



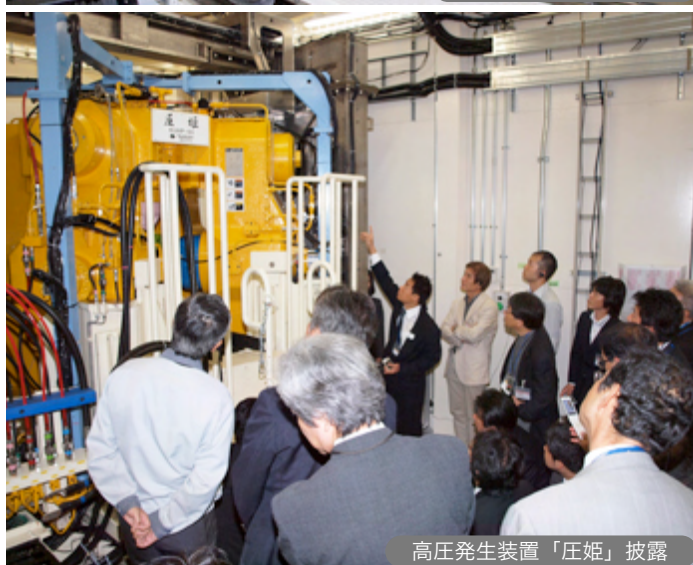
科学研究費補助金「新学術領域研究」
高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学

目次

- 巻頭言 八木 健彦 (愛媛大) 2
- ビームライン建設状況報告 服部 高典、佐野 亜沙美 (原研) 3
- J-PARC 超高压中性子回折装置 (PLANET) 完成式典報告 永井 隆哉 (北大) 4
- (特集) J-PARC超高压中性子回折装置 (PLANET) 完成までの歩み 6
- 完成式典を迎えて 八木 健彦 (愛媛大) 7
- Launching PLANET 鍵 裕之 (東大) 8
- 建設を振り返って 服部 高典 (原研) 9
- 「PLANET」と「圧姫」 内海 渉 (原研) 10
- 年表 11
- (写真) PLANET construction 2006~2009 13
- (写真) PLANET construction 2009~ 14
- (写真) ATSUHIME Installation 15
- IUCr 高压コミッションミーティング/原子力機構量子ビーム応用研究部門国際シンポジウム "Advances in Crystallography at High Pressures" 報告 片山 芳則 (原研) 16
- 各班からの報告
 - ・含水鉱物班 「PLANETにおける初めての実験報告」 永井 隆哉 (北大) 17
 - ・マグマ班 「PLANET 初実験」 井上 徹 (愛媛大) 18
 - ・液体班 「PLANET 初実験」 片山 芳則 (原研) 19
 - ・計算班 「分子性結晶の圧力効果に対する第一原理計算による理論研究」 宮崎 剛 (NIMS) 20
- 学術創成研究班からの報告 学術創成チームの初期実験 鍵 裕之 (東大) 22
- 平成25年度からのPLANETの共用ビームラインへの移行について 内海 渉 (原研) 23
- 2012年度後期PLANETビームタイム審査会の報告 永井 隆哉 (北大) 24
- PLANET利用説明会報告 永井 隆哉 (北大) 24
- 新学術領域研究まとめの研究集会のご案内 永井 隆哉 (北大) 25
- 編集後記 井上 徹 (愛媛大) 26



完成式典テープカット



高压発生装置「圧姫」披露



完成式典での集合写真 (ビームラインにて)



巻頭言



領域代表：愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター・八木健彦

新学術領域研究「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」のニュースレター最終号をお届けします。本号には昨年9月に行われた PLANET 完成式典の様子から、IUCr ワークショップの報告、11月下旬に始まった各班による最初の実験の予備的報告、それに新学術領域研究終了後の運営形態に関する展望など、PLANETの今と今後を知る上で重要な記事をまとめました。

振り返ってみると、2008年11月に課題採択の通知を受けてから4年半、実にいろいろなことがありましたが、同時に、何かあつという間のことという気もします。本領域研究で第一の目標としたものは、今までにない高温高圧条件下での中性子実験が可能で新しい装置を建設し、地球深部における水素のふるまいを研究できるようにしたい、ということでした。正直のところ本領域のメンバーは中性子実験にはほとんど素人の集まりで、初歩からの勉強が必要だった上、東日本大震災を含めさまざまな予期せぬ困難もありましたが、関係者の並々な熱意と努力でそれらを何とか乗り越え、当初期待した通りのすばらしいビームライン PLANET が無事完成したことを、まずご報告したいと思います。昨年春に始まった立ち上げのコミショニングを経て、11月からの班員を中心としたメンバーによる実験では、高い S/N 比をもち今まで高圧下ではとても得られなかった見事な中性子実験のデータが次々と取れ始めています。それらをサイエンスの成果に結びつけるには、まだもう少し解析や検証が必要ですが、この段階としては上々の滑り出しと思います。

本領域研究は本年3月で一応終了しますが、高圧中性子地球科学にとってそれはゴールではなく、ようやく夢を実現するスタート地点に立ったという状態です。また、完成したビームライン PLANET も、地球科学分野に限らず、物理、化学、材料科学分野を始め、産業界も含めた多様な分野において、きわめて特色ある情報が得られる貴重な実験装置として、今後その存在感を増していくことでしょう。しかしそうした形で PLANET が広く使われ役立つという状態を維持していくにはまた、今後もその運営やさらなる性能向上のための努力が不可欠です。これらに関しても、本領域のメンバーを中心としてさまざまな手は打ったつもりですが、やはりもっと広いコミュニティのサポートが重要な役割を果たすと思っています。今後とも関係者の皆さまの暖かいご支援をお願いして、最後のご挨拶とさせていただきます。



ビームライン建設状況報告



日本原子力研究開発機構：服部 高典、佐野 亜沙美

昨今のビームラインの状況を報告します。7月初旬に first commissioning を終え、しばし休憩と思っていたのも束の間、プレスレールの敷き直し、水戸で開催された IUCr 高圧ワークショップのお手伝い、完成式典の準備、プレスの安全審査等を行っているうちに、あっという間に夏季休止期間が終り、project メンバーを迎え入れるための最終 commissioning が10月中旬から始まりました。久しぶりのビームライン作業ということで、うきうきしながら、再びコミッションング生活が始まりました。commissioning では、NPD 等小さな試料を使用する高圧実験のためのブーストミラーの性能評価を行い、短波長～長波長にかけて1~3倍程度のゲインを得られることを確認しました。また、ユーザー実験に移行する上で一番のネックになっていた大型プレス「圧姫」の施設安全審査も、2回の大ブローアウト実験を経て、ビーム開始直前になんとか審査をパスし、ユーザーを迎え入れる準備ができました（一度も日の目を見ることなく、お亡くなりなった超硬アンビルのご冥福をお祈りします）。

11月中旬からは、project メンバーによる実験が始まりました。期待に胸をふくらませて東海に来られる皆さんを失望させないかと、大変心配をしておりましたが、大型プレス及び小型プレスを用いた両実験において、ラジアルコリメータとシビアな入射系のおかげで大変クリーンなデータが得られ（本号の他の記事参照）、皆さん満足して帰って行かれるのを見て安堵しております。

昨年内に各班、first trial の実験を行い、現在2週目に突入しております。広めに作った BL 11 キャビンは、BL 19 や BL 21 も含んだ MLF 高圧ユーザーのたまり場にもなり、連日にぎわっております。ユーザーも熟れてきて、装置責任者がつきっきりで居なくとも、ユーザー実験が進むようになってきました。2008 年に建設予定地の穴を前に途方にくれたあの日から5年、このようにデータがとれる日が来るとは、つい最近まで想像できませんでした。来年度から共用ビームラインとして再出発し、ますます多くユーザーを迎え入れることとなりますが、今後とも皆さんのご協力どうぞよろしくお願いいたします。

