

時間軸と空間軸をもつ化学状態解析での材料研究 不均一現象のトリガーを見つけるために

稲田 康宏

立命館大学生命科学部応用化学科

はじめに

現代社会を支える触媒材料や電池材料は固体状態で機能しており、それは多くの場合、不均一に発現する。機能の不均一性には空間と時間の両面があり、これまではそれぞれの次元を分解する手法で独立に解析されてきたが、空間的および時間的に不均一な状態がいかにして発生するかを明らかにすることは、機能が発現するトリガーを見いだすことに対応し、今後の材料開発において重要な知見を与えると考えられる。

時空間分解への展開

微小化した光を用いて試料位置を走査する従来の空間分解 XAFS 解析は、多くの材料の状態解析に有用である一方で、電池の駆動、物質変換触媒の動作、半導体材料の製造プロセス、生物の成長などの状態変化が進行しているその場での適用の重要性がますます高まっている。例えば、二次電池正極の充放電過程(図1)のように空間的に不均一に進行する現象が、最近の透過型二次元イメージング XAFS 測定によって明らかになり、正極合剤内での電気伝導性や活物質粒子内でのリチウムイオン拡散性、電極表面の被膜形成などが関与している。二次電池の容量や出力特性に直結する正極反応の不均一現象の発現因子を解析することで、より電流密度を高め、より高容量を達成する二次電池系のための材料設計の指針が導かれる。

さらに、位置と時間の相関を求めることで不均一現象の時間発展の解析が可能になる。比較的広い領域を、同時に、その場で、マイクロ秒までの時間スケールでリアルタイムに、状態変化の様子を捉える時空間分解 XAFS 技術の確立により、電池材料や物質変換触媒などのエネルギー関連分野をはじめとして、農業や食品、医療などのライフサイエンス分野での新しいサイエンスの展開も期待される。

また、次世代エネルギー源の水素のクリーンな製造法として、固体光触媒を用いた水分解が重要性を増している。金属触媒での光励起状態が活性種となる光触媒系がその目的に対して重要であり、光触媒活性の発現メカニズムを理解することが、より効率的な触媒系の開拓に不可欠である。活性種である短寿命光励起状態の状態解析には、特に XAFS 法から得られる電子状態や局所構造の情報が極めて有効であり、今後、ポンプ-プローブ時間分解 XAFS 法の応用が期待される分野の一つである。

まとめ

様々な機能を生み出す固体材料に関して、不均一現象の発現要因がその性能の改善に直結する可能性は高い。不均一に発生するイベントについて、その発現のトリガーを探索することが、より高性能な機能性材料の創製に貢献すると期待される。

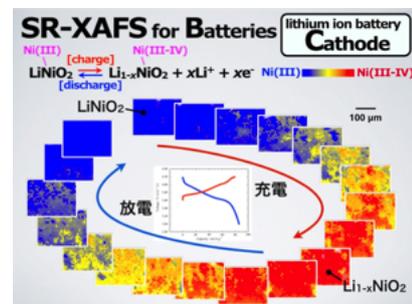


図1 ニッケル酸リチウム正極の充放電過程における空間的に不均一な電極反応