# 金属電子密度における
# 電子相関の理論的研究

名古屋大学工学部情報工学教室

長 谷 川 武 光

1 9 7 5

# 金属電子密度における電子相関の理論的研究

名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻課程

学位論文

名古屋大学工学部情報工学教室

長谷川武光

1975

第1章　序論　1
第2章　古典的リューピュ方程式による電子相関　15
§2－1　序　15
§2－2　古典的リューピュ方程式による誘電関数　18
§2－3　対分布関数，相関エネルギーおよび圧縮率の計算結果　23
§2－4　長波長の極限でのプラズマ振動の分散関係と圧縮率　39
§2－5　結論と討論　44
第3章　古典的リューピュ方程式によるスピン相関　47
§3－1　序　47
§3－2　古典的リューピュ方程式による一般化帯磁率　49
§3－3　スピンに依存する対分布関数とスピン帯磁率　54
§3－4　結論と討論　62
第4章　量子論的分布関数による誘電関数と電子相関　63
§4－1　序　63
§4－2　Wigner 分布関数および誘電関数　66
§4－3　対分布関数，相関エネルギーおよび圧縮率の計算結果　71
§4－4　長波長の極限でのプラズマ振動の分散関係と圧縮率　78
§4－5　結論と討論　85
第5章　量子論的分布関数による一般化帯磁率とスピン相関　87
§5－1　序　87
§5－2　一般化帯磁率　88

§5－3　スピンに依存する対分布関数とスピン帯磁率　93
§5－4　結論と討論　102
第6章　磁場中における電子気体のプラズマ振動の分散関係　104
§6－1　序　104
§6－2　定式化　105
§6－3　交換散乱項による補正　112
§6－4　結論と討論　116
第7章　結論と討論　117
謝辞　123
付録　A　124
付録　B　126
付録　C　130
付録　D　132
参考文献　134

## 第1章　序論

金属内の伝導電子を扱うとき，イオンのポテンシャルの影響が小さい場合，このイオンによる正電荷を塗りつぶし一様媒質とみなし，その中で電子が互いにクーロン相互作用をしながら運動しているという電気的に中性な模型が使われる．この模型を電子気体模型という．たとえば，アルカリ金属内の伝導電子系ではこの模型がよい近似になっていると考えられている．この電子気体ではクーロン相互作用による電子間の相関が中心課題である．また，電子気体の状態を指定する唯一のパラメーターは一電子あたりの平均体積を球とみなしたときの半径を原子単位で測った $r_s$ である．

この相互作用をしている電子気体の最初の量子論的な取り扱いは Sommerfeld[1] によってなされた．Sommerfeld[1] は電子間のクーロン相互作用を無視し，一電子の平面波状態を用い，Pauli の原理を考えることにより問題の多体的な側面を考慮するという自由電子近似を考えた．しかし，この自由電子近似では，Wigner と Seitz[2] の方法によって金属の凝集エネルギーを求めてみると，正の値となり金属結合を許さない結果を与えた．また，Pauli[3] は自由電子近似でスピン帯磁率を求めたが，アルカリ金属の Li と Na の実測値に対してオーダーの一致のみしか得られなかった．自由電子近似の欠点は，電子の位置の間に相関が無いため電子の斥力ポテンシャルエネルギーの高い近距離に 2 電子が長時間接近していることである．Hartree—Fock 近似[4] は Pauli の原理によって，平行スピンの電子同志を遠ざけるように作用する交換相関の効果を取り入れ，自由電子近似の欠点をいく

らか改善した．この交換エネルギーのため，電子系のエネルギーは自由電子近似の場合より下がり，アルカリ金属の凝集エネルギーは金属結合に好ましい方向に少し近づいたが，依然実験とのよい一致は得られなかった．Hartree—Fock 近似では，同種スピンの電子は互いに避けあうので，ある電子の周りには他の電子の密度が減少し，いわゆる exchange hole が生ずる．したがって，自由電子の代わりに exchange hole をひきずった電子を扱うことになる．この修正された電子像は準粒子と呼ばれる．Hartree—Fock 近似における準粒子のエネルギーから求めた低温の電子比熱は温度の対数の逆数の因子をもち，実験とまったく一致しないことが Bardeen[5] により示された．この Hartree—Fock 近似の欠点はクーロン相互作用による電子の位置の相関を無視したことによる．相関は電子同志を遠ざけ，したがって系のエネルギーを下げる働きをする．このクーロン相関を自由電子模型に取り入れることにより Hartree—Fock 近似の欠点を改良するため，クーロン相互作用を電子の運動エネルギーに対して小さい摂動と仮定し 2 次の摂動エネルギーを計算すると，クーロン相互作用が長距離力であることに起因して，この摂動エネルギーに発散が生じてしまう．この発散の困難を解決するために Wigner[6), 7)] と Bohm と Pines[8), 9)] はそれぞれ違った方法を用いた．Wigner[6), 7)] は高密度の系，$r_s \ll 1$，に対しては波動関数として↑スピンと↓スピンの 1 粒子波動関数からなる Slater 行列式の積を考え，反平行スピンをもつ電子間のクーロン相互作用による相関は，↑スピンの 1 電子波動関数が全↓スピンの電子の位置によっていると仮定することにより考慮した．こ

の波動関数を用いて全エネルギーが最小になるように変分をとりエネルギーを求めた．一方，低密度の系に対してはクーロン相互作用が運動エネルギーよりも勝るため，電子系が格子を作ると仮定してエネルギーを求めた。このようにして，電子密度の両極端において得られたエネルギーの表式を用いて，中間の密度，すなわち金属電子密度，の系に対するエネルギーを内挿法により評価した．しかし，実際の金属電子密度，$2 \leq r_s \leq 6$，に対してこの内挿による結果が正しいという理論的な根拠はない．一方，Bohm と Pines[8), 9)] はクーロン相互作用の長距離効果をプラズマ振動として分離し，残りの自由度は遮蔽された独立粒子となるようにカノニカル変換を行った。実際はプラズマ振動間の相互作用が残るが，これは高密度では弱いので無視する近似を行った．この近似は Random Phase Approximation (RPA)[8), 9), 10), 11), 12), 13)] と呼ばれている．その後 Macke[14)] および Gell－Mann と Brueckner[15)] は電子気体に摂動論が適用でき，もし始めの発散する項で止めないで各次数の most divergent な項の全数列の和を Feynman ダイアグラムを用いて求めると，全体として収束した基底状態のエネルギーの値が得られることを示した．Gell－Mann と Brueckner の方法は，このように巧みにクーロン相互作用の長距離力の性質からくる発散を取り除き，高密度な電子気体について正確な基底状態のエネルギーを与えたが，やはり現実の金属電子密度領域については適用できなかった．Sawada 達[16), 17)] は運動方程式の方法を用い，Gell－Mann と Brueckner[15)] の級数和の方法からも Bohm と Pines[8), 9)] が求めたプラズマ振動からのエネルギーへの寄与が導かれること

を示した。

Nozières と Pines[18] は古典論からの類推により，量子論的な多体系に対して線型応答関数である波数ベクトル $\mathbf{q}$ と振動数 $\omega$ に依存する誘電関数を導入し，摂動論によらないで系の基底状態のエネルギーがこの誘電関数によって表現されることを示した。ここで簡単に誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ について説明される。電子気体に弱い外部試電荷 $z\rho^{ext}(\mathbf{r},t)$ が入れられたときの巨視的なポアッソン方程式は

$$\mathrm{div}\ \mathbf{D}(\mathbf{r},t) = 4\pi z\rho^{ext}(\mathbf{r},t) \quad , \tag{1-1}$$

$$\mathrm{div}\ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = 4\pi[-e\delta n(\mathbf{r},t)+z\rho^{ext}(\mathbf{r},t)] \quad , \tag{1-2}$$

ここで $\mathbf{D}(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ はそれぞれ変位場ベクトルと電場ベクトルであり，$-e\delta n(\mathbf{r},t)$ は外部試電荷により電子気体内に誘起される電荷密度である。$\mathbf{D}(\mathbf{r},t)$ と $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ のフーリエ成分をそれぞれ $\mathbf{D}(\mathbf{q},\omega)$ と $\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega)$ と書くと，誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は巨視的な場合の定義から類推して

$$\mathbf{D}(\mathbf{q},\omega) = \varepsilon(\mathbf{q},\omega)\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega) \quad , \tag{1-3}$$

で定義される。空間が等方的であるので（1－3）式における $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ はスカラーである。

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = -\mathrm{grad}\ \phi^{ext}(\mathbf{r},t) \quad , \tag{1-4}$$

によって定義される外部ポテンシャル $\phi^{ext}(\mathbf{r},t)$ を用いると $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は（1－1），（1－2），（1－3）および（1－4）式から

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)} - 1 = - \frac{V(\mathbf{q})\,\delta n(\mathbf{r},t)}{e\phi^{ext}(\mathbf{q},\omega)} \quad , \tag{1-5}$$

となる．（1－5）式において $\phi^{ext}(\mathbf{q},\omega)$ と $V(\mathbf{q})$ はそれぞれ $\phi^{ext}(\mathbf{r},t)$ とクーロン相互作用 $V(\mathbf{r}) = e^2/|\mathbf{r}|$ のフーリエ成分である。以上の $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の導出は巨視的な場合からの類推によって行われたが，微視的な場合でも（1－5）式を $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の定義と考える．このように定義された誘電関数から空間と時間に関して変動する弱い外場に対する応答，密度の揺らぎの励起スペクトルや密度の揺らぎの間の相関をも知ることができるため，誘電関数を正確に求めることは大変に重要である．最初，誘電関数は Lindhard[19] により RPA により求められた．しかし，これから得られた正定値符号であるべき対分布関数 $g(\mathbf{r})$，これは原点に 1 電子が見いだされたとき別の1電子が距離 r だけ離れた所に見いだされる確率である，が r が小さいとき高密度以外では負になるという結果になり，金属電子密度領域において RPA は成立していないことがわかる．RPA の欠点は short range 効果が無視されていることによる．

RPA を超えた近似理論を得る最初の試みは Hubbard[20] と Nozières と Pines[21] によってなされた．Hubbard[20] は bubble ladder ダイアグラムの無限和を近似的に求めることにより，相関エネルギーに対する exchange term からの寄与を考慮した．一方，Nozières と Pines[21] の方法は相関エネルギーに対する大きい運動量の transfer と小さな運動量の transfer の寄与の間の内挿にもとづいている．

両者の方法は共に，RPA では正しく取り入れられていない大きい運動量の transfer に対しては，反平行スピンの電子間相互作用がエネルギーに主に効くという考えにもとづいている．Hubbard 近似[20] による誘電関数は RPA よりよい物理的な結果を与えるが，これから得られた対分布関数は，電子の間隔が小さいとき，金属電子密度領域で依然として負になる． この欠点は Hubbard[20] の誘電関数が Hartree—Fock 近似で exchange hole を考慮している程度にしか局所場の補正を取り入れていないことによっている．金属電子密度では電子間相互作用が大きな役割を演じているので， Coulomb hole に関連した局所場の補正も考慮されなければならない．一方，Gaskell[22] は Rayleigh—Schrödinger の変分法を用い，Slater 行列式と相関関数の積で波動関数を求め，基底状態のエネルギーと対分布関数を計算した．対分布関数は金属電子密度領域でやはり負となった。

Singwi 達 (STLS)[23] および Hubbard[24] は古典的リュービュ方程式を用いて誘電関数を対分布関数のフーリエ成分の汎関数として求め，局所場の補正に関与する短距離相関を取り入れた．ここで簡単に STLS[23] の理論を説明しよう。 (1—5) 式から $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を求めるためには，外部ポテンシャルがかけられたときの系の電荷密度のずれを求めることが必要となる．古典論では，外部ポテンシャルのある場合の 1 粒子分布関数 $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する古典的リュービュ方程式を解くことにより，弱い外部ポテンシャルによる $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ のずれを求め，これから系の電荷密度のずれが求められる。この古典的リュービュ方程式の中に現れる 2 粒子分布関数 $f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ が次のように $f(\mathbf{r},$

$\mathbf{p};t)$ の積で近似された．

$$f(\mathbf{r};\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)f(\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{1-6}$$

ここで $g(\mathbf{r})$ は平衡状態での対分布関数である．$f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対するリューピュ方程式を解くことにより，$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 + \frac{Q_0(\mathbf{q},\omega)}{1-G(\mathbf{q})Q_0(\mathbf{q},\omega)} \quad , \tag{1-7}$$

と得られる．ここで $Q_0(\mathbf{q},\omega) = -V(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q},\omega)$，$\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ は自由電子に関する分極率であり，$G(\mathbf{q})$ は次式で与えられる。

$$G(\mathbf{q}) = -\frac{1}{n}\int\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'}{q'^2}[S(\mathbf{q}-\mathbf{q}')-1]\frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \quad , \tag{1-8}$$

ここで $S(\mathbf{q})$ は静的構造因子で，

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n\{g(\mathbf{q})-\delta(\mathbf{q})\} \tag{1-9}$$

によって与えられる．ここで $g(\mathbf{q})$ は $g(\mathbf{r})$ のフーリエ成分で，$\delta(\mathbf{q})$ はデルタ関数である．$S(\mathbf{q})$ は次の厳密な関係式[25)]

$$S(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar q^2}{4\pi^2 e^2 n}\int_0^\infty \mathrm{Im}\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)}d\omega \tag{1-10}$$

によって $\varepsilon(q,\omega)$ と結ばれているので，$S(\mathbf{q})$ と $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は（1－7），（1－8）および（1－10）式から self－consistent に計算される。STLS[23)] はこの self－consistent な数値計算を行うことにより，数値的に $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を求め，この $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の結果を用いることにより

$r_s \leq 4$ に対して対分布関数は正と求められ，RPA や Hubbard 近似によって求められた結果より大変改善された結果が得られた。しかし，圧縮率 sum rule は満足されず，すなわち $\varepsilon(y,\omega)$ の長波長の極限から導かれる圧縮率が基底状態エネルギーを $r_s$ で 2 階微分して得られる圧縮率と一致せず，また Lobo 達[26] が示したように STLS[23] の方法をスピン相関に拡張して求めたスピン帯磁率は Na の実験値[27],[28] の 2 倍の大きさになり実験値と一致しない結果となった。

圧縮率 sum rule を満たすように Hubbard[20] の誘電関数の中にパラメーターを導入する方法が Sham[29] と Geldart と Vosko[30] により示されたが，この方法でもやはり金属電子密度領域において対分布関数を正にすることができなかった。その後 Singwi 達 (SSTL)[31] は対分布関数に外場の影響を考慮し，STLS[23] の理論の有効ポテンシャルの局所場の項の中に入るクーロン相互作用を静的な誘電関数で遮蔽することにより，STLS[23] の理論を改善した。SSTL[31] の理論では，圧縮率 sum rule は近似的に満たされ，スピン帯磁率の値は実験値により近い値が得られた。しかし，$r_s > 3$ に対して対分布関数は近距離で依然として負のままであった。このように金属電子密度領域で同時に対分布関数が正で，かつ圧縮率 sum rule を満たすような理論を作ることは困難であるが，重要な問題である。

そこでこの論文では，第 2 章に示したように Schneider 達[32],[33] が提案した方法を用いて，対分布関数に対する外場の影響を取り入れることにより，Schofield[34] が示したように，電子気体における三体相関の効果が近似的に考慮される。したがって，STLS[23] と同じ方

法によって古典的リュービュ方程式から，Schneider 達[32), 33)] の近似を用い，self－consistent にかつ数値的に電子気体の誘電関数を求め，これから電子気体における対分布関数，相関エネルギー，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係を求める．このとき，古典的リュービュ方程式を解いて得られる誘電関数の表式の中に現れる古典的な分極率および構造因子を STLS[23)] と同様に，対応する量子論での量で置き換えることにより，量子論での誘電関数が得られるとする。Schneider 達[32), 33)] の近似は古典的には圧縮率 sum rule を厳密に満たすが，量子論的には満たしていないことが Vashishta と Singwi[35)] によって示された．そこで彼らは Schneider 達[32), 33)] の方法にさらにパラメーターを導入し，量子論的にも圧縮率 sum rule をほぼ満たすように経験的にこのパラメーターの値を決定した．しかし，このパラメーターの導入の正当性を理論的に説明することはまだはっきりとなされていない[36), 37)]。以上のような方法によって得られた対分布関数のわれわれの結果は $r_s \leq 3$ で正であるが，$r_s \geq 4$ ではやはり短距離で負となる。しかし，圧縮率 sum rule は近似的に満たされており，相関エネルギーの結果は STLS[23)] の結果に近い値が得られた。

電子気体のスピン帯磁率については，Pauli[3)] の自由電子模型による計算が行われて以来，多くの人達によってクーロンの電子間相互作用の効果を取り入れる努力がなされた．スピン帯磁率に対する交換相互作用の重要性は最初 Bloch[38)] により電子気体の強磁性の議論に関連して指摘され，一方，相関の重要性は Wigner[6)] によって指摘された。Sampson と Seitz[39)] は交換エネルギーおよび Wigner[6)] によっ

て与えられた相関エネルギーを同時に考慮することにより，Na と Li に対するスピン帯磁率を求めた．Sampson と Seitz[39] の理論は全エネルギーを↑スピンによる項と↓スピンによる項に完全に分離し，↑（または↓）スピンの電子に対する相関の効果が↓（または↑）スピンの電子の密度にも依存していることを無視したため，平行スピンの電子間の相関および反平行スピンの電子間の相関が同時に重要な高密度でこの理論はよくないし，金属電子密度でもよい結果を与えない。Pines[40] は，Bohm と Pines[8),9)] のプラズマ模型による電子気体の相関エネルギーの計算結果を用い，カットオフ波数がスピン分極によって変化しないという仮定のもとで Sampson と Seitz[39] の方法でスピン帯磁率を計算し，帯磁率の問題に対する相関エネルギーの重要性を示した。Brueckner と Sawada[41] は Gell—Mann と Brueckner[15] によって与えられた電子気体における相関エネルギーの理論を用い，$r_s \ll 1$ で厳密に成り立つスピン帯磁率の表式を導いた．Bohm と Pines[8),9)] の方法の帯磁率の計算への応用は Shimizu[42] および Silverstein[43] によってなされた．相互作用の波数の小さい部分からのエネルギーへの寄与は RPA の表式，すなわち Shimizu[42] は Bohm と Pines[8),9)] の集団座標の方法，Silverstein[43] は bubble ダイアグラムの無限和を用い，波数の大きい部分からの寄与は摂動計算により，磁気的な分極状態における全エネルギーを求め，これからスピン帯磁率を計算する方法が用いられた。Silverstein[43] は内挿法によって中間の波数からエネルギーへの寄与を計算した．Rice[44] は Hubbard 近似を用い，Landau[45] の Fermi 液体理論によってスピン帯磁率を計算

した。

空間的に変動する外部磁場に対する応答関数である一般化帯磁率 $\chi(\mathbf{q})$ は拡張された RPA を用い Wolff[46] によって初めて計算され，クーロン相互作用によって帯磁率が増進（enhance）されることが示された。さらに波数ベクトル $\mathbf{q}$ と振動数 $\omega$ に依存する一般化帯磁率 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ は Izuyama 達[47] により強磁性の問題に関連して導入され，スピン相関のダイナミカルな振る舞いのみならず静的な振る舞いを扱うのに大変重要であることが示された。STLS[23] の理論をスピン相関に拡張することにより，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の摂動論によらない計算が Lobo 達[26] によってなされた。↑スピンと↓スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(r)$ は $r_s \leq 4$ で正となったが，スピン帯磁率の計算値は Na と Li の実験値[27), 28] に一致しなかった。SSTL[31] の理論は実験値により近いスピン帯磁率の結果を与えたが，$g_{\uparrow\downarrow}(r)$ の結果は Lobo 達[26] の結果より悪くなっている。

第 3 章において，第 2 章で説明される Schneider 達[32), 33] の近似を用いた誘電関数の計算法が $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の計算へ拡張され，self-consistent に $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が数値計算される。この $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の結果から，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，↑スピン同志の対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率が計算され，いろいろな以前の結果と比較される．得られたスピン帯磁率の結果は Na の実験値[28] によく一致し，高密度領域では厳密な Brueckner と Sawada[41] の結果に非常に近い。

STLS[23]，Vashishta と Singwi[35] 達の行った計算および第 2 章に

示された計算では，弱い外部ポテンシャルがかけられたときの古典的な一粒子分布関数に対する運動方程式を解いて誘電関数の表式を導き，その中の古典的な自由電子に関する分極率と構造因子を対応する量子論的な量ですりかえることにより，誘電関数への量子論的な効果を考慮した。しかし，このようにして得られた誘電関数は Sham[36] が示したように厳密な量子論的な量ではない．そこで第 4 章において，古典的な一粒子分布関数に対応する量子論的な量である Wigner 分布関数[48), 49), 50), 51)] に対する運動方程式の解から誘電関数の量子論的な表式が導かれる． Kubo[51] が示したように，Wigner 分布関数は物理量を$\hbar$で展開する系統的な方法を与え，古典的な物理量の量子論的な補正を得るのに大変有用である． Wigner 分布関数に対する運動方程式の中に現れる二粒子分布関数に対して，STLS[23] が古典論で用いた近似と同様の近似を用い，これを $g(\mathbf{r})$ と Wigner 分布関数の積で置き換え，self－consistent に誘電関数と構造因子 $S(\mathbf{q})$ が数値計算される．この $S(\mathbf{q})$ の収束値から，電子気体について対分布関数 $g(\mathbf{r})$，相関エネルギー，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係が金属電子密度領域で計算される．ここでの $g(\mathbf{r})$ の計算結果は $r_s \leq 6$ で正となり，金属電子密度領域で $g(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件が初めて満たされる結果となったことは重要なことである．

第 5 章では，スピン相関の問題に第 4 章において説明された誘電関数を求めるために用いられた Wigner 分布関数の方法を適用し，また古典論で Lobo 達[26] が行った近似と類似の近似を用いることによって，$\chi(\mathbf{q},\omega)$ の表式が導かれ，self－consistent に $\chi(\mathbf{q},\omega)$ お

よび磁気的構造因子 $\tilde{S}(\mathbf{q})$ が計算される。この $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の結果から $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$, $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率が $r_s \leq 6$ に対して数値計算される。$g_{\uparrow\uparrow}(r)$ は Pauli の排他律に強く支配されて決定されているが，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ にはクーロン相関の効果が直接反映するので，クーロン相関がどの程度考慮されたか調べるのに好都合である。ここで得られた $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果は $r_s \leq 6$ に対して常に正になり，正定値符号の条件が満足されているので，クーロン相関が適切に取り入れられていることがわかる。