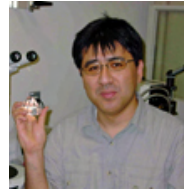


図1 いよいよ始まった高圧中性子実験に期待を膨らます面々



J-PARC 超高圧中性子回折装置 (PLANET) 完成式典報告

北海道大学大学院理学研究院：永井 隆哉



忘れもしない2011年3月11日、私たちが経験したことがない大地震と大津波が東日本を襲いました。皆さんご存知のように、その日の午後予定されていた PLANET 完成式典は中止となり、式典に参加のため PLANET を訪問中だった八木先生をはじめ本研究メンバーの何人かは、幸いにも人的被害はありませんでしたが、電気や水のライフラインが切れた真っ暗な東海で一夜を過ごすことを余儀なくされました。それから一年半、様々なトラブルもありましたが、服部さん、佐野さんら現地スタッフの超人的な活躍のおかげで、2012年9月27日（木）J-PARCセンター 物質・生命科学実験施設 第1会議室にて、ようやく PLANET 完成式典の開催に漕ぎ着けることが出来ました。当日は、PLANET の建設にご尽力いただいた約100人の方々にご参加いただき、盛大な会となりましたことを報告いたします。



写真1 八木先生挨拶



写真2 実験成功祈願をかけて達磨への目入れ

J-PARC/MLF 超高圧中性子回折装置 (PLANET) 完成式典プログラム

日時： 2012年9月27日(木) 13:30~16:30

会場： 日本原子力研究開発機構原子力科学研究所内

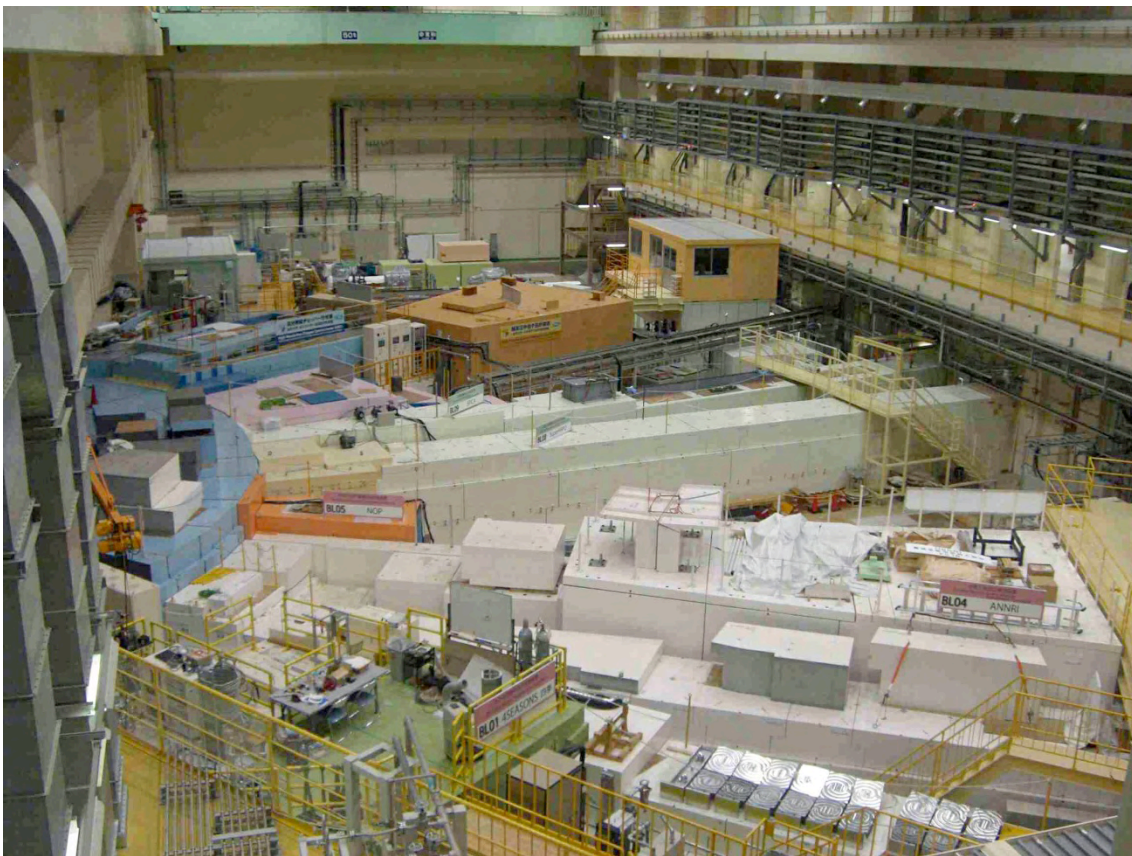
J-PARCセンター 物質・生命科学実験施設 第1会議室

(〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4)

- | | | |
|-------------|--|--|
| 13:30~13:40 | はじめに | 愛媛大学特命教授/新学術領域研究代表 八木 健彦 |
| 13:40~14:00 | 来賓挨拶 | J-PARCセンター長 池田 裕二郎
日本原子力研究開発機構理事 南波 秀樹
総合科学研究機構東海事業センター長 藤井 保彦 |
| 14:00~14:10 | 関係者への感謝状授与 | 八木 健彦 |
| 14:10~14:15 | だるま開眼式&乾杯 | 鍵 裕之 |
| 14:15~14:30 | 建設までの歩みと「PLANET」が目指すもの | 東京大学大学院理学系研究科教授/学術創成研究代表 鍵 裕之 |
| 14:30~14:50 | 「PLANET」の状況 | 日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門/J-PARCセンター 服部 高典 |
| 14:50~15:00 | 休憩 | |
| 15:00~15:15 | 「PLANET」への期待(1) | 愛媛大学地球ダイナミクス研究センター長 入船 徹男 |
| 15:15~15:20 | 「PLANET」への期待(2) | The University of Edinburgh John Loveday |
| 15:20~15:35 | 「PLANET」への期待(3) | 東北大学金属材料研究所 青木 勝敏 |
| 15:35~16:30 | テープカット及び記念撮影、物質・生命科学実験施設実験ホール見学
(於：物質・生命科学実験施設第1実験ホール内) | |

特 集

J-PARC超高压中性子回折装置 (PLANET) 完成までの歩み



超高压中性子回折装置完成式典

(2012年9月27日 於：J-PARC 物質・生命科学実験施設)

完成式典を迎えて

新学術領域研究「高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学」領域代表

東大名誉教授・愛媛大特命教授 八木 健彦



2008年にスタートした文部科学省科学研究費の新学術領域研究「高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学」と、その前年にスタートした学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高压物質科学の開拓」のふたつのチームが協力して建設を進めてきた、高压下の中性子実験装置「PLANET」がようやく完成の暁を迎えました。ここに至るまでには実にさまざまな問題や困難がありましたが、それらを一つ一つ乗り越えて完成まで漕ぎつけられたのは、関係者の大変な努力と、多くの方々の暖かいご支援のたまものと、改めて感謝致します。

年表にありますように、この新しい装置を作る計画は10年前の西暦2002年に、主として地球深部の科学を研究している若手研究者達の中から生まれ、それ以来関係者のさまざまな努力を積み重ねて今日に至ったものです。私自身はこの計画のまとめ役を務めさせて頂き、もちろん大変なことも多々ありましたが、次代の科学を担う若い人達といろいろ議論を重ねながら新しいものを創りだしていくという作業の楽しさを味わうことができました。また日本のものづくりを支えている現場の方々の高い技術力と立派なものを造り上げるという真摯な姿勢にも大変勉強させられました。さらに、東日本大震災によって計画そのものがほぼ丸1年の遅れを余儀なくされるといった全く予期しない事態にも遭遇しましたが、そのような緊急事態を乗り越えるために、それぞれの関係者がその持ち味を発揮して協力するという、チームワークの大切さも学びました。

今回建設された新しい装置は、X線では見えないけれども地球深部の理解には欠かせない水素の振る舞いを、中性子という新しい目で何とか見てみたいという「夢」を実現させるために作られました。今その10年来の夢が実現し、つくばのフォトンファクトリーや西播磨のSPring-8など、シンクロトロン放射光実験施設の新しい装置で地球深部科学が大きく発展したように、J-PARCに建設されたこの装置が地球科学の新たな展開に大きく寄与することが期待されています。またさらに、地球科学だけでなく、物理、化学、物質科学など多分野の研究にも大いに威力を発揮すると期待されています。それらの成果を楽しみにしつつ、皆さまに今後ともこの装置の発展を暖かく見守って頂ければとお願いする次第です。

