

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2021S01

課題名：高分解能チョッパー分光器による物質のダイナミクスの研究

実験代表者：伊藤晋一

種別：新規

ビームタイム配分： $\beta = 61.6\%$

評価結果：5 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

2020年11月25日午後にオンラインで開催された HRC 研究会での説明に基づき、以下の評価を行った。

HRC は、装置責任者のリーダーシップのもと、明確な戦略にもとづき第1期、第2期において着実なグレードアップと、装置特性を生かした研究推進、テーマ開拓に成功している。かつ東大物性研との連携では、それぞれの強みの相乗効果が現れており、単独ではなし得ない分野拡大を進めている。その結果として、多数の特徴ある学術的成果を上げた。さらに、これまで重点的に進めた高精度化により、先鋭的な研究テーマの呼び込みに成功しており、世界的にみても HRC でしかできないユニークな研究が行われている。コロナ禍により若干の停滞はあるが、逆にそれを利用し、装置グループの先鋭的なサイエンスを進めることもできた。これらを鑑み、評点を 5.0 とし、課題を採択する。

HRC が世界の分光器の中でも特徴を示しているのは高精度のブリルアン散乱である。複雑な物性を示す物質では、単結晶がなければ中性子は無力であったが、HRC において粉末や多結晶試料であっても多くの実験が可能となり、たとえば MnGe で注目すべき成果をあげている。これは世界でも HRC でなければできないことである。最先端研究では大型単結晶がないのが普通のことであり、それがミクロスコピックな振る舞いの理解の大きな障壁となっていた。HRC において粉末試料でスピン波分散、フォノン分散の観測が可能になったことは、固体物理においても中性子コミュニティーにおいて非常に大きい意義をもつ。

(様式：各年評価)

また、今回特筆すべき印象深い成果として、金属磁性体 **FeMn** での磁気励起観測の成功がある。金属磁性の理解、とくに高エネルギー磁気励起の観測は固体物理学の長年の中心テーマであったが、バンド間磁気励起の観測の難しさから、近年では目覚ましい進展がなかったようにおもう。したがって、最近 **HRC** において **FeMn** での **150meV** 以上でのスピン波でない磁気励起の発見に成功したのは、長年の学術的課題へのブレークスルーに繋がる重大なことである。まだ検証は必要であろうけれど、そもそも高エネルギー磁気励起観測を目指し高精度化を着実に進めてきた装置グループの野望のひとつが達せられたようにおもう。

学術的成果だけでなく、その運営体制も評価できる。すなわち東大物性研との強固な連携はますます効果をあげており、特に物性研の得意とする極端条件下でのダイナミクス研究の環境が整ってきている。今回、**5T** とはいえ高磁場での測定が、トラブルのあと着実な進展を見せていることもわかり、これも重要な連携の成果といえる。高圧についての報告がなかったのは、この1年で実験がなかったためと思われるが、それでも **ISSP-KEK** 連携でなければそもそも実現が難しい研究戦略であり、今後の進展に多いに期待した。

さらに、物性研での連携は、ユーザーフレンドリーな解析環境も生み出した。ある意味マニアックな測定であるチョッパー分光実験を学生でもイメージできる環境を物性研と連携して構築したことは、**HRC** にとって重要であるだけでなく、**MLF** 全体にとって重要なことと認識している。

論文発表などの数は理想的とはいえないけれど、これはコロナ禍への対応が一因であり、マイナス評価とはならない。むしろ善戦していると思われる。

以上のことから、**HRC** グループは、コロナ禍にもかかわらず、印象深い学術的成果をあげつつ、共同利用装置としてもユーザーフレンドリーな装置への成長している。特段減点すべき事項は見当たらないため、**5.0** 点評価とする。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S03

課題名：パルス冷中性子を用いた中性子基礎物理研究

実験代表者：三島 賢二 (KEK 物質構造科学研究所 特別准教授)

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta=32.1\%$

評価結果：4.8 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

本課題は、先進的な中性子光学系の開発研究を基盤に、BL05において中性子の崩壊、散乱、干渉、回折等、多彩な中性子基礎物理を展開する計画である。中性子寿命や短距離重力など、J-PARCでの高強度パルス冷中性子の特徴を活かした素粒子物理研究とともに、測定器開発においても、世界初となる成果が創出されており、高エネルギー実験と相補的に重要である本分野を国際的に牽引していくため、重要課題として推進していくことが必要と思われる。また、2020年度は、論文成果報告（査読付き論文：2、proceedings：5）も着実に行われ、BL5の3本の特徴ある中性子ビームライン（偏極、非偏極、低発散）の整備拡充とともに、定常的に成果がでていっているのは高く評価される。

