

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01951

研究課題名(和文) 微量元素の化学研究を通じた重元素の理解 モデルケースの提供

研究課題名(英文) Chemical researches for micro amounts of metals toward heavy element chemistry

研究代表者

笠松 良崇 (Kasamatsu, Yoshitaka)

大阪大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：70435593

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,000,000円

研究成果の概要(和文)：重元素の化学的性質と相対論効果の影響を調べるために、同族元素の極微量状態での化学的性質、化学種の分析、さらに相対論計算を行った。さらに、実際に重元素の化学的挙動が報告されている反応系に対して、相対論計算を行う環境整備、条件探索を行った。

Noの比較対象元素である2族元素の化学では、水酸化物沈殿における多核錯体の形成を質量分析やXAFS分析によって観測することに成功した。さらに実際に新しいNoの化学実験にも成功した。Noまで含めて相対論計算を駆使することができ、実験データを非常によく再現することができた。さらに、重元素特有の化学結合を提案することができた。Rfに対する成果も得ることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

全ての元素の系統的理解には重元素の理解が必要である。ただし、短寿命の重元素の今すぐの社会的利用は難しい。しかし、重い元素の理解が進むことによる社会への還元は小さくない。例えば、第5、6周期元素(Ru, Pd, Ir, Ptなど)の有機錯体や合金、触媒の利用が増えており、新しい物性を持つ物質の普及が社会を大きく変えている。ウランなどの工業利用も実は多い。そのような“少し”重い元素においても相対論効果自体の影響は無視できない。元素の完全な理解に不可欠な相対論効果の理解が進めば、すぐに相対論効果の小さい少し重い元素のより完全な理解、そして物質社会への貢献にもつながっていく。

研究成果の概要(英文)：For the purpose of establishing chemical research method for heavy elements, chemical experiments and calculations have been performed with various samples including micro amounts of metals which are homologues of heavy elements. In addition, calculation tools were prepared and suitable conditions were determined for quantum chemical calculations for heavy elements taking into account the relativistic effects.

Various chemical experiments with group 2 and 4 elements were performed for No and Rf chemistry. Chemical properties were investigated from the results obtained and calculations, and chemical species were also investigated by chemical analyses such as mass and XAFS spectroscopy. New chemical experiments of various chemical reactions have been achieved for No and new knowledge has been obtained.

研究分野：核・放射化学

キーワード：重元素 化学 微量分析

1. 研究開始当初の背景

現在、人類は膨大な種類の物質に囲まれて生活しており、これら物質を構成している各元素の性質を知ることは非常に重要な基礎化学の課題であり、周期表に記載される全ての元素の性質の理解を深めることは無機化学の重要な役割といえる。第4周期までの元素は、研究例も多く、理解が進んでいる。一方で、第5周期以降の元素に対しては、基本的な性質も不明のことがある。そのような中で近年ではこれらの元素が含まれることにより新機能を発現する物質の発見が多く、研究が重要になってきている。原子番号がさらに大きくなるとウランを越えるような重元素、さらには人類にとって新元素となる超重元素(超アクチノイド元素)と呼ばれる領域になる。近年、日本初の新元素合成として二ホニウム¹⁰⁹の合成も報告されており、まだ記憶に新しい。ただし、これらの新元素の化学的性質はほとんどが未知の状態である。

元素の性質を理解する上では、**実験と理論の相補的な研究**が不可欠である。理論的には、原子核と電子のクーロン相互作用に電子-電子間反発、量子電磁力学効果、**相対論効果**を含めて高精度に計算することが課題であり、特に軌道殻電子数が多くなる重い元素の計算は非常に困難である。さらに、相対論効果は軽い元素では無視できる上に重元素の実験データが乏しいため、その理解、検証が遅れている。現状としては高度な理論や計算手法は開発されているが、重元素の一つ一つの実験データに対して計算し、比較していくような計算環境の構築にはまだ遠い状況である。実際に、原子番号が100を越えるような重い元素では、相対論効果が強く、化学結合やイオン化エネルギー、イオン半径など基本的な性質にも大きな影響が生じる。しかし、これまでに得られた重元素の実験データ、計算の貢献が少なく、同族元素との単純な挙動の比較に基づいた考察にとどまっており、化学的性質や電子状態を考慮した詳細な議論には至っていない。

