

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		遠紫外分光法によるアルミナ表面の疎水性メカニズムの解明			
研究テーマ (欧文) AZ		Hydrophobic mechanism of an alumina surface studied by far-ultraviolet spectroscopy			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓) ゴトウ	名) タケヨシ	研究期間 B	2015 ~ 2017 年
	漢字 CB	後藤	剛喜	報告年度 YR	2017 年
	ローマ字 CZ	Goto	Takeyoshi	研究機関名	関西学院大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		関西学院大学理学部・助教			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>アルミナ表面は、零電荷点の pH 条件でも表面水酸基に正負の電荷が存在することから親水性であると予想される。しかし濡れ測定では、アルミナ表面は弱い疎水性を示す。この不可思議なアルミナ表面疎水性を分子論的に明らかにするため、アルミナ/水界面の遠紫外光の近接電場の染みだし深さを変化(10-30 nm)させてスペクトルを測定する多角入射法で純水の遠紫外スペクトルを測定し、界面相とバルク相の溶液構造を検討した。実験条件として、試料水溶液の pH とイオン強度、アルミナ表面の結晶面を変えることで表面水酸基を変化させた。その結果、各 pH の溶液構造を比べると、バルク相よりも界面相で溶液構造が大きく変化することが分かった。このことは、アルミナ表面上の拡散電気二重層が、表面水酸基のプロトン状態に強く依存しているためだと考えられる。</p> <p>水分子の遠紫外吸収は非常に強く、理論的には分子単層でも十分な感度で測定できる。その特長を生かし、固体触媒反応で重要な役割を果たすセラミック細孔内のナノ空間に局在する薄膜水の水素結合構造を遠紫外分光法で明らかにした。具体的に、高精細に研磨(平均粗さ R_a: 5 Å 以下)されたアルミナプリズムとアルミナ基板の表面間に圧着法で厚さ数ナノメートルの薄膜水を形成し、その厚みを 15 nm 程度から 1 nm 以下に薄くしながら遠紫外スペクトルを測定した。その結果、薄膜水の厚みが 10 nm 以下になると水分子の $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$ バンドがバルク状態から大きく変化したことから、10 nm より薄くなるとバルクの水素結合状態を保てなくなることが分かった。</p> <p>以上の研究により、近接電場の染みだし深さが非常に浅い多角入射遠紫外分光法は、固体表面上の界面相からバルク相へどのように溶液構造が変化していくのか、電子状態の観点から明らかにできることが示された。</p>					
キーワード FA	アルミナ表面	界面水分子	遠紫外分光法	量子化学計算	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	A Correction Method for Attenuated Total Reflection–Far Ultraviolet Spectra Via the Use of Charge Transfer to Solvent Band Intensities of Iodide in the Ultraviolet Region							
	著者名 ^{GA}	A. Ikehata, T. Goto, Y. Morisawa	雑誌名 ^{GC}	Applied Spectroscopy					
	ページ ^{GF}	1530~1536	発行年 ^{GE}	2	0	1	7	巻号 ^{GD}	71
雑誌	論文標題 ^{GB}	Interpretation of the $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$ Transition of Hydrated Protons in Aqueous Solutions Observed in the Far-UV Region with Quantum Chemical Calculations							
	著者名 ^{GA}	T. Goto, K. B. Beć, Y. Ozaki	雑誌名 ^{GC}	Physical Chemistry Chemical Physics					
	ページ ^{GF}	21490~21499	発行年 ^{GE}	2	0	1	7	巻号 ^{GD}	19
雑誌	論文標題 ^{GB}	Study of first electronic transition and hydrogen bonding state of ultra-thin water layer of nanometer thickness on an α -alumina surface by far-ultraviolet spectroscopy							
	著者名 ^{GA}	T. Goto, T. Kinugasa	雑誌名 ^{GC}	Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular					
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}	2	0	1	7	巻号 ^{GD}	印刷中
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

The hydrogen bonding states of interfacial water in the electric double layer on the charged solid surface strongly depend on the physicochemical states of the surfaces. In this work, the surface effects of an alumina on the hydrogen bonding and hydration states of the interfacial water were studied using variable angle attenuated total reflection (ATR) far-ultraviolet (FUV) spectroscopy. A variation in the penetration depth of the evanescent wave of the probe light (25–19 nm) directly determined individual FUV spectra associated with bulk and interfacial phase. The hydration structures of the electric double layer on the charged alumina surface were controlled by pH and ionic strength of the electrolyte solutions. Specifically, variable angle ATR-FUV spectra of various buffer solutions on each alumina prism were measured using the ATR-FUV spectrophotometer. The FUV spectra of the bulk and interfacial phases were determined from the measured variable angle spectra using the multivariate curve resolution method, based on the changes in the spectra with the penetration depth of the evanescent wave of the probe light. The hydrogen bonding and hydration structures of the interfacial water were determined from the interfacial spectra using quantum chemical calculations. The examinations of the interfacial molecular structures at various experimental conditions of pH, ionic strength, and crystal planes of the alumina prisms revealed how the surface electric potential of the alumina affects the hydrogen bonding and hydration structures of the interfacial water in the electric double layer. These findings concerning interfacial water will have an impact on the development of solid catalysis of metal oxides and adhesion of ceramic materials.