

水素吸蔵材料への応用に向けた ナノ材料の化学状態分析

名古屋大学エコトピア科学研究所 八木 伸也

名古屋大学大学院工学研究科 小川 智史、塚田 千恵、
水谷 剛士、藤本 大志

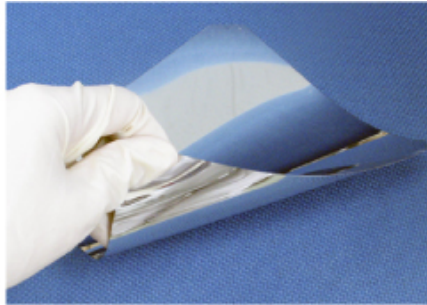
株式会社アツミテック 金井 友美、内山 直樹

背景

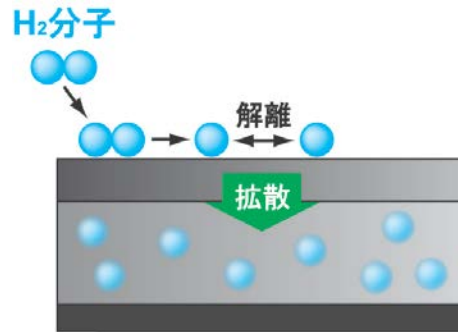
水素：可燃性ガス

簡単に検出できないものか？

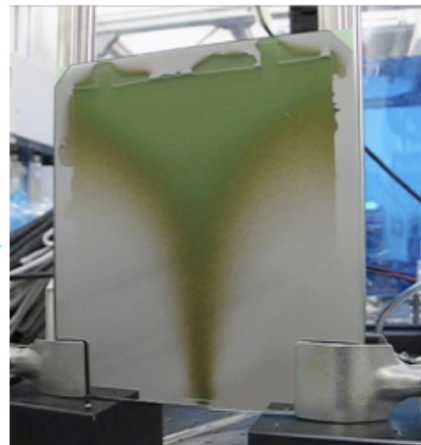
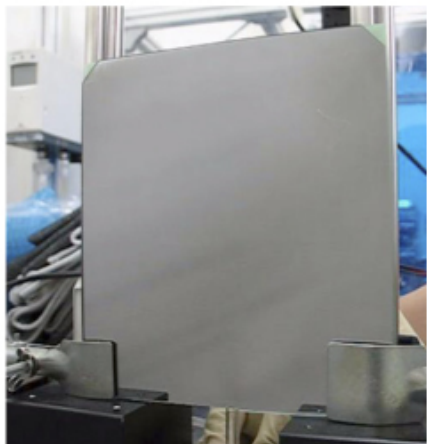
水素化している部分を可視化するフィルムとして
Pd/Mg-Ni材料が実用化に向けた研究を実施



