DAFS 法による粉末結晶試料に対する 3 次元的局所構造解析法の検討

Study of 3D local structural analysis of powder crystal samples using DAFS method

高輝度セ [1]　○宇留賀 朋哉 [1]，金子 拓真 [1]

JASRI [1]

○Tomoya Uruga[1], Takuma Kaneko[1]

E-mail: urugat@spring8.or.jp

DAFS 計測法は、結晶性試料（単結晶、粉末結晶）に対し、測定ターゲットとする元素の X 線吸収端近傍のエネルギーにおいて、入射 X 線エネルギーを掃引しながら、幾つかの X 線回折ピークの積分強度変化を計測する手法である。DAFS 法は、複数のサイトに同一元素種がある場合に、サイト選択的に原子の電子状態/局所構造情報を分離抽出できるなど、通常の XAFS 計測では得られない情報を提供することが可能である。

これまで、3 次元的な吸着構造や配位構造の解析には、単結晶試料に対する偏光 XAFS 計測による解析が主に行われてきている。本研究では、粉末結晶試料に対して、回折像の方位角の DAFS スペクトル強度が、入射 X 線に対し偏光依存性を有することを利用し、複数の回折ピークの DAFS スペクトルを回折像の 1/4 象限の範囲で計測することにより、測定ターゲット原子の周りの 3 次元的な配位構造/局所構造に関する情報の抽出を行うことを目的としている。

DAFS 測定は、大型放射光施設 SP ring-8 のビームライン BL36XU[1]において行った。図 1 に計測装置配置を示す。DAFS 計測には、2 次元ピクセル X 線検出器 PILATUS 100K を用いた。試料は、$Sr_3Fe_2O_x$ 粉末結晶を 1 mm ϕ のキャピラリに封入したものを用いた。DAFS 計測は、Sr K 端（17.0 keV）近傍で、クイック XAFS スキャン法により行った。現在、得られた DAFS スペクトルに対し解析を進めている。発表では、計測の概要および解析結果について報告する。

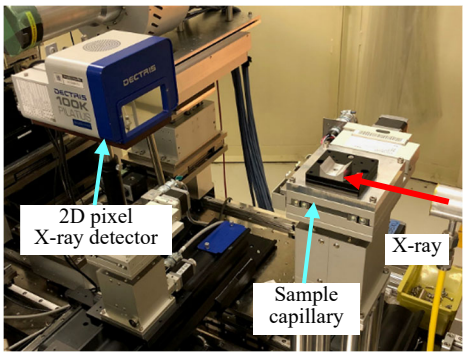


Fig.1 Layout of DAFS measurement system.

[1] T. Uruga et al., *Chem. Record*, **19**, 1444 (2019).

謝辞

本成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の委託業務（JPNP20003）の結果得られたものです。

© 2023年 応用物理学会