

## BL21（高強度全散乱装置）中間評価報告書

粉末・単結晶回折分科会

主査 大山 研司（東北大学）

副査 神山 崇（高エネルギー加速器研究機構）

委員 石垣 徹（茨城大学）

委員 井手本 康（東京理科大学）

委員 片山 芳則（日本原子力研究開発機構）

委員 木村 宏之（東北大学）

委員 中村 優美子（産業技術総合研究所）

### § 1 はじめに

本分科会の目的は、高強度全散乱装置 BL21 (NOVA) の計画に対し、その進捗状況と今後の高度化計画を評価し計画の継続の可否を判断すると共に、さらなる装置活用の向上のため助言を行う事にある。NOVA は社会的意義がきわめて高い装置であり、NOVA が高い性能をもち、充実したユーザー利用と特色あるサイエンスを展開することは、我が国の機能性材料研究にとって重要である。以下に各項目に対する分科会の評価を示す。

### § 2 装置の建設・維持および技術開発などに関する事項

本装置は NEDO 事業により強力に推進され、装置の基本思想を変更することなく早期に建設が完了し、利用が開始されており、成功している計画と言える。本装置の建設に関する目標は明確に示されており、目標達成のための各技術課題に関して、複雑な形状の真空槽の設計・製作や検出器の選択・配置など、技術の現状や予算制約等を勘案して最適な方策が選択されている。かつ、水素貯蔵分野での具体的なテーマが提示されており、装置として明確な差別化がなされている。NEDO の水素吸蔵プロジェクトに採択されたことで、液体・アモルファスを中心としたメンバーに水素貯蔵分野のメンバーが加わり、両者のテーマを包含しつつ利用・運用されている点が特筆すべきである。

装置グループもマンパワーは十分とはいえないにもかかわらず、その制約の中で充実した技術開発、装置維持がなされている。特に、nGEM モニター開発、フェルミチョッパーの導入、高温用のレビテーション装置の開発など、野心的な挑戦が行われ、すでに一定の成果が得られている。これらは国際的にみても特色となる技術で、MLF にとっても重要であり高く評価したい。また、測定環境としても、通常のアクセサリだけでなく、水素ガス雰囲気下 in-situ 実験装置、高圧実験用パリ・エンジンバラセルを導入済みで、ユーザーの多彩なニーズに答えられる環境構築に取り組んでいる。とくに、Fermi チョッパーの導入による  $S(Q)$  測定は NOVA の特徴の一つで、将来のパルス源弾性散乱装置の試金石となる野心的な試みとして高く評価したい。一方で、NOVA の条件での非弾性散乱測定に具体的なメリットがあることを示せるかが鍵となるので、その評価を続けてほしい。

第一次 NEDO 事業の終了も着実に利用が拡大しつつあり、2012A から始まった一般課題も幅広い分野で一定数の課題数が採択されている。2013B までの課題の 50% が液体、ガラス系で、全散乱装置としてユーザーコミュニティから適切な評価を受けているといえる。

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

現状で、分解能、強度、バックグラウンドにおいて、ほぼ当初計画通りの性能を達成している。海外装置との性能の定量的な比較はできていないものの、全散乱装置としては世界トップクラスの性能に達していると考えられる。また基本的アクセサリーの整備も順調に進んでいる。検出器の装備は100%ではないが、当初計画の性能を出す上で十分な検出器は導入されており、検出器の欠損は現状で問題にはならないだろう。実際、1秒測定や1mg測定に成功しており、 $Q_{\max}=70 \text{ \AA}^{-1}$ の実現により実空間での0.1 Åの分離も手が届きつつある。

一方、小角散乱部については、ハードは完備しているが、バックグラウンドの影響で当初目標の $Q_{\min}=0.01 \text{ \AA}^{-1}$ のLow-Q領域測定は実現していない。しかし、すでに $Q \sim 0.026 \text{ \AA}^{-1}$ までは測定が可能になっており、全散乱装置としてはまず満足できるQ領域をすでにカバーできている。抜本的なバックグラウンド対策にはPSDを真空槽中にいれる必要があり、そのような大規模改造は今では不要と考えるが、将来の小角散乱領域までの連続測定実現のため、バックグラウンド低減の努力は引き続き進めてほしい。

詳細計画書で検討された偏極中性子の利用は現段階のNOVAにとって必須性能でないのは明らかだが、中間報告ヒアリングで提案された磁気PDF解析は新しいサイエンスを切開く技術であることから、MLFでの将来の挑戦的な展望のひとつとして、偏極中性子の検討を続けてほしい。

#### § 4 利用者支援に関する事項

限られたマンパワーで、現段階でのユーザーの期待に答えるサポートがなされている。NOVAの大きな特徴である局所構造解析に関しては、通常の結晶構造解析に比べて専門的な知識が必要であり、パワーユーザーをのぞく一般利用者には敷居の高いものとなっている。現状では高い専門性をもつ利用者が中心と考えられるが、今後ビーム強度の向上に伴う利用課題数の増加が見込まれるにあたり、一般ユーザーにも局所構造研究ができるような支援体制を構築することが望まれる。

