

# JRR-3 将来計画検討委員会

## 分野 II 報告書

— 小角・反射率・高分解能装置がカバーする分野 —

## 目次

1. はじめに (杉山)	2
2. サイエンスの現状と展望	3
2.1. ソフトマターサイエンス (竹中・柴山)	3
2.2. ライフサイエンス (杉山・中川)	8
2.3. ガラス・マテリアルサイエンス (山室)	14
3. これまでの施設の利用	16
3.1. JRR-3 (武田)	16
3.2. 大学共同利用 (柴山)	19
4. 各分光器の現状と今後の整備・開発とサイエンスの展開	20
4.1. SANS-U (柴山)	20
4.2. SANS-J (元川)	24
4.3. C3-1-2 分光器群 (日野)	27
4.4. SUIREN (武田)	30
4.5. BIX (玉田)	38
4.6. AGNESS (山室)	42
4.7. iNSE (遠藤)	45
5. まとめ (杉山)	47
5.1. 現状分析	47
5.2. 今後の方向性	47
5.3. その他	49
6. 終わりに (杉山)	50
(執筆担当者：敬称略)	
付録：	51
A. 委員名簿	
B. JRR-3 炉室・ガイドホールの装置配置図	

## 1. はじめに

2020年度の再開が予告されJRR-3は10年近くに及んだ眠りから再び目覚めようとしている。良く知られているようにJRR-3に設置された分光器群は1990年の臨界以来長らく日本の中性子科学を牽引してきており、再開後も各分光器は同様の役割を担う事への期待が高まっている。しかしながら、10年という停止期間は学問の進歩を考えると長い期間であり、各分光器が対応する学問分野の状況も変化している。この点を考慮して、今後の各分光器の在り方について、まず固体物理分野に関連する分光器群の現状と将来についての検討が行われた。一方、手法科学である中性子科学に関連する学問分野は広く固体物理のみならず、ソフトマター科学・生命科学・不規則系科学・固体材料科学、更に材料開発・産業利用等の応用を主とする研究から基礎物理研究にまで及ぶ。そこで、JRR-3分光器の再配置・最適化とそのために必要な目指すべきサイエンス（もしくは今後の中性子科学の潮流）の分析を目的として本JRR-3将来計画委員会（小角・反射率・高分解能装置がカバーする分野）が日本原子力研究開発機構と東京大学が合同で所掌するJRR-3中性子ビーム利用推進委員会の下部ワーキンググループとして設置された。本委員会は関連する各分野と各装置の専門家から構成され（付録A委員名簿参照）、2回にわたり（第1回：2018年9月25日、第2回：2018年10月31日）、施設・大学共同利用、関連する学問分野（ソフトマターサイエンス、ライフサイエンス、ガラス・マテリアルサイエンス）の現状と今後の動向分析を行った。更にそれを基に対応する分光器、小角散乱装置（SANS-U、SANS-J、MINE1（小角散乱装置設置計画有））、反射率計（SUIREN、MINE2）、準弾性散乱装置（AGNES、iNSE）、単結晶回折装置（BIX）のこれまで成果と現状、将来について（特に再開後の各分光器の在り方について）検討を行った。

本報告書はこれらの議論をまとめたものである。（各項の執筆担当者は目次を参照されたい）

## 2. サイエンスの現状と展望

### 2.1. ソフトマターサイエンスの現状と展望

#### 2.1.1. ソフトマターサイエンスの研究動向

ソフトマターという用語は比較的新しく、1991年の de Gennes のノーベル物理学賞受賞講演以来との説もあるので、これをキーワードとして検索することは必ずしも適当ではないかもしれない。しかし、それまで高分子や液晶、コロイドなどと分類されてきた分野が、これ以降、「ソフトマター」という一大研究分野として、主に物理学の分野で評価され、発展してきた事実を踏まえ、この項においては、現在の「ソフトマター」における研究の動向の分析をデータベースを用いた論文数解析によって行った。以下に、その結果を示し、今後の動向を占うこととする。

##### 2.1.1.1. 大型科研費採択課題のキーワード分析

まず、2015年~2017年における大型科研費採択課題においてソフトマターをキーワードとした課題の数を調べた。その結果、ソフトマターをキーワードに含む大型科研費採択課題は、新学術領域研究7件、基盤S1件、基盤A2件であった。興味深いことに、学術の新領域を開拓するのが主眼とされている新学術領域研究において7件がソフトマターをキーワードにしており、ソフトマターの研究が学問の新しい潮流にとって重要な役割を果たしていることがわかる。

##### 2.1.1.2. Web of Science を用いた分野・キーワード別論文数分析

まず、ソフトマターの研究の隆盛について、ソフトマターの分野の過去20年間の論文数の推移を調べた結果を図1に示す。図2.1.1より論文数はここ20年間にわたり順調に上昇しており、ソフトマターの分野が成長している分野であることがわかる。

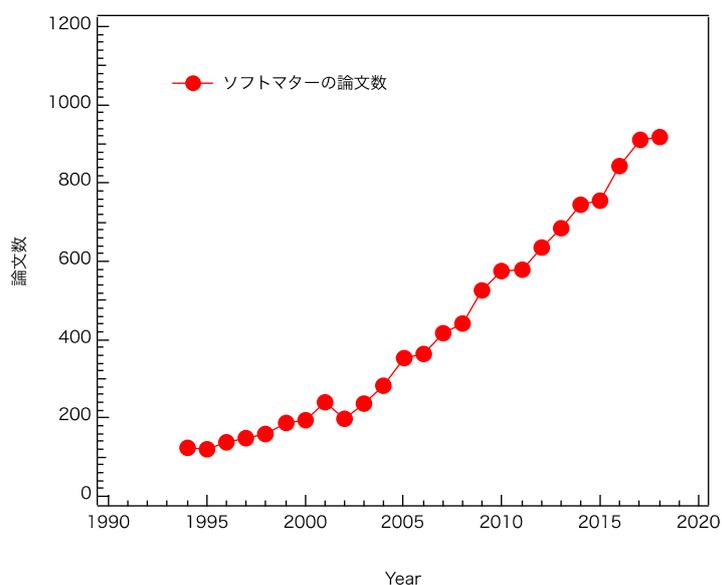


図 2.1.1. “Soft matter”をキーワードとする論文数推移。Web of Science で検索。

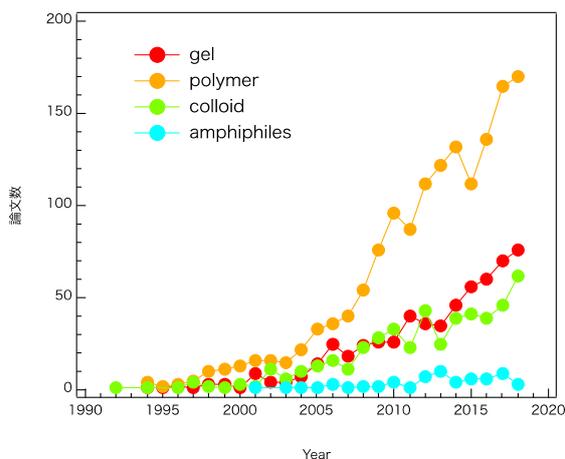


図 2.1.2. “Soft matter”分野におけるキーワード別の論文数推移。Web of Science で検索。

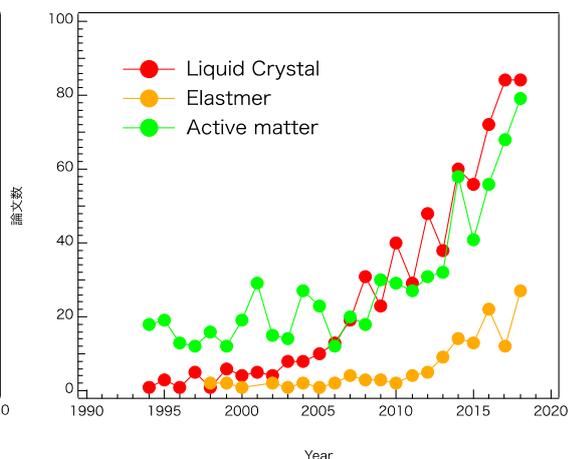


図 2.1.3. “Soft matter”分野におけるキーワード別の論文数推移。Web of Science で検索。

そこで、より詳細にソフトマターの分野における研究動向を解析するために、以下でキーワード別に論文数の年次推移を調べた。キーワードとしてはソフトマターの主要な分野である、gel, polymer, colloid, amphiphiles, liquid crystal, rubber, active matter とし、ソフトマターのカテゴリでの論文数の推移を調べた。図 2.1.2 に gel, polymer, colloid, amphiphiles での論文数の年次推移を示す。amphiphiles 以外では順調な増加が観測されている。特に polymer 分野での増加が顕著である。

図 2.1.3 に liquid crystal, elastomer, active matter の結果を示す。どの分野も比較的增加傾向を示している。分野別の論文推移数を概観すると、どの分野もほぼ順調に増加しており、特に 2015 年以降の増加傾向はかなり顕著である。これらのことより、ソフトマター分野はここ数年でますます注目される分野となってきたことが見出される。

### 2.1.1.3. ソフトマターにおける中性子科学の状況

今後の JRR-3 におけるソフトマターの研究を考えるために、ソフトマターにおける中性子科学の状況の分析を行った。図 2.1.4 に中性子科学関連のソフトマターの論文数推移を示す。

中性子散乱の分野におけるソフトマターの論文数は、2010 年以降で飽和している様に見られる。さらに詳細に調べるために分野ごとの傾向をソフトマターの “分野” AND “neutron scattering” で検索したものを図 2.1.5 に示す。“分

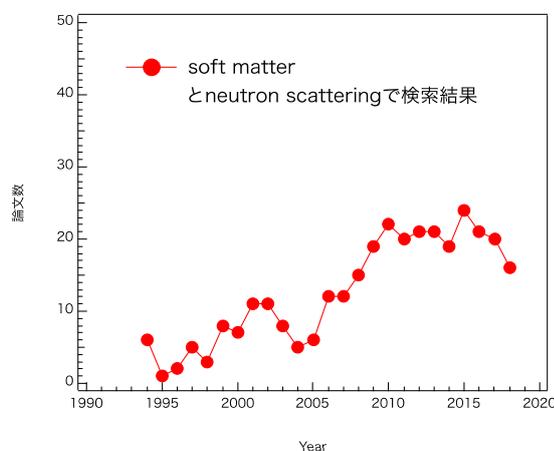


図 2.1.4. “Soft matter”AND“neutron Scattering”で調べた論文数推移。Web of Science で検索。

野”と“neutron scattering”とでの検索を行うと、“polymer”の分野は漸増しているのに対して、他の分野はほぼ一定であるというのが見て取れる。なお、ここで“Soft matter” AND “neutron scattering”で検索したものに比べて“分野” AND “neutron scattering”で検索したものの数が多いことに注目していただきたい。これは、例えば、“polymer”の分野であれば、高分子の合成のグループがneutron scatteringによって構造のキャラクタリゼーションなどをした場合には、soft matter をキーワードに入れないなどが考えられ、中性子散乱が物性のみならず合成などの広い範囲におけるツールとして有効に使われていることを示しており、高分子科学にとって、X線散乱・回折やNMR、電子顕微鏡と同じく、確立した一つの構造やダイナミクス研究手段となっていることを示している。

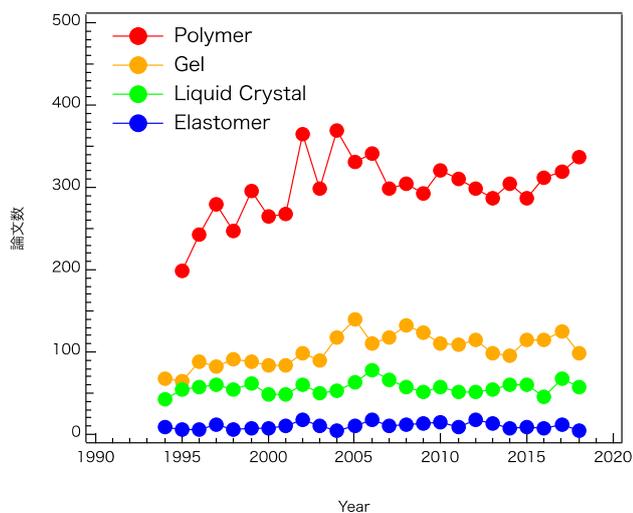


図 2.1.5. “neutron scattering” AND “分野”で調べた論文数推移。Web of Science で検索。

#### 2.1.1.4. 高分子分野の現状

前節では、「ソフトマター」をキーワードとして検索した研究動向について報告した。冒頭で述べたように、「ソフトマター」はいくつかの分野を統合した比較的新しい学術用語であるため、かならずしも「従来からある分野（例えば高分子）」の研究動向を反映しているとはいえない。図 2.1.5 はそれを端的に示している。

そこで、視点を変えて「高分子(polymer)」で検索した結果を紹介する。図 2.1.6 は 1990 年から 2018 年の“neutron scattering” AND “polymer”の検索結果における国別の論文数を示す。米国、フランス、ドイツ、イギリスに次いで日本は 5 位である。中国は日本の半分である。日本はこの分野でかなりの重要な貢献をしていると考えられる。

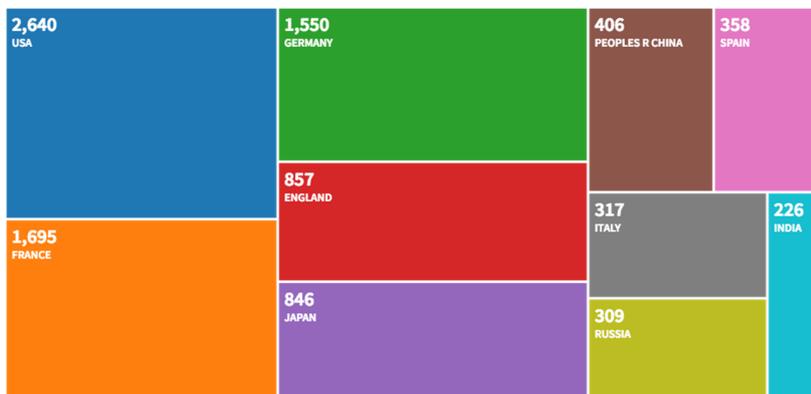


図 2.1.6. 1990 年~2018 年における“neutron scattering” AND “polymer”の検索による国別論文数。

“neutron scattering” AND “polymer”の検索による国別論文数にお

ける年次推移を調べたものを図 2.1.7 に示す。米国は高い水準を維持しているもののフランス、ドイツ、日本、イギリスは 2010 年以降停滞気味である。特に日本は論文数を減らしており、短絡的には結論をつけることができないが、2011 年の東日本大震災による JRR-3 の長期停止が影響しているものと考えられる。注目すべきは中国の論文数の推移であり、2017 年においては日本とほぼ同数の論文数まで上昇している。今後アジア地域における中性子散乱研究において中国の勢いが強くなっていくことはほぼ間違いないと予想される。

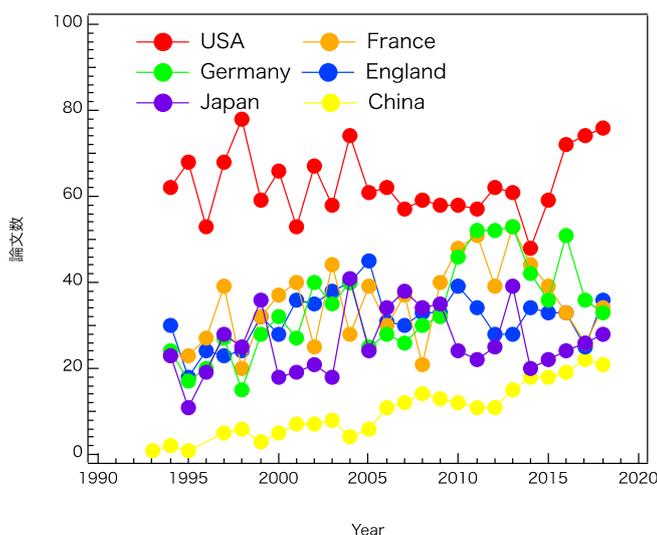


図 2.1.7. 1990 年～2018 年における“neutron scattering” AND “polymer”の検索による国別論文数の年次推移。

### 2.1.1.5. 分析のまとめ

ソフトマターのアクティビティは年々増加しており、特に 2015 年以降の増加は大きい。どの分野も増加の傾向が見られるが、特に“polymer”分野の増加は著しいものがある。中性子散乱の分野におけるソフトマターの論文数は一見、飽和している様に見えるが、“polymer”の様に漸増している分野も見られる。“polymer”の分野を詳細に見ると、日本は 2010 年以降論文を 2011 年の東日本大震災による JRR-3 の長期停止が影響しているものと考えられる。

### 2.1.2. ソフトマターサイエンスの展望

手前味噌ではあるが報告者の一人による最近のレビューで「中性子散乱による高分子研究」(高分子, 2017, 66, 403-405)があるので、それを引用しつつソフトマターサイエンスの展望について述べる。

これまでの中性子散乱研究は、小角中性子散乱 (SANS) が主で、1980 年代から 1990 年代は高分子ブレンドやブロック共重合体の研究が多く、相溶性や相分離の研究、マイクロ相分離構造、秩序-無秩序転移などの研究が多く行われた。1990 年代後半から 2000 年代になると、高分子ゲルの研究が多くなり、ゲルの構造解析、不均一性の研究などが行われるようになった。さらに最近では、高強カゲルの変形挙動の研究などが盛んに行われている。一方で、1990 年代から、中性子反射率 (NR)、中性子スピンエコー (NSE)、非弾性中性子散乱 (INS) なども高分子系に応用されるようになり、薄膜の厚み方向の構造や薄膜のガラス

転移、高分子溶融体や高分子濃厚溶液分子運動やローカルモードなどの研究に利用されてきた。その結果、中性子散乱はバルク状態の構造解析のみならず、表面・界面構造解析、階層構造のダイナミクス、分子運動などの測定手段としてますます不可欠なツールとなってきた。

中性子散乱が高分子研究に使われ始めた頃は中性子散乱の特徴、重水素化ラベルによる特定分子の選択的可視化を活かした研究が主であった。現在もこの事実には変わりはないが、放射光 X 線の圧倒的な強度と高い角度（空間）分解能、高い S/N 比には到底勝ち目がない。さらに、中性子散乱のもう一つの長所である高い物質透過性についても、ラボ X 線散乱において波長の短いモリブデンターゲットを用いることや、放射光施設にて短波長 X 線を用いて実験することにより、O や N、S といった原子を含む化合物を対象とする場合でも X 線散乱に軍配があがるケースが出つつある。

しかし、中性子散乱は以下の理由で、今後ますます重要な研究手段となっていくと期待する。

第一に、**中性子散乱の絶対強度の信頼性**である。X-線散乱に比較して中性子散乱の場合には重水素化によって圧倒的なコントラスト差がつくことにより、 $Q=0$ における絶対散乱強度  $I(0)$ は直接、熱力学量と比較できる量であるため、信頼性の高い分子量決定や相互作用パラメータの評価が可能である。また、多成分系の構造解析には、 $\Delta \rho$ の組み合わせを利用した**コントラスト変調法**により、それぞれの成分を抽出して構造解析ができることである。

