

X線吸収法とX線回折法による液体 AgI での圧力誘起局所構造変化の発見

“*In situ* XAFS and XRD studies of pressure-induced local structural change in liquid AgI”

Hiroshi Arima, Osamu Ohtaka, Takanori Hattori, Yoshinori Katayama, Wataru Utsumi and Akira Yoshiasa,

J. Phys.: Condens. Matter **19**, 076104 (2007)

大型放射光施設 (SPring-8) を用いた高温高压その場X線吸収及び X 線回折実験によって、圧力を変化させたときに起こる液体ヨウ化銀 (AgI) の構造変化をその場観察することに成功し、高压領域での液体 AgI の局所構造を決定した。本研究の成果は J. Phys.: Condens. Matter 誌に掲載され、特に注目すべき論文として「IOP Select」に選ばれた。

近年“液体における多形”の存在が盛んに議論されており、例えば液体リンでは一次相転移が起きていることが Katayama ら [Science 306, 848 (2004)] によって実験的に明らかにされている。AgI は I-VII 化合物に分類され、結晶相では圧力を加えることで共有結合性を持つ構造からイオン結合性の支配的な構造へと相転移する。また高压下において融点極大が存在する。これらの特徴から液体 AgI について液相中での複数の構造の存在が予想されていたが、しかし高压下での液体 AgI の構造については不明であった。

我々は X 線吸収法と X 線回折法による高温高压その場観察実験を行い、1000 K、6 GPa までの温度圧力範囲において液体 AgI の局所構造変化を測定した。その結果、X 線構造因子と XANES パターンの圧力変化より、液体 AgI の局所構造は常圧での zincblende 的な短距離秩序から高压で rocksalt 的な短距離秩序へと変化することがわかった。また第一近接 I-Ag 結合距離は 2 GPa までは加圧とともに増加し、2 GPa 以上では加圧により単調に減少した。これらの結果から 2 GPa 以上では rocksalt 的な短距離秩序が安定な構造であると考えられる。また、液相と結晶相での I-Ag 結合距離を比較した結果、液体 AgI の高压での局所構造は rocksalt 的ではあるが配位数は 6 よりも小さいことがわかった。

液体 AgI における低压構造と高压構造の存在を明らかにした本研究の成果は基礎科学のみならず地球科学的、物質科学的にも有意義なものである。今後、局所構造変化に伴うであろう密度や粘性などの物性変化の測定が期待される。本研究は日本原子力研究開発機構との共同研究である。

(宇宙地球科学専攻 土山研 博士後期課程3年 有馬 寛)