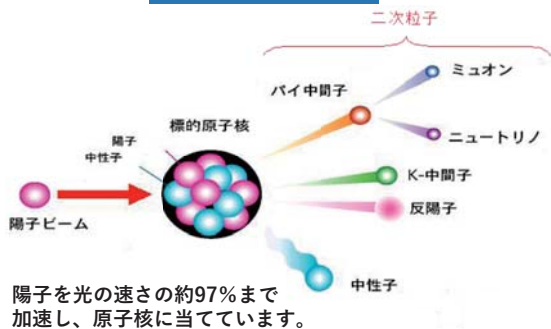


中性子による材料構造解析

中性子で何ができるか(材料構造解析での威力)

中性子とは

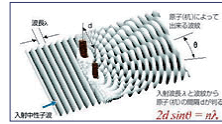


原子核を構成する粒子であり、陽子とほぼ同程度の質量をもち、電荷をもたない中性の粒子。
透過性があり、軽元素の観測が得意なため、様々な物の構造を観察するために利用されている。

中性子を使ってできること

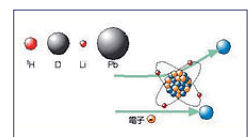
○結晶構造を見る

✓干渉による回折現象
⇒ **結晶構造解析**



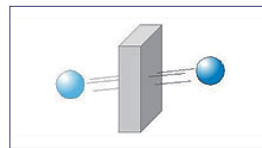
○軽元素を見分ける

✓原子核とのみ相互作用する
⇒ **非破壊観測**



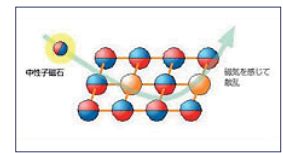
○透過性が高い

✓電荷がゼロで相互作用がほとんどない
⇒ **非破壊観測**



○磁気構造を調べる

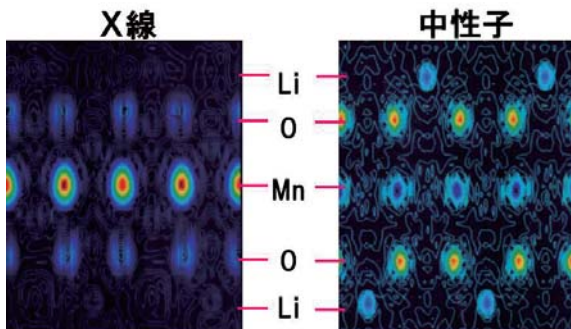
✓磁気モーメントを有する
⇒ **磁気構造解析**



中性子結晶構造解析 (X線と中性子の比較)

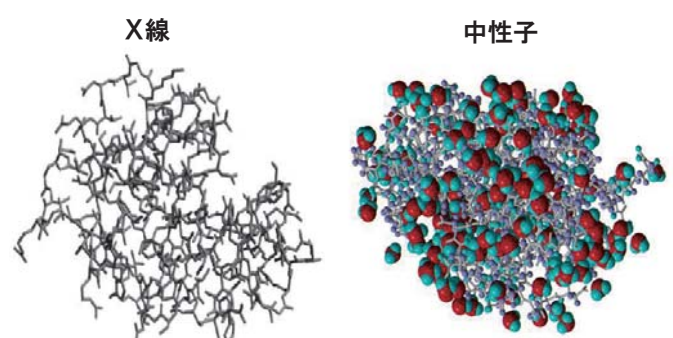
リチウムイオン電池の結晶構造解析

X線では困難なリチウム等の軽元素の位置と量を決定可能



タンパク質の結晶構造解析

X線では困難な水素や水分子の位置を正確に把握可能



中性子を利用するならJ-PARC* (大強度陽子加速器施設)へ！

茨城県東海村に所在するJ-PARC*の物質・生命科学実験施設 (J-PARC MLF) では、中性子を用いて物質・生命科学の研究を行っています。

* Japan Proton Accelerator Research Complex

J-PARC俯瞰図



MLFのビームライン

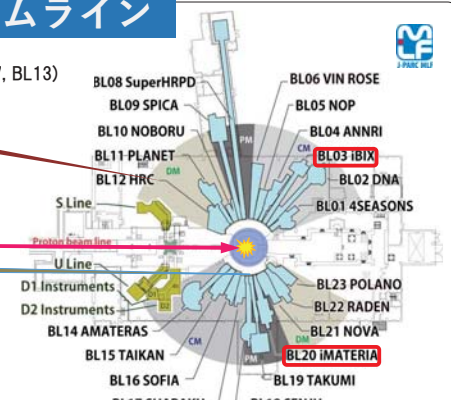
共用ビームライン(BL):21本
空きビームライン:2本 (BL07, BL13)

