

3A1b 電子-核混合系の DFT に基づく流体水素の 金属-非金属転移の理論解析

豊橋技科大, JST-CREST ○墨 智成, 関野 秀男

E-mail: sumi@cochem2.tutkie.tut.ac.jp

液体金属の研究は、科学的にも工学的にも重要である。水素は宇宙でも多く存在する元素であり、星の主要構成要素の一つである。木星の約 9 割は水素で構成されており、自分自身の作る重力場による高い圧力のため、内部の水素は金属化していると考えられる。また、金属化による自由電子の存在が、木星の巨大な磁気(地球の約 1200 倍)の原因として考えられている。

工学的側面では、原子力発電における高速増殖炉の冷却媒体として、アルカリ金属が最も有効であると考えられている。そのため、その基礎物性の解析およびアルカリ金属による配管の脆化機構の解明は急務である。

液体金属を第一原理的に扱うためのモデルとしては、電子と核(またはイオン)から成る二成分混合流体が適切であり、通常、第一原理分子動力学法や量子モンテカルロ法を用いて研究されている。しかしながら、これらの第一原理手法は計算コストが膨大であるため、誰もが容易に行えるわけではない。

我々は、液体金属中の電子と核を同時に扱う事が可能な電子-核混合系の密度汎関数理論(DFT)[1]の再構築を行い、電子の交換相関ポテンシャルに対する非局所密度形式の有効密度近似(Effective density approximation: EDA)を提案した。この手法は、形式的には weighted density approximation(WDA)に対応し、局所密度近似(LDA)における局所密度を有効密度に置き換えた単純な形式を持つ。現段階では有効密度を密度展開の一次で近似している。

先行研究において、本手法を木星内部の状況に近い密度パラメータ $r_s = 0.5$ の高密度流体水素に適用し、流体構造および電気伝導特性の解析を行った。有限温度に拡張された Ziman 公式を用いて、電気抵抗を計算した結果、温度 $T = 10^4$ Kにおいて、約 $0.7 \mu\Omega\text{cm}$ という値と成った。これは、室温のアルカリ金属と比べても小さい値であり、高密度流体水素は金属化していると言える。また、 $r_s = 0.5$ の等密度線に沿った温度上昇により、温度が $10^{5.25}$ K前後で金属からプラズマへクロスオーバーする事が明らかと成った[2]。

本研究では、温度 $T = 10^4$ Kの等温線に沿った密度減少に伴う高密度流体水素の変化を、EDA 法に基づく電子-核混合系の DFT を用いて調べた。微視的構造、熱力学量、および電気伝導特性の結果から、不連続な金属-非金属転移の可能性について議論する。

[1] J. Chihara, Prog. Theo. Phys. 72, 940 (1984).

[2] T. Sumi and H. Sekino, J. Chem Phys. 125, 194526 (2006).