

## 第5回 X線吸収国際会議 — XAFS Vに参加して

京都教育大学・物理 村田 隆紀

### Report on the 5th International Conference on X-Ray Absorption Fine Structure at Seattle

Takatoshi MURATA

Department of Physics  
Kyoto University of Education

1988年8月21日より26日まで、アメリカ・ワシントン州シアトルのワシントン大学を会場にして開催された標記の会議に参加したので、その概要を簡単に報告したい。

会議の正式名称は 5th International Conference on X-Ray Absorption Fine Structure である。EXAFS や XANES は X線吸収分光による構造解析法としてすっかり定着しているので、もはや内容の説明を必要としないと考えられるが国際会議の歴史はそう古いものではない。1981年3月に英国のダルスベリ研究所の所内行事として行なわれた Study Weekend が最初のもので、米国、ヨーロッパ各国からの参加者はわずかに23名、日程も2日間という小さな集まりであった。翌82年9月にイタリアのフラスカティのPULSが主催して第2回の会議が持たれ、実質的にはこれが最初の本格的な国際会議であった。その後2年ごとにアメリカ・スタンフォード(1984)、フランス、フォントヴロー(1986)の2回の会議を経て今回に至っている。会議の参加者は前回までは会を追うごとに増加して来たが、今回は前回の300人を

下まわる約250人であった。しかし、日本からは前回の17人から28人となり、増加している。

今回の会議は EXAFS の創始者である E. A. Stern, F. W. Lytle, D. Sayers の3名が Co-chairman となって組織した。又会議の略称に XAFS なる言葉をはじめて用い、EXAFS と XANES を総称する呼び名を創出している。

会議の構成は約20のセッションを一部をシングルセッションで行なって、90編の口頭発表がなされた。これにポスターセッションで約260編が発表された。口頭発表のセッションの分類は次のようなものであった。(数字はセッションの数)

Overview, 基礎論(3), 高温超伝導体(2), 表面・界面, 実験技術(2), 無機物質, 混合原子価化合物・酸化物・層状物質, SEXAFS, 生物(2), 半導体・絶縁体, 関連技術, データ解析, 触媒, 合金・非晶体・ガラス・液体, 世界のシンクロトロン光源, ワークショップ

これらの中から主なものをひろって主観的な紹介をすることをお許し頂きたい。

はじめの Overview は理論, 装置, 解析, 軽元

素の SEXAFS の4つの主題についてそれぞれ、J. Rehr, J. Gouton, D. Crozier, K. Baberschke が講演した。私は実験の立場から装置の最近の傾向に興味深く聞いた。講演ではまずSRリングにふれ、高エネルギーリングとそこに設置される挿入光源の利用によって直線偏光や円偏光を得られる時代が来ている事、table-topの小型光源の開発が進んで BESSY や SUPER-ACO と同程度の臨界波長のものが手軽に得られる時代が近いことをのべ、さらにレーザー励起によるプラズマが軟X線領域での時間分解 XAS の測定用光源として期待されることなどを事例を示しながら要領よくまとめた。次に分光技術にふれ、分光器では特に注目すべきデザインは見当たらないが、軟X線領域での多層膜利用が進んでいることや、Si 511や551面という高次面の反射の実用化による高エネルギー XAFS における分解能の改善、非対称カット単結晶の利用やサジッタルフォーカシングの進歩、二枚のミラーによる高次光除去などをとり上げた。又検出器についても固体検出器の広範な利用が Dispersive EXAFS や迅速 EXAFS 実験(モノクロメータのスキャンとデータの取込みを高速化して測定時間をこれまでの1/10程度に縮めた実験)などの新しい実験技術を発展させていることを紹介した。

口頭発表の行われたセッションの中では基礎論(Fundamental Aspects)に最も多くの時間がさかれていた。このことは最近の実験データの質的向上にともなって、従来からの1電子の1回散乱、平面波近似による EXAFS の解析法では不十分で、より精密な理論を必要としている事や、XANES スペクトルからも構造情報を得ようとする試みが盛んなことを反映している。中心的な話題は XANES の多重散乱理論を用いた解析法であり、イタリアの Natoli のグループが多岐にわたる物質での計算結果を積極的に提出していた。日本からは横浜国大の藤川高志氏のグループによる NaCl の Na K-XANES の full multiple scattering に

