

令和 4 年 10 月 20 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H02005

研究課題名(和文) 巨大歪み下におけるマントル鉱物構造相転移の新描像

研究課題名(英文) New approach for phase transformation of mantle minerals under high pressure and heavy strain

研究代表者

遊佐 斉 (YUSA, Hitoshi)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・グループリーダー

研究者番号：10343865

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,400,000円

研究成果の概要(和文)：等方的でない圧力場による相転移圧力への影響について精査するため、ダイヤモンドアンビルセルを用いての高精度加圧制御と放射光X線その場観察による超高圧下で歪み発生のための装置を開発・構築した。さらに、理論的アプローチとして、「せん断応力緩和理論」を構築し、選択的応力場を考慮した第一原理計算による相転移圧力への影響を検討した。マントル鉱物アナログ物質として、いくつかのフッ化物(MgF<sub>2</sub>, BaF<sub>2</sub>, NaMgF<sub>3</sub>, NaNiF<sub>3</sub>)における変移型相転移について、歪み・差応力により相転移圧力が大幅に低減することが確認された。これは、配位多面体フレームワークに差応力が効果的に作用することを示している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により開発された、制御性に優れた高圧下歪み・差応力付与装置の開発により、高圧下での構造相転移に対する歪み・差応力の影響が明らかになった。おそらく、構造相転移は計算科学においても、取り扱いの簡便な等方的な圧力のみならず差応力の存在下で追究されるべきと考えられる。地球内部で起こる鉱物の相転移現象の解明につながるだけでなく、必然的に固体圧力を「場」に使用せざるを得ない様々な超高圧構造物性の解明のために大きな布石となったと考えられる。

研究成果の概要(英文)：To examine the effect on the transition pressure under non isotropic pressure fields, we developed a high-pressure apparatus equipped with high-precision controlled system using a piezo actuator device and a DAC rotating system with a high torque pulse mortar. The apparatus performed in-situ x-ray diffraction experiments in a synchrotron radiation facility. Based on the ab initio calculation, a theoretical approach, “theory of shear stress relaxation associated with phase transitions” was also constructed to verify the transition pressure under anisotropic stress. We confirmed a considerable transition pressure reduction in the several compounds, e.g., MgF<sub>2</sub>, BaF<sub>2</sub>, NaMgF<sub>3</sub>, and NaNiF<sub>3</sub>, under the anisotropic stress. The pressure reduction implies that the anisotropic stress definitely affects the rearrangements of high-coordination polyhedral framework in the high-pressure crystal structures.

研究分野：超高圧物質科学

キーワード：ダイヤモンドアンビルセル 構造相転移 歪み・差応力 高圧化その場観察

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

固体地球における物質科学研究は、地球内部が高圧であるという事実から、主に高圧実験によって検証がおこなわれている。その多くの場合、等方的な圧力場を仮定のもと実験が進められている。しかしながら、地球内部の沈み込むスラブ等におけるダイナミクスを考慮した場合、差応力や大きな歪みを取り入れるべきことは必然といえる。また、近年、材料物性分野では、物性・構造・相転移に及ぼす巨大歪みによる影響が注目を集めている。本研究では、マントル関連鉱物の結晶構造への巨大歪みがおよぼす影響を明らかにするために、放射光 X 線その場観察と巨大歪み発生・制御技術の開発、計算科学による巨大歪み下での構造予測を融合した研究に取り組むことが重要であると考えた。

### 2. 研究の目的

第一の目的は、静水圧での相転移と歪・差応力を与えた場合の違いにより、相転移圧力に差が生じるか否かについて追究することである。地球内部で想定される相転移は、その主要組成であるケイ酸塩鉱物であり、最も主要な鉱物組成によれば、 $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  (olivine)  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  (wadsleyite)  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  (ringwoodite) および  $\text{MgSiO}_3$  (bridgemanite)  $\text{MgSiO}_3$  (post perovskite) における相転移が想定される。そこでは、相転移機構として、前者においては再構成型の相転移が、後者においては変移型の相転移様式が提案されている。そこにおいては、第一原理計算において、ある種の歪みを与えた場合に、頂点共有の  $\text{SiO}_6$  八面体フレームワーク ( $\text{AX}_6$ ) が面共有構造に変移することで相転移が促進されることが提起されている (Tsuchiya et al., EPSL, 224, 241-248 [2004])。ケイ酸塩酸化物では、カイネティクス的に室温で相転移を進行させることは困難なので、このような相転移様式を検討するために、フッ化物アナログ物質を対象に選び、高圧下で歪みを与えながら、放射光を用いたその場観察による方法を検討した。

