

第一回連携研究会
—筑波大学数理物質科学研究科と KEK 物質構造科学研究所の連携を目指して—

2009年8月27日(木)—28日(金)
筑波大学 第一エリア 1D201 大教室

趣旨

筑波大学とKEKとは隣接しているという地理的条件にも関わらず、これまで、この条件を研究連携に充分には活かしてきれていなかった。そこで、平成21年度の KEK 物質構造科学研究所・構造物性研究センターの発足を機に、筑波大学数理物質科学研究科と KEK 物質構造科学研究所の実質的な研究連携を深めてゆきたいと考えた。筑波大学数理物質科学研究科は物質科学研究を精力的に進めており、KEK 物質構造科学研究所は放射光科学・中性子科学・ミュオン科学を推進している。物質科学といわゆる量子ビーム科学は、車の両輪であり、両者の融合の中から新しい科学が生まれるはずである。

本研究会では、筑波大学数理物質科学研究科の研究者と構造物性研究センターの研究者に共通のテーマに対して、それぞれの観点からの講演をお願いしている。また、活発な議論を促すため、討論の時間を長めにとっている。こうした講演/討論の中から、共通の問題意識が生まれ、施設の共同利用/研究者間の共同研究、そしてつくば地区の研究の活性化、への発展を期待している。

守友 浩（筑波大学 平成21年度 KEK 大学等連携支援事業 代表）

moritomo@sakura.cc.tsukuba.ac.jp

村上洋一（KEK 物質構造科学研究所 構造物性研究センター長）

主催：平成21年度 KEK 大学等連携支援事業

「加速器科学と融合した物質科学教育研究拠点の構築に向けて」

共催：戦略イニチャティブ A

「学際物質科学研究拠点」

第一回連携研究会 プログラム

2009年8月27日(木)—28日(金)
筑波大学 第一エリア 1D201 大教室

8月27日(木)

12:30-12:40 趣旨説明 守友 浩(筑波大)

12:40-12:50 研究科長挨拶 村上浩一(筑波大)

12:50-13:00 所長挨拶 下村 理(KEK)

講演1(数理物質科学研究科と構造物性研究センターの連携を目指して)座長 守友 浩(筑波大)

13:00-13:30 構造物性研究センターの紹介(30分)村上洋一(KEK)

13:30-14:00J-PARC 物質・生命科学実験施設の概要説明(30分)瀬戸秀紀(KEK)

14:00-14:20 休憩

講演2(磁性体、強相関、先端計測) 座長 齋藤一弥(筑波大)

14:20-14:55 松石清人(筑波大)有機無機複合型半導体の光誘起現象と超高压物性

14:55-15:30 中尾裕則(KEK):強相関電子系における電荷・軌道秩序状態の研究

15:30-16:05 守友 浩(筑波大)配列ナノ空間物質シアノ錯体の機能発現と構造物性

16:05-16:25 休憩

16:25-17:00 足立伸一(KEK):物質・生命科学における実時間構造ダイナミクス研究

17:00-17:35 門野良典(KEK):幾何学的電子相関がもたらす異常金属相の解明

18:00-懇親会 オークラガーデン

第一回連携研究会 プログラム

2009年8月27日(木)—28日(金)
筑波大学 第一エリア 1D201 大教室

8月28日(金)

講演3 (磁性薄膜、表面) 座長 久保 敦(筑波大)

9:00-9:35 雨宮健太(KEK) 磁性薄膜・多層膜における表面・界面の原子構造、磁気状態、電子状態

9:35-10:10 柳原英人(筑波大) スピネル型フェライト／遷移金属強磁性ヘテロ界面での磁氣的結合

10:10-10:30 休憩

10:30-11:05 小野寛太(KEK) : 光電子顕微鏡による磁性超薄膜の研究

11:05-11:40 佐々木正洋(筑波大) 局所仕事関数と表面物性

講演4 (ナノ構造、中性子散乱) 座長 大嶋建一(筑波大)

13:00-13:35 神山崇(KEK) : 超高分解能粉末中性子回折による構造解析

13:35-14:10 谷本久典(筑波大) 金属系ナノ構造材料に見られる特異物性とその発現機構について

14:10-14:45 大友季哉(KEK) 中性子全散乱装置による水素貯蔵材料の研究

14:45-15:05 休憩

15:05-15:40 寺西利治(筑波大) : 無機ナノ粒子の精密構造制御と構造特異機能の創出

15:40-16:15 伊藤晋一(KEK) : 中性子非弾性実験による量子スピン系の研究

16:15-Closing 村上洋一(KEK)



