

(様式2)

議事録番号

提出 2023 年 3 月 14 日

会合議事録

研究会名： 構造物性研究会

日 時： 2023 年 2 月 22 日 (水) 10:30~12:00

場 所： オンライン

出席者： 秋山広夢、東正樹、石上啓介、石橋広記、一柳光平、稲葉雅之、今井康彦、大隅寛幸、大和田謙二、小澤芳樹、河口彰吾、鬼頭俊介、木下まゆ、久保田佳基、黒岩芳弘、小林慎太郎、坂田修身、佐賀山基、澤博、下野聖矢、杉本邦久、高橋聖弥、玉作賢治、中村唯我、中埜彰俊、西村真一、西畑保雄、西堀英治、橋塚貴彦、原武史、松宮茂樹、山中勇樹、山本隆文、和達大樹、Cheng YANG 計 35 名

議題：

1. 最近のトピック

「単結晶解析に関する最近の話題」(筑波大学 西堀英治)

2. BL 群 BL02B1, BL04B1, BL40XU, (BL08W) のアップグレードについて (JASRI 玉作賢治)

3. 動向調査項目について

- ・新分野・新領域に関する研究開発ニーズについて
- ・研究開発成果の展開について
- ・SPRING-8 次期計画やビームラインのアップグレード計画について
- ・利用制度や新しいスタイルの放射光利用実験について

4. その他

議事内容：

1. 最近のトピック

筑波大学西堀英治会員が、BL02B1 においてデンマークオーフス大学と共同で行われた InTe 熱電変換材料の disorder 構造の研究成果について発表した。この研究の中で使われた、散漫散乱まで含めた全散乱データを用いた 3D- Δ PDF 解析の手法についても紹介され、結果や手法に関して質疑が行われた。

2. BL 群 BL02B1, BL04B1, BL40XU, (BL08W)のアップグレードについて JASRI 玉作賢治氏が、BL 再編および SPring-8-II アップグレードにおける単結晶構造解析ステーション整備の方向性について説明し、その後質疑が行われた。

質疑、コメント等を以下に列挙する。

○低温測定環境について

・多軸回折計に冷凍機を載せたいという要望がある。特に物性分野には、重元素を含む物質を低温で調べたい研究者がいる。低温環境についてどのようなユーザーのニーズがあるか調査する必要がある。

・02B1 を 05XU と B2 に分けることになるが、吹付け低温装置は 1 台しかなくどちらかにしか使えない。一方でクライオスタットを使える BL が欲しいという要望がある。施設ではすでにクライオスタット本体を新調して物はあるが、回折計がない状態である。

○新規 05XU について

・有機低分子の絶対構造解析での利用において、軽原子の異常散乱が大きい 10keV 以下のエネルギーでの測定は可能かという質問があった。これまで 40XU で 8、15keV が使用可能であったが、これらのエネルギーが使えなくなることはない。使用する検出器によって使えるエネルギーが制限されると回答があった。

・05XU の装置は新規に製作する。2023 年末には仕様が決まる予定である。

・05XU で大きな単結晶は測定可能か、完浴になる条件が必要であるとの質問があり、スリット光学系を用いれば、0.5mm×0.5mm くらいのビームサイズにすることができると回答があった。

・課題申請における競争率はどうなると予想されるか質問があった。40XU はこれまで 30%が微小単結晶であった。05XU では 30%が共用になるので大きくは変わらない。05XU には 02B1 と 40XU の両方のユーザーが来ることになるが、02B2 でやっていたことが B2 でできなくなるわけではないのでユーザーが集中するのは避けられるのではないかと回答があった。

・最近ラボの装置の性能が上がっているので、SPring-8 に期待されるのは特に微小単結晶の測定である。05XU は低偏心ゴニオメータであるが、交差精度は 1 ミクロンで良いのか。

○その他

・HUBER 6 軸回折計はどうなるのか質問があった。現状で修理は考えていないが、多くのユーザーが利用を希望するならば修理して 05XU または B2 へ移すことも考えると回答があった。

・クライオスタットやガス雰囲気など外場下における実験はどこまでできるかという質問があった。また、重量物を載せることが可能な回折計が欲しいという要望がある。05XUは縦振りであり、かつ低偏心ゴニオメータであるが、10kg程度は問題ない。B2なら問題はない。

・SPring-8-II アップグレードは東北放射光が稼働しなければ進まないが、現在の予定では2027年後半から約1年かけて行うことになっている。

3. 動向調査項目について

○研究開発成果の展開について

・散漫散乱に関する研究

02B1において3D- Δ PDF解析が行われている。3万点ほどの散乱を3次元で測定し、ブラッグ反射を差し引いて散漫散乱のみでPDF解析を行う手法であり、ヨーロッパで精力的な研究が進んでいる。

13XUで測定したCeO₂の粉末回折データに対し、散漫散乱を考慮した解析を行うと極めて良く合うことがわかり、IDの威力は絶大であると再認識された。

○SPring-8次期計画やビームラインのアップグレード計画について

・シャットダウンの期間をできる限り短くしてほしいとの要望がある。

・3D- Δ PDFの測定ではデータ量が膨大であり、そのハンドルが大変である。SACLAではユーザーがアカウントを持っていて使い易いが、SPring-8はBLごとにストレージがバラバラであり、実験中も常にデータの圧縮を続ける必要がある。データセンターの充実が必要である。

○動向調査項目について後日、Google formを用いてアンケートを実施することとなった。

4. その他

・BLs アップグレードワークショップ (3月8日) の案内

・2023年度のSPring-8シンポジウム (9月26~27日、大阪大学) の案内

以上。