

GeO<sub>2</sub> を選び、ダイヤモンドアンビルを用いた高温高圧 X 線その場観察を中心にして種々の実験を行った。その結果、

- ① 結晶－非晶質転移の境界線は、出発物質である quartz 型相（高温低圧相）の melting curve の外挿線とほぼ一致する。
- ② 室温で 16GPa 以下では、生成した非晶質内に quartz 的構造と rutile（低温高圧相）的構造が混在している。
- ③ 生成した非晶質は、高圧下においては容易に結晶化しない。

等のことが確認された。

これらから、GeO<sub>2</sub> の圧力誘起非晶質化現象は、基本的には Mishima らによるモデルに沿って発現していることが分かった。

〔参考文献〕

- |                                       |                                  |
|---------------------------------------|----------------------------------|
| 1) O.Mishima, L.D.Calvert & E.Whalley | Nature <u>310</u> (1984) 393-395 |
| 2) R.J.Hemley et al.                  | Nature <u>334</u> (1988) 52-54   |

## 16. 極低温、超高压下の磁気測定装置の開発

清水 克 哉

現在、ダイヤモンドの単結晶を用いたダイヤモンドアンビルセル（以下 DAC）を使って、盛んに高圧力下の物性測定が行われているが、我々は、DAC と冷凍機を組み合わせた磁気測定を行うことにより圧力誘起型超伝導体や磁性体の可能性を追求することにした。

DAC は手軽に超高压を発生できるにも関わらず、装置自体は非常に小型であることから冷凍機に取り付けて極低温に冷却するのには有利であるが、試料体積が極めて小さい（ $\sim 10^{-3} \text{ mm}^3$ ）ため物性測定にはそれに伴う困難が避けられない。磁化測定を行うサンプルは相対的に非常に大きな高圧セルの中にあることになり、測定すべき信号が十分な感度で得られるかが問題となる。我々は、非磁性高圧材料として銅ベリリウムを用いて DAC を設計し、希釈冷凍機をはじめとする冷凍機に取り付け、極微量試料に対応して高感度な測定を行うべく SQUID 磁束計による磁化測定を試みた。

DAC は、阪大極限センターでもよく使われている Bassett 型セルをも

とにガスケットのまわりに磁化測定用のコイルが組み込めるように設計し、部品はダイヤモンドとセラミックのベアリングをのぞきガスケットも銅ベリリウムで製作した。鉛の超伝導転移がWittigらによって測られており、それを追試してこの装置を検定した。室温で約5万気圧を発生し冷却しSQUIDにより磁化を測定した。大きなバックグラウンドに乗っているが、Wittigらのデータと同じ約5度に超伝導転移を示す信号が現れた。圧力を0に戻し再度冷却して常圧の転移温度(約7.2度K)に信号が現れるのを確認した。また、約8,9万気圧についてもそれぞれ同様に行い、十分な感度で測定できることを確認した。当初から予想されたがDAC部品の熱膨張率の違いにより冷却することで設定した圧力から変化するのがみられた。バックグラウンドの評価とともにこれから取り組むべき問題である。

## 17. 平面波バンド計算法の収斂性の改良の試みおよびその 水素-ヘリウム系への応用

田 中 豊

木星、土星等の巨大惑星の内部構造モデルは、金属化している水素にヘリウム原子が溶解しないと言う仮定に基づいていて、超高圧下での液体及び固体水素に対するヘリウム原子の溶解性の研究は、重要な意味を持っている。

しかしながら、この溶解性はまだよくわかっていない、直接実験するには、圧力領域が高過ぎる(4~40 Mbar程度)。理論的には、高圧の極限(100 Mbar以上)と低圧の極限(1 Mbar以下)の研究は成されているものの、もっとも興味ある圧力領域での信頼できる研究はまだない。

その最大の理由は、混合状態のGibbsの自由エネルギーと分離状態のGibbsの自由エネルギーの差が非常に小さいため、H系・He系・H-He系に異なる計算方法を使用すると、計算方法の違いによる内在的な計算誤差の方が大きくなる可能性があるためである。

今回の我々の計算では、この点を考慮にいて、計算誤差が構造やHe濃度に原理的に依存しない平面波バンド計算法を採用した。この平面波バンド計算法は、金属水素については一応の成功を納めた。しかしながらH-He系を扱うには、さらに膨大な数の平面波を必要とし、計算機的能力から困難である。そこで我々