

オルソパラ水素混合系における相転移の コンピューターシミュレーション

土 谷 茂 樹

オルソ H_2 (O-H_2), パラ D_2 (P-D_2) は低温では $J=1$ の回転量子数を持ち, 電気四重極モーメントを有する。一方パラ H_2 (P-H_2), オルソ D_2 (O-D_2) の回転量子数は $J=0$ で電気四重極モーメントを持たない。

O-H_2 (P-D_2) 固体はある温度 T_c 以下では F.C.C. 構造をとり, 電気四重極相互作用のため, 分子は 4 つの部分格子内でそれぞれ同一方向 (body diagonal) を向いている (Pa3 構造)。しかし T_c 以上では各部分格子で分子の向きは random になる。この系を P-H_2 (O-D_2) でうすめていくと, これらの分子が電気四重極モーメントを有しないため T_c の降下がおこり, P-H_2 (O-D_2) の濃度がある critical な濃度以下では $T_c=0$ となる。この濃度は F.C.C. 構造の site percolation model における percolation threshold よりもかなり高い。

我々は rigid な F.C.C. 格子に O-H_2 (P-D_2) をある濃度で random に配置し, これらの分子の向きを 4 つの body diagonal だけに限定し, 量子力学的ゆらぎを平均した実際の水素分子の電気四重極相互作用エネルギーをデータとしたモデルを用いた。そしてこれをモンテカルロ法によるコンピューターシミュレーションによって T_c の O-H_2 (P-D_2) 濃度依存性を調べた。

高密度ヘリウムの状態方程式

二 木 久 嗣

木星におけるヘリウムの存在度は水素に次いで大きく, 全質量の約 20% を占めると考えられている。従来の木星のモデルは, 水素-ヘリウム一様混合モデルが大部分であったが, 近年では, 水素-ヘリウムの分離により, コア中心にヘリウム層が存在する可能性もあ

るようである。そのような領域では、圧力は数 10 Mbar に達しており、このような高圧下でのヘリウムの存在状態に我々は興味を持つ。

本研究では、 $T=0\text{K}$ での高密度固体（立方構造）ヘリウムについて、基底状態エネルギーを計算し、そして状態方程式を求めた。結晶の全エネルギー E_T は、（我々は静止した格子を考えたので）、Madelung エネルギー E_M と、電子系のエネルギー E との和で与えられる。この電子系の熱力学ポテンシャル $\mathcal{Q}$ は、

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}_{eg} - \sum_g' V_1(g) \sum_{p\sigma} \int_0^1 d\lambda \cdot \mathcal{G}_\sigma^\lambda(p, p+g; 0^-)$$

（ V_1 は電子-イオン相互作用ポテンシャル）

で与えられる。 $\mathcal{G}_\sigma^\lambda$ は、電子-イオン相互作用 H_1 が λ 倍された系の exact な一電子 Green 関数で、我々はこれを H_1 および電子-電子相互作用 H_2 で摂動展開し、 $\mathcal{Q}$ を摂動の 4 次まで計算した。しかるのち、エネルギー E は

$$\lim_{T \rightarrow 0} (\mathcal{Q} + \mu N) = E$$

で与えられる。sc, fcc, bcc について計算を行った結果、高密度では bcc が最も低いエネルギーを持つことがわかった。次に圧力を

$$P = - \frac{\partial E}{\partial V} = - \frac{1}{4\pi r_s^2} \cdot \frac{\partial E}{\partial r_s}$$

により求め、 P - V 表を作成した。その結果は数 Mbar 以上で有用であると思われる。

また、摂動の 4 次項は、金属水素の理論で重要な役割をはたすが、本研究においても大きな寄与を持った項であることを、3 次までとの比較において示す。

Si<111> 再構成面の電子状態とその光学的性質

長谷 伊 知 郎

へき開によって生じた Si<111> 面は、室温付近で、 2×1 の super lattice を持つことが LEED によって観測されており、このためにバンド・ギャップ中にできる surface