



Neutron

四季

【18年・冬】 Vol.41

中性子産業利用推進協議会 季報
Industrial Users Society for Neutron Application

2018年12月25日 発行

CONTENTS

P2 J-PARCセンター情報 P2-3 中性子実験技術の紹介 P3-10 研究トピックス P10-11 中性子産業応用セミナー P11-12 活動報告とお知らせ

中性子で解き直し

東京大学 五十嵐 圭日子

1958年にミオグロビンの構造が初めて明らかになって以来、60年経った今でも蛋白質の形はX線結晶構造解析によって解くのが一般的です。私自身も博士論文のテーマだった、きのこ由来のバイオマス変換酵素「セロビオース脱水素酵素」の構造がウプサラ大学で解かれたと聞いて、居ても立っても居られずポスドクとしてスウェーデンに留学したのが2000年のことでした。滞在中の1年間、ほぼ毎日酵素を精製し、ほぼ毎日結晶化のセットアップをしていました。しかし、この頃ウプサラ大学では蛋白質の構造を解くこと自体は既にルーチンワークとなっており、むしろ蛋白質の結晶作製の方が律速となっていることが分かりました。そのため、日本に戻ってきてからは主にサンプル調製と高品質結晶作製にこだわってきました。しかしながら、タグ付きの組換え蛋白質をスピнкаラムで精製し、ロボットで結晶化条件を決めて、全自動ソフトで構造解析をするようになると、蛋白質精製や結晶作製のノウハウに関して語る機会も少なくなっていました。

そんな私のこだわりが、巨大結晶が必要な中性子構造解析で活かせることに最近気づき、2015年の世界初のセルラーゼ中

性子構造解析につながりました。そこで見えてきたのは、イミド酸型のアスパラギンが起点となって複数のペプチド結合を巻き込む互変異の連鎖(multiple tautomerization)で、これまでのX線結晶構造解析では見えていなかった蛋白質の「鼓動」に触れた気がしました。その一方で、ペプチド結合の二重結合性や活性中心付近のBファクターの高さは昔から論じられていたにも拘わらず、互変異の重要性を論じるような真の蛋白質科学からX線結晶構造解析が遠のいてしまっていることにも気づきました。マニュアル化やキット化、ロボット化と自動化によって、確かに数多くの構造が明らかになりましたが、その代償として蛋白質の本来の姿に向き合うことをなござりにしてきたのが今世紀の構造解析トレンドと言っても過言ではないでしょう。

2018年8月末現在、PDBに登録されているX線による構造解析結果が12万を超えているのに対して、中性子構造は100件ほどです。真の蛋白質の姿を見たいなら、この12万構造を全て中性子で解き直してみたいかがでしょうか。もちろん、中性子構造解析用の結晶を作る辛さを知っている方にしてみたら「五十嵐、正気かよっ」という感じだと思いますが、蛋白質の真の姿を見たいなら、それくらいの努力をすべきではないでしょうか。私からの挑戦状と受け取っていただけたら本望です。

J-PARCへの期待

株式会社日立製作所 村上 元

大量消費社会がかげりをみせるなか、デジタル技術を活用したさまざまなシェアリングサービスが生まれており、モノの所有から、利用価値、さらには、得られた結果に対して対価を払うという価値観の変化がますます加速しているように思います。IoTやAIに代表されるデジタル技術は、埋もれていた膨大なデータを活用して、従来の枠組みを超えた新しい価値をすばやく提供する技術として、ますます進化していくと思います。

一方で、質の高い生活や環境の保全、持続的な経済の発展、エネルギー・資源の確保といった、ときに相反する社会課題の解決に向けては、従来システムの限界を根本的に打破する、革新材料によるイノベーションへの期待が依然として高いことも事実です。例えば、地球環境を維持しながらストレスなく移動するEV社会を実現するためには、デジタル技術による社会システムの最適化と共に、蓄電デバイスの性能を飛躍的に向上する革新的な電池材料の創生が欠かせません。

しかし、スピードが重視されるデジタル時代において、従来

のように長い年月をかけて材料を開発することは受け入れられなくなってきています。弊社でも材料開発の加速に向けて、マテリアルズインフォマティクスの活用などの取り組みを進めており、数年かかっていた樹脂の開発が数ヶ月に短縮するなどの成功例が出始めています。そのコアとなるのは、データを解析するAIやシミュレーションの技術と共に、稼働状態での材料の挙動など、実データを蓄積する高度解析技術です。これまで、電池の充放電時におけるイオン挙動、モータ回転時の磁区構造、さらには、構造材の溶接時の相変化等をその場で計測するなど、J-PARC MLFやSPring-8を幅広く活用させていただいています。今後、さらなる活用に向けて、先進的な計測はもちろんのこと、それにも増して、短い開発期間の中で、必要なときに素早くデータを収集することが重要になると考えています。

J-PARC MLFにおいては、本年度は出力500kWで稼働率が90%以上の安定した運転ができていますと聞いています。運営面でさまざまなご苦労はあると思いますが、ユーザーにとってよりタイムリーな計測が可能となる環境の実現を期待しています。

J-PARCセンター情報

水銀ターゲット9号機の運転状況

J-PARCセンター 羽賀 勝洋

J-PARCセンターでは、運転を終えた水銀ターゲット容器8号機を夏季メンテナンス中に9号機へ交換し、10月22日から利用運転を開始しました。水銀ターゲット容器を保護するためのバブリング用ガス供給設備の不調により、300kWの陽子ビーム出力で運転を開始しましたが、11月6日からは出力を500kWに上げて安定な運転を継続しています。図1に9号機による運転状況を示します。9号機は8号機と同じ構造と製法を採り、特に、溶接部については製作時に入念な検査を行って健全性を確認しました。また、利用運転を開始する前には、ビーム試験により水銀ターゲット容器の温度や振動が8号機を含めた従来のデータと比較して異常がなく、許容値を下回ることを確認しました。

水銀ターゲット容器では、パルス陽子ビームが水銀に入射して生ずる圧力波によって生成されるキャビテーションが水銀容器を損傷させるため、図2に示すように水銀中に微小気泡を注入するバブリングを行うとともに、陽子ビームが入射する壁面に設けた二重壁の狭隘流路に速い水銀流を形成するという、J-PARCで開発した損傷低減技術を適用しています。8号機から採取した試験片を用いて、これらの損傷抑制効果を定量的に評価した結果、予測以上の効果が得られていることが分かりました。

気泡生成器へのヘリウムガスの供給については、加圧のためのコンプレッサーを用いることなく、水銀流動によって生ずる吸引力でガスを気泡生成器へ供給する方式を採用していますが、損傷の低減に必要な気泡生成機能が得られています。

MLFでは、今後も損傷低減技術の改良と高度化を進めるとともに、実機運転で得られたデータを技術開発にフィードバックし、安定な運転と高出力化の両立を目指します。

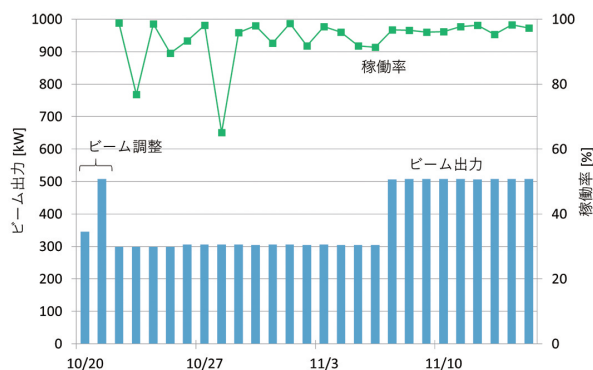


図1 水銀ターゲット容器9号機による運転状況 (2018年11月15日現在)

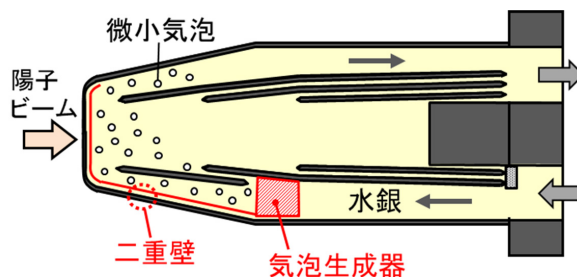


図2 水銀ターゲットにおける流路構造

中性子実験技術・研究の紹介

情報技術を用いた中性子非弾性・準弾性散乱の新しい解析法の考え方とその発展

J-PARCセンター/住友ゴム工業株式会社 菊地 龍弥

中性子源と中性子散乱装置の進歩に対応した次世代の中性子非弾性・準弾性散乱の解析法について研究しています。新解析法により実験データから新しい情報を取り出すことができます。

