

鈴鹿高専 ○南部智憲, 清水信恵 (学生), 江崎尚和, 大分高専 松本佳久  
名古屋大院工 湯川 宏, 森永正彦, 産総研 竹市信彦

【緒言】純ニオブ水素透過膜は多量の水素を固溶するために、水素透過試験中に脆性破壊する場合がある。一方で、水素圧力を負荷した状態で室温まで冷却すると、ニオブ水素化物 ( $\text{NbH}$ ) を形成するにもかかわらず膜試料は破壊しない。この原因を解明するために、水素雰囲気中でその場X線回折測定およびNb-H系の量子構造計算を行い、水素を固溶した純ニオブの体積ひずみと水素脆化との関係について検討した。

【方法】純度約99.9mass%の純ニオブ粉末を試料として、293～673K、真空～0.3MPaの水素雰囲気中でその場X線回折測定を行い、格子定数を算出した。得られた格子定数の値をもとに、水素を固溶した純ニオブのクラスターモデルを作製し、全エネルギー計算および分子軌道計算を行った。

【結果】673Kでの水素圧力と純ニオブの体積ひずみ  $\epsilon_v$  (%)との関係を右図に示す。水素圧力と体積ひずみとの間には強い相関がある。これまで報告した水素透過試験の条件では、純ニオブは10～12%程度膨張していることがわかった。このように固溶水素によって体積が膨張する場合には、膜試料は破壊しない。しかしながら、真空排気によって直ちに体積が約10%収縮する場合に膜試料は破壊する。一方、Nb-H固溶体からNbH水素化物へと変態する場合、Nb原子間の距離はほとんど変化しない。したがって、構造変化にともなう体積ひずみをほとんど生じず、膜試料は破壊に至らない。

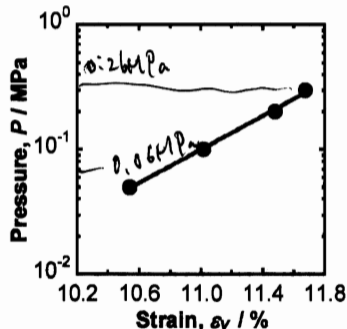


図 水素圧力と純ニオブの体積ひずみとの関係