

金属水素化物の圧力誘起構造相転移

Pressure induced structural transition in metal hydrides

青木 勝敏 [1]

Katsutoshi Aoki[1]

[1] 原子力機構

[1] JAEA

水素は地球惑星科学において重要な役割を担っている。宇宙で最も多く存在する元素であり、宇宙の生誕を考察する上で、また未来を予測する上での鍵物質である。地球内部においても水素は大きな役割を担っている。内部コアの組成元素として、あるいは鉱物中に水酸化物として取り込まれ、地球内部のダイナミックな運動に関与している可能性があるからである。水素は物質中で他の元素には見られない特異な振る舞いを示す。結合様式は多様であり共有結合、イオン結合、金属結合を形成することが知られている。多くの物質中で拡散あるいは転位現象を示すことも知られており、固体中の物質移動としては最速で拡散する。水素化物研究を進める上で高圧実験は有効である。金属を例に水素雰囲気中で加圧されたときに起こる現象を予測してみる。水素は金属格子間に侵入し、水素化物が形成される。水素分子固体の化学ポテンシャルは加圧に伴って増加することから水素分子は解離して、より安定な固溶水素として金属格子間に侵入するからである。金属水素化物の高圧研究は古くから行なわれており、現在までに 2000 ,10 GPa の温度-圧力領域で多くの遷移金属、希土類金属の相図が決定されている。

ここでは希土類金属水素化物の高圧構造相転移に関して、放射光を利用した X 線回折実験の最新のの結果を報告する。YH₃ は Y 金属が形成する六方晶格子の四面体ならびに八面体サイトを水素が占有した、水素の高密度状態が実現された構造をとる。六方晶から面心立方晶への転移は中間相を経て段階的に進行することが観測された。10 GPa を超えたあたりから六方晶-YH₃ のピークは弱くなり新しいピークが現れ始める。20 GPa を超えると回折パターンは単純になり観測された回折角度領域で 5 本のピークが観測されるだけである。この回折パターンは面心立方晶格子で説明される。六方晶と面心立方晶の金属格子を比較すると Y 原子がつくる平面六方格子の積層構造の違い、abab ⋯ (六方晶) と abcabc ⋯ (面心立方晶) で両者の格子が関連付けられることがわかる。このような金属の典型的な金属格子構造間に中間相が存在し、積層構造が加圧とともに段階的に変わり、面心立方格子に移行するのは、金属面間を占有している水素と金属間に結合が形成されているためである。Y 金属面のスライド運動が水素によってピン止めされていると考えられる。

当日は金属格子内の水素移動によって駆動されたと考えられる構造相転移に関しても報告する。