

CONTENTS

- P1 会長就任のご挨拶 P2 重水素化反応の化学と応用：低分子から高分子まで P5 構造食品科学の最近の研究紹介
P9 第1回 MLF ロードマップワークショップ 報告記事 P9 研究会・講習会開催 P11 新会員企業の紹介 P10 施設からのお知らせ
P11 今後の行事予定

会長就任のご挨拶

中性子産業利用推進協議会 会長
トヨタ自動車株式会社 代表取締役副社長兼 CTO
中嶋裕樹

このたび、2025年7月13日の中性子産業利用推進協議会総会において、会長を拝命いたしました。協議会の使命を改めて胸に刻み、副会長の池田育嗣氏、阿部晃一氏、大竹淑恵氏とともに、中性子科学の産業利用のさらなる推進に尽力してまいります。何卒よろしくお願ひ申し上げます。

本協議会は2008年の発足以来、今年で17年を迎えました。この間、文部科学省、茨城県、J-PARC、日本原子力研究開発機構、高エネルギー加速器研究機構、総合科学研究所、大学、関連学会など、多くの皆様のご支援とご尽力により、中性子科学技術を産業界で活用できる環境が整備され、我が国のものづくり力の強化に大きく貢献してまいりました。協議会を代表し、心より御礼申し上げます。

また、前会長の中村道治氏には、将来ビジョンの策定や合同実験の推進など、多方面にわたるご指導を賜りましたことに、改めて深く感謝申し上げます。さらに、2025年11月には会員数は58会員(55社・3機関)となり、発足以来の最多となりました。これもひとえに、皆様の継続的なご支援の賜物であり、重ねて御礼申し上げます。

私たちは今、気候変動の深刻化を背景に、2050年のネットゼロエミッションの実現に向けて、再生可能エネルギーの導入、輸送機器の電動化、水素製鉄、メタネーションなど、さまざまな課題に直面しています。加えて、経済安全保障の観点からは、最先端半導体の開発や資源問題への対応が重要性を増しており、少子

高齢化社会における健康寿命の延伸も喫緊の課題となっています。こうした複雑かつ多様な課題に対し、私たちには、欧米やBRICS諸国を凌駕する高品質なものづくりが求められています。

トヨタ自動車においても、これらの社会課題の解決に向け、カーボンニュートラル技術の開発や次世代モビリティの創出に取り組んでおります。その中で、中性子計測技術は、材料の微細構造の解析、電池・水素関連部材の評価、高信頼性部品の開発などにおいて、極めて有効な手段であり、技術革新を支える重要な基盤と認識しております。今後も中性子技術の活用を通じて、より安全で持続可能な社会の実現に貢献してまいりたいと考えております。

そのためには、科学・技術・現場知を有機的に結びつけ、単なる総和を超えた創発的な価値を生み出す取り組みが不可欠です。中性子産業利用推進協議会は、学術と産業の好循環を促進し、さまざまなステークホルダーが互いに刺激し合い、新たな価値を創出する場としての役割を担っています。研究会や講習会を通じて、産学の研究者・技術者が分野や組織の垣根を越えて議論を深められるよう、運営委員会・研究開発委員会を中心により一層の環境整備に努めてまいります。

今後は、施設側や学術界との対話を重ねながら、次の10年、15年を見据えた中性子・ミュオン計測の解析装置、手法、応用に関する将来ビジョンの具体化を進めてまいります。これらの取り組みが、次世代人材の育成や基礎・基盤研究を重視する文化の醸成にもつながるものと確信しております。

以上、会長就任にあたり、私のご挨拶とさせていただきます。引き続き、皆様のご理解とご支援を賜りますよう、心よりお願ひ申し上げます。

重水素化反応の化学と応用：低分子から高分子まで

総合科学研究機構 中性子科学センター
阿久津和宏

1. はじめに

水素には軽水素、重水素、および三重水素の3種類の同位体が存在し、重水素と三重水素はそれぞれ H. C. Urey¹⁾ と M. L. Oliphant²⁾ によって発見された。重水素は、軽水素の原子核に中性子が1個付加した構造を有するため、その質量は軽水素の約2倍に相当する。H. C. Urey は、重水素の発見に加えて、軽水素と重水素の化学反応の平衡が予想よりも大きく異なることを報告した³⁾。現在では、重水素を導入した物質において化学反応等が変化する「同位体効果」が顕著に認められるケースが数多く報告されており、その応用も進んでいる。また、核スピン量子数も、軽水素の $I = 1/2$ に対して重水素は $I = 1$ と異なる。重水素の核スピン量子数の差異を活用した核磁気共鳴 (NMR) 法による重水素化物の利用も、近年ますます拡大している。

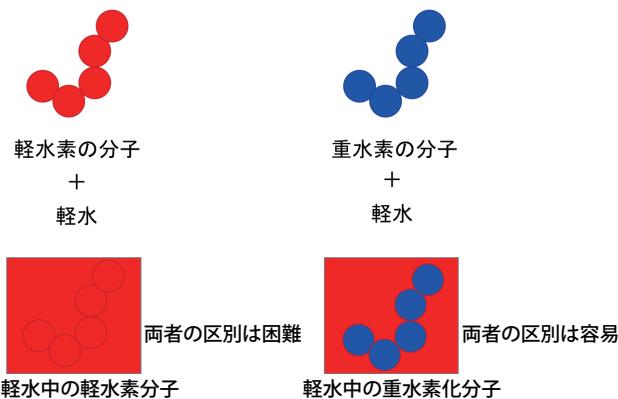


図1. 重水素によるコントラスト変化のイメージ図。

中性子科学研究においては、水素が中性子に対して高い感度を示す特性を有することから、有機化合物を対象とした研究において顕著な有効性を発揮する。また、中性子散乱強度は原子核種に依存して変化し、軽水素および重水素の散乱長はそれぞれ -3.74 fm と 6.67 fm と顕著な差を示す。そのため、ソフトマテリアルの構造解析研究では、図1に示したように試料のコントラスト変化を目的として重水素化物が用いられる⁴⁾。このような背景から、各国の中性子実験施設には、重

