

JAERI-Research

2002-036



JP0350377



生物用非弾性散乱装置 DYANA の概念設計

2003 年 3 月 .

柴田 薫・田村 格良・曾山 和彦
新井 正敏・新村 信雄

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2003

編集兼発行 日本原子力研究所

生物用非弾性散乱装置 DYANA の概念設計

日本原子力研究所東海研究所大強度陽子加速器施設開発センター
柴田 薫・田村 格良・曾山 和彦・新井 正敏・新村 信雄*

(2003年1月31日受理)

生体高分子、生体物質および関連するソフトマターの動的構造を研究することを主たる目的として計画、設計されている生物用非弾性散乱装置 DYANA の最適化デザインの検討結果について述べる。本装置は、日本原子力研究所東海研究所において建設が進められている大強度陽子加速器プロジェクトのなかの物質・生命科学実験施設パルス中性子源に設置することが提案されている。DYANA 分光器は逆転配置型結晶解析分光器でカバーするエネルギー・運動量範囲はそれぞれ数 μeV ~ 数 meV , 0.1 \AA^{-1} ~ 数 \AA^{-1} になる。これらの分光器の仕様により、蛋白質分子の運動を解析が可能になることが期待される。

東海研究所: 〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4

*先端基礎研究センター

A Design of Neutron Inelastic Scattering Spectrometer
for Protein Dynamics Analysis: DYANA

Kaoru SHIBATA, Itaru TAMURA, Kazuhiko SOYAMA,
Masatoshi ARAI and Nobuo NIIMURA⁺

Center for Proton Accelerator Facilities
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received January 31, 2003)

In this research report we describe the design of DYANA, a new neutron spectrometer dedicated for biology, biomaterials, and related soft-matter studies, which will be installed in the materials and life science experimental facility project at the JAERI Tokai establishment. The DYANA spectrometer is an indirect-geometry crystal-analyzer instrument and its energy and momentum transfer range are from several 10 μeV to several meV and from 0.1 \AA^{-1} to several \AA^{-1} , respectively. These specifications will become possible to do the study of protein dynamics analysis.

Keywords: Inelastic Neutron Scattering Spectrometer, Indirect-geometry Crystal-analyzer Instrument, Third-generation Pulsed Neutron Source, Protein Dynamics

⁺ Advanced Science Research Center

目次

1. 序論	1
1. 1 はじめに	1
1. 2 装置検討の目的；生物用非弾性散乱分光器として求められる仕様	1
2. 生物用非弾性散乱装置 DYANA の仕様	2
2. 1 背面反射型結晶アナライザー逆転配置型分光の原理	2
2. 1. 1 逆転配置型分光器の一般原理	2
2. 1. 2 エネルギー焦点法型分光器	4
2. 1. 3 背面反射型結晶アナライザー逆転配置型分光器 の場合の分解能関数、フレームオーバーラップ	5
2. 2 DYANA 分光器の仕様	6
2. 2. 1 プライマリー分光器（ガイド管等）に関する検討	6
2. 2. 2 解析結晶の交換による測定範囲の拡大	9
2. 2. 3 高検出率化のための分光器構造	9
2. 2. 4 偏極スーパーミラーソーラースリットによる 偏極解析実験	10
2. 2. 5 McStas を用いて行ったモンテカルロ シミュレーション	10
3. 他のタイプの分光器との仕様比較	10
3. 1 Multi Disk Copper 分光器との比較	10
3. 2 Back Scattering 分光器との比較	10
4. 結論	11
謝辞	11
参考文献	11

Contents

1. Introduction	1
1.1 Background	1
1.2 Aim of the Spectrometer Design ; Requirement in Studying Protein Dynamics	1
2. Design of Neutron Inelastic Scattering Spectrometer for Protein Dynamics Analysis: DYANA	2
2.1 General Principle of Back Scattering Crystal Analyzer Indirect Geometry TOF Spectrometer	2
2.1.1 General Principle of Indirect Geometry Spectrometer	2
2.1.2 Energy Focusing Crystal Analyzer Spectrometer	4
2.1.3 Back Scattering Type Indirect Geometry Spectrometer ; Energy Resolution Function, Frame Overlap	5
2.2 Specification of DYANA	6
2.2.1 Design of Primary Spectrometer	6
2.2.2 Extension of Accessible Q-E Range on DYANA Spectrometer	9
2.2.3 Special Structure of DYANA for Performing High Efficiency	9
2.2.4 Polarization Analysis Mode with Polarized Super Mirror Solar Collimators	10
2.2.5 Results of Monte Carlo Simulations Calculations by McStas	10
3. Comparison with other Type Spectrometer	10
3.1 Comparison with Multi Disk Chopper Spectrometer	10
3.2 Comparison with Back Scattering Spectrometer	10
4. Conclusion	11
Acknowledgments	11
References	11

1. 序論

1. 1 はじめに

バイオテクノロジー分野ではヒトゲノム情報の解読完了により、現在はゲノムから実際に作られるタンパク質の機能解析が「ポストゲノム」として焦点となっている。日本でも「タンパク 3000」プロジェクトにより今後数年で大量のタンパク質立体構造が決定されていくと予想される。しかし良く知られている通り、静的立体構造だけでは機能発現のメカニズムをすべて解明することは難しい。タンパク質は複雑な分子機械であり、各分子固有の立体構造をもちそのまわりを揺らぐことにより機能を発揮する。タンパク質の機能をその立体構造ダイナミクスに基づいて理解することは自然科学における最も中心的な課題の一つである。そのための実験手段として中性子非弾性散乱の有用性は以前から指摘されていたが、中性子強度が弱いことから実際のタンパク質研究にあまり用いられてこなかった。しかし、世界最高強度のパルス中性子源が我が国で実現することとなり、世界に先駆けて中性子非弾性散乱によるタンパク質の機能解析ができる下地が整った。そこで我々はタンパク質の機能と関わるダイナミクスが観測できるエネルギー領域で中性子散乱強度を最大限にできるハイスループット生体物質用非弾性散乱分光器を建設を計画することにした。

本報告では生体高分子、生体物質および関連するソフトマターの動的構造を研究することを主たる目的として、日本原子力研究所東海研究所において建設が進められている大強度陽子加速器プロジェクトのなかの物質・生命科学実験施設パルス中性子源に設置することが提案されている生物用非弾性散乱装置 DYANA 分光器について目的及び最適化デザインの検討結果について述べる。

1. 2 装置検討の目的；生物用非弾性散乱分光器として求められる仕様

立体構造ダイナミクスのエネルギー範囲から見た中性子散乱を概要すると以下のような議論が成り立つ。

タンパク質の動的特性の時間、空間スケールは大変広く、時間軸では fsec から year にまで、空間軸では nm から m にまで及ぶ。これを 1 台の装置でカバーするのは不可能であり、焦点を絞る必要がある。これまでも、タンパク質の中性子非弾性散乱実験は行われてきた。そこで行われてきたエネルギー範囲とタンパク質動的特性は、すべて水素の非干渉性散乱強度の大きいことを利用して、

[1] 数 100meV の spectroscopy, [2] 数 10meV まで見て振動数分布を得る、[3] Boson

peak を見る数 meV の実験、[4] 準弾性散乱や確率的運動や自己拡散を求めるものが主流であった。一方タンパク質の動的特性と機能の関係で最も重要なものの一つに、hinge bend motion (蝶番運動)があるがこれの観測は皆無に近い。またその動的特性もほとんど判っていない。例えば、運動モードなのか確率的なものか。運動モードとして計算すると数 meV との予測もある。また、その運動特性上強い方向性を持っていることが期待されるので、干渉性散乱による assign が可能である。そこで、我々はほとんどその特性が判っていない hinge bend motion を定常的に観測できる装置を建設を計画する。この運動が確率的なものである可能性もあるので、定常観測エネルギー範囲を 15 μeV から 10meV とする。これは同時に従来行われてきた、数 10meV まで見て振動数分布を得る、Boson 凝縮を見る数 meV の実験、準弾性散乱で確率的運動や自己拡散を求める実験も、従来の数 100 倍の測定効率が得られるものでもある。

hinge bend motion の中性子非弾性散乱測定は過去に何度か試みられているが、散乱断面積が大変小さいので、決定的なデータは皆無である。当該装置はこれを世界に先駆けて観測可能にするものでその意義は大変高い。これにより、酵素反応等のタンパク質の機能発現に原子レベルでの理解が加わり、機能解析への大きな寄与となる。⁽⁹⁾

2. 生物用非弾性散乱装置 DYANA の仕様

パルス中性子源に設置するいくつかの非弾性散乱分光器のタイプのうちエネルギー分解能 $\Delta E < 100 \mu\text{eV}$ の特性をもつ高分解能低エネルギー分光器として、エネルギー解析結晶を背面反射で用いる逆転配置型分光器は非常に優れた特性をもつことが知られている。[Fig.4 参照]

以下に、生体高分子の動的構造を研究することを主たる目的にした高測定効率の逆転配置型分光器の原理と DYANA の仕様について述べる。

2. 1 背面反射型結晶アナライザ—逆転配置型分光の原理

2. 1. 1 逆転配置型分光器の一般原理

パルス中性子源を利用した逆転配置型分光器(indirect geometry spectrometer)の中性子非弾性散乱装置は、一般的に、Fig. 1 に表わすような配置になる。この型の分光器の特徴は、散乱中性子のエネルギーを識別するエネルギーアナライザ—

