

C12A7 エレクトライドの高圧力下での挙動 Behavior of C12A7 electrider under high-pressure

阿藤敏行^{1,*}, 吉田利紀², 竹村謙一³

¹東京工業大学応用セラミックス研究所, 〒226-8503 横浜市緑区長津田 4259

²東京工業大学総合理工学研究科, 〒226-8503 横浜市緑区長津田 4259

³放射光科学研究施設, 〒305-0801 つくば市大穂 1-1

Toshiyuki Atou^{1,*}, Kazuki Yoshida² and Kenichi Takemura³

¹MSL, Tokyo Tech., 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama, 226-8503, Japan

²IGSST, Tokyo Tech., 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama, 226-8503, Japan

³Photon Factory, 1-1 Oho, Tsukuba, 305-0801, Japan

1 はじめに

[Ca₁₂Al₁₄O₃₂]²⁺(X)₂ (以下、C12A7)は直径約 0.4 nm の籠状構造を持つ物質である。ケージ内に電子を包接したエレクトライド(C12A7:e)は、電気伝導性を持ち、仕事関数がアルカリ金属並みに低いにも関わらず、室温・空气中で安定という特徴を持つ[1]。

昨年度の PF Activity Report では、C12A7:e の結晶相について、約 6 GPa 以上の圧力領域で異常な圧縮挙動を示し、その挙動は圧力媒体の種類により異なることを報告した。本年度は圧力媒体の種類を増やした実験を行なうとともに、取得した粉末 X 線回折パターンに対して Rietveld 解析を行なうことにより、圧縮挙動の異常の原因について調べたので報告する。

2 実験

ダイヤモンドアンビルセルを用いて C12A7:e 粉末を室温で加圧した。圧力媒体にはフッ素化 FC-72、アルゴンおよびヘリウムを用いて約 12 GPa まで結晶相の回折パターンを測定した。圧力はルビー蛍光法により決定した。高圧力下の粉末 XRD 測定は KEK の BL-18C と NE1A にてイメージングプレートを用いて行った。Rietveld 解析は RIETAN-FP を用いた。

3 結果および考察

図 1 に種々の圧力媒体下で測定された C12A7:e の圧縮曲線を示す。約 6 GPa までは、いずれの圧力媒体においても、ほぼ同様な圧縮挙動を示した。しかしながら、6 GPa 以上では圧縮率が急激に大きくなる様子が観察され、その挙動は圧力媒体の種類により異なることがわかった。低圧域では圧力媒体に関わらず同様な挙動が見られること、さらに圧縮率の異常は圧力媒体によらず、ほぼ同じ圧力から始まることを考慮すると、ケージ構造と圧力媒体の間に相互作用は起きていないと考えられる。

Rietveld 解析により原子位置の精密化をおこなったところ、C12A7:e は 6 GPa を超えるとケージが一方方向に潰れる変化を示すこと、さらに 9 GPa 以上ではケージの空隙がつぶれることが明

らかとなった(図 2)。つまり、9 GPa 以上でケージ構造とは別の高圧相に一次相転移していると解釈することができる。このケージが崩壊した相は不安定であり、約 12 GPa 以上ではアモルファス相へと相転移する。

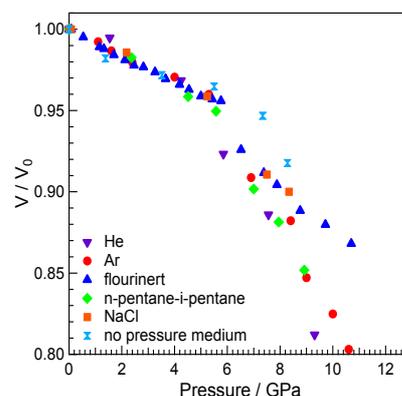


図 1 : C12A7:e の圧縮曲線

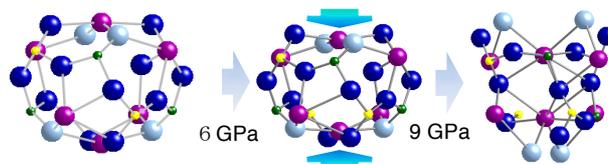


図 2 : ケージの圧力による崩壊

4 まとめ

C12A7:e は約 6 GPa からケージがつぶれ始め、約 9 GPa でケージが崩壊した相に一次相転移することが明らかとなった。

参考文献

- [1] Y.Toda, et al., Adv. Matter. 19, 3564 (2007).
[2] T. Atou, et. al., PF Activity Rep. 2013, #31B, No. 130 (2014).

atou@msl.titech.ac.jp