

K.A.Brueckner: 多体問題に於ける或る topics

宗 田 敏 雄 (教育大)

Brueckner は身体の大い、精力的な、直観の鋭い物理学者で correlated crystal の理論で固体 He^3 の極めて新しい多体問題の扱いを発表すると共に液体 He^3 の性質に関して彼の one parameter K matrix が Landau 理論より、first principle の点から秀れていることを、stationary な性質と輸送係数とを結びつけて示した。この他に原子核の核構造理論の現状と云う話も行つた。ここでは一番最初のものの説明をしようと思う。但しこの話は Progress の Supplement (1965) Extra 383 ~ 399 に出ているのを少しくわしくしたものであることを注意しておく。

今固体の性質、特にエネルギーを問題にしているが、 He^3 を除く他の crystal では semi classical treatment で色々な性質が良く説明される。今点 $\vec{r}_i$ でのポテンシャル・エネルギーを

$$V(\vec{r}_i) = \sum_{j \neq i} v(\vec{r}_i - \vec{R}_j) \quad (1)$$

とする。ここで $\vec{R}_j$ は格子中の他の原子の位置を表わし、 $v(\vec{r}_{ij})$ は原子 i と原子 j との間のポテンシャルエネルギーである。 $V(\vec{r}_i)$ を格子点 $\vec{R}_i$ で展開して

$$V(\vec{r}_i) = V(\vec{R}_i) + \alpha(\vec{r}_i - \vec{R}_i)^2 + \dots \quad (2)$$

として最初の二項を取ると、single particle states は harmonic oscillator になる。これが semiclassical treatment である。

もつと正確には、wave function を

$$\Psi(1, \dots, N) = \prod_i \phi(\vec{r}_i - \vec{R}_i) \quad (3)$$

と取つて全エネルギーの期待値

$$E = N \int \phi^\dagger(\vec{r}) T(\vec{r}) \phi(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{N}{2} \sum_{i,j} \int \phi^2(\vec{r}_i - \vec{R}_i) \phi^2(\vec{r}_j - \vec{R}_j) v(\vec{r}_{ij}) d\vec{r}_i d\vec{r}_j \quad (4)$$

を $\delta E / \delta \varphi = 0$ と変分して

φ に対する方程式

$$[T(r) + V_H(r)] \varphi(r) = \epsilon \varphi(r) \quad (5)$$

と Hartree ポテンシャル

$$V_H(r) = \sum_j \int \varphi(\vec{r}_j - \vec{R}_j)^2 v(r - r_j) dr_j \quad (6)$$

を得る。もしも波動函数 φ が localize されていると、即ち $\varphi(\vec{r}_j - \vec{R}_j)^2 \simeq \delta(\vec{r}_j - \vec{R}_j)$ とすると(6)は(1)と同じになり semiclassical の結果と同じになる。

上記の処方、Shaw と Nosanow 達と、Rosenwald によつて用いられた。彼らの φ の選び方は $\vec{p} = \vec{r}_i - \vec{R}_i$ として、

$$\varphi(\vec{p}) = \varphi_0(p) + \varphi_4(p) K_4(\hat{p}) \quad (7)$$

で K_4 はオー-Kubic Harmonic と

$$K_4(\hat{p}) = \frac{x^4 + y^4 + z^4}{r^4} - \frac{3}{5} \quad (8)$$

である。これらの計算は He^3 に対して、実験で得られた nearest neighbor spacing 3.70 Å に対してなされ、Shaw と Nosanow は 35 calories per mole Rosenwald は 32 calories per mole を値を得たが、実験値が -1.14 calories なので 33 calories の差がある。この independent particle の計算と実験値との差が correlation エネルギーで、これが極めて大きいのが He^3 に unique であつて、他の重い noble gas では、単に semiclassical な結果への small correction であつたし、水素のような他の固体でも全エネルギーに較べて小さかつた。

