

第3回日本放射光学会若手研究会 「水の構造と物性研究の最前線」報告

徳島高（理化学研究所），原田慈久（東京大学），小原真司（JASRI）

第3回放射光学会若手研究会「水の構造と物性研究の最前線 Research Frontier of Structure and Properties of Water」が、2011年8月18日および19日にSPring-8に近い兵庫県姫路市で開催されました。事前登録81名（受付でのカウントによると77名）の方にご参加いただき、盛況であったことをまずはご報告させていただき、この場を借りて関係者の皆様に、感謝の意を表したいと思います（図1）。

放射光学会若手研究会は、若手研究者のリーダーシップの育成、および、サイエンスを通じた新しい人的ネットワークの形成に貢献するとともに、独創的・萌芽的な研究テーマの発掘およびその研究促進を目的として、日本放射光学会が毎年公募しているもので、今年で3回目になります。過去の記録を見ると若手研究会の第1回は「X線ナノ集光技術研究会」、第2回は「顕微分光のフロンティア」という、どちらかといえば手法に立脚した研究会でしたが、今回の研究会のテーマは水という物質を限定し、手法は限定しない形にしました。様々な分光法の中での放射光

の位置づけを知るという意味でも、この試みはうまくいったと思っています。

「水」は、化学（Chemistry）が錬金術（Alchemy）だった時代には世界を構成する要素「エレメント」であり、その後18-19世紀の蒸気機関の時代から続く熱力学的性質の研究、現代のX線や赤外線を利用した研究など、科学の歴史の始まりから今日に至るまで研究が行われている物質です。水をテーマとして選んだ理由は、もちろん研究会代表者が、液体の水を研究している事もありますが、研究会のテーマを水の構造や物性の研究にすることで、赤外線、X線、中性子などを使った実験手法から計算機シミュレーションにいたる幅広い手法による液体や溶液の研究者間の交流を促進し、異なる分野の研究者の間で交流ができれば、という考えがあったからです。

今回の研究会では会場として美術館の講堂を選ばせていただきました。ポスター、チラシ（図2）、学会誌あるいはメーリングリスト等の案内に会場は美術館と書いてあったので、興味をお持ちいただいた方もいらっしゃったかと



図1 初日の夕方、交流会へ移動する直前に姫路市立美術館の正面玄関前で撮影した集合写真。今年は、関西においても電力不足の懸念から交通機関、公共施設等においても、冷房の運転を控えめにする等の対策が行われていました。また、大変暑い時期であったので、熱中症防止のためにCool Bizでご参加くださいというお知らせをさせていただきました。



図2 水の構造をイメージしてデザインした、研究会のポスターとリーフレットの原案図。リーフレットとして机の上に置いたときに、どちらの方向からでも読めるようにと、ほぼ上下対称にデザインしてあります。

思います。これは、水の存在が科学的な側面は勿論のこと、文化的な面においても重要であることを意識したものです。そこで、文化の香りを感じられる施設はないかと考えて会場を探していたら、学術芸術の女神であるミューズ(Muse)がその名前の由来である Museum (博物館, 美術館等々) にたどりついたという訳です。日本の他の都市と同じく、もちろん姫路市にも、美術, 文学, 科学, 歴史をテーマとして多くの Museum があるのですが、姫路市立美術館を選んだ理由は、スケジュールの問題もさることながら、その建物の美しさでした。この美術館の建物は、もともとは大正時代に作られた美術とは無関係なレンガ造りの倉庫なのですが、その後、姫路市の市役所として使われていた時代があり、その経緯から現在もこのレンガ造り美しい建物が姫路城のすぐ横という姫路市の中心部に残っているのです(図3)。

今回の研究会では、特別講演においても文化の香りを感じていただけたと思います。サントリー酒類株式会社ブレンダー室チーフブレンダーの興水精一氏を講師としてお招きし、ウイスキーの醸造に関する御講演をいただきました。また、興水先生は初日の夜に行われた交流会において、熟成の過程においてどのようにウイスキーが変化するかを実際に体感するテイスティングの実践講座を開いてくださいました。ご存知のように醸造されたアルコールと水の”混合系”であるお酒は、歴史的に人類との結びつきが深く、現在も文化的に重要であることは言うまでもありません。