水素に反応して透明に変化する水素検知フィルム



Pd/Mg-Ni / 基板



水素拡散状態の可視化

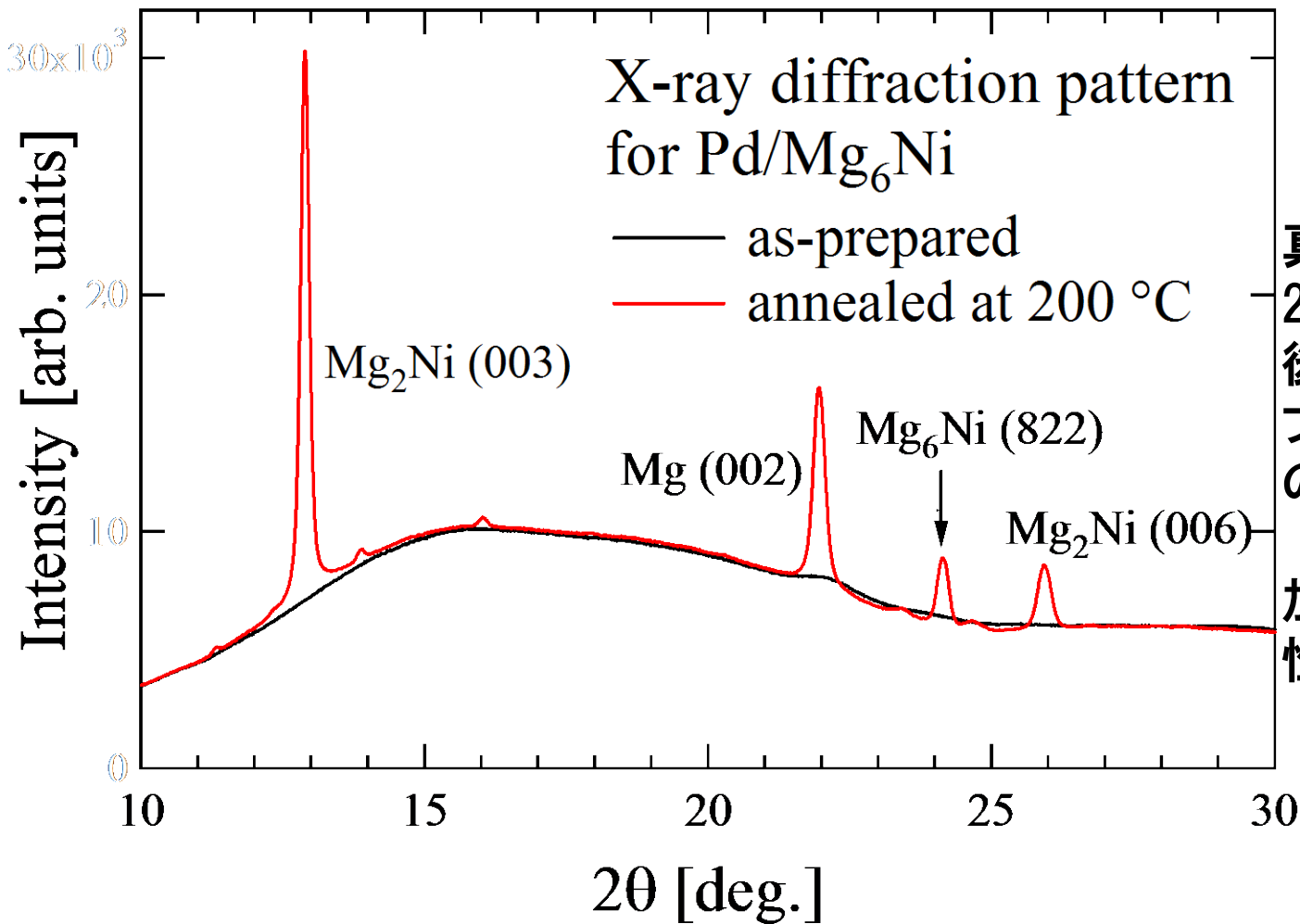
Mg-Ni水素化物の形成における
光学特性の変化を利用
(株式会社アツミテック)

背景

問題点： Mg-Ni層の局所構造や化学状態、さらに水素化によってどのように変化するか？

目的： BL5S1, BL5S2におけるX線吸収微細構(XAFS)測定とX線回折(XRD)測定によってPd(4 nm)/Mg₆Ni(340 nm)の局所構造分析を行った。

