

暗黒物質直接探索のための放射線物性セミナー2025

月出 章

第2回

1.3 光吸収断面積と振動子強度

1.3.1. 誘電応答関数

1.3.2. 吸収係数と振動子強度 古典論

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論

2. 原子模型

2.1. 電子ガス

2.2. Thomas-Fermi 模型

質問は声でお願いします

内容 (仮)

1. 序論

1.1. 阻止能と断面積

1.2. 重粒子の阻止能 古典論

1.3. 光吸収断面積と振動子強度

2. 原子模型

2.1. 電子ガス

2.2. Thomas-Fermi 模型

3. 重粒子の阻止能

3.1. 高速重粒子の阻止能 Betheの式

3.2. 重粒子の飛跡構造 -1

4. 低速重粒子

4.1 核的阻止能 Rutherford 散乱

4.2 電子的阻止能 誘電応答 (Lindhard理論)

4.3 MO理論

5. W値と energy balance

5.1 気体と凝縮相

5.2 高速粒子と低速粒子

5.3 Penning電離 一重項と三重項

文献

光吸収断面積、振動子強度

井口道生, 放射線化学誌の特集・連続記事

L.D. Landau and E. M. Lifshitz, “Electrodynamics of continuous media”, Pergamon, London (1960).

Charged Particle and Photon Interactions with Matter: Recent Advances, applications, and Interfaces; ed.Y. Hatano et al. Taylor & Francis, Boca Raton, 2010;.

Chapt. 2. T. Odagiri and N. Kouchi

Chapt. 5. H. Hayashi and Y. Udagawa

1.3.1. 誘電応答関数

自由電子

$\hbar\omega \gg$ 電子の束縛エネルギー

External field

$$E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$$

The Newton equation of motion

$$m_e \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e \mathbf{E}$$

定常解は

$$\mathbf{r} = \left(\frac{e}{m_e \omega^2} \right) \mathbf{E}$$

分極 (単位体積当りの双極子モーメント)

$$\mathbf{P} = -e N_e \mathbf{r} = - \left(\frac{e^2 N_e}{m_e \omega^2} \right) \mathbf{E}$$

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$$

N_e : 単位体積当りの電子の数

$$\epsilon = 1 + 4\pi \frac{P}{E} \quad \epsilon: \text{permittivity, 誘電率}$$

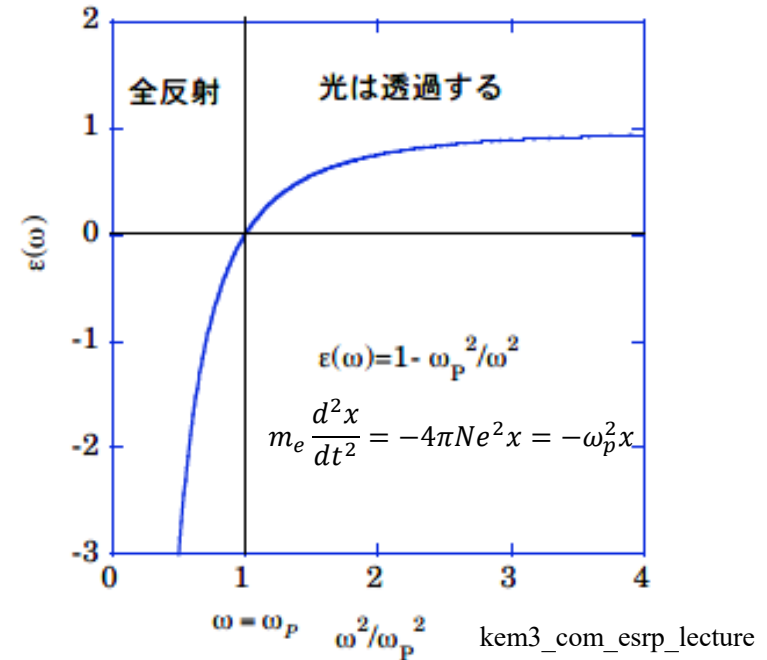
$$= 1 - \frac{4\pi N_e e^2}{m_e \omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

ω_p : プラズマ角振動数

$\omega \rightarrow \infty$ のときの ϵ の振舞い

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi N_e e^2}{m_e}}$$

一様な正の電荷を帯びて無限に広い背景に置かれた、数密度が N の電子の集団が自然に起こしうる調和振動の角振動数。



$\mathbf{D}$: electric displacement, 電気変位

The dipole polarizability $\alpha(\omega)$
(The electric dipole moment induced by the unit field)

自由電子の分極率 $\alpha = -\frac{e^2}{m_e \omega^2}$

物質の中の電子

平衡の位置からの変位に比例する力で束縛。固有角振動数 ω_n

External field

$$E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$$

The Newton equation of motion

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} = -m_e \omega_n^2 x - m_e \gamma_n \frac{dx}{dt} - eE(t)$$

γ_n :damping coefficient

他の電子や核にエネルギーを.
光を放出.

解は

$$x = -\frac{1}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega} \left(\frac{e}{m_e} \right) E_0 e^{-i\omega t}$$

双極子能率 (-ex)

(the induced electric dipole moment)

$$P = \frac{1}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega} \left(\frac{e^2}{m_e} \right) E_0 e^{-i\omega t}$$

The dipole polarizability $\alpha(\omega)$

$$\alpha(\omega) = \frac{P}{E} = \frac{e^2}{m_e(\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega)}$$

for one electron (oscillator).

