

光還元を利用した酸化グラフェンの構造推定と還元ダイナミクスの解明

Structure Estimation and Reduction Dynamics of Graphene Oxide by Photoreduction

岡山大学大学院自然科学研究科¹, 岡山大学異分野融合先端研究コア² ○佐和孝嘉¹, 溝手翔太¹,

仁科勇太^{1,2}, 陳望², 羽田真毅¹, 西川亘¹, 山下善文¹, 林靖彦¹

Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University¹

Research Core for Interdisciplinary Sciences, Okayama University²

○Takayoshi Sawa¹, Shota Mizote¹, Yuta Nishina¹, Wang Chen², Masaki Hada¹,

Takeshi Nishikawa¹, Yoshifumi Yamashita¹, Yasuhiko Hayashi¹

E-mail: pvl36z17@s.okayama-u.ac.jp, hadamasaki@okayama-u.ac.jp

酸化グラフェンはグラフェンの誘導体であり, 酸化グラフェンを還元することにより, 簡便かつ安価にグラフェンに近い構造を持つナノカーボン材料を作製することが可能である. したがって, 酸化グラフェンを用いた幅広い応用研究が進められている[1]. 品質の保証や再現性の確保の観点から酸化グラフェンの構造を理解することは非常に重要である. しかし, 未だ酸化グラフェンの詳細な構造について完全な解明には至っていない. そこで我々は, 紫外光照射による酸化グラフェンの還元反応中の原子運動を直接的に観測し, それをもとに酸化グラフェンの詳細な構造と還元ダイナミクスについて理解することを目的とし実験を行った.

酸化グラフェン薄膜から得られた電子線回折像を Fig. 1 に示す. Fig. 1 より, 酸化グラフェンの(100)面及び、(110)面の鮮明な回折リングが得られていることが分かる. この酸化グラフェンにフルーエンス 1~6 mJ/cm² の紫外光を照射するとピーク位置はどちらの回折ピークも高角側にシフトした. これは酸化グラフェンの(100)面及び、(110)面が光励起により縮んだことを意味する. また, Gaussian を使用した密度汎関数理論(DFT)計算により構造を最適化したグラフェン及び, 酸素官能基を導入したグラフェンのモデルを作製した. それぞれの構造からエポキシ基が離脱する際に (100)面と(110)面の面間距離が縮むことが分かった. 発表では, 電子線回折実験の実験結果と密度汎関数理論(DFT)計算から酸化グラフェンの詳細な構造推定, また還元ダイナミクスについて議論する.

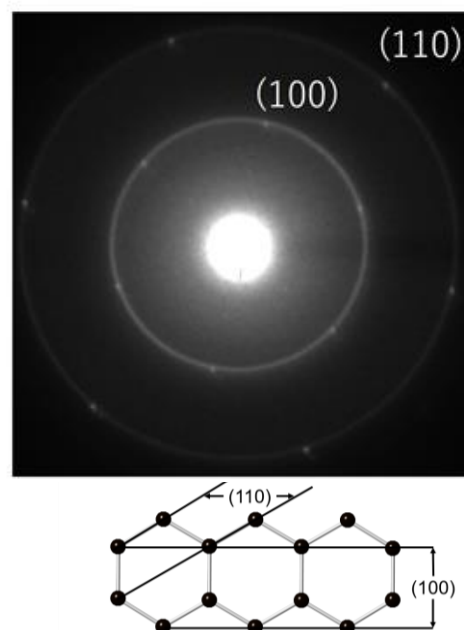


Fig. 1 Electron diffraction pattern from Graphene Oxide thin film

[1] N. Morimoto, T. Kubo, Y. Nishina, Sci Rep. **6**, 21715 (2016).