



文責 高尾 2016.03.28

第1回 SPRUC 分野融合研究（実用）ワークショップ議事録

SPRUC 研究会組織検討作業部会等で発議され、評議員会で設置が決定された、分野融合型研究グループ「実用」の第1回ワークショップを開催した。

開催趣旨 「実用」研究グループでは、実用材料の開発加速に向けて、実用上未解明の技術ボトルネックに真正面から取り組むために、背景のサイエンスをきちんと研究解明すること、そのために最先端の放射光装置を徹底的に使うことを基本精神とした研究者コミュニティ作りを行います。活動内容はいくつかのテーマ候補の中から創・蓄・省エネルギーデバイスで一般性のある「固液界面の構造と可視化の可能性」を取り上げ、ベテランユーザーと新規参入のユーザー候補を加えて、新たな出口志向のユーザーコミュニティを形成することを活動目標とします。具体的なアウトプットについて研究グループ内のワークショップ等での検討後、実用研究グループとして SPring-8 共同利用制度「新分野創成利用課題」に相応しいテーマを企画立案し、利用申請を目指すことを目標とします。本ワークショップでは、SPring-8 の多数のビームラインの包括的利活用のほか、計算機シミュレーションとの連携も視野にいたした活動についても議論します。

（分野融合研究については以下の URL を参照。

HP の URL: http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc/SG_SPRUC_info/practical_app.html)

（「新分野創成利用」については

http://www.spring8.or.jp/ja/users/proposals/call_for/epoch_16b/)

記

ワークショップ次第

- 主催 SPRing-8 ユーザー共同体：SPRUC（会長高原 淳,九州大学）
世話人（実用）高尾正敏（大阪大学）、若林裕助（大阪大学）
（全体）原田慈久（東京大学）、高田昌樹（東北大学）
（PD）松井 純爾（兵庫県立大）、福山秀敏（東京理科大学）
対象 SPRUC 会員(SPring-8 ユーザーID 所有者)限定（演者、招待者を除く）
日時 2016年3月28日（月） 13:00～17:30（予定）
場所 大阪大学基礎工学研究科 G 棟 5階講義室（G508）
<http://www.osaka-u.ac.jp/ja/access/toyonaka/toyonaka.html>（69番の5階）
世話人 実用グループ代表 高尾正敏 若林裕助
参加人数 19名（ほか賛同いただいているが、欠席された方10数名）
守秘義務確認 研究計画検討会のため、当日の発表資料は参加者限定とし、守秘義務確認の署名を頂きました。

話題提供とディスカッション

主 題 「固液界面の構造と可視化の可能性」

13:00-	はじめに	中川敦史 (SPRUC 副会長、大阪大学)
13:05-	趣旨説明	高尾正敏 (世話人、大阪大学)
13:20-	「固液界面とエネルギーデバイス」	中西真二 (トヨタ自動車)
13:40-	「京」を用いた蓄電池界面・SEI 膜の第一原理計算解析	館山佳尚 (NIMS, ESICB)
14:10-	「溶媒とダイナミクスの実時間観測の可能性」	長澤 裕 (立命館大)
14:30-	「表面 X 線回折による固液界面の構造観測」	若林裕助 (大阪大学)
14:50-	休 憩	
15:10-	「SPring-8 における新分野創成利用課題の推進状況」	為則雄祐 (JASRI)
15:30-	コメントおよびディスカッション 順不同	
	永島英夫 (九州大学)、 原田慈久 (東京大学)、高谷光 (京都大学)、 松浦弘泰 (東京大学)、山添誠司 (東京大学)、藤原明比古 (関西学院大)、 土井 教史 (新日鐵住金)、北岡良雄 (大阪大学)、高田昌樹 (東北大学)、 福山秀敏 (東京理科大)	
17:15-	おわりに	松井純爾 (PD)

主な議事：

① 中川副会長より挨拶のあと、高尾より趣旨説明を行った。2015年9月に開催した準備会での議論、その後の関係者へのインタビュー等の結果として、ワークショップの主題を「固液界面の構造と可視化の可能性」としたことの説明を行った。固液界面、気体固体界面等では、従来固体側の種々の測定はおびただしいほど行われてきているが、液体側、気体側の測定は難しいこともあり、本質を示す測定が数少ないことが課題として認識される。特に固体表面近傍の数十ナノメートルの厚みのある界面領域での、液体あるいは、気体とのイオンと溶媒物質による、溶媒和、脱溶媒和過程、物質（イオン）移動、化学反応を伴う挙動は、二次電池、メッキ、腐食、固体触媒を用いる化学反応等で、重要であるとの観点で議論を行った。

