

BL02（ダイナミクス解析装置）評価報告書

非弾性分科会 主査	佐藤 卓（東北大学）
非弾性分科会 副査	吉澤 英樹（東京大学）
	古坂 道弘（北海道大学）
	伊藤 晋一（J-PARCセンター）
	藤原 悟（量子科学技術研究機構）
	山室 修（東京大学）

§ 1 はじめに

本中間評価報告はJ-PARC物質生命科学研究施設 (MLF) BL-02に設置されたダイナミクス解析装置 (DNA) に関するものである。装置グループより提出された平成29年度中性子実験装置中間評価調書、並びに平成29年11月2日に開催された中間評価ヒアリングでの発表に基づき上記非弾性分科会委員間で持たれた議論をまとめたものである。

DNAは当初蛋白質機能発現に密接に関わるとされる数 μeV ～数 meV 領域の運動を詳細に研究するために提案された背面反射型高分解能低エネルギー中性子分光器である。初期の建設提案においては非結合減速材を線源とした比較的オーソドックスな構成が考えられていたが、平成19年に結合型減速材とパルス整形チョッパーを併用する構成に大きく変更された。また、研究範囲も当初予定されていた蛋白質等の生命科学研究のみならず、ソフトマター・機能性材料等への利用も視野に入れられた。

本中間評価ではこのような装置計画の変遷を考慮に入れた上で以下の項目に関して集中的な議論を行ったので報告する。

§ 2 装置の建設・維持および技術開発などに関する事項

DNAは結合型減速材の大強度を有効利用し高強度かつ高エネルギー分解能を達成した世界でも他に類を見ない独創的な背面反射型分光器である。高精度精密球面配置完全結晶アナライザーの実現や、バックグラウンド低減のための完全結晶背面への中性子吸収体溶射技術の確立、高強度と高S/Nを実現する楕円曲導管開発、高分解能かつ測定エネルギー範囲拡大のための高速マルチスリットパルス整形チョッパー開発等、オリジナルな技術を多数確立しており、装置グループの高い技術開発力は世界をリードしている。試料環境に関しても、多種の試料環境装置を整備し幅広い研究課題への対応を可能にしている。建設過程で外部の意見を積極的に取り入れるなど設計・建設に極めて柔軟な姿勢が見られそれが現在の成功に結びついているものと判断できる。このようにDNAはJ-PARCに設置するにふさわしい高性能中性子非弾性散乱分光器として、最先端技術を駆使して建設が行われており極めて高く評価される。

§ 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）

パルス中性子源に設置された背面反射型分光器としてはエネルギー分解能、エネルギー範囲、強度、S/N比の全てにおいて世界最高性能を達成しており、極めて高く評価される。平成19年の詳細設計変更、並びに平成20年の国際アドバイザー委員会提言に対応する仕様変更

で、本分光器は数 μeV の高エネルギー分解能達成を第一目標とすることとされており、その意味で、当初計画で想定された装置性能に完全に達していると判断される

一方で、原子炉装置群との定量的な比較に関してはもう少し詳細な議論があると今後のこのような装置の設計の際に役に立つと思われる。ぜひどのような性能比較をすれば良いのかに関して研究を進め、論文化してほしい。また楕円曲導管の輸送効率については計算値と実際効率に乖離が見られるが、この原因究明を進め、少しでも効率を上げる努力をしてほしい。

§ 4 利用者支援に関する事項

ビームタイム配分の観点からは75%以上を共用に割り当てるなど一般課題を十分なレベルで受け入れている。ハードウェア面ではトップローディング・クライオファース、標準2重円筒セルの完備等、一般課題受け入れ対応に必要な措置が取られている。ソフトウェア面でもユーザー自身でフィッティング可能なソフトウェアを用意しているなど十分な努力が見られる。ユーザー実験時には1課題に対して最低1名のグループ員が実験サポートを行っており丁寧な支援と言えるであろう。一方で、本分科会委員からは実験後のサポート、特にデータ解析に対する利用者支援を充実することでより良い成果が得られるのではないかと指摘があった。また、このようなデータの解析では、理論家や分子動力学シミュレーション等の専門家との協力を行いながらより踏み込んだ解析をすることが世界的な潮流である。海外の同様な施設にはそのような専門家が実験施設に存在し、様々な実験家との良い協力関係が作られている例が多い。ぜひJ-PARCでもそのような専門家との協力関係を強化する方向で努力をしてほしい。同様な意味で生命科学関係の専門家がグループ内、あるいはJ-PARC内に必要である。

§ 5 得られた成果に関する事項

J-PARCの運転が決して順調ではなかったというこれまでの状況の中で、生命科学研究では α -シヌクレイン、ヘモグロビン、リン脂質膜等で、物質材料研究ではイオン液体、リチウム伝導体、太陽電池材料等にかなり良い成果が出ている。しかしながら調書提出時点で原著論文は7報であり、この数は海外の類似施設分光器に比較して少ないと言わざるを得ない。このような、論文数が少ないという問題はJ-PARC/MLFの共通の問題でもある。これに関して本分科会は以下のように分析した。