第二には、**高い物質透過性**を利用して、**さまざまな実験環境を構築**できることである。具体的には、厚いサファイア窓をもつ高圧セルを用いたサブギガパスカルでの**超高压実験**、レオメーターを装備した**Rheo-SANS 実験**などが挙げられ、すでに多くの成果が出ている。

第三（これは X 線散乱と共通）には、リバースモンテカルロ（RMC）法に代表される**実逆両空間での構造解析**のさらなる進化が期待される。つまり、最近の計算科学を活かし、実空間で散乱系の粗視化モデルを作製し、そのフーリエ変換形と実測散乱関数の比較による構造解析により、より精度の高い構造解析が可能となりつつある。

一方で、ソフトマター分野では、日々、新規物質が合成され開発されており、精密構造解析や物性研究を必要としている。これらの多くは、H/D 置換により、ただちに中性子散乱研究の対象となる。事実、次々と合成グループと中性子散乱グループの共同研究による成果が生まれている。こうした中性子散乱の特徴を活かした新規材料開発をはじめ、熱力学的定量的研究、延伸場や流動場、反応場などでの実時間観察などが益々盛んになると期待される。

## 2.2. ライフサイエンス

近年の生命科学、特に構造生物学におけるブレークスルーは「クライオ電子顕微鏡による生体高分子の構造解析」であることに異論はないであろう。2017年のノーベル化学賞が英 MRC 分子生物学研究所のヘンダーソン (Richard Henderson) 博士, スイス・ローザンヌ大学のデュボシェ (Jacques Dubochet) 博士, 米コロンビア大学のフランク (Joachim Frank) 博士の3氏に「溶液中での生体高分子を高分解能構造測定するための低温電子顕微鏡の開発」により授与された事は記憶に新しい。図 2.2.1 に示すようにクライオ電子顕微鏡による構造解析における分解能は日進月歩であり、これまでの構造解析の主流であった X 線結晶構造解析に一部の結果は肩を並べるレベルに達している。一方で、このような単粒子の静的構造解析の結果に立脚しつつ、より複雑な系・現象の解明により分子レベルから生命現象に迫ろうという流れが加速している。ここで述べている「複雑な系・現象」とは例えば、解離会合する多成分系の織り成す系や多成分からなる複合体、またはマルチドメイン蛋白質の構造変異やそのダイナミクスなどである。このような複雑な系・現象の解析に必要な手法としては、上述のクライオ電子顕微鏡や結晶構造解析だけでなく、核

磁気共鳴(NMR)法、X 線小角散乱(SAXS)法、中性子小角散乱 (SANS) 法、中性子準弾性散乱(QENS)法、中性子スピンエコー (NSE) 法、高速 AFM 法、無変性質量分析 (nMass)法、超遠心分析(AUC)法、基準振動解析や分子動力学などの計算手法が挙げられ、加えて単独ではなくこれらの多くの手法を協奏的に用いることが必須となる (図 2.2.2)。したがって、これからの構造生物学はこの考えを踏襲した「統合構造生物学(Integrative Structural Biology)」が主流となっていくと考えられる。

### Graphical Abstract

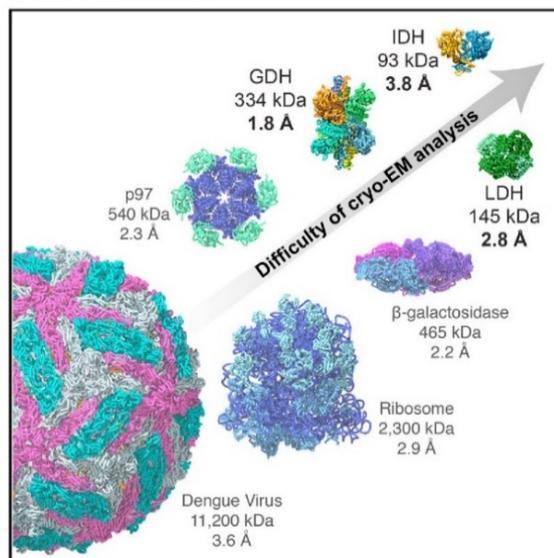


図 2.2.1. クライオ電子顕微鏡の分解能の向上。Merk et al., *Cell*, **165**(2016)1698–1707.

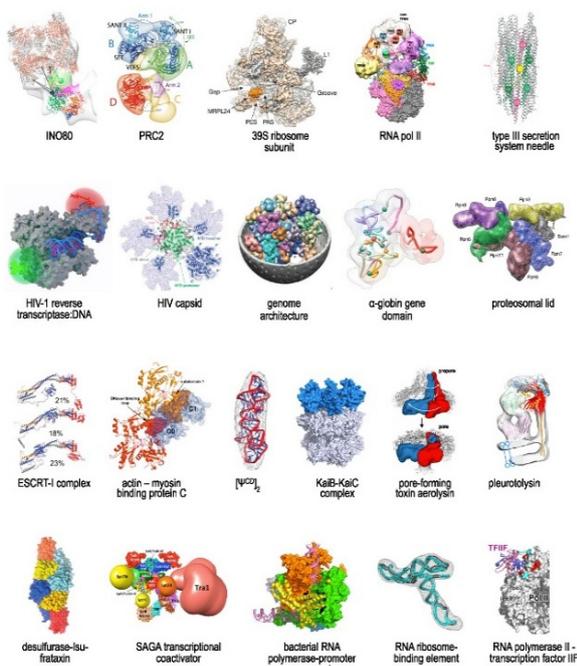


図 2.2.2. 種々の手法の協奏的利用に解かれた構造。A. Sali, et al., *Structure*, **23** (2015) 1156.

このような潮流の中、「中性子」にはどのような手法的な意義があるのだろうか？中性子の生物試料の構造解析のための散乱・回折のプロープとしての特徴は以下の3点が挙げられる。(主としてX線との比較において)

- ① **水素を観測しやすい**: X線は原子中の電子で散乱されるために、電子数が少ない水素はX線では観測が困難である。一方、中性子は主として原子核によって散乱されるために他の原子との比較において水素の散乱能が低いこともなく、測定が容易である。この特徴は結晶構造解析法において有用である。
- ② **水素の同位体効果が大きい**: 軽水素の散乱長は $-3.74\text{fm}$ であるのに対して、重水素の散乱長は $+6.64\text{fm}$ である。したがって、生体高分子に多く含まれる軽水素を重水素に置換することでその分子の散乱長密度を大きく変化させる事が出来る。この特徴は、**溶液散乱法**において特に有用である。
- ③ **プロープとして用いる中性子のエネルギーは低い**: 散乱プロープとして用いる熱・冷中性子のエネルギーは同波長のX線と比して6桁から7桁程度低い。この性質を生かすことにより空間スケールだけでなく、時間スケールの両面において生体高分子のドメインおよびドメイン間の運動を捉える事が可能となる。言い換えると他の手法では測定不可能な $S(q, \omega)$ や $I(q, t)$ を直接測定することが可能である。この特徴を生かした手法が、**中性子準弾性散乱法**であり、更にスピンの制御まで取り入れることでよりエネルギー分解能を高めた手法が**中性子スピンエコー法**である。

このような中性子の他にはない特徴を生かした手法をより一層進展させ、構造生物学における地歩を固めていくことが求められている。上述の点を踏まえ、今後のJRR-3をはじめとする国内中性子散乱分光器を用いた生命科学を発展させるためには、世界の原子炉中性子源に設置された分光器およびそこでのサイエンスのトピックを検討することが重要であると思える。ここではBIXの項において①のトピックが、iNSEの項で③に関する点が触れられるので、中性子小角散乱(SANS: ②)と中性子準弾性散乱(QENS: ③)に注目し、今後重要と思われる具体的な方向性について触れてみたい。(その他のトピックに関しては、筆者らがまとめた資料「Neutron Biology for Next Generation」(<http://www.rr.kyoto-u.ac.jp/PSlab>よりダウンロード可能)に詳しいので、興味がある方は参照されたい。)

軽水素—重水素の散乱能の相違の利用の第一の手法は溶媒コントラスト変調法である。これは、溶媒中の軽水と重水の比率を変えることで、溶媒の散乱長密度を任意に設定し、複合体中の特定ドメインのみを選択的に観測し、複雑な構造を解く手法である。古典的には核酸(DNA, RNA)と蛋白質の散乱長密度の違いを利用し、それぞれの部分構造を解いていくことで、特に、染色体の基本構造であるヌクレオソームの構造解析に適用されてきている。一方、結晶構造解析手法の発展により一時的にこの手法の適用例は減少したが、近年、機能的な構造体は溶液中で確定的な構造を取らず、それに伴い結晶化が困難、または結晶化しても溶液中では構造変調を起こしていることが多いことが判明してきており、溶液中で構造が注目されてきている。加えて、試料調製技術の進歩によりこれまで不可能であった機能性生

## Information contained in SANS data: positions of proteins/RNA within the complex

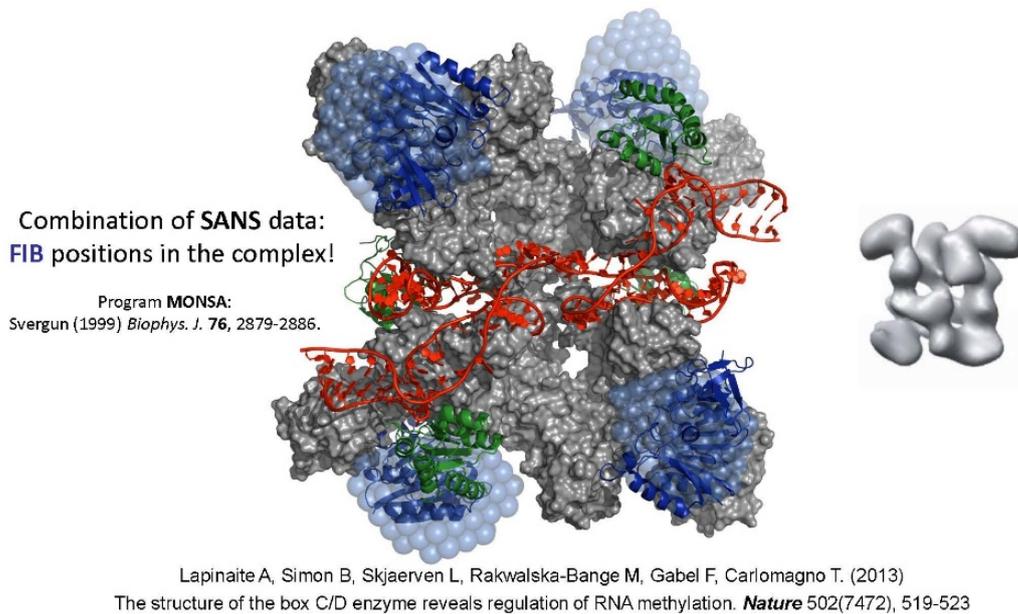


図 2.2.3. sRNP の構造 (RNA : 赤、L7Ae : 緑、Nop5 : 灰色、FIB : 青)。右は EM により示唆された構造。

体高分子複合体も調製が可能となってきた。したがって、このような機能性または複雑複合体の溶液中での構造解析手法として SANS が再び注目を浴びている。例えば、巨大蛋白質-核酸複合体の統合構造解析の例としては図 2.2.3 に示した「rRNA 前駆体をメチル化する box C/D small nucleolar RNA-protein complex (sRNP) の溶液構造解析」が挙げられる。この研究では、NMR、SAXS に加え、SANS による各成分の配置決定が重要な役割を占めている。

溶媒コントラスト変調法に加え、近年重要視されているのは、蛋白質自身の重水素化によ

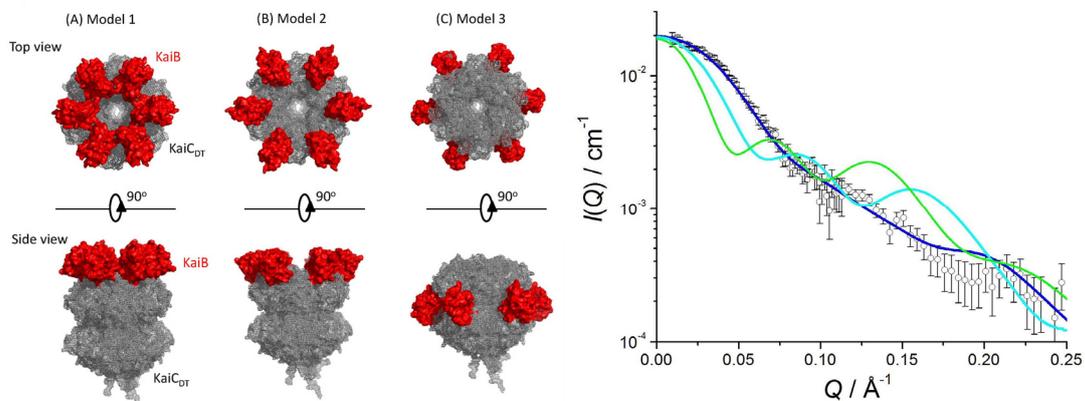
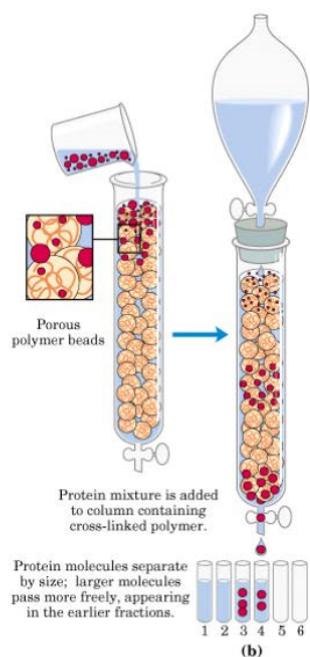


図 2.2.4 : 逆転コントラスト同調法を用いた KaiC-KaiB 複合体の構造解析の例。  
M.Sugiyama, et al., *Sci. Rep.* **6**, 35567.

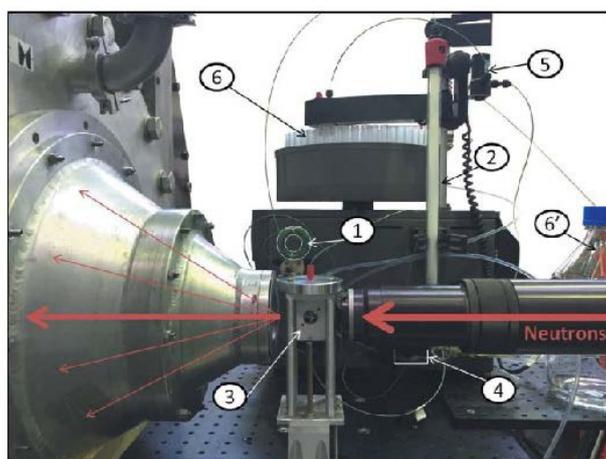
るコントラスト同調法である。これは、40%重水と軽水素化蛋白質の散乱長密度が一致することを利用し、蛋白質複合体中の可視化ドメインを重水素化し、不可視化ドメインを軽水素化体で調製し、上述の40%重水中で観測する手法である。この手法は1980年代後半から行われ、特に30Sリボソームの構造解析は有名な手法である。また、先述のsRNPの構造解析でも蛋白質ドメインの配置決定にも利用されている。更に、近年の蛋白質重水素化技術の進展を利用し、この手法を更に一步進めたのが逆転コントラスト同調法である。この手法では可視化ドメインを軽水素化体、不可視化体を75%重水素化体で調製し、100%重水中で測定する(図2.2.4)。この時、100%重水溶媒は通常のコントラスト同調法で利用する40%重水溶媒に比べ軽水比率が著しく低いので、軽水からの非干渉性散乱がなくバックランドの少ないS/N比の良い測定が可能であり、高強度でない多くのSANS装置でも複合体解析を可能とする。

上述の通り、重水素化を利用したコントラストの制御が今後重要となることは間違いない。一方で複眼的に複数同時測定を可能にする事も今後の装置開発において重要となることが考えられる。例えば、ILLでは蛍光分光とSANSの同時測定手法が開発されており、これを用いて蛋白質のフォールディング機構をSANSの時分割測定と組み合わせた野心的な研究も行われている(Z.Ibrahim, et al., Sci Rep., 7 (2017) 40948)。更に、最も興味深い手法は、図2.2.5に示したSize Exclusion Chromatography-SANS(SEC-SANS)法であろう。生体高分子の溶液散乱における最大の障害は、ターゲット分子以外の凝集体存在である。小角

## Size-exclusion chromatography (SEC) SANS



© University of Arizona



**Figure 1**  
Setup of *in situ* chromatography SANS. The sample is manually injected into the loop (1), then it passes through the size exclusion column (2), the SANS sample cell (3), the UV-visible spectrophotometer (4) and the valve (5), which directs it either to the fraction collector (6) or to the waste container (6').

Jordan, A., Jacques, M., Merrick, C., Devos, J., Forsyth, V.T., Porcar, L. and Martel, A. (2016) SEC-SANS: size exclusion chromatography combined *in situ* with small-angle neutron scattering. *J. Appl. Crystallogr.* **49**(Pt 6), 2015-2020.