中性子寿命の実験では、先行する2つの実験手法：ビーム法とトラップ法とは、全く系統性の異なるパルス中性子とTPCを用いた第3の実験手法を提案している。すでに、10秒の測定精度を実現して、測定手法を確立している（論文成果報告あり：PTEP）。本申請では、3年計画で、測定精度1秒を実現することを目標にしているが、測定精度向上に向けて、これまでの開発蓄積をふまえて、具体的な戦略、系統誤差抑制の方針等が綿密に練られており、着実な成果が期待される。すでに統計誤差4秒に相当するデータ収集が完了しており、系統誤差の主要な成分であるTPC動作ガス中の ^3He 含有率の測定・解析手法を確立するとともに、ソレノイド磁石を用いた新しい系統誤差の抑制に一定の見通しを立てつつある。また、中性子フラックスの増強により統計誤差を向上させるため、スピンプリップチョッパーに用いられている磁気ミラーの大口径化と、学系の最適化、シミュレーション等、順調にアップグレードが進んでいる。

(様式：各年評価)

短距離重力の研究では、余剰次元の存在から予測される波長 $<0.1\text{nm}$ 領域での重力の逆二乗則の破れに対して世界最高感度を実現し、国際的にも注視されている。本研究では、感度向上を実現するために、ターゲット標的として、ガスではなく、ナノ粒子標的を用いた干渉散乱の実験開発が進行中である。微分断面積に現れる重力散乱項の測定感度を高めるため、核散乱による寄与を低減させるための標的開発が鍵となるが、異なる符号の散乱長を持つ元素を混合することで、この寄与を抑制する標的を実現する設計手法も確立しつつあり、世界をリードする研究が維持されると思われる。

さらに、超冷中性子 (UCN) デバイスの開発も、多岐にわたって進められている。特に、UCN ガイドの性能評価の設備を構築し、UCN の透過効率を測定し、表面における様々な反射モデルをもとに、UCN の表面での物理過程の微視的理解が大きく進んでいる。これは、KEK/RCNP/TRIUMF の国際共同プロジェクトとして進められている UCN-EDM の重要な構成要素の開発に大きく貢献しており、中性子光学デバイス開発拠点の役割を果たしていると評価される。このように、国際的にも、UCN を用いたデバイス開発を柔軟に実施できる施設は他になく、本研究グループが独自で開発を進めている中性子ドップラーシフトを用いた UCN 源は、国際的にもユニークな UCN のテスト実験コースとして、今後、広く UCN を用いた科学の発展に寄与していくと考えられる。

国際的にも初めての実現となる多層膜を用いたパルス中性子対応干渉計の開発では、初めて干渉縞の観測にも成功し、系統誤差の評価を行いながら、今後の未知相互作用探索に向けて、大きく進展している。さらに、中性子エマルジョンの開発も順調であり、中性子イメージングへの応用展開も視野に、広範囲にわたる中性子デバイスの開発と、さまざまな分野への波及を意識した研究が推進され、S 型課題としての役割を果たしていると高く評価する。

限られたマンパワーで、広い範囲での中性子光学の技術開発を進めており、プロジェクトが発散しないような工夫が必要と思われるが、研究代表者のコラボレーションのマネジメントと、中性子の特性を活かした新物理の探索という明確な目標設定のもと、各装置開発の連携・技術交流も積極的に行いながら、相乗効果により研究が活発に進められている。すでに、OPERA 等、産学連携による事業推進も行われているが、基礎物理から、工学、BNCT も含めたライフサイエンスにも本研究での開発成果が広く波及しつつあり、学術変革領域等への提案も含めた大型外部資金等の財源獲得による開発加速も期待される。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S05

課題名：SuperHRPD を活用した機能性物質の構造科学研究

実験代表者：萩原 雅人 (KEK 物質構造科学研究所 特別助教)

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta = 55.3\%$

評価結果：※5.0～1.0 を記載

4.7 最優先で行うべき課題である。

1. 装置の性能を最大限に引き出す先導的実験手法・解析手法の開拓及び機器開発

本年度はコロナの世界的流行により、加速器の運転、装置整備、ユーザー対応など、様々な面で極めて深刻な影響を受けてきた。それにもかかわらず、装置グループの尽力によって順調に SuperHRPD の整備・高度化が進んできていることに、最大限の感謝と評価を与えたい。

