

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2025S01

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：植田大地（KEK 物質構造科学研究所 助教）

益田隆嗣（東京大学物性研究所 教授）

種別：新規

ビームタイム配分： $\theta = 57.1\%$

評価結果：5.0 ※ 5.0～1.0 の範囲から、0.2 点毎で評点を記載

コメント：

2024 年 11 月 20 日にオンラインで行われた HRC 研究会に参加し、S 型課題 2024S01 に関して、2024 年度の当該グループによる研究成果と制御系ソフトウェアの更新等についての説明を拝聴した。その説明と質疑に基づき、以下のよう

に評価した。
HRC (High Resolution Chopper Spectrometer) は、これまでの第 1 期、第 2 期、第 3 期において着実に中性子分光器の装置まわりのグレードアップをおこなってきた。また、装置特性を生かした研究推進、テーマ開拓に成功し、最先端の磁性、強相関電子系物理学に重点をおいた世界的に見ても独特の地位にあるチョッパー分光器に成長している。

まず 2024 年度の全体の取り組みと成果について実験代表者の伊藤先生から報告があった。基本的にこれまで本グループが取り組んできた、トポロジカル磁性体、量子スピン系、希土類フラストレーション系磁性体の研究に関する成果の概要が紹介された。参画メンバーとして東京大学の関氏や琉球大学の小林氏が新たに加わっており、本課題における共同研究が強化されている。続いて東京大学物性研の川名氏より、装置制御ソフトウェア YUI, HANA サーバーの更新、真空層制御系の更新について報告があった。ユーザーフレンドリーなソフトウェアへの更新が継続的に行われている。上田氏から新奇な希土類フラストレーション系物質 Ce_5Si_3 に関する成果について報告があった。この物質の単結晶は当グループメンバーの小林氏からの提供である。また、本成果は HRC の multi-Ei による測定によって、広いエネルギー領域を同時に測定しつつ高分解能で測定するという特徴を活かした成果であるとともに、本 S 型課題によって整備された 1K 冷凍機も活用しており、装置開発と研究成果の親和性が高い。KEK の招聘プログラムによってオーストラリア ANSTO の矢野氏から J-PARC の短期滞在について報告があり、論文として成果を発表している。また、琉球大学の大学院生の前川氏より CeTe_3 , CeSeTe_2 に関する研究の紹介があり、今後

の中性子による実験への発展が期待される。東京大学益田氏から、交替磁性に関する最新の成果の報告があった。反強磁性秩序と結晶構造の特殊性によって現れる新しい磁気秩序状態で、磁気ピエゾ効果やトポロジカルホール効果な

どのマクロな新奇物性も期待される系である。HRCで行った中性子非弾性散乱と理論計算によって、特異なスピン波分散を示すことを実験的に実証した。東京大学中島氏より、スキルミオン系物質 GdPd_3 に関する報告があった。反転対称性のある結晶構造をもつ物質でのスキルミオン構造は稀な例であり、通常の中性子では吸収が極めて強いナチュラル Gd を含む化合物を用いた実験であり、HRCの特徴である高エネルギー単色入射中性子と小角バンクを最大限に活用した成果といえる。東大の関氏との共同研究として継続的に成果が生み出されている。

このように、本年度はグループの参画者がそれぞれ良い成果を挙げており、申し分ない。また、参画メンバーの追加などによって本課題のプロジェクトに関する共同研究の強化も行われている。また、装置の保守整備、更新も継続に行われている。よって、5.0 の評価点とした。