2. 研究の目的

近年、加速器性能の発達などにより、重元素の合成と共に化学研究にも取り込まれるようになってきた[The Chemistry of Superheavy Elements, 2nd ed., edited by M. Schädel and D. Shaughnessy (Springer, Heidelberg, 2014)]. 申請者は以前からこのような重・超重元素の化学研究に取り組んできた。これらの元素は、**1原子状態**でしか存在できない上に短寿命であり、化学分析は非常に困難であるため、抽出挙動のような限られた系に対して、実験データを得てきた。ただし、上述したように考察は深まっていない。申請者はこの一因として、計算の不足だけでなく、重元素の性質を調べるために比較対象となる同族元素の化学的性質に関しても、特に第5、6周期の元素の性質の理解が不十分であることがあげられると考えている。同族元素が多核錯体を形成する例も多い。つまり、軽い同族元素に対して化学種の特定などを含めたより詳細な化学研究が必要であり、手法の開発、導入が必要である。そのような計算と十分に比較できるデータを取得し、相対論を含めた計算との相補的な研究からこれらの元素の結合性や電子状態、その系統性を理解する。その後、超重元素の計算手法の確立にも取り組みを拡大し、同族元素との比較から重元素の性質を理解できると期待できる。

本研究では、第3-5周期の2-4族元素の極微量状態での単核での錯形成に関する性質を、詳細に調べ、計算化学の実施と相互比較からその性質の系統的に理解する。そのデータを元に重元素としては主に102番元素(ノーベリウム、No)や104番元素(ラザホージウム、Rf)のすでに調べられた化学実験の系に対して、その性質の理解を深める。さらに、超重元素のデータに対する相対論を考慮した計算に挑戦し、超重元素さらには相対論効果自体を理解するための手法を確立する。本研究はその後のその他の重・超重元素の化学的性質を調べるためのモデルケースとなる。今後、次々と新しい超重元素の化学研究成果が得られることが予測されるなかで、その解釈、理解が停滞している現状における本手法確立の意義は大きいと考えられる。

3. 研究の方法

(1) 実験

本研究で対象とする重元素の実験系として、まずは重元素に対して比較的精度の高いデータがすでに得られている反応系としては、Rfのフッ化水素酸や塩酸からの液液、固液抽出(フッ化物錯体と塩化物錯体)、RfとNoの水酸化物沈殿(水酸化物錯体)がある。また、さらに今回新しく基礎実験を行うことのできたRfの硝酸系のイオン交換挙動、シュウ酸、マロン酸系での共沈挙動、HDBP、HDEDTP錯体との反応を対象として加えた。さらに、Noのクラウンエーテル抽出、硫酸沈殿やシュウ酸沈殿といった反応系においては、同族元素を用いた基礎化学実験だけでなく、実際にNoの実験にも成功したため、研究対象として加えることができた。

これまでの研究では、Rfのフッ化物錯体形成においてはイオン結合的な結果として理解されてきたが、塩化物錯体では異なる傾向が観測されており、統一的な考察には至っていなかった。酸素の配位(オキソ化合物)の様子も分かっていない。同族元素に対してすら化学種の同定ができず、計算化学に供することも困難であった。

本研究では、第3-5周期の2-4族元素の上記目的反応系での詳細な化学研究を実施し、化学分析などにより化学種の情報を調べた。各化学反応系における溶液濃度条件の水相や有機相、樹脂相、沈殿試料を作成し、各種分光測定、質量測定、XAFS測定等を実施した。量子化学計算を精

力的に行い、化学種やその安定性を調べるための重要なサポートとして用いた。

さらに、今回は新しい反応系で重元素である No の化学実験を実現することにも成功した。そして、No や Rf を対象とした相対論計算を様々な条件で実施し、実験結果との比較から重要な知見を得ることができた。