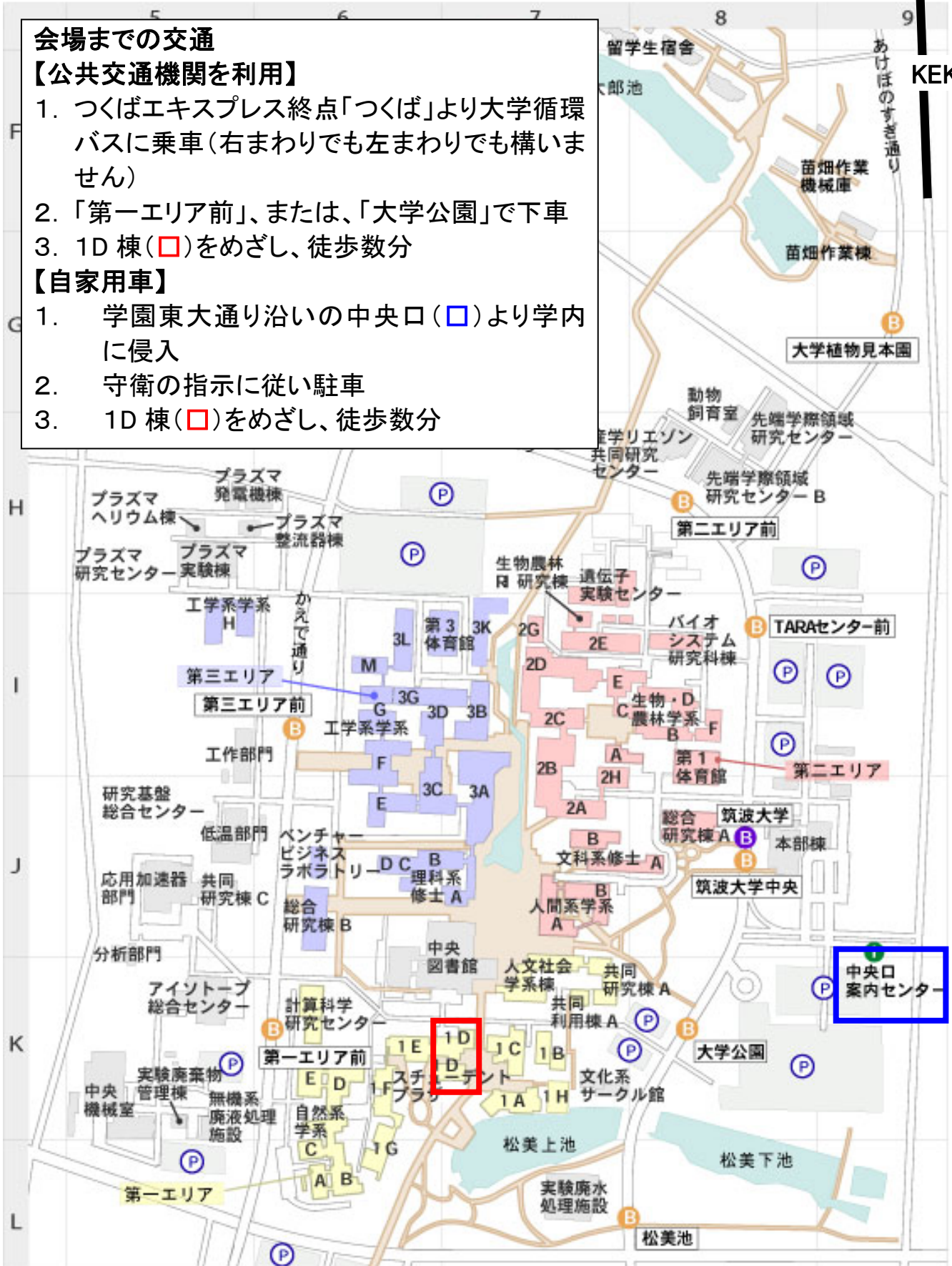
会場までの交通

【公共交通機関を利用】

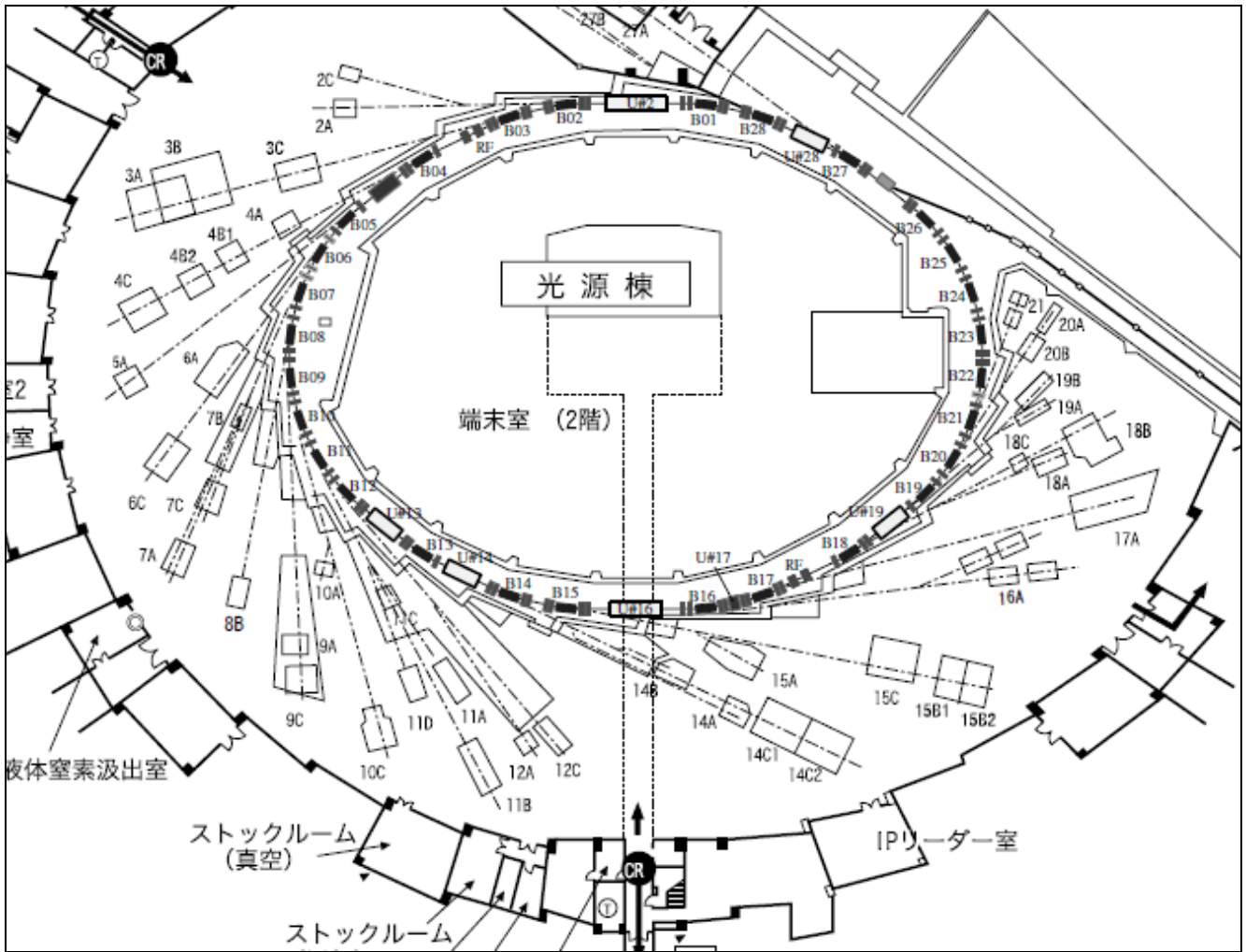
1. つくばエクスプレス終点「つくば」より大学循環バスに乗車(右まわりでも左まわりでも構いません)
2. 「第一エリア前」、または、「大学公園」で下車
3. 1D棟(□)をめざし、徒歩数分

【自家用車】

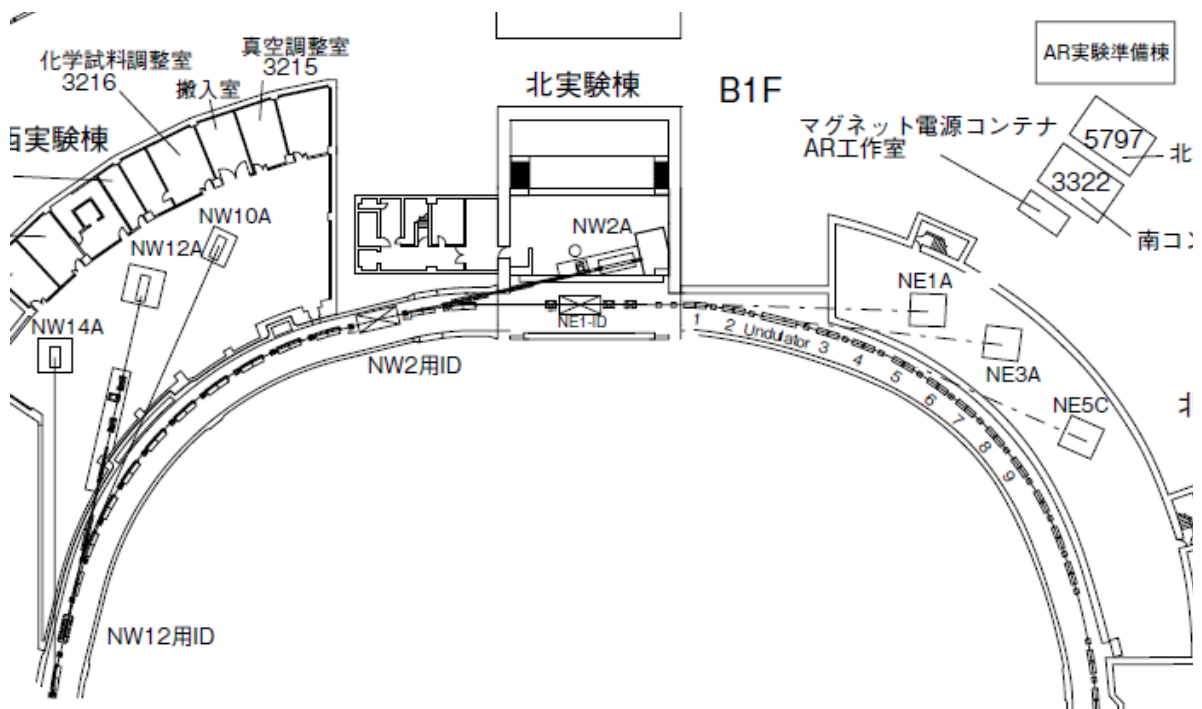
1. 学園東大通り沿いの中央口(□)より学内に侵入
2. 守衛の指示に従い駐車
3. 1D棟(□)をめざし、徒歩数分



PF ビームラインマップ



PF-AR ビームラインマップ



BL1

- A: 極限条件下粉末回折実験
- B: 極限条件下粉末回折実験
- C: VUV/SX 光電子分光

BL2(アンジュレータ)

- A: 軟X線分光実験
- C: 軟X線分光実験

BL3

- A: X線回折・散乱実験
- B: VUV/SX 分光実験
- C1: X線回折実験
- C2: X線光学素子評価
- C3: X線白色磁気回折実験

BL4

- A: 蛍光X線分析・マイクロビーム
- B1: 微小結晶回折実験
- B2: 高精度X線粉末回折実験
- C: X線回折・散乱実験

BL5(多極ウイグラー)

- A: タンパク質構造解析

BL6

- A: タンパク質構造解析
- B: タンパク質構造解析
- C: タンパク質構造解析

BL7

- A: 軟X線分光実験
- B: 表面光化学反応・角度分解光電子分光
- C: XAFS・X線回折実験

BL8

- A: 軟X線分光実験
- B: XAFS
- C: X線トモグラフィ/顕微鏡

BL9

- A: XAFS
- C: X線汎用ステーション

BL10

- A: X線回折・散乱実験
- B: XAFS
- C: X線小角散乱(溶液)

BL11

- A: 軟X線分光実験
- B: 表面EXAFS・軟X線分光実験
- C: 固体VUV分光実験
- D: VUV/SX 固体光電子分光

BL12

- A: VUV/SX 光学素子評価・分光実験
- B: VUV 高分解能分光実験
- C: XAFS

BL13(多極ウイグラー/アンジュレータ)

- A: 高温高压X線回折実験
- B1: 表面敏感XAFS・X線回折実験
- B2: 高温高压X線回折実験
- C: 軟X線発光分光・XAFS

BL14(縦型ウイグラー)

- A: 結晶構造解析・XAFS
- B: 精密X線光学
- C1: 医学応用・X線汎用ステーション
- C2: 高温高压X線回折実験

BL15

- A: X線小角散乱(筋肉・合金)
- B1: 白色X線トポグラフィ・X線磁気散乱
- B2: 表面界面回折実験
- C: 高分解能X線回折実験

BL16(多極ウイグラー/アンジュレータ)

- A1: X線汎用ステーション
- A2: X線回折・散乱実験
- B: 軟X線分光実験

BL17

- A: XAFS
- B: 光化学蒸着実験
- C: 斜入射X線回折実験・X線蛍光分析

BL18

- A: 角度分解光電子分光
- B: タンパク質結晶構造解析
- C: 高压X線粉末回折実験

BL19(アンジュレータ)

- A: スピン分解光電子分光
- B: スピン分解光電子分光・軟X線発光分光

BL20

- A: VUV 分光実験
- B: X線汎用ステーション

BL21 モニター用ビームライン**BL27(非密封 RI 実験)**

- A: 放射線生物・軟X線分光
- B: 放射線生物・XAFS・X線回折実験

BL28(多極ウイグラー/アンジュレータ)

- A: 円偏光VUV/SX 分光実験
- B: 円偏光X線分光・散乱実験

AR-NE1(多極ウイグラー/アンジュレータ)

- A1: 高分解能コンプトン散乱・磁気コンプトン散乱

A2: 臨床応用

- B: 円偏光軟X線分光実験

AR-NE3(アンジュレータ)

