Neutron J 四季
【19年・秋】 Vol.44
中性子産業利用推進協議会　季報
Industrial Users Society for Neutron Application
2019年9月25日 発行

CONTENTS

P1 巻頭言　P2 協議会活動報告　P5 要望書の提出　P6 2019B課題申請　P6 J-PARCセンター情報　P8 実験技術・研究紹介
P9 研究トピックス　P11 産業応用セミナー　P12 活動報告＆お知らせ

不屈なる負ミュオンに薫風馥郁たり

国際基督教大学　久保 謙哉

今年のJ-PARC MLF産業利用報告会は、ミュオン関係の講演が初めて組込まれ、それも一挙に3件という“歴史的インパクトのある会”（当事者談）となりました。

「そんなもの誰が注文したんだ！」と（後の）ノーベル賞受賞者に言い放たれ、83年前の発見時から邪魔者扱いされてきたミュオンです。素粒子や原子核物理の世界ではそれなりの立場を与えられ、それ自身が研究対象とされたり道具として使われて来たミュオンですが、“物質生命科学研究”の施設（J-PARC MLF）に居場所（MUSE）を確保するとは、「どこから忍び込んだんだ？」と今でも言われそうです。中性子の話題なら何日でも続けて語れる人は数多くいますが、ミュオンの紹介に1分以上費やせる人はいるでしょうか。さらにミュオンはμSRという物性測定の手段として役立つことは知っていても、普段μSRに使う正ミュオンは“正電荷を帯びている反粒子”、という正しいのに反対という変な立場であることを認識している人はどのくらいいるのでしょうか。本来の正粒子である「負ミュオンを使った様々な研究がMLFで行われ、近年とみに注目を集めつつある」（当事者談）ことをご存知でしょうか。中性子は電荷を持たないので、正負の区別がありませんが、負ミュオンは電荷の符合の定義のせいで発見されてからずーっと、ネガティブな印象、日陰者、マイノリティとして生きて来ました。

ミュオンの研究に特化した施設（KEK-BOOMまたはKEK-MSL）は、1980年にKEKつくばのブースター研究施設として実現し、中性子研究施設（KENS）とは壁を隔てた同じ建物の中にありました。中性子とミュオン、さらに医学利用の3施設間で陽子ビームを振り分けて排他的に利用していたために、ときには水争いもあったようです。KEK-MSLはパルス状の正ミュオンビームを使ったμSRの豊穣な研究成果で世界をリードし、またそこではミュオニウムの光解離によるQEDの検証、超低速ミュオン生成の原理実証などの実験が行われていました。当時でも現在MUSEで進められている負ミュオンを使った研究は原理的には可能でしたが、負ミュオンビームの強度が低く、現実的なビームタイムで有意な結果を出すことは考えられませんでした。したがって1980年代後半に世界的なブームに後押しされて行われた、負ミュオンを媒介とする^{2}H-^{3}H核融合（ミュオン触媒核融合）の実験が、つくばでほとんど唯一積極的に推進された負ミュオン研究だったのです。

中性子と違って電荷を持つミュオンは、陽子からの生成率が正負で異なり、陽子エネルギーが低いほど負ミュオンの生成率は小さく、エネルギーが上がると次第に等しくなっていきます。つくばでは0.5GeVの陽子が使われていましたが、MLFでは陽子エネルギーが3GeVとなり、ビーム電流の大幅な増強も相まって、負ミュオンビームが実用強度で得られるようになりました。世界5ヶ所のミュオン施設の中で、J-PARC MUSEで負ミュオン実験がさかんになったのはこの“3GeV”というファクターと、負ミュオンをビームとして十分利用可能にするために施設関係者が費やしている膨大な時間と労力のおかげです。

負ミュオンを使った、試料を壊さず接触することなく物体中の3次元元素組成分布をミュオンX線を利用して測定する方法は、宇宙地球科学的試料や考古学的試料、リチウム電池などに応用され始めています。実用的でないからと、ほとんど絶滅したかと思われた負ミュオンのμSR研究は、ここにきて突然の活況を呈し始め、ミュオンによるソフトエラーの研究は半導体社会での重要度をいや増しつつ産業界からも注目を集

めています。これらのことが、冒頭に述べた今年のJ-PARC MLF産業利用報告会での椿事を招きました。

電子より200倍重いけれども陽子に比べると1/9の重さであり正負両方の電荷をもつミュオンを、中性子とは相補的であったり、異質であったりするツールとして多くの人に活用してもらえるとともに、新たな利用法がつぎつぎに開拓される躍動感と期待感に溢れた時代が到来しています。やっと始まったという感のある負ミュオン利用研究の今とこれからを大いに楽しみたいと思います。

中性子産業利用推進協議会の進む方向

中性子産業利用推進協議会
研究開発委員長　日比 政昭（日本製鉄）

7月18日に中性子産業利用推進協議会の総会が開催されました。この総会は、この一年間の活動の総括あるいは今後の方針・計画について、会員間で議論し、確認するための重要な場です。今年度の協議会総会においても、大変活発な議論をしていただき、協議会の進む方向が少しずつ見えてきたと考えております。

すなわち、中性子産業利用推進協議会は2008年に設立され、11年目に入りましたが、我々を取り巻く環境の変化に対応するために、現在、様々な点で改革に取り組んでいます。協議会の活動を進めるためには、会員全員が自分達の進む方向をしっかりと把握した上でJ-PARC MLFに代表される中性子施設関係者の皆様、日本中性子科学会に代表される学術分野の皆様等、関連の皆様とうまく連携を図らねばなりません。そのためには対話の場を多く持つことが重要ですが、もう一つ重要なことは、協議会の進む方向について情報発信を増やすことです。その一環として「四季」本号において、中村副会長と志満津運営委員長の総会における挨拶をそれぞれほぼ全文を掲載させていただくことにしました。

これを契機に、中性子産業利用推進協議会が進むべき方向について、改めて会員各位に考えていただければ幸いです。

中性子産業利用推進協議会活動報告

●2019年度総会

7月18日(月)に東京秋葉原コンベンションホールにおいて、中村道治副会長、志満津孝運営委員長、会員企業48社・機関(委任状含む)他が出席して2019年度総会を開催しました。会員以外の方の出席を含めて97名の参加がありました.

