

JAERI-Review

96-019



原研中性子科学研究センター構想における
中性子散乱研究

1997年1月

山田安定*・渡辺 昇・新村信雄
森井幸生・片野 進・相沢一也
鈴木淳市・小泉 智・長壁豊隆

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。

入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財團法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 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 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1996

編集兼発行 日本原子力研究所

印 刷 緯原子力資料サービス

原研中性子科学研究センター構想における中性子散乱研究

日本原子力研究所中性子科学推進特別チーム

山田 安定*・渡辺 昇・新村 信雄+

森井 幸生+・片野 進+・相沢 一也+

鈴木 淳市+・小泉 智+・長壁 豊隆+

(1996年12月9日受理)

日本原子力研究所では、従来研究用原子炉を中心として研究を行ってきた東海研究所の新しい将来を拓く目的で、「中性子科学研究センター構想」を打ち出している。この小冊子は、新しい施設での中性子散乱実験により進展すると期待される科学の諸分野をサーベイする作業を行った成果をまとめたものである。

Next Generation Neutron Scattering at Neutron Science Center
Project in JAERI

Yasusada YAMADA*, Noboru WATANABE, Nobuo NIIMURA[†]

Yukio MORII[†], Susumu KATANO[†], Kazuya AIZAWA[†]

Jun-ichi SUZUKI[†], Satoshi KOIZUMI[†] and Toyotaka OSAKABE[†]

Special Task Force for Neutron Science Initiative

Tokai Research Establishment

Japan Atomic Energy Research Institute

Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received December 9, 1996)

Japan Atomic Energy Research Institute (JAERI) has promoted neutron scattering researches by means of research reactors in Tokai research establishment, and proposes "Neutron Science Research Center" to develop the future prospect of the Tokai research establishment. The scientific fields which will be expected to progress by the neutron scattering experiments carried out at the proposed facility in the Center are surveyed.

Keywords: Thermal and Cold Neutron Scattering, Life Science, Material Basic Science, Material Applied Science, Analysis Science, Basic Science, Future Project, Accelerator Based Neutron Science

* Waseda University

+ Advanced Science Research Center

目 次

はじめに	1
1. 熱・冷中性子利用研究の展望	5
2. 生命科学	9
3. 物質科学	21
4. 材料・分析科学	32
5. 認識科学	36
付録 全体計画および実験設備	38

Contents

Preface	1
1. A General View of Thermal and Cold Neutron Scattering Study	5
2. Life Science	9
3. Material Basic Science	21
4. Applied and Analytical Science	32
5. Basic Science	36
Appendix Layout of the Project and Experimental Facility	38

はじめに

日本原子力研究所では、従来研究用原子炉を中心として研究を行って来た東海研究所の新しい将来を拓く目的で、「中性子科学研究センター構想」を打ち出している。

この研究センターは、「大強度陽子加速器を中心とする多目的研究施設」として特徴づけられ、現在の計画では最も早く進捗した場合、2007年完成を目指している。この計画の第1の柱は自然科学の基礎分野の発展を図ることで、この中には、中性子散乱による物質科学、材料科学、生命科学の研究の他中性子核物理学等が含まれる。第2の柱は、高レベル廃棄物の処理に関連して加速器駆動長寿命核種消滅処理技術を開発することである。第3の柱は、このような大強度陽子加速器の建設、運転を通じて将来必要性が予測される未来型原子力システムのための陽子加速器の基盤技術を確立することである。

上に述べたようにこの研究施設は多目的であり加速器よりのビームは、核変換利用施設、極短パルス中性子利用施設、中性子散乱利用施設などに分岐して利用される（図0-1）。この中で中性子散乱施設は、上記の目的の第1の柱である基礎科学の進捗を担う重要な施設として位置づけられている。

本計画における加速器本体の基本的な考え方は、次の2点である。

- (1) ビーム出力世界最大級（6～8MW）の加速器であること、このうち約5MWが中性子散乱施設に供給される。
- (2) 超伝導加速を基礎とすること

従ってこの計画は、国全体の中性子散乱に関する将来計画としては、既に先行している文部省・JHP計画より更に1桁近く強度の高い中性子を利用するものとして位置づけられる。

現在所内ではこの計画の実現にむけて、種々の体制が整えられて具体的な作業が進められている。その中で、先端基礎研究センターに属する中性子散乱関連の3グループでは、特に中性子散乱施設に関する部分を分担し、より具体的に設備の性能等を検討する作業に入っている。

この小冊子は、その作業の第一段階として所外の方を含め多数の専門家の意見をもとに、この新しい施設を用いて進展が期待出来る科学の諸分野をサーベイする作業を行った結果をまとめたものである。

第1章では、基礎科学の研究プローブとしての中性子散乱の特徴を包括的にとらえることを試み、それ以下の章で、21世紀に向けて自然科学のブレークスルーの契機となり得るようなテーマのうち、原研グループとして重点的に考えている研究分野を中心として、研究の展開の方向をさぐった。

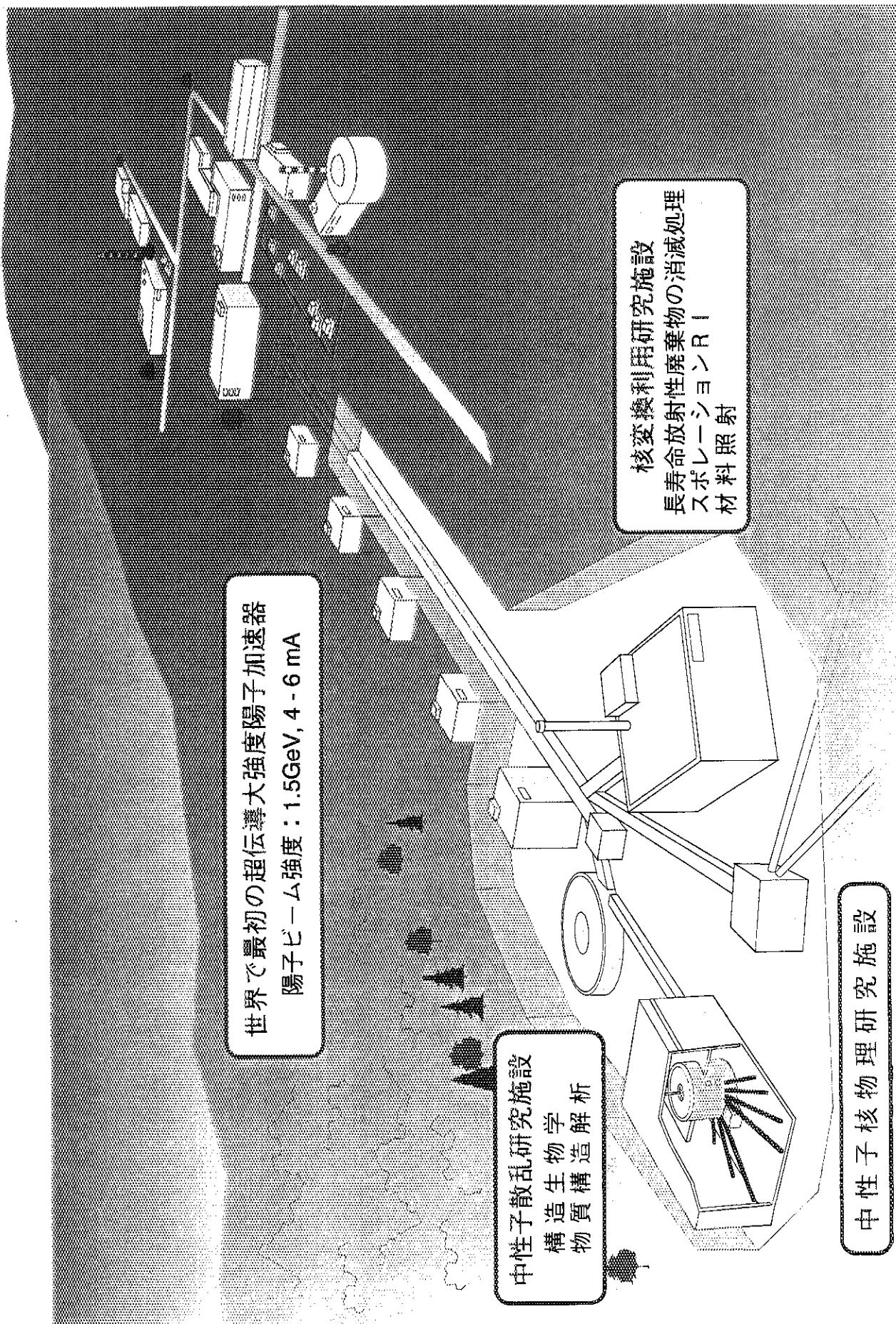


図0-1 中性子科学研究施設構構想

1. 热・冷中性子利用研究の展望

日本原子力研究所の将来計画「中性子科学研究センター」構想の中で、重要な役割を担っている中性子研究施設の性能、特徴をより具体的に策定するため、その第一ステップとして、この施設によって21世紀にむけてどのような科学の分野でブレークスルーが期待できるかを包括的、概念的にとらえることを試みた。

热・冷中性子を用いた研究として圧倒的に広い適用分野を持っているのが波動として振る舞う中性子をプローブとして行われる物質の研究—中性子回折・散乱研究—である。しかしこれと相ならんで、粒子として振る舞う中性子をプローブとして行われる物質の研究—中性子ラジオグラフィ等—、及び素粒子としての中性子そのものの研究も、それぞれ看過できない重要な研究分野である。以下では、中性子散乱研究に重点をおきつつ、中性子ファクトリーとしての本施設で展開される「中性子を用いた研究」の可能性を展望する。

波動として振る舞う中性子を研究対象である物質に入射し、その回折散乱波をプローブとして、これによって運ばれてくる対象物質の詳細な情報を得るのが中性子回折・散乱研究の手法である。回折・散乱波によって運ばれてくる情報は二つのキーワード：研究対象の「構造」と「機能」でとらえることが出来る。「構造」に関する情報は中性子波が多数の原子の集合体からなる対象物質によって生ずる回折波の干渉効果から得ることが出来る。一般的にはX線、電子線など他の波動プローブでも同様の効果はあるが、中性子波の場合は独特的のコントラストによって他のプローブでは得難い構造情報を得ることができる。一方「機能」に関する情報は中性子に独特のものである。中性子は物質によって、単に回折されるだけでなく、物質とエネルギーをやりとりして非弾性的に散乱される過程がある。この過程では中性子は「外力」として物質に作用を及ぼすため、非弾性散乱波には物質の外力に対する応答の仕方に関する情報が含まれている。物質の持つ「機能」とは、本来物質が種々の外力にどのように応答するかで記述されるのであるから、端的に言って中性子非弾性散乱は研究対象の持つ「機能」を研究する手段と言いうことができる。

それでは熱・冷中性子をプローブとして研究することができる物質の「構造」と「機能」は実際どのような自然科学の分野で有用な情報をもたらすのかを考えてみる。一般的に言えば、問題となる科学に特徴的な物質の「構造」の空間的スケールと「機能」の時間的スケール（エネルギー・スケール）に丁度マッチするように、プローブとしての中性子波の特性波長と特性周波数が選べることが必要である。例えば一個の原子内に束縛された一個の電子の振る舞い、といった物質科学的な情報は、空間的、エネルギー的スケールはそれぞれ、0.1 nm、1 eV程度であり、複雑な生体高分子といった生命科学的な情報は10 nmの空間的スケールに含まれている。一方熱・冷中性子の特性波長と特性エネルギーは0.1～10 nm、1 neV～1 eVの広い範囲にわたって選択することが可能である（図1-1）。このことから、中性子散乱研究を有効に適用できる自然科学の領域は、広く物質科学から生命科学までを包含しているということができる。この意味で中性子散乱研究の大きな特徴として、その「学際的適用性」をあげることができる。結局、中性子回折・散乱研究の将来の展望は、大局的に物質の「構造」と「機能」を縦糸とし、物質科学から生命科学にいたる幅広い科学の諸分野を横糸として、織りなされる「綾模様」としてとらえることができる。

研究の分野は大別して物質科学、生命科学にわけられるが、それについて更に細分化されることは勿論である。たとえば物質科学については、従来から物理学の基本的な研究領域で

ある磁性、電気的性質（伝導性、誘電性）などに関するものは勿論、化学的領域；特に高分子など複雑なマクロモレキュール系の結合や反応に関する分野なども含まれる。生命科学についても詳しく見れば多数の横糸が含まれることになる。一方縦糸について、「構造」の中にも単に原子構造に止まらず磁性を担うスピンの構造、生体を含む複雑系で重要な非周期構造や階層構造などがあり、「機能」についても磁気的、電気的、粘弾性的、熱的機能等が含まれる。このような特性をふまえて、中性子散乱研究の特徴的概念図を図1-2に示した。

新施設で織りなされる綾模様を展望するにあたって、計画中の中性子源が「大強度」である点が極めて重要である。次章以下で具体的に見るように、大強度のプローブの利用によって、たとえば生命科学分野で必然的に要求される極微試料での測定や、物質科学分野で重要な極限環境下での測定など、あらゆる分野で現在の測定条件では到底得られない質的に新奇な情報が豊富に得られる可能性があるからである。

このような情報の質的飛躍によって新施設における中性子散乱研究の綾模様は、21世紀基礎科学にふさわしい、絢爛たる錦を織りなすことが出来ると期待されるのである。

粒子としての中性子線を用いる研究分野はどちらかと言えば自然科学の基礎よりは応用面での利用が期待される分野である。このような方面も広く人類の福祉という観点からは看過できない重要性を持っている。中性子線の優れた物質透過性を利用して非破壊的に物質の内部構造を調べる手法は、工業上極めて広い応用分野を持っているだけでなく医療診断でも将来性が期待できる。

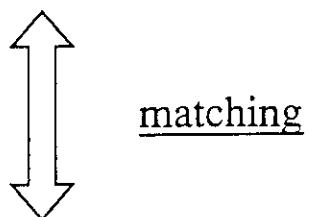
素粒子としての中性子そのものに関する研究は、中性子利用研究分野全体からみれば限られた研究対象ではあるが、それが持つ自然科学的意義は極めて大きい。中性子の電気双極子能率の検証、中性子の寿命、素粒子反応の対称性、などの研究は現代物理学の基幹をなす自然法則の検証という意図をもって様々な工夫を凝らして試みが続けられている。このような試みの一つの方向は、より低エネルギーの（超冷）中性子を用いる方向であり、十分な強度を持つ超冷中性子は、この方面的研究の発展に資するものと期待される。いずれにせよ、この分野の持つ基本的重要性から考えて、長期的視野のもとに研究の推進を図らねばならず、その中で中性子ファクトリーの持つ役割は極めて大きいと言える。

なお、「学際的適用性」に関連して次のことも重要である。学際的な中性子散乱研究に携わる研究者は当然、普段は交流のない異分野の科学者と接触し、討論を行う機会を持つことになる。このような機会を通じて日頃なじみのない自然法則の把握の仕方、概念を知りこれを自らの研究にフィードバックすることによって、各分野に新しい研究の流れを作りだす可能性が生まれる。このような異分野の研究者の接触がもたらす緊張と活力も学際的な中性子散乱研究の重要な特徴としてあげておきたい。

次章以下では数MW級大強度陽子線形加速器を用いて建設される熱・冷中性子ファクトリーにおいて、近い将来において期待できる多彩な研究の「綾模様」の一端を具体的なテーマをあげて垣間見ることを試みた。これらは現在原子力研究所で展開されている研究の延長上でその可能性をさぐって見たものにすぎず、国内はもちろん、広く世界にむけて開かれた利用形態の上で、施設全体の展望としては、予見できない新領域の発見も含めて自然科学、応用科学の広い領域にわたり21世紀への科学のブレークスルーの契機となる研究が活発に展開されると期待できる点が重要である。

