

領域略称名：中性子地球科学
領域番号：2002

平成25年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」

(領域設定期間)

平成20年度～平成24年度

平成25年 6月

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

目 次

1. 研究領域の目的及び概要	3-4 頁
2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	5-6 頁
3. 研究領域の設定目的の達成度	7-9 頁
4. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	10 頁
5. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	11 頁
6. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	12 頁
7. 総括班評価者による評価	13-14 頁
8. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	15-18 頁
9. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	19-23 頁
10. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	24 頁

1. 研究領域の目的及び概要（2ページ程度）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、これまでの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

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。

研究の学術的背景

近年、様々な実験技術や観測技術の進歩により、地球や惑星内部に関する我々の理解と知識は飛躍的に増進した。これらの研究で大きな役割を果たしてきたのが、フォトンファクトリーや SPring-8 の大型放射光実験施設に建設された超高压高温下の X線回折装置である。これらの装置は地球の中心部に達する極限条件下での精密な実験を可能にし、地球深部物質に関する多様な性質を解明してきた。しかしながら、これらの装置をもってしても、X線と軽元素の相互作用が小さいために、地球深部物質中に含まれる水や水素を直接観測をすることはほとんど不可能であった。

水素は太陽系で最大の存在量を持つ元素であり、地球表層においては水という形で存在する。地球内部にも鉱物中の水酸基や格子欠陥中の水素という形で大量に取り込まれていると考えられている。水はケイ酸塩鉱物や鉄に数%入るだけで、融点を数百°Cも低下させたり、粘性を数桁も減少させたりするなど、地球深部を構成する物質の性質を大きく変化させることが知られているが、その原因に関して物質科学的な理解はほとんどなされていない。したがって地球内部の理解を進めるには、これら水の実態を原子レベルで正確に把握することが必要である。しかし水素は最も電子数の少ない元素ゆえに X線ではほとんど観測できず、含水系の高压下の研究はまだ未発達段階である。一方中性子線は、X線と同様に物質に当たって回折、散乱を起こすが、原子核によって散乱されるために電子数の少ない水素の観測が可能である。さらに、中性子線は等電子イオンの識別や、ランダム系、磁性などの研究にも強力な研究手段となるなど独自の利点があるため、物性科学や材料科学の分野では広く使われている重要なプローブである。しかしながら今までは国内で得られる中性子線源の強度が弱かったために、小さい試料を使用せざるを得ない高压下の実験は汎用的には行われてこなかった。

研究の着想から新学術領域研究開始に至る経緯

前節で述べたような背景をもとに、従来の 100 倍以上のピーク強度を持つ世界最強レベルの J-PARC のパルス中性子源と高圧装置を組み合わせれば、中性子をプローブとする高圧物質科学を飛躍的に発展させることができ、地球・惑星科学のみならず、物質科学や材料科学の広い分野においても、革新的な情報と新しい展開をもたらすことが期待できるという着想に至った。そこで高圧地球惑星科学の若手研究者が中心となり、高圧物性物理、中性子科学、計算物理、液体物理など多分野の研究者の参加と協力を得て、2002 年頃から高圧中性子ビームラインを建設する準備を進めてきた。2003 年 5 月には東大の鍵裕之氏を代表者として「超高压高温物質科学ステーション」装置建設の提案書を J-PARC に提出し、2005 年 6 月に 2 次審査までパスして、ビームラインの建設が認められた。しかし建設に要する費用は自分たちで調達することが要請されており、その実現のためにさまざまな努力がなされた。その一環として 2007 年 4 月には鍵裕之氏が代表者となった学術創成研究が採択され、微小試料に集光する中性子光学系の開発研究等がスタートした。続いて 2008 年 11 月には本学術領域研究が採択され、高圧実験に特化した新しいビームライン「PLANET」の建設が開始された。

全体構想

上記のような経緯から、本学術領域研究ではまず J-PARC 内のパルス中性子実験施設 MLF に、高圧実験に特化したビームラインの建設を計画した。その具体的な方策として、実験に適した極微小ビームの集光ミラーによる生成、および 90° 方向に配置した高感度・低バックグラウンドの特性を持つ ^3He 検出器による高温高圧装置中の微小試料からの散乱信号の取得、を Time of Flight 法を用いて高効率で行う方法を採用した。そのために新たな光学系の開発や、放射線安全を確保するためのビームライン遮蔽体の設計、中性子実験に適した大容積の試料室を持つ大型高温高圧発生装置の設計と建造、それらの装置を組み合わせることで試料の回折中性子線だけが検出できるようにする最適化されたラジアルコリメーターの開発、等々の高圧中性子実験に不可欠な新たな要素もたくさん含まれていた。

一方これらの装置開発・建設と並行して、各研究班では含水鉱物や含水マグマ、水などを対象として、高圧からの回収実験や放射光その場観察を用いた予備的な実験などにより研究が推進された。また理論計算に基づくさまざまなシミュレーションも行われ、実際に中性子回折実験が可能になった暁にはいろいろな物質に関してどのような結果が期待されるか、といった研究も推進された。

また本研究領域の主な研究対象は地球深部物質であるが、高圧中性子実験そのものは広く物理学、化学、工学の諸分野での活用が期待されることから、ビームラインの設計にあたっては当初から高温高圧実験だけでなく、低温高圧実験や、光学測定と中性子回折の同時測定実験などが可能なように配慮され、それぞれの実験に適した新たな高圧装置の開発も行われた。

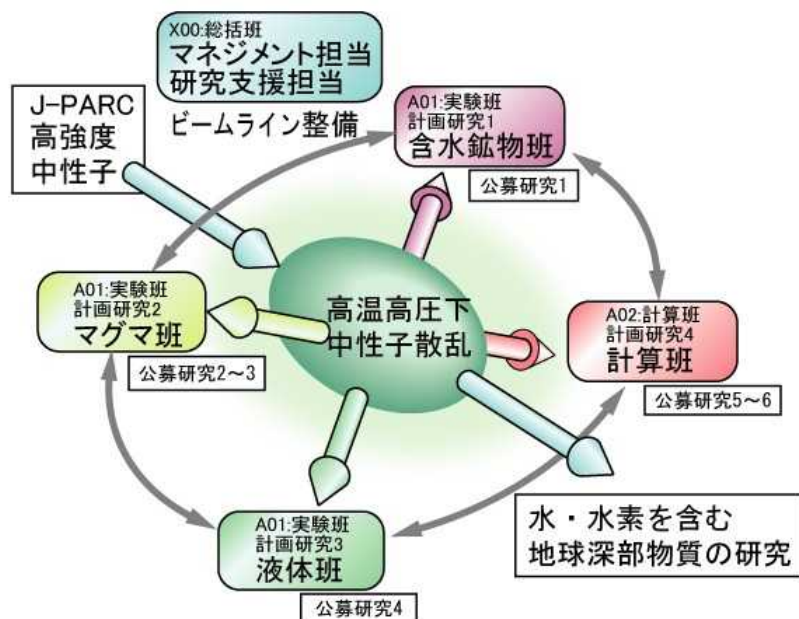
このようにして、今まで比較的低い圧力領域に限られ、得られるデータの質も低かった高圧下の中性子回折実験が、広い圧力温度領域で精密な実験が可能になる装置を建設することで、地球科学だけでなく惑星科学、材料科学、物性物理学、化学など広い分野に大きな発展を促すものになるとの全体構想の下、本研究領域の研究を推進してきた。

2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ程度）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

< 研究戦略 >

本研究領域は、地球深部物質中に固定された水、マグマに含まれる水の正体に、世界的にも先駆的かつ挑戦的な実験となる高温高压下の中性子回折実験を通じて物質構造科学的に迫ろうとするものである。その目的の達成に、世界に類のない超高压高温物質科学中性子ビームラインの建設、そのビームラインでの実験の手法を共通的な基盤とする含水地球深部物質の高温高压下の実験的研究、近年進展が目覚ましい量子シミュレーションによる水・マグマ・含水鉱物についての構造・動的性質・反応性の研究という3本の柱を立て挑んだものである。この3本の柱の連携には緊密な情報交換と研究方針・スケジュール調整が必要で、高度に機能化された風通しの良い組織体制が必須条件である。そこで本研究領域ではそれぞれの柱に対応した総括班 X00、研究項目 A01（実験班：3つの計画研究からなる）、研究項目 A02（計算班）を設定した。下に示したのはそれら各班の相互の関係を視覚化したものであり、中心に書かれた「高温高压下中性子散乱」の装置を建設することにより、高強度中性子ビームを利用して、上記3つの実験班および計算班へのさまざまな新しい実験情報が与えられ、水・水素を含む地球深部物質の研究を行った。それぞれの研究班は各分野の公募研究者とも協力しながら相互に協力を進め、全体構想を推進した。総括班は、その中心となる高温高压ビームラインの整備を研究支援担当が中心になって行い、計画全体の推進をマネジメント担当が行った。



< 研究内容、研究項目間・計画研究間の関係 >

総括班 X00 は、領域全体の研究方針の策定や企画調整の役割と、本領域研究で中心的な役割を果たす高温高压中性子実験装置の建設の役割を担った。しかし両者を一つの組織で運営することは必ずしも効率が良くない。そこで両者の役割分担を明確にするために、領域代表者の下、領域全体の研究戦略の構築、研究項目間のスケジュール調整や情報交換のサポート、および広報活動や研究集会の企画・実行などを行うマネジメント担

当と、超高压高温ビームラインの設計・開発・建設・運営を担当する研究支援担当の二つにメンバーを分け、それぞれの任務に専従する体制をとった。前者は各計画研究の研究代表者（班長）からなり、後者は各実験班の計画研究が必要とする装置スペックを理解し、それらを反映した装置の建設ができるよう、実際にビームラインを建設する東海村を勤務地とするメンバーを中心に構成した。これらの体制のもと、年3回程度の総括班会議と各計画研究の進捗状況報告会を開催した。さらに情報交換の有効な手段であるホームページの整備、ニュースレターの発行を行い、メンバー全員が常に最新の情報を共有できるようにした。

研究項目 A01（実験班）は、主に本研究領域で建設する超高压高温ビームラインを共通基盤とした実験的手法で研究を推進した。本研究領域が目指す地球内部の物質科学的理解の鍵は、鉱物中への水の固定機構とその動的な挙動、および含水マグマの構造と物性の理解である。そこで、計画研究として前者をターゲットとする含水鉱物班、後者をターゲットとするマグマ班を構成した。一方、マグマ班のターゲットであるマグマ（溶融岩石）は、液体ではあるもののその構造はきわめて複雑で、一足とびにその解明を行うことは、きわめて難しい。そこで組成として比較的簡単な液体を対象とし、その高温高压下での構造と物性の解明、及び液体物質の構造解析手法の確立を目的とした液体班を構成し、マグマ班と密接に協力しながら研究を推進した。

研究項目 A02（計算班）は、近年進展が著しい最先端の量子シミュレーションを用いて、水・マグマ・含水鉱物について広い温度・圧力範囲にわたる構造、動的性質、反応性などの基礎物性を予測した。さらに、研究項目 A01（実験班）と密接に情報交換を行い、実験で着目すべき系や温度・圧力条件などの提案や中性子実験データから得られた含水鉱物・マグマの構造や動的性質の物理的解釈に関する研究を推進した。

