

量子ビームでさぐるソフトマターの物性

中性子と中性子散乱

瀬戸秀紀

CROSS

High Energy Accelerator Research Organization

中性子とは？

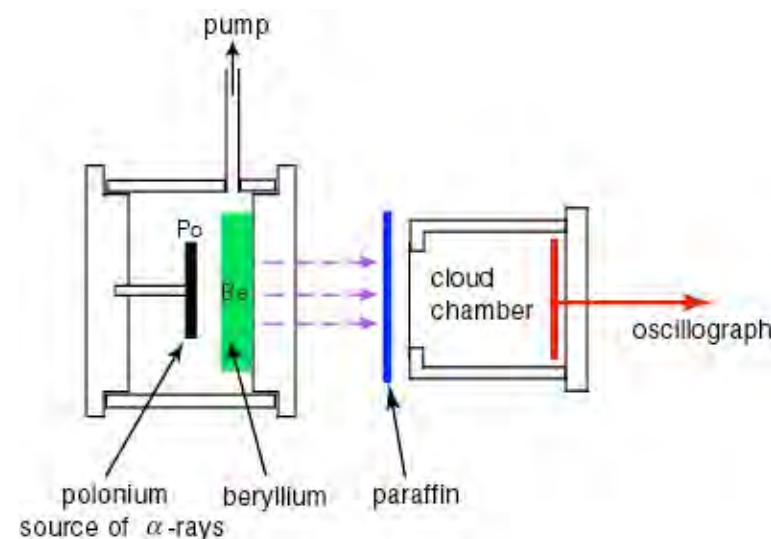
電氣的に中性で準安定なバリオン

(3つのクォークによるハドロン)

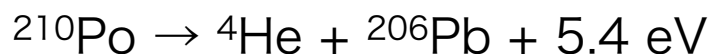
質量	$m = 1.674927 \times 10^{-27} \text{kg}$ (1.00866 a.u.)
スピン	$s = 1/2$
磁気能率	$\mu_n = -1.913\mu_N = -0.966236 \times 10^{-26} \text{ J/T}$
寿命	$t = 886.7 \pm 1.9 \text{ s}$
波動関数動径	$r = 0.7 \text{ fm}$
クォーク	udd



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

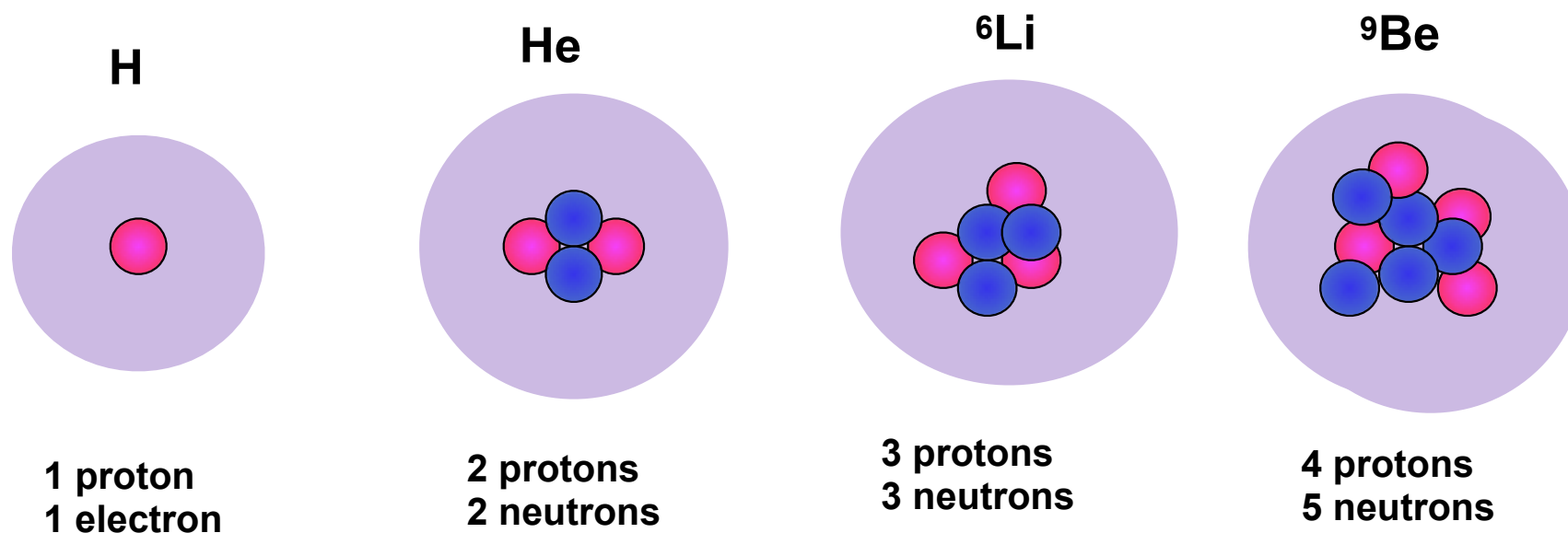
マンハッタン計画から中性子束の利用へ

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

核子としての中性子

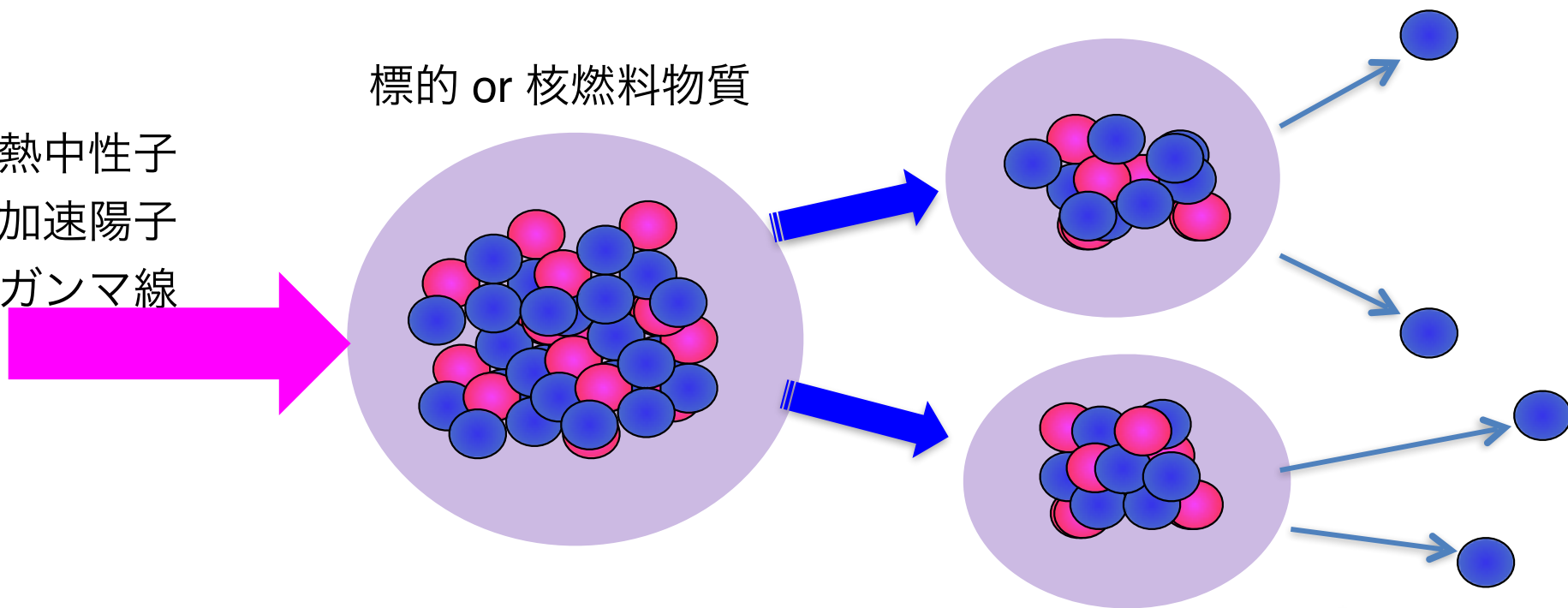


${}^{235}\text{U}$: 陽子数95/中性子数140 → 中性子が45 個多い

中性子をつくる

- 熱中性子
- 加速陽子
- ガンマ線

標的 or 核燃料物質



中性子の発生！

粒子性と波動性

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

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

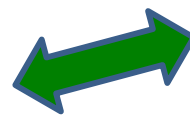
より次の表が得られる。

E(meV)	T(K)	$\lambda(\text{\AA})$	
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

中性子の速度

冷中性子

$\lambda \sim 10 \text{ \AA} (\sim 0.8 \text{ meV})$,
 $v \sim 400 \text{ m/s} \sim 1400 \text{ km/h}$



超音速旅客機: マッハ1~2



熱中性子 ($\sim 300\text{K}$)

$\lambda \sim 1 \text{ \AA} (\sim 80 \text{ meV})$
 $v \sim 4 \text{ km/s}$

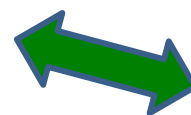


人工衛星: 3.1 km/s
(高度 $36,000 \text{ km}$)



