



# XAFS 法によるシリカ粒子内に取り込まれた TiO<sub>2</sub> の構造解析

阿久津 和宏

総合科学研究機構 中性子科学センター

キーワード：TiO<sub>2</sub>, XAFS, シリカ

## 1. 背景と研究目的

安価で簡便なシリカコーティング技術は、紙素材等の多くの用途に利用されている。近年では、本コーティング材に TiO<sub>2</sub> を添加することで有機物等を分解する機能を付加することに成功しており、現在は TiO<sub>2</sub> の構造と触媒活性の相関に着目している。これまでに、赤外分光法や電子顕微鏡等による研究を実施しており、その結果、シリカ層の中には数 nm 程度の TiO<sub>2</sub> 粒子が均一に分散していることが明らかとなっている。しかし、それらの手法では TiO<sub>2</sub> の構造を詳細に分析することが難しく、TiO<sub>2</sub> の構造と触媒活性の相関については現在も不明のままである。我々は、TiO<sub>2</sub> のナノ粒子の多くが Anatase 型のナノ粒子であり、Anatase 型 TiO<sub>2</sub> ナノ粒子が触媒作用を示しているものと推察している。本研究では、様々な条件で合成したシリカ-TiO<sub>2</sub> 試料の XAFS データを測定し、その中に含まれる TiO<sub>2</sub> の Anatase-Rutile の比を分析することで、TiO<sub>2</sub> の構造と触媒活性の相関を定量的に評価する。

## 2. 実験内容

BL5S1 に設置されている XAFS 測定用装置を用いて、シリカ粒子内に取り込まれた TiO<sub>2</sub> 粉末の XAFS スペクトルを測定した。XAFS スペクトル測定は Ti の K 吸収端エネルギー (4.966 keV) を用いて、4.6-6.0 keV 程度のエネルギー領域の測定を実施した。データの測定は Step Scan 法により実施している。得られた XAFS データの解析は、解析ソフト Athena<sup>1)</sup>を用いて実施した。

## 3. 結果および考察

Rutile、Anatase、Brookite (全て標準試料) 及びシリカ-TiO<sub>2</sub> 試料の Ti K 吸収端の X 線吸収端近傍構造 (XANES) スペクトルを Fig. 1 に示す。シリカ-TiO<sub>2</sub> 試料の XANES スペクトルは Anatase のスペクトルと形状が類似しており、従って合成したシリカ-TiO<sub>2</sub> 試料中に含まれる TiO<sub>2</sub> は Anatase 型の構造を主に有していることが示された。合成条件の異なるシリカ-TiO<sub>2</sub> 試料の XANES スペクトルも Anatase のスペクトルと形状が類似しているものの全くの同一ではないため、Anatase 型の TiO<sub>2</sub> が主成分ではあるものの、その構造は少しずつ異なっているようである。

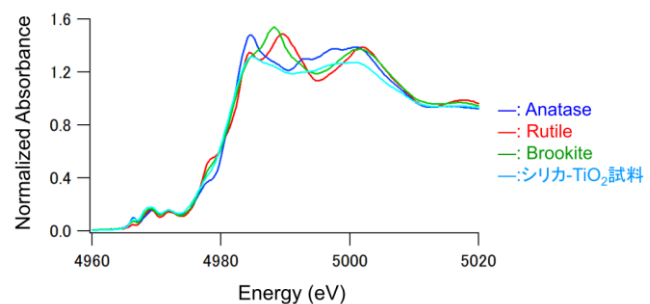


Fig.1 Rutile、Anatase、Brookite及びシリカ-TiO<sub>2</sub>試料のXANESデータ。

今後は、合成条件が異なるシリカ-TiO<sub>2</sub> 試料の XAFS データの解析を実施し、合成条件と TiO<sub>2</sub> の構造の相関について詳しく解析する。

## 4. 参考文献

1. B. Ravel and M. Newville, 'ATHENA, ARTEMIS, HEPHAESTUS: data analysis for X-ray absorption spectroscopy using IFEFFIT', *J. Synchrotron Rad.*, **12**, 537-541 (2005).