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2024S05

課題名：超分解能中性子回折による物質構造科学研究

実験代表者：森一広（KEK 物質構造科学研究所 教授）

種別：継続

ビームタイム配分： $\theta = 49.3\%$

評価結果：4.8

コメント：

SuperHRPD (BL08)は世界一の分解能をもつ時間飛行型粉末中性子回折装置であり、J-PARC が今後も中性子実験施設として世界的な優位性を示す上で重要な装置に位置づけられる。2024 年 11 月 21 日に 2024 S 型研究会が開催され、2024S05 課題の進捗報告を受けた。温度、磁場、電流、電圧等のパラメータを高精度で制御し、試料環境場の変化に伴う微少歪み（Symmetry Braking）の検出を目指す本課題の方針は、SuperHRPD の超高分解能性能を活用するものであり、理に適っている。着実に研究成果が挙がっており、今後、研究のさらなる進展が期待される。試料周辺環境を制御するためのセットアップも充実しており、適切なアップデートが施されていることが確認できた。今回、ソフトウェアやインターロック機構などの安全対策が確立されたことで、バナジウム高温炉の遠隔運転が可能になり、より円滑に研究が推進できる体制が整ったと考えられる。また、ビームパワーの増強により、究極条件での測定が実効的な測定時間で可能になってきたことも大変喜ばしい。試料ホルダについては、安定供給の難しい状況の中、枯渇を防ぐため使用済みホルダの再利用方法が提案された。再利用までのプロトコルも確立されており、ユーザーへの説明も十分に進められていることが確認できた。困難な状況ではあるが、引き続き工夫をしながら乗り切っていただきたい。

申請時に提案された超高分解能単結晶中性子回折実験システムの開発については、多軸ゴニオメーターの開発や検出器の導入などの具体的な検討が開始されたとの報告があった。また、分解能評価や温度校正の計画に関しても計画が進められており、基礎データの取得を進めるとの説明があった。今後の進捗を大いに期待したい。

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2024S06

課題名：結晶と非晶質が織りなすサイエンスダイバーシティ

実験代表者：本田 孝志（KEK 物質構造科学研究所・助教）

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta = 52.9 \%$

評価結果: 4.6 ※ 5.0～1.0 の範囲から、0.2 点毎で評点を記載

コメント：

NOVA 分光器は J-PARC の高強度中性子全散乱装置として、水素化物の構造解析、非晶質・液体物質の構造解析、また磁気構造解析を通じて、物質の規則・不規則構造の研究分野で活躍している。2019-2023 年度の S 型研究課題代表者を途中交代した本田氏は、交代後本年度までの短期間に、偏極中性子システムの導入や 3D プリンタによるラジアルコリメータの製作など、NOVA の高度化に大きく貢献した。

申請書では、磁性強相関、水素、イオン電導、機能性液体、乱れた構造など、多様な分野の専門家による個々の研究計画が記述されており、数多くの成果が期待される。さらに、研究代表者の本田氏は、各研究テーマの連携・融合により新しい研究分野創成を目指している。装置・測定手法の高度化についても具体的に述べられている。

S1 型課題研究会は、2024 年 11 月 22 日にオンラインで開催され、10 名のコアメンバーにより研究計画が説明された。本田氏からは、新しい試みとしてユーザーアンケートの導入とブレインストーミングを行い、境界領域の開拓や新しい研究テーマの構築をめざしていることが説明された。CROSS の池田氏からは、高圧水素ガスその場実験環境を利用した水素吸蔵合金の構造解析が提案された。高圧水素ガスの利用可能な中性子装置は世界的に少ないが、NOVA はその数少ない装置の一つであり、装置の特徴を生かした有意義な課題と言える。KEK の廣田氏は、高分子多糖類のプロトン伝導性と水和構造の関係性の解明を提案している。他分野から参入した若手研究者であり、今後の活躍が期待される。山形大の亀田氏は、 $^6\text{Li}/^7\text{Li}$ および H/D 同位体置換試料を用いた中性子回折による複雑な溶液構造の解析を提案した。非弾性散乱の効果が小さい短波長かつ小散乱角領域の測定が必要であることから、高強度かつ高分解能な NOVA が不可欠な課題である。NIMS の小野寺氏は機能性結晶・非晶質材料研究を加速するナノ・メソスケール元素選択 PDF 解析の基盤構築と推進を提案した。不純物周りの局所的な乱れの観測が必要であることから、全散乱装置である NOVA が不可欠な課題である。CROSS の社本氏はフラストレート磁性体の磁場下結晶、磁気 PDF 解析を提案した。新たに導入予定の 3.5T マグネットを利用するテーマであり、NOVA の SE 機器開発に必要な課題である。名工大の

