

中性子科学研究施設

Neutron Science Laboratory

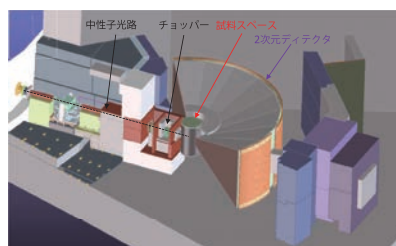
中性子は透過力に優れ、微小磁石の性質を持つので、原子の中心にある原子核やその周りにある電子のつくる磁場と力を及ぼし合う。この性質を利用して物質による中性子の散乱のされ方を測定し、物質内の原子や磁気モーメントの配列や運動の様子を知る実験方法を「中性子散乱」という。物性研究所の中性子科学研究施設では主に日本原子力研究開発機構の研究用原子炉 JRR-3 に設置された分光器を用いて、中性子散乱実験による物性研究のための全国共同利用を推進してきた。さらに、2009年に本格稼働した大強度陽子加速器施設 J-PARC においては、最新のチョッパー型分光器 HRC を用いた共同利用の推進を行っている。当施設が実施する全国共同利用により、高温超伝導体の研究、フラストレートした磁性体や重い電子系、低次元磁性体等の様々な磁性体の研究をはじめとして、複雑凝縮系の化学物理、高分子やコロイドの構造や相転移、生体物質の高次構造と機能の研究、などハードマテリアルからソフトマテリアルまで含む幅広い物質や材料の基礎研究が中性子散乱を用いて盛んに行われている。また、当施設は日米協力事業「中性子散乱分野」の実施機関としても活動し、我が国の中性子散乱研究の発展に貢献している。

Since 1961, the ISSP has been playing a central role in neutron scattering activities in Japan not only by performing its own research programs but also by providing a general user program for the university owned various neutron scattering spectrometers installed at the research reactor of JAEA (Tokai). In the JRR-3 reactor (20MW), the university group owns 14 spectrometers, and the Neutron Science Laboratory (NSL) is conducting the general user program. Furthermore the NSL owns state-of-art inelastic neutron scattering spectrometer HRC in J-PARC which started its operation in 2009. Major research areas supported by NSL user program are solid state physics (strongly correlated electron systems, high- T_c superconductors, heavy Fermions systems, low dimensional magnetism, high-pressure physics, etc.), fundamental physics and neutron beam optics, structure and phase transitions of polymers, gels, and colloidal systems, physical chemistry of complex condensed matter, structure and functions of biological systems, and material sciences. The NSL also operates the U.S.-Japan cooperative program on neutron scattering, and supports the development of the neutron-beam-based material sciences in Japan.

| | | | | | |
|------------------------------|----------------------|--------------------------|------------------|--------------------|------------------|
| 教授 (施設長) | 柴山 充弘 | 助教 | 古府 麻衣子 | 特任研究員 | 秋葉 宙 |
| Professor (Director) | SHIBAYAMA, Mitsuhiro | Research Associate | KOFU, Maiko | Project Researcher | AKIBA, Hiroshi |
| 教授 | 吉澤 英樹 | 助教 | 左右田 稔 | 特任研究員 | 中尾 俊夫 |
| Professor | YOSHIZAWA, Hideki | Research Associate | SODA, Minoru | Project Researcher | NAKAO, Toshio |
| 教授 | 山室 修 | 助教 | リ シャン | 特任研究員 | 池田 陽一 |
| Professor | YAMAMURO, Osamu | Research Associate | LI, Xiang | Project Researcher | IKEDA, Yohichi |
| 准教授 | 益田 隆嗣 | 技術専門職員 | 浅見 俊夫 | 特任研究員 | 浅井 晋一郎 |
| Associate Professor | MASUDA, Takatsugu | Technical Associate | ASAMI, Toshio | Project Researcher | ASAI, Shinichiro |
| 准教授 (客員) | 山田 鉄平 | 技術専門職員 | 杉浦 良介 | 特任研究員 | 守島 健 |
| Visiting Associate Professor | YAMADA, Teppei | Technical Associate | SUGIURA, Ryosuke | Project Researcher | MORISHIMA, Ken |
| 教授 (外国人客員) | チャン リージェン | 技術職員 | 川名 大地 | 特任研究員 | 萩原 雅人 |
| Visiting Professor | CHANG, Lieh-Jeng | Technical Associate | KAWANA, Daichi | Project Researcher | HAGIHARA, Masato |
| 教授 (外国人客員) | ロットー マーティン | 専門員 | 木船 聡 | | |
| Visiting Professor | ROTTER, Martin | Administrative Secretary | KIFUNE, Satoshi | | |

