

相関エネルギーの r_s 展開とその金属密度領域への外挿公式

東北大・理 遠藤孝徳, 堀内雅史, 東大物性研 高田康民, 東北大・理 安原洋

(1997 年 1 月 20 日受理)

Abstract

1 電子あたりの相関エネルギーの r_s 展開の $O(r_s)$ の項の評価に際して, Carr-Maradudin が数値評価できなかった 12 次元積分からの寄与を数値評価する. $E'_3 = 0.015$.

こうして得られた $O(r_s)$ まで正しい r_s 展開を基にして, 2 つのパラメーターを使い, 高密度から全金属密度領域にわたって有効な精度の良い外挿公式を提案する.

1 序章

金属, 特に単純金属における伝導電子間の多体相関の研究には, 電子液体モデルが有効である. 電子液体の基底エネルギーを電子間のクーロン相互作用について摂動展開した場合, 2 次および高次の摂動項が, 相互作用の長距離性のため発散する. この困難は, 裸のクーロン相互作用の代わりに, 動的に遮蔽されたクーロン相互作用を用いて基底エネルギーを展開し直し摂動項の順序を並べ換えることによって解決される [1].

この系の展開パラメーターは, クーロン相互作用の強さ e^2 である. 通常 1 電子あたりの体積に等しい球の半径を Bohr 半径 a_0 で測った値を r_s とする. すなわち, $(4\pi/3)(r_s a_0)^3 = n^{-1}$. ここで n は電子密度である. フェルミ波数 k_f は $k_f^3/(3\pi^2) = n$ であるので, フェルミエネルギーは $\epsilon_f = \hbar^2 k_f^2/(2m) = (3/5)(9\pi/4)^{2/3} r_s^{-2} (e^2/2a_0)$, クーロンエネルギーは $1/(4r_s a_0) = (3/8\pi)(9\pi/4)^{1/3} r_s^{-1} (e^2/2a_0)$ となる. したがって, この無次元化されたパラメーター r_s は, 1 電子あたりの運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの比の目安を与える. 運動エネルギーがポテンシャルエネルギーより十分大きい高密度では r_s が小さく ($r_s \ll 1$), 両者が同じ程度の大きさである金属密度領域では電子間の相関が強く, r_s の値は $1.8 \lesssim r_s \lesssim 5.6$ である. r_s による展開は高密度展開とも呼ばれる.

r_s 展開は, r_s^n および非解析的な $r_s^n \ln r_s$ の項から成り立っていて, 元来収束半径が 0 の漸近展開である. これは電子液体のハミルトニアン中の結合定数 e^2 を負にした場合, 非摂動的な超伝導状態に変わってしまうことを反映している. つまり, $\text{Re } e^2$, $\text{Im } e^2$ をそれぞれ横, 縦軸とする複素平面において $\text{Re } e^2$ が負に相当する横軸に branch cut が存在するからである.

最も高次までの r_s 展開は, Carr-Maradudin によって試みられた [2]. 彼らによれば, 1 電子あたりの基底エネルギーをリュードベリ単位 ($e^2/(2a_0)$) で表わした場合, 次のように書ける.

$$\begin{aligned} \epsilon(r_s) = & 2.21 r_s^{-2} - 0.916 r_s^{-1} + 0.0622 \ln r_s - 0.096 + 0.018 r_s \ln r_s + (E'_3 - 0.036) r_s \\ & + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \end{aligned} \quad (1)$$

第 1 項は運動エネルギー, 第 2 項は交換エネルギー, 第 3 項およびより高次の項は相関エネルギーの寄与である. 高密度で主要な相関エネルギー $\ln r_s$ の項は, Mücke によって最初に与えられ

た [3]. 定数項は Gell-Mann-Brueckner がモンテカルロ法を用いて計算し [4], 後に Onsager らによって解析的に評価された [5]. $r_s \ln r_s$ を与える表式は DuBois によって初めて導かれたが [6], その係数の数値は Carr-Maradudin によって正しく評価された [2]. 次の r_s のオーダーの項は彼らによって部分的に計算されたが, 完全ではない. まだ数値評価されていない 12 次元積分からの寄与は, (1) で E'_3 と書かれている.

高密度展開 (r_s 展開) は, r_s が十分小さい場合 ($r_s \lesssim 1$) には有意義であるが, 現実的な金属密度領域での相関エネルギーの評価には無効である. 現在までに多くの研究者によって金属密度領域で有効な様々な手法が考案された. すなわち Green's Function Monte Carlo (GFMC) 法をはじめ [7][8], Fermi Hypernetted Chain (FHNC) 法 [9][10][11], Coupled-Cluster Expansion 法 [12], Effective Potential Expansion 法 [13], 摂動展開の partial summation 法 [14][15], などの理論的手法である. 強い相関を扱うこれらの理論的手法に共通する特色は, 金属密度でのクーロン相互作用による強い短距離相関をあらかじめ取り込み, 交換効果を適切に含めて, 長距離および短距離相関を内挿する考えである. これらの計算による 1 電子あたりの相関エネルギーの値は全金属密度領域にわたって 0.5 mRy の範囲内で一致するまでになっている.

この論文では, (1) r_s 展開をわかりやすく整理し (DuBois の論文は先見的で優れているが, ミスが多く表記法が混乱していて読みにくい), Carr-Maradudin が数値評価できなかった $O(r_s)$ の寄与の一部, すなわち E'_3 を数値評価する. (2) このようにして得られた $O(r_s)$ まで正しい r_s 展開を基にして, 2 つのパラメーターを使って, 高密度から全金属密度領域にわたって有効な精度の良いスムーズな外挿公式を提案する.

§ 2 では $O(r_s)$ までの r_s 展開を与える形式的表式の導出を行なう. § 3 では 2 次の摂動項およびより高次の各摂動項の中で最も発散する項をまとめる. これは $\ln r_s$ のオーダーの項を与える他, 高次の項にも寄与することを示す. § 4 では 3 次および高次の摂動項の中で 2 番目に最も発散する項をまとめる. これは $r_s \ln r_s$ のオーダーの残りの寄与および $O(r_s)$ の部分的寄与を与える. § 5 では残りの $O(r_s)$ の寄与を扱う. § 6 では金属密度領域への外挿公式を提案する.

2 r_s 展開

基底エネルギーの電子間相互作用によるずれは, 誘電応答関数 K_{r_s} を用いて表わされる ([6] (3.12b)). 波数 q は k_f , 振動数 ω は $\hbar k_f^2 / (2m)$ の単位で表わし, エネルギーの単位をリュードベリ ($E_{ryd} = e^2 / (2a_0)$) とすれば,

$$\Delta E = \frac{3}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_0^{r_s} \frac{dr_s}{r_s} \int d^3 \mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \left\{ 1 - \frac{1}{K_{r_s}(q, \omega)} \right\}, \quad (2)$$

$$K_{r_s}(q, \omega) = 1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}(q, \omega), \quad \alpha \equiv \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} = 0.52106 \dots \quad (3)$$

ここで proper な分極関数 Q_{r_s} は遮蔽された相互作用で次のように展開される.

$$Q_{r_s} = Q^{(0)} + Q^{(1)} + Q^{(2)} + \dots \quad (4)$$

$Q_{r_s}^{(n)}$ の n は遮蔽された相互作用の次数を意味し, 裸のクーロン相互作用の次数ではない. $Q^{(0)}$ は Lindhard 関数である.

誘電応答関数による表式 (2) では Hartree 近似での遮蔽効果を improper な寄与としてあらかじめ抜き出し、残りの交換相関効果を $Q_{r_s}(q, \omega)$ の高次の寄与、 $Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + Q_{r_s}^{(3)} + \dots$ を用いて表わしている。 $Q_{r_s}(q, \omega)$ の高次の寄与は遮蔽された相互作用（有効相互作用） $(\alpha r_s / 2\pi^2 q^2) K_{r_s}^{-1}(q, \omega)$ の汎関数であるので $K_{r_s}(q, \omega)$ と $Q_{r_s}(q, \omega)$ は自己無撞着な関係にある。

$1 - 1/K$ の極は、 $\omega > 0$ の場合実軸より無限小下側、 $\omega < 0$ の場合実軸より無限小上側にある。また $1 - 1/K$ は、 $|\omega| \rightarrow \infty$ のとき $O(1/\omega^2)$ であることに注目すれば、極を横切らずに積分路を反時計回りに $\pi/2$ 回転し、虚軸上に変形できる ([6] (3.12c))。

$\omega \equiv iu$ において、

$$\Delta E = \frac{3}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_0^{r_s} \frac{dr_s}{r_s} \int d^3\mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} \left\{ 1 - \frac{1}{K_{r_s}(q, iu)} \right\}, \quad (5)$$

