

CONTENTS

P2 J-PARCセンター情報 P2-3 中性子実験装置の紹介 P3-10 研究トピックス P10-11 中性子産業応用セミナー P11-12 活動報告 P12 お知らせ

物質・材料開発研究に欠かせない中性子で切り開く道

東京理科大学 井手本 康

私が中性子に出会ったのは、1995年4月から1年間、米国アルゴンヌ国立研究所のIPNSでChun Loong, J, W. Richardson, Jr.のもとで中性子回折による構造解析に取り組んだことに始まります。当時は高温超電導酸化物を固体物理化学的な観点での研究を展開しており、構造解析の必要性を感じてのことでした。IPNSでは、その後ずっとお世話になり、現地にはなかなか来ないInternational heavy userと紹介されていました。

帰国後は、KEKでもお世話になり、1996年からリチウムイオン電池の正極材料の構造解析の重要性に着目し、リチウム、酸素とキーになるものを観るには中性子が最適といち早く取り組みました。当初はマクロなスケールで経験的に考えられていた電池の世界で、これで何が言えるのかとの声も聞こえていましたが、多くの発表をしているうちに重要性が認識されてきて、現在では多くの産官学の研究者が常套手段として使っています。この間、JRR-3や米国ロスアラモス研究所のLANSCEを利用して、電池材料や強誘電体を中心にリートベルト解析、さらには、MEMによる原子核密度解析などを積極的に取り入れ材料研究を進めてきました。その過程で、電子を観る放射光X線回折は結合性を議論するのに必要であ

り、電子構造や局所構造を議論するXANESと中性子結晶構造解析を相補利用する研究をいち早く展開しました。

J-PARC MLFが完成して、初期の成果として、電池の充放電過程の構造解析を実験室レベルの合材を含む電極で、しかも10mgという中性子にとってはこれまでにないごく少量で測定するというチャレンジングな試みに取り組んで構造変化を捉えることに成功しました。それをプレスなど多くの場に取り上げていただき、電池の充放電過程を中性子で観る先導的役割を果たせたと思っています。また、アモルファスなどの解析で使われていた中性子および放射光X線による全散乱解析において、結晶の局所構造をみる結晶PDF法にいち早く取り組み、これまでに平均構造では明らかにできなかった個々の原子の配列を含めた局所構造を明らかにし、多くの学会発表をしました。現在では構造解析の一つの重要なツールになっています。このように物質・材料開発の場で必要に応じて、色々な手法を新規に開拓し、これらを組み合わせて成果を発表し、多くの方に認知していただき、研究手法として広がるのが醍醐味と思って研究を進めています。

このような研究は施設および多くの研究者にご支援をいただいているものであり、ここに感謝の意を表したいと思えます。最後に一言、中性子を始めとする量子ビームを用いた研究では「人の輪」が特に大事ではないでしょうか。

J-PARCを利用して頂いている企業の一分析研究者として思うこと

味の素株式会社 柏木 立己

味の素株式会社は、食品事業やアミノ酸を軸とした事業を通じ、人々の食・健康への貢献とスペシャリティによる社会的価値の創造を目指して、様々な研究開発を進め、得られた成果を世界中のお客様に製品・サービスとして提供しています。私の所属する分析・構造解析部門は、独自の分析技術と最先端技術の導入により、将来の当社グループの成長を支える基礎研究や、各事業に共通した基盤技術開発を担っています。

私は入社以来、ほぼ一貫してX線結晶構造解析や粉末X線分析等の研究業務に従事してきました。X線を用いた分析・構造解析が、質量分析・NMR・分離分析等の他の分析技術と大きく異なる特徴の一つは、社外の最先端研究施設の活用により、in houseの装置では達成できない高度な分析や構造解析が可能であることだと感じています。当社においても、有用酵素創出やドラッグデザインを目的としたタンパク質結晶構造解析や、高度な粉末X線分析のために、KEK-PFやSPring-8等の放射光施設を20年余り前から積極的に利用しています。中性子に関しても、J-PARC MLFの運用開始当初

から利用を継続させて頂いており、有機低分子の結晶構造解析や粉末分析に対して、水素が特異的に観測できる有用性を実感してきました。企業研究者が、放射光や中性子等の最先端研究施設をこのように身近に利用できるのも、官学の先生方の先端的な装置開発のお蔭であり、ここに改めて感謝させて頂く次第です。

近年は、新たなイノベーション創出に向け、より付加価値の高い製品・ビジネスに対する要求が益々高まっています。分析・構造解析の企業研究者も、自身の専門性に閉じこもることなく、新たな技術に対するアンテナを常に張り巡らし、それらを将来の事業の発展に役立つような研究開発に適切に展開していく「目利き」の能力が益々重要になると思います。中性子産業利用推進協議会の研究会や企業セミナー、講習会等の様々な活動は、上記のような能力を培う上で非常に有益な場となっており、関係者の御尽力に改めて謝意を表します。今後も、J-PARC MLFの研究者や中性子産業利用推進協議会、企業の分析部門研究者、企業の製品・技術開発の直接的な担当者がさらに有機的に連携し、中性子の産業利用が益々発展していくことを期待しています。

MLF成果最大化に向けて

J-PARCセンター 金谷 利治

平成27年6月1日に高エネルギー加速器研究機構(KEK)物質構造科学研究所に異動し、大強度陽子加速器施設物質生命科学実験施設(J-PARC MLF)のディビジョン長を仰せつかり、約2年が経ちました。異動直前の平成27年4月30日および異動後11月20日に中性子標的容器冷却水の漏れが原因で2回のJ-PARC MLFの停止を経験しました。これにより前人未達の1MW達成への困難さを実感させられると同時に、まだまだハード充実へ向けた努力が必要であることを痛感しました。その後、中性子源セクションを始め、多くの方々の努力で200~150kWの出力ですが、95%を超える稼働率でMLFは安定運転を続けています。利用者の方の利便性向上やMLFの成果創出のためには1MWを目指すことと同時に、継続的な安定運転の重要性を改めて認識しています。

並行して、成果最大化に向けて関係者と協力し、多くのMLF改革を行っています。山田和芳KEK物構研所長からは成果最大に向けて明確なPDCAサイクルをご提案いただきました(図1参照)。これによると、(1)いい課題を、(2)きちんと実行し、(3)きちんと結果を出し、(4)結果を具現化し、(5)戦略的に公表し、(6)更なる研究展開へと続けることで成果を最大化できるということです。当たり前のことのように思えますが、容易なことではありません。

それぞれのステップにおいてボトルネックを1つずつ解消して行かなければなりません。まず、研究推進に向けて会議体・グループの変革を行いました(図2参照)。中性子・ミュオンの特性を踏まえた研究とその戦略を議論するため研究企画会議を、外部有識者からMLFの研究方

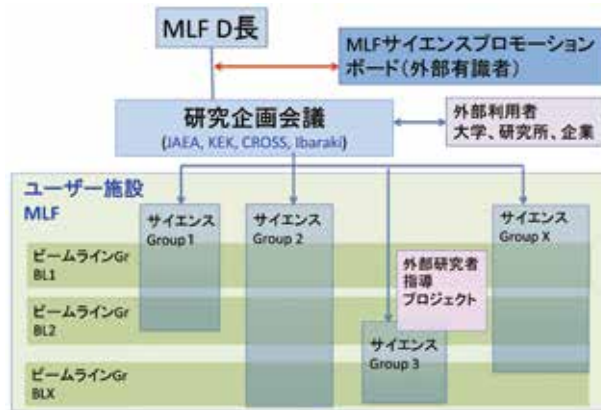


図2 MLF成果最大化に向けた体制の改革

向性について助言・提言をいただくためMLFサイエンスプロモーションボードを、内部研究活性化と「見える化」、および、外部ユーザーと連携強化を推進するためMLFサイエンスグループを立ち上げました。これらが各ビームラインと有機的に連携して、MLFに根付き、実効的に働くように進めることが重要です。

MLFにおいて課題選定は重要です。現場の方の意見を取り入れやすいように改め、また、柔軟なビームタイム配分を実現するため、一般課題調整枠(10%)を設け、利用者支援強化を進めています。長期課題の導入によりポテンシャルユーザーとの連携を深めることも成果創出に向けての大きな前進となるはずですが、産業利用においては、利用者支援および企業との協働に向けた企業ポスドク制度を開始しました。解析ソフトなど計算環境の整備は成果創出に直結しますが、関係者の努力により大きく進み始めました。

MLFの発表論文を全てWebに公開し、どの程度インパクトのある成果が出ているかをTop10%論文解析により明らかにしました。MLF成果の現状を知ることは、成果創出の第一歩です。年々、論文数は明らかに増えていますし、Top10%論文の割合も確実に増加しています。

MLFにおける生命科学の活性化も今後の課題であり、新たにCROSSのサイエンスコーディネーターとして着任された片岡幹雄先生の指導のもと強力に進めて行く予定です。

J-PARC MLFはハード面では世界のトップに立っています。今後、学術成果の創出を強力に推し進めますが、それは必ずや産業利用の成果創出にもつながります。名実ともに世界の最強の施設にするために努力を続けていく所存です。ご協力をお願いします。

