

### PF 研究会「次世代放射光源で期待される XAFS を活用したサイエンス」開催報告

北海道大学触媒化学研究センター 朝倉清高  
名古屋大学シンクロトロン光研究センター 田淵雅夫  
放射光科学第二研究系 木村正雄, 阿部 仁

7/11(Fri)-12(Sat)の2日間, 4号館 1F セミナーホールにて, PF 研究会「次世代放射光源で期待される XAFS を活用したサイエンス」を開催しました。台風の進路, 影響をはらはらと見守っていましたが, 両日ともに晴天に恵まれ, 皆様のお陰で熱い研究会となりました。以下では研究会での御講演内容を紹介します。また両日それぞれの最後に時間をとって行われた, XAFS 分野に望まれる次期光源に関する議論を最後にまとめて報告します。

佃先生(東大)より, 金クラスター, 特に超原子分子の概念やその精密合成法の開発についてご講演頂きました。続いて近藤先生(慶應大)からは触媒反応機構の解明のための in situ NEXAFS の高速化, AP (Ambient Pressure) -NEXAFS の開発, 電気化学 XAFS による operando 観測についてご講演頂き, 今後の課題として, よりリアルな条件での operando 観測, 時空間分解能をもった operando 観測, 多チャンネル同時観測, の必要性を示して頂きました。村尾先生(新日鐵住金)からは, 製鉄・製鋼プロセスという高温かつ非平衡反応系におけるカルシウムフェライトの還元挙動の解明を中心にご講演頂きました。鳥本先生(名大)からはイオン液体・金属スパッタリング法を用いた金属ナノ構造体の創製とそれを用いた触媒反応についてご講演頂きました。

山下先生(阪大)からは, 規定空間を利用したナノ構造制御触媒, 特にシングルサイト光触媒についてご講演頂きました。駒場先生(東京理科大)からは Li, Na 電池の材料開発と, 新しい材料を生むために如何に XAFS のデータを活かすか, という視点からご講演を頂きました。保倉先生(東京電機大)からは, 植物の重金属蓄積機構(ファイ



図1 会場の様子

トレメディエーション)について基礎研究から応用・実用研究までご講演頂きました。顕微 XAFS を用いた化学組成・化学形態分析等に, 時間軸, 空間軸を掛け合わせた研究展開をお示し頂きました。

初日の最後には横山先生(分子研)から日本 XAFS 研究会「XAFS 光源検討委員会」の活動報告を頂きました。最先端の各種 XAFS 実験法, それらと最先端の物質科学, 環境科学などの研究との繋がりに加えて, 新光源に求める性能についてもお話がありました。この報告を受け, パネルディスカッションが開かれました。次期光源に対して, XAFS コミュニティとして要望する内容が議論されました。2日目の最後にもパネルディスカッションが開かれましたので, 本報告の最後に併せてご紹介します。

続いて, 会場横のホールにて, 懇親会が開かれましたが, XAFS という一実験手法を介して, 異分野の研者が繋がる活気ある会となりました。ドミトリーでも深夜まで熱い議論が続いていました。

2日目の土曜日は, 野村先生(KEK)からこれまでの XAFS を振り返りつつ未来への提言を頂き, 視野を広げて将来を描くことの重要性を強調されました。続いて宇尾先生(東京医科歯科大)からは, 歯科材料の金属アレルギー等の問題に, XAFS, XRF 等を用いて挑むお話を頂きました。病理標本を用いた微量分析, さらにその結果を診断に活かす活動の紹介がありました。高橋先生(東大)からは, アラクルニウム分子地球化学として, BCLA (Bent Crystal Laue Analyzer) を用いた蛍光分光 XAFS が多元素混合系である天然試料に有効であること, 金属錯体の配位の仕方から同位体分別の機構が理解できることが紹介されました。炭素から遷移金属までを同時に測定できる環境, 早急に, 多くのユーザーの利便性と経済性を考えた PF 後継機リングを東日本に欲しい, という要請がありました。

稲田先生(立命館大学)からは, 時間軸, 空間軸に工夫を凝らした実験手法の開発し, 触媒や電池で見られる不均一現象のトリガーを見つける研究をご講演頂きました。野中先生(豊田中研)からは, 自動車関連材料の in situ XAFS として, SPring-8 豊田ビームライン BL33XU での Super Quick XAFS, Operando 解析システムについてご紹介頂き, 正極活物質二次粒子の劣化過程の観測などのご講演を頂きました。また, 産業界の放射光利用の特徴として,



