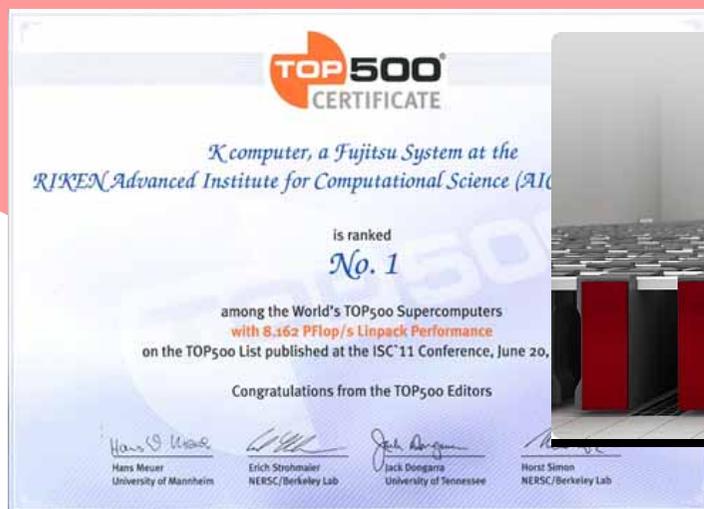


# 特定先端大型研究施設間の協力 「京」, J-PARC/MLF, SPring-8



# HPCI戦略プログラム

特に第2分野との連携が重要  
(CMSI: 東大物性研、分子研、東北大金材研)

## 5分野で、**戦略機関** (分野別中核拠点)

### 分野1

予測する生命科学・医療  
および創薬基盤

#### 予測医療と革新的創薬

臓器レベルでの疾患を再現する階層統合シミュレーションを実現し、予測医療に貢献。また、標的タンパク質に強く結合する薬の候補化合物の設計を行い、創薬プロセスを加速。



血栓成長による血管閉塞シミュレーション



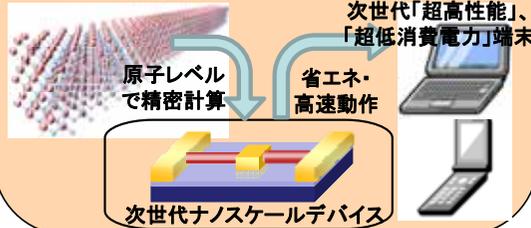
薬候補のタンパク質への結合シミュレーション

### 分野2

新物質・エネルギー創成

#### 世界に先駆けた次世代デバイスを提唱

ナノスケールデバイスをまるごとシミュレーションし、機能・材料特性予測を実現することで、次世代デバイスの設計手法を提唱、超高性能・超低消費電力端末等の実現に貢献する。



次世代「超高性能」、  
「超低消費電力」端末

原子レベル  
で精密計算

省エネ・  
高速動作

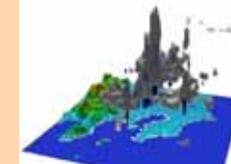
次世代ナノスケールデバイス

### 分野3

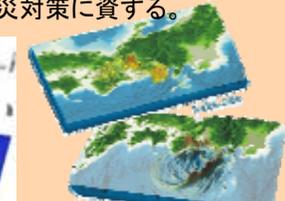
防災・減災に資する  
地球変動予測

#### 集中豪雨や地震の予測

雲解像モデル、強震動モデル等を駆使して、集中豪雨の位置や地震の被害規模を高精度に予測し、防災・減災対策に資する。



集中豪雨や局地的大雨の予測



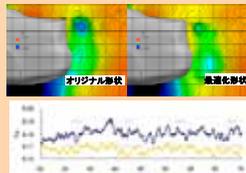
地震波伝播計算と津波発生伝播の連成シミュレーション

### 分野4

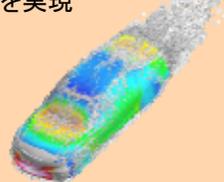
次世代ものづくり

#### 設計プロセスの革新

熱流動の物理メカニズム理解に基づいた高度な設計制御技術を確立することで、環境(CO2,NOx)と製品性能のバランスを目指した将来の製品競争力強化に資する革新的ものづくりを実現



車体後部周りの超精緻解析による最適形状の究明



非定常空力・振動連成解析による、低空気抵抗、低揺動車の開発

物質と宇宙の起源と構造

#### 大質量星の超新星爆発の解明

超新星爆発の3次元シミュレーション



爆発時の密度分布

磁場増幅、ニュートリノ輻射輸送などを考慮した3次元シミュレーションを、次世代スパコンを用いることで世界に先駆けて実行し、大質量星が重力崩壊から超新星爆発に至る過程を解明する。