液体・固体を問わずあらゆる物質中では、原子は相互に力を及ぼしあっています。相互の力の結果として、安定的に原子が配置します。これが構造です。また、原子は相互に与える力の下で止まることなく運動し続けます。これがダイナミクスです。原子そのものだけでなく、原子が持つスピン(磁性)も同様に構造とダイナミクスを持ちます。中性子散乱実験は原子やスピンについて、構造だけではなく、ダイナミクスだけでもなく、構造とダイナミクスの関係を観測可能な稀有な実験手法です。

中性子散乱実験で観測できる非弾性散乱や準弾性散乱は運動量遷移 Q とエネルギー遷移 E に対する強度分布 S

(Q, E)として測定されます。 Q は原子・スピンの繰返しの構造を表します。 E は、原子・スピンの持つエネルギーを示します。運動しているということはエネルギーを持つということです。

近年では、中性子源の改良によりビーム強度が増しており、中性子散乱装置の改良と相俟って非弾性散乱や準弾性散乱をより効率的に測定できるようになっています。その結果、MLFでは、 Q と E の範囲を絞らずに、広範囲かつ高分解能で $S(Q, E)$ を測定することができます。 $S(Q, E)$ の解析において、従来は局所的に Q と E の関数として見ていましたが、広範囲測定により全体として $S(Q, E)$ を捉えることができるようになっています。すなわち、 $S(Q, E)$ の中に広く、薄く入っている情報を正しく取り出すことが可能です。これが次世代の解析法の原点です。

広範囲のデータを利用した解析として、一般的に利用されている方法に、実空間構造($g(r)$ やPDF(Pair Distribution Function))解析や、中間散乱関数 $I(Q, t)$ があります。これらは、フーリエ変換により $S(Q, E)$ から直接計算できます。 Q は実空間距離 r に、 E は時間 t に変換されます。これらに対し、3つの解析法を開発しています。

その解析法では、

- ◇ $G(r,t)$ 解析 [1] : $Q \rightarrow r, E \rightarrow t$
- ◇ $G(r,E)$ (DPDF) 解析 [2] : $Q \rightarrow r, E$ はそのまま
- ◇Mode Distribution Analysis (MDA) [3] : $E \rightarrow \Gamma$ or τ
(τ は拡散・緩和現象の緩和時間、 Γ はその逆数)

という変換を行います。 $G(r,E)$ は、Dynamic Pair Distribution Function (Dynamic PDF) とも呼ばれます。 $G(r,t)$ 解析と $G(r,E)$ 解析はフーリエ変換ですが、その計算には非常に広い Q 範囲のデータが必要になります。中性子散乱では測定の原理が理由で、広範囲測定でも高エネルギーを除いて、十分な Q 範囲を測定することはできません。そこで情報技術により計算を補い、狭い Q 範囲でも計算を可能にしています。MDAは逆ラプラス変換に対応する計算であるため、同様に情報技術を用います。逆に言えば、情報技術の導入によって初めて、これらの計算が可能になりました。

図1に示すように、 $G(r,t)$ 解析と $G(r,E)$ 解析は、特定の原子間

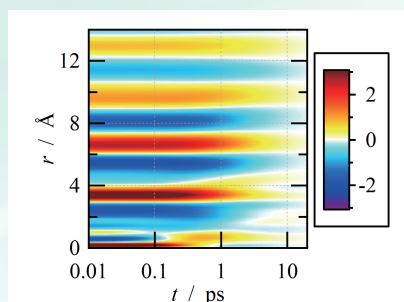


図1 溶融ビスマスの $G(r,t)$ [1]

で生じるダイナミクスを切り出すことができます。特定の原子間の情報は $S(Q,E)$ では Q 方向に広く分布するため判別が困難ですが、 $G(r,t)$ 、 $G(r,E)$ では正にそのものが表されます。MDA

は図2に示すように、緩和モードの分布を表す $B(Q,\Gamma)$ を計算します。緩和モードのシグナルは、 $S(Q,E)$ では E 方向に完全に重なってしまっていますが、 $B(Q,\Gamma)$ では独立したモードとして表されます。これらのように、広がった(埋もれた)情報を最適な視点で取り出す

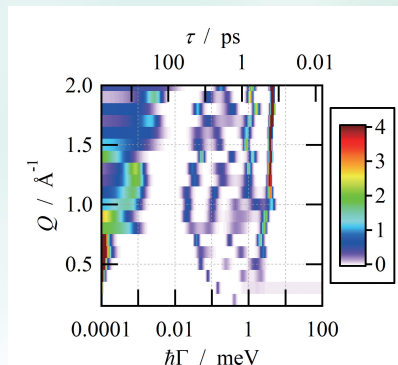


図2 ポリブタジエンの $B(Q,\Gamma)$

方法が次世代の解析法になると考えています。

今後は、1) $G(r,t)$ 解析や $G(r,E)$ 解析、MDAによる新しい研究の促進、2) 新たな情報技術の導入による解析法の改良、3) ダイナミクスの新たな視点への発展、を進めて行きます。これらにより中性子散乱実験の可能性が広がって行くと期待されます。

解析法の研究は多岐に亘る分野が関わり、MLFの分光グループの皆さま、特に、BL14「AMATERAS」やBL01「四季」、BL02「DNA」の関係者にお力添えをいただいています。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Y. Kawakita, et al., Physica B: Cond. Mat., DOI: 10.1016/j.physb.2017.12.037, in press.
- [2] M. Nakamura, et al., Physica B: Cond. Mat., DOI: 10.1016/j.physb.2017.12.057, in press.
- [3] T. Kikuchi, et al., Phys. Rev. E 87, 062314 (2014).

研究トピックス

●J-PARC

中性子を用いた新規リチウム含有ニッケル・ニオブ系酸化物の結晶構造解析

横浜国立大学 藪内 直明
高エネルギー加速器研究機構 米村 雅雄

BL09「SPICA」を用いた中性子回折によりLiイオン電池用 $\text{Li}_3\text{NbO}_4\text{-NiO}$ 系電池材料の結晶構造解析を行い、その詳細な結晶構造と、充電時に酸素に正孔が生成することで高容量を発現することを明らかにしました。

Liイオン蓄電池は携帯電子機器の電源としてだけでなく、現在では電気自動車にも広く利用されています。現在、電気自動車の走行距離を向上させるために、Liイオン蓄電池の高性能化が求められています。そのためには、正極材料の革新が必要不可欠とされています。近年、次世代の正極材料として充放電時における酸化物イオンによる電荷補償を利用する(充放電時に酸素の2p軌道に正孔が形成される)アニオンレドックス材料が注目されています。これまでに、 $\text{Li}_{1.2}\text{Ti}_{0.4}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_2$ のようなTi・Mn系正極材料において、酸化物イオンの電荷補償を利用することで高容量アニオンレドックス材料となることを明らかにしてきました[1]。しかし、Mn系のアニオンレドックス材料の平均放電電圧はLi金属基準で3.3V程度と低く、さらなるエネルギー密度の向上に向けて4V以上の電圧を示すアニオンレドックス材料が求められていました。

そこで、本研究では、Ni系のアニオンレドックス材料

の実現へと向けて $\text{Li}_3\text{NbO}_4\text{-NiO}$ 系二元系材料について系統的な研究を行いました。中性子回折測定の結果、 Li_3NbO_4 の割合が多い組成の試料については、Li、Nb、Niの全てのカチオン種が6配位サイトで不規則配列した岩塩型構造となることを確認しました。また、電池材料としては充電時に酸素が電荷補償を担う結果、不安定となり、酸素分子として脱離する不可逆な反応が進行することも確認しました。しかし、NiOの割合を増やした組成の試料を合成したところ、図1に結晶構造を示すように、Nbが8aサイトで規則配列する一方で、LiとNiが残った6配位サイト(16gと8bサイト)で不規則配列した構造となることを確認しました。さらに、電池材料としては、現状では放電容量が低いという問題が残っています

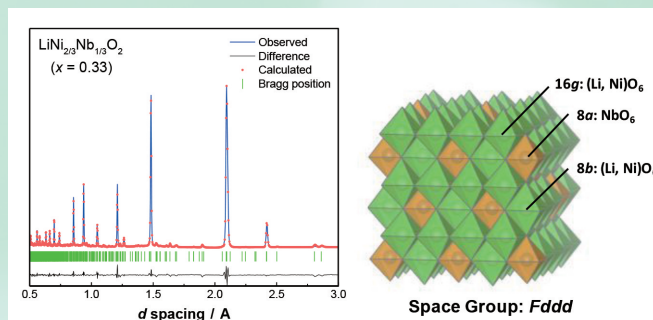


図1 $\text{LiNi}_{2/3}\text{Nb}_{1/3}\text{O}_2$ の中性子回折図形と結晶構造の模式図

が、Li金属基準で4Vという高い平均電圧を示すアニオンレドックス材料となることを確認しました。このような現象は第一原理計算の結果とも一致し、さらに、実験的には軟X線吸収分光法によっても明らかにしています。将来的には固体中のLiイオンを増やした組成でも、同様にアニオンレドックスを安定化することができれば、高電圧・高容量を実現する次世代の正極材料の誕生に繋がることが期待できます。

これらの成果は、将来的なLiイオン電池の高電圧化と高エネルギー密度化に繋がることから、携帯電子機器や電気自動車の高性能化だけでなく、自然エネルギーから得られた電気エネルギーを貯蔵する用途や、ロボットやドローンのような新しいデバイスの高性能化と普及に繋がることも期待できます。

参考文献

[1] N. Yabuuchi *et al.*, *Nature Commun.*, 7, 13814 (2016).

