

共鳴X線回折分光法による結晶学的サイトを区別したXAFS解析

Site-selective XAFS analyses by resonant X-ray diffraction spectroscopy

東北大学 金属材料研究所 構造制御機能材料学研究部門

河口 智也

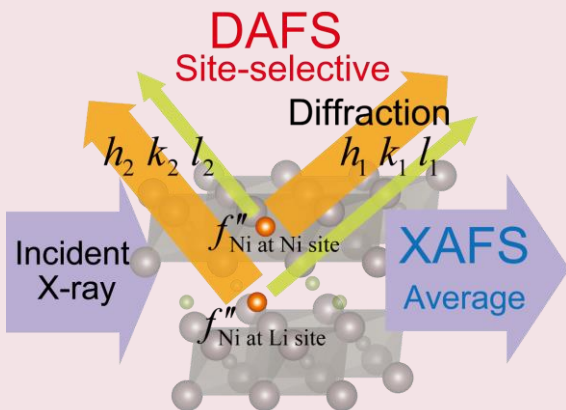


Fig. 1 Schematic relationship between DAFS and XAFS.

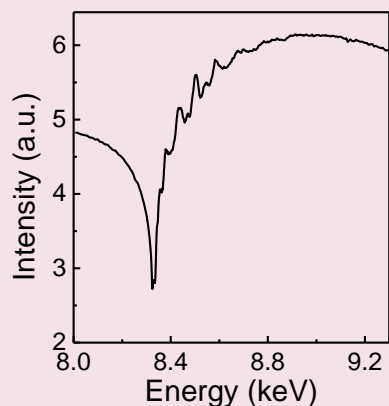


Fig. 2 Typical DAFS spectrum of $\text{Li}_{0.9}\text{Ni}_{1.1}\text{O}_2$ around Ni Kedge.

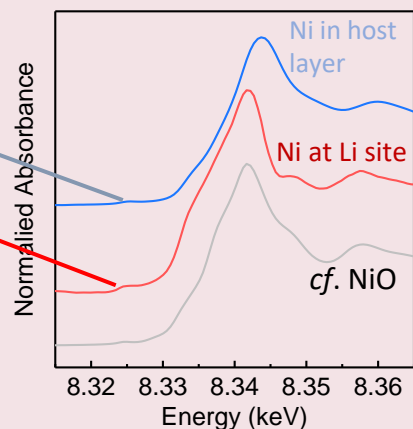
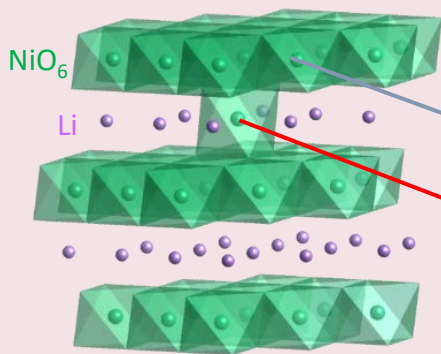


Fig. 3 (Left) Structure of $\text{Li}_{0.9}\text{Ni}_{1.1}\text{O}_2$ and (right) site-selective XAFS spectra obtained by RXDS. Ni occupies both at the host layer and Li site.

複数の結晶学的サイトを占有する元素の化学状態や局所構造を、それぞれのサイトを区別して解析する手法である。本手法は Resonant X-ray Diffraction Spectroscopy (RXDS) と呼ばれ、吸収端近傍のX線回折強度に現れる構造である Diffraction Anomalous Fine Structure (DAFS) を測定することから、DAFS法とも呼ばれる。

RXDS法では複数の回折線において、吸収端近傍における回折線強度変化(DAFS)を測定する。回折線強度には共鳴分散項の虚部として、吸収スペクトル(XAFS)の情報が含まれる。一方、それぞれの回折線では構造因子として知られているように、各結晶学的サイトの寄与の大きさが異なるため、複数の回折で測定したDAFSの情報を組み合わせることで、サイトを区別した吸収スペクトル測定が行える。このような吸収スペクトルからは、元素の化学状態分析や局所構造解析が行え、蓄電池正極材料など様々な材料の分析に用いられる[1-2]。

[1] 河口智也 他, 放射光 **28**, 124 (2015).

[2] T. Kawaguchi et al., J. Phys. Condens. Matter **29**, 113002 (2017).