

擬ポテンシャルの方法によるアルカリ金属の電子構造

発表者 市川准平

駒場 繁

指導教員 眞榮平孝裕

擬ポテンシャル(Pseudopotential)の方法を用いて、ナトリウム金属のバンド構造とフェルミ面を調べ、その性質が自由電子モデルに非常に似ていることを確かめる。

金属は結晶構造と電子密度の違いに従って、それぞれ独特なフェルミ面をもつ。フェルミ面とは金属の最も重要な特徴であり、金属の特性である電気や熱などの高い伝導度、金属的光沢（光の反射）等に見られる金属の輸送的性質や光学的性質は、フェルミ面の形状や大きさに支配される。そこで Na 金属の物性を理解するために フェルミ面を理論的に導いた。

ここで擬ポテンシャルの方法とは電子の感じる内核近傍のポテンシャルを、擬似的ポテンシャルに置き換える方法である。擬ポテンシャルの方法によれば、原子の外殻軌道の電子状態は原子核近傍の深いポテンシャルを取り除いて浅くした有効ポテンシャル（擬ポテンシャル）を用いて記述される。そのようなポテンシャルの中では、外殻電子の波動関数（擬波動関数）は核近傍で急激に変化する部分を失い、空間的に穏やかに変化するのみである。

我々は、Topp と Hopfield が提案したポテンシャルを用いて Na 金属のエネルギーバンド構造を計算し、ド・ハースーフアン・アルフェン効果実験の結果と比較した。Topp と Hopfield が提案したポテンシャルは次の式で表される。

$$\begin{aligned}v(r) &= v_0 \cos(qr) + v_1 & r \leq r_c \\ &= \frac{-2}{r} & r \geq r_c\end{aligned}$$

ただし、 $r_c = 3.0$ 、 $q = 1.224$ 、 $v_0 = -v_1 = 0.3580$ である。ここでは原子単位系($\hbar = 1$ 、 $2m = 1$ 、 $e^2 = 2$)を用いて、長さは Bohr 半径、エネルギーは 1 Ryd. を単位として表している。この擬ポテンシャルは Na 原子の 3 s 軌道のエネルギーに対して -0.3776 Ryd. を与えるが、これは実験値 -0.3776 Ryd. と一致する。また、3 p および 4 s の励起状態に対しても、実験値と良く一致する結果が得られている。

ブリルアンゾーン内において Σ 方向と Δ 方向のフェルミ半径 $k_F(\Sigma)$ と $k_F(\Delta)$ を理論的に求め、実験結果と比較した。結果の詳細は発表にて報告する。