図 2.2.5. SEC-SANS システム (D22@ILL)。

散乱では散乱強度はほぼ分子量の 2 乗に比例するため、少量の凝集体の混入は散乱曲線をターゲットの分子からの散乱曲線とは異なるものにしてしまう。特に小角領域で顕著となる間違った慣性半径の値を与えてしまい精密な構造解析において誤った結論を導いてしまう。この問題を解決する目的でシンクロトロン施設の X 線小角散乱装置において導入が進んでいるのが SEC-SAXS 法である。これは、ゲルろ過カラムのからの溶液を直接試料セルに流し込み、凝集が起こる前に目的の分子の構造測定をしてしまうものである。この手法では凝集除去だけでなく、解離会合系の特定構成成分測定も可能である。欠点としては、フロー状態での測定のため高強度ビーム(=シンクロトロン光)を必要とすることである。しかしながら、近年、ゲルろ過装置・流速・セルサイズの最適化によりこの手法が SANS でも可能であることが示され、実際 ILL では共同利用にも供されてきている。今後この画期的手法が上述の装置パラメータの最適化により、多くの SANS 装置でも適用されていくことで、機能発現に関連する溶液中での解離会合系の研究が進展することが期待されている。

一方③に注目すると、QENS は X 線と比較して中性子の特徴が際立つ手法の一つである。生物物理学では、一分子計測などにより蛋白質の揺らぎの重要性が指摘されているが、そのような熱揺らぎをピコ～ナノ秒の時間スケール、およびナノメートルの空間スケールで計測できるのが QENS である。多くの場合、QENS では非干渉性散乱を観測するため、観測している分子の構造や位置情報を直接には含まない。そのため、スペクトルの解釈が難しい場合があるが、そのような場合に、重水素化を活用した特定構造の選択的観測や計算機科学を活用するなどによって、これまでにない新たな情報が得られることが期待できる。また構造情報を含まずにダイナミクスだけが見えることを逆手にとって、蛋白質の構造安定性に対するエントロピーの寄与を定量的に議論できるという活用法もあるため、構造と機能に介在するダイナミクスという観点からの蛋白質科学の基礎・応用研究が期待される。また水分子の非干渉性散乱が非常に大きいことを活用して、生体分子周りの水分子のダイナミクスを調べる事にも適している(図 2.2.6)。生体分子の水和は理論的な研究が進んでいる一方で、実験的研究が遅れているため中性子の利用は有効である。しかし、非干渉性散乱で得られる情報は系全体の平均像としてのスペクトルのみである。構造科学的な視点からのより詳細な解析には、計算機など別の手法を組み合わせることで、データを解釈することも必要とされるが、それができれば QENS は効果的な手法となる。凝集体やガラス化した生体物

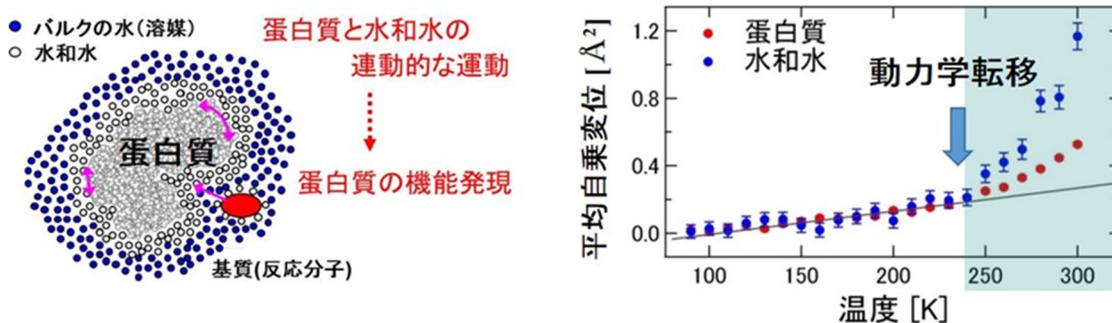


図 2.2.6. 蛋白質の水和とダイナミクス。

質などの立体構造の決定が難しい蛋白質の構造状態を、揺らぎの観点から解析するといった活用法も有効である。非干渉性散乱による THz 周波数領域のダイナミクス計測は、今後ますます重要になってくると考えられる。また、分子クラウディング効果の観点からの研究展開も可能性がある。溶液蛋白質の QENS では分子拡散も比較的良好に見えるため、他の分子と相互作用することで変化する拡散現象の解析にも有効である。QENS においても、計算科学との協奏的利用は有効であるため、両者がカップルした解析手法が提案されつつある点に期待されている。

最後に、解析手法の方向性にも触れる。中性子小角散乱(SANS)・中性子準弾性散乱(QENS)・中性子スピネコー(NSE)は、残念ながら実空間での構造をあからさまに与えない。特に溶液中でのダイナミクスを動画のごとく表示することは困難である。そこで、基準振動解析・分子動力学などの計算機科学との協奏的な解析が極めて重要になる。加えて、このような計算の基礎には原子座標の情報が不可欠であり、結晶構造解析・溶液 NMR・クライオ電顕との協奏もまた重要である。このように、これからの構造生物学は一つの手法だけでなく多くの手法を用いた「統合構造生物学」の方向で進展していくと考えられる。

### 2.3. ガラス・マテリアルサイエンス

これらの分野の高分解能分光器による中性子準弾性散乱 (QENS) 研究の潮流は、これらを主な対象とする国際会議である QENS/WINS (2年おきに開催) の発表内容に明確に表れている。昨年行われた QENS/WINS2018 (<http://qens-wins2018.com/>) の発表件数の統計を表 2.3.1 に示す。この統計を見ると、かつてはこの分野の中心であったガラス転移に関係する分子液体・熔融塩の研究、液体基礎論に関係する液体金属などの研究が激減している。それらの液体研究に代わって、様々な機能性液体、

特にイオン液体の研究が非常に活発に行われている。イオン液体の中でも、プロトニックイオン液体と呼ばれるプロトン移動を起こす系、水との混合系の研究が多い。水の研究は依然として大きな割合を占めるが、水そのものの研究ではなく、後述する生体関連物質の周りの水、表面・かご状物質などの制約空間内の水、プロトン伝導などの電池材料に関する水の研究がほとんどである。高分子 (生体高

表 2.3.1. QENS/WINS2018 の発表件数の統計

1. 生体関連物質・膜 : 13
2. イオン液体 : 5
3. 高分子 : 8
4. 閉じ込め系 (触媒系・水) : 3
5. 液体 (ガラス) : 11
6. イオン・水素伝導体 : 8
7. 固体内振動・回転 : 8
8. 磁性体 : 6

分子以外) の研究も、かつてのように高分子そのもののダイナミクスの研究ではなく、薄膜などの制約空間の高分子、イオン・電気伝導を有する高分子、ナノコンポジットと言われるような高分子と無機物との混合系 (例えばタイヤなど) の研究が盛んである。

現在、圧倒的によく研究されているのは、タンパク質やリン脂質膜などの生体関連物質である。これらの研究には後方散乱やスピネコーなどの高分解能分光器 (ns 以上の遅い運動を観測) が用いられる。対象も、かつては中性子強度の問題で、ごく一部の大量に入手できるタンパク質、しかも水和物結晶に限られていたが、現在では水溶液中のタンパク質の運動が主な研究対象である。具体的には、タンパク質機能と密接に関係する構造変化であるタンパク質のクラスター化、フォールディング、結晶化などが対象になっている。どちらも ORNL, SNS の BASIS 分光器のデータであるが、生きた細胞の中のタンパク質の運動、生きた動物 (プラナリア) 中の水や細胞形成物質の運動の研究さえ行われている。圧力下、照射下などの外場に対するタンパク質の運動を扱った研究も多い。タンパク質の研究以外では、古典的な研究であるが、NSE を主な手法とした細胞膜 (リン脂質二重膜) の研究、細胞膜を模したベシクルの運動の研究も依然行われている。QENS を用いると、膜の硬さ (弾性率)、膜に埋め込まれたタンパク質などの拡散運動を、理論モデルを用いた解析を通して、かなり精密に観測することができる。

固体における緩和運動の研究も多数行われているが、電池に関係したプロトンやリチウムなどのイオン伝導の研究、太陽電池や熱電材料に関係した固体内のイオン (例えば  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  中の  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ) の再配向運動などの研究が多い。クラスレート化合物などのナノ

細孔の分子運動の研究も多い。これらはガス貯蔵、フィルター、センサーなどの機能性を有する。細孔は新しい反応場や触媒表面と考えることもできるので、その観点の研究も多数ある。以上のような固体中の運動は、ps オーダーから ns オーダーまでの広い時間領域で起こるため、数種の装置を組み合わせて行われることがほとんどである。近年、スピン液体やフラストレーション磁性体の研究が盛んであるが、磁気スピンの運動そのものは、QENS のタイムスケールより遅いことが多く、残念ながらあまり活発な QENS 研究の対象にはなっていない。

以上に述べたように、現在の高分解能分光器を用いた QENS 研究は、生体関連の研究か、応用指向の研究に向かっていると見てよい。この傾向はこれからますます加速するだろう。現在の日本は、新物質開発、機能性材料開発の研究において間違いなく世界のトップレベルである。このような分野を専門とする大学の研究室、国立研究所、企業と組んで研究を行えば、これまであまり盛んではなかった日本の QENS 研究は、大きく発展すると考えられる。もう一つの重要な観点は、現在の世界の QENS 研究は計算科学と強く結びついていることである。例えば、分子動力学 (MD) シミュレーションは分子・イオンの構造だけでなく、時間相関関数(緩和関数)を与えてくれるので、QENS 実験の結果と直接的な比較ができ、それから運動のメカニズムを教えてくれる。MD シミュレーションは 2 体ポテンシャルを与えて行う方法が一般的だか、近年の計算機の高速化により、第一原理計算に基づく MD シミュレーションも行われるようになってきている。日本は計算科学でも世界のトップレベルだが、残念ながら、QENS 研究との協力はほとんど行われていない。計算科学グループとの共同研究は、今後の日本の QENS 研究にとって、絶対に必要である。

### 3. これまでの施設の利用

#### 3.1. JRR-3

JRR-3は、わが国初の国産研究炉として建設され、昭和39年に臨界に達した後、約21年間にわたり原子力の黎明期を支える多くの研究（原子炉の設計・製作・建設等の全般的な経験の獲得、動力炉用の原子燃料及び部品の性能及び寿命に関するデータの取得、再処理試験用燃料の供給並びに放射性同位元素の生産等）に広く活用された。その後、1985年から性能向上を目指した改造を行い、1990年に熱出力20MW、軽水減速、重水反射体付きプール型の高性能汎用研究炉として利用運転を再開し、2010年度には年間20,000人・日に及ぶ多くの日本原子力研究開発機構（原子力機構）内外の利用者で賑わっていた（図3-1-1）<sup>1</sup>。しかし、2010年度定期検査のための停止期間に入った後、東日本大震災後に制定された研究用原子炉の新規制基準適合性審査とそれに続く耐震補強工事のために運転を休止している。JRR-3の運転休止が長期間にわたっている異常な状態に対し、以下の学術団体や国から以下のような提言が出されており、一刻も早い運転再開が望まれている。

#### ■ 日本学術会議

平成25年10月 提言「研究用原子炉のあり方について」

- ・ J-PARC と原子炉定常中性子源JRR-3 とが互いに補完することにより、この分野の研究開発力において世界的な優位性をもたらさなければならない。

平成29年8月 記録「研究炉の長期停止に伴う影響調査」

- ・ 我が国全体の中性子利用という観点から、J-PARCだけではとても全てをカバーできるものではなく、研究炉の役割は非常に大きい。

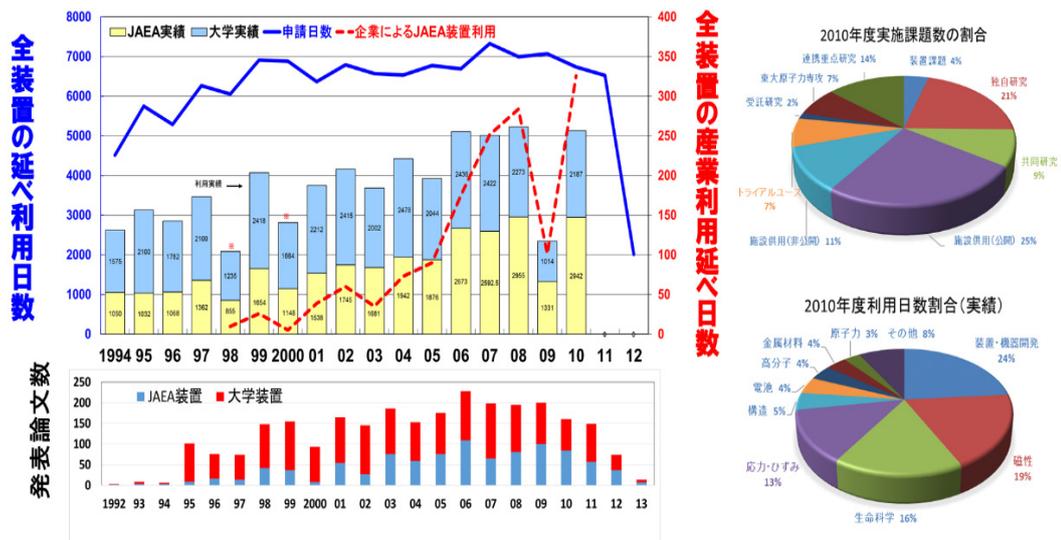


図 3-1-1 JRR-3 の利用の年次推移

<sup>1</sup> ATOMOS 日本原子力学会誌 58, (2016) 38. の図 1

■文部科学省 原子力科学技術委員会

平成28年8月 原子力人材育成作業部会 中間取りまとめ

- ・ 原子力機構等の研究炉等を所有する各機関においては、一日も早い再稼働を目指して新規制基準対応に取り組む。また文部科学省は、引き続き各機関に対して、我が国の研究炉等が持続的に運営できるように必要な支援を行う。

平成30年4月 原子力研究開発基盤作業部会 中間まとめ

- ・ 原子力機構においては、JRR-3をはじめとする試験研究炉の一日も早い運転再開を目指して新規制基準対応等に取り組むとともに、文部科学省においても必要な支援を行う。

■日本原子力学会

平成28年3月 我が国における研究炉等の役割（中間報告書）

- ・ 依然として研究炉は研究開発及び産業利用のツールとして極めて重要なものである。また、中性子利用研究や利用技術開発を担う人材育成の場としても重要である。

■中性子科学会

平成24年12月 次世代研究用原子炉検討特別委員会報告書

- ・ JRR-3の高経年化対策を継続的に実施し、J-PARCとの共存を念頭に実験装置の更新や冷中性子源を高度化することが望まれる。

平成30年7月 ロードマップ検討特別委員会 提言

- ・ JRR-3やKURの定常中性子原子炉施設においては、利用に対する機動性の高さや利用ジャンルの多様性、さらには教育への活用の観点からプラットフォームのハブ施設となることが期待される。

新規制基準適合性審査は予想よりもはるかに長期間に及んだが、平成30年11月7日に新規制基準適合性審査に合格し、2020年度内の運転再開を目指して、建物・構築物の耐震改修など必要な安全対策工事を適切に実施するとともに、炉心に近いところに設置されている冷中性子導管の更新や利用者の方の利便性を高めるための施設供用制度の検討などを進めている。

代表的な研究用原子炉で生み出されてきた論文数の年次推移を比較したものを図3-1-2に示す。ILLのHFRが他の追随を許さないほど高い論文生産数を示しているが、熱出力、装置の数、年間の運転日数で規格化した指標でみた場合にはそれほど、生産性は高くない事がわかる。一方で、JRR-3と同程度の熱出力を持つNISTのNCNRや、後発のFRM-IIの論文生産性と比較すると、JRR-3は大きく水をあげられているわけではなく、上述の冷中性子導管の更新を始めとする、実験設備、実験装置の高度化によって、さらなる論文を生み出す可能性を秘めている。

原子力機構は、国内唯一の総合的な原子力研究開発機関として、長期にわたり国内の原子力研究開発をリードしてきたが、研究インフラである原子力施設は、その多くが昭和年代に

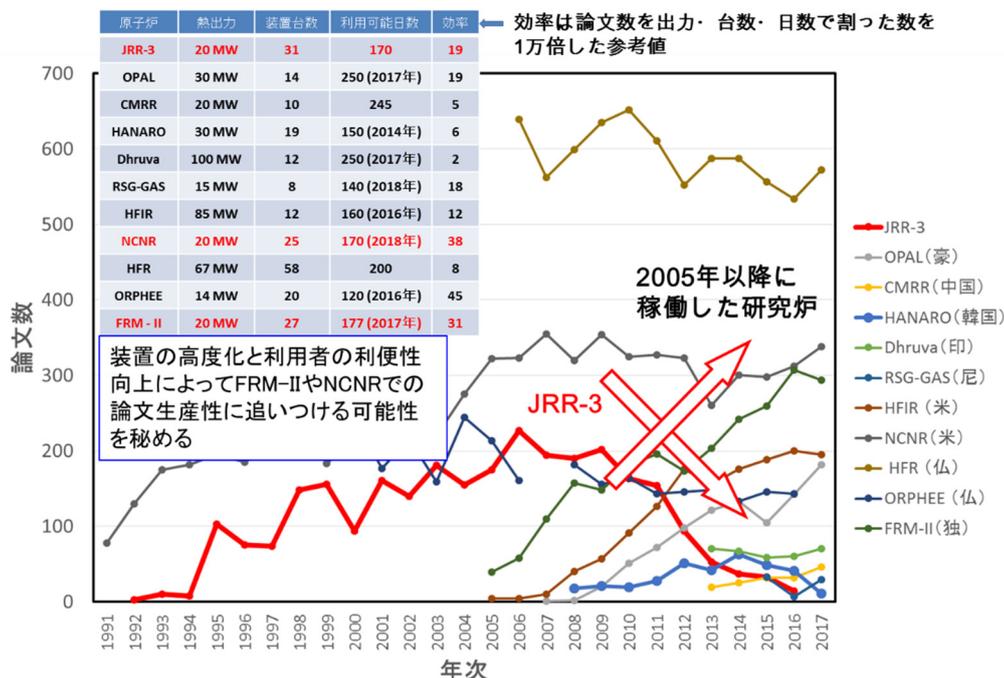


図 3-1-2 代表的な研究用原子炉での発表論文数の年次推移

整備されたもので老朽化が進み、近年、高経年化への対応が大きな課題となってきている。その一方、役割を終えた原子力施設に対する廃止措置及び放射性廃棄物の処理処分といったバックエンド対策を進める上で多額の費用が必要な状況となっている。この難局を乗り越え、将来にわたって高いレベルでの原子力に係る研究開発機能を維持・発展させるために、原子力機構では、「施設の集約化・重点化」, 「施設の安全確保（新規制基準対応・耐震化対応, 高経年化対策, リスク低減対策）」及び「バックエンド対策（廃止措置, 廃棄物の処理処分）」を「三位一体」で整合性のある総合的な計画としての「施設中長期計画」<sup>2</sup>を公表し、JRR-3 を継続利用施設として位置づけている。この計画では、当面の期間として、平成 29 年度から平成 40 年度<sup>3</sup>まで（第 4 期中長期目標期間末まで）を想定しているため、JRR-3 を含む全ての継続利用施設の平成 41 年度<sup>3</sup>以降の利用を継続するかどうかについては判断していない。運転再開後に JRR-3 から生み出される研究成果、原子炉本体の寿命、次期中性子ビーム実験炉（次期炉）の検討の進捗状況、その実現可能性などを考慮の上で経営判断がなされると考えられる。次期炉の実現に漕ぎ着けるためにも、運転再開後の迅速な施設供用利用の開始と、MLF や SPring-8 等の放射光実験施設との連携の下、JRR-3 から数多くの研究成果を生み出して行くことは、今後、大強度の定常中性子源とパルス中性子源に小型中性子源を加えたネットワーク上で進んで行くであろう国内の中性子科学の未来にとって大きな試金石である事は間違いない。

<sup>2</sup> 施設中長期計画 策定: 平成 29 年 4 月 1 日, 改定: 平成 30 年 4 月 1 日  
[https://www.jaea.go.jp/about\\_JAEA/facilities\\_plan/keikaku.pdf](https://www.jaea.go.jp/about_JAEA/facilities_plan/keikaku.pdf)

<sup>3</sup> 本計画書の中の記載をそのまま使い、新元号は考慮せず

### 3.2. 大学共同利用

共同利用の歴史は JRR-3 の前身である JRR-2 の臨界とともに始まった。その後、1962 年の国産第 1 号炉 JRR-3 の臨界を経て、1990 年の JRR-3 の改造を機に 1993 年 4 月、東大物性研はそれまでの中性子回折物性部門を改組・拡充し、「東京大学物性研究所附属中性子散乱研究施設」（以下「物性研中性子施設」と略す）を創設し、中性子散乱研究の大規模共同利用体制の確立と共同利用「中性子散乱全国共同利用」を推進してきた。2003 年には「東京大学物性研究所附属中性子科学研究施設」と改称し、より本格的な共同利用を展開してきた。2011 年の大震災以降は、海外実験支援プログラムを運営し、JRR-3 再稼働までの間、少しでも多くのユーザーに中性子散乱実験の場を提供している。

