

研究会等報告

◇第14回関西XAFS研究会

岡山大学 理学部

西畑 保雄

8月5日から7日にかけて2泊3日の日程で中国四国地区国立大学大山共同研修所にて第14回関西XAFS研究会が行われました。50人の参加者がありましたが、企業からや学生の参加者が多いのが特徴でした。ここでは研究会の概略を報告します。

基調講演では横山利彦先生（東京大・理）に「EXAFSによる非調和原子間ポテンシャルの決定」と題して熱振動の効果についてお話ししていただきました。熱振動はEXAFS信号を弱めたり、非調和振動がある場合は原子間距離を補正する必要があるなど問題が多いのですが、逆に非調和振動を積極的に利用して情報を引き出すことができます。講演では統計力学の基礎から話を起こし、二原子分子や三原子分子について4次までのキュムラントの導出をしてもらいました。そして実際に Br_2 や HgBr_2 の実験データから原子間ポテンシャルを見積もり、基準振動を考慮した解析の重要性を示されました。

EXAFSの解析に関するワークショップ（第2回）では事前に配布されていた未知試料のデータ解析を行って集った9組のグループが発表しました。過去の国際ワークショップではEXAFSの理論、実験、解析方法等についての議論がなされてきましたが、1シェルモデルでは原子間距離については 0.01 \AA 、配位数については10%程度の信頼性があると言われてきています。ここでは2シェルモデルについて問題になる解析の手順や得られた結果の信頼性などについて議論しました。(1)5員環、6員環には含まれたFe原子の周りの局所構造では第1近接原子は5員環のC原子で $\pm 0.02 \text{ \AA}$ 程度のばらつき、第2近接原子は6員環のC原子で $\pm 0.01 \text{ \AA}$ 程度のばらつきで求められました。(2) CuCl と CuBr の混合物ではその混合比について議論されました。精密にEXAFSを議論する場合でのベースラインとEXAFS関数の規格化の重要性が再認識されました。モデルの妥当性を判断する基準としてR因子の定義や誤差の評価、許されるパラメータ数の評価など、これから検討すべきいくつかの重要な事項が指摘されました。今回のワークショップの詳しいまとめは近い将来、別の機会に報告する予定です。また新たに出てきた問題点については今後の研究会や講演会で順次取り上げたいと考えています。

話題提供では、野村昌治先生(KEK-PF)の「PFでのXAFS用ステーションの近況」、渡辺巖先生(大阪大・理)の「大気圧ヘリウム中転換電子収率XAFS法」、乾雅祝先生(広島大・総合科学)の「高温高圧でのXAFS」、私、西畑の「高エネルギーXAFSの問題点」、前田裕宣先生(岡山大・理)の「解析時に使用する理論値(Teo, Mckale, FEFF)について実用上どの程度違うのか」について話していただきました。また「XAFSのミステリー」という、ふだん疑問に思いながら解決できていない問題などを議論するコーナーを新しく企画しました。

研究会の日程はほとんど朝から晩まで講演やワークショップなどで詰まっていたのですが、終始和やかな雰囲気で行っていました。特に夕食や懇親会ではお酒も入り、交流に寄与

していたようです。天候にも恵まれ、最終日の早朝には大山寺近辺の散策(迷いながらも)をしました。研究会の予稿集がわずかですが残っていますので、ご希望があれば実費でお渡しいたします。ご連絡ください。

◇茅コンファレンスに参加して

(財)高輝度光科学研究センター

勝部 幸輝

日本学術振興会第33回茅コンファレンスは、「放射光物性とその応用－新世代の放射光に期待するもの－」を主題として、平成7年8月21日から24日まで、兵庫県三原郡南淡町、南淡路ロイヤルホテルで、菅野暁先生(理研・研究顧問)を中心に、植木龍夫先生(理研・主任研究員)菅滋正先生(阪大・教授)が世話人となり、開催されました。

開会に当たり、運営委員長の近角聰信先生から茅コンファレンスの意義についてのお話があり、このコンファレンスがわが国の物性研究推進に大きく貢献してきたことに深く感銘いたしました。また、先生は、講演者に対し、「もち時間の超過は、他人の家に土足で踏み込むようなものだ」と、もち時間厳守を求められました。その所為か、各セッションとも、十分な時間をかけて質問や討論ができ、近角先生のいわれたコンファレンスの目的を達せられたものと思います。

