

(様式 2)

議事録番号

提出 2016 年 9 月 16 日

会合議事録

研究会名：原子分解能ホログラフィー研究会・

機能性材料ナノスケール原子相関研究会 合同研究会

日 時：2016 年 8 月 28 日 13 時-17 時

場 所：関西学院大学 大阪梅田キャンパス 1406 号室

出席者（議事録作成者に下線）

：大門 寛、藤原明比古、小原真司、林 好一、脇原 徹、富中悟史、室隆桂之、村木智則、松永利之、板倉智也、内富直隆、北村尚斗、岩満一功、八方直久、松下智裕、増野敦信、山田大貴、紅野安彦、前島尚行、井畑治廣、野村琴広、助永壮平、木下豊彦、田尻寛男、若林裕助、小野寺陽平（計 26 名）

議題：「原子分解能ホログラフィー研究会」、「機能性材料ナノスケール原子相関研究会」の合同研究会を開催し、両研究会間の相互理解を行う。そして、新しいサイエンスの創出を目指した実験技術の相補利用について議論する。

議事内容：

1. 「原子分解能ホログラフィー概論」

大門 寛（奈良先端科学技術大学院大学）

ドーパント、界面、ナノ物質といった材料中の機能発現に重要な役割を果たしている非周期の局所構造である「3D 活性サイト」を解析するために有効な手法である原子分解能ホログラフィーに関する講演がなされた。特に、放射光を駆使した原子ホログラフィーの手法である光電子ホログラフィーおよび蛍光 X 線ホログラフィーについて、基礎的な原理と実験手法について解説がなされた。

2. 「X 線 PDF 解析概論」

小原 真司（物質・材料研究機構）

まず、機能性材料ナノスケール原子相関研究会において中心的な役割を果たす技術である SPring-8 の BL04B2 ビームラインの非晶質物質用二軸回折計と高エネルギー放射光 X 線を用いた二体分布関数（PDF）解析の原理に関する紹介が

なされた。さらに、中性子散乱との相補利用の有効性、多孔質・ナノ材料への PDF 解析の適用例、X 線異常散乱実験による複雑な組成を持つガラスの元素選択的な解析結果が報告された。そして最先端の研究トピックとして、ガラスにならない物質である ZrO_2 の原子・電子レベルでの構造解析による成果が紹介された。また、今後の展開として、様々な手法で取得した実験データをシミュレーション、データ科学、数学の援用によって解析し、得られた結果を逆マテリアルデザインとして産業利用へと活かしていくことの重要性が示された。

3. 「蛍光 X 線ホログラフィー：バルクの活性サイト局所構造」

林 好一（名古屋工業大学）

蛍光 X 線ホログラフィー法について、特徴的な測定法であるインバースモードの原理の解説がなされ、放射光を利用した多波長法によって強度が弱いホログラムについても十分な強度で測定することが可能となることが示された。さらに実際の測定例として、リラクサー強磁性体および高温強磁性半導体における 1 パーセント以下のドーパント周りの局所構造に関する解析結果が報告され、蛍光 X 線ホログラフィー法によって材料の機能向上の基点となる微量元素周りの構造を 3 次元的に解析できることが示された。

4. 「PDF 解析を駆使したゼオライトの微細構造制御」

協原 徹（東京大学）

様々な分野において触媒や分離膜として活用されているゼオライトについて、未だ構造が明らかになっていない生成過程のアモルファス状態を PDF 解析によって解析した結果が報告された。特に、異なる有機物由来ではあるが同じ条件下で合成される 2 種類のゼオライト（BEA と CHA）について PDF 解析結果から明らかになった結晶化のメカニズムが示され、構造解析を基にした微細構造の制御によって新しいゼオライト材料が創製できる可能性が示された。

5. 「二体分布関数を用いたナノマテリアルの構造解析」

富中 悟史（物質・材料研究機構）

二体分布関数 (PDF) を用いたナノ材料の構造解析の一例として、粉末の物性が単結晶の場合と異なることが知られている TiO_x 系燃料電池材料について報告がなされた。粉末試料の散漫散乱を含めた全散乱データをフーリエ変換して得られる PDF を解析することによって、Bragg ピークを示す Ti_2O_3 構造の中にブロードな散漫散乱を示す Ti_4O_7 構造が存在していることが明らかになった。さらに、

富中氏が開発した GUI ベースの PDF 解析ソフトが紹介された。解析ソフトは実験室・放射光施設問わず様々な実験装置で測定された X 線全散乱データを解析することが可能で、且つ時分割測定、異常散乱測定にも対応しており、実材料の PDF 解析を行う上で解析ソフトが非常に重要であることが示された。

6. 「光電子ホログラフィー：表面構造とデバイス中のドーパント」

室 隆桂之 (JASRI)

表面構造に敏感な光電子ホログラフィーについて、SPRING-8 の BL25SU ビームラインにおける軟 X 線を用いた角度分解光電子分光による測定系が紹介された。入射角 5 度以下の斜入射領域において入射角を最適化することで光電子放出効率が大きく向上し、希薄系においても高い光電子強度で測定が可能であることが報告された。さらに、解析プログラムについても報告がなされ、高いエネルギー分解能で測定されたデータを用いたスペクトルフィッティングによって微量なドーパントの化学シフトを精密に分離して解析が可能であることが示された。

7. 「原子分解能ホログラフィー・機能性材料ナノスケール原子相関両研究会の今後の融合研究へ向けて」

コーディネーター：八方 直久 (広島市立大学)

今後の両研究会の融合研究の可能性について議論が行われた。特に多孔体の研究において活発な議論が行われ、PDF 解析による研究が先行して行われているゼオライトについては、試料を薄膜化する等の工夫をすることによってホログラフィー測定を利用できる可能性が示唆された。

産業応用の観点からは構造解析を基点とした材料設計の早期実現が望まれているが、そのためには企業向けに実験・解析手法やソフトウェアの使用法に関する講習会を開催することが重要であり、そのような活動がひいては放射光施設利用の活性化に繋がるのではないかという意見が挙げられた。

データベース化についても議論が行われた。機能性材料ナノスケール原子相関研究会側からは PDF データについては X 線だけではなく中性子も含めて実験データのデータベースを作成していく動きがあることが報告された。原子分解能ホログラフィー研究会でもホログラフィーデータに関するデータベースの作成を検討しており、データベースの作成・整備を行う上での情報交換の重要性が議論された。