

## 平成 29 年度液体・非晶質材料研究会

主催：中性子産業利用推進協議会  
茨城県中性子利用促進研究会  
J-PARC MLF 利用者懇談会

協賛：(一財)総合科学研究機構中性子科学センター

日時：2018 年 3 月 1 日(木)10:00~17:50

場所：茨城県立県民文化センター

〒310-0851 水戸市千波町東久保 697 番地

TEL: 029-241-1166

( <http://www.ibarakiken-bunkacenter.com/> ) をご参照ください)

参加費：無料

ただし、資料代として 5,000 円いただきます。なお、中性子産業利用推進協議会の会員の皆様と大学、研究機関の方は無料です。それ以外の方は事務局までご相談ください。資料代は当日徴収させていただきます。

**プログラム：**

**<QENS データ解析ワークショップ>**

10:00-12:00 液体・非晶質材料の準弾性散乱データ解析

菊地龍弥 (J-PARC)

12:00~13:00 昼 食

13:00-14:30 QENS 解析実習

川北至信, 菊地龍弥 (J-PARC)

準弾性散乱(QENS)測定について、データ処理の基本的なところから、解析のノウハウに至るまで、実際のいくつかの測定データを用いて実習する。参加申込み者には、事前に準備すべきものをご連絡します。

14:30~14:45 休 憩

**<J-PARC MLF の装置>**

14:45-15:15 BL15「大観」の現状

高田慎一 (J-PARC)

「大観」は小角散乱測定に重点を置いた装置であるが、広角領域にも検出器を配置しており、幅広い  $q$  領域 ( $5 \times 10^{-3} < q < 17 \text{ \AA}^{-1}$ ) を同時に測定可能な装置である。また、現在コミッショニング中である超小角検出器(シンチレータ型高分解能検出器)を利用すれば、 $q_{\min} = 7 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$  まで測定可能となる。本講演では、「大観」の現状について、本体の仕様と各種実験用に整備された周辺機器の概要を紹介するとともに、いくつかの実験例を紹介する。

15:15-15:45 「冷中性子ディスクチョッパー分光器 AMATERAS の現状」

古府麻衣子 (J-PARC)

冷中性子ディスクチョッパー型分光器 AMATERAS は、複数のディスクチョッパーと結合型減速材による大強度ビームの組み合わせにより、大強度かつ高分解能を実現する非弾性・準弾性散乱装置である。特に、0.01~数 10meV のエネルギー領域で、物質中の原子や分子、スピンのダイナミクスを調べることに適している。複数の異なる入射エネルギーを同時利用することにより、広いダイナ

ミックレンジを効率良く測定できることも特長である。講演では、実際の測定例を紹介し、液体・非晶質物質の緩和ダイナミクス研究における AMATERAS の有用性を示したい。

## <研究成果>

### 15:45-16:05 リチウム電解質溶液のプレピーク構造とダイナミクス

吉田亨次 (福岡大学)

リチウムイオン電池用電解液として濃厚有機リチウム電解液が広く利用されているが、電池性能の向上のためには電解液の物性の制御が不可欠であり、電解液の物性を液体の構造やダイナミクスの観点から理解する必要がある。LiPF<sub>6</sub>/Propylene Carbonate (PC) 溶液および LiClO<sub>4</sub>/PC 溶液では塩濃度の増加に伴って分子スケールより大きな構造の存在を示すプレピーク( $q=10 \text{ nm}^{-1}$ )が成長する。本研究では、同位体置換中性子小角散乱と中性子スピネコー法により、プレピーク構造の起源と電解液の物性との関連を解明した。その結果、プレピークはイオン部と無極性部のコントラストによって生じていることが明らかとなった。また、プレピークの構造緩和は交流電導率の周波数依存性と相関があり、主ピークの構造緩和はずり粘性率の周波数依存性と一致した。

### 16:10-16:35 X線散乱と分子動力学シミュレーションによる硫酸系水溶液の構造解析

齋藤吉広 (住友電工)

風力発電や太陽光発電の大量導入に伴い、電力システムの安定化を目的とした大容量二次電池の活用が期待されている。このような電力貯蔵用の大容量二次電池の候補の1つが、レドックスフロー(RF)電池である。中でも正極側の活物質にマンガン(Mn<sup>2+</sup>/Mn<sup>3+</sup>)を用いるタイプでは、充電時の MnO<sub>2</sub> 析出( $2\text{Mn}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Mn}^{2+} + \text{MnO}_2 + 4\text{H}^+$ )の抑制が重要課題であるが、当社は電解液である硫酸系水溶液への Ti<sup>4+</sup>共添加が析出抑制に有効であることを見出した。そのメカニズムの鍵を握ると考えられる液中のイオンの配位構造について放射光分析(X線散乱、他)と古典分子動力学シミュレーションを用いた解析を進めている。本講演では、これまでに得られた知見について報告する。

