

出来る限り、以下の様式に沿った議事録を作成下さいますようお願いいたします。

(様式 2)

議事録番号

提出 28 年 9 月 16 日

## 会合議事録

研究会名：結晶化学研究会

日 時：2016 年 8 月 30 日 16:30-18:00

場 所：関西学院大学神戸三田キャンパス VII 号館 113 教室

出席者：(議事録記載者に下線)

植草秀裕 (東京工業大学)

小澤芳樹 (兵庫県立大学)

尾関智二 (日本大学)

杵渕 幸 (藤田保健衛生大学)

清川多美子 (昭和薬科大学)

橋爪大輔 (理化学研究所)

安田伸広 (高輝度光科学研究センター)

計 7 名 (五十音順、敬称略)

議題：結晶化学分野における放射光 X 線ビームラインの現状報告と最近の研究  
例紹介および将来計画に関する報告

プログラム：

1. 16:30-16:50 講演 1：「BL40XU ガンドルフィーカメラ法によるマグネシウム合金の熱膨張率の精密決定」安田伸広 (高輝度光科学研究センター)
2. 17:10-17:30 講演 2：「PF AR NW2A, NE3A を利用した巨大球状ポリオキシメタレート結晶の湿度応答構造変化」尾関智二 (日本大学)
3. 16:50-17:10 講演 3：「BL04B2, BL10XU, BL02B1 を利用した多核金属錯体の発光挙動と結晶構造の圧力依存性」小澤芳樹 (兵庫県立大学)
4. 17:30-18:00 討議：「SPring-8 次期計画と結晶化学関連ビームラインの性能向上と新しい利用技術開拓」

議事内容：

プログラム番号に沿った発表及び討議内容は以下のとおり。

1. JASRI 安田伸広 博士より、始めに結晶化学関連の結晶回折ビームラインお

よび実験ステーションの現状と利用成果について報告があった。

BL40XU ピンポイント単結晶計測装置は、 $\chi 45^\circ$ 固定のゴニオメータがとりつけられ、 $\phi$ および $\omega$ 軸が自動で回転できるようになり、コンプリートネスの高いデータがほぼ自動で収集できるようになっている。 $\phi$ 軸の回転により、ガンドルフィーカメラとしての計測も可能となっていることが報告された。

結晶化学関連ビームライン利用研究の成果として論文出版数の推移を示した。研究会が中心となって利用促進を始めた2011年から順調に論文数が増えていて、2016年も既に例年の半数を越える論文が発表されていることが報告された。

前述のピンポイント計測装置ゴニオメータのガンドルフィーカメラモード測定を利用した成果として、マグネシウム合金の膨張係数の温度変化に関する自身の研究成果について講演した。長周期積層構造を持つ、マグネシウム合金(18R-Mg<sub>85</sub>Zn<sub>6</sub>Y<sub>9</sub>)の熱膨張係数を精密に測定するために、多結晶試料を Gandolfi camera アタッチメントに取り付け、擬似粉末回折像から格子定数を精密化した。Mg合金は、純粋な $\alpha$ -Mgに比べて熱膨張係数が小さいことが明らかになった。

2. 日本大学の尾関智二教授より、PF AR NW2A, NE3A を利用した巨大ポリオキシメタレート結晶の湿度に対する結晶構造の応答性の研究について発表があった。モリブデンあるいはタングステン 130 個からなる巨大球状分子構造をもつ Keplerate 型ポリオキシメレート [Mo<sub>132</sub>O<sub>372</sub>(CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>)<sub>30</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>72</sub>]<sup>42-</sup>を含む立方晶の結晶は、周りの湿度によって結晶構造を保ったまま結晶水が出入りすることにより格子定数が可逆的に変化することができる。結晶を任意の湿度環境に保ったままX線回折測定が可能な湿度制御装置の紹介と放射光X線を用いた実験結果を発表した。
3. 兵庫県立大学の小澤芳樹准教授により、ダイヤモンドアンビルセルを用いた、発光性多核錯体結晶の高圧下での発光挙動の圧力変化と粉末結晶および単結晶X線構造解析の組み合わせによる、構造変化と発光挙動の相関に関する研究成果を発表した。ヨウ素架橋銅(I)あるいは銀(I)4核キューバン型錯体の結晶は、紫外光照射で可視部に強い発光を示すが、高圧下では発光エネルギーが低下する圧力応答性を示す。この原因は、高圧下で分子の中心にある M<sub>4</sub>I<sub>4</sub> の立方体型クラスター骨格が外部圧力により変形し、金属原子間距離が大きく短縮することによる電子状態の変化に起因することを示した。

4. SPring-8-II 計画に対し、結晶化学研究関連ビームラインへの影響について評価し、ビームライン、実験ステーションの性能向上、高度化、実験環境の改善について議論した。特に、実験申請-実施のサイクル、エネルギー分布を中心とした次期計画のビーム性能、回折計の性能向上への期待と要望の意見が多かった。詳細は「動向調査報告書」で述べる。

\*A4 縦

\*会合で使用した 資料（差し支えないもの）を添付してください。