物性研中性子施設は次のような特徴をもっている。(1) 東京大学の一部局として中性子散乱装置群をもち、東北大金属材料研究所/理学部、京都大学複合原子科学研究所（京大複合研、旧：京都大学原子炉実験所）とともに全国共同利用事業を行う。(2) 独自の実験課題審査委員会の諮問にもとづき、共同利用と実験支援を行う。(3) 宿泊施設を保有し利用者の利便をはかる。また、旅費支給制度をもち、東京大学大学院工学系研究科原子力専攻共同利用管理本部（開放研；旧東京大学原子力総合センター）を通じて実験者への旅費援助を行う。さらに、(4) 液体ヘリウムなどの消耗品援助（物性研予算）などを行う。(5) 日米科学技術協力協定に基づく日米協力事業「中性子散乱分野」の日本側実施機関として「中性子散乱日米協力」を推進する。このように、物性研中性子施設は、世界の多くの中性子散乱施設とは一線を画した活動をし、この独自のミッションを活かし、常にコミュニティの声を反映した全国共同利用システムの運営をおこなうとともに、施設スタッフの自発的活動により、物質研究の一拠点としての役割を演じてきた。

全国共同利用では、JRR-3 の炉室に 3 台、ガイドホールに 11 台の装置を所有し、それらは 3 軸分光器、粉末回折装置、小角散乱装置、反射率計、スピネコー装置、非弾性散乱装置（飛行時間法）などから成り、中性子散乱に必要なほぼすべての分野をカバーしている。約 3/4 が磁性、構造と励起、強相関係物理といったハードマター、残り約 1/4 が高分子、液体、ガラス、生物などのソフトマターであり、諸外国中性子散乱施設と比較して固体物性関連の研究が多いのが特徴である。2000 年頃には共同利用の規模は課題数が年間約 300 課題、利用者数は延べで年間約 6000 人（フィルムバッジで管理するユニークユーザー数で 400 人程度）に達し、震災が起こるまでこの規模の共同利用が行われてきた。しかし、2011 年 3 月の大震災以降、JRR-3 の停止により、JRR-3 を使った共同利用も停止し、共同利用は大きな打撃を受け、現在に至っている。

#### 4. 各分光器の現状と今後の整備・開発とサイエンスの展開

##### 4.1. SANS-U

##### 4.1.1. SANS-U の歴史と現状

SANS-U は、1991 年に東大物性研が JRR-3 のガイドホールに建設した小角散乱装置である。当初から、幅広い分野のユーザーを対象とした汎用小角散乱装置として、多くのユーザーの利用と支援を得てきた。1992 年に本格的な共同利用を開始し、2003-2006 年に第一次高度化(VAX から WINDOWS へ)、2008-2010 年に第二次高度化（集光系導入、低 BG 化）を行った。震災直前には物質レンズによる集光系の導入と高分解能検出器を備えた当時

では最先端汎用小角散乱装置の一つとなった。その光学系を図 4.1.1 に示す。

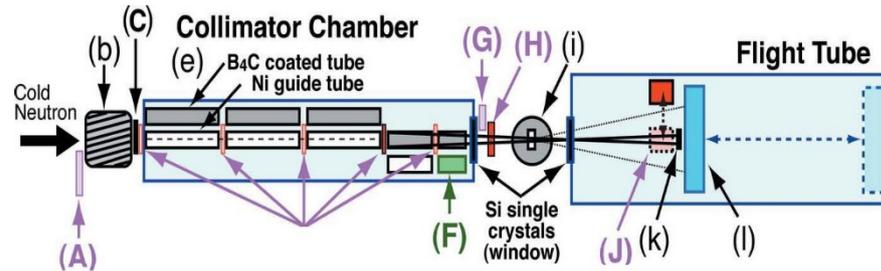


図 4.1.1. SANS-U の光学系(Iwase et al., 2011, J. Appl. Cryst., 44, 558.)

高分解能モードでは、 $q_{\min} = 3.8 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$  を、強度モードでは従来の強度の 3 倍化を実現した(図 4.1.2、図 4.1.3)。図 4.1.3 では、ラテックスの散乱をまで測定することが出来るとともに、空間分解能も向上している。また、試料-検出器間距離(SDD)を 1m から 16m に

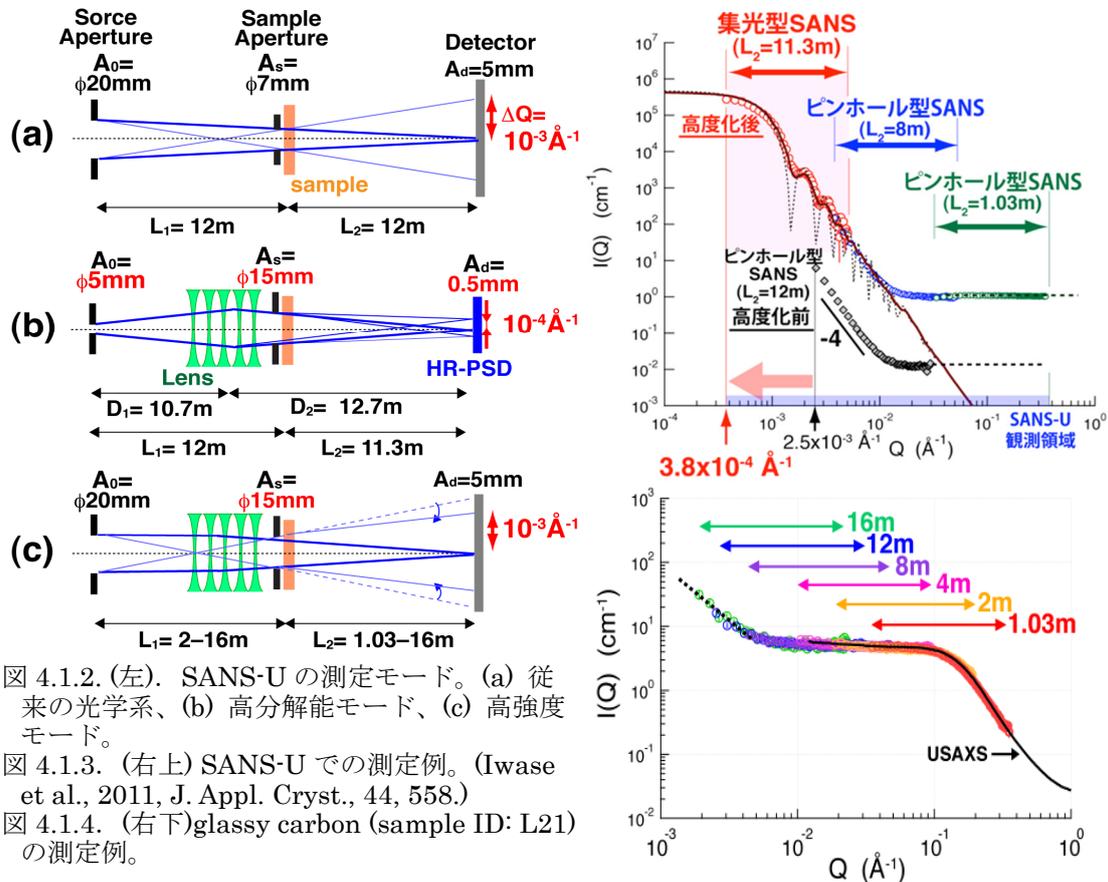
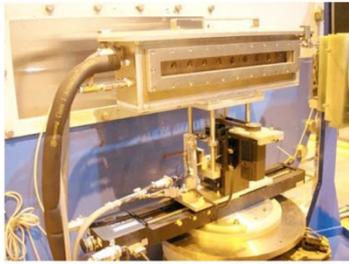


図 4.1.2. (左). SANS-U の測定モード。(a) 従来の光学系、(b) 高分解能モード、(c) 高強度モード。

図 4.1.3. (右上) SANS-U での測定例。(Iwase et al., 2011, J. Appl. Cryst., 44, 558.)

図 4.1.4. (右下) glassy carbon (sample ID: L21) の測定例。



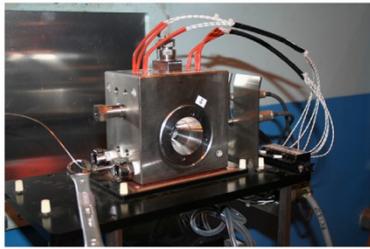
標準サンプルチェンジャー



高温セル



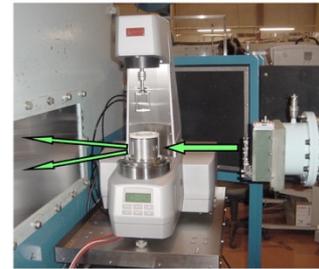
延伸セル



高圧セル(超臨界CO<sub>2</sub>)



高圧セル(~ 400MPa)



流動セル(Rheo SANS)

図 4.1.5. SANS-U の実験環境 (アクセサリー) 群。

変えることで、図 4.1.4 に示すような幅広い  $q$  空間でノイズが少ないデータをとることができる。

SANS-U には、図 4.1.5 に示すように標準サンプルチェンジャーの他、高温セル、延伸セル、超臨界 CO<sub>2</sub> 高圧セル、静水圧高圧セル、流動セルなどが整備されており、さまざまな実験環境を提供している。

#### 4.1.2. SANS-U の共同利用と成果

SANS-U はその汎用性とユーザーフレンドリーな制御環境により、多くのユーザーに利用されてきた。毎年の実験課題数は 30 件前後で、JRR-3 の装置群の中でも 1, 2 を争う多くの課題をこなしてきた。図 4.1.6 に統計を取り始めた 2002 年以降の論文成果の推移を示す。

研究テーマは、ブロック共重合体、ポリマーブレンド、ゲル、ミセル、ナノエマルジョン、高分子溶液、中性子スピンエコー実験との併用実験、生体系、結晶系高分子、ベシクル、界面活性剤、薄膜、高圧下でのミセルの相挙動、両親媒性高分子、タンパク質ダイナミクス、剪断場での界面活性剤の構造変化、スピノーダル分解、結晶化、ゲルの延伸メカニズム、ゲル化剤、生体膜、金属アロイの構造・相転移、ミセルの Rheo-SANS、剪断場での高分子の結晶化、水/アルコール系の構造、結晶性高分子のシシカバブ構造、天然ゴム、ポリオレフィンの相溶性、超伝導物質の磁性と構造など、非常に幅広い。その成果一覧は以下の URL を参照されたい。

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/neutron/inst/sans-u/Publications/publications.html>

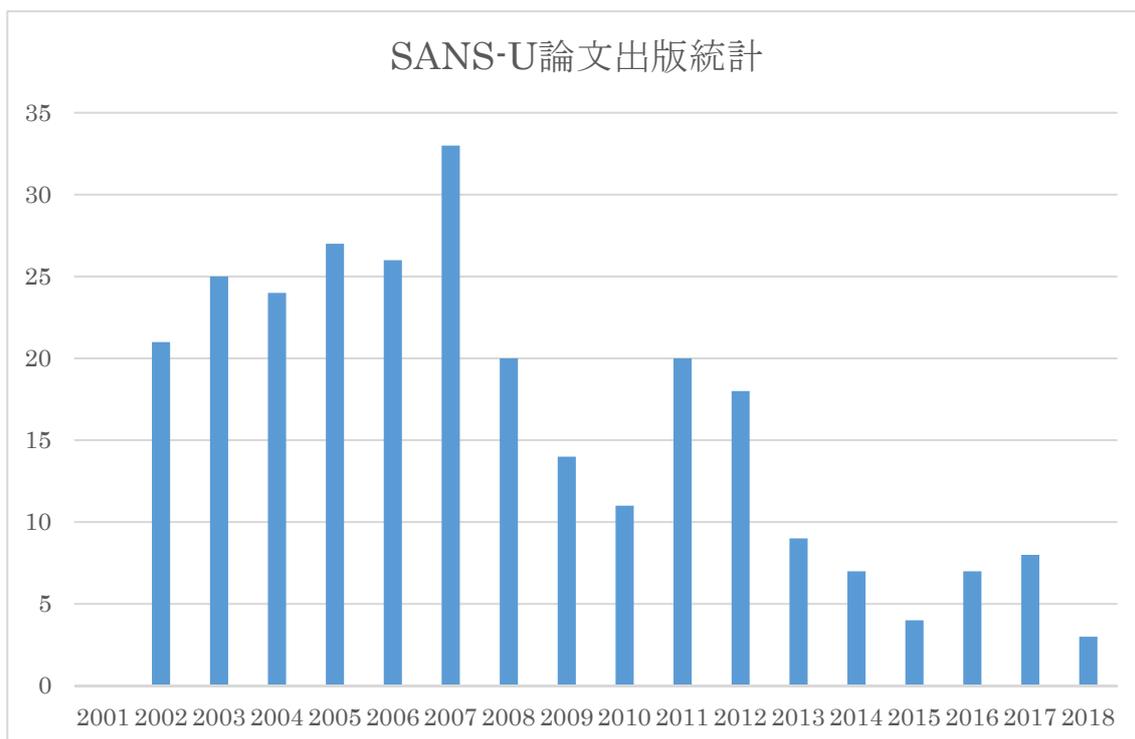


図 4.1.6. SANS-U からの論文成果 (2018.9.10 現在)。

このように、震災が起こった 2011 年 3 月の前年の 2010 年まで、多少の増減はあるものの、毎年 20 報前後の論文を生み出していた。2011 年以降の論文成果は、2010 年度までに行った実験の成果であったり、2012 年から行っている海外実験支援プログラムにて、韓国 HANARO、オーストラリア ANSTO を始めとする海外施設での成果である。

#### 4.1.3. 今後の整備・開発

震災後、東大のビーム孔占有料予算を投入し、C1 ガイドラインの 3Qc スーパーミラー化を行った。また、サンプルチェンジャーの温度制御系を水循環系からペルチエ制御系へと改良した。その背景には、安全対策の一つとしてガイドホール内での水使用の禁止（もしくは低減化）がある。また、飛行管用真空ポンプをオイルポンプからオイルフリーポンプへの交換を行った。また、老朽化した速度選別器を新しい速度選別器に更新した。

現在、2020 年 10 月の JRR-3 の再稼働をめざし、SANS-U の駆動試験を行っている。すでに、新速度選別器の駆動試験を行い、約 2 万回転までの運転に成功した。近く、新しくした OS のもとでの実験制御系の動作試験を行う予定である。

SANS-U については、震災直前に本格的な高度化を行ったので、今回、再稼働に向けた装置自体の本格的な高度化、先端化の予定はない。新中性子導管の導入と集光系の導入により、従来より遙かに強い中性子ビーム強度のもと、高分解能検出器ならではのサイエンスの展開を期待している。

#### 4.1.4. サイエンスの展開

以上、述べたように SANS-U は 10 年のブランクこそあれ、操作性に優れた高性能小角散乱装置である。この特徴を活かし、

- (1) 集光系を生かした高分解能/高強度 SANS 実験
- (2) 特殊環境（極限環境）下での SANS 実験

Rheo-SANS、High-Pressure SANS などを中心に、国内のパワーユーザーを再結集するとともに、潜在ユーザーの発掘を行うことで、スペクトルの広いサイエンスを展開する。

また、

- (3) 合成 G からの新奇試料の提供を受けるなど、外部 G との共同研究を促進する。

さらに、

- (4) J-PARC/MLF との相補利用や、東海 IQBRC に設置した SAXS 装置(SAXS Point 2.0; Anton Paar)を使った SANS/SAXS 相補利用を行う。

<https://www.shibayamalab.issp.u-tokyo.ac.jp/saxs-u>

また、

- (5) SANS データの実空間解析を行うことで、逆空間では把握できない現象の理解を深め、
- (6) 企業との共同研究を従来以上に推進する。

## 4.2. SANS-J

SANS-Jは、高分子、界面活性剤、膜材料などのソフトマテリアルに加え、生体試料、鉄鋼材料、無機材料、磁性材料などのマイクロ構造を観察する手法として、幅広い研究領域で多くの研究成果を創出してきた実績がある。これらの成果は、中性子光学の発展に合わせて行われた装置の高度化に基づいている。2010年度までにSANS-Jで行われた代表的な高度化として、最小到達波数 ( $q_{\min}$ ) の拡張と偏極中性子の獲得が挙げられる[Koizumi *et al.*, *J. Appl. Crystallogr.*, 40 (2007) s474-s479]。前者は、入射中性子を集光する物質レンズ ( $\text{MgF}_2$ )、磁気レンズ及び高分解能検出器 (フォトマル;  $\text{ZnS}^{60}\text{LiF}$  シンチレーター) が導入されたことで  $q_{\min} = 0.003 \text{ nm}^{-1}$  まで拡張され、約  $1 \text{ nm}$  から可視光の波長と同程度の数  $100 \text{ nm}$  の構造決定が可能になった。後者は、偏極ミラー、 $\pi$ -フリップパー、磁気レンズ等を導入したことにより達成され、後述するスピンコントラスト変調中性子散乱技術を用いたサイエンスの発展や偏極解析システムの導入を可能にしている。また、老朽化しトラブルが頻発していた  $^3\text{He}$  二次元検出器も信頼性の高い1次元検出器を80本並列させるタイプに更新されている。

2011年度以降のJRR-3稼働停止に伴い、他の分光器と同様にSANS-Jでも装置の高経年化・老朽化が問題になっている。現在までに、中性子速度選別機の修理、オイルフリー型排気ポンプの設置、様々なパーツにおけるモーター駆動制御システムの修理や更新等を段階的に進めることで不具合を改善し、JRR-3の再稼働に備えている。ただし、全体的な装置制御システムの老朽化・陳腐化の問題を解決して安定的に装置を稼働させるためには、大々的な制御システムの更新が近い将来必要になる。

現時点では抜本的な改造を伴う高度化計画こそないものの、再稼働に合わせて試料位置、検出器、ビームストッパー等のレイアウトを最適化し、装置のユーザビリティを高める予定である。特に、現在の汎用的な光学機器配置を用いて測定できる高角域での到達波数 ( $q_{\max}$ ) は約  $1 \text{ nm}^{-1}$  に制限されており、それよりも高い波数の測定を行うには機器配置を大きく変更する必要がある。そのため、試料-検出器間の距離を現状よりも近づけることで  $q_{\max} = 3\text{--}4 \text{ nm}^{-1}$  までの測定ができるようにレイアウトすることが好ましい。また、このような高角域では干渉性・非干渉性散乱成分が拮抗するためその切り分けが難しいが、偏極中性子と偏極アナライザーを用いた偏極解析測定を同様の光学機器配置で行えるようにすることで、マシンタイムの限られた多くのユーザーが精度の高い構造情報を得られるようにする。

ここで、SANS-U及びJ-PARCに設置される中性子小角散乱装置TAIKAN (BL-15) との装置性能の違いを記述する。SANS-J、SANS-Uは、どちらも同等の性能を持つレンズと検出器を用いて冷中性子を集光・検出するため  $q_{\min}$  や測定効率などの基本性能は同等と考えて良いが、偏極中性子の利用はSANS-Jにおいてのみ可能である。偏極中性子は、ソフトマテリアルの研究では上述の偏極解析、ハードマテリアルでは鉄鋼材料の力学特性に寄与するナノ構造体、強磁性材料における磁区の観測、磁気スカーミオンに代表されるスピントクスチャーや超伝導体中の磁束格子などの長周期磁気構造を決定する研究に威力を発揮することが期待される。また、後述するスピンコントラスト変調中性子小角散乱技術の開発を推進

するためにも重要である。一方、パルス中性子を用いる TAIKAN とは観測波数領域が相違点になる。色収差の問題から中性子レンズは TAIKAN で用いる白色のパルス中性子を集光することができない。そのため、TAIKAN は集光単色中性子を用いる SANS-J、SANS-U に対し、より小さな波数領域 ( $q < 0.1 \text{ nm}^{-1}$ ) の測定が不得手である。反対に、TAIKAN は飛行時間計測により  $q > 1 \text{ nm}^{-1}$  の中角領域の散乱成分を分解能良く得られるといった特徴を持つ。また、分光学的な性能の比較以外に、SANS-J は核燃料物質の使用許認可が得られている点も大きな特徴である。それぞれの研究テーマ、目的に応じた装置の選択が求められる。

