

## BL11 (超高压中性子回折装置) 評価報告

粉末・単結晶回折分科会 主査 木村 宏之 (東北大学)

粉末・単結晶回折分科会副査 神山 崇 (KEK)

有馬 孝尚 (東京大学)

森 初果 (東京大学)

鈴木 昭夫 (東北大学)

八島 正知 (東京工業大学)

亀卦川 卓美 (KEK)

永井 隆哉 (北海道大学)

### § 1 はじめに

超高压中性子回折装置PLANETの開発の主たる目的は、地球深部における鉱物やマグマ中の水(結晶水、水酸基を含む)が地球の構造や進化に与える影響を原子レベルから解明することである。そのために代表者らは大型プレスを装備した高压専用ビームラインを建設し、高温高压下で中性子回折データをその場測定できる実験環境を構築した。さらに以下のテーマにも挑戦している。

・水素が主要な役割を担う現象に着目し、高压下における物質中の水素の振る舞いを調べることで、その発現機構を明らかにする。

・液体-液体一次相転移を始めとする高压下における液体・非晶質固体の特異な振る舞いを調べ、その発現機構を明らかにする。

### § 2 装置の建設、維持および技術開発などに関する事項

主要メンバーの多くが装置提案時と入れ替わったものの、当初のプロジェクトにそって、代表者を中心に一致団結してビームライン建設と運用にあたってきた。世界初の中性子ビーム実験用6軸加圧プレス、低温高压実験用のMito System、GUIソフトなどの開発も行われたことは高く評価できる。一方、原子座標や原子変位パラメータ等の結晶構造パラメータを精度良く導出できれば、材料科学の研究者等もユーザーとして呼び込むことが期待できる。

### § 3 当初計画に対する装置性能の達成度(世界の類似装置を含めた位置づけを含む)

圧力10GPa、温度2000Kまでの広い温度圧力範囲における粉末中性子回折測定が実現し、計画書の10GPa、2000℃を達成しつつある。光学系(スリット系)や検出器系、ラジアルコリメータの導入など、高いS/Nを実現するための様々な工夫がなされ、先行するISIS-PEARLとSNS-SNAPに比べ、分解能、測定可能d-rangeは高压ビームラインとして世界最高の性能となっていて評価できる。例えばプレス発表を行った氷に関する研究では、温度圧力領域の広さではなく、回折装置としての性能の高さが成果に繋がっている。超高压発生という点ではSNAPに及ばないものの、BL11装置グループは温度圧力領域拡大に注力する必要はなく、ユーザーにその技術的開発を任せて良いのではないかと考える。

### § 4 利用者支援に関する事項

各課題2名(JAEA+CROSS)で手厚いサポート体制がとられている。初心者に対する講習会、ユーザー開拓にも取り組んでいる。全課題のうち8割程度が結晶に関する課題である。結晶に関する研究課題については副装置責任者が主として対応し、液体・非晶質の研究課題については装置責任者が主に対応している。結晶に関する研究課題のユーザーは経験のある人が多く、少しの教育で実験を遂行できる。ただしスタッフには相当な負担がかかっており、パワーユーザー制度などの導入も検討されるべきである。

## § 5 得られた成果に関する事項

論文総数は10報程度と少ないが注目度の高い研究に積極的に取り組み、4報のNature関連誌等に結びついている点は高く評価できる。プレス発表や受賞などアクティビティが高い。このことは高圧下における水素や水の状態、軽元素の位置や構造に関して、PLANETでしかできないインパクトのある研究が行われていることの証でもある。しかしながら複数の事故やトラブルがあったことを考慮したとしても、実施課題総数に対する成果数はまだ少なく、今後の改善が求められる。論文の出版などの研究成果に関しては短期、中期および長期の目標を立て、世界最高性能の高圧ビームラインに相応しい成果をあげる高圧中性子回折装置を目指してもらいたい。

## § 6 今後の装置運営・管理・高度化および学術研究テーマに関する事項

鉄-水素系、高圧氷の研究により、国内外の高圧研究者にPLANETの能力を示すことができた。次の目玉となる可能性のあるテーマを抱えているユーザーの開拓に努めてほしい。材料開発では高圧合成が重要な手法であり高圧合成の条件下で実験できるメリットは大きい。そのようなユーザーを取り込むために、学会や研究会等でデータを見せていく活動が必要である。

典型的な幾つかの圧力-温度領域において、どの程度の精度で構造が解けるのか標準試料などを用いて基礎データを取得し、ユーザーに公表してもらいたい。新規ユーザーにとって、実験の勝算を見積もるための非常に重要な情報になる。

とはいえ地球科学メインで出発したPLANETでもあることから、材料合成や高圧物理などについては少しずつ進めていくのでよいのではないかと。

測定可能温度範囲と圧力範囲の拡大が計画されているが、PLANETを用いてどのような学術を牽引していくのか、ビジョンを明確にして実行すべきである。中程度の圧力領域における中性子回折実験をPLANETで受け持つべきかどうか、DACによる超高圧中性子回折実験をPLANETで行う必要があるか、MLF全体や他装置グループとも議論してほしい。短期的には6軸プレスと下部マントル領域に向けた研究開発に集中し、徐々に地球科学と物性・材料科学のテーマに領域を広げて特徴を出すことが、世界的な優位性を維持するベースになると思われる。また、SNAPやPEARLに比べて測定可能範囲が高温領域に広いと、液体・非晶質の科学の進展が期待できる。一方、いかにして世界の優れた研究者やグループを巻き込んで学術の潮流を作っていくのかというビジョンを持っている必要があるだろう。

## § 7 施設への要望

既に記述したように、スタッフには相当な負担がかかっておりパワーユーザー制度などの導入や人員の補充がその職種を含め検討される必要がある。

また、高圧下で精度の高い測定を数多く行うためには、中性子の強度を一層高くする必要がある。一日も早いフルスペックでの安定したビーム運転の実現が必須である。

## § 8 総評

装置グループの多くのメンバーが入れ替わったにもかかわらず、世界的に高い性能を発揮、Nature関連誌等で複数の論文を発表していることは高く評価できる。

SNAPでは見えなかったからPLANETに来たという海外ユーザーもおりPLANETの性能の高さが世界に知られつつある。装置責任者をはじめとしたグループの不断の努力に敬意を払いたい。

装置グループメンバーは地球科学を専門とする方が多いので、物性や化学、材料科学の研究者にアドバイザーとして加わってもらおうと良い。構造解析装置を謳う以上、原子核密度の導出を最終目的とするべきではないだろうか。今後、地球科学だけではなく、高圧物理、高圧化学、高圧を利用した材料科学など幅広い高圧科学への展開が期待される。

また、標準データを示すことが重要であり、論文になっている実験は成功事例なので積極的に広く周知していただきたい。

論文の出版などの成果に関して短期、中期および長期の目標を立てて、それを実現し、PLANETが世界で最も成果が上がっている高圧中性子回折装置となるよう期待したい。