第1実験ホール

パルス中性子源

陽子ビーム

第2実験ホール



茨城県中性子ビームライン

- ・ BL03 生命物質構造解析装置 (iBIX)
- ・ BL20 材料構造解析装置 (iMATERIA)

詳しい情報・最新情報は

茨城県 中性子



茨城県中性子ビームライン(茨城県BL)とは？

茨城県では、J-PARC MLFに2台の中性子構造解析装置を設置・運用して、中性子の産業利用の促進に取り組んでいます。

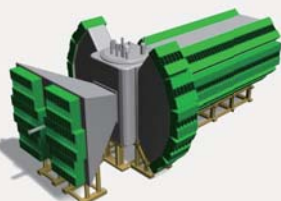
生命物質構造解析装置 BL03: iBIX

多数の高性能検出器を有する
単結晶構造解析装置



材料構造解析装置 BL20: iMATERIA

産業利用の多様なニーズに応える
多様な汎用中性子散乱装置



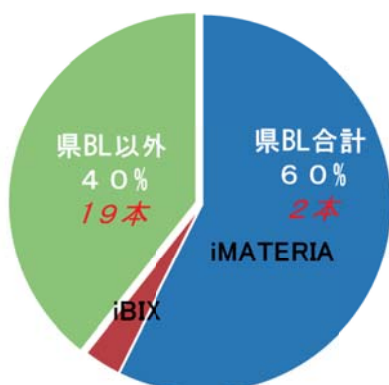
産業利用へ向けた取り組み

- ★ 産業利用コーディネーターによる
利用相談
- ★ 装置運用を(一財)総合科学研究機構
(CROSS) に委託してユーザーの
実験・解析支援
- ★ 研究会などの実施による産業利用の
啓発と利用者開拓

茨城県ビームラインの利用状況

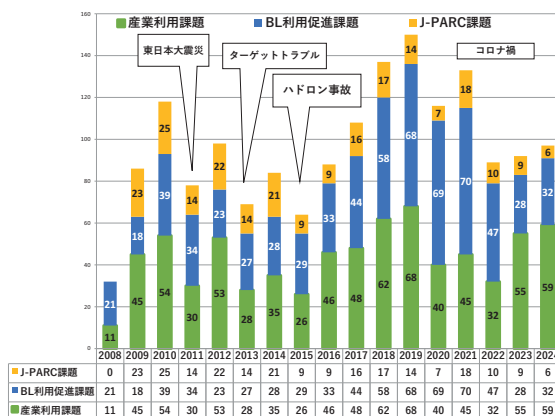
① MLF産業利用課題 採択数における県BL の割合

(2018～2024年の
産業利用課題のみ)



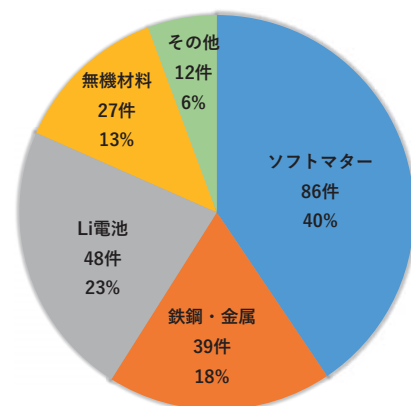
- ・ 県BLがJ-PARC MLF
の産業利用全体の約60%

②採択件数の推移 (2024年度まで)



- ・ 年間で平均40件の産業利用
- ・ 産業利用に資する学術研究も
多く実施

③直近5年の課題分類 (2020～2024年度)



- ・ 新たな測定・解析手法の
研究を通じた利用分野の
拡大により、ソフトマ
ター、鉄鋼・金属材料の課
題が増加

茨城県BLを利用するには？

- コーディネーターによる実験内容・課題など
の利用相談
- 課題申請から最短45日*1で実験可能
- CROSS*2が実験・解析を支援
- メールインサービス(測定代行)制度
- 無料で利用できるトライアルユース制度
(初めての方)
- 大学や研究機関の方々にも利用可能な課題
公募制度

