



平成 22 年度黎明研究成果報告集

Reports on JAEA's Reimei Research Program

April 1, 2010 – March 31, 2011

(編) 永目 諭一郎

(Ed.) Yuichiro NAGAME

先端基礎研究センター

Advanced Science Research Center

August 2011

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

平成 22 年度黎明研究成果報告集

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター
(編) 永目 諭一郎

(2011 年 6 月 21 日受理)

原子力科学の分野で革新的な原理や現象の発見をめざす先端基礎研究を対象として、研究テーマを原子力機構外から公募する黎明研究制度が平成 18 年度から新たに発足した。研究期間を最長 2 年間とし、年度ごとに評価を実施して課題を採択することとした。平成 22 年度は応募総数 26 件の中から 5 件を選定し、先端基礎研究センターとの共同研究として実施した。本報告書はこれらの黎明研究の成果をまとめたものである。

本報告書は、黎明研究から多くの基礎・基盤研究が進展する一助とするため、黎明研究の実施者より提出された成果報告書をまとめ、公表するものである。

Reports on JAEA's Reimei Research Program
April 1, 2010 – March 31, 2011

(Ed.) Yuichiro NAGAME

Advanced Science Research Center
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received June 21, 2011)

The Reimei (Dawn) Research Program is conducted based on public application to encourage original and/or unique ideas in the field of new frontier research of atomic energy sciences. The five research subjects were accepted in the fiscal year 2010 that were carried out in collaboration with Advanced Science Research Center. The summaries of these research subjects are compiled in this report. We hope that new frontier research projects will be developed through the present Reimei Research Program.

Keywords: Reimei Research Program, Atomic Energy Science

目 次

1	極限条件下実験によるアクチノイド化合物のエキゾチック物性研究への新しい アプローチ	1
	G. H. Lander, A. Hiess, and S. Kambe	
2	軟 X 線によるアデノシン三リン酸 (ATP) 放射線障害の生物学的評価	7
	秋光 信佳、藤井 紳一郎、藤井 健太郎、月本 光俊、小島 周二	
3	スピントロニクス材料及びナノ磁性体ダイナミクスの理論	13
	T. Ziman	
4	Li(Mn,Zn)As 及び I - II - V 族ドーパ磁性半導体の合成と MuSR 及び他の手法を用いた 特性評価	18
	Z. Deng, C. Q. Jin, Q. Q. Liu, X. C. Wang, J. L. Zhu, S. M. Feng, L. C. Chen, R. C. Yu, C. Arguello, T. Goko, F. L. Ning, J. S. Zhang, Yayu Wang, A. A. Aczel, T. Munsie, T. J. Williams, G. M. Luke, T. Kakeshita, S. Uchida, W. Higemoto, T. U. Ito, Bo Gu, S. Maekawa, G. D. Morris, and Y. J. Uemura	
5	パルス強磁場核スピン偏極による時間分解中性子コントラスト法	24
	鳴海 康雄、野尻 浩之、大山 研司	

Contents

1	New Approach to the Exotic Phases of Actinides Compounds under Unconventional Experimental Conditions	1
	G. H. Lander, A. Hiess, and S. Kambe	
2	Biological Assessment of Radiation Damage of ATP by Soft X-rays	7
	N. Akimitsu, S. Fujii, K. Fujii, M. Tsukimoto and S. Kojima	
3	Theory of Materials for Spin Electronics and Dynamics of Magnetic Nanostructures	13
	T. Ziman	
4	Synthesis, MuSR and Other Studies of Li(Mn,Zn)As and I-II-V Doped Magnetic Semiconductors ..	18
	Z. Deng, C. Q. Jin, Q. Q. Liu, X. C. Wang, J. L. Zhu, S. M. Feng, L. C. Chen, R. C. Yu, C. Arguello, T. Goko, F. L. Ning, J. S. Zhang, Yayu Wang, A. A. Aczel, T. Munsie, T. J. Williams, G. M. Luke, T. Kakeshita, S. Uchida, W. Higemoto, T. U. Ito, Bo Gu, S. Maekawa, G. D. Morris, and Y. J. Uemura	
5	Time-resolved Neutron Contrast Method by Pulsed-high-magnetic-field Nuclear Polarization	24
	Y. Narumi, H. Nojiri, and K. Ohyama	

1. New Approach to the Exotic Phases of Actinides Compounds under Unconventional Experimental Conditions

G. H. Lander^{1,2}, A. Hiess¹, and S. Kambe³

¹ Institut Laue–Langevin, Grenoble, France

²European Commission, JRC, Institute for Transuranium Elements, Karlsruhe, Germany

³ Advanced Science Research Centre, Japan Atomic Energy Agency, Tokai, Japan

Abstract

We describe some collaborative experiments using large facilities that have been performed during the first year of the REIMEI project with the title above. Also discussed are the conclusions of the 1st Workshop on this program, held at Tokai 16-18 Feb. 2011.

1. Research Objectives

We propose development of measurements for actinides compounds under unconventional conditions *i.e.* highly radioactive (uranium, transuranium, ²³⁵U enriched) materials, high magnetic field, high pressures on international collaborations of several institutes which have their own special techniques, in order to discover and clarify the exotic electronic properties in 5f-electron systems, which appear only under extreme conditions due to large energy scales (Fermi energy, Kondo temperature), compared with 4f-systems. A special emphasize will be put to combine in-situ bulk measurements with scattering methods to gain microscopic insight into the various phases in such systems. Because of the difficulty for international transport of actinides samples, researchers and techniques will be encouraged to travel and collaborate to develop and perform the investigations.

2. Research Contents

We describe below some of the collaborations that have been established in the first year of operating the REIMEI project.

- (1) High magnetic field NMR using ²⁹Si-enriched URu₂Si₂ in National High Magnetic Field Laboratory (NHMFL), USA Collaboration between JAEA, Los Alamos National Laboratory (LANL) and NHMFL underway at NHMFL.
- (2) Energy scale of the electron-boson spectral function and superconductivity in NpPd₅Al₂. Collaboration between Insitute for Transuranium Elements (ITU) and JAEA. Experiments at JAEA with theory at ITU and University of Turin.
- (3) Search for quadrupolar ordering in the hidden ordered phase of URu₂Si₂. Collaboration between ITU and Commissariat à l'énergie atomique (CEA) with experiments at ESRF.
- (4) Resonant x-ray emission spectroscopy at the *L*₃ edge of americium up to 23 GPa. Collaboration between ITU and ESRF, with experiments at ESRF.
- (5) Understanding the complex phase diagram of uranium: the role of electron-phonon coupling. Collaboration between CEA, ITU, and LANL. Experiments at ESRF with theory at CEA.

- (6) First International Advanced Scientific Research Centre Workshop in Tokai, 16-18 Feb. 2011.

3. Research Results

(1) *High magnetic field NMR using ^{29}Si -enriched URu_2Si_2 in NHMFL.*

Several single crystals of URu_2Si_2 enriched to 99.8 at. % by ^{29}Si isotope were shipped from LANL to NHMFL. These crystals were grown by the Czochralski-pulling method, and well annealed with solid-state electro-transport furnace under ultra high vacuum condition. In this first NMR measurement by JAEA and NHMFL NMR groups, we have characterized the sample quality. The line width of ^{29}Si -NMR at 6.7 T is around 10 kHz for H//a, which is quite narrow indicating a good homogeneity of sample. In fact, this line width value is consistent with the previously reported line width in non-enriched sample [1] if we consider some additional line broadening due to the dipolar contribution from ^{29}Si nuclei. In addition, T-dependence of spin-lattice time has been found to be same as the previously reported value in a high quality non-enriched sample. The ^{29}Si -enrichment can reduce the magnet time very efficiently. For the next measurement in the higher field, we will concentrate to measure the temperature dependence of NMR spectrum under the several higher fields up to 29 T, in order to identify the phase transition around 22 T, which would be accompanied with a change of Fermi-surface [1]. In addition to the high field NMR study, we have developed a high pressure NMR cell (Fig.1) in order to perform NMR under multi-extreme (high field+ high pressure) conditions.



Fig. 1 High pressure NMR cell designed up to 3.5 GPa

(2) *Energy scale of the electron-boson spectral function and superconductivity in NpPd_5Al_2 .*

The energy scale Ω_0 of the electron-boson spectral function in the heavy-fermion, d-wave superconductor NpPd_5Al_2 has been predicted on the basis of Eliashberg theory calculations (Fig.2). Assuming a spectral function shape typical for antiferromagnetic spin fluctuations, and imposing constraints provided by the experimental values for the critical temperature and the low-temperature energy gap, one obtains values of Ω_0 of about 2-2.5 meV, slightly dependent on the strength of the Coulomb pseudopotential. These values are in excellent agreement with the characteristic magnetic fluctuations energy estimated from NMR measurements of the nuclear-spin-lattice relaxation time at

the Al site. The calculated temperature dependence of the upper critical field, the local spin susceptibility, and the nuclear spin-lattice relaxation rate is also in good agreement with available experimental data, showing that a coherent description of the superconducting state can be obtained assuming that the electron pairing in NpPd_5Al_2 is mediated by antiferromagnetic fluctuations. Inelastic neutron scattering experiments are planned to confirm the proposed scenario. This work has been published [2].

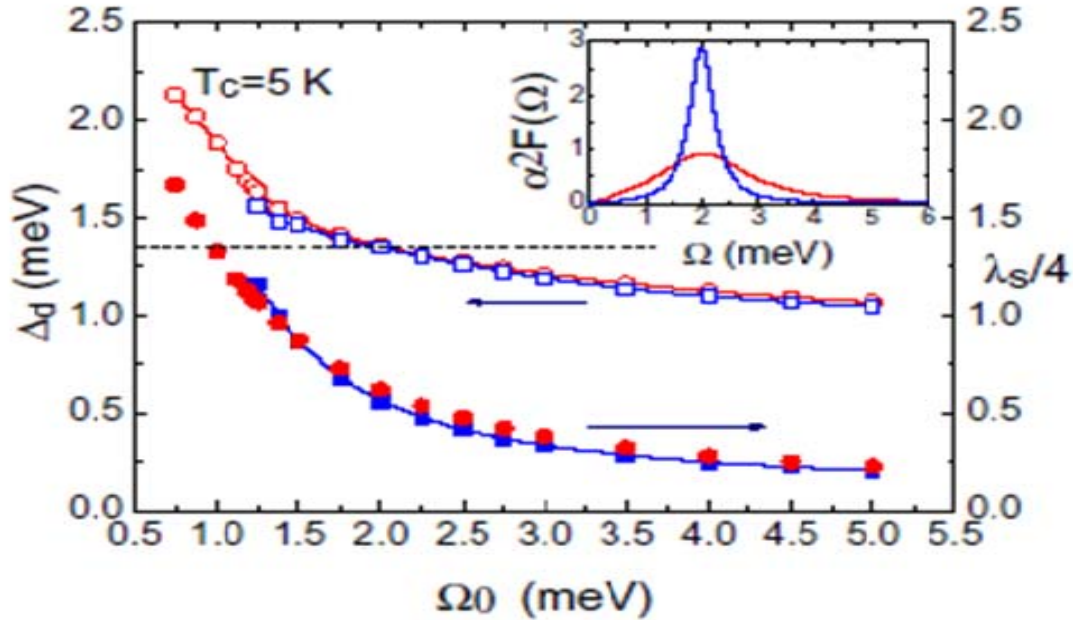


Fig. 2 (Left axis) Gap values Δ_d calculated at $T = 0.25$ K assuming a Coulomb pseudopotential $\mu_d^* = 0$, and an Eliashberg spectral function centered at an energy Ω_0 and having full width at half maximum of 1 meV (open circles) or 0.25 meV (open squares). The horizontal dashed line represents the experimental value of μ_d^* . (Right axis) Electron boson coupling constant λ_s as a function of Ω_0 , for $T_c = 5$ K, $\mu_d^* = 0$, and FWHM of 1 meV (closed circles) or 0.25 meV (closed squares). The inset shows the electron-boson spectral function in the two cases.