ここで虚軸上の関数 $K_{r_s}(q, iu)$ は実関数となる。

r_s 展開に便利のように $1 - 1/K$ を展開しよう。

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{K_{r_s}(q, iu)} &= \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q_{r_s}(q, iu)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q_{r_s}(q, iu)} \\ &= \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q^{(0)} + Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q^{(0)} + Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)}, \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、

$$Q^{(0)}(q, iu) = \int_{|p| < 1, |p+q| > 1} d^3\mathbf{p} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ ituq - |t| \left(\frac{1}{2} q^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \right) \right\}. \quad (7)$$

高密度での遮蔽は RPA の誘電応答関数 $K_{r_s}^{(0)} = 1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}$ で適切に表わされるので、分母をこの因子でくくれば次のようになる。

$$\begin{aligned} &1 - \frac{1}{K_{r_s}(q, iu)} \\ &= \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q^{(0)} + Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)}{\{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}\} \left\{ 1 + [(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)] / [1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}] \right\}} \\ &= \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q^{(0)} + Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \left\{ 1 - \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)} + \dots)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} + O(r_s^4) \right\} \\ &= \frac{\alpha r_s / \pi^2 q^2}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \left\{ (Q^{(0)} + Q_{r_s}^{(1)} + Q_{r_s}^{(2)}) - \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2) (Q^{(0)} Q_{r_s}^{(1)})}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \right\} + O(r_s^4) \\ &= \frac{\alpha r_s / \pi^2 q^2}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \left\{ Q^{(0)} + \frac{Q_{r_s}^{(1)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} + Q_{r_s}^{(2)} \right\} + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (8)$$

したがって、 r_s の 1 次までの r_s 展開は形式的に次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{3}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_0^{r_s} \frac{dr_s}{r_s} \int d^3\mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} \left\{ \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q^{(0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(1)}}{\{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}\}^2} + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(2)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \right\} + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2), \end{aligned} \quad (9)$$

ここで $\{$ の第 2, 3 項に現れる収束因子 $1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}$ は以下でわかるように、その全てが不可欠なわけではない。

まず第1項は、次のように分けられる。

$$\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q^{(0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} = \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q^{(0)} - \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q^{(0)^2}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}}. \quad (10)$$

次に第2項中の $Q_{r_s}^{(1)}$ を以下のように分ける。

$$Q_{r_s}^{(1)} = Q_{r_s}^{(1,0)} + Q_{r_s}^{(1,rest)}, \quad (11)$$

ここで $Q_{r_s}^{(1,0)}$ は裸の相互作用について1次であり、 $Q_{r_s}^{(1,rest)}$ はより高次の部分である。
 q の積分に必要な収束因子だけ残せば、

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(1)}}{\{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}\}^2} \\ &= \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(1,0)}}{\{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}\}^2} + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(1,rest)}}{\{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}\}^2} \\ &= \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(1,0)} - 2 \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_{r_s}^{(1,0)} Q^{(0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(1,rest)} + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (12)$$

(12) の各項に対応するエネルギーダイアグラム、およびこれを構成する proper な分極関数 $Q_{r_s}^{(1)}$, $Q_{r_s}^{(1,0)}$, $Q_{r_s}^{(1,rest)}$ のダイアグラムが図1に示されている。

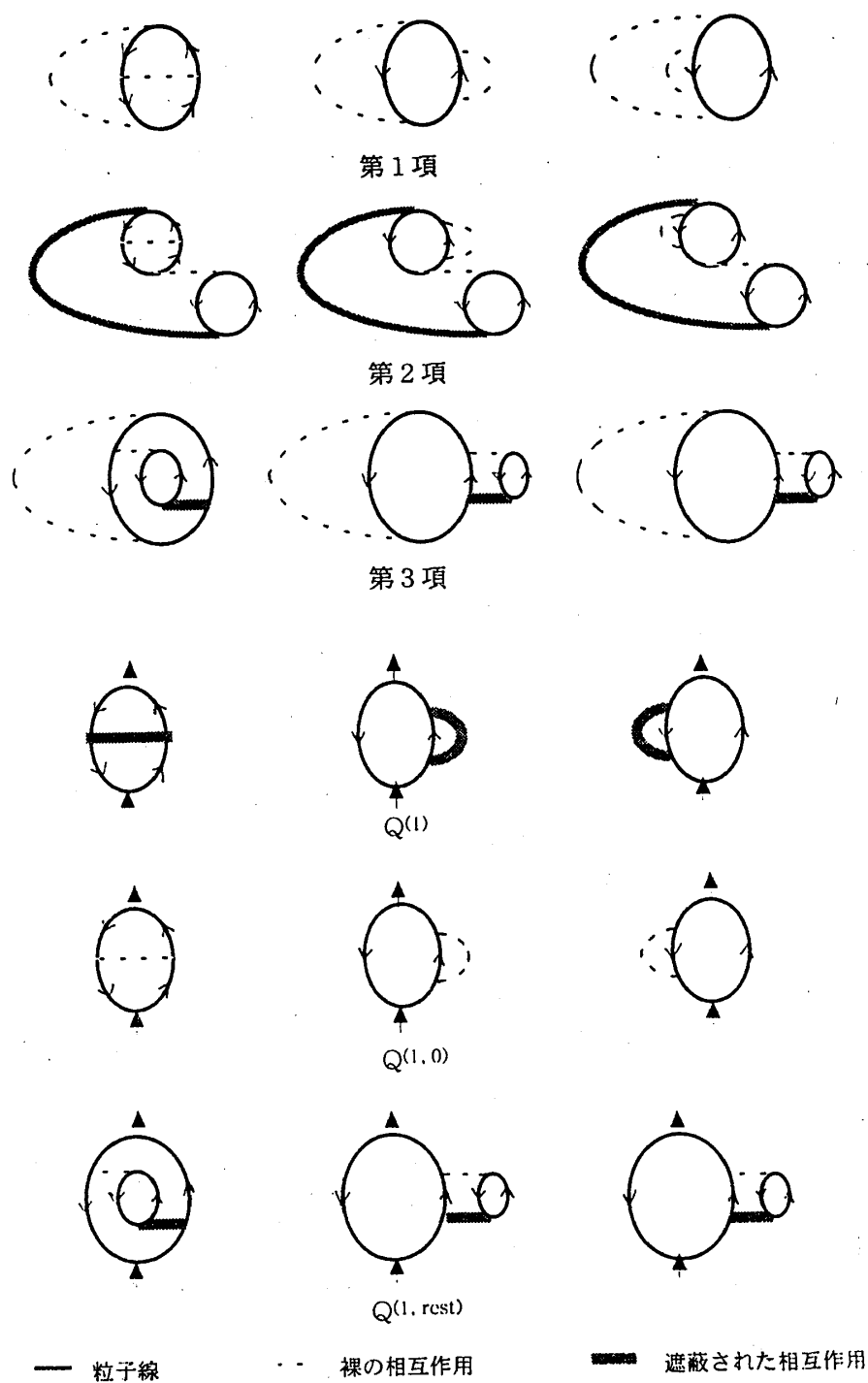


図 1: (12) の各項に対応するエネルギーダイアグラム, およびこれを構成する proper な分極関数のダイアグラム

第3項の $Q_{r_s}^{(1,rest)}$ から構成されるエネルギーダイアグラムのトポロジカルな構造が第2項の寄与、すなわち $Q_{r_s}^{(1,0)}$ に improper な分極の効果をつけ加えた高次のダイアグラム構造と同一であることに注目しよう。すなわち、 q および u の積分のもとでは (12) は次のように置き換えてよい。

$$\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(1,0)} - 3 \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_{r_s}^{(1,0)} Q^{(0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} + O(r_s^4). \quad (13)$$

この事情をもう少し詳しく述べてみよう。Hartree 近似による分極 (improper) が自動的に取り込まれるようになっている誘電応答関数によるエネルギーの定式化では、proper な分極関数の近似を進める方式を採用している。そのため同じエネルギーダイアグラムが異なった分極関数から生じ得る。別な言い方をすれば、あるエネルギーダイアグラムを計算する場合、これを与え得る全てのタイプの proper な分極ダイアグラムを取り込むことが不可欠なのである。さもないと、対応する摂動項の係数を正しく与えないのである。

(9) の第3項中の $Q_{r_s}^{(2)}$ についても同様に分離する。

$$Q_{r_s}^{(2)} = Q_{r_s}^{(2,0)} + Q_{r_s}^{(2,rest)}. \quad (14)$$

$Q_{r_s}^{(2,0)}$ は裸のクーロン相互作用について2次の部分であり、 $Q_{r_s}^{(2,rest)}$ はより高次の部分である。

この場合 $O(r_s^3)$ までの計算では収束因子は不要である。すなわち対応するエネルギーダイアグラムにおける3つのクーロン相互作用はそれぞれ異なった波数成分からなっており、 q^{-2} の因子が重なることによる発散は生じない。積分のもとでは第3項は次のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(2)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \\ &= \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(2,0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{Q_{r_s}^{(2,rest)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \\ &= \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(2,0)} + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (15)$$

