

Title: Neutron diffraction study of hydrogen site occupancy in Fe_{0.95}Si_{0.05} at 14.7 GPa and 800 K, JMPS, 116, 309-313, 2021.

Authors: Yuichiro MORI, Hiroyuki KAGI, Sho KAKIZAWA, Kazuki KOMATSU, Chikara SHITO, Riko IIZUKA-OKU, Katsutoshi AOKI, Takanori HATTORI, Asami SANO-FURUKAWA, Ken-ichi FUNAKOSHI, Hirouyuki SAITOH

受賞者

森 悠一郎 会員

東京大学大学院理学系研究科



鍵 裕之 会員

東京大学大学院理学系研究科



柿澤 翔 会員

高輝度光科学研究センター



小松 一生 会員

東京大学大学院理学系研究科



佐野 亜沙美 会員

日本原子力研究開発機構



授賞理由

水素は地球中心核の軽元素の有力候補と考えられており、金属鉄中の水素の挙動を調べる目的で、これまで主に純鉄を重水素化したFe-D二成分系について中性子線回折実験がなされてきた。一方、地球化学的研究からは、地球中心核の鉄に数wt%のケイ素が固溶していることが予想されている。本論文ではそれを踏まえてFe-Si-D三成分系に組成を拡張し、地球の内核を構成する鉄合金の有力な結晶構造である六方最密充填構造を持つFe_{0.95}Si_{0.05}の重水素化物について、高圧高温その場中性子線回折実験を行うことにより、六方最密充填構造中の四面体間隙（Tサイト）と八面体間隙（Oサイト）における重水素の席占有に関する検討を行っている。

著者らは、高圧下800 Kでの加熱による重水素化に起因したFe_{0.95}Si_{0.05}の格子体積の膨張を観測し、約2時間保持の後に格子体積の膨張が停止して定常状態になっていること、およびその後の12時間に亘る中性子線回折プロファイル測定中の平均格子体積と測定後の格子体積が一致していることを確認した。これらは、重水素含有率一定の条件下で中性子線回折測定が行われたことを保証しており、本研究で取得された回折データはきわめて質の高いものである。そして、著者らは得られた中性子線回折データのリートベルト解析により、14.7 GPa、800 Kにおいて重水素は六方最密充填構造中のTサイトは占有せず、Oサイトのみを占有することを明らかにした。さらに、ケイ素を含まない系における先行研究でもTサイトへの重水素の占有が認められないことから、ケイ素の存在がTサイトにおける重水素の占有に影響を与えないことを示唆した。

本研究で得られた鉄ケイ素合金中の重水素の挙動についての新たな知見は、地球中心核のさらなる理解に貢献するものである。また、結晶構造を解析するために行った高圧高温その場中性子線回折実験としては、現時点で最高記録となる圧力を発生させており、今後の高圧中性子線回折実験技術の発展に大きく寄与していることも評価される。よって、本論文は日本鉱物科学会論文賞候補として推薦するにふさわしいと考えられる。

森 悠一郎 会員の略歴

2020年 3月 九州大学理学部地球惑星科学科卒業
2022年 3月 東京大学大学院理学系研究科修士課程修了
2022年 4月 東京大学大学院理学系研究科博士課程進学
2022年 9月 現在に至る

鍵 裕之 会員の略歴

1991年 7月 東京大学大学院理学系研究科研究科博士後期課程中退
1991年 8月 筑波大学物質工学系助手
1996年 2月 同講師
1998年 1月 東京大学理学部講師
2000年11月 同助教授（後に准教授に職名変更）
2010年 4月 東京大学大学院理学系研究科教授
2022年 9月 現在に至る

柿澤 翔 会員の略歴

2014年 3月 愛媛大学スーパーサイエンス特別コース卒業
2016年 3月 愛媛大学大学院理工学研究科博士前期課程修了
2019年 3月 愛媛大学大学院理工学研究科博士後期課程修了
2019年 4月 東京大学理学系研究科附属地殻化学実験施設特別研究員
2020年 4月 広島大学大学院先進理工系科学研究科助教
2022年 1月 高輝度光科学研究センターテニユアトラック研究員
2022年 9月 現在に至る

小松 一生 会員の略歴

2003年 3月 東北大学大学院理学研究科博士課程前期課程修了
2006年 3月 東北大学大学院理学研究科博士課程後期課程修了
2006年 3月 博士（理学）（東北大学）
2006年 4月 日本学術振興会 特別研究員（PD）
2009年 1月 東京大学理学系研究科附属地殻化学実験施設特任講師
2012年 4月 同 准教授
2022年 9月 現在に至る

佐野 亜沙美 会員の略歴

2001年 3月 東北大学理学部地球物質科学科卒業
2003年 3月 東北大学大学院理学研究科博士前期課程修了
2007年 3月 東北大学大学院理学研究科博士後期課程修了
2007年 4月 日本学術振興会特別研究員（東京大学物性研究所）
2009年 4月 日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門研究員
2015年 7月 日本原子力研究開発機構 J-PARCセンター中性子利用セクション 副主任研究員
2022年10月 同上 主任研究員
2022年 9月 現在に至る