図2 懇親会での様子

## <プログラム>

### 7月11日(金)

- 13:00 ~ 13:05 挨拶 (田淵雅夫)
- 13:05 ~ 13:35  
「XAFSによる金属クラスターの局所構造解析」  
(佃 達哉/東京大学大学院理学系研究科)
- 13:35 ~ 14:05  
「In-situ XAFSによる触媒反応機構へのアプローチ」  
(近藤 寛/慶応義塾大学理工学部)
- 14:05 ~ 14:35  
「XAFSを用いた材料・プロセス解析～製鉄/製鋼分野の事例紹介」  
(村尾玲子/新日鐵住金(株)先端技術研究所)
- 14:35 ~ 15:05  
「イオン液体-金属スパッタリング法による金属ナノ構造体の作製と電極触媒への応用」  
(鳥本 司/名古屋大学大学院工学研究科)
- 15:20 ~ 15:50  
「規定空間を利用するナノ構造制御触媒・光触媒の設計と応用」  
(山下弘巳/大阪大学大学院工学研究科)
- 15:50 ~ 16:20  
「リチウムおよびナトリウム電池の材料開発と XAFS 分析」  
(駒場慎一, 久保田圭/東京理科大学理学部・京都大 ESICB)
- 16:20 ~ 16:50  
「放射光で読み解く植物の重金属蓄積機構」  
(保倉明子/東京電機大学工学部)
- 16:50 ~ 17:20  
「日本 XAFS 研究会『XAFS 光源検討委員会』の活動報告」  
(横山利彦/自然科学研究機構分子科学研究所)
- 17:30 ~ 18:30 パネルディスカッション その1  
【内容: その日の講師からの発表内容や『XAFS 光源検討委員会』からの答申を踏まえた自由な意見交換。  
パネラー: 横山利彦氏, 朝倉清高氏, 田淵雅夫】
- 18:45 懇親会 (4号館セミナーホール前ホワイエ)

### 7月12日(土)

- 9:00 ~ 9:30  
「XAFSの現状と今後の進展」  
(野村昌治/高エネルギー加速器研究機構)
- 9:30 ~ 10:00  
「放射光 XRF と XAFS の臨床診断と安全性評価への応用」  
(宇尾 基弘/東京医科歯科大学医歯学総合研究科)
- 10:00 ~ 10:30  
「XAFSが可能にするアラユルニウム分子地球化学」  
(高橋 嘉夫/東京大学大学院理学系研究科)
- 10:40 ~ 11:10  
「時間軸と空間軸をもつ化学状態解析での材料研究: 不均一現象のトリガーを見つけるために」  
(稲田 康宏/立命館大学生命科学部)
- 11:10 ~ 11:40  
「自動車関連材料の in-situ XAFS 解析」  
(野中 敬正/豊田中央研究所)
- 11:40 ~ 12:10  
「XAFS理論の最近の進歩」  
(藤川 高志/千葉大学理学部)
- 12:10 ~ 12:40  
「革新型電池研究における XAFS を中心とした放射光研究」  
(内本 喜晴/京都大学大学院人間・環境学研究科)
- 12:40 ~ 13:15 パネルディスカッション その2 (弁当)  
【内容: 二日間の全体を踏まえて、今後の新光源への方向性に関する議論・意見表明。  
パネラー: 横山利彦氏, 朝倉清高氏, 田淵雅夫】
- 13:30 閉会の挨拶 (木村正雄)

時間分解測定, 空間分解測定, in situ 測定のニーズが高いこと, 不均一系や一過性の現象を扱うことが多いこと, 測定・解析のスピード, スループットが要求されること, を挙げて頂きました。藤川先生(千葉大)からは, XAFS 理論の最近の進歩として, Ultrafast XAFS の理論をご紹介頂きました。Pump-Probe 実験の観測結果をきちんと理解するには, 強力な Pump 光は摂動では取り扱えないことに注意し, Pump 光による励起状態と Probe 光による観測状態の干渉を露らに取り扱いその時間発展を記述する方法についてご講演頂きました。内本先生(京大)からは, 革新型電池の XAFS を中心とした放射光研究として, 充電過程

の in situ XANES, in situ XRD の同時測定などについてご講演頂きました。電池材料の研究において, マクロ解析, ミクロ解析, 原子レベル解析, これらの有機的なリンクが重要であることをお示し頂きました。また, 界面現象をいかに捉えるかを今後の方向性として挙げて頂きました。

二日間の御講演と参加者の皆様の熱心なご討論を通じて, XAFS 法という一つのツールが, 現在様々な研究開発の分野で重要な意味を持つことを改めて痛感しました。また御講演者から頂いた示唆を通じて, XAFS 法には様々な方向性を持った高度化の可能性があり, どの一つが実現されても非常に大きな意義があること, 現在の XAFS ユー