以上をまとめると、(9) は $O(r_s)$ までで次のように書ける。

$$\begin{aligned} \Delta E = & \frac{3}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_0^{r_s} \frac{dr_s}{r_s} \int d^3 \mathbf{q} \int \frac{du}{2\pi} \left\{ \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q^{(0)} - \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q^{(0)^2}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \right. \\ & + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(1,0)} - 3 \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_{r_s}^{(1,0)} Q^{(0)}}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q^{(0)}} \\ & \left. + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_{r_s}^{(2,0)} \right\} + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \end{aligned} \quad (16)$$

(16) の各項を順を追って説明しよう。

ここで Carr-Maradudin の表記法を並用する。彼らによれば各エネルギーダイアグラムの寄与は $E_{m,2n}$ (m, n : integer) と書ける。 m は裸のクーロン相互作用の次数、 n は同じ波数成分をもつクーロン相互作用の数を表わす。

第1項は交換エネルギーで E_{12} に対応する。

$$\begin{aligned} E_{12} &= -\frac{3}{8\pi^3} \frac{1}{\alpha r_s} \int_{p_1, p_2 < 1} d^3 \mathbf{p}_1 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{1}{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2} \\ &= -\frac{3}{2\pi \alpha r_s} \\ &= -\frac{0.916}{r_s}. \end{aligned} \quad (17)$$

第2項は2次の直接項を初めとする摂動の各オーダーで最も発散する項をまとめたもので、 $\epsilon' = E_{24} + E_{36} + E_{48} + \dots$ に対応する。これは $\ln r_s$ の項を与え、より高次の項にも寄与する。

第3項は2次の交換項で E_{22} に対応する。この積分はOnsagerらによって解析的に与えられた[5].

$$\begin{aligned} E_{22} &= \frac{3}{16\pi^5} \int d^3q \int d^3p_1 \int d^3p_2 \frac{1}{q^2} \frac{1}{(p_1 + p_2 + q)^2} \frac{1}{q^2 + q \cdot (p_1 + p_2)} \\ &= \frac{1}{3} \ln 2 - \frac{3}{2\pi^2} \zeta(3) \\ &= 0.04836 \dots, \end{aligned} \quad (18)$$

ここで $\zeta(3)$ はRiemannのzeta functionである。 E_{22} の積分領域は $(|p_i| < 1, |p_i + q| > 1)$ である。

第4項は、3次および高次の摂動の各オーダーで2番目に最も発散する項を集めたものである。 $\epsilon'' = E_{34} + E_{46} + E_{58} + \dots$ に対応する。これは $r_s \ln r_s$ のオーダーの寄与の残りの部分を与え、 $O(r_s)$ の項にも寄与する。

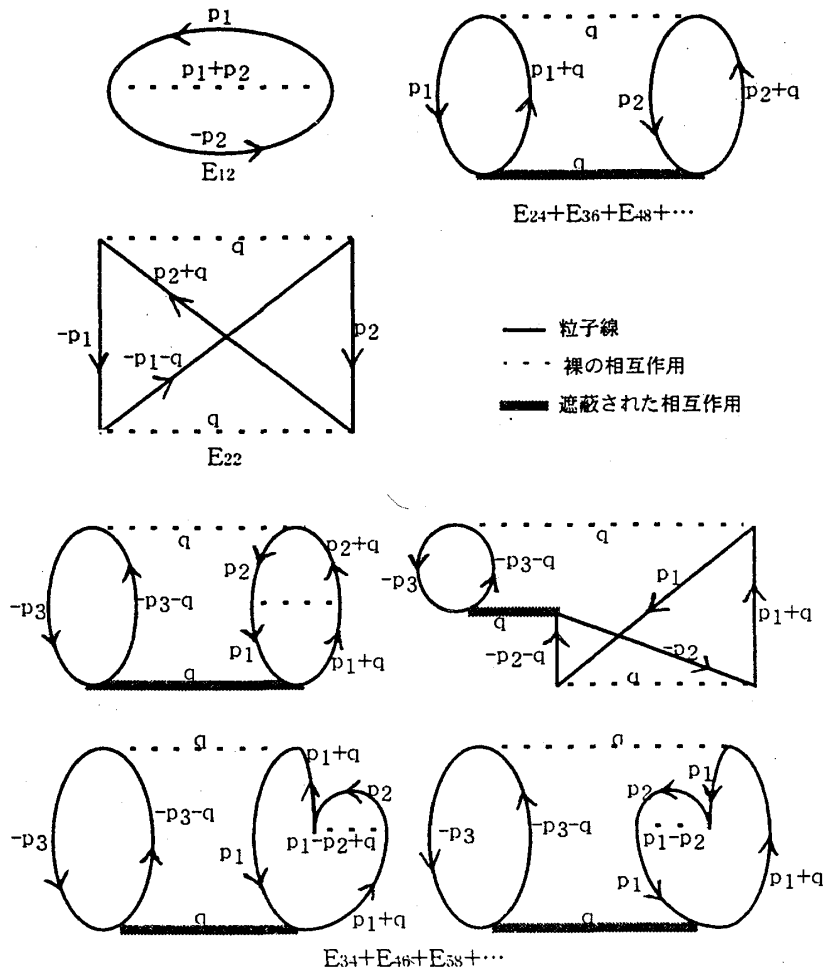


図 2: E_{12} , $E_{24} + E_{36} + E_{48} + \dots$, E_{22} , $E_{34} + E_{46} + E_{58} + \dots$ のダイアグラム

第5項は、 $O(r_s)$ の残りの部分を与える。これは3次の摂動項の中で3つのクーロン相互作用が全て異なった波数成分をもつ型の寄与であり、 $E_{32}(= E'_3 r_s)$ に対応する。

以下の § 3, § 4, § 5 では最も発散する摂動項系列の和, 2 番目に発散する摂動項系列の和, および E_{32} の評価について詳しく述べる.

3 最も発散する摂動項系列の和

(16) の第 1 項と第 2 項をまとめて r_s 積分を行ったのち第 1 項を差し引けば, 最も発散する摂動項系列の和を得る.

$$\epsilon' = \frac{3}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{2\pi} \int_{0 < q < \infty} d^3 \mathbf{q} \left\{ \ln \left(1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q^{(0)}(q, iu) \right) - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q^{(0)}(q, iu) \right\}. \quad (19)$$

$u \equiv q\mu$ と変数変換し $Q^{(0)}(q, iq\mu) \equiv Q_q(\mu)$ とおくと,

$$\epsilon' = \frac{3}{16\pi^6} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_{0 < q < \infty} d^3 \mathbf{q} \, q \left\{ \ln \left(1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \right) - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \right\}, \quad (20)$$

ここで

$$\begin{aligned} Q_q(\mu) = & 2\pi \left[\frac{1}{2q} \left(1 + \mu^2 + \frac{1}{4}q^2 \right) \ln \left\{ \frac{(1 + q/2)^2 + \mu^2}{(1 - q/2)^2 + \mu^2} \right\} + 1 \right. \\ & \left. - \mu \tan^{-1} \left(\frac{1 + q/2}{\mu} \right) + \mu \tan^{-1} \left(\frac{q/2 - 1}{\mu} \right) \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

(20) において, r_s が小さい場合, q が小さい領域からの積分を解析的に行なうために, q 積分領域を $0 \rightarrow 1$ と $1 \rightarrow \infty$ に分けて行なう.

$$\epsilon' = \epsilon'_{0 \rightarrow 1} + \epsilon'_{1 \rightarrow \infty}. \quad (22)$$

まず, $\epsilon'_{0 \rightarrow 1}$ を計算する.