(3) *Search for quadrupolar ordering in the hidden ordered phase of URu_2Si_2 .*

Experiments at the ID20 beamline at the ESRF (Grenoble) have searched for any indication of quadrupole (or higher multipole) ordering in URu_2Si_2 below the ordering temperature $T_N = 17$ K. All previous searches have been performed along the highly symmetric [001] direction in reciprocal space, but symmetry considerations may possibly forbid a diffraction peak in this direction, as is the case, for example, in UO_2 . We have used a crystal cut with a (101) face and examined the (201) reflection. All aspects of the signal, including its azimuthal dependence, follow precisely the predictions for a *dipole* signal, in agreement with previous work. We can exclude *all* types of possible quadrupolar ordering at wave vectors corresponding to $q = [1\ 0\ 0]$. In addition, a careful examination of the energy dependence eliminates the possibility of many higher-order multipoles ordering, at least at this and neighbouring wave vectors. Our work complements and extends a recent study reported from SPring-8 by a Japanese group [3]. This work has been accepted for publication [4].

(4) *Resonant x-ray emission spectroscopy at the L_3 edge of americium up to 23 GPa.*

Resonant x-ray emission spectroscopy and x-ray absorption near-edge structure experiments have been performed on Am metal at the L_3 edge as a function of pressure. The hypothesis that the Am valence change at high pressure is associated with a mixing of the $5f^6$ and $5f^7$ configurations, hybridized with the 6d valence band, is not substantiated by the experiments. Neither the measured resonant x-ray emission spectroscopy nor x-ray absorption near-edge structure exhibit additional features expected for mixed valence. Only a small shift +2 eV of the L_3 edge energy position and a decrease in white line intensity at high pressure is observed. Further progress should be directed toward experiments at the Am M edges to observe directly the 5f states. This work has been published [5].

(5) *Understanding the complex phase diagram of uranium: the role of electron-phonon coupling.*

Both experiment (at the ESRF) and theory (performed at the CEA) have played a role in understanding the phase diagram of uranium metal. Understanding the complex low-temperature behavior of uranium metal has been a challenge for theorists since its experimental determination in the period 1960-1985. Recently, theory has accurately reproduced the phonon dispersion curves and predicted their behaviour under pressure. We report an experimental confirmation of these predictions up to 20 GPa. New calculations demonstrate the strong pressure (and momentum) dependence of the electron-phonon coupling, whereas the Fermi-surface nesting is independent of pressure. This allows a full understanding of the complex phase diagram, and the interplay between the charge-density wave and superconductivity.

This work has been submitted for publication. S. Raymond, J. Bouchet, G.H. Lander, M. Le Tacon, G. Garbarino, M. Hoesch, J.-P. Rueff, M. Krisch, J.C. Lashley, R.K. Schulze, and R.C. Albers.

(6) *First International Advanced Scientific Research Centre Workshop in Tokai, 16-18 Feb. 2011.*

The Workshop was attended by 12 scientists from outside Japan, all of whom gave presentations: R. Caciuffo, and O. Pauvert (ITU, Karlsruhe, Germany), G. H. Lander and A. Hiess (ILL, Grenoble, France), J. P. Brison and S. Raymond (CEA, Grenoble, France), A. Rogalev (ESRF, Grenoble, France), F. Ronning (LANL, USA), N. Magnani (LBNL, Berkeley, USA), W. Knafo (LNCMI, Toulouse, France) and R. Urbano (NHMFL, USA) and Z. Fisk (UC-Davis, USA and JAEA). About 20 Japanese attended the Workshop with talks being given by: S. Kambe, Y. Haga, K. Kaneko, Y. Tokunaga, N. Tateiwa, H. M. Suzuki, and H. Sakai (all of JAEA, ASRC), T. Okane, and S. Fujimori (JAEA, SPring-8), and T. Hotta (Tokyo Metropolitan University).

The major purpose of the workshop was to identify collaborative projects for the second and third year of the REIMEI project. A number of important such collaborations were identified, some of which are discussed in the conclusions below.

4. Conclusions

The present REIMEI programme has made a good start with a number of important collaborations in the first year of operation (2010-2011). The objective is to increase our understanding of the unusual properties of the 5f electron systems by establishing collaborations on an international scale, and performing difficult experiments at large central facilities. These have the capability of answering questions about the microscopic origins of the unusual physics of the 5f electron states.

Some examples of the work planned for the near future are given below:

- (1) Further work at JAEA on NpPd_5Al_2 to make larger crystals for neutron scattering at JRR3 with ILL collaborators. This will allow a determination of the wave-vector dependence of the spin susceptibility.
- (2) NMR work to be concentrated on 115 materials at JAEA and LANL. A major goal is to observe the NMR signal from ^{239}Pu , which has never been observed.
- (3) NMR at ITU to explore multipolar order in mixed $\text{UO}_2 - \text{NpO}_2$ system. This will complement neutron and x-ray work already done on these systems, and establish microscopically whether the intermediate phases have a frustrated quadrupolar ordering.
- (4) LANL has reported a new Pu-based superconductor; PuCoIn_5 and an intensive effort will be made to further understand the microscopic origins of superconductor, in full collaboration with LANL. High-pressure resistivity experiments are to be made at ITU. Further efforts at ITU to make crystals of $^{242}\text{PuCoIn}_5$ would allow neutron experiments at the world's most productive source, ILL in Grenoble, France, and possible measurements of the phonons and x-ray circular magnetic dichroism (XMCD) at the ESRF, also in Grenoble. These experiments should prove whether the magnetic fluctuations drive the superconductivity.
- (5) Growth of USn_3 crystals will be attempted at JAEA and CEA, Grenoble. In principle, the use of the inelastic scattering spectrometer at J-PARC should give important information on the momentum dependence of the magnetic fluctuations, which have already been measured by NMR at JAEA. However, at the moment J-PARC does not allow the use of uranium samples, so this administrative problem needs to be solved. Further experiments on USn_3 single crystals would be Angle Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES) at SPring-8 – allowing a comparison of band structure calculations
- (6) XMCD at SPring-8 on UO_2 : oxygen K -edge, and U M -edges at ESRF. These experiments should allow a further understanding of the role of covalency in the actinide oxides.
- (7) Researchers from JAEA, CEA and ILL collaborate on inelastic neutron scattering investigations. The project focuses on cerium 115 superconductors such as CeCoIn_5 . Those compounds are precursor for future investigations planned on the newly discovered isostructural plutonium based superconductors PuCoGa_5 and PuCoIn_5 . Experiment on uranium based superconductors are also planned at ILL on Th-doped UBe_{13} , UPt_3 and UNi_2Al_3 .
- (8) A further follow-up workshop is planned to be held in Grenoble.

5. References

- [1] S.Takagi et al., J. Phys. Soc. Jpn.**76**, 033708 (2007).
- [2] G. A. Ummarino, R. Caciuffo, H. Chudo, S. Kambe , Phys. Rev. B **82**,104510 (2010).
- [3] H. Amitsuka et al., J. Physics Conf. Series **200**, 012007 (2010).
- [4] H. Walker, R. Caciuffo, D. Aoki, F. Bourdarot, G. H. Lander, and J. Flouquet, Phys. Rev. B **83**, 193102 (2011).
- [5] S. Heathman, J.-P. Rueff, L. Simonelli, M. A. Denecke, J.-C. Griveau, R. Caciuffo, and G. H. Lander, Phys. Rev. B **82**, 201103R (2010).

2. 軟 X 線によるアデノシン三リン酸 (ATP) 放射線障害の生物学的評価

Biological Assessment of Radiation Damage of ATP by Soft X-rays

秋光信佳¹、藤井紳一郎²、藤井健太郎³、月本光俊⁴、小島周二⁴

Nobuyoshi Akimitsu¹, Shin-ichiro Fujii², Kentaro Fujii³, Mitsutoshi Tsukimoto⁴, Shuji Kojima⁴

¹ 東京大学 アイソトープ総合センター

¹Radioisotope Center, the University of Tokyo

² 産業技術総合研究所 計測標準研究部門

²Biomedical Standards Section, National Metrology Institute of Japan (NMIJ),
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

³ 日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター

³Advanced Science Research Center, Japan Atomic Energy Agency

⁴ 東京理科大学 薬学部

⁴Faculty of Pharmaceutical Sciences, Tokyo University of Science

概要

リボ核酸 (Ribonucleic acid, RNA) の一種であるアデノシン三リン酸 (ATP) は、生体エネルギー供与物質として多様な生化学反応へエネルギーを供与している。また同時に、ATP は遺伝情報の仲介物質であるメッセンジャーRNA を合成するための基質として、さらには細胞間情報伝達物質としても働く。本研究では、SPring-8 原子力機構専用軟 X 線ビームライン BL23SU の持つ高分解能単色 X 線の照射により、ATP に対する軟 X 線照射障害を多様な生物学的特性の観点 (生体エネルギー供与、遺伝情報伝達、細胞間情報伝達) から解析した。

ATP (Adenosine tri-phosphate), one of ribonucleic acids, acts as an intracellular energy transfer. ATP is used as a substrate to synthesized messenger RNA and as a ligand of inter-cellular signaling. SPring-8 beam line BL23SU can produce high resolution monochromatic soft X-rays. In this study, we analyzed the soft X-ray induced radiation damage of ATP by various biological assessments, such as energy donor activity, genetic information transfer activity and inter-cellular signaling activity.

