

電子ガスの二体相関関数について

東北大教養 安 原 洋

(3 月 2 7 日 受 理)

§ 1. 序

金属中の伝導電子間の相互作用がおよぼす諸物理量への多体効果の数値的評価に際しては、いわゆる RPA の電媒定数やその Hubbard 型改良形が広く使われて来た。¹⁾

しかしながら RPA 電媒定数で計算された電子ガスの二体相関関数、 $g(r)$ は、 $r_s \geq 0.8$ (r_s は電子密度 ρ_0 と次の関係にある。 $\rho_0^{-1} = \frac{4}{3} \pi (a_0 r_s)^3$, a_0 ボアー半径) の場合、 r の小さい領域 ($p_F r \ll 1$) に対して負の値をとることが以前から知られている。²⁾ 二体相関関数は、その定義から確率を表わすので当然 $g(r) \geq 0$ である。

その原因は、第一に RPA による計算はパウリ原理の要請を満たしていない。すなわち、平行なスピンをもった電子間の相関関数の原点での値 $g^P(0) \equiv 0$ が保障されていない上に、反平行なスピンをもつ電子間の短距離相関が RPA にはうまく考慮されていないためである。改良された電媒定数を使って、 $g(r)$ の計算を試みている著者もいるが、本質的解決に到っていない。^{3), 4), 5)}

パウリ原理の要請を満たすには、どのような摂動計算の項を考慮すればよいかという問題は、以前から電子ガスの専門家にその処分が知られていたが、Geldart⁶⁾ が彼の論文の中で詳しく解説している。

従って興味あるのは、反平行なスピンを持った電子間の短距離相関をどのように取りこんだらよいかという問題である。この論文の目的は、従来の RPA や Hubbard 型近似などではとり入れられなかった電子間のクーロン相互作用について無限次までの多重散乱過程が互いに反平行なスピンを持った電子間の二体相関関数 $g^A(r)$ の短距離のふるまいには、本質的であること、特に原点での値 $g^A(0)$ が常に正の値をとるようにするには、どのような計算方法を行えばよいかを明らかにすることである。

§ 2. 二体相関関数の定義

通常の 0 °K での常磁性電子ガスの二体相関関数は、次のように定義される。

$$g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2} \langle \Psi_0 | \sum_i^{(\sigma)} \sum_j^{(\sigma')} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i) \delta(\mathbf{x}+\mathbf{r}-\mathbf{x}_j) | \Psi_0 \rangle \quad (2.1)$$

ここで Ψ_0 は電子ガス系の基底状態の波動関数である。 $g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})$ は、位置 $\mathbf{x}$ にスピン σ をもつ電子が存在する場合に、距離 $\mathbf{r}$ 離れた位置にスピン σ' をもつ別の電子の存在する確率を表わす。 σ, σ' は $\uparrow$ 或いは $\downarrow$ で、電子密度は、 $\rho_0 = \rho_0^\uparrow + \rho_0^\downarrow$, $\rho_0^\uparrow = \rho_0^\downarrow = \frac{\rho_0}{2}$ である。

(2.1) を密度演算子を使って書くと

$$\begin{aligned} \rho^\sigma(\mathbf{x}) &= \sum_i^{(\sigma)} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i) \\ \rho(\mathbf{x}) &= \rho^\uparrow(\mathbf{x}) + \rho^\downarrow(\mathbf{x}) \\ \rho^\sigma(\mathbf{x}) &= \rho_0^\sigma + \hat{\rho}^\sigma(\mathbf{x}) \\ g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}) &= 1 + \frac{1}{\left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2} \langle \Psi_0 | \hat{\rho}^\sigma(\mathbf{x}+\mathbf{r}) \hat{\rho}^{\sigma'}(\mathbf{x}) | \Psi_0 \rangle - \frac{2}{\rho_0} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{r}) \\ &= 1 + \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \{ S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) - \delta_{\sigma,\sigma'} \} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q})$ は

$$S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \langle \Psi_0 | \rho_{\mathbf{q}}^\sigma \rho_{-\mathbf{q}}^{\sigma'} | \Psi_0 \rangle \quad (2.3)$$

で与えられ、dynamical correlation function $S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega)$ を積分して得られる。

$$S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} S^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) &= i \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} + i\omega t} \\ &\quad \times \langle \Psi_0 | T(\hat{\rho}^\sigma(\mathbf{x}+\mathbf{r}, t+t') \hat{\rho}^{\sigma'}(\mathbf{x}, t)) | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

ここで、 T は time ordered product, $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ は Heisenberg 表示の dens-

ity fluctuation である。

今問題としている系では

$$g^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = g^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}), \quad g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = g^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r})$$

であるから、互いに平行及び反平行なスピンを持った電子間の二体相関関数を各々次のように書く。

$$g^P(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(g^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) + g^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r})), \quad g^A(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) + g^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}))$$

スピンを指定しない相関関数は

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (g^P(\mathbf{r}) + g^A(\mathbf{r}))$$

(2.2), (2.3), (2.4), (2.5) と同様に

$$g(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} (S(\mathbf{q}) - 1) \quad (2.6)$$

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{\rho_0} \langle \Psi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{\rho_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} S(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.7)$$

$$S(\mathbf{q}, \omega) = i \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} + i\omega t} \times \langle \Psi_0 | T(\hat{\rho}(\mathbf{x}-\mathbf{r}, t+t') \hat{\rho}(\mathbf{x}, t')) | \Psi_0 \rangle \quad (2.8)$$

$S(\mathbf{q}, \omega)$ の代りに電媒定数 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を使って書き変えると

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = 1 - v(\mathbf{q}) S(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.9)$$

であるから、static form factor $S(\mathbf{q})$ は電媒定数を使って次のように書ける。

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\rho_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{1}{v(\mathbf{q})} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right) \\ &= \frac{1}{v(\mathbf{q}) \rho_0 \pi} \int_0^{\infty} \text{Im} \left(\frac{-1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right) d\omega \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + v(\mathbf{q}) \pi(\mathbf{q}, \omega)$$

