

軽元素材料の複雑な化学結合と構造を描画する

～第一原理計算による放射光軟X線吸収スペクトルの理論解析～

工学研究科応用化学専攻

おおたゆうき むらまつやすじ
M2 ◎太田雄規, 教授 村松康司

キーワード

放射光, 軟X線分析, 材料分析, 分析化学, 量子化学, 計算化学, 化学状態, 電子状態, 局所構造解析, 軽元素材料,

研究概要

高輝度なX線であるシンクロトロン放射光を利用した放射光軟X線分光法は、材料を構成する原子や分子の姿を電子・化学状態の観点から詳細に描ける最先端の分析手法である。特にホウ素 (B), 炭素 (C), 窒素 (N), 酸素 (O), フッ素 (F) など軽元素の精密分析ができるため、最近ではナノ材料, 電池材料, ソフトマターなどのエネルギー・環境材料の分析評価技術として注目されている。

測定した軟X線スペクトルから電子・化学状態を明らかにするには、量子化学に基づく理論解析が必要である。理論解析の一例として酸素官能基をもつ芳香族化合物 Phloroglucinol の軟X線吸収スペクトル (CK端 XANES) とそのシミュレーション結果を図1に示す。これから、高分解能で計測された吸収構造が理論スペクトルで精度よく再現できることがわかる。このような放射光を利用した軟X線分光計測技術と第一原理計算による理論解析技術の両立によって、軽元素材料の先端的分析評価が可能になる。

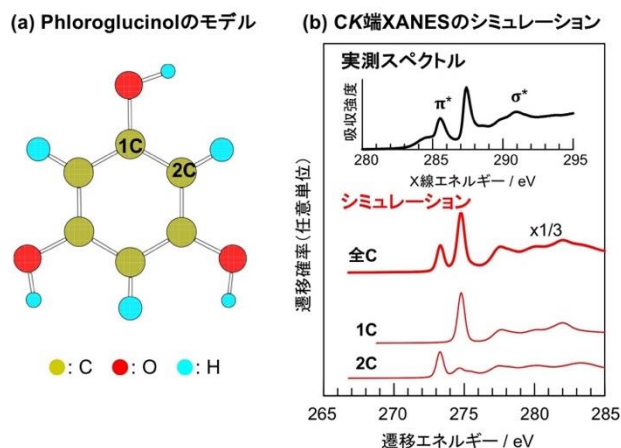


図1 第一原理計算に用いたPhloroglucinolの分子モデル(左)および、Phloroglucinolの実測CK端XANESと比較したシミュレーション(右)。

アピールポイント

我々は1990年代初頭より放射光軟X線発光・吸収分光法を駆使した軽元素材料の分析研究を先駆的に展開してきた。この長年にわたる軟X線分光計測技術の開発と膨大な測定データの蓄積、および第一原理計算による理論解析技術の確立などを経て、当研究室は放射光軟X線分析をワンストップで完結できる強みをもつ。

第一原理計算による理論解析は、計算機上で適切なモデルを考え、その量子化学計算結果を測定データと比較することによりなされる。つまり、計算結果の正誤は測定データがないと判断することができない。当研究室は高度研渡邊研究室の協力の下、ニュースバル放射光施設のビームライン BL10 で軟X線吸収分析の環境整備を進め、70 eV~1100 eV 領域での高分解能軟X線吸収測定を可能にした。また、世界最高輝度の軟X線が得られる米国の放射光施設 Advanced Light Source (ALS) を長年パワーユーザーとして常用し、より高度な軟X線吸収測定も行うことができる。このような放射光実験設備を使える当研究室は理論解析に重要な測定データを多種多様に蓄積することができ、理論解析を進めるうえでの優位点となっている。最近では、これら実験と計算の両技術を放射光軟X線分析の学術研究に利用するのみならず、企業からの材料分析ニーズに活かしている。軽元素材料を原子・分子・電子のレベルで分析評価したい方は遠慮なく当研究室まで連絡されたい。