熱外中性子

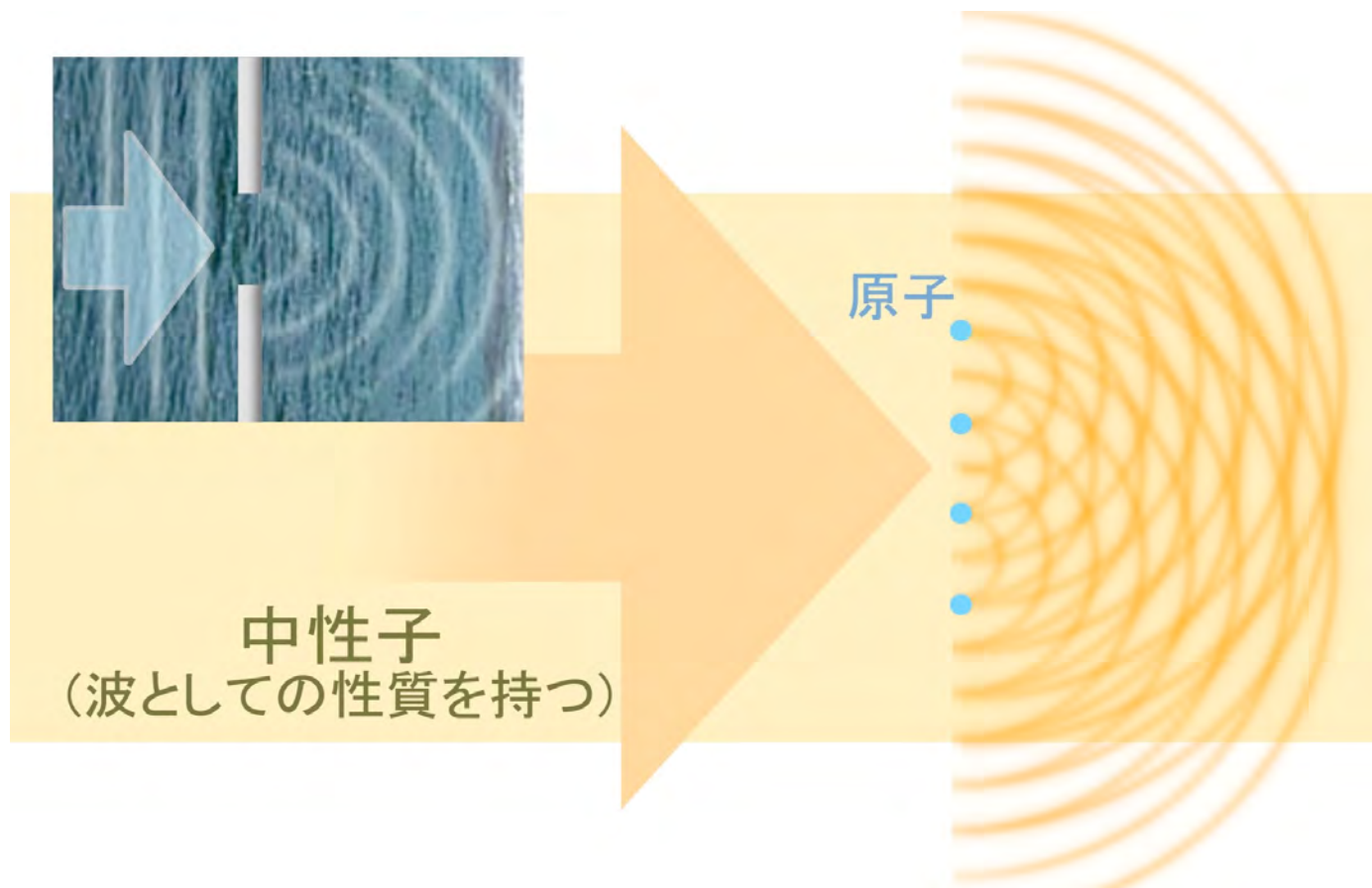
$\lambda \sim 0.1 \text{ \AA} (\sim 8 \text{ eV})$
 $v \sim 40 \text{ km/s}$



隕石 $\sim$ マッハ100



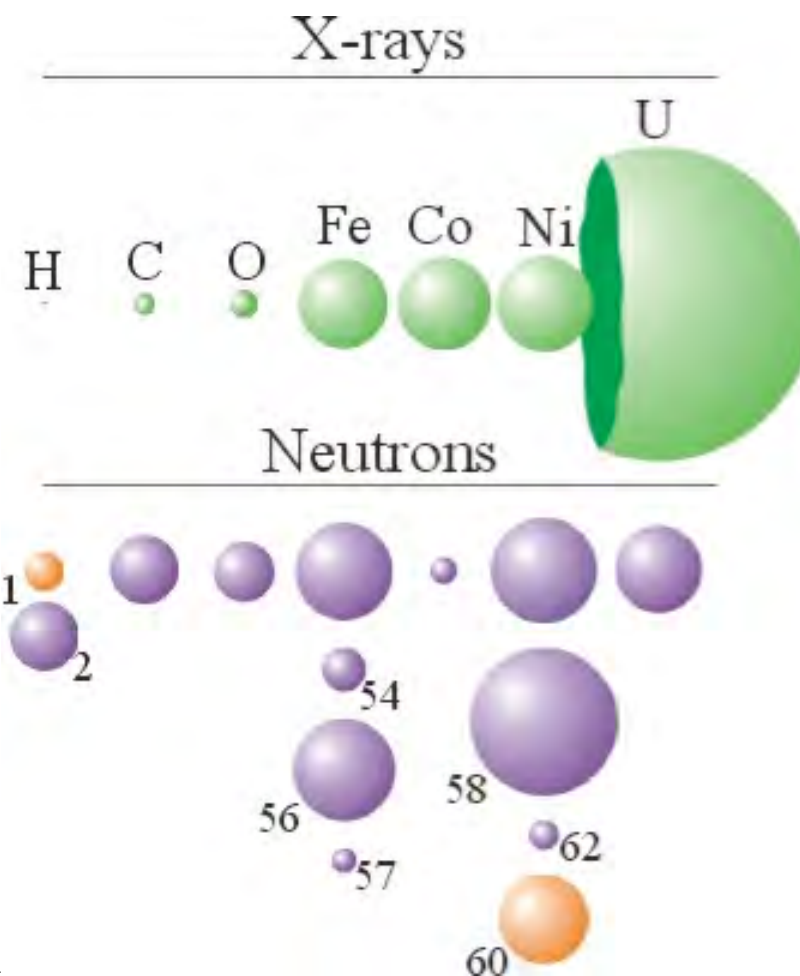
中性子散乱の原理



X線と中性子

X線：電子によって散乱される

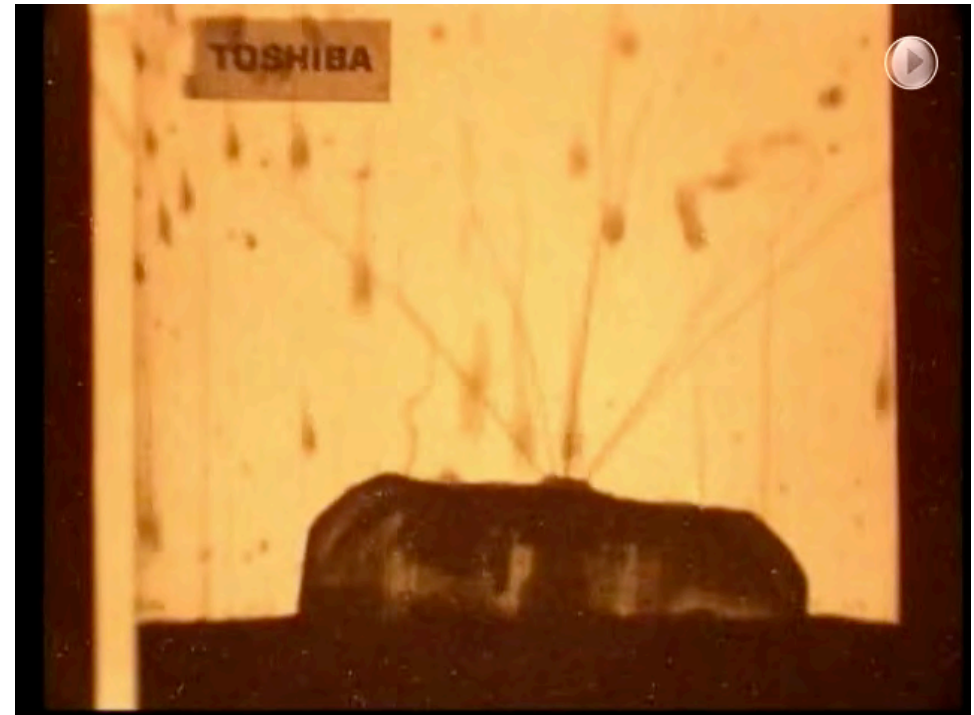
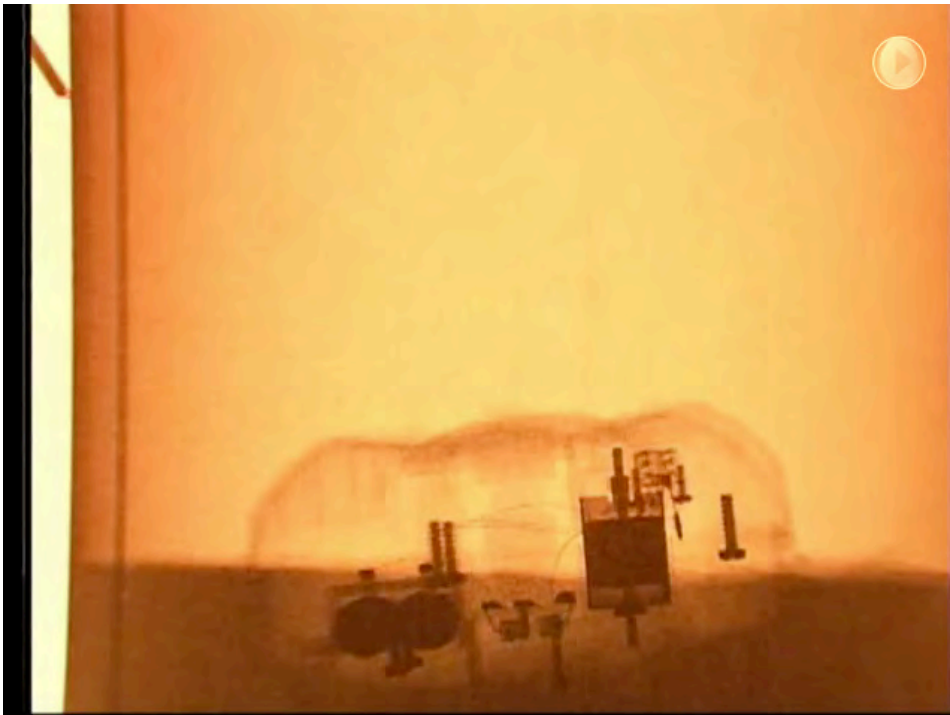
原子番号が大きいほど散乱が強い
軽い原子は見えにくい



中性子：原子核によって散乱される

散乱の強さは原子番号順になっていない
同位体は散乱能が違う

見え方の違い

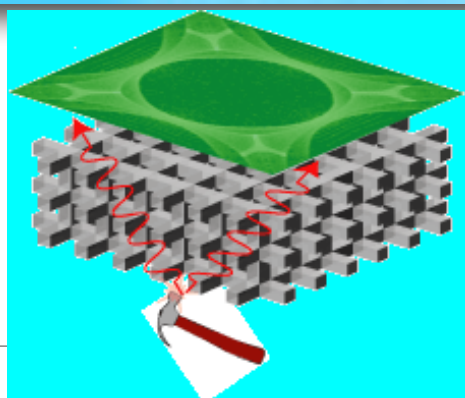
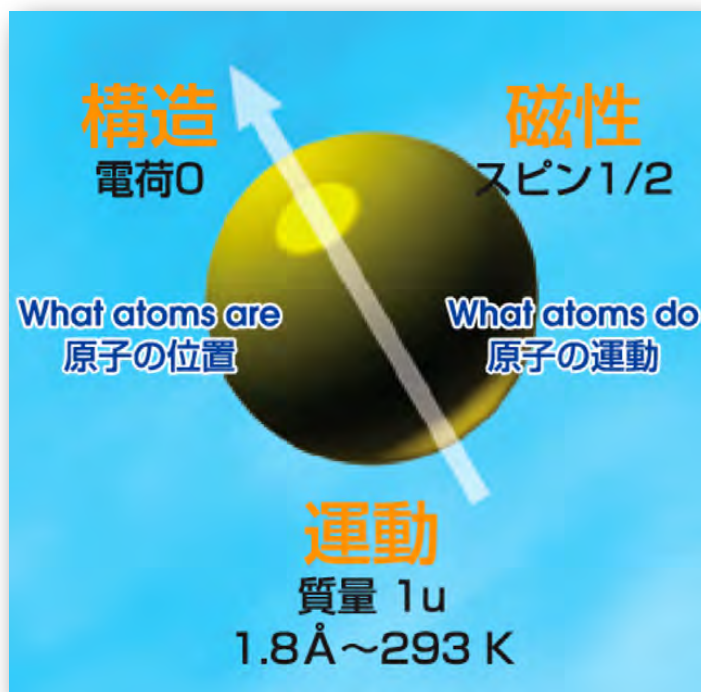
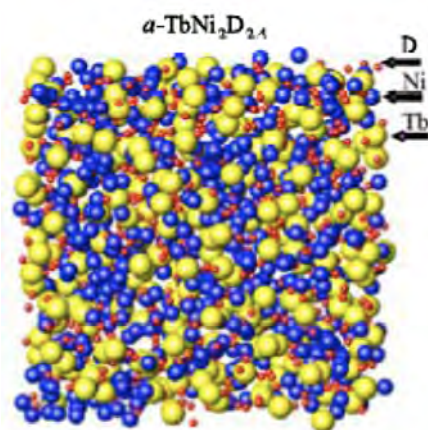


中性子散乱の特徴

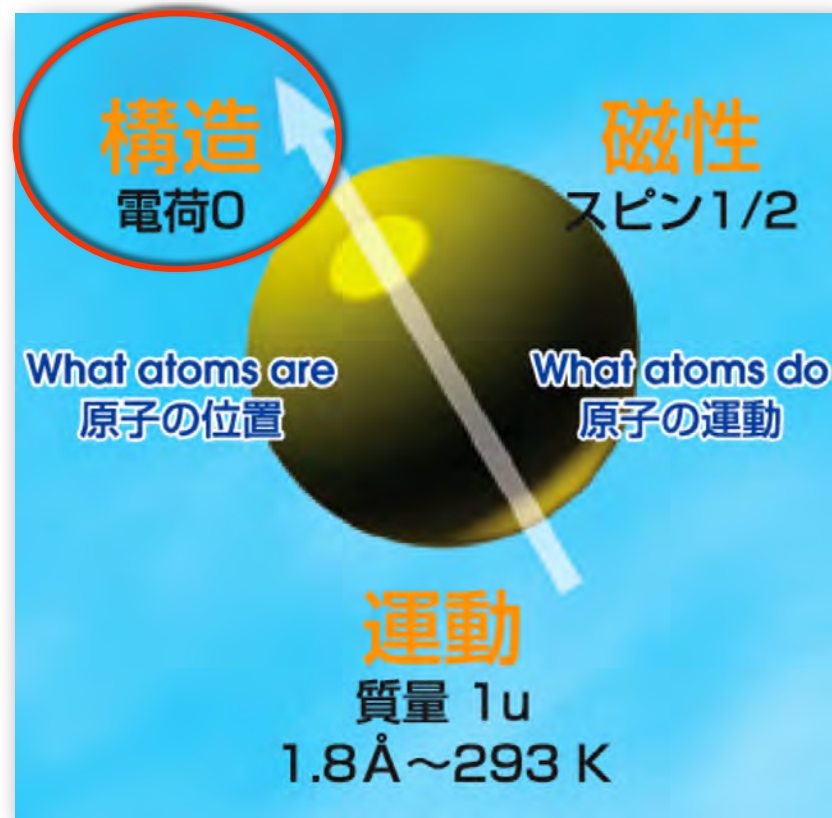
回折により原子スケールからサブ μm スケールの構造と運動状態を調べる実験手法

- ① 水素等の軽元素に強く、同位元素置換により特定の原子の構造を決めることができる
- ② 磁気構造を精密に決めることができる
- ③ 原子や原子集団の運動状態が分かる
- ④ 透過度が高く試料環境の自由度が高い

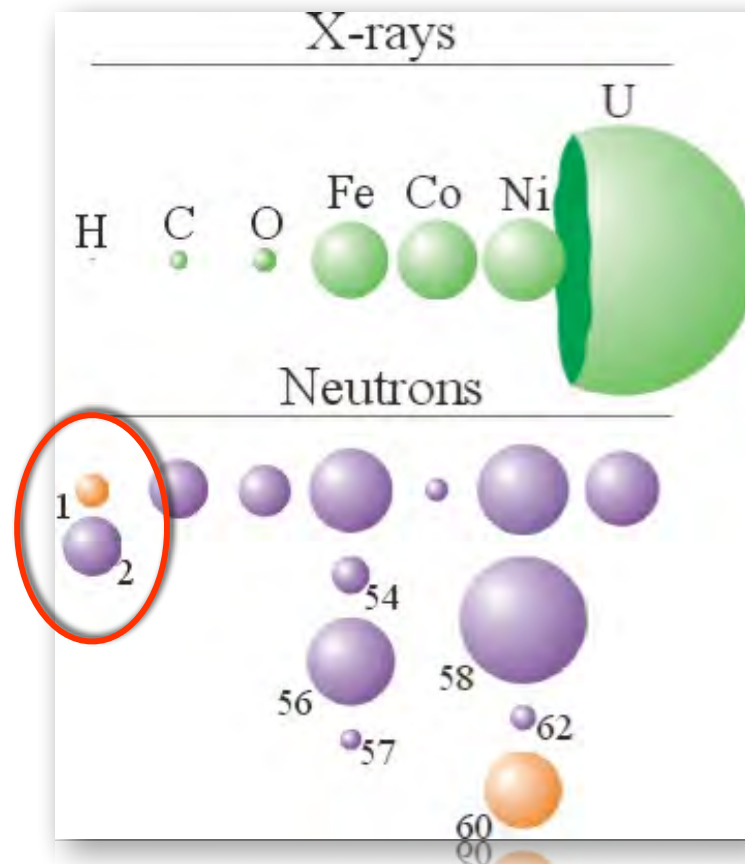
中性子の特徴を活かした測定



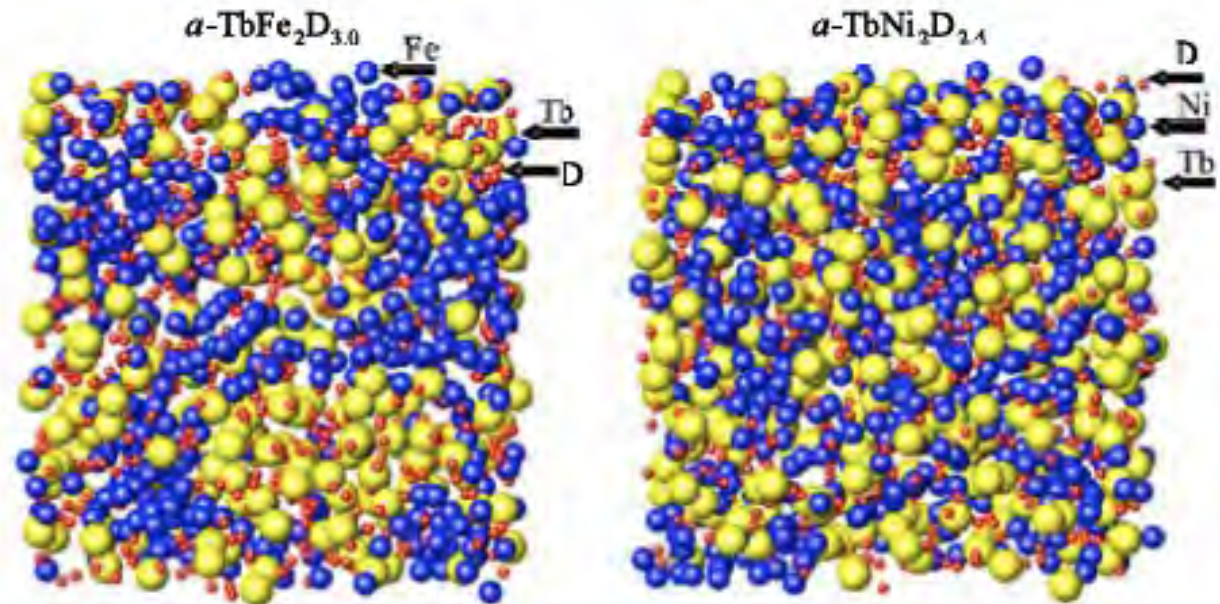
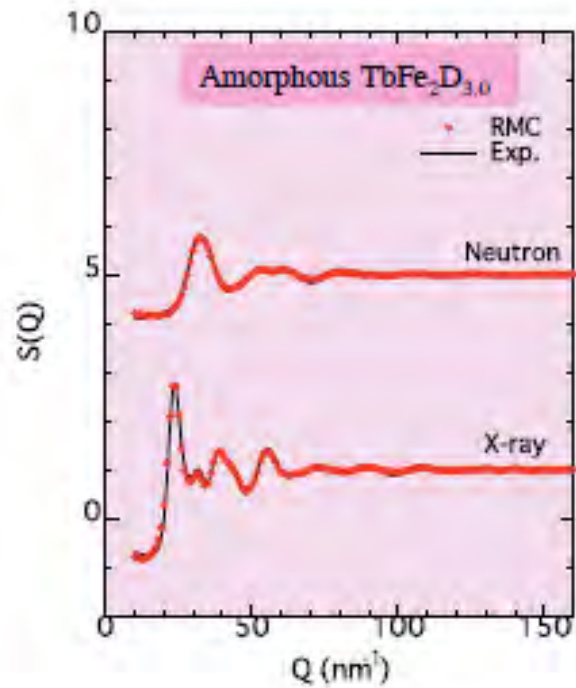
0:電荷ゼロ



