

先端高エネルギー光を利用した精密電子分布計測の現状

Current status of Accurate Charge Density Study using Advance High Energy Photon Sources.

筑波大数理¹

Univ. Tsukuba¹, °Eiji Nishibori¹, Hidetaka Kasai¹

E-mail: nishibori.eiji.ga@u.tsukuba.ac.jp

物質科学の分野で大型放射光施設 SPring-8 や X 線自由電子レーザー施設 SACLA など最先端の高エネルギー光 (X 線領域) を利用した研究は、無機のデバイス材料から生体に至るまで幅広い分野で進められている。それらの中で、X 線を使った電子の空間分布の観測は歴史的にも非常に古くから行われている研究の一つである。X 線回折の 2 年連続のノーベル物理学賞(1914, 1915 年)の 6 年後に当たる 1921 年には W. H. Bragg によりダイヤモンド禁制反射から結合電子を含めた電子の空間分布観測の可能性が示されている^[1]。一般的な原子位置を求める構造解析と比較すると回折データへの寄与が小さい結合電子観測の研究は、電子数が少なく化学結合に寄与する電子の量が相対的に多い分子性の物質を中心に進められてきた。1990 年代ごろまでの中心は、C=C 二重結合など一般的に良く知られた結合の観測が主であった。

これまで、約 20 年間にわたり SPring-8 にて電子の空間分布の精密に観測する研究を進めてきた。幸運にも SPring-8 の粉末 X 線回折(1999~)および単結晶 X 線回折(2008~)の装置の立ち上げメンバーに加わり、どちらの装置も電子密度の精密観測が可能な性能を盛り込んだ形で立ち上げることができた。粉末回折装置については、SPring-8 の装置を基にさらに電子密度に特化した装置がドイツ Petra-III に設置される^[2]、単結晶装置は欧米の研究者が電子密度解析で世界最高性能であることを論文上で報告する^[3]など世界的にも認知されている。

SPring-8 の粉末および単結晶 X 線回折装置の利用した精密電子分布計測は、分子性物質の π 電子の観測、層間物質のファンデルワールス相互作用の観測^[4]、単体金属の電荷集積の観測など物性を支配する弱い相互作用の観測へと進みつつある。また、2017 年より国際結晶学連合(IUCr)の新しいコミッションとして”Quantum Crystallography”が立ち上がり、世界的に精密データを利用した新たなデータ解析法の機運も高まっている。先端高エネルギー光を利用した精密電子分布計測の現状について、装置、解析法、応用例、将来展望を含めて報告する。

参考文献

- [1] W. H. Bragg, Proc. Phys. Soc. Lond. **33**, 301, 1921.
- [2] K. Tolborg et al., Acta Cryst. B **73**, 521, 2017.
- [3] M. Stokkebroe et al., Acta Cryst. A **69**, 570, 2013.
- [4] H. Kasai et al., Nat. Mater. **17**, **249**, 2018.