

## 2 化学状態分析用蛍光X線分析装置の標準スペクトルのデータベース化

山下 満

### 1 目的

化学状態分析用蛍光X線分析装置 (HRXRF) は蛍光X線スペクトルの変化から価数の変化や化学状態の違い (図 1) を検出するために開発された装置である。試料に含まれる元素を広範囲 (通常、B~U) に検出する汎用型の蛍光X線分析装置と異なり、HRXRF は手作業による分光結晶の交換が必要で走査可能な波長範囲も限定されるが、 $5/10000^\circ$  の高精度ステップスキャンを再現性よく実施可能 (図 2) である。本研究では主に典型元素と3族の遷移金属元素に対し、その単体や酸化物を分析試料とした標準スペクトルを収集・整理し、HRXRF 測定結果のデータベース化を検討した。

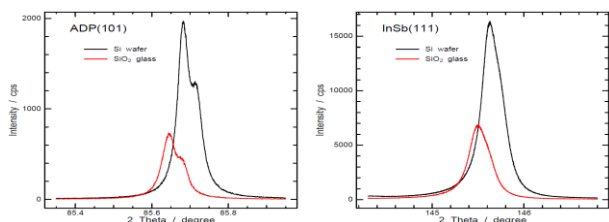


図 1 化学状態 (価数) の違いによるスペクトルの変化、および、分光結晶の違いによる分解能の差異の実測例 (分析試料: Si, SiO<sub>2</sub>、分光結晶: 左 ADP(101)、右 InSb(111)) ADP は強度面では不利であるが高い分解能が得られる。

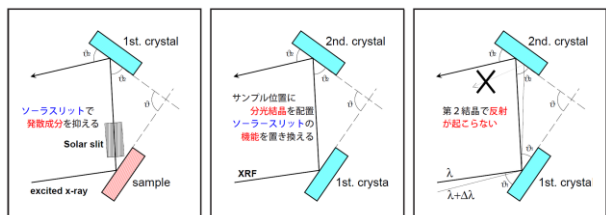


図 2 HRXRF の分光原理: 汎用 XRF (左) のソーラースリットを分光結晶に置き換えて、角度発散を抑制することで高分解能を実現している。

### 2 実験方法

測定された標準スペクトルを特徴づける主たるパラメータは、スペクトル全体の重心とその単体元素からのシフト量、および、 $K\alpha_1$  の重心とその単体元素からのシフト量、半値幅、規

格化因子、加えて、 $K\alpha_2$  の重心とその単体元素からのシフト量、半値幅、規格化因子である。

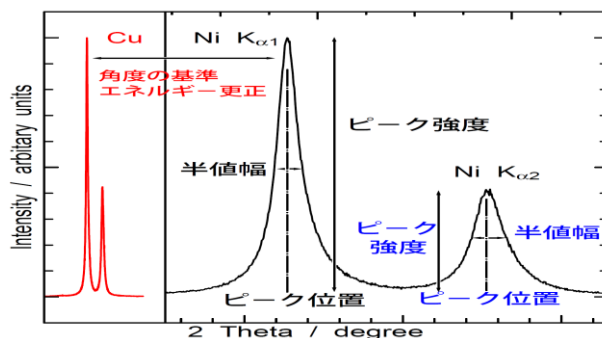


図 3 測定値規格化の模式図。測定前後に金属銅を測定し、Cu  $K\alpha_1$  のピーク位置を基準に角度を校正し、スペクトル特徴量 (ピーク位置、相対強度、半値幅等) を導出。

これらの素データに対して、表記スタイルを css 記述子のみで指定した html コードで表現することにより、プラットフォームに依存しないブラウザ参照型のデータベースを構築した。

### 3 結果と考察

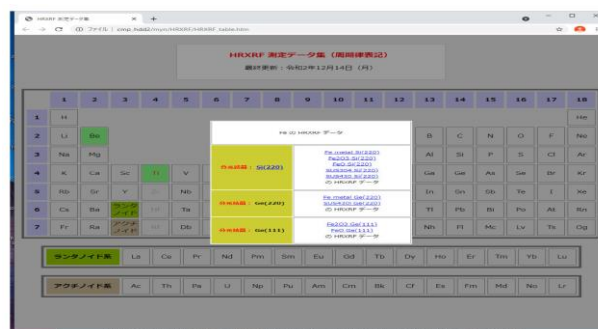


図 4 css 記述子のみで html コードで構築した Fe の測定データの表記例

紙面をベースとするデータベースと異なり、ページの概念が無く拡張性に優れた html ベースの表記を採用することにより、単にスペクトルの情報を羅列して記述するにとどまらず、データの追加やスペクトルの表示/比較が容易となった。将来的には、測定データの描画・フィッティング機能の追加や、他所のデータとの相互リンクといった拡張を図りたい。

(問合せ先 山下 満)