超高压中性子回折装置 PLANET で何ができるか？

日本原子力研究開発機構 J-PARC センター物質・生命科学ディビジョン 服部高典, 佐野亜沙美
総合科学研究機構中性子科学センター 町田真一, 阿部 淳, 舟越賢一, 岡崎伸生

Takanori HATTORI, Asami SANO-FURUKAWA, Shinichi MACHIDA, Jun ABE, Ken-ichi FUNAKOSHI and Nobuo OKAZAKI: What can we do with the High-Pressure Neutron Diffractometer PLANET?

PLANET is a powder neutron diffractometer dedicated to high-pressure experiments. By combining the intense neutron source of J-PARC and the high-pressure devices designed for time-of-flight powder neutron diffraction, precise structure analysis of crystal, liquid, and amorphous solids is possible over wide pressure and temperature range of 0~20 GPa and 77~2,000 K. This beamline is effective for various studies in geophysics, planetary science, physics and chemistry. This paper overviews the beamline and introduces recent results obtained at PLANET.

1. はじめに

1.1 超高压中性子回折装置で何ができるか？

超高压中性子回折装置 PLANET とは、東海村のパルス中性子施設、J-PARC 物質・生命科学実験施設に建設された高压専用の粉末回折ビームラインである。PLANET は、通常中性子回折装置でできることを、約 0.1~20 GPa (1 GPa $\approx$ 1 万気圧)、77~2,000 K の広い圧力温度範囲で行うことができる。中性子の物質との特徴的な相互作用を利用して、X 線では「見る」ことができないような物質の構造を、高压下で精密に調べることができる。この特徴は、地球深部の高温高压下における鉱物中の水（結晶水、水酸基）や水素の状態、惑星内部の低温高压下における軽元素の状態、およびそれらが与える天体の内部構造、進化過程への影響を推定するのに役立てられている。本稿では、装置の概要、その性能を紹介し、地球科学、惑星科学、材料科学への応用例を紹介する。なお、建設の経緯や実験の実際に関しては、文献¹⁻³⁾を参照のこと。

1.2 中性子の特徴と有用性

まず、中性子の特徴と物質の characterization における有用性を X 線と比較しながら述べる。最も顕著な違いは、X 線が電磁波で、中性子が電荷 0、スピン 1/2 の粒子である点である。そのため、X 線回折では、物質内の電子密度分布がわかるのに対し、中性子回折では、原子核の分布（正確には散乱長密度分布）や、磁気モーメントの大きさ、向き、分布を知ることができる。また散乱長（X 線の原子散乱因子に相当）は、X 線では電子数に比例するが、中性子では原子種や同位体によってまちまちであり、ものによってはほぼ 0 や、負のものさえある。そのため X 線では観測できない H^+ （プロトン）や、重元素中の

軽元素を見ることができる。また Mg^{2+} , Al^{3+} , Si^{4+} , O^{2-} などの地球科学的に重要な等電子イオンを区別することができる。さらに、中性子は、原子核でピンポイントに散乱されるために、散乱長は、高 Q まで減衰しない。そのため、高 Q までの散乱強度が測定可能であり、そのフーリエ変換である実空間情報を高い分解能で知ることができる。加えて、中性子は物質中の磁気モーメントと相互作用するため、磁気構造を調べることができる。一方、X 線と中性子の両方を用いた実験を行えば、各々の実験だけでは得られない情報（例えば、結晶構造解析における原子の熱振動と電子雲の広がりとの区別や、多成分液体の部分構造）を知ることができる。

1.3 高压下における中性子回折実験

次に PLANET の得意とする高压下での中性子回折実験の必要性に関して述べる。図 1 に地球の断面図と水（結晶水、水酸基）、水素のかかわりを示す。地球表層に

図1 「水」が及ぼす地球・惑星への影響 (Effect of “water” on Earth and Planets.)

図2 世界のパルス中性子施設と高圧専用ビームライン。(Pulsed neutron facilities in the world and the high-pressure beamlines launched there.)

