

《 解 説 》

マイクロポーラス物質の放射光構造科学の研究

高田昌樹^{*,**,***}, 久保田佳基^{****}, 小林達生^{*****}, 加藤健一^{*}, 田中宏志^{*****}

* 理化学研究所 播磨研究所 放射光科学研究センター,

** 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門,

*** 東京大学 大学院新領域創成科学研究科,

**** 大阪府立大学 理学系研究科 物理科学専攻,

***** 岡山大学 大学院理学研究科, ***** 島根大学 総合理工学部

高輝度X線である放射光を用いた高精度の粉末X線回折データは、マキシマムエントロピー法という解析法と組み合わせることで、新規物質の電子密度レベルでの構造を明らかにしてきた。近年、金属錯体をベースとする多孔性配位高分子に、気体分子が細孔内で1次元配列をして吸着するという特異な構造を持つ事を明らかにする事にも成功し、マイクロポーラス物質の新しい研究展開をもたらした。この構造科学の観点から、最近の我々の研究成果について紹介する。

1. はじめに

近年、金属錯体をベースとした新しいタイプの多孔性配位高分子が盛んに化学合成されている。これらの物質群は、方向性のある結合手を持つ遷移金属イオンとそれをつなぐ有機分子を、室温、1気圧で水やアルコールなどの溶媒中で混ぜ、自己集合化現象を利用することにより、容易に化学合成できる。この多孔性配位高分子は「丈夫で安定、軽量」で、均一な規則的に配列した多孔性骨格をデザインできる設計性に優れている。産業化も容易であり、天然ガスなどの燃料の低圧で安定な大量吸蔵や燃料電池への応用やCO₂など温暖化ガスの選択的吸着、有害物質の分離への応用が考えられ、次世代の素材として大きな期待が寄せられている物質である。これまで、様々な大きさや形状の細孔構造を持つ配位高分子が合成され、メタン、水素、酸素などの燃料ガスの高効率な吸蔵材料への実用的な応用研究が、京都

大学の北川 進教授らのグループを中心に行われてきた^{1,2)}。

我々は、2002年より、北川グループと、配位高分子のポーラス空間の機能を探るため、気体分子が細孔の壁面構造のどの位置にどのような形態で吸着されるのかを解明する研究を行ってきた。研究開始当時、以前試験的に行ったゼオライトの吸着構造の研究の経験から、気体分子は細孔壁面の反応性の高い位置に、不規則に分布して吸着されるものと予測した。北川グループにも、細孔中の気体分子の明確な描像はわからないかもしれないが、壁面のどのあたりに吸着しやすいかは解明できるであろうという展望を述べていた。しかし、この予測は、完全に覆され、気体分子が、細孔の中で1次元的に規則的に配列するという予想だにしなかった結果を得た³⁾。そして、この構造決定が契機となり、気体吸着による、新しい機能性材料設計の研究が行われるようになった。この構造決定には、我々が長年開発してきた放射光という高輝度X線を用いた粉末回折法による高精度な先端計測技術と、独自に開発してきたマキシマムエントロピー法(MEM)とリートベルト解析を組み合わせたデータ解析方法とが威力を発揮した⁴⁾。

受理日：2007年7月26日

〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都1-1-1

理化学研究所播磨研究所 高田構造科学研究室

e-mail: takatama@spring8.or.jp

本報では、気体吸着した多孔性配位高分子の構造決定を中心に、我々が進めてきた放射光を用いたマイクロポラス物質の構造科学の研究について解説する。

2. MEMによる電子密度可視化

物質の原子配列を決定するには、通常、X線回折データを用いた構造解析法が用いられる。一般には、目的物質の単結晶を育成しX線回折強度を測定する単結晶X線回折が汎用されている。粉末X線回折も同様に広く用いられ、1987年ごろの高温超伝導体の構造決定ではリートベルト解析とともに、大いに注目を集めた。一方、我々は1990年ごろよりマキシマムエントロピー法 (Maximum Entropy Method: MEM) という情報理論を導入した、従来の構造解析法とは異なる新しい解析法の開発に取り組んできた^{4,5)}。この方法は従来の構造解析とは以下に説明するように解析の方向性が異なっている。

