

固体NMRを用いた原子間距離の計測

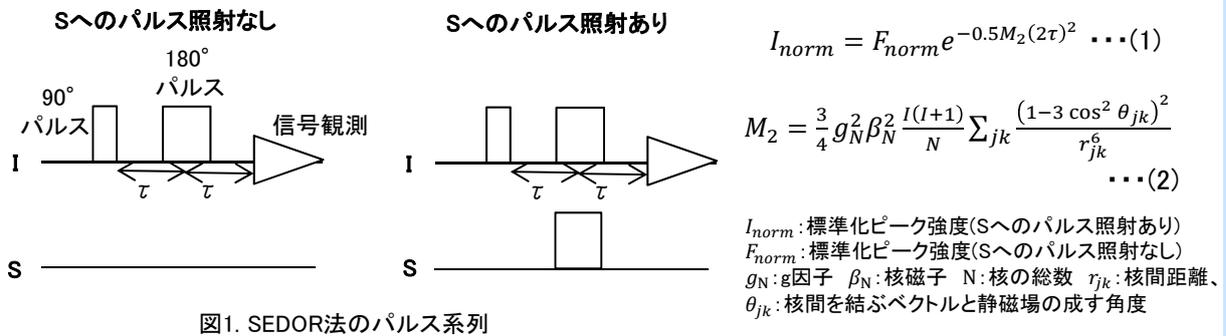
特定の原子間の距離を高精度で評価可能

固体NMRによる原子間距離の評価

分子や結晶中において、空間的に近接した原子核同士には双極子相互作用が働くことが知られています。この相互作用の強さは原子間の距離の6乗に反比例するため、固体NMRを用いたSEDOR法 (Spin Echo DOuble Resonance)で測定することによって原子間の距離を計測することができます。

測定原理

SEDOR 法では、観測核(I)に対してSpin Echoと呼ばれるパルス系列で測定し、パルス間の時間tを変化させつつピーク強度の減衰を観察します。さらに、観測核の180度パルスと同調したパルスを距離測定対象の核(S)に照射しながら同様の測定をし、観測核のピーク強度減衰を観察します(図1)。



相手の核への照射有無によるピーク強度の変化には、上述の式(1)のような関係が成り立つことが知られています。上記の式により、原子間の距離や元素の種類により定まる二次モーメント M_2 が算出され、この二次モーメントから原子間の距離が算出されます (van Vleckの式 (2))。

分析データ

フッ化リチウム (立方晶 NaCl型 $a=4.02 \text{ \AA}$, Li-F間距離 2.01 \AA)をモデルとして、SEDOR法を適用しLi-F間距離の計測を行いました。

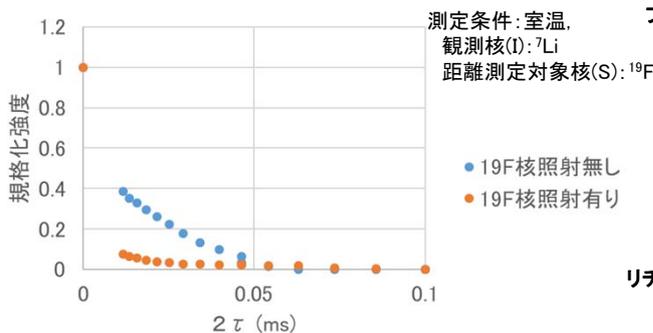


図2. SEDOR法によるtと信号強度の相関

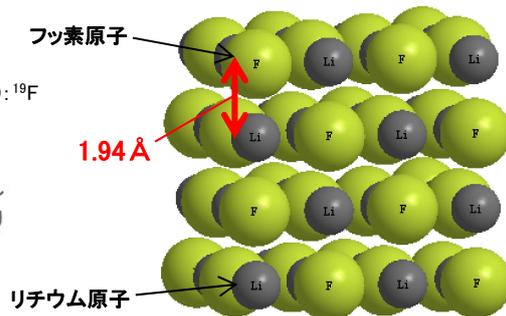


図3. LiFの結晶構造と SEDOR法で得られたLi-F間距離

得られた信号の減衰率から、二次モーメント $M_2 = 1.1 \times 10^9 \text{ rad}^2/\text{s}^2$ と算出されます。また、この二次モーメント値からLi-F間の距離は**1.94 Å (a=3.88 Å)**となり、モデル値と近い値となっています。



Point

固体NMRを用いて、原子サイズ・結晶・非晶質を問わず特定の原子間距離を高精度で算出することができます。

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp
URL : https://www.mst.or.jp/