

イットリウム鉄ガーネットの超音波印加下での 高分解能中性子散乱

High-E resolution neutron scattering on YIG under ultrasound irradiation

社本 真一・CROSS,成功大,原子力機構,理研、赤津 光洋・新潟大理、
松浦 直人・CROSS、安井 幸夫・明大理工、伊藤 孝・原子力機構、
根本 祐一・新潟大院自然、家田 淳一・原子力機構

イットリウム鉄ガーネット YIG[1]では、温度勾配[2]や超音波印加[3]によりスピントロニクス効果として発電が観測される。超音波印加による磁性体単結晶への中性子散乱効果はこれまで調べられた例がない。そこで我々は長期課題 2017L0300 を中心としてエネルギー分解能の高い DNA(BL02)を用いて磁気散乱への効果を調べてきたので、その結果を報告する。

室温では(220)磁気ブラッグ強度の増大はわずかにしか観測できなかったが、低温 8 K で、超音波の印加電圧の上昇に伴いこの磁気ブラッグがエネルギー幅の増加とともに散乱強度の増大が観測された。また YIG は低温で異方的な磁気キャパシタンス効果が観測される[4]が、同じ温度領域で[111]軸への磁場下でゼーマンエネルギーギャップが低温で大きく減少することを偶然発見した[5,6]。この異常は比熱や磁化でも確認された。この古くからよく知られる強磁性絶縁体でゼーマンエネルギーギャップがなぜほぼ消失するかはまだ謎である。

これらの研究成果は長期課題 2017L0300 及び一般課題 2014B0157, 2015I0002, 2016A0318 の研究成果であり、吉川貴史、張烈錚、柴田薫、日野正裕、遠藤仁、小田達郎、森道康、前川禎通各氏にご助力いただいた。

参考文献

- [1] S. Shamoto, T. U. Ito, H. Onishi, H. Yamauchi et al., Phys. Rev. B 97, 054429 (2018).
- [2] T. Kikkawa et al., Phys. Rev. Lett. 117, 207203 (2016).
- [3] K. I. Uchida et al., Nature (London) 455, 778 (2008).
- [4] Y. Yamasaki et al, Phys. Rev. B 80, 140412R (2009).
- [5] S. Shamoto, Y. Yasui, M. Matsuura, M. Akatsu, Y. Kobayashi, Y. Nemoto, and J. Ieda, Phys. Rev. Research 2, 033235 (2020).
- [6] Y. Nambu and S. Shamoto, submitted to J. Phys. Soc. Jpn., Special Topics (Renewed Interest in the Physics of Ferrimagnets for Spintronics).

鉄筋コンクリート造の長期耐久性に関する構造力学研究 Structural Engineering Study on Long-Term Durability of Reinforced Concrete Structure

鈴木裕士¹、向井智久²、兼松学³

1 JAEA、2 建築研究所、3 東京理科大学

現在社会問題となっている橋梁やトンネルなどの鉄筋コンクリート(RC)インフラ構造物の老朽化問題、また、マンションなどの RC 建築物の供給過多による建築ストックの増大と老朽化問題において、それら RC 建造物の長期利活用の観点から、定期的な点検・調査と、適切な手段による補修、増改築は、今後の持続可能社会の実現に重要である。本研究では、J-PARC の一般利用課題や長期課題制度(2017L0500)を活用し、RC 建造物の長期利活用に重要な技術として注目されている、防食鉄筋の利用や接着系あと施工アンカー技術について、それらの付着性能とその長期耐久性に関する研究を進めてきた。

(1)接着系あと施工アンカー 接着系あと施工アンカーの長期耐久性を評価するため、2017B 期より 3 年間にわたり、接着系あと施工アンカーのクリープ性能に関する研究を実施してきた。それに並行して、繰り返し負荷に伴う付着性能の変化(2017A0174)や、付着性能に及ぼす熱影響(2018B0112、0116)についても検討を重ね、それらから得られた成果と、オフラインで実施したクリープ試験などの結果を合わせて、あと施工アンカーの付着性能の評価を行ってきた。これまでに、クリープや繰り返し負荷、熱影響に伴う付着応力度分布の変化を確認するとともに、中性子 CT が接着剤の充填状況評価に有効な手段であることなどを明らかにしてきた。

(2)溶融亜鉛めっき鉄筋 本研究では、普通鉄筋 RC 試験体の付着応力度分布との比較から、溶融亜鉛めっき鉄筋の付着性能を評価した。長期課題で実施した「長期腐食に伴う付着応力度分布の変化」に関する検討に加え、「曲げや引き抜き試験によるめっき鉄筋の付着性能(2018B0204)」や、「ひび割れ補修による付着性能回復(2017A0156、0157)」などの観点も含めて、溶融亜鉛めっき鉄筋の付着性能について検討を重ねてきた。これまでに、溶融亜鉛めっき鉄筋の付着性能は普通鉄筋のそれとほとんど変わらないことを明らかにしてきた。

