



水素を構成元素とする分子性固体の高圧力下における構造変化IV

AichiSR

坂田 雅文, 関戸 幹斗, 加藤 崇真
岐阜大学

キーワード：高圧力, 分子性固体, 水素化物

1. 背景と研究目的

高圧力下で安定な高密度水素化物超伝導体は、銅酸化物高温超伝導体を超える高い超伝導転移温度を持ち、室温超伝導を実現する候補物質になっている。新奇高密度水素化物の合成を目指して、単体元素を出発物質に用いた高圧力下赤外レーザー加熱実験が数多く行われているが、金属元素の高密度水素化物の研究に偏っている。そこで我々は非金属元素の高密度水素化物超伝導体の発見を目指して、分子性水素化物を出発物質に用いた高圧合成を試みている。特に、高圧力下で生ずるハロゲン化水素-水素化合物について、その結晶構造と高圧力下での安定性について調べている。本実験ではその中でも塩化水素-水素化合物の構造を放射光粉末 X 線回折測定により調べた。

2. 実験内容

高圧力発生にはダイヤモンド・アンビル・セル (DAC) を用い、DAC の試料室内に塩化水素と水素を共に封入した。また、圧力校正用のルビー小片を試料室内に配置した。あいちシンクロトロン光センターBL2S1 の X 線回折装置を用いて、室温下、加圧過程での各圧力点 (計 8 点) における粉末 X 線回折スペクトル (X 線波長：0.724 Å) を測定した。

3. 結果および考察

高圧ラマン散乱測定において 5 GPa で単体水素よりも低振動数の H-H 伸縮振動が現れること、塩化水素の H-Cl 伸縮振動に不連続な圧力依存性が見られることから、この圧力において塩化水素-水素化合物が生ずることが分かった。また、放射光粉末 X 線回折測定により、塩化水素-水素化合物の結晶構造は、臭化水素-水素化合物 ($(\text{HBr})_2\text{H}_2$) やヨウ化水素-水素化合物 ($(\text{HI})_2\text{H}_2$) の結晶構造 (正方晶系, 空間群 $I4/mcm$) ではないことが分かった。Fig.1 に 5.8 GPa における塩化水素-水素化合物の粉末 X 線回折スペクトルを示す。このスペクトルから Conograph[1]を用いて結晶格子の空間群および格子定数を求めた。その結果、六方晶系の空間群 $P6/mmm$, 直方晶系の空間群 $P222$ および $F222$ が候補となった。その内、空間群 $P6/mmm$ の場合に格子定数を RIETAN-FP[2]を用いた Le Bail 解析によって精密化した結果を Fig.1 に示す。最適化された格子定数は $a = 8.2351(8)$ Å, $c = 7.3594(1)$ Å であった。 $P6/mmm$ 構造の単位格子体積は、 $I4/mcm$ 構造を仮定した $(\text{HCl})_2\text{H}_2$ に比べて約 2 倍となった。このことから、塩化水素-水素化合物の構造は他のハロゲン化水素-水素化合物に比べて、より複雑であると考えられる。

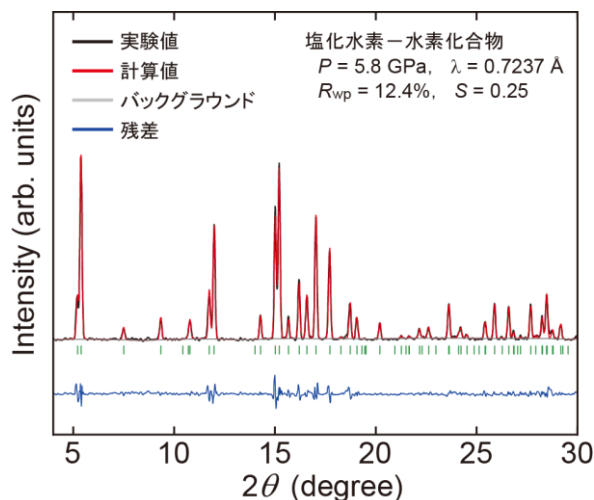


Fig.1 塩化水素-水素化合物の高圧力下粉末 X 線回折スペクトル

4. 参考文献

1. A. Esmaeili, *et al.*, *J. Appl. Cryst.*, **50**, 651 (2017).
2. F. Izumi, *et al.*, *Trans. Tech. Publ.*, **130**, 15 (2007).