

電子ガスにおける短距離相関について

東北大・教養 安 原 洋

(2月18日受理)

§1 序

周知のように電子ガスではクーロン相互作用が長距離的であることに由来して、長距離的相関であるプラズマ振動が高い励起状態として存在するので、基底状態ではこの長距離的相互作用は凍結していて遮へいされた短距離相互作用が実質的に電子間に働いている。¹⁾ 一個の電子に着目すると、これが動く場合、統計効果とクーロン相互作用の短距離部分による強い斥力の結果、その運動に伴いその近傍から他の電子を追い払う傾向がある。すなわち、電子の周囲には、他の電子を寄せつけない領域、交換穴、クーロン穴（それぞれ正に荷電している。）がつきまとしていて、これら全体の運動がいわゆる quasiparticle という概念にはほぼ相当する。²⁾ プラズマ励起とそれに相補的な遮へい効果を最も簡単に記述する近似は RPA であるが、これは高密度の場合のみ有効で、金属電子密度での強い短距離相関（交換穴、クーロン穴）の記述には適していない。我々の興味をもつ金属電子密度では、強い短距離相関の結果を生ずるクーロン穴は相当大きく、これを適切に記述するには、互いに反平行なスピンの持つ電子 — 電子間のハンゴ型相互作用が重要である。³⁾

本稿では短距離相関について更に厳密な討論を進める。すなわち構造因子 $S(\mathbf{q}) = \frac{1}{n} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle$ の $\mathbf{q}$ の大きい場合の漸近形 q^{-4} の係数は一般にどのような摂動項（ダイアグラム）によって考えられるか（短距離相関にはどのような摂動項を取りこむことが一般に重要であるか）を調べて、反平行なスピンを持つ電子間の相関々数 $g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ は $p_F r$ の小さい場合、厳密に $g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = g^{\uparrow\downarrow}(0) + 2\pi\lambda g^{\uparrow\downarrow}(0) p_F r + \dots$ ($\lambda = \frac{\alpha r_s}{\pi}$) という形に書けることを示す。金属電子密度、特に低い方の金属電子密度での電子状態の研究にはクーロン穴の概念が交換穴と同じように重要となるであろう。上記

の性質は、クーロン穴を調べる一つの手がかりとして興味があると思われる。

§ 2 短距離相関に対する基本的ダイアグラム要素

時間に独立な Goldstone の摂動表式を用いると電子ガス系のエネルギーは次のように書ける。

$$E - E_0 = \Delta E = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \hat{H}_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle_{\text{connected}}, \quad (2-1)$$

ここで E_0 は相互作用のない系の基底状態のエネルギーである。 $\hat{H}_0$, $\hat{H}_1$ は Schrödinger 表示の演算子でそれぞれ相互作用のない系, および相互作用に相当する。 $|\Phi_0\rangle$ は非摂動系の基底状態で (2-1) の右辺ではいわゆる connected ダイアグラムだけ拾う。この場合クーロンの長距離性による発散の取り扱いが不便であるがある項が発散した場合それを防止して遮へい効果を考慮するようなダイアグラム系列を共に採用することにすればよい。(2-1) を具体的に評価するには connected ダイアグラムを与えるような中間状態を取って matrix element を計算すればよい。これらの各項はいくつかの自由電子スペクトル $\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m}$ の和と差からなる中間状態の励起エネルギーをあらわすエネルギー分母とクーロン相互作用 $v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$ を組み合わせて書き下すことが出来る。従って ΔE は $v(\mathbf{q})$ の汎関数となる。

構造因子 $S(\mathbf{q}) = \frac{1}{n} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle$ (n : 電子密度, $\rho_{\mathbf{q}}$: density fluctuation) はエネルギー差 ΔE を $v(\mathbf{q})$ について汎関数微分して得られる。

$$\frac{\delta \Delta E}{\delta v(\mathbf{q})} = \frac{n}{2} (S(\mathbf{q}) - 1) \quad (2-2)$$