その中で、中心話題は、リチウムイオン二次電池の負極表面に生成するSEI (Solid Electrolyte Interphase) 膜の生成に関するもので、館山らの分子動力学シミュレーションの興味ある結果が普遍的な現象であるかどうかについての、実証実験の重要性について議論した。特に放射光を用いた固液界面近傍の化学反応と構造形成の観測については、物づくりの現場へのフィードバックが期待される。さらに、中西から紹介のあった最近トピックスとして、イオン濃度が従来の数十倍になる高濃度電解液での、イオン伝導度の著しい増加について、溶媒和されたイオンの構造と挙動を見極めることの重要性も議論された。更に、長澤からは、界面現象では、反応時間、緩和時間等が重要で、電子遷移、物質移動、等を考慮すると、フェムト秒、ピコ秒、ナノ秒領域での、ダイナミクスを追いかけるこ

とが可能な実験設備の整備が必要であり、また X 線だけでなく、紫外・可視・赤外領域に渡るレーザーなどをポンプ用あるいはプローブ用として用いるマルチプローブ計測も必要あるとの紹介があった。若林からは、固液界面付近の構造解析が、X 線反射率測定や、表面回折法で可能であることの例が示された。特に界面での反射・回折では S E I 膜生成シミュレーション結果を検証する計測が可能であるとの紹介があった。

② 本研究グループでは、トップダウン型研究の最近の流れとして、物づくり、計測さらに、理論・シミュレーションが協働していきたいとの希望を高尾から説明した。福山 PD からは、折角プロジェクト起案し実施を目指すからには、個別の結果の優劣ではなく、科学的普遍性を獲得する方向で進むようにとの指示があった。

③ 為則より「新分野創成利用課題」についての考え方と現状について紹介があったことを踏まえて、本研究会の目的である、トップダウン型の分野融合研究としてのプロジェクトフォーメーションについて議論を行った。SP-8 2016B 期申請に向けての準備の仕方について高尾より方針説明を行った。松井 PD からは、狙いを絞るようとの指摘があった。また、高田より運営体制についての基本認識についての最近の他の国プロでの例の紹介があった。

④ ディスカッションでは、上記の件について更なる深耕のための質疑があった。特に原田からは軟 X 線領域での微粒子の粒径計測の可能性について提案があり、他の計測手段を抱き合わせると微粒子の触媒作用についての新たな知見が得られる可能性についての紹介があった。松浦からは、第一原理シミュレーションを受けて、物理モデル形成についての考え方についてのコメントがあった。

⑤ 本研究グループが中核になって行う研究テーマは新たな分野を開拓するものであり、そのためには、新たな実験手段や装置を開発する必要が出てくる。在来の装置を使い倒して、施設全体を利用することに努めるほか、新たな計測装置を開発することも視野に入れておくことが必要であるので、本グループとしても、自ら新規装置開発のための資金獲得を目指すほか、汎用性が高くなることが予想されるものに関しては、**理研および JASRI へ新設・更新の提案**を行っていく。

⑥ H 2 8 年度開始予定の J S T 戦略事業 戦略目標「材料研究をはじめとする最先端研究における計測技術と高度情報処理の融合」は当研究グループと関連深いので、注視し、応募検討も視野に入れるように高尾より説明した。

(達成目標) 本戦略目標では、材料科学・ライフサイエンス等の分野において、計測・解析技術の深化により新たな科学の開拓が強く期待される研究課題について、計測対象の特徴量解析技術を構築するとともに、それらを新たな計測・解析技術へと展開することを目的とする。具体的には、以下の達成を目指す。(1) 計測対象の特徴量解析技術の構築 (2) (1) を活用した新たな計測・解析技術の構築 http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/28/03/1368512.htm

⑥ 次回WSの検討項目。 固液界面での追加として、メッキ、腐食、および触媒について行いたい。時期は9月ごろを予定。