

## 陽極酸化法を利用したアルミ水素貯蔵材料の開発

## Development of aluminum hydrogen storage materials by anodic coating

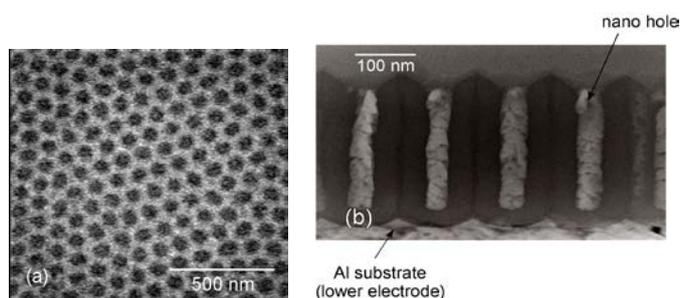
物材機構<sup>1</sup>, 政策研<sup>2</sup> ○加藤 誠一<sup>1</sup>, 片桐 昌彦<sup>1</sup>, 浦島 邦子<sup>2</sup>NIMS<sup>1</sup>, NISTEP<sup>2</sup>, <sup>✉</sup>Seiichi Kato<sup>1</sup>, Masahiko Katagiri<sup>1</sup>, Kuniko Urashima<sup>2</sup>

E-mail: kato.seiichi@nims.go.jp

水素は環境問題を解決し得る燃料である。しかし水素の体積当たりのエネルギー密度は小さく、軽い材料に高密度で貯蔵する必要がある。アルミニウム水素化物  $\text{AlH}_3$  は高い重量密度 (10.1 wt%) と体積密度 ( $148 \text{ kg/m}^3$ ) を有するため、有望な水素貯蔵材料である。近年 JAEA (Spring8) において、 $\text{AlH}_3$  を高温高圧下で直接合成する手法が開発された [1]。この方法は水素化を直接行える一方、水素化がアルミ表面近傍で止まってしまう問題がある。この障害を乗り越えるため、アルミ中の水素の拡散を増大させ、より内部で核生成・成長を起こさせる必要がある。

計算機を用いて、 $\pm\text{-AlH}_3$  中の水素拡散を調べた。第一原理 MD 計算で水素の動径分布関数や自己拡散係数を調べた結果、水素は殆ど拡散しないことがわかった。また  $\pm\text{-AlH}_3$  の第一原理フォノン計算の結果、圧力ゼロにおいてもフォノン DOS に虚数が出ず、安定構造であることが分かった。一度  $\pm\text{-AlH}_3$  構造が生成されると水素は拡散できず、表面近傍で水素化が止まってしまう。水素の拡散を増大させるために、水素と金属との相互作用を変化させる必要となる。

我々は、陽極酸化により厚い  $\text{AlO}_x$  酸化膜でコーティングすることを提案した。写真 1 は、陽極酸化による  $\text{AlO}_x$  中のナノホールを示している [2]。この配列・直径・深さは、実験条件で制御できる。Al 表面の酸化物は一般に水素化を阻害するが、ナノホールが水素拡散パスになり得ると期待している。実験では 10GPa 程度の高圧条件で、ナノホールが壊れてしまう可能性がある。そこで、高圧でも水素の拡散パスを確保す



(a) 表面の SEM

(b) 断面の TEM

写真 1 陽極酸化法によるポーラスアルミナ / アルミニウム構造

ることも必要となる。また陽極酸化による酸化膜は自然酸化膜と比べて厚いので、この酸化膜の存在により H の結合が変化し、H の拡散増大により Al 内部まで水素化できると期待した。この指針を基に試料作成し、JAEA (斎藤氏) で水素化実験を行ったところ、より厚い酸化膜で覆われた Al の方が、より内部まで水素化され大きな水素化物相ができた。その後の実験により、酸化膜の厚さと水素化物相の大きさに相関があることが確認され、再現性があることが分かった。今後このメカニズムを核生成・成長の観点から動力的に考察する必要がある。

1. H. Saitoh, et al., Appl. Phys. Lett., 93, 151918 (2008).

2. 加藤誠一他, 「アルミニウム陽極酸化薄膜の電界誘起スイッチング効果」応物春季 (2006).