

(様式 2)

議事録番号

提出 2013 年 9 月 14 日

会合議事録

研究会名：3 研究会合同会合

「機能性材料ナノスケール原子相関」、「放射光赤外」、「不規則系物質先端科学」

日 時：2013 年 9 月 6 日 13:00-17:00

場 所：京都大学宇治おうばくプラザ セミナー室 4・5

出席者：(議事録記載者に下線)：

青柳拓也 ((株) 日立製作所)、池本夕佳 (JASRI)、白杵 毅 (山形大学)、梅咲則正 (兵庫県立大)、尾原幸治 (京都大)、岡村英一 (神戸大学)、小野寺陽平 (京都大)、梶原行夫 (広島大学)、木下豊彦 (JASRI)、木村耕二 (京都大)、小原真司 (JASRI)、下田景士 (京都大)、社本真一 (原子力機構)、高尾正敏 (大阪大)、留野 暁 (旭硝子)、中居 司 ((株) 東芝)、永谷清信 (京都大)、橋本英樹 (岡山大)、水野章敏 (学習院大学)、三井昭男 (京都大)、森 一広 (京都大)、森 正弘 (京都大)、森脇太郎 (JASRI)、家路豊成 (立命館大)、山田祐貴 (ノリタケカンパニーリミテッド)

計 25 名

議題：「不規則系物質先端科学研究会」、「機能性材料ナノスケール原子相関研究会」、「放射光赤外研究会」の合同研究会を開き、各研究会間の相互理解を行う。そして、研究手法主体ではなく、サイエンス主体の新しい方向性への向けた実験技術の相補利用について議論を行う。

議事内容：

13:05-13:35 SPring-8 BL04B2, BL13XU における HEXRD, AXS 実験の現状と将来展望 小原真司 (高輝度光科学研究センター)

最初に BL04B2 における高エネルギー X 線回折 (HEXRD) 実験のハイスループト化、BL13XU における X 線異常散乱 (AXS) 実験について現状の報告が行われた。SPring-8 のアンジュレータから得られる高輝度 X 線と X 線異常散乱スペクトルの結晶分光によるエネルギー分解能の向上により、元素選択性のある X 線異常散乱法がより簡便に使用可能となったことは今後のこの分野の発展に大きく寄

与していくであろう。また、近年 BL04B2 では無容器実験環境の整備が行われてきたが、ガスジェット浮遊法の高度化により高温（3000℃）環境の無容器実験が可能となったことが紹介された。さらに、PDF 解析の新しい適用例、無容器実験環境の高度化計画、成果の創出状況に関する報告がなされた。

続いて、BL04B2 では新規ユーザーが年々増加していることが報告され、SPring-8 の次期計画へ向けて、Bragg ピークの有無によらない様々な材料研究について多様な実験が可能な実験環境の整備、中性子や理論計算との相補利用、コヒーレント光を用いる二体相関を超えた新しい構造解析手法の開発などの重要性が示された。

質疑の時間では、無容器実験の今後の可能性に関する質問があった。

13:35-14:05 高速相変化材料と界面層効果の解析 中居 司 ((株)東芝)

高速相変化材料、特に2層光ディスクにおける界面層の効果をHAXPES、XRD、XAFSを用いて解析した研究例が紹介された。これまで幅広く研究がなされてきたGe-Sb-Te系よりもGe-Bi-Te系の方が結晶化速度が速いことが報告された。さらに、界面層の有無による消去（結晶化）速度の違いを種々の放射光実験より解析し、界面層が存在することにより、アモルファス相の電子状態がより結晶相に近づいていることが報告された。質疑ではHAXPESで観測している深さ方向の情報を考慮することと、価電子帯の部分状態密度の考察に関しての議論が行われた。

14:05-14:35 低温気密封止用バナジウム系低融点ガラス“Vaneetect”の開発 青柳拓也 ((株)日立製作所)

鉛フリーの低温気密封止用低融点ガラスの開発に関する研究紹介が行われた。とくに吸湿特性の改善に向けて SPring-8 の HEXRD および XAFS を用いた構造解析を行った結果が報告された。HEXRD データに基づいた PDF 解析より V_2O_5 はガラス化することにより結晶に存在していた VO_5 多面体の稜共有が消失し、それに伴い V-O 間距離が短くなることが明らかとなった。また、ネットワーク形成物質である P_2O_5 添加量の増加とともに V-O 間距離が長くなりかつ V-V 間距離が短くなることが示された。回折実験データに基づいた逆モンテカルロシミュレーションから、 $50V_2O_5-50P_2O_5$ では、 VO_x 多面体がネットワークを形成しているというサッカリアセンの法則に反する興味深い結果が得られた。そして、ネットワーク形成物質である P_2O_5 添加量の増加に伴い緻密なパッキング構造をもち、それに伴いガラスの吸湿性が抑えられることも明らかになった。吸水性の高い P_2O_5

を添加するにもかかわらず、 V_2O_5 への P_2O_5 を添加量が増えるほど吸湿性が抑えられることも非常に興味深く、本ガラス系の構造の特異性が浮き彫りになった。さらに、蓄積された物性データと構造との相関性について議論が行われた。

14:50-15:20 放射光X線と中性子の相補利用によるリチウムイオン伝導ガラスの伝導経路予測 森 一広 (京都大学)

リチウムイオン伝導ガラスおよびガラスセラミックスの伝導経路予測について、新しく開発された解析手法が紹介された。従来、結晶の構造解析に用いられる BVS (Bond Valence Sum) の価数評価手法をアモルファス構造解析へ適用し、得られる価数分布からリチウムイオンの安定位置と準安定位置を可視化することによって、イオン伝導性の高いガラスセラミックスとその母層であるガラスのイオン伝導性の違いの可視化に挑戦した意欲的な研究成果であった。本系は、Li イオン電池の固体電解質として優れた性質を持っていることから、今後の材料開発への指針を将来的に打ち出せる可能性を秘めている。

15:20-15:50 SPring-8 における赤外放射光の特徴と利用 池本夕佳 (高輝度光科学研究センター)

SPring-8 の赤外ビームライン BL43IR の紹介が行われた。放射光と通常の熱放射光源の違い、顕微分光の特性、赤外分光とラマン散乱との違いなど、赤外放射光の特徴が分かりやすく説明された。また、これまでの適用例の紹介や、不規則系/機能性材料への適用の可能性についても言及があった。赤外放射光の最大の利点は、その輝度の高さ故、ビームを絞れることにあり、今後の機能性材料の構造物性研究にさらに利用されて行く可能性を秘めていることを垣間見ることができた。

15:50-16:20 高圧での赤外放射光分光による物質の電子状態研究 岡村英一 (神戸大学)

赤外放射光を利用した高圧研究例、特に希土類系の圧力誘起電子状態変化についての研究の結果が紹介された。赤外放射光を用いれば、ダイヤモンド anvil cell を用いた高圧下での実験ができることは分野外の人間にとっても興味深い内容であった。また、放射光赤外と強相関係/高圧の親和性の良さや、あるいはデータの解析法や解釈の仕方が、専門外にもわかりやすい形で説明が行われた。さらに、最後に不規則系/機能性材料への適用についても提案があった。

16:25-16:55 「SPring-8 の利用促進に資する利用者の動向調査」討論

主に関連ビームライン (BL04B2、BL13XU、BL43IR) のアップグレードに関する議論が行われた。詳細は別途報告書に記載。