

課題番号 :2015B-E08
 利用課題名（日本語） :X線吸収法を用いた高温高压下での CuBr と AgI 融体の局所構造変化
 Program Title (English) :Local structure of liquid CuBr and AgI under pressures studied by XAFS
 利用者名(日本語) :大高理¹⁾, 安廣佑介¹⁾, 森本仰喜¹⁾, 有馬寛²⁾, 吉朝朗³⁾, 平床竜矢³⁾, 鳥羽瀬翼³⁾, 齋藤寛之⁴⁾
 Username (English) :O. Ohtaka¹⁾, Y. Yasuhiro¹⁾, A. Morimoto¹⁾, H. Arima²⁾, A. Yoshiasa³⁾, T. Hiratoko³⁾, 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 と AgI はこれに当てはまる物質群である。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 と AgI の液相の 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、CuBr では3~5GPa, AgI では0~2GPa の領域でそれぞれ XANES スペクトルに変化が見られ、これらの圧力領域以上で 6 配位的な局所構造をもつ高密度液相が出現しているものと考えられる。

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 と AgI の X 線吸収を考慮して、CuBr:BN=1:7.4、AgI:BN=1:6 (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 と I の 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)

CuBr の液相についての結果と考察を述べる。図 1 に本研究までに XRD および XAFS 測定によって決定した相図を示す。本申請課題では、液相領域での異なる圧力範囲で XAFS 測定を行った。図 2 に温度を 1400K に固定し、圧力を増加させていった際の EXAFS スペクトル解析から得られた Br と第一近接原子 (Cu) 間距離の変化を示す。参考のため、4 配位構造および 6 配位構造 (高压相) の CuBr 固相の第一近接原子間距離の圧力変化 (室温での値) を黄色と青色でそれぞれ示す。加圧に伴い原子間距離が徐々に増加することから、4 配位的な局所構造からより高い配位数 (6 配位) 成分が徐々に導入されていると考えられる。約 5GPa 以上では原子間距離が減少することから、6 配位への変化がこの圧力で終了し、6 配位的な局所構造をもつ液体が単調に圧縮されていくと考えられる。AgI でも同様の結果が得られた。

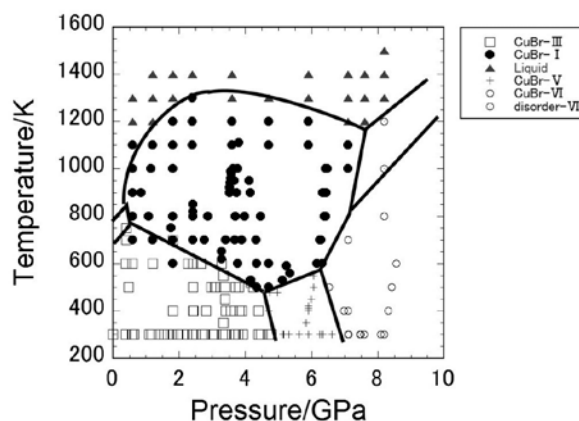


Figure 1 *P-T* phase diagram of CuBr determined by our XRD and XAFS studies.

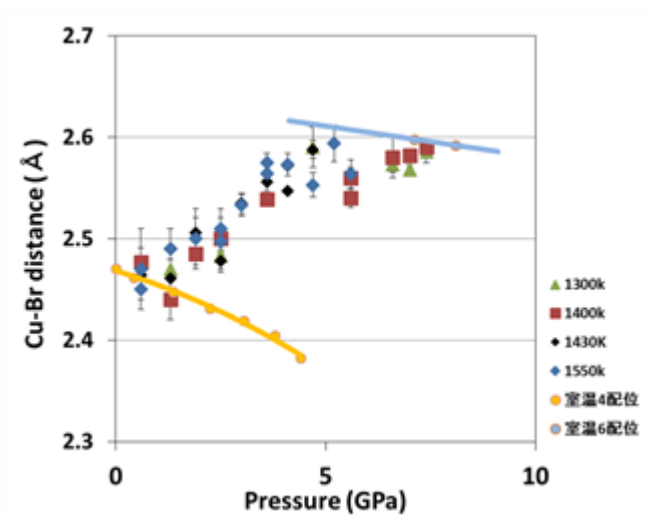


Figure 2 Pressure variation of the first-neighbor bond length in liquid CuBr at various temperatures. For comparison, the values of low pressure phases (4 fold coordination) and high pressure phases (6 fold coordination) at room temperature are also shown.

4. その他・特記事項 (Others)

なし