

(様式 2)

議事録番号

提出 2007 年 10 月 31 日

会合議事録

研究会名：不規則系物質先端科学研究会 第 2 回会合

日 時：2007 年 10 月 28 日 (日)

場 所：SPring-8 中央管理棟 1 階 特別会議室

出席者：(議事録記載者に下線)、以下敬称略

川北 (九大)、吉田 (福岡大)、尾原 (九大)、梶原 (広大)、米田 (原子力機構)、池本 (富山大)、田原 (新潟薬大)、河原 (阪大)、松田 (京大)、市坪 (京大)、渡辺 (東大)、岡田 (東大)、社本 (原子力機構)、小原 (JASRI)、乾 (広大) 計 15 名

議題：1. BL04B2 のアップグレード計画の具体化について

2. 逆モンテカルロ (RMC) 法の現状について

3. 大型科研費申請計画について

議事内容：

1. BL04B2 のアップグレード計画に関して、小原より BL04B2 に関連した研究のアクティビティや申請課題数などの現状、BL04B2 をランダム系ビームラインとして整備する具体的な案について説明があり、協議した。ランダム系物質の構造研究をなお一層促進してアクティビティをさらに向上させるためには、(1) 2 結晶モノクロメータを整備することにより、1 つのビームラインで小角から広角までの散乱・回折実験、異常散乱実験、X 線吸収測定 (密度測定)、高エネルギー XAFS 測定などを行えるようにすること、(2) 低温、高温、高圧など試料の状態を手軽に制御できる環境を整えることが是非とも必要であるという認識で一致した。ただ現状の BL04B2 実験ハッチは手狭であり、ここ数年申請課題数および採択課題数が極めて少ない単結晶構造解析用のワイゼンベルクカメラを残したまま BL04B2 の高度化計画を考えることは非常に困難であることが判明した。このことを利用者懇談会 (結晶化学研究会) や施設側に報告して、単結晶装置の移転等、有効な解決策を検討してもらうように要望することにした。

2. モデルポテンシャルを用いずに実験で得られる構造因子だけを指針に、3次元の原子座標を最適化するRMC法開発の歴史から現状と、分子力学とRMCを組み合わせた最近の研究例について小原が説明した。その後、動的構造因子を取り扱えるように開発された最新のRMC tについて川北が補足説明を行った。RMC法の具体的な応用例の詳細や、最新のRMCtの有用性などについて意見交換を行った。

3. 研究会設立の経緯や、液体およびアモルファス金属国際学会のローテーションなどから、ランダム系の基礎研究をさらに盛り立てていくことを目的とした大型外部資金獲得の必要性について乾が説明した。そのための1つの可能性として、来春新設される予定の科研費・新学術領域研究（仮称）の概略を8月に配布された文部科学省の事務連絡文書に基づいて報告し、意見交換を行った。新学術領域研究（仮称）に申請する場合の研究課題の選定などについて引き続き協議を継続することとした。

4. 報告

社本より最近E S R Fで開催されたPDF法のワークショップについて報告があった。

その他：(利用懇への要望もしくは施設側への要望)

議題1の議事録に記載したように、当該研究会が研究活動の第1の拠点としているBL04B2ビームラインの高度化を検討する過程で、ここ数年申請課題数および採択課題数が極めて少ない単結晶構造解析装置を残したままの高度化案の策定は極めて困難であるということで、出席者一同の意見が一致した。BL04B2をランダム系構造解析ビームラインとして特化させ有効な整備を行うことにより、新規ユーザーの開拓や、より完成度の高い研究成果の産出など、今度なお一層のアクティビティの向上が大いに期待できる。利用者懇談会（結晶化学研究会）ならびに施設側には、単結晶装置の移転等、有効な解決策の検討を是非ともお願いしたい。