

公益財団法人 立松財団 御中

様式 2021A1,A2,B

2024年 2月 22日

所属： 岐阜大学工学部

氏名： 坂田 雅文



2022年度 助成 研究 終了 報告書

※ゴシック文字で記入下さい。

研究テーマ	水素化物超伝導体を志向したハロゲン化水素－水素分子性共結晶の高圧合成と構造評価
研究の結果	<p>ハロゲン化水素として塩化水素(HCl)と臭化水素(HBr)を選択した。これらと水素(H₂)をダイヤモンド・アンビル・セルの試料室に封入し、ハロゲン化水素－水素混合物の試料を作製した。試料に高圧力を印加することでハロゲン化水素－水素化合物(分子性共結晶)の合成を試みた。物質同定のために、高圧力下でのラマン散乱測定および放射光粉末 X 線回折測定を行った。</p> <p>昨年度発見した塩化水素－水素化合物について、高圧ラマン散乱スペクトルにより、化合物中で塩化水素分子、水素分子が回転していることを明らかにした。さらに、化合物の粉末 X 線回折スペクトルから Conograph を用いて結晶格子の空間群と格子定数の候補を求め、さらに RIETAN-FP を用いた Le Bail 解析によって格子定数を精密化した。その結果、化合物が六方晶系の空間群 <i>P6/mmm</i>、格子定数 $a = 8.8920(5) \text{ \AA}$、$c = 7.9618(4) \text{ \AA}$ の単位格子を持つことを明らかにした。求めた化合物の単位格子体積および化合物中で各分子が回転していることから、塩化水素と水素の単体の単位格子と比較することで求めた化合物の組成は(HCl)₁₆H₆₋₇であった。したがって、化合物中の塩化水素分子と水素分子の比が 2:0.75~0.88 となり、臭化水素やヨウ化水素の水素化合物(HX)₂H₂(X = Br, I)に比べ、塩化水素に対する水素量が少ない。このことから塩化水素は(HX)₂H₂とは異なる構造の水素化合物を生ずることが明らかとなった。</p> <p>上記の研究を発展させ、塩化水素と硫化水素(H₂S)の混合物についても高圧ラマン散乱測定と粉末 X 線回折測定により、高圧力下の構造を調べた。その結果、混合物中の硫化水素の比率が高い場合、6 GPa 以下の圧力下で、塩化水素と硫化水素が混ざり合った立方晶 <i>Fm-3m</i> 構造を持つ化合物が生ずることが分かった。この化合物は、それぞれの分子が回転しつつ結晶構造を形成したプラスチック相であると考えられる。さらに、この化合物を加圧すると、6 GPa を超える圧力下でラマン散乱スペクトルおよび粉末 X 線回折スペクトルが変化し、新奇の硫黄－塩素－水素化合物が生ずることが分かった。</p>
研究発表 (実績)	<p>学会等での発表</p> <p>[1] 高圧力下で合成したハロゲン化水素－水素化合物の構造 坂田雅文, 関戸幹斗, 林 幸弘, 山田拓馬, 木村友亮, 佐々木重雄 日本物理学会第78回年次大会 (2023年9月16~19日, 東北大学)</p> <p>[2] 高圧力下における塩化水素－水素化合物の構造に関する研究 関戸幹斗, 坂田雅文, 林幸弘, 山田拓馬, 木村友亮, 佐々木重雄 第64回高圧討論会 (2023年11月1~3日, さわやかちば県民プラザ)</p> <p>[3] 硫化水素－塩化水素混合物の高圧力下における構造に関する研究 加藤崇真 (指導教員:坂田雅文) 中部・関西誘電体セミナー (2023年12月16日, 名古屋工業大学)</p>

提出期限：研究期間終了後、すみやかに助成金の「必要経費使途明細書」「領収書」と合わせて提出下さい。
年度をまたぐ場合は毎年3月末日までに、途中経過をご記入の上、報告願います。