

物質構造科学特論

瀬戸秀紀

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所

J-PARC Center

中性子と中性子散乱

中性子

電氣的に中性の準安定な素粒子 (バリオン)

質量	$m=1.674927\times 10^{-27}\text{kg}$ (1.00866 a.u.)
スピン	$s = -\frac{\hbar}{2}$
磁気能率	$\mu_m = -1.913\mu_N$ ($\mu_m = 5.051\times 10^{-27}\text{JT}$)
寿命	$t = 886.7 \pm 1.9\text{s}$ $n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e + 0.78\text{MeV}$
波動関数動径	$r=0.7\text{ fm}$
クォーク	uud

粒子性と波動性の関係から

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{mv} = \frac{3.96}{v(\text{km/s})} = \frac{0.286}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$

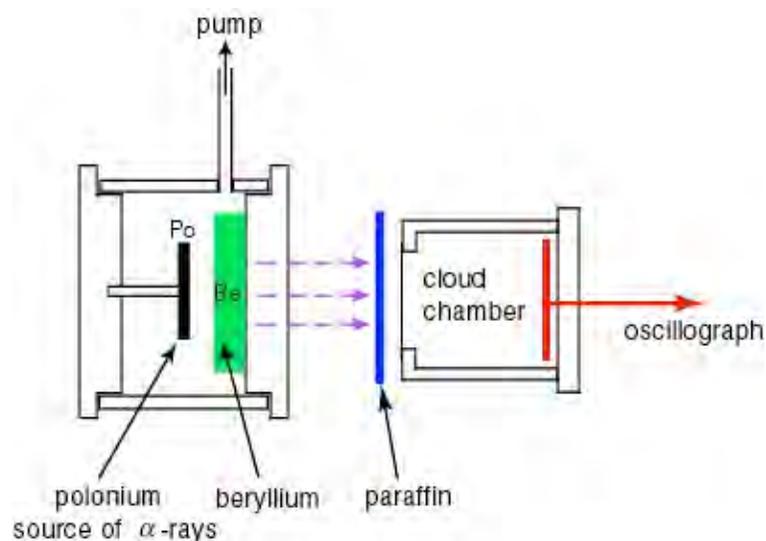
例えばE=0.1eVとすると $\lambda=0.9044\text{\AA}$ となる。また

$$E = k_B T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

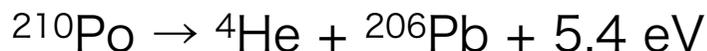
より次の表が得られる。

E(meV)	T(K)	λ (Å)	
0.1~10	1~120	30~3	冷中性子
5~100	60~1000	4~1	熱中性子
100~500	1000~6000	1~0.4	熱外中性子

歴史



1932年 チャドウィックによる中性子の発見



1942年 エンリコ・フェルミによる最初の原子炉CP-1 (Chicago Pile)

1943年 Argonne Forestにおける重水減速型原子炉CP-2

Oak Ridge National Lab. におけるGraphite Reactor

マンハッタン計画から中性子束の利用へ

1946年 Ernie Wollan(ORNL)がNaClの回折を測定

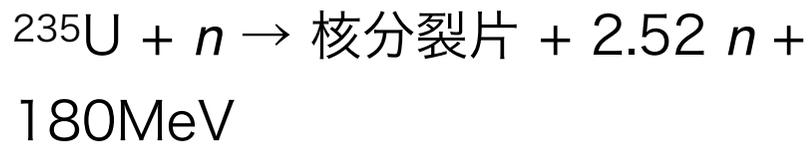
1949年 Shull and SmartがMnOの磁気構造を決定

1994年 Cliff Shull and Bertran Brockhouseがノーベル物理学賞受賞

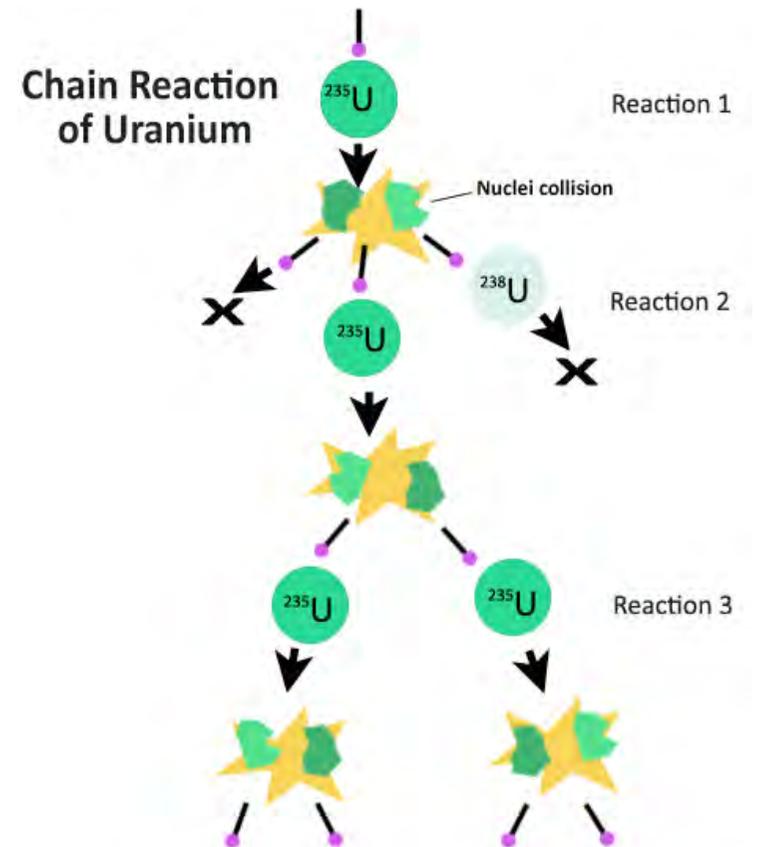
中性子の発生

原子炉からの中性子の発生

原子炉＝燃料（核分裂物質 ^{235}U や ^{239}Pu ）＋減速材（水や重水、炭素など）
＋冷却材（水や二酸化炭素、ヘリウム等のガス）＋遮蔽体



この反応が連鎖的に起こることによって原子炉が「燃える」



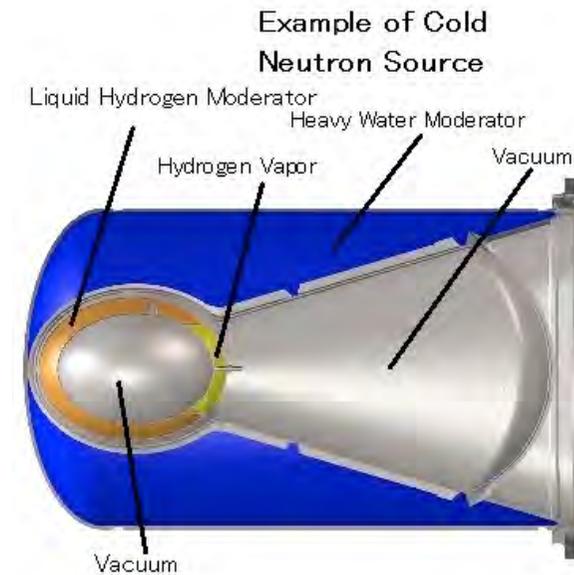
中性子の制御

減速材

核分裂で発生する中性子は約1MeVとエネルギーが高いため、効率良く核分裂を起こさせるためには熱中性子（約25meV）程度までエネルギーを落とす必要がある。例えばHの場合は18回、Cの場合は114回衝突することで熱中性子になる。