を試料と中性子検出器の間に置くことにある。エネルギーアナライザーとしては、主に、炭素の層状結晶パイロティック・グラファイト (P.G.)、ゲルマニウム (Ge) や銅 (Cu) 等の単結晶が用いられ、結晶によるブラッグ散乱によってエネルギーが決められる。入射中性子エネルギーは、飛行時間法 (TOF 法) で決められる。例えば、エネルギーアナライザーでエネルギー E_f (meV) を持った中性子だけを選別し、中性子検出器でこれを検出する場合を考える。その選別された中性子の速度 v_f (m/sec) は $v_f = \sqrt{E_f / 5.227 \times 10^{-6}}$ である。したがって、検出器で観測された中性子は、試料から検出器まで、必ず $t_f = (L_2 + L_3) / v_f$ で決められる一定の時間 t_f (sec) を要することとなる。もし、時刻 t で中性子が検出器で観測された時、それは、時刻 $t_1 = t - t_f$ に、試料に入射し散乱された中性子である。その入射中性子のエネルギー E_i (meV) は $E_i = 5.227 \times 10^{-6} (L_1 / t_1)^2$ のように決められる。 L_1 (m) はパルス中性子源と試料の間の距離である。 E_i と E_f の違いが試料に移行されるエネルギー ε である ($\varepsilon = E_i - E_f$)。パルス中性子源を利用した逆転配置型では、 E_f は一定であるが、試料に照射される中性子エネルギー E_i は時刻とともにかわっているため、 ε も t と共に変わり

$$\varepsilon(t) = E_i(t) - E_f$$

となる。また、 E_i の時刻変化に伴って、散乱時の運動量変化 \mathbf{hQ} も時刻 t と共に変化しており、

$$\mathbf{Q}(t) = \mathbf{k}_i(t) - \mathbf{k}_f$$

で与えられる。ただし、 $E_i(t) = \frac{\hbar^2 k_i^2(t)}{2m}$ 、 $E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$ である。パルス中性子源を利用した逆転配置型分光器では、中性子の検出時刻 t を記録することにより、運動量—エネルギー空間の非弾性散乱測定が可能である。

パルス中性子源を利用した逆転配置型分光器は、一般に、(1) エネルギー高分解能のスペクトル測定が容易にできること、(2) 広いエネルギー範囲にわたってスペクトル測定が可能であること、(3) 検出器等の完璧な遮蔽が行いやすく、バックグラウンドの低い測定が可能となること等々の長所をもっている。そして、散乱中性子エネルギーを特定するアナライザーの種類、構造が異なる多くの分光器が考案されてきている。その主な分光器の中から本報告で取り扱う、エネルギー焦点法型分光器について原理を以下に述べる。

2. 1. 2 エネルギー焦点法型分光器

逆転配置型分光器の一種であるエネルギー焦点法型分光器は、エネルギーアナライザーとして、試料から散乱された同一のエネルギーをもった中性子が曲面状に設置されたアナライザー結晶（結晶ミラー）によって中性子検出器の位置に収束されるという特殊な構造をもっている。

結晶ミラーでは、同一のエネルギーをもった中性子を散乱させるために、結晶ミラーのどの部分でブラック反射されても、同じブラック角度 θ_B を持つことが必要である。このため、散乱平面内では、結晶ミラーは、Fig. 2 に示す通り、試料と検出器と結晶ミラーの曲面が同一円（Rowland 円；半径 R ）になるように設計される。この結晶ミラーによる湾曲集光方法は X 線回折の単色化結晶湾曲集光方法として知られているヨハンソン法とおなじ原理である。一方、散乱平面に垂直の方向では、試料と検出器を結ぶ直線に対して回転対称となる曲面をもつように設計される。

このように、エネルギー焦点法型分光器では、散乱平面の垂直、水平の 2 方向にそれぞれ特別の湾曲をした大立体角の結晶ミラーを散乱中性子のエネルギー解析に用いることで、エネルギー高分解能を保ちながら、なおかつ、散乱中性子の検出効率を著しく向上させている。このため、エネルギー焦点法型分光器は、運動量移行 Q に依存しない非弾性散乱の高精度測定に極めて適した分光器である。

この分光器のエネルギー分解能 $\Delta \varepsilon$ は近似的に以下の式で与えられる。

$$\Delta \varepsilon = 2E_i \left[(\Delta t_p^2 + \Delta t_i^2 + \Delta t_f^2)/t_i^2 + (E_f/E_i)^2 \left\{ (\cot \theta_B \Delta \theta_B)^2 + (\Delta K/K)^2 \right\} \right]^{1/2}$$

ここで、 E_i は入射エネルギー、 E_f は散乱エネルギー、 Δt_p は中性子パルス幅、 t_i は入射中性子の飛行時間（距離： L_i ）、 Δt_i はその不確定さ、 Δt_f は散乱中性子の飛行時間の不確定さ、 $\Delta \theta_B$ は結晶ミラーのブラック角の不確定さ、結晶ミラーを構成する結晶の逆格子ベクター K とその不完全性 ΔK である。

この型の分光器は、まず北海道大学原子工学科で考案され、同大学の線形電子加速器パルス中性子線源を利用して実用化された⁽¹⁾。その後、これをもとにして、LAM 分光器群が高エネルギー物理学研究所に設置された。海外でも、イギリス・ラザフォード-アップルトン研究所の中性子散乱施設 ISIS に設置されている IRIS が同様の形式を用いて設計されている。LAM 分光器群は、上記のエネルギー焦点法を共通の分光原理として、異なる測定エネルギー範囲で最高の性能がだせるように

統一的に設計された 3 つの測定器 (LAM-40⁽⁵⁾, LAM-D⁽⁶⁾, LAM-80ET⁽²⁻⁴⁾) で構成されており、極めて広いエネルギー範囲をカバーしている。その、実質的な測定可能領域は $10^{-6} \sim 10^{-1}$ eV にわたり、中性子分光器としては他に類を見ない広範囲さである。(Fig. 3 参照)

最後に、パルス中性子源を利用してはいないが、エネルギー焦点法型の極限的な形式の逆転配置型分光器であり、現在、最高のエネルギー分解能を実現している背面反射型分光器について簡単に述べる⁽⁷⁾。この形式の分光器は、フランス・グルノーブルの ILL 研究所において、原子炉から取り出される連続中性子ビームを利用して、IN10A&B、IN13 及び IN16 分光器として実現しており、エネルギー分解能は最もよい条件で $\Delta\varepsilon = 0.2 \mu\text{eV}$ に達している。この分光器では、入射中性子側と散乱中性子側にそれぞれ結晶ミラーが設置されている。これらの結晶ミラーでのブラッグ角度 θ_B は 90° であり (背面反射)、さらに、Si 等の完全結晶で結晶ミラーを構成し、エネルギー分解能を著しく向上させている。散乱中性子側の結晶ミラーは固定されている。一方、入射中性子側の結晶ミラーは、入射中性子ビーム経路に沿って高速に往復運動し、そのドップラー効果を利用して入射中性子のエネルギーを変化させている。入射中性子側の結晶ミラーの温度を変化させ、その格子常数の変化を利用して、入射中性子のエネルギーが変えられる場合もある。しかし、この分光器では、測定可能エネルギー範囲が前述の LAM-80ET, IRIS と比較すると狭いのが難点である。このため、IN10B 分光器では、格子常数の異なる幾つかの完全結晶を用意し、測定可能範囲を拡張する工夫がなされている。最後に、以上の原理について詳細は文献 (8) を参照にされたい。

2. 1. 3 背面反射型結晶アナライザー逆転配置型分光器の場合の分解能関数、フレームオーバーラップ

$$\delta\omega = \sqrt{\delta\omega_p^2 + \delta\omega_s^2}$$

$$\delta\omega_p = 2E_i \left[\left(\frac{\delta L_i}{L_i} \right)^2 + \left(\frac{\delta t_i}{t_i} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\delta\omega_s = 2 \left[E_i^2 \left(\frac{\delta t_i}{t_i} \right)^2 + E_f^2 \left[(\cot(\theta_B) \delta\theta_B)^2 + \left(\frac{\delta d}{d} \right)^2 \right] \right]^{\frac{1}{2}}$$

背面反射型の場合の逆転配置型分光器の分解関数を書き下すと以上の式で表せる。ここで、 $\delta\omega_p$ は線源から分光器まで（プライマリー分光器）のエネルギー分解能、 $\delta\omega_s$ は分光器内（セカンダリー分光器）のエネルギー分解能を表す。

また、ここで δd はアナライザー結晶の格子面間隔の不確定さを表し主な結晶では以下の値をとることが知られている。

$$\text{Si}(111) \delta d/d = 1.86 \times 10^{-3}$$

$$\text{PG}(002) \delta d/d = 4.5 \times 10^{-3}$$

Fig.5 は上記エネルギー分解能の式を中性子線源パルス幅、結晶アナライザーブラック角、結晶の格子面間隔の完全性との3成分に分離して全体のエネルギー分解能の決定過程を示している。

