# 附属中性子科学研究施設

Neutron Science Laboratory

中性子は透過力に優れ、微小磁石の性質をもつので、原子核やその周りの電子がつくる磁場と力を及ぼし合う。これを利用して物質による中性子の散乱のされ方を観測し、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日本原子力研究開発機構の研究用原子炉JRR-3の12台の中性子散乱装置および大強度陽子加速器施設J-PARCの高分解能チョッパー分光器 HRCを用いた全国共同利用を推進してきた。これにより、超伝導体、トポロジカル物質、新規量子相などの固体物理研究をはじめとして、ガラスなど複雑凝縮系、イオン伝導体などの材料科学、高分子やゲルなどのソフトマター、生体関連物質まで幅広い物質科学が研究されている。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。

A neutron has excellent transparency of matter and a nuclear magnetic moment. Owing to these properties, neutron scattering is a powerful method to investigate the structure and dynamics of atoms and electron spins in condensed matter. Since 1961, the Neutron Science Laboratory (NSL) has been playing a central role in neutron scattering activities in Japan not only by performing its own research but also by providing a general user program using the university-owned 12 neutron scattering spectrometers installed at the research reactor JRR-3 (20 MW), JAEA (Tokai, Ibaraki). Furthermore, NSL owns stateof-art inelastic neutron scattering spectrometer HRC in J-PARC, which started its operation in 2009. Major research areas supported by the NSL user program are solid state physics (strongly correlated electron systems, superconductors, heavy fermion systems, topological materials, multiferroic materials, novel quantum phases etc.), soft matter (polymers, gels, membranes etc.), complex systems (glass, liquid, clathrate materials, etc.), material science (ionic conductors, hydrogen systems etc.), biological physics, and neutron optics. The NSL also operates the US-Japan cooperative program on neutron scattering since 1984.

施設長 山室 修

Leader YAMAMURO, Osamu

# 山室研究室

### Yamamuro Group

#### 研究テーマ Research Subjects

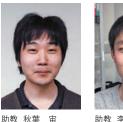
- 1 ガラス転移、ボゾンピークなどの不規則凝縮系のダイナミク
  - Dynamics of disordered condensed systems, such as glass transitions and boson peaks  $\,$
- 2 水および関連物質(含水多孔性結晶など)の構造とダイナミクス Structure and dynamics of water and related materials such as hydrated porous crystals
- 3 イオン液体の熱力学的性質とダイナミクス Thermal and dynamical properties of ionic liquids
- 4 水素吸蔵金属ナノ粒子の構造とダイナミクス Structural and dynamical properties of nanoparticles of hydrogen







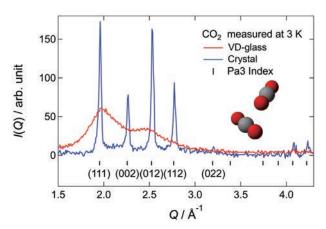
専攻 Course 理学系化学 理学系物理学 Phys., Sci. Chem., Sci.



助教 李 Research Associate LI, Xiang

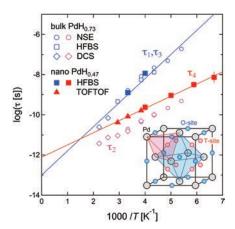
本研究室では複雑凝縮系の化学物理を研究している。現在 の主な対象は、ガラス・過冷却液体、水およびその関連物質、 イオン液体、水素吸蔵金属ナノ粒子である。ガラス転移は液 体が構造変化を起こさずに固化する不思議な現象であり、物 性物理学の長年の大問題の一つである。水は最も身近な物質 の一つであるが、水素結合が織りなす様々な特異物性を示す。 イオン液体では、静電力とファンデルワールス力の競合から、 ナノドメイン構造や階層的ダイナミクスが現れる。金属ナノ 粒子中の水素原子は、表面効果によりポテンシャル面が歪め られるため、バルクでは見られない特異な構造やダイナミク スを示す。これらの物質に対して、中性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

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 the 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.