本ポスター発表では、長期課題で得られた成果だけでなく、一般利用課題で実施した研究成果を含め、これまでに得られた研究成果を総合的にまとめて報告する。

中性子散乱によるトポロジカル磁気秩序の研究 Neutron scattering studies on topological spin orders

中島多朗・東大物性研/理研 CEMS

近年、磁気スキルミオンに代表される非共線・非共面的なスピン配列を持つ秩序状態が注目を集めている。磁気スキルミオンは長周期らせん磁性体等において現れるナノスケールの渦状のスピン構造であり、磁化分布を連続場とみなした際のトポロジカル欠陥と解釈することができる。そのためスキルミオンはトポロジーで特徴付けられる粒子としての性質を持ち、その粒子の配列(スキルミオン結晶)やダイナミクス、電流等の外場に対する応答等が盛んに研究されている [1]。

我々はこのようなトポロジカル磁気秩序を対象として中性子散乱を用いた研究を進めている。磁気スキルミオンは典型的には10~100 nmのスケールであるため、その周期性を探索するためには中性子小角散乱が適している。我々は2017年度B期よりMLFの中性子小角・広角散乱装置「大観(BL15)」を用いてこのテーマについての長期課題研究を行っており、本発表では今年度に得られた成果を発表する。

(1) 極性キラル磁性体 $\text{Ni}_2\text{InSbO}_6$ における電場中中性子散乱

らせん型磁気秩序による対称性の低下によって強誘電性を示すマルチフェロイック物質は2000年代前半の TbMnO_3 における自発電気分極の発見以降非常に精力的に研究されている。本研究では、結晶構造自体が元々カイラルかつポーラーであるらせん磁性体 $\text{Ni}_2\text{InSbO}_6$ について電場によってこのらせん磁性をコントロールし、これを中性子散乱で観測することを試みた。この実験は東大新領域博士課程の荒木勇介氏を中心として行われ、結果の詳細は本サイエンスフェスタにて荒木氏のポスターで発表されている。

(2) 圧力中の小角中性子散乱

MnSi をはじめとしてトポロジカル磁気秩序を示す物質群の中には、静水圧の印加によって新奇な物性を示すものも存在する[2]。我々は静水圧中での磁気秩序を小角中性子散乱によって探索するため、東大物性研の上床先生によって開発されたZrアモルファスガラスの圧力セルを用いて小角領域における磁気散乱を探索した。

参考文献:[1] S. Muhlbauer *et al.*, Science **323**, 915 (2009), N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotech. **8**, 899 (2013). [2] C. Pfleiderer *et al.* Nature **427**, 227 (2004).

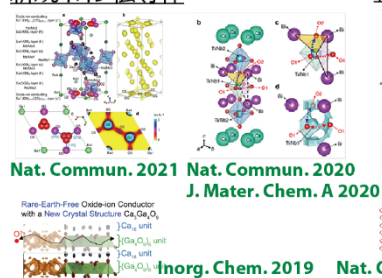
イオン伝導体および複合アニオン化合物の 新材料探索と構造物性

Exploration of new materials and Structure Science of Ionic Conductors and Mixed-Anion Compounds

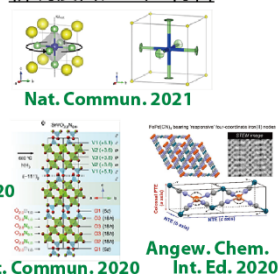
藤井孝太郎¹, 村上泰斗¹, 八島正知¹, 鳥居周輝², 齊藤高志², 神山崇², 大原高志³ (1 東工大理, 2 KEK IMSS, 3 JAEA J-PARC センター)

セラミック材料は多彩な機能を示すため基礎から応用まで幅広く注目される重要な材料である。その機能の多くは結晶構造と密接な関係があり、その結晶構造を精確に解明することは、その材料が示す機能を理解し、新材料を探索する指針を立てる上で必要不可欠である。特に比較的軽元素のアニオンや水素の構造情報を明らかにする上で、中性子回折法は重要である。本長期課題では、SuperHRPD, SPICA, SENJU での中性子回折実験と構造解析により、我々が見出した新規材料や高機能性が知られている材料について、それらが示す機能の構造的要因を明らかにすることを目的としている。最近の研究成果としては、実用材料を超えるイオン伝導度を持つ材料を含む新規イオン伝導体の発見^[1-4]や、新規複合アニオン材料の発見^[5-8]、高イオン伝導度を示す酸化物イオン伝導体におけるイオン伝導機構の解明^[9-11]などがある。現在は長期課題 2020L0800 として引き続き新規材料の構造物性などを進めている。

