

研究会等の報告／予定

第26回 PF シンポジウムのお知らせ

PF シンポジウム実行委員長 小出常晴 (KEK・PF)

第26回 PF シンポジウムを3月24日(火)と25日(水)に開催いたします。

今回のシンポジウムは、例年のシンポジウムに比べて重点の置き方を大分変更いたしました。主な変更点は、サイエンスの議論・討論を従来以上に重視すること、施設報告は単に一方的な報告だけではなく質疑・討論の時間を十分に取ることにすること、ポスター発表を充実すること、所外参加者の交通の便とシンポジウム活性化を考慮してつくば市中心の会場にすること、要旨集・プロシーディングズはシンポジウム当日までに正式版を完成させ一冊で済ませること、等です。これに応じて、招待講演は7件に増え、シンポジウム会場が「エポカルつくば」になり、講演・ポスター要旨の提出期限が僅かに早まり3月2日(月)となりました。

PF シンポジウムは、ユーザーの皆様とPFスタッフが情報と意見を緊密に交換できる良い機会ですので、お誘い合せのうえ是非ご参加下さい。またポスター発表・議論を充実させる基本方針ですので、PFの放射光利用研究及びPF光源・測定器の開発に関する、積極的なポスター発表をお願い申し上げます。なお以下のプログラムは最終版に近いですが、まだ暫定版ですので多少の変更も有り得ることをご承知おき下さい。

主催：放射光科学研究施設, PF 懇談会

会期：2009年3月24日(火)～25日(水)

場所：つくば国際会議場(エポカルつくば)中ホール200
茨城県つくば市竹園2-20-3

参加申し込み方法：

ホームページ (<http://pfwww.kek.jp/pf-sympo/26/>) の参加申込フォームにてお申し込み下さい。

参加費：500円 (PF 懇談会会員の方は無料です。)

懇親会：3月24日(火)

ホテルグランド東雲 (茨城県つくば市小野崎488-1)

会費：6000円 (一般), 3000円 (学生)

プログラム：

【3月24日(火) (1日目)】

09:30- 受付開始

10:00-11:35 施設報告 [座長：小出常晴] (95分)

所長挨拶 (下村 理)

施設長報告 (放射光源研究系報告, 放射光科学第一・二系報告を含む) (若槻壮市)

構造生物学研究センター報告 (加藤龍一)

構造物性センター構想報告 (村上洋一・東北大)

質疑・討論

新課題申請システム (小林克己)

質疑・討論

11:35-12:00 KEK 機構改革構想 [座長：下村 理] (25分)

鈴木厚人機構長

質疑・討論

12:00-13:00 昼食 (60分)

13:00-14:30 招待講演 (30分ずつ)

「放射光粉末X線および中性子回折を用いた無機材料の精密結晶構造解析」

八島正知 (東工大) [座長：沼子千弥 (徳島大)]

「トランスロコン装置による動的なタンパク質膜透過機構」

瀧木 理 (東大医科学研) [座長：栗栖源嗣 (東大)]

「重元素吸着 Ge(111) 表面でのラッシュバ効果」

八田振一郎 (京大) [座長：坂本一之 (千葉大)]

14:30-14:45 休憩 (15分)

14:45-15:50 ERL 報告：コンパクト ERL 及び研究会の報告 [座長：春日俊夫] (65分)

全体進捗状況 (河田 洋)

ERL 放射光源計画に向けた R&D の進捗状況 (坂中章悟)

ERL を利用したサイエンスの展開

(並河一道・学芸大)

質疑・討論

15:50-16:50 PF/PF-AR 光源・加速器の開発状況と今後の整備計画 [座長：前澤秀樹] (60分)

トップアップ運転

(小林幸則, 佐藤政則 (KEK 加速器))

光軸と輝度の安定化 (本田 融)

挿入光源 2008 (山本 樹)

質疑・討論

16:50-17:05 休憩 (15分)

17:05-18:40 PF/PF-AR ビームライン・測定装置の開発状況と整備計画 [座長：野村昌治] (95分)

全体報告 (野村昌治)

新 BL-16A 性能評価・今後の展開 (雨宮健太)

ERATO プロジェクト (腰原伸也・東工大)

新 AR-NE3A の建設 (山田悠介)

BL-1 の建設 (松垣直宏)

AR-NE1A の改造 (亀卦川卓美)

新 BL-13 計画 (間瀬一彦)

19:15-21:15 懇親会 (ホテルグランド東雲)

【3月25日(水) (2日目)】

09:00-10:00 招待講演 (30分ずつ)

「J-PARC におけるパルスミュオン利用—ミュオンスピン回転法 (μ SR) による物性研究の展望—」

門野良典 (KEK ミュオン) [座長：春日俊夫]