原子レベルでの構造を観察する方法の一つとして、高分解能電子顕微鏡法がある。これは、物質で回折された電子回折像 (逆空間) を、電子顕微鏡の中で電磁レンズにより原子レベルでの実像 (実空間) に結像してくれる。すなわち、“実空間”での構造観察の手段である。一方、通常のX線構造解析では、X線が電磁レンズに対応するものを持たないため、測定された回折データの強度を、仮定した構造モデルから計算した回折強度と比較検討することで構造を決定する。すなわち、“逆空間”での構造研究である。一方、MEMはこの逆空間を実空間に変換するひとつの統計的手法であり、回折データから結晶物質の電子密度分布をイメージングすることができる。すなわち、高分解能電子顕微鏡法と同様の“実空間”での構造研究とも言えるものである。電子顕微鏡との比較において、MEMはX線回折データに対する仮想的な結像レンズの役割をコンピューターによる解析で果たしている。(図1)しかも、この仮想的な結像レンズは、電子顕微鏡と違ってレンズの収差がほとんど無く、未観測の高次の波まで、結像に用いる波の情報を基に推定してくれる。また、物質とX線との相互作用は単純で、X線は物質中の電子によってのみ散乱される。よって、X線回折データを結像すれば、結合電子の分布などの情報を含む電子密度の分布のようすが、結晶の平均構造として得られ

るわけである。この様に、MEMでは、単なる原子配列としての構造情報だけではなく、物質の電子の分布までの精密な構造情報を実空間で与えることができるため、新規物質の物性と構造の精緻な関係を明らかにする上で大きな助けになる。そこで、我々は、物性と関連した電子密度レベルでの精密構造の研究、すなわち「精密構造物性」の研究手法としてMEMを用いた電子密度解析法と、それに適したX線回折実験法の開発研究を行ってきた⁶⁾。

特に放射光という、実験室系の高輝度X線の100万倍から1億倍に達する超高輝度X線の登場により、X線回折データの統計精度は飛躍的に向上し、粉末回折データからでも、電子密度解析が可能になった。その契機となったのが、1995年のMEM/リートベルト法という粉末X線回折データを用いるMEM電子密度イメージングの方法の開発である^{4,7)}。この方法により、金属内包フラーレンの世界初の構造解析に成功した⁷⁾。その後、様々な新規物質の電子密度を次々と明らかにし⁸⁻¹²⁾、この方法が、構造物性の研究に、非常に強力な手段であることを示してきた。とりわけ、単結晶を得ることの難しい新規物質合成の初期の段階では、粉末試料から得た詳細な3次元電子密度は、3次元的な物性予測に大きな助けとなる。MEMによる電子密度可視化の詳細については他の解説に譲り^{4,13)}、4章で、このMEM/リートベルト法がどのように、多孔性配位高分子の気体吸着の構造決定への役割を果たしたかを説明する。

3. 吸着現象の*in-situ*放射光粉末回折実験

解析に用いる粉末回折データはSPring-8の粉末回折ビームラインBL02B2で測定した。本研究を遂行するために、図2の模式的に示すようなガス吸着その場観察システムを構築した³⁾。通常、このビームラインは試料を直径0.1~0.3 mmのキャピラリーに装填して回折実験を行う。よって元々閉鎖系の試料ホルダーであるキャピラリーをスウェジロックで支持する形のガス導入装置を作製するだけで、*in-situ*吸着用試料ホルダーを作ることができる。その装置の写真を図中に示してある。試料へのガス導入装置は非常に簡便な小型のもので、そのまま、回折形のクロスゴニオに装着でき、試料周りは通常粉末回折実験と全く同じ実験配置で、ガス吸着のその場観察を行うことが可能である。

