



研究室紹介

## 高密度水素の話

中村 伝

圧縮水素の実験的研究は世界の各所でおこなわれている。どれだけの圧力で、どれだけ凝縮水素の体積がちぢむか、これは、いわゆる状態方程式である。極端に圧縮した水素は、私たちが知っている水素とは、ひどく違った性質を示すのではないか。

水素を極端に圧縮すると金属になる。このいわゆる金属水素は室温近くまで超伝導である、といわれている。木星の主成分は水素である。その中心部の圧力は1億バールのあたりにあるようで、したがって木星では、表面近くを除くと、ほとんど金属水素だということになる。

常圧の世界では、水素は分子である。それは、絶対温度20度で液体になり、14度で固体になる。この固体状態で、水素分子は一つの単位を保持し、分子の間の弱い引力でたがいに結びつきあっている。いわゆる分子結晶をつくるのである。

さて元素の周期律表を見ると、水素はリチウムの上にある。だがリチウムやナトリウムのように金属をつくらない。価電子が1個の元素のなかで、どうも水素は特異な位置を占めているようである。アルカリ原子は体心立方構造の金属となるのに、水素はそうせずに分子をつくるのは、いったいなぜだろう？ 物理的条件が変わってくると、水素もアルカリ金属と同様な性状を呈するのではないだろうか？

こんな疑問から、金属水素というアイデアが生れた。学生時代、サイツの固体電子論の教科書を読んだとき、目にとまった個処がある。いま探してみると、こうある：「水素の金属的形態は知られていないけれども、ウィグナーとハンティントンが、それがどんな条件で安定になるかを見つめるために、この仮想的物質の性

質を計算した。この計算は、金属格子が体心立方だと仮定してなされ……」

体心立方の金属水素を考えたのは、アルカリ金属のことが念頭にあったのだろう。理論物理の泰斗ウィグナーの結果は要するにこうである。水素原子核を体心立方格子の上にならべ、電子的エネルギーが原子核間距離とともにどう変わるかを計算する。すると、ある核間距離で、エネルギーの最も低くなる位置が出てきた。このエネルギーの谷に相当する、水素原子の密度は常圧の固体水素より8倍ほども高かった。だが、水素原子の最も低いエネルギー準位から見た谷の深さは、水素分子のつくる谷の深さの1/4 くらいしかなかった。

坂道におかれたボールは下へところがり落ちていく。水素の原子集団も、同じように、エネルギーの谷底へと落ちていく。最も深い谷の底は集団系の最も安定な配置をあらわしているのである。こうして水素は金属にならずに、分子となるのだ、というわけである。

だが、これは常圧のできごとである。圧力のかかった物質は、一般に、疎な構造よりは密な構造を好む。いまコンプレッサーで物質を押ししていく。もし疎な構造から密な構造へ移るとき、コンプレッサーのなした余分の仕事によって、エネルギーの深い谷から浅い谷へと、物質はたたき上げられる。ちょうど谷の落差がコンプレッサーのなした仕事にバランスするところで、物質系は疎な構造から密な構造へと移るわけである。こうして水素は分子相から金属相へと転移できる。

転移圧の見つもりは、ウィグナーたち(1935年)の0.4メガバールから、時代とともに、ウナギ上りに高くなっていった。多くの挑戦者たちの見つもりのなかで、レコードは13メガバールである。しかし、だんだん2メガバールのあ

中村伝 (Tuto NAKAMURA), 大阪大学基礎工学部, 教授, 理学博士, 物性理論

たりに落ちていった。

転移圧の見つもりがひどくばらついた一因は、水素分子の間にはたらく力が、分子をぎゅうぎゅうづめにしたときに、どうなっているのか、よくわからないことによる。この分子間力に対する、私たちの知識は、分子が比較的に離れあっているときには、よく確立されている。この知識を、分子がきわめて近づきあった場合に、外挿しようというわけなのである。金属相に対して、分子相の私たちの知識が貧困だというのが、おおかたの見解である。要するに、木に竹をつごうとしている、ということである。

だが、金属相に対する考えは、ほんとに無キズなのだろうか？ 1970年代になって、ソビエトから奇妙な論文が出た。科学アカデミーから派遣されて来日した客に聞いたところ、著者の一人プロフマンはその後、自動車事故で死んだ若者で、もう一人のカガンは学界のボスだとのことである。彼らによれば、体心立方構造水素はエネルギーの浅い谷にさえもなっていないのである。

立方体を体積一定のもとで上下に伸ばすと、前後と左右に沿うての長さはちぢまる。このような変形で、立方格子は、水平面内で原子は互いに近づき、垂直方向では遠ざかるか——こんな配置になっている。すなわち、面のなかで密な構造をとり、面の間が疎である。これは層状構造とよばれるものである。もし上下に沿うて、伸ばすかわりに、ちぢめたらどうなるか？ やはり体積は一定であるという条件で、立方格子は、こんどは、上下の線に沿うて原子は密にならんでおり、前後と左右の向きに沿うて疎である。すなわち、稠密にならんだ原子の鎖があって、鎖同志の間が離れあっている。これはヒラメント構造である。

プロフマンたちによれば、よほど圧力が高くない限り、金属水素は層状か線状かになろうとする傾向がある。すなわち、ウィグナーたちの金属水素は安定ではない、というわけである。

そんな馬鹿なことが起こるものか、と思った。きっと何かウソがあるに違いないと考え

た。このウソを探そうということになった。だがミイラ取りがミイラになる。研究していく間に、なぜプロフマンたちの結果が出てきたかが、だんだん明かになってきた。

ふつうの金属では、価電子の内側に、結合に参加しない、閉じた電子の殻がある。このようなコアが水素にはない。結晶のわく組となるプロトンは、いわば点電荷なのである。この点電荷の間の反撥エネルギーが、立方結晶をつくる、たった一つの要因だった。残りの、電子的なエネルギーは、どれも立方結晶をこわそうとする向きに働いていた。

密度が最も高い側では、プロトン電荷の間の反撥エネルギーが最も発言権が強い。こうして結晶は立方的である。だが密度をすこしずつ減少させていくと、電子的エネルギーの傾向が頭をもたげてくる。こうしてプロトンの反撥力の要求は、すこしずつ譲歩せざるをえなくなる。最も譲歩してしまえば、それは分子である。立方、層状、線状といくにつれて、ある原子が最も近くに引き寄せている隣人の数はすくなくなっていくのである。こんなことが、密度を低くしていくにつれて、上の順で起こる。

だが、それだけではない。さらに密度を低くしていくと、線状水素は不安定になる。ヒラメントのなかで、プロトンが互い違いに変位して、カップルをつくった配置が安定になる。すなわち、水素はヒラメント構造から分子状へと移っていく。こんなことが、既に指摘した「木に竹をつぐ」ようなやりかたではなく、一貫して理解できるようになった。

液体水素（常圧）密度の3倍から5倍あたりの高密度水素について、現在はまったくのくらやみの状態である。この領域を明かにしていくことができれば、と思う。実験を説明するのが理論のすべてではない。予測という機能をはらんでいるのである。水素は最も単純な原子である。高密度水素の挙動の全貌が、理論的に明かになるのも遠いことではあるまい——すくなくとも温度のない水素（をここでは語った）については。