



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 齊

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，Cr ドープ，酸化ガリウム，コランダム

1. 背景と研究目的

13 族セスキ酸化物である酸化ガリウム (Ga_2O_3) は、近年、パワー半導体材料として注目を集めているが、主として β 相（単斜晶）の研究が多い。一方、コランダム構造である α 相（六方晶）は高压相として知られ、計算による β 相との安定性を比較する限り、常圧でのエンタルピー差は非常に小さいため、常圧下での準安定性が高いことから様々な応用が期待できる[1]。本研究では、高温高压下で合成した良質結晶について、蛍光スペクトルの圧力依存性を金の高压下の格子定数との対比によりおこなった。さらに、高温下での準安定性の検討を加えた結果について報告する[2]。

2. 実験内容

測定に利用した試料（コランダム型 $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ ）は、NIMS のベルト型高压装置（NIMS:FB30H）を用いて、固相反応法により合成した。合成条件は、7.7 GPa, 1200 °C であり、1 時間の保持後、急冷減圧により試料を取り出した。EPMA による分析の結果、結晶中の Cr 濃度は 1.0 mol % 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）をおこない、金の格子定数を求めた。検出器は PILATUS 1M を用いて約 100mm のカメラ長で測定した。測定は 10.2 GPa までの準静水圧下でおこなった。蛍光測定は、BL2S1 付設の分光器を用いて 405 nm 励起レーザーを用いて実施した。高温での構造安定性については、200°C から 800°C での温度で 1 時間電気炉中で加熱した試料について、BL2S1 において室温での X 線回折により追跡した。

3. 結果および考察

測定された金の格子定数から決定された圧力と、 $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ の蛍光ピーク波長（ R_1 線）の関係をプロットしたものを Fig. 1 に示す。金の圧力スケールは Tsuchiya et al. (2010) を参照した [3]。直線回帰による、蛍光波長から決定した圧力スケールは $P=(\lambda - \lambda_0) / 0.309(4)$ となり、ルビー蛍光による圧力スケール [4] と比較して求めた圧力スケール [2] $P=(\lambda - \lambda_0) / 0.314(2)$ とほぼ一致することが確認された。また、常圧で 500 °C 程度まで構造が不変であることから、 Ga_2O_3 コランダム構造の高い準安定性が示されているといえる。

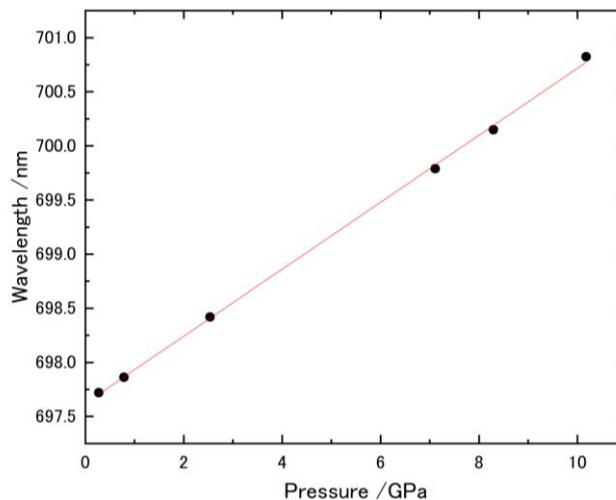


Fig. 1 コランダム型 $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$, R_1 線波長の圧力依存性

4. 参考文献

1. H. Yusa, T. Tsuchiya, N. Sata and Y. Ohishi, *Phys. Rev. B*, **77**, 064107 (2008)
2. H. Yusa and M. Miyakawa, *Inorg. Chem.*, **63**, 2695 (2024)
3. T. Tsuchiya, *J. Geophys. Res.*, **108**, 2462 (2003)
4. H. K.Mao, J. Xu, P. M.. Bell, *J. Geophys. Res.*, **91** 4673 (1986)