- A: 核共鳴散乱実験

AR-NE5

- A: 医学応用
- B: バンチ純度・ビームモニタ用
- C: 高温高压X線回折実験

AR-NE9

- B: 真空工学

AR-NW2(アンジュレータ)

- A: XAFS・エネルギー分散型 時分割 XAFS

AR-NW12(アンジュレータ)

- A: タンパク質構造解析

軟X線共用ビームライン

ビームライン	実験ステーション・実験装置	エネルギー領域 [eV]	担当者
BL-2A	軟X線2結晶分光ステーション	1740 - 5000	北島義典
BL-2C	軟X線不等間隔平面回折格子分光器 軟X線発光分光器	250 - 1400	足立純一
BL-3B	VUV 24m 球面回折格子分光器(SGM)	10 - 280	柳下明
BL-11A	軟X線斜入射回折格子分光ステーション	70 - 1900	北島義典
BL-11B	軟X線2結晶分光ステーション	1760 - 3910	北島義典
BL-11C	固体用瀬谷波岡分光器(SSN)	4 - 35	小野寛太
BL-11D	軟X線可変偏角分光器 高分解能光電子分光装置 Scienta SES-200	60 - 900	伊藤健二
BL-12A	軟X線 2m 斜入射分光器・光学素子評価装置	30 - 1000	柳下明
BL-27A	放射性試料用軟X線実験ステーション	1800 - 4000	小林克己
BL-20A	3m 直入射型分光器 気体光電子分光装置	5 - 40	伊藤健二
BL-28A/B	可変偏光 VUV・SX 不等間隔平面回折格子分光器・高分解能角度分解光電子分光実験ステーション	30 - 300	小野寛太

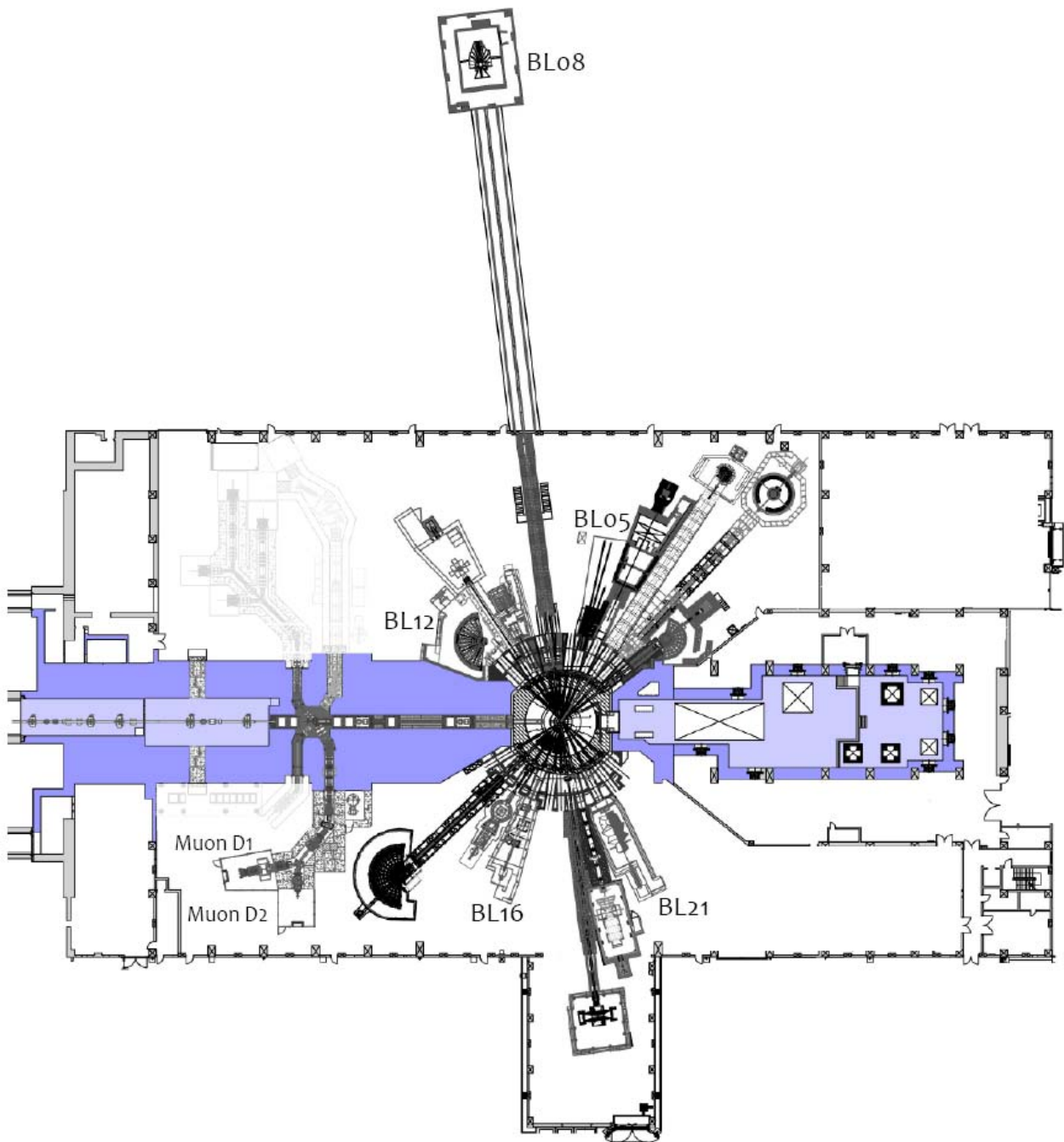
<http://pfwww.kek.jp/indexj.html> より転載

硬X線共用ビームライン

ビームライン	実験ステーション・実験装置	担当者
BL-3A	六軸X線回折計/二軸磁場中X線回折実験ステーション	中尾裕則
BL-3C	X線光学素子評価ステーション/白色磁気回折ステーション	平野馨一
BL-4A	蛍光X線分析/マイクロビーム分析	飯田厚夫
BL-4B1	極微小結晶・微小領域回折実験ステーション	中尾朗子
BL-4C	六軸X線回折計用実験ステーション	中尾裕則
BL-5A	タンパク質結晶構造解析ステーション	山田悠介
BL-6A	タンパク質結晶構造解析ステーション	五十嵐教之
BL-7C	XAFS/異常散乱/汎用X線ステーション	杉山弘
BL-9A	XAFS 実験ステーション	野村昌治
BL-9C	小角散乱/XAFSステーション	野村昌治
BL-10A	垂直型四軸X線回折装置	中尾朗子
BL-12C	XAFS 実験ステーション	野村昌治
BL-14A	単結晶構造解析・検出器開発ステーション	岸本俊二
BL-14B	精密X線回折実験ステーション	平野馨一
BL-14C1	白色・単色X線ステーション	兵藤一行
BL-14C2	高温・高圧実験ステーション <2009年夏にNE7Aへ移設> 高温高圧X線実験装置 (MAX90)	亀卦川卓美
BL-15B1	白色X線トポグラフィおよび汎用X線実験ステーション	杉山弘
BL-15B2	表面界面X線回折実験ステーション	杉山弘
BL-15C	精密X線回折ステーション	平野馨一
BL-17A	タンパク質結晶構造解析ステーション	五十嵐教之
BL-18C	超高圧下粉末回折計	亀卦川卓美
BL-27B	放射性試料用X線実験ステーション	宇佐美徳子
AR-NE5C	高温高圧実験ステーション/MAX80	亀卦川卓美
AR-NW2A	時分割 XAFS 及び時分割X線回折実験ステーション	野村昌治
AR-NW10A	XAFS 実験ステーション	野村昌治
AR-NW12A	タンパク質結晶構造解析ステーション	松垣直宏
AR-NW14A	時間分解X線回折実験ステーション	足立伸一

<http://pfwww.kek.jp/indexj.html> より転載

J-PARC (MLF) ビームラインマップ



KEK が中心となって運営しているビームライン

BL	装置名	担当者
05	中性子光学基礎物理実験装置 NOP	清水裕彦、猪野隆
08	超高分解能粉末中性子回折装置 SuperHRPD	神山崇、鳥居周輝
12	高分解能型チョッパー分光器 HRC	伊藤晋一、横尾哲也
16	高性能試料水平型中性子反射率計 ARISA-II	瀬戸秀紀、鳥飼直也
21	高強度汎用全散乱装置 NOVA	大友季哉、鈴谷賢太郎
MuonD1	ミュオン物質生命科学実験装置	三宅康博、髭本亘
MuonD2	ミュオン基礎科学実験装置	三宅康博、下村浩一郎

【BL05 中性子光学基礎物理実験装置 NOP】

- ・ 研究対象: 中性子崩壊、散乱。干渉、回折の精密測定による素粒子標準理論(小林—益川理論)を超える新たな素粒子理論の探索、中性子光学の基礎及び応用研究

【BL08 超高分解能粉末中性子回折装置 SuperHRPD】

- ・ 研究対象: 最新材料開発技術により生み出される複雑な構造、複合材料、階層構造の高精度解析
- ・ 特徴: X 線では困難な水素原子位置の決定が可能。強度・分解能の点で X 線との相補性を実現させ、新しい構造解析法の開拓。

