

# 圧力を利用した炭素ナノ構造体の 水素貯蔵に関する構造的な研究

## Structural Study on Pressure-induced Hydrogen Storage of Carbon Nano-structured materials

石動裕也<sup>1</sup>、○中山敦子<sup>2</sup>、田口翔太郎<sup>3</sup>、木竜葵<sup>3</sup>、中野智志<sup>4</sup>

大村彩子<sup>2</sup>、石川文洋<sup>1</sup>、山田裕<sup>3</sup>、藤久裕司<sup>5</sup>

1 新潟大院自然、2 新潟大超域、3 新潟大理、4 NIMS、5 AIST

グラファイトは、低温で水素の物理吸着を生じるが、電荷移動相互作用を必要とする水素-グラファイト層間化合物の生成は難しいとされていた。一方で、近年、軽量で環境負荷の少ないカーボン材料が水素貯蔵材料として注目され、カーボンナノチューブなどの炭素材料で水素吸蔵が報告された。しかし、水素がカーボンのどのサイトにどのような状態で取り込まれるかを実験的に解明した報告はない。

本研究では、気体水素と炭素  $\pi$  電子系との間にはたらく相互作用の本質を理解するため、グラファイト構造をもつメソカーボンマイクロビーズ (MCMBs) に注目した。水素が MCMBs のどのサイトにどのような状態で取り込まれるか明らかにすることを目的として、圧力による水素-炭素間相互作用制御をおこない、X 線回折、ラマン散乱によるその場観察をおこなった。

圧力発生には、ダイヤモンドアンビルセルを用いた。粉末 X 線回折実験には放射光を用い、角度分散法により回折像を得た。得られた回折パターンをリートベルト法により解析し、各圧力下での格子パラメータを決定した。ラマン散乱実験は、顕微レーザーラマン分光装置を用いて  $180^\circ$  後方散乱で観測した。光源には、 $\text{Ar}^+$  レーザー (励起波長 514.5 nm) を用いた。

本研究でおこなわれた 2GPa 以下の測定では、系が非平衡状態にあると考えられ、定量的評価は難しいが、次のことが明らかになった。

- MCMBs- $\text{H}_2$ 、MCMBs-He 双方で層間距離の単調な収縮を示す一方で、0.6 GPa 以下で炭素 6 員環の炭素間結合距離の等方的な伸張が生じる
- $\text{H}_2$  や He を取り込むと、MCMBs の G-バンドは圧力の増大に伴ってハード化する
- MCMBs の示す G-バンドのフォノンエネルギーにおいて MCMBs- $\text{H}_2$  および MCMBs-He と MCMBs との間には、大きなエネルギーギャップがある

これらは、室温、2GPa 以下で  $\text{H}_2$ 、He がグラファイト層間へ挿入されたを示唆する。

また、圧力のかけかたによっては、MCMBs- $\text{H}_2$  の相分離が観察されることが明らかになった。グラファイトの最適なステージングモデルを検討、解析した結果、図 1 のような AB スタッキングからなる相 (空間群  $P6_3/mmc$ ) と、AA スタッキングからなる相 ( $P6/mmm$ ) の混相を本モデルとして提案する。

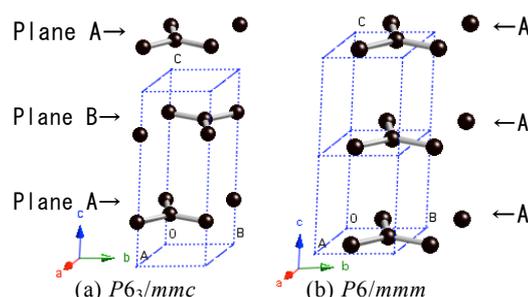


図1 MCMBs- $\text{H}_2$  の相分離後のモデル構造.