

不規則系物質先端科学研究会活動報告書

全体で2ページ以内（厳守）に収まるようにご記入願います。

1. 代表者、副代表者

代表者 氏名（所属）： 乾 雅祝（広島大学）

副代表者 氏名（所属）： 小原 真司（（財）高輝度光科学研究センター）

2. 研究会開催記録（日時、場所、特筆すべき内容（他の研究会との合同開催や学会との共催など））

- ・ 第1回、2006年8月28日～29日、SPring-8 放射光普及棟 中講堂
不規則系構造研究の動向と将来計画について
- 理論・シミュレーションと放射光研究との緊密な協力関係の構築に向けて
- ・ 第2回、2007年10月28日、SPring-8 中央管理棟1階 特別会議室
（前半）BL04B2 ビームラインの高度化計画、大型外部資金獲得計画
（後半）最近の不規則系の動的構造研究について（凝縮体の動的構造研究会と共催）

3. 2カ年計画の遂行状況および目的の達成状況

第1期研究会の設立申請書には、不規則系物質の基礎研究ならびに応用研究をなおいっそう促進するため、以下の3つの目標を掲げた。

- (1) 世界トップクラスの構造不規則系ビームライン群の構築
- (2) 世界トップクラスの構造不規則系解析技術の構築
- (3) 構造不規則系研究国際ネットワークの構築

目標(1)に関しては、これまでそれぞれのビームラインに散らばって活動していた研究者に加えて、理論家や中性子散乱を専門とする研究者も本研究会に参画し、不規則系分野の全国規模の組織ができあがった。ホームページやメーリングリストを整備し、より広い視野と深い見識から不規則系研究の将来を議論する体制が整った。

目標(2)に関しては、構造データから不規則な3次元の原子配置を推定する逆モンテカルロ法について、その適用範囲や信頼性を高めるための実験や解析コードの開発に取り組んだ。また逆モンテカルロ法の第一人者であるハンガリーの L.Pusztai 教授を招いて講習会を開催した。

目標(3)に関しては、第1回の研究会に英国・バース大学の P.S.Salmon 博士が参加し協力関係の構築について話し合った。また実験のため定期的に SPring-8 を訪れるハンガリーの L.Pusztai 教授らとは、緊密な協力関係を維持している。

このように、当初掲げた3つの目標を展開していくための必要条件は達成でき、今後、不規則系物質の研究をさらに促進し、優れた成果を創出できる基盤が整備された。

4. 研究会活動により得られた成果（例：研究会が核となり行った外部資金獲得の申請や実績、コンソーシアムの立ち上げ、新規ユーザーの開拓、施設の改善・高度化に関わる提案やその実績など）

第1回研究会で今後の不規則系物質研究の動向について議論した後、第2回研究会ではBL04B2ビームライン高度化計画について議論した。その結果、現状のBL04B2実験ハッチが手狭であり、単結晶構造解析用のワイゼンベルクカメラと共存しながら高度化計画を進めることは不可能であ

ると結論した。この件に関して拡大世話人会の機会を利用して、ワイゼンベルクカメラの移設など有効な解決策を策定してもらえよう利用者懇談会と施設側に要望した。

5. 研究論文発表リスト (主要なもの 5 編程度)

- “Structural basis for the fast phase change of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$: Ring statistics analogy between the crystal and amorphous states”, S. Kohara, et al., *Appl. Phys. Lett.*, **89**, 201910 (2006).
- “Instability of the Electron Gas in an Expanding Metal”, K. Matsuda, K. Tamura, and M. Inui, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 096401 (2007).
- “Medium-Range Fluctuations Accompanying the Metal-Nonmetal Transition in Expanded Fluid Hg”, M. Inui, K. Matsuda, D. Ishikawa, K. Tamura, and Y. Ohishi, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 185504 (2007).
- “Nanoscale elastic inhomogeneity of a Pd-based metallic glass: Sound velocity from ultrasonic and inelastic x-ray scattering experiments”, T. Ichitsubo et al., *Phys. Rev. B*, **76**, 140201 (2007).
- “Very strong hydrogen bonds in a bent chain structure of fluorohydrogenate anions in liquid $\text{Cs}(\text{FH})_{2,3}\text{F}$ ”, S. Kohara et al., *J. Chem. Phys.*, **129**, 014512 (2008).
- “Orientational correlations in high pressure fluid oxygen and nitrogen”, L. Temleitner et al., *Phys. Rev. B*, in press.
- “Orientational correlations in molecular liquid SnI_4 ”, L. Pusztai et al., *J. Chem. Phys.* in press.

6. 研究会Webページ (研究会の情報を公開しているWebページなどがあれば、URLをご記入ください。)

[http:// home.hiroshima-u.ac.jp/dismat/index-j.html](http://home.hiroshima-u.ac.jp/dismat/index-j.html)

7. その他 (特筆すべきことがあれば、ご記入ください。)

第1期期間中に以下の3件のプレスリリースを行った。

- DVD-RAMの記録速度を支配する構造の謎を解明 - さらなる記録速度向上への材料設計の指針を提示 -
BL02B2 (粉末結晶構造解析) , BL04B2 (高エネルギー X 線回折) 2006 年 10 月 17 日
- 奇妙な媒質「負の誘電率をもつ電子ガス」は実在する - 超伝導材料創製のための新たな指針 -
BL04B2 (高エネルギー X 線回折) , BL28B2 (白色 X 線回折) 2007 年 02 月 22 日
- 水銀に隠されていたもうひとつのゆらぎ - 天才物理学者 L.D.ランダウの予言を実証 -
BL04B2 (高エネルギー X 線回折) 2007 年 05 月 08 日