高圧下で歪・差応力を与えることで、新規物質合成や物性変化の報告が相次いでいるという背景もある (Razavi-Khosroshahi et al, J. Mat. Chem. A, 38, 20298 [2017], Edalati et al, Mat. Res. Lett. 3, 216 [2015])。しかしながら、これらの研究は、現状ではその場観察することはなく、有限要素法や回収試料から歪み等を評価している部分が多い。今後、この種の研究を精査していく波及効果のためにも、超高圧下での高精度加圧・その場観察システムの構築が必要と考えた。また、鉱物の弾性的性質を決定する基本的な物性量である体積弾性率についても、本システムの利用により高精度測定が可能になると考えられた。

### 3. 研究の方法

#### (1) 高精度ピエゾアクチュエータ加圧 DAC および高圧下歪・差応力付与装置の開発

高圧発生手段として、高い圧力を容易に発生させることができるダイヤモンドアンビルセル (DAC) を選択した。DAC の加圧は依然として多くの場合、バネの力を使った手動によるねじ込み操作によりをおこなわれおり、X 線回折で結晶構造に関するデータの収集をおこなう際、都度加圧と位置調整を必要とするため、データの稠密性が失われる原因となっている。差応力下での相転移圧力の差異は小さいことも予測され、かつ構造変化を確認しながら連続的に検出する必要がある。よって、DAC 加圧の新たな試みとして、ピエゾアクチュエータを用いた加圧方法の開発に挑戦した。図 1 左に加圧原理の図示す。

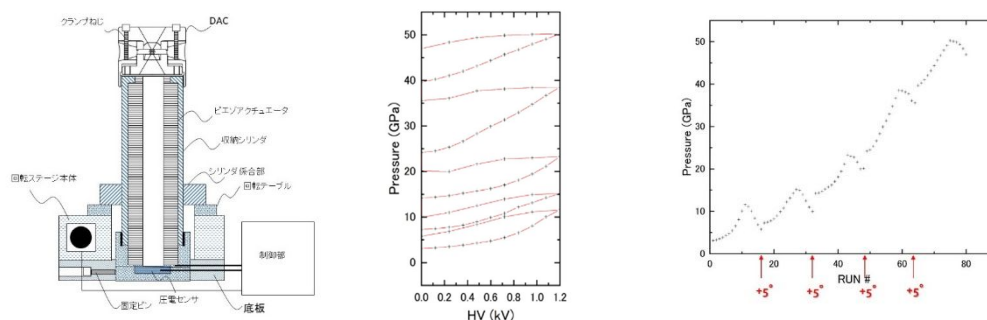


図 1 ピエゾアクチュエータ加圧原理図 (左) と DAC 加圧曲線 (中) と圧力ステップ (右)

ピエゾアクチュエータの最大ストロークは  $80\ \mu\text{m}$  のため、DAC 下部やアクチュエータ収納シリンダ部の弾性変形で吸収される部分を考慮する必要があった。そのため、収納シリンダの伸縮するための機構を設けた。先端  $300\ \mu\text{m}$  のダイヤモンドアンビルを用いて NaCl を加圧した加圧曲線を図 1 中、右) に示す。圧力はダイヤモンドのラマングナルから決定し、アンプによるピエゾ供給電位 1200V までの加減圧繰り返しを、数回のシリンダ回転角とともに記録した。図で明らかのように、加圧に際し、精緻な制御が可能であり、データ稠密性が保たれていることが理解できる。なお、本装置を用いて、先端  $40\ \mu\text{m}$  のベベルド型アンビルを用いることで、300GPa を超える圧力発生に成功している。

高精度加圧については、 piezoアクチュエータにより実現できたが、放射光 X 線観察状態において高圧下で歪・差応力を与えるための、回転型 DAC およびリモート回転加圧機構の新規開発が必要となった。これらは、段階を踏んで 2 種類の異なるリモートシステムを試作した。まず、加圧状態で片側のアンビルに回転を与える方式をテストするために、シンプルにメンブレンによる

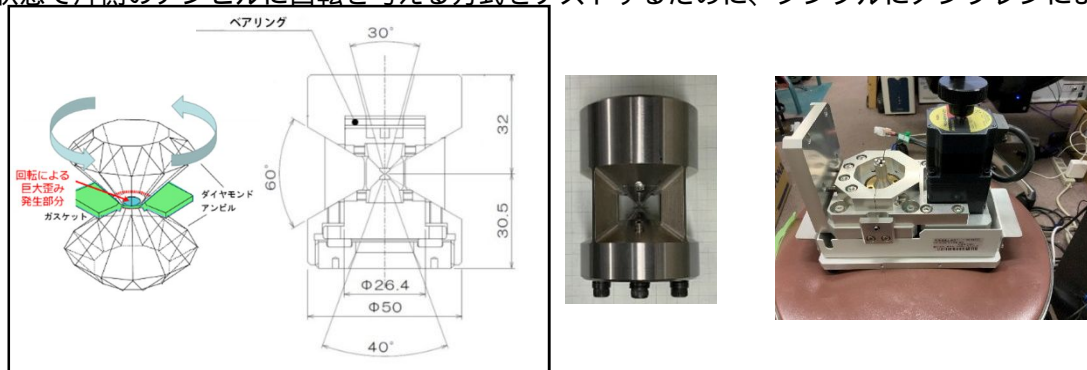


図 2 回転型 DAC の方式と図面 (メンブレン加圧型)(左)と写真(中)DAC 回転機構(右)