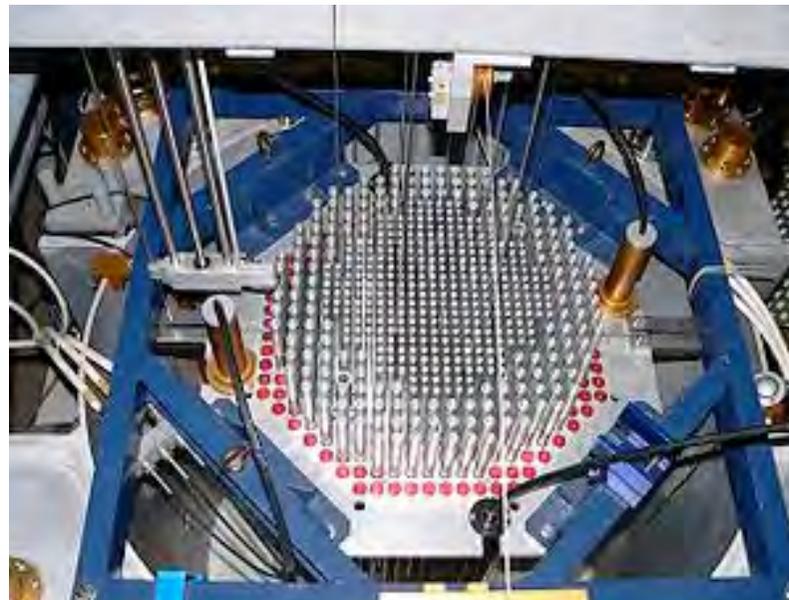
制御棒

中性子を吸収して中性子数を制御して、連鎖反応が進み過ぎる（暴走する）のを防ぐ役割を果たす。（ B_4C 、Cd合金、In、Ag、Hfなど）



中性子実験用原子炉

炉心のすぐ外で中性子束が最大になるように設計。水を沸騰させてタービンを回す発電用原子炉のように高温や高圧にする必要が無いため、運転中は大気圧に保たれ温度も55°C以下。電源喪失しても冷却水のみで自然に冷却する。また低エネルギーの中性子を生成するために液体水素などを満たした冷中性子源を備えていることが多い。

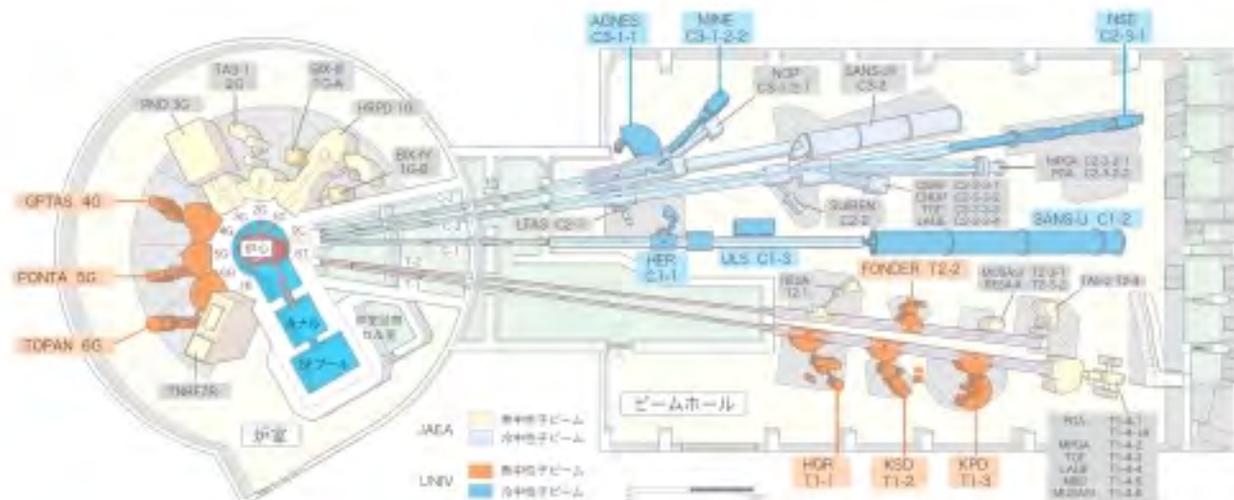


中性子実験用原子炉

炉心や冷中性子源から中性子導管によって中性子を実験装置に導く。バックグラウンドを減らすために、中性子導管は中性子源を直接見ないように配置する。

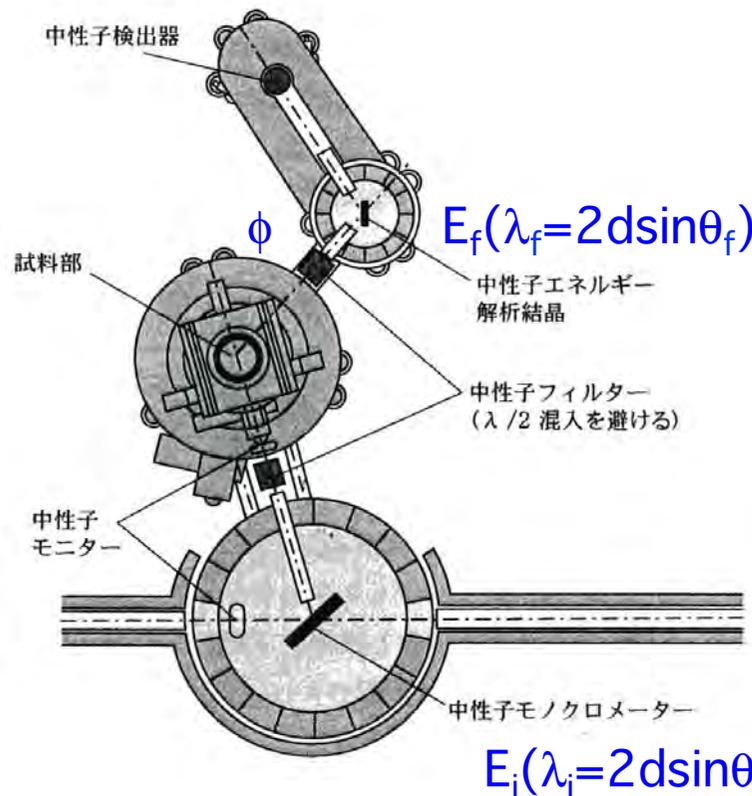
中性子導管は平滑度の高いガラス上にNiなど中性子に対して干渉性散乱断面積が大きく吸収の小さい金属膜を蒸着した鏡面を用いる。

中性子導管によって引き出された中性子はガイドホールに導かれ、モノクロメータ等で分岐させて実験装置で利用する。



中性子散乱実験装置 (原子炉)

原子炉から取り出される中性子は時間的変化のない定常ビームであり、またあるエネルギー（波長）範囲に分布する白色ビームである。従って多くの場合、結晶やチョッパ、速度選別機によって単色化して実験に用いる。



$$\hbar\omega = E_i - E_f$$

$$\vec{Q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$$

$$Q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \phi$$

$$Q_x = k_i - k_f \cos \phi$$

$$Q_y = k_f \sin \phi$$

$$q_x = k_i \cos \psi - k_f \cos(\phi - \psi)$$

$$q_y = k_i \sin \psi + k_f \sin(\phi - \psi)$$

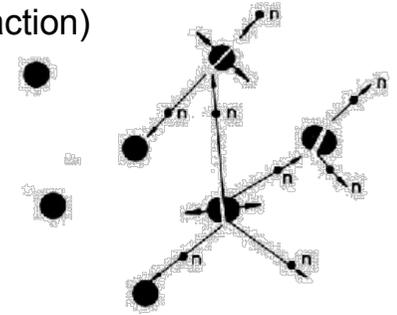
研究用原子炉

核分裂反応を用いる
中性子は連続的に発生

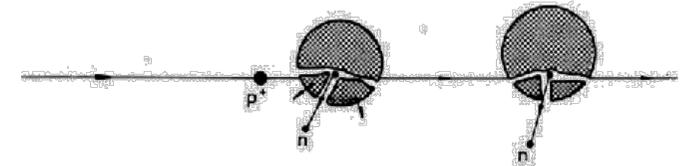
加速器中性子源

陽子加速器による核破砕反応
中性子はパルス状に発生

Fission($\sim 2.5n/\text{Reaction}$)



