



超高压合成における高配位構造の探索と凍結性に関する研究

遊佐 斉

国立研究開発法人物質・材料研究機構

キーワード：超高压，高配位構造，ホウ化物

1. 背景と研究目的

ホウ化物は、ホウ素量の様々な変化により、多彩な構造を形成することが知られる。今まで、我々は、常圧下では合成が困難であった RB_{12} に焦点をあて、軽希土類 12 ホウ化物 (PrB_{12} , CeB_{12}) について、高压下レーザー加熱合成法により合成に成功し、 RB_{12} 構造の堅牢性について、構造中に同じ配位数（24 配位）を持つ RB_6 構造と体積弾性率 (B_0) を比較することにより、構造—圧縮特性の相関について議論をおこなってきた[1]。今回、 RB_{12} 、 RB_6 と異なる高配位構造（18 配位、double-bicapped heptagonal prism）を有する RB_4 (DyB_4) について着目し、構造-圧縮特性相関について、さらなる追究をおこなった。

2. 実験内容

測定に利用した試料 (DyB_4) は、酸化物とホウ素を粉碎混合し CIP 成型後、真空石英管中で高周波誘導加熱により合成されたものを粉碎したものである。圧力マーカーの金粉末と混合し、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) 中にメタノール、エタノール混合媒体とともに封入し、BL2S1 において単色 X 線回折実験 (17.14 keV) をおこなった。検出器は PILATUS 1M を用いて約 100 mm のカメラ長で測定した。測定は 8 GPa までの準静水圧下でおこなった。2 次元回折パターンを積分により 1 次元化し、ソフトウェア PDIndexer によるピークフィッティングをおこない、格子定数の精密化をおこなった。なお、圧力は金の格子定数により決定した。

3. 結果および考察

Fig. 1 に測定された DyB_4 の圧力-体積データとバーチマーナガン状態方程式にフィットすることで決定された圧縮曲線を示す。その結果、体積弾性率は 176(1) GPa となり、 $B_0=165\sim168$ GPa を示す RB_6 に比べ、有意に大きな値を示すことが明らかとなった。これは、 RB_4 の配位構造が、 RB_6 に比べ密であること(平均 R-B 距離 7%減)に起因すると考えられる。

4. 参考文献

[1] H. Yusa, et al, *Inorg. Chem.* 61, 2568 (2022).

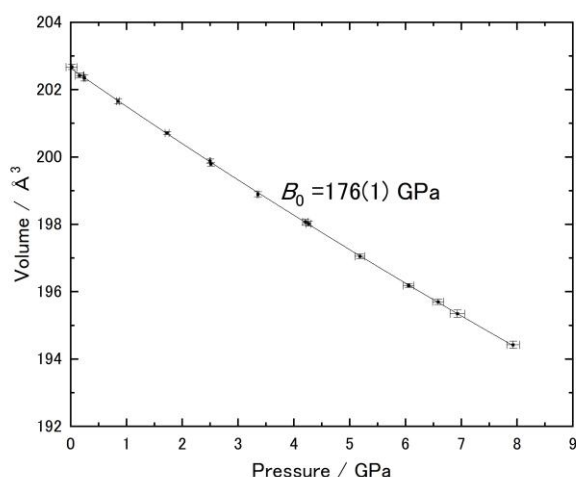


Fig.1 DyB_4 の圧力-体積データと圧縮曲線