この関係式は次の考察によってたしかめられる。まず最初に ΔE に寄与する n 次のオーダーのある Goldstone ダイアグラムを考えてみる。このダイアグラムの ΔE への寄与を $\Delta E^{(n)}$ と書くことにする。 $\Delta E^{(n)}$ を $v(\mathbf{q})$ について汎関数微分すると n 個の $S(\mathbf{q})$ に対するダイアグラムが得られる。その和を $S^{(n-1)}(\mathbf{q})$ と書く。こうして得られた n 個の項の和 $S^{(n-1)}(\mathbf{q})$ からポテンシャルエネルギーへの寄与を求めるために $v(\mathbf{q})$ を乗じて q

について和を取ると同じ値をもつ n 個の項が得られる。一方運動エネルギーへの相互作用の効果を含んだ全エネルギーへの寄与はポテンシャルエネルギーを coupling strength について積分すると得られる。

$$\Delta E^{(n)} = \frac{1}{2} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) (S^{(n-1)}(\mathbf{q}) - \delta_{n,1}), \quad n \geq 1. \quad (2-3)$$

上記の同一値をもつ n 個の項を (2-3) 式に代入して coupling strength について積分を実行すると最初に考察した n 次のある Goldstone のエネルギーダイアグラムに相当する表式を得る。これは任意のオーダーの任意のダイアグラムについて成立する。従って (2-2) 式がたしかめられた。(2-2) 式はエネルギーに対する Goldstone ダイアグラムを取ってこれから任意の $v(\mathbf{q})$ を取り除くと $S(\mathbf{q})$ に対するダイアグラムが得られることを意味している。

さて (2-2) を使って $S(\mathbf{q})$ の $\mathbf{q}$ の大きい場合の振舞を調べてみよう。エネルギーに対する 2nd オーダーの direct および exchange 項から得られる構造因子への寄与 $S^{(1)}(\mathbf{q})$ は $\mathbf{q}$ の大きい場合 q^{-4} のオーダーの漸近形を持つことはよく知られている。^{5), 6)} 又、先の報告³⁾で電子—電子間のハシゴ型ダイアグラム系列から得られるすべての構造因子への寄与 $S_{\text{ladd}}(\mathbf{q})$ も $\mathbf{q}$ の大きい場合 q^{-4} の項に寄与することがわかった。ここでは一般にどのようなダイアグラムが $S(\mathbf{q})$ の支配的な漸近形 q^{-4} の項に寄与するかをダイアグラムの解析によって厳密に調べてみる。周知のように RPA は $\mathbf{q}$ の小さい場合、各オーダーで最も divergent なダイアグラムを集めたことに相当していて $\mathbf{q}$ の小さい場合の正しい構造因子の形 $S(\mathbf{q}) \simeq \frac{\hbar q^2}{2m\omega_{pl}}$ を与える¹⁾ がここでは反対に $\mathbf{q}$ の大きい場合 $S(\mathbf{q})$ に対して最も重要なダイアグラムは一般にどのようなものか調べるわけである。

実例としてなじみ深い RPA のダイアグラムが $\mathbf{q}$ の大きい場合どのように $S(\mathbf{q})$ に寄与するかを考えよう。RPA に属する任意の n 次の項を $v(\mathbf{q})$ について汎関数微分すると残りの $n-1$ 個の相互作用はすべて変数 $\mathbf{q}$ を担うので $(v(\mathbf{q}))^{n-1}$ の因子が生ずる。また n 次のダイアグラムは $n-1$ 個の中間状態に対応するエネルギー分母を持ち、これらはすべて二個以上の電子—空孔対による励起エネルギーに対応しており各

々の電子 — 空孔対は $\epsilon_p - \epsilon_{p+q}$ ($p \leq p_F$) に対応するから q の大きい場合 エネルギー分母から $q^{-2(n-1)}$ の因子が生ずる。従って RPA は q の大きい場合の $S(q)$ の漸近形として次の形を与える。

$$\left\{ \frac{4\pi e^2}{q^2} - \frac{2m}{\hbar^2 q^2} \right\}^{n-1}, \quad n \geq 2.$$

$n=2$ の場合は q^{-4} の支配的な漸近形の形を与えるが n 次の RPA の項は一般に n 次の RPA 以外の他のダイアグラムの中で最も次数が高い寄与を与えるものの一つである。

上の例からわかるようにある擾動項から得られる q が大きい場合の $S(q)$ への寄与は相互作用 v とエネルギー分母から来る q^{-2} の因子がどのように蓄積するかによって決まるわけである。一般に任意の n 次のダイアグラムから得られる q の大きい場合の $S(q)$ の漸近形のオーダーは $q^{-4(n-1)}$ より大きく q^{-4} よりも小さい。

