

## 平成27年度日本鉱物科学会研究奨励賞第20回受賞者

門馬綱一 会員 (国立科学博物館)

地学研究部鉱物科学研究グループ)

研究対象: 「鉱物の結晶構造に基づく成長組織解析および記載鉱物学的研究」



門馬綱一会員は、計算機シミュレーションと成長組織観察に基づく双晶の成長履歴の解析、最大エントロピー法 (Maximum Entropy Method; MEM) による結晶構造中の電子・核密度分布の解析、記載鉱物学的研究などにおいて、国際的に高く評価される顕著な業績を挙げている。

長年未解決であった、水晶の日本式双晶が単結晶より巨大に成長する問題に対して、門馬会員は古典力場計算と自作の構造モデリングソフトウェアを駆使し、日本式双晶の{1122}接合面の構造シミュレーションを行った。更に接合面の構造に基づいて、SEMやカソードルミネッセンスによる天然試料の成長組織観察結果を解釈する新たな研究アプローチを展開した。その結果、① {1122}接合面のみが整合的な構造をもちエネルギー的に安定であること、② 接合面が{1122}と平行である時だけ双晶が優先成長すること、③ {1122}接合面がブラジル双晶ラメラの発生源になっており、それが優先成長に関わっていることなどを明らかにした。

MEMによる結晶構造中の電子・核密度分布の精密解析においては、観測データに経験的な重み付けをしないと合理的な電子密度分布が得られないことが指摘されていたが、門馬会員は重み付けの持つ物理的意味を指摘し、X線回折データと中性子線回折データでは適切な重みが異なることを明らかにした。また、単体のソフトウェアとしては世界で唯一、近似解ではなくMEMの厳密解に収束する解析ソフトウェア (Dysnomia) を開発した。Dysnomiaと粉末回折ソフトウェアRIETAN-FPとの組み合わせは、MEMに基づくパターンフィッティング (MEM-based Pattern Fitting; MPF) 解析を行える唯一のシステムでもあり、世界中で多くの研究に用いられている。

記載鉱物学的研究においては、門馬会員は2種類の新鉱物 (千葉石、房総石) を発見した。また、単結晶X線構造解析によって水酸基の有無や原子のオーダリングを決定することで、組成分析だけでは困難であった新鉱物の理想化学組成の決定に寄与するなど、8種の新鉱物の記載にも貢献している。

このように門馬綱一会員は結晶学的観点から多様な鉱物の研究を進めており、今後もさらなる活躍が期待される。よって、門馬綱一会員を日本鉱物科学会研究奨励賞として相応しいと考え、ここに推薦する。

門馬 綱一 会員の主要論文

1. K. Momma, T. Nagase, T. Kuribayashi, and Y. Kudoh: Growth history and textures of quartz twinned in accordance with the Japan law. *Eur. J. Mineral.*, 27, 71-80 (2015).
2. K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik and F. Izumi: Dysnomia, a computer program for maximum-entropy method (MEM) analysis and its performance in the MEM-based pattern fitting. *Powder Diffraction*, 28, 184-193, (2013).
3. K. Momma, T. Nagase, T. Kuribayashi and Y. Kudoh: Computational simulations of the structure of Japan twin boundaries in quartz. *Eur. J. Mineral.*, 21, 373-383 (2009).

門馬 綱一 会員の略歴

2004年 3月 東北大学理学部卒業

2006年 3月 東北大学大学院理学研究科博士前期課程修了

2009年 3月 東北大学大学院理学研究科博士後期課程修了  
(博士: 理学)

2009年 4月 物質・材料研究機構 研究員

2011年 4月 国立科学博物館 研究員

2016年 9月 現在に至る