

CONTENTS

P2 中性子産業利用推進協議会の平成27年度の体制 P2-3 J-PARC施設ニュース P3 ミュオン技術の紹介 P4 中性子実験装置の紹介 P4-7 研究トピックス P7-8 活動報告 P8 お知らせ

中性子と産業

東京理科大学 福山 秀敏

中性子が活発に産業利用される時代になりました。大変印象深く思います。1965年大学院入学の筆者にとって、当時の状況を考えると夢のようです。線形応答久保理論に基づいて強磁性金属における中性子散乱に関する研究の端緒となった歴史的論文Izuyama, Kim, Kuboが出版されたのがその直前の1963年のことです。その後、絶縁体や金属を問わず、様々な物質、とりわけ銅酸化物の磁気的性質の理解に中性子が果たした役割は大きいと思います。このように物質(物性)研究に活躍した中性子が、J-PARC稼働を機に材料研究にも威力を発揮するようになりました。産業利用を軸に「物質」と「材料」間に健全な関係が生まれつつあります。材料研究においては目標が明確であり、その目標に対して施設や装置の能力をどのように引き出すかが挑戦課題となります。同時に、材料における研究課題の背後に基礎物質科学としての先端的課題が隠れていることが多く、「元素戦略<拠点>」設立の基本思想である本多光太郎博士の『産業は学問の道場』の言わんとすることそのものです。

J-PARCがここに至るまでの道筋はドラマです。J-PARCの名称は2002年に既に決定していましたが、2005年のJ-PARCセンター発足時は中性子BL建設の目処がほとんど立っていませんでした。しかし、文科省量研室、中性子科学会、JAEA量子ビーム応用研究部門、茨城県、東海村等の関係者の見事な連携と尽力により、短期間にハード面の目標を実現しました。これからは質量ともに世界的研究成果の創出が期待されます。そのためには、組織全体の「研究戦略策定」と適切な研究マネジメントが必要となります。この観点から、「省エネルギータイヤ」開発に貢献したSPRING-8「フロンティアソフトウェア開発産学コンソーシアム」の組織形態はたいへん参考になります。実際、材料研究が主体となる「産業利用」では現場でのニーズと施設の能力を適切かつ迅速に結びつける仕組み(結局は人であるが)が必須で、従来から活動が外にみえる「茨城BL」や新しく設置された「元素戦略構造材料拠点装置」をきっかけとして、上記コンソーシアムで既に始まっている「放射光」と連携した「量子ビーム」の総合的利用へとさらに大きく展開されることを期待します。

イノベーション創出に向けた基盤技術の強化

(株)東芝 須藤 亮

現在、わが国では平成28年度から始まる第5期科学技術基本計画の策定に向けて数々の検討が進められています。科学技術イノベーションを巡る大変革時代の到来によりイノベーションの創造プロセスは大きく変貌し、既存の産業構造や技術分野の壁に阻まれることなく付加価値が生まれ出される時代を迎えています。とりわけICT (Information and Communication Technology) の進展に伴いインターネットを媒体として様々な情報とモノがつながるようになります。このICTの台頭により、新たな形でイノベーションが生まれ出されていく時代を迎えつつあると言えます。

このような大変革時代においては情報ネットワークを介してあらゆるものが結びつき、新たな付加価値として社会に還元されることが可能となります。いくつかの技術と製品を組み合わせ統合体としてデザインする「システム化」によって新しい価値が生まれ出されることになると期待されています。このように、新たな価値を生み出す「システム化」によって未来の社会変革を成し遂げる試みがかもっとも重要視され、また期待されて

います。

この「システム化」を推進するためにも、その基礎・基盤となる技術開発や仕組みの強化が極めて重要となります。特に、1) ICT技術や素材技術などに関連した戦略的な基盤技術、2) エネルギーやインフラ整備、高齢化社会対応等の課題解決に関連する基盤技術、3) 新たな産業の創造に向けて様々な分野に横断して適用できる共通基盤技術等への注力は我が国が率先して強化すべき点と考えられます。本協議会で取り組んでいる中性子の産業利用の仕組みから得られる様々な成果は、これらの重要な基盤技術に含まれると思います。是非ともこれらの成果が社会を変革する「システム化」に大きく貢献できるように、得られる成果が最終的に活用される姿を思い浮かべて研究・開発に取り組んで頂きたいと思います。併せてイノベーションの創出を効果的に推進するためには、これまで以上の産学官の連携を強化したオープンイノベーションが不可欠であり、それによる人材の流動化も重要と考えます。本協議会を通じて新しい形の産学官の連携の在り方を推進し、その成果が広く社会の変革に反映されることを期待します。

中性子産業利用推進協議会の平成27年度の体制

平成27年4月1日付けで副会長を務めていただいていたエーザイ株式会社の内藤晴夫CEOが都合により辞任されました。また、会計監事を務めていただいていた日立パワーソリューションズの瀧澤照廣氏が顧問を退任されることになり、会計監事は同社の浦瀬賢治社長に委嘱することになりました。

エーザイ株式会社が退会となり、それに伴って運営委員と研究開発委員長を務めていただいていた川上善之氏が離任されることになりました。また、住友化学の岡田明彦委員と日立製作所の山田真治委員が異動となり運営委員を離任されることになりました。これを受けて、運営委員の後任には、住友電工の斎藤吉広氏と住友化学の後藤文郷氏、日立製作所の西村信治氏に就任していただくことになりました。

川上善之氏とブリヂストンの大月正殊氏の離任を受けて、研究開発委員会委員長には運営委員であるキヤノンの野間敬氏に、委員長代理には三井金属鉱業の田平泰規氏に就任していただくことになりました。東芝の佐野雄二氏と大月正殊氏の両氏についてはそれぞれ吉岡研一氏と毛利浩氏に交替されました。また、新たに日産アークの今井英人氏と住友ゴムの岸本浩通氏に幹事に就いていただくことになりました。