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad \pi(\mathbf{q}, \omega) \text{ は proper polarization part である。} \quad (2.6),$$

(2・10) から $g(\mathbf{r})$ は電子ガスの電媒定数 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を通じて表わされる。いわゆる RPA では

$$\epsilon^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + v(\mathbf{q}) \pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$$

$$\pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} G^{(0)}(\mathbf{p}, \epsilon) G^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \epsilon+\omega) \quad (2 \cdot 11)$$

$G^{(0)}(\mathbf{p}, \epsilon)$ は，クーロン相互作用のない電子ガス系のフーリエ変換された一体のグリーン関数である。

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{\mathbf{p}} + i\delta}$$

$$\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m}, \quad \delta \rightarrow \pm 0, \quad |\mathbf{p}| \lesseqgtr p_F$$

§ 3. パウリ原理の要請，従来の計算例

理想的な電子ガス系の二体相関関数，或いは，Hartree - Fock 近似での二体相関関数は，よく知られているように

$$g_{\text{HF}}^A(\mathbf{r}) = 1$$

$$g_{\text{HF}}^P(\mathbf{r}) = 1 - 9(p_F r)^{-2} j_1^2(p_F r) \quad (3 \cdot 1)$$

互いに平行なスピンをもつ電子の位置の間には，全く相関がなく，平行なるスピンを持つ電子間には，パウリ原理による効果がある。すなわち $g_{\text{HF}}^P(\mathbf{r})$ は原点では零で， $|\mathbf{r}|$ の増加と共に次第に増加し 1 に近づく。原点の近くのくぼみは，いわゆるフェルミ孔と呼ばれるものである。

一般に，クーロン相互作用の効果を正しくとり入れれば， $g^P(0) \equiv 0$ は変わらないが，Ueda⁷⁾ の計算結果のように，フェルミ孔の大きさは小さくなる。
($\mathbf{r}$ を p_F^{-1} の単位で測った場合) クーロン相互作用の効果は，互いに反平行なスピンをもった電子の間にも相関を生ぜしめて， $\mathbf{r}$ の小さい領域 ($p_F r \lesssim 1$) では， $g^A(\mathbf{r}) < 1$ となる。

(2・1) を電子の消滅及び生成演算子を使って書き変えれば

$$g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{\left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2} \langle \Psi_0 | \psi_\sigma^*(\mathbf{r}) \psi_\sigma^*(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_\sigma(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle$$

$\sigma = \sigma'$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ とすれば, 反交換関係から, パウリ原理の要請 $g^P(0) \equiv 0$ は明らかである。

次に $g^P(0) \equiv 0$ を満すには, どのように $S^{\sigma\sigma}(\mathbf{q}, \omega)$ を計算すればよいかを Ueda⁷⁾ の計算を例にとって簡単に述べる。Ueda は Gell-Mann, Brueckner によって計算された高密度電子ガス系のエネルギーを与えるように $g^A(\mathbf{r})$, $g^P(\mathbf{r})$ を別々に計算した。(2.2), (2.3), (2.4) から

$$g^P(0) = 1 + \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{\sigma} \frac{1}{\rho_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} S^{\sigma\sigma}(\mathbf{q}, \omega) - 1 \right\} \quad (3.2)$$

Ueda 近似では, $S^{\sigma\sigma}(\mathbf{q}, \omega)$ を次のようにとった。

$$S_U^{\sigma\sigma}(\mathbf{q}, \omega) = W_0(\mathbf{q}, \omega) + W^{(1)}(\mathbf{q}, \omega) + W^{(2)}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.3)$$

$W_0(\mathbf{q}, \omega)$ だけ考慮すれば (3.1) の Hartree-Fock の結果を得る。 $W_0(\mathbf{q}, \omega)$ は (2.11) の $\pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ でスピンの和を除いたものである。

$$W_0(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} G^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon) G^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \varepsilon+\omega) \quad (3.4)$$

$$W^{(1)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{v(\mathbf{q})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)} \cdot (W_0(\mathbf{q}, \omega))^2 \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} W^{(2)}(\mathbf{q}, \omega) = & - \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \sum_{\mathbf{p}'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi i} G^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon) G^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \varepsilon+\omega) \\ & \times \frac{v(\mathbf{p}-\mathbf{p}')}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{p}-\mathbf{p}', \varepsilon-\varepsilon')} G^{(0)}(\mathbf{p}', \varepsilon') G^{(0)}(\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \varepsilon'+\omega) \end{aligned} \quad (3.6)$$

(3.4) を使って, 積分変数の変換を行えば, 直ちに

$$\sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} (W^{(1)}(\mathbf{q}, \omega) + W^{(2)}(\mathbf{q}, \omega)) = 0$$

