

★リチウム電池・燃料電池・触媒・錯体・高分子…構造・反応の本質を明らかにする

- |                  |                                |                               |                         |
|------------------|--------------------------------|-------------------------------|-------------------------|
| 【執筆一覧(敬称略)】      | ●木口 賢紀(東北大学)                   | ●平山 司<br>((一財)ファインセラミックスセンター) | ●堀内 伸((独)産業技術総合研究所)     |
| ●渡部 孝((株)コベルコ科研) | ●溝口 照康(東京大学)                   | ●岩澤 康裕(電気通信大学)                | ●福森 健三((株)豊田中央研究所)      |
| ●一國 伸之(千葉大学)     | ●折笠 有基(京都大学)                   | ●森 利之((独)物質・材料研究機構)           | ●大久保 貴広(岡山大学)           |
| ●宮永 崇史(弘前大学)     | ●内本 喜晴(京都大学)                   | ●脇田 久伸(佐賀大学)                  | ●吉田 朋子(名古屋大学)           |
| ●奥村 和(工学院大学)     | ●山本 和生<br>((一財)ファインセラミックスセンター) | ●岡島 敏浩<br>(公財)佐賀県地域産業支援センター   | ●田中 庸裕(京都大学)            |
| ●片山 真祥(立命館大学)    | ●入山 恭寿(名古屋大学)                  |                               | ●大塚 祐二<br>(株)東レリサーチセンター |
| ●稲田 康宏(立命館大学)    |                                |                               |                         |

# XAFS/EELS による 局所構造解析・状態分析技術

発刊:2014年9月 定価:60,500円(税込(消費税10%)) 体裁:B5判ソフトカバー 240頁

各種の材料・デバイスの構造・反応解析に用いられる  
XAFS(X線吸収微細構造)とEELS(エネルギー損失分光法)  
その利用法を詳解するとともに、測定・解析事例を集成。  
基礎・原理から活用・実践までをわかりやすくまとめた1冊です。

## <XAFS/EELSによる測定・解析のテクニック>

- X線・電子線を用いた  
局所構造解析・状態分析技術の変遷と現状は?
- XAFS(X線吸収微細構造)…in situ測定・解析も
- 局所構造解析の手順や計算方法、実験原理は  
どうなっているの?
- 国内の放射光施設の概要と  
利用申請・測定の注意点とは?
- 透過法・蛍光法・電子収量法・QXAFS・DXAFSなど、  
各測定法の実際はどのように?
- EXAFS(および温度因子)とXANES、各領域の解析方法は?
- EELS(エネルギー損失分光法)…STEM-EELSを中心に
- 光学系と測定原理、スペクトルの原理は  
どうなっているの?
- 測定時の電子顕微鏡内部/外部の  
環境についての注意点とは?
- スペクトルの測定と材料解析の実際はどのように?
- 第一原理計算などを用いた  
理論計算によるデータ解析方法とは?

## <各種材料・デバイス向け事例>

- リチウム電池
  - XAFSによる電極/電解質界面のin situ測定例
  - 位置分解TEM-EELSによる全固体LIBの電子状態計測
- 燃料電池
  - in situ/時間分解/空間分解XAFSによる  
固体高分子形燃料電池の解析
  - EELSによる酸化物形/高分子形燃料電池の電極・電解質界面解析
- 高分子材料
  - XAFSの高分子材料表面解析への応用
  - EFTEM・EELS・ESIによる各種高分子構造の解析
  - 時分割XAFS法による各種ゴム系の架橋反応解析
- 錯体・CNT
  - 金属錯体のXAFSスペクトル測定・解析
  - XAFSによるカーボンナノチューブ細孔内の水和錯体の構造解析
- 触媒
  - 時間分解/Operando XAFSによる各種触媒の+構造解析  
(自動車排気用触媒他)
  - EELSによる燃料電池触媒/排ガス処理用助触媒の界面解析

★書籍申込書

FAX : 03-5740-8766、または、<http://www.johokiko.co.jp> にて

(書籍申し込み要領)

- ◎右記記入の上、FAXでお申込を承ります。  
FAX:03-5740-8766まで!
- ◎お申込書を確認次第、書籍、請求書および  
振込要領をお送りいたします。
- ◎未発刊の書籍をお申込の場合、申込書を確認  
次第、受領書をお送りいたします。  
発刊時に弊社より書籍、請求書および振込  
要領をご送付いたします(送料は弊社負担)
- ◎お支払いは請求日翌月末日までに、銀行振込  
にてお願いいたします。原則として領収証の  
発行はいたしません。
- ◎振り込み手数料はご負担ください。
- ★<http://www.johokiko.co.jp/>  
の申込みフォームからも承ります!

書籍名 HP	【BC140902】	冊数
XAFS/EELSによる局所構造解析・状態分析技術		書籍
住所〒	会社名	
所属部課・役職等	TEL	FAX
E-MAIL	申込者名	上司役職・氏名
ご案内をご希望の場合は今後の案内方法にレ印を記入下さい(複数回答可) <input type="checkbox"/> e-mail <input type="checkbox"/> FAX <input type="checkbox"/> 郵送		

ご連絡頂いた、個人情報は弊社商品の受付・運用・商品発送・アフターサービスのため利用致します。今後のご案内希望の方には、その目的でも使用致します。  
今後のサービス向上のため「個人情報の取扱に関する契約」を締結した外部委託先へ、個人情報を委託する場合があります。個人情報に関するお問合せ先policy@johokiko.co.jp

# 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ドーブドセリア薄膜/アノード界面近傍  
における微細構造変化
- 1.2.2 Gdドーブドセリア薄膜/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. EFTM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 (<http://www.johokiko.co.jp/>) 案内登録にてお受けしております。

★★★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