※負の散乱長は、散乱過程で位相が逆転することを意味する（編集注）。

素化物を利用した中性子科学研究の成果最大化のため重水素化物を合成・提供するためのラボが併設されていることが多い。

本稿では、試料を重水素化する化学反応、技術開発の現状、及びそれらの応用例を紹介する。

2. 重水素化反応の種類

多くの中性子ユーザーは、試料のオリジナルの化学構造を中性子散乱実験により解析することを希望している。そのため、試料の効率的な散乱実験のためには、各々の物質の構造に合わせた適切な重水素化反応を構築する必要がある。

試料の重水素化には、大きく分けて2つの手段がある。1つが多段階反応、もう1つが直接重水素化反応（一段階反応）による重水素化である（図2）。直接重水素化反応は試料の軽水素を重水素に置換する反応であり、1回の反応で目的の重水素化物が得られる。一方、多段階反応は複数回に渡り化学反応を行い、最終的に目的物を得る反応であり、そこには多くの工程がある。

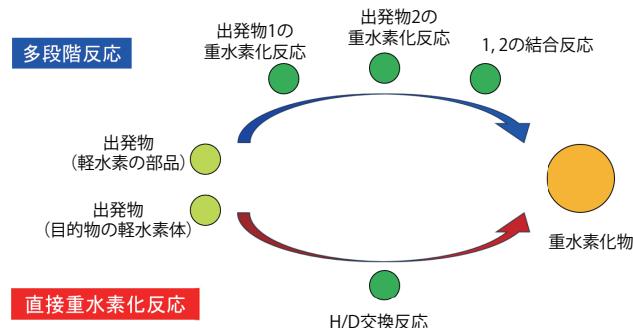


図2. 多段階反応と直接重水素化反応の違い。

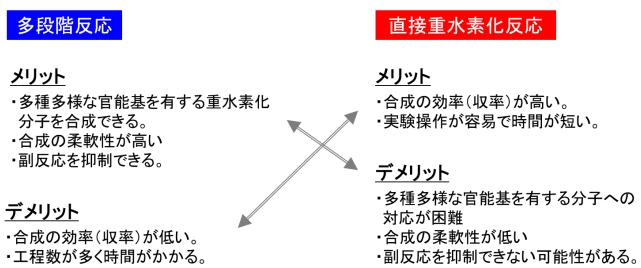


図3. 各反応のメリットとデメリット。

多段階反応と一段階反応のそれぞれが持つ利点と欠点は、相互にトレードオフの関係にある（図3）。重水素化ラボでは、大量合成かつ多数の実験をこなす必要があるため、試料の重水素化には直接重水素化反応

を用いることが効率的である。そのため、直接重水素化反応に関する研究が数多く行われている。

直接重水素化反応には、大まかに分けて2種類の触媒、均一系触媒と不均一系触媒が使用される。均一系触媒は触媒が反応物と同一の相に存在し、分子レベルで均質に作用するものであり、反応の選択性や制御性に優れる一方、触媒の回収が困難であるという特徴を有する。一方、不均一系触媒は触媒が反応物と異なる相に存在し、主として固体表面において反応を進行させるものであり、触媒の分離・再利用が容易で工業的利用に適する反面、反応選択性に制約が生じる場合がある。一見すると合成の柔軟性が低い不均一系触媒は利点が乏しいように思われるが、重水素化反応においては佐治木教授らが開発した「不均一系白金族触媒を用いた重水素標識化反応」を利用することで多様な有機化合物を効率的に重水素化することが可能であり^{5, 6)}、この反応は世界的に利用されている。我々も、不均一系白金族触媒を用いた直接重水素化反応により重水素化物の合成を行っており、これまでにアミド系化合物⁷⁾、イオン液体(1-alkyl-3methyl imidazolium chlorideなど)⁸⁾、アミン類⁹⁾といった、低分子量の有機物の効率的な重水素化法の開発に成功している(図4)。

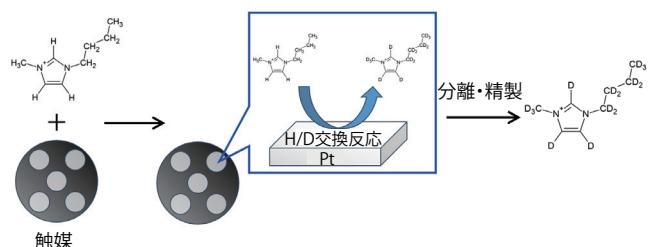


図4. 不均一系白金族触媒によるイオン液体の重水素化反応。

3. 重水素化反応による試料合成

不均一系白金族触媒を用いた重水素化反応は、一般に100°Cを超える温度条件下で行われることが多い。そのため、実験には高温高圧の条件に耐えられる反応容器が必要となる¹⁰⁾。我々は、200°C以上の重水素化反応に適用可能なステンレス製反応容器による実験法と、200°C以下の反応に適用可能なテフロン内殻製反応容器による実験法を導入・改良し、中性子実験用試料の重水素化を行っている¹⁰⁾。本稿では、これらの重水素化システムを用いた低分子化合物および高分子化合物の重水素化研究例を紹介する。

3-1 低分子化合物の重水素化

不均一系白金族触媒を用いた低分子化合物の重水素化は数多く報告されており、これまでに多様な分子で

成功例が示されている。一般に、硫黄・ハロゲン・エーテル酸素を含む化合物は触媒を不活性化するため、重水素化が困難となる場合が多い。さらに、反応温度が100°Cを超えることが多いため、熱的安定性の低い化合物では、重水素化に先立って分解が生じるか、重水素化反応と分解反応が並行して進行することが少なくない。従って、耐熱性の高い分子ほど効率的に重水素化することが可能となる。

3-2 高分子化合物の重水素化

低分子化合物とは異なり、高分子化合物の重水素化に成功した例はほとんど報告されていない。均一系・不均一系触媒はいずれもH/D交換反応において分子との直接的な接触を必要とするが、特殊な場合を除き触媒が高分子内部へとアクセスするのは容易ではない。そのため、どちらの触媒を用いても高分子の重水素化反応を効率的に進行させることは難しいと考えられる。

