



水素化した Mg₂Ni 合金の XRD および XAFS 解析

小川 智史¹, 砥綿 眞一²

1 名古屋大学, 2 あいちシンクロトロン光センター

キーワード：マグネシウム合金, 水素吸蔵, Mg K-edge XAFS

1. 背景と研究目的

水素は長期かつ大量の保存が可能なエネルギーキャリアとして注目されており、その実用に向けては信頼性の高い貯蔵方法の確立が不可欠である。Mg は高い水素吸蔵量を有し、さらに軽量かつ安価なことから水素貯蔵材料として注目されている。しかし、水素吸放出時に高温条件を必要とする、すなわちエネルギー効率が悪いという課題がその実応用を妨げている。Mg の水素吸放出時のエネルギー効率の向上に向けては異種金属との合金化が有効であり、Ni との合金である Mg₂Ni はよく知られた合金系である¹⁾。Mg₂Ni は水素吸蔵時に Mg₂NiH₄ を形成することで 3.6 wt% の水素を吸蔵する。この Mg₂NiH₄ の結晶構造として低温相 (LT 相) と高温相 (HT 相) が知られており、235 °C 付近で構造相転移を起こすことが報告されている²⁾。この構造相転移温度付近における結晶構造の変化をつぶさに調べた研究は少ないため、本研究では Mg₂NiH₄ の構造相転移に注目し、その前後における Mg 原子周りの化学状態および局所構造の変化を調べることを目的として Mg₂NiH₄ の Mg K 吸収端近傍 X 線吸収微細構造 (Mg K-edge XAFS) 分析を行った。

2. 実験内容

本研究では 2 種類の方法で Mg₂NiH₄ 試料を準備した。一つは高温状態から長時間の冷却によって得られた徐冷試料 (Annealed) であり、もう一つは急速に冷却することで得られた急冷試料 (Quenched) である。徐冷試料中では LT 相が、急冷試料中では HT 相がそれぞれ多く含まれていることが期待できる (試料作製方法の詳細に関しては実験番号 202006022 の報告を参照のこと)。Mg₂NiH₄ 試料は大気中で急速に酸化するため、測定用試料は大気非曝露条件下で準備した。水素雰囲気下で封止された試料をアルゴン置換されたグローブボックス内で取り出し、カーボンテープで試料ホルダーに固定し、トランスファーベッセルに封入することで大気にさらすことなく XAFS 測定室へと導入した。

3. 結果および考察

Fig. 1 に Mg₂NiH₄ の徐冷試料および急冷試料の NEXAFS スペクトルを示す。標準試料の Mg 薄膜試料のスペクトルと比較すると、スペクトル形状が大きく異なることから大部分は水素化していることが見て取れる。徐冷試料のスペクトルでは 1303~1304 eV に肩構造が見られることから、未反応の Mg-Ni 合金が残存していることが明らかとなった。

4. 参考文献

- 1) J.J. Reilly and R.H. Wiswall Jr., *Inorg. Chem.* **7**, 2254 (1968).
- 2) J. Schefer *et al.*, *J. Less-Common Met.* **74**, 65 (1980).

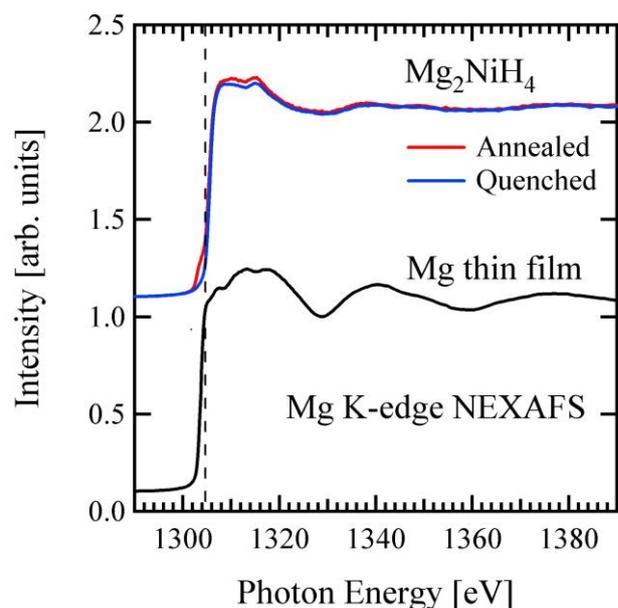


Fig. 1 Mg K-edge NEXAFS of Mg₂NiH₄ and Mg thin film.