*1 課題公募締切日から最短で45日 *2 装置管理・運用担当

事前相談・実験遂行・データ解析・ 報告書提出の全過程で手厚い支援

【ご相談・問合せ先】

○iMATERIA産業利用コーディネーター：峯村 哲郎
E-mail: t_minemura@cross.or.jp
TEL: 029-219-5300

○iBIX産業利用コーディネーター：佐藤 衛
E-mail: m_sato23@cross.or.jp
TEL: 029-219-5300

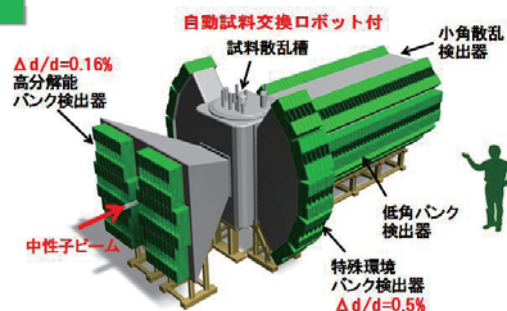
○OAYA'S LABORATORY量子ビーム研究センター県事務室
E-mail: info-neutron@pref.ibaraki.lg.jp
TEL: 029-352-3301

茨城県材料構造解析装置 (iMATERIA) とは？

iMATERIA/BL20 (茨城県材料構造解析装置)

産業利用の多様なニーズに応える 多機能な汎用中性子材料構造解析装置

X線では困難な水素やリチウムのような軽元素の位置と量の決定ができるほか、原子サイズからナノサイズまでの幅広いスケールでの材料構造解析が可能な装置です。



装置の特徴

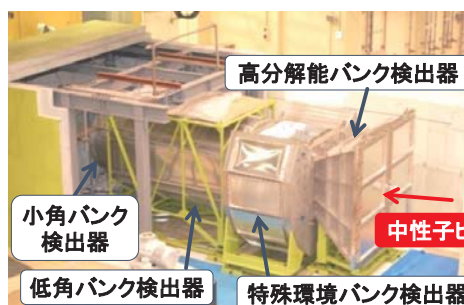
- 原子サイズからナノサイズまでの幅広いスケールでの材料構造解析 (高分解能粉末構造解析、小角散乱解析、集合組織解析)
- 多成分で構成される製品のナノ構造をそのままの状態調べることができる先端的な手法 (核スピン偏極用超電導マグネット(DNP))
- 多彩な環境下でのその場測定 (温度、雰囲気、充放電、引張)

実験対象例

- ・ 電池材料
- ・ セラミック材料
- ・ 金属材料
- ・ 高分子材料

主な利用分野

- 電池など エネルギー関連
- 自動車用部材など 社会インフラ関連
- 食品・ヘルスケアなど 生活(高分子)関連



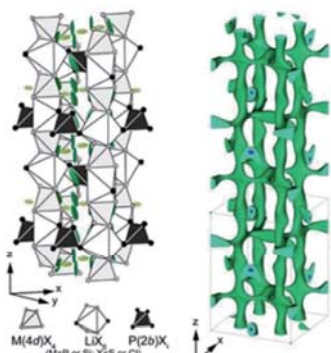
iMATERIAの研究成果事例

全固体型セラミックス電池の開発

東京工業大学 菅野了次教授

従来の3倍以上の出力を持つ
全固体セラミックス電池の開発に貢献

超イオン伝導体の結晶構造を決定し、イオン伝導経路を解明



今回発見した超イオン伝導体の結晶構造とイオン伝導経路

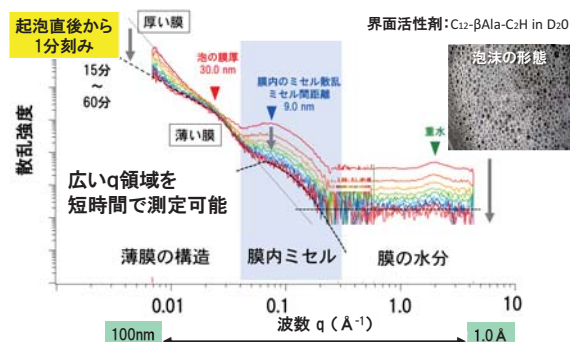
より「高出力/高容量/安全性/長寿命」の電池の開発に貢献

洗剤泡沫の崩壊過程のその場観測

高性能な界面活性剤の開発に貢献 日油(株)

界面活性剤の違いによる泡沫構造とその崩壊過程を解析

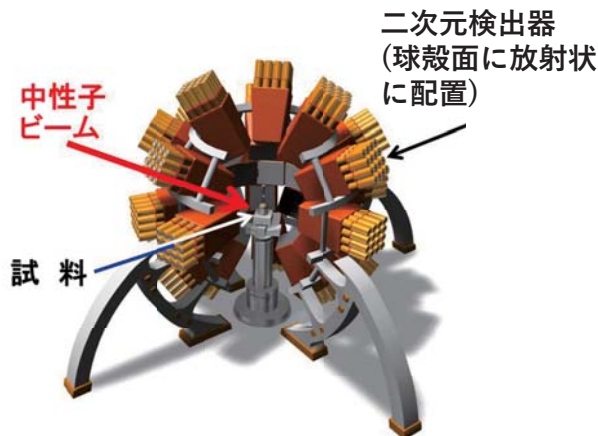
泡立ちが良くかつ泡切れが良い洗剤の実現に向けた新規界面活性剤の開発に貢献



茨城県生命物質構造解析装置 (iBIX)

