

PRESS RELEASE (2025/08/05)

水素誘起金属－絶縁体転移に伴う電子状態変化の直接観測に成功

～新たな機能性水素化物材料の開発につながる可能性～

ポイント

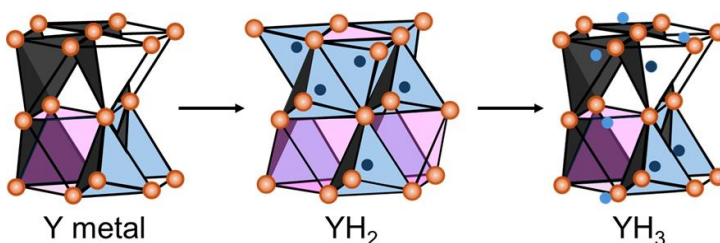
- ① 高濃度に水素を吸蔵した金属は多彩な性質を示すが、その微視的な起源については十分に解明されていなかった
- ② マイナス 253℃で液体水素からイットリウム金属(※1)内に水素を吸蔵させながら、生成水素化物の電子状態の直接観測に初めて成功した
- ③ 水素化物の電子物性においても電子相関が重要な役割を担うことを明らかにすることで、今後の機能性水素化物材料の開発に新たな指針を示すことが可能となった

概要

高濃度に水素を吸蔵した金属に超高压を印加すると室温近傍でも超伝導転移が観測されるなど、金属水素化物が示す多彩な性質は様々な先端科学分野において利用が期待されています。今回注目したイットリウム水素化物では、水素濃度の上昇とともに金属－絶縁体転移が出現することにより、電気伝導性や光学的性質が大きく変化することが知られていました。しかしどのような機構でそのような大きな物性の変化が出現するのか、その微視的な起源の解明は長年の課題でした。

九州大学大学院工学研究院の河江達也准教授と宮川一慶元博士大学院生(令和5年修了)、志賀雅亘助教、稲垣祐次元助教(現：岡山理科大学准教授)の研究グループはマイナス 253℃(20 ケルビン)という極低温で液体水素からイットリウム金属内に水素を吸蔵させながら、生成された水素化物の電子状態の変化を直接観測するという独自に開発した実験方法を用いて、水素濃度の上昇に伴う詳細な物性変化を測定しました。測定の結果、イットリウム水素化物の電子状態は金属状態から絶縁体的状態に連続的に変化していることを初めて明らかにしました。この結果は電子相関効果(※2)が水素化物の電子物性に重要な役割を担うことを示しており、金属水素化物が示す多彩な電子物性の解明に役立つだけでなく新たな機能性水素化物材料の開発につながる成果と期待されます。

本研究成果は米国物理学協会発行の学術誌「Low Temperature Physics」のオンライン版に2025年7月1日(火)付で公開され、その重要性から「Editor's Pick (注目論文)」にも選出されています。



図：常圧下のイットリウム金属は原子1個に対して、最大で3つの水素原子を吸蔵する。その二水素化物(YH₂)は面心立方構造をとる。さらに水素が取り込まれ三水素化物(YH₃)になると六方細密構造へ構造変化することが知られている。この YH₂ から YH₃ への水素吸蔵過程で金属－絶縁体転移が生じる。オレンジ色の球がイットリウム金属、青色の球が水素を示す。

研究者からひとこと：本研究では $T \sim 20\text{K}$ において水素が金属内部へ吸蔵する現象を観測していますが、これは水素が量子力学的なトンネル効果によって金属内部に侵入することを意味します。水素はエネルギー関連研究から機能性水素化物材料の開発に至るまで非常に幅広い分野で注目されていますが、このような水素の示す多彩な性質を理解する上で、水素の持つ強い量子力学的な性質を理解することが不可欠であることを、本研究を通してあらためて感じました。

【研究の背景と経緯】

水素は質量が最も小さい元素のため強い量子性を示すことが知られています。実際に、水素の金属表面から内部への侵入・拡散過程においては量子力学的なトンネル効果に関与します。さらに内部に侵入した水素は金属原子の電子バンドと混成することで、母金属の電子状態にも影響を及ぼします。その代表例として、高濃度に水素を吸蔵した金属に超高压を印加することにより出現する、室温近傍に転移温度を持つ超伝導が挙げられます。また高濃度に水素吸蔵することにより、金属－絶縁体転移が誘起されることもあります。一方、このような高濃度水素化物が示すその量子性に起因する多彩な振る舞いは十分に解明されていませんでした。これは、水素吸蔵は一般に高温で行われるため試料作製時に空孔・欠陥が発生する、物性測定を行う低温域まで冷却する際に試料が破砕する、金属内部の水素吸蔵・拡散過程やその電子状態を微視的に直接検出できる方法が限られている、などの理由によります。

