



## ランタノイド M-edge XANES と局所構造

朝倉 博行  
近畿大学

キーワード : ランタノイド, 局所構造, 軟 X 線 XAFS

### 1. 背景と研究目的

光学材料, 触媒などに微量添加されたランタノイド元素が特性の発現や向上に大きな影響を与える場合がある. 軟 X 線 XAFS は電子状態のわずかな変化をとらえることができるため, これらの微量添加元素の状態分析に有効であると思われるものの, 論文などでの系統的な報告例はほとんどない. そこでランタノイド元素を含む構造既知の複合酸化物を合成し, ランタノイド  $M_4$ ,  $M_5$ -edge XANES スペクトルに違いが表れるか検討した.

### 2. 実験内容

サンプルプレートにカーボンテープおよびインジウム箔に貼りつけ, La あるいは Nd を含む複合酸化物粉末を塗布した. トランスファーベッセルを用いてサンプルプレートを輸送し, 全電子収量法による La あるいは Nd 複合酸化物の  $M_4$ ,  $M_5$ -edge XANES スペクトル測定を行った.

### 3. 結果および考察

カーボンテープ上に塗布した試料については同様の現象が観測され, いわゆるチャージアップによる影響と考えられる. 一方, インジウム箔上に塗布した試料の  $M_5$ -edge,  $M_4$ -edge XANES スペクトルは一見して異常な挙動は示さなかった. また, 低エネルギー側及び高エネルギー側の両方からスキャンを行った際にもスペクトルの変化は見られず, チャージアップの影響は十分抑制できており, 妥当な

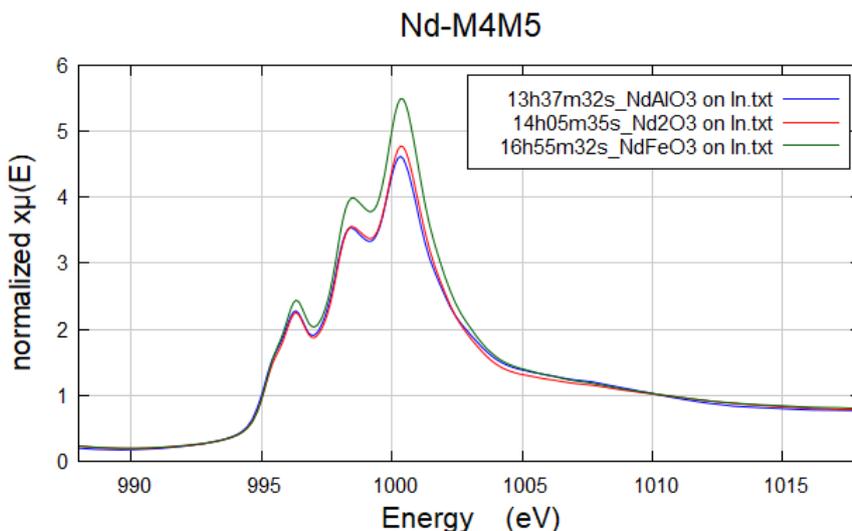


Figure 1.  $\text{NdAlO}_3$ ,  $\text{Nd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{NdFeO}_3$  の Nd  $M_4$ -edge XANES スペクトル

スペクトルが得られているものと判断した. 軟 X 線 XAFS スペクトルの規格化にはいくつかの指針が考えられる. 今回は  $M_5$ -edge のプレエッジ領域について直線近似でバックグラウンドの吸収を引き去り,  $M_4$ -edge より高エネルギー側の吸収量で規格化を行った. Figure 1 に  $\text{NdAlO}_3$ ,  $\text{Nd}_2\text{O}_3$ ,  $\text{NdFeO}_3$  の Nd  $M_4$ -edge XANES スペクトルを示す. 吸収量の立ち上がり位置はほとんど変わらず, 酸化数は想定通り  $\text{Nd}^{3+}$  と考えられる.  $M_4$ -edge XANES スペクトルは主に 4f 軌道への遷移に由来していると考えられている. 4f 軌道は強く局在化されているので化学結合の影響はあまり受けないと考えられている. しかし, 慎重に測定したスペクトル間で有意な変化が観測された. この違いは局所構造の違いに起因しているものと考えている. XANES スペクトルのシミュレーションを行うことで, この際について検討を進める.