Neutron J 四季
【15年・秋】 Vol.28
中性子産業利用推進協議会 季報
Industrial Users Society for Neutron Application
2015年9月25日 発行

CONTENTS

P2-3 中性子産業利用推進協議会活動報告　P3 ミュオン技術の紹介　P4-7 研究トピックス　P7-8 活動報告　P8 お知らせ

私服の時

京都大学　杉山 正明

会社の人って、しっかりしているなぁと思います。と言うのも、共同研究をしている会社の方が研究室に来てくださる時はいつも「きっちりとした」格好をされているからです。一方、こちらときたら夏ならポロシャツにジーンズが制服。冬はポロシャツがセータに代わります。最近は少し反省して気が付いた時はジーンズがチノパンくらいになりますが、頑張ってもその程度です。

ところが、J-PARC/MLFなどで一緒に実験をするとなると面白いです。会社の皆さんも完全に私服で来られるので、思わずじっと観察してしまいます（失礼！）。予測通りの人、すごいギャップがある人など、各人各様で、そのセンスに人となりが見えるようです。いずれにしても、そういう服装を見ると何かを発見したようで楽しくなってしまいます。でも、もっと楽しいのは、鎧を脱いだ方々との会話です。製品開発にかける情熱！だけでなく、その裏話、そしてちょっと漏れてくる……。研究室での議論では中々話して貰えなかったことを聞かせて貰えます。それは、企業社会に出たことのない私からするとどれもこれも貴重なものです。そんな訳で、実験室で私服で共に過ごす時間が重なるにつれ、人間関係が深まります。すると、それにつれて実験や研究に関する議論も深まっていきます。思っていたけど口に出せなかったアイデア、言い過ぎかなぁと思っていたコメント、聞いたら恥をかくんじゃないかと思っていた疑問などが、お互いに自然に口から出るようになります。こんな楽しい時間はありません、正に私にとって至福の時です。

中性子の実験はJ-PARC/MLFと言えども、「待ち」の時間が多いのですが、この「待ち時間」が最高の産学連携の種を生み出してくれる可能性が非常に高いのではないかと思っています。ちょっと違った視点かもしれませんが、これからもっともっと実験室での「私服の付き合い」を進めてみませんか？

追記。学会などで「きっちりとした」（つもりの）格好の私を見ても粗探しはしないよう切にお願い申し上げます。

日々使われるモノだからこそ…

花王株式会社　久米 卓志

花王株式会社は、洗剤やおむつ、化粧品といった家庭品や日用品を製造しています。弊社の商品はご家庭のお客様に直接届き、日々の生活に使われるモノです。それゆえ、継続的な研究による改良と発展が必要と考えます。そのための弊社の研究開発における姿勢として、「科学の目で物事の本質を追及せよ」というものがあります。

例えば、「歳をとると黄色い歯になることを改善する」ハミガキの開発では、最初に歯の色に関して徹底的に本質研究をしました。歯は黄色い象牙質をエナメル質が覆っています。エナメル質には隙間があり、それがすりガラスのように光を乱反射させて歯を白く見せています。しかし、加齢に伴い、その隙間に食べ物や唾液から作られる無機物などが詰まり、エナメル質が透明になると次第に象牙質の黄色が目立ってきます。歯の表面の歯垢だけが要因ではなく、エナメル質が透明になることが、加齢により歯が黄色になる本質であることを突き止めました。そこで、研磨で歯垢を取るのではなく、隙間の無機物を除去する成分を開発し、その成果を「ホワイトニングハミガキ」に応用しました。

このように、弊社の製品開発では、必ず「エビデンス」を重視します。また、弊社の製品は多くの人々の日々の生活に使われるため、使用する資源も膨大な量となります。社会の継続的な発展（サステナビリティ）のため、これからの時代は、製品の性能だけなく、エネルギーや原料などの資源も総合的に捉えて、社会に果たす役割をしっかりと考えていかなければなりません。そのため、中性子を含めた最先端の解析技術を用いた研究は、弊社のような製品の開発においても「科学の目で物事の本質を解明する」ために非常に重要であると考えています。

堅苦しいことはこれくらいにして、思い起こせば私が初めて中性子を利用したのは大学院生のときに先輩のお手伝いでJRR-3のSANS実験を行った時でした。でも、中性子という言葉を初めて認識したのは小学校のときのヒーロー番組（今も続いている戦隊シリーズの2作目）で、主人公が「中性子スコープ」という透視能力を使っていたことです。今まさに実用化されている中性子イメージング技術ですね。私はもっぱら小角散乱を利用していますので違いはありますが、ある意味、当時のヒーローの技を使えるようになったのは感慨深いです。

あの頃の子供たちは、まさにそのようなことを見聞きし、未来に夢を持っていました。時代は移り変わり、社会情勢も大きく変わってしまっていますが、これからの子供たちが未来に夢を持てる社会のため、私達が果たせる責任を考え続けていかねばならないと思っています。

中性子産業利用推進協議会活動報告

● 2015年度総会および2014年度成果報告会

7月23日（木）に秋葉原コンベンションホールにおいて、庄山悦彦副会長、須藤亮運営委員長、会員企業47社（委任状含む）他が出席して2015年度総会および2014年度成果報告会を開催しました。

午前中に開催した2015年度総会では非会員企業他からの出席を含めて104名の参加がありました。初めに、庄山悦彦副会長の挨拶があり、来賓として岸本康夫文部科学省科学技術・学術政策局次長の挨拶をいただきました。続いて、須藤亮運営委員長の挨拶がありました。総会の議事においては、第1号議案「2014年度事業報告及び決算報告について」（監査報告を含む）、第2号議案「会員の入退会について」、第3号議案「2015年度事業計画及び収支予算について」、第4号議案「会則の改訂について」、その他「2015年度の体制」「細則の制定」の各項目について審議と報告があり、審議項目については全て承認されました。