以上の結果、中性子産業利用推進協議会の平成27年度の体制は下記の通りとなります(敬称略)。

会長

今井 敬 新日鐵住金株式会社 名誉会長

副会長

庄山 悦彦 (株)日立製作所 相談役
内山田竹志 トヨタ自動車株式会社 代表取締役会長

会計監事

浦瀬 賢治 (株)日立パワーソリューションズ 社長
富田 祐介 (株)日本アドバンステクノロジー 社長

顧問

有馬 朗人 武蔵学園 学園長

運営委員会

委員長：須藤 亮 (株)東芝 常任顧問
委員長代理：古屋 和彦 富士フィルム(株) 取締役
運営委員(50音順)

(株)東レリサーチセンター	石切山一彦
住友化学(株)	後藤 文郷
住友電工(株)	斎藤 吉広
(株)豊田中央研究所	杉山 純
(株)日立製作所	西村 信治
キヤノン(株)	野間 敬
新日鐵住金(株)	日比 政昭

研究開発委員会

委員長：キヤノン(株) 野間 敬
委員長代理：三井金属鉱業(株) 田平 泰規
幹事(50音順)

(株)MCHC R&Dシナジーセンター	赤井 俊雄
(株)日産アーク	今井 英人
味の素(株)	柏木 立己
トヨタ自動車(株)	金子美智代
住友ゴム工業(株)	岸本 浩通
JFEスチール株式会社	佐藤 馨
サントリーグローバルイノベーションセンター(株)	田中 良和
旭化成(株)	松野 信也
(株)ブリヂストン	毛利 浩
(株)東芝	吉岡 研一

J-PARC施設ニュース

J-PARC研究棟が完成

J-PARCセンターが平成24年度から建設を進めてきたJ-PARC研究棟が完成し、5月11日に完成記念式典が挙行されました。図1に研究棟の外観写真を示します。

本研究棟は、

- 1) 中性子ビーム利用者の研究環境を整備し、施設の利用促進を図る
- 2) 研究者とスタッフの相互交流と情報交換の場を作ることによって、新たな研究テーマの創出を刺激する
- 3) 研究環境の充実によりJ-PARCの国際拠点化を図ることを目的としています。

研究棟は鉄筋コンクリート造り4階建てで、延べ床面積は5,900m²、延べ収容人数は最大240名です。使い方としては、

- 1) 施設利用者が自由に、必要に応じたメンバーで集まり研究を行える空間を提供する
- 2) 支援を行うスタッフと、支援を受ける施設利用者が、効率的に実験を行えるように、共有できる場と多目的オープンスペースを提供する
- 3) 様々な異分野の研究者と専門の支援者の間で直ぐに相談できる場を提供する

ことを想定しています。

参考までに研究棟2階の配置図を図2に示します。データ解析用サーバー室やユーザー支援スタッフの居室、ユーザーの作業スペース、大会議室などが配置されています。中央部のアトリウムは施設側の研究者と外部ユーザーの方々が自由に交流できる場として利用できます。

J-PARCセンターとしては、この研究棟について、

- 1) 中性子実験の前処理設備を充実させ、大強度ビームの特性を活かした研究を促進して、電池やタンパク質の時代に応える
- 2) 大強度ビームの実験による膨大なデータ処理を行う専用の計算機環境を整備して、高空間分解能で高時間分解能を実現し、解析時間を短縮する
- 3) 世界の先端研究者が集まる拠点化を図り、研究者間の交流拡大により相乗効果を上げ、研究成果の最大化を図ることを将来計画として考えています。

MLFユーザーの皆さまのご活用をお願い致します。



図1 完成したJ-PARC研究棟の外観写真

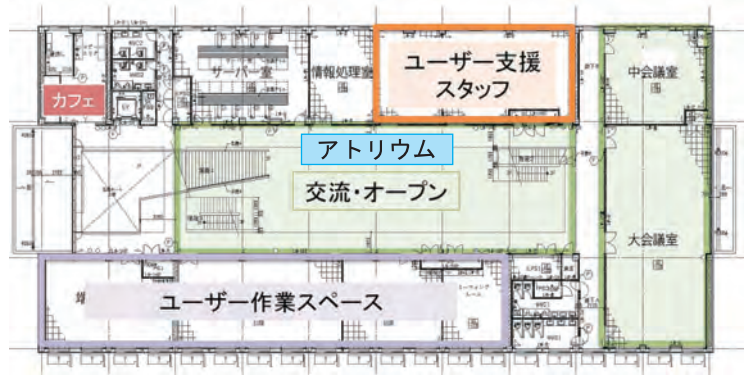


図2 J-PARC研究棟2階のフロアマップ

ミュオン技術の紹介

ミュオンでみる生体物質中の電子伝達

北里大学 菅原 洋子

タンパク質分子内および分子間の電子移動は、光合成や細胞内のミトコンドリアにおける呼吸鎖において必須の役割を担っています。電子移動の機能においては、酸化還元電位が少しずつ異なるヘム鉄や非ヘム鉄、キノン誘導体などの有機分子が用意され、有機分子の間を電子がつぎつぎに受け渡されていきます。これとカップルしてプロトン移動が起こり、ATP合成を介してエネルギー代謝（光合成であればエネルギー固定、呼吸鎖であればエネルギー消費）が進みます。これまで、タンパク質における電子移動の解析は、主として、光電子移動を起こす金属錯体をアミノ酸側鎖に導入し、光照射後の吸収もしくは蛍光変化を観察する手法で研究されてきました。