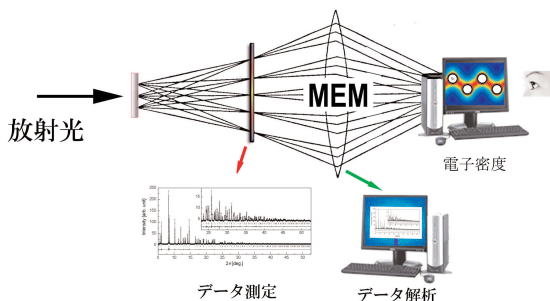


図1 MEMによる回折データのイメージング

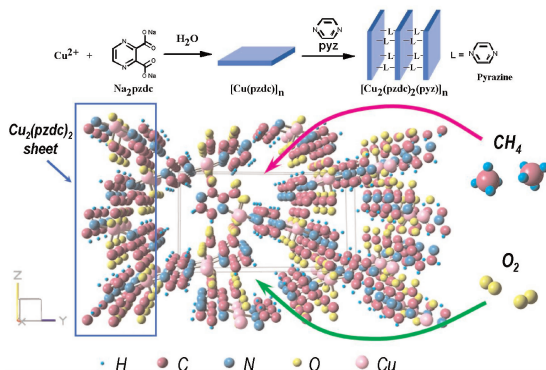
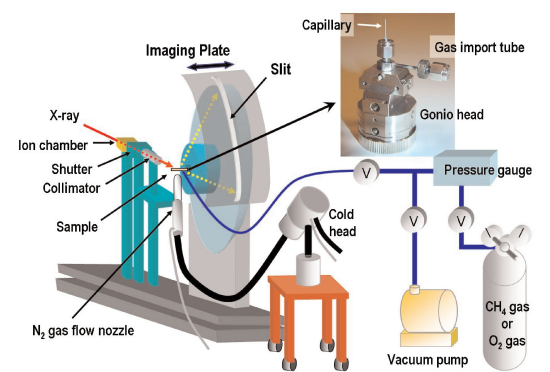
図3 CPL-1: $[\text{Cu}_2(\text{pzdc})_2(\text{pyz})]_n$ の構造モデル

図2 SPring-8のBL02B2に設置された大型デバイセラーカメラの模式図。気体吸着その場観測装置を取り付けてある。この装置により、物質の気体反応や吸着現象のその場観察が可能となった

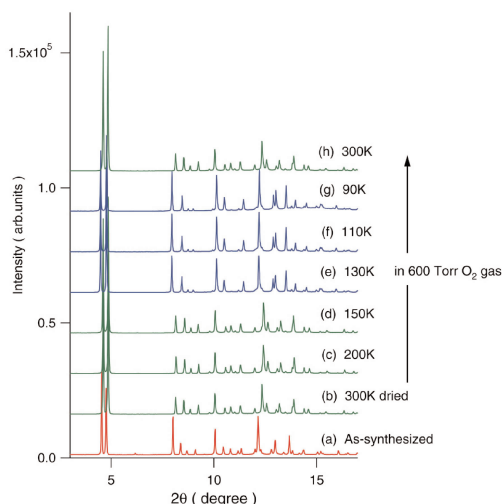


図4 CPL-1に酸素ガスを流しながら (600 Torr) 測定した粉末回折パターンの温度変化

実験に用いた多孔性配位高分子は、図3に示したような均一な $4 \times 6 \text{ \AA}$ の1次元細孔をもつ多孔性配位高分子で、銅2価イオン、ピラジン、2,3-ピラジンジカルボン酸からなる、 $[\text{Cu}_2(\text{pzdc})_2(\text{pyz})]_n$ 、通称CPL-1 (Coordination Polymer 1 with Pillared Layer Structure) と呼ばれる物質である。この物質は、 $[\text{Cu}(\text{pzdc})]_n$ の金属錯体の2次元シートがピラジン分子を架橋分子として1次元細孔構造を形成し、低温、1気圧以下の条件で酸素分子を吸着する。

構造決定には単結晶を用いたX線回折実験が一般であるが、

- ① 気体吸着による体積変化により結晶が壊れる心配がない。
- ② 試料の合成が単結晶よりも容易である。
- ③ X線回折強度が吸収や消衰効果による補正をほとんど必要としない。

といった点で、粉末回折実験は有利である。

図4は測定された粉末回折パターンの温度変化である。まず、試料を373 Kまで加熱し真空引きにより、試料中の水分子を完全に除去した。その後、試料を室温に戻し、キャピラリー中の試料へ加える酸素圧力を1気圧よりも低い600 Torrに保ち、低温窒素ガス吹き付け装置により90 Kまで冷却しながら回折パターンを測定した。図を見て明らかのように、130 Kを境に回折パターンの相対強度が大きく変化している。酸素を加えないで真空中で同じプロセスで測定した場合には、回折パターンの相対強度はほとんど変化しなかった。よって130 Kを境にしたこの強度変化は酸素吸着による構造変化によるものと

