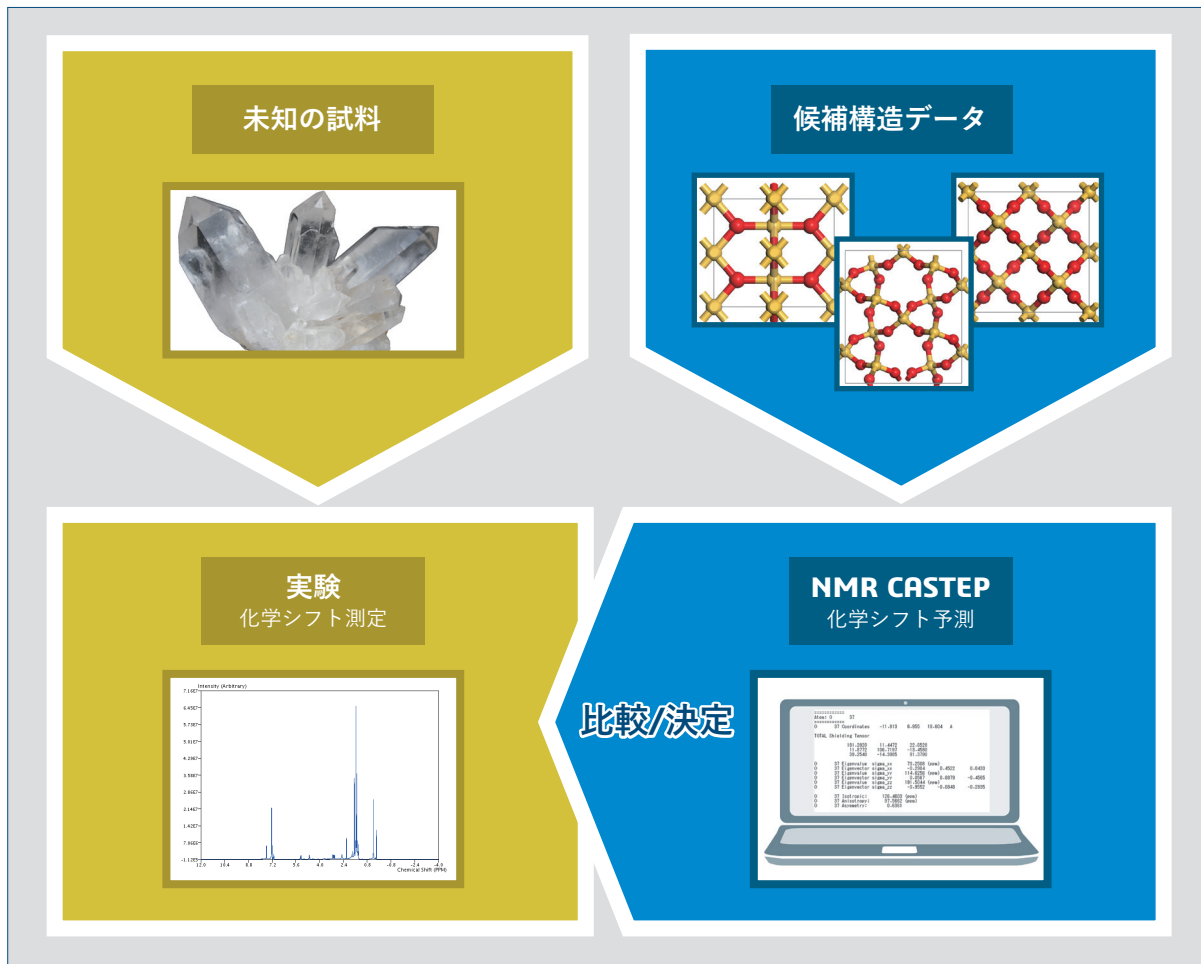


材料・デバイス開発分野でのNMR利用とNMR CASTEPによる化学シフト予測

核磁気共鳴分光法(NMR法)は試料の分子構造の決定に広く利用され、現在では製薬、食品、化学分野の必須技術となっています。材料やデバイス開発においても原子レベルでの材料解析のため普及が期待されますが、低分子や有機化合物の膨大なスペクトルデータベースに比べると、無機結晶やガラス材料に対するデータは限られており従来の経験的なスペクトル解釈が困難な場合があります。第一原理計算手法であるNMR CASTEP による化学シフトシミュレーションは既存のデータを必要とせず、様々な新規材料に対してNMR法の活用の幅を広げます。

