



## 2021 年度 XAFS 夏の学校測定実習②

小川智史<sup>1</sup>, 塚田千恵<sup>2</sup>

1 名古屋大学大学院工学研究科, 2 あいちシンクロトロン光センター

キーワード : X 線吸収微細構造法 (XAFS)

### 1. 背景と研究目的

X 線吸収微細構造 (X-ray absorption fine structure: XAFS) とは物質の X 線吸収スペクトルに現れる振動構造である。この振動構造は元素固有の吸収端近傍に現れ、X 線吸収元素の化学状態と構造情報を同時に与えることから、XAFS は非常に強力な材料分析手法として広範に利用されている。日本 XAFS 研究会では XAFS の普及拡大を目的として、主に学生や若手研究者を対象とした夏の学校を開催してきた。本年度は XAFS 関連講義や解析実習に加えて放射光施設での XAFS 測定実習を予定していたが、COVID-19 の蔓延により、現地での実習を中止し、XAFS 測定の様子をオンライン配信する試みを行った。本稿ではあいちシンクロトロン光センターの XAFS ビームライン BL11S2 における標準試料の XAFS 測定結果に関して報告する。

### 2. 実験内容

XAFS 測定はあいちシンクロトロン光センターの硬 X 線 XAFS ビームライン BL11S2 にて行った。ビームライン (BL) 所有の標準試料 (Fe 箔, Co 箔, Ni 箔) を測定用試料として、透過法によって XAFS スペクトルを得た。

### 3. 結果および考察

Fig. 1 に Fe 箔 (体心立方構造: bcc)、Co 箔 (常温常圧で安定な構造は六方最密充填構造: hcp だが BL 所有の標準試料は面心立方構造: fcc)、Ni 箔 (fcc) の XANES スペクトルを示す。本来、それぞれの構成元素に対応する吸収端エネルギー位置は異なるが、Fig. 1 は吸収端エネルギー ( $E_0$ ) に対する相対値 ( $E - E_0$ ) を横軸として示している。構成元素も吸収端エネルギーも異なるにも関わらず、Co 箔と Ni 箔の

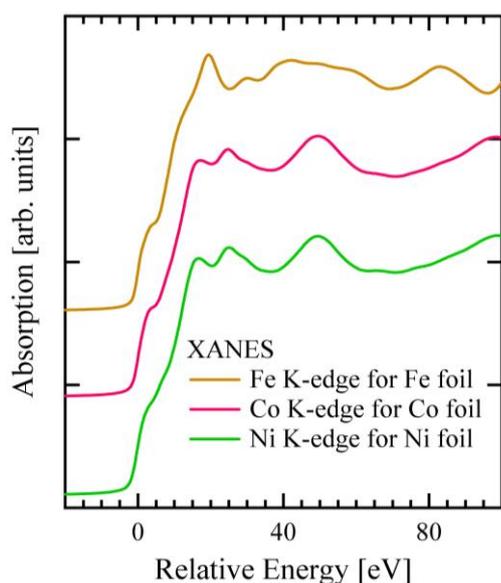


Fig. 1 XANES spectra for the standard samples.

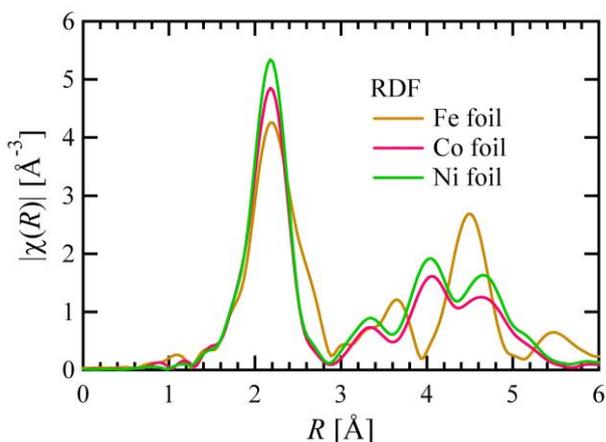


Fig. 2 Radial distribution function (RDF) obtained from the EXAFS for the standard samples.

XANES スペクトルは形状が酷似している。これは XANES の構造が吸収元素周りの局所構造に強く依存していることを反映した結果である。対象元素周りの配位環境（対称性や原子間距離など）が相似であれば、多少の原子番号の違いによらず XANES スペクトルは似通ったものとなる<sup>1)</sup>。Fe 箔のスペクトル形状が残る 2 つの試料と比べて大きく異なることは結晶構造の違い(Fe 箔のみ bcc)を反映している。このような結晶構造による違いは EXAFS にも現れている。Fig. 2 にそれぞれの XAFS スペクトルから EXAFS 振動を抽出し、フーリエ変換することによって得た動径分布関数 (RDF) を示す。第 1 配位に対応するピーク位置はどの試料でもほぼ同じだが、第 2 配位以遠に対応するピーク構造は Fe とそれ以外で異なっている。これは bcc と fcc のそれぞれの結晶格子における配位環境の違いによるものである。

#### 4. 参考文献

1. 日本 XAFS 研究会 編, 『XAFS の基礎と応用』, 講談社 (2019), p. 112.