

## 放射光軟X線吸収分光と第一原理計算による先端材料分析

工学研究科 応用化学専攻 村松 康司



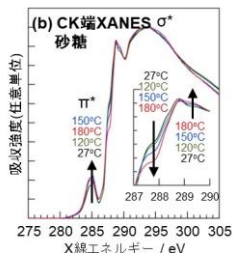
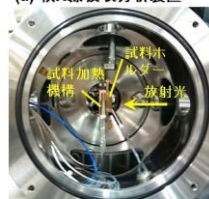
## キーワード

放射光、軟X線吸収分光、X線分析、理論計算、材料分析、軽元素

## 研究概要

当研究室(物質計測化学研究グループ)では、放射光軟X線吸収分光法による軽元素材料の先端分析技術を開発し、物性基礎研究と実材料の精密分析に展開している。具体的にはニュースバル放射光施設のビームラインBL10に軟X線吸収分析装置を導入し、物性基礎研究の推進と学内外ユーザーからの分析要望に応じている。最近では試料を加熱しながらin-situで測定できる環境を整備した。さらに、量子化学に基づく第一原理計算から、原子・分子・電子レベルの電子状態分析や局所構造解析を行う。我々の強みは、放射光実験と理論解析の両方を高いレベルで実現し、物性研究から分析応用研究まで展開するところである。

(a) 軟X線吸収分析装置



BL10/NewSUBARUの軟X線吸収分析装置(a)と、180°Cまで加熱しながら測った砂糖のCK端XANES(b)。

## アピールポイント

1980年代後半より、放射光軟X線分析技術の開発と軽元素材料の軟X線分析応用研究を一貫して行ってきた。特に炭素材料を中心とした軽元素工業材料の分析は先駆的に行い、分析に有効な知見を実験・理論の両面から豊富に蓄積している。BL10では、無機/有機または固体/液体を問わず軽元素材料の軟X線吸収分析が可能であり、産業界からの様々な工業材料の分析要望に応えることができる。

## 応用分野

軽元素(B、C、N、O、F、Si等)からなる材料の詳しい分析評価から、新規材料の開発に展開できる。特に、企業等においてこれまで経験的に識別してきた材料を原子・分子・電子の観点から合理的に理解できるため、企業材料の高度な分析評価に役立つ。