1. 研究目的

リボ核酸 (Ribonucleic acid, RNA) の一種であるアデノシン三リン酸 (Adenosine tri-phosphate, ATP) は、生体エネルギー供与物質、遺伝情報の仲介物質であるメッセンジャーRNA の合成基質、及び、細胞間情報伝達物質として機能する。このように、生命活動の様々な局面において重要な役割を担う ATP は、最も重要な生体物質の一つと言える。これまでに、放射線障害の直接的影響のターゲットとしての DNA に対する放射線影響は非常によく解析されてきた。しかしながら、DNA と同じ核酸分子である RNA (ATP も RNA 分子の一種である) に対する放射線障害の詳細はほとんど調べられてこなかった。特に、軟 X 線などの低エネルギー X 線の波長の違いによる RNA 分子の障害パターン

の変化については全く分かっていないと言える。

ごく最近、放射光軟 X 線を用いて DNA に選択的に分子変異を誘発させる技術が開発され[1, 2]、照射する軟 X 線の波長を変化させることにより DNA 分子変異を操作することが可能になった。この技術開発の成功から、DNA と同じ核酸分子である ATP などの RNA 分子に対しても放射光軟 X 線を用いた選択的な分子変異の誘発が可能になると期待される。そこで本研究では、SPRING-8 原子力機構専用軟 X 線ビームラインの特徴を最大限に活用して、軟 X 線によって引き起こされる ATP の構造的障害、並びに生理機能欠損を調べた。特に、照射する軟 X 線の強度と ATP 障害との相関関係を明らかにするための基礎的検討を実施し、ATP の放射線障害を系統的に調べるシステムを構築した。

2. 研究内容

本研究では、まず、軟 X 線照射した ATP を回収する場合の回収率を精確に測定する必要がある。回収率測定では、放射線照射の影響を受けない内部標準物質の添加が有効であるため、どのような内部標準物質を使用することが適切かを調べた。次に、軟 X 線を照射したときに生じる ATP、及び種々のヌクレオチド分子の構造変化の有無を軟 X 線吸収スペクトルの測定によって調べた。最後に、照射する軟 X 線の強度を変えることによって変化する ATP の生物活性を調べた。

3. 研究結果

放射線照射 ATP の回収率評価法確立、並びに質量分析法による異常分子構造の同定

ATP やウリジン三リン酸(UTP)に軟 X 線を照射する場合、真空中で固体試料に照射を行い、蒸留水に溶解させて回収を行う。後に行う生物学的活性評価において、供する ATP や UTP の量を見積もるには、回収率を精確に評価することが必要となる。ATP や UTP そのものは照射による分子構造の変化が見込まれるため、回収率評価における直接的な測定対象にはできない。そこで、Cs や Rb といった特異的な元素を内標準として照射試料に予め添加し、誘導結合プラズマ質量分析装置(ICP-MS, Agilent7500a, Agilent Technologies)で、各元素を照射前後で測定することによって、試料の回収率を算定する手法の開発を試みた。

本研究で得られる軟 X 線照射後の回収試料量は、数十 μL と微量である。通常、ICP-MS で用いられる試料導入系では、1 回の分析で数 mL 程度の試料を必要とする。従って、ここでは、独自に開発した微量試料導入系(AIF-01, S. T. Japan and AIST)を使用することで、1 分析あたりの試料量を 200 nL まで減量し、ICP-MS における繰り返し測定を可能とした[3]。軟 X 線照射実験前の予備検討試料を用いて添加回収実験を行ったところ、74~93%の回収率と評価することができたため、SPRING-8 での ATP 薄膜への軟 X 線照射用の薄膜試料の準備を行った。添加回収率については、生物学的活性評価において供した ATP や UTP 量の補正に用いた。

また、軟 X 線を照射した ATP 試料について、質量分析法を用いた異常分子構造の同定を行った。測定には、高速液体クロマトグラフ質量分析装置(Quattro Ultima, Micromass)を用い、MS での負イオンモードでの Scan 分析を行った[4]。Fig.1 に測定結果を示す。Fig.1 下には未照射の ATP 試料を測定した結果を示すが、ATP や ATP のナトリウム塩、リン酸基が一つ外れたアデノシン二リン酸(ADP)が見られるのみである。これに対して、560 eV の軟 X 線を照射した試料(Fig.1 上)では $m/z = 252$ が顕著に測定され、ATP の塩基部分であるアデノシンから窒素が外れたものと推測される。このことは、後述の軟 X 線吸収スペクトルにおける窒素原子の K 殻吸収端領域の変化に対応すると考えられ、照射エネルギーを変化させた場合や、分子種を変更した場合に分子構造としてどのような変化が見られるかという点で興味深い。

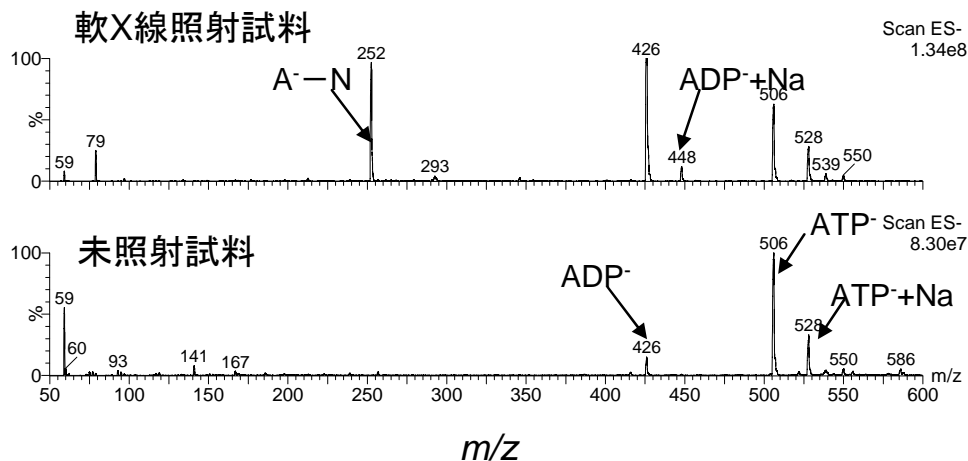


Fig. 1: 軟 X 線照射 ATP の質量分析結果

軟 X 線未照射（下部）および軟 X 線照射試料（上部）の質量分析結果。未照射試料には ATP から一つリン酸基が抜けた ADP が若干含まれている。一方、軟 X 線照射試料からは、ADP や塩基部位であるアデニン（A）から窒素（N）が抜けた A-N が観測された。

軟 X 線照射によるヌクレオチド分子の軟 X 線吸収スペクトルの測定

これまでに行った DNA に対する軟 X 線照射実験から、イオン化する元素を選択することにより、誘発される塩基や糖部位の変異の量が大きく変化することが明らかになっている。また、分子の軟 X 線吸収スペクトル中に現れる微細なピーク構造は、その分子の電子状態に依存することが知られている。そこで、放射線障害により生じる ATP 分子の構造変化についての知見を得るために、ATP 薄膜の軟 X 線照射前後の軟 X 線吸収スペクトルの測定を行った（Fig. 2）。試料に照射した軟 X 線として、炭素、窒素および酸素をイオン化する 560 eV の軟 X 線を照射した。照射前後の差分スペクトル（Fig. 2(b)）から、照射前のスペクトル中の 2 つの主要なピークが、軟 X 線照射により共に減少していることが明らかになった（図中矢印）。これらのピークは ATP 塩基中のプリン環に局在化した

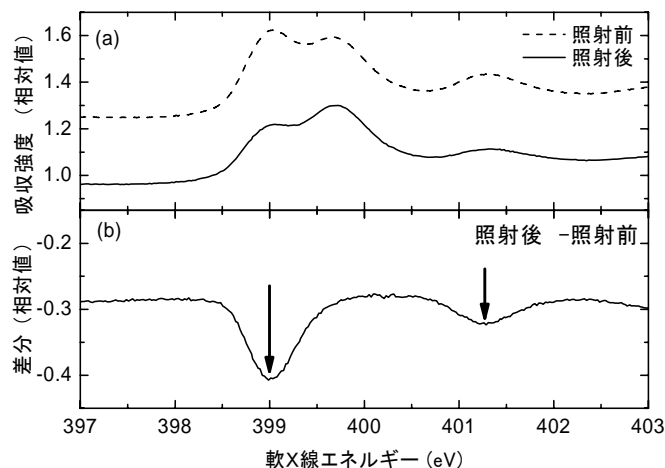


Fig. 2: ATP の軟 X 線吸収スペクトル

軟 X 線照射前後のヌクレオチド分子の窒素 K 殻領域軟 X 線吸収スペクトル(a) および、照射前後の差分スペクトル(b)

電子状態に由来した共鳴励起であると想定されており、前述の質量分析の結果と相互に推察すると、軟 X 線の照射に伴いプリン環が分解し、窒素原子が分離していると考えられる。さらに、イオン化しきい値よりも十数 eV 程度低エネルギーに存在する、内殻共鳴ピークを照射エネルギーとして選択することで、イオン化とは異なった反応過程によって生じる分子変化を引き起こすことができると期待される。今後は、このようなエネルギーでの照射実験を検討したい。また、ATP のリン酸基数の違い

や糖部位の OH 基の有無による吸収スペクトルの変化を観測した結果（Fig. 3）、塩基から離れた部分

に存在する OH 基の影響が塩基部分にまで及んでいることが明らかになった。

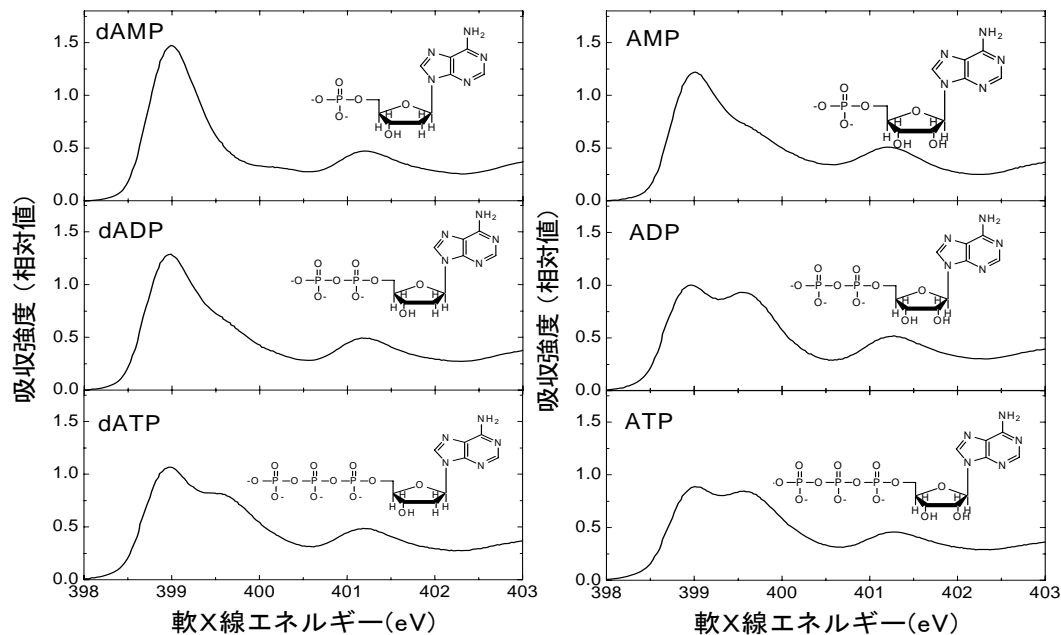


Fig. 3 : ATP 関連分子の軟 X 線吸収スペクトル

Deoxyadenosine mono-phosphate (dAMP) (左上)、Deoxyadenosine di-phosphate (dADP) (左中)、Deoxyadenosine tri-phosphate (dATP) (左下)、Adenosine mono-phosphate (AMP) (右上)、Adenosine di-phosphate (ADP) (右中)、および Adenosine tri-phosphate (ATP) (右下) の窒素 K 殻吸収端領域の軟 X 線吸収スペクトル

軟 X 線照射による ATP 分子の生理活性変化

ATP は細胞内においてエネルギー供与体として働く [5, 6]。そこで、ルシフェリンとルシフェラーゼ酵素を用い、軟 X 線および γ 線照射された障害 ATP のエネルギー供与能力を評価した。その結果、560 eV の軟 X 線照射によって、ATP のエネルギー供与能力が低下することを見出した。一方、 γ 線 (^{137}Cs 線源, 0.88 Gy/min) 照射によつては 30 Gy まで照射線量を上げて ATP のエネルギー供与能力は変化しなかった。これらのことから、軟 X 線と γ 線には ATP に対する影響に違いがある可能性が示唆された。

