

金属凝集のメカニズム

—Wigner-Seitz の方法—

発表者：上原 一樹

稲葉 勇太

指導教員：眞榮平 孝裕

Wigner-Seitz の方法を用いて、ナトリウム金属の凝集エネルギーを調べ、金属凝集のメカニズムを明らかにする。

物質を構成している原子や分子の間に働く相互作用の結果、ある温度、圧力の領域では、原子や分子がバラバラで存在するよりも集まっている（凝集状態）方がエネルギーは低い。これが固体や液体の存在する理由である。凝集エネルギーは金属の物性を決める要因の一つである。今回、アルカリ金属の仲間であるナトリウム金属を例にとって金属凝集のメカニズムを調べる。

Na 金属内では内殻軌道電子（ $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ）は原子核のところに局在し、原子核とともにイオン殻を形成して体心立方格子を作り、最外殻軌道電子（ $3s$ ）が Bloch 電子になると考える。バンドの底（ $k = 0$ ）にいる電子の固有値 E_0 と固有関数 $\Psi(r, k = 0) = u_0$ ($r = |\mathbf{r}|$)

は次の **Schroedinger** 方程式によって決定される。

$$P''(r) + [E_0 - V_p(r)]P(r) = 0 \quad (1.1)$$

Na^+ イオンを中心に基本単位格子 Wigner-Seitz セルをとり、Wigner-Seitz セル間で、波動関数が滑らかに接続するように境界条件として次のようにおく、

$$P'(r_s) = \frac{P(r_s)}{r_s} \quad (1.2)$$

ここで、 $P(r) = ru_0(r)$ とおいた。また、 r_s は Wigner-Seitz 球の半径である。単位系は原子単位系（ $\hbar = 1, m = 1, e^2 = 2$ ）が採用されており、この単位系では、長さは Bohr 半径 a_B

($= 13.6\text{eV}$.)、エネルギーは $1\text{Ryd.}(=13.6\text{eV.})$ を単位として与えられる。式(1.1)の $V_p(r)$ は

Prokofjew ポテンシャルである。このポテンシャルによる Na 原子の $3s$ 準位のエネルギーは -0.3810Ryd. であり、実験値(-0.3376Ryd.)とかなり良く一致する。このような問題を独自に作成した数値計算プログラムを用いて、Na 金属の凝集エネルギー、格子定数を理論的に決定し、実験結果と比較する。