


Powder Diffraction at the Japanese Spallation Source - Present status of J-PARC/MLF

J-PARC/MLFの現状と粉末回折装置の現状

Takashi Kamiyama, J-PARC/ KEK





J-PARC計画の目指すもの


陽子を光速近くまで加速し、原子核と衝突させ
二次粒子ビームを作る。

↓

二次粒子ビームによる多彩な科学

陽子(p)
中性子(n)

陽子ビーム(p)
3 GeV, 50 GeV



標的原子核

パイ中間子(π)

ハドロン実験施設

K-中間子(K)

ニュートリノ(v)

ニュートリノ実験施設

ミューオン(μ)

物質生命の科学

原子核素粒子の科学

物質生命の科学

中性子(n) 原子力の科学
(核変換...2期)

世界最大のビーム強度


フルパワー時の各ビームの強度

	入射陽子1個に 対する発生粒子数	1秒間の 発生粒子数	典型的なビームライン における粒子数/秒*)
中性子	80	10^{17}	10^8
ミューオン	10^{-4}	10^{11}	10^7
K中間子	10^{-4}	10^{10}	10^6
ニュートリノ	6	10^{15}	3×10^7

*) ニュートリノは神岡検出器を通過するニュートリノ数







最近の2年半の主な出来事

2008

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

2009

1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

2010

1

2

3 GeVにて5 kW/pulse ビーム出力 (130 kW equiv.), 50 kW 引き出し成功

MRにて, 3 GeV ビームの RF 捕獲と取り出しに成功 (5/22)

中性子ビーム発生成功 (5/30)

J-PARC 施設特別公開 (8/10)

3 GeVにて 12 kW/pulse 瞬間値 (300 kW equiv.), 210 kW 引き出し成功

ミュオンビーム発生成功 (9/26)

MRにて 30 GeV 加速成功 (12/23)

中性子とミュオンの共同利用開始 (12/23)

30 GeVビームのハドロンホールへの取り出し成功 (1/27)

K中間子ビーム発生成功 (2月)

ニュートリノビーム発生成功 (4/23)

完成記念式典 (東京九段会館にて) (7/6)

J-PARC施設公開 (8/1) 約4600名

3 GeVにて120kW達成
敷地内検出器で最初のニュートリノ観測 (11/22)

3 GeVにて300kW達成(1時間のみ)(12/10)

スーパーカミオカンデでニュートリノ検出 (2/24)

7

中性子発生とその検出



計算値 ${}^6\text{Li}(n,\alpha)$ 反応を利用して
中性子(4500個)を検出
(about 13 meV)
 ${}^7\text{Li}$ (Background)

BL10 NOBORU

Time-of-flight for neutrons (ms)

粉末回折装置 世界最高分解能0.035%達成




BL08 SuperHRPD (KEK)

Intensity (arb. unit)

Lattice spacing (Å)


5/30/2008 14:25



祝 中性子ビーム生成

2008年5月30日14時25分 J-PARC MLE

6/21/2008



日経産業新聞 08年 6/21/2008

J-PARCの中性子実験装置
世界最高の分解能達成
高エネ研と原研機構

中性子発生とその検出 粉末回折装置 世界最高分解能0.035%達成

BL10 @14m
計算値
 ${}^6\text{Li}(n,\alpha)$ 反応を利用して中性子(4500個)を検出
(about 13 meV)
 ${}^7\text{Li}$ (Background)

BL08 SuperHRPD (KEK)
分解能 0.035% ± 0.0003%

The Science News Oct. 2, 2008
新しい手法の開発
BL01 4SEASONS

Award
2007 Papers of Editors' Choice
First Demonstration of Novel Method
Effective Neutron Scattering Measurement
Using Multiple-Order Bragg

6/21/2008
J-PARCの中性子実験装置
世界最高の分解能達成
高エネ研と原研機構

2009.7.6 完成記念式典 (1)