中性子小角散乱を利用したドラッグデリバリーキャリア用ナノゲルの微細構造解明

日本原子力研究開発機構 関根 由莉奈

ドラッグデリバリーキャリアとして利用が期待される高分子ナノ微粒子(ナノゲル)の内部の微細構造をコントラスト変調中性子小角散乱法によりはじめて明らかにしました[1]。

親水性の天然高分子(プルラン)に対して、わずかに疎水性の官能基(コレステロール)を化学修飾すると、疎水性相互作用により水中で自己組織的に30nm程のナノゲルが形成されます。図1に示すように、ナノゲルは内部にタンパク質等の生体分子を内包するナノ空間を有することから、体内に薬物を運搬するドラッグデリバリーキャリアとして研究されています。ナノゲル内部へ生体分子が内包される挙動は、内部の微細構造が大きく関与していると考えられています。しかし、ナノゲルは90%以上が水で構成されるため、電子顕微鏡等では観察が極めて困難であり、今まで内部構造を可視化することはできていませんでした。

本研究では、J-PARC MLFのBL15「大観」を利用して、コントラスト変調中性子小角散乱法によりナノゲル内部の構造を解析しました。ナノゲルを含む溶液の重水体積比率を0から100%まで変化させた試料の散乱プロファイルの変化を図2(a)に示します。観察されたプロファイルの変化は、プルランに含まれる水酸基(-OH)のHがDに置換することにより、プルランとコレステロール、溶媒の散乱コントラストが変化したことを反映しています。この変化に対して特異値解析を行って、ナノゲルの構成成分であるプルランとコレステロール、および溶媒それぞれの散乱プロファイルを抽出しました。それらのスペクトルに対してフィッティング解析を行い、各々の大きさや分布を評価した結果、図2(b)に示すようにナノゲルの内部では平均約3個のコレステロールが会合して1つの架橋点を形成しており、全体として19個の架橋点が約1.7 nmの距離で分布していることを明らかにしました。

コレステロール会合体で形成される動的な架橋点は、ナノゲルの内部や表面付近において生体分子の取り込みや固定化、放出に大きく寄与していると考えられます。

今回得られた知見は、今後、さらなる高性能なドラッグデリバリーキャリア材料を開発する上で重要な情報となります。また、コントラスト変調中性子小角散乱法を有効利用して、材料設計へフィードバックすることにより、ナノ構造体の形態や構造、機能の相関に基づくさらなる高機能なナノ構造体の開発が期待されます。

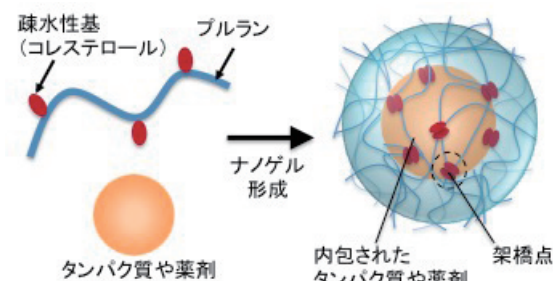
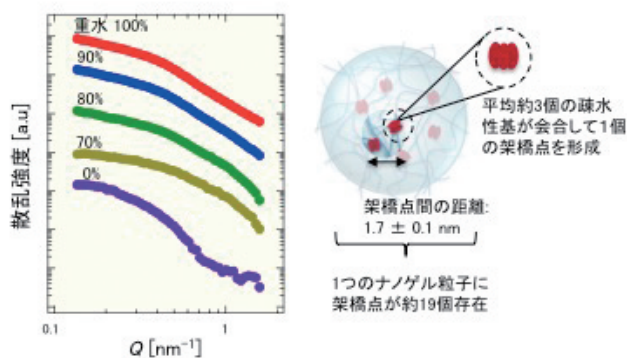


図1 ナノゲルの概要



(a) 散乱プロファイルの変化 (b) 内部構造の解析結果

図2 ナノゲルの散乱プロファイルの変化

参考文献

[1] Y. Sekine, H. Endo *et al.*, *J. Phys. Chem. B* 120, 11996-12002 (2016)

コントラスト変調SANSを利用したリポソーム表面の修飾PEG鎖の構造解析

富士フィルム株式会社 杉島 明典

ポリエチレングリコール(PEG)修飾リポソームの脂質膜とPEG鎖の構造をコントラスト変調小角中性子散乱(SANS)法で調べ、PEG鎖の広がりとその修飾率によって変化することを明らかにしました。

リポソームは生体膜と同じリン脂質二重膜でできた0.1~0.2 μ mの微細なカプセルで、生体適合性が高く、毒性

が低いという利点があり、必要な薬剤が必要な場所に届けるドラッグデリバリーシステム(DDS)のキャリアとして使用されています。リポソームは膜表面に修飾基を付与することで様々な機能化できることが知られています。例えば、PEG修飾では代謝系への捕捉率が下がり、血中での安定性や滞留性が向上します。リポソームの機能を制御するためには修飾基の構造を知ることが不可欠です。

今回、PEG修飾違いのリポソームでPEG鎖の広がりを小角散乱法で調べました。PEG鎖は溶媒との電子密度差が小さい

ため、X線小角散乱 (SAXS) 法とコントラスト変調中性子散乱 (SANS) 法を併用しました。コントラスト変調法ではリポソームの溶媒の水を重水置換しました。

PEG 修飾率を変えたりリポソームの SAXS と SANS による散乱パターンを図 1 に示します。PEG 修飾率を変えると X 線と中性子線の小角散乱パターンが明瞭に変化し、脂質二重膜または PEG 鎖の構造が変化していることが分かります。

SAXS と SANS の散乱パターンをフィッティング解析し、リポソーム膜の電子密度と散乱長密度の分布を求めた結果を図 2 に示します。脂質二重膜本体 (中心部の疎水基とその外側の親水基) に加え、脂質二重膜に修飾された PEG 鎖の存在を捉えることができました。PEG 鎖の濃度が異なるデータを比較すると、疎水基と親水基の膜本体の構造は変化していませんが、PEG 修飾率が高いほど溶媒に対する PEG 鎖の電子密度ならびに散乱長密度のコントラストが増し、広がりも大きくなっていることが分かります。ポリマー鎖は隣接鎖間距離が十分長い場合には

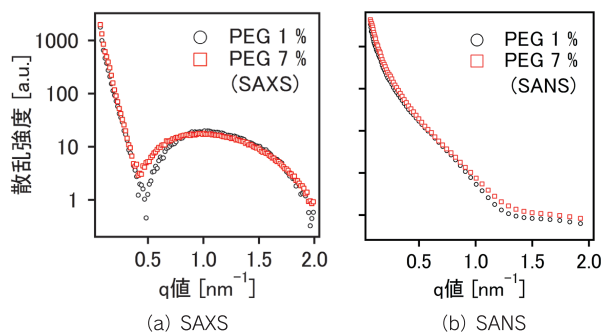


図1 PEG修飾リポソームの小角散乱パターン

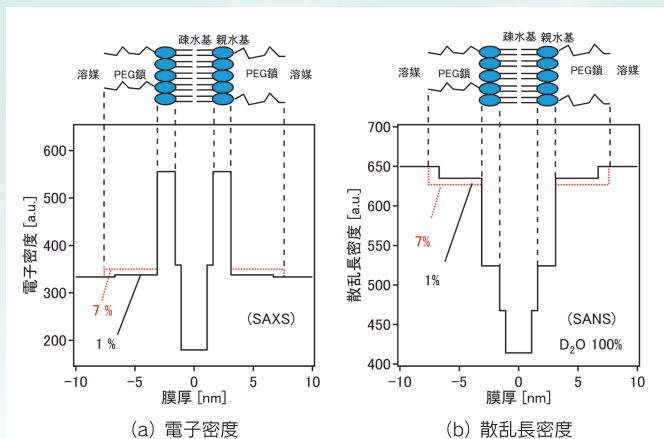


図2 PEG修飾リポソームの膜構造

マッシュルーム型構造を、短い場合にはブラシ型構造をとることが知られていますが[1,2]、リポソーム表面の修飾PEG鎖でも類似の現象が起きることが分かりました。

この成果は高薬効で副作用の少ないDDS製剤の開発に繋がることが期待されます。また、修飾基や吸着ポリマーの広がり、インクや化粧品などリポソーム以外の微粒子分散材料でもその分散性を支配する重要な特性であり、高い分散安定性を持つインクや化粧品の開発への応用も期待されます。

本研究はトライアルユース制度を利用して行いました。課題実施にあたり、(一財)総合科学研究機構の鈴木淳市部長と岩瀬裕希研究員にご指導いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

- [1] P.G.de Gennes, *Macromolecules*, **10** (1980) 1069.
- [2] O.Tirosh et al., *Biophys. J.*, **74** (1998) 1371.