しかし、重水素化高分子化合物の合成例はいくつか報告されている。例えば、不均一系白金族触媒を用いた反応では、単純なアルカン構造をもつpoly(1-decene)およびmineral oilが高い重水素化率で得られている¹¹⁾。この反応では、他の低分子化合物の重水素化に用いられるものと同じ触媒が使用されていることから、poly(1-decene)とmineral oilは触媒との接触効率が低分子化合物並みであると推測される。また、バイオポリマーであるCelluloseおよびStarch(デンプン)は、生物学的重水素化法によって合成可能であることが報告されている(詳細はNational Deuteration Facility Product Listを参照)。この方法では、重水を主成分とする培養液で微生物を培養し、培養後に目的の重水素化分子を単離する。重水素化できるバイオポリマーの種類は限られているものの、手法が確立されているものについては入手が可能である。

3-3 多段階反応による重水素化高分子化合物の合成

直接重水素化反応や生物学的重水素化法では重水素化できる高分子の種類が限られている。そのため、現状では多段階反応による重水素化高分子の合成が効率的な合成方法となる。そのためには出発物(モノマー)の重水素化が必要となるが、モノマーの効率的な重水素化法としては不均一系白金族触媒を用いた方法が報告されている^{12, 13)}。出発物である軽水素モノマーに、不均一系白金族触媒と重合禁止剤を混合し、重合が開始しない条件下で重水素化反応を行うことで、主鎖の二重結合部分を効率的に重水素化できる(図5)。さらに、Methacrylate系分子では側鎖のメチル基も効

率的に重水素化される。このようにして得られた重水素化モノマーを重合反応に用いることで、目的である重水素化高分子化合物の合成が可能となる。

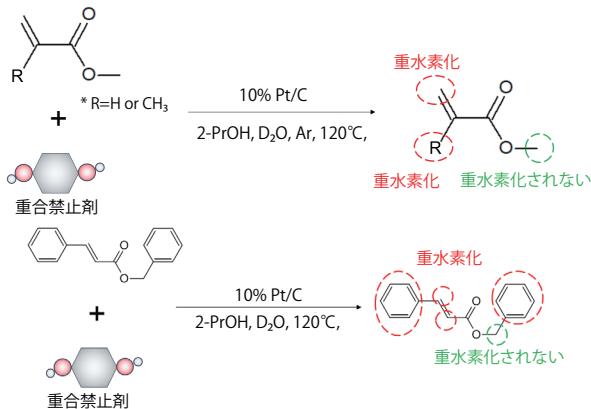


図5. モノマー化合物の重水素化反応。

このように、重水素化高分子化合物の合成は可能であるものの、低分子化合物と比較して高分子化合物の重水素化に関する方法は発展途上にあり、今後の更なる技術の進展が期待される。

4. 重水素化に関する最近の話題

重水素化物は、中性子散乱やNMRをはじめとする構造解析法に広く利用されており、その応用範囲は着実に拡大している。加えて、重水素の同位体効果を活用した材料開発研究も徐々に進展している。例えば、スクアレン squalene を重水素化した研究ではその酸化安定性の向上が実証され、重水素化率が高いほど安定性が増すことが示されている¹⁴⁾。また、ホスホニウム系イオン液体では、重水素化により放射線（ガンマ線）に対する分解耐性が向上することも報告されている¹⁵⁾。我々のアミノ酸に関する研究でも類似の現象が確認されている。具体的には、芳香族アミノ酸の一つであるトリプトファンが重水素化によって紫外線に対する分解耐性を示すことが確認された¹⁶⁾。理論的には、重水素化分子は軽水素化分子より化学的に安定であるとされてきたが、近年はこれを裏付ける実験結果が数多く報告されている。今後、重水素の同位体効果を利用した材料開発研究はさらに発展していくと考えられる。

6. 謝辞

重水素化技術の開発と応用研究において、多大なご協力とご支援を賜りました以下の皆様に、この場をお借りして深く感謝申し上げます。

佐治木弘尚教授（愛知工業大学）、西直哉准教授（京

都大学）、石井浩介博士（KEK）、柴崎千枝博士（J-PARCセンター）、杉山晴紀博士（CROSS 中性子産業利用推進センター）、Tamim Darwish博士（ANSTO-DNF）、Marina Cagnes氏（ANSTO-DNF）、Zoë Fisher博士（ESS）。

また、本研究の一部は日本学術振興会 科学研究費助成事業（課題番号：21K05121）の支援を受けて実施されました。ここに記して感謝いたします。

参考文献

- 1) H. C. Urey, F. G. Brickwedde, G. M. Murphy, *Phys. Rev.*, **39**, 164 (1932).
- 2) M. L. Oliphant, P. Harteck, *Nature*, **133**, 413 (1934).
- 3) H. C. Urey and D. Rittenberg, *J. Chem. Phys.*, **1**, 137–143 (1933).
- 4) T. A. Darwish, E. Luks, G. Moraes, N. R. Yepuri, P. J. Holden, M. James, *J. Label. Compd. Radiopharm.*, **56**, 520–529 (2013).
- 5) H. Esaki, T. Kurita, Y. Fujiwara, T. Maegawa, Y. Monguchi, H. Sajiki, *J. Synth. Org. Chem. Jpn.*, **65**, 1179–1190 (2007).
- 6) H. Esaki, F. Aoki, M. Umemura, M. Kato, T. Maegawa, Y. Monguchi, H. Sajiki, *Chem. Eur. J.*, **13**, 4052–4063 (2007).
- 7) C. Micheau, Y. Ueda, K. Akutsu-Suyama, D. Bourgeois, R. Motokawa, *Solvent Extr. Ion Exch.*, **41**, 221–240 (2023).
- 8) K. Akutsu-Suyama, M. Cagnes, K. Tamura, T. Kanaya, T. A. Darwish, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **21**, 17512–17516 (2019).
- 9) K. Akutsu-Suyama, M. Ueda, M. Shibayama, K. Ishii, N. Nishi, *EPJ Web of Conf.*, **286**, 01004 (2023).
- 10) K. Akutsu-Suyama, M. Ueda, C. Shibasaki, Z. Fisher, *CROSS Reports*, 2024.001 (2024).
- 11) M.A. Klenner, M. Cagnes, K. Wood, K. Mita, M. Kishimoto, T. Darwish, *Polym. Chem.*, **11**, 4986–4994 (2020).
- 12) K. Park, T. Matsuda, T. Yamada, Y. Monguchi, Y. Sawama, N. Doi, Y. Sasai, S. Kondo, Y. Sawama and H. Sajiki, *Adv. Synth. Catal.*, **360**, 2303–2307 (2018).
- 13) K. Akutsu-Suyama, K. Park, R. Takakura, K. Tamura, M. Cagnes, T. A. Darwish, T. Yamada, Y. Sawama and H. Sajiki, *JPS Conf.*

- 14) J. Möller, C. Recsei, R. Russell, T. Darwish, *RSC Adv.*, 14, 26002–26006 (2024).
15) K. Ishii, K. Akutsu-Suyama, C. Recsei, Y. Yokoyama, T. Sakka, T. A. Darwish, N. Nishi,

- 16) C. Shibasaki, H. Sugiyama, M. Ueda, T. Oku, M. Adachi, Z. Fisher, K. Akutsu-Suyama, *Bioengineering*, 12, 981 (2025).

