強磁場中の原子に対する TF 理論: 局所尺度変換によるアプローチ II

岡山大・理　　小坂圭二

A Thomas-Fermi Theory of an Atom in the Strong Magnetic Field: an Aproach Based on a Local Scale Change II

Department of Physics, Okayama University　　Keiji KOSAKA

先に発表した強磁場中の原子に対する TF 理論1) を用いて，磁場中の原子の電子状態を求める．

先の講演で発表したように，強磁場中の均質な電子ガスに対する Dirac 密度行列2) への局所尺度変換を用いると，z 方向にかかった一様磁場 $\mathcal{H}$ の中の，原子番号 Z, 電子数 N の原子のエネルギー E は次のように書ける:

$$E[n] = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\; n(\boldsymbol{r})\widetilde{\varepsilon}_k(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{8}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\; \frac{(\nabla n)^2}{n} - \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\; \frac{Z}{|\boldsymbol{r}|} n(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\; \frac{n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} + \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\; \varepsilon_{\mathrm{X}}(\boldsymbol{r}) \,, \tag{1}$$

$$\widetilde{\varepsilon}_k = \frac{3}{4}\gamma\lambda^2 + \frac{\gamma^2}{8}(\lambda^2-1)(2\lambda^2-1)(x^2+y^2) \,, \quad \varepsilon_{\mathrm{X}} = \frac{\gamma^2\lambda^4}{8\pi^3}\left[\ln p + C - \mathrm{e}^p \mathrm{Ei}(-p) - 4p\int_0^\infty \tan^{-1}(1/t)\exp(-pt^2)\,\mathrm{d}t\right] \,, \tag{2}$$

$$p = 3\left[1 + (\gamma/2)(\lambda^2-1)(x^2+y^2)\right] \,, \quad \mathrm{Ei}(-p) = -\int_p^\infty t^{-1}\mathrm{e}^t\,\mathrm{d}t \,. \tag{3}$$

ただし，尺度因子 $\lambda(\boldsymbol{r})$ は，電子数密度 $n(\boldsymbol{r})$ と次式で結び付けられる量である:

$$n(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{3}{8\pi^4}\right)^{1/2} \gamma^{3/2}\lambda^3 \left[1 + \frac{\gamma}{2}(\lambda^2-1)(x^2+y^2)\right]^{1/2} \,. \tag{4}$$

また，C は Euler の定数 ($C = 0.5772\cdots$) であり，原子単位系及び磁場に対してよく使われる単位 $\gamma = \mu_0\mathcal{H}/Ry$ (μ_0 は Bohr 磁子，$\gamma = 1$ のとき $\mathcal{H} = 2.3478 \times 10^9\mathrm{Oe}$) を用いた．式 (1) で与えられたエネルギー汎関数 $E[n]$ を電子数一定の条件下で最小化することによって，電子状態を求める事が出来る．

本講演では，幾つかの原子に対して電子状態を数値的に求め，原子の電子状態に対する磁場の影響を議論する．

1) 小坂，米井: 日本物理学会第 50 回年会，1995 年 3 月，静岡大学

2) K. Yonei and T. Motomochi: J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 3571.