

V-5. 水銀の Pseudopotential

名古屋大学工学部 野口 精一郎
豊田 理研 武内 隆

Pseudopotential を利用して、液体金属の電気抵抗や熱電能を定量的に求める試みは Ziman によっておこなわれ⁽¹⁾、多くの液体金属で実験とよく一致する結果を得た⁽²⁾。

しかし、液体金属として極めてよく知られており、実験も数多くなされている水銀については、理論値と実験値の一致は良くないことが示された⁽²⁾⁽³⁾。

この不一致の原因として、Mott は液体水銀では状態密度が、他の液体金属のように自由電子的ではなく、フェルミ・エネルギー E_F の近傍で極小をもったためであろう⁽⁴⁾と考えた。しかし Ziman の方法にしたがって事態を改善することも可能で、Ashcroft⁽⁵⁾、Takeuchi⁽⁶⁾、および Evans⁽⁷⁾ らは独自の pseudopotential をもちいることにより液体水銀の場合にも実験値とよくあう値を得ることができた。

これらの potential を水銀に、Animalu-Heine の potential⁽⁸⁾ を他の金属に対してもちいて水銀の稀薄合金(液体)の電気抵抗と熱電能を計算すると、実験とかなりよく合う結果が得られる⁽⁶⁾が、溶質元素が Ia 属の金属 (Ga, In, Tl) の水銀合金で観測されている“熱電能がある組成で極小となる現象”を説明することが出来なかった。⁽⁶⁾

しかし、水銀の pseudopotential として Fig. 1 に (trial II) として示したものを使うことによって、Fig. 2 に示すように理論値と実験値の極めてよい一致を得られることが出来る。この pseudopotential (trial II) は Animalu-Heine の potential に Fig. 1 に示した ΔU という項を付加したもので、(trial II) の形は Harrison が銅に対して求めた pseudopotential の形⁽⁹⁾ に酷似し、また ΔU は彼の s-d hybridization による項と同じ形をしている。

このことは水銀においても s-d hybridization を考慮することが必要で

あることを示すひとつの証拠であるのかもしれない。

参 考 文 献

- 1) J.M. Ziman: Phil. Mag., 6(1961) 1013.
- 2) N.W. Ashcroft and J. Lekner: Phys. Rev., 145(1966) 83.
- 3) N.C. Halder and C. N. J. Wager: Z. Naturforsch. 23A(1968) 992.
- 4) N.F. Mott: Phil. Mag., 13(1966) 989.
- 5) N.W. Ashcroft and D. C. Langreth: Phys. Rev., 159(1967) 500.
- 6) T. Takeuchi: J. Phys. Soc. Japan, 30(1971) 995.
- 7) R. Evans: J. Physics C 3(1970) S137.
- 8) A.O.E. Animalu and V. Heine: Phil. Mag., 12(1965) 1249.
- 9) W.A. Harrison: Phys. Rev., 181(1968) 1036.

