# 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 fermion 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) Professor (Director)

SHIBAYAMA, Mitsuhiro 吉澤 英樹 教 授 Professor YOSHIZAWA, Hideki 山室 修 教 授 Professor YAMAMURO, Osamu

柴山 充弘

益田 降嗣 准教授 Associate Professor MASUDA, Takatsugu 萩田 克美 准教授(客員)

Visiting Associate Professor HAGITA, Katsumi 大槻 晶 教授(外国人客員) OHTSUKI, Akira Visiting Professor

助 教 Research Associate

LI, Xiang 浅見 俊夫 技術専門職員 Technical Associate ASAMI, Toshio 杉浦 良介 技術専門職員 Technical Associate SUGIURA, Ryosuke 川名 大地 技術専門職員

シャン

KAWANA, Daichi Technical Associate 係長 木船 聡 Administrative Secretary KIFUNE, Satoshi

特仟研究員 Project Researcher

特任研究員 Project Researcher 特任研究員

Project Researcher 特任研究員 Project Researcher

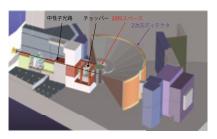
秋葉 宙 AKIBA, Hiroshi

浅井 晋一郎 ASAI, Shinichiro

守鳥 健 MORISHIMA, Ken 吉田 雅洋 YOSHIDA, Masahiro

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.



http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/shibayama\_group.html

# 柴山研究室

Shibayama Group



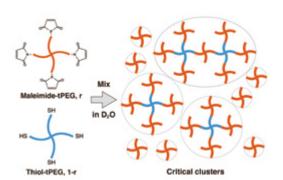
柴山 充弘 SHIBAYAMA, Mitsuhiro 教授 Professor



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圧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一分子結合相関系一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力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、超均一ゲル網目の調製と構造・物性評価、熱硬化性樹脂の高性能化のための構造解析や分子動力学シミュレーション、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、静的動的光散乱装置 (SLS/DLS 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。

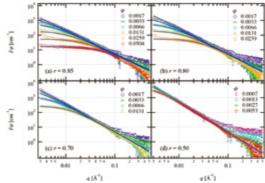


非対称ゲル臨界クラスターの合成概念図。相互反応官能基(マレイミド (分率 r) と チオール (分率 1-r))を有する 4 官能性ポリエチレングリコールを混合することで合成される

An illustration for synthesis of asymmetric critical clusters by mixing two different types of tetra-armed PEG prepolymers with mutual reactive end groups (maleimide-tPEG (r) and thiol-tPEG (1-r)).

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.

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. 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, (5) fabrication of uniform-polymer networks and their structure/ property characterization, (6) development of high-performance thermoset polymers by structure-designing and molecular dynamics simulations.



様々なポリマー体積分率 ( $\phi$ ) や混合比率 (r) 下でのゲル臨界クラスターの小角中性子散乱強度プロファイル。

Small-angle neutron scattered intensity profiles of critical polymer clusters at different tPEG ratio (r) and polymer volume fraction ( $\varphi$ ).

- 1. 均一高分子ゲルの精密合成とその構造解析および物性評価 Evaluation of structure and physical properties of uniform polymer gels
- イオンゲルの開発と構造解析
   Developments of ion gels and structural characterization
- 3. 散乱法による熱硬化性樹脂の構造解析と分子ダイナミクスシミュレーション Structural analyses and molecular dynamics simulation of thermoset polymers
- 4. 小角中性子散乱および小角 X 線散乱による高分子ゲルの構造解析 Structural analyses of polymer gels by small-angle neutron and X-ray scattering methods

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yoshizawa\_group.html

# 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 La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> と同型の結晶構造を持つ La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>NiO<sub>4</sub> 系 において観測されるストライプ秩序のドープ濃度依存性を x = 1/2 までの高ドープ領域まで測定した結果をまとめた 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プ濃度領域では次第に電気抵 抗が減少しx~0.9付近で絶縁体-金属転移を示す。最近 の J-PARC のパルス中性子分光器を用いたスピンダイナミク スの研究により2次元層状 Ni 酸化物のスピンダイナミクス は、x = 1/2 以下のストライプ相と x = 1/2 以上の市松模 様型電荷秩序相において定性的に振る舞いが異なっている ことを見いだし、そのような特異なスピンダイナミクスと輸送 現象の関連についてさらに詳しい研究を行っている。

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 steadysource neutron beams, and the triple axis neutron spectrometer owned by the ISSP is shown in the left bottom figure. The hole-doping dependences of the incommensurability and the transition temperature of the stripe ordering for hole concentration x up to x = 0.5 have been observed in the highly-doped La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>NiO<sub>4</sub> which is one of the isomorphic compounds of the High T<sub>c</sub> 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 show the insulator to metal transition at  $x \sim 0.9$ . Our recent pulse neutron studies on the Ni system revealed that the characteristics of the spin dynamics changes at x = 0.5, and further detail studies of such unusual spin dynamics and their relation to the transport properties are now ongoing.

