

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ので、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. 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、 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。