第 6 章では，有限の磁場の中での電子気体のプラズマ振動の分散関係が調べられる。電子気体の集団運動であるプラズマ振動は，有限の磁場のもとでは Landau 準位[52] の出現のために，磁場のない場合とは違った振る舞いを示す。磁場中のプラズマ振動は量子論により RPA を用い初めて Zyryanov[53] によって調べられた。Zyryanov[53] によって求められたプラズマ振動の分散関係は Stephen[54] によりダイアグラムの方法でも導かれた。プラズマ振動による超音波吸収の RPA による取り扱いは Quinn と Rodriguez[55] によってなされた。Mermin と Canel[56] は RPA でプラズマ振動の分散関係を詳しく調べ，いろいろな集団励起状態を示し，またそのダンピングを計算した。ここでは長波長の極限での磁場中のプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の寄与が，拡張された RPA の範囲内で，運動方程式の方法を用いて調べられる。磁場のない場合のプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の寄与は，Kanazawa 達[57] によって調べられ，それは波数ベクトル $\mathbf{q}$ の 2 乗の項に寄与すること

が見いだされた。ここでは Edwards[58] が磁場中のスピン波を求めた方法に類似の運動方程式の方法を用い，exchange scattering の寄与が磁場中のプラズマ振動に対して計算され，磁場方向の波数ベクトル $\mathbf{q}$ をもつプラズマ振動に対して exchange scattering は分散関係に $\mathbf{q}$ の 2 乗に比例する項を与え，磁場に垂直方向のそれに対しては定数項を与えていることが見いだされた。

第 7 章では全体の結論と討論が与えられる。

## 第2章　古典的リューピュ方程式による電子相関

### §2－1 序

この章では，古典的リューピュ方程式を用い，電子気体のクーロン相互作用による電子相関が扱われる．対分布関数 $g(\mathbf{r})$，相関エネルギー，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係に対するクーロン相互作用の影響が調べられる．第1章で述べたように，$r_s \lesssim 6$ の金属電子密度においては運動エネルギーに比べてクーロン相互作用は小さいとみなせないので，摂動論でこれを取り扱うことは困難である．この事実は，Gell－Mann と Brueckner[15] の摂動論的な取り扱いにおけるように，most divergent term の級数和から求められた基底状態のエネルギーの結果が $r_s \ll 1$ でのみ成り立ち，$2 \lesssim r_s \lesssim 6$ ではよい結果を与えていないことからも明らかである。Nozières と Pines[18] は，波数ベクトル $\mathbf{q}$ と振動数 $\omega$ で揺れている弱い電場がかけられたときの系の線型応答関数である誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ から，平衡状態にある電子気体の物理的な性質が摂動論によらないで求められることを示した．$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は，外乱による系の動的な振る舞いを記述するので，これからプラズマ振動のスペクトルを知ることができるが，これのみならずまた静的な性質，すなわち，基底状態エネルギー，圧縮率や対分布関数の知識をも得ることができる．したがって，電子気体について $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ をよい近似で求めることが重要であり，かつ有効である．

電子気体の $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は初めて Lindhard[19] によって RPA で計算

された。この RPA はまた Ehrenreich と Cohen[10] により self-consistent field method と等価であることが示された。RPA では，局所場の補正が無視されており[18), 59)]，$r_s \ll 1$ でのみ成り立つ。事実，$r_s > 1$ ではポテンシャルエネルギーと運動エネルギーが互いに同程度の大きさなので RPA は成り立たない。$2 \leq r_s \leq 6$ では RPA が破たんすることは，$g(\mathbf{r})$ が $r$ が小さいとき負になることからもわかる。Hubbard[20] は bubble ladder ダイアグラムの無限和の中で交換項を近似的に取り入れて RPA の結果を改良した。しかし，Brouers[60] が示したように，Hubbard[20] の与えた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ はやはり $2 \leq r_s \leq 6$ において小さい $r$ に対して $g(\mathbf{r})$ を負にする。Hubbard 近似の欠陥は，STLS[23] が示したように，局所場の補正において短距離の相関が無視されたことによる。STLS[23] の理論では，クーロン相互作用および交換相互作用から生ずる短距離の相関を取り入れるために，古典的リューピュ方程式の方法を用い，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ が $g(\mathbf{r})$ のフーリエ成分の汎関数で表されるように近似した。STLS[23] による $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の self-consistent な数値計算の結果によれば，$g(0)$ が $r_s \leq 4$ で正となり，RPA や Hubbard[20] の結果に比べて大きな改善となった。しかし，STLS[23] の理論は小さな $\mathbf{q}$ に対して圧縮率 sum rule を満たさない。すなわち，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の長波長の極限から導かれる圧縮率が基底状態エネルギーの $r_s$ についての 2 階微分から得られる圧縮率と一致しない。さらに，STLS[23] の理論をスピン相関の問題に拡張した Lobo 達[26] の計算によると，スピン帯磁率の値は Na の実験値の 2 倍となった。

Hubbard 近似で求められた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ にパラメーターを導入し，圧縮率 sum rule を満たすようにこのパラメーターの値を決める試みがなされたが，[29), 30)] $g(\mathbf{r})$ が r が小さい所で負になるという欠陥は改善されなかった。一方，SSTL[31)] は $g(\mathbf{r})$ に対する外場の影響を考慮することにより，STLS[23)] の結果を改良した。SSTL[31)] の理論では，局所場の補正項の中のクーロン相互作用の遮蔽が静的な誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q})$ を通して考慮された。SSTL[31)] の計算結果では，圧縮率 sum rule は近似的に満たされ，スピン帯磁率の計算値は Na に対して STLS[23)] の結果より測定値に近い値となった。しかし，$g(0)$ は $r_s \geq 3$ で負となる。

Schneider 達[32), 33)] は，古典的リュービュ方程式の中に現れる二粒子分布関数を近似するときに用いる対分布関数に，三体相関の効果も近似的に取り入れられることにより，厳密に圧縮率 sum rule を満たすことができることを示した。しかし，このやり方は Vashishta と Singwi[35)] が示したように，量子論では圧縮率 sum rule を厳密には満たさない。そこで Vashishta と Singwi[35)] は Schneider 達[32), 33)] の方法にパラメーターを導入し，圧縮率 sum rule を満たすようにこのパラメーターの値を決定した。しかし，このパラメーターの導入の妥当性を理論的に説明することは難しい。

この章では，Schneider 達[32), 33)] の近似を用い，STLS[23)] と同様にして $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を self-consistent に数値計算し，これから電子気体について $g(\mathbf{r})$，プラズマ振動の分散関係，圧縮率および相関エネルギーが求められる。§2-2 では，Schneider 達[32), 33)] の近似を用い，STLS[23)] のやり方で $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の求め方が示される。§2-3

では，$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を self－consistent に数値計算し，$g(\mathbf{r})$，相関エネルギー，凝集エネルギーおよび圧縮率が求められ，以前の結果と比較される．§2－4 では，プラズマ振動の分散関係と圧縮率が長波長の極限で計算される．§2－5 では結論と討論が与えられる。

## §2－2．古典的リュービュ方程式による誘電関数

この節では，Schneider 達[32), 33)] の近似と STLS[23)] の方法を利用して，$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の導出がなされる．古典的な一粒子分布関数 $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する運動方程式は，弱い外部ポテンシャル $\phi^{ext}(\mathbf{r},t)$ のあるとき，次のように与えられる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - \int \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}-\mathbf{r})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)\,d^3p'\,d^3r'$$

$$= \nabla_{\mathbf{r}}\phi^{ext}(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) \quad , \qquad (2\text{-}1)$$

ここで $f(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ は二粒子分布関数で，$V(\mathbf{r})$ はクーロン相互作用である。（2－1）式は，$f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ の存在のため，$f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に関して閉じた形になっていない。（2－1）式を解くため，次のように $f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ を近似する

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)\,f(\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)\,g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t) \quad , \qquad (2\text{-}2)$$

ここで $g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ は対分布関数である．（2－2）式で $g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)=1$ と仮定すると，（2－1）式はLandau－Vlasov 方程式となり，以下に説明するのと同様の手続きを実行すれば，RPA での $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ が得られる．

Schneider 達[32), 33)] は，弱い外部ポテンシャルによる点 $\mathbf{r}$ での局所的な電子密度の揺らぎ $\delta n(\mathbf{r},t)$ に対する $g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ の依存性を考慮し，次のように仮定した．

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t) = g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)+\frac{1}{2}\{\delta n(\mathbf{r},t)+\delta n(\mathbf{r}',t)\}\frac{\partial g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\partial n} , \tag{2－3}$$

ここで $g(\mathbf{r})$ は平衡状態での対分布関数，$n$ は平均電子密度である。（2－3）式の右辺の第2 項を無視すれば，近似式（2－3）は STLS[23)] の近似に一致する．（2－3）式の右辺の第2 項は $\omega=0$，$\mathbf{q}=0$ での弱い静的な外場に対する 線型応答の範囲内で厳密な次のような表式からの類推によって仮定された．

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}';t) = g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) + \delta n\frac{\partial g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\partial n} , \tag{2－4}$$

ここで $\delta n$ は弱い静的な外場によって引き起こされる電子密度の変化である。（2－3）式の $\partial g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)/\partial n$ は Schofield[34)] によれば次式のように三体の対分布関数 $g_3(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ と関係している．

$$\frac{\partial\{n^2 g(\mathbf{r})\}}{\partial n} = \frac{2ng(\mathbf{r})+n^2\int\{g_3(\mathbf{r},\mathbf{r}')-g(\mathbf{r})\}d^3r'}{1+n\int\{g(\mathbf{r})-1\}d^3r} \tag{2－5}$$

したがって，(2－3) 式は三体相関をも部分的に取り入れたことになる．Ushneider 達[32),33)] は，(2－3)式を用いる場合には virial の定理から圧縮率 sum rule が満足されることを示した．しかし，近似式 (2－3) を用い，以下に示すように STLS[23)] の方法によって $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を求め，しかもその中に現れる古典的な自由電子に関する分極率を対応する量子論的な分極率で置き換えることによって求められた $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を用いる場合には，Vashishta と Singwi[35)] が示したように，圧縮率 sum rule は厳密には満たされない。そこで Vashishta と Singwi[35)] は (2－3) 式の右辺の第2 項の係数 1/2 をパラメーター a で置き換え，経験的に $a=2/3$ とすると，圧縮率 sum rule がほとんど満たされることを見いだした。このパラメーターの導入の妥当性を理論的に証明することは困難であるので[36),37)]，ここでは近似式 (2－3) をそのまま用いる。

弱い外部ポテンシャル $\phi^{ext}(\mathbf{r},t)$ による $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ の平衡値 $f^0(\mathbf{p})$ からのずれ $f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を

$$f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - f^0(\mathbf{p}) \quad , \qquad (2-6)$$

によって定義すると，$\delta n(\mathbf{r},t)$ は

$$\delta n(\mathbf{r},t) = \int f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)d^3p \quad , \qquad (2-7)$$

によって与えられる．(2－1) 式に (2－2) と (2－3) 式を用い，外場に関する1 次の項だけを残すと，$f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ の方程式として

$$\frac{\partial f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \int d^3r' \nabla_{\mathbf{r}} V_{eff}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f^0(\mathbf{p})\,\delta n(\mathbf{r}',t)$$

$$= \nabla_{\mathbf{r}}\phi^{ext}(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f^0(\mathbf{p}) \quad , \tag{2-8}$$

が得られる。ここで有効ポテンシャル $V_{eff}(\mathbf{r})$ は次式で与えられる。

$$\nabla_{\mathbf{r}} V_{eff}(\mathbf{r}) = \{g(\mathbf{r}) + \frac{n}{2}\frac{\partial g(\mathbf{r})}{\partial n}\}\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad . \tag{2-9}$$

(2—8) 式をフーリエ変換することによって，(2—8) 式は次のように解かれる。

$$\delta n(\mathbf{q},t) = -\frac{Q_0(\mathbf{q},\omega)\phi^{ext}(\mathbf{q},\omega)}{v(\mathbf{q})+v(\mathbf{q})(1-G(\mathbf{q}))Q_0(\mathbf{q},\omega)} \quad , \tag{2-10}$$

ここで

$$v(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/q^2 \quad , \tag{2-11}$$

$\delta n(\mathbf{q},\omega)$ は $\delta n(\mathbf{r},t)$ のフーリエ成分であり，$G(\mathbf{q})$ と $Q_0(\mathbf{q},\omega)$ は次式で与えられる。

$$G(\mathbf{q}) = -\frac{1}{2n}\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'}{q'^2}\{S(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)-1 + n\frac{\partial S(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)}{\partial n}\} \quad , \tag{2-12}$$

$$Q_0(\mathbf{q},\omega) = -V(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q},\omega) \quad . \tag{2-13}$$

$\chi_0(q, \omega)$ は通常の自由電子に関する分極率であり，古典論では

$$\chi_0(\mathbf{q},\omega) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{q}\cdot\nabla_p f^0(\mathbf{p})}{-\omega+\mathbf{v}\cdot\mathbf{q}-i\eta} \tag{2-14}$$

によって与えられる．$\eta$ は正の微少量である．(2—12) 式の中の構造因子 $S(\mathbf{q})$ は $g(\mathbf{r})$ のフーリエ成分 $g(\mathbf{q})$ と次のように関係している．

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n\{g(\mathbf{q})-\delta(\mathbf{q})\} \quad , \tag{2-15}$$

$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ は (1—5) 式によって定義されるので，(2—10) 式から $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ が次のように書かれる．

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 + \frac{Q_0(\mathbf{q},\omega)}{1-G(\mathbf{q})Q_0(\mathbf{q},\omega)} \quad . \tag{2-16}$$

(2—16) 式から，$G(\mathbf{q})$ が局所場の補正を与える項であることがわかる．揺動散逸の定理により $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は $S(\mathbf{q})$ と次のように関係している[25]．

$$S(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar q^2}{4\pi^2 ne^2} \int_0^\infty d\omega \mathrm{Im} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)} \quad . \tag{2-17}$$

(2—12)，(2—16) および (2—17) 式は $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を求めるために self—consistent に解くべき方程式の組を与える．電子気体は当然量子論で取り扱われるべきであるので，STLS[23] と同様に，この

論文では（2－14）式の $\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ を次式

$$\chi_0(\mathbf{q},\omega) = -\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{f^0(\mathbf{p}+\mathbf{q})-f^0(\mathbf{p})}{\hbar\omega-\frac{h^2}{2m}\{(\mathbf{q}+\mathbf{p})^2-p^2\}-i\eta} \tag{2-18}$$

で与えられる量子論的な式によって置き換え，次節に示すように（2－12），（2－16）および（2－17）式を self－consistentに数値計算する。

## §２－３．対分布関数,相関エネルギーおよび圧縮率の計算結果

この章以下では，$q_f$ は Fermi 波数とし，$\omega$ を $\hbar q_f^2/2m$，q を $q_f$ を単位として，表すことにする．すると（2－13）式と（2－18）式で与えられる $Q_0(\mathbf{q},\omega)$ の実部と虚部はそれぞれ次のようになる。

$$\mathrm{Re}Q_0(\mathbf{q},\omega) = \frac{\zeta}{8q^5}[8q^3+(\omega-q^2+2q)(-\omega+2q+q^2)\,\mathrm{In}\left|\frac{\omega-q(q+2)}{\omega-q(q-2)}\right|$$

$$+ (\omega+2q+q^2)(-\omega+2q-q^2)\,\mathrm{In}\left|\frac{\omega+q(q+2)}{\omega+q(q-2)}\right|] \quad , \tag{2-19}$$

$$\mathrm{Im}Q_0(q,\omega) = \frac{\pi}{2q^3}\zeta\omega \qquad : \quad q<2 \text{ かつ } 0<\omega<2q-q^2$$

$$= \frac{\pi}{2q^3}\zeta[1-\frac{1}{4}(\frac{\omega}{q}-q)^2] \quad : \quad q>2 \text{ かつ } q^2-2q<\omega<q^2+2q$$

$$\text{または } q<2 \text{ かつ } 2q-q^2<\omega<q^2+2q$$

$$= 0 \qquad : \quad \text{それ以外} \tag{2-20}$$

ここで $\zeta = (2/\pi q_f)(me^2/\hbar^2)$ 。　長さを Bohr 半径 $=\hbar^2/me^2$, エネルギーを $me^4/\hbar^2 = 27eV$ を単位とする原子単位を用い，かつ次の関係式

$$q_F^3 = 3\pi^2 n\ , \qquad q_F = (\alpha r_s)^{-1}, \qquad \alpha = (4/9\pi)^{1/3} = 0.521,$$

を用いると，(2—12) 式で与えられる $G(\mathbf{q})$ は角度について積分を実行した後，次のようになる。

$$G(\mathbf{q}) = -\frac{3}{8}\int_0^\infty dq' q'^2 \{1+\frac{q^2-q'^2}{2qq'}\ln|\frac{q+q'}{q-q'}|\}\{S(q')-1-\frac{1}{3}r_s\frac{\partial S(q')}{\partial r_s}\} \quad . \ (2\text{-}21)$$

また (2—17) 式は

$$S(\mathbf{q}) = -\frac{3}{8}\frac{1}{\alpha r_s}q^2\int_0^{2q+q^2} d\omega \mathrm{Im}\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)} + \frac{3}{8}\frac{\pi}{\alpha r_s}[\frac{\partial \mathrm{Re}\varepsilon(\mathbf{q},\omega)}{\partial\omega}]^{-1}_{\omega=\omega_p(\mathbf{q})}\ , \qquad (2-22)$$

となる。ここで (2—22) 式の右辺の第1項は電子空孔対励起からの寄与を表し，第2項はプラズマ振動からの寄与を表している項であり，$\omega_p(\mathbf{q})$ はプラズマ振動の分散関係を表している。$\omega_p(\mathbf{q})$ は §2—4で示されるように，$\mathrm{Im}\,\varepsilon(\mathbf{q},\omega)=0$ なる領域で $\mathrm{Re}\,\varepsilon(\mathbf{q},\omega)=0$ を解くことによって与えられる。

(2—16)，(2—21) および (2—22) 式を用いた self—consistent な数値計算は次のように行われる。最初に，(2—21) 式の中の $S(\mathbf{q})$ として Hartree—Fock 近似によるよく知られた次の表式[25]

$$S_{HF}(q) = \frac{1}{16}q(12-q^2) \quad : \quad 0 \leq q \leq 2$$

$$= 0 \quad : \quad q \geq 2 \quad , \quad (2\text{-}23)$$

から出発して $G(q)$ を求め，これを（2－16）式に代入して $\varepsilon(q, \omega)$ を求める．この $\varepsilon(q, \omega)$ の結果を（2－22）式に入れて再び $S(q)$ を計算すると，一回りの数値計算が終わる．これを $r_s$ に依存して約6回から8回繰り返すことにより，0．1%の誤差で $G(q)$ の収束値が得られた．このようにして収束した $G(q)$, $\varepsilon(q, \omega)$ および $S(q)$ の値のうち，$S(q)$ は後で示すように $g(r)$ ,相関エネルギー，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係を求めるために用いられる量であるので，それを $r_s = 1 \sim 6$ に対して表1に示す。

## 2－3－1．対分布関数

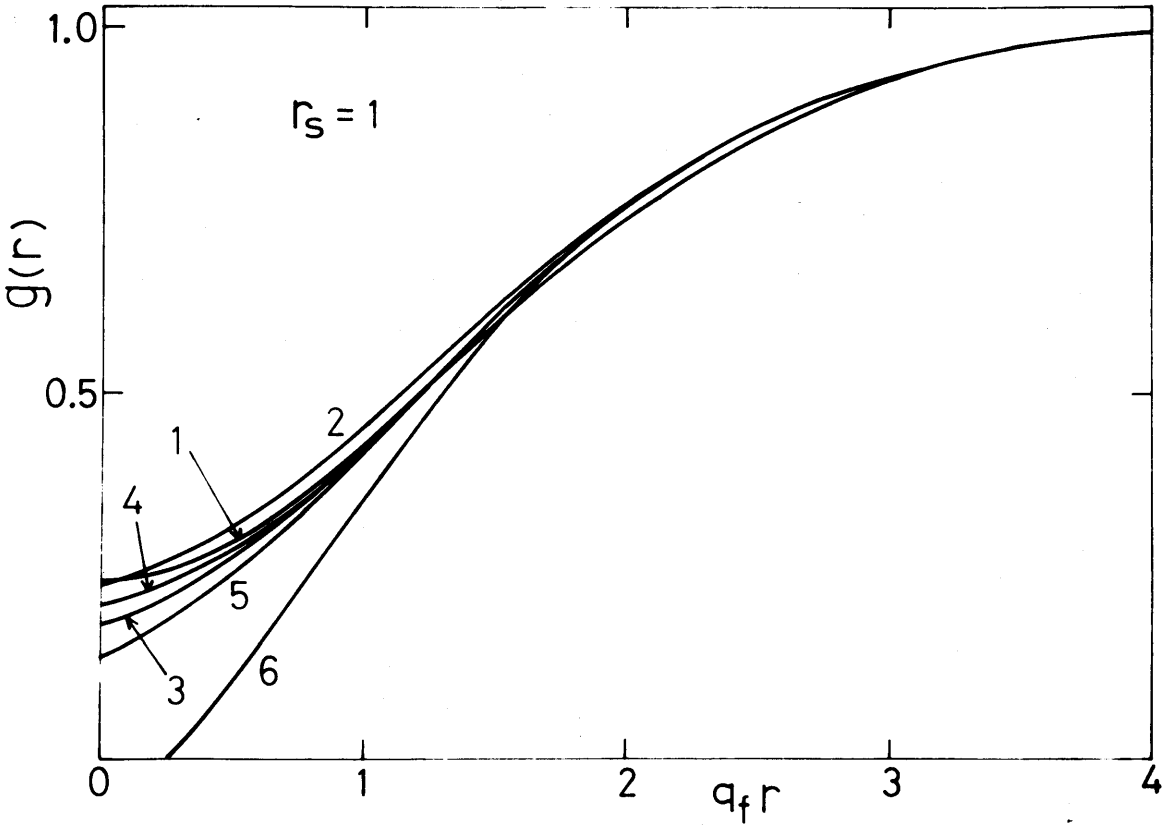
対分布関数 $g(r)$ は，（2－15）式をフーリエ変換し，角度について積分を実行することにより，次式で与えられる．

$$g(r) = \frac{3}{2}\int_0^\infty dq[S(q)-1]\frac{\sin qr}{r} + 1 \qquad (2\text{-}24)$$

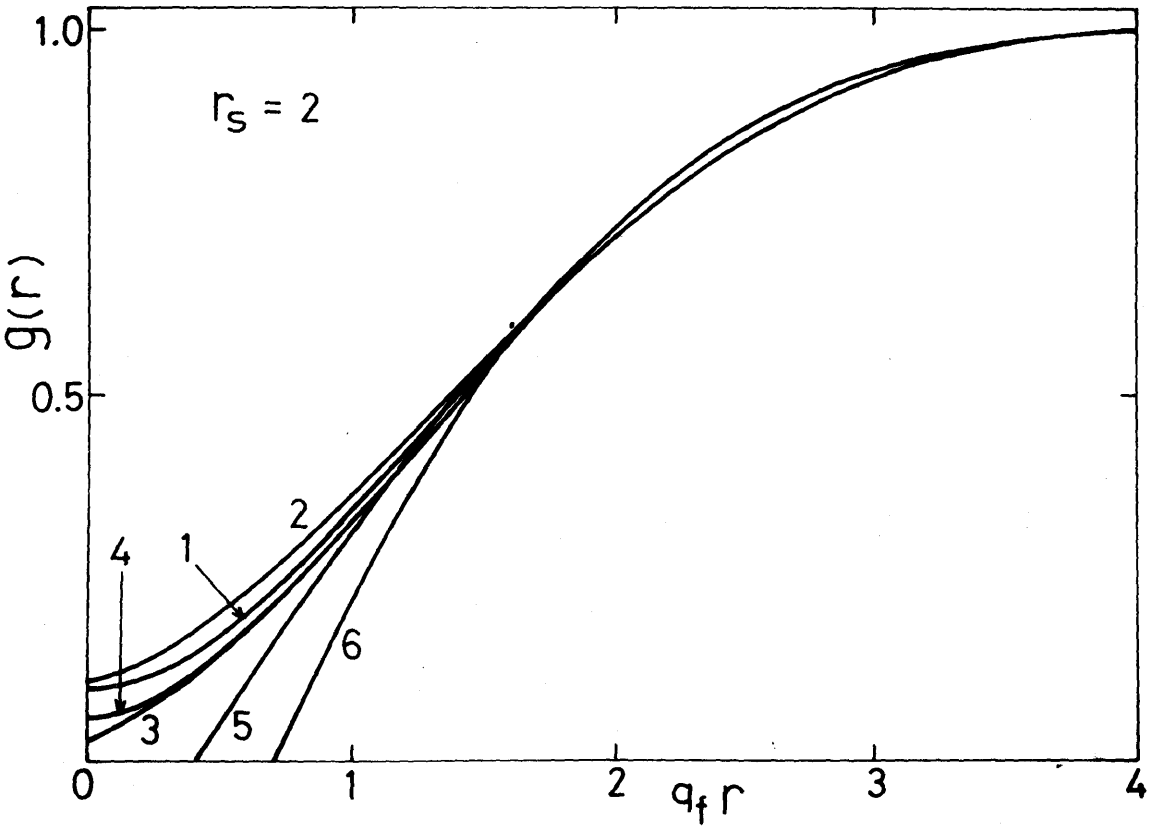
ここで $r$ は $q_f^{-1}$ を単位として測られている。表1に与えられた $S(q)$ の self－consistent な数値計算の結果を用い，（2－24）式から $g(r)$ が計算される．$r_s = 1 \sim 6$ に対して得られた $g(r)$ の結果をそれぞれ，図1～6に他の結果と共に示す．図1～6において曲線1は

表 1　　S(q) の値

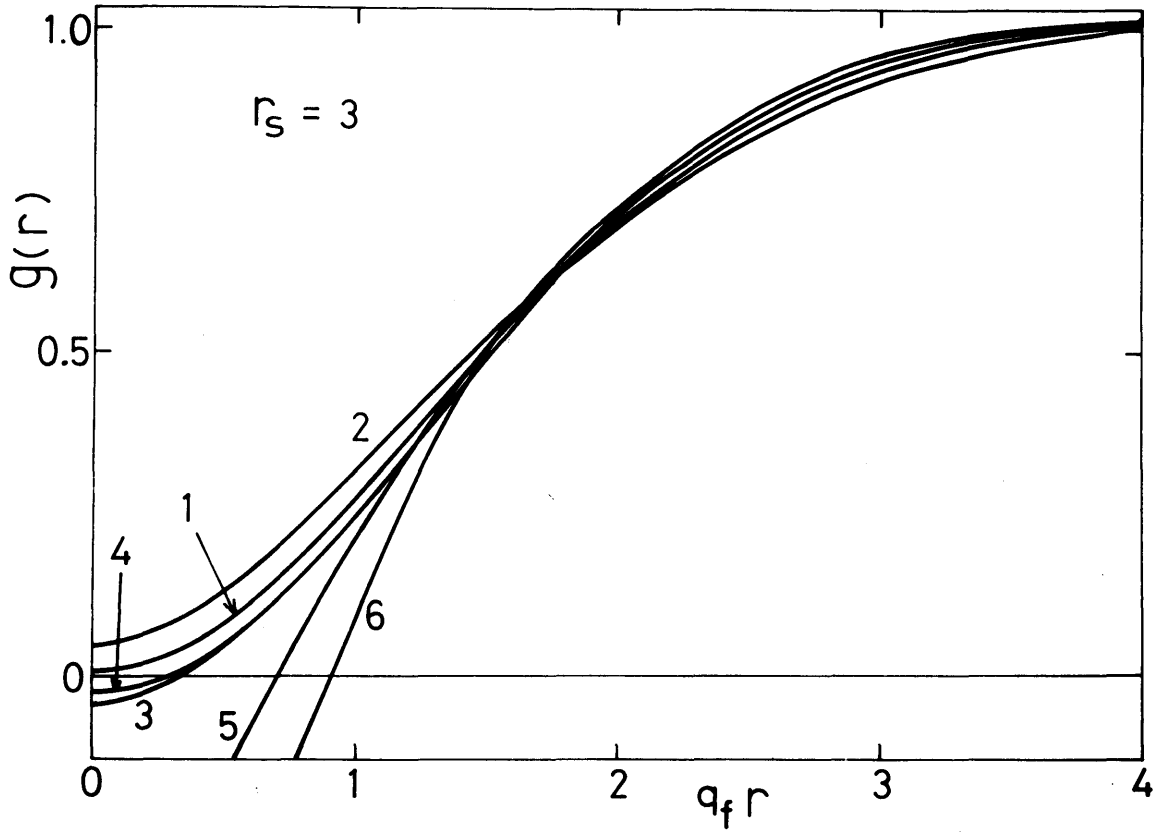
| $q/q_F$ \ $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.1 | 0.01051 | 0.007483 | 0.006122 | 0.005285 | 0.004754 | 0.004339 |
| 0.2 | 0.04078 | 0.02952 | 0.02430 | 0.02114 | 0.01896 | 0.01734 |
| 0.3 | 0.08779 | 0.06498 | 0.05401 | 0.04722 | 0.04249 | 0.03894 |
| 0.4 | 0.1477 | 0.1124 | 0.09439 | 0.08309 | 0.07509 | 0.06904 |
| 0.5 | 0.2166 | 0.1699 | 0.1447 | 0.1282 | 0.1165 | 0.1075 |
| 0.6 | 0.2909 | 0.2353 | 0.2034 | 0.1819 | 0.1662 | 0.1541 |
| 0.7 | 0.3676 | 0.3063 | 0.2689 | 0.2429 | 0.2235 | 0.2082 |
| 0.8 | 0.4443 | 0.3807 | 0.3397 | 0.3101 | 0.2875 | 0.2694 |
| 0.9 | 0.5192 | 0.4564 | 0.4136 | 0.3818 | 0.3569 | 0.3365 |
| 1.0 | 0.5910 | 0.5314 | 0.4890 | 0.4564 | 0.4304 | 0.4085 |
| 1.1 | 0.6586 | 0.6040 | 0.5637 | 0.5318 | 0.5059 | 0.4836 |
| 1.2 | 0.7211 | 0.6726 | 0.6358 | 0.6060 | 0.5815 | 0.5599 |
| 1.3 | 0.7779 | 0.7360 | 0.7037 | 0.6771 | 0.6549 | 0.6351 |
| 1.4 | 0.8286 | 0.7934 | 0.7659 | 0.7433 | 0.7243 | 0.7072 |
| 1.5 | 0.8728 | 0.8438 | 0.8214 | 0.8029 | 0.7876 | 0.7736 |
| 1.6 | 0.91026 | 0.8877 | 0.8690 | 0.8547 | 0.8431 | 0.8325 |
| 1.7 | 0.9406 | 0.9221 | 0.9084 | 0.8978 | 0.8896 | 0.8822 |
| 1.8 | 0.9636 | 0.9491 | 0.9390 | 0.9315 | 0.9263 | 0.9216 |
| 1.9 | 0.9788 | 0.9678 | 0.9605 | 0.9556 | 0.9526 | 0.9501 |
| 2.0 | 0.9863 | 0.9780 | 0.9729 | 0.9698 | 0.9685 | 0.9676 |
| 2.1 | 0.9892 | 0.9830 | 0.9795 | 0.9778 | 0.9775 | 0.9776 |
| 2.2 | 0.9914 | 0.9868 | 0.9844 | 0.9834 | 0.9838 | 0.9845 |
| 2.3 | 0.9931 | 0.9895 | 0.9879 | 0.9875 | 0.9882 | 0.9892 |
| 2.4 | 0.9944 | 0.9916 | 0.9905 | 0.9905 | 0.9914 | 0.9926 |
| 2.5 | 0.9953 | 0.9932 | 0.9925 | 0.9927 | 0.9937 | 0.9949 |
| 2.6 | 0.9961 | 0.9944 | 0.9940 | 0.9944 | 0.9954 | 0.9966 |
| 2.8 | 0.9973 | 0.9962 | 0.9961 | 0.9965 | 0.9975 | 0.9986 |
| 3.0 | 0.9980 | 0.9973 | 0.9973 | 0.9978 | 0.9987 | 0.9996 |
| 3.5 | 0.9990 | 0.9987 | 0.9989 | 0.9993 | 0.9998 | 1.0004 |
| 4.0 | 0.9994 | 0.9993 | 0.9995 | 0.9997 | 1.0001 | 1.0004 |



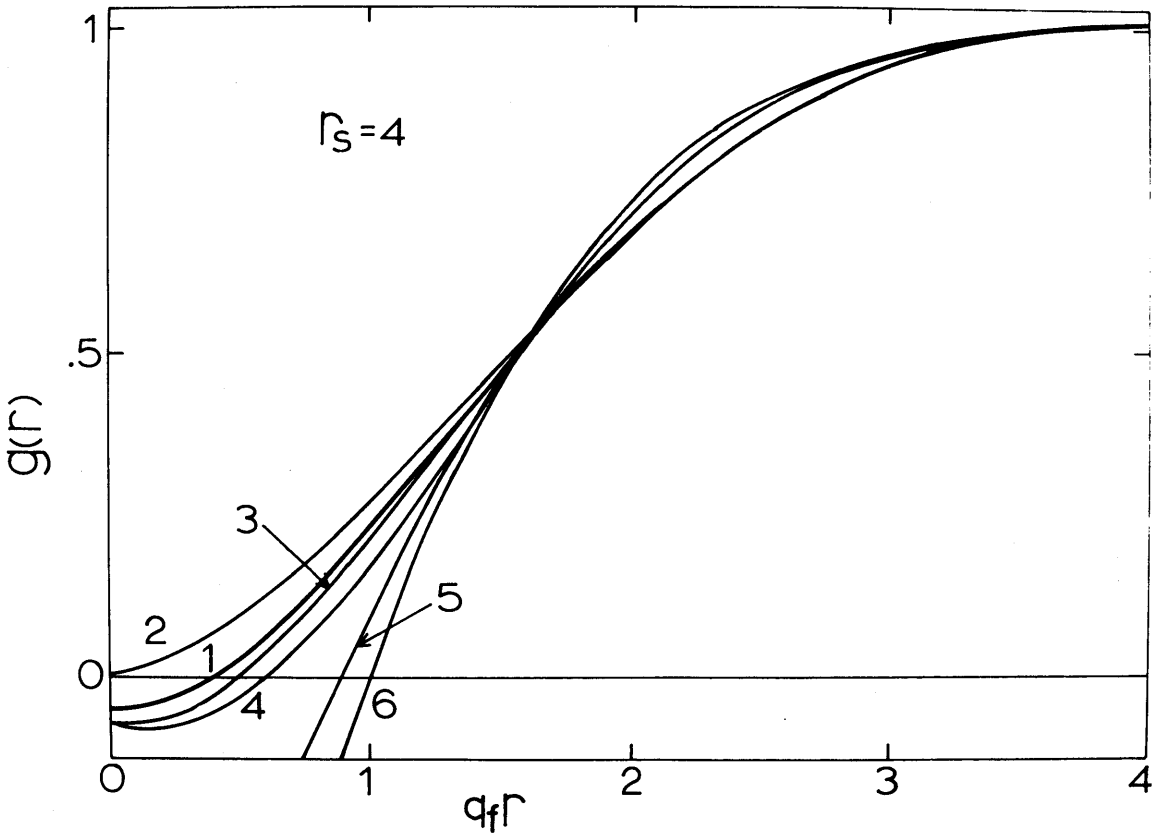

第1図：$r_s = 1$ に対する対分布関数 g(r) 対 $q_f r$。曲線1は第2章の結果，曲線2，3，4は，それぞれ STLS[23]，Vashishta と Singwi[35] および SSTL[31] の結果である。曲線5と6はそれぞれ Hubbard 近似[60] と RPA の結果である。



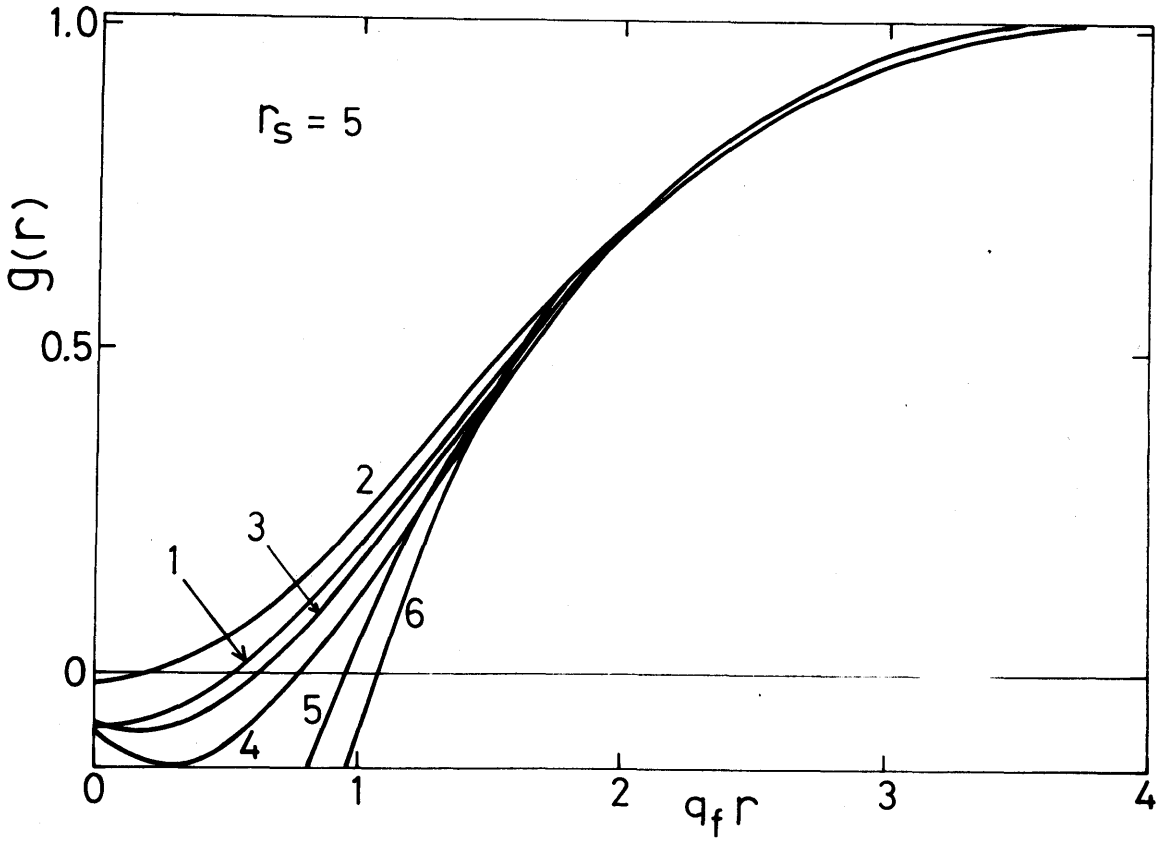

第 2 図：$r_s = 2$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$. 記法は第1図と同じ。



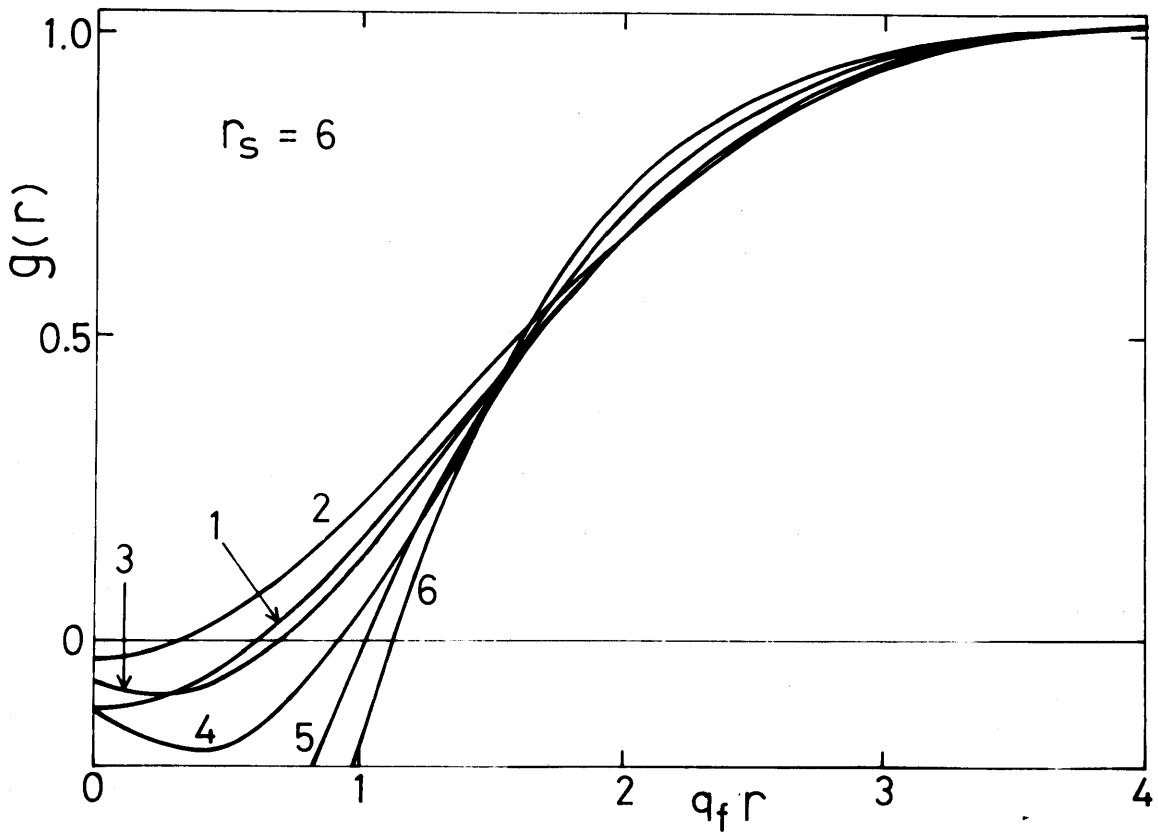

第 3 図：$r_s = 3$ に対する対分布関数 g(r) 対 $q_f r$. 記法は第1図と同じ。




第 4 図：$r_s=4$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$. 記法は第1図と同じ.




第 5 図：$r_s = 5$ に対する対分布関数 g(r) 対 $q_f r$. 記法は第 1 図と同じ.




第 6 図：$r_s = 6$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$. 記法は第1図と同じ.

この章の結果，曲線 2，3，4 はそれぞれ STLS[23]，Vashishta と Singwi[35] および SSTL[31] の結果である．曲線 5 は Hubbard 近似によって Brouers[60] が得た結果で，曲線 6 は RPA での結果である。図1から明らかなように，RPA の結果は $r_s \geq 1$ で r が小さいとき負になる。この章の $g(\mathbf{r})$ の結果 $r_s \leq 3$ では常に正であるが，$r_s \geq 4$ では r が小さいとき負になる．大きな r に対して，$g(\mathbf{r})$ は 1 の附近でゆっくり振動し 1 に収束していく．$g(\mathbf{r})$ はすべての r に対して正でなければならないので，この章の $g(\mathbf{r})$ の結果は STLS[23] の結果より少し悪い。もっとも，STLS[23] の理論では後で示すように圧縮率 sum rule が満たされていないが，この章の結果は近似的にこの sum rule を満たしている．図1～6 からわかるように，この章の $g(\mathbf{r})$ の結果は SSTL[31] および Vashishta と Singwi[35] の結果より少し良い。SSTL[31] および Vashishta と Singwi[35] の理論は圧縮率 sum rule を近似的に満たす結果を与えている．このことからわかるように，圧縮率 sum rule を満たすように理論を作ろうとすると $g(\mathbf{r})$ が常に正であるという条件が満たされなくなり，$g(\mathbf{r})$ が正であるようにすると，圧縮率 sum rule は満たされなくなるという矛盾したことになる。今まで圧縮率 sum rule と $g(\mathbf{r}) \geq 0$ の 二条件を同時に満足する理論は作られていない．

### 2－3－2．　相関エネルギー

1 電子あたりの相互作用エネルギー $E_{int}(r_s)$ は次式で与えられる。

$$E_{int}(r_s) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q^2} [S(\mathbf{q})-1] \quad . \tag{2-25}$$

$S(\mathbf{q})$ が $q$ の大きさのみによることを考慮して（2—25）式の右辺を書き直すと

$$E_{int}(r_s) = -\frac{4}{\pi} \frac{1}{\alpha r_s} \Gamma(r_s) \quad , \tag{2-26}$$

ここで

$$\Gamma(r_s) = -\frac{1}{2}\int_0^\infty dx \quad [S(x)-1] \quad . \tag{2-27}$$

系の基底状態エネルギー $E_0(r_s)$ は，Pauli が見いだした次式により，相互作用エネルギーのみによって決まる．

$$E_0(r_s) = \frac{2.21}{r_s^2} + \int_0^{e^2} \frac{d\lambda}{\lambda} E_{int}(\lambda) \qquad \text{(Ryd)} \ , \tag{2-28}$$

ここで（2—28）式の右辺の第1項は相互作用のない場合の1電子あたりの平均運動エネルギー，$\lambda$ は結合定数で電子気体では $e^2$ である．$e^2$ と $r_s$ とが比例することを用い，（2—28）式の右辺の第2項の積分を $r_s$ での積分に書き直し，（2—26）式を代入すると次のようになる．

$$E_0(r_s) = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{4}{\pi\alpha r_s^2} \int_0^{r_s} \Gamma(r_s) dr_s \ . \qquad \text{(Ryd)} \tag{2-29}$$

さて相関エネルギー $E_{corr}(r_s)$ は，$E_0(r_s)$ と Hartree—Fock 近似

の基底状態のエネルギー $E_{HF}(r_s)$

$$E_{HF}(r_s) = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \quad , \quad \text{(Ryd)} \qquad (2\text{-}30)$$