各研究班は、計画研究のメンバーとなった研究者を中心にそれぞれの研究を推進したが、それだけではカバーできない新たな着想に基づく研究や、高压中性子実験に強い興味を持つ地球科学分野以外の研究者を取り込むために、公募領域も設定した。ただ公募研究に関しては、高压中性子実験が長時間の露光時間を必要とし、班員に対しても十分なビームタイム確保できない可能性が高いと考えられたため、その数をかなり限定することにした。

3. 研究領域の設定目的の達成度（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記載してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目毎の状況も記述してください。

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圧中性子科学分野の発展に必要となる、高圧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る事態になった。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た。

同年11月からのビームタイムは各実験班に配分され、それぞれのグループが予定していた研究の最初の実験を行った。それらの結果は、各メンバーが長年抱いてきた期待に充分答えるものであり、高温高圧下でも高いS/N比をもった高分解能の見事なパターンが短時間で得られ、これからの研究の急速な進展を期待させるものであった。また公募研究の研究者にもそれぞれ、短いながらも何らかの実験体験を持ってもらうべくこれらの予備実験に参加してもらい、一部については公募研究者の試料に関しても実験を行った。これらの予備実験を通して、高温高圧中性子実験装置そのものだけでなく、各研究グループにおける個々の実験技術上の問題点なども明らかにされ、それらに対する対策なども行われ、より完成度の高いシステムに仕上がった。

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、項目8と9にまとめたように、予期した以上の成果を挙げる事ができた。含水鉱物班では、予備的実験で早くも $Mg(OD)_2$ や $Ca(OD)_2$ など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その詳しい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と共に、高圧実験での利用をより効果的に行う研究が進行した。液体班では、水の高温高圧下における精密な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た。さらに、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成功し、今後の中性子実験で着目すべき温度圧力領域が明らかにされた。またV族およびIV-VI族化合物の液体や SiO_2 ガラスに対する実験も種々行われ、それぞ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事ができた。これらの研究は理論研究として独立した論文にまとめられたが、それぞれの物質について、各々の実験を進めている実験班と情報交換や議論を行い、今後の中性子実験に対する強力な指針となっている。

本領域研究はもともと2013年3月までに設定されており、当初東北大震災の影響による PLANET 建設の遅れを考慮して1年間延長することも検討したが、中心課題であった新しいビームラインの建設は期待以上のできで無事完了したこと、後に述べる建設したビームラインの供用ビームライン化、今後の多方面における発展の可能性など種々の情勢を勘案した結果、予定通りの期間で一旦終了し、総括の会を2013年3月に東海村で開催した。

ここまでの経緯を分かり易いように年代順にまとめ一覧にしたのが次の表である。

研究経緯年表

(新学術領域研究「高圧中性子地球科学」発足までの経緯)

2002年11月 愛媛県松山市で、高圧討論会参加中の有志メンバーにより J-PARC 高圧研究専用ビームライ

ンの実現に向けた方策を議論。

- 2003年09月 日本高圧力学会に「高圧力実験技術と中性子科学」研究・作業グループが発足（第2期を含めて、2009年8月まで2期活動）。
- 2003年10月 J-PARCに「超高压高温物質科学ステーション」装置提案書（代表：鍵裕之）提出。
- 2004年04月 KEK-KENSの中性子粉末回折装置 Siriusに KEK-PFの高圧プレス MAX80の金型を持ち込み、高圧中性子実験の模擬テストを行う。
- 2004年08月 装置提案が J-PARC 中性子実験装置 1次審査合格。
- 2004年10月 J-PARCに「超高压高温物質科学ステーション」詳細提案書提出。
- 2005年06月 装置提案が J-PARC 中性子実験装置 2次審査合格。
- 2006年04月 基盤研究C（企画調査）「パルス中性子線源を用いた高圧下中性子回折実験と鉱物科学の新展開」（代表：鍵裕之）が採択される。
- 2007年04月 学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高压物質科学の開拓」（代表：鍵裕之）が採択される。

このあと翌年の新学術領域研究の採択を受けて、両グループが密接な連携の元に高圧中性子ビームラインの建設を進める。

（新学術領域研究「高圧中性子地球科学」発足以降）

- 2008年11月 新学術領域研究「高温高圧中性子で拓く地球の物質科学」（領域代表：八木健彦）が採択される。ビームライン建設のための予算を確保し、装置の本格的なデザイン検討を開始。
- 2008年11月 英国・ラザフォードアップルトン研究所のパルス中性子施設 ISISの高圧ビームライン Pearlに視察に行く（内海、服部、有馬）。
- 2008年12月 東海村 J-PARC で、新学術領域研究「高圧中性子地球科学」のキックオフミーティングが開かれる。
- 2009年01月 J-PARC 装置委員会にて、「超高压高温物質科学ステーション」の BL11 への建設が承認される。
- 2009年04月 ビームライン建設の測量が始まる。
- 2009年05月 ビームラインの愛称が「PLANET」(high Pressure Leading Apparatus for NEuTron diffraction)に、また、そこに設置する高圧プレスは「圧姫」に決定する。
- 2009年07月 水戸において PLANET の設計に対して諸外国の経験者を呼んで意見を聞く国際アドバイザー一会議を開催。
- 2009年07月 ピット埋設などが行われ、いよいよ PLANET の建設に着工。
- 2009年09月 生体遮蔽部埋め込み機器据え付け完了。
- 2010年02月 愛媛大 GRC で新学術の全体会議が開かれ、高圧プレスとして従来型の DIA 機の代わりに6軸型プレスの案が検討され始める。
- 2010年02月 岡山大地球研(三朝)に6軸プレスの状況を視察に行く。
- 2010年03月 ビームライン全体をカバーする中性子遮蔽体が完成。
- 2010年03月 世界的な品薄で価格が高騰し必要数購入できるかどうか心配された ^3He 位置敏感検出器が何とか無事納入される。
- 2010年04月 種々の検討を経て、高温高圧発生装置として総出力 3000 トン(500 トン x 6)の6軸型プレスを採用することに決定。新居浜の住友テクノフォートが製作を担当。
- 2010年04月 プレスと組み合わせる検出器カバーの設計開始。
- 2010年05月 ドイツ・バイロイト大で稼働中の6軸プレスの視察に行く(八木、服部、丹下)。実際に動か

してみて問題点等を把握し、設計に反映。

- 2010年05月 米国・SNSの高圧ビームライン SNAPでの実験と視察に行く(鍵、永井、服部、小松、佐野)。
- 2010年06月 遮蔽体の素材に問題が生じ、一旦全部解体、撤去。数ヶ月後に再組み立て。
- 2010年08月 中性子ビームチョッパーのインストールが完了。
- 2010年09月 中性子を実験ハッチ内まで導くスーパーガイドミラーの設置が完了。
- 2011年02月 実験準備や各種装置の操作・解析などを行う2階建てのキャビンがビームライン後方に完成。
- 2011年02月 新居浜で製作中の6軸プレス本体が完成し検収が行われる。ただし油圧ユニットは次年度製作予定で、まだ本来の稼働状態ではない。
- 2011年3月08日 BL11の施設検査が完了し、待ちに待ったfirst beamを実験用ハッチに受け入れ、1枚だけテストパターンを取得。
- 2011年3月11日 公式のfirst beam受入日で、全国から集まった関係者がビームラインに集まりビーム受け入れを待っていた時に、東日本大地震が発生。幸い人的被害はなかったものの、関係者一同真っ暗な避難所で一夜を過ごし、翌日何とかそれぞれの町に帰る。
このあと2012年1月30日の復旧までJ-PARCのビームは完全に停止。
- 2011年03月 生産、物流なども含め日本中が大混乱になり、建設作業は一旦中止。PLANETも被害の検査や復旧に追われる日々が続く。
- 2011年08月 復旧作業中ワイヤーに関する事故が起き、工事が一旦停止。
- 2011年09月 PLANETにおけるデータ処理や解析についての検討会を開催する。
- 2011年11月 ラジアルコリメータ完成。
- 2011年12月 検出器架台設置完了。
- 2011年12月 中性子カメラ(東芝製)が完成。
- 2011年12月 6軸プレスの油圧系が完成し、新居浜で試運転開始。
- 2012年01月30日 地震後初めて中性子ビームを受け入れる。
- 2012年02月29日 完成した6軸プレス「圧姫」が東海村に輸送され、PLANETハッチ内に無事設置完了。
- 2012年04月 高圧中性子実験に必要な装置がほぼ揃って、コミッショニング開始。
- 2012年07月 原研メンバー(服部・佐野)を中心として、3ヶ月を越す期間さまざまな各種試運転やテストを行った結果、ほぼ設計通り、きわめて高品質の中性子回折パターンがとれることが確認され、ユーザー実験の準備が整う。
- 2012年09月27日 超高圧中性子回折装置完成記念式典を開催。
- 2012年11月23日 プロジェクトメンバーによるユーザー実験が開始される。
- 2013年3月 プロジェクト総括の会議が東海村で開催される。

以上のように、申請時には全く予期しなかった障害が生じたため、新しく建設した高圧中性子実験装置を用いての実験は現段階ではコミッショニング関係の予備実験に限られている。しかし中心となる装置そのものは立派に完成し、またコミッショニング等の予備実験によって、期待されたとおり今までにない高品質の高圧中性子回折実験が行えることが明らかになっており、本格的な研究成果が得られるのはまさにこれからである。さらに、並行して進めてきた高圧からの回収実験やシンクロトン放射光を使った実験では、すでに多くの新しい成果を得ることができた。

またすでに本研究領域の班員以外で、物性科学、材料科学をやっている研究者が我々と協力して行った予備実験でも大変面白い実験結果を得ており、今後PLANETは高圧地球科学以外の分野でもさまざまな新しい成果を生み出していくものと確信している。

4. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1ページ程度）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

新しいビームラインの建設を始めて間もなく、世界的なヘリウム供給の逼迫によりヘリウム価格が高騰した。我々の装置は中性子を検出するために数百本の³He位置敏感型検出器を搭載することが決定しており、価格上昇によって必要な数の検出器を購入できなくなる事態が心配されたが、建設担当メンバーの高い情報収集能力と機敏な判断によって新規購入ルートを開拓し、何とか必要数を確保することができた。

さらに、中性子実験用大型高圧発生装置の設計段階において、当初予定していたシンクロトロン放射光実験施設 SPring-8 に設置された SPEED-1500 型装置のような金型を使った従来型の高圧発生装置では、中性子データ測定に十分な開口角がとれず、根本的な設計の変更が必要になった。さまざまな検討と議論、情報収集の結果、各アンビルを直接油圧ラムで加圧することにより開口角が大きく取れる6軸型高圧発生装置の採用が新たな候補として挙げられた。類似の装置を持っている国内とドイツの研究機関にメンバーを派遣してさらなる検討を進め、最終的にはその新しい6軸型高圧発生装置を採用することになった。その結果最終的には当初の予想を上回る高性能な装置を完成させることができた。