軽元素を見る



例：水素貯蔵合金



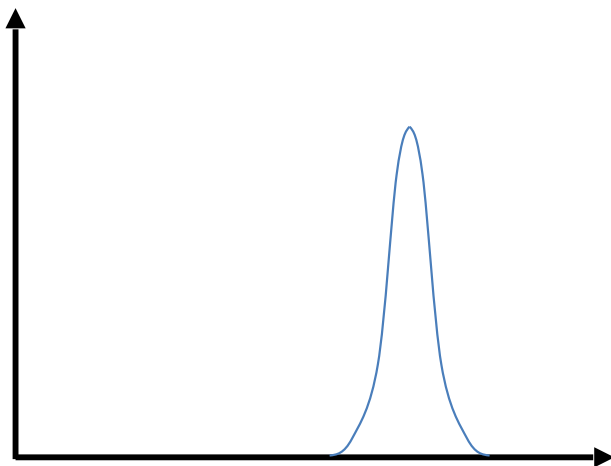
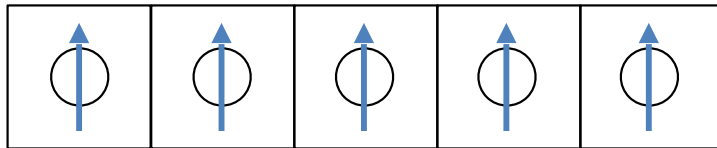
Separation of Fe and Tb atoms

$1/2$: スピン $1/2$

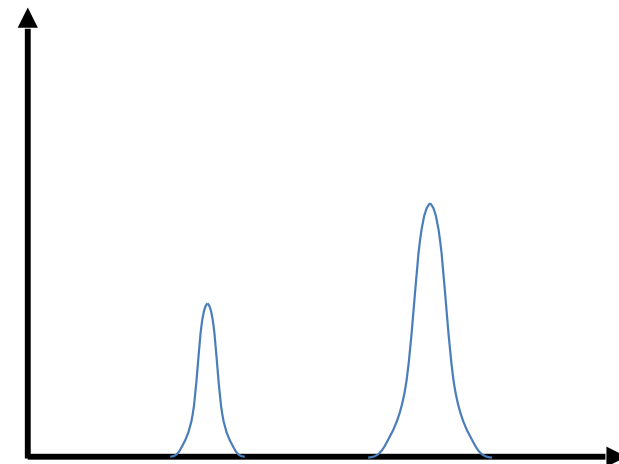
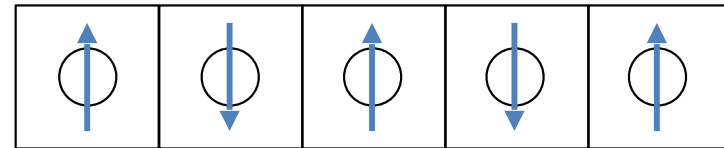


例：磁氣散乱

強磁性体



反強磁性体

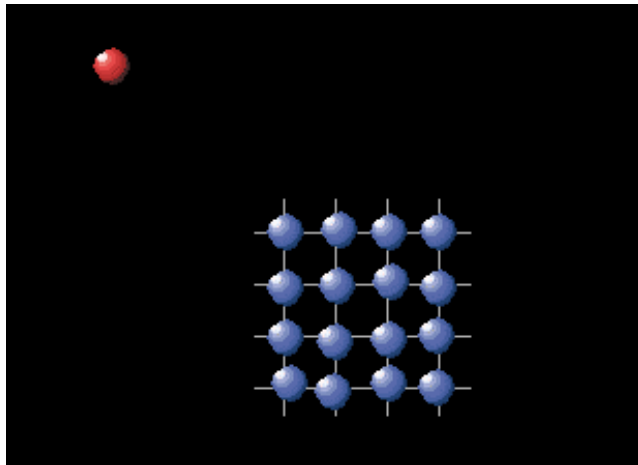


1:質量 $\sim 1u$



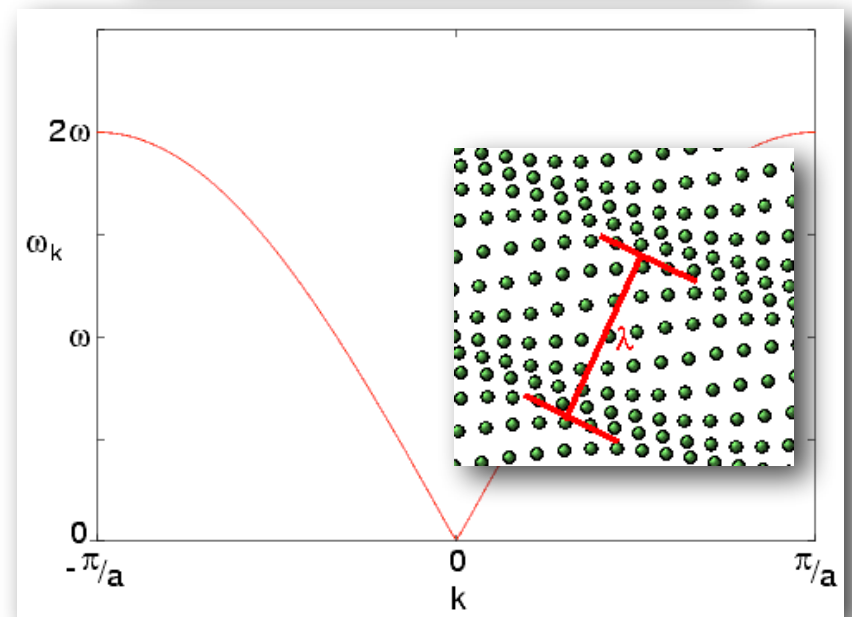
例: 非弾性散乱

散乱前後の中性子のエネルギー変化を調べることで、原子・分子や分子集団の運動状態が分かる。



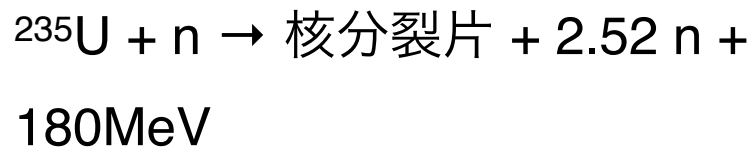
$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{\{ij\}(nn)} (x_i - x_j)^2$$

