

海外支援プログラム実験終了報告書

2015年10月8日

実験者1（氏名・所属）：古府麻衣子・東京大学物性研究所

実験者2^{(*)1}（氏名・所属）：橋本直樹・東京大学物性研究所

研究代表者（氏名・所属）：山室修・東京大学物性研究所

中性子散乱課題番号・装置名：15588・AGNES

実験課題名^{(*)2}：パラジウムナノ粒子中の水素原子の速いダイナミクス

利用施設・装置：FRM II（ドイツ）・TOFTOF

利用期間：2015年9月26日～2015年10月7日

実験の概要^{(*)3}：

パラジウム水素化物 PdH_x は、代表的な金属水素化物のひとつであり、応用だけでなく物性物理の観点からも研究されてきた。なかでも、パラジウム格子中の水素の運動は、古くから取り組まれてきた課題であり、おもに中性子散乱、核磁気共鳴法(NMR)により調べられてきた。水素濃度 $x > 0.6$ で、水素はパラジウムの fcc 格子中の八面体(O)サイトに内包され、いわゆる NaCl 構造をとることが知られている。バルク試料中の水素の拡散運動は、この O サイトのジャンプ運動であると理解されている。

Pd をナノ粒子化すると、そのサイズ効果や表面効果により、水素吸収特性などの基礎物性に変化が現れることが報告されている。我々は、パラジウムナノ粒子中の水素の状態を明らかにするために、中性子回折実験や中性子準弾性散乱を行ってきた。中性子回折実験から、パラジウムナノ粒子中では、水素は O サイトだけではなく、四面体(T)サイトも占有することが明らかになった。また、昨年米国 NIST の HFBS 分光器を用いた中性子準弾性散乱実験から、バルク試料では見られない“速い緩和”($\sim 1 \text{ ns}$)を観測することに成功した。今回の実験では、より広い時間領域を調べるために、ドイツ FRM II に設置された TOFTOF 分光器を用いて、中性子準弾性散乱を行った。4.5～12 Å の波長の入射中性子を用い、1ps～1ns の時間領域を探査した。HFBS 分光器で観測した緩和は同様に観測することができた。しかし、それ以外の緩和は発見できなかった。ナノ粒子でのみ現れる 1ns 程度の緩和は T サイトにいる水素の緩和である可能性が高い。今後、より詳細な解析を行い、この緩和の起源を明らかにしたい。

(*)1 1人のみ支援を受けた場合は空欄でお願いします。

(*)2 物性研中性子共同利用で採択された課題名です。

(*)3 簡単な記述で構いません。この報告書の提出をもって、旅費が支給されます。また、実験終了後 2ヶ月以内に物性研 ISSP-NSL Database (<http://quasi.issp.u-tokyo.ac.jp/db/index.php>) から activity report の提出をお願い致します。