SuperHRPD の最大の「売り」である超高分解能は、単結晶を用いた測定による $\Delta d/d \sim 0.03\%$ の達成後も着々と高度化が遂行され、粉末試料による、 $\Delta d/d \sim 0.0365$ の超高分解能における実用的測定に繋がった。更に、この分解能下でリートベルト解析（定量構造解析）が実現し、装置の性能が最大限に発揮できる状況が整ってきたことは大きな飛躍である。2021 年度以降の更なる加速器出力向上により、高分解能を活かした様々な測定・解析が可能になり、今まで捉えられなかった現象、新しい物理が開拓されていくと期待できる。

試料環境アクセサリの高度化については、様々な問題点がありながらも、概ね順調に進んでいると評価できる。特に、4 K から 800 K の幅広い温度領域をシームレスに測定できるクライオファーンネスは、ユーザーからの要求が非常に高いアクセサリであり、早急な導入が求められている。2019 年度終わりに装置が納入され、2020 年度はオフラインでの降温・昇温試験が行われ、概ね性能が仕様通り発揮されているようである。現在修理中のバナジウム高温炉と合わせて、2021 年度の稼働（一般課題への解放）を目指して引き続き整備を進めていただきたい。その他 14 T マグネット及び 1 K 冷凍機についても、それぞれ $H = 14\text{ T}$ 及び $T = 0.9\text{ K}$ の安定運転が達成されており、一部一般課題に解放されたことは大きな進歩である。14 T マグネットについては、MLF 施設や粉末 BL 全体でよく議論し、より効率的な運用を目指していただきたい。外場環境装置から発生するバックグラウンドの低減に必須である、ラジアルコリメータの早期導入も必要である。

(様式：各年評価)

Z-code project については、Z-Rietveld と Z-MEM の統合による解析の高速化、初期値推定のアルゴリズム、AI の導入など、様々なアップデートがなされている。磁気構造解析についても、長周期ノンコリニア構造の解析まで可能になっている。今後は UI の向上を計り、ユーザーフレンドリーな磁気構造解析実現を目指していただきたい。電池材料の時分割オペランド測定などに必要な、自動測定と自動解析の連携についても着々と進んでいるようである。

2. 先導的プロジェクト研究

磁性体から熱電材料、電池材料、触媒材料、有機物など、非常に多岐にわたる研究プロジェクトが計画・推進されている。全国のユーザーとの共同研究により、概ね順調に進んでいると評価できる。特につくば地域の研究機関（筑波大や AIST, NIMS）との緊密な連携・共同研究により、コロナ禍の様々な困難と共存しながらプロジェクトを遂行してきたことは、非常に高く評価できる点である。また、多点自動解析による電池材料のオペランド測定や、従来装置では検出不可能であった回折線幅の超精密測定による磁性体の超微小格子歪み、超微小対称性破れの観測など、SuperHRPD の特性を最大限に活用した研究が、一般課題においても実現しつつあり、KENS 時代から構想してきた理想の装置が現実になりつつあることを感じさせる。今後も超高分解能測定を活かせるサイエンスの開拓を継続していただきたい。

3. その他

近年、中性子粉末回折装置のハード・ソフト面の充実により、ユーザーが着実に増加し、定着してきている。その一方で装置を支え、運営しているスタッフの減少が進んでいる。2020 年度からは本課題の装置責任者が交代し、コロナ禍も相まって多くの困難・混乱が起こったと考えられるが、スタッフの努力により停滞なくプロジェクトが進んできたことには深く敬意を評したい。しかしながら人的資源は有限であり、今後の減少は避けられない。iMATERIA, SPICA, SuperHRPD などの粉末グループ間の横断的連携による人・金・モノの共有化や人材育成など、効率的運営を進めていくことが重要である。

近年、世界の放射光施設や中性子施設などの共用大型施設においては、代行実験、リモート実験が当たり前の潮流になっており、その流れは今年のコロナ禍によりさらに加速している。SuperHRPD でも導入されるべき課題であり、自動測定・自動解析のさらなる高度化が求められる。結果としてそれが恒久的なマンパワー不足の緩和に繋がるであろう。

成果創出に向けた取り組みも充実している。Z-Code の高度化・利便化による解析支援や講習会も継続的に実施されており、これらの取り組みも高く評価できる。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S06