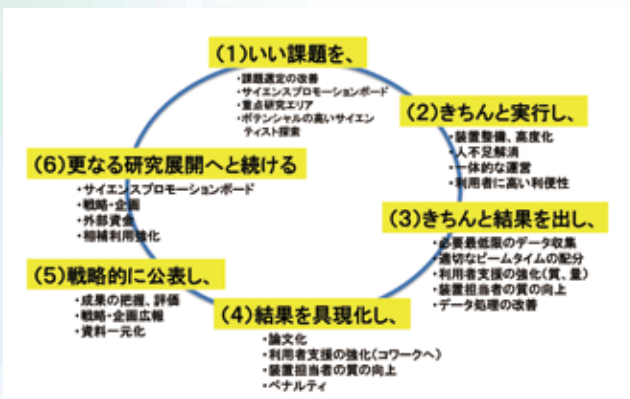


図1 MLF成果最大化に向けたPDCAサイクル

中性子実験装置の紹介

北海道大学中性子源HUNS (Hokkaido University Neutron Source)

北海道大学 大沼 正人

北大HUNSは1973年に完成し、以後40年以上にわたり貴重な小型中性子源として利用されてきました。ただ、私も含めて中性子科学のど真ん中以外の方々にはほとん

ど知られてこなかったのではないかと思います。実際には運用開始直後より物質・材料研究に重要な冷中性子発生のための減速材研究が行われ、今も世界中で活用されるデータが取得されています[1]。また、中性子磁気集光レンズはHUNSを利用して開発が行われ、J-PARCで活用されています[2]。最

近ではBragg Edgeイメージング技術およびその解析法であるRITSコードの開発など、HUNSからJ-PARCでの新測定技術に発展した例もあります[3,4]。一方で、小型中性子源を使った研究が材料科学分野で本格化したのは2000年以降のことで、中性子利用技術の新しい動きの一つです。以下、材料組織解析の一つである中性子小角散乱(SANS)測定とHUNSに整備した小角散乱装置iANSについてご紹介します。

SANSは材料の中に埋め込まれた種々の不均一物質のサイズや数を非破壊で定量化できるため、数ある中性子利用技術の中でも工学・産業分野に適した観測手法です。SANSプロファイルの例として、熱処理によりナノサイズの析出物を制御した鉄鋼材料の結果を図1に示します[5]。横軸は散乱角度の代わりに散乱ベクトルの変化量 $Q=4\pi\sin Q/\lambda$ を使います。この図には韓国の研究用原子炉HANAROの18mSANSで測定した結果と、HUNSに整備したナノ組織観測に特化したSANS装置であるiANS (intermediate-Angle Neutron Scattering:「アイアンズ」と呼称:図2参照)を用いた測定結果を比較してあります[5]。両装置で測定している部分については縦軸の絶対強度も含めて完全に一致します。つまり、ナノ組織評価であれば出力1kWの加速器駆動小型中性子源でも既に実用段階にあることがわかります。

中性子の透過率はX線より大きいので、厚みのある試料でもナノ組織の測定が可能です。実際、ほとんどの合金で厚さ1mm以上の試料で測定が行えるため、ナノ組織を制御した製品において、製造時の異常や使用環境における変化をプロファイルの変化として非破壊で比較できます。これを日常的に利用できれば、製造現場で抱える種々の問題に回答を与える新しいツールとなり得ます。そのためには小型中性子源の性能向上とその数が増えていく必要があります。

HUNSでは出力を3倍程度にあげる計画を進めており、実現後は測定時間を1時間程度に短縮可能です。施設は札幌キャンパスのど真ん中、工学部の建屋群の中にあります。私の居室からは徒歩5分です。さらに、HUNSから徒歩3分でX線小角散乱(SAXS)装置にアクセス可能です。SAXSとSANSを併設した施設も増えつつありますが、「徒歩3分」はおそらく世界最短距離でしょう。

加速器増強後は1泊2日程度札幌に出張していただければ、10個程度の試料をSANS測定、3個程度をSAXS測定して、SANS/SAXSのコントラスト比較も可能です[6]。測定後は札幌市街にてディスカッションです。測定数をこなすことが必要な場合にはiMATERIA等を活用すべきでしょう。しかし、研究の初期段階において、じっくり考え

ながら測定と解析を進める段階ではディスカッションとモチベーションの活性化に小型中性子源が最適です。ぜひ、産学連携の玄関口として北大iANSをご活用ください。

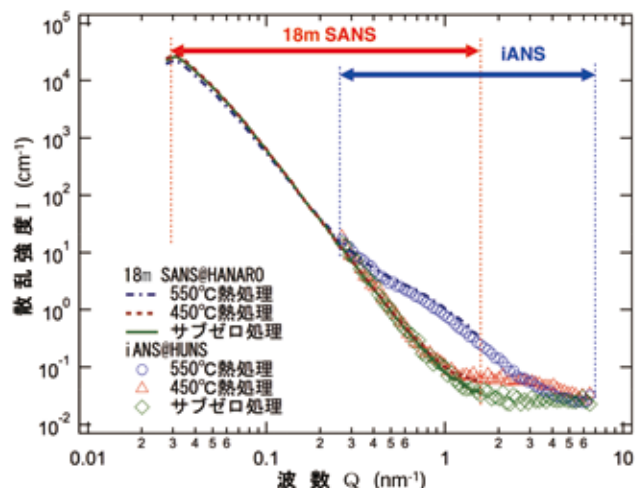


図1 同一鉄鋼材料のSANSプロファイルの大型施設(韓国HANARO)とHUNSによる比較[6]

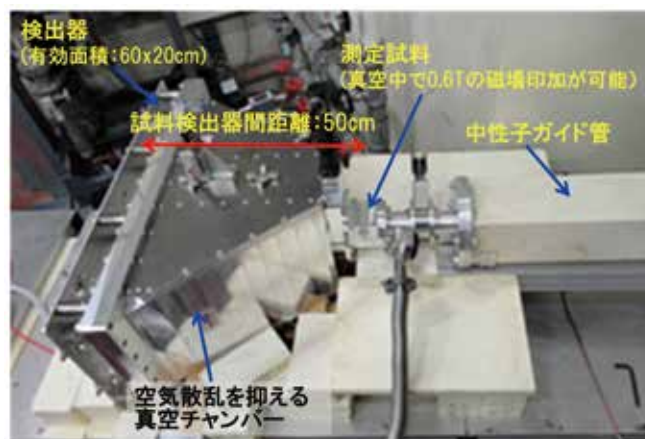


図2 iANS(アイアンズ)の外観

参考文献

- [1] 鬼柳善明, 木野幸一, Isotope News, 717 (2014) p.31
- [2] J. Suzuki, T. Oku, T. Adachi, H. M. Shimizu, Y. Kiyonagi, T. Kamiyama, F. Hiraga, H. Iwasa, K. Sato, M. Furusaka, Nucl. Instr. and Meth. A 529 (2004) p.120
- [3] Y. Kiyonagi, H. Sato, T. Kamiyama and S. Shinohara, J. Phys. Conf. Ser.340 (2012), 012010
- [4] 鬼柳善明, 四季, 34 (2017) p.4
- [5] T. Ishida, M. Ohnuma, B. S. Seong, M. Furusaka, ISIJ International, submitted
- [6] 大沼正人, 検査技術, 22 (2017) p.1

研究トピックス

●J-PARC

1つの遷移金属原子に9つもの水素が結合した新たな水素化物の誕生

東北大学 高木 成幸、折茂 慎一

第一原理計算により金属原子1つあたり9つもの水素が結合する錯体水素化物が形成されるとの予測に基づき、試料を合成して高強度全散乱装置「NOVA」による中性子回折実験を行った結果、予測通りの錯イオンの形成を確認しました。

水素はほとんどの元素と結合して多様な水素化物を形成します。例えば、リチウムイオン電池の電気伝導を担うリチウムは水素と結合してリチウム水素化物(LiH)を形成します。富士山付近から湧き出る天然水に含まれるバナジウムは、金属格子間に多くの水素を固溶させることから水素貯蔵材料としての研究が進められています。火山や温泉特有の卵の腐つ

た臭いの元である硫化水素は、硫黄に水素が結合した気体ですが、最近、150万気圧という超高圧下にて金属化し、あらゆる物質の中で最も高い超伝導転移温度を示すことが発見され、大きな話題となりました。

多くの元素と結合して多様な機能性を発現する水素ですが、VI族からXII族の遷移金属元素とは安定な二元系水素化物を形成しないハイドライド・ギャップが知られています(図1参照)。一方、これらの元素は、錯体水素化物においては多数の水素と共有結合して錯イオンを形成します。唯一の例外がCrとMo、Wの属するVI族元素であり、これらはハイドライド・ギャップに属するにも拘わらず、錯体水素化物においても水素と結合しないとされてきました。これに対して私たちの研究グループは、2015年、Crに7つの水素が結合した錯体水素化物の合成に成功しました。

本研究では、残りの例外であるMoとW、また、ハイドライド・ギャップには属さないものの、これまで錯体水素化物の合成報告のないNbとTaを含む4種の錯体水素化物の合成を試みました。これらの元素はいずれもCrより原子サイズが大きく、錯イオンを形成すればより多くの水素と結合することが期待されます。

第一原理計算を用い、これら4元素と水素が結合する可能性を詳細に調べた結果、9つの水素が金属原子に四角面三冠三角柱状(図2参照)に配位することで、4元素すべてが水素と結合することが分かりました。さらにこれらの結合が、リチウムイオン(Li⁺)、ヒドライドイオン(H⁻)と電子の授受を行うことで安定化した4種の錯体水素化物(Li₅MoH₁₁、Li₅WH₁₁、Li₆NbH₁₁、Li₆TaH₁₁)を形成するとの結論に達しました。