The polarizability of the atom is the superposition of the above Eq.

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_e} \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega}$$

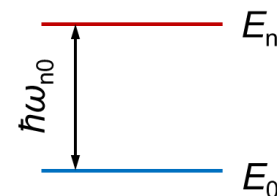
The frequency ω_n is related to the excitation energy E_n of the state n measured from g.s.

by the Bohr condition,

$$\omega_n = E_n / \hbar$$

$\omega \gg \omega_n$, the f sum rule

$$\sum_n f_n = Z$$



$$\hbar\omega_{0n} = E_n - E_0$$

1.3.2. 吸収係数と振動子強度 古典論 -2

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$$

ε : 誘電率

物質の分極 $\mathbf{P} = -eN\mathbf{r}$

$$\begin{aligned}\varepsilon &= 1 + 4\pi \frac{P}{E} \quad \text{前頁より} \\ &= 1 + \frac{4\pi NZe^2}{m_e} \frac{1}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n\omega} \quad (4.28)\end{aligned}$$

屈折率 $n = n' + in'' = \varepsilon^{1/2}$

$$\begin{aligned}n' + in'' \\ \approx 1 + \frac{2\pi NZe^2}{m_e} \frac{1}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n\omega}\end{aligned}$$

屈折率の虚部 n'' は

$$n'' = \frac{2\pi NZe^2}{m_e} \frac{\gamma_n\omega}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma_n^2}$$

角振動数 ω で x 方向に進む電場は

$$\begin{aligned}E(t) &= E_0 e^{-i\omega\left(t - \frac{nx}{c}\right)} \\ &= E_0 \underbrace{e^{-i\omega\left(t - \frac{n'x}{c}\right)}}_{\text{速さ } c/n \text{ で伝わる}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{\omega n''}{c}x}}_{\text{減衰}}\end{aligned}$$

電磁波のエネルギーは振幅の二乗に比例

$$I = I_0 e^{-\frac{2\omega n''}{c}x}$$

吸収係数

$$\mu = N\sigma_a = \frac{2\omega n''}{c}$$

N : 単位体積当りの原子の数

断面積

$$\sigma_a = \frac{2\omega n''}{Nc} = \frac{4\pi Ze^2}{m_e} \frac{\omega}{c} \frac{\gamma_n\omega}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma_n^2} \quad (4.33)$$

1.3.2. 吸収係数と振動子強度 古典論 -3

断面積

$$\sigma_a = \frac{2\omega n''}{Nc} = \frac{4\pi Z e^2}{m_e} \frac{\omega}{c} \frac{\gamma_n \omega}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_n^2} \quad (4.33)$$

$$\text{sum rule} \quad \int f(\omega_n) d\omega_n = Z \quad \text{より}$$

$$\sigma_a = \frac{4\pi e^2}{m_e} \frac{\omega^2 \gamma_n}{c} \int_0^\infty \frac{f(\omega_n) d\omega_n}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_n^2}$$

$f(\omega_n) \rightarrow f(\omega)$ として積分の外に出し、分母を
 $(\omega_n - \omega)^2(\omega_n + \omega)^2 + \gamma_n^2 \approx \omega^2[4(\omega_n - \omega)^2 + \gamma_n^2]$
と変え積分を行うと、積分値が $\pi/2\gamma_n\omega$ となり

$$\sigma_a = \frac{2\pi^2 e^2}{m_e c} f(\omega) \quad (4.36)$$

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論 -1

Einstein の A と B

Boltzmann distribution

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} \exp\left(-\frac{h\nu_{nm}}{k_B T}\right) \quad T \rightarrow \text{大}$$

g : 準位の縮退度, $N_n/N_m \rightarrow g_n/g_m$

Planckの公式

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

平衡状態 detail balance

$$N_n [A_{nm} + B_{nm} u(\nu_{nm})] = N_m B_{mn} u(\nu_{mn})$$

A と B との関係

$$A_{nm} = \frac{8\pi h \nu_{nm}^3}{c^3} \frac{g_m}{g_n} B_{mn} \quad [\text{s}^{-1}]$$