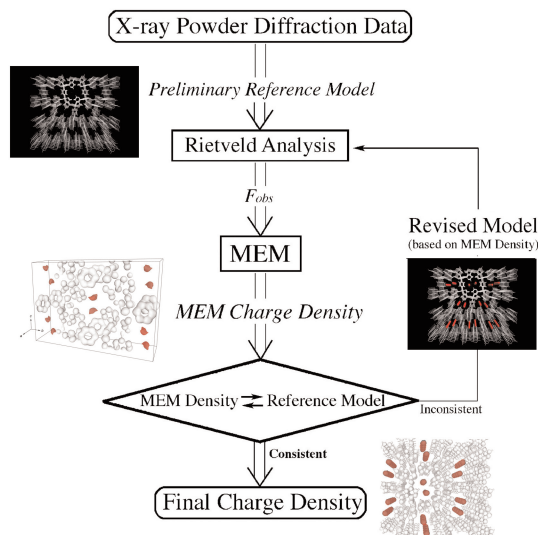


図5 MEM/リートベルト法のフローチャート

考えられる。

4. MEM/リートベルト法による吸着された酸素分子の可視化

前述したように、MEMは、測定されたX線回折データから詳細な電子密度分布をイメージング（回折データのイメージング）することができる。しかし、正確には、全く未知の状態からではなく、結晶の単位胞（ユニットセル）の情報や、その中の全電子数の情報を既知の情報として、解析の中で束縛条件として用いる。また、ある程度の構造情報がある場合は、観測された回折データの初期位相情報として用いる。MEMによるイメージングの考え方は、簡単な構造モデル（初期位相）からスタートして、観測データに基づく詳細な電子密度の可視化により、最終的な構造モデルを精密化できる、“構造予測性”という特性にもつながっており、その特性がMEM/リートベルト法の発案の契機となった。そして、この方法の登場は、複雑な構造を持ち平均構造の原子配列モデルを予測するのが非常に困難な金属内包フラーレンの様な化合物の構造解析にとってブレイクスルーとなった⁷⁾。また、粉末回折データに含まれる結合電子や水素等の散乱能の弱い電子の分布の情報を、観測データのありのままにイメージングすることも容易にした⁴⁾。

図5に、解析のフローチャートを示す。図のよう

に、この方法は、リートベルト解析のプロファイル分離の機能を利用して、MEMによりイメージングされた電子密度から、基となった初期構造モデルを改良し、構造の精密化を繰り返していく方法である。

図4での90 Kのデータ解析を例に説明する。酸素分子がどの位置に吸着されているかは未知であるので、MEMによる構造予測性を利用して、その位置を明らかにする。まず、リートベルト解析の初期構造モデルとして、既知のCPL-1の単結晶構造解析による構造モデルを用いた。このモデルに酸素分子は含まれていないので、リートベルト解析の結果は図6(a)のように、モデルに基づく計算パターンと観測された粉末回折パターンとの一致は悪いものになる。このリートベルト解析の粉末回折パターンフィッティングの結果を基に、重なり合った反射の観測強度をモデルによる各反射の計算強度の比率で振り分ける。このようにして観測強度をそのまま用いて見積もられた観測構造因子を用いてMEMにより電子密度分布をイメージングする。そのようにして得られた電子密度が図7(a)である。細孔近傍の電子密度の断面を等高線図で示してある。本来、真空であるはずの細孔の中心付近に、局所的な電子密度が存在する。図5のフローチャート中には、同じ電子密度を3次元の等電子密度面表示で示している。赤で示したのが、細孔中の仮定していない電子密度分布で、酸素分子に対応するものと考えられる。よって、この部分に酸素分子を新たに仮定することにより、構造モデルを改良し、それを基にリートベルト解析を再び行う。この過程を繰り返し、モデルとMEM電子密度がほとんど一致するまで構造モデルの精密化を行う。これにより、図6(b)の一致の良いリートベルトフィッティングの結果が得られ、その結果、各反射の観測強度の見積もりも適正に行われ図7(b)に示すスムーズで酸素分子の形態が鮮明な電子密度分布が得られる。この様に、MEM/リートベルト法は、MEMの構造予測性を利用したセルフコンシステントな“構造精密化”の方法であり、この様な吸着分子の構造を解析する際に威力を発揮することがお分かりいただけたと思う。

図8に、CPL-1に吸着された酸素分子の電子密度(b)とそれによって得られた構造モデル(a)を示す。この様に、当初の予想とは異なり、各孔の細孔に酸素分子（赤色で示してある）が一列に並んで規則的

