

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	丹羽 健
研究機関名	名古屋大学
所属部署名	工学研究科
役職名	准教授
研究課題名	高エネルギー密度窒化炭素の創製と機能創出
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

**研究成果の概要**

本研究では、100 万気圧以上における超高压実験によるユビキタス元素の代表である炭素と窒素で構成された新しい高エネルギー密度材料の創製と、その機能創出および物質科学の学理構築に挑戦する。前年度に超高压発生させる装置の先端部に取り付けたダイヤモンドを目的圧力が発生可能な形状に加工し、かつ高出力仕様な赤外線レーザーを導入することで、本研究で合成を予定している超高压超高温環境を実現した。本年度は前年度構築した超高压高温新物質合成システムを用いて、新規な窒化炭素物質の創製に取り組んだ。合成実験で 150 GPa における炭素と窒素の直接反応の他に、常圧下で予め炭素と窒素が結合している分子構造を持つ前駆体を超高压高温下で処理する手法も取り入れた。3 種類の分子性 CNH 化合物を前駆体に用い、50 GPa 以上の超高温（3000 K 以上）で処理したところ、すべての前駆体から欠陥ウルツ鉱型  $C_2N_2(NH)$  が合成された。この結果は、少なくとも数十 GPa の範囲では前駆体の分子構造に依らず  $C_2N_2(NH)$  が最安定相として存在することを示している。さらに圧力領域を拡げてその安定性を調べたところ、100 GPa 程度までの圧力範囲でも安定に存在することがわかった。これらの結果は窒化炭素もダイヤモンドと同様に  $sp^3$  結合四面体が超高压下でも安定に存在することを意味している。圧力によって出現する高密度相の多くは結晶構造中の配位数が増加する場合が多いが、炭素のように結合に寄与する電子が少ない元素では六配位構造の物質創製は難しい。しかしながら、超高压力によって原子間同士を強制的に接近させたり、第三の元素を添加したりすれば、構造の安定性は変わり特異な配位構造の物質が創製される可能性がある。今後、より高い圧下で窒化炭素の超高压物質科学にアプローチすると共に、遷移金属窒化物、リン化物および珪化物などに系を拡げ、圧力軸を導入した新物質探索とその機能開拓に取り組む予定である。