K038-P001 **時間：5 月 28 日　17:15-18:45**

六方晶ダイア(lonsdaleite)の精密構造と安定性

Detailed structure and stability of hexagonal diamond (lonsdaleite)

吉朝　朗[1]，大高　理[1]，桂　智男[2]
Akira Yoshiasa[1], Osamu Ohtaka[2], Tomoo Katsura[3]

[1] 阪大・理・宇宙地球，[2] 岡大・固地研
[1] Earth and Space Sci., Osaka Univ., [2] Earth and Space Science, Osaka Univ, [3] ISEI, Okayama Univ.

六方晶ダイア(lonsdaleite)は、隕石中で発見されているが、安定相なのか準安定相なのか、単相の合成が可能であるのかなど、分かっていないことが多い。六方晶ダイアの合成、構造の精密化を行い、安定性、転移のメカニズムについて詳細に検討したので報告する。

試料は岡山大学固体地球研究センターの 6-8 式マルチアンビルプレスを用いて 20GPa、800～2000℃の高圧高温下で合成した。出発物質には、結晶性の異なる数種の石墨などを用いた。粉末Ｘ線回折実験を行い、Rietveld 法により六方晶ダイアの結晶構造パラメーターを精密化した。

合成試料には全て六方晶ダイアが含まれるが、立方晶ダイアとダイアの構造中に取り込まれた石墨が必ず共存し、単相としては合成されない。母結晶としての石墨との間に明瞭な方位関係が存在し、構造解析には優先配勾の補正が必要である。結晶化学的な考察また計算によるシュミレーションの結果から判断して、六方晶ダイアは立方晶ダイアに比較して全領域で不安定であると思われる。六方晶ダイアは、石墨の存在下で非平衡状態で生じる。常温常圧下にクエンチされるには 13GPa 以上の圧力が必要で、800～1600℃では六方晶ダイアと立方晶ダイアは 1:1 の比率で現れ、1600℃以上では立方晶ダイアの量が増大する。800℃以下では六方晶ダイアはクエンチされない。六方晶ダイアの結晶構造は、球の最密充填から想定される理想値構造から大きくはずれ、sp３の脱混成が有意に生じている。結合の異方性が顕著に現れ、物理的性質は、六方晶ダイアと立方晶ダイアは異なる。隕石にみられる六方晶ダイアについても議論する。結果の詳細は、Yoshiasa et al. (2003) Jpn. J. Appl. Phys.を参照。