

98S1-001 高分解能放射光粉末回折による結晶構造解析法の開発研究

実験組織： 虎谷秀穂(代表)、井田隆、日比野寿、奥寺浩樹、劉紅超、山寄悟、林茂雄、宮崎真、中村久芳、山田英一、棚橋優策、大西智彦、佐藤文治、安藤真隆、山本博司、嶋崎聖悟、鴫美那子、北條奨（名古屋工業大学・セラミックス基盤工学研究センター・解析システム研究グループ）田中雅彦、大隅一政（物質構造科学研究所）

課題有効期間：1998年4月1日～2001年3月31日

使用実験ステーション：BL-4B2

ビームタイム：1998年度6回（34.8日間）、1999年度現在まで6回（40日間）、2000年度8回（49日間）

研究目的：本研究は放射光高分解能粉末回折法を用いた結晶構造解析法の確立を目指し、それに必要なハードウェアおよびソフトウェアを開発し、それらを実用試料の解析に応用することによって方法論にフィードバックすることを目的としている。主な目標として以下を掲げる。

- 1) 粉末回折実験ステーションの整備（実験パラメータの最適化、回折計の高分解能化、データ処理システムの開発）
- 2) 光学系パラメータに基づいたプロファイル関数の開発
- 3) 未知結晶構造の決定法の開発
- 4) 単結晶法に匹敵する精度での構造精密化の方法論の開発
- 5) 実用試料の構造解析への応用

研究成果：現時点において本課題に関係し、1998年以降、装置関連3編、プロファイルモデル開発関連7編、データ解析手法の開発関連9編、未知結晶相の解析関連6編、未知結晶構造決定関連5編、構造精密化関連4編、総論4編、合計38編の学術論文を報告した。1998～2001年の三年間において、本研究課題は

第I期 装置開発、ステーションの整備、実験パラメータの最適化

第II期 プロファイルモデルの開発、各種データ解析の方法論の開発

第III期 実用試料の構造解析

として分類される段階を経て推進された。これらの課題実行によって、共同利用実験のための放射光粉末回折実験ステーションとしての整備、プロファイルモデルの開発、データ解析の手法とソフトウェアが整備され、粉末回折法を用いて構造解析を実行できる基盤が整ったと考えられる。実際、これらの道具立てが使用できるようになり、課題最終年度においては次々と実用材料の未知結晶構造決定が可能となった。今回のシンポジウムにおいては、これら最近の成果を中心に報告する。