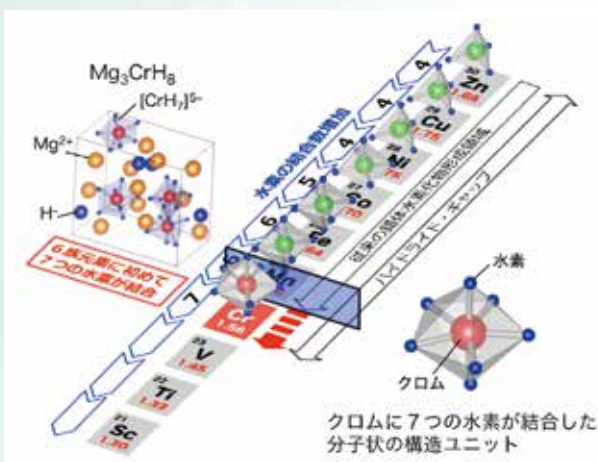


図1 VI-XII族元素が属するハイドライド・ギャップ

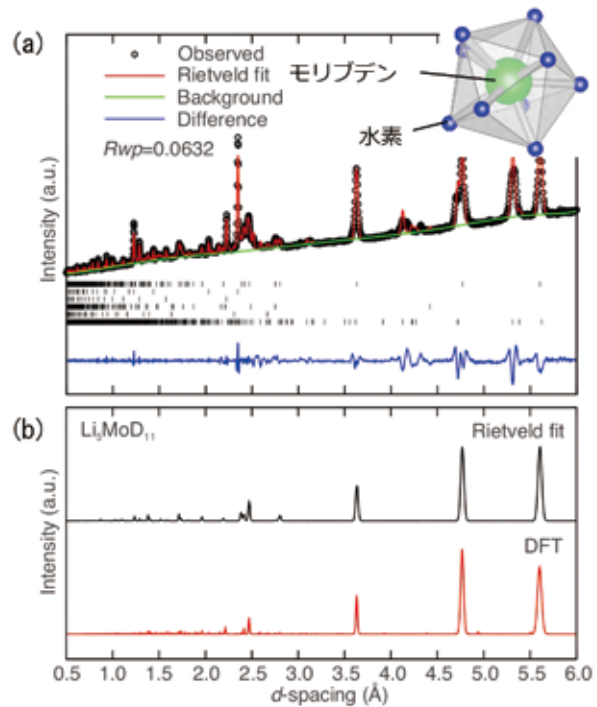


図2 (a)NOVAで測定した合成資料(Li-MoD)の中性子回折プロファイル、(b)Rietveld解析(黒線)と理論計算(赤線)より得られたLi₅MoD₁₁の中性子回折プロファイル

以上の理論予測を受け、合成実験に取り組みました。4種の金属とLiHの粉末を所定の比率でよく混ぜた後、高圧プレスにより5万気圧に加圧し、650°Cから750°Cの水素流体に長時間晒しました。J-PARC MLFの中性子高強度全散乱装置「NOVA」を用いて中性子回折実験を行った結果、理論予測通り金属原子1つあたり9つもの水素が結合した錯イオンの形成を確認しました。

水素を高密度に含む物質は、水素貯蔵材料に加えて超伝導材料やイオン伝導材料としての応用が期待されるなど、近年多くの注目を集めています。本結果は、水素を高密度に含む物質の探索に向けて新たな指針を提示する重要な成果となりました。

本研究の実施に際し、量子科学技術研究開発機構の齋藤寛之上席研究員、高エネルギー加速器研究機構の池田一貴特別准教授、大友季哉教授、豊田中央研究所の三輪和利主任研究員、東北大学金属材料研究所の飯島樹祐氏、佐藤豊人助教、池庄司民夫博士に多大なるご支援をいただきました。この場を借りて厚く感謝申し上げます。

中性子反射率測定による無機固体界面上に調製したゴム架橋薄膜の凝集状態

九州大学 犬束 学、下村 信一郎、田中 敬二
高エネルギー加速器研究機構 山田 悟史

中性子反射率計SOFIAを用いた構造解析により、ポリイソプレン (PI) が良溶媒であるn-ヘキサンにも膨潤しない層を石英との界面に形成することを解明しました。

省エネルギーで持続可能な社会の実現がますます求められています。その一環として、金属やセラミックスに置き換わる、軽くて丈夫な高分子材料の開発が重要視されています。このような高分子材料は多くの場合、シリ

カ微粒子やガラス繊維など、無機フィラーの添加により補強された複合材料として製造されます。典型的な例は、ゴム状高分子にカーボンブラックやシリカ微粒子を添加したタイヤ用ゴム材料です。このような高分子/無機フィラー複合材料のさらなる高強度化のためには、無機固体界面上における高分子鎖の構造とダイナミクスの理解が必要不可欠ですが、これまでその詳細は明らかにされていませんでした。無機固体と高分子との界面は空気界面や水界面とは異なり、物質に“埋もれて”いるため、解析手法が限られていたためです。このような界面のナノスケールの構造の解析には、高い透過力と軽元素に対して高い感度を有する中性子線を用いた反射率測定は最

も有効な測定手法の一つであると言えます。

本研究では、天然ゴムの主成分であるPIの石英基板との界面における凝集状態をJ-PARC MLFのBL16「SOFIA」を用いて解析しました。この試料は、タイヤ用ゴム材料に無機フィラーとして添加されたシリカ微粒子界面をモデル化したものです。図1に測定時の模式図を示します。石英基板上に光架橋剤を添加したPI薄膜をスピコート法により成膜し、これに紫外線を照射して架橋PI薄膜を調製しました。この架橋膜をリザーバーを用いて重水素化ヘキサン(*n*-hexane-*d*₁₄)と接触させました。重水素化*n*-ヘキサンを用いたのは、架橋PI膜と*n*-ヘキサンに散乱長密度のコントラストをつけるためです。この際、*n*-ヘキサンはPIにとって良溶媒であるため、架橋PI薄膜は膨潤しますが、もし、石英との界面に固着したPI鎖の層があれば、石英界面近傍ではPIの膨潤度が小さくなります。

空気中と*n*-hexane-*d*₁₄中において測定した中性子反射率曲線のフィッティングから得られた石英界面近傍におけるPIの体積分率のプロファイルを図2に示します。空気中では、ごく単純な架橋PIの膜が1層あるだけです。一方、この膜を*n*-hexane-*d*₁₄中に浸漬させて膨潤させたところ、架橋PI膜中に*n*-hexane-*d*₁₄が浸入して膜全体としては膨潤しているのに対し、石英界面近傍ではPIの体積分率が高い、すなわち、あまり膨潤していない領域があることが分かります。さらに、界面からおおよそ2 nm程度の領域ではPIが全く膨潤していない“最界面層”があり、この層と界面から離れたバルク層の間には10 nm程度のやや膨潤度の低い“中間層”があることが分かります。このような2層がバルク層と石英との間にあると仮定したモデルでなければ中性子反射率の結果を再現できないことから、このモデルが石英との界面におけるPIの凝集状態を正しく表していると考えられます。また、これらの2つの界面層は、無機固体への高分子鎖の吸着層形成に関する研究で提唱されてきた、

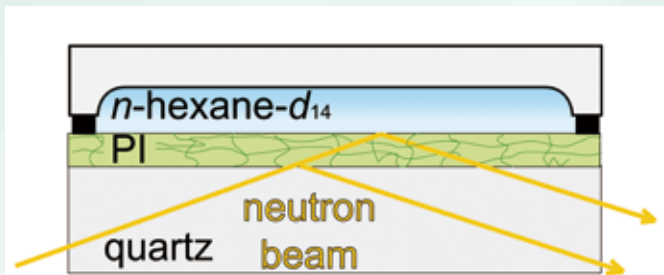


図1 中性子反射率法の模式図

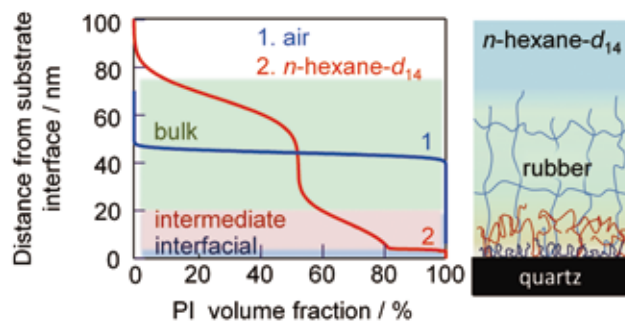


図2 得られた体積分率のプロファイル

“tightly adsorbed chain”および“loosely adsorbed chain”と関係している可能性もあります。

本研究は、J-PARC MLFの課題番号2014S08、2015A0217によって実施し、文部科学省科研費(15K17871, 15H02183)、JST先端計測プログラム(13A0004)、革新的研究開発推進プログラム(ImPACT)および光量子融合連携研究開発プログラムの助成を受けたものです。

参考文献

- [1] M. Inutsuka, K. Tanaka, et al., Polymer, 105, (2016), pp.526-531

中性子回折による新規ペロブスカイト化合物PbCoO₃の電荷分布解明

東京工業大学 東 正樹
 神奈川県立産業技術総合研究所 酒井 雄樹

新しく合成されたペロブスカイト化合物PbCoO₃において、Pb²⁺_{0.25}Pb⁴⁺_{0.75}Co²⁺_{0.5}Co³⁺_{0.5}O₃という、他に例のない電荷分布が実現していることを発見しました。温度変化による位置決めを抑制する負熱膨張材料などへの応用が期待されます。