この He^3 での correlation エネルギーの大きい原因は、比較的弱い力と小さな原子質量であつて、これらが零点運動を格子点附近に引き起す。従つて correlation の効果を系の波動函数にとり入れることが極めて重要なことになる。

今、次の trial function を考える。

$$\psi(1, \dots, N) = \prod_i \varphi(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i) \prod_{i < j} f_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \quad (9)$$

ここで correlation function $f(\vec{r}_{ij})$ は格子点の距離 $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_i - \vec{R}_j$ と $\vec{R}_{ij}$ と $\vec{r}_{ij}$ の間の角度に一般に依存する。(9)では反対称化していないが、single particle の localization が十分にあれば particle overlap は省略するか又は摂動として扱える。

次に cluster 展開を行う。今 ψ を real して次の恒等式

$$\begin{aligned} \int \psi \nabla_i^2 \psi d\mathbf{r}_i &= \frac{1}{2} \int [\psi \nabla_i^2 \psi - (\nabla_i \psi)^2] d\vec{r}_i \\ &= \frac{1}{2} \int [\psi^2 \nabla_i^2 \log \psi] d\vec{r}_i \end{aligned} \quad (10)$$

を用いると、運動エネルギーの期待値は

$$\langle T \rangle = \sum_i -\frac{\hbar^2}{4m} \frac{\int \psi^2 \nabla_i^2 \log \psi d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}{\int \psi^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N} \quad (11)$$

と書ける。(9)を用いると全エネルギー E は

$$\begin{aligned} E &= E_0 + E' \\ E_0 &= -\frac{\hbar^2}{4m} \frac{\int \psi^2 (\sum_i \nabla_i^2 \log \varphi_i) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}{\int \psi^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N} \\ E' &= \sum_{i < j} \frac{\int \psi^2 V_{ij} d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}{\int \psi^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N} \end{aligned} \quad (12)$$

となり、ここに

$$V_{ij} = v(\mathbf{r}_{ij}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{ij}^2 \log f_{ij}(\vec{r}_{ij}) \quad (13)$$

である。

非常に便利な φ に対する近似は $\nabla_i^2 \ln \varphi_i = \text{const.}$ にすることで、規格化して

$$\varphi(|\vec{r}_i - \vec{R}_i|) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2} |\vec{r}_i - \vec{R}_i|^2\right) \quad (14)$$

と取ればよい。

$$\text{すると } E_0 = \frac{3\hbar^2}{4m} \alpha^2 \text{ となり}$$

$$E' = E - E_0 = \left[\frac{\partial}{\partial r} \ln W(r) \right]_{r=0} \quad (15)$$

と書ける。ここに

$$W(r) = \int \varphi_1^2 \cdots \varphi_N^2 \prod_{i < j} g_{ij}(r) d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \quad (16)$$

で

$$g_{ij}(r) = \exp(r V_{ij} + \log f_{ij}^2) \quad (17)$$

である。ここで $W(r)$ について cluster 展開を行う。 i, j 等の pair を $\alpha, \beta, \dots$ で書き、

$$\langle g_\alpha g_\beta \cdots \rangle = \int \varphi_1^2 \cdots \varphi_N^2 d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N (g_\alpha g_\beta \cdots) \quad (18)$$

と書くと

$$W(r) = \langle \prod_\alpha g_\alpha \rangle$$

となり、これを particle pair, triplet, etc. の積で書く為に

$$P_1(\alpha) = \langle g_\alpha \rangle, P_2 = \frac{\langle g_\alpha g_\beta \rangle}{P_1(\alpha) P_1(\beta)}, \dots, P_n = \frac{\langle g_\alpha g_\beta \cdots \rangle}{\prod P_{n-1} \prod P_{n-2} \cdots \prod P_1}$$