「高温超伝導体と高分解能光電子分光の進歩」

高橋 隆 (東北大) [座長：吉田鉄平 (東大)]

10:00-12:00 ポスターセッション (120分)

12:00-13:00 昼食 (60分)



今回初めて PF シンポジウムの会場となるつくば国際会議場（エポカルつくば）

13:00-14:00 招待講演（30分ずつ）

「PF リングにおけるパルス 6 極電磁石を用いた入射システムの開発」

高木宏之（東大物性研） [座長：宮内洋司]

「放射光 X 線構造解析による有機強誘電体の分極起源の解明」

熊井玲児（産総研） [座長：中尾裕則]

14:00-14:30 PF 懇談会総会（30分）

14:30-14:45 休憩（15分）

14:45-15:45 PF の運営についての意見交換（60分）

[座長：三木邦夫・PF 懇談会会長・京大]

PF 光源系と KEK 加速器施設の融合案

PF 懇談会からの提案議題（検討中）

新規課題申請システム

ISAC 報告

生命科学分科会（加藤龍一）

ISAC 本委員会（若槻壯市）

その他

16:35-16:40 閉会の挨拶（若槻壯市）（5分）

16:40 閉会

PF シンポジウムに関するご意見ご要望の連絡先：

小出常晴（tsuneharu.koide@kek.jp）

第 26 回 PF シンポジウム実行委員（五十音順・敬称略）：

五十嵐教之（PF），稲田康宏（PF），○栗栖源嗣（東大），
◎小出常晴（PF），坂本一之（千葉大），沼子千弥（徳島大），
平野馨一（PF），宮内洋司（PF），吉田鉄平（東大），（◎
委員長，○副委員長）

PF 研究会 「蛍光 XAFS 研究の現状と進展」 開催のお知らせ

名古屋大学 VBL 田淵雅夫

蛍光 XAFS 法は XAFS 測定の一手法であるが、X 線を透過しない構造や厚さを持つ試料や、透過法ではスペクトルの質が悪くなる低濃度元素の XAFS 測定に適した測定法として利用されてきた。特に近年では、材料研究や環境に関する研究の中で表面や極端な低濃度元素の測定が行われ、さらに蛍光 X 線を高度に分光することで状態選別した測定等が試みられるようになってきた。

本研究会では、まず第一に、蛍光 X 線を用いた XAFS 測定が一般的にどの様に利用されており、また、先端的にどこまでの測定が試みられているのかを明らかにする。さらに将来には新世代の放射光源として、ERL 導入が計画されていることとも対応して、光源や測定系、測定手法の新展開によって、今後、蛍光 XAFS 測定やその周辺の測定技術がどの様に進展していく可能性があるのかを探ることを目的とする。

会期：2009 年 3 月 10 日（火）～ 3 月 11 日（水）

会場：高エネルギー加速器研究機構

研究交流センター交流ラウンジ 1

提案者：田淵雅夫（名大），野村昌治（KEK-PF）

世話人：稲田康宏（KEK-PF）

プログラム（暫定版）

【3 月 10 日（火）】 14:30～17:25

14:30 開会

14:35 生物に高濃度に濃縮された元素に対する蛍光 XAFS 測定（徳島大 沼子千弥）

15:00 XAFS を用いた焼却飛灰上のダイオキシン類生成機構の解明（京大 高岡昌輝）

15:25 階層構造を有するナノ粒子の原子相関 - その場、試料作製・蛍光 EXAFS 測定 -
（富山大 池本弘之）

15:50 休憩

16:10 InGaN および MgZnO 薄膜の偏光 XAFS
（弘前大 宮永崇史）

16:35 半導体材料中不純物元素の蛍光 XAFS 測定
（名大 VBL 田淵雅夫）

17:00 金属材料表面の XAFS 測定
（新日本製鐵（株）先端技術研 木村正雄）

17:25 休憩

17:45 懇親会

【3 月 11 日（水）】 9:00～15:10

09:00 PF の ERL 計画（仮）（KEK-PF 河田 洋）

09:40 偏光全反射蛍光 XAFS による表面高分散金属種の研究と ERL への期待
（北大触媒化学研究セ 朝倉清高）

- 10:05 休憩
 10:20 ピクセルアレイ検出器 (PAD) でみる新しい蛍光 XAS の世界 (産総研光技術 大柳宏之)
 10:55 高エネルギー分解能蛍光分光により状態選別した XAFS 測定 (千葉大 泉 康雄)
 11:20 担持触媒の XAFS による構造解析 - 蛍光法と透過法の比較 (千葉大 原 孝佳)
 11:45 in situ XAFS 測定による燃料電池／リチウムイオン 2 次電池の反応解析 (京大 内本喜晴)
 12:10 休憩
 13:30 考古学への XAFS の応用 (東理大 中井 泉)
 13:55 放射光蛍光 X 線分析による環境浄化植物における重金属蓄積機構の解明 (東理大 保倉明子)
 14:20 下水道管渠内堆積物中重金属の存在形態評価への蛍光 XAFS の適用 (東大 小島 啓輔)
 14:45 蛍光分光 XAFS 法による地球化学試料中の微量元素の高感度状態分析 (広大 高橋嘉夫)
 15:10 閉会

