

Title	7.電子ガスのDynamical Corretionによる多体問題の計算 (I)(II講義ノート,基研研究会報告)
Author(s)	金沢, 秀夫
Citation	物性研究 (1967), 8(4): D67-D70
Issue Date	1967-07-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/86060
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

7 電子ガスの Dynamical Corretion

による多体問題の計算 (I)

東大教養 金 沢 秀 夫

電子ガスは一つのモデルであるから，電子ガスそのものの実験がないために理論の近似の信頼度が常に問題になる。従って近似の度合をためす試金石が必要である。以下にいくつかの criterion をあげ，従来の理論がどの程度これらの criterion を満足するかをしらべよう。

電子ガスでは多くの問題が誘電率 $\epsilon(q, \omega)$ を求める問題に帰着する。例えば基底状態のエネルギーは

$$E_0 = E_0^{(0)} - \frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{q \neq 0} \int_0^\infty \frac{e^2}{\epsilon(q, \omega)} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \frac{2\pi^2 n}{q^2} \quad (1)$$

pair distribution function は

$$g(r) = \frac{1}{n} \sum_{q \neq 0} (S(q) - 1) e^{iqr} + 1 \quad (2)$$

$$S(q) = - \frac{\hbar^2 k^2}{4\pi^2 e^2 n} \int_0^\infty \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} d\omega \quad (3)$$

で与えられる。 $\epsilon(q, \omega) = \epsilon_1(q, \omega) + i\epsilon_2(q, \omega)$ とすれば， $\epsilon_2(q, \omega)$ が求められれば Kramers-Kronig の関係式によって $\epsilon_1(q, \omega)$ が得られるから，結局電子ガスの問題は $\epsilon_2(q, \omega)$ を求める問題になる。

次にいくつかの criterion をあげよう。

(I) $\omega > 0, \quad \epsilon_2(q, \omega) \leq 0$

(II) $g(r) \geq 0$

(III) Ferrell¹⁾ の条件

$$\frac{d^2}{dr_s^2} \{ r_s^2 E_0(r_s) \} \leq 0$$

(IV) ビリアル定理

$$2\langle T \rangle + \langle V \rangle = -r_s \frac{dE}{dr_s}$$

電子ガスのDynamical correlation による多体問題の計算(I)

(V) sun rule

$$\int_0^\infty \omega \epsilon_2(q, \omega) = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \quad \left(\omega_p = \frac{4\pi e^2 n}{m} \right)$$

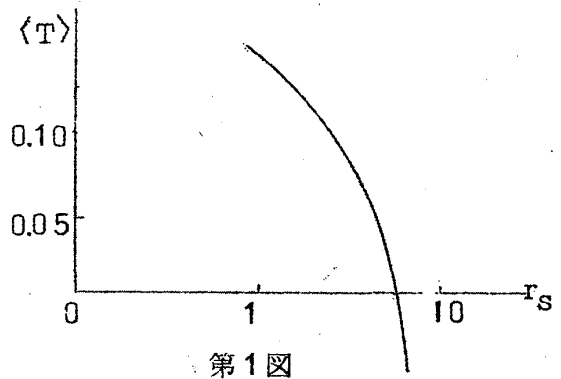
(I) r_s - 展開

$$E_0 = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.0622 \ln r_s - 0.096 + 0.018 r_s \ln r_s + (E_3 - 0.036) r_s + O(r_s^2 \ln r_s) \quad (4)$$

(4)は Carr-Maradudin²⁾によって得られた結果である, E_3 は3次の交換エネルギーからくる多重積分で数値は得られていない。 $E_3 < 0$ とすると r_s 展開の収束は悪いので, かりに $E_3 = 0$ とおいてみる。ビリアル定理 (IV)を変形して $\langle T \rangle = -E_0 - r_s E_3$ に(4)を代入すると第1図のように metallic density で $\langle T \rangle < 0$ という矛盾した結果となる。²⁾

さらに同じような r_s で(III)が破れる。

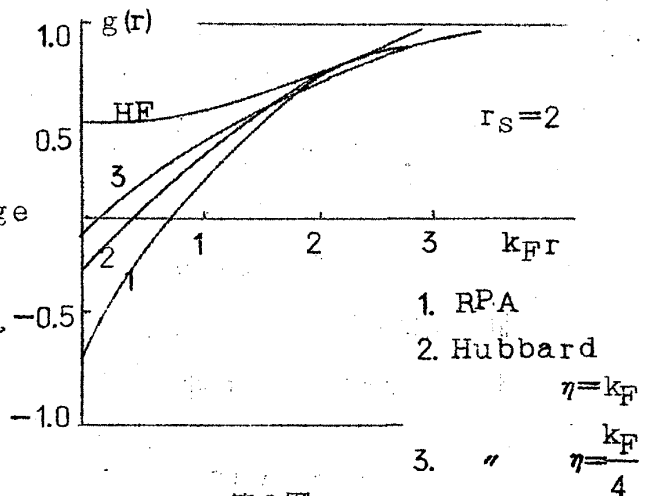
Gell-Man, Brueckner に比べれば改善をされているが, r_s - 展開の労力を考えるとこれ以上高次まで進めるのは意味ないであろう。



第1図

(II) RPA

RPAというのは $\epsilon(\epsilon, \omega)$ を ϵ_0 だけとって計算して(1), (2)に代入した近似である。RPAは(I), (III), (V)は満足するが(II)は $r_s \geq 1$ で破られる。RPAは short range correlation が貧弱であるため, r が小さいところで $g(r) < 0$ という矛盾した結果を与えるわけである。第2図, 第3図は Brouers³⁾が計算したものである。



