

深い3d準位のもたらす新しい化学と物理 ：新物質開発と化学的・物理的機能の探索

高野 幹夫 (京都大学 化学研究所 教授)

【概要】

チタン(Ti)、鉄(Fe)、そして銅(Cu)などのなじみ深い金属の酸化物はコンデンサー、触媒、磁気記録材料、高温超伝導材料などとして実に幅広い用途を持っている(これら原子番号22~29の範囲の元素を、一括して3d遷移金属元素とよぶ)。本研究は、さらに新しい3d遷移金属酸化物を発掘して、そこに革新的物性・機能を見出そうとするものである。このような探索的研究は試行錯誤の部分が多い。どのような組成と構造をもつ物質が実際に得られるか、またその物質がどのような物性を示すかのいずれも、無数のイオンや電子の様々なタイプの相互作用により決まるものであるため、的確な予測は事実上不可能である。本研究では、この難点を軽減するために、高圧合成法、薄膜作製法、溶液法などの多彩な合成法を一挙に動員することにより探索の効率化を図る。

3d遷移金属元素のイオンは、 $\text{Fe}^{4+/5+/6+}$ 、 Co^{4+} 、 $\text{Ni}^{3+/4+}$ 、 $\text{Cu}^{2+/3+}$ などのように、原子番号が大きくしかも価数が高いほどd軌道のエネルギーが低くなり、周囲にいる酸素イオンから電子を奪ってそこに詰め込む傾向がある。これを言い換えると、通常は脇役とみなされがちな酸素イオンから大きな貢献を引き出すことが出来る可能性がある。金属イオンだけではなく、酸素イオンも協働してはじめて発現する特異な物性・機能の開発が本研究の重要な課題である。

【期待される成果】

合成技術の進歩・革新：合成技術の進歩・革新は、物質探索を大きく進展させる効果をもつ。上記のような多彩な合成法の専門家が一つの研究に同時参加することは、合成法の進歩・革新を生む契機となる。

新物質、新規物性・機能の発見：酸素イオンの面白さを強く意識した物質開発は、実はかなり手薄である。本研究では窒化物まで対象を広げて、新規な磁性、電気伝導性、誘電性、光物性、そしてイオン伝導性を開発する。

【関連の深い論文・著書】

1: A 'checkerboard' electronic crystal state in lightly hole-doped $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, *Nature*, **430** (2004) 1001-1005. T. Hanaguri, M. Azuma, H. Takagi, M. Takano 他

2: Oxygen-Holes Creating Different Electronic Phases in Fe^{4+} -Oxides: Successful Growth of Single Crystalline Films of SrFeO_3 and Related Perovskites at Low Oxygen Pressure, *J. Mater. Chem.*, **11** (2001) 2235-2237. N. Hayashi, T. Terashima and M. Takano

【研究期間】 平成17~21年度

【研究経費】 81,700,000円

【ホームページ】 <http://msk2.kuicr.kyoto-u.ac.jp/home.html>