ペロブスカイト型酸化物は、強誘電性や圧電性、超伝導性、巨大磁気抵抗効果、イオン伝導など、多彩な機能を有するため盛んに研究されています。これまでに鉛と3d遷移金属を含むペロブスカイト型酸化物として確立していたのは、強誘電体として良く知られているチタン酸鉛(Pb²⁺Ti⁴⁺O₃)だけでした。しかし、近年、我々の研究によってバナジウム酸鉛(PbVO₃)がPb²⁺V⁴⁺O₃、クロム酸鉛(PbCrO₃)と鉄酸鉛(PbFeO₃)がPb²⁺_{0.5}Pb⁴⁺_{0.5}Cr³⁺O₃とPb²⁺_{0.5}Pb⁴⁺_{0.5}Fe³⁺O₃、ニッケル酸鉛(PbNiO₃)がPb⁴⁺Ni²⁺O₃の電荷分布を持つことが明らかとなり、チタン(Ti)→バナジウム(V)→クロム(Cr)→鉄(Fe)→ニッケル(Ni)のように元素周期律表を右に進むにつれて、鉛(Pb)の価数が増加し、遷移金属の価数が減少する傾向が分かりつつあり

ました。コバルト(Co)はFeとNiの間に位置するため、両者の中間的な電荷分布が期待されますが、PbCoO₃はこれまで合成されていませんでした。

今回の研究では、15GPa(15万気圧)という超高压を用いることで、世界で初めてPbCoO₃の合成に成功しました。MLFのBL08「SuperHRPD」での高分解能中性子回折実験によって結晶構造を詳細に調べた結果、図1に示すように、ペロブスカイト型構造(一般式ABO₃)のAサイトにPb²⁺とPb⁴⁺が

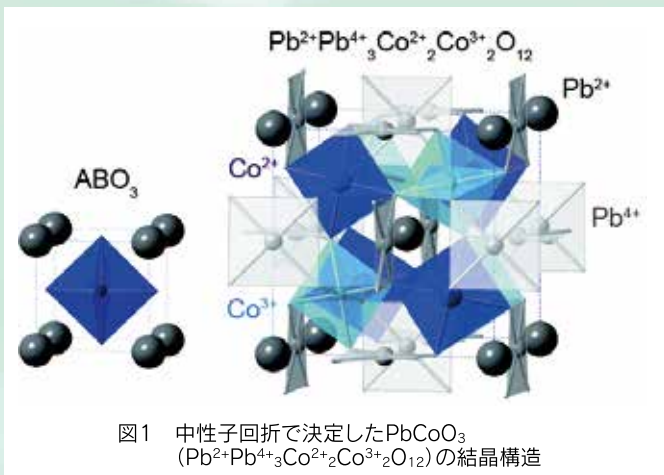


図1 中性子回折で決定したPbCoO₃(Pb²⁺Pb⁴⁺₃Co²⁺₂Co³⁺₂O₁₂)の結晶構造

1:3で、Bサイトに Co^{2+} と Co^{3+} が1:1で秩序配列した四重ペロブスカイトと呼ばれる構造であることが明らかになりました。

即ち、 PbCoO_3 は、 $\text{Pb}^{2+}_{0.5}\text{Pb}^{4+}_{0.5}\text{Fe}^{3+}\text{O}_3$ と $\text{Pb}^{4+}\text{Ni}^{2+}\text{O}_3$ の中間である $\text{Pb}^{2+}_{0.25}\text{Pb}^{4+}_{0.75}\text{Co}^{2+}_{0.5}\text{Co}^{3+}_{0.5}\text{O}_3$ (平均価数は $\text{Pb}^{3.5+}\text{Co}^{2.5+}\text{O}_3$) という特殊な電荷分布を持っています。その結果、 PbCoO_3 は単純な化学組成であるにも拘らず、 Pb^{2+} と Pb^{4+} 、 Co^{2+} と Co^{3+} の違いを考慮すると、四重ペロブスカイトと呼ばれる $\text{Pb}^{2+}\text{Pb}^{4+}_3\text{Co}^{2+}_2\text{Co}^{3+}_2\text{O}_{12}$ の複雑な結晶構造を有することになります。四重ペロブスカイトは巨大誘電率や磁気抵抗効果、負の熱膨張、酸素還元・酸素発生触媒など、様々な機能を有することから注目されている物質群です。

リチウムイオン電池用 Li_2TiO_3 - LiMnO_2 系新規材料の結晶構造と充放電特性

東京電機大学 齋内 直明
高エネルギー加速器研究機構 米村 雅雄

BL09「SPICA」を用いた中性子回折によりLiイオン電池用 LiTi_2O_3 - LiMnO_2 系電池材料の結晶構造解析を行い、充電時に酸素が電荷補償に寄与することで高容量正極材料になることを明らかにしました。

Liイオン蓄電池は携帯電子機器の電源としてだけではなく、電気自動車にも利用されています。しかし、電気自動車の走行距離は既存の内燃機関を利用した自動車と比較して短く、電気自動車の本格普及にはLiイオン蓄電池の高性能化が必要不可欠とされています。

Liイオン電池の高性能化には、その高容量化の足かせとなっている正極材料の革新が必要不可欠です。近年、次世代の正極材料として「酸素分子」が注目されています。しかし、空気中の酸素分子を利用するLi・空気電池の理論エネルギー密度は高いものの、一般的なLiイオン電池と比較して構造が大きく異なり、実用化に向けて解決すべき多くの課題があります。一方、同じ酸素を固体である「酸化物イオン」として用いることで、従来のLiイオン電池と全く同じ構造のまま、空気電池に匹敵するエネルギー密度を目指す研究が行われています。

一般的な正極材料においては、酸化物イオンが酸化されると酸素脱離が進行することが知られています。しかし、これまでに4d遷移金属であるニオブを用いることで、酸化物イオンによる電荷補償が安定に進行し、高容量が得られることが確認されていました[1]。しかし、ニオブは高価な元素であり、電気自動車やスマートグリッド用途への展開は難しいと考えられていました。そこで、ニオブ系材料の反応機構を詳細に解析した結果、ニオブをチタンに代替できる可能性を見出し、実際にチタン・マンガン系材料(図1)を合成したところ、ニオブ系材料以上の高エネルギー

PbCoO_3 では、鉛、コバルトの両方が電荷秩序を持つことが明らかとなりました。電荷秩序の融解の際には、超伝導や巨大磁気抵抗効果などの特異な現象が観測されることが多く、材料の改質によるこのような特異な現象の探索に興味を持たれます。また、鉛とコバルトの価数の変化によって、半導体製造のような高精度な位置決めが求められる場面において熱膨張によるずれを抑制できる負熱膨張の発現も期待できます。

本研究の実施に際しては、高エネルギー加速器研究機構のPing Miao研究員、Sanghyun Lee研究員、鳥居周輝技師、神山崇教授にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

ギー密度が得られることを確認しました[2]。

この新規チタン・マンガン系材料($\text{Li}_{1.2}\text{Ti}_{0.4}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_2$)のエネルギー密度(正極重量ベース)を評価したところ、既存の電気自動車用のLiイオン電池で広く用いられているスピネル型¹リチウムマンガン酸化物(LiMn_2O_4)やリン酸鉄リチウム(LiFePO_4)を大きく上回る1,000mWh/g以上のエネルギー密度が得られることがわかりました。また、放射光や中性子を用いた構造解析から、結晶構造はリチウム・チタン・マンガンイオン全てが不規則配列した岩塩型構造であり、充放電時には遷移金属イオンの酸化還元反応だけではなく、ニオブ系材料と同じく、チタンと結合している酸素の可逆的な固相酸化還元反応が進行することで高容量材料となることもわかりました。

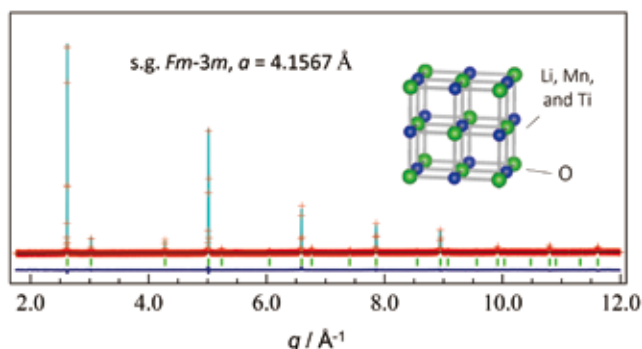


図1 Li_2TiO_3 - LiMnO_2 系酸化物 ($\text{Li}_{1.2}\text{Ti}_{0.4}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_2$)の中性子回折パターンと結晶構造模式図

これらの成果は、将来的なりチウムイオン電池の高容量・高エネルギー密度化に繋がることから、携帯電子機器や電気自動車の高性能化ということだけではなく、ドローンやロボットといった新しいデバイスの高性能化と普及が進むことも期待できます。

参考文献

- [1] N. Yabuuchi *et al.*, PNAS, **112**, 7650 (2015).
- [2] N. Yabuuchi *et al.*, Nature Communications, **7**, 13814 (2016).

