

放射光軟X線分光法と第一原理計算による炭素機能材料の構造解析と産業利用への展開

村松康司
兵庫県立大学工学研究科

軟X線吸収分析は軽元素や遷移金属から構成される材料の状態分析に威力を発揮する。特に、近年注目される電池関連材料は Li, C, N, O, F などの軽元素が重要な役割を担うため、これらの精密な分析評価手法として軟X線吸収分光法への期待が高まっている。実際に、炭素電極、太陽電池、炭素繊維複合材料、導電性有機薄膜、さらにはグラフェンやナノダイヤモンドなど複雑で多様なナノ炭素材料の分析に軟X線吸収分光が活発に利用されている。このような工業材料の分析を行うには、汎用性と簡便性を有し、かつ多様な形態の試料を扱える分析環境が望まれる。一方、我々は兵庫県立大学放射光実験施設 NewSUBARU の多目的ビームライン BL10[1]において軟X線吸収分析を実現するため、高度研スタッフと共同してビームラインの改良を進めてきた。これまでにビームライン前置ミラーの炭素汚染を除去し、分光器に 1800 mm^{-1} 回折格子と 2400 mm^{-1} 多層膜回折格子を導入した。その結果、70~1100 eV 領域において十分なエネルギー分解能で XANES 測定ができる分光性能に到達した[2-4]。

BL10/NewSUBARU では工業材料の汎用、簡便、多様な分析の実現を目指した軟X線吸収分析装置を開発・導入した[5]。装置設計にあたり、大きさ $25 \times 75 \text{ mm}^2$ の試料基板で多くの試料を効率的に測定できるようにし、特殊な計測にも対応できるようにチャンバー内へのアクセスを容易にした。また、真空排気系と試料基板の処理方法を工夫することにより、通常の軟X線分光実験では敬遠される液体有機試料の直接測定も可能になった[4]。現在、嫌気性試料の測定にも対応するよう、トランスファーベッセルの導入を進めている。さらに、BL10 に従前から備えられている反射率計と組み合わせることにより、薄膜試料の状態分析とともに膜質評価が可能である[6,7]。

XANES から対象試料の局所構造や電子構造を明らかにするには量子論に基づく理論解析が不可欠であり、我々は第一原理計算である DV- $X\alpha$ 分子軌道計算ならびに CASTEP を駆使して、様々な炭素機能材料の解析を進めてきた。これらの計算手法は近年の計算技術の進歩によって容易に実行できるとともに、計算精度が著しく向上している。このような XANES 測定と第一原理計算による理論解析から、従来の実験室系手法では解析が困難であった複雑な炭素機能材料の局所構造解析が可能になりつつあり、産業界における工業炭素材料の開発に寄与する事例が増えてきた[8]。この流れは今後ますます加速されるであろう。

- [1] T. Watanabe, H. Kinoshita, K. Hamamoto, M. Hosoya, T. Shock, LASTI Annual Report, **2**, 50-51 (2000).
- [2] 村松康司, 濱田明信, 原田哲男, 木下博雄, X線分析の進歩, **43**, 407-414 (2012).
- [3] 村松康司, 濱田明信, 植村智之, 原田哲男, 木下博雄, X線分析の進歩, **44**, 243-251 (2013).
- [4] 植村智之, 村松康司, 南部啓太, 原田哲男, 木下博雄, X線分析の進歩, **45**, 269-278 (2014).
- [5] Y. Muramatsu, A. Tsueda, T. Uemura, K. Nambu, T. Ouchi, T. Harada, T. Watanabe, H. Kinoshita, LASTI Annual Report, **17**, 27-28 (2015).
- [6] 植村智之, 村松康司, 南部啓太, 福山大輝, 九鬼真輝, 原田哲男, 渡邊健夫, 木下博雄, X線分析の進歩, **46**, 217-325 (2015).
- [7] Y. Muramatsu, A. Tsueda, T. Uemura, K. Nambu, T. Ouchi, T. Harada, T. Watanabe, H. Kinoshita, LASTI Annual Report, **17**, 29-30 (2015).
- [8] 例えば, LASTI Annual Report, **17** (2015), pp.77-78, 79-80, 81-82, 83-84, 85-86.