

IV - 2. 液体金属中の一電子グリーン関数

東北大理 渡部三雄 長谷川正之

Edwards グリーン関数法を現実の液体金属に適用して電子構造を計算する試みが従来いくつかなされている (Watabe-Tanaka, Ballentine)。電子・イオン相互作用が局所的であれば、その一次の項 (diagonal term) は定数となりエネルギー原点をずらすだけであるから考慮する必要はない。更に電子・イオン相互作用の Vertex 補正が無視できるとすれば、電子の自己エネルギー $\Sigma(k, E)$ は図のグイヤグラムで表わされて、 $\Sigma(k, E)$ に対して次のような積分方程式が得られる。

$$\Sigma(k, E) = \frac{n}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \frac{|U(k' - k)|^2 a(k' - k)}{E - k'^2/2m - \Sigma(k', E)} \quad (1)$$

ここで n はイオン数密度 ($n = N/V$)、 $a(k)$ はイオン系の構造因子、 $U(k)$ は (遮蔽された) 電子・イオン相互作用の matrix element である。Ballentine は (1) の積分方程式を近似的に解いて A_0 と B_1 の電子構造を計算した。彼の近似解法は被積分関数の分母を

$$E - k'^2/2m - \Sigma(k_0, E) \quad (2)$$

で近似することである、ここで k_0 は

$$E - k_0^2/2m - \text{Re} \Sigma(k_0, E) = 0 \quad (3)$$

を満たすように定める。

我々は以前積分方程式 (1) を Ballentine が行ったような近似解法に頼らず直接 iteration で解く試みをした。その際 $U(k)$ に Ballentine と同じものを使わなかったため我々の結果はそのまま彼の結果と比較できないが、主な内容は次のようになった。 $\Sigma(k, E)$ ($\text{Re} \Sigma, \text{Im} \Sigma$ 共) は Ballentine の

結果にくらべて数倍小さい。その結果状態密度の shift もフェルミ面での運動量分布のボケも数倍小さくより自由電子的である。解く際の iteration の収束性から判断して Ballentine の解法自体はかなり良い近似であると思われる。それにもかかわらず我々の結果とかなり異なるのはこのような計算においては $U(k)$ の違い（特にその零点）が非常に微妙な効果をもつためと思われる。したがって擬ポテンシャル $U(k)$ に非局所性をとり入れることが重要であろう。またバンドの底の領域では実験的な測定困難な構造因子の長波長領域が重要であり、更に電子・イオン相互作用の Vertex 補正を無視する近似は疑問である。

このような初歩的な結果を考慮して簡単な液体金属の電子構造に関する興味は次のようにまとめられる。

- (1) 従来の計算は定量的には疑問である。したがって定量的に充分信頼できる結果を与えておく必要がある。
- (2) そのためには一般の非局所的な擬ポテンシャルに対するグリーン関数法を定式化する必要がある。
- (3) 定性的には電子構造の摂動論構造（振舞い）も興味深い。これは積分方程式を自由電子から出発して iteration で解きその各段階で電子構造の変化を追いかければよいであろう。
- (4) 同様に理論的興味としてはイオン系の構造が電子構造にどのように反映されるかを調べることである。これは種々の構造をもつモデル液体に対して電子構造の特徴を調べればよいであろう。