再稼働後の SANS-J では、従来のソフトマテリアル、生体系試料に関連する研究に加えて、核燃料物質の測定が行える点を生かし、原子力機構が担うべき原子力科学に関連する基礎・応用研究を積極的に取り扱う。例えば、再処理、群分離（高レベル廃液の化学分離）技術に関連する研究では、金属イオン抽出試薬の分子設計や分離システムの構築に SANS 法で得られる知見が有用なことが実証されている[Motokawa *et al.*, ACS Cent. Sci., 5 (2019) 85–96]。これらの化学分離に関する研究は、精錬および都市鉱山からの希少金属の回収・リサイクル、環境中の有害金属除去の技術開発研究にも関連するため、SANS 法がこれまでの小角散乱研究であまり取り扱われてこなかった研究領域に波及することが見込まれる[Zemb *et al.*, Colloid Polym. Sci., 293(2015) 1–22]。その他、放射性廃棄物を溶かし込むためのガラス固化技術開発、地層処分に用いられる人工バリア（圧密ベントナイト）、原子炉の炉壁材、核燃料被覆管の開発と安全性評価など、様々な課題に対して SANS-J の貢献が期待されている。さらに、老朽化した原子炉の廃炉技術開発研究に関しても、今後は SANS-J の貢献が求められる可能性が高い。

また、偏極中性子と水素核偏極試料を用いて複合材料のナノ構造解析を行うスピコントラスト変調中性子小角散乱技術の開発を SANS-J で進める。現在、ソフトマテリアル複合材料の構造解析では、部分重水素化モデル試料を用いるのが一般的である。しかし、部分重水素化モデル試料を用意することはユーザーにとって大きな負担となるばかりでなく実試料とモデル試料の構造が同一であるという仮定に基づく解析手法そのものに疑念を抱く声が特に産業界から多く寄せられていた。スピコントラスト変調法は、中性子と水素核のスピ制御により、単一試料から構造決定に寄与する複数の散乱を得る手法である。本手法が確立すれば、重水素化モデル試料を準備することなく複合材料の精密構造解析が可能になる。重水素化の必要性ゆえに中性子小角散乱法の利用を躊躇していたポテンシャルユーザーの取込みに大きく寄与することが期待される。再稼働にあわせて現在偏極性能とユーザビリティを大幅に改善した核偏極装置の導入を進めている。本装置導入によってスピコントラスト法を用いた構造研究が今以上に進展することが期待される [Kumada *et al.*, J. Chem. Phys. 133 (2011) 054504]。

再稼働には予算と人員が制限される中で装置を更新し、安全性と信頼性を担保した運営を続けることが求められる。装置のスペックと実際の使いやすさをバランスさせながら、トラブルの少ない装置として稼働させる。共同利用および産業利用については、再稼働後の状

況と環境を見きわめつつ可能な範囲で進めることになる。

### 4.3. C3-1-2 分光器群

#### 4.3.1. 分光器の現状

C3-1-2 分光器群は C3-1-2-2(MINE1)、C3-1-2-3(MINE2)の 2 ビームラインから構成される。図 4.3.1 に C3-1-2 ビームラインベンダーの写真と概要図を示す。MINE1、MINE2 は C3-1-1(AGNES)の下流に配置されていることから、AGENS のモノクロメーターを透過する長波長中性子のみが利用可能である。

MINE1 はニッケルガイド管が設置され、0.8nm 以上の長波長中性子の利用が可能である。ガイド管出口の中性子束は  $10^6\text{n/cm}^2$  程度である。京大複合研が培ってきた中性子スピン干渉技術をベースに 2004 年より JST 先端機器開発事業（「中性子スピン干渉原理に基づく中性子スピンエコー装置開発」）の支援も受けて、中性子共鳴スピンエコー分光法（具体的

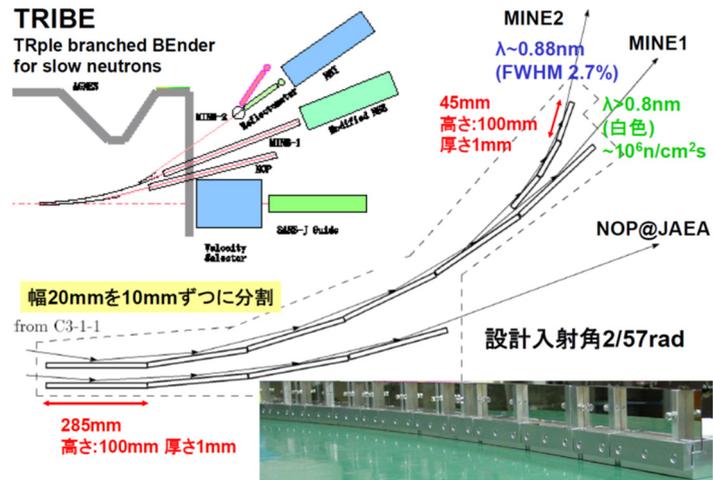


図 4.3.1 C3-1-2 ポートのビームライン分岐。

には MIEZE 及び NRSE 分光法) 開発を行った。2014 年の J-PARC MLF BL06 ビームライン完成に伴い、架台を残してこれらの装置は移設した。そのため現在は、ガイド管と装置架台及び光学ベンチ等の関連光学部品のみとなっている。

MINE2 では、中性子波長 0.88nm の単色中性子（波長分解能 2.7% FWHM）が利用可能であり、反射率計が設置されている。反射率計は反射率が  $2 \times 10^{-6}$  程度まで測定可能である。試料位置での中性子強度はビーム発散角にもよるが、最大で  $2 \times 10^4$  cps 以下であり、試料の放射化はほとんど無視できる。反射率計の下流にはスピン干渉計が設置され、多層膜干渉計開発が行われてきた。スピン干渉計とエタロンを用いた Jamin 型多層膜干渉計は、2018 年に J-PARC MLF BL05(NOP)に移設して開発を開始している。そのため反射率計の下流も装置架台及び光学ベンチ等の関連光学部品のみとなっている（図 4.3.2）。



図 4.3.2 MINE1 及び MINE2 の写真(2018 年 9 月)。

#### 4.3.2. 今後の整備・開発とサイエンスの展開

C3-1-2 ビームラインは開発ポートの位置づけが強く、反射率計のみを残し、J-PARC MLFに移設した(図 4.3.3)。

このような開発ポートがあることは、JRR-3 が広くかつコンパクトに分光器を設置でき、かつ基盤的な開発ができる証左の一つになる。C3-1-2 ビームラインとしては、引き続き中性子を用いることで広がる研究分野、中性子を用いることでし

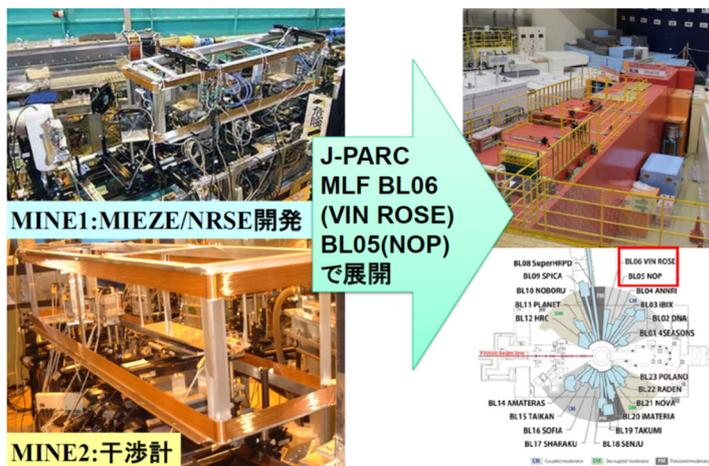


図 4.3.3 MINE1, MINE2 から J-PARC MLF への展開。

かできない研究課題を中心に広く開発研究を推進する。J-PARC MLF の第 2 ターゲットステーションから小型中性子源まで、様々な中性子源計画もあり、今後の中性子散乱研究において、分光器の高度化、それを広く支える中性子光学デバイスや検出器、そして新たな分光器開発研究は今後も重要である。しかしこれらの開発だけでは JRR-3 の長期にわたる貴重なビームタイムを有効に使うことは難しい。また分光器やデバイス、検出器も広く利用されてその価値が上がる。物性利用の分光器運用も必須である。

MINE1 は新たに開発に成功した回転楕円体集光ミラーを利用した集光中性子小角散乱装置の実現を目指す。小角散乱はユーザーが多く、定常中性子源の長波長中性子利用に向けた分光法である。また JRR-3 将来計画検討委員会(固体物理分野)検討結果報告書にもあるように、トップサイエンスにおける(偏極)小角散乱法の重要度も高まっている。また比較的中性子強度が弱い中性子源でも鉄鋼関係など試料を選ぶことで有効な研究分野が広い。集光ミラーを用いることで既存の小型 2 次元検出器の利用が可能となり、コンパクト小角散乱装置として比較的早期にスタート可能である。また京大複合研の小角散乱装置(図 4.3.4: KUMASANS)等、連携する装置も身近にあり、適切なユーザー開拓を行える。

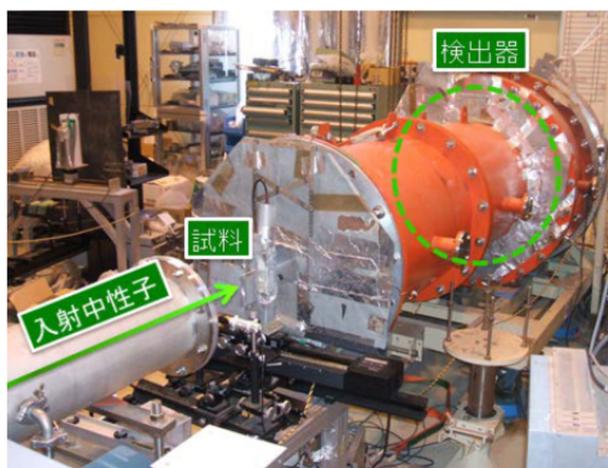


図 4.3.3 京大複合研の小角散乱装置(KUMASANS)。中性子導管を含む入射ビームライン系から検出器まですべて京大原子炉(現:京大複合研)で製作。

MINE2 中性子反射率計は J-PARC MLF BL16(SOFIA)や BL17(SHARAKU)と比較すると、到達可能反射率や時分割測定等、出来ないことも多く、今や大きく見劣りする。しかし、実際に J-PARC MLF でなされている課題を見ると、MINE2 で十分な課題も散見される。またトライボロジー研究は MINE2 反射率計よりずっと弱い京大複合研の CN-3 ビームラインで培われたものであり、J-PARC で目指すようなトップサイエンスと近年進展のある小型中性子源との橋渡し、連携強化が出来る装置である。そのため固液界面測定等を中心に、中性子利用ならではのユーザー開拓、拡大を行う。ここで参照膜等、必要な試料成膜等も京大複合研で積極的にサポートする。なお MINE2 反射率計の良さはそのシンプルな装置セットアップにあるため、光学系などをいじる予定は無いが、中性子検出については 2 次元 PSD に変更する等の高度化を検討する。また多層膜干渉計開発は、J-PARC MLF BL05(NOP)における干渉計開発と連携して研究を行っており、その進展と合わせて JRR-3 再稼働後に確認を行う。JRR-3 再稼働後の MINE2 は反射率計利用に集中する予定である。放射光や電子顕微鏡等、他手法で観測できることが飛躍的に増えている現状がある。中性子はそれらが出来ないことが観測できる必要がある。そのためには、今までに我々には見えていないユーザーの掘り起こしが重要であり、MINE1, MINE2 は開発研究と J-PARC MLF との協奏利用によって、C3-1-2 分光器群は停止前以上の研究アクティビティ向上を目指す。

#### 4.4. SUIREN

SUIREN (Apparatus for surface and interface investigation with reflection of neutron)は C2-2 に設置され平成 18 年から施設供用実験を本格的に受け入れている偏極中性子反射率計である。中性子反射率法は、中性子が物質表面にすれすれの角度で入射すると、反射、屈折に代表される光学的な振る舞いをするという特徴(中性子光学)を利用した薄膜や多層膜の表面・界面の構造解析手法である。しかし、光学的な振る舞いと言っても、通常、反射率測定に使う中性子の波長は 1nm よりも短く(SUIREN の場合 0.38 nm)、数 100 nm の波長を持つ可視光とは光学現象の現れ方が異なる。その代表的な例が、可視光とは異なり、中性子の場合にはすれすれの角度(90°に近い入射角)で入射しないと全反射現象が起きないことである。

中性子反射率計は国内ではその利用率も知名度も高くないものの、国外に目を向けると、ほとんど全ての中性子実験施設には中性子反射率計が設置されており、複数台の中性子反射率計が稼働している施設も少なくない<sup>4</sup>。それは、中性子反射率計が測定対象とする異種物質が接する界面が、自然界に存在する物質では決して見られることのない新奇な現象の発現の場となっており、科学者の興味を引きつけるとともに、それらの現象を利用した様々な高性能デバイスが、我々の日常生活に深く入り込んでいるからである。

現在では、走査型トンネル顕微鏡(STM)や原子間力顕微鏡(AFM)などの表面ナノ構造解析技術が飛躍的に向上したことにより、従来の手法では不可能であったナノオーダーの表面構造情報が得られるようになってきている。最近の機能性デバイスの多くは、数 nm から数十 nm の薄膜を積層して多層膜構造とし、多くの界面を導入することで新たな機能を引き出したり、それらの性能向上が図られている。したがって、表面ではなく、物質内部に埋もれてしまっている界面の構造解析が重要になってきているが、上述の表面解析手法は、残念ながら埋もれた界面の構造解析には無力である。一方、X線や中性子をプローブとする反射率法は、表面は言うまでもなく界面のナノ構造をも非破壊的に知ることのできる実験手法である。特に中性子は、X線と比較して物質に対する透過力が非常に大きく、物質中に深く埋もれた界面にも容易に達する。また、X線が苦手とする軽元素に対する感度や磁気感受性を持つだけでなく、周期律表で隣り合う元素の識別能力を持つため、中性子反射率計は金属、高分子、生体物質と測定対象を問わない理想的な表面・界面の構造解析手法である。

SUIREN は高密度磁気記録デバイスの基本である磁性多層膜の磁気構造解析を視野にいたれた、偏極中性子の利用によって磁気感受性を向上させる事のできる偏極中性子反射率計である。SUIREN の諸元を表 4.4.1 に示す。試料は試料面(反射面)の法線ベクトルが水平面内となる試料垂直配置型であり、気体-液体、液体-液体が接する自由界面の測定には不向きである。使用する中性子の波長は C2 導管の設計上の特性波長である 0.4 nm に近い 0.39 nm を PG モノクロメータの(002)反射により取り出して使っている。入射中性子強度は試料位置で毎秒・平方センチメートルあたり約 10,000 個前後である。ビームホールの低いパッ

<sup>4</sup> <http://www.reflectometry.net/reflect.htm> によれば、稼働中のものだけで ILL 5 台、FRM-II 5 台、ISIS 5 台、SINQ 3 台、NIST 3 台、HANARO 2 台、J-PARC MLF 2 台

クグラウンドレベルを反映して、この程度の入射中性子強度でも、試料の大きさ、試料そのものからのバックグラウンドの増加などの条件にはよるものの、 $10^{-6}$ までの反射率には到達可能である。

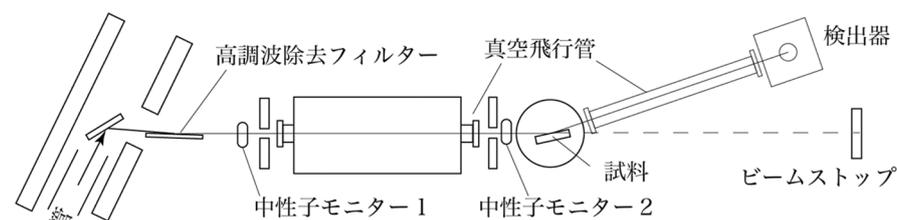
表 4.4.1. 偏極中性子反射率計 (SUIREN) の代表的諸元。

試料取付け方向	試料垂直配置型
中性子波長 :	0.393 nm ( $\Delta \lambda / \lambda = 2.6\%$ )
最大ビームサイズ:	$80^H \times 10^V$ mm <sup>2</sup>
入射中性子強度 1:	$1.8 \times 10^4$ n/cm <sup>2</sup> /s (非偏極時, $\Delta \theta = 0.08$ deg.)
入射中性子強度 2:	$0.75 \times 10^4$ n/cm <sup>2</sup> /s (偏極時, $\Delta \theta = 0.08$ deg.)
バックグラウンド 1:	$4.5 \times 10^{-3}$ n/s (ビームシャッター閉時)
バックグラウンド 2:	$10 \times 10^{-3}$ n/s (ビームシャッター開, 試料の無い時)
到達可能反射率:	$10^{-6}$ 以下
入射中性子偏極率:	0.96 以上 (偏極中性子利用時)
代表的な試料環境装置	1T 電磁石, 10K 冷凍機

図 4.4.1 に SUIREN の平面図を模式的に示す。上に示したのは、偏極中性子を使わない場合で、下は使う場合である。PG モノクロメータを使って取り出された 0.39 nm の非偏極中性子は、非偏極中性子利用の場合には、Ni 単層ミラーで起こる全反射現象を利用して、モノクロメータで反射した中性子に含まれる高調波成分 ( $\lambda/2, \lambda/3, \lambda/4, \dots$ ) を取り除いた後、1 対の 4 象限スリットによりビームサイズと入射中性子の水平面内の角度分散を制御し、試料に導かれて反射率測定に使われる。偏極中性子を利用する場合には、上述の Ni 単層ミラーを中性子偏極ミラーに置き換えるとともに、入射偏極中性子のスピンの状態 (量子化軸に対して  $+\hbar/2$  または  $-\hbar/2$ ) を制御するためのスピンプリッパーや、入射偏極中性子のスピン状態が反射の前後で変化したかどうかを判定するためのスピナナライザ (中性子検極ミラー) などが、ビーム経路に沿って適切な場所に挿入される。

図 4.4.2 に SUIREN で測定した 3 インチの Si ウェハーそのものと、その上に Ni を 50 nm の厚さで成膜した Ni 多層膜からの非偏極中性子反射率を示す。測定データをエラーバーとともにプロットしたものに加え、それぞれの反射率曲線をモデルによって最小自乗法によってフィッティングした結果を実線で重ねた。測定時間は、Si 基板では 27 時間、Ni 単層膜では 10 時間であるが、反射率の誤差がある範囲に収まるまでの時間など、測定時間そのものに意味はなく、これだけの時間をかけたら、図に示すような誤差で反射率曲線データが得られたというだけの事を意味する。どちらの場合でも、モデルフィッティングと良く一致する  $10^{-6}$  までの反射率の実測データが得られている。

