



## V-Ti-Cr 系 BCC 合金の水素昇圧サイクルに伴う構造変化

Suganthamalar Selvaraj<sup>1</sup>, Ankur Jain<sup>2</sup>, 宮岡裕樹<sup>2</sup>, 小島由継<sup>2</sup>, 市川貴之<sup>1,2,3</sup>

1 広島大学総合科学研究科, 2 広島大学 N-BARD, 3 広島大学工学研究科

キーワード：金属水素化物, 水素昇圧, 水素貯蔵, BCC 合金

### 1. 背景と研究目的

水素吸蔵合金を用いた水素昇圧システムは、機械駆動部を必要とせず、低騒音で稼働できる点等で既存の機械式コンプレッサーより優位性が認められるため、近年研究が進められている[1]。この水素化物を用いた化学昇圧システムにおいては、高温高压下での水素吸蔵特性が重要である。我々のグループでは、特に BCC 系  $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{38.5}$  を水素昇圧用合金として注目し、上記の特性やサイクル特性等に関する研究を進めている[2]。本研究では、 $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{38.5}$  合金の一部を Zr, Fe, Nb に置換した合金の昇圧サイクルに伴う構造変化を、放射光を用いた XRD 測定により明らかにすることを目的とした。

### 2. 実験内容

実験には、アーク溶解法にて 1500 K, 24 時間の条件下で作製された  $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{33.5}M_5$  ( $M = Zr, Fe, Nb$ ) 合金を用いた[2]。これら合金について、昇温による昇圧と室温までの冷却を 100 サイクル行い、合成後、10, 25, 50, 100 サイクルした試料の水素貯蔵特性を圧力 - 組成 - 等温線 (PCI) 測定により評価した。昇圧サイクルに伴う構造変化は、当研究室の保有する X 線回折 (XRD) 及び放射光を用いた SR-XRD 測定により調査した。

### 3. 結果および考察

$V_{20}Ti_{32}Cr_{48}$  合金は、昇圧のサイクルに伴い、連続的に特性が変化(劣化)するのに対し、 $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{38.5}$  合金の水素貯蔵特性は、10 サイクル後から安定し、PCI における水素吸蔵容量、プラトー圧力、及び水素吸蔵/放出のヒステリシスは 10-100 サイクルの間で大きな変化を示さない。このようなサイクル特性の違い及びメカニズムを理解するため、XRD 測定を用いた構造変化の調査を行ってきたが、昇圧サイクル後の回折ピークは低強度且つブロードであり、厳密な議論が困難であった。そこで、本研究では、高強度な回折ピークが得られ、より詳細な構造評価が期待できる SR-XRD 測定を実施した。Fig.1 に未処理及び 100 サイクル後の  $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{33.5}Zr_5$  合金の XRD プロファイルを示す。尚、挿入図は当研究室で測定した XRD プロファイルである。SR-XRD 測定結果より、昇圧サイクルに伴い  $ZrCr_2$ -cubic 相が  $ZrV_2$ -cubic 相に変化することが明らかになった。 $ZrV_2$  相は  $ZrCr_2$  とは異なり水素を吸蔵しないため、この  $ZrV_2$  相の生成が水素貯蔵量低下の原因であると考えられる。

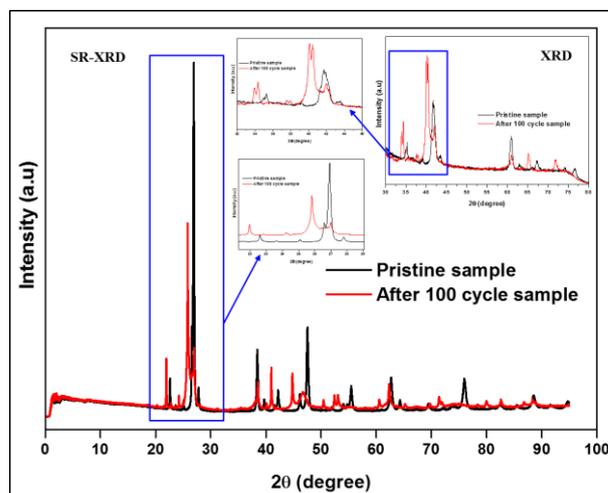


Fig.1  $V_{40}Ti_{21.5}Cr_{33.5}Zr_5$  の SR-XRD 測定結果

### 4. 参考文献

1. M.V. Lototsky; *Int J Hydrogen Energy*; 2014,39,5818-5851.
2. S. Selvaraj et al, *Int J Hydrogen Energy*; 2018, 43, 2881-2889.