物質科学へのSANSの展開と「大観(TAIKAN)」

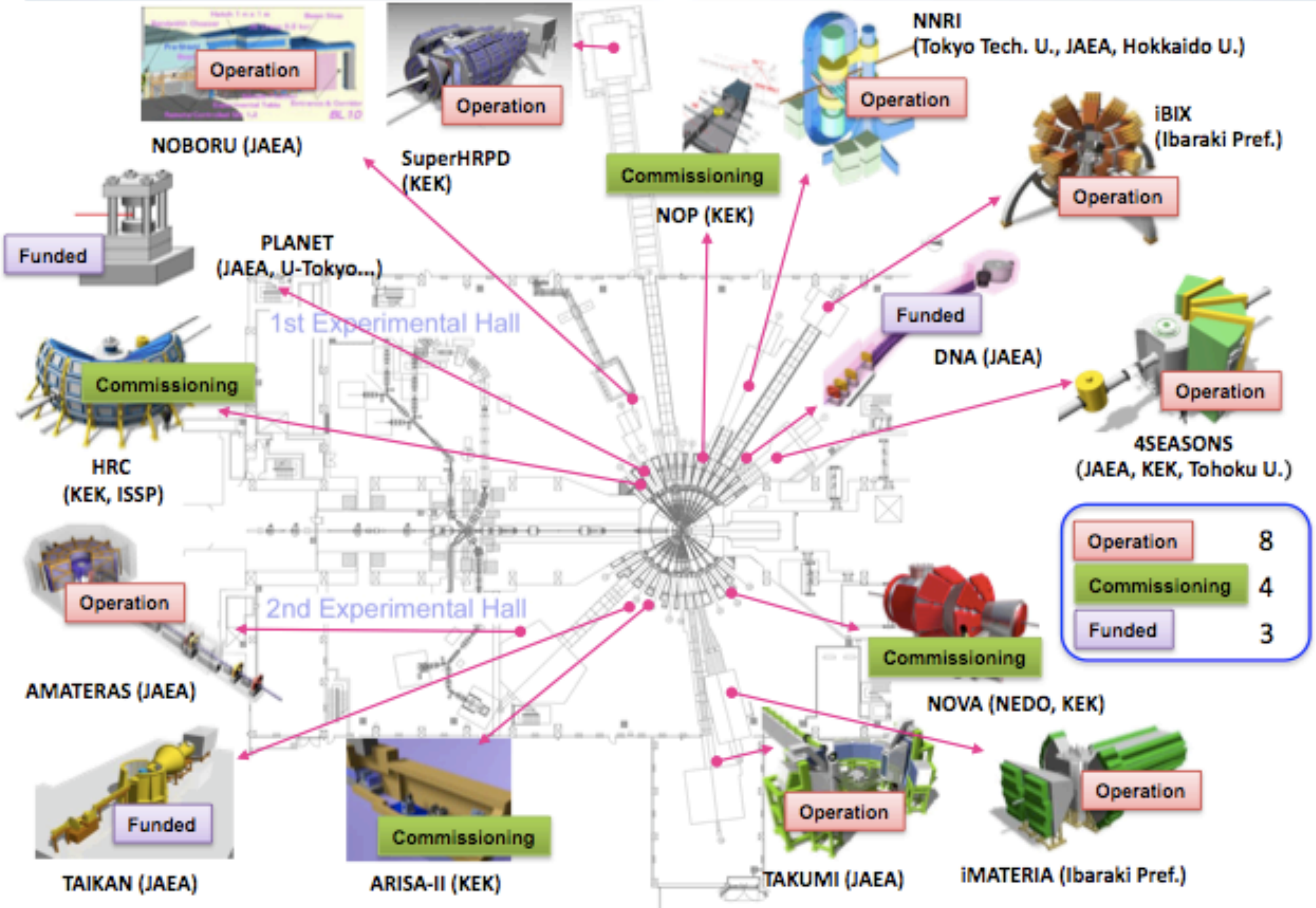
J-PARCセンター 原子力機構: 鈴木淳市、高田慎一、篠原武尚、奥隆之、吉良弘、中谷健、鈴谷賢太郎、相澤一也、新井正敏

J-PARCセンター 高エネ機構:大友季哉

京大炉:杉山正明

第1回 中性子小角散乱解析法研究会,
Jan. 18, 2010, 京都大学原子炉実験所

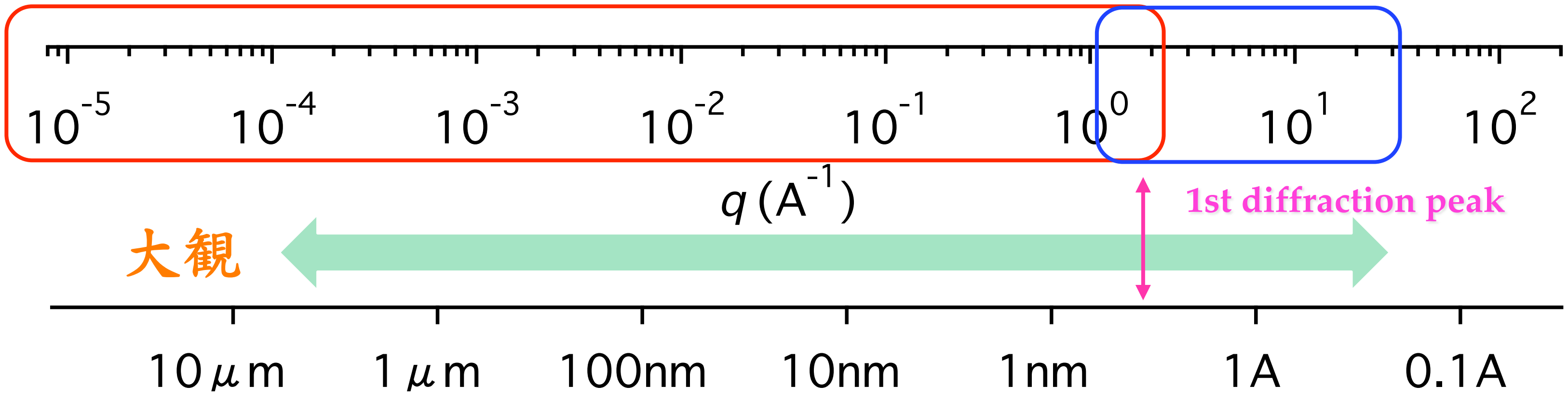
Neutron Instruments in MLF



中性子小角散乱法

中性子の特徴を活かしたサブナノからミクロの構造解析法

J-PARC, MLF



Size
large

Small

広い分野の観測対象, 学会・産業界: 日本物理学会, 日本鉄鋼協会, 高分子学会, 日本生物物理学会, …

TAIKAN - Requirements for performance -

- Recent progress in nano science (nano structure and electronic state) and research of multi-phase, multi-component system and nonequilibrium system
- Efficient measurement with higher spatial resolution and higher time resolution

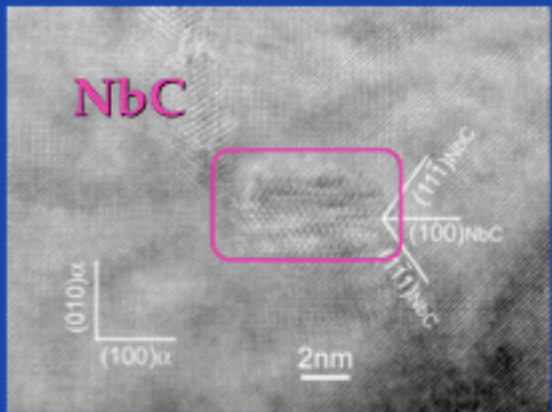
---

ex1. **Pd**

polyhedron ≠ sphere
ferromagnetism on surface
quantum size effect, surface effect

Properties of nanoparticle

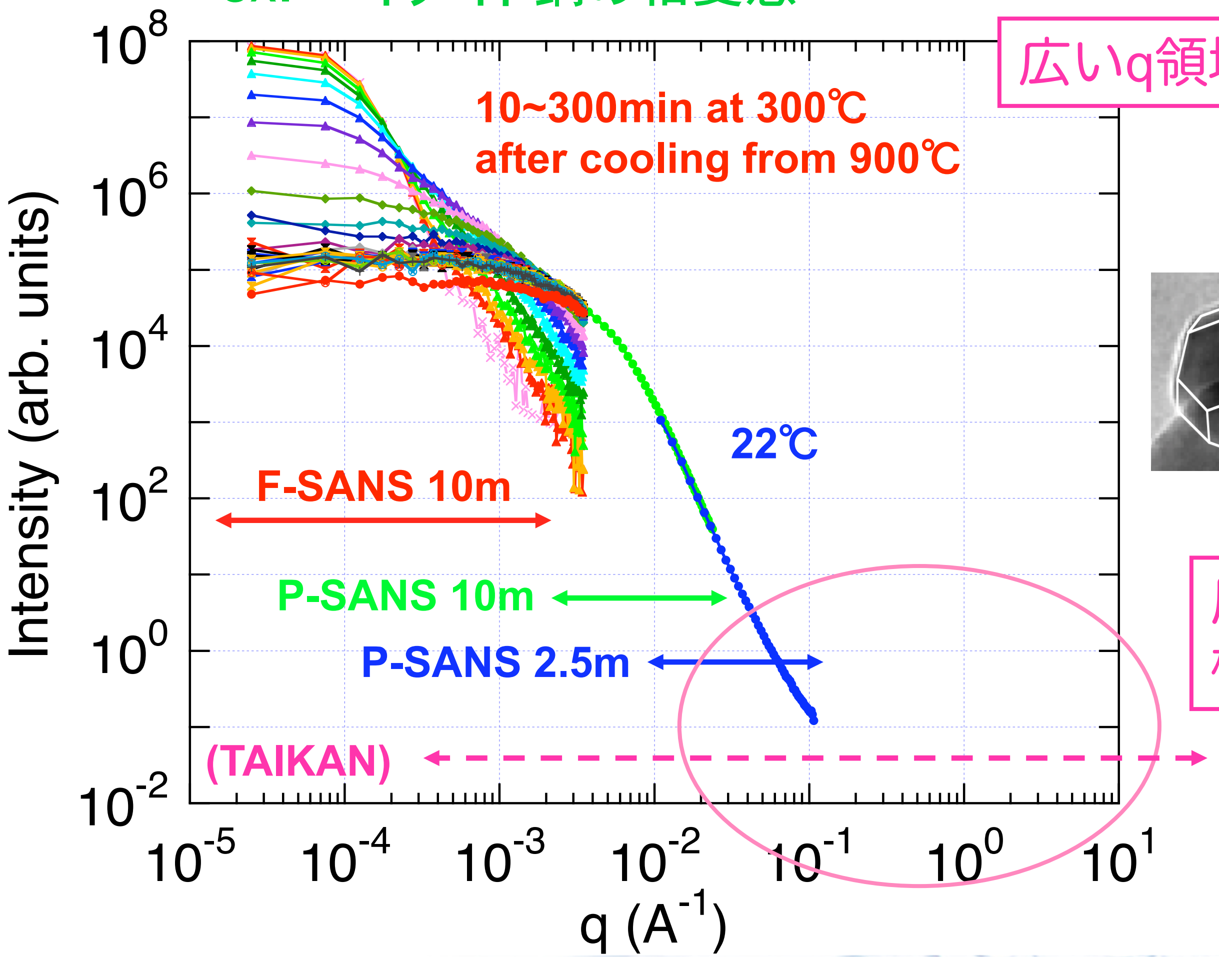
ex2.



