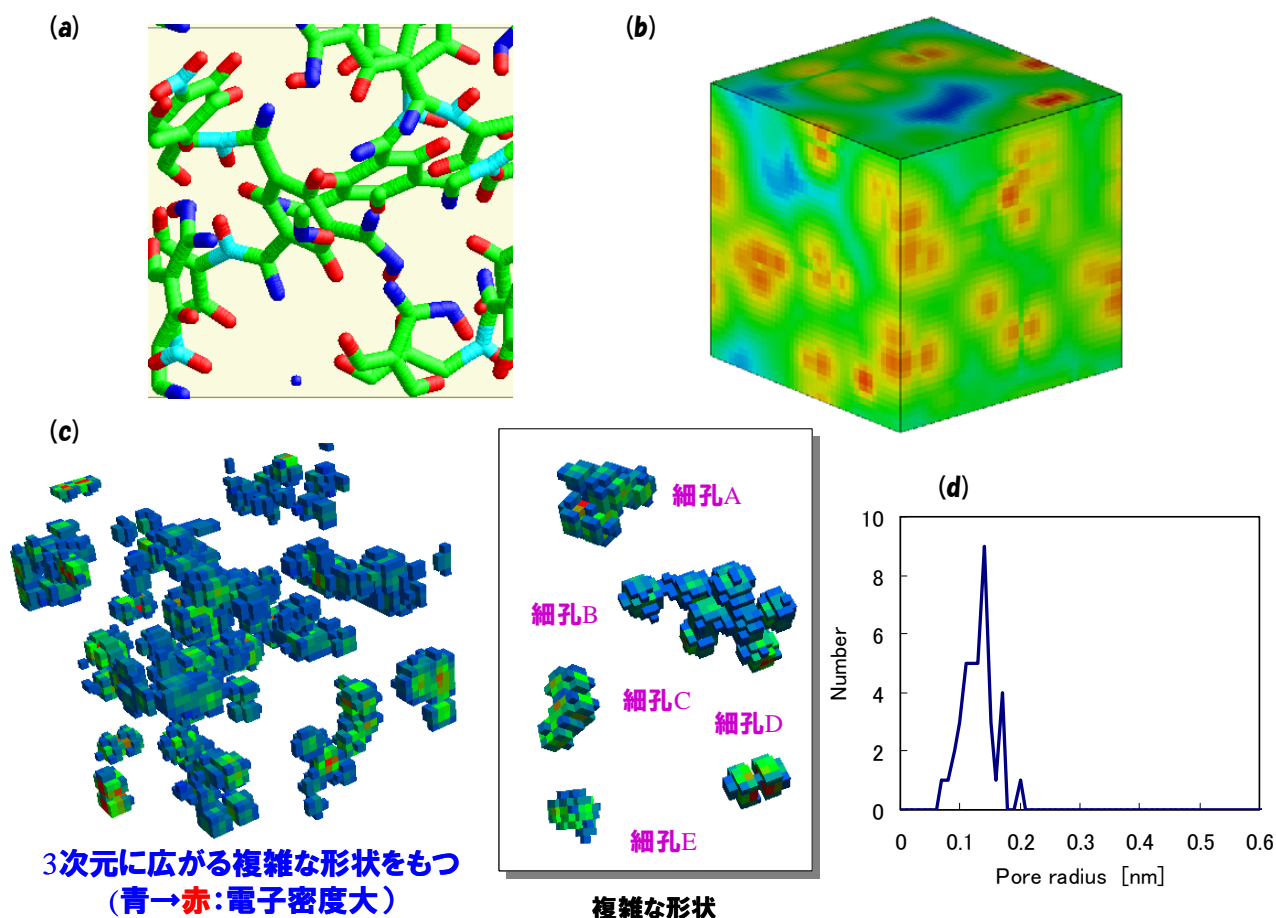


ナノ細孔構造解析を目的とした 陽電子消滅法シミュレーション

(東北大) たかば ひろみつ すずき あい さぬ ー り あ ど こ や ま みちひさ つばい ひでゆき
○高羽 洋充・鈴木 愛・Sahnoun Riadh・古山 通久・坪井 秀行・
はたけやま のぞむ えんどう あきら てる かる びお かる ろす く ほ も もじ みやもと あきら
畠山 望・遠藤 明・Del Carpio Carlos A.・久保 百司・宮本 明

陽電子消滅法とは：陽電子消滅法は、材料中に分布する電子と陽電子が対消滅するまでの時間から細孔径を見積もる方法であり、1 nm 以下の微細孔を測定することができる。したがって、原子レベルの欠陥測定など、触媒分野のみならず、高分子、半導体、など幅広い分野で利用されている。しかしながら、細孔形状の理論的取り扱いなどにおいて議論の余地があり、実際の細孔構造をどの程度反映しているかについては不明な点がある。そこで本研究では、陽電子消滅法の理論的解析を目的として、多様な微細孔構造モデルについて、量子化学計算で電子密度分布を求め、陽電子消滅法の直接シミュレーションを試みた。

結果：ここでは芳香族系ポリアミドのシミュレーション結果について示す。下図に示されるように、細孔は完全な球形ではなく複雑な構造をもつことがわかる。電子密度分布から細孔径分布を計算したところ、約 0.1-0.2 nm の細孔が存在することが示唆された。本シミュレータを活用することで、陽電子消滅法の測定結果を詳細な構造モデルと対比させて議論することが可能となった。今後は本シミュレーションを他の計算化学手法と融合させて、電子密度分布という観点から多孔質材料の構造と機能の解析を進めていきたい。



(a) 芳香族系ポリアミドの分子構造モデル, (b) 電子密度分布,
(c) 三次元細孔可視化結果, (d) 計算された細孔径分布