次に、 γ 線照射した ATP を合成基質した試験管内 RNA 転写反応を実施し、メッセンジャー RNA 合成の基質としての ATP 活性に対する照射の影響を調べた (Fig. 4)。その結果、5 Gy 照射による RNA 合成活性に低下は認められなかった。

細胞外において ATP や UTP は、細胞間情報伝達物質として機能することが知られている [7, 8]。これは、細胞から刺激に応じて放出された ATP や UTP が細胞膜上に発現する P2 受容体を活性化させることによって細胞内情報伝達を引き起こすためである。しかし、放射線によって照射された ATP などのヌクレオチドの細胞間情報伝達物質として機能変化については全く分かっていない。そこで、本項目では、軟 X

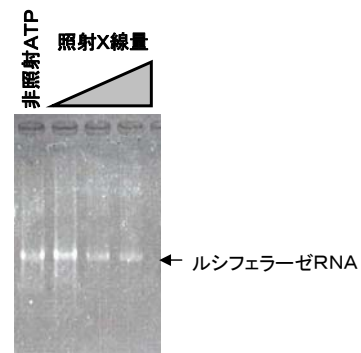


Fig. 4 : 照射 ATP による RNA 合成
 γ 線照射した ATP を合成基質として、ルシフェラーゼ RNA を試験管内合成した。合成した RNA をアガロースゲル電気泳動分析し、正常な RNA が合成しているかを判定した。

線および γ 線を ATP に照射し、ATP 受容体活性化能への変化を検討した。P2 受容体活性化能の解析に関しては、ATP 受容体活性化による extracellular signal-regulated kinase 1/2 (ERK1/2) のリン酸化 (活性化) の変化を検討した。その結果、軟 X 線 (1500 eV) 照射 ATP では、ERK1/2 活性化能は低下することが明らかとなった (Fig. 5)。

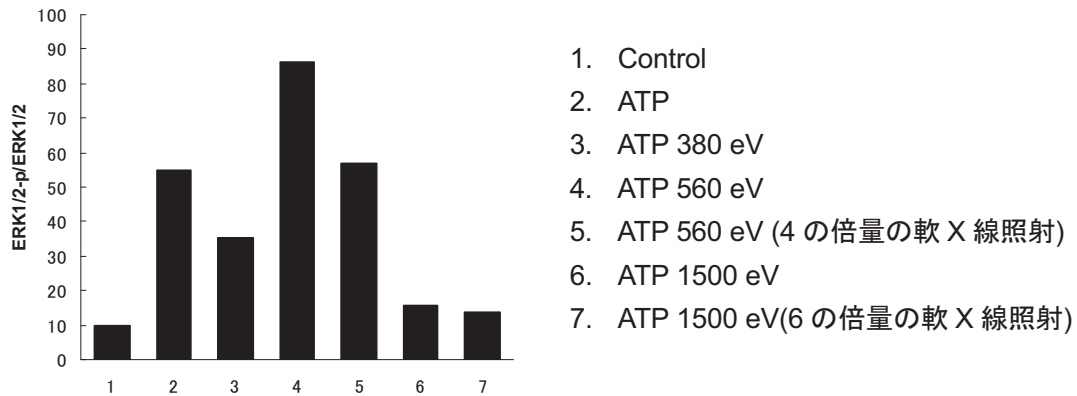


Fig. 5: 軟 X 線照射 ATP による P2 受容体活性化能の低下

軟 X 線を ATP に照射し、その照射した ATP (1 μ M) を HaCaT 細胞に添加し、細胞内酵素 ERK1/2 の活性能を測定した。

一方、 γ 線 (^{137}Cs 線源, 0.88 Gy/min) を 5 Gy ATP に照射したところ、非照射 ATP に比べ照射 ATP では ERK1/2 活性化能が上昇した (Fig. 6)。これらの結果は、照射によって ATP の構造変化が生じ、ATP 受容体活性化能に変化が生じていることを示唆している。また、 γ 線と軟 X 線では、ATP の構造変化に違いがあることが示唆されたため、今後、質量分析により γ 線と軟 X 線照射による両者の構造変化の違いについて解析することを検討している。

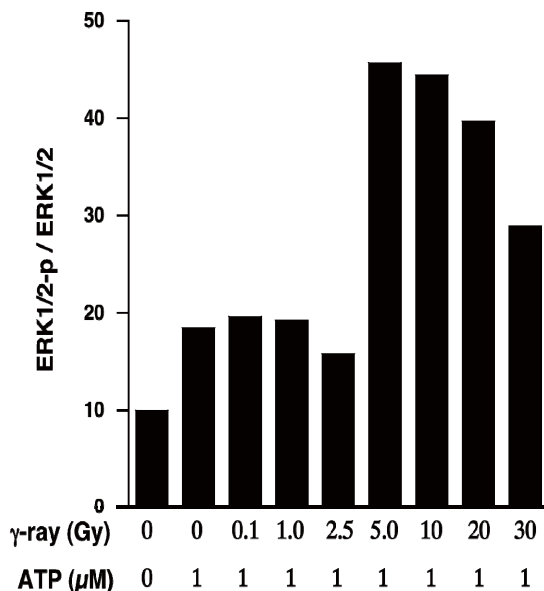


Fig. 6: γ 線照射 ATP による P2 受容体活性化能の増加

γ 線を ATP に照射し、その照射した ATP(1 μ M)を HaCaT 細胞に添加し、細胞内酵素 ERK1/2 の活性化を測定した。

4. まとめ

以上のように、軟 X 線照射した ATP の回収率を定量的に測定できる手法を開発した。また、軟 X 線照射が ATP の構造変化を引き起こしていることを見出した。今後、どのような構造変化が起きているかを詳細に調べて行きたい。さらに、本研究では、放射線照射した ATP の生物活性を多角的かつ系統的に調べる評価系を構築した。その結果、大変興味深いことに、 γ 線照射によって ATP のエネルギー供与能力と RNA 合成能力に影響の認められない照射量 (5 Gy) で明瞭な ATP レセプターの活性化が検出された。今後、軟 X 線を含めた照射する波長や照射フラックスを変えた時の ATP の生理活性の影響を多角的に調べていく。

5. 参考文献

- [1] K. Fujii, N. Shikazono, and A. Yokoya, Nucleobase lesions and strand breaks in dry DNA thin film selectively induced by monochromatic soft X-rays, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 16007-16015 (2009).
- [2] K. Fujii, A. Yokoya, and N. Shikazono, Induction of single strand breaks, and base lesions in plasmid DNA films induced by carbon, nitrogen, and oxygen KLL Auger process, *Int. J. Radiat. Biol.*, **84**, 1104-1111 (2008).
- [3] S. Fujii, K. Inagaki, A. Takatsu, T. Yarita and K. Chiba, Determination of phosphorus using capillary electrophoresis and micro-high-performance liquid chromatography hyphenated with inductively coupled plasma mass spectrometry for the quantification of nucleotides, *J. Chromatogr. A*, **1216**, 7488-7492 (2009).
- [4] T. Kinumi, T. Narukawa, S. Fujii, S. Eyama, M. Saeki and A. Takatsu, Quantification of an oligonucleotide containing a sequence failure product: Comparison of isotope dilution mass spectrometry with other quantification methods, *Euro. J. Mass Spec.* **15**, 399-407 (2009).
- [5] H. Tani, N. Akimitsu, O. Fujita, Y. Matsuda, R. Miyata, S. Tsuneda, M. Igarashi, Y. Sekiguchi and N. Noda, High-throughput screening assay of hepatitis C virus helicase inhibitors using fluorescence-quenching phenomenon, *Biochem Biophys Res Commun.* **379**, 1054-1059(2009).
- [6] N. Akimitsu, J. Tanaka, and J. Pelletier, Translation of nonSTOP mRNA is repressed post-initiation in mammalian cells, *EMBO J.* **26**, 2327-2338(2007).
- [7] A. Tokunaga, M. Tsukimoto, H. Harada, Y. Moriyama, S. Kojima, Involvement of SLC17A9-dependent vesicular exocytosis in the mechanism of ATP release during T cell activation, *J. Biol. Chem.* **285**, 17406-17416 (2010)
- [8] M. Tsukimoto, T. Homma, Y. Ohshima, S. Kojima, Involvement of purinergic signaling in cellular response to gamma radiation, *Radiat. Res.* **173**, 298-309 (2010).

3. Theory of Materials for Spin Electronics and Dynamics of Magnetic Nanostructures

Timothy Ziman

Institut Laue Langevin(ILL), France

Abstract

The purpose of the program was to reinforce efforts to understand mechanisms underlying the material design of devices useful in spintronics and other multifunctional materials. The theoretical investigation was in close contact with experimental groups developing promising devices with large or giant spin Hall angles in order to clarify the underlying mechanisms and to contribute to the choice of new materials or designs. In the field of multi-ferroics we advanced collaboration with several experimental teams to explain from a microscopic point of view the mechanism of coupling of ferroic and magnetic degrees of freedom in a good model system. The collaborative project also led to new directions, including the applications of inverse spin Hall effects to probe nonlinear magnetic susceptibilities and investigating mechanisms for the use of muon precession to measure conduction electron spin polarizations in out of equilibrium semiconductors.

1. Research objectives

By combining theoretical and computational approaches, we study the basic science underlying spin electronics and multifunctional materials and thereby look for novel means of improving, for example, the efficiency of interconversion of spin and charge in the spin Hall effect or the coupling between magnetism and ferroelectricity in multi-ferroics. By combining theoretical and computational approaches we wish to develop new materials and devices for high efficiency of spin current generation, based on spin Hall effect and spin motive force. The mechanisms for usefully large spin Hall effects have based on spin skew scattering of impurity magnetic ions, transition metals or rare earths, in metallic Hall bar. The fundamental physics underlying the phenomenon involves spin-orbit couplings, crystal field splitting and Hund's rule coupling but computation has been a challenge because of many-body correlations that give results that cannot be obtained purely by density functional methods.

A related class of materials needed for spintronics are multi-functional materials with both ferro-electric and magnetic properties. To be useful candidate materials must possess both properties with appreciable coupling between them. Because of the different symmetries the couplings must be non-linear and it is a challenge to quantify them from experiments probing at an atomic level. In many candidate materials the multi-ferroicity is based on magnetic

frustration, spin-orbit couplings, charge disproportionation and lattice couplings. In this proposal we concentrated on the case MnWO_4 which has an ideal temperature and field range for experimental investigation. The microscopic magnetic couplings had been estimated some years ago by inelastic neutron scattering, which for reasons of simplicity of analysis, had only been performed in high symmetry directions in reciprocal space. The number of exchanges fitted was large considering the few directions of dispersion measured. The extracted parameters, while showing the importance of magnetic frustration also were very different quantitatively from those estimated from recently published ab-initio estimates. The first task was to re-measure the dispersion in off-symmetry directions, aided by numerical calculation of the dispersion and intensities in arbitrary directions of reciprocal space. This will also identify the appropriate wavevectors where one should be able to continue and do a full polarization analysis in order to measure more directly coupling between magnetic fluctuations and nuclear displacement. An alternative mechanism, wherein coupling to charge disproportionation is more effective than nuclear movement, should more clearly be seen by means of resonant X-ray scattering than neutrons, as the elemental specificity of the resonant scattering can be exploited. It is planned to pursue these studies in parallel by collaboration with different, but overlapping, experimental teams.