課題名：高強度中性子全散乱法による機能性材料の規則－不規則構造解析

実験代表者：池田一貴

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta=46.5\%$

評価結果：4.5 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

BL21 NOVA は、全散乱装置として世界トップクラスの性能を有しており、本 S 型課題申請はその能力を活用しさらに発展させていく研究を総合的に推進する目的で実施されている。物質・材料研究の基礎領域をカバーする本装置は持続的に維持発展されるべきものと言える。本課題は、1MW が目前の J-PARC の大強度を活かす全散乱測定装置 NOVA を目指して、3 つのキーワード「微小試料測定」、「短時間測定」、「精密測定」を掲げ、申請グループ内サブテーマの構成も各々これらのキーワードに沿って実施されていると見ることができる。この方針は、大強度施設的全散乱装置として妥当な方向性である。

装置性能の向上については、偏極デバイス導入やラジアルコリメータの導入など、精密試料や微量試料の測定に対応した内容が進められているが、2020 年度のコロナ禍で遅延が生じているのが惜まれる。一方で、この状況に対し、グループとしてリモート実験への対応を模索しながらの外部実験サポートにも対応している。この経験は、今後の外部実験の実施方法にもフィードバックされ、より良いサポート体制が構築されていくと期待できる。一方で、特に機構内メンバーの過重なロードには注意を払うべきだろう。

申請グループ内では、大きく「水素化物構造解析」、「液体・非晶質物質構造解析」、「磁気構造解析」の 3 つの構造解析が研究テーマとして取り上げられている。いずれも本課題が目指す機能性材料の構造解析および 3 つのキーワードの進展に沿ったサブテーマであり、それぞれのテーマで研究の進展がみられる。それらが NOVA の性能を活かしたトップサイエンスということであれば、より効果的な情報発信が望まれる。論文報告や研究発表はコンスタントに行われているし、研究内容は実際に興味深いものばかりなので、分野が完全には重なら

(様式：各年評価)

ない研究者や学生にもアピールしてみても如何だろうか。それによりさらに広い範囲で研究者を集めることができるかもしれない。なお、このような発信にも関連しそうであるが、マルチビームの利用を進めている点は評価できる。他の中性子 BL や放射光、電子線の利用を組み合わせた研究が進められており、異手法研究者との接点を活かしていくことが期待される。さらに、情報科学を活用した解析共通化や測定効率化にも取り組んでおり、一般ユーザーの実験遂行への波及的な効果や新規ユーザーの獲得にも関連していくものとして期待できる。引き続き中性子全散乱という分野の外側にある領域との関係を開拓して、新しい研究領域を拓けて行ってほしい。

以上のように、BL21 NOVA では申請課題で示されたキーワードが装置グループ内全体で十分に理解共有され、各々の研究に取り込まれている状態にある。この状態がぶれずに進められれば、NOVA の特徴を活かしたサイエンスに到達すると期待されることから、このままの研究代表者と研究グループを基盤に据えた形で S 型課題として研究を進めて行くことが妥当と考えられる。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S07

課題名：中性子共鳴スピネコー分光器群(VIN ROSE)によるスロ
ダイナミクス研究

実験代表者：小田 達郎 (京都大学複合原子力科学研究所 助教)

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta=50.3\%$

評価結果：4.6 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

中性子スピネコー法は、中間散乱関数 $I(Q, t)$ を直接測定し、時間領域でピコ秒からサブマイクロ秒までの高いエネルギー分解能を測定可能な中性子散乱分光法である。J-PARC MLF BL06に建設された中性子共鳴スピネコー分光器群 VIN ROSEはMIEZEとNRSEと呼ばれる2台の分光器からなり、MIEZEでは1nsオーダーの低分子や磁性体のダイナミクス、NRSEでは高分子等の100 nsオーダーのダイナミクスをターゲットとしている。どちらの装置も日本独自の中性子光学技術をフルに用いたオリジナリティーの高い装置であり、開発要素が多い装置でもある。

本課題のS1型課題研究会は、2020年11月25日(水)にZoomによるリモート形式で開催された。研究会の最初に、実験代表者の小田達郎氏(京大複合研)から装置の開発状況に関する講演があった。まず、かねてより計画していた第2アナライザー(散乱後の偏極解析のため)を設置したことが報告された。今後、スピNFLリップ成分とノンNFLリップ成分の分離が可能になる。今年度のハイライトは、MIEZE型スピネコー分光と組み合わせた中性子反射率測定であろう。シリコン基板に炭素薄膜を成膜した試料からの反射率とMIEZEシグナルのコントラストの Q 依存性を比較すると、炭素膜厚からのフリンジに対応する箇所周期的にMIEZEシグナルのコントラストの低下が観測された。たいへん興味深い結果である。NRSEでは、回転楕円集光ミラーによる集光試験が行われた。ガイド管出口に設置したピンホール像が、集光ミラーにより1点に集光されている様子が確認された。さらに、発散のあるビームに対して楕円集光を行い、最終的に光路差を補正する形で、TOFを用いた広いダイナミクスレンジでスピネコーシグナルを観測することに成功した。NRSEの完成に向かって一歩

