

ボロファンの水素サイトの決定

株式会社デンソー 鈴木 寛

1. Introduction

グラフェンに代表される単原子層の二次元物質は特異な物性を有することが知られている。このような中、ホウ素と水素から成る二次元物質（ボロファン）については理論的に特異な電子機能や水素吸蔵機能などが予測されていた。このような中、2017年に筑波大で構造中にホウ素の二次元構造を有する MgB_2 を母材として、マグネシウムと水素（プロトン）をイオン交換することによりボロファンが合成された（*J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 13761 (2017)）。本物質は軽元素のみで構成されるために水素の吸蔵密度が上げられる可能性があり、研究に取り組んでいる。

現行材料の課題を解決するために、ボロファンの結晶構造、特に水素サイトに関する情報を得て物性との関係を明らかにしていく必要がある。結晶構造は X 線回折の PDF 解析、および光電子分光においてホウ素が負にチャージしていることなどから推定されている。ボロファンの水素のサイトについては理論的に最安定なサイトが予測されているが、実際には赤外線分光により少なくとも B-H-B、B-H サイトが存在していることが示唆されている。また、それらのサイトの結晶中での位置関係は必ずしも明確にはなっていない。水素の吸脱着特性、耐久性向上のためにボロファンの水素サイトに関する正確な情報を得ることが必要である。今後、水素の吸脱着に伴うボロファンの構造の変化を調べる予定であるが、今回はまず初期の H(D):B=1:1 のボロファンの構造解析が可能かを検討する。

2. Experiment

2.1 試料

H 体と D 体のボロファン(H(D):B=1:1)の粉末

2.2 実験方法

装置名：iMATERIA BL20 茨城県ビームライン(J-PARC)

中性子：Time of Flight

モード：シングルフレーム

測定バンク：背面バンク、90度バンク、低角バンク

（全散乱として90度バンクを解析対象とした。）

試料：バナジウム容器内(φ6)に中空のバナジウム円筒(φ5)を配置してそれらの隙間に粉末試料を充填

測定温度：室温

測定時間：各 10 時間

2.3 解析方法

解析コード：Z-Rietveld Ver.1.1.3 および PDFgetN (P. F. Peterson et al.; *J. Appl. Crystallogr.* **33**, 1192 (2000))

解析データ：90度バンク、解析範囲： $2.10 \text{ \AA}^{-1} < Q < 20.00 \text{ \AA}^{-1}$

吸収補正：円筒対象

3. Results

図1に90度バンクで測定したH体(HB)とD体(DB)のボロファンの全散乱パターンを示す。水素に由来すると考えられるバックグラウンド強度に違いはあるが、どちらのサンプルでもブロードなプロファイルを観測した。得られた中性子散乱強度データを、PDFgetNを用いて中性子構造因子 $S(Q)$ の導出を試みたが、 $Q \rightarrow Q_{max}$ のとき $S(Q) \rightarrow 1$ に漸近するような $S(Q)$ の導出はできていない。現状のD体の $S(Q)$ を図2に示す。現在、バックグラウンドを引く際の係数の見直し、 $I(Q)$ から $S(Q)$ 導出の際の規格化を見直している。

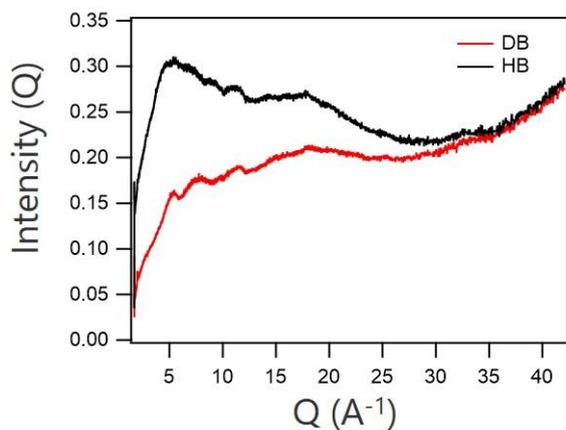


図1 HBおよびDBの中性子散乱強度データ

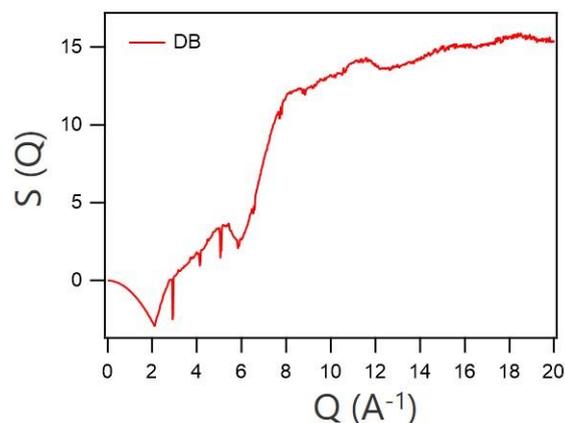


図2 DBの中性子構造因子

4. Conclusion

iMATERIA BL20にてボロファンの中性子散乱実験を行った。H体とD体の中性子散乱強度データを比べると、 5 \AA^{-1} 付近のブロードなピークをD体のデータでは観測できたので、重水素置換の効果を確認することができた。また $S(Q)$ を導出するにあたり標準試料 CeO_2 の測定データを用いて、PDFgetNに入力するバンクの設定値や有効密度の最適化方法をBLご担当者様からご教授頂けたが、本実験ではボロンの吸収補正や二重になっているサンプル管の補正の方法に課題があるため、継続して検討している。