(2) 計算

本研究では、ランタノイドなどの比較的重い元素の計算を行っている理論化学者が研究分担者となっており、計算化学的研究の推進を主導した。第一に実験と並行して、(最終的には重元素に対しても) 計算が行える環境を整えた。その後、実験データの得られた元素、反応系から順に計算を実施した。特に、これまで非相対論的手法で実施されてきた錯体の安定性に関する計算に、2 次の Douglas-Kroll-Hess 法(DKH2)レベルの相対論的近似法を導入することにより、オキソ化合物や純粋なハロゲン化物、その逐次錯形成の様子などを調べた。特に、相対論効果を含めた計算を実行し、実験結果と比較することにより、超重元素における基底関数や量子化学計算法の妥当性を検証した。加えて、第 4-6 周期元素において、超重元素の計算結果を、同族元素での計算結果、さらには、各種実験データと比較することにより、超重元素の性質を予測した。これらの結果は、超重元素の性質を明らかにするのみならず、今後新たに必要な価値のある超重元素実験データに適した条件を検討する上でも重要な指針となることが期待できる。さらには、このような化合物に適した方法論に関する知見を与えるという点でも大変重要な成果と言える。

4. 研究成果

本研究の成果を各課題別に以下に記す。

計算環境としては非常によい環境を構築することに成功し、スカラーレベルでの相対論計算により、重元素の錯体において各軌道の寄与を考慮することが可能となった。これは、これまでにない電子の情報を重元素の錯体に対して示すことができ、重元素の化学研究に大きな革命をもたらすものと考えている。さらに、スピン軌道相互作用の影響まで含めたより高度な相対論の化学計算をする環境も整えることができた。これによりどういった化学性質やエネルギー、結合軌道がスピン相互作用の影響を受けるのかを知ることができ、大きな影響を受ける性質に関しては初めてより精度の高い計算結果を示すことができるようになった。さらに、相対論効果にできるだけ近似を含めずに Dirac 方程式を解く計算の実装も行うことができた。計算の時間コストの関係でまだ限られた系にしか適用できていないが、今後重元素化学研究に大きく貢献できる環境を構築できたことは大きな成果といえる。また、スピン軌道相互作用をハミルトニアンにあらわに含んだ計算を用いることにより、化合物スピン状態に関する知見が得られたほか、第 5 周期元素に相対論効果を考慮した基底関数を用いることにより、電荷とスピン状態を詳細に検討した。これら計算の各反応系における具体的な成果は、以下に課題別に記載する。

● 102 番元素 No の水酸化物錯体

本研究開始前に、すでに No の水酸化サマリウムとの共沈挙動は実験的に観測に成功していた。比較対象元素として 2 族元素である Ca、Sr、Ba の水酸化物沈殿挙動と水酸化サマリウム共沈挙動を調べ、これらとの比較から No の性質を議論していた。特に水酸化物イオンとの結合やアンモニア分子との結合を議論していた。しかし、周期表内の多くの元素において沈殿挙動と共沈挙動が似ていた中で 2 族元素は明確に異なっていることが問題となっていた。

そこで、本研究では、2 族元素の水酸化物錯体が多核錯体を形成することで単核の共沈挙動とは異なっている可能性を調べるために金属濃度を変更して様々な沈殿試料、水酸化サマリウム共沈試料、ろ液試料を作成し、質量分析や XAFS 分析を行った。質量分析では、原子数の比較的少ない試料にも有効なエレクトロスプレーイオン化法を利用した。XAFS 分析は、あいちシンクロトロン光センターの X 線ビームラインを利用した。