初めに、中村道治副会長からの挨拶があり、続いて。志満津孝運営委員長からの挨拶がありました。この後にそれぞれの全文を掲載します。

総会の議事においては、第1号議案「2018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「2019年度事業計画及び収支予算について」、第4号議案「会計監事の交代について」、その他「2019年度の運営体制」の各項目について審議と報告があり、審議項目については全て承認されました。

中村道治 副会長

志満津孝 運営委員長

2019年 総会会場の様子

中性子産業利用推進協議会総会での挨拶

中性子産業利用推進協議会 副会長　中村 道治（JST 顧問）

この度、今井会長からのご指名により、庄山前副会長の後を務めさせていただくことになりました。どうかよろしくお願いします。この令和元年の総会に多数お集まりいただきまして、心からお礼申し上げます。私自身は、平成20年にこの中性子産業利用推進協議会ができました時に、初代の運営委員長を拝命しました。協議会の立ち上げにあたっては、産業界から沢山の方々にご参加いただきました。またその後、一貫して、J-PARCの皆様、茨城県の皆様、CROSSの皆様に大変ご尽力いただき、産業競争力につながる様なさまざまな成果を上げて今日に至ったということで、感銘を受けている次第です。

最近、J-PARC MLFは大変安定に稼働して、また高出力運転も実績を重ねておられるということでございます。心から敬意を表したいと思います。このようなJ-PARCの皆様方のご努力に対し、産業界がきちんと成果を出して応えることが一番大事と思っております。震災以来懸案になっておりました研究用原子炉JRR-3の方ですが、これも関係者のご努力で、再来年の3月に、我々が使えるようになるというように伺っております。厳しい環境の中で、再開に向けて頑張っていただいておられます皆様方に御礼を申し上げます。

最近の我々を取り巻く環境は、非常に厳しいものがあります。一つは、せっかく世界中で動き出した多国間のシステム、とりわけ自由貿易、自由市場を守るということが、いろいろな理由によって難しくなり始めているということがあります。その中で日本の製造業がこれからどういうふうに発展して行くかが問われていると思います。また、国連のリーダーシップの下に世界中が取り組んでいる持続的な開発目標(SDGs)においても、製造業のありかた、とりわけ循環型社会の中で、製造業がどういう役割を果たすかということが大きなテーマになっています。持続可能な社会の実現に向けて、ますます環境調和型の製造業が望まれています。

そういう意味で、こういう最先端の研究施設を使いこなして産業界が新しい道を切り開くということは、日本が特に望まれていることだと思います。我々の責任が大きいと思っております。今日は総会やいろいろな研究会等活動のご報告、意見交流会を通じて、ぜひ皆様方、活発なご議論をしていただければ幸いです。

中性子産業利用推進協議会総会での挨拶

中性子産業利用推進協議会
運営委員長　志満津 孝（豊田中央研究所）

中性子産業利用推進協議会の運営委員長の志満津です。平素は当協議会の運営にあたりご高配を賜り、厚く御礼申し上げます。また本総会に文部科学省量子研究推進室よりご臨席を賜り、日頃より大強度陽子加速器施設の運営にあたり多大なるご尽力をいただいていることに深く感謝申し上げます。さて大強度陽子加速器施設 物質・生命実験施設(J-PARC MLF)においては、2016年3月以降3年4か月にわたり、安定的に目標出力で運転され、2018年以降は500kWでの長期運転を、さらには定格出力1MWでの10.5時間の連続運転に成功されるなど、MLFの皆様の努力によるものと考えております。これら中性子の利用環境が整うことで今後さらに大きな学術成果、産業のイノベーションにつながる研究が加速されるものと大いに期待しております。

2008年に発足しました中性子産業利用推進協議会も今年で11年目を迎えました。現時点で49社2研究機関による51会員に参加していただきながら運営がなされております。本協議会の設立の目的は、全国の産業界が結集してJRR-3とJ-PARC MLF等における中性子の産業利用を推進すること、そして、施設側と産業界がしっかりと議論して学術分野、産業利用分野で大きな成果：イノベーションを生み出すことだと規定されております。中性子の利用の環境が整って来た今、本協議会でも、さらに連携を加速するための議論を開始しております。まずは、協議会における運営委員会と研究開発委員会の役割を明確にして、具体的で実効性のある提言・活動につなげて行くという活動を進めて行こうとしております。

具体的には、協議会から施設へ生の声をお届けする、風通しの良い議論の場を作り、また一方的な提案ではなく、施設の皆様と直接お話し、お伝えすることを考えていきます。さらに、研究会の位置付けを明確にして施設側の各機関、また学術界や産業界の方々と一緒にあるべき姿について議論した上で、実行に移して行

きたいと思います。

午後の報告会では「MLFの産業利用の現状について」ということで、J-PARC、茨城県、CROSSの方からお話をしていただきます。午前の総会、午後の産業利用報告会において、出来たこと、出来ていないこと、さらに今後なすべきことを共有して、今後に向けた方向性を見出す良い機会となることを期待しています。

一方で、J-PARC MLFには世界最高レベルの中性子実験施設：ハードが整備され、施設側、大学、研究機関などの多くの研究者が活発に研究活動を進めています。同時に本協議会という産業界と学術分野が議論する場もあります。産業界は現在非常に激しく変化する中で、環境性と両立しながら熾烈な世界市場の中で日々戦っています。同様に学術分野でもグローバルな研究機関の厳しい生存競争が繰り広げられているものと思います。

産業界と学術分野が連携し世界最高レベルの研究開発を推進するためにハード面とソフト面での高いポテンシャルの構築と融合、産業界と学術両軸での成果の最大化、また施設運営の安定性が整ってきた今、スピードとフレクシビリティーの向上が非常に必要だと考えています。何を一緒に目指せば世界一の施設で、世界一の研究開発が推進出来るのかを両者で共有し、実現するために何をすべきかを一緒に考えていきたく存じます。

