



# 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 II

坂田 雅文, 伊藤 慎介, 林 幸弘  
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、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となっている。新規の高密度水素化物の合成を目的として、高圧力下で水素や水素源となる物質を用いた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近い高温下という合成条件のために複数の準安定相が混在し、目的とする物質単相を得ることは困難である。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、分子性水素化物が形成する水素結合に着目し、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。本実験では、硫黄および窒素を構成元素とする分子性物質であるチオ尿素 ( $(\text{NH}_3)_2\text{CS}$ ) の高圧力下における構造変化を調べた。同物質を対象とした前回の実験「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」において、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、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した。

## 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 の試料室内にチオ尿素の粉末と圧力校正用のルビー小片を導入した。圧力媒体としてダフネオイル 7373 を使用した。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、加圧および減圧過程での各圧力点 (12 点) における粉末 X 線回折パターン (X 線波長: 0.723 Å) を測定した。

## 3. 結果および考察

Fig.1 に、本実験で得た高圧力下での粉末 X 線回折パターンを示す。圧力媒体を使用したため、圧力の増加による回折線幅の広がり方は、圧力媒体未使用の実験と同じであり、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。そこで、IX 相への相転移圧力を越えた 8 GPa で加圧を止め、減圧過程の測定を行った。その結果、IX 相→VIII 相→VII 相→V 相に対応する粉末 X 線回折パターンの変化を観測することができた。このことから、IX 相までの圧力誘起相転移は可逆であることが分かった。

さらに、これまでの実験で得た粉末 X 線回折パターンを解析し、結晶構造が未知であった VII 相および VIII 相が、両相とも直方晶系の結晶格子を持つことが分かった。

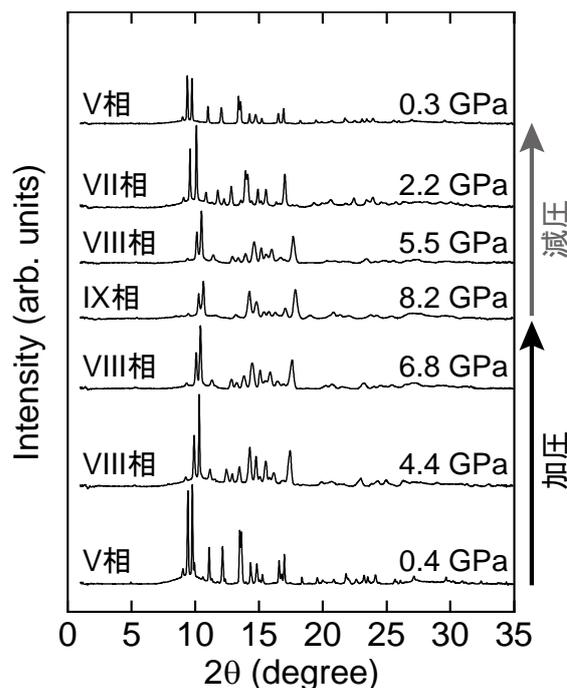


Fig.1 チオ尿素の高圧力下粉末 X 線回折パターン