



無機化合物及び金属間化合物の合成と結晶構造に関する研究

自然科学系・物理学領域

山本 一樹

教授

YAMAMOTO Kazuki

博士(工学)(筑波大学)

■研究キーワード 物性物理学／結晶物理学／金属物理学

■主な所属学会 日本物理学会, 日本結晶学会, 日本金属学会

■研究者総覧 <https://koto10.nara-wu.ac.jp/profile/ja.16d6542e09f604ae520e17560c007669.html>



研究者総覧

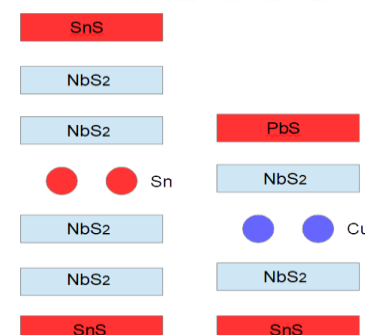
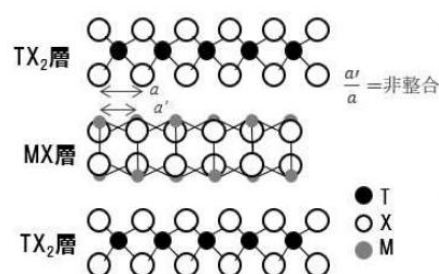
研究概要

無機化合物及び金属間化合物の合成とその結晶構造をX線を使い研究しています。具体的には

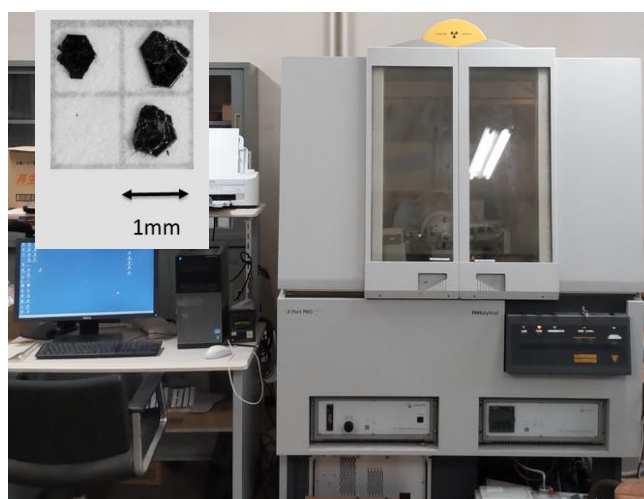
(1) 低次元物質：高次積層状態を持つ新規化合物の合成を行い、その結晶構造をX線回折実験より明らかにします。層間化合物やミスフィット層状化合物を対象にしています。

(2) 準結晶（高次元物質）：準結晶の合成を行い、X線回折実験より内在するフェイゾン歪の検出を行います。

(3) 電子密度分布：半導体や金属間化合物の電子密度分布を高精度X線回折実験より解析し、物質の結合状態を見ます。



ミスフィット層状化合物の構造例



X線回折装置と単結晶例

研究のプロセス・研究事例

1. 遷移金属二硫化物質は層状物質[TS₂]であり、その層間に異種原子[M]を挿入させると層間化合物[M_xTS₂]になります。また、その層間に、岩塩型硫化金属層[MS]が挟まるとミスフィット層状化合物[(MS)_{1+x}(TS₂)_n]になります。これらの化合物はその2次元性から多様な物性を発現させることができます。研究では、遷移金属二硫化物の毎層間ではなく、1層間おきや2層間おきに、異種原子や岩塩型硫化金属層を入れる高次積層型の新規物質を合成する方法を探ることです。また、さらに空いている層間に新たな異種原子を挿入させ、これまでにない複合型の層間化合物とミスフィット層状化合物の合成も行っています。

2. 高次元（5次元や6次元）で考えると規則結晶であり、その3次元射影に対応する準周期性を持つ準結晶の構造安定性を考えます。準結晶に内在するリニアフェイゾン歪量の検出を高分解能X線回折実験により行い、準結晶から結晶への多段的な構造転移に関する仕組み・近似の度合を考えます。

3. 単結晶精密X線回折実験を行い、積分強度測定からマキシマムエントロピー法解析を行い、結晶内電子密度分布解析を行います。半導体・金属間化合物・準結晶類縁の結晶相(近似結晶)などの電子密度分布から結合状態を探り、共有結合や電荷移動の検出を通して、物質の安定性を考えます。

以上のように、物質科学における結晶構造に関する基礎研究を行っています。