

会合議事録

研究会名：不規則系物資先端科学研究会

日 時：2008 年 10 月 31 日 18:30-21:00

場 所：東京国際交流館 会議室 3 (4F)

出席者：(敬称略、議事録記載者に下線) 福永 (京大)、丸山 (新潟大)、河原 (中部大)、尾原 (九大)、千葉 (慶応大)、山野 (岡山大)、伊藤 (JASRI)、岡田 (JAXA)、細川 (広工大)、社本 (原子力機構)、臼杵 (山形大)、梅林 (九大)、梶原 (広大)、松田 (京大)、森田 (山形大)、橋本 (岡山大)、服部 (原子力機構)、川北 (九大)、小原 (JASRI)、乾 (広大)
計 20 名

議題：

1. BL04B2 ビームラインの現状ならびに高度化について
2. 逆モンテカルロ (RMC) 法の現状と新コード開発状況について
3. J-PARC の現状について

議事内容：

1. 小原より BL04B2 関係の論文発表状況、課題数の推移、新規ユーザー参入状況などについて説明の後、BL04B2 ハッチ内の実験装置の高度化計画の概要について提案があり、高度化が目標とする方向性について了承した。これに関連して、来年度には BL04B2 ビームラインからパワーユーザー制度に申請することを決定し、その具体化についてさらに検討を続けることとした。また大型外部資金申請の件に関しても、引き続き検討を続ける事とした。
2. 小原、尾原、森田より、RMC 法の開発の歴史、公開されている計算コードそれぞれの特徴と使い方、RMCPOW を粉末結晶スペクトルに適用した場合のリトベルト解析との比較、現在開発中の分子力学を取り入れた解析コード RMC-MM についての説明と適用例について報告があった。
3. 福永より J-PARC の現状について説明があり、今後の利用形態などについて情報交換を行った。

報告：

1. 乾より 9 月 3 日から 5 日の期間、ESRF で開催された Workshop 「New Opportunities and Challenges for Liquid and Amorphous Materials Science (Noclams)」で発表された話題の中で、新しく ILL に設置された小角散乱分光計型の非弾性中性子散乱装置 BRISP、紫外線散乱と非弾性中性子・非弾性 X 線散乱で観測可能なエネルギー-運動量領域のギャップを埋めることができる性能をもつイタリア・トリエステに建設中の自由電子レーザーに設置予定の動的散乱装置について報告があった。
2. 千葉より ISIS で行われた液体カルコゲンの非弾性中性子散乱データの解析結果に基づき、液体の動的構造因子から引き出すことのできる情報に関して発表があった。主要な結果である、共有結合を有する液体セレンの伸縮モードの振動数 ω に着目した時の動的構造因子 $S(Q, \omega)$ の Q 依存性の解釈について、出席者からいくつかの質問やコメントが寄せられた。

【添付資料】

第3回不規則系物質先端科学研究会プログラム

日時: 2008 年 10 月 31 日(金) 18:30~21:00 ごろ

場所: 東京国際交流館 会議室 3(4F)

プログラム(敬称略)

乾(広大) はじめに(5 分)

小原(SPring-8) BL04B2 の現状(15 分)

乾(広大) ESRF の Workshop の報告(15 分)

福永(京大) J-PARC の現状(20 分)

千葉(慶大) 液体の動的構造因子から引き出すことのできる情報
--液体カルコゲン系について(20 分)

*休憩(10 分)

--- RMC の最前線 ---

小原(SPring-8) Reverse Monte Carlo modelling
-RMCA (3.04, 3.14), RMC++, RMCProfile を中心に(15 分)

尾原(九大) 結晶用 RMC ソフト「RMCPOW」(15 分)

森田(山形大) RMC と分子力学計算を組み合わせた新しい RMC「RMC-MM」(15 分)

* 総合討論(20 分)