本日から２日間に渡って、総会、産業利用報告会が開催されます。産業界と施設側研究者がしっかりと議論して、次につながる２日間になるように是非よろしくお願いいたします。

●2019年度J-PARC MLF産業利用報告会

7月18日(木) -19日(金)に東京秋葉原コンベンションホールにおいて、4回目のJ-PARC MLF産業利用報告会を開催しました。今回は産業利用に関する５つのセッションと３つの特別講演、ポスターセッションが行われました。初めてミュオン利用セッションが設けられました。

初めに齊藤直人J-PARCセンター長から開会挨拶があり、続いて菱山豊文部科学省科学技術・学術政策局長から挨拶がありました。

＜セッション１＞では、MLFの産業利用の現状について、金谷利治MLFディビジョン長、児玉弘則茨城県産業戦略部技監、宮﨑司CROSS産学連携推進室長から、それぞれ報告がありました。

＜セッション２＞は中性子利用をテーマとして、日本製鉄(株)の重里元一氏が「鉄鋼業における中性子利用への期待」と題して、東京農工大学の直井勝彦教授が「電池・キャパシター材料の開発」と題して講演されました。

＜セッション３＞はミュオン利用をテーマとして、三宅康博KEK教授が「ミュオンによる産業利用の可能性」と題して講演され、(株)豊田中央研究所の梅垣いづみ氏が「J-PARC MLFにおける大強度負ミュオンビームによる電池解析」、大阪大学の橋本正宣教授が「ミュオン起因半導体ソフトエラーの測定と分析」と題して講演されました。

＜特別講演１＞では、(株)日産アークの松本隆氏、今井英人氏、富安啓輔氏が「中性子線を用いた解析への期待と将来展望」と題して、分析専門会社が、量子ビームを使ったマルチプローブ・マルチモーダル・マルチスケール分析をサービスとして提供する将来像を示されました。

19日(金)に開催されたセッション４と５は、昨年と同様「イノベーションの共創」と銘打ち、産業界から利用成果とニーズを、施設側からシーズを紹介するいわゆる「ニーズとシーズのマッチングセッション」でした。

齊藤直人
J-PARCセンター長

菱山豊 文部科学省
科学技術・学術政策局長

松本隆氏
（日産アーク）

峯村哲郎氏
（茨城県）

伊藤耕三氏
（東京大学）

＜セッション４＞では産業界側から、アイシン精機(株)の今井和紀氏がBL22でのイメージング、(株)豊田中央研究所の橋本俊輔氏がBL14での中性子準弾性散乱を利用した成果をそれぞれ報告されました。

＜セッション５＞では産業界側から、日油(株)の藤田博也氏がBL20での中性子小角散乱、(株)クラレの津村佳弘氏がBL17での調湿環境下の反射率測定を利用した成果をそれぞれ報告されました。

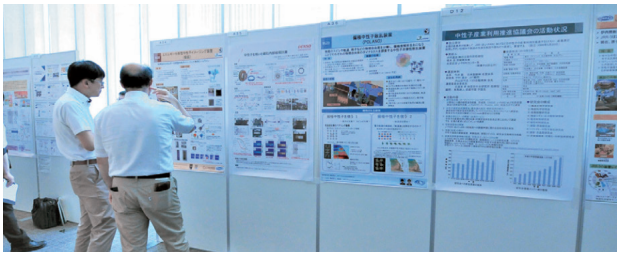
＜特別講演２＞では、茨城県の峯村哲郎氏が「産業利用この10年」と題して講演され、茨城県ビームラインの10年間の活動を分析・総括されました。

＜特別講演３＞では、東京大学の伊藤耕三教授が「自動車用しなやかなタフポリマーの開発」と題して講演されました。

報告会閉会後、会場において利用相談会を行いました。

18日の報告会には224名、19日の報告会には214名、の参加者があり、2日とも参加された方は158 名でした。

報告会会場の様子



ポスターセッションの様子

要望書の提出

6月11日(火)に、柴山昌彦文部科学大臣に宛てて、中村道治副会長から要望書を提出しました。

この日、中村道治副会長が松尾泰樹科学技術・学術政策局長と佐伯浩治研究開発局長とにそれぞれ面会して、中性子利用に対する産業界の期待を説明し、要望書を手渡しました。

協議会からの要望事項は下記の５項目です。

1. ユーザーへのマシンタイムの増加
   年間９サイクル運転の実現
2. J-PARC MLFのユーザーの利便性向上
3. J-PARCサイトへの直接入域を可能にする
   アクセス道路の整備
4. JRR-3の早期運転再開
5. J-PARCセンターからの先進的研究成果の創出

松尾泰樹科学技術・学術政策局長からは「J-PARCの年間9サイクル運転については資金をどう確保するか、が課題である。」測定する試料の前処理を行う装置設備の整備を行うことで、ユーザーの利便性向上を図りたいという要望に対し、「前処理設備などは企業が施設側と一緒になって進めて行くことが大事だと思う。」アクセス道路の要望については「自治体などの関係者とよく相談していただきたい。」との回答がありました。

さらに、「量子ビーム全体を見て、中性子以外のビームの成果も含めてどう産業界に役立つかを考えて進めて行く。各施設の役割分担、連携も今後考えて行きたいので、民間からのご意見もいただきたい。」とのコメントをいただきました。

佐伯研究開発局長からは、「JRR-3の着実な運転再開への思いは皆さんと同じであり、必要な予算措置に関して努力して行きたい。科学技術全般として、予算はなかなか厳しいのが実情である。JRR-3に関しても、ユーザーのための周辺設備については、例えば企業側も費用の一部を負担して整備して行くこともあるのではないか。」との回答がありました。

