

令和 6 年 6 月 3 日現在

機関番号：12102

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）

研究期間：2019～2023

課題番号：19KK0132

研究課題名（和文）国際規模の先端量子ビーム利用による次世代回折構造研究

研究課題名（英文）Next generation diffraction Structure Study using advance quantum beam facilities in the world

研究代表者

西堀 英治 (Eiji, Nishibori)

筑波大学・数理解物質系・教授

研究者番号：10293672

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 14,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、デンマークオーフス大との国際共同研究により、大型放射光施設 SPring-8とX線自由電子レーザー施設SACLAを利用した物質科学研究を推進した。開始半年でコロナ禍に突入したものの、渡航と海外研究者の来日を2年間控えた形で研究を推進し、最終的には、原著論文で5報を超える成果をあげることに成功した。コロナ禍が空けたのちには来日と渡航も再開され、2022年度と2023年度にはオーフス大に渡航してワークショップを開催し、学生や若手研究者間の活発な交流も行った。2022年度からはSPring-8やSACLAでの国際共同研究に多くのスタッフ学生が参加し活発な交流を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

大きな成果は、熱電変換材料の新しい高性能化の方法の発見と、XFELを用いた2種類の新しい物質科学研究のための手法開発がある。熱電変換材料については、精密なデータ測定と3次元デルタ二体相関関数法の適用、および放射光非弾性散乱測定により、単純な結晶構造で知られていたInTe熱電変換材料の中に不規則な構造が存在することを明確に発見した。これは、今後のエネルギー問題の解決に向けた大きな一歩である。X線自由電子レーザーを物質科学研究に利用するために結晶構造解析が可能な手法開発と、非結晶から原子の配列とフェムト秒の時間分解能で決定可能な方法の開発を行った。これは原子構造が関連する全分野への貢献が大きい。

研究成果の概要（英文）：In this research, we did materials science using the large synchrotron radiation facility SPring-8 and the X-ray free electron laser facility SACLA through international collaboration with Aarhus University, Denmark. Although the coronavirus pandemic hit half a year after the start of the project, the project continued while refraining from traveling and inviting foreign researchers to Japan for two years, and ultimately succeeded in producing more than five original papers. After the coronavirus pandemic, we were visiting Japan and traveling abroad, and in 2022 and 2023. We traveled to Aarhus University to hold workshops and have active exchanges between students and young researchers. From 2022, many staff and students have participated in international joint research at SPring-8 and SACLA.

研究分野：放射光物質科学

キーワード：量子ビーム 放射光 X線自由電子レーザー 構造解析

## 1. 研究開始当初の背景

X線自由電子レーザー-SACLA,次世代光源(3GeV SLiF-J),SPring-8 次期計画と続く流れは、日本は国策として放射光 X線計測で世界を先導し、産業を発展させる方向に進んでいる。一方で、日本の研究者がそれらを先端利用し、利用研究を開拓する方向には進んでいないように見受けられる。この原因は、日本の放射光利用が産業利用や物質開発など応用志向ユーザーに特化しすぎており、手法開発や新光源の利用研究を進める研究が減少していることにある。25年前には旧帝国大学とよばれる東大、京大、東北大、阪大、名大、九大、北大や東工大など主要大学に1校あたり複数存在した放射光の研究室の数は現状半減以下である。一方、海外をみるとデンマークのオーフス大学やドイツのハンブルグ大学など特定の大学やグループが責任をもって新しい施設での先端研究を整備する体制が確立しつつある。日本が施設と産業利用だけでなく、利用研究でも優位性を保つためには、科学技術の最先端を進める研究が必須である。そうした開発研究を国内グループに有することで、将来の産業利用でも世界を先導することが可能となる。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、**デンマーク・オーフス大との国際共同研究**により、XFEL や最先端放射光などの先端 X線を利用した先端構造計測を物質科学から産業応用に至る幅広い科学技術に適用する基盤を構築することである。材料合成の可視化し、合成条件の高度化に貢献する“**合成その場観察**”、量子力学的な物性・機能の理解を可能とする“**精密電子密度計測**”、非晶質や結晶中の欠陥構造を可視化する“**1D、3D-PDF 解析**”、数 10 ナノからピコメートル範囲のマルチスケール計測を可能にする“**XFEL コヒーレント回折イメージング(CDI)、シリアルフェムト秒 X線回折(SFX)の融合研究**”を手法開発と装置開発も含めて推進する。

