

14. 高密度固体水素における格子変形と方向秩序の協力転移

高 森 靖 博

最近、高圧下での固体水素の研究がさかんに行われている。

Mao らは、X 線回折で normal hydrogen の構造解析を 300 K で約 0.3 Mbar までおこなった。それによると normal hydrogen は hcp 構造のままであったが、圧力の増加に伴い結晶軸の比 c/a の値は ideal hcp 構造での値 $\sqrt{8/3}$ から 2~3 % 減少して縮む。

この格子変形の機構は、分子が球対称で自由に回転していると仮定すると解釈が困難であり、分子の回転状態の変化を伴う協力的なものであると考えたと理解できる。

高圧下での固体水素の回転状態の変化（圧力誘起転移）は、England ら（Pa3 構造）及び Aviram ら（ideal hcp 構造）によって研究されたが、これらの計算はいずれも格子変形を考慮していない。もし、格子変形と分子の回転状態の変化の協力現象を考慮すると、転移はこれまでの計算結果よりさらに低い圧力で起こると期待される。

今回の計算では、二体の分子間力を用いて rigid lattice を仮定して分子の方向秩序と格子変形の協力転移のモデルを考えた。オルソ分子とパラ分子はランダムに配置していると仮定して、分子場近似でこのモデルを取り扱った。

c 軸方向への歪みのパラメーター γ を

$$\gamma = (c/a)/(c/a)_{\text{ideal}}$$

とすると計算で得られた格子歪みは $\gamma - 1 = 0.01 \sim 0.03$ で、歪の大きさは実験とよく合っているが、実験と異なり結晶は c 軸方向に伸びる。また、転移圧 P_c は実験より高かった。

発表では、我々の計算結果と実験結果との相異点と同位体効果について報告する。