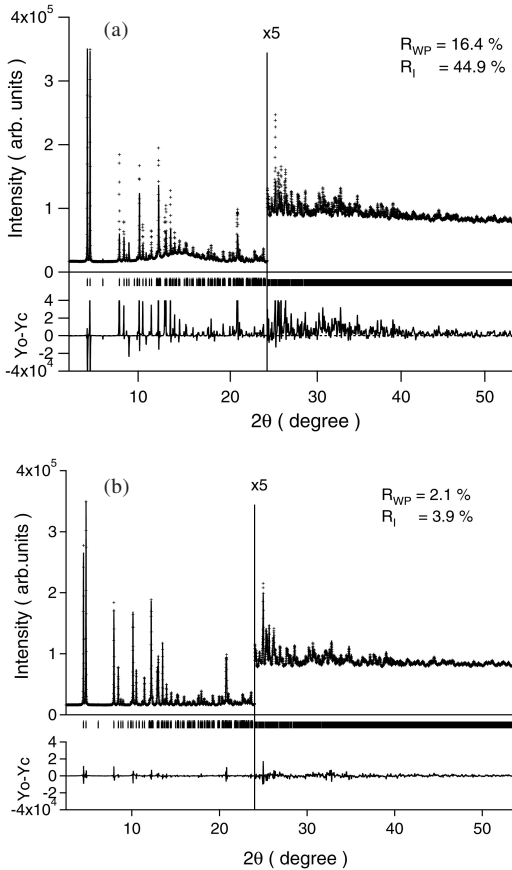


図6 CPL-1に酸素吸着させた粉末回折パターンのリートベルト解析のフィッティングパターン。(a)酸素分子を仮定しないPreliminaryなモデルでの解析結果。(b)酸素分子も仮定した最終構造モデルに基づくフィッティング結果

配列していることが、世界で初めて可視化された³⁾。得られた電子密度分布は全電子密度分布そのものである。よって、酸素分子の電子密度分布の電子数を直接計算する事ができる。この並んでいる酸素分子一個の電子の数を得られた電子密度から求めると16であった。すなわち、酸素分子からの電荷移動はなく、物理吸着であるという事が明らかになった。酸素分子はそれ自身が磁性を持つことが知られている。この結果を基に、この酸素分子の並んだ固体の磁性を調べたところ、反強磁性的な性質を発現することを確認した³⁾。これは、気体分子を固体中に配列させると、気体分子自身に備わっている物性を利用した機能デザインを行うことが可能であることを初めて示したもので、MEMによる回折データのイメー

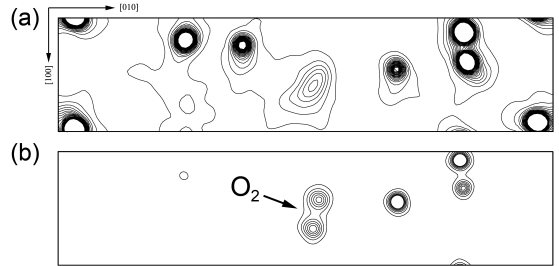


図7 CPL-1のMEM電子密度分布。(a) 図6(a)の解析結果に基づくMEM電子密度。(b) 図6(b)のフィッティング結果に基づくMEM電子密度

ジングが、気体吸着を利用した新しいポーラス構造科学の展開を生み出したと言える。

5. 細孔に配列した気体分子の多様な形態

水素は電子を一つしか持たない最もX線散乱能の低い元素であるので、これまでX線を使って水素の構造決定することは難しいとされてきた。しかし、MEM/リートベルト法の利用によってCPL-1の細孔に吸着させた水素分子を直接観察することにも成功した¹⁴⁾。図9は粉末回折データから得られた90 Kでの水素分子を吸着したCPL-1の電子密度分布である。細孔内に青色で示した水素分子の電子密度が可視化されている様子がわかる。水素分子は細孔の中央ではなく、酸素分子の時よりも少し壁側に寄った位置に、酸素と同様に一次元に規則的に配列していることがわかる。そして、水素分子は銅原子に配位結合した酸素原子(図9中赤で示している原子)の近くに存在していることがわかった。その他、窒素分子、二酸化炭素分子など、様々な気体分子が、物理吸着の状態、このナノポーラス構造の中で一次元配列の規則構造をもっていることが次々と明らかにされた。