であることを示すのは容易である。従って Ueda 近似では $g_U^P(0) = 0$ が保障される。

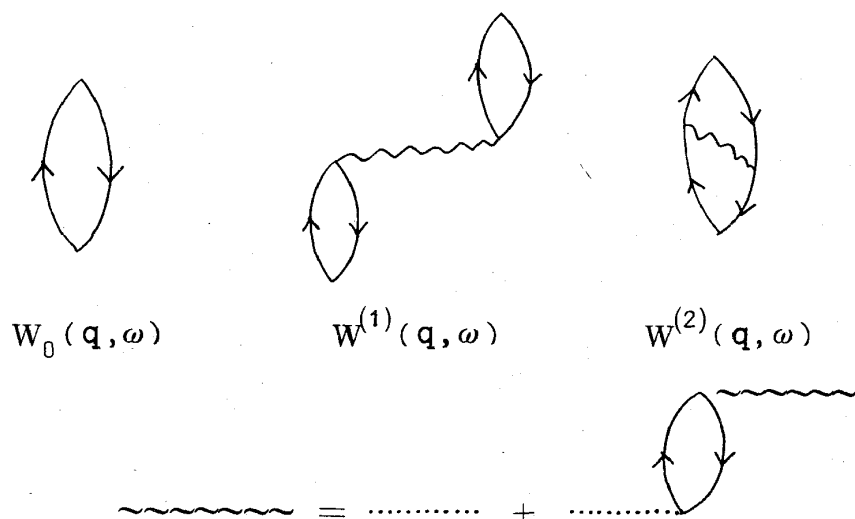


図1 $W_0(q, \omega)$, $W^{(1)}(q, \omega)$, $W^{(2)}(q, \omega)$ のダイアグラムを示す。~~~~ はいわゆる RPA の電媒定数 $\epsilon^{(0)}(q, \omega)$ で遮蔽された有効な相互作用である。..... は裸のクーロン相互作用。

一般に $g^P(0) = 0$ を保障するには proper, improper (裸のクーロン相互作用を一本切って二分するダイアグラムを improper と言う。) polarization を問わず図2に示されているように、あるダイアグラムとそれを構成する外側の二本のグリーン関数に対する exchange counter part が必ず対になって $S^{\sigma\sigma}(q, \omega)$ に含まれるように計算されれば $g^P(0) \equiv 0$ が満されることが Gellart⁶⁾ によって示されている。

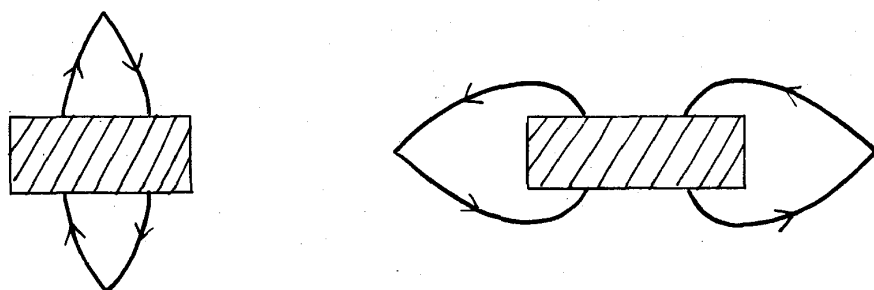


図2 $g^P(0) = 0$ を満すダイアグラムの対

Ueda 近似にとりこまれた $W^{(1)}(\mathbf{q}, \omega)$, $W^{(2)}(\mathbf{q}, \omega)$ は上のような対の関係になっている。

$g^A(\mathbf{r})$ と $g^P(\mathbf{r})$ を別々に計算する場合には, $g^P(0) = 0$ を満す処方は簡単である。しかしながら (2・6), (2・10) を使って $g^A(\mathbf{r})$ と $g^P(\mathbf{r})$ をまとめて電媒定数 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を通じて計算する方法が何人かの著者^{3), 4), 5)}によって使われているが, この場合に $g^P(0) = 0$ を満すように電媒定数或いは proper polarization $\pi(\mathbf{q}, \omega)$ を計算するには無限に多くの proper polarization の摂動項の和が必要になり, その収束性も問題となって困難である。この事情を簡単な例を使って以下に示す。まず RPA の電媒定数 $\epsilon^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ を使って $g(\mathbf{r})$ を計算した場合, 図 1 の $W^{(1)}(\mathbf{q}, \omega)$ が考慮されるから, $\sigma = \sigma'$ の場合, $W^{(2)}(\mathbf{q}, \omega)$ が proper polarization として RPA に相当する第零近似の polarization diagram の他に含まれると, 次々と図 3 に示されたダイアグラムの系列を考慮して始めて $\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega)$ の展開に先に述べた $g^P(0) = 0$ を満すダイアグラムの対が必ず含められることになる。

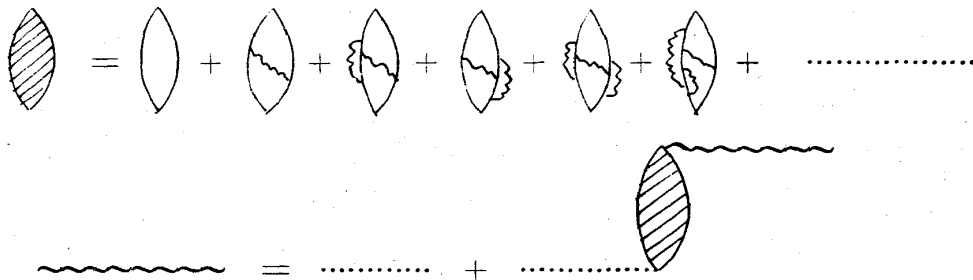


図 3. $g^P(0) = 0$ を満すために必要とされる $\pi(\mathbf{q}, \omega)$ の近似例

従来の電媒定数を通じた $g(\mathbf{r})$ の計算で, このような複雑な要請を満している例はみあたらない。又よく使われる Hubbard 近似もパウリ原理の要請は満していない。

以下に主な $g(\mathbf{r})$ の計算例を述べる。

Brouers⁴⁾ は電媒定数として RPA 及び Hubbard 近似で Hubbard factor を変えて数値計算を行った。

Hubbard 近似の電媒定数は

$$\epsilon_H(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{v(\mathbf{q}) \pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - f_H(\mathbf{q}) v(\mathbf{q}) \pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}$$

Hubbard factor は

$$f_H(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \frac{q^2}{q^2 + \xi p_F^2} ; \quad \xi = 1, \left(\frac{1}{2}\right)^2, \left(\frac{1}{4}\right)^2$$

Hubbard 近似の結果は RPA の場合よりも若干の改善はあるが $g(\mathbf{r})$ の値は、やはり金属の電子密度領域では $p_F r \lesssim 1$ の場合負になっている。