蒸着 CO<sub>2</sub> ガラス(赤線)と結晶(青線)のX線回折パターン。二体分布関数解 析から、CO2分子はガラスと結晶の両方で図中のような最近接分子間配置をと ることが分かった。

X-ray diffraction patterns of the vapor-deposited glass (red curve) and crystal (blue curve) of CO2. The pair-distribution function analyses revealed that the nearest-neighbor configuration of CO2 molecules is as shown in the figure for both glassy and crystalline



バルクおよびナノ粒子パラジウム水素化物のアレニウスプロット。これらの緩和時 間は4台の分光器による中性子準弾性散乱により決定された。緩和のQ依存性 から、τ1、τ2、τ3 は Ο サイト、τ4 は Т サイトの Η 原子の拡散によることが分かった。

Arrhenius plots of bulk and nanoparticles of palladium hydrides. These relaxation times were determined by the QENS experiments with 4 spectrometers. The Q dependence of the relaxation clarified that  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  and  $\tau_3$  correspond to the H atomic diffusion at the O-sites while  $\tau_4$  at the T-sites

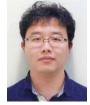


https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/yamamuro\_group.html

#### 研究テーマ Research Subjects

- 1 量子臨界点近傍におけるフラストレート磁性体の非自明な混成モード Nontrivial hybridized mode in frustrated magnet near quantum critical
- 2 中性子によるスピン波スピン流の検出 Detection of spin wave spin current by neutron
- 3 マルチフェロイクス物質の非自明な音響マグノン Nontrivial acoustic magnon in multiferroics
- 4 スピン液体状態の探索 Search of spin liquid





助教 浅井 晋一郎 Research Associate ASAI, Shinichiro

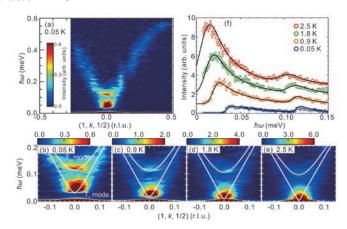
准教授 益田 隆嗣 Associate Professor MASUDA, Takatsugu

専攻 Course 新領域物質系

Adv. Mat., Frontier Sci.

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。スピン液体、RVB、キューボック構造等新しい磁気状態 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に興味を持っている。最近の我々の研究 例として、マルチフェロイクス物質 Ba<sub>2</sub>MnGe<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の中性子非 弾性散乱スペクトルを図に示す。音響マグノン (T<sub>1</sub>) モードの k = 0 におけるエネルギーギャップはスピン・ネマティック 相互作用に起因していること、その温度依存性は磁気モーメ ントではなく電気分極の温度依存性でスケールされることが 明らかにされた。この非自明なふるまいは、電気分極を担う d-p 混成軌道の温度変化により説明された。

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. Figure shows inelastic neutron scattering spectrum measured on multiferroics Ba<sub>2</sub>MnGe<sub>2</sub>O<sub>7</sub>. Energy gap at k=0 of acoustic magnon (T<sub>1</sub>) mode originates from spin nematic interaction, and its temperature dependence is scaled by electric polarization instead of magnetic moment. The nontrivial behavior of the anisotropy gap can be rationalized as change of the hybridized d-p orbital with temperature.



Ba<sub>2</sub>MnGe<sub>2</sub>O<sub>7</sub>の中性子非弾性散乱スペクトル。(a)0.05 K で測定されたスペクトル。(b)-(e) 低エネルギースペクトル ((b)0.05 K, (c)0.9 K, (d)1.8 K, (e)2.5 K)。白線は計算曲線。(f) コンスタント q カットの温度依存性。黒線は計算曲線。

Inelastic neutron scattering (INS) spectra on  $Ba_2MnGe_2O_7.$  (a) False color plot of the INS spectrum measured at 0.05 K. (b)-(e) The INS spectra focused on the low-energy range measured at (b) 0.05 K, (c) 0.9 K, (d) 1.8 K and (e) 2.5 K. (f) Temperature evolution of constant- $\it q$  cuts.