【BL12 高分解能型チョッパー分光器 HRC】

- ・ 研究対象: 固体中のスピン・原子・分子の運動
- ・ 特徴: 高速回転フェルミチョッパーにより、世界最高分解能を実現し、高エネルギー中性子と小角散乱検出器の利用により、これまで不可能だったエネルギー運動量空間へアクセスすることを目指す。

【BL16 高性能試料水平型中性子反射率計 ARISA-II】

- ・ 研究対象: ソフトマター界面、電気化学界面
- ・ 特徴: 下向きのビーム取出しにより自由界面の観測が可能、短い時間での時分割測定が可能、従来の深さ方向に、面合い方向を加えた多次元での精密構造解析

【BL21 高強度汎用全散乱装置 NOVA】

- ・ 研究対象: 水素吸蔵・放出仮定における物質の構造変化の観測、特に酸いぞ位置の精密測定
- ・ 特徴: 再隣接原子間距離からナノメートル程度の構造変化の観測が可能。中性子全散乱装置としての測定効率は、世界最高レベル。

【MuonD1 ミュオン物質生命科学実験装置】

- ・ 研究対象: 磁性体、半導体、生命物質、燃料電池等あらゆる物質
- ・ 特徴: 世界最高強度パルスミュオン利用の μ SR 実験装置、さまざまな複合環境下での測定により多種多様な現象に対応、ビームスラサーによる時間分解能の向上

【MuonD2 ミュオン基礎科学実験装置】

- ・ 研究対象: 物質の新規な現象解明、ミュオン原子の構造や角有効、素粒子としてのミュオンの性質、考古学資料の非破壊検査
- ・ 特徴: 正負の大強度高速ミュオンの利用により、 μ SR、 μ CF、ミュオン X 線測定、ミュオンラジオグラフィーなどの多彩な実験を実現、自由な装置レイアウトが可能

構造物性研究センターの紹介

村上洋一

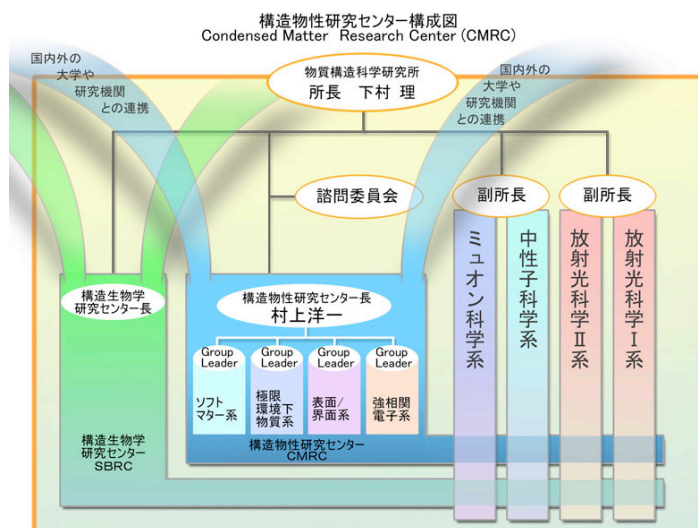
youichi.murakami@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・構造物性研究センター

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所（物構研）において、2009年4月1日より構造物性研究センター（CMRC: Condensed Matter Research Center）が設立されました。構造物性研究センターは、物構研が持つ放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子という複数のプローブの総合的な利用と、外部の研究者との密接な研究協力により、独創的かつ先端的な研究を展開し、物性科学分野の世界的研究拠点となることを目指していきます。

物構研は、加速器ベースによる安定で高品質な放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子を、大学共同利用機関として多くの研究者に提供し、幅広い研究・利用分野での成果創出を目的としています。また研究所員自身が、関連する研究分野を先導する先端的研究を行うことも研究所としての重要な役割です。このために物構研には構造生物学研究センターが設立され、生命科学分野で多くの世界的な成果を生み出していますが、この度、物性科学分野の研究を牽引する目的で、新たに構造物性研究センターが発足することになりました。物構研の研究環境は、今大きく変わろうとしています。大強度陽子加速器施設J-PARC（Japan Proton Accelerator Research Complex）では、世界最強のビームを使った新たな中性子・ミュオン利用研究がまさに始まり、放射光科学研究施設では直線部増強や新たなビームラン統廃合が戦略的に進められてきています。この時期に、構造物性研究センターを設立することは時宜を得ていることであり、生命科学と物質科学の研究を先導する2つのセンターを車の両輪として持つことは物構研としても非常に有意義なことであると考えています。

構造物性研究センターでは、現在の物性科学分野の中で重要であると考えられる次の4つの物質系を対象にして、構造物性研究を推進することを計画しています：1. 強相関電子系、2. 表面・界面系、3. ソフトマター系、4. 極限環境下物質系。今後、これらの研究領域に関連する国内外の研究者の連携を図り、各研究プロジェクトを推進していきます。また、これらの研究領域間を跨る新しい研究領域の開拓も目指していきます。



構造物性研究センターの組織図

構造物性研究センターは物構研所長のもとに組織されます。放射光科学研究系・中性子科学研究系・ミュオン科学研究系という、共同利用を推進するための研究施設（ハードウェア）を基盤とした研究系を縦系とすると、構造物性研究センターはマルチプローブを利用した独自研究を行ない、これらの研究系を横断した横系の役割を果たします。

J-PARC 物質・生命科学実験施設の概要

瀬戸秀紀、門野良典

hideki.seto@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

大強度陽子加速器施設 J-PARC は、入射器として使用される線形加速器、陽子を 3Gev まで加速する Rapid-Cycling Synchrotron (RCS)、50Gev まで加速する Main Ring からなり、素粒子・原子核から物質、生命まで様々な基礎科学と応用科学に利用される複合施設である。この中で「物質・生命科学実験施設」(MLF)では、RCS で加速された陽子ビームをターゲットに導き、そこで発生する中性子ビームとミュオンビームを用いた研究を行う。

一次陽子ビームはまずグラファイトのミュオンターゲットに当たる。MLF には、そこで生成されるパイ中間子、あるいは低速（表面）ミュオンを利用するための二次ビームライン（超伝導ソレノイドによる汎用ミュオンビームライン）が一本建設されている。2008 年 9 月には最初のミュオンビーム取り出しに成功するとともに、その後の調整を経て 2009 年 1 月からはミュオンスピン回転 (μ SR) 用の D1 実験装置、およびミュオン原子 X 線等を行なう D2 実験装置を用いての共同利用実験も開始されている。また、表面・界面や微小試料での μ SR 実験を可能にする「超低速ミュオンビームライン」の整備を目指し、KEK から概算要求が行なわれている。

陽子ビームラインの終端に置かれた水銀ターゲットから発生した中性子は、結合型、非結合型、ポイズン型の 3 種類のモデレータで減速され、23 本のビーム孔から取り出されて各分光器に導かれる。KEK と JAEA の他、茨城県等が分光器を設置しており、2009 年度の最初のサイクル(Run #24)では 12 台の装置でビームを受け入れ、実験または調整を行った。KEK は「中性子光学基礎物理実験装置 NOP (BL05)」「超高分解能粉末中性子回折装置 S-HRPD (BL08)」「高分解能型チョッパー分光器 HRC (BL12)」「高性能試料水平型中性子反射率計 ARISA-II (BL16)」「高強度汎用全散乱装置 NOVA (BL21)」の 5 台を運用または立ち上げ中で、更に数台の装置の建設に向けて予算獲得の努力を行っている。



有機無機複合型半導体の光誘起現象と超高压物性

松石清人

kiyoto@bk.tsukuba.ac.jp

筑波大学 数理物質科学研究科 物性・分子工学専攻

量子ドット、量子細線、量子井戸構造を持つ低次元量子構造半導体では、励起子ボーア半径程度に粒径、細線径、井戸幅が小さくなると励起子が強い摂動を受け、その光学特性には顕著なサイズ効果が現われる。例えば、励起子のエネルギーシフト、励起子の巨大振動子効果や長寿命コヒーレンスなどが観測される。そのようなサイズの量子ドット、量子細線、量子井戸では、それらを取り巻くミクロな環境（例えば、界面、表面の結合状態など）が励起子状態に強く影響を及ぼす。また、多重量子構造の場合は、単一量子構造では観測されない量子構造間の相互作用に起因した効果が現れる。我々は、有機分子が持つ機能性（構造柔軟性や外場に対する応答の多様性など）と無機量子構造半導体が有する特徴（次元に依存した電子制御性、低次元化による特異な電子状態と励起子状態の発現など）を複合させた有機無機複合型多重量子構造半導体において、高压下での有機と無機の複合化に起因した新しい物性現象に興味を持っている。これまでに、有機分子をテンプレートとして鉛ハロゲン系無機半導体量子ドット、量子細線、量子井戸を自己組織的に形成させ、かつ規則的に配列させた、有機無機複合型低次元多重量子構造半導体を作製し、それらの高压下の光学特性と構造を調べてきた。特に、圧力印加によって誘起される有機分子の配向化や回転運動の変化を伴う構造相転移、有機分子の HOMO-LUMO 遷移エネルギーと無機半導体部のバンドギャップ（最低励起エネルギー）の圧力チューニングによる有機部と無機半導体量子構造部との間の電荷移動やエネルギー移動の制御などを研究してきた。また、有機分子によって隔てられた無機量子構造部間の相互作用を圧力によって変化させ、それによる光学特性への影響を調べてきた。さらに、数 nm サイズの有機無機複合型半導体量子ドット (CdS, CdSe) をホットインジェクション法及び One-Pot 法によって作製し、高压下分光測定と高压 X 線回折実験によってこれらの物質の電子状態と構造状態の圧力依存性を調べてきた。