### 分野5

## 計算科学との連携の実績

中性子散乱は物質内の原子構造やその振動、電子状態等の情報を的確に得る重要な手段と位置づけられており、ことにパルス中性子散乱はこれらの情報に係る広い波数-エネルギー空間の応答関数を一挙に与えることができる多量のデータが排出されることになる。

J-PARC 物質・生命科学実験施設(MLF)においても、物性物理学、材料科学、生命科学、産業利用の多岐にわたる分野での研究が展開されるが、そのデータ処理においても、実験の理論予測においても計算科学との連携が不可欠である。

以上のことから、中性子科学と計算科学の直接的な連携や融合へ向けた取り組みの必要性から、継続的に下記のような研究会を開いてきた。所内外の研究者らと、第一原理を初めとするシミュレーション計算の現状や可能性、中性子散乱実験における具体的な計算的手法や計算機技術など多岐にわたり議論し、本格的な連携を模索した。

「J-PARCの中性子科学と計算科学」研究会

2005年3月18日(高エネルギー加速器研究機構)

「J-PARCにおける中性子科学と計算科学の連携あるいは融合研究」研究会

2009年3月17日(J-PARC, MLF)

「J-PARCと計算科学の連携に関する研究会」

2010年4月12日(J-PARC, MLF)



今後、計算科学戦略との具体的かつ組織的な連携を進めたい。

第1回CMSIシンポジウム

2011年9月12,13日【場所】東京大学 物性研究所  
J-PARCとの連携について議論

第2回CMSIシンポジウム

2012年10月  
京、J-PARC、SPring-8をキーワードとした議論を行う予定。

元素戦略プログラムでは具体的な連携が実現される。  
(SPring-8, J-PARC, KEK-PF, CMSIが同プログラム策定作業に参画)  
(材料創成G、機能評価G、電子論G間の連携がなされる。)

元素戦略4研究拠点(磁石材料、電子材料、電池・触媒材料、構造材料)

各元素戦略研究拠点に

- 材料創成グループにより新材料の作製
- 機能評価グループにおけるSPring-8、J-PARCの利用。  
登録機関は共用装置に重点利用枠を設けて課題実施に対応  
MLFの対応については現在検討を進めている。
- 電子論グループに「京」が参画

# 量子ビームによる鉄系超伝導体の研究(具体例)

日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 & 理化学研究所播磨研究所

J-PARC中性子とSPring-8放射光X線を横断的に利用することで、鉄系超伝導体とその関連物質の結晶構造、電子状態ならびに原子間やスピン間の相互作用の強さを求め、理論計算との比較を通じて鉄系超伝導機構との関係を明らかにする。

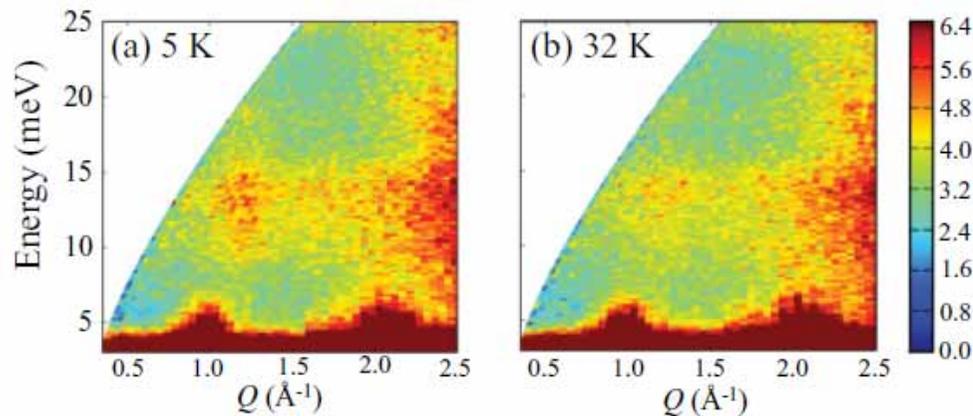
中性子 (J-PARC, JRR-3)