大強度陽子加速器施設 J-PARC に設置された高分解能チョッパー分光器 (HRC)。50Hz で発生する白色のパルス中性子は、中性子光路を通りチョッパーで単色化された後、試料で散乱され、2次元ディテクタで検出される。ディテクタでは全てのエネルギーの中性子をもれなく測定するため、効率的なデータ収集が可能となっている。

High resolution chopper spectrometer installed in J-PARC. A white pulsed neutron beam generated with the frequency of 50 Hz propagates inside the neutron beam guide. The beam is monochromated by the Fermi chopper, scattered by the sample, and detected by 2-dimensional detectors. The detectors detect all the scattered neutrons with all the energy, which makes the data acquisition drastically efficient.

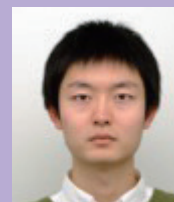


柴山研究室

Shibayama Group



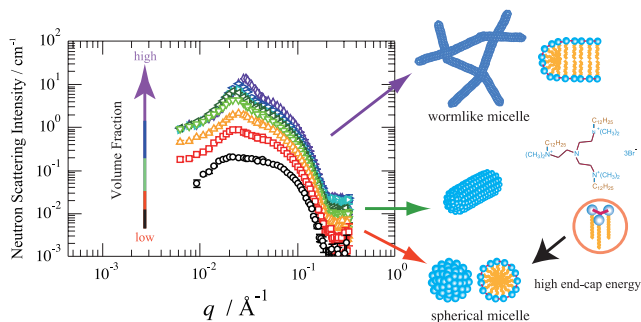
柴山 充弘
SHIBAYAMA, Mitsuhiko
教授
Professor



リ シャン
LI, Xiang
助教
Research Associate

ソフトマターとは、我々の身の回りの物や生体物質を構成する「柔らかい」物質・材料のことである。磁性体や超伝導物質などのハードマターでは超高压や極低温という極限環境において特異的な物性を示すのに対し、ソフトマターでは常温・常圧付近で興味深い物性を示し、多様な機能を果たす。我々の研究室ではソフトマターの本質である—分子結合相関—の学問的体系化を目指している。最近では、ゲルの相分離・相転移、不均一性の研究などのほか、驚異的な力学物性をもつさまざまな高強カゲルの開発と構造解析・物性研究、流動場におけるミセルの物性と構造相関、イオンゲルの開発と構造解析・物性評価などを行っている。

世界有数の二次元位置測定小角中性子散乱 SANS-U を中心に、静的動的散乱装置 (SLS/DLD ALV-5000)、力学・熱物性測定装置、レオメーターなどを用いて、ソフトマターのナノオーダーの構造解析、ナノ秒から数千秒までのダイナミクスをカバーした幅広い研究を展開している。

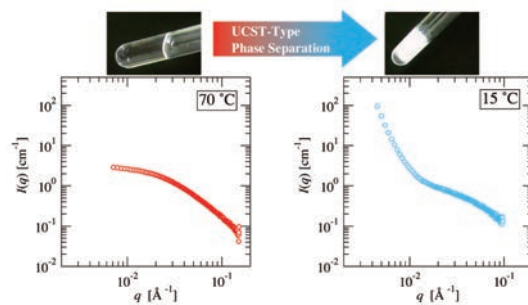


星形三叉型界面活性剤分子のミセル形成・成長過程の小角中性子散乱観察。界面活性剤の量の増大に伴い、球状から紐状ミセルへ転移し、さらに紐が絡み合った構造へと転移する。

Variation of SANS profiles for star-type trimeric surfactant in aqueous solution with varying volume fractions. With increasing surfactant concentration, micelles are transformed from spherical to wormlike micelles, followed by entangled rodlike micelles.

Soft matter undergoes various transitions in response to a slight change of an environmental variable. We investigate the relationship of the structure and dynamics of soft matter, such as polymer gels, nanoemulsion, and micelles. The aims of our research are systematization of “molecular-bond correlated systems”. Concurrently, we explore various applications of soft matter on the basis of the physics of soft matter. Recently, we are developing various types of super-tough gels on the basis of findings on the structure-property relationship unveiled by neutron scattering.

Nano-order structure investigations and studies on dynamics of soft matter are carried out with state-of-the-art equipments, SANS-U, a small-angle neutron scattering instrument (upgraded in 2010). Other techniques, such as dynamic/static light scattering, microscopy, mechanical/thermal analyses, and rheological studies, are also employed if necessary. Current interests cover (1) inhomogeneities in polymer gels, (2) structural characterization and studies on deformation mechanisms of high-performance polymer gels, (3) rheo-SANS of nanoemulsion and micelles, and (4) development of ion-gel and structural analyses.



ポリN-イソプロピルアクリルアミド/イオン液体溶液の小角中性子散乱プロファイルの温度依存性。温度の低下により系は相分離 (UCST 型相挙動) し、水を溶媒とする系 (LCST 型相挙動) と逆の挙動を示す。

Temperature dependence of SANS profiles of pNIPAm/ionic liquid solutions. By lowering temperature, the system undergoes phase separation (UCST type behavior), which is opposite to pNIPAm/water systems (LCST).

研究テーマ Research Subjects

1. 機能性高分子ゲルの構造とダイナミクス、体積相転移、ゾルゲル転移
Structure and dynamics, phase separation, and sol-gel transition of functional polymer gels
2. 高強カ高分子ゲルの変形メカニズム
Deformation mechanisms of super-tough polymer gels
3. 流動場でのナノエマルジョンおよびミセルの構造変化
Structural evolution of nanoemulsion and micelles in flow field
4. イオンゲルの開発と構造解析
Development of ion-gel and structural analyses

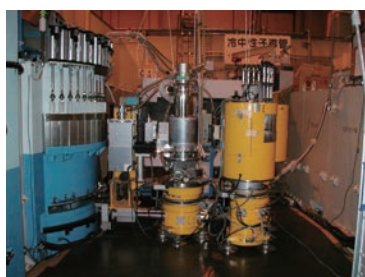
吉澤研究室

Yoshizawa Group



吉澤 英樹
YOSHIZAWA, Hideki
教授
Professor

遷移金属酸化物の示す金属・絶縁体転移は、スピン・電荷・格子・軌道状態などが密接に関連して生じる現象として盛んに研究されてきている。当研究室では、大強度陽子加速器施設 (J-PARC) の加速器や日本原子力研究開発機構 (JAEA) の研究炉で発生される中性子ビームを用いて中性子散乱と呼ばれる研究手法により、遷移金属酸化物の示す電荷・軌道秩序や磁性および構造相転移と電気伝導との関連などを系統的に研究している。左下の図は、日本原子力研究開発機構 (JAEA) の研究炉に設置された物性研究所の中性子分光器の1台である。中性子散乱実験では、このような分光器を使用して物質の非弾性散乱スペクトル等を測定する。右下の図は、高温超伝導銅酸化物の一つである $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ と同型の結晶構造を持つ $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ 系において観測されるストライプ秩序のドーピング濃度依存性を $x=1/2$ までの高ドーピング領域まで測定した結果得られたストライプ秩序の形成温度とストライプ秩序のストライプの間隔のホール濃度依存性を示したものである。ストライプ秩序の形成温度は $x=1/3$ で極大を示したあと減少に転ずる。また、 $x=1/2$ 以上のさらに高ドーピング濃度領域では、次第に電気抵抗が減少し $x\sim 0.9$ 付近で絶縁体-金属転移を示す。最近のパルス中性子を用いたスピンドYNAMIKSの研究によれば、Ni や Co の 2 次元層状酸化物においても線形スピン波理論では解釈のつかない特異な砂時計型のスピンドYNAMIKS が観測されており、そのような異常なスピンドYNAMIKS と輸送現象、低次元性の関連を中性子非弾性散乱実験により研究している。



