

Title	高圧下の水素における安定相の理論的研究
Author(s)	長柄, 一誠
Citation	大阪大学, 1979, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/32593">https://hdl.handle.net/11094/32593</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

## 【 2 】

氏名・(本籍)	長 柄 一 誠
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	第 4 6 5 8 号
学位授与の日付	昭和 54 年 5 月 2 日
学位授与の要件	基礎工学研究科 物理系専攻 学位規則第 5 条第 2 項該当
学位論文題目	高圧下の水素における安定相の理論的研究
論文審査委員	(主査) 教授 中村 伝 (副査) 教授 吉森 昭夫 教授 長谷田 泰一郎 教授 高木 修二 教授 金森 順次郎 助教授 張 紀久夫

## 論 文 内 容 の 要 旨

金属水素の高圧下での安定相についての幅広い理論的研究は、Brovman 等によって行なわれた。彼らは 3 次までの摂動展開の方法を用いて、金属水素が高圧下において異方的な構造をとることを示した。我々は彼らの得た構造の外にも unit cell の中に 2 個以上の原子を含むような構造の中にエネルギーの低いものが存在することを見出した。中でも dimer を BCC 状に並べて [111] 方向に向けた構造は今までに得られた最低エネルギーの構造である斜方型とほとんど等しいエネルギーをもつものであることがわかった。またこれらの構造においては、4 次以上の高次の項の寄与も大きい事がわかった。摂動展開の 4 次項については Hammerberg と Ashcroft の研究があるがきわめて不完全である。有限温度グリーン関数の方法に従い、無限次までの ring diagram の総和に基づく摂動展開の 4 次までに現れるすべての項を我々は求めた。この結果を使い、BCC の [111] 方向に dimer が向いた構造についてくわしい評価をおこなった。その結果 4 次項の寄与は重要であり [111] line の中で monomer-dimer 転移が起こることがわかった。この転移圧は約 0.8 M bar と評価された。また 5 次項についても部分的に評価し、その結果をしらべた。

## 論 文 の 審 査 結 果 の 要 旨

金属水素に関する数多くの研究の中で、本論文の特長は次の点にある。第 1 に、高密度極限を出発点として基底エネルギーへの寄与を逐次、求めていく、いわゆる構造展開理論は、これまで誘電関数

がよく定義されていなかった。誘電関数の選び方で展開式も変って出てくる。本論文では Lindhard の誘電関数を使って、4次までの展開を正しく与えている。

第2に、電子的エネルギーを最も低くするものは、フェルミ運動量を単位にして測った逆格子ベクトルの最短なものが最小になる結晶構造だという考えかたなどに導かれて  $r_s \geq 1.1$  域での安定相として線状構造水素にたどりついた。この構造は Brovman らによって提唱されたが、疑問視されていた。

第3に、 $r_s = 1.57$  で線状水素は分子をつくりはじめる。分子相は4次の項を考慮して、はじめて出てくる。

だが低密度極限に至る道はなお遠く、5次の項の一部考慮による原子当りエネルギー値  $-1.14$  Ry は自由分子の値  $-1.1745$  に迫っているが、このときの  $r_s (= 1.8)$  は、本論文の展開が使えるぎりぎりの線をすこし超えているようである。

今後の研究に多くの示唆を与える結果を含んでおり、有意義な研究だと判断する。