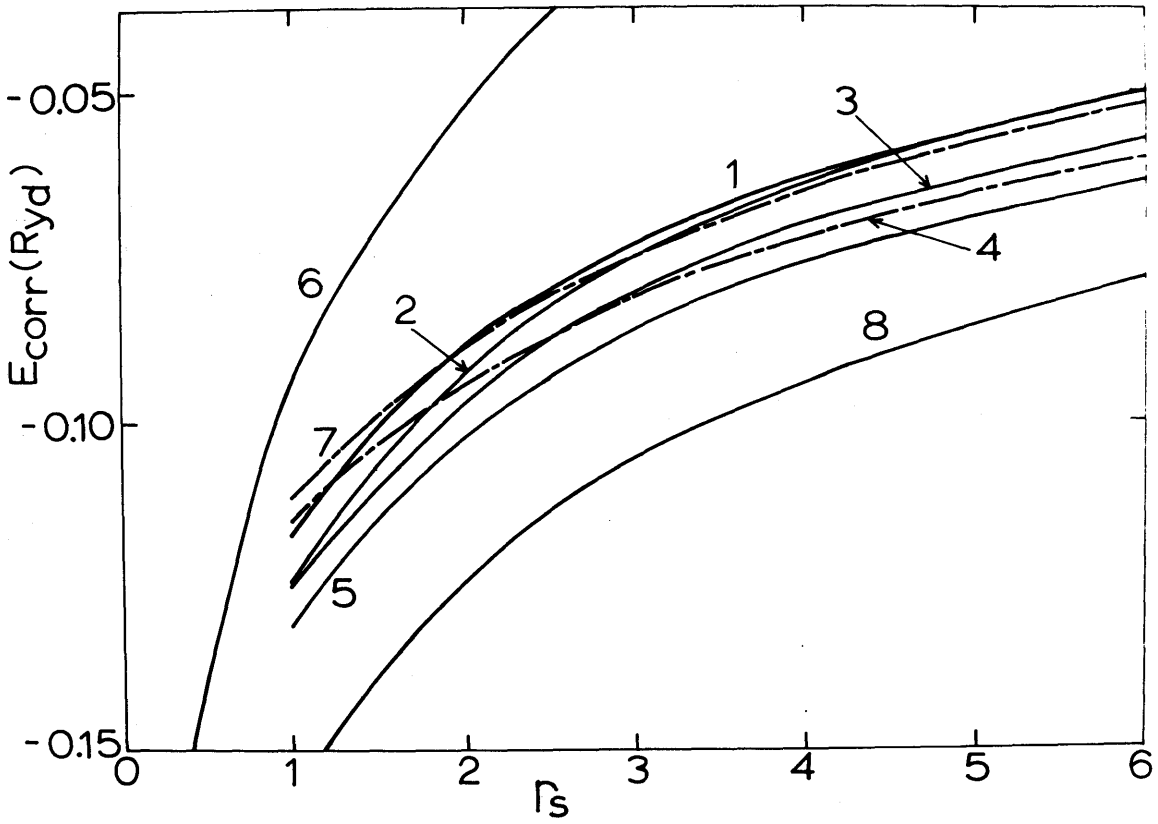
との差によって定義されるから

$$E_{corr}(r_s) = \frac{1}{r_s^2}\int_0^{r_s}[0.916 - \frac{4}{\pi\alpha}\Gamma(r_s)]dr_s \quad , \qquad (2\text{-}31)$$

となる．self－consistent なやり方で計算され表1に与えられた $S(q)$ の値を（2－27）式に用いて $\Gamma(r_s)$ を求め，（2－31）式から相関エネルギーが計算される．表2に $\Gamma(r_s)$ の計算結果が与えられる．$E_{corr}(r_s)$ の計算値は図7に示され，また他の結果と比較される．図7において，曲線1はこの章の結果，曲線2，3，4，5，6および7はそれぞれ STLS[23]，SSTL[31]，Nozières と Pines[21]，Hubbard[20]，Gell－Mann と Brueckner[15] および Vashishta と Singwi[35] によって得られた結果である．Gell－Mann と Brueckner[15] の理論は $r_s < 1$ で成り立つ．Nozières と Pines[21] の方法は内挿法によっている．曲線8は Lindhard[19] の $\varepsilon(q, \omega)$ を用いた RPA による結果である．この章の結果は STLS[23] の結果に非常に近い。図1～6に示された $g(r)$ の結果からわかるように，Hubbard 近似や

表2　　$\Gamma(r_s)$ の値

| $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\Gamma(r_s)$ | 0.4503 | 0.4870 | 0.5110 | 0.5283 | 0.5413 | 0.5520 |




第 7 図：$r_s$ の関数としての相関エネルギー．曲線1 は第 2 章の結果，曲線 2, 3, 4, 5, 6 および 7 は，それぞれ STLS[23], SSTL[31], Nozières と Pines[21], Hubbard[20], Gell—Mann と Brueckner[15] および Vashishta と Singwi[35] の結果である．曲線 8 は RPA の結果である。

RPA による場合には短距離の相関が効きすぎているため，相関エネルギーが図 7 に示されるように大きな負の値になっている．STLS[23]，Vashishta と Singwi[35] およびこの章の結果においては，短距離の相関が過大に見積もられることがないため，相関エネルギーがより小さい負の値になっていることが図 7 からわかる．

アルカリ金属の凝集エネルギーは Pines と Nozières[61] により次のように与えられている．

$$E_{coh} = E_{ion} + \frac{2.21}{r_s^2}\left(\frac{m}{m_{kin}}\right) + \frac{0.28}{r_s} + E_{corr} \quad \text{(Ryd)} \ , \quad (2\text{-}32)$$

ここで（2—32）式の右辺の第1 項の $E_{ion}$ は，最も強く束縛された伝導電子の結合エネルギーと自由原子のイオン化エネルギーとの差，第2項は電子が相互作用していないと仮定することにより計算される伝導電子の平均運動エネルギーであり，$m_{kin}$ は電子がイオンからの周期的ポテンシャルの中を動くときの実効質量である．第 3 項は電子の自己エネルギー $1.2/r_s$ と交換エネルギー $-0.916/r_s$ との差である．電子気体の場合には，電子の自己エネルギーは，一様な正電荷との相互作用エネルギーおよび正電荷の自己エネルギーと打ち消し合うので，考えなくてもよかった．（2—32）式では，アルカリ金属の相関エネルギーは電子気体のそれであると仮定されている．（2—32）式を用いて凝集エネルギーを求めるのに必要な $E_{ion}$ と $m_{kin}/m$ の値として，Pines と Nozières[61] が推定した値を表 3 に示した．$m_{kin}$ は Brooks[62] によって得られたものである．この

表 3 の値と図 7 に示された相関エネルギーの値を (2—32) 式に用いて求められた凝集エネルギーの結果が他の結果および実験値と共に表 4 に示される。

表 3 凝集エネルギーに寄与する項

| | $r_s$ | $E_{ion}$ | $m_{kin}/m$ | $\frac{m_{kin}}{m}\frac{2.21}{r_s^2}$ | $0.28/r_s$ |
|---|---|---|---|---|---|
| Li | 3.22 | -87.2 | 1.45 | 45.7 | 27.4 |
| Na | 3.96 | -71.3 | 0.98 | 44.7 | 22.3 |
| K | 4.87 | -51.6 | 0.93 | 31.2 | 18.1 |
| Rb | 5.28 | -47.6 | 0.89 | 28.8 | 17.1 |
| Cs | 5.57 | -43.9 | 0.83 | 26.7 | 15.9 |

エネルギーの単位は Kcal/mole (1Ryd=311 Kcal/mole)

表 4 凝集エネルギー

(Kcal/mole)

| | Li | Na | K | Rb | Cs |
|---|---|---|---|---|---|
| present theory | -36.1 | -24.0 | -20.0 | -18.8 | -17.7 |
| STLS | -36.0 | -23.9 | -19.9 | -17.8 | -20.4 |
| SSTL | -38.1 | -26.4 | -22.6 | -20.6 | -20.4 |
| Nozières-Pines | -37.5 | -25.2 | -21.8 | -20.9 | -19.9 |
| experiment[63] | -38.4 | -25.9 | -21.5 | -19.5 | -19.9 |

### 2－3－3。圧縮率

電子気体の等温圧縮率 $\kappa$ はよく知られた次式で与えられる。

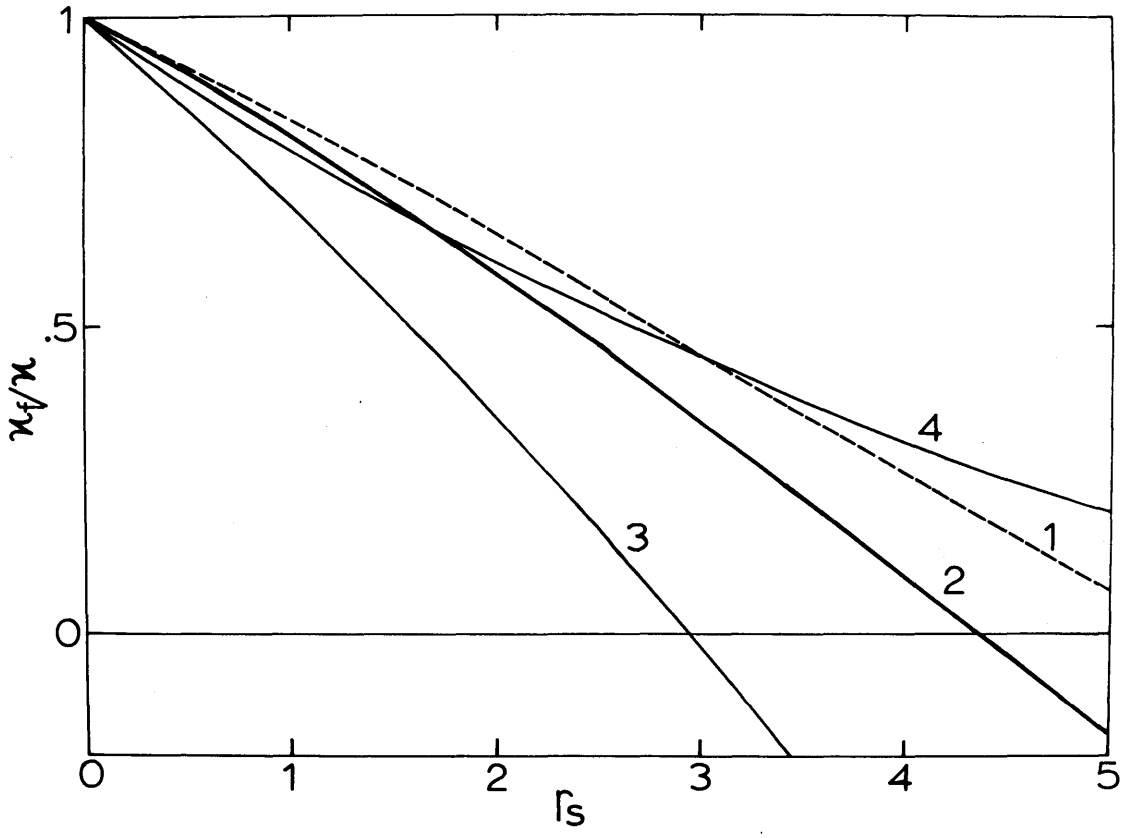
$$\frac{\kappa_f}{\kappa} = \frac{\alpha^2 r_s^4}{6} \frac{d^2 E_o(r_s)}{dr_s^2} - \frac{\alpha^2 r_s^3}{3} \frac{dE_o(r_s)}{dr_s} \qquad (2\text{-}33)$$

ここで $\kappa_f$ は自由電子気体に対する圧縮率であり，$E_0(r_s) = 2.21/r_s^2 - 0.916/r_s + E_{corr}(r_s)$ である．図 7 に示された $E_{corr}(r_s)$ を用い。(2－33) 式から計算された圧縮率が図 8 の曲線1 で示される．相関エネルギーから $\kappa$ への寄与は Hartree－Fock 近似のエネルギーからの寄与に比べて小さいので，STLS[23] と SSTL[31] の $\kappa$ の計算された結果は図 8 の曲線1 に非常に近い．図 8 の曲線1 からわかるように，$r_s \geq 5$ で圧縮率は負になる．すなわち，$r_s \geq 5$ では電子気体が無限小の密度の揺らぎに対して不安定になっていることを意味している．圧縮率への相関エネルギーからの寄与が小さいため，この不安定性の出現は Hartree－Fock 近似のエネルギーの項によって決まり，相関エネルギーを求める際に用いられる近似にはあまり依存しない．

## §2－4。 長波長の極限でのプラズマ振動の分散関係と圧縮率

### 2－4－1。 プラズマ振動の分散関係

電子気体では，電子間に働くクーロン相互作用が長距離力であることに起因して，集団運動のモードが存在し，それはプラズマ振動と呼ばれる。プラズマ振動は電子の密度の揺らぎであるから，外部電場に対する電荷密度の応答関数の pole からプラズマ振動のエネル




第 8 図：$r_s$ の関数としての，自由電子気体と相互作用をしている電子気体の圧縮率の比。曲線1 と 2 は（2－33）式と（2－39）式から得られる。曲線 3 と 4 は曲線 2 に対応する STLS[23] と SSTL[31] の結果である。

ギースペクトルが求められる．したがって，$\mathrm{Im}\ \varepsilon(\mathbf{q},\omega)=0$ なる領域内で $\mathrm{Re}\ \varepsilon(\mathbf{q},\omega)=0$ によってプラズマ振動の分散関係が与えられる．小さい $\mathbf{q}$ と有限の $\omega$ に対して，（2－16）式から $\mathrm{Re}\ \varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は次のように $\mathbf{q}$ のべき級数に展開される．

$$\mathrm{Re}\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left[1+\frac{9}{5}(q/q_{FT})^2-\gamma(q/q_F)^2\right]+\cdots \qquad (2\text{-}34)$$

ここで

$$\gamma = -\frac{1}{3}\int_0^\infty dx[S(x)-1] + \frac{1}{12}\int_0^\infty dx r_s\frac{\partial S(x)}{\partial r_s} \qquad (2\text{-}35)$$

$\omega_p=\sqrt{4\pi ne^2/m}$ は $\mathbf{q}=0$ のときのプラズマ振動数，$q_{FT}$ は Thomas－Fermi 波数で $q_{FT}^2=4me^2q_f/(\pi\hbar^2)$ で与えられる．表1 に示された $S(\mathbf{q})$ の値を用い，（2－35）式から求められた $\gamma$ の値がいろいろな $r_s$ の値に対して表5 に与えられている．（2－34）式からプラズマ振動の分散関係は次のように与えられる．

$$\omega = \omega_p\{1+9\pi(q/q_F)^2/(40\alpha r_s)-0.5\gamma(q/q_F)^2+\cdots\} \qquad (2\text{-}36)$$

表 5　　$\gamma$ の値

| $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\gamma$ | 0.2925 | 0.3150 | 0.3307 | 0.3421 | 0.3520 | 0.3586 |

任意の $\mathbf{q}$ での分散関係は（2－16）式と §2－2 で self－consis－tent に得られた $G(\mathbf{q})$ の数値計算の結果から，数値的に計算されることができる．このようにして得られたいろいろな $r_s$ に対するプラズマ振動の分散関係の結果が図 9 に示される．$r_s \geq 8$ に対して極小値が存在する．各曲線は電子空孔対励起の出現の点で終わっている．

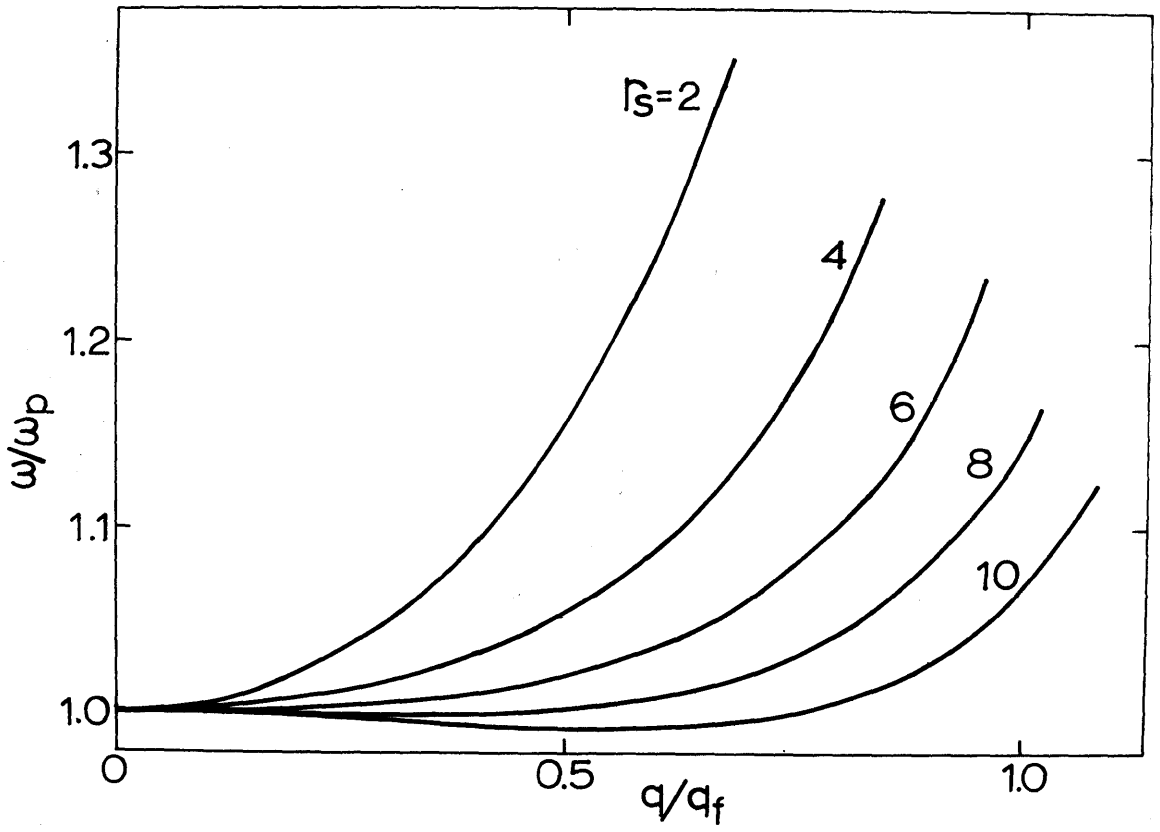
## 2－4－2．圧縮率

等温圧縮率は，外部からかけられた圧力，すなわち外力，によって引き起こされた系の体積変化の割合によって決定される．ところで，長波長の極限における静的な誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ は，空間的にゆるやかに変動する外部電場，これは電子系からみて外力，に対する電子気体の密度の応答，したがって体積変化，を表しているため，$\mathbf{q}$ が小さい極限での $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ は系の圧縮率と関係する．この関係は次式により，圧縮率 sum rule として知られている．小さな $\mathbf{q}$ に対して

$$\varepsilon(\mathbf{q},0) = 1 + \frac{\kappa}{\kappa_f}(q_{FT}/q)^2 = 1 + \frac{\kappa}{\kappa_f}\frac{4\alpha r_s}{\pi}\left(\frac{q_F}{q}\right)^2 \quad . \qquad (2\text{-}37)$$

RPA の場合，$\kappa/\kappa_f = 1$ である。一方，（2－16）式から小さい $\mathbf{q}$ と $\omega = 0$ に対する誘電関数は次式で与えられる。

$$\varepsilon(\mathbf{q},0) = 1 + (q/q_F)^2/\left(\frac{\pi}{4\alpha r_s} - \gamma\right) \qquad (2\text{-}38)$$




第 9 図：いろいろな $r_s$ に対するプラズマ振動の分散関係．

(2－37) と (2－38) 式から次式が得られる．

$$\kappa_f/\kappa = 1 - 4\alpha r_s \gamma/\pi \tag{2-39}$$

ここで $\gamma$ は (2－35) 式で与えられる． (2－39) 式と (2－35) 式を用いて得られる圧縮率の計算結果が図 8 の曲線 2 で示されている． (2－39) 式を用いた STLS[23] と SSTL[31] による $\kappa$ の別の計算結果は図 8 にそれぞれ曲線 3 と 4 によって示されている． (2－39) 式で与えられる $\kappa$ と (2－33) 式のようにエネルギーを $r_s$ に関して 2 階微分することから導かれる $\kappa$ は，理論が正しいとすれば，厳密に一致すべきである．したがって，この一致を調べることは理論の正当性の一つの証拠を与えることになる．しかし，今まで厳密に一致する理論は作られておらず，この章の結果でも図 8 の曲線1 と 2 からわかるように厳密には一致しないが，STLS[23] の結果に比べて良くなっている．

## §2－5． 結論と討論

この章では，相互作用をしている電子気体に対して，クーロン相関が重要な役割を演じている金属電子密度において，諸物理量に対するクーロン相互作用の影響を調べるため，STLS[23] が示した self－consistent に $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を求める方法が用いられた． 古典的リューピュ方程式の中に現れる二粒子分布関数を近似するとき，Schneider 達[32), 33)] が提案したように，$g(\mathbf{r})$ を電子密度で微分した項を $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式の中に取り入れることにより近似的に三

体相関の効果が考慮された．以上の近似を用い，電子気体について self－consistent に $\varepsilon(q, \omega)$ が数値計算され，この結果を用いて $g(r)$，$\kappa$，$E_{corr}(r_s)$ およびプラズマ振動の分散関係が金属電子密度において計算された．この章での $g(r)$ の結果は SSTL[31] の結果より少し良いが，$r_s \geq 4$ に対して小さな r の領域で依然として負となる．$E_{corr}(r_s)$ の計算結果は STLS[23] の結果に近い．したがって凝集エネルギーの結果も STLS[23] の結果に近い．Schneider 達[32), 33] の古典論の場合はもちろん，STLS[23] と同様にこの章で行ったように，自由電子に関する古典的な分極率と静的な構造因子を対応する量子論的な量で置き換えることによって得られた $\varepsilon(q, \omega)$ から圧縮率を計算した場合（これを量子論の場合と称することにする）でも，$g(r)$ が電子密度に依存する項は圧縮率 sum rule の矛盾を改良するのに重要であることが見いだされた．　古典論の場合には，Schneider 達[32), 33] が示したように圧縮率 sum rule が厳密に満たされるが，量子論の場合には図 8 に示されるようにそうなっていない．そこで Vashishta と Singwi[35] は，Schneider 達[32), 33] の理論に $g(r, r'; t)$ に対する仮定としてパラメーターを導入し，量子論の場合にも圧縮率 sum rule をほぼ満たすように，数値計算によってこのパラメーターの値を決定した．しかし，この取り扱いに対する理論的な根拠はない．

この章の計算結果は，RPA や Hubbard 近似による結果よりは，はるかに改善されているが，STLS[23]，SSTL[31] および Vashishta と Singwi[35] の理論と同様に全金属電子密度領域で同時に $g(r)$ が正

でかつ圧縮率 sum rule が厳密に満たされるようになっていない。すなわち，この章の結果では STLS[23] の結果に比べて $g(\mathbf{r})$ は少し悪いが，圧縮率 sum rule は良くなっている．また SSTL[31] に比べたとき，この章の結果の方が $g(\mathbf{r})$ は良く，圧縮率 sum rule はほぼ同じである。Vashishta と Singwi[35] の結果は，圧縮率 sum rule に関してはこの章の結果より良いが，$g(\mathbf{r})$ についてはこの章の結果の方が良い．結局この章の計算結果は，STLS[23]，SSTL[31] および Vashishta と Singwi[35] の結果と同様に，完全に満足なものとはいえず，すべての r に対して全金属電子密度で $g(\mathbf{r})$ が正となり，同時に圧縮率 sum rule を厳密に満たすような理論を作ることが今後の課題である。

