



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Ⅲ

坂田 雅文, 林 幸弘, 山田 拓馬
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、室温超伝導を実現しう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、金属元素の水素化物を中心とした研究に偏っている。そこで、我々は非金属元素の水素化物超伝導体の発見を目指している。現在は分子性固体を出発物質とした非金属元素の水素化物超伝導体を目的として、ハロゲン元素－水素系を対象に高圧力下での結晶構造と超伝導の可能性について調べており、本実験ではハロゲン化水素（塩化水素、臭化水素）と水素との混合物の高圧力下における相変化を調べた。

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または臭化水素を水素とともに封入した。また、圧力校正用のルビー小片も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、加圧および減圧過程での各圧力点（2 試料で計 8 点）における粉末 X 線回折パターン（X 線波長：0.724 Å）を測定した。

3. 結果および考察

Fig.1 に、本実験で得たハロゲン化水素－水素混合物の高圧力下における粉末 X 線回折パターンを示す。4 GPa の両試料の粉末 X 線回折パターンでは、ハロゲン化水素（立方晶系： $Fm\bar{3}m$ ）に対応する回折線のみが観測できた。この状態から加圧すると、両試料とも 5~6 GPa で粉末 X 線回折パターンに変化が起こった。この圧力領域でハロゲン化水素の相転移はないことから水素との混合によって生じた変化である。加えて、変化が起こった圧力は、申請者が行ったハロゲン化水素－水素混合物の高圧ラマン散乱測定において、純粋な水素と異なる環境にある水素が観測された圧力と一致している。

臭化水素－水素混合物の変化後の粉末 X 線回折パターンにおいて新たに現れたピークは、報告のあるヨウ化水素－水素化合物と同じ空間群 $I4/mcm$ の結晶格子で指数付けできた。ただし、原子配置の決定には至らなかった。本実験により高圧力下では臭化水素と水素が組み合わさった臭化水素－水素化合物が生じることが明らかとなった。一方、塩化水素－水素混合物の変化後の粉末 X 線回折パターンは、空間群 $I4/mcm$ の結晶格子では指数付けできなかつた。したがって、塩化水素－水素化合物が生じること、ハロゲン元素の違いによってハロゲン化水素－水素化合物の結晶構造が異なることが明らかとなった。

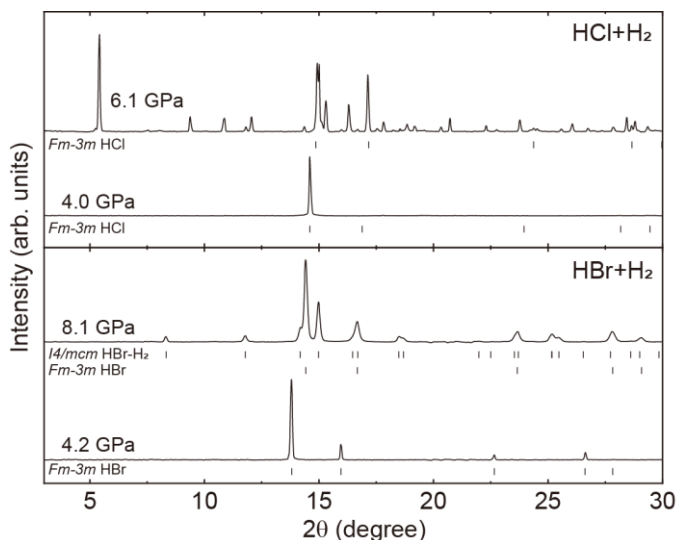


Fig.1 ハロゲン化水素－水素混合物の高圧力下粉末 X 線回折パターン