### SUIREN 非偏極実験用装置配置



### SUIREN 偏極実験用装置配置

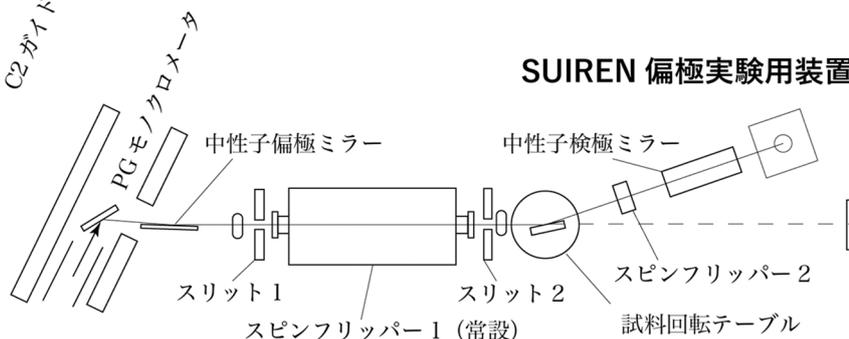


図 4.4.1. SUIREN の実験配置の模式図

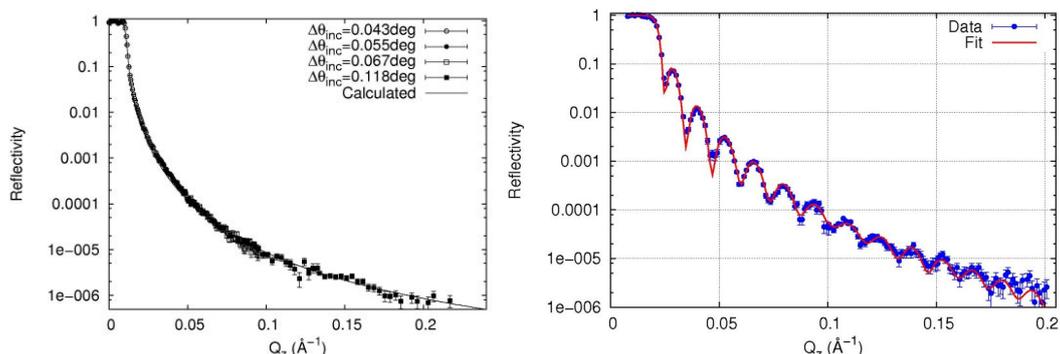


図 4.4.2. SUIREN で測定したシリコン基板 (左) と厚さ 50 nm の Ni 単層ミラー (右) の反射率。試料の大きさは両方とも 3 インチウエハまたはその上に蒸着したものの。

次に、SUIREN で測定した MRAM の動作原理として重要な交換バイアス現象を起こす強磁性体/反強磁性体界面の磁気構造解析の例を紹介する<sup>5</sup>。試料は Si 基板の上に Ta(1.0 nm), Ru(2.0 nm), MnIr, CoFe, Ru(2.0 nm)の順にスパッタ成膜した MnIr 層および CoFe 層の厚みが異なる 4 種の試料 (A, B, C, D) で、熱処理の効果を見るため、MnIr 層成膜は、試料 A, B は室温下で、C, D は 300 °C の条件下で行っている。また、成膜後に磁場 15 kOe を面内方向に印加して field cooling を行い、交換バイアス現象の起源と考えられているピン止め

<sup>5</sup> N. Awaji, T. Miyajima, S. Doi, K. Nomura, J. Phys. : Condens. Matter **22**, 474012 (2010)

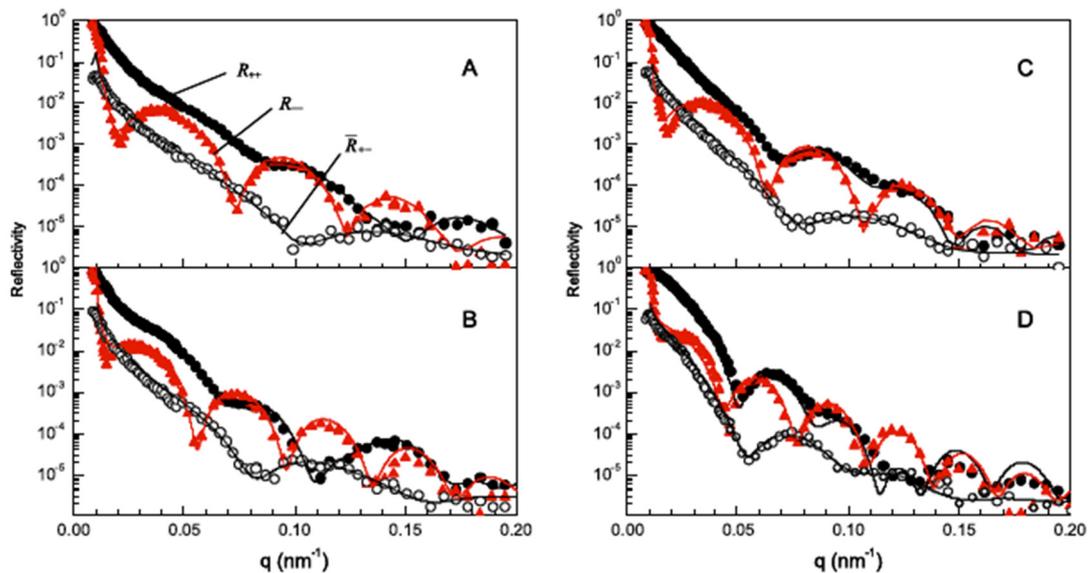


図 4.4.3. SUIREN で測定した Ta(1.0 nm)/Ru(2.0 nm)/MnIr( $t_{mi}$  nm)/CoFe( $t_{cf}$  nm)/Ru(2.0 nm)/Si 基板[( $t_{mi}$  nm,  $t_{cf}$  nm) = A (40, 60), B(60, 80), C(40, 80), D(60, 120)] の偏極中性子反射率<sup>2</sup>. ● は  $R_{++}$ , △は  $R_{-}$ , ○は  $R_{+-}$  ( $= R_{-+}$ ) である.  $R$  は反射率下付の符号は順番に入射中性子スピンの状態, 反射中性子スピンの状態を表す.

スピンを MnIr/CoFe 界面に誘起した. 測定は磁場 1 kOe を面内方向かつ交換バイアスと垂直な方向に印加して行った. 図 4.4.3 に結果を示す.  $R_{++}$  と  $R_{-}$  はそれぞれ印加磁場方向に平行, 反平行に偏極した中性子がスピンの向きを変えずに反射した反射率である.  $R_{+-}$  ( $= R_{-+}$ ) は反射中性子の中で反射の際に中性子スピンの向きが逆転している成分 (SF: スピンフリップ成分) であり, SF が 0 でないことは印加磁場と垂直方向 (つまり交換バイアス方向) の磁気モーメント, つまりピン止めスピンの試料膜内に残っていることを示唆している.

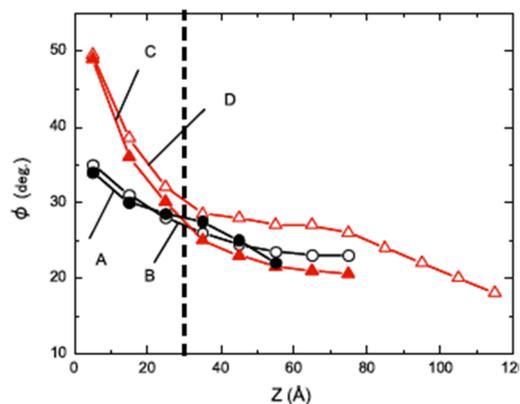


図 4.4.4. MnIr/CoFe 界面でのスピンの傾き角  $\phi$  の厚さ方向依存性<sup>2</sup>.

これらの反射率データを解析した結果, MnIr/CoFe 界面付近の磁化ベクトルは印加磁場方向に対して図 4.4.4 のような傾き  $\phi$  を持つことが分かった. すなわち, どの試料の磁化ベクトルも MnIr 層との境界 ( $Z = 0$ ) に近づくにつれて印加磁場方向からの傾き  $\phi$  を増し, その傾きは MnIr 層の成膜時に 300 °C の熱処理をした試料 C, D の方で顕著であった.  $\phi$  が大きいことはそれだけピン止めが強いことを示しており, ピン止めされた Mn スピンが試料 A, B では MnIr/CoFe 界面 1 nm の領域に, 試料 C, D では同じく 3 nm の領域に存在していることが分かった. すなわち, MnIr 層成膜時に加熱処理したことによりピン止めされた Mn ス

ピンの領域が広がり、それが交換バイアス効果の増大につながっていることを示唆している。

表 4.4.2 に中性子反射率計の代表的な研究対象を示す<sup>6</sup>。すでに説明したように、学術的に重要な分野も多く含まれているが、表面・界面の存在によって誘起される機能を利用した産業利用に関しても多くの研究テーマがある。

表 4.4.2 中性子反射率計の代表的な研究対象。

情報・通信	フォトレジスト, Low-k, High-k 材料, HDD, 量子ドットレーザー, フォトニック結晶
化学	触媒, 腐食, 界面活性, 接着, 粘性, 濡れ
エネルギー	燃料電池, 太陽電池, 超電導材料, 水素吸蔵材料
医療・生体	生体膜, バイオセンサー
繊維・素材	撥水・親水処理
機械	摺動, 潤滑, 接合, センサー
鉄鋼・金属	熱処理, 塗装, めっき, 酸化膜
建設	軽量構造材料, 耐候性材料, 遮光ガラス
食品	包装フィルム, 濾過, 分離・精製, 生分解性プラスチック

国(文部科学省)は平成 13 年から大強度陽子加速器施設「J-PARC(Japan Proton Accelerator Research Complex)」の建設が始まり、将来の中性子利用が重要視されるのに備えるため、平成 18 年度から平成 23 年度(東日本大震災のために実験が行えたのは平成 22 年度まで)にかけて、中性子利用技術移転推進プログラム<sup>7</sup>(トライアルユースとして知られている)を実施し、中性子産業利用の促進のため、産業界への中性子利用技術の移転を図ってきた。上述のように、中性子反射率法は、産業利用の観点からも有用であり、このプログラムによって、SUIREN では以下のような実験が行われた。

- ・ 中性子反射率による単分子層修飾金電極の構造解析
- ・ Bi 系高密度光記録材料薄膜の深さ方向の組成分布解析

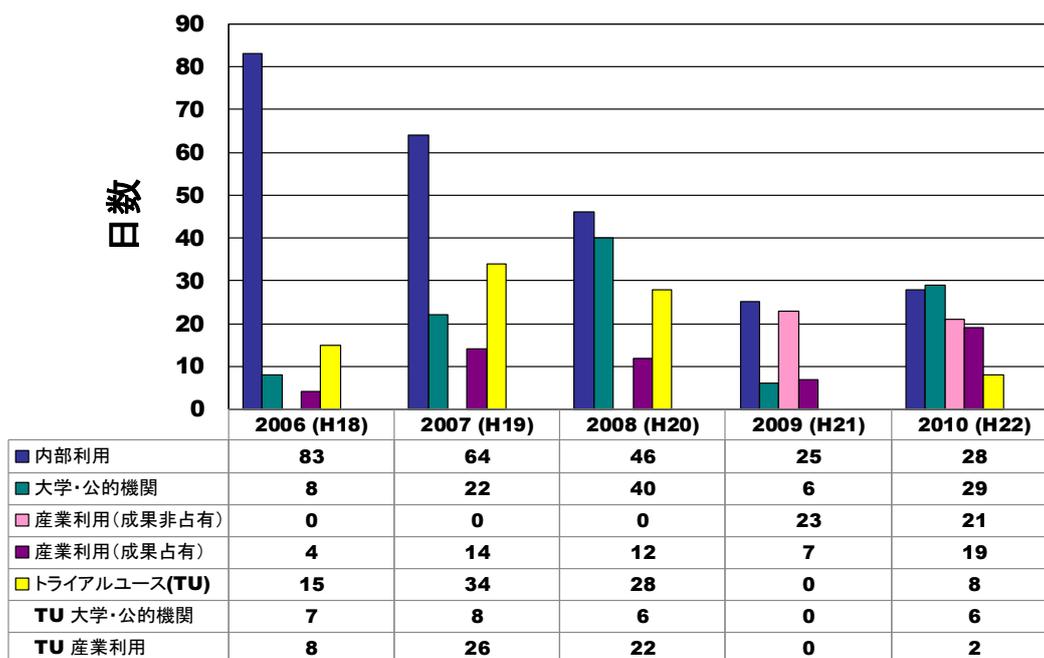
<sup>6</sup> 平成 18 年度科学研究費補助金【基盤研究(C)】 X 線・中性子解析による「埋もれた」界面の科学に関する調査 中間報告書 研究代表者 桜井健次 より抜粋

<sup>7</sup> 「中性子利用技術移転推進プログラム」業務実施結果報告書  
[http://www.mext.go.jp/a\\_menu/shinkou/ryoushi/detail/1323226.htm](http://www.mext.go.jp/a_menu/shinkou/ryoushi/detail/1323226.htm)  
 反射率だけではなく多くの測定例が掲載されている。

- ・ NdFeB の表面磁気構造評価
  - ・ コンデンサ界面の解析
  - ・ Fe/炭化物スパッタ多層膜の中性子反射率測定による水素トラップ状態の検討
  - ・ 中性子反射率によるバイオ燃料電池電極界面の構造解析
  - ・ 磁気ヘッド膜の反強磁性／強磁性界面 における磁気構造の評価
  - ・ 中性子反射率法によるシロキサン樹脂膜の評価
  - ・ TiO<sub>2</sub> 薄膜の 5nm 不完全極薄膜の薄膜密度の測定技術の調査
  - ・ 多層膜中の酸化膜に挟まれる 10nm 金属膜の正確な膜厚と密度の測定技術
  - ・ 合わせガラスにおける中間膜/ガラス界面の評価
  - ・ 銅エポキシ樹脂接合界面の中性子反射率測定による研究
  - ・ 垂直磁気記録多層薄膜界面磁気構造の解析
  - ・ シリコンを添加したダイヤモンドライク カーボン (DLC-Si) 薄膜の表面構造解析
  - ・ 鉄鋼材料の表層酸化物の組成および構造解析
  - ・ 磁気デバイス用反強磁性／強磁性交換結合膜における界面磁気構造の解明
  - ・ 水素フリーDLC 膜の膜密度評価
- など

上記の中には、外部の方々が日本原子力研究開発機構の研究施設・設備を利用できるように原子力機構が設けている施設供用制度での本格的な利用に移った研究テーマもあるが、中性子反射率法に限らず、JRR-3 での産業利用件数が右肩上がりに増加している中、東京電

表 4.4.3 SUREN の利用実績の年次推 (2006 年度 - 2010 年度)



力ホールディングス 福島第一原子力発電所の事故を受けて制定された「核燃料施設等に係る新規規制基準」への適合性審査のために長期間にわたり運転を休止している事は、非常に残念であるとともに、世界的にも肩を並べる中性子ビーム利用実験が可能な、国内唯一の大型試験研究炉である JRR-3 を有効に活用できないのは、人材育成、学術研究、産業界における国際競争力の維持にとっても大きな損失である<sup>8</sup>。

表 4.4.3 に 2006 年度から 2010 年度の間 SUIREN の利用者及び利用制度ごとの利用日数の年度推移をまとめた。SUIREN の場合には、上述の中性子利用技術移転推進プログラムが有効に機能し、同プログラムの中から、施設共用制度による成果占有、成果非占有利用を合わせた有償利用に移っていった事を読み取る事ができる。

JRR-3 の運転休止が長期化する一方、2008 年から J-PARC の物質生命科学実験施設 (MLF) で、大強度パルス中性子を利用した ARISA-II (BL16) がコミッションングを経て、本格的な運用を始め、その後 SOFIA として生まれ変わったのに加え、BL17 にも偏極中性子反射率計「写楽」も 2012 年度から一般利用課題の受け入れを開始しており、SUIREN の利用者はそれら 2 台の中性子反射率計や海外の実験施設の利用に移行していると考えられる。“Every neutron is good neutron.”に象徴されるように、中性子反射率法は、JRR-3 のような定常中性子源でも、MLF のようなパルス中性子源でも同様に行うことができるが、特定のピークの強度や幅に解析の主眼があるのではなく、ある  $q$  範囲の中性子反射率曲線 (反射率プロファイル) 全体を解析する事によって構造パラメータを得るプロファイル解析が本質的な反射率法にとっては、まさに、ある  $q$  範囲の反射率プロファイルを一度に得ることのできる飛行時間法が自然であるパルス中性子源を利用した方が有利である<sup>9</sup>。

以上のような状況から、SUIREN の存在意義は以前に比べて薄れていると考えるのが自然である。一方で、SUIREN と SOFIA、写楽を比べた場合に、SUIREN の方に大きく有利な点もあるのは事実である。まず、大強度パルス中性子源に設置された装置のように、装置を囲む頑強な生体遮蔽が必要ないために、試料回りがオープンスペースで試料環境装置が扱いやすいのは大きな利点である。また、イベントレコーディングを採用する MLF のデータ収集システム (DAQ) では、中性子のカウント数が数値化されるまでの過程がブラックボックスであり直感的にわかりにくいのに比べ、時間軸等に関するデータを持たずに、単純にある測定条件 (たとえば散乱角  $2\theta$ ) に対して 1 対 1 で中性子計測数が得られる SUIREN の方が、データ収集が単純でわかりやすく、特に中性子反射率測定を初めて行う方にとっては原理の理解が容易であり、特に学生の教育目的には適していると考えられる。

また、ある程度長時間の実験時間が確保できるため、結果を見ながら新たな測定条件を考

<sup>8</sup> 平成 30 年 11 月 7 日付けで新規規制基準への適合性確認について、原子炉設置変更許可を取得後、設計基準事故を超える事故に備えた設備の設置、建物・構築物の耐震改修など必要な安全対策工事を適切に実施し、2020 年 10 月の運転再開を目指している。

<sup>9</sup> 定常中性子源でも飛行時間法を使う事は可能である。中性子反射率計で利用されている一例は、ANSTO の Platypus (<https://www.ansto.gov.au/research/user-office/instruments/neutron-scattering-instruments/platypus/technical-information>)。

えるような実験や時間のかかる新たな測定手法の原理実証や中性子利用実験技術開発など、MLF の中性子反射率計では難しい研究テーマの実施が可能である。さらには、ここ数年、MLF の 2 台の反射率計の一般利用課題での要求日数に対する充足率が下がっており、それを補填する役割や、MLF に比べて安価な利用料金の設定や、利便性の高い利用支援を提供することで、一定の産業利用の需要も見込まれる。以上のような教育的な観点(人材育成)、産業利用の推進の観点、すぐには結果の出ない新たな中性子利用実験技術の開発など、SUIREN を今後も維持する合理的な理由は間違いなく存在する。しかし、SUIREN の存続は、利用者からの要望があり、そこからの支援が得られること、装置の運用に対して必要な予算や人的資源の投入が可能である事が大前提である。早急に、これらの条件が満たされているかどうかを精査する必要がある。