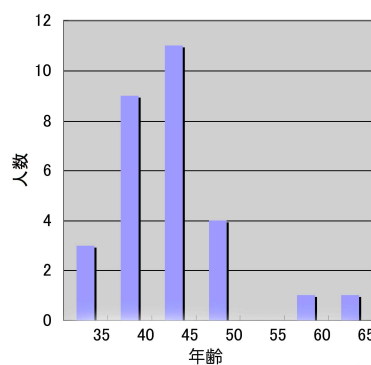
またその後、前節にも詳しく書いたように、全く予期しなかった東日本大震災に遭遇して J-PARC でのほとんどの活動が丸一年ほどストップし、計画の大幅な遅れを余儀なくされた。大型高圧発生装置の製作やビームライン建設も長期間の中断を余儀なくされたため、各年度内の予算執行も困難になった。予算の繰り越しが何とか認められたために、建設そのものは最終的に予定通りのレベルまで行うことができ、期待した以上の高性能な装置を完成させることができた。このようにビームライン建設においては、途中幾多も頭を抱え込むような困難に遭遇したが、班員一同のスムーズな情報交換や協力のおかげで、それらの問題を解決することができた。これも本研究領域で、情報共有をスムーズに行える体制を確立していたことと、班員相互が同じ目標に向かって総力を結集したことによると思われる。

総括班の研究支援担当が担ったビームライン建設以外の部分においては特段の問題は生ぜず、ホームページの開設や更新、ニュースレターの発行、研究集会の開催などが順調に行われ、従って組織変更も必要とされなかった。各研究班の実験班においては、それぞれのグループが目的とする実験に関して、予定された研究や予備実験が順調に行われ、予期された通り、あるいはそれ以上の進展を見せた。また計算班はすでに数多くの先駆的な成果を挙げ、その成果が高圧中性子実験で確認されることを待っている状態である。

5. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1ページ程度）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者の研究終了後の動向等を記述してください。

本領域研究は当初、全く新しい研究領域ということもあって下図に示すようにその構成メンバーの中心が30代後半から40代前半ときわめて若く、若手研究者育成というより、若手の協力により新分野を開拓するという面も強かった。まだ定職を持たない若い研究者が多かったために、その後所属が変更になったメンバーも少なくないが、幸いこのような研究の重要性が世間にも認知され、J-PARCでも新しい人員を確保する必要性が生じたため、ポストクや大学院生からJ-PARCのある原研やCROSSに就職した若手研究者なども複数ある。



また中性子科学分野そのものが従来線源が原子炉しか無くかなり特殊なものだったため、人材がきわめて限られており、人事交流などの面で問題になることもあったが、本研究領域の立ち上げによって中性子分野に大量の「新人」が加わり、この分野の活性化という面でも貢献していると思われる。

6. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ程度）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

本学術領域研究では、経費の大きな部分が J-PARC の新しいビームライン「PLANET」の建設に充てられた。前述したように建設経費の中でも大きな部分を占める ^3He 検出器の購入や震災による計画の停滞によってさまざまな問題が生じたが、結果的にはほぼ予定通りの用途で有効に利用することができ、大変立派な高圧実験に特化したビームラインが完成した。

このようなビームラインは、建設だけでなくその後の運用や維持管理にも多額の費用が必要とされるので、本学術領域研究終了後にそれらの費用をどうやって捻出するかが課題であった。種々議論の末、「共用ビームライン」に移行するのが良いだろうということになり、その審査を無事通って J-PARC の共用ビームラインとして認定された。そのため、2013 年度からは本研究領域の班員だけでなく、国内はもとより国際的にも良い研究アイデアを出してプロポーザルさえ認められれば、誰でも利用可能な施設に生まれ変わった。このビームライン建設に多大な労力と時間をつぎ込んできた我々新学術領域研究のメンバーとしては、ただでさえ厳しいビームタイムの確保がさらに難しくなることから多少複雑な思いも無いではないが、大局的に見れば今後本新学術領域研究で創成した「高圧中性子科学」の研究が大きく発展する良い体制が確立できたと思っている。

7. 総括班評価者による評価（2 ページ程度）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

新学術領域研究「高温高圧中性子実験で拓く地球の物質科学」に対する評価

日本学術会議特任連携会員

Carnegie Institution of Washington, Geophysical Laboratory

山中高光

高圧中性子科学を推進する実験用装置として新学術領域研究、学術創成研究両グループによって J-PARC の BL-11 に高温高圧中性子散乱ビームラインが計画されて、PLANET（Pressure Leading Apparatus for Neutron Diffraction）の設計・建設が完成し実験が開始されました。ビームラインスタッフ並びに大学、多くの研究所の高圧科学に興味のある地球科学研究者達の努力によって、昨年9月23日に開所式が開催された事は喜ばしい事と思います。現在までに既に成果が色々な学会で報告がなされてきています。

中性子回折実験と X 線回折実験は、得られる情報は相補的な関係にあります。過去20年以上の間に高エネルギー研究所の放射光実験施設や SPring-8 の放射光の、共鳴、吸収、散乱、回折現象を利用した高圧 X 線回折実験が精力的になされてきました。一方、中性子回折実験は高エネルギー研究所に KENS に於いて time of flight (TOF) 実験でなされていましたが、フラックスが小さく、高圧発生装置を加味した極端条件下での実験は、国際的に十分な競争力がありませんでした。

含水鉱物はマントルや地殻構成物質に非常に多く、それらの研究は枚挙にいとまがありません。しかし X 線回折実験では X 線の散乱能（原子散乱因子）の関係から軽元素、特に含水物質の正確な構造研究は困難でしたので、PLANET の開設は高圧地球科学者にとって非常に意義深い事です。

アメリカの Department of Energy (DOE) によって、Argonne, Brookhaven, Lawrence Berkeley, Los Alamos, Oak Ridge, and Jefferson 研究所の共同企画として2006年に、Oak Ridge の Spallation Neutron Source (SNS) に Spallation Neutron and Pressure (SNAP) diffractometer が計画され、2011年7月に完成し実験が開始されました。SNS に於いては高圧中性子粉末回折装置がニューヨーク州立大学と Carnegie Institution が中心になって建設されました。Paris-Edinburgh Design, Panoramic Design, Beijing-Washington Design の高圧発生装置を用いた中性子回折実験の研究は機関誌に論文発表もなされています。J-PARC は東北地方太平洋沖地震による被害など、いくつかのトラブルがあり、SNS より2年近く完成が遅れました。しかし日本の独自開発した技術を網羅した大容量高圧発生装置やミラーシステムにより、SNS の実験と比較して、遥かに、高精度な粉末回折実験（回折線の小さな半値幅、低いバックグラウンド、高分解能、高精度回折強度測定）が可能になりました。その成果は今春3月19日に行われた、総括班、含水鉱物班、マグマ班、液体班、計算班各班の『高温、高圧中性子研究会』での報告に見られました。水と物の水素結合の圧力変化、ケイ酸塩中の水素置換機構、高温高圧融液の構造と物性研究、など興味ある結果の報告がありました。

今期の高圧実験条件は実験開始初期であり、ブローアウト事故を警戒し発生圧力も 10GPa 以下の低い実験でありましたが、今後十分なテストをした結果、さらに高圧状態での実験が可能となると思います。そ

の結果下部マントル（23GPa 以上）の高圧地球科学の実験研究が期待できます。近年、米国、欧州でも同規模の中性子源が稼動を開始されており、地球科学者らも、地球深部における水の問題には大きな関心を寄せていることから、この分野の激しい国際競争となることが想像されます。PLANET を用いて日本の研究者がイニシャティブをとる事も期待できます。

本新学術領域研究は水、水和物、また液体、融体に研究対象とした地球科学研究者で組織されましたが、PLANETはJ-PARCの中のビームラインだけでなく国際的に見ても唯一大容量の高温高圧中性子粉末回折装置であります。そのため今後共同利用として公募研究がなされるようになれば、極端条件下での構造研究、物性研究に有効な研究が可能になる事が期待できると思います。水素やH₂Oの高圧多形構造、有機分子の高圧下での構造変化、またX線の原子散乱因子に差がない元素で構成される物質の構造研究にも応用できるようになり、本研究組織で開発したPLANETの波及効果は計り知れません。惑星科学、環境科学、材料科学、地球化学、物理化学など interdisciplinary sciencesなどにも新しい研究分野の開拓にも有効な装置となると思われます。

8. 主な研究成果（発明及び特許を含む）〔研究項目毎または計画研究毎に整理する〕

（3ページ程度）

新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（発明及び特許を含む）について、図表などを用いて研究項目毎に計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。

総括班：高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学の総括と研究支援

領域内の共通設備基盤である高温高压中性子散乱ビームライン PLANET を茨城県東海村 J-PARC・MLF 施設内に建設した（図 1）。建設は、J-PARC に常駐するメンバーを中心に、領域内全メンバーが設計から建設、設置に至る様々な部分で協力し、まさに全メンバー丸となって行われた。ビームラインの中には、独創的な設計に基づく 6 軸型マルチアンビルプレスと、散乱角 90° 方向にラジアルコリメータを有する位置敏感型中性子検出器 (PSD) が配置され（図 2）、当初計画、設計通りのスペックを持つビームラインが完成した（表 1）。



図 1. PLANET（オレンジ色のビームライン）の外観

表 1 PLANET の規格・性能

装置名称	超高压中性子回折装置 (PLANET)
装置の目的・概要	高温高压極限環境下における結晶及び液体、ガラスの構造解析を目的とした粉末回折装置
装置の規格・性能	
ビームライン設置場所	J-PARC 物質・生命科学実験施設 BL11
モデレータ種類	非結合型モデレータ
中性子波長、d 範囲	0.3 ~ 5.8 Å (1st frame)、0.2 ~ 4.1 Å (1st frame)
試料位置での中性子強度	1.0×10^8 neutrons/s/cm ² (@ 1 MW, 標準モード) 0.3×10^8 neutrons/s/cm ² (@ 1 MW, 高分解能モード)
分解能 ($\Delta d/d$)	0.6 % (標準モード)、0.4 % (高分解能モード)
ビームサイズ	最大 15 mm × 15 mm
ビーム方向見込み幅	3mm (ラジアルコリメータ)
検出器範囲	90 度検出器バンク (水平 90 ± 11.3 度、垂直 0 ± 34.6 度)
試料環境・機器	6 軸型マルチアンビル高压発生装置「圧姫」(15GPa, 2000 K) PE プレス VX4 (20GPa, 室温)、低温高压プレス (5GPa, 77K)

計画研究 1：高压下における水の鉱物への固定機構と

ダイナミカルな挙動

(1) Mg(OD)₂ の層間が高温下で負の熱膨張という特異な挙動を示すこと、また、Ca(OD)₂ の層間も高压高温下では負の熱膨張を示すことが高温、あるいは、高温高压下での中性子回折実験より示された。この現象は、D 原子の異方的熱振動の増大による層間水素結合の誘起によると考えられる。解析に用いられた PLANET で収集した高温高压下での中性子回折パターン（図 3）は、本実験条件のような極限条件下でのデータとして、世界に類を見ない極めて高品質なものであり、本研究の精密構造解析を可能にした。

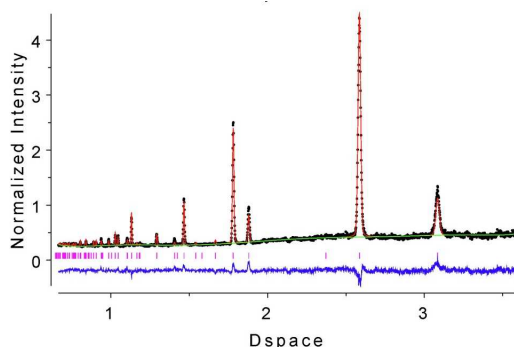


図 2. 6 軸型マルチアンビルプレス

図 3 Ca(OD)₂ 中性子回折パターンと Rietveld 解析結果 (3 GPa, 773 K)

