

# 新光触媒TiドーパタイトのXAFS、X線回折による評価

(株)富士通研究所 野村健二

光触媒チタンドープカルシウムヒドロキシアパタイト TiHAP  $[\text{Ca}_{10-x}\text{Ti}_x(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$ は、有機物を特異的に吸着する能力があるカルシウムヒドロキシアパタイト HAP  $[\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$ に、光半導体物質である酸化チタン  $\text{TiO}_2$  をドーパしたものであり、インフルエンザ・ウイルスなどの毒素を吸着、分解できることから、環境材料として、空気清浄機や抗菌マスク等にその利用が広がっている。今回、 $\text{TiO}_2$  のドーパにより、構造が大きく異なる HAP が光触媒機能を発現する原因を明らかにする為に、TiHAP の触媒活性サイトと考えられる Ti 原子近傍の XAFS 測定を行い、局所構造を調べた。 $\text{TiO}_2$  には、作製方法により、触媒活性が高い材料と低い材料があることが分かっている。今回、Ti 近傍の原子構造の違いを調べるために、TiHAP 及び、活性な  $\text{TiO}_2$ 、不活性な  $\text{TiO}_2$  の XAFS 測定を行った。結果を図1に示す。動径分布のピーク強度は、不活性  $\text{TiO}_2$ 、活性  $\text{TiO}_2$ 、TiHAP の順に減少していることが分かった。当日は、図2に示したX線回折データを含めて、光触媒機能が発現する原因について議論する。

