

○ 東京大学教養学部物理学教室

イオン結晶に対する Heitler-London 近似の
妥当性に関する定量的考察

小 林 幸 夫

イオン結晶に対して、われわれは、結晶が正負のイオンから構成され、各電子は各イオンに局在しているという Heitler-London 的な描像を描いている。ここでは、イオン結晶の中で、電子構造が最も簡単な LiH を取り上げ、このような描像に基づいて疑義のない計算を実行した。

イオン結晶に対するコンプトンプロフィールや凝集エネルギーの量子力学的計算は、これまでも多くの人たちによって行なわれてきた。しかし、それらはいずれも、実験と直接に比較できる結果を出すために、精度の不確実な近似が使われていた。最近になって、藤井は MgO の場合に、等方的コンプトンプロフィール J と自由原子が集まって結晶になったことによる電子系の全運動エネルギーの増し高 ΔT に対して、疑義のない計算を実行した。その結果、在来の AO を用いる限り、 ΔT に対して、理論と実験との間には、電子間相関では説明できないほど大きな不一致があることが示された。われわれが取り上げた LiH は、MgO と結晶構造は同じだが、電子構造がひどく違っている。それにもかかわらず、同じ方法で J と ΔT を計算したところ、程度にかなりの差があるものの、MgO の場合と似た傾向を示すことがわかった。