この形式の分光器は、解析結晶の種類とブラック角度 θ_B に依って3種類程度に分類されている。(Fig.4 参照)

$$\text{DBS Si}(111) \delta\omega_s = 0.56 \mu\text{eV} \quad dE = 0.80 \mu\text{eV}$$

$$\text{NBS Si}(111) \delta\omega_s = 1.06 \mu\text{eV} \quad dE = 1.50 \mu\text{eV}$$

$$\text{NBS PG}(002) \delta\omega_s = 9.0 \mu\text{eV} \quad dE = 15.0 \mu\text{eV}$$

ここで、DBS は $\theta_B = 90^\circ$ で Si 完全結晶の Si(111)を用いた Direct Back Scattering Spectrometer である。NBS は $\theta_B = 87 \sim 80^\circ$ で Si 完全結晶や PG 不完全結晶をもちいた、Near Back Scattering Spectrometer である。

DYANA はこのうち、解析結晶に PG(002)反射をブラック角度 80° で用い、エネルギー分解能 $\Delta E = 15 \mu\text{eV}$ の高検出効率を目指した分光器である。超高エネルギー分解能を目的としないため、第一飛行距離 $L_1(32\text{m})$ が比較的短めに設定でき、パルス繰り返し周期(25Hz)が短めなことと相まって一時に非常に広いエネルギー範囲 ($-0.3\text{meV} < E < 14.1\text{meV}$) を測定できるユニークな特性をもつ分光器になっている。Fig.6 にフレーム・オーバーラップ(Frame Overlap)の原理および、Table-1 に 25Hz と 50Hz 線源に設置した場合の比較を示してある。

2. 2 DYANA 分光器の仕様

2. 2. 1 プライマリー分光器（ガイド管等）に関する検討

中性子線源から分光器本体に向かい以下のデバイス群 A~J を配置することで、フレームオーバーラップを避けながら、最大限広い波長バンドを分光器本体に入射できることが検討された。

A. Source	Moderator	Liquid H ₂ , None poisoned decoupled
B. Geometry	Moderator-Sample Distance	32 .0m
	Sample-Analyzer Distance	1.0m
	Analyzer-Detector Distance	0.8m
	Total Final Flight Path	35.8m
C. Guide	Type	Straight
	Coating, top and sides	3 x θ c ^{Ni} supermirror
	Channel Width	10 cm
	Channel Height	10 cm
	Moderator-Guide Distance	2.0 m
	Guide Length	28.7 m
	(シャッター内へ挿入を希望)	
D. Guide Funnel (収束管)	Coating, top and sides	4 x θ c ^{Ni} supermirror
	Width at Exit	15mm
	Height at Exit	15mm
	Funnel Length	3.0m
	End of Funnel-Sample Distance	30 cm
E. T ₀ Chopper	Type	?
	Radius to Beam Center	30 cm
	Distance from Moderator	7.5 m (可能ならば更に短く)
	Frequency	25.0 Hz (Option; 12.5 Hz)
	Energy Range[meV]	[65.4 , 0.920] at 25.0 Hz ([16.4 , 0.230] at 12.5 Hz)
	Beam width at chopper	10 cm
<p>(L1=32 m で Guide width 10 cm のため、特性波長$\lambda^* < 2.0 \text{ \AA}$ の条件で試料位置から線源を臨まない Curved Guide が設置出来ないため、Straight Guide にして、T₀</p>		

Chopper を設置する必要がある。)

F. Frame overlap elimination chopper 1.

Type	Disk
Radius to Beam Center	30 cm
Distance from Moderator	8.0 m
Frequency	75 Hz
Open time	8.89 m sec
Beam width at chopper	10 cm
Wavelength Range to Open or Close	0.35 Å

G. Frame overlap elimination chopper 2.

Type	Disk
Radius to Beam Center	30 cm
Distance from Moderator	8.5 m
Frequency	25 Hz
Open time	11.56m sec
Beam width at chopper	10 cm
Wavelength Range to Open or Close	0.99 Å

(Frame overlap elimination chopper 1. が 75 Hz で回転するため第1Frame を通過させて、第2、3Frame からの長波長の混入を遮断するための chopper。また開放時間を 1.415 m sec 長めに設定して、Frame overlap elimination chopper 1. による第1Frame の Sharp edge を損なわないように設定してある。)

H. Frame overlap elimination chopper 3.

Type	Disk
Radius to Beam Center	30 cm
Distance from Moderator	12.0 m
Frequency	25 Hz
Open time	14.74 msec
Beam width at chopper	10 cm
Wavelength Range to Open or Close	0.7. Å

(Frame overlap elimination chopper 2. が通過させた、第4Frame からの長波長の混入を遮断するための chopper。また開放時間を 1.415 m sec 長めに設定して、Frame overlap elimination chopper 1. による第1Frame の Sharp edge を損なわないように設定してある。)

I. Frame overlap elimination chopper 4.

Type	Disk
Radius to Beam Center	30 cm
Distance from Moderator	24.0 m
Frequency	25 Hz
Open time	26.67 msec
Beam width at chopper	10 cm
Wavelength Range to Open or Close	0.35. Å

(Frame overlap elimination chopper 4 & 1 により、波長 Band $\delta\lambda = 4.40 \text{ \AA}$ が立ち上がり、立ち下がり、 $0.35. \text{ \AA}$ で設定される)。

以上の4台の Frame overlap elimination chopper により第6Frame まで長波長の混入を遮断することができる。

これにより、波長幅 $\delta\lambda = 4.40 \text{ \AA}$ の波長幅のビームが得られる。

波長帯は、測定モードにより上記の条件で逐次変更可能にする。

J. Frame overlap elimination mirror

第7Frame からの長波長の混入長波長成分が問題になる場合、設置を考える。

2. 2. 2 解析結晶の交換による測定範囲の拡大

DYANA においては、標準解析結晶 PG(002)以外に、広 Q 範囲用 Ge(311)、高エネルギー分解能用 Mica(004)or(002)の3種類の結晶を分光器内部に設置し、遮蔽体を移動することなく交換可能な構造にすることにより、測定範囲の変更が自由に行うことができる。Energy range: $1\mu\text{eV}\sim 35\text{meV}/4.5$ 桁に広げることが可能となる。Fig. 7に測定可能な Q-E 範囲が示されている。

2. 2. 3 高検出率化のための分光器構造

Fig.8-10 に示すような、アナライザーミラーの昇降移動可能な構造を採用する事により、上記3種類の結晶アナライザーミラーの交換を試料の移動無しに行う事が可能になる。さらに試料を見込む解析結晶の立体角、ガイド管断面の増加等の幾何学的な高効率化により、現在英国 ISIS 施設で稼働中の同形の分光器 IRIS と比較して単純に比較して40倍、ガイドミラーの効率化によりさらに2.5倍程度の検出効率のゲインを期待できる。さらに、線源自身の高強度化(約6倍)を考慮

にいれると、最終的に約 500 倍程度のゲインが期待される。この高検出効率化により、特に微少な試料で測定を行う生体高分子の動的構造の研究等は飛躍的に進むことが期待される。

2. 2. 4 偏極スーパーミラーソーラーズリットによる偏極解析実験

解析結晶、検出器周辺のコンパクトな構造のため、低エネルギー領域で優れた特性を示すスーパーミラー偏極素子が設置可能で、既存の技術で高効率な偏極解析実験が可能になる。これにより現在まで簡便にはできなかった水素を含む物質の干渉性、非干渉性非弾性散乱の分離が容易に行えることが期待される。

2. 2. 5 McStas を用いて行ったモンテカルロシミュレーション

以上、議論してきた DYANA 分光器の仕様に基づき、モンテカルロシミュレーションソフト; McStas を用いて行った。現時点では、モンテカルロシミュレーションの基本的な結果を得ているだけであるが、Fig.11 に、モンテカルロシミュレーションの体系と、エネルギー分解能を示すバナジウム標準試料の弾性散乱スペクトルを示している。シミュレーションの結果から、DYANA 分光器の仕様はモンテカルロシミュレーションの範囲内で実現されている事が明らかになった。

3. 他のタイプの分光器との仕様比較

3. 1 Multi Disk Copper 分光器との比較

同様のエネルギー領域をカバーする分光器として、結合型減速材に設置されるタイプの Multi Disk Chopper 分光器との比較が考えられる。このタイプの分光器は直接型分光器に分類され、エネルギー測定範囲も逆転配置型 DYANA と比較して狭くなる。そのため、一度の測定で、広いエネルギー範囲をカバーできる逆転配置型 DYANA の方がメリットが大きいと期待される。検出効率については、個別の分光器の素子の特性に依存するレベルで拮抗していると推定されるため優位性は不明である。

3. 2 Back Scattering 分光器との比較

解析結晶に完全結晶 Si(111)等を用いるエネルギー分解能 $\Delta E=1\sim 2 \mu\text{eV}$ の Back Scattering(BS)分光器との比較では、解析結晶の反射効率が 2 桁以上、PG(002)を用