沈殿などの固体試料に対する質量分析は、困難を極め、明確な分析データを得ることができなかった。一方でろ液試料に対しては、いくつかの条件の Sr 試料に対して得られたスペクトルから 2 核錯体の存在を確認することができた。これにより Be や Mg に対して報告されていたような多核の水酸化物錯体形成の安定性が示された。ただし、様々な 2 核錯体が確認され、中には硝酸が含まれている化合物のスペクトルも見られたため、イオン化の過程が影響しており、溶液中で安定に支配的に存在している化学種の情報を反映していない可能性が考えられた。

XAFS 分析では、Sr と Ba に対してろ液試料だけでなく沈殿試料に対しても分析することができた。Sr の沈殿試料のスペクトルは、標準物質として用いた安定な水酸化ストロンチウムの無水物とも 8 水和物ともスペクトルが一致しなかったため、通常ではない化合物を形成している可能性が示された。硝酸の有無によるスペクトルの変化も調べ、硝酸が影響している可能性を否定することができた。動径分布関数を見ると、第 2 配位圏の辺りに特有のピークが観測された。多核錯体を形成することで知られる炭酸ストロンチウムの動径分布関数にも似たピークが観測されていた。このため、第一水和圏に水酸化ストロンチウムの酸素を第 2 水和圏に炭酸ストロンチウムのストロンチウムを模擬して XAFS スペクトルを計算により作成すると実験で得られた沈殿試料のスペクトルをよく再現した。さらに、近年開発されたウェーブレット変換という 2 次元解析を取り入れて分析を行うことで、沈殿試料の第 2 配位圏に Sr と思われる元素からの寄与があることが分かり、より明確に酸素架橋した多核錯体の形成を明らかにすることができた。

この結果に対して、Srの塩基溶液中での水酸化物錯体形成を様々な単核錯体、2核錯体の形成をモデル化し、量子化学計算による全ての化合物の安定性を調べて反応経路図を作成した。この結果から、2核錯体が最も安定な構造となることが示され、計算からも2核錯体が安定に存在する可能性を示唆することができた。この成果は、日本放射化学学会年会にて優秀発表賞を受賞した。以上の成果は、Noの結果を議論する上で重要なサポートとなった。

● Noのクラウンエーテル錯体

クラウンエーテルは、イオン半径により錯体の安定性が異なるため、これまでの化学研究とは違って新しくイオン半径の依存性を観測できる可能性があると考え、基礎実験を開始した。また、安定な錯体を形成するには1:1で配位し、クラウンエーテルの輪の中に金属イオンが取り込まれるという構造を有するため、構造が定めやすく、計算に適しているという利点も考えた。2族元素に対してはクラウンエーテル樹脂を用いた固液抽出挙動をRaまで含めて調べることができた。イオン半径との適合性から予想通りSrに対して最も高い分配係数が得られ、計算結果もこれを支持した。

また、実際の構造を調べるためにXAFS分光測定を行った。これにより硝酸系ではクラウンエーテルの中に金属が取り込まれた上で、上下に硝酸イオンが配位していることが分かり、塩酸系では、塩化物イオンが配位せず、おそらく水分子が配位していることなどが分かった。

加速器オンラインの実験装置を用いた抽出実験にも成功し、迅速に正しい分配比が求まることが示された。それゆえ、その後実際にNoの製造と化学実験を実現することができた。これにより非常に重要な知見を得ることに至った。

Noに関しては、安定な錯体の構造どころか反応前の水和構造すら分かっていなかった。そこで、重元素のMD計算に取り組んだ。同族元素に対する計算から適切な条件や関数を決定し、相対論を考慮した計算によりNoの水和に関する情報を得ることができた(J. Phys. Chem. A, 2024, 128, 2717)。クラウンエーテル錯体の構造は実験的に得られているため、水和構造を初期状態として用いることで錯形成における安定性をギブズ自由エネルギー変化などから議論することにつながった。2族元素およびNoの全ての元素に対して実験結果を非常によく再現する計算結果を得ることができた。水和から錯体いたるまでの構造、さらには電子状態まで全てにおいて相対論効果の影響の大きさなどを観測することができ、適切な条件にて実験データを再現する相対論化学計算が行えたことは、本研究分野における非常に大きな発展といえる。実際に、錯体の電子状態を観測することでNoが2族元素とは異なった化学結合性を有しているという大きな成果が得られた。