要望書提出の様子を下記写真に示します。

松尾泰樹科学技術・学術政策局長、佐伯浩治研究開発局長への要望書の提出

J-PARC MLFの2019Bにおける課題申請状況

J-PARC MLF中性子一般利用課題2019B期(2019年11月~2020年3月に実施予定)の公募が5月17日~6月7日の期間に行われました。総数379件の応募がありました。2019A期に比べ、114件の大幅増となりました。図1に2018Bと2019Aそれぞれの申請課題の申請元別分類を示します。これを見て分るように申請元の比率はほとんど変わっていません。これらは審査を経て、9月の選定委員会で採否が決定されます。

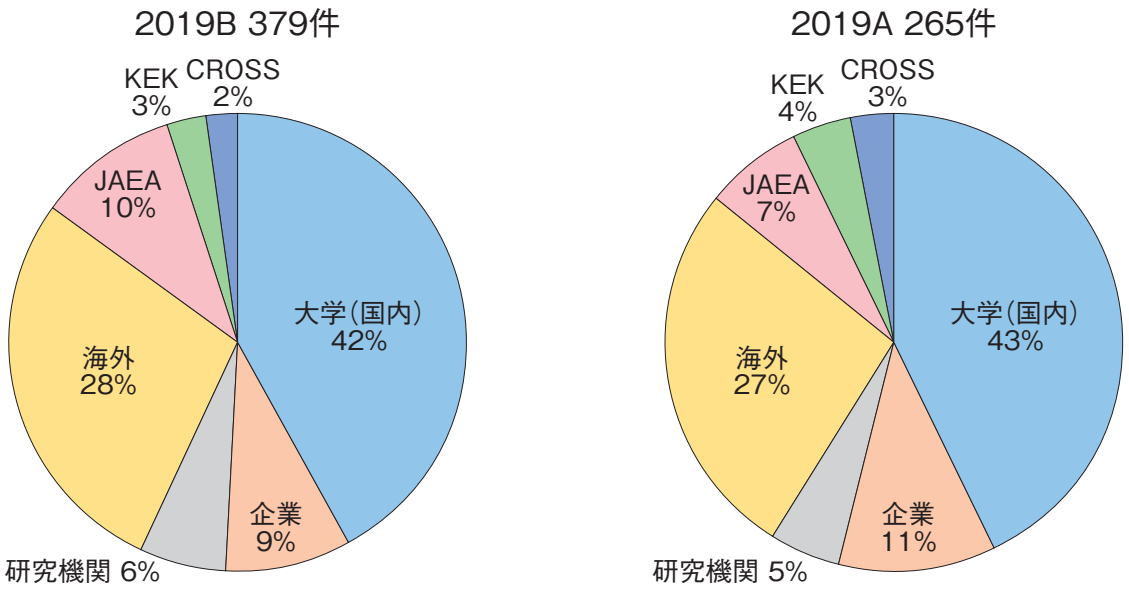


図1　2019Bと2019Aの申請課題の申請元別分類

J-PARCセンター情報

日本学術会議マスタープランに向けた第２標的ステーションの検討

J-PARC センター　下村 浩一郎、三島 賢二
金谷 利治

J-PARCでは新たなコンセプトによる中性子・ミュオン源を建設して中性子・ミュオンの輝度の大幅な増大を達成しMLFでは達成できない新たなサイエンスの創出と学術及び産業における大幅な利用拡大による展開を目指すために第２ターゲットステーション(2nd Target Station=TS2)施設の建設に向けての検討を重ねてきています。本計画は中性子源・ミュオン源を一体化する現在のコンセプトをもとに2016年に学術会議マスタープランに提案がなされ、ヒアリング対象として選ばれたものの残念ながら重点課題として採択されませんでした。そこで2017年からは検討体制をより本格化し、MLF内に将来計画の施設検討ワーキンググループを設置するとともに日本中性子科学会・日本中間子科学会にTS2におけるサイエンスの検討を進めていただきました。施設の概念設計はMLFの建設時の経験者を中心として検討を進め、学会・施設の合同検討会を東京大学・京都大学・量子ビームサイエンスフェスタ・中性子科学会等で開催し相互理解に努めてまいりました。さらに本提案を物理学一般・物性分野から提出するため拡大物性委員会における２回のシンポジウムおよび学術会議主催のシンポジウムにおいてその概要を周知し適切なフィードバックを受けました。2019年３月には前述の概念設計書をまとめるとともに、計画を2020年度マスタープランに向け提出しました。

TS2は現有の加速器を効率的に利用する計画です。中性子においては陽子ビーム集束や中性子標的、モデレータ、及びビーム輸送の最適化などにより中性子輝度で現行のMLFの20倍以上、ミュオンは中性子標的表面から発生するミュオンを効率的に取り出すことにより、50倍～100倍の強度増大を計画していま

す。これらの増強により現在のMLFでは測定不可能な中性子実験、例えばガン治療や酵素の機能に関係するタンパク質の構造解析や、地球の下部マントルに匹敵する高温高圧条件における構造解析、実空間イメージング等が可能になります。またミュオンにおいては時間分割測定やミュオン顕微鏡が実現できるようになります。これらにより新たなサイエンスの領域を拡大するとともに、産業利用を含むユーザーの拡大によりイノベーションに貢献することが期待されます。詳細はTS2の概念設計書(J-PRAC MLFのホームページ)：
http://j-parc.jp/researcher/MatLife/ja/publication/index.html
に公開しております。詳しくは当設計書をご覧くださるとともに、今後のより一層のご理解とご支援を賜りたいと思います。

