

高強度全散乱装置 (NOVA) による アルミニウム水素化物の構造解析 Structural Analysis of Aluminum Hydride by the High Intensity Total Diffractometer (NOVA)

池田一貴¹、大友季哉²、大下英敏²、金子直勝²、坪田雅己¹、瀬谷智洋²、
鈴谷賢太郎³、李海文⁴、千星聡⁴、折茂慎一⁴、他 NOVA グループ

1 KEK 物構研、2 KEK J-PARC センター、
3 JAEA J-PARC センター、4 東北大 金研

J-PARC 高強度全散乱装置 (NOVA) は $0.01\text{--}100\text{\AA}^{-1}$ の広い Q 領域にわたり、静的構造因子 $S(Q)$ を正確かつ短時間に測定することにより、液体、非晶質、結晶等の幅広い物質を対象とした研究が可能であるため、水素貯蔵材料の水素化・脱水素化過程における構造変化の解明に有効である。アルミニウム水素化物 AlH_3 は水素密度が高く ($10.1\text{wt.}\%$ 、 149kg/m^3)、 $370\text{--}470\text{K}$ 程度においてシンプルな反応 ($\text{AlH}_3 \rightarrow \text{Al} + 3/2\text{H}_2$) により脱水素化反応が進行するため [1-5]、高密度水素貯蔵材料として期待されている。本研究では、 LiAlD_4 と AlCl_3 を用いた液相反応により AlD_3 を合成し、NOVA で粉末中性子回折測定を実施して詳細な構造解析を行うことにより脱水素化過程に関する情報を得ることを目的とした。測定された中性子回折曲線を Rietveld 解析することにより、これまで報告されている $\alpha\text{-AlD}_3$ と同様の結晶構造パラメータを確認できた。さらに、 AlD_3 の脱水素化反応を抑制する数 mol% の酸化物相が生成していることが示唆された [6]。

本研究は独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 事業「水素貯蔵材料先端基盤研究 (Hydro-Star)」のもとで実施されている。

- [1] G. Sandrock, J. Reilly, J. Graetz, W. M. Zhou, J. Johnson, J. Wegrzyn, *Appl. Phys. A*, 80 (2005) 687.
- [2] S. Orimo, Y. Nakamori, T. Kato, C. Brown, C.M. Jensen, *Appl. Phys. A*, 83 (2006) 5.
- [3] K. Ikeda, S. Muto, K. Tatsumi, M. Menjo, S. Kato, M. Biemann, A. Züttel, C.M. Jensen, S. Orimo, *Nanotechnology*, 20 (2009) 204004.
- [4] S. Muto, K. Tatsumi, K. Ikeda, S. Orimo, *J. Appl. Phys.*, 105 (2009) 123514.
- [5] S. Kato, M. Biemann, K. Ikeda, S. Orimo, A. Borgschulte, A. Züttel, *Appl. Phys. Lett.*, 96 (2010) 51912.
- [6] K. Ikeda, H. Ohshita, N. Kaneko, J. Zhang, M. Yonemura, T. Otomo, K. Suzuya, H. Yukawa, M. Morinaga, H.-W. Li, S. Semboshi, S. Orimo, *Mater. Trans.*, in press.