【研究の内容と成果】

マイナス 253°C(20 ケルビン)という極低温で、液体水素に浸したイットリウム金属製のナノ接合に電圧印加することで、水素を吸蔵させながら、生成された水素化物の微分伝導信号を直接観測できる実験装置(図 1)を独自に開発しました。それを用いて、水素濃度の上昇に詳細な物性変化を測定しました。水素吸蔵前の微分伝導が金属的な電子状態を示すのに対して、液体水素中で電圧を印加するとイットリウム金属が高濃度に水素吸蔵し、微分伝導信号が絶縁体的な信号に連続的に変化していくことを初めて明らかにしました。この結果は電子相関効果が水素化物の電子物性に重要な役割を担うことを強く示唆しており、金属水素化物が示す多彩な電子物性の解明に役立つだけでなく新たな機能性水素化物材料の開発につながる成果と期待されます。

【今後の展開】

高濃度水素化物では高温超伝導、金属－絶縁体転移、磁気相転移などの多彩な現象が見られるのですが、水素の強い量子性のためにその微視的な機構は十分に解明されておられません。この成果は、水素が誘起する多彩な量子物性解明に役立つと期待されます。

【参考図】

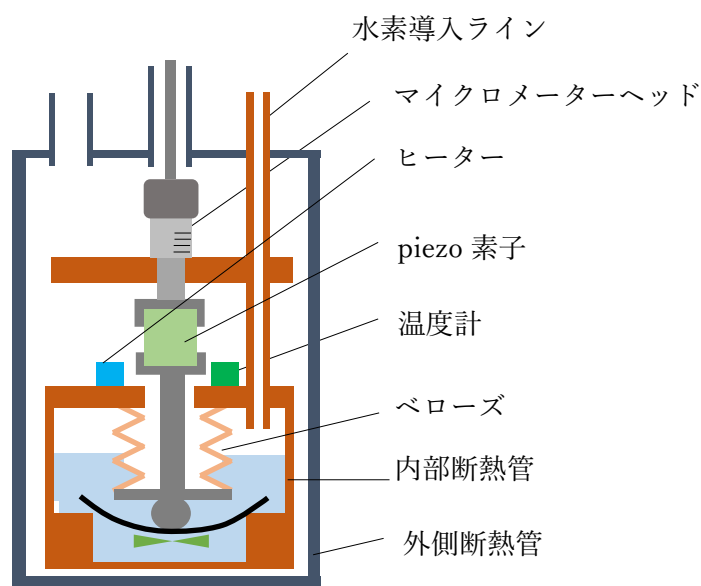


図 1：実験装置の模式図。断熱管が二重構造になっているため、試料が設置されている内部断熱管内を液体水素で満たした状態で金属ナノ接合を制御しながら測定を行うことができるようになっている。

【用語解説】

(※1) イットリウム金属

イットリウム金属は、LED の赤色蛍光体の材料や YAG（イットリウム・アルミニウム・ガーネット）レーザー、高温超伝導体など、さまざまな機能性物質の材料として使用されています。このことから分かるように、イットリウムの化合物は多様な物性を示します。

(※2) 電子相関効果

電子相関効果は、複数の電子が互いに反発し合いながら同時に運動することによって生じる現象であり、バンド理論に基づく平均場近似（例：ハートリー・フォック法）では十分に記述できない部分を指します。

【謝辞】

本研究は科学研究費(課題番号：25220605, 26600102)、池谷科学技術振興財団、日本板硝子材料工学助成会、村田学術振興財団の支援を受けました。

【論文情報】

掲載誌：Low Temperature Physics

タイトル：In situ investigation of electronic properties in yttrium hydride using point-contact spectroscopy

著者名：宮川一慶、太子周、高田弘樹、山口大志、志賀雅亘、稲垣祐次、河江達也

D O I : 10.1063/10.0036932

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院 准教授 河江達也（カワエタツヤ）

TEL：092-802-3521 FAX：092-802-3501

Mail：kawae.tatsuya.122@m.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp