



Ga₂O₃/Al₂O₃ 光触媒の配位構造解析

吉田 朋子

大阪市立大学 人工光合成研究センター

キーワード： Ga K-edge XANES, Ga₂O₃ 光触媒

1. 背景と研究目的

酸化ガリウム(Ga₂O₃)は水存在下での光照射によって CO₂ を還元し, CO, H₂, O₂ を生成することが報告されているが¹⁾, 更なる反応活性の向上が望まれる. 本研究では Ga₂O₃ を比表面積の大きい Al₂O₃ に担持することにより, その触媒活性を向上させることを目的とした. Ga₂O₃ の担持量を変えることにより, Ga 周辺の配位構造が変化することが期待される. 本研究では, Ga K-edge XANES を用いた定量的解析法を構築することを目的とした.

2. 実験内容

結晶多形である Ga₂O₃ のうち, 市販の β-Ga₂O₃ (高純度化学) 用意した. この試料の Ga K-edge XAFS スペクトルをあいちシンクロトロン光センターBL5S1 において透過法により測定した.

3. 結果および考察

Ga₂O₃ は Ga 原子に 4 つの酸素が配位した四面体配位サイト (Ga (t)) と, 6 つの酸素が配位した八面体配位サイト (Ga (o)) の二つの配位構造を持つが, これらの割合は Ga₂O₃ の結晶構造 (α 相, β 相, γ 相, ε 相, δ 相, κ 相) によって異なる. 例えば, β-Ga₂O₃ 結晶では, Ga (t) と Ga (o) の比は 1:1 であることが知られている.

Fig.1 に β-Ga₂O₃ について測定した Ga K-edge XANES スペクトルと, それをカーブフィッティングによりピーク分離した結果について示す. Fig.1 における 10375 eV および 10379 eV 付近の二つの明確なピークは, 内殻電子の空軌道への励起 (1s→4p 軌道への遷移) を示しており, それぞれ Ga (t) および Ga (o) に帰属することができる. 一方, 10384 eV 付近の小さなピークは, 隣接原子による励起電子の多重散乱効果を示している. 本研究では, 真空準位 (連続状態) への遷移はアークタンジェント関数で近似し, 空軌道への励起 (1s→4p 軌道への遷移) と多重散乱効果を示すピークについては, 擬フォークト関数を採用した. これらの関数を用いて β-Ga₂O₃ の Ga K-edge XANES スペクトルをフィッティングし, Ga (t) と Ga (o) にそれぞれ帰属される 10375 eV と 10379 eV のピーク面積比を用いて Ga (t) と Ga (o) の割合を算出した. フィッティングを行って見たところ, 4 配位サイトと 6 配位サイトの比が 1 : 0.94 と良い一致を示した. よって, 今回のフィッティング法が妥当であることが示唆された.

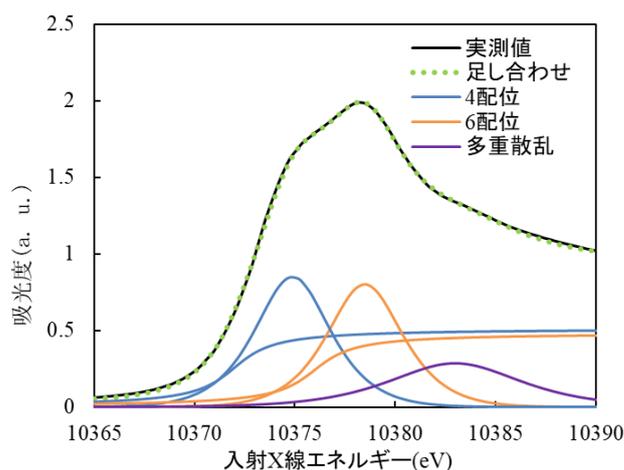


Fig.1 β-Ga₂O₃ の Ga K-edge XANES スペクトルとカーブフィッティング結果

4. 参考文献

1) R. Ito, M. Akatsuka, A. Ozawa, Y. Kato, Y. Kawaguchi, M. Yamamoto, T. Tanabe, T. Yoshida, ACS Omega, 4 (2019) 5451-5458.