

高圧 EXAFS による金の非調和有効 2 体間ポテンシャル

Anharmonic effective pair potentials of gold under high-pressure and high-temperature

奥部 真樹[1], 吉朝 朗[1], 大高 理[1], 福井 宏之[1], 内海 渉[2], 片山 芳則[3]

Maki Okube[1], Akira Yoshiasa[1], Osamu Ohtaka[2], Hiroshi Fukui[2], wataru uthumi[3], yoshinori katayama[3]

[1] 阪大・理・宇宙地球, [2] 原研, [3] 原研・SPring-8

[1] Earth and Space Sci., Osaka Univ., [2] Earth and Space Science, Osaka Univ, [3] JAERI

本研究では、高圧実験の圧指標として広く用いられる金の非調和性の効果を検討することを目的とし、金の EXAFS 測定を高圧・高温その場観察によって行い、高圧下における EXAFS Debye-Waller factor の温度変化から、有効 2 体間ポテンシャルを決定した。高圧のデータから、各圧力における金の非調和有効 2 体間ポテンシャルを決定し、非調和性の変化を比較することが出来た。これらの結果から熱膨張率も算出し、Anderson et al (1988) 結果の妥当性を検討した。その結果、Anderson et al では非調和性の見積もりが小さいという結果が得られた。

金は高圧実験の圧指標として広く使われている物質である。この金の圧指標としての妥当性については、高温高圧条件かでは合わないのではないかとすることが地球科学を含めて高圧科学では問題になっている。高温高圧下では熱膨張の非調和の効果を考慮することが非常に重要であるが、過去の文献では非調和性の検討が十分でない可能性がある。EXAFS は非調和性を定量的に求めることが出来ることから、本研究では、高圧実験の圧指標として広く用いられる金の非調和性の効果を検討することを目的とし、金の EXAFS 測定を高圧・高温その場観察によって行い、高圧下における EXAFS Debye-Waller factor の温度変化から、各圧力下での金の非調和有効 2 体間ポテンシャルを決定した。非調和有効 2 体間ポテンシャルは EXAFS Debye-Waller factor から知ることができ、熱的特性について重要な情報が得られる。

実験は SPing-8 の BL01B1 と BL14B1 にて行った。サンプルは金箔を用い、厚さはそれぞれ 4 μm とした。L3 端において常圧 ~ 14GPa、300~1000K の温度領域で EXAFS 測定を行った。圧力発生装置としては BL01B1 にて Large-Volume 1 軸圧縮プレス (Paris-Edinburgh Press) を、BL14B1 にてマルチアンビルプレス (SMAP) を用いた。

得られた EXAFS をキュムラント法により解析し、非調和 2 体間ポテンシャル $V(u)=a/2! \cdot u^2 + b/3! \cdot u^3$ (u : 平衡位置からの変位) が決定できた。得られた EXAFS パラメータから各温度圧力下における熱膨張率を算出し、Anderson et al (1988) 結果の妥当性を検討した。その結果、Anderson et al では非調和性の見積もりが小さいという傾向が得られた。