は、海水という形で多くの水が存在しているが、地球内部にも結晶水ないし水酸基の形で大量の水（海水の数倍～数十倍）が鉱物中に含まれている。最近の研究⁴⁾では、地球深部のマントル遷移層由来のダイヤモンドの中に1 wt%の水を含むRingwoodite（マントル遷移層の主要構成鉱物）が見つかり、場所によっては大量の水を含んでいることが実証されている。これら鉱物中の水は、岩石の弾性率（機械的性質）を下げたり、融点（熱力学的性質）を下げたりするため、地球の物性に大きな影響を与えていると考えられている。地球科学では、地表で観測される内部の情報（地震波の伝搬速度から地球内部の密度分布、磁気嵐の応答から地球内部の電気伝導度分布など）と地上における高温高压実験結果（高压地球科学）の双方から地球内部モデルを構築するが、それを行ううえで、高温高压下で水が与える鉱物の構造・物性への影響を知ることは重要である。これを行うためには、水あるいは水素を「見る」ことのできる中性子を用いた高温高压実験が有効である。

このような重要性があるにもかかわらず、高圧下における中性子実験はこれまであまり行われてこなかった。それは、これまで使用できる中性子ビームの強度が弱く、原理的に小さな試料を扱わざるを得ない高圧実験と相性が悪かったためである（使用可能な試料サイズ $V_{\max}$ は、およそ $V_{\max} \propto P_{\max}^{-3/2}$ 、 $P_{\max}$ は発生可能圧力）。しかしながら近年、世界各国で大強度のパルス中性子源が建設され、高圧中性子実験が現実的なものとなってきた。図2に世界のパルス中性子源（赤枠）とそこに建設されたあるいは建設予定の高圧専用ビームライン（赤字）を示す。日本でも、東海村に大強度陽子加速器施設 J-PARC が建設され、そこに建設されたのが超高圧中性子回折装置 PLANET⁵⁾ である。

2. 超高压中性子回折装置PLANET

2.1 超高圧中性子回折装置とは？

PLANET (Pressure Leading Apparatus for NEuTron)

図3 超高压中性子回折装置PLANETの断面図。(Cutaway view of the high-pressure neutron diffractometer PLANET).

図4 六軸プレスを用いた場合の回折ジオメトリ。 (Diffraction geometry for experiments using the 6-axis press.) 図はElsevierの許可を得て文献⁵⁾より転載。

diffraction) とは、J-PARC の物質・生命科学実験施設 (Materials and Life Science Experimental Facility) に建設された高圧実験専用の中性子ビームラインである。その最大の特長は、高温高圧発生に長けたマルチアンビルプレス「圧姫」⁶⁾を擁し、高温高圧下 (10 GPa, 2,000 K) での中性子回折実験ができることである。図3にPLANETの概略図を示す。核破碎反応によって発生した高速中性子は、減速材 (1.5 MPa, 20 K の超臨界パラ水素) により実験に適当な速度に落とされ、各ビームラインに供給される。そのうち、実験に有用な中性子が、鉄コリメータやチョッパー、四象限スリットで時間的および空間的に選別され、疑似放物線形状のスーパーミラーガイド管により実験ハッチまで輸送・集光される。試料の直前には、小型の四象限スリットが設置されており、試料以外の部分にビームを当てないように、工夫がなされている。高圧下の試料により散乱された中性子は、アンビルの隙間を通してプレスの両側に設置された³He位置敏感型検出器で検出される (図4)。検出器の前には、ラジアルコリメータが配備されており、ブレード間隔の異なるものを用いることで、ビーム軸方向に関して1.5 mmないし3 mmの部分を見込めるようになっている。入射ス

リットと組み合わせることで、3 mm角以下の領域の情報を選択的に取得できるようになっており、これらを用いることで試料を取り囲むヒーターや圧媒体からの散乱を除去することができる。また、試料下流にイメージングカメラを設置することで高压下のラジオグラフィもできるようになっている。常温高压あるいは低温高压実験を行う際には、マルチアンビルプレスは下流に退避され、その場所には小型プレスが設置される。