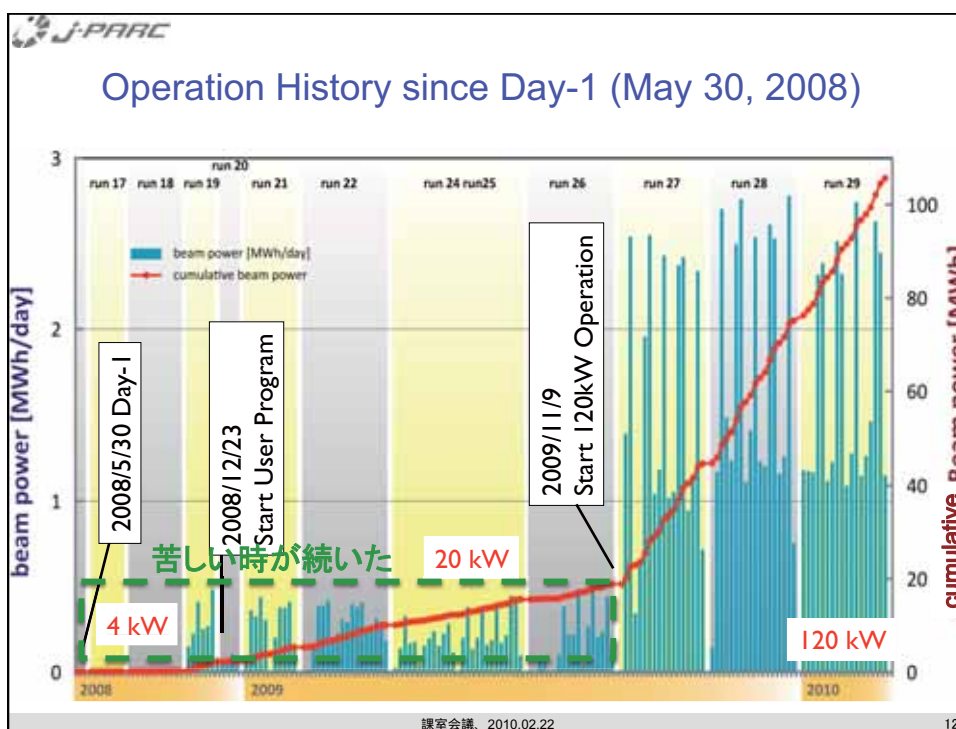
岡崎 理事長
鈴木 機構長

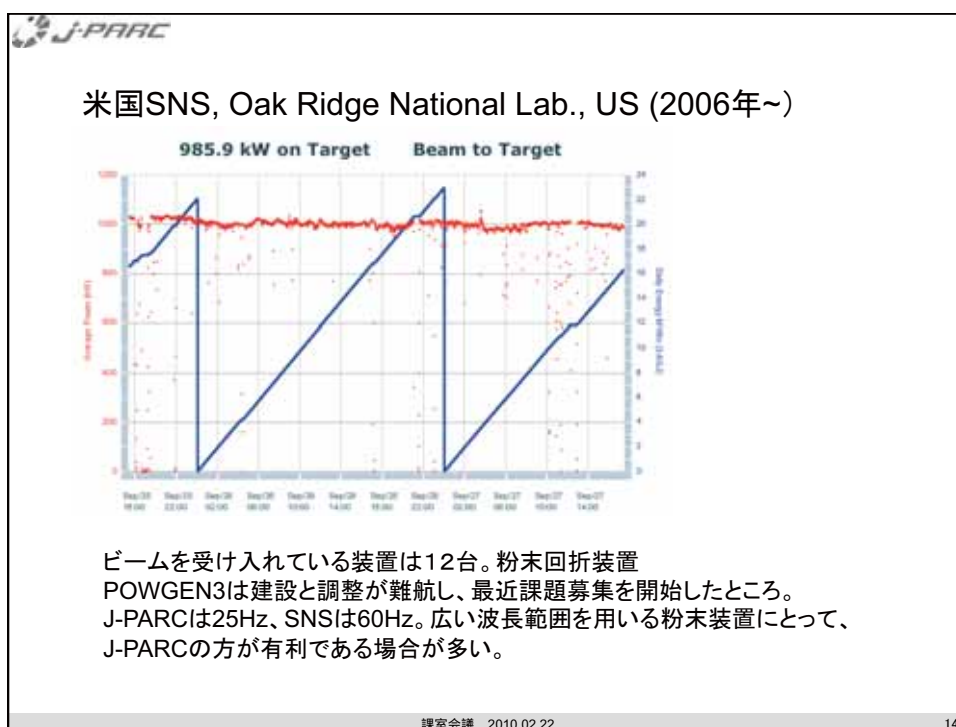
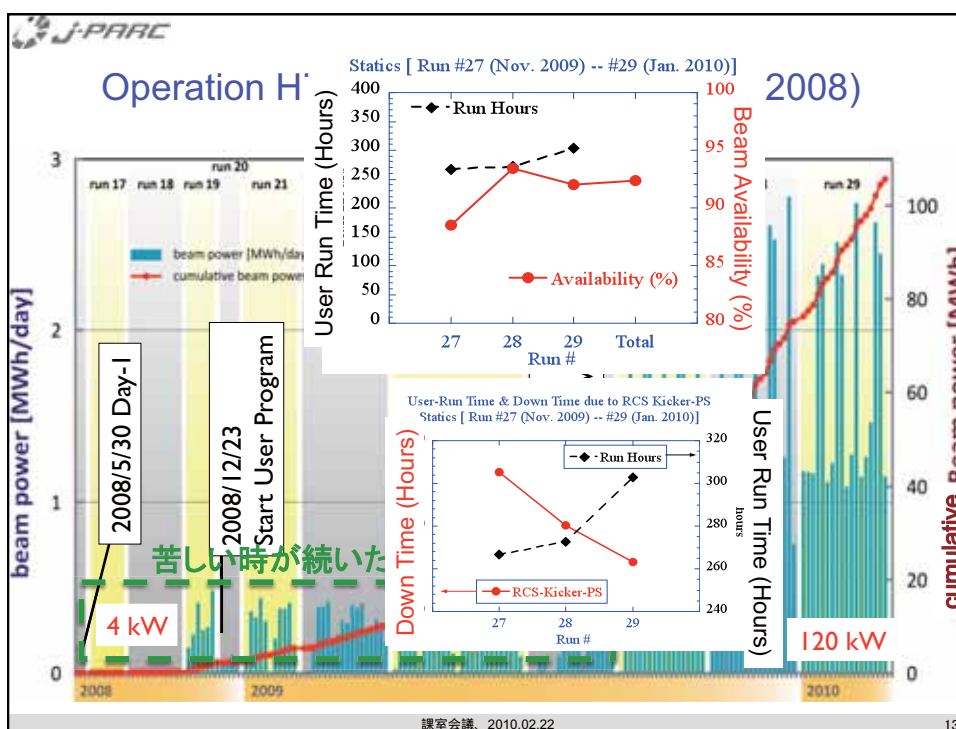
塩谷大臣(元)

江田 参院議長(元)

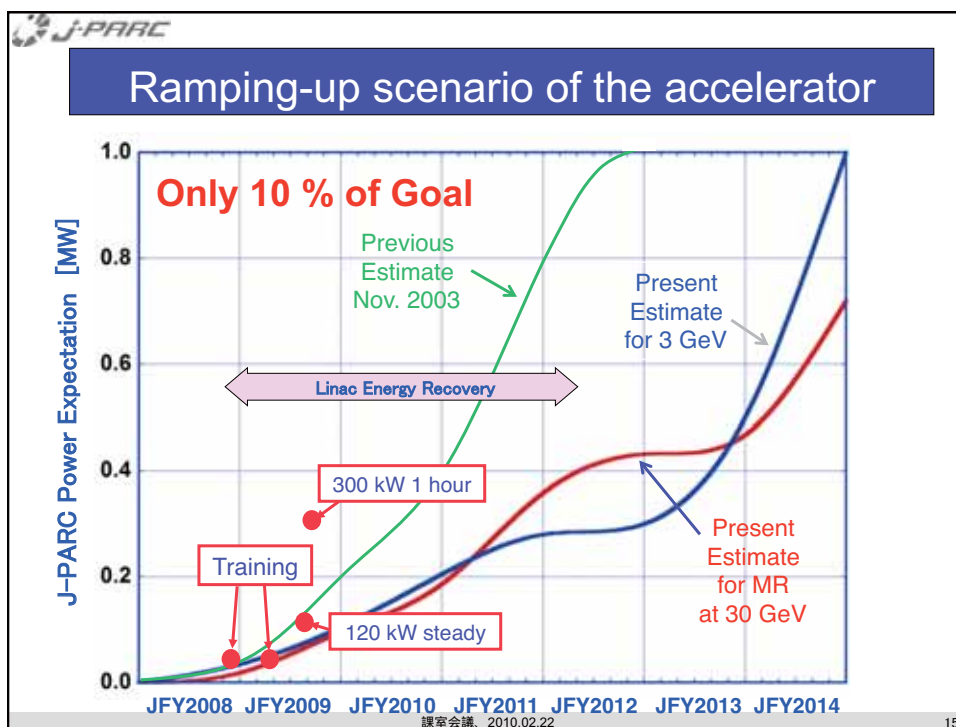
塩谷 大臣
金澤 学術会議議長
日本 敬氏
今井 元大臣
有馬 県知事
橋本 茨城

参加者(全部で約900人)