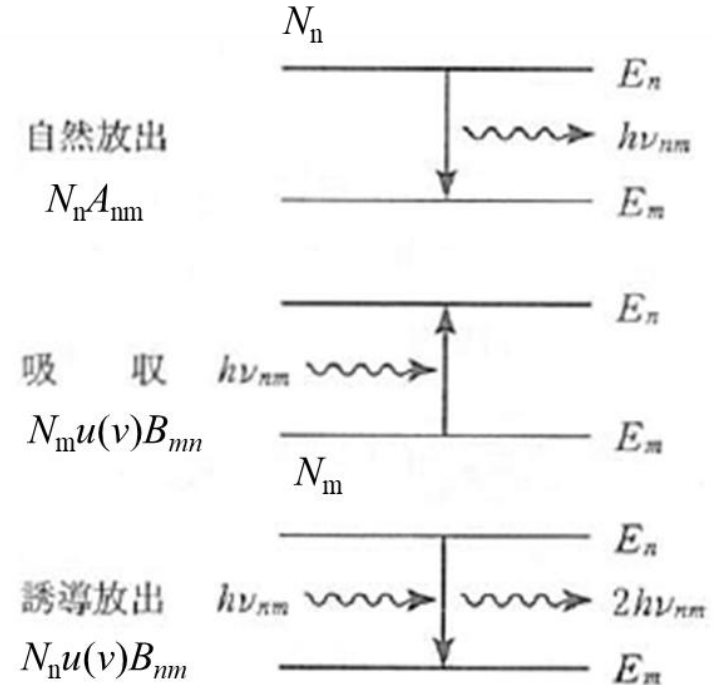


図 4.9 光吸収・放出の3過程

rate equation

$$\frac{dN_n(t)}{dt} = -N_n \sum_m A_{nm}$$

radiative lifetime

$$\tau_n = \left(\sum_m A_{nm} \right)^{-1}$$

分子や凝縮相では
non-radiative
な過程が入る

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論 -2

$$H = eU + \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 / 2m_e$$

$$\approx \frac{p^2}{2m_e} + eU - \frac{p}{m_e c} (\mathbf{pA}) \quad (4.38)$$

振動

角振動数 ω , 波数 k の光に対して、
 $\mathbf{e}_k$: 単位電気ベクトル

$$\mathbf{A} = \sqrt{\frac{\hbar c^2}{\omega}} \mathbf{e}_k \left(a_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right)$$

消滅 生成

遷移の始状態と終状態を結ぶ行列要素{(4.38)第3項}は

$$-\mathbf{e}_k \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \langle \phi_f x_{n'} | \mathbf{p} (a_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}) | \phi_i x_n \rangle$$

行列要素の中で 0でなく、吸収に関するものは

$$-\frac{e}{m_e c} \langle \phi_f x_{n'} | \mathbf{pA} | \phi_i x_n \rangle$$

$$= -e_k \frac{e}{m_e c} \langle x_{n'} | a_k | x_n \rangle \langle \phi_f | p e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \phi_i \rangle$$

$$= -e_k \frac{e}{m_e c} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \sqrt{n} \langle \phi_f | p e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \phi_i \rangle \quad (4.41)$$

U : 静電ポテンシャル

$\mathbf{A}$: ベクトルポテンシャル

ϕ : 電子波動関数

x_n : $\hbar\omega$ のエネルギーを持つ光子が
 n 個存在する状態

$$a_k^\dagger |x_n\rangle = \sqrt{n+1} |x_{n+1}\rangle$$

$$a_k |x_n\rangle = \sqrt{n} |x_{n-1}\rangle$$

双極子近似

$$p e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx p \pm i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})p \approx p$$

また、

$$p = i \frac{m_e}{\hbar} \{Hr - rH\}$$

$$\langle \phi_f | p | \phi_i \rangle = i \frac{m_e}{\hbar} \langle \phi_f | Hr - rHp | \phi_i \rangle$$

$$= i \frac{m_e}{\hbar} (E_f - E_i) \langle \phi_f | r | \phi_i \rangle$$

$$= i m_e \omega \langle \phi_f | r | \phi_i \rangle \quad (4.43)$$

電気双極子

$$= -i(\hbar\omega)^{1/2} \sqrt{n} \langle \phi_f | e r | \phi_i \rangle \quad (4.45)$$

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論 -3

黄金則

摂動 H' によって Φ_i から Φ_f への遷移確率は

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Phi_i | H' | \Phi_f \rangle|^2 \delta(E_i - E_f) \delta_\nu \quad (2.19)$$

δ_ν : 遷移可能な終状態の状態数

単位体積当たり k と $k+dk$ の間の運動量を持つ状態の数は

$$\frac{1}{8\pi^3} k^2 dk d\Omega = \frac{1}{8\pi^3 c^2} \omega^2 d\omega d\Omega$$

行列要素の中で 0 でなく、放出に関するものは
前頁と同様に

$$\begin{aligned} & -\frac{e}{m_e c} \langle \phi_f x_{n'} | \mathbf{p} \mathbf{A} | \phi_i x_n \rangle \\ & = -e_k \frac{e}{m_e c} \langle x_{n'} | a_k^\dagger | x_n \rangle \langle \phi_f | p e^{ikr} | \phi_i \rangle \\ & = -i(h\omega)^{1/2} \sqrt{n+1} \langle \phi_f | er | \phi_i \rangle \end{aligned}$$

自然放出に対しては

$$= -i(h\omega)^{1/2} \langle \phi_f | er | \phi_i \rangle$$

遷移確率は、

$$A = \frac{\omega^3}{hc^3} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 d\Omega$$

全空間で積分すると

$$A = \frac{8\pi\omega^3}{3hc^3} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 \quad (4.49)$$

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論 -4

吸収に対する遷移確率は、

$$B = \frac{\omega^3}{hc^3} n |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 d\Omega$$

電気ベクトルと遷移方向との角度を θ とすると

$$B = \frac{\omega^3}{hc^2} n |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 \cos^2 \theta d\Omega$$

角度について平均すると

$$\begin{aligned} B &= \frac{8\pi\omega^3}{3hc^3} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 n_\omega \\ &= I = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 c} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 I_0(\omega) \end{aligned} \quad (4.52)$$

