

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 4月 5日

## 会合議事録

研究会名：構造物性研究会、不規則系先端物質科学研究会

日 時：2019年3月24日(日) 9:30~12:00

場 所：工学院大学 新宿キャンパス

出席者：久保田佳基、河口彰吾、森吉千佳子、尾原幸治、富中悟史、本橋輝樹、三浦章、漆原大輔、石井悠衣、西堀麻衣子 ほか 計60名



**議題：大型放射光施設 SPring-8 を利用したセラミックス材料の構造物性研究  
—何が出来るか？ 何がわかるか？—**

議事内容：高輝度放射光を利用した構造物性研究に焦点をあて、構造物性研究

会、不規則系先端物質科学研究会共催で、日本セラミックス協会 2019 年會にて、基礎セミナーを開催した。SPring-8 のビームライン担当者やヘビーユーザーが講師を務め、粉末回折や全散乱、PDF (Pair Distribution Function) 解析の基礎と応用を初学者向けにわかりやすく解説された。さらに、一般的な結晶構造解析だけでなく、SPring-8 の高輝度光源の利用により、材料の平均構造から局所構造まで色々なレベルにおいて、どのような情報が得られるのか、研究事例についても紹介された。また特に、これまで放射光を利用した経験のない大学・企業研究者や学生の方々を対象として、SPring-8 関係者とのコンタクトの仕方や申請の仕組み・手続きについても紹介された。

### 1. 久保田 佳基氏 (大阪府立大学 理学系研究科) 「はじめに」

最初に、基礎セミナー開催の趣旨と講演者について紹介された。その後、SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC)、SPRUC 研究会、SPring-8 パートナーユーザー (PU) の各々の役割についても紹介された。さらに、参加者の方々に対して、「放射光で 何ができるか? 何が分かるか?」を知っていただくだけでなく、「放射光 (SPring-8) を利用してみよう!」と思っただきたい旨が強く述べられた。そのために、講演者や SPRUC 研究会が SPring-8 と学術・産業界の架け橋となることも言及された。

### 2. 河口 彰吾氏 (高輝度光科学研究センター) 「放射光粉末回折の基礎」

SPring-8 BL02B2 の担当者である河口氏より、粉末 X 線回折の基礎、SPring-8 BL02B2、放射光粉末回折データの特徴 (試料調整・準備)、様々な条件での“その場”放射光粉末回折について紹介された。SPring-8 の高エネルギー X 線を利用することで、数 mg の試料からも精密な電子密度や化学結合状態を得られること、近年の全自動化により試料交換から試料位置調整、温度可変粉末回折測定が誰でも簡単に実施できることが示された。さらに、より良いデータを測定するために、研究目的に沿った試料準備や測定条件を決定すること、BL 担当者との相談の重要性について言及された。

### 3. 森吉 千佳子氏 (広島大学 理学研究科) 「放射光粉末回折によるセラミックス材料の研究事例 ～SPring-8 BL02B2 の例～」

SPring-8 BL02B2 のパートナーユーザー代表である森吉氏より、放射光粉末回折で分かることとして、合成物質や不純物の同定・存在比、結晶系や格子定数の決定、粒子系や歪みの解析が事例を含めて紹介された。また、リー

トベルト解析、電子密度分布解析、精密熱振動解析、非調和熱振動解析・確率密度分布解析の事例についても丁寧に解説された。さらに、外場（温度変化・ガス吸着・電場印加）応答や水熱合成の放射光粉末回折など、“その場”観察の事例も紹介された。最後に、平均構造と局所構造（短距離秩序）との相関について言及され、放射光粉末回折と PDF 解析を活用した物質研究や材料開発の重要性について言及された。

#### 4. 尾原 幸治氏（高輝度光科学研究センター） 「X 線全散乱・PDF 解析の基礎」

SPring-8 BL04B2・BL08W の担当者である尾原氏より、全散乱と PDF 解析の基礎として、結晶材料と非晶材料の構造解析の違い、全散乱から PDF 解析までの流れ、SPring-8 での全散乱計測について紹介された。また、PDF 解析の特徴として、プローブ（X 線と中性子）の違いによる差、関数定義や配位数評価、ナノスケール材料の評価、差分 PDF を用いた混合材料解析について解説された。さらに、近年整備を進めた時分割全散乱計測・PDF 解析の現状についても紹介された。

