

# 超精密結晶構造因子測定とその展開研究会活動報告書

## 1. 代表者、副代表者

代表者 氏名(所属): 田中 清明(名古屋工業大学大学院工学研究科)

副代表者 氏名(所属): 石澤 伸夫(名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター)  
佐々木 聡(東京工業大学応用セラミックス研究所)

## 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10月21日、SPRING-8 中央管理棟講堂
- ・第2回、2008年2月16日、東京大学本郷工学部6号館107会議室

## 3. 2カ年計画の遂行状況および目的の達成状況

X線精密解析の進歩に伴い、従来の研究室のX線回折装置による構造因子測定の精度が不十分になりつつある。そのため、現行より一桁上(0.1%)の測定精度を達成する手段として、放射光実験にかかる期待は大きい。本グループはそのために放射光実験で何が出来るかを議論する世界に公開されるフォーラムを創ることを目的として結成された。そのため、上記、2回の研究会の内容は、国内16名、海外7カ国15名のX線精密測定の各国を代表する研究者に紹介された。

2回の研究会で、一桁上の超精密測定を行うための装置、検出器について、各分野を代表する専門家の方々にご講演いただき、詳細に検討した。その結果、APDを検出器とする4軸回折計が、現在では、もっとも可能性のある方法と考えられるに至っている。高効率なAPDにより、反射強度の測定時間は秒単位に短縮されるため、超精密測定への道が開ける可能性が生まれた。しかし、測定時間のほとんどが四軸角度合わせに消費される欠点がある。貴重な放射光のビームタイムを勘案すると、角度設定を高速に行う四軸回折計を開発していく必要がある。

一桁上の測定精度の達成により、重原子を含む結晶の原子軌道関数や分子軌道関数等のこれまで回折実験だけでは得られなかった物理量が求められる可能性がある。そのため、物質科学におけるX線回折法の重要性が更に高まると考えられる。

本研究会の存続を望む声が内外から寄せられたが、本研究会の目的のひとつである超精密測定への道筋はついたと思われるので、本研究会の継続申請はしなかった。しかし、放射光の高度利用により、超精密測定が行えることは確実であるので、電子密度測定に特化したビームラインが、今後、SPRING-8に設置されることを期待している。

## 4. 研究会活動により得られた成果(例:研究会が核となり行った外部資金獲得の申請や実績、コンソーシアムの立ち上げ、新規ユーザーの開拓、施設の改善・高度化に関わる提案やその実績など)

本研究会は、放射光による超精密測定の可能性を探ることが主眼であったので、予算申請等は考えなかった。

## 5. 研究論文発表リスト(主要なもの5編程度)

研究会の会員の名前に下線を付した。

- ・ A New Large Radius Imaging Plate Camera for High-resolution and High-throughput Synchrotron

X-ray Powder Diffraction by Multi-exposure Method. Masahiko Tanaka, Yoshio Katsuya, and Akiji Yamamoto, *Review of Science Instruments* **79**,075106 (2008)

- An experimental electron density study on "1-zirconacyclopent-3-yne", Daisuke Hashizume and Teiji Chihara, *Chem. Commun.*, 1233-1235 (2006).

- Synthesis and structure of a Hexacoordinate Carbon Compound. T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, D. Hashizume, K. Akiba, Y. Zhang, C. A. Reed and Fujiko Iwasaki. *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 6894-6995 (2008).

- Structural Disorder and Diffusional Pathway of Oxide Ions in a Doped Pr<sub>2</sub>NiO<sub>4</sub>-Based Mixed Conductor M. Yashima, M. Enoki, T. Wakita, R. Ali, Y. Matsushita, F. Izumi and T. Ishihara, *J. Am. Chem. Soc. (Communications)*, **139**, 2762-2763 (2008).

- Structure and electron density of oxysulfide Sm<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4.9</sub> as a visible light responsive photocatalyst. M. Yashima, K. Ogisu and K. Domen, *Acta Crystallogr.* **B64**, 291-298 (2008).

- Structural Phase Transition of Gd<sub>3</sub>RuO<sub>7</sub>, N. Ishizawa, K. Tateishi, S. Kondo and T. Suga, *Inorg. Chem.*, **47**, 558-566 (2008).

- Synchrotron X-ray study of noncentrosymmetric Tb<sub>3</sub>RuO<sub>7</sub> with partial structure disorder. N. Ishizawa, T. Suwa, K. Tateishi & R. Hester, *Acta crystallogr.*, **C63**, 143-146 (2007).

- Structural evolution of Corundum at high temperatures, S. Kondo, K. Tateishi & N. Ishizawa, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47**,616-619 (2008).

- X-ray atomic orbital analysis. I. Quantum-mechanical and crystallographic framework of the method. K. Tanaka, R. Makita, S. Funahashi, T. Komori & Zaw Win, *Acta Crystallogr.*, **A64**, 437-449 (2008).

- Inversion of 4f-states in CeB<sub>6</sub> thermally excited at 430 K. Ryoko Makita, Kiyoaki Tanaka, Yoshichika Onuki & Hiroshi Tatewaki, *Acta Crystallogr.*, **B63**, 683-692 (2007).

## 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://nitzy.mse.nitech.ac.jp/~tanakalab/software.html>

で、XAO解析のプログラムを公開している。

## 7. その他 (特筆すべきことがあれば、ご記入ください。)

PFのBL14AでAPDを検出器とする4軸回折計が設置されており、同時反射を避けるX線回折斑点強度測定が可能になっている。今後、放射光による超精密測定を行える体制が整いつつある。