

00018

Platform Session II

## The Structure and Dynamics of Inorganic Systems: Solid State NMR Studies

계영식

육군사관학교 화학과

$\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ 들은 수용액상에서 고체혼합물을 형성하는 것으로 알려져 있다.  $(\text{Pb,Sr})(\text{NO}_3)_2$ 와  $(\text{Pb,Ba})(\text{NO}_3)_2$ 의 고체혼합물의  $^{207}\text{Pb}$  NMR 스펙트럼은 12개의 가장 가까운 이웃 납 양이온들이 스트론튬이나 바륨이온으로 치환되면서 나타날 수 있는 총 13개의 피크를 보여준다.  $(\text{Pb,Sr})(\text{NO}_3)_2$ 의  $^{207}\text{Pb}$  NMR 스펙트럼에서는 한 개의 스트론튬 이온 치환당 약 21.8ppm의 피크이동을 보여주고 있고, 한 개의 바륨 이온 치환당 약 19.1ppm의 피크이동을 보여주고 있다. 이 차이점을 설명하기 위하여 NMR 스펙트럼을 기초로 혼합결정구조 안에서 이온들의 치환확률을 보여주기 위하여 몬테카를로 계산을 시도하였다. 계산된 결과들은 양이온들이 이 혼합 결정을 형성할 때 약간의 클러스터 형태를 선호하는 것을 보여 주고 있고, 그 서로 다른 이온들끼리의 상호작용에너지는 약 120 J/mol로 공유결합에서 나타나는 에너지 보다 훨씬 작음을 보여준다. 그리고 이 에너지는 반데르발스 에너지 계산 결과 거의 일치한다.