- 非弾性散乱実験による磁気励起測定

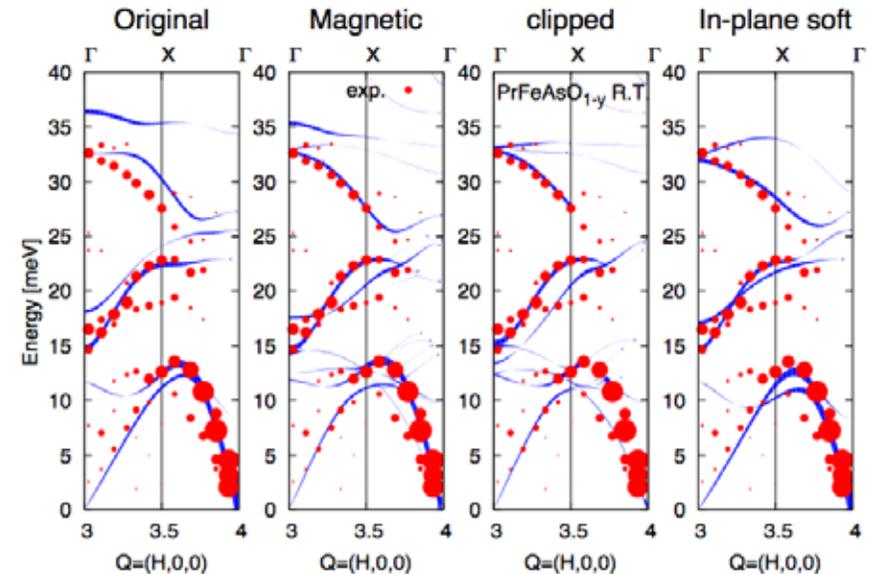
X線 (SPring-8)

- 非共鳴非弾性散乱実験によるフォノン測定

- 共鳴非弾性散乱実験による電子励起スペクトル測定



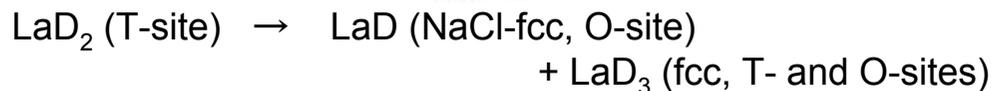
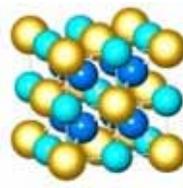
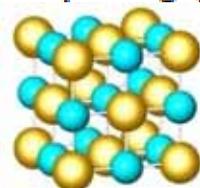
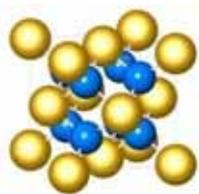
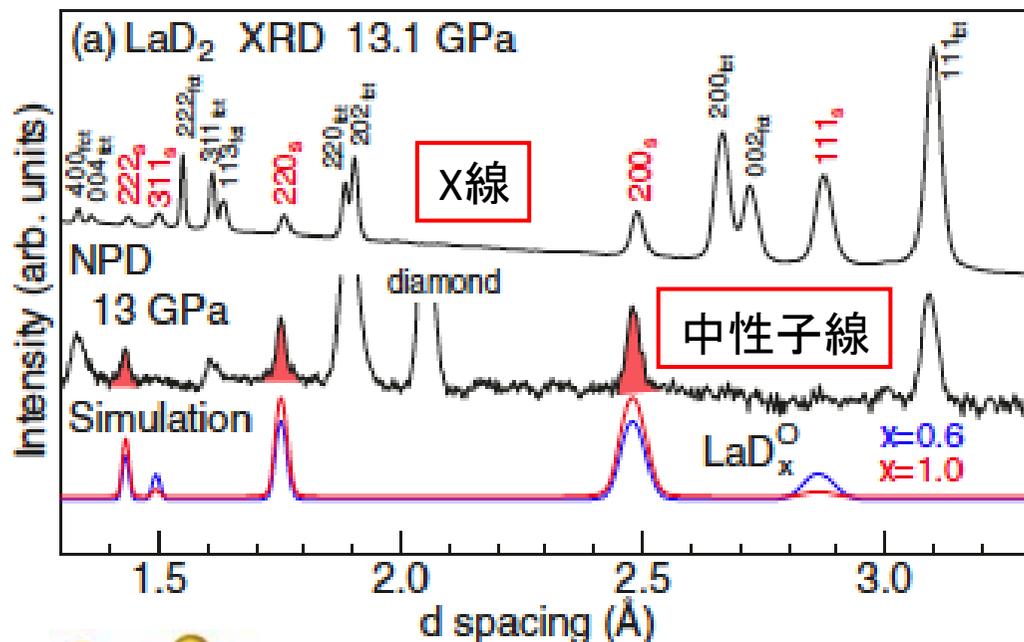
J-PARCにおける非弾性中性子散乱実験によって観測した  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{0.65}\text{P}_{0.35})_2$  の磁気励起スペクトル



