

XAFS (X線吸収微細構造) について

1. はじめに

物質の構造を調べるために行われる測定には、NMRや結晶構造解析などがあります。このうち、結晶構造解析では測定物質が結晶である必要がありますが、一般には非晶質物質や多数の物質の混合物なども多く存在し、これらには結晶構造解析をそのまま適用することはできません。そこで、特定元素周りの構造のみを検討する手法として、^{ザフス}XAFS (X線吸収微細構造) と呼ばれる分析が注目されています。今回はこのXAFSを紹介します。

2. XAFS とは

XAFSとは、X線の吸収スペクトルあるいは蛍光スペクトルを解析し、原子の価数、隣接する原子の位置や数、種類などを導く分析手法です。X線のエネルギーを連続的に変えながら試料に照射し、試料を通過したX線や蛍光X線を観察して測定を行います。

XAFS分析は、X線があたっている領域全体の情報が抽出されるため、全体の平均的な情報を得ることができるという特徴があります。また、特定の元素にのみ注目した測定ができるため、不純物や不明な構造があっても通常は測定に影響を与えません。さらに、試料の準備や測定が簡単であるため、反応途中の触媒の状態を観察するなど、応用範囲が広いことも特徴です。特に電池材料分野、触媒分野で活発に測定が行われています。

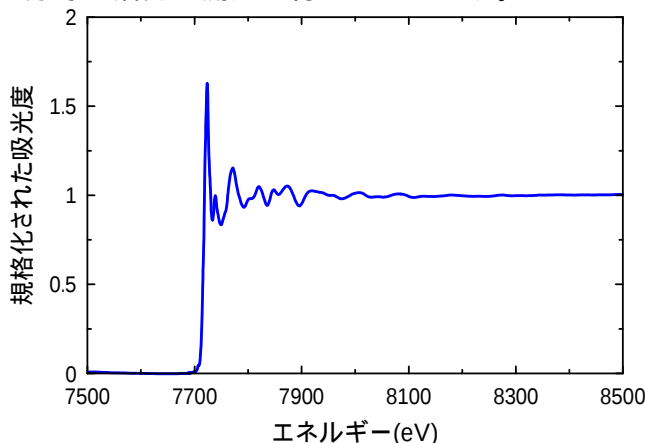


図1 CoOの吸収スペクトル

図1は酸化コバルトの吸収スペクトルの例です。横軸はX線のエネルギー、縦軸は吸光度を表します。7710 eV付近で吸光度が急に上昇しています。この点をコバルトの吸収端と呼びます。元素が異なると別の位置に吸収端が現れるため、どの元素の情報が欲しいかによって当てるX線のエネルギーを変えて測定します。吸収端より高エネルギー側は、吸収スペクトルの振動構造が現れています。この振動の周期や振幅、減衰などは、隣接する原子の位置や数、種類などにより形が変わります。試料の予測される構造を元に適切なモデルを作成し、そのモデルの吸収スペクトルを数値計算・比較することによって、コバルト原子周りの情報を得ることが可能となります。

図1のXAFSスペクトルを解析した結果、コバルト原子に隣接する原子及びその隣の原子の種類、数、距離はそれぞれ表1のようでした。しかし、XAFSの結果だけでモデルが正しいとは判断できません。モデルの正しさを裏付けるために、蛍光X線分析等の補助的な分析が必要です。

表1 分析結果

種類	数	距離(nm)
酸素	6	0.213
コバルト	12	0.302

3. まとめ

XAFSの分析には輝度が高くて連続したエネルギーのX線発生源が不可欠です。このため、XAFS分析は通常、SPring-8に代表される放射光施設で行われます。愛知県においてもXAFS測定が可能な中部シンクロトロン光利用施設(仮称)が建設中ですので、XAFS測定に興味がある方は測定可能かどうかなど問い合わせてください。



基盤技術部 杉山 信之 (0566-24-1841)
研究テーマ: X線分析
担当分野: 食品包装