

世界最速の水素位置解析速度

SATテクノロジー・ショーケース2014

■ はじめに

大強度陽子加速器施設(J-PARC)では、陽子加速器を用いて世界最高輝度のパルス状中性子を発生させることができる。このようなパルス中性子源では、飛行時間を用いて白色中性子の波長解析が可能であり、また短波長中性子を効率よく発生させることができるという特徴を有する。短波長中性子を用いる事で、幅広い運動量遷移領域の観測が可能であるため、回折プロファイルをフーリエ変換することで、空間分解能の高い実空間2体分布関数を得る事ができる。2体分布関数を用いた構造解析は、全散乱法と呼ばれ、物質中の乱れた構造を解析する上で威力を発揮し、ガラスや液体の構造解析に広く使われてきた。近年では、結晶における構造揺らぎの解析にも用いられている。

水素は、さまざまな物性や機能を担い、誘起する元素として重要である。水素貯蔵材料は、低炭素社会実現において重要なコンポーネントであるが、水素が吸蔵・放出される過程ではアモルファス化を伴う場合もあり、乱れた構造の解析が必要である。中性子が水素(プロトン)の観測に有利である事と、J-PARCの高強度中性子線を生かした構造解析を行うための中性子高強度全散乱装置(NOVA)が稼働を開始している。

■ 活動内容

NOVAは、パルス中性子源の特長である幅広い波長の中性子を利用し、広いQ領域($0.1 \text{ nm}^{-1} \sim 1000 \text{ nm}^{-1}$)にわたるS(Q)を同時に取得可能である。最高分解能($\Delta Q/Q$)は約0.4%を実現しており、汎用的な粉末回折装置として、様々な物質・材料の構造解析に有用である。また、小角領域を含む観測が可能であるので、数十nm程度の相関まで観測できる。ただし本稿執筆時点で実証されている最小Q値は、約 0.26 nm^{-1} である。

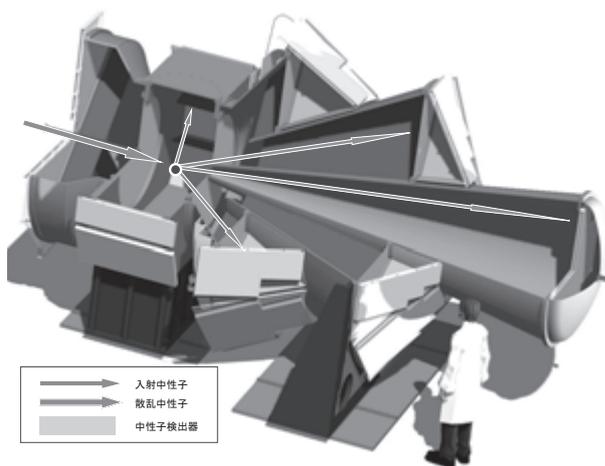
S(Q)をフーリエ変換して得られる2体分布関数については、20 nm程度までの相関を観測できることが実証されている。水素-水素原子間相関を得る事ができるということが、中性子を用いる大きな利点である。

J-PARCの高強度(高輝度)中性子線を生かすことで、数秒単位の過渡現象も観測可能である。これまでで、最も少量の試料による測定は1.4 mgであり、中性子を用いた物質の構造解析において新たな可能性を示している。この性能を生かして、水素貯蔵・放出過程の水素ガス雰囲気下での構造変化の観測を進めている。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

中性子高強度全散乱装置(NOVA)は、課題申請による利用が可能です。詳細はJ-PARC物質・生命科学実験施設のホームページ(<http://j-parc.jp/MatLife/ja/index.html>)を参照いただくか、著者までお問い合わせいただければ幸甚に存じます。

本研究の一部は、NEDO「水素貯蔵材料先端基盤研究事業(HydroStar)」(平成19年度～平成23年度)、NEDO「燃料電池自動車用水素貯蔵材料に関する調査研究」(平成24年度)、KEK中性子共同利用S型実験課題(2009S06)、科研費基盤研究(A)(24241034)、基盤研究(B)(24310075)若手研究(A)(23686101)、若手研究(B)(24710103)の助成のもとに進められた



高強度全散乱装置(NOVA)概念図

代表発表者 **大友 季哉(おおとも としや)**
 所属 **高エネルギー加速器研究機構
 物質構造科学研究所・中性子科学研究系**
 問合せ先 **〒319-1106 茨城県 那珂郡東海村大字白方
 203 番地 1
 TEL:029-284-4897 FAX:029-864-3202
 toshiya.otomo@kek.jp**

■キーワード: (1) 中性子回折構造解析
 (2) 水素貯蔵材料
 (3) 過渡現象測定