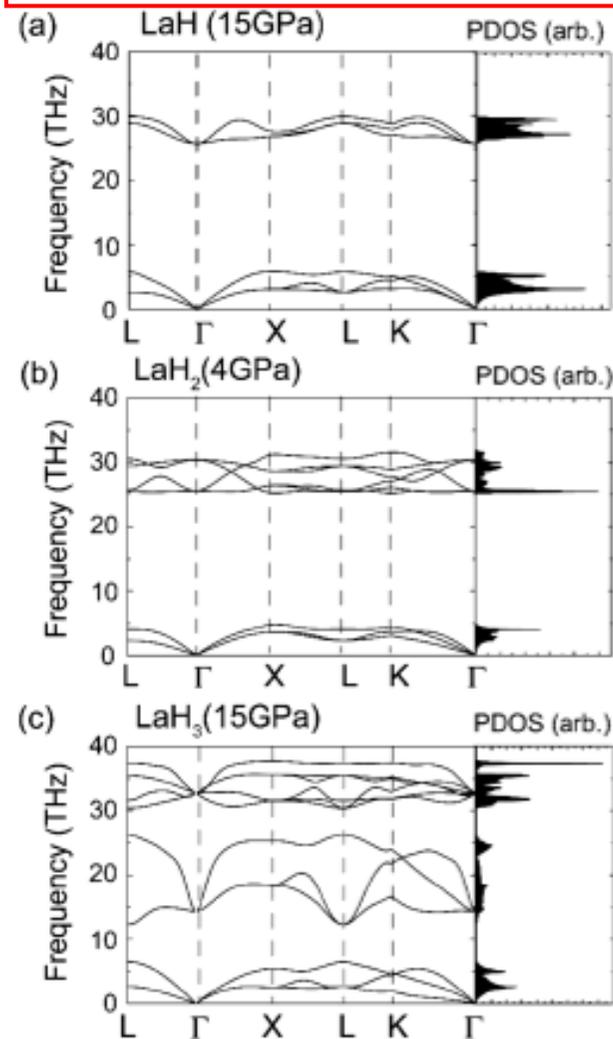
SPring-8における非弾性X線散乱実験によって求めた  $\text{PrFeAsO}_{1-y}$  のフォノン分散関係および理論計算との比較

# 高水素密度材料開発のための高圧化での水素安定サイトの研究（具体例） SPring-8とJ-PARCのデータの比較から初めて明らかになった。

11万気圧以上で、岩塩 (NaCl) 構造をもつレアアースメタルの水素化物(LaD)が存在することを発見



## 第1原理計算がLaDの安定性示唆

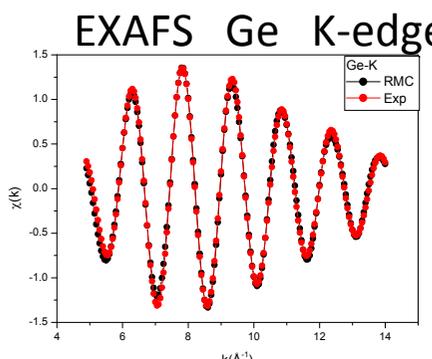
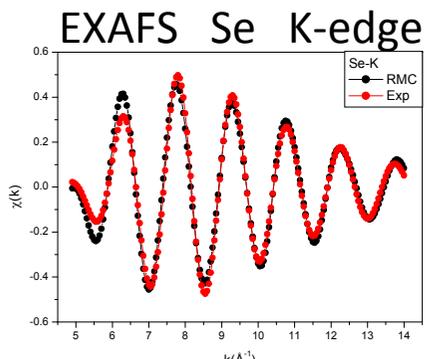
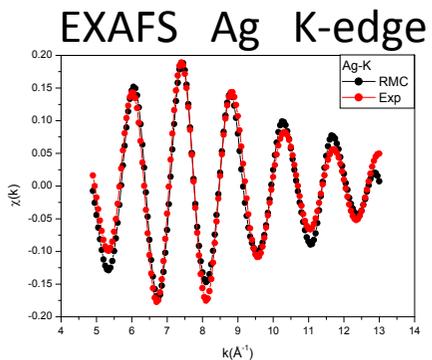
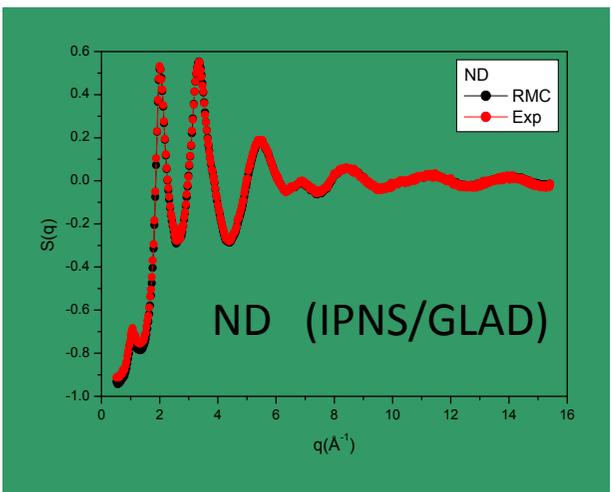
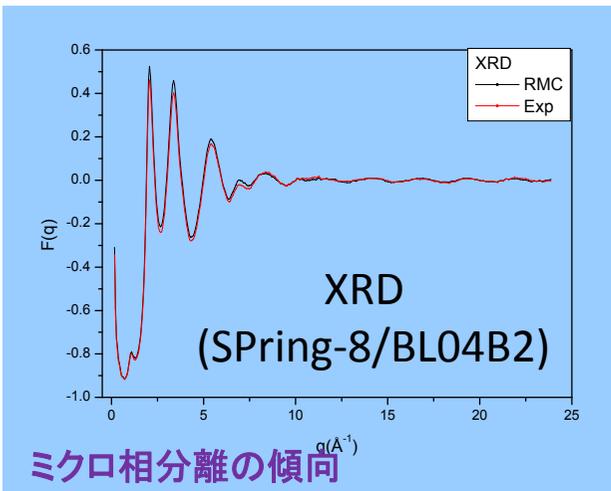