#### 5. 冨中 悟史氏（物質・材料研究機構） 「X 線全散乱・PDF 解析の研究事例」

SPring-8 BL04B2・BL08W・BL22XU にて PDF 解析を利用している冨中氏より、全散乱と PDF 解析の研究事例が紹介された。特に、ナノ材料をターゲットにした PDF 解析の重要性を丁寧に説明していただいた。粉末回折と PDF 解析で得られる構造情報の違いから、ナノシート（層状酸化物）の平均構造と局所構造を同時に解析していく例が示された。PDF データの 1 次元データから 3 次元構造情報を引き出すため、粉末回折実験と他計測手法（IR、NMR など）、計算科学の併用の重要性も紹介された。

#### 6. 久保田 佳基氏（大阪府立大学 理学系研究科） 「SPring-8 利用のすすめ」

最後に、SPring-8 利用のすすめとして、課題申請の種類（申請時期、実施期間）、課題申請の方法、申請書作成のポイント、成果の公開や利用に向けた相談やサポートについて紹介された。また、SPring-8 利用経験の少ないユーザーを対象としたイベント（夏の学校や秋の学校）、SPring-8 手法紹介 Youtube についても紹介された。課題申請前に、ビームライン担当者、SPRUC 研究会、パートナーユーザーに気兼ねすることなく相談することも推奨された。

動向調査については、アンケートにより実施した。アンケート内容、およびアンケート結果を別途添付する。ニーズ調査の観点からは、外場等環境下測定の要望がとて多い結果であった。さらに、利用推進の観点からは、それぞれの講師へ何件かの質問や相談が入り、それらの情報は共有し対応を始めた。

以上

SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC) 研究会アンケート

今後の SPing-8 の利用促進に役立てるため、アンケートにご協力をお願いいたします。該当する番号に○を付けてください。

1. あなたの年齢
  - 1) 10~20代
  - 2) 30代
  - 3) 40代
  - 4) 50代
  - 5) 60代以上
2. あなたの所属機関
  - 1) 学生
  - 2) 企業
  - 3) 大学
  - 4) 公的研究機関等
  - 5) その他
3. あなたの専門分野 (複数回答可)
  - 1) エンジニアリングセラミックス
  - 2) 誘電性材料
  - 3) 導電性材料
  - 4) 磁性材料
  - 5) ガラス・フォトリソ材料
  - 6) 生体関連材料
  - 7) セメント
  - 8) 陶磁器
  - 9) 環境・資源関連材料
  - 10) エネルギー関連材料
  - 11) 液相プロセス
  - 12) 気相プロセス
  - 13) パウダープロセス
  - 14) キャラクタリゼーション
  - 15) 教育
  - 16) その他材料
  - 17) その他

4. 放射光を利用したことがありますか？

- 1) 1回ある
- 2) 2~3回ある
- 3) 4回以上ある
- 4) ない

5. SPing-8 を利用したことがありますか？

- 1) 1回ある
- 2) 2~3回ある
- 3) 4回以上ある
- 4) ない

6. 今後、SPing-8 を利用したいと思いませんか？

- 1) ぜひ利用したい
- 2) 条件が整えば利用したい
- 3) それほど利用したいとは思わない。

7. 今後、どのような計測手法や技術があれば、あるいは発展すれば良いと思いませんか？ (複数回答可)

- 1) 迅速測定 (測定時間をより短縮する)
- 2) 自動測定 (試料や測定条件等の変更を効率化する。より多数の測定)
- 3) 時間分解測定 (結晶成長過程や反応過程など時間変化を測定)
- 4) 外場等環境下測定 (高圧、電場、磁場、光照射、ガス雰囲気などの試料環境)

- 5) 測定代行・メールイン
- 6) その他 ( )

8. どのような手法、情報に興味をお持ちですか？ (複数回答可)

- 1) 回折・散乱
- 2) 分光 (XAFS, 光電子分光, XMCD)
- 3) イメージング (CT, トポグラフィ)
- 4) 分析 (蛍光分析)
- 5) 相同定
- 6) 結晶構造
- 7) アモルファス構造
- 8) 電子密度分布
- 9) 電子構造
- 10) その他 ( )

9. 本日、粉末回折と全散乱・PDF解析についてセミナーを開催いたしました。ご専門の研究分野や領域にて、当該手法による研究展開や応用のニーズがございましたら、お書きください。また、ご記入内容に関して、講師とぜひ交流を願いたします。