(2) マントル遷移層の主要構成鉱物であるワズレアイト(β - Mg_2SiO_4)の重水素化物を合成し、放射光による単結晶X線回折実験と粉末中性子回折実験の両方を行い、相補的マルチビーム精密構造解析することで構造中の水素位置を初めて明らかにした(図4)。この結果から、含水ワズレアイトのプロトンや欠陥の拡散、電気伝導度の異方性が予測された。

(3) 合成重水素化紅簾石、フェリエライト、バビングトナイトなどの中性子構造解析に成功し、複雑な化学組成の固溶体鉱物における陽イオン席間のイオン置換と水素の挙動の関係の系統的研究に道を開いた。

(4) 氷結晶中の水素結合が $-200^{\circ}C$ 程度の温度条件下で自発的に揃うことを中性子回折実験により世界で初めて観測し、氷惑星内部に強誘電体の氷が存在する可能性を提唱した。

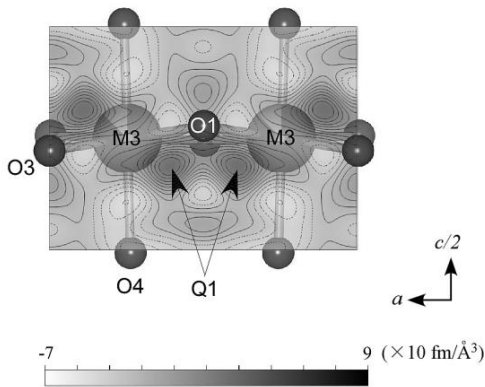


図4 含水ワズレアイトの $y=0.21$ 面でのX線回折と中性子回折の差フーリエ図。Q1は残差のピークを示す。

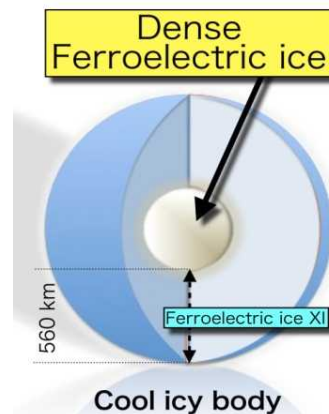


図5 氷惑星内部に存在が予想される強誘電体氷

計画研究2：高圧下におけるマグマの物性と構造、及び水の影響

(1) 中性子実験に特化した高圧セルの開発

加圧システムとして6-6加圧システムを採用し、中性子実験に特化した高圧セルの開発を行った。アンビルとしては中性子による放射化の問題のため、従来のCoを焼結助材としたWCの代わりに、Niを焼結助材としたWCを用いることとし、各種予備実験を行った。また、中性子実験では可能な限り試料容積を確保することが重要であるため、従来放射光X線実験で用いていた底面18mm□のアンビルを26mm□のアンビルに大型化することにより、より高荷重がかけられる設計にした。

(2) 中性子カメラの導入、及び中性子イメージング予備実験

数年間に渡る検討・議論の末、本ビームラインに特化した中性子イメージング用のカメラを導入した(図6)。基本的には、入力面には濃縮ホウ素B-10を反応膜として使い、 $^{10}B(n, \alpha)$ 反応で発生した α 線でCsI蛍光体を発光させるシステムを採用することにした。また、パルス中性子である特徴を生かすため、時間分解(すなわちエネルギー分解)した画像も収集できるようにブランキング機能を掲載した装置にした。画像の明瞭さをできるだけよくするためには、カメラの入力面は高圧装置に可能な限り近づける必要があり、そのための工夫も施した。

中性子イメージングでは、無水及び含水シリカガラスにより水による吸収が明瞭に観察され、含水物質のイメージングが可能であることが示された(図7)。また、中性子はPtカプセルを透過することにより、X線回折やイメージングでは使用することが難しいPtカプセルを中性子回折やイメージングでは使用可能であることが明瞭に示された(図8)。



図6 導入した中性子カメラ

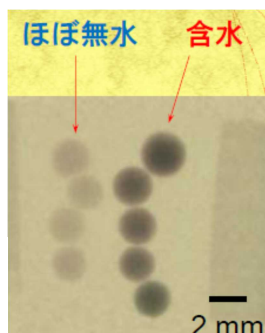


図7 シリカゲルの中性子イメージング

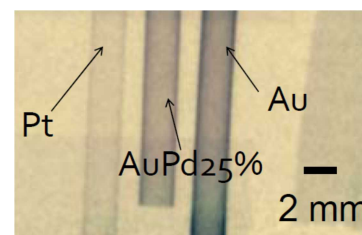


図8 Pt, AuPd25%, Auチューブの中性子イメージング

(3) 含水 SiO₂ ガラスの中性子回折実験

最終年度にほぼ J-PARC, PLANET ビームラインが完成し、中性子実験が可能となったことに伴い、コミッションの一环として、最初に重水素 (D) 置換した含水シリカガラス及び含水アルバイトガラスの回折パターンを約 10 GPa の圧力条件下まで収集した。この測定により、高圧下での測定であるにも関わらず、非常にきれいな中性子散乱パターンが収集できることが明らかになり、散乱ベクトル Q (\AA^{-1}) が 30~40 程度までの振動パターンが収集可能であることが明らかとなった(図9)。加えて、中性子試料合成用の新しいセルを開発し、高圧下における大量の含水ガラスの合成を可能とした。

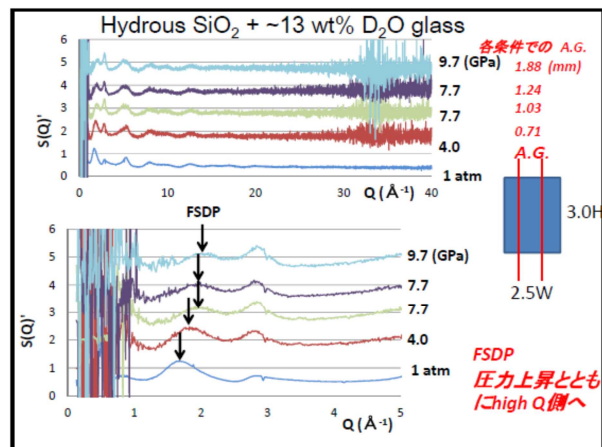


図9 D置換した含水シリカガラスの10 GPaまでの中性子回折パターン(干渉関数)

計画研究3: 高圧下における水をはじめとした液体の構造変化

(1) 常圧の水は様々な特異な性質を示すが、これは液体状態でも水分子間に水素結合が形成されるため、氷の構造に類似した局所4配位構造が存在するからである。水の高圧高温下での構造変化を解明するため大型放射光施設 SPring-8 で行ってきた X線回折実験の詳細な解析を進め、約4GPaまでは、ひとつの水分子の周りに存在する他の水分子の数(配位数)が急激に増大することによって密度が増加し、単原子分子からなるような単純な液体の構造に近づいていくこと、それ以上の圧力では、配位数はほぼ飽和し、水分子間の距離が縮むことによって密度が増加することを明らかにした。ただし、以上の研究は融点直上で行ったため、水の構造に対する圧力(密度)の効果と温度の効果が分離できていなかった。一方、本領域の計算班の池田との共同研究により、第一原理分子動力学計算から、構造変化には温度の効果により重要であるという結果が得られた。SPring-8 で密度一定の条件で行った放射光高温高圧 X線回折実験から得られた酸素-酸素間相関は、計算の結果とよく一致し、計算が信頼できることが明らかになった(図10)。本研究は、中性子実験において、ターゲットとするべき温度圧力領域を決定する上でも意義を持つ。

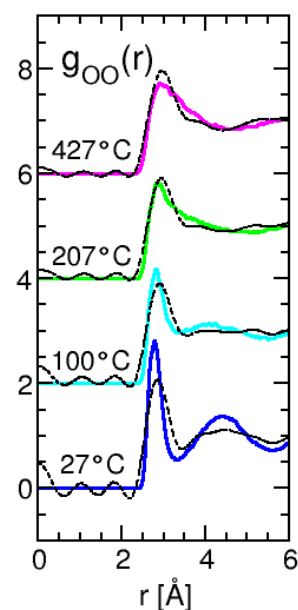


図10 第一原理分子動力学計算(太線)と放射光 X線回折実験(細線(黒))から得られた密度 1.0g/cm^3 での酸素-酸素間の動径分布関数の比較

(2) 放射光実験によって、V族およびIV-VI族化合物の液体中のパイエルス歪が圧力とともに解消されること、液体ガリウムの構造が加圧により単純な金属と類似の構造へ近づいていく過程、熔融高分子の加圧によってその構造が疎な構造から密な構造へ変化することなどを明らかにした。

(3) 高圧中性子回折実験法の開発としては、液体の散乱実験に対応できるよう超高压中性子回折装置の検討を行い、設計に反映させた。平成24年秋の利用実験開始に伴い、まず、非晶質の標準的な試料として、放射光 X線による高温高圧下その場観察実験を行った石英ガラスを選び、常温で9.9GPaまでの測定を行った。これにより、高圧下の非晶質試料においても、圧媒体等の回折ピークの混入の無い良質なデータが測定可能であることが確認された。さらに、水の測定に関しては、TiZrカプセルに重水を入れ溶接して試料を密封する技術を開発し、液体を高圧下で保持する事に成功した。高圧下での温度依存性を調べるため、圧力0.8GPaで室温、100°C、200°Cの測定を行い、回折パターンの大きな変化を観測した(図11)。今後の解析で分子間の水素結合の変化が明らかになることが期待される。

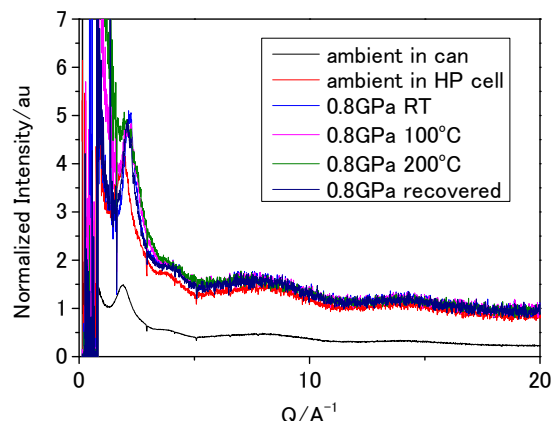


図11 重水の中性子回折の予備的な解析結果

計画研究 4： 高圧下における含水鉱物、マグマ、水の量子シミュレーション

(1) マントル遷移層上部主要構成物質であるワズレアイトは、不純物として水素を含み、全体では海水の数倍という多量の水を蓄える能力を持っている。本研究では、第一原理電子状態計算により含水量と地震波速度低下の定量的関係、ワズレアイト中での水素の存在形態を明らかにした (図 12)。

(2) 高温高圧下での水の構造はよく分かっていなかったが、本研究では、通常の水と同じ密度でも高温高圧下では分子が極めて高速に回転するため水素結合が安定に形成されず分子の配列が普通の液体のようになることを第一原理分子動力学計算によって明らかにし、その結果を高温高圧下での X 線回折実験により確かめた。これは、計算班と液体班による領域内共同研究の成果である (図 13)。

(3) 地球における温度の低い沈み込んだスラブ内や、氷天体の深部に存在するかもしれない氷 VII 相におけるプロトン拡散運動の圧力依存性が 10GPa 付近で特異なピークを示すことを、欠陥の輸送理論と分子動力学シミュレーションにより明らかにした (図 14)。

(4) 理化学研究所に設置されたスーパーコンピューター「京」を活用することにより、1000 万原子系の大規模量子分子動力学シミュレーションへの拡張および sp²-sp³ 領域の自動判別に成功した。高圧下のナノ組織のシミュレーションを可能にする研究成果である。

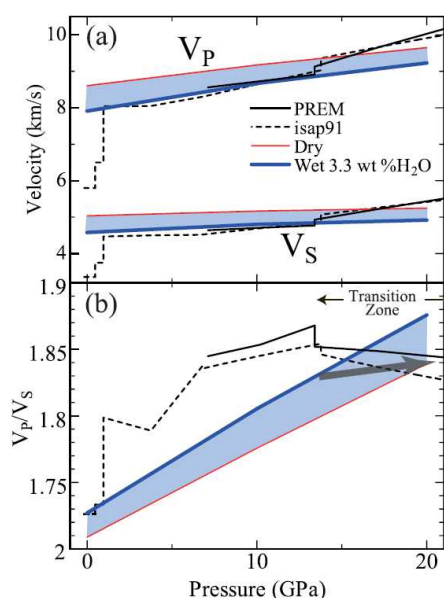


Figure 13. (a) Calculated acoustic velocities (V_P and V_S) and (b) V_P/V_S ratio of dry and hydrous wadsleyite along adiabatic geotherm (1873 K at 660 km depth) using $(\partial B_S/\partial T)_P = -0.0171 \text{ GPa K}^{-1}$ and $(\partial G/\partial T)_P = -0.0157 \text{ GPa K}^{-1}$ [Isaak et al., 2007]. Gray arrow indicates V_P/V_S ratio when water content of wadsleyite decreases from 3.3 to 0 wt % H₂O with depth in the upper part of the transition zone.