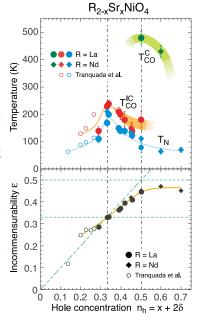


日本原子力研究開発機構(JAEA) の研究炉 JRR-3 に 設置された物性研究所の 3 軸型中性子分光器。

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

高温超伝導を示す銅酸化物の一つである  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  と同型の結晶構造を持つ  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$  の系において観測されたストライプ秩序のドーブ濃度依存性。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。さらに高濃度ドーブ領域では、次第に金属的となり、 $x\sim0.9$  付近で絶縁体金属転移を示す。

Doping dependence of the stripe ordering in highly-doped  $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ , which is an isomorphic compounds of one of High  $T_c$  cuprate superconductors  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . 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  $x\sim0.9$ .



- 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ダイナミクスの研究
  Neutron scattering study of spin sturucture and dynamics in noncentrosymmetric magnetic superconductors

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yamamuro\_group.html

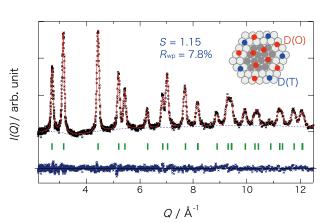
## 山室研究室

Yamamuro Group



山室 修 YAMAMURO, Osamu 教授

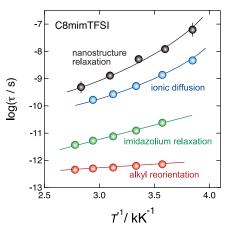
本研究室では複雑凝縮系の化学物理を研究している。現在の主な対象は、ガラス・過冷却液体、水およびその関連物質、イオン液体、水素吸蔵金属ナノ粒子である。ガラス転移は液体が構造変化を起こさずに固化する不思議な現象であり、物性物理学の長年の大問題の一つである。水は最も身近な物質の一つであるが、水素結合が織りなす様々な特異物性を示す。イオン液体では、静電力とファンデルワールス力の競合から、ナノドメイン構造や階層的ダイナミクスが現れる。金属ナノ粒子中の水素原子は、表面効果によりポテンシャル面が歪められるため、バルクでは見られない特異な構造やダイナミクスを示す。これらの物質に対して、中性子散乱、X線回折、熱容量、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。



パラジウム重素化物ナノ粒子( $PdD_{0.36}$ )の中性子回折パターンとリートベルト解析結果。ナノ粒子の表面付近では、D原子は正8面体サイト(バルクではこのサイトのみ)だけでなく正4面体サイトにも存在することが分かった。

Neutron powder diffraction pattern and the result of the Rietveld analysis for nanoparticles of palladium deuteride (PdD $_{0.36}$ ). We found that D atoms occupy not only the O sites (only this site for bulk samples) but also the T-sites at around the surface of the nanoparticles.

We are studying chemical physics of complex condensed matters, especially glasses and supercooled liquids, water and related materials, ionic liquids, and nanoparticles of hydrogen storage metals. 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 nanometer-size domains and hierarchical dynamics generated by competing electrostatic and van der Waals interactions. Hydrogen atoms in metal nanoparticles give rise to unusual structure and dynamics caused by the surface effects and resultant distorted potential energy surfaces. These substances are investigated by 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.



イオン液体 C8mimTFSI の緩和マップ。これらの緩和時間は3台の分光器による中性子準弾性散乱実験により決定された。4つの異なる緩和モードが1 ps から 100 ns の広い時間領域に存在している。

Overall relaxation map of C8mimTFSI. These relaxation times were determined by quasielastic neutron scattering experiments using 3 spectrometers. Four different relaxation modes exist in a wide time range between 1 ps and 100 ns

- 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

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/masuda\_group.html

### 益田研究室

Masuda Group



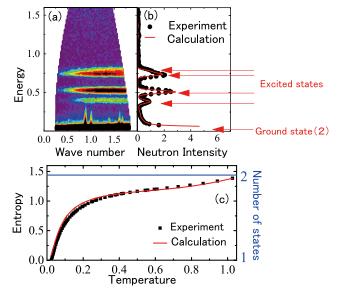
益田 隆嗣
MASUDA, Takatsugu
准教授
Associate Professor

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、キューボック構造等、新しい磁気状態の研究と、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の研究を行っている。図(a),(b) はブリージングパイロクロア反強磁性体のBa3Yb2Zn5O11 の中性子スペクトルであり、解析により擬二重縮退した基底状態が示された。図(c)のエントロピーは、極低温では一つの状態が選択され新しいスピン液体が実現している様子を示している。

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, etc. Another goal is to observe a new magnetoelectric effect in multiferroic compounds and/or relaxor magnets. Figures (a) and (b) show neutron spectra of breathing pyrochlore antiferromagnet Ba<sub>3</sub>Yb<sub>2</sub>Zn<sub>5</sub>O<sub>11</sub> and the analyses reveal that the ground state is quasi-doublet. In the measured entropy in Fig. (c) we observe that unique ground state is selected and a novel spin liquid is realized at very low temperature.