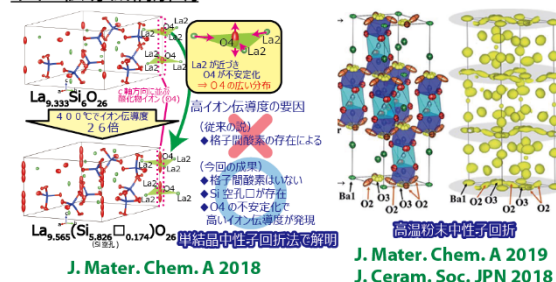
新規イオン伝導体



新規複合アニオン材料



イオン伝導機構解明



【成果】

- [1] M. Yashima, Nat. Commun., 2021, 12, 556
- [2] W. Zhang, et al. Nat. Commun., 2020, 11, 1224
- [3] W. Zhang, et al., J. Mater. Chem. A, 2020, 8(47), 25085
- [4] Y. Yasui, et al. Inorg. Chem. 2019, 58(14), 9460
- [5] S. Gao, et al. Nat. Commun., 2021, 12, 151
- [6] T. Yamamoto, et al., Nat. Commun., 2020, 11, 5923
- [7] R. Ohtani, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59(43), 19254
- [8] T. Matsumoto, et al. ChemCatChem, 2020, 12(7), 1968
- [9] M. Yashima, et al., J. Mater. Chem. A, 2019, 7(23), 13910
- [10] K. Fujii, et al. J. Mater. Chem. A, 2018, 6(23), 10835
- [11] W. Uno, et al., J. Ceram. Soc. Jpn., 2018, 126(5), 341

複合核共鳴から原子核低励起状態への即発ガンマ線の強度比計測 (MLF長期課題2017L2000)

Branching ratio measurement of prompt gamma-rays from the compound resonances to the low lying states.

広田克也¹、安部亮太¹、石崎貢平¹、猪野隆²、遠藤駿典^{1,3}、奥平琢也¹、奥隆之³、木村敦³、北口雅暁¹、古賀淳⁴、酒井健二³、嶋達志⁵、清水裕彦¹、高田秀佐⁴、谷結以花⁶、長谷川拓郎¹、藤岡宏之⁶、堀田大稀¹、山本知樹¹、吉岡瑞樹⁴、吉川大幹⁵、他 NOPTREX Collaboration
¹名古屋大、²KEK、³JAEA、⁴九州大、⁵大阪大、⁶東工大

核子間相互作用におけるパリティ反転対称性の破れは、中性子複合核共鳴を經由した場合に増大することが知られており、これまでの研究で p 波共鳴と s 波共鳴の干渉によりこの増幅効果が大きくなると説明されている。このパリティ破れの増幅効果は時間反転対称性の破れに拡張することができ[1]、両者を結ぶ関係式におけるスピン結合の組替係数 $\kappa(J)$ を求めることが、時間反転対称性の破れ探索実験における測定可能性を見積もるために重要な要素となる。この $\kappa(J)$ は p 波共鳴時に中性子が持ち込む全角運動量 j の比に依存する量となっており、計算で求めることができず、 (n, γ) 反応実験の角度分布測定から決められる。

我々は ^{139}La に対してこの $\kappa(J)$ を求めることができ[2]、引き続きその他の元素に関しても $\kappa(J)$ の決定作業を進めている。この $\kappa(J)$ を求める計測においては p 波共鳴から残留核の低励起状態への直接遷移のガンマ線計測が必要であるが、通常データベースに掲載されている熱中性子入射によるガンマ線とはスピン角運動量が異なるため、遷移強度が異なって観測される。そこで本長期課題において様々な原子核のガンマ線強度を計測することで、 $\kappa(J)$ 解析に使えるような核種の候補を探す研究を進めている。

本発表においてはこれまでの計測結果に関して報告をする。

[1] V.P. Gudkov, Phys. Rep. 212 (1992) 77-105

[2] T. Okudaira, et.al., Phys. Rev C97 (2018) 034622

反強磁性 MnD_x の結晶及び磁気構造の温度圧力変化 Temperature and pressure variation of crystal and magnetic structures of antiferromagnetic MnD_x

町田晃彦¹、青木勝敏²、齋藤寛之¹、服部高典³、佐野亜沙美³、小松一生²、
町田真一⁴、舟越賢一⁴、池田一貴⁵、大友季哉⁵

1 QST 量子ビーム、2 東大理、3 JAEA J-PARC センター、4 CROSS、
5 KEK 物構研

マンガン水素化物 MnH_x は高温高水素圧下で形成され、温度圧力相図上では fcc および hcp、dhcp 構造の金属格子構造を持つ MnH_x が報告されている [1, 2]。fcc および hcp- MnD_x は常圧に回収した試料の中性子回折実験から反強磁性構造であることが報告されているが [2]、高圧下での結晶・磁気構造と磁気転移については報告されていなかった。我々は Fe-D [3] や Ni-D [4] で培った MLF-BL11 での高温高重水素圧力下その場中性子回折測定技術を Mn-D 系へ適用し、fcc- MnD_x のネール温度 T_N ($\sim 550K$ 、 $0.7GPa$) を決定することに成功した。また、高温高圧下で合成した hcp- MnD_x の回収試料に対して低温高圧下中性子回折実験を実施し、その T_N ($\sim 320 K$ 、 $0.4GPa$) を決定した。得られた fcc および hcp- MnD_x の中性子回折プロフィールに対して Z-Rietveld [5] を使用した構造解析を実施し、それぞれの構造パラメータおよび磁気モーメントの温度変化を明らかにした。fcc および hcp- MnD_x の磁気構造は先行研究 [2] による報告と同じであり、磁気モーメントはそれぞれ $\sim 1.78\mu_B$ (300K) および $\sim 0.85\mu_B$ (100K) と導出され先行研究の結果 [2] と良い一致を示した。さらに、高温高圧下で合成した fcc- MnD_x の回収試料に対して、MLF-BL21 を利用して常圧における 100-300K での中性子回折実験を実施し、室温以下で fcc- MnD_x の磁気モーメントはほとんど変化しないことも確認した。

- [1] Y. Fukai *et al.*, Scripta Materialia **46** (2002) 679–684.
- [2] V.E. Antonov *et al.*, J. Alloys Compd. **330–332** (2002) 110–116.
- [3] A. Machida *et al.*, Nat. Commun. **5** (2014) 5063.
- [4] H. Saitoh *et al.*, Physica B **587** (2020) 412153.
- [5] R. Oishi *et al.*, Nuclear Instruments and Methods **A600** (2009) 94–96.

