3P109

有限系における電子的物質の nearsightedness

(大阪大学)　満田祐樹, 山中 秀介, 北河 康隆, 川上 貴資, 奥村 光隆

Nearsightedness of electronic matter in finite model

(Osaka Univ.) Yuki Mitsuta, Shusuke Yamanaka, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura

【序】量子論的な電子は原理的に遠くまで非局在化しているが、実際には遠くで摂動が加わったとしてもその距離が十分遠ければ注目している場所の電子構造はほとんど変化しない。これを Kohn らは「電子的物質の nearsightedness(NEM)」という形で概念化した[1]。系が巨視的になることで、電子の相関効果、例えば電子ガス系での乱雑位相近似型相関の取り込みによるクーロンの遮蔽効果や、デバイヒュッケルモデルでの同様の効果は良く知られているが、Kohn らは NEM という概念は電子間の相互作用や遮蔽効果を含めなくても無限系では一電子密度揺らぎの破壊的干渉効果により局所化がおこるという事を指摘している[1]。同時に、彼らは数電子系を NEM の対象から外しているが、実際以下の計算結果で見るように数電子系では NEM は成立していない。では数電子系から電子数を増加させていった時、どれくらいの電子数で NEM が成立するのか、あるいはそれが連続的なものであるならば「NEM の成立する度合い」の電子数依存性はどのようなものなのか？本研究では、有限多電子系に対しその線形応答関数を解析する事でこの問題を明らかにした。

【結果と考察】モデルポテンシャルとして１次元井戸型ポテンシャルを採用し、電子間相互作用を考慮せず、電子数の変化に対する線形応答関数は$\delta\rho(r)/\,\delta v(r')$の変化を解析した。ここで$\delta v(r')$は$r'$における摂動量で、$\delta\rho(r)$は$r$におけるその摂動に起因する密度変化量を表す。

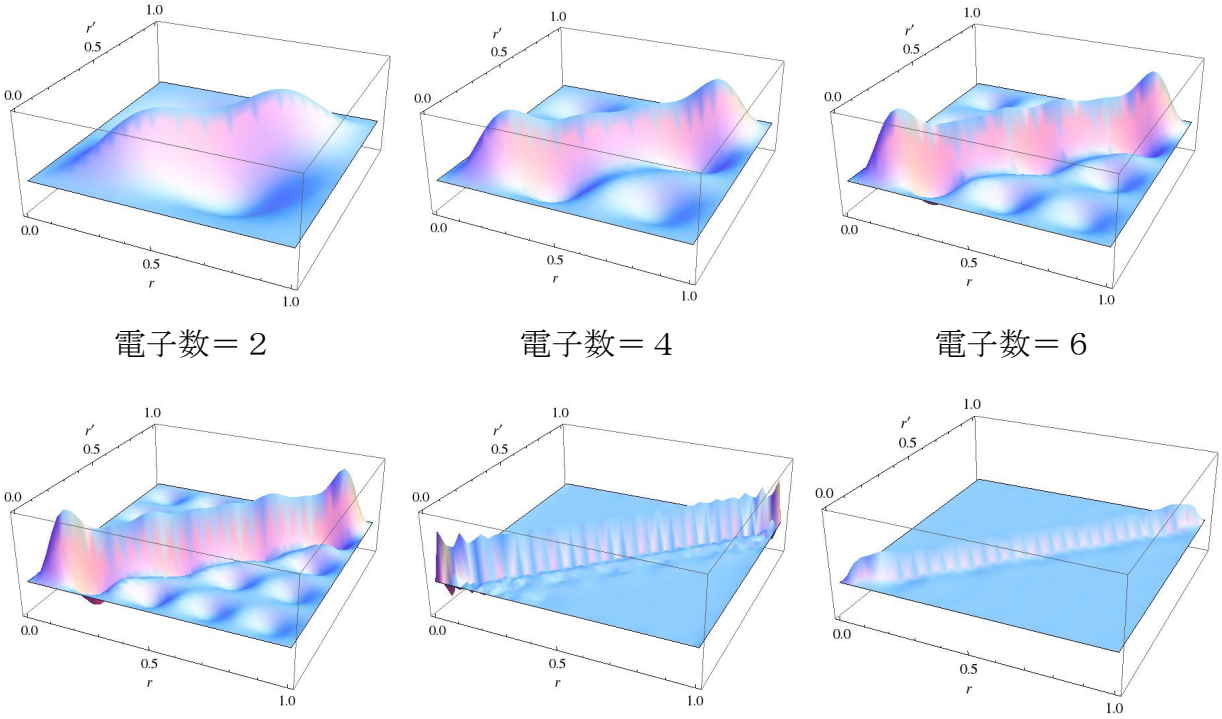
電子数 2, 4, 6, 8, 40, 100 と増加させていった際の、$\delta\rho(r)/\,\delta v(r')$を線 2 次元プロットとしたものを図 1 に示す。線形応答関数は r と r'の入れ替えに対する対称な関数であり、対角線 r=r'での振幅は摂動が加わった場所での密度の揺動、すなわち局所応答を示す。逆に対角線から離れた場所の振幅が非局所応答を表す。これらのプロットから、電子数２では非対角線上に存在していた大きな振幅が、電子数の増加に伴い現象し、非対角電子数１００ではほぼ消滅し局所応答だけになっている事が分かる。つまり、電子数が増えることによって NEM が徐々に成立していく事が分かる。

この NEM 成立の電子数依存性を数値的に解析するため、次の関数を定義した。

$$\mathrm{N_S} = \left(\frac{1}{N} \int drdr' \left| \frac{\delta\rho(r)}{\delta v(r')} (r - r') \right| \right)^{-1} \qquad (1)$$

() 内は、線形応答関数に摂動を与える場所と密度変化を見る場所の距離の重みをつけて絶対値を積分し電子数で割ったものであり電子構造の非局在性の度合いを示すので、その逆数の Ns は「Nearsightedness 指数」と呼ぶべき量である。

Nearsightedness 指数の電子数(N)依存性は図 2 に示すように N^2 となり、NEM が一電子密度揺らぎの間の破壊的干渉効果の結果である事を含意する。



電子数＝２　　電子数＝４　　電子数＝６

電子数＝８　　電子数＝40　　電子数＝100

図１　無限井戸型ポテンシャルにおける線形応答関数の計算結果
（縦軸が線形応答関数の値）

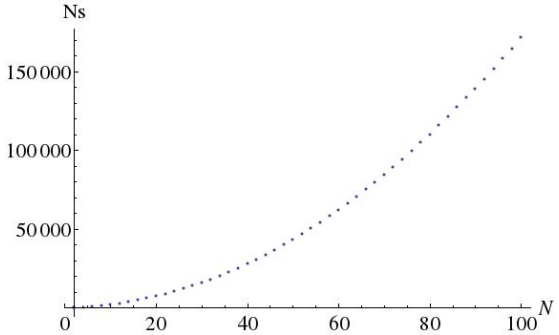


図 2　Nearsightedness 指数の電子数依存性

二重井戸型ポテンシャル系や調和振動子ポテンシャル系の結果は当日発表する。

【参考文献】

[1] W. Kohn, Phys. Rev. Lett. 1996, 76, 3168; E. Prodan, W.Kohn, PNAS 2005, 112, 11635.

[2] 例えば, P. J. Senet, J. Chem. Phys. 1996**,** 105, 6471.