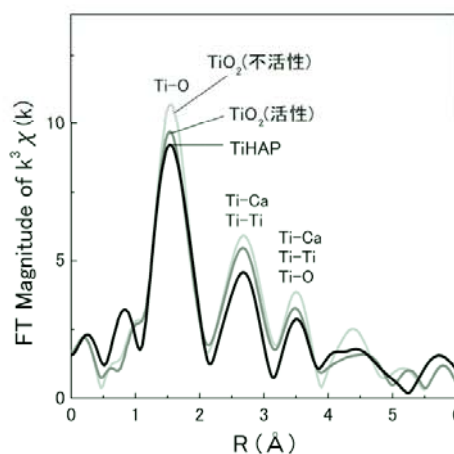


図1 Ti 原子近傍の動径分布

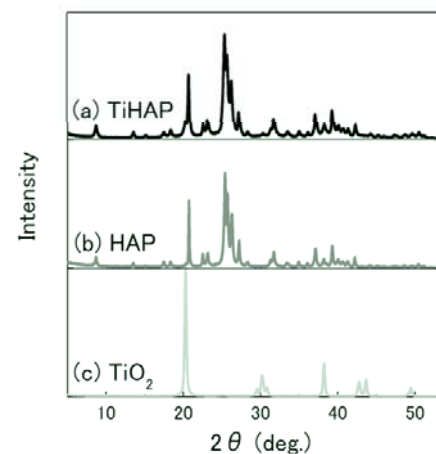


図2 X線回折測定結果



# 新光触媒Tiドーパタイトの XAFS、X線回折による評価

(株)富士通研究所  
野村健二、土井修一、若村正人、塚田峰春、淡路直樹

# はじめに

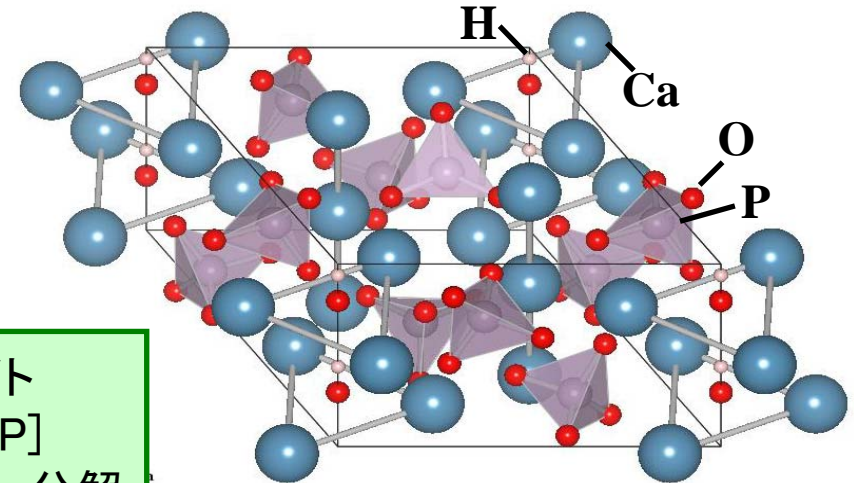


カルシウムヒドロキシアパタイト  
 $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  [略称HAP]  