10. SPing-8 や SPing-8 ユーザー協団体へのご意見、要望等、自由にお書きください。

ご協力ありがとうございます。  
会場入り口の回収ボックスまたは総合受付へご提出願います。

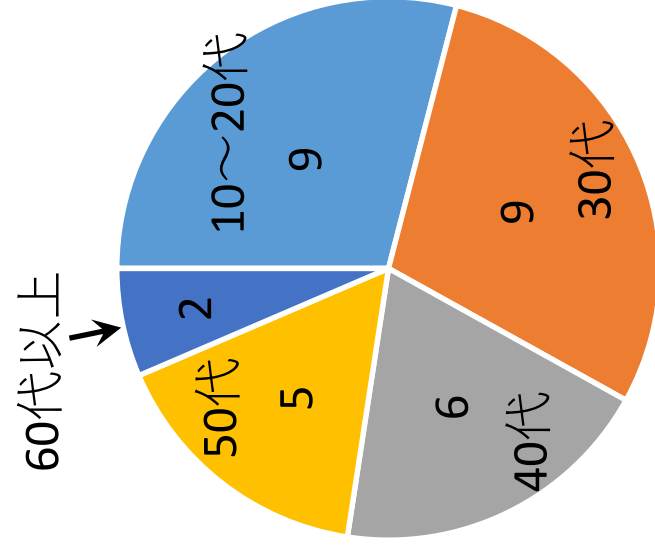
日本セラミックス協会2019年年会 基礎セミナー  
大型放射光施設Spring-8を利用したセラミックス材料の構造物性研究  
－ 何ができるか？ 何がわかるか？ －

