

# Etude par diffraction de neutrons des composés NaMgD<sub>3</sub> et KMgD<sub>3</sub> sous haute pression

Julius Andrew NUNEZ (Department of Physical Sciences and Mathematics, University of the Philippines Manila, Manille, Philippines)

Céline GOUJON (Institut Néel, CNRS, UPR 2940 , Grenoble)

Claire V. COLIN (Institut Néel, CNRS, UPR 2940 , Grenoble)

Laetitia LAVERSENNE (CNRS Institut Néel, Grenoble)

## Abstract

L'exploration des matériaux dans le domaine des hautes pressions est une des voies de recherche de nouveaux composés pour le stockage de l'hydrogène. Nous nous intéressons aux composés à base de magnésium qui cristallisent dans une structure de type pérovskite en raison de leur capacité massique d'hydrogène relativement élevée. Dans ce contexte, nous avons mis en oeuvre des mesures par diffraction des neutrons in situ pour étudier les transformations structurales des composés NaMgD<sub>3</sub> et KMgD<sub>3</sub> dans une cellule du type Paris-Edimbourg. Aucune transformation de phase n'a été observée pour NaMgD<sub>3</sub> ( structure orthorhombique, groupe d'espace Pnma) ni pour KMgD<sub>3</sub> (structure cubique, groupe d'espace Pm-3m) à température ambiante jusqu'à la pression maximale accessible (11 GPa). Cependant nous avons mis en évidence une variation significative des longueurs et angles des octaèdres MgH<sub>6</sub> dans le cas du composé à base de sodium. Les paramètres de mailles ont été déterminés par affinement de Le Bail et utilisés pour la détermination des valeurs des modules de compressibilité et de leur dérivé première selon l'équation d'état de Birch-Murnaghan du troisième ordre. Les valeurs déterminées expérimentalement ( $B_0 = 45,7$  GPa,  $B_0' = 2,8$  pour NaMgD<sub>3</sub>) et ( $B_0 = 38,9$  GPa,  $B_0' = 3,4$  pour KMgD<sub>3</sub>), sont proches des valeurs calculées par des approches numériques.