(様式：各年評価)

ずつ前進しているという印象であった。次に必要なプロセスは、共鳴スピンフリップパーの高周波数化であろう。これにより、フーリエ時間が長くなり、より遅いダイナミクスの観測が可能になる。

続いてスピンエコー関係したサイエンスや装置の講演が5件行われた。まず、中島多朗氏（東大物性研）が昨年引き続き、MIEZEを用いた磁気スキルミオンのダイナミクス研究の結果を発表した。この結果は最近、Physical Review Researchに発表されており、VIN ROSEの代表的な結果となっている。次に、米国NISTでスピンエコー装置を担当している長尾道弘氏（NIST, インディアナ大）が偏極解析を利用した高角でのMIEZE実験の可能性について講演した。Zoom開催ならでは講演である。MIEZEで高角の測定は容易ではないが、その必要性をアピールする講演であった。南部雄亮氏（東北大金研）は磁性研究の観点からのスピンエコー分光器への期待を話した。昔のNiGs₂S₄のデータや最近のYIGなどが示され、NRSEによる長いフーリエ時間の必要性が述べられた。続いて、松浦直人氏（CROSS）は自らがMLFで担当しているBL02ダイナミクス解析装置DNAの現状と研究動向について話した。Si(311)アナライザーの設置がかなり進み、高Q極限が3.7 Å⁻¹まで達したという話が印象的であった。もともと、MIEZEとDNAは測定時間領域が重なっており、今後、いかに両者を相補的に用いるかが重要になるであろう。最後に、吉田亨次氏（福岡大）が溶液ダイナミクス研究の観点からのスピンエコー分光器への期待について講演した。やはり高Q領域のデータ取得が必要であること、また水素を含む系では偏極解析によるcoherent/incoherent分離が有用であることなどが話された。

以上のように、NRSEが本格的に動き出すにはもう少し時間がかかるが、MIEZEはすでにハイレベルな論文につながる研究が可能な状態にある。装置の開発要素の多さを考えると、S1課題の研究は順調に進んでいると評価できる。最初のサイエンスのターゲットとしてスキルミオンに注力している方針も間違っていない。この調子で、MIEZEではスキルミオン研究の続行、新しい研究対象の発掘（1nsオーダーの磁気緩和を示すもの）、冷凍機、マグネットなどの試料環境の整備を進めることが必要であろう。NRSEでは、スピンフリップパーの高度化を進め、できるだけ早く一般課題を受け入れて欲しい。そのためのビームタイムとして、MIEZE35日、NRSE45日（合計80日）は妥当な日数である。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S09

課題名：偏極中性子散乱装置 POLANO による交差相関物理の解明

実験代表者：横尾哲也

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta=89.9\%$

評価結果：5.0 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

近年の磁性体研究では、スピнкаイラリティーから生じる磁場の異常ホール効果やスピン流など新しい現象が次々に見つかっており、偏極中性子散乱がこの分野で果たす役割は益々重要になっている。このように世界的に偏極中性子散乱の需要が増す中で、POLANO は非常にタイムリーな装置である。偏極中性子散乱研究の歴史は長く、すでに多くの研究がある中でも、装置は限られており、特に高エネルギーという観点では、これまで ILL で 30-40meV 程度が限界であった。これを 100meV ほどまで拡大するという意味で、非常に野心的な装置である。

多少遅れているものの、今年度中に SEOP とガイド磁場の設置により、検出器前の 40 数 meV までの偏極性能のアナライザーミラーを利用して、いよいよ偏極非弾性散乱実験が可能になるとのことで、今回の高い評価結果は、この偏極非弾性散乱実験が今年度中に実現することを前提としている。高エネルギーでの偏極実験の成功だけでも、新聞発表の価値があり、非常に楽しみである。

開発の中で、今回、ガイド磁場のフレームがディテクター上で影となることがわかり、早急に設計を見直した点は重要で、このようなコンポーネントの見直しがスムーズに行われている点は、昨年 DNP 開発を休止した点と並んで高く評価される。

SEOP アナライザーも困難な環境下で実現を目指しているようだが、ディテクターの ^3He のガス圧も 10 気圧で、アナライザーミラーにも適していること、またサイエンスでの展開も期待されていること、人的余裕は感じられないことから、アナライザーミラーでの測定システムを改めてまずは完成させることに集中していただきたい。