Spallation($\sim 24n/1\text{Gev Proton}$)



- 1970年代 東北大電子ライナックとHarwell Linac (UK)で加速器駆動による中性子源開発がスタート
- 1980年 KENS (KEK, Japan)
- 1981年 IPNS (ANL, USA)
- 1983年 LANSCE (LANL, USA)

中性子を発生する方法

世界の主な核破砕中性子源



ISIS (UK)

1985: SNS以前は世界最高強度のパルス中性子源 2006年利用開始

2008: 加速器の更新と第2ターゲットステーション 第2ターゲットステーション計画



SNS (USA)

2006年利用開始

第2ターゲットステーション計画



ESS (EU)

現在建設中。利用開始は2023以降

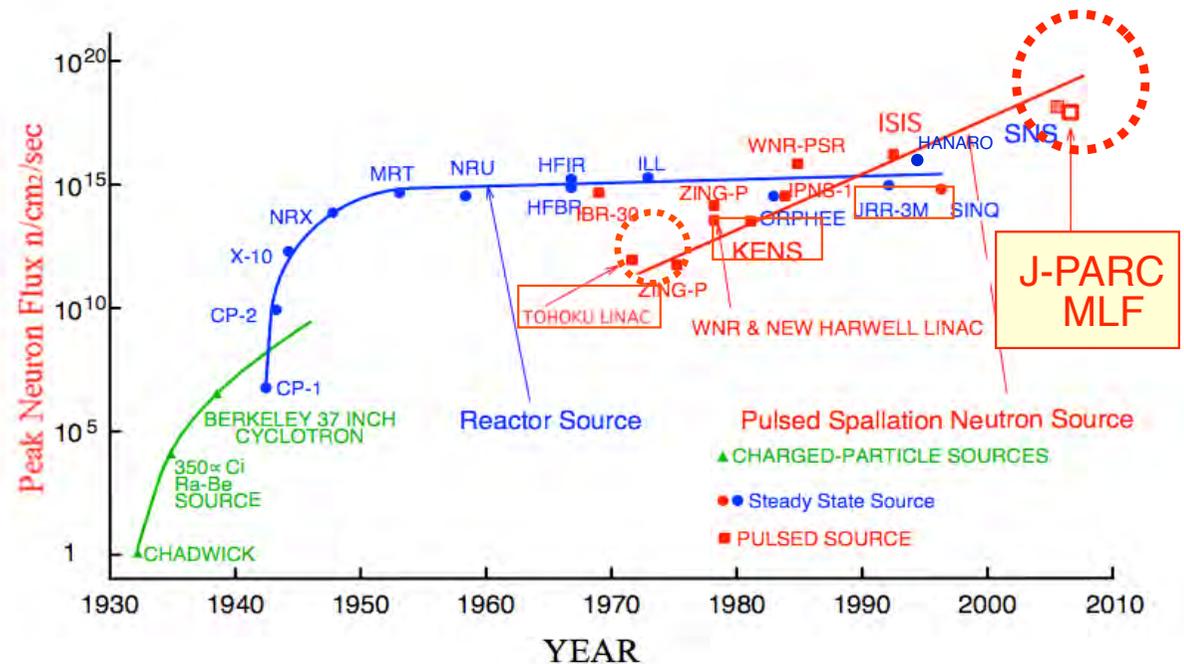
1970年代 東北大電子ライナックとHarwell Linac (UK)で加速器駆動による中性子源開発がスタート

1980年 KENS (KEK, Japan)

1981年 IPNS (ANL, USA)

1983年 LANSCE (LANL, USA)

中性子強度増大の歴史



MLF/J-PARC (Japan)

2008年より利用開始

パルス中性子

加速器は、陽子や電子などの荷電粒子に電場によってエネルギーを与えて高速粒子を作る。粒子が加速器内を一度しか通らないものを「線形加速器」、何度も通すものを「円形加速器」と呼ぶ。円形加速器では加速空洞で加速した後、偏向電磁石で軌道を曲げて、加速器内を何度も通してエネルギーを増加させる。荷電粒子が加速空洞に入る時には空洞内に引き込むように、出る時には打ち出すように電場を制御する。また粒子の加速に伴って円形軌道の半径が大きくなるようとするため、それに合わせて偏向磁場も大きくする必要がある。更にそれに同期して、加速空洞の周波数も変化させなければならない。このように加速粒子の軌道に応じて電磁場を変えていく加速器を「シンクロトロン加速器」と呼ぶ。シンクロトロンでは加速空洞を通過する際に荷電粒子がひとまとまりになる「バンチング」が起きる。従ってシンクロトロンから取り出された加速粒子は加速周波数に合わせたパルス状になる。これにより加速器中性子源から発生する中性子は「パルス中性子」となる。

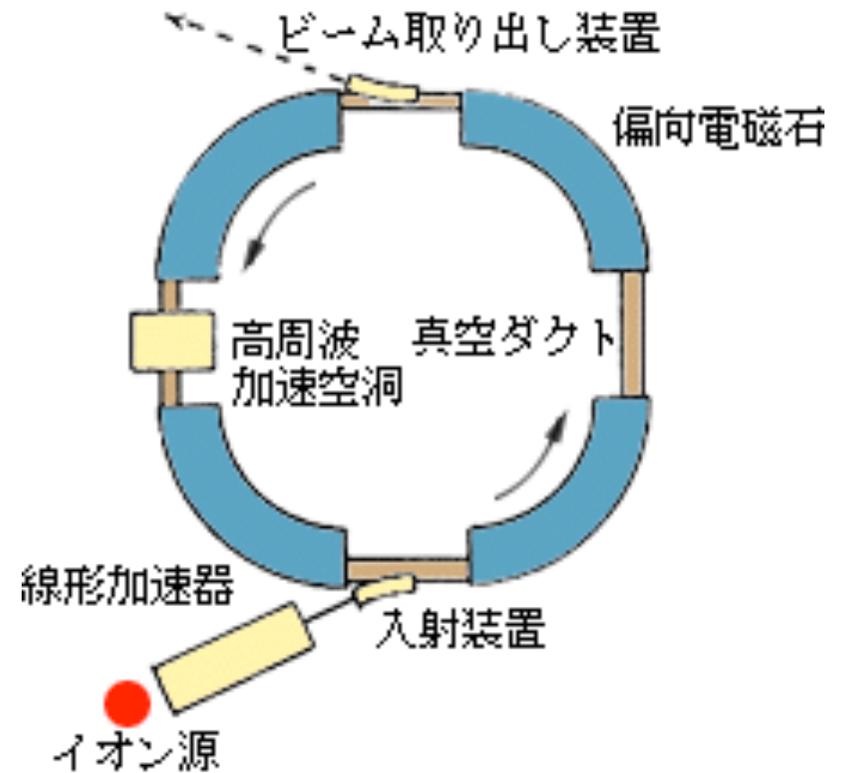
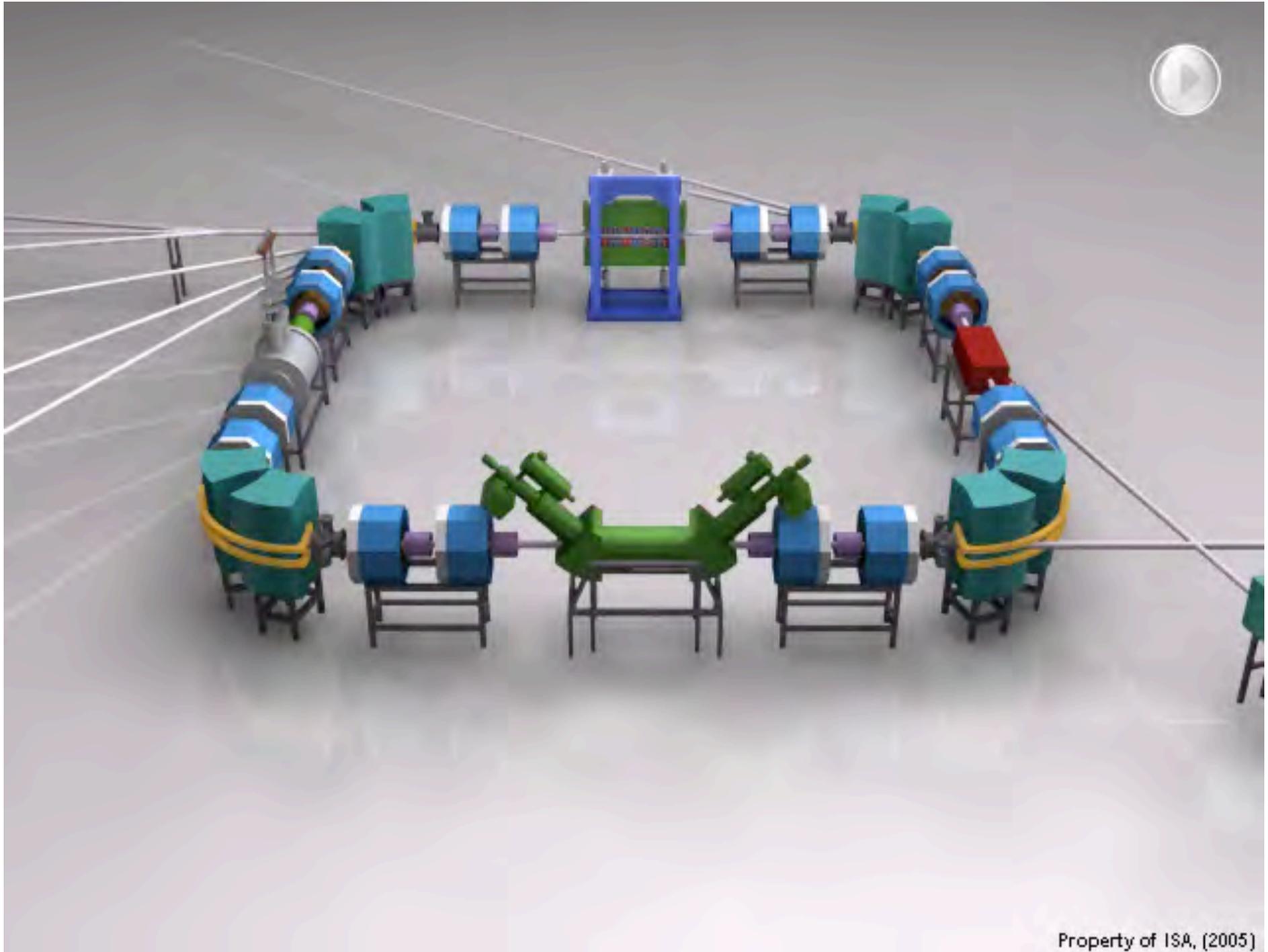


