

I-1 イオン間有効相互作用と その圧力依存性の理論的計算

東北大・理 長谷川 正之

イオン殻が小さくて伝導電子とイオンとの相互作用（正確には pseudo-potential）を摂動として2次までとるのが十分良い近似であるような、いわゆる“単純な金属”の全エネルギーはイオンの配置によらない部分と、イオン間対相互作用の和から成る部分に分離して記述することができる。このときイオン間対相互作用は、直接クーロン相互作用と伝導電子の偏極（遮蔽効果）を通じての間接相互作用の和とから成っている。

伝導電子とイオンの相互作用として Ashcroft の pseudopotential を用いて、アルカリ金属と Zn, Al および Pb のイオン間有効相互作用を融点直上に相当する場合について計算した。その際、遮蔽効果に電子間相互作用の高次の効果、いわゆる exchange および correlation の効果を取り入れることが重要であることがわかった。この多電子効果を、長波長極限で遮蔽効果が compressibility sum rule とコンシステントであるように考慮に入れた誘電関数を用いて得られた結果は、常圧下での液体金属のイオン系の構造をよく説明することが計算機実験により確かめられているイオン間有効相互作用とかなり良く一致している。（話題提供の田中氏の項参照）

最近圧力下でのイオン系の構造が実験的に調べられ始めているが、それに関連してイオン間有効相互作用の圧力効果を理論的に調べることは興味深い。Schiff が常圧下の場合について行ったのと同じような計算機シミュレーションの方法で、理論的に求められた圧力下でのイオン間有効相互作用を用いて、構造因子、速度自己相関関数等の圧力依存性を計算することも可能であろう。実験との比較により、上述のイオン間有効相互作用の理論的計算の種々の近似の check にもなると思われる。更に、このようにして得られたイオン間相互作用および構造因子の圧力依存性を用いて、液体金属の諸物性（熱力学的諸量、電子的構造、輸送現象等の電子的性質、等）の圧力依存性を調べることも興味ある問題であろう。