木村氏は、中性子全散乱による蓄電池材料の乱れた原子配列の解析を提案した。全散乱データのトポロジカルデータ解析を用いて $(\text{Li}, \text{La})\text{NbO}_3$ の欠損層の様子を明らかにすることを検討している。全散乱装置 NOVA の特徴と新しい解析手法の開発を兼ね備えた興味深い課題である。福岡大の吉田氏は多孔質炭素クノーベルにおけるナノ空間内の水の構造研究を提案した。NOVA で開発が進んでいる偏極中性子の利用が含まれており、NOVA の開発に不可欠な課題である。東北大の高田氏は、 ^3He スピンフィルタを用いた偏極中性子ビームによる軽水素の非干渉性散乱成分の分離を提案した。NOVA の偏極ビーム利用を推進するために重要な課題である。KEK の大下氏はハードウェアとソフトウェアの環境整備についての説明を行った。OS 更新作業など、NOVA 運営に不可欠な開発を行っていることが説明された。

本田氏のリーダーシップの下、各分野の有力な研究者が NOVA を利用した研究を推進することで、大きな科学的成果が期待される。本課題は最優先で行うべきものとする。

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2024S07

課題名： 中性子共鳴スピンエコー分光器群(VIN ROSE)を用いたメゾスコピックな時空間領域における物質ダイナミクス研究

実験代表者： 遠藤 仁 (KEK 物質構造科学研究所・准教授)

種別：継続

ビームタイム配分： $\beta = 60.7\%$

評価結果： 4.8 ※ 5.0～1.0 の範囲から、0.2 点毎で評点を記載

コメント：

中性子スピンを利用して、中性子強度を落とさずに高いエネルギー分解能での準弾性散乱スペクトルを得ることができる中性子スピンエコー法は、メゾスコピックな空間領域での遅いダイナミクスの研究を大いに発展させることができると期待されている。MLF BL06 には、中性子共鳴スピンエコー分光装置群 (VIN ROSE) として、MIEZE (Modulated intensity by zero effort) 型と NRSE (Neutron resonance spin echo) 型の二台の分光器が設置されている。これらの装置の性能の最大限に引き出すことにより、「偏極中性子を活用した磁気スキルミオン等の磁気集団構造のダイナミクス研究」・「中性子反射率と NSE 法 とを組み合わせた薄膜の励起モードの研究」・「ソフトマターにおけるスローダイナミクス研究」を推進することが本課題の目標である。

本年度の成果報告ならびに来年度以降の計画に関する研究会を 2024 年 12 月 16 日 (月) に開催された。会場は KEK 東海キャンパス 1 号館 3 階 324 室、ならびに Zoom によるハイブリッド開催であった。

まず、KEK・遠藤仁氏より、BL06 の現況報告が行われ、MIEZE 型装置の Q 範囲が計画のスペックよりも小さい側に二桁も拡大しており、観測可能な空間領域が大きく広がっていることが示された。そして、研究面では炭素薄膜において Sezawa 波が観測され、中性子反射率測定と NSE 法 とを組み合わせた薄膜の励起モードの研究が順調に進められていることが報告された。次に、京大・日野正裕氏より、回転楕円体ミラーが NRSE 型分光器には位相補正のために必須であること、集光ミラーの導入により、集光により微小試料の測定が可能になるだけでなく、波長の長い中性子を用いてフーリエ時間の延長 (~ 100 ns) が可能であることが示された。集光ミラーは完成して、NRSE 型分光器に組み込まれており、来年度は実機での性能確認が主となる。東大・小田達郎氏より、位相スキャンを利用することにより低周波 MIEZE の観測が可能で、その結果、より速い方向へ時間窓が拡大されることが示された。 $S(Q, t)$ において短い時間領域の緩和挙動が明らかになることにより、系のダイナミクスに関する新たな情報が付け加わることになる。

