

Ti-V 系 BCC 水素吸蔵合金の残留水素に関する構造観測

Structural observation concerning underused hydrogen atoms within Ti-V alloy of hydrogen storage materials

森 一広¹⁾ 杉山 正明¹⁾ 福永 俊晴¹⁾ 岩瀬 謙二²⁾ 深澤 裕³⁾

Kazuhiro MORI Masaaki SUGIYAMA Toshiharu FUKUNAGA Kenji IWASE Hiroshi FUKAZAWA

¹⁾京都大学 ²⁾茨城大学 ³⁾原子力機構

Ti-V-Cr 合金と重水素を吸蔵させた Ti-V-Cr-D 合金の 2 種類を用いて中性子回折実験を行った。その結果、Ti-V-Cr 合金が null 合金であること、Ti-V-Cr-D 合金の中性子回折パターンが D のみによる結晶構造を反映していることを確認した。現在、詳細な構造解析を進めている。

キーワード：水素吸蔵合金、中性子回折、Ti-V 系 BCC 合金

1. 目的

Ti-V 系 BCC 水素吸蔵合金は水素貯蔵材料の分野で応用が期待されている物質である。しかしながら、可逆的に吸蔵放出できない死蔵水素が全体の 3 割近く占めている等、実用上において深刻な問題を抱えている。この死蔵水素の問題を解決するためには、「Ti-V 等の組成比」・「死蔵水素量」・「構造」の関係を明らかにし、Ti-V 系 BCC 合金の水素と金属間に働く相互作用の大きさについて検討する必要がある。本実験では特に構造に注目し、中性子回折を利用することで Ti-V 系 BCC 合金中の水素を直接観測することを目的としている。

2. 方法

試料は Ti-V 系 BC 合金に Cr を一部固溶させた (1) Ti-V-Cr 合金と重水素を吸蔵させた (2) Ti-V-Cr-D 合金の 2 種類を用意した。この系の水素吸蔵放出特性を図 1 に示す。尚、Ti-V-Cr-D 合金は死活処理を施すことによって重水素の放出を防いでいる。中性子回折実験は高分解能粉末中性子回折装置 HRPD を利用し、室温で測定を行った。また、試料ホルダーは円柱型バナジウムセルを使用した。

3. 研究成果

図 2 に Ti-V-Cr 合金 (灰色実線) および Ti-V-Cr-D 合金 (黒実線) の中性子回折パターンを示す。Ti-V-Cr 合金の平均散乱長はほぼゼロ (null 合金) に近いので、回折ピークが出現していない。一方、Ti-V-Cr-D 合金は明確な回折ピークが出現した。これは D のみで構成される結晶構造 (立方晶) を直接観測していることがわかる。

4. 結論・考察

現在、Ti-V-Cr-D 合金の中性子回折データに対して精密結晶構造解析を行っている。今後、結晶構造解析で得られた重水素の占有率と水素吸蔵放出測定から求められた重水素量を比較することで、吸蔵された重水素の存在位置をより明確にする予定である。

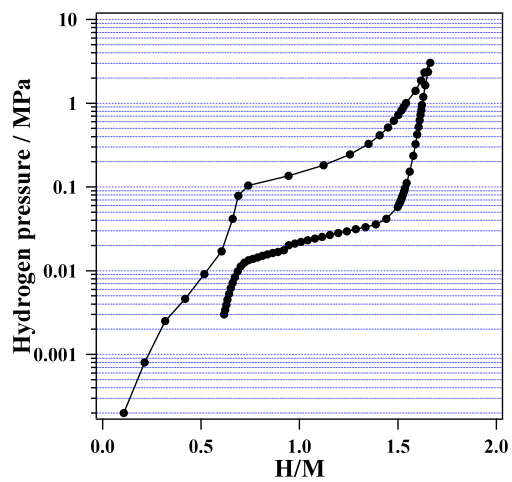


図1 Ti-V系 BCC 合金の PCT 曲線

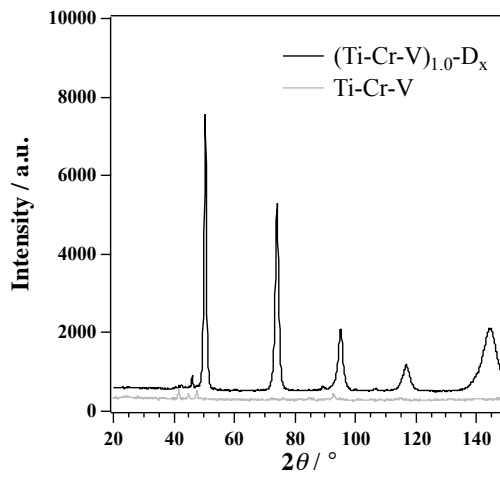


図2 中性子回折パターン