$$\omega_k = \sqrt{2\omega^2(1 - \cos(ka))}$$

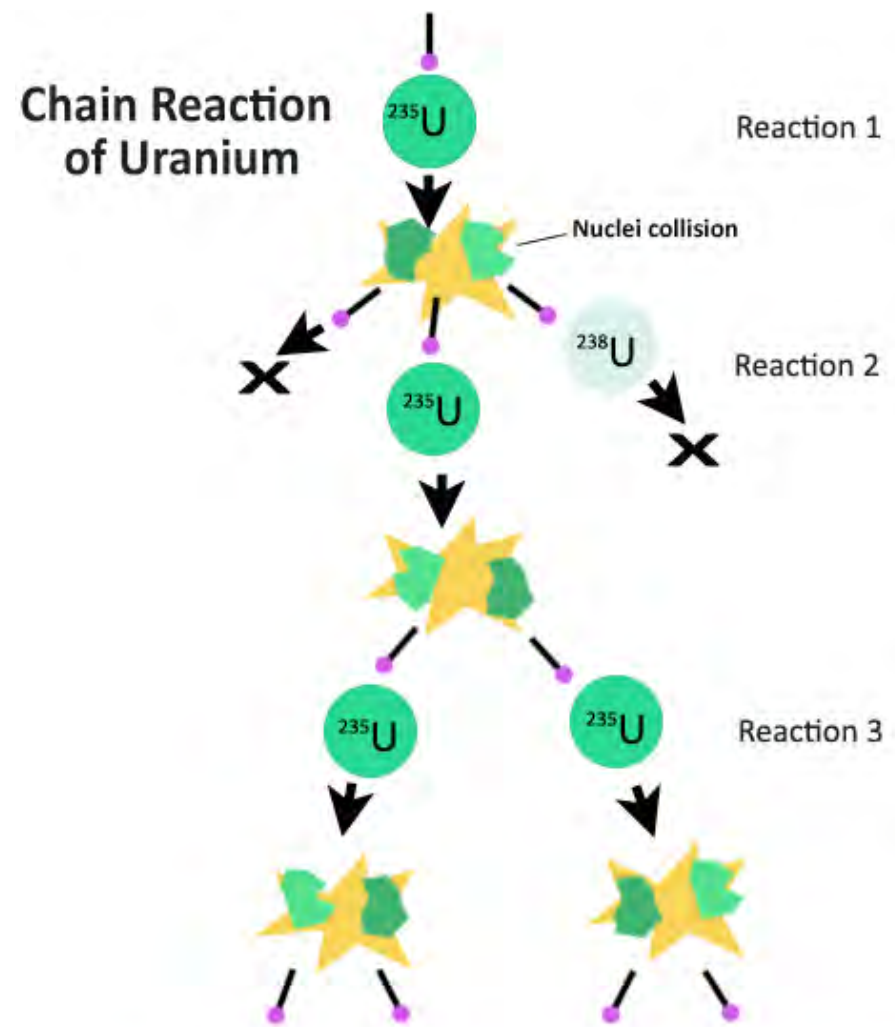


核分裂による中性子の発生

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」



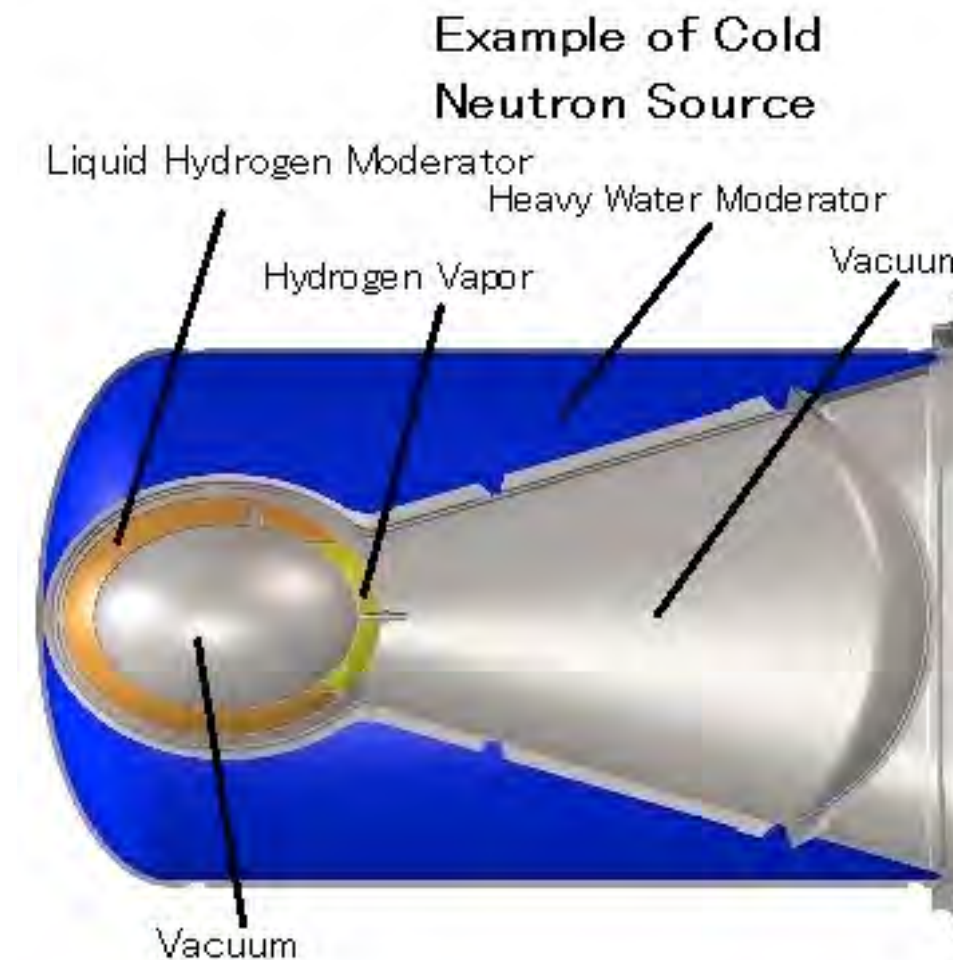
中性子の制御

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）



研究用原子炉

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。

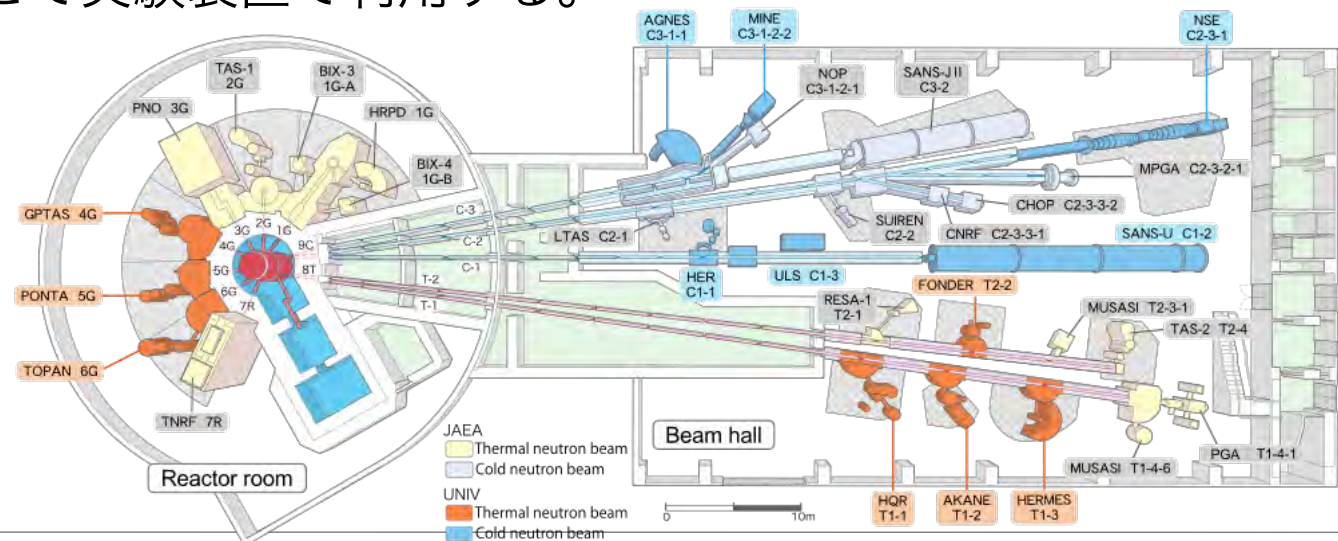


JRR-3

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。

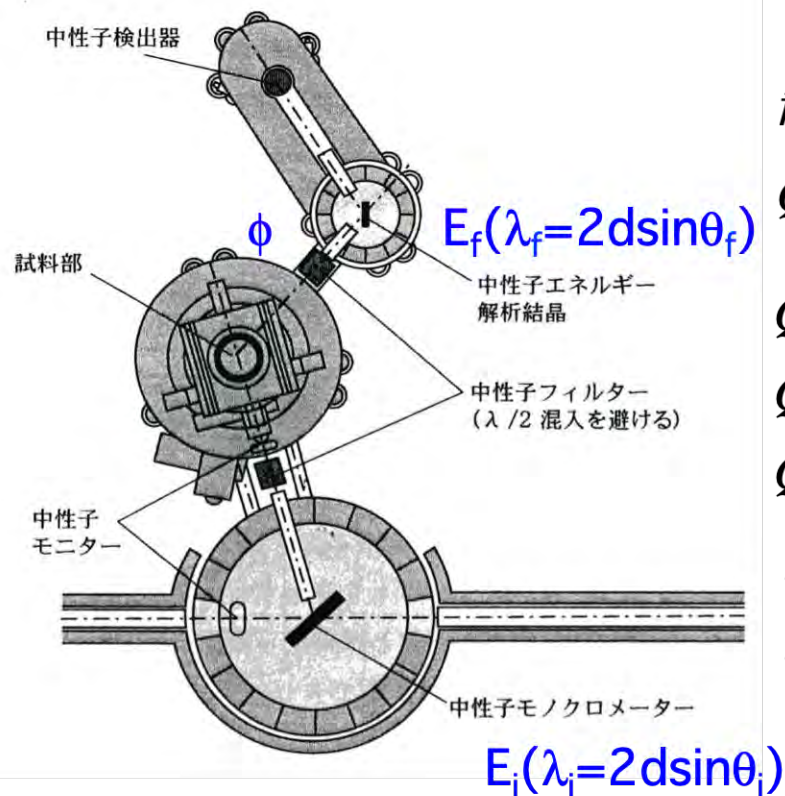
中性子導管は平滑度の高いガラス上にNiなど中性子に対して干渉性散乱断面積が大きく吸収の小さい金属膜を蒸着した鏡面を用いる。

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、速度選別機によって単色化して実験に用いる。



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

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

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

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

$$Q_y = k_f \sin \phi$$

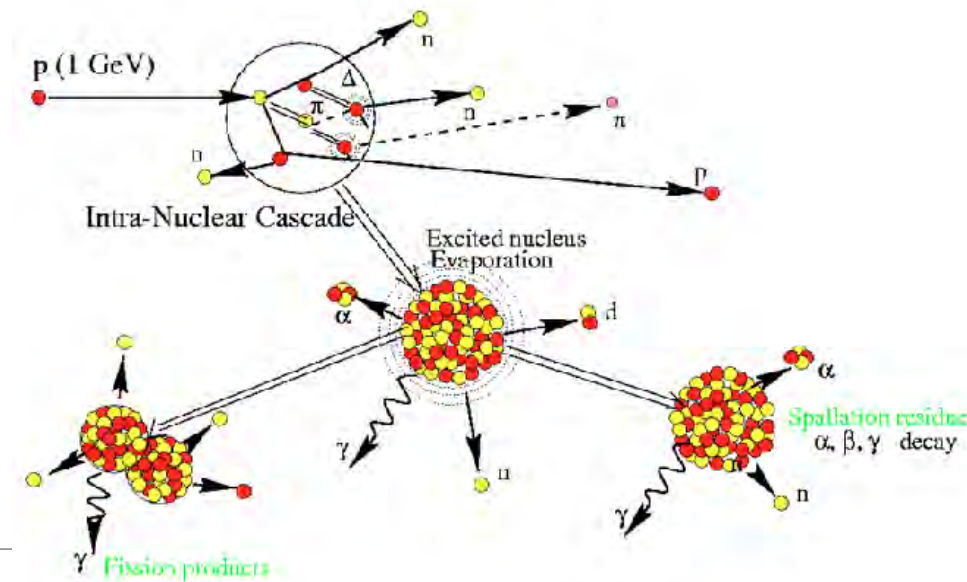
$$q_x = k_i \cos \psi - k_f \cos(\phi - \psi)$$

