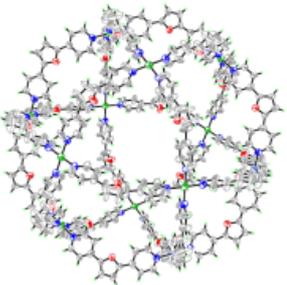
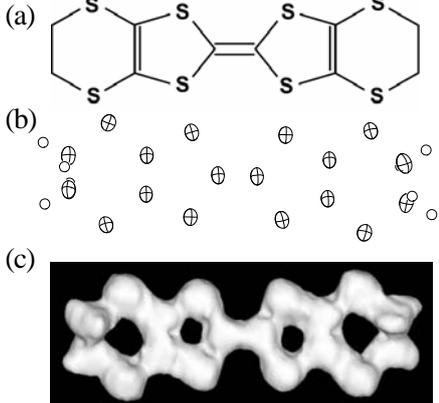


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-2. 固体構造と機能
小項目	3-2-13. 放射光と結晶構造

概要（200字以内）	
放射光を用いた構造解析により，実験室系では測定不可能である，微小結晶試料，電荷密度解析，外場応答や特定元素の局所対称性の直接観測などが可能である。高精度な構造情報は物質開発にきわめて重要な知見を与えるが，最近では更に非弾性散乱による格子の分散関係の研究や，時分割測定による反応過程の追跡，小角散乱によるマクロモレキュールのイメージングによる解析など多彩な対象への適用が可能である。	 <p>自己集合した立方八面体型の球状カプセル構造[1]</p>
現状と最前線	
<p>新物質の作成を側面からサポートする分析技術の中で，特に大型施設である放射光を用いた構造解析は，その結晶構造だけでなく電子状態までも議論できるレベルに高まってきており，この分野での重要な位置づけである。通常，合成された物質の構造同定は実験室系で行われるが，重原子と軽元素が混在している金属錯体など，実験室系では精密化が極めて難しい物質には標準的な利用と位置づけられる。結晶構造を可視化するだけではなく電子状態の計算などに利用できるだけの精度の構造情報を得る，または結合電子の状態を直接観測するためには，質の高い回折現象を用いた構造解析的な手法を利用することが必要である。分子性導体で有名なBEDT-TTF分子を例に挙げる。図1(a)の分子構造で描かれている結合は，通常の構造精密化においては無視しており，元素種とその位置，回転楕円体近似を用いた熱振動パラメータによってモデル化するが(b)，放射光のデータを用いて精密な解析を行えば，現実の物質の結合電子を直接観測することが可能である(c)。この手法を用いて，わが国で数多く開発された金属内包フラーレンなどの構造解析が放射光によって数多く報告された。また，合成の初期には得られるサイズが小さい，または結晶化が難しく微小結晶しかえられない，更に最近では自己凝縮化などにより構成分子のサイズが小さくても，複雑な配位結合により大きなユニットセルを持っているような結晶の構造解析は，構成元素主に最適な波長を選択可能な高輝度X線を用いることで比較的容</p>	 <p>図1. BEDT-TTF分子の(a)構造式，(b)回転楕円体近似の構造モデル，(c)再構築された電荷密度分布</p>

易に精密な情報を得ることが出来る。用できるメリットは化学合成の観点からも有用である。最近では、高輝度であることを用いて、外場応答などによる微小な変化を明らかにするという試みも進んできている。わが国には、世界的に見てもユニークな時分割専用放射光ビームラインがある(KEK PF-AR NW14A)。ここでは、放射光のパルス性を積極的に利用し、レーザーなどの外場とのタイミングを制御することによって光誘起などによる非平衡な状態の観測だけでなく、液体中の分子の変化や分子性薄膜の外場応答など多くの対象に対して研究が行われている。

一方、放射光を用いた構造解析的な手法の一つとして、異常分散光を利用した位相決定の手法が古くから知られている。これをさらに進めた、共鳴散乱法を用いると遷移金属の結晶場の変化を精密に議論することが出来る。この手法はわが国で最初マンガン酸化物における巨大磁気抵抗の発現物質に対して重要な成果をあげ、例えば構造変化が極めて小さい価数の変化や軌道状態の変化を観測可能である。この手法を用いると、機能を発現する物質の構造解析を行うことなく、結晶学的に重要な情報を得ることが出来る。生体分子中での鉄の価数の変化など金属錯体など多くの物質群に適用可能であり、今後の発展が期待される。更に、中性子回折の独断場であった磁気構造の決定も、高輝度X線回折による磁気散乱の測定が可能となりキラル磁性体などに成果が上がっており、今後マルチフェルイクスなどの新規物質群の解析にも展開していくと予想される。

Ref.1 Takumi Yamaguchi, Shohei Tashiro, Masahide Tominaga, Masaki Kawano, Tomoji Ozeki, Makoto Fujita: A 3.5-nm coordination nanotube. *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 10818-10819 (2004)

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

新機能物質の開発の現場と放射光などの大型施設の直接のネットワークがもっと完備され、十分なリソースの活用が望まれる。高効率の測定技術や超高精度の計測技術開発が、放射光の十分な特性を活かすために必要である。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

わが国はまもなく新しい光であるXFELを生み出す。これは、かつて人類が手にしたことのないX線領域のレーザー光であり、新しい分野の幕開けとなる。例えば、結晶でなくとも機能性分子の単体構造解析が可能となる。更に強励起状態の電子の科学が拓かれるであろう。

キーワード

放射光、構造解析、粉末回折、マキシマムエントロピー法、共鳴散乱法、時分割測定、光誘起、X線自由電子レーザー、単分子構造解析

(執筆者： 澤 博)