



ホウ化水素ナノシートの局所構造解析

富中 悟史

国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

キーワード：ホウ化水素ナノシート，構造解析，表面，軟X線吸収分光

1. 背景と研究目的

水素とホウ素からなる分子レベルの厚みを有するナノシート（ホウ化水素ナノシート）は、近年、筑波大を中心としたグループが世界で初めて合成に成功した新物質である^[1]。電子伝導性などの魅力的な物性を有しており、様々な応用が期待できる材料である^[2]。軽元素のみからなるため、X線の散乱能が低いと構造解析が容易ではなく、さらに非晶質化しやすいという難点もある^[2]。無機物のような物性を示す一方で、その共有結合で構築されたネットワークは有機分子に類似しており、分子吸着による構造・物性変調の可能性も見えている^[2]。構造の理解がその特異な物性・機能の理解に繋がる物質であり、本研究では軟X線吸収分光を用いた局所構造解析を目的とした基礎研究を行った。

2. 実験内容

ホウ化水素ナノシートは、既報のように合成した粉末試料を用いた^{[1], [2]}。粉体は、カーボンテープに固定化したインジウムシートにグローブボックス中で付着させ、大気暴露せずにあいち放射光の BL7U にて測定に用いた。ホウ素の吸収端について、全電子収量法 (TEY) と蛍光収量法 (TFY) の両方で吸収分光データを測定した。得られた吸収分光データは Athena プログラムを用いて規格化を行った。また、同じサンプルで光電子分光データの取得も行い、清浄な金とインジウムのデータを取得し、フェルミ準位の運動エネルギーを Au のデータ ($4f_{7/2}$, 84.0 eV) を用いて得て、各測定の帯電補正はインジウムの内殻ピーク ($3d_{5/2}$, 443.9 eV) を用いて行った。

(a) (b)

3. 結果および考察

ホウ化水素は一般的には酸化されやすい物質であるため、測定サンプルは慎重に取り扱っているものの、基礎データが不足しているため、構造が良く知られているデカボラン ($B_{10}H_{14}$) および m-カルボラン ($C_2B_{10}H_{12}$) の測定も行った。

Fig. 1 に示すように、光電子ピーク (B 1s) について見てみると、デカボランは純ホウ素の 189 eV より低エネルギーにもピークがありホウ化水素の典型的なピークが確認できた。より安定な物質と知られるカルボランは酸化物と同様の高結合エネルギー位置が主たるピーク位置であった。吸収分光データ (Fig. 1b) では、TEY と TFY で大きな差はなく、表面の酸化層ではなく、材料自体を測定できていると考えられた。ピークやスペクトラムの挙動の詳細は第一原理計算による計算と併せて解析中であり、ホウ化水素ナノシートの解析結果と併せて論文発表を行う予定である。

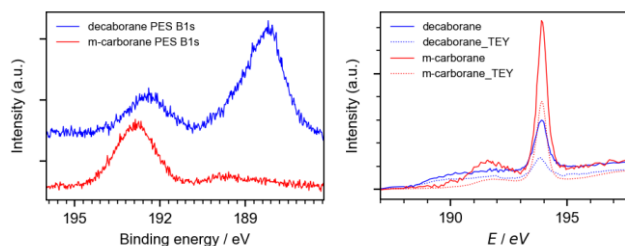


Fig.1 Hydrogen boride clusters (decaborane and m-carborane). (a) Core-level B 1s photoelectron spectra collected at 400 eV incident energy. (b) X-ray absorption spectra obtained by TEY mode and TFY mode.

4. 参考文献

- [1] H. Nishino, T. Fujita, N. T. Cuong, S. Tominaka, M. Miyauchi, S. Iimura, A. Hirata, N. Umezawa, S. Okada, E. Nishibori, A. Fujino, T. Fujimori, S. I. Ito, J. Nakamura, H. Hosono, T. Kondo, *J. Am. Chem. Soc.* 139, 13761–13769 (2017).
- [2] S. Tominaka, R. Ishibiki, A. Fujino, K. Kawakami, K. Ohara, T. Masuda, I. Matsuda, H. Hosono, T. Kondo, *Chem.* 6, 406–418 (2020).