骨や歯の無機成分で有機物を特異的に吸着

酸化チタン  
 $\text{TiO}_2$   
光半導体物質

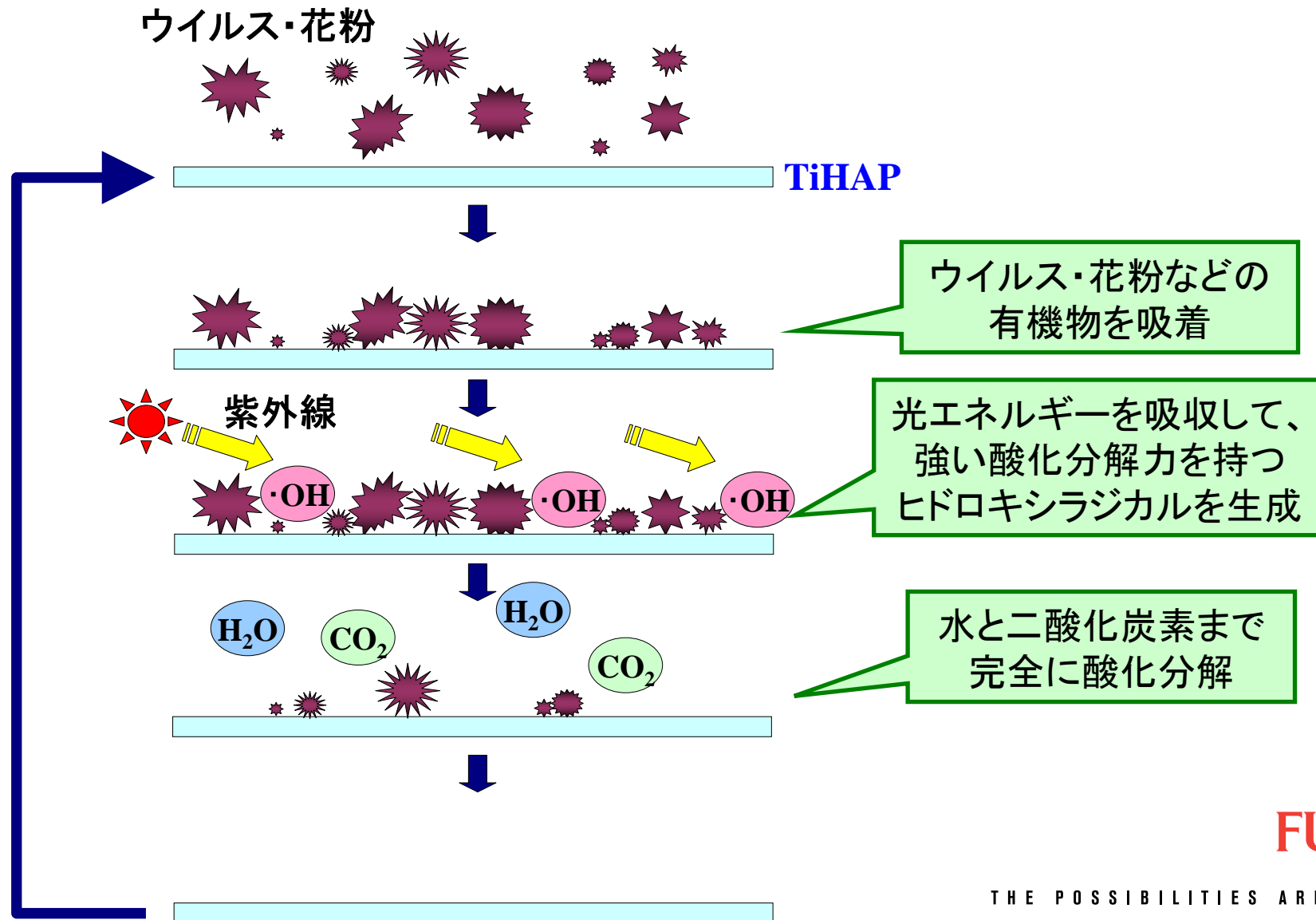
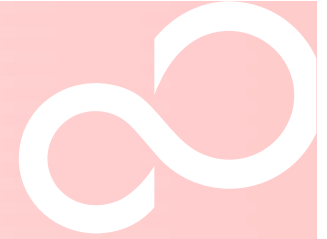
チタンドーパカルシウムヒドロキシアパタイト  
 $\text{Ca}_{10-x}\text{Ti}_x(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  ( $x \leq 1$ ) [略称TiHAP]  
インフルエンザウイルス・花粉等の毒素を吸着・分解