$Q_q(\mu)$ を $q = 0$ の値 $4\pi R(\mu)$, q^2 の項 $R_{(1)}(\mu)$ および残りの寄与 $\Delta_q(\mu)$ に分ける.

$$Q_q(\mu) = 4\pi R(\mu) + q^2 R_{(1)}(\mu) + \Delta_q(\mu), \quad (23)$$

ここで

$$R(\mu) = 1 - \mu \tan^{-1} \frac{1}{\mu}, \quad (24)$$

$$R_{(1)}(\mu) = -\frac{\pi}{3(1 + \mu^2)^2}. \quad (25)$$

(20) の $\{ \}$ 内は以下ようになる.

$$\begin{aligned} I &= \ln \left(1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \right) - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \\ &= \ln \left\{ 1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} (4\pi R + q^2 R_{(1)} + \Delta_q) \right\} - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} (4\pi R + q^2 R_{(1)} + \Delta_q) \\ &= \ln \left\{ \left(1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R \right) \left(1 + \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} \right) \right\} - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} (4\pi R + q^2 R_{(1)} + \Delta_q) \\ &= \ln \left(1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R \right) - \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R + \ln \left\{ 1 + \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} \right\} \\ &\quad - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} (q^2 R_{(1)} + \Delta_q). \end{aligned} \quad (26)$$

ここで第3項は q が小さい場合次のように展開できる.

$$\begin{aligned} & \ln \left\{ 1 + \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \right\} \\ &= \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{q^2 R_{(1)} + \Delta_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} - \frac{1}{2} \left\{ \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{q^2 R_{(1)} + \Delta_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \right\}^2 + \frac{1}{3} \left\{ \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{q^2 R_{(1)} + \Delta_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \right\}^3 \\ &+ O(r_s^4). \end{aligned} \quad (27)$$

これをさらに r_s についての次数で整理しよう. ただし, (20) の q 積分は q^3 の因子を含んでいるので, $q \rightarrow 0$ で $O(q^{-4})$ となる場合には収束因子を残さなければならない.

$$\begin{aligned} & \ln \left\{ 1 + \frac{(\alpha r_s / \pi^2 q^2)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \right\} \\ \rightarrow & \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} (q^2 R_{(1)} + \Delta_q) - \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 (4\pi R)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q) + \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 \frac{(4\pi R)^2 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^2 + \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 (4\pi R)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^2 \\ & + \frac{1}{3} \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^3 + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (28)$$

したがって,

$$\begin{aligned} I = & \ln \left(1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R \right) - \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R \\ & - \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 (4\pi R)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q) + \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 \frac{(4\pi R)^2 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^2 + \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 (4\pi R)(q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^2 \\ & + \frac{1}{3} \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 (q^2 R_{(1)} + \Delta_q)^3 + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (29)$$

(23) を用いて $q^2 R_{(1)} + \Delta_q$ を書き換えると,

$$\begin{aligned} I = & \ln \left(1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R(\mu) \right) - \frac{4\alpha r_s}{\pi q^2} R(\mu) \\ & - \left(\frac{4\alpha r_s}{\pi^2} \right)^2 \alpha_q(\mu) + \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^3 \frac{4\pi R q^2 R_{(1)}}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2)R} \\ & + \left(\frac{4\alpha r_s}{\pi^2} \right)^2 \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \beta_q(\mu) + O(r_s^4), \end{aligned} \quad (30)$$

ここで, $\alpha_q(\mu), \beta_q(\mu)$ は,

$$\alpha_q(\mu) = -\frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{2q^4} \left[\{Q_q(\mu)\}^2 - \{4\pi R(\mu)\}^2 \right], \quad (31)$$

$$\beta_q(\mu) = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{3q^4} \left[\{Q_q(\mu)\}^3 - \{4\pi R(\mu)\}^3 - 3q^2 \{4\pi R(\mu)\}^2 R_{(1)}(\mu) \right] \quad (32)$$

である.

最終的な $O(r_s)$ までの $\epsilon'_{0 \rightarrow 1}$ の表式は次のように与えられる.

$$\begin{aligned}
 \epsilon'_{0 \rightarrow 1} &= \frac{3}{16\pi^6} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_{0 < q < 1} d^3 \mathbf{q} \, q \left\{ \ln \left(1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \right) - \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} Q_q(\mu) \right\} \\
 &= \frac{3}{\pi^3} \ln r_s \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 \\
 &\quad + \left\{ -\frac{3}{\pi^3} \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{4\alpha}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 + \frac{3}{\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 \ln R + \frac{12}{\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^1 dq \, q^3 \alpha_q(\mu) \right\} \\
 &\quad - \frac{6\alpha}{\pi^5} r_s \ln r_s \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 R_{(1)} \\
 &\quad - \left\{ \frac{8\alpha}{\pi^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^3 + \frac{6\alpha}{\pi^5} \ln \frac{4\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 R_{(1)} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{6\alpha}{\pi^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 R_{(1)} \ln R - \frac{12\alpha}{\pi^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^1 dq \, q \beta_q(\mu) \right\} r_s \\
 &\quad + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2), \tag{33}
 \end{aligned}$$

ここで $\ln r_s$ の項の係数は解析的に評価できる.

$$\frac{3}{\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 = \frac{2}{\pi^2} (1 - \ln 2) = 0.0621814 \dots \tag{34}$$

一方 $\epsilon'_{1 \rightarrow \infty}$ では, q が大きい場合 $(\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q_q(\mu)$ が十分 1 より小さいことに注目して, (19) 中の対数項を展開すれば,

$$\begin{aligned}
 \epsilon'_{1 \rightarrow \infty} &= -\frac{3}{8\pi^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_1^{\infty} dq \frac{Q_q^2(\mu)}{q} + \frac{\alpha r_s}{4\pi^7} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_1^{\infty} dq \frac{Q_q^3(\mu)}{q^3} \\
 &\quad + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \tag{35}
 \end{aligned}$$

(33) と (35) をまとめて数値積分を行ない, 次の結果を得る.

$$\epsilon' = \epsilon'_{0 \rightarrow 1} + \epsilon'_{1 \rightarrow \infty} = 0.0622 \ln r_s - 0.1422 + 0.00542 r_s \ln r_s - 0.0144 r_s + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \tag{36}$$

なお, 上記の定数項の評価については (33) 中の $\int_{-\infty}^{\infty} d\mu R^2 \ln R$ を除いて, 積分は解析的に行われ得る [16].

4 2 番目に最も発散する摂動項系列の和

(16) の第 4 項で $u \equiv q\mu$ と変数変換すれば,

$$\epsilon'' = -\frac{9}{8\pi^5} \left(\frac{\pi^2}{\alpha r_s} \right)^2 \int_0^{r_s} \frac{dr_s}{r_s} \int d^3 \mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{2\pi} q \left\{ \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_{r_s}^{(1,0)}(q, iq\mu) Q_q(\mu)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q_q(\mu)} \right\} \tag{37}$$

となる.

$r_s \ln r_s$ のオーダーの項を導き出すため, q 積分を $0 \rightarrow 1$ と $1 \rightarrow \infty$ に分け, q が小さい領域での積分を解析的に行なう.

$$\epsilon'' = \epsilon''_{0 \rightarrow 1} + \epsilon''_{1 \rightarrow \infty}. \tag{38}$$

まず、 $\epsilon''_{0 \rightarrow 1}$ では $Q^{(0)}$ 、 $Q_{r_s}^{(1,0)}$ をそれぞれ $q=0$ の値と残りの寄与に分ける。

$$Q_q(\mu) \equiv 4\pi R(\mu) + \Delta'_q(\mu), \quad (39)$$

$$Q_{r_s}^{(1,0)}(q, iq\mu) \equiv \alpha r_s \{R^{(1)}(i\mu) + \Delta_q^{(1)}(\mu)\}, \quad (40)$$

ここで、 $R^{(1)}(i\mu)$ はDu Bois[6]の(A5)の積分で定義され、解析的に次のように与えられる[17].

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} Q_{r_s}^{(1,0)}(q, iq\mu) &\equiv \alpha r_s R^{(1)}(i\mu), \\ R^{(1)}(i\mu) &= \frac{4}{1+\mu^2} \left\{ (1+3\mu^2) - (2+3\mu^2)\mu \tan^{-1}\mu \right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

(37)の積分中の $\{\}$ 内を、まず q が小さい場合について展開したのち r_s の次数について整理する。

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_{r_s}^{(1,0)} Q_q(\mu)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) Q_q(\mu)} \\ &= \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{\alpha r_s (R^{(1)} + \Delta_q^{(1)}) (4\pi R + \Delta'_q)}{1 + (\alpha r_s / \pi^2 q^2) (4\pi R + \Delta'_q)} \\ &= \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{\alpha r_s (R^{(1)} + \Delta_q^{(1)}) (4\pi R + \Delta'_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} \left\{ 1 + \frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \frac{\Delta'_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} \right\}^{-1} \\ &= \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{\alpha r_s (R^{(1)} + \Delta_q^{(1)}) (4\pi R + \Delta'_q)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} + O(r_s^4) \\ &= \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \alpha r_s \left\{ \frac{R^{(1)}(4\pi R)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} + \frac{R^{(1)} \Delta'_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} + \frac{4\pi R \Delta_q^{(1)}}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} + \frac{\Delta_q^{(1)} \Delta'_q}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} \right\} \\ &\quad + O(r_s^4). \end{aligned} \quad (42)$$