東大・中島多朗氏より MIEZE 型 NSE を使った磁気スキルミオン研究の成果

と今後の計画が示された。磁気スكىルミオン研究は現在の MIEZE 型 NSE を用いた研究の主軸となっている。標準的な試料を用いた装置の検証実験を終えて、新しい系の測定に挑戦するとのことである。磁気スكىルミオン研究は、学術面でだけでなく、新たな磁性材料として大いに関心も持たれており、本装置の有用性を世界的に示すことになるだろう。

KEK・猪野隆氏より、偏極中性子実験のために必要な ^3He 中性子スピフィルターについての報告があった。偏極率の補正が不要な SEOP (Spin-exchange optical pumping) 型を実装することが検討されており、BL06 のために大きな直径 (100 mm) のフィルターの開発が待たれる。中性子スピフィルターは MIEZE 型の利点を活かす上で必須であり、優先的に進めるべき内容である

KEK・山田雅子氏、NIST・長尾道弘氏より、話題提供として BL16 および NIST の NSE 装置のアップグレードについて、それぞれ報告があった。BL06 は BL16 と協力関係にあり、反射率測定ユーザーをスピエコー測定(膜等のダイナミクス測定)に引き入れるためにも重要である。また、NIST の装置で測定された液体アルコールを BL06 でも測定する計画があることが述べられた。この研究は装置の検証にとどまらず、偏極中性子を利用した液体ダイナミクスの研究としても非常に興味深い。

申請ビームタイムについては、MIEZE 型は 40 日、NRSE 型では 50 日となっている。そのうち、MIEZE 型では研究に、一方、NRSE 型では開発と調整に多く割り当てられている。それぞれの装置の現状に合わせた配分となっており、妥当である。

申請メンバーは、人数は絞られているが、それぞれ装置開発やサイエンス分野の専門家を揃えており、本計画の実効性は高いと考えられる。

以上の観点から、当初計画に従って順調に進展しており、このまま本計画が実施されれば装置の性能を最大限に引き出すことが可能で、先導的研究が進められると判断し、上記の評価結果とした。

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2024S09

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（KEK 物質構造科学研究所 教授）

種別：新規

ビームタイム配分： $\beta=65.0\%$

評価結果: 4.6 ※5.0～1.0 の範囲から、0.2 点毎で評点を記載

コメント：

2024 年 11 月 28 日に POLANO S1-type project meeting で、進捗状況の報告を受けた。新しい技術開発を伴うので、常に海外の研究者を招聘し、また国際会議の場で議論を重ねている点は素晴らしい。今後ともこのような活動は積極的に続けていただきたい。予算面では検出器バンクが小角に入り着実に埋まっている点も評価される。これまでの課題であったヘルムホルツコイルの加熱の問題、ファン型磁石の再設計など問題を着実に解決し、今回、準弾性散乱で偏極実験を成功させた点は特に評価される。これにより偏極準弾性散乱のソフトマター分野で世界から新たに数グループからの申請が期待できるとのことなので、ぜひそれに最適化したフェルミチョッパーも用意していただきたい。ソフトウェアもイベントデータから自動でデータ表示ソフト用の `spe` データを書き出す機能や、測定中にすでに実行した測定予定のシークエンスを編集できるようにするなど、ユーザーの立場にたった改善が行われており、この点も評価される。まだヘルムホルツコイルのコントロールまではシークエンスに入れられないとのことだが、今後も利用者の立場に立ってより使いやすいシステムにしていきたい。今年度、 ^3He の冷凍機が導入され、すでにユーザー利用まで実現したとのことだった。最後に、今年度に準弾性散乱での偏極実験に成功したことから、来年度には偏極非弾性散乱実験を実現し、そして念願の偏極共同利用の早期開始に期待したい。