Geldart⁶⁾ は $g^A(0)$, $g^P(0)$ を r_s の関数として RPA, Ueda 近似($g^A(0)$ については RPA と同一である。), Hubbard 近似で $\xi = 1$, $\xi = 1 + \frac{4\alpha r_s}{\pi}$ (遮蔽効果) 圧縮率との関係から Geldart, Vosko¹³⁾ によって得られた ξ の値、及び Hubbard 近似が最低次で、 $g^P(0) = 0$ の要請を満たすように Hubbard factor $f_H(\mathbf{q})$ の関数形を正しく修正した場合について数値計算を行っている。彼によって明らかにされたことは $g^A(0)$ を RPA (或いは Ueda 近似) で計算しても $r_s \geq 1.7$ 程度で負の値をとること、最低次で正しく見積られた Hubbard factor $\phi(\mathbf{q})$ を使用した Hubbard 近似の結果は、高密度から最低の金属電子密度に到るまで、 $g^A(0)$ の高密度展開の結果 ($r_s \gtrsim 1.36$ で負となる。) とほとんど変わらないことは注目すべき点である。すなわち Hubbard 近似による遮蔽効果およびいわゆる vertex 補正は互いに相殺し $g^A(0)$ には金属電子密度領域でほとんど効かない。

Singwi, Tosi, Land and Sjolander^{8), 9), 10), 11), 12)} は電媒定数を二体相関関数 $g(\mathbf{r})$ のフーリエ変換の凡関数と見なして自己無撞着的に電媒定数に短距離相関をとり入れた。得られる電媒定数は、Hubbard型で、後の論文では遮蔽効果を考慮して圧縮率についての sum rule をよりよく満たすように改良されている。しかしながら、Singwi らの方法では一応短距離相関をとり入れ二体相関関数の短距離のふるまいを大部分改善してはいるもののその理論構成上、 $g^P(0) = 0$ および $g^A(\mathbf{r}) \geq 0$ が保障されていない上に摂動論的立場からどのような物理的過程が考慮されているのか不明である。

§ 4. 電子間の短距離相関

互いに反平行なスピンをもった電子間の短距離相関 $g^A(\mathbf{r})$ ($p_F r \lesssim 1$) にはどのような物理的過程が重要かを考察する。

始めに電子ガス系の $g(\mathbf{r})$ の r が小さい場合 ($p_F r \ll 1$) の関数形について述べる。まず $S(\mathbf{q})$ の q が大きい場合 ($q \gg p_F$) のふるまいに注目する。クーロン相互作用について一次の項までとれば

$$S(\mathbf{q}) = S_{\text{HF}}(\mathbf{q}) + S^{(a)}(\mathbf{q}) + S^{(b)}(\mathbf{q})$$

$$S_{\text{HF}}(\mathbf{q}) = \frac{3q}{4p_F} - \frac{q^3}{16p_F^3}, \quad 0 < q \lesssim 2p_F$$

$$= 1, \quad q \geq 2p_F$$

$$S^{(a)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{p}\sigma} v(\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'}) (1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}'}}$$

$$S^{(b)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{p}\sigma} v(\mathbf{p}+\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'}) (1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}'}} \quad (4.1)$$

ここで $f(\epsilon_{\mathbf{p}})$ は 0°K でのフェルミ分布関数である。 $S^{(a)}(\mathbf{q})$, $S^{(b)}(\mathbf{q})$ は $q \gg p_F$ で q^{-4} の漸近形をもつ。一般に $S(\mathbf{q})$ への高次の項は、高々 q^{-4} の漸近形をもつ。

(2.6) を角度変数について積分して、次元のない変数 $\bar{q}$, $\bar{r}$ を導入すると、
($q = \bar{q} p_F$, $r = \bar{r} p_F^{-1}$)

$$g(\bar{r}) = 1 + \frac{3}{2} \int_0^\infty \bar{q}^2 \cdot \frac{\sin \bar{q} \bar{r}}{\bar{q} \bar{r}} (S(\bar{q}) - 1) d\bar{q}$$

変数変換 $s \equiv \bar{q} \bar{r}$ を行くと $1 \gg s_0 = \bar{q}_0 \bar{r} \gg \bar{r} > 0$ なる $\bar{r}$ に対して

$$S\left(\frac{s}{\bar{r}}\right) - 1 \approx A(r_s) \left(\frac{\bar{r}}{s}\right)^4$$

であることに注意して

$$g(\bar{r}) = g(0) + \frac{3}{2} A(r_s) \bar{r} \int_{s_0}^\infty \frac{\sin s}{s^3} ds \quad (4.2)$$

ここで $A(r_s)$ は static form factor $S(\bar{q})$ の $\bar{q}^{-4}$ の漸近形の係数で r_s に依存する。電子ガス系の $g(\bar{r})$ は $\bar{r}$ が小さい場合 $\bar{r}$ について線形に変化する。電媒定数を通して行われた従来の数値計算例に於いて同一計算にもかかわらずかなりの数値上のばらつきが見い出されたり、 $\bar{r} \ll 1$ に対して $\bar{r}$ について二次の曲線が書かれている場合が見受けられるが、これは $S(q)$ の q が大きい所からの寄与が正しく評価されていないためである。RPA による $g(0)$ の値は $r_s = 4$ の場合 -1.60 程度であるが $q \geq 10P_F$ である積分領域からのクーロン相互作用について最低次のダイアグラムの寄与は -0.26 程度である。Ueda 近似⁷⁾ (RPA の有効相互作用についてのボルン近似) では $g_V^A(0) = -0.55$ でこの場合にはその寄与は重要である。

