

共用ビームライン建設の現状と抱負

◇ BM3 「XAFS」 ビームライン

岡山大学 理学部

前田 裕宣

大阪大学 産業科学研究所

江村 修一

1. はじめに

今回建設されるXAFSのビームラインは、10本の共用ビームラインのうち、ベンディングマグネットを利用したビームラインの1本である。SPring-8は、特性エネルギー(ϵ_c)が29keVと格段に高いので、それを十分に生かして、3.5~90keVと幅広いエネルギー範囲におよぶXAFSビームラインを建設する予定である。これはK(19)からBi(83)までの65種類におよぶ元素のK-吸収端の測定を可能にする。

2. XAFSビームラインの概要

光学系は、図1に示すように、分解能およびフォトン・フラックスの損失を押さえるために、垂直方向のコリメートの役を担う第1ミラー、そして石川氏の開発した可変傾斜型二結晶モノクロメータ(Si)を用いる。それは、ある軸のまわりの回転により、(111)、(311)、(511)面・・・をそれぞれ利用することで、3.5~90keVのエネルギー領域の分光を可能にしてる。このモノクロメータで、水平方向のサジタル集光を行い、ついで、第2ミラーにより垂直方向の集光を行う。SPring-8の ϵ_c が29keVと高いので、XAFSにコンタミする高調波の除去問題が深刻となるが、これら2枚のミラーは、同時に高調波除去の働きもする。

実験ハッチ(5m×7m)を図2に示す。実験ハッチ内には、2台の大型光学定盤を設置する。主定盤(1.2m×2m)には分光測定に必要な最低限の機器が準備され、副定盤(1.5m×3m)には、本ビームラインの主研究テーマの一つである変調XAFSならびに精密XAFSを行うための励起光源としてYAGレーザが設置される(詳しくは文献²⁾を参照)。

3. 当面目的にしている研究テーマ

以下の4つのカテゴリーに分類される。

- (1) 変調XAFS法の開発とその応用
- (2) 高エネルギー領域XAFS
- (3) 精密XAFS
- (4) 希薄系XAFS

ここでは、分光学でよく用いる変調技術を適用した変調XAFSの取り組みについて紹介する。

通常の回折法では、結晶の周期性を前提とした平均構造の解析が行われるが、XAFS法は、各原子のまわりの局所構造を解析できる特徴があり、構造に周期性がない場合、すなわち気体や液体の構造を研究するための強力な実験方法である。レーザーによる光励起を組み合わせて、励起状態の（分子）構造を直接検出することは、XAFS法の新しい応用として非常に興味深い。しかしながら通常使用されるレーザーパワーでは、レーザーによって励起される励起状態の割合は、その寿命にもよるが試算では～10%程度なので、通常のXAFS法では励起構造のXAFSは解析不可能である。そこでXAFS信号のS/N比を高めるためCardona¹⁾によって開発され、分光法でよく用いられる変調分光法の手法を応用した変調XAFS法(MXAFS)という新しい実験方法を開発し、精度良く励起状態の（分子）構造を検出する。

一般に励起状態では基底状態よりも結合距離が大きくなり構造自体もその電子励起状態を反映して基底状態の構造から大きく変化するとされている。また極性も大きく変化する。このような励起状態での構造変化と極性変化が励起状態と基底状態での反応性の違いに反映されている。この励起状態での構造変化を直接観測することは励起状態研究の夢であり、MXAFSはそれを果たしてくれる方法となるであろう。

以上、本研究はレーザー光とSRを組み合わせた実験であり、その特徴を要約すると、

1) 外部振動（光、電場、磁場、圧力等）によって系に生じる物理量の変化分だけを抽出する方法で、 $\Delta \mu / \mu \sim 10^{-4}$ 程度までの変化分を楽に取り出せるMXAF法を確立する。

2) 励起状態の構造を直接決定するという意欲的な研究課題である。

なお、最も簡単なシミュレーションの一例を次にあげておく。結合距離の変化量は、0.01 Å、励起状態に存在する分子の割合は、1%としてXAFS振動をシミュレーションしたものを見図3に示す。下段が基底状態でのXAFS、上段は、変調XAFSで得られる振動である。

文献

- 1) M. Cardona, Solid State Physics (Suppl. 11); *Modulation Spectroscopy*, eds. F. Seiz, D. Turnbull and H. Ehrenreich (Academic Press, New York, 1969)
- 2) SPring-8利用者情報 3(1996), 27.