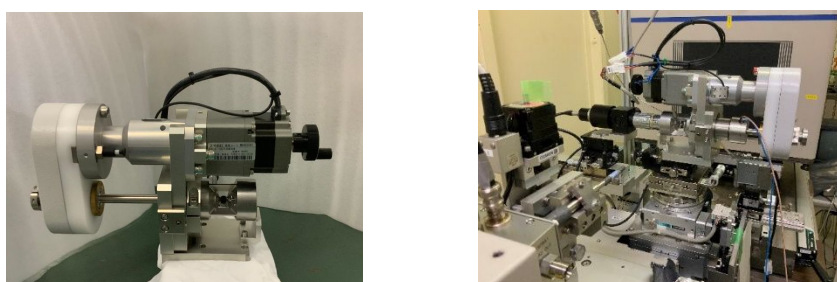


図 3 アクチュエータ併用型リモート DAC 回転機構(左)とビームライン(BL04B2)上に DAC をセットした様子(右)

るリモート加圧による方法を試みた、図 2 に左側アンビルの回転可能な DAC の図面および、写真を示す。上部に加圧のためのメンブレンを装着し、下側アンビル下部に回転軸を挿入し回転軸を接続するように設計した。ラジアル X 線回折をおこなうための、大開口を確保し、かつ DAC 加圧による圧縮強度を維持できるように一体型成形による加工とした。回転する左側アンビル受け台下部にはベアリングを配置している。当初、左右両アンビルともキュレット面を円形に成型したため、試料との間で滑りが生じ、効果的に歪みを与えられなかったが、右側アンビルキュレット面を八面体に成型することにより、左側回転により歪みの付与が可能になった。開発した DAC を駆動する回転機構の写真を図 2 右に示す。加圧状態で片側アンビルを回転させるトルクが得られるかについて懸念があったが、大きめのパルスモータを設置することにより解決した。回転軸は X 線パスを確保するために中空であるが、強度的には問題は生じていない。

もう一つのシステムは、右側からメンブレン加圧をおこなうとともに、左側から piezoアクチュエータによる精密加圧制御と、回転を付与できる機構になっている(図 3)。これについても、DAC の開発からおこなった。この場合、DAC 左側に積層アクチュエータの保持部分が必要となっている。そのため、このセルを固定するための回転機構も左側に大きなスペースを有している。その部分の取り付けを考慮した設計となっている。回転機構は、SPring-8 (BL04B2) に、以前の科研費課題で製作した「広方位高圧下応力解析装置」の上部を交換する形で設置できる設計になっており、X 線ビームに対しての試料の位置決めが付属する対物レンズによりおこなうことが可能になっている。

この方式の優れた点は、目的の圧力までメンブレンで加圧したのちアクチュエータで微動できるということであり、回転機構を有する DAC においても精密制御できる圧力領域が広いということである。これらのシステム的设计・試作・試運転および設置は、時間的スケジュールの非常に制限されたコロナ禍の中おこなわれたことを付記する。

## (2) せん断応力緩和理論の構築

本研究では、第一原理計算によるアプローチ(分担者 藤久)による、差応力場における相転移圧力への影響について考察した。そこで、以下のせん断応力緩和理論の構築に至った。

せん断応力(シアーストレス, shear stress)を加えた場合の相転移圧力が、等方的応力(静水圧)を加えた場合のそれよりも低下する現象を統一的に説明することができる理論を考案した。「相転移に伴うせん断応力緩和理論(theory of shear stress relaxation associated with phase transitions)」と呼ぶことにした。この概要を説明する。結晶構造モデルに等方的応力(静水圧、垂直応力)を加えて構造最適化、エンタルピーを実施する。横軸圧力縦軸エンタルピーをプロットすると右上がりの曲線が得られる。二つの構造モデルについての曲線に交点が見



つかると、交点の圧力で相転移することが計算される(図4 青矢印)。その状態に追加で固体のある面に水平方向の外力(せん断応力、シアー応力)を追加すると、それに応答してせん断ひずみが発生する。系のエンタルピーはひずみの弾性エネルギー分だけ増加する。一定のせん断応力を加えたエンタルピーの曲線は、せん断応力を加える前のそれに比べて上方に平行移動する。つまり常圧相と高压相の二つの構造モデルの両方にせん断応力を加えた計算を行うと、どちらのエンタルピー曲線とも上方に平行移動するため(図4 破線) 曲線の交差する圧力はほとんど変化しない(図4 青点線矢印)。

