

研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		金属状態水素の創出:超高密度水素への電子ドーピングによるアプローチ			
研究テーマ (欧文) AZ		An approach to metallic hydrogen by electron doping to high-density hydrogen.			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓)マツオカ	名)タカヒロ	研究期間 B	2013 ~ 2014 年
	漢字 CB	松岡	岳洋	報告年度 YR	2015 年
	ローマ字 CZ	Matsuoka	Takahiro	研究機関名	岐阜大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		岐阜大学 工学部 電気電子・情報工学科 電気電子コース			
<p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)</p> <p>本研究では高密度で水素を含有する金属水素化物 LiH_x 及び BeH_x を合成し、これを圧縮することで未だ実現されない水素の金属状態を創出することを目的とした。</p> <p>金属水素化物合成のために、高温高压合成法の適用を試みた。1 GPa (1 GPa=1 万気圧) 以上の圧力下で水素の化学ポテンシャルは急激に増大する。さらに、これに高温という条件を加えて金属と水素の化学反応の促進を狙った。</p> <p>Li と H_2 を高压力発生容器中で混合して、6 GPa で 1800 K に加熱した後、30 GPa まで加圧すると、従来唯一知られている Li 水素化物である LiH に比して原子体積が約 14 % 膨張した、立方晶の結晶が出現した。Raman 散乱測定で H_2 分子の分子内伸縮振動モードが複数観測され、結晶格子内に H_2 分子を内包する LiH_x の生成を確認した。LiH_2 又は LiH_5 が生成したと考えている。この LiH_x は約 180 GPa まで透明な絶縁体であった。</p> <p>同様に Be と H_2 を 7 GPa 及び 18 GPa で 1700 K に加熱すると、それぞれの圧力で hcp 構造及び fcc 構造をもつ水素化物が出現した。これらは従来唯一存在が知られている BeH_2 には該当しないことが X 線回折と Raman 散乱測定から確認され、また原子体積の膨張から、新しい BeH_x の生成が明らかとなった。hcp 構造の BeH_x は約 14 GPa まで安定に存在し、金属光沢は観測されなかった。</p> <p>水素を高密度で含む金属水素化物の合成には成功したが、目標である金属化には至らなかった。しかし、LiH_x の格子中に含まれる H_2 分子の挙動が圧力下で様々に変化する様子が捉えられ、本研究で得られた LiH_x は高密度状態にある水素の物性の新たな側面を研究する格好の舞台であることが見出された。新しい研究の展開に繋がる大きな成果が得られたと考える。</p> <p>本研究にご支援を頂いた住友財団基礎科学研究助成に深く感謝を申し上げる次第である。</p>					
キーワード FA	水素	金属水素化物	高压		

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Heating of Li in hydrogen: possible synthesis of LiH _x							
	著者名 ^{GA}	Kuno, Matsuoka et al.	雑誌名 ^{GC}	High Pressure Research					
	ページ ^{GF}	16~21	発行年 ^{GE}	2	0	1	5	巻号 ^{GD}	35
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要^{EZ}

The aim of this study is approaching to the metallic state of hydrogen by compressing metal hydrides LiH_x and BeH_x that consists of large amount of hydrogen.

In order to synthesize LiH_x and BeH_x, high-pressure and temperature method was applied. The chemical potential of hydrogen exhibits significant increase at pressures above 1 GPa (1 GPa = 10000 bar). In addition to pressure, we added high temperature to enhance the chemical reaction between metals and hydrogen.

The mixture of Li and H₂ was mixed and heated at 6 GPa and 1800 K, and then it was squeezed to 30 GPa. A cubic structure was confirmed in X-ray diffraction and it was found that its atomic volume was 21 % larger than that of LiH that has been the only known stable phase of lithium hydride. Raman scattering measurements indicated that the material consists of H₂ molecules in its crystal lattice. These results indicate that the novel lithium hydride LiH_x (x>1) was synthesized using high pressure and temperature. It is considered that this LiH_x might be LiH₂ or LiH₅. The synthesized LiH_x was confirmed to be a transparent insulator up to 180 GPa.

The mixtures of Be and H₂ were heated to 2000 K at 6 GPa and 12 GPa. The samples heated at 6 GPa and 12 GPa were confirmed to be in hcp and fcc structures, respectively. Both of phases have significantly larger atomic volumes than that of pure-Be metal. This result supported the synthesis of novel Be hydrides BeH_x. The hcp-BeH_x was confirmed to be stable up to 20 GPa and it did not show metallic reflection.

This study was successful in the synthesis of novel hydrogen rich metal hydrides, but the metallic state of them was not achieved. However, various new phenomena were confirmed in H₂ molecules that were contained in the crystal lattice of LiH_x. This indicates that LiH_x synthesized in this work is suitable to reveal the new aspects of physical and chemical properties of H₂ under pressures. At this point, this work is considered to have significant contribution to open up the door to the new field of materials science/physics.

The support from the Sumitomo foundation is greatly appreciated.