

## 層状窒化炭素化合物の NEXAFS スペクトル(2)

### NEXAFS spectroscopic studies of graphitic Carbon Nitride materials (2)

九州シンクロトロン光研究センター<sup>1</sup>, 岐阜高専<sup>2</sup>, 岡理大理<sup>3</sup>

岡島 敏浩<sup>1</sup>, 瀬戸山 寛之<sup>1</sup>, 吉村 大介<sup>1</sup>, 羽瀨 仁恵<sup>2</sup>, 財部 健一<sup>3</sup>

Kyushu Synchrotron Light Research Center.<sup>1</sup>, NIT, Gifu College<sup>2</sup>, Okayama Univ. of Science<sup>3</sup>

°Toshihiro Okajima<sup>1</sup>, Hiroyuki Setoyama<sup>1</sup>, Daisuke Yoshimura<sup>1</sup>, Hitoe Habuchi<sup>2</sup>, Kenichi Takarabe<sup>3</sup>

E-mail: okajima@saga-ls.jp

炭素 (C) と窒素 (N) から構成される層状窒化炭素化合物は、バンドギャップが約 2.7eV の半導体である。燃料電池の Pt 触媒との置き換えを想定した酸素還元能、水分解の光触媒作用、そして蛍光体としての特性が近年報告され、注目を集めてきている[1]。層状窒化炭素化合物の構造には、2 種類のモデルが提案されている。一つは C, N の六員環 3 個を単位とする s-heptazine が 2 次元的に繋がった graphitic-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) であり、そしてもう一つは melon : C<sub>6</sub>N<sub>6</sub>(NH)(NH<sub>2</sub>)あるいは C<sub>6</sub>N<sub>9</sub>H<sub>3</sub> である。g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> は水素を含まない層状窒化炭素化合物であり、melon は水素を含む層状窒化炭素化合物である。前回の年回において我々は、第一原理計算により g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, melon のそれぞれの NEXAFS スペクトルを求め、スペクトルの特徴に違いが現れることを報告した[2]。すなわち実験で得られたスペクトルと計算で求められたスペクトルとの比較することで、作製された層状窒化炭素化合物の構造を決定することが可能である。今回我々は、グアニジン炭酸塩を原料とした蒸着法により層状窒化炭素化合物の NEXAFS スペクトルの測定を行い、その構造について検討を行った。

図中の黒実線で示したスペクトルは Si 基板上に蒸着した試料から得られた N K 吸収端での NEXAFS スペクトルである。赤実線と青実線は、それぞれ計算で求めた melon および g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> のスペクトルである。NEXAFS スペクトルの測定は SAGA-LS BL10 で行った。スペクトル形状の比較から、実験で得られたスペクトルは  $\pi^*$  領域、 $\sigma^*$  領域とも melon 構造から得られたスペクトルとよく一致している。このことから、グアニジン炭酸塩を原料とした蒸着法で得られた層状窒化炭素化合物は melon 構造であることが示唆される。C K 吸収端などでの結果と合わせ、今回作製した層状窒化炭素化合物の構造を議論する。

[1] A. Thomas *et. al.*, J. Mater. Chem., 2008, 18, 4893(2008). M. J. Bojdys *et. al.*, Chem. Eur. J. 14, 8177(2008); この論文は g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> を提唱している。  
B. V. Lotsch *et. al.*, Chem. Eur. J., 13, 4956,(2007); この論文は melon を提唱している。 [2] 岡島敏浩ら, 第 77 回応用物理学会周期学術講演会, 15a-A26-5.

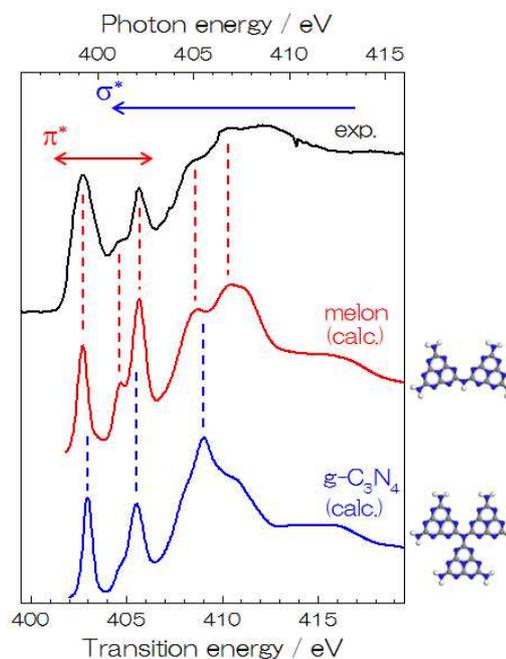


図 グアニジン炭酸塩を原料とする蒸着法 (基板: Si ウェハー) により得られた層状窒化炭素化合物の N K-edge NEXAFS スペクトル (黒実線) と、計算で求めたスペクトル (赤実線: melon, 青実線: g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>)。