

時間分解XAFSの理論解析について: XANES解析プログラムMXANの有用性, 及びX線自由電子レーザーの使用により生じる非線形効果の一つである飽和吸収

畑田 圭介 主任研究員 (University of Camerino, XAS laboratory)



2013年12月6日(金) 13:30-14:30

創成科学研究棟4階セミナー室B・C

<http://www.cat.hokudai.ac.jp/access.html>

近年のX線自由電子レーザー(XFEL)の登場により, 10~100フェムト秒オーダーの非常に短かつ強度の非常に高いX線パルスが使用出来る用になって来た. これにより非常に短時間のX線スペクトルの測定が可能となり, 時間分解XAFSに大きな展開が期待される. XAFSを用いた構造解析ではEXAFSは非常に強力かつ有用な方法であり広く用いられている. 散乱理論に基づくと, 自由グリーン関数の原子間位置情報のみでEXAFS振動構造がほぼ記述出来るため, 我々が開発しているGNXAS(ジーエヌザス)の様なプログラムを用いる事により安価な労力で非常に正確な構造解析が出来る. 極短時間XAFSではEXAFS領域はノイズが大きくなる為に綺麗な振動構造を得る事は実験的に困難になる. 反して吸収端近傍のスペクトルであるXANESは, スペクトルの構造が大きい為に極短時間XAFSに向いている. 吸収端から100~200eVまでスペクトルをみると, 構造はほぼ自由グリーン関数の原子間位置情報のみで理解する事が出来る為に, 散乱理論が有力な方法となる. EXAFSの場合は吸収原子からの距離すなわち一次元的

な情報が支配的だが、XANESでは三次元的な情報がそのまま反映される。原子種の違いによるスペクトルへの影響もXANESでは大きい。そのために構造解析は複雑となる。イタリア フラスカーティ グループと共に開発したXANES構造解析プログラムMXAN(エムクサン)は多重散乱理論を元に、吸収原子近傍の3次元局所構造を決定する。本講演ではまず溶液の錯体についてGNXASとMXANによる違いを見る。次に金属タンパク質の構造解析への応用を示す。さらに時間分解XAFSの例としてpump & probeの構造解析についても示す。極短時間XAFSでは入射パルスの高い強度の為に、X線分光に今まで現れなかった様々な非線形効果が現れて来る。その一つとして固体による吸収の飽和現象がある。従来の光学レーザーに対して、VUV-/X-FELでは励起状態(コアホール)の寿命が短い為にパルス時間との競合が起き、定常状態から外れてしまう。本講演ではこの物理現象を、時間に依存した非線形連立方程式に基づくモデルで計算した結果と実験結果を示す。

問合せ先： 触媒化学研究センター・朝倉 清高 (askr@cat.hokudai.ac.jp・011-706-9113)

略歴：2001年千葉大学にて学位取得 (Prof. Takashi Fujikawa)・2001年～2011年LNF, Frascati, Italy (Prof. Natoli)・2011年～University of Camerino (Prof. A. Di Cicco)

Awards:Dale Sayers Prize 2009