午後に開催した2014年度成果報告会では、前半の＜J-PARC/MLFセッション＞において、齊藤直人J-PARCセンター長からJ-PARC/MLFの現状について報告があり、続いて、林眞琴茨城県企画部技監がJ-PARC/MLFにおける産業利用の状況や茨城県BLの現状、ならびに産業利用の成果を紹介しました。その後、米村雅雄KEK准教授が「BL09「SPICA」におけるLi電池の充放電過程のin-situ観察」、五十嵐圭日子（きよひこ）東京大学准教授が「iBIXにおける加水分解酵素の結晶構造解析」と題して報告されました。いずれもTOF型中性子実験装置でなければ得られない成果の報告でした。

後半の＜中性子の産業応用セッション＞では、㈱日産アークの今井英人氏（代理：茂木昌都氏）が「Liイオン電池の充放電特性に及ぼす各種因子の影響解明」、㈱豊田中央研究所の工藤憲治氏が「白金上のNafion薄膜の物質移動とナノ構造解析」、㈱本田技術研究所の池田知廣氏が「中性子回折による自動車廃ガス浄化触媒の構造解析」、住友ゴム工業㈱の増井友美氏が「J-PARC大観を活用したゴムの精密構造解析」と題して報告されました。それぞれの講演に対して多くの質問がありました。成果報告会には165名もの参加者があり大変盛況でした。

成果報告会のあと、会場脇の「ホワイエ」において懇親会を開催し、85名の方が参加されました。参加者の皆様から、産業利用が着実に進捗していること、また、茨城県プロジェクトによる先行研究において非常に良い成果が挙がっている、などのコメントをいただきました。ワイングラスを片手に、産学官の懇親を深めるとともに、J-PARC/MLFの産業利用の深化について活発な意見交換がありました。

庄山悦彦副会長と岸本康夫次長の挨拶

成果報告会の様子

懇親会における西谷隆義CROSS理事長の挨拶と会場の様子

● 要望書の提出

（1）日本原子力研究開発機構への提出

5月25日（月）に児玉敏雄原子力機構理事長に対して、日本中性子科学会（代表：鬼柳善明会長（名大特任教授））と東京大学物性研究所（代表：瀧川仁所長、柴山充弘教授）と合同で、JRR-3の早期運転再開に関して要望書を提出しました。

原子力機構からは児玉敏雄理事長、三浦幸俊理事と瀬尾理事長補佐、吉井研究主幹、武田量子ビーム応用研究センター副センター長が出席されました。

中性子産業利用推進協議会、日本中性子科学会、東大物性研がそれぞれの立場からJRR-3の必要性と再稼働への強い希望を表明し、JRR-3の早期運転再開に向けての要望書を提出しました。協議会からの要望事項は下記の5項目です。

1）早期運転再開
2）運転時間の増加
3）高経年化対策ならびに次期炉計画の推進
4）量子ビーム応用研究部門と研究炉運転管理部門の一体化
5）量子ビームプラットフォームの構築

児玉理事長からは、JRR-3に対する産業界と学術界の要望は良く理解できるとの回答がありました。一方、産業界と学術界が共同で原子力規制委員会の田中俊一委員長に対してJRR-3に関して同様の要望書を提出することについては、諸般の事情があり、現在の段階での要望書の提出は逆効果に働く可能性があるとのことで、当面、要望書を提出することについては手控えることになりました。

(2) J-PARCセンターへの提出

7月17日(金)に齊藤直人J-PARCセンター長に対して、庄山悦彦副会長からJ-PARC/MLFに関して要望書を提出しました。

協議会からの要望事項は下記の5項目です。

1) 随時課題受付制度の整備
2) 定期課題公募時期の見直し
3) 一般ユーザー向けマシンタイムの適正化
4) KEK装置の一般利用化
5) J-PARCの2016年度の9サイクル運転の実現

齊藤センター長からは要望事項については理解できるところがあり、J-PARCセンターに持ち帰って関係者と検討するとの回答がありました。

ミュオン技術の紹介

水素貯蔵材料の水素脱離温度付近での測定

㈱豊田中央研究所　梅垣 いづみ、杉山 純

車載用の水素貯蔵材料には、重量当たりと体積当たりの貯蔵密度が大きいこと、すなわち、軽量でコンパクトであることが求められます。軽量の観点から、錯体系の水素貯蔵材料は有望と考えられていますが、水素脱離温度(T_d)が高いことが実用への課題の一つです[1]。前稿において門野良典KEK教授が、錯体系材料$NaAlH_4$のT_dの決定要因を低温でのμSR測定から決める試みを解説されました[2]。今回は、少し違った観点から、水素化マグネシウム(MgH_2, T_d=710K)のμSR結果を解説します[3]。

MgH_2のT_dは合成後の処理に大きく依存します。すなわち、合成後のMgH_2を粉砕して粒径を数十nm程度に微細化するとT_dは約100K低下し、5wt%のNb_2O_5を添加して微細化するとT_dはさらに100K低下します(図1(a))[4]。しかしながら、微細化によりT_dが低下する機構は不明でした。

そこで、合成後、粉砕後、Nb_2O_5と粉砕後の3種類の試料を用意し、T_d以上までμSRスペクトルを測定しました。ここで、ミュオンは水素の軽い同位体と見なせるので、μSR測定は貯蔵材料中の水素の状態や運動に関する情報を与えます。粉砕前のMgH_2試料(T_d=710K)では、T_d直前まで内部磁場は静的で、水素もミュオンも止まっていることが分かりました。しかし、粉砕した試料(T_d=610K)では、500K付近で内部磁場が動的になりました[3]。これは、水素やミュオンがT_dよりかなり低温からMgH_2内を拡散することを意味します。さらにNb_2O_5と粉砕した試料(T_d=520K)でも、500K付近から水素やミュオンが動き始め、その運動はより活発となることが分かりました(図1(b),(c))。