一方、ミュオンを用いた測定に、電子ラベル法と呼ばれる手法があります。この手法は、物質に照射されたミュオンが周囲の原子から電子を獲得する第1ステップと、ミュオンが物質内で停止すると同時に、運び込んだ電子を放出する第2ステップ、この電子とミュオンとの動的磁気双極子相互作用によりミュオンの偏極状態の緩和が進行する第3ステップで構成されています。従って、物質内に停止したミュオンの偏極状態の緩和測定を介して、ミュオンが運び込んだ電子の動きを観測することができます。

ミュオン電子ラベル法と呼ばれている方法は、ポリアセチレンなど有機伝導性高分子の研究で成果を挙げ[1,2]、磁性を持たない物質に対してミュオン緩和法の利用が可能であることが示されています。その後、生体物質にも適用され、タンパク質やDNAの分子内・分子間電子伝達を観察できることが示されました[3]。現在、呼吸鎖の一員であるシトクロムcについてミュオン電子ラベル法による測定を進めています(図1)。これらのデータに基づいて電子移動速度を求め、これまで分光測定から求められてきた値との対応関係の解析を進めています。

この方法は、非破壊分析であること、修飾などの前処理が不要であること、温度などの外場を制御した測定が容易であることなどの長所を有しています。現状では数百mgオーダーという大量の試料を必要とすることが短所となっ

ていますが、J-PARC/MLFに近々完成予定の超低速ミュオン顕微鏡を用いれば、 μg オーダーの量での測定が可能になります。それだけではなく、深さ方向において空間分解能10nmオーダーでのマッピングが可能になります。生体膜の厚みは10nm前後であるので、この方法を用いれば、膜タンパクの膜の外側だけでなく、膜内や膜の内側をターゲットとした測定が可能となり、膜タンパクの研究への活用が期待されます。

ミュオン実験を計画されている方は、J-PARCミュオンについてはKEK物構研の三宅康博研究主幹(yasuhiro.miyake@kek.jp)か、門野良典教授(ryosuke.kadono@kek.jp)と、理研RALミュオン実験施設については理研岩崎先端研の岩崎雅彦主任研究員(masa@riken.jp)とご相談下さい。

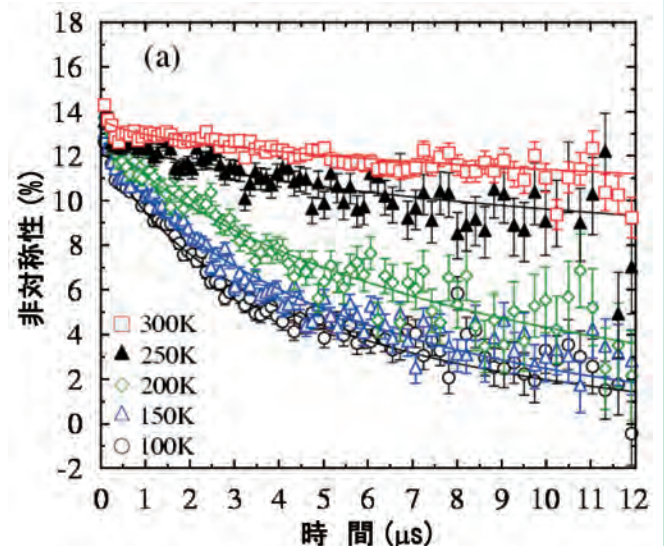


図1 シトクロムc(含水量約20wt%)の零磁場 μSR スペクトル(ガラス転移温度上下で振る舞いに相違が見られる)

参考文献

- [1] K. Nagamine, K. Ishida, T. Matsuzaki, K. Nishiyama, Y. Kuno and T. Yamazaki, Phys. Rev. Lett. 53, 1763 (1984).
- [2] F. L. Pratt, S. J. Blundell, W. Hayes, K. Nagamine, K. Ishida and A. P. Monkman: Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 2855.
- [3] K. Nagamine and E. Torikai, J. Phys. Condensed Matter 16 (2004) S4797.

中性子実験装置の紹介

茨城県生命物質構造解析装置 iBIXの現状

茨城大学 日下 勝弘、山田 太郎

茨城県生命物質構造解析装置iBIXは、主に生体高分子および有機化合物試料の構造解析を行うための単結晶中性子回折装置です。タンパク質の酵素反応機構解明や立体構造を基本とした医薬品開発への新たな寄与により生命科学の根源的理解に役立てること、また、応用範囲を広げて、有機化合物の水素原子が関与する化学反応機構の解明などを行うことを目的としています。

茨城県はJ-PARC/MLFの中性子産業利用を先導するため、県独自の中性子ビーム実験装置としてBL03にiBIXを整備し、その運営を行っています。運転維持・管理は茨城大学フロンティア応用原子科学研究センターに委託され、2008年12月からJ-PARC/MLFの運転開始に合わせて供用を開始しました。2012年には14台の既存検出器を高度化し、16台の新型検出器を導入して全検出器台数が30台となり、測定効率が約6倍に向上しました。図1にiBIXの外観と内部の構造を示します。

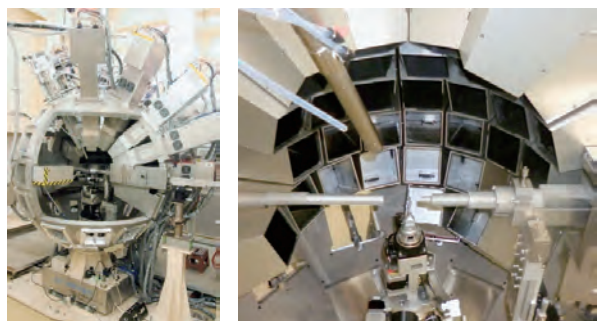


図1 茨城県生命物質構造解析装置iBIX

検出器の台数増強と高度化により2013年1月からタンパク質試料の本格的な測定が可能となり、県プロジェクト課題とJ-PARC一般課題の学術利用において成果が挙がっています。図2に県プロジェクト課題で実施したウシ膵臓由来RNase Aの中性子結晶構造解析結果を示します。タンパク質の活性に関与するHis12(ヒスチジン)の窒素原子に配位する水分子(重水)と重水素原子が明瞭に観測できています。