構造食品科学の最近の研究紹介

日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
中川洋、平田芳信、熊田高之

1. はじめに

食品の食感、保存性や安定性といった物性は、食品素材の分子スケールの相互作用からマクロな組織構造まで連続する階層構造により決定され、ミクロ構造とマクロ物性の関係性の解明は食品科学の重要なテーマである（図1）。近年、食品を「ソフトマター」として捉える視点が浸透しつつあり、ゲル、コロイド、液晶、アモルファスなどと共に通する食品の構造物性を分子・ナノからミリメートルスケールまで統一的に理解する枠組みを構築しようとする研究が多くなされている[1]。例えば、アモルファス糖質のガラス状態は、水分量に依存した分子運動性や拡散性を通じて、香氣保持や生体成分の安定化に重要な役割を果たすことが示されている[2]。また、食品の物性はそれを特徴付ける長さスケールに依存しており、エマルション中の油滴（～1 μm）、カゼインミセル（～50 nm）、デンプンのラメラ構造（数nm～μm）など、様々なスケールの構造的特徴が食感・レオロジー・保水性に影響する[3]。食品中の水は、品質劣化、レオロジー、微生物制御などに深く関与する。水分活性は古くから食品保存性の指標として用いられ、食品の品質に関わる様々な物性が予測されている（図2）。しかし、水分活性が意味する水の物理化学的状態には不明な点が多く、その熱力学的状態のみならず、水和構造や分子運動との関係が調べられている。調理・加工における加熱、攪拌、乾燥、せん断などの操作は、食品成分の物理化学的変化を引き起こし、これらプロセスの分子レベルの理解は調理現象の再現性向上、工業プロセスにおける最適化や新規食感創出にも寄与する。いわゆる「分子ガストロノミー」的視点は、調理中に生じる食品素材の構造変化を解明し、官能特性の定量化や創造的調理の基盤としての役割を担うことが期待されている[4]。

本稿では、食品の分子構造と巨視的な物性（食感・

保存性・安定性など）を結びつける構造食品科学の研究の最新の知見について、主に中性子散乱を活用した研究を紹介する。食品中の水や非晶質・ガラス状態などの食品物性を制御する食品素材の物理化学的状態のほか、最先端の分析手法なども紹介する。

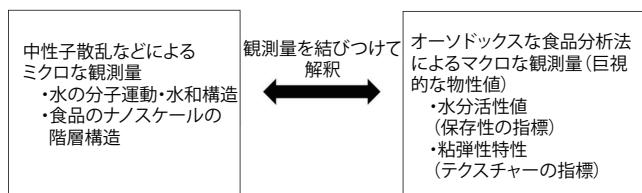


図1. 食品のミクロ構造とマクロ物性との関係
～構造食品科学のコンセプト～

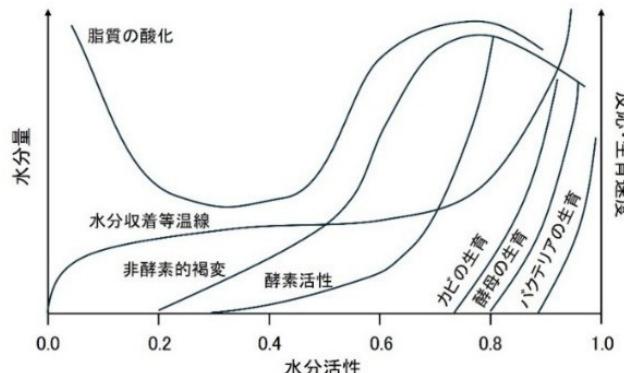


図2. 食品のStability map

2. 食品中の水

水分は食品の保存中の腐敗に関係し、食品の品質を劣化させる原因となる一方で、食品にソフトで口当たりのよい食感を与える。食品中の水は、タンパク質やデンプンなどの高分子量の成分のミクロ構造と相互に影響し合うことでマクロな物性の挙動を制御する。食品中の水はしばしば「結合水」と「自由水」といった用語で分類されるが、その境界は明確ではなく、実際の状態は多様で連続的である。この水の状態を熱力学的に統一的に扱う概念として導入されたのが図2でも示した水分活性である[5]。しかし、水分活性値が示す分子レベルでの水和構造やその運動性、他の食品

成分との相互作用については不明な点が多い。このような中、図3に示すような同位体コントラスト法を活用した中性子準弾性散乱により、水分活性と水の拡散運動との相関関係が示され[6]、水の水素結合ネットワークや分子運動性が、水分活性が意味する水分子の状態を解明する手掛かりになることが示されている。タンパク質の水和水の対する塩添加の効果を調べた結果も、水分量よりも水分活性の方が水の分子運動性との相関することが確認されている[7]。このように、中性子準弾性散乱は水素の大きな非干渉散乱面積を利用して水分子の並進・回転運動を高感度に検出できるため、食品中での水の拘束・緩和の度合いを定量化でき、食品中の水の状態を分析する有効な手法となっている[8]。

食品中の水の状態は氷結・乾燥といった加工条件とも密接に関係する。例えば食品の冷凍では、糖類が氷核形成を抑制し微細な氷結晶構造を形成することが知られているが、動的核スピン偏極を活用したスピニコントラスト中性子小角散乱では、急速凍結した濃厚糖溶液中に厚さ2-3 nmのナノ氷板が形成することが示され、糖分子が特定の結晶面の成長を阻害する分子メカニズムが明らかとなっている[9, 10]。このような氷の結晶成長メカニズムは、冷凍食品の凍結・解凍操作を最適化させる重要な手がかりになると期待される。また、水分活性値が食品の腐敗・安全性の指標になっている点のみならず、食感やガラス転移の発現を通じて食品物性そのものを支配する点も重要である。水分活性とガラス転移の密接な関係性は、食品中での水分子の拘束状態が「もっちり感・ぱりっと感」といった食感を生み出す要因となっていると議論されている[11]。食品のミクロ構造変化に伴う食品と水の界面の相互作用の変化や、食品の水分状態とマクロ物性の変化の因果関係についての解析が今後一層重要となると考えられる。