図 12 ワズレアイトを伝搬する地震波の速度 J. Tsuchiya et al., *J. Geophys. Res.*, 114,B02206 (2009)

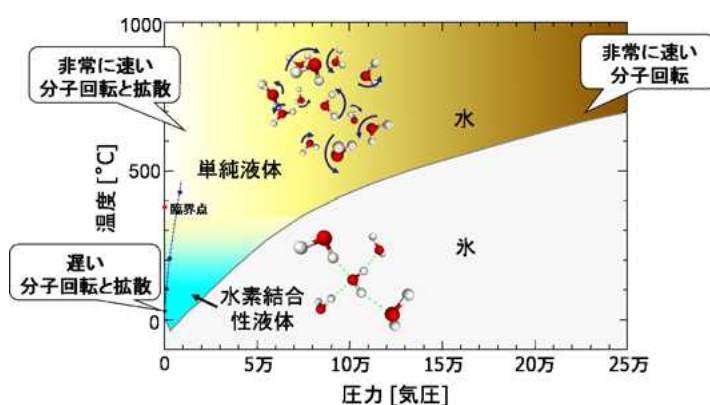


図 13 本研究で得られた水の温度-圧力相図の概略図 T.Ikeda et al., *J. Chem. Phys.* 132, 121102 (2010)

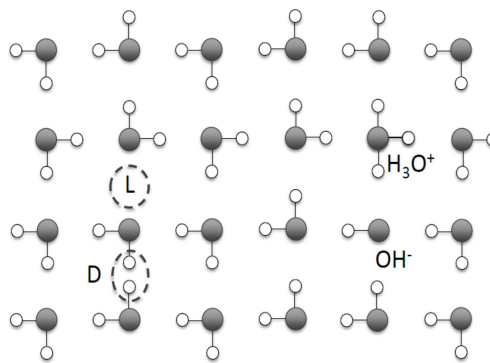


図 14 氷中の4種の欠陥の模式図 T. Iitaka, *Rev. High Press. Sci. Tech.*, 23 (2), 124 (2013)

9. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ程度）

新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。論文の場合、計画研究・公募研究毎に順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。また、一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

ホームページ： <http://yagi.issp.u-tokyo.ac.jp/shingakujutsu/index.html>

ニュースレター：全8号発行 オンライン版は <http://yagi.issp.u-tokyo.ac.jp/shingakujutsu/news%20letter.html>

シンポジウム、研究集会

- ：2008年12月9日 キックオフ研究集会（茨城県東海村）
- ：2009年7月25-26日 高圧中性子ビームラインアドバイザリーミーティング（茨城県水戸市）
- ：2010年3月2-3日 高圧中性子スプリングスクール in 愛媛（愛媛県松山市）
- ：2010年5月23-24日 地球惑星科学連合大会において「水素系物質と中性子の地球科学」セッション（千葉県幕張）
- ：2010年10月20-21日 第51回高圧討論会においてシンポジウム「高圧中性子科学」（宮城県仙台市）
- ：2011年2月21日 新学術領域研究・学術創成研究「強力パルス中性子源を活用した超高压物質科学の開拓」共同研究会（栃木県那須）
- ：2011年5月24-25日 地球惑星科学連合大会において「水素系物質と中性子の地球科学」セッション（千葉県幕張）
- ：2011年8月3-4日 高エネ研構造物性研究センターと共催「中性子高圧科学とマルチプローブを用いた惑星研究」研究会（茨城県つくば市）
- ：2012年5月23日 地球惑星科学連合大会において「水素系物質と中性子の地球科学」セッション（千葉県幕張）
- ：2013年3月19日 「新学術領域研究総括研究会」（茨城県東海村）
- ：2013年5月22日 地球惑星科学連合大会において「水素系物質と中性子の地球科学」セッション（千葉県幕張）

論文発表

計画研究 1

- Sano-Furukawa, A., T. Yagi, T. Okada, H. Gotou, T. Kikegawa (2012) Compression behaviors of distorted rutile-type hydrous phases, MOOH (M=Ga, In, Cr) and CrOOD, Phys. Chem. Minerals, 査読有, 39, 375-383
- 佐野亜沙美 (2012) 中性子散乱実験により明らかにする鉱物中の水素結合とその役割, 波紋, 査読有, 22, 162-165
- Arakawa, Masahi., Hiroyuki Kagi, Jaime A. Fernandez-Baca, Bryan C. Chakoumakos, Hiroshi Fukazawa (2011) Neutron diffraction study of hydrogen-ordered ice XI: Annealing effect and memory effect. Physics and Chemistry of ice, 査読有, 329-338
- Arakawa, Masahi., Hiroyuki Kagi, Jaime A. Fernandez-Baca, Bryan C. Chakoumakos, Hiroshi Fukazawa (2011) The existence of memory effect on hydrogen ordering in ice: The effect makes ice attractive, Geophys. Res. Lett., 査読有, 38, L16101(1-5)
- Ejima Terumi and Masahide Akasaka (2011) Oxidation state of Fe in olivine in a lherzolite xenolith from Oku district, Oki-Dogo Island, Shimane Prefecture, Japan, J. Mineral. Petrol. Sci., 査読有, 106, 110-125
- Fukazawa, Hiroshi., Masahi Arakawa, Hiroyuki Kagi, Jaime A. Fernandez-Baca, Bryan C. Chakoumakos (2011) Structure and properties of ferroelectric water ice, Physics and Chemistry of ice, 査読有, 421-428
- Iizuka, R., H. Kagi, K. Komatsu, D. Ushijima, S. Nakano, A. Sano-Furukawa, T. Nagai, T. Yagi (2011) Pressure responses of portlandite and H-D isotope effects on pressure-induced phase transitions, Phys. Chem. Minerals, 査読有, 38, 777-785
- Matsui, M., K. Komatsu, E. Ikeda, A. Sano-Furukawa, H. Gotou and T. Yagi (2011) The crystal structure of δ -Al(OH)₃: Neutron diffraction measurements and ab initio calculations, Am. Mineral., 査読有, 96, 854-859
- Sano-Furukawa, A., T. Kuribayashi, K. Komatsu, T. Yagi and E. Ohtani (2011) Investigation of hydrogen site of hydrous wadsleyite: A neutron diffraction study, Phys. Earth Planet. Inter., 査読有, 189, 56-62
- 栗林貴弘(2011)スラブやマントル鉱物の結晶構造中における水素原子の振る舞い. 日本結晶学会誌, 査読有, 53, 19-24
- Arakawa M., Kagi H. and Fukazawa H (2010) Annealing effects on hydrogen ordering in KOD-doped ice observed using neutron diffraction, J. Mol. Struct., 査読有, 972, 111-114
- Hamada, M., Akasaka, M., Seto, S. and Makino, K (2010) Crystal chemistry of chromian pumpellyite from Osayama, Okayama Prefecture Japan., Am. Mineral., 査読有, 95, 1294-1304
- Kagi K., Ushijima D, Sano-Furukawa A., Komatsu K, Iizuka R., Nagai T. and Nakano S. (2010) Infrared absorption spectra of δ -AlOOH and its deuteration at high pressure and implication to pressure response of the hydrogen bonds, J. Phys: Conf. Ser., 査読有, 215, 012052 (1-5)
- Igawa Naoki, Tomitsugu Taguchi, Akinori Hoshikawa, Hiroshi Fukazawa, Hiroki Yamauchi, Wataru Utsumi, Yoshinobu Ishii (2010) CO₂ motion in carbon dioxide deuterohydrate determined by applying maximum entropy method to neutron powder diffraction data, J. Phys. Chem. Solids, 査読有, 71, 899-905
- Nagai T., Ishido T., Seto Y., Nishio-Hamane D, Sata N. and Fujino K (2010) Pressure-induced spin transition in FeCO₃-siderite studied by X-ray diffraction measurements, J. Phys: Conf. Ser., 査読有, 215, 012002 (1-5)
- Nagashima, M. and Akasaka, M (2010) X-ray Rietveld and 57Fe Mössbauer studies of epidote and piemontite on the join Ca₂Al₂Fe³⁺Si₃O₁₂(OH)-Ca₂Al₂Mn₃Si₃O₁₂(OH) formed by hydrothermal synthesis, Am. Mineral., 査読有, 95, 1237-1246
- Nagashima, M., Akasaka, M., Ikeda, K., Kiyono, A. And Makino, K. (2010) X-ray single-crystal and optical spectroscopic study of chromian pumpellyite from Sarany, Urals, Russia, J. Mineral. Petrol. Sci., 査読有, 105, 187-193
- Nagashima, M., Armbruster, T., Akasaka, M. And Minakawa, T. (2010) Crystal chemistry of Mn²⁺, Sr-rich and REE-bearing piemontite from the Kamisugai mine in the Sambagawa metamorphic belt, Shikoku, Japan, J. Mineral. Petrol. Sci., 査読有, 105, 142-150
- Seto Y., Nishio-Hamane D., Nagai T., Sata N., and Fujino K (2010) Synchrotron X-ray diffraction study for crystal structure of solid carbon dioxide CO₂-V, J. Phys: Conf. Ser., 査読有, 215, 012015 (1-4)
- 深澤裕(2010)粉末中性子回折による強誘電体の氷の研究-宇宙進化の謎解明を目指して-, RADIOISOTOPES, 査読有, 50, 239-247

