

ルテンサイト相との相境界をうまく説明できることがわかった。

## 6. Auger中性化過程の高次摂動項

加地 博子

金属表面での動的過程の主なものの一つである Auger 中性化過程について、その遷移確率と放出電子のエネルギー分布を調べた。

Auger 中性化過程は、イオンが金属表面で散乱される時に金属のバンドに二個の hole を残し、原子は中性化され、一個電子が放出される過程である。よく知られている Hagstrum の準静的理論を含めいくつかの理論が既に提案されているが、Auger 過程の動的な効果を調べた研究はほとんどない。そこで、Keldysh-Green 関数を導入し、この問題を動的に取り扱うと共に、どのような条件で Hagstrum の取扱いが良い近似になっているのかを明らかにする事を試みた。

Hagstrum の考え方は、各時刻での原子上の電子の占有数の変化率に関する Rate 方程式に基づくものである。イオンの運動の軌道を仮定し、その運動が緩やかであるとすれば軌道上の各場所での遷移確率を Golden Rule から計算できる。それを基に、時刻  $t$  までに遷移している確率  $n_a(t)$ 、運動量  $q$  の放出電子のエネルギー分布  $n_q(t)$  が求められる。

一方、Keldysh-Green 関数を用いると、非断熱効果を正確に取入れることができる。また Keldysh-Green 関数に対しては、よく知られている Feynman Diagram 法を用いた解析が可能である。

そこで、次のような解析を試みた。

1. 一般の時刻  $t$  で Dyson 方程式を展開形で解き、 $n_a(t)$  を求める。
2. イオンの速さの遅い極限と速い極限で  $n_a(\infty)$ 、 $n_q(\infty)$  を Auger の matrix element  $V$  の摂動展開形で求める。
3.  $n_a(\infty)$ 、 $n_q(\infty)$  をイオンの速さの関数として数値的に求める。

解析に当っては、(1) ~ (3) のそれぞれについて、Hagstrum の近似に基づいて計算した結果と比較をした。

結果として、次の事が分った。

1. 一般的な Dyson 方程式は、高次の積分方程式となり、簡単には解けない。 $V$  の摂動展開としては、4次までは、イオンの遅い極限で Hagstrum の結果と一致する。
2.  $n_a(\infty)$ 、 $n_q(\infty)$  は、それぞれ遅い極限では Hagstrum の結果と一致する。速い極限では、 $V$  の高次の寄与は無視できて2次までで充分である。また、両極限で

一致する一般の速度に対する表式を推測した。

3. 数値解析ではどの時刻  $t$  においても特異性は見られず、 $V$  が充分小さければ、どのようなイオンの速度に対しても上記表式が良い近似で成り立つ。

今後の課題としては、今回の計算では matrix element を単純化しすぎている可能性があるため、運動量依存性を考慮してより現実性を持たせた計算をする予定である。

## 7. $\text{FeS}_2$ の高圧下における電子状態と状態方程式の計算

加藤 竜次

この研究は、地球内核の物質構成を知る上で興味を持たれている、 $\text{FeS}_2$  (pyrite) の状態方程式、圧力誘起絶縁対-金属転移、高圧下における電子状態、を local-density functional (LDF) 理論に基づいて第一原理より求めること、を目的とする。

LDF 理論では、結晶場内の電子密度を正確に求めることが重要である。ここでは、linear augmented plane wave (LAPW) 法を用いた計算によってこれを求めた。

ここで用いた LAPW 法は、Andersen (1975) によって考案された方法を、Shaughnessy ら (1987) が発展させたものである。Andersen の方法に比べ、固体の全エネルギー及び圧力を、低密度から高密度の広い範囲にわたって評価する上で、一度に求めることができる固有値の範囲が広い点が優れている。高圧状態では、一般にエネルギー分散が大きくなるので、このことは重要である。

Andersen の方法では基底関数を、ハミルトニアンのある二つのエネルギーでの解をもとに、エネルギーについて一次の Taylor 展開で作る。Shaughnessy らの方法では、もとになる解の数を増し、高次の展開を行う。これにより、より広い範囲でエネルギー固有値の精度が保たれる。

今回の計算は、muffin-tin (M-T) potential 近似の範囲内で行った。上記物性のうち、電子状態、状態密度、電荷密度、の圧力変化について計算結果を報告する。今後、non M-T 効果を含めた計算との比較が必要である。