吸収されるエネルギーは毎秒 $I\hbar\omega$ だから、

吸収断面積は

$$\sigma_a = \frac{4\pi^2\omega}{3\hbar c} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2$$

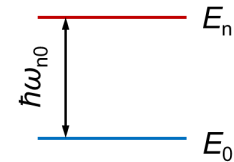
振動子強度は

$$f = \frac{2m_e\omega}{3\hbar e^2} |\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|^2 \quad (4.36) \text{ と比較}$$

体積 V の中にエネルギー $\hbar\omega$ を持つ光子が n_ω 個存在するとき、そのエネルギー密度は

$$\frac{1}{V} \left\{ 2 \sum_{\omega} \hbar\omega \left(n_\omega + \frac{1}{2} \right) \right\} = \int \hbar\omega \frac{n_\omega}{\pi^2 c^3} d\omega$$

$$f_{0n} = \frac{2m_e(E_n - E_0)}{3\hbar^2} |\langle n | \sum_s r_s | 0 \rangle|^2$$



次元のチェック

$$f = \left(\frac{1}{3} \right) \left(\frac{\hbar\omega}{R_\infty} \right) \left(\frac{|\langle \Phi_f | er | \Phi_i \rangle|}{ea_B} \right)^2$$

$$R_\infty = 13.6 \text{ eV:}$$

1.3.3. 吸収係数と振動子強度 量子論 -5

総和則

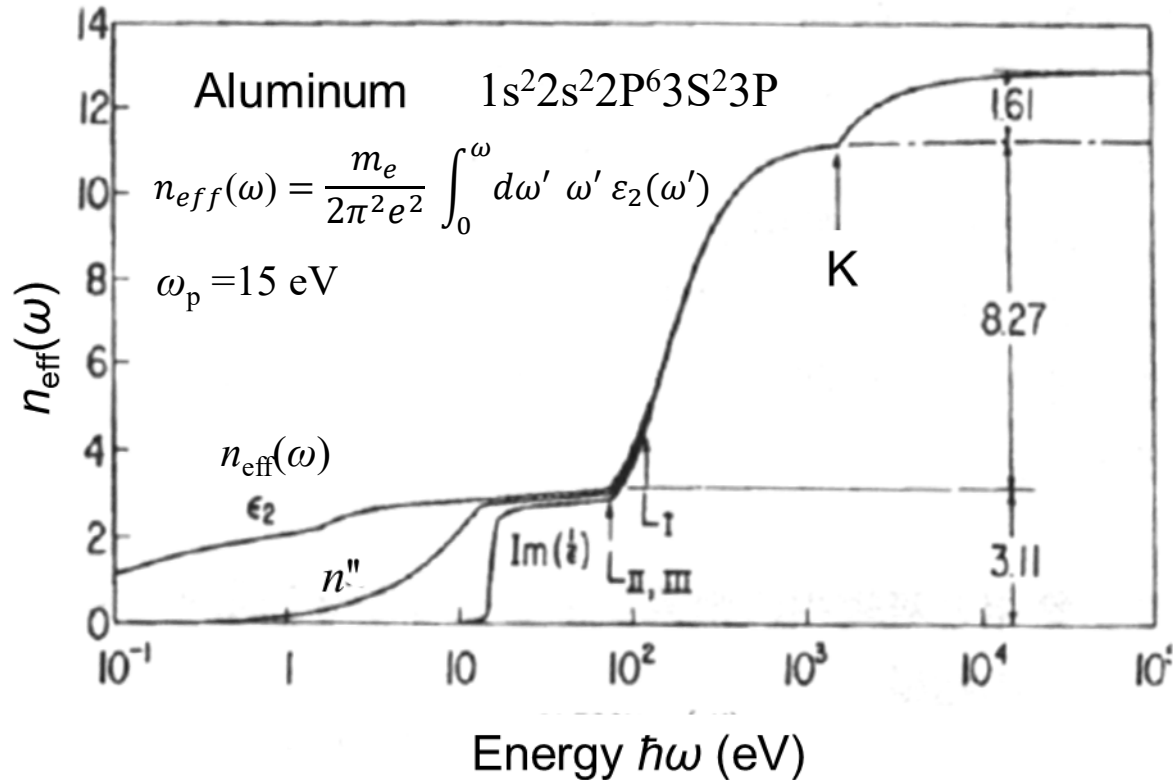


図 Al 金属における総和則

M電子 3.11, L電子 8.27, K電子 1.61, 和 12.99

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi N e^2}{m_e}} = 15 \text{ eV} \quad , \quad N = 2.7 \quad \text{価電子3個 (3s}^2\text{3p) が伝導電子}$$

E, Shiles et al. Phys. Rev. B22, 1612 (1980).
井口道生, 放射線化学, 49, 2 (1990).