第2図

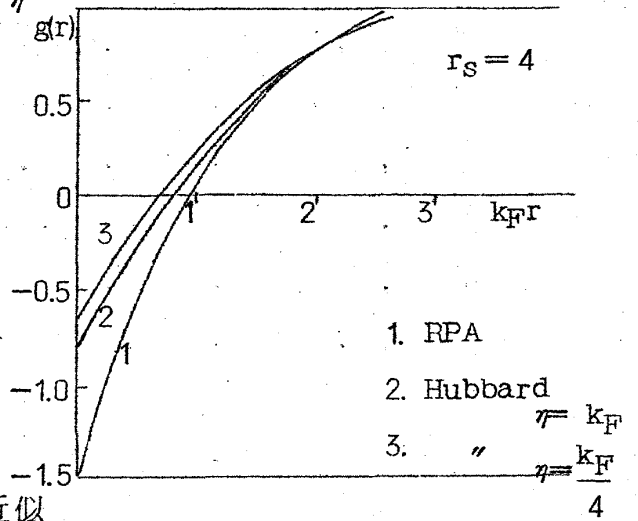
(III) Hubbard 近似

Hubbard は $\epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots$ を近似的に次式で表わした (点線はクーロン相互作用)

$$\epsilon_H(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} Q_0(q, \omega) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{4\pi e^2}{k^2 + \eta^2} Q_0(q, \omega)^{-1}\right)$$

第3図

ただし、 $\epsilon_{RPA} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} Q_0(q, \omega)$ である。
 Brouers は $\eta = k_F, k_F/2, k_F/4$ として計算した。第2図、第3図のように RPA よりは改善されているが、まだ $r_s \geq 2$ 以上では $g(r) < 0$ の矛盾は解消していない。さらに Hubbard 近似は (I) と (V) を破っているのである。



(IV) screened Coulomb による梯子近似

植田は $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ と $g_{\uparrow\downarrow}(r)$ を計算した。誘電率では表わせないので 2 体グリーン関数を用い、次の近似で求めた。
 $\left[\begin{array}{c} 1' \\ \text{---} \\ 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} 2' \\ \text{---} \\ 2 \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} 2' \\ \text{---} \\ 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} 1' \\ \text{---} \\ 2 \end{array} \right]$ ただし $\sim\sim\sim = v(q)/\epsilon_{RPA}(q, \omega)$ である。誘電率でいえば $\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$ にあたるといえよう。この場合には $g_{\uparrow\uparrow}(0) = 0$ が r_s の値の如何に拘らず成り立つので $g_{\uparrow\uparrow}(r) < 0$ ということにはならない。従って $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ が負になる r_s までは $g(r)$ は負にならない。植田は $r_s = 0.1, 0.5, 1.0$ しか計算していないので $g(r) < 0$ となる r_s の値は分らない

(三沢によると $r_s \sim 6$ までよいということである) が $\sim\sim\sim$ を 1 本入れただけでも RPA よりかなり改善されている筈である。ただし 1 本入れただけでは (I) と (V) が破れる。

DuBois は $\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$ を計算したがこの近似は (I) を破る。(I) を満足させるには $\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \dots$ を集めなければならない。ここで $\sim\sim\sim$ は RPA の近似で自己エネルギーを入れた propagator である、上のような梯子を求めたのは大阪⁷⁾、Glick⁸⁾ である。この近似では (V) は近似的にしか満足されない (Glick は数値計最の段階で近似をしているが、2.5% の範囲で (V) を満足しているといっている) (V) を完全に満足するように diagram をつけ加えるのは困難である。この近似では恐らく $g(r)$ は相当大的な r_s まで負にはならないと思われる。

(I) から (V) までの criterion をある程度満足し、計算を実行できる近似 で我々は満足しなければならないとなると (IV) 程度が限度ではなからうか。

電子ガスの Dynamical Correlation による多体問題の計算(I)(II)

文 献

- 1) R.A.Ferrell. Phys.Rev.Letters 1 (1958) 443
- 2) W.J.Carr and A.A.Maradudin. Phys.Rev.133 (1964) 371
- 3) F.Brouers. Phys.stat .sol 19 (1967) 867
- 4) J.Hubbard. Proc.Roy.Soc.A243 (1957) 336
- 5) S.Ueda. Prog.Theor.Phys.26 (1961) 45
- 6) Y.Osaka. J.Phys.Soc.Japan 17 (1962) 546, 1322
- 7) A.J.Glick. Phy.Rev.129 (1963) 1399

電子ガスの Dynamical Correlation による
多体問題の計算 (II)

東北大通研 大 坂 之 雄

与えられた題を二様に解釈して、二つの事に重点を置いて電子ガスの多体問題を論じよう。一つは、electron correlation の dynamical な部分の効果という意味で、Fermi liquid theory に基づいた最近の長波長、低振動の現象に対する計算を述べる。もう一つは、dynamic な correlation function の計算として、高振動のタテ誘電常数の計算、特に長波長 Plasmon の分散係数及び damping の計算を述べよう。

① 低振動、長波長の現象

相互作用をしている Fermion の系に、外部より波数 q 、角振動数 ω で特徴づけられる disturbance が加つた時、 $q \ll k_F$ (Fermi 波数) $\hbar\omega \ll E_F$ (Fermi energy) の時の現象は、Landau¹⁾ の Fermi 流体理論により正しく記述され得る。この理論は He³ に対して Landau により提案され、Silin²⁾ により電子ガスに拡張され、その基礎づけは、Landau³⁾ 自身及び Nozier-Luttinger⁴⁾ によりなされた。この理論の概要及び電子ガスへの応用について