

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 quantumchemical computing and solid-state NMR

京都大学 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

Gauge Including Projected Augmented Wave (GIPAW)法の登場により結晶系で NMR パラメータを高速に計算できるようになった。一般に構造最適化の実行が推奨されるが、結晶系の NMR パラメータ計算では構造最適化をせずに回折実験等で得られた原子座標のまま計算をした方が実験値とよい相間を与えることが報告されている。報告者は固体 NMR を用いてランタンを含むリチウムイオン固体電解質を研究しているが、無機ランタン化合物でも最適化をしていない構造で計算された  $^{139}\text{La}$  の四極子結合定数が実験値とよく一致したと報告されている。<sup>[1]</sup>京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムの Material Studio の CASTEP による NMR のパラメータ計算でランタン化合物の構造最適化が必要か検証を行った。

既報<sup>[1]</sup>のランタン化合物の NMR パラメータを Material Studio ver. 22.1 の CASTEP を用いて、GGA-PBE 汎関数と On The Fly 擬ポテンシャルを採用して行った。カットオフエネルギーと k 点メッシュの間隔をそれぞれの物質で最適化した。構造最適化は結晶格子形状を保持した状態で体積と内部原子座標を最適化した。La(OH)<sub>3</sub> は先に水素位置だけを最適化した後に他と同様に構造最適化した。四極子相互作用の結合定数 Cq と異方性パラメータ η の計算結果を図 1 に示す。両方とも本研究の構造最適化して計算したほうが実験値をより再現するという結果が得られた。特に水素を含む La(OH)<sub>3</sub> では構造最適化の有無により値が大きく変わった。

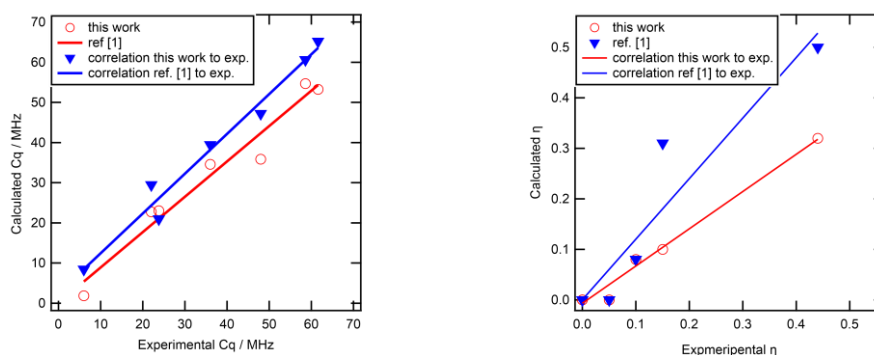


図 1 種々のランタン化合物における  $^{139}\text{La}$  の四極子相互作用の結合定数 Cq (左) と異方性パラメータ η (右) の計算値と実験値の相間。▼は既報値、○は本研究の計算値。

[1] A. L. Paterson et al., *J. Phys. Chem. C* 119 (2015) 25508.

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)