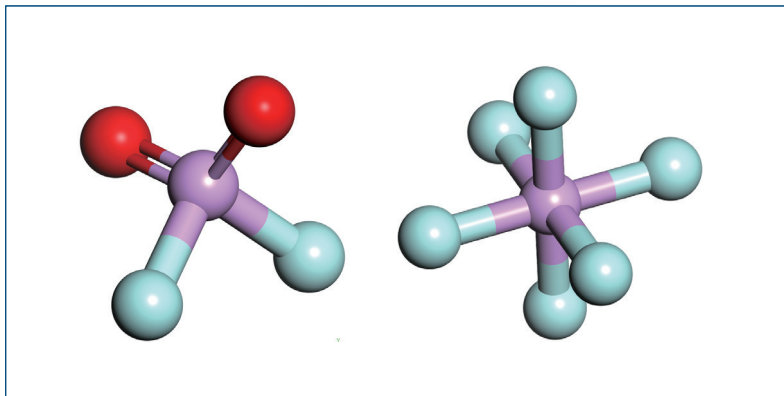


燃料電池

水素と酸素の化学反応で水が生じる際の反応エネルギーを電流に変換する燃料電池は、クリーンで効率的なエネルギー輸送インフラとして普及が期待されています。材料物性において特にデバイス性能に直接影響を及ぼす電解質中のイオン輸送が重要視され、NMRと数値シミュレーションを組み合わせることで新材料のイオン輸送メカニズムが分析されています。[1]

リチウムイオン電池

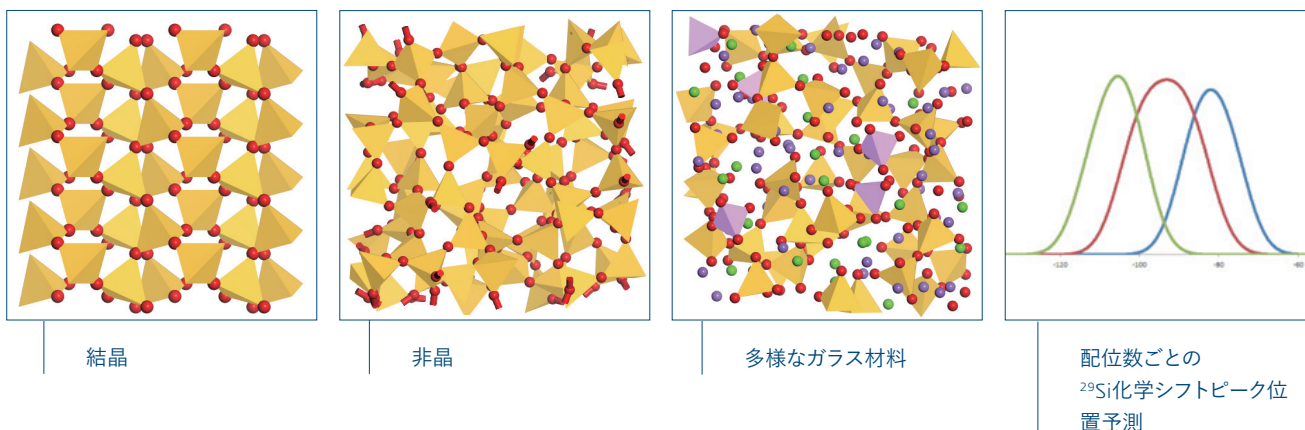
携帯電話から自動車まで実用化が進み、さらに日進月歩で性能向上するリチウムイオン電池にもNMR法が様々な場面で利用されています。次世代型電池の一つとして、従来の可燃性電解液をより安全な固体材料で置き換える全固体電池の開発が望まれており、NMR法とNMR CASTEPの組み合わせが活用されています。[2]



	孤立分子構造	化学シフト ³¹ P計算値
劣化前	PF ₆ ⁻	-104 ppm
劣化後	PF ₂ O ₂ ⁻	-4 ppm

無機非晶質固体、ガラス材料

ガラスは非常に多用途に利用され、現代ではフラットパネルディスプレイや光エレクトロニクス、バイオセラミックスなどハイテク分野において次々に高性能・高付加価値製品が開発されています。結晶とは異なり非晶質は原子がネットワーク状に配列して長距離秩序が存在しないため、原子レベルで構造を理解するためには、構成元素と、どの原子が隣り合いやすいかといった近距離秩序構造の2点を分析する必要があります。この近距離秩序構造の測定には固体NMR法が適しており、NMR CASTEPと組み合わせて様々に活用されています。[3]



[1] Riza Dervişoğlu et al., Chem. Mater. 2015, 27, 3861–3873

[2] Ferreira et al., RSC Adv., 2016, 6, 41015–41024

[3] Charpentier et al., RSC Adv., 2013, 3, 10550–10578

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**11**の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語)をご参照ください。



3DEXPERIENCE