ポリオキサゾリンを基盤とする生体不活性界面の凝集状態 Aggregation States of Polyoxazoline-based Bioinert Interfaces

^{1,2}松野寿生、¹Jinhyeok HONG、¹戸谷匡康、^{1,2}川口大輔、³山田悟史、^{1,2}田中敬二
¹九大院工、²九大接着セ、³KEK

タンパク質や細胞など生体成分の材料表面への付着を抑制する生体不活性は、医療デバイスの性能を左右する重要な因子の一つである。本研究では、pseudo peptide 骨格を有し生体不活性を示すことが知られているポリオキサゾリン誘導体に着目した。oligo(2-ethyl-2-oxazoline)部位を側鎖に有し、また、種々の基板へのコーティングが可能になるよう疎水性部位として poly(methyl methacrylate) (PMMA)を導入したボトルブラシ型ブロック共重合体 PMMA-*b*-P[O(Ox)MA]を設計した。水界面における PMMA-*b*-P[O(Ox)MA]薄膜の凝集状態を明らかにし、生体不活性界面の設計指針を提案することを目的とした。

試料として、カチオン開環重合および原子移動ラジカル重合に基づき合成した PMMA-*b*-P[O(Ox)MA]を用いた。PMMA-*b*-P[O(Ox)MA]薄膜は、スピンコート法に基づき石英ブロック上に調製し、413 Kにおいて 12 h 熱処理を施した。空气中および重水中における膜厚方向の密度分布は、中性子反射率(NR)測定に基づき評価した。

Fig. 1(a)のプロットは、大気中および重水中で測定した PMMA-*b*-P[O(Ox)MA]薄膜の NR 曲線である。図中の実線は、Fig. 1(b)のモデル散乱長密度(b/V)プロファイルに基づき計算した反射率である。重水中においては、重水が薄膜内部にまで収着し、また、基板界面付近に重水の濃縮層が形成されることがわかった。一方、重水界面の厚みは、空気界面のそれと比較して、著しく厚くなることがわかった [1]。

当日は、P[O(Ox)MA]ブロックの側鎖の長さが異なるホモポリマーと PMMA からなる混合薄膜の凝集状態についてもあわせて議論する [2]。

[1] Tanaka *et al.*, *ACS Appl. Bio Mater.*, **3**, 7363 (2020); [2] Tanaka *et al.*, *Polym. J.* doi.org/10.1038/s41428-020-00459-7.

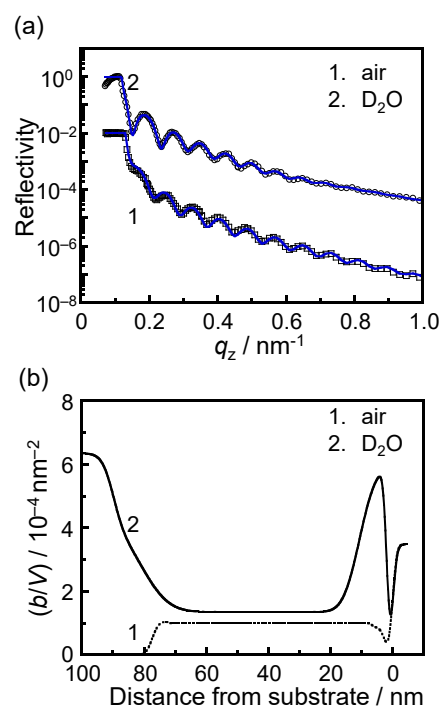


Fig. 1. (a) NR curves for a PMMA-*b*-P[O(Ox)MA] film acquired in air and D₂O. Open symbols represent the experimental data, and solid curves are the reflectivity calculated on the basis of the (b/V) profiles of the film shown in (b).