いている DYANA 分光器の方が優れている。そのため、 $\Delta E=1\sim 2 \mu\text{eV}$ の BS 分光器は高検出効率を望めない構造になっている。ただ、 $\Delta E=1\sim 2 \mu\text{eV}$ を必要とする測定もいくつか想定されているため、DYANA とは別の範疇に属する分光器として別途建設を計画するのは有意義なことを考えられる。このタイプの分光器は最近原子炉に設置されることにより高効率化が可能なが明らかになっているので、原子炉に設置するか、パルス線源に設置するかを含めて議論する必要があると考えられる。(Fig.12 参照)

4. 結論

生物高分子の動的構造を研究することを主たる目的にした高測定効率の逆転配置型分光器 DYANA の装置検討により以下の特性を示すことが明らかになった。

特徴

高エネルギー分解能($\sim 0.5\%$)

高検出効率(IRIS の約 80 倍以上, 1MW 運転時約 500 倍以上)

広いエネルギー測定範囲 (~ 4.5 桁)

偏極解析の実現

以上の特徴から、線源運転開始当初の弱いビーム強度の時点から十分な成果が期待される”Day 1”分光器と考えられる。

謝辞

本分光器検討をまとめるにあたり、中性子利用開発グループの松林政二氏、相澤一也氏、山岸秀志氏、中村龍也氏、先端基礎科学研究センター中性子構造生物学研究グループ田中伊知朗氏から有用なご意見をいただきました。また、大強度加速器施設開発センターの横溝英明センター長ならびに大山幸夫センター次長からは貴重なご助言をいただきました。ここに感謝いたします。

参考文献

- (1)K.Inoue, Y.Kiyanagi, H.Iwasa, and Y.Sakamoto: Nucl. Instr. and Meth., **178**, 459-568 (1980).
- (2)K.Inoue, T.Kanaya, Y. Kiyanagi, S. Ikeda, K.Shibata, H.Iwasa, T.Kamiyama, N.Watanabe and Y.Izumi: Nucl. Instr. and Meth., **A309**, 294-302(1991).

- (3) S. Ikeda, N. Watanabe, K. Inoue, Y. Kiyonagi, A. Inaba, S. Takeda, T. Kanaya, K. Shibata, T. Kamiyama, Y. Izumi, Y. Ozaki and C. J. Carlile: J. Phys. Soc. Jpn., 60, 3340-3350 (1991).
- (4) T. Kanaya, Y. Kawabata, K. Shibata, T. Kawaguchi, K. Kaji: Physica B213&214, 948-950 (1991).
- (5) K. Inoue, Y. Ishikawa, N. Watanabe, K. Kaji, Y. Kiyonagi, H. Iwasa and M. Kohgi: Nucl. Instr. and Meth., A238, 401-410 (1991).
- (6) K. Inoue, T. Kanaya, Y. Kiyonagi, K. Shibata, K. Kaji, S. Ikeda, H. Iwasa and Y. Izumi: Nucl. Instr. and Meth., A327, 433-440 (1993).
- (7) M. Birr, A. Heidemann and B. Alefeld: Nucl. Instr. and Meth., 95 (1971) 435-439.
- (8) 池田進、柴田薫、外館良衛: "逆転配置型分光器" 「結晶解析ハンドブック」日本結晶学会「結晶解析ハンドブック」編集委員会／編 共立出版. 437-443. (1999)
- (9) Nobuo Niimura, Kaoru Shibata and H. Dieter Middendorf: J. Neutron Research, 10, 163-167 (2002).

Table 1 Comparison of energy windows

 ΔE ; Energy Window [meV]

	25 Hz;JKJ	50Hz;ESS
$\delta\lambda[\text{\AA}]$	4.95	2.47
$\Delta E = 0.00 \sim$	0.00 \sim 27.78	0.00 \sim 2.91
$\Delta E = - 0.30 \sim$	-0.30 \sim 14.08	- 0.30 \sim 1.77

PG(002), $\theta_B=80.$, $E_f=1.87$ [meV], $\lambda_f=6.61$ [Å]

L1=32 [m]@DC_H2

 $\delta E = 15$ [μeV] at $E = 0.0$ [μeV]

Table 2 Specification of DYANA

Name	Indirect Geometry Crystal Analyzer TOF Spectrometer (DYANA)			
Moderator	Decoupled Cold liq.H ₂			
L1 [m]	32.			
L2 [m]	1.8			
Guide	Super Mirror Guide;2Qc			
Solid Angle covered by Analyzer Mirror around Sample position [str.]	1.20 π			
Analyzer Crystal	PG(002) , Ge(311) , Mica(004), Mica(002)			
Final Energy [meV] @ $\theta_B=80\text{deg.}$	1.874	7.247	0.8520	0.2130
Q Range [\AA^{-1}] Scattering Angle[deg.]	0.08~1.88	0.12~3.69	0.06~1.26	0.03~0.63
Q Resolution [\AA^{-1}]	0.05	0.07	0.04	0.02
E Range[meV]	-0.30~14.0,-7.0~35.0,-0.150~0.500,-0.030~0.030			
E Resolution [μeV] $\Delta E/E_i$ [%]	15 (0.8%)	40 (0.6%)	5 (0.6%)	1 (0.5%)
Surface of Moderator (a x b mm ²)	100x100			
Sample Size (a x b mm ²)	10x10			
Frequency [Hz]	25			
Band width of Wave Length[\AA]	4.95			
Spatial Resolution at Counter (a x b mm ²)	10x10			
Filter	Cooled Be for PG(002)			
T0 Chopper (Yes or No)	Yes			
Tail Cutter (Yes or No)	Yes			
Detector	He3 proportional			
Polarizer	Solar Super Mirror Polarizer			

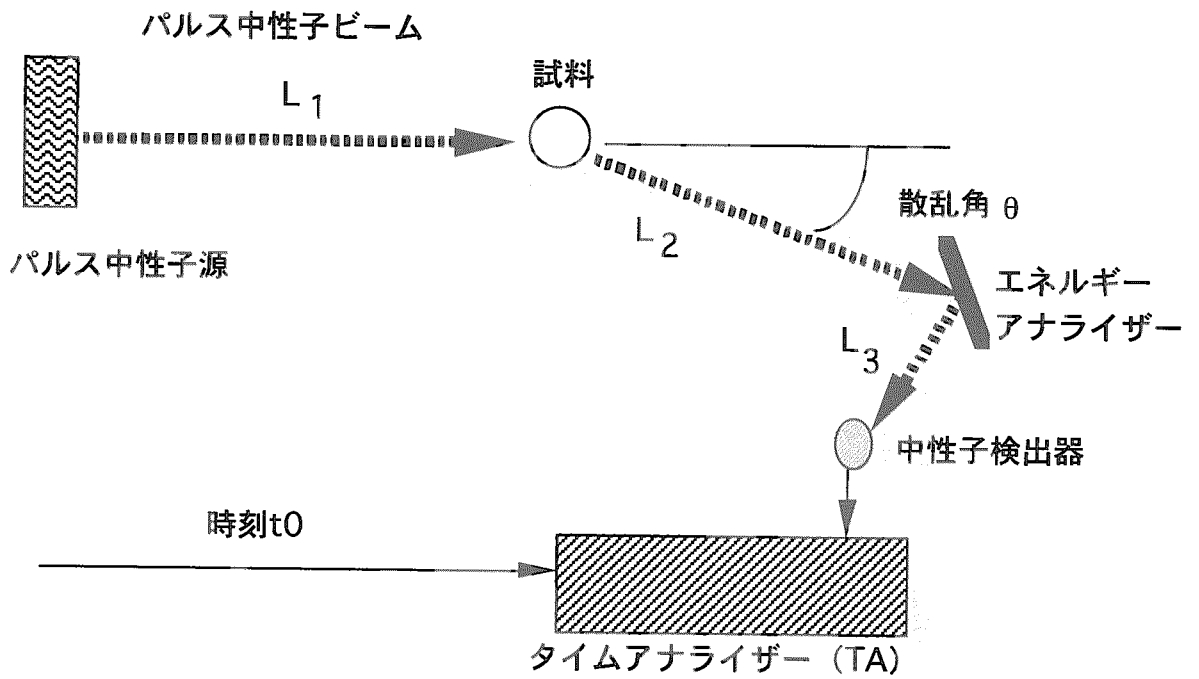


Fig. 1: The general principle of indirect geometry spectrometer

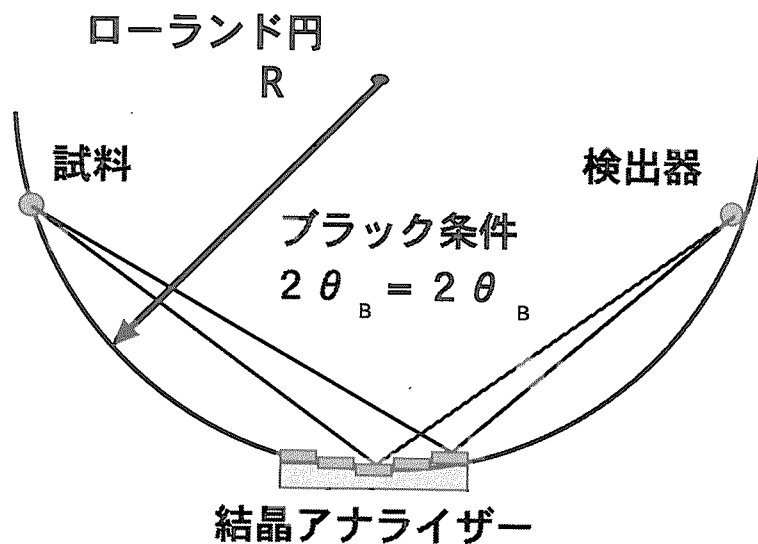


Fig. 2: The general principle of energy focusing analyzer mirror.