X線と中性子を用いた耐候性鋼のさび形成過程の評価

株式会社コベルコ科研 横溝 臣智
株式会社神戸製鋼所 中山 武典

X線と中性子の相補利用により、耐候性鋼の表面に形成される保護性さび層の乾湿状態と湿潤状態からの乾燥過程における状態変化を追跡した結果、耐候性鋼のさび層では湿潤状態で一部低価数のFeが生じ、乾燥過程で大きさ数

nmのさび微粒子が生じて、この微粒子が緻密な膜を形成し、保護性さび層になっていることがわかりました。

橋梁分野を中心に、合金元素添加によりさびを緻密化し、大気耐食性を向上させた耐候性鋼がライフサイクルコストを低減する構造用材料として注目されています。鉄鋼表面のさび層は複数の化合物のさび微粒子の集合体であり、特に耐候

性鋼は地鉄との界面に緻密な保護性さび層を形成します。このさび層の形成には大気下での乾湿に伴う酸化還元反応が関与していると考えられますが、さび層ならびにその下に存在する界面の挙動は十分には捉えることができていません。

そこで、JIS耐候性鋼上に生成したさび層の乾湿状態、湿潤状態からの乾燥過程における結合状態と局所構造についてはX線吸収微細構造法(XAFS)、生成する微粒子のサイズについては中性子小角散乱法(SANS)の時分割測定で追跡しました。

図1にSPring-8 BL16B2において転換電子収量法を用いて測定したXAFSスペクトルから得られたFe-K吸収端(XANES)、および、Fe周りの動径分布関数(RDF)の変化を示します。吸収端の形状から、湿潤状態では低価数のFeが混在していますが、乾燥に伴いFe³⁺が主体となっていくことが分かります。また、動径分布関数の2~3Å付近のピークの挙動からも、湿潤状態では低価数のFeを含む化合物が増加していると推定されます。この挙動は透過法や蛍光法では捉えることが困難で、転換電子収量法で初めて捉えることができたので、さび層の中でも水と接触している部分のみで起きている変化であると考えられます。

図2にJ-PARC MLFのBL15「TAIKAN」で測定した中性子小角散乱から得られた散乱体積と平均粒径の変化を示します。湿潤状態からの乾燥過程において、散乱体積が増加して平均粒径が減少していることから、数nmの大きさの微粒子が生じていると考えられます。この挙動は普通鋼に比べて耐候性鋼で顕著です。

以上の結果から、耐候性鋼のさび層では湿潤状態で一部低価数のFeが生じ、乾燥過程で数nmの大きさのさび微粒子が生じていると考えられます。この微粒子が緻密な膜を形成し、保護性さび層になっていることが示唆されます。

今後、SANSの時間スケールに合わせたXAFS測定や、より広いレンジでの中性子回折測定を行うことにより、さび層の挙動の全体像に迫りたいと考えています。

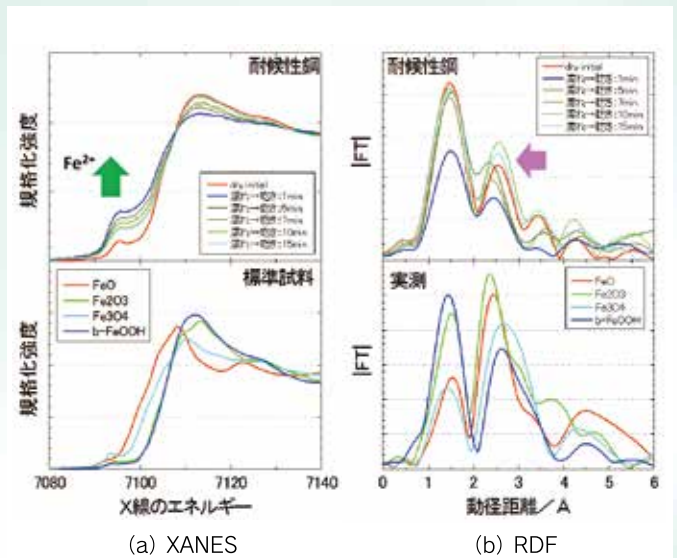


図1 JIS耐候性鋼の湿潤状態からの乾燥過程におけるXAFS測定結果

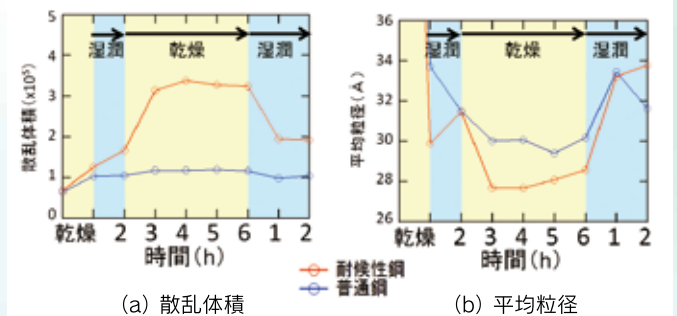


図2 JIS耐候性鋼の湿潤状態からの乾燥過程における中性子小角散乱測定結果

中性子単結晶構造解析による水素結合型有機強誘電体の分極起源の解明

総合科学研究機構 中尾 朗子
高エネルギー加速器研究機構 熊井 玲児

酸と塩基からなる有機強誘電体の単結晶中性子結晶構造解析を行い、水素位置を決定することで、水素結合鎖におけるプロトン移動が自発分極の起源であることを明らかにしました。

新規強誘電体の開発は、物性の探索の観点からの学術的な重要性に留まらず、電子デバイス素子などの材料開拓として応用的側面からも期待されています。特に低コスト・軽量・省電力などの特長を有する有機エレクトロニクス材料は、希少元素や有害元素を使わないデバイスとして注目され、今後更に必要性が増すと考えられます。分子性の有機結晶は、構造設計が可能な分子軌道の自由度に加え、制御可能な分子配列を有します。さらに、これらと強く結合する分子の屈曲や伸縮などの分子構造の自由度で、分子自身のもつ双極子だけでなく、分子の組み合わせや配列を利用して強誘電性を発現させることができ、他の物質群にはない特異性を持ち合わせています。

フェナジン(Phz)とアニル酸(H₂xa)からなる強誘電体Phz-H₂xaは、水素結合型強誘電体で最初に見つかった物質であり、置換ハロゲンの種類や温度、圧力の外場パラメータによって種類の異なる強誘電相が出現します[1]。図1にフェナジンとアニル酸の分子構造を示します。常誘電相における結晶構造は、PhzとH₂xaが交互に並び、Phzの窒素原子とH₂xaの水酸基間のO-H...Nからなる一次元の水素結合鎖を形成しています。これまでの研究から、この物質の誘電応答にはこの水素結合あるいはプロトンダイナミクスが重要な役割を果たすことが知られています[2]。強誘電体は実空間の構造と物性発現が直接結びついているため、誘電の起源を理解するためには、水素結合の構造変化や原子変位を詳細に観測することが重要です。

本研究では、Phz-H₂xa(x=Cl)の低温強誘電相における分極の起源を調べるために、MLFのBL18「単結晶回折装置(SENJU)」で実験を行いました。この物質の低温相は、常誘電相の構造の2倍の長周期構造を有し、結晶学的に非等価な分子は8倍になります。このため、X線構造解析では全ての水素原子位置を決定することは困難です。一方、中性子は原子核によって散乱するためX線に比べ軽元素を検出しやすいと

いう特徴を有しており、水素原子の精密化には中性子回折法は非常に有効な手法です。

常誘電相では、中性の分子からなる一次元の水素結合鎖を形成し、中間温度領域で現れる強誘電相では、この水素結合鎖中のひとつの水素原子がわずかに変位し、この非等価性が分極の起源となっていることがX線構造解析により分かっていました。一方、低温強誘電相では、中性子による単結晶構造解析の結果、図2に示すように、結晶学的に独立した4つの水素結合鎖中、2つの水素結合鎖は H_2ca から一つのプロトンがPhzへ移動した Hca^- と $HPhz^+$ から形成されていることが明らかとなりました。イオン性分子からなる水素結合鎖と中性分子からなる水素結合鎖はb軸方向に交互に積層し、非等価な2つのイオン性水素結合鎖のプロトンは、それぞれ[111]と[-11-1]の方向に移動しています。結晶構造は、ac面では分極を打ち消し合い、b軸方向にのみ自発分極を生じることを示唆しています。この結果は誘電率測定の結果と一致しています。このことから、中間強誘電相と低温強誘電相では分極の発現機構が異なることが明らかになりました。

本研究の成果は、今後の強誘電体デバイス材料開発の設計指針に反映できると期待されます。

本研究の実施に際しては、BL18の装置担当者にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

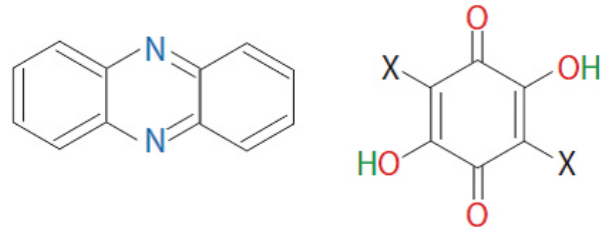


図1 一次元水素結合鎖の構成分子

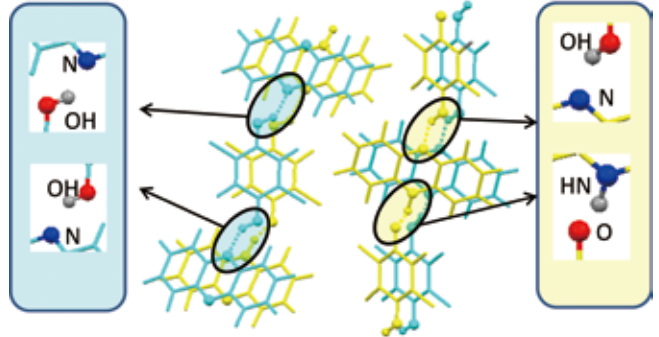


図2 中性子単結晶構造解析から得られた水素結合鎖の様子

参考文献

- [1] S. Horiuchi, R. Kumaia, Y. Tokura, J. Mater. Chem., 2009, 19, 4421
- [2] R. Kumai, S. Horiuchi, J. Fujioka, Y. Tokura, J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 1036

