

(様式2)

議事録番号

提出 平成18年 9月 4日

## 会合議事録

研究会名：不規則系物質先端科学研究会 — 第1回会合 —

日時：平成18年8月28日、8月29日

場所：(財)高輝度光科学研究センター 放射光普及棟 中講堂

出席者：(議事録記載者に下線)

安仁屋 勝	熊本大学 院自然科学
<u>乾 雅祝</u>	広島大学 院総合科
臼杵 毅	山形大学 理
内野 隆司	神戸大学 理
大友 季哉	高エネルギー加速器研究機構
柿沼 藤雄	新潟工科大学 工学部
梶原 行夫	広島大学 院総合科
片山 芳則	日本原子力研究開発機構
川北 至信	九州大学 院理
河原 敏男	大阪大学 産業科学研
小原 真司	(財)高輝度光科学研究センター
下條 冬樹	熊本大学 院自然科学
鈴谷 賢太郎	日本原子力研究開発機構
武田 信一	九州大学 院理
鄭 誠虎	分子科学研
中平 敦	大阪府立大学
服部 高典	日本原子力研究開発機構
星野 公三	広島大学 院総合科
松田 和博	京都大学 院工
松永 利之	松下テクノロジー
丸山 健二	新潟大学 理
森下 徹也	産総研
余野 建定	宇宙航空研究開発機構
脇原 徹	横浜国立大学 院環境情報
Phil Salmon	University of Bath

計 25 名

議題：理論・シミュレーションと放射光実験との協力関係の構築、ならびに今後の活動方針の決定、中性子散乱実験との連携の模索

議事内容：

不規則系物質先端科学研究会は、ランダム系物質高エネルギーX線回折研究会を主たる母体としながら、高温 BLSG、高分解能非弾性散乱 BLSG、理論研究会の不規則系研究者を加えて発足した。第1回の会合は、よりアドバンスな成果獲得のため理論・シミュレーションと放射光実験の協力関係の構築を目指して、2日間にわたる研究会を開催した。研究会のはじめに、JASRI 利用研究促進部門部門長の高田先生にご挨拶を頂いた後、液体、ガラスの構造と電子状態に関わる研究をされている理論家の方々から、実験への要望や問題提起をして頂き、それをもとに SPring-8 の関連するビームラインの将来望ましい方向や、中性子散乱との連携の必要性などについて討論した。

プログラムと提起された問題の概略

8月28日（月）

13:30～13:35      ご挨拶                      高田 昌樹（JASRI/理研）

13:35～13:40      これまでの経緯      乾 雅祝（広大院総合科）

13:40～14:40      内野 隆司（神戸大理）

「ガラスの欠陥構造と電子状態」

－高エネルギーX線回折法によるガラスの欠陥構造の直接観察の可能性－

【提言】ガラス中の濃度 ppm オーダーの欠陥状態が、ガラスの中距離構造まで影響を及ぼすとき、動径分布関数の微量な変化として観測が可能か？光誘起欠陥を回折実験のその場観測で検出可能か？

14:55～15:55      下條 冬樹（熊大院自然科学）

「不規則系物質の第一原理シミュレーション」

－理論から実験に望むもの－

【提言】独立な実験データをできるだけ多く駆使して多成分系の部分構造を導出できるような、回折実験（放射光、中性子）やX線吸収微細構造測定などの協力関係の構築が必要。

16:15～17:15 鄭 誠虎 (分子研)

” Role of structural relaxations and vibrational excitations in the high-frequency dynamics of liquids and glasses “

- new insights from theory waiting for experimental confirmation -

【提言】より分解能の高い非弾性X線散乱装置の開発が必要。動的音速が流体力学的音速より速くなる”正の分散”がこれまで多く報告されてきたが、今後、ガラスでは理論的に予想される”負の分散”が観測にかかる可能性もある。

17:20～17:50 総合討論 (第1部)

18:00～19:30 懇親会

8月29日 (火)

9:00～10:00 森下 徹也 (産総研)

「温度・圧力変化に伴う液体Siの構造変化」

—理論はどこまで実験に迫る(越える)ことができるか?—

【提言】シリコンの第1原理計算、古典分子動力学シミュレーションの結果比較:計算の信頼性をより向上するため、構造データと共に信頼できる密度の実験データが必要。

10:10～11:10 安仁屋 勝 (熊大院自然科学)

「超イオン導電ガラスの構造と物性」

- 実験で確認してほしいこと -

【提言】中距離秩序(FSDP)と超イオン伝導との関わりからより低いQでFSDPをもつ超イオン導電ガラスの合成、光ドーブ現象のメカニズムの解明に有効な電子状態のその場観測などが必要。

11:15～12:00 総合討論 (第2部)

12:00～12:05 閉会のご挨拶

### 総合討論のまとめ

BL04B2の高エネルギーX線回折に代表されるように、精度の高い構造因子が放射光でも得られるようになった。さらにここ数年BL04B2での不規則系物質の課題申請数が増加しており、特に材料系の課題において新規ユーザーが大幅に増加した。その結果、課題採択率もここ数年は低下しており、さらに4台の装置が相乗りになった現状の再考を施設側に提言することとなった。また、今後の

不規則系物質の研究のアクティビティをあげるために PU（パワーユーザー）制度の導入についても検討することとなった。また、今後不規則系分野の研究をいっそう促進するため、放射光、中性子、理論・シミュレーションが協力して、より精度の高い多成分系の部分構造解析やダイナミクス研究の必要性が確認された。放射光実験のサイドからは、SPring-8 での X 線異常散乱法の開発、不規則系構造解析手法の習熟や新しい解析手法の開発を行っていくことが提案された。X 線異常散乱法については SPring-8 の特徴である高エネルギー X 線を用いた透過法の測定を試験的に行う予定である。さらにダイナミクス研究の促進のため、新しい高分解能非弾性散乱実験ビームライン建設に向けた凝集体の動的構造研究会との連携や新規ユーザー開拓の必要性が指摘された。これらの目標を達成するため必要な活動を研究会として推進していくことが承認された。