

XAFS 法による CaGeO_3 ペロブスカイト、ガーネット、ウォラストナイトによる Ca-O 有効二体間ペアポテンシャル

Effective pair potential for Ca-O bonds in CaGeO_3 perovskite, garnet, wollastonite

小金丸 藍^{1*}, 吉朝 朗¹, 有馬 寛², 仲谷 友孝¹, 王 玲¹, 奥部 真樹³, 中塚 晃彦⁴, 大高 理⁵, 杉山 和正²

Ai koganebaru^{1*}, Akira Yoshiasa¹, Hiroshi Arima², Tomotaka Nakatani¹, Rin Wan¹, Maki Okube³, Akihiko Nakatsuka⁴, Osamu Ohtaka⁵, Kazumasa Sugiyama²

¹ 熊本大学, ² 東北大学, ³ 東工大応セラ研, ⁴ 山口大学, ⁵ 大阪大学

¹Kumamoto University, ²Tohoku University, ³Materials and Structures Lab. Tokyo Institute Technology, ⁴Yamaguti University,

⁵Osaka University

ガーネットからペロブスカイトへの構造相転移は、地球内部の特性を理解する上で大変重要であり、これまで多くの研究が行われてきた。ペロブスカイトとガーネットタイプの CaGeO_3 は、地球のマントルの構造アナログ物質である為、地球内部の特徴を調べるのにとても役に立つ。 CaGeO_3 ペロブスカイトとガーネットは、キュービックアンビル型高圧装置で合成した。Ca 原子と Ge 原子の K 吸収端の XAFS スペクトルは、700K までの温度で透過法により測定した。 CaGeO_3 の Ca-O 結合の有効二体間ペアポテンシャル $V(u) = -\frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{3}$ は温度依存性デバイワラー因子を用いて調査を行った。Ca-O 結合のポテンシャル係数は、ガーネット ($6.0\text{eV}/\text{\AA}^2$)・ウォラストナイト ($6.4\text{eV}/\text{\AA}^2$) タイプの CaGeO_3 と比較すると、ペロブスカイトタイプの CaGeO_3 は $4.4\text{eV}/\text{\AA}^2$ と小さい。ペロブスカイトにおける Ca-O 結合のポテンシャルが CaGeO_3 他の多形よりも広いのは、ペロブスカイト-ガーネットの相平衡境界の Clausius-Clapeyron カーブが負の勾配を持っている事が原因である。ペロブスカイトの Ca-O 結合のポテンシャル係数については、距離が大きいと通常は小さくなるのだが、フレームワーク振動のせいで長い距離をもつ Ge-Ge 距離のポテンシャル係数よりもかなり小さくなっている。