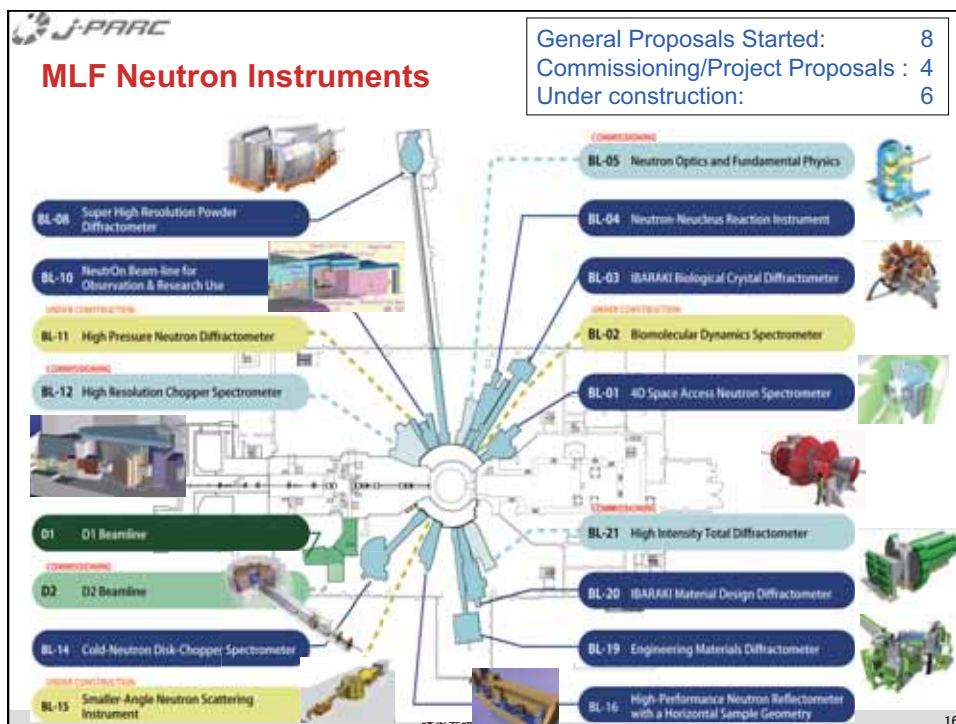




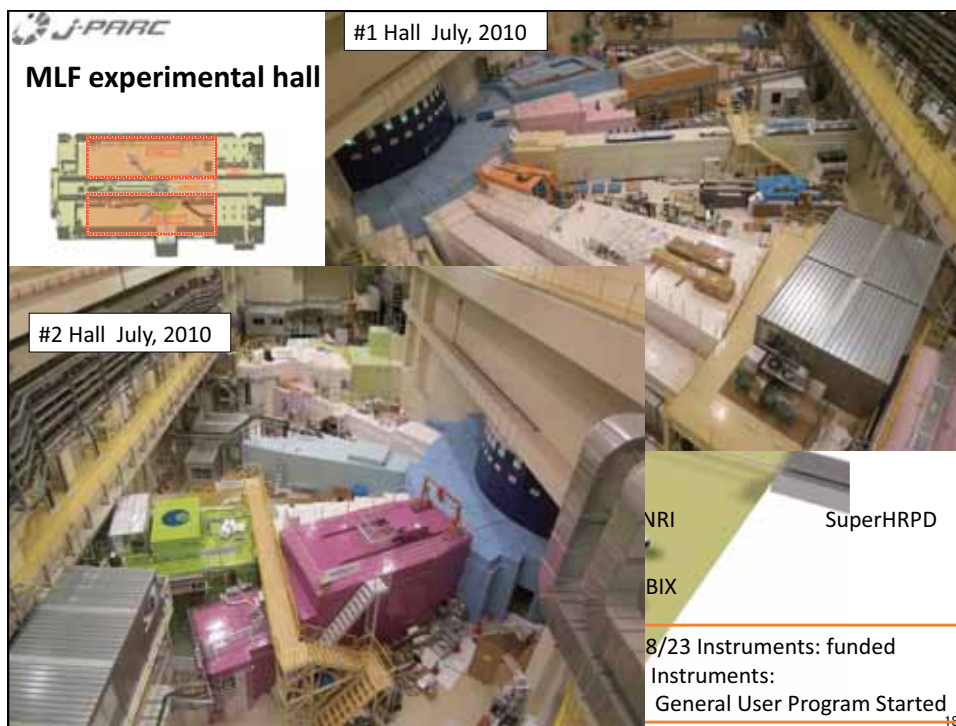
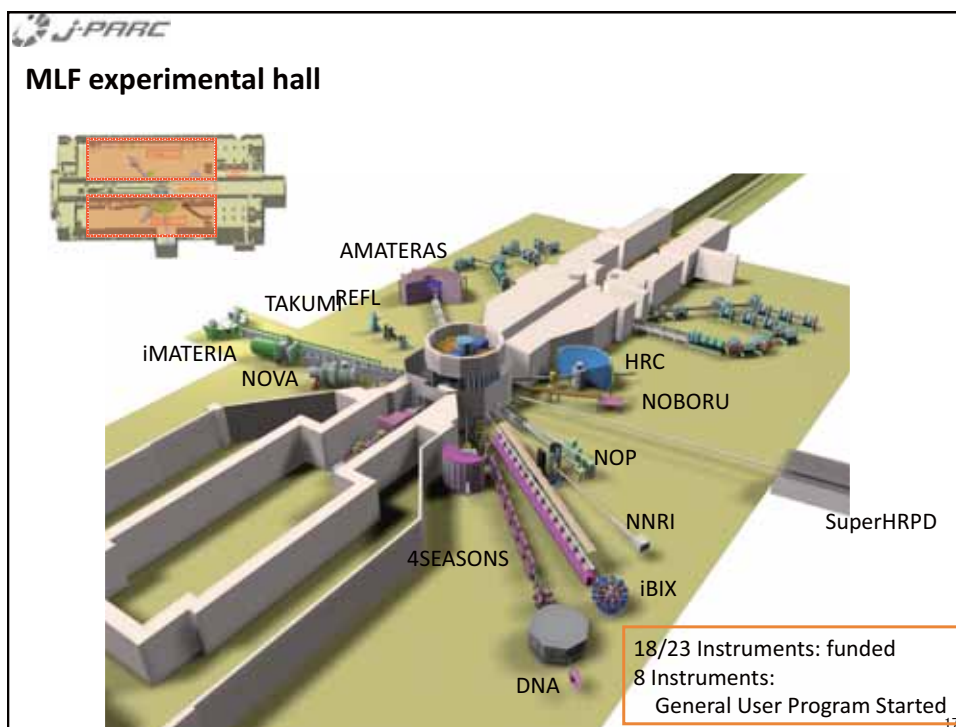
ビームを受け入れている装置は12台。粉末回折装置
 POWGEN3は建設と調整が難航し、最近課題募集を開始したところ。
 J-PARCは25Hz、SNSは60Hz。広い波長範囲を用いる粉末装置にとって、
 J-PARCの方が有利である場合が多い。