Launching PLANET

学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高压物質科学の開拓」

研究代表 東京大学 鍵 裕之



待ちに待った高圧中性子ビームラインPLANETがJ-PARC MLFに完成いたしました。計画の立ち上げ、メンバーの組織、ビームライン建設許可の獲得、建設費の調達、ビームラインの仕様決定、ビームライン建設といくつものステップを踏みながら足かけ10年ほどが経過し、この日を迎えることができたことは感無量の思いです。私はたまたま学術創成研究の研究代表者を仰せつかっておりましたため、このような機会をいただいてご挨拶を申し上げることになりましたが、PLANETビームラインはAll Japanの高圧研究者が力を合わせて実現したものです。多くの仲間を代表して、計画段階から多くのアドバイスをいただいております先生方・海外の研究者の方々、複雑な装置を製作して下さったメーカー・建設関係者の皆様、事務サポートをして下さった方々に心より御礼申し上げます。仲間うちではありますが、ビームライン建設にあたって想像を絶するご尽力をいただいた東海チームのメンバーには最大限の敬意をもって御礼を申し上げます。

PLANETは地球や惑星内部の物質科学に新たな光を当てることを目的に建設計画がスタートしましたが、いまや地球惑星科学の枠を超え、より広範な物質科学の先端的な研究に寄与しうる国際的にもきわめて重要な研究施設としての使命があると考えております。PLANETビームラインの最大の特徴は、世界で初めてパルス中性子源に大型6軸高圧発生装置を配備したところにあります。それに加えて、高精度な切り替え機構によって6軸装置を待避させ、小型高圧装置を用いる超高压条件や低温高圧下での実験も可能になることもPLANETの大きな特徴です。精密な結晶構造解析から液体の構造やイメージングまで、実にさまざまなサイエンスがこれからPLANETで展開されていくこととなります。さあ、本番はこれからです。楽しく研究を進めていきましょう。

建設を振り返って

超高压中性子回折装置 ビームライン責任者
原子力機構 量子ビーム応用研究部門 服部 高典



待ちに待った高圧中性子ビームラインPLANETの建設がようやくほぼ終わりました。思えば5年前、高圧力学学会後の宴会の席で「腹をくくれ」と皆さんに圧力をかけられ、(半ば強制的に?) 建設責任者宣言をさせられて以来、私の青春はすべてこのPLANETの建設に捧げられました。改めて今建設を振り返ると色々なことが思い出されます。

2008年11月にビームライン建設の資金源である八木科研費が採択されたという報を突然受け、急遽本格的な装置デザインに入りました。当時は中性子に関してはド素人であり、中性子分光器の教科書を片手に、装置をデザインしていたことを思い出します。その後、2009年の夏のBL11床面ピット埋設工事から始まり、2012年3月のプレス設置工事に至るまで実に色々な事が起こりました。建設開始時には、中性子検出に必要不可欠なHe同位体ガスの世界的欠乏が報じられ、ガス会社、検出器製造会社を集めチームを結成し、ガスの確保に駆け回りました。その後も、当ビームラインは、「高圧がやると何かが起こる」とMLF内でも言われ、通常は起こらない事象がたびたび起こりました。例えば、建設当時、遮蔽体は一度建てたら解体することはないというのが常識でしたが、われわれの遮蔽体に関しては設置後半年程で不具合が見つかり、MLF始まって以来の遮蔽体全解体、持ち帰りという事もありました(その節はお世話になりました)。また、2011年3月には、first beam祝賀セレモニーの当日に東北地方太平洋沖大地震が起こり、全国から集まった研究者が体育館で一夜を過ごされました。このような緊急事態にも、業者の方の真摯な態度、職人さんの明るい笑顔、東海建設メンバーの献身的な協力に支えられ、なんとかここまでたどり着くことができました。その途中では私の人間の未熟さにより、皆様には多大なるご迷惑をお掛けしたことと申します。また、このプロジェクトの上役の方々は、実力が未知数な私に装置建設の全権を委任して下さい、好き勝手にやらせて頂きました。これらの関係者の方々に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。PLANETはこの夏にビームコミッショニングを終え、いよいよユーザー実験を行っていく段階になります。「世界でも有数の素晴らしい中性子分光器」と胸を張って言えるものができ上がりましたので、ユーザーの方々は存分にご活用頂き、いい意味での「何か」を起こして頂けるよう熱く期待しております。

「PLANET」と「圧姫」

原子力機構 量子ビーム応用研究部門
研究推進室長 内海 渉



今日、めでたく完成式典を迎える J-PARC 高压ビームラインの名称をどうするのかについては、関係者の間で、早くからサイエンス以上に熱い議論が交わされていました。

新学術領域及び学術創成研究の参加メンバーから、数多くの名称案が寄せられ、最終的に「PLANET」と「圧姫」の2つが候補として残りました。「PLANET」は、響きも優雅で、地球惑星科学の研究装置としても絶妙のネーミングですが、ただひとつLの語呂合わせが難点でした（Rならばpressureの最初の2文字として完璧ですが）。これに関しては、八木先生から、Pressure Leading Apparatus for Neutronのアイデアが出され、一同感心したものです。一方、「圧姫」（勿論、NHK大河ドラマ篤姫のパクリです）を強力に主張したのが、建設の中心となった服部さんです。当初は、皆、単なる洒落、冗談だろうとタカをくくっていましたが、あにはからんや、服部さんは真剣で、やがてこちらを支持する者も多く出てきました。電子メールが飛び交い、「PLANET」vs「圧姫」の戦いは、参加メンバーを2分しての意見の応酬となりましたが、外野でそれをご覧になっていた方々は、その熱心さに驚くやらあきれられるやら、という思いだったと想像します。そのやりとりは、関東・関西の研究者気質や文化論の考察のネタにもなりそうです。

参加主要メンバーが全員集まった東京上野での会議でも、当初議論は平行線でしたが、司会を務めていた私は、現場で貢献度が一番高い服部さんの意向を尊重すべきとの思いから、「圧姫」に誘導しようとしていました。大勢がそれで仕方ないとの雰囲気醸成されかけた時、最後の念押しのため、Sさんに「圧姫」でいいよね、と問いかけたところ「絶対嫌だ！」との答え。Sさんのこの一言で、状況は大逆転し、ビームライン全体の名称は「PLANET」に決定しました。この日東海に戻る常磐線の中で、服部さんが、とても淋しそうな顔をしていたのを昨日のことに思い出します（後日談ですが、その後、服部さんを支えて建設の最大の功労者のひとりとなったSさんは、寝食を忘れて働く服部さんの姿を目のあたりにして、「あのとき「圧姫」でいいと言ってあげてもよかったかな」とつぶやいておられました）。

結局、「圧姫」の名は、本ビームラインで中核を占める6軸高压プレスの愛称として採用されることとなり、服部さんの士気も上がりました。「PLANET」と「圧姫」が、今後数十年にわたって、超高压下の中性子実験装置として多くの成果を発信し、世界にその名をとどろかせることを期待してやみません。

年表

- 2002年11月 愛媛県松山市で、高圧討論会参加中の有志メンバーによりJ-PARC高圧研究専用ビームラインの実現に向けた方策を議論。
- 2003年09月 日本高圧力学会に「高圧力実験技術と中性子科学」研究・作業グループが発足（第2期を含めて、2009年8月まで活動）。
- 2003年10月 J-PARCに「超高压高温物質科学ステーション」装置提案書（代表：鍵裕之）提出。
- 2004年04月 KEK-KENSの中性子粉末回折装置SiriusにKEK-PFの高圧プレスMAX80の金型を持ち込み、高圧中性子実験の模擬テストを行う。
- 2004年08月 装置提案がJ-PARC中性子実験装置1次審査合格。
- 2004年10月 J-PARCに「超高压高温物質科学ステーション」詳細提案書提出。
- 2005年06月 装置提案がJ-PARC中性子実験装置2次審査合格。
- 2006年04月 基盤研究C（企画調査）「パルス中性子線源を用いた高圧下中性子回折実験と鉱物科学の新展開」（代表：鍵裕之）が採択される。
- 2007年04月 学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高压物質科学の開拓」（代表：鍵裕之）が採択される。
- 2008年04月 播磨から東海へ服部異動。
- 2008年11月 新学術領域研究「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」（領域代表：八木健彦）が採択される。ビームライン建設のための予算を確保し、装置の本格的なデザイン検討を開始。
- 2008年11月 英国・ラザフォードアップルトン研究所のパルス中性子施設ISISの高圧ビームラインPearlに視察に行く（内海、服部、有馬）。
- 2008年12月 東海で、採択後初の決起集会在開かれる。
- 2009年01月 J-PARC装置委員会にて、「超高压高温物質科学ステーション」のBL11への建設が承認される。
- 2009年04月 ビームライン建設（測量）が始まる。
- 2009年05月 ビームラインの略称が「PLANET」に決まる（プレスは「圧姫」に）。
- 2009年07月 国際アドバイザー会議を開催。
- 2009年07月 建設着工（ピット埋設）完了。
- 2009年09月 生体遮蔽部埋め込み機器据え付け完了。
- 2010年02月 高圧プレスとして、従来型のDIA機の代わりに6軸型の案が出る。三朝に6軸プレスを見学に行く。
- 2010年03月 遮蔽体完成。自分たちの城ができる。
- 2010年03月 ^3He 位置敏感検出器、とりあえず無事納入。

