新学術領域 平成２２年度成果報告会
2011年3月4日　東京大学本郷キャンパス　工学部6号館63号講義室

電子ガス中の１原子問題：遮蔽電子の遍歴と局在

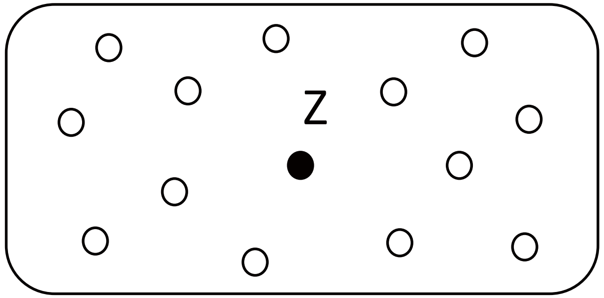
上智大理工　吉澤香奈子
東大物性研　高田康民

Introduction
（電子ガス中の1原子問題について）

- 不純物アンダーソンモデル
  近藤問題
- 交換相関エネルギーE_{xc}の決定
  非一様効果を取り入れる

$\boxed{\text{多体問題と第一原理計算において重要なテーマ}}$

電子ガス中の1原子系



<u>ハミルトニアン</u>

$$H = \sum_i \frac{{\boldsymbol{p}_i}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} - \frac{1}{2}\sum_i \frac{Z\,e^2}{|\boldsymbol{r}_i|}$$

電子密度：$n_0 = 4\pi\, \boldsymbol{a}_B{}^3 r_s{}^3 / 3$

密度パラメータ

- 線形応答理論

電子ガス系の原点に試験電荷 $Z\delta(\boldsymbol{r})$ を挿入

<u>誘起される密度</u>

$$\Delta n(\boldsymbol{q}) = -e\boxed{\chi(\boldsymbol{q},0)}\,\underline{V_{\rm ext}(\boldsymbol{q})} = -Z\frac{4\pi e^2}{\boldsymbol{q}^2}\chi(\boldsymbol{q},0) = -Z\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},0)} - 1\right]$$

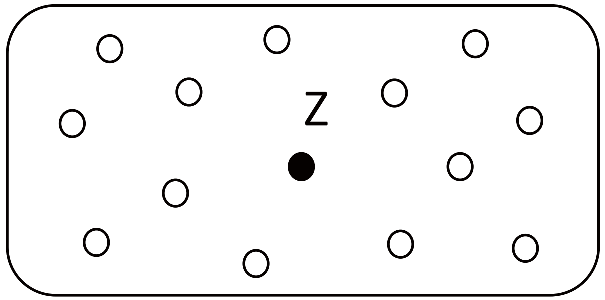
応答関数　外場

$$V_{\rm ext}(\boldsymbol{q}) = \frac{4\pi Z e}{\boldsymbol{q}^2}$$

$$\Delta n(r) = \sum_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\,\Delta n(\boldsymbol{q})$$

・$Z \to$ 小、$r_s \to$ 小

線形応答で記述できる。
遮蔽。局在しない。



電子密度 r_s

・$Z \to$ 大、$r_s \to$ 大

束縛状態 ⇨ 原子、分子
例）$Z = 2$、$r_s \to$ 大 ⇨ He

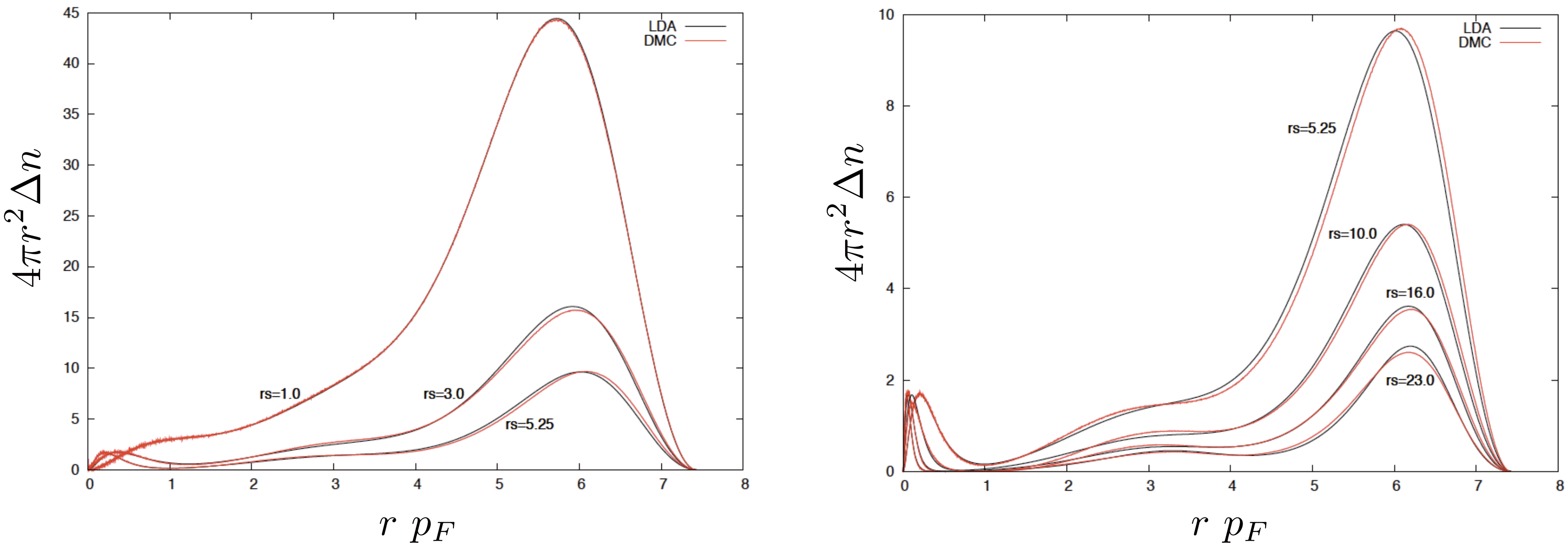
・Z , r_s についてmedium rangeではどうなるか ？

密度汎関数法（局所密度近似）で電子密度のゆらぎや位相差を調べる。

拡散モンテカルロ（DMC）とDFT（LDA）の比較

Z = 2

R. Maezono



Z = 2 でDMCとDFT（LDA）は一致
→ 正しい電荷密度を与える

- 密度汎関数法(DFT)