15



16

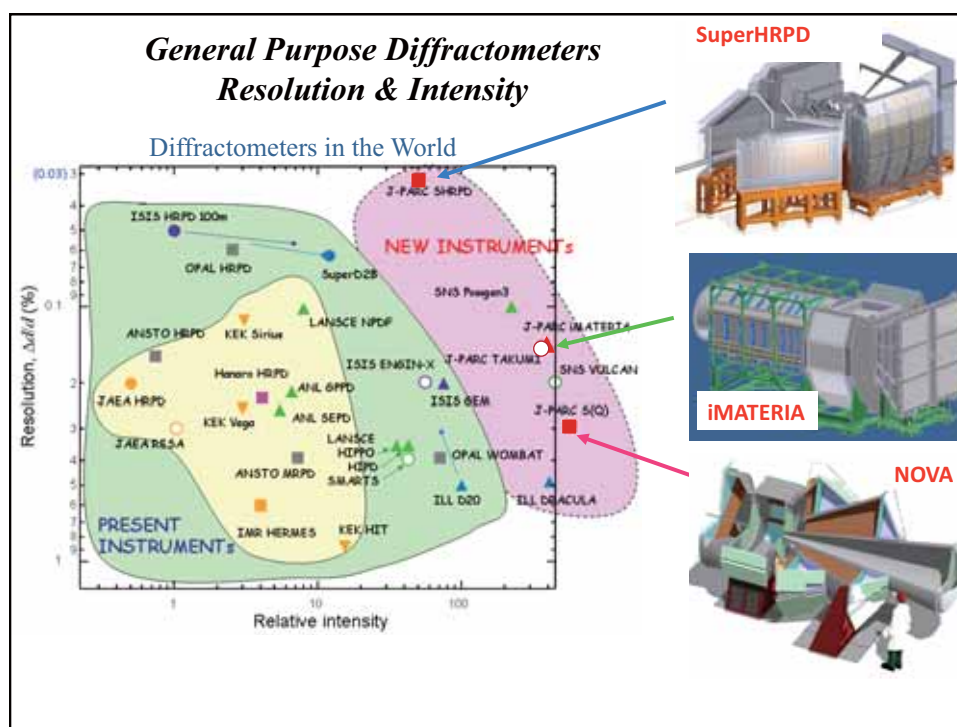


回折装置	
茨城県生命物質構造解析装置 (BL03, iBIX)	
超高分解能粉末回折装置 (BL08, SuperHRPD)	
特殊環境中性子回折装置 (BL09, SPICA)	建設中
超高圧回折装置 (BL11, PLANET) 建設中	
特殊環境微小単結晶中性子構造解析装置 (BL18, 千手)	建設中
工学材料回折装置 (BL19, 匠)	
茨城県材料構造解析装置 (BL20, iMATERIA)	
高強度全散乱装置 (BL21, NOVA)	
非弾性散乱装置	
4次元空間中性子探査装置 (BL01, 4SEASONS)	
ダイナミクス解析装置 (BL02, DNA)	建設中
高分解能チョッパー分光器 (BL12, HRC)	
冷中性子ディスクチョッパー型分光器 (BL14, アマテラス)	
小角散乱・反射率計	
大強度型中性子小角散乱装置 (BL15, 大観)	建設中
高性能試料水平型中性子反射率計 (BL16, ARISA-II)	
試料垂直型偏極中性子反射率計 (BL17, VNR)	建設中
その他	
中性子核反応測定装置 (BL04, ANNRI)	
中性子光学基礎物理実験装置 (BL05, NOP)	
中性子源特性試験装置 (BL10, NOBORU)	


回折装置	18台
茨城県生命物質構造解析装置 (BL03, iBIX)	赤6:KEK、緑2:茨城県、黒10:JAEA 外部資金7、供用法4
超高分解能粉末回折装置 (BL08, SuperHRPD)	
特殊環境中性子回折装置 (BL09, SPICA)	建設中
超高圧回折装置 (BL11, PLANET) 建設中	
特殊環境微小単結晶中性子構造解析装置 (BL18, 千手)	建設中
工学材料回折装置 (BL19, 匠)	
茨城県材料構造解析装置 (BL20, iMATERIA)	
高強度全散乱装置 (BL21, NOVA)	
非弾性散乱装置	
4次元空間中性子探査装置 (BL01, 4SEASONS)	
ダイナミクス解析装置 (BL02, DNA)	建設中
高分解能チョッパー分光器 (BL12, HRC)	
冷中性子ディスクチョッパー型分光器 (BL14, アマテラス)	
小角散乱・反射率計	
大強度型中性子小角散乱装置 (BL15, 大観)	建設中
高性能試料水平型中性子反射率計 (BL16, ARISA-II)	
試料垂直型偏極中性子反射率計 (BL17, VNR)	建設中
その他	
中性子核反応測定装置 (BL04, ANNRI)	
中性子光学基礎物理実験装置 (BL05, NOP)	
中性子源特性試験装置 (BL10, NOBORU)	

回折装置	8台	
	赤3:KEK(外部資金2)、緑2:茨城県、黒3:JAEA(供用法1)	
	茨城県生命物質構造解析装置(BL03, iBIX)	
	超高分解能粉末回折装置(BL08, SuperHRPD)	
	特殊環境中性子回折装置(BL09, SPICA)	NEDO 建設中
	超高压回折装置(BL11, PLANET)	建設中
	微小単結晶中性子構造解析装置(BL18, 千手)	供用法 建設中
	工学材料回折装置(BL19, 匠)	
	茨城県材料構造解析装置(BL20, iMATERIA)	
	高強度全散乱装置(BL21, NOVA)	NEDO

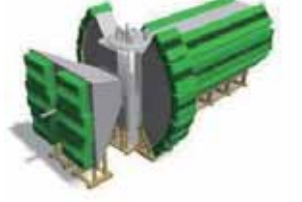
粉末回折装置群整備の戦略	6台	
	赤3:KEK(外部資金2)、緑1:茨城県、黒2:JAEA	
	分解能と強度の異なる3台 (General Purpose Diffractometers)	
	超高分解能粉末回折装置(BL08, SuperHRPD)	
	茨城県材料構造解析装置(BL20, iMATERIA)	産業利用促進
	高強度全散乱装置(BL21, NOVA)	水素貯蔵材料(NEDO)
	特殊環境・特殊目的 (Special Purpose Diffractometers)	
	特殊環境中性子回折装置(BL09, SPICA)	電池(NEDO) 建設中
	超高压回折装置(BL11, PLANET)	建設中
	工学材料回折装置(BL19, 匠)	残留応力




Three General Purpose Powder Diffractometers



BL08: SuperHRPD (KEK)
Highest Res. Powder Diff. ($\Delta d/d = 3 \times 10^{-4}$)
Poisoned Decoupled Moderator
L1 = 92.4 m / Curved guide $r = 5\text{km}$



BL20: iMATERIA (茨城県)
目的: 産業促進
High Res. Powder Diff. ($\Delta d/d = 1.5 \times 10^{-3}$)
Poisoned Decoupled Moderator
L1 = 26.5m / straight guide
80 % beamtime is called by Ibaraki Pref.
20 % called by J-PARC for academic users



BL21: NOVA (KEK) NEDO
目的: 水素貯蔵材料基礎研究
Total Scattering Diff. ($\Delta d/d = 3-5 \times 10^{-3}$)
Non-Poisoned Decoupled Moderator / L1 = 15m
In 2010B, 10 % beamtime is called by J-PARC

Three Special Purpose Powder Diffractometers



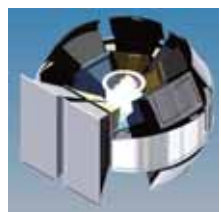
BL19: TAKUMI (JAEA)
 Engineering Diffractometer ($\Delta d/d = 2 \times 10^{-3}$)
 Poisoned Decoupled Moderator
 L1 = 40m/ Curved guide

Under Construction



BL11: PLANET (Univ. Tokyo/JAEA) 科研費
 High Press. Diffractometer ($\Delta d/d = 5 \times 10^{-3}$)
 Non-Poisoned Decoupled Moderator
 L1 = 25m

Under Construction



SPICA (KEK/Kyoto Univ.) NEDO
 目的: 蓄電池材料基礎研究
 Special Environment Powder Diff. ($\Delta d/d = 8 \times 10^{-4}$)
 Poisoned Decoupled Moderator
 L1 = 52m/ straight guide

BL08: Highest Resolution Powder Diffractometer (SuperHRPD)