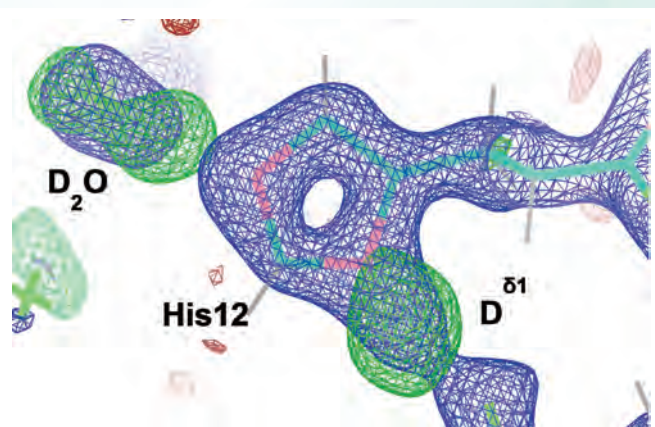


図2 RNaseAにおける活性部位の中性子散乱長密度マップ

2014年度までのJ-PARC/MLFの加速器出力300 kWでの測定実績としては、重水素原子が観測可能な分解能は2.0 Åで、2.0 Åより高分解能なデータが得られた試料については、最大の格子体積が約110×110×70 Å³、試料体積が1～6 mm³程度、平均測定日数が約7～10日間程度となっています。加速器出力が1 MWとなった場合には試料体積もしくは測定日数を約1/3にすることができます。現在は、より大きな格子体積の試料(分子量の大きな試料)の測定を実現するために、データ精度の向上、反射分離法の開発を進めています。また、多様なユーザーニーズに対応するために、試料の高温・延伸装置やパルスレーザーの整備も進めています。

研究トピックス

●J-PARC

銅酸化物高温超伝導体における高エネルギー磁気励起の電子注入効果

東北大学 藤田 全基
日本原子力研究開発機構 梶本 亮一、石井 賢司

電気抵抗がゼロとなる超伝導現象は、これを利用した材料への応用研究のみならず、新しい超伝導機構の可能性を探るといった観点からも魅力的な研究課題の一つです。とりわけ、現在最も高い転移温度を示す銅酸化物高温超伝導体は、注入された電荷(電子またはホール)同士、あるいは、電荷とスピンの相関が超伝導発現の鍵を握っている点が非常にユニークな物質です。しかし、その相関が複雑であるために、超伝導機構の理解に重要な電荷とスピンの静的構造や動き(励起)の完全な把握が一筋縄では行かず、発見から四半世紀以上経った今もなお、精力的な研究が続け

られています。スピンの動き(磁気励起)を観測する中性子非弾性散乱は、銅酸化物高温超伝導にとって最も重要な研究手法の一つですが、銅イオン上のスピンは量子数が最小値の1/2で、スピン間の相互作用のエネルギースケールが1000 K以上と非常に大きいため、もともと弱い全観測中性子強度が広いエネルギー空間に分散してしまっています。従って、磁気励起の全体像を精度良く捉えるという点で、銅酸化物高温超伝導体の励起状態は実験的に最も困難な研究対象と言えます。そのため、研究は測定装置の発展と共に少しずつ進展してきました。今回、私たちが測定した電子注入された銅酸化物の磁気励起状態も、これまで系統的な研究が進んで来なかった研究対象です。

私たちは複数入射エネルギー同時測定法(Multi-E法)を世

界に先駆けて実現した図1に示すBL01「四季」において、300 meVに及ぶ広いエネルギー空間での磁気励起スペクトルの電子濃度依存性を世界で初めて明らかにしました。この成功の一因は、Multi-Ei法の利用により磁気励起スペクトルを一度に測定し、従来は一つの組成に対して一週間程度必要であった測定時間を劇的に短縮できたことです。高い効率の測定が可能になったことで、現実的なマシンタイムの中で電子濃度に対する系統的变化を示すことができました。電子が注入されていない母物質では、古典的な磁性体に特徴的なスピン波励起に一致する励起スペクトルが観測されました。しかし、そこに電子を注入すると、図2に示すように、磁気励起スペクトルがエネルギー方向に長

く延びた特異な形状へと変化することが分かりました。このことは、電子の注入によって磁気励起が高いエネルギー領域にシフトすることを示唆しています。私たちは、中性子非弾性散乱とは相補的な研究として放射光を用いた共鳴非弾性X線散乱測定も行い、300 meVを超える高エネルギー領域でのスピンと電荷の励起を観測することで、高エネルギー領域における磁気励起が電子の注入により変化することを確認しました。