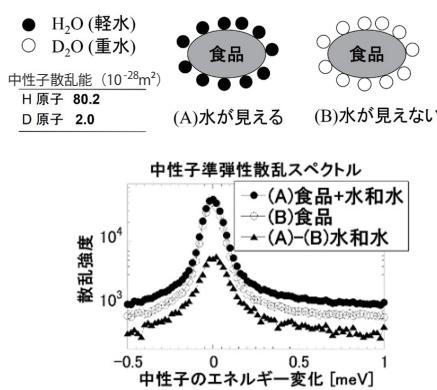


図3. 同位体コントラストによる食品と水和水の中性子準弾性散乱スペクトルの分離方法

3. 非晶質およびガラス状態

食品における非晶質（アモルファス）状態とガラス状態は、食品物性を議論するうえで不可欠な概念である[12]。多くの食品素材（糖類、デンプン、タンパク質など）、乾燥食品、さらには微生物でもガラス転移温度を境として、分子運動性が劇的に変化する。低水分活性のガラス状態ではミクロブラウン運動が凍結され、流動性や反応性が低下するため、食品の硬さ、脆さ、粘弹性、さらには化学劣化・微生物活動などの保存性が左右される（図2）。特に水は強力な可塑剤であり、非晶質食品のガラス転移温度を大きく低下させる。前節で述べたように、水和構造や水分活性は食品物性と密接に関係するが、その根底には分子運動性と運動するガラス転移があると言える。Kawai, Sogabeらによる細菌-溶質系の研究では、水分活性の低下に伴い細菌自身がガラス化し、機械的緩和や中性子散乱に現れる動力学転移が抑制されることが示された[13, 14]。この結果は、微生物不活性の背景にガラス転移や分子運動性が関与することを示唆し、食品保存におけるガラス物性の実用的重要性を明確にしている。

デンプンの老化においても、結晶化と並んでアモルファス領域の分子運動性が重要な役割を担う。中性子準弾性散乱による解析では、加熱糊化によりデンプンの分子運動性が大きくなり、その後の老化中に再結晶化が進行するにつれて分子運動が空間的に強く制限されることが示された[15]。EISF (Elastic Incoherent Structure Factor) の増加は、非晶質領域に対する結晶領域の比率の増加を反映し、X線回折で観察される結晶化度の変化と対応する。この解析では非晶質領域の運動性の定量化が可能になり、従来は状態の違いを区別ができた糊化状態にも多様な状態が存在することが分かってきている[16]。

このように、非晶質構造における水和、ガラス転移、分子運動性の程度は、食品の食感（硬さ、ねばり、脆さ）、経時変化（老化、吸湿、離水）、安定性（微生物活性、化学反応性）を支配する。とりわけガラス転移は、温度・水分をパラメーターとしたフードプロセス設計や保存条件設定に利用できる物理指標であり、食品物性の統一的理解を可能にする基盤概念である。また、牛乳タンパク質であるカゼインなどの変性タンパク質のように、不定形な構造を持つ天然高分子に対して構造とダイナミクスの両面から調べることも、液体中に分散した食品の安定性や機能性の理解に重要である[17]。

4. 同時測定

食品材料は、原子配列の秩序構造（結晶性）や分子のナノ構造からマクロ構造までが階層的に連結した複雑系であり、デンプンやタンパク質のような天然高分子の変性・再構造化などの非平衡過程では、異なる空間スケールの構造変化が同時並行で進行することが多い。しかし、個別の構造解析手法を組み合わせる方法では、構造変化の時間的順序や因果関係を正確に対応づけることが難しい場合がある。こうした課題を解決する手法として有効なのが同時測定である。DSC（示差走査熱量計）やレオロジー測定などと中性子小角散乱と同期させる測定系のほか^[18]、最近、金子が開発した中性子小角散乱とFTIR-ATR（フーリエ変換赤外分光法-全反射測定法）との同時測定システムは（図4）^[19]、食品の階層構造変化を直接的に結びつける新たなアプローチとして有効である。本システムでは、同一サンプルに中性子と赤外光を同軸照射するATRセルを用いることで、デンプンの老化を時間分解で計測することに成功した^[20]。小角散乱ではラメラ構造の周期性に由来するピークが経時的に増大し、ナノスケールの規則構造の再形成が進行する様子が捉えられた。さらにFTIRによる短距離秩序を示す吸収ピークの追跡により、アミロペクチン側鎖の二重らせんの再形成がナノ構造の再形成に先行することが示された。さらに、FTIRで得られる水のスペクトルから、「水の離脱 → 短距離秩序の形成 → ラメラ構造の発達」という3段階の順序で構造変化が生じることが分かり（図5）、老化プロセスにおいて「二重らせんは早期に再生し、配向やラメラ構造の秩序化は後から追隨する」という、従来の個別測定では明瞭に捉えられなかつた重要な知見を得ることができている。このように、同時測定は非平衡状態にある食品の状態変化を正確に解析することを可能にし、階層構造変化の詳細を定量的に知ることができると強力な手段である。

食品科学の実験では、データの再現性が取りやすいモデル系に比べ、実際の食品では、測定試料毎の個性がある程度存在するため、各測定の測定結果の相関を取りにくい場合がある。例えば、加熱による経時変化では実験毎の試料のちょっとした加熱ムラなどがデータの相関を取る際に、やっかいな問題となることがある。これは多くの食品は多成分系でその構造は複雑であり、また不安定な非平衡状態にあることに由来する。また、共同利用施設で行う中性子散乱実験は、他の測定データとの相関を確認するためだけに何度も実験して再現性を確認することは難しい。同一試料で測定することができればこのような問題は回避できる。