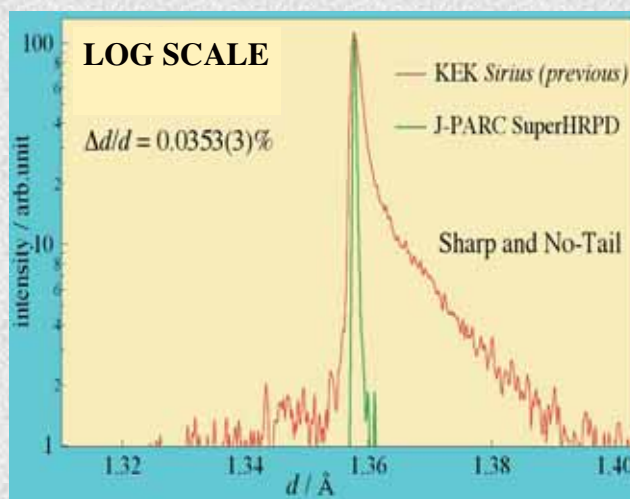
Requirement

- Best Resolution ($\Delta d/d = 3 \times 10^{-4}$) with WIDER d windows
- More Symmetric Peak Profile, Good S/N ratio
- 25Hz and $L = 100$ m
- Develop HIGH RESOLUTION MODERATOR

SuperHRPD @BL08

BL08 potentially has **best resolution**

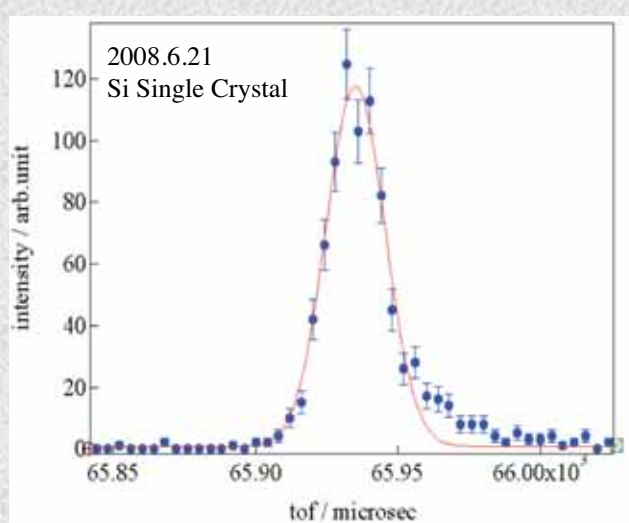
$\Delta d/d = 3.5 \times 10^{-4}$ with **symmetrical profile shape**



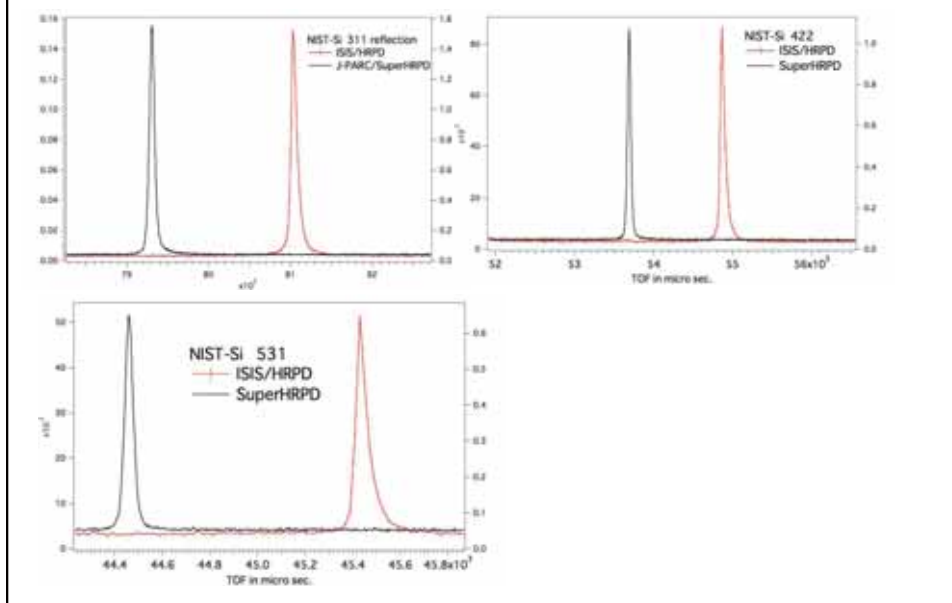
SuperHRPD @BL08

BL08 potentially has **best resolution**

$\Delta d/d = 3.5 \times 10^{-4}$ with **symmetrical profile shape**



SuperHRPD @BL08は世界最高分解能を達成した
ISIS-HRPD@2m and J-PARC-SuperHRPDの比較



SuperHRPD @BL08

Specification

Moderator: Poisoned-decoupled (thin side) (AIC decoupler/ Cd poison)

L1 = 92.4m /L2 = 2 - 4.5 m (3 banks)

supermirror guide (m = 3, 82 m, 25mmW x 75-55mmH)

検出器バンク: 3つの散乱角:

recycled 3He gas-filled PSD (10 atm, ½ inch x 60cm)

320 PSD (70%) in backward bank

240 PSD (25%) in 90 deg. bank

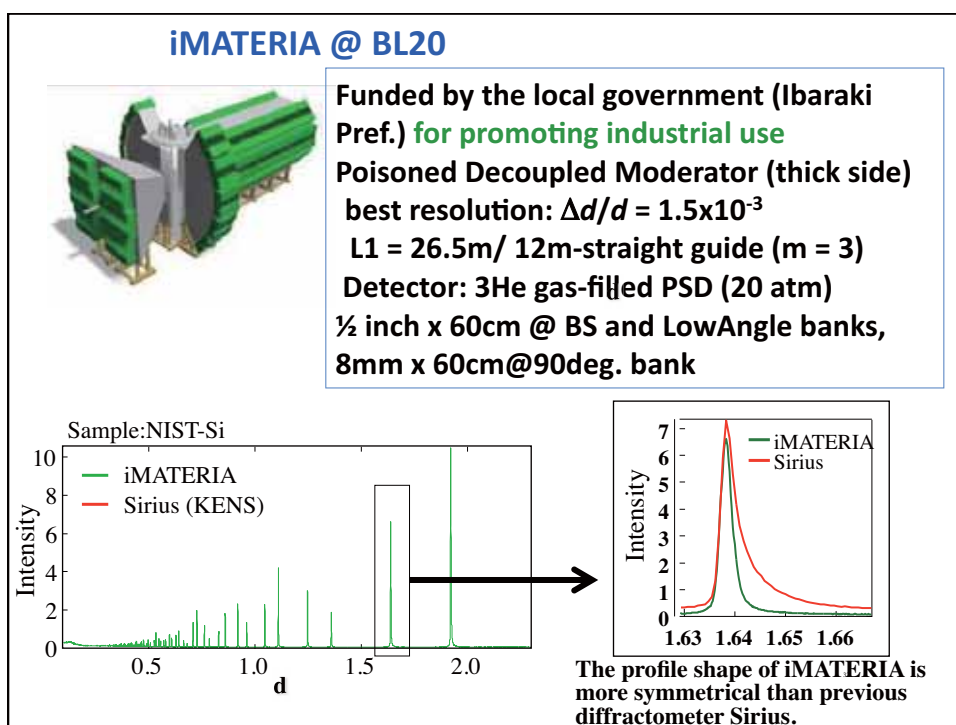
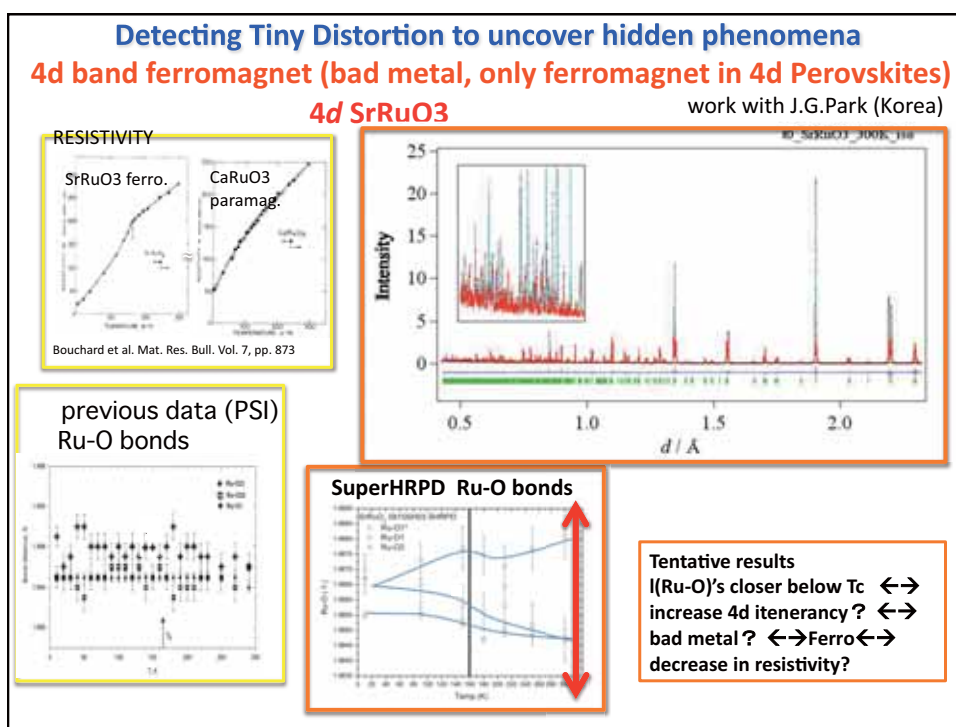
192 PSD (40%) in low angle bank