1電子のシュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{r};[n(\boldsymbol{r})])\right]\phi_i(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\boldsymbol{r})$$

Kohn-Shamポテンシャル

$$V_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{r};[n(\boldsymbol{r})]) = \underbrace{V_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})}_{\text{外場}} + V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{r};[n(\boldsymbol{r})]) + \underbrace{V_{\mathrm{xc}}([n(\boldsymbol{r})])}_{\text{LDA}}$$

外場

$$V_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r}) = -\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r}|}$$

LDA

電子密度

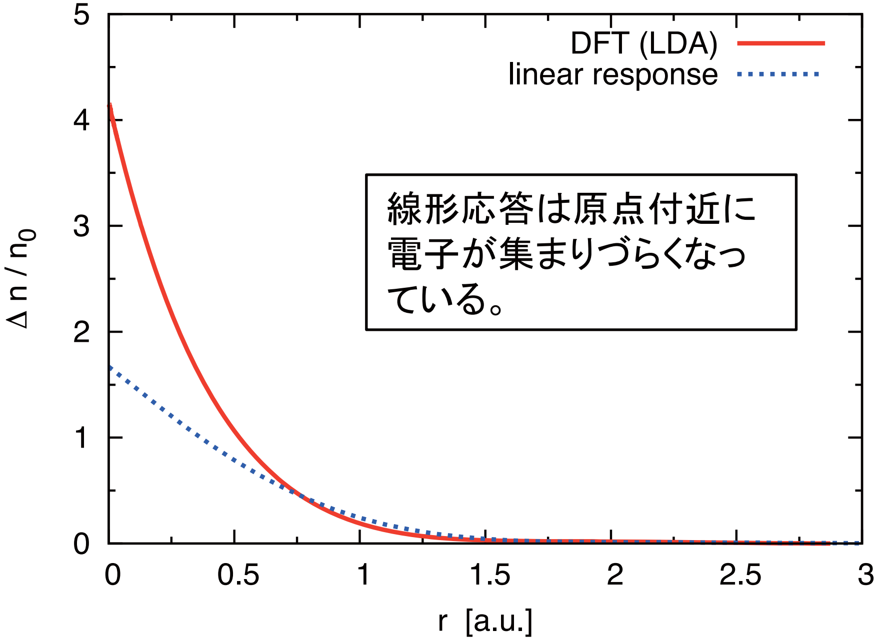
$$n(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N}|\phi_i(\boldsymbol{r})|^2$$

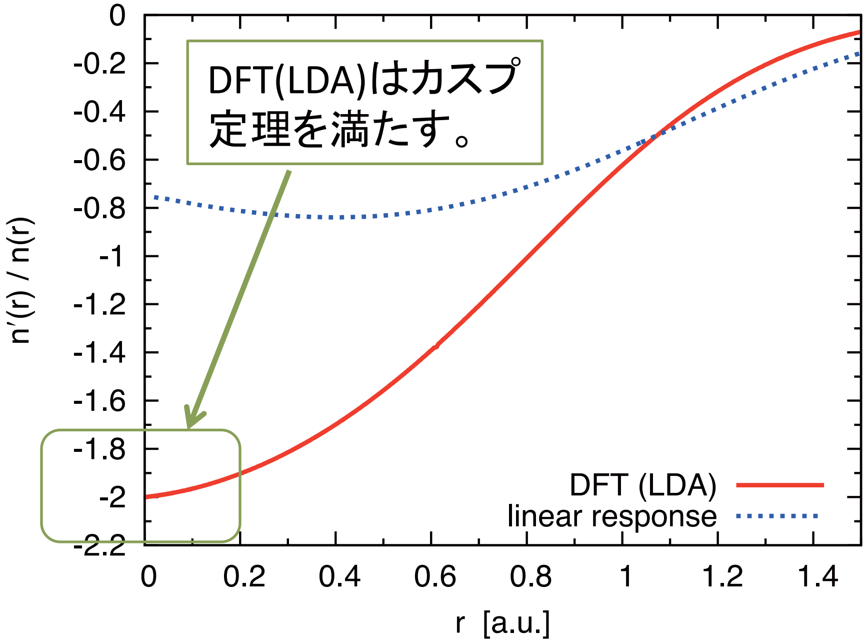
$$\Delta n(\boldsymbol{r}) = n(\boldsymbol{r}) - n_0$$