第1項では、 q 積分の収束因子としての分母をそのまま残し、残りの項では分母を1とおいてよい。ここで(42)中の $\Delta'_q(\mu)$ 、 $\Delta_q^{(1)}(\mu)$ を Q_q 、 $Q_{r_s}^{(1,0)}$ および R 、 $R^{(1)}$ で書き直す。

$$\left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \left\{ \frac{\alpha r_s (4\pi R(\mu)) R^{(1)}(i\mu)}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} + Q_q(\mu) Q_{r_s}^{(1,0)} - \alpha r_s (4\pi R(\mu)) R^{(1)}(i\mu) \right\} + O(r_s^4). \quad (43)$$

一方 $\epsilon''_{1 \rightarrow \infty}$ では、 $q > 1$ なので(37)の積分中の $\{\}$ 内の分母を展開してよい。

$$\left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 \frac{Q_q(\mu) Q_{r_s}^{(1,0)}}{1 + (4\alpha r_s / \pi q^2) R} = \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^2 Q_q(\mu) Q_{r_s}^{(1,0)} + O(r_s^4). \quad (44)$$

まとめると、

$$\begin{aligned} \epsilon'' &= \epsilon''_{0 \rightarrow 1} + \epsilon''_{1 \rightarrow \infty} \\ &= -\frac{9}{8\pi^5 r_s^2} \int_0^{r_s} dr_s r_s \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{2\pi} \left[\int_{0 < q < 1} d^3 \mathbf{q} \frac{\alpha r_s \{4\pi R(\mu)\} R^{(1)}(i\mu)}{q(q^2 + (4\alpha r_s / \pi) R)} \right. \\ &\quad \left. + \int_{q > 0} d^3 \mathbf{q} \frac{\alpha r_s Q_q(\mu) Q_{r_s}^{(1,0)}}{q^3} - \int_{0 < q < 1} d^3 \mathbf{q} \frac{\alpha r_s \{4\pi R(\mu)\} R^{(1)}(i\mu)}{q^3} \right] \\ &\quad + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2), \end{aligned} \quad (45)$$

ここで

$$Q_0^{(1,0)} \equiv \frac{Q_{r_s}^{(1,0)}}{\alpha r_s}. \quad (46)$$

第2項と第3項について r_s 積分を実行すると,

$$\begin{aligned} \epsilon'' = & -\frac{9\alpha}{\pi^4 r_s^2} \int_0^{r_s} dr_s r_s^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^1 dq \frac{q R(\mu) R^{(1)}(i\mu)}{q^2 + (4\alpha r_s/\pi) R(\mu)} \\ & - \frac{3\alpha r_s}{4\pi^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^{\infty} dq \frac{Q_q(\mu) Q_0^{(1,0)}(q, iqu)}{q} + \frac{3\alpha r_s}{\pi^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^1 dq \frac{R(\mu) R^{(1)}(i\mu)}{q} \\ & + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \end{aligned} \quad (47)$$

第1項では, q 積分を実行した後 r_s 積分を行なう.

$$\begin{aligned} & -\frac{9\alpha}{\pi^4 r_s^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \int_0^{r_s} dr_s r_s^2 \int_0^1 dq \frac{q}{q^2 + (4\alpha r_s/\pi) R(\mu)} \\ = & -\frac{9\alpha}{2\pi^4 r_s^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \int_0^{r_s} dr_s r_s^2 \ln \left\{ \frac{1 + (4\alpha r_s/\pi) R(\mu)}{(4\alpha r_s/\pi) R(\mu)} \right\} \\ = & -\frac{9\alpha}{2\pi^4 r_s^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \left[-\int_0^{r_s} dr_s r_s^2 \ln \left\{ \frac{4\alpha r_s}{\pi} R(\mu) \right\} + O(r_s^4) \right] \\ = & -\frac{9\alpha}{2\pi^4 r_s^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \left(-\frac{1}{3} r_s^3 + \frac{1}{3} \left[\frac{1}{3} - \ln \left\{ \frac{4\alpha r_s}{\pi} R(\mu) \right\} \right] r_s^3 + O(r_s^4) \right) \\ = & \frac{3\alpha}{2\pi^4} r_s \ln r_s \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \\ & - \left[\left\{ \frac{\alpha}{2\pi^4} - \frac{3\alpha}{2\pi^4} \ln \left(\frac{4\alpha}{\pi} \right) \right\} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) - \frac{3\alpha}{2\pi^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \ln \{ R(\mu) \} \right] r_s \\ & + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2) \end{aligned} \quad (48)$$

以上まとめると,

$$\begin{aligned} \epsilon'' = & \frac{3\alpha}{2\pi^4} r_s \ln r_s \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \\ & - \left[\frac{3\alpha}{2\pi^4} \left\{ \ln \left(\frac{4\alpha}{\pi} \right) - \frac{1}{3} \right\} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) - \frac{3\alpha}{2\pi^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu R(\mu) R^{(1)}(i\mu) \ln \{ R(\mu) \} \right. \\ & \left. + \frac{3\alpha}{4\pi^5} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^{\infty} dq \frac{Q_q(\mu) Q_0^{(1,0)}(q, iqu)}{q} - \frac{3\alpha}{\pi^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \int_0^1 dq \frac{R(\mu) R^{(1)}(i\mu)}{q} \right] r_s \\ = & 0.0130 r_s \ln r_s - 0.021 r_s + O(r_s^2 \ln r_s, r_s^2). \end{aligned} \quad (49)$$

5 $E_{32}(= E'_3 r_s)$ の数値計算

E_{32} はその中の3つのクーロン相互作用がそれぞれ違った波数成分をもつ型の3次の摂動項を表わす. これは1964年当時, Carr-Maradudin が数値計算せずに残した $O(r_s)$ に寄与する項である [2].

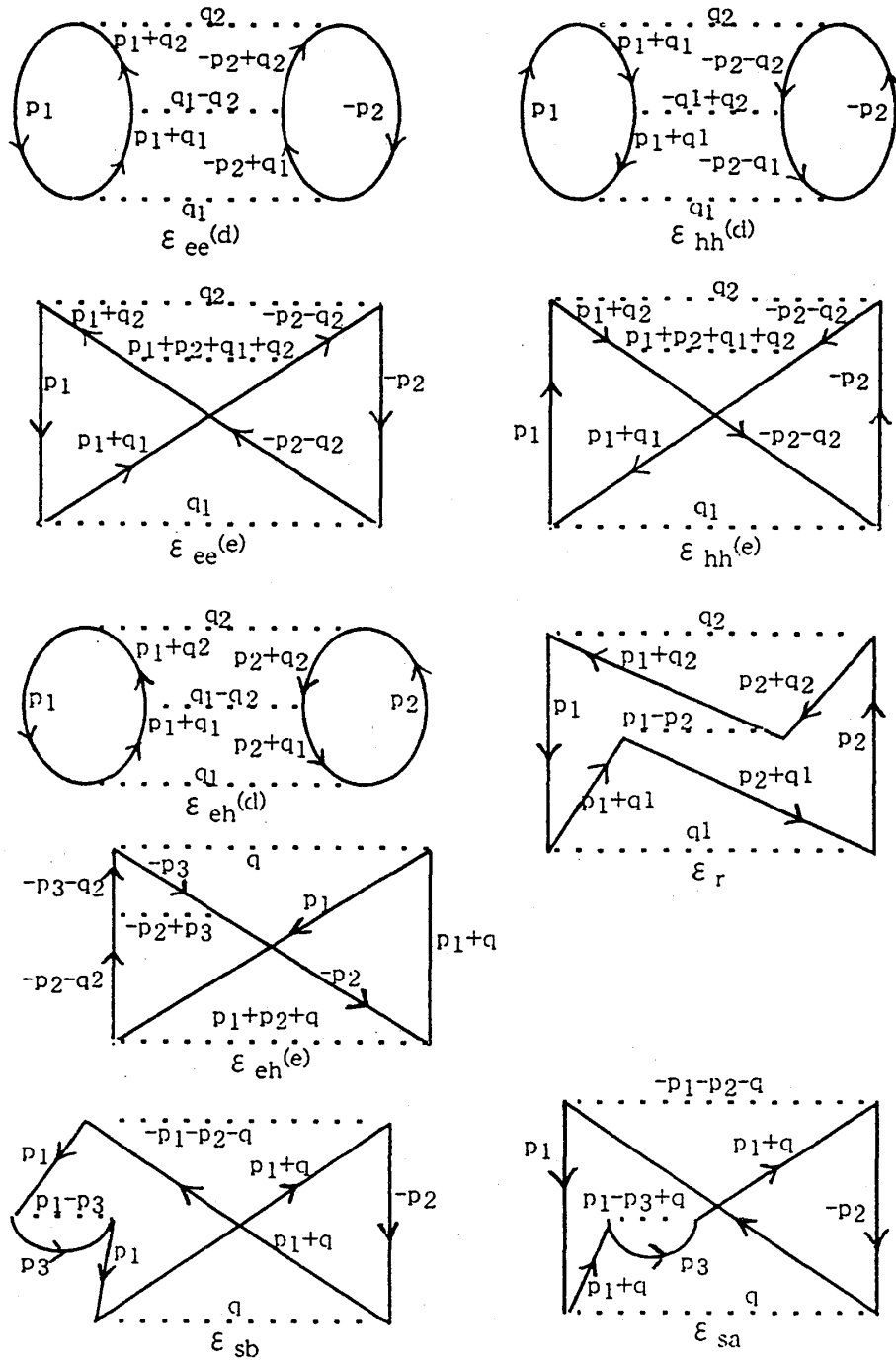


図 3: $\epsilon_{ee}^{(d)}$: 電子電子直接散乱項, $\epsilon_{hh}^{(d)}$: 正孔正孔直接散乱項, $\epsilon_{ee}^{(e)}$: 電子電子交換散乱項, $\epsilon_{hh}^{(e)}$: 正孔正孔交換散乱項, $\epsilon_{eh}^{(d)}$: 電子正孔相互作用を含む直接散乱項, ϵ_r : リングの2重交換項, $\epsilon_{eh}^{(e)}$: 電子正孔相互作用を含む交換散乱項, ϵ_{sb} : 自己エネルギー型, ϵ_{sa} : 自己エネルギー型