とすると

$$\begin{aligned} W(r) &= \prod_\alpha P_1(\alpha) \left[\frac{\langle \prod_\alpha g_\alpha \rangle}{\prod_\alpha P_1(\alpha)} \right] = \prod_{\alpha\beta} P_2(\alpha\beta) \left[\frac{\langle \prod_\alpha g_\alpha \rangle}{\prod_{\alpha\beta} P_2(\alpha\beta) \prod_\alpha P_1(\alpha)} \right] \\ &= \prod_{\alpha\beta} P_1(\alpha) \prod_{\alpha\beta} P_2(\alpha\beta) \prod_{\alpha\beta\gamma} P_3(\alpha\beta\gamma) \cdots \prod_{\alpha\beta\gamma} P_n(\alpha\beta\gamma \cdots) \end{aligned} \quad (20)$$

となる。するとエネルギー E' は

$$E' = \sum_{\alpha} E_1(\alpha) + \sum_{\alpha\beta} E_2(\alpha\beta) + \dots \quad (21)$$

となり

$$E_n = \left[\frac{1}{P_n(r)} \frac{\partial}{\partial r} P_n(r) \right]_{r=0} \quad (22)$$

となる。今

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} g_{\alpha} g_{\beta} g_r \dots \right]_{r=0} = (V_{\alpha} + V_{\beta} + \dots) (f_{\alpha}^2 f_{\beta}^2 f_r^2 \dots) \quad (23)$$

に注意すると

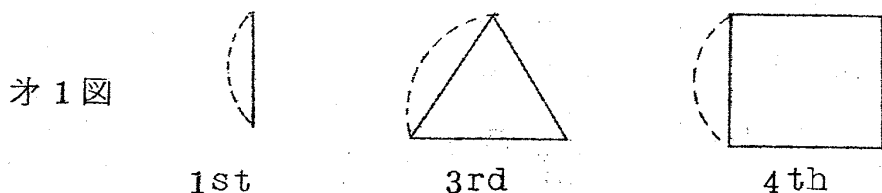
$$E_1(\alpha) = \frac{\langle f_{\alpha}^2 V_{\alpha} \rangle}{\langle f_{\alpha}^2 \rangle} \quad (24)$$

$$E_2(\alpha\beta) = \frac{\langle f_{\alpha}^2 f_{\beta}^2 (V_{\alpha} + V_{\beta}) \rangle}{\langle f_{\alpha}^2 f_{\beta}^2 \rangle} - E_1(\alpha) - E_1(\beta) \quad (28)$$

$$E_3(\alpha\beta r) = \frac{\langle f_{\alpha}^2 f_{\beta}^2 f_r^2 (V_{\alpha} + V_{\beta} + V_r) \rangle}{\langle f_{\alpha}^2 f_{\beta}^2 f_r^2 \rangle} - E_2(\alpha\beta) - E_2(\alpha r) - E_2(\beta r) \\ - E_1(\alpha) - E_1(\beta) - E_1(r)$$