● Noの硫酸錯体

Noの沈殿挙動を調べた研究としては、上記に示したようにこれまでに水酸化物系でのデータが得られている。しかし、多核錯体の形成という問題点が指摘されていた。2族元素に特徴的な化学反応、安定な沈殿としては硫酸沈殿が挙げられる。そこで、新たに硫酸系での共沈実験のための基礎実験を行った。Raを含めた2族元素の沈殿挙動、共沈挙動を調べ、これらの挙動が一致していること、元素によって収率に大きな差があり、収率とその硫酸濃度依存性から錯形成の性質を調べられることを明らかにした。構造に関しては、量子化学計算の助力を得た。

この反応系において、加速器オンラインの迅速実験のための装置を用いた実験手法の確立、実験条件の決定まで成功したため、実際にNoの共沈実験を実現することができた。結果として、得られた収率は、イオン半径からの予測から外れていた。この反応系に関しては、まだ高度に相対論を考慮した計算にまでは至っていないが、スカラーレベルでの相対論計算までは行い、その解析の結果、2族元素とは異なる配位子からの電子供与が観測された。

● Noのシュウ酸錯体

金属イオンの半径依存性が観測されることが期待できる多座の有機配位子としてシュウ酸系に着目し、実験を行った。2族元素を用いた基礎実験では、平衡到達時間に対して沈殿と共沈の間、さらには元素間で明確な差がみられた。基礎実験から沈殿の核生成と成長に関してはCaはNoの実験に適用できるほど早いことが分かり、他の元素においてもCaを担体とすると早い反応が観測されたので、No実験へ適用可能と判断した。ただし、沈殿試料の α 線スペクトルの分解能が悪く、課題としては残った。これは沈殿が結晶性であったことが原因と考えられる。錯体の構造に関しては、様々な構造で計算した結果、いくつか安定な構造として錯体が存在しそうであることが分かった。

シュウ酸系においてもNoの実験を実現することができた。 α 線スペクトルのエネルギー分解能が悪く、収率に大きな誤差が付くという課題の残る結果であったが、収率が幅広い濃度条件において100%近く高いことは明確に示された。Caとの類似性は示すことができたが、それ以上の情報を得ることができなかったため、キャリア元素の変更など今後の発展が期待される。

● Rfの水酸化物錯体

Rfの水酸化物沈殿挙動はすでに調べられており、同族元素との比較から同族元素とは異なる興味深い性質が議論されていた。本研究では、特に同族元素に対する量子化学計算によってそのデータを考察するためのサポートを行った。1原子としてしか存在しない重元素に対しては、分光

分析などは適用できず、形成された錯体の構造や特に配位数が分からないことが大きな課題といえる。その水和構造すら分からないため、計算による実験データのサポートは困難であった。本研究系では、中性の水酸化物沈殿 ($M(OH)_4$) に対してさらに水酸化物イオンの配位が進んで錯イオンとなって溶解することが共沈収率に作用していると考え、この配位の反応だけに特化して計算することで同族元素間の差異を観測することにした。この結果、反応のエネルギー変化が実験値を非常によく再現することがわかり、強力に実験データをサポートすることができた。さらに、重元素の化学ではあまり注目されてこなかった各電子軌道の化学結合への寄与を示すことで Rf の化学、今後の計算発展の興味深さを示すことができた (Nat. Chem. 2021, 13, 226)。

● Rf のシュウ酸、マロン酸錯体

4 族元素との特徴的な化学反応により安定な沈殿を生成する配位子として、2 座で配位するシュウ酸とマロン酸などが挙げられる。このような配位子と超アクチノイドとの反応を調べた例はなく、多座配意する配位子も例が少ないため新しい知見が得られると考えられる。そこで、4 族元素である Zr、Hf および Th を用いて基礎実験を行った。