さてエネルギー分母と相互作用から来る q^{-2} の因子を最小限の各々一個ずつに抑えて、 q^{-4} に寄与するダイアグラムはどんなものか考えよう。Goldstone ダイアグラム中の相互作用 $v(q)$ は、電子・空孔対発生、対消滅、電子→電子散乱、空孔→空孔散乱の四通りの内から任意の二つを組み合わせた16通りのいずれかの場合を通じてあらわれる。この内、空孔→空孔散乱を含む5通りの場合 $v(q)$ の担う momentum transfer q は $q \leq 2p_F$ に制限されるので大きな momentum transfer の過程には寄与しないので除外する。図1には空孔→空孔散乱を除いた9通りの場合が書いてある。

たとえば図1の(a)のダイアグラムを取り上げると取り除かれる相互作用 $v(q)$ の変数 q が充分大きい場合 ($q \gg 2p_F$) これらを担うのは二個の電子であることに留意する。(a)に対してエネルギー分母

$$\frac{f(p)(1-f(p+q))f(p')(1-f(p'-q))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+q} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-q} - E_R}$$

が対応する。ここで $f(p)$ はフェルミ分布関数、 E_R は (a) をより大きなダイアグラム中の一部分とみなした場合、取り除いた相互作用直後の他の部分からの励起エネルギーである。これに続く第二の相互作用として二個の電子と二個の空孔の間での二通り

