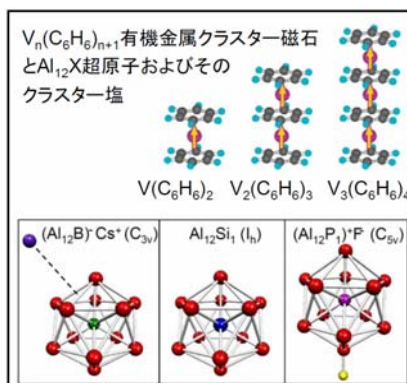


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-7. クラスタ
小項目	1-7-15. ナノクラスタの複合化と機能デザインによる材料化

概要（200字以内）

気相生成させたナノクラスタでは、新奇な構造と電子状態にもとづく多様な機能性が見出されている。特に、複数の元素の組み合わせや無機・有機化合物の融合によってナノクラスタを複合化すると、多様な物性発現とともに機能化する自由度の増大が実現できる。近年確立されたソフトランディング法を用いると、気相生成された機能ナノクラスタを組成やサイズを選別して基板上に二次元物質を構築することが可能となっている。



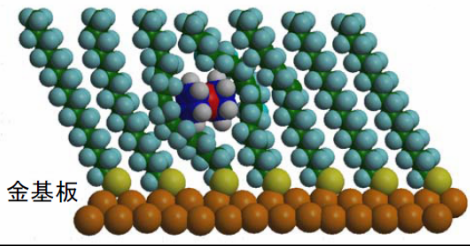
現状と最前線

原子・分子レベルで物質の組織・構造の制御を行ない、光や磁気を用いて電子状態と電子スピンの応答を利用する機能材料を制御的に合成する手法は、極めて重要な次世代技術である。ナノクラスタは、原子・分子の気相孤立系と、固体・液体の凝集系（バルク）との「中間相」に位置付けられ、溶液や固体中における様々な構造、電子状態、反応を原子・分子レベルで理解するための微視的モデルを提供し、さらには新ナノ物質の供給源として期待される。ここで、ナノクラスタとは、原子や分子が数個から数百個凝集したナノメータースケールのナノ構造体である。すなわち、原子・分子の基本単位とアボガドロ数個程度のバルクの化学物質との中間の領域で、集合数の上からは、「少数多体系」と呼ばれる新たな階層を形成している。少数多体系としてのナノクラスタが、新たな階層としての位置づけられる1つの理由は、この1-10 nm 前後のナノクラスタが、材料科学的な視点から見たときに、発光特性、磁気特性、エネルギー変換特性といった「機能」を発現する基本単位であると考えられるからである。

これらのナノクラスタの研究の中から、微視的なモデルの視点を越えて、電子殻モデルや構造ゆらぎなどの新しい概念が創出されているばかりでなく、フラーレンやカーボンナノチューブに代表されるような様々な新ナノ物質が生まれてきた。特に、これらの新物質は「気相反応場」から生まれており、気相反応は機能性物質を生み出すボトムアップ創成法として重要である。また、ナノクラスタを元素の組み合わせや無機・有機化合物の融合によって複合化させると、ナノクラスタの物性を最適化するパラメーターを多様化できるばかりか、少数多体系の物質群の豊かな物質科学が展開できる。

これまでの研究から、金属ナノクラスターの反応性を、集合原子数を1つ1つ区別して評価することにより、触媒活性サイトの微視的な描像が得られてきている。また、金属原子と有機分子とをハイブリッド化した有機金属ナノクラスターでは、多層一次元構造の強磁性ナノクラスターが自在に創成でき、また、遷移金属とケイ素原子からは金属原子を内包

アルカンチオール自己組織化単分子膜にソフトランディングされた有機金属クラスター



したケイ素ケージ化合物が生成できる。このようなナノクラスターの種々の物性を利用して、特定のサイズ・組成のナノクラスターが有する機能を最大限に活かした材料創製を実現させるためには、ナノクラスターをサイズ選別して固体表面上に均一に集積することが必要である。

ソフトランディング法を利用すると、気相中で生成させたナノクラスターを基板表面上に大量に集積できる。ただし、ナノクラスターによる機能材料を実現するには、基板表面上でのナノクラスターの配向や二次元配列といった吸着状態を制御することが重要である。とりわけ、吸着状態の制御の上では、ナノクラスターの機能性に合わせた適切な基板選択が重要である。たとえば、金属クラスターを利用した触媒活性な表面を創出するためには、固定部位の構造と電子状態が金属クラスターの活性を大きく左右する。また、機能ナノクラスターの固定化では、室温以上でも捕捉できることとともに、基板との相互作用によってその機能性が大きく損なわれない工夫が必要であり、この点では自己組織化単分子膜 (SAM) の利用が効果的であることが示されている。

今後、基板表面上でのナノクラスターの吸着状態を、均一な表面基板や化学修飾によって精密に制御する方法の拡充を進めると、触媒活性の高い基板構築やナノクラスターを機能単位とする新しいナノクラスター2次元物質系が生成可能であると期待されている。このナノクラスター2次元物質系の電子物性については、次元性という新たな視点が与えられる可能性を秘めており、極めて豊かな新しいナノクラスター機能物質の科学が大きく広がっている。

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

機能ナノクラスターの気相中での選択的、効率的生成方法の確立

固定基板上での機能クラスターの担持状態評価法の高感度化と多様化

固定基板の精密設計法の構築と機能ナノクラスターの周期配列制御による固定化

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

高輝度放射光などを用いた機能クラスターの精密構造決定

担持状態での電子状態と構造揺らぎのナノスケール制御

機能ナノクラスターの反応過程の実時間観測

キーワード

機能ナノクラスター、ソフトランディング法、気相反応場、クラスター磁石、触媒活性

(執筆者： 中嶋 敦)