## Spring-8ユーザー協同体（SPRUC）研究会アンケート

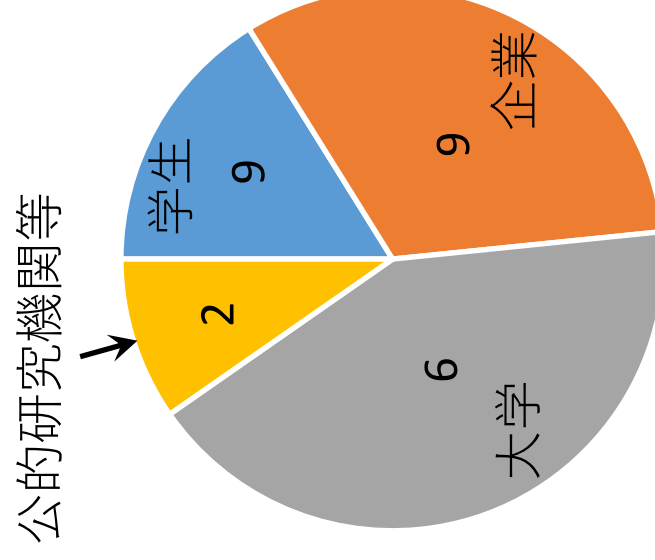
参加者数 60名

アンケート回答数 31

### 1. あなたの年齢



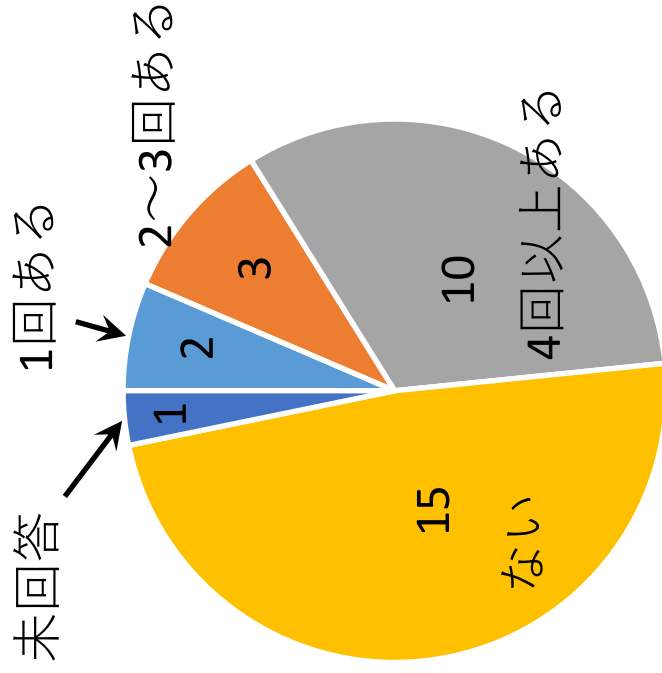
### 2. あなたの所属機関



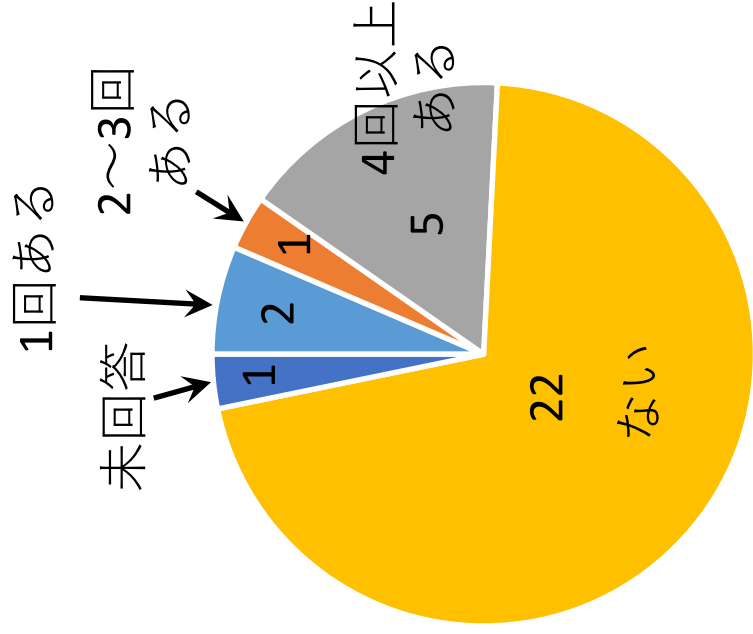
### 3. あなたの専門分野（複数回答可）

14	エネルギー関連材料
7	ガラス・フォトニクス材料
7	環境・資源関連材料
7	液相プロセス
5	誘電性材料
5	導電性材料
5	キャラクタリゼーション
4	パウダープロセス
3	気相プロセス
2	エンジニアリングセラミックス
2	生体関連材料
2	その他材料
1	磁性材料
1	セメント
1	陶磁器
1	教育

