บทที่ 4 สรุป

ผู้วิจัยได้ทำการคำนวณสมบัติของโครงสร้าง สถานะ และความดันการเปลี่ยนสถานะของโลหะสตรอนเทียมด้วยระเบียบวิธีเชิงทฤษฎี โดยคำนวณตั้งแต่ความดันปรกติจนถึงความดันประมาณ 50 GPa พบว่า ถ้าพิจารณาจากเอนทัลปี การเปลี่ยนสถานะจะมีลำดับตามความดันที่เพิ่มขึ้นดังนี้ fcc -> bcc -> hcp แต่ลำดับที่เสนอโดยการทดลองคือ fcc -> bcc -> Sr-III -> Sr-IV -> Sr-V ทำให้ผู้วิจัยเชื่อว่าการพิจารณาเอนทัลปีอย่างเดียวอาจเป็นการคำนวณที่หยาบเกินไป ผู้วิจัยจึงได้พิจารณาลงไปถึงพลศาสตร์ของอะตอมเพราะมีหลักฐานที่ชี้ให้เห็นว่าพลศาสตร์ของอะตอมมีผลกับระบบอิเล็กตรอน ผลเบื้องต้นจากการคำนวณสมบัติทางพลศาสตร์ อย่างเช่น ความถี่โฟนอน และค่าคงที่ความยืดหยุ่น แสดงให้เห็นว่า โครงสร้างแบบ bcc และ hcp อาจไม่ใช่โครงสร้างที่เสถียรอย่างแท้จริงแม้ว่าจะมีเอนทัลปีต่ำที่สุดในช่วงความดันหนึ่ง เพราะว่า hcp นั้นไม่เสถียรภายใต้ความเค้น เมื่อมีการผิดรูปเพียงเล็กน้อย โครงผลึก hcp จะเปลี่ยนสถานะกลายเป็นโครงผลึกแบบอื่นทันที ซึ่งโครงผลึกสุดท้ายจะเป็นอะไร จะใช่โครงสร้างที่เกี่ยวข้องกับ Sr-IV และ Sr-V หรือไม่ ผู้วิจัยยังต้องทำการค้นคว้ากันต่อไป แต่ทำให้เราทราบว่า ลำดับการเปลี่ยนสถานะที่ทำนายได้จากการคำนวณเมื่อตัด hcp ออกไปเป็นดังนี้ fcc -> bcc -> Sr-IV -> Sr-V ในส่วนของผลึกแบบ bcc นั้น ผู้วิจัยพบว่า โฟนอนมีสัญญาณของความไม่เสถียรเกิดขึ้นเพราะ โฟนอนในบางตำแหน่งนั้น “อ่อน” ตัวลงเมื่อความดันเพิ่มขึ้น เมื่อทำการจำลองพลศาสตร์โมเลกุลผสมควอนตัมแล้ว พบว่า โครงสร้างแบบ bcc เกิดการเปลี่ยนสถานะทางโครงสร้างไปเป็นโครงผลึกที่มีสมมาตรต่ำลง และมีความไร้ระเบียบเกิดขึ้นภายในโครงผลึก ซึ่งความไร้ระเบียบนี้สามารถนำไปอธิบายสถานะผสม ซึ่งได้รับการค้นพบในการทดลองมาแล้วก่อนหน้านี้ ผู้วิจัยยังได้คำนวณสมบัติตัวนำยิ่งยวดของสตรอนเทียมภายใต้ความดันสูงด้วย พบว่า ค่าอุณหภูมิวิกฤติมีความสอดคล้องกับผลการทดลองอย่างมาก งานในอนาคตคือ พยายามอธิบายว่า ทำไมสตรอนเทียมจึงเป็นตัวนำยิ่งยวดเฉพาะที่ความดันสูงเท่านั้น