

X線吸収微細構造法 XAFS

X-ray Absorption Fine Structure

測定原理：XAFSはある特定原子にX線のエネルギーを連続的に変化させて照射した時に、原子の内核軌道電子を非占有軌道以上のエネルギー状態に励起することにより得られる吸収スペクトルです。励起された電子はその励起状態とエネルギーによりXANES (X-ray Absorption Near Edge Structure: X線吸収端構造) やEXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure: 拡張X線吸収微細構造)とよばれます (図1)。XANESでは、原子の電子構造、配位数、対象性などの情報が得られ、EXAFSでは特定原子周囲の局所的な構造の情報が得られます。EXAFSの測定方法には、透過法、蛍光法、全電子収量法などがあります。試料は、固相、液相、気相のいずれの状態においても測定が可能であり、また雰囲気 (ガス、圧力、温度) なども任意に設定できるので、有機、無機を問わず様々な分野における特定原子の局所構造を知ることができます。特に、蛍光EXAFSは高感度の測定が可能なので、希薄溶液、薄膜、触媒の表面などの構造解析に用いられています。

応用例：図2には、high-k材料として用いられる、単斜晶HfO₂のEXAFS解析による動径分布関数を示します。この結果を基に、理論値とのフィッティングを考慮した計算をおこなうと、Hf-Oの平均原子間距離は0.21nm、配位数は7、Hf-Hfの平均原子間距離は0.32nm、配位数は9が求まり、XRDの解析結果とほぼ一致することがわかります。

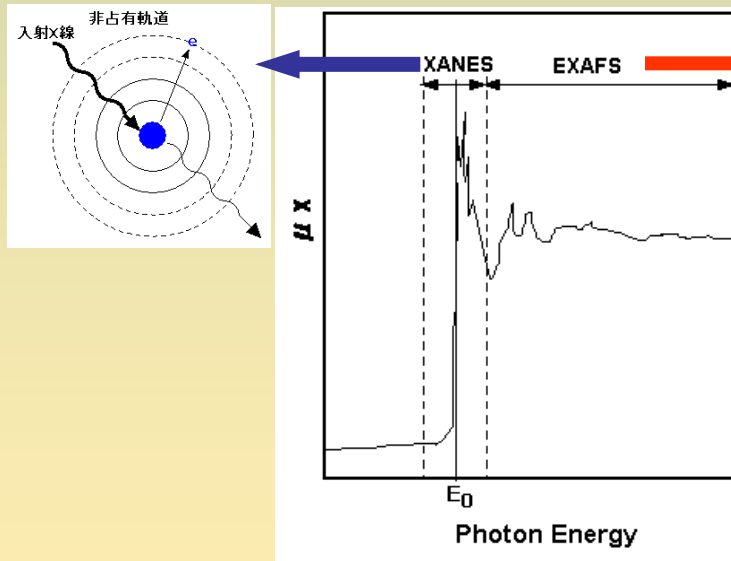


図1 XAFSの原理とスペクトル

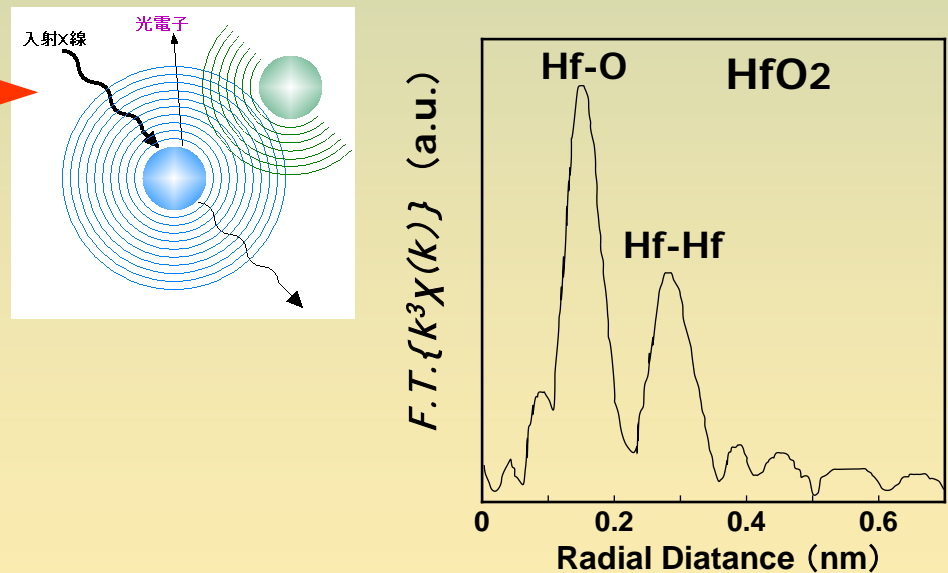


図2 m-HfO₂の動径分布関数