Mechanism of hydrogen inducing brittlement in high-strength steels which posing engineering problem in the context of a hydrogen economy

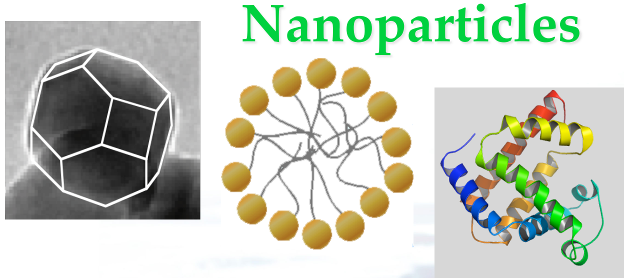
手法の高度化、更なる機能の充実

ex. ベイナイト鋼の相変態



広いq領域での高い時間分解能

Nanoparticles



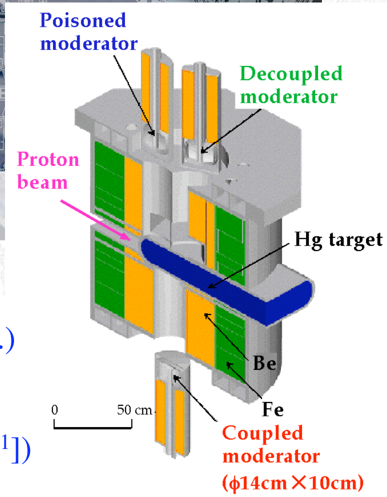
原子レベルの分解能での構造解析

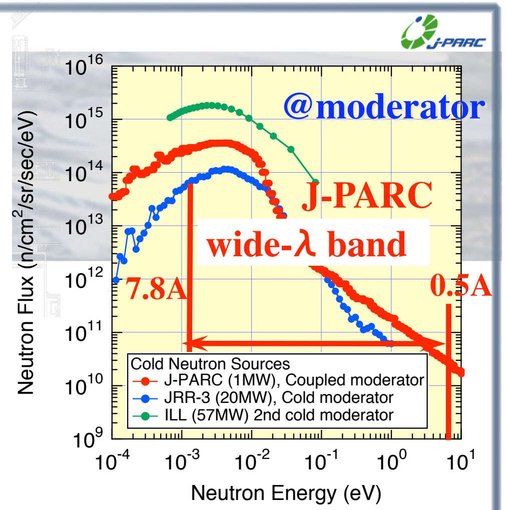
大観の概要

“大観の特徴”

- 高強度
- wide-q 測定 (hierarchical structures : polymer, protein..)
- 偏極・集光中性子ビームを利用可能

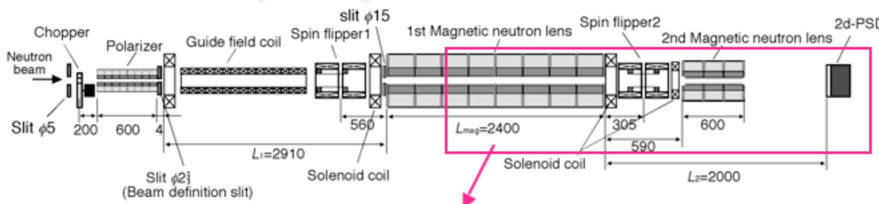
(magnetic materials) (low−q measurement, q ~10^{-4}[$Å^{-1}$])

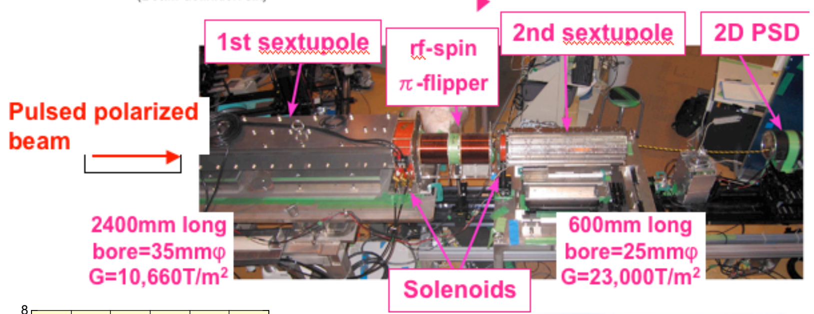


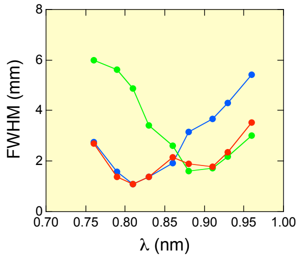


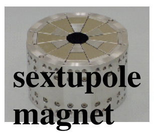
Time-averaged intensity

Magnetic lens -
Demonstration of focusing pulsed neutrons with a double sextupole magnet

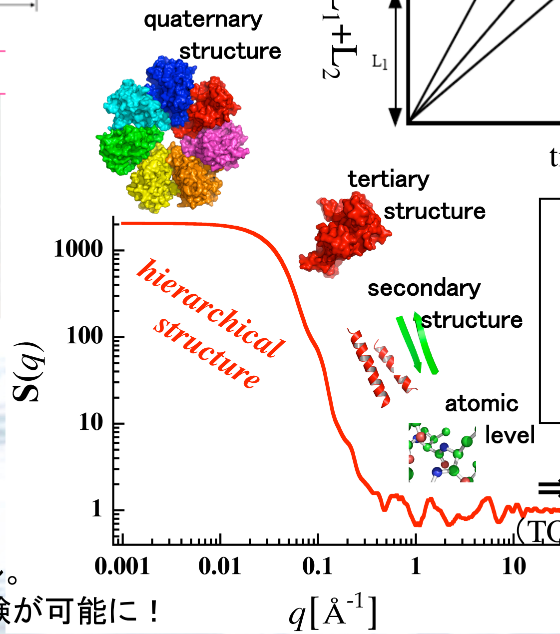


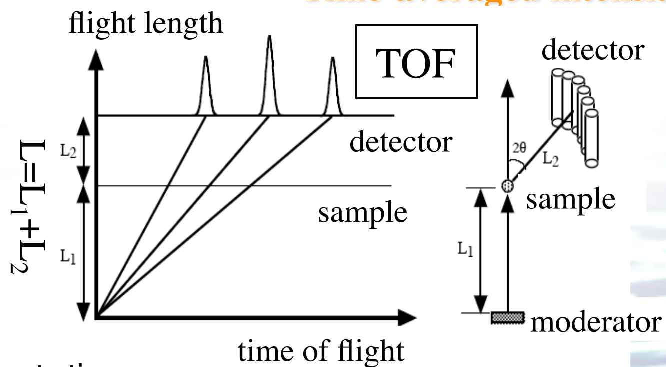






磁気レンズを用いた
パルス中性子集光実験
に成功(@JRR-3)
↓
同様のシステムを大観にインストール。
偏極・集光中性子ビームを使った実験が可能に！





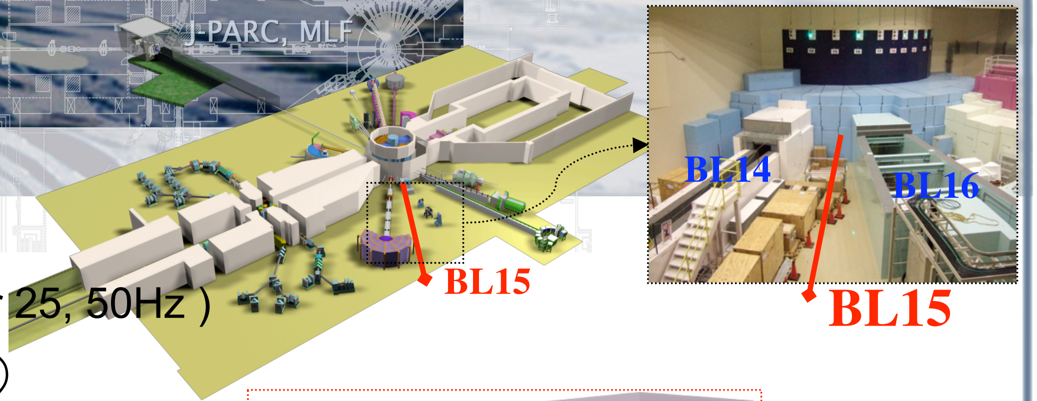
$$t(msec) = \frac{\lambda(Å)\cdot L(m)}{3.956}$$

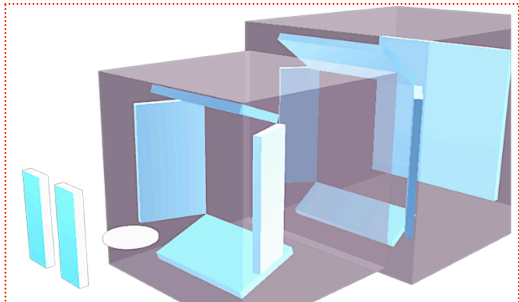
$$q = \frac{4\pi}{\lambda}\cdot \sin\left(\frac{2\theta}{2}\right)$$

⇒ **wide-q測定が可能**
(TOF法、白色中性子、広い散乱角)

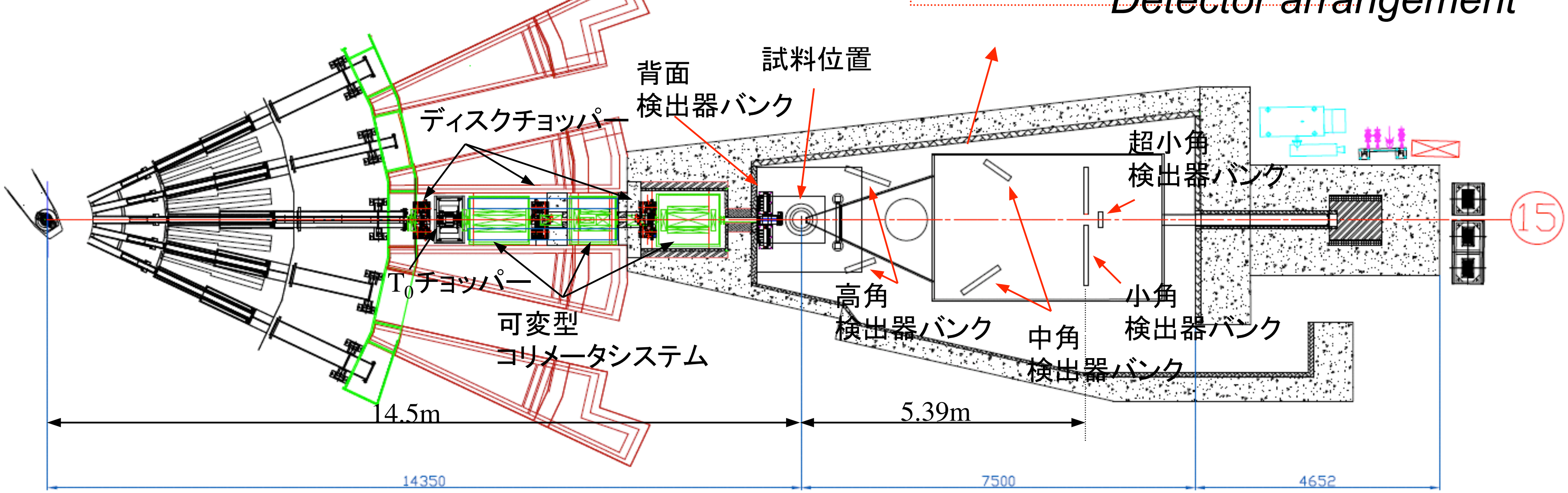
装置構成(1)