今後、上述のような変化を記述できる理論モデルを構築することにより銅酸化物における超伝導発現機構を解明したいと考えています。

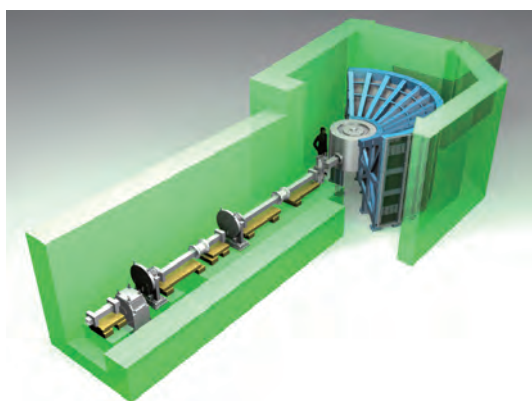


図1 チョッパー型中性子非弾性散乱分光器「四季」

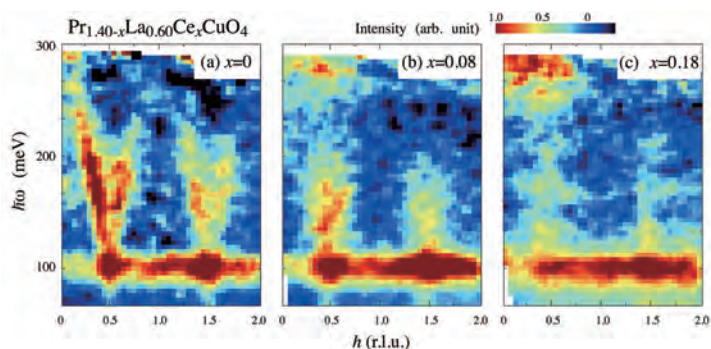


図2 $\text{Pr}_{1.40-x}\text{La}_{0.60}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ の磁気励起スペクトル (a)電子が注入されていない母物質 (b),(c) 電子を銅イオンあたりそれぞれ8%と18%注入した物質

偏極パルス中性子イメージングを利用したモーター内部磁界の観察

株式会社日立製作所 今川 尊雄
株式会社日立産機システム 相馬 憲一
J-PARCセンター 篠原 武尚

現在環境問題への影響とエネルギー危機を背景に、電力使用量の低減が急務となっています。国内に限れば、使用される電力のおよそ半分はモーターにより消費されています。モーターの効率を平均1%向上させればほぼ原子力発電所1基分の消費電力削減効果があります。モーターの効率向上には、使用する磁石や磁心などの機能性材料の性能向上が有効であることは知られています。しかし、性能の高い材料を組み入れたモーターが必ずしも期待通りの性能を発揮してはいないのが現状です。理由の一つには、機能性材料の特性が、モーター組み立ての間に応力等を受けて劣化することがあるためと考えられています。しかし、材料劣化の程度は明らかでなく、また、劣化を実測し取り込んだモーター設計もまだ十分ではありません。

中性子は金属を透過する能力が高く、古くから材料のミクロな構造解析に利用されてきました。近年、J-PARC/MLFにおいて中性子スピンを偏極させ、磁界を通過させて磁界の強度と方向を可視化する偏極パルス中性子イメージングの手法が開発されました[1]。モーターは体積の大部分を磁界発生コイルが占め、また、回転動作は回転子と固定子間のギャップ部の磁界分布により決まります。そこで、私たちは、偏極パルス中性子イメージングによりモーターギャップ部の磁界とコイル内部磁界を可視化し、材料劣化したモーター動作状態を実測して設計に反映できないか

検討しました。

図1は偏極パルス中性子イメージングの実験方法と結果を示したものです。(a)は実験のために各部を簡略化して製作したモーターです。このモーターはギャップ部を可視化できるようにフレームを省略した構造としました。(b)は計算モデルです。計算では、ギャップ部分と磁石内外に $1 \times 10^5 \text{ A/m}$ を超える磁界強度部分があることが分かります。(c)は中性子の透過像で、緑の部分は透過率が高いことを示しています。ギャップ部分は中性子がほぼ透過していることが分かります。また、モーター全体を支えるアルミフレームや巻きつけている銅線なども部分的に透過しています。(d)は偏極パルス中性子イメージングによる磁界観察結果です。この図では中性子スピンは紙面上下方向に偏極させており、青い部分がスピンの透過率の高い部分です。青い部分は図中円で示したギャップ部の左右にあり、(b)に示した4つの磁石のうち上下に強い磁界を発生している部分に相当します。この結果、偏極中性子には強度分布があり、かつ、強い磁界中でも偏極状態を失わずに見えること、また、計算結果とよく一致しています。中性子があるまま透過する位置はスピン偏極方向を 90° 変えるとギャップ上下位置に変わり、また、印加磁界の有無によっても位置が変わることが観察されており、今後モーターを回転させながら測定するなど、動作状態に近い条件で測定する予定です。

参考文献

[1] T.Shinohara, et al., Nucl. Instrum. Meth., A 651, 121 (2011)

