

るようである。そのような領域では、圧力は数 10 Mbar に達しており、このような高圧下でのヘリウムの存在状態に我々は興味を持つ。

本研究では、 $T=0\text{K}$ での高密度固体（立方構造）ヘリウムについて、基底状態エネルギーを計算し、そして状態方程式を求めた。結晶の全エネルギー E_T は、（我々は静止した格子を考えたので）、Madelung エネルギー E_M と、電子系のエネルギー E との和で与えられる。この電子系の熱力学ポテンシャル $\mathcal{Q}$ は、

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}_{eg} - \sum_g' V_1(g) \sum_{p\sigma} \int_0^1 d\lambda \cdot \mathcal{G}_\sigma^\lambda(p, p+g; 0^-)$$

（ V_1 は電子-イオン相互作用ポテンシャル）

で与えられる。 $\mathcal{G}_\sigma^\lambda$ は、電子-イオン相互作用 H_1 が λ 倍された系の exact な一電子 Green 関数で、我々はこれを H_1 および電子-電子相互作用 H_2 で摂動展開し、 $\mathcal{Q}$ を摂動の 4 次まで計算した。しかるのち、エネルギー E は

$$\lim_{T \rightarrow 0} (\mathcal{Q} + \mu N) = E$$

で与えられる。sc, fcc, bcc について計算を行った結果、高密度では bcc が最も低いエネルギーを持つことがわかった。次に圧力を

$$P = - \frac{\partial E}{\partial V} = - \frac{1}{4\pi r_s^2} \cdot \frac{\partial E}{\partial r_s}$$

により求め、 P - V 表を作成した。その結果は数 Mbar 以上で有用であると思われる。

また、摂動の 4 次項は、金属水素の理論で重要な役割をはたすが、本研究においても大きな寄与を持った項であることを、3 次までとの比較において示す。

Si<111> 再構成面の電子状態とその光学的性質

長谷 伊 知 郎

へき開によって生じた Si<111> 面は、室温付近で、 2×1 の super lattice を持つことが LEED によって観測されており、このためにバンド・ギャップ中にできる surface

state bandは、2つに split しているものと考えられている。これに対する実験的検証としては、Chiarotti et. al. による光吸収スペクトルと Rowe et. al による ELS の実験が良く知られており、ともに2つの surface band 間の遷移によるものとみられる、単一のピークを見出している。ところでこの 2×1 構造に対しては、covalent model, ionic model の2つの model が提唱されているのであるが、これらの model の何れか一方を支持する決定的な証拠は未だ見つかっていない。一方、この covalent model に対しては、Tosatti and Scloni によって tight binding method を用いたバンド計算がなされており、その結合状態密度 (J. D. O. S.) を Chiarotti et. al. の結果と比較している。彼らの得た J. D. O. S. には、2次元バンド特有の log 発散のピークが2つ生じているのであるが、同じような方法で ionic model に対する J. D. O. S. を計算してやると、やはり2つの log 発散のピークが生じる事がわかる。そこでスペクトルの形をより詳しく調べるために、遷移マトリックスの k 依存性と偏光依存性を考慮して、スペクトルを計算し、更に coulomb 相互作用のスペクトルに及ぼす影響を調べた。その結果、ionic model に対しては、光の polarization の方向によって log 発散のピークが1つ又は2つ消えること、covalent model には、そのような顕著な polarization effect が生じない事、更に、coulomb 相互作用は、このような polarization effect の存在には、影響を存ぼさないが、個々のスペクトルにはかなり強い影響を及ぼす事がわかった。そして最後に ELS のスペクトルを光吸収スペクトルの計算に用いた誘電関数を使って計算した。

NiS₂ の強磁性と反強磁性構造

福 田 尚 央

NiS₂ は T_N が約 40K の反強磁性体で 30K ($=T_C$) 以下では弱い強磁性を示す。中性子回折、メスバウア効果の測定によれば $T_C < T < T_N$ では、パイライト構造の Ni イオン ($S=1$) のつくる面心立方格子での 1st kind と呼ばれる反強磁性構造で non-collinear な構造を持つと考えられ、 $T < T_C$ では、弱い強磁性に加えて 1st kind と 2nd kind の mixed structure でやはり non-collinear な構造をもつものと考えられている。圧力を加えたり、