- *Wavelength range*:
  λ=0.8(0.4)~7.8[Å] (1-st frame, T0-chopper 25, 50Hz)
- *Scattering angle range*（ビーム水平方向のみ考慮）
  小角: 2θ=0.2~12.5[°], 中角: 2θ= 11.5~25[°],
  高角: 2θ= 23~50[°], 背面: 2θ= 141~165[°]
- *q range* : 0.0025 < q < 1.71 [$Å^{-1}$] (小角)
  : 0.16 < q < 3.4 [$Å^{-1}$] (中角)
  : 0.32 < q < 6.64 [$Å^{-1}$] (高角)
  : 1.52 < q <15.5 [$Å^{-1}$] (背面)

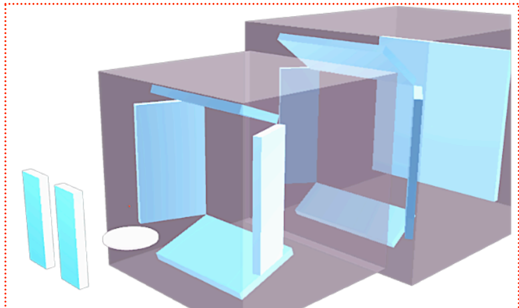




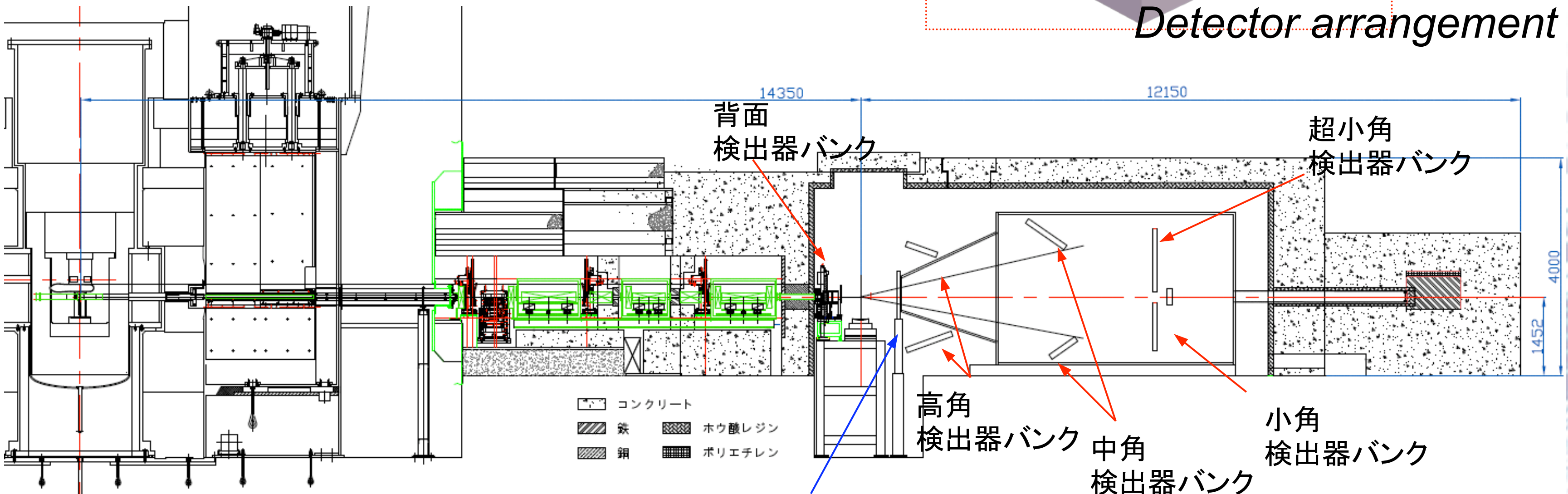
Detector arrangement



装置構成(2)