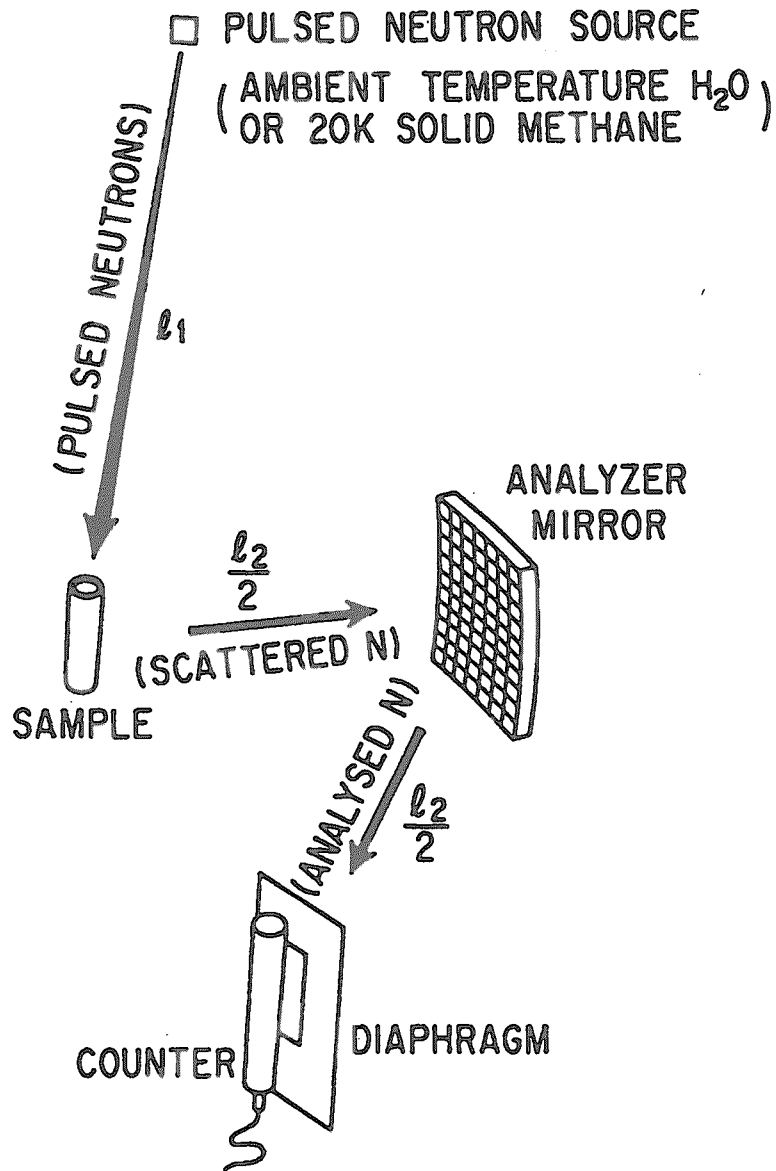
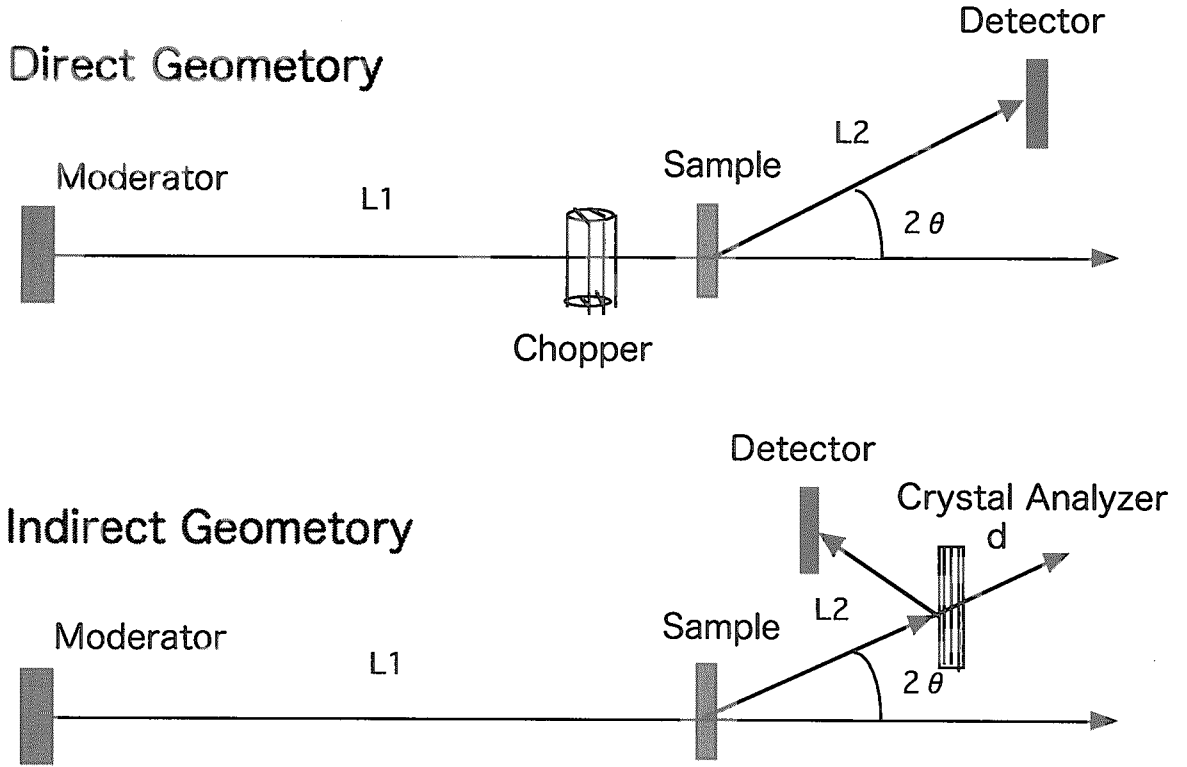


Fig. 3: The general principle of LAM type spectrometer.

パルス中性子非弾性散乱装置



Crystal Analyzer $\lambda = 2d \sin \theta_B$
 $\Delta \lambda / \lambda = \delta d / d + \cot \theta_B \cdot \delta \theta$
 $\theta_B \rightarrow 90^\circ ; \Delta \lambda / \lambda \rightarrow \text{small}$

Back Scattering Spectrometry

Direct Back Scattering

Near Back Scattering

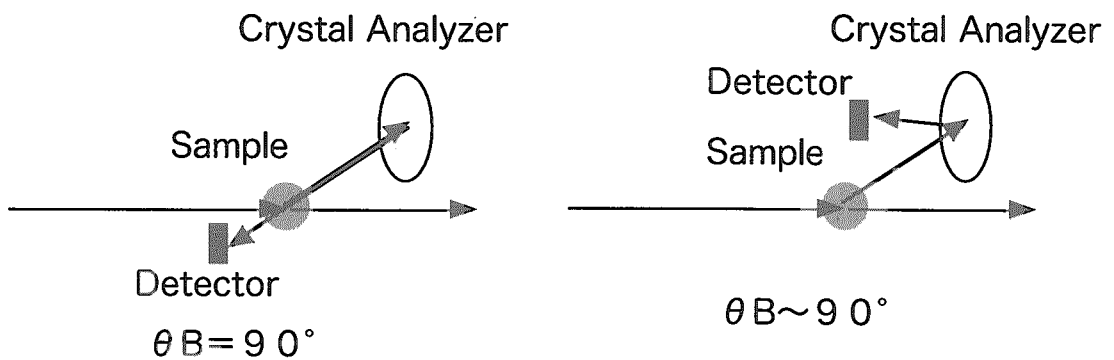


Fig. 4 : The general principle of TOF spectrometer installed in Pulsed Neutron Source.

This is a blank page.

