

## 日本鉱物科学会応用鉱物科学賞

平成25年度日本鉱物科学会応用鉱物科学賞第7回受賞者

門馬 綱一 会員 (国立科学博物館)

受賞題目:「結晶構造・電子/核密度・結晶外形等の三次元可視化システムの開発と鉱物学への応用」



近年、結晶構造解析手法の発展や、電子状態計算の普及により、結晶中の物理量を三次元で可視化する必要性が増してきた。また、結晶構造モデルと、電子・核密度分布との比較や、結晶外形との比較など、異なるデータの比較も必要不可欠であるが、それら全てを統一的に可視化できるソフトウェアは存在しなかった。

そのような背景の中で、門馬綱一会員は、結晶構造、電子・核密度、波動関数などの三次元データ、結晶外形を統一的に可視化できるソフトウェアとして、VESTAを開発した。VESTAは、1) 空間充填模型、球棒模型、配位多面体模型、熱振動楕円体などの種々の構造図を描け、2) 配位多面体の容積、変形度、原子間距離、結合角を結晶構造図上で求めることができ、3) 電子・核密度等の等値曲面の表示を行うことができる極めて優れたソフトウェアであるが、Windows, Mac OS X, Linuxのいずれのプラットフォームでも使用できるフリーソフトウェアとして公開され、無料配布されている。その応用範囲は鉱物学だけに留まらず、材料科学や電子状態計算などの分野でも有用なツールとして認められ、国内外で多用されている。また、本ソフトウェアはリートベルト解析プログラムとして広く利用されているRIETAN-FPに連携されており、粉末X線・中性子回折法の高度のユーザーにとって有用であることはもちろん、初心者のユーザーにとってもリートベルト解析結果の評価、その構造的意義の把握および考察を容易にすることができるため、広いユーザーから歓迎され、新たなユーザーを拡大してきた。その結果、VESTAを利用した研究成果は、2007年の公開以来、年々増え続けており、VESTAに関する論文2報(Momma and Izumi, 2008, 2011)の被引用数は、これまでに1700報以上、2013年の被引用数は500報近くに上り、国産結晶学プログラムでは他に類を見ない実績をあげている。フリーソフトウェアであるために、大学教育における鉱物科学および物質科学の教育にも大きな貢献をしている。

また、結晶構造中の電子・核密度分布を最大エントロピー法により解析するソフトウェアの開発も行っており(Momma et al., 2013)、鉱物科学、物質科学分野における研究の発展にさらに貢献するものと期待される。

以上の門馬綱一会員の応用鉱物学分野における業績、これまでの貢献度、および今後の分野の発展に対する貢献の期待度から、門馬綱一会員を平成25年度日本鉱物科学会応用鉱物科学賞の候補者として推薦いたします。

門馬 綱一 会員の略歴

2004年 3月 東北大学理学部地球物質科学科卒業

2006年 3月 東北大学大学院理学研究科地学専攻博士前期課程  
修了

2009年 3月 東北大学大学院理学研究科地学専攻博士後期課程  
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

2014年 9月 現在に至る

門馬綱一会員の主な業績

主要論文

1. K. Momma and F. Izumi (2006) An integrated three-dimensional visualization system VESTA using wxWidgets. International Union of Crystallography Newsletter, No. 7, 106-119.
2. F. Izumi and K. Momma (2007) Three-dimensional visualization in powder diffraction. Solid State Phenom., 130, 15-20.
3. K. Momma and F. Izumi (2008) VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. Journal of Applied Crystallography, 41, 653-658.
4. K. Momma, T. Nagase, T. Kuribayashi and Y. Kudoh (2009) Computational simulations of the structure of Japan twin boundaries in quartz. Eur. J. Mineral., 21, 373-383.
5. 泉 富士夫, 門馬綱一(2008) 新世代システム RIETAN-FP・VESTA への招待. セラミックス, 43, 902-908.
6. 門馬綱一, 泉 富士夫(2010) 鉱物学における三次元可視化システム VESTA の応用. 岩石鉱物科学, 39, 136-145.
7. K. Momma, T. Ikeda, K. Nishikubo, N. Takahashi, C. Honma, M. Takada, Y. Furukawa, T. Nagase and Y. Kudoh (2011) New silica clathrate minerals that are isostructural with natural gas hydrates. Nature Communications, 2, Article number: 196.
8. K. Momma and F. Izumi (2011) VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. Journal of Applied Crystallography, 44, 1272-1276.
9. 門馬綱一, 池田卓史(2011)新鉱物 千葉石(chibaite) について. ゼオライト, 28, 25-32.
10. 門馬綱一(2012)シリカクラスレートの結晶構造. セラミックス, 47, 361-366.
11. 門馬綱一, 泉 富士夫(2012) 次世代三次元可視化プログラム VESTA 3. 日本結晶学会誌, 54, 119-120 (2012).
12. K. Momma, T. Ikeda, A. A. Belik, and F. Izumi (2013) Dysnomia, a computer program for maximum-entropy method (MEM) analysis and its performance in the MEM-based pattern fitting. Powder Diff., 28, 184-193.
13. K. Momma (2014) Clathrate compounds of silica. J. Phys.: Condensed Matter, 26, 103203(18pp)