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

核破碎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碎反応と呼ぶ。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。



シンクロトロン加速器

シンクロトロン：荷電粒子のエネルギーに対応して電磁場を変えて行くことができる加速器。加速空洞で「バンチング」が起きるため、パルス状のビームが得られる。

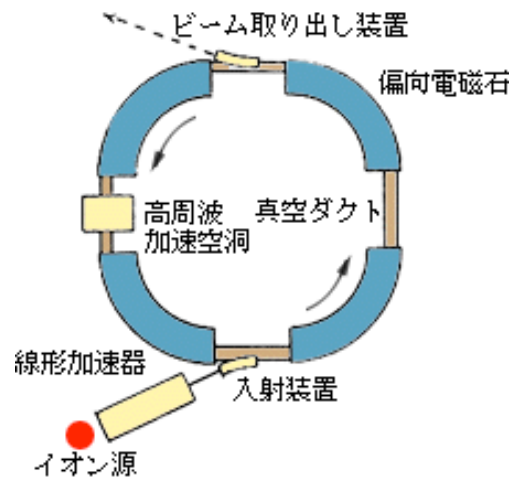
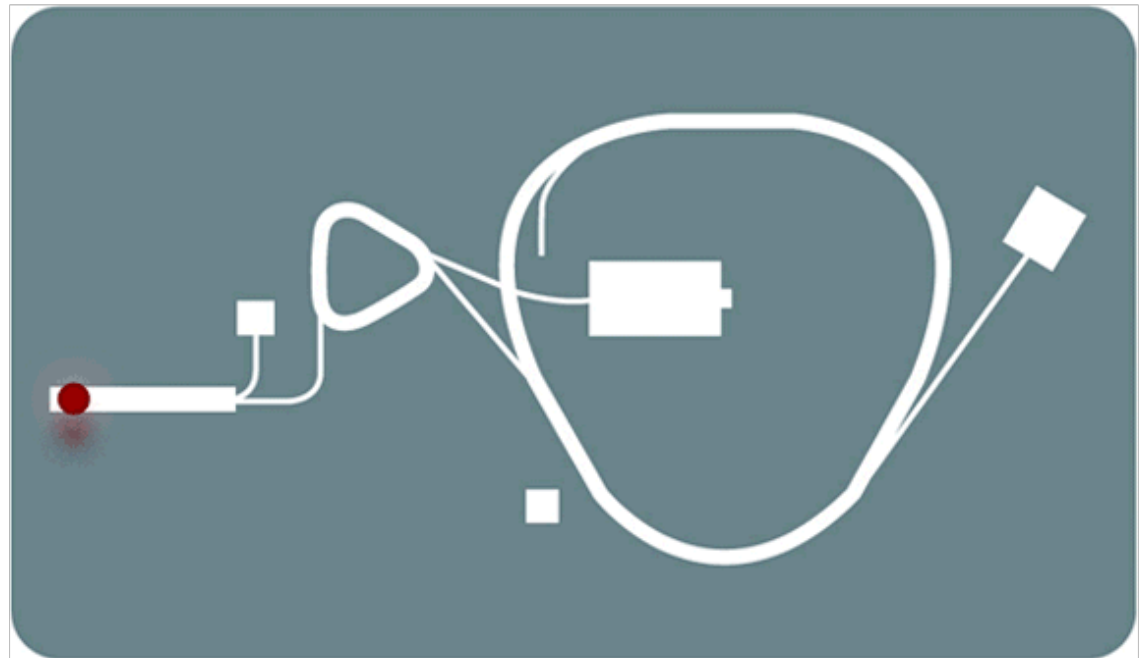
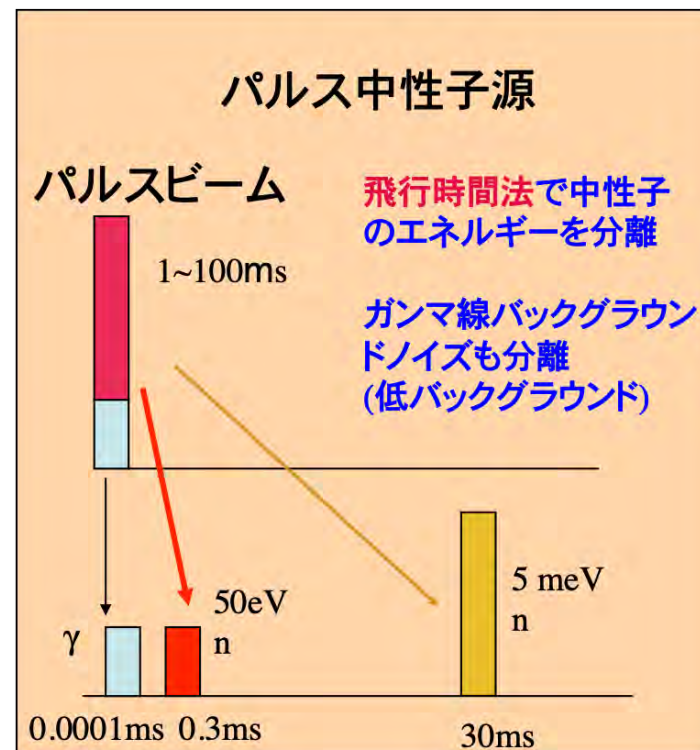
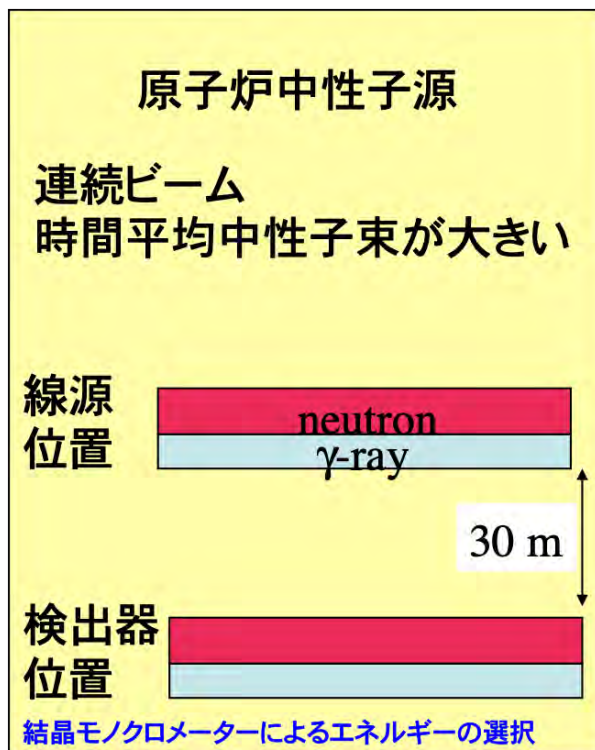


図1.シンクロトロンの構成

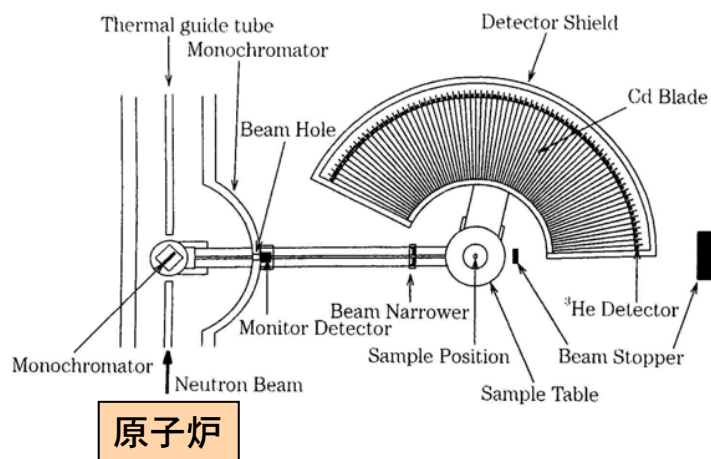


原子炉と加速器の違い



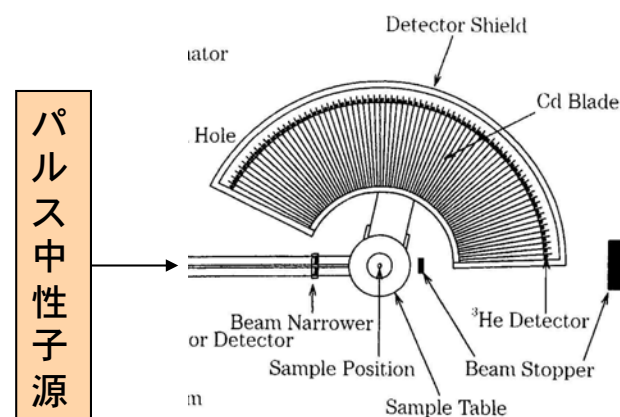
回折実験装置の比較

定常中性子源



結晶を使って特定の波長の中性子を取り出し（単色化し）、試料からの散乱を角度ごとに測定する。

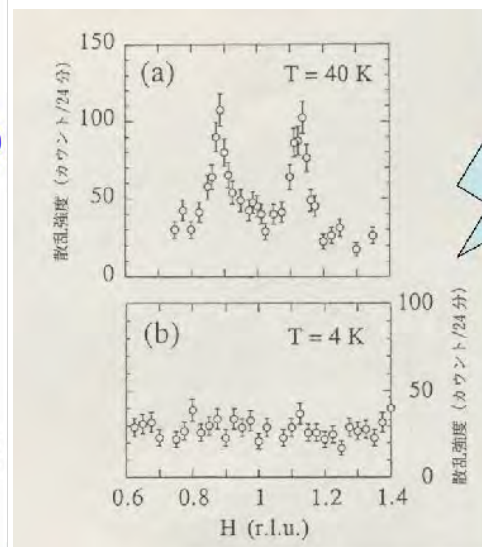
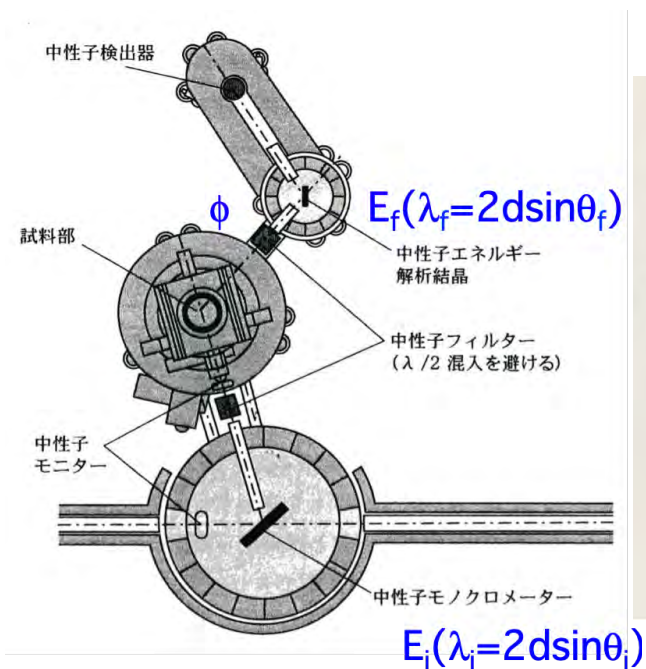
パルス中性子源