- 2010年04月 6軸図面の第一案を見て、採用することに決定（検出器カバーとの戦いの始まり）。
- 2010年05月 ドイツ・バイロイトに6軸プレスの視察に行く(八木、服部、丹下)。良い感触を得て帰国。
- 2010年05月 米国・SNSの高圧ビームライン SNAPの実験に行く（鍵、永井、服部、小松、佐野）。
- 2010年06月 遮蔽体全解体、撤去。骨組みだけになり、城が丸裸に。絶望に打ちひしがれる。
- 2010年08月 チョッパーインストール完了。
- 2010年09月 スーパーガイドミラー設置完了。
- 2011年02月 2階建てのキャビン完成。高圧研究者憩いの場ができる。
- 2011年3月08日 BL11待ちに待ったfirst beamを受け入れる(施設検査完了)。
- 2011年3月11日 first beamセレモニー開催当日、東北太平洋沖大地震を受ける。皆さん、被災する。
- 2011年02月 新居浜で、6軸プレス本体が完成する（油圧ユニットは未完成なので火入れはまだ）。
- 2011年08月 諸事情のため、工事停止。ビームライン責任者坊主に。悲嘆にくれる。
- 2011年09月 データ解析、BL11 データ処理および液体の構造解析についての検討会を開催する。
- 2011年11月 ラジアルコリメータ完成。
- 2011年12月 検出器架台設置完了。
- 2011年12月 完成式典に向けて、酒蔵でビール造り（八木、鍵、内海、服部、佐野、小松）。
- 2011年12月 中性子カラー I. I. 完成。
- 2011年12月 新居浜で6軸プレスが試運転開始。
- 2012年1月30日 地震後初めてのbeamを受け入れる。
- 2012年02月 6軸プレス、満を持してMLFにやってくる。分光器内へ無事インストール完了（29日）。
- 2012年04月 コミッショニング開始。連日の深夜作業とプレッシャーに疲労困憊。
- 2012年07月 コミッショニングほぼ完了
- 2012年9月27日 超高压中性子回折装置完成式典を開催。



061024



物性研短期研究会



090403

BL11
ビームライン
2009/4/3
藤田 良川
AS 研

ビームライン確認

2009.04.03



090725

国際アドバイザー会議



091204



091225

2009年12月25日
PLANET 3915 2009
藤田 良川
AS 研

ATSUHME Installation

ベース据付



111219

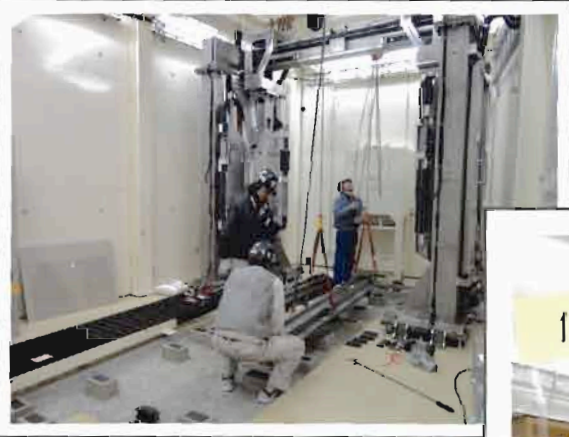
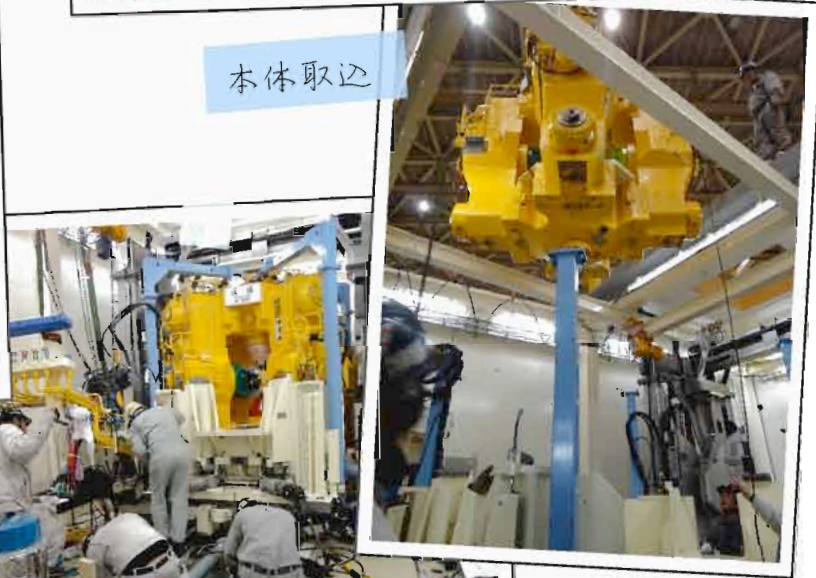


120229

120223



本体取込

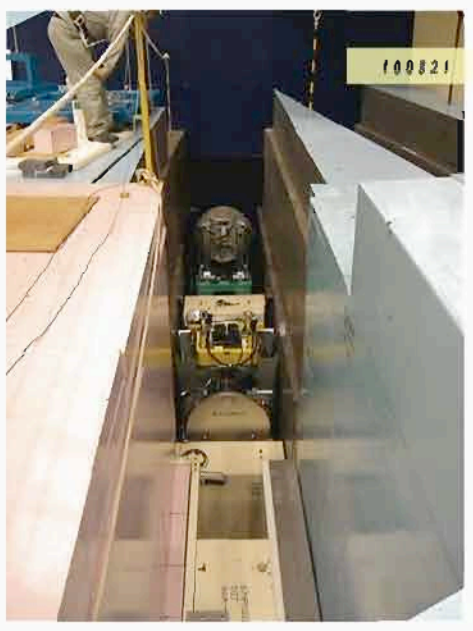


120229

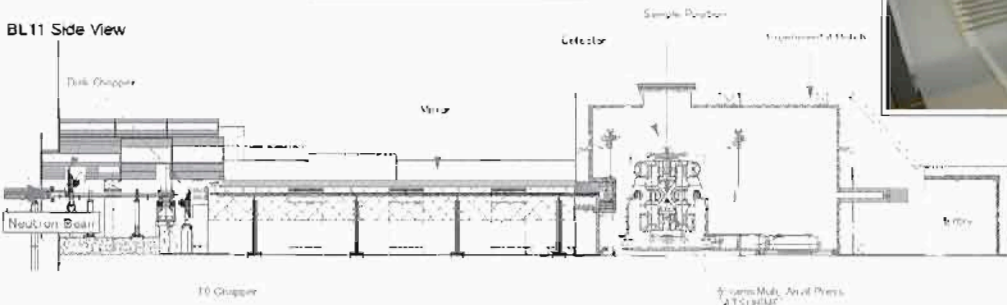


プランジャーポンプ据付





BL11 Side View





"Advances in Crystallography at High Pressures" 報告



日本原子力研究開発機構：片山 芳則

2012年9月23日から27日にかけて、茨城県水戸市において、国際結晶連合(IUCr)の高圧コミッション会議「高圧下の結晶学の進歩」が原子力機構量子ビーム応用研究部門の国際シンポジウムと共同で開催されました(IUCrHP2012/QuBS2012)。新学術領域や学術創成プロジェクトのメンバーの方々の積極的な参加があり、参加者は予想を上回る14か国から95人と、おかげさまで盛会のうちに終了することができました。

