

(様式 2)

議事録番号

提出 年 月 日

## 会合議事録

研究会名：原子分解能ホログラフィー・機能材料ナノスケール原子相関研究会

日 時：2018年6月2日

場 所：名古屋工業大学

出席者：細川伸也，小原真司，木村耕治，北村尚斗，Lu Cong，後藤敬典，近藤陸弥，漆原大典，大門寛，加藤健太，後藤雅司，籠宮功，塚田宗弘，西川修平，横谷尚睦，西岡拓巳，岩田真，井端治廣，久保園芳博，木下豊彦，村松廣亮，横地恒平，内富直隆，松下智裕，Ang Arnoni，小野寺陽平，脇原徹，林好一

計名 28名

議題：非周期系物質の構造・物性研究の進化と深化

議事内容：

1. 結晶中のドーパント及びアモルファス物質の構造解析に関して、非周期系という新たな切り口で議論するという趣旨説明があった。(熊本大学・細川伸也氏)
2. 研究会前半において、最近の原子分解能ホログラフィーの成果・発展についての報告がなされた。
  - ・レターディングフィールドアナライザーの配置を工夫した光電子回折装置の開発及び像再生理論について報告がなされた。(JASRI・松下智裕氏)
    - 像再生理論に関して、名古屋工業大学の林好一氏と意見交換がなされた。
  - ・蛍光X線ホログラフィーによる原子位置の揺らぎの解析について、Mg合金及び熱電材料への応用例が紹介された。(名古屋工業大学・木村耕治氏)
    - 熱振動の解析について温度依存性を測定すれば良いのではないかという意見が出た。(岡山大学・久保園芳博氏)
    - 非調和振動の評価にも応用できないか。(岡山大学・久保園芳博氏)
      - ← 空間分解能とS/Nを改善すれば原理的に可能
    - Debye-Waller factor を考慮して解析すべき(奈良先端・大門寛氏)
    - 光電子ホログラフィーでも熱揺らぎの解析が可能か。(岡山大学・横谷尚)

睦氏)

←光電子ホログラフィーでも可能であるが、揺らぎに対する感度が異なるかもしれない (木村氏)

- ・最近行われた Mn ドープ Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> の蛍光 X 線ホログラフィーの成果の報告および異常分散効果を利用した蛍光 X 線ホログラフィーの紹介がなされた。異常分散効果を利用すれば、原理的に再生した原子像の元素種の判別が可能であり、試験的に行った実験の結果が紹介された。(熊本大学・細川伸也氏)

– Mn の間入サイトについて、ドナーかアクセプターかどちらの機能を有するか議論があった。(岡山大学・久保園芳博氏)

– 温度依存を系統的に測定することの重要性が指摘された (JASRI・木下豊彦氏)

← 十分なビームタイムあるいは測定時間の短縮等が必要 (細川氏)

- ・ノーマルモードを用いた蛍光 X 線ホログラフィー実験について、最近の成果が報告された。ノーマルモードでは原子像の質がインバースモードよりも劣る一方、微小試料の測定や二次元検出器を用いた測定時間の短縮が可能である点が紹介された。また、像再生理論の発展によりノーマルモードでも原子像の質を確保できる可能性も指摘された。ノーマルモードをマグネタイトに適用し、価数選択的に測定した結果が紹介された。(名古屋工業大学・Artoni Kevin Roquero 氏)

– 価数選択測定について、吸収端付近で細かくエネルギーを変更し測定を行えば、より正確に原子像が得られるのではないかというアイデアが出た。

(岡山大学・久保園芳博氏)

3. 研究会後半において、機能材料ナノスケール原子相関研究会から解析手法の紹介、最近の成果・発展についての報告がなされた。

- ・PDF (Pair distribution function) 解析の近年の発展が紹介され、様々なアモルファス物質や液体の構造因子にみられる特徴と、それらの特徴がどのような構造に対応するかについて系統的な解説がなされた。また、パーシステントホモロジー (PH) 解析の概略について説明があり、高密度シリカガラスの構造の結晶との類似性について解説された。アモルファスの構造や物性を統一的に理解しようとする試みがこれまでなされてきたが、今後は回折パターンや PH 解析に基づき各論を作ることが先決である。とくに「FSDP (回折パターンの一番低角に現れる鋭いピーク)」や「中距離構造」をマジックワード化して統一的に理解しようとする方向性を修正する必要がある。(NIMS・

小原真司氏)

- PDF を用いたリバースモンテカルロ (RMC) モデリング、空隙解析、パーシステントホモロジー解析について詳細な紹介がなされた。空隙の解析についてはリン酸塩系ガラスを例に組成と空隙の関係が紹介され、パーシステントホモロジー解析についてはグラファイトとダイヤモンドを例にとって解説された。

(京都大学・小野寺陽平氏)

- パーシステントホモロジー解析をアモルファス物質に適用した際にどのようなようになるかについて、より詳細な議論がなされた (名工大・木村耕治氏)

- 様々なゼオライトの構造とその合成法が紹介され、PDF 解析を結晶化する前のゼオライトに適用した結果が報告された。構造解析を応用面に繋げていく上でゼオライトは重要な系になることが強調され、PDF 解析による高速合成の機構解明などの将来展望についても紹介された。(東京大学・脇原徹氏)

- ゼオライトをナノシート状にすることにに関して議論がなされた。(JASRI・木下豊彦氏)

- 電池の電極・電解質材料に PDF 解析を適用した研究が報告された。Bragg 反射のみを用いた解析では得られない、格子の歪みや原子位置のずれを密度汎関数理論等も組み合わせて評価し、それが電極・電解質におけるイオン伝導性に影響を与えている可能性が指摘された。(東京理科大学・北村尚斗氏)

- どこまでが周期性を仮定した解析 (Rietveld 解析等) により得られた知見で、どこからが PDF 解析で得られた知見なのかについて議論があった。

(奈良先端・大門寛氏)

- 欠陥構造を議論する際のセルサイズの決め方について確認があった。

(JASRI・松下智裕氏)

\*A4 縦

\*会合で使用した 資料 (差し支えないもの) を添付してください。