

出来る限り、以下の様式に沿った議事録を作成下さいますようお願いいたします。

(様式 2)

議事録番号

提出 2019 年 10 月 25 日

会合議事録

研究会名：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合同研究会

日 時：2019/8/31

場 所：岡山大学津島キャンパス 一般教育棟 D 棟 1 階 D12 室

出席者：脇原徹、木村耕治、小野寺陽平、小原真司、志賀元紀、木下豊彦、八方直久、中田彩子、脇田高德、横谷尚睦、紅野安彦、若林整、増野敦信、大林一平、松下智裕、大門寛、鷹野優、林好一、梅名泰史

計 19 名

議題：数学、データサイエンスと放射光構造解析技術（原子分解能ホログラフィー、X線異常散乱等）との連携の模索

議事内容：

- ・岡山大学の梅名准教授より、光合成の機能を司る光科学系 II (PSII) タンパク質内の X 線構造解析について発表して頂いた。PSII 内に形成される金属クラスターの構造を初めて決定した成果や最近取り組んでいる蛍光 X 線ホログラフィーによる価数選択解析について紹介がなされた。生体試料から得られるホログラムは、従来の無機材料とは異なる視点から解析する必要がある、数学的手法や、情報科学との連携が検討事項として挙げられた。
- ・理化学研究所の大林一平客員研究員より、パーシステントホモロジー法による構造解析について、発表頂いた。この解析では、アモルファス物質中に形成されるリング構造に着目することが特徴である。液体およびガラス状態は、ともにアモルファスであるが、リングに注目することで、両状態の違いが明瞭に区別できる様子が紹介された。パーシステントホモロジー解析を、ドーパントを含む結晶など、アモルファス以外の解析に使えないかについて議論がなされた。
- ・岐阜大学の志賀元紀准教授より、データサイエンス、特に、統計的機械学習について、発表頂いた。電子顕微鏡による元素マッピングにおいて得られる多

数のスペクトルに現れるピークを自動で検出する手法について紹介があった。スペクトルの分離について価数の区別がどこまで可能か、ピークの数をおらかじめ与えておく必要があるかなどについて、議論がなされ、光電子ホログラフィー解析との連携が検討された。

研究会の様子