### 中島研究室

### Nakajima Group

#### 研究テーマ Research Subjects

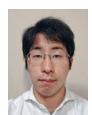
- 1 中性子散乱による磁気スキルミオンの構造とそのダイナミクスの研究
  - Neutron scattering studies on magnetic skyrmions and their dynamics
- 2 光の電場成分に応答する磁気励起 エレクトロマグノン -Magnetic excitations driven by the electric field component of light – electromagnons -
- 3 異方的な応力を用いたマルチフェロイック物質の磁性と誘電性の制御
  - Control of magnetic and dielectric properties in multiferroics by means of anisotropic stress
- 4 時分割中性子散乱法を用いた磁性体における非平衡・過渡現象の研究

 $\label{thm:continuous} Time\mbox{-resolved neutron scattering studies on nonequilibrium and transient phenomena$ 





専攻 Course 工学系物理工学 App. Phys., Eng.



助教 齋藤 開 Research Associate SAITO, Hiraku

固体の磁気的性質は非常に古くから知られており、精力的に研究されてきたテーマである。例えば我々の身近にある磁石では、固体中のスピンが自発的に同じ方向に揃う「強磁性」が実現している。これ以外にも、らせん型や渦型など様々な磁気秩序が存在するが、近年それらのスピン配列の幾何学的特徴が、物質の誘電性、伝導性、あるいは弾性などを大きく変化させ得ることが明らかになってきた。本研究室ではこのような「スピン秩序によって引き起こされる創発物性現象」を主な研究テーマとしている。例としては、らせん型の磁気秩序によって電気分極を生じるマルチフェロイック系や、トポロジカルな渦状磁気構造である磁気スキルミオン等を対象として、中性子散乱とX線散乱を用いて磁気秩序とその励起状態を明らかにすることに取り組んでいる。また、中性子散乱技術自体を発展させるべく、多重極限環境下の測定や時分割測定など、新たな手法開発にも取り組む。

(a) 磁気スキルミオン格子状態におけるスピン配列の模式図 (b) 磁気スキルミオン物質 MnSi の熱平衡 - 準安定状態図。0.2 T の磁場中で急加熱・急冷することで準安定スキルミオン状態が実現する。

26 28

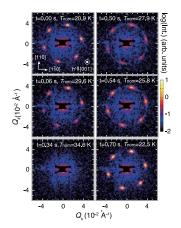
Temperature (K)

30

24

(a) A schematic of magnetic skyrmion lattice. (b) The equilibrium and metastable state diagram of MnSi. The metastable skyrmion lattice state is realized by a rapid temperature sweep in a magnetic field of  $0.2\,\mathrm{T}$ .

Magnetism in solids has been extensively studied in the field of condensed matter physics. A well-known example is ferromagnetism, which means that magnetic moments in a solid are spontaneously aligned to be parallel to each other owing to exchange interactions. Besides the ferromagnetism, there are various types of orders of magnetic moments, such as collinear antiferromagnetic and helical magnetic orders. Among them, non-collinear or non-coplanar magnetic orders have recently attracted increasing attention because they can lead to time-space symmetry breaking which may dramatically alter electronic properties of the systems. We study emergent phenomena induced by the non-collinear/non-coplanar spin orders by means of neutron and X-ray scattering techniques. One example is spin-driven ferroelectricity, where a spiral magnetic order breaks spatial inversion symmetry of the system and leads to spontaneous electric polarization. Another example is a vortex-like spin texture called magnetic skyrmiom, which often appears in a long-wavelength helimagnet. By the virtue of the topologically-nontrivial spin texture, the magnetic skyrmion induces an effective magnetic field acting only on conduction electrons. We are also exploring new methodologies in neutron and X-ray scatterings, such as time-resolved neutron scattering, to investigate the unconventional magnetic orders in detail.