2.1. 電子ガス -1

電子ガス

電子が平均的な静電ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の中を動いているとする。微小空間（原子）を考え、電子の de Broglie 波長がこの空間の大きさに比べて十分に小さいと、自由電子と見なすことができる。

自由粒子に対する平面波は規格化できない。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^* \phi = \int_{-\infty}^{\infty} dx 1 = \infty$$

そこで

$$f(x) = \sum_n a_n \phi_n(x)$$

と固有関数の和として表す。

さらに、連続量も許す。 $k = 2\pi/L$: 波数

$$\sum_{n=1}^{\infty} () \rightarrow \int_0^{\infty} dk () \frac{L}{2\pi}$$

波動光学

x 方向に進む平面波

$$U(x, t) = A \exp\{-i(\omega t - kx - \alpha)\}$$

$k = 2\pi/\lambda$: 波数 α : 位相

2.1. 電子ガス -2

周期的境界条件

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = E \phi(x)$$

$$\phi\left(x - \frac{L}{2}\right) = \phi\left(x + \frac{L}{2}\right)$$

$$\phi'\left(x - \frac{L}{2}\right) = \phi'\left(x + \frac{L}{2}\right)$$

解が e^{ikx} となる

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{ik \cdot x}$$

$k = 2\pi/L$: 波数

許される k_x, k_y, k_z の値は

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right) \quad n_i: \text{整数}$$

領域 dk_x, dk_y, dk_z に入る状態の数は

$$\frac{dk_x}{2\pi} L_x \cdot \frac{dk_y}{2\pi} L_y \cdot \frac{dk_z}{2\pi} L_z = \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} V_L$$

半径 k の球の体積 $V_k = \frac{4\pi}{3} k^3$

V_k の中に入る電子数

$$N = 2V_k / \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{L^3}{3\pi^2} k^3$$

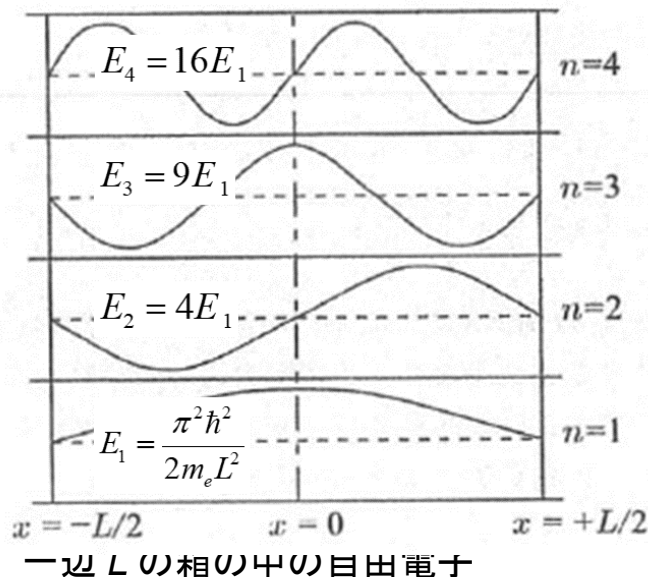
↑
スピン

電子密度

$$n_e = \frac{N}{L^3} = \frac{k^3}{3\pi^2}$$

$$k = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$$

$L(V)$ は消えるが必要



2.1. 電子ガス -3

エネルギーは、

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_e}$$

電子は低い状態から詰まっていく。

フェルミエネルギー

電子のもつ
最大エネルギー

$$k = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

E から $E+dE$ の状態密度

$$\rho(E)dE = \frac{1}{L^3} \times 2 \times \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \times 4\pi k^2 dk$$

電子のエネルギー E は

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = E \quad \frac{\hbar^2}{m_e} k dk = dE \quad p = \hbar k$$

$$k = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar}$$

$$k^2 dk = \frac{m_e}{\hbar^2} k dE = \frac{\sqrt{2m_e}^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} dE$$

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2m_e}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

運動量空間 一つの状態が占める体積
 $(2\pi\hbar)^3$

電子密度

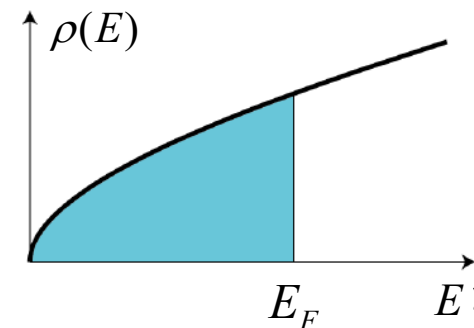
$$n_e(r)dr = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{p_F(r)}{\hbar} \right)^3$$

最大速度 (フェルミ速度)

$$v_F = \frac{p_F}{m_e} = \frac{\hbar(3\pi^2 n)^{1/3}}{m_e}$$

電子密度

$$n_e = \int_0^{E_F} \rho(E) dE = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{3\pi\hbar^3}$$



2.2. Thomas-Fermi 模型 -1

Wave fn の議論を避け、電子密度 n_e 扱う。

原子を Z_e の電荷を持った原子核の周りに Z 個の電子が充満した電子ガスと近似する。

ポテンシャルエネルギー

一電子近似

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_j \int \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_j(r_j)|^2 dr_j \quad (1.31)$$

$eV(\mathbf{r}) = U(r)$ 球対象

$\frac{p_e^2}{2m_e} - U(r)$ 束縛されているので 負

$$\left[\begin{aligned} \frac{p_F^2}{2m_e} - U(r) &= U_0 \\ E_F &= \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3} \end{aligned} \right.$$

