

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19051015

研究課題名（和文）配列ナノ空間物質の結晶構造

研究課題名（英文）Study of the crystal structures of materials with having regulated nano spaces

研究代表者：澤博（SAWA HIROSHI）

名古屋大学 名古屋大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：50215901

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：放射光、配列ナノ空間物質、単結晶構造解析、粉末構造決定、電子密度解析

1. 研究計画の概要

本特定領域で創製される配列ナノ空間を有する新物質を対象に、最新の放射光X線散乱実験技術を駆使してその精密構造を決定し、構造的観点から新物質相の電子状態と量子物性の発現機構を明らかにすることを目的として、①粉末回折法による構造研究、②単結晶を用いた精密測定を利用した電子密度解析を行っている。放射光X線回折実験はSPring-8において、粉末測定はBL02B2、単結晶測定はBL02B1において行っている。

平成20年度末に導入されたBL02B1の単結晶専用X線回折装置を用いて、平成22年度までの間にSPring-8の放射光の質の検証と、測定技術の確立を行う立ち上げ作業を行った。領域内との共同研究を通して粉末試料、単結晶試料のどちらかを使ってクラスレート、金属内包フラーレンなど配位空間物質の解析を行っている。

2. 研究の進捗状況

世界最高輝度を誇るSPring-8に設置された単結晶用新型回折装置(SPring-8 BL02B1)は、様々な基本性能のチェックを経て国際的な競争力を持つ性能を有することが明らかとなった。我々は、精密解析に必要な逆格子空間内の分解能

がどの程度まで確保できるかを詳細に調べ、10ミクロン角程度の合金系単結晶であれば0.2Åの超高分解能測定が可能であることを確認した。また、この装置の性能を十分引き出すための、画像データの処理のアルゴリズムを新しく開発するとともに、測定のための諸条件を洗い出した。更に、我々は粉末試料として開発される物質の未知構造を決定するアルゴリズムを汎用的に利用できるように整備し、これらの手法を駆使して、広島大学、東北大学、東京理科大学、京都大学など本特定領域のメンバーとの共同研究により様々な成果が上がりつつある。例えば、金属内包C₆₀の内包証明を行い、各種学会などで新しいフラーレンサイエンスの可能性を提案した。この成果は現在論文投稿中である。一方、粉末回折測定では領域内との共同研究により、配列空間のゲスト分子の存在による骨格の再配列など興味深い現象を見出し、成果発表を行っている。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

この特定領域のプロジェクトに時期を合わせて、新しい装置の立ち上げが順調に行われ、SPring-8の性能を十分生かすことが出来ることが分かってきた。我

々は、特定領域内の多くの研究者と様々な物質における共同研究を通して、成果を上げつつある。具体的には熱電材料のラットリングと元素欠陥の関係を明らかにしたり、金属内包C₆₀の解析によって新しい物質化学の展開を提案したり、また新機能物質の構造の同定などを行っている。これらは論文による成果発表だけでなく、特許出願なども行っており、順調な成果の排出を期待している。また、粉末試料を用いた未知構造解析のアルゴリズムは商用ベースを目指した戦略を立てている。

4. 今後の研究の推進方策

この新単結晶回折装置によって、実空間における空間分解能が0.1Å程度まで可能であることから、原子やイオンの電子軌道を直接観測し、様々な量子パラメータの決定が可能であることが明らかとなってきた。これは、物性物理学の発展の観点からも極めて重要な情報を提供可能であることから、分野の発展が見込める。このことは、単なる物質同定から、この装置による解析結果が物性発現の機構解明に直接寄与できることを表しており、今後の研究には質的にも高いレベルでの成果を期待できる。

5. 代表的な研究成果

(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24件)

- ① X. Lu, H. Nikawa, T. Tsuchiya, *T. Akasaka, M. Toki, H. Sawa, N. Mizorogi, and *S. Nagase, Nitrated Benzyne Derivatives of La@C₈₂: Addition of NO₂ and Its Positional Directing Effect on the Subsequent Addition of Benzyne. *Angew. Chem. Int. Ed.* 49, 594-597 (2010). 査読有
- ② Y. Kohama, T. Rachi, J. Jing, Z. Li, J. Tang, R. Kumashiro, S. Izumisawa, H. Kawaji, T. Atake, H. Sawa, Y. Murata, K. Komatsu, and K. Tanigaki, Rotational Sublevels of an Ortho-Hydrogen Molecule Encapsulated in an Isotropic C₆₀ Cage. *Phys. Rev. Lett.* 103, 073001(4pp) (2009). 査読有

- ③ E. Nishibori, T. Ogura, S. Aoyagi, and M. Sakata, Ab-initio structure determination and refinements for a pharmaceutical, Prednisolone Succinate, by the combination of Genetic Algorithm and Maximum Entropy Method from Synchrotron powder data. *J. Appl. Cryst.* 41, 292-301 (2008). 査読有
- ④ T. Kakiuchi, Y. Wakabayashi, H. Sawa, T. Takahashi, and T. Nakamura, Charge ordering in α -(BEDT-TTF)₂I₃ by synchrotron X-ray diffraction. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 76, 113702 (2007). 査読有

[学会発表] (計75件)

- ① H. Sawa, E. Nishibori, and S. Aoyagi, Challenge to Atomic Orbital Visualization by 0.2 Å Resolution Synchrotron Radiation Single Crystal Experiment. *AsCA'09*, October 22-25, 2009, Beijing, China (oral)

[図書] (計4件)

- ① H. Sawa and T. Kakiuchi, *Transworld Research Network, Molecular Electronic and Related Materials- Control and Probe with Light*, 2010, 117-134

[産業財産権]

○出願状況 (計1件)

○取得状況 (計1件)

名称：蛍光体
発明者：大長久芳、岩崎剛、榎本公典、四ノ宮裕、青柳忍
権利者：株式会社小糸製作所
種類：特許権
番号：2008-274240
取得年月日：2008年11月13日
国内外の別：国内

[その他]

新聞報道 計2件