

BL08（超高分解能粉末中性子回折装置）評価報告

粉末・単結晶回折分科会長	大山研司（東北大学）
粉末・単結晶回折分科会副会長	石垣 徹（茨城大学）
	相澤一也（JAEA）
	井手本 康（東京理科大学）
	大友季哉（高エネ機構）
	島川祐一（京都大学）
	友田 陽（茨城大学）

§ 1 はじめに

本分科会の目的は、超高分解能粉末回折装置BL08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。以下に各項目に対する分科会の判定を示したが、特に、世界最高分解能実現への道筋、ユーザーコミュニティとの意思疎通、Z-Codeの戦略について重点的に質疑を行った。

§ 2 装置の建設・維持および技術開発などに関する事項

震災はじめ幾多のトラブル、資金とマンパワー不足にも係らず、ほぼ当初の目標を達成していると認められる。装置建設当初からの提案グループの努力により世界的に見ても高いレベルの装置になっており、活発な一般共用が進められている。特に、データ解析ソフトウェアZ-Codeの開発が戦略的に進められており、利用者も順調に増えていることは高く評価できる。今後、Z-Codeが世界標準解析ソフトウェアになることを期待する。

§ 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）

中性子源セクションに協力し粉末装置グループがポイズンモデレータの設計から関与することで、裾のないシャープなピーク形状を持ち、かつ強度の大きいビームを得ており、海外装置に比べても優位に立っている。単結晶試料においては当初目標の世界最高分解能0.035%を達成できていると評価できる。粉末試料では背面バンクを積算した場合の分解能でまだ0.08～0.09%であるが、それでもすでにBL08でしか得られないデータが得られていると評価できる。今後、詳細計画書で提示された粉末での0.035%分解能を実現させるため、組織的に予算獲得の努力を続け、現在準備が進められている8mm検出器の早期の導入に期待したい。

§ 4 利用者支援に関する事項

限られたマンパワーでありながら、質の高いユーザー支援がおこなわれており、すでに多くの利用者が満足いくデータを得ていると評価できる。Z-Codeの公開や講習会開催など実験後のユーザー支援の努力も継続して、かつ組織的に行われている。建設と平行してのユーザー支援であることを考えれば、装置グループの努力は高く評価されるべきである。

しかしながら、今後のさらなる展開には、装置グループのマンパワー不足が懸念される。特に、これまで以上にBL08で画期的な成果を創出するためには、非パワーユーザーに対する支援の充実が求められる。ヒアリングの説明では新規ユーザーの参加が少ないように感じられることから、新規開拓に

も努力する必要があるが、当然マンパワーが必要となる。装置グループにできることとして自動化など負担軽減の努力がなされているのは評価できるが、今後トップサイエンスを進める装置の運営・支援を実施するため、施設としての対応を期待したい。

§ 5 得られた成果に関する事項

強相関電子系物質、マルチフェロイック物質、強誘電体、リチウムイオン導電体等に関して、当該装置の高分解能を活用した世界第1級のインパクトの高い成果が得られていると評価できる。マルチフェロイクス系での混晶系でのピーク分離や周期の長い螺旋構造の解明は、高分解能が新しいサイエンスを拓くことを示しており、社会に対しても理解されやすい成果が期待できる。今後も、超高分解能を必要とする研究にこだわり、これまで想定されていない先鋭的なサイエンスの開拓に期待する。

§ 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

提示された装置の高度化、学術研究テーマは、概ね妥当と考えられるが、やはり超高分解能粉末回折装置として、早急な高分解能検出器の整備を期待する。また、BL08の狙いが外場に対する微小な変化の発見であるので、試料周辺機器の整備は重要である。これまで低温に重点をおいて取り組み、十分な成果をあげていると評価できるので、今後の展開として14T級マグネット計画や、中高温アクセサリーの充実を狙う計画は適切と判断する。一方で、今後のサイエンスの展開へ適切に対応するため、将来的にどのような測定環境が必要なのか、粉末ユーザーコミュニティとの組織的な議論を継続していくことが必要だろう。MLFが施設として行っている試料環境整備の議論に加え、粉末ユーザーコミュニティと協力し、潜在的ユーザーを含めた広い範囲での構造物性研究者のニーズを議論する取り組みが必要となると考える。施設として行っている試料環境整備の議論に加え、粉研究テーマの選択について、ヒアリングでは、性能が順調に向上しており装置グループが当初狙っていたサイエンスは実現しつつある、という説明があった。そこで、分解能0.035%を用いた次の戦略的テーマを探す努力を始めてほしい。BL08は基本的には汎用装置ではなく特色の際立った装置なので、超高分解能でしか見えてこない先鋭的なサイエンスを目指し、装置グループのプレゼンスをもっと示してほしい。BL08グループがイニシアチブをとったユーザーとの共同研究を展開するというのも一つの方向性ではないか。

Z-Code は戦略的に開発が進められており、同時に普及への努力が組織的になされ、利用者が着実な広がりを見せていることは高く評価できる。Z-Code の弱点のひとつは磁気構造解析であったが、磁気構造解析ツールの導入計画が着実に進められているのはたいへん喜ばしい。また、未知構造解析、MEM などへの対応も取り組んでおり、さらに拡大が期待できると評価できる。現在は Fullprof と GSAS の世界シェアが大きいですが、いずれ Z-Code を世界標準にしたいという高い志がヒアリングで示された。これに敬意を表したい。一方で、今後の継続的な開発と展開には、施設とユーザーコミュニティの支援に基づく組織的な取り組みが必須なので、その枠組み構築が必要であろう。

§ 7 総評

BL08 は、震災によるガイド管破損はじめ多くの困難に直面したが、資金不足・マンパワー不足にも係らず、すでにほぼ当初計画の目標を達成していると高く評価できる。粉末回折としては目標の 0.035%を実現できていないものの、すでに新しい現象の観測に成功しており、BL08 以前には得られなかった十分な成果があがっている。当然ながらより超高分解能を実現し新しいサイエンスの展開が期待されるが、8mm 検出器導入など適切な計画が進められており、高度化計画も妥当と評価できる。また、Z-Code の開発と高度化が戦略的かつ順調に進められており、J-PARC 発信の世界標準ソフトになることが期待できる。従って、本分科会は、本装置計画を継続すべき優れたものと判定する。

一方で、装置の高度化と Z-Code の高度化、測定環境の充実、ユーザー拡大には、予算と人的補償の両面で組織的取り組みの継続が必須である。施設と協力して予算獲得とマンパワー獲得への努力を継続し、計画を

進めてほしい。特に Z-Code のさらなる展開には、施設とコミュニティから組織的な支援を確保することが重要であろう。

以上