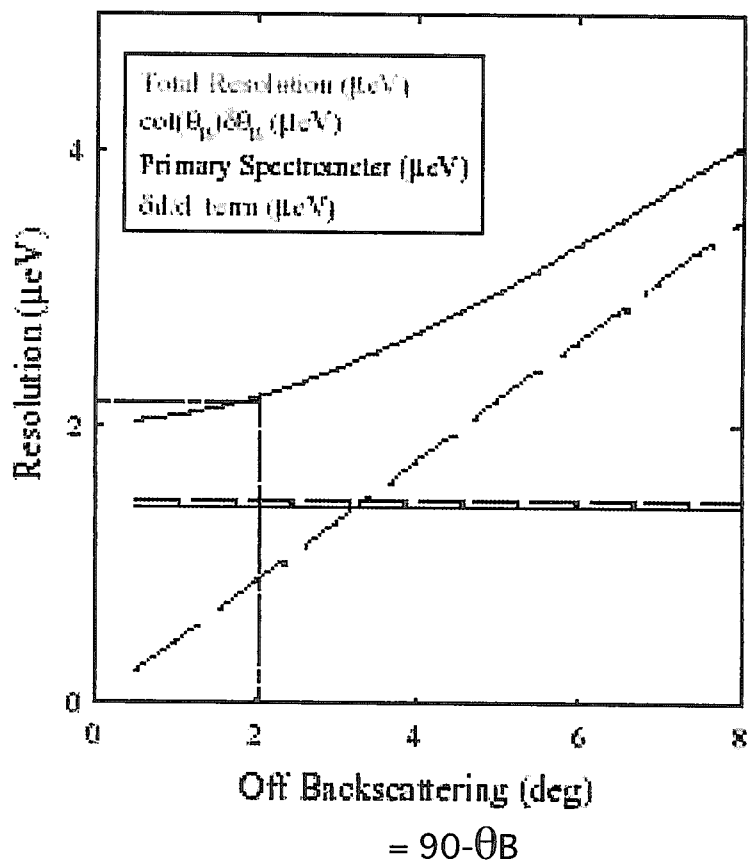


Fig. 5: Three contributions for total energy resolution on an indirect crystal analyzer spectrometer

This is a blank page.

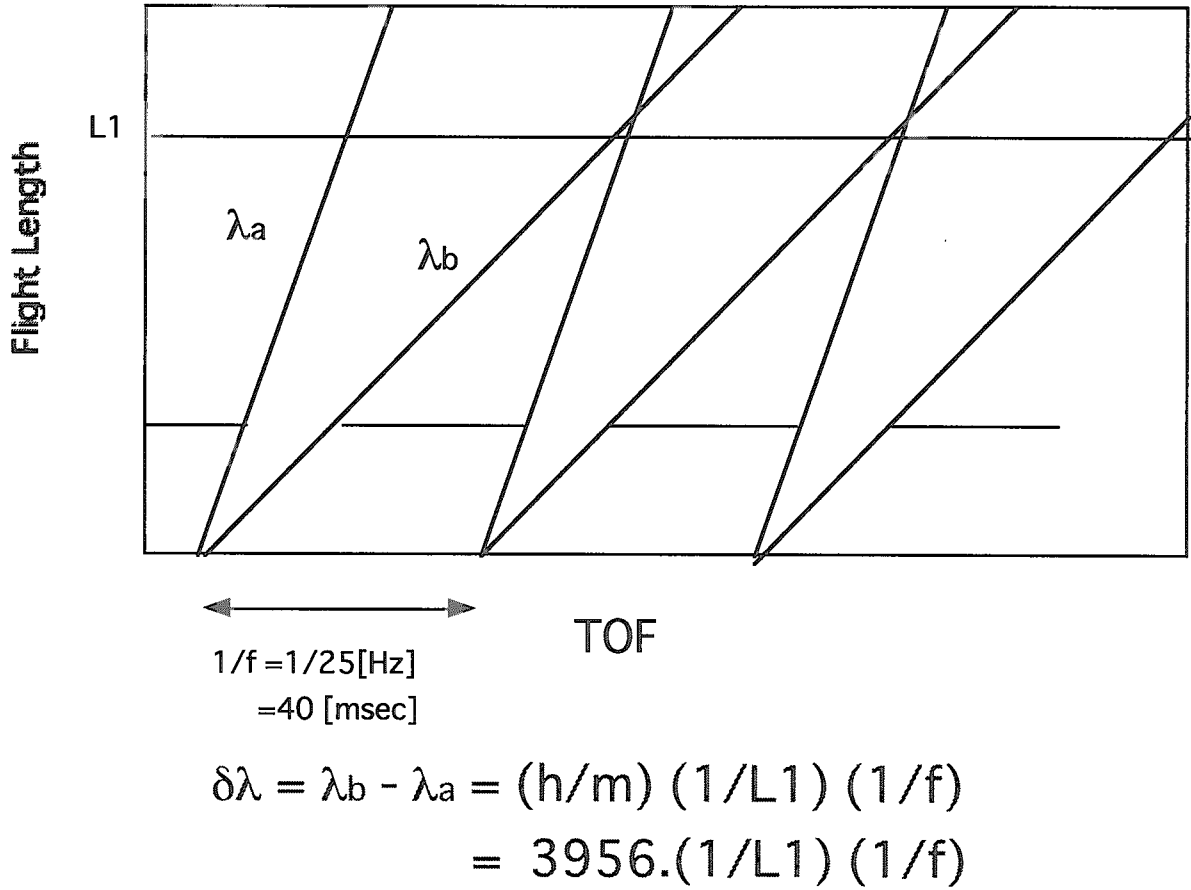


Fig. 6: The general principle of frame overlap on an indirect geometry spectrometer

This is a blank page.

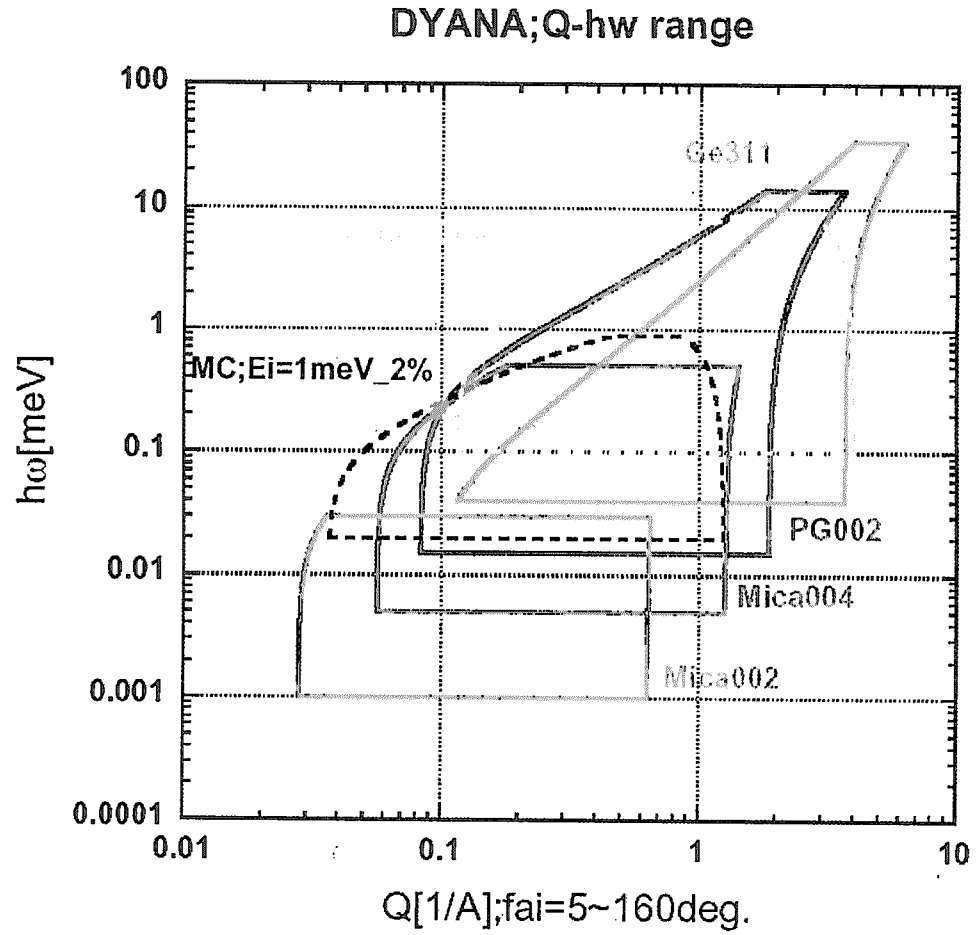


Fig. 7: The accessible Q-E range on DYANA spectrometer.

This is a blank page.

Indirect Geometry Crystal Analyzer TOF Spectrometer (DYANA)