本研究は、**海外共同研究者が世界のトップランナーとして行っているその場観察と PDF の研究と、研究代表者が X線回折の研究者の中で先駆的に進めている XFEL の研究、海外共同研究者と研究代表者が世界のトップを走る電子密度解析の研究**を並行して進めることにより、**研究代表者のグループだけでなく海外共同研究者のグループも世界の先端技術を身に付けつとこ**ろに特徴がある。研究代表と海外共同研究者の組み合わせは、X線回折を基盤とした分野で、こうした WIN-WIN の関係を構築しつつの共同研究で世界的な強みを有する。

その場観察の研究では、ナノ粒子合成条件と粒子のサイズ、形状との相関や条件と核生成関係など結晶成長の物理に関する知見が得られるだけでなく、粒子の超臨界水中での合成である「**超臨界ナノ材料合成**」も対象とするため、「**超臨界流体**」の性質に関する情報も得られる。この研究は、物質合成の最適化や産業への応用などの展開とともに超臨界水の学理など学術分野への貢献も期待できる。

## 3. 研究の方法

本研究では、最先端の高性能放射光や XFEL の先端計測の国際共同研究を通して、5 ~ 10 年後の日本における放射光、XFEL の物質科学や産業応用における X線回折の研究の基盤構築を目的としている。そのために行う、1)その場観察、2)電子密度解析、3)PDF 解析の研究を進めた。

本研究を開始して1年が経過したところでコロナ禍に突入し、デンマークや海外施設のあるドイツやスウェーデンへの渡航やデンマークのグループの来日が2年以上できなくなった。放射光その場観察のデータ測定はコロナ禍のためすべて国内の SPring-8 を利用した。コロナ期間中はデンマークのグループが来日することができなかったため、デンマークのグループのマシントイムの実験をサンプルを郵送してもらって我々が代わりに行った。

電子密度精密観測は、2018年に納入された新型 CdTe ピクセル検出器を利用した精密電子密度計測を進めた。2019年度中にデータを集めデンマークのグループが原著論文として報告した。この際の技術が、コロナ禍での筑波大側のサンプルを受け取っての測定に継承され、共同研究が複数すすめられた。3D- $\Delta$ PDFについても SPring-8 でデンマーク側と議論しつつデータを測定し、解析を進めた。

科研費の終了が近づく 2022 年度よりデンマークのグループも来日して実験を行えるようになってきた。2年以上 SPring-8 で実験をしていなかったため、2022 年度のデンマークグループの実験はすべて国際共同研究として筑波大グループも参加して行った。また、2019 年に開始された XFEL を利用した国際共同研究についても 2020 年度から 2022 年度後半まではサンプルを受け取った形で、2022 年度後半からはオーフス大が参加する形ですすめられた。2022 年度の活発な交流から、1年間延長し 2023 年度も継続して研究を実施した。

## 4. 研究成果

### (1) 放射光非弾性散乱による熱電変換材料 InTe のフォノン構造

$s^2$  孤立電子対をもつゆるく結合した(ラットリング)原子は強い非調和性と予想外の低い熱伝導と通常関係している。その詳細な相関はほとんど不明のままである。この相関を理論と実験を組み合わせた系統的な研究によって、熱電材料テルル化インジウム(InTe)において明らかにした。

In ラットリング原子の  $z$  軸方向の大きな振動と巨大な非調和性を調べた。大きな非調和フォノン是非局在化した In の  $5s^2$  孤立電子対と Te の  $5p$  状態との共有性が誘起した不安定な占有された反結合状態をもつ動的な孤立電子対の寄与から生じることを示した。立体化学的に活性な孤立電子対をもつラットリング原子による強い非調和性の微視的起源を突き止めることができ、熱電エネルギー変換に効率的な材料を設計するために重要な知見を与えることができた。

低い熱伝導をもつ材料は熱電変換などの応用において重要である。効率的な熱電材料を設計するには低い格子熱伝導の微視的起源の理解が不可欠である。ラットリング原子と孤立電子対は低い熱伝導のためのよく知られた概念である。近年、この2つの概念の組み合わせが注目されている。静的な結晶構造では活性な孤立電子対を観測できないため、これまでの実験と理論研究ではラットリング原子の孤立電子対と非調和振動の相関が不明であった。

