

金属水素の基底状態 ～構造及び零点振動の効果～

日高 潤

Brovman等によって金属水素の基底状態の構造は異方的構造をとり、立方晶系にならないことが主張されている。さらに長柄等は、低圧側で分子相から転移を起こす原子相としてBCC[111]構造という線状構造の存在を主張した。これに対しAshcroft等はfcc構造において2次摂動までを扱い、格子振動の零点振動の効果を議論して立方晶が低エネルギーとなる可能性を示した。しかし異方的な構造は3次、4次の項によって安定化されているためAshcroftの2次摂動までの扱いでは問題がある。

今回の研究ではFreeman等が用いたものと同じ局所密度汎関数ハミルトニアンに基づく構造展開により4次摂動まで考慮して種々の構造について基底状態のエネルギーを再評価し、Freeman等によって得られたバンド計算の結果との比較をした。更に、格子の零点振動のエネルギーも近似的に評価した。

その結果、(1) BCC[111]と立方晶とのエネルギー差は、 $r_s=1.6$ で約0.057[Ry]あるのに対し、BCC[111]構造の零点振動のエネルギーは、0.028~0.047[Ry]である。格子振動を考慮しても依然としてBCC[111]の方が低いエネルギーを与える。従ってAshcroft等の主張のようにならないことがわかった。

(2) また最近Freeman等は、低圧側でPa3構造が低いエネルギーを与えることをAPWバンド計算により示したが、我々の計算では分子相のBCC[111]の方が、それより更に低くなっている。(Freeman等はBCC[111]構造については計算していない。)

(3) 更に今回、分子の向きをc-軸に平行にした分子相のHCP構造のエネルギーを計算したところ、 $r_s=1.45$ より低密度側で分子相のBCC[111]よりも低いエネルギーを持ち、分子相のHCPから原子相のBCC[111]への1次転移が起こる可能性があることが分かった。この転移を金属-分子転移と考えると転移圧は1.55 Mbarである。この値は格子振動の零点エネルギーの寄与を加えていないがこれを大まかに見積った値、約0.5 Mbarを加えると、転移圧は約2 Mbarになる。