この章で述べられた Schneider 達[32), 33)] の近似を用い，STLS[23] の方法によって $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を self－consistent に求める理論を一般化帯磁率 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の場合に拡張し，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ をこの章と同様の方法で self－consistent に計算することができる。さらに，この $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の計算結果から反平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ および常磁性スピン帯磁率 $\chi$ を求めることができる。このような数値計算が次章で説明される。

## 第3章　古典的リュービュ方程式によるスピン相関

### §3－1．　序

前章では，古典的リュービュ方程式を利用し電子気体の相関を扱ったが，この章では，これを拡張しスピンの相関を問題にする。とくに，反平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率 $\chi$ に対するクーロン相互作用の影響を調べる．$\chi$ はスピンが分極したときの基底状態のエネルギーの変化を計算することによって求められる．したがって，$\chi$ を求めるために相関エネルギーの計算結果を用いることができる．この方法により Sampson と Seitz[39] は，Wigner[6), 7)] による相関エネルギーの表式を利用して，Li と Na について $\chi$ を計算し，初めて Pauli[3] の自由電子模型での $\chi$ に対する電子相関の効果を求めた．しかし，Sampson と Seitz[39] は，分極したときの基底状態エネルギーを求める際，↑スピンからの寄与と↓スピンからの寄与を完全に分離したため，正しい結果を得ることはできなかった．

Brueckner と Sawada[41] は，高密度で成り立つ Gell－Mann と Brueckner[15] の摂動論による相関エネルギーの計算結果を $\chi$ の計算に応用し，初めて高密度の電子気体について厳密な $\chi$ の表式を $r_s$ の展開形で与えた．Shimizu[42] および Silverstein[43] は，Bohm と Pines[8), 9)] の相関エネルギーの計算結果を利用し，アルカリ金属に対して $\chi$ の値を評価した．別の $\chi$ の計算法は Landau[45] の Fermi 液体理論による方法である．この理論は現象論である

ので，具体的な問題に応用するには，その相互作用関数を微視的な理論から決定しなければならない。Rice[44] は Hubbard 近似[20] を用いてこの方法で $\chi$ を計算し，Na と Li に対する $\chi$ の値を求めた。

スピン相関の場合，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ に対応する量は，空間的，時間的に変動する弱い外部磁場に対する線型応答関数である一般化帯磁率 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ であり，それは Izuyama 達[47] により強磁性出現条件および中性子散乱の議論に関連して導入された。相関エネルギーの計算を行なうことなく直接 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を求めることにより，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ を求めることができる。Lobo 達[26] は STLS[23] の理論をスピンに拡張し，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ のフーリエ成分の汎関数として self－consistent に計算し，この結果から $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ を求めた。Lobo 達[26] の $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果は $r_s \leq 4$ で正となり，クーロン相関がかなりよく考慮された結果となったが，Li と Na に対する $\chi$ の計算結果は，実験値[27),28)] の 2 倍の大きさになり，よくなかった。SSTL[31] は STLS[23] および Lobo 達[26] の理論を改良し，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の計算において enhancement factor の中の相互作用の項を $\varepsilon(\mathbf{q})$ で遮蔽することによって，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ に対する外場の影響を考慮した。SSTL[31] においては $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の self－consistent な数値計算の結果から求められた $\chi$ の値は，Na と Li の実験値[27),28)] に STLS[23] の結果より近くなったが，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ の結果は悪くなった。

この章では，第 2 章で述べられた Schneider 達[32),33)] の近似を利用した $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の self－consistent な理論をスピン相関の問

題に拡張し，Lobo 達[26] の方法にならって $\chi(\mathbf{q},\omega)$ を self－consistent に数値計算し，この結果から $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ を求める． $\chi(\mathbf{q},\omega)$ は $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})-g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ のフーリエ成分およびその電子密度に関する微分の汎関数として表される． §3－2 では，Lobo 達[26] の方法にならってスピンに依存する一粒子分布関数に対する古典的リュービュ方程式の解から $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の表式が導かれる．§3－3 では，揺動散逸定理から導かれる $\chi(\mathbf{q},\omega)$ と磁気的構造因子 $\tilde{S}(\mathbf{q})$ とを結びつける厳密な関係式を用い，全金属電子密度における電子気体について $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の self－consistent な数値計算がなされる．さらにこの $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の計算結果と第 2 章で求められた $g(\mathbf{r})$ の計算結果を利用して，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ が計算される．$\chi(\mathbf{q},0)$ の $\mathbf{q}\to 0$ の極限から $\chi$ が計算され，Na と Li について実験値と比較される．この章で得られた Na に対する $\chi$ の計算値は，Schumacher と Vehse[28] の実験値によく一致する． §3－4 では，結論と討論がなされる．

## §3－2． 古典的リュービュ方程式による一般化帯磁率

この節では，第 2 章に示された $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の self－consistent な理論が Lobo 達[26] の方法にならって $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の self－consistent な理論へ拡張される．弱い外部磁場 $H(\mathbf{r},t)$ がかけられたとき，スピン $\sigma$ をもった電子の一粒子分布関数に対する古典的リュビュ方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \mu_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} H(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$$

$$- \int d^3r' d^3p' \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot \sum_{\sigma'} \nabla_{\mathbf{p}} f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = 0 \quad , \qquad (3\text{-}1)$$

ここで $\mu_\sigma = g\mu_B\sigma/2$ であり，g は Lande の g－因子，$\sigma = \pm 1$，$f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ はスピンに依存する二粒子分布関数である．スピンに依存する対分布関数 $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ を用い，$f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ は次のように仮定される．

$$f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) f_{\sigma'}(\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t) \quad . \qquad (3\text{-}2)$$

弱い外部磁場による $f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ の平衡状態での値 $f_\sigma^0(\mathbf{p})$ からのずれは次のように定義される．

$$f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - f_\sigma^0(\mathbf{p}) \quad . \qquad (3\text{-}3)$$

さらに，(3－2) 式の中の $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ は外部磁場による影響を考慮して，次のように表されると仮定する．

$$g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t) = g_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) + \{\delta n_\sigma(\mathbf{r},t) + \delta n_{\sigma'}(\mathbf{r}',t)\}\frac{\partial g_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\partial n}, \qquad (3\text{-}4)$$

ここで $g_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ は $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ の平衡状態での値であり，$\delta n_\sigma(\mathbf{r},t)$ は外部磁場により誘起されたスピン σをもつ電子の局所的な密度の揺らぎで，次式で与えられる．

$$\delta n_\sigma(\mathbf{r},t) = \int f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)d^3p \quad . \tag{3-5}$$

したがって，(3－4) 式の右辺の第 2 項は $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ に対する外部磁場による影響を表す項であり，この項を無視すれば，Lobo 達[26] が用いた近似に相当する．(3－1) 式を $H(\mathbf{r},t)$ について 1 次の項までを残すと，

$$\frac{\partial f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla_{\mathbf{r}} f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \mu_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} H(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f_\sigma^0(\mathbf{p})$$

$$- \sum_{\sigma'}\int d^3p' d^3r' \nabla_{\mathbf{r}} V(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\delta n_{\sigma'}(\mathbf{r}',t)$$

$$\times \left[g_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)+n_{\sigma'}\frac{\partial g_{\sigma,\sigma'}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\partial n}\right]\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f^0(\mathbf{p}) = 0 \quad , \tag{3-6}$$

となる。ここで $n_\sigma$ は平衡状態での $\sigma$ スピンをもつ電子の粒子数密度で，

$$n_\sigma = \int f_\sigma^0(\mathbf{p})d^3p \tag{3-7}$$

によって与えられる．平衡状態では，↑スピンと↓スピンが同等であるから，$f_\uparrow^0(p)=f_\downarrow^0(p)=f^0(p)/2$，したがって $n_\uparrow=n_\downarrow=n/2$．(3－6) 式を $\sigma$ について和をとり，

$$f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f_\uparrow^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + f_\downarrow^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) \quad , \tag{3-8}$$

であることを考慮して，$f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ についてリュービュ方程式を作り，外部磁場をポテンシャルで置き換えると，当然，第 2 章の (2－8) 式と一致した式が求められる．すなわち (3－1)，(3－2) および (3－4) 式は第 2 章の (2－1)，(2－2) および (2－3) 式の拡

張になっていることがわかる。

$$F(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f_{\uparrow}^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)-f_{\downarrow}^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) \tag{3-9}$$

によって定義される $F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する方程式は（3—6）式より次のように書かれる。

$$\frac{\partial F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}F(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + g\mu_B\nabla_{\mathbf{r}}H(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p})$$

$$- \int d^3r'\nabla_{\mathbf{r}}V(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\{\delta n_{\uparrow}(\mathbf{r}',t)-\delta n_{\downarrow}(\mathbf{r}',t)\}$$

$$\times \{\tilde{g}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)+\frac{n}{2}\frac{\partial\tilde{g}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\partial n}\}\cdot\nabla_{\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p}) = 0 \quad , \tag{3-10}$$

ここで

$$\tilde{g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\{g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})-g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})\} \quad . \tag{3-11}$$

（3—10）式を導く際，平衡状態では両方のスピン状態が同等であることから $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})=g_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})=g_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r})$ なる関係を用いた。（3—10）式はフーリエ変換することにより次のように解かれる。

$$\int d^3p F(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = -\frac{1}{2}\frac{g\mu_B\chi_0(\mathbf{q},\omega)H(\mathbf{q},\omega)}{1-I(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q},\omega)} \tag{3-12}$$

ここで $\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ は自由電子の古典的な分極率であり，第2章の（2—14）式によって与えられる。$F(\mathbf{q},\mathbf{p};\omega)$，$H(\mathbf{q},\omega)$ および $I(\mathbf{q})$ はそれぞれ $F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$，$H(\mathbf{r},t)$ および $I(\mathbf{r})$ のフーリエ成分であり，$I(\mathbf{r})$ は次式で定義される。

$$\nabla_{\mathbf{r}} I(\mathbf{r}) = \{\tilde{g}(\mathbf{r}) + \frac{n}{2}\frac{\partial \tilde{g}(\mathbf{r})}{\partial n}\}\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad . \tag{3-13}$$

(3—13) 式から $I(\mathbf{q})$ は次のように書くことができる．

$$I(\mathbf{q}) = \frac{1}{2n} V(\mathbf{q}) \int \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'}{q'^2}\{\tilde{S}(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|) - 1 + n\frac{\partial \tilde{S}(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)}{\partial n}\} , \tag{3-14}$$

ここで $\tilde{S}(q)$ は磁気的構造因子であり，$\tilde{g}(\mathbf{r})$ のフーリエ成分 $\tilde{g}(\mathbf{q})$ と次のように関係している．

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = 1 + n\tilde{g}(\mathbf{q}) \quad . \tag{3-15}$$

(3—12) 式より $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ は次のように求められる．

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = -\frac{1}{4}\frac{(g\mu_B)^2 \chi_0(\mathbf{q},\omega)}{1 - I(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q},\omega)} \quad . \tag{3-16}$$

以上の導き方からわかるように，(3—16) 式で与えられる $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ は古典的に求められた量である．そこで，Lobo 達[26] と同様に，量子論的な $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を得るため，単に (3—16) 式の右辺の $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ を量子論的な表式 (2—18) 式で置き換える． (3—15) 式に現れる $I(\mathbf{q})$ は (3—14) 式からわかるように $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の汎関数であり，この $\tilde{S}(\mathbf{q})$ はまた揺動散逸の定理により $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の虚部と次の厳密な関係式によって結ばれている[47]。

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = \frac{4\hbar}{\pi n (g\mu_B)^2}\int_0^\infty d\omega \, \mathrm{Im}\chi(\mathbf{q},\omega) \quad . \tag{3-17}$$

(3—14), (3—16) および (3—17) 式は self—consistent に解かれるべき方程式の組を与え，次節では，全金属電子密度領域においてこの方程式の組を self—consistent に数値計算し，収束した $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の値が求められる．

## §3—3. スピンに依存する対分布関数とスピン帯磁率の計算結果

(3—14) 式は角度に関する積分を実行した後，次のようになる．

$$I(\mathbf{q}) = \frac{3}{2}\pi(\alpha r_s)^2 \frac{1}{q^2}\int_0^\infty dq' q'^2 \{1+\frac{q^2-q'^2}{2qq'} \ln\left|\frac{q+q'}{q-q'}\right|\}\{\tilde{S}(\mathbf{q}')-1-\frac{r_s}{3}\frac{\partial \tilde{S}(\mathbf{q}')}{\partial r_s}\} , \tag{3-18}$$

これから先 $q$ と $q'$ は $q_f$ を，$\omega$ は $\hbar q_f^2/2m$ を単位として測る．また (3—17) 式は，この単位系を用いて書き直すと，

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = \frac{6\pi(\alpha r_s)}{(g\mu_B)^2}\int_0^\infty d\omega \mathrm{Im}\chi(\mathbf{q},\omega) \quad . \tag{3-19}$$

(3—16), (3—18) および (3—19) 式の self—consistent な数値計算は次のように行われる．最終的には self—consistent に求められた結果は初期値に依存しないから，　第 2 章で $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ が self—consistent に数値計算されたときと同様に，(3—18) 式の中の $\tilde{S}(\mathbf{q})$ として (2—23) 式で与えられる Hartree—Fock 近似で求められた $\tilde{S}(\mathbf{q})$ を最初に用い，$I(\mathbf{q})$ を数値計算する．このようにして求められた $I(\mathbf{q})$ を (3—16) 式に用い，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が求められる．この $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の結果を (3—19) 式に代入して再び $\tilde{S}(\mathbf{q})$ を計算して一回り分の計算が終わる．収束を速めるため，このようにして求

められた $\tilde{S}(\mathbf{q})$ と前の $\tilde{S}(\mathbf{q})$ との平均を次の $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の入力とする。この繰り返しを約 6 回実行することにより，$r_s=1\sim5$ に対して収束した $\tilde{S}(\mathbf{q})$，$I(\mathbf{q})$ および $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の値を得ることができた。$r_s=1\sim5$ に対して求められた $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の値が表 6 に示されている。この結果を用い，以下で $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ が計算される。

### 3－3－1．　スピンに依存する対分布関数

$g(\mathbf{r})$ は $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ によって次のように表される。

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\{g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})+g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})\} \quad . \tag{3-20}$$

(3－11) と (3－20)式とから $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ は

$$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) + \tilde{g}(\mathbf{r}) \quad , \tag{3-21}$$

$$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) - \tilde{g}(\mathbf{r}) \tag{3-22}$$

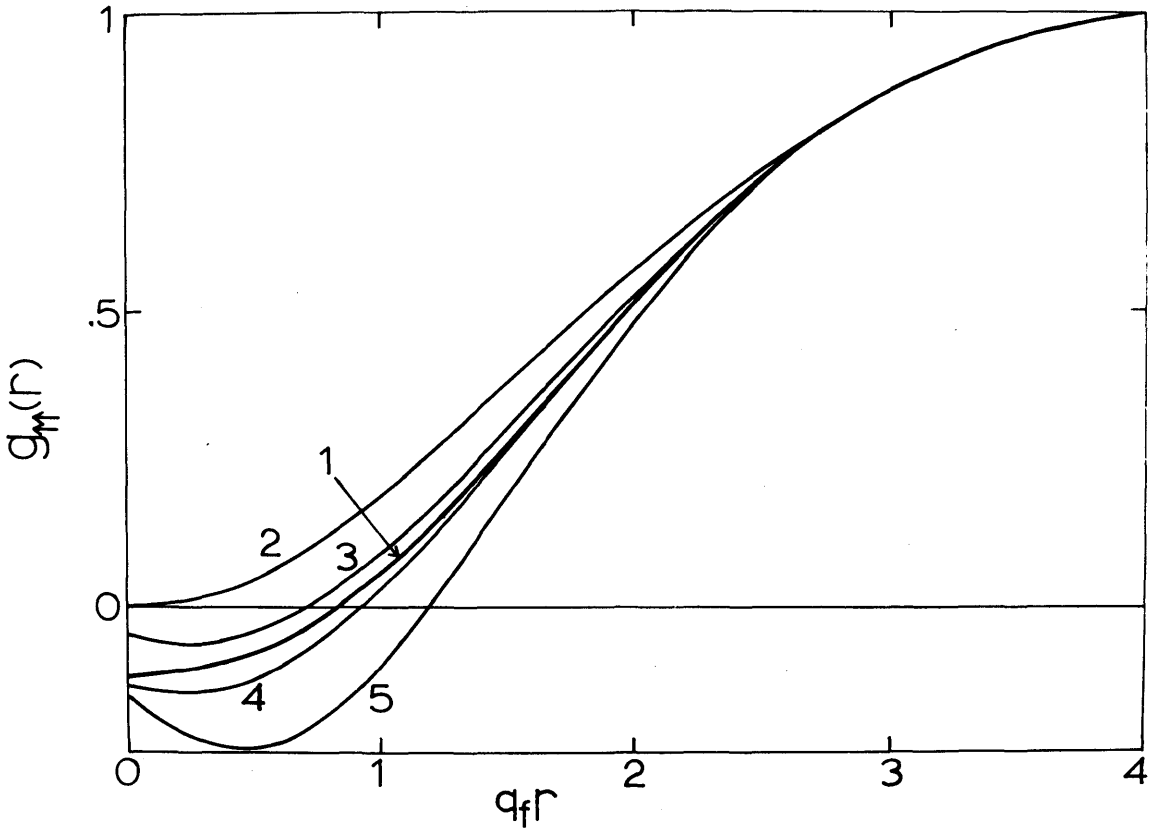
で与えられる。$\tilde{g}(\mathbf{r})$ は

$$\tilde{g}(\mathbf{r}) = \frac{3}{2}\int_0^\infty dq\{\tilde{S}(q)-1\}\frac{\sin qr}{r} \quad , \tag{3-23}$$

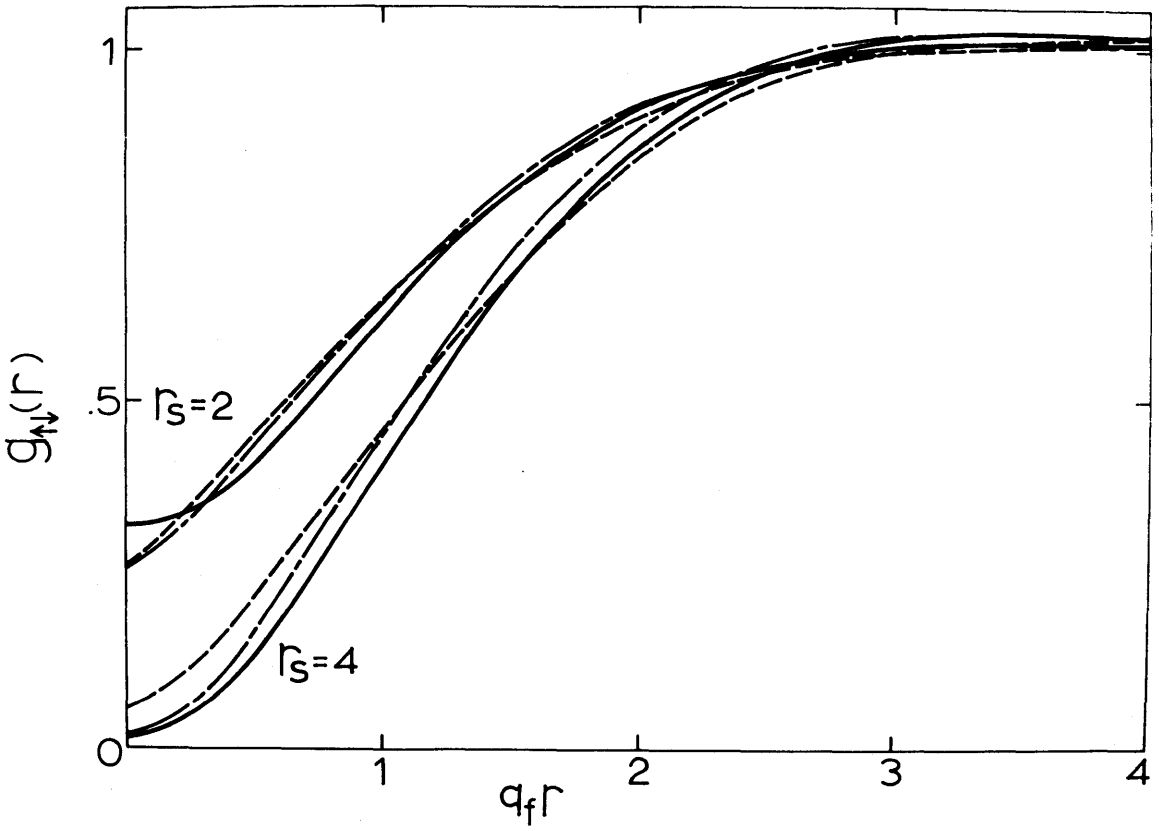
ここで r は $q_f^{-1}$ を単位として測る。表 6 に与えられている $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の収束値を (3－23) 式に入れて，$\tilde{g}(\mathbf{r})$ を求め，これと第 2 章で得られた $g(\mathbf{r})$ の値を (3－21) 式と (3－22) 式に代入すれば，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ が求められる。このようにして得られた $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の結果は，それぞれ図10 の曲線1 と 図11 の実線で示され