中性子回折とX線回折によるLaD形成の観測  
第1原理計算による高圧下でのLaDの安定性の検証

Phys. Rev. Lett.  
108, 205501 (2012).



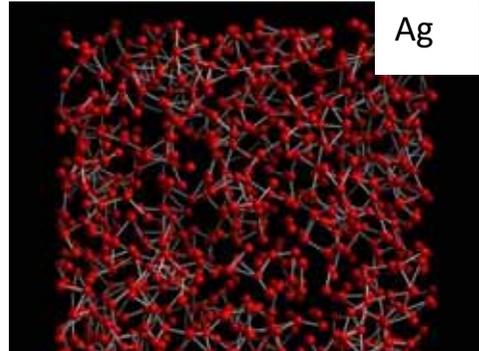
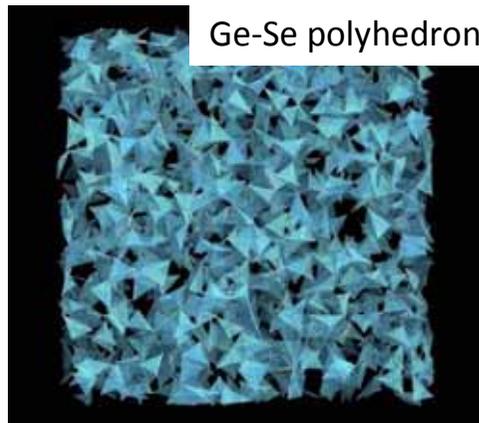
# 中性子、放射光データの相互解析により部分構造因子の導出(具体例)



PAL(Pohang 3C2)

中性子回折、X線回折、EXAFS(SPring-8)を用いて部分構造を解明  
逆モンテカルロ構造モデリング法(RMC法)により数万個の粒子のコンピューター上で最適化し実験データを再現できる。

