

強い重力場を用いた反ポーリング則構造を持つ TiO_2 の合成Synthesis of anti-Pauling structure Rutile (TiO_2) produced under strong gravitational field熊大¹、東工大²、東北大³、産総研⁴ ○真下 茂¹、Rabaya Bagum¹、緒方裕大¹、奥部真樹²、杉山和正³、杵鞭義明⁴、磯部 博志¹、吉朝 朗¹Kumamoto Univ.¹, Tokyo Inst. Tech.², Tohoku Univ.³, AIST⁴ ○Tsutomu Mashimo¹, Rabaya Bagum¹, Yudai, Ogata¹, Maki Okube², K. Sugiyama³, Hiroshi Isobe,¹ Akira Yoshiasa¹

E-mail: mashimo@gpo.kumamoto-u.ac.jp

1. はじめに

ルチル $\text{TiO}_2(\text{D}_{\text{h}}^{14})$ は本質的に 8 面体 TiO_6 のグループの歪みにより、8 面体の 2 つの稜を共有した構造であり、Ti イオンは c-軸が圧縮された正方格子を形成する。強い重力場 ($\sim 10^6\text{G}$) 下ではボデーフォースによって、重い原子は重力方向に、軽い原子は重力方向とは反対方向に変位する。そのような条件下では、高压や高温下では得られない特異な結晶歪、さらには非平衡な結晶状態が現れ、準安定相としてクエンチされることが期待される。我々は、強い重力場によって単結晶ルチルの結晶構造さらに物性を変化させることを狙って実験を行った。

2. 実験方法

重力実験は熊大の高温超遠心機を用いた。3.5x3.5 mm、厚さ 1 mm の単結晶板試料を SUS304 カプセル中にサファイア板上に c-軸を重力方向にセットする。回転数は 100,000rpm で、試料に最大 $(0.39\text{--}0.40) \times 10^6\text{G}$ の重力が発生する。高周波加熱によってロータを 400℃まで加熱させる。単結晶 X 線回折測定は、筑波光子ファクトリーで単色シンクロトロン X 線を用いた BL-10A ビームラインでの 4 軸回折計により測定した。

3. 結果と考察

X 線回折による c/a 比率を圧力[2]および温度[3]を変化させた場合と比較したグラフを Fig. 1(a) に示した。c/a 軸比率は圧力の増加と共に増加するが、重力サンプルにおいて、格子定数 c は減少 (0.3%)、格子定数 a は増加 (0.05%) となり、異方性が増す結果となった。Fig. 1(b) はルチル相における距離 Ti-Oa と Ti-Ob の比率を示し、圧力[4]および温度[3]とを比較したものである。実験後、Ti-Oa 距離は a-軸に沿って増加 (0.7%) し、Ti-Ob 距離は c-軸に沿って減少 (0.9%) し、これらの二つの原子間距離の比率は増加し、1 に近づいている (0.997)。また、Oa-Ob は 2.613 Å (標準ルチルより 3.2%拡大)、Oa-Oa は 2.7728 Å (標準ルチルより 0.16%縮小) であった。その結果、Oa-Ob/Oa-Oa 比も 1 に近い値となり、より等方的な状態となっている。これはポーリングの法則に反する結果である。

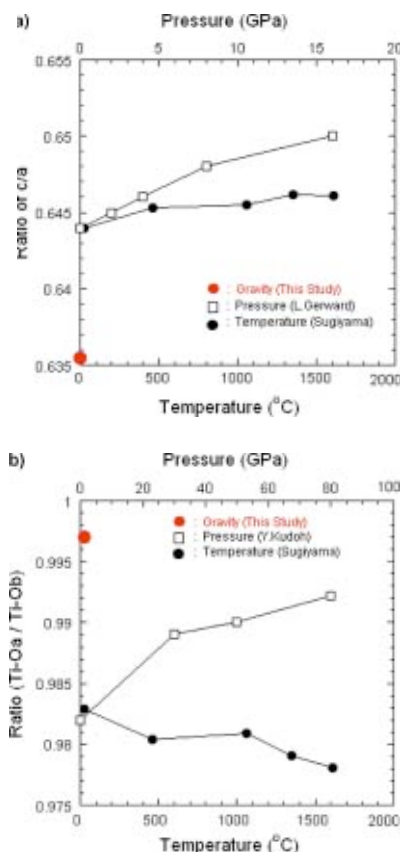


Fig. 1. The c/a (a) and Ti-Oa / Ti-Ob (b) ratios for rutile of the gravity sample as compared with pressure [2] and temperature dependences [4].

強調したいことは、強い重力場では原子に直接作用するボデーフォースが生じるので、高压や高温処理とは異なる非平衡な効果を結晶に与え、今まで不可能であった新規物質の合成が期待される。

参考文献

- [1] T. Mashimo *et al.*, *Rev. Sci. Instr.* **74**, 160 (2003).
- [2] L. Gerward, J. Staunolsen, *J. Appl. Cryst.*, **30**, 259 (1997).
- [3] K. Sugiyama, Y. Takeuchi, *Zeitschrift Fur Kristallographie*, **194**, 305, (1991).
- [4] Y. Kudoh, H. Takeda, *Physica B*. **139-140**, 333, (1986)