表 6　　$\tilde{S}(q)$ の値

| $q/q_F$ \ $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.1 | 0.08025 | 0.08623 | 0.09302 | 0.10090 | 0.1104 |
| 0.2 | 0.1600 | 0.1717 | 0.1848 | 0.2000 | 0.2181 |
| 0.3 | 0.2386 | 0.2555 | 0.2742 | 0.2955 | 0.3202 |
| 0.4 | 0.3156 | 0.3371 | 0.3605 | 0.3864 | 0.4158 |
| 0.5 | 0.3904 | 0.4155 | 0.4425 | 0.4716 | 0.5036 |
| 0.6 | 0.4628 | 0.4908 | 0.5202 | 0.5511 | 0.5841 |
| 0.7 | 0.5323 | 0.5622 | 0.5931 | 0.6247 | 0.6570 |
| 0.8 | 0.5984 | 0.6295 | 0.6608 | 0.6919 | 0.7225 |
| 0.9 | 0.6609 | 0.6923 | 0.7228 | 0.7529 | 0.7811 |
| 1.0 | 0.7196 | 0.7503 | 0.7800 | 0.8076 | 0.8330 |
| 1.1 | 0.7732 | 0.8033 | 0.8312 | 0.8564 | 0.8787 |
| 1.2 | 0.8225 | 0.8510 | 0.8767 | 0.8991 | 0.9183 |
| 1.3 | 0.8669 | 0.8933 | 0.9165 | 0.9361 | 0.9539 |
| 1.4 | 0.9058 | 0.9299 | 0.9504 | 0.9671 | 0.9804 |
| 1.5 | 0.9391 | 0.9608 | 0.9786 | 0.9924 | 1.0031 |
| 1.6 | 0.9665 | 0.9854 | 1.0005 | 1.0118 | 1.0202 |
| 1.7 | 0.9878 | 1.0040 | 1.0165 | 1.0255 | 1.0319 |
| 1.8 | 1.0026 | 1.0162 | 1.0262 | 1.0332 | 1.0379 |
| 1.9 | 1.0107 | 1.0218 | 1.0297 | 1.0349 | 1.0381 |
| 2.0 | 1.0118 | 1.0206 | 1.0266 | 1.0303 | 1.0325 |
| 2.1 | 1.0096 | 1.0165 | 1.0211 | 1.0237 | 1.0251 |
| 2.2 | 1.0079 | 1.0134 | 1.0169 | 1.0188 | 1.0196 |
| 2.3 | 1.0066 | 1.0110 | 1.0137 | 1.0151 | 1.0155 |
| 2.4 | 1.0055 | 1.0091 | 1.0112 | 1.0122 | 1.0124 |
| 2.5 | 1.0046 | 1.0076 | 1.0093 | 1.0100 | 1.0100 |
| 2.6 | 1.0039 | 1.0064 | 1.0077 | 1.0082 | 1.0082 |
| 2.8 | 1.0029 | 1.0046 | 1.0055 | 1.0057 | 1.0055 |
| 3.0 | 1.0022 | 1.0034 | 1.0040 | 1.0041 | 1.0039 |
| 3.5 | 1.0011 | 1.0018 | 1.0020 | 1.0019 | 1.0018 |
| 4.0 | 1.0007 | 1.0010 | 1.0010 | 1.0010 | 1.0009 |




第10図：対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ 対 $q_f r$。曲線1は第3章の結果，曲線2はHartree—Fock近似の結果，曲線3，4および5は，それぞれLobo達[26]，$r_s=2$ および $r_s=4$ のSSTL[31]の結果である。SSTL[31]以外の結果は $r_s$ にほとんど依存しない。




第11図：$r_s=2$ と $r_s=4$ に対する対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(r)$ 対 $q_f r$. 実線は第3章の結果，破線と鎖線は，それぞれ Lobo 達[26] と SSTL[31] の結果である。

ている。他の計算結果も図10と図11に示されている。図10において曲線2はHartree—Fock近似の結果であり，曲線3はLobo達[26]の得た結果である。曲線4と5は，それぞれ$r_s=2$と$r_s=4$の場合におけるSSTL[31]の結果である。図11において破線と鎖線は，それぞれLobo達[26]とSSTL[31]によって得られた結果である。図11には現れていないが，Hartree—Fock近似の場合には，反平行スピンの電子間の相関が完全に無視されているため，常に$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})=1$である。図10に示されているようにこの章の$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$の結果は，Hartree—Fock近似およびLobo達[26]の場合と同様に，$r_s$にほとんどよらない。このことは平行スピンをもつ二電子の間の相関は主にFermi統計の性質によって決定されていることを意味する。一方，図11からわかるように，反平行スピンの二電子の相関を決定するのにクーロン反撥力が重要な役割を演じていることがわかる。

### 3－3－2. スピン帯磁率

スピン帯磁率$\chi$は$r_s$の関数として(3—16)式から次のように与えられる。

$$\chi = \lim_{q\to 0} \chi(q,0) = \frac{\chi_f}{1-4\alpha r_s \gamma/\pi} \tag{3-24}$$

ここで

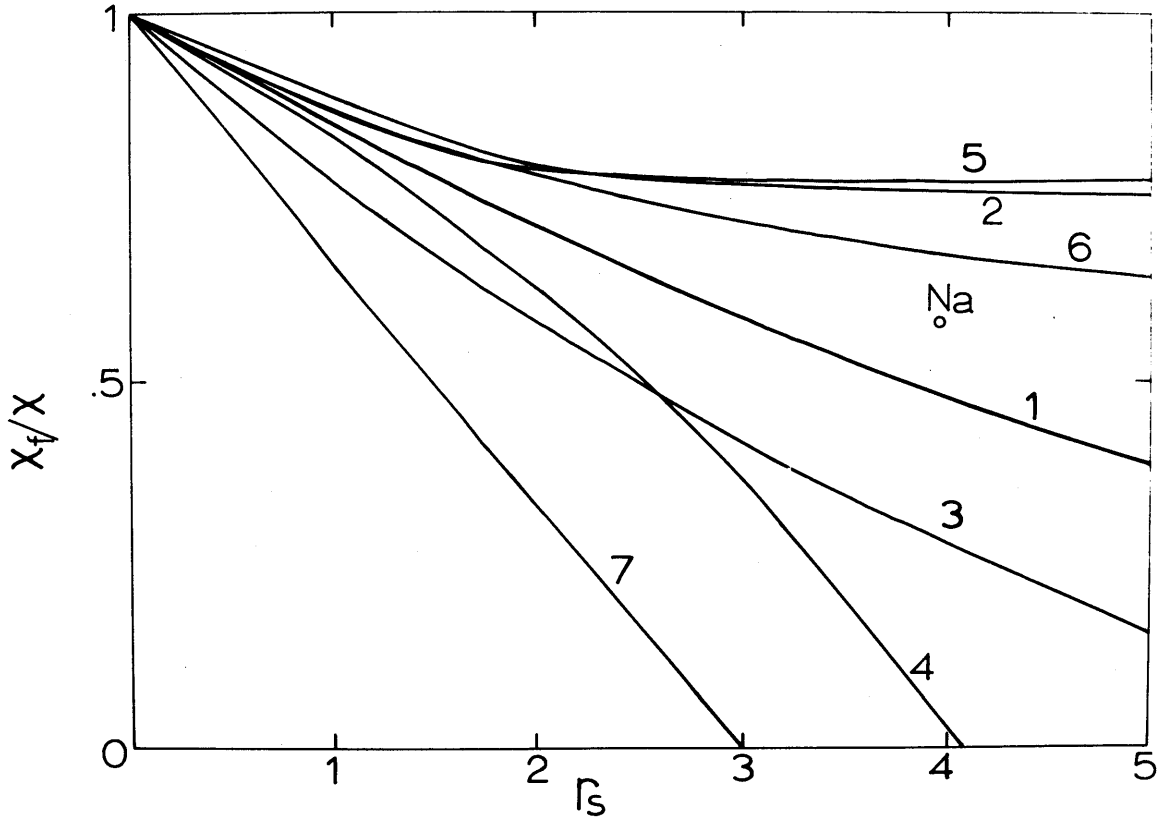
$$\gamma = -\frac{1}{3}\int_0^\infty dq\{\tilde{S}(q)-1\}+\frac{1}{12}\int_0^\infty dq r_s \frac{\partial \tilde{S}(q)}{\partial r_s} \quad , \tag{3-25}$$

であり，$\chi_f$ は自由電子近似でのスピン帯磁率である．表 6 に与えられた $\tilde{S}(q)$ を（3－25）式に用い，$\gamma$ を計算し，これを（3－24）式に代入して求められた $\chi$ の結果が図12 に曲線1 で示され，他の計算結果および Na の実験値と比較される．図12 において曲線 2，3，4，5 および 6 は，それぞれ SSTL[31]，Lobo 達[26]，Brueckner と Sawada[41]，Silverstein[43] および Hedin と Lundqvist[64] によって得られた結果である．曲線 7 は Hubbard 近似，すなわち，（3－16）式において

$$I(q) = -\frac{1}{2}\frac{4\pi e^2}{q^2+q_F^2} \quad , \tag{3-26}$$

とおくことにより Lobo 達[26] によって計算された結果である．Hedin と Lundqvist[64] の結果は Landau[45] の Fermi 液体理論を用いて得られている．図12 からわかるように，$r_s<1$ においては，この章で得られた $\chi$ の計算値は $r_s<1$ において正しい Brueckner と Sawada[41] の理論によって求められた曲線 4 に最も近い．Na に対するこの章で得られた $\chi$ の計算値は $\chi=1.35\times10^{-6}$ emu／cm$^3$ と求められ，Schumacher と Vehse[28] の実験値 $\chi=1.13\times10^{-6}$ emu／cm$^3$ にかなりよく一致している．Li について実験値と比較するためには，バンド構造によるスピン帯磁率 $\chi_s$ への影響を考慮しなければならない。Li に対する $\chi_s$ の値は Silverstein[43] によって導かれた次の式

$$\chi_s = \frac{\chi}{1+(\frac{m}{m^*}-1)\frac{\chi}{\chi_f}} \quad , \tag{3-27}$$




第12図：自由電子気体と相互作用をしている電子気体に対するスピン帯磁率の比対 $r_s$. 曲線1は第3章の結果，曲線2，3，4，5および6は，それぞれSSTL[31]，Lobo達[26]，Brueckner と Sawada[41]，Silverstein[43] および Hedin と Lundqvist[64] の結果である。曲線7は Hubbard 近似の結果である．円は Schumacher と Vehse[28] による Na の実験値である．

から計算される。Ham[65] によって求められた実効質量 $m^*$ の値を用い，$\chi_A = 2.5 \times 10$ emu／$cm^3$ と求められる。 Li の $\chi_P$ の実験値は $\chi_P = 2.08 \times 10$ emu／$cm^3$ である。

## §3－4. 結論と討論

この章では，第 2 章で説明された $\epsilon(q, \omega)$ の self－consistent な理論が $\chi(q, \omega)$ の場合に拡張され，全金属電子密度領域において self－consistent に $\chi(q, \omega)$ が数値計算された。収束した $\chi(q, \omega)$ の計算結果から常磁性状態における $g_{\uparrow\uparrow}(r)$，$g_{\uparrow\downarrow}(r)$ およびスピン帯磁率 $\chi$ が計算された。 $g_{\sigma,\sigma'}(r)$ の電子密度に関する微分 $\partial g_{\sigma,\sigma'}(r)/\partial n$ を含ませることにより非平衡状態での対分布関数に対する外部磁場の影響が近似的に考慮された。Schofield[34] によって示されたように，$\partial g_{\sigma,\sigma'}(r)/\partial n$ は三体相関を近似的に考慮したことに相当している。金属電子密度での $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ のこの章での結果は $r_s$ にほとんどよらないが，小さな r に対して依然として負となる。SSTL[31] の $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ の結果は，図 9 からわかるように，$r_s$ に依存しており，小さな r に対し $r_s$ が大きくなるとより絶対値の大きな負の値となっている。 この章で得られた $\chi$ の計算値は STLS[23]，SSTL[31]，RPA および Hubbard 近似の結果よりも Na の実験値[28] により近い。このことは，スピン帯磁率の結果を改善するためには，弱い外部磁場による非平衡状態での対分布関数に対する影響を表す項を考慮することが重要であることを示している。

## 第4章　量子論的分布関数による誘電関数と電子相関

### §4－1。序

第2章では，一粒子分布関数に関する，外場のある場合の古典的なリューピュ方程式を Schneider 達[32),33)] の近似を利用して解くことによって誘電関数 $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ が求められた。STLS[23)] および Vashishta と Singwi[35)] と同様に，この $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式の中に現れた自由電子の古典的な分極率 $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ および構造因子 $S(\mathbf{q})$ をそれぞれ対応する量子論的な量で置き換えることによって，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式に量子論的な効果が考慮されただけであった。このようにして求められた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ はもちろん量子論による量ではない。古典的な一粒子分布関数に対応する量子論的な量は Wigner 分布関数[48), 49), 50), 51)] である。そこでこの章では，外部電場のある場合に Wigner 分布関数に関する運動方程式をたて，これを解くことにより，第2章で行った分極率に関する置き換えをしないで，直接，量子論的な $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式が求められる。

Wigner 分布関数は量子論における位相空間分布関数である。量子論では不確定性原理により座標と運動量の両方を同時に指定することはできない。このため Wigner 分布関数は古典的な一粒子分布関数のようにはっきりした物理的解釈をもたない[50), 66)]。しかし量子論では Wigner 分布関数を用いれば，古典論での分布関数と形式的にはまったく同様にして，物理量の期待値を求めることができる。さらに Wigner 分布関数を運動量または座標の一方について積分し

た量は，それぞれ粒子密度または運動量密度として，はっきりした物理的意味をもつ．　量子論的表式の古典的な極限は，この表式が Wigner 分布関数を用いて書かれているときには，簡単に求められる．とくに Wigner 分布関数は物理量を $\hbar$ で展開する系統的な方法を与えるから古典的な表式に対する量子論的な補正を得るのに有用である[51]．

Wigner 分布関数は気体および液体の理論において広く用いられた。Kubo[51] は磁場の中の電子の取り扱いに際して Wigner 分布関数を用い，また詳しくこの関数の性質を調べた。Dekeyser[67] は Wigner 分布関数を用い RPA で $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を求めた。この章では，Wigner 分布関数を用い，その運動方程式の中に現れる二粒子 Wigner 分布関数を，古典論で STLS[23] が行った近似と同様に，Wigner 分布関数と対分布関数 $g(r)$ の積で近似することにより，　運動方程式を解き，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ が求められる。このようにして求められた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式は，当然 STLS[23] が古典的リューピュ方程式を解いて求めた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ とは違った形をもっている．第 2 章での計算をはじめ，STLS[23] やその他の理論[31), 35)] の場合には，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の中の局所場の補正項は自由電子に関する分極率と波数のみに依存する因子に分解されたが，この章で得られる $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式はこのように分解されていない。この章で得られた $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式は，第 2 章の場合と同様に $g(\mathbf{r})$ の汎関数として表される．第 2 章で示したように構造因子 $S(\mathbf{q})$，ここで $S(\mathbf{q})$ は $g(\mathbf{r})$ のフーリエ成分 $g(\mathbf{q})$ と $g(\mathbf{q})-\delta(\mathbf{q})=$

$= [S(\mathbf{q}) - 1]/n$ で関係している，は $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ と次のような厳密な関係によって結びついている[25]．

$$S(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar q^2}{4\pi^2 ne^2}\int_0^\infty d\omega \, \mathrm{Im}\, \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q},\omega)} \quad . \tag{4-1}$$

したがって，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ は（4－1）式を用い，　第 2 章と同様に self－consistent に解かれなければならない．この章では第 2 章と同様に，全金属電子密度領域で self－consistent な数値計算が実行される。この $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の計算結果から $g(\mathbf{r})$ が計算され，$r_s \leq 6$ なるすべての $r_s$ に対して $g(\mathbf{r})$ が正になることが見いだされた．それゆえ，この章で示される理論は全金属電子密度で $g(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件を満足している．最近，RPA を超えるいろいろな理論[23), 31), 35), 68), 69), 70)] が出されたにもかかわらず，全金属電子密度領域で $g(\mathbf{r})$ が常に正であるという条件は満たされていなかった．§4－2 では，Wigner 分布関数についての運動方程式を作り，STLS[23)] と類似の近似でこの方程式を解き，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式が導かれる．§4－3では，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の self－consistent な数値計算が実行される．対分布関数，相関エネルギーおよび圧縮率の計算結果が以前の計算結果と比較される。§4－4 では，長波長の極限でプラズマ振動の分散関係および圧縮率が計算される．　§4－5 では，結論と討論がなされる．

## §4－2。 Wigner 分布関数および誘電関数

この節では，Wigner 分布関数に対する運動方程式を解いて，$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の表式が導かれる。Wigner 分布関数 $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ は次式で定義される[48]。

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = \frac{1}{h^3}\sum_\alpha\int d^3\mathbf{l}\; e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}\langle\Psi_\alpha^+(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)\Psi_\alpha(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)\rangle \qquad (4\text{-}2)$$

ここで $\psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)$ と $\psi_\alpha(\mathbf{r},t)$ はそれぞれ時刻 t，点 $\mathbf{r}$ にスピン $\alpha$ をもつ電子を作る場の演算子および消す場の演算子である。$\langle\cdots\rangle$ は次式で与えられる弱い外部ポテンシャル $U_e(\mathbf{r},t)$ のあるときの電子気体の全ハミルトニアン H の基底状態での期待値を意味する。

$$H = -\sum_\alpha\int\Psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)\frac{\hbar^2\nabla_{\mathbf{r}}^2}{m}\Psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r+\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\int\Psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)\Psi_\beta^+(\mathbf{r}',t)V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Psi_\beta(\mathbf{r}',t)$$

$$\times\;\Psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3rd^3r'+\sum_\alpha\int\Psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)U_e(\mathbf{r},t)\Psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r\quad. \qquad (4\text{-}3)$$

ここで $V(\mathbf{r})$ はクーロン相互作用である。$f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する運動方程式は，付録 A に示したように次式で与えられる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3\mathbf{l}d^3p_1e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$$

$$\times\;[U_e(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-U_e(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)]+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3\mathbf{l}d^3p_1d^3p_2d^3r'e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}$$

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)[V(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2}-\mathbf{r}')-V(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2}-\mathbf{r}')] = 0\quad, \qquad (4\text{-}4)$$

ここで二粒子 Wigner 分布関数 $f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ は次式で定義される。

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = \frac{1}{h^6}\sum_{\alpha,\beta}\int d^3\mathbf{l}\,d^3\mathbf{l}'\,e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}+\mathbf{p}'\cdot\mathbf{l}')/\hbar}$$

$$\times\ \langle\Psi^+_\alpha(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)\Psi^+_\beta(\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}'}{2},t)\Psi_\beta(\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}'}{2},t)\Psi_\alpha(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t) \qquad (4\text{-}5)$$

方程式（4－4）は $\hbar\to 0$ とすれば古典的なリュービュ方程式に帰着することができるので，古典的な分布関数に対するリュービュ方程式に対応する量子論的な運動方程式である。（4－4）式の右辺の第1項と第2項は $\hbar$ によらないため古典論の場合と同じ形をしているが，第3項と第4項は古典論の対応する項とまったく違う形となっていることがわかる。(4－4)式は $f(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ を含むため $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ について解くことができない。そこで古典論で STLS[23] が用いた近似と類似の近似を用い，（4－4）式の中の $f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ を次のように $f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ と $g(\mathbf{r})$ の積で近似する。

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)f(\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad , \qquad (4\text{-}6)$$

ここで $g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ は平衡状態での対分布関数である。（4－6）式で $g(\mathbf{r})=1$ と仮定することは RPA に対応する。古典論では Landau－Vlasov 方程式がこの仮定によって導かれている。$f(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ の $U_\theta(\mathbf{r},t)$ による平衡値 $f^0(\mathbf{p})$ からのずれ $f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を次式で定義する。

$$f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - f^0(\mathbf{p}) \qquad (4\text{-}7)$$

(4—4) 式を $U_e(\mathbf{r},t)$ に関して 1 次の項まで残すと次のようになる。

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3\mathbf{l}\,d^3p_1\,e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}$$

$$\times f^0(\mathbf{p}_1)\left[U_e(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-U_e(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)\right]+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3\mathbf{l}\,d^3p_1\,d^3p_2\,d^3r'$$

$$\times e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}\{f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;t)f^0(\mathbf{p}_2)+f^{(1)}(\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)f^0(\mathbf{p})\}$$

$$\times g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}}{2})-V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}}{2})\right]=0 \quad . \tag{4-8}$$

付録 B に示されているように，$\hbar\to 0$ の極限で（4—8）式の右辺の第 3 項は $-\nabla_{\mathbf{r}}U_e(\mathbf{r},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p})$ となり，これは古典的リューピュ方程式の中の対応する項である．また第 4 項は

$$-\int d^3p_2\,d^3r'g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f^{(1)}(\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)\nabla_{\mathbf{r}}V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\nabla_{\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p}) \quad , \tag{4-9}$$

となり，古典論で STLS[23] によって得られた項に対応する．付録 B に示されているようにして（4—8）式を $\mathbf{r}$ と $t$ についてフーリエ変換すると

$$\omega f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p};\omega)-\frac{1}{m}\mathbf{p}\mathbf{q}f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p};\omega)+\frac{1}{\hbar}U_e(\mathbf{q},\omega)\left[f^0(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}}{2})-f^0(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}}{2})\right]$$

$$+\frac{1}{\hbar}\int d^3p_2f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p}_2;\omega)\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}g(\mathbf{q}-\mathbf{q}')v(\mathbf{q}')\left[f^0(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2})-f^0(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2})\right]$$

$$=0 \quad , \tag{4-10}$$

ここで $f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p},\omega)$, $U_\theta(\mathbf{q},\omega)$, $g(\mathbf{q})$ および $V(\mathbf{q})$ は，それぞれ $f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$, $U_\theta(\mathbf{r},t)$, $g(\mathbf{r})$ および $V(\mathbf{r})$ のフーリエ成分である。付録 B に示されているように，$\hbar\to 0$ の極限で（4－10）式の右辺の第 4 項は古典論で STLS[23] によって導かれた項に一致する．外部ポテンシャル $U_\theta(\mathbf{r},t)$ によって誘起される粒子数密度のフーリエ成分は次式で定義される．

$$\delta n(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{h^3}\int d^3p f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p};\omega) \quad . \tag{4-11}$$

（4－10）式を $\delta n(\mathbf{q},\omega)$ について解くと

$$\delta n(\mathbf{q},\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q},\omega)U_e(\mathbf{q},\omega)}{1-\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega)g(\mathbf{q}-\mathbf{q}')v(\mathbf{q}')} \quad , \tag{4-12}$$

ここで $\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}',\omega)$ は自由電子に関する拡張された分極率であり，次式によって定義される．

$$\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega) = -\frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3p}{h^3}\,\frac{f^0(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2})-f^0(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2})}{\omega-\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}/m+i\eta} \quad . \tag{4-13}$$

また $\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ は（2－18）式で与えられた通常の自由電子の分極率であり，$\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}',\omega)$ と次のように関係している．

$$\chi_0(\mathbf{q},\omega) = \chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q};\omega) \quad . \tag{4-14}$$

（4－12）式において $g(\mathbf{q}-\mathbf{q}')=\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}')$ と仮定すると，　RPA

に相当する次の表式が得られる。

$$\delta n(\mathbf{q},\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q},\omega)U_e(\mathbf{q},\omega)}{1-\chi_0(\mathbf{q},\omega)v(\mathbf{q})} \quad . \tag{4-15}$$

(1—5) 式を用い，(4—12) 式から $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ は次のように得られる。

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 - \frac{\chi_0(\mathbf{q},\omega)v(\mathbf{q})}{1-I(\mathbf{q},\omega)} \quad , \tag{4-16}$$

ここで $\mathbf{q}$ と $\omega$ に依存する局所場の因子 $I(\mathbf{q},\omega)$ は次で与えられる。

$$I(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{n}\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega)[S(\mathbf{q}-\mathbf{q}')-1]v(\mathbf{q}') \quad . \tag{4-17}$$