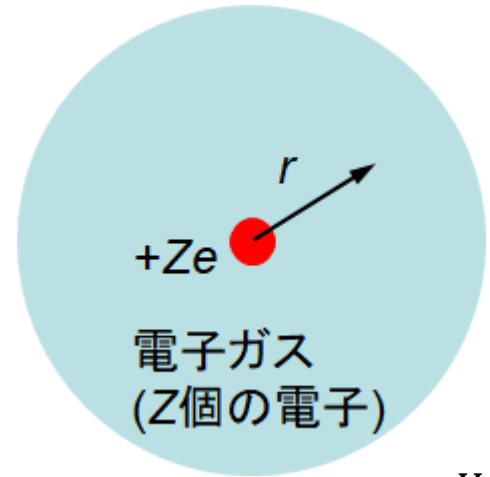
$$n_e(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{p_F(r)}{\hbar} \right)^3 d\mathbf{r}$$

$$n_e(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \{ 2m_e (U(r) - \underbrace{U_0}_{0}) \}^{3/2}$$

中性原子
0

Poisson の方程式

$$\nabla^2 U = 4\pi e^2 n_e(r) \quad \nabla^2 U = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi \hbar^3} e^2 m_e^{3/2} U^{3/2} \quad (1.43)$$



$rU \sim Ze$

Thomas-Fermi 関数 $\chi(r)$

$$U(r) = \frac{Ze}{r} \chi(r) = \frac{Z^* e}{r}$$

$Z^* = Z \chi(r)$ 電子が感じる有効電荷

境界条件 $\chi(0) = 1, \chi(\infty) = 0$

$$\frac{1}{r} Z \frac{d^2 \chi}{dr^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} e^2 m_e^{3/2} \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^{3/2} \chi^{3/2}$$

$$r = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{m_e e^2} \right) Z^{-1/3} x$$

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}}$$

Thomas-Fermi 方程式

2.2. Thomas-Fermi 模型 -2

Thomas-Fermi 方程式

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}}$$

$$r = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2}{m_e e^2} \right) Z^{-1/3} x$$

$$r = \underbrace{0.88534 a_B}_{a_{\text{TF}}} Z^{-1/3} x$$

a_{TF} : Thomas-Fermi 半径

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r} \chi(r) = \frac{Z^* e^2}{r}$$

$$a_B = \hbar / m_e e^2 = 0.529 \text{ \AA}$$

$$p_B = m_e v_B = \sqrt{m_e e^2 / a_B}$$

電子分布 $4\pi r^2 \cdot n(r)$

$$n_e(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \left\{ 2m_e (U(r) - \underbrace{U_0}_{0}) \right\}^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \left(2m_e \frac{Ze^2}{r} \chi(r) \right)^{3/2}$$

$$4\pi r^2 n_e(r) dr = 4\pi r^2 n_e(r) \left\{ 0.88534 a_B Z^{-1/3} \right\} dx$$

$$= Z x^{1/2} \left\{ \chi(x) \right\}^{3/2} dx \quad x \text{ の関数として表わすとすべての原子に共通}$$

2.2. Thomas-Fermi 模型 -3

Fermi energy

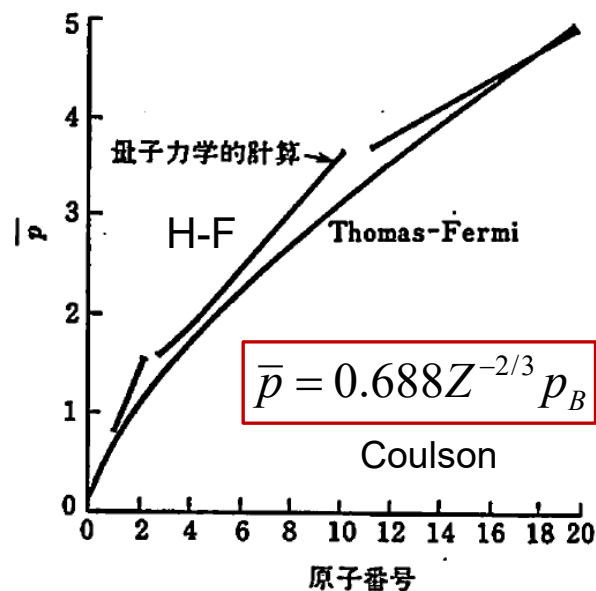
$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3} \quad v_F = \frac{p_F}{m_e} = \frac{\hbar(3\pi^2 n)^{1/3}}{m_e}$$

