

中性子回折で観る高重水素組成の鉄重水素化物 FeD_x の多彩な構造と物性

Neutron Diffraction Study of FeD_x with High Deuterium Composition

青木勝敏 東北大学金属材料研究所

水素分子は金属表面で解離・吸収され、金属格子間が水素原子で一部占有された水素化物を形成する。鉄への水素溶解度は低水素圧下では極めて小さいが数万気圧の高水素圧下では大きく増加して高水素組成 ($x \approx 1$) の水素化物が形成される。水素化の母体金属への影響は、金属格子の 10 パーセントを超える膨張(負の圧力効果)と伝導帯からの電子の受容である。Fe-H システムの状態図は 300 - 2000 K、0 - 20 GPa の温度、圧力領域で詳しく調べられており、低圧相の bcc- FeH_x ($x < 0.05$)、高圧相の dhcp- FeH_x ($x \approx 1$)、高温相の fcc- FeH_x ($x = 0 - 1$) の金属格子構造が異なる三つの相が平衡状態として存在することが知られている。

Fe-H 状態図上で出現する興味深い状態は、①強磁性の dhcp 相、②全率固溶体の fcc 相、③bcc、fcc 相に出現する超多量空孔状態、④500 K を超える融点降下と融点極小、などである。これらの状態を理解するためには、金属格子構造に加えて水素組成、水素原子のサイト占有率、磁気構造(モーメントの大きさと方向)を知ることが必要不可欠である。しかしながら、これらの鉄水素化物は高水素圧下でのみ安定であり、常圧で回収することは困難である。これまで放射光 X 線回折、メスバウアー分光、磁気二色性分光などによって結晶構造、電子・磁気構造が調べられて来たが、水素に関する情報が全く欠落したまま現在に至っている。

J-PARC、MLF に超高压中性子回折装置 *PLANET* が建設・整備されたのを契機に、我々は SPring-8 で蓄積してきた高温高压 X 線回折技術を *PLANET* に移転して、上述の多彩な状態を重水素化物の中性子回折実験によってその場観察することを目指した一連の実験を進めている。講演では研究全体の概要、中性子回折用に開発された重水素化セルなどの技術開発と昨年 5 月に実施した第 1 回 *PLANET* 実験の結果を報告する。

本研究は科研費基盤研究(A)(課題番号 24241032)の助成の下で進められている。