研究会では代表者3名を除くと13名の方に来ていただきご講演いただきました。講演者の方々が利用されている手法を列挙すると、NMR, IR, ラマン散乱, 分子動



図3 研究会初日に姫路市立美術館の正面から撮影した写真。美術館の建物の後ろに保全修理中の姫路城を覆っている素屋根が見えています。姫路城の天守閣の保全修理は平成21年秋から平成26年度まで行われます。

力学計算, レーザーを使った高速分光, X線回折, 中性子線回折, X線小核散乱(SAXS), X線非弾性散乱(IXS), 軟X線吸収分光, 軟X線吸収分光と非常に多様です。そのため、プログラムは、何とかうまくまとめようと思ひ散々苦勞した末に、共通点の多い話が連続しないようにする、つまり、わざとバラバラにするというプログラム(表1)になりましたが、この混沌さも水という特殊な物質ならではの思っております。

初日は、問題提起という意味合いもあって、水の構造をめぐる放射光分光の動向について研究会代表者の一人である原田が発表させていただき、その後、徳島が軟X線発光分光によって見つかった(と主張している?)水の構造などについて発表させていただきました。次にご講演いただいたのは岡山大学の松本正和氏で、分子動力学計算による水のネットワーク構造の研究、特に見ランダムに見えるネットワーク構造を分類し、そのダイナミクスをいかにとらえるかについて、計算機シミュレーションならではの視覚的な表示を駆使しながら解説していただきました。東京農工大学の芦原 聡氏には、振動分光がどのように水のダイナミクスをみているのかについて概説いただき、赤外線レーザーを使った時間分解分光による振動の緩和過程の観測についてご講演いただきました。東京工業大学の塚原剛彦氏には、ナノ空間内に水を閉じ込めるとバルクの水と比べてどのような変化が現れるのか、ナノとマイクロの間の空間サイズ(拡張ナノ空間)の領域をNMRによって調べた研究について、山形大学の天羽優子氏には超臨界アルコールの低振動数ラマン散乱についてラマン散乱の原理からその解析方法まで詳細にお話をいただきました。日本原子力研究開発機構の片山芳則氏には、水の高圧下での構造のふるまいについて放射光X線回折と分子動力学シミュレーションを併用した手法で解析した結果についてご講演いただき、高圧下ではより単純液体に近い構造になるとい

表1 研究会のプログラム

1日目 2011年8月18日

		講演者	所属	タイトル
1	はじめに	徳島 高		
2	講演(25分)	原田慈久	東京大学	水の構造をめぐる放射光分光の趨勢, 海外での研究動向
3	講演(30分)	徳島 高	理化学研究所	水, 溶液の軟 X 線発光分光
4	講演(30分)	松本正和	岡山大学	水のネットワーク構造とダイナミクス
5	講演(30分)	芦原 聡	東京農工大学	中赤外超短パルスで見る水の高速ダイナミクス
6	講演(30分)	塚原剛彦	東京工業大学	NMR によるナノ空間内の水分子構造とダイナミクスに関する研究
7	講演(30分)	天羽優子	山形大学	超臨界アルコールの低振動数ラマン散乱
8	講演(30分)	片山芳則	日本原子力研究開発機構	X 線回折で見る液体の構造と転移—高圧の水の構造解析
9	特別講演(50分)	興水精一	サントリー酒類株式会社	ウイスキーセミナー
10	ポスターセッション			
11	交流会			