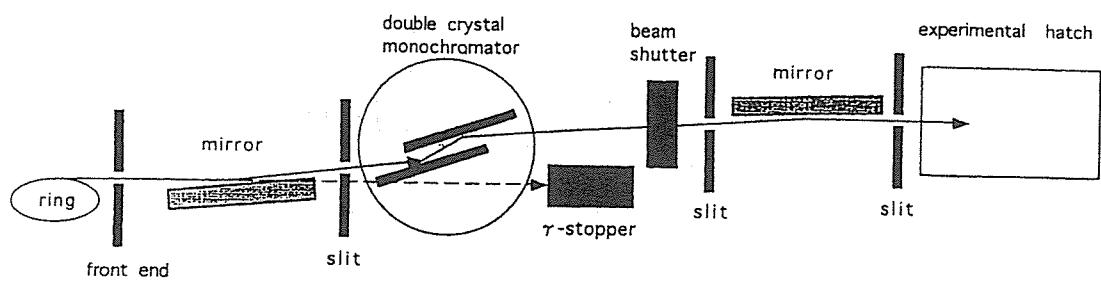


図1 光学系の概略図

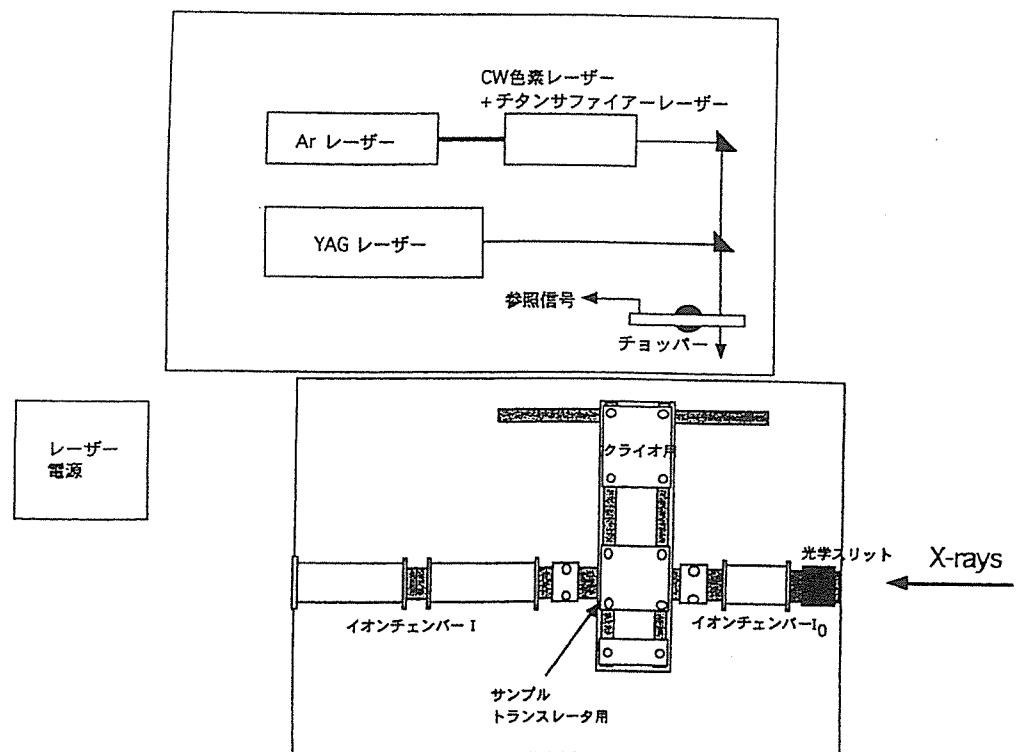


図2 実験ステーションの概略図

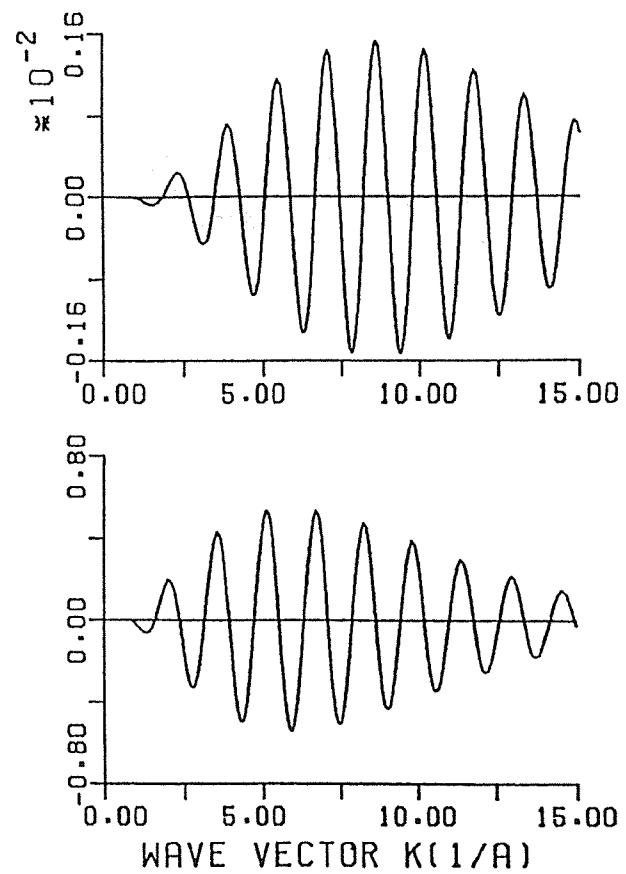


図3 シミュレーションによる基底状態のXAFS振動（下）と変調法で測定されるスペクル