講演では、有機—無機間の電荷移動遷移を有する量子細線結晶(C₁₂H₁₄N₂)Pb₂I₆、有機—無機間のエネルギー移動による燐光増強を示す量子井戸結晶(C₁₀H₇C₂H₄NH₃)₂PbCl₄及び量子ドット超格子結晶 (CH₃NH₃)₄PbI₆・2H₂Oを中心に有機無機複合型多重量子構造半導体の光学特性と構造の圧力依存性について紹介する。また、有機無機複合型半導体量子ドット (CdS, CdSe) においては、体積弾性率と変形ポテンシャルの粒径依存性と表面配位子の効果について紹介する。

強相関電子系における電荷・軌道秩序状態の研究

中尾裕則

hironori.nakao@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

強相関電子系では、高温超伝導や巨大磁気抵抗効果、さらに最近の巨大電気磁気効果といった多彩な電氣的・磁氣的性質が、電子の持つ自由度である電荷・スピン・軌道の結晶構造の上での多様な振る舞いによって発現することが分かってきた。従って、これらの電子自由度の秩序状態を調べることで、強相関電子系の物性を理解する上で重要になっている。ここで共鳴 X 線散乱は、放射光 X 線の特徴の 1 つである波長可変性を生かし原子散乱因子の異常分散項を用いた研究手法である。通常の X 線散乱では物質中のすべての電子が応答するのに対し、原子の X 線吸収端近傍での散乱強度を測定することにより、目的の原子の電荷・軌道・スピンといった情報を効果的に得ることができるのが本手法の利点である。我々のグループでは 構造物性研究および観測技術開発という観点より、吸収端近傍の X 線散乱を利用した電荷・軌道秩序状態の研究をこれまでにやってきた。[1] 講演では、本手法の原理とその応用例を紹介する。

[1] H. Nakao et al., Phys. Rev. B **66** (2002) 184419. H. Ohsumi et al., J. Phys. Soc. Jpn. **72** (2003) 1006. H. Nakao et al., J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 2620. K. Horigane et al., J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 044601. H. Nakao et al. , J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 024602.

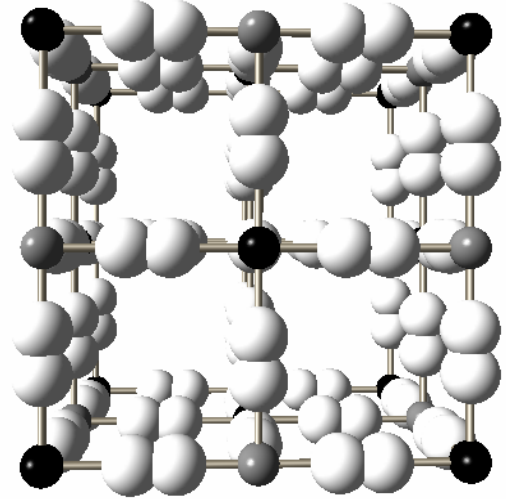
配列ナノ空間物質シアノ錯体の機能発現と構造物性

守友 浩

moritomo@sakura.cc.tsukuba.ac.jp

筑波大院数理

プルシャン・ブルー型結晶構造を有するシアノ架橋金属錯体($A_xM[M'(CN)_6]_y \cdot zH_2O$: A はアルカリ金属、M, M' は遷移金属)では、右図に示すように配列ナノ空間構造を有する。遷移金属(黒丸と灰色丸)がシアノ基(白丸)で架橋され、三次元的なネットワークを組んでいる。この八配位のナノ空間を、アルカリ金属や水分子が部分的に占有する。以後、三次元ネットワーク骨格を“ホスト”、ナノ空間を占有するイオンや分子を“ゲスト”と呼ぶ。この物質系の著しい特徴は、ゲストの濃度を酸化還元[1-3]や電圧印加[4]および湿度や減圧[5]で制御できる点である。こうした物質パラメータの制御性は、強相関酸化物をも凌駕している。



本講演では、この物質系の多彩な機能性を紹介するとともに、構造物性研究の重要性を議論する。

1. **ホール濃度と物性制御** = アルカリ金属の量を制御することにより、錯体を構成している遷移金属の価数を制御することができる。ここでは、Co-Fe 系化合物[3]および Ni-Fe 系化合物[2]を例にして、ホール濃度と物性との関係を議論する。さらに、プルシャンブルー錯体界面の性質を利用した電圧誘起強磁性[1]に言及する。
2. **結晶水と物性制御** = Co-Fe 系シアノ錯体の結晶水量を制御し、結晶水が電荷移動相転移に及ぼす効果を明らかにした。[2]特に、セオライト水とリガンド水とは電荷移動相転移に与える影響が異なることが明らかとなった。
3. **イオン半径とカチオン移動** = プルシャンブルー格子におけるカチオンの移動度がイオン半径に大きく依存することが明らかとなった。さらに、精密構造解析に基づいた第一原理計算を行い、それぞれのカチオンが感じるポテンシャルを評価した。計算結果は実験を見事に再現した。

参考文献

- [1] F. Nakata, H. Kamioka, Y. Moritomo, J. E. Kim, M. Takata, Phys. Rev. B **77**(2008)224436
- [2] T. Shibata, F. Nakada, H. Kamioka, Y. Moritomo, J. Phys. Soc. Jpn. **77**(2008)104714.
- [3] K. Igarashi, F. Nakada, Y. Moritomo, Phys. Rev. B. **78**(2008) 235106
- [4] Y. Moritomo, S. Shibata, Appl. Phys. Lett., **94**(2009)043502
- [5] Y. Moritomo, F. Nakada, J. E. Kim and M. Takata, Appl. Phys. Ex. **1**(2008)111301
- [6] Y. Moritomo, K. Igarashi, J. E. Kim, Hi. Tanaka, Appl. Phys. Ex. **8**(2000)085001



物質・生命科学における実時間構造ダイナミクス研究

足立伸一

shinichi.adachi@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所

レーザー光科学の進展により、超高速フェムト秒ダイナミクスの研究分野は大いに発展しているが、X線領域における超高速ダイナミクス研究に限っていえば、これまでのところ適当な光源が少なく、ほとんど未開拓のままである。現在主流のレーザーが主にカバーする赤外から紫外域は物質の価電子帯の励起に相当するのに対して、X線領域は内殻電子の励起エネルギーに相当し、またX線と電子との弾性・非弾性散乱過程を観測することにより、物質中の電子の密度分布や運動量分布をプローブすることができる。したがって、超短パルスX線光源が実現すれば、これまでのレーザー光科学では得ることのできなかつた情報、たとえば超高速な物質構造変化の直接観測、内殻励起過程のダイナミクス観測などが可能となり、その利用研究は基礎科学のみならず応用分野においても多くのブレークスルーをもたらすことが期待される。

さて、シンクロトロン放射光は加速器中の高周波電場によってほぼ光速まで加速され、かつ数センチほどの長さにバンチ化された電子群から放出される電磁波であり、元来電子バンチ長程度の時間幅(～50ピコ秒)を持つパルス光である。超短パルスX線光源というには少しおこがましいが、ピコ秒からサブナノ秒オーダー程度の時間分解実験には十分有用な短パルスX線光源といえる。特に現在建設が進められている次世代X線光源の利用研究計画とも絡んで、パルスX線の利用実験は近年世界各地で活発化しつつある。我々は高エネルギー加速器研究機構の放射光科学研究施設PF-ARを利用して、溶液系の高速度光反応、金属タンパク質結晶の光反応など様々な測定系についてピコ秒分解X線実験を進めている。講演では、放射光を用いたピコ秒オーダーの時間分解X線回折・散乱・吸収実験について、測定の動機、測定法の原理とこの研究分野の現状について俯瞰し、この新しい測定手法が拓く今後の放射光科学の可能性について述べたい。

幾何学的電子相関がもたらす異常金属状態の解明

門野 良典

ryosuke.kadono@kek.jp

高エネ機構・物構研／総研大

20年前の銅酸化物高温超伝導の発見以来、新奇な物性を発現させる舞台として強い電子相関を示す導電性物質＝強相関物質が重要な研究対象となっている。高温超伝導が擬二次元モット絶縁体近傍に現れるように、このような強い電子相関は伝導電子密度が低く、電子間に働くクーロン相互作用の遮蔽が不完全でかつ異方的であるような系、言い換えれば「悪い金属」であるような物質に典型的な特徴であり、そこでは従来のフェルミ液体論に基づく一体近似的な金属の描像が破綻しかかっていると云える。X線、中性子など回折現象に基づいた研究手段は、エネルギー・運動量空間での電子状態の解明に威力を発揮する一方、このように「局在と遍歴の間にあるような電子」の状態を捉えることには必ずしも向いておらず、実空間での情報をもたらし相補的な実験手段との組み合わせることによって、初めて対象物質の全体的な理解を得る事ができると考えられる。ミュオンスピン回転法 (μ SR) はこのような電子状態の局所性に伴う異常、特に**磁気的な異常**を、原子スケールで明らかにすることができる**局所磁気プローブ**であり、「局所電子構造の理解」に欠かせないプローブの一つとしてその役割を果たす事が出来ると考えられる。

我々はこのような量子ビームの相補的利用が威力を発揮できる研究として、幾何学的フラストレーションが上述の「中間的な」電子の運動にもたらす効果を集中的に研究することを構造物性センターのプロジェクト課題として提案し、4月より研究を開始した。具体的な物質としては伝導性スピネル、パイロクロアなどが対象で、局在モデルでは正四面体の頂点にあるイオンが反強的相互作用の下でスピン・電荷のフラストレーションにより巨視的な縮退を伴っている。本講演では、そのようなフラストレーションの効果により「重い電子」状態が出現しているのではないかと興味を持たれている導電性スピネル酸化物 LiV_2O_4 を紹介する。重い電子といえは、 f 電子系での近藤効果に伴う重い準粒子形成がよく知られているが、 LiV_2O_4 ではそのような f 電子系の重い電子とはまるで異なる基底状態が見えていることを紹介し、「相補的な測定手段で全体を見る」事の重要性を示す。さらに、最近行っているルテニウムパイロクロア酸化物や YMn_2 の研究結果についても時間の許す限り紹介したい。

参考文献

- [1] A. Koda *et al.*, *J. Phys: Condens. Matt.* **17**, L257 (2005).



