

# ナノ材料の構造解析：燃料電池触媒の理解

Keyword : ナノ材料、構造解析、燃料電池触媒、PDF(二体分布関数)解析

## 研究の背景

燃料電池触媒などの多くの分野にナノ材料が利用または研究されているが、その原子配置についてはバルク材料と同等であることを仮定している。しかし、詳細な物性を理解する上で、結晶歪みなどを明らかにする高精度な解析が必要となってきた。また、ナノ材料でしか存在しえない未知構造の存在も示唆されており、詳細な構造解析を行うことでナノ材料の物性の理解が原子レベルから行える。

## 研究の狙い

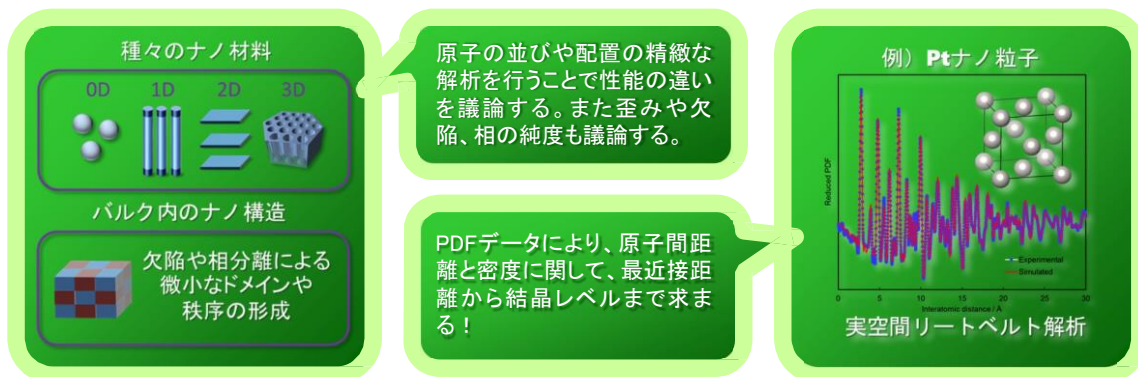
本研究では、X線PDF(pair distribution function、二体分布関数)を用いて、ナノ材料の原子配置を超高精度で解析を行っている。例えば、同じ組成のナノ粒子であっても、物性が異なる事例はよく報告されているが、その材料の歪みや欠陥を含めた詳細な構造解析が本研究で行えるようになった。さらに、X線解析であり液体も扱えるため、合成直後や合成中のウェットなサンプルも扱えるため、合成反応の理解も期待できる。

## 最先端研究トピックス

燃料電池触媒を中心に、X線PDFを用いた超高精度構造解析を行っている。

ナノ材料中の原子がどう並んでいるか、解析可能！

原子間距離と原子ペア密度を測定するため、ナノ結晶・結晶・アモルファスという幅広い材料の構造解析が行える。



種々の構造を持つナノ材料の歪みと物性の関係を原子レベルの詳細な構造解析をもとに行っている。またナノ材料の相の純度や結晶歪みに由来する物性の変化について議論が行えるようになった。【文献1】バルク材料内部の欠陥や近距離秩序の解析を行えるようになった。【文献2, 3】

## 文献

- S. Tominaka, et al. Mater. Horiz. 2014, 1, 106–110.
- S. Tominaka, et al., J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 6428–6431.
- S. Tominaka, et al., Chem. Sci. 2015, 6, 1465–1473.

## まとめ

- ナノ材料の新しい顔が見えるようになった。
- ナノ材料の相の純度の測定が可能になった。
- 未知構造の解析が可能になった。
- 原子配置に基づく物性の議論が可能になった。

## 実用化の目標

- ナノ材料の性能の違いを原子配置、結晶歪み、欠陥など構造の本質をもとに議論が可能になるため、新物質の同定や機能の高度化へ寄与ができる。
- 解析を高速化・高度化するためのプログラムを作成しており、手法の普及も行う。



ナノマテリアル分野 メソスケール物質化学グループ

富中 悟史

E-mail: TOMINAKA.Satoshi@nims.go.jp

URL: <http://mesochem.xyz/satoshi-tominaka/>