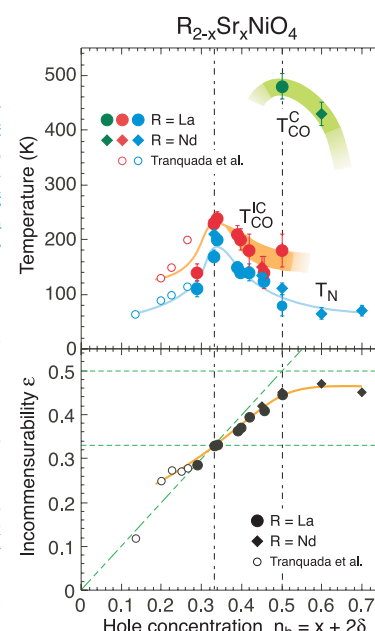
日本原子力研究開発機構 (JAEA) の研究炉 JRR-3 に設置された物性研究所の 3 軸型中性子分光器。

Triple-axis spectrometer installed at the JRR-3 in the Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Ibaraki.

Metal-insulator transition in transition-metal oxides has drawn much attention because such a phenomenon reflects interplay among spin, charge, lattice, and orbital degrees of freedom. Our group has been studying their behavior by neutron scattering technique with use of pulse and steady-source neutron beams, and the triple axis neutron spectrometer owned by the ISSP is shown in the left figure below. The hole-doping dependences of the incommensurability and the transition temperature of the stripe ordering for the hole concentration x up to $x = 0.5$ have been observed in the highly-doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ which is one of the isomorphous compounds of the High T_c cuprate superconductors. The ordering temperatures of the stripe charge as well as spin orderings have the maxima at $x = 1/3$, and they decrease beyond $x = 1/3$. Beyond $x=1/2$, the Ni system gradually becomes metallic and shows the insulator to metal transition at $x\sim 0.9$. Recent pulse neutron studies on Ni and Co systems revealed that the unusual hour-glass type spin excitations exist in these 2 dimensional transition metal oxides, and our group is studying such unusual spin dynamics and their relation to the transport properties with using pulse and reactor-source inelastic neutron spectrometers.

高温超伝導を示す銅酸化物の一つである $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ と同型の結晶構造を持つ $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ の系において観測されたストライプ秩序のドーピング濃度依存性。ストライプ秩序の転移温度と付随した磁気秩序の転移温度は $x=1/3$ で極大を示したあと減少に転ずる。またストライプ秩序の周期は $x=1/2$ までドーピング濃度と近似的に線形な関係を示めすが、詳細に見てやると $x=1/3$ の前後で特徴的なずれを示し $x=1/3$ の濃度の特殊性を際立たせている。この特異な振舞いは、ストライプ内のキャリア濃度の変化と関係があることがホール効果の測定結果から示唆されている。

Doping dependence of the stripe ordering in highly-doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$, which is an isomorphous compounds of one of High T_c cuprate superconductors $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Unlike the expectation from the previous studies, the transition temperatures of the stripe charge and spin orderings exhibit the maximums at $x = 1/3$, and decreases above $x = 1/3$. The periodicity of the stripe order is approximately linear in x , but levels off beyond $x=1/2$. The system gradually becomes metallic and shows the insulator to metal transition near $x\sim 0.9$.