PF 研究会 「PF リングのトップアップ・シングルバンチ 運転利用研究と今後の発展について」 の報告

上智大理工 東 善郎
 放射光科学第一研究系 伊藤健二

標記の PF 研究会が 2008 年 11 月 7 日 (金), 8 日 (土) の二日間にわたり高エネルギー加速器研究機構国際交流センター交流ラウンジで開催されました。42 名の研究者が参加し, PF シングルバンチに関連した 18 件の口頭発表が行われ, 熱心な検討・議論が行われました。

フォトンファクトリーにおいて, シングルバンチ運転およびその利用に関する研究会は, 今回が初めてではなく, 今までに以下に示すように過去 3 回開かれています。

1981 年 5 月 29 日「SOR パルス特性の利用」

(籾野嘉彦, 太田俊明)

1990 年 10 月 19 日「単バンチ運転による SR パルスの

利用」(籾野嘉彦, 田中健一郎)

1996 年 11 月 26 日「放射光実験施設における単バンチ運転の将来」(三橋利行, 岸本俊二)

最初の研究会は, PF 2.5 GeV リング稼動の前であり, すでにユーザー側からシングルバンチに対する期待が大きかったことが伺えます。その後, 光源系を中心としてシングルバンチ運転実現に向けて多くの努力が行われ, 1990 年 4 月 16 - 18 日初めてのシングルバンチ営業運転が行われました。当時の研究会で行われた光源系からのシングルバンチ運転現状報告では, シングルバンチの純度, 寿命, 安定性など数々の問題点が挙げられています。しかし, 本報告集にもあるように最近のシングルバンチ運転では, トッ



研究会の様子

プアップモードにおける連続入射の実現によって, 1 日 2 回の PF-AR 入射時を除けば蓄積電流 50 mA \pm 0.1%, 純度 10^{-6} 台が実現されています。このように PF 2.5 GeV リングのシングルバンチ運転は世界的に見ても最高レベルの性能に到達しています。

シングルバンチを利用した研究に関しては, 上述した研究会の報告集そして今回の研究会にも見られるように様々な展開が見られます。しかしながら, シングルバンチ利用者への風当たりはそれほど快適なものとはなっていません。シングルバンチモードでの運転時でさえ, シングルバンチを積極的に利用しているのは 6 ~ 7 ユーザーグループであり, 年間 3 週間のシングルバンチモードを削減する動きも見受けられます。2008 年 3 月 4, 5 日に行われた PF 国際科学諮問委員会による報告書の中でシングルバンチに運転について, “It was clear that the fraction of single bunch time should be assigned on the basis of scientific excellence. ISAC does recognize that PF offers unique scientific capabilities in this area. The performance of experiments carried out during this time should be carefully examined and benchmarked.” のようなコメントを受けています。これに呼応して, これまで行われてきた研究成果をまとめ, 新しい研究計画を含む今後の発展性について議論するために本 PF 研究会「PF リングのトップアップ・シングルバンチ運転利用研究と今後の発展について」を企画しました。研究会では, PF シングルバンチ運転を利用した原子分子科学, 表面科学および検出器開発に関する研究成果が発表されました。また, 新たな研究計画として, 磁化ダイナミクスの直接観察, 表面化学反応のリアルタイム観察, レーザー+軟 X 線放射光による時分割分光などが提案されました。このように, PF シングルバンチユーザーは少数ですが, その研究は着実な成果を上げさらに研究課題も増加する傾向にあり, 今後もシングルバンチ運転が定常的に行われることが重要であると考えられます。今回, 光源系スタッフによる発表のように, 例えばリング半周は通常のマルチバンチ蓄積, 空いた半周の中央に 1 バンチ蓄積する FILL の実用化を進めることも重要であります。マルチバンチには 400 mA 蓄積可能で, 多くのマルチバンチユーザーと共存できます。必ずしもすべてのシングルバンチ利用実験がこの FILL で測定を

行えるわけではありませんが、光チョッパーの導入により、実質的にシングルバンチ運転時間を増加させ、PF シングルバンチ利用研究の発展に繋げることができると考えています。最後に本研究会に参加していただいたユーザー各位、またサポートしていただいた方々に感謝します。