粉砕により新鮮な表面が露出し、全表面積も増加します。このような新鮮な表面では、水素が表面から脱離しやすい状態になります。水素が脱離すると空サイトができ、内部の水素がそこへ移動できるようになります。このように、一度空きサイトが生成すると、固体内部の水素拡散が連続的に起こり、試料全体の水素脱離反応が進むものと考えています。

なお、同様な測定は^{1}H-NMRでも原理的には可能です。しかし、μSRはスピンを偏極させるためにパルス磁場を印加する必要がないので、高温まで感度が落ちません。さらに、ミュオンが崩壊して生じる陽電子のエネルギーが高いので、金属オーブン内の試料でも簡単に測定できる利点があります。

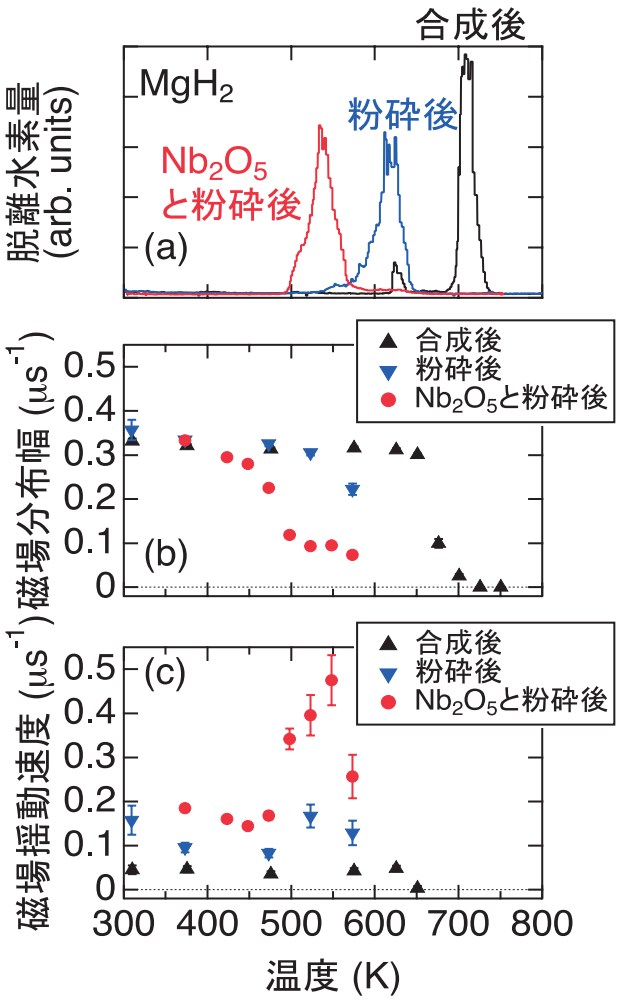

図1　3種類のMgH_2試料の(a)熱分析で求めた水素脱離挙動、(b)μSRで求めた核磁場分布幅と(c)核磁場揺動速度の温度依存性

核磁場分布幅はNMRの共鳴線幅つまり水素量に、
核磁場揺動速度はスピン格子緩和率つまりミュオンと
水素の拡散ジャンプ頻度に相当する

参考文献
[1] L. Schlapbach and A. Züttel, Nature, Vol.414, 353 (2001)
[2] R. Kadono et al., Phys. Rev. Lett., Vol. 100,026401(2008); 四季, Vol.21, 4 (2013)
[3] I. Umegaki et al., J Phys. Confer. Series, Vol.551, 012036 (2014)
[4] N. Hanada, T. Ichikawa, and H. Fujii, J. Alloys Compounds, Vol.446-447, 67 (2007).

研究トピックス

●J-PARC

BL04「ANNRI」における元素分析法の開発

日本原子力研究開発機構　藤 暢輔、黄 明輝、木村 敦
中村 詔司、原田 秀郎
首都大学東京　海老原 充

J-PARC/MLFのBL04「ANNRI」では即発ガンマ線分析（PGA）と中性子共鳴捕獲分析を同時に行うことができる新しい元素分析法を開発しました。

日本原子力研究開発機構と首都大学東京は共同で、J-PARC/MLFで得られる大強度パルス中性子を利用した新しい元素分析法の開発とその応用研究を推進しています。

中性子ビームを利用した元素分析には即発ガンマ線分析（PGA）と飛行時間法（TOF）を用いる中性子共鳴捕獲分析があります。PGAは中性子捕獲反応の際に放出される即発ガンマ線のエネルギーで元素を同定し、ガンマ線ピークのイベント数から定量を行います。一方、中性子共鳴捕獲分析は高い中性子エネルギー領域に存在する中性子捕獲反応断面積の急激な増減を表す共鳴を利用した分析です。中性子（共鳴）のエネルギーで元素を同定し、共鳴ピークのイベント数から定量を行います。どちらの手法も同位体を区別できるので核種分析とも呼ばれており、バルク試料を非破壊で、また、多元素を同時に定量することができます。これらの特長から隕石や土器などの貴重な試料や環境評価、材料開発分野などで用いられています。非破壊分析が要求されるこれらの試料は多数の元素を含んでいることが多く、各元素のガンマ線のピークや共鳴のピークが重なることによって正確な定量値を得ることが困難な場合がありました。

