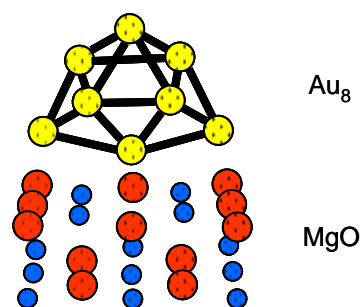


ディビジョン番号	14
ディビジョン名	ナノテク・材料化学

大項目	1. ナノ物質
中項目	1-2. 無機材料、金属材料
小項目	1-2-8. クラスタ

概要（200字以内）

クラスタは、バルクとは異なる特異な性質を示し、その性質はサイズに依存して顕著に変化する。金属クラスタの構造、反応性、磁性、光学特性の知見を踏まえて、すべての物質のサイズ効果として普遍的なものは何かを明らかにすること、およびその材料化、多成分・多元素クラスタへの展開が、今後クラスタの研究に求められる方向性である。また、自由電子レーザーの導入やコンピュータの高速化が、クラスタ研究を飛躍的に進めると期待される。



酸化マグネシウム表面上の金 8 量体クラスタの構造。CO の酸化反応に触媒活性を持つことが知られている。

現状と最前線

原子が2個～数千個程度集合した物質群をクラスタという。クラスタは気相に孤立したもの（気相クラスタ）、液相に分散されたもの、固体表面に担持されたもの、格子の中に閉じ込められたものなどさまざまな存在形態をとる。もともとは気相クラスタの分野でのみクラスタという言葉が使われていたが、近年では化学の広い分野でクラスタという概念が用いられるようになってきている。ここでは、クラスタの、物質としての本質を明らかにするため不可欠な気相クラスタ研究について報告する。

クラスタは構成原子数（サイズ）に依存して、その性質が顕著に変化し、またバルクとも異なるという特徴がある。また、一般に、気相クラスタは安定ではない。したがって、生成から分離、分析までを *in situ* で行う必要があり、そのために適した装置開発をおこなうことから実験的研究が始まる。気相クラスタの研究の大きなテーマは、クラスタの構造、物性、反応性のサイズ効果をさまざまな実験手法を駆使して明らかにすることである。特に、質量分析器と光解離分光法、光電子分光法を組み合わせた手法は、もっともよく使われる最先端の手法である。これまで多くの元素のクラスタが生成され、その構造や物性、反応性が明らかにされている。さらにそれを進めて、すべての物質のサイズ効果として普遍的なものは何かを明らかにすることが、今後クラスタの研究に求められる1つの方向性である。

またこれらの分光法に関連して、近年、自由電子レーザーが開発され、 100 cm^{-1} 領域の分光が可能となっている。これは、クラスターの骨格振動のエネルギー領域に相当し、クラスターの構造解析に決定的な役割を果たしており、今後研究が広がる可能性がある。

一方で、気相クラスターを長時間その組成を変えずに保持するために、固体表面上にのせ（ソフトランディング）、基板上に担持させることで、反応性や磁性を調べる研究が進展している。特に、Heizらによる金クラスターの触媒活性のサイズ効果の研究が有名である（図参照）。

近年、量子化学計算の著しい発展によって、これまで難しいとされてきた重金属の金属クラスターの理論計算が可能になってきた。これにより、実験的な研究と理論計算をあわせて議論することにより、構造や物性に対してより厳密な議論が可能となっている。

気相クラスターは単元素から多元素（複数の元素を含むクラスター）へと広がりつつある。単元素では単にサイズという軸しかなかったが、多元素のクラスターには無限の組み合わせがある。また、元素どうしの相乗効果によって新しい物質群が生成する可能性がある。これらの研究は、原子同士の結合という基礎的な知見から、新しい機能を持つ物質の探索という広がりのある研究ターゲットとなるだろう。

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

- ① 単元素からなるクラスターについて、さまざまな分光法による構造解析がすすみ、さらにクラスター特有の反応性・物性のサイズ依存性の解析が進む。これらについて、すべての物質のサイズ効果を議論できる普遍的なものが明らかされること。
- ② 重原子を数多く含む金属クラスターは、これまで量子化学計算によって正確な解析ができなかった。今後、グリッドコンピューターなどを含むコンピューターの高速化によって、サイズの大きな金属クラスターの量子化学計算による構造解析が可能となり、理論計算による物性の予測が可能となること。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

- ① 多元素・多成分クラスターは、まだ未開拓の分野であり、この分野が発展すると考えられる。そのために無限に近い元素の組み合わせから、目的とする性質を持ったクラスターを高速で探索する方法論が開発されること。
- ② 上記ソフトランディングなどによって、クラスターを直接材料化すること。あるいは、クラスター化学の研究から新物質の材料開発の指針を得て、材料を開発すること。

キーワード

サイズ効果、分光、構造解析、反応性、多元素・多成分クラスター

(執筆者：真船文隆)