

私の ICSD の使い方 = ユーザ事例その1 =

京都大学工学研究科 陰山 洋

ICSD を初めて使ったのは 1997 年ごろである。それまで物質の検索は、JCPDS カード、ケミアブ、各化学系論文などの紙媒体に頼っていて、大学のあちこちの研究室や図書館を走り回ったものだった。古い紙の独特の匂いは嫌だった。それがパソコン上で簡単に検索できるわけであり、圧倒的に快適になった。

しかし、それは苦しみの始まりでもあった。検索が楽になったのは皆同じである。私より遥かに物理の分かる実験家や、そして理論家さえもが簡単に物質(のデータベース)にアクセスできるようになったからだ。昔の物質や文献の検索は探検という雰囲気もあったと思うが、それは吹っ飛んだ。自分のお気に入りの場所が、観光地化してしまったといえいいだろうか。..「既存の物質から、新しい物性を見出す」というスタンスでは生きていけないと(本気で)3, 4年間悩んだ。

その末に辿り着いたのが、「低温合成法を利用した新物質開発」である。この手法では、既存物質を「前駆体」として用い、その構造の基本骨格を保ったまま新しい物質に変換する(ことを目指す)。私たちは、図に示すようにペロブスカイト構造 SrFeO_3 と金属水素化物との低温還元反応によって、 FeO_6 八面体の頂点酸素2個を取り除いた無限層構造 SrFeO_2 を作ることに成功した(Nature 450, 1062 (2007))。 SrFeO_2 では、鉄としては非常に珍しい局所状態(平面正方配位)をもつ。次いで、既知の2次元構造 $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_7$ から、スピン梯子構造をもつ新物質 $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_5$ の合成にも成功した。

ここで紹介した前駆体の SrFeO_3 や $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_7$ は古くからよく知られている物質であり、既に多くの研究がなされている。しかし、そんな物質でも低温合成というマジックによって全く新しい構造、機能を産み出すことができる。一見、研究対象(狙っている物性)とは関係なさそうな退屈な物質でも、低温合成のための前駆体としてみてやると可能性は無限に広がる。例えば、非磁性体でも低温合成により磁性体や超伝導体に変えることができる。私は今、ICSD を前駆体の候補を探すツールとして大変重宝している。

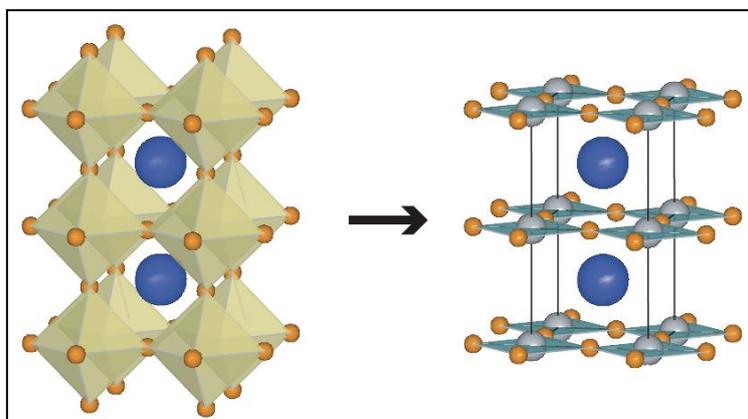


図 SrFeO_3 (左)から SrFeO_2 (右)への構造変換。青(Sr), 橙(O), 灰(Fe)。

作図は、物質・材料研究機構の泉富士夫先生の VESTA を使用した。

ICSD のお問合せは 化学情報協会 科学データ情報室まで