2. Research contents

(1) Enhanced skew scattering and microscopic mechanisms of the spin Hall effect:

Extensive Quantum Monte Carlo Techniques are used to make quantitative calculations of the spin Hall angle, fully including Kondo fluctuations and examining crossover between room temperature and high and low temperatures. The dependence on surface-specific contributions was explored, following experimental indications that there was a specific surface-dependent effect.

(2) Microscopic mechanism of multiferroicity in the material MnWO_4 spin Hall effects

Calculate dynamics of magnetic excitations in the model multi-ferroic material MnWO_4 in order to compare to neutron inelastic scattering studies, eventually with polarisation analysis.

New Projects initiated during the period of the REIMEI program:

(3) Inverse spin Hall effect as a probe of non-linear susceptibilities

Calculations of the spin Hall angle for conduction electrons couple to a magnetic lattice will test the prediction that the inverse spin Hall effect can be used to probe nonlinear susceptibilities in the critical region of a ferromagnet and other magnetic materials.

(4) Theory of muonium as a probe of conduction electron polarization.

Calculations will be made to test the hypothesis that dynamically generated triplet states of the negatively charged muonium ion can detect the conduction electron spin density in doped semiconductors.

3. Research results and Future Prospects

Enhanced skew scattering and microscopic mechanisms of the spin Hall effect:

The first results gave quantitative evidence for the hypothesis, previously advanced by Guo, Nagaosa and Maekawa, that Kondo-type fluctuations, where there are both spin and orbital degeneracy, can substantially enhance the effect of spin-orbit interaction on the skew scattering. This was first demonstrated for the case of Fe impurities in Au (Ref.1), but there was an apparent contradiction between the enhancement predicted and the measured orbital moments (as deduced by X-ray Magnetic Circular Dichroism). In addition there was the puzzle of the original experimental observation by Seki et al of the giant spin Hall Effect and the null result obtained by different experimental groups with slightly different devices. A possible resolution showed different regimes depending on correlation energies and applied magnetic field and is shown in Fig. 1.

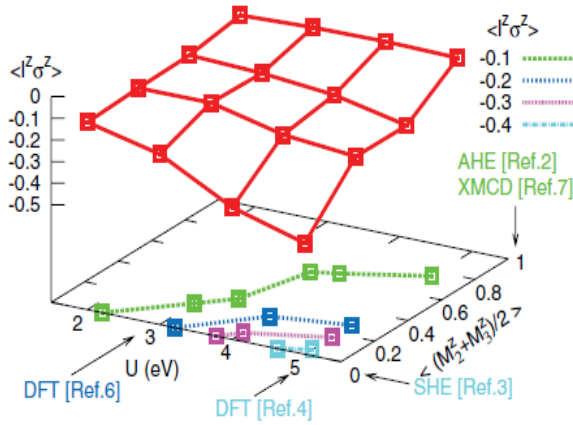


Fig. 1: (From reference 1) The spin-orbital correlation function, which determines the spin Hall angle, as a function of correlation energy U and magnetization. Different theoretical and experimental regimes are indicated by arrows.

Indications from several different experiments, suggesting the relevance of surface effects, have lead to recognition that Pt impurities at the surface of Au can have an extra degeneracy, leading to enhancement in skew scattering. This gives a third route to giant spin Hall: surface-induced degeneracy of crystal field levels plus Kondo enhancement. We show theoretically a novel route to obtain giant room temperature spin Hall effect using surface-assisted skew scattering. By a combined approach of density functional theory and the quantum Monte Carlo (QMC) method, we have studied the spin Hall effect due to a Pt impurity in different Au hosts. We show that the spin Hall angle could become larger than 0.1 on the Au (111) surface, and decreases by about a half on the Au (001) surface, while it is small in bulk Au. The QMC results show that the spin-orbit interaction (SOI) of the Pt impurity on the Au (001) and Au (111) surfaces is enhanced, because the Pt 5d levels are lifted to the Fermi level due to the valence fluctuations. In addition, there are two SOI channels on the Au (111) surface, while only one for Pt either on the Au (001) surface or in bulk Au.

Experiments, of the Takanishi group of IMR, Sendai, jointly published with the theory (Ref. 2) confirmed this. In the experiments, the spin-Hall effect was obtained in Pt-doped Au films with different thicknesses t_N . A giant spin-Hall angle $\gamma_S = 0.12 \pm 0.04$ was obtained for $t_N = 10$ nm at room temperature, while it was much smaller for the $t_N = 20$ nm sample. The combined *ab initio* and quantum Monte Carlo calculations for the skew scattering due to a Pt impurity predicted $\gamma_S \cong 0.1$ on the Au (111) surface, but a small value for bulk Au. In future calculations

in order to fully compare to experiments, for example on decoherence properties of impurities, we need to follow the calculated skew scattering cross sections to lower temperatures by improving the quantum Monte Carlo calculations at lower temperatures. This is in the process of being implemented using recent Continuous Time Monte Carlo algorithms instead of the Hirsch-Fye algorithm.

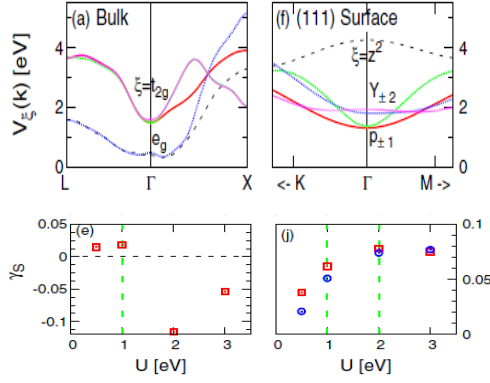


Fig. 2 : (From reference 2) The calculated hybridization for Pt impurities in a Au host for the case of Bulk (left) and (111) surface (right). Below each case see the spin Hall angle as a function of correlation U , with physical values 1-2 eV

Microscopic mechanism of multiferroicity in the material MnWO_4

The investigation of the multi-ferroic MnWO_4 has advanced with notably the analysis of the dispersion of magnon modes in lower symmetry directions by Inelastic Neutron Diffraction at Paul Scherrer Institut (PSI) Zurich and to be undertaken shortly at the ILL, Grenoble. The theoretical contribution was to calculate the intensities of modes according to different coupling strengths. Full polarisation analysis, which is limited by available flux depends crucially on the intensities. In collaboration with experimentalists specialised in X-ray scattering, proposals have been made to the ESRF, Grenoble and Diamond, Oxfordshire, UK for measurements of the magnetic moments in the MnO complexes.

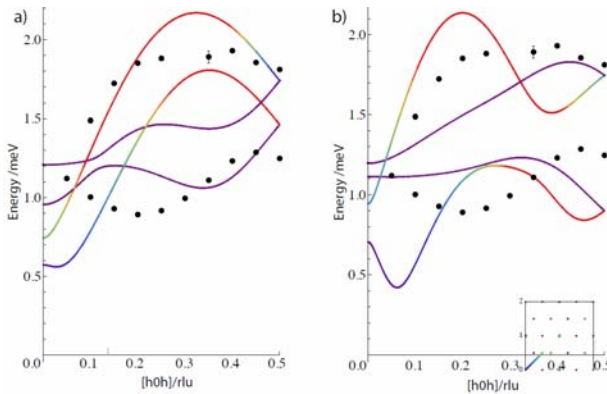


Fig. 3 : Calculated dispersion and intensities from previously published exchanges, compared to measurements, A. Poole et al unpublished.

Inverse spin Hall effect as a probe of non-linear susceptibilities.

The Otani group (ISSP ^{*1}, Tokyo) has recently measured the inverse spin Hall effect in Ni-Pd electrodes with composition chosen to be ferromagnet (a few % Ni). They observed an anomaly in transverse resistance around the Curie temperature. Our aim was to understand these anomalies in terms of the correlations in the ferromagnet near criticality. We have constructed a theory to explain the results of the Otani group, based on extension of Kondo's classic theory

of skew scattering from impurities with crystal field and spin-orbit scattering. The transverse resistivity is predicted to be proportional to a non-linear susceptibility. This opens up an interesting possibility of using the inverse spin Hall effect as a novel probe of higher susceptibilities on nanowire samples.

Theory of muonium as a probe of conduction electron polarization:

This project came about at a meeting with the experimental team of Nagamine et al (Tsukuba/RAL*2 /Tokai) who have been looking for theoretical explanation of their results showing that muon rotation can be used as a probe of non-equilibrium distributions in n-type doped GaAs. Our calculations have looked at the stability and electronic structure of muonium⁻, i.e. bound states of positive muons with two electrons. There have been preliminary results from two complementary approaches: (i) treating the band structure of the GaAs host with correlations treated in Local Density Approximation(LDA) and (ii) taking hydrogenic wave functions that go beyond mean field approximations but treat the semiconductor as a vacuum. Ultimately a synthesis of the two approaches will probably be necessary. In particular we wish to elucidate the possible role of metastable triplet state of muonium⁻ in scattering processes.

4. Conclusion

During the period of the REIMEI project, useful advances have been made in the theory of spin Hall effect in alloys and a new route indentified to the occurrence of giant spin Hall angles. In the area of multiferroics the theory has been an impetus to a new set of experimental investigations by neutron diffraction and also magnetic X-ray scattering. The REIMEI project has allowed, in the last few months two new collaborations on the subject of inverse spin Hall effects in ferromagnetic metals and spin-dependent scattering of muonic atoms in semiconductors. We note that an important part of the REIMEI project was the organization of an international workshop in March 14-17 2011. This unfortunately had to be postponed because of the major earthquake of March 11 but will be held during the current financial year.

5. References

- [1] B. Gu, J.Y. Gan, N. Bulut, T. Ziman, G.Y. Guo, N. Nagaosa, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **105**, 086401 (2010).
- [2] B. Gu, I. Sugai, T. Ziman, G. Y. Guo, N. Nagaosa, T. Seki, K. Takanashi, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **105**, 216401 (2010).
- [3] G. Khaliullin, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **105**, 257005 (2010).
- [4] Bo Gu, Timothy Ziman, Guang-Yu Guo, Naoto Nagaosa and Sadamichi Maekawa, J. Applied Physics, **109**, 07C502 (2011). (Article selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, April 4, 2011)

*1 The Institute for Solid State Physics

*2 Rutherford Appleton Laboratory

4. Synthesis, MuSR and Other Studies of Li(Mn,Zn)As and I-II-V Doped Magnetic Semiconductors

Z. Deng¹, C. Q. Jin¹, Q. Q. Liu¹, X. C. Wang¹, J. L. Zhu¹, S. M. Feng¹, L. C. Chen¹,
R. C. Yu¹, C. Arguello², T. Goko², Fanlong Ning^{2, 3}, Jinsong Zhang⁴, Yayu Wang⁴,
A. A. Aczel⁵, T. Munsie⁵, T. J. Williams⁵, G. M. Luke⁵, T. Kakeshita⁶, S. Uchida⁶,
W. Higemoto⁷, T. U. Ito⁷, Bo Gu^{7,8}, S. Maekawa^{7,8}, G. D. Morris⁹, and Y. J. Uemura²,

¹ Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, and Institute of Physics, China

² Department of Physics, Columbia University, USA

³ Department of Physics, Zhejiang University, China

⁴ Department of Physics, Tsinghua University, China

⁵ Department of Physics and Astronomy, McMaster University, Canada

⁶ Department of Physics, University of Tokyo, Japan

⁷ Advanced Science Research Center, Japan Atomic Energy Agency, Japan

⁸ CREST, Japan Science and Technology Agency, Japan

⁹ TRIUMF, Canada

Abstract

Based on the support of the Reimei project from JAEA, we have generated a new ferromagnetic system Li(Zn,Mn)As, by doping carriers with excess / deficient Li concentrations and doping spins with (Zn,Mn) substitutions in the I-II-V semiconductor LiZnAs. This system was characterized by the x-ray scattering, magnetization, conductivity and Hall effect measurements in China as well as by the MuSR measurements in Canada. We established that Li excess systems have T_c up to 50 K for Mn concentrations of up to 15% with a very small coercive field, and that the static magnetic order is achieved in the full volume fraction in a single phase system. Contrary to general expectation, we found p-type charge carriers in Li excess systems.