研究テーマ Research Subjects

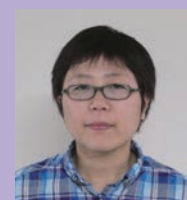
1. 遷移金属酸化物が示す金属・絶縁体転移や、その際に出現する磁気秩序・電荷秩序・軌道秩序などの中性子散乱による研究
Neutron scattering study of metal-insulator transition, magnetic ordering, charge/orbital orderings in transition-metal oxides
2. 中心対称性の欠損した超伝導体における磁気秩序とスピンドYNAMIKSの研究
Neutron scattering study of spin structure and dynamics in noncentrosymmetric magnetic superconductors

山室研究室

Yamamuro Group

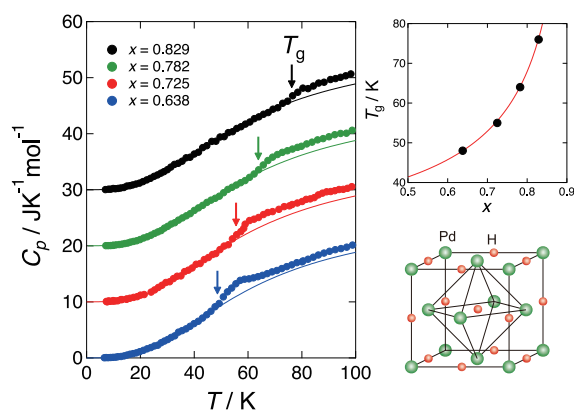


山室 修
YAMAMURO, Osamu
教授
Professor



古府 麻衣子
KOFU, Maiko
助教
Research Associate

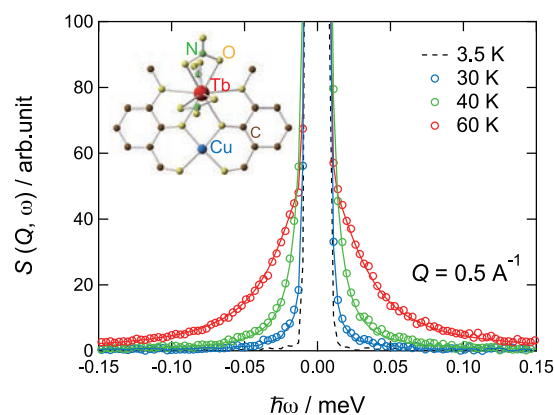
本研究室では複雑凝縮系の化学物理を研究している。現在の主な対象は、ガラス・過冷却液体、水およびその関連物質、イオン液体、水素吸蔵固体、単分子磁石である。ガラス転移は液体が構造変化を起こさずに固化する不思議な現象であり、物性物理学の長年の大問題の一つである。水は最も身近な物質の一つであるが、水素結合が織りなす種々の特異物性を示す。イオン液体では、静電力とファンデルワールス力の競合から、様々な新しい物性が現れる。固体中の水素は、ポテンシャル面によって古典拡散と量子（トンネル）拡散を起こす。単分子磁石は高密度磁気記録媒体などの応用面だけでなく、磁化反転の量子効果など基礎物性面でも興味深い。これらの物質に対して、中性子散乱、X線回折、熱容量、誘電緩和などを測定し、構造・ダイナミクス・熱力学の3視点から、複雑な物質に内在する単純(?)な法則を明らかにすることを目指している。



パラジウム水素化物の熱容量。水素運動の凍結によるガラス転移が現れた。右上図はガラス転移温度の組成依存性、右下図は結晶構造の模式図。

Heat capacities of palladium hydrides. Glass transitions due to the freezing of hydrogen motions appeared. Upper-right and lower-right figures represent the composition dependence of T_g and the crystal structure, respectively.