ANNRIには、7個のゲルマニウム結晶で構成されるクラスターゲルマニウム検出器2台と通常のゲルマニウム検出器8台からなる高効率のガンマ線検出器が設置されています。ゲルマニウム検出器はガンマ線のエネルギー分解能が高いため、PGAに適した検出器ですが、時間分解能はシンチレータ等に比べて劣るため、中性子共鳴捕獲分析には用いられて来ませんでした。大強度のパルス中性子と高効率のガンマ線検出器を用いれば、中性子源からある程度距離を離して検出器を設置することができ、ゲルマニウム検出器でも中性子共鳴捕獲分析を行うことができます。ANNRIではMLFの大強度パルス中性子とクラスターゲルマニウム検出器を用いることによってゲルマニウム検出器でも中性子共鳴捕獲分析を行える手法を確立しました。これによってANNRIではPGAと中性子共鳴捕獲分析を同時に行うことができます。さらに、これら2つの測定を同時に行うことによる相乗効果があり、図1に示すように、PGA、あるいは、中性子共鳴捕獲分析を単独で行うと測定が困難な試料でも定量できることがあります。

今後は本手法を宇宙化学的試料や環境試料、放射性核種定量などへの適用を拡大し、手法の検証と更なる高度化を進めて行きます。

本研究は科研費 JSPS（22750077）の助成を受けた成果を含んでいます。

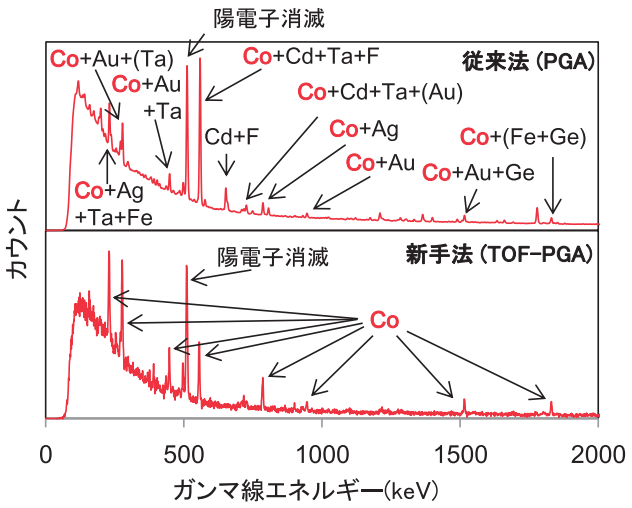

図1　混合標準試料を用いた従来法との比較
従来法でのCoはガンマ線が重なっており解析が困難であるが、新手法では共鳴ピークを用いてCoのみを選択的に抽出したスペクトルを得ることができる。

偏極中性子反射率と深さ分解X線磁気円二色性を用いた界面におけるねじれ磁気構造の解明

高エネルギー加速器研究機構　雨宮 健太、酒巻 真粧子

磁性薄膜の磁気構造を深さ分解X線磁気円二色性（XMCD）と偏極中性子反射率を相補的に用いて観察し、特異な磁気異方性を示すNi薄膜と反強磁性体であるFeMn薄膜の界面付近がねじれた磁気構造になっていることを解明しました。

磁性薄膜はいわゆるスピントロニクス技術の主役であり、特に、磁気記録媒体および読み取りデバイスに利用されています。このスピントロニクス技術において重要な役割を果たしているものの一つに強磁性体／反強磁性体接合があります。一方、磁性薄膜が面法線と面内どちらの方向に磁化されやすいかという磁気異方性も記録密度や安定性の向上の観点から注目されています。本研究では、典型的な強磁性体であり、特異な磁気異方性を示すNi薄膜を反強磁性体であるFeMnと接合させ、それらの界面における磁気構造を深さ分解X線磁気円二色性（XMCD）と偏極中性子反射率を相補的に用いて観察しました。

残留磁化状態において面法線および面内方向の磁化を示す2種類のNi薄膜（膜厚によって磁気異方性を制御できます）にFeMnを蒸着して深さ分解XMCD測定を行った結果を図1に

示します。この手法は、X線の吸収に伴って放出されるオージェ電子の実効的な脱出深度が、その出射角によって異なることを利用して様々な検出深度を有する一連のXMCDスペクトルを得るというものです。図1 (a) より、Niが面法線方向の磁化を示す場合には、FeMnがある程度厚くなって反強磁性が発現すると、表面敏感なほどXMCD強度が減少し、FeMnとの界面付近で磁化の面法線成分が小さいことが分かります。一方、図1 (b) より、Niが面内磁化を示す場合には、界面における面内方向の磁化の減少は認められません。これは、FeMnとの界面付近でNiのスピンが面内方向に向きやすいと考えれば説明できますが、深さ分解XMCDは残留磁化状態でしか測定できないため、磁化の傾きを観察することができません。

そこで、残留磁化状態で面法線方向の磁化を示す試料に対して、界面付近におけるスピンの面内成分が外部磁場によってどのように変化するかを偏極中性子反射率を用いて観察した結果を図2に示します。解析した結果、外部磁場の増大につれて界面付近の磁気モーメントの面内成分が、内部層よりも早く大きくなることが明らかになり、右上に示すようなねじれた磁気構造になっていると推定できます。

本研究は、PF PAC No.2010S2-001とJ-PARC/MLFの課題番号2012B140によって実施しました。偏極中性子反射率の測定と解析に際しては、CROSS東海の水沢まり氏や日本原子力研究開発機構の武田全康氏を始め、BL-17「SHARAKU」のスタッフの方々に大変お世話になりました。この場を借りて感謝申し上げます。

