

中性子散乱による物質中水素の観測

大友 季哉

KEK 物構研、J-PARC センター、総研大、茨城大理工学研究科

中性子は、陽子とほぼ同じ質量の電氣的に中性の粒子であり、物質波として性質を持つ。中性子線として物質に入射すると、原子核や磁場により散乱され、波の干渉により物質内原子の配置や、振動状態および磁気励起などのダイナミクスの測定が可能である。中性子の特長としては、1) 散乱能は原子番号には依存せず重い元素に含まれる軽元素の観測が容易、2) 1 Å の波長の中性子のもつエネルギーは 81.8 meV であることから原子配置とダイナミクスの測定に適している、3) 電氣的に中性であることから物質の透過能が高い、4) 1/2 のスピンを持っているため磁気散乱が生じる、等があげられる。物質の原子配置やダイナミクスを調べるための中性子線の発生には原子炉や陽子加速器などの施設が必要である。茨城県東海村で稼動している大強度陽子加速器施設 (J-PARC) 物質・生命科学実験施設 (MLF) では、陽子を用いた核破砕反応により、世界トップレベルの中性子線の利用が可能になった。MLF では、中性子を用いた回折、小角散乱、反射率、非弾性散乱、イメージングなどの装置が整備されており [1]、基礎から応用まで幅広い研究が行われている。

J-PARC MLF に設置されている高強度中性子全散乱装置 (NOVA) は、J-PARC パルス中性子源の世界最高レベルの中性子フラックスを生かし、結晶から液体・非晶質まで様々な物質の構造解析が可能である [2]。NOVA は、4 桁にわたる広い運動量遷移 (Q) 領域 ($0.26 < Q < 1000 \text{ nm}^{-1}$) における回折プロファイルから静的構造因子 $S(Q)$ を得ることができ、かつ粉末結晶構造解析に十分な最高 Q 分解能 ($\Delta Q/Q = 0.35\%$) を有している。また、 $S(Q)$ を Fourier 変換して得られる 2 体分布関数では、0.01 nm の相関の分離と 20 nm 程度までの相関を観測できることが実証されている。高強度中性子線を生かして 1 mg 程度の微小試料測定や、秒単位での過渡現象測定なども可能である。また、磁性体の構造解析にも有効な装置で、磁気構造解析に成功した最小の磁気モーメントは 0.3 μ_B である。水素は、さまざまな物性や機能を誘起する元素として重要であり、中性子が水素 (プロトン) の観測に有利であることから、NOVA においては水素化物の構造解析をメインテーマとしている。低い分解能ながら、非弾性散乱も可能で、水素の振動スペクトルの観測も可能である。講演では、NOVA を用いた水素化物をはじめとする構造解析についても紹介する。

本研究の一部は KEK 中性子共同利用実験 S 型課題 (2014S06)、文科省 光・量子融合連携研究開発プログラムのもとに進められた。

【参考文献】

[1] “Materials and Life Science Experimental Facility (MLF) at the Japan Proton Accelerator Research Complex II: Neutron Scattering Instruments”, K. Nakajima, et al., Quantum Beam Science, **1**, 9-67 (2017).

[2] 「高強度全散乱装置の概要と水素貯蔵材料研究」大友季哉, 鈴木賢太郎 日本結晶学会誌, **50**, 29-34 (2008).