

量子化学計算と固体 NMR を用いた新規無機物質の構造解析  
Structure analysis of novel inorganic materials by using quantum chemical computing and  
solid-state NMR

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子構造化学研究室  
野田 泰斗

### 研究成果概要

酸化物に代表される無機化合物は広範な用途に用いられているが、構造の基本となる配位構造が限定されていることなどから得られる機能には大きな制約がある。このような現状の中、物質中に酸素(O<sup>2-</sup>)、窒素(N<sup>3-</sup>)、水素(H<sup>-</sup>)などのアニオンが複数含まれる「複合アニオン化合物」では、特異な局所構造が得られることなどの優位な点がある。この点を活かすことにより様々な分野において既存とは全く異なる機能が発現する可能性がある。複合アニオン化合物では局所構造の解析と制御が鍵になると考えられるが、現状の技術では複合アニオン化合物の特異な局所構造を得ることは難しい。例えば、標準的な X 線回折は酸素と窒素の区別がつかず、中性子線回折は酸素とフッ素を識別することは困難である。また、酸素水化物中の H-イオンの化学シフト位置は電子が多いため負の値を示しそうであるが正の値をとり、通常の H+イオンと区別することが困難である。NMR は物質が結晶でも非結晶でも局所構造を探ることのできる強力な手法であるが、既存物質の情報を基に信号を帰属しており、全くの新規物質の場合には信号の帰属が著しく難しい場合がある。そこで MS の NMR CASTEP を用いた DFT 計算により、新規化合物の NMR 信号予測ならびに信号を帰属し局所構造の同定を行うことを目的に利用を開始した。

### 今後の研究計画

本年は申請者が DFT 計算を行ったことがなかったため、既報の物質と計算結果を再現できるか検証するところから始めた。切断エネルギーや逆ベクトル点の設定だけではなく、構造最適化が大きく結果に影響することがわかった。今後は、本年得られた構造最適化や計算条件の最適化方法を活かして、新規物質の構造決定を行っていく予定である。具体的には、遷移金属酸水素化物や窒素ドーピング硫化燐ガラスセラミックスなどをターゲット物質として考えている。