

分子結晶における分子運動の Sb 核の NQR による研究

NMR 研究室

桑江 常和 , 武川 玲治

指導教官 : 二木 治雄 , 與儀 護

核四重極共鳴(NQR)とは、核スピン $I=1$ 以上の原子核において、核の電荷分布が立方対称でないことによってできるエネルギー準位を利用し、差分のエネルギー準位間の周波数に相当する電磁波を与え共鳴信号を得ることができる測定方法である。また核磁気共鳴(NMR)と違い、外部磁場を必要としないので比較的手軽にできる実験方法である。

今回、我々は核四重極共鳴を使って、分子結晶化合物 $4\text{-NH}_2\text{C}_5\text{H}_4\text{NHSbBr}_4$ の分子運動について研究を行った。Sb 核は核スピン $I=7/2$ の ^{123}Sb と核スピン $I=5/2$ の ^{121}Sb があり、 $I=7/2$ では 3 本、 $I=5/2$ では 2 本の共鳴線が観測される。 $4\text{-NH}_2\text{C}_5\text{H}_4\text{NHSbBr}_4$ では、85K で ^{123}Sb は、49.61MHz, 31.46MHz, 26.65MHz, ^{121}Sb は、53.63MHz, 33.76MHz に共鳴信号を観測できた。

$4\text{-NH}_2\text{C}_5\text{H}_4\text{NHSbBr}_4$ の熱運動を明らかにするために、Sb のパルス法 NQR によるスピン-格子緩和時間 T_1 の温度依存性を測定した。図は縦軸を $\ln(T_1)$ 、横軸を $1/T$ で示してある。低温から 120K 付近までは、格子振動による T^2 則で緩和をしているが、それ以上の温度では $T_1=\exp(-E_a/RT)$ による緩和を行う。 E_a は Sb サイトでの運動の活性化エネルギー、 R は気体定数 ($R = 8.314472 \text{ J / K}\cdot\text{mol}$) である。活性化エネルギーを各共鳴線毎に 85K での周波数とともに示すと次のようになる。すなわち、それぞれ 22.0 kJ/mol (31.46MHz), 12.0 kJ/mol (49.61 MHz), 19.4 kJ/mol (33.76 MHz), 14.7 kJ/mol (56.63 MHz) となる。26.65 MHz の信号については信号強度が非常に弱いため残念ながら詳細な温度変化の測定は出来なかった。

卒業研究の発表では、Sb 核の NQR によって求められたデータから $4\text{-NH}_2\text{C}_5\text{H}_4\text{NHSbBr}_4$ についての分子運動について検討して発表を行う予定である。