カスプ定理

$$\lim_{r\to 0}\frac{1}{n(r)}\frac{\partial n(r)}{\partial r} = -2Z$$

$Z = 1$, $r_s = 1$





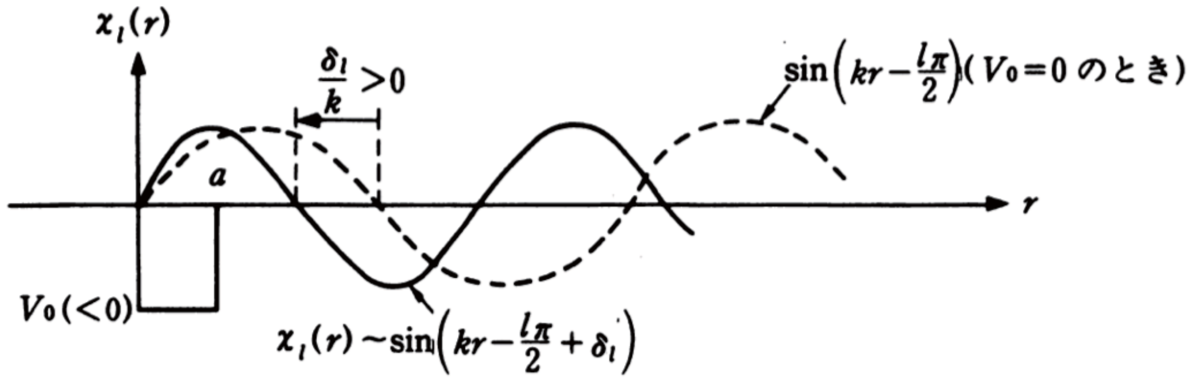
位相差

波動関数 $(r \to \infty)$

$$\chi_{k,l}(r) = B\, j_l(kr) + C\, n_l(kr)$$
$$\longrightarrow \frac{B}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$$

