岩瀬 謙二(Kenji Iwase)

所属(Domain) 物質科学工学領域(Domain of Materials Science and Engineering) •博士後期課程量子線科学専攻(Major in Quantum Beam Science)

●研究テーマ(Research theme)

①水素吸蔵合金の結晶構造と水素吸蔵放出特性に関する研究

(Crystal structure and hydrogen absorption-desorption property of hydrogen absorbing alloy)

①これまでLaves構造を有するRNi₂ (R = Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er)やCaCu₅-type構造を有するRNi₅広範囲にわたって研究されてきた。 RNi₃ and R₂Ni₇ (R = La, Ce, Pr, Nd)は、ニッケル水素電池の負極材として研究が展開されている。それらの合金は、MgZn₂-type構造とCaCu₅-type構造 を有するセルが1:2の割合でc軸方向に積層した結晶構造を形成している。 超格子合金と呼ばれ、水素がMgZn₂-typeセルとCaCu₅-typeセルにどれくらい吸蔵されるのか、吸蔵量と水素吸蔵放出特性にどのような相関があるの か大変興味深い。

水素吸蔵に伴う構造の変化は、水素貯蔵材料の開発の際に重要な情報をもたらす。水素吸蔵放出過程における結晶構造変化を明らかにするため



に、その場観察(in situ測定)をX線回折や中性子回折に導入している。水素吸蔵放出特性を評価するPCT測定 と回折実験を同時に行うことによって、水素化物の構造を明らかにする。

The hydrogen absorption property and structural change observed upon hydrogenation of the intermetallic compounds Lavestype RNi₂ (R = Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er) and CaCu₅-type RNi₅ (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm) have been extensively investigated. RNi₃ and R₂Ni₇ (R = La, Ce, Pr,Nd) have been investigated as negative electrode of nickelmetal hydride battery. They consist of cells with MgZn₂- and CaCu₅-type structures stacked along the c axis in ratios of 1:1 and 1:2. For such alloys with superstructures, it is particularly interesting to elucidate how hydrogen occupies each CaCu₅- and MgZn₂-type cell during hydrogenation and how the hydrogen occupation of the cell is related to the hydrogenation properties.

Structural changes during hydrogenation provide substantial information for the development of hydrogen storage materials. We attempted to observe hydrogen absorption-desorption phenomena and understand the structural changes from the alloy to the full-hydride phase using in situ X-ray diffraction (XRD) and in situ Neutron diffraction (NPD) along the P-C isotherm.

キーワード(Keyword)	結晶構造(crystal structure)X線回折(XRD)水素化物(metal hydride)
専門分野(Specialized Field)	材料科学(material science)
共同研究可能技術(Possible Technology of Cooperative research)	結晶構造解析(Rietveld refinement)
関連論文・特許情報 website (Related articles・patent information)	https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/25/0002462/profile.html
研究設備(Research Facility)	X線回折装置(XRD)アーク溶解(Arc melting)
研究室URL(Lab. URL)	http://
E-mail	Kenji.iwase.fullback@vc.ibaraki.ac.jp