



放射光分析の進展

近畿大学 朝倉博行

近畿大学工学部応用化学科講師の朝倉博行と申します。私は京都大学にて X 線吸収分光法の基礎及び触媒材料への応用を学んだ後、名古屋大学にて 2013 年に利用が開始されたあいちシンクロトロン光センターの立ち上げと運営に従事しました。その後、触媒・電池元素戦略プロジェクトの一員として再び京都大学を経て、近畿大学に奉職いたしました。

学生の頃から行ってきた放射光、特に X 線吸収分光を利用した分析の進展に関して、簡単に紹介させていただきます。日本の放射光利用は 1960 年代から始まる加速器や分光学の専門家による先駆的な研究を経て、高エネルギー加速器研究機構の Photon Factory や大型放射光施設 SPring-8 を契機とし、現在では光触媒を含む様々な研究分野で利用されるようになりました。粉末 X 線回折、たんぱく質の単結晶構造解析、X 線吸収分光などはもちろんのこと、X 線発光分光、散乱、光電子分光などがごく一般的に利用されるようになりました。既に長きにわたって利用されている方にとっては、実験室と同じとまではいかなくとも、一分析手法として定着しているものと思います。

分析手法の 1 つとして利用しているユーザーの視点からすると、例えば X 線吸収分光の基本的な測定手法は十分確立されていると言えます。しかしながら、光源や光学系あるいはデータ処理手法の発展により、現在も着実な進歩を遂げています。代表的な例としてイメージング技術の発展が挙げられます。高度な集光技術を使った走査型イメージング、トモグラフィーによる三次元再構成、コヒーレント X 線回折イメージングなど様々なイメージング手法が、従来では考えられないほど高空間分解能、高時間分解能で測定できるようになりつつあります。例えば、光電極の活性は材料だけでなくマクロな構造がその活性に重要な影響

を及ぼす場合も少なくないと思います。同じ材料から作製した動作中の電極間の性能の違いを可視化から明らかにすることも一般的になっていくと考えられます。他にも X 線発光分光を応用することで従来よりもはるかに高いエネルギー分解能を持つスペクトル、すなわち高精度な電子状態の描像が得られるようになってきており、エネルギー分野の多岐にわたる材料の開発の一助になると期待されます。

また、X 線を使った分析手法として実験室でよく利用される粉末 X 線回折や X 線光電子分光においては、各種データベースによる定性分析が日常的になされていると思います。X 線吸収分光においても、そのスペクトルの有用性が発見された当初からデータベース化が試みられていますが、PDB、ICDD、ICSD や光電子分光装置メーカーなどが出しているカタログなどと比較すると、デファクトスタンダードなデータベースは存在しませんでした。測定手法の発展とは異なりますが、放射光利用においてもデータ科学、機械学習などの流れの例外ではなく、データベースの構築に関する機運が高まりました。その結果、国内においては各放射光施設や大学で集められてきたデータを物質・材料研究機構 (NIMS) が運営する Material Data Repository (MDR) において、X 線吸収スペクトルのデータベースが構築され、既に 2000 以上のスペクトルをライセンスに従って利用することができます。近い将来、X 線回折などと同じように手軽に参照データとして利用されたり、それ以上の利活用の例が現れたりするものと期待されます。

以上、X 線吸収分光法を中心に放射光利用の発展状況についてご紹介いたしました。皆様のご研究の一助となれば幸いです。

末筆になりますが、これまでご指導いただいた田中庸裕先生、宍戸哲也先生、寺村謙太郎先生、人見穰先生、田淵雅夫先生、細川三郎先生にこの場を借りて厚く御礼申し上げます。