RMC simulation



Number of Particles = 18,000

# 高压分野の新たな展開(具体例)

## 放射光(SPring-8の技術・人材含め)→中性子(J-PARC)へ発展的移動

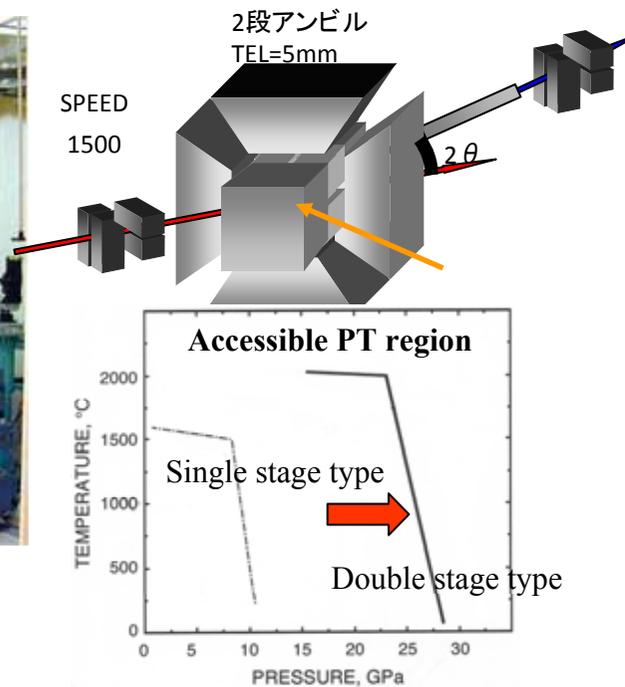
(科研費新学術領域研究、領域代表 八木(東大)、 科研費学術創成研究、研究代表 鍵(東大))

### 高压技術の継承・発展



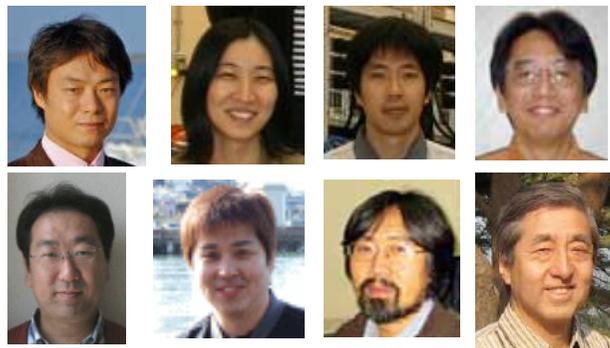
SPring-8 Multi-Anvil Press, SPEED1500

2段式加圧システムと発生可能圧力の拡大



J-PARC 6Axis Multi-Anvil Press  
ATSUHIME 圧姫

### 人材の移動



関ヶ原を超えて



## 分子量を精密制御した高分子電解質の分子鎖形態の精密解析

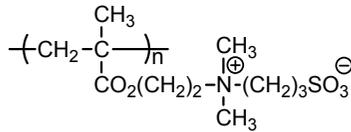
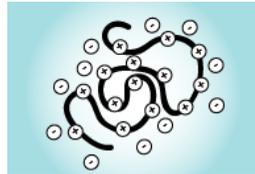
SPring-8 SR-SAXS

J-PARC MLF NR (SOFIA)

フリーポリマー

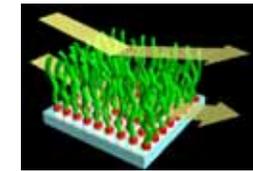
微粒子(曲面)表面上の  
ポリマーブラシ

平板上のポリマーブラシ

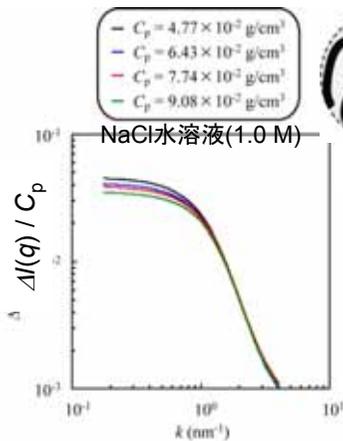


フリーポリマー水溶液の  
小角X線散乱(SAXS)測定

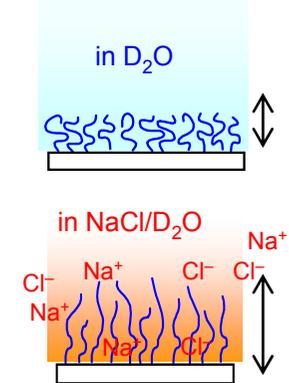
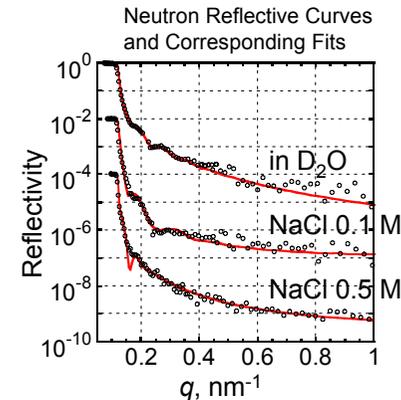
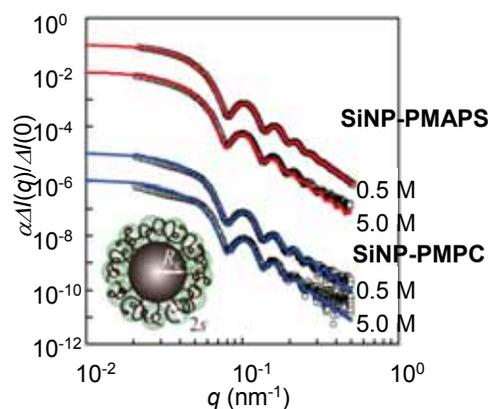
ポリマーブラシ微粒子の  
SAXS測定