1. Research Objectives: Introduction and background

I. Doped magnetic semiconductors based on III-V systems

Most of currently available diodes, transistors, and other semiconductor devices have been made based on charge transport which does not involve spin selection. As demonstrated in highly successful application of magnetoresistance phenomena on magnetic memories, however, novel functions may be achieved if semiconductor devices acquire spin sensitive functions. “Spintronics” is a fashionable word generated for this concept, but current effort has been confined to studies of basic properties of candidate materials.

In early-mid 1990's, Hideo Ohno and his collaborators succeeded in making ferromagnetic

films of Mn doped III-V semiconductors (In,Mn)As [1] and (Ga,Mn)As [2]. This triggered extensive studies on “doped magnetic semiconductors” (DMS) continuing up to now [3]. In these systems, substitution of trivalent Ga^{3+} or In^{3+} with divalent Mn^{2+} results in self-doping of hole carriers. Mn atoms have 4-5 Bohr magneton of spins per each, and RKKY-like interaction of Mn and hole carriers mediate effectively ferromagnetic interaction, since carrier density is very low and the RKKY-like oscillation length scale is much larger than the distance between neighboring Mn atoms. This picture has developed into “p-d Zener model” [4], while a somewhat different view point of “Mn impurity-band” model has also been presented [5] to explain ferromagnetic couplings.

Due to mismatch of the charge states of Mn and Ga or In, chemical solubility limit is very low (less than 1% doping) in Mn substitution into III-V semiconductors. Therefore, ferromagnetic specimens can be made only as very thin films fabricated by Molecular Beam Epitaxy, which leads to metastable chemical material. Due to this feature, magnetic properties are often sensitive to fabrication conditions and heat treatments of the MBE-grown films [6].

II. Low-energy MuSR studies of (Ga,Mn)As films

Magnetic properties of (Ga,Mn)As films have been studied mainly by magnetization measurements and anomalous Hall effect which reflects ferromagnetic order. Thin film specimens prevented application of neutron scattering and NMR. The low-energy (LE) muon beam at PSI allows implantation of positive muons with the depth of 20 – 100 nm from the surface with precision of ± 10 nm. MBE films of (Ga,Mn)As typically have a thickness of about 20-50 nm. We performed LE-MuSR studies of (Ga,Mn)As films at PSI, and recently published our results in Nature Materials [8]. Contrary to earlier views of “highly inhomogeneous magnetism” [7], we demonstrated that properly-made (Ga,Mn)As films exhibit spatially homogeneous ferromagnetism over a wide range of Mn concentrations [8].

III. Next generation DMS system Li(Mn,Zn)As based on I-II-V semiconductor

LiZnAs is a direct-gap semiconductor [9,10], and has a crystal structure very close to that of GaMnAs, as shown in Fig. 1. The role of trivalent Ga^{3+} is replaced by Li^+ and Zn^{2+} , and consequently this system can be denoted as a I-II-V semiconductor. LiMnAs is an antiferromagnet with Neel temperature of ~ 410 K, and ordered moment of 3.75 Bohr magneton per Mn at $T = 13$ K [11]. Recently, Jungwirth et al. [12] performed theoretical calculation of electronic and magnetic properties of Mn-doped LiZnAs using Local Density Approximation (LDA), and predicted that Li(Mn,Zn)As can be an analogue of (Ga,Mn)As.

The I-II-V DMS systems are expected to have several possible advantages over the III-V DMS systems. Thanks to iso-valent substitution of Zn^{2+} with Mn^{2+} , the (Mn,Zn) alloyed compound can be made without chemical solubility limit, and may be available in bulk materials rather than chemically metastable thin films grown by MBE. Unlike self-doped p-type (Ga,Mn)As, Li(Mn,Zn)As may be obtained both in p-type and n-type region, tunable via the Li off-stoichiometry, as discussed by Jungwirth et al. [12].

2. Research Contents and Results:

I. Synthesis, Structure, Magnetization and Transport studies of Li(Zn,Mn)As

Since April 2010, we started synthesis of poly-crystalline specimens of Li(Zn,Mn)As with Li concentrations between 0.9 and 1.2, and Mn concentrations of 0 – 0.15. X-ray scattering studies confirmed single phase of the material in this composition range. Magnetization studies revealed ferromagnetism for Li excess systems, with T_c up to 50 K for Li 1.1 and Mn 0.10-0.15, as shown in Fig. 2, and average ordered Mn moment size up to ~ 3 Bohr magnetons per Mn. A very small coercive field of ~ 50 G, observed in ferromagnetic Li(Zn,Mn)As, will help future manipulation of spin polarization by the applied field.

II. Transport measurements

Transport studies revealed: (a) semiconducting behavior for stoichiometric LiZnAs and metallic transport for Li-deficient or excess LiZnAs; (b) increasing resistivity with increasing (Zn,Mn) substitution and metallic behavior for (Zn,Mn) substituted systems; (c) large negative magnetoresistance below ferromagnetic T_c ; and (d) anomalous Hall effect for ferromagnetic specimens below T_c , together with most surprising p-type carrier (hole carriers) for Li excess systems. The p-type carriers can be understood if we assume that excess Li atoms occupy substitutional Zn sites, while the replaced Zn atoms leave from the system. This possibility is consistent with the behavior of lattice constant which remain constant with increasing Li for excess-Li systems.

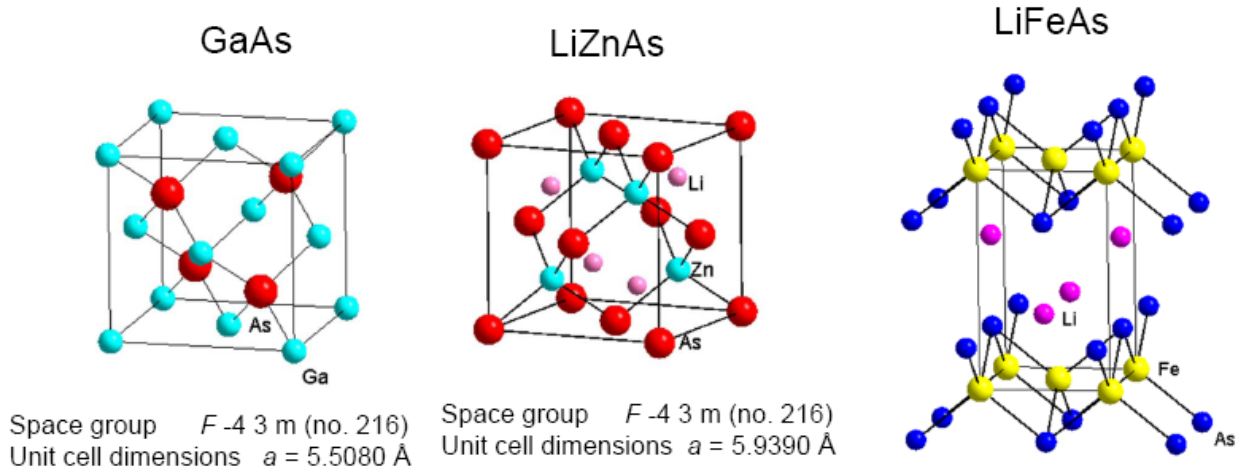


Fig. 1: Crystal structures of GaAs, LiZnAs and LiFeAs

III. MuSR Measurements

We performed MuSR measurements on poly-crystalline specimens of Li(Zn,Mn)As. As shown in Fig. 3(a), we found a sharp increase of the zero-field muon spin relaxation rate below the ferromagnetic transition temperature. Measurements in zero field and weak transverse field (WTF) show that the volume fraction of regions with static magnetic order increases with decreasing temperature below T_c , and finally the entire volume participates in static magnetic order, as demonstrated in the asymmetry in WTF in Fig. 3(b) which

represents muons in non- or para-magnetic environment. The ratio between the relaxation rate at $T = 0$ and the ferromagnetic transition temperature T_c in $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$ follows the behavior observed for $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ [8], indicating that the strength of magnetic exchange interaction is comparable in Li-excess $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$ and in $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$. This is consistent with our finding that Li-excess $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$ is a hole-doped magnetic semiconductor, similar to $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$.

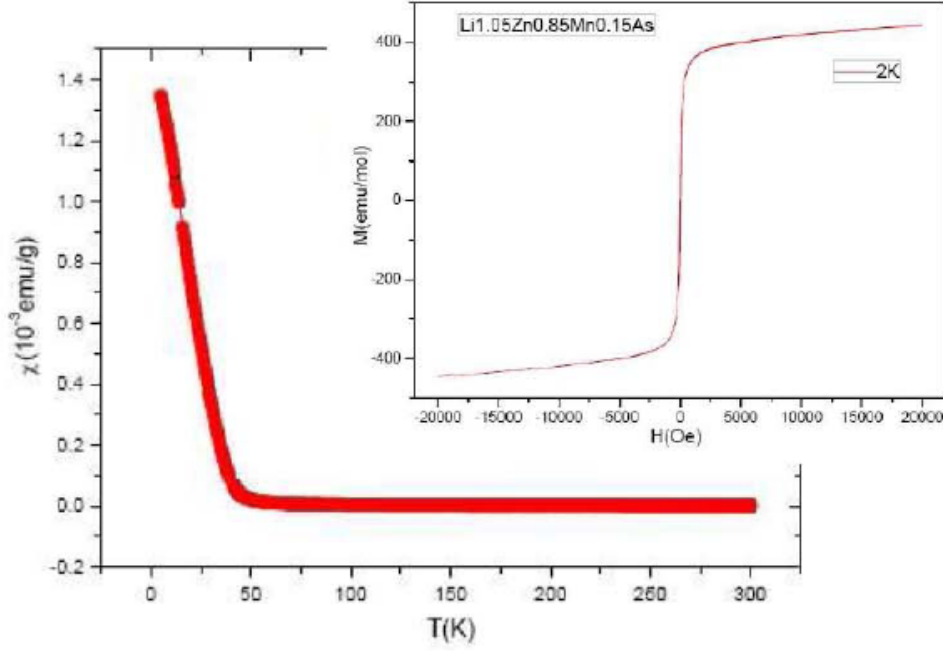


Fig. 2: Temperature and field dependence of magnetization in $\text{Li}_{1.05}(\text{Zn}_{0.85}\text{Mn}_{0.15})\text{As}$ showing clear signature of ferromagnetic

IV. LDA and quantum Monte Carlo studies

We also performed theoretical studies on $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$. Our quantum Monte-Carlo (QMC) and local density approximation (LDA) calculations indicate that the carriers are p-type for the compound with the ratio of the excess Li atoms at interstitial sites to those at Zn-substitutional sites being lower than 1.5. Furthermore the QMC-LDA calculation implies that ferromagnetism in $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$ can be expected only for p-type carriers, which is consistent with our observation of p-type carriers in the ferromagnetic Li excess systems.