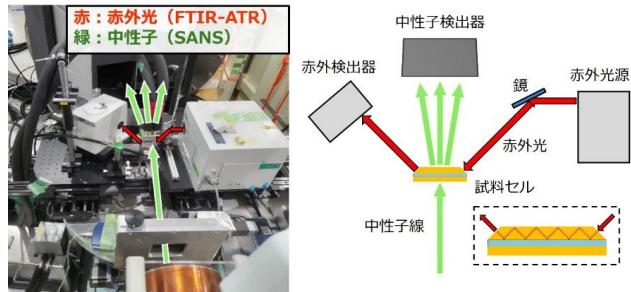


図4. 赤外分光と中性子小角散乱の同時測定系

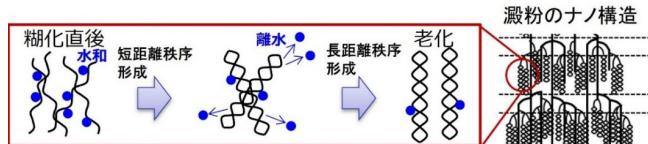


図5. 赤外分光と中性子小角散乱の同時測定系

5. 計算科学

食品分子の構造変化の過程を原子レベルで追跡できる手段として、分子動力学シミュレーションを中心とする計算科学が食品物性研究に大きく寄与しつつある^[21]。例えば、タンパク質の水和構造について水和水ネットワークを全原子分子動力学シミュレーションで解析し、水分量の増加に応じて水和水が疎水表面にも均一に広がること、さらにタンパク質の水和水がバルク水に近い四面体構造を保つことを明らかにした^[22]。これは、食品タンパク質の安定性やガラス転移、酵素活性に関わる鍵となる知見である。一方、多糖であるデンプンに関しては、分子動力学シミュレーションが微細構造モデルの再定義の必要性を指摘している^[23]。ここでは、アミロースやアミロペクチン鎖のコンフォメーション、水素結合の寄与、さらにはラメラ構造や成長輪といったメソスケール構造の形成に至るまで、計算科学は従来のモデルを刷新し得る精度で分子挙動を可視化している。分子動力学シミュレーションで得られる原子分解能の食品分子の構造動態は、構造物性の理論的取り扱いを可能にすると期待できる。

近年は計算と実験の統合が進み、材料科学や生命科学の分野では、分子動力学シミュレーションで得られる自己相関関数や拡散係数などの動的特性を中性子散乱や核磁気共鳴（NMR）、FTIRと直接比較する研究が増えている。同様の流れが食品科学においてもここ数年で増えつつある。このような研究のトレンドは、食品分子の「ゆらぎ」が巨視的物性へどのように結びつくかを定量的に記述していく大きな後押しになると期待できる。特に中性子散乱関数は、分子動力学シミュレーションで得られる時々刻々と変化する原子座標と直接的な関係にある^[8]。これは例えば禁制則が存在

する光を用いた分光法に比べ大きなアドバンテージである。計算科学は単に分子モデルを補完するのではなく、食品物性の基盤となる分子機構を明らかにし、次章で述べるようなフードプロセス（加熱、乾燥、押出など）が構造に与える影響を理解するための理論的支柱として機能することも夢ではなくなってくるであろう。

6. 加工プロセスにおける構造変化

近年、最先端技術を活用するフードテックが急速に進展している。多様化する生活様式に対応するため、食品素材の加工・流通技術が発達するほか、特に環境問題とも関連して代替食品が注目されている。その中でも植物性タンパク質を素材にした代替肉の研究は比較的歴史が長い。代替肉は、一般にタンパク質粉末を適切な水分量で混合し、エクストルーダーで加熱・せん断・冷却することで、肉様の纖維構造を形成することで加工される。しかし、このプロセスで「どの階層（分子・ナノ・ミクロ）で何が起きているのか」という分子メカニズムは長く不明であり、経験的なトライアンドエラーによりその技術が改良されてきた。

最近、エクストルーダーを中性子小角散乱の試料位置に組み込んだ装置を用いた *in situ* 観察により、その分子メカニズムの理解が大きく進んだ [24]。この研究では冷却過程のナノ構造を解析し、従来推定されてきた「タンパク質鎖の分子レベルでの伸長・配向が纖維生成を導く」という仮説が否定された。冷却過程において約 40 nm のタンパク質ナノ凝集体（直径約 9 nm の球状タンパク質が密集した構造）が存在することを示し、分子鎖の配向散乱は見られなかった。さらに、冷却中に固化が進んでもナノ構造はほとんど変化しなかった。これらは、押出時の「纖維化」が分子レベルではなく、ナノ粒子の連結・流動場での破断・急冷固化といったメゾスケールの現象により生じることを示唆する。さらに、上流の加熱・せん断プロセスから冷却プロセスに至るエクストルーダーによる処理過程での分子～ナノレベルの変化についての詳細な解析が FTIR によって行われた（図6）[25]。加熱すると α -ヘリックスや分子内 β -シートが崩壊し、ランダム構造を経て分子間 β -シートが形成され不可逆的凝集が進む。冷却では β -シートがさらに秩序化し、一部ランダム鎖が非天然型 β 構造へ折りたたまれることが分かった。加えてせん断を与えると分子間 β -シートの増加が加速することが示された。この β -シートに富むタンパク質ネットワークが、押出物の粘弾性や破断性を決めていると推定されている。こ

のように食品加工プロセスのメカニズムを分子レベル理解するには、分子構造変化（FTIR、DSC）、ナノ構造（中性子小角散乱）、マクロ物性（レオロジー、せん断）を統合的に扱う重要性を示しており、同時測定系はここでも重要なツールになると期待できる。

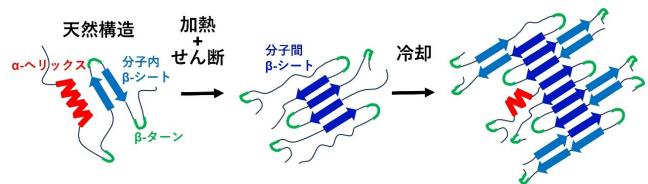


図6. 加熱・冷却とせん断によるタンパク質の構造変化

7. 今後の展望

中性子散乱は、食品の構造科学において他の手法では得られない独自の視点を提供する [26]。水素に対して極めて高い感度を持ち、高い透過性を備え、コントラスト変調が可能であるという中性子線の特徴は、食品のような複雑で多成分のソフトマターにおいて特に大きな強みとなる。近年の研究は、食品中の「水」「非晶質」「ダイナミクス」「階層構造」「加工プロセス」などの理解に中性子が本質的に寄与することを示しており、食品分子の研究を“経験的技術”から“分子構造に基づく設計科学”へと変革する鍵を握るであろう。一方で、中性子だけでは複雑な構造を持つ食品分子の全貌を解明するには限界がある。様々な分析手法と組み合わせデータの相関を取りながら解析していく相関構造解析が必要になるだろう。Structure-Based Food Design (SBFD) といった構造ベースに食品の物性や機能性をデザインすることを目指す構造食品科学においては、「解く構造」から「使う構造」へ構造情報を見事に昇華させていくことが求められる。

