

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 2023 年 3 月 29 日

会合議事録

研究会名：コヒーレント構造科学研究会

日 時：2023 年 3 月 8 日 (水) 13:00-15:00

場 所：オンライン (Microsoft Teams)

出席者：(議事録記載者に下線)

阿部 真樹 (東北大)、西久保 匠 (神奈川産総研)、香村 芳樹 (理研)、大隅 寛幸 (理研)、水牧仁一朗 (JASRI)、中尾裕則 (KEK) 大和田 謙二 (量研)、他 20 名 (大学、企業等) 計 27 名

議題：

プログラム (敬称略)

13:00-13:05 開会の挨拶 大和田 謙二 (量子科学技術研究開発機構)

座長：水牧仁一朗 (高輝度光科学研究センター)

13:05-13:35 「テンダーX線タイコグラフィの開発と硫黄化学状態ナノイメージングへの応用」

阿部 真樹 (東北大学)

13:35-14:05 「相転移型負熱膨張材料の設計とブラッグコヒーレント X線回折イメージングを用いた分域構造観察」

西久保 匠 (神奈川県立産業技術総合研究所、東京工業大学)

14:05-14:35 「物質のトポロジを用いた X線制御」

香村 芳樹 (理化学研究所)

14:35-14:55 総合討論

14:55-15:00 まとめ 大隅 寛幸 (理化学研究所)

議事内容：

・テンダーX線タイコグラフィの開発と硫黄化学状態ナノイメージングへの応用 阿部 真樹様（東北大学）

テンダーX線は軟X線と硬X線の上に位置するエネルギー領域で、多種多様な元素の吸収端を含み化学状態の分析に適したX線である。一方透過力もあるためバルク試料の観察が可能であり、近年テンダーX線に言及する報告数が増加傾向にあり、日本でも NanoTerasu の稼働によりテンダーX線領域の研究が大きく進展することが期待される。分解能が期待できるX線タイコグラフィの開発に着手した。まず、原理の説明がなされた。得られる情報は位相像すなわち透過電子密度分布、また、吸収像すなわち化学状態分布である。開発は BL27SU にて行われた。開発要素は3つ。①計測装置の恒温化、②ピンホールの精密加工、③光学系の改良（FZPの一次回折光＝ピンホール縮小像）。これにより50 nmの構造も明瞭に再構成可能となった。開発された手法を用いて、リチウム硫黄電池の硫黄化学状態イメージングへの適用事例が紹介された。活物質粒子中の不均一な硫黄化学状態分布や性能劣化とかかわりのある生成物が正極中で局所的に分布する様子をとらえることに成功した。

講演後、オペランド計測の開発状況に関する質問があり、電解液を封入できるセルを開発中であることが報告された。また計測時間に関する質問があり、現状はエネルギー方向含めて10時間程度かかっているが、NanoTerasuの稼働で1/10程度の時間で計測が期待できるとの話であった。質問者から、性能の異なるシリーズをいくつか見たいので高輝度光源に期待したいとのコメントがあった。

・相転移型負熱膨張材料の設計とブラッグコヒーレントX線回折イメージングを用いた分域構造観察 西久保 匠 様（神奈川産総研、東工大）

負熱膨張という現象は古くから知られており、精密な位置決めが要求される場面で熱膨張の制御可能な負熱膨張物質が必要とされている。オープンフレー

μワーク構造のフォノンの振動による負熱膨張のほか、近年は相転移型負熱膨張材料が研究されており、磁気体積効果や電荷移動、強誘電転移が知られている。まず電荷移動相転移を示す BiNiO_3 と極性構造を持つ BiFeO_3 の混晶物質 $\text{BiNi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3 (0.3 \leq x \leq 0.5)$ において、極性-非極性転移が Bi-Ni 間電荷移動による負熱膨張を増強するメカニズムが紹介された。次に、 c/a 比 1.23 の巨大正方晶歪を持つ PbVO_3 を母物質とする負熱膨張物質の開発が紹介された。Bi を導入することにより電子をドーピングし Jahn-Teller 効果を抑制、高温相と低温層の分率の温度変化による巨大負熱膨張を実現した。しかし、この方法では負熱膨張特性が低下する方向に働く。そこで、さらに Pb の持つ孤立電子対の効果を切り分けることで 10% の巨大な体積差を持つ 2 相の共存状態（正方晶-立方晶の 011 接合）を実現し、これまでで最大となる巨大負熱膨張物質の開発に成功した。2 相の共存状態などの材料組織観察には電子顕微鏡や Bragg-CDI 法が活用された。立方晶-正方晶境界面付近に 0.2GPa 程度の圧力が生じていることが推測され、一見 Gibbs の相律に反した振舞いは説明可能。今後、Bragg-CDI 法によるドメインの温度変化の計測に期待が寄せられた。

講演後、違う反射を見ても同じ情報が得られるのかとの質問に対し、反射が違えば敏感な原子シフト方向が変わるので違う情報になるとの回答があった。

・物質のトポロジーを用いた X 線制御 香村 芳樹 様 (理研)

結晶格子の欠陥によるトポロジーが紹介された。これらのトポロジーを用いた波面制御に関する研究が紹介された。はじめはらせん欠陥を用いた光渦ビーム生成と検証が紹介された。SiC に存在するらせん欠陥に X 線を照射すると X 線にらせんの位相が転写されるが、らせんの位相を 2 光束干渉計を用いて直接的に検出することに成功した。Off-Bragg の条件で実験がなされ、動力学的（多重散乱）効果を抑えた実験により、運動学的に求められたシンプルなシミュレーションと比較することを可能とした。X 線光学的実験結果の検証に福音となるアイデアである。これらの方法はハイパワー半導体の欠陥評価にも使えると

のコメントがあった。次に、ダイヤモンド結晶のブラッグ点近傍で、ダイヤモンド結晶に存在する積層欠陥界面に至るマクロな X 線横滑り現象を観察した結果が紹介された。界面での反射と復屈折によるペンデル稿が観察された。これは、積層欠陥界面、シングル格子面間隔内での X 線局在導波路形成の可能性を示唆するものであり、X 線の局在状態を用いた導波路やナノ共振器への応用を検討しているとのことである。また、天然の歪みで有意な横滑りが見られたのは、今回のダイヤモンドが初めてとのことであった。

講演後、横滑りが発生するサイズ感に対する質問があり、特にはないとの回答があった。また、2 光束干渉計について、それなりの結晶性がよいかとの質問に対し、やはり必要である、との回答があった。

・総合討論

動向調査について、別途アンケートを実施し集計して報告することとなった。

・まとめ 大隅寛幸（理化学研究所）

コヒーレンスは頑張って使ってゆく。このような動きを、研究会活動を通して拡大してゆきたい。次回は、試料側から解決したい課題を取り上げてみたい。会員の皆様からのフィードバックを期待する。とのコメントで締めくくられた。