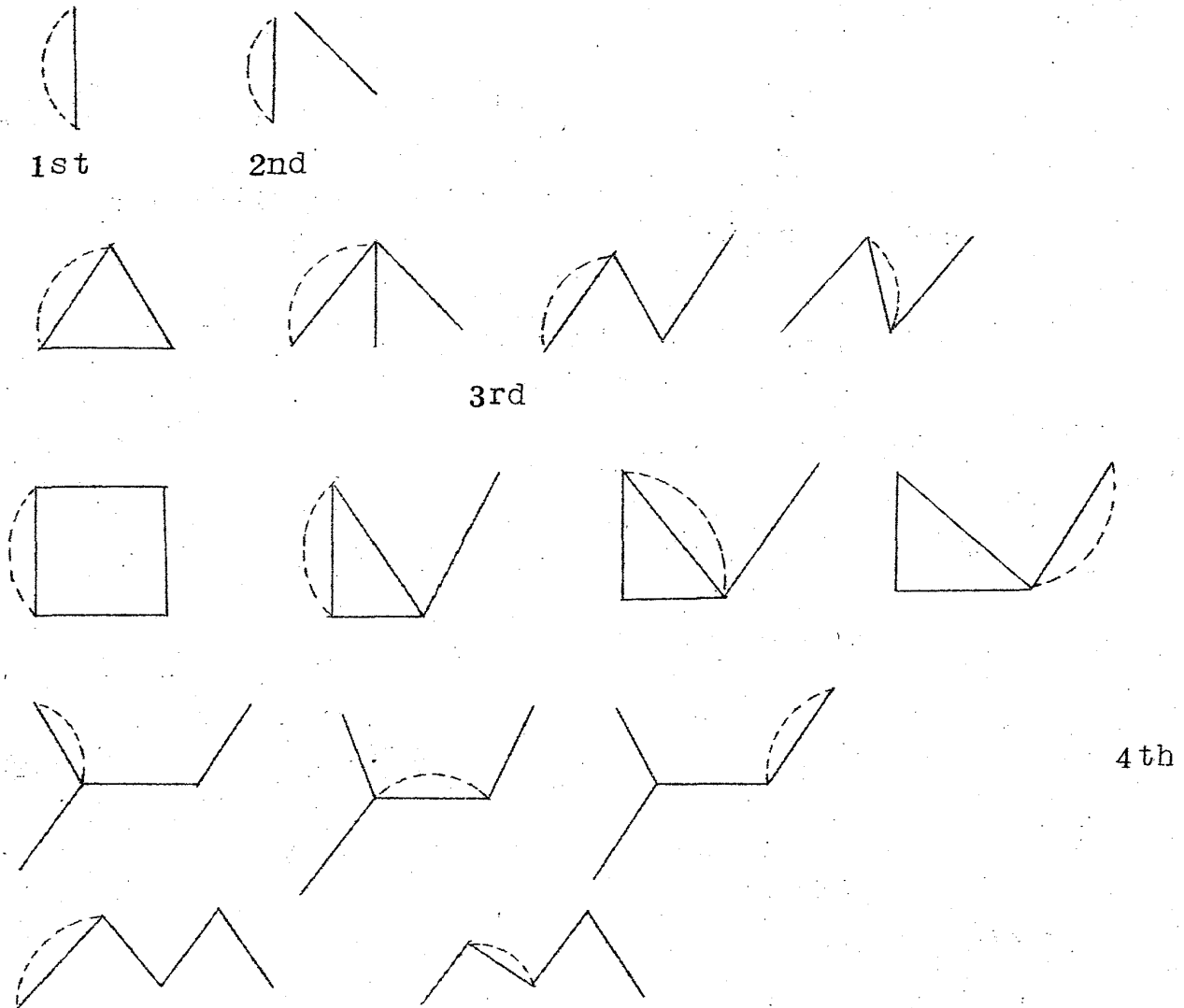
...

である。固体に特徴的なことは、気体と液体では translational invariance E_2 の項は 0 であるのに、 $E_2 \neq 0$ と云うことである。図示すれば、才 1 図では気体と液体での cluster expansion を与える。



ここに実線は correlation factor f^2 で点線は相互作用である。同様に crystal に対しては、才 2 図で示せる。

才 2 図



次いで cluster 展開の近似に移る。この問題では cluster 展開の急速な収束が期待される。と云うのは crystal では粒子の localization から、粒子は crystal の近傍に存在する粒子とだけ強い相互作用をするからである。
才一近似は

$$E' = E - E_0 \doteq \sum_{\alpha} E_1(\alpha) \quad (27)$$

$$(E - E_0)_1 = \frac{1}{2} \sum_{12} \frac{\langle f_{12}^2 V_{12} \rangle}{\langle f_{12}^2 \rangle}$$

$$= \frac{1}{2} \varepsilon_{12} \int d\vec{r} g_{12}(r) f_{12}^2(r) (v(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \log f_{12}) \quad (28)$$

で

$$g_{12}(r) = \frac{\alpha^3}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[-\frac{\alpha^2}{2} (\vec{r} - \vec{R}_{12})^2\right] \quad (29)$$