熱・冷中性子で研究できるscienceの分野は？

scienceを特徴づける「構造」と「機能」の
空間的-時間的（エネルギー的）スケール



利用できる中性子波の特性波長と特性周波数
(エネルギー)

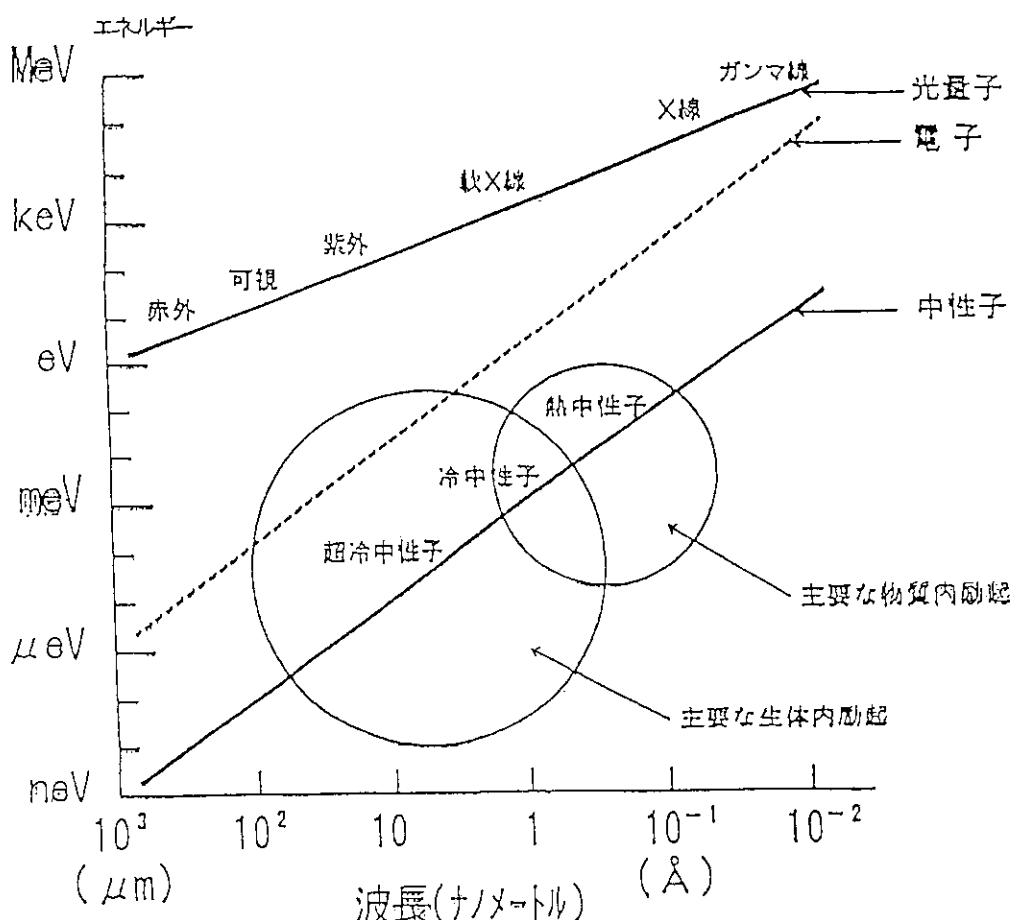


図 1-1

		構造				機能			
		原子構造	スピン構造	アモルファス構造	階層構造	磁性的	電気的	粘弹性	熱的
物質科学	磁性体	---	---	---	---	---	---	---	---
	誘電体	---	---	---	---	---	---	---	---
	伝導体	---	---	---	---	---	---	---	---
	複雑系	---	---	---	---	---	---	---	---
	---	---	---	---	---	---	---	---	---
生命科学	DNA	---	---	---	---	---	---	---	---
	蛋白質	---	---	---	---	---	---	---	---
	膜蛋白	---	---	---	---	---	---	---	---
	ウイルス	---	---	---	---	---	---	---	---
	---	---	---	---	---	---	---	---	---

中性子散乱研究は、これらの「縦糸」と「横糸」の織りなす「綾模様」である

図 1-2

2. 生命科学

§ 1 はじめに

ビッグバンに始まる宇宙の生成後、元素の生成、物質の進化の過程で、最初の生命は、みずからの複製を触媒できるRNA分子集団の進化によって始まった、と考えられている。やがて、これらのRNA触媒集団が協同作業を営むうちに、その中からポリペプチドの合成を指令する能力を獲得したものが現れ、進化に進化を重ね、現在の自然界を構成する生命体が実現した。35億年に亘り繰り返された進化の歴史は、複雑・多種多様な生命体が生き延びるのに全く巧妙な生命現象を創出することになる。そしてようやく20世紀も終了せんとする今、人類は生命現象の本質を理解する糸口を構造生物学に見出そうとしている。生命科学は間近に迫った21世紀の最も関心ある科学の一つに数え上げられるようになった。

生体内ではさまざまな物質が機能し、生命活動を維持している。さまざまな生体内物質の中でも、蛋白質は、最も重要な物質の一つである。蛋白質の種類は非常に多く、ヒトゲノムに含まれている蛋白質の種類は10万種に及ぶと言われている。又種類が多いだけでなく、一つ一つが複雑に折り畳まれ、多様な3次元立体構造を形成し、それを起源に発生する機能もまた多種多様である。このように多種多様な蛋白質それぞれが、巧妙にデザインされたメカニズムにしたがって作用し、機能を果たしている。これが生命である。生体物質はどのような構造をとり、どのように運動し、どのように機能を発現しているのであろうか。これを解明するのが構造生物学であり、生命現象を理解するための一つの重要な学問である。しかも中性子散乱研究はこれらの研究課題を解明するのに最適なプローブである。

§ 2 生命科学研究のための中性子

中性子散乱が、生命科学研究で有効な実験手法となるのは、ひとえに中性子の有する性質から由来するものであり、物質との相互作用が他のプローブ（例えばX線、赤外線や紫外線等）と比較して、全く特異的だからである。原子・分子の大きさに相当する波長（0.03~1 nm）の中性子のエネルギーはちょうど、生体物質の運動エネルギーレベル（1 meV~数eV）に相当していることである。これは中性子が質量を有しているからであり、X線（質量を有しない）と比較すると、その違いが歴然とする。結晶解析に用いる $\lambda = 0.2 \text{ nm}$ のX線のエネルギーは $0.62 \times 10^4 \text{ eV}$ で生体物質の運動エネルギー LEVELより桁違いに大きな値である。一方、生体物質の運動エネルギー LEVELを調べるのに用いられる赤外線や紫外線の波長は $10^3 \sim 10^4 \text{ nm}$ で、生体物質の空間サイズから大きくかけ離れており、構造観察に適さない。

以上を含めて、中性子が有する特徴のうち生命科学研究に優利に働く項目を列挙する。

- (1) 水素原子を観測できる。
- (2) 水素と重水素では中性子散乱能が大きく異なる。
- (3) 生体物質のダイナミックスを観測できる。
- (4) 生体物質に放射線損傷を与えない。

これらの特徴は図2-1に示すような実験手法に利用され生命科学研究に大きく貢献する。

§ 3 中性子と構造生物学（機能生物学）

「構造生物学」は21世紀の生命科学の動向を左右するきわめて重要な分野である。構造生物学とは、生体高分子の三次元構造を決定する学問であると思われているふしがあるが、全く誤っ

た考え方である。例えば、ワトソン・クリックの成果の大きな意義は、DNAの二重螺旋構造を決定したことさらなることながら、その構造を通して遺伝学の原理を提示したことにある。これが「構造生物学」の原点であり、得られた構造に基づいてその機能を理解、説明できないと全く意味がない。米国ブルックヘブン国立研究所のProtein Data Bank (PDB) に登録された生体物質立体構造の数は、毎年ウナギ登りに増えて行き、5,000近くに達している。ほとんどがX線解析により決められたものである。蛋白質やDNAは立体構造を形成して初めて機能を発揮する。立体構造の決定は生体物質の全体像が見えたことで、生理機能の解明に大きな役割を果たしたことは明らかであるが、残念にもこれにより水素原子の振る舞い等、さらにきめの細かい生体物質の固有の生理機能が解明されたものはわずかである。

これを補ってくれると期待されるのが、中性子構造生物学である。蛋白質やDNAは立体構造を形成して初めて機能を発揮することは既に述べた。原子レベルで見ると、蛋白質やDNAの骨格、アミノ酸残基および塩基に結合している水素原子及びそれらに配位する水の水素原子が直接あるいは間接的に殆どの機能発現に関与していることが知られている。ところが、立体構造決定においては、強力な実験手法であるX線回折法は水素原子位置決定では力不足である。一方、中性子回折法ではこれが可能である。また、生体物質の機能と分子のダイナミックスは直接対応づけられるものと考えられるようになってきており、その証拠もいくつかあがってきている。中性子は、スタティックな立体構造の段階で足踏みしていた構造生物学分野に蛋白質分子の水素原子位置やダイナミックな運動情報を提供することができるので、生命科学のブレークスルーが期待できる。中性子構造生物学は『構造生物学』の最終目標である『機能生物学』というパラダイム構築を本質的に目指す分野であり21世紀の生命科学のフロンティアである。

一つ具体例を挙げる。数ある生命現象の中で、今なお重要であるにもかかわらず謎の多い現象として多くの研究者が注目しているものに、発生・分化がある。生命体の全ての情報はDNAに書き込まれている。また、同一個体の細胞は同じDNAを有する。従って同一個体の細胞は全て同じ生命情報を持つことになるが、それにもかかわらず細胞の形態は、組織毎にすべて異なる。これが発生・分化の問題である。何故このようなことが起きるのだろうか。それは、DNAが各細胞に必要な情報部分しか発現しないからである。その制御機構に関しては多くの研究が成されているが、原子・分子レベルでの理解は緒についたばかりである。

発生・分化の基本は、選択的DNA情報発現である。(図2-2) 細胞外からDNA情報発現を促す信号が来ると、それがトリガーとなり、組織に必要なタンパク質合成メニューの書かれたDNAの箇所に、メニュー読取り機能を有するタンパク質が結合する。そのDNA情報がmRNA、tRNAを経て、リボソームでタンパク質合成される。このプロセスの中で重要なのがタンパク質とDNAの結合構造解明である。タンパク質がDNAに結合する様子はいくつかの例がX線結晶構造解析で解かれている。しかし、これでDNA結合タンパク質の様子が判ったわけではなく、大きな疑問が残っている。DNAの長さはヒトで約2mあり、DNA結合タンパク質はDNA中の必要な箇所をいかにして見出すのか全くの謎である。これに対して、DNAに名札が掛かっており、タンパク質はその名札を認識して、その場所を見出しているという、一つの仮説をたててみたい。名札はDNAの周囲を取り巻く水である。図2-3にX線結晶構造解析で決められたDNAの周囲の水(X線では水分子の酸素の位置を決定している。)の様子を示す。実際に多くの水分子がDNAの周囲を取り巻いていることが判る。図2-3(a)は常温の構造、図2-3(b)は低温(16K)の構造である。ここで、次の2点を指摘しておく。

1) X線回折法で決められた構造であるため、図には水分子の酸素の位置しか書かれていな

いが、水は水素を介して水分子同志、水とDNAと多種多様な結合パターンを形成できる。このパターンがDNAの情報を示す可能性があり、しかもこれだけの水分子が存在すれば、その組合わせの数は相当数に昇り、充分DNAの情報を示すことが可能である。これを証明するのに中性子回折法は最適である。

2) 低温では分子の動きがとまるので、常温より多数の水分子位置が決定されるのが通例であるが、DNAの周囲の水については、それが逆転している。最近、生理機能と分子運動に強い相関関係があることが言られてきている。例えばミオグロビンの分子振動の平均2乗振幅の温度変化は、200 K以上で急激に振幅が大きくなっているが、丁度この温度からミオグロビンの生理機能が発現されるようになる。また、この温度以下低温では、ミオグロビンは本来の生理機能を有せず、かつ分子振動は非生体物質と同様の振舞をしている。このように生理機能の発現に分子振動が関与していることが明白になってきているが、これは、DNAと水についても言えよう。低温で生理機能を失ったDNAは本来の機能発現に必要な水を多数有する必要がないのであろう。こう考えると図2-3の水分子の常温と低温の異常までの数の違いが説明できる。

これはほんの一例でこれ以外に中性子散乱実験が貢献できるだろう生命科学のテーマを表に列挙した。また、そのうちのいくつかを§5以降にとりあげ説明を加える。

表

DNAの配位水の構造と機能

鉄輸送蛋白質トランスフェリンとその受容体の相互作用とダイナミックス

DNAと非ヒストンDNA結合蛋白質HMG1、HMG2との相互作用

DNA修復機構の解明

膜蛋白質の可溶化

光合成系アンテナ器官の構築原理の解明

リポタンパク質の構造

生体組織内水の分布と機能

複合体形成メカニズム

酸素反応プロセスの直接観察

生体高分子結晶化過程の直接観察

DNA結合タンパク

モーター蛋白質やG-蛋白質等によるヌクレオチド加水分解機構

生体高分子と糖の相互作用と水分子

リボ核酸分解酵素のグルタミン酸とRNAのリン酸基との相互作用の解明

§4 次世代中性子源(MW級大強度中性子源)と21世紀生命科学

§2に述べた中性子の特徴は決して目新しいことではなく、原理はすべてわかっていたことである。しかし今まで残念にも中性子強度の不足から実験例も少なく、又測定時間や試料の量の不足から統計精度が悪く、注目を集めてこなかった。強いて現在の強度を有する中性子源で統計精度の高い実験を行おうとすると50日～100日の連続マシンタイムが必要となる。これほどの日数を一つのテーマに割り振ることはありえない。これは言ってみれば不可能な実験と同等

である。次世代中性子源は現有の中性子源強度を2~3桁増強することであり、現時点では50日~100日の連続マシンタイムが必要な実験が1日で終了するということになる。将に不可能が可能となるのである。

21世紀生命科学がもっとも必要としている端的な情報の一つは生体物質、たとえば、蛋白質分子の生理機能に関係した水素原子位置とダイナミックな運動情報であり、次世代中性子源はそれを提供する。

§ 5 コントラスト変調法をもちいる中性子構造生物学

1) 生体高分子と糖の相互作用と水分子の関連

21世紀に向けて、食料増産のためには、より厳しい環境下（低温、乾燥地域）でも食料の生産ができるようのように、穀物、野菜などを改良する必要がある。この問題解決のひとつの道は、生物がどのようにして低温、乾燥に適応しているのかを解明し、そのメカニズムを応用することである。全ての生物は、温度などの周囲の環境の変化に対してある程度は、適応することが出来るようになっている。昆虫や植物は、乾燥状態になると、体液内のある種の糖（トレハロースやソルビトール）の割合を増加させる。また、昆虫は低温状態になった時も、同様に体液内でトレハロースなどの糖が増加する。このように、ある種の糖は、生物を乾燥、低温から守る働きがある。しかしながら、どのような分子メカニズムによって、上記の機能が発揮されるかは、現在のところよく分かっていない。糖が乾燥のストレスから生物を守ることに関する昔からある仮説の一つは、生体高分子（蛋白質など）や生体超分子集合体（細胞膜など）は水分子がないと、その立体構造を維持できないが、乾燥状態では、糖が水分子の変わりとして、蛋白質や細胞膜に吸着して生体高分子の構造維持するというものである（直接説）。しかし、この仮説では説明出来ない現象が最近の研究で数多く報告されている。直接説に対し、糖が直接的に生体高分子や生体超分子集合体に作用するのではなく、糖が水をガラス化させることで、水の蒸発を押さえるという仮説（間接説）が最近提案されている。昆虫の糖による低温耐性の獲得機構については、まだあまり研究が進んでいないが、やはり、糖と水分子の相互作用が大きな役割を果たしていると指摘されている。