(4—17) 式で与えられる $I(\mathbf{q},\omega)$ は STLS[23], SSTL[31] および第2章の理論における $G(\mathbf{q})Q_0(\mathbf{q},\omega)$ に対応する。ここで $Q_0(\mathbf{q},\omega)=-\chi_0(\mathbf{q},\omega)V(\mathbf{q})$ は Lindhard の分極関数で $G(\mathbf{q})$ は振動数に依存しない局所場の因子である。(4—17) 式に対応する古典論から導かれた STLS[23] の $G(\mathbf{q})Q_0(\mathbf{q},\omega)$ は次式で与えられている。

$$G(\mathbf{q})Q_0(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{n}\chi_0(\mathbf{q},\omega)\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'}{q'^2}[S(\mathbf{q}-\mathbf{q}')-1]V(\mathbf{q}') \tag{4-18}$$

この章における理論では，(4—17) 式で与えられる $I(\mathbf{q},\omega)$ を $G(\mathbf{q})$ と $Q_0(\mathbf{q},\omega)$ の積に分解することはできないが，振動数にも依存する $G(\mathbf{q},\omega)$ を $G(\mathbf{q},\omega)=I(\mathbf{q},\omega)/Q_0(\mathbf{q};\omega)$ によって定義することにより見かけ上そうすることができ，これは Toigo と Woodruff [71] および Goodman と Sjölander[72] が指摘したように，$G(\mathbf{q})$ の

一般化の一例である．方程式（4－1），（4－16）および（4－17）式が次節で self－consistent に数値計算される．

## §4－3．対分布関数，相関エネルギーおよび圧縮率の計算結果

（4－17）式の積分変数を変換し，角度に関する積分を実行すると（4－10）式は次のようになる．

$$I(q,\omega) = \frac{3}{2\pi}\alpha r_s \int_0^\infty dq' \frac{q'}{q}[S(q')-1] \int_{q^2-qq'}^{q^2+qq'} dt \frac{\tilde{F}(t,q,\omega)}{2t+q^2-q'^2} \tag{4-19}$$

これ以後 $q$, $q'$ は $q_f$ を単位とし，$\omega$ は $\hbar q_f^2/2m$ を単位として測る。$\alpha=(4/9\pi)^{1/3}=0.521$，さらに $t=\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'$ としたとき無次元の量 $\tilde{F}(t,\mathbf{q},\omega)=(2\pi^2\hbar^2/mq_f)\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}',\omega)$ の実部と虚部はそれぞれ次で与えられる．

$$\mathrm{Re}\tilde{F}(t,q;\omega) = \frac{-1}{q^3}\{qt+\frac{1}{2}[q^2-(\frac{\omega-t}{2})^2\ln|\frac{\omega-t-2q}{\omega-t+2q}|]$$

$$+\frac{1}{2}[q^2-(\frac{\omega+t}{2})^2\ln|\frac{\omega+t+2q}{\omega+t-2q}|]\}, \tag{4-20}$$

$$\mathrm{Im}\tilde{F}(t,q;\omega) = -\frac{\pi}{2q}[1-\frac{1}{4q^2}(\omega-t)^2] \quad : \quad 2q<t \text{ かつ } -2q+t<\omega\leq 2q+t$$

または $2q>t>0$ かつ $2q-t<\omega<2q+t$ のとき

$$= \frac{\pi}{2q}[1-\frac{1}{4q^2}(\omega+t)^2] \quad : \quad -2q>t \text{ かつ } -2q-t<\omega<2q-t$$

または $0>t>-2q$ かつ $2q+t<\omega<2q-t$ のとき

$$= -\frac{\pi}{2}\frac{\omega t}{q^3} \quad : \quad 2q>t>0 \text{ かつ } 0<t<2q-t$$

または $0>t>-2q$ かつ $0<t<2q+t$ のとき

(4-21)

(4－19) 式による $I(\mathbf{q},\omega)$ の数値計算には (2－23) 式で与えられる Hartree－Fock 近似での $S(\mathbf{q})$ の表式を最初に用いる．$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ を計算するため，この $I(\mathbf{q},\omega)$ の計算結果を (4－16) 式に代入する．$\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$ の結果を，再び $S(\mathbf{q})$ を計算するためは，(4－1) 式に代入する．この繰り返しを $r_s$ の大きさによって 5 回から 10 回実行することにより，0.1% の誤差で $S(\mathbf{q})$ の収束した値が得られた．収束を速めるため，得られた $S(\mathbf{q})$ と前の $S(\mathbf{q})$ との平均が次の $S(\mathbf{q})$ の入力として用いられた．$r_s=1\sim6$ に対して $S(\mathbf{q})$ の収束した値が表 7 に与えられている．

## 4－3－1．対分布関数

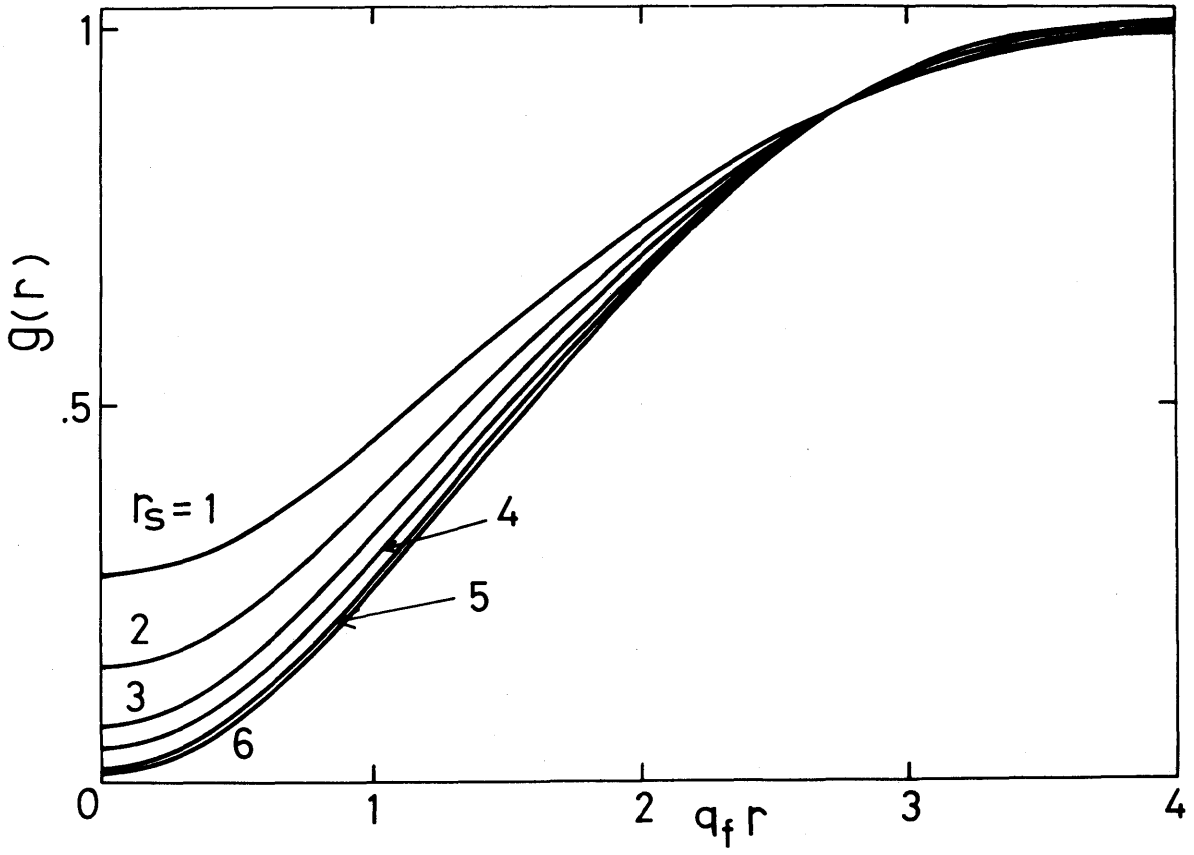
対分布関数 $g(\mathbf{r})$ は次で与えられる．

$$g(\mathbf{r}) = \frac{3}{2}\int_0^\infty dq\{S(q)-1\}\frac{\sin qr}{r}+1 \qquad (4\text{-}22)$$

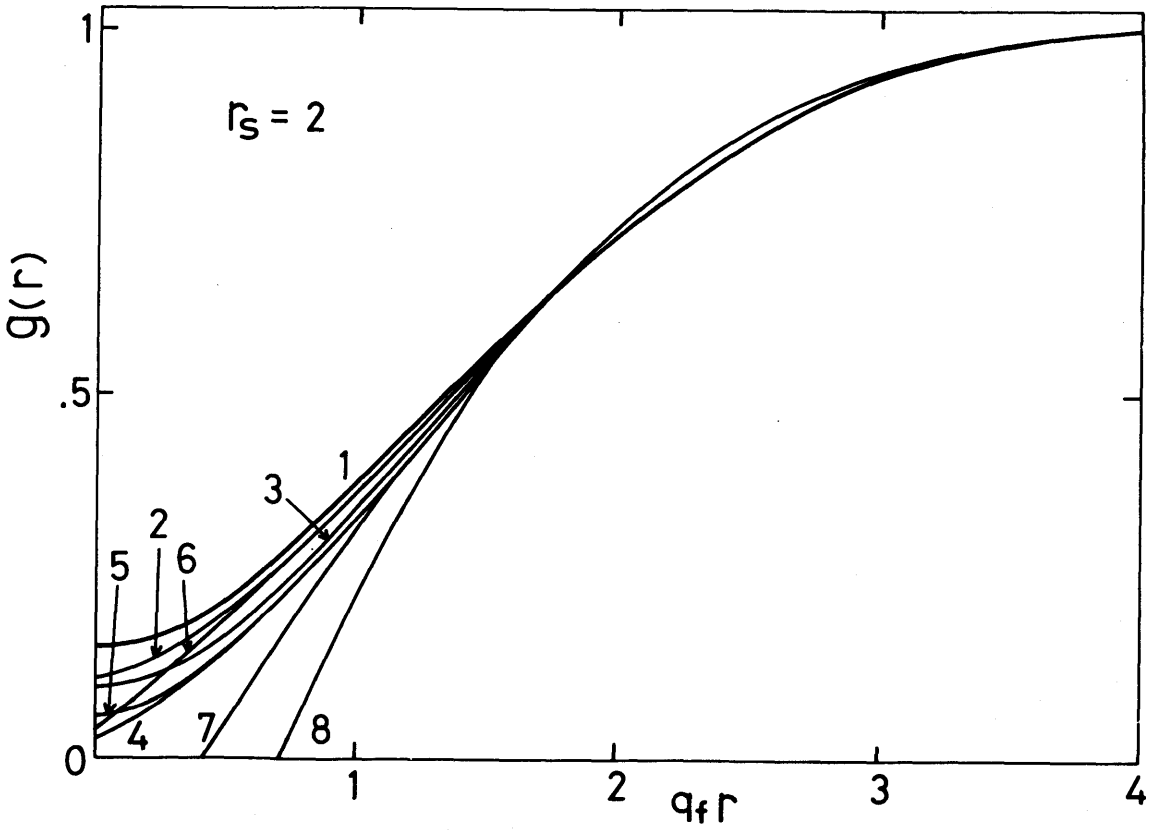
ここで r は $q_f^{-1}$ を単位として表されている．self－consistent に計算され表 7 に示された $S(\mathbf{q})$ の値を (4－22) 式に用い，$g(\mathbf{r})$ を全金属電子密度において計算する．図 13 に $r_s=1\sim6$ に対する $g(\mathbf{r})$ の計結果が示されている．図 13 から，この章での結果では $g(\mathbf{r})$ は全金属電子密度領域 $r_s\leq6$ において常に正となっていることがわかる．図14，図15 および図16 においてそれぞれ $r_s=2$，4 および 6 の場合にこの章で得られた $g(\mathbf{r})$ の計算結果が他の結果と比較されている．図14，図15 および図16 において曲線1 はこの章で

表 7　　S(q) の値

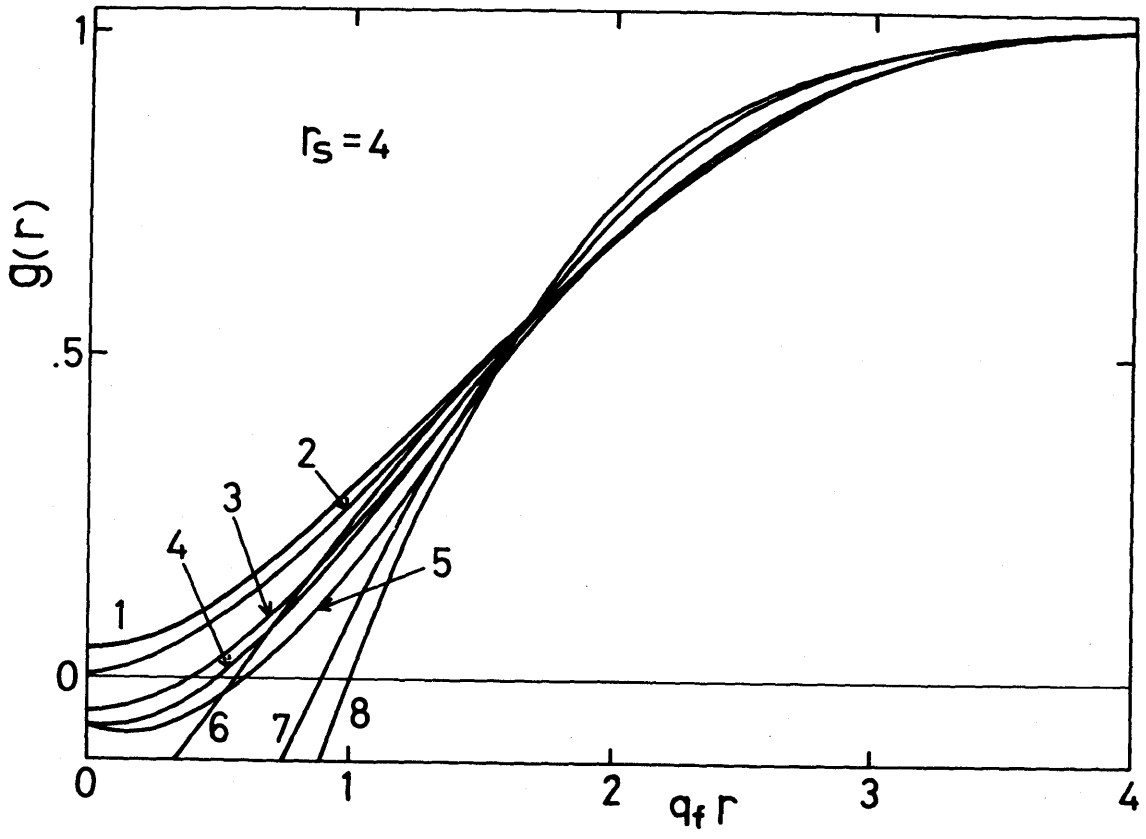
| $q/q_F$ \ $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.1 | 0.01051 | 0.007487 | 0.006129 | 0.005293 | 0.004763 | 0.004332 |
| 0.2 | 0.04048 | 0.02951 | 0.02434 | 0.02119 | 0.01901 | 0.01739 |
| 0.3 | 0.08365 | 0.06446 | 0.05402 | 0.04739 | 0.04270 | 0.03977 |
| 0.4 | 0.1448 | 0.1168 | 0.09758 | 0.08562 | 0.07712 | 0.07113 |
| 0.5 | 0.2322 | 0.1675 | 0.1519 | 0.1360 | 0.1221 | 0.1118 |
| 0.6 | 0.3079 | 0.2339 | 0.2168 | 0.1862 | 0.1784 | 0.1677 |
| 0.7 | 0.3748 | 0.3166 | 0.2900 | 0.2437 | 0.2455 | 0.2405 |
| 0.8 | 0.4505 | 0.3967 | 0.3649 | 0.3198 | 0.3192 | 0.3201 |
| 0.9 | 0.5268 | 0.4702 | 0.4367 | 0.4054 | 0.3933 | 0.3935 |
| 1.0 | 0.5982 | 0.5445 | 0.5076 | 0.4842 | 0.4647 | 0.4577 |
| 1.1 | 0.6645 | 0.6164 | 0.5811 | 0.5560 | 0.5351 | 0.5206 |
| 1.2 | 0.7301 | 0.6864 | 0.6535 | 0.6292 | 0.6075 | 0.5903 |
| 1.3 | 0.7844 | 0.7483 | 0.7206 | 0.7001 | 0.6809 | 0.6651 |
| 1.4 | 0.8346 | 0.8054 | 0.7826 | 0.7661 | 0.7499 | 0.7363 |
| 1.5 | 0.8774 | 0.8540 | 0.8361 | 0.8237 | 0.8111 | 0.8005 |
| 1.6 | 0.9138 | 0.8956 | 0.8821 | 0.8735 | 0.8646 | 0.8574 |
| 1.7 | 0.9452 | 0.9310 | 0.9208 | 0.9154 | 0.9093 | 0.9051 |
| 1.8 | 0.9683 | 0.9581 | 0.9512 | 0.9487 | 0.9455 | 0.9440 |
| 1.9 | 0.9813 | 0.9745 | 0.9706 | 0.9707 | 0.9701 | 0.9709 |
| 2.0 | 0.9897 | 0.9854 | 0.9835 | 0.9853 | 0.9864 | 0.9893 |
| 2.1 | 0.9951 | 0.9938 | 0.9937 | 0.9964 | 0.9940 | 0.9979 |
| 2.2 | 0.9955 | 0.9942 | 0.9941 | 0.9965 | 0.9972 | 1.0005 |
| 2.3 | 0.9958 | 0.9946 | 0.9944 | 0.9966 | 0.9982 | 1.0007 |
| 2.4 | 0.9961 | 0.9950 | 0.9947 | 0.9967 | 0.9981 | 1.0003 |
| 2.5 | 0.9965 | 0.9954 | 0.9951 | 0.9968 | 0.9980 | 0.9996 |
| 2.6 | 0.9968 | 0.9957 | 0.9954 | 0.9969 | 0.9979 | 0.9996 |
| 2.8 | 0.9974 | 0.9965 | 0.9961 | 0.9971 | 0.9977 | 0.9984 |
| 3.0 | 0.9981 | 0.9973 | 0.9967 | 0.9973 | 0.9975 | 0.9980 |
| 3.5 | 0.9989 | 0.9983 | 0.9978 | 0.9980 | 0.9980 | 0.9981 |
| 4.0 | 0.9993 | 0.9989 | 0.9985 | 0.9985 | 0.9985 | 0.9984 |



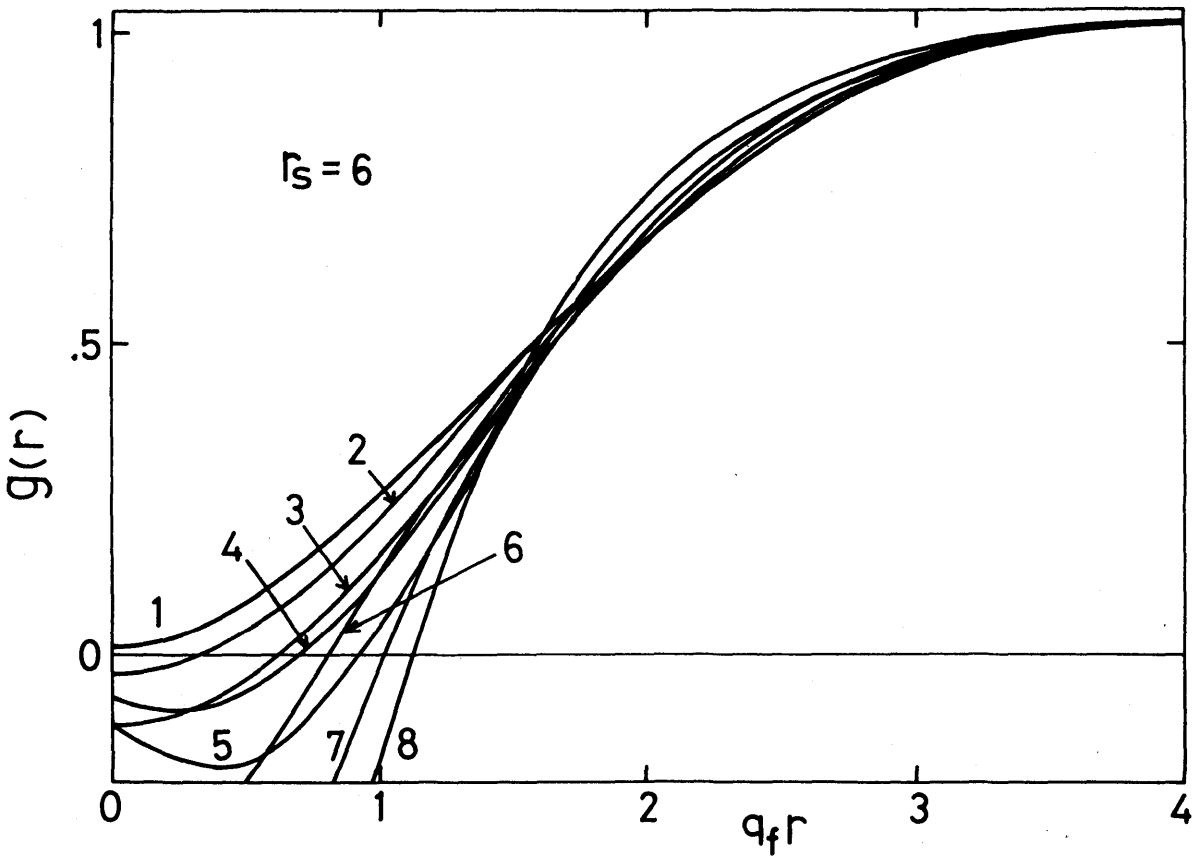

第13 図：$r_s = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$。




第14図：$r_s=2$ に対する対分布関数 g(r) 対 $q_f r$. 曲線1は第4章の結果，曲線2，3，4，5および6は，それぞれ STLS[23]，第2章の結果，Vashishta と Singwi[35]，SSTL[31] および Toigo と Woodruff[71] の結果である。曲線7は Brouers[60] による Hubbard 近似での結果で曲線8は RPA の結果である．




第15図：$r_s = 4$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$. 記法は第14図と同じ.




