

## XAFS 解析ソフトウェア“xTunes”の開発

P28 XAFS processing software “xTunes”

山添 誠司 yamazoe@tmu.ac.jp  
首都大学東京

## 1. 緒言

X 線吸収微細構造(XAFS)は注目する元素の電子状態や局所構造を調べる上で強力な手法である。近年では反応中もしくは合成中の試料の状態変化を追跡するため、*in situ*での時分割測定や、他の分光手法等を組み合わせた *operando* 計測による測定が一般的になってきている。その結果、多数のスペクトルを扱う機会が増加しているだけでなく、得られる一連のスペクトルを実験中にその場で表示・解析することが必要になってきている。XAFS の解析には Demeter, GNXAS, REX2000 など、すでに確立されたプログラムが多数存在するが、これらのプログラムは多数のスペクトルを一度に解析する用途には適していないのが現状である。Ifeffit や Larch などのスクリプト環境を用いることで多数のスペクトルを解析することは可能であるが、一定のプログラミング経験が必要である。そこで、我々は、使いやすくシンプルな GUI でありながら多数のスペクトルを扱うことのできる新しい XAFS 解析プログラム xTunes を開発した[1]。

## 2. 概要

xTunes は国内で一般的な 9809 フォーマットの他、タブ区切り表形式の一般的な XAFS データファイルの読み込みに対応している。また、ステップスキャンモードで測定したデータに加え、クイックスキャンモード(QXAFS 測定)や多素子の検出器を用いた蛍光法で測定したデータの取り込みにも対応している。取り込んだデータに対して、バックグラウンド減算、規格化、EXAFS 振動の抽出、EXAFS のフーリエ変換などの基本的な解析を行うことができる。また、必要であれば、異常点除去処理、スムージング処理、幾つかのデータを足し合わせる積算処理を行うこともできる。

XAFS データ解析の際の各解析パラメータの設定は、混乱を防ぐために異なるタブ中に配置されている。タブを順番に開いてパラメータを設定することで EXAFS 振動の抽出や EXAFS のフーリエ変換をスムーズに実行することができる。また、フーリエ変換した EXAFS スペクトルに対するカーブフィッティング解析の際に必要なパラメータ算出のための ATOMS および FEFF8.5L も実装している。ATOMS を用いることで、結晶構造データ(Crystallographic information file, cif)を読み込む、あるいは手入力により作成した ATOMS の入力ファイルから FEFF 計算のための入力ファイルを生成することができる。次に FEFF8.5L を用いることで、作成した FEFF 入力ファイルからカーブフィッティング解析に必要な後

方散乱強度関数および位相シフト関数等を算出できる。EXAFS カーブフィッティング解析においては、REX2000 や Artemis など既存のソフトウェアと同等の結果が得られることを確認している。

また、規格化した XANES スペクトルに対して、すでに解析済みのスペクトルの線形結合による解析や、ガウス関数・ローレンツ関数等を用いたピークフィッティング解析を行うことも可能である。

xTunes の大きな特徴は、時分割 XAFS 測定を行う際に得られるデータを半自動的に処理する“Watch”機能を有する(図1)ことである。*In situ*あるいは *operando* 測定時に半自動解析を行うことでその場で適切に実験計画を変更するなどして、効率的に XAFS 測定実験を行う助けとなる。

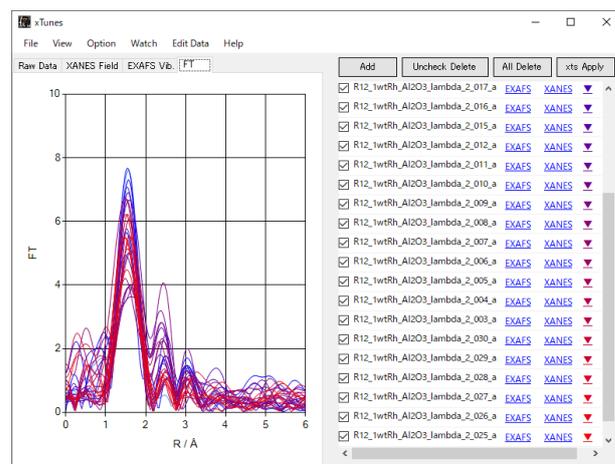


図 1 “Watch”機能の動作の様子。

## 【共著者(所属)】

朝倉博行(京都大学 ESICB)・三角哲平(科学技術研究所)・藤田明希(科学技術研究所)・佃達哉(東京大学)・田中庸裕(京都大学)

## 【関連プロジェクト】

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>触媒・電池材料拠点

## 【参考文献】

[1] Hiroyuki Asakura, Seiji Yamazoe, Teppei Misumi, Aki Fujita, Tatsuya Tsukuda, Tsunehiro Tanaka, 2019, *in press*. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2019.04.020

## 【関連 WEB】

[1] <https://www.xtunes.jp/>(ソフトウェアダウンロードサイト)