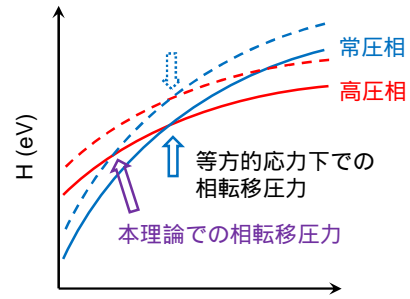


図4 青曲線、赤曲線はそれぞれ常圧相、高压相のエンタル

そこで分担者は、常圧相に印加されたシーストレスが構造相転移を起こすと、ストレスとひずみが解消される方向に格子が変形し、相転移後にはストレスが緩和されることを想定し、次の手順で相転移圧力を評価することにした。相転移前の状態としては図4 青破線で示すひずみエネルギー分が上昇したエンタルピーを、相転移後は図4 赤実線で示すシアーをかけていないエンタルピーを比較対象として、両者を比較する。これらのエンタルピーの交点は低压側にシフトすることになる(図4 紫矢印)。この圧力をせん断応力をかけた場合の相転移圧力として採用する。この方法で計算された各種物質の相転移圧力は、実験によるそれとよく一致することが確かめられた。いくつかの計算例について、研究成果として以下にとりあげる。

#### 4. 研究成果

##### (1) MgF<sub>2</sub>の相転移(静水圧・非静水圧比較)

ピエゾアクチュエータによる加圧制御が完成した段階でおこなった実験において対象にした相転移の一つは、MgF<sub>2</sub>における rutile 型 - CaCl<sub>2</sub> 型構造相転移(図5)である。静水圧条件ではアルコール混合媒体を用いた。なお、圧力は双方の条件とも Au 111 回折線(Tsuchiya, 2003)により決定した。図6にMgF<sub>2</sub>の静水圧下ならびに非静水圧一軸圧縮における相転移圧の違いを示す。相転移の判断は、rutile 型の 220 が CaCl<sub>2</sub> 型への 121, 211 に分裂することによりおこなった。X線回折パターンは加圧軸と平行のジオメトリーで取得した。静水圧の場合は9 GPaであった転移圧が8.3 GPa程度で転移することが確認された。

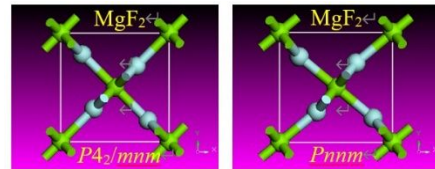


図5 MgF<sub>2</sub> rutile 型 - CaCl<sub>2</sub> 型における変形型相転移様式

当該相転移において、「せん断応力緩和理論」を使って相転移圧力の再評価を試みた結果は以下になった。シアー応力  $\sigma_{xy} = 3$  GPa と、 $\sigma_{xz} = 2$  GPa の二つの場合で相転移圧力を計算したところ(図7) どちらもそれは6.0 GPa となった(図7)。これは等方的応力の場合の値7.5 GPa よりも1.5 GPa の低下するという結果を示した。圧力媒体を使わない直押し実験での相転移圧力の低下は0.8 GPa であったが、下アンビル回転によりシアー応力をより大きくかけた実験を実施すれば相転移圧力はより大きく低下することが予想され、計算との一致度がよくなることが期待される。

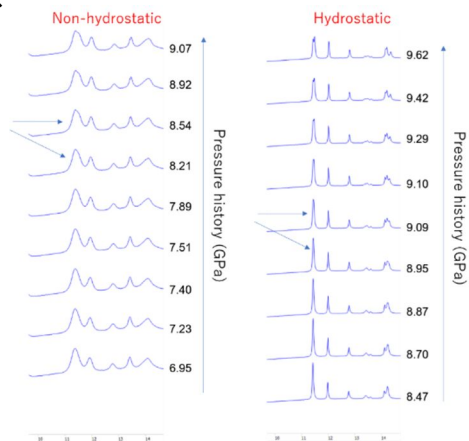


図6 MgF<sub>2</sub>における rutile-CaCl<sub>2</sub> 相転移(静水圧・非静水圧比較)

##### (2) BaF<sub>2</sub>の相転移(静水圧・非静水圧・回転歪み比較)

アクチュエータ併用型リモート DAC 回転機構を用いて、ピエゾアクチュエータとメンブレン加圧を併用しながら加圧をおこない、BaF<sub>2</sub>における fluorite 型 - cotunnite 型構造相転移に対する歪み・差応力効果の検証をおこなった。結果を図8に示す。相転移の開始は、fluorite の 111 と 200 の間に出現する cotunnite 102, 200 回折線により判断し、相転移の完了は、fluorite 111 の消失で判断した。図

