



XAFS による SiO₂ 結晶中の Al イオンサイトの特定

山田 航

名古屋大学 グリーンモビリティ連携研究センター

1. 背景と研究目的

SiO₂ 結晶は多種多様な結晶構造をとるが、結晶中に幾種かの軽金属をドーピングすることで特性の変化が起こることが知られている。今回、Al を添加した場合に SiO₂ 中のどのサイトにドーピングしているのかを確認するために軟 X 線 XAFS を実施した。

2. 実験内容

Al を添加して高温焼成した SiO₂ を 2 種類と原料 SiO₂(共に粉末状態)の計 3 サンプルを準備した。合成した SiO₂ の 2 種に関しては、Al の添加量を変えている。BL1N2 を用いて、Al の K 吸収端付近(1600 eV)で軟 X 線 XAFS を行った。含有量は 1 mol%程度(推定)と少量のため、蛍光スペクトル法を用いた。

3. 結果および考察

Fig.1~3 は 3 サンプルの Al の XAFS のスペクトルである。3 つのサンプルに対してほぼ同型のスペクトルが得られた。

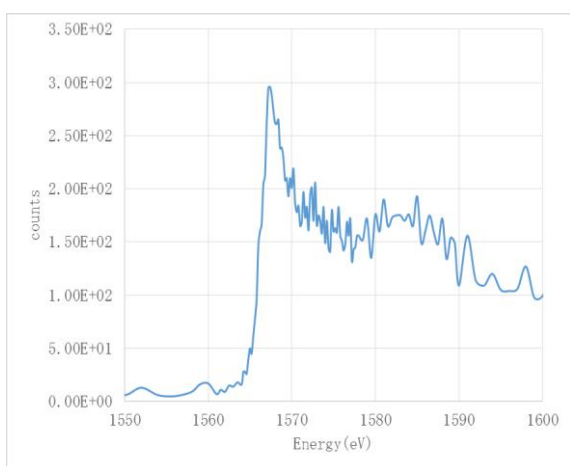


Fig.1 Al の XAFS スペクトル
(原料 SiO₂)

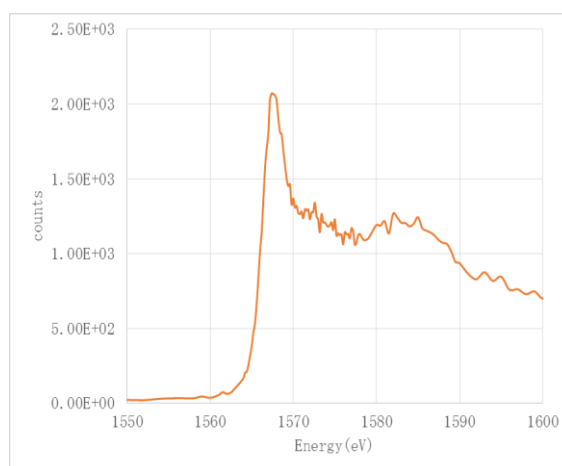


Fig.2 Al の XAFS スペクトル
(Al 添加 SiO₂-1)

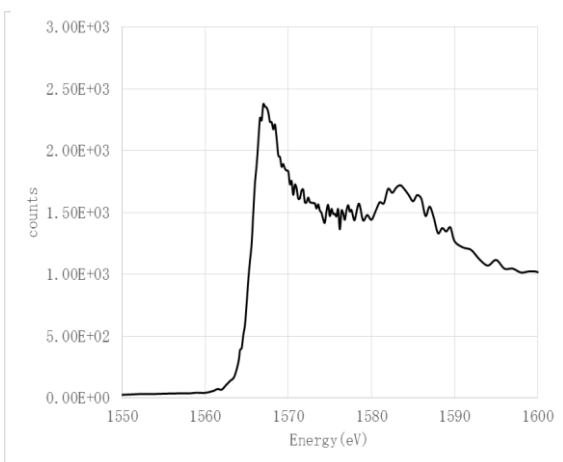


Fig.3 Al の XAFS スペクトル
(Al 添加 SiO₂-2)