タイヤ用ゴム/フィラー界面におけるエラストマーの密度分布プロファイルと拡散特性

高エネルギー加速器研究機構 堀 耕一郎、山田 悟史
瀬戸 秀紀
三重大学 藤井 義久
住友ゴム工業株式会社 増井 友美、岸本 浩通

カーボン表面近傍に存在するポリブタジエン (PB) の密度および分子鎖の運動性がカーボンの表面自由エネルギーに依存して大きく変化することを明らかにしました[1]。

乗用車や航空機などに用いられているタイヤは、マトリックスとしてゴム弾性を有する高分子であるエラストマーを、無機フィラーとしてカーボンブラックやシリカを用いた複合材料です。複合材料の力学特性を決める要因の一つとして、無機フィラーの表面近傍におけるマトリックスの構造および物性が挙げられます。タイヤの場合、フィラー表面に吸着したエラストマーをバウンドラバー層 (BRL) と呼びますが、BRLの量がタイヤの物性を大きく左右することが古くから知られています。BRLの量は、フィラーの表面をカップリング剤等により修飾する、すなわち、フィラーの表面自由エネルギーを変化させることである程度制御できますが、BRLの構造と物性との関係はほとんど明らかになっていませんでした。

本研究では、タイヤに用いられるエラストマーの一種で

あるPBの表面自由エネルギーを変化させたカーボン表面における構造と運動性をX線反射率測定 (XR) と中性子反射率測定 (NR) の結果に基づいて検討しました。NRにはJ-PARC MLFのBL16「SOFIA」を利用しました。測定に際して、タイヤ用ゴム材料に添加されたカーボンブラックとPBの界面をモデル化するため、カーボン膜の上にPB膜を調製した試料を用いました。図1 (b) は、種々の表面自由エネルギーを有するカーボン上に製膜したPBのXR曲線です。図1 (a) のモデルを用いて反射率曲線を解析した結果、carbon-58 (親水性カーボン) 上の、カーボン界面近傍におけるPB1層、すなわち、バウン

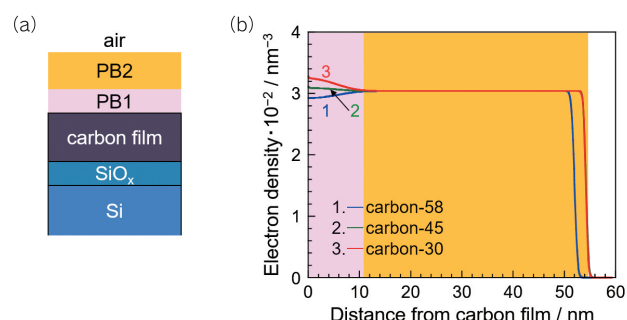


図1 (a) XRの解析モデル、(b) PB膜の電子密度プロファイル。

ドライバーに相当する層 (RL) の電子密度が、バルク層 (PB2) と比較して小さいことが分かりました。一方、carbon-45 と carbon-30 (疎水性カーボン) 上では、PB1 層の電子密度は PB2 層より大きくなりました。このことから、RL の電子密度、すなわち、質量密度は接しているカーボンの表面自由エネルギーに依存することが分かります。

質量密度の異なる RL の運動性を評価するため、次のような試料を調製しました。まず、バルクの PB 膜を除去するため、試料をトルエンで洗浄し乾燥します。その後、重水素化した PB (d-PB) をスピコート法により成膜し、乾燥させました。図2は 180 °C で熱処理を施す前後における RL/d-PB 二層膜の NR 曲線です。丸が実験値で黒線がモデル散乱長密度プロファイルから計算した値です。解析した結果、carbon-58 上の RL は熱処理を施す前から RL と d-PB 膜の界面で拡散を起こしますが、carbon-45 と carbon-30 上では、熱処理を施した後もほとんど拡散していません。このことは、密度の大きい RL 層中における PB 分子の運動が抑制されていることを示唆しています。

本研究で用いた実験手法は、種々の界面における BRL の評価に適用可能です。将来的には、BRL のより深い理解が新世代タイヤの材料設計において重要な役割を果たすため、BRL の調査のための重要な手法となると期待されます。

本研究は光量子融合連携研究開発プログラムの助成を受けました。

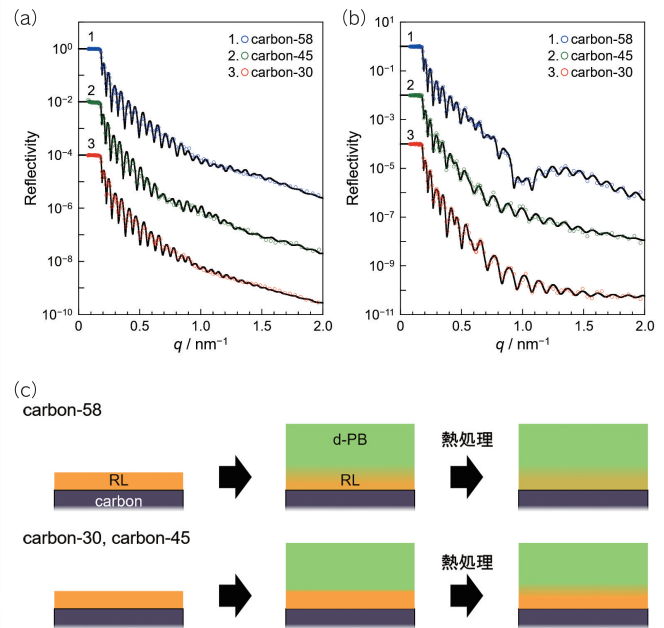


図2 (a) 熱処理前および (b) 熱処理後における、RL/d-PB二層膜のNR曲線 (c) 熱処理前後におけるRL/d-PB二層膜の模式図

参考文献

[1] K. Hori, H. Seto *et al.*, *Langmuir*, **33**, 8883-8890 (2017)

中性子で観るパラジウムナノ粒子中の水素の配置と振動状態

J-PARCセンター 古府 麻衣子
東京大学 秋葉 宙、山室 修

パラジウム水素化物ナノ粒子の中性子回折・非弾性散乱測定を行い、ナノ粒子表面近傍の水素原子の配置と振動状態がバルク試料とは大きく異なることを明らかにしました [1,2]。

パラジウム (Pd) は高い水素吸蔵能力や触媒機能を持ち、古くから研究されてきた金属です。近年、Pd をナノ粒子化すると、水素吸蔵特性や触媒機能が大きく変化することが報告され、様々な研究分野で注目を集めています。これらのことから、Pd 格子中に存在する水素原子の受けるポテンシャル場が表面近傍とバルクでは大きく異なると推測されます。しかしながら、表面近傍での水素の振舞いやポテンシャル場の詳細はほとんど分かっていませんでした。そこで、筆者らは、中性子散乱手法を駆使して Pd ナノ粒子中の水素原子の状態を明らかにしようと試みました。

初めに、Pd 格子中の水素の配置を調べるために、BL21 「NOVA」で中性子回折実験を行いました。図1に Pd 格子中の水素原子の占有サイトと中性子回折パターンを示します。過去の研究から、バルク試料では水素は Pd が作る面心立方格子の八面体サイトに存在することが知られています。解析の結果、ナノ粒子では水素は八面体サイトだけではなく、四面体サイトにも存在することが分かりました。また、四面体サイトの水素は表面近傍にのみ存在する可能性が高いことも明らかになりました [1]。バルクでは四面体サイトはエネルギー的に非常に不安定であると考えられており、今回の結果は驚くべき結果です。

次に、水素の振動状態を観測するため、BL01 「4SEASONS」で中性子非弾性散乱測定を行いました。図2 (a) は PdH ナノ粒子中の水素の振動スペクトルです。バルク試料で見られた八面体サイトの水素の振動励起とは別に、付加的な振動励起を検知することに成功しました。振動励起のエネルギーと強度を解析したところ、八面体サイトの水素の振動は調和振動で説明できることが分かりました。一方、四面体サイトの水素の振動だと考えられる付加的な励起は、非調和性の高いトランペット型ポテンシャルにおける振動であることが分かりました [2]。図2 (b) - (d) にこの様子を模式的に示します。さらに、中性子準弾性散乱により水素原子の拡散挙動を調べ、四面体サイトの水素の運動だと考えられる活性化エネルギーの小さい速い拡散も見出しています [3]。これは、ポテンシャル障壁が小さいことを意味しており、図2 (d) のポテンシャルと矛盾しない結果です。