この糖による乾燥、低温耐性の獲得の分子メカニズムの解明には、生体高分子、生体超分子集合体の周り水分子の状態が、糖の存在によってどう影響を受けるのか、そしてさらにそれが生体高分子、生体超分子集合体の構造、機能にどのような影響を与えるのかを明らかにする必要がある。水分子の状態、生体高分子の水和の様子を最も、敏感に観察できる手段の一つが、水分子の変わりに、重水を用いることで水分子に関する詳細な情報を得ることが出来る中性子回折、散乱である。次世代中性子源への期待は大きい。

2) 中性子散乱による光合成系アンテナ器官の構築原理の解明

緑色植物を含む光生物は数十億年の進化により、現在地球上で最も大規模に太陽の輻射エネルギーから化学エネルギーへの変換を効率良く行ない、地球環境の形成及び大気組成の保持に決定的な役割を演じている。生物の光合成能を利用して、エネルギーや化学物質を生産する技術が確立されれば、地球上の炭素循環の定常化ひいては生態系の健全性を保つことに大きく寄与できるものと考えられる。太陽エネルギーの利用を化学的に行なおうとするとき、生物の光エネルギー獲得の仕組みを理解することが前提となる。本研究では、中性子散乱法を用いて、光合成生物の光エネルギー捕獲器官であるアンテナ中の色素構造とその配置関係の解明を目的とし、光合成反応の工学的利用を目指している。アンテナ錯体にはクロロゾーム（chlorosome）

と呼ばれる細胞膜のすぐ内側に位置するアンテナと膜内アンテナ (membrane antenna) が存在する。これまでの研究から、アンテナ中の色素分子は単独にはほとんど機能せず、一定規模の集合体を形成して光エネルギー伝達の役割を果たすことが知られており、またクロロゾーム中の色素分子(クロロフィル)は秩序性の高い会合体を形成することが示唆されている。一方、人工的に作られたクロロフィルの会合体はクロロゾームと類似した分光学的挙動を示すことからクロロゾームのモデルとして用いられている。しかし、会合体の構造についてはまだ十分解明されていない。そこで、中性子散乱の測定より、モデルとなるバクテリオクロロフィル人工会合体の溶液構造 (会合体のサイズと形態) に関する情報が得られ、これらの結果をもとに、会合体の構造と分光学的挙動との対応関係を明らかにすることが期待できる。

これまで中性子散乱によるクロロゾームアンテナの構造解析に関する報告はまだ見当たらぬが、むしろこのような研究には主に振動と共鳴分光法(紫外・可視・赤外吸収、蛍光分析及びNMR、共鳴ラマンなど)が用いられてきた。これらの手法により、現在研究の最も進んでいる緑色光合成細菌のクロロゾームアンテナについて、それを構成するc及びdタイプのバクテリオクロロフィルはある程度の秩序性をもつ会合体を形成し、その会合構造に非常な多様性をもつことが明らかになった。しかし、色素分子が実際どのような幾何学的配置をとり、それに基づいて光エネルギーがどのように伝達しているかについては現在精力的に研究されており、いくつかのモデルが提案されているものの、直接的な実験事実は得られていない。さらに生体内での会合体は人工モデルの何量体に対応するかについての評価法もまだ確立されていない。本研究では人工会合体の構造と分光学的挙動との対応関係の解明を目指とし、前述の分光法に加え、生体試料の構造解析に最も適した中性子散乱法を応用するところに特徴がある。このような測定により、色素分子の会合状態 (会合体の大きさ、秩序性の度合、配向状態及び配置関係など) を定量または半定量的に評価することができると思われる。これらの結果は天然のクロロゾームアンテナの構造解明につながる手掛かりを与えると共に、色素の幾何学的配置と光エネルギー伝達との関係解明にも大きく寄与するものと期待できる。

3) 血漿リポタンパク質

血漿リポタンパク質は構成員を選択的に重水素化し「コントラスト変化溶液散乱」法を用いて内部構造の解析をするのに最適なテーマである。それは、分子量 (リポタンパク質は脂質・タンパク質複合体なので粒子量と言うほうが正しいが、日本語ではなじみがない) が数十万から百万近い巨大粒子で、結晶化が困難であるからである。

血漿リポタンパク質は動脈硬化症との関連で患者のリポタンパク質の構造を容易に短い時間で解析すれば、治療に即応することが可能になる。たとえ、結晶化ができるようになっても、治療に役立てるには量や時間の問題が残り、溶液散乱の優位は不動であろう。

農業害虫の大発生は農業生産に大きな打撃を与える。彼らの移動時 (畑から畑、時には飲まず食わずで海も超える) のエネルギー源の補給を支える血液中のリポタンパク質の構造を中性子散乱で解明することで、生態系に影響せずにリポタンパク質の機能を低下させる農薬の開発に結びつけることも可能となる。

4) 生体中の「水」の挙動

母なる水、水なくしては生物は生存できないと言われ、誰もがそれを認めるが、このテーマにダイレクトに取り組むのはいろいろと困難が伴い見送られてきているのが、現状である。避けていると言うより、水のことは忘れたほうが得策と判断しているとも言える。中性子こそ、この問題に取り組み、解答を与える最も適した手法であると考えている。

医療・農業にとどまらず、生き物を対象とするあらゆる分野に貢献するのは論をまたない。あえて、例を挙げるならば、「組織内水の分布」や「組織内水の機能」の解明によって、臓器保存、精子・卵子・種子の保存、食品の冷蔵冷凍保存の際にいつも議論となる水・氷の問題が解決されるであろう。

5) 生体膜タンパク質

近年、生体膜蛋白質の構造研究が展開されつつある。その研究の基盤としてあるものは、いかに対象を単離するか、換言すれば、いかに生体膜蛋白質を生体膜から溶解抽出するかであろう。一部においては有機溶媒等の利用も試みられてはいるものの、界面活性剤による可溶化が主流であろう。生体膜蛋白質の結晶化においても、界面活性分子（コソルベント）が蛋白質分子と相互作用し分子の配向に影響を与えると考えられる。しかしながら、膜蛋白質の可溶化や結晶化は未だ“職人芸”的いきを脱し切れていない。事実、可溶化による蛋白質分子の構造への影響や生体膜蛋白質の結晶化のメカニズムはいまだ解明されていない。また、膜中に埋まった酵素蛋白質は、固定化酵素の一形態とも考えられ、その機能発現機構の解明は、生命現象の理解のみならず新技術の開発導入として産業分野においてもきわめて重要な課題であろう。これら、複雑な系における特定分子のみの構造解析は、中性子散乱の得意とするところと思われる。

6) 複合蛋白質の機能と構造

ウイルスなどの複合蛋白質の解離・会合のメカニズムを詳しく研究するためには、強力中性子源が有用である。これまで静的構造は冷中性子小角散乱実験によりかなり明らかになっているが、強力なパルス状の冷中性子が得られる様になると温度ジャンプ法や迅速混合法を適用することにより解離・会合のメカニズムを通じて複合蛋白質の動的構造が明らかになる。

7) 酵素反応の解析

酵素の基質との反応を解析するため、光フラッシュ・フォトリシス法を導入した動的な構造解析が有用である。例えばヘモグロビンやミオグロビンと酸素や一酸化炭素との特異な結合を解析するには、この手法が重要である。

8) 生体高分子の結晶化過程

フィブリンやコラーゲンのように生体物質のなかには、緻密な結晶構造をとるものがある。これらの物質の結晶化過程を詳しく調べるためにには、上述した温度ジャンプ法や迅速混合法などを適用した動的な中性子構造解析が重要で、強力なパルス中性子源が是非とも必要である。また、フェリチンのような鉄貯蔵蛋白質の鉄ミネラルの形成過程の研究においても時間経過を追える中性子小角散乱実験が可能になることが望まれる。

水素と重水素の中性子散乱長の大きな違いを利用したコントラスト変調法を用いることで、例えば、DNA-蛋白質複合体や膜蛋白質-界面活性剤複合体におけるそれぞれの構成要素の構造情報を抽出することができる。蛋白質サブユニットからなる複合体でも、特定のサブユニットの重水素化と溶媒のコントラスト変化と組み合わせることにより、目的のサブユニットの *in situ* 構造情報を得ることができる。例えば、筋収縮を担うアクチン-ミオシン系や筋収縮制御に関連したトロポニン複合体など、研究対象とすべき系は数多い。また、蛋白質分子内の特定アミノ酸の重水素化も、重要な手法となり得るものである。中性子結晶解析においてこの方法は、X線結晶解析における重原子修飾に対応する方法となり得るが、それに止まらず、例えば、纖維回折実験など様々な系において蛋白質分子内の特定領域の位置情報が得られる広い応用可能性をもった方法である。

§ 6 結晶構造解析法をもちいる中性子構造生物学

この数年来、X線結晶解析によって決定されるタンパク質立体構造の数は、飛躍的な増加を見ている。Nature誌やScience誌には、ほとんど毎号、新しい構造が報告されるようになった。これは生物科学の分野において立体構造のニーズが高まったことによる。タンパク質の機能は、もはや立体構造なしには理解できないという認識は定着し、「構造生物学」という学問分野の確立を見た。

X線結晶解析においても水素の位置を決定することは、全く不可能ではない。しかし、これはタンパク質の分子量と結晶性に依存し、また、極めて注意深い緻密な実験が要求され、決して一般的な例とはいひ難い。したがって、ミオグロビンでの例に示されるように、水素原子位置の決定は中性子回折の独壇場である。

膜タンパク質では、膜タンパク質を水溶液に溶かすこと、すなわち、可溶化が必要で、両親媒性の界面活性剤が用いられる。しかし、ミセルになってタンパク質表面に結合している界面活性剤は、結晶内できちんと配向していないため、X線結晶解析ではこれを見ることはできない。しかし、コントラスト変調法を用いた低分解能中性子回折は、反応中心複合体の結晶内での界面活性剤の構造を求めて、そのタンパク質への結合を直接的に示した。

原研の生体高分子結晶構造解析用中性子回折計は、このような課題にわが国でも挑戦できる可能性を与えてくれるものである。中性子回折では結晶の大きさなどに解決すべき問題も残っているが、水素原子の情報のためにはその労力を払う価値は十分にあるであろう。その水素位置決定が生物科学的にどのような意義を持つかということを常に意識して、水素位置の決定が、そのタンパク質の機能を理解する上でのキャスティングポートを握るようなターゲットを見いだすことが重要であろう。そのようなインパクトの大きな研究が、新しい中性子結晶学から生まれることを期待したい。

1) 中性子線による試料のダメージはX線に比べて著しく小さい。

X線結晶構造解析における最も大きな実験的問題点のひとつはX線による結晶の劣化である。そのダメージのために分解能が低下する、多数の結晶を使わなければならない、または測定自体が困難になるといった事態が起こっている。この問題点は、特に巨大タンパク質の場合に起こりやすく、実験の大きな障害になっている。現在は中性子線結晶解析では測定可能な結晶格子の大きさに上限があると聞いているが、巨大タンパク質の結晶構造解析にも適用可能にすることができるれば、ダメージの問題をほぼ完全に回避することができるようになり、構造生物学のひとつのブレークスルーになることが期待される。

中性子を用いることにより水素原子を見る能够があるので、蛋白質や核酸等の生体物質の結晶の中性子回折から、その生体物質内の水素の位置や水和水の位置を決めることが可能である。例えば、DNA結合蛋白質によるDNAの塩基配列の認識には蛋白質のアミノ酸残基とDNAの塩基との直接あるいは水分子を介した水素結合のネットワークが重要な役割を果たしていること、蛋白質の構造形成やその安定性そして機能の真の理解のためには蛋白質表面での溶媒との相互作用の解明が必須であるが、そのためには蛋白質の水和に関する情報が不可欠であること、また、モーター蛋白質やG-蛋白質等によるヌクレオチドの加水分解機構の理解のためには、ヌクレオチド周辺の水分子を含む水素結合のネットワークを明らかにする必要があることなど、中性子回折による水素の位置決定により大きな前進が期待される生物学上の問題は多数ある。測定法の側面を考えると、パルス中性子源での中性子結晶解析においては、time of flight Laue diffraction法を用いることにより、データ収集にかかる時間をさらに短縮できる可能性がある。

2) リボ核酸分解酵素のグルタミン酸とRNAのリン酸基との相互作用の解明

一本鎖リボ核酸（RNA）を分解する一群のリボ核酸分解酵素については、何種類もの酵素についてX線結晶構造解析がなされている。これらのリボ核酸分解酵素に共通する問題は、RNA切断作用において酸塩基触媒として作用するアミノ酸残基の組み合わせが、グルタミン酸-ヒスチジンであるのか、あるいはヒスチジン-ヒスチジンであるのかという点である。反応生成物やインヒビターを含む基質類似体との複合体の結晶構造が何種類も明らかにされているにも拘わらず、いまだに触媒残基の組み合わせの問題に決着は付いていない。問題を複雑にしている一つの要因として結晶構造の解釈の問題がある。結晶構造において、触媒残基の候補であるグルタミン酸が基質類似体のリン酸基に極めて接近している。通常グルタミン酸のpKa値は4.3程度であるから生理的条件下では、カルボキシル基は解離しているはずである。しかるに、これまでに得られている結晶構造はいずれも、カルボキシル基がプロトネートしてリン酸基と水素結合していると考えざるを得ないような状態である。ところがX線結晶構造解析はよほどの高分解能でもない限り、水素原子を捉えることは不可能であるから、水素結合の有無はもっぱら水素供与体と受容体との距離で判断せざるを得ない。構造解析における誤差を考えると距離だけで水素結合について判断するのははなはだ危険である。中性子結晶構造解析であれば、水素原子（重水素原子）を“見る”ことができるので、グルタミン酸とリン酸基との相互作用についてこれまでにはない知見を得ることが可能となるであろう。そうすれば、リボ核酸分解酵素によるRNAの切断反応における触媒残基の組み合わせの問題に決着を付けるための、新たな視点を得られるに違いない。

3) 鉄輸送性蛋白質トランスフェリン（Tf）とその受容体（TfR）の相互作用とそのダイナミクス

TfとTfRの相互作用は、抗菌活性、抗酸化脂質抑制、免疫賦活作用などの働きをもっており、さらに細胞の増殖因子として、鉄の代謝に関与し、鉄欠損症あるいは鉄過剰症などの疾患に関係している。また近年、Tfが癌細胞表層蛋白質p97と高い相同意をもち、癌蛋白質と深い関連性があることが示された。さらに、アルツハイマー病との関連から、AIを配位したTfが老化した脳細胞のTfRと結合することが報告されている。従って、Tf-TfRの相互作用に関する研究は、生医学上、大変重要である。

また、その他、DNAと非ヒストン様DNA結合蛋白質HMG1、HMG2との相互作用、細胞外マトリックスのフィブロネクチンフラグメントのヘパリンによる活性化機構、老化に係わるコラーゲンの線維形成（自己集合化）とゼラチンのゾルーゲル転移およびそれらの構造制御、H鎖あるいはL鎖richフェリチンの鉄取り込みに伴う構造変化が重要なテーマとしてあげられる。

§ 7 非弾性散乱をもちいる中性子構造生物学

タンパク質のダイナミクスを直接測定する手段は、極めて限られている。その中で最も直接的な情報を与えるものが非弾性中性子散乱である。最も重要な問題のひとつは、タンパク質のガラス転移である。この温度を越えてタンパク質は生理活性を持つ。したがって、この転移温度以上で獲得される運動モードこそが生理活性をもたらすものであると推定できる。この変化を定量的に測定することができれば、タンパク質機能の理解に大きな貢献をすることになると思われる。

構造に関する情報の得られる中性子回折・散乱法に対して、非弾性散乱・準弾性散乱測定により、蛋白質分子のダイナミクスに関する情報を得ることができる。蛋白質の機能発現に密接

