

水圏材料の軟 X 線分光理論計算による 不均一構造の解明



高橋 修
広島大学
准教授

分子レベルにおける水の構造およびダイナミクスはその物性と直結しており、水溶液の機能発現を探る鍵の1つです。構造を探るツールとしての軟 X 線分光法は元素選択的励起が可能であり、励起原子周辺の局所構造の情報を獲得できます。本研究では今までの水に対する知見を活かし、PINIPAM, Nafion のような水圏機能材料に対し、

第一原理に基づく理論計算によるモデル化と、軟 X 線による先端計測の情報と比較することにより真の水の

局所構造モデルを構築していきます。

