



Title	高密度固体水素の金属化に関する研究
Author(s)	柴田, 一範
Citation	大阪大学, 2011, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/58349">https://hdl.handle.net/11094/58349</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏 名	柴 田 一 範
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学 位 記 番 号	第 24811 号
学位 授 与 年 月 日	平成 23 年 3 月 25 日
学位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第2項該当
学 位 論 文 名	高密度固体水素の金属化に関する研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 児玉 了祐 (副査) 教 授 飯田 敏行 教 授 田中 和夫 教 授 上田 良夫 教 授 村上 匠且 准教授 羽原 英明 准教授 長友 英夫

### 論文 内容 の 要 旨

本研究論文は固体金属水素に関して、超電導状態での特徴的な物性を調べると共に、固体原子水素の金属絶縁体転移密度の計算を行った。また、高密度固体分子水素の光解離の割合を計算することで固体金属水素を生成するための新たな手法の提案を行ったものである。

第1章は序論である。高密度、高圧力下の水素の概論を行うと共に、高密度固体水素、特に固体金属水素の研究の背景を説明した。そのような背景の下で、単原子固体金属水素の超電導状態の特徴的な性質を明らかにすること、固体原子水素の金属絶縁体転移密度を求めることが、固体密度の原子水素を生成するための光解離の計算を行うことで固体金属水素を生成するための新しい手法を提案することが本研究の目的であることを述べた。

第2章は超電導状態の単原子固体金属水素の原子相関を研究対象として取り上げた。超電導状態になることによって形成されるクーパー対が原子相間に与える影響を評価するためにデバイ長の表式を導出し、原子核反応率の変化を調べた。

第3、4章では固体原子水素の金属絶縁体転移密度の構造、温度依存性を調べた。電子相関、特にフェルミ面近傍での振る舞い正確に扱うため、また温度の項を取り入れるために動的平均場理論を用いて計算を行った。動的平均場理論の計算方法の中でも計算速度と結果の妥当性の観点で反復摂動法を用いて計算を行った。結果として、300Kにおいて固体原子水素は0.1g/cm<sup>3</sup>程度で金属化することが分かった。これは、固体分子水素に関して予想されている密度(およそ1.43g/cm<sup>3</sup>)に比べて1/10未満である。すなわち、固体原子水素の場合従来よりも圧倒的に小さい圧力領域で金属化が起る可能性があることが分かった。

第5章は光解離によって固体密度の原子水素を生成するための計算を行った。ダイヤモンドアンビルセル中の固体水素分子に対して超短パルスレーザーを入射する状況を考えた。多光子過程によって水素分子は十分なエネルギーを得て励起状態に遷移する。解離が可能な状態へ遷移した分子はそのまま解離する。本計算では様々な時間波形を持つレーザーを考え、解離する分子の割合やその時の温度上昇を計算で求めた。その結果、ローレンツ型の波形が最も解離の割合が大きい事がわかった。その割合は50%程度である。また、温度上昇はローレンツ型が最も小さいことがわかった。

第6章は結論である。本研究の成果をまとめ総括を行った。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は固体金属水素に関して、イオンのダイナミックスに注目した物性に関する研究結果をまとめると共に、固体原子水素の金属絶縁体転移密度の理論的評価と高圧水素の光解離を利用して固体金属水素実現の新たな手法を提案したものである。常温、常磁性での固体原子水素の金属化密度が常温の固体分子水素の金属化密度として、従来、予想されていた値に対して約1/10程度であることを示し、また光解離によってダイヤモンドアンビルセル中の水素分子を高圧力に保ったまま解離させることができることを示している。

第1章は序論であり、固体金属水素の重要性と特徴を述べ本研究の位置付けを示している。

第2章は単原子固体金属水素における原子核と電導電子の相互作用に着目し、超電導状態の単原子固体金属水素の原子相関を評価している。このためにデバイ長の新たな表式や原子核反応率を導出している。その結果、他の物質では見られない特徴的な効果として、クーパー対が原子間の斥力ポテンシャルを強く遮蔽し、原子相間が大幅に強くなることを初めて見出している。

第3、4章では固体原子水素の金属絶縁体転移密度の構造、温度依存性を計算している。第3章で電子状態のモデル化を行い、考える結晶構造に依存するパラメーター等を導出している。第4章で金属絶縁体転移密度の計算を行っている。電子相間、特にフェルミ面近傍での振る舞い正確に扱うため、また温度の効果を取り入れるため、動的平均場理論を用いた計算が行われている。結果として、300Kにおいて固体原子水素は0.1g/cm<sup>3</sup>程度で金属化することを明らかにしている。これは、固体分子水素に関して予想されている密度(およそ1.43g/cm<sup>3</sup>)に比べて1/10未満であり、従来よりも圧倒的に小さい圧力領域で金属化が起こる可能性を初めて計算で示している。

第5章では高圧水素の光解離によって固体金属水素を実現する全く新しい手法が提案されている。ダイヤモンドアンビルセルに封入した高圧固体分子水素を超短パルス高輝度紫外光の多光子吸収過程を利用して、効率的に光解離させることで高密度原子水素を生成し固体金属水素に相変化させる手法である。この光解離を様々な条件で評価することで、その実現性を理論的に検討している。

第6章は結論であり、得られた研究成果をまとめ本論文の総括を行っている。固体金属水素の特性に関する理論的評価からそれを実現する新たな手法の提案に至るまでをまとめている。

以上のように、本論文は、単に固体金属水素の特性を理論的に評価のみに留まるのではなく、その成果をもとに新たな実現手法を提案しその可能性を評価している。これらの結果、考察は人類の長年の課題である固体金属水素実現に重要な知見を与えている。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。