



# 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 V

坂田 雅文, 加藤 崇真, 関戸 幹斗  
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、室温超伝導を実現しう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。本研究では、水素結合を形成する分子性水素化物である硫化水素と塩化水素の混合系について、高圧力下での新奇化合物の可能性を放射光粉末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 の試料室内に硫化水素と塩化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

硫化水素：塩化水素比が塩化水素過多である試料 (HCl 過多試料) の高圧ラマン散乱スペクトルにおいて、6 GPa 以下の圧力領域では H-S 伸縮振動と H-Cl 伸縮振動の圧力依存性はそれぞれ正と負であった。このことは、試料内の塩化水素は水素結合を形成するのに対して硫化水素は形成しないことを示す。6 GPa を超えると H-S 伸縮振動が不連続に低振動数側へシフトし、その振動数は純粋な硫化水素の値とほぼ一致した。HCl 過多試料の粉末 X 線回折スペクトルも測定した。全圧力領域で純粋な塩化水素と同じ立方晶系の空間群  $Fm\bar{3}m$  構造と一致する回折線のみが観測された。これらの結果から、HCl 過多試料において期待する硫化水素-塩化水素化合物は生じていないと考えられる。

試料室内の硫化水素比を増やすと、高圧ラマン散乱スペクトルにおいて、水素結合した塩化水素と水素結合していない硫化水素に加えて水素結合した硫化水素による H-S 伸縮振動が観測された (H<sub>2</sub>S 過多試料)。この試料を加圧すると、6 GPa 以上の圧力領域で、2100 cm<sup>-1</sup> を中心とする幅広いピークが観測された。H<sub>2</sub>S 過多試料の粉末 X 線回折スペクトルにおいても、5 GPa 以上で徐々に新たな回折線 (▼) が現れた (Fig.1)。これらの回折線は純粋な硫化水素や塩化水素の構造とは一致しないことから、5~6 GPa において新たな化合物が生じた可能性を示している。この化合物が期待する水素-硫黄-塩素化合物ではないかと考えている。

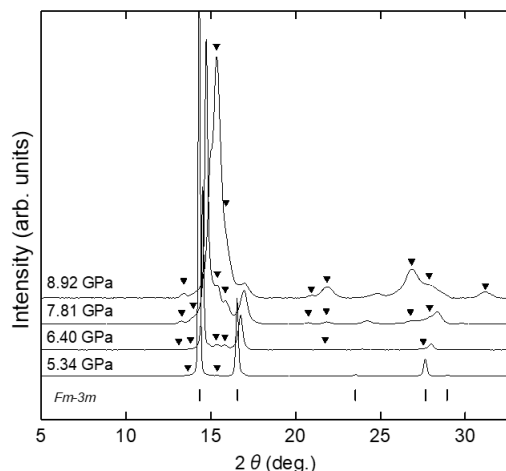


Fig.1 硫化水素-塩化水素混合物の高圧力下粉末 X 線回折スペクトル