磁性薄膜・多層膜における表面・界面の原子構造、磁気状態、電子状態

雨宮健太

kenta.amemiya@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

磁性薄膜・多層膜においては、その表面・界面が膜全体の性質に対して極めて重要な役割を果たす。例えば、基板の上に成長した薄膜が、界面における格子定数のミスマッチからバルクとは全く異なる成長様式を示したり、磁性薄膜の磁化容易軸が、表面への分子の吸着によって大きく変化したりすることは、数多く報告されている。こうした薄膜の構造や磁性を研究するにあたって、XAFS(X線吸収微細構造；後述する EXAFS, XMCD などの総称)は、内殻吸収を用いるために元素選択性があるという利点のほかに、例えば EXAFS(広域 X線吸収微細構造)からは原子構造が得られるし、XMCD(X線磁気円二色性)を用いれば、スピン磁気モーメントと軌道磁気モーメントを別々に定量的に決定できるという特長を持つ。しかしながら、XAFS は基本的には試料全体からの情報の平均値を観測しており、薄膜の表面・界面の状態を直接観測することはできない。

そこで我々はここ数年、「深さ分解 XAFS 法」という手法を開発してきた[1]。そもそも XAFS は、X線吸収強度の入射エネルギー依存性を測定するものであるが、軟 X線領域(ここではおおむね 100-1000 eV 程度)においては吸収強度そのものの測定は困難であり、X線の吸収に伴って生じる内殻ホール緩和過程において放出される電子を検出して吸収強度に代えることが多い。この際、図 1 に示すように、表面すれすれ

に放出される電子の脱出深度は極めて浅く、垂直方向に放出される電子は比較的深いところからでも脱出できることを利用すれば、様々な検出深度をもつ XAFS スペクトルを得ることができる。こうして得られた一連のスペクトル群を解析することによって、薄膜の表面・界面・内部層の構造や磁気状態を分離して観測することが可能になる。

本講演では、深さ分解 XMCD

を磁性薄膜に適用して表面・界面の磁性や電子状態を明らかにした研究[1,2]を示すとともに、深さ分解 EXAFS によって薄膜の原子構造の深さ分布を調べた例や、入射 X線をマイクロビーム化して[3]試料を走査することによって、深さ方向と合わせた「三次元 XAFS」測定を行った例を紹介する。

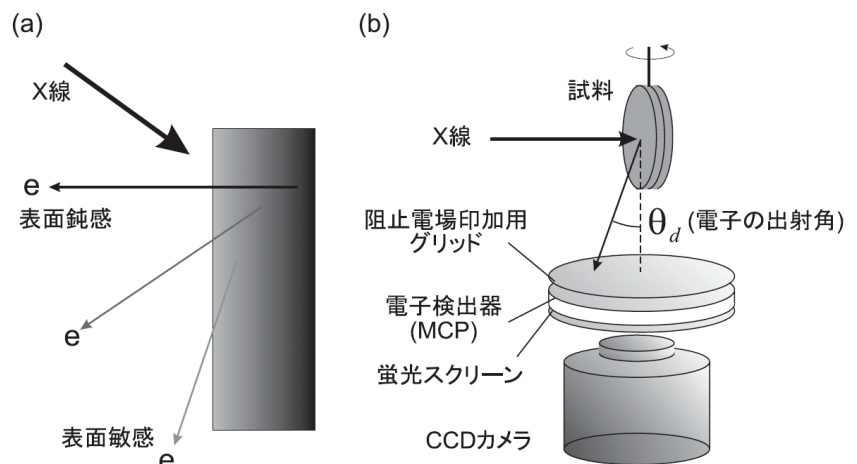


図 1 深さ分解 XAFS 法の原理(a)と測定のセットアップ(b)

[1] K.Amemiya et al., *J. Phys. Condens. Matter* 15 (2003) S561; *Appl. Phys. Lett.* 84 (2004) 936.

[2] K.Amemiya, et al., *Phys. Rev. B* 70 (2004) 195405; *Phys. Rev. B* 72 (2005) 201404(R); H. Abe et al., *Phys. Rev. B* 77 (2008) 054409; M. Sakamaki et al., *Acta Phys. Pol. A* 115 (2009) 309.

[3] K. Amemiya, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* 46 (2007) 3640.

スピネル型フェライト／遷移金属強磁性ヘテロ界面での磁氣的結合

柳原英人

yanagihara@bk.tsukuba.ac.jp

筑波大学大学院数理物質科学研究科電子・物理工学専攻

強磁性薄膜間に生じる反強磁性的層間交換結合は、磁性薄膜の静磁エネルギーを低減させるのに役立つことから今日のスピントロニクスにおいて不可欠な物理現象である[1]。2つの強磁性金属層の間に数原子層の膜厚をもつ非磁性金属薄膜を挟むことにより強磁性層間に層間結合が生じることが知られており、これはスピン依存する量子井戸やあるいはRKKY相互作用によって説明される[1]。最近我々は、この従来型の金属人工格子で見られる層間結合とは異なる機構に基づく層間結合を2つ見出した。どちらもスピネルフェライトと金属強磁性体との組み合わせで現れ、さらに層間結合のおおきさは実用材料として十分である。

ひとつめは、マグヘマイト(γ - Fe_2O_3)と呼ばれるスピネルフェライト単結晶薄膜とFe単結晶薄膜で極薄MgO膜を挟んだ系(γ - $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{MgO}/\text{Fe}(001)$)である。これは絶縁体であるMgOを介して現れる間接的な層間結合である[2]。 γ - Fe_2O_3 はその物性について不明な点が多く残されているフェライトであるが、オゾンを用いた反応性蒸着法により単結晶(薄膜)試料を作製することが可能となった。この試料を用いて放射光施設での回折実験を行ったところ、結晶構造を決定できた[3]。

一方典型的なスピネルフェライトであるマグネタイト(Fe_3O_4)単結晶薄膜とFe単結晶薄膜からなる2層構造のヘテロ界面においても非常に強い反強磁性結合を見出した。こちらは $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}(001)$ 界面において現れ、原子単位で急峻な界面構造が不可欠である[4]。さらにFeを $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$ で置換すると $x=0.5$ 付近で反強磁性結合が突然消失することから、 Fe_3O_4 と $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x$ の界面における構造と電子状態の解明がこの現象の理解に不可欠であるといえる。

スピネルフェライトのような酸化物と単純な強磁性金属の組み合わせからなるヘテロ構造に関する磁性の研究は、先行研究も少なく様々な可能性がある。今回見出した二つの磁気結合について理論的な解釈を進めるためにも、それらの界面状態の詳細を明らかにする必要があると考えている。

参考文献

[1] Ultrathin Magnetic Structures III: Fundamentals of Nanomagnetism, by J.A.C. Bland and B. Heinrich. Springer (2005).

[2] H. Yanagihara, Y. Toyoda, and E. Kita, JAP (2007).

[3] H. Yanagihara, M. Hasegawa, E. Kita, Y. Wakabayashi, H. Sawa, and K. Siratori, JPSJ (2006).

[4] H. Yanagihara, Y. Toyoda, A. Ohnishi, and E. Kita, APEX (2008).



