

平成 22年 3月 3日現在

研究種目：基盤研究 (C)
 研究期間： 2006～2009
 課題番号：18550003
 研究課題名 (和文) 相対論的効果を考慮した核磁気共鳴スペクトルパラメーターの理論計算
 研究課題名 (英文) Relativistic calculation of NMR spectrum parameters
 研究代表者
 福井洋之 (FUKUI HIROYUKI)
 北見工業大学 工学部 教授
 研究者番号：30002041

研究成果の概要 (和文) : Dirac 方程式の解である 1 電子波動関数は、4 行 1 列の列ベクトルの形をもち、4 成分スピノールと呼ばれる。上の 2 成分を大成分、下の 2 成分を小成分と呼ぶ。小成分を大成分と演算子を用いて消去して方程式を解く方法を 2 成分法、4 成分を同時に求める解き方を 4 成分法という。本研究では両方の方法で Dirac 方程式を解き、NMR パラメーターの相対論的効果を計算した。

研究成果の概要 (英文) : A solution for the Dirac equation has a form of 4x1 column vector and called a four-component spinor. There are two methods for solving the Dirac equation. One of them is the two component method in which the lower 2 components are eliminated using the upper 2 components. The other one is the four component method in which the four components are calculated simultaneously. In the research, both the two methods are used to evaluate the relativistic effects on NMR parameters.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,300,000	0	1,300,000
2007 年度	500,000	150,000	650,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
2009 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	2,800,000	450,000	3,250,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学：物理化学

キーワード：量子化学、NMR、化学シフト、Dirac 方程式、相対論的効果

1. 研究開始当初の背景 重原子を含む分子の NMR パラメーターは大きな相対論的効果を含んでいる。そのため、類似した化合物であっても、それらの NMR スペクトルは大きく異なっている場合があり、経験則は適用出来ない。そこで、相対論的効果を考慮

した NMR パラメーターの理論計算を行う必要があった。

2. 研究の目的 本研究の目的は、(1) NMR 遮蔽テンソルを計算し、NMR 化学シフトの理論計算を行うこと、及び、(2) NM

R核スピン結合定数の理論計算を行うことである。

3. 研究の方法 (1)理論計算を行う前に、計算を行うための式を導いた (formulation)。その後、コンピューターによる理論計算を行った。(2) NMR遮蔽テンソルの計算には、小成分を消去する NESc 法と 4成分法の両方を用いた。(3)従来の4成分法では、遮蔽テンソルの反磁性項を負のエネルギー順位を励起順位とする 2次の摂動エネルギーとして計算していた。しかし、本研究では、小成分を展開する基底関数に外部磁場を含めることにより、反磁性項を非相対論と同様、占有軌道のみから成る 2次の摂動エネルギーとして計算することができた。

4. 研究成果 (1) NMR遮蔽テンソルの相対論的計算に関して6編の英文論文を発表した。うち5編の英文論文は2成分法による研究であり、1編は4成分法による研究である。2成分法では、主として、小成分の消去の仕方について議論した。4成分法では、主として、反磁性項の導出について議論した。(2) NMR核スピン結合定数の相対論的計算については、十分な研究を行う時間が無かった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6件)

- ① Hamaya and H. Fukui, Dirac-Hartree-Fock perturbation calculation of magnetic shielding using the external field-dependent restricted magnetic balance condition, The Bulletin of the Chemical Society of Japan, 査読有、in press.
- ② S. Hamaya, M. Maeda, M. Funaki, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shielding tensor using the regular approximation to the normalized elimination of the small component. III. Introduction of gauge-including atomic orbitals and a finite-size nuclear model, The Journal of Chemical Physics, 査読有、Vol. 129, 2008, 224103 1-10.
- ③ Y. Ootani, H. Maeda, and H. Fukui, Decoupling of the Dirac equation correct to the third order for the magnetic perturbation, The Journal of Chemical Physics, 査読有、Vol. 127, 2007, 084117 1-7.
<http://hdl.handle.net/10213/1409>.

- ④ H. Maeda, Y. Ootani, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shielding tensor using the regular approximation to the normalized elimination of the small component. II. Consideration of perturbations in the metric operator, The Journal of Chemical Physics, 査読有、Vol. 126, 2007, 174102 1-6.
<http://hdl.handle.net/10213/1408>.
ibid., Vol. 128, 2008, 1299031-2 (E).
- ⑤ Y. Ootani, H. Yamaguchi, H. Maeda, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shielding tensor including two-component spin-orbit interactions, The Journal of Chemical Physics, 査読有、Vol. 125, 2006, 164106 1-4.
<http://hdl.handle.net/10213/1403>.
- ⑥ K. Kudo, H. Maeda, T. Kawakubo, Y. Ootani, M. Funaki, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shielding using normalized elimination of the small component, The Journal of Chemical Physics, 査読有、Vol. 124, 2006, 224106 1-7.
[学会発表] (計 9件)
- ① S. Hamaya and H. Fukui, Dirac-Hartree-Fock perturbation calculation of magnetic shieldings using gauge-including atomic orbitals, 13th International Congress of Quantum Chemistry, 2009年6月, Helsinki, Finland.
- ② K. Kudo, H. Maeda, T. Kawakubo, Y. Ootani, M. Funaki, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shielding using normalized elimination of the small component, 12th International Congress of Quantum Chemistry, 2006年5月, Kyoto, Japan.
- ③ K. Kudo and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shieldings using a unitary transformation of the Dirac equation, 12th International Congress of Quantum Chemistry, 2006年5月, Kyoto, Japan.
- ④ K. Kudo, Y. Ootani, M. Funaki, and H. Fukui, Relativistic calculation of nuclear magnetic shieldings of xenon difluoride, 12th International Congress of Quantum Chemistry, 2006年5月, Kyoto, Japan.

〔図書〕（計 6 件）

- ① H. Fukui, The Royal Society of Chemistry, Specialist Periodical Reports on Nuclear Magnetic Resonance, Vol. 38, 2009 年 7 月, 166-193.
- ② H. Fukui, Springer, Modern Magnetic Resonance, 2006 年 12 月, 75-79.

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

福井洋之 (FUKUI HIROYUKI)

研究者番号：30002041

(2)研究分担者

船木稔 (HUNAKI MUNORU)

研究者番号：90113711

(3)連携研究者

()

研究者番号：

