

## 第9回 X線吸収微細構造国際会議 (XAFS-IX)

横山 利彦 (東京大学大学院理学系研究科)

第9回 X線吸収微細構造国際会議 (9th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure: XAFS-IX) が1996年8月26日から30日の間フランスのグルノーブルで Goulon (ESRF) chair のもとで開催された。参加者は本会議過去最高の600名を越え、日本からの参加者も90名に及んだ。5日間とも午前中は45分程度の基調講演があり午後は概ね3~4つのパラレル口頭発表とポスター発表で占められた。参加者の数からして当然のことであるが発表は非常に盛り沢山であった。私のカバーできる範囲は EXAFS 分光法そのものについてであるから、ここではこれらを中心に全く個人的な印象から会議を振り返ってみたい。

今回はグルノーブルで開催されたことに伴って第3世代放射光利用がひとつの大きなテーマであった。最終日には ESRF の Laclare による第3~4世代光源に関する基調講演もあった。特に重要な放射光利用課題として X線発光分光がとりあげられ、東大物性研の小谷教授、ESRF の Sette 博士、Uppsala 大の Nordgren 教授の3氏が基調講演を行った。Nordgren 教授は X線発光分光を表面吸着分子系に応用し金属表面上の吸着 CO 分子の価電子状態を研究した論文を報告しているが、本講演では論文としてはおそらく未発表のさまざまな分子系への応用例を紹介していた。吸着系の発光分光では元素が異なるかぎり吸着種の価電子状態のみを抽出できる特徴があり、今後の応用が期待できる。

発光分光以外に基調講演としてとりあげられた

のは、磁気円二色性、X線顕微分光、地球環境科学・生体・触媒・その他機能性材料への XAFS の応用、X線検出器などであった。磁気円二色性に関しては IBM Almaden の Stohr 博士が 3d 遷移金属 (合金) の  $L_{II,III}$  吸収端スペクトルによる磁気モーメントの決定について、Augsburg 大の Schutz 教授が EXAFS の磁気円二色性についてそれぞれ紹介した。Stohr 博士は磁気円二色性の基礎を全くの素人でもわかるように解説し、実際の材料への応用結果について述べた。一方、これまで EXAFS の磁気円二色性は現象が知られているもののどのような新たな知見が得られるのか (少なくとも私には) はっきりしなかったが、Schutz 教授は吸収原子近傍の配位原子のスピンドensityがかなり定量的に反映されることを明確に示した。

私はこの会議に第4回から連続して6回参加している。主な目的のひとつに EXAFS における新しい理論や解析法を学び実際に自身の研究に適用するということがある。実際これまでの会議では何らかの直接直ちに役に立つ知恵を持ち帰っていたと思う。例えば前回の Berlin での会議では、原子の座標を与えるのみで EXAFS を理論的に多重散乱を含めて高速に計算する FEFF Version 6 (Washington 大 Rehr 教授らの製作で、現在は磁気円二色性を含んだ Version 7 まで発展している) が偏光依存性のある実験をも非常によく再現することを知り、現在の我々の研究に極めて有効に働いている。しかし、今回はこれと違ってすぐに役立つ面白い話は結局残念ながら見つけれ

なかった。自分も今回理論のセッションで口頭発表を行ったが、理論・解析は質・量とも優れていた前回に比べ、低調であったような気がする(間違っていたらごめんなさい)。

全く個人的な興味で参考になった報告は新しいわけではないがモンテカルロ法の XAFS への応用である。私個人としては、最近、有限温度の簡単な分子の EXAFS を量子統計力学的に解析的に理解することを目的にした研究を行っているが、実際の固体・液体となるとこれはほとんど不可能である。Di Cicco 博士 (Camerino 大), Filipponi 博士 (ESRF) らは高圧下での液体・固体 Kr の EXAFS を室温で測定し、モンテカルロ法による検討を行っていた。Di Cicco 氏の口頭発表は何をいっているのかよくわからなかったが、ポスターで長時間二人に特に Filipponi 氏に説明してもらい収穫があった。Kr の原子間ポテンシャルは多くの人沢山の関数を提唱しているが短距離側の斥力部分について議論の余地が残っている。新たな高圧下 (30 GPa) の EXAFS のデータからどれがもっともらしいか結論していた。この際のモンテカルロシミュレーションは定温・定圧条件下での古典論で、そこそこのパソコンとそこそこの信頼できる原子間ポテンシャルがあれば容易に誰でも計算し実験と比較することができる。ただし、この場合は Kr で室温だから量子効果があまり重要でないが、一般的には古典論で振動を扱うことに抵抗が大きい。分散には常に零点振動が直接関わってくる。かといって量子モンテカルロを極めて複雑な関数型をした原子間ポテンシャルを持つ系に適用するのはほとんど不可能に思える。しばらく悩んで個人的な方針に関して結論を出すつもりでいる。

