

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

固体 NMR で化学シフト (CS) テンソルを解析すれば、原子核周りの電子状態について精密な情報を得ることができる。しかしながら、CS テンソルを完全に決定するためには数 mm サイズの巨大な単結晶が要求される。そこで我々はこれまでに、 μm サイズの微結晶でも CS テンソルの解析が可能な、磁場配向微結晶懸濁体 (Magnetically Oriented Microcrystal Suspension, MOMS) の in situ 固体 NMR 法の開発に取り組んできた (Kusumi et al., *J. Magn. Reson.* **309**, 106618 (2019))。この MOMS-NMR 法を利用すれば、従来は CS テンソルの解析が不可能であった試料においても、精密かつより容易な解析が可能になると期待される。

本研究では、 ^{13}C 選択ラベル化されたセルロース II 板状結晶での MOMS-NMR を想定し、固体 NMR スペクトルのシミュレーションを行った。シミュレーションに必要な CS テンソルには、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの Materials Studio 2018 (Dassault Systems) に内包の CASTEP モジュールによる量子化学計算の結果を使用した。その結果、セルロース II 板状結晶を MOMS-NMR に供した際に得られる単結晶振動パターンをシミュレートすることができた。