しかし、アセチレン分子の場合は少し違っていた。CPL-1のひとつの細孔の中で吸着した酸素分子や水素分子、窒素分子、二酸化炭素分子は、2列の一次元構造を形成するが、アセチレン分子は図10に示すように1列で分子が横向きの1次元配列という異なる形態で吸着されている事が明らかになった¹⁵⁾。図10の下に、電子密度の断面図が等高線で示してある。これを見ると、アセチレン分子と細孔の内壁の酸素原子との間に電子密度の重なりが明確に存在し、ア

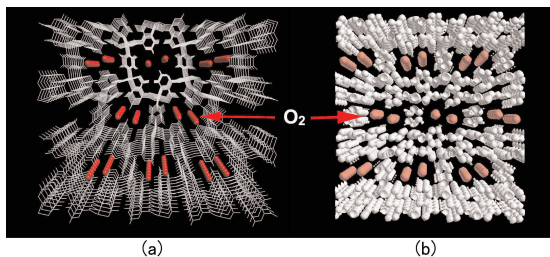


図8 CPL-1に酸素を吸着させた時のMEM電子密度を等電子密度面 ($1.0 \text{ e} \text{ \AA}^{-3}$) で示したものを、構造モデルと並べて書いてあり、酸素分子は赤で示してある

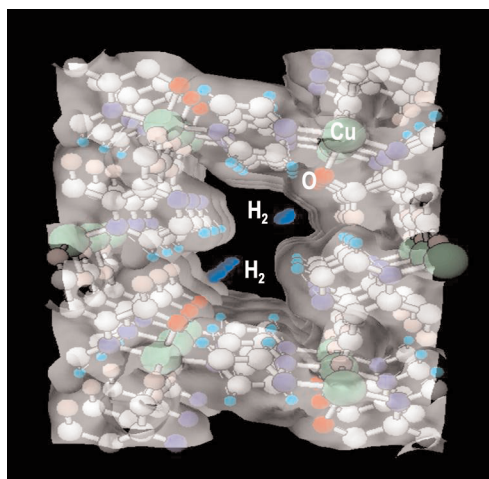


図9 CPL-1に水素を吸着させた時のMEM電子密度。水素分子の電子密度は青で示してある。構造モデルを電子密度に重ねて描いてある

セチレン分子が、CPL-1に水素結合の形で化学吸着しているという特異な状況である事が明らかになった。このことはアセチレン分子の反応性が強いことに起因していると思われるが、この吸着状態を、アセチレン分子の空間密度に換算すると、明らかになった構造はアセチレンの密度は約400気圧に相当し、アセチレン単独では爆発限界とされる2気圧の200倍になる。よって、この結果はアセチレンガスの高密度貯蔵の新しい形を示したと考えている。

このアセチレン分子の吸着等温曲線には、図11に示すように、途中にプラトーが見られる。これは吸着現象で中間状態が存在することを示唆している。この中間状態の構造を決定する事は、この化学吸着のダイナミクスの研究の足がかりとなる。そこで、我々は、粉末回折データを測定し、同様の方法で中