マクロ量の安定な金属を用いた沈殿実験の結果から、シュウ酸を用いた場合には、Th と Zr が安定に沈殿を生成し、幅広い濃度条件で収率が 100% となることが分かった。ただし、迅速に反応を進行させるためにはある程度昇温する必要があり、Rf の実験へ適用するためには 80 度に温める必要があることが分かった。ただし、化学的性質が非常によく似ていることが知られており、相互分離困難な Zr と Hf で沈殿収率に非常に大きな差が観測された。これは非常に稀な反応系であり、Rf の性質を計算の助力を得て調べる上では興味深い。次に、Th をキャリアとして選定し、放射性核種である ^{88}Zr と ^{175}Hf を核反応により生成し、これらキャリアフリーの RI を用いて共沈実験を行った。その結果、共沈の収率が沈殿の挙動を再現することが分かり、Rf 実験への適用性が示された。ただし、Th の α 線スペクトルから調べたエネルギー分解能は、少し悪く、問題となることが分かった。

マロン酸を使用した実験では、反応がさらに遅く、68 秒の半減期を有する ^{261}Rf の実験へ適用するためには 90 度以上の温度条件での反応が必要であることがわかった。次に、共沈実験の結果としては、沈殿挙動を再現することが確認でき、共沈挙動から沈殿生成に関する性質を調べられることを示すことができた。

● Rf の HDBP 及び HDEDTP 錯体

4 族元素である Rf の新しい化学反応系での実験を目指し、配位部位に硫黄を持つ配位子 HDEDTP を用いた液液抽出実験を Zr と Hf に対して実施した。比較対象として同様の構造を持ち、配位部位が酸素となる HDBP も用いて実験を行うこととした。基礎実験として放射性の Zr と Hf のトレーサを用いて抽出実験を行い、分配係数の時間依存性を観測した。結果として、HDBP を用いた場合は、数分以内に平衡到達する迅速な反応を確認することができた。また、Zr と Hf の分配比に若干の差も観測された。量子科学計算において、その錯体の電子状態を解析することで、Zr と Hf の錯体においては基本的に非常に似ていることが確認でき、実験データと整合性があることが確認された。HDEDTP に関しては、錯体が支配的に形成される条件を見つけれられていない。ただし、Rf がよりソフトな反応性を持つ場合、Rf だけが低い分配係数を示すことも期待でき、興味深い反応系となる可能性が考えられる。

● Rf 硝酸錯体の陰イオン交換実験を目指した基礎研究

Zr、Hf および Th が硝酸イオンと形成する錯イオンに関して、いくつかの基底関数や計算手法の組み合わせを用いて、水溶液中での構造最適化を実施した。得られた構造で錯体の安定性を求め、実験結果と比較したところ、計算結果は実験結果を概ね再現しており、 $[\text{Th}(\text{NO}_3)_6]^{2-}$ の安定性が裏付けられるとともに、Zr や Hf と比較してわずかな共有原子価を有することが示唆された。

● ランタノイドにおける相対論効果とスピン状態の検討

スピン軌道相互作用の考慮は、化合物のスピン状態の決定にも重要となる。計算によるスピン軌道相互作用の取り込みの妥当性を検証するために、ランタノイド化合物で実験的に得られている磁気測定の結果と計算結果を比較することにより、計算結果の妥当性を議論した (Dalton Trans., 2023, 52, 8873-8882)