2日目 2011年8月19日

		講演者	所属	タイトル
1	講演(30分)	長坂将成	分子科学研究所	水溶液の軟 X 線吸収分光
2	講演(30分)	谷田 肇	京都大学	X 線吸収分光法によるイオンの水和構造
3	講演(30分)	八木一三	技術研究組合 FCCubic, 北海道大学触媒化学研究所センター	表面増強振動分光法で観る電極/溶液界面の水と電極反応への関与
4	講演(30分)	小原真司	高輝度光科学研究センター	回折実験を用いた水の構造解析の現状
5	講演(30分)	László Temleinter	ハンガリー固体物理・光学研究機構	偏極中性子線回折と逆モンテカルロシミュレーションを用いた水の構造解析
6	講演(30分)	梶原行夫	広島大学	水の液体—液体相転移とゆらぎ: SAXS/IXS 測定
7	講演(30分)	今泉公夫	旭化成ケミカルズ株式会社	「あたらしい水の研究」構想
8	講演(30分)	吉田亨次	福岡大学理学部	ナノ細孔中の水の構造とダイナミクス
9	意見交換会	小原真司(司会)	共同研究の可能性, 放射光利用研究の将来展望について意見交換	
10	おわりに	原田慈久		

う新しい知見をご紹介いただきました。

特別講演は、前述したようにサントリー酒類株式会社の興水精一氏をお招きしました。ウイスキーの製造工程とその熟成、熟成中に起きる変化や熟成に使用する樽材成分が及ぼす影響、樽材の種類による違いの研究についての、大学や研究機関における研究とは一味違った話題をお話いただき、質疑応答も大いに盛り上がりました。

ポスターセッションでは、過冷却水、ガスハイドレート、ナノ空間の水、蛋白質の水和構造、アルカリ金属イオン水溶液、固体表面の水、水や溶液の光電子分光、軟 X 線吸収、軟 X 線発光から、分子動力学計算における水の構造と核の量子効果に関する話、大学教育における放射光まで実に多様なテーマで発表していただきました。ポスターセッションでは、「次世代若手支援」と銘打って参加

に要する費用の一部補助させていただいた4名の学生の方にも発表していただきました。

初日の夕刻に行われた交流会は、姫路駅に程近いレストランバーに場所を移して行われました。放射光学会の行事幹事 木村 滋氏 (JASRI) にご挨拶いただき、ビールで乾杯したあと舌が敏感なうちに、興水先生によるウイスキーの熟成を実際に体感するテイスティング実践講座が行われました。モルト0年(つまり熟成させていない物)、ホワイトオークの樽で12年熟成、シェリー樽で12年熟成した物の3種類をお持ちいただいてテイスティングし、その違いを体験しました。交流会では、アルコール混合の不均一性、水の2成分モデルの話、あるいは表面界面の水の議論など、あちこちで研究の話で盛り上がっていました。この交流会でさっそく意気投合し、共同研究を始めた理論

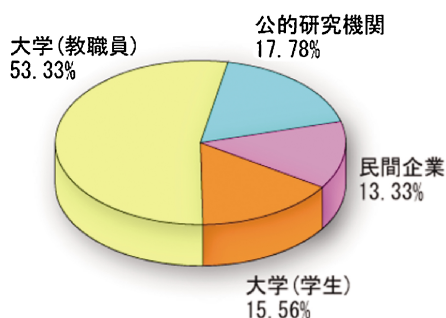
屋さんと実験屋さんがいらっしゃるとい話を、後日聞きまして交流会を企画した甲斐があったと代表者一同喜んでおります。

2日目は、分子科学研究所の長坂将成氏にメタノール水溶液、有機溶媒と水の混合系などについて軟X線吸収分光(XAS)を使った電子状態観測による水素結合の状態や陽イオンの水和構造に関する研究成果を紹介いただき、京都大学の谷田肇氏にX線吸収分光法(XANES, EXAFS)によるイオンの水和構造、水溶液表面、液液界面の研究についてお話いただきました。技術研究組合FC-Cubicの八木一三氏には、燃料電池の研究の観点から電極/溶液界面の水と電極反応について表面増強振動分光法などのレーザーを使った分光法を利用した研究についてお話いただきました。次に、研究会代表者の一人である小原が、X線回折実験を用いた水の構造解析の現状についてSPring-8のビームラインで得られた成果の紹介を交えながら解析方法やその問題点について議論させていただきました。ハンガリー固体物理・光学研究機構のLászló Temleitner(テムレイトナー ラスロー)氏には、偏極中性子線回折とその結果を用いた逆モンテカルロ(RMC)シミュレーションを用いた水の構造解析について、その利点・欠点とRMCシミュレーションの概要および水への適用結果についてお話いただきました。広島大学の梶原行夫氏には、水と熱力学的性質に共通点を持つ液体状態のテルルやセレン物質系をX線小核散乱、X線非弾性散乱によって調べる研究の話から、液体-液体相転移とゆらぎについてお話いただきました。旭化成ケミカルズ株式会社の今泉公夫氏には、水資源とそれにまつわる水処理、過冷却の応用の可能性、生体親和性と物質表面の水についてなど産業界からの視点でのお話、FSBL(フロンティアソフトマター開発専用ビームライン産学連合体)の活動などについてご紹介いただきました。福岡大学理学部の吉田亨次氏には、ナノ細孔中に閉じ込められた水の関連性や中性子散乱による解析や生体分子の水和水との関連性などについてお話いただきました。

