

X 線全散乱による Rh ナノ粒子の局所構造解析

Local structural analysis for Rh nanoparticles using X-ray total scattering



物材機構¹ ○(PC)廣井 慧¹, 坂田 修身¹

NIMS¹, °(PC)Satoshi Hiroi¹, Osami Sakata²

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

ナノサイズの金属結晶では、特異な触媒活性などの興味深い現象が見られることがある[1]。例えばロジウム (Rh) ナノ粒子の場合、バルク金属では観測されない水素の吸蔵が発現することが報告されている[2]。このような現象は、微細化に伴う量子効果や体積に対する表面積率の増大、金属原子間相関の変化に由来すると考えられる。

原子間相関の情報を得るための測定手法として、X 線全散乱が挙げられる。X 線全散乱では、放射光源から供給される高エネルギー X 線を使用し、広い角度範囲の干渉性散乱を測定することで、高い実空間分解能を持つ対相関関数(Pair-distribution function, PDF)を導出する。近年では、結晶性材料に含まれる原子の乱れを明らかにするために、PDF を使用した原子構造モデリングが行われている[3]。ナノ粒子に対しても同様に X 線全散乱は実施されているが、非周期系であることから原子構造のモデリングは難しく、十分に構造解析が行われているとは言い難かった。

我々は 2018 年応用物理学会秋季学術講演会にて、X 線全散乱を使用したナノ粒子の原子構造モデリング手法を提案した。この手法では、従来のナノ粒子の構造モデリング法で見られる”過度に乱雑な原子配置”を抑制し、結晶構造に由来する Bragg ピークを正しく評価することができる。我々は Rh ナノ粒子に対する原子構造モデリングを行うことを目的として、SPring-8, BL04B2 にて、61.4 keV の入射 X 線を使用した X 線全散乱測定を行った。図は測定から得られた Rh ナノ粒子の X 線全散乱を用い、原子構造モデリングにより生成した Rh ナノ粒子の 3 次元原子配置を示す。得られた 3 次元原子配置は部分的に崩れているが、fcc 構造を保持していることが確認された。講演では、3 次元原子配置を元に局所構造情報の抽出の結果を報告する。

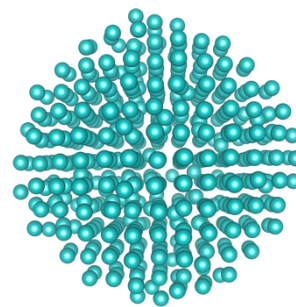


図 1 Rh ナノ粒子の原子構造モデル。

本研究は、JSPS 科研費 18K04868 の助成を受けて行われたものです。

- [1] N. Perkasi, J. Teo, S. Shen, Z. Wang, J. Highfield, Z. Zhong and A. Gedanken, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, **13**, 15690.
- [2] C. Song, A. Yang, O. Sakata, L. S. R. Kumara, S. Hiroi, Y. Cui, K. Kusada, H. Kobayashi and H. Kitagawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, **20**, 15183.
- [3] Y. Yoneda, T. Tsuji, D. Matsumura, Y. Okamoto, S. Tamaki and M. Takano, *Trans. Mat. Res. Soc. Japan*, 2017, **42**, 23.