

- 4) T. E. Faber. The Physics of Metals 1 Electrons Cambridge University Press (1969)
- 5) L. F. Ballentine. Can. J. Phys. 44 2533 (1966)
- 6) W. Kohn & N. Rostoker. Phys. Rev. 94 1111 (1954)
- 7) B. L. Gyorffy, Phys. Rev. B 1 3290 (1969)
- 8) J. E. Enderby & C. J. Simmons. Phil Mag. 20 125 (1969)
- 9) N. F. Mott, Adv. Phys. 16 49 (1967)
- 10) P. W. Anderson, Phys. Rev. 109 1492 (1958)

IV - 1. CPAの液体金属への応用

京大・基研 武野正三

固体の場合と同様液体金属の電子構造を問題とすると、対象に応じて二つの model 即ち nearly free-electron model と tight-binding-approximation model が考えられる。此の両モデルに対する一電子エネルギー状態の自己エネルギーを求める計算法を以下述べる。

系の Hamiltonian を次の形に取る。

$$H = \sum_{\lambda} h_1(\lambda) a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + \sum_{\lambda \lambda'} h_2(\lambda \lambda') a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} \quad (1)$$

但し

$$\lambda = \begin{cases} \mathbf{k} \\ n \end{cases} \quad h_1(\lambda) = \begin{cases} \epsilon(\mathbf{k}) \\ \epsilon(n) \end{cases}$$

$$h_2(\lambda\lambda') = \begin{cases} V(kk') = v(kk')\rho(k-k') & \text{--- for nearly free} \\ & \text{electron approxi-} \\ & \text{mation} \\ J(nn') & \text{--- for tight-binding} \\ & \text{approximation} \end{cases} \quad (2)$$

但し(2)式に於て k は電子の運動量, n は原子或はイオンの位置, $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ (m^* : effective mass) は電子の運動エネルギー, $\epsilon(n)$ は位置 n に対するエネルギーであるが, 此処ではすべて同一とし $\epsilon(n) = \epsilon = \text{constant}$ とおく。又,

$$v(kk') = (N/Q) \int \exp\{-i(k-k') \cdot r\} v(r) dr$$

$$\rho(k) = (1/N) \sum_n \exp(-ik \cdot Rn)$$
(3)

は夫々原点にあるイオンと電子との相互作用ポテンシャルの Fourier 変換及び液体内のイオンの密度の Fourier 変換である。 N と Q は夫々イオンの総数及び系の体積である。(1)よりグリーン関数の symbolic expression を次の如く導入しよう。

$$G \equiv G(E) = (E - h_1 - h_2)^{-1} \quad (4)$$

前報告“不規則系に於ける phonon mode” (以下これを(I)と記す)の場合と同様電子の自己エネルギー Σ を次の如く定義する。

$$\langle G \rangle = (E - \epsilon - \Sigma)^{-1} \quad (5)$$

すると(I)の場合と同様これを求める self-consistent な式は

$$\Sigma = \langle \epsilon Q \rangle \quad \text{with} \quad Q = 1 + \langle G \rangle (h_2 - \Sigma) Q \quad (6)$$

より求められる。

$$\sigma = J \Omega \tag{7}$$

を定義すれば tight-binding 近似での自己エネルギーは(II)の場合と全く同じ扱いが出来て

$$\Sigma(k) = \rho \int g_2(0n) \langle \sigma(0n) \rangle_{0n} \exp(ik \cdot n) dn \tag{8}$$

の結果が得られる。 $\langle \sigma(0n) \rangle_{0n} \rightarrow J(0n)$ なる最低次の近似は Cyrot-Lackmann の結果¹⁾ と同一である。

nearly free-electron 近似の場合は(6)の第二式の運動量表示の満す式を Feenberg の摂動法²⁾ により解く。此は多体問題の観点から見た時 van-Hove の摂動論の方法³⁾ と密接な関連を持っている。以下では結果のみを記す。

$$\begin{aligned} \Sigma(q) = & \langle v(kk) D(k)^{-1} \rangle + \sum_{q(\neq k)} v(kq) \langle D(q)^{-1} \langle G(q) \rangle \\ & \times v(qk) D(kq)^{-1} \rho(k-q) \rho(q-k) \rangle \\ & + \sum_{q(\neq k)} \sum_{q_1(\neq qk)} v(kq) \langle D(q)^{-1} \langle G(q) \rangle v(qq_1) D(q_1, q)^{-1} \\ & \times \langle G(q_1) \rangle v(qk) D(k, q_1, q)^{-1} \rho(k-q) \rho(q-q_1) \rho(q_1-k) \rangle \\ & + \dots \end{aligned} \tag{9}$$

但し $D(k)^{-1}$, $D(k, q)^{-1}$, $D(k, q_1, q)^{-1}$ 等は coherent scatterings を表わす項であるがその具体的な表式は此処では省略する。此等の factors を1に等しくおき, (9)の右辺の第3項以下をすべて省略すれば此は Ballentine の計算結果⁴⁾ に一致する。(9)式は自己エネルギーをイオンの多体相関関数で逐次展開する self-consistent な式となっている。(9)は又 disordered alloy に対し元来適用された CPA 法の液体金属への拡張とも見做すことが出来る。

さて原理的な問題に立帰って、液体金属の電子構造、輸送現象等を問題とするとき、我々は必然的にイオンの多体相関関数から生ずる一種の hierarchy に遭遇する。一方殆んどすべての物理量の測定結果から三体相関より以上の相関関数に対する information は殆んど現在のところ得ることが出来ない。他方では最低次の計算結果に基づく Ziman 一派の理論⁵⁾ は可成広範囲にわたる実験結果をよく説明出来るという事実がある。此等の事実を説明する一つの試みとして筆者は(I)の場合と同様 effective potential, effective pair correlation function の概念を(9)式或はそれに似た結果より導入したいと考えている。結果については未だ確定的なものが得られていなく、発表の段階でないと思っている。尚此仕事の内容の一部は J. Phys. C に発表の予定である。

References

- 1) F. Cyrot-Lackmann, Adv. Phys. 16 (1967).
- 2) E. Feenberg, Phys. Rev. 74 (1948), 206.
- 3) L. van Hove, Physica, 21 (1955), 901; 22 (1956), 343; 23 (1957), 441.
- 4) U. E. Ballentine, Can. J. Phys. 44 (1966), 2533.
- 5) J. Ziman, Adv. Phys. 16 (1967), 551 and also references cited therein.