

## 【特別推進研究】

### 理工系（数物系科学）

#### 研究課題名 超高压力下の新物質科学：メガバールケミストリーの開拓



大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

しみず かつや  
清水 克哉

研究課題番号：26000006 研究者番号：70283736

研究分野：物性

キーワード：高圧力、超伝導体、金属物性、磁性

#### 【研究の背景・目的】

メガバール（100万気圧）を超える圧力領域の物質科学を新展開させると同時に、これまで為し得なかった物質創造に挑戦する。超高压の世界に隠されている新奇物性を解き明かし、新現象や新物質を創成し、革新的な材料開発につながる新しい固体物理の構築を目指す。メガバールの超高压力は、もはや単純に原子間距離を縮めるだけの効果ではなく、電子軌道を変化させ、原子のネットワークを組み替え操作する「超高压化学」すなわち、メガバールケミストリーの領域に入ろうとしている。メガバールケミストリーにより、新しい状態と現象を生み出し、物質科学および材料開発における新たな手法を構築する。本研究では超高压力による顕著な効果が期待できる、シンプルなシステムと機能性物質に焦点をあて、必要な技術開発とあわせて以下の3項目を目的とする。A「水素をはじめとしたシンプルなシステムの超高压物性」、B「超高压合成による機能性物質のフロンティア」、C「革新的な高圧力実験技術および理論計算手法の開拓」

#### 【研究の方法】

A：原子番号1の水素は、4メガバールの超高压状態では金属となり室温超伝導を示すと考えられている。水素を高密度に圧縮し、超伝導相の有無、分子構造の情報など元素の究極構造に迫ることを目指す。また高温の超伝導性が軽いハロゲン元素および水素を分子状または原子状に内包する金属水素化物には、金属水素に似た電子状態を生成できる可能性がある。これら軽元素および水素関連物質の超高压物性および超伝導性を明らかにする。

B：熱電材料、マルチフェロイクス材料、高磁気抵抗素子、炭素系ナノ構造体、水素貯蔵物質などの材料は、環境調和をめざした高性能化が求められている。メガバールを経験したことの無いこれらの材料の物性を明らかにする。さらに超高压力を用いた合成または化学反応にも注目し、新しい物質機能の開発をめざす。

C：高圧実験に用いられるダイヤモンドを用いたダイヤモンドアンビルセルの発生限界とされる4メガバールを超える技術開発を行う。同時にサブミクロンサイズの微細な領域の精密な構造解析と物性測定を広い温度圧力の範囲で同時に実現させ、超高压力下物性測定プラットフォームを確立させる。また、第一原理電子状態計算を用いたコンピュータ・シミュレーションは超高压下における物質の結晶構造・

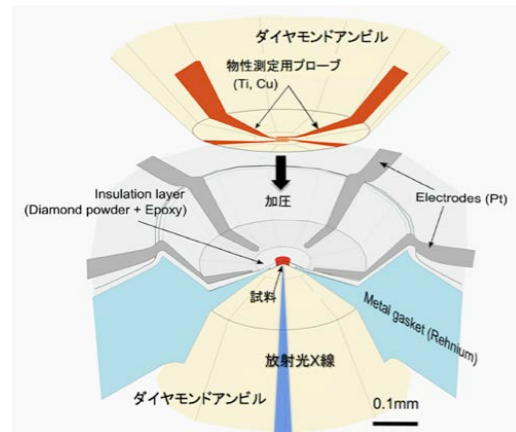


図1. メガバールプラットフォーム

物性の予測や解析において強力な手法となっている。上記のAおよびBにおいて、最新の計算手法を駆使して、圧力誘起相転移、安定構造圧力誘起超伝導転移等の物性において精密理論計算を行う。

#### 【期待される成果と意義】

目標の1つとして挙げている金属水素の実現は、単に科学者の長年の夢をかなえるだけでなく、物質の存在形態に関する新しい科学的知見を与える。室温超伝導が実現できた場合のインパクトは計り知れない。メガバールの高圧力による新超伝導体の発見、機能性材料の創出や合成法の確立は、これまでの元素置換やドーピングなどといった操作による物質開発や機能探索の限界を打破して、超伝導をはじめ発電など省エネルギーにつながる高圧力における先駆的な成果は物質機能開発の基盤をなすと期待できる。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ K. Shimizu, “Elemental Superconductors” 100 years of Superconductivity 4-8, 278-282, CRC Press, Taylor & Francis (2011).
- ・ T. Matsuoka and K. Shimizu, Direct observation of a pressure-induced metal-to-semiconductor transition in lithium, Nature 458, 186-189 (2009).

#### 【研究期間と研究経費】

平成26年度～30年度 359,500千円

#### 【ホームページ等】

<http://hpr.stec.es.osaka-u.ac.jp>  
shimizu@stec.es.osaka-u.ac.jp