ザーを越えた多くの研究者がそれを望んでいることが改めて明確に感じられました。

本研究会の最後は昼食(弁当)をとりながらのランチオンパネルディスカッションとなりました。2日間活発な議論がなされ、たくさんの意見が出されました。全部は書き切れませんが、参加者からの意見の一部を以下にご紹介します。

#### 【ビームラインの高度化に関する意見・議論】

- XAFS だけをやれば全て済む訳ではない。一度行くと色々な測定ができると良い。
- 高輝度の光を利用する際に、試料が壊れる可能性にも注意し、Photon density の tuning が出来ることが大事。
- 時間分解実験では、Pulse duration も大事だが、繰り返し速度 (rep rate) の調整ができることも大事。系によって適切な rep rate がある。
- imaging 等を考えると大きいビームも欲しい。センチメートルくらいのビームが欲しいこともある。ベンディング磁石 (BM) を光源としたビームライン (BL) を残すか、均一にビームを広げられる技術の確立が必要。
- 植物などでは、全体を見てから細部を見たい。大きなビームで平均を理解し、全体のマッピングを取ってから、興味のある細部を見たい。そのため、ビームサイズ可変など、見る領域をコントロールしたい。
- 高エネルギーの XAFS も残して欲しい。1 mm 角のビームも残して欲しい。最先端の物質科学に、必ずしも最先端のビームが最適かというところも限らない。
- 低濃度試料の測定で、1 ppb まで測定できると世界が変わる。
- XAFS 実験として、Undulator か、BM なのか、の議論もして欲しい。Undulator は Tapered Undulator だとしても使いにくい面もある。ビーム強度のムラも気になる。

#### 【将来光源の運営や組織に関する意見・議論】

- それぞれの施設ならではの特徴を打ち出すべき。
- いまの KEK-PF の民間共同研究の制度は使い易い。
- 新光源ができる時、切れ目のないスムーズな移行を望む。
- 場所は人口の多いところの近郊作って欲しい。地方からのアクセスも十分に考慮して欲しい。地方から地方はアクセスしにくい。いまの PF の課題の2年間有効の制度は残して欲しい。
- 夏の停止期間なしに実験できると嬉しい。
- 放射光を使いたい時に、すぐ相談できると良い。XAFS の専門家にどう相談すれば良いか。立ち話レベルで情報が流れるように裾野が広がるとやり易い。ユーザーとして眠っている人、潜在的なユーザーはたくさんいると思う。ビームタイムが配分されず、苦しい状況だ。貰えたとしても少ないので、新しい測定になかなかチャレンジできない。
- 放射光、XAFS は、材料等をやっている人の一つのツールとして使う時の利便性の向上も必要だ。あまり XAFS

に馴染みのない人への宣伝、広報も重要だ。

#### 【産業界からの要望】

- 企業では結果を速く求められ、一回行けば全部得られる体制が欲しい。XAFS に限らず、XRD, XPS も、など。硬X線、軟X線を同時に使える、などの贅沢仕様も嬉しい。
- 産業利用の拡大に向けては、現行計測手法の確実な継続、実験基盤技術の開発・整備・サポートの充実、測定・解析ソフトウェア・検出器・試料環境技術などの専門スタッフの欧米並みの充実、ビームライン・施設横断的な協力体制が必要。
- 「XAFS 光源検討委員会報告書」には、純粋な科学の事だけではなく、その出口として産業界も見て、イノベーションへの展開を書くべき。

最新の研究成果をもとに、将来を見据えた議論ができた2日間だったかと思います。この日の最高気温は33°Cでしたが、太陽の暑さに負けない参加者の熱気に包まれたまま、本研究会は終了しました。ご講演・ご参加頂いた皆様に心より感謝申し上げます。なお、日本 XAFS 研究会「XAFS 光源検討委員会」では、本研究会の議論も取り込んで最終報告書を作成していただくことになっております。

最後になりましたが、本研究会の開催をご支援頂きました高エネ研・物質構造科学研究所の関係者に感謝申し上げます。また、日本 XAFS 研究会「XAFS 光源検討委員会」の横山先生を始め、委員の皆様には中間報告書をまとめていただき、ありがとうございました。これを元に、新光源に向けた本格的議論を進めたいと思いますので、今回参加できなかった方も是非ご意見をお寄せ下さい(送付先: 木村正雄 masao.kimura@kek.jp)。