

X線異常散乱を利用した混合原子価化合物の状態分析

Mixed-valence state Analysis with Anomalous X-Ray Scattering

東北大学 金属材料研究所 ランダム構造物質学研究部門
徳田 誠

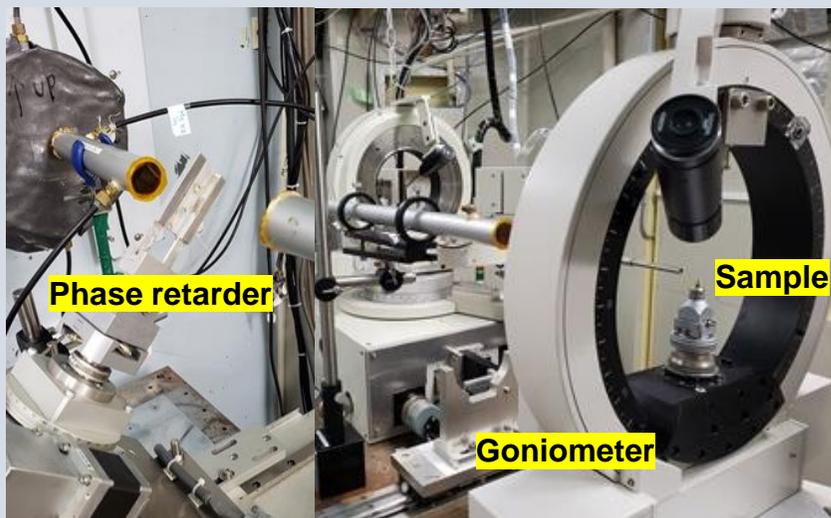


Fig. 1 AXS measurement setup at KEK, BL-6C

X線異常散乱法は吸収端近傍において、構造因子の異常散乱項 f' および f'' のエネルギー依存性を利用して、目的元素のシグナルを際立たせる手法である。目的元素の吸収端近傍で得られる散乱強度のエネルギー依存性を積極的に利用することによって、元素の種類だけでなく混合原子価状態の分析にも応用できる。

混合原子価化合物中の M^{2+} と M^{3+} が持つ異常分散項のエネルギー依存性 (Fig. 2a) を考慮すると、散乱強度のエネルギー依存性 $F(E3) - F(E2)$ を用いたコントラストから、目的原子 M が存在する陽イオン席が判明し、エネルギー依存性 $F(E2) - F(E1)$ には、 M^{2+} がいる陽イオン席がより強いコントラストが観測されると考えられる。

例として Mn^{2+} と Mn^{3+} を含む Ungarettiite $Na_3Mn_2^{2+}Mn_3^{3+}Si_8O_{24}$ を紹介する (Fig. 2b). 実験結果は、予想通り平均原子間距離の大きな M2 席に強いコントラストが観測され、M2 席に Mn^{2+} が選択的に秩序配列していることが判明した。

現在は定量的な解析のため、測定強度測定精度の向上と異常分散項の実部のコントラストをより精緻に評価するシステム開発を目指している。

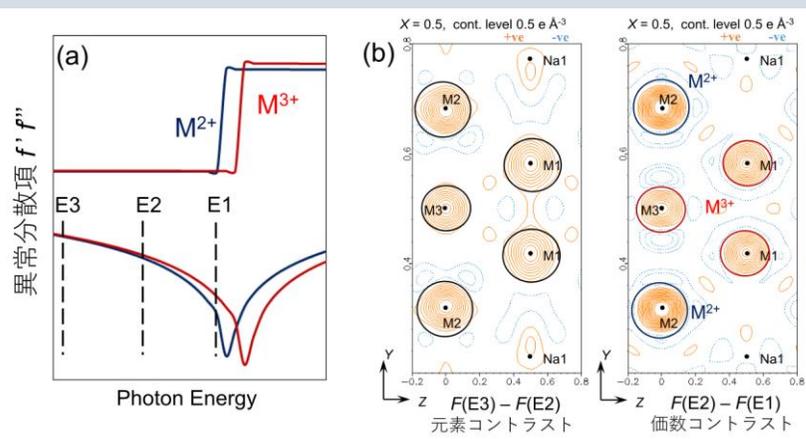


Fig. 2 (a) Energy dependence of anomalous dispersions f' and f'' . (b) Mn^{2+} and Mn^{3+} valence map