申請書はよく書かれているものの、今後は測定できる偏極モードの詳細を記

(様式：各年評価)

載していただきたい。単に偏極中性子散乱ではなく、この詳細により、先述のスピンカイラリティーが測定できるかどうかが決まるからである。また 3) 研究目的「研究期間に何をどこまで明らかにするのか」という項目で、銅酸化物高温超伝導と同時に MgB_2 のフォノンについても触れられているが、続く「独創的な点と意義」では、このような磁性状態の機構解明と共に、水素貯蔵物質や燃料電池などの環境材料開発も重要項目として取り上げている。これらの 2 点の大きな研究項目は、予め「研究期間に何をどこまで明らかにするのか」という項目でも書かれていた方が読みやすく、社会的な意義として説得力がある。特に水素関連の励起は元々よく見えているが、それはあくまでも自己相関であり、偏極中性子により水素原子対の相関が見えるようになることが重要であり、その特徴をきちんと書いていただきたい。先導的プロジェクト研究は、残念ながら 1 年経っても変更がない。研究への思いを変えないことも重要であるが、世の中では新しい発見が次々になされて変化していることから、KEK のような大きな共同研究所では、一つぐらいまったく新しいテーマを見つけて世の中の流れに遅れないようにしていただきたい。

最後に、POLANO で使われる偏極技術と装置は、中性子散乱に共通で利用できる重要な試料環境装置となるものである。昨年同様、今後 MLF での研究を先導して、その利用を他の装置に拡大することも重要である。固体物理だけでなく、中性子研究を代表する軽水素の関連研究でも多くが偏極中性子を必要としている。そこでも多くの発見が期待されることから、今後、益々、一般の研究者が使いやすい偏極装置を目指して、ソフトウェア開発などにも漏れがないように注力して、新しい高エネルギー偏極中性子の世界を切り開いていただきたい。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2019S10

課題名：機能性材料の機能性と反応の構造学研究

実験代表者：齋藤 高志 (KEK 物質構造科学研究所 特任准教授)

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta = 77.4\%$

評価結果: 4.5 ※5.0～1.0を記載

コメント：

課題申請書/計画書および、2020年11月30日に実施された、中性子共同利用S1型課題研究会での発表内容に基づき、以下のように評価を行った。

本課題は、SPICAの高強度かつ高分解能の特性を活かし、マルチスケール構造解析技術、operando測定技術を高度化し、革新電池材料などの機能性物質の構造学的研究を推進するものである。SPICAは、2009年からNEDOのRISING、RISING2プロジェクトの利用を中心に建設・開発され、電池材料用に専用の化学実験室を備え、車載用の実電池をも直接operand測定することのできる、世界で唯一の高分解能・高強度中性子回折装置である。これまでRISING1,2プロジェクトにおいては、様々な蓄電池材料の構造解析のみならず、企業研究者も加わりリチウムイオン電池の動作時の構造変化や不均一反応などの直接観測等にも成功してきた。また、SPICAはRISINGプロジェクト以外にも、高強度・高分解能という特性を活かして、様々な機能性物質の構造解析に活用され優れた成果を挙げている。

一方で、RISING2プロジェクトは2021年3月で終了し、2021年度からは後継プロジェクトに引き継がれる予定であるが、詳細な計画は明らかになっていない。また、運営体制の面では、2018年度に米村特別教授が抜け、2020年度末には、これまで中心的に携わってきた神山教授退職する。それに伴い、2021年度からは齋藤高志特任准教授を中心に、新たな体制で運営される予定である。これらの不確定要因や新たな運営体制の発足により、本申請書の研究計画は、主に2020年度までの成果の延長上で記載されているが、今後、柔軟に変更されるものと想定される。以下では、個別テーマの特殊性によらない、共通の計画や重要な課題設定、新たな体制方針について評価を行った。

(様式：各年評価)

実験手法・解析方法の開拓及び機器開発に関しては、①機器整備、試料周辺環境の高度化②オフビーム充放電試験設備の整備③operando 測定技術の高度化④ラジアルコリメータの開発⑤中性子ブラッグエッジイメージング技術の開発⑥MEM + Boltzmann distribution 法開発⑦分子動力学構造因子法が掲げられている。

