

高圧力を活用した新規金属水素化物の探索 —放射光 X 線と中性子を利用した構造研究—

町田晃彦、齋藤寛之：量研量子ビーム、青木勝敏：東大理、
服部高典：原子力機構 J-PARC、大友季哉：高エネ機構物構研

水素社会に向けた取り組みが加速しており、2020 年以降に水素の利用が大幅に拡大すると予想されている。水素の利用拡大に向けて、様々な用途に応じた材料研究が進められているが、安定的な利活用には水素と材料を構成する元素との相互作用など基礎科学的な知見も必要である。しかしながら材料開発へ適用するためには未だ十分な理解は得られていない。高圧力は原子間の相互作用に関する知見を得るために有効なパラメータの一つである。数 GPa の高圧力による圧縮で直接的に原子間距離、すなわち相互作用を変化させることで新規構造や物性の変化を誘起することが可能である。また、1 GPa を超えると水素分子の化学ポテンシャルが急激に増大し、常圧では生じない水素化反応の実現が期待される。金属水素化物に関しては金属格子間に位置する水素原子との相互作用の変化は例えば水素貯蔵合金の貯蔵能の向上への知見を与えるだけでなく、水素による機能性発現を利用した新規機能性材料の可能性にも関わる。そこで、放射光 X 線と中性子を活用した高圧力下構造観察によって、高圧力下で実現される新規金属水素化物の探索や、格子間の水素位置を含めた構造を決定し、原子間相互作用など基礎科学的知見を得るための研究を進めている。

特に単金属の水素化物を対象とした研究では、ランタン 2 水素化物 (LaH_2) という既知の水素化物において SPring-8 における高圧力下 X 線回折によって圧力誘起相分離という新しい現象を観測し[1]、J-PARC における高圧力下中性子回折の結果と合わせて、ランタンにおいてこれまでに存在が確認されていない 1 水素化物 (岩塩構造) が形成されることを明らかにした (図 1) [2]。また、難水素化金属である鉄の高温高圧下における水素化過程を中性子回折でその場観察することに成功し、fcc 鉄水素化物中の水素占有状態を解明した[3]。このような高圧研究の成果によって、固体中の水素によって誘起される新規構造・物性理解といった基礎科学の進展と水素貯蔵合金に代表される水素機能性材料開発の促進が期待される。

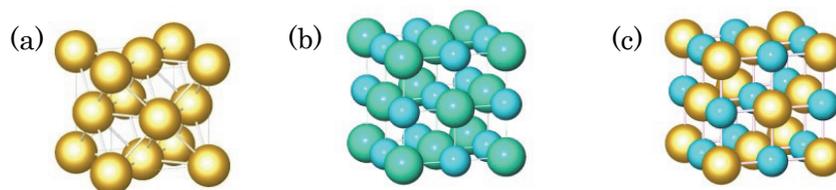


図 1: ランタン 1 水素化物の(a)X 線回折から得られた金属原子の配列、(b)中性子回折から得られた金属と水素の原子配列と(c)それらから明らかになったランタン 1 水素化物の構造。

参考文献

- [1] A. Machida *et al.*; Phys. Rev. B, **83**, 054103 (2011).
- [2] A. Machida *et al.*; Phys. Rev. Lett., **108**, 205501 (2012).
- [3] A. Machida *et al.*; Nat. Commun., **5**, 5063 (2014).

関連 web

<http://www.kansai.qst.go.jp/press-2366.html>

<http://www.kansai.qst.go.jp/press-3185.html>