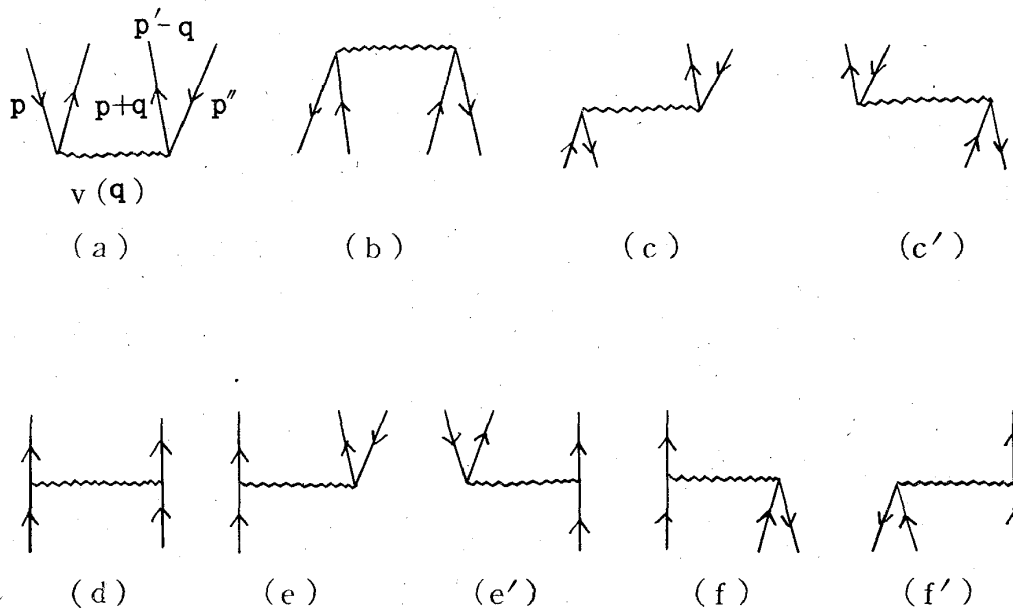


図 1

の電子—空孔相互作用，空孔—空孔相互作用或いはダイアグラムの他の部分と (a) に書かれている電子空孔との相互作用，他の部分同志での相互作用がある場合には更にエネルギー分母から q^{-2} の因子が生ずるばかりでなく，第二の相互作用以後の部分にも未だ変数 q があらわれるから更に余分の q^{-2} の因子がすくなくとも一つ増えることになる。もしここで充分大きい変数 q を互いに担い得る二個の電子同志が再び相互作用して $k-q$ の momentum をやりとりすれば連続する二回の相互作用の結果全部で $q + (k-q) = k$ だけ momentum をやりとりして，それぞれ $p+k$ ， $p'-k$ の状態（電子または空孔のいずれでもよい。）に散乱することになり二回目の相互作用 $v(q-k)$ の変数中に q があらわれるだけで，その後のダイアグラムの部分には変数 q はあられず，エネルギー分母，相互作用を通じての q^{-2} 因子の蓄積はもはや起らない。この場合エネルギー分母および相互作用から各々一個ずつ q^{-2} の因子が来るだけで最少の蓄積となる。図1の (b)，(d)，(e)，(e')，(f)，(f') の場合も同様な議論が出来る。しかし図1の (c) と (c') の場合には事情が異なる。すなわち (c) と (c') では q の大きさには制限はないが，この型のダイアグラムではエネルギー分母および相互

作用から来る q^{-2} の因子が各々一個ずつではおさまり切れず, 従って q^{-4} には寄与しないのである。これは次のこのタイプの簡単なダイアグラムの実例を見れば明らかであろう。

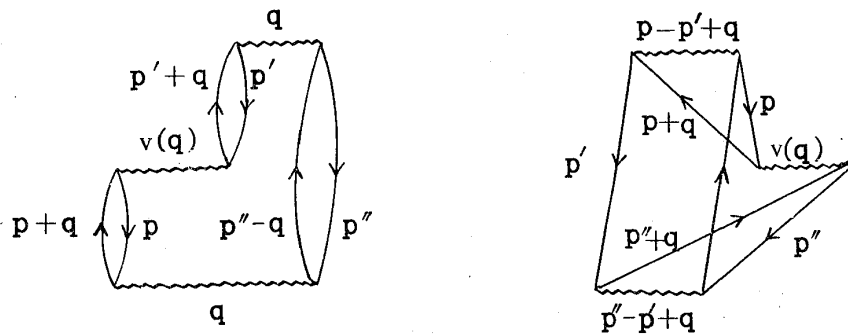


図 2

図2の場合いずれも二個のエネルギー分母と二個の相互作用から q^{-2} の因子が生じて $(q^{-2})^4$ のオーダーである。

これらの考察から q^{-4} に寄与する基本的ダイアグラム要素として図3に示したものを採用すればよい。

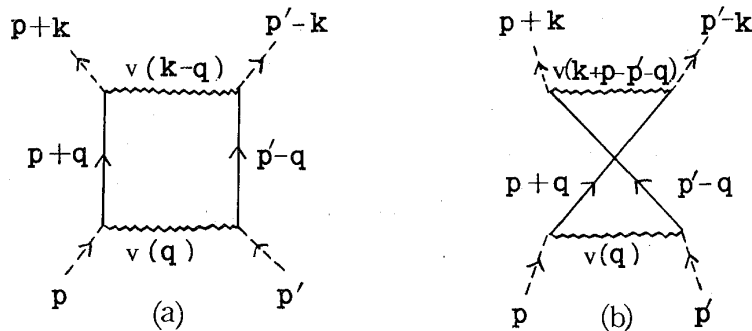


図3 短距離相関に対する基本的ダイアグラム要素

これは各々対発生或いは電子 → 電子散乱によって生じた二個の電子同志が再び相互作用して、各々対消滅するか別の電子状態に散乱する場合のダイアグラム要素である。連続する二回の相互作用の間が二本の電子の線で結ばれていることに留意せよ。最初の相互作用に伴う momentum transfer q はいかに大きくてもこれをフェルミ球外の二個の電子状態であれば担うことが出来る。その二個の電子同志が二回目の相互作用 $v(k-q)$ ($k-q$ はいかに大きくてもよい。) を行った場合、その結果は全部で $q + (k-q) = k$ の momentum transfer を伴う相互作用を行った場合に等しく二回目の相互作用で第一回目の相互作用の記憶は全く失われてしまうわけである。先の議論では空孔 → 空孔散乱を伴う5つのダイアグラムおよび図1の(c)と(c')のタイプのダイアグラムは q^{-4} に寄与しないので取り除いたが、これらの相互作用を図3の基本的ダイアグラム要素で置き代えて得られるダイアグラムはすべて q^{-4} に寄与する点に注目しよう。図4にその例を示す。