よる計算結果が発表された。

また、EXAFS の解析においても平面波のかわりに球面波を使った計算が重要であることは前回の会議でも強調されて来たことであるが、今回は「球面波でなければならない。」というところまで進んだようである。ただ、実験の立場からは球面波を使った振幅位相関数の表がなかったため、平面波の結果でがまんしていた、ということがあつた。この点で A. McKale et al. による「球面波 EXAFS の振幅、位相関数の Ab. Initio の計算」と題した発表は大きな意味を持っている(J. Am. Chem. Soc. **110**, 3763 (1988))。McKale はこの計算を原子番号 5~98 (B から Cf まで)の全原子について距離  $R = 2.5, 4.0 \text{ \AA}$  の2つの場合について、振幅、位相関数を  $k = 2.0 \sim 20 \text{ \AA}^{-1}$  にわたって計算した表をつくり、これを収めたフロッピーディスクを会場で希望者に配布した。この表は Teo-Lee の表に代るものである上、原子の種類、 $k$  の範囲共に Teo-Lee のものよりもはるかに広く、 $k$  のきざみも細かくして計算されている。表の使用法は簡単である。振幅と位相の値が2つの  $R$  の値に対して与えられているので、解析しようとする系の  $R$  の値に対してはこれらを内挿か外挿で求め、それらの値をそのまま EXAFS の式に代入して計算できる。実際に使用して見ると、確かに fit の精度は良いようである。(岡山大学理学部、前田裕宜氏による。)このディスクは私も一枚所有していて、コピーは自由との事なので、希望する方があれば配布したいと考えている。

高温超伝導体のセッションが2つ設けられた事は時節柄当然であろう。この物質の XAFS 研究者の主なグループは殆んど口頭発表を行ったようである。私は残念ながら2回共並行して行われた別のセッションに出席したため、これらを聞くことができなかった。

この会議の最大の特徴として、サーキュラーの段階から強調されて来たものは、「XAFS測定とデータ解析の標準化ワークショップ」の報告と

今後の方針についての討論である。本年2月に行われたワークショップの報告とその折にまとめられた勧告は、本誌の前号に大柳宏之氏によって紹介されている。会議では各セクションの責任者による報告と、質疑応答、最終勧告をまとめるまでの今後の方針と具体的活動についての提案などが行われた。勧告の内容の評価は参加者によってさまざまで、例えば実験方法の項目で分光器の波長校正を必ず行い、出来ればエンコーダを用いて角度読みをする事が勧められている個所などで、実験遂行上当然なされるべき事で記すまでもない、と言った強い意見などが出されていた。ワークショップの中で共通のデータを参加した各人が持帰り、それぞれのプログラムで解析した結果を集めて比較するという試みがなされた様だが、この結果についての詳細な比較がなされなかったのは残念である。解析法の標準化を言うならば、信頼に値する解析プログラムの確立を目指すべきであり、そのためには現在それぞれの研究者がまちまちに使っている解析プログラムの質が比較検討されて当然と思うのだが、このあたりはどのような問題意識であったのだろうか。最終報告をまとめる作業と今後の活動については参加者の中から希望者が集まってワーキンググループを継続的に組織してまとめの作業を行なうことと、EXAFS, XANESのデータベースをアメリカにつくり、これに世界各国から通信回線を通してアクセスできるようにする事を目標に体制を整えること、このための資金集めを各国が手分けして行うことなどが決定された。ただこの計画には、大型計算機の購入とデータベース管理のための人件費まで計上されているだけに、今後まだ曲折がある事が予想される。

ポスターセッションは260編が火水木の3日に分けて行われた。ポスター会場が小部屋に分散し目当てのポスターを探すのに苦労した上、説明時間が1時間半で掲示期間が1日だけ、ということで、少々盛況さに欠ける面があった。プログラム構成上はもう少し口頭発表を減らし、ポスターに

十分な時間をとるべきであったと思われる。

会議で印象に残ったことの一つとして、若手研究者の育成という意図がプログラム編集や登壇者の顔ぶれから強く感じられた。この事はこの分野の発展の夢を若い研究者に託したい、というEXAFSの創始者 Sternの強い意志表示であったと思われる。前回のフォントヴロー会議の際に、もう一人の創始者 F. Lytleが感慨をこめて「今はEXAFSの黄金時代」と述べて終りの言葉を述べた。2年後のこの会議で、果して黄金時代がまだ続いているのか、それともピークを過ぎた状況にあるのかは判断の分れるところであろうが、少くともある種の転換期を迎えているというのが私の印象である。つまり、これまでのような形で今後もXAFSを共通項とした国際会議を開くことに意味があるのか、あるとすればどんな形でそれを持つべきかが検討されなければならないと思う。

今回の会議の Proceedings は North Holland社から Physica Bの増刊号として発行される。

次回以降の会議については1990年にイギリスのダルスベリ研究所が主催し、1992年には日本で開くことまでが国際委員会で決定された。日本での開催はかねてから各国の要望が強かったものであるが、いよいよ時期も決定したのでこれから少しづつ準備をはじめなければならない。

なお、Mc Kaleの表は、私のもとにディスクを送って頂ければコピーして返送いたします。ディスクは8インチ又は5インチ2HDのものをお送り下さい。又、返信用切手を貼った返送用の封筒を同封して下さい。宛先は下記の通りです。

〒612 京都市伏見区深草藤森町1

京都教育大学・物理

村田 隆紀