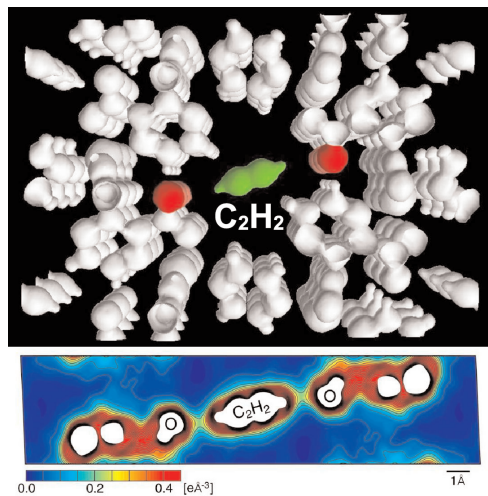


図10 CPL-1にアセチレン分子を吸着させた時のMEM電子密度。下に断面の等高線図をアセチレン分子近傍について示してある

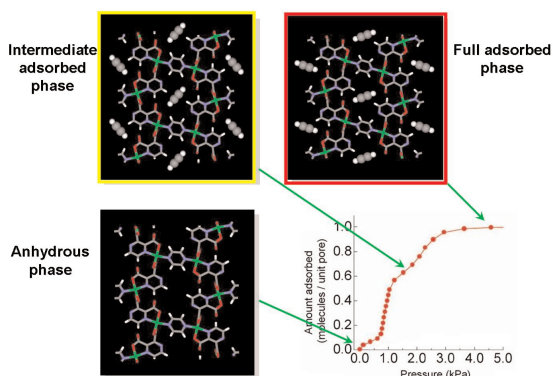


図11 CPL-1にアセチレン分子を吸着させた時、等温吸着曲線。中間状態の存在がわかる。それぞれの状態での構造モデルを一緒に示してある

間状態の吸着構造を決定した。その結果、図11中に挿入してあるように、アセチレン分子の配向が細孔の中で吸着量によって異なる構造となっていることがわかった¹⁶⁾。そして電子密度を詳細に見てみると図12にあるように中間状態では、アセチレン分子とCPL-1の間には共有結合の様なものの存在を示唆する明確な電子密度のオーバーラップはなかった。よって、まず吸着の初期段階では、アセチレン分子は、CPL-1の細孔の中で比較的緩く吸着され、飽和した際に、ラチェットが掛かるように、化学結合し

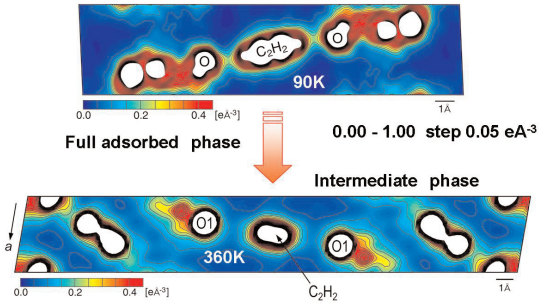


図12 アセチレンガスの飽和吸着状態と吸着の中間状態の電子密度. アセチレン分子近傍のみについて, 等高線図で示してある

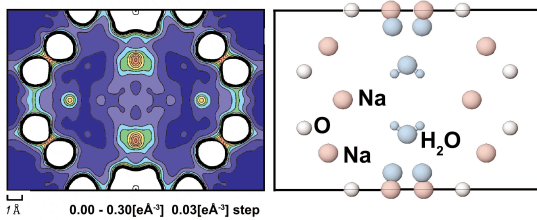


図13 Na-LTAのMEM電子密度. (110)面の断面を等高線図で示してある. 吸着された水分子が, 分子の形も含めて鮮明に可視化されている

て, アセチレン分子が固定されるのではないかと考えられている。

同様のポーラス構造を持つゼオライトにおいてもMEM/リートベルト解析は有効であり, 実は, 1999年ごろ, 寺崎 治グループとの共同研究で, Na-LTAゼオライトの電子密度マッピングの研究を行った事がある。その際に, 十分に脱水されたと考えていた粉末試料の放射光粉末回折データから求めた電子密度を, 構造モデルとともに図13に示す¹⁷⁾。(110)電子密度面を等高線図で示してある。どの段階で水が吸着されたかは特定できなかったが, 明確に細孔内に占有率約20%で不規則に吸着した水分子が, 分子の形も含めて鮮明に可視化されているのがわかる。この解析でも, 水の存在は, 仮定していなかった。

6. まとめ

以上示してきたように, 放射光粉末回折データのMEM/リートベルト解析は, 多孔性配位高分子やゼオライトのポーラス構造に吸着された気体分子の形

態を, 物理吸着か化学吸着か? 細孔のどのあたりに吸着されるか等の相互作用の情報をも解明する, 強力な構造科学の研究手法である事が, お分かりいただけたと思う。最近では新しいナノ構造を持つ $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ (C12A7)の細孔にドーピングした酸素イオンや電子の可視化にも成功している¹⁸⁾。また, MEM電子密度から実験的な静電ポテンシャルを求める方法も開発に成功し, 様々な物質の構造科学研究に応用を始めたところである¹⁹⁾。尚, 本稿で紹介した研究で用いたMEMのプログラムは, 我々によって開発された“ENIGMA”で²⁰⁾, 希望者には公開されている。使用を希望される方は, 筆者にご連絡頂きたい。本稿が, ポーラス構造の研究を進める上で, 放射光やMEMの活用を考える契機となれば幸いです。

謝 辞

多孔性配位高分子の気体分子吸着の研究は, 京都大学北川 進教授の研究グループとの共同研究である。又, ゼオライトの研究は名古屋大学坂田 誠教授の研究グループとの共同研究である。本研究は, 文部省科学研究費補助金の援助のもとに行われた。