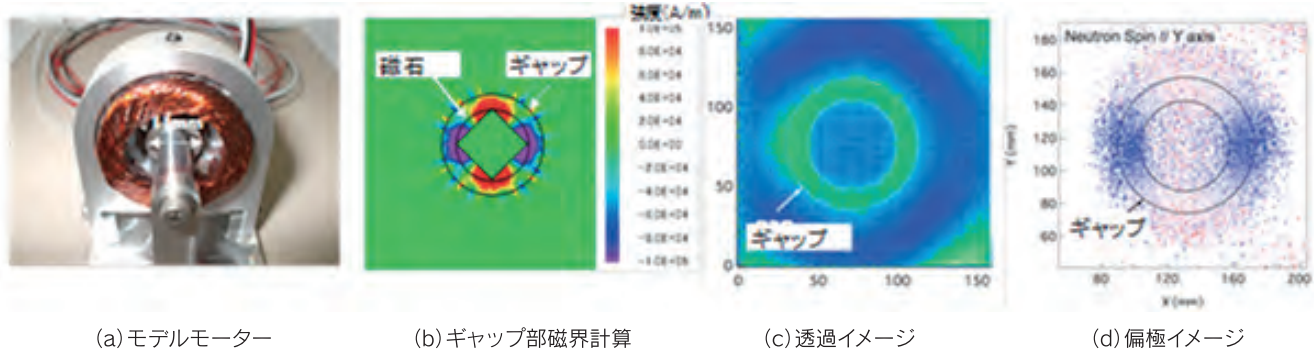


図1 偏極パルス中性子イメージングによるモーター磁界の観察

●茨城県BL & J-PARC

リチウム同位体を用いた電極断面方向の反応分布解析

京都大学 荒井 創、三井 昭男、佐藤 健児
折笠 有基、村山 美乃、内本 喜晴
小久見 善八
高エネルギー加速器研究機構 米村 雅雄、神山 崇

充電を行う前の電極において、 ${}^7\text{Li}$ と ${}^6\text{Li}$ の比率は0.8でした。これを低速(20時間率)で充電した試料では、充電後試料の ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ の比率は充電前と同じで、電極断面方向でリチウムは均一に抜けることが分かりました。一方、高速(1/5時間率)で充電した試料では、図2に示すように、充電量が増えるに従って ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ の比率は0.7~0.6と減少することが分かりました。

リチウムイオン電池に広く用いられる活物質や導電材、結着材からなる合剤電極内の反応分布、特に、厚み(断面)方向の反応分布は、出力や寿命を低下させる要因であり、その理解と改善のためには反応分布の可視化が求められます。

電極断面方向におけるリチウムの分布を見るためには、リチウム同位体を利用した中性子回折が有効です。本研究では、数十 μm 厚さのマンガン酸リチウム LiMn_2O_4 合剤電極内において、断面方向に空間分解能を持たせるため、対極に近い ${}^6\text{LiMn}_2\text{O}_4$ を含む層と集電体に近い ${}^7\text{LiMn}_2\text{O}_4$ を含む層を積層した図1に示すような電極を作製しました。放射光ではこの多層電極は単一層に見えますが、中性子では両層を判別可能と考えられます。実際に純 ${}^7\text{LiMn}_2\text{O}_4$ と純 ${}^6\text{LiMn}_2\text{O}_4$ の中性子回折実験を行ったところ、Li散乱が強度に反映されるピークとされないピークがあり、プロフィール解析により ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ 比率の定量が可能であることが分かりました。

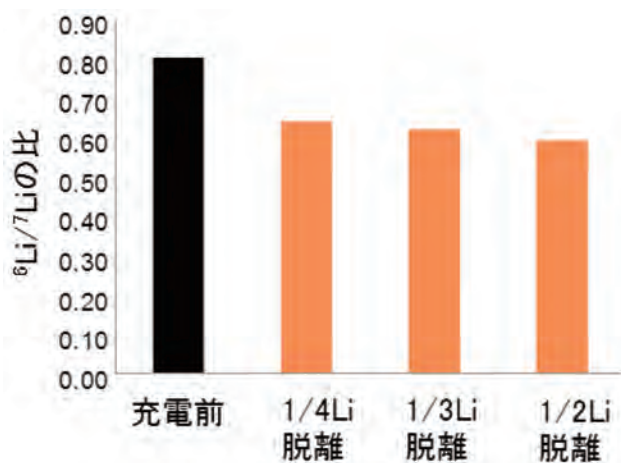


図2 高速で充電後の合剤電極中の ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ の比率

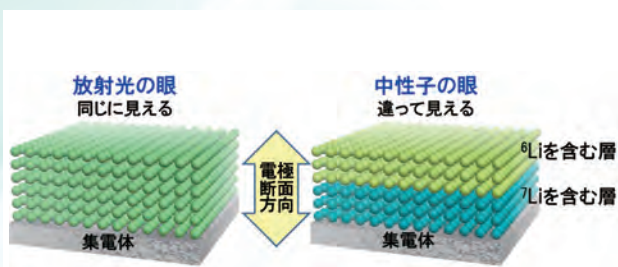


図1 ${}^6\text{Li}$ と ${}^7\text{Li}$ の配置を利用した反応分布解析法

この積層電極を試験セルに組み込み、充電で電極全体から一定量(全量に対して1/4、1/3、1/2)のリチウムを脱離しました。試験直後にセルを解体して電極を取り出して、大気に触れないようにバナジウム管に封入し、BLO9「SPICA」とBL20「iMATERIA」にて回折実験を行いました。回折データをZ-Rietveldで複数相のフィッティングを行って、各層におけるリチウム脱離量(反応進行量)を解析しました。

合剤電極においては、平均的には集電体側の層では電子伝導パスが短く、対極側の層では電解液にアクセスしやすくイオン移動パスが短いと考えられます。本研究で用いた合剤電極では、イオンが合剤電極中の微細な空隙に含まれる電解液を通して移動する過程が遅いため(律速過程であり)、集電体側の層でリチウム脱離量が制限されたものと考えられます。充電量が多いほど、集電体側の層からのリチウム脱離が制限されており、集電体側での反応の遅れが時間経過とともに顕著になったものと推察されます。

この手法を様々な厚み比や多孔度を有する電極の試験に展開することにより、合剤電極内におけるリチウム移動に関する知見を取得して電極特性の向上につながることを期待されます。

本研究はNEDOのRISINGプロジェクトの一環として実施しました。関係者の皆さまにこの場を借りて感謝申し上げます。

●茨城県BL

L-グルタミン酸ナトリウムの粉末結晶構造解析

味の素株式会社 柏木 立己

アミノ酸や核酸は一般的には水和物結晶を形成するものが多いため、結晶水の状態を精確に把握することが、生産・品質管理・知財等の様々な局面で極めて重要です。一方、X線回折により有機化合物の結晶構造を直接決定するX線粉末結晶構造解析が近年普及していますが、Naを含む水和物結晶の構造解析はやや難しいところがあります。そこで、水素原子の検出に優れる中性子による粉末結晶構造解析の有用性を確認するため、J-PARC/MLFのiMATERIAで測定した中性子粉末回折データを用い、X線粉末結晶構造解析では構造決定が困難なL-グルタミン酸ナトリウム1水和物(MSG)の中性子粉末結晶構造解析を行いました。