 $Ba3Yb_2Zn_5O_{11}$  の中性子スペクトルとエントロピー。(a) 温度 1.5K で測定された中性子スペクトル。(b) 安定状態と励起状態のエネルギー分布。(c) エントロピー変化の様子。絶対温度 0 度に向かってエントロピーが 0 に向かい、状態の数が 2 つから 1 つに減っていく様子が観測された。

Neutron spectrum and entropy of spin frustrated magnet  $Ba_3 Yb_2 Zn_5 O_{11}.$  The energy distribution of ground and excited states can be seen in neutron spectra in the panel (a) and (b). With decrease of temperature to absolute zero entropy approaches to zero in the panel (c) and accordingly the number of states changes from two to one.



- 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

# 萩田研究室

Hagita Group



萩田 克美 HAGITA, Katsumi 客員准教授 Visiting Associate Professor

高分子やそのナノ複合材料について、それらの物理的な挙動をコンピュータシミュレーションやデータ解析で明らかにする高分子物理学の研究を行っている。

ナノ粒子やクレイなどを含む高分子ナノ複合材料は、高分子の存在下でナノ粒子やクレイなどが凝集し、構造形成することで、有用な機械的性質を発現している系である。ナノ粒子が数十 nm 程度の大きさを持ち、高分子は太さ 1nm 程度、長さ数百 nm 以上であり、マルチスケールな現象である。小角散乱実験は、10nm ~数 μm の領域の3次元構造に関する情報や、延伸下や流動下における動的挙動に関する情報を得ることができる。近年のスパコンの性能向上に伴い、小角散乱実験データからのモデリング(逆問題解析)や、分子シミュレーションによる順問題解析が可能になった。本研究室では、ナノ粒子やクレイなどを含む高分子複合材料に関する研究を通じて、中性子小角散乱データの計算科学を駆使したシミュレーション解析に関する研究を推進している。

Polymer physics to describe behaviors of polymer chains and polymer composite materials by computer simulations and data analysis are the main subjects of our research.

The polymer nanocomposites filled with nanoparticles and/ or clays have useful mechanical properties with characteristic aggregations of fillers in the present of polymers. They can be regarded as multiscale phenomena because the size of the filler is about a few ten nm and the single polymer chain is about 1 nm thick and about several hundred nm or longer. Small angle scattering experiments provide us structural information in the region of ten nm to several µm and information on dynamic behaviors under stretching and/or shear flow. Recent supercomputer performance enables us modeling (inverse problems) from small angle scattering experiment data and forward problems such as molecular dynamics simulation. Currently, we are studying computationally-intensive data analysis and simulations for small angle neutron scattering through investigations of the polymer nanocomposite materials.

中性子科学研究施設 Neutron Science Laboratory

# 大槻研究室

Otsuki Group

大槻 晶 OTSUKI, Akira 外国人客員教授 Visiting Professor

環境負荷の低い選鉱法の開発など、微粒子混合物の高濃度分散系における粒子間相互作用のキャラクタリゼーションは粉体科学における重要な研究テーマである。選鉱では、分散媒中での分散質の均一分散、特定成分の高濃度化、抽出など、さまざまなプロセスがコロイド科学と密接に関係している。しかしながら、コロイド科学の主たる対象は希薄系であるのに対し、実際の選鉱や鉱物資源の分離などは高濃度分散系で行われることが多い。しかも、最近では、良質な鉱床の欠乏から低品位複雑鉱床からの採掘・選鉱を余儀なくされる場合が多い。さらに、環境負荷の低減から、これまでよりも高濃度の分散系での作業が必要とされている。

本研究では、鉱物資源の選鉱に代表される高濃度微粒子分散系に対して、レオロジー測定、中性子散乱、光散乱、走査型電子顕微鏡、トモグラフィーなどを駆使したキャラクタリゼーション法の開発、および粒子間相互作用の定量化などを目的としている。柴山研では主に顕微動的光散乱法による無機粒子分散系、無機粒子を高分子溶液に分散した複合分散系の研究などで、異分野交流による相乗的な研究展開をねらう。

Characterization of particle-particle interactions in concentrated fine particle suspensions is one of the most important research themes in the colloid and interface science. Such characterization can strongly assist in the development of environmental friendly mineral processing methodologies in which particle dispersion/liberation is significantly important to achieve selective enrichment of the target mineral particles. Such processes are closely correlated with colloidal and interface science since many of the valuable elements are enriched in fine mineral grains. On the other hand, characterization of the particle-particle interaction in concentrated fine particle dispersions is still a challenging task while the depression of high grade ore and the necessity of complex and low grade ore processing have been highlighted. Thus, more efficient processing of concentrated fine particle suspension is a must to maintain our limited natural resources with modest environmental footprint.

In this research, for concentrated fine particle suspensions relevant to the mineral processing, different characterization methods are being applied to precisely quantify the particle-particle interaction. Those characterization methods include suspension rheology, neutron/light scattering, electron microscope, and tomography. In the Shibayama group, using the newly developed dynamic light scattering microscope, I will characterize concentrated inorganic fine particle suspensions and the mixture of inorganic-polymer solution to aim the interdisciplinary research development.