に関わっている可能性の高い分子自身のゆらぎを直接測定できるこれらの方法は、非常に重要な測定法となるであろう。特に、蛋白質分子内の特定部位のダイナミクスに関する情報の抽出の可能性を考えると、特定アミノ酸残基の重水素化（あるいは重水素化蛋白質中の特定アミノ酸残基の軽水素化）技術が重要であると思われる。

中性子を用いた生体物質の研究は、こうした大きな可能性を持ちながらも、生体物質の試料精製や取扱の難しさに加えて、中性子源が弱いためにデータ収集に時間がかかるといった問題があり、これまでのところ、十分に展開してきたとは言い難い。重水素化蛋白質の精製といった分子生物学・生化学的技術の発展とともに、強力な中性子源の必要性は、この分野の発展において本質的である。

§ 8 実験手法・装置開発

1) 高速時分割中性子散乱測定

測定装置として、例えば、光合成過程における構造変化を追跡出来るような、光を当てながら、高速時分割中性子散乱測定が出来ることが望まれる。もしも、このような測定が実現できるならば、これから得られる知見は、新規な生体材料の開発と相俟って、現代ならびに今後の重大な問題である「環境およびエネルギー問題」の解決に対する重要な糸口を与えるものと期待される。

2) ソフトマターにおけるダイナミックスの中性子スピニエコー法による研究

高分子、液晶、界面活性剤系、コロイド分散系、ゲル、生体物質等のソフトマターにおける原子、分子集団の数nmから100 nmの大きさの構造及びその0.1 nsから100 nsの時間領域の動的振舞いを中性子スピニエコー法（NSE）を用いて研究し、物質科学や生命科学での問題解明のみならず新しい研究分野の開拓を目指す。パルス中性子中性子源はTOF法に適しているが、TOF法のNSEも検討すべきである。

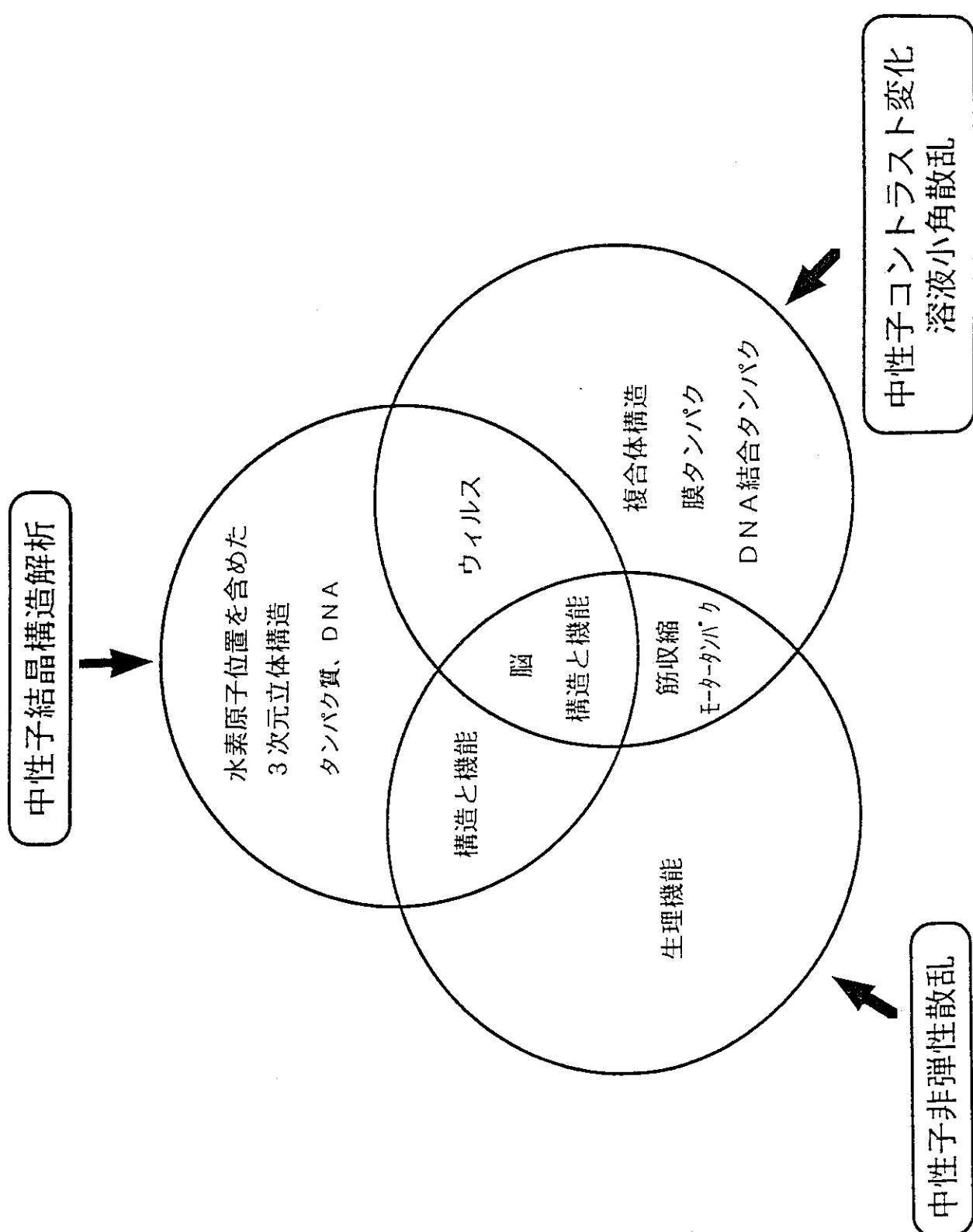


図 2-1

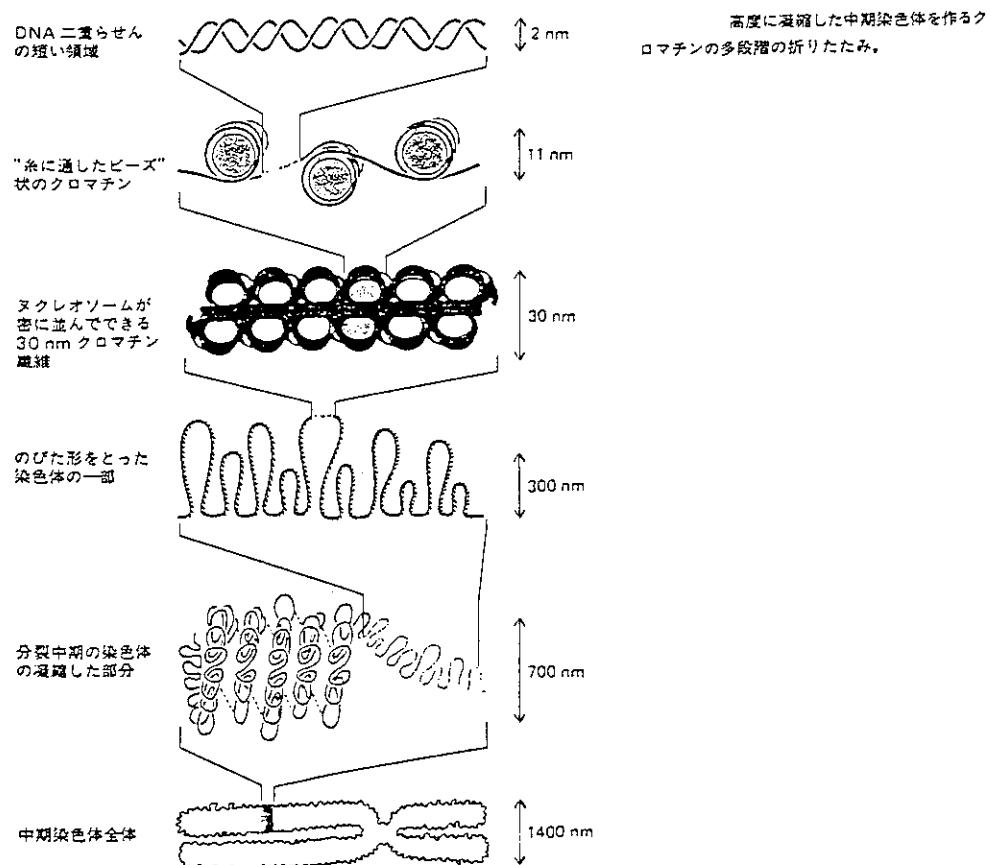
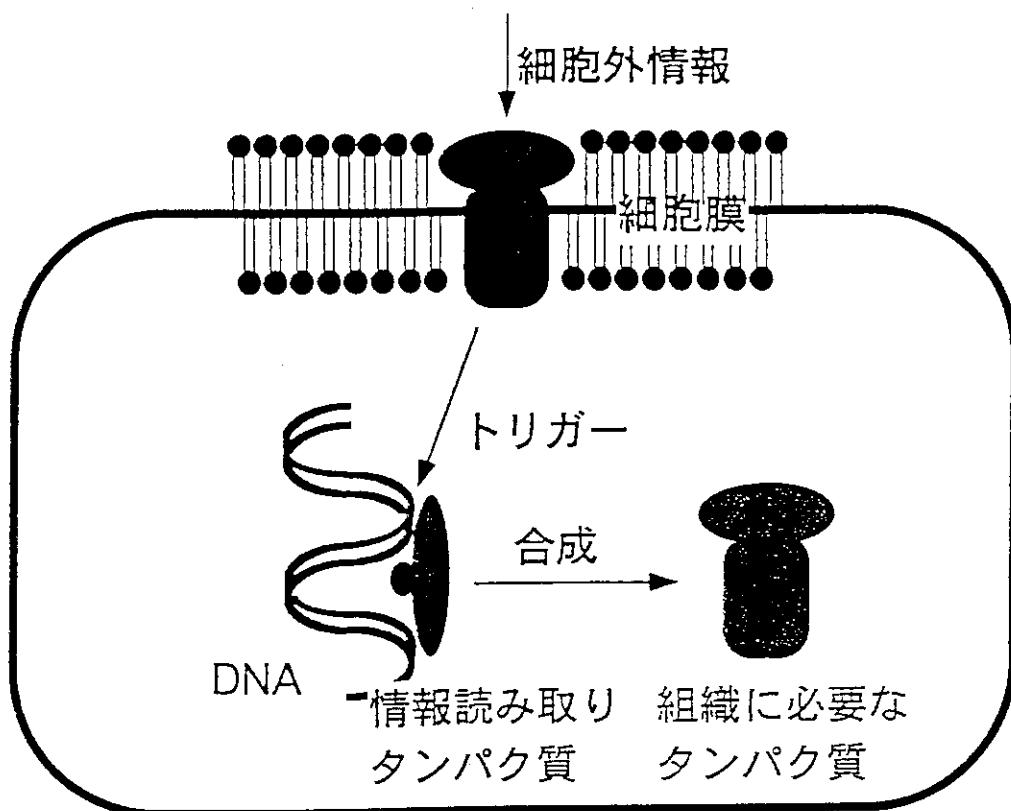


図 2-2

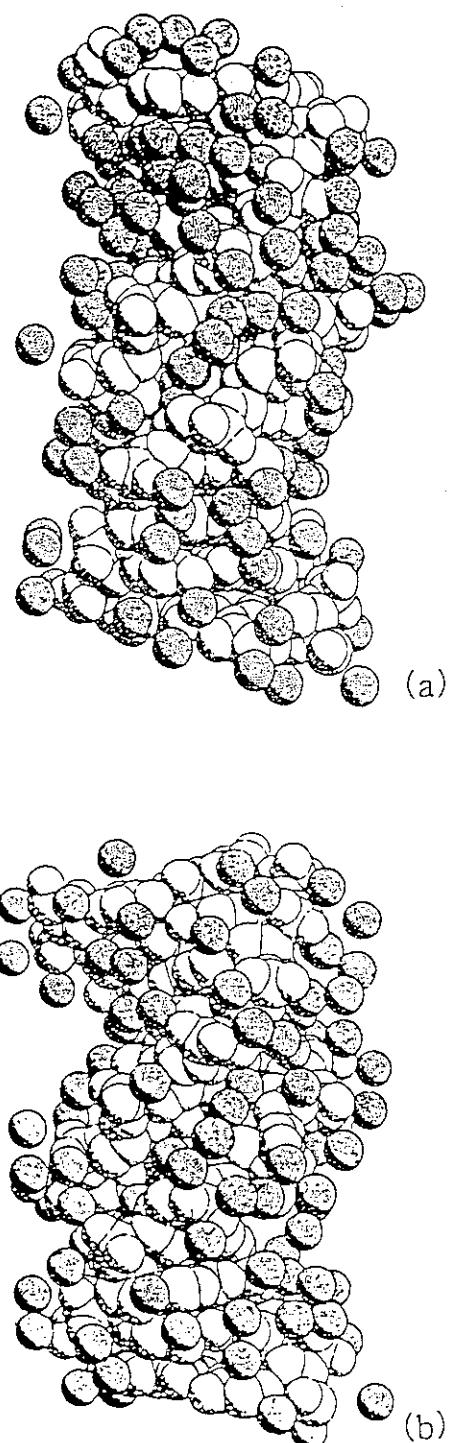


図 2-3 DNA (白丸) 二重らせんの立体モデル。斑点の丸は小さな溝の水和分子を示す。(a) : MPD構造、(b) : 16K構造。小さな溝の充填、大きな溝の表面を覆う水和層、リン酸基の母骨格の水和に注意。リン酸基の水和は室温ではほとんど見えない。

3. 物 質 科 學

20世紀の物質科学或いは固体物理学は、凝縮系における物理法則の解明に多くの成果をもたらしたが、21世紀の物質科学研究は、物質の「構造」と「機能」を高度に制御する事に多くの関心が集まると考えられる。ここでは、中性子回折・散乱を用いた物質科学研究の21世紀のブレークスルーとして期待される「極限条件下での物性の研究」、「ソフトマテリアルの研究」、「機能性材料の構造評価」を取り上げ概観する。

§ 1 極限環境下における物性研究

1) 極限物性

温度、磁場、圧力等は、物質の物理的、化学的性質を変化させるため、新物質探索や物性研究において極めて有用な基本的独立パラメーターとして用いられる。

物質の温度を極限迄下げていくと、物質は完全な基底状態におちこむが、その過程でその温度に応じてそれ迄熱的じょう乱に覆い隠されていた、より微細な相互作用による励起状態が次々とあらわれて来る（図3-1）。このことは21世紀への宿題として残されている、いわゆるランダム系やガラス系といわれる非周期系に見られるような、基底状態附近に無限に多くの励起状態をもつ体系を詳細に研究するのに極めて重要な意味をもっている。

一方、物質を高圧、高磁場のような大きい外力のもとにおく時におこる最も目ざましい効果は基底状態と励起状態の入れ代わりである。これによって物質を新しい安定状態におき、このもとで発現する新しい機能を調べることは、これ迄にない新奇な機能性材料の発見にもつながるであろう。

特に興味があるのは、丁度基底、励起の交替がおころうとする臨界点での振る舞いである。ここでは両状態が原理的に縮退することになり、いわゆる臨界現象のかたちで物質に通常みられない新機能があらわれる可能性が高い（図3-2）。

このような極限環境に時間的要素をつけ加えて考えると、その極限環境を維持する時間が短い程、到達する極限磁場、圧力等を高くできるのは当然である。すなわち‘パルス的’極限環境では、定常的なそれより遙かに到達限度を上げることができ、新しい機能のサーベイの領域が広がることが期待できる。

更にパルス環境の生成については、次のような利点がある。この場合は極限的な外力のもとに物質をおいた後に外力が取り去られるから、物質は瞬間的に本来の平衡状態からかけ離れた非平衡状態におかれる。時間経過とともにやがてはもとの状態にもどるが、その際どのような経過を過渡的に辿るかは今後の発展が期待されている非平衡系の統計物理学の一般的な課題として重要であり、ここにも21世紀の科学へのブレークスルーの大きな可能性がある（図3-3）。