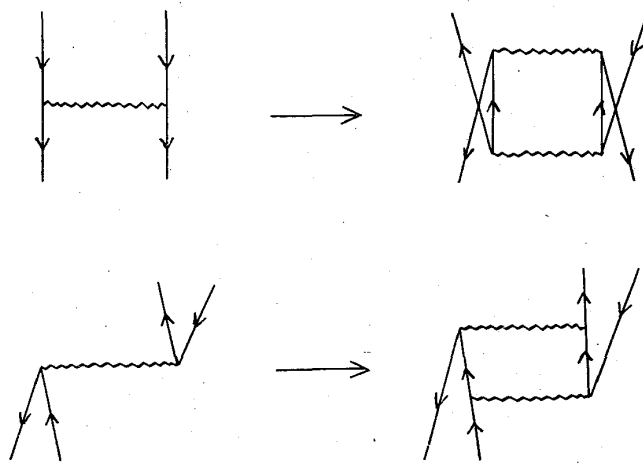


図 4

短距離相関に対する基本的ダイアグラム要素の部分から来るエネルギーへの表式を書く
と

$$\sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mathbf{k}} \cdots \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{q}))}{-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} - E_R} v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdots$$

となる。… の部分はダイアグラムの他の部分からの寄与で E_R は連続する二回の相互作用の間の他の部分の励起エネルギーを表わす。基本的ダイアグラム要素中の相互作用を変分すれば

$$\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{k}} \dots \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{q}))}{-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} - E_R} v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \dots$$

$$+ \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{k}} \dots v(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}))}{-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_R} \dots$$

となり、… の部分は変数 $\mathbf{q}$ を全く含まないことに注目すれば、これは q^{-4} に寄与することがわかる。又、図 3 (a) に対応して $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ が同一スピンをもつ場合、図 3 (b) の交換過程が可能である。この場合 (a) とは sign が異なるから (a) と (b) の双方からの寄与をもつ $S^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{q})$ では q^{-4} の項が相殺して q^{-4} よりも早く減少する漸近形をもつことがわかる。

§ 3 電子—電子間のハシゴ型ダイアグラム

前節で述べた短距離相関に対する基本的ダイアグラム要素を単純に延長して作られる最も簡単なエネルギーダイアグラムの性質をまず調べてみよう。³⁾ この場合すべての相互作用は電子—電子間相互作用を通じて起って、電子—空孔、空孔—空孔相互作用などが全くない。前節の議論から反平行なスピンをもつ電子間のハシゴ型ダイアグラムだけ考えればよい。二次の項は発散するがエネルギーは形式的に次のように書ける。

$$\Delta E_{\text{ladd}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) v(\mathbf{q}) \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q})) f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \quad (3-1)$$

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \quad (3-2)$$

(2-2) 式を用いて $S^{\uparrow\uparrow}_{\text{ladd}}(\mathbf{q})$ は (3-1), (3-2) 式から次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
S_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{q}) = & \frac{2}{n} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\sigma, \sigma'} (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q})) f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}} \\
& \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) \\
& + \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{\sigma, \sigma'} (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k})) f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}} \\
& \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \\
& \cdot \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{q}-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}-\mathbf{k}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}+\mathbf{k})
\end{aligned} \quad (3-3)$$

$q \rightarrow \infty$ に従って (3-2) 式で与えられる $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は

$$v(\mathbf{q}) \cdot \left\{ 1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \right\} \quad (3-4)$$

に近づく。(3-3) の右辺の第二項はたたみこみの形になっていることに注意すると、 q が大きくなるに従って

$$\begin{aligned}
S_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{q}) & \rightarrow - \frac{v(\mathbf{q})}{\epsilon_{\mathbf{q}}} \left\{ \frac{n}{2} + \sum_{\mathbf{k}} S_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \right\} \quad (3-5) \\
& = - \frac{v(\mathbf{q})}{\epsilon_{\mathbf{q}}} \frac{n}{2} \frac{4}{n^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}') \left\{ 1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}} \right. \\
& \quad \left. \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \right\}^2 \\
& = - \frac{4}{3} \frac{\alpha r_s}{\pi} \frac{P_F^4}{q^4} \cdot g_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(0)
\end{aligned}$$