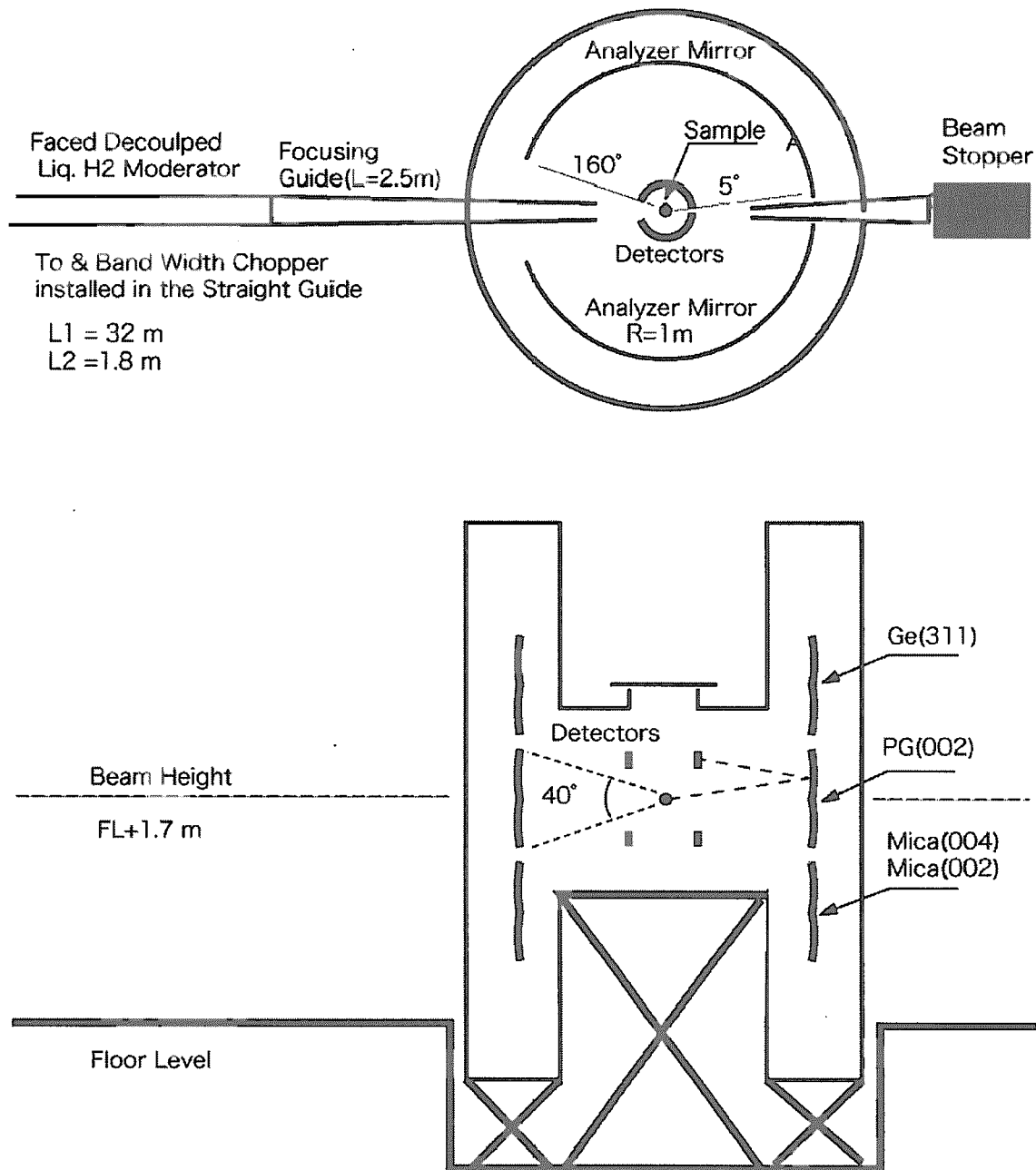


Fig. 8: The conceptual design of DYANA spectrometer

This is a blank page.

DYANA 3D

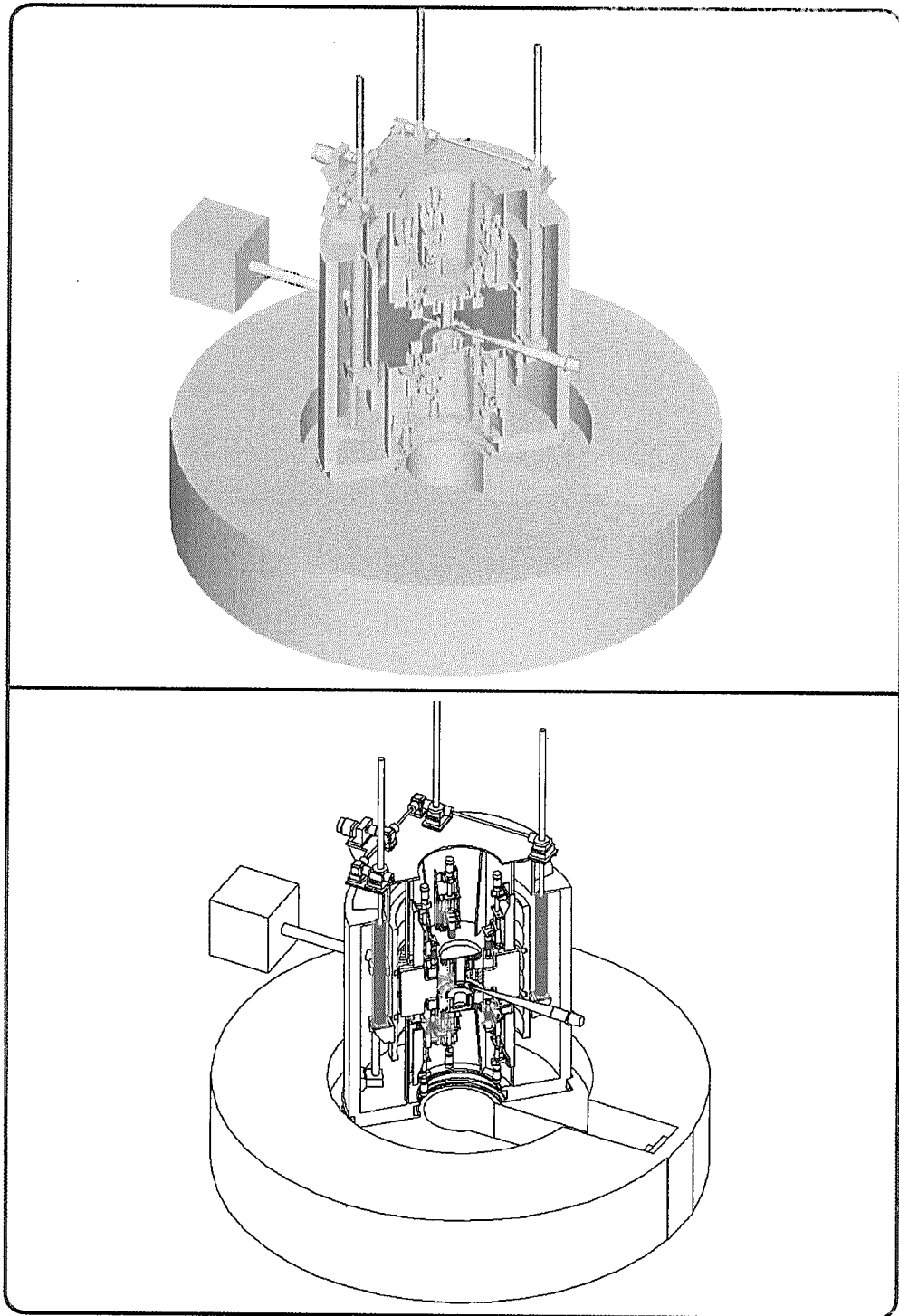


Fig. 9: The 3D design of DYANA spectrometer

This is a blank page.