含水鉱物の水素配置と水素輸送の統合解析 Crystal structure and dynamics of hydrogen in hydrous minerals

奥地拓生¹

1 京都大学複合原子力科学研究所

地球の水は海洋に加えて、地球内部の含水鉱物としても多量に存在する。これらの含水鉱物には、一定量の OH 基があって初めて安定な構造と、既存の陽イオンと H⁺が不定比で交換する構造がある。前者は地球内部の浅い場所、後者は深い場所で安定な場合が多い。これらの二種の構造の内部に存在する水素の配置とダイナミクスを、原子スケールの空間分解能をもって解析することで、それぞれの構造における水素の輸送の過程や速度を理解して、さらには予言したい。この目的のために、中性子単結晶回折と準弾性散乱を統合させた解析を、高温高压条件で合成した含水鉱物に対して実施してきた。単結晶回折については、ワズレアイト[β -(Mg,2H)₂SiO₄]、リングウッドイト[γ -(Mg,2H)₂SiO₄]、重水素化した含水高密度ケイ酸塩 Phase E[\sim Mg₂SiD₄O₆]などの精密な構造をこれまでに決定してきている[1-3]。準弾性散乱については、水酸化マグネシウム Mg(OH)₂ 中の水素が、それぞれ 230K において 3Å、430K において 2 Å のスケールを持つ、二種類の異なる制限空間内で拡散を行う様子を、温度の関数として計測した[4]。本報告では、以上の研究を土台として、その後に進めてきた、二種の構造中の水素の 600~650K に至る温度における準弾性散乱計測の結果について議論したい。

[1] Purevjav, Okuchi et al (2016) Sci. Rep. 6, 34988.

[2] Purevjav, Okuchi et al (2018) Acta. Cryst. B74, 115.

[3] Purevjav, Okuchi et al (2020) IUCrJ 7, 370.

[4] Okuchi, Tomioka et al. (2018) J. Appl. Cryst. 51, 1564.

オペランド中性子回折を用いた リチウムイオン電池の劣化要因解析 Degradation Analysis of Lithium-Ion Batteries Using *Operando* Neutron Diffraction

尾宮哲也¹、池澤篤憲¹、斉藤景一²、高橋慶多²、米村雅雄³、齊藤高志³、
神山崇³、荒井創¹

1 東工大、2 NTT ファシリティーズ、3 KEK-中性子

1. 目的

通信ネットワーク・データセンターの信頼性を確保するために、電源遮断時に備えたバックアップ電池が幅広く用いられている。これまで鉛蓄電池が主に使用されてきたが、近年は長寿命が期待されるリチウムイオン電池(LIB)の適用が検討されている。負荷と並列接続されて定電圧(フロート)充電される LIB の劣化挙動は明らかでないため、長期課題(2018L0301)を提案し、劣化させた LIB の挙動を作動状態(*Operando*)で解析し、劣化要因を検討したので、ここに報告する。

2. 実験

市販円筒型 LIB を連続フロート充電する、および連続充電を避けるため毎日 1 回満放電を挟む、二つのモードで 397 日間の劣化試験を行い、得られたセルを BL09 の SPICA 分光計において、放電させながら回折測定を実施した。

3. 結果および考察

試験後のセル容量は、連続フロート充電のものが初期容量の 96%を維持したのに対し、満放電を挟んだものは初期容量の 78%まで低下していた。また、比較のため試験日数と同じ回数満充放電サイクル試験のみを行ったセルは、初期容量の 95%を維持した。以上の結果から、フロート充電に満放電を挟んだセルの大幅な容量劣化が、フロート充電時と満充放電サイクル時に進行する容量劣化の単純な足し合わせでは説明できないことが明らかとなった。この容量劣化の要因を探るために、*Operando* 中性子回折を実施した。その結果、層状正極材料の層間距離に相当するピークの放電に伴う遷移が、劣化試験後に不明瞭になることが判明した。これは、正極の内部抵抗増大に伴い、著しい反応分布が形成されたことを示している。また、試験前後の回折プロファイルを比較することで、満充電時の正極および負極の充電状態が試験前と比較して低下しており、セルの充電不良が生じていることが明らかとなった。以上の結果から、フロート充電に満放電を挟んだセルの大幅な容量劣化は、主に正極内部抵抗の増大に起因することが明らかとなった。

鉄鋼材料の加工熱処理プロセスにおける マイクロ組織形成過程のその場中性子解析 In-situ neutron diffraction analysis on microstructure evolution in steels during thermomechanical processing

辻 伸泰^{1,2}, 柴田 暁伸^{2,3}, Yu Bai^{1,4}, 朴 明駿^{1,2}

¹京大・工, ²京大・ESISM, ³物質・材料研究機構, ⁴大連理工大学

鉄鋼材料に代表される構造材料の更なる高強度化・高性能化を実現していくためには、加工熱処理中のマイクロ組織形成過程を明らかにし、理論的な背景に基づいた加工熱処理によってマイクロ組織を制御していくことが必要である。我々は加工熱処理中のマイクロ組織形成過程を研究するために、J-PARC の MLF ビームライン 19 (匠) に、実際の鉄鋼材料製造プロセスを模擬した加工熱処理中のその場中性子回折実験が可能な高温加工熱処理シミュレータを導入した。本研究では、「動的フェライト変態」と呼ばれる、今後の鉄鋼材料における加工熱処理の基礎となる新しいメタラジとして注目されている相変態を研究対象にした。動的フェライト変態は母相オーステナイトの加工中に生じる相変態であり、動的フェライト変態を含む加工熱処理によって超微細粒マイクロ組織が得られることがわかっている。しかし、その変態メカニズムや超微細粒マイクロ組織形成メカニズムは不明のままであった。そこで本研究では、その場中性子回折実験によって動的フェライト変態におけるマイクロ組織形成過程を明らかにすることを目的として実験を行った。

