

# 固体ヨウ素の二つのインコメンシュレート相の結晶構造解析

- 40年間謎であったヨウ素の圧力誘起分子解離過程を解明
- 粉末X線構造解析とDFT計算の併用で構造解析に成功
- 粉末では困難であった新規変調構造の解析の突破口となる

## 研究のねらい

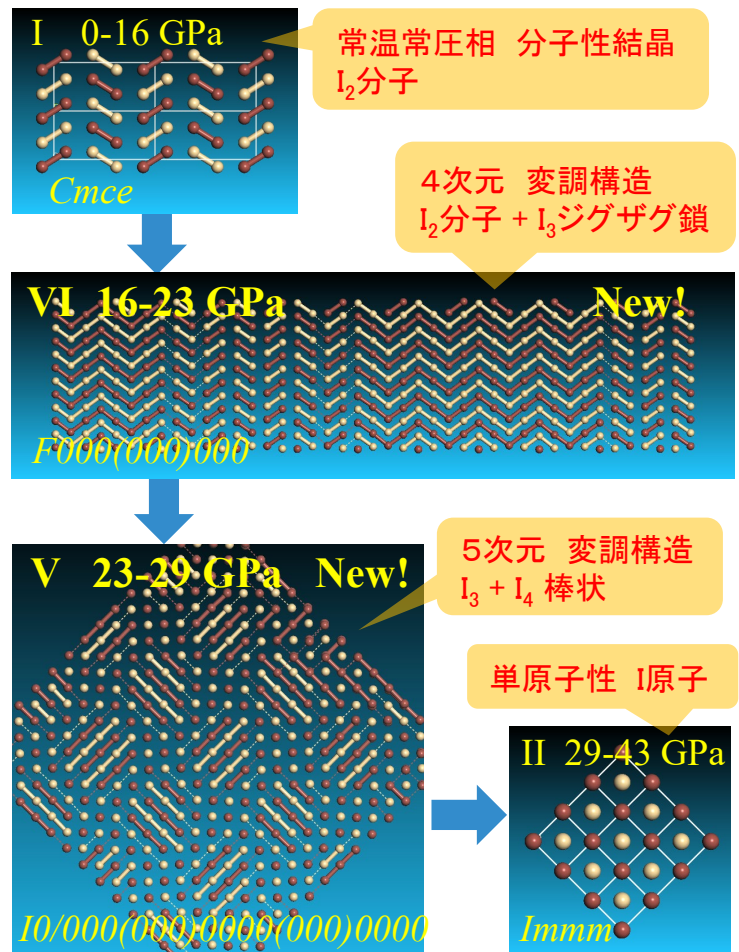
$I_2$ 分子による分子性結晶(I相)を組む固体ヨウ素は圧力21 GPaから分子解離が始まり、30 GPaで単原子Iから構成される単原子結晶(II相)へと相転移(分子解離)することが1980年代から知られていました。2003年になって我々は22 GPaから28 GPaの間にインコメンシュレートな変調構造(V相)の存在を明らかにしました[1]。しかし16 GPaから22 GPaの間に既知のI相の構造では説明できない回折ピーク位置のずれが残っていることから、新しい相(VI相)の存在が示唆されていました。そこで今回粉末X線構造解析とDFT計算を併用した我々の解析手法を駆使し、VI相の構造解析ならびにV相の変調構造の検証を試みました。

## 研究内容

4次元超空間群を用いたリートベルト解析により16 GPaから22 GPaの領域の結晶構造解析を行いました。その構造はインコメンシュレートな原子変調であることが分かりました(VI相)。DFT計算によるMDシミュレーションでも同様なジグザグ鎖の存在が確認できました。22 GPaから29 GPaの領域(V相)でもMDを行った結果、2003年の構造モデル[1]には修正が必要であり、その構造は5次元超空間群で表されるインコメンシュレート変調構造であることが分かりました。このように従来単結晶試料なしでは困難とされていた新規の複雑な変調構造の解析に成功しました。

## 今後の展開

- ・ 4次元、5次元超空間群の複雑な構造であっても、粉末試料から新規構造解析が可能であることが示されました。
- ・ これまで複雑すぎて迷宮入りしていた物質でも、その構造が明らかになる可能性が高まりました。
- ・ [1] K. Takemura *et al.*, Nature **423**, 971 (2003).



固体ヨウ素の圧力誘起相転移と分子解離