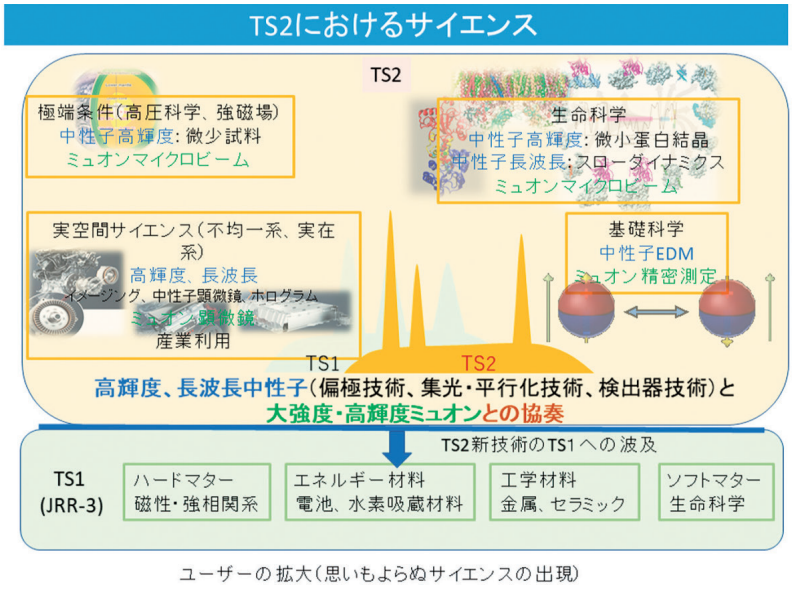


図1　第2標的ステーションで目指すサイエンス

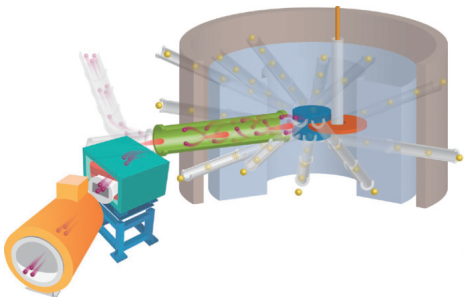


図2　第2中性子ミュオン源の概念図

1MW 相当で10 時間半の連続運転に成功

J-PARC センター　羽賀 勝洋

J-PARCセンターでは水銀ターゲット9号機のビーム出力を1MW相当に上げた高出力運転試験を7月3日に実施し、10時間半の連続運転に成功しました。

水銀ターゲット容器9号機は昨年10月22日から運転を始めましたが、当初は水銀ターゲット容器を保護するためのバブリング用ガス供給設備の不調により、陽子ビーム出力を300kWに抑えていました。その後、11月6日からは出力を 500kWに上げて運転を継続し、最終的な平均出力は509kW、総入射パワーは2120MWh、平均稼働率は94.5%と、これまで使用した水銀ターゲット容器の中で最も高い出力で長期に渡る安定な利用運転を達成しました。そして、7月3日朝の利用運転終了後、11:30から22:00に渡り922kW ～ 935kWで98%以上の極めて高い稼働率の連続運転に成功しました。図1に9号機による高出力運転試験の状況を示します。パルスが間引かれている

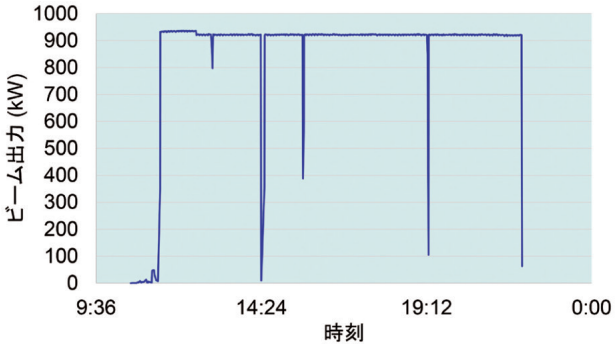


図1　水銀ターゲット9号機による運転状況
(2019年7月3日)

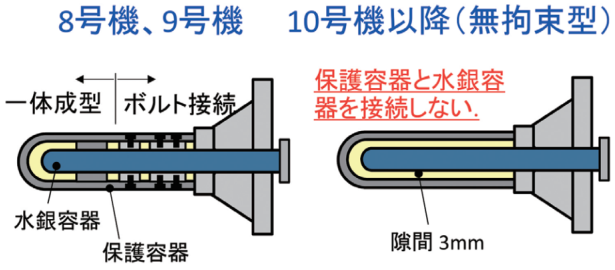


図2　水銀ターゲット容器構造の改良

ので、時間平均では1MWより若干低めの出力ですが、個々のパルス当たりの強度は、設計値である1MWのパルスビーム出力に相当します。

運転を終えた水銀ターゲットについては、これまでと同様に夏季メンテナンス中にこれまでのビーム運転によって受けた損傷の程度を調べ、その結果を基に寿命評価を行い、来年6月までの利用運転の出力計画を立案します。

今季のメンテナンスでは、これまで用いてきたターゲット容器とは異なる、新しい構造の無拘束型ターゲット容器に交換します。これは、図2に示すように水銀容器と保護容器の間を接続せず、それぞれの容器で生ずる熱伸びの差による熱応力を軽減し、信頼性と堅牢性を更に向上させた設計で、より高出力の安定な運転を目指して製作されました。MLFでは、これらの改良に対する運転経験を蓄積しつつ、1MWの連続運転を目指す計画です。

中性子実験技術の紹介

リートベルト解析ソフトウェア「Z-Rietveld」

高エネルギー加速器研究機構　神山 崇、米村 雅雄
萩原 雅人
総合科学研究機構　石川 喜久

Z-RietveldはJ-PARC粉末回折データのリートベルト解析ソフトで、現在、自動解析機能や磁気構造解析機能を強化中です。以下、機能を紹介します。

【Z-RietveldとMEM解析の一体化】

図1に、Z-Rietveldのmaximum entropy method(MEM)解析ウィンドウを示します。タブ(画面上部で横一列のボタン)を切り替えることで、リートベルト解析からMEM解析に簡単に切り替わり、連続的で快適な解析環境が実現しました。実行ボタンを押せばMEM解析が開始します。