図1.シンクロトロンの構成



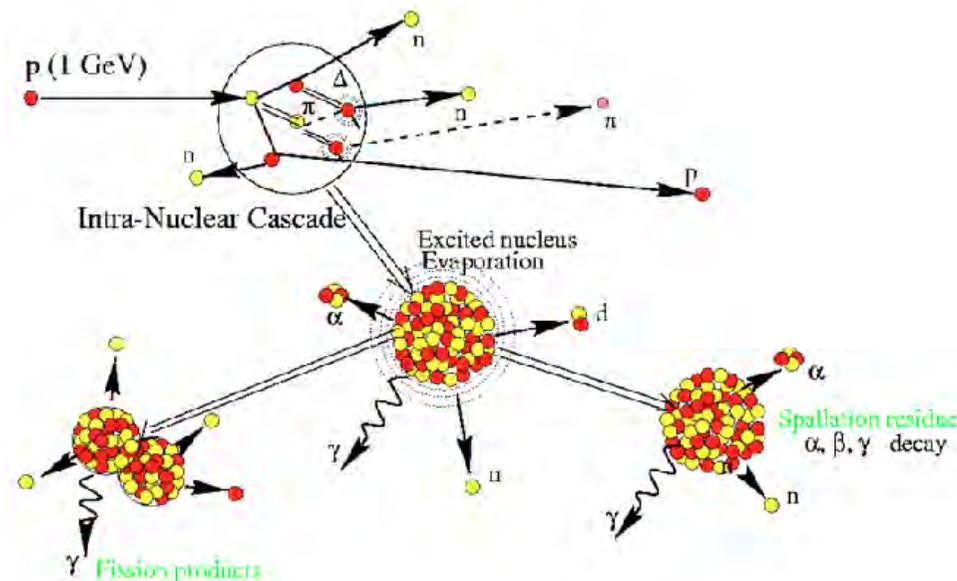
Property of ISA, (2005)

<http://www.isa.au.dk/web/imageGallery.asp>

核破砕による中性子の発生

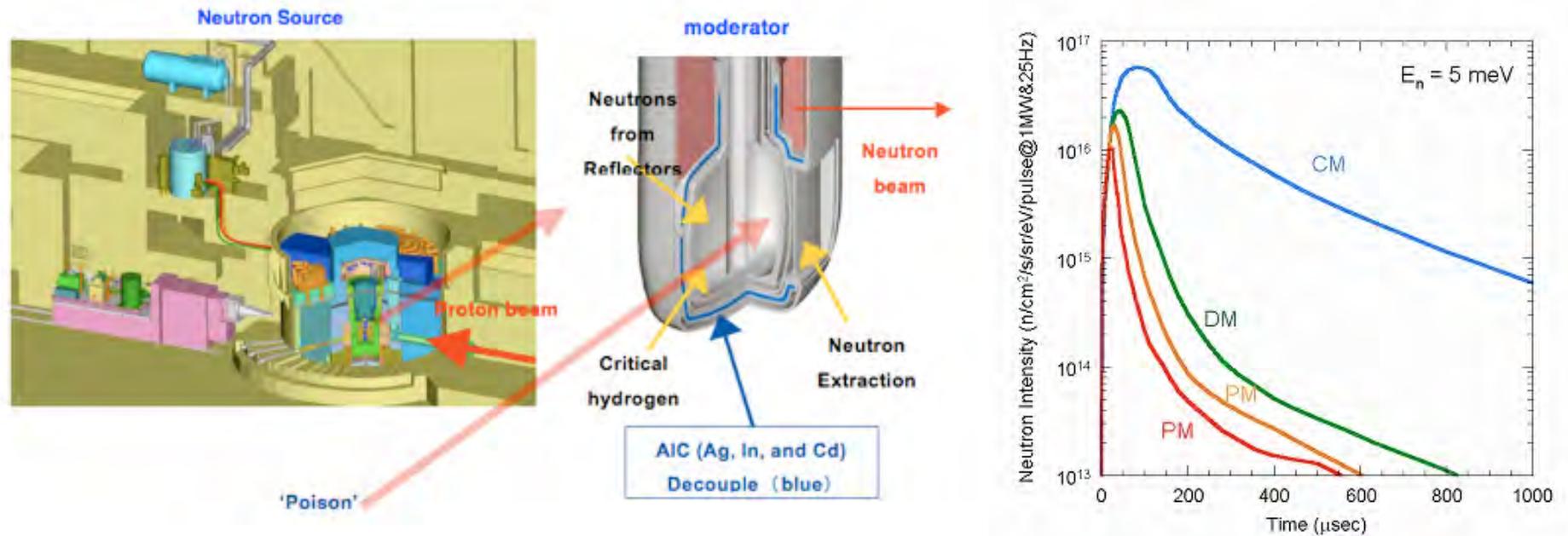
100MeV以上の粒子によって引き起こされる非弾性核反応を核破砕反応と呼ぶ。原子核にエネルギーが十分に高いハドロンが入射すると、それによって弾き出された核子（陽子、中性子）が内部で衝突を繰り返して核内カスケードを形成する。核内カスケードが終了し励起状態の残留核ができると、第二段階として残留核からの核子の蒸発が起こる。