タンパク質単結晶の構造解析に最適化させた世界最高性能の中性子回折装置

すべての生物にとって生きるためにとても大切な
はたらきをしているタンパク質の機能・発現や
化学反応に関与する水素や水分子を高い精度で
解析できる装置です。



装置の特徴

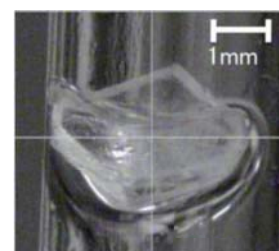
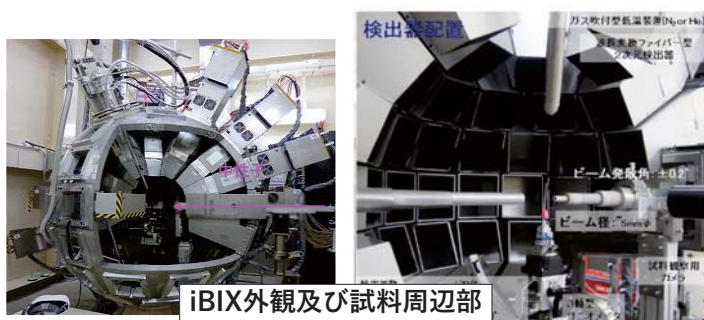
- 34台の高性能検出器によるタンパク質の世界最速での構造解析
- 大きな格子定数 (～190 Å) に対応
- 展伸試験中での測定 (高分子・繊維分子試料用)
- 低温 (100K) ～高温 (573K) の試料環境での測定
- 4 °Cでの恒温測定

実験対象例

- ・ タンパク質
- ・ 有機低分子
- ・ 合成高分子

主な利用分野

- 製薬
- バイオ化学
- 繊維
- 食品



キャピラリーに封入した
タンパク質単結晶

iBIXの研究成果事例

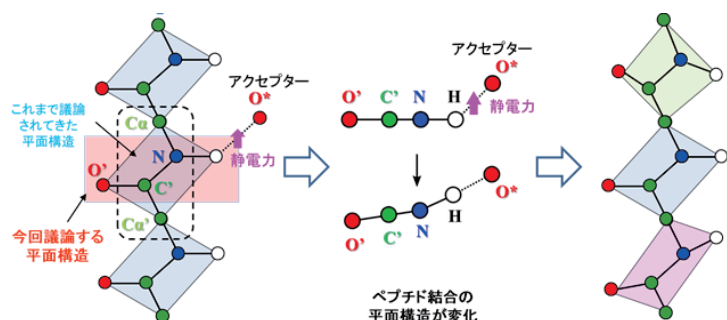
ペプチド結合構造に新規モデルを提唱

タンパク質内のペプチド結合の構造を精密に解明

(国研)量子科学技術
研究開発機構
玉田太郎 首席研究員

画一的なペプチド結合構造
(これまでの仮定)

多様なペプチド結合構造
(新たなモデル)



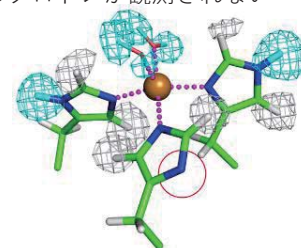
大型タンパク質の高分解能測定

銅アミン酸化酵素(分子量70,600)の中性子結晶構造解析に成功

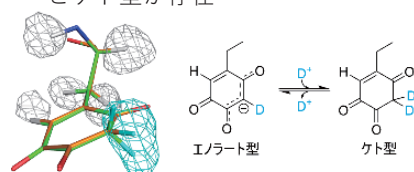
大阪大学
岡島俊英 准教授

水素イオンの位置を精密に決定することで、銅イオンに配位するヒスチジン残基や補酵素トパキノンの構造を観測

Cu²⁺に配位するヒスチジン残基のプロトンが観測されない



補酵素トパキノンはエノラート型とケト型が存在



大型タンパク質の詳細な立体構造決定により、薬剤反応機構の解明に貢献

高電位鉄イオウタンパク質(HiPIP)の全原子構造を高精度(1.2 Å分解能)で決定

ペプチド結合の構造に新たなモデルを提唱し、タンパク質の精密な立体構造の決定に寄与