中性子反射率測定による平板上ポリマーブラシ/  
重水界面における分子鎖形態と塩濃度依存性



回転半径



- ・シータ濃度の決定
- ・回転半径  $\langle S^2 \rangle^{1/2}$  の分子量および塩濃度依存性
- ・摂動状態みみず鎖モデルによる解析
- ・Kuhnの持続長  $\lambda^{-1}$

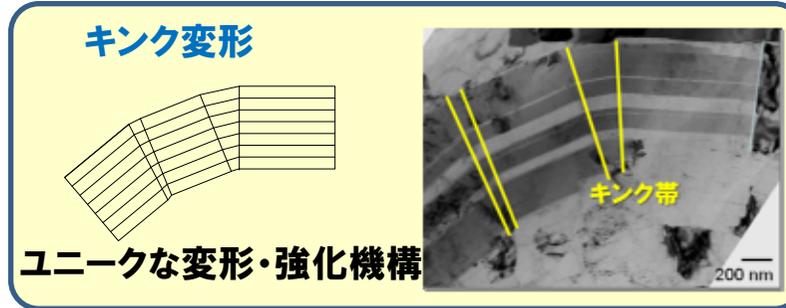
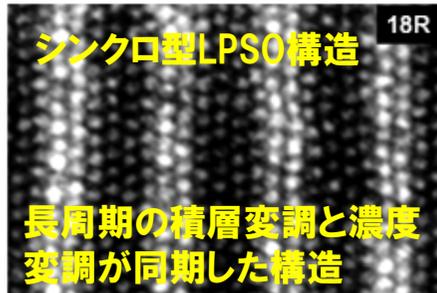
- ・排除体積効果を考慮したコアシェルモデルに基づく分子鎖局所形態の解析
- ・ブラシ層膜厚の分子量および塩濃度依存性
- ・高い浸透圧によりフリーポリマーの  $2\langle S^2 \rangle^{1/2}$  よりも3-6倍程度伸張した構造を形成

- ・高いグラフト密度による濃厚溶液状態
- ・排除体積効果によるほぼ伸びきり鎖の近い分子鎖形態
- ・膨潤膜厚の塩濃度依存性

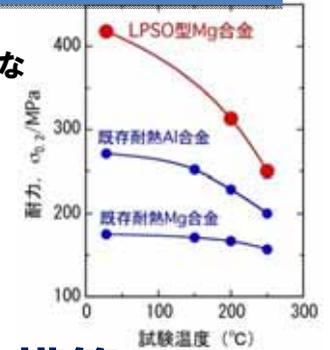
高分子電解質ブラシ表面における  
濡れ性、摩擦、接着との関係を解明

# シンクロ型LPSO構造の材料科学 - 次世代軽量構造材料への革新的展開-(具体例)

(科研費新学術領域研究、領域代表者 河村(熊本大)H24-28)



室温・高温で驚異的な機械的強度



## 構造科学班 (A01): 構造解析と計算科学の融合によるLPSO構造科学の構築

- SPring-8、J-PARC等を活用し、世界最高精度の構造決定
- 計算科学により原子・電子レベルからの構造決定因子の特定

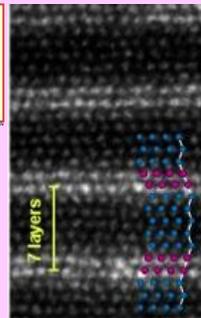
### 精密構造の決定

連携

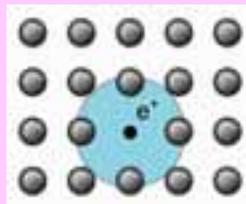
### 構造決定因子の解明

#### A01-1 構造モデルの導出

電子線による積層構造評価

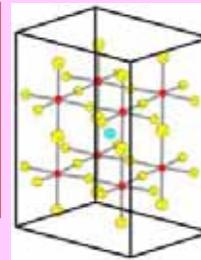


陽電子による欠陥評価



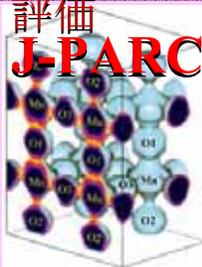
#### A01-2 精密原子配列の解明 電子密度分布の解明

中性子による精密原子配列



評価  
J-PARC

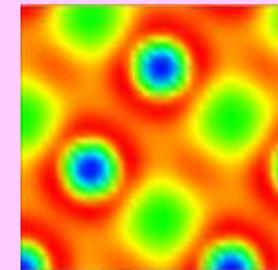
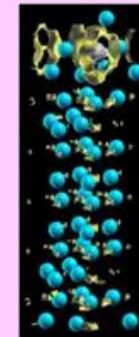
放射光による電子密度分布評価



