

水素化物の規則—不規則構造解析

Analysis of ordered/disordered structure in hydrides

大友季哉^{1,2,3}、池田一貴¹、本田孝志¹、大下英敏¹、角田茉優³、鈴木賢太郎⁴、川北至信⁴、社本真一⁵、樹神克明⁵、福永俊晴⁶、森一広⁶、小野寺陽平⁶、
亀田恭男⁷、山口敏男⁸、吉田亨次⁸、丸山健二⁹、榊浩司¹⁰、Hyunjeong Kim¹⁰、中村優美子¹⁰、町田晃彦¹¹、服部高典⁴、伊藤恵司¹²

1 KEK 物構研中性子、2 総研大高工、3 茨城大、4 JAEA J-PARC センター、
5 JAEA 量子ビーム、6 京大原子炉、7 山形大、8 福岡大、9 新潟大、10 産総
研、11 量研機構、12 岡山大

物質中の水素は、生命活動から新規材料まで、様々な物性や機能を誘起する元素である。本プロジェクトは、KEK 物構研の S1 課題「全散乱法による水素化物の規則—不規則構造解析」を軸として、外部の研究者とプロジェクトを通じた連携により、中性子による水素(プロトン)の観測技術の向上を行いながら研究を推進している[1-6]。

本講演では、プロジェクトの概要に加えて、軽量かつ高容量の水素貯蔵材料候補であるグラファイト鋳型カーボンの 3 次元グラフェン構造の全散乱法を用いた構造解析[7]、バナジウム系合金の水素貯蔵性能劣化メカニズムの全散乱法と中性子非弾性散乱法を用いた研究等の成果について紹介する。

本研究の一部は、中性子共同利用 S 型実験課題(2014S06)、NEDO 水素利用技術研究開発事業、JST 光・量子融合連携研究開発プログラムの助成のもとで進められた。

- [1] A. Machida, et al., *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 205501, (2012).
- [2] M. Hiraishi, et al., *Nature Physics*, **10**, 300–303, (2014).
- [3] H. Akiba, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 10238–43, (2016).
- [4] S. Iimura, et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **114**, E4354–E4359, (2017).
- [5] S. Takagi, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 5650–5653, (2015).
- [6] S. Takagi, et al., *Sci. Rep.*, **7**, 44253, (2017).
- [7] H. Nishihara, et al., *Carbon*, **129**, 854–862, (2018).