

(様式 2)
議事録番号

提出 H28年 2月29日

会合議事録

研究会名：不規則系物質先端科学研究会

日 時：2016年2月8日(月) 13:00 - 18:00

場 所：東京大学 本郷キャンパス 工学部5号館341室

出席者：(議事録記載者に下線)

飯田剛之 (東京大学)、井上 信 (京都大学)、家 泰弘 (日本学術振興会)、
青木勝敏 (東京大学)、奥地拓生 (岡山大学)、岡野哲之 (パナソニック株式会
社 先端研究本部)、尾原幸治 (JASRI)、片山芳則 (JAEA)、勝矢良雄 (物質・材
料研究機構)、加藤健一 (理化学研究所)、Kim Hyunjeong (産業技術総合研究
所)、佐藤豊人 (東北大学)、社本真一 (JAEA)、富中悟史 (物質・材料研究機構)、
前島尚行 (JAEA)、町田晃彦 (JAEA)、松村大樹 (JAEA)、森井幸生 (放射線利
用振興協会)、服部高典 (JAEA)、平野辰巳 ((株) 日立製作所 研究開発グルー
プ)、Sungchul Bae (東京理科大学)、堀口幸一 (科学技術振興機構)、山口展史
(出光興産株式会社 先進技術研究所)、米田安宏 (JAEA)、綿貫 徹 (JAEA)

計 25 名



写真：研究会の様子（講演者：Hyunjeong Kim 氏）

議題：原子二体分布関数（PDF）による局所構造解析の展開について

議事内容：結晶的周期性を持たない構造の乱れを捉える研究手法として、原子二体分布関数(PDF)解析が有効な手法となる。今回の会合では、SPring-8における各PDF解析装置の利用を中心に、相補的な中性子PDF解析も加えてPDF利用研究の現状について各講演者に紹介していただいた。既存および応用PDF研究手法のメリット／デメリットを参加者間にて共有し、今後のPDF利用研究の方向性について議論した。

1. 尾原幸治氏（JASRI） 「0次元検出器によるPDF解析の現状」

0次元（ポイント型）検出器と受光スリットを組み合わせバックグラウンドについて可能な限り除去することで、定量性のあるPDF解析が可能となることが示された。非晶質材料のバルクPDF解析については、ベンディングビームラインでは2-4時間程度、IDビームラインを用いれば約5分程度で実施可能であることも紹介された。また、他手法による評価から考えられる *ex situ* PDF解析の課題を挙げ、*in situ* PDF解析の重要性が示された。

2. 米田安宏氏 (JAEA) 「PDF 解析を用いた強誘電体の局所構造解析」

強誘電性の発現機構モデルとして変位型と秩序-無秩序型が提唱されているが、その実験的解明に PDF 解析と EXAFS 解析を相補に利用することが有効であることが示された。一例として示された BaTiO₃ ではキュリー温度前後で変異型に特徴的な短い距離相関での PDF の変化が見られる一方、XAFS では Ti 吸収端の whiteline はシャープなままであり、Ti3d 軌道が非局在的であることを示唆している。この結果は Ti の変位によって生じる電気双極子によって強誘電性が発現していることが示された。

3. 飯田剛之氏 (東京大学)

「材料中 Minority 成分の構造解析における PDF 解析の利用」

これまで非晶質材料と結晶材料の混合物の解析として、中性子回折を利用した PDF 解析の差分解析 (純結晶材料の PDF 解析 - 混合物 PDF 解析 = 混合物の非晶質材料の PDF 解析) をゼオライト材料の構造解析へ適用し、Minority 成分の評価にも有用であることが示された。さらに、今後、ゼオライト材料をナノ粒子化させ表面構造の比率を増やし、その表面構造の変化を計算機シミュレーションにより原子レベルで可視化していくアイデアが紹介された。

4. 加藤健一氏 (理化学研究所)

「一次元光子計数型検出器による In Situ 全散乱実験の現状と今後」

まず、ドメインサイズの異なる構造の評価に有用な PDF 解析について、国内外の放射光施設での実施状況について紹介がなされた。シャープな結晶のピークとブロードな非晶質材料のピークの同時計測 (PDF 解析) をするために、ダイナミックレンジのある検出器の選定、さらに検出器毎の特有な問題 (特に光子カウンティングに関して) の解決が必要であることが示された。今後、コヒーレント光の活用も組み合わせ、機能に直結した本質的な時空間の不均一評価に本手法が有用であることも示された。

5. 社本真一氏 (JAEA) 「中性子を用いた結晶 PDF 解析」

J-PARC が所有する装置群の $Q_{\max}$ 値や実空間分解能の紹介、PDF 解析より得られた最近の研究例が紹介された。さらに、PDF 解析に関連した中性子ならではの研究手法 (Dynamic PDF、PDF tomography、Magnetic RMC など) が紹介された。中性子 PDF からフォノンやマグノンの分散曲線を導出した海外の研究例は PDF を利用した新しい研究の展開の可能性を与えるものであった。

6. 町田晃彦氏 (JAEA) 「光・量子融合連携プログラムでの取り組み」

「エネルギー貯蔵システム実用化に向けた水素貯蔵材料の量子ビーム融合研究」の目的と、そのための PDF 解析の必要性などが紹介された。また、BL22XU におけるプロジェクト以外の PDF の研究について、最近の成果である PbCrO₃ の電化ガラスの発見と、バルクメタリックガラスのひずみ解析への適用について紹介された。

7. Hyunjeong Kim 氏 (産業技術総合研究所)

「Local structural study using RA-PDF setup at BL22XU」

BL22XU において実施している PDF 利用研究について講演を行った。V-Ti 水素貯蔵合金の水素吸蔵放出サイクルに伴う水素貯蔵量の劣化度と PDF の距離依存性ブロードニングに相関があることを明らかにし、ブロードニングの原因が転位密度の増加によることを MD シミュレーションから示した。Mg-Ti 合金薄膜での PDF の取得に成功し、水素化によって hcp-Mg マトリクス中にサイズが 30 Å 程度の fcc-TiH₂ クラスタ形成されることが PDF 解析から示された。

8. 前島尚行氏 (JAEA) 「BL22XU における時分割 PDF 測定の実現に向けて」

BL22XU では高エネルギーX線 (<70keV) と大型デジタルフラットパネル検出器を利用したその場かつ時分割 PDF 測定を進めており、得られた全散乱パターンの補正法の現状について紹介された。また、例として LaNi₄.5Al_{0.5} 合金の水素吸蔵過程の時分割測定が紹介され、1 秒の露光時間でも PDF 解析が可能なデータが得られることが示された。

以上