で与えられる。(28)の近似で f_{12} への最良解は (28)を最小にして求める。その為に $u_{12}(r) = f_{12}(r) g_{12}^{1/2}(r)$ とすると、

$$(\mathbb{E} - \mathbb{E}_0)_1 = \frac{1}{2} \varepsilon_{12} \int dr u_{12}^2(r) \left[v(r) + \frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 \log g_{12} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \ln u_{12} \right] \quad (30)$$

となり、これを最小にして u_{12} に対する式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + v(r) - \frac{3\hbar^2 \alpha^2}{4m}\right) u_{12} = \varepsilon_{12} u_{12} \quad (31)$$

を得る。これを解くと、 a を $v(r)$ の scattering length とする。

$$f(r) = \left(1 - \frac{a}{r}\right) \exp\left[\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} - \vec{R}_{12})^2\right] \times \text{const.} \quad (32)$$

となり、correlation function が short range と云うこととムジユンしている。この原因は、1次の計算では、crystal 中の他の粒子の効果が入つて来ないからである。これを入れるのには2次のエネルギー $(\mathbb{E} - \mathbb{E}_0)_2$ を最小にするように、 $u_{12}(r) = f_{12}(r) [g_{12}(r)]^{1/2}$ を取ると、 u_{12} は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + v + H_{12} + \frac{\hbar^2}{4m} \nabla^2 \log g_{12}\right) u_{12} = \varepsilon_{12} u_{12} \quad (33)$$

で

$$H_{12}(r) = \left[\int d\vec{R} \varphi^2(r_1 - R_1) \varphi^2(r_2 - R_2) \sum_{K=1,2} \int d\vec{r}_K \varphi^2(\vec{r}_K - \vec{R}_K) \right. \\ \left. (f_{1K}^2 V_{1K} + f_{2K}^2 V_{2K}) \right] [g_{12}(r)]^{-1} \quad (34)$$

は粒子1, 2と crystal 中の残りの粒子Kとの相互作用を表わす。

所で上記の方程式は Rayleigh-Schrödinger のセツ動論からも出て来ることを示そう。今 total Hamiltonian H を

$$H = H_0 + H' = \sum_i (T_i + V_i) + \left(\frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} - \sum_i V_i \right) \quad (35)$$

と書く。ここに V_i は粒子 i に対する Hartree potential である。今才二項 H' をセツ動として扱う。

$$(T + V_i) \varphi_n(i) = \epsilon_n \varphi_n(i) \quad (36)$$

をセツ動の基礎状態と取ると

$$E^{(0)} = N \epsilon_0 \quad (37)$$

$$E^{(1)} = \langle H' \rangle \quad (38)$$

$$E^{(2)} = \langle H' \frac{1}{E^{(0)} - H^{(0)}} H' \rangle \quad (39)$$

$$E^{(3)} = \langle H' \frac{1}{E^{(0)} - H^{(0)}} (H' - \langle H \rangle) \frac{1}{E^{(0)} - H^{(0)}} H' \rangle \quad (40)$$

...

となる。今

$$V_i = \sum_j \int \phi_0(r_j - R_j)^2 v(r_{ij}) d\vec{r}_j \quad (41)$$

となるから

$$\sum_i \langle V_i \rangle = \sum_{ij} \langle v_{ij} \rangle \quad (42)$$

であつて

$$E^{(0)} + E^{(1)} = \sum_i \langle T_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle v_{ij} \rangle \quad (43)$$

である。今次の記号を用いると二次のエネルギーが簡単になる。

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} - \bar{v}_{ij} \quad (44)$$

ここで

$$\bar{v}_{ij} = \int \phi_0(\vec{r}_i - \vec{R}_i)^2 v(r_{ij}) d\vec{r}_i + \int \phi_0(\vec{r}_j - \vec{R}_j)^2 v(r_{ij}) d\vec{r}_j \quad (45)$$

である。すると

$$E_1 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle v'_{ij} \rangle \quad (46)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle v'_{ij} \frac{1}{2\epsilon_0 - H_0(i) - H_0(j)} v'_{ij} \rangle \quad (47)$$