2) パルス中性子と極限物性

このような極限物性の研究を展開する上で、中性子散乱は非常に有利な条件を具えている。

中性子は他の波動的プローブ、X線や電子線に比べて物質に対する透過率が圧倒的に高い。従って超低温、高磁場などの極限環境をつくり出すために必然的に試料周辺におかれる真空容器や構造材などを簡単に透過して試料に到達でき、散乱波を観測することができる。

しかも原子炉から得られる定常中性子ビームを用いる時は多くの場合散乱波を解析するに‘角度分散方式’（散乱波のエネルギーをアナライザ結晶のプラグ角で測定する）を用いるため、検出器を測定中に駆動する必要があるのに対して、加速器からのパルス中性子を利用

する時は波長分散方式（散乱波のエネルギーを中性子の飛行時間によって測定する）を用いることが出来るため、検出器および試料を固定して解析を実行できる、極限環境を維持する大型付属装置の下での測定では、測定系の駆動部分の少ないパルス中性子源が特に有利である。

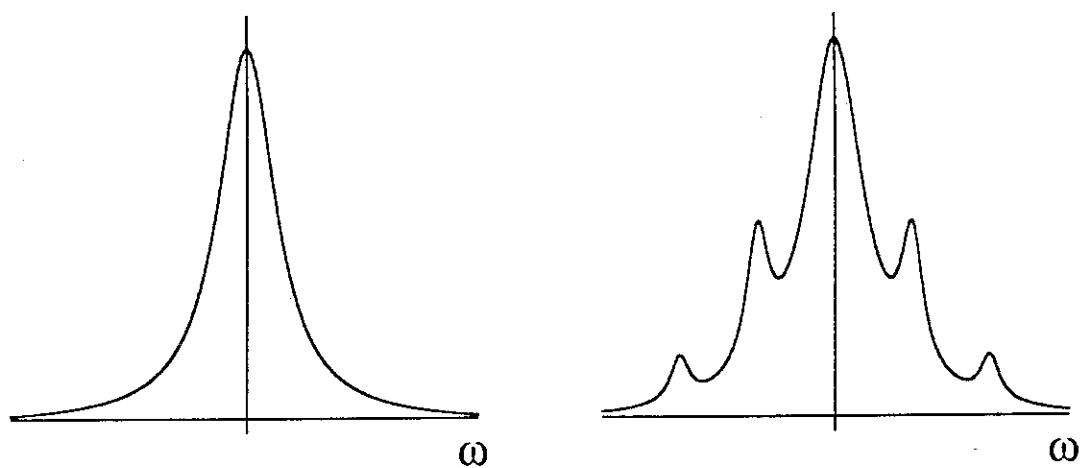
更に、パルス中性子を用いた場合の最大の特徴はパルス極限環境との組合せにある。パルス的に入射される中性子プローブと、瞬間に実現される極限環境を正確に同期させれば、現在の測定限界を遥かにこえる超極限状態を観測できるのみならず、その同期の位相を適当にずらすことにより、現在迄殆ど手のつけられていない、非平衡系の時間発展の詳しい測定という、広大な研究の分野を開拓できる（図3-4）。

3) 新施設における極限物性

計画中の原研中性子科学研究センター（仮称）の中性子散乱施設では、このような考察をふまえて、21世紀の物質科学的研究のために、10 mK、20 T（定常磁場）、100 T（パルス磁場）、数十GPa(定常圧力)、数十GPa以上（パルス圧力）の極限環境、あるいはこれらの組合せによる多重極限環境を実現できる付属装置を開発する。

これを用いて当面考え得る魅力的なテーマとして、この条件下で新しい物性を示すと期待できる強相関電子系物質の研究等を行う。特に酸化物、希土類化合物、アクチノイド化合物はその結晶構造、磁気構造や磁性と超伝導に関して非常に多彩で豊富な物性を示すものがある。酸化物超伝導体、ウラン化合物やセリウム化合物の重い電子系超伝導体では、これまで超伝導性を阻害すると考えられてきた磁性が共通舞台に登場し、磁気スピンがクーパー対形成に重要な役割を果たしている可能性がある。この場合には、これまでの金属超伝導とは異なる異方的超伝導が実現している可能性が高く、超伝導ギャップや臨界磁場 H_{c2} の異方性、極端条件下での超伝導多重相の出現、転移点での対称性の破れ等に関する詳細な研究が不可欠である。この研究において、中性子の果たす構造決定プローブ、磁性プローブ、エネルギー測定プローブとしての役割は極めて大きく、現代の固体物理学が取り組むべき最重要課題である強相関電子系物質のミクロスコピックな超伝導機構解明に大きく寄与するものと期待できる。

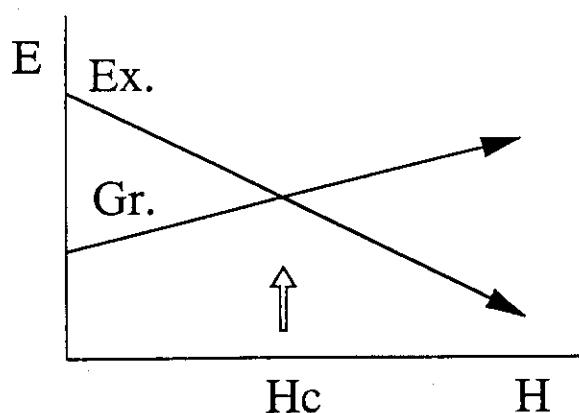
中性子はさらに、時間平均ではなく瞬間的な大強度中性子が利用出来れば、極端条件下で物質の示す過渡現象や緩和過程を高い時間分解能で測定することも可能になる。



準弾性散乱の詳細なスペクトル

→ 微細な相互作用の確認

図 3-1



Criticalな外場での χ の振る舞い

→ 新機能の発現

図 3-2

極限環境に時間的要素を付加

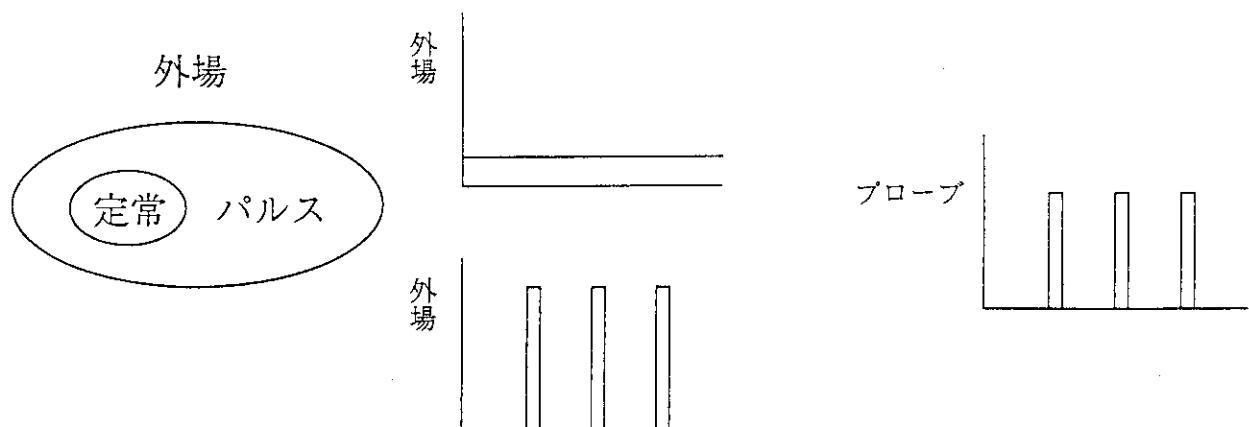


図 3-3 パルスプローブとの同期による極限領域の拡大

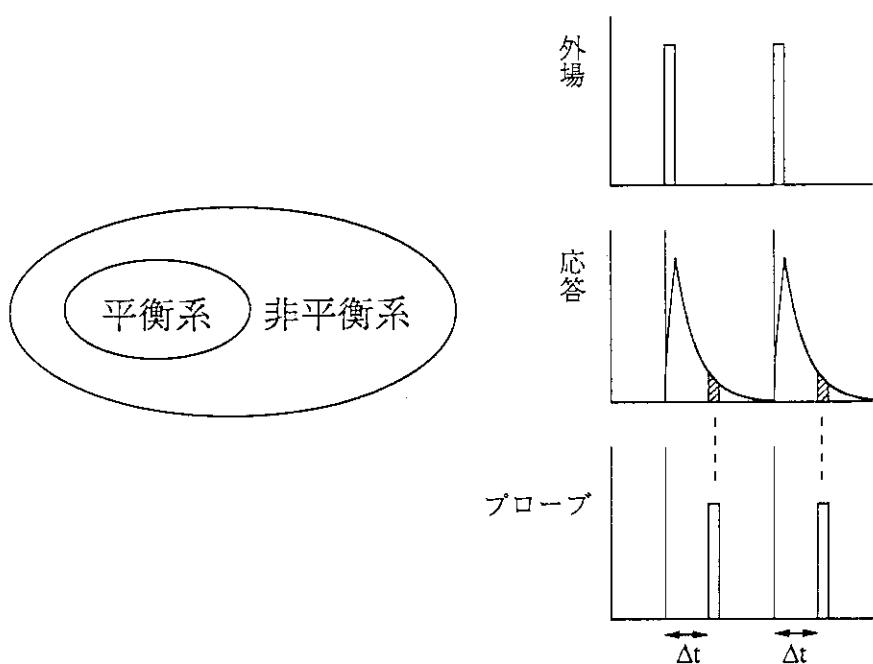


図 3-4 非平衡系・非線形系の時間発展過程の研究

§ 2 ソフトマテリアルの研究

1) ソフトマテリアルと次世代中性子源

科学の発展の歴史を辿るとそこには明確な研究の流れが見える。それは一体系から多体系、一成分系から多成分系、平衡系から非平衡系、線形系から非線形系、閉じた系から開放系への展開であり、いわば、理想化された単純な系から、より現実に近い複雑な系への自然な研究の流れを見ることができる。このような発展は、当然ながら測定機器、電子計算機を含めた科学技術の進歩や、自然界の諸法則に関する理論の発展に負うところが大きく、両者の相補的な発展の結果なし得た必然的な流れである。このような流れの中で次世代中性子源は、人類に自然科学を記述する新しい法則の発見と、新しい科学技術の展開をもたらすものとして大いに期待される。さらなる飛躍のチャンスが訪れたと言っても過言ではない。次世代中性子源は、より現実に近い複雑な系への科学的なアプローチを可能とし、現在に至るまでに得られた比較的単純で、理想化された系で発見された法則が、どのように現実に近い複雑な系に適用されるであろうかという命題の検証の場を与えてくれる。さらに、次世代中性子源を中心として、その利用をめぐり、様々な研究分野で新しい科学の発展に夢を持つことができるとしたら、この夢こそが新しい科学の発展のブレークスルーにつながり、延いては人類文化の発展、次世代への遺産をもたらすもと期待することができる。「夢のない社会は衰退する」としたら夢を与える大規模な文化事業こそは、人類の将来にとり貴重な事業として着手されるべきである。

次世代中性子源で大きな発展が期待される研究分野として「ソフトマテリアル」を挙げることができる。ここではソフトマテリアルを「高分子、コロイド粒子、ミセル、膜などを内部に含み、数十nmから数千nm程度の大きさの構造体を形成する能力のある液体」と定義する。これは固体に端を発した物性研究を複雑化する延長線上に存在する対象であり、この中には神秘的な生命現象を司る生体をも含めることができる。すなわち、ソフトマテリアルは「ただ柔らかい物質」という意味を持つだけでなく、単なる物質としての固体や液体というレベルから、複雑性、機能性、自己再生性などの積極的な意味を含む自然界の上位階層の物質を総称するものとして捉えることができる。

ソフトマテリアルの代表的な存在である高分子を例に挙げて、その発展の可能性、そこでの中性子散乱の役割を考えてみる。一個の高分子鎖は、多数の単純な分子単位（一個の低分子に相当し、モノマーと呼ばれる）が化学結合で連なった「連結系」である。この連結系は通常、数百以上のモノマー単位で構成され、数十nmの空間サイズを持つ。そのため一つの高分子鎖でさえ莫大な数の形態を取ることができ、莫大な内部自由度を保有している。さらにこの高分子鎖が、凝集構造、ネットワーク構造などの上位階層を形成すれば、その複雑性は計りしれない。またその運動も非常に広い時間スケールにわたる。モノマー単位に特徴的な時間は、他の低分子と同じくピコ秒程度であるが、高分子鎖全体の運動（鎖の変形、回転等）となるとマイクロ秒のオーダーとなる。さらに高分子濃厚系では、高分子鎖の絡み合いの効果で、拡散運動が更に遅く秒のオーダーとなる。高分子を冷却してガラス状態にすれば、その構造緩和に要する時間は数万年のオーダーにもなる。このように高分子系はその状態に依存して、広いスケールにわたる静的、動的階層構造を持つ。この階層構造の中で高分子の状態は決して固定化されたものではなく、静的、動的な自由度が最大限に開放され、絶えず時間的に変化している。つまり高分子を代表とするソフトマテリアルは、莫大な数の状態間で、移り変わりが容易な危うい均衡状態の上に存在し、このような不安定さが生体に代表されるような複雑な機能をささえていいると考えられる。生体が高分子を基本単位として成り立っていることは、ソフトマテリアルの

持つ可能性が進化の過程で選択された結果であり、その奥深さに疑問の余地はない。高分子をはじめとするソフトマテリアルの研究は、理想化された単純な系に段階的に自由度を増大させ、その延長線上にある複雑な系の奥深さを理解する試みと位置づけることができる。

こうしたソフトマテリアルの物性研究の中で、中性子散乱のしめる役割は何であろうか？ 中性子散乱測定技術の現状と照らし合わせて考えてみる。中性子散乱の大きな魅力は、その弾性、非弾性散乱を観測することで、注目する系の時空相関、すなわち「形と運動」を同時に知ることができることである。さらにソフトな系は運命的に多量の水素を含むので、重水素ラベル法やコントラストマッチ法を駆使し、複雑な多体系の「形と運動」の一部を選択的に観察できることである。先に述べたように高分子系は、モノマー単位からはじまってより大きな空間スケールとより遅い時間スケールで特徴づけられる階層構造を持つ。これを、熱冷中性子をプローブとして観測する場合の観測領域の上限は次のようである。静的構造は、冷中性子をプローブとする中性子小角散乱装置を用いて、数百nmまでの大きさを観測することができ、これは典型的な高分子鎖の回転半径のサイズの数十倍に相当する。また動的挙動は、中性子スピニエコー装置で数百nsの時間領域を観測することができ、これは高分子鎖の内部自由度に由来する緩和時間に相当する。このように現状の中性子散乱測定の技術は、高分子鎖が形成するより上位の階層構造の「形と運動」を十分に観測できるには至っていない。次世代大強度中性子源に期待されることは「より広いレンジの時空スケールでより精度の良い測定」を実現することである。スケールの向かうべき方向は「より大きく、より遅い」対象の観測を実現する方向であろう。「広く、早く、精密に」をキーワードとして、大強度中性子源の実現を大いに期待する。

2) 期待される研究テーマ

ソフトマテリアルを研究する視点を（1）マクロモレキュール系の物理的理解、（2）人類福祉への貢献の2つに大別し（図3-5）、そこで期待される研究テーマを以下に述べてみる。

（1）マクロモレキュール系の物理的理解

ここでは述べるのは、自然界に存在する複雑なソフトマテリアルを物理的に理解し、普遍的な法則を見つける流れである。すなわちそこではソフトマテリアルの持つ多自由度の粗視化が重要となる。

（i）高分子液体の諸物性

一本の高分子鎖の静的、動的な側面を記述する試みは、高分子鎖を構成するモノマー単位の数（重合度）に注目し、モノマーの微視的な化学構造を無視することからはじまった。このような粗視化のもとではモノマーはひとつの玉のように振る舞い、高分子鎖はこの玉がバネにつながれたバネビーズ模型として記述される。de Gennesらのスケーリング則は、このようなバネビーズ模型が高分子のミクロなパラメータの詳細に寄らないユニバーサルなモデルであることを証明し、その静的、動的側面を簡潔に記述した。このモデルの検証に中性子散乱が果たした功績は大きい。たとえば、中性子小角散乱法が、特定の高分子の水素を重水素で置換する重水素ラベル法を用いて、濃厚系での高分子鎖の広がりを初めて実測した。また動的側面では中性子スピニエコー法が、絡み合いのある高分子鎖の拡散モデルであるレブーションモデル（管模型）の仮想的な管の直径を初めて実測し、モデルの検証を行なった。このような中性子散乱法による実験的検証とあいまって、1991年にde Gennesがノーベル物理学賞を受賞したことを考えると、高分子液体の理解に中性子散乱実験が不可欠であることは疑う予知がない。さらにこのような成功をふまえて、液晶高分子や高分子ブロック共重合体が、相転移によって微細構造を形成した液体（Structured Fluids）の力学的性質やレオロジーの研究が進められている。この

分野は未開拓であり、中性子散乱として今後どのように貢献するかが期待される。

(ii) 過冷却液体と異常緩和

多体間の協同現象として脚光を浴びているのが過冷却液体のガラス転移とその異常緩和の問題である。多くの高分子は冷却すると分子運動が凍結されガラス状態になる。ガラス化の問題は古くから論じられているが、これまで現象論的考察が研究が主であった。このような流れに一石を投じたのがいわゆるモード結合理論である。ガラスの化学的構造の細部にはこだわらずこれを連続場とみなし、一般化された流体力学方程式にしたがってガラスの構造緩和を記述する試みである。このような試みが脚光を浴びた背景には、中性子スピニエコー法の開発がある。ガラス転移点近傍の密度揺らぎの異常緩和過程を、中性子スピニエコー法で観測することが可能となったことによる。ガラス転移の記述は未だ不完全であり、モード結合理論以外に粒子の微視的運動に基づいたモデル（たとえば、トラッピング拡散モデルなど）も提案されている。今後ともガラス化の理解に、中性子非弾性散乱による実験的検証が、大きく貢献すると期待される。

(iii) 非平衡、非線形系のパターン形成

非平衡、非線形系のパターン形成の問題としても、ソフトマテリアルは興味深い対象である。ソフトマテリアルは構成単位が大きく、弱い外場によって平衡状態から大きく外れ、強い非線形応答を示す。また同時に、非線形系に特有な規則的、あるいはカオス的なパターン形成が見られる。例えば開放系の問題として、薄い層に閉じこめた液晶に電圧を印加する時に観察される電気流体力学対流はその典型であり、そのパターンは液晶分子の異方性を強く反映して多彩である。その他にも様々な形態の会合体を形成するミセル系、巨大分子系とも言うべきコロイド分散系では、通常の液体では見られない多様の性質を示し非線形、非平衡現象が著しい。これらを理解してゆくことは、非線形物性としての新しい学問のジャンルを作っていくことになり、未だ発展の途上である。このような流れの中で、中性子散乱がどのように貢献していくか、またそのための分光器の開発は、次世代大強度中性子源で問われる大きなテーマである。

(2) 人類福祉への貢献

ここでは物質的構造を尊重し、複雑なものを複雑なままに扱うことで、人類福祉への貢献するような高機能をもつシステムを開発することを目的とする。いわゆる材料開発、物質探索といった応用化学的研究（たとえば、LB膜開発やクライオジェニック極限材料の探索など）もこの範疇に属するが、ここではさらに積極的に複雑な系を対象とする。たとえばそれは、生体模倣化学（Biomimetic Chemistry）の言葉にあるように、生体の模倣のなかで行われる材料開発であり、その延長線上には生命現象の理解も期待される。次世代大強度中性子源は、このような開発の中で必要とされる開発指針を与える手段と位置づけられる。中性子散乱によるソフトマテリアルの研究で、このような視点で行われているものは現時点ではほとんど皆無であり、新しく期待される研究分野である。

(i) 超分子開発

一般的の高分子鎖はバネビーズ模型で記述されるランダム鎖である。そこではモノマー単位が空間にランダムに分布する。このような高分子は、与えられた環境の中で必然的な形態を持たず、同じレベルの形態エネルギーを与えるモノマー配位が数多く存在する。すなわち形態の縮退が解けておらず、形と運動とそこで発現される機能との間に必然的な結びつきが無い。生体を範とすれば、高分子の内部構造を階層化することで、個々の分子が特徴のある機能を担うことのできる「超分子」の開発が実現されるものと考えられる。超分子とは、高分子の内部構造

と高分子鎖の内部自由度に由来する分子内運動が高度に制御された結果、個々の高分子鎖が、物質の認識、捕獲、輸送、合成、破壊等の機能をもつことのできる分子のことである。近年、高分子合成の分野では、目的とする内部構造を持つ高分子を自由自在に合成するテーラーメイド技術が進歩している（例えば、図3-6：金属ポルフィン錯体をコアとする機能性デンドリマー）。そこでは高分子を構成するモノマーの個性を尊重し、モノマー種を増加させ、その一次配列の制御を行う。その結果、各モノマー間には複数の物理的相互作用（ファンデルワールス力、水素結合、イオン結合等が）を非等方的に作用し、高分子鎖の形態に関して縮退の解けた必然的な状態を実現することができる。必然的な状態は、危うい均衡状態の上に実現し、期待される機能と密接に関連すると思われる。先に述べたように、中性子散乱は高分子の内部自由度に由来する「形と運動」を、水素、重水素の染め分けにより選択的に観測するのに長じた手段である。この考えれば、中性子散乱が超分子開発に指針を与えることで、両者の間には今後大きな交流が期待されるのである。

(ii) 会合現象と対象認識

高分子の会合現象は、高分子鎖がより大きな構造を形成するのと同時に、物質が対象認識という生物的機能を得る進化の過程の第一歩である。会合とは、化学結合が飽和した時点での物理的相互作用による一段高い階層での集合体の構築プロセスで、分子認識にいたる萌芽的な対象選択性が内包されている。近年、注目を浴びている可逆ゲルも、会合現象が巨視的なスケールに展開した極限としてとらえることができる。会合によって形成された高分子ネットワークも、ネットワークの部分鎖領域が「反応、記憶、情報伝達」の場として機能し、それをコントロールするのが架橋領域とみなすことができる。生命現象を垣間見る興味ある複雑な系である。自然界に目を転じてみれば、可逆ゲルは、天然高分子を基本単位として構成される生体系のいたるところにみられる普遍的かつ必然的な存在形態である（たとえば、細胞運動様式はアクチンの可逆ゾル・ゲル転移をサイクル作業物質として稼動する熱機関とも考えられる）。このような複雑な系の研究は、食品、薬剤などの工業分野で経験的な研究が行われてきただけで、未だ謎が多い。このような物質から生命への転移を示唆するような複雑な系の理解には、その機能と深く関わっている架橋点構造とその運動性の解析が不可欠であり、中性子散乱への期待は大きい。

3) おわりに

次世代中性子源による21世紀のソフトマテリアル研究には、「集団の形と運動」とそれを構成する様々な大きさの「要素の形と運動」を解明し、「物質の機能、その起源」についての知見を得ることが期待されるのである。この夢は、上で述べた（1）マクロモレキュール系の物理的理解と、これをベースとした（2）人類福祉への貢献の相補的な発展の結果実現されるものと思われる。次世代中性子源施設に期待されることは、この夢の実現を可能とする中性子分光器の開発は言うまでもなく、このように限りない発展性を内包するソフトマテリアルの研究に十分な機会を与え、全ての分野に強い中性子の光をあてる所以である。この点を強く主張したい。

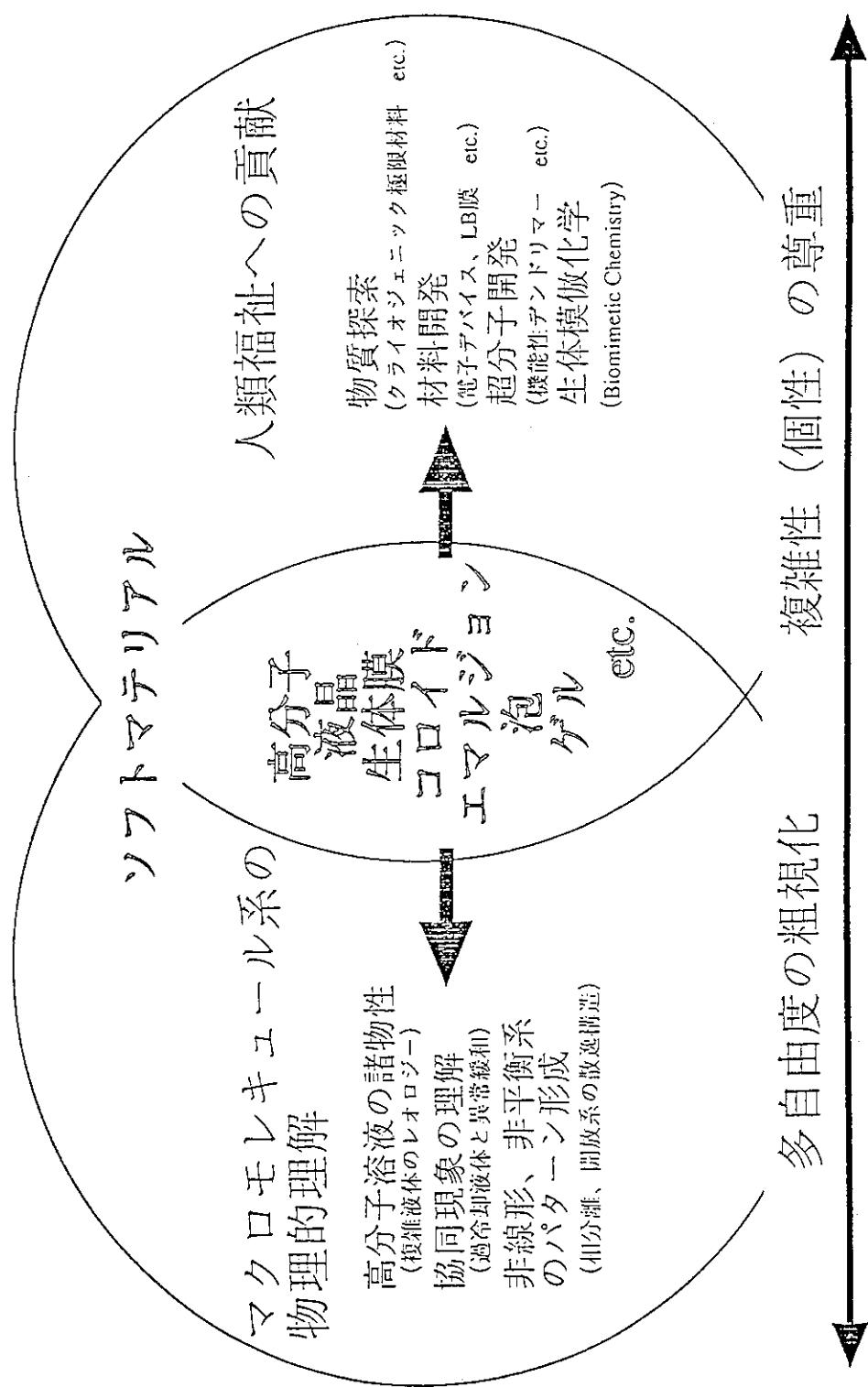
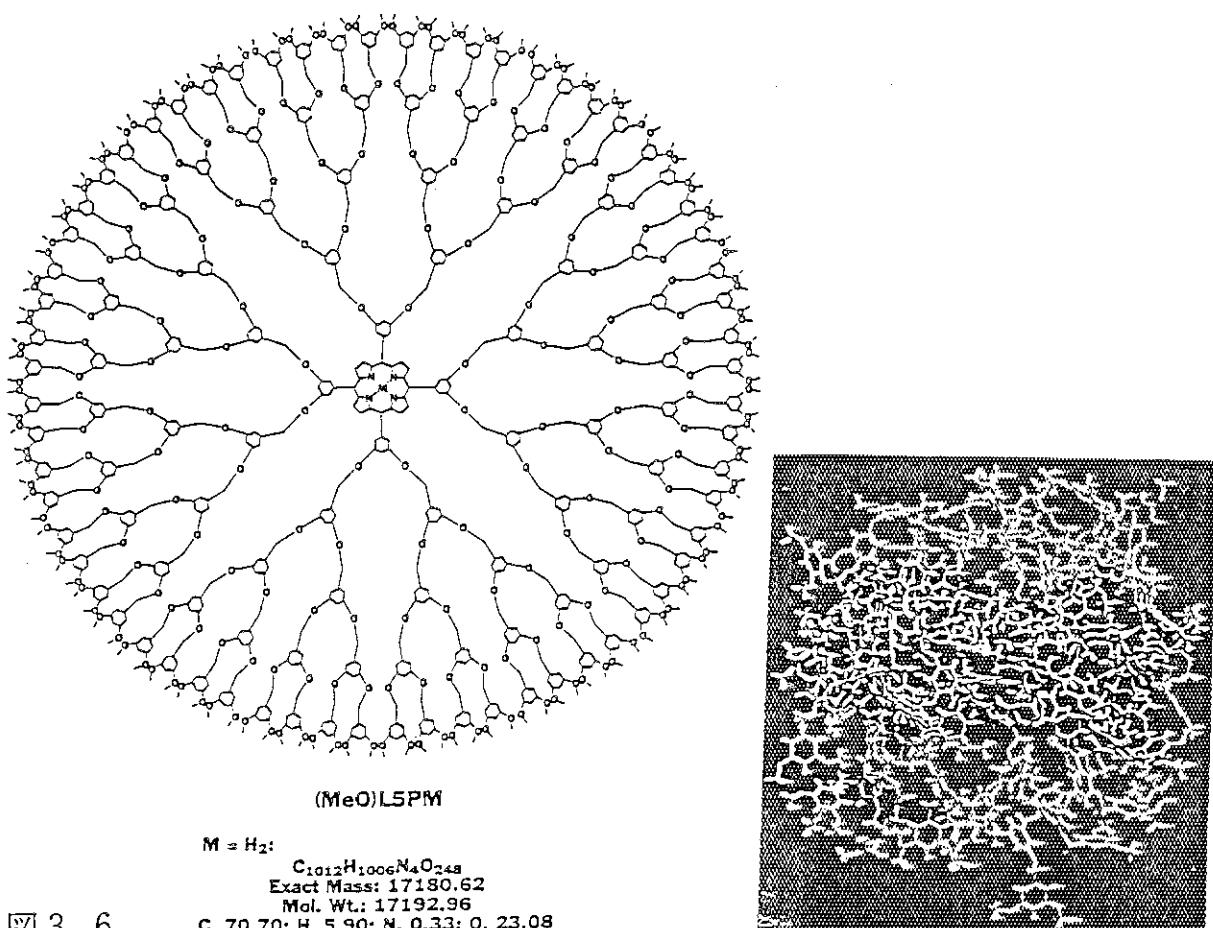


図 3-5



テーラーメイド合成による金属ボルフィリン錯体をコアとする機能性デンドリマー

ヘモグロビンを模倣して合成された機能性デンドリマー（デンドロンとは樹木のこと）は、分子組織内にビタミンを捕捉する機能を持つ超分子である。人工ヘムタンパクとして様々な機能が期待されている。図は相田卓三先生（東京大学工学部）のご厚意による。