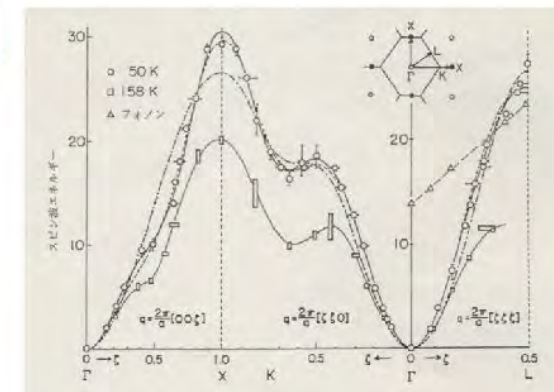
標的で発生した中性子のカウンターに到達するまでの飛行時間(Time-of-flight)を測定し、角度分析も行うことにより、全中性子を用いた解析ができる。

定常中性子源での非弾性散乱

原子炉における分散関係の測定

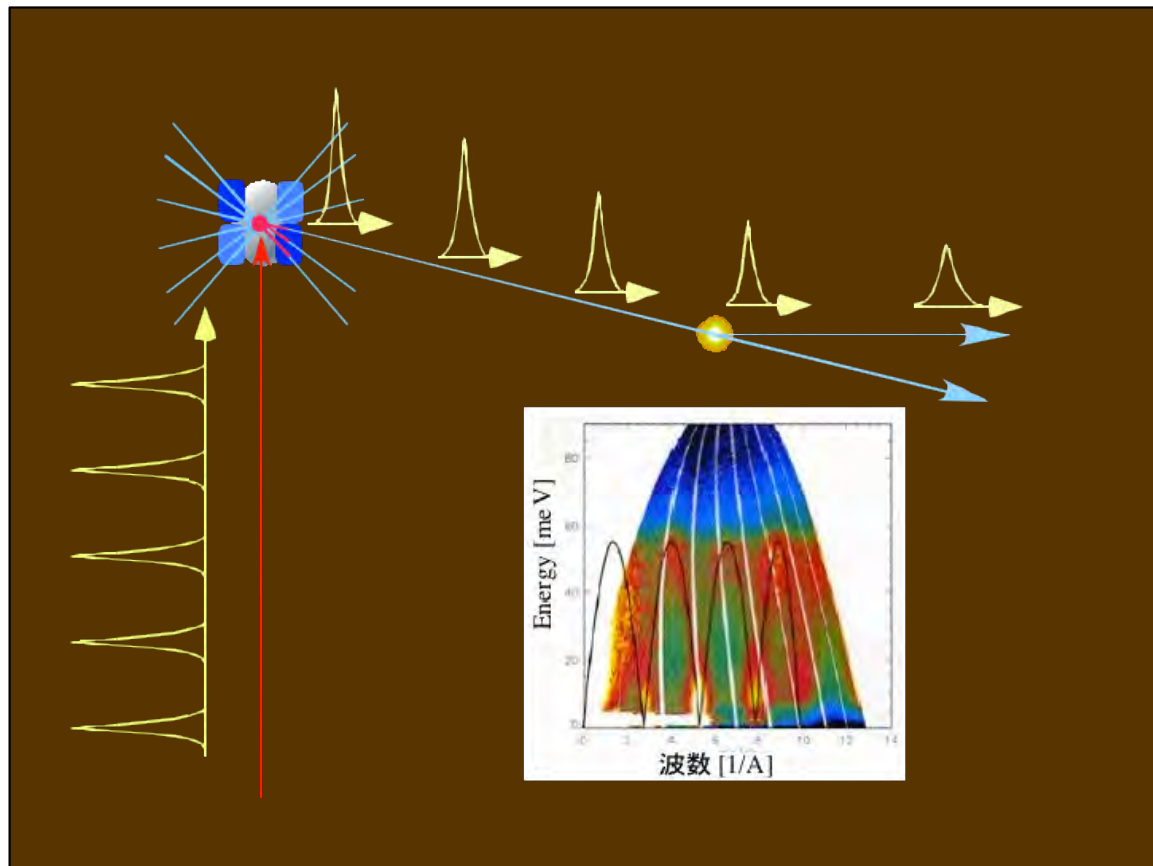


たくさん測定して繋ぎ合わせる



パルス中性子源での非弾性散乱

TOFによる分散関係の測定



波数-エネルギー空間の散乱強度分布を一度に測定できる



Linac

3 GeV シンクロトロン

ニュートリノ

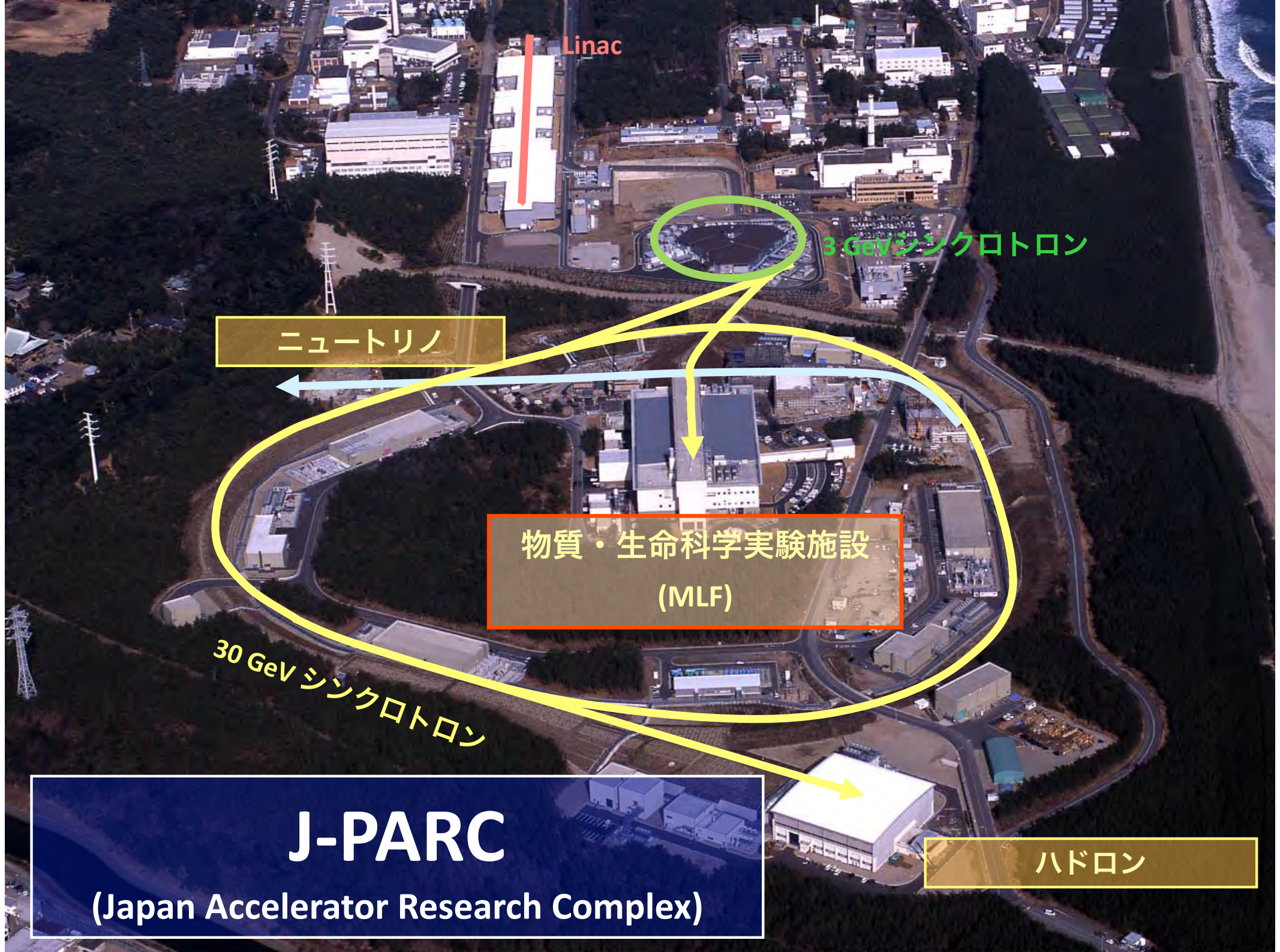
物質・生命科学実験施設
(MLF)