We are studying chemical physics of complex condensed matters, especially glasses and supercooled liquids, water and related materials, ionic liquids, hydrogen storage solids and single molecule magnets (SMMs). Glass transition is a mysterious phenomenon in which liquids solidify without structural change. This is one of big and long-standing issues in physics. Water, which is the most familiar material for us, exhibits various unique phenomena caused by hydrogen bonds. Ionic liquids have many interesting properties originating from competing electrostatic and van der Waals interactions. Hydrogen in solids exhibits classical and/or quantum (tunneling) diffusion dependently on potential energy surfaces. SMMs are significant not only for applications but also for basic physical properties such as quantum effects on magnetization reversal. These substances are investigated from neutron scattering, x-ray diffraction, heat capacity, and dielectric measurements. Our aim is to find simple (?) rules involved in complex systems from the three different points of view, i.e., structure, dynamics, and thermodynamic.



希土類単分子磁石の磁化反転による中性子準弾性散乱スペクトル。ローレンツ関数でフィットすることにより緩和時間が得られる。挿入図は分子構造を示す。

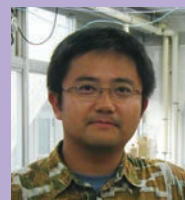
Quasielastic neutron scattering spectra due to the magnetic reversal of a rare-earth based molecule magnet. The relaxation times are obtained by fitting the data to Lorentz functions. The inset shows the molecular structure.

研究テーマ Research Subjects

1. ガラス転移、ボゾンピークなどの不規則凝縮系のダイナミクス
Dynamics of disordered condensed systems, such as glass transitions and boson peaks
2. 水および関連物質（含水多孔性結晶など）の構造とダイナミクス
Structure and dynamics of water and related materials such as hydrated porous crystals
3. 常温イオン液体の熱力学的性質とダイナミクス
Thermal and dynamical properties of room-temperature ionic liquids
4. 水素吸蔵固体の熱力学的性質とダイナミクス
Thermal and dynamical properties of hydrogen storage solids
5. 単分子磁石のスピンダイナミクス
Spin dynamics of single molecule magnets

益田研究室

Masuda Group



益田 隆嗣
MASUDA, Takatsugu
准教授
Associate Professor



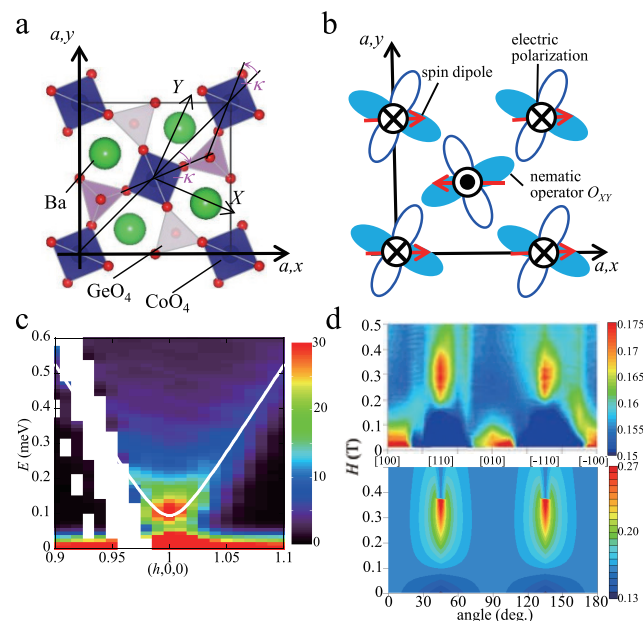
左右田 稔
SODA, Minoru
助教
Research Associate

本研究室は、低次元スピン系やフラストレーション系などにおける新しい量子現象・量子状態を実験的に発見することを目標の一つとしている。強い量子性や幾何学的フラストレーションは、自明な古典的秩序状態を阻害し量子状態が基底状態となる上に、小さな摂動に敏感なため、低次元スピン系やフラストレーション系は量子現象開拓のフロンティアとなっている。我々は、スピン液体、RVB、キューボック構造、スキルミオン格子等、新しい磁気状態を意識した研究を行っている。もう一つの興味の対象は、マルチフェロイック系やリラクサー磁性体などにおける、新しい電気磁気効果である。とりわけマクロな熱力学量が非共役な外場によりコントロールされる系において、ミクロにはどのような状態が実現しているかを明らかにすることを、目標としている。図は、マルチフェロイックス物質において、反強的ネマティック相互作用が存在していることを、中性子実験と磁化測定から明らかにした例である。

