高温高圧水素処理によるホウ化水素シートの水素脱離メカニズムの探索

（筑波大院数物[1]・筑波大数物・TREMS[2]・ゼロ CO_2 エミッション機能性材料開発研究センター[3]・量子科学技術研究開発機構[4]・物質・材料研究機構[5]・東北大 WPI-AIMR[6]・東北大 IMR[7]）○安田 幸広[1]・後藤 知歩[1]・野口 夏未[1]・中平 夕貴[4]・内海 伶那[4]・齋藤 寛之[4]・中野 智志[5]・伊藤 伸一[2]・引地 美亜[2]・折茂 慎一[6,7]・近藤 剛弘[2,3,6]

Exploration of Hydrogen Desorption Mechanism of HB Sheets by High-Temperature and High-Pressure Hydrogen Treatment ([1]*Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba,* [2]*Department of Materials Science and Tsukuba Research Center for Energy Materials Science, Institute of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba,* [3]*R&D Center for Zero CO_2 Emission with Functional Materials, University of Tsukuba,* [4]*National Institutes for Quantum Science and Technology (QST),* [5]*National Institute for Materials Science,* [6]*The Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University,* [7]*Institute for Materials Research, Tohoku University*) ○ Yukihiro Yasuda[1], Kazuho Goto[1], Natsumi Noguchi[1], Yuki Nakahira[4], Reina Utsumi[4], Hiroyuki Saitoh[4], Satoshi Nakano[5], Shin-ichi Ito[2], Miwa Hikichi[2], Shin-ichi Orimo[6,7], and Takahiro Kondo[2,3,6]

Hydrogen boride sheets (HB sheets), new two-dimensional materials[1)], have two types of bonds between B and H[2)]. The hydrogen release over a wide temperature range that occurs when HB sheets are heated was thought to be due to the change of the bonding configurations during heating, but the details were not known. In this study, hydrogen release properties and bonding states were evaluated for HB sheets heat-treated under various conditions of high-hydrogen partial pressure and ultrahigh-pressure. The results showed that the bonding state is preserved even after the heat treatments. Hydrogen release characteristics of HB sheets consist of lower (~350 ºC) and higher temperature ranges: while release character is different depending on the HB-lots for lower temperature, smaller amount release was always observed independent on HB-lots for higher temperature. Based on these facts and the theoretically predicted report that hydrogen release from HB sheets is due to bonding to adjacent hydrogen atoms between sheets[3)], we developed a new model of hydrogen release properties focusing on hydrogen atoms between sheets. The detail of the model will be presented.

Keywords : hydrogen boride sheets; hydrogen storage materials; two-dimensional materials

新しい二次元物質であるホウ化水素シート[1)](HB シート)は B-H 間に 2 種類の結合を持つ[2)]。HB シートを加熱した際に生じる広い温度領域での水素放出は加熱により刻々と変化する結合形態の変化によるものだと考えられていたが、詳しくはわかっていなかった。本研究では、高圧水素や超高圧の様々な条件下で加熱処理した HB シートについて水素放出特性と結合状態を評価した。その結果、水素とホウ素の結合状態は加熱や水素量によって大きく変化していないことがわかった。一方、HB シートの水素放出特性にはロット間で異なる特徴を示す~350 ℃での水素放出と、ロット間で違いが少ない高温域での少ない量の水素放出があることがわかっている。以上の結果と HB シートからの水素放出はシート間の隣接する水素原子に結合によるという理論研究の報告[3)]を踏まえ、我々はシート間の水素原子に着目した新たな水素放出特性のモデルを考案した。本講演ではこの詳細について報告する。

1) H. Nishino, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 13761. 2) S. Tominaka, et al., *Chem.* **2020**, *6*, 406.
3) T. A. Abtew, et al., *Phys. Rev. B.* **2011**, *83*, 094108.