

I 高エネルギー分解能 X 線吸収スペクトルによる遷移金属材料の評価技術の開発

Development of Characterization Technology for Transition Metals by X-ray Absorption Spectroscopy with High Energy Resolution

松井純爾
Matsui, J.

産業界からのさまざまな物質材料を放射光を使って評価する技術の開発を行っている。X 線吸収端微細構造(XAFS)測定システムを整備し、触媒、電池、薬剤などの特定元素周囲の局所構造（隣接原子の距離と配位数）の評価に加えて、2 年前からスタートした高エネルギー分解能 XANES 測定、特にプリエッジ領域で出現する弱い吸収ピークを測定する高エネルギー分解能 XANES 測定は、例えば電池電極物質中の金属（特に 3d 遷移金属）原子の電荷、周囲原子の配位数、その対称性などを解析できるため、3d 遷移金属を含む触媒、電池電極材料を中心にその応用範囲が広がりつつある。また、これにより得られるデータ解析のための第一原理計算システムの構築も進めている。

II 多チャンネル検出機能付き X 線粉末回折装置の利用

Usage of X-ray Powder Diffractometer with Multi-Channel Detectors

松井純爾
Matsui, J.

X 線粉末回折技術において、放射光の優れた特性（高輝度性、波長選択性など）をさらに強気に発揮できるようにするために、X 線回折装置の回転精度や検出器の高精度化を図り、試料からの回折 X 線を多数連続配置（合計 21 個）した Si 単結晶アナライザ（角度フィルターとして機能する）と同数のシンチレーション検出器の組み合わせにより、高角度分解（ 0.01° 以下）で多数の回折 X 線ピークを同時に取得できる X 線粉末回折装置の整備を昨年度完了し、これにより従来は不可能であった各種の粉末試料の高速かつ高精度な構造解析が可能となった。この回折装置と試料自動交換ロボットとの組み合わせにより、試料交換のために実験ハッチの扉を頻繁に開閉することなく、多数の試料を自動的に測定するシステムが構築され、X 線回折測定上の作業効率の向上が図られている。現在この装置を活用して、粉末材料の加熱による相変態を *in situ* に測定することを試みており、加熱によって回折プロファイルを高精度に測定できることを確認している。

III 放射光の産業利用技術

Synchrotron Radiation Technologies For Materials From Industrial Fields

松井純爾

Matsui, J.

I、II記載の放射光利用技術に加えて、XAFS (X-ray Absorption Fine Structure), SAXS (Small Angle X-ray Scatter), XRT (X-ray Topography) 等のいろいろな放射光利用技術を産業界からの試料に適用し、現在わが国で進行中の先端材料開発に寄与している。特に、放射光をミクロンスケールまで絞り、電池、触媒等の各種材料に適用することで、この空間分解能での局所的な XAFS マッピングが可能となりつつある。その適用材料範囲は、酸化物（触媒・電池電極材料・ガラスなど）、金属（腐食問題など）、高分子化合物など多岐に亘っており、それぞれの分野でわが国の材料動向を反映して多彩である。

発表論文 List of Publications

- III-1 J. Matsui: Precise Industrial Application of Hyogo Beamlines with Spatially, Energetically and Angularly High Resolutions, SSRF/SINAP-SPring-8 Joint Workshop, Shanghai, China (2011).
- III-2 J. Matsui: Industrial Application of Hyogo Beamlines with Spatially, Energetically and Angularly High Resolutions, PAL-SPring8 Joint Workshop, Pohang, Korea (2011).