SPring-8

#### A01-3 構造の評価・予測

第一原理計算による原子配列・電子密度分布評価  
JAEA大型計算機等



# パルス中性子とシンクロトン放射光をプローブとする革新型蓄電池の高度解析技術開発 (NEDO 革新型蓄電池先端科学基礎研究事業 (RISING事業) 小久見善八京大特任教授、H21-27)

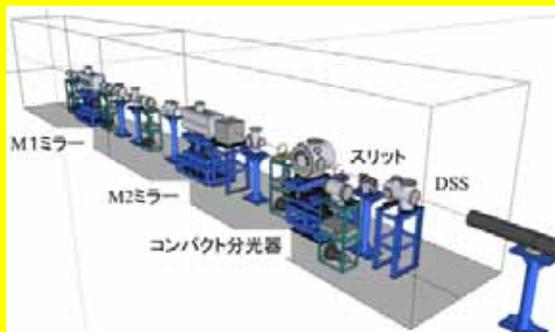
革新型蓄電池実現に向けた**2030年までに**、電池反応メカニズムの解明の**基礎研究を推進**する。SPring-8やJ-PARC等を用い、電池作動状態の**世界最高レベルの解析技術を開発**、**リチウムイオン電池性能飛躍とポストリチウム電池開発に活かす**。

All Japan  
の体制

(大学)京大、九州大、東工大、東北大、立命館大、静岡大、早稲田大、茨城大、北大、理科大  
(企業)トヨタ自動車、ホンダ、日産自動車、三菱自動車、日立、パナソニック、三洋、三菱重工、豊田中研、GSユアサ、日立マクセル、新神戸電機、  
(研究所)産総研、高エネ研、JAEA、ファインセラミックスセンター

## SPring-8とJ-PARCを駆使して充放電その場時・空間観測技術を確立

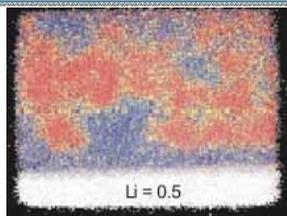
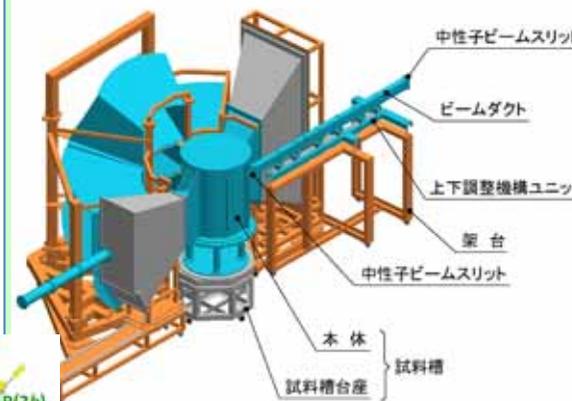
SPring-8に京大が専用ビームラインを建設(BL28XU)



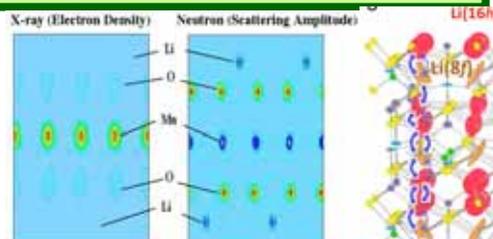
電極内の反応構造変化と分布(高い空間分解能)  
界面の構造変化解析

リチウムイオンの分布  
電極の反応構造変化解析  
電解質の精密な構造

J-PARCにKEKが専用ビームラインを建設(BL09: SPICA)



イメージングXAFS  
50%充電時のリン酸鉄リチウム電極表面面内のリチウムイオン分布の変化(青リチウムイオン多い、赤少ない)。



高分解能NPD  
世界最高のイオン導電率を持つ固体電解質が開発され、その結晶構造が解明された。