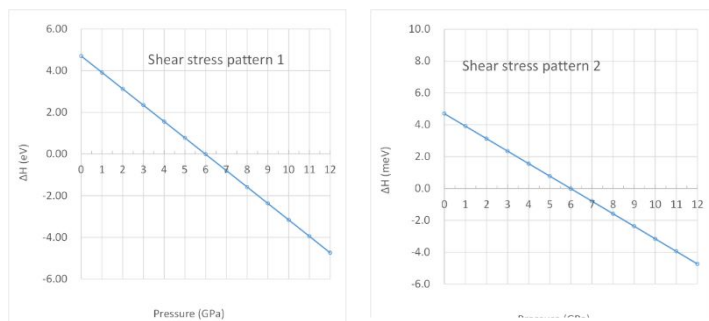


図7 せん断応力緩和理論によるエンタルピー差  $\Delta H$  の圧力変化。(左)  $\sigma_{xy} = 3$  GPa と、(右)  $\sigma_{xz} = 2$  GPa の場合とも相転移圧力は6.0 GPa となった。

8(a)はアルコール混合媒体中での静水圧下での実験結果であり、(b)は圧媒体を用いない場合の結果である。静水圧下では3.1 GPa付近から転移が開始し、5.4 GPaで完了したが、非静水圧下では、2.6 GPa付近から相転移が始まり、3.9 GPaで既に完了することを示している。強歪みを与える実験をおこなうために、改めて2.6 GPaまで加圧し、構築したDAC回転機構により左側アンビルを180°ずつ2度回転させた場合の結果を(c)に示す。これによると、圧力は増大し

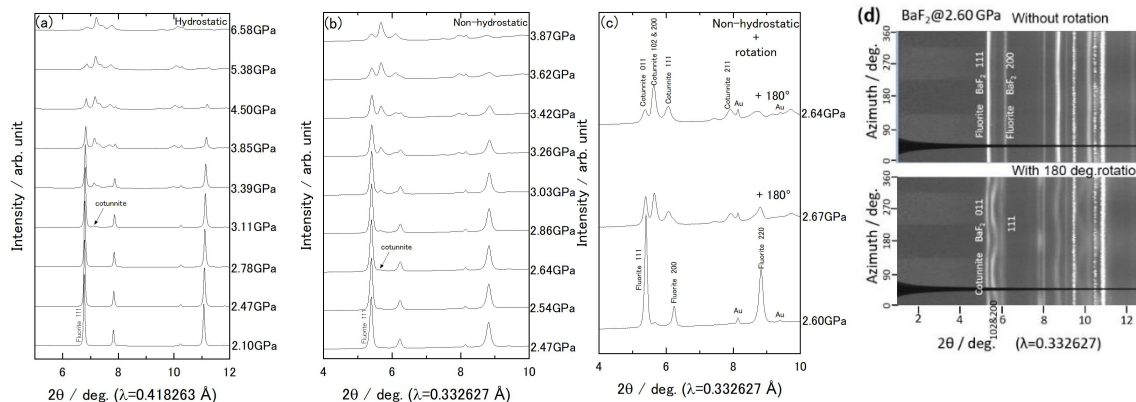


図8 BaF<sub>2</sub>における各種応力条件における fluorite 型 - cotunnite 型構造相転移の X 線回折パターンの比較 (a) 静水圧、(b)非静水圧、(c) 回転歪みを付与した場合。

ないにもかかわらず、2.6 GPa で相転移は完了することが理解できる。この場合に、ラジアル X 線回折をおこなった結果を(d)に示す。回転前に歪みの影響が小さい fluorite 型の回折線とは対照的に、DAC 回転による強歪みにより、特に cotunnite 102,200 回折線への歪み効果が明確に観察されたことがわかる。

本相転移においても、「せん断応力緩和理論」により、計算科学の面から応力下の相転移の比較をおこなった。等方的応力(静水圧)下での実験では fluorite 型 (Fm-3m) から cotunnite 型 (Pnma) へ 3.5 GPa で相転移したが、シアー成分  $\epsilon_{xy}$  を 2 GPa に設定し、構造(図 9)、エンタルピー(図 10)を計算した。その結果、相転移圧力は 2.0 GPa となり相転移圧力の低下を再現することができた。

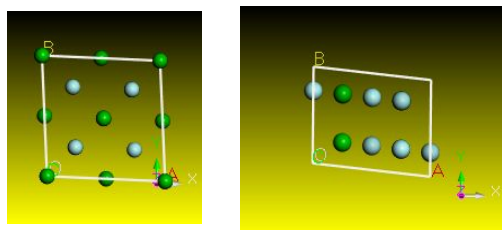


図 9 BaF<sub>2</sub> のシアーストレス ( $\epsilon_{xy} = 2$  GPa) 印加時の Fluorite 構造(左)と、Cotunnite 構造(右)。空間群 P1 で格子、原子座標を最適化した。