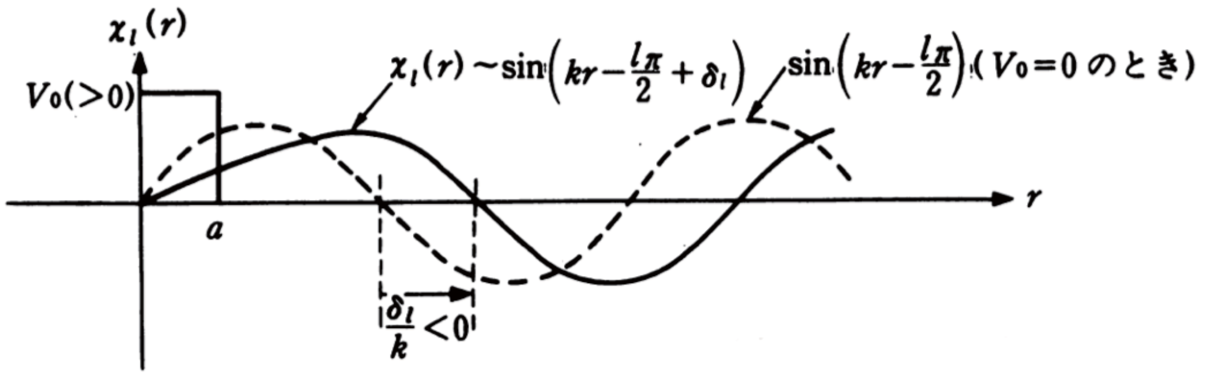
位相差

$$\boxed{\tan \delta_l(k) = -\frac{C}{B}}$$



$\delta_l > 0$: 引力

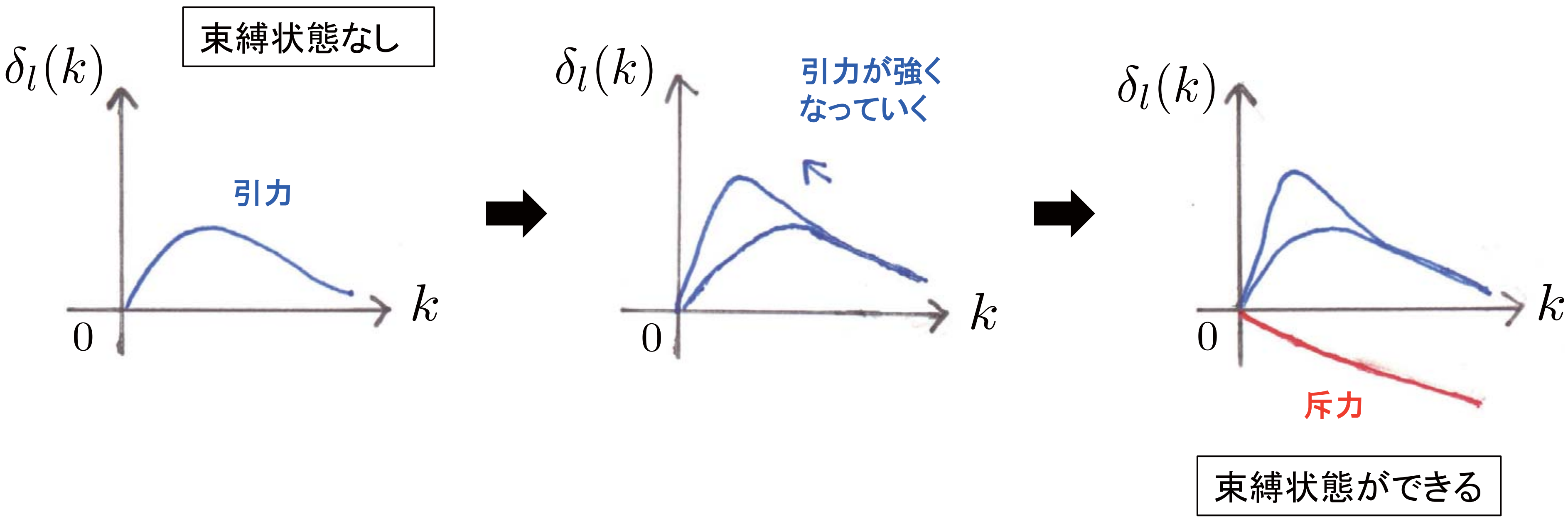
内に引き込まれる

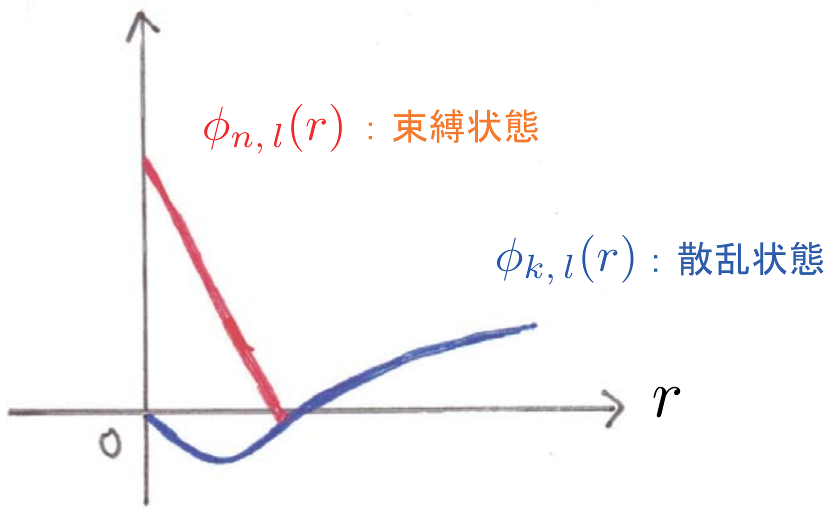


$\delta_l < 0$: 斥力

外に押し出される

位相差と束縛状態



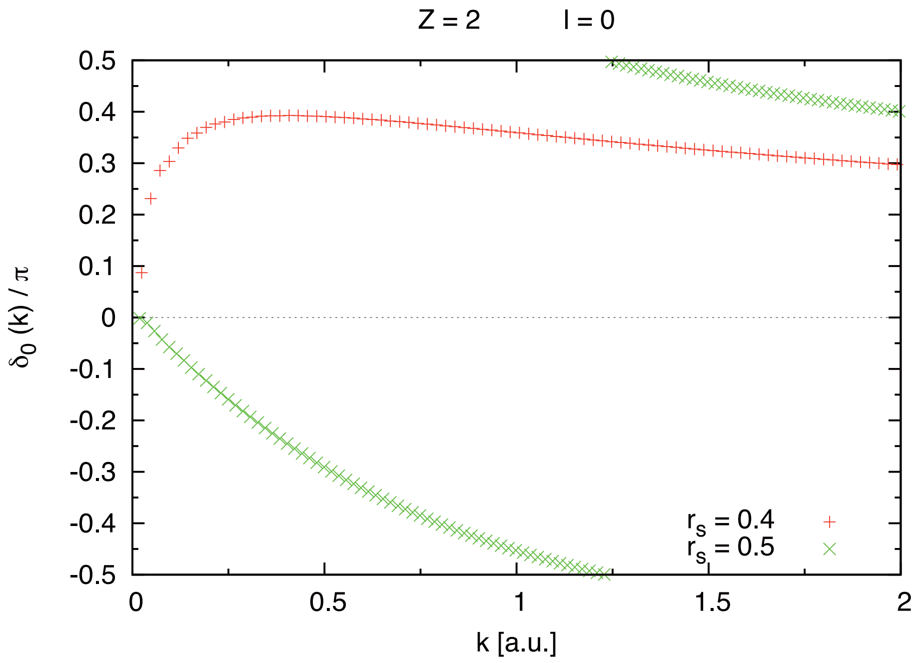


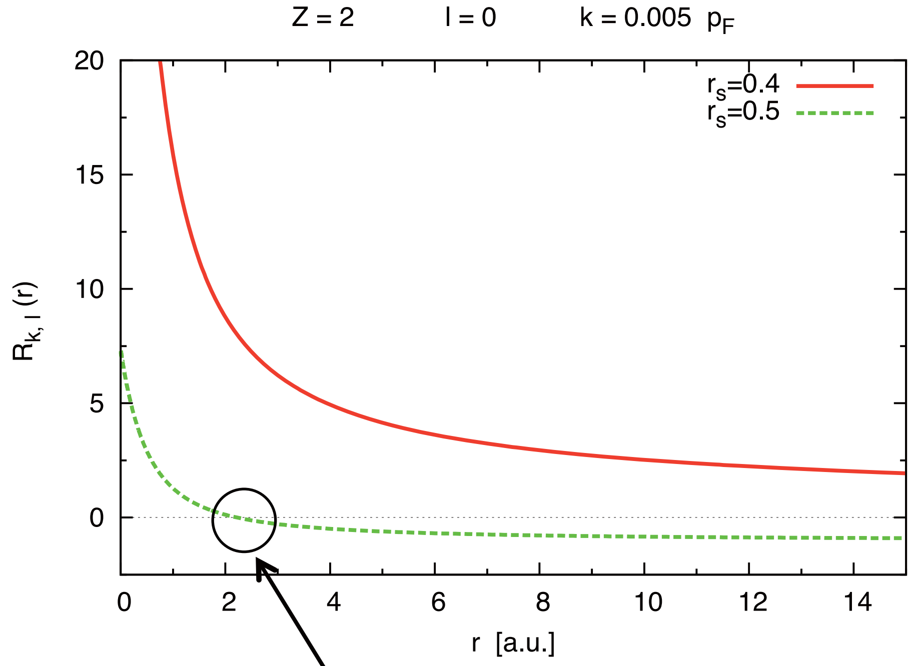
束縛状態が出来ると、
散乱状態はそれに直交するので、外に
押し出される
→ $\delta_l < 0$: **斥力**