粉末構造解析にはプログラムFOXを用いました。高分解能バンクで得られた図1(a)に示す中性子粉末データ単独で粉末結晶構造解析を行ったところ、L-グルタミン酸分子の構造を決定することができましたが、Naイオンや水分子の構造決定には至りませんでした。そこで、SPring-8のBL26B1で測定した図1(b)に示すX線粉末回折データを併用した結晶構造解析を行いました。その結果、中性子データのウェイトを高めた中性子・X線併用結晶構造解析により、佐野らが得ている、空間群 $P2_12_12_1$ 、 $a=15.237\text{Å}$ 、 $b=17.937\text{Å}$ 、 $c=5.562\text{Å}$ という単結晶構造とほぼ同一な図2に示すような結晶構造を決定することができました。即ち、正解に対する原子位置のずれのRMSD値は、全原子で 0.230Å 、L-グルタミン酸分子 0.180Å 、Naイオン 0.115Å 、水分子の酸素原子 0.234Å 、水分子の水素原子 0.487Å であり、水の水素原子の位置も水素結合のジオメトリを十分満足する精度で決定できました。これらの結果より、中性子粉末構造解析の構造決定能力はX線よりも優

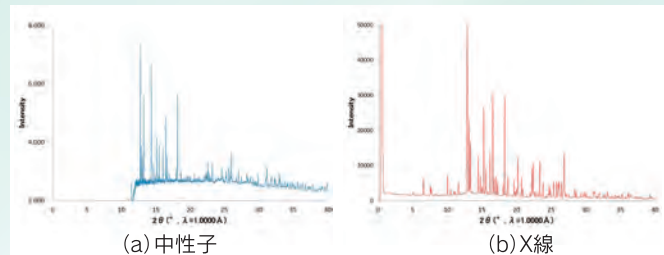


図1 MSGの粉末回折図形
(X線データとの比較のため、横軸は波長1Åでの2θ値に換算して表示してある)

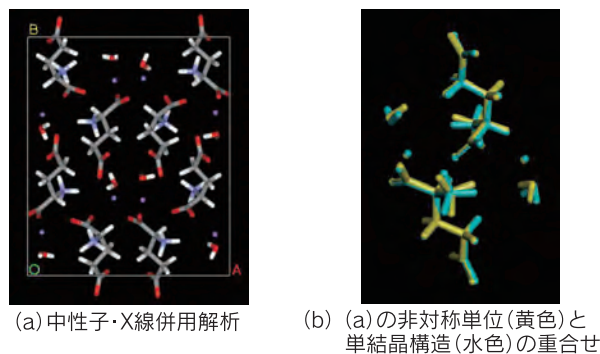


図2 MSGの結晶構造

れる場合があること、また、中性子・X線併用粉末結晶構造解析は水和物結晶等の解析や水素原子位置の決定等の点で非常に有用であることを確認しました。さらには、中性子・X線併用粉末結晶構造解析は水和物結晶等の解析や水素原子位置の決定等の点で非常に有用であることを確認しました。

本研究の実施に当たっては、茨城大学の石垣徹教授、星川晃範准教授、茨城県の森井幸生コーディネータ、林眞琴技監にご支援、ご指導いただきました。この場を借りて深く感謝申し上げます。

活動報告

●小角散乱解析法研究会

3月2日(月)に京都大学の東京オフィスにおいて、中性子小角散乱解析法研究会と京都大学原子炉実験所が主催し、中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「金属材料への適用に向けた取り組み」をテーマに開催しました。45名の参加がありました。

初めに、小泉智茨城大学教授がBL20「iMATERIA」における小角散乱機能の整備状況を報告しました。次いで、大場洋次郎京都大学原子炉実験所助教が京大炉の中性子小角散乱装置「KUR-SANS」を用いた鉄鋼材料のミクロ組織の測定について説明されました。その後、廣澤渉一横浜国立大学准教授や森一広京都大学原子炉実験所准教授、足立望豊橋技術科学大学助教、土山聡宏九州大学准教授、新日鐵住金の小林由起子氏、原子力機構の蘇玉華氏、ならびに、諸岡聡首都大学東京助教の各氏から時効硬化型Al-Li-Cu系合金や金属ガラス、窒素含有鋼、TiC析出強化鋼ならびにCu粒子強化鋼などに

おける強化機構の解明に関する研究結果が報告されました。今後、BL15「大観」やBL20「iMATERIA」を利用した鉄鋼材料研究が盛んになることが期待されます。



会場の様子



小林由起子氏(新日鐵住金)

●残留ひずみ・応力解析研究会

3月5日(木)にエッサム神田ホールにおいて、中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海、SPring-8ユーザー協同体が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「機械構造物における残留応力とひずみの評価」をテーマに第2回残留ひずみ・応力解析研究会を開催しました。50名の参加がありました。

最初にJ-PARCの現状と中性子の産業利用について報告があり、次いで、望月正人大阪大学教授から「残留応力は求まった！ さあ、それから？」と題して基調講演が行われました。その後、中性子のセッションでは、新日鐵住金の鈴木環輝氏からBL19「匠」を利用した研究成果が紹介されました。X線・放射光のセッションでは、三菱重工の湯村友亮氏と橋本鉄鋼の橋本匡史氏がラボX線を利用した測定事例を紹介され、日立製作所の平野辰巳氏とJAEAの菅浦貴久氏が放射光を利用した溶接部のin-situ測定結果を紹介されました。残留ひ

