

## 放射光を利用した化学状態解析技術 XAFSの応用事例：クロメートの化学状態解析

### 1. 概要

- ・ XAFS<sup>※1</sup>は、X線吸収スペクトルを測定・解析する事で、物質の化学結合状態（価数）や局所結晶構造（配位状態）を元素選択的に評価できる分析手法です。
- ・ 蛍光法<sup>※2</sup>によるXAFSを行う事で、**薄膜や、表面の微量元素の化学状態解析**が可能です。

※1 XAFS：X-ray Absorption Fine Structure

※2 試料表面から放出される蛍光X線を検出してXAFSを測定する手法

### 2. 評価事例

- ・ 二種のクロメート処理鋼板表面のXAFS測定を行い、表層皮膜中のCrの価数を評価した事例です。
- ・ クロメート①には、6価クロム特有のプリエッジピーク（図1中赤矢印）が明瞭に観察されました。
- ・ 価数標準試料を使用したスペクトルの線形結合フィッティングにより、スペクトルから6価及び3価成分を分離・抽出し、6価クロム量の半定量分析を行いました（図2）。
- ・ 動径構造関数の解析により、クロメート①には6価クロム特有の、Cr周囲に酸素が四面体配位した結合状態の存在が確認できました（図3）。

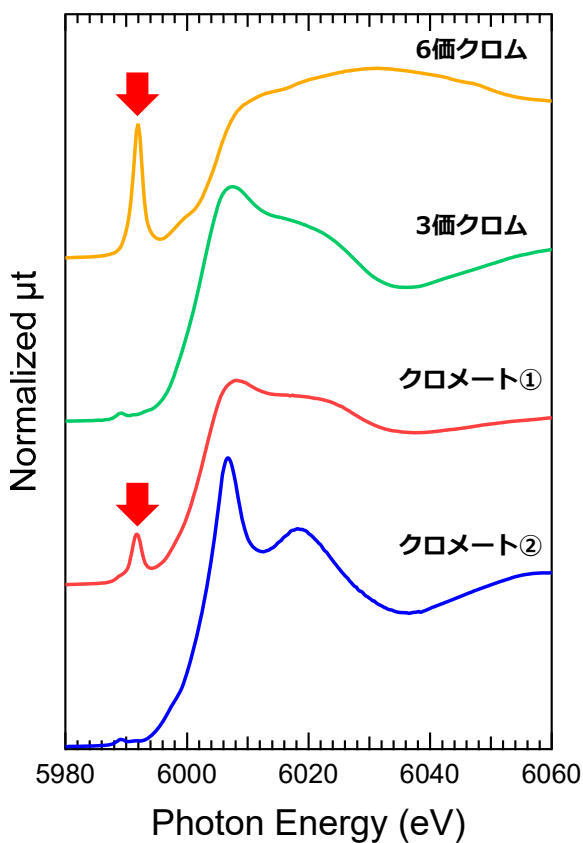


図1 各クロメートとクロム標準試料のCrK端XAFSスペクトル  
6価クロム：CrO<sub>3</sub>  
3価クロム：Cr(OH)<sub>3</sub>・xH<sub>2</sub>O

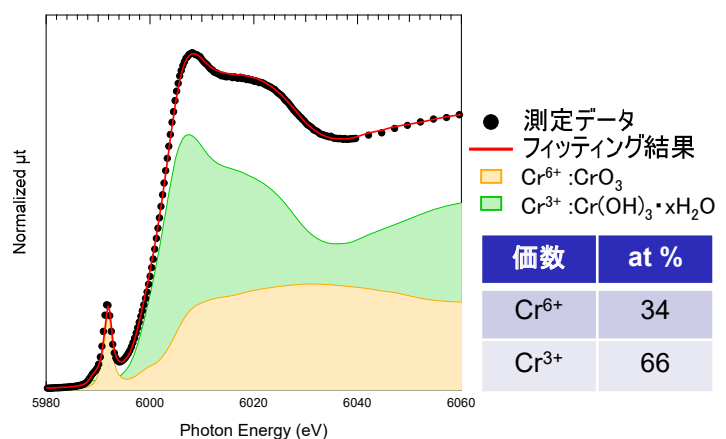


図2 フィッティングによるCr価数の半定量分析（クロメート①）

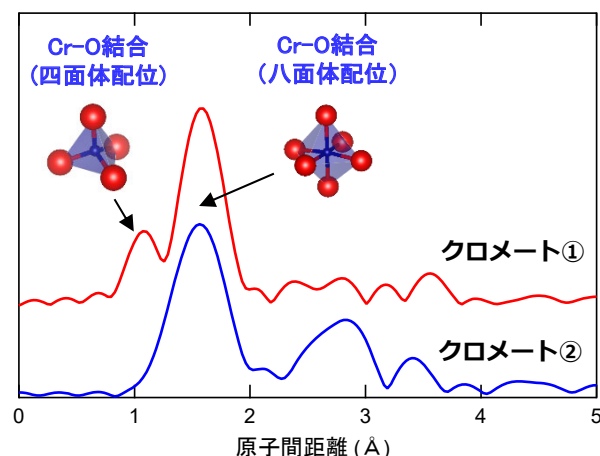


図3 各クロメートのCr周囲の動径構造関数