**先端研究施設共用イノベーション創出事業
(産業戦略利用) 講習会
「放射光を用いた結晶評価の新展開
～X線トポグラフィーによる半導体評価
を中心として～」の報告**

放射光科学第二研究系 平野 馨一
先端研究施設共用イノベーション創出事業 吉村 順一
先端研究施設共用イノベーション創出事業 阿刀田伸史
放射光科学第一研究系 野村 昌治

昨年(2008)の11月27日(木)にKEKの4号館2階輪講室1において、先端研究施設共用イノベーション創出事業(産業戦略利用)講習会「放射光を用いた結晶評価の新展開～X線トポグラフィーによる半導体評価を中心として～」が開催されました。PFでは現在、文部科学省の委託事業「先端研究施設共用イノベーション創出事業(産業戦略利用)」の一環として「フォトンファクトリーの戦略的産業利用」事業を進めています。この事業はPFがこれまで培ってきた放射光による材料評価・解析技術を企業の研究開発に活用していただくことにより、戦略的技術課題にブレークスルーをもたらすことを目指しています。この目的を達成するには放射光の魅力や威力を多くの企業研究者に知っていただくことがまず必要であり、そのために昨年1月にXAFSに関する講習会、2回目にあたる今回はX線トポグラフィーを中心とした講習会を開催しました。当初は参加者が集まるかどうか危ぶまれましたが、結果的に29名の参加者があり、そのうち14名が企業関係者でした(13社の企業が参加)。講習会のために用意した部屋では手狭に感じるほどの予想を上回る参加者があり、放射光利用に興味を寄せる企業関係者の多さに驚かされました。

講習会はPFの野村の挨拶から始まり(写真参照)、次いでPFの阿刀田より事業に関する説明がありました。その後、PF・平野がPhoton Factoryの概要に関する説明と、X線トポグラフィー実験等に利用されているビームラインBL-15Cの紹介を行いました。午前最後の講演では、X線トポグラフィーにあまり馴染みのない人のために、「X線トポグラフィーの基礎」というタイトルでPF・吉村が講演を行いました。この道一筋数十年という吉村の講演は非常に密度が濃く、X線トポグラフィーの奥深さがひしひしと感じられました。

午後の部では、実際に放射光を使って第一線で活躍している研究者の方々に、放射光を用いた結晶評価の現状と展望について御講演いただきました。まず名大・秋本氏が「半



講習会の様子

導体表面界面のひずみと応力」と題して講演を行い、Si結晶やSiCエピ層のX線トポグラフィーによる観察結果について、またSiO₂/Si界面や高誘電率絶縁薄膜(High-k膜)のX線回折強度測定による歪み・応力解析結果について紹介して下さいました。続いて、産総研の山口氏が「パワーデバイス材料研究におけるX線トポグラフの利用」というタイトルで講演されました。近年、パワーエレクトロニクス用デバイスの材料としてSiC結晶などのワイドギャップ半導体が注目を集めています。X線トポグラフィーはSiC基板やエピ層内の欠陥を観察するのに非常に有用な方法であることが実験結果と共に示されました。3番目に阪大・志村氏が「半導体薄膜からのX線回折とトポグラフィー」と題して講演を行い、薄膜結晶からのX線回折の基礎について分かりやすく説明した後、放射光X線トポグラフィーによる歪みSiウェーハの評価例を示されました。最後に、九州シンクロトン光研究センター(佐賀LS)の隅谷氏が佐賀LSにおけるX線トポグラフィー研究の現状について紹介されました。佐賀LSは放射光の産業利用を目指して設立された施設だけあって、そこでの様々な取り組みは今後のPFにおける産業利用を考える上で大いに参考になるという印象を受けました。

講習会の後、BL-15CでX線トポグラフィー実験のデモンストレーションが行われました。こちらでも予想を上回る多数の見学者があり、BL-15C周辺に人が溢れる結果となりました。実験内容はX線CCDカメラでSiC結晶の欠陥を観察するという初歩的なものでしたが、モニター画面を食い入るように見つめる見学者たちの真剣な姿には、主催者である私たちの方が居住まいを正される思いがしました。

いま講習会を振り返って一番感慨深いのは、放射光の産業利用に関心を寄せる企業研究者の多さです。今までPFは主に大学関係の研究支援に力を入れてきたわけですが、産業界への取り組みにやや不足していたように感じられます。今回の講習会から、放射光に対する産業界のニーズはかなりあることがわかりましたので、今後、産業界への広報活動や啓蒙活動にさらに力を入れたいと思います。

