



スイッチングミラー薄膜の XAFS 解析（2）

岡島敏浩¹, Iesari Fabio¹, 杉本皓輔², 八木浩樹², 重里有三²

1. あいち SR, 2. 青山学院大理工

キーワード：スイッチングミラー，水素化，脱水素化，XAFS

浩樹

1. 背景と研究目的

スイッチングミラー薄膜は、希薄な水素ガスと大気の切り替えによるガスクロミック方式により容易に水素化及び脱水素化され、これにより金属状態と半導体状態を可逆的に変化する。Y-Mg 合金や Ni-Mg 合金では、可逆的に脱水素化状態(金属状態、 $\text{YH}_2\cdot\text{Mg}$ 、 Mg_2Ni)と水素化状態(半導体状態、 $\text{YH}_3\cdot\text{MgH}_2$ 、 Mg_2NiH_4)を制御できる。例えば Y-Mg 合金においては、水素化・脱水素化に伴い約 3.9 倍の熱伝導率の変化が起こることから、熱伝導スイッチなど新しい熱制御素子への応用が期待され、また熱スイッチが開発されることで、半導体素子から燃焼機関に至るまでエネルギーの高効率化への貢献が期待できる。

一方、XAFS 解析は注目する元素周辺の局所構造を調べることができ、水素化・脱水素化に伴う熱伝導率と局所構造との相関の解明が期待できる。前回の実験（202201006）では Y-Mg 薄膜、Ni-Mg 薄膜において、蛍光法を用いて良好な XAFS スペクトルが得られることを確認した。そこで本実験では、水素化前後での XAFS スペクトルの変化の様子をその場観察する。

2. 実験内容

試料には、熔融石英基板上に、Y-Mg 薄膜又は Ni-Mg 薄膜を dc マグネトロンスパッタにより 300nm の膜厚で成膜し、その上に水素化・脱水素化の触媒作用や酸化防止用のために Pd を 5nm 成膜したものをを用いた。測定には成膜した後、水素化前の薄膜、および水素化後、並びに脱水素化後におけるスペクトルの変化をその場観察した。XAFS スペクトルの測定は、あいち SR・BL5S1 で Y K-edge 及び Ni K-edge に対して、7 素子 SDD を用いて蛍光 X 線収量法で行った。

3. 結果および考察

Fig.1 に、as depo 及び水素化後 (3% H_2 (He base)、100% H_2)、並びに脱水素化後の Ni-Mg 薄膜から得られた Ni K-edge での XANES スペクトルを示す。水素化することで、スペクトルの立ち上がりのエネルギーが高エネルギー側にシフトしていることがわかる。一方、脱水素化後では、as depo の状態まで戻っている。このことは、水素化した半導体状態では Ni 原子から H 原子への電子供与によって Ni の価数が高価数側にシフトしたと考えられる。また、Y-Mg 薄膜の水素化、脱水素化においても、同様なエネルギーの変化が見られた。

今後、同時に測定した EXAFS スペクトルの解析から、これら元素の周りに配位する Mg の配位数や結合距離を求め、水素化による構造変化の様子を明らかにしていく。

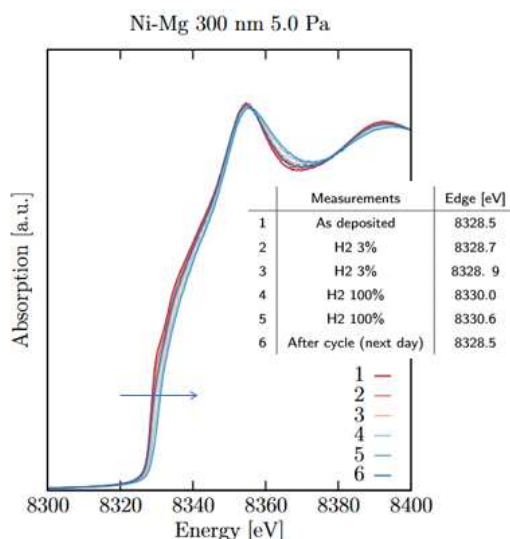


Fig.1 as depo 及び水素化後、脱水素化後の Ni-Mg 薄膜から得られた Ni K-edge XANES スペクトル。