

金 属 水 素

講師 阪大基礎工 中 村 伝

§ 1 金属水素

1. バンド理論的計算

Wigner-Huntingtonの計算では, zero pressure での b. c. c. 水素の結合エネルギーは, $r_s \sim 1.6$ に極小をもち, このときのエネルギーは自由H原子のエネルギーを基準点にとって, $\sim 0.68 \text{ eV/H}$ である。(プロトンの零点エネルギーを考慮。) ここで, r_s はふつうの定義である。 $N_H (4\pi/3) r^3 = V \quad r/a_0 = r_s$

a_0 : ボーア半径

2. high density electron gas である。

このため r_s 一展開がよい近似になる。

3. structure - dependent energy

dielectric constant を用いた近似は, W. T. Carr, N.W. Ashcroft E.G. Brovman et al, 等によって計算された。この講義では, 正確に r_s 一展開を3次まで行なった結果(宮城-長柄-中村)を他の人達の結果と比べた。図はその結果である。simple cubic (s.c) はいちばんエネルギーが低くなっている。

ひずみに対する係数の計算も示された。その結果によると, simple cubic は shear strain に対して不安定である。また f.c.c に対しても $(\alpha r_s) \gtrsim 0.5$ では不安定であることがわかった。

E.G. Brovman et al はいろいろな結晶構造について計算を行ない, hexagonal layer structure が安定であると結論した。

3次までの計算でははっきりといえないが, 圧力をかけてゆくと metallic phase では, まず, liquid metal の状態をとり, それから f.c.c 構造にうつってゆく可能性が示唆された。

この他に4次の項に関連して Fermi 面の変形によるエネルギーの計算の話があった。

4. 冷たい金属水素は zero pressure でもかなり長い寿命をもちうる。

5. 超伝導

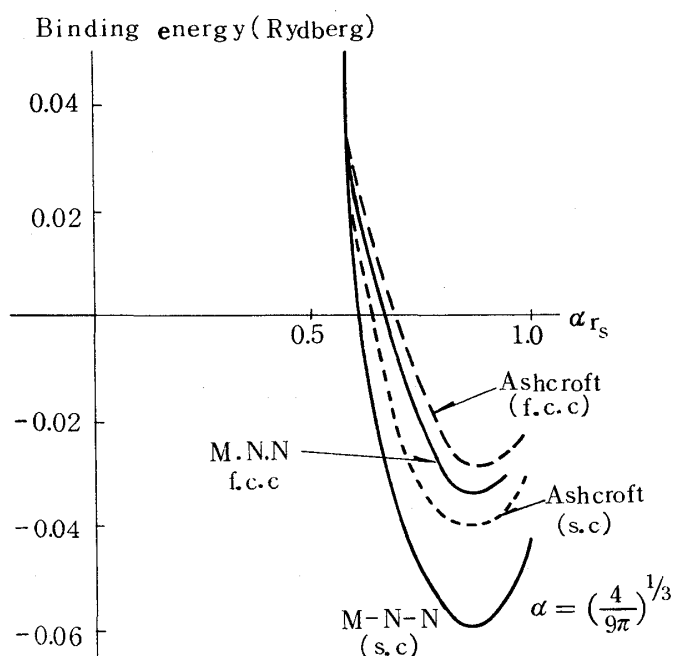
超伝導への転移温度 T_c は

$$T_c = 0.85 \theta_D \exp(-1/N_0 V)$$

で与えられるが, Ashcroft は $\theta_D = 2 \sim 3.5 \times 10^3$ K, $N_0 V \sim 0.25$ (下限値) と評価し, 金属水素は室温近くまで超伝導だと予想している。但しこの評価に疑問をもつ向きもある。

§ 2 分子相—金属相転移

転移の起こる圧力を p_c とすると, p_c は分子相, 金属相のエンタルピーが等しいという条件からきまる。Wigner - Huntington では $p_c \sim 0.25$ Mbar である。高いものでは 4.6 Mbar に達するものがあり, p_c の評価はちらばっている。その原因は主として分子相のエンタルピー評価のくいちがいからきている。これはまた小さい距離のところでの分子間力に関するわれわれの知識のとぼしいことによる。他に, 木星と土星の水素モデルの話があった。



文責 阪大基礎工 五十嵐潤一