2.2 6軸型マルチアンビルプレス「圧姫」⁶⁾

これまで高温高压下その場観察実験は、試料が小さくても十分な信号強度が得られる放射光を用いて主に行われてきた。それらの施設の高压ビームラインでも大型のマルチアンビルプレスが使用されてきたが、中性子実験では、強い中性子ビームが得られないために、試料を大きくするおよび散乱立体角を稼ぐなどの工夫が必要となる。しかしながら、従来型のマルチアンビルプレスでは、試料を等方的に加圧するための機構（ガイドブロックとスライディングブロック）が散乱開口角を厳しく制限してしまうために、散乱中性子のごく一部しか収集できないという問題があった。また、先に述べたような試料散乱情報のコリメーションを行う際、中性子ビームの発散が大きい（放射光の約200倍）、入射および受光コリメータを試料のなるべく近傍に設置する必要があるが、従来型ではそれが不可能であった。そこで採用されたのが6軸型のマルチアンビルプレス（以下6軸型プレスと呼称）である。

6軸型プレスは従来型とは異なり、6つの加圧軸それぞれに油圧ラムをもっており、それらを精密に同期して作動させることにより試料を等方的に加圧するシステムである。当時この方式を採用したプレスは、世界にまだ2台（日本のISEIとドイツのBGI）しかなく実績に乏しかったため、その採用は、PLANETにとっては大きな賭けであった。そのため急遽それらのプレスの性能評価を行い、問題点の洗い出しとその改善方法の検討を行った。調査の結果、6軸プレスは実用に耐え得ると判断し中性子回折実験用に新規に製作した（図5）。その性能の詳細は文献⁶⁾に譲るが、最終的には、各軸の同期精度70 μm 以下で1軸当たり5,000 kNまで加圧できる装置が完成した。

実際の実験では、試料の加圧は、二段目アンビルを一段目アンビルで加圧する二段加圧方式（MA6-6）⁷⁾が採用されている。この方式は二段式加圧のもつ特徴、すなわちアンビル相互の位置関係を自己アライメントさせることによる加圧精度の向上に加え、中性子照射により放射化したアンビルを素早く取り替えることができるという利点をもつ。図6に高温高压実験で一般的に使用される高压セルを示す。ペレット状に整形された試料は、グラファイトチューブの中に入れられ、それらはMgOないしZrO₂の圧媒体の中に装填される。加圧には、先端が

図5 PLANETにインストールされた6軸型マルチアンビルプレス「圧姫」。(Six-axis multi-anvil press ATSUHIME installed at PLANET.)

図6 高温高压実験で用いられる高压セル。(A typical high-pressure cell used in high-PT experiments.)

図7 PLANETで用いられる各種高压装置とその場観察実験が可能な温度圧力領域。(Various high-pressure presses used at PLANET and the currently available PT condition.)

truncateされた四角錐の超鋼合金製アンビル6つが用いられる。試料の加熱は、上下のアンビルを通してヒーターに通電することにより行われる。この方式により現在、直径約4 mm高さ4 mmの円柱試料に対して、約10 GPa, 2,000 Kの高温高压発生が可能となっている。

2.3 小型プレス

PLANETでは、高温高压以外の条件での実験のために各種の小型プレスが使用できるようになっている。図7

表1 PLANETの性能. (Specification of PLANET.)

中性子源から試料までの距離	25 m
試料から検出器までの距離	1.5~1.85 m (方位による)
検出範囲	90°±11.3° (水平方向) 0°±34.6° (鉛直方向)
分解能 ($\Delta d/d$)	0.6%
d レンジ	0.2~4.2 Å (single frame) 0.2~8.4 Å (double frame)
Q レンジ	1.5~30 Å ⁻¹ (single frame) 0.8~30 Å ⁻¹ (double frame)
試料位置での中性子フラックス	5.291 × 10 ⁷ neutrons cm ⁻² s ⁻¹ (加速器パワー 1 MW時)
実験可能温度圧力領域	0~16 GPa, RT-2000 K (6軸プレス), 0~20 GPa, RT (PE プレス) 0~5 GPa, 77~473 K (Mito system)

にその写真とその場観察可能な温度圧力領域を示す.