原子力機構の南波理事の挨拶、加倉井部門長による量子ビーム応用研究部門の紹介、八木先生による日本の高圧中性子プロジェクトの紹介に続き、鍵先生によりJ-PARCでの高圧中性子実験の紹介が基調講演として行われました。その後、10のトピックスに関するセッションで、25の招待講演、11の口頭発表、44のポスター発表が行われ、各国の放射光や中性子施設の研究者やユーザーを中心に、最新の研究成果が報告されました。

中性子関連の発表では測定の圧力領域の拡張が印象的でした。町田さん(CIW、M.Guthrieさんの代理)の発表では、SNSのダイヤモンドアンビルセルを使った実験で、これまでの常識を塗り替える60 GPaでの水の粉末回折が報告されました。また、S.Klotzさん(パリ第6大学)は数GPaの領域での水の準弾性散乱を報告し、計算班の池田さんの研究にも言及してダイナミクスの研究が可能であることを示しました。セッションの最後は服部さんによるPLANETの紹介で締められました。

セッション終了後、バスでJ-PARC/MLFに移動し、PLANETのお披露目が行われました。中性子施設の大型のプレスは参加者にとって印象深かったのではないのでしょうか？その後は、会場を袋田温泉に移してバンケット。和室、露天風呂、大広間の宴会など、通常の立食パーティーでは経験できない日本の文化に、外国からの参加者は喜んでくれたようです。和室での2次会では深夜まで参加者同士の交流が続きました。

会議を支援していただいた新学術領域研究、原子力機構、日本高圧力学会、IUCr、ICDDにはこの場を借りてお礼を申し上げたいと思います。また、事務局として奔走してくれた長壁さん、白田さんをはじめ、服部、佐野、深澤、山内、宮川、永井、井上、飯高の実行委員各位、そして支援していただいた八木先生、内海さん他、多くの方々にも感謝いたします。





含水鉱物班

PLANETにおける初めての実験報告

北海道大学大学院理学研究院：永井 隆哉



待ちに待った PLANET での実験が始まりました。その先陣を切って、2012年11月23～12月1日の約1週間、含水鉱物班が実験を行いました。実験参加者は、佐野・服部 (JAEA)、飯塚・鍵 (東大)、瀬戸 (神戸大) と永井 (北大) です。PLANET での初めての実験であり、測定手順などはまだ手探りの状態ではありましたが、予定していた課題をなんとかすべて実施することが出来ました。詳しい結果については、別の機会にご報告させていただくとして、本稿では測定したパターンの一例を紹介だけさせていただきます。

図は、圧姫を使い約3 GPaに加圧後、773、603、443、300 Kで測定された $\text{Ca}(\text{OD})_2$ の回折パターンです。使用したアンビルの先端は10 mm、圧力媒体はジルコニア、加熱はグラファイトの管状ヒーターを用い、加圧前の粉末試料ペレットサイズはφ4mm×4mmでした。測定時間は、各温度圧力条件下で約8時間です。

回折パターン中のピークはすべて試料からの回折線として説明でき、試料の周りを取り囲んでいたアンビル、圧力媒体、ヒーター材などからのピークは全く認められません。ラジアルコリメーターの効果絶大です。また、S/Nが非常に良いため、温度が高くなるにつれ、温度因子による短波長側での減衰が大きくなっていくことがはっきりと観察できます (図中拡大部分)。現在、どんな面白い結果がでてくるのか、ワクワクしながら解析を進めているところです。

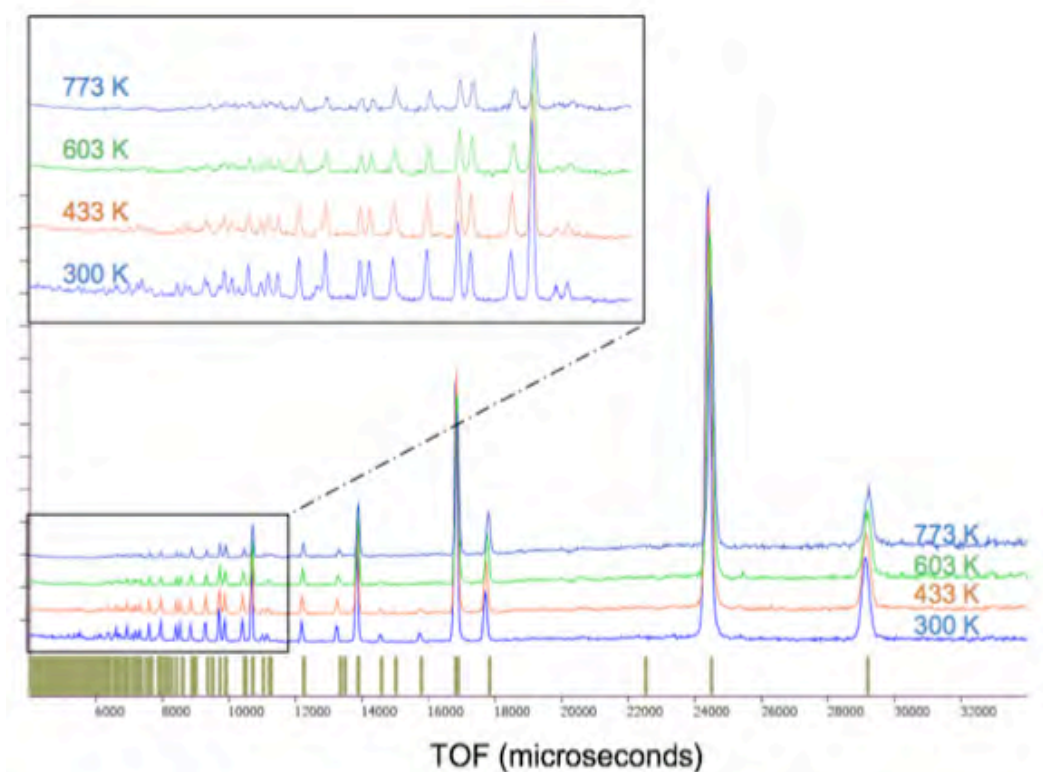


図 PLANETで測定した $\text{Ca}(\text{OD})_2$ の3 GPa、773、603、443、300Kでの回折パターン。挿入図はTOFの4000～12000 microseconds範囲の拡大図。



12月8日から12日朝、13日から15日朝にかけての6日間、液体班として初めてのPLANETでの実験に臨みました。参加者は液体班から、服部さん、ヤガファロフさん、千葉さん、私、また、佐野さんにもお世話になりました（写真1）。マグマ班の浦川さん、鈴木さん、山田さんに協力していただきました。液体や非晶質がどれくらい測定できるか調べるため、試料は典型的なガラスで、高温高压下の放射光X線回折を行った石英ガラスを選びました。アンビルは10mm角、圧媒体は17mmのジルコニア。圧力発生の子備実験はマシンタイム前に原子力機構播磨地区の齋藤さんとヤガファロフさんが1500トンプレス ZOHSAN を用いて行い、山田さんらによって報告された荷重と発生圧力の関係を再現する結果を得ました。試料構成としては最も単純に、直径4.6 mm の円柱状の石英ガラスのみを圧媒体の中心に入れました。サンプリングは服部さんが行いました（写真2）。ビームラインの調整後、初めての測定。ここで、意外なトラブル（試料が見えない!）が発生しましたが、それもすぐに解決し、その後は順調に高压下でのデータ取得に成功しました。入射スリット、各種の遮蔽、特にラジアルコリメーターの効果は絶大で、試料を取り囲むジルコニアの回折線が一切見えない、きれいなガラスのパターンを2.3 GPa および5.5 GPa で測定することができました。圧媒体の変形に伴いアンビルが邪魔をして強度が低下するので、測定時間は5.5 GPa では20時間以上かかっています。次に、リファレンスとなるバナジウムを圧媒体に入れ、アンビルの進みが同じになる条件で測定。空セルは高压下での変形を模擬したものを含め合計3つの測定を行いました。圧媒体の変形や、ポロシティ減少に伴う中性子吸収の変化をどう考えるか喧々譁々の議論を行い、現地で空セルを作りました（写真3）。単に試料とバナジウムそれぞれのパターンから空セルを引き、割り算した結果、波数 30\AA^{-1} 程度まで明瞭な振動が観測されました。本格的な解析はまだこれからですが、中性子による液体・非晶質の良質なデータ取得が可能という、うれしい成果が得られました。