One of the research goals in our group is to find a novel quantum phenomenon and to reveal its mechanism in low-dimensional spin magnets and frustrated magnets. Strong quantum fluctuation or geometrical frustration disturbs the development of trivial magnetic states and induces a non-trivial quantum state. Furthermore such a state is sensitive to a small perturbation and, thus, the area is frontier of quantum phenomena. Our research topic includes spin liquid, RVB, Cuboc structure, skyrmion lattice, etc. Another goal is to observe a new magnetoelectric effect in multiferroic compounds and/or relaxor magnets. Particularly we focus on the microscopic mechanism in the system where the macroscopic thermodynamic quantities are controlled by non-conjugate field. Figure is an example of our study identifying the existence of antiferromagnetic interaction in a multiferroic compound by combination of neutron scattering technique and magnetization measurement.

a, マルチフェロイックス性を示す2次元反強磁性体 $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ の結晶構造。b, $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ のスピン双極子、ネマティックオペレータ O_{XY} 、および電気分極秩序。赤い矢印がスピン双極子、円が電気分極、クローバーがネマティックオペレータを表す。c、中性子散乱スペクトル。0.1meVの異方性ギャップはアンチフェロネマティック相互作用の存在により説明される。d、磁化率 dM/dH の角度依存性の実験データおよび計算結果。アンチフェロネマティック相互作用を考慮した計算と実験結果はコンシステントである。

a, Crystal structure of $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$. b, Structures of spin dipoles, spin nematic operator O_{XY} , and electric polarizations in $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$. Red arrows are spin dipoles and open circles with crosses and small filled circles indicate the directions of electric polarization calculated by using the relation between spin nematic operator and electric polarization. Two-tone clovers are nematic operators. c, Inelastic neutron scattering spectrum. Anisotropy gap of 0.1 meV is explained by antiferro-nematic interaction. d, Angular dependence of magnetic susceptibility dM/dH . Calculation including antiferro-nematic interaction and experimental data are consistent.



研究テーマ Research Subjects

1. 量子磁性体及びフラストレート磁性体の磁気構造と磁気励起
Magnetic structure and excitations in frustrated magnets and quantum magnets
2. マルチフェロイックス
Multiferroics
3. 酸素超結晶の磁気励起
Magnetic excitation in supercrystal of oxygen molecule in nanoporous metal complex

山田研究室

Yamada Group



山田 鉄兵
YAMADA, Teppei
客員准教授
Visiting Associate Professor

新規のイオン性柔粘性結晶を合成し、構造やパッキングの対称性に由来する、特異なイオン伝導特性の探索を行っている。

イオン伝導現象は、リチウムイオン電池や燃料電池、キャパシタなどのエネルギーデバイスにおいて重要な役割を担っている。我々はイオン伝導性柔粘性結晶に「構造」を導入することで、全く新しいイオン伝導挙動を発現することを目指している。

イオン性柔粘性結晶は固体と液体の中間相であり、周期的に配列したイオンが回転運動やホッピングによる拡散運動をすることから、新しいイオン伝導体として注目が集まっている。本研究室ではキラリティを有するカチオンもしくはアニオンを用いたイオン対を合成し、新規の柔粘性結晶相を見出している。このキラル柔粘性結晶のイオンの非対称伝導現象を探求するとともに、構造とイオン伝導性との相間を解明し、全く新しいエネルギーデバイスの構築を物質科学の側面から探求している。中性子回折法からは構造の、準弾性散乱法からはイオン運動の情報が得られる。

My research subject is the synthesis and structure of novel ionic plastic crystals, and the quest for peculiar ionic conductivity derived from the symmetry and packing of the ionic species.

Ionic conductivity becomes more and more important recently because they are used as electrolytes in emerging energy devices such as lithium ion battery, fuel cells and capacitors. I intend to introduce “structure” to the ion conductive plastic crystals for the sake of achieving a novel style of ionic conductivity.