もうひとつ、あまり興味がわかないが注目せざるを得ない話としては誤差論がある。EXAFS は構造解析の手段であるから決定された数値には実験誤差 (データの統計的なランダムさ)・フィッティング誤差 (最小二乗法に基づいたもの)・理

論のもっともらしさを全て含んだ誤差を見積もることが本来必須である。ところが EXAFS では実験データを直接最小二乗法のフィッティングにかけることがむしろ少なく、EXAFS 関数の抽出・正逆フーリエ変換を行うことが普通であり、このような人為的な操作に基づく系統的誤差がかなり大きいと思われる。系統的誤差の中には最近特に問題となっている多電子励起過程の混在という本質的なものもある。このような状態で誤差を見積もることは大変であるが、誤差をきちんとした手続きに基づいて見積もらなければ、いつまでたっても EXAFS が構造解析法として広く認知されない。特にこれまで EXAFS の結果が嘘であった例はかなり多く、汚名を挽回し他の分野の人に認めてもらう第一歩として是非ともデータとフィッティングの誤差の見積もりは必要である (理論のもっともらしさというのは他の構造解析手段の X 線回折や電子線回折でも入っていないのでとりあえずは放置するしかないかもしれない)。現在提唱されている方法がどの程度正しいかはわからないが、こういう方法で客観的に誤差を求めたということは、うやむやに済ますよりは絶対に正当であろう。なるべく早急に手をうちたい。

会期中にエクスカージョンはなかったが、バンケットはグルノーブルの夜景が楽しめた。また、ESRF の見学があった。今度は実験しに来たいものである。

全体的な印象としては、とにかく大盛況であった。XAFS の人口がこれだけ増えたことは喜ぶべきことである。ただし、会が大きくなると当然新たな問題も出てくる。XAFS という共通のテーマで 3~4 のパラレルセッションが走るとどうしても聞きたいのに聞けないものがある。一日のポスターの数が多すぎて見切れないとか、朝から晩まで盛り沢山で会期後半は少し疲れた(飽きた)とか感じたのは私だけではないと思う。また、2日目のポスターはポスター賞の審査員になってしまい全部をざっと見たためひとつもまともに見ら

れなかった。これらは贅沢な悩みかもしれないが、今後はこの点の検討も必要かもしれない。

XAFS-Xは1998年8月にシカゴでイリノイ工科大学のT. I. Morrison 助教授らが co-chair に

なっていて行われる。少し新たな分野の課題を準備して参加したい。また、以降は周期が3年に変わり、XAFS-XIは2001年に日本で行われることが決定した。

一口メモ

## ポインセチア

今夏には四年に一度のスポーツの祭典でありますアトランタオリンピックが開催され、多いに楽しんでいたと思っていきましたら、もう師走がやってきました。本年の最後としてはクリスマスの時期を代表する花のポインセチアを取り上げてみます。

トウダイグサ科トウダイグサ属の常緑性低木のポインセチアは短日植物ですので、光がささない状態が14時間以上続かないと苞が色づきません。従って、通常は12月中旬から色づきますが、屋外は寒いので、室内に入れる必要があります。そのため、室内では暗い所に鉢を移動するか、鉢の上にダンボール箱をかぶせて下さい。色は赤が一般的ですが、ピンク、淡い黄色にピンクが入っている品種も出回っています。

燃える様な赤い苞葉のポインセチアの置いた部屋で、熱燗を飲みながら、過ぎ行く1996年をふり返るのはいかがでしょうか。

(K. Ohshima)

