

piezochromic material HgI_2 の圧力誘起相転移と結晶構造 Pressure-induced transformations and crystal structures of a piezochromic material HgI_2

中野智志¹、藤久裕司²、山脇浩²、竹谷敏²、後藤義人²、亀卦川卓美³

1 物材機構、2 産総研計測フロンティア、3 KEK-放射光

HgI_2 は複数の圧力誘起相転移を起こし、赤→黄→黒と鮮やかに変色するため、ダイヤモンド・アンビル・セル(DAC)を用いた直接観察のデモンストレーションに使っている。しかし、その高圧相の構造は未だに確定していない。常圧相においても、 HgI_4 層状構造が多様なスタッキングをとり、複数の準安定相が存在する。高圧相においても類似の理由で構造決定を困難にしている可能性がある。本研究は、ヘリウム圧力媒体を用いた高圧粉末X線回折実験により HgI_2 高圧相の良質な回折パターンを取得し、リートベルト解析により構造を明らかにすることを目的とした。試料は市販の粒状 HgI_2 (Aldrich, 5N)をメノー乳鉢で粉砕して用いた。KEK-PF BL-18Cにおいて $E = 20 \text{ keV}$ で測定した。

常圧相(Ⅲ相)は約1.2GPaで黄色のⅥ相、約7.3GPaで黒色のⅦ相となった。Ⅵ相は、一部の回折リングの間に「もや」のような回折が観察され、一次元化するとブロードなパターンとなった。それに対し、Ⅶ相はシャープな回折パターンを示し、これを除圧すると比較的シャープなⅥ相のパターンが得られた。これらの構造解析から、Ⅵ相は $P3_121$ 、Ⅶ相は $P31m$ であることが分かった。

いずれの高圧相もHg-Iは6配位で、常圧相の4配位から増大しているが、層状構造は維持されている。昇圧過程でのⅥ相でのブロードなパターンは、その層のスタッキングが乱れた状態を反映していると考えられる。

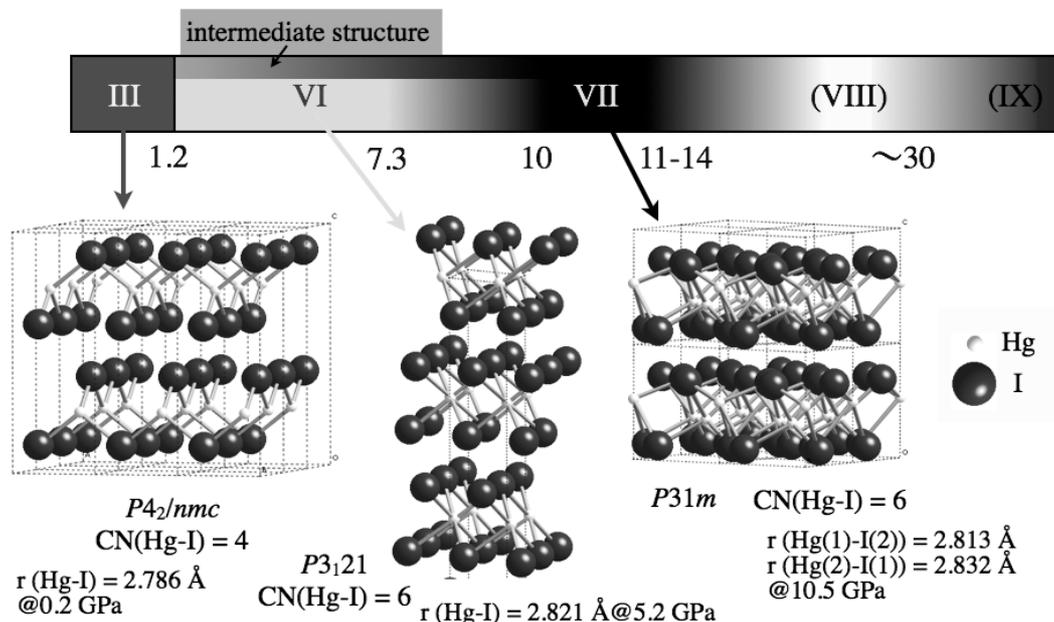


Fig.1 Pressure-induced transformations of HgI_2 and structure of the each phase.