



# 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

坂田 雅文, 伊藤 慎介, 勝俣 麻  
岐阜大学

キーワード：高圧力, 分子性固体, 水素化物, 構造変化

## 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、これまでの高温超伝導体を超える高い超伝導転移温度を持ち、室温超伝導体の候補物質として注目されている。新規の高密度水素化物開発を目的とした高圧水素中での赤外レーザー加熱実験が数多く行われているが、100 GPa を超える超高圧力下かつ 1000 K 近い高温下の合成条件では複数の準安定相が生じ易く、目的とする物質の単相を得ることが困難である。そこで、我々は、より常圧・室温に近い条件での高密度水素化物の合成を目指している。本研究では、分子性水素化物の水素結合に着目し、高圧力下での水素結合の対称化を用いた水素ネットワーク構造の形成、そのための基礎研究として水素結合系分子性固体の高圧下構造変化について調べている。今回は、硫黄および窒素を構成元素とする分子性物質のチオ尿素 ( $(\text{NH}_3)_2\text{CS}$ ) を対象に、高圧力下での構造相転移について調べた。

## 2. 実験内容

これまで報告のある構造変化[1,2]を示唆する圧力に加えて、岐阜大学でのラマン散乱分光測定が示唆した 11 GPa 付近を含めて調べるために、12 GPa 以下の圧力領域での粉末 X 線回折測定を行った (X 線波長：0.723 Å)。高圧力発生にはダイヤモンド・アンビル・セル (DAC) を用い、DAC の試料室内にチオ尿素の粉末と圧力較正用のルビー小片を導入した。圧力媒体は使用しなかった。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、加圧過程の各圧力点 (12 点) における粉末 X 線回折パターンを測定した。

## 3. 結果および考察

Fig.1 に、本実験で得た高圧下での粉末 X 線回折パターンを示す。圧力の増加とともに回折線幅が広がってしまったため、リートベルト解析が可能な粉末 X 線回折パターンを得ることは出来なかった。しかしながら、これまで X 線回折測定の報告のない 1 GPa を超える圧力下での測定に成功し、7~8 GPa における粉末 X 線回折パターンの変化を観測した。これは当該圧力における構造変化を示しており、ラマン分光測定[2]で示唆された VIII 相 → IX 相の相転移に相当する。本実験で、回折線強度を決定できる良質な粉末 X 線回折像を得ることができたことから、今後、圧力媒体の使用によって静水圧性を向上させ、リートベルト解析による結晶構造の決定を目指す。

## 4. 参考文献

1. H. Tomkowiak *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 5064 (2018).
2. A. Banerji *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **111**, 10915 (2007).

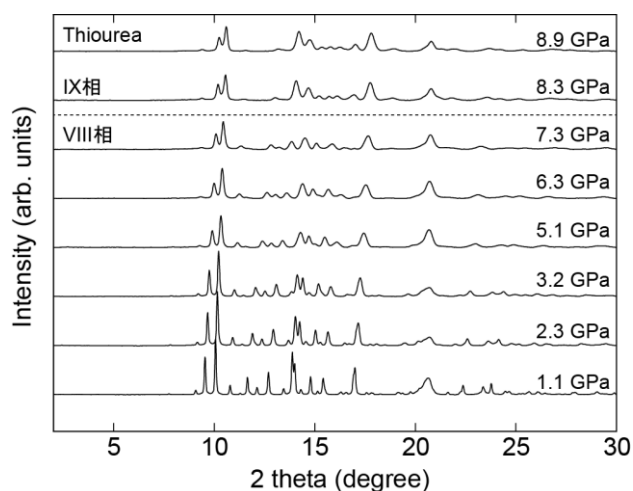


Fig.1 チオ尿素の高圧力下粉末 X 線回折パターン