- 1) MLFの装置グループの役割としてMLFでの実験の支援だけを行うのでは十分ではなく、実験終了後のデータ解析など、利用者が論文化を進められるような支援体制の整備が必要である。
- 2) そのためには、一般課題の実施・支援においてもサイエンスに深く関与できる装置グループを形成すること、また必要に応じて装置グループがサイエンティフィックなリーダーシップをとることが重要であろう。
- 3) 論文を完成させる手段の一つとして幾つかの分光器の相補的利用が有効であると考えられる。そのためにはMLFの研究者あるいは課題採択委員会が課題提案者にそのような提案をすることができる仕組みを作る必要がある。
- 4) 日本に準弾性散乱研究が定着していないという状況がある。これに関しては例えば準弾性散乱研究者によるワークショップ・勉強会などをMLFとその分野の研究者が積極的に立ち上げていくことで活性化できると考えられる。それに関しては研究会への支援などMLFの積極的関与が欲しい。

1)、2)に関しては§4に記した通り、装置グループ業務として解析支援を行い論文化までサポートする体制を構築することが望まれる。一方、3)、4)（と2)の一部）は主に施設運営の問題である。3)に関しては、サイエンス課題によっては広いエネルギーレンジをカバーする必要があることを鑑み、複数の分光器に同一テーマで課題申請ができる制度設計が必要と考える。（DNAの場合は具体的にはAMATERASとの複数申請が可能であることが望ましい。その際、DNAのカバーする研究分野が多岐に渡ることを考慮して制度設計を行う必要がある。）4)に関しては装置グループ員がより積極的にユーザーを育て専門家の育成を図ることが重要であろう。

§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

今後の装置高度化に関して提案されている項目は妥当であると判断される。特にSi (311)アナライザーが導入され測定Q範囲が広がることは今後の研究進展に極めて有用であろう。温度可変試料交換機、試料透過率測定等も有用と判断される。一方で、種々の研究分野への分光器利用を考えた場合、エネルギー分解能を落とし強度を優先することが非常に有効であると考えられる。

これは技術的にはパルス整形チョッパーを停止することで可能になるが、現時点ではパルス整形チョッパー起動・停止時の共鳴周波数によるチョッパーブレードの破壊リスク回避のため大強度運転モードの利用に制限がある。今後、高分解能モード・高強度モードの両者を制限なく切替使用できるようハードウェア開発を積極的に進めることによるメリットは非常に大きいと考えられるので、ぜひその整備を進めて欲しい。

学術研究テーマ展望に関しては世界的な動向を鑑みても生命科学および新規材料系に重点を置く方向は正しいと判断する。そのような中で、具体的な学術研究テーマ提案2件は個別の研究提案の域を超えていない。今後の系統的なサイエンス展開として生命現象の素過程の理解という大きな目的を挙げているにもかかわらずそれに対応するテーマがないことも問題の一つである。装置責任者が装置グループのサイエンスをリードする視点を持ち、外部の利用者との緊密な連携、共同研究の立ち上げを通じ、今後のサイエンス展開とそれに必要な装置高度化を明示することが望ましい。この観点から、本分科会としては以下の提案をする。

- 1) 外部の専門家及びDNAグループ員とで特別チームを結成し、長期的展望を持ちながら多くの経験を積めるような仕組みを作る。
- 2) 装置グループ員の研究を奨励し、外部からもその研究活動が明確になるような仕組みを作る。例えば装置グループ員各々の専門等をリストアップし広く開示することでDNA装置グループ員のサイエンス担当を明確にする。
- 3) 装置責任者がサイエンスの面からも指導的立場で装置グループ全体の運営に責任を持つ体制を構築する。

§7 施設への要望

本分科会ではDNAの現状を通して施設運営に関するいくつかの問題点を見出した。以下にそれらに対する改善要望を記す。

- 1) 複数の分光器を同一課題で利用できる制度の構築が望ましい（§5）。
- 2) 共用BL装置責任者の役割として、サイエンスをリードするという視点を明示する事が望ましい（§6項目3、§5項目2）。

- 3) 一方で、それぞれのBLが広いサイエンス分野をカバーする現状では、装置責任者に全てのサイエンスをリードしろというのは無理があるかもしれない。類似の分光器群ごとにサイエンスをリードする Head (あるいはscience coordinator) を据えることも一つの方策であろう。
- 4) 試料や機器の持ち込みに関する規則は複雑かつ煩雑で非常にハードルが高い。改善が望まれる。外国人ユーザーからもJ-PARCは使いにくいという声がある。

§ 8 総評

DNAはパルス中性子源に設置された背面反射型非弾性散乱分光器として世界最高性能を達成していることは間違い無く、その建設・維持と技術開発には最大限の評価が与えられるであろう。また、利用者支援も実験支援に関しては十分に行われていると判断できる。これまで得られた成果は数だけで判断するならば満足なものとは言えないが、これまでのJ-PARCの運転状況、並びにDNAの置かれているサイエンスコミュニティの状況を考慮に入れるならば十分だと言える。今後は、よりサイエンス展開を明確にして、ユーザー開拓・教育を世界的な視点で行うこと、さらに解析支援を充実させることで、世界をリードする準弾性散乱コミュニティの形成を目指していただきたい。

以上