

様式 2)

議事録番号

提出 平成 26 年 9 月 30 日

会合議事録

研究会名 : X 線スペクトロスコープ利用、機能性材料ナノスケール原子相関合同研究会

日 時 : 平成 26 年 9 月 12 日

場 所 : 東京大学 分子細胞生物学研究所 本館 102 号室
(東京都文京区弥生 1-1-1)

出席者 : 山本孝 (徳島大)、宇留賀朋哉 (JASRI)、紅野安彦 (岡山大)、新田清文 (JASRI)、奥村和 (工学院大)、小原真司 (JASRI)、廣瀬大亮 (北陸先端大)、L. S. Rosantha Kumara (NIMS)、朝倉清高 (北海道大)、伊奈稔哲 (JASRI)、臼杵毅 (山形大)、李雷 (兵庫県立大)、榊篤史 (日亜化学)、横哲 (東京大)、松成秀一 (ニコン)、藪田久人 (キャノン)、川村朋己 (日亜化学)、田旺帝 (ICU)、谷田肇 (京都大)、小野寺陽平 (京都大)

計 20 名

議題 :

1. 開会挨拶 (岡山大学 紅野安彦)
2. XAFS を利用した研究開発成果

(1) JASRI 新田清文氏より、「Spring-8 における XAFS 計測技術」との題で講演がなされた。はじめに XAFS の原理、測定法、解析に対する一般的な説明がなされ、現在 Spring-8 で測定可能な二種類の時分割測定法に関する特色が説明された。この技術を利用した研究として酸化チタン上に光照射下で生成するロジウムナノ粒子の形成過程に関する研究例が紹介された。また空間分解測定に関する測定技術、および固体触媒一粒子の化学状態分析に関する研究紹介がなされた。

(2) 徳島大学 山本孝准教授より、「XANES の見かけ上の吸収端シフトおよび価数評価」との題で講演がなされた。

まず XANES と EXAFS の特徴、長所と短所について説明がなされ、価数に対す

る X 線吸収スペクトルの見かけ上のシフトについて、3d 遷移金属、希土類、第六周期元素に関する傾向について紹介された。また価数評価に利用する際、吸収端や測定モードの選択により解析結果が異なる例が紹介され、測定モードの特徴および試料を構成する元素の特性を把握しておくことに重要性が示された。質疑応答においては XANES の理論的な解析について活発な議論が行われた。

(3) 工学院大学 奥村和教授より、「QXAFS による金属触媒の構造および状態解析」との題で講演および討論がなされた。

奥村教授が開発された高機能ゼオライト担持パラジウムナノ粒子触媒について、ゼオライトに担持されたパラジウム種の酸化、還元挙動の XAFS による解析、調製条件による触媒特性と化学種の関係について詳細な検討結果が紹介された。また、簡便な測定手法でも触媒の本質を理解する重要な議論が可能であることが示された。

3. 高エネルギー X 線回折を利用した研究開発結果

(1) JASRI 小原 真司主幹研究員より、「BL04B2 X-ray PDF (Pair distribution function) 装置の現状」との題で講演がされた。

まず高エネルギー X 線回折実験が実施可能な BL04B2 とデータ解析ソフトの紹介が行われ、ビームラインのハイスループット化について報告された。また Ba-Nb-P-O 系ガラスの Nb K 吸収端での異常 X 線散乱実験による Nb 周囲の原子相関を選択的に測定した結果、金ナノクラスターの解析等の研究例が報告された。ガラス試料の作製に利用できる種々の浮遊炉の導入および利用例に関する紹介もなされた。

(2) 北陸先端科学技術大学院大学 廣瀬大亮博士より、「ITO ゲルの X-ray PDF と XAFS の相補利用による解析」との題にて講演がなされた。

透明導電膜として近年注目を集めている酸化インジウムスズ (ITO) ゲル薄膜を評価するために、高エネルギー X 線回折による PDF および XAFS 解析を相補的に利用した構造研究の結果が報告された。近距離構造は EXAFS 解析で、中距離構造を PDF 解析で行っており、XAFS と PDF 解析を併用した相関の解釈において活発な議論が行われた。

(3) NIMS L. S. Rosantha Kumara 博士により「Structural analysis of transition - metal nanoparticles by high-energy XRD and RMC++ without

periodic boundary conditions」との題で講演がなされた。

まずシンクロトロン放射光による高エネルギーX線を用いたPDF解析と逆モンテカルロ(RMC)法による構造シミュレーションについて解説された。ナノ粒子では周期境界条件を適用せずに解析を行うことの重要性が示され、実際のRuナノ粒子の解析結果が詳細に報告され、実験値に対して良好な一致が得られることが示された。この解析手法、有効性について活発な議論が行われた。

4. 総合討論

最後に徳島大 山本准教授を司会として総合討論を行った。

総合討論では、XAFSとPDFの相補利用の有効性を再確認したとの意見が多く、両研究会から今後も合同での研究会開催を望む声が多数挙がった。また、XAFS討論会などでPDFのセッションを設けるなどして相補解析の重要性をアピールすること、産業界の研究者から講演きたいなどの意見が上がった。

以上