

全散乱

(技術)キーワード 1: 中性子線回折 全散乱

(装置)キーワード 2: NOVA

(知りたいこと)キーワード 3: 原子の配列 結晶構造 散乱

1.概要

中性子を試料に照射すると、その物質の原子や分子により散乱（回折）し、その内部構造を反映しながら試料を取り巻く検出器に到達します。これを観測し解析することによって、その物質の原子の配列（構造）を知ることができます。

2.原理

中性子は波の性質を持っているので、光や音波と同じように物質にぶつかると四方八方へ散らばります。その波長は物質を構成する原子の大きさと同程度なので、X線が電子により散乱するように、中性子は原子核によって散乱します。

試料を取り巻く検出器は、飛び込んできた中性子の数の時間変化を測定します。どの散乱角度の検出器にどの波長の中性子がどのくらい飛び込んできたか、を解析することによって、その物質の内部構造が解かります。

原子炉の中性子線強度(数)は時間に対して一定なのに対し、加速器の場合は、数～数十 ms 間隔のパルス状に発生します。

3.解説

○メリット

- ・中性子は電荷を持たないのでX線よりも物質を透過する能力が遥かに大きい特性があります。X線は電子によって散乱(回折)するのに対し、中性子は原子核まで到達して散乱するので、水素、炭素、酸素、リチウムなどの軽元素の構造解析、あるいは原子番号の近接した元素を区別することがX線に比べてはるかに容易にできます。また、X線よりも水素やプロトンによってよく散乱(回折)するので、水等の水素含有物質の構造解析に大きな役割を果たします。

○デメリット

- ・全散乱装置には、多額の建設費と運転維持費のかかる原子炉や陽子加速器が必要です。
- ・複雑な分子構造の解析は難しい場合がありますが、X線との相補的利用により詳細な構造解明が可能になります。

4.産業応用

- ・全散乱法は、もともとはガラス、液体等の不規則系の構造解析に適用されてきましたが、近年では結晶構造の解析にも用いられています。
- ・電池材料の構造的な解析例として、リチウム二次電池の電極材料開発や燃料電池自動車の燃料タンクの水素貯蔵材料開発、等があります

5.今後開発が必要な周辺機器・技術

- ・効率的に測定するための自動試料交換装置、過渡現象観測のための自動温度調整機の設置
- ・沢山の原子数からなる物質の大規模構造モデリングができるソフトウェアの開発

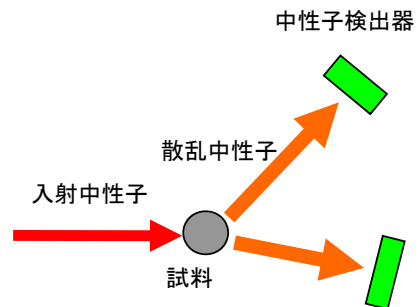


図1 中性子の散乱

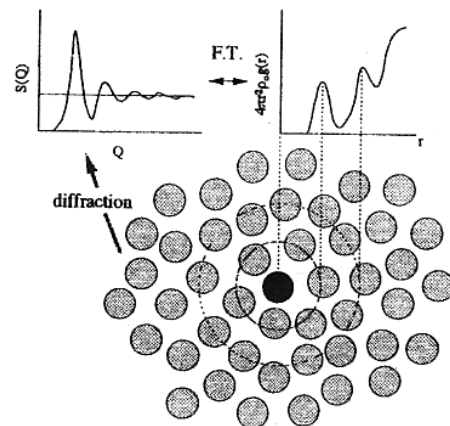


図2 構造観測例:個々の原子間の距離を測定する
・中性子は電荷を持たないのでX線よりも物質を透過する

担当者氏名 茨城県技術士会 岸 敦夫

[詳しい解説はこちらへ...](#)