加工熱処理中に得られたその場中性子回折プロファイルでは、圧縮加工を負荷し始めてからフェライトに対応する回折ピークが現れており、動的フェライト変態が母相オーステナイト中の加工中に生じていることが明らかとなった。また得られた中性子回折ピークを解析したところ、変態に伴って生成した動的フェライト相の格子定数が減少していた。これまで動的フェライト変態の変態メカニズムについては、「せん断型変態」、「マッシュ変態」、「拡散型変態」など種々の変態メカニズムが提案されてきているが、変態中のフェライト相の格子定数低下は拡散型変態を仮定しないと説明できないため、本研究によって動的フェライト変態は拡散型変態であることが明確にとなった。通常、母相オーステナイトは室温への冷却中にフェライトもしくはマルテンサイトに変態して消失してしまうため、バルク材において高温度域でのオーステナイトの加工状態を直接評価することはほぼ不可能であった。しかし、本研究では高温状態での加工状態を直接評価することが可能であり、加工熱処理中の母相オーステナイトの転位密度変化を定量評価することに成功した。得られた結果から、動的フェライト変態を含む加工熱処理によって得られる超微細粒マイクロ組織は動的再結晶によって生じていることが明らかとなった。

Status and plans for LTP SUBSTANCE

Søren Schmidt^{1,5}, Camilla Larsen², Patrick Tung³, Nancy Elewa⁴, Stavros Samothrakitis², Markus Strobl², Robin Woracek¹, Petr Sittner⁴, Luise Theil Kuhn¹, Ryoji Kiyonagi⁶, Takenao Shinohara⁶

¹European Spallation Source, ²Paul Scherrer Institute, ³University of New South Wales, ⁴Nuclear Physics Institute of the CAS, ⁵Technical University of Denmark, ⁶J-PARC

The longterm proposal SUBSTANCE (2018B0500) has conducted its first experiments at the RADEN and SENJU. The RADEN experiment has shown that magnetic fields arising from electrical currents of several amps the interior of materials can be characterized non-destructively by polarized neutrons (polarimetric setup). In the 2nd and 3rd year of the LTP the plan is to establish a novel imaging methodology for measuring much weaker currents through Spin Phase Contrast imaging. This is potentially applicable for characterizing current flow in energy materials/devices. At SENJU the first-year experiment was focused on different roads for mapping crystalline structures using different detectors, both in transmission and diffraction mode. Dedicated ToF algorithms have been developed for this task. In transmission mode the ToF Trindex algorithm mapped the micro-structure of an iron material. In diffraction mode the GPU-based 6DXNRD algorithm works with ToF but also with multiple detectors at any generic position. The availability of multiple wavelengths has proven to be especially important for analyzing data sets with few geometric projections, as is often the case for neutron data. The 2nd year at SENJU will focus on microstructural evolution in shape memory alloys before and after ex-situ deformation and heat treatments.

3 パラメーターモデルを使った粘土鉱物中の包摂水の拡散 緩和評価

Assessing diffusion relaxation of confined water in clay minerals using a minimalistic three-parameter model

Martin H. Petersen¹ Nathan Vernet¹ Will P. Gates² Félix J. Villacorta³
Seiko Ohira-Kawamura⁴ Yukinobu Kawakita⁴ Masatoshi Arai⁵ Gerald
Kneller^{6, 7} and Heloisa N. Bordallo^{1, 2, 5}

¹Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, ²Institute for Frontier Materials, Deakin University, ³Consortio ESS-Bilbao, ⁴J-PARC Center, JAEA, ⁵European Neutron Source (ESS), ⁶Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS and Université d'Orléans, ⁷Synchrotron Soleil

In this presentation we will show how a new minimal model approach for interpreting the intermediate scattering function $F(Q, t)$ can be used to describe quasi-elastic neutron scattering (QENS) data from confined water. This approach was used on data collected on AMATERAS in two different clay minerals: Montmorillonite (Mt) and Hectorite (Ht).

The new minimal model approach takes the instrumental contribution into account in the analysis, and describes the multiscale relaxation in a complex system with only three parameters. One of the parameters is the elastic incoherent structure factor (EISF), one of the key properties to describe the dynamics of a system that is not easily obtained using the analytical models.

Using the simple model, we were able to describe the dynamics of the confined water molecules for the two different clay minerals and compare the results. A clear difference in behavior of the confined water was found, and the analysis showed how robust and simple to use the model is. This new minimal model approach is expected to be the new common analysis method for investigating incoherent quasi-elastic signals.

