

平成 29 年度物質科学研究会

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

共催：J-PARC MLF 利用者懇談会(結晶解析・pdf 解析分科会)

協賛：総合科学研究機構(CROSS)中性子科学センター

日時：平成 29 年 10 月 20 日(金)10:00-17:05

場所：フクラシア八重洲会議室 K

(JR 東京駅八重洲地下街 5 番出口直ぐ。詳細は末尾の地図をご参照ください)

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企業の皆さまと大学、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。

テーマ：BL20「iMATERIA」における学術・産業利用研究

趣旨：

BL20「iMATERIA」は、産業利用を主たる目的として整備された汎用の中性子回折装置です。粉末結晶構造解析、小角散乱、全散乱、集合組織測定 of 4 つの機能を有しています。J-PARC MLF の供用開始から 8 年を経て、様々な周辺機器も整備されてきました。今回の研究会では、iMATERIA において整備されてきた各種周辺機器類をカテゴリー別に概要を紹介し、どのような材料評価実験が可能となるのか概観するとともに、茨城県プロジェクトや J-PARC の一般利用研究課題によって挙げられた産業利用に先行する学術成果から、いくつかのトピックスを取り上げて紹介します。

プログラム：

10:00-10:05 開会挨拶 主査 吉沢英樹（東京大学）

<iMATERIA の概況>

10:05-10:25 iMATERIA における成果創出のための取り組み

富田俊郎（茨城県）

茨城県が J-PARC MLF に設置している材料構造解析用パルス中性子解析装置「iMATERIA」は、J-PARC MLF の産業利用の約 6 割を担うビームラインである。パルス中性子の産業利用を活性化するために、装置の高度化・多機能化、試料環境設備の充実化、さらには研究会や講習会の開催、学会でのブース出展など各種の啓発活動に努めてきた。その結果、2016 年度までに産業利用の課題採択数は 328 件に達している。また、Li イオン電池の分野を中心に重要な成果も出始めている。このような iMATERIA における成果創出のための取組みと今後の展開について概説する。

10:25-10:45 iMATERIA の現状と標準周辺機器の稼働状況

石垣 徹（茨城大学）

iMATERIA は高付加価値材料の創成を実現することを目指した産業利用目的の汎用型の材料構造解析装置である。基本的には粉末構造回折装置であるが、広い Q-range 測定や小角散乱、集合組織測定も可能である。本講演では、iMATERIA の基本的な機能や現状を紹介するとともに、標準的な周辺機器について紹介する。

10:45-11:15 iMATERIA のカテゴリー別周辺機器の整備状況と今後の展望

星川晃範（茨城大学）

これまでに開発した iMATERIA の周辺機器の整備状況と、今後の開発予定に関して分類別に紹介する。

11:15-11:35 iMATERIA における小角散乱機能とその応用例

小泉 智（茨城大学）

iMATERIA の小角散乱機能に「中性子偏極」と「水素の核スピン偏極」を組み合わせた新しいコントラスト変調法を発展させている。特に、この技術を製品に適用するために、各企業ユーザーと茨城県小角散乱分科会の活動を行っている。本講演では、小角散乱機能の最新情報と、小角散乱分科会での共同実験の成果を紹介する。

<施設の概況>

11:35-12:00 J-PARC MLF の産業利用 林 眞琴（CROSS）

J-PARC MLF の現状、J-PARC MLF における産業利用の状況、ならびに、産業利用成果などを紹介する。

12:00-13:00 昼 食

<iMATERIA における材料研究>

13:00-13:35 有機非線形光学結晶における水素結合距離の中性子回折による評価

松川 健（茨城大学）

iMATERIA において粉末中性子回折により有機非線形光学結晶の結晶構造解析を行い、水素結合と光学特性の相関について検討した結果を報告する。

13:35-14:10 プロトン伝導体 $(\text{C}(\text{NH}_2)_3)_2\text{Zn}(\text{SO}_4)_2$ の構造パラメータ温度依存性

吉田幸彦（茨城大学）

低活性化エネルギーのプロトン伝導性は、燃料電池の高性能化や新規材料開発などのカギを握る重要な性質である。最近、塩基性の強いグアニジン分子から構成される無水和結晶 $(\text{C}(\text{NH}_2)_3)_2\text{ZnSO}_4$ において、固体相転移($T=178\text{K}$)に伴い、グアニジウムイオンを介した低活性化エネルギーのプロトン伝導性が観測された。本講演では、このプロトン伝導性を理解するために中性子回折測定を行い、水素結合状態や無機骨格の配位多面体構造、および、原子変位量(プロトン輸送経路等)について評価した結果について報告する。

14:10-14:45 六方晶系合金の変形と集合組織

小貫祐介（茨城大学）

マグネシウム合金およびチタン合金は、比強度に優れることから構造用材料として用いられているが、延性に乏しいため展伸材としての利用が進んでいない。これらの材料は、結晶構造が六方晶稠密構造であることが低延性の原因とされているが、その塑性変形と破壊のメカニズムは必ずしも明らかではなく、組織制御の指針も不明瞭である。本講演では、主としてマグネシウム合金の変形における変形メカニズムを集合組織の観点から検討した結果を報告する。中性子回折によるバルク集合組織測定や電子顕微鏡を用いた EBSD 測定、および、計算シミュレーションを組み合わせることにより、局所的現象と全体の変形を支配する現象を整理することに成功した。