常温高压実験では, 海外の施設でも広く使われているパリーエジンバラプレス⁸⁾ (以下PEプレスと呼称) が用いられ, 焼結ダイヤモンド製アンビルを用いることで20 GPaを超える圧力での高压中性子実験が可能となっている. また, 低温高压実験では, 東大の小松氏の開発したMito system⁹⁾ が使用されている. このプレスは従来行われていたようなプレス全体を液体窒素に浸すのではなく, アンビル周りに流体窒素を流すことにより, 本体の油圧ラムを常温にしたまま試料部のみを冷やせる. そのため, これまで難しいとされてきた低温下での加減圧を行うことができる. それゆえ, 状態が温度圧力履歴により変わる氷の研究などに効果を発揮している (詳細は本号の小松氏の記事を参照).

また, より高い圧力での実験を可能にするため, ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いた実験にも取り組んでいる. 米国SNSの高压ビームラインSNAPでは, DACを用いてすでに100 GPaでの中性子回折実験に成功している.¹⁰⁾

2.4 PLANETの性能

これまで明らかとなっているPLANETの性能を紹介する. 表1にその仕様を示す. 図8に中性子散乱実験で一般的に用いられるバナジウム管に入れたSi粉末 (NIST SRM640d) の回折パターンを示す. Braggピークはシャープで対称性もよいことがわかる. またバックグラウンドも十分低く, リートベルト解析を行うのに十分なレベルである. 測定可能な d レンジは通常の測定モード (single frame mode) では0.2~4.2 Å, 25 Hzで発生するパルスの2つのうちの1つを除去すれば (double frame mode) さらに2倍の0.2~8.4 Åとなる. これは Q 値に直すと0.8~30 Å⁻¹であり液体・非晶質の構造解析を行うのに十分である (地球科学的に重要なケイ酸塩ガラスのFirst Sharp Diffraction Peakが位置する $Q = 1.5$ Å⁻¹をカバーしている).

次に, ラジアルコリメータによる散乱情報選択性を紹介する. 図9に6軸プレスを用いた高温高压実験で標準的

図8 バナジウム管に入れたSi粉末 (NIST SRM640d) の回折パターン. (A neutron diffraction pattern of Si powder (NIST SRM640d) in a 3 mm-diameter V can.) 図はElsevierの許可を得て文献⁵⁾より転載.

図9 ラジアルコリメータがある場合とない場合のMg₂SiO₄ forsteriteの回折パターンの比較. (Comparison of diffraction patterns of Mg₂SiO₄ forsterite with and without radial collimators.) 図はElsevierの許可を得て文献⁵⁾より転載.

に使用される高压セルに試料を入れたときの, コリメータがある場合とない場合の回折パターンの比較を示す. コリメータがない場合 (図9下段) には, 試料周りの物質 (試料容器, ヒーター, 圧媒体) からのBraggピークが見られるが, コリメータがある場合 (図9上段) はそれらがすべて除去され, 試料のピークのみとなっていることがわかる.

3. 応用例

次にPLANETで行われた研究の例を紹介する.

3.1 地球科学への応用: 地球形成期におけるコアの軽元素の謎に迫る¹¹⁾

地球の中心核 (コア) は, 鉄を主成分とする合金でできていることが知られている. しかしながら, 地震波から推定されるコアの密度は, 高温高压実験から決定される合金の密度より数%低いことが知られており, 多量の軽元素が含まれていると考えられている. その候補として, S, Si, O, C, Hなどが提案されているが, どの元素

図10 回折パターンの温度変化。(Sequential change of the diffraction pattern during heating at 4.9 GPa.) 地球形成期の状態を模擬した出発試料（鉄とシリカと水酸化マグネシウムの混合物）を、4.9 GPaまで加圧後、昇温すると、含水鉱物が分解して水を供給し、その後、純鉄 (bcc) と反応し、鉄水素化物 (fcc) が形成されている。