$Z = 2$

位相差とKohn-Sham（KS）軌道

$R_{k,l}(r) = \phi_{k,l}(r) / r$

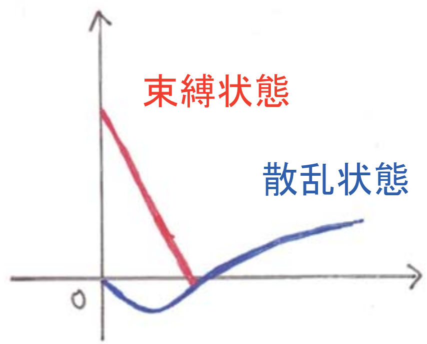


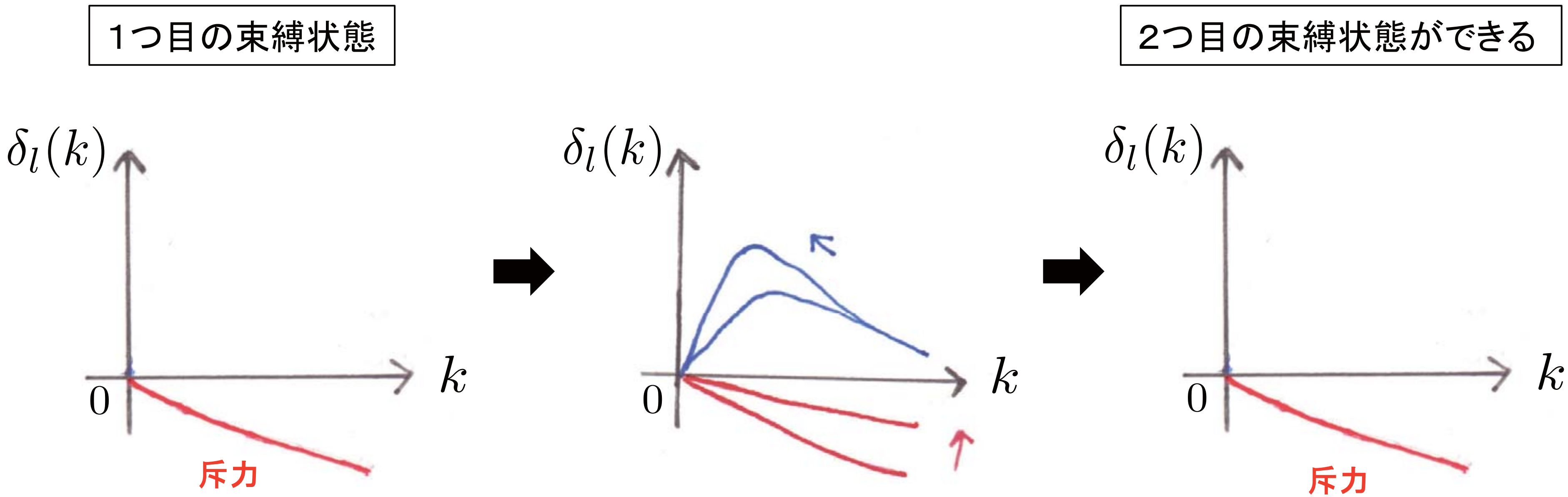


- $r_s < 0.4$: $\delta_0(k) > 0$
- $r_s > 0.5$: $\delta_0(k) < 0$

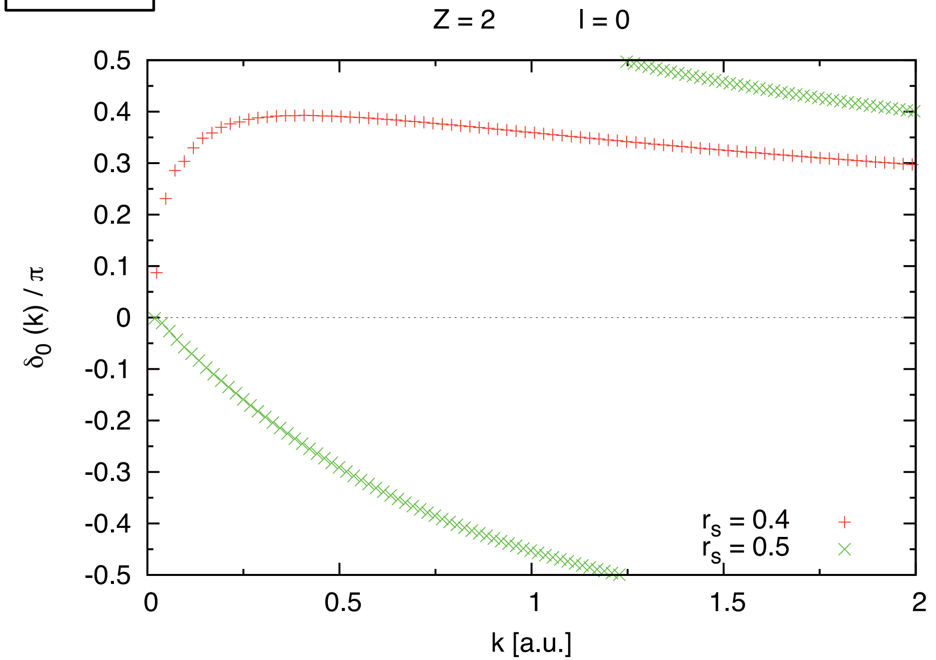
→ 束縛状態

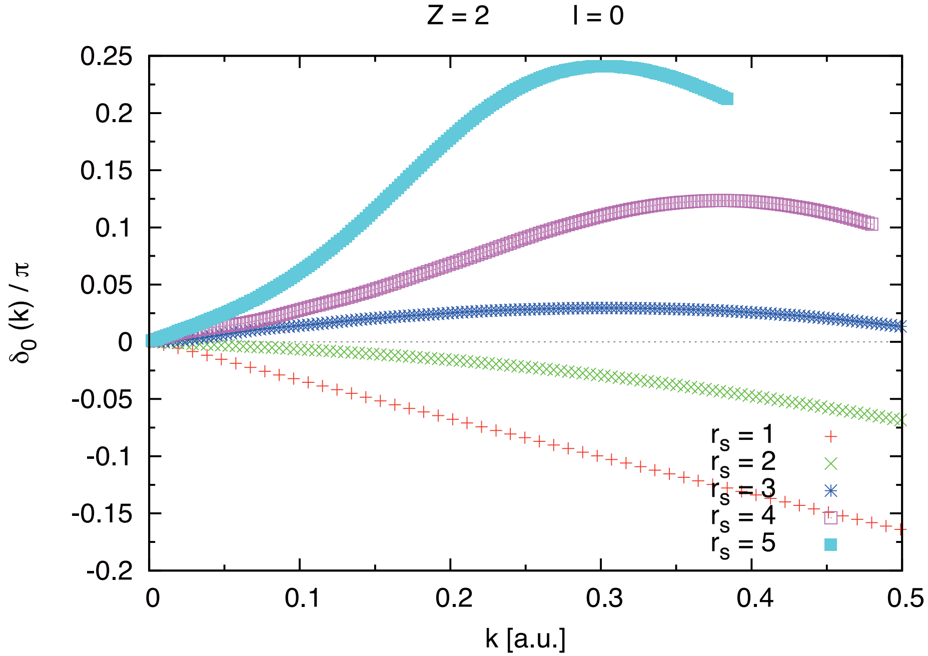
$r_s > 0.5$ で、KS軌道がnodeを持つ。束縛状態に対して直交する軌道になっている。