初日は「新世代放射光」と題し、放射光物性の歴史と展望、新世代放射光の特徴およびその利用によって期待される分光研究など、入門的な講演がありました。佐々木泰三先生の妙をえた司会もあり、楽しい雰囲気の中、初歩的なことから、かなり専門的なところまで、参加者は十分に勉強することができ、とくに、学生諸君には好評なセッションでした。

2日目の「磁性を探る」のセッションは、磁性体と光の相互作用の導入的な講演につづき、磁気散乱、スピン偏極光電子分光などの講演があり、いずれも筆者にとっては初めて耳にするものでした。光励起で放出された光電子をスピン状態まで含めて検出し、空の伝導電子体をも含め、より完全な形で固体の電子状態を理解しようとする研究が、基礎、応用の両面から精力的に進められていることを、講演や討論から、筆者は肌で感じることができました。

3日目午前中の「生体を探る」では、他のセッションと同様、先ず「生物学への応用」と題し、高輝度放射光利用による構造生物学研究の進め方および高輝度放射光によってもたらされるであろう新しい方法論などを論じた導入的な講演に始まり、タンパク質の構造構築、タンパク質構造の揺らぎに関する理論的考察などの講演がありました。さらに、このセッションの議論は、夜のランプセッションに引き継がれました。このセッションでは、構造研究に対する方法論の比較、とくに、X線散乱(回折)法と中性子散乱(回折)法の

メリット、デメリットが熱っぽく議論されました。この議論を聞き、筆者は、X線を用いる構造研究者と中性子を用いる構造研究者が、互いにそれらの方法の特徴を生かし、共同研究を行なう必要性を痛感しました。ランプセッションでは、一個のタンパク質分子あるいはドメインからの放射光散乱で分子構造を決めることができるか？が話題になり、多くの参加者から、いろいろな意見やアイデアが披露されました。結論として、将来、挑戦してみる価値がある課題だということになりました。また、タンパク質分子の折れ畳まれ方と分子進化との関係についても話題になり、今日のタンパク質の多様性は、偶然にできた少数の祖先型タンパク質から発散的な進化によってもたらされたものであろうということが、確率論的立場から議論されました。最後は、「神様も、たまには間違っただけのものを作り出すかも？」という珍説で締め括られ、爆笑のうちにランプセッションが閉じられました。

3日目の午後は、「表面を探る」のセッションでした。このセッションでは、新世代放射光の特徴の一つである高輝度円偏光を利用した表面研究の概要や、現在の最先端の研究成果の紹介がありました。筆者は、結晶成長に関する研究や、表面が物質やエネルギーの出入口としてどのように機能しているかを知る研究に利用できないかとの興味で、このセッションに参加しました。しかし、その考えは甘く、この方面の研究手法は素人の手に負えるものではなく、表面の微視的構造を決めることだけを取り上げてみても、私どもが行なっている分子構造決定に比べて桁違いに難しいことがわかりました。それだけに、このセッションは活気にあふれ、熱心な質疑応答がなされていました。

最終日は、「物質科学の新しい話題」で、ナノメートルサイズの一個の粒子の放射光による物性・構造研究の可能性について、レーザー光ポンピングにより変化した光電子スペクトルを観測する新しい研究方法の可能性について、また遷移金属化合物の強相関電子系の理論的実験的研究の最近の動向など、最終日にふさわしい戦略的・挑戦的研究についての講演があり、研究者の夢を大いにかきたたせてくれました。

「淡路学の会」の武田清市氏による特別講演「淡路の風土と歴史」では、淡路島の風土や自然が、どのようにして淡路島独自の歴史をつくりだしていったかについてのお話を聞かせて頂きました。また、エクスカーションとしては、阪神・淡路大震災の野島活断層見学と渦潮見学がありました。

菅野先生をはじめ世話人の先生方に、このような素晴らしいコンファレンスを開いて頂いたことに感謝いたします。次回も是非参加させて頂きたいと思っています。