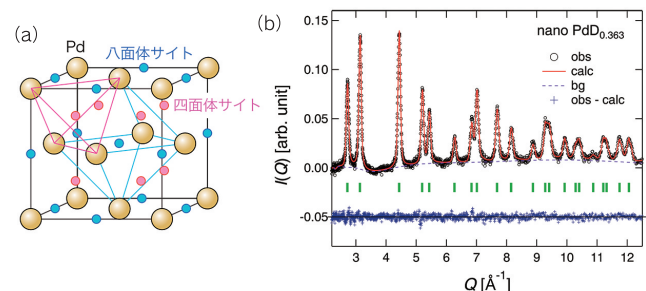


図1 (a) Pd格子中の水素原子の占有サイトと (b) ナノ粒子PdDの中性子回折パターン[1]

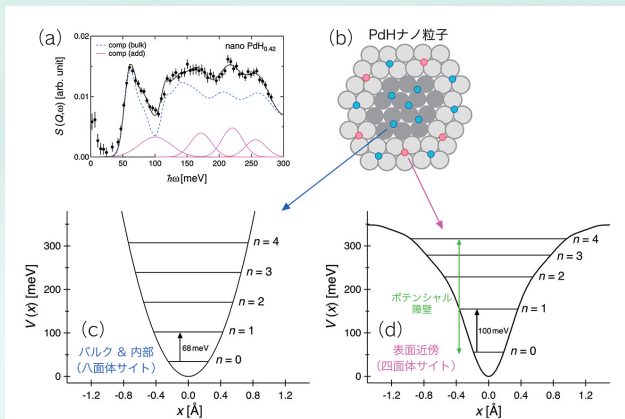


図2 (a) 中性子非弾性散乱実験で得られたPdHナノ粒子の水素の振動スペクトル、(b) PdHナノ粒子の模式図、(c) 内部の八面体サイト、および(d) 表面付近の四面体サイトのポテンシャル[2]

金属ナノ粒子中の水素の構造とダイナミクスについて包括的に調べた研究は過去にありません。Pd表面付近で水素が四面体サイトに存在することは、ナノ粒子化による水素吸蔵特性や触媒活性の変化を理解する鍵となります。本研究成果は、金属ナノ粒子の分野だけではなく、エネルギー関連材料や触媒、表面などの多岐にわたる研究分野の発展に貢献すると期待されます。

本研究は、京都大学の小林浩和准教授と北川宏教授、KEKの大友季哉教授と池田一貴准教授、JAEAの中村充孝博士、CROSSの飯田一樹博士との共同研究によるものです。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

- [1] H. Akiba et al, J. Am. Chem. Soc. **138**, 10238-10243 (2016)
- [2] M. Kofu et al., Phys. Rev. B **96**, 054304 (2017)
- [3] M. Kofu et al., Phys. Rev. B **94**, 064303 (2016)

$^6\text{Li}/^7\text{Li}$ 同位体置換試料を用いた中性子回折による溶媒和イオン液体中における Li^+ の局所構造解析

山形大学 亀田 恭男
新潟大学 梅林 泰宏
横浜国立大学 渡邊 正義

次世代Li-S電池の電解質溶液として注目されている溶媒和イオン液体LiTFSA (TFSA : N(SO₂CF₃)₂)-テトラグライム (G4 : CH₂O-(CH₂CH₂O)₄-CH₃) 溶液中における Li^+ の局所構造を、 $^6\text{Li}/^7\text{Li}$ 同位体置換試料を用いた中性子回折実験により初めて明らかにしました[1]。

Li-S電池は従来のLiイオン電池と比較して1桁高いエネルギー密度を有すると期待され、近年盛んに研究が行われています。Li-S電池の性能を維持するには電解質溶液に溶出するS原子とLiイオンが結合するのを阻止することが重要です。Li塩とG4の等量混合物は室温で安定な溶媒和イオン液体を形成し、Li-S電池の電解質溶液として機能することが知られています。溶液中では Li^+ 周囲にグライム分子のエーテル酸素原子が配位していると予想されてきましたが、実験による構造解析はこれまでに行われていません。溶液の構造解析の手段としてはX線回折が使われますが、原子番号の小さなLiはX線で捉えることが困難です。一方、同じ元素でも同位体により中性子の散乱能率が異なることを利用した同位体置換試料を用いた中性子回折実験を行えば、溶液中の Li^+ 周囲の構造を原子レベルで調べることが可能です[2,3]。

本研究では、天然同位体比 $^{\text{nat}}\text{Li}$ (92.5% ^7Li) および95.6% ^6Li 濃縮(*LiTFSA)_{0.5}(G4)_{0.5}を試料とし、J-PARC MLFのBL21「NOVA」を用いて室温で実験しました。 ^6Li および $^{\text{nat}}\text{Li}$

試料について観測された散乱強度の差分を取ることで、 Li^+ 周囲の構造情報を含む差分干渉項 $\Delta\text{Li}(Q)$ を求めました。 $\Delta\text{Li}(Q)$ のフーリエ変換により求めた Li^+ の分布関数 $G_{\text{Li}}(r)$ を図1に示します。 Li^+ の最近接構造に関する構造パラメータは差分干渉項 $\Delta\text{Li}(Q)$ の最小二乗法解析より求めました。得られた構造情報を図2に示します。 Li^+ 周囲にはG4分子が取り巻くように配置しており、 Li^+ にはG4分子の5個の酸素が配位していることが明らかになりました。今回中性子回折実験から求めた Li^+ G4複合体の構造は、量子力学計算や分子動力学計算の結果とも良く一致しました。

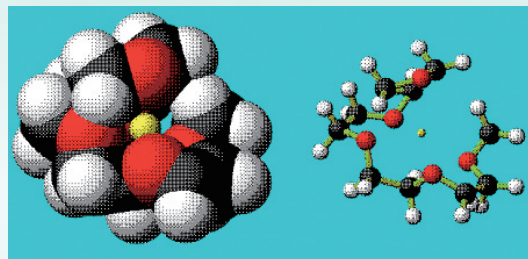


図2 中性子回折実験から求めた溶液中における Li^+ G4複合体の構造 (黄色: Li^+ 、赤: 酸素、黒: 炭素、白: 水素)

溶液構造解析の困難さから、電池材料の構造研究は従来主として電極の結晶構造に限られてきました。今回の研究成果は、電池の複雑な電解質溶液の構造解析、特に、電池の作動メカニズムにとって重要な Li^+ 周囲の構造情報を全散乱測定によって取得可能であることを示したと言えます。

本研究で用いた構造解析手法は、より高性能な次世代電池開発に大きく貢献すると期待されます。

中性子回折実験に際しては、高エネルギー加速器研究機構の大友季哉教授と池田一貴准教授のご支援をいただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

本研究は横浜国立大学の獨古薫教授と上野和英准教授、工学院大学の関志朗准教授、熊本工業高等専門学校の上野優准教授、ならびに、産業技術総合研究所の都築誠二上級主任研究員との共同研究として実施しました。

参考文献

- [1] S. Saito et al., J. Phys. Chem. Lett. **7**, 2832-2837 (2016).
- [2] Y. Kameda et al., J. Phys. Chem. B **120**, 4668-4678 (2016).
- [3] S. Maeda et al., J. Phys. Chem. B **121**, 10979-10987 (2017).

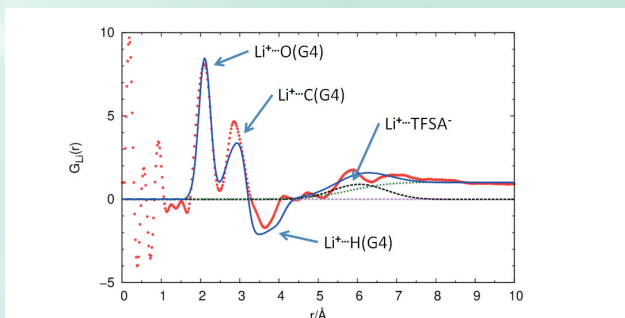


図1 Li^+ 周囲の原子分布を表す分布関数 $G_{\text{Li}}(r)$ (赤点: 実験値、青線: 最小二乗法解析から求めた計算値)

産業技術総合研究所 木野 幸一

パルス中性子透過法によりLiイオン二次電池における電解液やLiの移動の観察、ならびに、ブラッグエッジ解析により充放電反応のイメージングが可能なることを明らかにしました[1,2]。

Liイオン二次電池 (LIB) はその高いエネルギー密度のために広く社会に普及しています。しかし、電気自動車などへの普及のためには、蓄電容量の向上や繰返し充放電における劣化の抑制、安全性の向上などが課題で、これらについて世界中で研究開発が行われています。研究開発を効率良く行うには、実用電池を非破壊で分析する技術が有用です。私たちは、物質透過力に優れた中性子ビームは金属容器を用いる実用電池の非破壊分析に有用と考えました。さらに、近年、金属材料分析に威力を発揮しつつあるパルス中性子ビームのブラッグエッジイメージングに着目し、これをLIBに適用することで充放電反応の可視化を試みました。