光電子顕微鏡によるナノ磁性体の X 線分光

X-ray nanospectroscopy of nano magnets using photoelectron emission microscopy

小野 寛太

kanta.ono@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構

グラファイトを単層剥離したグラフェンや、層状遷移金属酸化物を単層剥離した遷移金属酸化物ナノシートは新しい二次元ナノ材料として近年注目を集めている。特に遷移金属酸化物ナノシートにおいては、室温強磁性、巨大磁気光学効果、高い誘電率などのバルクとは異なる物性を示し、デバイスへの応用が期待されている。

これらのナノ材料の物性発現機構を解明するためには電子状態、化学状態、スピン状態を明らかにすることが不可欠であるが、試料サイズは横方向が数マイクロメートル、高さは1ナノメートル以下であり、単一状態での物性を解明するために新たなX線ナノスペクトロスコーピー手法、X線顕微鏡の開発が求められている。

われわれは、室温で強磁性を示す遷移金属酸化物ナノシートの電子状態を明らかにすることを目的として、光電子顕微鏡を用いたナノスペクトロスコーピーに取り組んでいる。これまでの研究の結果、光電子顕微鏡を用いることにより、単一の遷移金属酸化物ナノシートの電子状態測定に成功した。(Y. Kotani et al., Appl. Phys. Lett. 93, 093112 (2008))

本講演では、光電子顕微鏡の空間分解能の向上により、アトグラム (10^{-18} グラム) の試料においてもX線吸収スペクトル測定が可能になったことを示し、新たな X線ナノスペクトロスコーピー手法としての光電子顕微鏡の役割について議論を行う。

特にスピントロニクスを支えるナノ磁性体や磁性長薄膜などのナノ材料の電子状態、化学状態、スピン状態を明らかにするためには水平方向で数十ナノメートル、高さ方向では1ナノメートル以下の分解能が必要であり、水平方向の高い空間分解能と、表面感性を両立する必要がある。軟X線領域での光電子顕微鏡を用いたX線ナノスペクトロスコーピー実験が最適であると考えられる。また、アトグラム試料において、構成原子数は 10^5 個程度であり、原子・分子・クラスターとバルクとの中間に位置するため、その電子状態や物性は大変興味深い。量子ビームによって可能になるナノスケールでの科学とX線ナノ分光、イメージングが果たす役割についても紹介したい。

局所仕事関数と表面物性

佐々木正洋 sasaki@bk.tsukuba.ac.jp

筑波大学大学院数理物質科学研究科

仕事関数は、いわば固体材料における電子の束縛エネルギーであり、化学反応、電子放出を決める重要な表面物性量である。表面科学の黎明期から詳細に検討されてきており、十分に理解されているものと考えられる人もいるかもしれない。しかし、表面現象の多くが、局所的に起こる現象であり、局所的な表面物性によって決まるはずであるが、仕事関数を原子スケールで改めて見直してみるとその理解が全く不十分であることがわかる。本講演では、走査トンネル顕微鏡を用いることで得られた、仕事関数の新たな姿を紹介する。

仕事関数は、一般にはフェルミ準位（あるいは化学ポテンシャル）と真空準位のエネルギー差と定義される。フェルミ準位は熱平衡にある物質において一定の値であり、真空準位は普遍量であることから、局所的に仕事関数を定義することができない様に見える。しかし、仕事関数の異なる物質を電氣的に接続すると、フェルミ準位の高さの違いに対応して電荷移動がおこるため、局所的な電氣的中性はもはや成り立たない。これにより固体外部に電界が生じ、真空準位は変調を受ける。ここで仕事関数をフェルミ準位と表面のすぐ外側における真空準位とのエネルギー差と定義する。これは、電界の染みこみが無視できる程度の電界下では、電子が固体から放出する際に感じるエネルギー障壁であり、電子放出を決める物性量である。表面に吸着した分子の準位も、局所的に変調を受けた表面近傍での真空準位に対応してシフトするので、化学反応においてもこの量が重要である。[1]

本講演では、STM を用いることで測定した局所仕事関数の例を紹介し[2-7]、この背景について議論する。

- [1] “Localized and delocalized features of microscopic work function”. M. Sasaki and S. Yamamoto, 真空 (J. Vac. Soc. Jpn.) **50**, 313-318 (2007).
- [2] “Moiré contrast in the local tunneling barrier height images of monolayer graphite on Pt(111)”, M. Sasaki, Y. Yamada, Y. Ogiwara, S. Yagyu and S. Yamamoto, Phys. Rev. B **61**, 15653 (2000).
- [3] “Moiré-like distribution of local tunneling barrier height of the monolayer graphite adsorbed on Pt(111) surface”, Y. Yamada, A. Sinsarp, M. Sasaki, and S. Yamamoto, Jpn. J. Appl. Phys. **41**, 7501 (2002).
- [4] “Microscopic study of the work function reduction induced by Cs-adsorption”, A. Sinsarp, Y. Yamada, M. Sasaki and S. Yamamoto, Jpn. J. Appl. Phys. **42**, 4882 (2003).
- [5] “Local tunneling barrier height imaging of a reconstructed Pt(100) surface”, A. Sinsarp, Y. Yamada, M. Sasaki and S. Yamamoto, Appl. Surf. Sci. **237**, 583 (2004).
- [6] “Microscopic Study of Work Function of Ag-Deposited Pt(111) and Ag/Pt Surface Alloy”, K. Miya, A. Sinsarp, M. Sasaki and S. Yamamoto, Jpn. J. Appl. Phys. **44**, L31 (2005).
- [7] “Local tunneling barrier height observations of NiAl(110)”, M. Saida, K. Horikawa, T. Sato, S. Yamamoto, and M. Sasaki, Surf. Sci. **600**, L139 (2006).



超高分解能粉末中性子回折による構造解析

神山崇、鳥居周輝

takashi.kamiyama@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構

物質の構造研究では、温度、圧力、光、磁場、電場等の外場や化学組成変化、化学的環境等に対する物理量の応答と構造変化を研究し、物性や機能の発現機構の解明や機能開発が行う。中性子の持つ特徴を最大限に生かした構造解析を実現するため、J-PARC の物質・生命科学実験施設(MLF)に 4 台の多結晶回折装置の設置すべく研究開発を推進してきた。すなわち、(1) 高エネ機構で稼働していた高分解能粉末回折装置 Sirius の発展型で分解能としてはもっとも使いやすい 0.1% 程度の茨城県材料構造解析装置 iMATERIA、(2) ガラス、非晶質、液体構造解析を主要ターゲットに全散乱測定、小角散乱測定が可能で、かつ、粉末回折としては高エネ機構で稼働していた粉末回折装置 Vega 程度の分解能 0.3-0.5% を持ち、実時間計測とハイスループットに大きな期待がもてる高強度全散乱装置 NOVA、(3) 残留応力測定を主要分野としつつ、分解能 0.2% 程度で微小領域粉末回折測定が可能な残留応力測定装置 Takumi (匠)、そして、(4) 既存の粉末回折装置では不可能な研究領域の開拓を目指す、従来にない 0.03% 程度の分解能を持つ超高分解能粉末回折装置 SuperHRPD、である。

図 1 に SuperHRPD で得られた Si の回折パターンを示す。併せてかつて高エネルギー加速器研究機構(KEK)にあった同種の装置である Sirius で得られた結果も示す。Sirius と比較して、SuperHRPD は分解能 1/3 以下を達成しただけでなく、ブラック反射に大きな裾がなくなり、1/10 線幅では 10 倍以上に改善されている。これは、僅かなピーク位置の変化やピーク強度を精密に計測するとき、すなわち構造を精密に解析するときに大きな威力を発揮することが期待されている。ここでは、SuperHRPD の開発の現状について紹介するとともに、今後の可能性について触れるつもりである。

金属系ナノ構造材料に見られる特異物性とその発現機構について

谷本久典

tanimoto@ims.tsukuba.ac.jp

筑波大学数理物質科学研究科

平均結晶粒径が 100nm 以下の超微細多結晶材料（ナノ結晶材料）では、結晶子の微細化及び結晶粒界に關与する原子割合の著しい増大により特異な物性が発現する。例えば、超微細多結晶構造で転位運動が抑制されるために、金属系ナノ結晶材料の破断強度や硬度は通常が多結晶状態よりも著しく増大することが知られている。これに対して、我々は金ナノ結晶材料(*n*-Au)の弾性特性において、約 200K 以上で温度上昇とともに内部摩擦が線形的に増大することや、室温で高応力印加時には弾性歪に匹敵する擬弾性歪が発現することを見出した。一方、定荷重下での塑性変形においては、変形速度（クリープ変形速度）がある応力以上で数桁も急増することを観測した。クリープ変形中のその場 STM 表面観察では個々の結晶粒が独立的に表面から浮上・沈降する変化が、クリープ変形前後での X 線回折測定からは平均結晶粒径は保たれたまま結晶子配向性にのみ大きな変化が見られた[1]。これらの結果は、*n*-Au は結晶子が結晶粒界層で取り囲まれた 2 相共存的な状態にあることを示唆しており、さらに言えば結晶粒界層は 200K 以上で粘弾性的になり、クリープ変形が急進する高応力域ではさらに流動性が増した状態になると考えられる。

ここで、室温の X 線回折測定から *n*-Au の結晶子の格子定数は通常金の多結晶(*poly*-Au)から 0.05%ほど収縮していることが分かっている。さらに、格子定数の温度変化として予備的に測定した *n*-Au の面間隔の温度変化は約 200K ~ 室温において *poly*-Au の線膨張係数から予想される値よりも大きく、温度低下で *n*-Au の結晶子はさらに格子収縮することを示している。この *n*-Au の格子定数の温度変化は粒成長が進展しない約 350K 以下での昇降温で繰り返して観測される。一方、焼鈍による格子定数及び試料長さ変化の測定からは、作製直後の *n*-Au には濃度 0.1%程度もの空孔型欠陥が室温に含まれていることが明らかになった[2]。水素化した Ni や Pd において過剰原子空孔導入により格子定数の減少が報告されていること[3]を踏まえると、*n*-Au で 200 K ~ 室温で見られる異常に大きな格子熱収縮は結晶子内の空孔型欠陥濃度が可逆的により温度変化していることを示唆する。すなわち、200K 以上では結晶子と結晶粒界層間で空孔型欠陥のやり取りがあり、結晶粒界層に空孔型欠陥が放出されることで *n*-Au の結晶粒界層が粘弾性的になっている可能性がある。

1. N. Yagi, A., Rikukawa, H. Mizubayashi and H. Tanimoto, *Phy. Rev. B*, 74(2006)144105.
2. H. Tanimoto, S. Sakai, E. Kita and H. Mizubayashi, *Mater. Trans.*, 44(2003)94.
3. Y. Fukai and H. Sugimoto, *J. Phys.: Condens. Matter*, 19(2007)436201.