§ 3 機能性材料の構造評価

1) 機能性材料開発における中性子の役割

21世紀の人間生活の豊かさを決定するのは重要な機能を持つ医薬品、触媒、電子材料、磁気材料、その他新物質を如何に開発するかに掛かっていると言っても過言では無い。新物質開発において、その結晶構造や磁気構造を精密に決定することは、基礎物性を解明し新しい物性や機能を探求する鍵を獲得するために極めて重要である。

2) 微量粉末試料による中性子回折

永久磁石材料、高温超伝導物質、フラー・レン化合物を例に挙げるまでもなく、現在においても、興味のある物性、機能を備えた新物質が次々に合成されて新機能材料として試用されている。しかし、これらの重要な新物質は当初粉末状でかつmgオーダーの僅かな量しか創製されない場合が多い。また極端条件下で粉末回折法を適用する場合は、通常の実験に比べて少量の試料しか使用できない。残念なことに現在の中性子ビーム強度は弱くて、微量物質の構造解析にはほとんど使用できないが、次世代中性子源による世界一強い中性子ビームを用いれば、微量粉末物質について構造のみならず機能をも解明することが可能となる。現在、微量粉末試料の構造解析は、放射光によるX線回折により可能になった。X線回折法は、X線の電子による散乱を測定している。しかし、中性子回折法では核による散乱を利用するため、軽元素の位置の決定、原子番号が隣り合った元素や同位体を含む系等の構造解析が可能になる。また、物質の磁気モーメントによる散乱を利用すると磁気構造に関する情報をも得るので、医薬品、触媒、電子材料、磁気材料その他新物質の微量粉末物質の構造解析においても決定的な役割を果たすものと期待できる。さらに、X線では不可能な非弾性散乱法により、物質内部の格子振動、スピノ波、結晶場等の動的物性を解明することは、新物質の機能解明のために不可欠である。

4. 材料・分析科学

中性子ビームの工業利用等への有力な応用として、種々の非破壊検査、分析法がある。ここでは内部応力解析、中性子トポグラフィ、中性子ラジオグラフィ、中性子誘起即発ガンマ分析を取り上げ概観する（図4-1）。

§ 1 内部応力解析

1) 中性子回折による内部応力測定の特徴

工業材料やそれを使った構造物、工業製品の残留応力や内部応力を非破壊的に測定評価することは、これらの健全性や寿命を予測する技術を確立したい工業界から強い関心を集めてきた。従来、このような測定評価にはX線が用いられており、X線回折応力評価法が確立されている。しかし、X線の浸透深さは高々数十 μm の程度であり、試験体の表面近傍での応力状態が調べられるだけで、バルク試料の内部情報は全く得られない。一方、中性子線は利用場所が限られているものの、その浸透深さが数cmにもおよぶので、中性子回折法を用いると試験体内部の結晶構造や集合組織、結晶格子の歪みや応力状態を三次元的に測定評価することが可能である。このような材料内部情報を非破壊的に測定できる機能は、決定的であるがゆえに工業利用にとって非常に魅力的である。したがって、X線回折法と中性子回折法をうまく相補的に利用することが極めて重要である。

2) 内部応力研究の現状

現在、デンマークRiso、カナダChalk River、英国RAL、米国ORNL、チェコNPI等で研究が実施されている。国内では京都大学KURで超伝導複合線材、SiC_x/Al MMC等の熱・変形履歴に伴う残留弾性歪み測定や原研JRR-3Mで熔接接手・セラミックス・SiCp/Al合金等の残留応力測定が精力的に行われている。また国際協力研究として中性子散乱法を用いた新しい技術部会が認定されて、この研究が推進されることになっている。

3) 今後の内部応力研究の課題

中性子回折で得られる応力は局所的なミクロ応力であり、通常の場合機械特性を記述するのは全体的なマクロ応力である。これまでの経験ではこれらは一致する場合が多いが、そうでない場合もあり、試料中に結晶粒等が存在する時それらの境界で応力場がどのようにになっているか、そこでの応力場の乱れが全体にどのように影響しているのかつまりマクロ応力とどのような関係にあるのかを解明することが、この研究分野の最重要課題であろう。そのためには、中性子マイクロビームによる微小領域の格子歪み測定が不可欠であり、次世代中性子源による強力中性子ビームが唯一この研究を実行する可能性を与える。

また、金属基の複合材料や金属-セラミックス継手における異相境界における応力場の解析も、材料全体の物性を理解するうえで極めて重要なことである。

さらに、原子力用構造材料等の安全性を極めて強く要求する材料にとって、その健全性測定や寿命予測は最優先の研究課題である。つまり、苛酷な条件にさらされた材料に発生する内部亀裂を如何に早くから予測し、また検知するかがポイントとなる。この問題解決のためにも強力マイクロビームを用いた亀裂面近傍の歪み解析が決定的な情報をもたらすものと期待できる。

最後に中性子回折内部応力解析法の工業分野への応用が、工業材料やそれを使った構造物、工業製品の製造工程を改良する決め手として利用される時、技術的のみならず経済的な寄与は図り知れなく大きいと考える。

§ 2 中性子回折トポグラフィ法

高温ガス発電タービン翼はその熱変換効率を上げるためにニッケル基超合金単結晶で製作する試みがなされている。この場合のように単結晶性が性能を左右する時、複雑な形状を持つデバイスの内部までを非破壊的に測定する方法として中性子回折トポグラフィ法が唯一の方法として注目を集めている。この方法は中性子回折による実写真を与えるので、静止状態の単結晶性情報をもたらすことはもちろん、次世代中性子源のパルス性と組み合わせると、印加力等の外場が変化する時の単結晶性の実時間観察が可能となる。そうなると、材料の動的過程や過渡現象の観察に威力を發揮するものと期待できる。

§ 3 中性子ラジオグラフィ

中性子ラジオグラフィは中性子線の透過特性がX線に比べて優れていることを利用してX線ラジオグラフィでは困難であった三次元可視化を可能とし、多くの非破壊検査に応用されている。その応用は、工業利用にとどまらず、考古学等人文科学にも及んでいる。今後益々利用が広がると思われる手法である。大強度パルス核破碎中性子を利用した次世代中性子ラジオグラフィとして1) 高速度運動体の静止画像取得法の開発 2) TOF法と組み合わせてエネルギー選別中性子ラジオグラフィ法の開発 3) 散乱成分の時間空間分布解析による新しい三次元画像再構成法の開発が検討されている。これらは、大強度ビームを利用して、より質の高い画像を得ようという試みである。

ここでは、実時間ラジオグラフィ法を用いた可視化と計測による金属管内の二相流、液体金属流れ、実際の機械内部の流れ等の熱流動現象の研究について述べる。このような熱流動現象は原子力、機械、化学工学の分野で重要であり、原子炉の開発、安全性、各種流体機器・プラントの設計、診断等の工学的研究が行われている。

中性子ラジオグラフィによる可視化と計測は、このような熱流動現象の研究に極めて有力な手法であり、現在JRR-3Mの熱中性子ラジオグラフィシステムでは原研、大学の10グループ程度が熱流動現象に関連した実験を精力的に行っている。研究炉の中性子源は線質、線量ともに優れているが照射室が広くとれず、また原子炉の安全のため実験には制約がある。一方加速器による中性子源ではこのような制約を少なくすることが可能であり、大型の実験装置や機械を持ち込める大照射室中性子ラジオグラフィ装置の実現が可能となることが期待される。また熱中性子の他に高速中性子も利用することができるので透過力が特に必要な大型装置の可視化・計測も可能になる。

研究対象としては以下のようなテーマが可能になる。模擬燃料集合体の二相流挙動、仮装事故時または過酷事故時の原子炉挙動、高速増殖炉の液体金属熱交換器、核破碎炉用の液体ターゲット、空調機、各種エンジン、コンプレッサー・ポンプ等の流体機器の設計等。さらに実際の機械が持ち込めるようになれば、いっそ工学的な応用が広がると考えられる。

模擬燃料集合体の二相流挙動は、軽水炉の安全性の観点からX線とガンマ線を利用して実機レベルの模擬装置での研究が行われており、中性子線を用いればさらに高精度の計測が行え原子炉の安全性に寄与すると思われる。この場合には、照射室としては床面積 $5 \times 5 \text{ m}^2$ 、高さ10 m程度で中性子照射口が高さ方向の真ん中にあり実験装置が回転3次元リフトに設置できれば十分な実験が可能であろう。他の機械であれば照射室はもっと小さくてもよい。照射野はJRR-3Mの数倍程度に相当する $50 \times 50 \text{ cm}^2$ 以上、中性子束は高い程良いが試料表面では、熱中性子では 10^7 n/cm^2 以上、高速中性子では 10^8 n/cm^2 以上あれば各種計測が可能になるとを考えている。

現在、半導体工学や生物工学の飛躍的な発展に比べ、重厚長大な機械の進歩は遅々たるものであるがここで提案するような装置が実用化されれば、工学上の新たなブレイクスルーが期待される。

§ 4 中性子誘起即発ガンマ分析

中性子ビームを利用した元素（又は同位体）分析法としては、1) 捕獲ガンマ線等の即発ガンマ線を測定する中性子即発ガンマ線分析（PGA）、2) (n, p) 及び (n, α) 反応等で放出される荷電粒子を測定し、試料中のホウ素及びリチウム等の分布測定を行なう中性子デプスプロファイリング（NDP）がある。PGAは他の方法では分析が困難な水素、ホウ素、イオウ、ケイ素等の軽元素に有効な多元素非破壊同時分析法という特長を持ち、環境試料、考古学試料、地質及び隕石等の分析法として注目されている。一方、NDPは国内での研究例は皆無に等しいが、半導体中のホウ素及びリチウム等の分布分析に有効とされている。

核破碎中性子ビームをPGAの中性子源とした場合、1) 高ビーム強度により、分析感度が増大し、検出限界の改善及び測定時間の短縮ばかりでなく、2) 熱外中性子による共鳴吸収を利用した選択的分析、3) パルス中性子に同期したガンマ線測定による励起レベルの寿命の差を利用した選択性の向上等が期待される。さらにまた、高ビーム強度は、マイクロビームによる試料中の元素の分布分析に好都合である。PGAによる分布分析法は、中性子及びガンマ線の透過力により、従来の方法である蛍光X線測定法では困難なバルク全体の分析が可能であり、さらにNDPとの組み合わせにより3次元方向の高度な元素（又は同位体）の分布分析が可能となる。現在開発中のマイクロキャピラリーレンズでは直径0.5 mmの収束ビームが得られ、生体試料の中のホウ素及びカドミウム等の分布分析に有効であり、更に微細ビームの開発により、材料分析にも有効な方法となる。

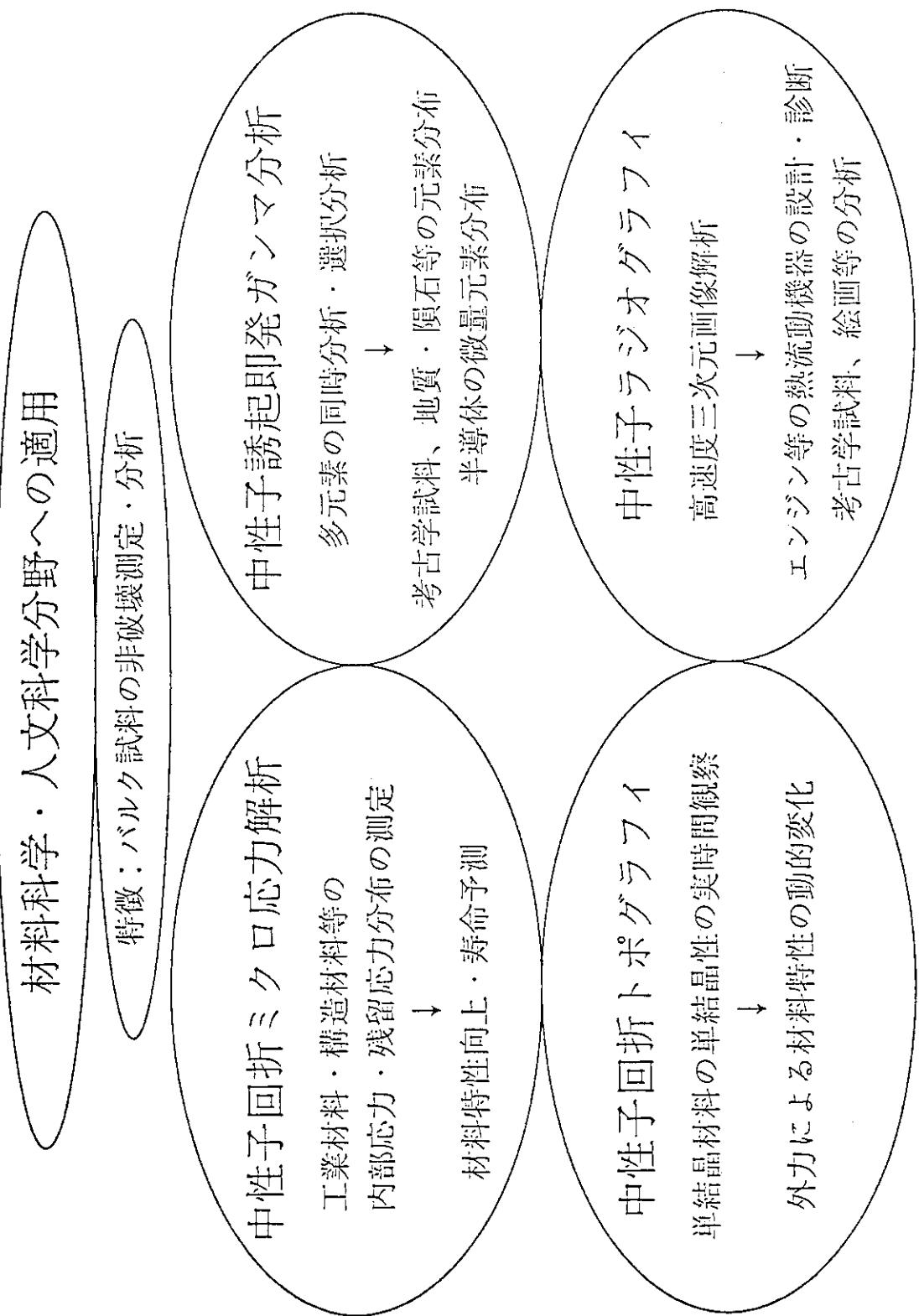


図 4-1

5. 認識科学

素粒子としての中性子そのものに関する研究は、中性子利用研究分野全体からみれば限られているが、それが持つ自然科学的意義は極めて大きく、現代物理学の基幹をなす自然法則の検証という意図をもって様々な工夫を凝らして試みが続けられている。このような試みの一つの方向は、より低エネルギーの（超）冷中性子を用いる方向であり、十分な強度を持つ（超）冷中性子は、この方面の研究の発展に資するものと期待される。またこの分野は、モノクロメータ、ミラー、偏極子、レンズ、干渉計、顕微鏡、2結晶回折計、キャピラリー等の中性子ビームハンドリング技術の発展に密接に関係しており、中性子散乱・回折分野と関係が深い。いずれにせよ、この分野の持つ基本的重要性から考えて、長期的視野のもとに研究の推進を図らねばならぬ、その中で十分な強度を持つ次世代強力中性子源の持つ役割は極めて大きいと言える。ここでは、超冷中性子（UCN）による研究と多層膜ミラーを用いた長波長中性子光学研究について述べる。

§ 1 UCNによる研究

次世代強力中性子源によりUCNを用いた研究として以下に掲げるテーマ等が考えられる。

1) 素粒子科学

(i) 自然法則の対称性の検証：ボトル貯蔵UCNのベータ崩壊における生成粒子の対称性の測定から、空間非対称性及び時間反転非対称性に関する最も正確な数値が得られる可能性がある。

(ii) 中性子寿命測定：すでに中性子寿命測定はUCNボトル法が最も有利であることが実証されている。UCN強度向上及びボトル実験の一層の精密化によりその測定精度を改善できる。