Ionic plastic crystal is an intermediate phase between crystalline solid and liquid. It has periodically arranged ionic species, which shows rotational motion at the sites and jump-diffusion hopping between these sites. We have prepared ion pairs consisting of chiral cation or anion, and found novel plastic crystalline phases. We also intend to achieve asymmetric ionic conductivity of these chiral plastic crystals, and also investigate the relationship between the crystal structure of the ionic plastic crystals and the ionic conductivity of it by neutron diffraction study. Neutron diffraction and quasielastic scattering techniques present the information for the structure and ionic motions, respectively.

チャン研究室

Chang Group



チャン リージェン
CHANG, Lieh-Jeng
外国人客員教授
Visiting Professor

固体物理におけるナノスケール量子現象の解明は、近年の物性物理学の目標の一つである。先端ナノ量子物性研究所では、ナノサイズの超伝導体と量子磁性体の創発物性の研究を、研究室レベルの実験手法（磁化・比熱・抵抗測定、EPR, NMR 測定など）と大型施設の実験手法（中性子散乱、シンクロトロン X 線回折、 μ SR）を組み合わせることで推進している。最近注目しているテーマは、ナノサイズ超伝導体の磁束格子のダイナミクス、スピン・アイスのモノポール、幾何学的フラストレート磁性体の新しい状態、スピン・軌道相互作用の強い系、などである。

To understand the nano-scale and the quantum phenomena in condensed matters is one of the main trends of modern physics developments. At Advanced Nano and Quantum Matters (ANQM) Laboratory, we principally investigate into the superconductivities of nano-size superconductors, and the emergent phenomena of quantum matters by using in-house low-temperature measurements, such as magnetization, heat capacity, resistivity, EPR, NMR etc.; and various neutron scattering techniques, synchrotron x-ray scatterings, and μ SR by mean of world-wide collaborations. Our recent researches focus on the flux-line dynamics of nano-size superconductors, emergent monopoles in spin ice, ground states and excited states of geometrically frustrated magnets, and the interplay between spin-orbital coupling and electron correlation.

ロッター研究室

Rotter Group



ロッター マーチン
ROTTER, Martin
外国人客員教授
Visiting Professor

近年の最先端の中性子散乱分光器では、検出器数が大幅に増加されるようになったため、検出性能が飛躍的に向上している。また、新規物性を示す酸化物やフラストレートした磁性体、スピン分裂電子系などのエキゾチックな物性を示す物質群の中性子散乱断面積をモデル化できる最先端の効率的なソフトウェアが開発されてきており、そのようなソフトウェアパッケージと中性子散乱測定法を組み合わせることにより、中性子散乱は新次元を開く測定手法へと進化しつつある。一方、加速器ベースの中性子源では eV 領域の高エネルギー中性子が利用可能になったため、J-PARC に物性研が KEK と共同で建設した HRC 分光器のように高エネルギーチョッパー分光器が建設され研究に用いられるようになってきている。このような高エネルギー領域では、中性子散乱断面積を計算する過程で用いられる双極子近似が成り立たなくなる事がしばしば生じ、より高度なモデル計算が必要である。我々は、スピン励起や軌道励起を持つ複雑系の中性子散乱断面積を計算するために“McPhase”ソフトウェアパッケージを用い、その機能を拡張する研究を行っている。

Neutron scattering at spallation and reactor sources has made considerable progress by making use of increased detector capacity. The technique becomes a groundbreaking experimental tool by combining it with efficient modern software for modelling the neutron scattering cross section of exciting new materials such as unconventional oxides, frustrated magnetic materials and spin-split electron systems. Spallation neutron sources provide higher-energy (eV region) neutrons quite effectively and allow to build high-energy chopper spectrometers, such as HRC co-constructed by ISSP and KEK at J-PARC. At this energy the frequently used dipole approximation fails and a more complex model calculation is necessary. We utilise and extend the capabilities of the McPhase software suite to calculate the neutron cross sections of complex materials with spin and orbital excitations.