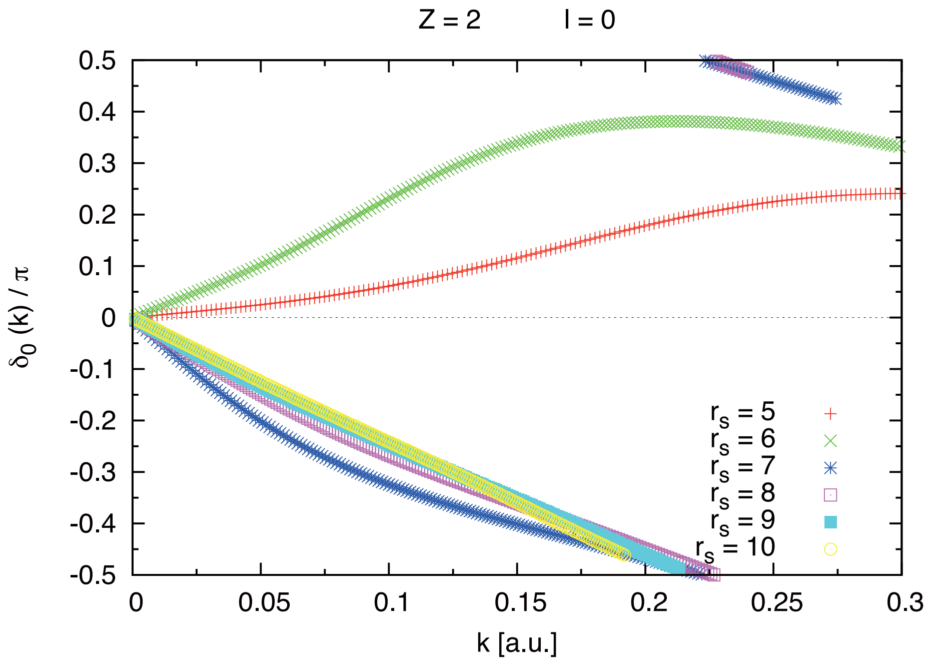



1つ目の束縛状態
2つ目の束縛状態ができる
$\delta_l(k)$
k
0
斥力

Z = 2







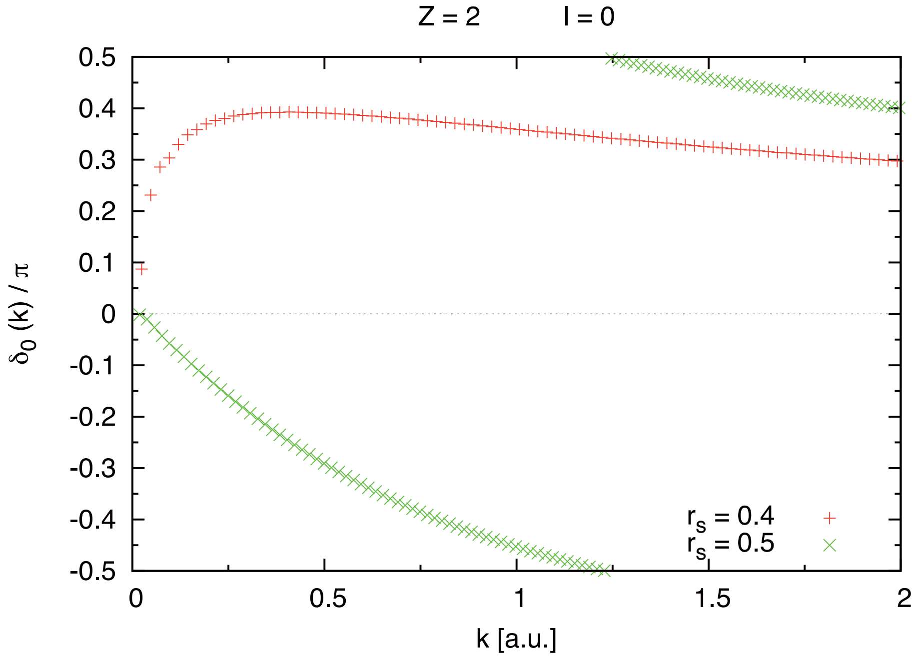
- $r_s > 0.5$: $\delta_0(k) < 0$

→ 1つ目の束縛状態

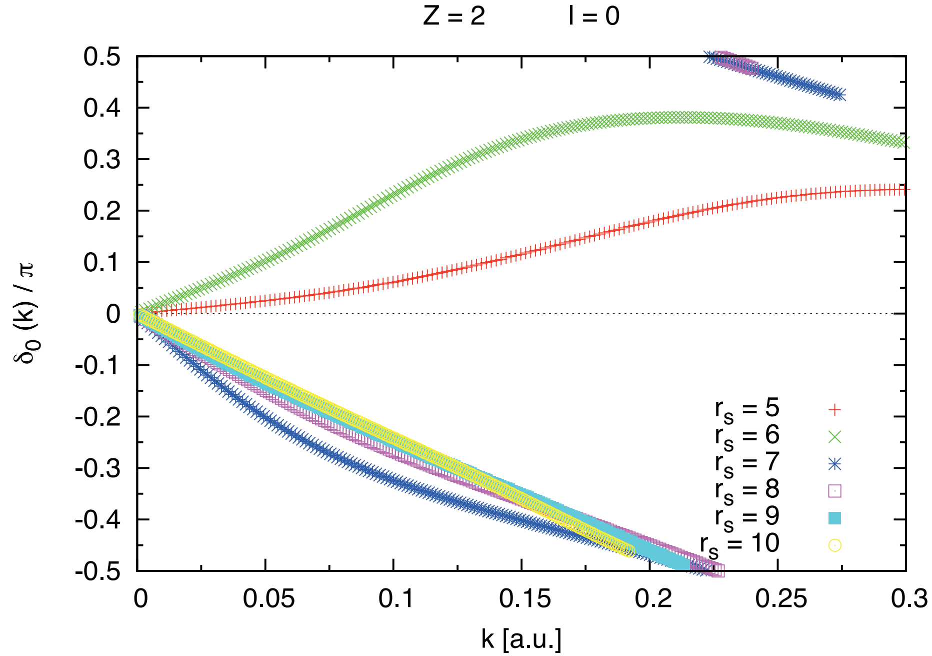