われわれは $g^A(\mathbf{r})$ の短距離のふるまいに効くと思われる電子間の裸のクーロン相互作用によるハシゴ型の多重散乱過程に着目する。

このような摂動過程は、従来の RPA や Hubbard 型近似に於いて全くとりこまれていない。 $g^A(0)$ に対しては遮蔽効果と Hubbard 型の vertex 補正は互いにほとんど相殺するのでこれらは考慮しない。又セルフエネルギー効果は短距離相関には余り効かないと期待されるので以下では考えない。⁵⁾

最初に、図 4 に示された電子ガス系のエネルギーダイアグラムの系列を考えよう。すなわち、フェルミ球内の二個の電子が相互作用して、二個の空孔を残してフェルミ球外に散乱された後、再び相互作用して元の空孔に戻る virtual な過程 (図 4 の最初のダイアグラム、これは RPA のエネルギーの計算に含まれる。) の他に、フェルミ球外に散乱された二個の電子が何回か相互作用をくりかえした後に元の空孔に戻る裸のクーロン相互作用について無限次までの摂動項系列を考察する。

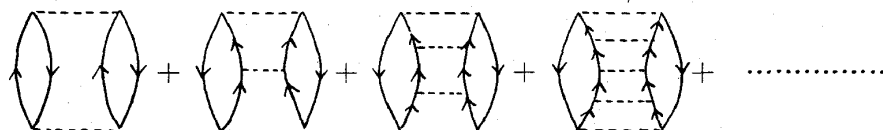


図 4 電子間の裸のクーロン相互作用によるハシゴ型の多重散乱過程を含むエネルギーダイアグラムの系列

一般に static form factor $S(\mathbf{q})$ 或いは $S^{\sigma\sigma}(\mathbf{q})$ に対するダイアグラムは、エネルギーダイアグラムに含まれる任意の裸のクーロン相互作用を表わす点線を取り除いて得られる。例えば図4の最初のダイアグラムからの電子一個あたりのエネルギーの寄与は次のように書ける。

$$E^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{1}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\substack{\mathbf{p} \sigma \\ \mathbf{p}' \sigma'}} v(\mathbf{q})^2 \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}}$$

又このダイアグラムの二本クーロン相互作用の点線のいずれかを取り除いて得られる $S^{(1)}(\mathbf{q})$ は

$$S^{(1)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \sum_{\substack{\mathbf{p} \sigma \\ \mathbf{p}' \sigma'}} v(\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}}$$

となる。図4のエネルギーダイアグラム系列から得られる $S(\mathbf{q})$ のダイアグラムは、次の二種類のものに別けられる。すなわち、エネルギーダイアグラム中のクーロン相互作用の中で、時間的に最初か最後のものを取り除いた場合と中間の相互作用を取り除いた場合である。前者を $S_{\text{ex}}(\mathbf{q})$ 、後者を $S_{\text{in}}(\mathbf{q})$ と書くことにする。

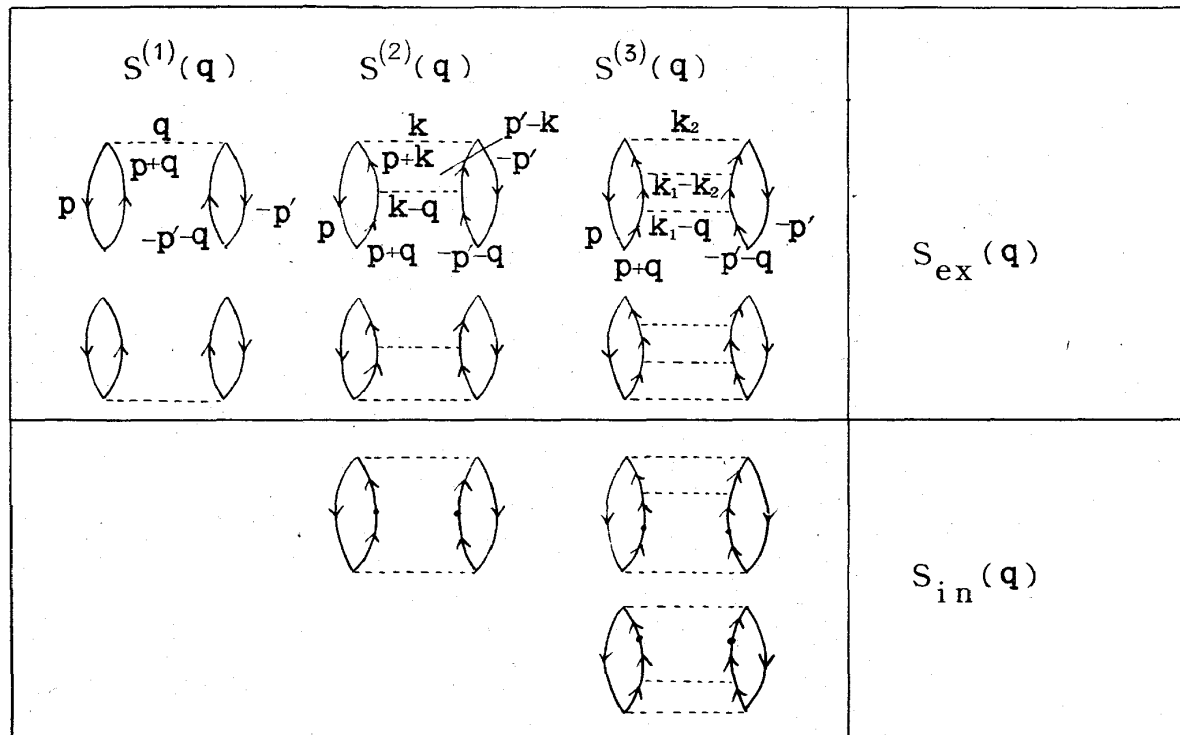


図5. 図4のエネルギーダイアグラムから得られる $S(\mathbf{q})$ のダイアグラム。

$S_{\text{in}}(\mathbf{q})$ のダイアグラム中の点は相互作用の点線を取り除いた場所を示す。

$g^A(\mathbf{r})$ の計算には

$$S^A(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{\rho_0} \langle \Psi_0 | \rho_{\mathbf{q}}^{\uparrow} \rho_{-\mathbf{q}}^{\downarrow} + \rho_{\mathbf{q}}^{\downarrow} \rho_{-\mathbf{q}}^{\uparrow} | \Psi_0 \rangle$$

