

26. 超高圧縮分子固体水素の構造

松 原 聡

1988年に Mao が Raman 散乱の実験から、77 K で 150 GPa あたりにビブロンのとびを観測し、相転移を発見した。最近この相転移が、金属化転移と同時に起こるのではないかと言う観点からたいへん興味を持たれている。

米国のグループは、Cohen らの hcp 分子相についての band 構造の計算の結果に基づいて、回転状態にある分子相から、分子の軸が C 軸方向に order した hcp 分子相への相転移を考えると、150 GPa 周辺での一連の相転移を説明できるのではないかと考えた。

C 軸方向に order した構造は disorder 状態よりも band gap が小さいことが既に調べられている。これは、分子が互いに避け合う構造よりも、分子が互いに角をつき合わせた構造の方が波動関数の重なりが大きく band gap が小さくなると考えられる。もし C 軸方向に order した構造が energy 的に有利であるならば、disorder 状態から order 状態へ移ることによって、ordering と金属化が同時に起こることになるというのである。

そこで、C 軸方向に order した構造が energy 的に本当に有利であるかどうか問題になってくる。しかし、C 軸方向以外の order 構造については計算されていない。また、C 軸方向へ order した構造は band energy としては得であるが、Madelung energy では損をしている。そこで、C 軸方向以外の order 構造を調べた。我々のグループで調べてきたところによると、この圧力領域でもまだ Madelung energy をかせげる構造が有利であるという結論を得ている。今回は、低圧で EQQ 相互作用を仮定した場合の hcp での低 energy を持つ order 構造について、band 計算を行なった。計算方法は Local Density Approximation に基づき、基底関数には平面波を用いている。

結果は C 軸 order 構造よりは今回調べた構造の方が明らかに低 energy であった。これにより分子が hcp 構造をとるにしても、C 軸方向に order した構造は energy 的に不利と言うことになる。また今回調べた構造の band gap は、disorder 状態への近似として potential を向きに関して平均化して求めたものよりも広い。したがって、分子の向きの ordering により band gap が閉じ、金属化が同時に起こるという考え方は困難になる。