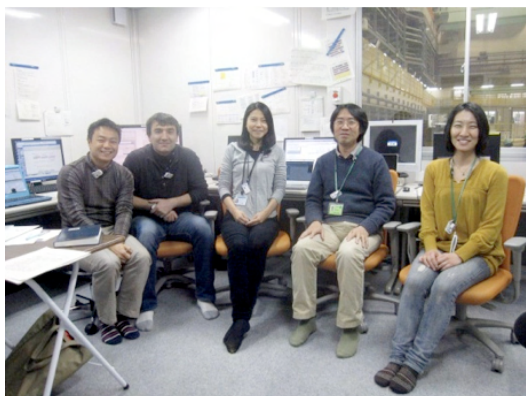


写真 1

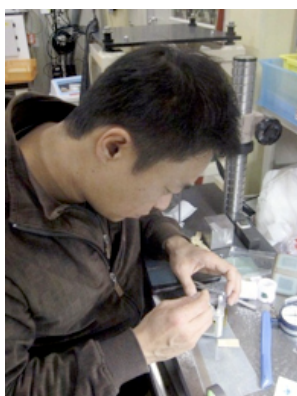


写真 2

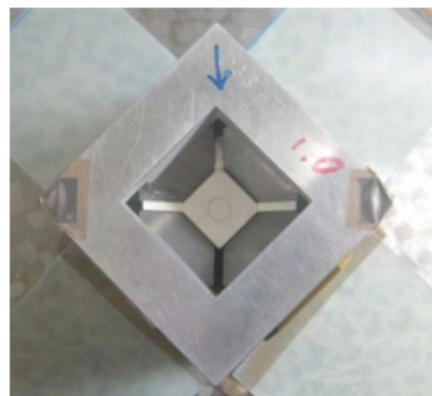


写真 3



液体班の実験に引き続き、12月15日の朝から21日の朝までの6日間、マグマ班としての初めての実験を行いました。今回は高圧下での無水及び含水アルバイトガラスの回折実験、及びイメージングの最適化に向けた実験を行いました。回折パターンの収集は、無水及び含水アルバイトガラスとも2.3 GPa及び5.5 GPaで行い、ビームが出ていた実効時間でそれぞれ14時間及び22時間かけて行いました。尚、各条件下での空セル、バナジウムセルの測定も必要で、それは今回液体班との共同で行うということで、その測定データを利用しました。それゆえ、マグマ班メンバーの参加もかなりローテーションでの参加になり、12/10-13が浦川さん、12/14-15が鈴木さん、12/13-20が山田さんと液体班のビームタイムから参加してもらいました。その後、井上が12/15-21、大高さんが12/17-19、寺崎さんが12/19-21の期間参加して実験を行いました。

写真1は山田さんによる圧姫へのセルセットの様子です。最初、含水アルバイトガラスの収集を行ったのですがその時思わぬハプニングが。2時間ごとに区切って測定をしていたのですが、その測定ごとに少しの強度減少が見られました。我々は初めての実験でしたので理由が解りませんでした。その後、データ収集ソフトの（時限爆弾的な？）バグであることが解りました。これは、測定データ数及びフォルダ数の合計が1000までしか収集できないという制約のために起こった現象で、測定を続けるごとに測定可能な検出器領域が順に減っていき、最終的には全く測定できない状態となりました。その後、バグを修正したため、現在は起こらない状態となっております。ただ、このため、丸1日分の測定データが使い物にならないものになってしまいました。立ち上げ時にはいろいろあるものです。写真2は測定データの解析の様子のコマです。画面上に、含水アルバイトガラスの回折パターンが表示されています。

また、最後の1日を使って中性子カメラ撮影のテストを行いました（写真3）。我々の測定は、被写体をカメラから離して測定せざるを得ず、中性子の発散のために離す距離に比例した像のぼやけが生じます。そのための最適化を上流及び下流スリットのサイズを変更して行うとともに、発散した中性子線をカットするための中性子グリッドの効用等をチェックしました。

それぞれの実験でまだ解析途中ですので、また結果が整理できれば発表していきます。

尚、今回、服部さん、佐野さん、さらに片山さんをはじめとした液体班の方々には多大にお世話になりました。また、原研の安田さんには貴重な中性子グリッドをお貸ししていただき、予備実験の許可をいただきました。（中性子グリッドは今回が初めての使用になります。）この場をお借りして感謝申し上げます。



写真1 6軸加圧式高圧発生装置（圧姫）へのセルセット（山田さん）

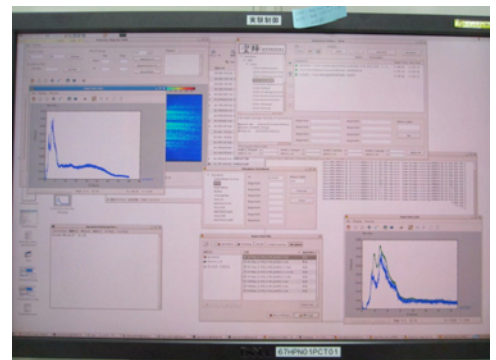


写真2 解析PCのようす。画面にはアルバイトガラスの回折パターンが写っている。

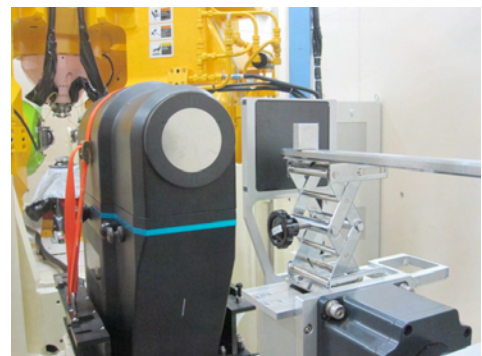


写真3 中性子カメラでの撮影風景。カメラ手前の黒い板は中性子グリッド。



我々は、密度汎関数法にもとづく第一原理計算により、物質の構造と電子状態を定量的に明らかにする研究を行っている。第一原理計算による理論研究の適用範囲を広げるために大規模計算手法の開発も行っているが、本記事では分子性固体の圧力効果に対する研究を紹介したい。分子性導体は金属—絶縁体転移、超伝導転移、多種多様な磁性相、電荷秩序相の出現等、興味深い現象を数多く示す。これら多様な物性は、分子修飾によって制御可能であることが多く、物質設計の面からも重要な物質群である。また、これらの物質は一般に柔らかく、圧力を加える事によって物性が大きく変わる。この多様な圧力効果を明らかにすることは極めて重要であるが、圧力下の実験は技術的に困難な点も多く、実験から得られる情報は限られている事が多い。我々はこの物質群に対して第一原理計算を精度良く行うことによって、高圧下の構造と電子状態を計算し、多様な圧力効果を明らかにすることを目指している。

例えば、図1に示されている β' -(BEDT-TTF)₂ICl₂は常圧下では室温以下で半導体的である。しかし、圧力下では金属的振る舞いを示すようになり、6.5 GPaという超高压下で超伝導転移を示す。また、14.2 K (8.2 GPa) という有機物の中では極めて高い転移温度を示す。一方、AuCl₂塩は常圧下ではICl₂塩とほとんど同じ物性を示すのにも関わらず、10 GPa程度の圧力をかけても金属化すら起こらない。ICl₂塩の超伝導転移、二つの塩の圧力効果の違い等を理論研究で明らかにすることが求められていた。