参考文献

- [1] Y. Cao et al., *Nature Food*, 1, 106 (2020).
- [2] J. Ubbink et al., *Trends Food Sci. Technol.*, 17, 244 (2006).
- [3] J. Ubbink et al., *Soft Matter*, 4, 1569 (2008).
- [4] E. Linden, et al., *Food Biophys.*, 3, 246 (2008).
- [5] T. P. Labuza et al., *J. Food Sci.*, 37, 154 (1972).
- [6] H. Nakagawa et al., *Front in Chem.*, 7, 731 (2019).
- [7] H. Nakagawa et al., *Macromol. Symp.*, 408, 2200071 (2023).
- [8] H. Nakagawa et al., *Life*, 13, 318 (2023).

- [9] T. Kumada et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, **14**, 7638 (2023).
- [10] 熊田高之、*四季*、**63**, 2 (2024).
- [11] 中川洋、*明日の食品産業*、**448**, 23 (2018).
- [12] Y. H. Roos, *Phase Transition in Foods*, Academic Press, (1995).
- [13] K. Kawai et al., *J. Food Eng.*, **375**, 112066 (2024).
- [14] T. Sogabe et al., *Biophys. J.*, **121**, 3874 (2022).
- [15] Y. Hirata et al., *Food Hydrocoll.*, **141**, 108728 (2023).
- [16] Y. Hirata et al., *Int. J. Biol. Macromol.*, **306**, 141668 (2025).
- [17] H. Nakagawa et al., *Biophys. J.*, **120**, 5408 (2021).
- [18] S. A. Pullen et al., *Meas. Sci. Technol.*, **25**, 055606 (2014).
- [19] F. Kaneko et al., *J. Appl. Cryst.*, **56**, 1522 (2023).
- [20] Y. Hirata et al., *J. Appl. Glycosci.*, **72**, 7201102 (2025).
- [21] Y. Wang et al., *Curr. Res. Food Sci.*, **5**, 1873 (2022).
- [22] H. Nakagawa et al., *Front in Chem.*, **9**, 738077 (2021).
- [23] C. Zhiguang et al., *npj Sci. Food*, **9**, 50 (2025).
- [24] T. Guan et al., *Food Hydrocoll.*, **155**, 110215 (2024).
- [25] H. Nakagawa et al., *Food Hydrocoll.*, **168**, 111453 (2025).
- [26] 中川洋 et al., *波紋・世界結晶年記念特集号*、**7** (2014).

第1回MLFロードマップワークショップ

2025年8月26日(火)、秋葉原UDXギャラリーにて「第1回 MLFロードマップワークショップ」が開催されました。本ワークショップは、中性子・ミュオン科学の発展を支えるMLFの将来構想について、施設側とユーザーコミュニティが継続的に意見交換を行う場として企画されたもので、今後2年間にわたり4回程度のシリーズとして実施される予定です。

冒頭では、MLFの長期計画や今後の方向性についての説明があり、続いて第2ターゲットステーション(TS2)の設計性能やビーム特性、さらにTS2に組み込まれる線源コンポーネントを用いた装置シミュレーションの紹介が行われました。その後の講演では、超高圧力下での含水素物質の構造研究、強磁場環境を利用した物質科学研究、バイオ分野における中性子小角

散乱(SANS)・中性子スピニエコー(NSE)装置や磁性・強相関分野における回折・分光装置の可能性、ミュオンを用いた反応科学や分子科学、さらには基礎物理・原子核科学など、多彩な分野から、TS2がもたらす研究の広がりが示されました。また、後半のパネル討論では、学術界・産業界・施設など多様な立場の代表者が登壇し、MLFが次世代の研究インフラとして果たすべき役割や、TS2を見据えたコミュニティの連携のあり方などについて、率直かつ活発な意見交換が行われました。参加者数は204名でした。

次回は、2025年度量子ビームサイエンスフェスタのサテライトイベントとして、2026年3月14日(土)に水戸市民会館で開催される予定です。

研究会・講習会開催

◆CBⅠ研究機構 量子構造生命科学研究所 中性子産業利用推進協議会生物・生体材料 研究会 合同シンポジウム「New Structure Based Drug DiscoveryⅠ」

これから「Structure Based Drug Discovery(SBDD)」は動的平衡構造のうち、生体内で実際に存

在する構造に基づくデザインが何より大切です。それらを考える機会として本シンポジウムが企画されました。量研機構の平野優様から「タンパク質のX線および中性子構造解析-SBDDへの貢献目指して-」、国立医薬品食品衛生研究所横尾英知様から「PROTAC創薬におけるSBDD」等4件の講演がありました。(10月14日Zoomによるオンライン開催 参加者数136名)

◆2025年度 初級者向けZ-Code講習会

本年は東京で開催され、中性子回折の基礎講義に加えて、Z-Rietveld 等の解析ソフトウェアの使い方について講義と実習がありました。Z-Rietveld を用いたマキシマムエントロピー法による解析や磁気構造解析についても紹介されました。講習会後に実施したアンケートでは、「オンサイトでなければ理解しにくい細

かな点までよく理解できた」という回答が寄せられました。(10月15日～16日、航空会館において開催 参加者数46名)

新会員企業の紹介

株式会社ダイセルが11月6日に入会しました。
会員数は58（54社4研究機関）になりました。

施設からのお知らせ

◆ J-PARC MLF

2026A期課題(短期・1年)公募の申請数は323件(中性子281件、ミュオン42件。産業利用促進課題は除く)でした。このうち企業からの申請は13件(すべて中性子)でした。