## 4.5. BIX

### 4.5.1. 現状

炉室 1G ポートに 2 台の生体物質構造解析装置 BIX-3 及び BIX-4 を設置している (図 4.5.1)。この 2 台の装置は、Si 完全結晶を水平方向にベントしたモノクロメータと中性子イメージングプレート (IP) を組み合わせて構成され、その基本的性能は同じである。実際に BIX-3, 4 で使用しているモノクロメータでは、Si(111)を用いており (当初 BIX-3 では有機分子用に Si(311)も利用していたが、現在は生体高分子専用となっている)、BIX-3 では  $2.9\text{\AA}$ 、BIX-4 では  $2.6\text{\AA}$  に単色化された中性子を利用する。中性子 IP は  $490\text{mm} \times 450\text{mm}$  を 2 枚使用し、試料からの距離は  $200\text{mm}$  で円筒型に設置している。BIX は格子定数  $100\text{\AA}$  程度までの結晶を対象とし、上記の設計から最高で  $d=1.5\text{\AA}$  (BIX-3)、 $1.4\text{\AA}$  (BIX-4) の分解能で測定することが可能である。また、ゴニオメータと一体化した液体窒素ガス吹付型低温装置も導入済みであり、低温 ( $100\text{K}$ ) 下での回折データ収集も可能である。

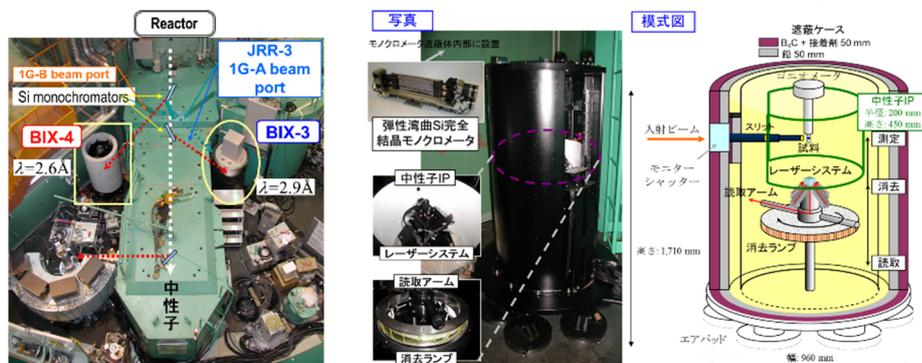


図 4.5.1. BIX-3, BIX-4 の概要および装置構成。

2 台の装置は 1999 年 (BIX-4 は 2002 年) から生体高分子 (タンパク質および DNA) 結晶からの中性子回折データ収集に供され、これまでに計 21 個の立体構造がデータベース (Protein Data Bank: PDB) に登録されている (図 4.5.2)。現在、全世界で 151 個の中性子構造が PDB に登録されているが、JRR-3 が稼働していた 2010 年時点では BIX-3 および 4 が全世界の約半数の構造決定を担っていた。このように「量」の点では世界に後れを取っている状況であるが、「質」の点では単色中性子の利用という特色から分解能および統計値の双方で今なお世界でも最高水準にあると言える。

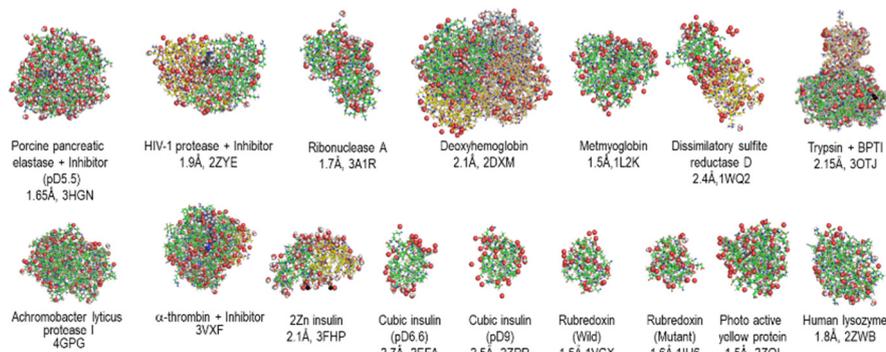


図 4.5.2. BIX-3, BIX-4 で構造決定された生体高分子の構造例。

#### 4.5.2. 今後の整備・開発

世界の他の回折装置と同等、さらに凌駕するためには、以下の整備・開発が必要不可欠と考えている。

##### ① 高精度中性子回折データ収集のためのモノクロメータ更新

複数の波長から使用する波長を選択できる機構を導入することで、研究試料に合わせた波長を選択することを可能とする。これにより、高い回折能を持つ結晶に対しては、使用波長をより短い波長に切り替えることで、従来の波長が固定された使用法では得られなかった高分解能測定を実現する。一方で、結晶の格子長に応じてより長い波長を使用することにより、従来困難であった大型分子からの回折データ収集の実現を目指す。後者については、長波長側の中性子強度の観点から、3.の回折装置設置場所変更、との組み合わせが重要である。前者を目的とした2波長を選択（Si (111) と Si (311) の遠隔切り替え）するシステム（図 4.5.3）については、所属機関において予算を確保済みで、実装のめどはついている。また現在、低モザイシティ PG の開発（共同研究代表者：J-PARC センター・柴田氏）に参画しており、この PG による湾曲形状モノクロメータの導入検討も並行して進める。

##### ② 高強度中性子ビーム利用のための集光系の設計・導入

楕円スーパーミラー集光系を設計・導入し、回折ピーク強度の増大による積分強度の S/N 比向上を図る。これによって、従来の大きさ (>2mm<sup>3</sup>) の結晶からの測定時間 (1~2 サイクル) を 7 割から半分程度に短縮、もしくは従来よりも小型の結晶 (1mm<sup>3</sup> 程度) からのデータ収集も可能とすることで、従来よりも数多くの回折データ収集を実現する。また、1.のモノクロメータ更新との組み合わせで、従来よりも高分解能かつより大型分子結晶からの回折データ収集も期待できる。なお、導入する場合は、J-PARC・阪大（石英基板）、もしくは京大複合研・理研・KEK・北大（金属基盤）が開発を進めている中性子集光楕円スーパーミラーを考えている。

##### ③ 回折装置設置場所の変更

炉室からガイドホールへ設置場所を変更することで、バックグラウンドを抑えた S/N 良い測定を可能とする。移設場所としては、ガイドホールの冷中性子導管の上流が好ましい

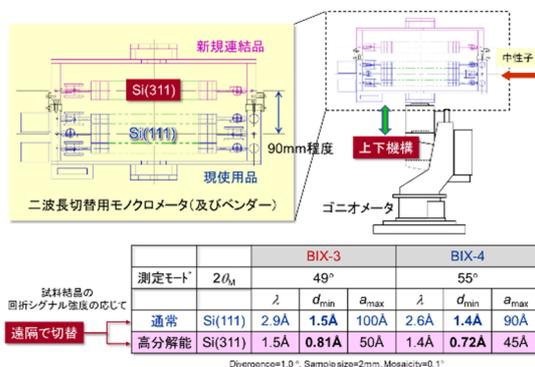
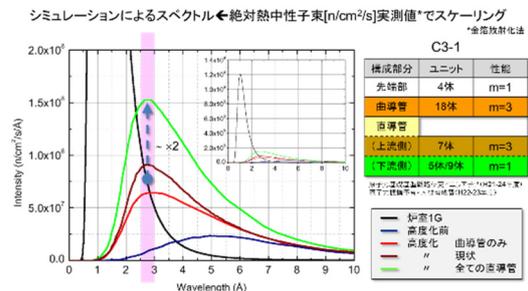


図 4.5.3.モノクロメータ更新計画（2波長切替）。



短波長側の輸送効率の向上 → 短波長側強度の増大  
特性波長のシフト  
λ > 2.6Å: メリット有り: 波長可変により大型格子へ対応可

図 4.5.4.中性子スペクトルのシミュレーション。

(先日廃止連絡があった C1-3 も候補)。より確度の高い検討は研究炉田村氏からの報告を待つ必要があるが、既報のデータやシミュレーション結果をまとめると、JRR-3 で計画が進められている(一部実施済み)冷中性子導管のスーパーミラー化により、 $2.5\text{-}3\text{\AA}$  をピークとした中性子の強度増強が予想される(図 4.5.4)。よって、ビーム強度の観点からも、このピーク付近より長い波長の中性子を利用する場合にガイドホールへの移設のメリットが大きいと見込まれる。移設は 2 台の回折装置のうち 1 台を考えているが、1.のモノクロメータ更新に関連して、多様な波長を選択可能とするビーム取出し散乱角可変機構を有した PG モノクロメータの導入が大型分子からの回折データ収集には必須である。また、2.の集光系の設計・導入との組合せが実現すれば、測定対象試料結晶の更なる拡大が見込まれる。これを実現するには、散乱角可変機構に対応した遮蔽機構や散乱角変更に連動する光学系・検出器回転機構の新設、C1-3 への移設の場合には石床新設や周辺の遮蔽体の増強等の設置コストの確保が重要な課題である。

#### 4.5.3. サイエンスの展開

タンパク質を代表とする生体高分子は、生命活動において中心的な役割を担い、医療・環境・資源などの産業とも深く関わっている。医療においては医薬品そのものとして、環境においてはその浄化に、資源としては水素やレアメタル確保のための重要な材料として重要な商品となる。その中でも医薬品としてのタンパク質は、世界的な戦略商品としての地位を確立している。既に PDB には、14 万件を越える立体構造が登録されている。その解析対象となるタンパク質の分子量は  $5,000\sim 500,000$  またはそれ以上と広く分布している。タンパク質研究において、膜タンパク質や超分子複合体などの立体構造解析に基づく生命機能の解明は、現代の生命科学研究におけるいわゆる「花形領域」である。

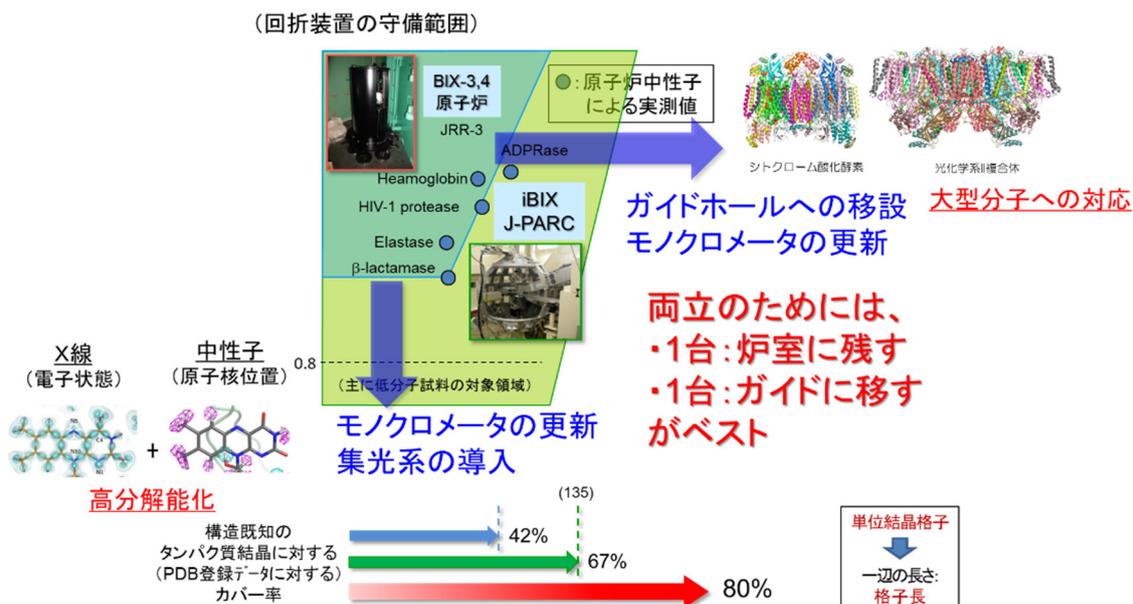


図 4.5.5.装置の高度化で実現するサイエンスの展開。

上述の整備・開発により、「質」「量」を兼ね備えた回折装置の設置が実現し、JRR-3 停止前のように、十分に世界と渡り合える装置としての運用が可能となる。大型分子に対応するという観点では、上述の膜タンパク質や超分子複合体からの回折データ収集の実現により、多様なタンパク質機能の解明とともに得られた知見に基づく人工光合成システムの創製等の産業展開への貢献も期待できる。また、高分解能化という観点では、超高分解能 X 線回折データと組み合わせることで、精緻な原子核位置に基づく軌道電子の議論が可能となり、量子論を考慮した生体分子の機能解明という新たな学問領域の創成が期待される。上記の両方を実現するために、1 台をガイドホールに移設し大型分子への対応を可能とし、1 台を炉室に残し高強度中性子ビーム利用による高分解能データ収集を可能とすることが必須と考える。これにより 2 台併せて世界を凌駕する運用が実現する (図 4.5.5)。

#### 4.6. AGNES

AGNES は JRR-3 ガイドホールの C3-1-1 ポートに設置されている中性子非弾性散乱分光器である。図 4.6.1 に示すように、5連の PG002 モノクロメータにより特定波長（標準モード：4.22Å または高分解能モード：5.50Å）の中性子ビームを取り出し、それを2連のフェルミチョッパーによりパルス化する。これを試料に照射し、試料によって散乱された中性子を試料から 1.8m 離れた 328 本の中性子検出器（散乱角 10° から 130° まで 1° 毎に置かれている）によって同時に測定する。中性子の飛行時間と散乱角に対する強度データから、動的構造因子  $S(Q, E)$  を決定する。AGNES で測定できるエネルギー領域とエネルギー分解能は以下の通りである。

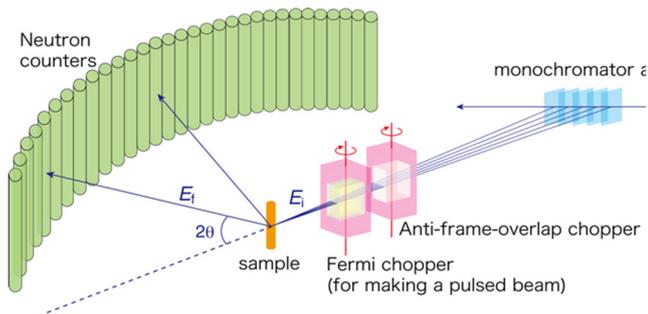


図 4.6.1. AGNES の原理図。

標準モード： $0.2 < Q/\text{Å}^{-1} < 2.7$ ,  $-3 < E/\text{meV} < 20$ ,  $\Delta E = 120 \mu\text{eV}$

高分解能モード： $0.15 < Q/\text{Å}^{-1} < 2.1$ ,  $-2 < E/\text{meV} < 10$ ,  $\Delta E = 49 \mu\text{eV}$

試料環境はトップローディング式のクライオファーンネスにより 6~800 K、圧力は液体圧で 500 MPa まで、気体圧で 200 MPa まで（いずれも圧媒体は任意）の測定が可能である。また、気体雰囲気下測定、低温蒸着試料測定、伝導度との同時測定など多彩な試料スティックが用意されている。

これらの装置を用いて、これまでに液体（イオン液体、水溶液など）、ガラス（ボゾンピーク、 $\beta$ 緩和）、ナノ細孔中（シリカ多孔体、MOF）の水、水素吸蔵固体（MOF、金属ナノ粒子）、高分子固体、ゲル、蛋白質（ボゾンピーク、動力学転移）、熱電半導体、単分子磁石などについて準弾性散乱（約 8 割）および非弾性散乱（約 2 割）の研究が行われてきた。図 4.6.2 に AGNES が動き出した 1995 年から 2016 年までの論文統計を示す。JRR-3 の計画外停止などを考慮すると、AGNES が実際に稼動していたのは 12 年間程度であるが、その間に 73 報の論文が出版されている。上記の分野を反映して、J. Phys. Chem. や J. Chem. Phys. などの物理化学専門誌が最も多い。

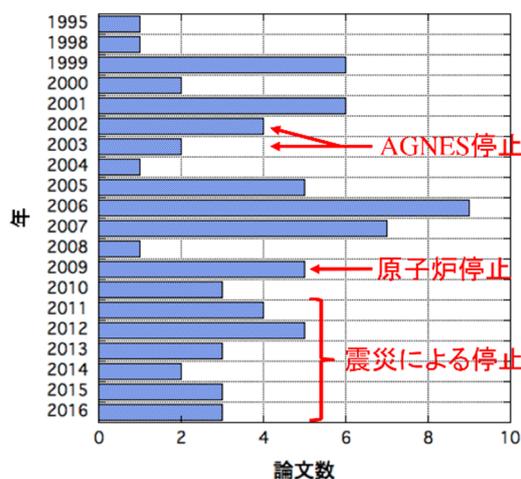


図 4.6.2. AGNES の論文統計。

AGNES は震災以後の停止期間中に以下の改造を行った。

- ① C3 ガイドのスーパーミラー化
- ② モノクロとチョッパー間のコリメータのスーパーミラー化 (上下方向) 高速チョッパーの更新
- ③ 検出器回路の更新
- ④ 検出器高圧電源 (ハイボル) の更新
- ⑤ トップローディング式クライオスタットの更新

このように、改造はおよそ可能な全ての箇所について行われた。特に時間と経費を費やしたのは、これまでの Ni ノーマルガイドを 3Qc のスーパーミラー (SM) ガイドに置き換えたことである。この詳細については、図 4.6.3 に模式的に示す。C3 ガイドは高速中性子を除去するために 15m の曲導管

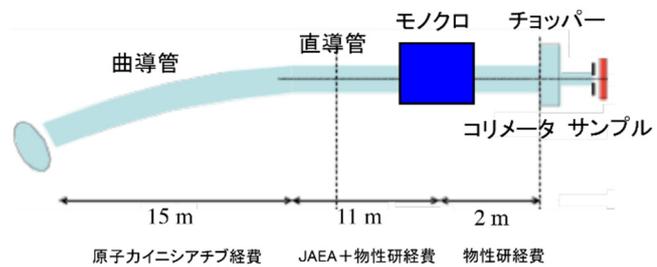


図 4.6.3. スーパーミラーガイド化の模式図。

を使用しているが、その部分とその下流の直導管 (11m) の両方について SM ガイド化した。さらに、モノクロとチョッパーの間にあるコリメータ部分についても上下面を SM 化した (側面は  $Q$  分解能を維持するためにボロンゴムのまま)。

SM 化によって期待される強度の増大 (モノクロ位置) を、図 4.6.4 に波長の関数として示す。標準モードで使用する  $4.2\text{\AA}$  の中性子については約 6 倍、設置予定の Ge311 モノクロで使用する  $2\text{\AA}$  では 20 倍以上の増強が見込まれる。コリメータによる強度増加は 1.5 倍程度と推定しているため、両方で 10 倍程度の強度増加が期待される。この強度を用いれば、これまで 3 時間程度かかっていた水の準弾性散乱が 20 分以内で測定できる。また、強度増加を活かして、Mica002 モノクロによる高分解能測定 (分解能  $15\mu\text{eV}$ ) や Ge311 モノクロによる中性子エネルギー減少側の測定 ( $\Delta E < 10\text{meV}$ ) も計画している。上記の (3)-(5) の改良では、大きな低ノイズ化が期待される。AGNES は震災以前に行った徹底した遮蔽体の増強によりノイズレベルは弾性散乱シグナルの  $1/500$  程度であったが、これにより  $1/1000$  以下まで下がると期待される。(6) で導入したトップローディング式のクライオファーンネスは、現在考えられる最高性能のもので、測定温度域は  $3\text{--}800\text{K}$ 、2 時間で  $3\text{K}$  まで冷却できる。

