

◁研究会報告▷

XAFS7 国際会議報告

村田 隆紀 (京都教育大学)

第7回X線吸収微細構造国際会議(XAFS7)が、8月23日から29日にかけて神戸市の兵庫県公館と兵庫県民会館を会場として開催された。この会議は日本放射光学会、高輝度光科学研究センター、高エネルギー物理学研究所、理化学研究所の共催、兵庫県、神戸市の後援、日本物理学会、日本化学会、日本応用物理学会、日本分析化学会、日本分光学会、日本結晶学会、近畿化学会の協賛のもとに行われたものである。この会議が日本でやられることが決まったのは1988年に行われた第5回のシアトル会議の場であって、それ以来、黒田晴雄東京大学教授を組織委員長とし、太田俊明現東京大学教授を総幹事として準備が進められてきた。私はこの会議の準備についてプログラム委員会のお世話する立場にあったので、この報告が必ずしも客観的なものにならないことを、あらかじめお断りしておくほうがいだろう。

参加者数は外国からは17ヶ国約100人、国内からは約200人で、全体としては前回のヨーク会議を少し上回る規模であった。

会議のプログラムは、日本のXAFS研究者16人からなるプログラム委員会を組織して作成された。会議を意義あるものにするためには、最近の研究を反映したものを取り上げること、これまで取り上げられなかった主題を紹介すること、第3世代の光源を視界に入れた新しい実験の提案などを含めることが重要であるとの考え方で、プレナリーセッションのを企画し、次の5つのセッションを立てることにした。

1) 基礎理論とスペクトロスコピー

- 2) 磁気 XAFS
- 3) 新しい実験技術
- 4) 関連実験
- 5) XAFS の将来

またこの会議の性格として応用分野が多岐にわたり、参加者の関心や興味が分散しがちであるため、パラレルセッションを主要なものに限定することにし、4日間に12の枠を用意した。基礎から応用へと流れ、しかも平行するセッションの主題がなるべく遠いものにする努力をしたのだが、参加者が全員満足するようにプログラムを組むことは不可能であることを思い知らされました。

会議の内容

時間の都合ですべてのセッションに参加することができなかったため、ごく一部の発表についての報告しかできないが、お許しいただきたい。プログラムではできるだけ新しい顔ぶれによる口頭発表を企画して、ロシアの研究者による発表を企画して、直前まで事務局でビザの取得のための努力をされたのだが、結局不参加でいくつかの部分でプログラムに穴があいてしまったのは残念なことであった。

プレナリーセッション

初日はG. Sawatzkyによる固体や分子の吸収端構造の理論のレビューから始まった。彼はまず吸収端スペクトルをXANESと対比し、これが特に磁気的な構造や相転移、局所的な対称性との関連で重要であることを述べたまとまった講演となっ

ていた。小谷章雄氏は稀土類元素を含む固体の吸収端構造の多体問題的な扱いを紹介した。これらの講演は、これまでの会議では特に中心的な主題として取り上げられたことがないため、今回のプログラム編成の際の目玉として企画されたものであり、その目的は成功したのではなかろうか。J. Rehrは多重散乱を取り入れたEXAFSとXANESの最近の理論の現状を紹介し、計算によるスペクトルの再現がより精密になっていることを示した。これは解析プログラムFEFFプログラムの新しいバージョンに取り入れられているようである。

2日目は磁気 XAFSで、X線吸収スペクトルに反映される磁気的な構造を、偏光を利用した測定によってスピンの向きの違いによる微小変化を検出するという、XAFSの世界では現在最もホットな話題である。今回は特に円偏光の利用による磁性体についての最近の研究が示された。実験的な側面からはG. Schützが、理論的な展開をP. Carraが行った。並河一道氏はX線磁気散乱の磁性研究への応用について発表した。

3日目は新しい実験技術についてのセッションで、まずJ. P. ItiéがLURE DCIのDispersive EXAFS装置を利用した高圧実験のレビューを行い、乾雅祝氏がPFでの高温の液体半導体の実験について発表した。また飯田厚夫氏は空間的な分解能を高めた微小部分のXAFS測定とそのイメージングへの応用について講演した。

