



2D 法等の高度な手法を含めた XAFS 法の理解を深めるための測定

Lin Yunli、岩井由宇賀、鈴木啓斗、鈴木凌輔、久能俊介、箱木響、田淵雅夫
名古屋大学

キーワード：XAFS 測定の基礎、2D XAFS 測定

1. 背景

我々は XAFS 法を応用した研究のみならず、XAFS 測定そのものを研究対象として、測定法や測定原理をより深く理解することや、測定法自体の発展を目指した研究を行っている。今回は、2 次元(2D) XAFS 測定や 3 次元(3D) XAFS 測定を行うときに問題になり得る不均質な試料状態について検討した結果を報告する。

通常 XAFS 測定では、測定データの S/N が良くなる最適の試料厚さ(最適の吸光度)を持つように試料を調整することや、試料の均質性を高いレベルで確保することは、良いスペクトルを得て正しく解析を行う上で非常に重要だと考えられている。しかし、2D、3D の XAFS 測定を行うときには、そもそも試料を均質なものは考えていない。試料に構造があって、必然的に場所ごとに状態が異なっている場合や、密度や組成、経過した環境その他様々な意味で試料内に違いが存在してその違いによって何が起こるかを調べたいと考える場合、シンプルには均質と思われる試料の中に何らかの理由で発生するであろう不均質なドメインを観察したいと考える場合など、試料が不均質であることを前提にして行うのが 2D、3D 測定である。したがって 2D、3D の測定を行ったとき、空間的に異なる各点で得られたスペクトルが「良い」条件で測定された「良い」スペクトルである保証はなく、解析する意味があるスペクトルかどうか、間違った情報を与えるスペクトルではないかは常に意識して確認されるべきである。一方で、2D、3D の測定では必然的に大量のデータが発生する。例えば、現在あいち SR の BL11S2 で利用できるカメラを最大の分解能で使用して 2D-XAFS 測定を行うと、 $2000 \times 2000 = 400$ 万ピクセルの各点で XAFS スペクトルが得られる。このスペクトルを一つ一つ人間が確認してその良し悪しを判断することは現実的ではない。従ってスペクトルの良し悪しを判断して、最低限警告を出せる技術は必須であり、そのような技術の実現を目指して研究を行っている。

2. 実験内容

従来、同様の目的で、試料面内でランダムに状態が変化する試料を準備し、スペクトルの良し悪しの判定や場合によってはその補正を行う技術を検討してきた。今回の実験では、ある程度系統的に試料の状態が変化している、試料のどの部分はどうなっているか予想できるような試料を準備し、機械的に判定を行ったときの判定結果が正しいかどうかの判断がある程度可能なデータを得ることを目的とした。この目的のために、機械的に加工して先端を針状にしたり、段階的に薄くつぶした銅線を準備し 2D、3D-XAFS 測定を行った。測定の様子と得られたスペクトルの例を図 1 に示す。

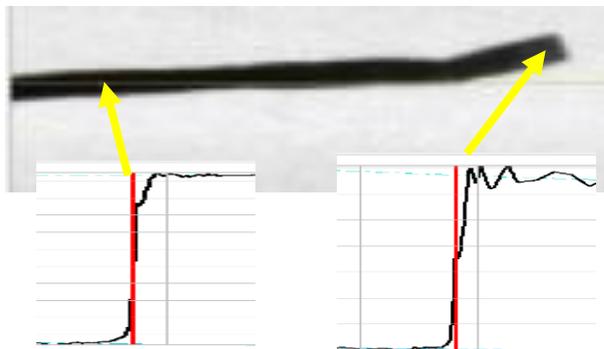


図 1. 先端部を薄くつぶした銅線の異なる場所の Cu-K XAFS スペクトル先端部から離れるとスペクトルが大きくひずんでいるのがわかる。

3. 結果

図 1 に示したように、場所によって明確に異なる(歪んだ)スペクトルを得ることができた。その歪み方と吸光度の対応関係を検討することで、スペクトルの良し悪しの判断法の検討を進めることができると期待している。可能ならば、歪んだスペクトルを正しいスペクトルに戻す方法も視野に入れて検討したい。図 1 以外にも 3D-XAFS の測定も行っており、このようにスペクトルが歪む状況下で 3 次元の状態分布がどのように見えるものかも検討の対象にして今後研究を進めていきたい。