$0.3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  の格子熱伝導と単純な結晶構造である InTe の原子ダイナミクスを調べた。孤立電子対がない  $\text{KInTe}_2$  や  $\text{RbInTe}_2$  と比較し、孤立電子対をもつラットリング原子の役割を調べた。理論計算による電子密度の化学結合解析、SPring-8 での非弾性 X 線散乱と粉末 X 線回折、非弾性中性子散乱、熱伝導測定、調和と非調和フォノンの第一原理計算を行った。化学結合解析によって、 $z$  軸方向に弱い相互作用を持つ In 原子の著しい共有結合性が明らかになった。その共有結合性は非局在化した In の  $5s^2$  孤立電子対と Te の  $5p$  状態の相互作用に起因することが分かった。その相互作用は価電子帯上部の占有された反結合状態を生じ、In 原子の隣接する結合をソフト化し、非調和のフォノンモードを生じ、格子熱伝導を抑制することが分かった。これらのフォノンモードが温度増加に伴って強化することも見出した。フォノン散乱は温度増加で弱くなるため、結果として格子熱伝導があまり温度に依存しないことを説明することができた。

### (2) ガラス化する MOF の電子密度解析

ガラス化する金属有機構造体 (MOF) が新材料として注目されている。その特異な融解の起源を明らかにするため、放射光 X 線回折を用いて2つのゼオライト型イミダゾレート構造体 (ZIF): ガラス化する Zn-ZIF-zni と同じ構造で熱分解する Co-ZIF-zni の電子密度分布を観測した。観測した電子密度から、Zn-N 結合が Co-N 結合よりもイオン性が高いことがわかった。温度を変えたラマン分光によって、Co-ZIF-zni において 673 K 以上でイミダゾレートの結合が弱くなり始めることがわかった。Co<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>-ZIF-zni ( $x = 0.3 \sim 0.003$ ) の熱分析から、金属-配位子とイミダゾレートの結合強度を調整することで融解が制御できることがわかった。Zn-ZIF-zni への 4% の Co ドーピングは融解ではなく熱分解を示した。

ガラス化する MOF がガス混合体の分離や CO<sub>2</sub> の吸着などの応用で注目されている。多くの MOF は加熱すると熱分解するのに対して、融解やガラス化する ZIF が報告されている。その融解の物理化学的な起源はほとんど不明である。融解する Zn-ZIF と熱分解する Co-ZIF を比較すると、i) 金属-配位子の結合の性質と ii) その差の構造ダイナミクスとイミダゾレートの結合への影響が融解/熱分解と化学結合の相関に関する疑問として挙げられる。

高分解能  $\sin\theta/\lambda = 1.35$  と  $1.25 \text{ \AA}^{-1}$  の X 線回折データを用いて Zn-ZIF-zni と Co-ZIF-zni の電子密度分布を決定した。単結晶試料はオートクレーブを用いてソルボサーマル合成した。回折データは SPring-8 で 50 keV の X 線を用いて 25 K で測定した。電子密度は多極子モデルと密度凡関数理論計算を用いて決定した。加熱による構造変化を調べるため、温度変化の X 線回折とラマン分光の実験を行った。Co<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>-ZIF-zni の熱的なふるまいを調べるため、熱重量分析と示差走査熱量測定を行った。

決定した電子密度のトポロジカル解析によって、Zn-ZIF-zni と Co-ZIF-zni の金属-配位子の共有結合性の差: Zn-N の方がよりイオン性が高いことを明らかにした。これはバンド構造の理論計算によって裏付けられた。ラマン分光によって、Zn-ZIF-zni の方がイミダゾレートの結合が安定であることが分かった。Co の場合の弱いイミダゾレートの結合は  $\pi$  電子のわずかな逆供与に関係していると考えられる。温度変化の X 線回折から、Zn-ZIF-zni の方が熱誘起の骨格構造のゆがみが小さいことが分かった。よりイオン性の高い Zn-N 結合とより安定なイミダゾレートの結合が Zn-ZIF-zni の融解をもたらしていることが明らかになった。

