

# 乱れた構造がもたらす機能性発現のメカニズム

## Mechanism of the function expression caused by disordered structure

川北至信<sup>1</sup>・Bing Li<sup>1</sup>・川崎卓郎<sup>1</sup>・菊地龍弥<sup>1</sup>・鬼柳亮嗣<sup>1</sup>・稲村泰弘<sup>1</sup>・大原高志<sup>1</sup>・柴田薫<sup>1</sup>・古府麻衣子<sup>1</sup>・中村充孝<sup>1</sup>・鈴谷賢太郎<sup>1</sup>・坂口佳史<sup>2</sup>・松浦直人<sup>2</sup>・花島隆泰<sup>2</sup>・阿久津和宏<sup>2</sup>・米村雅雄<sup>3</sup>・大友季哉<sup>3</sup>・田原周大<sup>4</sup>・丸山健二<sup>5</sup>・島倉宏典<sup>6</sup>

1 原子力機構 J-PARC、2 CROSS 中性子科学センター、3 高エネルギー機構、4 琉球大、5 新潟大、6 新潟薬科大

JAEA が施設枠のビームタイムの中で実施している JAEA プロジェクト課題「乱れた構造がもたらす機能発現のメカニズム」において、得られた研究成果をダイジェストする。本プロジェクトでは液体やガラスなど構造全体が不規則なランダム物質に対して用いられてきた研究手法・解析手法を、結晶に潜むランダム性がマクロな機能的物性を支配する物理現象に適用し、機能発現のメカニズムを解き明かしていくことを目的として、研究を展開してきた。

そのような手法として非弾性散乱・準弾性散乱によって得られる動的構造因子  $S(Q,E)$  を実時間・実空間に焼き直して、局所構造の動的な振る舞いを理解する動的相関関数を用いた研究例を紹介する。液体ビスマスは複雑な構造を有する短元素液体金属であり、その複雑性の起源が議論のまともになってきた。J-PARC MLF の AMATERAS(BL14) を用いてマルチ  $E_i$  手法で測定された測定領域・エネルギー分解能の異なる複数の  $S(Q,E)$  から、すべてを満たす時空相関関数  $P(r,t)$  を最大エントロピー法を利用して逆問題を解くアプローチにより得た。その結果、二重層状構造を持つ A7 構造という結晶構造から提唱されている Peierls 歪が液体中にも残存しているとする説を裏付ける構造緩和現象を観測できた[1]。

機能性物質としては、エネルギー変換デバイスとして期待される熱電材料の  $\text{AgCrSe}_2$ [2] と太陽電池素材の  $\text{MAPbI}_3$  ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) [3] について、ともに好ましい性質である低熱伝導性の起源を中性子準弾性散乱・非弾性散乱から突き止めた研究を紹介する。

- [1] Y. Kawakita et al, Physica B (2018), in press, Available online from 16 December 2017, (6 pages) <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.12.037>
- [2] B. Li et al, Nature Materials in press (2018) /DOI 10.1038/s41563-017-0004-2 published online 15 January 2018 (6 pages)
- [3] B. Li et al, Nature Communications. 8 (2017), 16086 (9 pages), DOI: 10/1038/ncomms16086.