PF 研究会

「高分解能角度分解光電子分光研究と
将来展望」の報告

東京大学大学院理学系研究科 藤森 淳

2008年12月17日, 18日, KEK4号館セミナーホールにおいて標記PF研究会が開催された。今回は, 高橋隆氏(東北大理), 尾嶋正治氏(東大工)と筆者が提案者として, 小野寛太氏(物構研PF)が世話人として企画・実行したもので, 活躍中の若手を中心とする全国の角度分解光電子分光(ARPES)研究者に集まっていた, 行なった。参加者は58名で, 学生, ポスドクによる16件のポスター発表も行われ, 盛況なPF研究会となった。

本研究会開催の背景にあるPFの状況は次の通りである。ARPES専用実験ステーションBL-28Aの共同利用供用から2年が経過し, 成果が蓄積されつつある。一方, 偏向電磁石ビームラインBL-1CにおけるARPESは, 薄膜のin situ ARPESなどで大きな成果を上げながらも, ビームライン再構築により, 今後の展開の検討が求められている。これらを背景に本研究会では, 国内のARPES研究者が一堂に会し, 最近の研究について議論するとともに, 施設間での相互交流をはかることを目的とした。また, ARPES利用研究の将来展望についても議論を行った。研究会では, PFで展開されているARPESを利用した研究成果のまとめと今後の展望および, 他の施設を用いているARPES研究者によるARPES研究成果が講演で紹介された。また, 国内の施設間での情報交換も行われた。プログラムは以下の通りである。

【12月17日(水)】

13:00「はじめに」藤森 淳(東大理)

セッション1(座長:藤森 淳)

13:10「PF BL-28における角度分解光電子分光」

小野寛太(物構研)

13:30「高分解能角度分解光電子分光による金属元素のフェルミオロジー」島田賢也(広大放射光)

14:00「機能性薄膜の放射光角度分解光電子分光」

横谷尚睦(岡山大理)

セッション2(座長:尾嶋正治)

14:50「モット・ハバード系酸化物の角度分解光電子分光」吉田鉄平(東大理)

15:20「SPRING-8 BL17SUにおける3次元軟X線角度分解光電子分光」江口律子(理研)

15:50「In-situ 角度分解光電子分光による $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ 薄膜の電子状態」近松 彰(東大理)

16:20「Mn酸化物の光電子スペクトルの温度変化」

齋藤智彦(理科大理)

16:40 ポスターセッション

18:10 懇親会(交流ラウンジ2)

【12月18日(木)】

セッション3(座長:高橋 隆)

09:00「重い電子系の共鳴角度分解光電子分光」

木村真一(分子研)

09:30「重い電子系物質の軟X線3次元角度分解光電子分光」関山 明(阪大基礎工)

10:00「強相関f電子系化合物に対する角度分解光電子分光」藤森伸一(原子力機構)

セッション4(座長:那須奎一郎)

10:50「銅酸化物高温超伝導体の高分解能角度分解光電子分光」中山耕輔(東北大理)

11:20「HiSORにおける高温超伝導物質の低エネルギー励起角度分解光電子分光」井野明洋(広大理)

11:50「高分解能角度分解光電子分光を用いたBi系超伝導における酸素同位体効果の精密検証の現状と将来展望」相浦義弘(産総研)

セッション5(座長:久保田正人)

13:20「真空紫外レーザーを用いた高分解能角度分解光電子分光」石坂香子(東大物性研)

13:50「鉄ニクタイト超伝導体の高分解能角度分解光電子分光」相馬清吾(東北大理)

14:10「酸化物表面の古くて新しい諸問題」

小澤健一(東工大理)

セッション6(座長:小野寛太)

14:50「高分解能スピン分解型光電子分光による表面Rashba効果研究の新展開」奥田太一(東大物性研)

15:20「重元素吸着半導体表面のRashba効果」

坂本一之(千葉大融合)

15:50「グラファイト上のカリウム吸着系の角度分解光電子分光」鎌倉 望(物構研)

16:10「まとめ」高橋 隆(東北大理)

研究会は初日まず, 筆者による背景説明に続き, 小野氏(物構研)がBL-28建設の経緯と現状について紹介した。引き続き行われた講演・議論がカバーするトピックは, 強相関電子系を中心に, 遷移金属酸化物, 重い電子系, 超伝導体(銅酸化物, 鉄ニクタイト, ダイヤモンド), Rashba効果, 表面準位, 表面吸着系と, 非常に多岐にわたった。近年のARPESの発展により, 物性科学の多くの分野でARPESを用いた研究が重要な役目を果たしているので, それぞれの分野の学会・研究会でARPESの講演を聴く機会が多い。しかし, 今回のようにARPESの研究者が一堂に集まって, トピックを横断してARPESの実験手法, ARPESに関連する物理について深く専門的な議論ができたのは貴重であった。