実験は、BL09「SPICA」にて、直径18mm高さ65mmの円筒型の18650型電池にパルス中性子ビームを照射し、透過した中性子を二次元検出器で計測しました。図1は、中性子波長0.1~0.8nmでの中性子透過イメージです。透過率の中性子波長依存性の分析から、充電率の変化に伴い、電解液(赤矢印)やLi(黒矢印)、両方(黄矢印)が移動していることがわかります。

中性子は結晶質材料とブラッグ反射を起こし、その痕跡が透過スペクトルにブラッグエッジとして現れます。図2は中性子波長に関する中性子透過率スペクトルです。LIBの正極・負極材、アルミニウムと銅の集電体、鉄容器に起因するブラッグエッジが多数得られています。放電状態と充電状態のスペクトルを比較すると、正極材のLi占有状態と負極材グラファイトのLiC₆への変化が明瞭に認められます。このように、充放電の可視化に必要な電極材のブラッグエッジとその変化が実用LIBで計測できることがわかりました。また、ブラッグエッジは理論曲線でフィッティングすることができました。

充電が進むと、負極材はグラファイトからLiC₁₂、そしてLiC₆へと変化してゆきます。図3は、図2のスペクトルをLIB試料の場所毎に取得し分析することで得られた負極材の各充電率でのグラファイトとLiC₁₂、LiC₆の面密度を画像化したものです。面密度は、ブラッグエッジの深さから得られます。本LIB試料は円筒形のため中央部分の面密度が高くなっています。

図4は、充放電に伴いLIB試料の負極に出入りしたLiの電荷量と、LIB試料に充放電器で流した電荷量の関係をプロットしたものです。お互いの電荷量の間にはほぼ妥当な相関が得られており、本手法に依れば、絶対値での充放電反応のイメージングが可能であることが示唆されます。

今後、劣化したLIBや低温環境下のLIBなどに適用することで、LIB開発に大いに貢献すると期待されます。

本研究は、KEKの神山崇教授と米村雅雄准教授、石川喜久助教(現CROSS研究員)との共同により、NEDO 革新型蓄電池先端科学基礎研究事業(RISING)において実施しました。また、中性子散乱実験はKEK中性子利用S型実験課題((課題番号:2009S6130, 2014S10)で実施しました。関係各位に深く感謝致します。

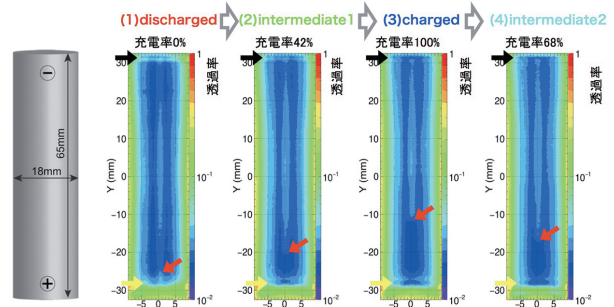


図1 波長0.1~0.8nmの中性子での透過率イメージ

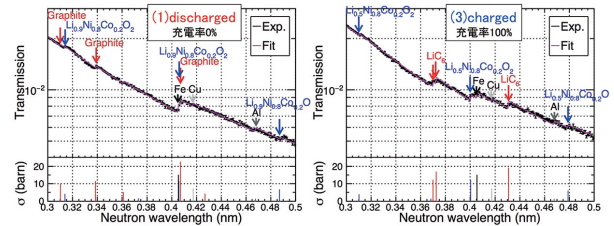


図2 透過率スペクトルとそのフィッティングの例

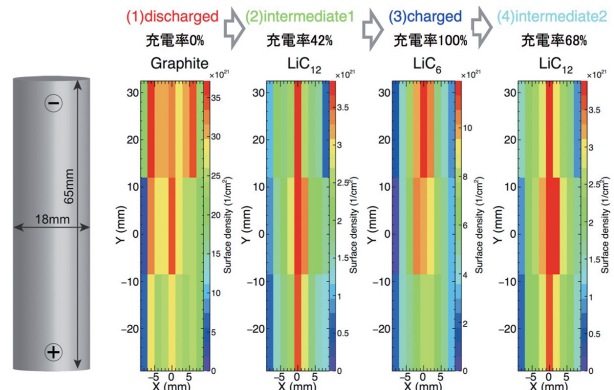


図3 各充電率での負極材の主要結晶の面密度

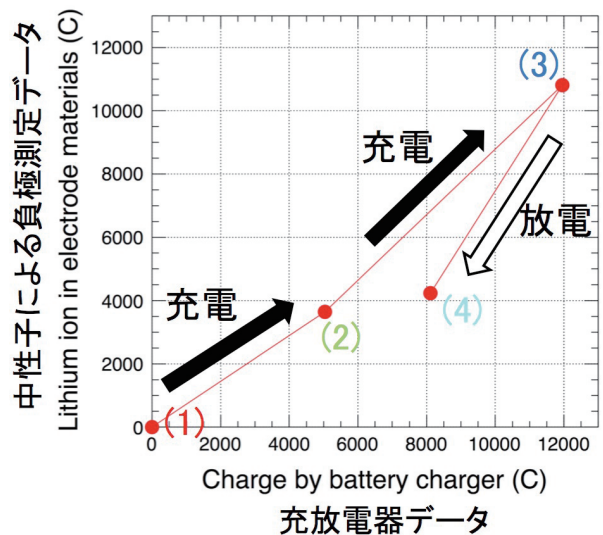


図4 LIB試料全体における負極材リチウム電荷量と充放電器で流された電荷量との相関

参考文献

- [1] K.Kino *et al.*, Solid State Ionics **288**, 257–261 (2016)
- [2] 小山昇監修, “リチウムイオン二次電池の長期信頼性と性能の確保”, サイエンス & テクノロジー株式会社, pp.103-113 (2016)

●JRR-3&茨城県BL

中性子を利用したLiイオン電池正極材料の遷移元素識別

パナソニック株式会社 岡野 哲之

中性子を利用して、Liイオン電池の正極材料中の遷移元素を識別できることを明確にし、結晶構造と充放電特性を関係付けることで、電池容量特性を向上させる正極材料開発に活用しました。

Liイオン電池 (LIB) は、高エネルギー密度を有する二次電池で繰り返し充放電が可能です。近年、PCやスマートフォン等の民生用だけでなく、車載用として使用が急速に拡大しており、エネルギー密度がより高く、高出力な性能が求められています。前記特性は、使用される正負極や電解液等の電池構成材料に大きく依存しています。負極材料である黒鉛の容量に対して、一般的なLiCoO₂等の正極材料の容量は低く、高エネルギー密度化においては正極材料開発が大変重要です。また、正極材料の多くは、LiCoO₂に代表されるLiと3d遷移元素 (Ni, Co, Mn, Fe等) との複合酸化物であり、充放電に伴うLi原子の酸化物結晶からの脱挿入速度が出力特性を律速します。より高性能な正極材料の開発が進められている中で、材料の結晶構造を明確にすることは、充放電特性を向上させる上で非常に重要です。結晶構造を明確にするには通常X線回折法を利用しますが、3d遷移元素の電子数はほぼ同じであり、X線回折では識別は困難です。

Li[Ni_{0.5}Mn_{1.5}]O₄は5V級正極材料として、実用化が検討されています[1]。結晶構造はスピネル構造をしており、酸素原子は32eサイトに存在し、Liは酸素原子4個に四面体的に囲まれた8aサイトに、MnとNiは酸素原子6個に囲まれた16dサイトに存在します。MnとNiの原子配列には2種類あり、図1(a)に示すように規則的に配列する場合と、図1(b)に示すようにランダムに配列する場合があります。前者は4.7V付近に平坦で広い作動電圧領域を示しますが、後者は4.0V付近に明確な反応領域が現れ、4.7V付近の平坦な作動電圧領域が狭くなるため、容量が低下します[2]。図2(a)にX線による規則配列/ランダム配列の回折図形シミュレーションを、図2(b)に中性子による回折図形シミュレーションを示します。X線ではMnとNiの電子数はほぼ等しく、規則配列/ランダム配列の違いを識別することは困難であるのに対し、中性子では原子核で散乱され、Mn/Niの散乱能は大きく異なるので、回折図形は明瞭に異なり、材料の結晶構造を容易に識別することができます。

この成果は、他の解析手法では困難な、正極材料内の

3d遷移元素を明確に識別するものであり、電池初期特性の最適化に活用できます。また、充放電に伴う結晶構造の変化を評価することにより、特性劣化要因を明確にする上で、重要な役割を果たすことができます。