- 深澤裕(2010)中性子を用いて水と氷の強誘電性を解明-身近な水・宇宙の氷-, 中性子産業利用推進協議会季報, 査読有, 7, 3
- 深澤裕(2010)中性子ビームによる氷天体の構造解明—強誘電性の発現と物質進化—, 日本結晶学会誌, 査読有, 52, 54-61
- Arakawa M., Kagi H. and Fukazawa H. (2009) Laboratory measurements of infrared absorption spectra of hydrogen-ordered ice: a step to the exploration of ice XI in space-, *ApJS*, 査読有, 184, 361-365
- Fukazawa H., Hoshikawa A., Chakoumakos B. C. and Fernandez-Baca J. A. (2009) Existence of ferroelectric ice on planets -a neutron diffraction study, *Rev. Sci. Instrum. A*, 査読有, 600, 279-281
- Itoh H., Nishi F., Kuribayashi T. and Kudoh Y. (2009) Orientational ordering of three SiO₄ tetrahedra in a'-Ca_{1.5}Sr_{0.5}SiO₄ that satisfies bond-valence requirements and avoids O-O repulsion, *J. Mineral. Petrol. Sci.*, 査読有, 104, 234-240
- Nagashima M., Akasaka M., Minakawa T., Libowitzky E. and Armbruster T (2009) Sursassite: Hydrogen bonding, cation order, and pumpellyite intergrowth, *Am. Mineral.*, 査読有, 94, 1440-1449
- Nagashima M., Geiger C.A. and Akasaka M. (2009) A crystal-chemical investigation of clinzoisite synthesized along the join Ca₂Al₃Si₃O₁₂(OH)-Ca₂Al₂CrSi₃O₁₂(OH), *Am. Mineral.*, 査読有, 94, 1351-1560
- Sano-Furukawa, A., H. Kagi, T. Nagai, S. Nakano, S. Fukura, D. Ushijima, R. Iizuka, E. Ohtani, and T. Yagi (2009) Change in compressibility of δ-AIOOH and δ-AIOOD at high pressure: A study of isotope effect and hydrogen-bond symmetrization, *Am. Mineral.*, 査読有, 94, 1255-1261
- Utsumi, W., H. Kagi, K. Komatsu, H. Arima, T. Nagai, T. Okuchi, T. Kamiyama, Y. Uwatoko, K. Matsubayashi, and T. Yagi (2009) Neutron powder diffraction under high pressure at J-PARC, *Nucl. Instr. and Meth. A.*, 査読有, 600, 50-52
- 内海渉(2009) J-PARCにおける中性子利用高压研究戦略, 高压力の科学と技術, 査読有, 19, 10-14
- 永井隆哉, 有馬寛, 奥地拓生, 鍵裕之, 八木健彦(2009) J-PARCでの高压高温専用ビームラインの実現に向けて, 高压力の科学と技術, 査読有, 19, 15-23
- 深澤裕(2009)氷 XI の発生と成長-中性子回折実験で宇宙に強誘電体の氷が存在することを提唱-, 日本結晶学会誌, 査読有, 51, 84-85
- 永井隆哉, 井上徹, 八木健彦(2008)中性子は鉱物学にどんな情報をもたらし得るか, 日本結晶学会誌, 査読有, 50, 109-113

計画研究 2

- Kawamoto, T., M. Kanzaki, K. Mibe, K. N. Matsukage, S. Ono (2012) Separation of supercritical slab-fluids to form aqueous fluid and melt composition in subduction zone, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 査読有, 109, 18695-700
- Lee, S-K., Y-S. Yi, G. D. Cody, K. Mibe, Y. Fei, and B. O. Mysen (2012) Effect of Network Polymerization on the Pressure-Induced Structural Changes in Sodium Aluminosilicate Glasses and Melts: ²⁷Al and ¹⁷O Solid-State NMR Study, *J. Phys. Chem. C*, 査読有, 116, 2183-2191
- Terasaki, H., Ohtani, E., Sakai, T., Kamada, S., Asanuma, H., Shibazaki, Y., Hirao, N., Sata, N., Ohishi, Y., Sakamaki, T., Suzuki, A., Funakoshi, K., I. (2012) Stability of Fe-Ni hydride after the reaction between Fe-Ni alloy and hydrous phase (δ-AIOOH) up to 1.2Mbar: Possibility of H contribution to the core density deficit, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 194-195, 18-24
- 大高理, 舟越賢二, 下埜勝(2012) Diamond-SiC 複合体焼結体の HIP 合成と高压アンビルへの応用, 材料, 査読有, 407-411
- Kono, Y., A. Yamada, Y. Wang, T. Yu and T. Inoue (2011) Combined ultrasonic elastic wave velocity and microtomography measurements at high pressures, *Rev. Sci. Instrum.*, 査読有, 82, 023906 (1-7)
- Mibe, K., T. Kawamoto, K.N. Matsukage, Y. Fei and S. Ono (2011) Slab melting versus slab dehydration in subduction-zone magmatism, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 査読有, 108, 8177-8182
- Nishida, K., Ohtani, E., Urakawa, S., Suzuki, A., Sakamaki, T., Terasaki, H., Katayama, Y. (2011) Density measurements of liquid FeS at high pressure using synchrotron X-ray absorption, *Am. Mineral.*, 査読有, 96, 864-868
- Reynard, B., K. Mibe and B. Van de Moortèle (2011) Electrical conductivity of the serpentinised mantle and fluid flow in subduction zones, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 307, 387-394
- Sakamaki, T., E. Ohtani, S. Urakawa, H. Terasaki, Y. Katayama (2011) Density of carbonated peridotite magma at high pressure using an X-ray absorption method, *Am. Mineral.*, 査読有, 96, 553-557
- Suzuki, A., Ohtani, E., Terasaki, H., Nishida, K., Hayashi, H., Sakamaki, T., Shibazaki, Y., Kikegawa, T. (2011) Pressure and Temperature dependence of the viscosity of a NaAlSi₂O₆ melt, *Phys. Chem. Minerals*, 査読有, 38, 59-64
- Tateyama, R., E. Ohtani, H. Terasaki, K. Nishida, Y. Shibazaki, A. Suzuki, T. Kikegawa (2011) Density measurements of liquid Fe-Si alloys at high pressure using the sink-float method, *Phys. Chem. Minerals*, 査読有, 38, 801-807
- Terasaki, H., Y. Shibazaki, T. Sakamaki, R. Tateyama, E. Ohtani, K. Funakoshi, Y. Higo (2011) Hydrogenation of FeSi under high pressure, *Am. Mineral.*, 査読有, 96, 93-99
- Urakawa, S., R. Matsubara, T. Katsura, T. Watanabe, T. Kikegawa (2011) Stability and bulk modulus of Ni₃S, a new nickel sulfur compound, and the melting relations of the system Ni-NiS up to 10GPa, *Am. Mineral.*, 査読有, 96, 558-565
- Yamada, A., T. Inoue, S. Urakawa, K. Funakoshi, N. Funamori, T. Kikegawa and T. Irifune (2011) In situ X-ray diffraction study on pressure-induced structural changes in hydrous forsterite and enstatite melts, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 308, 115-123
- Yamada, A., Y. Wang, T. Inoue, W. Yang, C. Park, T. Yu, and G. Shen (2011) High-pressure X-ray diffraction studies on the structure of liquid silicate using a Paris-Edinburgh type large volume press., *Rev. Sci. Instrum.*, 査読有, 82, 015103(1-7)
- 井上徹 (2011) 高温高压実験によるマントル鉱物における水の影響に関する研究, 岩石鉱物科学, 査読有, 40, 13-26
- Inoue, T., T. Ueda, Y. Tanimoto, A. Yamada and T. Irifune (2010) The effect of water on the high-pressure phase boundaries in the system Mg₂SiO₄-Fe₂SiO₄, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012101 (1-6)
- Inoue, T., T. Wada, R. Sasaki, and H. Yurimoto (2010) Water partitioning in the Earth's mantle, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 183, 245-251
- Ohtaka Osamu, Yoshinori Itakura, Hiroshi Arima, Takumi Kikegawa and Akira Yoshiasa (2010) Ionic conductivities of CuI phases at high pressure and temperatures, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 79, 51-53
- Sakamaki, T., E. Ohtani, S. Urakawa, A. Suzuki, Y. Katayama (2010) Density of dry peridotite magma at high pressure using an X-ray absorption method, *Am. Mineral.*, 査読有, 95, 144-147
- Sakamaki, T., E. Ohtani, S. Urakawa, A. Suzuki, Y. Katayama, D. Zhao (2010) Density of high-Ti basalt magma at high pressure and origin of heterogeneities in the lunar mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 299, 285-289
- Suetsugu, D., T. Inoue, M. Obayashi, A. Yamada, H. Shiobara, H. Sugioka, A. Ito, T. Kanazawa, H. Kawakatsu, A. Shito, and Y. Fukao (2010) Depths of the 410-km and 660-km discontinuities in and around the stagnant slab beneath the Philippine Sea: Is water stored in the stagnant slab?, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 183, 270-279

- Suzuki, A (2010) High-pressure X-ray diffraction study of ϵ -FeOOH, *Phys. Chem. Minerals*, 査読有, 37, 153-157
- Terasaki, H., K. Nishida, Y. Shibazaki, T. Sakamaki, A. Suzuki, E. Ohtani, T. Kikegawa (2010) Density measurement of Fe₃C liquid using X-ray absorption image up to 10 GPa and effect of light elements on compressibility of liquid iron, *J. Geophys. Res.*, 査読有, 115, B06207(1-7)
- Inoue, T., I. Yoshimi, A. Yamada and T. Kikegawa (2009) Time-resolved X-ray diffraction analysis of the experimental dehydration of serpentine at high pressure, *J. Mineral. Petrol. Sci.*, 査読有, 104, 105-109
- Mibe, K., I-M. Chou, A.J. Anderson, R.A. Mayanovic and W.A. Bassett (2009) The speciation of aqueous zinc(II) bromide solutions to 500 degC and 900 MPa determined using Raman spectroscopy, *Chem. Geol.*, 査読有, 259, 48-53
- Sakamaki, T., E. Ohtani, S. Urakawa, A. Suzuki, Y. Katayama (2009) Measurement of hydrous peridotite magma density at high pressure using the X-ray absorption method, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 287, 293-297
- Shibazaki, Y., Ohtani E, Terasaki, H., Suzuki, A. Funakoshi, K. (2009) Hydrogen partitioning between iron and ringwoodite: implications for water transport into the Martian core, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 287, 463-470
- Suzuki, A. (2009) Compressibility of the high-pressure polymorph of AlOOH to 17 Gpa, *Mineralogical Magazine*, 査読有, 73, 479-485
- Arima, H., K. Komatsu, K. Ikeda, K. Hirota, and H. Kagi (2009) Designing an elliptical supermirror guide for the high-pressure material science beamline of J-PARC, *Nucl. Instr. and Meth. A.*, 査読有, 600, 71-74
- Terasaki, H., S. Urakawa, K. Funakoshi, N. Nishiyama, Y. Wang, K. Nishida, T. Sakamaki, A Suzuki, E. Ohtani (2009) In situ measurement of interfacial tension of Fe-S and Fe-P liquids under high pressure using X-ray radiography and tomography techniques, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 174, 220-226
- Terasaki, H., Shibazaki, Y., Sakamaki, T., Tateyama, R., Nishitani, N., ODwyer-Brown, L., Leshner, C., Yamada, A., Suzuki, A. (2009) Phase relations in the system of Fe-H-light elements under high pressure and high temperature, SPRing-8 User Experimental Report, 査読無, 22, 2008B1439
- Yamada, A., D. Zhao, T. Inoue, D. Suetsugu and M. Obayashi (2009) Seismological evidence for compositional variations at the base of the mantle transition zone under Japan Islands, *Gondwana Research*, 査読有, 16, 482-490
- Yoshino, T., D. Yamazaki and K. Mibe (2009) Well-wetted olivine grain boundaries in partially molten peridotite in the asthenosphere, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 査読有, 283, 167-173
- Mibe, K., I-M. Chou and W.A. Bassett (2008) In situ Raman spectroscopic investigation of the structure of subduction-zone fluids, *J. Geophys. Res.*, 査読有, 113, B04208(1-8)