*) 一般に二つの関数 $f(\mathbf{k})$, $g(\mathbf{k})$ が k の充分大きい場合 k^{-4} の漸近形をもちその係数がそれぞれ c_f , c_g で与えられ, $\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$, $\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k})$ が存在する場合, そのたたみこみ $\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{q}-\mathbf{k}) g(\mathbf{k})$ ($= \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) g(\mathbf{q}-\mathbf{k})$) は q が充分大きい場合, q^{-4} の漸近形をもち, その係数は $c_f \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) + c_g \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$ で与えられることを示すことが出来る。

となる。 $g_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(0)$ はこの近似での相関々数の原点での値で次のように与えられる。

$$g_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(0) = \frac{4}{n^2} \sum_{\mathbf{p} \mathbf{p}'} f(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}') \left\{ 1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \right\}^2 \quad (3-6)$$

すなわちこの近似では $S_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{q})$ の q^{-4} の漸近形は相関々数の原点の値 $g_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(0)$ と (3-5) 式のように結びついている。この関係は次節で証明するようにハシゴ型近似に限らず、より一般的な関係である。

§ 4 電子—電子間ハシゴ型相互作用について既約なダイアグラム

この節では $S(\mathbf{q}) - 1$ の q^{-4} の漸近形の係数がどのように与えられるか調べてみる。エネルギー差 ΔE に対するすべての Goldstone ダイアグラムの中にあられるすべての短距離相関に対する基本的ダイアグラム要素およびそれを延長した電子—電子間ハシゴ型相互作用を単純な相互作用に置き代えたダイアグラムを考察する。⁴⁾ 従ってこの既約ダイアグラムはもはや q^{-4} には寄与しない。この既約ダイアグラムのすべての相互作用に各々独立にハシゴ部分を代入すればすべての ΔE に対するダイアグラムが再現される。既約ダイアグラム中のある相互作用 $v(\mathbf{k})$ をハシゴ部分で置き代えた場合に着目しよう。この場合のハシゴ部分は次の積分方程式で与えられる。

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E) = v(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}_1))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}_1} - \delta E} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E) \quad (4-1)$$

或いは次のようにも書き変えられる。

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E) = v(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}_1} I(\mathbf{p}+\mathbf{k}_1, \mathbf{p}'-\mathbf{k}_1; \mathbf{k}-\mathbf{k}_1; \delta E) \cdot \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}_1))(1-f(\mathbf{p}'-\mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}_1} - \delta E} \cdot v(\mathbf{k}_1) \quad (4-2)$$

ここで $\mathbf{p}$, $\mathbf{p}'$ はその相互作用にあずかる電子または空孔の運動量である。 δE はハシゴ部分の相互作用の始まる直前の中間状態の励起エネルギーでハシゴ部分の始めと終りの間でのダイアグラムの他の部分の励起エネルギー E_R と $-E_R = \epsilon_{\mathbf{p}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \delta E$ の関係にある。

δE に対するすべての摂動項を $v(\mathbf{q})$ で汎関数微分して得られる $S(\mathbf{q})$ に対する寄与の中で、 q^{-4} の漸近形に寄与するのはハシゴ部分を変分した場合である。まず (4-1) 式で与えられるハシゴ部分を $v(\mathbf{q})$ について汎関数微分してみよう。

$$\begin{aligned}
\frac{\delta I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E)}{\delta v(\mathbf{q})} &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\
&+ I(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}; \delta E) \frac{(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{q}))(1 - f(\mathbf{p}' - \mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{q}} - \delta E} \\
&+ \frac{(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}))(1 - f(\mathbf{p}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}} - \delta E} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k} - \mathbf{q}; \delta E) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}_1} I(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}; \delta E) \cdot \frac{(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}))(1 - f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} - \delta E} \\
&\cdot \frac{(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1))(1 - f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1} - \delta E} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}_1; \delta E) \quad (4-3)
\end{aligned}$$

(4-1), (4-2) を用いると (4-3) 式中の $I(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}; \delta E)$, $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k} - \mathbf{q}; \delta E)$ などは次のように書ける。

$$\begin{aligned}
I(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}; \delta E) &= v(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}_1} I(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{k}_1; \mathbf{k} - \mathbf{k}_1; \delta E) \frac{(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1))(1 - f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1} - \delta E} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) \quad (4-4)
\end{aligned}$$

$$I(p, p'; k-q; \delta E) = v(k-q) + \sum_{k_1} v(k_1-q) \frac{(1-f(p+k-k_1))(1-f(p'-k+k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k-k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-k+k_1} - \delta E} \cdot I(p, p'; k-k_1; \delta E) \quad (4-5)$$

