

磁場配向を利用した固体 NMR 解析手法の開発

Applications of magnetic orientation techniques to solid-state NMR spectroscopy

京都大学大学院 農学研究科 森林科学専攻 久住 亮介

研究成果概要

単結晶についての固体 NMR (単結晶 NMR) を用いれば, 化学シフト (CS) テンソルなどの異方的な相互作用の評価を通じて原子核周りの局所構造を解析できる. ただし, 単結晶 NMR 法のためには mm 次元の巨大な単結晶を準備する必要がある. 我々はこれまでに, 変調回転磁場による微結晶の三次元配向化法 (擬単結晶化法) を固体 NMR へと適用し, μm サイズの微結晶粉末から相互作用の異方性を決定する手法を提案してきた. その結果, ロッシェル塩の微結晶粉末について ^{23}Na 電場勾配 (EFG) テンソルを決定することに成功している. そこで本研究では, 実測による結果の検証を目的として, 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用してロッシェル塩の ^{23}Na CS および EFG テンソルの計算を試みた.

計算には Dassault Systems の Materials Studio 2018 を使用し, まずロッシェル塩単結晶の回折実験から決定された結晶構造モデルの最適化を行なった. 次に, 同アプリケーションに内包されている CASTEP モジュールを用いて量子化学計算を行い, ロッシェル塩の ^{23}Na CS テンソルと EFG テンソルを計算した. 交換相関汎関数には GGA-PBE を使用した. 得られた計算結果を図に示す. 図の通り, DFT 計算によりロッシェル塩の ^{23}Na CS テンソルと EFG テンソルを決定することができた. 今後, 擬単結晶化を通じて実験的に得られた両テンソルとの比較を行い, 擬単結晶を用いた単結晶 NMR の精度について考察する予定である.

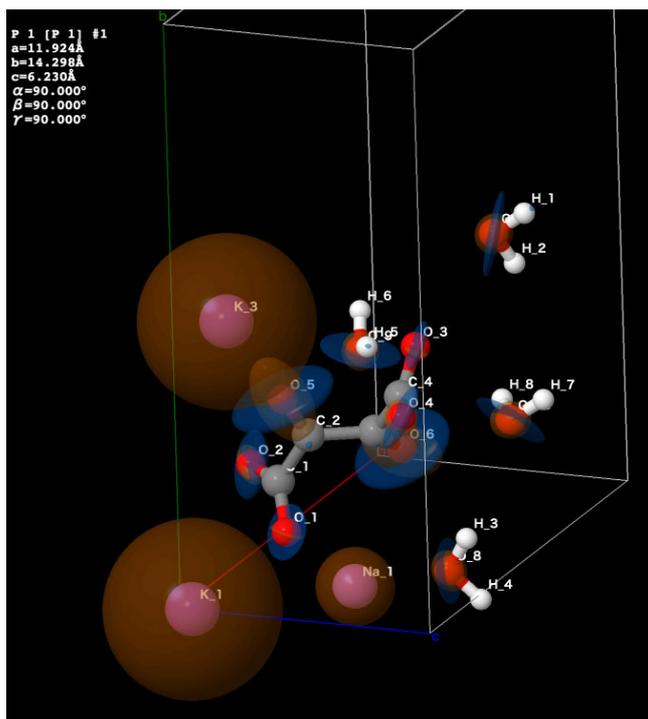


図 CASTEP により計算されたロッシェル塩の CS および EFG テンソル. 描画には CCP-NC の MagresView (S. Sturniolo et al., *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **78**, 64 (2016)) を使用した.