



放射光軟X線分光法と第一原理計算による炭素材料の化学状態解析

○夏目穰、風間美里、菊間淳
(旭化成株式会社 基盤技術研究所)

背景・経緯

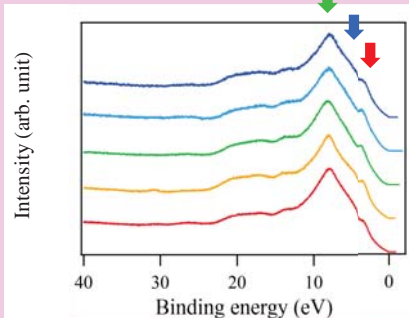
これまで、有機半導体材料などの軽元素を含んだ炭素系材料について、放射光軟X線分光法(XAS, XPS)と第一原理計算を併用した電子・化学状態解析を行ってきた。

本研究では、結晶性の高い有機半導体材料とは異なり、アモルファス構造である活性炭に着目し、従来法では得られないような新たな化学情報が得られるか検討するため、Aichi SRのBL7UおよびSAGA-LSのBL12において、XASおよびXPS価電子帯スペクトルを測定した。

結果



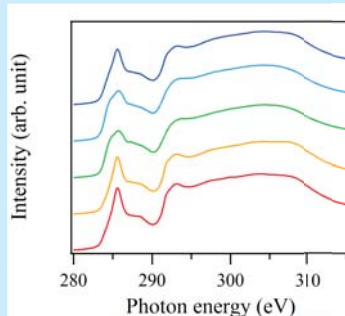
XPS-VB@90 eV



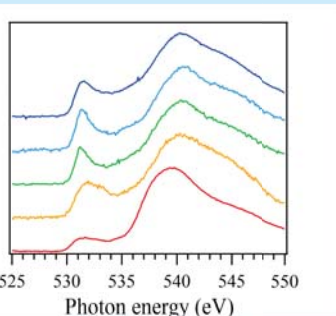
市販活性炭材料



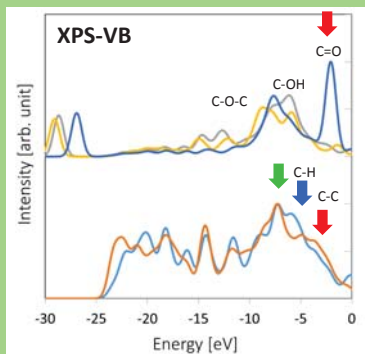
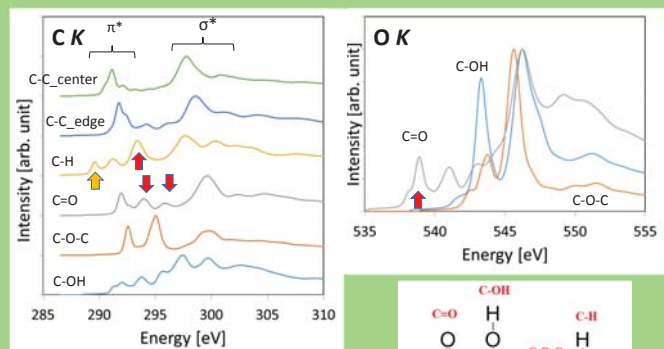
C K端 XANES



O K端 XANES

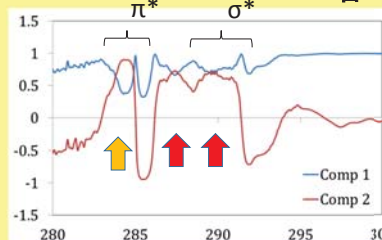


第一原理計算

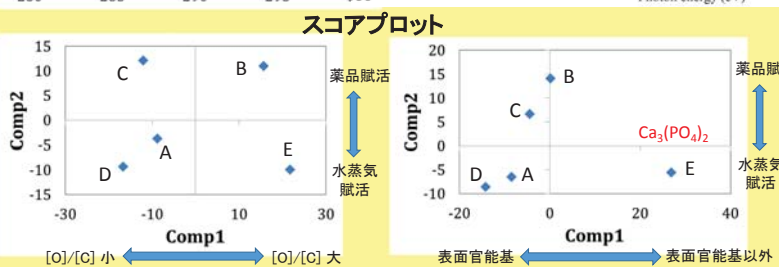
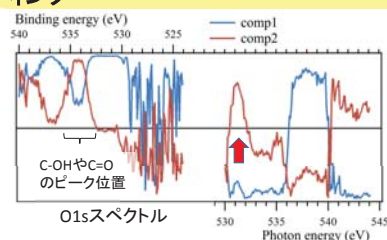


グラファイトを基礎にO官能基をモデル化

多変量解析



ローディング



試料	原料・賦活法	炭素網面の相対的大小さ	酸素について	
			量	化学状態
A	木粉、水蒸気賦活	中	やや多い	表面官能基
B	木粉、薬品賦活	小	多い	表面官能基
C	おがくず、塩化亜鉛賦活	小	多い	表面官能基
D	ピート炭、水蒸気賦活	大	少ない	-
E	ピート炭、水蒸気賦活	大	多い	主にCa ₃ (PO ₄) ₂

期待される効果・社会的インパクト

環境・エネルギー、エレクトロニクス領域に用いられる炭素材料について、詳細な化学状態解析ができた。第一原理計算を併用することで、性能向上のための材料設計や現象メカニズム解明などが可能となり、さらなる研究開発促進が期待できる。