がどのようなプロセスで入ったかはよくわかっていない。その有力な候補として宇宙存在度の大きい水素が挙げられるが、これまで水素を実験で直接観測することができなかったために、その詳細はわかっていなかった。そこで、本研究では中性子を用いて、地球形成期にコアに水素が取り込まれる様子を観察した。実験には高温高压発生が可能な6軸プレスを用い、出発試料として初期地球を模擬した鉄とシリカ (SiO_2) と水酸化マグネシウム ($\text{Mg}(\text{OD})_2$) の混合物を用いた。図10に昇温時の回折パターンの変化を示す。4.9 GPaまで加圧した後、昇温すると、含水鉱物が分解して水を供給し、それらが固体鉄と反応して鉄水素化物 FeD_x (fcc) を形成する様子が観察された。このことから、地球形成期も同様のメカニズムでコアに水素が取り込まれたものと考えられる。また、今回の実験で水素は融解する前の固体状態の鉄に入り込んでいくことがわかった。先に示したほかの軽元素は液体状態の鉄にしか溶け込まないので、地球形成期において地球サイズの増大、それに伴う温度の上昇が起こった場合、ほかの元素に先んじて水素がコアに溶け込んだものと考えられる。また、水素が溶け込むことにより融点は500℃以上も低下するため、その後のコア・マントル分離過程やほかの軽元素がコアに溶け込む過程に大きく影響すると考えられる。

3.2 物理化学、惑星科学への応用：塩を大量に含む氷の特異な構造を解明¹²⁾

氷は、木星型惑星の衛星や海王星型惑星の主要構成鉱物であり、その低温高压下における構造、物性はそれらの天体の内部構造を推定するうえで重要である。これまで不純物を含まない氷に関して数多くの研究がなされ

図11 (左) 塩化・臭化リチウム-水系相図と(右) 純粋な H_2O の PT 相図に記した本実験の温度圧力経路。(Experimental PT path shown in the $\text{LiBr}/\text{LiCl}-\text{H}_2\text{O}$ phase diagram (Right) and the phase diagram of pure ice (Left).) 二重丸の温度圧力で、塩を含んだ特異な氷が形成された。

図12 (左) 中性子回折により得られた純粋な氷 (ice VII 相) と、今回得られた“塩を大量に含む氷”の回折パターン。青は実測値。赤線は想定される強度。(中央) 分子動力学計算により得られたそれぞれの氷の原子配置。赤：O、白：H、黄色：Li、緑：Cl、(右) 水分子の双極子モーメントの向きを球面上に確率分布として示したもの。((Left) Neutron diffraction pattern of pure and salty ice taken at high- P condition. The red lines show the expected intensity (Center) Snap shot of the atomic arrangement obtained by MD simulation, Red : O, White : H, Yellow : Li, Green : Cl, (Right) Statistics of the direction of dipole moments of water molecule obtained by MD simulation.)

てきたが、実際の氷天体は海や金属、鉱物との相互作用によって不純物を含んでいると考えられるため、不純物を含んだ氷の研究を行う必要がある。

通常、塩水を凍らせると、塩は氷から吐き出される。しかし、原子の拡散が抑制された低温で加圧して氷を作

製すると、^{えん}塩を含んだ氷を作ることができる。本研究では、水分子6個に対して、LiCl/LiBrを1個含んだ高濃度の水溶液をMito System⁹⁾に装填し、低温でいったんガラスにした後、それらを加圧、アニールすることで、高濃度に塩を含む氷を作製することに成功した(図11)。それらの回折パターンを図12左下に示す。得られた回折パターンを純粋の高圧氷(氷Ⅶ相)のもの(左上)と比べると、水素の配列のみで決まる111反射が消失していることがわかった。これは、結晶中の水素の配置が無秩序になっていることを示している。同時に行われた分子動力学計算結果を図12中央に示す。結晶中の水素は隣り合う酸素の間におらず、水素結合が破壊されていることがわかる。水分子の向き(双極子モーメント)の分布を見ると(図12右)、塩を含まない氷では〈100〉方向を向いているのに対し、塩を含む氷では、ほぼ等方的であることがわかる。またその格子は純粋なものとは比べ大きく膨らんでおり、減圧すると結晶状態を保つことができず、再びガラスに戻ることがわかった。これらの性質はこれまでどの物質にも報告例がなく、新しい特異な性質をもった状態であると考えられる。

