

高強度中性子ビームを用いた水素貯蔵物質の構造研究

Structural studies of hydrogen storage materials with high-intensity neutron beam

高エネ機構¹, 日本原子力機構², 総研大³ ○大友 季哉¹, 池田 一貴¹, 大下 英敏¹,
鈴谷 賢太郎², 金子 直勝¹, 瀬谷 智洋¹, 藤崎 布美佳³

KEK¹, JAEA², SOKENDAI³ °Toshiya Otomo¹, Kazutaka Ikeda¹, Hidetoshi Oshita¹, Kentaro
Suzuya², Naokatsu Kaneko¹, Tomohiro Seya¹, Fumika Fujisaki³

E-mail: toshiya.otomo@j-parc.jp

中性子全散乱法は、静的構造因子 $S(Q)$ (ここで $Q = 4\pi \sin\theta/\lambda$, 2θ は散乱角、 λ は中性子波長) を精度良く測定し、フーリエ変換により実空間 2 体相関を得ることを基本的な流れとするものである。2 体相関には不規則構造を含んでおり、様々な不規則系の構造解析に威力を発揮してきた。フーリエ変換の精度は高 Q 領域のデータの精度に依存するため、短波長の中性子フラックスの大きな加速器駆動型の中性子源に全散乱装置は設置されてきた。我が国における中性子全散乱法による不規則構造研究は、1970 年代に東北大核理研において世界に先駆けて始められ、1980 年代後半から 2006 年まで高エネルギー物理学研究所 (現、高エネ機構) において精力的に行われてきた。そして 2009 年より、大強度陽子加速器施設 (J-PARC) の世界最高レベルの加速器駆動型中性子源を利用した高強度全散乱装置 (NOVA) が稼働を開始した。

NOVA は、パルス中性子源により発生する白色中性子を活用し、最隣接原子間相関から最大数十 nm 程度まで ($0.01 \text{ \AA}^{-1} < Q < 100 \text{ \AA}^{-1}$) の構造が短時間で観測可能である。液体や非晶質のみならず、結晶の構造解析にも十分適用可能な分解能を有し、結晶物質の Bragg peak 位置の観測であれば、1 秒以下での測定も十分に可能である。今後、J-PARC の陽子ビームパワーの増強に伴い、様々な過渡現象を広い Q 領域により観測することが可能になると考えている。

中性子は軽元素に対しても大きな散乱断面積を有するという利点があり、物質中の水素、とくにプロトンの観測に適している。水素貯蔵材料では、水素貯蔵・放出過程において、様々な乱れ、不規則性が生じる。中性子の特性を最大限に生かし、NOVA により不規則構造を含めた知見を得ることで、多様な物質・材料における水素貯蔵メカニズムを明らかにしたいと考えている。試料環境として、水素貯蔵プロセスを「その場」観測するための水素ガス雰囲気装置を整備しており、水素貯蔵・放出過程の過渡的な構造変化の観測が可能である。講演では、高強度中性子全散乱装置 (NOVA) の性能・特長を、これまでに測定された標準的試料や水素貯蔵材料の結果に基づいて紹介しつつ、極端条件下での実験可能性についても触れる。

本研究の一部は、NEDO 事業「水素貯蔵材料先端基盤研究 (Hydro-Star)」(平成 19 年度より平成 23 年度) により実施された。

参考文献: 「高強度全散乱装置の概要と水素貯蔵材料研究」大友季哉, 鈴谷賢太郎 日本結晶学会誌, 50, 29-34 (2008).