一方入射粒子のエネルギーが400MeVを越えると非弾性パイオン生成衝突が起こり、陽子、中性子、パイオン、ミュオン、ニュートリノ、電子等が生成する。



中性子モデレータ

核破砕反応によって発生した中性子はエネルギーが高過ぎてそのままでは実験には使えないので、液体水素による中性子減速器（モデレータ）でエネルギーを落として利用する。J-PARC MLFでは容器形状や反射材、吸収材との組み合わせによって”coupled moderator” “decoupled moderator” “poisoned moderator”の3種類を用意し、実験装置の目的に応じて利用している。



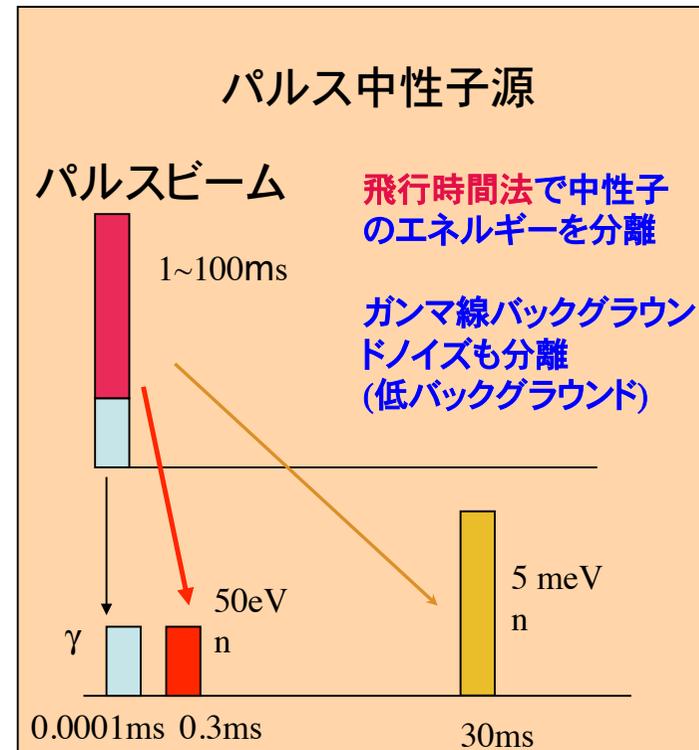
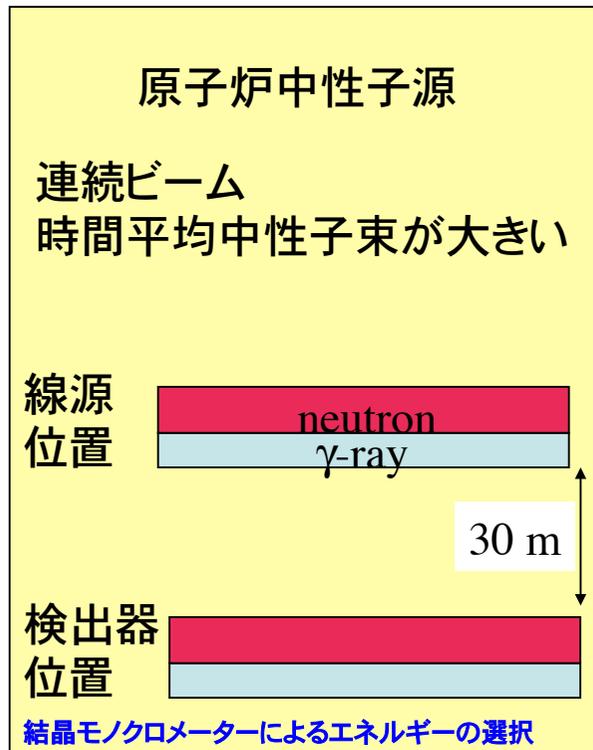
中性子散乱実験装置（加速器）

加速器中性子源ではシンクロトロン加速器から入射する陽子ビームの周期に対応したパルス中性子を用いる。パルス中性子は発生時刻が分かっているため、カウンター位置に中性子が到達した時刻を調べれば中性子の速度（波長）が分かる。中性子が飛行している時間を調べる方法なのでTOF(Time of Flight)法（飛行時間法）と呼ぶ。

定常中性子源では中性子は連続ビームとして得られるのに対して、パルス中性子源では1～100 μ 秒程度の幅の中性子が得られる。一般にパルス中性子源の中性子強度は時間平均では定常中性子源よりも弱いですが、パルスのピーク位置での強度は強い。弾性散乱実験の場合には時間とともに波長スキャンができるので、1つの散乱角 2θ である運動量遷移 Q の範囲のデータを取得できる。また非弾性散乱実験の場合にもTOFを用いることによって、広い運動量-エネルギー空間を一度に測定することができる。

また中性子カウンターは γ 線をバックグラウンドとして感じるが多いため γ 線をいかに落とすかがデータの質を上げるために重要だが、パルス中性子源の場合はカウンター位置における中性子と γ 線の到達時刻の違いからデータとバックグラウンドを見分けることができる。従ってパルス中性子源の実験装置の方がS/N比が良い場合が多い。

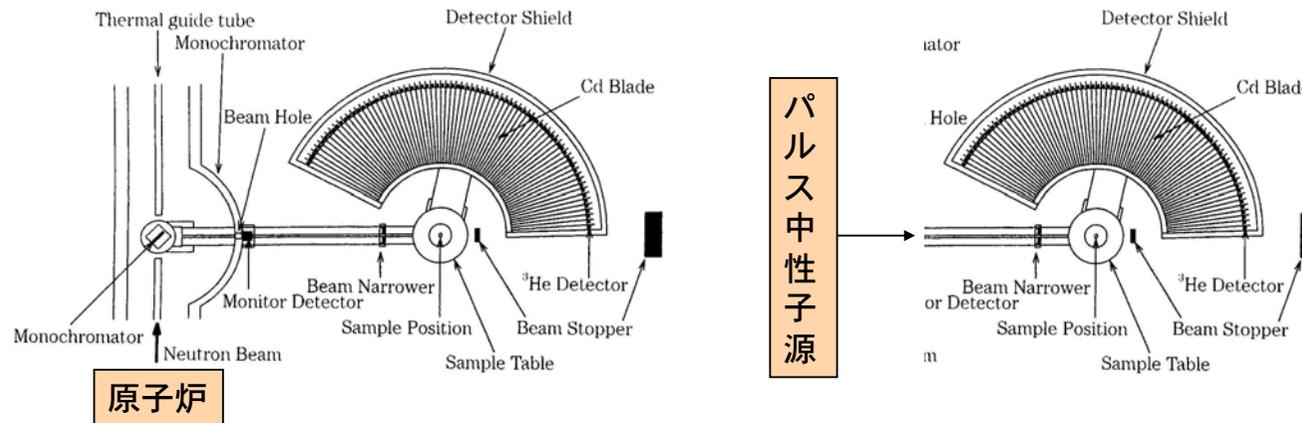
原子炉と加速器の違い



回折実験装置の違い

パルス中性子と定常中性子 – 回折実験(弾性散乱)