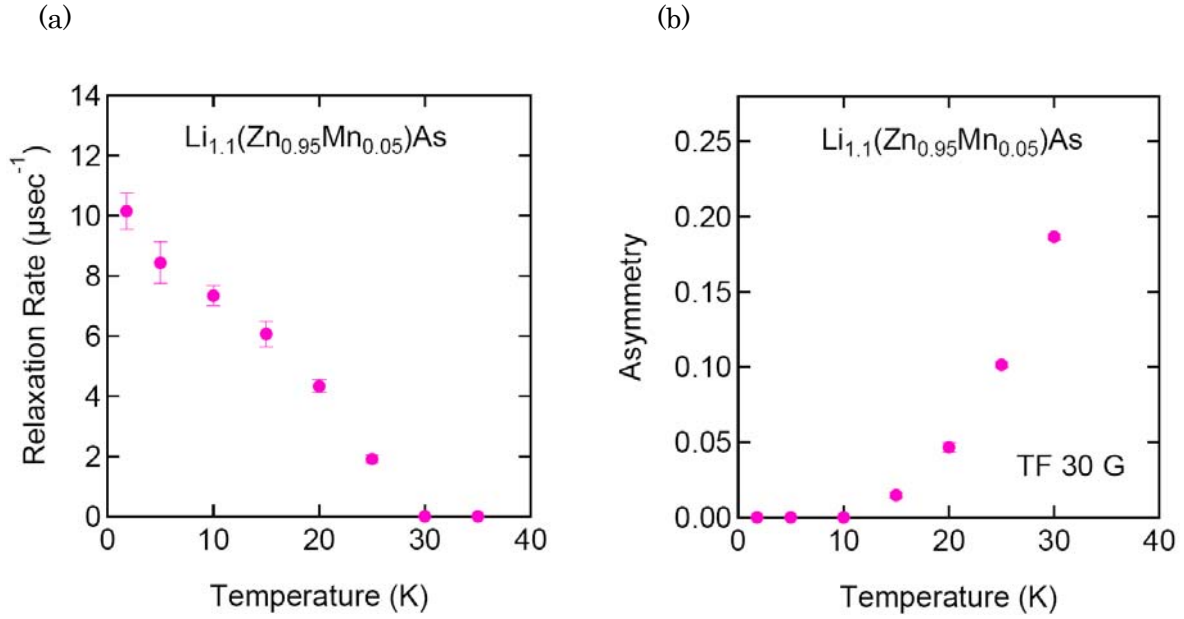


Fig. 3. (a) Muon spin relaxation rate in Zero Field in a Li excess and Mn 5% specimen of $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$. (b) The muon spin precession asymmetry in a weak transverse magnetic field of 30 G. This asymmetry represents muons in non- or paramagnetic environment. Absence of asymmetry below $T = 10$ K indicates establishment of static magnetic order in the entire volume fraction.

3. Conclusions and Perspectives

In conclusion, we demonstrated that $\text{Li}(\text{Zn},\text{Mn})\text{As}$ becomes ferromagnetic for Li excess systems with Mn concentrations up to 0.15. The carriers are p-type. As shown in Fig. 1, cubic crystal structure of $\text{Li}(\text{Mn},\text{Zn})\text{As}$ is different from that of a layered superconductor LiFeAs ($T_c \sim 20$ K). However, with lattice matching at As layers, one might form junctions of semiconducting LiZnAs , ferromagnetic $\text{Li}(\text{Mn},\text{Zn})\text{As}$ and superconducting LiFeAs or NaFeAs . For designing future spintronics devices, availability of superconducting system will provide widely different functionalities. It may also be possible to make similar DMS compounds based on the 1111, 122 and other FeAs superconducting systems.

Acknowledgement:

This work has been financially supported by the REIMEI grant from JAEA, Materials World Network and Paternership for International Research and Education projects of US-National Science Foundation, NSERC of Canada, and Chinese NSF and Ministry of Science and Technology (MOST).

4. References

- [1] H. Ohno et al., Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 2664.
- [2] H. Ohno et al., Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 363.
- [3] I. Zutic, et al., Rev. Mod. Phys. **76** (2004) 323.
- [4] T. Dietl et al., Science **287** (2000) 1019.
- [5] K.S. Burch, et al. J. Magn. Magn. Mater. **320** (2008) 3207.

- [6] S.J. Potashnik, Appl. Phys. Lett. **79** (2001) 1495.
- [7] V.G. Storchak et al., Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 027202.
- [8] S.R. Dunsiger et al., Nature Mater. **9** (2010) 303.
- [9] K. Kuriyama et al., J. Crystal Growth **166** (1996) 631.
- [10] S.H. Wei et al., Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 528.
- [11] W. Bronger et al., Z. anorg. allg. Chem. **539** (1986) 175.
- [12] J. Masec et al., Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 067202.

5. パルス強磁場核スピン偏極による時間分解中性子コントラスト法

Time-resolved Neutron Contrast Method

by Pulsed-high-magnetic-field Nuclear Polarization

鳴海康雄¹、野尻浩之¹、大山研司¹

Yasuo Narumi¹, Hiroyuki Nojiri¹, Kenji Ohyama¹

¹ 東北大学金属材料研究所

¹Institute for Materials Research, Tohoku University

概要

パルス強磁場と時間分解中性子散乱測定を組み合わせた同位体置換や特定の物質に依らない中性子コントラスト法を実現するために、その基盤技術となるパルス強磁場と中性子を同期させた強磁場中性子透過・散乱実験として、J-PARC/MLF-BL10において中性子実験としては世界最高磁場となる 42 T 強磁場での TOF による中性子散乱実験が可能であることを実証した。

Neutron scattering and transmission experiments have been performed in conjunction with pulsed high magnetic fields to realize a novel neutron contrast method without any isotope substitution and/or any organic radicals as sources of an electron spin polarization. At BL-10 of Materials and Life Science Experimental Facility (MLF) in Japan Proton Accelerator Research Complex (J-PARC), Time-of-Flight neutron scattering experiments have been demonstrated with the world highest magnetic field of 42 T.

1. 研究目的

核スピン偏極を利用した中性子散乱は、特定部位に注目してコントラストを付けることが可能な中性子独自の構造解析法として期待されている[1]。複雑な構造の生体物質では、同じアミノ酸でも部位によってその性質が全く異なるため、生理機能を理解するには部位毎にコントラストを付けた高度な構造解析が求められる。X 線と比較して軽元素にも強く散乱される中性子は、構成要素の約半数が水素である生体物質の構造解析に大変有利である。加えて同一元素でも同位体や核スピン偏極度に応じて散乱強度が異なることを使えば、特定の部位にコントラストをつけることも原理的に可能である。しかし複雑な高分子では構造解析に不可欠な重水素置換は容易ではなく、特定のサイトが置換されにくい問題もある。また核スピン偏極の有力な方法のひとつ動的核スピン偏極 (DNP) は、偏極を媒介する電子スピンが必要なため対象となる物質が限定されることが弱点である。歴史的には強磁場-超低温によるいわゆる Brute-Force 法によるスピン偏極も行われてきたが、利用された磁場は超伝導磁石による約 8 T までという状況である[2]。

本研究の目的は、40 T 級パルス磁場により飛躍的に高い核スピン偏極を実現し、時間分解中性子測定で選択的にサイトを色分けする新しい中性子コントラスト法を開発することである。核スピン緩和が部位毎で異なることにより生じる散乱像の時間変化を利用すれば、パルス中性子のサイクル

に同期した時間分解中性子散乱測定で散乱強度の時間変化を観測することで、部位毎の構造に関する情報を選択的に分離することができる。これにより同位体置換や特定物質に依存する既存の DNP とは異なる、汎用性が高くかつ高分解能な中性子コントラスト法の実現が可能となる。

2. 研究内容

Fig. 1 にパルス磁場による時間分解中性子コントラスト法の概念図を示す。横軸を時間軸として、下から順に磁場強度、核スピン偏極度、大強度陽子加速器で生成されるパルス中性子、そして期待される実空間でのイメージである。パルス強磁場とは、コンデンサの充放電により生成される高強度で且つ持続時間が短い磁場発生法で、この磁場により誘起された核スピンは部位 A, B で異なる緩和時間を持つため、消磁後には異なる核偏極度の時間依存性を示す事になる。これに対して、40 msec の間隔で繰り返し生成されるパルス中性子を使い散乱強度の時間変化を測定し、異なる散乱ピークで強度の時間依存性に差異を見いだす事ができれば、実空間において部位毎に濃淡をつける事が可能であることを実証できる。

具体的には以下に示す課題を主要なテーマとして研究を進めた。

- 1) 中性子透過・散乱測定による核スピン偏極度の磁場効果
- 2) パルス磁場と同期した時間分解中性子散乱による核スピン緩和過程
- 3) 偏極中性子を使った磁場中核スピン偏極度の定量評価と高感度化

1) と 2) の項目では、核スピン偏極を制御及び評価する上で重要な磁場発生制御技術と時間分解中性子測定に関する基盤技術を確立するために、磁場発生用パルス電磁石を備えたクライオスタットの開発と TOF による時間分割磁場中中性子散乱測定を行った。最終的な中性子実験は構造が単純なナフタレンを始めとする有機化合物の単結晶を用いるが、予備実験としてより水素核の効果を効率的に評価が可能と期待させる無機水素化物を利用した。核スピン偏極度は中性子の透過強度を指標に評価した。当面の最大磁場は 40 T、試料温度は ^4He ポンピングによる 1.5 K とする。今回の研究で着手することの出来なかったが、項目 3) において光学系に偏極中性子を導入して測定の高感度化の向上を目指すことは今後の重要な課題であると考えている。