が必要であるから, $S_{\text{ex}}^A(\mathbf{q})$ と $S_{\text{in}}^A(\mathbf{q})$ からの寄与を書くと

$$S_{\text{ex}}^{(1)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} v(\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \quad (4.3)$$

$$S_{\text{ex}}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} v(\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \\ \times \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} v(\mathbf{k}) \quad (4.4)$$

$$S_{\text{ex}}^{(3)}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} v(\mathbf{q}) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \\ \times \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1-\mathbf{q}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}} \\ \times \sum_{\mathbf{k}_2} v(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}} v(\mathbf{k}_2) \quad (4.5)$$

以下 $S_{\text{ex}}^{(4)}(\mathbf{q})$, $S_{\text{ex}}^{(5)}(\mathbf{q})$, は上の結果から容易に類推出来る。

$S_{\text{in}}^A(\mathbf{q})$ は

$$S_{\text{in}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} \\ \times v(\mathbf{k}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}+\mathbf{q}}} v(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \quad (4.6)$$

$$S_{\text{in}}^{(3)}(\mathbf{q}) = S_{\text{in}}^{(3),1}(\mathbf{q}) + S_{\text{in}}^{(3),2}(\mathbf{q})$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{in}}^{(3),1}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}} \\
& \times v(\mathbf{k}_1) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}} \\
& \times \sum_{\mathbf{k}_2} v(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}} v(\mathbf{k}_2)
\end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{in}}^{(3),2}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} v(\mathbf{k}_1) \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_1}} \\
& \times \sum_{\mathbf{k}_2} v(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2}} \\
& \times \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_2+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}} v(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q})
\end{aligned} \quad (4.8)$$

以下, $S_{\text{in}}^{(4)}(\mathbf{q})$, $S_{\text{in}}^{(5)}(\mathbf{q})$ についても上の結果から類推出来る。

図5に示めされた r_s について無限次までの $S_{\text{ex}}(\mathbf{q})$ の系列は上の計算から明らかなように, 次の積分方程式の形にまとめ上げることが出来る。

$$\begin{aligned}
S_{\text{ex}}^{\text{A}}(\mathbf{q}) = & S_{\text{ex}}^{(1)}(\mathbf{q}) + S_{\text{ex}}^{(2)}(\mathbf{q}) + S_{\text{ex}}^{(3)}(\mathbf{q}) + \dots \\
= & \frac{2}{\rho_0} \cdot 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})
\end{aligned} \quad (4.9)$$

ここで $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は次の積分方程式の解である。

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \quad (4.10)$$

$S_{\text{ex}}^{(1)}(\mathbf{q})$ は先に述べたように q^{-4} の漸近形をもつが、このダイアグラム系列の $S_{\text{ex}}^{(2)}(\mathbf{q})$ 以上の高次の項に於いて $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ の $\mathbf{q}$ 依存が $v(\mathbf{k}-\mathbf{q})$ を通じてのみ表われ、エネルギー分母は $\mathbf{q}$ に依存しない点が重要である。すなわち、この $S_{\text{ex}}^{(n)}(\mathbf{q})$ の系列は $\mathbf{q}$ の大きい所ですべて q^{-4} の漸近形をもつことに注目する。金属電子密度或いは低電子密度での $g^A(0)$ には、このダイアグラム系列が大切であると思われる。 $S_{\text{in}}(\mathbf{q})$ に関しては、 $\mathbf{q}$ についての和をとって積分変数の変換を行うと次のようにまとめ上げることが出来る。

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} S_{\text{in}}(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{q}} (S_{\text{in}}^{(2)}(\mathbf{q}) + S_{\text{in}}^{(3)}(\mathbf{q}) + S_{\text{in}}^{(4)}(\mathbf{q}) + \dots) \\ &= \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right\}^2 \end{aligned} \quad (4.11)$$

$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は (4.10) の積分方程式の解である。 $S_{\text{in}}(\mathbf{q})$ のダイアグラム系列も q^{-4} の漸近形をもつ。セルフエネルギー効果を別にすれば、上に考察した以外のすべてのダイアグラム、例えば、電子と空孔、空孔と空孔間の相互作用などを含むダイアグラムからの $S(\mathbf{q})$ への寄与は高々 q^{-6} の漸近形をもつことを示すのは容易である。

図5からの $S^A(\mathbf{q})$ を使った $g^A(0)$ の値は、次のように書ける。

$$\begin{aligned} g^A(0) &= 1 + \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} S^A(\mathbf{q}) \\ &= 1 + \frac{2}{\rho_0} \sum_{\mathbf{q}} (S_{\text{ex}}^A(\mathbf{q}) + S_{\text{in}}^A(\mathbf{q})) \\ g^A(0) &= 1 + \frac{8}{\rho_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \\ &\quad + \frac{4}{\rho_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right\}^2 \end{aligned} \quad (4.12)$$

更に次のようにまとめると簡潔である。

$$g^A(0) = \frac{4}{\rho_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f(\epsilon_{\mathbf{p}}) f(\epsilon_{\mathbf{p}'}) \left[1 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right]^2 \quad (4.13)$$

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k})$$

(4.13) の $g^A(0)$ の表式はすべての電子密度について $g^A(0)$ が正であたえられる点に注目する。又高密度展開の結果は、

$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) = v(\mathbf{q})$ として、 $S_{\text{ex}}^{(1)}(\mathbf{q})$ だけ考慮すれば得られる。

$$g_{\text{Hi}}^A(0) = 1 + \frac{8}{\rho_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{p}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})) f(\epsilon_{\mathbf{p}'})(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} v(\mathbf{q}) \quad (4.14)$$

