

氏名(本籍)	おい かわ けん いち (千葉県) 及川健一		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第1,885号		
学位授与年月日	平成10年3月23日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	工学研究科		
学位論文題目	TOF型多目的中性子回折装置 VEGA の建設, およびそれを用いた2次電池用正極材料 Li- スピネルの結晶構造解析		
主査	筑波大学教授	理学博士	浅野 肇
副査	筑波大学教授	工学博士	水林 博
副査	筑波大学教授	工学博士	若槻 雅夫
副査	筑波大学教授	理学博士	大嶋 建一
副査	筑波大学助教授	工学博士	鈴木 博章

論文の内容の要旨

本論文は、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) に建設された TOF 型多目的中性子回折装置 VEGA の性能と、VEGA を用いた 2 次電池用正極材料 $\text{LiMn}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ の結晶構造解析を記述したものである。

KEK には従来、高分解能粉末中性子回折装置 HRP が設置されていたが、HRP の性能を 1 桁上回る VEGA の建設が開始された。VEGA は、背面反射位置に 1 次元位置敏感検出器 (PSD) を 112 本敷きつめた配置をもち、分解能、計数率の格段の向上が達成されている。分解能 ($\Delta d/d$) は 0.26% に達し、この装置が世界第一級の分解能を有することを示している。また、PSD で収集された回折データの time-focussing 処理により計数率が向上し、1 試料あたりの測定時間は数時間に短縮された。さらに、分解能の向上にともなうシャープな回折線を表現する新しいプロファイル関数を導入し、リートベルト解析用プログラムを完成させた。

VEGA を用いて、2 次電池用正極材料 $\text{LiMn}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ ($x = 0, 1/9, 1/6, 1/3$) の結晶構造解析を行った。この物質は、Cr 添加により電池寿命の改善が計られることが知られているが、その起源は明らかではなかった。本研究で、Cr イオンが Mn イオンを置換していることが示され、さらに置換 Cr 量の増加とともに、結晶の粒子サイズが小さくなること、結晶の異方的ひずみが減少することが明らかにされた。また、 LiMn_2O_4 の低温における構造相転移に関する知見も得た。

審査の結果の要旨

本研究は、高性能の中性子回折装置の建設を通じて、物質工学に多大の貢献をもたらすものといえる。また、 $\text{LiMn}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_4$ の結晶構造に関する研究は、電池材料の開発に重要な知見を与えている。

よって、著者は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。