HAPの結晶構造



HAPが、光半導体物質である微量のTiイオンのドーパ (~10%) により、構造が大きく異なるにもかかわらず、光触媒機能を発現する原因を調べるために、XAFSおよびX線回折測定を行った

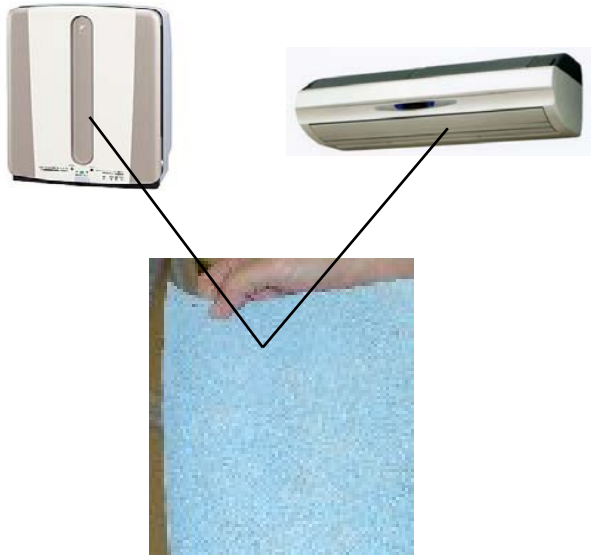
# TiHAPの光触媒機能



# TiHAPの利用



環境材料として、空気清浄機・抗菌マスク等に利用



空気清浄機/エアコン用  
フィルタ



抗菌マスク

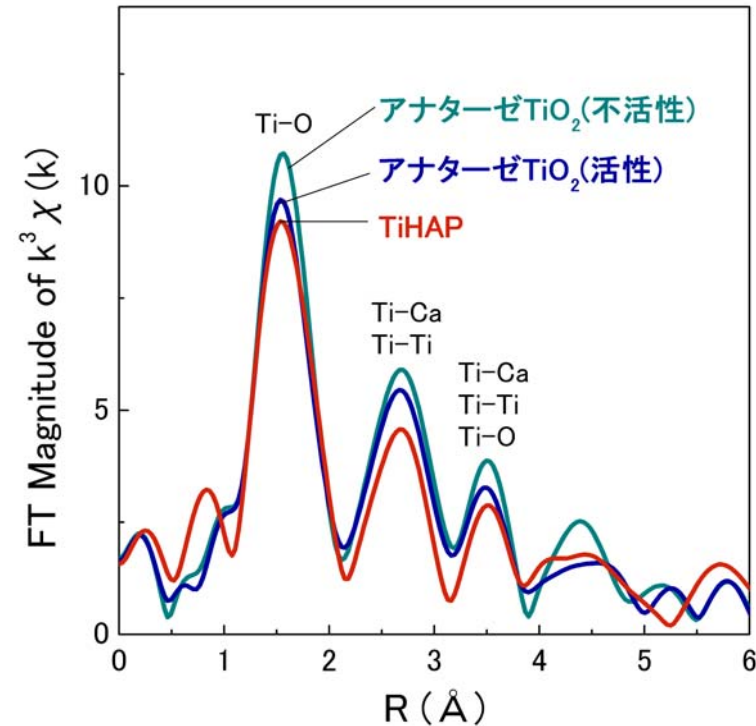
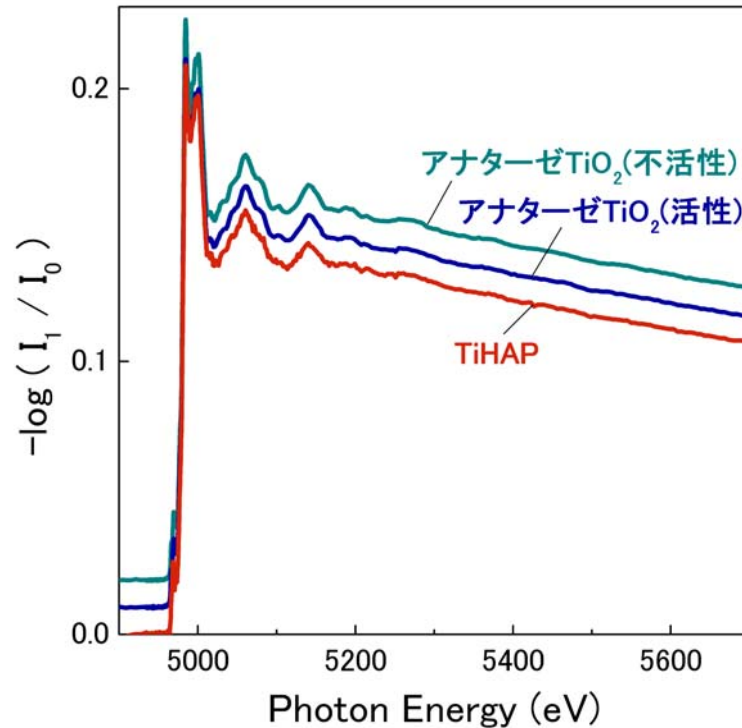