力は構造物の信頼性に係わるため熱心な議論がありました。



会場の様子



鈴木環輝(新日鐵住金)

活動報告

●ソフトマター中性子散乱研究会

3月12日(木)に研究社英語センターにおいて、中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海が主催し、フロンティアソフトマター開発産学連携ビームラインが共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「GISAXSとGISANSおよびSANSの産業利用に向けたプラットフォームの構築」をテーマにソフトマター中性子散乱研究会を開催しました。50名の参加がありました。

初めに、J-PARC/MLFの概要と中性子の産業利用の現状が紹介された後、チュートリアルとして、小川紘樹京都大学助教と田中敬二九州大学教授、竹中幹人京都大学准教授からGISAXS/GISANSによるソフトマターの構造解析などの講演が行われました。実験装置のセッションでは、小泉智茨城大学教授からBL20「iMATERIA」における小角散乱機能の整備状況、山崎大J-PARCセンター研究副主幹からBL17偏極中性子反射率計「写楽」の現状の紹介がありました。最後の産業応用セッションでは、日東電工の宮崎司氏とクラレの鎌田洋平氏、DICの小池淳一郎氏、住友ベークライトの和泉篤士氏、ならびに、MCHC R&Dシナジーセンターの小島優子氏の各氏が高分子フィルムやファイバー含有ポリマー、フェノール樹脂、有機半導体薄膜

のGISAXS/GISANS/WAXによる構造解析結果を紹介されました。今後、J-PARC/MLFの小角散乱装置や反射率計を利用した高分子材料や樹脂の構造解析が盛んになるものと期待されます。



会場の様子



小島優子氏 (MCHC)

●第2回生物構造学研究会

3月26日(木)に研究社英語センターにおいて、中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海が主催し、新世代研究所水和ナノ構造研究会とJ-PARC/MLF利用者懇談会が共催し、日本学術振興会第169委員会中性子回折小委員会が協賛して「計算化学と中性子構造解析の融合」をテーマに第2回生物構造学研究会を開催しました。34名の参加がありました。

初めに、J-PARC/MLFの現状と産業利用ならびに茨城県生命物質構造解析装置IBIXの現状について報告されました。その後、計算化学と結晶構造解析の融合に関して、奥野恭史京都大学教授から「ポスト「京」による計算創薬の展望と実験科学との融合への期待」と題して基調講演がありました。具体的な成果として、池口満徳横浜市立大学教授が「SAXSと計算化学の融合」ならびに、光武亜代理慶応大学講師と中川洋JAEA研究副主幹が「中性子散乱と計算化学の融合」と題して講演されました。最後に、片岡幹雄奈良先端科学大学院大学副学長に「中性子生物物理学の展開」と題して退官記念講演を行っていただきました。



会場の様子



片岡幹夫奈良先端大副学長

お知らせ

●平成27年度総会・平成26年度成果報告会

日時：平成27年7月23日(木) 10:40-17:10

会場：秋葉原コンベンションホール

中性子産業利用推進協議会の平成27年度総会を午前中に、平成26年度成果報告会を午後開催致します。

平成27年度総会においては、平成26年度の事業報告と決算、ならびに平成27年度の事業計画と予算などについて審議していただきます。

平成26年度成果報告会では、「J-PARC/MLF」のセッションにおいてMLF施設の現状と産業利用の現状、ならびに主要な研究成果を報告します。「中性子の産業応用セッション」では産業界から中性子実験装置の利用成果に関する講演を4件予定しています。昨年度までに比して開催時間を長く取り、より充実した成果報告会になるものと思います。多くの皆さまのご出席をお願い致します。

●物質科学研究会

日時：平成27年7月30日(木) 10:30-17:00

会場：エッサム神田ホール401会議室

中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会ならびにCROSS東海が主催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「原点回帰：中性子回折で何が見えるか？—中性子材料構造解析の威力—」をテーマに開催します。初めにチュートリアルとして大山研司茨

城大学教授と林好一東北大学教授に講演していただきます。そのあと「軽元素(水素やリチウム)を見る」と「酸素を見る」「同位体や原子番号の近い元素を見る」の3つのセッションで合計6件の講演があります。中性子材料構造解析の特長的な成果を俯瞰してその威力の認識を共有する場にしたいと考えます。

●茨城県中性子利用促進研究会第1回小角散乱分科会

日時：平成27年7月8日(水) 13:00-16:55

会場：研究社英語センター大会議室

茨城県中性子利用促進研究会が主催し、中性子産業利用推進協議会とCROSS東海が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して、平成27年度第1回分科会を「iMATERIAにおける小角散乱機能と実験例の紹介」をテーマに開催します。チュートリアルでは、小泉智茨

城大学教授にiMATERIAの小角散乱機能の現状と展開、能田洋平茨城大学特任助教にコントラスト変調法の原理と実例について講演していただきます。その後、「iMATERIAでの小角散乱実験例」と「コントラスト変調法の実験例」の2つのセッションにおいて企業の皆さまから最新の実験例を紹介していただきます。

協議会HP(<http://www.j-neutron.com/>)の構成をリニューアルしました。J-PARC/MLFやJRR-3の運転情報などを提供するサイトや、研究成果を紹介するサイトなどを新設しました。研究会や総会などの詳細についてはHPに順次新規情報を掲載しています。是非HPにアクセスして活用してください。

中性子産業利用推進協議会 季報【15年・夏】Vol.27

発行日 2015年6月25日

発行元 中性子産業利用推進協議会

〒319-1106 茨城県那珂郡東海村白方162-1 いばらき量子ビーム研究センター2F D201

TEL:029-352-3934 FAX:029-352-3935 E-mail:info@j-neutron.com URL:http://www.j-neutron.com/