中性子全散乱装置による水素貯蔵材料の研究

大友季哉

toshiya.otomo@j-parc.jp

KEK 物質構造科学研究所

水素貯蔵材料の研究は、水素社会実現のため、より高密度に水素を貯蔵できる材料の開発という応用面の重要性に加え、量子効果が大きく影響する水素の存在状態という基礎研究上の重要性を持つ。新規の材料開発においては、貯蔵メカニズムについて基礎に立ち返ることによるブレークスルーが期待されている。金属系の水素貯蔵材料では、水素原子が水分子と同程度の拡散定数を持っており、貯蔵サイト間をめまぐるしく移動しているため、ナノスケールで水素の空間密度は何らかの揺らぎや乱れを有している可能性がある。水素-水素相関の導出は、水素の貯蔵密度を原子レベルで評価するという材料の新しい評価方法となり得るとともに、最隣接水素間距離を決める相互作用の理解、つまり水素を高密度化するためのパラメーターの理解に繋がることが期待できる。最隣接からナノメートル程度までの広い距離スケールでの水素-水素相関の導出には、中性子全散乱法が極めて有効と考えている。全散乱法は、ブラッグ回折ピークのみならず、散漫散乱を含めた構造解析であり、回折パターンをフーリエ変換にすることにより実空間二体分布関数を得る事ができる。中性子全散乱法は、これまでは主に液体やガラス等のブラッグ回折が起こらない物質の構造解析に用いられ、分解能よりも強度を優先してきた。しかし、J-PARCにおける大強度中性子源を用いる事で、結晶構造解析装置として汎用的な分解能を実現しつつ、全散乱実験に必要な強度を得る事が可能になった。

J-PARC 物質・生命科学研究所施設 (MLF) の高強度全散乱装置 (NOVA) は、このような背景を踏まえ、NEDO 事業「水素貯蔵材料基盤研究事業」(プロジェクトリーダー:産総研・秋葉悦男氏)における中性子サブグループとして高エネ機構が委託を受け、日本原子力機構、京都大学、山形大学、福岡大学、九州大学、新潟大学と共同で建設を進めている。NOVA は、パルス中性子源を用いた全散乱法の特長を最大限生かし、水素貯蔵及び死蔵サイトの局所構造の解析、水素-水素相関の導出、ナノメートル程度での水素分布の揺らぎ等の観測を計画している。具体的な仕様としては、 0.01 \AA^{-1} から 100 \AA^{-1} までの広い Q 空間を一挙に測定可能である事、最高 Q 分解能は 0.35% としている。したがって、様々なスケールでの構造変化を短時間に測定可能という特長を有した高強度粉末回折装置と位置づけることもできる。平成 21 年 5 月末より中性子ビームを用いた装置調整を開始した NOVA の性能と水素貯蔵材料研究計画の概要について紹介する。

参考文献

[1] 大友季哉、鈴谷賢太郎: 高強度全散乱装置の概要と水素吸蔵材料研究」日本結晶学会誌 2008 年 第 50 巻 29-34 頁



無機ナノ粒子の精密構造制御と構造特異機能の創出

寺西利治

teranisi@chem.tsukuba.ac.jp

筑波大学大学院数理物質科学研究科化学専攻、JST-CREST

有機分子で安定化された粒径 1~100 nm 程度の無機ナノ粒子は、無機核が電子の閉じ込め、発光、線形・非線形光学特性、磁性などの物性を示す一方、周囲の有機配位子殻はナノ粒子の粉末化・溶媒への溶解、無機核の機能化などの役割を担う。高品質無機ナノ粒子の化学合成法は近年急激な進歩を見せており、一次構造（粒径、形状、結晶構造、組成、相構造）を極めて良く制御できるようになったおかげで[1,2]、ナノ粒子の構造－物性間の相関が議論可能となってきた[3]。本講演では、有機配位子ならびに無機核それぞれの視点から見た、ナノ粒子の構造特異機能の創出について紹介する。

帯電エネルギーの大きい粒径 2 nm 程度の金属ナノ粒子では、室温でのクーロンブロッケード現象の発現が期待できるため、単電子トンネル効果を利用したデバイスへと展開できる[4,5]。金属ナノ粒子の電子輸送特性に影響を及ぼす要因として、粒径に加えて有機配位子のトンネル抵抗が挙げられる[6]。我々は、大環状 π 共役部位の有機配位子への導入が、トンネル抵抗低減等のデバイス特性向上に効果的であることを明らかにした[7,8]。

無機核の構造制御による新規機能発現の観点から、近年、複数化学種からなる無機核の相分離構造制御が注目されている。複数化学種が異方的に相分離した構造が形成できれば、複数機能の同時発現、ナノ粒子の指向性配列、粒子内電荷分離、界面原子・イオン拡散による新規材料の創成が可能になる。ここでは、金属、金属カルコゲニド、金属酸化物の組み合わせからなる異方性相分離ナノ粒子の合成と構造特異的機能（ナノ粒子の指向性配列、粒子内電荷分離、界面原子・イオン拡散による新規材料の創成）について紹介する[9-13]。

参考文献

- [1] M. Kanehara, J. Sakurai, H. Sugimura, and T. Teranishi, *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 1630 (2009).
- [2] C. Li, R. Sato, M. Kanehara, H. Zeng, Y. Bando, and T. Teranishi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, accepted.
- [3] Y. Yamamoto, T. Teranishi, H. Hori et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 116801 (2004).
- [4] Y. Azuma, M. Kanehara, T. Teranishi, and Y. Majima, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 016108 (2006).
- [5] Y. Azuma, T. Teranishi, Y. Majima et al., *Appl. Phys. Lett.* **91**, 053120 (2007).
- [6] H. Zhang, Y. Yasutake, Y. Shichibu, T. Teranishi, and Y. Majima, *Phys. Rev. B* **72**, 205441 (2005).
- [7] M. Kanehara, E. Kodzuka, and T. Teranishi, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 13084 (2006).
- [8] M. Kanehara, H. Takahashi, and T. Teranishi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 307 (2008).
- [9] T. Teranishi, Y. Inoue, M. Nayaka, Y. Oumi, and T. Sano, *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 9915 (2004).
- [10] T. Teranishi, M. Saruyama, M. Nakaya, and M. Kanehara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46**, 1713 (2007).
- [11] T. Teranishi et al., *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 4210 (2008).
- [12] M. Saruyama, M. Kanehara, and T. Teranishi, *Chem. Commun.*, 2727 (2009). (Hot article)
- [13] T. Teranishi, M. Saruyama, and M. Kanehara, *Chem. Lett.* **38**, 194 (2009). (Highlight review)

中性子非弾性散乱実験による量子スピン系の研究

伊藤 晋一

shinichi.itoh@kek.jp

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所

高分解能で物質の動的構造を探索するため、高分解能チョッパー分光器をJ-PARCに建設している。サブeV程度のエネルギーを持つ中性子を入射して、高エネルギー分解能を実現させることによって、以下のような、量子スピン系における新しい手法での研究が可能となる。

(1) 通常の中性子散乱実験のエネルギー運動量空間における高分解能実験：単色化デバイスの性能を向上させ、装置分解能を制御し、励起エネルギーが 100meV 程度に及ぶ全ての Q での分散関係を観測すると同時に動的構造因子の波数依存性を決定するような実験方法を確立して、磁性研究の精度を高める。一次元磁性体における量子相転移の問題をはじめとし、より高精度の測定が可能となる。

(2) 第1ブリルアンゾーンへのアクセス：運動量遷移 Q が 0.2\AA^{-1} 程度かつ数 10meV の遷移エネルギー E の励起を観測するには、散乱角が 1° 程度、サブ eV の中性子を用いてはじめて可能になる。その上、数 meV のエネルギー遷移を観測するためには、高いエネルギー分解能が不可欠である。この方法を用いれば、粉末試料により、(000)から伝播する強磁性スピン波の観測が可能になり多くの強磁性物質のスピン波観測へと研究範囲が画期的に広がる。金属強磁性体、磁性半導体におけるスピンドYNAMICSへの研究へと研究対象が広がる。

(3) eV 領域中性子分光の可能性：多くの反強磁性物質のスピン波の観測では $Q=1\text{\AA}^{-1}$ 程度の逆超格子点のまわりで素励起の分散関係を決定する。分散関係決定には少なくとも $\Delta Q=0.1\text{\AA}^{-1}$ 以下の運動量分解能が必要であるが、現時点でこれを満たす事例はない。運動量分解能はエネルギー分解能で決まるので、高エネルギー分解能を実現すれば、高エネルギー磁気励起の分散関係の測定が可能となる。また、eV 領域の中性子が利用できるようになると、中性子非弾性散乱実験による電子励起の観測も期待される。

