

材料開発を加速する先端分析事例と中性子への期待（特別講演）

株式会社東レリサーチセンター

石切山 一彦、中田 克、山根 常幸

製造業の材料開発現場では、種々の物性のトレードオフを解消し、物性・品質向上のために物性発現メカニズムの究明や、物性低下・劣化等の本質原因究明が求められている。まずは仮説を立て、その仮説に基づいて材料を試作し、その妥当性を検証、そして再び仮説を立てて物性向上を図る、というサイクルを高速回転させることによってこれまで材料開発を加速させてきた。この仮説検証段階では、物性確認とともに材料分析・評価が決め手となることも多い。ときには着目成分が微量すぎて検出限界以下となり、仮説を検証できないことがある。大型量子ビーム施設を含めて、分析技術が格段に進歩・発展して測定感度や分解能が向上すると、トラブル原因の究明が進展し、新素材の開発はスピードアップする。このため材料・素材に関わる産業界では分析技術は極めて重要な役割を担っている。一方、第4の科学パラダイムとも言われているデータ駆動型材料開発が最近注目されている。従来型の仮説検証サイクルにより原因究明せずとも、効率的に材料創生が可能になり、材料開発は大きくパラダイムシフトしようとしている。ただし、その際のキーになるのは高品質なデータ取得であり、そのためにも分析・計測が注目されている。

当社は、1978年の設立以来、常に新規な分析技術を導入・開発し、“分析の極限追求”をキーワードとして分析の高度化に取り組んでいる。講演では、中性子全散乱および準弾性散乱、動的核スピン偏極（DNP）による中性子小角散乱等を用いて、逆浸透（RO）膜¹⁾、炭素繊維²⁾、生体適合性高分子の中間水³⁾や細胞内氷晶について構造解析を実施した事例を紹介する。さらに、最近の先端分析事例として、*in-situ* TEMによる有機単分子の高温下における化学反応追跡、AFM-Ramanによる光学限界を超えた局所構造解析を可能にした分光分析、Nano-SIMSによる局所元素分析マッピングの結果等を紹介した後、中性子への期待を述べる。

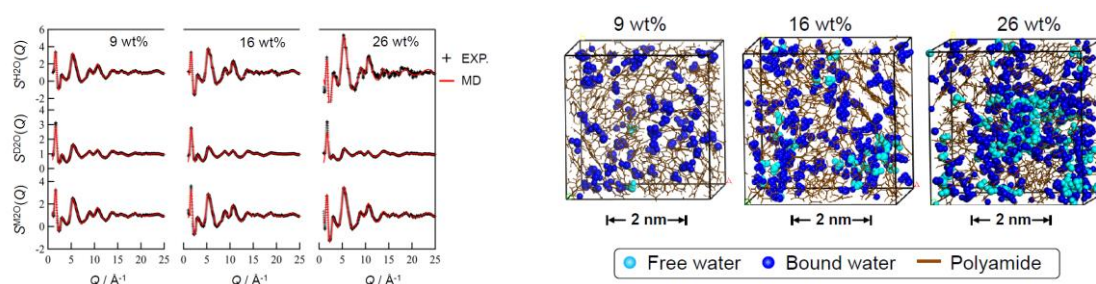


図 1. 逆浸透膜（RO 膜）の中性子全散乱結果(左)と MD 計算結果(右)¹⁾

文献 1) Kawakami T., Nakada M., Shimura H., Okada K., and Kimura M., *Polymer Journal*, **50**, 327-336 (2018). 2) Ono K., Okuda H., Takada M., and Tanaka F., *TANSO*, **285**, 185-196 (2018). 3) Nakada M., Yamada T., Ikeda Y., and Otomo T., *Proc.3rd J-PARC Symposium*, 011080 (2019).