

# アルミニウムの電子構造

発表者：名嘉真 英之

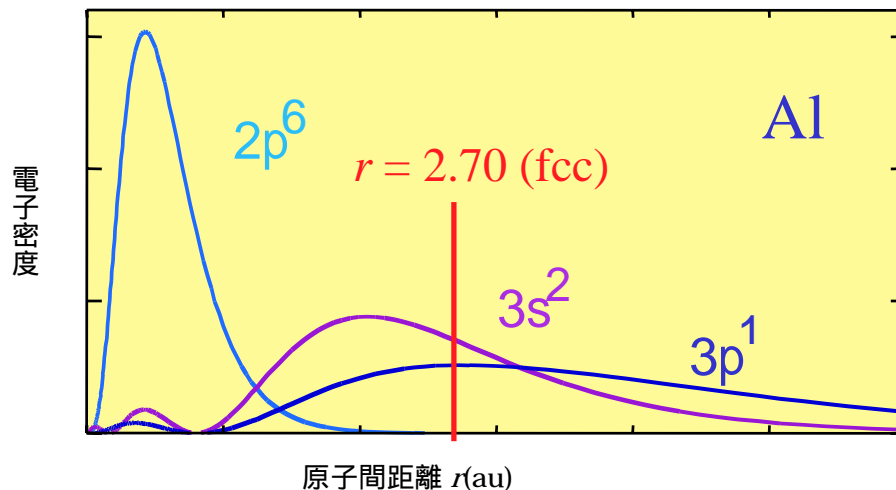
指導教官：眞榮平 孝裕

Na や K などのアルカリ金属と、ベリリウムとマグネシウムおよびアルミニウムなどのアルカリ土類金属は、電気伝導をはじめとする物理的性質が自由電子によって担われていると考えてよく、単純金属と呼ばれる。今回、アルカリ土類金属の仲間であるアルミニウムの電子構造とフェルミ面を理論的に導き、アルミニウムの物性を調べる。

アルミニウムは周期律表では 3B 族に属している。原子番号は 13、原子での電子配置は  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$  であり、ナトリウムよりも 3s と 3p 電子が 1 個ずつ多い。内殻は Ne 殻で、3s 電子 2 個と 3p 電子 1 個が金属結晶中でバンドを形成し、伝導電子となる。アルミニウムにおいて d 電子は関与していない。図は理論的に導いたアルミニウムの電子密度図である。横軸は原子間の距離、縦軸は電子密度となっている。赤い線はアルミニウム原子からとなりの原子の中間の距離である。この結果からも 3s 電子と 3p 電子が伝導電子となっていることが予測できる。

金属は結晶構造と電子密度の違いによって、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もっと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、金属的光沢などに見られる金属の性質は、フェルミ面の形状や大きさによる。そこでアルミニウムの物性を理解するためフェルミ面を理論的に導いた。

講演では、バンド計算で導いた、電子構造、フェルミ面について説明する。



図：アルミニウムの電子密度図