E_{32} は図 3 に示されている 9 つのエネルギーダイアグラムに対応し、次のような 12 次元積分で与えられる [18].

$$\begin{aligned}
 E_{32} = & \frac{3}{32\pi^7} \alpha r_s \int d^3 p_1 d^3 p_2 \int d^3 q_1 d^3 q_2 \frac{1}{q_1^2} \frac{1}{q_2^2} \left[\frac{2}{|q_1 - q_2|^2} - \frac{1}{|p_1 + p_2 + q_1 + q_2|^2} \right] \\
 & \times \frac{1}{q_1^2 + q_1 \cdot (p_1 + p_2)} \frac{1}{q_2^2 + q_2 \cdot (p_1 + p_2)} \quad (\epsilon_{ee}^{(d)} + \epsilon_{hh}^{(d)}, \epsilon_{ee}^{(e)} + \epsilon_{hh}^{(e)}) \\
 & - \frac{3}{16\pi^7} \alpha r_s \int d^3 p_1 d^3 p_2 \int d^3 q_1 d^3 q_2 \frac{1}{q_1^2} \frac{1}{q_2^2} \left[\frac{2}{|q_1 - q_2|^2} - \frac{1}{|p_1 - p_2|^2} \right] \\
 & \times \frac{1}{q_1 \cdot (p_2 - p_1)} \frac{1}{q_2 \cdot (p_2 - p_1)} \quad (\epsilon_{eh}^{(d)}, \epsilon_r) \\
 & + \frac{3}{8\pi^7} \alpha r_s \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3 \int d^3 q \frac{1}{q^2} \frac{1}{|p_1 + p_2 + q|^2} \frac{1}{|p_2 - p_3|^2} \\
 & \times \frac{1}{q^2 + q \cdot (p_1 + p_2)} \frac{1}{q^2 + q \cdot (p_1 + p_3)} \quad (\epsilon_{eh}^{(e)}) \\
 & + \frac{3}{16\pi^7} \alpha r_s \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3 \int d^3 q \frac{1}{q^2} \frac{1}{|p_1 + p_2 + q|^2} \left[\frac{1}{|p_1 - p_3 + q|^2} - \frac{1}{|p_1 - p_3|^2} \right] \\
 & \times \frac{1}{\{q^2 + q \cdot (p_1 + p_2)\}^2} \quad (\epsilon_{sb}, \epsilon_{sa}). \quad (50)
 \end{aligned}$$

上の表式と各ダイアグラムとの対応が明示してある.

第 1 の積分の領域は,

$$\begin{aligned}
 |p_1 + q_1| > 1, |p_1 + q_2| > 1, |p_1| < 1, \\
 |p_2 + q_1| > 1, |p_2 + q_2| > 1, |p_2| < 1, \quad (51)
 \end{aligned}$$

および、これらの不等号を逆向きにした領域である.

第 2 の積分の領域は,

$$\begin{aligned}
 |p_1 + q_1| > 1, |p_1 + q_2| > 1, |p_1| < 1, \\
 |p_2 + q_1| < 1, |p_2 + q_2| < 1, |p_2| > 1.
 \end{aligned}$$

第 3 の積分の領域は, $|p_i + q| > 1, |p_i| < 1$.

第 4 の積分の領域は, $|p_1 + q| > 1, |p_2 + q| > 1, |p_i| < 1$.

これらの 12 次元積分の数値評価に際して次のような技法を用いる. すなわち、まず各積分で全てのクーロン相互作用 q_i^{-2} を、適当な値の λ をもつ相互作用 $(q_i^2 + \lambda^2)^{-2}$ でおきかえて数値計算し、 λ を次第に小さくする極限值から積分を評価する.

図 4, 5, 6 では、 E_{32} の 9 つの積分、 $\epsilon_{ee}^{(d)}, \epsilon_{hh}^{(d)}, \epsilon_{eh}^{(d)}; \epsilon_{eh}^{(e)}, \epsilon_{ee}^{(e)}, \epsilon_{hh}^{(e)}; \epsilon_{sa}, \epsilon_{sb}, \epsilon_r$ の λ を変えた場合の様子がプロットされている. λ の値は $2k_f$ で測ったものである.

$\epsilon_{ee}^{(d)}, \epsilon_{hh}^{(d)}, \epsilon_{eh}^{(d)}$ は λ を変えていくと、 $0.002 < \lambda < 0.05$ の間でそれぞれ $\ln \lambda$ に比例している. すなわち $\lambda \rightarrow 0$ で対数的に発散する. しかしその和 $\epsilon_{ee}^{(d)} + \epsilon_{hh}^{(d)} + \epsilon_{eh}^{(d)}$ は収束する. 実際、 $\lambda \lesssim 0.01$ ですでに収束している.

他の 6 つの積分 $\epsilon_{eh}^{(e)}, \epsilon_{ee}^{(e)}, \epsilon_{hh}^{(e)}, \epsilon_{sa}, \epsilon_{sb}, \epsilon_r$ は、 $\lambda \lesssim 0.01$ でそれぞれほとんど収束しており、 $\lambda \rightarrow 0$ で発散を示さない.

結論として $E_{32} = \epsilon_{ee}^{(d)} + \epsilon_{hh}^{(d)} + \epsilon_{eh}^{(d)} + \epsilon_{ee}^{(e)} + \epsilon_{hh}^{(e)} + \epsilon_{eh}^{(e)} + \epsilon_{sa} + \epsilon_{sb} + \epsilon_r$ はほとんど $\epsilon_{ee}^{(d)} + \epsilon_{hh}^{(d)} + \epsilon_{eh}^{(d)}$ に等しい. 有効数字 2 桁で言えば、 $E_{32} = 0.015 r_s$ である.

以上まとめると $O(r_s)$ までの1電子あたりの相関エネルギー $\epsilon_c(r_s)$ の高密度展開は次のように与えられる.

$$\begin{aligned}\epsilon(r_s) &\equiv 2.21r_s^{-2} - 0.916r_s^{-1} + \epsilon_c(r_s) \\ \epsilon_c(r_s) &= 0.0622\ln r_s - 0.0938 + 0.0184r_s\ln r_s - 0.020r_s + O(r_s^2\ln r_s, r_s^2).\end{aligned}\quad (52)$$