Thomas-Fermi

$$r = 0.88534 a_B Z^{-1/3} x$$

$$a_{TF} = 0.88534 a_B Z^{-1/3}$$

$$v_0 = 0.688 Z^{-2/3} v_B$$



Bohr

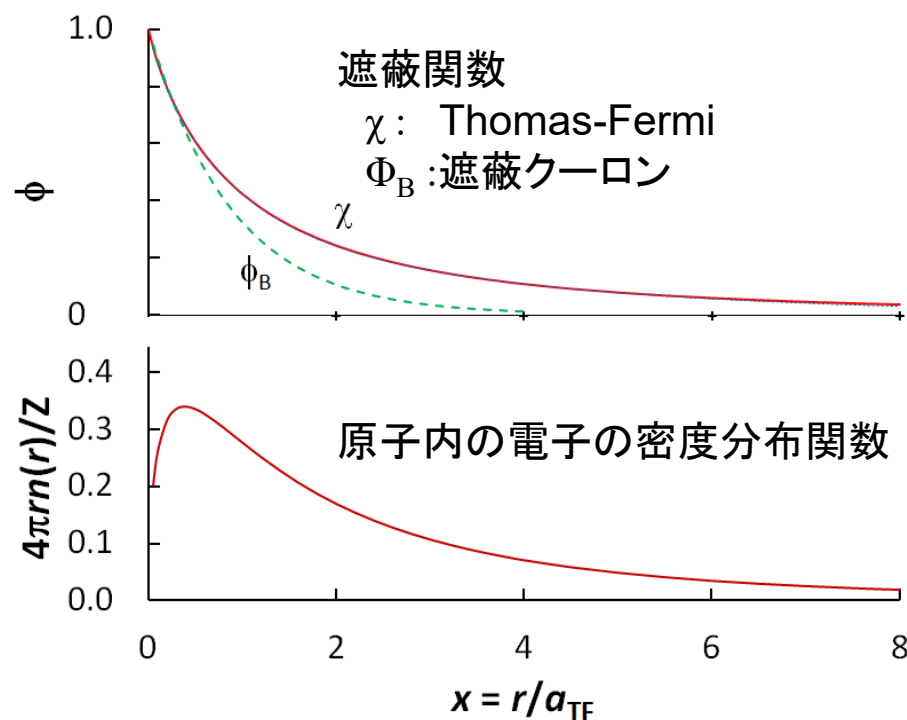
$$a_B = \hbar / m_e e^2 = 0.529 \text{ \AA}$$

$$p_B = m_e v_B = \sqrt{m_e e^2 / a_B}$$

$$v_B = e^2 / \hbar = c / 137$$

$$\approx 2.2 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

$$R_\infty = e^2 / 2a_B = 13.6 \text{ eV}$$



2.2. Thomas-Fermi 模型 -4

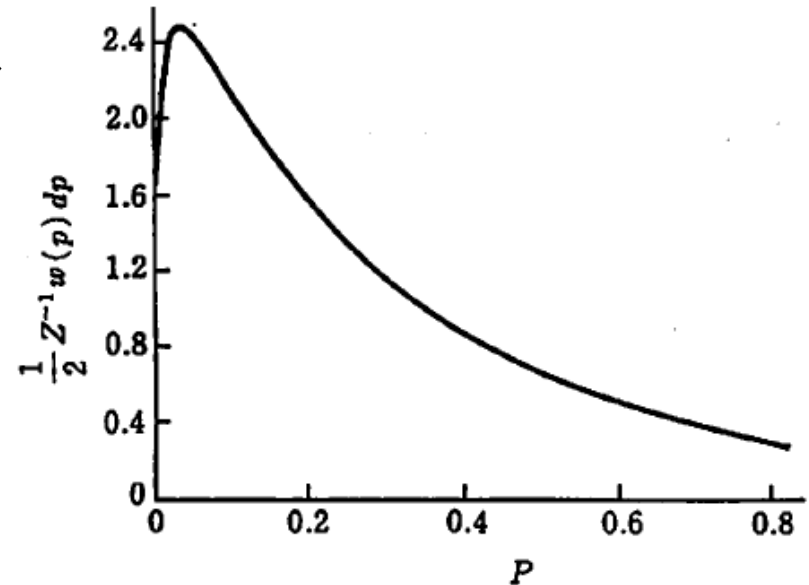
運動量分布

点 r にある電子の運動量エネルギーの平均値 $\langle T \rangle$ は、

p と $p+dp$ の間の運動量を持つ電子の数

$$\frac{4\pi p^2}{4\pi^3 \hbar^3} dp = \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} dp \quad \text{より}$$

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m_e} \cdot \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} dp \\ &= \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2)^{2/3} (n(r))^{5/3} \end{aligned}$$



Thomas-Fermi 模型による運動量分布

運動量分布

運動量が p と $p+dp$ の間にある電子の数

$$w(p)dp = (4\pi/3)r_p^3 (p^2 / \pi^2 \hbar^3) dp = (4r_p^3 / 3\pi \hbar^3) p^2 dp$$

$$p^2 = 2m_e U(r_p) = 2m_e \frac{Ze^2}{r_p} \chi(r_p) = \frac{4m_e e^2 Z^{4/3} \chi(r_p)}{(3\pi/4)^{2/3} a_B x_p} = 2 \left(\frac{4}{3\pi} \right)^{1/3} Z^{2/3} p_B \left(\frac{\chi(x_p)}{x_p} \right)^{1/2}$$

$$w(p)dp = Z x_p^2 \chi(x_p) dP \quad \text{ここで} \quad P = \sqrt{\chi(x_p) / x_p}$$

χ の関数 すべての原子に共通

2.2. Thomas-Fermi 模型 -5

Cf.