3.3 材料科学への応用：鉄中の水素の新しい占有状態¹³⁾

水素は鉄に溶け込み、材料強度を著しく低下させる(水素脆性)。鉄は鉄鋼材料として広く一般に使われているため、特性改善のためにその原因を知ることは、工学的に大変重要である。そのためには、水素が結晶中のどこに、どのくらい存在するのかという情報が必要になるが、常温常圧下で鉄に溶け込む水素の量はごくわずかであり(ppmオーダー)、また溶け込んだ水素はX線では見えないことからこれまでその詳細はよくわかっていなかった。一方、水素圧を数GPa(万気圧)まで高めると状況は一変し、多量の水素が鉄に溶け込むようになる。しかし、このようにしてできた水素化鉄も常温常圧に取り出すと元の鉄に戻ってしまう(ほとんどの水素が抜け出てしまう)ために、高温高圧下でその場観察する必要がある。そこで本研究では、水素を封じこめられる高压セルを開発し、これを用いて観察した(実験の詳細は文献¹³⁾参照)。

図13に鉄および鉄水素化物のPT相図上に記した実験のPTパスを示す。また得られた回折パターンを図14に示す。約7.4 GPaまで加圧後、昇温するとbcc-Feがfcc-Feになる。その後、水素化が始まり第1ピークと第2ピークの強度比の変化および格子の膨張が見られた。Feの水素化が完了した後に取得した回折パターンのリートベルト解析の結果を図15に示す。構造解析の結果、水素組成は $x = 0.64$ であり、また高温下で水素はこれまで言われてきたfcc格子の八面体サイトのみでなく(図15上段)、四面体サイトも占有する(図15下段)ことがわかった。さらに理論計算の結果から、この現象は水素原子の

図13 FeおよびFeH_xのPT相図上に表した実験のPTパスと水素源の分解温度。(Experimental PT phase shown in the PT-phase diagram of Fe and FeH_x, together with decomposition temperature of the hydrogen source.)

図14 7.4 GPaまで加圧した後の昇温中のパターンの変化。(Change of the diffraction pattern during heating after the compression to 7.4 GPa.)

図15 得られた回折パターンの2つのモデルによるリートベルト解析結果。(Result of Rietveld analysis of the observed pattern by two models.) (上) 水素が八面体サイトにのみ占有。(下) 八面体サイトと四面体サイトを占有。

図16 SiO₂ ガラスの中性子構造因子の圧力変化。(Pressure dependence of neutron structure factor $S(Q)$ of SiO₂ glass.)

八面体サイトから四面体サイトへの熱励起であると解釈できた。この結果は、各種鉄鋼材料の高品質化・高強度化に向けた研究開発や、地球内部の核に存在する水素の研究に役立つと期待されている。

3.3 非晶質固体の構造解析：SiO₂ガラスの永久高密度化のメカニズム¹⁴⁾

石英ガラスはSiO₄四面体を構成ユニットとした非晶質固体である。四面体が互いに頂点共有して多員環（中距離秩序）を作っているため構造中に隙間が多く、加圧により顕著な密度の増加が見られる。また緩和が遅いため、常温下で約12 GPa以上に加圧すると高密度のまま常圧に回収される（永久高密度化）。永久高密度化は、高温下で促進され、最大で約20%の密度の増加が報告されている。これまで、その微視的機構に関していろいろ調べられてきたが、いまだよくわかっていない。これを明らかにするには、通常の散乱実験で得られるような原子間の距離の情報だけでなく、Si、Oを区別した角度相関や連結性の情報が必要となる。これを調べるためには単一の散乱実験では不十分で、散乱能の異なる2種の線源を用いて得られたデータを組み合わせることが有効である。そこで、本研究では、高压X線回折と高压中性子回折のデータを組み合わせ、リバース・モンテカルロ法（RMC）によりガラスの三次元構造を導出した。