14:45-15:00 休 憩

<先行学術研究>

15:00-15:30 中性子を用いたナトリウムイオン電池用正極材料の研究

藪内直明 (東京電機大学)

将来的な化石燃料依存からの脱却と自然エネルギーの活用へ向けて、定置型大型蓄電池への期待が高まっている。その候補として、資源が豊富な元素で構成されるナトリウムイオン蓄電池の研究が世界中で活発に行われている。本講演では、クロムやチタン、マンガンといった資源が豊富な元素で構成された、ナトリウムイオン蓄電池用の新規酸化物系電極材料について、中性子回折法により結晶構造解析を行い、結晶構造の違いや遷移金属酸化物層間におけるナトリウムイオンの分布が、電池材料の電極特性に与える影響について検討した結果を報告する。

15:30-16:00 リチウムイオン電池用正極材料の充放電過程における平均・局所構造変化
井手本 康 (東京理科大学)

リチウムイオン電池正極材料の充放電過程では、リチウムの脱挿入過程の構造変化が特性を支配する重要なキーになる。平均構造解析においては、コインセルサイズの正極で中性子回折を用いて充放電過程の構造変化を捉えることに BL20 を用いて世界で初めて成功した。さらに、正極材料においても結晶 PDF 解析を先駆けて適用することで局所構造解析も可能になり、平均構造では明らかにできなかった局所的な構造変化(ひずみ、秩序-無秩序配列)などについて中性子と放射光 X 線を相補的に用いて明らかにした。ここで、局所構造初期モデルなどの妥当性の検証もこの理論計算で行うことができる。これらの方法を組み合わせて多角的に取り組むことで電池特性を支配する因子を明らかにし、電極材料の開発指針を得ていくことを目指している。本報告では、 $0.5\text{Li}_2\text{MnO}_3\text{-}0.5\text{Li}(\text{Mn}_{1/3}\text{Ni}_{1/3}\text{Co}_{1/3})\text{O}_2$ 系固溶体の充放電レートが平均・局所構造に与える影響などについて報告する。

16:00-16:30 ヒドリドイオン導電性酸水素化物の合成、構造、イオン導電特性
小林玄器 (分子研)

ヒドリド(H^-)は酸化物イオン(O^{2-})と同程度のイオン半径をもつ 1 価のアニオンであり、サイズと価数の観点から高イオン導電が期待できる。また、 H^-/H_2 の標準酸化還元電位(-2.25 V vs. SHE)が Mg/Mg^{2+} (-2.38 V vs. SHE)と同程度であることから、 H^- のイオン導電現象と酸化還元反応を利用することで、高エネルギー密度のエネルギーデバイスが実現する可能性がある。我々は、 H^- と O^{2-} が結晶格子内に共存する酸水素化物を対象に物質探索を行い、輪率 1 の H^- 導電性を有する新規酸水素化物 $\text{La}_{2-x+y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1-x+y}\text{O}_{3-y}$ ($0 \leq x < 1, 0 \leq y \leq 2$)を開発した。本講演では、 $\text{La}_{2-x+y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1-x+y}\text{O}_{3-y}$ の合成方法や結晶構造、 H^- 導電特性について報告する。

16:30-17:00 Fe 及び Ni 置換 Li_2MnO_3 系正極材料の充放電時の結晶構造変化
田淵光春, 栗山信宏(産総研), 渋谷英香, 堂前京介(田中化学)
弓削亮太, 田村宜之(NEC)

我々の開発した新規 Fe 及び Ni 置換 Li_2MnO_3 系正極材料は、合成法及び電池作製技術の進展により、既存の Li 過剰系正極材料と比較して、優れた充放電特性を有するに至った。さらなる特性改善のためには、遷移金属イオンのみならず酸化物イオンまでも酸化還元する複雑な充放電機構の解明が必須である。本講演では、今まで主に行ってきた X 線リートベルト解析結果をベースに昨年度初めて iMATERIA による粉末中性子リートベルト解析を行った結果について報告し、解析の妥当性やさらなる充放電特性改善の可能性について議論する。

17:00-17:05 閉会挨拶とお知らせ 峯村哲郎 (茨城県)

<会場へのアクセス>

<貸し会議室>フクラシア八重洲

JR 東京駅八重洲地下街 5 番出口

グラン東京サウスタワーの東正面, 八重洲ブックセンター北隣のビル 3F

<https://www.fukuracia.jp/yaesu/>



<交流会場>

会費：2,000 円

時間：17:30～19:30

会場：銀座ライオン(八重洲地下 1 番通り)

TEL: 03-6214-3636

http://www.yaechika.com/shop_detail.php?shopid=sp286