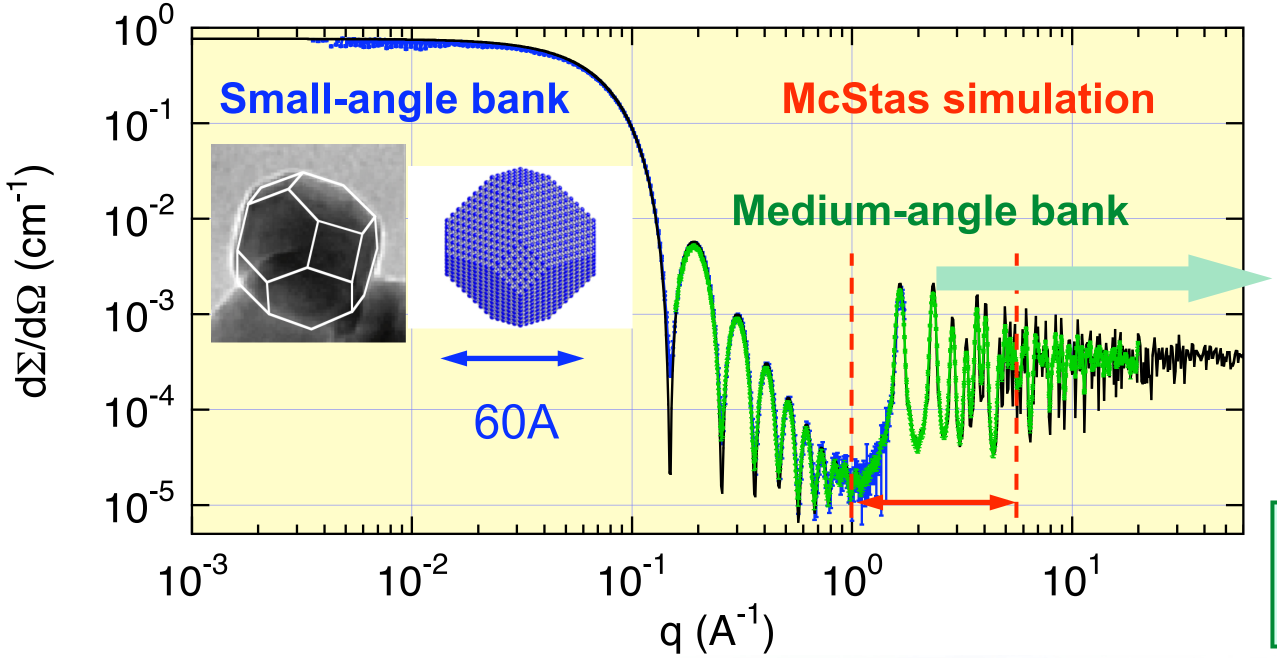


Detector arrangement

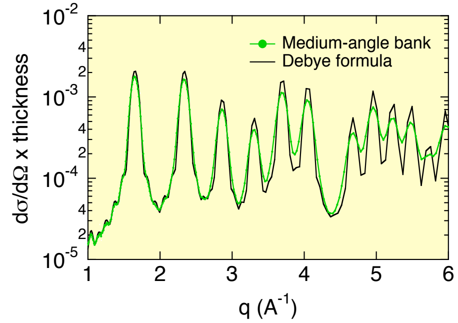


真空安全

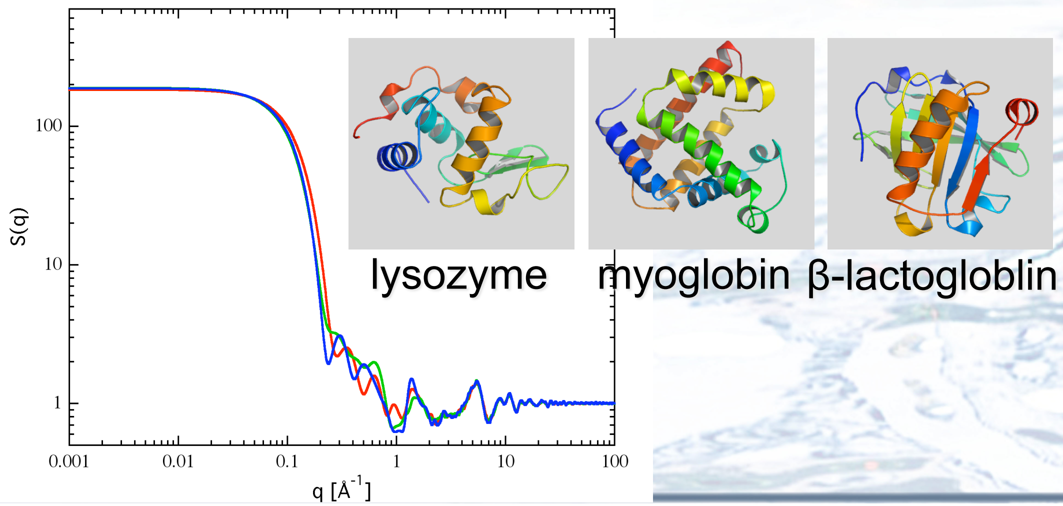
q領域, q分解能と連続性

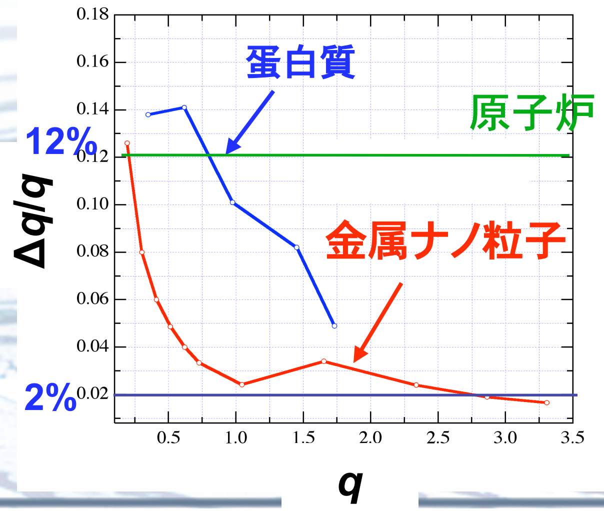


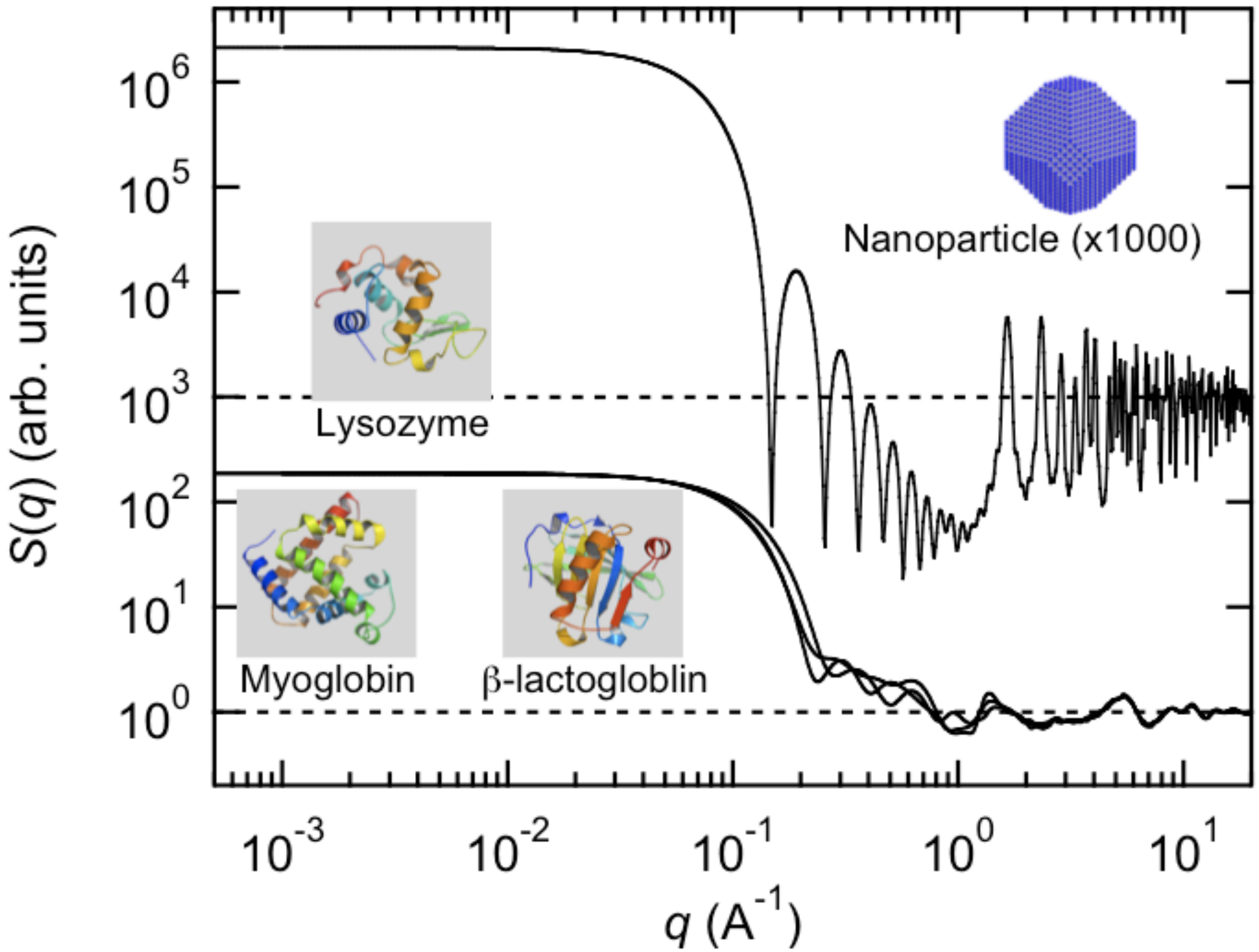
Δq/q～1% (FWHM)



q分解能の接続性
Δq/q<2% (FWHM)







非干渉性散乱と
q分解能

Vセルの測定経験

検出器の配置:考え方

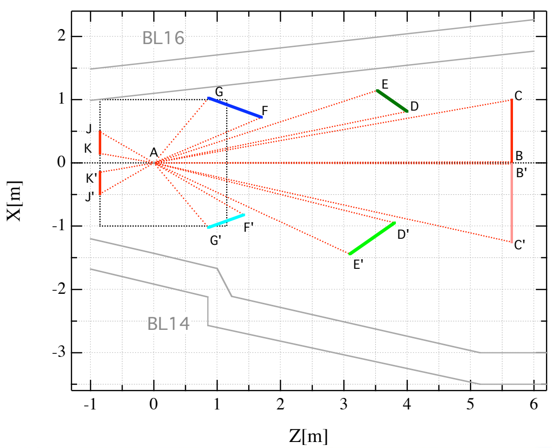
J-PARC, MLF

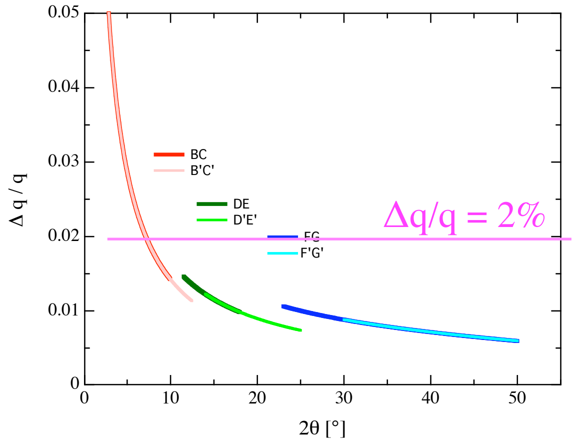
Concepts of detector arrangement

1. spatial restriction
2. under the q resolution less than 2%
3. without a dead (blind) scattering angle

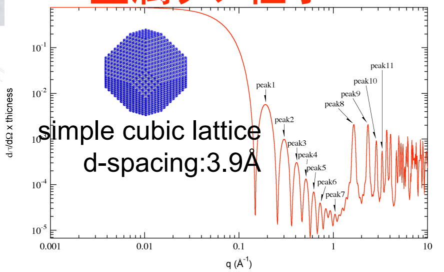
Resolution function

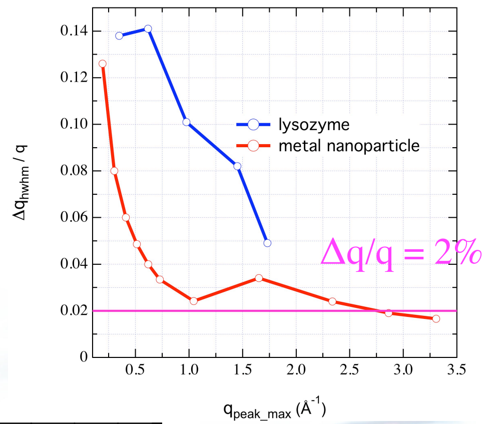
$$\left(\frac{\Delta q}{q}\right)^2 \approx ctan^2\theta\delta\theta^2 \qquad \delta\theta^2 = \frac{1}{4}\left[\frac{\delta o^2}{L_1^2} + \delta s^2\left(\frac{1}{L_1}+\frac{1}{L_2}\right)^2 + \frac{\delta d^2}{L_2^2}\right]$$



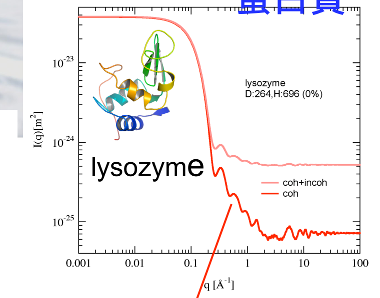


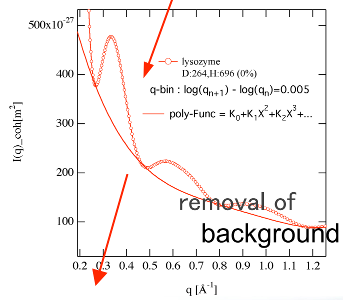
金属ナノ粒子

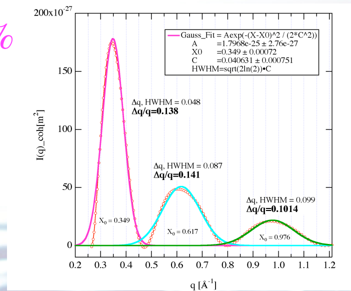




蛋白質





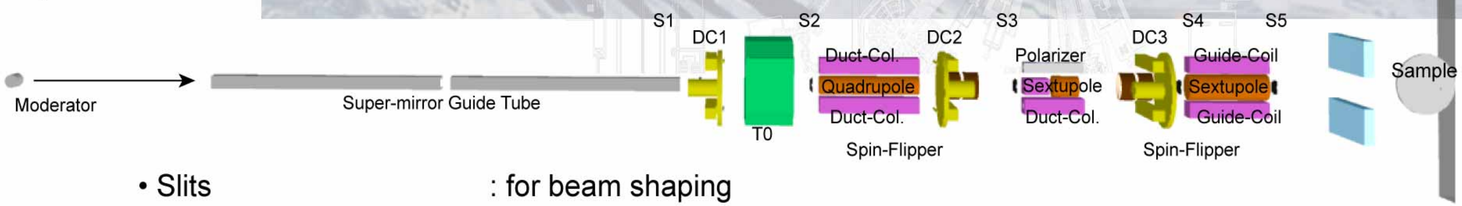


fitting by the Gauss func.

Optical Devices

J-PARC, MLF

Installed optical devices

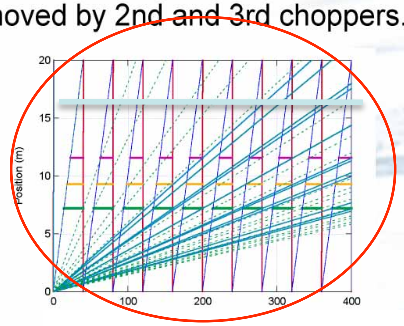


- Slits : for beam shaping
- Super-mirror guide tubes : for high intensity neutron transport
- Duct-collimator : to shield unnecessary neutrons
- Polarizer+Spin-Flipper : for magnetic scattering measurements
- Focusing device : for high resolution at low q and to expand q_{min}
- T0 chopper : to remove fast neutrons and to use shorter wavelength neutrons
- Band-definition choppers : to eliminate frame overlapping

Choppers

T0 Chopper

Two kinds of choppers are placed upstream of sample. A T0 chopper is used to remove high energy neutron back ground and to use shorter wavelength neutrons efficiently. Three disk choppers are used to define the bandwidth. Especially, the contamination from the higher order frame is successively removed by 2nd and 3rd choppers.



第9フレームまで対処!

Super-mirror Guide Tubes

搭載!

3Qc guide tubes were installed in the shutter and the biological shield.