装置グループが信頼性の高い $S(Q)$ をユーザーに提供することを目指しているのは高く評価する。一方、全てのユーザーの $S(Q)$ について装置グループが責任をもつことは明らかに負担が大きすぎるので、ヒアリングで示されたように、構造解析フローの確立およびユーザーが自ら補正を行い $S(Q)$ の信頼性をチェックしつつ解析できる環境の整備をぜひ進めてほしい。このユーザーフレンドリーな解析環境の整備はほとんどの委員から指摘があった重要事項である。この環境整備により、パワーユーザーには $S(Q)$ 作製から独自に解析してもらうことで、ユーザー自身が $S(Q)$ の信頼性を評価しつつすばやい解析が可能になり、かつ装置グループの負担低減が可能になるのではないかと。また、今後局所構造研究のニーズが高まることを考えると、局所構造解析を得意とするNOVAグループから解析ソフトを発信することで、iMATERIAなど他の装置でも局所構造を可能にする装置連携の推進、展開が期待される。ぜひ検討してほしい。これらのソフトウェア整備はMLFの特色を強化する上でも重要と考えるので、本分科会としては、MLFが施設としてNOVAでのソフトウェア整備の支援をすることを期待する。

装置グループの負担をあまり増やさずに利用を活発化させる方法として、NOVAを軸として液体ユーザーコミュニティ、結晶ユーザーコミュニティを拡張、かつ独り立ちさせることで、ユーザー主体で講習会を開催し解析技術情報を共有したり、さらにユーザー同士が解析について支援しあう環境をつくる、などの方策が検討できるのではないかと。ヒアリングで示されたように、WebなどでNOVAで何ができるかの積極的な情報発信も、適切な課題申請を増やすことや、ユーザー自身のデータ解析にとって有効だろう。

#### § 5 得られた成果に関する事項

当初の装置論文からサイエンス創出論文に順調に移行してきており、特に2014年にはこれまでに11報と急増している。NEDO事業への参画により、水素化物関係の重要な成果が得られていることに加え、申請当初の重点テーマではない磁気構造解析などでも成果が得られていること、元素戦略プロジェクト関連で著名雑誌への論文発表があることは、NOVAの特色や汎用性が広い範囲の物質研究に役立つことを示している。今後も研究対象が広がっていく事が期待できる。

一般課題数のガラス・液体系の占める割合に比べ、現段階での論文成果リストではガラス系・液体系が少ないが、ヒアリングで2012年度以降の実験結果が論文化されつつあることが示された。信頼性の高いS(Q)をユーザーにすばやく渡すことの困難さというNOVA特有の課題はあるが、今後、ガラス・液体系での成長が期待できると評価する。特に、産業界のガラス・液体の測定のデマンドは多いので、この分野の支援を強化することで、いっそうの成果創出が期待できよう。一方で、意外なことに一般課題で水素系の申請が少ないように思われる。NEDOをベースに装置グループから優れた成果がでているのだから、それをコミュニティーに対してより一層PRし、一般課題からも水素系で成果をだしていく努力をしてほしい。

## § 6 今後の装置運営・管理・高度化および学術研究テーマに関する事項

運営はおおむね順調であり、現状の運営管理体制を維持できることが望ましい。しかし、さらなる飛躍をするには、他の装置同様にスタッフは不足しているといわざるを得ない。マンパワー不足はどの装置でも同じではあるが、NOVAが機能性材料研究において世界トップクラスの装置であること、すなわち我が国にとって重要な装置であることを考えれば、マンパワーの充実を施設と連携して継続して要望していくべきであろう。

課題の動向としては、J-PARC以前に比べて結晶PDF解析の課題が急速に増えていることが大きな特徴だろう。強相関電子系の磁性に関するテーマもある。このように、液体・ガラスや水素系に限らず、ひろく結晶構造解析においてNOVAが有効であることがすでに示されているので、より一層の利用分野の拡大を期待したい。磁気PDF解析に向けたチャレンジの提案があったが、NOVAならではの魅力的な手法となるので大いに期待したい。そのため、適切な磁場環境導入と偏極利用の検討を進めてほしい。

高温・高圧環境には他の専用ビームラインがあるが、1000°Cを越える高温領域にはNOVAにふさわしい重要なテーマが多数あるので、積極的に取り組んでほしい。その意味で、レビテーション装置は野心的な手法であり、開発を加速してほしい。また、NOVAの重要な特色として1mg試料実験があるので、画期的な極端条件、in-situ測定への一層の挑戦に期待したい。

中性子と放射光の相補利用が重要かつ有効であることは言をまたず、MLF全体で取り組むべきテーマではあるけれど、NOVAは中性子と放射光の相補利用がもっとも有効な装置と思われるので、装置グループも積極的に相補利用にとりくみ、かつその威力をコミュニティーに発信してほしい。

## § 7 総評

本計画装置NOVAは、NEDOの強力な支援のもと順調に建設がすすみ、すでに分解能、強度、試料環境整備において当初計画の性能をほぼ達成しており、世界トップクラスの装置であると認められる。2012Aよりユーザー利用も順調に実施されている。今後目指すグレードアップについても野心的な案も含め具体的な検討と準備がすすめられている。従って、当分科会は、本装置計画を継続すべき優れた計画と判断する。

限られたマンパワーではあるが、ユーザー支援の努力も続けており、今後のユーザーからの成果発表が期待できる一方、NOVAは我が国にとって重要な装置であるゆえ今後のユーザー増加が予想されることを考えると、装置グループの過剰な負担をさけるために、構造解析フローの確立、および、ユーザーが自ら補正を行いS(Q)の信頼性をチェックしつつ解析できる環境の整備、ユーザーコミュニティーの強化と自立促進などが必須である。解析環境の整備は、実験後、S(Q)をすばやく入手したいというパワーユーザーのニーズにも答えることができ、かつ他の粉末回折装置への広がりも期待できることから施設として優先順位の高い課題と考えるので、解析環境整備に関しても施設の支援を期待したい。

ヒアリングでは発表者は人的増強の必要性を強調はしなかったが、NOVAの社会的ニーズと施設にとっての重要性を考えたとき、やはり人的補強の要望を対外的に明示していくことを施設と検討してほしい。

以上