今 v'_{ij} を含む数列を加えると

$$\sum_{n=1}^{\infty} E_n = \frac{1}{2} \sum_{ij} \Delta \epsilon_{ij} \quad (48)$$

であり、ここに

$$\Delta \epsilon_{12} = \langle K_{12} \rangle \quad (49)$$

で

$$K_{12} = v'_{12} + \frac{v'_{12} (1 - P_0) K_{12}}{2\epsilon_0 - H_0(1) - H_0(2) + \Delta \epsilon_{12}} \quad (50)$$

となる。ここに P_0 は ground state への射影で

$$\Delta \epsilon_{12} = \int \varphi_0(1) \varphi_0(2) v'_{12} \psi_{12} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (51)$$

で

$$\psi_{12} = \varphi_0(1) \varphi_0(2) + \frac{1 - P_0}{2\epsilon_0 - H_0(1) - H_0(2) + \epsilon_{12}} v'_{12} \psi_{12} \quad (52)$$

である。 ψ_{ij} の規格は次の通りである。

$$\int \varphi_0(1) \varphi_0(2) \psi_{12} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 1 \quad (53)$$

ψ_{ij} の従う方程式は (52) から、

$$[H_0(1) + H_0(2) + v'_{12}] \psi_{12} = (2\epsilon_0 + \epsilon_{12}) \psi_{12} \quad (54)$$

或いは

$$[T_1 + T_2 + V'_1 + V'_2 + v_{12}] \psi_{12} = (2\epsilon_0 + \epsilon_{12}) \psi_{12} \quad (55)$$

であつてここに

$$V_1 = \sum_{K \neq 12} \int \phi(\vec{r}_K - \vec{R}_K)^2 v(\vec{r}_1 - \vec{r}_K) d^3 r_K \quad (56)$$

$$V_2 = \sum_{K \neq 12} \int \phi(\vec{r}_K - \vec{R}_K)^2 v(\vec{r}_2 - \vec{r}_K) d^3 r_K \quad (57)$$

となる。もし H_{12} への correlation を省略すると、 $V_1 + V_2$ の和は (34) の H_{12} と同じになる。従つて cluster 展開の最初の二項についての変分計算はセツ動論の範囲での pair interaction の ladder sum と等しいことが解る。

近似をして pair equation (33) の簡単化を次に考えよう。方程式 (34) の分母に現われる g_{12} を 1 で置き換え、 H_{12} に現われている correlation function の状態と角度依存性を落す。そして今

$$L_{1k} = f_{1k}^2 V_{1k} \quad (58)$$

$$L_{2k} = f_{2k}^2 V_{2k} \quad (59)$$

とすると、 $H_{12}(\mathbf{r})$ は

$$H_{12}(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} a^3 \sum_{K \neq 12} \int d\mathbf{R} d\mathbf{r}_K \exp \left[-2a^2 \left(\vec{R} - \frac{1}{2}\vec{R}_1 - \frac{1}{2}\vec{R}_2 \right)^2 \right] \\ \times \phi^2(\mathbf{r}_K - \mathbf{R}_K) \left[L\left(\vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r}_K\right) + L\left(\vec{R} - \frac{1}{2}\vec{r}_K - \vec{r}_K\right) \right] \quad (60)$$

となる。今、次の格子点の nearest neighbor を考える。

$$\mathbf{R}_1 = (0, 0, 0)$$

$$\mathbf{R}_2 = (1, 1, 1)$$

今 35 気圧で与えられる、 $3.70\text{\AA}$ の He^3 の lattice constant を単位として距離を測るものとする。上の二点への nearest neighbor は

$$(1, -1, 1), (-1, 1, 1), (1, 1, -1)$$

$$(1, -1, -1), (-1, 1, -1), (-1, -1, 1), (-1, -1, -1)$$

$$(0, 2, 2), (2, 0, 2), (2, 2, 0)$$

$$(2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2), (2, 2, 2)$$

である。今二つのベクトル

$$\vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r} - \vec{r}_K = \vec{S} \quad (61)$$

$$\vec{r}_K - \vec{R}_K = \vec{r} \quad (62)$$

を導入すると、(60)が積分出来て

$$H_{12}(r) = 2 \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} \alpha \int_{-\infty}^{\infty} ds \, s L(s) \Sigma_K \frac{\exp \left[-\frac{2}{3} \alpha^2 \left(s - \left| \frac{\vec{r}}{2} - \vec{q}_K \right| \right)^2 \right]}{\left| \frac{\vec{r}}{2} - \vec{q}_K \right|} \quad (63)$$

