



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VI

坂田 雅文, 佐伯 友翼, 柳野 祐吾
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

硫黄水素化物超伝導体 (H_3S) の発見以来, 高圧力下で安定化する高密度水素化物は高温超伝導体の候補になっている. 金属元素の高密度水素化物超伝導体はいくつか見つかっているが, 既知の非金属元素の高密度水素化物超伝導体は H_3S のみである. 近年, 高密度水素化物を合成する試みとして, 硫化水素 (H_2S) やヨウ化水素 (HI) と水素 (H_2) との混合物について高圧実験が行われ, 高圧力下において分子性水素化物-水素化合物 [$(\text{H}_2\text{S})_2\text{H}_2$, $(\text{HI})_2\text{H}_2$] が生ずることが分かった[1,2]. また, 我々は臭化水素 (HBr) が高圧力下で水素との化合物を生ずることを明らかにした. 臭化水素-水素化合物 $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ は 8 GPa まで $(\text{H}_2\text{S})_2\text{H}_2$ や $(\text{HI})_2\text{H}_2$ と同じ $I4/mcm$ 構造であることが分かっている. 本研究ではより高い圧力下における $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の構造と安定性を調べるために粉末 X 線回折測定および高圧ラマン散乱測定を行った.

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 の試料室内に臭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 \AA) を測定した.

3. 結果および考察

臭化水素-水素混合物を加圧すると 5.3 GPa で $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ が生じた. 加圧過程における $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の粉末 X 線回折スペクトルを Fig. 1 に示す. 全てのスペクトルは $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の $I4/mcm$ 構造で指数付けをすることができた. また, 単体臭素の弱い回折線が現れたが $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の分解はわずかであった. これらのスペクトルから RIETAN-FP を用いた Le Bail 解析により $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の単位格子体積の圧力依存性を決定した[3]. この圧力依存性に構造相転移を示す明確な変化が見られなかったことから, 22.6 GPa まで $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ は $I4/mcm$ 構造を維持することが分かった. また, 高圧ラマン散乱測定においても 22.6 GPa まで $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ の H-Br 伸縮振動と H-H 伸縮振動によるラマンピークが観測された. したがって, 同じ $I4/mcm$ 構造の $(\text{HI})_2\text{H}_2$ (分解圧力: 12 GPa) に比べ, $(\text{HBr})_2\text{H}_2$ はより高い圧力領域まで安定であることが分かった.

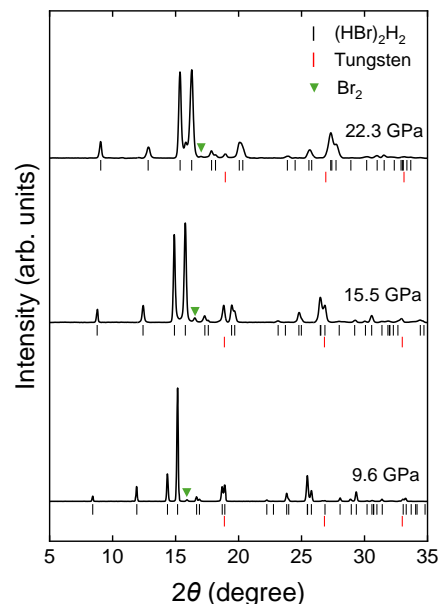


Fig.1 臭化水素-水素化合物の高圧力下粉末 X 線回折スペクトル

4. 参考文献

1. E.J. Pace, *et al.*, *Phys. Rev. B*, **101**, 174511 (2020).
2. J. Binns, *et al.*, *Phys. Rev. B*, **97**, 024111 (2018).
3. F. Izumi, *et al.*, *Solid State Phenom.*, **130**, 15 (2007).