

Title	Higher order Effects on the Anisotropic Structures and the Monomer-Dimer Transition of High-Density Hydrogen
Author(s)	蛭名, 邦禎
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	http://hdl.handle.net/11094/441
DOI	
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

【2】

氏名・(本籍)	^{えび} 蛭	^な 名	^{くに} 邦	^{よし} 禎
学位の種類	工	学	博	士
学位記番号	第	5718	号	
学位授与の日付	昭和57年5月21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1項該当			
学位論文題目	高密度水素の異方的構造と金属一分子転移に対する高次摂動効果			
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 助教授 宮城 宏

論 文 内 容 の 要 旨

高密度水素は木星等大惑星の内部構造の解明以外に、第一原理から取り扱えるという理由で興味ある物質である。近年実験技術の進歩にともない、地上で作れ出す可能性もあって注目を集めるようになった。この系を理論的に研究する方法として、電子-イオン相互作用を一様な電子ガスに対する摂動として扱う構造展開法によるもの、バンド計算法によるものに大別される。本論文の目的は前者の方法で、高次摂動効果が重要になる中間密度領域での異方的構造相と金属-分子転移を調べることである。

論文の前半では構造展開をめぐる方法論的な諸問題が研究される。単純金属の基底エネルギーに対する構造展開において最も重要な事は高次の分極関数の評価である。2次の分極関数は電子ガスの誘電関数との関連において、その交換-相関効果についても多くの研究があるが、3次以上の分極関数については詳しい研究の数は少ない。この関数に対する交換相関効果を考慮する目的で有効パーテックス近似が検討される。漸近形の解析から3次の分極関数に対する近似の正当性が示され、4次の分極関数に対して新しい表式が提案される。また数値的な解析により、近似の有効性が、分極関数に現われる特異点(Lloyd-Sholl-Brovman-Kaganの特異点)より大きな波数領域に限られることが明らかになった。電子-イオン相互作用の高次の項を系統的に繰り込む新しい方法が、Luttinger-Wardの変分原理に基づき、クラスター展開の形で提案される。また高次の分極関数の主要部をなす多頂点リング・ダイアグラムを計算するための一般的な方法を与えた。

これらの結果に基づき、高密度水素に対する高次摂動効果を研究したのが論文の後半である。線状構造水素の力学的安定性が高次の分極関数の特異性との関連において解明される。また水素の異方的

構造をもたらすものと同じ機構によって、高密度ヘリウムでは立方構造が安定になる。この結論は更に数値計算によっても確認された。高次からの繰り込みの効果を調べたがその結果は上記の結論を変えるものではない。

金属-分子転移がbcc [111] モデルにおいて調べられる。4次摂動エネルギーにおける交換-相関効果が小さくないこと、しかしそのかなりの部分がHubbardのH-ダイアグラムからの寄与と相殺することが指摘される。5次摂動までの計算によって零点振動効果を無視した近似で転移圧が評価され、2.3メガ・バールという値が、転移点における密度0.98g/cm³($r_s=1.4$)とともに得られた。

論文の審査結果の要旨

冷たい圧縮水素に高密度極限から近接する構造展開法は金属-分子転移の起こる密度域で収束がかなり遅くなるため、高次摂動項の研究がきわめて重要になる。本論文の前半はその方法的諸問題を考究したもので、高次分極に及ぼす交換-相関効果に対する有効パーテックス近似の有効性と限界を明かにし、4次分極に対する新しい近似式を提案している。また5次以上の分極の計算に必要な3個の漸化式の明快な導出が与えられ、その一つは新しい。摂動級数の再総和をクラスター展開として論じたのも著者の創見である。

論文の後半では、高密度水素の異方構造相の出現機構を、高密度ヘリウムの場合と対比させつつ、高次分極関数の特異点との関連において明かにし、また5次の分極を考慮した金属-分子転移の結果も新しい。転移の起こる密度の評価はほとんど収束しているようである。なお、ここで取り扱った菱面体晶族が体心立方、単純立方、面心立方格子を含む自己相反系を形成するという独自の認識に基づく立論も興味深い。著者はここで現実的な自己相反系をHeineの提案に追加したのである。

学位論文にふさわしい意義ある貢献だと考える。