課題審査結果は2026年3月頃通知されます。詳しくはMLF ホームページをご参照ください。

<https://mlfinfo.jp/ja/user/proposals/>

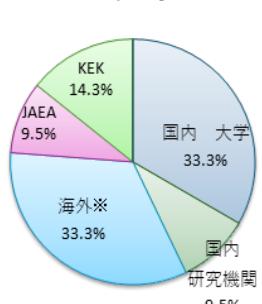
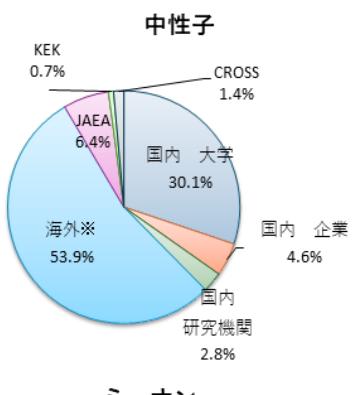


図 J-PARC MLF 2026A期の課題(短期・1年)
申請状況(産業利用優先課題は除く
※大学、研究機関を含む

◆ JRR-3

令和7年度の供用運転は、11月14日(金)に無事終了しました。

11月の定期課題募集では164件の応募があり、課題審査を実施しているところです。

次年度の運転計画については、決まり次第JRR-3のホームページに掲載します。

<https://jrr3.jaea.go.jp/5/51.htm>

◆茨城県ビームライン

産業利用課題を常時公募しております。

希望する実験時期の公募スケジュールをご確認いただき(希望する実験時期により締め切りが異なります)、募集要項をお読みの上、ご応募ください。

直近は令和7年度第7回募集(3月に実験実施予定)で締切は令和8年1月15日(木)12:00です。

詳細は茨城県ビームラインのウェブサイト

https://www.pref.ibaraki.jp/sangyo/kagaku/tyusei/procedure_industrial_use.html
をご覧ください。

今後の行事予定

| 日時 | 会議名 | 場所 | その他 |
|----------------------|--|--|---|
| 2026年 1月8日～ 9日 | 第32回 CROSSroads Workshop 高圧中性子実験に向けた装置開発及びサイエンスへの展開 | AYA'S LABORATORY量子ビーム研究センター (AQBRC、東海村) | https://neutron.cross.or.jp/ja/events/20260108-09 |
| 1月20日 | 令和7年度 第2回中性子構造生物学研究会 「創薬と量子ビーム(X線、中性子、電子線)」 | Zoomによるオンライン開催 | https://j-neutron.com/posts/activity69.html |
| 1月23日 | 2025年度 磁性材料研究会 | 東北大學 片平北門会館 2階エスパス(仙台) 対面とZoomによるハイブリッド開催 | https://www.j-neutron.com/posts/activity71.html |
| 1月29日 | 電池材料研究会 | 航空会館B101号室(新橋) 現地及びZoomによるハイブリッド開催 | https://www.j-neutron.com/posts/activity72.html |
| 2月5日 | ものづくり基盤研究会 | オンライン開催 | https://j-neutron.com/posts/activity73.html |
| 2月20日 | 研究開発委員会 | 対面とZoomによるハイブリッド開催 | |
| 3月10日～ 13日 | HIRES 2026 | ILL (Grenoble,France) | https://workshops.ill.fr/event/533/ |
| 3月11日～ 13日 | 2025年度 量子ビームサイエンスフェスタ 第17回 MLFシンポジウム, 第43回 PFシンポジウム | 水戸市民会館 | https://www2.kek.jp/imss/qbsf/2025/ |
| 3月13日 | 液体・非晶質研究会 | 水戸市民会館 | |
| 4月13日～ 17日 | ICANS25 | Clarion Hotel Malmö Live – Malmö (Sweden) | https://indico.ess.eu/event/3811/overview |
| 4月26日～ 5月1日 | Neutron Scattering Gordon Research Conference Neutrons as a Probe to Drive Our High-Technology Society | Avinguda de l'Hotel Castelldefels, Barcelona (Spain) | |
| 7月12日～ 16日 | 2026 American Conference on Neutron Scattering (ACNS) | Renaissance Center (Detroit,USA) | |

◆リンクのご案内

中性子・ミュオン利用ポータルサイト J-JOIN : <https://jrr3ring.jaea.go.jp/jjoin/>
J-PARC : <https://j-parc.jp/c/index.html>
J-PARAC MLF (Meet @ MLF) : <https://mlfinfo.jp/ja/>
J-PARAC MLF (Meet @ MLF) パンフレット : <https://mlfinfo.jp/ja/reports/published.html>
J-PARC センターユーザーズオフィス : <https://is.j-parc.jp/uo/ja/index.html>
茨城県中性子ビームライン : <https://www.pref.ibaraki.jp/sangyo/kagaku/tyusei/bl-top.html>
J-PARC MLF成果検索 : <https://mlfinfo.jp/ja/publications.html>

JRR-3 : <https://jrr3.jaea.go.jp/>
JRR-3 Twitter : https://twitter.com/JAEA_JRR3
JRR-3 ユーザースオフィス : <https://jrr3uo.jaea.go.jp/>
(一財)総合科学研究機構(CROSS) 中性子科学センター : <https://neutron.cross.or.jp/ja/>
J-PARC MLF利用者懇談会 : <https://is.j-parc.jp/MLFuser/>
いばらき量子線利活用協議会 : <https://www.ibaraki-quantum.com/>

日本中性子学会 : <https://www.jsns.net/>
日本中性子学会「国内の中性子実験施設」 : <https://www.jsns.net/facilities/>
日本中間子学会 : <http://jmeson.org/>

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)、佐野 亜沙美(J-PARC)、水沢 多鶴子(CROSS)、
坂本 直紀(旭化成)、佐々木 宏和(古河電工)
事務局 小室 又洋、綿引 美知枝(中性子産業利用推進協議会)

※「四季」のバックナンバーは下記のサイトでご覧いただくことができます : <https://j-neutron.com/siki.html>

中性子産業利用推進協議会(IUSNA) 季報「四季」【25年・冬】Vol.69

発行日 2025年12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 D201
TEL:029-352-3934 FAX:029-352-3935 E-mail:info@j-neutron.com
<https://j-neutron.com/>(2022年2月1日よりURLを変更しました)

本誌掲載物の著作権は著者が保有します。本誌の複写、転載等に際しては著者の許可が必要です。