

# 20aXA-10 シリコンクラスレートの高圧相転移

理研中央研 飯高敏晃

Phase transition of silicon clathrate at high pressure

RIKEN Toshiaki IITAKA

Ba 原子を封入したシリコンクラスレート  $Ba_8Si_{46}$  は、次世代エネルギー資源として注目されているメタンハイドレート  $(CH_4)_8(H_2O)_{46}$  と相似な結晶構造を持ち、Si 原子で構成された多面体の籠状クラスターの内部に Ba 原子が封入されている[1]。この物質は高温高圧下で  $BaSi_2$  と Si を原料として合成され[2]、封入された Ba 原子が籠内ですらと振動 (rattling) することが特徴的である。この物質が持つ小さな格子熱伝導率や超伝導発現に rattling が果たす役割を解明しようと、高圧下での振動状態や電子状態の実験的理論的研究が急速に進みつつある[1]。

なかでもとくに興味深い発見は、ラマン散乱と X 線回折により約 15GPa で観測されている”homothetic isostructural transition”[1,3]である。この相転移がどのようなものであるのか、どのようにして起きるのか、ほとんど理解されていない。そこで本講演では  $Ba_8Si_{46}$  および関連物質の結晶構造と振動状態の第一原理計算を行うことにより、シリコンクラスレートの高圧相転移とその光学的測定について理解を深める。

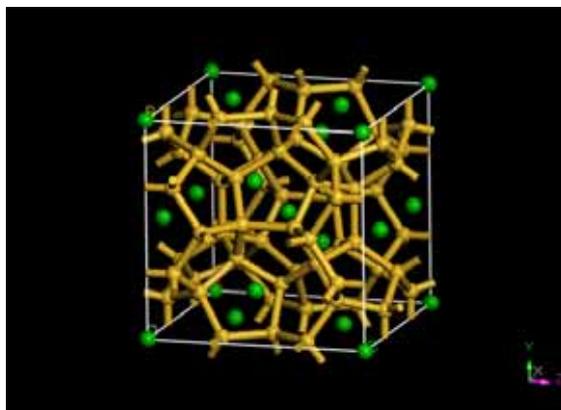
[1] 清水宏晏、久米徹二、日本物理学会誌、第 60 巻 7 号 543 頁(2005).

T.Kume et al., Phys. Rev. Lett. 90, 155503(2003).

[2] S.Yamanaka et al., Inorg. Chem. 39, 56 (2000).

[3] A. San Miguel et al., Europhys. Lett. 69, 556 (2005).

[4] <http://www.iitaka.org/>



$Ba_8Si_{46}$