4日目は関連実験と称し、X線吸収と関連する新たな実験法についてのセッションで、まず初日に講演予定であったC. T. ChenがDragon分光器を使った高分解能軟X線分光実験の現状と将来についてレビューを行った。続いてA. Hitchcockによる内殻の電子線エネルギー損失とX線吸収の関連と相違点についての詳しいレビューが行われた。C. E. BouldinはX線回折のスポットの強度を波長を変えながら、異常分散スペクトルを観測してこれをEXAFSと関連付ける方法について講演した。この方法はDiffraction Anomalous Fine Structure

(DAFS)と称され、回折法とX線吸収に等価な方法を組み合わせて、サイト選択的な局所構造情報を求めようとする新しい方法である。K. HämäläinenはX線蛍光スペクトルに狭い窓をかけ、励起X線をスキャンして蛍光収率を観測すると、core-holeの寿命による吸収線の自然幅よりも幅の狭いスペクトルが測定できることを示した。これについてはその解釈の妥当性をめぐって多くの議論があるが、新世代光源の利用の主要なテーマとなることは間違いないだろう。

最終日はXAFSの将来として、まずE. Sternが現在の状況と新世代光源を利用した実験の今後の展望をのべたうえ、とくに理論面の展望として藤川高志氏の光学ポテンシャルを用いた振幅減衰因子の原理的な計算を高く評価したのは印象的であった。A. FontaineはESRFのX線吸収実験のプランを述べ、時間分解が現在の1/10~1秒程度から1msまで短くできる見通しや、50ミクロン以下にまで小さく絞りこんだビームを利用して、10数ミクロンのサイズの単結晶試料の高圧下での吸収を測定する計画、直線偏光、円偏光を利用した実験計画など、極めて具体的なプランを示して、利用実験の近いことを印象付けた。大柳宏之氏はSPRING-8での実験計画を述べた。

パラレルセッション

多岐にわたる主題のパラレルセッションのすべてを報告することは不可能なので、ごく一部についての私の印象のみを紹介することに留めたい。

第1日午後の実験技術のセッションでJ. WongによるQuick XAFSの現状についてが目をひいた。この技術はHasylabのR. Frahmによって開発されたものであり、分光器を連続スキャンしながらデータをとりこむもので、XANES領域ならば数秒、EXAFSでも1分以内に測定が終了する高速測定法であり、Dispersive EXAFS法と比較できる程度の時間分解能をもち、88年のシアトル会議から毎回発表されている。今回の発表はこの技術を燃

焼にもなる酸化現象の時間的な変化の測定という具体的な事例に応用した興味深いもので、ビデオを見せながらの発表は人目を引くものであった。彼はこの方法の様々な実例をポスターでも発表していた。この中で、U(ウラン)の L_3 から L_1 端までの約6keVにわたる吸収を、わずか14分で測定した例を提示していたのは驚きであった。このモードでの測定は各地の放射光施設で標準的な測定法として採用されつつあり、日本でもぜひとも早い時期に実現が期待される。

この会議の発表の中では、解析プログラムにJ. RehrのFEFFを利用したものが数多く見られた。日本でもかなりのグループが使用を始めているが、フォートランのソースコードつきで配布されるこのプログラムは利用しやすく、精度もよいと思われるもので、今後ますます利用が広がるものと予想される。このような汎用解析プログラムは日本でも藤川高志氏が開発をされているので、以前から提案されている同一データの解析を異なるプログラムで行う比較があってもよいと考えられる。

ポスターセッション

多岐にわたる応用領域を理論、データ解析、実験技術、XAFS実験装置、乱れた系、磁性物質系、表面界面、生物、触媒、有機・無機物質に分類し、2日に分けて実施された。ポスター数は両日とも約130を数えた。プログラム上は18時30分から20時までの90分があてられていたが、両日ともパラレルセッションの終了した17時ごろからポスター会場に続々と参加者が訪れはじめ、実質2時間以上にわたって熱心に討論が行われた。会場は十分な広さがあり、ところどころにテーブルや椅子も配置されていて、討論をする上にも都合のよいレイアウトがなされていた。ただ、今回もポスターを貼ってあるだけで説明者のいないものが散見されたのは残念なことであった。