MnSi の準安定スキルミオン格子が熱パルスによって消滅し、その後再形成される過程を時分割中性子小角散乱によって観測した結果。

The results of time-resolved neutron scattering measurement on MnSi in a magnetic field; the hexagonal diffraction patterns correspond to a triangular lattice of metastable skyrmions



 $https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/main contents/organization/labs/nakajima\_group.html\\$ 

# 真弓研究室

### Mayumi Group

#### 研究テーマ Research Subjects

- 1 高強度高分子材料の強靭化メカニズムの解明 Toughening mechanism of tough polymeric materials
- 2 中性子・X線小角散乱法を用いた多成分系高分子・ソフトマター 材料の構造解析
  - Structure of multi-component polymer and soft matter systems by small-angle neutron/X-ray scattering
- 3 中性子準弾性散乱法を用いた多成分系高分子・ソフトマター 材料のダイナミクス解析
  - Dynamics of multi-component polymer and soft matter systems by quasi-elastic neutron scattering





助教 小田 達郎 Research Associate ODA, Tatsuro

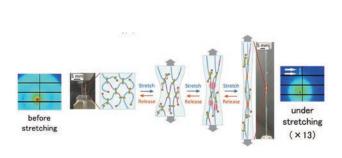
准教授 眞弓 皓一 Associate Professor MAYUMI, Koichi

専攻 Course 新領域物質系

Adv. Mat., Frontier Sci.

本研究室では、高分子をはじめとしたソフトマターの物性発現機構の解明を目指している。例えば、近年ナノ・分子レベルでの構造制御により高分子材料の機械強度は飛躍的に向上しつつあり、そのような高強度高分子材料は、人工関節や人工血管などの医療材料、ソフトロボット用のアクチュエーター、車・飛行機などに用いる構造材料としての応用が期待されている。我々は、高強度高分子材料に対して、中性子・X線小角散乱法および中性子準弾性散乱法によって変形下におけるナノ構造・ダイナミクスの計測を行っている。高分子材料は多成分で構成されていることが一般的であるが、中性子散乱法を用いると、重水素化ラベリングによって各構成要素を選択的に観察することが可能となる。散乱法によって明らかにされた階層構造・ダイナミクスとマクロな力学・破壊挙動との相関を解明するとともに、新規材料設計指針の探索を行っている。

The research goal of our group is to reveal molecular mechanisms for macroscopic properties of soft matter systems. One of our targets is to understand toughening mechanisms of polymeric materials. Recently, the fine control of nano-structure has improved significantly the mechanical toughness of polymer-based materials. The tough polymeric materials are expected to be applied for biomaterials, soft robots, and structural materials for automobiles and airplanes. We study nano-structure and dynamics of the tough polymeric materials by means of small-angle and quasi-elastic neutron scattering measurements with deuterium labelling. The deuterium labelling technique enables us to observe separately each component in multi-component systems. By combining the nano-scale structure/dynamics measurements, macroscopic mechanical tests, and molecular dynamics simulations, we aim to establish molecular understandings of toughening mechanisms for polymeric materials and discover novel molecular designs for tough materials.



Self-reinforced gel

Conventional gel

break

伸長すると高分子鎖が結晶化し、鎖の破断を防ぐ自己補強ゲルを開発した。 この伸長誘起結晶は、力を取り除くと消失し、自己補強ゲルは元の状態まで復元する。

We have developed self-reinforced gels in which polymer chains are crystallized under stretching. The crystalline domains disappear immediately after the strain is released. The reversible strain-induced crystallization simultaneously realizes high toughness and rapid recoverability under repeated deformation.

通常の高分子ゲルの場合、亀裂を入れた試験片を引っ張ると、すぐに亀裂が進展して、破断してしまう。一方で、自己補強ゲルでは、亀裂の周辺において高分子鎖が引き延ばされて結晶化することで、亀裂の進展が抑制される。

When we stretch a pre-notched specimen of a conventional polymer gel, the crack propagates immediately and the sample is broken. For the self-reinforced gel, the strain-induced crystallization of polymer chains near a crack tip suppresses crack propagation.



