

分光測定とX線吸収、散乱、回折技術の同時利用に関する ワークショップ (CSX2012) の報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター
利用研究促進部門 奥村 英夫

SRI2012 (Lyon, France) のサテライトミーティングとして “3rd Workshop on Simultaneous Combination of Spectroscopies with X-ray Absorption, Scattering and Diffraction Techniques (CSX2012)” (組織委員長 Martin Fuchs氏、PSI) が2012年7月4日～6日の3日間にわたってスイス、チューリッヒにあるスイス連邦工科大学チューリッヒ校において開催された。今回のワークショップは2008年のESRF、2010年のソレイユで開催された同シリーズのワークショップの第3回目の開催となる。

本ワークショップの目的としては、*in-situ* 光学分光法とX線による測定手法の組み合わせを目指した測定技術の開発と応用について国際的に徹底的に議論することにある。近年、多くの放射光科学を基盤とした研究分野において、可視・紫外域光と赤外吸収、蛍光、そしてラマン分光法により得られる相補的な情報活用した応用研究が増加してきている。このような測定手法を組み合わせる利点としては次のようなものが挙げられる。

- (i) 同一な実験条件下での相補的な情報の取得
- (ii) 連続測定に起因する系統誤差の最小化
- (iii) 相補的かつ独立な測定を利用して反応中間状態を検出、高速測定、操作することにより、その理解が容易になる
- (iv) X線照射による試料損傷の観察と回避

会議は別表のようなスケジュールで進行され、PSI/SLSのFriso van der Veen教授の歓迎の挨拶から始まった。セッションとしては生物、触媒、物質科学、時間分解測定の各分野から発表が交互に行われた。生物分野ではISB、D. Bourgeois氏より蛍光タンパク質の結晶構造と吸収分光、蛍光、ラマン分光による光反応の研究の発表、Leeds大のA. Pearson氏より分光測定と結晶構造による脱炭酸酵素の不可逆反応の捕捉の試み、BNLのA. Orville氏より分光と結晶構造ならびにX線散乱の組み合わせ

による植物の窒素固定細菌のシステムバイオロジー研究が発表された。また、SPring-8、ESRF、SLSから各施設のタンパク質結晶構造ビームラインにおける分光測定環境の現状と開発の報告があった。ESRFとSLSでは可視/紫外吸収、赤外吸収、ラマン分光、蛍光のX線同軸測定環境のバージョンアップが報告された。特にSLSでは同軸顕微分光装置の常設運用を開始するとのことであり、SPring-8 MXBLにおける早急の環境整備の必要性が感じられた。触媒分野では、Utrecht大のA. Beale氏よりX線回折CTと吸収CTを利用した触媒反応の実時間イメージングの研究、ESRFのM. Newton氏よりXAFSと拡散反射赤外スペクトルの組み合わせ(DRIFTS)、さらに高エネルギーX線回折と拡散反射赤外スペクトルを組み合わせた触媒反応の研究、Yeshiva大のA. Frenkel氏よりXAS、X線回折、赤外、ラマン測定を組み合わせた水性ガスシフト反応の研究が紹介された。物質科学、時間分解測定分野では、SNBLのW. Van Beek氏より、変調励起分光(MES)の方法論をX線結晶回折に適用した変調拡張回折法(MED)について発表が行われた。また、Piemonte



写真：CSX2012 が開催されたスイス連邦工科大学チューリッヒ校から臨むチューリッヒの街並み

Orienteale大の M. Milanesio氏より、粉末回折とラマン分光、MEDを使ったスピン交差物質の構造遷移の研究成果が報告された。物質科学の分野からはケンブリッジ大の J. Cole氏より光結晶学と XANES あるいは EXAFS の組み合わせによる研究例の紹介がなされた。最終日には SLS 見学ツアーが開催され、SLS の実験ホールならびに加速器の見学を行った。

会場であったスイス連邦工科大学チューリッヒ校では、同じメインビル内で "7th International Workshop on Nano-scale Spectroscopy and Nanotechnology (NSS-7)" が重なる期間で開催されていた。ポスター会場では CSX2012 と NSS-7 のポスターが隣り合って掲示されており自由に見ることができた。同スペースでのコーヒブレイクも両会議でタイミングが合うこともあり、分光法という共通の視点での分野交流が行われた。

"3rd Workshop on Simultaneous Combination of Spectroscopies with X-ray Absorption, Scattering and Diffraction Techniques (CSX2012)" program

Wednesday, July 4th, 2012

Session: Welcome & Introduction

10:00 - 10:10 Welcome

VAN DER VEEN, Friso

Paul Scherrer Institut, Switzerland

10:10 - 10:20 Introduction

FUCHS, Martin R

Paul Scherrer Institut, Switzerland

Session : Biological 1(Chair: Allen Orville)

10:20 - 10:50

Combining spectroscopy and crystallography: a tool to investigate fluorescent proteins

BOURGEOIS, Dominique

IBS, France

10:50 - 11:20

Dynamic Structural Science: developing tools for time-resolved structural studies

PEARSON, Arwen

Astbury Centre for Structural Molecular Biology, University of Leeds, UK

11:20 - 11:40

Present status of micro-spectroscopic instruments in SPring-8 macromolecular crystallography beamlines

OKUMURA, Hideo

JASRI/SPring-8, Japan

11:40 - 12:00

Status of the Cryobench in crystallo spectroscopy laboratory of the ESRF

VON STETTEN, David

European Synchrotron Radiation Facility, France

12:00 - 12:20

Third generation of on-axis in situ optical spectroscopy - Extending the scope of macromolecular crystallography

DWORKOWSKI, Florian

Paul Scherrer Institut, Switzerland

12:20 - 13:20 Lunch

Session: Catalysis 1 (Chair: Anatoly Frenkel)