防錆用シリカコーティング膜の中性子反射率法による構造解析と高性能化

株式会社アート科学 新関 智丈

ペルヒドロポリシラザン (以下、PHPS) を用いた防錆用シリカコーティング膜の構造を中性子反射率法により解析し、 SiO_2 (Me-PHPS) 膜の防水性が優れていることを明らかにしました。

PHPSを用いたシリカコーティングは、容易に緻密な膜が得られることから防汚や防錆などの目的で様々な分野の製品で実用化されています。

J-PARCの30GeVシンクロトロン加速器空洞において陽子の加速に用いられる金属磁性体カットコアは水冷されており、その表面は腐食防止のためにPHPSを用いたシリカコーティングが施されています。PHPSで形成されるシリカコーティング膜は、優れた防錆性を有していますが、その構造と防水性能に関する詳細は明らかになっていません。

本研究では、金属磁性体カットコアを模擬した基板に、PHPSをジメチルシラザン-メチルシラザン共重合体(PDMMS)と混合することでメチル基を導入したMe-PHPSを用いてシリカコーティング膜を作製し、膜の構造と水の浸透状態を中性子反射率法により解析しました。

実験には、金属磁性体カットコアを模擬した基板として、Siウェハを使用しました。PHPS (AZエレクトロニックマテリアルズ社製AQUAMICA) は、キシレンで希釈して5%に調整し、PDMMSはメチルトリクロロシランとジメチルジクロロシランから合成し、PHPSと混合して使用しました。スピンコーティングを行い、コーティング後、60°Cで1時間乾燥しました。水の浸透状態解析用の試料は、純水中に基板を7日間浸漬し、測定3時間前に取り出し、

室温で乾燥させました。中性子反射率は、BL17「SHARAKU」で測定しました。

図1に、水に浸漬後測定した、 SiO_2 (PHPS) 膜および SiO_2 (Me-PHPS) 膜の中性子反射率プロファイルとフィッティング結果を示します。解析から得られた、 SiO_2 (PHPS) 膜と SiO_2 (Me-PHPS) 膜の深さ方向における散乱長密度のプロファイルを図2と図3に示します。

SiO_2 (PHPS) 膜と SiO_2 (Me-PHPS) 膜のいずれも水の比率が高い相と中間相、水の浸透していない層が形成されていることが明らかとなりました。また、コーティング膜表面からの水の浸透状態は、 SiO_2 (PHPS) 膜では400Å程度、 SiO_2

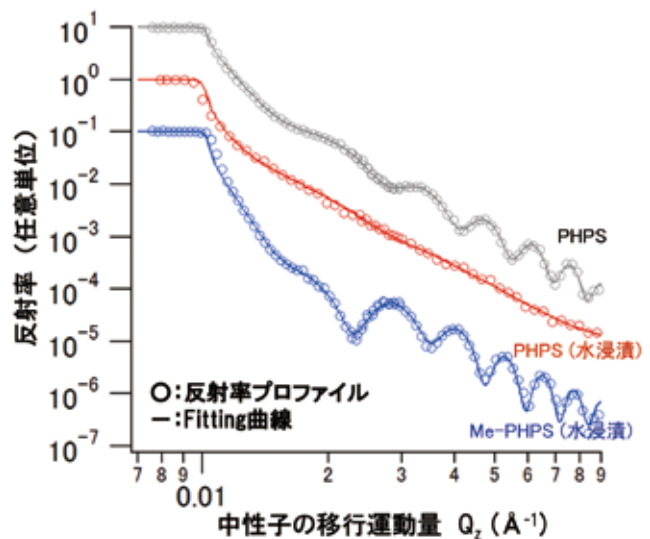


図1 SiO_2 (PHPS) 膜と SiO_2 (Me-PHPS) 膜の中性子反射率プロファイル

(Me-PHPS)膜では200Å程度でした。このことから、SiO₂ (Me-PHPS)膜の方がSiO₂ (PHPS)膜よりも水の浸入を防いでいることが明らかとなりました。中性子反射率の解析結果から、SiO₂ (Me-PHPS)膜の方がSiO₂ (PHPS)膜に比べ防水性に優れていることが示されたことから、今

後、防錆用コーティング膜の薄膜化などへの応用が期待できます。

本研究は、J-PARC MLFの課題番号:2014B0055で実施しました。実施に際しては、CROSS東海にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

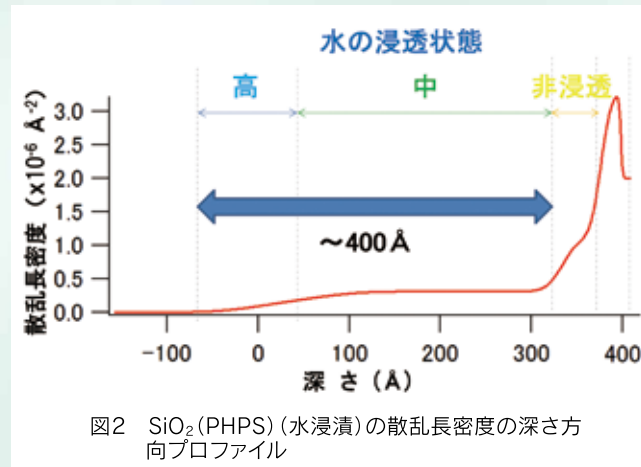


図2 SiO₂ (PHPS) (水浸漬)の散乱長密度の深さ方向プロファイル

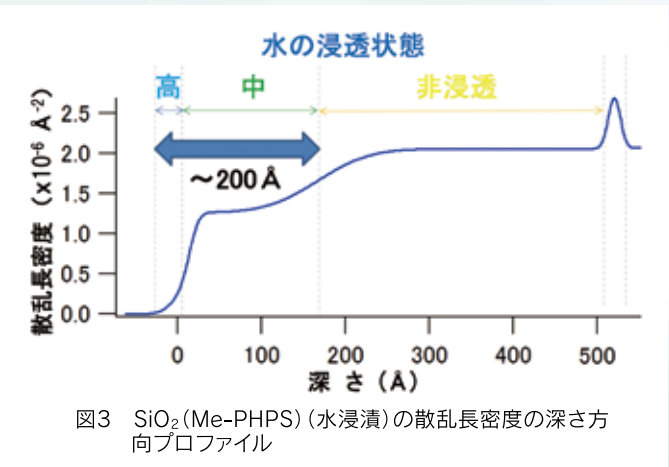


図3 SiO₂ (Me-PHPS) (水浸漬)の散乱長密度の深さ方向プロファイル

茨城県BL

メタン-プロパンハイドレートのメタンの充填率に関する評価

茨城大学 星川 晃範

粉末中性子回折による構造解析からメタン-プロパンハイドレートのメタンの充填率を解明しました。

クラスレートハイドレート(以下、ハイドレート)とは、水分子で作るカゴ状の構造(ホスト構造)の中にガス分子等のゲスト分子が内包された化合物です。日本近海の海底に大量のメタンハイドレートが埋蔵されていることが分かり、次世代エネルギー資源として着目されています。ハイドレートに内包されるガスは、ガス圧や温度等の条件により、化学量論的に変化します。純粋なメタンガスからメタンハイドレートを合成する場合、数十気圧の高圧が必要ですが、メタンとプロパンの混合ガスを用いてハイドレートを合成する場合には数気圧で合成できます。このメタン-プロパンハイドレートの結晶構造についてはこれまで明らかにされていませんでした。

透過力が高い中性子を用いると、試料容器だけでなく、試料全体としての平均的な情報が得られます。一般的に、粉末中性子回折パターンからのリートベルト解析から、結晶構造や不純物量が評価できます。本研究では、それらに加えて、結晶内に内包されたガス量を構造解析から評価しました。

測定に用いた試料は3種類で、中性子回折パターンのバックグラウンドを高くする非干渉性散乱を抑制するため、全て重水(D₂O)を用いて合成しました。内包されるメタン(CH₄)を比較するため、純粋なプロパン(C₃H₈)ハイドレートとメタンとプロパンの仕込み圧力がそれぞれ2:1と4:1となるメタン-プロパンハイドレートを、プロパンの分圧が常温で0.2MPaになるように-10°Cで合成しました。

得られた回折パターンを用いてリートベルト解析(Z-Rietveld)と最大エントロピー法(Z-MEM)により、散乱長密度分布を求めました。図1に結晶構造モデルと、特に変化の大きかった部分の散乱長密度分布を示します。

この結果から、メタン-プロパンハイドレートは構造II型と呼ばれる小さいカゴと大きいカゴを積み重ねた結晶構造であり、プロパンは大きいカゴ全てに入り、メタンの分圧が高いほど、小さいカゴにメタンが多く内包されることが明らかになりました。ただし、結晶内のカゴに内包されているメタンの充填率(図1 (b)参照)は、仕込み量に比べて少なくなることから、メタン-プロパンハイドレートを形成する骨子はプロパンであり、プロパンハイドレートが合成される過程において取り込まれたメタンであると考えられます。一方、メタンの圧力を