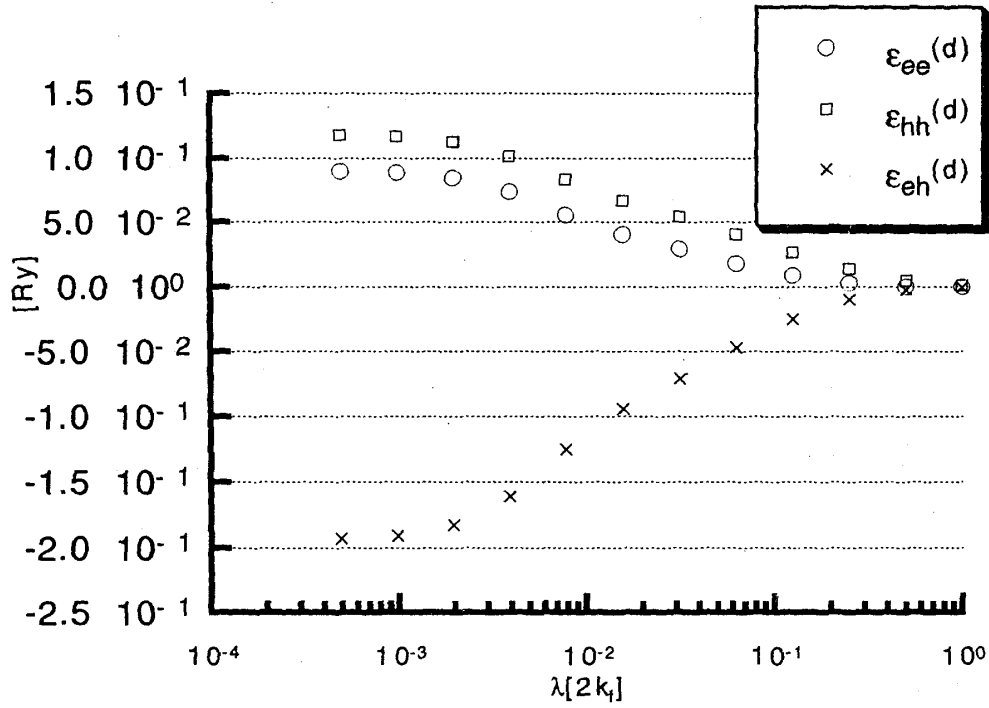


図 4: E_{32} の $c_{ee}^{(d)}$, $c_{hh}^{(d)}$, $c_{eh}^{(d)}$ の λ 依存性

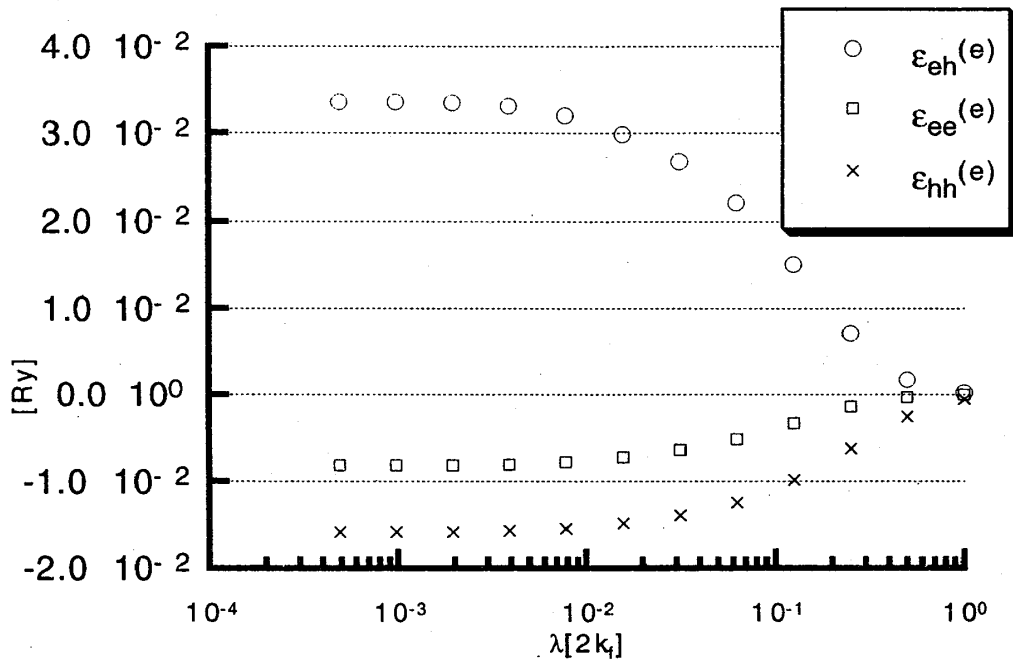


図 5: E_{32} の $\epsilon_{eh}^{(e)}$, $\epsilon_{ee}^{(e)}$, $\epsilon_{hh}^{(e)}$ の λ 依存性

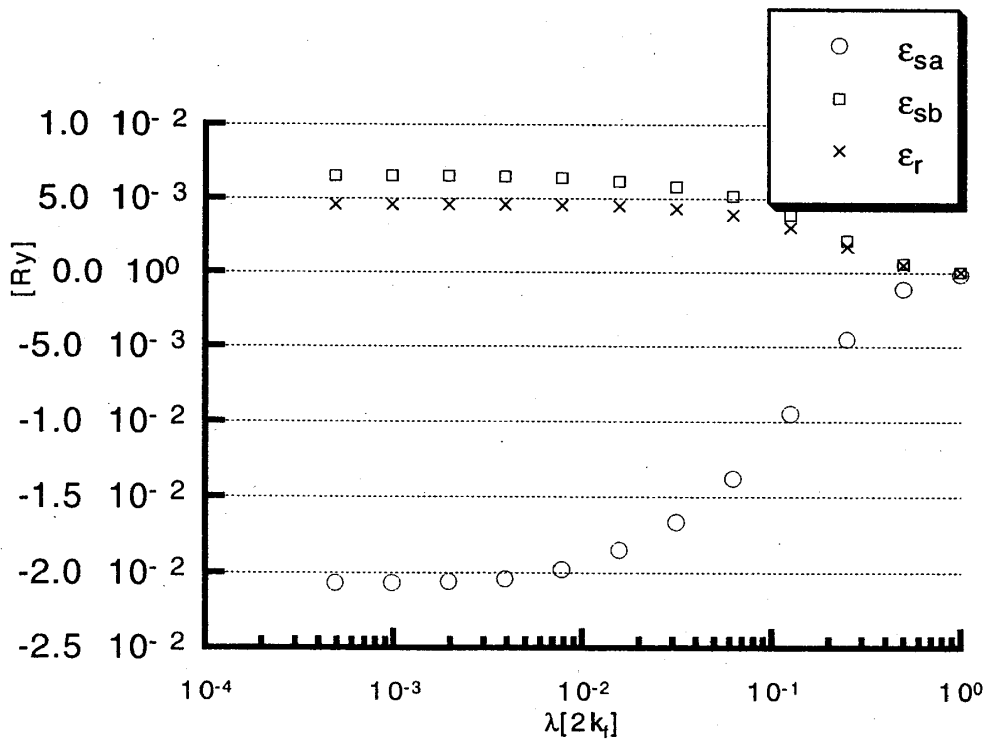
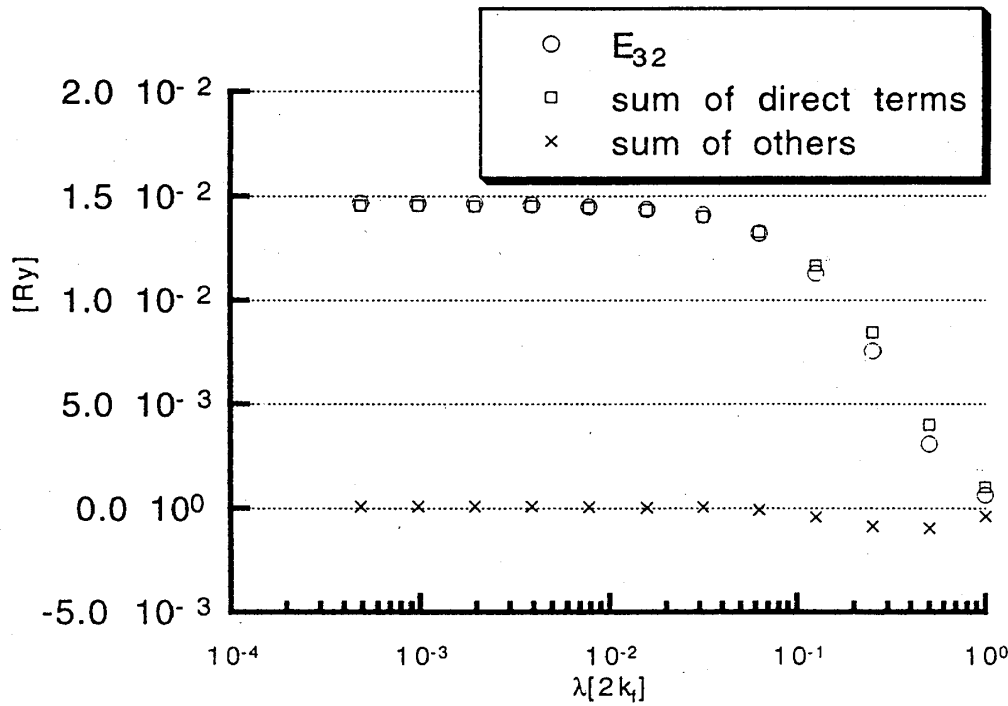


