

低濃度水素を用いた Pd/Ni 二層触媒付き Y 薄膜の水素化とそのギブス自由エネルギー評価

Assessment of Gibbs free energy of YH_x ($0 < x < 3$) fabricated using
Pd/Ni caplayers under low density hydrogen gas

○矢吹 康佑¹、青木 信彦¹、酒井 政道¹、松永 智善¹、飯笹 圭太郎¹、樋口 宏二²、北島 彰²、
長谷川 繁彦²、中村 修³ (1. 埼大院理工、2. 阪大産研、3. 岡山理大)

○K. Yabuki¹, N. Aoki¹, M. Sakai¹, T. Matsunaga¹, K. Iizasa¹, K. Higuchi², A. Kitajima²,
S. Hasegawa², O. Nakamura³ (1.Saitama Univ. , 2.Osaka Univ. , 3. Okayama univ. of Science)

E-mail: sakai@fms.saitama-u.ac.jp

緒言：YH_x は水素濃度 x の増加とともに結晶構造が、hcp ($x < 0.21$: α 相)、fcc ($x = 2$: β 相)、hcp ($x = 3$: γ 相) と変態し、 $x = 2.8$ で金属から半導体へ変化することが知られている[1]。YH_x を作製する時、 β 相生成においては Pd 触媒、 γ 相生成においては Ni 触媒が適していることが報告されている[2]。この実験において X 線回折測定結果は定性的に分析された。本研究では Pd と Ni を重ね合わせた触媒を用いた水素化と X 線回折強度の定量的な分析、その各相間のギブス自由エネルギー差の評価を行った。

実験と解析方法：Y 膜は電子ビーム蒸着により石英基板上に約 500 nm 成膜した。続いて Pd 触媒 (Pd/Y) および Ni 触媒 (Ni/Y) を同様に 80 nm 成膜した。Pd/Ni 積層触媒はそれぞれ約 80 nm、15 nm 成膜した

(Pd/Ni/Y)。水素化は流量 2L/min で 3%水素アルゴンガス雰囲気中、様々な温度で 10 分間行われた。構造解析は $\theta - 2\theta$ 法 X 線回折を用いた。無配向試料のブラック反射強度式 (I_h^{cal}) を計算し、 I_h^{cal} と生データの積分強度を用いることで、配向度や多重度、吸収係数を考慮した各相の濃度を算出した。算出した濃度をもとに各相間のギブス自由エネルギー差を算出した。

結果と考察：Pd/Ni/Y を水素化した結果、水素化温度 35°C では β 相が主相、その後 200°C までは温度の上昇に伴い γ 相濃度が増加した。 γ 相単相は作製できず、400°C では β 相単相となった。Pd/Ni/YH_x の X 線回折結果と Pd/YH_x、Ni/YH_x の X 線回折結果より各相の濃度を算出し、その濃度を元にギブス自由エネルギー差 E_1 ($\alpha \rightarrow \beta$: 図 1) と E_2 ($\beta \rightarrow \gamma$: 図 2) を算出した。 E_1 において Pd/Ni/Y は Pd/Y 的挙動を示し、 E_2 では Pd/Ni/Y は 200°C までは Ni/Y 的挙動、300°C 以上では Pd/Y 的挙動を示すことが分かった。

[1] J. N. Huiberts et al., Nature 380 (1996) 231

[2] 平間弘晃ら 第 61 回応用物理学会関係連合講演会
2014 年 18p-PG12-3

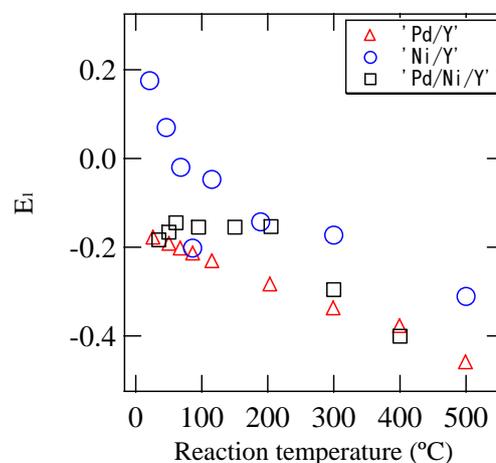


図 1 α β 相間のギブス自由エネルギー差 E_1

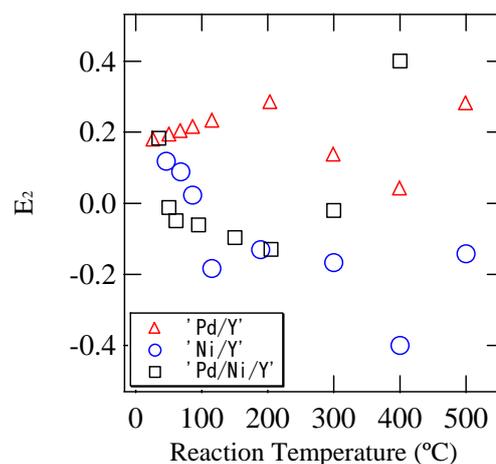


図 2 β γ 相間のギブス自由エネルギー差 E_2