- $r_s > 7$: $\delta_0(k) < 0$

→ 2つ目の束縛状態

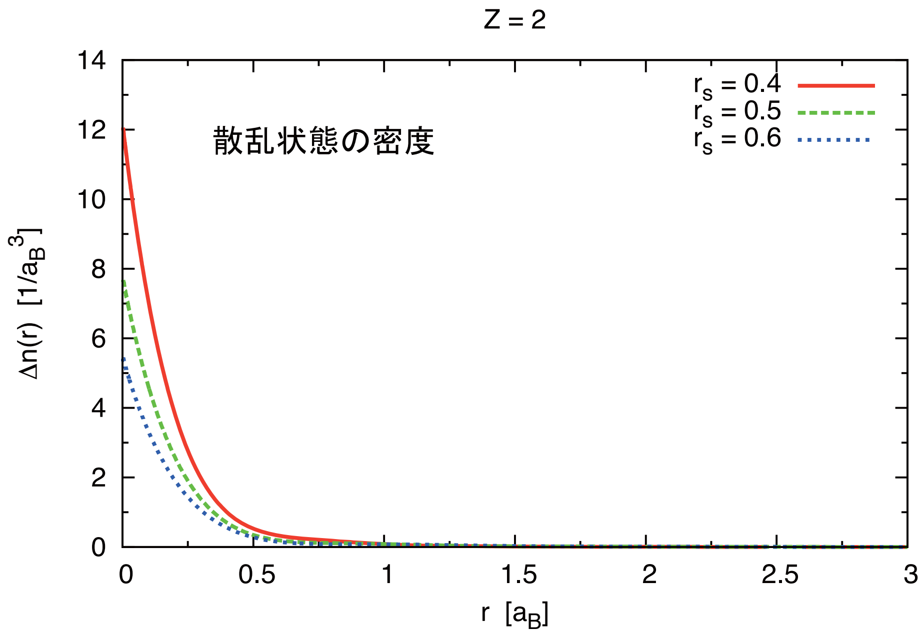
位相差と電子密度



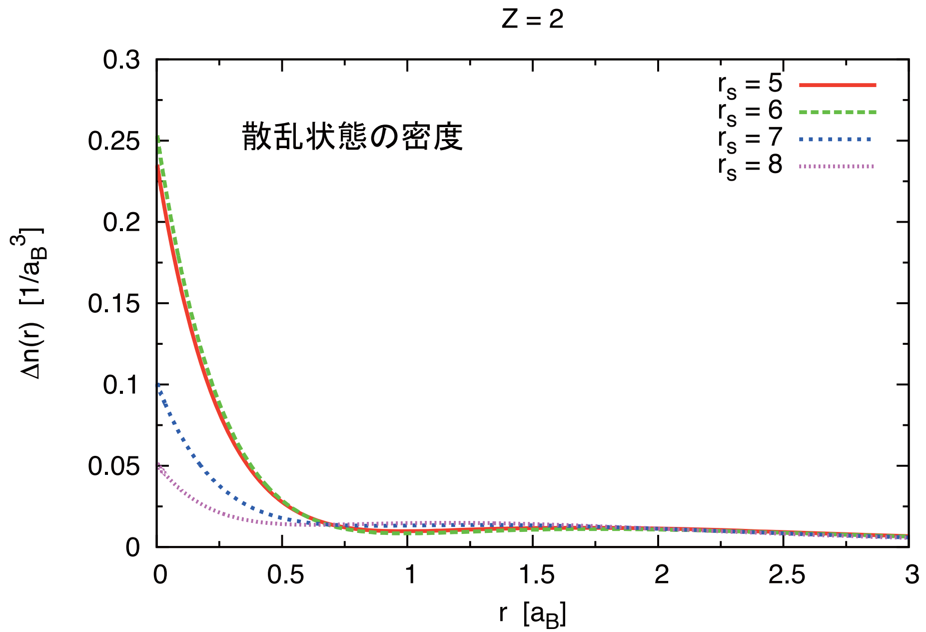
Z = 2 l = 0
δ0 (k) / π
k [a.u.]
rs = 0.4
rs = 0.5