結果

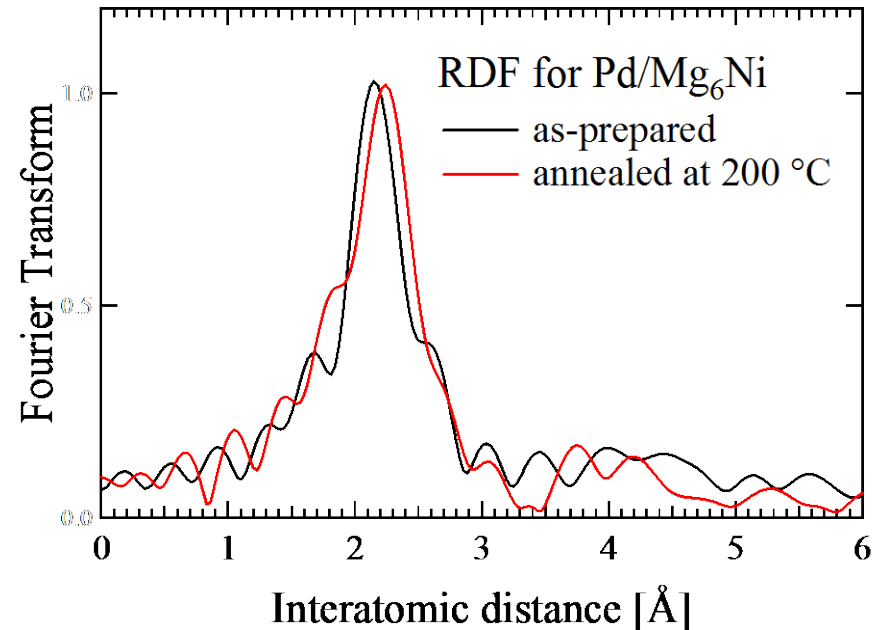
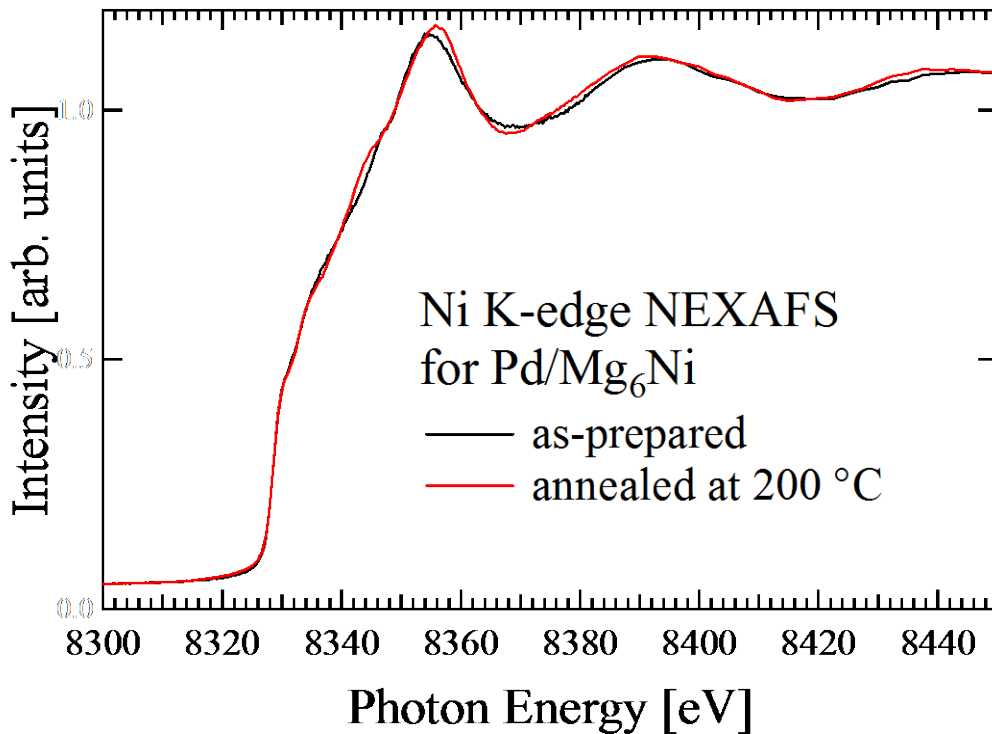


