

アルゴン結晶のバンド構造

高 倉 賢

アルゴン結晶は Van der Waals 力で結合している希ガス結晶で融点 84K 付近で H. C. P. それより低温では F. C. C. 構造をとる。このバンド構造は、理論的にも実験的にも数値が求められているが、ここでは、M. S. 法により $X\alpha$ 法を考慮して理論計算を行った。まず、trial function を Slater rule から作り $\alpha=0.72177$ として、atomic な coulomb potential 及び electron charge density を求める。次に隣接する atom からの寄与を各々について Löwdin の方法で加え、得られたものから $\alpha=1$ に戻して muffin-tin potential を作った。更にこの potential から special points の方法で charge density を求め 1-step 進んだ potential が計算される。我々は、この計算された potential と先のものの平均を用いて energy value を求めた。まだ self-consistent ではないが $X\alpha$ 法を考慮しなかった Mattheiss の計算結果及び実験値を我々の数値と比較した。その結果、 $X\alpha$ 法を考慮すると energy gap (3p band conduction band との差) が小さくなり、3p band の band 巾が広がった。

しかし、実験値と比較すると band 巾はまだ狭く、electron affinity も Mattheiss のものと同様正である。

また、Slater rule により得た wavefunction の atomic なものの良い近似になっていることも知れた。