

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

$[\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{32}]^{2+}(\text{X})_2$ (以下、C12A7)は直径約 0.4 nm のケージを持った籠状構造をとる(図 1a, b)。この物質は結晶格子が正電荷を帯びることが特徴であり、ケージ内に様々な陰イオンを包接することができる。陰イオンの代わりに電子を包接したものがエレクトライドである(C12A7:e)が、電気伝導性を持ち、仕事関数がアルカリ金属並みに低いものにも関わらず、室温・空気中で安定という特徴を持つ[1]。

本研究では、C12A7:eの結晶相について、高圧下での X 線その場観察により圧縮挙動を調べたところ、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が観察されたので、これを報告する。

2 実験

ダイヤモンドアンビルセル(DAC)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ナート FC-72、アルゴンおよびヘリウムを用いて約 10 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。

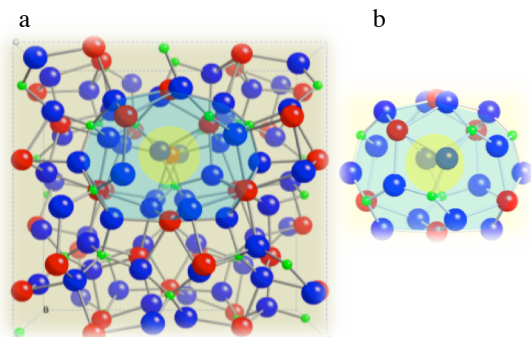


図 1 : C12A7:e の結晶構造
立方晶の単位格子 (a) が 12 個の籠状の構造 (b) から構成されている

3 結果および考察

図 2 に測定された X 線回折パターンより求めた C12A7:e の圧縮曲線を示す。約 6 GPa までは、ど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 以上ではいずれの圧力媒体を使った場合でも、圧縮率が急激に大きくなる様子が観察された。また、その挙動は圧力媒体の種類により異なっている。これらの異常な圧縮挙動の原因として、まず静水圧性の違いが考えられるが、圧力媒体分子と結晶格子間に何らかの相互作用が存在する可能性も否定できない。このような異常な圧縮率の増加は、約 10 GPa 以上で起こるアモルファス化と関連している可能性がある[2]。X 線回折パターンの各回折線の強度比は 10 GPa の領域では常圧と大きく異なっており、格子内の原子位置が大きく変位していることを示している。現在、Rietveld 解析による構造決定を試みている。

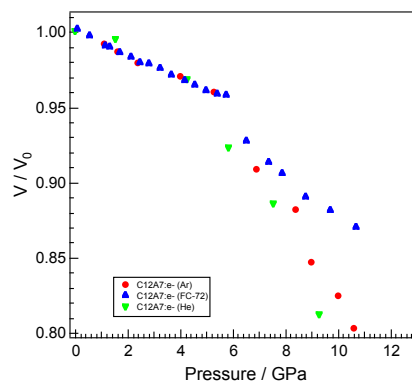


図 2 : C12A7:e の圧縮曲線

4 まとめ

C12A7:e が、約 6 GPa 以上で圧力媒体によって異なる、異常な圧縮挙動を示すことを見出した。

参考文献

- [1] Y.Toda, et al., Adv. Matter. 19, 3564 (2007).
[2] X.Zhang, et al., J.C.P. 135, 094506 (2011).

atou@msl.titech.ac.jp