$$\lambda = 2d \sin \theta$$



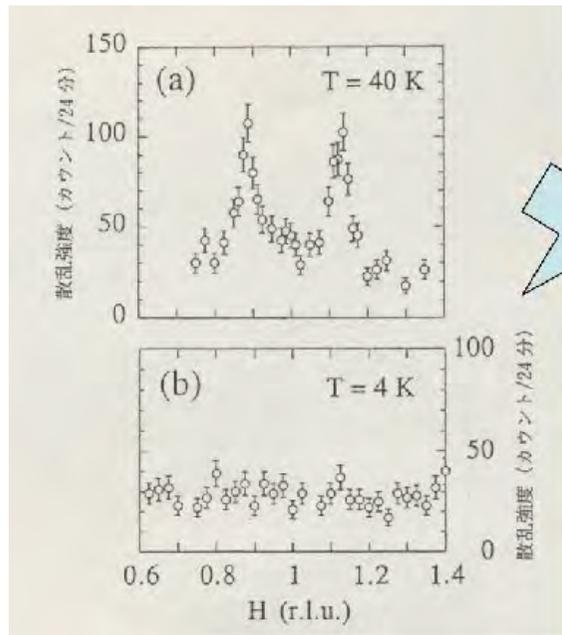
モノクロメーターで波長を選んで試料に入射し散乱角 2θ をスキャン。

連続波長を試料に入射し飛行時間を分析して波長をスキャン。散乱角 2θ もスキャン可。

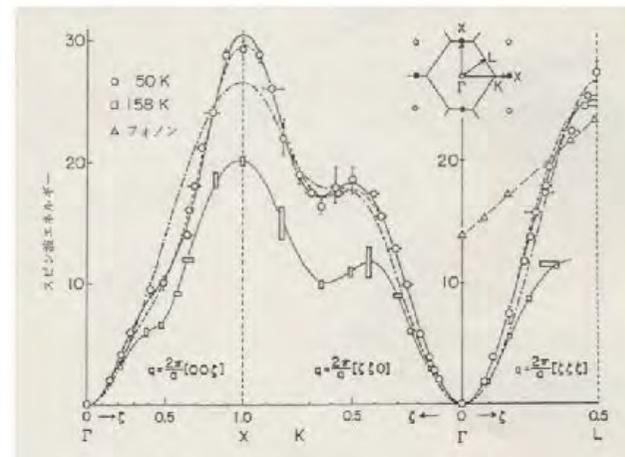
$$\lambda = h/mv = (h/mL)t$$

定常中性子源での非弾性散乱

定常中性子源（原子炉）における分散関係の測定