Fig.4 は、ピークの強度を原料 SiO_2 のスペクトルで規格化して並べたものである。

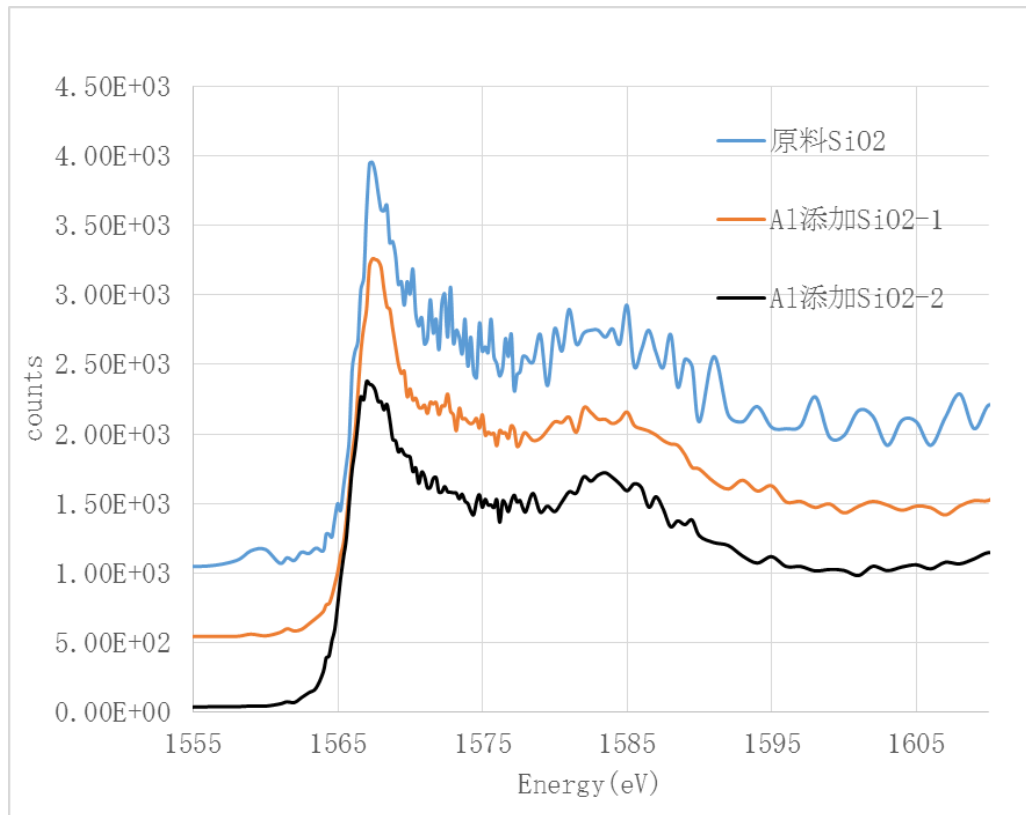


Fig.4 Al の XAFS スペクトル 3 サンプル比較

この結果より、原料 SiO_2 中の Al サイトと、合成した SiO_2 結晶中の Al サイトは同じであると考えられる。Al 添加 SiO_2 -2 のプレピークが他の 2 サンプルと比べて小さく見えるが、これは Al の添加量が SiO_2 -1 の 3 倍ほどなので自己吸収を起こしているためと考えられる。

Fig.1 のピークと似た形のピークがないか文献を調べたところ、カルシウム・アルミノシリケート(以下 CA)の一種に、今回の実験データと良く似たピークがあった[1]。この論文は CA を合成する際に SiO_2 の添加量を多くしていったときに CA の Al-XAFS スペクトルがどのように変化していくかを実験していったものである。 SiO_2 の量を増やしていくと、今回の実験のスペクトルに似たピークが得られている。CA 中では Al は AlO_4 中にあり 4 配位なので、今回測定した 3 サンプルも 4 配位であると推測できる。

今回の実験で、合成した SiO_2 結晶中では Al が SiO_2 の Si と置換して AlO_4 の 4 配位をとっていることを確認できた。他にも SiO_2 には様々なイオンがドーピングしていると考えられるため、さらなる分析によってそれらが結晶構造に対してどのような役割を果たしているのかを解明していきたい。

4. 参考文献

[1] D.R.Neuville, L.Cormier, A.Flank, V.Briois, D.Massiot, *Chem. Geology* 213, pp153-163 (2004).