真空中でPd/Mg₆Niを200 °Cまで加熱した後に測定を実施。ブロードな構造は基板のガラスに由来。

加熱により薄膜の結晶性が増加している。

Pd/Mg₆Ni薄膜の加熱によるXRDパターンの変化。

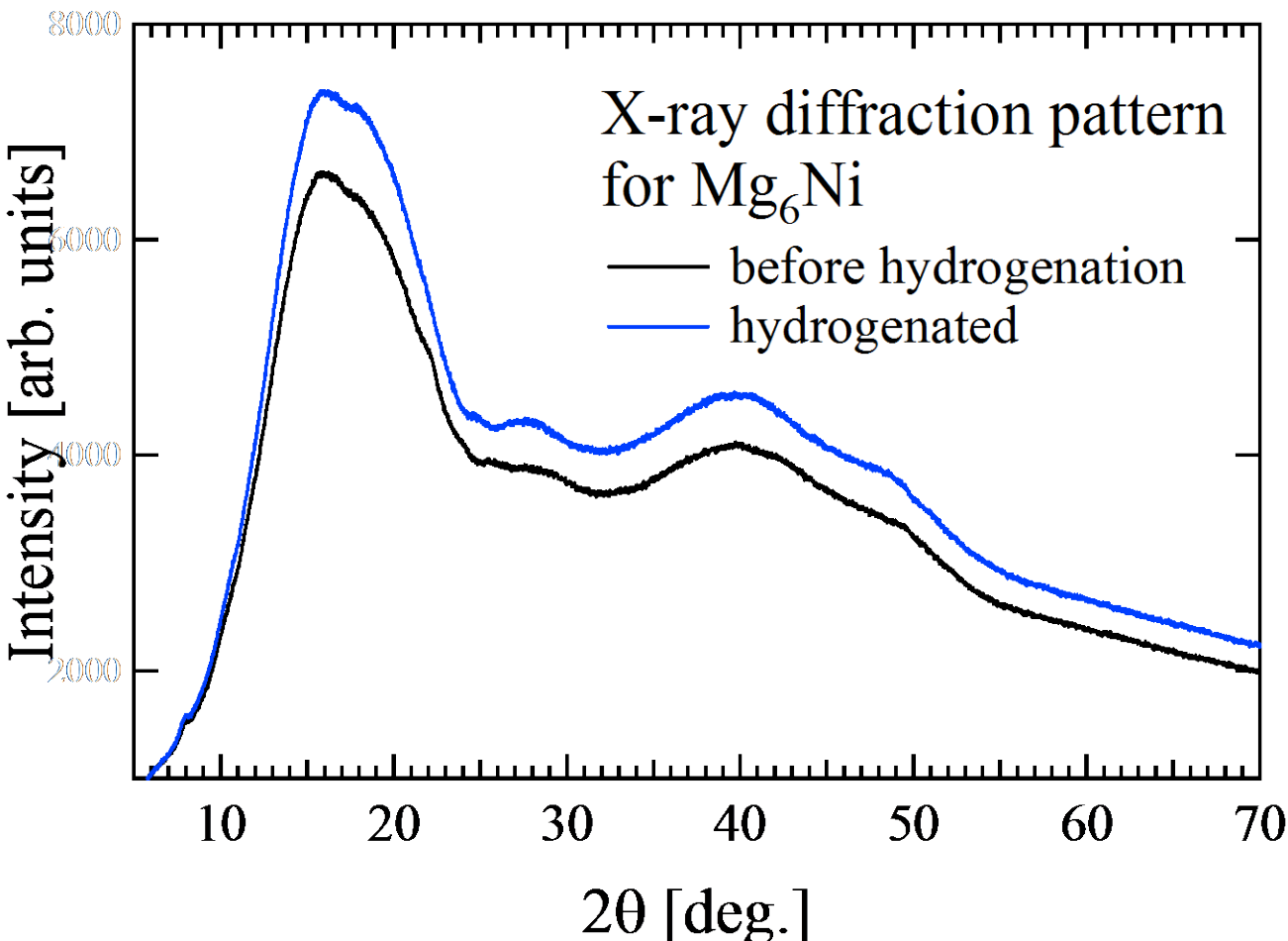
結果



Pd/Mg₆Ni薄膜の吸収端近傍X線吸収微細構造(NEXAFS)スペクトル(左)と動径分布関数(RDF)(右)の加熱による変化。

加熱によってMg₂Ni相が形成され、Ni周りの局所構造が変化するため、NEXAFSが変化するとともにRDFにおけるピークシフトが確認された。

結果

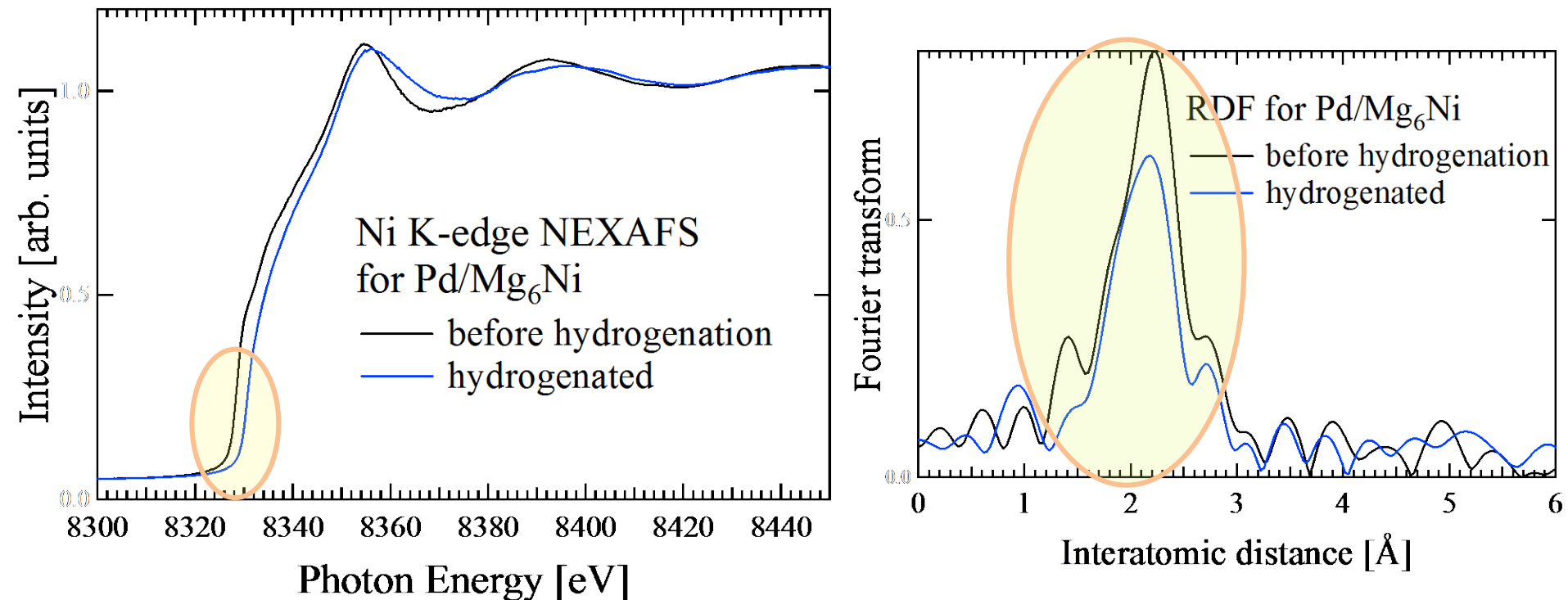


希釈水素ガス (4 wt% H_2 in He) をフローしながら測定を行った。フローレートは100 sccmであり、測定は室温でおこなった。

Pd/ Mg_6Ni 薄膜の水素化によるXRDパターンの変化。

加熱によって結晶化が進行するが、水素化においては安定であることが明らかになった。

結果



Pd/Mg₆Ni薄膜のNEXAFSスペクトル(左)とRDF(右)の水素化による変化.

吸収端のシフトから水素化によるNiの価数変化が見て取れ、更にRDFからはNiの配位環境が大きく変化していることがわかる。今後はモデル構造を用いた解析を行う必要がある。

まとめ

まとめ:

本課題で得られた結果から、Mg-Ni層は乱れた構造を有しており、薄膜試料の加熱後においては、 Mg_2Ni 相が形成され、その結晶性も増加する。

しかしながら、水素化においては結晶相の変化は認められなかったが、Niの価数変化が観測され、Niの配位環境が大きく変化する。

今後:

理論的解釈(Reverse Monte Carlo法など)を用いた解析から水素の吸蔵サイトを明らかにすると共に、水素吸蔵材料への応用を目指した研究開発を行う。