(4.13) の結果の類推から $g^A(0)$ を常に正であるように計算する処方をより一般化することは容易である。すなわち図6に示めされるダイアグラムからの $g^A(0)$ への寄与は

$$g^A(0) = \frac{4}{\rho_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f(\epsilon_{\mathbf{p}}) f(\epsilon_{\mathbf{p}'}) \left[1 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}))(1-f(\epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \right]^2$$

$\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ ばかりでなくより一般的に例えばクーロン相互作用を一本切って部分に別れるようなダイアグラム、電子と空孔、空孔同志の相互作用などいかなるものを含んでいてもよい。

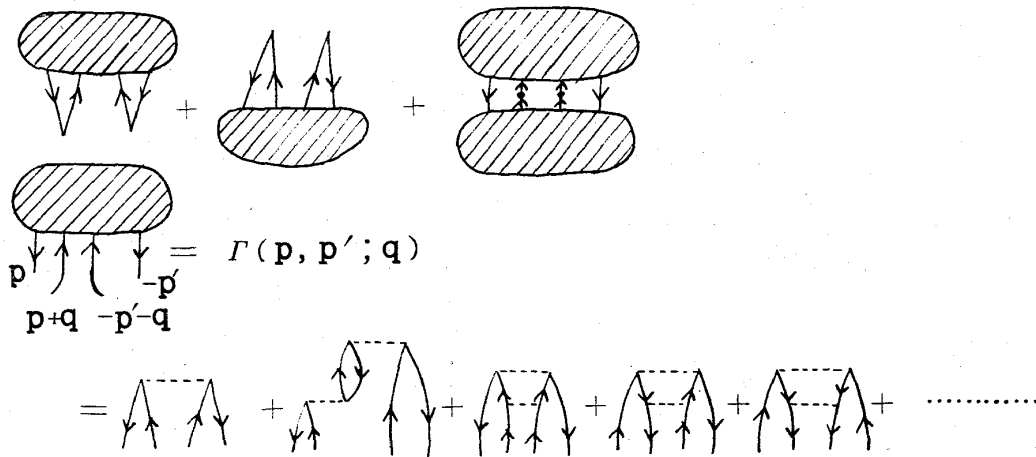


図6 $g^A(0) \geq 0$ を満す $S^A(\mathbf{q})$ のダイアグラム

このようなダイアグラムの集め方をすれば $g^A(0) \geq 0$ は保障されるがこの方法で考慮されないダイアグラムもあることを注意しておく。

§ 5. 積分方程式

前節(4・13)中の $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ についての積分方程式について考察する。

(4・14)の $g^A(0)$ の高密度展開は Geldart の数値計算から

$$g^A(0) = 1 - 2r\lambda, \quad 2r = 4.41$$

$$\lambda = \frac{\alpha r_s}{\pi}, \quad \alpha = 0.52106$$

(4・14)で $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ の積分を行う際被積分関数を $\mathbf{p} = \mathbf{p}' = 0$ すなわちフェルミ球の中心の値で近似的に代表すれば(この近似は $|\mathbf{p}| \leq p_F, |\mathbf{p}'| \leq p_F$ 内で被積分関数が $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ に関してほとんど一様である場合有効である。)

$$g^A(0) = 1 - 2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1 - f(\epsilon_{\mathbf{q}})}{-2\epsilon_{\mathbf{q}}} v(\mathbf{q}) = 1 - 4\lambda \quad (5.1)$$

となり正しい結果と λ の係数が一割程度しか違わない。従って近似的に次のように $g^A(0)$ を表わし, $\mathbf{p} = \mathbf{p}' = 0$ の場合の $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ についての積分方程式の性質を調べることによって(4・13)の正しい結果の本質的な部分はそこなわないであろうと期待する。

$$g^A(0) = \left[1 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{1 - f(\epsilon_{\mathbf{q}})}{-2\epsilon_{\mathbf{q}}} I(\mathbf{q}) \right]^2 \quad (5.2)$$

$$I(\mathbf{q}) = I(\mathbf{p}=0, \mathbf{p}'=0; \mathbf{q})$$

$$I(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \frac{1 - f(\epsilon_{\mathbf{k}})}{-2\epsilon_{\mathbf{k}}} I(\mathbf{k}) \quad (5.3)$$

積分方程式(5・3)を調べるのに便宜上次元のない変数を次のように導入する。

$$I(\mathbf{q}) = \tilde{I}(\bar{q}) v(p_F), \quad q = p_F \bar{q}$$

(5・3)は角度積分を実行した後

$$\tilde{I}(\bar{q}) = \frac{1}{\bar{q}^2} - \lambda \int_1^\infty d\bar{k} \frac{1}{\bar{q}\bar{k}} \ell n \left| \frac{\bar{k} + \bar{q}}{\bar{k} - \bar{q}} \right| \times \tilde{I}(\bar{k}) \quad (5.4)$$

煩雑さをさけるため還元変数につけられた横棒を以下では取り除いて書くことにする。(5.4)の第一番目の逐次近似の結果は

$$\begin{aligned} \tilde{I}^{(1)}(q) &= \frac{1}{q^2} (1 - 2\lambda) + 2\lambda \varphi(q) \\ \varphi(q) &= \frac{1}{q^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1 - q^2}{4q} \ell n \left| \frac{q + 1}{q - 1} \right| \right\} \end{aligned}$$

ここで関数 $\varphi(q)$ は次の性質をもつ

$$\begin{aligned} \text{as } q \rightarrow 0, \quad \varphi(q) &= \frac{1}{q^2} \\ \text{as } q \rightarrow \infty, \quad \varphi(q) &= \frac{2}{3} \frac{1}{q^4} \end{aligned}$$