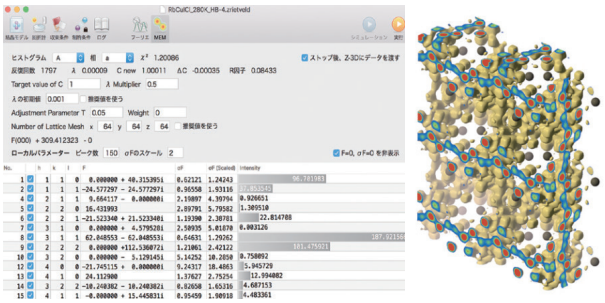


図1　Z-Rietveld1.1.0.の画面(MEM解析画面)とMEM解析結果の一例をZ-3Dで表示(中性子回折データはhttps://z-code.kek.jp/zrg/からダウンロードできる$Rb_4Cu_{16}I_{7.2}Cl_{12.8}$)。

【ポーリー法vsル・ベール法】

どちらも回折パターンから回折強度を抽出する方法ですが、ル・ベール(Le Bail)法はリートベルト解析プログラムに導入しやすいため未知構造解析の需要の高まりもあって普及しました。一方、ポーリー(Pawley)法は最小二乗法で各ピークの強度を計算するため標準偏差が得られる利点があります。

Z-Rietveldにはル・ベール法が導入されていませんが、Z-Rietveldのポーリー解析は非常に強力で未知構造解析に用いることができます。その上、リートベルト解析と同じ最小二乗法を用いているため、リートベルト解析とポーリー解析が連続的に繋がっており、たとえば、主相はリートベルト解析、副相は強度をパラメータにポーリー解析、さらに、いくつかの回折ピークは個別にフィッティングというようなことがボタン一つで選べます。図2に1141本の反射にポーリー解析を実施した例を載せました。

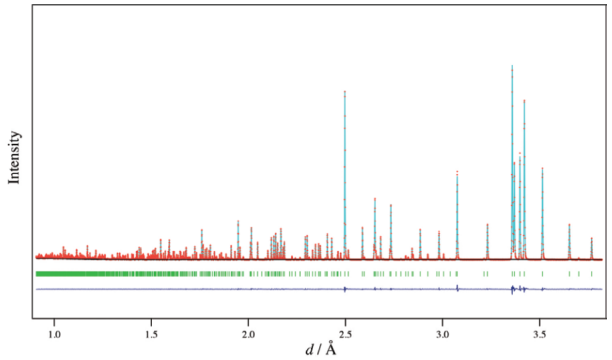


図2　Z-Rietveldを用いたポーリー法による解析。(glycyl-glycine、a=9.7826Å,b=9.7563Å,c= 9.7826Å, β =104.3023°)。

【MLF以外の回折データ解析も簡単に行えます】

Z-Rietveldで読み込める強度データファイルと回折計ファイルは、Z-Rietveldを用いて作成することができます。強度データファイルは、ウィンドウメニューから「ヒストグラムの作成ウィンドウ」を選び、現れた「ヒストグラムの作成」ウィンドウ内に、強度データを

ペーストし書き出します。XYデータ形式の強度データをテキストエディタで開きコピーしておいてください。回折計ファイルは、Z-Rietveld付属のテンプレートを読み込み、回折計のパラメータ(波長、回折法等)を確認・修正し、ファイルメニューから「回折計を書き出す…」を選択して作成します。テンプレートとしてブラッグ—ブレンターノ、放射光X線回折、角度分散型中性子、TOF型中性子等の回折計ファイルが用意されています。

【複数の強度データの同時解析が可能】

複数のX線回折・中性子回折データの同時解析ができます。ファイルメニューの「新規解析…」を選ぶと「ヒストグラムと回折計ファイルの選択」ウィンドウが現れますので、ヒストグラムと回折計ファイルの組み合わせを順次選び、「解析データを新規作成…」ボタンを押します。また、解析の途中でヒストグラムを追加し解析を続行するには、ファイルメニューから「ヒストグラムと回折計を追加」を選び指示に従います。

Z-Rietveldには他にもさまざまな機能があります。TOFデータの解析から有効結晶子サイズや有効歪みの計算も可能です。また、Z-Rietveldは旧来のプログラムに比べ発散しにくく収束性も高いのですが、それでも、ログを読み解きながら解析をすすめていくと収束性が改善します。これらについては、クイックガイドが公開されており、最新版の取得と合わせてhttps://z-code.kek.jp/zrg/からダウンロードできます。

Z-Rietveldはコード本体を富安亮子(KEK、現九州大学)らがつくり、平井博明(Innoface)、田村智志(VIC)、田辺豪信(KCS)、鳥居周輝(KEK)、石垣徹(茨城大)らの支援でKEK構造科学グループが開発と配付を行っています。Z-Rietveld開発の大部分は茨城県委託事業で行われ、一部はNEDO-RISING事業、KEK運営費交付金で実施しています。

研究トピックス

鉄筋コンクリート造の長期利活用技術の開発に貢献する中性子実験技術

日本原子力研究開発機構　鈴木 裕士
東京理科大学　兼松 学

鉄筋腐食に伴う付着応力度分布の変化や、樹脂注入工法によるひび割れ補修に伴う付着回復効果を評価するうえで、中性子CTや中性子回折法などの中性子実験技術が有効な手段であることを明らかにしました[1]。

鉄筋コンクリート(RC)は、圧縮に強いコンクリートと引張に強い鉄筋を相補的に組み合わせた複合材料であり、多くの建築・土木構造物に利用されています。RC造の性能は、鉄筋とコンクリート間に働く付着力に由来しています。そのため、付着力が低下すれば、建物の倒壊や落橋などのリスクが増加します。特に、老朽化の進む社会インフラの維持管理やRC集合住宅の長期利活用の観点からは、補修や補強によって、この付着性能を維持・回復することが重要になります。本研究では、このようなRC建造物の老朽化と長期利活用の問題に資するため、鉄筋腐食に伴う付着劣化とひび割れ補修による付着回復効果を、中性子実験技術をもって評価することを目的としました。

