

擬ポテンシャル法に関して

- 擬ポテンシャル法では、内殻電子に関しては、分子や固体中でも、孤立原子と同じ波動関数を持つと近似している。この近似が良いと考えられる理由を挙げてください。
- 擬ポテンシャル法は、どのような問題に有用となるか、考えてください。どのような物理量を擬ポテンシャル法で計算すると、どういったことに役に立つか、お話してください。

大学院工学研究科 森川良忠