また, ARPES実験が行われた施設も, PFの他に, SPRING-8, HiSOR, UVSORと多岐にわたっており, 実験室で希ガス放電管, 紫外レーザーを用いた実験も紹介された。BL-28AのARPESステーションは, ARPESのなかでも最も使いやすい光エネルギー領域をカバーし, 標準的なARPES実験に最適なステーションとなっている。一方で,



研究会の様子

Hi-SOR や UVSOR の低エネルギー光子やレーザー光を用いた超高分解能 ARPES 実験, SPring-8 の軟 X 線を用いたバルク敏感 ARPES はそれぞれの目的に適しており, 互いに相補的な役割を担っている。同じ試料を複数の施設を用いて多面的に研究することで良い成果を挙げられることもある一方で, 試料に適した施設 (f 電子系は高いエネルギーの光, 酸化物は低いエネルギーの光) を用いなければ効率の悪い場合もある。本研究会はこのことを明らかにするのも役立つ, 国内の ARPES 研究者の相互利用促進の場にもなったと考えている。

大部分の講演は, もちろん物質研究を主題としたものであったが, 測定技術, 解析方法にも重点を置いた講演もいくつか行われた。なかでも, 相浦氏 (産総研) の講演では, 銅酸化物高温超伝導体におけるアイソトープ効果を研究するために, いかに測定精度の極限を追求するかが主題となっていた。実験技術の発展, 特に分解能の向上がきっかけとなって, 物性研究における新しい知見が次々と得られるようになることは, 近年の ARPES の発展の歴史そのものであるが, 物性研究側からの要請が ARPES 実験技術の進展を促すという実例が (本当は, それが学術研究本来の姿ではあるが) 興味深かった。

ポスターセッションでは, 若い人たちの間で活発な議論が行われ, 大きな盛り上がりを見せた。続く懇親会は交流ラウンジで行われた。PF スタッフに準備いただいた手作り感溢れる懇親会で, 尾嶋氏 (東大工) の若い研究者を励ますスピーチに続いて, 和やかな歓談の場となった。ポスターセッションに引き続いて大勢の若い人の熱気が溢れ, 遅くまで歓談が続いていた。

最後のセッションでの高橋氏 (東北大) の「まとめ」は, 高橋氏が 20 年前に測定した世界最初の高温超伝導体の ARPES スペクトルを例にとり, 若い研究者に失敗を恐れないチャレンジ精神を説いた。「まとめ」に続いて最優秀ポスター賞の授賞式が行われた。賞は提案者 3 人が 3 名連記で投票し, 満票を獲得した宮崎秀俊氏 (名大工), 安斎太陽氏 (広大理) の 2 名に差し上げた。賞状とともに授与された「2009 年高エネ研カレンダー」は, ノーベル賞

を授賞した小林先生が表紙に載ったもので, 2 氏とも大変喜んでいて, これを励みにして, 今後の益々のご活躍を期待したい。

最後に, 本研究会の提案者と世話人, 世話人をサポートしてくれた PF スタッフの方々, 会場設営・タイムキーパーを手伝ってくれた学生諸氏, 事務手続き・受付・コーヒークレーク等を準備いただいた PF 秘書の方々のご尽力に感謝したい。

PF 研究会 「第 4 回粉末回折法討論会： 粉末法の新しい技術と応用」の報告

名工大セラミックス基盤工学研究センター 井田 隆
放射光科学第二研究系 中尾朗子

2008 年 12 月 25 日～26 日の 2 日間にわたり, 高エネルギー加速器研究機構国際国流センター・交流ラウンジにおいて PF 研究会「第 4 回粉末回折法討論会：粉末法の新しい技術と応用」を開催いたしました。この討論会は粉末回折に関する方法論およびその応用に主題を限定する国内で唯一の討論会であり, 今回は 1997 年 12 月, 2001 年 5 月, 2004 年 12 月に引き続いて 第 4 回目の開催となりました。粉末 X 線回折法は実用材料の分析技術として広く普及しており, 既に確立された完成度が高い技術であるという面もあるのですが, 環境・エネルギー・情報技術関連材料の高い機能性や信頼性を確保したり, 実用的な材料製造プロセスを低環境負荷・省資源化することについての社会的な要請に呼応して, 詳細な構造情報を正確に効率良く取得するための先進性がさらに強く求められています。本研究会では, 前回討論会を開催してから 4 年間の間に開発された新しい手法や応用面での発展を見直し, 材料・物性・構造科学分野における粉末回折法利用のさらなる発展の端緒とすべく企画されました。年末の多忙な時期にも関わらず, 講演者を含めて約 60 名の方々の参加をいただき, 下記のプログラムに沿って活発な討論が行われました。