図 6: E_{32} の ϵ_{sa} , ϵ_{sb} , ϵ_r の λ 依存性


 図 7: E_{32} の直接散乱項の和, その他の和の λ 依存性

6 高密度からの金属密度領域への外挿

この節では、先に得られた $O(r_s)$ までの r_s 展開の正確な表式を全金属密度領域 ($2 \lesssim r_s \lesssim 6$) でも有効な形に外挿する。すなわち全金属密度領域を通じて1電子あたり0.5mRyの精度で与えられている $\epsilon_c(r_s)$ の数値に最も良くフィットする形を考案する。様々な外挿形が可能であるが、下記の形は単純でその物理的内容がわかりやすい。高密度展開との関係が明らかになるように、係数が明示してある。

$$\epsilon_c(r_s) = \left(0.0622 + \frac{0.0184 r_s}{1 + b r_s} \right) \ln \left(\frac{r_s}{1 + a r_s} \right) + \frac{-0.0938}{1 - (1/0.0938)\{0.020 - 0.0622a\}r_s}, \quad (53)$$

$$a = 1.13, b = 0.202. \quad (54)$$

上記のパラメーター a, b の値は $r_s = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ で評価された $\epsilon_c(r_s)$ の数値に最も良くフィットするように選ばれたものである。 $\epsilon_c(r_s)$ の値として末広の学位論文 [14] のものを採用した。

$$\epsilon_c(1) = -118.9, \epsilon_c(2) = -88.7, \epsilon_c(3) = -73.2,$$

$$\epsilon_c(4) = -63.3, \epsilon_c(5) = -56.3, \epsilon_c(6) = -51.0.$$

単位は mRy である。

図 8 に上記の外挿公式を用いた $\epsilon_c(r_s)$ の値が r_s の関数として描かれている。フィットするべき $\epsilon_c(r_s)$ との誤差は全金属密度領域を通じて 0.5mRy 以下である。(52) の r_s 展開の値も描かれている。

上記の外挿公式の物理的意味について述べておこう。 r_s 展開中の $\ln r_s$ および $r_s \ln r_s$ の出現は元来高密度での遮蔽効果に起因する。高密度では遮蔽距離を特徴づける量はトーマスフェルミ波数

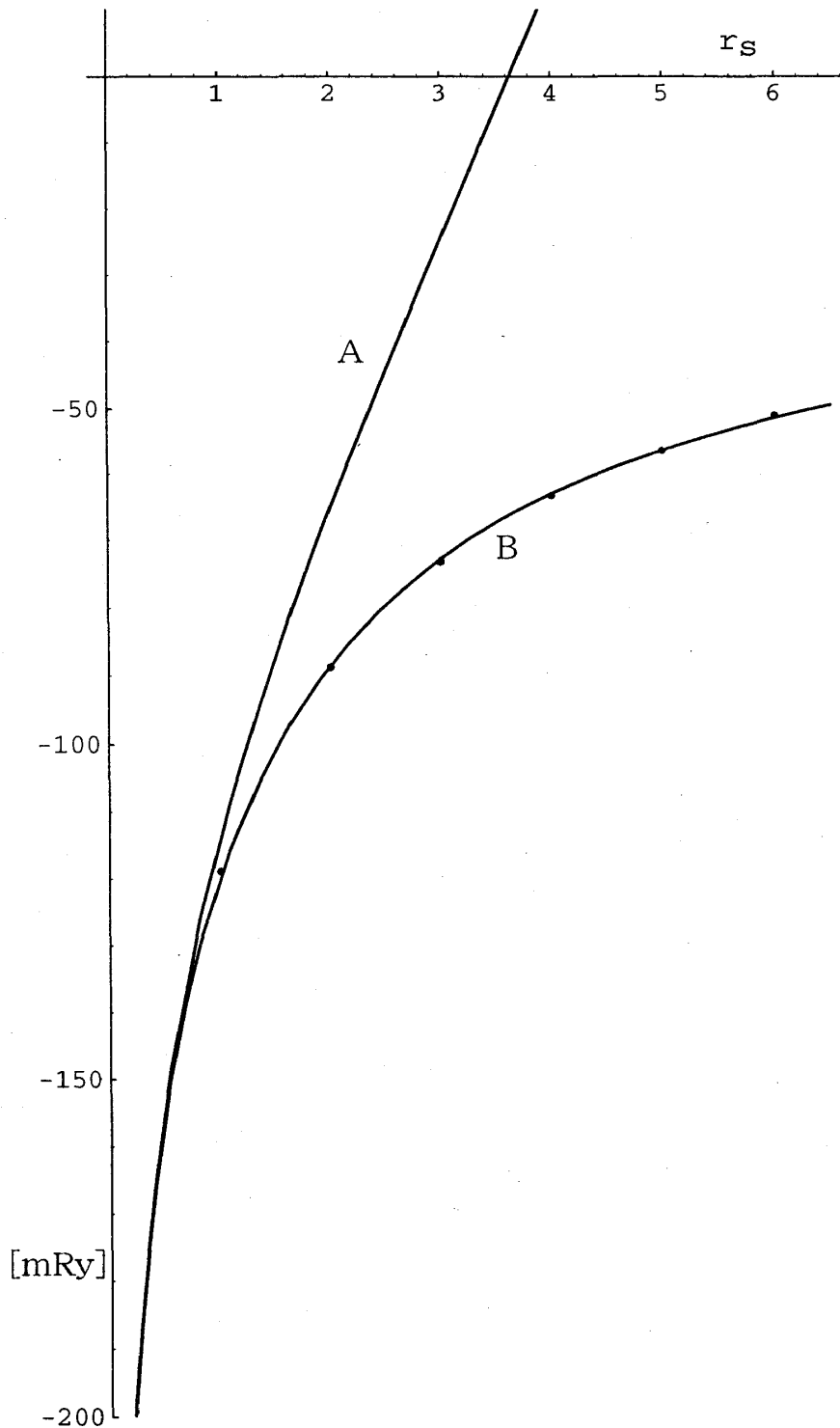


図 8: A : 高密度展開, B : 高密度展開の金属密度領域への外挿公式

k_{TF} である。 k_f の単位で $k_{TF}/k_f = \sqrt{4\alpha r_s/\pi}$ となる。すなわち $r_s \ll 1$ では、遮蔽距離は粒子間平均距離で測った場合 $\sqrt{\pi/(4\alpha r_s)}$ 程度で1より十分大きい。しかし r_s が金属密度領域に増加するにしたがって $\sqrt{\pi/(4\alpha r_s)} < 1$ となり、遮蔽距離が粒子間距離より小さくなる不都合を生ずる。すなわち、金属密度での k_{TF} の値の使用は遮蔽効果の過大評価をまねく。そこで対数変数中の r_s を $r_s/(1 + a r_s)$ で置き換える。この置き換えは遮蔽効果の金属密度での過大評価を実質的に修正し

ている。

定数項 (-0.0938) も金属密度領域に適用すればやはり過大評価をまねく。上記の対数変数の置き換えから生ずる変化を考慮し、正しい $O(r_s)$ の値 ($-0.020r_s$) を再現するように分母の形で定数項を補正している。

$r_s \ln r_s$ の係数 0.0184 を, $0.0184/(1 + b r_s)$ で置き換える操作も実質的に、金属密度での過大評価を抑える役割を果たしている。

従来相関エネルギー $\epsilon_c(r_s)$ に対して様々な内挿公式が提案されている。上記の高密度からの外挿公式は r_s 展開を $O(r_s)$ まで正確に再現するばかりでなく、金属密度領域への単純かつスムーズな精度の良い外挿公式となっていることを強調したい。

参考文献

- [1] D. Pines, The Many-Body Problem (Benjamin, 1962).
- [2] W. J. Carr, Jr. and A. A. Maradudin, Phys. Rev. **133**, A371, (1964).
- [3] W. Mäcke, Z. Naturforsch **5a**, 192, (1950).
- [4] M. Gell-Mann and K. A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364, (1957).
- [5] L. Onsager, L. Mittag and M. J. Stephan, Ann. Phys. (Leipzig) **18**, 71, (1966).
- [6] D. F. DuBois, Ann. Phys. (N.Y.) **7**, 174, (1959).
- [7] D. M. Ceperley and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566, (1980).
- [8] S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. **58**, 1200, (1980).
- [9] L. J. Lantto, Phys. Rev. **B22**, 1380, (1980).
- [10] J. G. Zabolitzky, Phys. Rev. **B22**, 2353, (1980).
- [11] E. Krotscheck, Ann. Phys. (N.Y.) **155**, 1, (1984).
- [12] K. Enrich and J. G. Zabolitzky, Phys. Rev. **B30**, 2049, (1984).
- [13] Y. Takada, Phys. Rev. **B35**, 6923, (1987).
- [14] 末広晴彦, 学位論文 (北海道大学) (1987).
- [15] H. Yasuhara, H. Suehiro and Y. Ousaka, J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 4045, (1988).
- [16] G. G. Hoffman, Phys. Rev. **B45**, 8730, (1992).
- [17] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. **B45**, 13244, (1987).
- [18] R. D. Mattuck, A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem (McGraw-Hill, 1976).