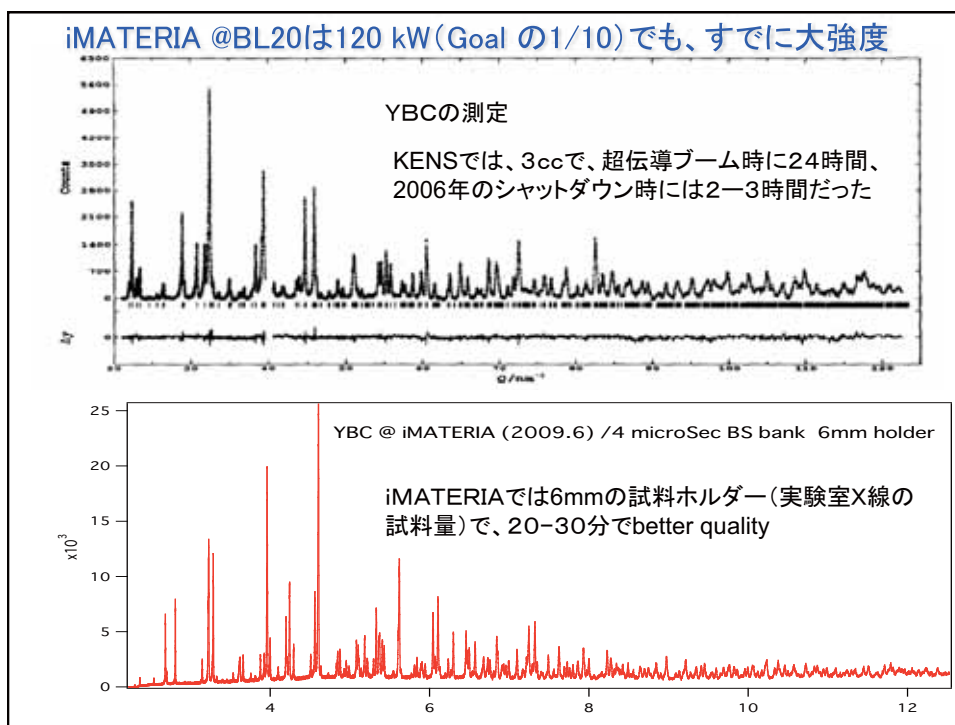
$d = 0.5 - 60 \text{ \AA}$

$2\theta = 10 - 175 \text{ degree}$

2010年6月以前のデータに対し
3バンクのデータ処理方法が
ほぼ確立した







iMATERIA @ BL20

- 80% 'General Use' (産業界向けに茨城県から公募)→ratingはJ-PARC 'Ibaraki Project Use' (大学等の研究者を含む)
- 20% 'General Use' (J-PARCが公募) → 大学等の研究者

公開した8台の装置への申請課題数

= 134(2009A+B), 190(2010A+B);

Proposals to iMATERIA = 52(2009A+B), 57(2010A+B)

J-PARCが公募 (University) 18(2009A+B), 22(2010A+B)

茨城県が公募 (Industries) 34(2009A+B), 35(2010A+B)

→Most industry users are from research laboratories, and no experience in neutron scattering, but many of them have experience in Spring-8 or PF.

→Academic users feel frustrated because of limited beamtime

iMATERIA @ BL20

Sample Exchange Robot was developed because;

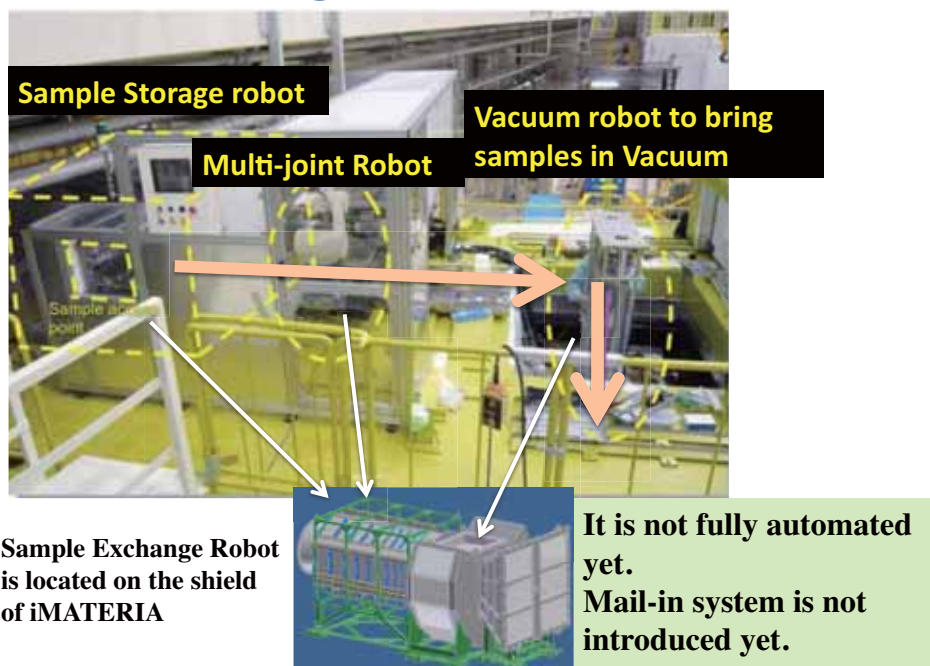
- 1) Most industry users and academic users in materials science requires many room temperature experiments
- 2) Introduction of Mail-in system is requested by such users