プログラム

【12 月 25 日 (木)】

13:00 開会の挨拶

13:03 「新構造精密化・三次元可視化システム RIETAN-FP・VESTA」泉富士夫 (物材機構), 門馬綱一 (東北大)

13:35 「2H, 3R 型 Na-D₂O-CoO₂ 系超伝導物質の中性子粉末回折パターンのシミュレーション」小野田みづ子, 高田和典, 佐々木高義 (物材機構)

14:02 「新規ネットワーク錯体材料の開発と粉末 X 線構造解析」河野正規 (東大)

14:29 「高輝度放射光によるシリカメソ多孔体の構造とガス吸着過程の観測」久保田佳基 (大阪府立大)

(休憩)

15:04 「粉末法における Charge Flipping 法を用いた構造解析」池田卓史 (産総研)

15:31 「静電ポテンシャルイメージングによる分子間相互作用の可視化」加藤健一 (理研), 田中宏志 (島根大), 高田昌樹 (理研)

15:58 「SPring-8 BL15XU IP 粉末 X 線回折カメラの評価」田中雅彦 (物材機構)

16:25 「Powder Diffraction at BL-20B - Where we have been and where we are going」G. Foran (ANBF)

(休憩)

17:00 「高分解能粉末 X 線回折データを用いた電子密度分布解析」西堀英治, 青柳 忍, 澤 博 (名大)

17:30 「次世代リチウムイオン電池材料の構造と反応機構」山田淳夫 (東工大)

17:57 「イオン伝導体の拡散経路と触媒の電子・核密度解析」八島正知 (東工大)

(懇親会)

【12月26日(金)】

08:20 「近年のタンパク質粉末 X 線解析の発展状況」三浦 圭子 (JASRI/SPring-8)

08:50 「粉末 X 線結晶構造解析で解明する医薬品化合物の物性」藤井孝太郎, 植草秀裕 (東工大), 井戸田尚子, 長谷川玄, 米持悦生, 寺田勝英 (東邦大)

09:17 「原子対相関関数 (PDF) を用いた結晶性物質の局所構造解析」樹神克明 (原子力機構), 飯久保智 (原子力機構, 現東北大 WPI)

09:44 「新しい計数型 X 線時分割画像検出器と粉末法への応用」谷森 達 (京大)

10:19 「高強度・高分解能多連結晶アナライザー」虎谷秀穂 ((株)リガク)

10:46 「動き出した J-PARC/MLF とパルス中性子粉末回折装置」神山 崇 (KEK), 石垣 徹 (茨城大), 星川晃範 (茨城大), 鳥居周輝 (KEK), 米村雅雄 (茨城大), 森嶋隆裕 (KEK), 大石亮子 (KEK), 岩瀬謙二 (茨城大), ディア (茨城大), 森 一広 (京大), 鬼柳亮嗣 (東北大)

11:13 「粉末回折法における粒子統計の評価とその応用」井田 隆, 後藤大士, 大矢哲久, 日比野寿 (名工大)

11:40 まとめ

粉末回折データを用いた構造解析あるいは電子密度・核密度解析における最近の進歩のうちで、最大エントロピー法 (MEM) と 3 次元可視化技術の応用は特に顕著なものです。国内で広く使われているリートベルト解析ソフトウェア RIETAN の作者である泉氏による講演では、最新の構造解析ソフトウェア RIETAN-FP と 3 次元可視化ソフトウェア VESTA, さらに電子状態計算などとの連携による先進的な構造解析システムの詳細が紹介されました。MEM の応用例として、メソ細孔への吸着分子の可視化 (久保田氏), 静電ポテンシャルのイメージングによる相互作



開会の挨拶をする著者

用の可視化 (加藤氏), 電池やセンサの材料として重要なイオン伝導体におけるイオンの拡散経路の可視化 (山田氏, 八島氏) などが示されました。これらはいずれも、従来の伝統的な構造解析技術では困難な解析が実現されている例であり、MEM と 3 次元可視化技術が、粉末回折法による構造研究においてさらに重要な位置を占めるようになってきていることがわかります。また、SPring-8 での深い軌道放射光回折実験の結果に基づいて、理論計算の妥当性を検証しうるレベルで精密な電子密度解析を実施した例について西堀氏から報告がありました。

積層不整を含む物質の構造研究では、原子配列のパターンを確率的に記述しなければならない独特の難しさがありますが、小野田氏の発表では複雑な積層不整パターンを高次の行列により正確にモデル化し、実測の粉末回折図形を極めて忠実に再現した例が示されました。一見奇妙な粉末回折図形が合理的なモデルで説明できることは、専門外の研究者にとっても刺激的であり、将来はさらにこのような解析法が活用されることが期待されます。

