

水素吸蔵材料における水素雰囲気下でのXAFSによる化学状態および構造評価

カーボンニュートラルや水素社会実現のため、水素雰囲気下での固体材料の特性把握がますます望まれる。水素吸蔵金属として知られているパラジウムについて、ガス流通 *in situ* XAFS評価により、水素流通下でのみ存在するパラジウム水素化物の生成を捉えた事例を紹介する。

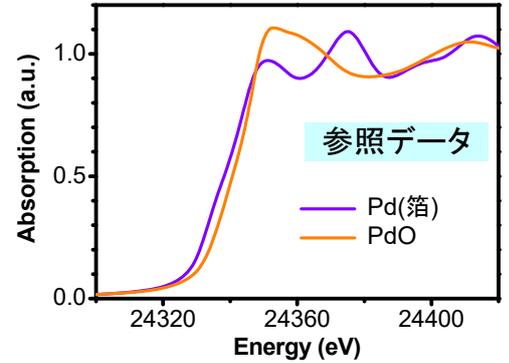
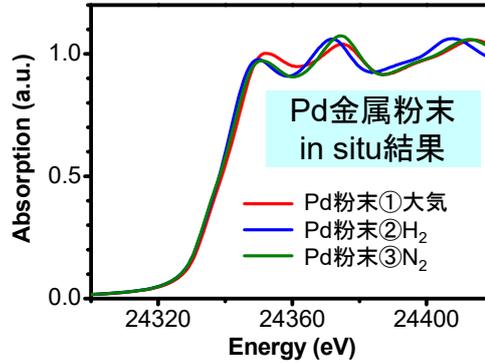
1. 試料及び測定条件

試料: パラジウム金属粉末

- ① 大気下で測定
- ② H₂フロー下測定*
- ③ N₂フロー下測定*

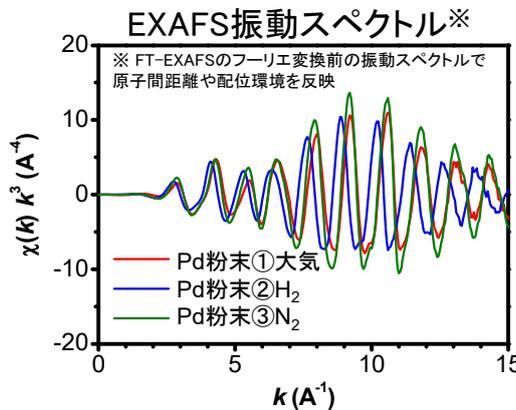
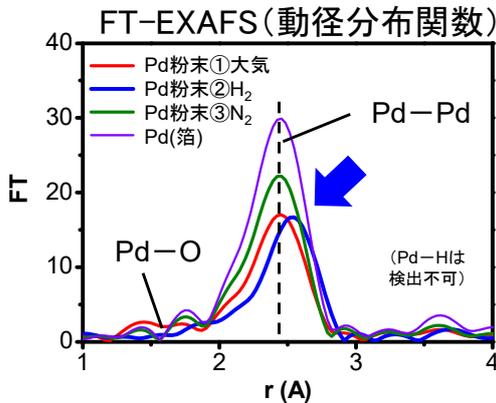
* ガスフロー *in situ* セルにて大気遮断状態で、H₂またはN₂に晒された状態で評価(いずれも100%, 100 cc/min.)

2. XANESスペクトル



- ①では参照データとの比較からPd金属に加えて、Pd酸化成分が混在。
- ②, ③はPd⁰価成分が主成分。ただし、②と③でわずかなシフトを確認。→ ②での水素吸蔵および水素化物生成を示唆。

3. FT-EXAFSおよびEXAFS振動スペクトル



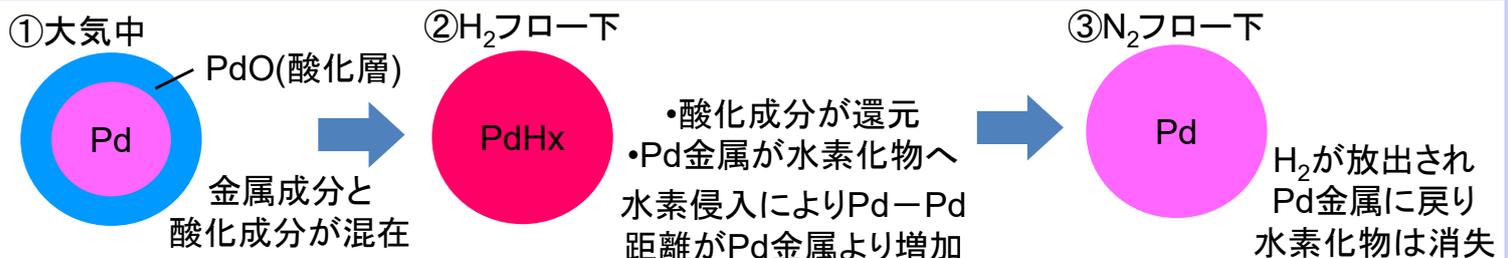
EXAFSカーブフィッティングによるPd-Pd原子間距離算出

Pd-Pd	原子間距離(Å)
①大気中	2.74
②H ₂ フロー下	2.83
③N ₂ フロー下	2.74

参考) Pd-Pd原子間距離(回折法での評価)
Pd金属: 2.75 Å, Pd水素化物: 2.84 Å (PdH_x)

- ①および③では、一般的なPd金属と同様のPd-Pd結合を確認
- ②では水素吸蔵によるPd水素化物生成(水素侵入)によりPd-Pd距離が増加。

4. パラジウム粉末の水素フローによる状態、構造変化のイメージ



東レリサーチセンターでは、ガスフロー *in situ* 分析による水素下での評価や水素前処理などのメニューを取り揃えています！