

課題番号 :2014B-E13
 利用課題名 (日本語) :X線吸収法を用いた CuBr 液体の高温高压下での局所構造研究
 Program Title (English) :Local structure of liquid CuBr under pressures studied by XAFS
 利用者名(日本語) :大高理¹⁾, 安廣佑介¹⁾, 有馬寛²⁾, 吉朝朗³⁾, 鳥羽瀬翼³⁾, 齋藤寛之⁴⁾
 Username (English) :O. Ohtaka¹⁾, Y. Yasuhiro¹⁾, H. Arima²⁾, A. Yoshiasa³⁾, T. Tobase³⁾, H. Saito⁴⁾
 所属名(日本語) :1) 大阪大学大学院理学研究科, 2) 東北大学金属材料研究所,
 3) 熊本大学大学院自然科学研究科,
 4) 日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門
 Affiliation (English) :1) Earth and Space Science, Osaka University,
 2) Institute for Materials Research, Tohoku University,
 3) Faculty of Science, Kumamoto University,
 4) SPring-8, JAERI

キーワード : XAFS, high pressure, liquid, local structure, multi-anvil press, CuBr

1. 概要 (Summary)

最近の研究によると、低圧で4配位の局所構造を取り、かつ共有結合性の高い物質では、その液相が圧力誘起の急激な局所構造変化(配位数変化)を示す可能性が高いことが指摘されている。CuBrはこれに当てはまる物質群の一つである。本申請課題では、マルチアンビルプレスを用いて1500K・8GPaまでの高温高压領域で、CuBrの複数の高压相(固相)と液相のXAFS測定を試み、XANES並びにEXAFS解析を行えるX線吸収スペクトルを得た。その結果、液相において5GPa以上の領域でXANESスペクトルに変化が見られた。これは液相の圧力誘起局所構造変化を示すものと考えられる。

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

高温高压発生にはSPring-8のBL14B1に設置された180トンのマルチアンビルプレス(SMAP180)を用いた。加圧は先端6mmのWCアンビル、圧力媒体は9mm角のボロン-エポキシ樹脂、加熱はスリーブ状のグラファイトヒータをそれぞれ使い、試料温度はPt-Rh(R)熱電対で測定した。測定試料には、CuBrのX線吸収を考慮して、CuBr:BN=1:7.4(重量比)の混合物を用いた。ガスフロー型イオンチェンバー2台を高压装置の前後に設置し、Br K吸収端でのX線吸収スペクトルを測定した。

3. 結果と考察(Results and Discussion)

図1に8GPaで昇温した際のXANESスペクトルを示す。800Kと1000Kおよび1200Kと1300Kの間でスペクトルの変化が測定された。事前に行った我々のX線回折実験結果と比較すると、これらは岩塩型→無秩

序岩塩型→融体に対応すると考えられる。図2に異なる圧力・同一温度で測定した液相のXANESスペクトルを示す。低圧側2GPaと高压側(5GPaおよび6GPa)のスペクトルには不連続な違いが見られ、5GPa以上の圧力領域で液相の構造に変化が生じている。関連物質AgIで観測されたような局所構造が4配位から6配位へと変化したことが示唆され、今後のEXAFS解析による詳細な解析により明らかにできる。

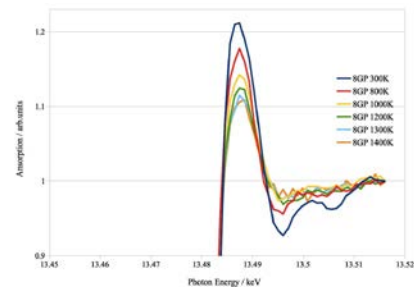


Figure 1 XAFS patterns comparing at 8GPa. Pattern changes with increasing temperature and the melting is detected at 1300K.

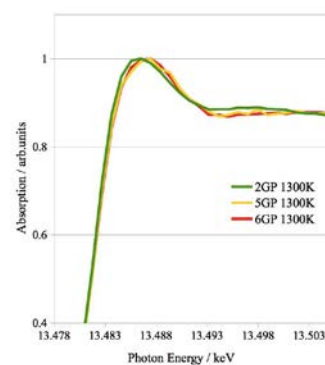


Figure 2 XAFS patterns of liquid phase measured at 1300K and various pressures.

4. その他・特記事項 (Others)

なし