中性子回折実験において、約10 GPaまでは6軸プレスを用いてデータの取得を行った。図16に得られた中性子構造因子 $S^N(Q)$ を示す（なお高温高压下の結果に関しては誌面の都合上、割愛する）。約17 GPaまでの加圧において、高 Q まで続く振動に大きな変化は見られないが、約7 Å⁻¹以下の低 Q 領域に大きな変化が見られた。これは短距離秩序を維持したまま中距離秩序が変化することを示しており、SiO₄四面体の形状を保ったまま、そのつながり方が変化するを示している。図17にX線構造因子と中性子構造因子を用いてRMC法により導出した原子配置を示す。SiとOを区別した三次元構造が得られたことで、部

図17 RMC法によりX線および中性子構造因子から導いた5.4 GPa, 670 °CにおけるSiO₂ガラスの三次元構造。(3-dimensional atomic arrangement of SiO₂ glass at 5.4 GPa and 670 °C obtained from X-ray and neutron $S(Q)$ by RMC method.)

図18 三次元構造から導かれた部分二体分布関数。(Partial pair distribution functions obtained from the 3-dimensional atomic arrangement.)

分二体分布関数（図18）、角度相関の圧力変化を知ることができた。永久高密度化のメカニズムに関しては、現在検討中である。

4. 最後に

本稿ではPLANETの概要と、応用例を紹介した。PLANETは現在、高温高压下の中性子回折実験をルーチンに行える世界で唯一の装置である。また、散乱情報の高い位置選択性により試料周りの物質のBraggピークの混入がなく、精度の高い構造解析ができるようになっている。つまり、結晶構造解析においては、個々の反射の強度をより正確に決められるし、液体・非晶質の構造解析においては、ピーク混入によるblind領域がなく、すべての測定範囲にわたって試料の散乱強度を取得することができる。

次にPLANETが与える高压構造研究への影響を述べる。これまで放射光を用いた高温高压X線回折実験では、パターンのピーク位置情報から相を同定し各温度圧力条件での安定相を調べるいわゆる“phase study”が主流であった。一方、中性子回折実験では、一様な散乱強

度を出すバナジウムなどを用いて, 比較的容易に散乱強度の補正ができるため, ピーク強度情報から原子位置を決める“構造解析”が可能となる. この点は, 中性子の特性に加え, 今後の高压構造研究を質的に変えるものとなるだろう.

PLANETはユーザー運転から4年半が経ち, スムーズに実験が行えるようになってきた. ほかの施設ではできないような実験が可能であるため, よいテーマをもってぜひ使いに来ていただきたい.