図1は、BL22「螺鈿」を用いて観察したRC試験体の中性子CT断面像です。中性子線は樹脂に含まれる

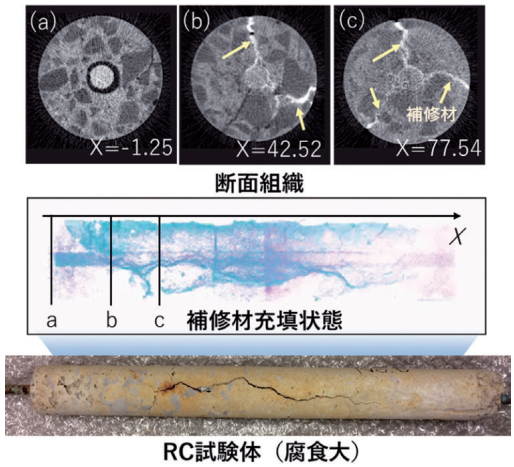


図1　腐食大のRC試験体の中性子CT像

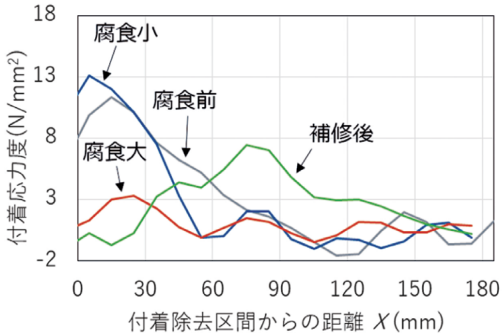


図2　中性子回折法により測定した付着応力度分布

水素に敏感なため、中性子CTによって、ひび割れや鉄筋周りに充填された樹脂の状態をはっきりと捉えることができました。一方、図2はBL19「匠」を用いた中性子回折法により測定した付着応力度分布を示しています。付着応力度は、付着力を表す指標の一つで、大きいほど付着性能が良いことを示します。腐食小では、腐食生成物による機械的固着により付着応力度が増加しますが、さらに腐食が進行するとコンクリートに割裂ひび割れを生じ、付着応力度が大きく減少する様子を確認できました。一方、ひび割れに樹脂を注入すると、腐食前の状態までには戻りませんが、樹脂注入による拘束効果によって付着応力度が回復することがわかりました。

このように、鉄筋腐食に伴う付着応力度分布の変化や、樹脂注入工法によるひび割れ補修に伴う付着回復効果を評価するうえで、中性子CTや中性子回折法などの中性子実験技術が有効な手段であることが分かりました。

中性子実験技術は、RCに対する新しい付着性能評価手法として期待されています。将来的には、建築・土木分野における設計指針の策定や、新しい補修技術等の開発といった産業応用に繋がると期待されます。

本研究の実施に際しては、日本原子力研究開発機構のステファヌス ハルヨ博士と川崎卓郎博士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。

参考文献

[1] 関根,兼松,鈴木,コンクリート工学年次論文集 40, 1545-1550 (2018)

量子ビームを利用した合成高分子構造物性相関の電子レベルからの検討は夢だけか？

田代 孝二[1]、塙坂 真[1]、山元 博子[2]、日下 勝弘[3]、細谷 孝明[3]、大原 高志[4]、田中 伊知朗[3]、新村 信雄[3]、栗原 和男[5]、黒木 良太[5]、玉田 太郎[5]
[1]豊田工業大学　[2]あいちシンクロトロン光センター
[3]茨城大学工学部　[4]CROSS　[5]量子科学技術研究開発機構

ポリジアセチレン単結晶について行った広角中性子およびX線回折データの精密結晶構造解析結果を結び合わせ、高分子鎖に沿った結合電子密度分布の定量評価に成功するとともに、量子化学計算結果との間に良い一致を得ました[1]。

合成高分子は、力学物性を利用した構造材料としての役割だけにとどまらず、電気電子物性、熱物性、光物性など種々の優れた物性を有する材料として欠くべからざる存在になっています。これら様々な物性を理解し、より優れた性能を有する新規高分子物質を分子設計するためには、従来のように分子鎖の形態やその集合状態を知るだけではなく、電子レベルにまで立ち入った検討が必要となります。モノマーが無数に連結した高分子化合物ならではの電子密度分布を調べることは重要です。ポリアセチレンなど導電性高分子について分光学的手法による検討は古くから行われていますが、分子鎖に沿った電子分布を具体的な形で観察した例は皆無でした。一般に合成高分子材料においては、数百Åオーダーの微結晶が非晶相中に存在するが故に、X線あるいは中性子回折データは極めて貧弱であり、結合電子密度分布の評価は夢物語とされてきました。しかし、手で扱える程度に大きく発達した「巨大単結晶」があれば、この課題に挑戦することは不可能ではありません。我々はポリジアセチレン単結晶に着目しました。ジアセチレンモノマー単結晶にガンマ線を照射すると固相重合反応がトポタクティック的に起こり、殆どモノマー単結晶の形態を保ったまま高分子へ転移し、数ミリ角の大きな結晶が得られます。こうなると、X線回折データだけではなく、高品質の中性子回折データの収集も可能となります。X線構造解析は電子密度分布情報を与え、中性子構造解析により原子核位置情報が得られます。後者からは、個々の(孤立した)原子核周辺での均一電子密度分布が推定されます。それをX線による電子密度分布から差し引くことで、結合によって生じる電子密度分布変形の様子を定量的に知ることが可能となります。この方法をX－N法と言います。

ポリジアセチレン単結晶について、X線結晶構造解析はラボ装置ならびにSPring-8高エネルギーX線回折装置(BL02B1)を用いて、また広角中性子回折実験については、単色中性子からの二次元回折データをJRR-3のBIX-3で、飛行時間法による回折データ収集をJ-PARC MLFのi-BIXを用いて行いました。このように種々のシステムを用いた結晶構造解析を行い、構造の精度を慎重に確認しました。X－N法の実行結果を図1(a)に示します。CC三重結合の中心に高い電子密度ピークが見えるなど隣接原子間の結合に伴う電子密度分布変形の様子が見てとれます。密度汎関数法を用いて量子化学計算した結果が図1(b)です。分子鎖