Z = 2 l = 0
δ0 (k) / π
k [a.u.]
rs = 5
rs = 6
rs = 7
rs = 8
rs = 9
rs = 10

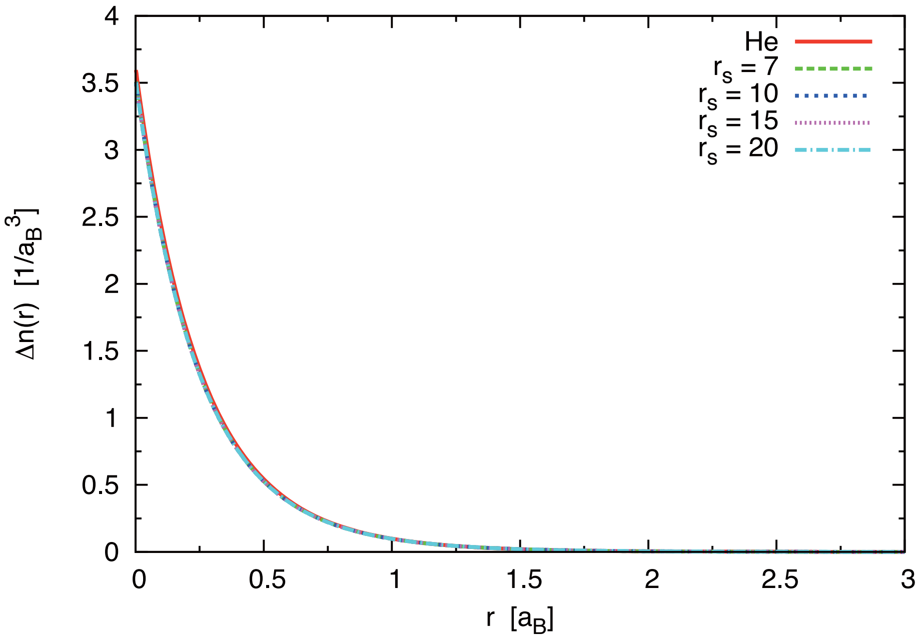


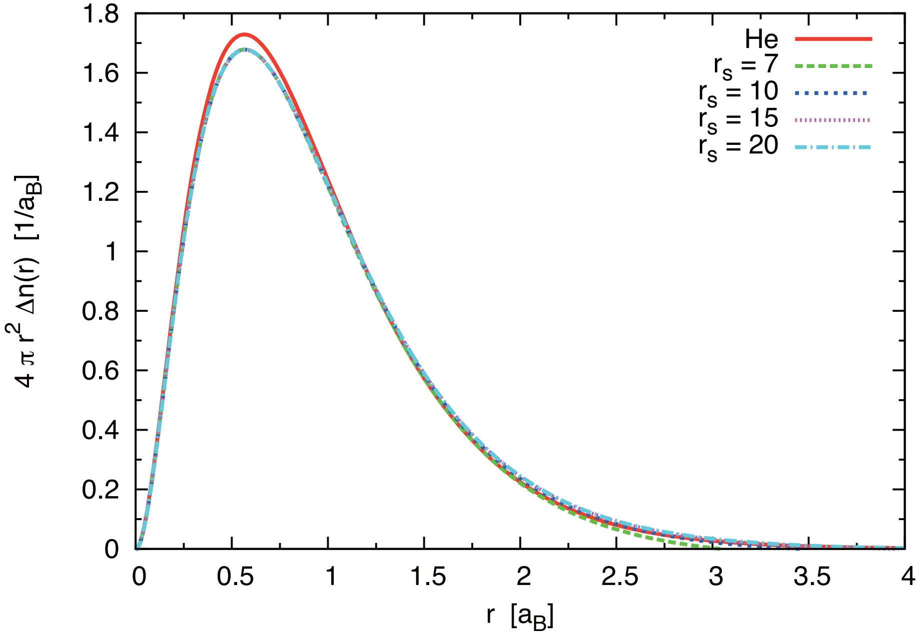
Z = 2
散乱状態の密度
Δn(r) [1/aB3]
r [aB]
rs = 0.4
rs = 0.5
rs = 0.6



Z = 2
散乱状態の密度
Δn(r) [1/aB3]
r [aB]
rs = 5
rs = 6
rs = 7
rs = 8

$Z = 2$





$r_s > 7$ で2つの束縛状態 → Heの電子密度

まとめと今後の展望

- 電子ガス中の1原子系
  密度汎関数法による散乱状態と束縛状態

$Z = 2$ ： $r_s > 0.5$ で1つ目の束縛状態
$r_s > 7$ で2つ目の束縛状態 → He

↑ 連続的に1つずつ束縛状態ができる

- $Z = 1$
  LDAでH^-ができるのか？