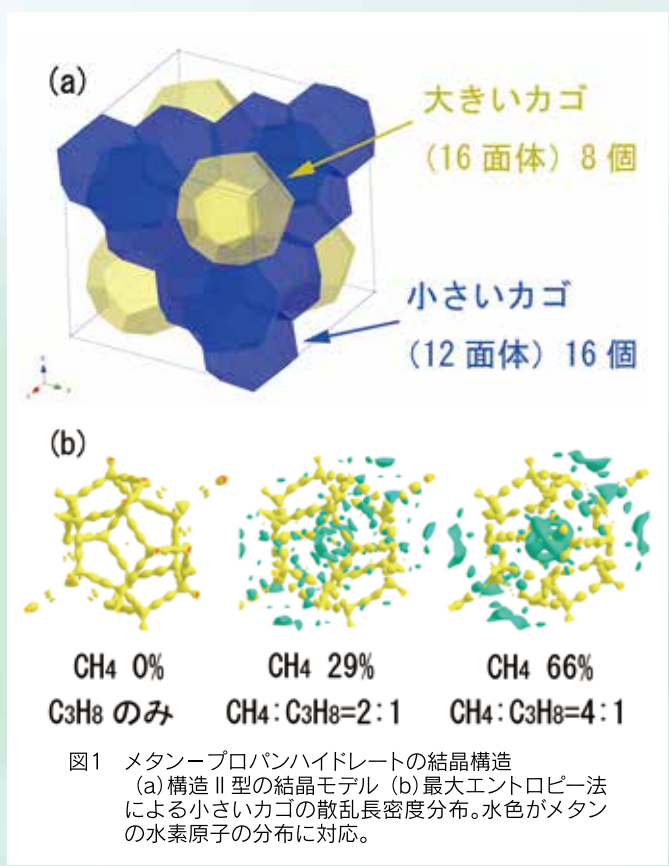


図1 メタン-プロパンハイドレートの結晶構造 (a)構造II型の結晶モデル (b)最大エントロピー法による小さいカゴの散乱長密度分布。水色がメタンの水素原子の分布に対応。

高くするとメタンハイドレートとメタン-プロパンハイドレートに相分離します。今回の結果は、相分離を起こさない低圧下でのメタン-プロパンハイドレートのメタンの充填率の変化を構造解析から明らかにしたもので、本研究の合成条件下では結晶中にメタンが内包されることを確認しました。

現在、天然ガスの主成分であるメタンを輸送するときには液化させていますが、将来的にはメタンを固化して輸送できると期待されます。

本研究に当たり、茨城大学の石垣徹教授を始めとするiMATERIAの装置グループ員にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

iBIXにおけるタンパク質単結晶の回折斑点強度を高精度に決定する手法の実用化

茨城大学 矢野 直峰

タンパク質単結晶のパルス中性子回折において、回折斑点強度をより高精度に決定するプロファイルフィッティング法を実用化しました。リボ核酸を分解する酵素の一種であるリボヌクレアーゼAでは、回折データの精度を示す指標の1つであるRintが最も強度の弱い回折斑点群で、従来の積算法に比して0.375から0.280へと絶対値で9.5%低下し、水素原子やプロトンの位置についてより信頼性の高い情報を得られるようになりました。

タンパク質の中性子回折実験は世界的にパルス中性子源に移行していますが、そのデータ処理精度は芳しくありませんでした。単波長のX線や中性子を用いた2次元の強度分布をもつタンパク質の回折データに対してはガウス関数近似プロファイルフィッティング法が適用可能となっていますが、3次元の強度分布を有するパルス中性子の回折データでは反射パターンが非対称な形をしているため、上記の手法では十分な精度では解析できませんでした。そこで、このたび、複数関数形を組み込んだプロファイルフィッティング法を開発しました。

開発した手法では、回折斑点の強度分布を関数フィッティングし、得られた関数を積分して強度を見積ります。3次元の強度分布を1次元の強度分布に変換し、図1 (A)のようにガウス関数でフィッティングすると強度分布と一致しません。様々な関数を検討し、ガウス関数と指数関数を畳み込んだ関数を使用することにした結果、図1 (B)に示すように観測された強度分布とよく一致することが分かりました。次に、同一の検出器で観測された同じような配向の強度の弱い回折斑点の強度分布は、強度の強い回折斑点の強度分布と相似形であると仮定してフィッティングすることにしました。この手法を2つのタンパク質単結晶の中性子回折データに適用したところ、積算法に比して回折斑点の強度分布を精度良く決定することができました。因みに、リボヌクレアーゼAでは、回折データの精度を示す指標の1つであるRintが最も強度の弱い回折斑点群で0.375から0.280へと絶対値で9.5%低下させることができました。この手法は強度の弱い回折斑点に対して特に有効でした。実用化した手法は回折データ処理ソフトSTARGazerに組み込み、ユーザーが利用できるようにしました。

今後、J-PARC MLFの加速器出力が増加すると、より多くのタンパク質で、水素原子やプロトンの位置を精度良く決定することができようになります。さらに、今回実用化した手法を用いると、より信頼度の高い互変異性現象の観測や水素結合の有無、アミノ酸側鎖の水素原子の位置決定につながります。これらはエネルギー変換機構の解明やドラッグデザインの基礎となり、エネルギー問題の解決や創薬などに貢献することが期待されます。

本研究の実施に際しては、茨城大学の日下勝弘教授と山田太郎准教授にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

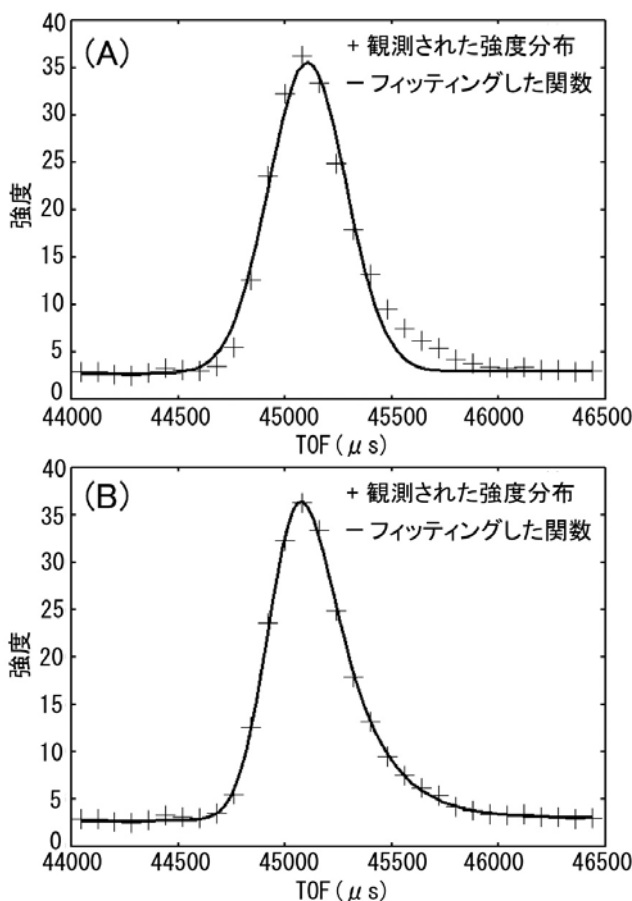


図1 非対称な1次元の強度分布を関数フィッティングした結果 (A) ガウス関数を使用、(B) ガウス関数と指数関数を畳み込んだ関数を使用

中性子産業応用セミナー

中性子産業利用推進協議会と茨城県、総合科学研究機構(CROSS東海)では、J-PARCセンターほかのご協力をいただいて、中性子の産業利用に関わる測定技術を会員企業に向いて講習するセミナー、いわゆる「出前講座」を開催しています。今回2社においてセミナーを開催しましたのでご報告します。いずれの会場においても活発な質疑がありました。今後、中性子実験装置を利用していただけることを期待しています。

● ノリタケカンパニーリミテド

4月27日(木)に愛知県みよし市三好町にある(株)ノリタケカンパニーリミテドの三好事業所において中性子産業応用セミナーを開催しました。プログラムは下記の通りです。

1. 中性子の基礎 林 眞琴 (CROSS)
2. 中性子粉末構造解析 石垣 徹 (茨城大学)
3. 中性子小角散乱による構造解析 大沼正人 (北大)



セミナー会場の様子

4. ガラス・非晶質材料の構造解析 川北至信 (J-PARC)
 5. 準弾性散乱による材料の機能解析 柴田 薫 (J-PARC)
 6. 中性子の産業利用 峯村哲郎 (茨城県)
- ノリタケカンパニーリミテドの開発・技術本部ほかから21名の方が聴講されました。



川北至信氏 (J-PARC)



柴田 薫氏 (J-PARC)

● 日立オートモティブシステムズ

5月8日(月)に茨城県ひたちなか市高場にある日立オートモティブシステムズ(株)の佐和事業所テクニカルセンターにおいて、中性子産業応用セミナーを開催しました。プログラムは下記の通りです。

1. 中性子の基礎と産業利用 富田俊郎 (茨城県)
2. 中性子回折による構造物の残留応力測定 林 眞琴 (CROSS)
3. 電池・金属材料の中性子散乱構造解析 石垣 徹 (茨城大学)
4. JRR-3のTNRFによる高速イメージング 飯倉 寛 (JAEA)



セミナー会場の様子

5. J-PARC MLF BL22「RADEN」によるパルス中性子イメージング 篠原武尚 (J-PARC)
6. お知らせ 峯村哲郎 (茨城県)

日立オートモティブシステムズの佐和事業所や(株)日立製作所研究開発グループなどから31名の方が聴講されました。講義終了後には実験希望案件の紹介および計測に関する質問コーナーを開催し、5件の技術相談がありました。