①の試料周辺環境の高度化に関しては、2019年度から進めているクライオスタット、クライオファーネス、vanadium furnace の整備を更に進めることとしている。今後、蓄電池材料等の研究においても、相転移挙動やイオン移動経路の解明のために、広い温度範囲で精度良く(かつ短時間で)回折測定を行う事は極めて重要となる。特に、放射光 X 線とのマルチプローブ解析が標準化しつつあり、温度の精度・確度・均一度を X 線並みに高める必要がある。これは、蓄電池材料に留まらず、S1 課題にあるヒドリド伝導体など、中性子でしか測れない新規物質群の構造解析においても極めて重要であり、今後の開発整備に期待したい。

②のオフビーム充放電試験設備の整備については、特に蓄電池のサイクル性や劣化時の構造変化の解析に必要不可欠であるが、長期にわたり無人で大電流実験を繰り返す事になるので、安全監視システムや緊急時の対応も含めて万全の措置を構築して欲しい。

③～⑤については、既にこれまでも開発・準備が進んでいるが、ラジアルコリメータの開発は、バックグラウンド低減のみならず、中性子に 3 次元空間分解能を付与する基礎技術として今後重要性が増すと考えられるので着実に進めて欲しい。⑤⑥は解析技術の高度化・ソフトウェア開発に関わるが、下記の全散乱測定技術の開発とも関係して、今後は、従来のリートベルド解析に留まらない、ランダム性やダイナミクスをも取り込んだ解析の必要性が高まると予想されることから、大いに期待される。また、③operando 測定技術の高度化においては、大量の時系列データ等から AI 等も活用した自動解析技術の開発も進められている。これらの、データ処理・解析の部分は、パワーユーザーとの協力も得てできるだけ公開・標準化し、新たなユーザーでも少ない負担で論文にできるレベルの結果が得られれば、今後の中性子利用の拡大にもつながると期待される。

先導的プロジェクト研究としては(2-1)革新型蓄電池材料の構造学的研究の推進(RISING2)に関する内容と、(2-2)～(2-8)のその他 S1 課題について計画されている。

(2-1)については、冒頭に述べたように、これまでの RISING2 のテーマをベースに記載されており、既に多くの成果を得ているが、今後継続される場合には、時間・マンパワー等について十分に検討・調整いただきたい。このうち、2-1A の中性子全散乱の開発については、一時中断されていたが 2021 年度より再開が計

(様式：各年評価)

画されている。蓄電池材料のみならず、近年の物質・材料開発においては、結晶相とアモルファス相の混在や、ナノ構造体、階層複合構造体など、マルチスケール構造解析が必須となっている。SPICAをはじめ高分解能の回折装置に全散乱機能を持たせることには賛否が分かれるかも知れないが、ユーザー視点からは一度で全貌が把握できるメリットは大きい。また、本来計画されていた小角バンクの拡充も、マルチスケール構造解析を目指す上では必須であろう。

一方で、これまでの装置でも(2-2)～(2-8)に掲げられた S1 課題で目指す様々な物質材料の構造解析には、高強度と高分解能を活かして十分に活用できるので、SPICA の性能を世界にアピールするためにも、これらの課題が十分に実施できるマシンタイムと支援体制を確保いただきたい。

最後に、実験組織については、計画に掲げられた課題(いずれも重要と評価されるが)に較べて、マンパワー的に厳しい事が予想される。その点では、計画にも記されている測定の自動化・遠隔化と並んで、2019 年よりすすめられてきた SuperHRPD と SPICA の一体運営など、構造解析グループ全体としてソフトウェアや一部のハードウェア(温度制御も含む)の共通化・標準化を進める方針は、有効であると評価できる。実際、今回の研究会も SuperHRPD と連続して開催されたが、両者の違いと共通性を踏まえた検討ができて効果的であった。また、これまでに育ってきたユーザー層を中心にパワーユーザー方式を導入する案が検討されているが、今後の大学との連携や人材確保の面からも重要である。制度的困難もあるようだが、是非前向きに検討していただきたい。

最後に、報告会においては新型コロナによる様々な制限の中でも、着実に研究成果を挙げている事が理解できた。ユーザーと装置運営に携わる方々の尽力に敬意を表したい。

(様式：各年評価)