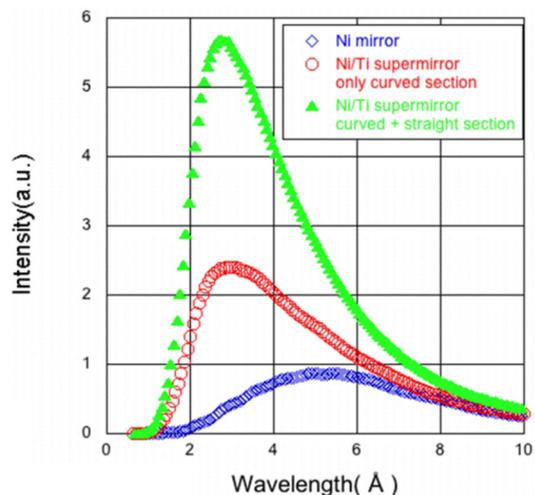


図 4.6.4. SM ガイド化による強度増加。

以上のように AGNES の性能は震災前に比べて、別の装置と言えるほどの改良がなされた。大強度化を活かして、今まで難しかった少試料実験、多数試料実験、特殊環境実験を行うことができる。ちなみに、QENS2018 で発表された対象は一部の極少量試料（生体関連試料や新規合成試料）を除き、全て測定可能である。特に、高圧実験など、すでに存在する豊富な試料環境を活かした研究では、早期に成果をあげることができる。

AGNES の将来計画を考えるにおいて、最も重要なのは J-PARC との相補利用である。AGNES は 120, 50, 15  $\mu\text{eV}$  とエネルギー分解能を変えることによって、1 ps $\sim$ 100 ps の時間領域のダイナミクス研究が可能である。従って、100 ps 以上の高分解能をもつ DNA, VIN-ROSE との組み合わせは理想的である。もちろん、AGNES の時間領域は AMATERAS と重なっている。しかし、AMATERAS は非弾性散乱研究を主な対象にしており、固体物理系の研究対象を中心に、非常に競争率の高い装置である。AGNES を準弾性散乱、特に液体、ソフトマター、粉末固体試料の準弾性散乱に用いるのは、実に合理的である。1 ps $\sim$ 100 ps のダイナミクスが決め手となる研究対象はたくさんある。

#### 4.7. iNSE

中性子スピンエコー (NSE) 法は、中性子スピンを自由度として散乱前後の中性子のエネルギー変化を測定する分光法であり、原理的に中性子波長分散とエネルギー分解能が分離されているので、入射中性子強度を下げることなく、高いエネルギー分解能を達成可能である。(※実際には経路分散がエネルギー分解能を下げるのだが、これは他の結晶分光法や飛行時間法などの中性子非弾性散乱法も同様であり、NSE 法においては後述する通り経路補正が可能である。) 事実、NSE 法は中性子非弾性散乱法において、最高のエネルギー分解能 (ピコ電子ボルトオーダー) を達成している。更に、測定結果は中間相関関数  $I(Q, t)$  として評価されるので、緩和現象などのスローダイナミクスを評価するのに非常に適した手法である。NSE 法は高分子ダイナミクスの検証に非常に重要な役割を果たし、その後、マイクロエマルジョンや脂質などの膜運動やタンパク質のドメイン運動の評価等、ソフトマテリアルや生体物質におけるスローダイナミクス研究の主要な実験手法として認知されている。最近では、長周期らせん磁気構造における磁気スピンのダイナミクス研究や、フラストレーション系におけるスピンダイナミクス研究等にも用いられ、固体物理の分野における NSE の利用も注目されている。

日本におけるスピンエコーの研究は、京大複合研グループと広島大学グループにより開始され、前者はより基礎物理的な見地 (中性子スピン光学) から、後者は物性測定利用 (NSE 分光装置開発) に主眼を置いたものであった。1980 年代に JRR3 の高度化が決定されると、東京大学物性研究所が広島大学・好村滋洋研究室に依頼する形で ISSP-NSE の開発が開始された。ILL の IN11、LLB の MESS に次ぐ、世界三番目の NSE 分光装置であった。実際の装置開発は、当時、好村研の助教授であった武田隆義の多大な尽力に依っていた。装置の一般共用が開始されると、装置担当者は、武田から瀬戸秀紀 (当時、広大助手) に引き継がれ、瀬戸が京都大学に転出すると、長尾道弘 (当時、東大物性研助手) に任された。長尾は、C2-2 ビームポートから C2-3-1 ビームポートへの移設を行い、装置の名称を iNSE と改めた。この移設により、ビーム強度を増強するとともに、速度選別機を用いて波長の切り替えも容易になり、偏極子及び検極子、二次元検出器等の高度化が進められた。長尾が米国 NIST の NSE 分光装置の担当者として転出すると、遠藤仁が物性研助手に採用され、iNSE の装置担当者となった。遠藤は、競争的資金を獲得することで iNSE のさらなる高度化を進め、東日本大震災前には最大フーリエ時間 50 ナノ秒の測定が可能となった。参考の為、図 4.7.1 に iNSE の概略図 (a)、写真(b)、ダイナミックレンジ(c)、性能表(d)を示す。

これまで、iNSE では、高分子・マイクロエマルジョン・誘電体・磁性体などでの測定実績を有し、JRR-3 の再稼働後も更に広範な物性分野におけるスローダイナミクス研究に貢献することが期待できる。また、装置開発が非常に困難なことから、稼働中の NSE 分光装置は世界に 9 台しかなく、しかも米国の SNS と NIST にある 2 台の装置は、ドイツ・ユーリッヒ研究所に装置建設を委ねた点を考慮すると、日本に国産の NSE 分光装置があることは、技術継承の点で重要であるし、JRR-3 にとっても利点となり得る。

### JRR-3 再稼働後の iNSE 運営に関して

前述の通り、NSE 分光装置は世界的に希少であり、また需要も拡大している。日本においては、J-PARC・MLF に 2 台の装置（MIEZE 型及び NRSE 型）が建設中であるが、両装置ともにコミッショニングに時間を要していることから、JRR-3 再開後の iNSE の需要は十分に見込める。その為、JRR-3 再開後に速やかに装置調整を再開し、可能な限り早期に共用を再開できるように人的物的資源を充てる事を物性研に期待する。その運営に関しては、(i) ソフトマター、(ii) 固体物理、(iii) 偏極中性子利用等に分野を分類し、共用時期を各分野で分けて担当するなど、負担を分散するなどの工夫が必要であろう。

また、J-PARC の NSE 分光装置が定常状態になれば、iNSE は性能の点で大きく立ち遅れることになるので、同時に高度化計画を進めておくことを推奨する。iNSE は Mezei 型と呼ばれる NSE 分光装置であり、J-PARC の共鳴スピンリッパを用いた装置とは異なった特徴を有する。例えば、現状の最大磁場（0.22Tm）を 2~3 倍増することで、測定効率が一桁程度向上するので、今後も競争力を維持することは十分可能であろう。また、MEZEI 型分光装置の開発技術を継承することは、次世代の NSE 分光装置開発に向けても非常に重要である。

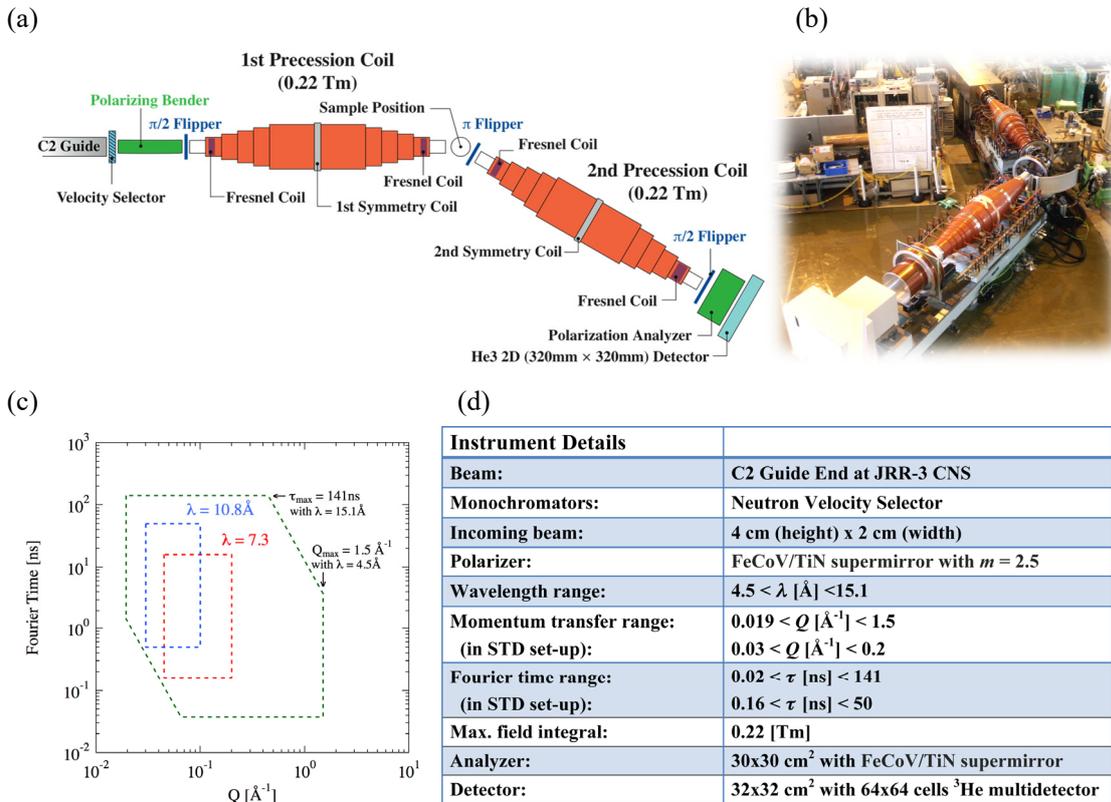


図 4.7.1. iNSE に関する (a)概略図, (b)写真, (c)ダイナミックレンジ, 及び (d)性能表.

## 5. まとめ

### 5.1. 現状分析

2 節に示したようにサイエンスの現状・動向について「ソフトマター」「ライフサイエンス(構造生物学)」「ガラス・マテリアルサイエンス」について分析を行った。科研費採択・論文の出版状況・学会発表状況・代表的な成果と言う点からも、これらの分野において中性子散乱法はこれまで非常によく使われてきていると言える。一方、現在どの分野に共通してみられる傾向は、

- ① 技術開発に伴いこれまでにない試料や材料が開発されている
- ② 上述の試料を対象とした学術研究・材料を利用した応用研究が発展している
- ③ 解析において計算機の積極的な利用が行われている。
- ④ 研究手法は一つの手法ではなく上述の計算機による解析を含め、多くの手法を協奏的に用いて、多方面からの構造・ダイナミクス・機能解析が行われている。

点である。先述のとおり各分野の研究動向においてこれまでも中性子を用いた手法はこれまでも十分に利用されているが、今後は④に示した協奏的な解析手法群の中に地位を築くことが中性子科学の将来において重要である。この視点で見た場合、構造解明のプローブとして同じ量子線としては X 線、電子線、ミューオン、レーザーが存在する。その中で中性子のプローブとしての特徴は、以下の点にある。

- A) 核散乱に由来する同位体効果でありそれを利用したコントラスト変調
- B) プローブとして使用するエネルギーを利用したスローダイナミクス測定
- C) スピンを利用した測定
- D) 透過力の高さを利用した自由な試料環境の構築

したがって、今回取り上げた分光器においても A)–D) の特長を最大限に生かした試料環境・測定手法・解析手法を積極的に取り入れかつ開発を行い、①、②にあるような新たなサイエンスを開拓していくことが求められていると言える。このような姿勢は JRR-3 停止期において各分光器の既存装置の更新・新たな装置の導入が積極的に行われている点に見られる。

また留意すべき点は J-PARC との協奏である。小角散乱・反射率計・準弾性散乱分光器・スピンエコー分光器・結晶回折は同種の装置が J-PARC に存在する。お互いの特長を生かすことによって、中性子科学全体の発展に寄与することが可能になると言える。この点とこれまでの記述した各装置の特長・計画も踏まえて、以下に各測定手法に関する今後の方向性・要望について触れてみたい。

### 5.2. 今後の方向性

#### 5.2.1. 小角散乱

小角散乱法は生命科学・ソフトマターから固体物理・金属材料までの多くの分野の構造研究に用いられている手法である。他の手法に対する優位性は分野に応じて異なるが、新たな技術開発も行われており、現在でもよく使われている手法である。実際、J-PARC において

も小角散乱装置は最もマシンタイムの獲得が困難な装置の一つであり、国内における中性子小角散乱の需要を賄いきれているとは言えない。したがって、JRR-3 再開後の SANS-U、SANS-J の必要性は非常に高い。

加えて、広角度領域の測定を得意とする TAIKAN と異なり両装置とも  $Q < 0.01 \text{ \AA}^{-1}$  領域の測定を可能とする技術開発を行っており、この領域でも比較的短時間で高い統計精度の測定が可能である。この点において両者の共存、むしろ両者が存在することが必然であると言える。更に、SANS-U と SANS-J の 2 台の分光器の関係においては、これまでに開発されたアクセサリ一群と蓄積された経験から SANS-U は主としてソフトマター・生命科学に注力し、SANS-J は(金属)材料科学・核燃関係実験にそれぞれ注力していくことで、更なる役割分担が明確になると考えられる。

再稼働に関しては、それぞれ構成装置の老朽化対策および更新を行っているが、更に進める必要があると言える。特に、データ処理系などは最新のものに変更し、世界標準となっているソフト群の導入を行う事が望ましい。

C3-1-2(MINE1)への新たな中性子小角散乱装置の設置も担当グループがこれまで集積した集光・偏極技術により十分可能であり、SANS-U、SANS-J を補完する装置として位置づけられる。加えて以下の 2 つの点でも有意義である。1 つは鉄鋼材料をはじめとする長時間照射を問題としない試料を対象とした研究である。C3-1-2-SANS はこのような系で実用的なデータを十分取得可能である。2 つ目は、ユーザー拡大に大きく寄与する点である。産業利用において機動力のある装置は非常に重要であり、この C3-1-2-SANS の存在は中性子主格散乱装置群にその機動力をもたらし、それによりユーザー拡大に貢献することが期待できる。

### 5.2.2. 反射率計

JRR-3 の SUIREN、MINE2 という 2 台の反射率計将来を考える上で、J-PARC における写楽と SOFIA との関係を検討せざるを得ない。これまでの実績と言う点では SUIREN、MINE2 における技術開発・研究が J-PARC の 2 台の装置に繋がったことは間違いないが、測定時間の点では水をあげられていることは事実である。しかしながら、実用デバイスを構成する多層膜の、動作中 (インオペランド) の膜そのものや界面の構造変化の観測等は、試料周りへのアクセスが容易で試料環境の自由度の高さを持つ SUIREN、MINE2 の 2 台の反射率計が得意とする分野である。したがって、J-PARC では実施不可能な試料環境や開発要素が多い環境での実験課題を積極的に開拓し、実施していくことが SUIREN、MINE2 の将来において重要である。

また、反射率計は世界的にみると需要が多い装置であり、今後、国内においても J-PARC の装置のみではマシンタイムがひっ迫することも予想される。したがって、試料や実験手法の性質に合わせて、SUIREN、MINE2 に住み分けがなされていくように努力することが重要で、両装置は JRR-3 の再開後も上述の点を考慮しつつ運用していくことが求められる。

### 5.2.3. 結晶回折

BIX 装置群は現在企画している高度化が完了した場合、高分解能と高強度の 2 方向に対応した中性子結晶回折装置として高い性能を持つ装置群となることが期待できる。更に、結晶構造解析において水素位置の同定は膜蛋白質のエネルギー輸送などで重要な課題であることは疑いがない。その意味において、このような試料に対応可能な高強度化と X 線との相補解析による高分解能化に期待したい。しかしながら、一般的蛋白質の構造決定においては、X 線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡が優勢であることは否めない。したがって、水素位置決定が重要かつ BIX 装置群で解明が可能な蛋白質以外の比較的 low molecular weight (記述のあったエネルギー関連物質など) の新たな研究課題の開拓も重要である。

このような視点を留意しつつ JRR-3 再開後の運用を期待したい。

### 5.2.4. 準弾性散乱

今回の JRR-3 の停止期間中に行われた AGNES の高強度化・低ノイズ化は非常に意義深い。本装置の測定レンジは J-PARC の AMATERAS に重なるが、AMATERAS は J-PARC において最もマシンタイムが取りにくい装置である。したがって、AGNES が改良により期待通りパフォーマンスが得られていることが確認できれば、AGNES 測定可能な課題、特にソフトマター系の課題を受け入れることなどにより共存が可能であり、この分野の拡大・発展に大きく寄与すると期待できる。JRR-3 再開後の利用が期待される装置である。

NSE は中性子の独自性が強い分光器であり、他の手法では到達できないエネルギー分解能を実行的な散乱強度で測定可能とする装置である。このエネルギー分解能の分野ではソフトマターやライフサイエンス、磁性物理において未踏の課題が存在している。iNSE は数少ない Mezei 型の NSE 装置であり、この装置における技術を将来にわたって継承していくことは重要な責務である。しかしながら、単純な技術継承装置としてだけでは存在意義が低いので、実用的な装置であることも重要である。この点を考慮すれば、JRR-3 再開後は、人材・資金の投入が不可欠である。

## 5.3. その他

4 節に記載した通り、JRR-3 停止期間中も各装置は不断の改良を続け、JRR-3 の再開後には停止以前の性能を発揮することが予想されている。また、サイエンスの方向性も十分練られており、J-PARC と共存しながら中性子科学の発展に大きく寄与することが期待できる。しかしながら、大きな問題は運用における人材確保である。この保証がなければせっかくの装置の性能を十全に発揮すること、発揮し続ける事は不可能である。この点のサポートが必須である。

また、今後の発展において不可欠な点は計算機科学との連携である。計算機科学との協奏的にデータ処理・データ解析を進めることを積極的に推進する環境整備、例えば、計算機グループの設置なども期待したい。

## 6. おわりに

今回検討した各分光器が対応するサイエンス分野は、新たな現象の発見・新たな物質の開発が盛んに行われており、基礎・応用の両面から現在も発展し続けている。また、それに対する研究手法も多岐に渡っているが、その中でも中性子は独自の特徴を生かし、他の手法では得がたい情報を提供することが可能である。JRR-3 は、本報告書で示したように最先端の研究推進が可能であるだけでなく、利用に対する機動性の高さや利用ジャンルの多様性、さらには教育への活用までの「中性子利用機会の多様性」の確保まで期待できる。したがって、JRR-3 に設置する分光器は、中性子利用ならではのアイデアの発掘とそれを実現する技術開発を続ける必要がある。その意味では、JRR-3 停止期間中でも今回取り上げた分光器では新装置の導入・改良・老朽化装置の更新を行っており、JRR-3 再開後はこれまで以上の性能が期待でき、十分な人材と資金があれば、上述した新分野・新技術の開拓に寄与し、中性子科学を牽引することが可能である。

付録

A. 委員名簿

氏名	所属
遠藤 仁	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
柴山充弘	東京大学 物性研究所
杉山正明*	京都大学 複合原子力科学研究所
武田全康	日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
竹中幹人	京都大学 化学研究所
玉田太郎	量子科学技術研究開発機構
中川 洋	日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
日野正裕	京都大学 複合原子力科学研究所
元川竜平	日本原子力研究開発機構 物質科学研究センター
山室 修	東京大学 物性研究所

\* : 委員長

B. JRR-3 炉室・ガイドホールの装置配置図

