



# 構成及び内容

## 第1章 序論

1. X線・電子線を用いた  
化学結合状態分析・局所構造解析の変遷
2. X線吸収分光法による  
局所構造解析、状態分析技術の沿革と現状

## 第2章 XAFSによる局所構造解析のポイント

### 第1節 XAFSの解析方法と実験原理

#### 第1節 XAFSの解析方法と実験原理

1. EXAFS
- 1.1 理論
- 1.2 EXAFSによる局所構造解析の手順
- 1.3 動径分布関数シミュレーションを用いた局所構造解析
- 1.4 XAFSにおける  
構造不規則系の動径分布関数出現パターン

#### 2. DV-X $\alpha$ 法の応用

- 2.1 DV-X $\alpha$ 分子軌道計算
- 2.2 遷移エネルギー
- 2.3 遷移確率の計算

#### 3. 実験原理

### 第2節 XAFS測定に利用可能な放射光施設と利用時の留意点

#### 1. 放射光施設

- 1.1 PFおよびPF-AR
- 1.1.1 ビームライン
- 1.1.2 実験課題
- 1.2 SPring-8

#### 1.2.1 ビームライン

##### 1.2.2 実験課題

#### 1.3 SAGA-LS

##### 1.3.1 ビームライン

##### 1.3.2 実験課題

#### 1.4 AichiSR

##### 1.4.1 ビームライン

##### 1.4.2 実験課題

#### 2. 課題申請ならびに測定

##### 2.1 申請書の注意点

##### 2.2 測定に際して

### 第3節 XAFS測定の実際

#### 第1項 XAFSの測定法と留意点

1. 光学系
2. 透過法による測定
3. 蛍光法による測定
4. 電子収量法による測定
5. その他の測定手法

#### 第2項 QXAFSの測定法と留意点

##### およびパラジウム触媒での解析事例

#### 1. QXAFS法

##### 2. SPring-8における最近の技術的進歩:

##### ガルバノスキャナを用いた

##### ミリ秒時間分解QXAFS測定

##### 3. QXAFSによるPdクラスターの動的挙動追跡

#### 第3項 DXAFSの測定法と留意点

#### 1. DXAFS測定法

##### 1.1 DXAFS光学系

##### 1.2 湾曲分光結晶

##### 1.3 位置敏感検出器

#### 2. DXAFS測定の留意点

##### 2.1 散乱光と試料の不均一性

##### 2.2 吸収スペクトルの導出

#### 3. DXAFSの応用

##### 3.1 時間分解測定のための実験技術

##### 3.2 化学反応の追跡と短寿命化学種の観測

### 第4節 XAFS測定データの解析手法

#### 1. EXAFSの解析方法

#### 2. 温度因子の解析方法

#### 3. XANESの解析方法

### 第3章 EELSによる局所構造解析のポイント

#### 第1節 EELSの基礎原理

#### 1. EELSの光学系と測定原理

##### 1.1 EELSの光学系

##### 1.2 電子顕微鏡におけるEELSの測定モード

##### 1.3 測定パラメーター

#### 2. EELSの基礎原理

##### 2.1 EELSのスペクトルの概要

##### 2.2 価電子励起スペクトル

##### 2.2.1 価電子励起スペクトルの基礎

##### 2.2.2 プラズモン励起

##### 2.2.3 バンド間遷移

##### 2.2.4 その他の励起

##### 2.3 内殻電子励起スペクトル

##### 2.3.1 内殻電子励起スペクトルの基礎

##### 2.3.2 エッジの記号の意味

##### 2.3.3 エッジの閾エネルギーの決め方

##### 2.4 バックグラウンドの成因

##### 2.5 試料厚さと多重散乱

##### 2.6 空間分解能とDelocalization

#### 第2節 EELS測定のための測定環境

#### 1. 電子顕微鏡内部の環境

##### 1.1 コンタミネーションとその対策

##### 1.2 照射ダメージ

##### 1.3 ドリフト

#### 2. 電子顕微鏡外部の環境

### 第3節 EELS計測の実際

#### 1. EELSスペクトルの測定

#### 2. EELSを用いた材料解析

##### 2.1 STEM-EELSによる原子分解能ドーパント解析

##### 2.2 STEM-EELSによる人工超格子の解析

#### 第4節 EELS測定データの解析手法

#### 1. EELSデータ解析法の原理

#### 2. 多重散乱計算によるELNESの理論計算

#### 3. 第一原理バンド計算によるELNESの理論計算

#### 4. 