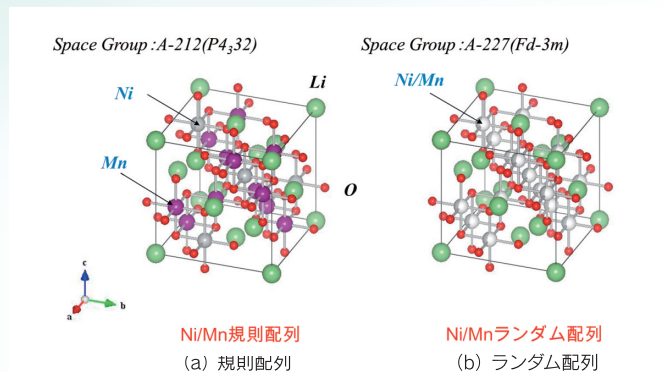


図1 Li[Ni_{0.5}Mn_{1.5}]O₄の結晶構造

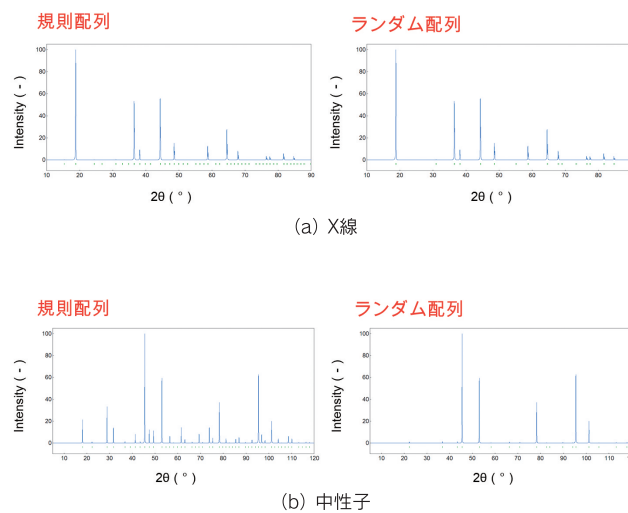


図2 X線、及び、中性子の粉末回折図形シミュレーション

本研究の実施に際しては、日本原子力研究開発機構の井川直樹研究主幹と茨城大学の石垣徹教授にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

- [1] T. Ohzuku, J. Electrochem. Soc., Vol.137, No. 3, (1990).
- [2] 電気化学学会 電池技術委員会 [編], 電池ハンドブック, p.477

●茨城県BL

リチウムイオン電池用正極材料の平均・局所構造と充電レートの関係

東京理科大学 井手本 康、北村 尚斗、石田 直哉

充電後のリチウムイオン電池用正極材料の平均・局所構造を中性子線と放射光X線の相補利用により検討し、充電時の電流密度が与える影響を明らかにしました[1]。

Liイオン電池は小型モバイル機器用の電源として幅広く

用いられてきました。しかし、近年、電気自動車用電源としての利用が期待されており、高速充放電が可能な高エネルギー密度の正極材料の開発が期待されています。その実現のためには、電流密度などの充放電条件が正極材料の平均・局所構造に与える影響を明らかにし、新規材料の設計指針を確立する必要があります。そこで当研究室では、異なる電流密度で充電した後の0.5Li₂MnO₃-0.5LiMn_{1/3}Ni_{1/3}Co_{1/3}O₂について中

中性子線と放射光X線を相補利用した構造解析を行い、電流密度と平均・局所構造の関係を検討しました。

異なる電流密度(Cレート: 1C, 3C)で充電した正極材料について中性子回折パターンを測定し、リートベルト解析を行いました。このとき、ICP発光分光分析の結果を考慮して各金属の占有率を精密化しました。その結果、図1に示すように平均構造を決定することができました。

得られた平均構造を用いて複数の局所構造モデルを作成し、第一原理計算によって安定なモデルを決定した後、放射光X線全散乱測定により得られた還元二体分布関数 $G(r)$ を用いて局所構造解析(PDFフィッティング)を行いました。図2に充電に伴う MnO_6 八面体の結合角分散 σ^2 の変化を示します。なお、 σ^2 は結合角に関する歪みを表しています。この図から分かるように、満充電時(4.8V vs. Li/Li^+)における MnO_6 の σ^2 は3Cに比べて1Cで顕著に大きくなっていることが分かります。一方、 CoO_6 八面体については3Cの充電の方が σ^2 は大きくなったため、遷移金属の種類によって歪みの変化が異なることが分かりました。また、個々の遷移金属と酸素からなる八面体に着目した結果、リチウム層を占有するNiが形成する NiO_6 八面体の歪みが特に大きいことが明らかになりました。

今回は電流密度の影響を報告しましたが、他の充放電条件も平均・局所構造に影響を及ぼすと考えられるため、より優れた電池を製造するためには今後も系統的な研究が必要です。また、今回紹介した手法は他の蓄電池にも適用できるため、Liイオン電池に代わる次世代蓄電池の開発にも貢献すると考えられます。

中性子回折実験に際しては、茨城大学の石垣徹教授と星川晃範准教授にご支援いただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

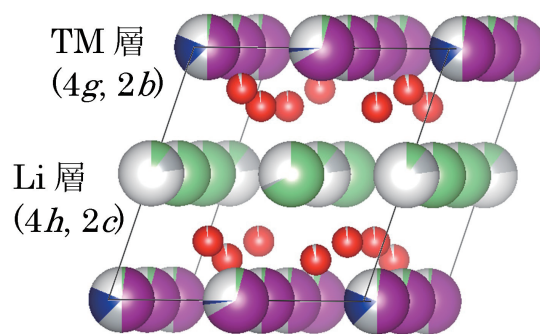


図1 中性子回折測定により決定した平均構造モデル (3C, 4.8V vs. Li/Li^+)

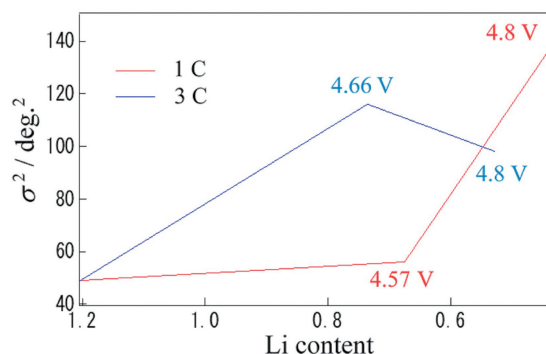


図2 MnO_6 八面体の結合角分散 σ^2 のCレート依存

参考文献

[1] Y. Idemoto, T. Sekine, N. Ishida, N. Kitamura, *J. Mater. Sci.*, **52**, 8630 (2017).

中性子産業応用セミナー

中性子産業利用推進協議会と茨城県、総合科学研究機構では、J-PARCセンターほかのご協力をいただいて、中性子の産業利用に関わる測定技術を会員企業に出向いて講習するセミナー、いわゆる「出前講座」を開催しています。今回3社においてセミナーを開催しましたのでご報告します。いずれの会場においても活発な質疑がありました。今後、中性子実験装置を利用していただけることを期待しています。

●パナソニック株式会社

7月30日(月)に大阪府門真市大字門真1006にあるパナソニック株式会社のWonder LAB Osakaにおいて中性子産業応用セミナーを開催しました。プログラムは下記の通りです。

- | | |
|--------------------------|---------------|
| 1. 中性子の産業利用 | 富田 俊郎 (茨城県) |
| 2. 中性子の基礎 | 野間 敬 (CROSS) |
| 3. 中性子粉末構造解析 | 星川 晃範 (茨城大学) |
| 4. 中性子小角散乱による材料内部の微細構造解析 | 大場 洋次郎 (JAEA) |

●株式会社クラレ

9月14日(金)に岡山県倉敷市酒津にある株式会社クラレのくらしき研究センターにおいて、中性子産業応用セミナーを開催しました。プログラムは下記の通りです。

- | | |
|--------------------|--------------|
| 1. 中性子の産業利用 | 峯村 哲郎 (茨城県) |
| 2. 準弾性散乱による材料の機能解析 | 山田 武 (CROSS) |

5. iMATERIAにおける

中性子小角散乱による高分子材料の構造解析
峯村 哲郎 (茨城県)

6. ガラス・非晶質材料の構造解析

鈴谷 賢太郎 (J-PARC)

7. お知らせ

峯村 哲郎 (茨城県)

パナソニック株式会社のテクノロジーイノベーション本部ほかから42名の方が聴講されました。

3. ガラス・非晶質材料の構造解析

鈴谷 賢太郎 (J-PARC)

4. 中性子ラジオグラフィ

篠原 武尚 (J-PARC)

5. 構造物内部の残留応力測定

林 眞琴 (CROSS)

6. 即発ガンマ線分析

松江秀明 (JAEA)

7. ミュオンによる産業利用の可能性 三宅康博 (KEK)
 8. お知らせ 峯村哲郎 (茨城県)