文 献

- 1) 田中大輔, 北川 進, ゼオライト, **24**, 11 (2007).
- 2) M. Kondo, T. Yoshitomi, K. Seki, H. Matsuzaka, and S. Kitagawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **36**, 1725 (1997).
- 3) R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, T. C. Kobayashi, K. Kindo, Y. Mita, A. Matsuo, M. Kobayashi, H. Chang, T. C. Ozawa, M. Suzuki, M. Sakata, and M. Takata, *Science*, **298**, 2358 (2002).
- 4) M. Takata, E. Nishibori, and M. Sakata, *Z. Kristallogr.*, **216**, 71 (2001).
- 5) M. Sakata and M. Sato, *Acta Crystallogr.*, **A46**, 263 (1990).
- 6) M. Takata, E. Nishibori, K. Kato, Y. Kubota, Y. Kuroiwa, and M. Sakata, *Adv. in X-ray Anal.*, **45**, 377 (2002).
- 7) M. Takata, B. Umeda, E. Nishibori, M. Sakata, Y. Saito, M. Ohno, and H. Shinohara, *Nature*, **377**, 46 (1995).
- 8) C. Wang, T. Kai, T. Tomiyama, T. Yoshida, Y. Kobayashi, E. Nishibori, M. Takata, M. Sakata, and H. Shinohara, *Nature*, **408**, 426 (2000).
- 9) E. Nishibori, I. Terauchi, M. Sakata, M. Takata, Y.

- Ito, T. Sugai, and H. Shinohara, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 19215 (2006)
- 10) K. Kiriwara, T. Nakata, M. Takata, Y. Kubota, E. Nishibori, K. Kimura, and M. Sakata, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 3468 (2000).
- 11) S. Aoyagi, K. Kato, A. Ota, H. Yamochi, G. Saito, H. Suematsu, M. Sakata, and M. Takata, *Angew. Chem. Int'l Ed.*, **43**, 3670 (2004).
- 12) K. Kato, M. Takata, Y. Moritomo, A. Nakamoto, and N. Kojima, *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 201902-1 (2007).
- 13) 高田昌樹, 坂田 誠, 電子顕微鏡 **38**, 104 (2003).
- 14) Y. Kubota, M. Takata, R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, K. Kato, M. Sakata, and T. C. Kobayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **44**, 920 (2005).
- 15) R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, R. V. Belosludov, T. C. Kobayashi, H. Sakamoto, T. Chiba, M. Takata, Y. Kawazoe, and Y. Mita, *Nature*, **436**, 238 (2005).
- 16) Y. Kubota, M. Takata, R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, and T. C. Kobayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **45**, 4932 (2006).
- 17) K. Hasegawa, E. Nishibori, M. Takata, M. Sakata, N. Togashi, J. Yum, and O. Terasaki, *Jap. J. Appl. Phys.*, **38**(Suppl.38-1), 65 (1999).
- 18) S. W. Kim, S. Matsuishi, T. Nomura, Y. Kubota, M. Takata, K. Hayashi, T. Kamiya, M. Hirano, and H. Hosono, *Nano Letters*, **7**, 1138 (2007).
- 19) H. Tanaka, Y. Kuroiwa, and M. Takata, *Phys. Rev. B*, **74**, 172105-1 (2006).
- 20) H. Tanaka, M. Takata, E. Nishibori, K. Kato, T. Iishi, and M. Sakata, *J. Appl. Cryst.*, **35**, 282 (2002).

Structural Materials Science of Micro-Porous Materials
using Synchrotron Radiation X-ray Diffraction

Masaki Takata^{*,**,**}, Yoshiki Kubota^{****}, Tatsuo C. Kobayashi^{*****},
Kenichi Kato^{*}, and Hiroshi Tanaka^{*****}

^{*}RIKEN, Harima Institute/SPring-8, ^{**}JASRI/SPring-8,

^{***}Department of Advanced Materials Science, The University of Tokyo,

^{****}Department of Physical Science, Osaka Prefecture University,

^{*****}Department of Physics, Okayama University,

^{*****}Department of Material Science, Shimane University

Synchrotron radiation high brilliance X-ray is very powerful for the charge density study of novel functional materials by the combination with the new data analysis method, that is, the Maximum Entropy Method. Recently, we succeeded in determination of various particular one-dimensional ordered features of absorbed gas molecules in the micro pores of the metal organic coordination polymers. Our findings are leading to a novel structural science of the micro-porous material.

Keywords: Synchrotron Radiation, Charge Density, Structural Materials Science,
Coordination Polymer, Gas Absorption