

(様式2)
議事録番号

提出06 年10月28日

会合議事録

研究会名：超精密電子密度研究会

日時：2006年10月21日

場所：SPring-8 中央管理棟

出席者：（議事録記載者に下線）

大庭卓也、坂田修身、佐々木聡、竹中康之、田中清明、田中雅彦、
八島正知、山中高光、吉朝 朗、Yury Ivanov
計10名

議題：

1. 研究会の目的
2. メンバーの自己紹介
 - a. 各人の本研究会における課題について（5～10分程度）
 - b. メンバーの拡充と他の研究会との連携
表界面・薄膜ナノ構造研究会
 - c. 外国人メンバーの紹介
Prof. Coppens, Becker, Lecomte 等の手紙（若手の紹介）
3. ビームライン獲得に向けた今後の研究会運営の基本方針
 - a. 世界共用のビームラインを目指す。世界への情報発信が重要
本研究会の内容は会の終了後、会議の内容を外国人メンバーに発信する。
 - b. プロジェクト予算の獲得
 - c. 世界的連携体制の構築に向けた体制の整備（連絡体制・事務局他）
- d. J-PARK 等のビッグプロジェクトとの関係
4. 今後の検討事項
 - a. どのようなビームラインが望ましいか。
5. 講演
 - a. 中性子・放射光粉末回折による精密構造解析
東京工業大学大学院教授 八島 正知
 - b. 電子密度測定の現状と今後の課題—何故”超”精密が必要か—
名古屋工業大学大学院教授 田中 清明
5. その他

議事内容：研究会設置申請書、外国人研究者に配布した参加要請、活動計画書のコピーを、メンバーには既に配布済みであったが、配布して、研究会の目的について賛同を得た。参加者の自己紹介を兼ねた各人の研究について、皆さんが熱心

に話されたので、2時間以上かかった。その後会の運営方針を協議した。チームライン獲得のため、特定領域への応募も含めて、今後協議することになった。APDの専門家2名が今回は急用で参加できなかったため、次回以降に、あるべきチームラインについて協議することになった。その後、メンバーの2名による講演が行われた後、散会した。

参考資料

すでに SPring-8 に提出したものを除いて、添付します。

超精密電子密度研究会プログラム

日時：2006年10月21日14:00～17:00

場所：SPring-8 中央管理棟 1階会議室

議題：

1. 研究会の目的
2. メンバーの自己紹介
 - a. 各人の本研究会における課題について（5～10分程度）
 - b. メンバーの拡充と他の研究会との連携
表界面・薄膜ナノ構造研究会
 - c. 外国人メンバーの紹介
Prof. Coppens, Becker, Lecomte の手紙（若手の紹介）
3. ビームライン獲得に向けた今後の研究会運営の基本方針
 - a. 世界共用のビームラインを目指す。世界への情報発信が重要
本研究会の内容は会の終了後、会議の内容を外国人メンバーに発信する。
 - b. プロジェクト予算の獲得
 - c. 世界的連携体制の構築に向けた体制の整備（連絡体制・事務局他）
- d. J-PARK 等のビッグプロジェクトとの関係
4. 今後の検討事項
 - a. どのようなビームラインが望ましいか。
 - b. 検出器（APD, IP, CCD）・回折計（4軸、真空カメラ他）の選定
役割分担
検出器
APD：岸本、石澤
IP：田中
CCD：
回折計
4軸型
真空カメラ
粉末回折計
 - c. 補正法
 - d. 解析法
 - e. その他 プログラム等の頒布
4. 講演
 - a. 中性子・放射光粉末回折による精密構造解析
東京工業大学大学院教授 八島 正知
 - b. 電子密度測定の実況と今後の課題—何故”超”精密が必要か—
名古屋工業大学大学院教授 田中 清明
5. その他

研究会名：超精密電子密度研究会

番号	氏名	所属 1	所属 2
1	石澤 伸夫	名工大	セラミックス基盤工学研究センター
2	大里 齊	名工大	大学院工学研究科
3	大庭 卓也	島根大	総合理工学部
4	岸本 俊二	高工研	物質構造科学研究所
5	坂田 修身	Spring-8	利用研究促進部門構造物性
6	佐々木 聡	東工大	応用セラミックス研究所
7	竹中康之	北海道教育大	函館校情報社会教育課程
8	田中清明	名工大	大学院工学研究科
9	田中 雅彦	物質・材料研究機構	BL15XU/SPring8
10	八島正知	東工大	大学院総合理工学研究科
11	山中高光	大阪大	大学院理学研究科
12	吉朝 朗	熊本大	大学院自然科学研究科

