

高圧力下における結晶構造予測

理研、飯高敏晃

<http://www.iitaka.org>

物質は与えられた温度と圧力のもとでその自由エネルギーを最小にするような構造をとる。たとえば、1気圧のもとで水を冷やすと0℃で氷になり熱すると100℃で水蒸気なる。そして構造の変化は物質の物理的・化学的性質を大きく変化させる。温度を制御する実験は古くから行われてきたが、近年の高圧実験技術の進歩により圧力を制御する実験も広く行われるようになってきた。たとえば、雪の結晶からも分るように氷は常圧で六方晶であるが、室温のもとで水を数GPaまで加圧すると氷VII相という立方晶の氷ができる。このような高圧相の氷は常温常圧に戻すとまた元の水に戻ってしまうが、物質によっては高圧相の構造をそのまま準安定構造として常温常圧に回収して利用することができる。その典型が地球内部の高温高圧で生成されるダイヤモンドである。ダイヤモンドは黒鉛(グラファイト)、フラーレン(C₆₀)、カーボンナノチューブ(CNT)などと共に炭素の同素体である。常温常圧ではダイヤモンドは準安定状態であるが、エネルギー障壁が非常に大きいため最安定状態であるグラファイトには転移しない。古来、天然ダイヤモンドの輝きは人々の心を虜にしてきたが、現代では人工ダイヤモンドが最も硬い物質として工業的に重用されている[1]。マントル構成物質MgSiO₃は地球最深部の高圧下でペロブスカイト構造からポストペロブスカイト構造に相転移する[2]が、常温常圧に回収できない。MgSiO₃と同様にポストペロブスカイト構造をもつCaIrO₃の高圧相は常温常圧に回収でき、その新奇な物性が詳細に研究できるようになった[3]。このような高圧合成法を利用した材料開発はいま急速に発展しつつある。どのような圧力でどのような結晶構造が安定になるのかを予測できれば、石墨をダイヤに変えるような材料開発[1]が飛躍的に加速されることが期待される。そこで本講演では、第一原理電子状態計算による高圧下における結晶構造予測の試みについてお話ししたい。



graphite



diamond

【参考文献】

- [1] T. Irifune, A. Kurio, S. Sakamoto, T. Inoue, H. Sumiya, *Nature* **421**, 599 (2003).
- [2] M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata, Y. Ohishi, *Science* **304**, 855 (2004);
T. Iitaka, K. Hirose, K. Kawamura, M. Murakami, *Nature* **430**, 442 (2004).
- [3] N. Miyajima, K. Ohgushi, M. Ichihara, T. Yagi, *Geophys. Res. Lett.* **33**, L12302 (2006);
K. Ohgushi, H. Gotou, T. Yagi, Y. Kikuchi, F. Sakai, Y. Ueda, *Phys. Rev. B* **74**, 241104 (2006).
H. Kojitani, A. Furukawa, M. Akaogi, *American Mineralogist* **92**, 229 (2007).