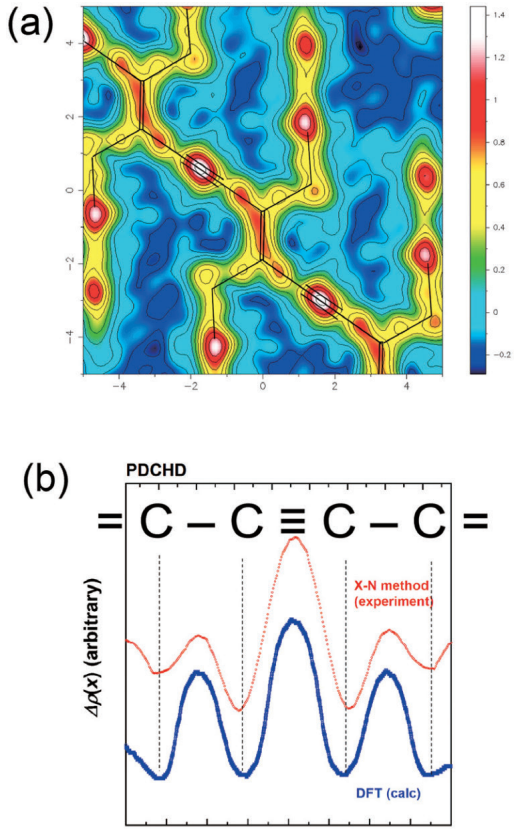


図1　(a)ポリジアセチレン主鎖骨格に沿った結合電子密度分布、(b)量子化学計算結果との比較

骨格に沿った結合電子密度分布を実験結果(X－N法)と比較したものですが、極めて良好な一致が得られています。

巨大単結晶という特殊なケースではありますが、合成高分子について分子鎖骨格に沿った結合電子密度を実験的に定量評価出来ました。この意義は大きい。高分子化合物の構造物性相関を電子レベルから議論出来る道を拓いただけではなく、時には絶対的に正しいとまで言われる量子化学計算の妥当性を直接検証することが可能となったのです。高分子に光照射すると電子励起が起こる。その時の高分子の状態は？あるいは高分子を変形、破壊させた際の電子構造変化は？電子レベルからの議論こそ高分子科学が将来目指すべきテーマです。しかし、一般の高分子材料の回折データの貧弱さを考えると、はたと立ち止まってしまいます。この分野の今後の展開を期待します。

参考文献

[1] Kohji Tashiro *et al.*, *Macromolecules*, 51, 3911–3922 (2018).

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、総合科学研究機構では、J-PARCセンター他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出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。今回パナソニックにおいてセミナーを開催しましたのでご報告します。パナソニックはこれまでもJ-PARC MLFを積極的に利用していただいていますが、今後、さらに多くの分野で利用されることを期待します。

●パナソニック株式会社

8月6日(火)、大阪府守口市八雲中町3-4-1にあるパナソニック イノベーション推進部門で中性子産業応用セミナーを開催しました。22名の方が聴講されました。

プログラムと講師は下記の通りです。

1. 中性子の基礎	野間 敬(CROSS)
2. 構造物内部の残留応力測定	鈴木 裕士(JAEA)
3. パルス中性子イメージング	林田 洋寿(CROSS)
4. 即発ガンマ線分析	松江 秀明(JAEA)
5. 中性子反射率測定	阿久津 和宏(CROSS)
6. 準弾性散乱による材料の機能解析	山田 武(CROSS)
7. お知らせ	峯村 哲郎(茨城県)

会場の様子

「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。

お知らせ

◆研究会

●第１回構造生物学研究会

日時：2019年11月28日(木)13:30-17:00
会場：エッサム神田ホール１号館401会議室

中性子産業利用推進協議会と茨城県、CROSSが主催し、J-PARC MLF利用者懇談会が共催して「新世代中性子構造生物学と相関構造解析」をテーマに開催します。

今回はトピックとしてタンパク質の構造・機能解析における相関構造解析の現状を紹介し、「新世代中性子構造生物学」が目指す研究の方向を探っていきます。

＜チュートリアル＞、＜相関構造解析＞、＜タンパク質の構造解析と創薬＞の３つのセッションで５件の講演を予定しています。

◆講習会

●中性子実験技術基礎講習会（レベル１講習会）

日時：2019年11月29日(金)9:35-17:00
会場：エッサム神田ホール１号館701会議室

中性子産業利用推進協議会、日本中性子科学会、茨城県、CROSSが主催して開催します。

中性子実験技術の初心者の方を対象に、中性子実験技術の基礎的事項を紹介し、パルス中性子実験施設であるJ-PARC MLFでの実験計画立案や課題申請に役立てていただくことを目的として開催します。

多くの皆さまのご参加をお願い致します。

●初級者向けZ-Code講習会

日時：2019年11月7日(木)9:30-8日(金)17:00
会場：エッサム神田ホール(予定)

J-PARCセンター MLFディビジョン、KEK物構研、茨城県、中性子産業利用推進協議会、茨城大学Fセンター、CROSSが主催して、粉末構造解析ソフトウエアZ-Codeの初心者向け講習会を開催します。Z-RietveldとZ-3D、Z-MEMの最新版の使い方について講義と実習を行います。J-PARC MLFの粉末構造回折装置を利用される多くの皆様には是非ご参加いただき、これらの解析ツールを構造解析に活用していただきますようお願い致します。

多くの皆さまのご参加をお願い致します。

協議会HP（http://www.j-neturon.com/）では、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。また、新規材料の発見や高度な測定技術の開発、ならびに、中性子に関係する重要な会議など皆様に周知すべき情報がありましたら、是非ご提供ください。

季報「四季」編集委員会
委員長　杉山 純(CROSS)
委　員　勅使河原 誠(J-PARC)、山田 悟史(J-PARC)、水沢 多鶴子(CROSS)
事務局　野間 敬、大内 薫(中性子産業利用推進協議会)

中性子産業利用推進協議会　季報【19年・秋】Vol.44

発行日　2019年9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