[1] G. Kneller, Franck–Condon picture of incoherent neutron scattering. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2018, 115, 9450

[2] M. Saouessi, J. Peter, G. Kneller, Asymptotic analysis of quasielastic neutron scattering data from human acetylcholinesterase reveals subtle dynamical changes upon ligand binding. J. Chem. Phys., 2019, 150, 161104

[3] M. Saouessi, J. Peter, G. Kneller, Frequency domain modeling of quasielastic neutron scattering from hydrated protein powders: Application to free and inhibited human acetylcholinesterase. J. Chem. Phys. 2019, 151, 125103

E-mail for corresponding author: bordallo@nbi.ku.dk

蛋白質の階層構造ダイナミクスの解明 Clarification of hierarchical dynamics in protein

中川洋¹、井上倫太郎²、小田隆^{3,4}、矢木-内海真穂⁵、斉尾智英⁶、笠口友隆⁷、長田裕也⁸、杉山正明²、佐藤衛⁴、川北至信¹、岩瀬裕希⁹、富永大輝⁹、高田慎一¹

1 原子力機構、2 京都大学、3 立教大学、4 横浜市立大学、5 自然科学研究機構、6 徳島大学、7 慶応大学、8 北海道大学、9 CROSS

蛋白質は階層構造と階層的なダイナミクスを持つ。溶液中の蛋白質の構造ダイナミクスを解析する重要性は近年ますます高まっているが、生物機能に関わるナノメートルオーダーの階層構造、およびピコ～ナノ秒の時間スケールでのダイナミクスの実験手法として中性子散乱が期待されている。BL02(中性子準弾性散乱装置)と BL15(中性子小角散乱装置)を用いて、これら時空間スケールの構造ダイナミクスを解明することを目的として研究を開始した(MLF長期課題 2019L0300)。本課題では、折り畳み蛋白質や天然変性蛋白質を含む特徴的な機能性マルチドメイン蛋白質をターゲットとして、研究を推進する。生化学と計算科学の専門家が中性子科学に強くコミットし、MLFにおける構造生物学研究の発展をバックアップする体制が整っている(図 1)。幅広い専門分野の研究者が連携し、「中性子散乱の特徴を生かすための蛋白質部分重水素化法」「各種中性子分光器連携による広い時空間シームレス解析法」「中性子と計算科学との連携による蛋白質ダイナミクスの可視化法」の開発により、我が国の蛋白質科学を先導する新世代中性子構造生物学の確立を目指す。発表では、これまでの進捗の報告と今後の展望について議論したい。

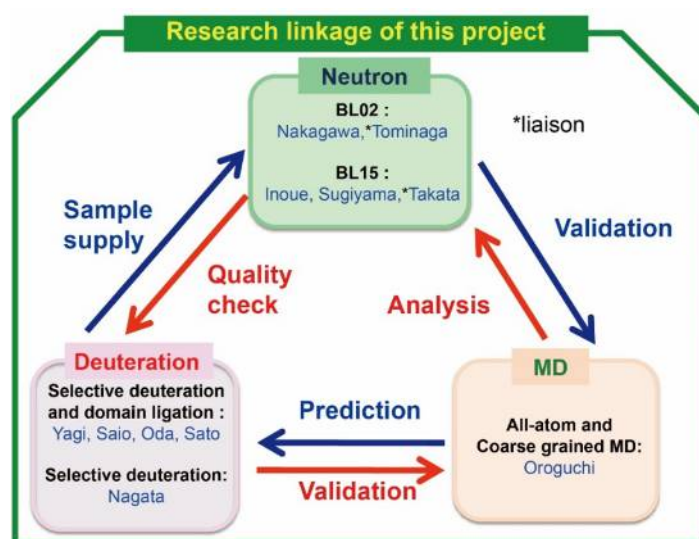


図 1. 本長期課題の研究体制

固体高分子形燃料電池の触媒層における 吸着イオノマと析出イオノマの識別 —コントラスト変調小角中性子散乱法の応用— Distinguishing Adsorbed and Deposited Ionomers in the Catalyst Layer of Polymer Electrolyte Fuel Cells using Contrast-Variation Small-angle Neutron Scattering

原田雅史¹、高田慎一²、岩瀬裕希³、梶谷修司¹、門浦弘明¹、金谷利治⁴
1 豊田中研、2 JAEA、3 CROSS、4 KEK

固体高分子形燃料電池においてプロトンが酸素と反応するのは触媒層で、触媒層はイオノマ(ナフィオンなどの高分子)で被覆された白金担持カーボン粒子(Pt/C)から構成されている。プロトンと酸素はイオノマを経由して触媒に至るので、反応速度はイオノマの被覆構造に依存する。被覆構造を反映するPt/Cとイオノマの部分散乱関数を評価するため、触媒層の空隙をD/H比が異なる液体で満たし、コントラストを変調して小角中性子散乱を測定した(図1)。それぞれの部分散乱関数は、粒径分布をもつPt/Cのフラクタル凝集体とシェル状に吸着したイオノマおよび短距離秩序をもつ析出イオノマでモデル化でき、吸着イオノマの厚さ(51 Å)と析出イオノマの体積分率(8.5%)を求めることができた。