計画研究 3

- 池田隆司, 片山芳則 (2013) 高温高圧水の構造と動的性質, *低温科学*, 査読有, 71, 125-129
- 千葉文野 (2013) 液体・液体構造相転移：リン，水から高分子まで, *固体物理*, 査読有, 48, 101-111
- Yagafarov, O. F., Y. Katayama, V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin, and H. Saitoh (2013) Energy-dispersive X-ray diffraction study of liquid gallium under high pressure at elevated temperatures, *High Press. Res.*, 査読有, 33, 191-195
- Yagafarov, O. F., Y. Katayama, V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin, and H. Saitoh (2012) Energy dispersive x-ray diffraction and reverse Monte Carlo structural study of liquid gallium under pressure, *Phys. Rev. B*, 査読有, 86, 174103(1-9)
- Yamaguchi, T., K. Fujimura, K. Uchi, K. Yoshida, Y. Katayama (2012) Structure of water from ambient to 4 GPa revealed by energy-dispersive X-ray diffraction combined with empirical potential structure refinement modeling, *J. Mol. Liq.*, 査読有, 176, 44-51
- 池田隆司, 片山芳則 (2012) 水の新たな姿を明らかに 高温高圧領域への挑戦, *日本原子力学会誌*, 査読有, 53, 42-44
- Brazhkin, V. V., J. Akola, Y. Katayama, S. Kohara, M. V. Kondrin, A. G. Lyapin, S. G. Lyapin, G. Tricot and O. F. Yagafarov (2011) Densified low-hygroscopic form of P₂O₅ glass, *J. Mater. Chem.*, 査読有, 21, 10442-10447
- Chiba Ayano, Nobumasa Funamori, Kazuya Nakayama, Yasuo Ohishi, Stephen M. Bennington, Sanjay Rastogi, Anuj Shukla, Kazuhiko Tsuji, and Mikihiro Takenaka (2011) Pressure-induced structural change of intermediate-range order in poly(4-methyl-1-pentene) melt, *Phys. Rev. E*, 査読有, 85, 021807(1-5)
- Hinzmann Andreas, Ayano Chiba and Kazuhiko Tsuji (2011) The structure of liquid SnTe under pressure, *J. Phys.: Condens. Matter*, 査読有, 24, 115103(1-5)
- Kamiyama Takashi, Kentaro Suzuya (2011) Neutron Instruments at J-PARC: Toward the State-of-the-Art Facility, *Neutron News*, 査読有, 22, 20-25
- Kohara, S., J. Akola, H. Morita, K. Suzuya, J. K. R. Weberg, M. C. Wilding, and C. J. Benmore (2011) Relationship between topological order and glass forming ability in densely packed enstatite and forsterite composition glasses, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 査読有, 108, 14780-14785
- 鈴谷賢太郎 (2011) 中性子回折・全散乱法による液体・非晶質構造解析の基礎, *RADIOISOTOPES*, 査読有, 60, 63-87
- Abe, J., M. Arakawa, T. Hattori, H. Arima, H. Kagi, K. Komatsu, A. Sano-Furukawa, Y. Uwatoko, K. Matsubayashi, S. Harjo, A. Moriai, T. Ito, K. Aizawa, M. Arai, and W. Utsumi (2010) A cubic-anvil high-pressure device for pulsed neutron powder diffraction, *Rev. Sci. Instrum.*, 査読有, 81, 043910 (1-5)
- Abe, J., T. Hattori, K. Komatsu, H. Arima, M. Arakawa, A. Sano, H. Kagi, S. Harjo, T. Ito, A. Moriai, K. Aizawa and W. Utsumi (2010) High Pressure Experiments with the Engineering Materials Diffractometer (BL-19) at J-PARC, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012023 (1-6)
- Arima, H., T. Hattori, K. Komatsu, J. Abe, W. Utsumi, H. Kagi, A. Suzuki, K. Suzuya, T. Kamiyama, M. Arai, T. Yagi (2010) Designing PLANET: Neutron beamline for high-pressure material science at J-PARC, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012025 (1-6)
- Chiba, A., M. Tomomasa, Y. Hayakawa, A. Hinzmann, R. Takahashi, J. Nakamura, T. Tsukatani, T. Kumazawa, K. Tsuji (2010) Relationship between Peierls Distortion and Medium-Range Order in Liquid Group-V elements and Liquid Group-IV-VI Compounds, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012077 (1-5)
- Hattori, T., Y. Katayama, A Machida, T Otomo and K. Suzuya (2010) For High-Pressure Experiments Using Total Scattering Spectrometer NOVA at J-PARC, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012024 (1-4)
- Katayama, Yoshinori, Takanori Hattori, Hiroyuki Saitoh, Takashi Ikeda, Katsutoshi Aoki, Hiroshi Fukui, Kenichi Funakoshi (2010) Structure of liquid water under high pressure up to 17 GPa, *Phys. Rev. B*, 査読有, 81, 014109 (1-6)
- Katayama, Y., H. Saitoh, Y. Yomogida, and K. Aoki (2010) Structure of liquid iron hydrogen alloy under high pressure., *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012080 (1-4)
- Kohara, Shinji., Hideo Ohno, Masaki Takata, Takeshi Usuki, Hidetoshi Morita, Kentaro Suzuya, Jaakko Akola, Laszlo Pusztai (2010) Lead

- silicate glasses: Binary network-former glasses with large amounts of free volume, *Phys. Rev. B*, 査読有, 82, 134209(1-7)
- Nakamura, J., A. Chiba, and K. Tsuji (2010) Pressure-Induced Structural Changes in Liquid $\text{Ge}_{33}\text{Te}_{67}$ and Liquid $\text{Ge}_{15}\text{Te}_{85}$, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 79, 064604 (1-4)
- Saitoh, H., Y. Okajima, Y. Yoneda, A. Machida, D. Kawana, T. Watanuki, Y. Katayama and K. Aoki (2010) Formation and crystal growth process of AlH_3 in Al-H system, *J. Alloys Compounds*, 査読有, 496, L 25-L 28
- Saitoh, H., Y. Sakurai, A. Machida, Y. Katayama and K. Aoki (2010) In situ X-ray diffraction measurement of the hydrogenation and dehydrogenation of aluminum and characterization of the recovered AlH_3 , *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012127 (1-4)
- Sugisaki, Mariko., Ayano Chiba, Kazuho Tsuji (2010) Pressure Dependence of Hopping Conduction in Amorphous Ge alloys, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012082 (1-4)
- Suzuva, Kentaro., Shinji Kohara, Kiyohito Okamura, Hiroshi Ichikawa, Kenji Suzuki (2010) Intermediate-range order in polymer-route Si-C-O fibers by high-energy X-ray diffraction and reverse Monte Carlo modelling, *Ceramic Transactions*, 査読有, 213, 33-38
- Tsukatani, T., A. Chiba, K. Tsuji (2010) Pressure-Induced Structural Change in Liquid $\text{Ge}_{0.15}\text{Te}_{0.85}$ alloy, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012076 (1-4)
- 服部高典, 有馬寛, 内海渉 (2010) J-PARC 超高压中性子回折装置 PLANET の設計思想と建設状況, *波紋*, 査読有, 20, 39-44
- Brazhkin, V. V., M. Kanzaki, K. Funakoshi, and Y. Katayama (2009) Viscosity Behavior Spanning Four Orders of Magnitude in As-S Melts under High Pressure, *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 102, 115901(1-4)
- Brazhkin, V. V., O. B. Tsiok, and Y. Katayama (2009) Investigation of Polyamorphism in Compressed B_2O_3 Glass by the Direct Measurement of the Density, *JETP Lett.*, 査読有, 89, 244-248
- Chiba, Ayano., Masatoshi Tomomasa, Takazumi Hayakawa, Stephen M. Bennington, Alex C. Hannon, and Kazuhiko Tsuji (2009) Pressure-induced suppression of the Peierls distortion of liquid As and GeX (X=S, Se, Te), *Phys. Rev. B*, 査読有, 80, 060201(R)-1-4
- Fuchizaki, K., T. Hase, A. Yamada, N. Hamaya, Y. Katayama, and K. Funakoshi (2009) Polyamorphism in tin tetraiodide, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 130, 121101(1-4)
- Saitoh, H., A. Machida, Y. Katayama, and K. Aoki (2009) Hydrogenation of passivated aluminum with hydrogen fluid, *Appl. Phys Lett.*, 査読有, 94, 151915(1-3)
- Tuktabiev, M. A., S. V. Popova, V. V. Brazhkin, A. G. Lyapin and Y. Katayama (2009) Compressibility and polymorphism of a- As_4S_4 realgar under high pressure, *J. Phys.: Condens. Matter*, 査読有, 21, 385401(1-7)

計画研究 4

- 飯高敏晃 (2013) 氷高压相におけるプロトンダイナミクス・シミュレーション, *高压力の科学と技術*, 査読有, 23, 124-132
- 飯高敏晃 (2013) 氷高压相におけるプロトンダイナミクス, *低温科学*, 査読有, 71, 121-124
- Hoshi Takeo, Yohei Akiyama, Tatsunori Tanaka and Takahisa Ohno (2012) Ten-million-atom electronic structure calculations on the K computer with a massively parallel order-N theory, *J. Phys. Soc. Jpn*, 査読有, 82, 023710 (1-4)
- Sogabe Tomohiro, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang, Takeo Fujiwara (2012) Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, *J. Comp. Phys.*, 査読有, 231, 5669-5684
- Takeo Hoshi, Susumu Yamamoto, Takeo Fujiwara, Tomohiro Sogabe, Shao-Liang Zhang (2012) An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system, *J. Phys.: Condens. Matter*, 査読有, 24, 165502 (1-5)
- Wang Hui, John S Tse, Kaori Tanaka, Toshiaki Iitaka, Yanming Ma (2012) Superconductive 'sodalite'-like clathrate calcium hydride at high pressures, *PNAS*, 査読有, 109, 6463-6466
- Zhang Jingyun, Jer-Lai Kuo, Toshiaki Iitaka (2012) First principles molecular dynamics study of filled ice hydrogen hydrate, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 137, 084505 (1-7)
- Dekura, H., T. Tsuchiya, J. Tsuchiya (2011) First-principles prediction of post-pyrite phase transitions in germanium dioxide, *Phys. Rev. B*, 査読有, 83, 134114 (1-6)
- Dekura, H., T. Tsuchiya, Y. Kuwayama and J. Tsuchiya (2011) Theoretical and experimental evidence for a new post-cotunnite phase of titanium dioxide with significant optical absorption, *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 107, 045701 (1-4)
- Ishikawa, T., J. Tsuchiya, T. Tsuchiy (2011) Stacking-disordered phase of iron in the Earth's inner core from first principles, *Phys. Rev. B*, 査読有, 83, 054115(1-4)
- Li, Z., J.S. Tse, S. You, C.Q. Jin, T. Iitaka (2011) Electronic and magnetic structure of the high pressure phase of Li_2CuO_2 , *Int. J. Mod. Phys. B*, 査読有, 25, 3409-3414
- Teng, H., T. Fujiwara, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, S. Yamamoto (2011) Efficient and accurate linear algebraic methods for large-scale electronic structure calculations with nonorthogonal atomic orbitals, *Phys. Rev. B*, 査読有, 83, 165103(1-12)
- Tomono Hidekazu, Masaru Aoki, Toshiaki Iitaka and Kazuo Tsumuraya (2011) Implementation of GPU-FFT into Planewave Based First Principles Calculation Method, *JCST*, 査読有, 5, 89-105
- Yang, J., J.S. Tse, T. Iitaka (2011) First-principles study of liquid gallium at ambient and high pressure, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 135, 044507(1-6)
- Aoki, M., H. Tomono, T. Iitaka, and K. Tsumuraya (2010) Acceleration of orbital-free first principles calculation with graphics processing unit GPU, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012120 (1-4)
- Fujiwara, T., T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Sogabe and S-L. Zhang (2010) Novel algorithm of large-scale simultaneous linear equations, *J. Phys. Condens. Matter*, 査読有, 22, 074206 (1-6)
- Gao, Guoying., Artem R. Oganov, Peifang Li, Zhenwei Li, Hui Wang, Tian Cui, Yanming Ma, Aitor Bergara, Andriy O. Lyakhov, Toshiaki Iitaka, and Guangtian Zou (2010) High-pressure crystal structures and superconductivity of Stannane (SnH_4), *PNAS*, 査読有, 107, 1317-1320
- Gao, Guoying., Artem R. Oganov, Yanming Ma, Hui Wang, Peifang Li, Yinwei Li, Toshiaki Iitaka, Guangtian Zou (2010) Dissociation of methane under high pressure, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 133, 144508(1-5)
- Hongo, Kenta., Mark A. Watson, Roel S. Sanchez-Carrera, Toshiaki Iitaka, and Alan Aspuru-Guzik (2010) Failure of Conventional Density Functionals for the Prediction of Molecular Crystal Polymorphism: A Quantum Monte Carlo Study, *Phys. Chem. Lett*, 査読有, 1, 1789-1794
- Hoshi, T., M. Tanikawa, A. Ishii (2010) A hierarchical research by large-scale and ab initio electronic structure theories - Si and Ge cleavage

