

放射光軟X線分光法と第一原理計算による炭素材料の複雑構造解析

～高度な実験と計算から実材料の複雑な原子・分子構造を解き明かす～

工学研究科 応用化学専攻

ひらい ゆうま よしだ けいご はまなか そうた むらまつ やすじ
◎M2平井佑磨、M2吉田圭吾、M2濱中颯太、教授 村松康司

キーワード

放射光, 軟X線分析, 第一原理計算, 量子化学計算, 軽元素材料 (B, C, N, O 等), 局所構造, 化学状態, 電子状態, 産業応用分析

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) 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。兵庫県立大学は国内の大学では最大規模の放射光施設 NewSUBARU (NS) を保有し、これは放射光軟X線分析に適する。当研究室は NS で放射光軟X線分析研究を行うため、高度産業科学技術研究所 (高度研) の協力を得て多目的のビームライン BL10 に軟X線吸収分析システムを開発した。また、軟X線吸収スペクトルから材料の複雑構造を解き明かすには第一原理計算を用いた理論解析が必要である。当研究室は最新の理論解析手法を駆使して様々な材料の軟X線スペクトルから材料の複雑構造を明らかにすることができる (図 1)。当研究室は、このような高度な実験と計算技術に基づく材料分析技術の開発と物性基礎研究を進めるとともに、本技術を企業の材料開発に応用することで産業界への貢献を目指している。

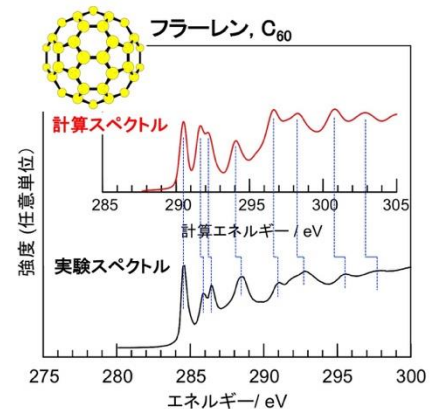


図1 フラーレンC₆₀のCK端X線吸収スペクトルの実験(下)と第一原理計算で算出した計算(上)との比較。複雑な実験スペクトル形状を計算スペクトルで正確に再現できる。この技術を実材料に適用することにより、材料の複雑構造を明らかにすることができる。

アピールポイント

当研究室 (物質計測化学研究グループ) は放射光軟X線分光研究を先駆的に行ってきた。研究推進にあたり、(1)軟X線分析技術の開発、(2)物性基礎研究、産業応用を見据えた(3)分析応用研究を3本柱とし、基礎から応用さらには産業展開を目指した幅広いスタンスをもつ。放射光実験技術と理論計算技術の両者を保有することも特長である。高度研と協力して開発した軟X線吸収分析システム (図 2) は国内でも稀な軟X線吸収分析と反射率測定が可能であり、現在は企業を中心として多くの学内外ユーザーが材料評価に利用している。

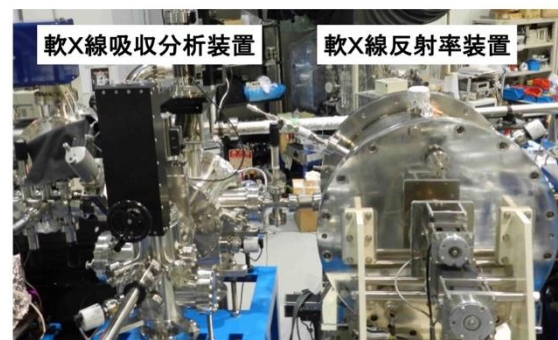


図2 BL10/NewSUBARUに整備した軟X線吸収分析装置(左)。従前の軟X線反射率装置(右)と組み合わせると、多様な材料の分析評価が可能になる。

