

## 16. 局所密度汎関数法に基づいた構造展開による 金属水素の基底エネルギーの計算

波多野 卓 史

金属水素の研究においては、高圧下では電子の運動エネルギーが大きく電子ガスに近いいためクーロン相互作用（電子-イオン，電子-電子）を摂動と考えることができることと，コア電子がないため，Hamiltonian に何ら近似する必要がないことから，構造展開による方法が多くとられてきた。

これに対して最近，B. I. Min, H. F. Jansen, A. J. Freeman によって有効一体ポテンシャルを使い電子に対する self-consistent-equation を解くという局所密度汎関数法を使った研究が行なわれた。これは，その手法を使ったものでは最も信頼できるものであり，それによると立方晶中最も低エネルギーである SC で約  $-1.088$  Ry と従来の展開理論より約  $0.02$  Ry 低い。また展開理論とは逆にわずかではあるが bcc の方が fcc よりも低エネルギーである。

この結果をもとに展開理論の結果の収束性と局所交換相関ポテンシャルの影響を調べるために Freeman らと同じ有効一体ポテンシャルを持った系を構造展開理論で扱い，金属水素の基底エネルギーを求めた。

局所交換相関ポテンシャル  $v_{xc}$  を局所密度  $\rho(\mathbf{r})$  の関数であるとして，Hamiltonian に取り込むことにより展開の 4 次まで評価し，Freeman らの結果に近い値を得た。

このように，構造展開法によって，Freeman らの結果を再現できることから，展開理論による結果は収束しているであろうと予想できる。しかし，fcc と bcc のエネルギーの順位については，従来の展開理論と同じく fcc の方がわずかながら低くなる結果を得た。