となる。そして $H_{12}(r)$ を Legendre 展開して

$$\frac{\exp \left[-\frac{2}{3} \alpha^2 \left(s - \left| \frac{\vec{r}}{2} - \vec{q}_K \right| \right)^2 \right]}{\left| \frac{\vec{r}}{2} - \vec{q}_K \right|} = \Sigma_l \beta_l(r, q_K, s) P_l(\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{q}}_K) \quad (64)$$

を行なう。ここに $\vec{q}_K$ は

$$\frac{1}{2} (1, 1, -3), \frac{1}{2} (1, -3, 1), \frac{1}{2} (-3, 1, 1),$$

$$\frac{1}{2} (1, -3, -3), \frac{1}{2} (-3, 1, -3), \frac{1}{2} (-3, -3, 1),$$

$$\frac{1}{2} (3, 3, 3)$$

と、この反対のベクトルに及ぶ。今 $(1, 1, 1)$ 軸上の単位ベクトル

$$\hat{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, 1, 1)$$

をとつて ψ を $\hat{n}$ 軸の azimuthal angle とすると、

$$P_l(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{q}}_K) = \Sigma_m (2 - \delta_{m,0}) \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\hat{\vec{r}} \cdot \hat{n}) P_l^m(\hat{n} \cdot \hat{\vec{q}}_K) \times \cos m\psi \quad (65)$$

の展開を考える。一般 $H_{12}(\vec{r})$ は azimuthally に symmetric ではないが、格子点の間の azimuthal variation は小さいことが He^3 の場合は調べられているので、ここでは (65) で $m = 0$ だけを取る。すると $H_{12}(\vec{r})$ は

$$H_{12}(\vec{r}) = \sum_{l, \text{even}} H_l(r) P_l(\hat{r} \cdot \hat{n}) \quad (66)$$

と書けて、

$$H_l(r) = 2\alpha \left(\frac{2}{3\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} ds s L(s) \sum_{|q_K|} N_K \beta_l(s, r, sK) P_l(\hat{q}_K \cdot \hat{n}), \quad (67)$$

となる。 N_K は $|q_K|$ に依存する constant である。元の微分方程式に戻ると

$$[\theta(r) + \sum_{l, \text{even}} H_l(r) P_l(\hat{r} \cdot \hat{n})] u(\vec{r}) = 0 \quad (68)$$

となり、ここで

$$\theta(r) = -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + v(r) - \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - \epsilon \quad (69)$$

である。今

$$u(r) = \sum_l \frac{S_l(r)}{r} P_l(\hat{r} \cdot \hat{n}) \quad (70)$$

とすると、(68) 式は

$$\theta_l(r) S_l + \sum_{l', l''} C(l' l'' 00 | l 0) H_{l'} S_{l''} = 0 \quad (71)$$

となり、 $\theta_l(r)$ は

$$\theta_l(r) = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + v(r) - \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - \epsilon \quad (72)$$