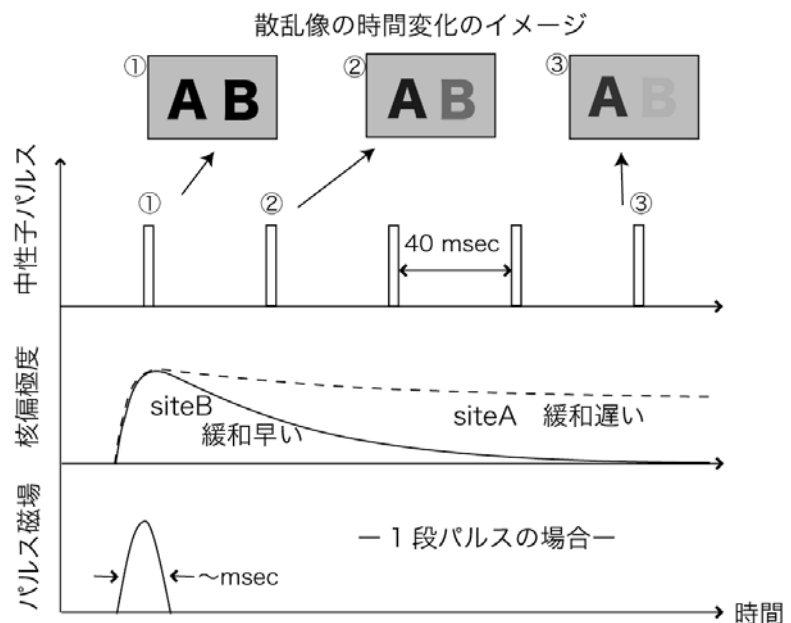


Fig. 1 パルス磁場中性子コントラスト法の概念図

3. 研究結果

【定常炉 JRR-3 における中性子透過実験】 強磁場中の核スピン偏極度を評価する予備実験として二水素化チタン (TiH_2) の粉末試料に対するパルス強磁場中の中性子透過実験を JRR-3 において実施した。 TiH_2 は、有機化合物と比較した場合、高い水素密度と短い核スピン緩和時間を持つため、水素核の偏極効果を検証する上で最も効率的な物質と考えられる。本実験では、磁場による水素核の偏極度増加に応じて中性子透過率の向上が期待される。電磁誘導の影響を避けながら熱伝導を確

保できるアルミナセラミック容器に封入した TiH_2 粉末に対して、既存のポータブルパルス強磁場発生装置を用いて最大 22 T の磁場を印加し、最低温度 2.0 K という温度条件の元、123 回の積算を行って最終的な中性子透過度の磁場依存性を得た (Fig. 2)。しかし、中性子検出器に対する入射光量の制限、到達最低温度が不十分などの理由から、理論的に期待される透過度の変化を検出できるだけの統計精度を得ることが出来ず、結果的に有効な透過量の磁場変化を

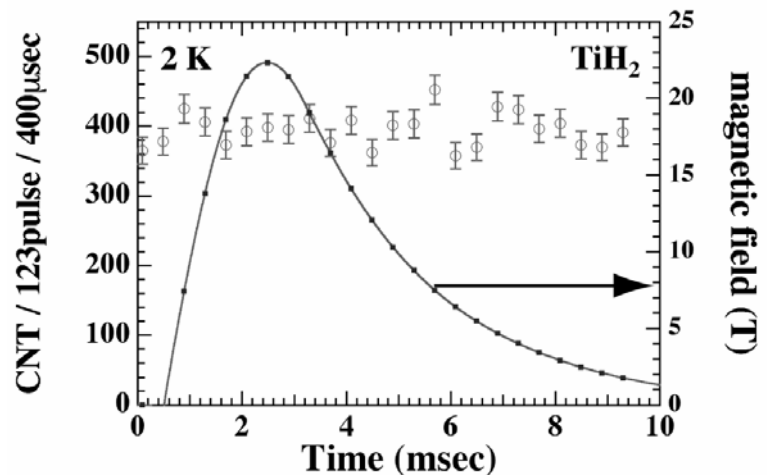


Fig. 2 TiH_2 のパルス強磁場中性子透過実験

確認することは出来なかった。今後は、定常炉 JRR-3 と比較して時間当たりの中性子強度が高い J-PARC のパルス中性子を利用することで、より高い統計精度での実験が期待できる。また、J-PARC に常設している大型のパルス磁場発生装置を利用することで 40 T 級の磁場発生も可能であることから、より高い核スピン偏極度も期待できる。

【低温強磁場環境の開発】 時間分解中性子コントラスト法を実現するための基盤技術として、超流動ヘリウム 4 による極低温での中性子実験が可能な磁場発生システムの開発を行った。高い核スピン偏極度を得るためには、強い磁場環境と極低温の双方が不可欠である。一般的に、パルス電磁石の冷却には液体窒素が不可欠であるため、液体窒素が中性子の飛行に影響を与えないようにヘリウム槽と窒素槽が逆転した特殊な構造のクライオスタットが必要である (Fig. 3)。また、槽間の温度差とそれに見合う寸法の自由度を設けなければ、熱収縮により容器自体にストレスがかかり真空洩れの要因となる。以上を考慮した上で、電磁石をクライオスタットの底面に設置し、ヘリウムおよび窒素槽をアルゴン溶接により封止したクライオスタットテールを開発した。東北大学金属材料研究所にて液体ヘリウムを減圧しての冷却試験を行い、超流動温度領域でもスーパーリークによる真空度の低下はなく、1.66 K を連続 10 時間持続できることを確認した。さらに、J-PARC/MLF に設置のコンデンサ電源を使用して、開発したクライオスタットテールを使ったパルス磁場発生試験を実施し、42 T の磁場発生が可能であることも確認した。

【TOF による強磁場中性子回折】 時間分解中性子コントラスト法を実現するために重要なもう一つの基

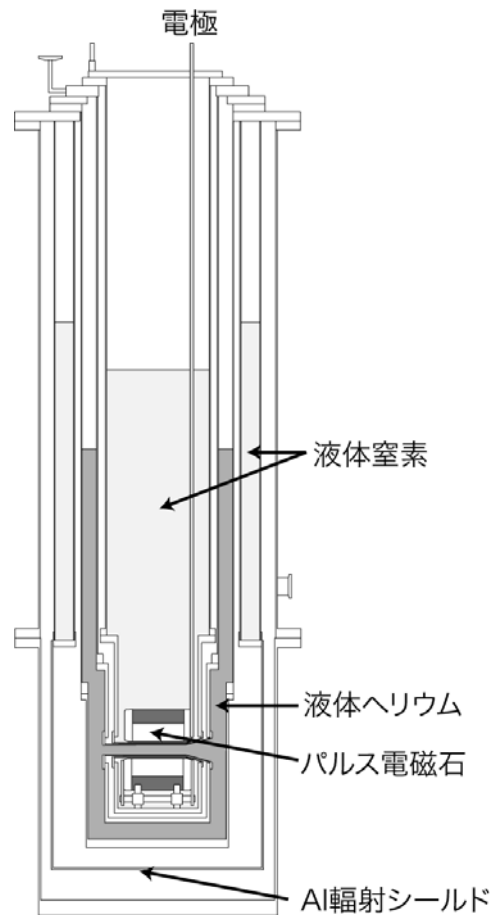


Fig. 3 パルス強磁場実験用逆転配置型クライオスタット

盤技術として、パルス磁場に同期した中性子回折実験を J-PARC のパルス中性子を使って実施した。開発したクライオスタットテールとそれに装着したパルス電磁石を使って、磁性誘電体が示す中性子磁気回折ピークの TOF を 22 T の最高磁場に同期させた測定を行い、約 200 回の積算で磁場中でも十分な回折信号を検出できることを確認した。その上で 42 T の磁場中でも回折実験が行えることも合わせて確認し、世界最高磁場環境下での中性子回折実験を行うことが可能であることを実証する画期的な成果を得た。

4. まとめ

本研究では、J-PARC/MLF の BL-10 において 40 T 級パルス強磁場を用いた時間分割 TOF 中性子散乱測定が可能であることを実証し、またパルス強磁場核スピン偏極の予備実験として定常炉 JRR-3 を利用して二水素化チタンの中性子透過測定を実施した。今回達成した磁場(B)・温度(T)環境は、 $B/T = 26$ [T/K]という極めて高い複合極限環境で、とりわけ中性子施設における 40 T 以上の磁場環境は世界的にも唯一無二の存在である。この条件では約 3%の陽子核スピン偏極が得られると見積もることができる。その上で、持続時間の短いパルス磁場に対して測定に寄与しない無磁場での中性子照射量が少ない J-PARC の高強度パルス中性子を組み合わせることで、効率的な中性子の計測が可能になる。今後、これら二つの世界最高レベルの技術融合させた強磁場中性子透過・散乱測定を行うことで、原子炉の実験で検証出来なかったパルス強磁場による核偏極を実証できると考えている。無機粉末試料での核偏極を検証した後は、有機単結晶を用いて核散乱強度測定および非干渉性散乱測定を行い、磁場印加による回折信号の鮮明化（散乱強度の増強、非干渉性散乱の低減）が可能である事を実証する。そして、この技術を実用的なレベルに引き上げるには、さらなる低温環境の実現が求められる。そのステップとして、ヘリウム-3 冷凍機を組み合わせることで 0.4 K の低温環境を実現し、40 T 強磁場と組み合わせることで 10%の核偏極を達成する。具体的には、ヘリウム-3 冷凍機を装着可能なトップローディング型クライオスタットと、同時に中性子散乱実験を可能にするスプリットペア型のパルス電磁石を開発する。このシステムを使って、磁場印加中、および印加後の回折強度の時間依存性を複数のブラッグ点において測定する。その時間依存性に差異を見いだす事ができれば、実空間つまり原子位置毎にコントラストを付ける技術を証明する実験となる。

5. 謝辞

本研究の主要な実験は、日本原子力研究開発機構の研究用原子炉 JRR-3、および大強度陽子加速器施設 J-PARC/MLF において実施されました。著者は施設利用およびビームライン担当者の技術サポートに対して深く感謝いたします。

6. 参考文献

- [1] 橋本竹治, JAEA 先端基礎研究センター 基礎科学ノート, **13** (2006) 33.
- [2] R. Bures et al., Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. **224** (1984) 347.

This is a blank page.

国際単位系（SI）

表 1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表 2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立法メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立法メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の) 1	1
比透磁率 ^(b)	(数字の) 1	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
(b) これらは無次元量あるいは次元 1 をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の 1 は通常は表記しない。

表 3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス度 ^(e)	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光束度	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照射度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
(b) ラジアンとステラジアンは数字の 1 に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の 1 は明示されない。
(c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
(d) ヘルツは周期現象についてののみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてののみ使用される。
(e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
(f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
(g) 単位シーベルト (PV.2002,20,705) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表 4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎平方メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ s ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨ	Y	10 ⁻¹	デ	d
10 ²¹	ゼ	Z	10 ⁻²	セ	c
10 ¹⁸	エ	E	10 ⁻³	ミ	m
10 ¹⁵	ペ	P	10 ⁻⁶	マイ	μ
10 ¹²	テ	T	10 ⁻⁹	ナ	n
10 ⁹	ギ	G	10 ⁻¹²	ピ	p
10 ⁶	メ	M	10 ⁻¹⁵	フェ	f
10 ³	キ	k	10 ⁻¹⁸	ア	a
10 ²	ヘ	h	10 ⁻²¹	ゼ	z
10 ¹	デ	da	10 ⁻²⁴	ヨ	y

表 6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	′	1′=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	″	1″=(1/60)′=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1L=11=1dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1t=10 ³ kg

表 7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	1eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	1ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表 8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm)2=10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
デジベール	dB	

表 9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エル	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオット	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≡ (10 ³ /4π) A m ⁻¹

(c) 3 元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ≡ 」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	1cal=4.1858J (「15°C」カロリー) , 4.1868J (「IT」カロリー) 4.184J (「熱化学」カロリー)
マイクロン	μ	1 μ =1μm=10 ⁻⁶ m

