に再現できる。この事からアルカリ原子吸着系は長距離的秩序がないような無秩序状態でも、非常に強い、そして温度依存性のある短距離秩序状態にあることがわかる。

どころでこの高温展開の部分和によって得られた積分方程式は展開の低次に現われる簡単な項の繰返しをすべて含んでいるが、その物理的意味は必ずしもよくわかっているわけではない。そこで Kirkwood 等の液体論の方法をもちい、この積分方程式の近似の程度を調べてみた。これによると高温展開の部分和によって得られた積分方程式は液体論の方法の中で重ね合わせの近似をもちいその一部を平均場で近似したものと対応づけることができる。このことはこの積分方程式が幾分気体論的なものであることを示しており、秩序・無秩序相転移の議論まではこのままの形では困難であると考えられる。

また同じ系に対して 相転移までの議論が可能だと考えられる Green 関数の方法を用いて計算を行なった。高温展開と同様に、相関関数の自己無憧着型の積分方程式をうることが出来るがその解を求めることには成功していない。今回は、高温展開の方法との対応を比較、検討してみたい。

| 2 REBa2Cu3O1-6の石京 | |
|-------------------------------------|------------------|
| | 兼子哲幸 |
| 1 Nb に 金同 と クラッドした線村: | 試料では NA内の2-11-12 |
| が超伝真近接効果によって全 | |
| 又177-効果之示す。我久の測定 | - |
| Cuの界面からほぼ50Mm以 | |
| マイスナー交が果を示すことが毎見りして | |
| 石狐性不純物で含む系に応用し 混入したCuをNbにクラッドし線す | |
| ニュニスしたしはとノンロニソラットしまれた | |
| による数乱 なわら Kondo 交が果」 | • |
| 号の響されることがわかった。 | |

| 上作成しその電気抵抗、AC帯磁率DC帯磁率を測定した。 |
|--|
| それらの全てはほぼ gok 内近で抵抗がゼロになった。RE17ンの |
| 有効石鉱子。大きはフリーなRE3+インのそれとほぼ同じであった。また |
| 比動等の測定によれば (Nd Sm. Gd. Dy. Ho. Er. Yb) z 含むものは |
| それらのREはつのモーメントが任き显でたダーなことがわかっている。 |
| LかLAC帯磁率の結果によると30mkまで完全マイスナー効果が維持さ |
| 小7113。よって磁気的な整列×超伝真は共存(でなり、このことが) |
| YBazCuzOn-sの構造によいてY(RE) site の原子は起伝道に |
| 雪与していないものと考えられる。 |

固体LiHの金属化圧の計算と状態方程式

川上 展弘

固体 Li Hの衝撃波状態方程式(Hugoniot)及び圧力下における非金属~金属転移の転移圧を密度汎関数法に基づいて計算を行う。 固体 Li Hは常圧で B1 (Na Cl型)構造の比較的バンド・ギャップの小さな(4.99 eV)の絶縁体であり、 Marshの衝撃波実験によると~45 GPaで相転移を示さない。 常圧下における格子常数の計算値(rigid lattice)と実験値の比較を Table Iに示す。 零点振動の効果が無視できないが、 計算値は~3%小さな値を与える。

凝集エネルギーを(分離した原子のエネルギー)ー(T=0 Kの固体のエネルギー)と定義すると、凝集エネルギーの計算値は 431 KJ/mole(実験値~463 KJ/mole)となる。

格子振動をDebye近似をして、Hugoniotの計算を初めて行った。でLiDのHugoniotの実験との比較をFig.1に示す。計算結果は、~10%低い圧力を与えるが、傾向としては、かなり合っている。

金属転移圧の計算は、Beringer (Pn=3.5 TPa, Vn=0.34 cm³/mole)及び、Vaisnys & Zmuidzinas (Pn=110 GPa, Vn=5.0cm³/mole)があるが、前者はbandclosing mechanismをfcc He と同一(W-L)と仮定していて また、後者は古典的な Herzfeld理論を用いて評価している。そこで、APW法を使って、圧力下における電子状態を計算し、両者と異なる結果を得た(Pn=226 GPa, Vn=3.35 cm³/mole)。 band gapの圧力変化をFig.2に示す。また、B1(NaC1型)構造~B2(CsC1型)構造転移についても議論したいと思う。