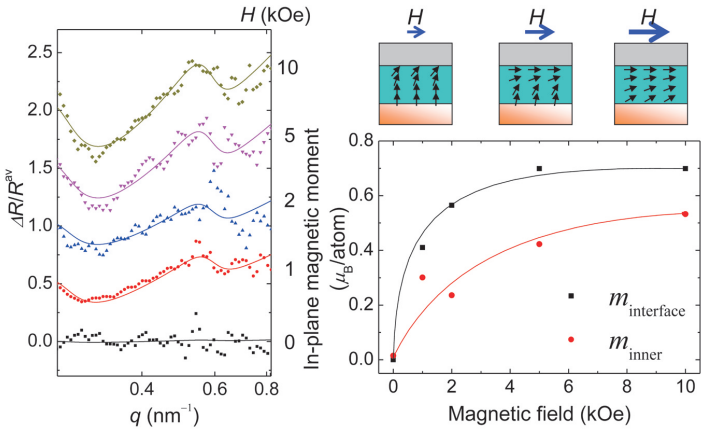

図2　面法線方向の残留磁化を示すCu/FeMn/Ni/Cu(001)に対する偏極中性子反射率曲線(左;差分ΔRを平均R^{av}で割ったもの)および解析によって得られた界面及び内部層の面内磁気モーメント(右)の磁場依存性

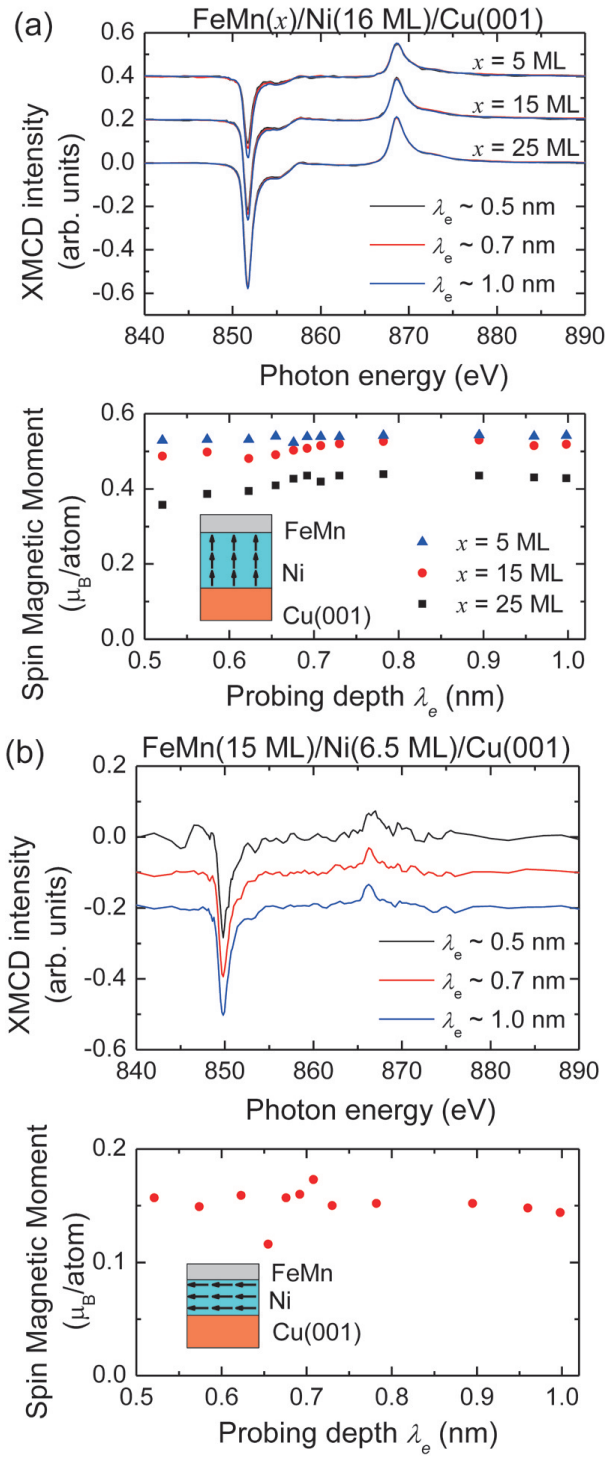

図1　(a)面法線および(b)面内方向の残留磁化を示すFeMn/Ni/Cu(001)に対するNi L吸収端XMCDスペクトル(上)および解析によって得られたNiのスピン磁気モーメント(下)の検出深度(λ_e)依存性

●茨城県BL

プロトン共役型電子移動錯体の合成とその中性子単結晶構造解析

東京理科大学　田所 誠

遷移金属錯体の混合原子価状態に伴う電子移動反応に、強く水素結合したプロトン移動を介在させた、新しいクラスの混合原子価状態を有する分子システムの合成に成功し、その結晶構造を解明しました。

タンパク質などの生体物質は、その電子移動反応を迅速に行うために、ペプチド結合やアミノ酸残基、あるいは系内に存在する水分子などの水素結合したプロトンの移動を利用することが知られています。これは、プロトン共役型電子移動(PCET)と呼ばれ、プロトン移動と電子移動をシンクロさせた新しい分子系触媒のメカニズムとして注目を集めています。最近では、光によって水を分解する分子性光触媒のように、単分子系での触媒反応のメカニズムとして利用されています。しかし、これまでこのようなPCET現象を結晶などの固体中

で直接研究した例は余り知られていませんでした。

私たちは、遷移金属錯体の混合原子価状態に伴う電子移動反応に、強く水素結合したプロトン移動を介在させた新しいクラスの混合原子価状態をもつ分子システムの合成に成功しました。得られた錯体は、図1に示すように、Reイオンに対してCl^-イオンが2つ、P^nPr_3基が2つ、2座キレート配位子の$Hbim^-$ (bim^{2-}) (2,2´-biimidazolate anion) が配位した6配位構造を有します。この錯体が1つのプロトンによってNH…N型の分子間水素結合で連結した$[Re^{III}Cl_2(P^nPr_3)_2(Hbim)][Re^{IV}Cl_2(P^nPr_3)_2(bim)]$を合成します。

この単結晶の特徴は、Re^{III}錯体とRe^{IV}錯体をイミダゾール間の強いNH…N型の水素結合によって連結したため、結晶中でPCET反応を引き起こしRe^{III}価とRe^{IV}価を区別することができない点にあります。これは室温から5Kまでの極低温に渡って動的なPCET反応が起こり、混合原子価状態においてRe^{III}/Re^{IV}の分子間電子移動と水素結合したプロトンが絶えず揺動していることを示しています。

図2に293 Kにおける中性子単結晶構造解析の結果を示します。結晶学的なデータは次のようになります。2.0×1.3×0.5 mm^3, *triclinic*, *P*–1 (#2), T =293K, a=9.6659(7) Å, b=10.2110(14)Å, c=16.8158(18)Å, α=75.027(11)°, β=86.454(7)°, γ= 75.479(10)°, V=1552.1(3)$Å^3$, Z=2, R_1=8.82%, Rw =20.15%, GOF =1.04. 原子核密度の差フーリエを考慮すると、この結晶構造では水素結合したプロトンが2.730 (1) Åの比較的長いN…N間距離で、ほぼシングルポテンシャルの挙動をもつことが分かりました。一方、プロトンの原子核密度は、水素結合方向に１つのブロードな温度因子として観測され、動的にプロトンが移動していることが分かりました。通常、水素結合内をプロトンで動いている場合には、2つあるN原子のローンペアのどちらかに局在化したダブルミニマムポテンシャルを形成します。しかし、プロトンと混合原子価状態の電子が同時に動くため、プロトンではなく水素原子移動となり、長いN…N間でもシングルポテンシャルのような挙動を示しているものと考えられます。

本研究は、茨城県プロジェクトとして実施しました。実験に当たっては、日下勝弘茨城大学准教授に技術支援していただきました。また、解析では細谷孝明茨城大学講師にご協力をいただきました。両氏にこの場を借りて感謝申し上げます。

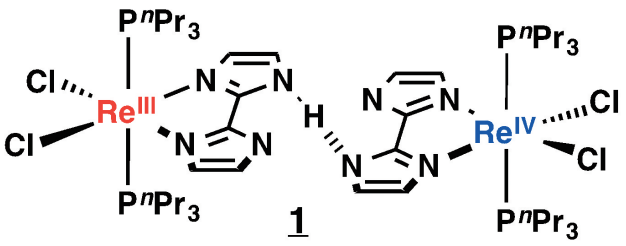

図1　プロトン共役型電子移動錯体の分子構造

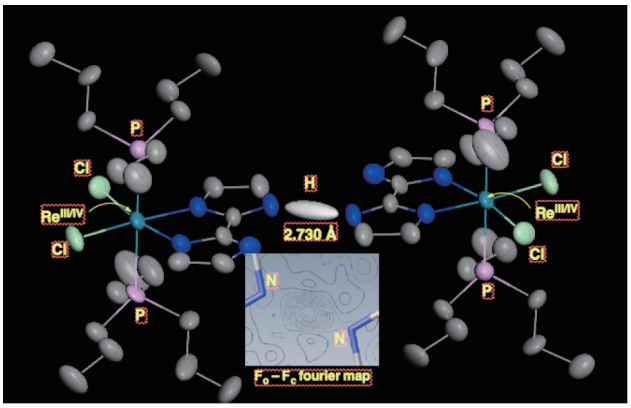

図2　293Kにおける水素結合型プロトンの状態

●茨城県BL

ビリン還元酵素PcyAとその基質ビリベルジン複合体の結晶構造を解明

茨城大学　海野 昌喜

BL03「iBIX」を用いて、シアノバクテリア由来の光合成色素合成酵素PcyAと基質との複合体結晶の中性子回折実験を行い、得られた回折強度データを用いて1.95Å分解能で構造解析を行って、ビリベルジン複合体中の水素原子の可視化に成功しました。

シアノバクテリアは光合成によって酸素を生み出す真正細菌です。その光合成で光を集める色素フィコシアノビリンは、生体内にあるビリベルジン (BV) という物質から酵素PcyAによって生合成されます。PcyAが触媒する反応は非常に特徴的で、BVの2箇所に位置選択的に2電子供与・2水素添加し、しかもこの二段階反応が一定の順序で起こります。このような特異な反応機構には「光合成色素の生合成」という重要性以上に多くの科学者の興味が注がれていました。その水素を使った反応を「水素原子レベル」で理解するためには、酵素 (PcyA) と基質 (BV) 中の水素の立体的な配置を同定することが極めて重要です。

そこで、PcyA-BV複合体の中性子結晶構造解析に取り組みました。一般に、タンパク質の中性子結晶構造解析では、十分な回折強度データを得るために、大きな結晶を必要とします。さらに、本研究の場合、色素であるBVが光に反応してしまうため、暗所で結晶化を行わなければならないという問題がありました。研究途中に東日本大震災もありましたが、それを乗り越え、大きな結晶を作製することができ、結晶中水素の重水素への置換を行った後、iBIXで中性子回折実験を行いました。

得られた回折強度データから構造解析を行い、1.95Å分解能の構造解析を行うことに成功し、PcyA-BV複合体中の水素原子を可視化することができました[1]。その結果、以下に記すような重要なことを解明しました。まず、BVの水素化状態