外国人会員

番号	氏名	国	所属
1	Becker, Pierre	France	UMR SPMS, Ecole Centrale Paris
2	Blessing, Robert	USA	SUNY at Buffalo
3	Coppens, Philip	USA	SUNY at Buffalo
4	Fertey, Pierre	France	LCM3B, Univ. Henri Poincaré, Nancy 1
5	Gillet, Jean Michel	France	Ecole Centrale Paris
6	Jayatilaka, Dylan	Australia	The University of Western Australia
7	Lecomte, Claude	France	LCM3B, Univ. Henri Poincaré, Nancy 1
8	Rossmannith, Elisabeth	Germany	Universität Hamburg
9	Schneider, Jochen R.	Germany	HASYLAB at DESY
10	Tsirelson, Vladimir G.	Russia	Mendeleev University of Chemical Technology of Russia
11	Wang, Yu	Taiwan	National Taiwan University
12	Zhurov, Vladimir	Russia	Karpov Institute of Physical Chemistry
13	Zhurova, Elizabeth, A.	USA	Univ. Toledo

14	Ivanov, Yury	Russia	National Library Moskow
15	Eddie Snell	USA	
16	Mark Pressprich	USA	
17	Bo Iversen	Denmark	
18	Piero Macci	Italy	
19	Louis Farrugia	UK	
20	Dieter Schalke		
21	Wolfgang Scherer		
22	Guru Row	India	

超精密電子密度研究会への参加要請

Dear Colleagues,

Users community of Spring-8 recently decided to renew all the user-groups. Old user-groups were abolished. I think the charge density community of Japan should be reconstructed by setting up a user group for super-accurate structure factor measurements utilizing SR. The accuracy needed for new methods of EDD analysis exceeds that of the measurements, which is evident when we analyze EDD of crystals with the rare-earth elements and by calculating the ratio of two-center scattering factors to their structure factors in the MO models. We need one-order more accurate X-ray diffraction experiments. Therefore I organized a group for super-accurate structure factor measurements with Prof. Ishizawa and Prof. Yamanaka with the following aims;

Systematic errors, such as absorption, extinction, multiple diffraction, TDS and Lp factors will be discussed again for super-accurate structure factor measurements with the accuracy of 0.1%. When structure factors are measured with the accuracy of 0.1% new horizon of EDD researches will appear.

New methods of measurements using two-dimensional detectors such as CCD and IP need additional corrections such as slant-incidence of diffracted beams and accurate crystal orientation determination. How these new detectors are used most effectively for SR beams is very important for EDD community.

The frontier of EDD measurements and analyses should be extended to protein crystals, crystals with rare-earth and super-uranium elements, MO analyses and EDD measurements in the time-resolved researches. How SR beams are utilized most accurately and effectively in these new works should be discussed and the good results and techniques should be made common as soon as possible.

Opportunities for international discussion on the problems cited above will be presented in our group activity.

I'd like ask you to be an international member of our group. If you agree, please send a return mail to me.

研究会参加承諾へのお礼と研究会が承認されたことの連絡

Dear Colleagues,

Thank you for attending our group, which I asked on March 23 to attend for making a beamline specified for super-accurate structure factor measurements. It was approved and we are making our plans of activities for the next two years. I would like to explain our present plan and ask you to attend discussions on a super-accurate beamline.

The aims of our group are stated again below,

Systematic errors, such as absorption, extinction, multiple diffraction, TDS and Lp factors will be discussed again for super-accurate structure factor measurements with the accuracy of 0.1%. When structure factors are measured with the accuracy of 0.1% new horizon of EDD researches will appear.

New methods of measurements using two-dimensional detectors such as CCD and IP need additional corrections such as slant-incidence of diffracted beams and accurate crystal

orientation determination. How these new detectors are used most effectively for SR beams is very important for EDD community.

The frontier of EDD measurements and analyses should be extended to protein crystals, crystals with rare-earth and super-uranium elements, MO analyses and EDD measurements in the time-resolved researches. How SR beams are utilized most accurately and effectively in these new works should be discussed and the good results and techniques should be made common as soon as possible.

Opportunities for international discussion on the problems cited above will be presented in our group activity.

We have a lot of problems to attain the aims, such as X-ray source, diffractometer, detector (APD/IP/CCD), systematic errors and so on, Japanese group will discuss on the problems and make it open to all the foreign members to get advices. We will set up a forum and collect the ideas and advices for the next generation charge density works. And at the same time we will try to get funds to construct diffractometer optimum for super-accurate SR experiments and present opportunities for charge density researchers in the world to do accurate experiments at Spring-8, though it is highly competitive and the chances are very small.

The members of Japanese group are listed below.

Kiyoaki Tanaka, Nagoya Inst. Tech. (chair)

Nobuo Ishizawa, Nagoya Inst. Tech. (sub-chair)

Shunji Kishimoto, KEK

Takuya Ohba, Shimane Univ.

Hitoshi Osato, Nagoya Inst. Tech.

Osami Sakata, Spring-8

Satoshi Sasaki, Prof. Tokyo Inst. Tech.

Yasuyuki Takenaka, Hokkaidou Univ. of Education

Masahiko Tanaka, NIMS

Takamitsu Yamanaka, Osaka Univ.

With best regards,

出来る限り、以下の様式に沿った議事録を作成下さいますようお願い致します。