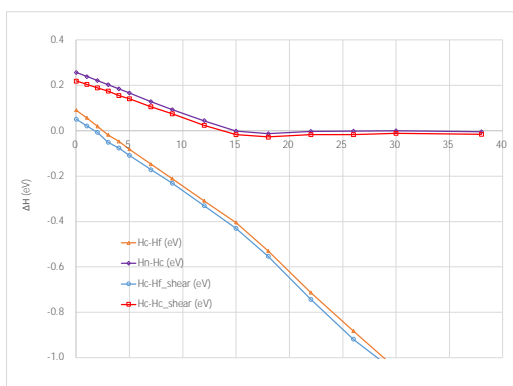


図 10 BaF<sub>2</sub> 等方的応力 (isotropic) と、異方的応力 (shear  $\epsilon_{xy} = 2$  GPa) 印加時のエンタルピー差  $\Delta H$  の圧力変化。Hf, Hc, Hn はそれぞれ Fluorite, Cotunnite, Ni<sub>2</sub>In 相のエンタルピーを意味する。  $\Delta H$  の 0 ラインとクロスした圧力が相転移圧力である。

### (3) NaMgF<sub>3</sub> (M = Mg, Ni) の相転移 (計算と実験)

MgSiO<sub>3</sub> と同様に高圧下でペロブスカイト *Pnma* からポストペロブスカイト *Cmcm* へ構造相転移を起こす NaMgF<sub>3</sub> について「せん断応力緩和理論」により計算をおこなったところ、ポストペロブスカイトへの相転移圧力は 12.5 GPa と見積もられた。この値は等方的応力下での値(17.5 GPa)よりも 5 GPa 低いことが明らかとなった。紙面の都合で割愛するが、実験でおこなった類似組成のフッ化物 NaNiF<sub>3</sub> の相転移への差応力の影響と同等の傾向を示しており、シアー応力が相転移圧力を低減させることが分かった。今回は、カイネティクスの関係上、対象をフッ化物に限定して室温実験をおこなったが、いずれも六配位 AX<sub>6</sub> 八面体の回転に対する応力の及ぼす影響となるため、高温高圧下で SiO<sub>6</sub> でも同様の効果となることが考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計28件（うち査読付論文 28件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yusa Hitoshi, Iga Fumitoshi, Fujihisa Hiroshi	4. 巻 61
2. 論文標題 High-Pressure Synthesis of Light Lanthanide Dodecaborides (PrB12 and CeB12): Effects of Valence Fluctuation on Volume and Formation Pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 2568 ~ 2575
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.1c03525	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamawaki Hiroshi, Fujihisa Hiroshi	4. 巻 265
2. 論文標題 Infrared spectra of the and phases of oleic acid under high pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy	6. 最初と最後の頁 120290 ~ 120290
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/maps.13735	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Nakatsuka Akihiko, Fukui Hiroshi, Kamada Seiji, Hirao Naohisa, Ohkawa Makio, Sugiyama Kazumasa, Yoshino Takashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Incorporation mechanism of Fe and Al into bridgmanite in a subducting mid-ocean ridge basalt and its crystal chemistry	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 22839-1 ~ 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-87638-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kuno Keiji, Matsuoka Takahiro, Masuda Ryo, Mitsui Takaya, Seto Makoto, Machida Akihiko, Fujihisa Hiroshi, Hirao Naohisa, Ohishi Yasuo, Shimizu Katsuya, Sasaki Shigeo	4. 巻 865
2. 論文標題 Mixed-valence state and structure changes of EuH ( $x=2$ and $2 < x < 3$ ) under high-pressure H <sub>2</sub> atmosphere	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 158637 ~ 158637
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43247-021-00298-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hamada Maki, Kamada Seiji, Ohtani Eiji, Sakamaki Tatsuya, Mitsui Takaya, Masuda Ryo, Hirao Naohisa, Ohishi Yasuo, Akasaka Masahide	4. 巻 103
2. 論文標題 Synchrotron Mossbauer spectroscopic and x-ray diffraction study of ferropicicase in the high-pressure range of the lower mantle region	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 174108-1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0041208	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fei Hongzhan, Liu Zhaodong, Huang Rong, Kamada Seiji, Hirao Naohisa, Kawaguchi Saori, McCammon Catherine, Katsura Tomoo	4. 巻 126
2. 論文標題 Pressure Destabilizes Oxygen Vacancies in Bridgmanite	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Geophysical Research: Solid Earth	6. 最初と最後の頁 022437-1 ~ 18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0033721	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akahama Yuichi, Kawaguchi Saori, Hirao Naohisa, Ohishi Yasuo	4. 巻 129
2. 論文標題 High-pressure stability of bcc-vanadium and phase transition to a rhombohedral structure at 200GPa	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 135902 ~ 135902
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4131/jshpreview.30.195	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akahama Y., Kamiue K., Okawa N., Kawaguchi S., Hirao N., Ohishi Y.	4. 巻 129
2. 論文標題 Volume compression of period 4 elements: Zn, Ge, As, and Se above 200GPa: Ordering of atomic volume by atomic number	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 025901 ~ 025901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0029148	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 KAWAMURA Fumio, YUSA Hitoshi	4. 巻 30
2. 論文標題 Synthesis of Novel Nitride Semiconductors and Hard Materials Using High-Pressure Metathesis Reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Review of High Pressure Science and Technology	6. 最初と最後の頁 195 ~ 201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.125402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akahama Yuichi, Kawaguchi Saori, Hirao Naohisa, Ohishi Yasuo	4. 巻 117
2. 論文標題 Elastic softening of bulk modulus of monoclinic HfO <sub>2</sub> under high pressure	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 182903 ~ 182903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c01482	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 N. Hirao, S. I. Kawaguchi, K. Hirose, K. Shimizu, E. Ohtani and Y. Ohishi	4. 巻 5
2. 論文標題 New developments in high-pressure X-ray diffraction beamline for diamond anvil cell at SPring-8	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Matter and Radiation at Extremes	6. 最初と最後の頁 18403
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5126038	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 B. B. Yue, F. Hong, N. Hirao, R. Vasin, H. R. Wenk, B. Chen and H. K. Mao	4. 巻 116
2. 論文標題 A simple variant selection in stress-driven martensitic transformation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences of the U. S.A.	6. 最初と最後の頁 14905-14909
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.1906365116	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -



〔学会発表〕 計45件（うち招待講演 6件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 遊佐 斉, 伊賀文俊, 山田健介, 高橋直樹
2. 発表標題 RB12ホウ化物の超高压合成と陽イオンサイズの系統性
3. 学会等名 令和3年（2021年度）日本結晶学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 遊佐 斉, 平尾直久, 大石泰生
2. 発表標題 ピエゾ素子によるDAC圧力発生とP-Vデータ稠密化
3. 学会等名 第62回高压討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 赤浜裕一, 遊佐 斉
2. 発表標題 高压流体酸素のエキシマレーザー照射：分子解離と相分離
3. 学会等名 第62回高压討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮川 仁, 小林 清, 川村 史朗, 谷口 尚, 遊佐 斉
2. 発表標題 高压力下パルス放電焼結法による高品位焼結体作製の試み
3. 学会等名 第62回高压討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮川 仁, 小林 清, 川村 史朗, 谷口 尚, 遊佐 斉
2. 発表標題 超高压パルス放電焼結による酸化物・窒化物焼結体の作製
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期(第169回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 川嶋 哲也, 遊佐 斉
2. 発表標題 4d遷移金属窒化物 -MoNの焼結体作製と硬さ評価
3. 学会等名 第62回高压討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中 有希, 伊藤 匠, 中本 有紀, 清水 克哉, 坂田 雅文, 藤久 裕司, 河口 沙織, 平尾 直久, 大石 泰生
2. 発表標題 アルカリ土類金属ストロンチウムの低温・高压下における結晶構造と超伝導転移
3. 学会等名 第62回高压討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Matsuoka, R. Masuda, K. Kuno, H. Fujihisa, T. Mitsui, M. Seto, A. Machida, N. Hirao, Y. Ohishi, Y. Yoda, K. Shimizu, S. Sasaki, K. Aoki
2. 発表標題 High-pressure phase diagram of Europium Hydride
3. 学会等名 10th Asian Conference on High Pressure Research (ACHPR-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平尾直久, 河口沙織, 大石泰生
2. 発表標題 BL10XU でのオンライン共焦点ラマン分光測定
3. 学会等名 第62回高圧討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平尾直久, 赤浜裕一, 大石泰生
2. 発表標題 地球中心圧力までの鉄とニッケルの状態方程式
3. 学会等名 第62回高圧討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naohisa Hirao, Yasuo Ohishi, Saori Kawaguchi
2. 発表標題 New Optical Raman Probe System for Combined Measurement with High-Pressure X-Ray Diffraction at BL10XU of SPring-8
3. 学会等名 10th Asian Conference on High Pressure Research/HPSP-19/WHS-3 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 遊佐 斉, 伊賀文俊, 山田貴大, 竹森氷馬, 藤久裕司, 平尾直久, 大石泰生 亀卦川卓美
2. 発表標題 新規希土類12ホウ化物の高圧合成と物性
3. 学会等名 第61回高圧討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 遊佐 斉
2. 発表標題 硼・窒化物の高圧構造物性と関連物質の機能性材料創製のための調査研究
3. 学会等名 第4回 TIA かけはし成果報告会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 遊佐 斉, 伊賀文俊, 山田貴大, 竹森氷馬, 藤久裕司
2. 発表標題 新規RB12ホウ化物の高圧合成と圧縮特性
3. 学会等名 2020年度量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 遊佐 斉
2. 発表標題 新材料機能創出に向けた高圧高温プロセス - 特徴と展望 -
3. 学会等名 日本セラミックス協会第33回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川村 史朗, 村田秀信, 井村将隆, 山田直臣, 谷口 尚, 遊佐 斉
2. 発表標題 新規多元系窒化物半導体の高圧・薄膜合成及び評価
3. 学会等名 日本セラミックス協会第33回秋季シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤久裕司、竹村謙一、小野田みつ子、後藤義人
2. 発表標題 固体ヨウ素の二つの非整合相の構造解析
3. 学会等名 第61回高圧討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平尾直久、河口沙織、大石泰生
2. 発表標題 BL10XUにおけるダイヤモンドアンビルセル用オンライン共焦点ラマン分光システム
3. 学会等名 第61回高圧討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 遊佐 斉、川村 史朗、谷口 尚
2. 発表標題 5 d 遷移金属窒化物の高圧合成と体積弾性率の結晶構造相関
3. 学会等名 令和元年（2019年度）日本結晶学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遊佐 斉、川村 史朗、谷口 尚、村田秀信、平尾直久、大石泰生
2. 発表標題 WC型窒化レニウムの合成と体積弾性率の評価
3. 学会等名 第60回高圧討論会
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 藤久裕司, 遊佐 斉
2. 発表標題 DFT計算による超硬質ホウ化物のピッカース硬さ計算
3. 学会等名 第60回高圧討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遊佐 斉, 藤久裕司, 平尾直久, 大石泰生
2. 発表標題 YNのポストB1構造相転移: 実験と計算
3. 学会等名 第60回高圧討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遊佐 斉
2. 発表標題 硼・窒化物の高圧構造物性と関連物質の機能性材料創製のための調査研究
3. 学会等名 TIAかけはし令和元年度第一回研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遊佐 斉
2. 発表標題 窒化物と関連物質の高圧構造物性調査研究と超硬質高密度材料開発
3. 学会等名 第3回TIAかけはし成果報告会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遊佐 斉, 谷口 尚, 中野 智志, 川村 史朗, 川嶋 哲也, 宮川 仁, 藤久裕司, 亀卦川卓美, 近藤剛弘, 鍵裕之
2. 発表標題 硼・窒化物の高圧構造物性と関連物質の機能性材料創製のための連携基盤
3. 学会等名 物性研究所短期研究会「高圧合成による新規材料開発と高圧下測定技術の集結」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤久裕司
2. 発表標題 超硬質ホウ化物の結晶構造モデリングとピッカース硬さ計算
3. 学会等名 2019年度計量標準総合センター成果発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Hirao, Y. Ohishi, S. Kawaguchi
2. 発表標題 High-pressure x-ray diffraction using high-energy focused x-ray beam at BL10XU of SPring-8
3. 学会等名 OptoX-Nano 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平尾直久, 河口沙織, 大石泰生
2. 発表標題 BL10XUにおける放射光高圧X線回折用レーザー加熱・輻射温度計測システム
3. 学会等名 第60回高圧討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Hirao, S. Kawaguchi, Y. Ohishi
2. 発表標題 High-pressure x-ray diffraction using high-energy x-ray refractive optics in bealime BL10XU at SPring-8
3. 学会等名 AIRAPT27
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計4件