(4-4), (4-5) を用いると (4-3) 式の右辺は q が充分大きい場合次の漸近形をもつことを示せる。((4-3) 式の右辺の第4項はたたみこみの形であるから §3 の脚注に注意する。)

$$\begin{aligned} & - \frac{v(q)}{2 \epsilon_q} \cdot \left\{ 1 + \sum_{k_1} I(p+k_1, p'-k_1; k-k_1; \delta E) \frac{(1-f(p+k_1))(1-f(p'-k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-k_1} - \delta E} \right\} \\ & - \frac{v(q)}{2 \epsilon_q} \cdot \left\{ 1 + \sum_{k_1} \frac{(1-f(p+k-k_1))(1-f(p'-k+k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k-k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'+k+k_1} - \delta E} \cdot I(p, p'; k-k_1; \delta E) \right\} \\ & - \frac{v(q)}{2 \epsilon_q} \sum_{k_1} I(p+k_1, p'-k_1; k-k_1; \delta E) \frac{(1-f(p+k_1))(1-f(p'-k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-k_1} - \delta E} \\ & \quad \cdot \left\{ 1 + \sum_{k_2} \frac{(1-f(p+k_1-k_2))(1-f(p'-k_1+k_2))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k_1-k_2} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-k_1+k_2} - \delta E} \cdot I(p, p'; k_1-k_2; \delta E) \right\} \\ & - \frac{v(q)}{2 \epsilon_q} \cdot \sum_{k_1} \left\{ 1 + \sum_{k_2} I(p+k+k_2-k_1, p'-k-k_2+k_1; k_1-k_2; \delta E) \right. \\ & \quad \cdot \frac{(1-f(p+k+k_2-k_1))(1-f(p-k-k_2+k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k+k_2-k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p-k-k_2+k_1} - \delta E} \left. \right\} \\ & \quad \cdot \frac{(1-f(p+k-k_1))(1-f(p'-k+k_1))}{\epsilon_p - \epsilon_{p+k-k_1} + \epsilon_{p'} - \epsilon_{p'-k+k_1} - \delta E} \cdot I(p, p'; k-k_1; \delta E) \end{aligned} \quad (4-6)$$

(4-6) を書き直すと,

$$\begin{aligned}
& - \frac{v(q)}{\epsilon_q} \cdot \left\{ 1 + \sum_{\mathbf{k}_1} I(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{k}_1; \mathbf{k} - \mathbf{k}_1; \delta E) \frac{(1-f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1))(1-f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}' - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1}} - \delta E} \right. \\
& + \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{(1-f(\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1))(1-f(\mathbf{p}' - \mathbf{k} + \mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}' - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k} + \mathbf{k}_1}} - \delta E} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k} - \mathbf{k}_1; \delta E) \\
& + \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} I(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1, \mathbf{p}' - \mathbf{k}_1; \mathbf{k} - \mathbf{k}_1; \delta E) \frac{(1-f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1))(1-f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1))}{\epsilon_{\mathbf{p} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{p}' - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1}} - \delta E} \\
& \cdot \frac{(1-f(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2))(1-f(\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2))}{\epsilon_{\mathbf{p} - \epsilon_{\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} + \epsilon_{\mathbf{p}' - \epsilon_{\mathbf{p}' - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}} - \delta E} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2; \delta E) \left. \right\} \\
& \quad (4-7)
\end{aligned}$$

(4-7) は更に次のように簡潔にまとめることが出来る。すなわち, $q \rightarrow \infty$ に従って

$$\frac{\delta I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E)}{\delta v(q)} \rightarrow - \frac{v(q)}{\epsilon_q} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{\delta I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E)}{\delta v(\mathbf{k}_1)}$$

となる。従って $S(q) - 1$ の q^{-4} の漸近形の係数はすべてのハシゴ部分をもつダイアグラムについての和およびそのダイアグラム中のすべてのハシゴ型相互作用の位置についての和をとって得られる。

$$\sum_{\substack{\text{ハシゴ部分をも} \\ \text{つダイアグラム}}} \sum_{\delta E} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \sum_{\mathbf{k}} \cdots \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{\delta I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}; \delta E)}{\delta v(\mathbf{k}_1)} \cdots \quad (4-9)$$