我々はICl₂塩とAuCl₂塩の圧力下の構造（格子定数、内部座標）を第一原理計算で求め、電子状態の圧力依存性を調べた。ICl₂塩に対するバンド構造の変化、フェルミ面の変化を図2に示す。常圧下では擬一次元的な電子状態を示すが、圧力下では二次元的に変化することが分かる（12 GPa付近では、閉じたフェルミ面を持つ）。さらに、バンド幅も大きく増大する。このバンド構造の圧力変化を再現するTight Bindingモデルを構築し、FLEX近似にもとづく理論解析を行った。反強磁性と超伝導状態の安定性を比較した結果、低圧下では反強磁性状態が低温で実現するのに対し、10 GPa程度の高圧下で超伝導状態が現

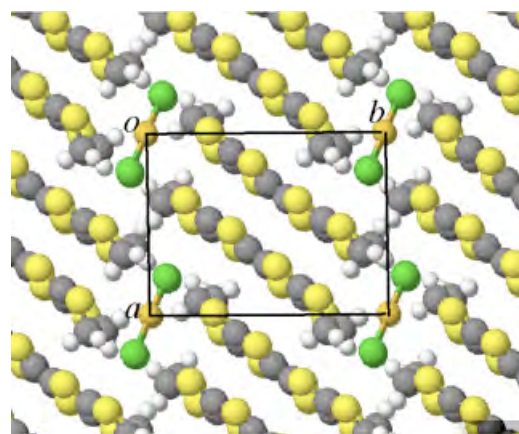


図1 β' -(BEDT-TTF)₂XCl₂ (X=I or Au) の結晶構造

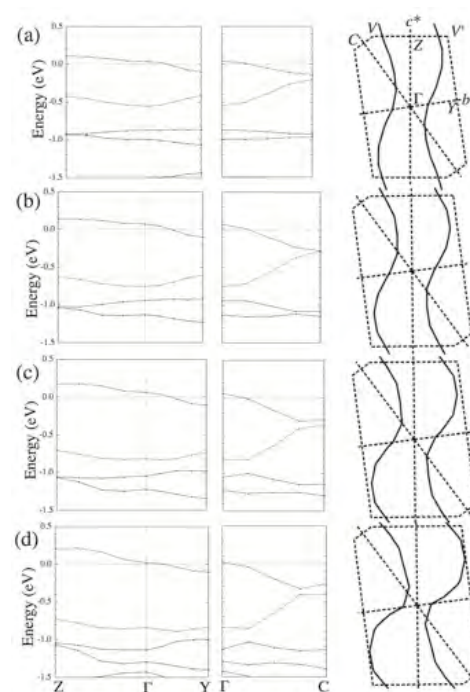


図2 β' -(BEDT-TTF)₂ ICl₂ のバンド構造（左）とフェルミ面（右）の圧力変化。
(a) 常圧下, (b) 4 GPa, (c) 8 GPa, (d) 12 GPa.

れることが分かった (図3)。一方 AuCl_2 塩では、常圧下では ICl_2 塩とほとんど同じバンド構造を持つのにに対し、バンド構造の圧力変化は ICl_2 塩とは大きく異なることが分かった。例えば、バンド構造の次元性は擬一次元から3次元的になる。 ICl_2 塩と同様の理論解析を行うと、全圧力下 (20 GPa 以下) で反強磁性状態のみが安定化されることが分かった。以上から、 ICl_2 塩と AuCl_2 塩の圧力効果の違いは定量的なものではなく、定性的なものであることが示された。

実験技術の進歩により、分子性結晶に対しても 10 GPa 以上という超高压の圧力効果の研究が可能となってきた。最近、図4に示されている単一性分子結晶も約 16 GPa という超高压下で金属化することが Cui、Kato らによって示された。我々は最近、この物質に対しても第一原理計算による理論研究を行い、12 GPa 以上の高压下で金属化が起こる事を示している。このような極めて高い圧力や一軸性の圧力により、この物質群の新しい物性発見が更に増える事が期待される。

ここで紹介した研究は、昨年9月に水戸で行われた国際会議 IUCrHP 2012/QuBS2012 で講演した内容であり、木野日織、圓谷貴夫らとの共同研究によるものである。

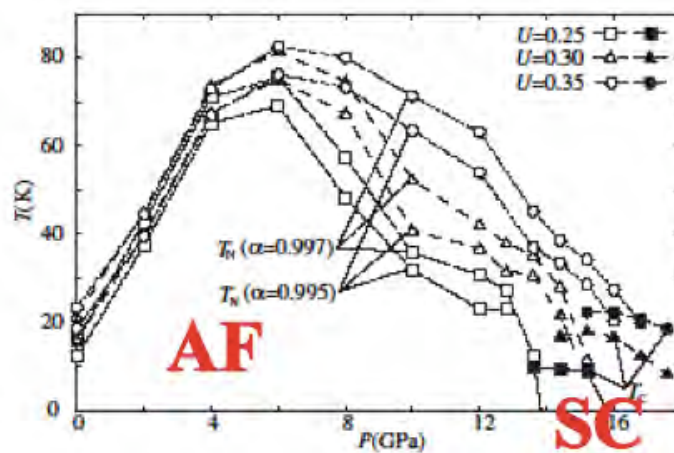


図3 第一原理計算計算によって得られたバンド構造を用い、FLEX近似による理論解析で得られた β' -(BEDT-TTF) $_2$ ICl_2 の圧力-温度相図。

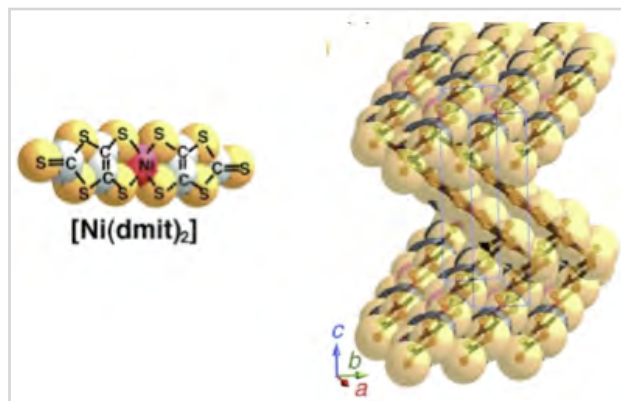


図4 単一性分子結晶 $[\text{Ni}(\text{dmit})_2]$ の結晶構造 (右図) と $\text{Ni}(\text{dmit})_2$ の分子構造 (左図)