抗菌まな板



抗菌ボールペン

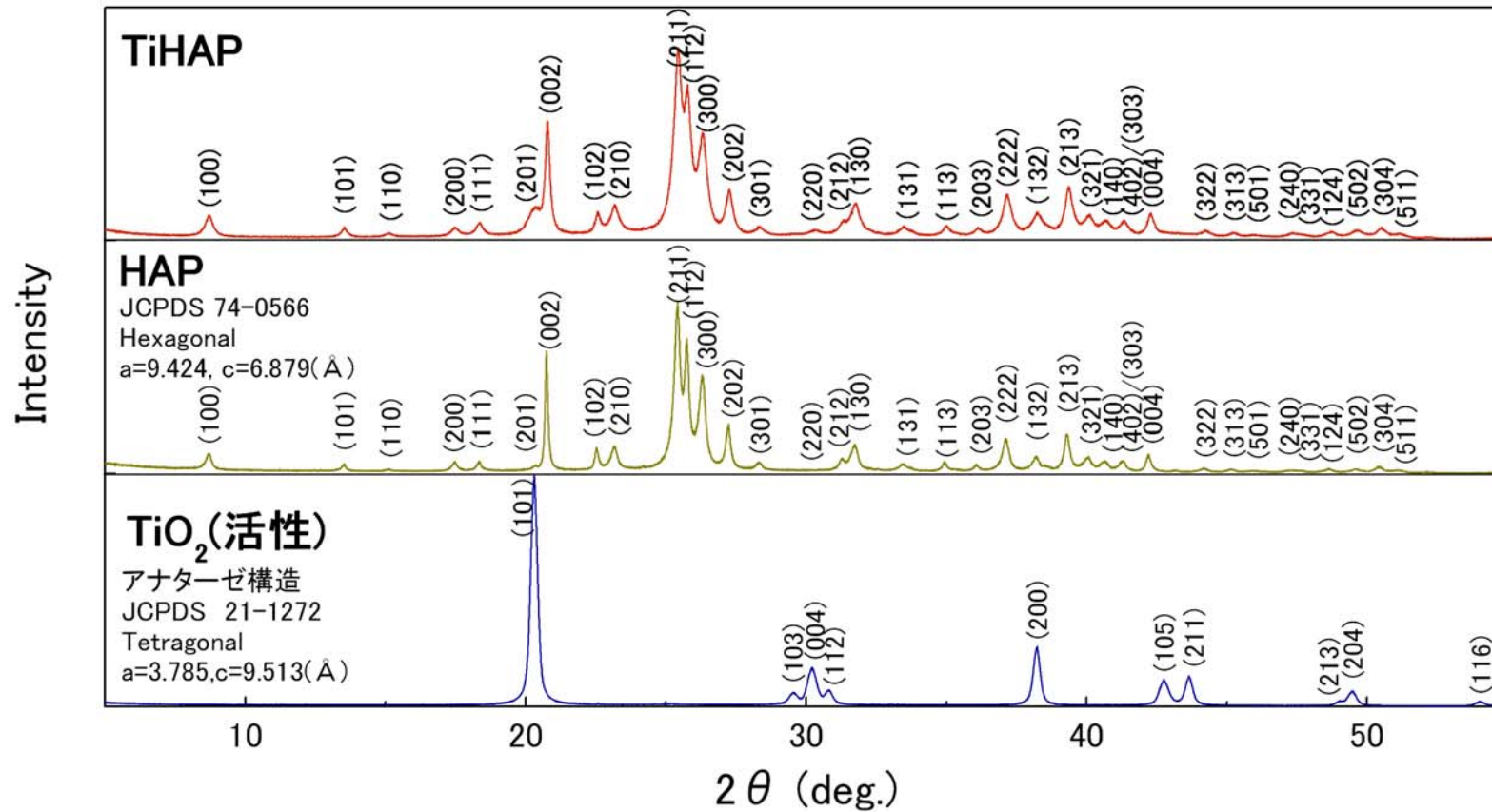
# XAFS測定



- TiHAPの触媒活性サイトと考えられるTi近傍の局所構造は、アナターゼ構造のTiO<sub>2</sub>に似ている
  - 活性と不活性のTiO<sub>2</sub>を比較し、活性試料の方が動径分布のピーク強度が減少
  - TiHAPの動径分布のピーク強度は、TiO<sub>2</sub>の活性試料よりもさらに減少
- ⇒ TiHAPの光触媒機能が発現する一因として、構造欠陥の可能性が考えられる



# X線回折測定



- ・TiHAPで観測された全ピークは、HAPと同じ結晶構造で指数付けを行うことができる
  - ・TiHAPのピークパターンは、アナターゼ構造のTiO<sub>2</sub>(活性)と異なっている
- ⇒TiHAPの光触媒活性は、TiO<sub>2</sub>の析出によるものではない

# まとめ



1. 光触媒活性サイトと考えられるTi原子近傍のXAFS測定を行った結果、 $\text{TiO}_2$ とTiHAPの動径分布は似ており、そのピーク強度は、不活性 $\text{TiO}_2$ 、活性 $\text{TiO}_2$ 、TiHAPの順で、減少していた。TiHAPの光触媒機能が発現する一因として、構造欠陥の可能性が考えられる。

2. 粉末X線回折測定を行った結果、TiHAP中に $\text{TiO}_2$ は観測されなかった。TiHAPが光触媒活性を示す原因は、光触媒 $\text{TiO}_2$ の析出によるものではないことが分かった