産業財産権の名称 加圧装置、それを用いた顕微ラマン散乱測定装置、X線回折装置、および光学顕微鏡装置	発明者 遊佐 斉	権利者 物質・材料研究機構
産業財産権の種類、番号 特許、特許出願2021-152744	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 新規なプラセオジウムホウ化物及びその製造方法	発明者 遊佐 斉, 伊賀 文俊	権利者 物質・材料研究機構、茨城大学
産業財産権の種類、番号 特許、特願2020-144821	出願年 2020年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 セリウム12ホウ化物及びその製造方法	発明者 遊佐 斉, 伊賀 文俊	権利者 物質・材料研究機構、茨城大学
産業財産権の種類、番号 特許、特願2020-193300	出願年 2020年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 加圧・歪装置、それを用いたX線回折装置、顕微ラマン散乱測定装置、および、光学顕微鏡	発明者 遊佐 斉	権利者 物質・材料研究機構
産業財産権の種類、番号 特許、特願2022-142356	出願年 2022年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	平尾 直久 (HIRAO Naohisa) (70374915)	公益財団法人高輝度光科学研究センター・回折・散乱推進室・主幹研究員  (84502)	
研究分担者	藤久 裕司 (FUJIHISA Yuji) (90357913)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・計量標準総合センター・主任研究員  (82626)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------