石垣 徹茨城大学教授



飯倉 寛氏 (JAEA)

「出前講座」を希望される企業は協議会事務局 (E-mail : info@j-neutron.com) までご相談ください。

活動報告

◆研究会

●第2回残留ひずみ・応力解析

3月8日(水)東京飯田橋の研究社英語センター大会議室において、平成28年度第2回残留ひずみ・応力解析研究会を「輸送機器における残留応力評価」をテーマに開催しました。これまでの研究会において過去最高となる100名もの参加者がありました。

<施設の概況>セッションでは林眞琴氏 (CROSS東海) がMLFにおける水銀ターゲットの改良計画と中性子産業利用の現状を紹介されました。

<チュートリアル>では、原田仁平名古屋大学名誉教授が「X線・粒子線回折法による材料分析」、大倉一郎大阪大学准教授が「アルミニウム合金摩擦攪拌接合部の残留応力が構造部材の終局強度と疲労強度に及ぼす影響」と題して講演されました。

<鉄道車両の構造信頼性>のセッションでは、(株)日立製作所の川崎健氏が「FSWで接合したアルミ合金製の鉄道車両」、川上洋司大阪市立大学准教授が「アルミニウム合金FSW接合部の残留応力評価」と題して講演されました。

<自動車・部品における残留応力>セッションでは、中央発條の榎原隆之氏が「自動車用ばねにおける残留応力」、ジェイテクトの楼黎明氏が「自動車用ベアリングにおける残留応力」と題して講演されました。

<X線・放射光・中性子による応力測定>セッションでは、佐野智一大阪大学准教授が「フェムト秒レーザピーニングによるアルミニウム合金の疲労特性向上」、(株)山本金属製作所の河合真二氏が「改

良型深穴穿孔法による内部残留応力測定」、JFEスチールの須藤幹人氏が「缶用薄鋼板の曲げ加工に伴う板厚方向ひずみ分布の実測」、コベルコ科研の横暮俊典氏が「表面除去法で測定した残留応力分布の有限要素法による補正」、川崎重工業(株)の今村嘉秀氏が「浸炭歯車における表面層の残留応力分布」と題して講演されました。

世界的にインフラ設備としての需要が増加している鉄道車両や、自動車の信頼性と安全性に関わる部品の残留応力評価を対象としたこと、ならびに、原田仁平名誉教授にX線回折の基本を講義していただいたということで、これまでにない多数の参加者があり、活発に議論が交わされました。J-PARC MLFのBL19「匠」の利用拡大に繋がることを期待したいと思います。



会場の様子



原田仁平名誉教授

●第2回生物構造学研究会

3月29日(水)に東京飯田橋の研究社英語センター大会議室において、平成28年度第2回生物構造学研究会を「構造生命科学の最前線と医薬品産業総合戦略の展望2」をテーマに開催しました。57名の参加者がありました。

＜施設の概況＞セッションでは、日下勝弘茨城大学教授が、茨城県生命物質構造解析装置IBIXの現状と利用成果を紹介されました。

＜構造生命科学＞セッションでは、豊島近東大学教授が「カルシウムポンプの構造生物学 - 磷脂質との相互作用」、清水伸隆KEK教授が「PF小角散乱ビームラインにおけるBioSAXS測定解析」、中迫雅由慶応大学教授が「生命科学におけるコヒーレントX線回折イメージングの展開」と題して講演されました。

＜医薬品産業&DDS＞セッションでは、奥直人静岡県立大学教授が「脳梗塞を標的としたDDS製剤の開発」、新津洋司郎札幌医科大学名誉教授が「臓器線維症に対するsiRNAHSP47を用いた治療法の開発」、(株)レクメドの松本正社長が「医薬品産業に新風を吹き込むバイオベンチャーの活躍」、エーザイ(株)の菊池寛氏が「DDS技術による創薬：企業視点から見たその重要性」と題して講演されました。

創薬に繋がる技術としての中性子溶媒コントラスト変調測定技術や放射光によるBioSAXSの最新技術、ならびに、厚い試料の内部構造を高分解能で可視化するコヒーレントX線回折イメージング法が紹介され、臓器線維症に対する治療薬が治療だけに留まらず再生医療としても機能すること、さらに、DDS技術が創薬の重要なツールの一つになっており、新薬の創出が困難になっている中でその重要性がますます高まっていることなどが活発に議論されました。

創薬に繋がる技術としての中性子溶媒コントラスト変調測定技術や放射光によるBioSAXSの最新技術、ならびに、厚い試料の内部構造を高分解能で可視化するコヒーレントX線回折イメージング法が紹介され、臓器線維症に対する治療薬が治療だけに留まらず再生医療としても機能すること、さらに、DDS技術が創薬の重要なツールの一つになっており、新薬の創出が困難になっている中でその重要性がますます高まっていることなどが活発に議論されました。



会場の様子



豊島 近東大教授

◆講習会

●初心者向けZ-Code講習会

平成28年度の初心者向けZ-Code講習会を2月27日(月)9:30～28日(火)17:00にLMJ東京研修センターにおいて開催しました。

Z-Codeは毎年のように改良を重ねています。今年度は初めての試みとして「初心者向け」と「中級者向け」を分けてそれぞれ開催しました。今回の初心者向けの講習会では、TOF粉末中性子回折データだけでなく、X線を含む他の回折データのリートベルト解析やX線と中性子データの同時リートベルト解析を一人で実行できる、制約条件下でのリートベルト解析ができる、構造パラメータやプロファイルパラメータ、補正パラメータ等を理解し、原子間距離や角度などを正しく求め、論文や報告書を執筆するための表記法を理解する、MEM解析を行って結果を表示できる、結晶模型を描ける、さらに、簡単な磁

気構造も解析できるようにすることを目的としました。

結晶構造解析ソフトZ-Rietveldとマキシム・アントロピー法ソフトZ-MEMの最新版についての実習を主体に行い、解析結果を3次元表示するツールZ-3Dの最新版の使い方についても実習を行いました。

受講者は会員企業から14名、非会員企業から10名、大学から20名、研究機関から2名、地方自治体から1名の合計47名でした。



会場の様子



木村宏之東北大教授

◆茨城県研究会

●集合組織分科会

3月15日(水)に首都大学東京南大沢キャンパス6号館401教室において、茨城県中性子利用促進研究会の平成28年度集合組織分科会を開催しました。本分科会は、日本鉄鋼協会第173回春季講演大会のシンポジウム「中性子・X線回折、散乱法による金属ミクロ組織解析の課題と展望」として、日本鉄鋼協会の「鉄鋼のミクロ組織要素と特性の量子線解析」研究会、「鉄関連材料のヘテロ構造・組織の解析研究」フォーラム、「微視的集合組織の解析と制御」自主フォーラム、中性子産業利用協議会と茨城県の集合組織分科会の5者が共催で開催しました。167名の参加がありました。

プログラムは、午前が、放射光・X線・中性子を用いたラインプロファイル解析による転位組織などの微細組織解析研究、午後が、中性子による集合組織および複相分率解析研究、ならびに、中性子小角散乱法によるナノ構造解析研究をテーマとして、全部で11件の講演がありました。



会場の様子

お知らせ

●平成29年度総会

日時：平成29年7月20日(木)10:20-12:00

会場：東京 秋葉原コンベンションホール

庄山悦彦副会長、伊藤洋一文部科学省科学技術・学術政策局長、ならびに、須藤亮運営委員長の挨拶のあと、

第1号議案 平成28年度事業報告及び決算報告について

第2号議案 会員の入退会について

第3号議案 平成29年度事業計画及び収支予算について

第4号議案 会計監事の交替について

の4つの議案について審議する予定です。会員企業の皆さまだけでなく、非会員企業や大学、研究機関の皆様も参加できます。多くのご出席をお願い致します。

●平成29年J-PARC MLF産業利用報告会

主催：J-PARCセンター、(一財)総合科学研究機構
茨城県、中性子産業利用推進協議会

共催：J-PARC MLF利用者懇談会

日時：平成28年7月20日(木)13:00～21日(金)18:00

会場：東京 秋葉原コンベンションホール

齊藤直人J-PARCセンター長と上田光幸文部科学省量子研究推進室長の挨拶のあと、＜セッション1＞、＜セッション2＞においてMLFやCROSS NCS、茨城県BLの成果を報告したあと、＜特別講演＞で

は菊池昇豊田中央研究所代表取締役所長に「豊田中研における中性子利用」と題して講演していただきます。21日は「イノベーションの共創」と題して産業界のニーズと施設側のシーズのマッチング講演を4組予定しています。また、＜招待講演＞として、田中敬二九州大学教授、折茂慎一東北大学教授、インターメトリックス社の佐川正人氏の3氏に講演していただく予定です。

多くの皆さまのご出席をお願い致します。

●平成29年度物質科学研究会

日時：平成29年8月7日(月)10:00-17:05

場所：エッサム神田ホール401会議室

テーマ：BL20「iMATERIA」における学術・産業利用研究

●平成29年度第1回構造生物学研究会

開催日時：平成29年9月11日(月)10:00-17:10

場所：研究社英語センター大会議室

テーマ：中性子構造生物学の最前線

協議会HP(<http://www.j-neutron.com/>)には、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が設けてあります。研究会や講習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【17年・夏】Vol.35

発行日 2017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/>