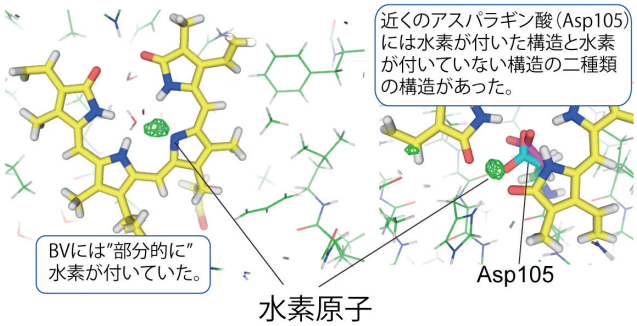

図1　BV近傍の水素化状態

が二状態あることと、その構造（水素の位置）が分かりました。すなわち、ピロール環の4つの窒素全てが水素化したBVH⁺の構造と、4つのピロール環中3つが水素化した中性のBVの状態が混在していました（図1, 2参照）。一方、ラクタム構造（-NH-C=O）の酸素の周辺には水素は認められず、ラクチム構造（-N=C-OH）は存在しないことも明確になりました。BVと相互作用するAsp105は二重配座をとっていましたが、一方のコンフォメーションには水素があり、もう一方にはありませんでした（図1）。この混在はBVの水素化状態と対応していると考えられます（図2）。また、BVのラクタム酸素の近くにあるHis88のNεが水素化しており、A環のラクタム酸素と水素結合を形成していることも分かりました。さらに、そのHis88の近傍にはH_3O^+があることを発見し、His88に効率よくプロトンを供給していることが示唆されました。

水素原子レベルで明らかにしたPcyA-BV複合体の構造は、光合成色素を合成する特異な反応のメカニズムを解明するにあたって非常に有用な情報になります（図2）。さらに、反応メカニズムの解明により、新しい機能を有する色素類縁体物質を合成することが可能となり、それが近い将来、新しい人工光合成システムなどに使われることが期待されます。

本研究は、福山恵一大阪大学大学院教授、日下勝弘茨城大学准教授の他、多くの方々の協力のもとに実施しました。関係者の皆様にこの場を借りて感謝申し上げます。

なお、本研究の成果は、参考文献にも挙げてありますが、化学分野の世界最高峰の学術誌である「米国化学会誌（Journal of the American Chemical Society）」に4月21日に掲載されました。

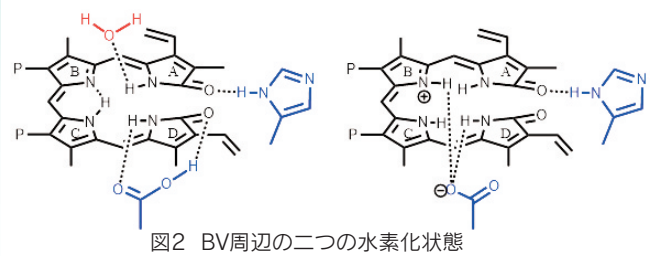

図2　BV周辺の二つの水素化状態

参考文献
[1] Unno, M., et al. J. Am. Chem. Soc. (2015), **137**, 5452-5460

活動報告

●Z-Code講習会

3月30日（月）-31日（火）にLMJ東京研修センターにおいて、中性子産業利用推進協議会とJ-PARCセンターMLFディビジョン、KEK物質構造科学研究所、茨城県、茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター、ならびにCROSS東海が主催して平成26年度Z-Code講習会を開催しました。

Z-Codeは毎年のように改良を重ねています。今年度はZ-Rietveldの最新版の使い方についての講義と実習を主体に行い、新たに開発した磁気構造解析用Z-Rietveld-Mについても講義を行いました。また、Conographによる指数付けの原理とデモ解析、ならびに、マキシマム・エントロピー法（MEM）による解析ツールZ-MEM、解析結果を3次元表示するツールZ-3D、結晶模型表示ツールZ-ATOMの最新版の使い方についても講義と実習を行いました。

参加者は会員企業から7名、非会員企業から8名、非会員研究機関から8名、大学から17名、地方自治体から4名の合計44名でした。

会場の様子

神山崇KEK教授

木村宏之東北大教授

●物質科学研究会

7月30日（木）にエッサム神田ホールにおいて、中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会ならびにCROSS東海が主催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「原点回帰：中性子回折で何が見えるか？ －中性子材料構造解析の威力－」をテーマに開催しました。60名の参加がありました。

初めにチュートリアルとして大山研司茨城大学教授が「中性子で何が見えるか？－中性子散乱の原理と特長－」、林好一名古屋工業大学教授が「中性子線ホログラフィーの可能性」と題して講演されました。<軽元素（水素やリチウム）を見る>セッションでは、佐藤豊人東北大学助教と井手本康東京理科大学教授、<酸素を見る>セッションでは、藤井孝太郎東京工業大学助教と伊藤孝憲東京理科大学客員研究員、<同位体や原子番号の近い元素を見る>セッションでは、パナソニックの岡野哲之氏と石垣徹茨城大学教授がそれぞれ講演されました。

テーマとした「中性子で何が見えるか？」という中性子による構造解析の威力を認識していただく場になったと考えます。

会場の様子

伊藤孝憲氏（東理大）

岡野哲之氏（パナソニック）

●茨城県中性子利用促進研究会「小角散乱分科会」

7月8日（水）に東京 飯田橋の研究社英語センターにおいて、茨城県中性子利用促進研究会が主催し、中性子産業利用推進協議会とCROSS東海が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して、平成27年度第1回小角散乱分科会を「iMATERIAにおける小角散乱機能と実験例の紹介」をテーマとして開催しました。41名の参加がありました。

