



チタン酸ナトリウムの構造解析

田中 秀樹, 守屋 映祐, 林 文隆, 山田 哲也, 手嶋 勝弥

信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所 (RISM), 信州大学工学部物質化学科

キーワード：粉末 X 回折

1. 背景と研究目的

チタン酸ナトリウム (NTO) は、水中に存在する金属陽イオンとナトリウムイオンとのイオン交換反応を生じるため、浄水器への応用が可能な機能性無機材料であり、最近になって、信州大学発ベンチャーであるヴェルヌクリスタル株式会社が NTO の販売を開始している。そして、2023 年に信州大学とヴェルヌクリスタル株式会社が、戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 「マテリアル事業化イノベーション・育成エコシステムの構築」に採択され (研究代表者：信州大学 手嶋勝弥教授)、NTO のイオン交換能の向上を目指している。ここで、NTO の結晶構造がこれまでに報告されているものとはやや異なっており、未知相に属する可能性もあることから、本研究では、NTO の結晶構造を粉末 X 線解析により明らかとすることを目的とする。また、同時に、水中において NTO が Mn^{2+} イオンなどを交換吸着する際の構造変化についても明らかとすることを目的とする。

2. 実験内容

NTO は乳鉢で粉碎し、直径 0.5 mm のキャピラリーマークチューブ (ボロシリケート) に入れ、真空加熱 (200°C, 30 分) を行った後に封管した。また、 Mn^{2+} イオンなどを交換吸着した NTO はスラリー状とし、マークチューブに封入した。粉末 X 線回折測定は、X 線波長：0.68864 Å (CeO₂ を用いた波長校正結果)、 2θ 範囲：0~95°、露光時間：540 秒/ショットにて行った。

3. 結果および考察

NTO (真空加熱後)、水に浸漬後の NTO、水中で Mn を吸着 (50% および 100% 置換) した NTO の粉末 X 線回折パターンを Fig. 1 に示す。真空加熱後の NTO については、現在、指数付けと、実空間法による構造決定に取り組んでおり、妥当な構造が得られ次第、Rietveld 解析を実施する予定である。また、NTO を水に浸漬すると最強線が低角側にシフトしていることから、NTO の構造内に水分子が包接されていることが示唆される。そして、 Mn^{2+} イオンを 50% まで吸着させると、さらに最強線が低角側にシフトすると同時に強度も大きくなっているため、 Mn^{2+} に水和した水分子も同時に取り込まれていることが示唆される。一方、 Mn^{2+} イオンを 100% まで吸着させると、最強線がわずかに高角側にシフトすると同時に、強度が小さくなっていることから、一部の水和水が放出されている可能性が考えられる。

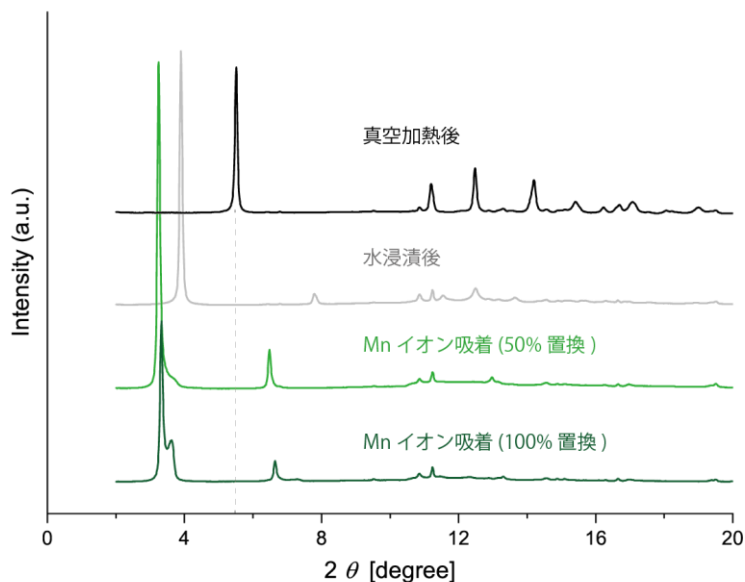


Fig. 1 NTO の粉末 X 線回折パターン