(iii) 中性子電気双極子能率：時間反転非対称性の実証として、その追求が行われており、これもUCNボトル法が最も有利であるが、UCN強度以外に電場の安定性等多くの条件の精密化が重要である。

2) 量子力学における課題

(i) 観測問題：速度の遅いUCNによる精密実験が可能となることにより、量子力学的観測問題に関する様々な様式の検証が具体的な研究課題と成りうる。

(ii) スピン制御：UCNの強度が上がることにより、UCNビームのスピン制御を精密且つ自在に行なうことが具体的な実験課題と成りうる。スピン波動力学の格段の解明をもたらしうる。

3) 中性子光学の基礎

(i) 波束の波動力学：UCNはその波長が長いこと、速度が遅いことに加えて、ボトル壁面において多数回反射し得るという顕著な特徴を有することから、特に中性子の波束に関する基礎物理実験を有利に行なうことができる。

(ii) 重力波動力学：UCNが顕著な重力効果を表すことから、スピン依存性や慣性質量効果との相違性等、重要な実験の精度を格段に向上できる。

(iii) 波動方程式の検証：UCNを用いた精密実験により現実的課題となる可能性がある。

§ 2 多層膜ミラーを用いた長波長中性子光学研究

多層膜ミラーを用いた長波長中性子光学は、物質波の波動光学研究及びその基礎物理学への応用研究の観点から独特の優れた特徴をもっている。中性子は、光子と違って、Fermionとして自分自身としか位相相関を持たない物質波である。また、冷中性子は、荷電粒子と較べて、電荷を持たないため物質との相互作用が弱く、単純であると同時に、エネルギーも低く、長波長、低速度であるが、バックグラウンドも少なく、100 %近い効率での検出が容易である。一方、多層膜ミラーにより形成される中性子に対するポテンシャルは、一次元の連続した矩形の単純な形状を持つと同時に、その幅、高さを自由に制御できることが特徴である。ポテンシャルの高さの制御には、核散乱によるReal及びImaginaryポテンシャルに加えて、強磁性体による静的あるいは動的な磁気相互作用も利用可能である。この様な特徴を利用すると、研究目的に合った様々な波動光学特性をもつ多層膜ミラーを設計、開発することが可能であり、多様な光学実験、干渉実験を行うことができる。

長波長中性子波動光学研究は主として3つの分野から構成される。第一には、冷中性子散乱実験のために、多層膜ミラーを用いて、冷中性子を制御するデバイスを開発、製作することである。多層膜ミラーとしては、スーパーミラー、モノクロメータ、磁気ミラーの3種が基本であるが、それらの複合的なものも含め多種多様なデバイスの開発、製作が考えられる。第二には、多層膜ミラーを用いて、研究目的に合ったポテンシャルを設計、製作し、物質波の波動光学現象の基本的性質を研究することである。具体的には、様々な多層膜ミラーにおける波動光学現象の実験的解明と計算方法の確立、反射メカニズムの解明、磁性体薄膜におけるPrecessionの研究あるいは薄膜におけるトンネル現象の解明などが含まれる。第三には、多層膜ミラーを用いた長波長中性子干渉計の開発とその基礎物理学研究への応用研究である。多層膜ミラーを用いると、様々な性能をもつ長波長中性子波の分波器（位相差調整機能を含む）を開発することが可能である。このことは、研究目的に合わせて様々な性能をもつ多層膜中性子干渉計の開発が可能であることを意味する。これら干渉計を研究目的にあわせて応用すると、量子力学観測問題あるいは中性子に対する微弱な相互作用の検出など基礎物理学研究に関して独特の多様な分野を開拓することが可能である。次世代強力中性子源により長波長中性子光学研究のブレイクスルーが起きることは、明らかである。

付録 全体計画および実験設備

1 原研中性子科学研究計画の全体構想

原研中性子科学研究計画（図1）は、他の計画と比較するとその特徴として以下の3つが挙げられる。

- 1) 多目的利用（基礎研究と工学研究の共存）
- 2) 超伝導リニアックの採用
- 3) 世界最大級出力（6 - 8 MW）を目指す。

1.1 多目的利用

多目的利用の主な研究分野として以下の3分野が検討されている。

1) 中性子による基礎科学

中性子散乱による構造生物学（生命科学）、物質・材料科学の研究、中性子核物理の研究、スペクレーションRI科学等の研究を行う。

2) 加速器駆動消滅処理

原研が提案している加速器駆動消滅処理システムの概念検証を目的とした高レベル廃棄物処理法の高度化の研究を行う。

3) 大強度陽子加速器技術

未来型原子力システム、ビーム型エネルギー源のための加速器研究を行う。

1.2 加速器計画

現在検討されている超伝導リニアックの設計パラメータ主要諸元を以下に示す。

加速エネルギー	1.5 GeV
平均ビーム電流	4 - 5.3 mA
平均出力	6 - 8 MW
ピーク電流 (p/H)	30 mA
繰り返し周波数	50 - 60 Hz
デューティーサイクル	約0.2 (中性子源の場合)

検討されているコンプレッサーリングの設計パラメータ（主要諸元）を以下に示す。

エネルギー	1.5 GeV
チョッピングファクター	0.6
台数	1 - 2
出力パルス幅	< 1 μs
平均出力	5 MW

各利用分野で要求している加速器出力

- 1) 中性子散乱 ~5 MW
- 2) 核消滅処理技術開発基礎研究 ~2 MW (CW)
- 3) その他の利用分野 1 - 2 MW
計6 - 8 MW

加速器の構成

図2に加速器の模式図を示す。

2 中性子散乱施設

現在検討されている中性子散乱施設の主要諸元を以下に示す。

出力	5 MW
中性子源タイプ	短パルススパレーション中性子源（SPSS） 但し、状況によっては、長パルススパレーション 中性子源（LPSS）でスタートすることもあり得る
ターゲットステーション・実験室の数	1 将来 2
ターゲット	液体重金属（Hg）
モデレータ数	約4／ステーション
中性子ビームラインの数	18／ステーション
設置可能装置の数	25／ステーション以上

利用形態

- ・全国共同利用
- ・産業界での利用の促進
- ・広く国際的に利用を目指す
- ・装置の選択、開発、建設等：一部を除き実質的には、ユーザーオリエンテッドを目指す。
- ・利用者支援体制の拡充に努力する。

3 年次計画

- ・加速器および中性子源の完成年度 2007年
- ・中性子散乱等実験共用開始 2008年

JAERI NEUTRON SCIENCE RESEARCH CENTER

JAERI-Review 96-019

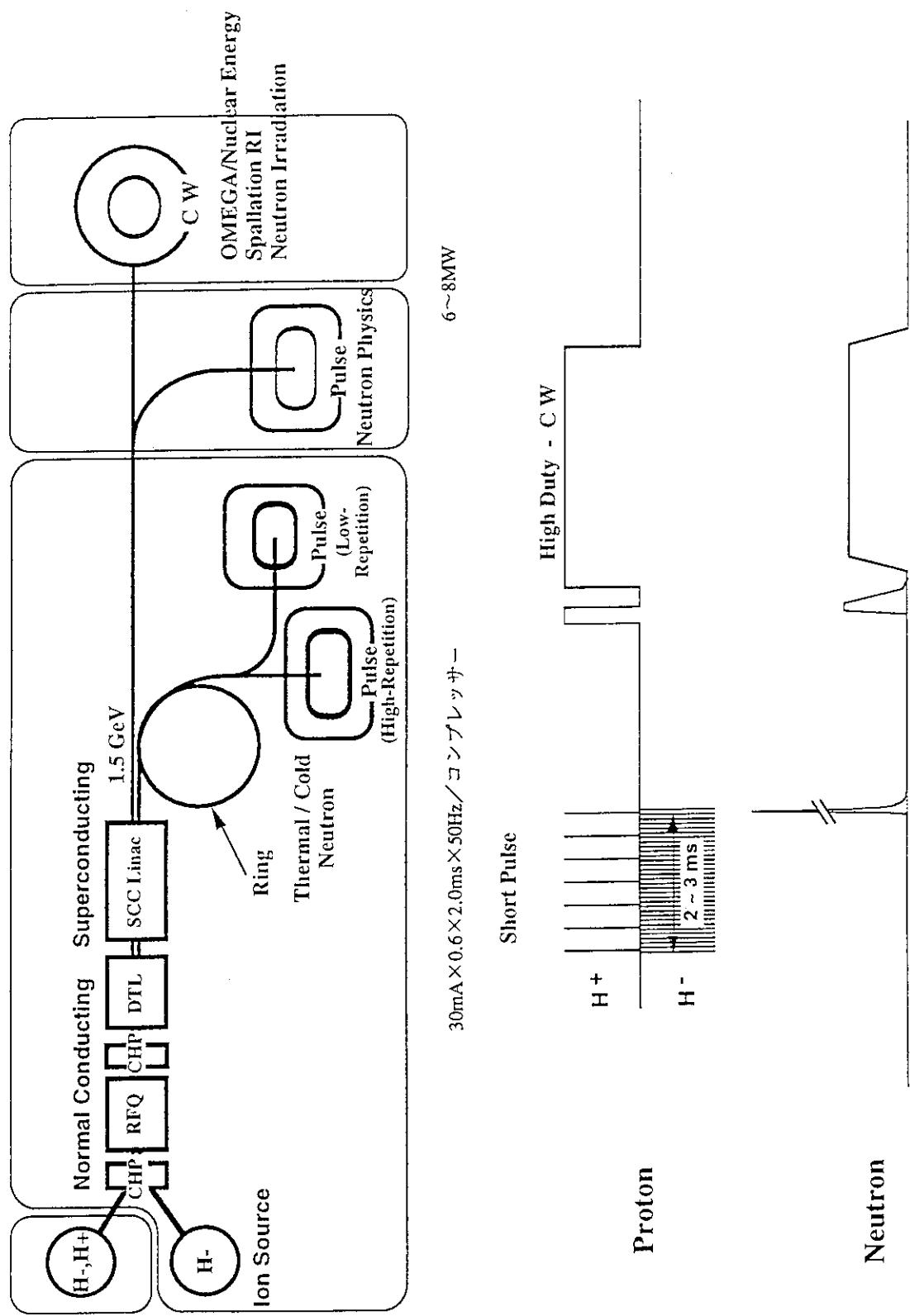
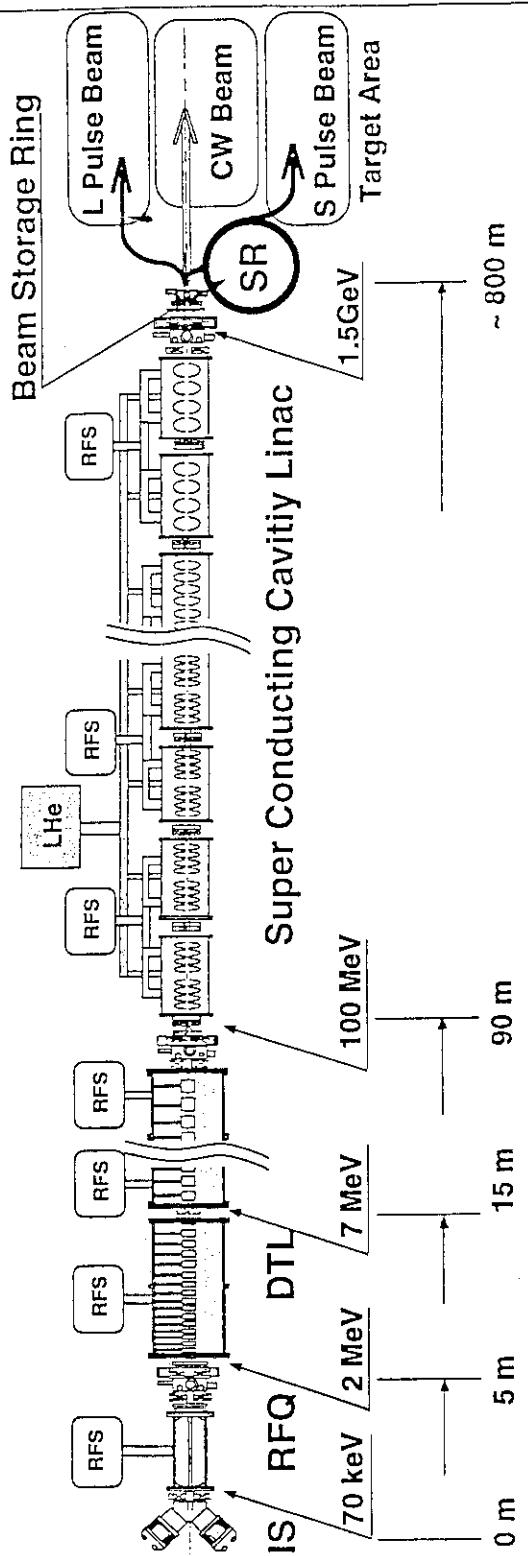


図 1

Accelerator for Neutron Science



IS : High Brightness H^- , H^+ Ion Source
 RFQ : Radio Frequency Quadrupole Linac
 DTL : Alvarez type Drift Tube Linac
 RFS : Radio Frequency Power Source

Beam Intensity: 1.5 GeV, 4~5.3mA

Conceptual Layout of JAERI Proton Linac

意見をいただいた方々

○序文

山田安定（早稲田大学理工学総合研究センター、原研・先端基礎研究センター）

○生命科学

王征宇（東北大・工学部）
片桐千仞（北大・低温科学研究所）
木寺詔紀（京大・理学部）
郷信広（京大・理学部）
高橋浩（名大・工学部）
野澤庸則（東北大・工学部）
野中孝昌（長岡技科大・工学部）
前田豊（京大・原子炉実験所）
三木邦夫（京大・理学部）
矢島博文（東京理科大・理学部）
八田一郎（名大・工学部）
渡邊康（食品総合研究所）
新村信雄（原研・先端基礎研究センター）
藤原悟（原研・先端基礎研究センター）

○物質科学

・物性等

梶谷剛（東北大・工学部）
坂田誠（名大・工学部）
室町英治（無機材研）
山口泰男（東北大・金属材料研究所）
山田安定（早稲田大学理工学総合研究センター、原研・先端基礎研究センター）
大貫惇睦（阪大・理学部、原研・先端基礎研究センター）
林博和（原研・燃料研究部）
森井幸生（原研・先端基礎研究センター）
片野進（原研・先端基礎研究センター）
鈴木淳市（原研・先端基礎研究センター）
長壁豊隆（原研・先端基礎研究センター）

・高分子

梶慶輔（京大・化学研究所）
金谷利治（京大・化学研究所）
武田隆義（広大・総合科学部）
武野宏之（京大・工学部院生）
田中文彦（東京農工大・工学部）
角森史昭（理研）
土井正男（名大・工学部）

土井正男（名大・工学部）
橋本竹治（京大・工学部）
山岡仁史（京大・工学部）
小泉智（原研・先端基礎研究センター）

○材料・分析科学

池田泰（(財)ファインセラミックセンター）
小野正義（京大・原子炉実験所）
小林久夫（立教大・原子力研究所）
坂井田喜久（(財)ファインセラミックセンター）
竹中信幸（神戸大・工学部）
原田慎太郎（(財)ファインセラミックセンター）
斎藤公明（原研・環境安全研究部）
松林政仁（原研・研究炉部）
米沢仲四郎（原研・燃料研究部）
皆川宣明（原研・先端基礎研究センター）

○認識科学

宇津呂雄彦（京大・原子炉実験所）
海老沢徹（京大・原子炉実験所）
河合武（京大・原子炉実験所）
清水裕彦（理研）
田崎誠司（京大・原子炉実験所）
富満広（原研・先端基礎研究センター）
相澤一也（原研・先端基礎研究センター）

○全体計画及び実験設備

渡辺昇（原研・中性子科学推進特別チーム）