### (3) InTe 熱電変換材料におけるディスオーダー構造の発見

原子が無秩序に配列したディスオーダー構造は熱伝導の低下に有効であり、熱電変換や遮熱コーティングなどの応用に重要である。特に、格子間の、ディスオーダーの、拡散しやすい原子は非常に低い熱伝導率をもつ複雑な結晶構造に一般的であり、単純な結晶構造で見つけることはめったにない。放射光 X 線回折と理論計算を組み合わせ、単純な結晶構造をもつ熱電材料テルル化インジウム ( $\text{TeIn}$ ) において、In 原子の一次元的な鎖状のディスオーダー構造を発見した。この In 原子鎖は温度増加に伴って静的-動的転移を起こし、1次元の拡散経路を形成することを観測した。拡散経路の観測によって、TlSe 型の鎖状の物質における非常に低い熱伝導率とその温度依存性の弱さを理解するための基盤を与えることができた。

ディスオーダー構造や欠陥は電子やフォノンなどの順粒子の散乱中心として働き、物質の輸送特性に影響する。ディスオーダー構造はフォノンを散乱し、低い熱伝導率を生じさせること

が知られている。低い熱伝導率は熱電変換技術に不可欠であるため、熱電材料のディスオーダー構造は重要である。最近、SnSe,  $\text{Ti}_3\text{VSe}_4$ ,  $\text{BaTiS}$  などの単純な構造をもつ無機結晶固体が非常に低い熱伝導率を示すことが発見されている。理論はディスオーダー構造によって低い熱伝導率やその温度依存性の弱さをモデル化することに成功している。しかしながら、単純な無機結晶固体でディスオーダー構造を観測することは難しく、これまでどの  $\text{TiSe}$  型化合物においてもディスオーダー構造の実験的な証拠は報告されていなかった。

単結晶 X 線回折を用いて  $\text{InTe}$  のディスオーダー構造を観測した。SPRING-8 で回折データを測定し、最大エントロピー法と 3 次元差分二体相関解析法を用いて解析した。その結果、理論的に予測されていた In 原子位置における欠損を観測した。さらに、欠損した In 原子位置の周りに二つの新たな In 原子位置を観測した。発見した In 原子位置は 1 次元のディスオーダーした In 原子の鎖を形成することがわかった。温度変化の構造観測と分子動力学シミュレーションから、静的-動的転移によって In 原子の拡散経路を形成することがわかった。理論計算から、発見したディスオーダー構造と静的-動的転移は多くの  $\text{TiSe}$  型化合物に一般的な特徴であることがわかった。

#### (4) シリアルフェムト秒 X 線回折による低分子構造決定法の開発

小さい単位格子の系においてシリアルフェムト秒構造解析は明らかな科学的な重要性にも関わらず、その適用が制限されてきた。これは信頼できるデータを得るための手法がこれらの系において利用可能ではなかったためである。一般に、部分反射の補正などの重要な強度補正は正確な結晶配向の決定に依存している。この補正は単位格子の結晶の場合、回折点の数が少ないために難しい。回折点の指数付けからマージされた構造因子までデータ処理のすべての段階を完全に自動で扱うことが可能な手法が開発された。手法は既知の格子定数、強度積分、重なりによって合わさったエワルド球の幅と部分反射の補正を含む強度補正と、調整された post-refinement の手順に基づいてデータの指数付けを可能にする。この手法により、化合物  $\text{K}_4[\text{Pt}_2(\text{P}_2\text{O}_5\text{H}_2)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  の測定データは処理され、 $R_1 = 9.1\%$  の構造を決定した。開発手法は小さい単位格子のシリアルフェムト秒構造解析の実験の分野を広げるものである。応用例として励起状態と反応過程の化学の分野の研究を可能にする。

XFEL の small-unit-cell 結晶学は難しい試料の必要条件を要求せずに材料の構造の新しい研究を生み出すポテンシャルがある。しかし、これは現在まで少ない数の回折点によるシリアル結晶学のデータ処理の難しさによって広い未開拓な研究領域となってきた。ここで、私たちは自動的データ処理の堅実で融通性のきく方法を提示した。この方法は単位格子のパラメータと結晶のラウエ群に基づいた強く最適化された計算の枠組みにおける正確な強度積分が特徴である。開発手法は回折点の位置決定、指数付け、強度積分、構造因子のリストの最終的なマージの中間の結果を記録し、他のデータ処理の方法を用いて簡単に強度積分を可能にする。

