(3) 低い励起状態のエネルギーは，長距離相互作用であるOhno 或いはMataga－Nishinoto の式の代りに，ハバート型の短距離力を仮定しても十分定量的に再限出来る。

参考文献

1) 例えば L. Salem "The Molecular Orbital Theory of Conjugated Systems" W. A. Benjamin (New York, 1966)
B. S. Hudson and B. E. Kohler. Chem. Phys. Lett. 14 299 (1972).
K. Schulten and M. Karplus, Chem. Phys. Lett. 14 305 (1972).
K. Schulten. I. Ohmine and M. Karplus, J. Chem. Phys.

Resonance Broadening 効果の取り扱いの改良について

東北大・理 遠藤光宏
渡部三雄

無秩序系の電子相関の問題，特にMott 転移の問題は，良く知られた半導体中の不純物帯の問題や，最近注目されている臨界点近傍に於ける液体金属[2),3)] Na－Ar, Cu－Ar 等 － 稀ガス混合体[4)] 等で見出された金属 － 絶縁体転移と関連して興味が持たれている。我々はこの問題をHubbard 理論を無秩序系（置換型及び構造型それぞれについて）に拡張することにより調べてきた。[5)] ただし，これらの論文では，合金のCPAによる取り扱いがそのまま適用できる。いわゆるSpin disorder 効果のみを考慮し，Hubbard 理論に含まれるもう一つの重要な効果 — resonance broadening 効果を無視している。resonance broadening 効果についてはHubbard が行なったと同じ近似（Hubbard Ⅲ近似）の範囲ではCPA の形で取り扱えることが知られており[6),7)] 無秩序系への拡張も容易であり，この効果が，Spin disorder 効果だけから得られた結果にかなり重要

な修正を与えることも知られている。[6),8)] しかし，Hubbard Ⅲ の resonance−broadening 効果の扱いは，重大な欠陥を含んでいることがKawabata により指摘されており[9)]，その改良が提案されている。ただし，彼の議論は相関の強い極限（いわゆる atomic limit）に限られている。

ここでは，Kawabate 近似を拡張して，相関の強さのより広い範囲，特に金属−非金属転移の領域について resonance−broadening 効果の取り扱いの改良を試みる。

Hubbard Ⅲ での resonance broadening 効果の取り扱いに含まれる種々の近似の中，Kawabata に従って次の項に注目する。（HⅢ の (44) 式）

$$\langle\langle n^{\alpha}_{k\sigma}\, c^{\pm}_{k,\sigma}\, c^{\mp}_{k,-\sigma}\, c_{i\sigma}\, ;\, c^{+}_{j\sigma}\rangle\rangle \cong \delta_{k\ell} \langle n^{\alpha}_{k\sigma}\, n_{k-\sigma}\rangle \times \langle\langle c_{i\sigma} ; c^{+}_{j\sigma}\rangle\rangle$$

Hubbard はここで更に $\langle n^{\alpha}_{k\sigma}\, n_{-\sigma}\rangle = n^{\alpha}_{\sigma} n_{-\sigma}$ $(\langle n^{\alpha}_{k\sigma}\rangle = n^{\alpha}_{\sigma})$ と近似した。この近似は相関を無視したもので，相関の強い場合には当然成り立たない。特に atomic limit では $\langle n_{i\sigma}\, n_{i-\sigma}\rangle = 0$ と取るべきで，このことについてはKawabata が詳論している。Hubbard バンドの分裂が生ずる領域でも相関の強さはかなり大きいのでこの点の改良が必要であると思われる。

Hubbard Ⅲ を若干手直しすることにより，Green 関数を求めると同時に，$\langle n_{i\sigma}\, n_{i-\sigma}\rangle$ も self−consistent に決定することが可能である。最終的には次に掲げる方程式を self−consistent に解けば良い。

$$\begin{aligned}
&(E-\varepsilon_{\alpha}-\lambda_{\sigma}(E))\, \langle\langle n^{\alpha}_{i,-\sigma}\, c_{i\sigma}\, ;\, c^{+}_{j\sigma}\rangle\rangle \\
&\quad = n^{\alpha}_{-\sigma}\, \{ \frac{1}{2\pi}\, \delta_{ij} + \sum_{\ell} t_{i\ell} \langle\langle c_{\ell\sigma}\, ;\, c^{+}_{j\sigma}\rangle\rangle \\
&\qquad - \{ \lambda'_{\sigma}(E)\, n^{\alpha}_{-\sigma} + \lambda'_{-\sigma}(E)\, \nu^{\alpha}_{-\sigma}(E) \\
&\qquad + \lambda''_{-\sigma}(E)\, \nu^{\alpha}_{-\sigma}(\varepsilon_{+}+\varepsilon_{-}-E)\}\, \langle\langle c_{i\sigma}\, ;\, c^{+}_{j\sigma}\rangle\rangle
\end{aligned}$$

$$\ll c_{i\sigma} ; c^{+}_{j\sigma} \gg \; = \; \sum_{\alpha} \ll n^{\alpha}_{i-\sigma} \, c_{i\sigma} ; c^{+}_{j\sigma} \gg$$

$$= \frac{1}{N} \sum \frac{1}{F^{\sigma}(E) - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \, e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$$

$$G_{ii}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{F^{\sigma}(E) - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

