

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	3. ナノ計測・分析
中項目	3-1. 計測
小項目	3-1-10. 放射光X線回折

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な試料、電荷密度解析、光誘起などの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。特に、機能性材料を目指すナノ物質のその場観測によって、例えばガス分子の吸蔵されていく様子を可視化することが出来る。実空間での高精度の構造情報はナノ物質開発にきわめて重要な知見を与える。今後は更に強力なX線自由電子レーザーによってナノ単分子解析が可能となる。

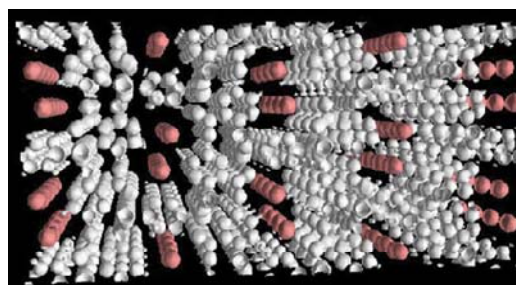


図1. 酸素分子が吸蔵されたナノチャンネル構造[1]

現状と最前線

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ナノマテリアルの構造解析は、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、構造同定は実験室系で行われるが、ナノマテリアルの機能と密接に絡んだ解析や軽元素などの実験室系では観測が極めて難しい物質の測定には、もはや標準的な利用と位置づけられている。ナノマテリアルの分野で最初に重要な知見を与えたのは、やはりフラーレンの同定であろう。20年近く前に高温超伝導の発見によって原子像の直接観測が可能であることから、物性研究において不動の位置を占めた電子顕微鏡やトンネル顕微鏡などは、物質の直接観測という観点からは注目を集めたが、単に原子像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ためには、やはり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。 C_{60} 、 C_{70} などのフラーレンの構造情報については多くの観測結果が報告されたが、その後わが国で数多く開発された金属内包フラーレンの構造解析は、放射光の独断場となったといえよう。特に世界最大の放射光施設 SPring-8 における構造研究は、それまで比較的狭い範囲のユーザーに限られていた放射光利用を、化学合成を主体として物質開発をしている研究者に広く知らしめて、数多くの評価の高い成果が報告されている。この理由は、多種多様なナノマテリアルの合

成が微量の試料でしか得られず微粉末結晶によって合成されることが多いなどの理由による。新規性の高い物質がマイクログラム程度の試料から構造同定することが可能であれば、合成化学の分野の受ける恩恵は計り知れない。精度の高い粉末回折図形を用いて、電子密度分布を精度良く求めることが出来るマキシマムエントロピー法、未知物質の粉末試料による構造同定の新しいロジックなど、

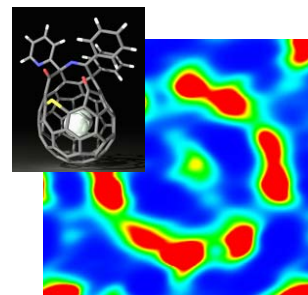


図1. 開口 C60 に内包された水素分子の電子密度分布 [2]

計算科学の発展もこれらの新規物質の開発に重要な役割を担っている。一方、化学合成的に水素分子を C₆₀ に封じ込めることに世界で初めて成功した水素内包フラーレンの単結晶を用いて、高エネルギー加速器研究機構の放射光施設で水素分子単体の直接観測にも初めて成功した(図1)。わが国のこの分野の研究者は分野を越えた協力研究体制が充実しており、世界的にも例を見ない。

一方、薄膜デバイスなどの分野の試料は普通の測定では構造情報を得ることが難しい。有機薄膜など今後この分野の観測技術の必要性はますます多くなっていくことが予想される。わが国で開発された放射光による共鳴散乱という手法を用いると、金属酸化物薄膜、金属錯体、生体分子中の遷移金属の電子状態の変化による機能発現など様々な分野に放射光散乱測定が応用可能である。この手法は遷移金属の局所対称性の変化の観測であり、構造解析よりも簡便に光などの外場の応答や圧力・温度などの環境の変化によってどのような機能を発現するかを時系列で追いかけることも可能となる。最近では、時分割 X 線回折による構造解析的な手法も重要な位置づけとなり、つくばの KEK PF-AR には世界で類を見ない時分割専用ビームラインが建設され、世界中から共同研究の申し込みがあり成果があがりつつある。

References: 1) *Science*, 298 (2002), 2358-2361, 2) *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44, 1981-1983

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かった 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。この新しい技術への、ナノマテリアル開発者の積極的な関与が今後 10 年間の課題となろう。

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: 澤博)