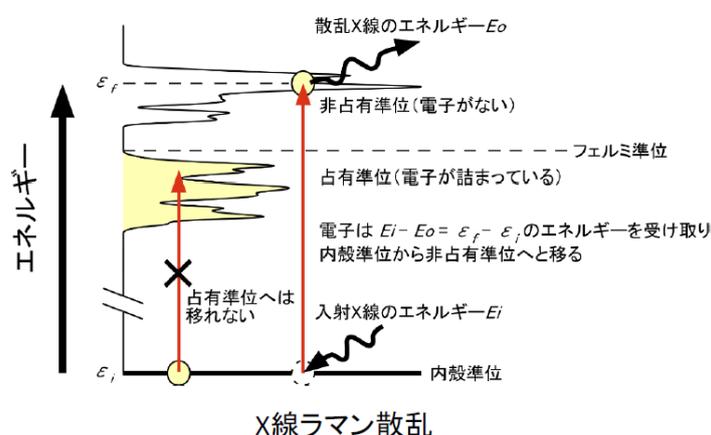


酸素金属化に伴う電子状態変化を 世界で初めて実測



福井宏之助教(左)と Le The Anh 博士(右)



概要:

兵庫県立大学の福井宏之助教(理化学研究所客員研究員兼務)、和田正弘大学院生(当時)、理化学研究所情報システム本部計算工学応用開発ユニットの Le The Anh 研究員(当時)は、台湾の國家同步輻射研究中心(NSRRC)、高輝度光科学研究センター(JASRI)、愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター(GRC)と共同で、100万気圧で酸素が金属化することに伴う電子状態の変化を X 線ラマン散乱測定と電子状態計算により解明しました(詳細は「参考リンク」をご覧ください)。これは、大型放射光施設 SPring-8 とスーパーコンピュータ「京」とを連携させた研究成果で、米国科学誌「米国科学アカデミー紀要(Proceeding of the National Academy of Sciences of the United States of America)」においてオンライン公開されました。本研究はポスト「京」萌芽的課題 1-1-C の支援を受けました。

論文情報:

Hiroshi Fukui, Le The Anh, Masahiro Wada, Nozomu Hiraoka, Toshiaki Iitaka, Naohisa Hirao, Yuichi Akahama, & Tetsuo Irifune, “Electronic structure of dense solid oxygen from insulator to metal investigated with X-ray Raman scattering”, *Proc. Natl. Acad. Sci USA* (Latest Articles).

<https://doi.org/10.1073/pnas.1905771116>

関連論文:

Le The Anh, Masahiro Wada, Hiroshi Fukui, Tsutomu Kawatsu & Toshiaki Iitaka, “First-principles calculations of the epsilon phase of solid oxygen”, *Sci. Rep.* 9, 8731 (2019).

<https://doi.org/10.1038/s41598-019-45314-9>

参照リンク:

[公立大学法人兵庫県立大学](#)

[国立研究開発法人理化学研究所 \(top page\)](#)

[公益財団法人高輝度光科学研究センター](#)

[国立大学法人愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター](#)



大型放射光施設 SPring-8



スーパーコンピュータ「京」