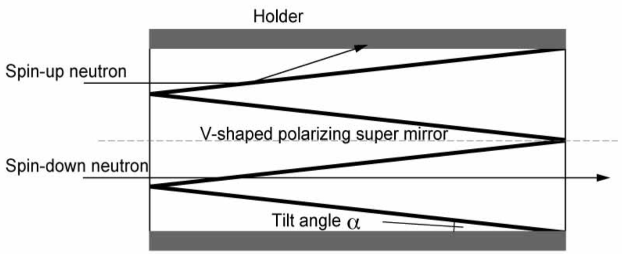
Neutron Polarization

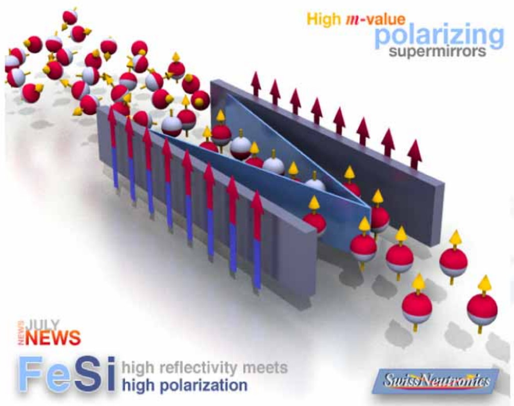
J-PARC, MLF

Polarizer Design

- Transmission type : same trajectry with the unpolarized neutron beam experiment
- Wide wavelength range : applicable wavelength λ > 2~3 Å
- Large cross-section : covering 40mm x 40mm beam size in a short length
- High polarizability : P > 90 % for long wavelength neutrons

→ Multi-channel V-shaped magnetic super-mirror cavity

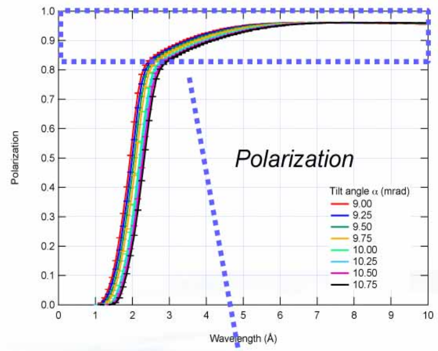


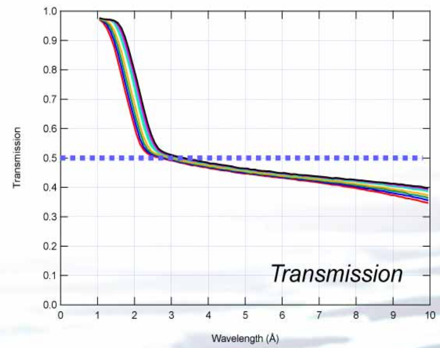


http://www.swissneutronics.ch/

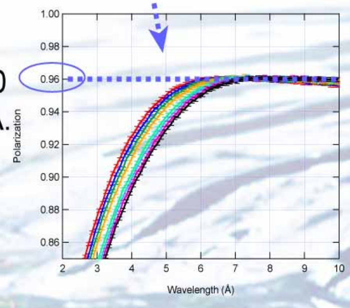
McStas simulation results

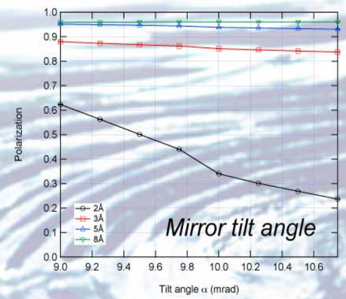
m=3 for up-spin neutrons
Reflectivity = 0.99





Polarization over 0.90 is achieved at λ > ~4 Å.





Tilt angle dependence is large near the critical wavelength.
25 ~ 60 % at λ = 2Å

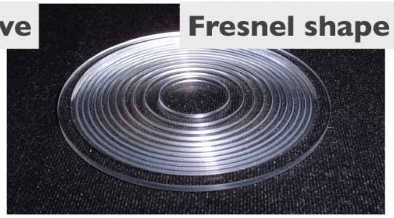
Pulsed Neutron Focusing

J-PARC, MLF

Neutron Lens

To achieve lower qmin & good resolution in the low q region

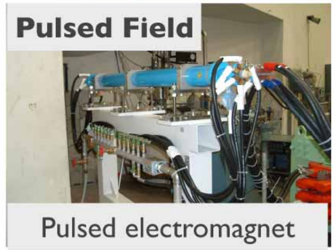
Aperture=20mm-ϕ



Aperture=45mm-ϕ

Magnet length=2m
Aperture=46.8mm-ϕ

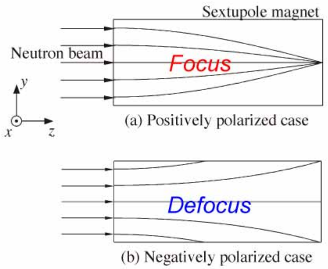
Magnet length=0.3~2m
Aperture<25mm-ϕ

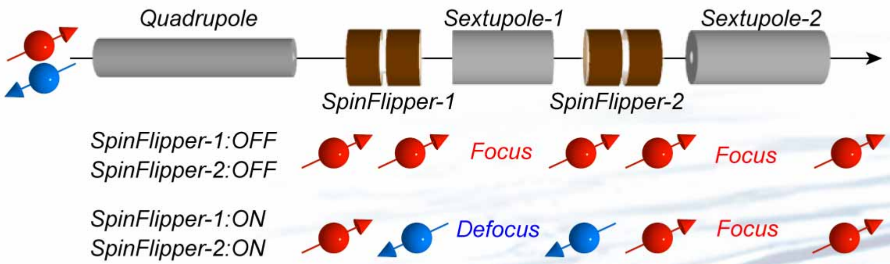


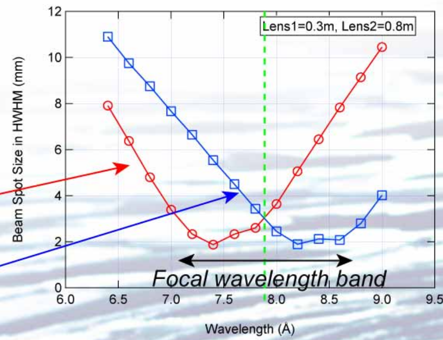
Magnet length=2m
Aperture=22mm-ϕ

Pulsed neutron focusing -> chromatic averration should be suppressed.

Multiple sextupole magnet system







波長幅～20%

Turning ON/OFF spin flippers synchronously with neutron TOF, pulsed neutrons can be focused with small chromatic aberration.

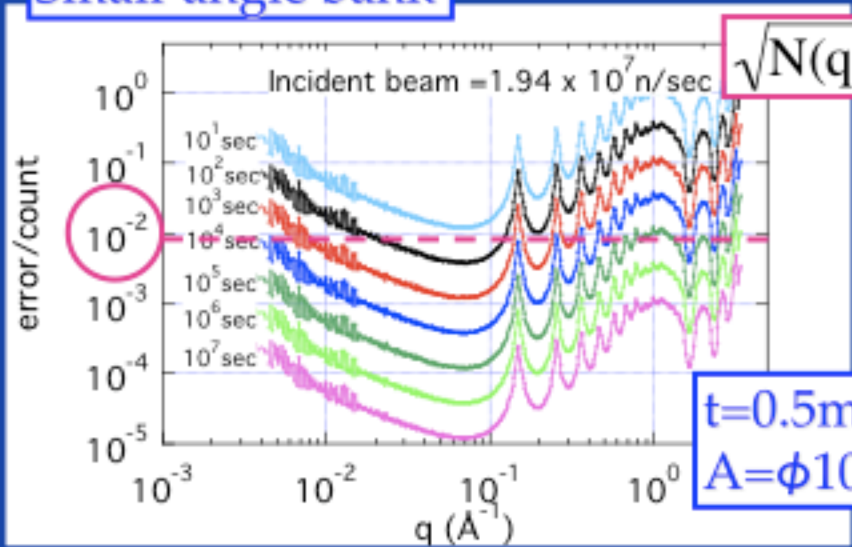
For the magnetic lens system, the polarization degree is crucial to the focused beam quality, because negative polarized neutrons spread out and cause broadning of beam spot . Quadrupole magnet as a high performance polarizer and two sextupole magnets with spin flipper system is suitable for Focusing TOF-SANS instrument.

散乱現象は確率現象

TAIKAN - Efficiency of measurements -

Small-angle bank

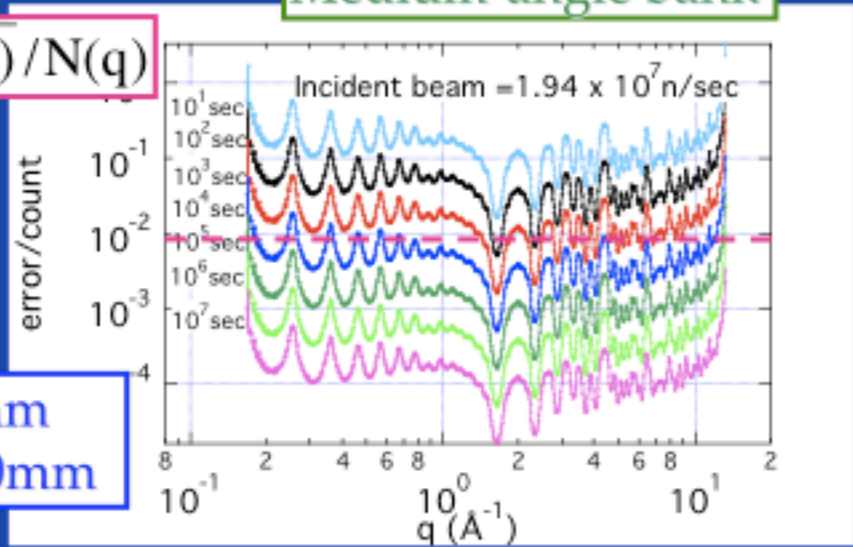
Medium-angle bank

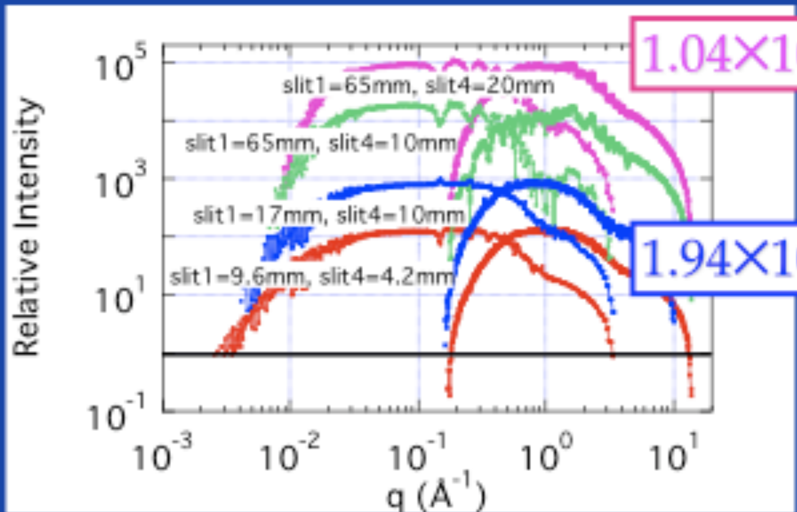


$\sqrt{N(q)}/N(q)$

t=0.5mm

A=ϕ10mm





1.04×10^9n/sec

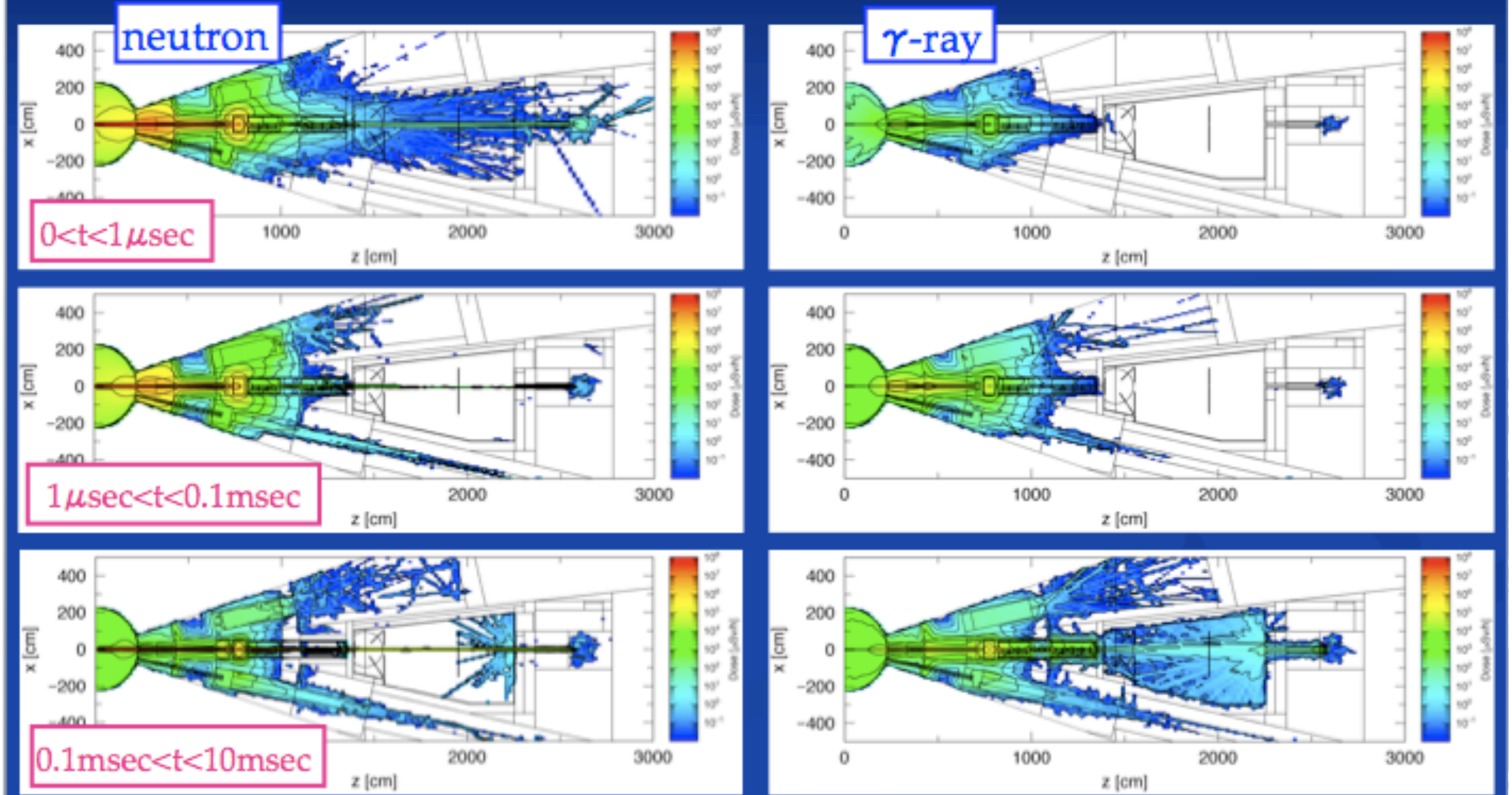
1.94×10^7n/sec

statistial accuracy of 1%
→ 10^3〜10^4sec

time-resolved measurement of soft matter, etc. with high-$d\Sigma/d\Omega$

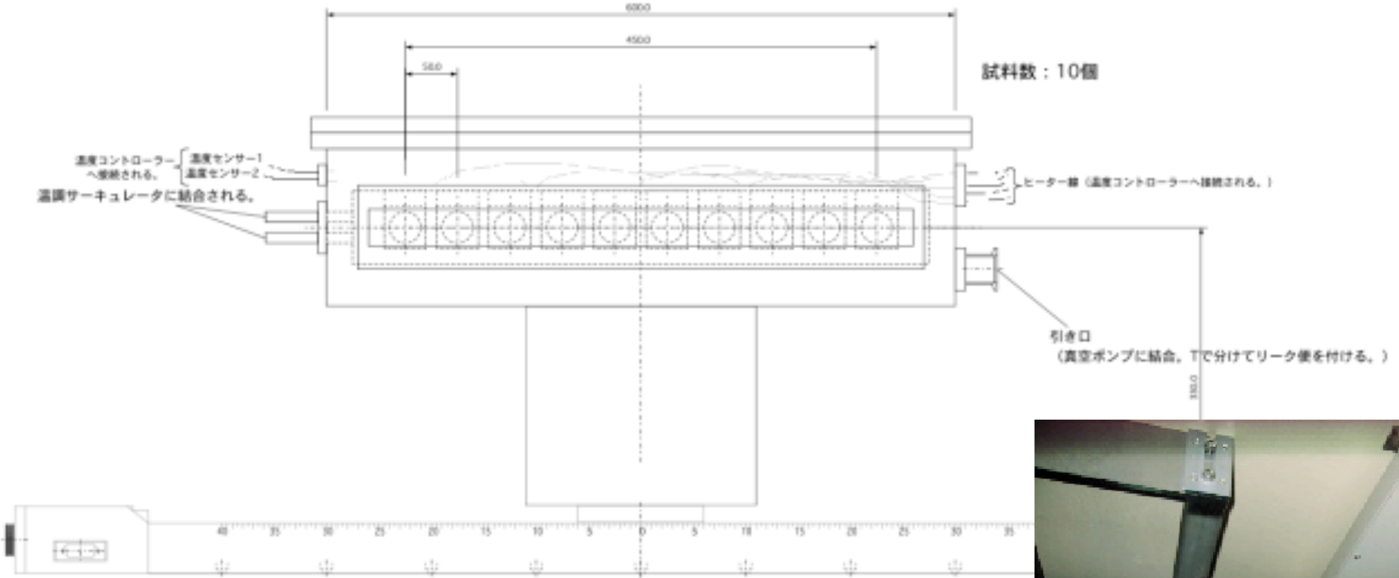
TAIKAN - Shield, background -

PHITS simulation (with T_0 chopper) → data analysis

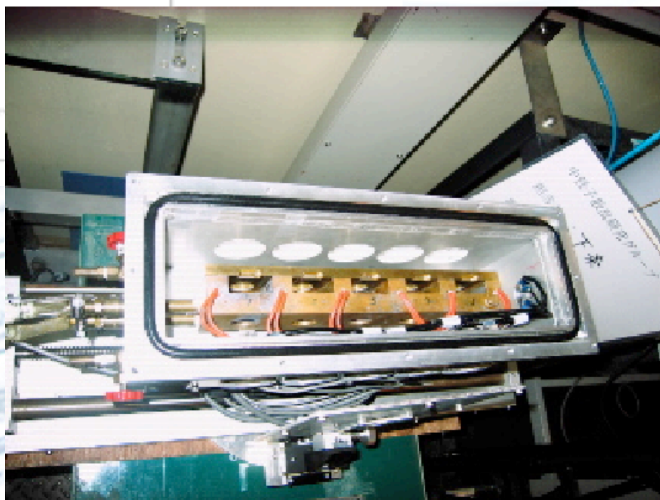


試料環境

自動試料交換器(試料数:10, T= -25～125℃, ガス雰囲気:可能)



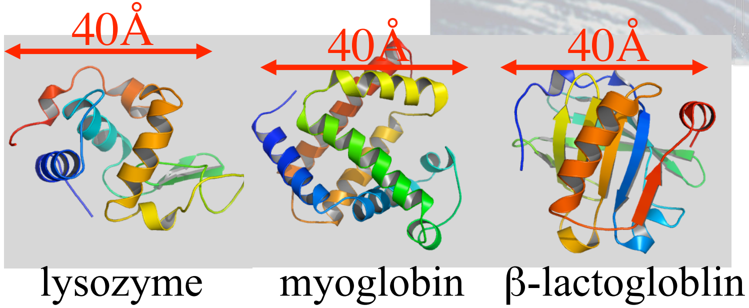
冷凍機, 高温炉, マグネット,
H/D制御機器等を順次導入



参考:SANS-J-IIの自動試料交換器

Scattering functions for three protein molecules in the wide *q* range

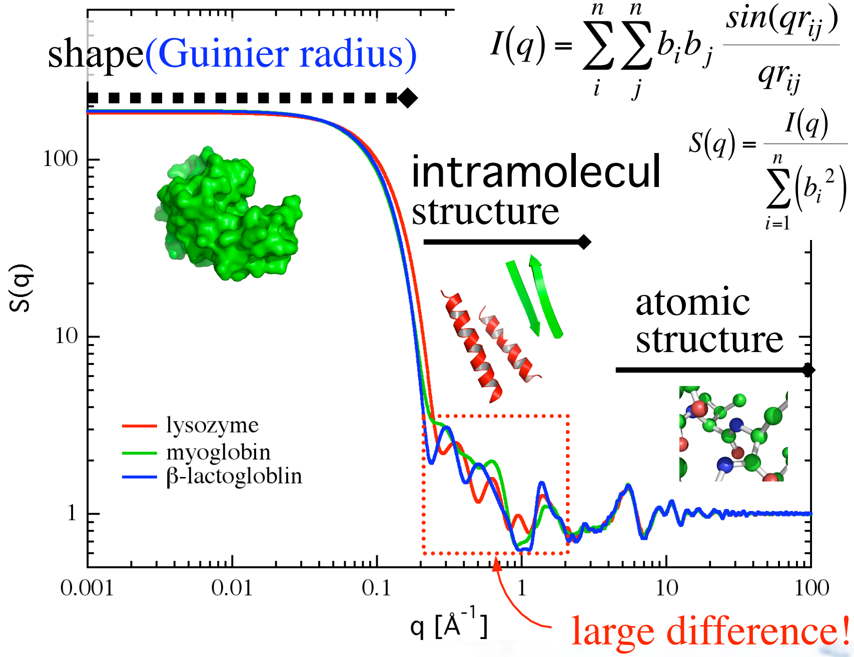
J-PARC, MLF



Debye formula.

$$I(q)=\sum_{i}^{n}\sum_{j}^{n} b_i b_j \frac{\sin(qr_{ij})}{qr_{ij}}$$

$$S(q)=\frac{I(q)}{\sum_{i=1}^{n}\left(b_i^{2}\right)}$$

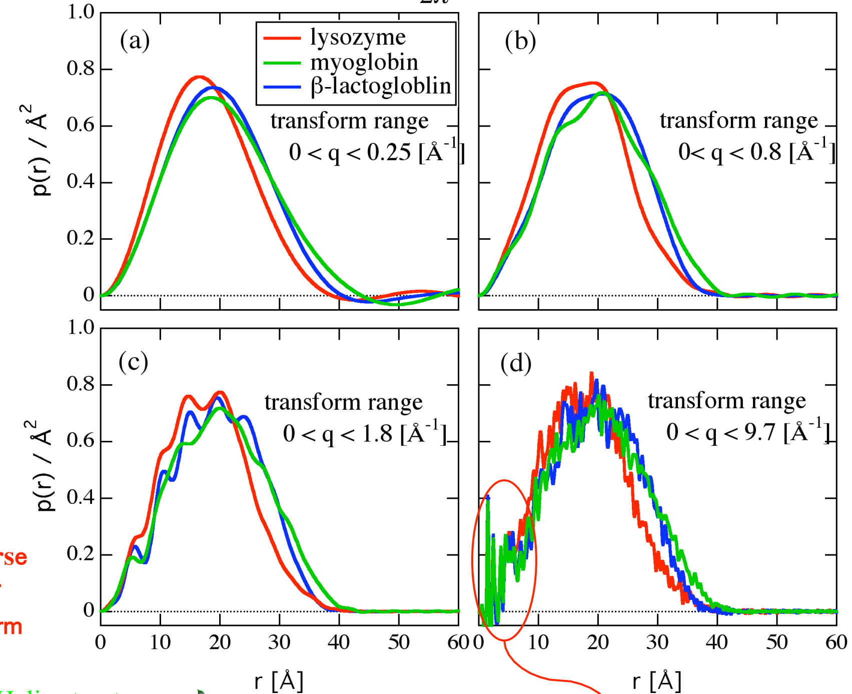


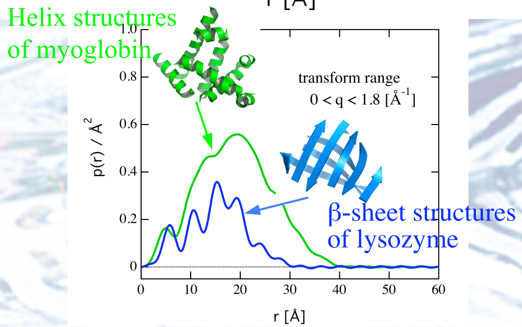
Inverse Fourier transform (IFT)

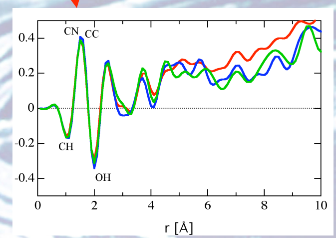
The IFT- range dependence on

Distribution function.

$$p(r)=r^{2}\left(\rho(r)-\rho_0\right)=\frac{r}{2\pi^{2}}\int_0^{\infty} q\left(S(q)-1\right)\sin(qr)M(q)\,dq$$





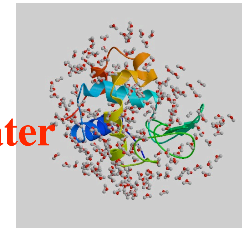


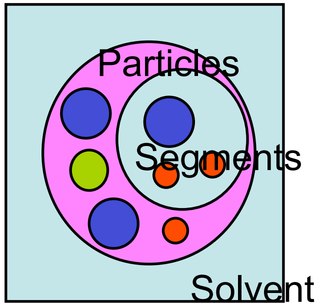
・0.1 < q < 2 [Å^{-1}]において、3種の蛋白質の散乱関数は、内部構造の違いによって大きな違いが現れる。

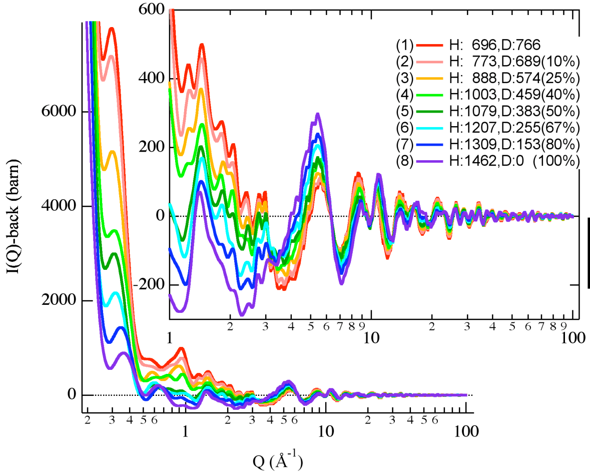
Effect of solvent, incoherent scattering
(Under development)

Contrast variation in wide *q* range
Contrast matching with various segments and particles
(~ 100 contrasting measurements)

lysozyme + hydration water



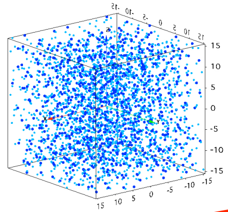




Hundreds of independent I

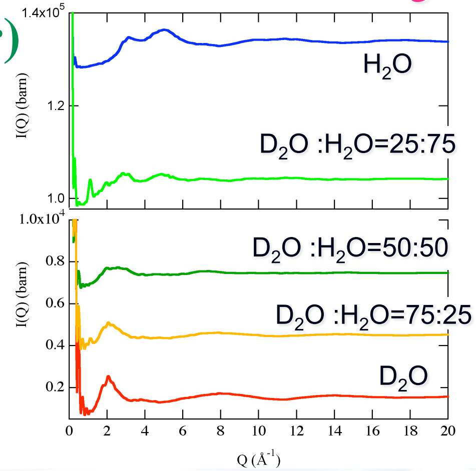
$$I(Q) = \sum_i^n \sum_j^n b_i b_j \frac{\sin(qr_{ij})}{qr_{ij}} + \sum_i^n \frac{\sigma_{inc\,i}}{4\pi}$$

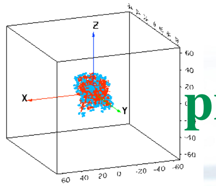
Solvent(water)



database

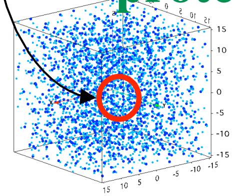
Total scattering

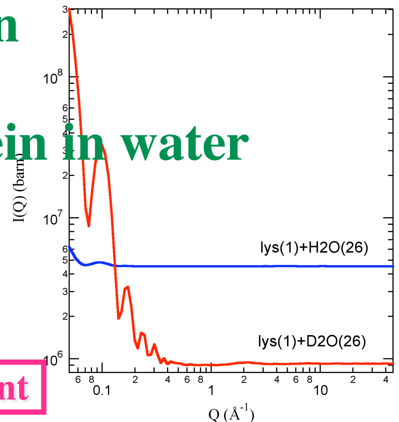




protein

protein in water





Under development

⇒ 3D atomic scale information could be obtainable.

まとめ

物理

磁性(領域3, 8)

- $q\sim0$近傍の強磁性相関：$M(q\sim0)$, $\chi(q\sim0)$
- 長周期構造(ヘリカル磁性)
- ナノ粒子の磁性：有限空間の磁性

超伝導(領域6, 8)

- 量子化磁束の構造(磁場侵入長)と空間相関(超伝導対称性)

ソフトマター物理(領域12)