30 GeV シンクロトロン

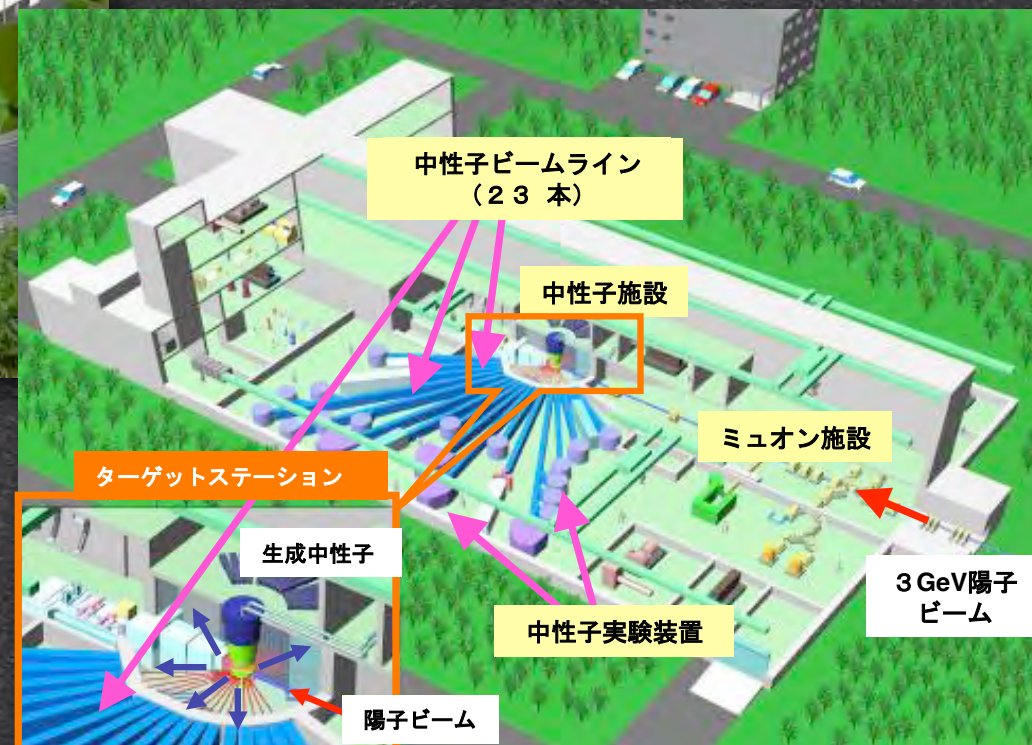
J-PARC

(Japan Accelerator Research Complex)

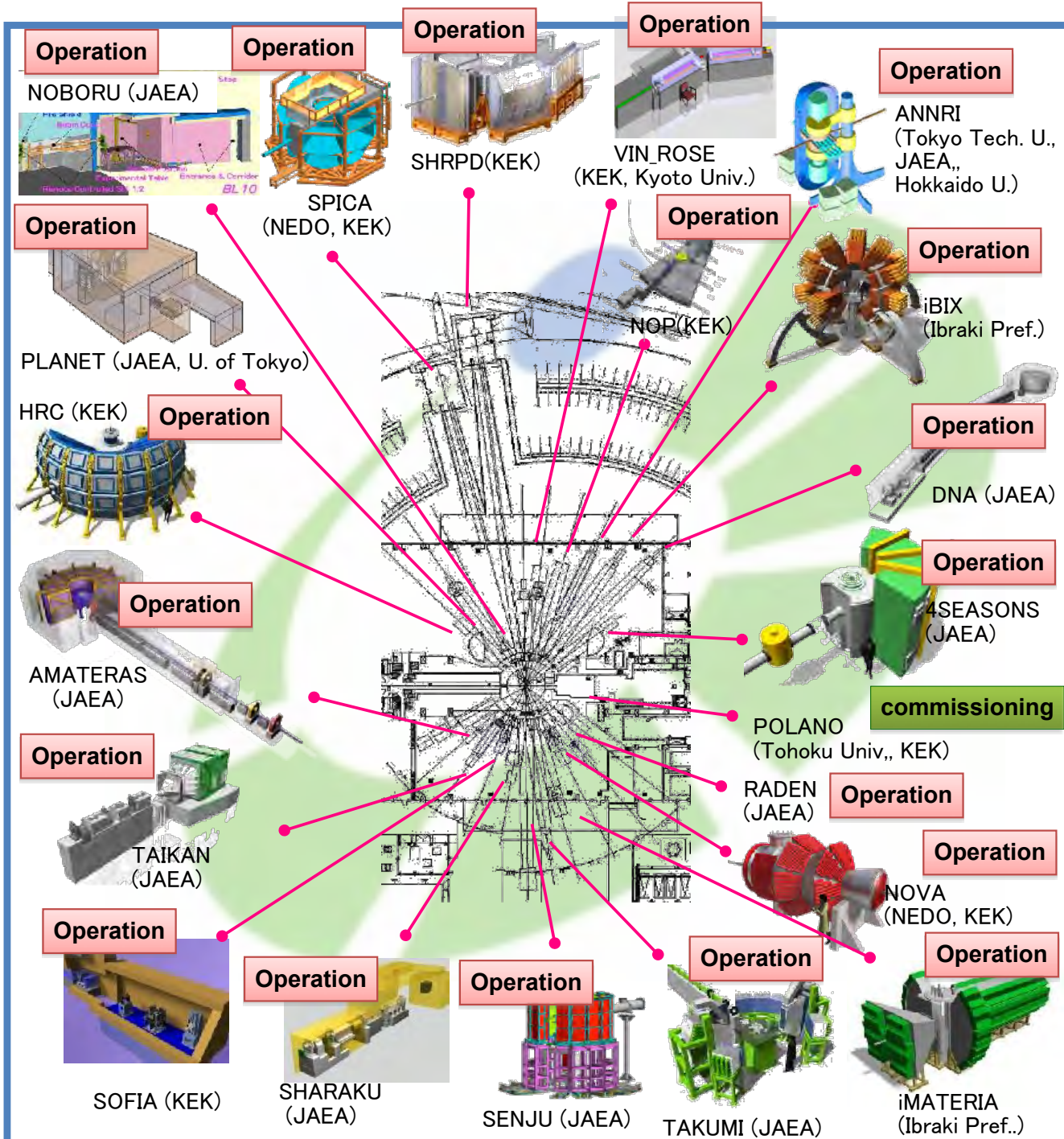
ハドロン



物質生命科学実験施設



MLF中性子実験装置群

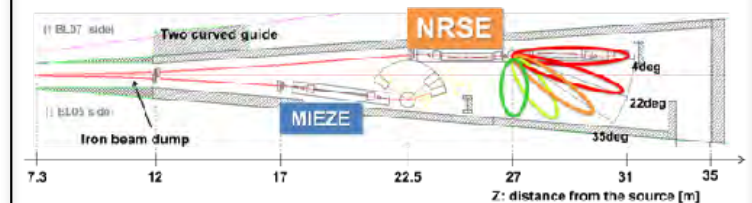


■ 中性子ビーム孔: 23

■ 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

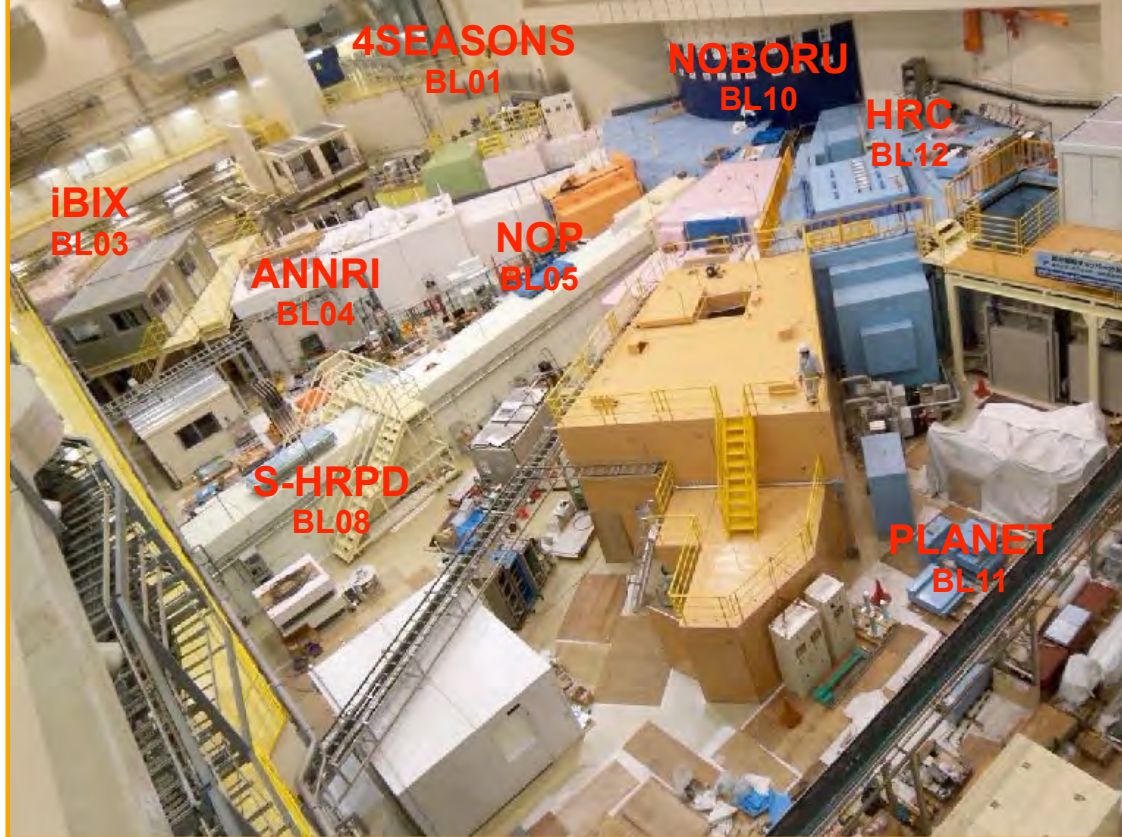


POLANO
(Polarization
Analysis Spect.)



2019Aより一部利用開始

1st Experimental Hall



2nd Experimental Hall



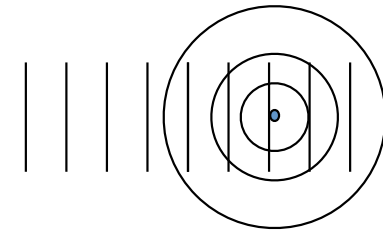
中性子散乱

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、

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \\ |f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

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、

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

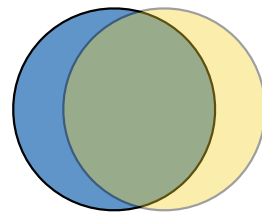
(バーは結晶の始状態に対する熱平均) となる。ここで中性子が感じる粒子密度関数

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

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'