助成番号　210266	５－２

研 究 成 果 報 告 書

研究テーマ（和文）	時間分解結晶構造解析による分子性結晶破壊過程の解明		
研究テーマ（英文）	Time-Resolved Crystal Structure Analysis of Molecular Crystal in Fracture Process		
研究期間	2021年 ～ 2023 年	研究機関名　帝京大学	
研究代表者	氏名（漢字）	星野 学	
	氏名（カタカナ）	ホシノ マナブ	
	氏名（英文）	Manabu Hoshino	
	所属機関・職名	帝京大学・准教授	
共同研究者 ＊２名をこえる場合は、【別紙追加用紙】（P3）に３人目以降を追記してください。	氏名（漢字）		
	氏名（カタカナ）		
	氏名（英文）		
	所属機関・職名		
	氏名（漢字）		
	氏名（カタカナ）		
	氏名（英文）		
	所属機関・職名		

概要 （600 字～800 字程度にまとめてください。）

本テーマでは、分子性の結晶試料に衝撃を与えることで起きる破壊現象に注目し、単結晶 X 線構造解析を用いて結晶試料が壊れる瞬間の分子の様子を原子分解能で観察し、破壊過程の詳細を解明することを目的にして研究を行った。被験試料として、共有結合でベンゼン分子を環状に連結した分子であるシクロパラフェニレンに注目した。研究代表者らによる先行研究により、シクロパラフェニレンは結晶化によって円形から楕円に歪む柔軟性を持つことがわかっている。このシクロパラフェニレンの構造的柔軟性に注目して、本研究では、シクロパラフェニレンの単結晶に衝撃を加えて破壊が起こる瞬間の分子構造変形を調べた。実験では、シクロパラフェニレンの単結晶表面に顔料を塗布し、その顔料を大強度レーザーの照射によって爆発（レーザー光子場で電子を剥ぎ取ることで起こるクーロン爆発）させて結晶を破壊する瞬間に、放射光パルス X 線を同期させて照射し、破壊過程を反映した単結晶 X 線回折データの収集を行った。実験は放射光施設 PF-AR NW14A で行い、破壊の瞬間の回折データを計測したところ、回折点が衝撃伝播方向に伸長する結果を得ることができた。この伸長は、衝撃によってシクロパラフェニレン分子が圧縮されて分子構造の楕円扁平率が大きくなり、その結果として結晶格子の変形が起きていることを示している。

上記に加えて、本研究では破壊が化学現象に深く関係した物質探索も行い、結晶の破壊に伴い発光（摩擦発光）する物質にも注目して、破壊によって生じる結晶構造の変化の分析も行なった。その結果、破壊に伴う構造変化と発光の性質を関連づけることに成功した。

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）

雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	～	発行年		巻号	
雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	～	発行年		巻号	
雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	～	発行年		巻号	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ﾍﾟｰｼﾞ	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ﾍﾟｰｼﾞ	

英文抄録（100 語～200 語程度にまとめてください。）

This research focuses on the destruction of molecular crystalline materials, using single-crystal X-ray structure analysis to clarify the geometrical features of molecules at the moment of fracture with atomic resolution. I selected cycloparaphenylene, a molecule consisting of linked benzene molecules in a ring through covalent bonds, as the subject compound because we preliminarily found softness in its ring-shaped structure. The geometrical changes of cycloparaphenylene in a single crystal under destruction were evaluated based on X-ray diffraction data collected by time-resolved X-ray diffraction measurements. In these measurements, pulsed X-rays were irradiated precisely at the moment when the subject crystal was destroyed by the coulombic explosion, driven by the ionization of pigment molecules initially coating the subject crystal under the strong photon field of high-intensity laser pulses. The elongation of diffraction spots in the collected data images indicates a deformation of the molecular structure of cycloparaphenylene from a circle to an ellipsoid.
I also explored materials associated with chemical phenomena during destruction and focused on triboluminescent materials. Triboluminescence is a phenomenon that shows light upon the fracture of a crystal. I clarified the relationship between structural changes upon fracturing and triboluminescence.