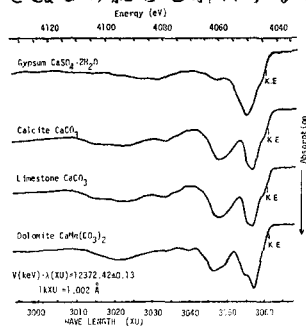


(和洋女大文家政) 高橋和雄 片岡チトセ (宮城教育大) 塩田安男

はじめに K吸収端から若干遠方までの構造(EXAFS:Extended X-ray Absorption Fine Structure)は、古くから知られ、1970年代からは解析法も明らかとなってきた。<sup>1,2,3)</sup> EXAFSは吸収係数のエネルギー依存性を $10^3$ の変化まで検出するという厄いな点を除けば、原子を抜きだして調べられる点に特長がある。したがって、非結晶物でも支障なく、また結晶粉末中でも溶液中でも共通の情報が得られる。そこで、洗剤成分あるいはキレート剤とCaとの結合を解析する含みで、Ca含有結晶粉末EXAFSのデータを解析してみる。<sup>4)</sup>

方法<sup>2),3),5)</sup> i)用いた資料は、 $\text{SiO}_2$ の(10 $\bar{1}$ 1)面を利用した分光写真器でCa含有試料の透過X線強度分布を撮ったものである(右図)。このため $1/\lambda_0$ をエネルギーごとに正しく記録したものではないが、4040~4120eVの範囲で①用いたWのX線源は白色に近い、②分光器の原子散乱因子は $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ の関数で与えられるが入が変化しても $\frac{\sin\theta}{\lambda} = \frac{1}{2d}$ のため変化しない、③偏光因子の逆数は14%しか変化しない、④コンプトン散乱の寄与もあまり変わらない等の考察から $1/\lambda_0$ に比例するものとみなした。ii)常法に従い、 $1/\lambda_0 = e^{-\mu x}$ から $\mu = \frac{1}{x} \ln \frac{1}{I}$ として $\mu$ を求め、その相対変動分 $\chi(k) = \frac{\Delta\mu}{\mu_{\text{iso}}}$ に重み $k^3$ を付けたもののフーリエ変換 $\int \frac{e^{-2i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{2\pi} k^3 \chi(k) dk$ からCaの状態を調べた。



- 1) Kossel, Z. Phys., 1(1920)119; Kronig, ibid., 70(1931)317, 2) Sayers et al., Adv. X-ray Anal., 13(1970)243  
 3) Lee and Pendry, Phys. Rev., B 11(1975)2795; Eisenberger and Kincaid, Sci., 200(1978)1441  
 4) Shiota et al., Tech. Rep. Tohoku Univ., 33(1968)109, 5) Shulman et al., J. Mol. Biol., 124(197) 305