

# 平成25年度 新学術領域研究（研究領域提案型） 事後評価結果（所見）

## 研究領域名

高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学

## 研究期間

平成20年度～平成24年度

## 領域代表者

八木 健彦（愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・特命教授）

## 研究領域の概要

本領域は、水を含む地球深部物質の高温高压下の研究を、中性子を使って飛躍的に発展させることを目指す。そのためにまず、東海村のJ-PARCに完成する新しい高強度パルス中性子施設に、世界に類を見ない上部マントル条件下での実験が可能な高温高压中性子散乱ビームラインを設計・建設する。それをを用いて含水鉱物やマグマなど、水を含んだ地球深部物質の高温高压下の実験を推進する。さらに、計算科学による量子シミュレーションとも協同して、地球内部の諸現象において大きな役割を果たす水が、どのようにして地球深部にもたらされ、そこで何が起きるか、原子レベルで理解していく。本領域で計画中の実験装置と技術は今後、広範な物質科学の発展にも大きく寄与すると期待される。

## 領域代表者からの報告

### 1. 研究領域の目的及び意義

本研究領域は、地球内部の諸現象において大きな役割を果たすにも関わらずまだその物質科学的実態がほとんど解明されていない、水を含む地球深部物質の高温高压下の研究を、中性子を使って飛躍的に発展させるために計画された。そのためにまず、東海村J-PARCに建設された世界最強レベルのパルス中性子実験施設MLFに、高温高压下での中性子散乱実験に最適化した、微小試料に集光できるなどの特性を持つビームラインと、上部マントルの圧力温度領域をカバーする大型高温高压実験装置を開発・建設する。それらを用いて含水鉱物やマグマなど水を含んだ地球深部物質の物質科学的な研究を新たに展開し、地球深部の水に関連する理解を飛躍的に進展させるとともに、将来的に物質科学の広範な分野の発展にも貢献することを目的とする。

中性子を用いた回折や透視実験は、X線を用いた実験とさまざまな点で類似性を持つが、X線ではほとんど見えない水素や水などの軽元素を明瞭に観察できるという特徴があるため、今までも物理学や化学、工学などさまざまな分野で広く活用されてきた。しかし近年、多くの研究分野で重要な役割を演ずるようになってきた高压下の実験では、技術的な困難のため中性子の利用はきわめて限られてきた。ヨーロッパや米国では新しい強力な中性子源と組み合わせた高压下での中性子実験が始められてきたが、我が国の研究者は今までもっぱら、それら外国の施設に行き行って研究を行っている状況であった。本研究領域は国内のJ-PARCに近年建設された強力パルス中性子源をうまく利用することにより、諸外国の施設でもまだほとんど行われていない高温高压下における中性子実験を行える装置・体制を確立することにより、我が国の学術水準の向上・強化につなげようとするものである。

### 2. 研究の進展状況及び成果の概要

本領域研究で最低限の目標としたものは、各研究班の研究基盤となりさらに今後の高压中性子科学分野の発展に必要な、高压研究に最適化した新しいビームラインの建設であった。これに関しては、2011年3月に発生した未曾有の大地震とそれによりもたらされた社会的混乱によって、J-PARCそのものがほぼ丸1年間停止したほか、新しい装置・施設の建設も困難になるなど、計画全体として見てもほぼ1年の停滞を余儀なくされた。しかしメンバー一同の必死の努力が稔り、2012年9月には新しいビームライン「PLANET」の建

設が一応終了し、完成式典を開くことができ、引き続き各班による高圧中性子実験が行われた。

一方 PLANET の建設と並行して行われた各実験班による、高圧下からの回収実験やシンクロトン放射光を用いた実験、および計算班によるシミュレーションでは、予期した以上の成果を挙げることができた。含水鉱物班では、予備的実験で早くもいくつかの含水鉱物の層間が負の熱膨張を示すという興味深い現象を明らかにしたり、重水素化した各種含水鉱物の合成や構造解析を行うことに成功した。マグマ班では、開発を進めていた新しい中性子カメラを用いて、含水鉱物の中性子によるイメージングが可能であることを実証することができた。液体班では、水の高圧高温下における精密な X 線回折実験により、4GPa までの間に水分子の配位数が急増し、それ以降では分子間距離の減少により密度が増加していくという新しい知見を得ることができ、理論班との共同研究によりその圧力と温度による効果を分離することにも成功した。また各種化合物の液体や SiO<sub>2</sub> ガラスに対する実験も行われ、新しい知見を得ることができた。一方理論班では高圧下における含水鉱物、マグマ、及び水に関する量子シミュレーションが行われ、数多くの成果を挙げることができた。これらの研究は今後の中性子実験に対する強力な指針となっている。

## 審査部会における所見

A- (研究領域の設定目的に照らして、概ね期待どおりの成果があったが、一部に遅れが認められた)

### 1. 総合所見

本研究領域は、高温・高圧下での中性子回折実験を行う新技術の確立とその活用を軸に、種々の実験的研究や第一原理動力学計算などの多様な手法を組み合わせ、地球内部のケイ酸塩鉱物やマグマ中の水の物理化学的挙動や、その地球の諸現象に対する役割について解明する計画であった。しかしながら、東日本大震災の影響で1年間の停滞を強いられ、さらに J-PARC 施設の事故も相まって、ビームラインは完成したもの、それを用いた初期実験を行った段階で研究期間が終了することとなった。そのため、領域の設定目的に照らし、一部に遅れがあったと言わざるを得ないが、予備実験において期待以上の良質なデータが得られ、また動力学計算等による物性予測にも著しい進展が見られるなど、全体としては概ね期待どおりの成果があったと判断する。

### 2. 評価に当たっての着目点ごとの所見

#### (a) 研究領域の設定目的の達成度

不可抗力による大幅な遅延により、データを連続的に産出するには至らなかったものの、中性子回折を用いた高圧高温実験の新技術の確立に成功している。また、これと相補的な形で第一原理計算を用いた物性予測研究が進展するなど、地球内部における水の役割の解明を飛躍的に前進させるための研究基盤が形成されたことは評価できる。

#### (b) 研究成果

ビームライン建設にいたる予備実験で様々な研究実績をあげている。特に、完成した装置を用いた実験により、極めて良質な中性子回折データを取得したことは当該分野のみならず、周辺分野にも波及する研究基盤が構築できたことを示すもので、高く評価できる。また、動力学計算からも高圧下での水素結合の振舞いなどについて、興味深い予測データが得られている。

#### (c) 研究組織

外的要因によるトラブルにも関わらず、しっかりとした運営がなされ、また本領域研究を通じて若手研究者が着実に育成されるなど、総括班が適切に機能したと思われる。

#### (d) 研究費の使用

特に問題点はなかった。

#### (e) 当該学問分野、関連学問分野への貢献度

本研究領域により構築した高性能のビームラインは、当該学問分野の今後の研究にとって重要なツールとなることが期待される。また本領域の推進により、若手研究者を中心に多様な手法を持つ地球内部物性研究者のネットワークが形成されたことも高く評価できる。今後、材料物理学など周辺分野への活用の広がりも期待できる。

**(f) 若手研究者育成への貢献度**

世界をリードしてきた我が国の高温高压実験分野において、中性子技術を用いる共同研究は今回が実質的に初めての試みであり、放射線技術を持つ新たな人材が流入した。さらに多くの若手研究者が参画して分野開拓を進めたことは、研究の裾野を広げるとともに、若手人材の育成という点で効果的であったと考えられる。本研究領域に参画した若手研究者の数名が、すでに大学等で研究者としてのポストを得ており、今後の活躍が期待される。