### 16:35-17:00 GPa 圧力下の電解質水溶液の構造

山口敏男 (福岡大学)

### 17:00-17:25 Liquid-like thermal conduction in intercalated layered crystalline solids

Bing Li (J-PARC)

### 17:25-17:45 人工腎臓膜における中間水の静的・動的構造解析

中田 克 (東レリサーチセンター)

人工腎臓のような血液と直接接触するタイプの医療デバイスにおいては、材料と接触した血液の生体反応によって血栓が生じ、人体への刺激や脳梗塞などの障害を引き起こすことが大きな課題である。近年、医療材用ポリマーの抗血栓性の制御に関して、ポリマーと中間的な相互作用をした中間水の存在が重要な役割を果たしているとして注目を集めている。本研究では、代表的な抗血栓性ポリマーであるポリビニルピロリドン(PVP)水溶液について中性子散乱を実施し、PVP 水溶液における中間水の静的・動的構造解析を行った。

### 17:45-17:50 閉会挨拶 富田俊郎 (茨城県)

## <意見交換会> 18:10~19:30

参加者との意見交換会を開催します。会場は茨城県民文化センターから水戸駅寄りの店を予定しています。講演者と参加者のざっくばらんな意見の交換の場になりますので、是非ご

参加ください。参加希望者は2月23日(金)までに登録してください。参加費は当日いただきます。なお、当日キャンセルされた場合には参加費をいただきます。

参加費は4,000円(予定)です。ただし、中性子産業利用推進協議会とJ-PARC MLF利用者懇談会から2,000円程度の補助があります。

### <参加申込み>

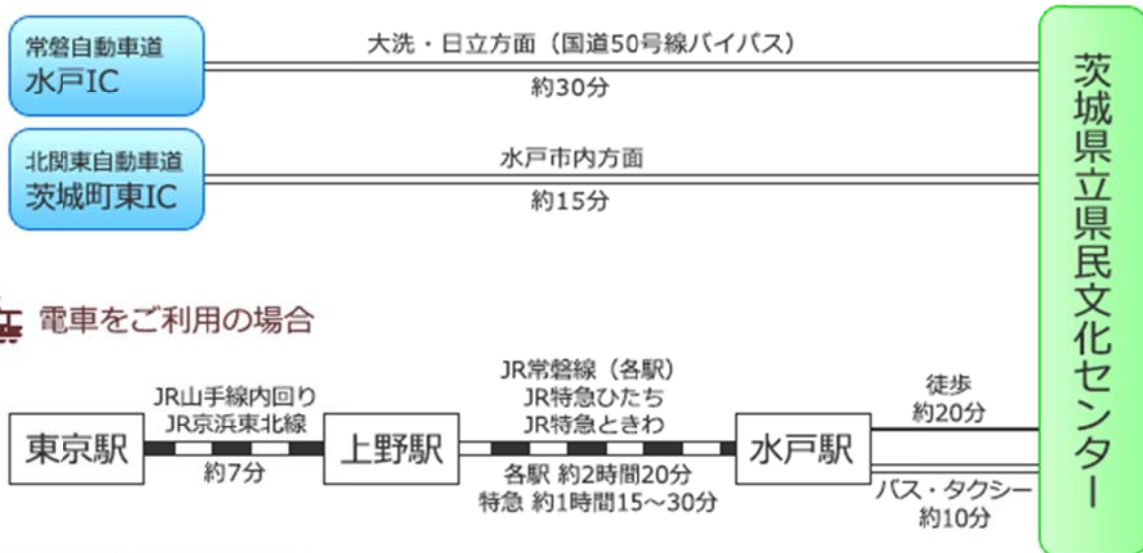
申込み先：中性子産業利用推進協議会 事務局 大内 薫

E-mail: [info@j-neutron.com](mailto:info@j-neutron.com)

(1)名前, (2)所属, (3)連絡先(電話番号, E-mail address), (4)交流会への参加の有無(領収書を発行します)をご記入の上, メールにてお申込みください。

### <茨城県民文化センターへのアクセス>

#### 車をご利用の場合



#### バスをご利用の場合

《JR水戸駅北口8番乗り場より》

関東鉄道…… [行き先] 文化センター・本郷方面 [下車バス停] 文化センター

茨城交通…… [行き先] 千波・笠原 メディカルセンター前 [下車バス停] 文化センター前

※ 文化センター入口で下車してしまうと、当センターまでは徒歩数分かかりますのでご注意ください。

### <バス時刻表>

[水戸駅北口8番乗り場発 ⇒ 文化センター方面](#)

[文化センター前停留所発 ⇒ 水戸駅方面](#)

<駐車場>：無料で使用できます。