'Sample Storage Robot (試料貯蔵ロボット)' with 672 samples

'Multi-Joint Robot (多関節ロボット)' to pass samples inside to the radiation shield

'Vacuum Robot (真空ロボット)' to bring samples into the sample position in Vacuum

iMATERIA @ BL20



NOVA @ BL21 (Most Intense Total Scattering Diffractometer)



Funded by NEDO (funding organization under Ministry of Economy, Trade and Industry) for the study of hydrogen absorbing materials

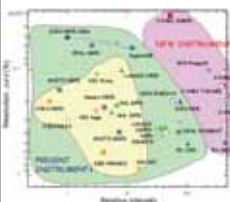
Best resolution: $\Delta d/d = 3-5 \times 10^{-3}$

Non-Poisoned Decoupled Moderator L1 = 15m

Detector: ^3He gas-filled PSD (20 atm, $\frac{1}{2}$ inch)

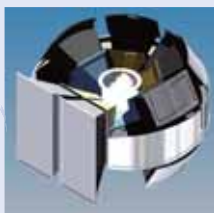
Commissioning started on Mar. 2009, and the general user program starts on 2010B (Dec., 2010 – March, 2011)

Initially 10 % beamtime is called by J-PARC
90 % is used by NEDO project team



NOVAは最大強度の粉末回折装置だが、液体・非晶質などの構造研究に適している

SPICA @ BL09 (Dedicated instrument for Battery Research)



Funded by NEDO (funding organization under Ministry of Economy, Trade and Industry) for the study of ADVANCED BATTERIES

Special Environment Powder Diff. ($\Delta d/d = 8 \times 10^{-4}$)

Poisoned Decoupled Moderator
L1 = 52m/ straight guide

SPICA @ BL09 (Dedicated instrument for Battery Research)

J-PARC MLF

Funded by NEDO (funding organization under Ministry of Economy, Trade and Industry) for the study of **ADVANCED BATTERIES**

Special Environment Powder Diff. ($\Delta d/d = 8 \times 10^{-4}$)

Poisoned Decoupled Moderator
L1 = 52m/ straight guide

Commissioning is scheduled on Oct. 2011

Dedicated beamline BUilding

BL08

BL09

BL09

Development of Z-Code for Powder diffraction data analysis

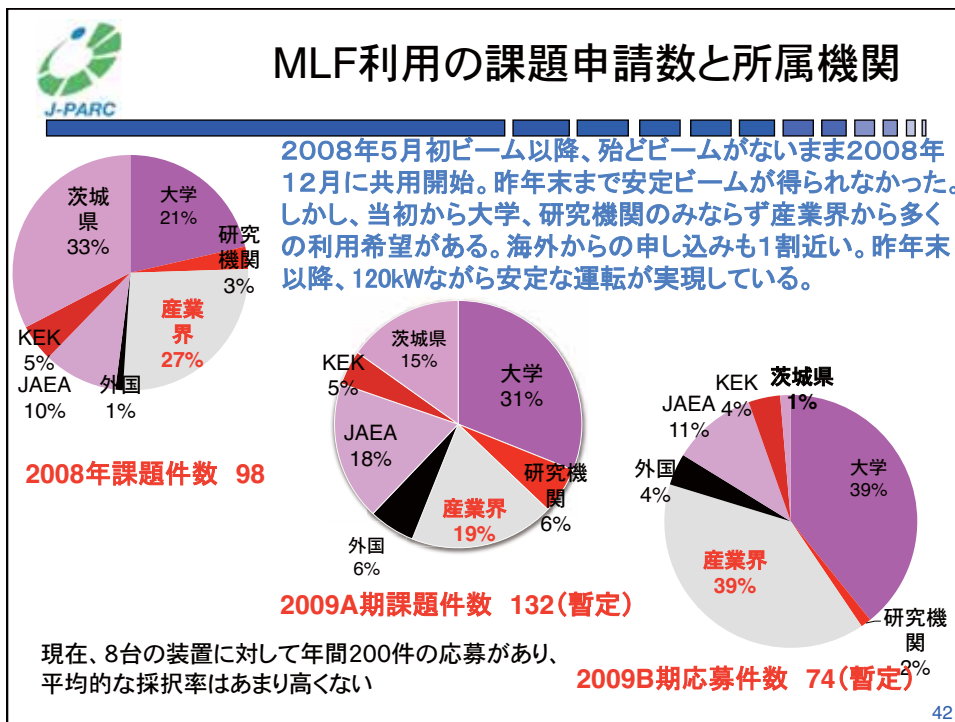
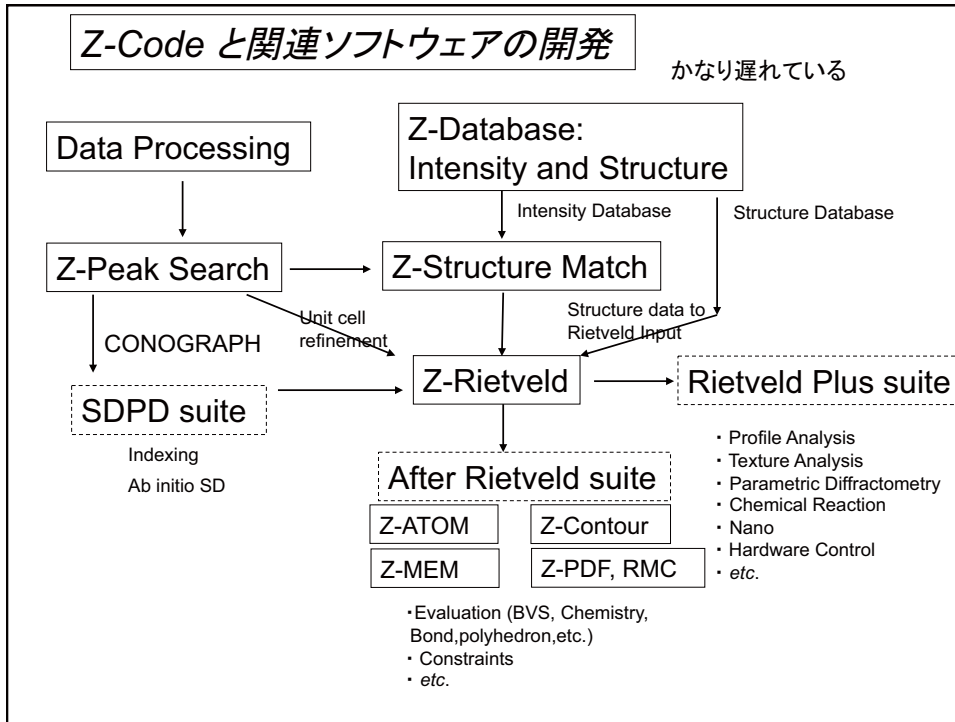
Z-Rietveld

Rietveld 解析ソフトウェア

Z-MEM 最大エントロピー法

Z-RMC
逆モンテカルロ法 (RMC)

Z-PS, PM, DB,
ピーク検索、データベース検索、構造検索、物質同定。



MLF利用課題の分類

Categories of Proposals	Type of proposals	
General Use	Regular proposal - Called twice a year	Nonproprietary Proprietary
	Urgent proposal (under planning)	Nonproprietary Proprietary
	Rapid access proposal	Not Ready
Project Use	Regular proposal - Called once a year	Nonproprietary
Instrument Group Use	Regular proposal - Called once a year	Nonproprietary

Proposals for General Use are evaluated by 4 referees, and results are pre-reviewed by specific sub-committees.

