

結晶化学研究会活動報告書

※ 全体で2ページ以内（厳守）に収まるようにご記入願います。

1. 代表者、副代表者

代表者 氏名（所属）：小澤芳樹（兵庫県立大学 大学院物質理学研究科）

副代表者 氏名（所属）：尾関智二（東京工業大学 大学院理工学研究科）

2. 研究会開催記録（日時、場所、特筆すべき内容（他の研究会との合同開催や学会との共催など））

- ・第1回、2006年8月26日、(株)三菱総合研究所 2F 大会議室：中性子利用促進研究会との合同会合。

茨城県に建設中の J-PARC の中性子利用促進研究会個別研究会「分子間反応場研究会」と合同で会合をおこない、相互に情報交換を行った。

- ・第2回、「結晶化学における放射光利用10年の歩みと将来の展望」2007年8月10日、SPring-8 中央管理棟3F テレビ会議室。

SPring-8 供用開始10年を迎えるにあたり、結晶化学研究分野でどのような研究が行われてきたか、ビームライン測定装置の充実発展について、第一線の研究者による研究の紹介と、将来にむけて結晶化学分野の放射光利用実験の展望や、それに対して実験設備、利用環境などはどうあるべきかについて、議論した。

3. 2カ年計画の遂行状況および目的の達成状況

1. 先端研究の促進

当初の計画で具体的な項目として上げた1.励起状態、遷移状態、準安定状態の分子の直接観察。2.結晶相反応のその場観察。3.分子の構造ダイナミクス、構造物性相関の高精度解析。

4. 極微小結晶のX線構造解析とその利用研究：については、放射光の高輝度で高エネルギー分解能を生かした研究の推進ができたと考えられる。特に BL02B1 の低温真空カメラにおける光励起構造解析、BL04B2 の高エネルギーX線ワイセンベルグカメラを用いた高精度X線構造解析は、実験室の装置では実現困難な精度をもつデータの収集で威力を発揮した。

2. 化学結晶学分野での放射光利用促進、利用研究者の拡大

放射光利用によるX線結晶回折実験が SPring-8 で簡単に実行できることを関連分野の研究者にもっと知ってもらうために、学会等を通じて放射光利用研究の魅力をアピールした。2007年度には、第57回錯体化学討論会で研究会世話人が中心となり「錯体化学で展開される結晶構造解析研究の最先端」の題目でシンポジウムを開催し、放射光を利用した最先端の研究を紹介した。実際に、研究会関連の申請実験課題は、この2年間で増えており、実験の中心となる BL02B1, BL04B2 ビームラインの利用時間は、2007A, B 各期でそれぞれ100シフト近くにも達していることから、目標を達成できたと考える。

3. SPring-8 における化学結晶分野の研究促進のための物的・人的環境の整備と実験支援体制の充実

利用促進の成果が上がることにより、新規施設利用者が増加し、ユーザのサポートの強化が必要となった。研究会では、これに対応すべく物理的、人的サポートの充実につながる提言をまとめ SPring-8 シンポジウムなどの機会に発表してきた。しかしながら、これらの活動は必ずしも施設の改善につながったとは言えない。むしろ個々の実験者が、ビームタイム利用報告書等を通じて具体的な要望を多数寄せることが効果的だったと考えられる。

4. 研究会活動により得られた成果

- ・利用者指定重点パワーユーザ課題を中心に、サイエンティフィックな支援を充実させ、放射

光利用研究者の拡大につなげることができた。

- 微小単結晶構造解析には、より高輝度のX線源が必要なことを、施設側に要望し、関連ビームラインで高集光サジタルモノクロメータの導入と定常的な運用の実現に協力した。

5. 研究論文発表リスト (主要なもの5編程度)

- Yamaguchi, T.; Yamamoto, Y.; Kinoshita, D.; Akiba, K.-y.; Zhang, Y.; Reed, C. A.; Hashizume, D.; Iwasaki, F. "Synthesis and Structure of a Hexacoordinate Carbon Compound" *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 6894-6895.
- Yamamoto, T.; Iijima, T.; Ozawa, Y.; Toriumi, K.; Kubota, K.; Sasaki, S., "Poly(*p*-phenylene)-type polymer composed of an (*R,R*)-C₂-symmetric chiral recurring unit: Solution behavior, packing structure, and large circular dichroism observed with a film of the polymer." *J. Poly. Sci. Part A: Polymer Chemistry* **2006**, *45*, 548-552.
- Sekiguchi, S.; Akagi, M.; Naito, J.; Yamamoto, Y.; Taji, H.; Kuwahara, S.; Watanabe, M.; Ozawa, Y.; Toriumi, K.; Harada, N., "Synthesis of Enantiopure Aliphatic Acetylene Alcohols and Determination of Their Absolute Configurations by ¹H NMR Anisotropy and/or X-ray Crystallography." *Eur. J. Org. Chem.*, **2008**, (13), 2313-2324.
- Sato, S.; Iida, J.; Suzuki, K.; Kawano, M.; Ozeki, T.; Fujita, M. "Fluorous Nanodroplets Structurally Confined in an Organopalladium Sphere" *Science* **2006**, *313*, 1273-1276.
- Tanaka, D.; Horike, S.; Kitagawa, S.; Ohba, M.; Hasegawa, M.; Ozawa, Y.; Toriumi, K., "Anthracene array-type porous coordination polymer with host-guest charge transfer interactions in excited states." *Chem. Commun.*, **2007**, 3142-3144.
- Shishido, S.; Ozeki, T. "The pH Dependent Nuclearity Variation of {Mo_{154-x}}-type Polyoxomolybdates and Tectonic Effect on Their Aggregations" *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *in press*.

6. 研究会Webページ (研究会の情報を公開しているWebページなどがあれば、URLをご記入ください。)

http://www.sci.u-hyogo.ac.jp/material/cryst_struct/LTVcam/sp8_sg/index.html

7. その他 (特筆すべきことがあれば、ご記入ください。)

本研究会は利用懇の利用促進委員会の趣旨に沿って SPring-8 における先端的研究への寄与を活動目的とし、研究分野で関連のある研究者が構成メンバーとなっている。しかしながら、サイエンス中心の研究会であればあるほど、「SPring-8でどうやったら先端研究を推進できるか施設側に提言する」のではなく「放射光利用の先端研究なら、どのビームライン（あるいは他の放射光施設）を使えば一番良い測定が可能か」の方にどうしても関心が集まってしまい、研究会が施設の高度化、利用環境の充実を実現するための十分な力にならなかったと感じた。実際の施設の改善・高度化に関わる提案は、パワーユーザなどの一部の施設利用者が利用報告書等を通じた要望によって、具体的に進展することとなった事案が多い。研究会—利用懇—SPring8/JASRIの流れに沿い、意見や要望のやり取りが、利用懇会員や施設利用者によりもっと分かりやすいような仕組みをきちんと作るべきだと考える。