

SnS₂ の高温高圧処理の in-situ X 線回折による評価

In-situ Xray diffraction during high-temperature and high-pressure treatment of SnS₂

北大. 総合化学¹, 北大. 工², 高輝度光科学研究センター³ (M1) 相川 皆子¹, 田所 泰志郎¹, 横倉

聖也^{1,2}, 牧 紘太郎¹, 三浦 章^{1,2}, 河口 沙織³, 門林 宏和³, 岡 健太³, 島田 敏宏^{1,2}

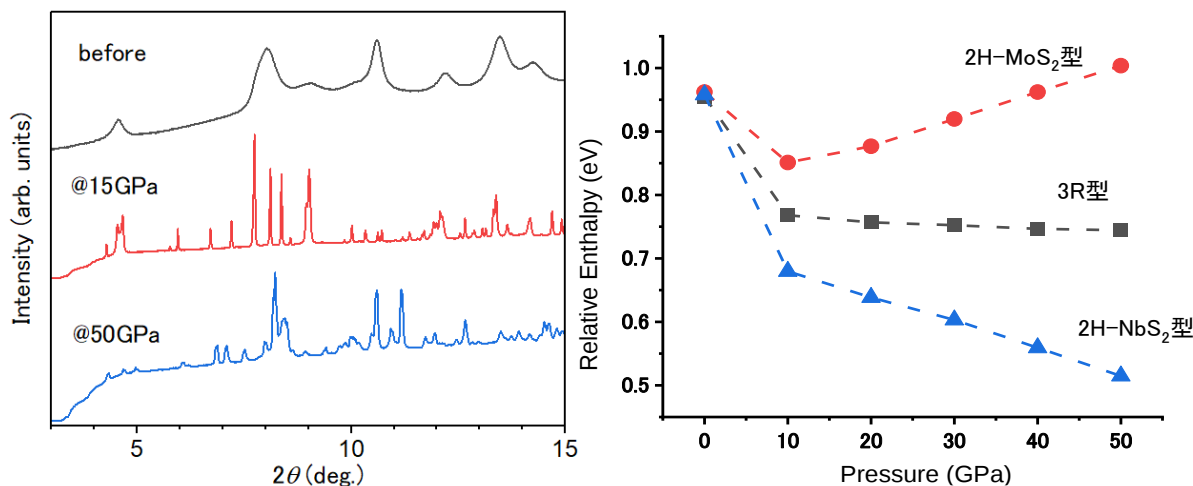
Hokkaido Univ. CSE¹, Eng.², °Minako Aikawa¹, Taijiro Tadokoro², Seiya Yokokura^{1,2}, Kotaro Maki¹,

Akira Miura^{1,2}, Saori Kawaguchi³, Hirokazu Kadobayashi³, Kenta Oka³, Toshihiro Shimada^{1,2}

E-mail: aimina_hr@eis.hokudai.ac.jp

層状金属カルコゲナイドである SnS₂ は、可視光領域にバンドギャップを持つ橙色の半導体であるが、最近、超高压で電子的相転移を起こし超伝導を示すことが報告されている[1]。また、SnS₂ は常圧または減圧下での加熱により Sn₂S₃ や SnS 等と S に分解するため[2]、ストイキオメトリックな SnS₂ の単結晶を合成することは容易ではない。高压下での SnS₂ の合成の可能性を探るため、本発表では SnS₂ の超高压下での加熱による変化の結果について報告する。実験は、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用い、SPRING8 の BL10XU において行った。試料は、気相トランスファー法で得られた SnS₂ の結晶をアモルファス SiO₂ と混合して配向をランダムにした状態で DAC に導入した。22W の近赤外レーザーを 1 分程度照射して局所的に加熱しながら X 線回折(XRD) のその場測定を行った。最高温度は放射温度計測定によると 1300K 程度であった。

図 1 に示すのは、加熱前および 15GPa, 50GPa で加熱した試料の XRD パターンである (波長 0.4127 Å)。加熱後では多数のピークがみられており、格子定数の大きい未知の物質ができていていることを示唆している。図 2 に、第一原理計算(VASP)により計算したエンタルピーの圧力依存性(常圧相である CdI₂ 型 SnS₂ との差)を示す。正八面体配位(CdI₂ 型)の SnS₂ が三角プリズム型(2H-MoS₂ 型, 2H-NbS₂ 型, 3R 型)に変化した場合高压下でもエンタルピーは逆転しないが、その差は小さくなっていることがわかる。SnS₂ が Sn₂S₃ や SnS と S に分解した場合についても現在計算を行っている。XRD の結果で示唆される大きな格子定数は、配位構造や対称性が異なる物質が積層した長周期構造に由来する可能性を検討している。



[1] B. Yue *et al.*, *Phys.Rev.B*105,104514(2022). [2] T. Shimada *et al.*, *J.Vac.Sci.Technol.* A10, 539 (1992).