

(様式 2)

議事録番号

提出 平成 29 年 9 月 13 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：平成 29 年 9 月 3 日(日) 10:00~17:00

場 所：広島大学 東千田キャンパス 東千田未来創生センター

出席者：小原 真司 (物質・材料研究機構)、横田 紘子 (千葉大学)、高橋 幸生 (大阪大学)、小野寺 陽平 (京都大学)、片山 真祥 (立命館大学)、内山 智貴 (京都大学)、稲田 康宏 (立命館大学)、稲葉 誠二 (AGC 旭硝子)、乾 雅祝 (広島大学)、片山 芳則 (量子科学技術研究開発機構)、藤原 明比古 (関西学院大学)、脇原 徹 (東京大学)、高橋 勝國 (京都大学)、堀川 裕史 (東京大学)、北村 尚斗 (東京理科大学) 計 15 名

議題： 最近の研究成果について

議事内容：

プログラムに沿って 以下 に概要を示す。

・「量子ビーム実験、構造モデリング、トポロジカル解析を併用した不規則系物質の構造解析」小原

2 体分布関数 (PDF) を用いた従来の非晶質の構造解析の問題点をあげ、放射光 X 線と中性子の相補利用の重要性について説明があった。また、多成分からなる実用化材料では X 線異常散乱および XAFS の併用が重要となること、新しいトポロジカル解析法であるパーシステントホモロジーを用いた非晶質の構造のデータベース化の必要性について説明があった。本講演により、当研究会の主旨が述べられた。

・「原子対相関関数を用いた圧電固溶体の局所構造解析」横田

圧電体として実用化されているペロブスカイト型構造を有する  $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$  を例にして、結晶における 2 体分布関数 (PDF) の解析の重要性が説明され、PDF 解析により  $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$  における Pb の変位を詳細に解析することより、新たな相図が示された。さらに講演者が利用している RMC モデリングコード RMCProfile

は結晶学と全散乱実験の利点を生かしたモデリング法であり、本手法の有用性が示された。

・「X線タイコグラフィ XAFS によるナノ構造・機能解析」高橋

X線タイコグラフィの原理について説明があり、 $\text{CeO}_2$ 系触媒を例として、顕微 XAFS よりも高空間分解能で XANES データが得られることが示された。また、本実験を行っている現在のビームラインの構成と、次期 SPring-8 II に向けてピンクビームを用いる新手法の提案があった。

・「放射光・中性子・NMR を用いたリン酸塩ガラスのネットワーク構造解析」

小野寺

リン酸塩ガラスの構造解析をするにあたり、放射光（回折・XAFS）・中性子・NMR を用いることの必要性和、得られた実験データを用いて逆モンテカルロ (RMC) シミュレーションをする際の注意点の説明があった。また、実際の解析例として、熱膨張異常を示す  $\text{ZnO-P}_2\text{O}_5$  における組成とネットワーク構造の関係について詳細な報告があった。

・「時間分解・空間分解 XAFS 法を用いた反応解析」片山

2次元検出器を用いた新しい XAFS 法の原理について説明があり、リチウムイオン二次電池を例として、イメージング XAFS による正極における反応分布の解析、波長分散型 XAFS による時間分解・空間分解 XAFS、多元素同時解析の実施例が紹介された。

・「高エネルギーX線回折・X線吸収分光を相補的に用いた燃料電池用 Pt カソード触媒の構造解析」内山

固体高分子形燃料電池における Pt ナノ粒子触媒の役割について説明があり、熱処理と MEA 化が電気化学特性に及ぼす影響が紹介された。このような変化の要因を明らかにするため、EXAFS と PDF を用いた構造解析を行った結果が報告された。

・SPring-8 次期計画に向けた総合討論

上記の講演内容を踏まえて、ビームライン高性能化検討作業部会からのアンケート第二弾「(1) SPring-8-II の first light で何を見るか、(2) 上記の目的で今から行うべき技術開発は何か」について議論した。小原代表より、現在、非晶質の

構造において不明になっている点について具体的に説明があり、本研究会が提案している SPring-8 II の挿入光源ビームラインから得られる高輝度低エミッタンスコヒーレントビームを用いた versatile な回折計の紹介と低エミッタンスピンクビームの利用の可能性について説明があった。また、versatile な回折計の特徴を生かした新たな機能の可能性について議論された。