

JRR-3との連携によるSANS実験について

KEK量子ビーム連携研究センター 山田悟史

CIQuSとは？

- ▶ 物構研では、2020年4月に従来の構造物性研究センターを発展的に改組し、**量子ビーム連携研究センター**（Center for Integrative Quantum Beam Science：CIQuSサイキュース）を新設しました。
 - ▶ 本センターは、放射光・中性子・ミュオン・低速陽電子という4つの量子ビームを備えた世界的にもユニークな研究所である物構研のメリットを生かして、新たな「発掘型共同利用」と「テーマ設定型共同研究」を推進するとともに、若手人材を育成することで、これまでにない新しいマルチプローブ連携分野を、物質の表面構造・内部構造・不均一構造の3つの観点で創成することを目指しています。
- ▶ 以下に、本センターで推進する3つの取り組みを示します。
 - ▶ **① 発掘型共同利用**
 - ▶ 初心者を含む共同利用申請に対して指導・助言することでマルチプローブ研究を加速する。研究内容を検討し、マルチビームに適した試料作成など研究実施までの指導・助言・実験支援を一気通貫に行う。
 - ▶ **② テーマ設定型共同研究**
 - ▶ イノベーションに貢献できる量子ビーム連携研究課題を設定し、産学官連携・国際連携によって課題を解決する。
 - ▶ **③ マルチプローブ若手人材育成**
 - ▶ マルチプローブ利用により不可欠となるAIを活用したデータ駆動型実験・解析手法を開拓するとともに、量子ビーム連携分野で国際的に活躍できる若手人材を育成する。

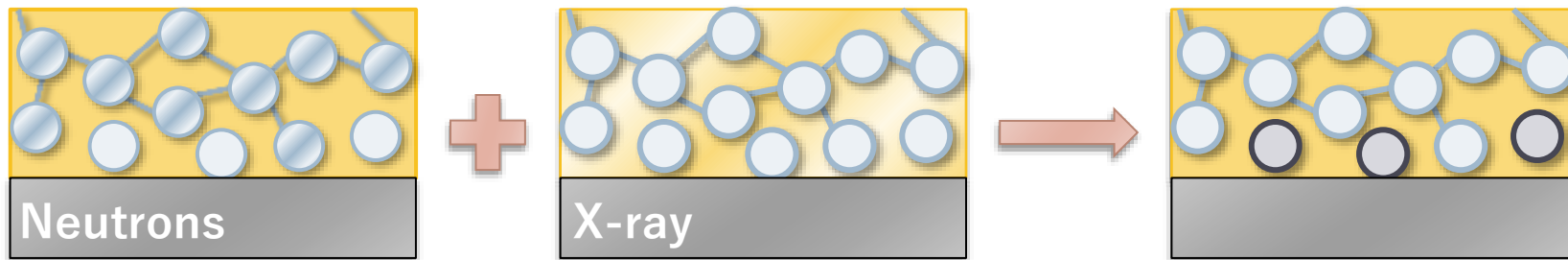
X線と中性子で共通の実験手法

	MLF	JRR-3	PF
単結晶回折	BL18	FONDER	BL-3A, 4C, 6C, 8A, 8B, 10A, 14A
粉末回折	BL08, 09, 20, 21	HRPD, HERMES	BL-4B2, 6C, 7C, 8A, 8B
小角散乱	BL15	SANS-U, SANS-J	BL-6A, 10C, 15A2
反射率	BL16, 17	MINE, SUIREN	BL-7C, 11D; AR-NE7A
イメージング	BL22	TNRF	AR-NE7A
二体分布・動径分布	BL21 (PDF)	-	BL-7A, 11A, 11B, 16A (XAFS)
ホログラフィー	BL10 (持ち込み)	-	BL-6C

- ▶ マルチプローブ連携するにあたって、X線と中性子で共通する実験手法を活用するのが一番敷居が低く、わかりやすいと思われる。ただし、KEKの装置に限ると単結晶・小角散乱・イメージング・ホログラフィーがカバー出来ない。

SAXS/SANS相補利用のメリット

- ▶ マルチコントラスト解析による組成分析の精密化
 - ▶ H/D置換によるコントラスト変化
 - ▶ SAXSで構造の骨格を決めてSANSで水の場所の同定する
 - ▶ 近い原子番号を有する元素の識別
 - ▶ C,N,OとF
 - ▶ FeとNi
- ▶ 例えば、高分子電解質Nafionでは内部に水のクラスターが存在しており、それを介してプロトン伝導が生じることが知られている。
 - ▶ 中性子反射率で重水と軽水のコントラスト変化を詳細に調べると、一部の水は外部と接続されていない「死蔵水」である可能性が示唆された。
 - ▶ X線のコントラストを加えれば、死蔵した水の位置を正確に特定できる。



2種類の水を区別できる

ナフィオンと水を区別できる

中性子小角散乱装置 SANS-U

ソフトマターやハードマター内の 微視的構造を測定

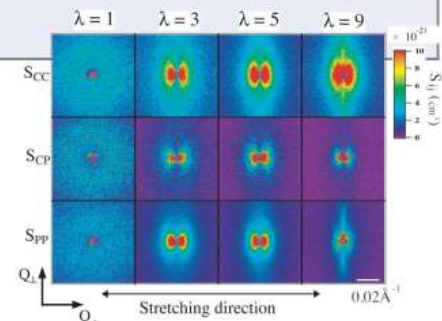


C1-2 : SANS-Uの活用事例

- ✓ ナノコンポジットゲルの一軸延伸下での構造測定
- ✓ 流動場下でのコントラスト変調によるソフトマターの部分相関の決定
- ✓ 温度応答性高分子溶液とゲルの高圧条件下での相分離構造形成の観測
- ✓ リン脂質二重膜からなるナノディスクの構造決定

Web site: <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/neutron/inst/sans-u/index.html>

性能	Q領域: $3.8 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-1} < q < 0.35 \text{ \AA}^{-1}$ 波長: 通常 7Å (利用可能領域5-12Å) 波長分解能: 8-30% (波長に依存) ビームサイズ 5, 10, 15 mm ϕ
検出器	有効エリア: $64.5 \times 64.5 \text{ cm}^2$ データアレイ: 128x128 位置分解能: $5 \times 5 \text{ mm}^2$ サンプル検出器間距離: 1-16 m
高分解能検出器	有効エリア: 74mm ϕ データアレイ: 256x256 サンプル検出器間距離: 11.3 m 固定
サンプルチェンジャー	サンプル個数: 12個 温度制御範囲: 5-80°C 温調方法: ペルチェー式加熱・冷却
高圧セル	圧力範囲: 0.1-400 MPa 温度制御範囲: 10-80°C
流動場装置	Anton Paar社製501 (調整中)



具体的な運用

- ▶ PFのSAXSビームラインで採択課題をお持ちの方が、SANSを用いた実験を検討するためのビームタイムを提供できます。
- ▶ まずは、実際にそのテーマでSAXSとSANSの相補利用が有効かどうかを確かめられるよう、1,2日程度の予備実験のためのビームタイム提供をKEKから東大物性研に依頼します。
 - ▶ うまく空きがあればビームタイムを配分してもらえる予定です。
- ▶ 実験の計画・実施のサポートは山田が行います。
 - ▶ まずはメールnorifumi.yamada@kek.jpにご一報下さい。
- ▶ その後も継続して実験を行う場合は、予備実験で得られたデータを基に課題申請を行って頂く形となります。

