

Mg-Ni系ナノ粒子の水素吸蔵・放出過程の解析



八木伸也、小川智史、塚田千恵、水谷剛士、藤本大志、
金井友美*、内山直樹*
名古屋大学、*株式会社アツミテック



背景・経緯

可燃性の水素ガスを検出し、その空間分布を可視化するフィルムとしてPd/Mg-Ni材料が実用されている。この材料はMg-Ni水素化物の形成における光学特性の変化を利用して調光している[1]。しかし、Mg-Ni層の局所構造や化学状態、さらにそれらが水素化によってどのように変化するかは明らかになっていない。本課題ではあいちシンクロトン光センターBL5S1, BL5S2におけるX線吸収微細構造(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。

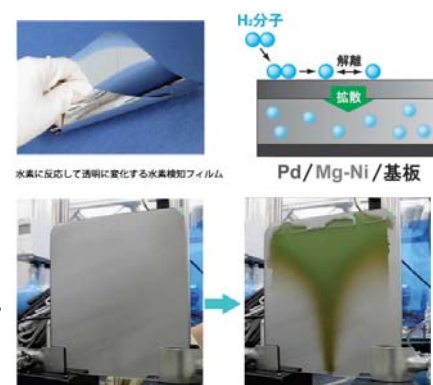


図1. Pd/Mg-Ni薄膜による水素の可視化. [2]

結果

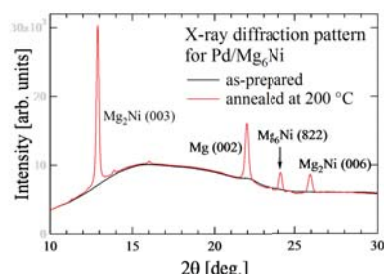


図2. Pd/Mg₆Ni薄膜の加熱によるXRDパターンの変化。

真空中でPd/Mg₆Niを200 °Cまで加熱した後に測定をおこなった。ブロードな構造は基板のガラスに由来している。

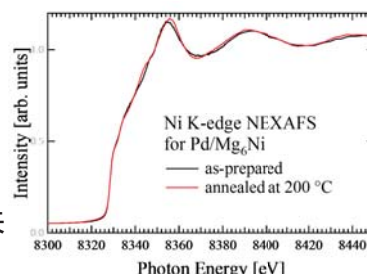


図4. Pd/Mg₆Ni薄膜の吸収端近傍X線吸収微細構造(NEXAFS)スペクトルと動径分布関数(RDF)の加熱による変化。

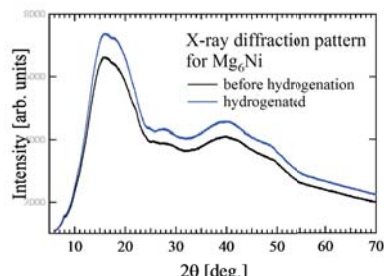
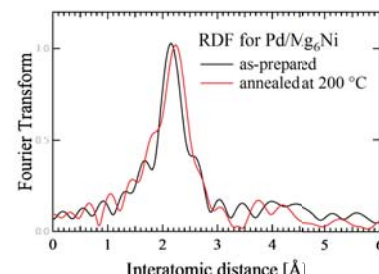


図3. Pd/Mg₆Ni薄膜の水素化によるXRDパターンの変化。

希釈水素ガス(4 wt% H₂ 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。

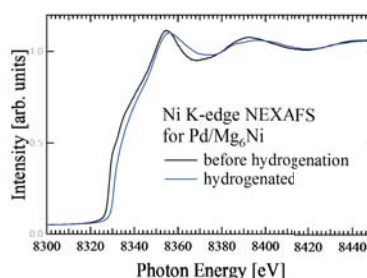
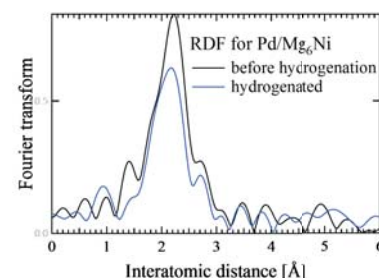


図5. Pd/Mg₆Ni薄膜のNEXAFSスペクトルとRDFの水素化による変化。



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。

Mg₆Ni層はアモルファス構造を有しているか、微細な結晶相によって構成されている。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。

吸収端のシフトから水素化によるNiの価数変化が見取れ、さらに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。

期待される効果・社会的インパクト

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、それは水素化においても結晶相を形成しないことが明らかになった。今後、Reverse Monte Carlo法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ことでMg系水素吸蔵材料の実用化を目指す。

参考文献

- [1] 吉村和記, 表面技術 56, 882 (2005).
- [2] 株式会社アツミテックHP
<http://www.atsumitec.co.jp/>