

# Mg<sub>2</sub>Ni 合金およびその水素化物の XAFS 測定

## 1. はじめに

水素はクリーンな再生可能エネルギーであり、燃料電池等への実用化が進められている (1)。しかし、その貯蔵方法には大きな課題がある。例えば、現在、燃料電池自動車では、35~70 MPa の高压水素としての貯蔵が主流となっている。今後、よりコンパクトな貯蔵が可能となれば、水素エネルギーの応用範囲も広がる。水素吸蔵合金は、水素ガスに比べて 1/1000 程度の小容器での貯蔵が可能であり、水素貯蔵材料の候補の一つである。水素吸蔵合金 Mg<sub>2</sub>Ni は軽量で高貯蔵能を有する有望な合金である。本合金については、これまで多くの研究が進められているが、主に結晶構造に関する研究が多い。本研究では、水素吸蔵合金 Mg<sub>2</sub>Ni の物性をより詳細に把握することを目的に、水素吸蔵にともなう構成元素の化学状態変化を軟 X 線 XAFS 法により調べた。

## 2. 実験内容

試料 : Mg<sub>2</sub>Ni 合金塊を粉砕して 1 mm の粒状とし、内容積 20mL の SUS304 製試料セルに充填した。試料セルを簡易 PCT 特性測定装置に装着して、最大水素圧 0.1MPa、温度 300°C で水素吸蔵処理を行った。その後、酸素濃度 (0.5 ppm) および露点 (-80°C) が管理されたグローブボックス中にて、試料を取り出し、XAFS 測定用の試料ホルダーに装着した。粉末試料の装着については、まず試料ホルダーに In 箔を貼り、その上に試料粉末を練りつけた。軟 X 線 XAFS・BL1N2 にて、Mg K 吸収端付近の XAFS 測定を行った。

## 3. 結果および考察

図 1 に、標準試料の純 Mg、Mg<sub>2</sub>Ni 合金および水素化した Mg<sub>2</sub>Ni 合金 (Mg<sub>2</sub>NiH<sub>4</sub>) の XAFS 測定結果を示す。Mg K 吸収端の立ち上がりは、純 Mg に比べて Mg<sub>2</sub>Ni ではわずかに低エネルギーへシフトするが、水素吸蔵によって約 2.5 eV と大きく高エネルギーへシフトした。また、吸収端付近のスペクトル形状も水素吸蔵によって大きく変化した。EXAFS 領域まで測定したスペクトル (b) から、Athena により動径分布関数を求めた (c)。2.4 Å 付近の Mg の第一近接配位圏には、主に Ni が存在するが、水素吸蔵により配位数の減少がみられた。

## 4. 参考文献

- 例えば <https://www.nedo.go.jp/content/100871975.pdf>

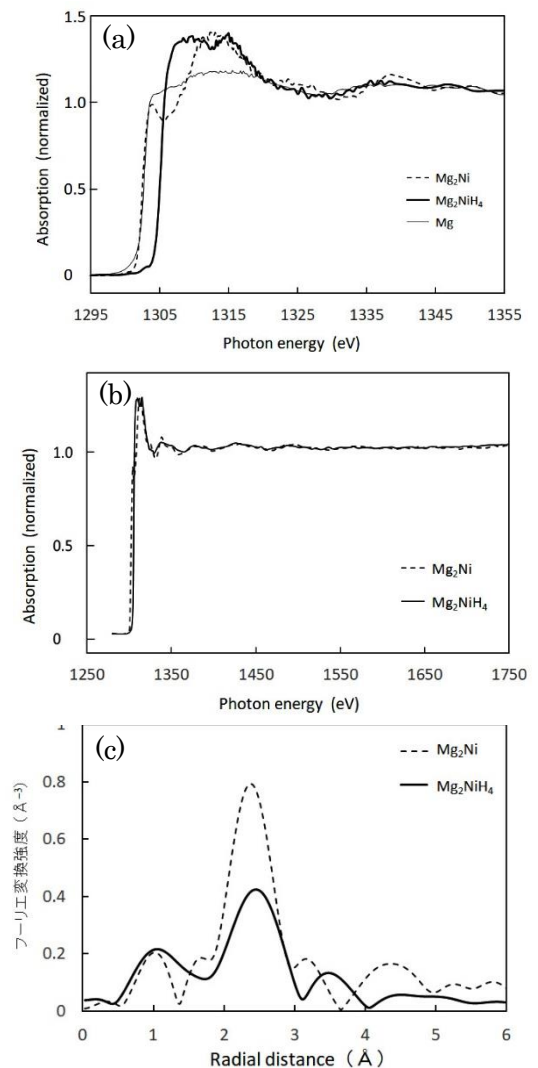


図 1 Mg K 吸収端の XAFS 測定  
(a) XANES, (b) XAFS,  
(c) 動径分布関数