

21. 金属水素－ヘリウム混合系の理論的研究

牧 野 至 洋

巨大惑星の内部構造を考えるうえでHe原子の超高圧下の水素への溶解度は大きな関心が寄せられている。例えば、木星のモデルでは、対応する圧力温度領域において、水素（金属？）にHe原子はほとんど溶解しないということを仮定し、星が徐々に冷えるにつれてHe原子が沈降しその結果星全体がわずかに収縮すると考えられている。この重力エネルギーの放出が木星のエネルギー収支のつじつまをあわせるのである。この仮定を確かめるための実験は、興味のある圧力領域は数十Mbar程度であるために現在は不可能である。また理論的な扱いとしては、混合状態の GIBBS の自由エネルギーと分離状態のそれとの差 ΔG を種々の濃度において調べればよいが、これを実行した過去の仕事には問題がある。つまり水素ヘリウム分離系、H-He混合系を異なる方法で計算を行ったために計算方法の違いによる誤差に ΔG が大きく依存する可能性があるのである。

そこで我々は、計算誤差が構造に依存しない平面波バンド計算法を用いた。しかし、BARBEEら（1989）、および長柄（1989）の金属水素の計算結果より、H-He系では膨大な数の平面波が基底ベクトルとして必要なことが容易に想像される。つまり、より局在化したHe原子のまわりの電子雲を扱うには水素だけの系を扱うよりも短波長の平面波がより多く必要とされるのである。しかし、基底ベクトルの数を単純に増やすことは必要な計算機のメモリーの量や、演算時間の点から考えて不可能である。

そこで我々は短波長の平面波を取込んだ基底関数を用いることにより比較的少数の平面波を用いて計算できる方法を定式化した。この計算法の定式化とその有効性、およびH-He系への応用、我々の得た計算結果と過去の計算結果との比較について発表する。