

純ニオブ中の水素原子近傍の局所格子ひずみと原子間の化学結合

鈴鹿高専 南部智恵, 大分高専 松本佳久, 名大院工 湯川 宏, 森永正彦

【目的】 Nb-H固溶体およびNbH水素化物の電子状態を計算し, 水素原子近傍の局所的な格子ひずみを調べ, 格子ひずみによる原子間の化学結合状態の変化を明らかにすることを目的とする。

【方法】 Nb-H固溶体(濃度H/M=0.25 ~ 1.0), NbH水素化物の全エネルギー計算を行い, 水素の溶解エンタルピーの濃度依存性を算出した。また, 最適化された構造データに基づいて作成したクラスターモデルを用いてDV-X分子軌道計算を行い, 化学結合状態を調べた。

【結果】 右図に, 構造最適化計算より得られた, 原子間距離の水素濃度依存性を示す。Nb-Nb間では, 水素濃度の変化にしたがって2種類の異なる原子間距離が存在し, それぞれ ○印および ●印で表す。また, Nb-H間の原子間距離を ◆印で表す。H/M=0.25では, Nb-Nb間の原子間距離に大きな差があり, 局所的に格子がひずんでいることがわかる。しかし, H/M=0.75まで水素を固溶すると, Nb-Nb間の原子間距離がほぼ等しくなり, 局所的な格子ひずみがなくなっている。さらに, H/M=1.0まで水素を固溶すると再び局所的な格子ひずみが現れるが, NbHの規則構造では, 格子ひずみが解消されていることがわかる。

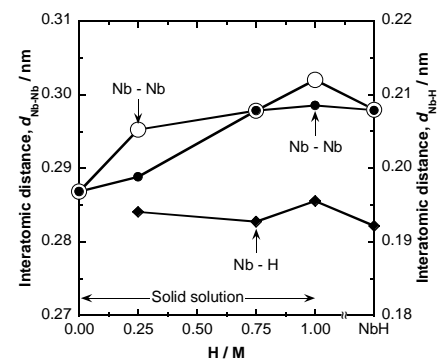


図 Nb-H固溶体およびNbH水素化物中の水素濃度に対する原子間距離の変化