<チュートリアル>では、小泉智茨城大学教授と能田洋平茨城大学連携研究員がiMATERIAにおける小角散乱機能の整備状況とコントラスト変調法に関して講演されました。<iMATERIAでの小角散乱実験例>セッションでは、三井化学の三田一樹氏とクラレの津村佳弘氏が昨年11月にiMATERIAで行った実験成果を報告されました。<コントラスト変調法の実験例>セッションでは、武野宏之群馬大学准教授とJSRの冨永哲雄氏、住友ゴム工業の増井友美氏が高分子やゴムの小角散乱解析の結果を報告されました。

iMATERIAの小角散乱機能とそれを利用した中性子小角散乱ならではの「コントラスト変調法」の有用性への期待を持たせる場になりました。

会場の様子

三田一樹氏（三井化学）

増井友美氏（住友ゴム）

お知らせ

◆講習会

●中性子実験技術基礎講習会（レベル1講習会）

日　時：平成27年11月25日（水）9:55-16:50
会　場：研究社英語センター中会議室
受講料：¥10,000（協議会会員企業の方と日本中性子科学会会員の皆さま、ならびに学生は無料です）

中性子産業利用推進協議会と日本中性子科学会、CROSS東海が共催して、中性子実験技術の初心者の方を対象に中性子実験技術の基礎的事項を紹介し、パルス中性子実験施設であるJ-PARC/MLFへの課題申請に役立てていただくことを目的として、「中性子実験技術基礎講習会（レベル1講習会）を開催します。

中性子の基礎、結晶構造解析、残留応力測定、小角散乱、反射率、準弾性散乱、ラジオグラフィ、ならびに、中性子の産業利用の8件の講義を行います。中性子実験技術の基礎を学びたい方の参加をお願い致します。

◆研究会

●薄膜・界面研究会

日時：平成27年10月1日（木）10:00-17:00
会場：研究社英語センター大会議室

中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会ならびにCROSS東海が主催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「中性子反射率測定による薄膜・界面の理解」をテーマに開催します。

チュートリアルでは中性子を光源とした反射率測定に基づき、材料薄膜および界面の解析法について解説します。反射率法の学術成果のセッションでは、主として高分子構造解析の学術成果を5件紹介します。産業応用のセッションでは、各種材料の反射率法の適用成果を3件紹介します。

本研究会は、ユーザー同士の交流や今後中性子反射率測定を考えている技術者や研究者との意見交換も目的としています。

●残留ひずみ・応力解析研究会

日時：平成27年10月13日（火）10:00-17:00
会場：エッサム神田ホール401会議室

中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海、SPring-8ユーザー協同体、JAEA微細構造解析プラットフォーム、ならびに、NIMS微細構造解析プラットフォームが主催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して、「X線、パルスおよび定常中性子源による残留応力評価」をテーマに開催します。初めの現場用X線装置のセッションでは、国内のX線装置メーカーが現場用X線装置とその実機への適用事例を紹介します。中性子源応力測定のセッションでは、カナダ、米国、英国、オーストラリア、韓国、ならびに日本の原子炉およびパルス中性子源施設における残留応力測定装置の装置担当者がそれぞれの装置の概要と実機への適用事例などを紹介します。

世界の主要な最先端中性子実験施設の装置関係者が一堂に会して残留応力測定技術を議論する極めて有益な場になると考えます。

●第1回生物構造学研究会

日時：平成27年11月17日（火）13:00-17:00
会場：エッサム神田ホール401会議室

中性子産業利用推進協議会と茨城県中性子利用促進研究会、CROSS東海が主催し、日本学術振興会第169委員会中性子回折小委員会（予定）と新世代研究所水和ナノ構造研究会が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して「分子イメージングとタンパク質結晶成長技術」をテーマに開催します。

初めにiBIXの現状とそれを利用して得られた光合成メカニズムに関する成果を紹介します。現在、生物構造学においては、クライオ電子顕微鏡やSACLAなどにより分子レベルでのイメージングとX線・放射光・中性子結晶回折を併用することにより、生命物質の立体構造を明らかにして生化学反応機構を解明することが1つの目標となっています。一方、中性子回折による結晶構造解析のためには、結晶の大型化が必須の技術です。これらの研究の最前線について議論を深めることを目的とします。

◆茨城県

●茨城県中性子利用促進研究会「磁石材料分科会」

日時：平成27年10月6日（木）13:00-17:00
会場：エッサム神田ホール401会議室

茨城県中性子利用促進研究会が主催し、中性子産業利用推進協議会とCROSS東海、元素戦略プロジェクト磁性材料研究拠点が共催し、J-PARC/MLF利用者懇談会が協賛して、「量子ビームによる磁石材料研究の最前線」をテーマに開催します。

本研究会では、磁石材料構造解析研究の現状、およびiMATERIAでの解析手法をチュートリアルとして紹介するとともに、元素戦略プロジェクトの最近の進展状況、ならびに、放射光などの量子ビームによる磁石材料構造解析の最新事例も紹介し、量子ビームによる磁石材料研究の今後を展望します。

協議会HP（http://www.j-neutron.com/）では、J-PARC/MLFやJRR-3の運転情報などを提供するサイトや、研究成果を紹介するサイトなどが設けてあります。研究会や講習会などの詳細についてはHPに順次最新情報を掲載しています。是非HPにアクセスして活用してください。

中性子産業利用推進協議会　季報【15年・秋】Vol.28

発行日　2015年9月25日
発行元　中性子産業利用推進協議会
〒319-1106　茨城県那珂郡東海村白方162-1　いばらき量子ビーム研究センター2F　D201
TEL：029-352-3934　FAX：029-352-3935　E-mail：info@j-neutron.com　URL：http://www.j-neutron.com/