

TiO₂ の高圧相転移シーケンスと高圧相の状態方程式

浜根大輔, 清水亜沙, 中平律子, 丹羽健, 佐野亜沙美, 岡田卓, 八木健彦
(東大物性研), 亀掛川卓美(物構研)

【はじめに】

TiO₂ には6つの高圧相 (Rutile, α -PbO₂, Baddeleyite, OI, Fluorite, Cotunnite) が知られているが, Fluorite および Cotunnite 間の高圧相関係は不明瞭であり [1,2], 高圧相転移シーケンスが確立していない。また, 各高圧相に対して実験・理論計算により状態方程式が検討されているが, 報告された体積弾性率は極端にばらついており, 整合性に乏しい。そこで, 本研究では, レーザー加熱式ダイヤモンドアンビルセルと放射光 X 線回折実験によって, TiO₂ の高圧相転移シーケンス, および, 高圧相の状態方程式の再検討を行ったのでここに報告する。

【実験】

高圧発生にはダイヤモンドアンビルセルを用い, Rutile 型 TiO₂ と Pt 粉末とを混合したものを出発物質とした。出発物質は NaCl でサンドイッチした状態でレニウムガasket中封入し, 加圧後に PF-13A 付属の YAG レーザーを用いて加熱を行った。放射光 X 線観察は PF-13A で行い, 加圧・加熱後に室温にて X 線回折パターンを測定した。

【結果と考察】

X 線観察は約 10–70 GPa で行い, Rutile \rightarrow α -PbO₂ \rightarrow Baddeleyite \rightarrow OI \rightarrow Cotunnite の高圧相転移シーケンスを確認できた。一方で, Fluorite 相は観察されなかった。この観察事実は, 同じ圧力において, 本研究で観察された Cotunnite 相のほうが報告されている Fluorite 相 [2] よりも体積が小さかったことと調和的である。

サンプルに混合した Pt の X 線回折ピークを用い Uniaxial Stress Component の規模 (St 値) を見積もったところ, レーザー加熱後は準静水圧の水準であった。このような準静水圧下で取得された体積データから各高圧相の状態方程式を再検討したところ, ほぼすべての高圧相で先行研究とはかなり異なった結果となった。特に Cotunnite 相に関して, これまでは体積弾性率が 431 GPa [1] と報告されていたが, 本研究では 294–306 GPa と決定された [3]。

【参考文献】

1. Dubrovinsky et al. (2001) Nature, 410, 653–654.
2. Mattesini et al. (2004), PRB, 70, 212101.
3. Nishio–Hamane et al. (2010 in press), PCM, doi:10.1007/s00269–009–0316–0