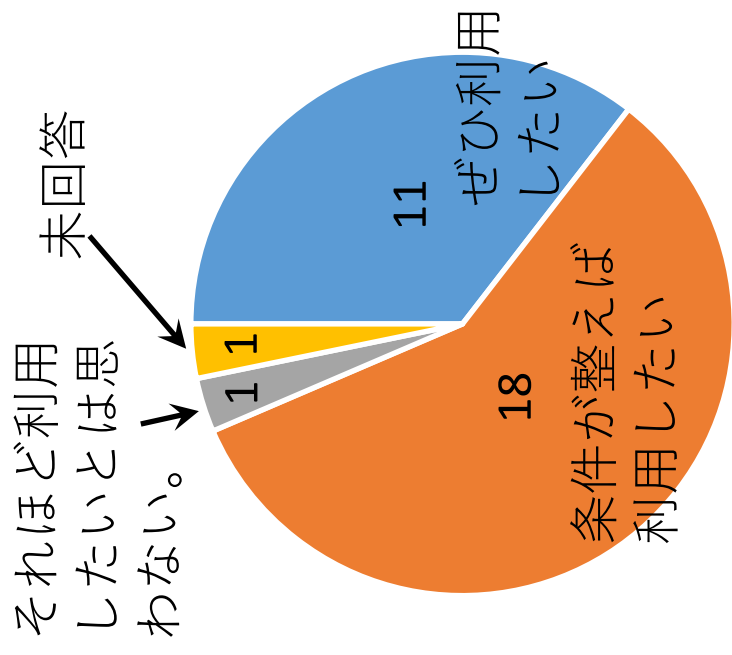
4. 放射光を利用した  
ことがありますか？



5. Spring-8を利用した  
ことがありますか？

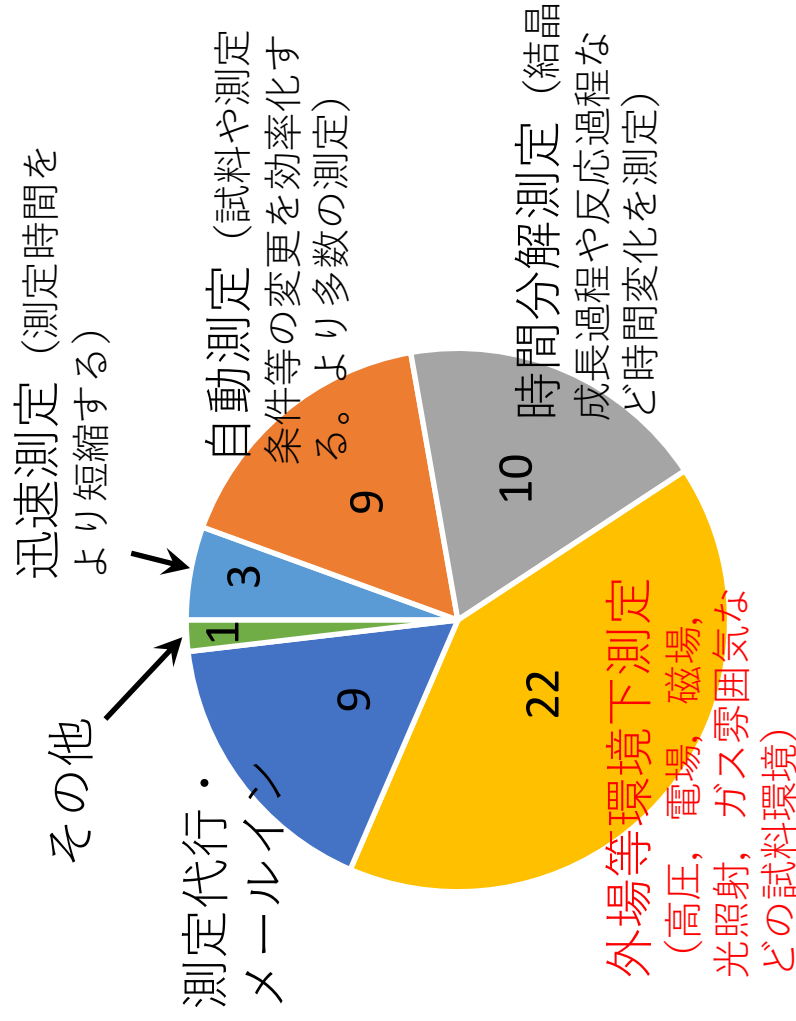


6. 今後、Spring-8を利用  
したいと思いますか？





7. 今後、どのような計測手法や技術があれば、あるいは発展すれば良いと思いますか？ (複数回答可)



8. どのような手法、情報に興味をお持ちですか？ (複数回答可)

21	分光 (XAFS, 光電子分光, XMCD)
19	回折・散乱
18	結晶構造
13	電子密度分布
9	アモルファス構造
9	電子構造
5	相同定
4	イメージング (CT, トポグラフィ)
2	分析 (蛍光分析)
1	その他

9. 本日、粉末回折と全散乱・PDF解析についてセミナーを開催いたしました。ご専門の研究分野や領域にて、当該手法による研究展開や応用のニーズがございましたら、お書きください。また、ご記入内容に関して、講師とぜひ交流を願います。

- ・ 蛍光体の発行中心（例えばEu<sup>3+</sup>イオン, Eu<sup>2+</sup>イオン, Tb<sup>3+</sup>, Tb<sup>4+</sup>イオン等）のまわりの酸素の配位数と非対称性と蛍光強度（3D-PL）との関係
- ・ 大変有用なセミナーでした。ありがとうございます。
- ・ PDF解析とXAFSとの比較があるとよかったです。
- ・ プロトン導電セラミックスの研究をしているが、in-situ測定が簡便かつ迅速に行えるようなので、是非利用させていただきたい。

10. **Spring-8やSpring-8ユーザー協団体へのご意見、要望等、自由にお書きください。**

- ・ 原理や解析の難しさというより、申請して、試料準備、実験のための出張に至る時間的なラグと、その手間が放射光利用のしきいになっている気がします。ビームタイムは短くても良いので、もう少しタイムリーに気軽に測定できると大変ありがたいと考えています。
- ・ やってみたいけど**Spring-8**が良くわからないので、課題申請がともしきいが高い。
- ・ **Spring-8**を利用していたのは約**10**年前でしたが、自動化など進んでいる事におどろきました。昔より、利用ハードルが低くなっているように感じられました。
- ・ (利用の) 入り口が分かりにくい。