- 高分子パターンや秩序形成

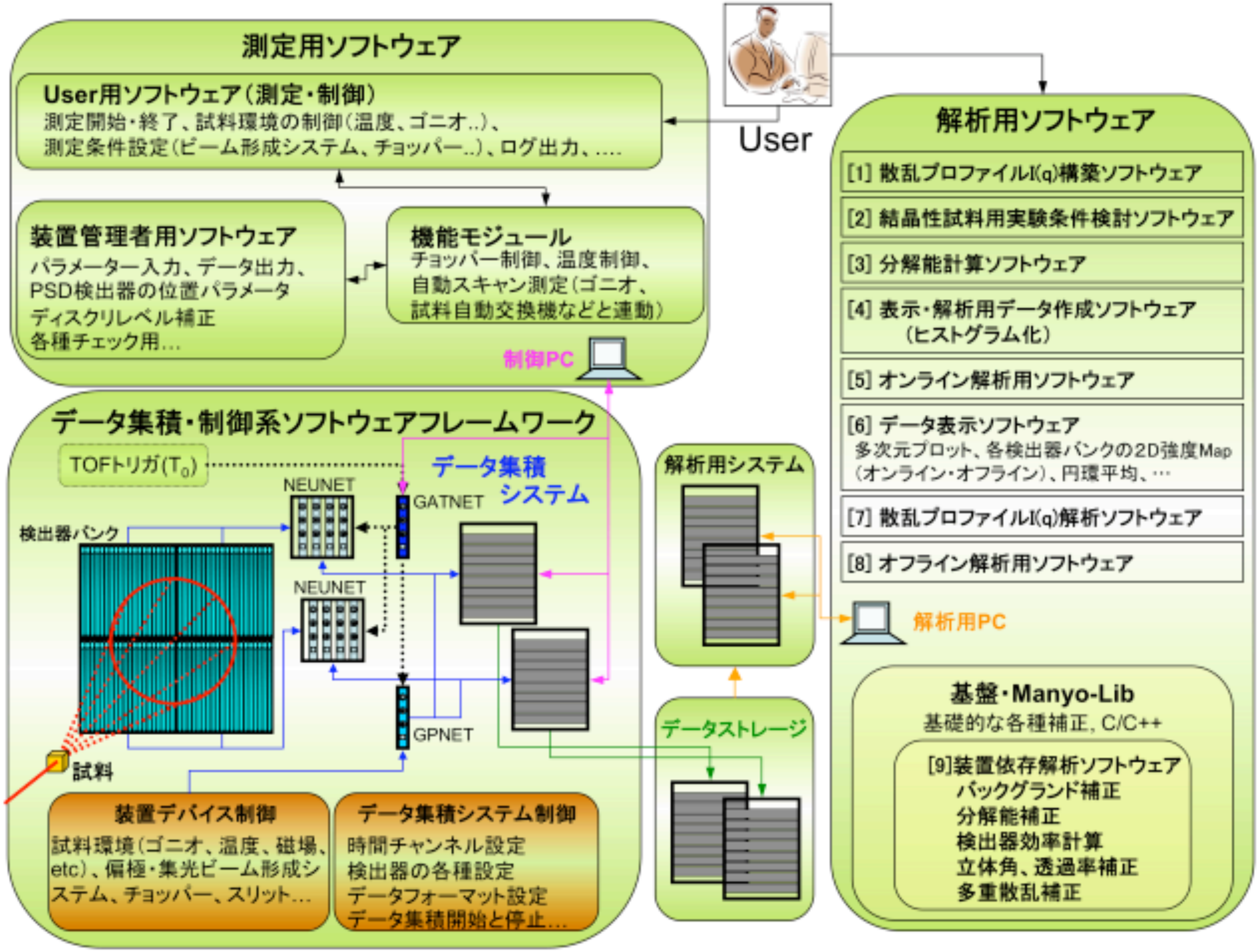
磁性材料

- NdFeB強力磁石(元素戦略), 高周波軟磁性膜

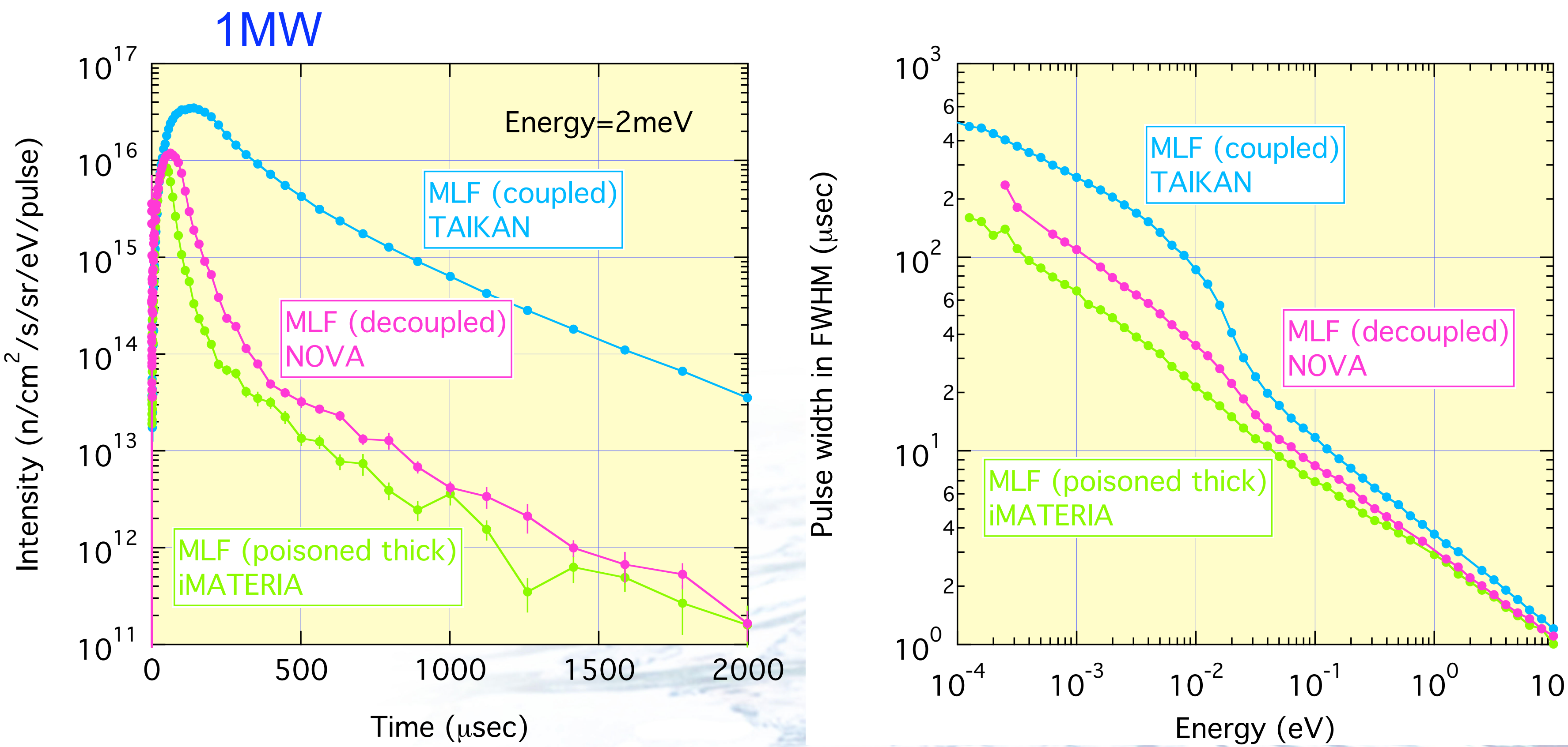
触媒材料

金属材料(鉄鋼材料), …

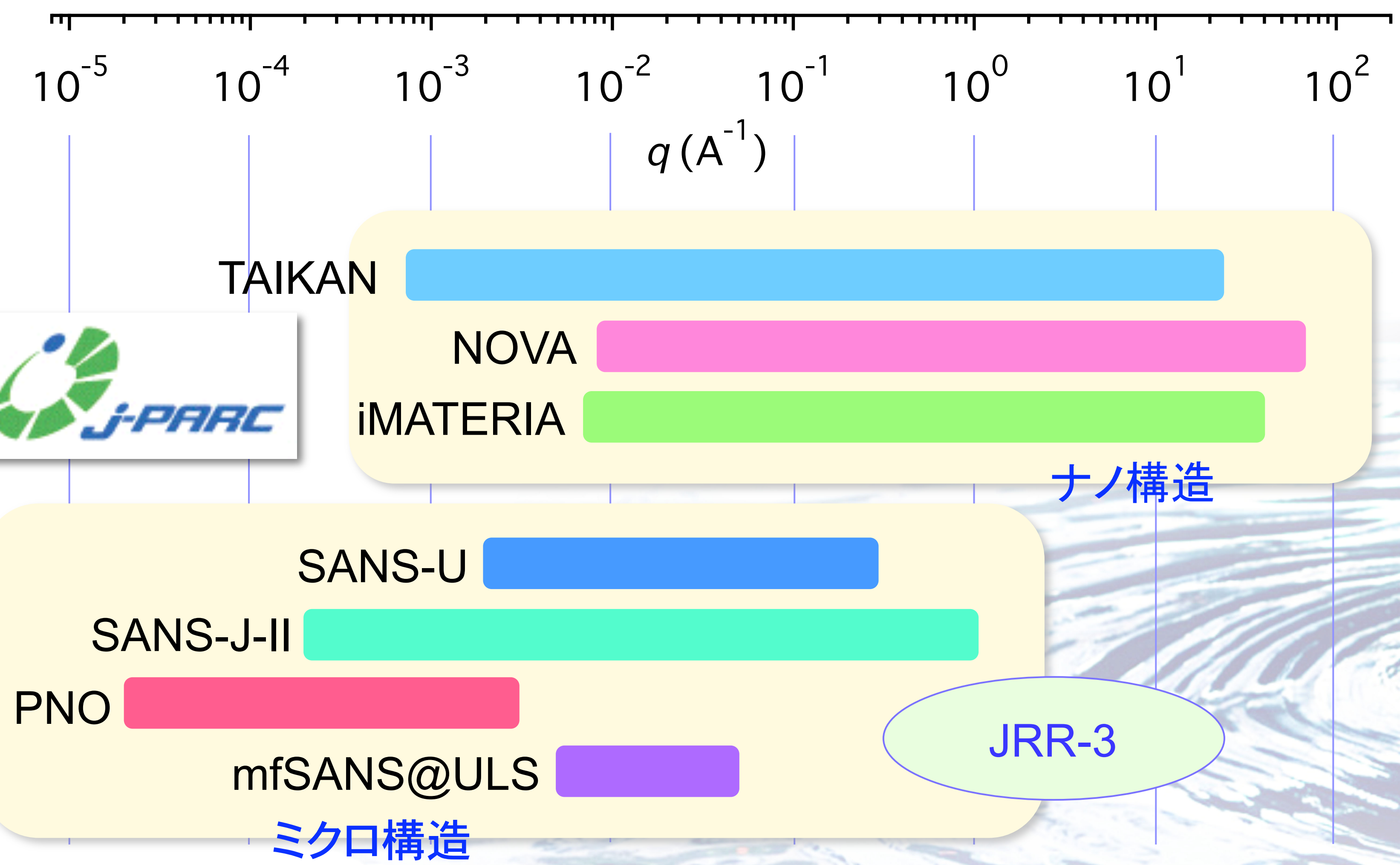
解析ソフト相関図


測定用ソフトウェア
User用ソフトウェア（測定・制御）
測定開始・終了、試料環境の制御（温度、ゴニオ..）、
測定条件設定（ビーム形成システム、チョッパー..）、ログ出力、....
User
装置管理者用ソフトウェア
パラメーター入力、データ出力、
PSD検出器の位置パラメータ
ディスクリレベル補正
各種チェック用…
機能モジュール
チョッパー制御、温度制御、
自動スキャン測定（ゴニオ、
試料自動交換機などと連動）
制御PC
データ集積・制御系ソフトウェアフレームワーク
TOFトリガ(T_0)
NEUNET
GATNET
データ集積
システム
検出器バンク
NEUNET
GPNET
試料
装置デバイス制御
試料環境（ゴニオ、温度、磁場、etc）、偏極・集光ビーム形成システム、チョッパー、スリット…
データ集積システム制御
時間チャンネル設定
検出器の各種設定
データフォーマット設定
データ集積開始と停止…
解析用システム
データストレージ
解析用ソフトウェア
[1] 散乱プロファイルI(q)構築ソフトウェア
[2] 結晶性試料用実験条件検討ソフトウェア
[3] 分解能計算ソフトウェア
[4] 表示・解析用データ作成ソフトウェア（ヒストグラム化）
[5] オンライン解析用ソフトウェア
[6] データ表示ソフトウェア
多次元プロット、各検出器バンクの2D強度Map（オンライン・オフライン）、円環平均、…
[7] 散乱プロファイルI(q)解析ソフトウェア
[8] オフライン解析用ソフトウェア
解析用PC
基盤・Manyo-Lib
基礎的な各種補正, C/C++
[9]装置依存解析ソフトウェア
バックグランド補正
分解能補正
検出器効率計算
立体角、透過率補正
多重散乱補正

中性子源にみる各装置の特徴



SANSが測れる装置群



まとめ、今後のスケジュール

1. J-PARCの大強度型パルス中性子小中角散乱装置「大観」

ナノ物質や多成分系, 多相系, 非平衡系の高精度・高効率測定という新たな可能性を提供する。

・広いq領域の高効率測定

・偏極ビームの利用 磁性・超伝導材料、核スピンコントラスト評価

・集光ビームの利用 よりlow-qへ

2. 建設スケジュール

共用促進法の下での建設をH21～H23年度の3カ年で遂行する。

・H21年4月 建設開始

・H23年3月 ビーム受入れ予定

種々の試料環境装置(試料交換, 温度, 磁場, H/D制御)を導入する。

3. NOVA, iMATERIAとの連携やJRR-3, SAXSとの連携による SANS実験環境整備