

第9回極限物質科学研究会

動力的回折理論による結晶構造解析

日時： 2019年9月30日（月）会場使用時間：9:00-17:00

場所： TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター ミーティングルーム 305

https://www.kashikaigishitsu.net/facilitys/cc-tokyo-nihombashi/room_detail/4723/

企画： 飯高敏晃 (tiitaka@riken.jp)

主催： ポスト「京」萌芽的課題 1-1 サブ課題 C「地球惑星深部物質の構造と物性」

協賛： ポスト「京」重点課題 7 サブ課題 C・サブ課題 G； 科研費

概要

運動学的回折理論とは回折現象を扱うときに一回散乱のみを考慮する理論（1次の摂動論）である。電荷を持たず散乱確率が小さいX線回折や中性子回折では運動学的理論は非常に良い近似となる。他方、電荷を持ち結晶と強い静電相互作用をする電子線／陽電子線回折では多重散乱を考慮した動力的回折理論（行列対角化）が重要となる。本研究会では、動力的回折理論のための数値解析法、動力的回折理論を用いた局所的結晶構造解析・表面構造解析などへの応用と手法開発について議論を展開する。（参加希望の方は事前に飯高までご一報ください。）

プログラム （*印：招待講演。講演 35分+質疑 15分 or 講演 30分+質疑 10分を目安）

9:30-10:00 飯高敏晃（理研）「回折実験と結晶構造解析」

10:00-10:50 瀬戸雄介*（神戸大）「電子回折計算ソフトの開発状況と結晶構造解析への展開」

<http://pmsl.planet.sci.kobe-u.ac.jp/~seto/?lang=ja>

<https://drive.google.com/open?id=1nNL7xiWIOCCHIWPBQMB6NoLj1EkEaAph>

10:50-11:40 星健夫*（鳥取大）「陽電子回折実験に対する高速化データ駆動科学」

<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/#JA>

<https://sites.google.com/view/ddshpc2018/>

<https://sites.google.com/view/ddshpc2019/>

（昼休み）

12:40-13:30 藤堂眞治*（東大）「データ同化による結晶構造予測」

<https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja/members/wistaria>

http://www.hpci-office.jp/invite2/documents2/ws_material_190208_todo.pdf

13:30-14:10 中西義典*（東大）「X線CTR散乱による界面構造解析に資するベイズ推論」

<http://www.c.u-tokyo.ac.jp/info/research/faculty/list/mds/f014325.html>

<https://drive.google.com/file/d/15D347JK5MKeWp3T5eLi9GSkjRRDuAYlh/view>

（休憩）

14:30-15:10 富岡尚敬*（JAMSTEC）「電子線回折による超高压鉱物の探索」

<https://sites.google.com/site/ntomioka11/#TOC--3>

<https://sites.google.com/site/temfiblab/home>

15:10-15:50 大塚真弘*（名大）「電子チャネリング効果（動力的回折）を活用したサイト選択的結晶材料分析」

<https://researchmap.jp/7000002999/>

15:50-16:30 望月出海*（KEK）「TRHEPDの最近の成果」

<https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/20170802114000/>