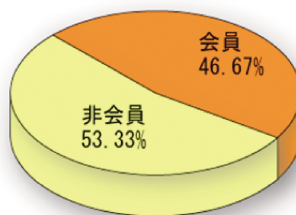
研究会の終わりには、共同研究の可能性、放射光利用研究の将来展望について意見交換会を行いました。原田が研究会で行われた講演の概要を紹介しながら全講演を振り返ったあと、軟X線発光が見つけた水の2状態モデル(液体の水の中に、水素結合が氷に似た様式を持つ物と、水素結合にゆがみや切断部分がありより乱れた状態になっている物の2成分)についてどう思われるか?という問いかけから意見交換会はスタートしました。それに対して、シミュレーション、ラマン、X線回折実験の観点から発言していただきました。2状態モデルに関連して、水の軟X線発光と吸収の結果の解釈に関する議論が行われました。また、現在、決め手となる観測手法に乏しい、界面の非常に厚みの薄い構造である電気2重層を直接見ることが出来ないかどうか、について意見交換がおこなわれました。意見交換会の終わりには、原田から、今後、水の研究会活動を継続させることを参加者の皆さんにお知らせさせていただきました。

研究会の受付にて、アンケート用紙をお渡しし、参加された方にアンケートにお答えいただきました。参加者の57%の方がアンケートにご回答くださいました。ご協力ありがとうございました。アンケートの結果の一部を図4にまとめました。参加者の所属は、大学の教職員の方が53%、学生は16%、研究機関の方が18%、企業に所属されている方は13%となっています。アンケート結果には出ていませんが、水の研究会ということで、その他に数名の一般の方も参加してくださいました。放射光学会の会員かどうかを問う設問の結果を見ると、実に半数以上の方が放射光学会の非会員の方でした。学生や企業に所属されている方の参加が少なくはないこと、放射光学会の会員ではない方が多数参加して下さったことなど、参加者の広がりがあったことをうれしく思っています。参加者の年齢構成ですが、図4一番左のグラフのようになりました。最も多かったのは40-44才、ついで多かったのは25-29才の年齢層の方でした。これ以外のアンケート結果とその考察については、研究会のwebサイト(<http://sites.google>).

設問：所属について教えてください。



設問：放射光学会会員ですか？



設問：参加者の年齢層を調べるために、あなたの年齢を教えてください。

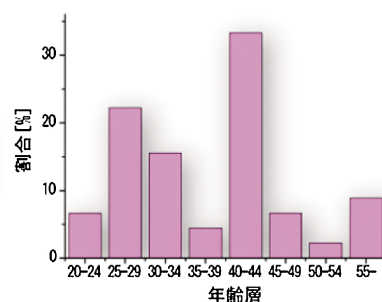


図4 参加者の皆様にご記入いただいたアンケートの結果の一部をまとめた図。左から、所属について、放射光学会の会員か非会員かについて、年齢についてご回答頂いた結果を割合として表示したグラフ。