評価報告書

2024 年 12 月 20 日 中性子共同利用実験審査委員会

課題番号：2024S10

課題名：SDGs を支えるエネルギー・機能性材料の中性子構造研究

実験代表者：森 一広（KEK 物質構造科学研究所 教授）

種別：新規

ビームタイム配分： $\beta=77.9\%$

評価結果: 4.6

コメント：

本評価は 2024 年 12 月 2 日に開催された令和 6 年度「2024S10」S1 型実験課題研究会での発表および合わせて提出された研究計画書に基づいて行ない、以下に述べる観点より評価を 4.6 とした。

課題 2024S10 では、SPICA を利用し「次世代蓄電池材料の創製」と「社会的課題の解決」の二つの研究テーマを柱とする SDGs 達成に向けた構造研究を進めている。SPICA は NEDO プロジェクトの 1 つである「革新型蓄電池先端科学基礎研究事業(RISNG)」の一環として設計・製作された高分解能・高強度中性子回折装置であり、現在は RISNG3 プロジェクトにおいて、フッ化物電池及び亜鉛負極電池の電池反応メカニズム解明のための高度解析技術の一つとして利用されている。さらに学術変革領域研究 A「イオン渋滞学プロジェクト」においては、イオン渋滞現象の解明を目指した研究に先端計測として寄与している。今年度 9 月にプレリリースされた研究結果「原子配列の乱れをもつフッ化物イオン導電性固体電解質のイオン伝導メカニズムの解明」では、背面バンクによる結晶構造解析・MEM 解析と 90 度バンクによる PDF 解析・RMC modeling を組み合わせることにより、F イオンの拡散経路の可視化に成功するとともに、F 原子配列の局所的な乱れを明らかにし、これがイオン伝導率向上に大きく寄与していることを示した。2つの異なるスケールでの測定結果を相補利用することで、全固体フッ化物電池のイオン伝導メカニズム解明につながる結果を得た研究であり、この分野における SPICA の高い可能性が示されたとして評価される。数年前より開発が進められているブラッグエッジイメージング測定法においては、測定手法の開発に大きな前進がみられている。新たに開発されたカレントモード TOF 法を用いたオペランドブラッグエッジイメージング測定と回折測定との相補利用により、製品リチウムイオン電池における正極・負極の両電極

材についてのイメージングに成功している。また、近年は機械学習や仮想空間スクリーニングなど情報技術の発展により、従来の組成操作に基づく系統的な合成では得られない新規なイオン導電性材料が次々と創出されてきているが、これらの物質にみられる複雑な構造の評価において SPICA での回折測定が重要な役割を果たしてきている。さらに、蓄電池と並行して行われている材料研究として、生物が常温常圧下で作りに出す鉱物である「バイオミネラル」の研究が進められている。SPICA での回折測定によって、これらの鉱物に合成材料ではみられない構造学的特徴が見出されており、新たな観点からの材料開発研究として注目される。

ビームタイム配分は、提案されている 17 の研究課題と装置調整のための日数を合わせ $\beta=78\%$ (109 日) とされている。研究課題には複数テーマからなる 2 つのプロジェクト課題が含まれており、これらの課題を遂行するために単一テーマより多くの日数を必要とすること、一般ユーザーの開拓が順調に進んでおり一般課題競争率は十分に高い点を考慮すると、この値は適切と考えられる。予算については、保守、消耗品とユーザー旅費について昨年度と同額が申請されており、本課題を実施する上で必要と認められる。

SPICA では、背面バンクによる構造解析・MEM 解析と中、低角バンクを用いた PDF 解析、さらに透過ビームを用いたブラッグエッジイメージングを同時に行うことにより、材料物質の平均構造、局所構造および透過強度像の一括測定が可能である。現在計画されている簡易小角バンクの改良が進めば測定の空間領域はさらに広がり、研究分野の開拓がより一層進むと予想される。今後、試料環境と同時にこれら多様な測定法に対する測定・解析環境の整備が進み、幅広いスケールで構造を統括的に調べる装置として SPICA が SDGs に貢献することを期待したい。