擬ポテンシャル法を用いた

##### 高精度・高速ELNES理論計算

#### 5. DFT-LDA/GGA近似を超えたELNES/XANES理論計算

#### 6. XANES/ELNESスペクトルにおけるピークの起源

### 第4章 XAFS/EELSによる局所構造解析事例

#### 第1節 XAFSによるリチウムイオン二次電池の

##### 電極・電解質界面の解析

##### 1. リチウムイオン二次電池の電極/電解質界面

##### 2. 薄膜モデル電極による界面構造の単純化

##### 3. 全反射蛍光XAFS法

##### 4. 深さ分解XAFS測定

##### 5. リチウムイオン二次電池電極/電解質界面の

##### その場測定例

#### 第2節 位置分解TEM-EELSによる

##### 全固体リチウムイオン電池内部の

##### Li分布と電子状態計測

##### 1. 「その場形成電極」を用いた全固体LIB

##### 2. 位置分解TEM-EELSの原理と特長

##### 3. 位置分解TEM-EELSによる

##### Li分布と電子状態分布の計測

### 第3節 時空間分解XAFSによる

#### 固体高分子形燃料電池の活性・耐久因子の解析

##### 1. 燃料電池専用XAFS新ビームラインBL36XU

##### 2. in situ XAFSによる燃料電池触媒解析

##### 3. 時間分解XAFSによる燃料電池触媒解析

##### 4. 空間分解XAFSによる燃料電池触媒の解析

#### 第4節 EELSによる燃料電池材料の解析

#### 1. 酸化物形燃料電池内界面のEELSを用いた解析例

##### 1.1 酸化物形燃料電池用固体電解質内欠陥構造解析

##### 1.2 酸化物燃料電池デバイス内

##### 電極・電解質界面解析

##### 1.2.1 Gdドープドセリア薄膜/アノード界面近傍

##### における微細構造変化

##### 1.2.2 Gdドープドセリア薄膜/カソード界面近傍

##### における微細構造変化

##### 2. 高分子形燃料電池内白金電極界面の

##### EELSを用いた解析例

### 第5節 XAFSによる錯体分析技術とその事例

#### 1. d遷移金属錯体の事例

##### 1.1 錯体のXAFSスペクトル測定

##### 1.2 大環状配位子の金属錯体の

##### 固体並びに溶存構造-EXAFSスペクトル解析

##### 1.3 大環状配位子の金属錯体の

##### 固体並びに溶存構造-XANESスペクトル解析

##### 2. その他の金属錯体の事例

##### 3. 最近の話題

### 第6節 XAFSによる高分子材料表面の解析

#### 1. 高分子材料におけるXAFSの特徴

#### 2. 軟X線領域でのXAFS測定

#### 3. 高分子材料表面解析への応用

### 第7節 EELS・ESIによる高分子構造解析

#### 1. EFTEMによるポリマーブレンドの相分離過程の解析

#### 2. 高分解能炭素マッピングによる

##### コア・シェル構造の解析

#### 3. エネルギーフィルターTEMによる界面の可視化

#### 4. 高分子試料におけるEELSの分析感度と分解能

### 第8節 時分割XAFS法によるゴムの架橋反応解析

#### 1. ゴムの硫黄架橋反応とZn-K吸収端XANESスペクトル

#### 2. 放射光を利用した時分割XAFS測定システムの概要

#### 3. 各種ゴム系の架橋反応解析への応用

##### 3.1 水素化NBR系

##### 3.2 EPDM系

### 第9節 カーボンナノチューブ細孔内に吸着した

#### 水和錯体のXAFSによる構造解析

##### 1. イオンの水和構造とXAFS

##### 2. CNT細孔内で形成される酢酸亜鉛水和錯体の

##### XAFSによる構造解析

##### 2.1 サンプル調製および測定方法

##### 2.2 CNTの細孔内に吸着した酢酸亜鉛の構造

### 第10節 XAFSによる触媒表面活性種のナノ構造解析

#### 1. 時間分解XAFS及びOperando XAFSによる

##### 触媒活性種その場観察

##### 1.1 光電着法による酸化チタン表面での

##### 貴金属ナノ粒子形成

##### 1.2 Ptナノ粒子の還元挙動に対する担体の影響

##### 1.3 自動車排気用触媒のOperando XAFS解析

#### 2. 触媒活性種を対象としたXAFS解析方法の構築

##### 2.1 チタニア光触媒可視光応答化に関わる

##### 添加窒素の化学状態解析

### 第11節 EELSによる触媒界面の解析

#### 1. EELSによる燃料電池触媒の評価

#### 2. EELSによる排ガス処理用助触媒の評価

・ E M A I L : ダイレクトメール等によるご案内希望の方は

…弊社HP ( . . . . . ) . . . . . L . . . . . F . . . . .

★★★書籍の申込書・申込要領等は裏面にございます★★★

(株) 情報機構 TEL: 03-5740-8755 FAX: 03-5740-8766 〒141-0032 品川区大崎3-6-4 トキワビル3階