com/site/researchfrontierofwater/) で公開する予定にしております。

ところで、今回の研究会では新しい試みとして紙媒体の要旨集の代わりに、ユーザー認証を行って限定的に公開することができるwebサイトを使って講演者の方から発表資料、ポスターなどをご提供いただきPDFファイルの形で公開させていただいております。当初、要旨集など冊子の資料を作る予定はなかったのですが、研究会開催の前後にメール、お電話などで資料がほしいというご要望を多数いただきました。そこで、webサイトでの限定公開というやり方を試みました。事前登録された方、サイト公開前にメールで問い合わせを頂いた方にはすでにメールでのお知らせをお送りしています。参加者以外の方で閲覧の希望される方も申請していただければ公開資料を閲覧することが可能ですので、本報告をお読みになって興味をもたれた方は、研究会のwebサイト (<http://sites.google.com/site/researchfrontierofwater/>) の「資料公開について」のフォームからご申請ください。今回の研究会では、代表者の予想よりもかなり多数の皆様にご参加いただいたため、ポスター発表の場所を当初の予定からの変更を余儀なくされるという不手際と、プログラムの予定時間から遅れてしまったことで、ポスターの発表の時間が会場の閉館時刻との兼ね合いで予定よりも短くなるという不手際があり、ポスター発表していただいた方にはご迷惑をおかけしました。そのため、ぜひ多数の皆様にも上記webサイトで見てくださいと思っています。

研究会の開催にあたって、放射光学会事務局の佐藤亜己奈さんには、講演者の方への旅費・宿泊費の支払いや会計で大変お世話になりました。学会の受付は、東京大学事務補佐員の原田美佐さんに、写真の撮影にあたっては、東京大学の永村直佳さんとJASRIの尾原幸治さんにお世話になりました。広島大学平谷研究室および兵庫県立大学本間研究室の学生の方々には、研究会会場でのサポートやwebサイト構築などをお手伝いいただいております。

最後は、僭越ながら今回の若手研究会代表者からのメッセージで本報告を締めくくらせていただきます。

今回、初めて研究会の企画をさせていただいて、非常に良い経験になりました。IT時代的な新しいやり方を取り入れるということで、3人の代表者の間の連絡や打ち合わ

せを、ネット上で情報を常時共有することで極力省いたり、オンライン会議にするなど色々内部的には新しい試みも行ってみましましたので、苦労はありましたが、大変楽しく研究会を企画させていただきました。ところで、若手研究会の参加について、「若手ではないのだけれど参加しても良いか」という問い合わせを何件か頂きました。その際には、「若手が企画する研究会ではあるけれども、若手だけのための研究会ではないので、ぜひ参加してください」、あるいは、「若手のハート（マインド）をおもちであればぜひ参加していただければ」とお答えしました。来年の若手のどなたかの企画による若手研究会にも、皆様、ぜひお気軽にお誘い合わせの上ご参加ください。（徳島高）

若手研究会も今回で3回目となり、前2回の研究会の高い完成度を引き継ぐには場所的にもテーマ的にも難しいかという一抹の不安もありましたが、放射光を軸として他の分光法、理論を積極的にプログラムに取り入れて、自由にディスカッションをするという形式が意外に当たったと思います。欲を言えば、総合討論で、水の構造をめぐる対立する様々な主張の間で意見を戦わせるような激しい展開に持ち込みたかったのですが、そこは私の力量もあって次回に持ち越しとなりました。上で書かれているように、参加して下さった皆様の年齢層、業種の幅の広さからも、水というテーマがいかに広く関心を持たれているかがわかります。これを契機に、水研究の新しい討論の場を引き継ぎ、この若手研究会がそのスタートラインとして位置付けられたらと思います。（原田慈久）

今回の研究会は若手主催ということで若手の年齢を過ぎていることから共同提案者として徳島、原田の後ろに回るという形でやらせていただきました。実際は、両者に任せきりでしたが、今回の研究会で水というテーマにおいていろんな手法を用いた研究をやっている人が集まってこのような研究会が開けたことは非常に有意義であったと思います。また、放射光以外の分野からの参加者が多数あったこと、水をはじめとする不規則系物質の放射光利用の未来についても議論出来る場が持てたことも放射光施設のスタッフとしてうれしく思っております。そして、本研究会をきっかけとして水の研究に関して新たな展開が起こり世界に誇れる新しい研究成果が出ることを期待しております。（小原真司）