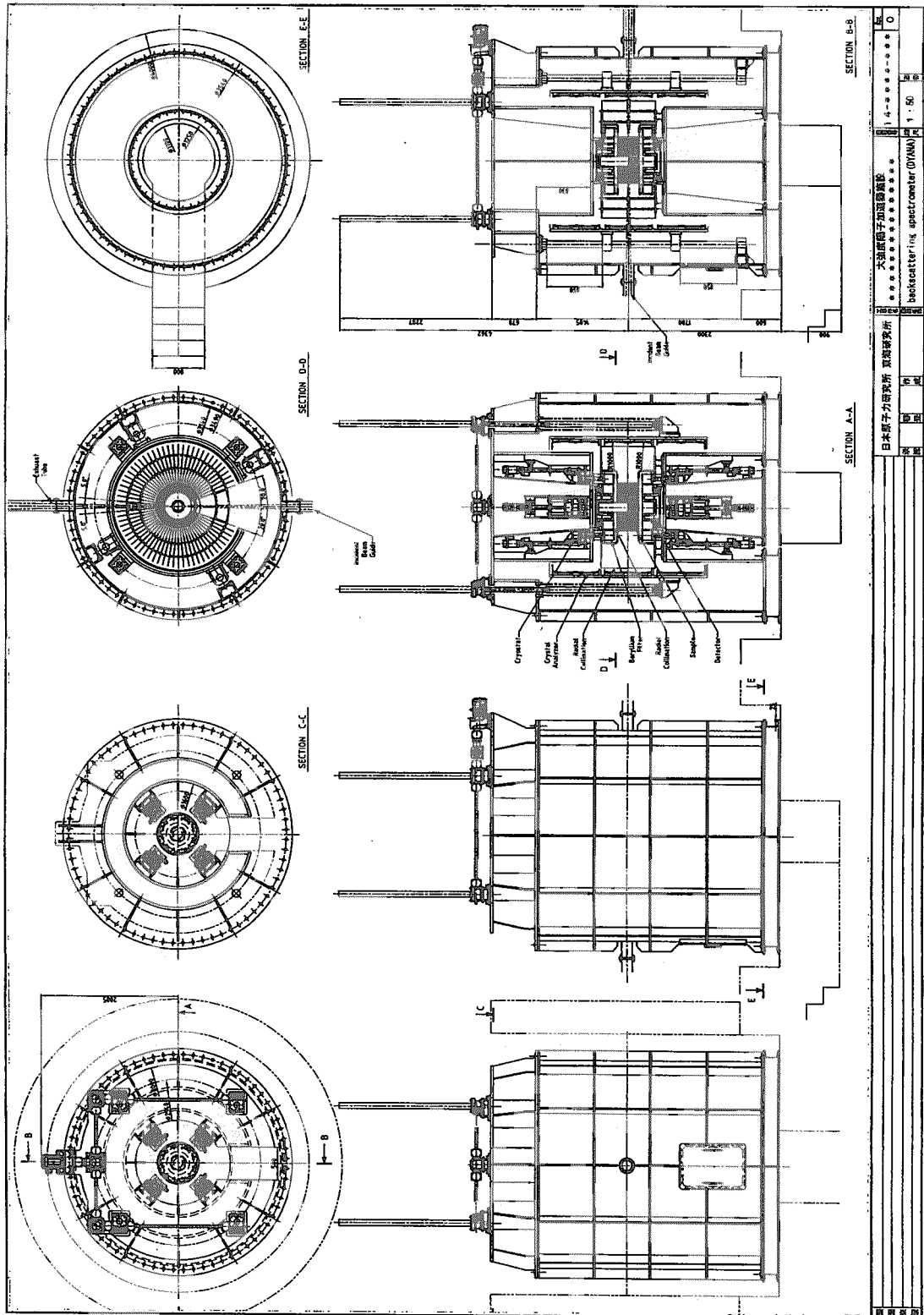


Fig. 10: The 2D design of DYANA spectrometer

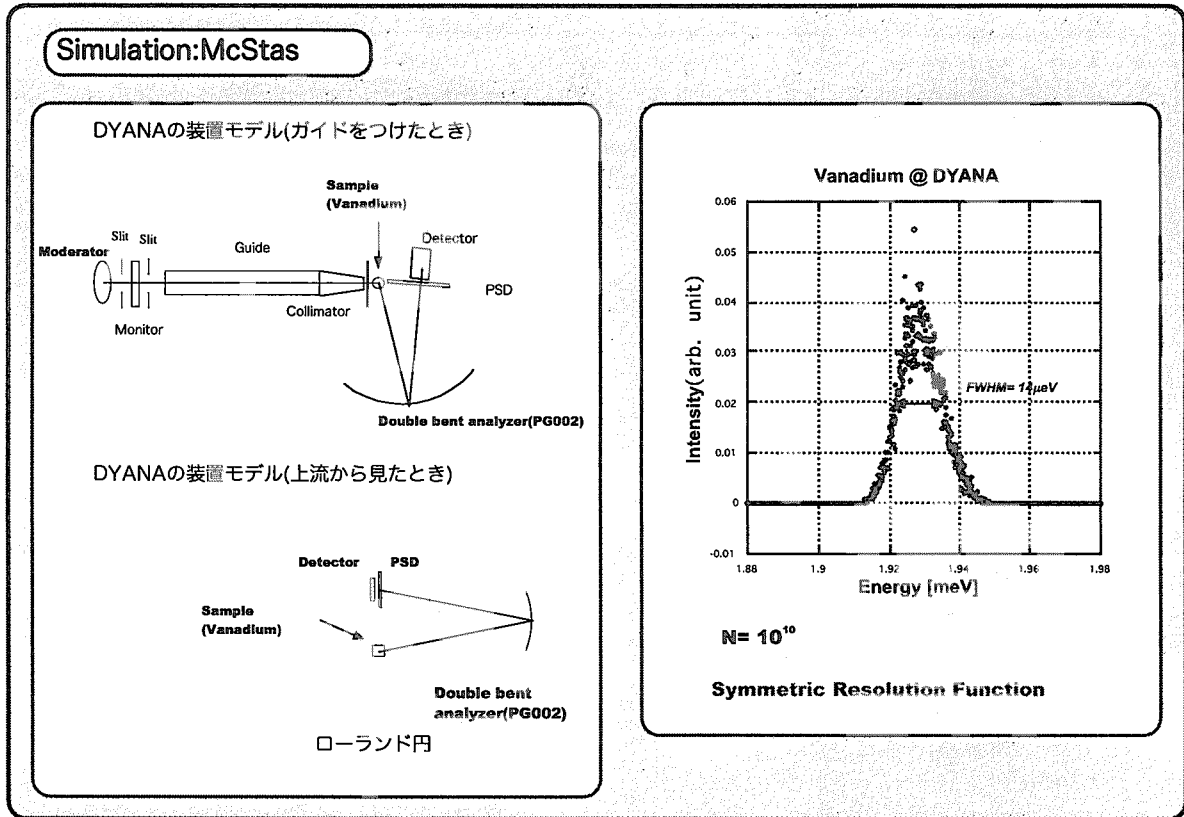


Fig. 11: Results of Monte Carlo Simulations Calculations by McStas

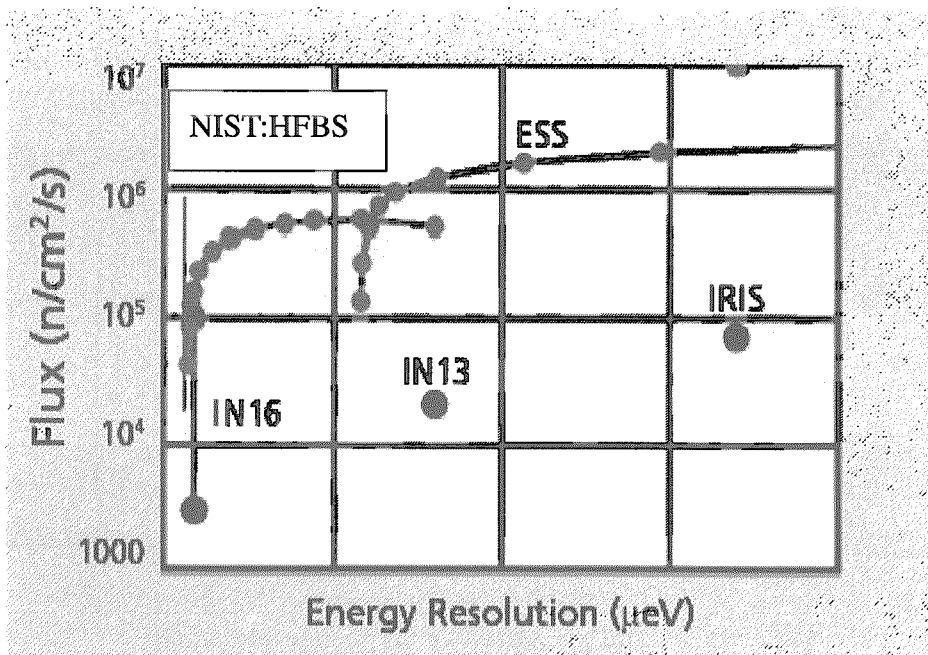


Fig. 1 2 : Comparison between several back scattering spectrometers around the world

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV=1.60218×10⁻¹⁹J
1 u=1.66054×10⁻²⁷kg

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光強度	ルーメン	lm	cd·sr
照射度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バール	b
バル	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å=0.1nm=10⁻¹⁰m
1 b=100fm²=10⁻²⁸m²
1 bar=0.1MPa=10⁵Pa
1 Gal=1cm/s²=10⁻²m/s²
1 Ci=3.7×10¹⁰Bq
1 R=2.58×10⁻⁴C/kg
1 rad=1cGy=10⁻²Gy
1 rem=1cSv=10⁻²Sv

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクトールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリに分類されている。
- E C閣僚理事会指令ではbar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリに入れている。

換算表

力	N(=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 1 Pa·s(N·s/m²)=10 P(ポアズ)(g/(cm·s))

動粘度 1 m²/s=10⁴St(ストークス)(cm²/s)

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
力	1	10.1972	9.86923	7.50062×10 ³	145.038
	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322×10 ⁻⁴	1.35951×10 ⁻³	1.31579×10 ⁻³	1	1.93368×10 ⁻²
	6.89476×10 ⁻³	7.03070×10 ⁻²	6.80460×10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV
	1	0.101972	2.77778×10 ⁻⁷	0.238889	9.47813×10 ⁻⁴	0.737562	6.24150×10 ¹⁸
	9.80665	1	2.72407×10 ⁻⁶	2.34270	9.29487×10 ⁻³	7.23301	6.12082×10 ¹⁹
	3.6×10 ⁶	3.67098×10 ⁵	1	8.59999×10 ⁵	3412.13	2.65522×10 ⁶	2.24694×10 ²⁵
	4.18605	0.426858	1.16279×10 ⁻⁶	1	3.96759×10 ⁻³	3.08747	2.61272×10 ¹⁹
	1055.06	107.586	2.93072×10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515×10 ²¹
	1.35582	0.138255	3.76616×10 ⁻⁷	0.323890	1.28506×10 ⁻³	1	8.46233×10 ¹⁸
	1.60218×10 ⁻¹⁹	1.63377×10 ⁻²⁰	4.45050×10 ⁻²⁶	3.82743×10 ⁻²⁰	1.51857×10 ⁻²²	1.18171×10 ⁻¹⁹	1

1 cal= 4.18605J (計量法)
= 4.184J (熱化学)
= 4.1855J (15°C)
= 4.1868J (国際蒸気表)
仕事率 1 PS(仏馬力)
= 75 kgf·m/s
= 735.499W

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270×10 ⁻¹¹
	3.7×10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58×10 ⁻⁴	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

生物用非弾性散乱装置 DYANA の概念設計



古紙配合率100%
白化度70%再生紙を使用しています