(4-9) 式中の $\cdots$ はダイアグラム中の注目するハシゴ部分以外の部分からの寄与をあらわすハシゴ部分を含んでいる場合もあり, ない場合もある。(4-9) 式中の変分の第一項 $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)$ ((4-3) 式をみよ。) からは k^{-4} の漸近形には寄与しないすべての構造因子への寄与 $S_{\ell}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})$ が与えられる。又, 変分の第2, 第3, 第4項((4-3) 式を見よ。) からは k^{-4} に寄与するすべての構造因子への寄与 $S_s^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})$ が与えられる。ただし, §3で考察したハシゴ型ダイアグラムは還元した場合なくなってしまうから, その寄与をつけ加えると q^{-4} の係数は

$$\begin{aligned}
 & - \frac{v(q)}{\epsilon_q} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (S_{\ell}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) + S_s^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})) + \sum_{\mathbf{k}} S_{\text{ladd}}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) + \frac{n}{2} \right\} \\
 & = - \frac{v(q)}{\epsilon_q} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} S^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) + \frac{n}{2} \right\} = - \frac{v(q)}{\epsilon_q} \cdot \frac{n}{2} \cdot g^{\uparrow\downarrow}(0), \quad (4-10)
 \end{aligned}$$

ここで $g^{\uparrow\downarrow}(0)$ は相関々数の原点での値で

$$g^{\uparrow\downarrow}(0) = 1 + \frac{2}{n} \sum_{\mathbf{k}} S^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}). \quad (4-11)$$

すなわち $S^{\uparrow\downarrow}(q)$ は q の大きい場合

$$S^{\uparrow\downarrow}(q) \rightarrow - \frac{4}{3} \frac{\alpha r_s}{\pi} \frac{p_F^4}{q^4} g^{\uparrow\downarrow}(0) + \dots, \quad (4-12)$$

となることが証明された。(4-12)は $g^{\uparrow\downarrow}(r)$ は $p_F r \ll 1$ の場合厳密に

$$g^{\uparrow\downarrow}(r) = g^{\uparrow\downarrow}(0) + 2\pi\lambda g^{\uparrow\downarrow}(0) \cdot p_F r + \dots, \quad (4-13)$$

という形をもつことを意味している。⁷⁾ $g^{\uparrow\uparrow}(r)$ は $g^{\uparrow\uparrow}(0) = 0$ で $S^{\uparrow\uparrow}(q) - 1$ が q^{-4} よりも早く減少する漸近形をもつことから $p_F r$ の項には寄与しないから スピンについて平均した $g(r) = \frac{1}{2} (g^{\uparrow\downarrow}(r) + g^{\uparrow\uparrow}(r))$ についても

$$g(r) = g(0) + 2\pi\lambda g(0) p_F r + \dots^*) \quad (4-14)$$

となる。(4-13), (4-14) 式の結果はその導出から明らかなように相互作用がクーロンであることに由来するもので quantal な電子ガスの短距離相関の特長である。

*) Kimball J. C. (Phys. Rev. A7 (1973), 1648) はいくつかの plausible な仮定に基づいて density matrix を用いてこの関係を簡潔に証明しているが、摂動論的立場からは何も述べていない。

参 考 文 献

- 1) D.Pines and P.Nozieres : The Theory of Quantum Liquids
(Benjamin, 1966)。
- 2) V.Heine : The Physics of Metals 1. Electrons, edited by
J.M.Ziman (Cambridge, 1969)。
- 3) H.Yasuhara : Solid State Commun. 11 (1972), 1481,
H.Yasuhara : J.Phys. Soc. Japan, 36 No. 2。
- 4) A.L.Fetter and J.D.Walecka : Quantum Theory of Many-Particle
System (McGraw-Hill, 1971),
J.Goldstone : Proc. Roy. Soc. (London), A239 (1957), 267。
- 5) J.Hubbard : Proc. Roy. Soc. A243 (1958), 336。
- 6) P.Nozieres and D.Pines : Phys. Rev. 111 (1958), 442。
- 7) Y.Fukui and K.Hiroike : The Tecknology Reports of the Tohoku
University 32 (1967) 1。