データ処理の良さを最初に証明するのは、構造の解と精密化の質である。そこで、小さな単位格子の系である  $\text{K}_4[\text{Pt}_2(\text{P}_2\text{O}_5\text{H}_2)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  のシリアルフェムト秒単結晶 X 線回折データを解析した。我々の開発した手法を用いることで、非常にまばらな反射数のデータフレームからスポットを見つけ、指数を付け、積分を行った。その結果は、回折スポットが 5 個程度しかないフレームでも、orientation matrix の調整に高い精度と系統的なずれがないことを示した。膨大な数の強度補正を適用し、データを post refinement プロセスにかけた後、パイプラインから得られた最終的な構造因子リストにより、構造決定に成功した。

得られた構造解析と精密化の精度 ( $R_1 \approx 9.1\%$ ) は、同じ結晶に対する実験室の結晶構造解析 ( $R_1 \approx 3.7\%$ ) に劣る。比較すると、精密化された結合長は、 $0.01 \text{ \AA}$  オーダーのみ異なることが明らかになった。これにより、例えばレーザー励起中の構造変化を解決できることが期待される。構造の最適化は、主に部分反射補正を改善することである。部分反射補正は、反射強度に蓄積される他のすべての誤差の直接的な乗数であるため、誤差の主な原因となる可能性がある。

#### (5) XFEL を利用した PDF 解析 — 非晶質材料の原子配列決定に向けて —

X 線自由電子レーザー (XFEL) 施設 SACLA においてフェムト秒の時間スケールで測定した酸化ハフニウム ( $\text{HfO}_2$ ) ナノ粒子の X 線散乱データに二体分布関数 (PDF) 解析を適用した。分解能  $Q_{\text{max}}: \sim 8 \text{ \AA}^{-1}$  の PDF を得た。その XFEL の PDF はドイツ・PETRA III の放射光を用いて得た  $Q_{\text{max}}: 20 \text{ \AA}^{-1}$  の PDF と比較して、主な特徴が再現した。XFEL の PDF から決定した格子定数や粒子サイズなどの構造パラメータは信頼できる値を与えた。これらの結果は、実験条件をより最適化すれば、フェムト秒の時間分解能で質の高い PDF が測定できることを示した。

ナノ粒子はエネルギー応用や触媒などのテクノロジーにおいて重要であり、その核生成、成長、構造の理解はナノ材料の設計や最適化に不可欠である。ナノ粒子に対して PDF 解析は不可欠なツールになっており、時分割 PDF 観測は構造ダイナミクスの研究を可能にしている。信頼できる PDF を得るには、放射光 X 線が必要である。MAX IV などの第 4 世代放射光を用いてミリ秒の時間分解能を実現している。さらに高強度の XFEL を PDF に用いれば、超高速プロセスを観測し、原子スケールの反応経路と反応機構の最初のステップの解明が期待できる。