遮蔽クーロンポテンシャル

一様な電子ガスに外部電荷 $q(r)$ を与える

Jellium モデル

金属など

正電荷は電子が散逸しないように
均一なゼリーのように存在

$$\varepsilon_F^0 = \varepsilon_F(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r})$$



ε_F^0 : 自由電子のフェルミエネルギー

外部電荷によるポテンシャルの変化

$$\varepsilon_F(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m_e} (3\pi^2)^{2/3} \{n_0 + \delta n(\mathbf{r})\} \cong \varepsilon_F^0 \left\{ 1 + \frac{2\delta n(\mathbf{r})}{3n_0} \right\}$$

$$e\phi(\mathbf{r}) = \frac{2\varepsilon_F^0}{3n_0} \delta n(\mathbf{r})$$

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi(q(\mathbf{r}) - e\delta n(\mathbf{r}))$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{6\pi e^2}{\varepsilon_F^0} \right) \phi(\mathbf{r}) = -4\pi q(\mathbf{r})$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{q}{r} e^{-r/a_s} \quad \begin{array}{l} \text{遮蔽クーロンポテンシャル} \\ \text{湯川ポテンシャル} \end{array}$$

a_s : 遮蔽半径

電子間のクーロン力により電子は互いに遠ざかろうとする。

注目する電子近傍の電子密度が減少する。

一様な正電荷によってこの電子は実効的に正電荷を帯びる。

ポテンシャルが遮蔽されたことになる。

2.2. Thomas-Fermi 模型 -6

Hartree-Fock とThomas-Fermi

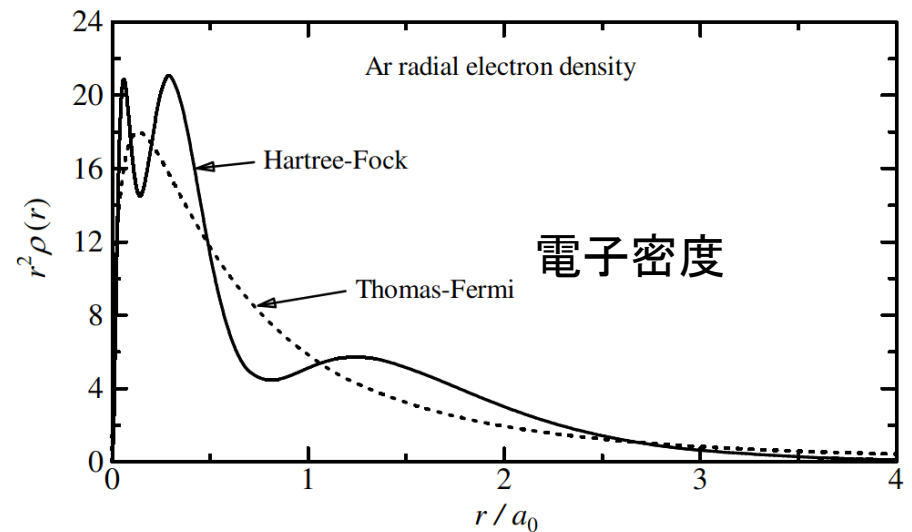
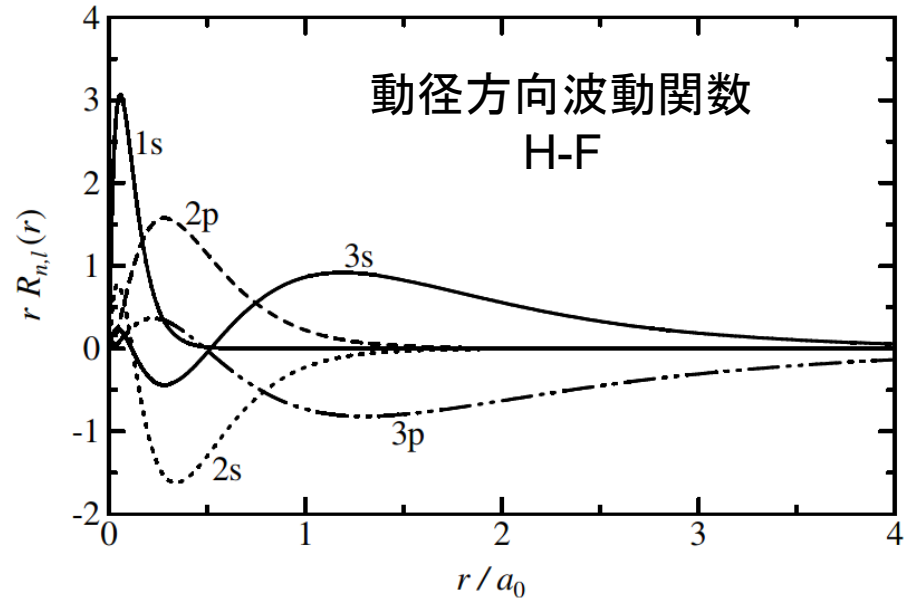
1 電子近似のハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_j' \int \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_j(r_j)|^2 d\mathbf{r}_j$$

Hartree-Fock Self consistent field

1 電子系で $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ 初期値を代入
→ H を決定 → $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ 導出 → 式に代入
→ H を決定 → $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ 導出 → 式に代入

多電子系では複雑すぎる。
収束性が悪い。



2.2. Thomas-Fermi 模型 -7

Thomas-Fermi method

Neutral or positively charged ion

Asymptotic

	TF	reality
$r \rightarrow \infty$	$\rho(r) \sim r^{-6}$	$\rho(r) \sim \exp(-r)$
$r \rightarrow 0$	$\rho(r) \sim r^{-3/2}$ diverges	$\rho(0)$ is finite

Asymptotically exact for $Z \rightarrow \infty$

Total energy is too low

No shell structure

No chemical binding