$$\lambda'_{\sigma}(E) = F^{\sigma}(E) - \frac{1}{G_{ii}(E)}$$

$$\lambda_{\sigma}(E) = \lambda'_{\sigma}(E) + \lambda'_{-\sigma}(E) + \lambda''_{-\sigma}(E)$$

$$\lambda''_{\sigma}(E) = \lambda'_{\sigma}(\varepsilon_{+} + \varepsilon_{-} - E)$$

$$F^{\sigma}(E) = F^{\sigma}_{0}(E - \lambda_{\sigma}(E)) + \lambda'_{\sigma}(E) + \frac{\lambda'_{-\sigma}(E)}{h^{\sigma}(E)} + \frac{\lambda''_{-\sigma}(E)}{h'^{\sigma}(E)}$$

$$\frac{1}{h^{\sigma}(E)} = \sum_{\alpha} \frac{\nu^{\alpha}_{-\sigma}}{E - \varepsilon_{\alpha} - \lambda_{\sigma}(E)}$$

$$\frac{1}{h'^{\sigma}(E)} = \sum_{\alpha} \frac{\nu^{\alpha}_{-}(\varepsilon_{+} + \varepsilon_{-} - E)}{E - \varepsilon_{\alpha} - \lambda_{\sigma}(E)}$$

$$\nu^{\alpha}_{-\sigma}(E) = F^{\alpha}_{0}(E) \cdot \sum_{\beta} \frac{\langle n^{\beta}_{i\sigma} \, n^{\alpha}_{i-\sigma} \rangle}{E - \varepsilon_{\beta}}$$

$$\frac{1}{F^{\sigma}_{0}(E)} = \frac{n_{-\sigma}}{E - \varepsilon_{+}} + \frac{1 - n_{-\sigma}}{E - \varepsilon_{-}}$$

以 上。

ここで $\langle n_{i\sigma} \, n_{i-\sigma} \rangle = n_{\sigma} \, n_{-\sigma}$ とすると，

$$\nu^{\alpha}_{-\sigma}(E) = n^{\alpha}_{-\sigma}$$

となり，当然HⅢ に移行する。

self－consistent な扱いをより完全にするには $\nu_{-\sigma}^{\alpha}(E) \rightarrow \nu_{-\sigma}^{\alpha}(E-\lambda_{\sigma}(E))$ とする必要がある。

half－filled band の場合，この近似で得られる結果と従来の理論との対応を図示すると，

$$n_{\pm}{}^{\sigma} = \frac{1}{2} \pm m \; ; \quad \langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle = \frac{1}{4} + \delta$$

として，

	$m = 0$	$m \neq 0$
$\delta = 0$	HⅢ	HⅢ
$-\frac{1}{4} < \delta < 0$	HⅢ	※
$\delta = -\frac{1}{4}$	HⅢ	Kawabata

※ は我々の近似で扱える。

n＝0，すなわち non－magnetic の場合には δ に無関係に常にHⅢ に移行することがわかる。興味をもっている領域 ※ は，我々の取り扱いで改善されると考えられるが，現在まだ計算の最終結果が得られていないので，具体的な結論の考察については別の機会に譲る。

参　考　文　献

1）J. Hubbard; Proc. Roy. Soc. A 281 (1964) 401.

2）米沢富美子，渡部三雄； 日本物理学会誌　29（1974）1002.

米沢富美子，渡部三雄，遠藤裕久； 日本物理学会誌　29（1974）665.

3）H. Endo, A. I. Eatah, J. G. Wright, N. E. Cusack J. Phys. Soc. Japan. 34 (1973), 666.

4）F. Yonezawa, M. Watabe: Phys. Rev. B8 (1973) 4540.

5) F. Yonezawa, M. Watabe, M. Nakamura and Y. Ishida; Phys. Rev. B10 (1974) 2322.

6) 米沢富美子； 私信

7) L. C. Bartel, H. S. Jarret; Phys. Rev. B10 (1974), 946.

8) H. Aoki, H. Kamimura; J. Phys. Soc. Japan 39 (1975) 1169.

9) A. Kawabata; Prog. Theor. Phys. 48 (1972) 1793.

高励起下の半導体における電子・正孔系の相転移

東北大・工　長島富太郎

高励起状態におかれた G_e や S_i 内の電子・正孔系において，電子・正孔の励起密度 n を変化させた場合の相転移について最近種々の検討がなされている。実験的には，Thomas et al. により G_e における相図が求められていて，それによれば，critical point が $T_c = 6.5K$，$n_c = 0.8 \times 10^{17}\,cm^{-3}$ である Liquid-Gas transition がある。低密度側で電子・正孔プラズマ状態，高密度側で電子・正孔液相である。理論的には，Combescot,[2] Silver,[3] Mahler[4] によって，Ge や Si における T_c と n_c を決定する試みがある。これらの取り扱いの共通点は，励起子の存在を無視していることである。

我々は，電子，正孔，励起子からなる3成分系に，化学平衡の条件を課し，電子・正孔あるいは励起子の化学ポテンシャルを励起密度の関数として求める。電子・正孔，励起子の密度をそれぞれ n_e, n_h, n_x, またそれぞれの化学ポテンシャルを μ_e, μ_h, μ_x とすると，

$$n_e + n_x = n \tag{1}$$

$$\mu_e + \mu_h = \mu_x - E_B \tag{2}$$

ここで E_B は励起子の束縛エネルギーである。さらに電気的中性の条件

$$n_e = n_h \tag{3}$$