 $https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/mayumi\_group.html \\$ 

Rietveld Group

## 稲村研究室 Inamura Group



客員准教授 稲村 泰弘 Visiting Associate Professor INAMURA, Yasuhiro

J-PARC の物質・生命科学実験施設(MLF)に設置された中性子散乱装置において、データ収集、特にイベント記録型データ収集システムと多彩な試料環境を組み合わせた新規な測定・データ処理手法の開発と実用化を推進している。特に時間分割に適したデータ記録方式を活用し、試料に加えられる外場(磁場、電場、温度、圧力など)の時間変化に伴う試料内部の物理量の詳細な応答や変化を捉えることを可能としてきた。

主に、東京大学物性研究所にて開発が進められているフラットトップ・ロングパルス磁場機器を J-PARC のパルス中性子実験装置に組み込み、試料の磁場による物理量の応答を測定データから引き出すための装置制御とデータ処理システムの開発研究を行う。また JRR-3 の装置に対し J-PARC のデータ収集とデータ処理の導入を検討する。

We have been developed and produced the novel experimental method and data treatments for neutron scattering measurement at the beam lines in the Materials and Life Science Facility (MLF) of the J-PARC using the event-recording data acquisition system (DAQ) and various sample environments. Especially, with the event-recorded data, which is most useful to divide along a time line, it has been successfully realized to observe time-depending phenomena responded by applied external field on samples like a temperature, electrical and magnetic field, a pressure and so on.

One of our aim is to develop and establish the method to measure the transition phenomena in sample under the magnetic field using the new device developed at ISSP installed in the neutron beamline at J-PARC, MLF. This device enables to apply to samples a flat-top-pulsed magnetic field which is suitable for the pulsed neutron scattering experiment.

In addition, we begin a study to install the DAQ system, device control system and data treatment software used at MLF into the beamline at JRR-3.

# リートベルト研究室 Rietveld Group



外国人客員教授 リートベルト イボ Visiting Professor RIETVELD, Ivo

私は製剤の物理的安定性を研究している。適量の活性医薬成分(API)を送達することは、治療活性を確実にし、毒性を排除するため重要である。薬剤の取扱いや保存において、この量はほとんど変化しない。結晶多形、APIと賦形剤との干渉や化学反応などの多くの問題が発生する可能性があり、これらは毒性や治療活性の喪失を引き起こす。このような問題を回避するため、製剤の熱力学安定性を知る必要がある。

私の現在の ISSP での研究は、API の熱容量を測定することである。熱容量は API 結晶における分子間相互作用と関係しており、この情報は計算科学的な結晶構造の予測、特に分子間相互作用ポテンシャルの開発において重要である。現時点では、計算機による多形の安定性の順位付けは、ポテンシャルの不確実性のため困難だからである。相互作用ポテンシャルの理解の向上は、タンパク質や工業用触媒など、他の多くの分野においても役立つ。

My research is focused on the physical stability of drug formulations. It is essential that drugs deliver a designed quantity of active pharmaceutical ingredient (API) to ensure therapeutic activity and to avoid toxicity. There should be little variation in this quantity on drug handling or storage. Many problems can arise such as crystalline polymorphism, interactions between API and excipients, or chemical reactions, which may cause toxicity and loss of therapeutic activity. It implies that the thermodynamic stability profiles of drug formulations need to be known so that changes in the behavior of the drug can be avoided.

My current research in ISSP involves an in-depth study of the heat capacity of some APIs as the heat capacity is related to the interactions between the molecules in their crystal structure. This information is very important for the development of computational crystal structure prediction in particular for the interaction potentials between molecules in the crystal structure. At present, polymorph stability rankings are still difficult to determine, due to the uncertainties in the many interaction potentials in turn can be applied in many other areas, such as interactions involving proteins or industrial catalysts.