



## XAFS 入門講習会 測定解析実習 (BL11S2)

加藤 弘泰<sup>1</sup>、竹田 晋吾<sup>1</sup>、村瀬 晴紀<sup>2</sup>、福岡 修<sup>2</sup>

1 スプリングエイトサービス株式会社 2 あいち産業科学技術総合センター

キーワード：XAFS、Athena、LCF

### 1. 測定実施日

2018 年 10 月 16 日 BL11S2 (2 シフト)

### 2. 概要

これから XAFS の測定を考えている方や XAFS の解析に関心のある方向けに、硬 X 線 XAFS 測定と取得データの解析を体験する実習を開催した。サンプル調製や、解析に取り組むことにより、参加者の XAFS 測定及び、試料調製、解析のスキル向上を目的とした。

### 3. 研修内容

測定試料として CuO と Cu<sub>2</sub>O の混合比が既知の物(1:1, 1:3, 7:3)及び未知の物の 4 点を用意し、Cu K 吸収端 XAFS 測定を行った。XAFS データ処理ソフトウェア Athena により、測定で取得したスペクトルのバックグラウンド処理や規格化を行った後、標準物質スペクトルを用いて線形結合フィッティング (LCF) による定量解析を実施した。また、試料(FeO)と希釈物質(BN)の攪拌時間を変化させた FeO ペレットを用意し、Fe K 吸収端 XAFS 測定を行った。この試料については参加者がペレット作製から行った。取得したデータから Athena により EXAFS 振動を抽出し、攪拌の状態でスペクトルにどのような変化があるのかを観察した。

### 4. 結果

例として、CuO と Cu<sub>2</sub>O の混合物のスペクトルと LCF の結果を示す(表 1、図 1)。これらについて研修参加者が実際にバックグラウンド処理から LCF 解析までを行い、Athena の操作や、どのような解析結果が得られるかを体験した。また、ペレット作製の方法やペレットの良し悪しの重要性を実際に確認した。今後、参加者が XAFS 測定を利用する際の一助となれば幸いである。

表 1. LCF による混合比の計算結果

	weight	
	Cu <sub>2</sub> O Ref	CuO Ref
Cu <sub>2</sub> O:CuO=3:7	0.297(0.004)	0.703(0.004)
Cu <sub>2</sub> O:CuO=1:1	0.499(0.004)	0.501(0.004)
Cu <sub>2</sub> O:CuO=3:1	0.751(0.002)	0.249(0.002)
Cu <sub>2</sub> O:CuO=x:y	0.382(0.009)	0.618(0.009)

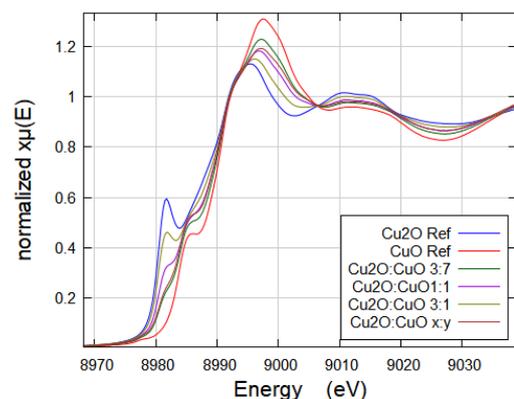


図 1. CuO と Cu<sub>2</sub>O の混合物のスペクトル