- and stepped surfaces -, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 査読有, 42, 2784-2787
- Hoshi, T., T. Iitaka, M. Fyta (2010) Large scale simulation of quantum-mechanical molecular dynamics for nano-polycrystalline diamond, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012118(1-4)
- Iitaka Toshiaki (2010) GPU-accelerated large-scale quantum molecular dynamics simulation of 3-dimensional C60 polymers, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012119(1-6)
- Ikeda, T., Katayama, Y., Saitoh, H., and Aoki, K. (2010) High-temperature water under pressure, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 132, 121102 (1-4)
- Ishikawa, T., H. Nagara, N. Suzuki, T. Tsuchiya, and J. Tsuchiya (2010) High-pressure phases of calcium: Prediction of phase VI and upper-pressure phases from first principles, *Phys. Rev. B*, 査読有, 81, 092104(1-4)
- Tomono, H., M. Aoki, T. Iitaka, and K. Tsumuraya (2010) GPU based acceleration of first principles calculation, *J. Phys: Conf. Ser.*, 査読有, 215, 012121 (1-4)
- Tsuchiya, Jun., Taku Tsuchiya (2010) First-principles prediction of a high-pressure hydrous phase of AlOOH, *Phys. Rev. B*, 査読有, 83, 054115(1-5)
- Usui, Y., J. Tsuchiya, and T. Tsuchiya (2010) Elastic, vibrational and thermodynamic properties of MgGeO₃ post-perovskite investigated by first principles simulation, *J. Geophys. Res.*, 査読有, 115, B03201(1-13)
- Yang, Jianjun., John S Tse and Toshiaki Iitaka (2010) First-principles studies of liquid lithium under pressure, *J. Phys. Condens. Matter*, 査読有, 22, 095503(1-7)
- Yim Wai-Leung, John S.Tse, Toshiaki Iitaka (2010) Pressure-Induced Intermolecular Interactions in Crystalline Silane-Hydrogen, *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 105, 215501(1-4)
- Zhang, Meiguang., Hui Wang, Hongbo Wang, Xinxin Zhang, Toshiaki Iitaka, Yanming Ma (2010) First-Principles Prediction on the High-Pressure Structures of Transition Metal Diborides (TM₂, TM=Sc, Ti, Y, Zr), *Inorg. Chem.*, 査読有, 49, 6859-6864
- Hoshi, T., and T. Fujiwara (2009) Development of simulation package 'ELSES' for extra-large-scale electronic-structure calculation, *J. Phys.: Condens. Matter*, 査読有, 21, 064233 (1-4)
- Hoshi, T., and T. Fujiwara (2009) Domain boundary formation in helical multishell gold nanowire, *J. Phys.: Condens. Matter*, 査読有, 21, 272201 (1-7)
- Sogabe, T., T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara (2009) On an application of the QMR_SYM method to complex symmetric shifted linear systems, *Proc. Appl. Math. Mech.*, 査読有, 7, 2020081-2020082
- Tsuchiya, J., and T. Tsuchiya, Elastic properties of δ-AlOOH under pressure: first principles investigation, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 174, 2009, 122-127
- Tsuchiya, J., and T. Tsuchiya (2009) First-principles investigation of the structural and elastic properties of hydrous wadsleyite under pressure, *J. Geophys. Res.*, 査読有, 114, B02206(1-13)
- Tsuchiya, J., and T. Tsuchiya (2008) Elastic properties of phase D (MgSi₂O₆H₂) under pressure: ab initio investigation, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 査読有, 170, 215-220

公募研究

- Fuchizaki Kazuhiro and Yuta Asano (2013) Sublimation of the Modified Lennard-Jones System, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 82, 033001 (1-4)
- Fuchizaki Kazuhiro, Nozomu Hamaya, and Yoshinori Katayama (2013) Characteristic Densities of Low- and High-Pressure Liquid SnI₄, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 82, 033003 (1-4)
- Asano Yuta and Kazuhiro Fuchizaki (2012) Phase diagram of the modified Lennard-Jones system, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 137, 174502 (1-9)
- Ishikawa, T., H. Nagara, N. Suzuki, and K. Shimizu (2012) First-principles molecular dynamics study on simple cubic Calcium: comparison with simple cubic phosphorus, *High Press. Res.*, 査読有, 32, 11-17
- Ishikawa, T., H. Nagara, N. Suzuki, and K. Shimizu (2012) First-principles Molecular Dynamics Simulation for Calcium under High Pressure: Thermodynamic Effect on Simple Cubic Structure, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 査読有, 81, 124601-124606
- Nagara, H., T. Ishikawa, Y. Yamada, T. Kotani (2012) Structural and Electronic Properties of YH₃ at High Pressure — Band calculation by the GW approximation —, *High Press. Res.*, 査読有, 32, 464-470
- Nakanishi, A., T. Ishikawa, H. Nagara, K. Shimizu, and H. Katayama-Yoshida (2012) First-principles study on Superconductivity of simple cubic, modulated and simple hexagonal phases in phosphorus, *High Press. Res.*, 査読有, 32, 3-10
- Takamuku, T., H. Wada, C. Kawatoko, T. Shimomura, R. Kanzaki, and M. Takeuchi (2012) Amide-induced Phase Separation of Hexafluoroisopropanol -Water Mixtures Depending on the Hydrophobicity of Amide, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 査読有, 14, 8335-8347
- Takamuku, T., T. Shimomura, K. Sadakane, M. Koga, and H. Seto (2012) Aggregation of 1-Dodecyl-3-methylimidazolium Nitrate in Water and Benzene Studied by SANS and 1H NMR, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 査読有, 14, 11070-11080
- Fuchizaki Kazuhiro and Nozomu Hamaya (2011) Equation of state for the low-pressure crystalline phase of SnI₄, *Phys. Rev. B*, 査読有, 84, 144105 (1-9)
- Fuchizaki, Kazuhiro., Nozomu Hamaya, Takaki Hase, and Yoshinori Katayama (2011) Probable scenario of the liquid-liquid phase transition of SnI₄, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 135, 091101 (1-4)
- Fujii, K., R. Kanzaki, T. Takamuku, Y. Kameda, S. Kohara, M. Kanakubo, M. Shibayama, S. Ishiguro, and Y. Umabayashi (2011) Experimental Evidences for Molecular Origin of low-Q peak in Neutron/X-ray Scattering of 1-Alkyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethanesulfonyl) amide Ionic Liquids, *J. Chem. Phys.*, 査読有, 135, 244502 (1-10)
- Shimomura, T., T. Takamuku, and T. Yamaguchi (2011) Clusters of Imidazolium-based Ionic Liquid in Benzene Solutions, *J. Phys. Chem. B*, 査読有, 115, 2011, 8518-8527
- Takamuku, T., M. Tobiishi, and H. Saito (2011) Solvation Properties of Aliphatic Alcohol-Water and Fluorinated Alcohol-Water Solutions for Amide Molecules Studied by IR and NMR Technique, *J. Solution Chem.*, 査読有, 40, 2046-2056
- Takamuku, T., T. Shimomura, M. Tachikawa, and R. Kanzaki (2011) N,N-Dimethylformamide-induced Phase Separation of Hexafluoroisopropanol -Water Mixtures, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 査読有, 13, 11222-11232

10. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ程度）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

今まで繰り返し述べてきたように、本研究領域の成果としてはその中心となる基本的な高温高圧中性子実験装置がまだ完成したばかりという段階であり、それを用いた研究結果が当該学問分野、あるいは関連分野に具体的なインパクトを与える段階には至っていない。しかしそれにもかかわらず、装置立ち上げの作業期間や予備実験で得られた実験結果は期待以上の高い質を持ったデータだったことから、すでにいろいろなところから今後の研究の発展に対する期待や装置を利用した新しい研究の提案がなされている。

予備実験で得られた結果は、2012年9月に水戸市で開かれたIUCr(国際結晶学連盟)のワークショップや、2013年3月に愛媛大で開催されたTANDEM国際会議、2013年5月に幕張で開催された地球惑星科学連合大会などで報告されたが、高圧下で観測したとは思えないほどきれいなデータに外国からの参加者からも賞賛が寄せられた。我々の研究の発展に期待が寄せられたと共に、自分たちでもこれを使った実験をやってみたいという共同研究の希望も寄せられ、今後の多様な研究の展開が期待される。

また本研究領域の主体となったのは地球科学分野の若手研究者であるが、近年水素を重要なエネルギー源としてとらえ集中的に研究を行っている材料科学分野の研究者も大変な興味を示し、実際に予備実験に参加してもらう段階までいっている。今後彼等のグループとも協力しつつ、高圧下の水素化物の物性研究など、多分野での研究の進展が期待されている。

本研究領域では、ビームラインの建設だけでなく、計算班が中心的な役割をして第一原理計算による水素など軽元素を含む物質の高圧下における構造や物性の予測に関する研究も精力的に行われた。この分野は計算機のハード部分や計算アルゴリズムといったソフト面の進展も相まって、非常な勢いで進歩しているが、本研究領域の計算班も特に水素結合の高圧下のふるまいなどに関して先駆的な研究成果を挙げ、当該分野で高い評価を得ている。またそれらは今後実験班が行う実験の計画立案や、結果の予測を行うためにも重要な役割を果たしており、実験結果が出始めればその結果をフィードバックして理論的手法もさらに進歩することが期待され、波及効果は一層大きいものになっていくであろう。