13:20 - 13:50

An eye on the inside: imaging of catalytic particles under reaction conditions

BEALE, Andrew

Inorganic Chemistry and Catalysis, Utrecht University, Netherlands

13:50 - 14:20

Chasing changing catalysts with XAFS and high energy X-ray techniques combined with infrared spectroscopy

NEWTON, Mark

ESRF, Grenoble, France

14:20 - 14:40

Combination of HERFD XAS and ATR IR for in situ investigation of the liquid phase hydrogenation of nitrobenzene

MAKOSCH, Martin

ETH Zurich, Switzerland

14:40 - 15:00

Operando characterisation of heterogeneous catalysts by combination of Quick-XAS with Raman Spectroscopy

ROCHET, Amelie

SOLEIL, France

15:00 - 15:20

XAS, XRD and Raman study on nanostructured CeO₂-Gd₂O₃ solid solutions

ABDALA, Paula M.

SNBL at ESRF, France

15:20 - 15:50 Coffee Break

Session: Materials & Time resolution 1 (Chair: Augusto Marcelli)

15:50 - 16:20

Modulation Excitation Spectroscopy applied to Crystallography

VAN BEEK, Wouter

SNBL at ESRF, France

16:20 - 16:50

Combined modulation enhanced X-ray powder diffraction and Raman spectroscopic study of structural transitions in the spin crossover material [Fe(Htrz)(trz)](BF)

MILANESIO, Marco

Universita Piemonte Orientale, Italy

16:50 - 17:10

Modulation excitation spectroscopy coupled with synchrotron X-ray methods to unravel dynamic processes on supported Pd catalysts

FERRI, Davide

Empa, Switzerland

17:10 - 17:30

Probing the structure of proteins in physiological conditions by X-ray absorption and UV/Visible spectroscopies

SILATANI, Mahsa; LIMA, Frederico Alves

Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Switzerland

17:30 - 17:50

Time-resolved X-ray absorption studies on charge carrier dynamics in aqueous TiO₂ nanoparticles

RITTMANN-FRANK, Mercedes Hannelore

Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Switzerland

18:00 - 21:00 Dinner Reception in the GP Pavillon

Thursday, July 5th, 2012

Session: Catalysis 2 (Chair: Andrew Beale)

9:00 - 9:30

In situ X-ray studies of model and real catalysts: Bridging the complexity gap

FRENKEL, Anatoly

Yeshiva University, USA

9:30 - 9:50

In-situ QXAS investigation of the genesis of cobalt active phases in supported Fischer-Tropsch catalysts

KHODAKOV, Andrei

UCCS, CNRS, Universite Lille 1, ENSCL, Ecole Centrale de Lille, France

9:50 - 10:10

Evidence for central carbon in nitrogenase FeMo cofactor

SIPPEL, Daniel

Institut fur organische Chemie und Biochemie, Albert-Ludwigs-Universitat Freiburg, Germany

10:10 - 10:30

Identifying dynamic structural changes in catalysts with time and energy-resolved XAS and XES

NACHTEGAAL, Maarten

*Paul Scherrer Institut, Switzerland***Session: Posters**

10:30 - 12:00 Posters & Coffee Break

12:00 - 13:00 Lunch

Session: Biological 2 (Chair: Arwen Pearson)

13:00 - 13:30

Systems biology in Prokaryote - Eukaryote symbiosis: single-crystal spectroscopy correlated with X-ray crystallography and other complementary methods

ORVILLE, Allen

Brookhaven National Laboratory, USA

13:30 - 13:50

Fingerprinting redox/ligand states and driving catalysis in protein single crystals

HOUGH, Michael

University of Essex, UK

13:50 - 14:10

Iron-porphyrin coordinates an arginine guanidine side-chain in a protein pocket - Insights from microspectrophotometry and crystallography

KNIPP, Markus

Max-Planck-Institut fur Bioanorganische Chemie, Germany

14:10 - 14:30

Structural and spectroscopic observation of an enzyme at work

MARTINOLI, Christian

University of Pavia, Italy

14:30 - 14:50

Using in situ single-crystal UV-vis and Raman spectroscopy to study the effect of X-ray radiation damage on the crystal structures of haem proteins

HERSLETH, Hans-Petter

*Department of Molecular Biosciences, University of
Oslo, Norway*

14:50 - 15:20 Coffee Break

15:20 - 15:40 Round Table

Session: Materials Science (Chair: Marco Milanese)

15:40 - 16:10

En-Light-ening photo-crystallography with X-ray absorption

COLE, Jacqueline

*University of Cambridge, UK & University of New
Brunswick, Canada*

16:10 - 16:30

Exploration of the mechanical properties of flexible MOFs
by coupling experimental and modeling approaches

YOT, Pascal G.

Universite Montpellier 2, France

16:30 - 16:50

Investigation of crystallization processes using Synchrotron
X-ray diffraction and Raman spectroscopy

GNUTZMANN, Tanja

*BAM Federal Institute for Materials Research and Testing,
Germany*

16:50 - 17:10

Pushing microbeam probes to nanoscale resolution for the
study of buried interfaces

GHIGNA, Paolo

Dipartimento di Chimica, Universita di Pavia, Italy

17:10 - 17:40

In-situ time-resolved x-ray and IR combinatorial approach
for materials science investigation using 3rd generation
synchrotron radiation sources

MARCELLI, Augusto

INFN - LNF, Italy

Friday, July 6th, 2012

Visit to Paul Scherrer Institut

奥村 英夫 OKUMURA Hideo

(公財)高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

TEL : 0791-58-0833 FAX : 0791-58-0830

e-mail : okumurah@spring8.or.jp