- 1) Promoting and enhancing researches in wide variety of users (General Use)
- 2) Both JAEA/KEK mission oriented researches (Project Use)
- 3) Maximizing the performance of MLF and leading edge scientific program by instrument groups (Instrument Group Use)

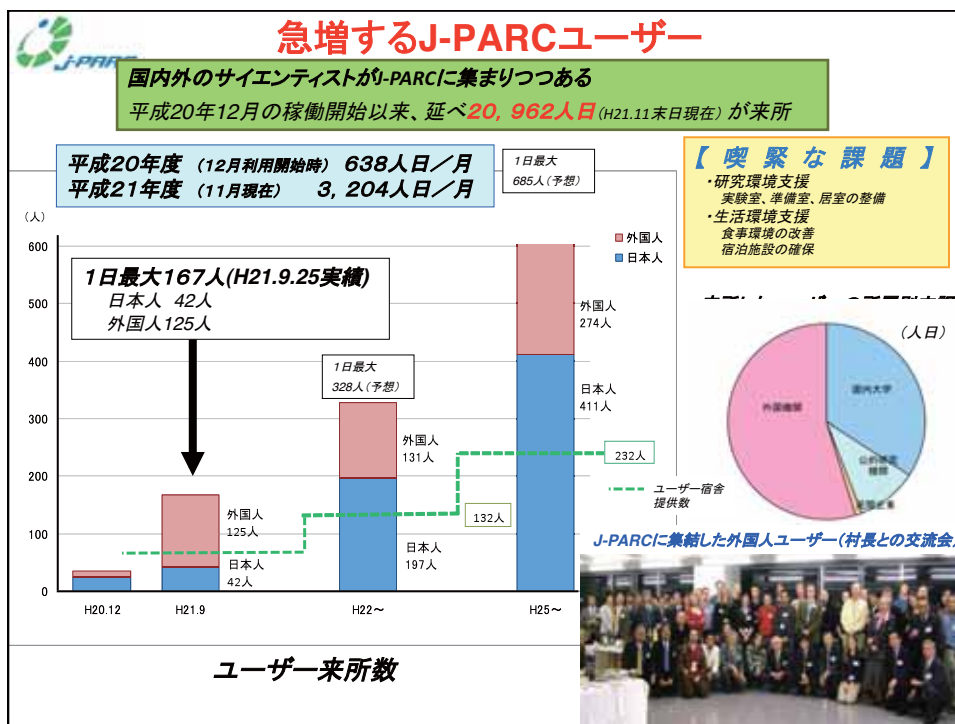
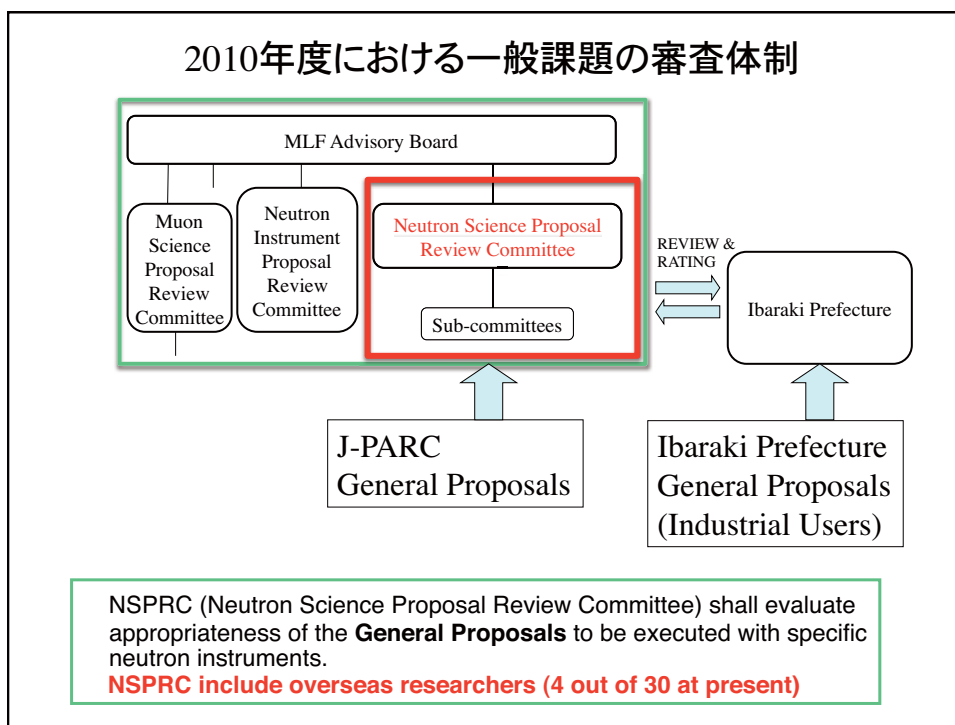
MLF利用課題の分類

Categories of Proposals	Type of proposals	
General Use	Regular proposal - Called twice a year	Nonproprietary Proprietary
	Urgent proposal (under planning)	Nonproprietary Proprietary
	Rapid access proposal	Not Ready
Project Use	Regular proposal - Called once a year	Nonproprietary
Instrument Group Use	Regular proposal - Called once a year	Nonproprietary

**General Proposal form is in English, all proposals (except industrial use) should be written in English.
We will welcome Proposals from Overseas researchers**

Proposals for General Use are evaluated by 4 referees, and results are pre-reviewed by specific sub-committees.

- 1) Promoting and enhancing researches in wide variety of users (General Use)
- 2) Both JAEA/KEK mission oriented researches (Project Use)
- 3) Maximizing the performance of MLF and leading edge scientific program by instrument groups (Instrument Group Use)





いばらき量子ビーム研究センター(IQBRC)


1階 ユーザーズオフィス、等
2階 会議室、等
3-4階 居室





ユーザーズオフィス

47



まとめ

- ユニークな加速器プロジェクト ... 多目的施設
 - 世界最大強度の大型陽子加速器 → 多種類の二次粒子
→ 多目的施設。
 - 広範囲の科学 (物質・生命科学、原子核素粒子科学、原子力工学)
→ 学際複合施設。
- MLF: 12台運転中、6台建設中
 - 新規建設と、利用者の受け入れ体制の整備に努力中。
- 粉末回折装置: 今後の課題
 - 成果の創出
 - 建設済みの装置の早期整備 (まだ部分的にしか設計した機能を発揮していない)
 - 利用体制の整備 Mail-inの導入の検討など
 - 新規建設
 - Z-Codeの整備とリリース

48

***Acknowledgment:
Powder Diffraction Group and Colleagues***

KEK Group for BL08, BL09 and BL20



S. Torii



Y. Yonemura



R. Tomiyasu

J. Zhang
K. Kino
T. Y. S. Panca P.
P. Miao
K. Muroya
M. Kawai
H. Asano

JAEA Group for BL19



S. Harjo



K. Aizawa

Ibaraki University Group for BL20



T. Ishigaki



A. Hoshikawa

K. Iwase
Dyah

Ibaraki Prefecture

M. Hayashi
Y. Morii

Kyoto Univ. Group for BL09



T. Fukunaga,

Tohoku Univ. Group

Y. Noda
R. Kiyonagi

And J-PARC members

K. Mori

visit J-PARC website

<http://j-parc.jp/index-e.html>