主に軌道放射光を利用することにより、粉末回折法が適用される物質系の範囲は拡大しつつあります。本研究会では、ネットワーク型錯体材料 (河野氏) や低分子量有機化合物 (藤井氏) への粉末回折法の適用例が報告されました。さらに、粉末回折法をタンパク質の構造解析に適用する試みについて三浦氏から報告がありましたが、現状では ESRF や APS における研究の進展が顕著であり、日本国内でのタンパク質粉末回折研究をさらに進展させる必要があることは強く意識すべき課題になっていると思われます。

Charge Flipping 法は、2004 年に Oszlanlyi らにより初めて提案された回折データの解析手法ですが、単純なアルゴリズムで位相問題を解決できる新しい手法として注目を集めています。池田氏の講演では Charge Flipping 法の概念から最近の展開、特に粉末回折データに適用した例について詳しく解説していただきました。明解な原理に基づく強力な方法であり、未知構造解析の分野では今後確実に応用が広がっていくものと思われます。

粉末回折測定装置開発における最近のトピックスとしては、SPring-8 BL15XU においてアンジュレータ光源と大半

径イメージングプレートの組み合わせによる高分解能化（田中氏）、新しい計数型X線時分割画像検出器の応用（谷森氏）、新しい設計思想による多連結晶アナライザと一次元検出器によるハイスループット化（虎谷氏）についての報告がありました。将来の軌道放射光粉末回折計の高機能化にとってはいずれも重要な技術であると思われる、さらに詳細について検討する必要があります。

PFのオーストラリアビームライン（ANBF）は1993年に稼働を開始し、15年にわたって主にオーストラリアの研究者に軌道放射光利用実験のための環境を提供してきましたが、2008年からは、メルボルンに設立されたオーストラリアの軌道放射光施設が本格的に供用を始めています。今年は節目の年として、G. Foran氏から粉末回折を含むANBFでの軌道放射光利用研究を解説していただきました。

樹神氏からは中性子回折データと原子対相関関数（PDF）を利用して、局所的な構造秩序を解析した例について報告がありました。PDF解析のためには特に空間分解能の高い中性子回折データの利用が効果的だと思われませんが、実用材料中の10 Åから100 Å程度の比較的短距離の構造秩序を解析するために優れた方法であり、この手法はさらに将来応用が広がっていくことが予想されます。

2008年は東海村の大強度陽子加速器施設（J-PARC）で初めて陽子ビームが取り出され、6月には超高分解能粉末中性子回折装置（SuperHRPD）で、世界最高の分解能を達成したことが発表されています。本研究会ではSuperHRPDを含むJ-PARCのパルス中性子粉末回折装置について神山氏から報告がありました。今後は先進的な中性子粉末回折法が最先端の物質構造科学研究へ展開されることが期待されています。

粉末回折法では、通常は試料中に回折条件を満たす結晶粒が十分な個数存在することを前提としますが、通常の測定条件でも回折結晶粒が有限であることに由来する統計的な変動が観測される場合が珍しくなく、結晶性の高い試料で高分解能測定を実施した場合には、これが特に顕著に現れます。井田は粉末回折法によって収集された回折強度データが含む結晶粒の配向に由来する統計的な変動を実験的に調査した結果と、定量的に評価された統計的な変動の情報を材料評価に応用する新しい方法を提案しました。

最後にまとめとして、PFの河田氏から粉末回折法の新しい方法論の応用研究への展開について提言がありました。本研究会の参加者の多くは広い研究分野で実際に粉末回折法を利用するユーザであり、軌道放射光や関連する先進的な技術をさらに効果的に利用して研究を活性化してほしいことが強調されました。

今回の研究会では、粉末回折法の応用研究よりも方法論研究そのものに重点をおいた面がありますが、多くの有意義な研究成果が報告され、この4年間で着実に方法論研究が進展していることが明確になったと思います。反面多くの重要な応用研究を取り上げることができなかったことは反省すべきかもしれません。いずれにしても今後も定

期的にこのような討論会を開催することが必要であることを実感しています。

最後に本討論会の開催について多大な援助をいただいたKEK-PFの皆さん、多忙な中参加をいただいた参加者の皆さん、討論会の実行委員としてプログラム作成や運営に協力をいただいた東工大八島先生、植草先生、大阪府大石橋さん、物材機構田中さん、KEK神山先生、また参加者への案内や受付その他のサポートについて協力をいただいたPF秘書室の皆さんにこの場をお借りして深く感謝申し上げます。