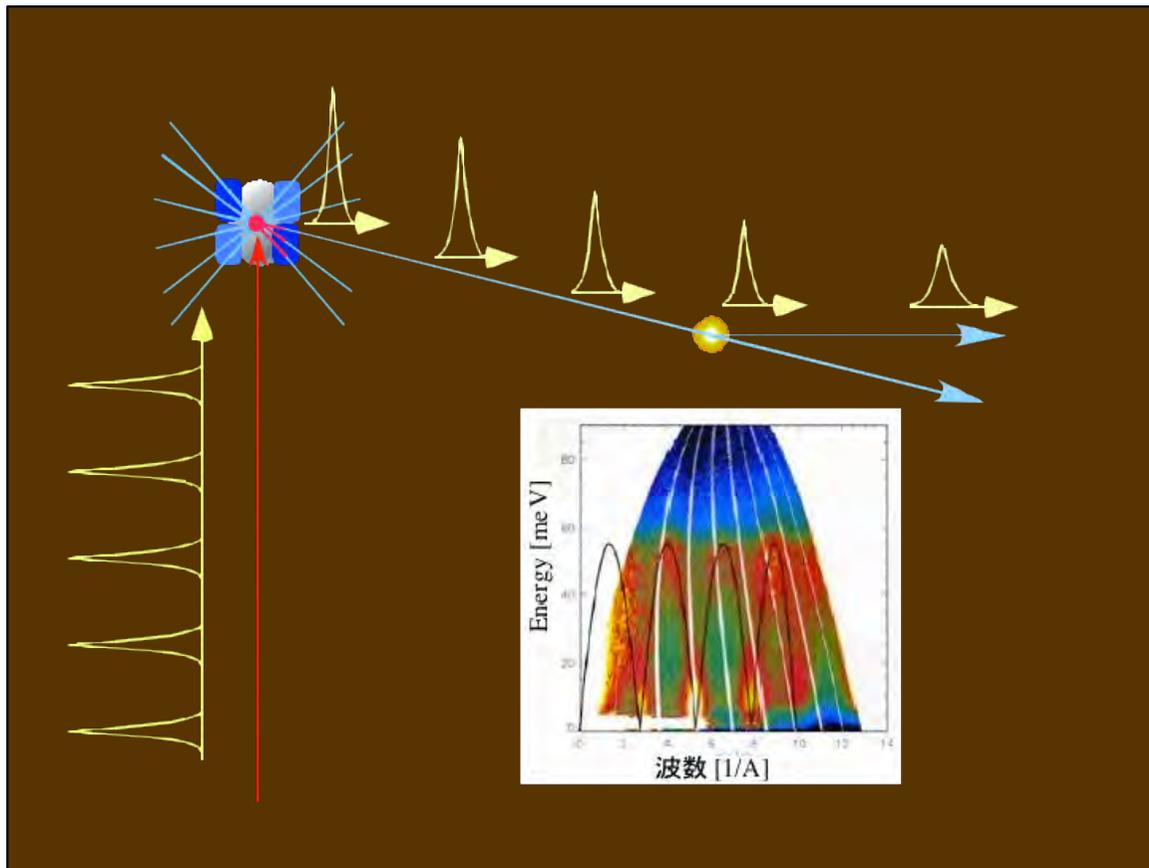


たくさん測定して繋ぎ合わせる



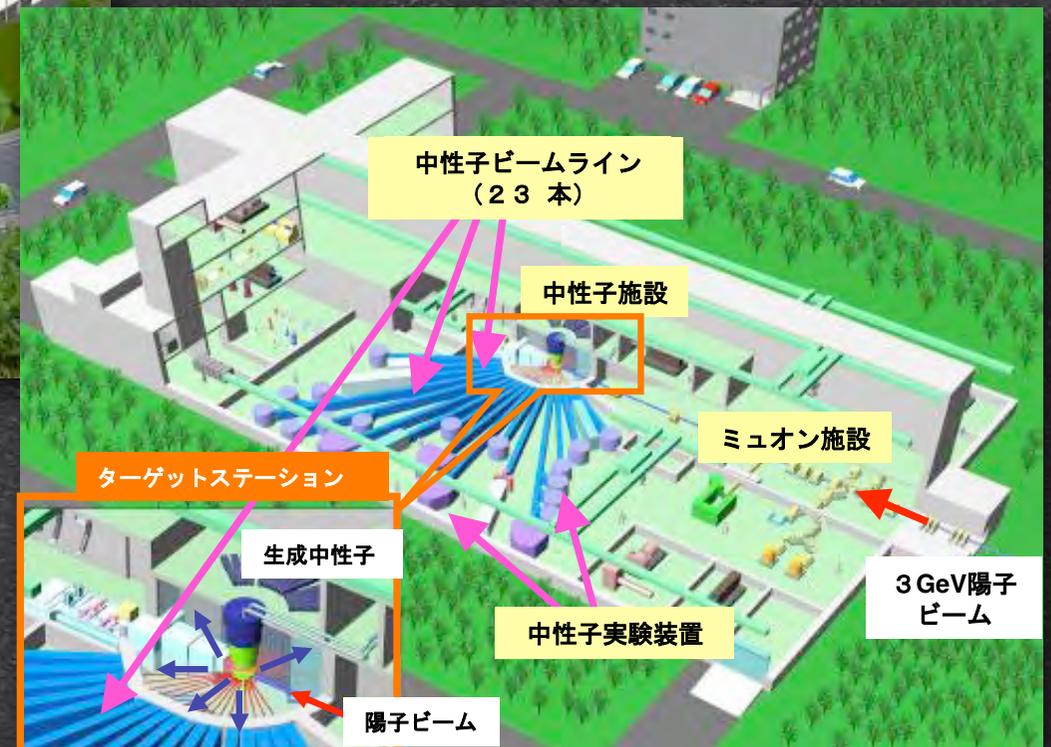
パルス中性子源での非弾性散乱

パルス中性子源（加速器）における分散関係の測定

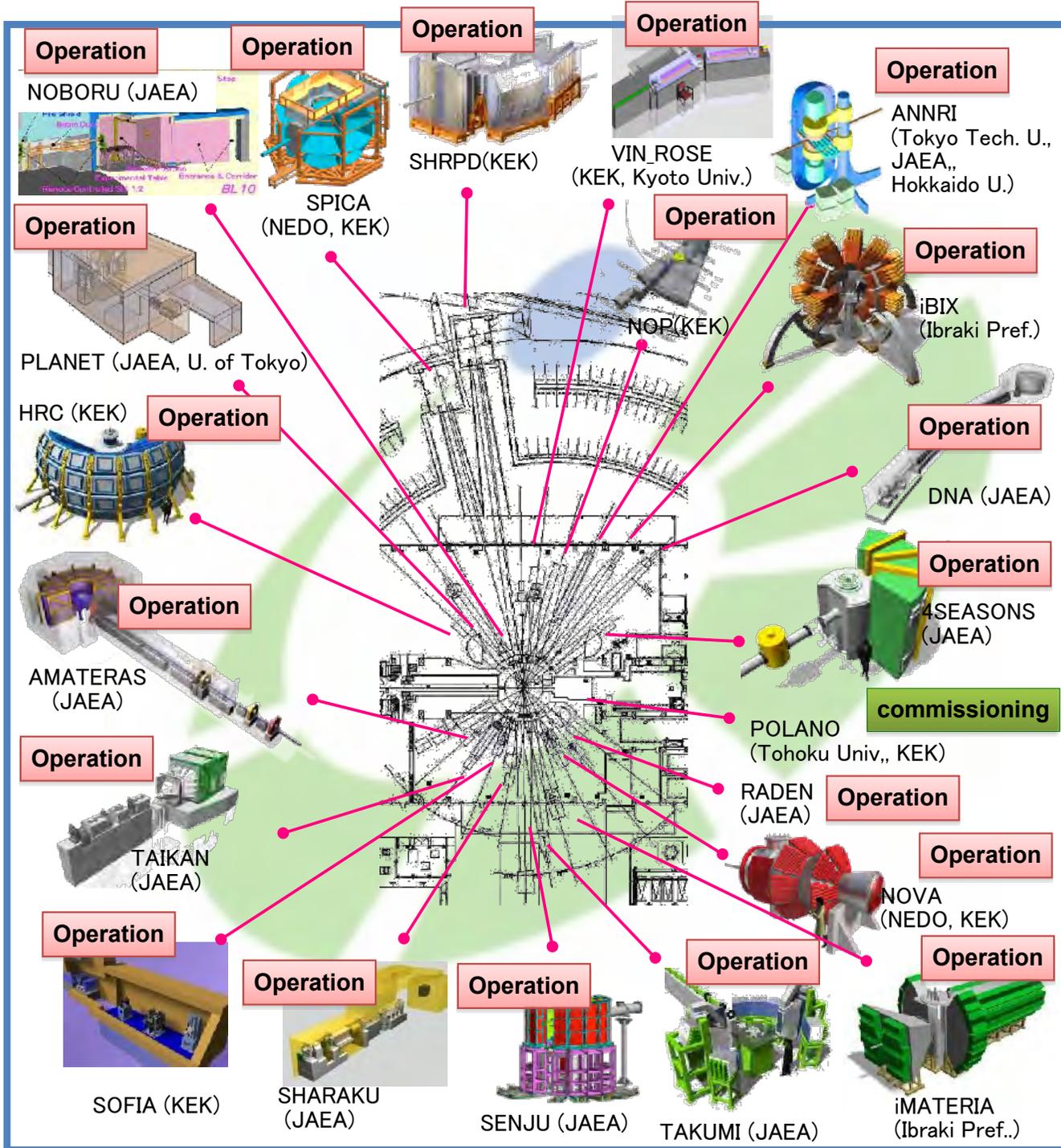


波数-エネルギー空間の共同分布を一度に測定できる

物質生命科学実験施設



MLF中性子実験装置群



■ 中性子ビーム孔: 23

■ 利用中: 21 (2020)