すなわち $\tilde{I}(k) = \frac{1}{k^2}$ として (5.4) の右辺に代入した結果再び q が大きい場合に主要項となる $\frac{-2\lambda}{q^2}$ が得られることに着目する。逐次近似を更に進めた結果は

$$\begin{aligned} \tilde{I}(q) &= \left\{ 1 - 2\lambda + (2\lambda)^2 - (2\lambda)^3 + \dots \right\} \cdot \frac{1}{q^2} \\ &+ 2\lambda \left\{ 1 - 2\lambda + (2\lambda)^2 - (2\lambda)^3 + \dots \right\} \\ &\times \left[\varphi(q) - \lambda \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ell n \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \varphi(k) \right. \\ &+ \lambda^2 \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ell n \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \int_1^\infty dk' \frac{1}{k'k} \ell n \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \varphi(k') \\ &- \lambda^3 \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ell n \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \int_1^\infty dk' \frac{1}{k'k} \ell n \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \\ &\times \left. \int_1^\infty dk'' \frac{1}{k'k''} \ell n \left| \frac{k'+k''}{k'-k''} \right| \varphi(k'') + \dots \right] \quad (5.5) \end{aligned}$$

(5.5) は次のように書き直すことが出来る。

$$\tilde{I}(q) = \frac{1}{1+2\lambda} \left\{ \frac{1}{q^2} + 2\lambda \Phi(q) \right\} \quad (5.6)$$

$$\Phi(q) = \varphi(q) - \lambda \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ln \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \Phi(k) \quad (5.7)$$

$\Phi(q)$ は遠方で q^{-2} となる項を含むので q の大きい場合の主要項がすべて (5.6) の第一項で与えられるわけではない。級数 $1 - 2\lambda + (2\lambda)^2 - (2\lambda)^3 + \dots$ の収束は、 $|2\lambda| < 1$ に限られるが積分方程式の解としては、上記のようにまとめてもよいであろう。

$$g^A(0) = \left[\frac{1}{1+2\lambda} - 2\lambda \frac{2\lambda}{1+2\lambda} \int_1^\infty dq \Phi(q) \right]^2 \quad (5.8)$$

λ (或いは r_s) の関数として $g^A(0)$ の具体的な形は、積分方程式の解 $\Phi(q)$ を数値的に計算しなければ得られないが、 λ が大きい極限、低電子密度の極限でどうなるかについて若干考察する。(5.7) に対する斉次方程式の固有値および規格直交化された固有関数を $\lambda_i \Phi_i(q)$ とすれば積分方程式の一般論から

$$\Phi_i(q) = -\lambda_i \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ln \left| \frac{k+q}{k-q} \right| \Phi_i(k) \quad (5.9)$$

$$\Phi(q) = \varphi(q) + \lambda \sum_{i=1}^\infty \frac{\varphi_i}{\lambda_i - \lambda} \Phi_i(q) \quad (5.10)$$

$$\varphi_i = \int_1^\infty \Phi_i(q) \varphi(q) dq$$

$\lambda \rightarrow \infty$ の場合

$$\Phi(q) \rightarrow -\frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^\infty \lambda_i \varphi_i \Phi_i(q)$$

従って

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} g^A(0) = \left\{ 2 \sum_{i=1}^\infty \lambda_i \int_1^\infty \Phi_i(q) \varphi(q) dq \cdot \int_1^\infty \Phi_i(k) dk \right\}^2 \quad (5.11)$$

となる。直感的には $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} g^A(0) = 0$ であるように思われるが、今後数値計算を行って検討するつもりである。

§ 6. 討 論

電子ガス系の二体相関関数の短距離のふるまいについては、従来の RPA, Hubbard 近似には考慮されなかった電子間の多重散乱過程による短距離効果を取りこめばよいが、今後の問題としてこれら短距離効果 (§ 4 の図 4 のダイアグラム系列の他に散乱する電子間の交換過程も含めて) を Hubbard 近似の精神に沿って電媒定数の形にとりこむこと、或いはそれを使ってエネルギーを計算した場合、低い金属電子密度で従来の結果と比較してみるなどが考えられる。又このような短距離効果は電子ガス中の不純物電荷によって誘導される電子密度分布、或いはイオン間の有効なポテンシャルにも影響が予想される。

謝 辞

電子ガス系の二体相関関数についての問題点を指摘し、多くの有益な討論をして下さった渡部三雄助教授に深く感謝申し上げます。

又御多忙の折有益な討論をして下さった大坂之雄教授に感謝申し上げます。

文 献

- 1) L.Hedin and Lundqvist, Solid State Physics Vol 23 ('69)
(Academic press, New York and London)
- 2) A.J.Glick and R.A.Ferrell, Ann. of Phys. 11 359 ('60).
- 3) L.Hedin, Phys. Rev 139 A796 ('65)
- 4) F.Brouers, Phys. Status Solidi 19, 867 ('67)
- 5) P.R.Antoniewicz and L.Kleinman, Phys. Rev. B2 2828 ('70)
- 6) D.J.W.Geldart, Can. Journ. Phys. 45, 3139 ('67)
- 7) S.Ueda, Prog. Theoret. Phys. 26 45 ('61)
- 8) K.S.Singwi, M.P.Tosi, and R.H.Land and A.Sjolander, Phys, Rev, 176 589 ('68)
- 9) R.Labo, K.S.Singwi. M.P.Tosi, Phys. Rev. 186 186 ('69)

安原 洋

- 10) K.S.Singwi, A.Sjölander, M.P.Tosi, and R.H.Land, Phys. Rev. B1 1044 ('70)
- 11) J.Hubbard, Phys. Letters 25 A, 709 ('67)
- 12) R.W.Shaw, J.Phys. C: Solid st. Phys. 3 1140 ('70)
- 13) D.J.W.Geldart and S.H.Vosko, Can, Journ. Phys. 44 2137 ('66)