野口精一郎, 武内 隆

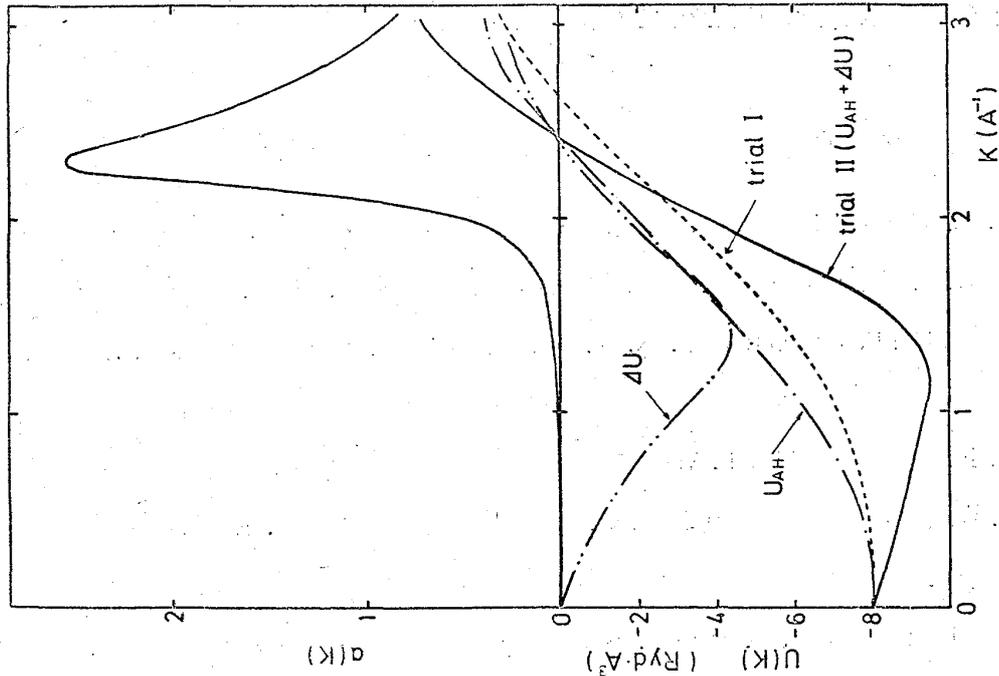


Fig.1 水銀の pseudopotential: structure factor $a(K)$ は実験より求めた値, form factor $U(K)$ のうち U_{AH} は Animalu-Heine, trial I は Takeuchi によるもの, trial II は U_{AH} に付加項 ΔU を加えたものである。

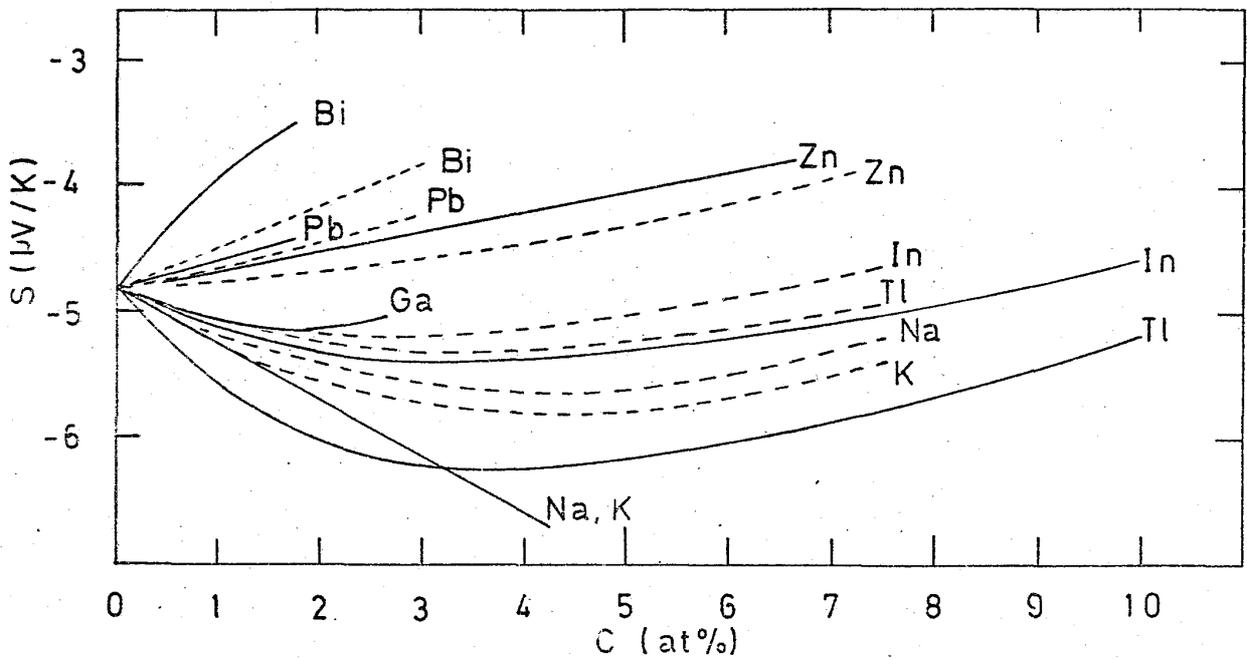


Fig.2 水銀合金の熱電能: 実線は実験値, 点線は理論値である。