

特別講演

放射光軟X線分析と計算機化学

村松康司

兵庫県立大学大学院工学研究科（〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167）

一般に、波長が約 0.1～数十 nm の軟X線は物質に対する透過能が低く、薄い空気層によって容易に吸収される。これは物質中の軌道電子と軟X線との相互作用が強いためであり、軟X線をプローブとしてこの相互作用を観測すれば電子状態や化学状態に関する分析情報を引き出すことができる。このように軟X線をプローブとして利用する分析を軟X線分析とよぶ。励起プローブに軟X線を用いる分析は、1970～1980年ごろから実用化されたシンクロトロン放射光（以下、放射光とよぶ）の利用によってこれまで目覚ましい発展をとげてきた。放射光を用いる放射光軟X線分析では、X線吸収分光（XAS: X-ray Absorption Spectroscopy）とX線発光分光（XES: X-ray Emission Spectroscopy）およびX線光電子分光（XPS: X-ray Photoelectron Spectroscopy）が三大分光法であり、現在ではこれらを基本として様々な励起方法や検出方法を工夫した多用な分光計測技術が開発されている。特に高輝度放射光源の特長（高輝度、広エネルギー範囲、高指向性、偏光制御など）を活かした分光計測技術の開発により、実験室系装置では取得することができない高度な分析情報を含むスペクトルが得られるようになってきた。この分析情報は上述のように軌道電子と軟X線との相互作用の結果として得られるものであるから、ここから電子状態や化学結合の姿を詳細に描くには量子的手法によるスペクトル解析技術が不可欠である。つまり、先端的な軟X線分光計測技術と計算機化学が両輪となってはじめて放射光軟X線分析が成り立つ。

我々は、挿入光源（アンジュレータ）が実用化されはじめた1980年代からフォトンファクトリー（PF: Photon Factory）において軟X線分光計測の準備をはじめ、1990年代初頭に世界に先駆けて不等間隔刻線回折格子を搭載した軟X線発光分光器を開発し、国内で初めて軽元素物質の放射光励起軟X線発光分光測定を行った[1]。以来、軟X線発光分光と吸収分光を組み合わせた放射光軟X線発光・吸収分光法（図1）を高精度な電子・化学結合状態分析技術として確立・普及させるため、炭素材料を中心とする軽元素機能材料を対象として、軟X線分光計測と Discrete Variational (DV) -X α 分子軌道法[2]を手法とする放射光軟X線分析研究を行っている。

本報では、これまでに行ってきた固体有機材料の電子状態解析、黒鉛系炭素の局所構造解析、ダイヤモンド半導体のバンドギャップ解析などを例として、軟X線分光計測と DV-X α 分子軌道法による放射光軟X線分析の有用性と可能性を紹介する。

[1] Y. Muramatsu, M. Oshima, T. Shoji, and H. Kato, Undulator radiation excited x-ray fluorescence analysis system for light elements, *Rev. Sci. Instrum.*, 63, 5597-5601 (1992); Y. Muramatsu, M. Oshima, and T. Shoji, Undulator radiation excited x-ray fluorescence analysis system for light elements, *Photon Factory Activity Report*, 9, 284 (1991).

[2] H. Adachi, M. Tsukada, C. Satoko, Discrete variational X α cluster calculations. I. Application to metal clusters. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 45: 875-83 (1978); 『はじめての電子状態計算』足立裕彦監修（三共出版, 1998）。

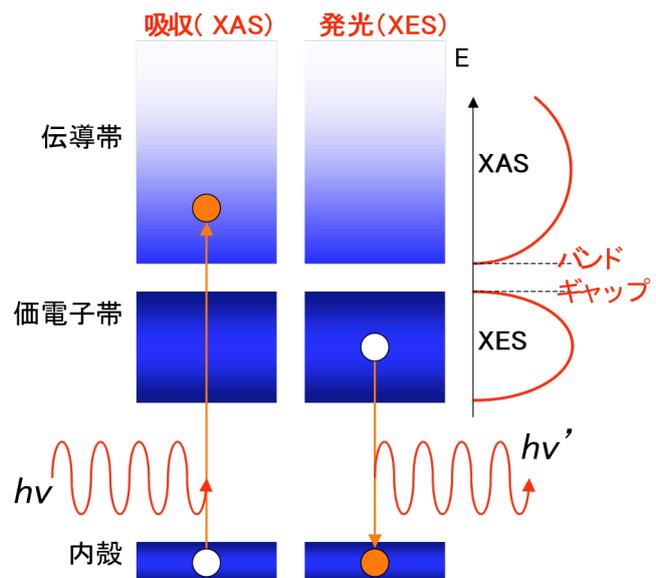


図1 軟X線発光・吸収分光法の原理。