である。

どの l value まで寄与があるかを correlation 無しの $u^{(0)}$ から調べると l は 0 から 8 ~ 10 までであるが、strong correlation $= 0$ と $l = 1$ にあるから、それだけは correlation を入れて、それより高い l の場合には 0 次の $S_l^{(0)}$ を取る。0 次の対称、非対称の解は

$$u_{\text{symm}}^{(0)} = \frac{1}{2^{1/2}} \left(\frac{\alpha^2}{2\pi} \right)^{3/4} \left\{ \exp \left[-\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} - R_{12} \hat{n})^2 \right] + \exp \left[-\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} + R_{12} \hat{n})^2 \right] \right\} \quad (73)$$

$$u_{\text{antisymm}}^{(0)} = \frac{1}{2^{1/2}} \left(\frac{\alpha^2}{2\pi} \right)^{3/4} \left\{ \exp \left[-\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} - R_{12} \hat{n})^2 \right] - \exp \left[-\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} + R_{12} \hat{n})^2 \right] \right\} \quad (74)$$

となる。粒子の localization に対応して、 R_1 と R_2 の格子点附近に存在する解は

$$u^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_{\text{symm}}^{(0)} + u_{\text{antisymm}}^{(0)}) \quad (75)$$

これから

$$\frac{S_l^{(0)}}{r} = \frac{1}{2^{1/2}} \left(\frac{\alpha}{2\pi} \right)^{3/4} (2l+1) \int_{-1}^1 d\mu \exp \left[-\frac{\alpha^2}{4} (\vec{r} - R_{12} \hat{n})^2 \right] P_l(\mu) \quad (76)$$

となる。これを用いて

$$\theta_0 S_0 + H_0 (S_0 - S_0^{(0)}) + \sum_l C(l 1 0 0 | 1 0) H_l S_0^{(l)} = 0 \quad (77)$$

$$\begin{aligned} \theta_1 S_1 + [H_0 + C(1 2 0 0 | 1 0) H_2] (S_1 - S_1^{(0)}) \\ + \sum_l \sum_{l'} C(l l' 0 0 | 1 0) H_{l'} S_l^{(0)} = 0 \end{aligned} \quad (78)$$

これが S_0 と S_1 を定める方程式である。この数値解については後の publication に発表する予定であるが、ここでは二、三の注意をしよう。

(68)式の構造から困難について注意しよう。 $H_{12}(\vec{r})$ は $\hat{r}$, $\hat{r}$ の非対称関数なので、二つの $u^{(+)}$ と $u^{(-)}$ の組の解がある。そしてそれらは一般には異なった固有値 ϵ^+ と ϵ^- を持つ。この二つの解は粒子 1 と 2 がそれぞれ $\vec{R}_1$ と $\vec{R}_2$ または $\vec{R}_2$ と $\vec{R}_1$ の附近に存在する振巾を各々等しく (又は符号反対で) 加えたものになっている。所で粒子 1 が $\vec{R}_1$ の近くで、粒子 2 が $\vec{R}_2$ の近くに在る解は上記の二つの解の混合で

$$u(\vec{r}_{12}, t=0) = \frac{u^+ + u^-}{\sqrt{2}} \quad (79)$$

になっている、時間 t 経つと、

$$u(\vec{r}_{12}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u^+ \exp(-i \frac{\epsilon^+}{\hbar} t) + u^- \exp(-i \frac{\epsilon^-}{\hbar} t)] \quad (80)$$

従つて $\epsilon^+ = \epsilon^-$ の時だけ、粒子は最初の格子点に localize している。もし $\epsilon^+ \neq \epsilon^-$ だと、二粒子は格子点 1 と 2 の間で交換され、交換の割合は

$$R_{\text{ex}} = \left| \frac{\epsilon^+ - \epsilon^-}{\hbar} \right| \quad (81)$$

となり、これはもし初期の localized particle の仮定が充されるためには小さくならず、

$$|\epsilon^+ - \epsilon^-| \ll |\epsilon^+ + \epsilon^-| \quad (82)$$

がこの講義の仕事の扱い方が有効の為には充されなければならない。

最後に従へることは、correlation function に対する self consistent な解は、推察から始めて iteration で解かないとならない。全エネルギーに対する式は、single particle function に対する Gauss 型の range parameter α に依存し、その各々を変分で定めないといけない。そうするとエネルギーは密度 ρ の函数となり、lattice parameter は $E(\rho)$ を得る様に変分する。