● 化合物におけるスピン状態変化に関する研究

上記ランタノイドの系以外にも、実験結果によって得られているさまざまな化合物のスピン状態変化に関して、理論計算により原理の解明に成功した。例えば、第 5 周期元素を含む化合物系において、わずかの構造変化により電荷とスピン状態が変化する現状が発見されたが、上記で検証した方法論を用いた理論計算を適用することにより、その原理を解明することに成功した (J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 26179-26189)。また、上記の方法論は、複数のスピンを有し、特異な磁気挙動を示す化合物にも適用され、その原理の解明に成功している (Chem. Eur. J., 2023, 29, e202301009)。また、一部の有機化合物では、スピン状態を変化させるとの電気伝導性などの物性も変化する可能性があることを、理論計算により示すことに成功した (Nanomaterials, 2024, 14(1), 98)。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 E. Watanabe, Y. Kasamatsu, T. Yokokita, S. Hayami, K. Tonai, H. Ninomiya, N. Kondo, Y. Shigekawa, H. Haba, Y. Kitagawa, M. Nakano, A. Shinohara	4. 巻 40
2. 論文標題 Anion-exchange Experiment of Zr, Hf, and Th in HNO ₃ and Quantum Chemical Study on the Nitrate Complexes toward Chemical Research on Element 104, Rf	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Solv. Extr. Ion Exch.	6. 最初と最後の頁 590-605
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/07366299.2021.2020956	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Kasamatsu, M. Nagase, H. Ninomiya, E. Watanabe, Y. Shigekawa, N. Kondo, K. Takamiya, T. Ohtsuki, N. Shiohara, A. Shinohara	4. 巻 179
2. 論文標題 Coprecipitation with samarium hydroxide using multitracer produced through neutron-induced fission of ²³⁵ U toward chemical study of heavy elements	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Appl. Radiat. Isot.	6. 最初と最後の頁 110006/1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.apradiso.2021.110006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 1件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 渡邊 瑛介、笠松 良崇、横北 卓也、中西 諒平、大高 咲希、板倉 悠大、益田 遼太郎、王 瑞麟、重河 優大、南部 明弘、殷 小杰、羽場 宏光、高宮 幸一、篠原 厚
2. 発表標題 クラウンエーテルを用いた102番元素ノーベリウムの硝酸系固液抽出実験
3. 学会等名 日本放射化学会第66回討論会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中西 諒平、渡邊 瑛介、大高 咲希、王 瑞麟、板倉 悠大、速水 翔、羽場 宏光、南部 明弘、篠原厚、笠松 良崇
2. 発表標題 Rfの共沈実験に向けたZr, Hf, Thのシュウ酸、マロン酸系でのフロー式共沈実験
3. 学会等名 日本放射化学会第66回討論会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大高 咲希、笠松 良崇、渡邊 瑛介、中西 諒平、速水 翔、澤村 慶、篠原 厚
2. 発表標題 ノーベリウムの化学的性質解明にむけた2族元素の水酸化物及び硫酸沈殿実験と化学種分析
3. 学会等名 日本放射化学会第66回討論会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡邊 瑛介
2. 発表標題 クラウンエーテルを用いた 102 番元素ノーベリウムの抽出実験と抽出錯体の相対論的量子化学計算
3. 学会等名 2022重元素化学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 A Quantum Chemical Approach to Magnetic Molecules and Its Application
3. 学会等名 The 73rd Yamada Conference & IMR International Symposium, Invited talk, Tohoku University, Japan, October 8-11, 2022. (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北河康隆
2. 発表標題 多核金属錯体の機能発現機構解明に向けた量子化学的アプローチ
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ2022「複雑電子状態の理論・計算科学」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 渡邊瑛介、笠松良崇、中西諒平、大高咲希、高宮幸一、篠原厚
2. 発表標題 ノーベリウムの化学研究に向けたCa, Sr, Ba, Raのクラウンエーテルによる固液抽出
3. 学会等名 日本放射化学会第65回討論会 (2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊瑛介、笠松良崇、中西諒平、大高咲希、中嶋隆人、篠原厚
2. 発表標題 第一原理分子動力学計算によるノーベリウムの水和構造の理論研究
3. 学会等名 日本放射化学会第65回討論会 (2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中西諒平、笠松良崇、渡邊瑛介、大高咲希、篠原厚
2. 発表標題 Rfの共沈実験に向けたZr, Hf, Th, Euのシュウ酸、マロン酸沈殿実験
3. 学会等名 日本放射化学会第65回討論会 (2021)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	北河 康隆 (Kitagawa Yasutaka) (60362612)	大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------