株式会社クラレのくらしき研究センターほかから18名の方が聴講されました。

●JFEスチール株式会社

10月5日(金)に千葉市中央区川崎町にあるJFEスチール株式会社のスチール研究所において、中性子産業応用セミナーを開催しました。プログラムは下記の通りです。

1. 中性子の産業利用 富田 俊郎 (茨城県)
2. 中性子小角散乱による材料内部の微細構造解析 大場 洋次郎 (JAEA)
3. 構造物内部の残留応力測定 林 真琴 (CROSS)

4. 金属材料の集合組織と複相材料における相分率測定 小貫 祐介 (茨城大学)

5. お知らせ 峯村 哲郎 (茨城県)
 スチール研究所の千葉地区から31名、京浜地区から5名、倉敷地区から4名、福山地区から14名、合計54名の方が聴講されました。

3社におけるセミナー会場の様子を下記の写真に示します。



パナソニック株式会社



株式会社クラレ



JFEスチール株式会社

「出前講座」を希望される企業は協議会事務局 (E-mail:info@j-neutron.com) までご相談ください。

活動報告

◆研究会

●第1回構造生物学研究会

9月26日(金)にエッサム神田ホール2号館501会議室において、平成30年度第1回構造生物学研究会を「新世代中性子構造生物学の目指すもの」をテーマに開催しました。36名の参加者がありました。

<施設の概要>セッションでは、日下勝弘茨城大学教授が「iBIXの現状と将来計画」、<チュートリアル>セッションでは、山縣ゆり子熊本大学名誉教授が「ゲノムの安定性に関する酵素の機能解明と中性子構造解析の展望」と題して講演されました。

<構造生物学>セッションでは、姚 閔北海道大学教授と山下敦子岡山大学教授が講演されました。

<創薬における量子ビームの利用>セッションでは、理研の山本雅貴氏、田辺三菱製薬の宮口郁子氏、ならびに、庄村康人茨城大学准教授が講演されました。

酵素の機能解明やアンモニアの輸送機構、味物質の応答など従来の研究会で取り上げていなかったタンパク質の構造に係わる機能に

ついて活発な議論が展開されました。iBIXでは135Å立方という大型の格子結晶も解析可能であることが実証されており、多くのタンパク質の構造と機能との関係の解明に活用されることを期待しています。



会場の様子



山縣ゆり子名誉教授

●第1回残留ひずみ・応力解析研究会

10月9日(火)にエッサム神田ホール1号館301会議室において、平成30年度第1回残留ひずみ・応力解析研究会を「引張変形および疲労変形による残留応力の変化」をテーマに開催しました。91名の参加者がありました。

<施設の概況>セッションでは、富田俊郎茨城県技監がJ-PARC MLFと中性子産業利用の現状を紹介されました。

<チュートリアル>セッションでは、事故解析や破壊力学で著名な小林英男東京工業大学名誉教授が「実機の疲労解析」、坂井田喜久静岡大学教授が「炭素鋼のレーザ焼入による硬化層と残留応力生成に及ぼす表面前処理の影響」と題して講演されました。

「残留応力の変化」セッションでは、林真琴SC(CROSS)、秋田貢一東京都市大学教授、諸岡聡JAEA研究員、窪田哲氏(日立建機)、土田紀之兵庫県立大学助教、王延緒氏(NIMS)が講演されました。

「X線・放射光・中性子による残留応力測定」セッションでは、熊谷正芳東京都市大学助教、鈴木賢治新潟大学助教、林雄二郎氏(豊田中央研究所)が講演されました。

各種表面加工により形成された残留応力がその後の引張変形や疲労変形により変化する挙動や残留応力と半価幅による寿命予測手法について説明があり、残留応力測定の意義をよく理解していただくことができたと考えます。



会場の様子



小林英男名誉教授

◆茨城県研究会

●第1回iMATERIA研究会

9月19日(水)に東北大学川内キャンパスで開催された日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会において、茨城県中性子利用研究会平成30年度第1回iMATERIA研究会を「微細組織形成過程解析のための観察と予測技術」をテーマとして開催しました。約100名の参加者がありました。

<施設の概況>セッションでは、富田俊郎茨城県技監がJ-PARC MLFと中性子産業利用の現状を紹介されました。

午前中のセッションでは、米国ロスアラモス国立研究所(LANL)のDr. Vogelと高城重宏氏(JFEスチール)がLANLのHIPPOによる成果を紹介され、集合組織の測定に関して小貫祐介茨城大学助教と三菱マテリアルの伊東正登氏が講演されました。

午後のセッションでは、富田俊郎茨城県技監と田中泰明氏(新日鐵住金)、畑頭吾氏(新日鐵住金)、早川康之氏(JFEスチール)、片岡隆史氏(新日鐵住金)、伊藤良規氏(神戸製鋼所)、高山善匡宇都宮大学教授が講演されました。

ほとんどの講演が集合組織形成に及ぼす各種因子の影響とモデリングに関わるもので、幅広い視点から活発な議論が展開され、集合組織に関わる研究者にとっては大変有益な研究会であったと考えます。



会場の様子



Dr. Vogel(LANL)

●第2回iMATERIA研究会

10月18日(木)にエッサム神田ホール1号館5階イベントホール2において茨城県中性子利用研究会平成30年度第2回iMATERIA研究会を「充放電による二次電池電極材料構造変化の中性子散乱解析の現状」をテーマに開催しました。45名の参加者があり、約80%が企業からの参加でした。

富田俊郎茨城県技監の開会挨拶のあと、石垣徹茨城大学教授が「iMATERIAにおけるエネルギー分野活用の取り組み」と題して講演されました。

<チュートリアル>では、井出本康東京理科大学教授が「電池の劣化構造を顕るー結晶PDF解析の基礎ー」と題して講演されました。<量子ビームによる充放電構造変化解析>セッションでは、北村尚斗東京理科大学准教授と数内直明横浜国立大学教授が講演されました。

<iMATERIAでの利用成果>セッションでは、原田康宏氏(東芝)、弓削亮太氏(日本電気)、岩間悦郎東京農工大学助教が講演されました。二次電池の充放電過程における劣化機構を放射光や中性子を用い

た解析や、逆モンテカルロ法によりシミュレーションした結果に基づいて検討し、大容量、かつ、充放電特性に優れた正極材料の開発状況が議論されました。今後益々 BL20「iMATERIA」を利用した電池材料開発が期待されます。



会場の様子



原田康宏氏(東芝)

お知らせ

平成31年1月～3月に開催を予定している研究会と講習会のスケジュールを次の表に示します。研究会や講習会のプログラムの詳細につきましては協議会のHPに掲載してありますのでご参照ください。

月	日	行事名称	テーマ名	開催地	会場
1月	15日	電池材料研究会	二次電池の材料構造解析とオペランド計測の最新成果	東京	研究社英語センター
	30-31日	薄膜・界面研究会	反射率法の最新情報と将来計画	東京	エッサム神田ホール
2月	12-13日	初級者向け Z-Code 講習会	初級者向けの Z-Code 最新版の講習	東京	エッサム神田ホール
	調整中	金属組織研究会	中性子散乱でナノ構造を顕るー共同実験への誘いー	東京	エッサム神田ホール
3月	4日	第22回 iBIX 研究会	磁気レンズによる中性子ビームの集光技術	東海	IQBRC C104 会議室
	11日	液体・非晶質研究会	全散乱測定における S(p) 導出の実際	つくば	つくば国際会議場
	19日	第2回残留ひずみ・応力解析研究会	各種計測手法によるひずみと残留応力の計測法	東京	研究社英語センター
	20日	第4回 iMATERIA 研究会 (鉄鋼協会春季大会)	金属微細組織解析を指向した量子ビーム応用の最前線	東京	東京電機大学
	調整中	第5回 iMATERIA 研究会	コントラスト変調中性子小角散乱法の威力	東京	エッサム神田ホール
	27日	第2回構造生物学研究会	新世代中性子構造生物学の目指すものII	東京	エッサム神田ホール

主催者：黒字：協議会、CROSS& 茨城県、青字：茨城県研究会

協議会HP(<http://www.j-neturon.com/>)では、J-PARC MLFやJRR-3の運転情報などを提供するサイトや、研究成果を紹介するサイトなどが設けてあります。研究会や講習会などの詳細についてはHPに順次新規情報を掲載しています。是非HPにアクセスして活用してください。また、新機能性材料の発見や高度な測定技術の開発、ならびに、中性子に関係する重要な会議など皆様に周知すべき情報がありましたら、是非ご提供ください。

中性子産業利用推進協議会 季報【18年・冬】Vol.41

発行日 2018年12月25日

発行元 中性子産業利用推進協議会

〒319-1106 茨城県那珂郡東海村白方162-1 いばらき量子ビーム研究センター2F D201

TEL:029-352-3934 FAX:029-352-3935 E-mail:info@j-neutron.com URL:http://www.j-neutron.com/