国際XAFS学会の設立準備

今回の会議では、この分野の研究者にとっての大きな変革が決定された。それは国際XAFS学会(International X-ray Absorption Fine Structure Society)の発足準備である。これまでこの会議は特に国際組織を持つことなく、会議毎に次の会議の主催国を決め、その主催者がInternational Advisory Committeeを決めるという方式で運営されてきた。しかしこの分野の学問の発展のためには、何かの形で学会組織を作る必要があるとの共通認識が前回のヨーク会議で確認され、その準備が行われてきたのであるが、今回のIACの場で暫定案が作成されてその内容が閉会式で発表された。詳細については、いずれ改めて本誌に報告したいと思っているが、ここではその内容の簡単な紹介をしておくことにする。

まず、学会組織を確立するために、設立綱領(Charter)とその付則(By-laws)の暫定案が作られた。この案は次回のベルリン会議までに各国から意見を集約して修正し、正式に決定することとされた。学会組織とするためには学会員の登録が必要であるが、登録申込書はベルリン会議の第1回の案内と共に各個人に送付されることになっている。さらに学会の評議員(Executive Committee Member)を選挙で選ぶこととし、この選挙もベルリン会議の前に行われるが、それまでの間は暫定的に次のようなメンバーで評議員会を構成して準備に当たることとした。暫定評議員会は地域的なバランスを考慮して選ばれたということである。

D. E. Sayers	(米, 委員長)
A. Fontaine	(仏, 副委員長)
T. Ohta	(日, 事務局長)
E. Stern	(米)
G. Bunker	(米)
J. Penner-Hahn	(米)
J. Wong	(米)
S. Gurman	(英)
K. Baberschke	(独)

S. Mobilio	(伊)
K. Garg	(印)
T. Murata	(日)

学会の活動内容としては、定期的な国際会議の開催、これまで進められてきた標準化のためのワークショップの継続とデータベース確立のための活動、教育カリキュラムの作成、発展国援助などがあげられる。一部の主題については、これまでの活動の中心グループを学会の常置委員会とし、活動を続けることとした。学会の経済的な基盤、運営方法など山積する問題があるのだが、ともかく同好会的なものから一歩進んだ組織を設立することとなったのは新しい発展である。

次回以降の会議

この会議の習慣として、会期中に開かれるIACの場では2回先の会議を決めることになっている。次回については既に前回のヨーク会議で決定済みであり、ベルリン自由大学のK. Baberschke教授を組織委員長として、ベルリンで開催される。今回の会議では1996年の第9回会議がフランスのグルノーブルで開催することも決定された。この時期にはESRFがフルに移働している予定であり、新世代の光源を利用した実験が行われていることを予想しての選択である。

おわりに

会議前夜には低気圧が大阪湾に接近して台風並みの風雨が吹き荒れ、初日の朝には神戸市全域の停電まであり、その夕にレセプション会場で予定していた写真撮影も雨のために中止となるなど、大いに気をもませられたが、天候も徐々に回復し、最終日の六甲山上でのバンケットでは1年に何度かしかないといわれたほどの澄み切った夜景を楽しむことができて、一安心したものである。

最後になったが、ここでこの会議の準備と期間中の運営に当たってこられた現地委員会の尽力について特に記しておきたい。この会議が滞りなく運営されたのは、吉田郷弘京都大学教授を委員長とし、関西地方の研究者がメンバーとなって組織された現地委員会の献身的な努力のおかげである。会場が2ヶ所に分かれ、様々な制約の多い公的な建物を使用しての会議であっただけに、運営上の苦労は大変なものであったと想像されるのだが、大きなトラブルもなく無事に、しかも成功の内に会議を終えることができたのは、現地委員会による長い間の周到な準備と会議期間中の適切な運営によるものであった。

この国際会議の論文集はJJAPの特別号として1993年の早い時期に出版が予定されている。また、この会議で日本人で口頭発表をされた方々の講演の一部については、本誌の次号にトピックスとして掲載されると伺っている。

