



【重点M3】湿式ハイスループットプロセスによる多元系酸化物機能材の探索

藤本 憲次郎

東京理科大学理工学部

キーワード : XAFS・ハイスループット・インフォマティクス

1. 背景と研究目的

知の拠点あいち重点研究プロジェクト「地域先端計測基盤とAIの統合による機能材料探索の新展開」に貢献するハイスループット材料合成装置（コンビナトリアル合成装置）により得られる膨大な粉体試料群の効率的な放射光実験データ収集のため、これまでに試料準備に要する時間の短縮と試料群の連続測定を可能にする治具を提案（Fig.1）し、粉体試料をポリイミドテープによって貼り合わせた試料のXRDパターンおよびXAFSスペクトルの測定データを示してきた^[1]。Fig.2のXAFSスペクトルは従前のBN粉体との混合後にペレット化させた試料を測定したスペクトル（赤色）とポリイミドへ粉体を貼り付けてFig.1の治具により測定したスペクトル（青色）を重ね合わせたものである^[1]。

この結果は開発治具による結果は従前の結果と概ね遜色ないものであり、これまでのよう各試料ごとにペレット化する作業が不要となることから、全体の作業量の低減に貢献できるとともに、測定ハッチ外からの遠隔連続測定制御が可能になり、XAFSデータの効率的な取得に貢献できると考えている。一方で、ポリイミドテープへの試料貼り付けのハンドリングのさらなる改善・簡便を図るため、今回は貼り合わせるテープ素材を変えた場合の測定結果について、同組成粉体の結果（上記参考文献[1]の一部）と比較することとした。

2. 実験内容

測定試料には参考文献[1]で用いたペロブスカイト型CaMnO₃粉体^[1]を用いた。当該粉体試料をポリイミドテープに擦り付け、本来であればもう一枚のポリイミドテープによって貼り合わせるところ、取り扱い安いと感じられた「スコッチ®あとではがせるテープ（特殊ポリプロピレンフィルム マットフィニッシュ（つや消し加工）・粘着剤：特殊アクリル系粘着剤、テープ厚：0.058mm）に置き換えることとした。すなわち、「ポリイミド」 - 「粉体試料」 - 「特殊ポリプロピレンフィルム」の3層構成としたものを透過法、クイックスキャンにより測定した。

3. 結果および考察

Fig.3の赤色スペクトルはFig.2の赤色スペクトルと同データ、すなわちポリイミドテープ2枚で粉体を貼り合わせた場合のXAFSスペクトルである。一方、青色スペクトルは「ポリイミド」 - 「粉体試料」 - 「特殊ポリプロピレンフィルム」の3層構成のものをXAFS測定したものである。EXAFS領域では波打ったスペクトル形状となり、テープ素材あるいは粉体貼り付け法によっては当該領域での解析を困難にしてしまうことが示された。

参考文献

1. ACS Combinatorial Science 22(12) (2020) 734-737.

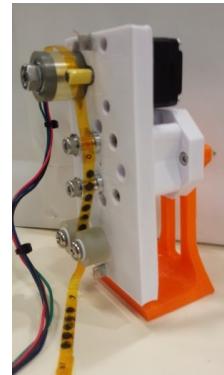
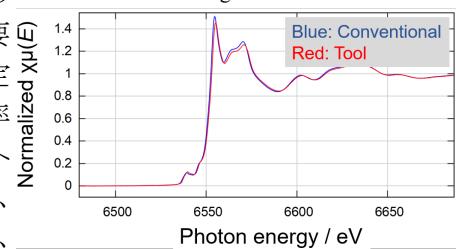
Fig.1 開発治具写真^[1]

Fig.2 CaMnO₃粉体のXAFSスペクトル
青：従前のBN希釈ペレットによる測定結果
赤：Fig.1に示す試料形態での測定結果

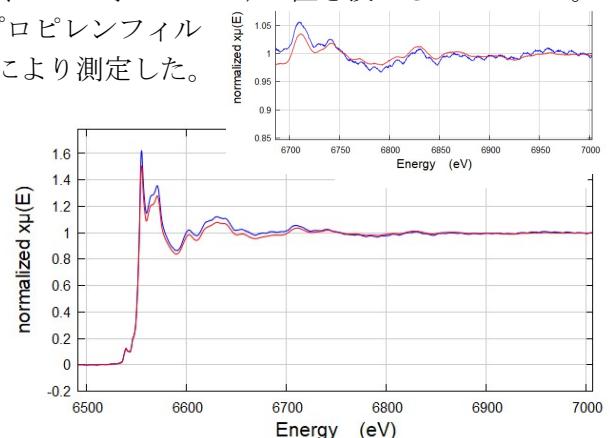


Fig.3 CaMnO₃粉体のXAFSスペクトル
赤：Fig.1に示す試料形態での測定結果
青：Fig.1での片方テープ素材に「特殊ポリプロピレンフィルム」を用いた場合の結果