



Title	First-Principles Study on Solid Oxygen and Selenium under High Pressures
Author(s)	Otani, Minoru
Citation	大阪大学, 2000, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3169504
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	おおたに 谷 実
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 15541 号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学位論文名	First-Principles Study on Oxygen and Selenium under High Pressures (高圧下における固体酸素とセレンに関する第一原理計算を用いた研究)
論文審査委員	(主査) 教授 鈴木 直 (副査) 教授 天谷 喜一 教授 三宅 和正

論文内容の要旨

本研究では、高圧下における2種類のVI-b族元素の固体、酸素およびセレンについて第一原理的手法を用いた研究を行った。

1. 固体酸素の分子相

局所密度汎関数近似に基づいて、分子性固体酸素の電子帯構造と全エネルギーを体積の関数として計算し、その電子状態および磁性が加圧とともにどのように変化するかを初めて明らかにした。まず、常圧下においては反強磁性磁気秩序をもつ絶縁体である。加圧に伴い磁気モーメントは減少し、まず、バンドのオーバーラップによる金属化が起こり、反強磁性金属状態が実現される。さらに加圧していくと100GPa付近の圧力では磁性は消失し、分子性結晶構造を保ったまま非磁性状態の金属が安定となる。

2. セレンおよび酸素の単原子相

単原子相セレンの電子状態と全エネルギーを体積の関数として計算し、実験で確認されている β -Po構造からbcc構造への相転移が理論的にも起こることを確認した。また、それぞれの構造に対して求められた格子定数の圧力変化は広い圧力範囲にわたって実験と良い一致を示している。ただし、転移圧力については実験で報告されている150GPaよりも30GPa低い120GPaと見積られた。

単原子相酸素については他のVI-b族元素S、SeおよびTeの場合とは異なり、 β -Po構造からbcc構造への相転移は実験で到達可能な圧力範囲では起きないと予想される結果を得た。

3. 単原子相セレンにおける圧力誘起超伝導

最後に、 β -Poおよびbcc構造のセレンについて、格子振動及び電子格子相互作用を線形応答理論を用いて第一原理的に計算し、超伝導転移温度(T_c)の圧力依存性をはじめて評価した。

bcc構造のセレンについては、減圧に伴うフォノンのソフト化を観測し、特に Γ Nライン上の横のモードの一つに顕著なフォノンの異常を見出した。また、超伝導転移温度 T_c が減圧により著しく増加する結果を得たが、この T_c の減圧による急激な上昇は、前述の Γ Nライン上のフォノン異常によりもたらされることを明らかにした。

β -Po構造セレンにおける T_c の圧力依存性については、bcc相での T_c の振る舞いとは異なり、圧力にほとんど依存しないという結果が得られた。また、 β -Po相からbcc相への相転移に際して T_c の飛びがあり、大きく上昇することを見出した。

論文審査の結果の要旨

本論文では、固体酸素の圧力誘起絶縁体-金属転移に関する第一原理的研究を行って重要な成果を挙げると同じに、セレンにおける圧力誘起超伝導に関しても、第一原理的研究に基づいて興味ある結果（予測）を得ている。

1. 固体酸素における圧力誘起絶縁体-金属転移

局所密度汎関数近似を用いたフルポテンシャルLMTO法で、分子性固体酸素の電子帯構造を計算し、(1)常圧下においては反強磁性磁気秩序をもつ絶縁体である、(2)加圧に伴い磁気モーメントは減少し、まず、バンドのオーバーラップによる金属化が起こり、反強磁性金属状態が実現される、(3)さらに加圧していくと100GPa付近の圧力では磁性は消失し、分子性結晶構造を保ったまま非磁性状態の金属が安定となる、結果を得た。固体酸素の電子状態に関する第一原理計算はこの研究で世界に先駆けてなされたものであり、分子性のまま金属化が起こるという結果は、現在までの実験と矛盾しない結果である。

2. セレンにおける圧力誘起超伝導

60GPaから150GPaで実現される β -Po構造セレンおよび150GPa以上で実現されるbcc構造セレンに対して電子帯構造のみならず格子振動および電子格子相互作用も第一原理的に計算し、超伝導転移温度(T_c)の圧力依存性をはじめに評価した。bcc構造のセレンについては、 T_c が減圧により著しく増加する結果を得たが、これは、ブリルアンゾーン Γ Nライン上の横モードの一つが減圧に伴って顕著にソフト化するためであることを明らかにした。また、 β -Po構造セレンにおける T_c の圧力依存性については、圧力にほとんど依存しないという結果が得られ、 β -Po構造からbcc構造への相転移に際して T_c の飛びがあり、大きく上昇することを見出した。

以上のように本研究は、固体酸素の圧力誘起絶縁体-金属転移について重要な知見を得ていると同時に、セレンにおける圧力誘起超伝導に関して示唆に富む予測をしており、物性物理学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。