

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いたします。

(様式 2)

議事録番号

提出 2024 年 12 月 9 日

## 会合議事録

研究会名：不規則系機能性材料研究会

日 時：2024 年 10 月 29 日 13:00~17:50、30 日 9:30~11:45

場 所：名古屋工業大学 4 号館 2 階会議室 3

Zoom 開催 (ハイブリッド開催)

出席者：(議事録記載者に下線)

各日 計 55 名 記録者 北村尚斗、小野寺陽平

議題：機能性材料に潜む超秩序構造

プログラム：

10 月 29 日

13:00-13:45 『量子ビーム回折』 小原 真司 (NIMS)

13:45-14:30 『粉末回折からアプローチする全散乱』 加藤 健一 (理研)

14:30-15:15 『Atomic XAFS (AXAFS) の理論的研究』 畑田 圭介 (富山大学)

15:15-15:35 休憩

15:35-16:20 『BL04B2 の PDF 計測変遷と Li イオン伝導ガラスの研究』

尾原 幸治 (島根大学)

16:20-17:05 『ゼオライトのトポロジーを有する非晶質シリカの構造解析』

正井 博和 (産総研)

17:05-17:50 『非晶質アルミナの構造と新たな展開』 橋本 英樹 (工学院大学)

10 月 30 日

9:30-10:15 『高密度シリカガラスの構造』 小野寺 陽平 (NIMS)

10:15-11:00 『パーシステントホモロジーによる形のデータサイエンス

：アモルファスへの適用例を中心に』 大林 一平 (岡山大学)

11:00-11:45 『オングストロームビーム電子回折による非晶質材料の局所構造解析』 平田 秋彦（早稲田大学）

議事内容：

冒頭に不規則系機能性材料研究会代表の東京理科大学の北村尚斗氏から研究会の主旨について説明があり、NIMSの小原真司氏から、非晶質を対象とする回折実験の意義と酸化物ガラスに関する近年の成果について紹介がなされた。続いて、理研の加藤健一氏から結晶の全散乱測定の問題点とそれを解決するアプローチについて紹介があり、ナノ粒子に関する成果について紹介があった。また、富山大学の畑田圭介氏からは XAFS の理論について説明があり、理論的アプローチによる Atomic XAFS の検証について紹介があった。島根大学の尾原幸治氏からは、近年の BL04B2 の発展について紹介があり、リチウムイオン電池用材料を対象とする高エネルギー X 線回折測定と計算科学の融合によるイオン伝導機構の検討について紹介があった。また、産業技術総合研究所の正井博和氏からはゼオライトを出発原料とした非晶質シリカの合成法について紹介があり、ゼオライトと作製した非晶質シリカにおける原子配列のトポロジーと類似性について議論がなされた。初日の最後に、非晶質アルミナの構造について工学院大学の橋本英樹氏から紹介があり、アルミナを含めた中間酸化物の非晶質の構造と一般的なシリカガラスの構造の相違について解説がなされた

2 日目は、最初に NIMS の小野寺陽平氏から温度と圧力を制御することによって合成された高密度シリカガラスの構造をトポロジーに着目して解析した結果が報告された。続いて、岡山大学の大林一平氏からパーシステントホモロジーによるトポロジー解析について説明があり、本手法をアモルファスシリコンの構造へ適用し、熱伝導率との相関を議論した研究例が紹介された。さらに、早稲田大学の平田秋彦氏からオングストローム電子回折について紹介があり、シリカガラスや金属ガラスの局所領域から得られる回折スポットの解析によって明らかになったガラスの構造秩序について紹介がなされた。

討論では以下のような意見が上がった。

・ 出発原料等が、非晶質・ガラスの構造の不均一性や物性に影響を与えている可能性が高いため、小角まで含めた広い  $Q$  範囲の計測（測定データの併用）と解析手法の確立が重要である。光源性能の向上により、微小領域の PDF 解析が期

待できる。

・結晶の全散乱測定には、広い  $Q$  範囲の計測と高い  $Q$  分解能を両立させる必要があるが、そのためには大きな散乱角の領域で高統計のデータを測定する必要がある。幾つかの代表的な試料の測定等については、BL 担当者とユーザーが協力して実施する必要がある。また、試料に応じて BL04B2 と BL44B2 などの使い分けも研究会として考える必要がある。

・Atomic XAFS に関する議論からわかるように、散乱から実空間関数を導出するときにはバックグラウンドが重要となる。また、理論による検証も十分に行われなければならない。これらの点についてユーザーに周知する必要がある。

最後に挨拶があり、研究会は閉会した。