

原子・分子の自在配列と特性・機能  
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

加藤 大地

京都大学 大学院工学研究科  
助教

ローンペアの自在配列制御による低次元性・低対称性物質の創成

## § 1. 研究成果の概要

$\text{Pb}^{2+}$ 、 $\text{Bi}^{3+}$ のように  $d^{10}s^2p^0$  の電子配置を有するカチオンでは、 $s^2$  電子がローンペアとして振る舞い立体障害を有するため、例外的に非対称な配位環境をとりやすく、セラミクス材料において様々な物性発現の鍵を担っている。しかし、これらのローンペアカチオンの配列までも自在に制御することは困難である。

本さがけ研究は、これまでの単アニオン系から脱却し複数のアニオンと組み合わせることで、これまで難しかったローンペアの制御された新物質の開発を試みるものである。構造や組成の予測が難しいローンペアを有する複合アニオン系を設計する指針として、「①ローンペアによる3次元構造の切断」、「②異種アニオン導入によるローンペアの能動的制御」、「③理論的なローンペア制御の理解および新物質創成」、の3つの戦略に基づいて物質開発を進めている。第一年次は、特に①に基づき新たな低次元化合物の合成を試みた。その中で酸塩化物  $\text{Bi-O-Cl}$  系を発見し、電子顕微鏡や粉末回折等を利用して詳細な構造を明らかにすることに成功した。その結果、本物質はローンペアの立体障害に由来すると思われるユニークな波状構造を有することを明らかにした。さらに②の戦略に基づき、異種アニオンの導入を行ったところ、波状構造が消失し、有機物分解に対する光触媒活性が向上した。今後は、①・②の戦略をイオン伝導体や磁性材料などの機能性材料の開発に応用していくと共に、③の理論の活用も進めていく。