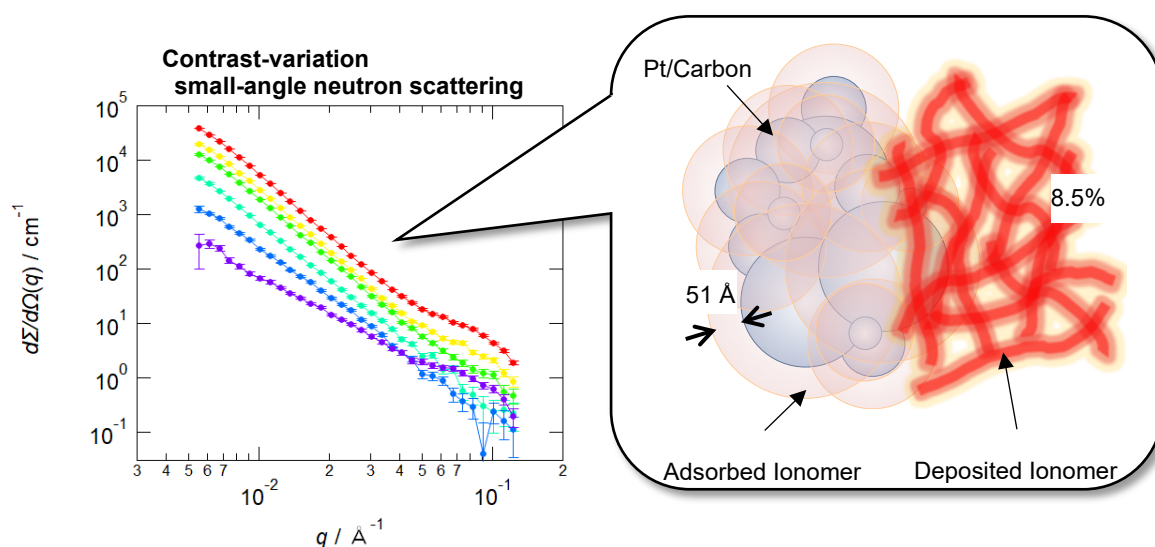


図1 コントラスト変調した触媒層の小角中性子散乱スペクトルおよび触媒層を構成する白金担持カーボンに吸着したイオノマと析出したイオノマのモデル

エポキシ薄膜界面の凝集状態に及ぼす湿度の効果 An Effect of Humidity on Aggregation States at Interface of Epoxy Thin Films

^{1,2} 川口大輔、² 青木美佳、³ 宮田 登、
³ 吉田鉄生、³ 宮崎 司、⁴ 青木裕之、^{1,2} 田中敬二
¹ 九大院工、² 九大接着セ、³ CROSS 東海、⁴ JAEA

エポキシ硬化物はマルチマテリアル化を実現する高強度かつ高耐久性を兼備した接着剤として期待されている。その実現には、異種固体界面におけるエポキシ硬化物の凝集状態ならびに接着特性を分子レベルで理解することが鍵となる。当研究室では、エポキシ硬化物と銅の界面において、硬化剤であるアミンが偏析することを明らかにしている[1]。これはエポキシと比較して分子サイズの小さなアミンがエントロピー駆動により偏析するためである[2]。本研究では、高湿度下におけるエポキシ薄膜の凝集状態を明らかにすることを目的とした。

試料として、水素化ビスフェノール A ジグリシジルエーテルおよび 1,4-ビス(アミノメチル)シクロヘキサンをモル比 2:1(等量比)で混合した硬化物を用いた。膜は、テトラヒドロフラン溶液からスピんキャスト法に基づきシリコン基板上に調製し、窒素雰囲気下、293 K で 24 h プレ硬化させた後、373 K で 1 h 硬化させた。乾燥状態および重水蒸気雰囲気下における膜厚方向の密度分布は中性子反射率(NR)測定に基づき評価した。

Fig. 1(a)は乾燥状態および相対湿度 85%で測定したエポキシ薄膜の NR 曲線である。測定温度はいずれも室温である。図中の実線は Fig. 1(b)のモデル散乱長密度(b/V)プロファイルから計算した反射率である。調湿下の場合、エポキシ膜の基板界面付近には重水の濃縮層が形成されることを明らかにした。当日は、エポキシの硬化条件と界面における重水濃縮層の関係について議論する。

- [1] Tanaka *et al.*, *Polym. J.*, **51**, 359 (2019).
[2] Tanaka *et al.* *ACS Appl. Polym. Mater.*, **2**, 1474 (2020).

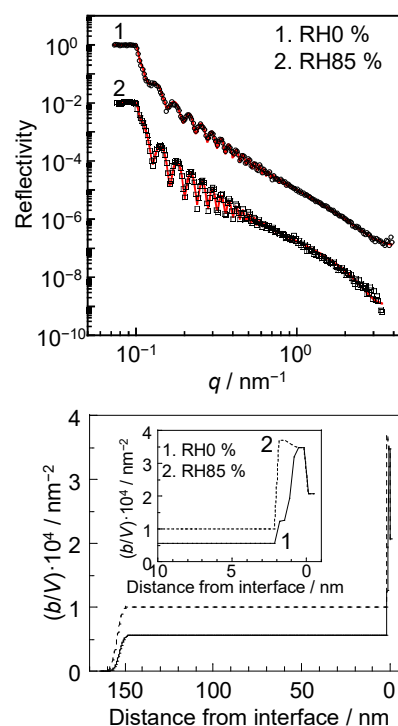


Fig. 1. (a) NR curves for an epoxy thin film supported on a silicon substrate under dried and a D₂O vapor (RH85 %) conditions at room temperature. Experimental data sets are shown by plots, and best-fit curves calculated using model (b/V) profiles shown in (b) are expressed by solid and dotted lines.