

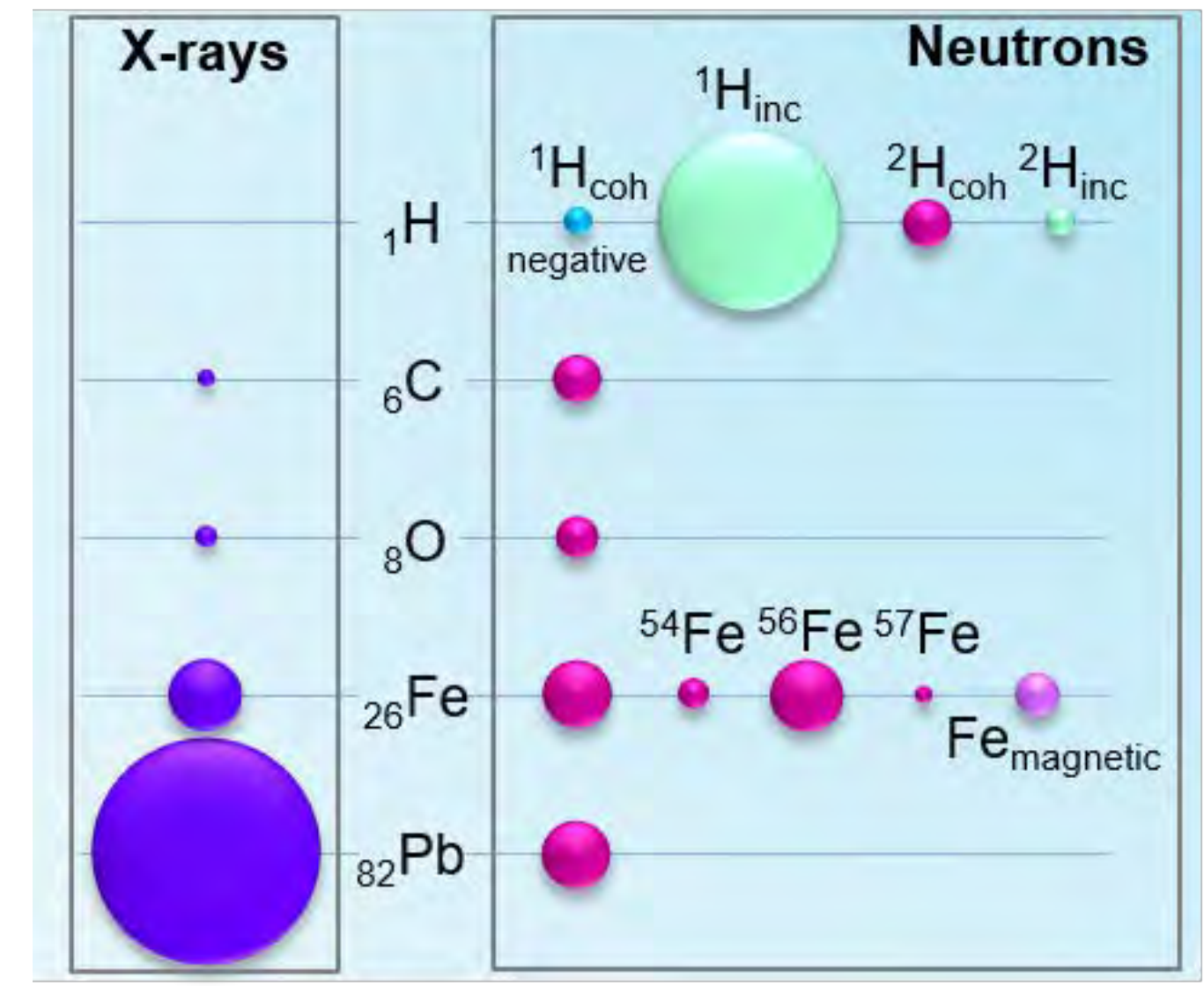
Structural study on metal hydrides using synchrotron radiation
 x-rays and neutron under high pressure

町田 晃彦、綿貫 徹、齋藤 寛之（量研機構）、服部 高典、佐野 亜沙美（原子力機構）、
 青木 勝敏（東京大）、池田 一貴、大友 季哉（KEK）

研究概要

➤ 放射光利用による金属中に水素が高密度に存在するときに現れる現象の探索と中性子利用による水素の占有状態の解明

- ✓ 放射光X線・・・金属格子構造変化を観測、現象の探索
- ✓ 中性子・・・水素に高感度
- ✓ 高圧力・・・高密度状態を実現



X線と中性子の散乱断面積の比較

➤ 金属中に高密度に水素が存在する状態の正確な理解

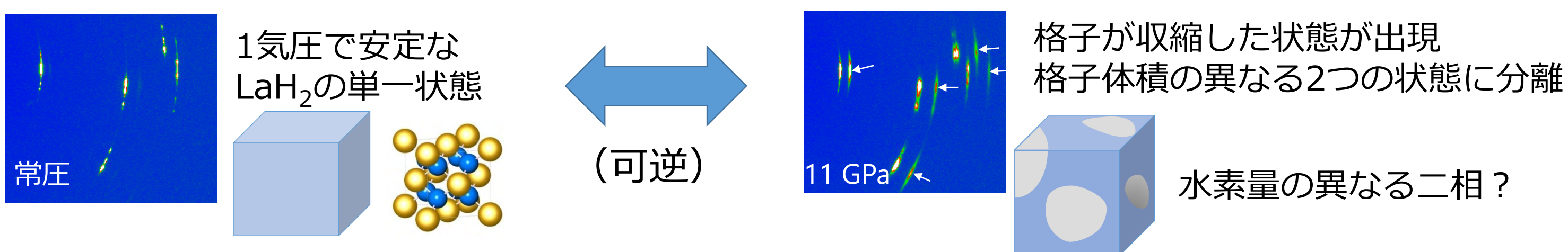
研究成果

ランタン水素化物の圧力誘起相分離と新規水素化物相の発見

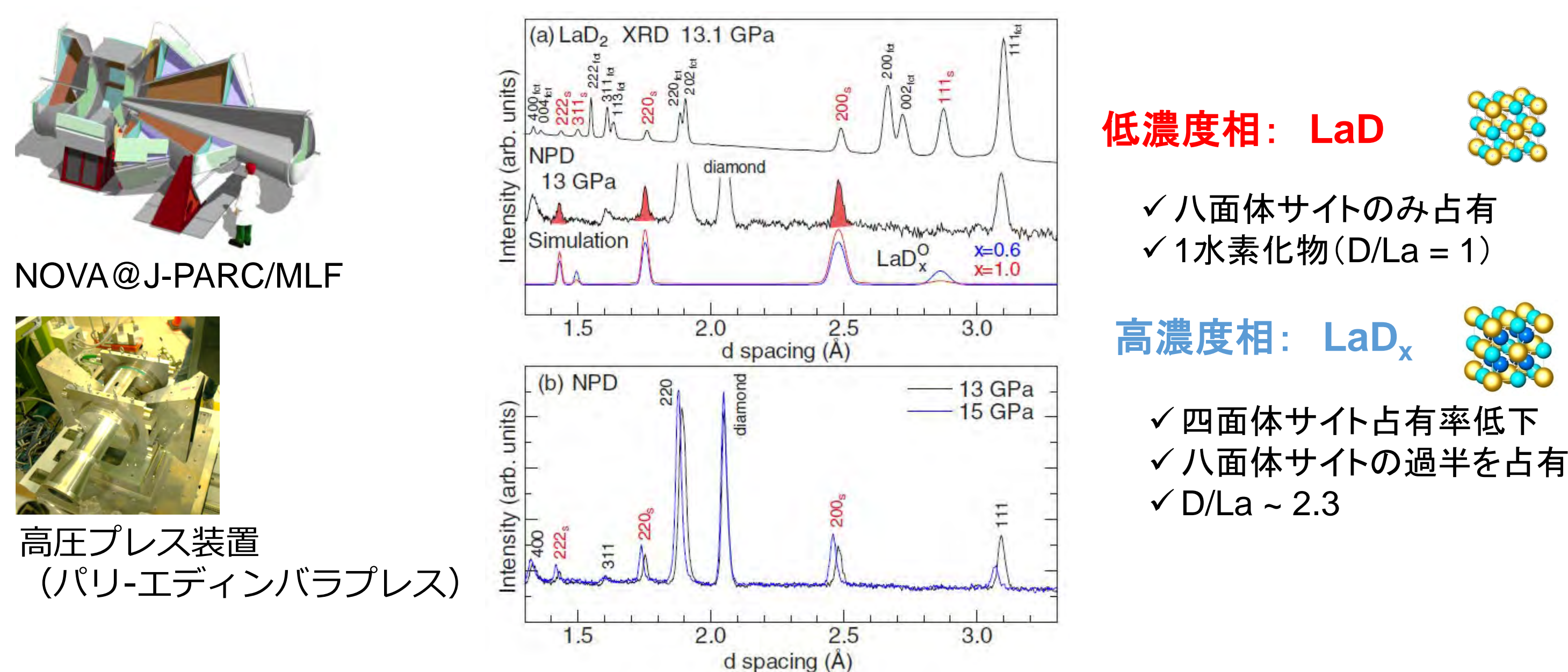
- およそ11 GPaの高圧力を加えると2つの状態に分かれる金属水素化物を放射光X線回折により発見
- 分かれた2つの内の1つの状態は通常では存在しない水素化物であることを中性子回折により解明



ランタン2水素化物 (LaH₂) で圧力誘起相分離現象を発見



中性子回折による相分離状態での水素占有状態を解明

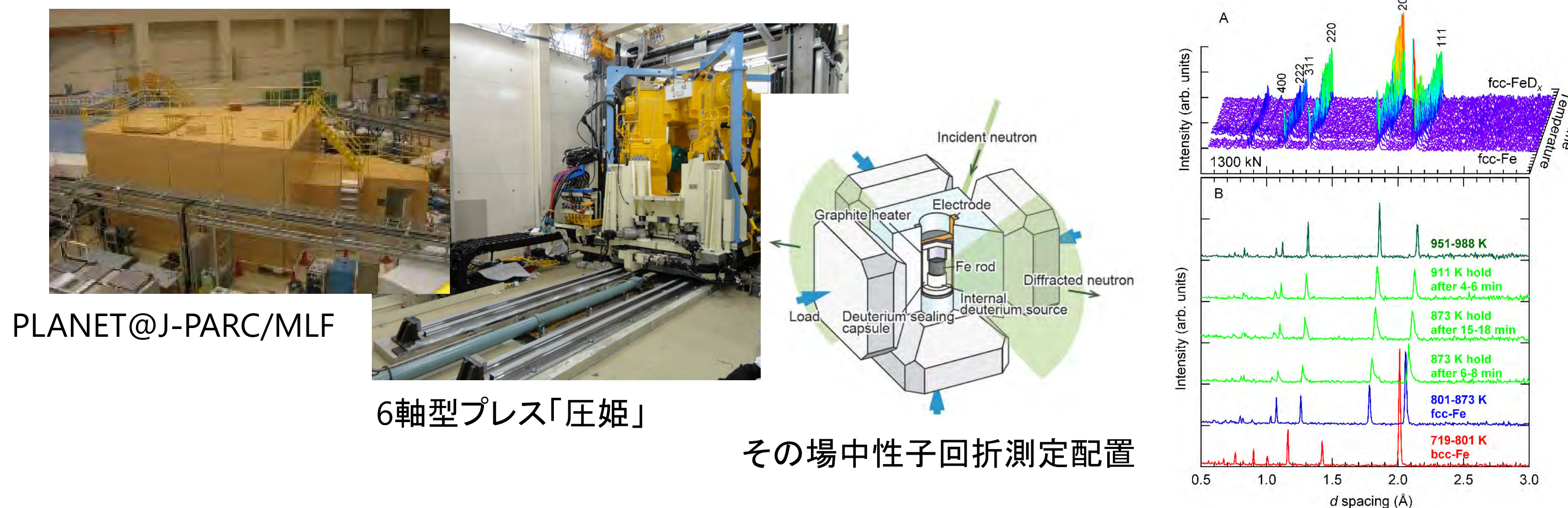


希土類金属水素化物ではこれまでになかった**1水素化物相 (NaCl型構造)**を発見

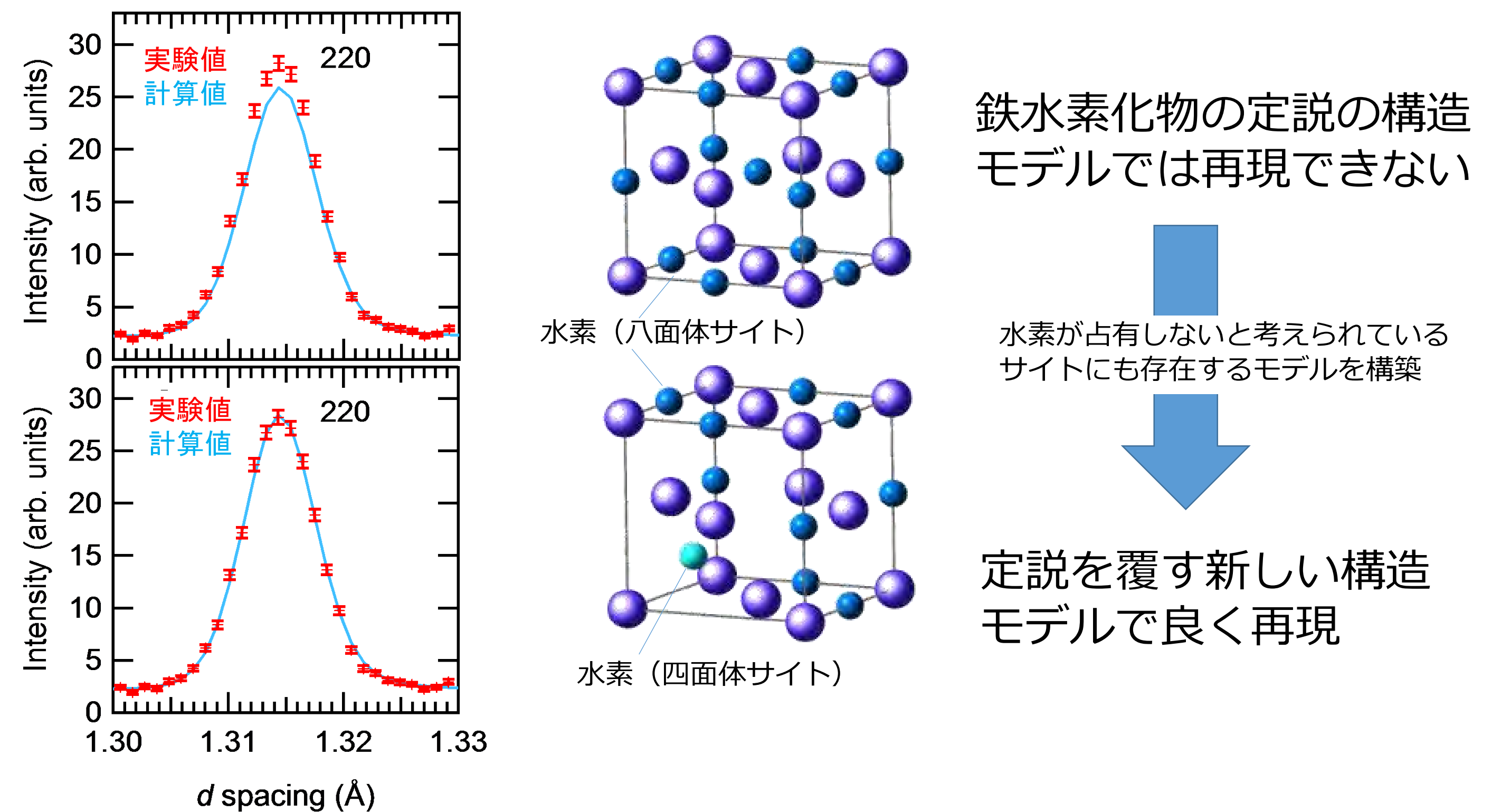
A. Machida *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 205501 (2012).
 プレス発表「岩塩 (NaCl) 構造をもつレアアース金属の水素化物を発見 - 水素貯蔵材料の高性能化の発展に期待 -」 (H24.5)

高温・高水素圧力下でのみ存在する鉄水素化物中の水素占有状態を解明

- 放射光X線回折用の高温・高水素圧力下水素化反応試料セルをベースに中性子その場観察用セルを開発
- 約700℃、6 GPaにおけるその場中性子回折測定と構造解析による重水素占有状態の決定に成功し、定説とは異なる占有状態であることを解明



715℃, 6.3 GPaでのfcc-FeD_xの構造



A. Machida *et al.*, Nature Communications **5**, 5063 (2014).
 プレス発表「鉄に溶けた水素はどこにいる？ - 鉄中の水素を中性子で観測することに成功 -」 (H26.9)

まとめ



今後の課題

- 構造と物性（電子状態、磁気構造など）との相関の解明
- 周期平均構造からのズレ（短距離の原子相関）の観測（原子二体分布関数）
- 動的構造の観測（非弾性、準弾性散乱）