# 付 録C　Thomas-Fermi方程式

ここでは, 3.8節で用いたThomas-Fermi方程式について述べる. まず, 図3.37における静電ポテンシャル$\phi(x)$についての境界条件は次の2つである:

$$\lim_{x\to\infty}\phi(x) = 0, \tag{C.1}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = -\frac{4\pi}{\varepsilon}\sigma. \tag{C.2}$$

ここで, $\varepsilon$は連続体の誘電率, $\sigma$は連続体にドープされた電子の面密度である. $x\to\infty$では電場が存在せず, $\phi(x)$は一定値を取る. 一つ目の条件はその一定値を0としたことに対応する. 二つ目の条件は連続体表面$x=0$での電束密度の連続性を表している. Thomas-Fermiの理論では, 電子の存在する空間を小さな細胞に分割し, その細胞内の電子を自由電子ガスとして扱う. そうすると, $x$における電子密度$\rho(x)$は, 細胞内にいる電子の最大運動量$p_{\mathrm{max}}(x)$を用いて

$$\rho(x) = \frac{1}{3\pi^2}p_{\mathrm{max}}^3(x), \tag{C.3}$$

と表される. また, 連続体内部のいたるところでフェルミエネルギーは一定であることから

$$\frac{p_{\mathrm{max}}^2(x)}{2} - \phi(x) = \frac{p_{\mathrm{max}}^2(\infty)}{2}, \tag{C.4}$$

が成り立つ. ここでは$\rho(\infty)\to 0$なので式(C.3)より$p_{\mathrm{max}}(\infty)=0$となる. したがって, 式(C.4)を式(C.3)に代入することによって電子密度と静電ポテンシャルを結びつける関係式

$$\rho(x) = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2}\phi(x)^{\frac{3}{2}}, \tag{C.5}$$

が得られる. これをPoisson方程式に代入すれば, 解くべきThomas-Fermi方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi\varepsilon}\phi(x)^{\frac{3}{2}}, \tag{C.6}$$

が得られる. 本研究ではこの微分方程式をEuler法により数値的に解いた. また, 得られた電子密度は, 総電子数の和則

$$\sigma = \int_0^\infty \mathrm{d}x\rho(x). \tag{C.7}$$

を満たすことを確認した.

最後に Thomas-Fermi 方程式 (C.6) および境界条件 (C.2) がパラメータである $\varepsilon$ や $\sigma$ によらない形に書けることを述べておく．そのためには新しい変数

$$\overline{x} = \varepsilon^{-\frac{3}{5}} \sigma^{\frac{1}{5}} x \tag{C.8}$$

と, 新しい関数

$$\overline{\phi}(\overline{x}) = \varepsilon^{\frac{2}{5}} \sigma^{-\frac{4}{5}} \phi(x) \tag{C.9}$$

を導入する．これらを用いると Thomas-Fermi 方程式 (C.6) は

$$\frac{\mathrm{d}^2 \overline{\phi}(\overline{x})}{\mathrm{d}\overline{x}^2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \overline{\phi}(\overline{x})^{\frac{3}{2}}, \tag{C.10}$$

と書ける．また境界条件 (C.2) は

$$\left.\frac{\mathrm{d}\overline{\phi}(\overline{x})}{\mathrm{d}\overline{x}}\right|_{\overline{x}=0} = -4\pi \tag{C.11}$$

となる．したがって, 式 (C.10) を解いてしまえば, それを式 (C.8) と式 (C.9) を用いてスケールを変換するだけで任意の $\varepsilon$ と $\sigma$ の電子密度が求まる．また, 式 (C.8) からは $\varepsilon^{\frac{3}{5}} \sigma^{-\frac{1}{5}}$ が長さのパラメータの役目をしていることも分かる．