液体ジェットを用いて HfO<sub>2</sub> ナノ粒子の XFEL の PDF を得ることができた。XFEL の PDF は PETRA III で測定した PDF で見られた特徴の大部分を再現した。XFEL の PDF もモデリングから、格子定数  $a = 5.161(1)$ ,  $b = 5.204(2)$ ,  $c = 5.342(2)$  Å, 粒子サイズ: 4.38(3) nm が得られた。これらの値は文献値や同じ試料を用いた粉末 X 線回折データから決定した値と一致した。Q 分解能の低さは PDF において原子間距離の不確かさをもたらした。これは実験配置を変えることで  $Q_{\max}: \sim 14 \text{ \AA}^{-1}$  に改善できる。今後、ポンププローブ実験に適用し、フェムト秒の時間分解能のその場 PDF 研究が期待できる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Zhang Jiawei, Ishikawa Daisuke, Koza Michael M., Nishibori Eiji, Song Lirong, Baron Alfred Q. R., Iversen Bo B.	4. 巻 135
2. 論文標題 Dynamic Lone Pair Expression as Chemical Bonding Origin of Giant Phonon Anharmonicity in Thermoelectric InTe	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie	6. 最初と最後の頁 202218458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ange.202218458	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Leiszner Sofie Stampe, Chakarawet Khetpakorn, Long Jeffrey R., Nishibori Eiji, Sugimoto Kunihisa, Platts James A., Overgaard Jacob	4. 巻 62
2. 論文標題 Electron Density Analysis of Metal-Metal Bonding in a Ni4Cluster Featuring Ferromagnetic Exchange	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 192 ~ 200
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c03170	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Stouckler Lise Joost, Krause Lennard, Svane Bjarke, Tolborg Kasper, Richter Bo, Takahashi Seiya, Fujita Tomoki, Kasai Hidetaka, Sugahara Michihiro, Inoue Ichiro, Nishibori Eiji, Iversen Bo Brummerstedt	4. 巻 10
2. 論文標題 Towards pump-probe single-crystal XFEL refinements for small-unit-cell systems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 IUCrJ	6. 最初と最後の頁 103 ~ 117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052252522011782	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Sarkar Sounak, Gronbech Thomas Bjorn Egede, Mamakhel Aref, Bondesgaard Martin, Sugimoto Kunihisa, Nishibori Eiji, Iversen Bo Brummerstedt	4. 巻 61
2. 論文標題 X ray Electron Density Study of the Chemical Bonding Origin of Glass Formation in Metal-Organic Frameworks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 202202742
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202202742	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Pal Rumpa, Jayatilaka Dylan, Nishibori Eiji	4. 巻 126
2. 論文標題 Structure Factors and Charge Density Description of Aluminum: A Quantum Crystallographic Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 2042 ~ 2049
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c10730	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Manjon-Sanz Alicia Marla, Surta T. Wesley, Mandal Pranab, Corkett Alex J., Niu Hongjun, Nishibori Eiji, Takata Masaki, Claridge John Bleddyn, Rosseinsky Matthew J.	4. 巻 34
2. 論文標題 Complex Structural Disorder in a Polar Orthorhombic Perovskite Observed through the Maximum Entropy Method/Rietveld Technique	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 29 ~ 42
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c01979	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Jiawei, Roth Nikolaj, Tolborg Kasper, Takahashi Seiya, Song Lirong, Bondesgaard Martin, Nishibori Eiji, Iversen Bo B.	4. 巻 12
2. 論文標題 Direct observation of one-dimensional disordered diffusion channel in a chain-like thermoelectric with ultralow thermal conductivity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 6709
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-27007-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sarkar Sounak, Gronbech Thomas Bjorn Egede, Mamakhel Aref, Bondesgaard Martin, Sugimoto Kunihisa, Nishibori Eiji, Iversen Bo Brummerstedt	4. 巻 61
2. 論文標題 X ray Electron Density Study of the Chemical Bonding Origin of Glass Formation in Metal-Organic Frameworks	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 202202742
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202202742	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nishibori E., Karatsu S., Terakura C., Takeshita N., Kinoshita M., Ishiwata S., Tokura Y., Seki S.	4. 巻 102
2. 論文標題 Structural analysis of high-pressure phase for skyrmion-hosting multiferroic Cu <sub>2</sub> OSeO <sub>3</sub>	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 2011061-2011065
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.201106	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fujita Tomoki, Kasai Hidetaka, Nishibori Eiji	4. 巻 20
2. 論文標題 Ion Product Scale for Phase and Size Selective Crystal Growth of Zirconia Nanoparticles	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 5589 ~ 5595
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.0c00765	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 0件)

1. 発表者名 Eiji Nishibori
2. 発表標題 Low-temperature structural phase transitions in thermoelectric tetrahedrite, Cu <sub>12</sub> Sb <sub>4</sub> S <sub>13</sub> and tennantite, Cu <sub>12</sub> As <sub>4</sub> S <sub>13</sub>
3. 学会等名 16th Conference of the Asian Crystallographic Association
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Pal Rumpa
2. 発表標題 The metallic bond in Aluminium: Quantum Crystallography
3. 学会等名 16th Conference of the Asian Crystallographic Association (招待講演)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 笠井秀隆
2. 発表標題 放射光X線回折による層状物質TiS2の層間相互作用の研究
3. 学会等名 第33回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	P A L R U M P A  (PAL RUMPA)  (30842265)	筑波大学・数理物質系・助教   (12102)	
研究分担者	笠井 秀隆  (Kasai Hidetaka)  (80634807)	筑波大学・数理物質系・助教   (12102)	
研究分担者	河口 彰吾  (Kawaguchi Shogo)  (10749972)	公益財団法人高輝度光科学研究センター・回折・散乱推進室・研究員   (84502)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------