

Li-ion 電池の正極材、固体電解質、負極材や強誘電体をはじめとする様々な材料の機能の発現には局所構造が重要であることはよく知られています。局所構造の評価方法の 1 つとして PDF 解析が広く知られています。しかし、実測値である  $S_{\text{obs}}(Q)$  や  $G_{\text{obs}}(r)$  は重み付き部分相関の和であるため詳細な局所構造の議論には部分相関の分離が必要です。部分相関を分離する 1 つの方法に Reverse Monte-Carlo (RMC) 法<sup>1)</sup>があり、この手法の最大の利点は計算によって実測値を再現する局所構造モデルが得られるということです。

当日は実際の解析例を使いながら PDF 解析と RMC 法の基礎についてご紹介いたします。

(1). R.L. McGreevy, L. Pusztai, *Mol. Simul.*, **1** (1988) 359–367.