評価報告書

2020年12月24日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2018S12

課題名：パルス偏極熱外中性子の利用

実験代表者：清水 裕彦（名古屋大学大学院理学研究科 教授）

種別：継続

評価結果: 4.8 ※5.0～1.0 を記載

コメント：

本課題は、世界最高強度のパルス熱外スピン偏極中性子ビームを用いた素粒子物理を軸足に、最先端中性子光学と中性子検出技術を開発し、中性子基礎物理の基盤を開拓するものである。中性子の共鳴吸収における複合核状態において発現するパリティの破れの量子増幅現象に着想を得て、本研究では、複合核で増幅される時間反転対称性 (T 対称性) の破れを高精度で測定し、物質・反物質 (CP) 対称性の破れの起源に迫る挑戦的な研究である。T 対称性の破れの増幅度が高い原子核を選定するために (n, γ) 反応の微分断面積を測定する実験が系統的に進められ、実験結果とともに、増幅度を決める物理量の抽出に成功している。今年度は、それらの結果についての論文成果発表も順調に行われ (査読付き論文5編、投稿中2編)、さらに、中性子と原子核に関する独創的なスピン偏極技術の開発により、対称性の破れの解明という長期的な素粒子物理研究に向けた準備が着実に進み、短期・長期の研究戦略が十分に練られて、高く評価される。

量子補正効果により生じる CP 対称性の破れを探索するために、さまざまな粒子の電気双極子能率 (EDM) が測定されている。この CP を破る構成要素のうち、色電荷に起因する CP を破る相互作用 (中間子・核子の結合) の寄与は、これまで、原子核 EDM (Shiff モーメント) により研究が進められているが、他にも様々な CP を破る寄与が複合されるため、その切り分けは非常に難しい。本課題は、複合核における CP 対称性の破れの増幅に着目しており、その起源は、CP を破る中間子・核子の結合が支配的であり、EDM とは完全に相補的な観測量となる。今年度は、CP を破る相互作用を得るための理論構築が格段に進み、高精度での CP を破る中間子・核子結合定数の抽出が期待される。

(様式：各年評価)

本計画では、中性子や原子核のスピン偏極技術が重要であり、高度な技術蓄積が必須となるが、各技術のエキスパートが共同研究者として参画している。キーデバイスとなる中性子偏極のための ^3He スピンフィルターや核偏極では、世界で初めてとなる技術・性能を実現しつつあり、極めて高く評価される。本研究では、偏極した Rb 原子を生成し、その偏極を ^3He に移すスピン交換法によりスピンフィルターを実現している。特筆すべきは、この ^3He を封入したガラスセルの内部洗浄方法を確立し、高強度レーザーを導入することで、世界最高性能に達する偏極緩和時間 \sim 174 時間、偏極度 85%を達成しており、ビームラインに設置するスピンフィルターの技術は確立してきた。今後、20cm 厚のスピンフィルターを製作するための戦略もたっている。さらに、T-violation の実験に必要な原子核偏極に関して、電子スピンの偏極を核スピンの移す動的核偏極法 (DNP) の開発が進み、東北大・金研で Nd をドープした LaAlO_3 の小型結晶の育成に成功し、La、Al の NMR 信号の確認、動的偏極の確認に初めて成功している。

T 対称性破れの増幅が高い標的を選定するためには、P 対称性破れの増幅効果の理解と、P 対称性の破れと T 対称性の破れの相関を示すパラメータ (κ) の決定が必要である。研究グループは、P 対称性破れの増幅機構のモデルである s 波 p 波混合モデルの検証を (n, γ) 測定により進め、BL04 において、 ^{139}La をはじめ、複数の標的候補に関して実験データを取得・解析が進み、論文による成果報告も順調である。 ^{139}La , ^{81}Br , ^{117}Sn に関して、 κ が 0 より大きいことがわかってきており、さらに ^{111}Cd , ^{131}Xe , ^{115}In に関しては高統計を目指すなど、各標的に関する計画も着実である。さらに、BL4 で偏極中性子を用いた $^{139}\text{La}(n, \gamma)$ の核相関測定を行った。この部分断面積の高精度測定が可能になってきたため、sp 混合モデルの検証とともに、この理論の再検討を促す実験結果も出つつあり、実験と理論の両輪により、反応機構の理解を深める研究が加速されると考えられる。

以上、最終目標である時間反転対称性の破れの実験結果を出すタイムラインの設定が難しいものの、そこに至る計画、戦略は明確にたてられ、着実な進展が期待される。特に、新たに、原子核反応の理論研究者も参画し、国内外の第一線の理論ネットワークを形成していることは高く評価される。また、核偏極生成には、高品質結晶技術、動的核偏極技術、開発基盤が揃って実現されるが、各々の技術を持つ東北大・金研、山形大、阪大 RCNP 等、全国共同利用の拠点を中心に、緊密な開発ネットワークを構築しており、開発が加速されることが期待される。最後に、中性子基礎物理の拠点として、毎年、名古屋大学、九州大学、大阪大学を中心として活発な大学院生・人材が育成されている事は、特筆すべきである。