

ニューズバル BL10 における軽元素材料の軟 X 線吸収測定と 第一原理・分子動力学計算による理論解析

～軽元素材料を原子・分子・電子レベルで詳細に分析～

工学研究科 応用化学専攻

◎M2 まるやま るな丸山瑠菜, M1 たなか としゆき田中利幸, B4 しもがき いくや下垣郁弥, 教授 むらまつ やすじ村松康司

キーワード

放射光, 軟 X 線, X 線吸収端構造 (XANES), 軽元素材料, 炭素材料, 第一原理計算, 分子動力学計算, 状態分析, 局所構造解析

研究概要

放射光を利用した X 線吸収分光法は, 材料を原子・分子・電子レベルで調べることができる高度な分析手法である。特に, エネルギーが 1 keV 以下の軟 X 線を使った軟 X 線吸収分光法は, ホウ素 (B), 炭素 (C), 窒素 (N), 酸素 (O) など重要な軽元素の分析ができるため, ナノ材料, 電池材料, ソフトマターなど, 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, 当研究室 (物質計測化学研究グループ) は NS で放射光軟 X 線分析研究を行うために, 多目的ビームライン BL10 に軟 X 線吸収分析システムを開発・導入した。また, 軟 X 線吸収スペクトルから材料の化学状態や局所構造を解き明かすには理論解析が必要で, 当研究室は最新の理論計算手法を駆使して様々な材料の軟 X 線吸収スペクトルを理論解析している。例えば, 図 1 に示すようにフラーレン C₆₀ の X 線吸収端構造 (XANES) を第一原理計算により精度よく再現できる。最近では, 分子動力学 (MD) 計算技術もとりいれ, 分子間相互作用が効く材料の理論解析もできる。このように当研究室は, 高度な実験技術と計算技術を駆使して物性基礎研究と分析技術の開発を進めるとともに, 本分析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。

アピールポイント

当研究室は最先端の放射光軟 X 線分析研究を先駆的に行っている。具体的には, (1) 軟 X 線分光計測技術研究, (2) 物性基礎研究, (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で研究を推進している。放射光の分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。最近, 独自技術として絶縁性バルク試料の全電子収量測定技術を開発し, 紙や布などの日用品を母材とする材料の分析が簡便に行えるようになった[Y. Muramatsu *et al.*, *Anal. Sci.*, 36, 1507-1513 (2020)]。真空中で試料を約 200°C まで加熱しながら測定できるシステムを開発し, 従来は困難とされた加熱融解試料の軟 X 線吸収測定を可能にした[K. Hiramatsu *et al.*, *LASTI Ann. Rep.*, (submitted)]。グラフェン構造の CK 端 XANES を詳細に理論解析することにより, グラフェンエッジ炭素の状態から黒鉛系炭素材料を識別する技術を開発した[Y. Muramatsu *et al.*, *Anal. Sci.*, (accepted)]。さらに, 最近導入した MD 計算技術を第一原理計算と組み合わせることにより, 水素結合やイオン会合などの分子間相互作用を取り入れた理論解析が可能となった。このような実験と計算の技術進展により, 従来は困難であった多様な形態をとる材料の放射光軟 X 線分析を実現させている。

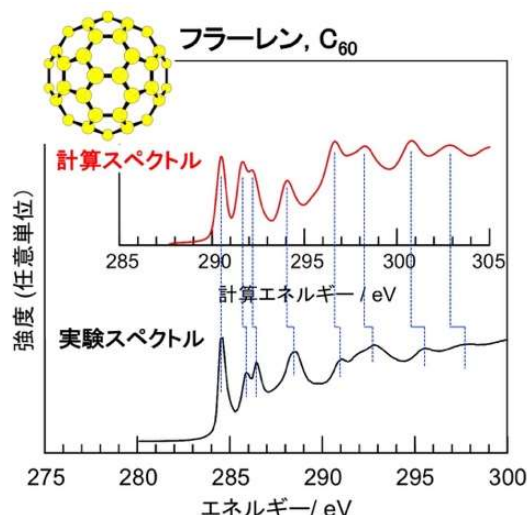


図1 フラーレンC₆₀のCK端X線吸収スペクトルの実験(下)と第一原理計算で算出した計算(上)との比較。複雑な実験スペクトル形状を計算スペクトルで正確に再現できる。この技術を実材料に適用することにより, 材料の複雑構造を明らかにすることができる。