文 献

- 1) 服部高典: 日本中性子科学会誌 **25**, 231 (2015).
- 2) 服部高典, 佐野亜沙美, 有馬 寛: 日本中性子科学会誌 **26**, 85 (2016).
- 3) 服部高典, 佐野亜沙美, 有馬 寛, 舟越賢一, 阿部 淳, 町田真一, 岡崎伸生, 大内啓一, 稲村泰弘: 高压力の科学と技術 **26**, 89 (2016).
- 4) D. G. Pearson, F. E. Brenker, F. Nestola, J. McNeill, L. Nasdala, M. T. Hutchinson, S. Matveev, K. Mather, G. Silversmit, S. Schmitz, B. Vekemans and L. Vincze: *Nature* **507**, 221 (2016).
- 5) T. Hattori, A. Sano-Furukawa, H. Arima, K. Komatsu, A. Yamada, Y. Inamura, T. Nakatani, Y. Seto, T. Nagai, W. Utsumi, T. Iitaka, H. Kagi, Y. Katayama, T. Inoue, T. Otomo, K. Suzuya, T. Kamiyama, M. Arai and T. Yagi: *Nucl. Instr. Meth. A* **780**, 55 (2015).
- 6) A. Sano-Furukawa, T. Hattori, H. Arima, A. Yamada, S. Tabata, M. Kondo, A. Nakamura, H. Kagi and T. Yagi: *Rev. Sci. Instrum.* **85**, 113905 (2014).
- 7) N. Nishiyama, Y. Wang, T. Sanehira, T. Irifune and M. L. Riversi: *High Press. Res.* **28**, 307 (2008).
- 8) J. M. Besson, R. J. Nemes, G. Hamel, J. S. Loveday, G. Weill and S. Hull: *Physica B* **180-181**, 907 (1992).
- 9) K. Komatsu, M. Moriyama, T. Koizumi, K. Nakayama, H. Kagi, J. Abe and S. Harjo: *High Press. Res.* **33**, 208 (2013).
- 10) M. Guthrie, R. Boehler, C. A. Tulk, J. J. Molaison, A. M. Santos, K. Li and R. J. Hemley: *Proc. Nat. Aca. Sci.* **110**, 10552 (2013).
- 11) R. Iizuka-Oku, T. Yagi, H. Gotou, T. Okuchi, T. Hattori and A. Sano-Furukawa: *Nature Com.* **8**, 14096 (2016) and references therein.
- 12) S. Klotz, K. Komatsu, F. Pietrucci, H. Kagi, A. A. Ludl, S. Machida, T. Hattori, A. Sano-Furukawa and L. E. Dove: *Sci. Rep.* **6**, 32040 (2016).
- 13) A. Machida, H. Saitoh, H. Sugimoto, T. Hattori, A. Sano-Furukawa, N. Endo, Y. Katayama, R. Iizuka, T. Sato, M. Matsuo, S. Orimo and K. Aoki: *Nature Com.* **5**, 5063 (2014).
- 14) T. Hattori (in prep.)

プロフィール

服部高典 Takanori HATTORI
原子力研究開発機構 J-PARC センター
J-PARC Center, Japan Atomic Energy Agency
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1196, Japan
e-mail: hattori.takanori@jaea.go.jp
最終学歴: 2000 年大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了
専門分野: 高压物理
趣味: テニス, J-PARC 裏でのサーフィン

佐野亜沙美 Asami SANO
原子力研究開発機構 J-PARC センター
J-PARC Center, Japan Atomic Energy Agency
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1196, Japan
e-mail: sanoasa@post.j-parc.jp
最終学歴: 2007 年東北大学大学院理学研究科博士課程後期修了
専門分野: 高压地球科学
趣味: 自家焙煎コーヒー, 地ビール, ツーリング

町田真一 Shinichi MACHIDA
総合科学研究機構 中性子科学センター
Neutron Science and Technology Center, CROSS
〒319-1106 茨城県那珂郡東海村大字白方 162-1
162-1 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1106, Japan
e-mail: s_machida@cross.or.jp
最終学歴: 2008 年筑波大学大学院博士課程生命環境科学研究科修了
専門分野: 高压物理
趣味: 自転車, 漫画

阿部 淳 Jun ABE
総合科学研究機構 中性子科学センター
Neutron Science and Technology Center, CROSS
〒319-1106 茨城県那珂郡東海村大字白方 162-1
162-1 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1106, Japan
e-mail: j_abe@cross.or.jp
最終学歴: 2008 年東北大学大学院環境科学研究科博士後期課程修了
専門分野: 岩石力学
趣味: 息子の子守り

舟越賢一 Ken-ichi FUNAKOSHI
総合科学研究機構 中性子科学センター
Neutron Science and Technology Center, CROSS
〒319-1106 茨城県那珂郡東海村大字白方 162-1
162-1 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1106, Japan
e-mail: k_funakoshi@cross.or.jp
最終学歴: 1997 年東京工業大学大学院理工学研究科博士課程修了
専門分野: 高压地球科学
趣味: スキー

岡崎伸生 Nobuo OKAZAKI
総合科学研究機構 中性子科学センター
Neutron Science and Technology Center, CROSS
〒319-1106 茨城県那珂郡東海村大字白方 162-1
162-1 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1106, Japan
e-mail: n_okazaki@cross.or.jp
最終学歴: 2013 年大阪大学大学院工学研究科論文博士 (工学)
専門分野: タンパク質結晶構造解析, ソフトウェア開発
趣味: スキー, お菓子作り (最近はマカロンが多い)