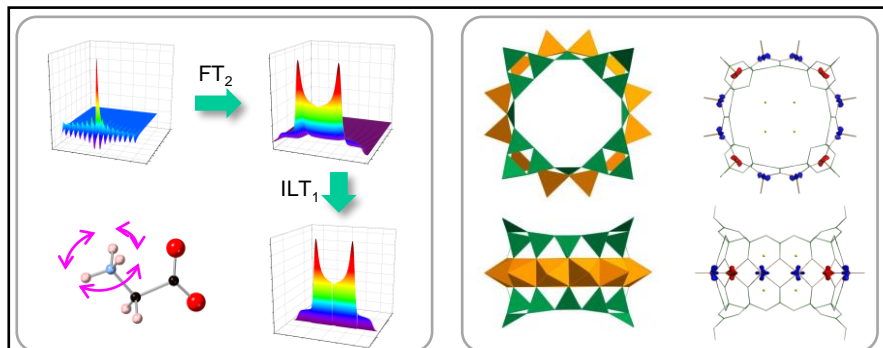


# 固体NMR分光による材料の局所構造解析

キーワード [NMR, シミュレーション, 分子運動, 量子化学計算]

教授 飯島 隆広



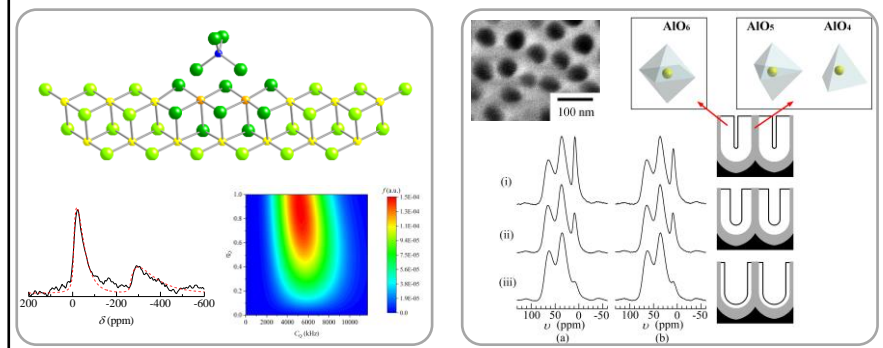
分子運動解析  
( $^2\text{H}$  NMR)

混合原子価ポリ酸  
( $^{11}\text{B}$ ,  $^{23}\text{Na}$  NMR)

H																		He	
3	4																	10	
Li	Be																	Ne	
11	12																	18	
Na	Mg																	Ar	
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118		
Fr	Ra	Ac	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc							

- スピン0 (or 不安定) 核
- スピン1/2核
- 四極子核 (を含む)

触媒表面への吸着 (47, 49Ti NMR)      ポーラス・アルミナ ( $^{27}\text{Al}$  NMR)



内容:

核磁気共鳴 (nuclear magnetic resonance, NMR) 分光は、物質の局所的な構造を調べるための有力な方法です。NMRのプローブには $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ といった核スピン $I = 1/2$ 核が用いられることが多いですが、周期表中の多くの元素は核スピンが $1/2$ を超える四極子核です。本研究室では、 $^2\text{H}$  ( $I = 1$ ),  $^{11}\text{B}$  ( $I = 3/2$ ),  $^{27}\text{Al}$  ( $I = 5/2$ ),  $^{49}\text{Ti}$  ( $I = 7/2$ ),  $^{93}\text{Nb}$  ( $I = 9/2$ )などの四極子核を積極的に活用し、多様な材料を対象とした構造解析を行っております。

研究例としては、Ziegler-Natta触媒の表面に吸着した分子の構造解析や、リング状の混合原子価ポリ酸における分子および電子スピンの構造解析、また、分子中に異なる運動性を有する化学サイトの分離解析があります。この他にもペロブスカイトやポーラス・アルミナなど、構造に乱れがある材料の局所構造解析を実現してきております。

アピールポイント:

固体NMRでは、得られたスペクトルをフリーの解析ソフトウェアで解析できないことが多々ありますが、本研究室はソフトウェア開発も行っておりますので、ほとんどのスペクトルに対応可能です。

分野: 物理化学  
専門: 核磁気共鳴 (NMR) 分光

E-mail : [ijjima@kdw.kj.yamagata-u.ac.jp](mailto:ijjima@kdw.kj.yamagata-u.ac.jp)

HP: <http://ijjimatakahiro.com>

