

Fe 高压相の X 線吸収分光測定と次世代放射光光源への期待

石松直樹

広大院理

X 線吸収分光法(XAFS)は試料の電子状態と局所構造の情報を含むため物質科学に有用な手法である。高压下の XAFS 測定では微小な試料、ダイヤモンドアンビルからの強い X 線吸収およびグリッチの発生が測定の困難となっていたが、近年、高輝度のアンジュレーター光源の使用、perforated アンビル[1]、ナノ多結晶ダイヤモンド(NPD)アンビル[2]の使用といった対策が施され、高压下測定が精力的に行われている。今後は、超高温高压下などの多重極端条件の測定、XRD+XAFS といった複合測定、高エネルギー X 線($E > 20$ keV)の利用、イメージング XAFS といったの実験技術が発展すると考えられる。本講演では次世代放射光光源が高压下 XAFS 測定にとっても有用な光源となることを期待し、最近の成果として Fe の圧力誘起構造相転移の EXAFS 解析[3]を紹介する。

室温常圧で bcc 構造(α 相)の Fe は、約 14 GPa の圧力下でマルテンサイト変態により hcp 構造(ϵ 相)の高压相に構造相転移する。マルテンサイト変態のトリガーについてはこれまで多くの議論があるが結論には至っていない。

我々は NPD アンビルを利用した広域 XAFS(EXAFS)測定によって Fe 周りの局所構造について精密解析を行い、マルテンサイト変態の shear と shuffle と呼ばれる 2 つの変形が加圧に対してどのように進行するかを決定した[3]。その結果、shear 変形がほぼ完了した状態で ϵ 相が現れ、加圧で ϵ 相の存在比率が増加するのに伴って shuffle が段階的に進行することが分かった。この結果は、剪断応力がトリガーとなって shear 変形を誘起し転移が始まることを示唆する。また、 ϵ 相の比率に依存した shuffle の段階的な進展は、主に α - ϵ 界面の強い構造歪に由来すると考えられる。界面の構造歪の検出は、長周期構造の有無に関係なく局所構造解析ができる EXAFS の特長といえる。最近、我々は α -Fe 単結晶を 111 方向に一軸加圧し、そこから発生する ϵ 相の方位を解析している。EXAFS と同様に XRD でも、剪断応力をトリガーとしたモデルを支持する結果を得ている。

[1] A. Dadashev *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **72**, 2633 (2001).

[2] N. Ishimatsu *et al.*, J. Synchrotron Rad. **19**, 768 (2012).

[3] N. Ishimatsu *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 014422 (2014).