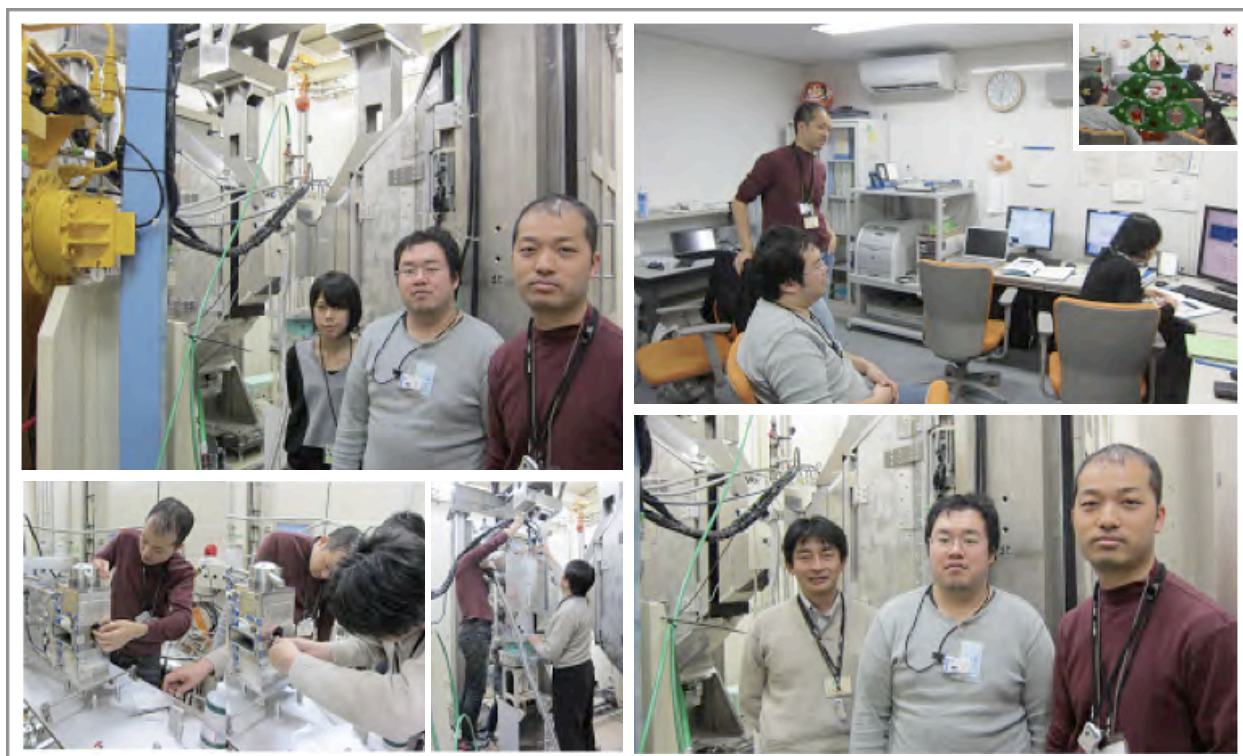
学術創成チームの初期実験

学術創成研究代表：東京大学大学院理学系研究科・鍵 裕之



学術創成チームは、窒素ハイドレートの構造解析、氷 VII 相の構造解析、NaCl 新規水和物の構造解析、Fe₂P 圧力誘起磁気相の構造決定と言った研究テーマで、11月からのプロジェクトビームタイムで実験を開始した。研究テーマ・用いる高圧装置によってサブグループに分かれ、それぞれ独立して研究を進める体制が整ってきた。学術創成チームの測定は室温から液体窒素温度における高圧条件で行われるため、主として小型対向アンビルセルを用いて実験を進めている。

我々の研究グループでは、小松らによって開発された (Komatsu et al., 2013として High Pressure Research に印刷中) 液体窒素温度から 200 °Cまで温度可変な対向アンビルセルを用いて、PLANET ビームラインにおいて中性子回折実験を開始した。本装置はニュースレター No.7 においても紹介されているとおり、ジルコニアの優れた断熱性によって、低温条件でも油圧を使った圧力制御が可能で、消費する液体窒素も最小限に抑えることができることが特筆すべき点である。このような特徴から、PLANET のハッチを閉鎖した状態で外部からのコンピュータコントロールで長時間にわたる低温高圧実験を行うことができる。ところでこのシステムの呼称はまだ決まっておらず、どなたかネーミングセンスの良い方からの命名を期待してやまない。



東大グループによる実験風景



平成25年度からのPLANETの共用ビームラインへの移行について

日本原子力研究開発機構：内海 渉



皆様ご存じのとおり、新学術領域研究「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」は、平成24年度末で、そのプロジェクトを終了します。平成25年度以降、超高圧中性子回折装置（PLANET）をいかに運用していくかについては、領域代表である八木健彦先生、学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高圧物質科学の開拓」研究代表である鍵裕之先生、J-PARC センター首脳陣ならびに文部科学省担当課室の間で、一昨年から議論・検討がなされてきました。その結果、平成25年4月1日づけで、本装置を共用ビームラインに移行させることで、合意が得られました。

共用化にともない、本ビームラインは、高圧地球惑星科学にとどまらず多彩な学術分野の研究者の一般利用に開放され、産業利用を含めた国内の幅広い学術・科学技術の振興に貢献することが期待されています。また、海外の研究者の積極的な利用への道も開けます。その運営は、J-PARC センター及び登録機関である一般財団法人 総合科学研究機構 (CROSS) に委ねられ、新たな職員の採用も予定されているとのことです。

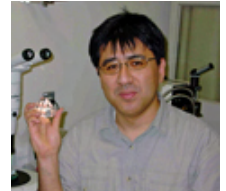
平成25年度上期は、共用化のための環境整備期間と位置づけられており、一般共用課題募集はなされません。この期間中には、本ビームラインをより幅広い利用者の共用に供するため、低温実験用高圧発生装置の制作、ラジアルコリメータ追加、6-8 型加圧による圧力温度発生領域の拡大、制御システム及びソフトウェアの整備などが行われ、下期からの一般ユーザー開放への準備が行われる予定です。

平成25年度下期の課題公募時期については、現在その詳細が決まっておりませんが、J-PARC センターのホームページ等でご確認頂き、多くの方々にPLANETにふさわしい優れた研究課題を提案くださいますよう、お願いいたします。



2012年度後期PLANETビームタイム審査会の報告

北海道大学大学院理学研究院：永井 隆哉



2012年10月中旬から始まるPLANETでの実験のビームタイム配分の審査会を9月3日（月）東大にて行った。審査会は、八木先生を委員長とし、新学術、学術創成、建設メンバーの代表で構成した。審査会に先立って、あらかじめ新学術各研究と学術創成研究の各班内で実施を希望する課題を検討し、それぞれ班内で優先順位をつけて提案していただいた。それらの提案について、各課題のサイエンス、実験条件の実現可能性、準備状況、装置状況などを議論し、ビームタイム配分の大枠を決定した。



PLANET利用説明会報告

北海道大学大学院理学研究院：永井 隆哉

9月28日（金）いばらき量子ビームセンター大会議室において、(1) PLANETで実験をするための手続き、(2) PLANETの装置構成、(3) PLANETでの実験手順、(4) PLANETで得たデータの解析、についての説明会を開催した。講師は服部さんで、新学術研究、学術創成研究メンバー30人程度が1ヵ月後から始まるビームタイムを前に真剣に説明を聞き、活発な質疑応答がなされた。



新学術領域研究まとめの研究集会のご案内

北海道大学大学院理学研究院：永井 隆哉

本新学術領域研究は本年度が最終年です。昨年10月中旬からPLANETの本格利用実験が始まりましたが、まだ皆さん手探りの状態で実験をされている段階ではないかと想像します。しかしながら、新学術のまとめとして、各班の現在までの実験の様子を速報的に紹介してもらい、今後の実験に向けての準備と情報交換をすることは重要だと考えます。そこで、以下のような日程で、新学術領域研究まとめの研究集会を開催したいと思います。プログラムなどの詳細はメーリングリストでお知らせする予定です。

新学術領域研究まとめの研究集会

日時：2013年3月19日（火）10時半から18時まで（予定）

場所：いばらき量子ビームセンター大会議室（那珂郡東海村大字白方162番地1）



編集後記

新学術領域研究最終号のニュースレターをお送りいたします。このプロジェクトも開始してから早5年が経ち、その間いろいろな苦難がありました。その苦難にもめげず、特に東海建設グループの服部さん、佐野さんの毎晩深夜までの頑張りのおかげで世界に誇れる高圧中性子ビームラインが完成しました。また、各班員は高圧中性子実験の実現に向けて、高圧下の急冷回収実験や放射光実験による予備実験で成果を出しつつ、絶え間ないセル開発を続けて来た成果がここに実ってきていると感じています。本ニュースレターを見ていただいておりますように、「PLANET」による高圧中性子実験は始まったばかりです。本学術領域研究としてはその役割を終えますが、今後この世界に誇れるビームラインで成果を出し続けていく必要があります。今後とも、皆様のご協力をお願いします。

本学術領域研究のホームページ

<http://yagi.issp.u-tokyo.ac.jp/shingakujutsu/index.html>

(井上 徹)

お問い合わせ：井上 徹 (inoue@sci.ehime-u.ac.jp)

山本 夏水 (yamamoto@issp.u-tokyo.ac.jp)

ニュースレター NO.8

科学研究費補助金「新学術領域研究」

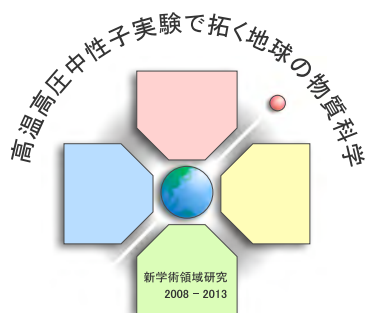
「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」

平成25年1月発行

発行責任者：八木 健彦（研究代表：愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター）

編集責任者：井上 徹（広報担当：愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター）

〒790-8577 愛媛県松山市文京町2-5



<http://yagi.issp.u-tokyo.ac.jp/shingakujutsu/index.html>

ニュースレター NO.8

平成25年1月 発行

発行責任者：八木 健彦

編集責任者：井上 徹