

(様式 2)  
議事録番号

提出 2013 年 4 月 25 日

## 会合議事録

研究会名：機能性材料ナノスケール原子相関研究会

日 時：2013 年 3 月 17 日

場 所：東京工業大学大岡山キャンパス

出席者：梅咲則正（兵庫県立大学）、藤原明比古（JASRI）、脇原徹（横浜国立大学）、小野寺陽平（京都大学）、橋本英樹（岡山大学）、小原真司（JASRI）、紅野安彦（岡山大学）ほか 計 67 名（ワークショップ参加者を含む）

議題：SPRING-8 ワークショップ「無容器環境が切り拓く新しいガラスサイエンス」の招待講演による話題提供と研究会の活動について

議事内容：

### 1. 「開会の挨拶」紅野安彦（岡山大学）

SPRING-8 ワークショップとの共同開催の形式となった第 1 回研究会会合の開催にあたり、機能性材料ナノスケール原子相関研究会の発足の経緯とこれまでの会員数動向、SPRING-8 ワークショップ開催の趣旨等について説明された。



### 2. 「無容器法を用いた新規ガラス材料の創製」井上博之（東京大学）

ガス浮遊炉を用いた無容器法により新たな特性をもつ新規ガラスを作製し、構造解析により原子配列に見られる特徴について解説された。例として紹介されたのは BaO-TiO<sub>2</sub> 系であり、融点が低く共晶組成に近い BaTi<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 組成において、直径 2mm 程度の真球に近いガラスが得られ、酸化物ガラスとしては極めて高い屈折率をもつものである。分子動力学法による構造解析によると、Ti の配位数は約 5 であり、酸素の最密充填構造というこれまでに知られたガラスの原子配列とは異なる興味深い特徴を有していることが示された。

### 3. 「静電浮遊法を用いた酸化物融体の熱物性測定-ISS での実験にむけて」石川 毅彦 (JAXA)

JAXA が取り組む静電浮遊法の位置付けが他の浮遊法（電磁浮遊、音波浮遊）との比較に基づいて説明され、静電浮遊炉の開発や液滴振動を利用した融体の熱物性測定の実績が挙げられた。酸化物融体を対象とした場合、蒸発の抑制や帯電の制御の観点から、金属合金系に比較して安定した浮遊や溶融が困難であるとの話であったが、絶縁体を高温で浮遊できる静電浮遊法の特徴を生かして開発が進められている国際宇宙ステーション (ISS) に搭載される浮遊炉の実験計画が紹介された。

### 4. 「動き出した高強度全散乱装置 J-PARC NOVA と非晶質構造研究への展開」大友 季哉 (KEK)

物質科学を含む幅広い分野の最先端研究を行うための加速器施設 J-PARC と物質・生命科学実験施設の高強度全散乱装置 NOVA (BL21) について、その優れた性能と中性子実験で得られる情報がこれまでの測定例に基づいて解説された。NOVA の一般利用の開始により、小角から high-Q 領域に至るまで正確な全散乱測定が短時間、少量試料でも可能になり、SPring-8 の放射光との相補的利用がより一層期待される講演であった。

### 5. 「高輝度放射光と大規模理論計算を併用した非晶質物質の原子・電子レベル構造解析」小原 真司 (JASRI)

DVD やブルーレイディスクに利用される Ge-Sb-Te 系高速相変化材料と無容器法で合成された  $\text{MgO-SiO}_2$  系ガラスについて、SPring-8 での高エネルギー X 線回折測定、元素選択性のある X 線異常散乱 (AXS) 測定と逆モンテカルロ法や第一原理 (DFT) -分子動力学 (MD) 計算といった手法を併用することで、アモルファス構造における構成元素の繋がり方を解明した研究成果が紹介された。さらに、材料研究に特化し多様な実験手法を選択できる新たな実験ステーション設置の重要性を強調された。

### 6. 「計算物質科学が切り拓く新しいガラスサイエンス」高田 章 (旭硝子)

最初に、P. W. Anderson の言葉を引用と共にガラス構造とガラス転移がガラス研究の両輪であることを示され、ご自身の研究を紹介された。局所構造の解析法として挙げられた “Structon” という概念や “Local Oxygen Packing Number (LOPN)” という指標による解析、局所構造に依存するエネルギー分布解析は、

それぞれ動的構造単位解析、幾何学的解析、統計熱力学的解析による構造多様性のシミュレーションであり、ガラス研究の両輪を支える斬新なアイデアが分かりやすく解説された。

7. 「SPring-8 の利用について」 藤原明比古 (JASRI)

SPring-8 を利用したことがないワークショップ参加者に向けて、SPring-8 およびビームラインの概要と利用研究課題募集について解説された。

8. 「次回 SPRUC 研究会について」 梅咲則正 (兵庫県立大学)

次回の機能性材料ナノスケール原子相関研究会について、開催時期および場所に関する現時点の計画が説明された。

9. 最後に、材料科学分野の専用実験ステーションの建設を含めた将来目標が研究会副代表より示され、機能性材料ナノスケール原子相関研究会の今後の活動と併せて議論された。

SPring-8ワークショップ

# 「無容器環境が切り拓く新しいガラスサイエンス」

—超高温融体の熱物性計測・量子ビーム計測・大規模シミュレーションの協奏—

公益財団法人 高輝度光科学研究センター(JASRI)

SPring-8ユーザー協同体(SPRUC)

機能性材料ナノスケール原子相関研究会

協賛 公益社団法人 日本セラミックス協会ガラス部会

# SPring-8ユーザー協同体 機能性材料ナノスケール原子相関研究会



## 発足の経緯

2012年 2月 7日

小原さんよりご提案

8月24日

研究会設置申請 (第一期追加募集の締切日)

8月25、26日

SPring-8シンポジウム2012(大阪大学)

設置申請の打合せ

(梅咲、藤原、脇原、小野寺、橋本、小原、紅野)

8月27日

研究会名称を修正して再申請

「機能性材料ナノスケール原子相関研究会」

9月 3日

設立承認

2013年 3月17日

第1回研究会開催

(SPring-8ワークショップとの共同開催として)

## 会員数動向(累積)

|     |    |
|-----|----|
| 9月  | 12 |
| 10月 | 16 |
| 11月 | 19 |
| 12月 | 29 |
| 1月  | 34 |
| 2月  | 38 |

## 会員内訳

|        |    |
|--------|----|
| 大学(国内) | 17 |
| 企業     | 12 |
| JASRI  | 4  |
| 海外     | 5  |

# プログラム

9:00-9:05 開会の挨拶 (岡山大学 紅野安彦)

## 【招待講演】

9:05-9:30 「無容器法を用いた新規ガラス材料の創製」 (東京大学 井上博之)

9:30-9:55 「静電浮遊法を用いた酸化物融体の熱物性測定  
-ISS での実験にむけて」 (JAXA 石川毅彦)

9:55-10:20 「動き出した高強度全散乱装置  
J-PARC NOVA と非晶質構造研究への展開」 (KEK 大友季哉)

10:20-10:35 (休憩)

10:35-11:10 「高輝度放射光と大規模理論計算を併用した  
非晶質物質の原子・電子レベル構造解析」 (JASRI 小原真司)

11:10-11:35 「計算物質科学が切り拓く新しいガラスサイエンス」 (旭硝子 高田章)

11:35-11:50 「SPring-8の利用について」 (JASRI 藤原明比古)

11:50-12:00 「次回SPRUC研究会について」 (兵庫県立大学 梅咲則正)

12:00 閉会 (JASRI 小原真司)

18:00- 交流会(参加自由) 和旬(自由が丘店)にて