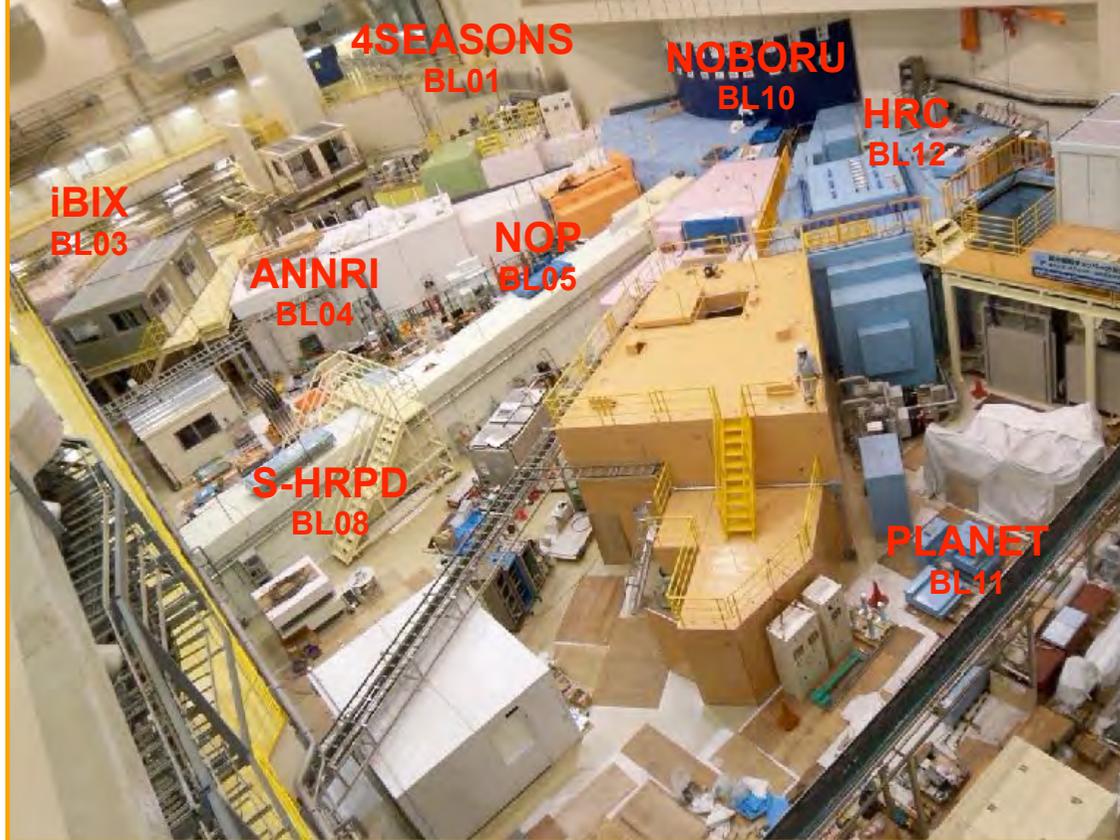
VIN-ROSE (NSE): 2017BよりMIEZEのみ一般利用開始

Schematic top view of VIN_ROSE

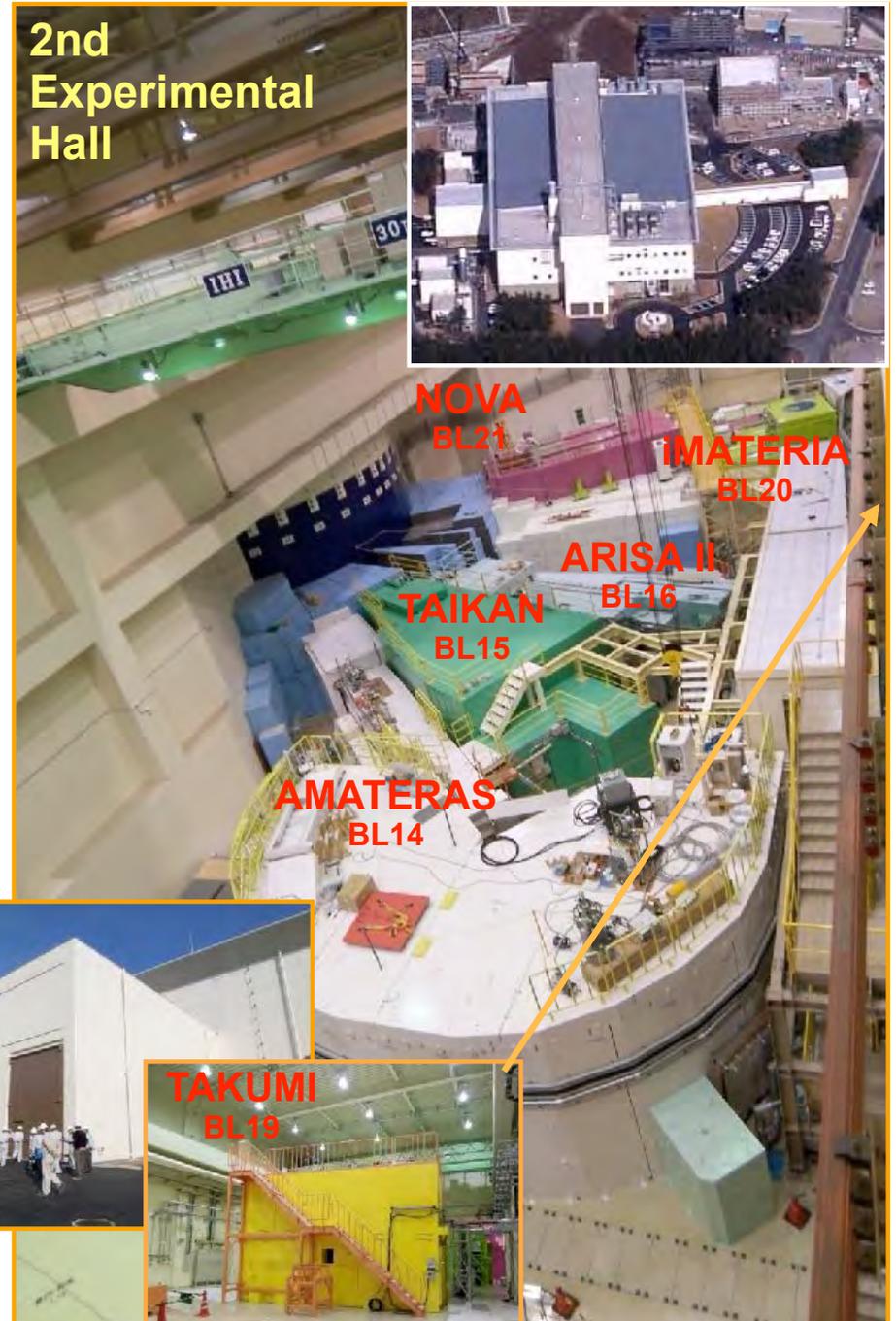
POLANO (Polarization Analysis Spect.)

2019Aより一部利用開始

1st Experimental Hall



2nd Experimental Hall



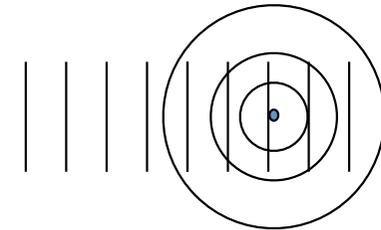
中性子散乱

中性子は原子核との核力相互作用と電子の磁気モーメントとの磁気相互作用によって散乱される。

2.1 核散乱

入射中性子を無限遠から飛来する運動量 p の粒子と考える。衝突係数 r を持つ古典粒子の原点周りの角運動量は量子化されているとすれば、

$$\begin{aligned} r_n &= \frac{n\hbar}{p} = \frac{n\hbar}{mv} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ &= \frac{n\lambda}{2\pi} \end{aligned} \quad (2.1)$$



$\lambda = 1 \text{ \AA}$ とすると、

$$r_n \simeq 2 \times 10^{-11} n (\text{m})$$

一方核の大きさ（核ポテンシャルの到達範囲）は $10^{-15} (\text{m})$ 。よって $n=0$ の角運動量を持つ中性子（S波）のみ散乱される、と考えて良い。よって散乱波も散乱体である核を中心としたS波

$$\varphi_s = \frac{b}{r} e^{ikr} \quad (2.2)$$

(b は散乱振幅)であることを意味する。

一般に弱いポテンシャル V による波動の散乱を取り扱う上で最も基本的なBorn近似によると、散乱の微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} |\langle f|V|i\rangle|^2 \quad (2.3)$$

ここで $|i\rangle$, $|f\rangle$ はそれぞれ入射波と散乱波の波動関数で、

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_i r} \\ |f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_f r} \end{aligned} \quad (2.4)$$

上記の中性子のS波散乱の事情をBorn近似で都合よく説明するためには、1個の原子核による有効散乱ポテンシャルを

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_N) \quad (2.5)$$

(\mathbf{r}_N は中性子の座標)と表現しておけば良い。このように表現された有効散乱ポテンシャルを「フェルミ擬ポテンシャル」と呼ぶ。

2.2 結晶による散乱

i 番目の原子核の位置座標を \mathbf{r}_i とすると、

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i b_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N) \quad (2.6)$$

従って、

$$\begin{aligned} \langle f|V|i \rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \int \sum_i b_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_N) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}_N} d\mathbf{r}_N \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i b_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{r}_i} \end{aligned} \quad (2.7)$$

よって散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{i,j} b_i b_j e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{ij}} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i, \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$$

結晶においては原子は周期的に並んでいるので、

$$\mathbf{r}_i = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c} \quad (x, y, z \text{は整数}) \quad (2.9)$$

と書ける。よって結晶からの散乱は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = Nb^2 \sum_h \delta(\mathbf{K} - \mathbf{Q}_h) \quad (\mathbf{Q}_h \text{は逆格子ベクトル}) \quad (2.10)$$

2.3 非弾性散乱

散乱体となっている結晶は運動の自由度を持っているので、エネルギー保存則は中性子+散乱体の全系で成り立っている。

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2}{2m}(k_f^2 - k_i^2) = \hbar\omega \quad (2.11)$$

ここで E_i , E_f はそれぞれ結晶の始状態と終状態のエネルギー。 $\hbar\omega$ は中性子の散乱によるエネルギー損失である。エネルギーのやり取りがある場合の散乱断面積は運動量-エネルギー空間でのスペクトルとして表される。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \left| \langle \mathbf{k}_f, f | V | \mathbf{k}_i, i \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_f + E_i) \quad (2.12)$$

ここで $|\mathbf{k}_i, i\rangle$ と $|\mathbf{k}_f, f\rangle$ はそれぞれ全系の始状態と終状態を意味する。ここで

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega \quad (2.13)$$

等を用いると、

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \int \sum_{ij} \overline{b_i b_j} \langle i | e^{-K \cdot r_i} | f \rangle \langle f | e^{K \cdot r_j} | i \rangle e^{i(\frac{E_f}{\hbar} - \frac{E_i}{\hbar})t} e^{i\omega t} dt \quad (2.14)$$

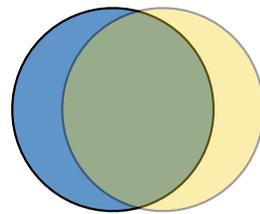
(バーは結晶の始状態に対する熱平均) となる。ここで中性子が感じる粒子密度関数

$$\rho_N(\mathbf{r}, t) = \sum_i b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (2.15)$$

を定義すると、散乱断面積は

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \int \langle \rho_N(\mathbf{r}, 0) \rho_N(\mathbf{r}', t) \rangle e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\omega t} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' dt \quad (2.16)$$

すなわち中性子の散乱断面積は、散乱体の粒子密度分布の場所と時間に関する二体相関関数のFourier変換と考えることができる。



t=0 t=t'