

# 擬ポテンシャルの方法による電子構造計算

発表者：小山田雄一郎  
指導教員：眞榮平 孝裕

周期律表の第1族元素の中でHを除くNa以下をアルカリ金属と呼ぶ。アルカリ金属単体では最外殻のs電子が自由電子的振る舞いをして金属的性質を示す。今回は擬ポテンシャルの方法を用いて、ナトリウム金属のバンド構造とフェルミ面を理論的に導き調べた。

ナトリウムは、 $1s^2 2s^2 2p^6$ の内殻の電子は原子核近傍にトラップされ、原子核とともにNe殻を形成し体心立方格子を作る。このとき最外殻s軌道の電子は内殻近傍の深いポテンシャルを受けない。そこで、外殻電子の電子状態は電子の内殻近傍の深いポテンシャルを取り除き浅くした有効ポテンシャル(擬ポテンシャル)を用いて記述する。これが擬ポテンシャルの方法である。この擬ポテンシャルの中では外殻電子の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。

Na原子のポテンシャルはこれまで様々な人々によって提案されてきたが、今回はToppとHopfiledによって提案されたものを用いてバンド構造を計算した。ToppとHopfiledが提案した式は次の式で表される。

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

ここで、 $r_c = 3.0$ 、 $q = 1.224$ 、 $v_0 = -v_1 = 0.3580$ である。ここでは原子単位系( $\hbar = 1$ 、 $2m = 1$ 、 $e^2 = 2$ )が用いられており、長さはBohr半径、エネルギーは1 Ryd.を単位として表されている。この擬ポテンシャルはNa原子の3s軌道のエネルギーに対して $-0.3776 \text{ Ryd.}$ を与えるがこれは実験値 $-0.3776 \text{ Ryd.}$ とよく一致する結果が得られている。

講演では、Na金属の電子構造とフェルミ面の計算結果を用いて、実験結果の説明を行う。