第16 図：$r_s = 6$ に対する対分布関数 $g(r)$ 対 $q_f r$. 記法は第14 図と同じ。

得られた計算結果で，曲線 2，3，4，5 および 6 は，　それぞれ STLS[23]，第 2 章，Vashishta と Singwi[35]，SSTL[31] および Toigo と Woodruff[71] によって得られた結果である．曲線 7 は Brouers[60] により Hubbard 近似によって得られ，曲線 8 は RPA の結果である．図14，図15 および図16 からわかるように，この章で得られた結果のみが全金属電子密度領域のすべての $r_s$ に対して $g(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件を満たしている．

## 4－3－2。 相関エネルギー

第 2 章で説明したように，相関エネルギー $E_{corr}(r_s)$ は次で与られる．

$$E_{corr}(r_s) = \frac{1}{r_s^2}\int_0^\infty dr_s\{0.916-\frac{4}{\pi\alpha}\Gamma(r_s)\} \quad \text{(Ryd)} \quad , \qquad (4\text{-}23)$$

ここで

$$\Gamma(r_s) = -\frac{1}{2}\int_0^\infty dq[S(q)-1] \quad . \qquad (4\text{-}24)$$

以前のように $S(q)$ の計算された結果を用い，$E_{corr}(r_s)$ と $\Gamma(r_s)$ がそれぞれ（4－23）式と（4－24）式から計算される．$\Gamma(r_s)$ の値は表 8 に与えられている．$E_{corr}(r_s)$ の計算結果は表 9 で他の結果と比較される。この章での $E_{corr}(r_s)$ の結果は STLS[23] および第 2 章の結果に非常に近い．このことは Goodman と Sjölander[72] が示したように，$g(\mathbf{r})$ が $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の $\mathbf{q}$ 依存性に敏感であるのに対して，相関エネルギーは $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の積分によって決まり，その詳細

表 8　　$\Gamma(r_s)$ の値

| $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\Gamma(r_s)$ | 0.454 | 0.488 | 0.507 | 0.522 | 0.531 | 0.536 |

表 9　　相関エネルギーの計算値　$E_{corr}(r_s)$

単位は　Ryd.

| $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 第 4 章の結果 | -0.122 | -0.091 | -0.074 | -0.063 | -0.055 | -0.049 |
| 第 2 章の結果 | -0.117 | -0.088 | -0.073 | -0.063 | -0.056 | -0.050 |
| Vashishta-Singwi[35] | -0.130 | -0.098 | -0.081 | -0.070 | -0.062 | -0.056 |
| STLS[23] | -0.124 | -0.092 | -0.075 | -0.064 | -0.056 | -0.050 |
| SSTL[31] | -0.125 | -0.097 | -0.080 | -0.070 | -0.063 | -0.057 |
| Hubbard[20] | -0.131 | -0.102 | -0.086 | -0.076 | -0.069 | -0.064 |
| Nozières-Pines[21] | -0.115 | -0.094 | -0.081 | -0.072 | -0.065 | -0.060 |
| RPA | -0.157 | -0.124 | -0.105 | -0.094 | -0.085 | -0.078 |
| Toigo-Woodruff[71] | -0.128 | -0.092 | -0.077 | -0.068 | -0.061 | -0.056 |

な形には敏感でないことによっている。また第 2 章で述べた（2−32）式に表 9 に示されたこの章の $E_{corr}(r_s)$ の結果を用い，凝集エネルギーを評価すると，当然 STLS[23] の結果に近くなるであろう。

### 4−3−3。 圧縮率

第 2 章で説明したように，電子気体の等温圧縮率 $\kappa$ は次で与えられる。

$$\frac{\kappa_f}{\kappa} = \frac{\alpha^2 r_s^{\,4}}{6}\frac{d^2E_0(r_s)}{dr_s^{\,2}} - \frac{\alpha^2 r_s^{\,3}}{3}\frac{dE_0(r_s)}{dr_s} \qquad (4\text{-}25)$$

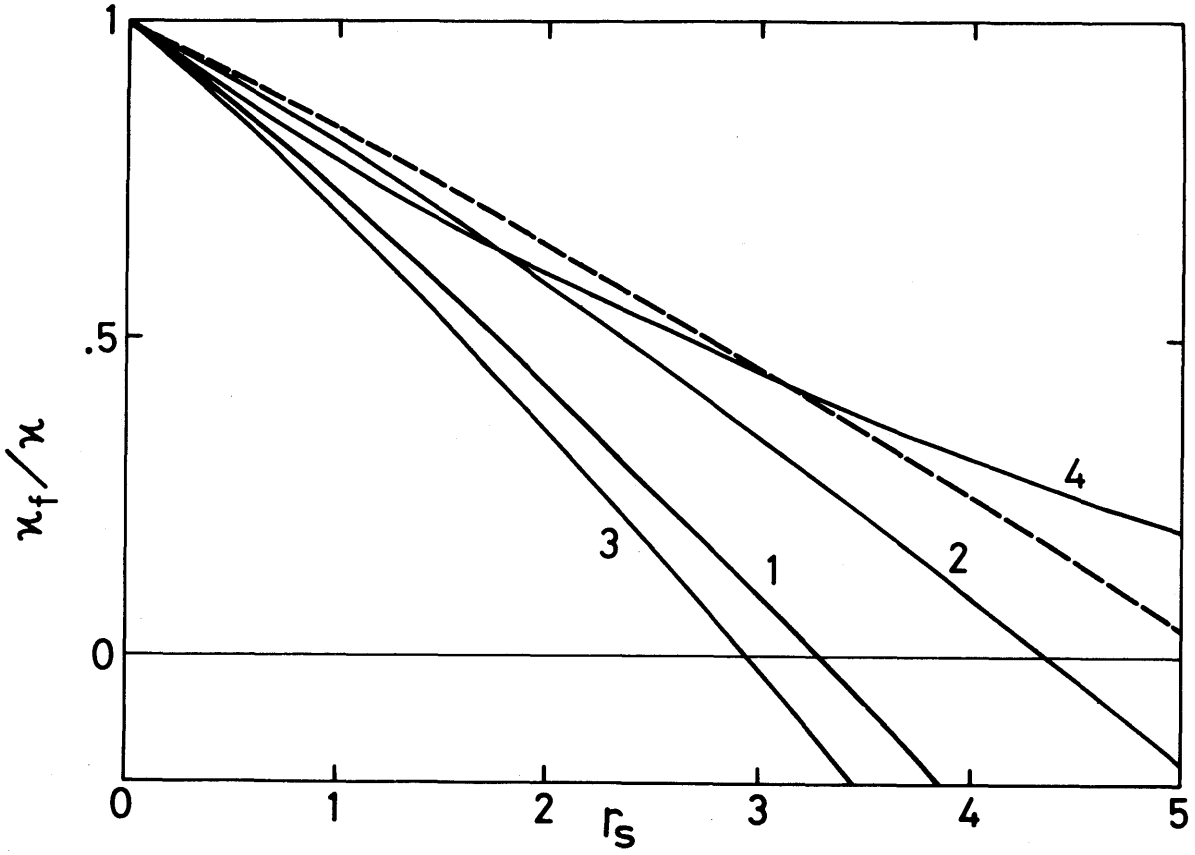
ここで $\kappa_f$ は自由電子気体の圧縮率で $E_0(r_s) = 2.21/r_s - 0.916/r_s + E_{corr}(r_s)$ 。（4−25）式と表 9 に与えられた $E_{corr}(r_s)$ の計算結果から $\kappa_f/\kappa$ が計算され，結果は図17 の破線で示されている。相関エネルギーから $\kappa$ への寄与は小さいので，STLS[23]，SSTL[31] および第 2 章の $\kappa$ の計算結果は図17 に破線で示されているこの章で得られた $\kappa$ の結果に非常に近い。

## §4−4。 長波長の極限でのプラズマ振動の分散関係と圧縮率

### 4−4−1。 プラズマ振動の分散関係

（4−16）式で与えられる $\varepsilon(q,\omega)$ は $\omega$ が有限で $q$ が小さいとき，$q$ のべき級数で次のように展開される。

$$\varepsilon(q,\omega) = 1-\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2\left[1+\frac{9}{5}(q/q_{FT})^2-\Gamma(r_s)(q/q_F)^2\right]+\cdots \quad , \quad (4\text{-}26)$$




第17図：自由電子気体の圧縮率と相互作用をしている電子気体に対する圧縮率の比対 $r_s$. 破線と曲線1は，それぞれ（4—25）式と（4—31）式から得られる．曲線 2，3 および 4 は，それぞれ曲線1に対応する第 2 章，STLS[23] および SSTL[31] の結果である．

ここで $\omega_p = \sqrt{4\pi n e^2/m}$ , $q_{FT}^2 = 4me^2 q_f/\pi\hbar^2$

(4−26) 式からプラズマ振動の分散関係は次のように得られる。

$$\omega_p(q) = \omega_p\{1 + \frac{9\pi}{40\alpha r_3}(q/q_F)^2 - 0.5\Gamma(r_s)(q/q_F)^2 + \cdots\} , \qquad (4\text{-}27)$$

任意の $q$ での分散関係は (4−16) 式と §4−3 で得られた $I(q,\omega)$ の数値計算の結果から数値的に計算される。$r_s$ のいろいろな値に対する結果は図18 に示されている。各曲線は電子空孔対の励起の出現の位置で終っている。$r_s \geq 5$ で最小値が存在することが見いだされている。

## 4−4−2. 圧縮率

第2 章で示したように圧縮率 sum rule は次で与えられる。小さな $q$ に対して

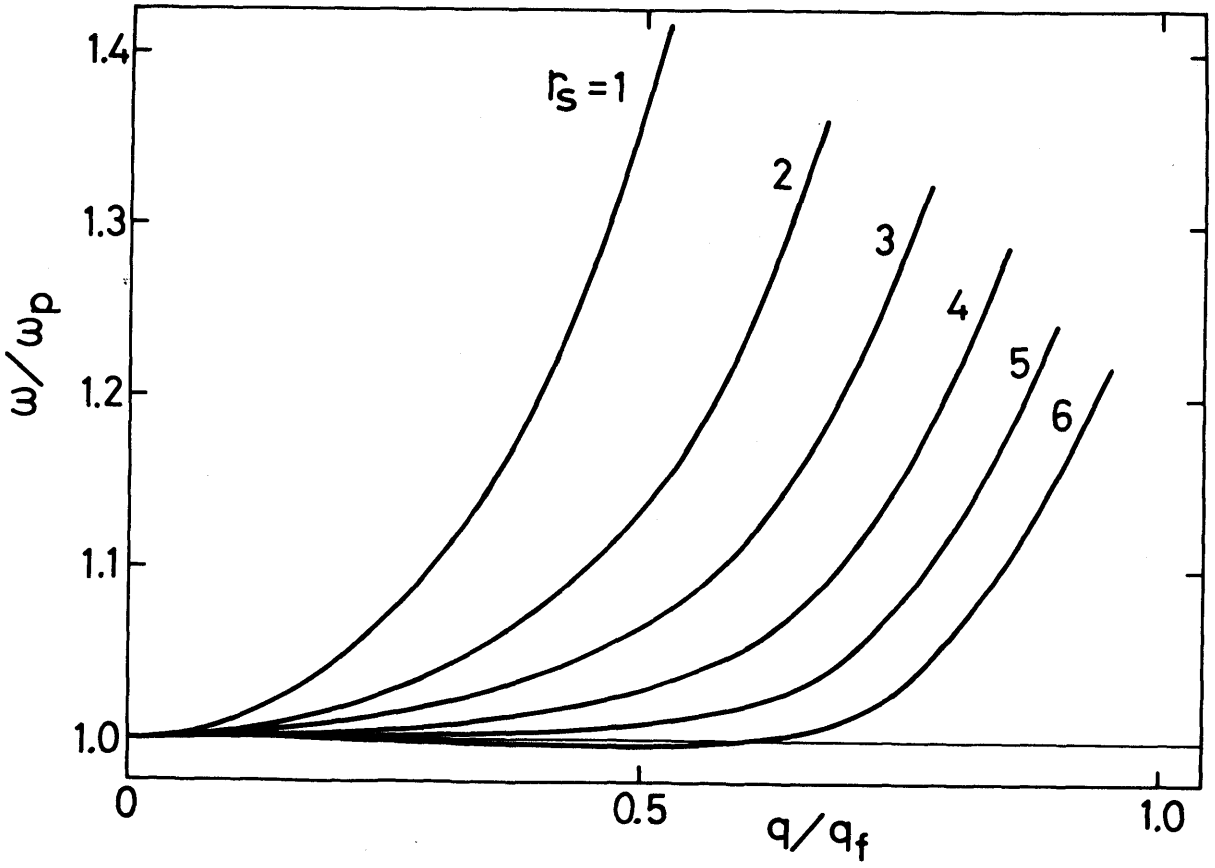
$$\varepsilon(q,0) = 1 + \frac{\kappa}{\kappa_f}\frac{4\alpha r_s}{\pi}\left(\frac{q_F}{q}\right)^2 . \qquad (4\text{-}28)$$

一方，(4−16)式から小さな $q$ と $\omega=0$ に対して $\varepsilon(q,0)$ は次のようになる

$$\varepsilon(q,0) = 1 + \left(\frac{\pi}{4\alpha r_s} - \gamma\right)^{-1}\left(\frac{q_F}{q}\right)^2 , \qquad (4\text{-}29)$$

ここで

$$\gamma = \frac{3}{8}\int_0^\infty dx\{S(x)-1\}\{-1+\frac{4}{x^2} - \frac{x^4-16}{4x^3}\ln\left|\frac{x-2}{x+2}\right|\} . \qquad (4\text{-}30)$$




第18 図：$r_s$＝1～6 に対するプラズマ振動の分散関係．

(4－28) と (4－29) 式とから次式が得られる．

$$\frac{\kappa_f}{\kappa} = 1 - \frac{4\alpha r_s}{\pi}\gamma \ . \qquad (4\text{-}31)$$

表 7 で与えられる $S(\mathbf{q})$ を用い，(4－30) 式と (4－31) 式とから計算された圧縮率の結果が図17 の曲線1 で示され，これは (4－25) 式から得られた破線と比較される．(4－31) 式による第 2 章，STLS[23] および SSTL[31] で得られた $\kappa$ の計算結果が，それぞれ曲線 2，3 および 4 で示される．図17 からわかるようにこの章の理論では (4－25) 式で得られる $\kappa$ と (4－31) 式で得られる $\kappa$ が一致しない．すなわち圧縮率 sum rule が満たされていない． しかし，STLS[23] の結果よりは少し良い．現在では，圧縮率 sum rule と $g(\mathbf{r})$ を常に正とするという条件の両方を同時に満足する理論はない．Vashishta と Singwi[35] の理論は圧縮率 sum rule をほとんど厳密に満たすが，$g(0)$ の値は $r_s \geq 3$ で依然として負となる．最近 Jain と Jain[69] は，Ichimaru[73] が Bogoliubov－Born－Green－Kirkwood－Yvon の方程式系を解いて得た $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式から， self－consistent に $g(\mathbf{r})$ と $\kappa$ を計算し，圧縮率 sum rule をほとんど厳密に満たす結果を得た．しかし，彼らの $g(\mathbf{r})$ の結果は $r_s \geq 3$ で $r$ が小さいとき絶対値が大きな負の値となっている．一方，この章で得られた結果では，圧縮率 sum rule は満たされていないが，$g(\mathbf{r})$ は全金属電子密度において正になっている．

## §4－5。 結論と討論

この章では，STLS[23] の古典論の場合のように，対分布関数を利用して Wigner 分布関数に対する方程式を解くことにより，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の量子論的な表式が導かれた．この章の理論では，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ は $G(\mathbf{q})$ と $Q_0(\mathbf{q}, \omega)$ の積に分解されることができない局所場の因子をもつ．一方，Toigo と Woodruff[71] の理論以外の STLS[23] をはじめとする他の理論では，局所場の因子はそのように分解されることができた．そして，STLS[23] の方法と同様にして，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の self－consistent な数値計算が実行され，$g(\mathbf{r})$，$E_{corr}(r_s)$，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係がその計算結果を利用して，全金属電子密度領域において計算された．最も重要なことは，この章で得られた $g(\mathbf{r})$ の値が全金属電子密度において正となったことである。それゆえ，この章における理論は $g(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件を満たしている。$E_{corr}(r_s)$ の計算結果は STLS[23] および第 2 章の結果にかなり近い．この章での理論からは圧縮率 sum rule は満たされていないが，$K$ の結果は図17 が示すように STLS[23] の結果より少し良い．Vashishta と Singwi[35] は Schneider 達[32), 33] の理論において適当なパラメーターを導入し，圧縮率 sum rule をほとんど厳密に満たすようにこのパラメーターの値を決定した．しかし，Vashishta と Singwi[35] の $g(0)$ の結果は $r_s \geq 3$ で負となった．Jain と Jain[69] は，Ichimaru[73] の三体相関を近似的に取り入れ，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ を self－consistent に数値計算して，近似的に圧縮率 sum rule を満たす結果を得たが，やはり $g(0)$ は $r_s \geq 3$ に対して

大きな負の値となった。電子気体模型の理論に対して課せられる条件は，圧縮率 sum rule を満たすことと対分布関数が常に正となることであるが，この両方を同時に満たす理論はまだなく，この章で得られた結果および Vashishta と Singwi[35] または Jain と Jain[69] の結果からわかるように，一方の条件を満足させようとすると他方の条件が破れるということになっている。この論文の理論から得られた結果は g(r) が常に正という条件を満たしているから，将来この章の方法を改良し，圧縮率 sum rule をも満たす理論を作ることが今後の課題である。振動数と波数に依存する一般化帯磁率，スピン帯磁率，平行スピンの電子間の対分布関数および反平行スピンの電子間の対分布関数が，第 3 章で示されたようにしてこの章の方法を拡張し，計算されることができる。この数値計算および結果が次章で与えられる。

## 第5章　量子論的分布関数による一般化帯磁率とスピン相関

### §5－1。　序

第3章では，第2章の $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の求め方をスピン相関に拡張し，古典的リューピュ方程式から一般化帯磁率 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が求められた．Lobo 達[26] と同様に，この $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の表式の中に現れる古典的な自由電子に関する分極率 $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ と磁気的構造因子 $\tilde{S}(\mathbf{q})$ を，それぞれ対応する量子論的な量に置き換えることにより，量子論的な $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が得られると仮定した。このような方法では，第4章で述べられたように，厳密に量子論的な $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を求めることはできない．一方，第4章では古典的な一粒子分布関数に対応する量子論的な量である Wigner 分布関数を用い，直接に量子論的な $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の表式が求められた。

この章では，第4章の $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ についての方法をスピン相関の場合に拡張し，スピンに依存する Wigner 分布関数の運動方程式から，直接に量子論的な $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の表式が導かれる．古典論でリューピュ方程式を解く際 Lobo 達[26] が用いた近似，すなわちスピンに依存する二粒子分布関数をスピンに依存する一粒子分布関数とスピン $\sigma, \sigma'$ に依存する対分布関数 $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r})$ の積で置き換えるという近似に類似の近似が用いられる。このようにして求められた $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ は $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r})$ の汎関数となる．一方，$g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r})$ のフーリエ成分は $\tilde{S}(\mathbf{q})$ と関係している．そこで第3章と同様に，近似に依存しない $\tilde{S}(\mathbf{q})$ と $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を結びつける厳密な関係式

$$\tilde{S}(q) = \frac{4\hbar}{n\pi(g\mu_B)^2}\int_0^\infty d\omega \mathrm{Im}\chi(q,\omega) \quad , \tag{5-1}$$

を用い，$\chi(\mathbf{q},\omega)$ が self－consistent に解かれる。この self－consistent な方法で数値計算された $\chi(\mathbf{q},\omega)$ を用い，平行スピン間の対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$，反平行スピン間の対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率 $\chi$ が全金属電子密度，$2\leq r_s\leq 6$，に対して計算される。STLS[23]，SSTL[31] および第3章の $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果は $r_s\leq 4$ では常に正となるが，$r_s\geq 6$ では小さな r に対して負となるのに対して，$r_s\leq 6$ に対するこの章で得られる $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果は常に正となり，正定値符号の条件を満足している。Yasuhara[74), 75)] は摂動論により ladder ダイアグラムを集めて $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ を計算し，常に $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) \geq 0$ となる結果を得た。いろいろな $r_s$ に対するこの章での $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ の結果は，Yasuhara[74), 75)] の結果より少し大きいが，それに近い値をとっている．§5－2 では，弱い外部磁場のある場合に，スピンに依存する Wigner 分布関数に対する運動方程式を解いて，$\chi(\mathbf{q},\omega)$ の表式が導かれる．§5－3 では，$\chi(\mathbf{q},\omega)$ が self－consistent に数値計算され，この結果を用いて $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ が計算され，以前の結果と比較される．§5－4 では，結論と討論がなされる．

## §5－2。一般化帯磁率

スピン $\sigma$ に依存する Wigner 分布関数 $f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ は次式で定義さ

れる．

$$f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = \frac{1}{h^3}\int d^3l\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}\langle\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)\ \psi_\sigma(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)\rangle \quad , \qquad (5\text{-}2)$$

ここで $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r},t)$ と $\psi_\sigma(\mathbf{r},t)$ はそれぞれ時刻 t 点 $\mathbf{r}$ にスピン $\sigma$ をもつ電子を作る演算子および消す演算子である． $\langle\cdots\rangle$ は次式で与えられる弱い外部磁場 $H(\mathbf{r},t)$ のあるときの電子気体のハミルトニアン $\mathcal{H}$ での期待値を意味する．

$$\mathcal{H} = -\sum_\alpha\int\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r},t)\frac{\hbar^2\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m}\psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\iint\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r},t)\psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}',t)V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

$$\times\psi_\beta(\mathbf{r}',t)\psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r\ d^3r' + \sum_\alpha\int\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r},t)\mu_\alpha H(\mathbf{r},t)\psi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r \quad , \qquad (5\text{-}3)$$

ここで $V(\mathbf{r})$ はクーロン相互作用，$\mu_\sigma = g\mu_B\sigma/2$, $\sigma=\pm 1$. この章では， $f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する運動方程式を作り， この方程式から $f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を求めて $\chi(q,\omega)$ の表式が導かれる． $f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する運動方程式は付録 A における方法に類似の方法によって次のように与えられる．

$$\frac{\partial f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3p_1 e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}$$

$$\times\mu_\sigma f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;t)[H(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-H(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)] + \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3r' d^3p' d^3p''$$

$$\times e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{l}/\hbar}[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}}{2})-V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}}{2})]$$

$$\times\sum_{\sigma'}f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p}';\mathbf{r}',\mathbf{p}'';t) = 0 \quad , \qquad (5\text{-}4)$$

ここで二つのスピン $\sigma,\sigma'$ に依存する二粒子 Wigner 分布関数 $f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ は次式で定義される。

$$f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = \frac{1}{h^6}\int d^3l\,d^3l'\,e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}+\mathbf{p}'\cdot\mathbf{l}')/\hbar}$$

$$\times\ \langle\Psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}+\tfrac{\mathbf{l}}{2},t)\Psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}'+\tfrac{\mathbf{l}}{2},t)\Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}'-\tfrac{\mathbf{l}'}{2},t)\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}-\tfrac{\mathbf{l}}{2},t)\rangle \quad . \qquad (5\text{-}5)$$

(5—4) 式は第 3 章の古典的リュービュ方程式 (3—1) に対応する量子論の場合の式である。(5—4) 式は $f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)$ を含み，これについての運動方程式は三粒子 Wigner 分布関数を含む。このようにして無限の運動方程式の連鎖ができる。この章では，この方程式の連鎖を切断するため，古典論で Lobo 達[26] が行った仮定と類似の次の仮定を行う。

$$f_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t) = f_{\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)f_{\sigma'}(\mathbf{r}',\mathbf{p}';t)g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad , (5\text{-}6)$$

ここで $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r})$ は平衡状態での $\sigma$ スピンと $\sigma'$ スピンの間の対分布関数である。　二粒子の間の相関を無視する近似，すなわち (5—6) 式で $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=1$，をして以下の手続きを実行すると RPA に対応する $\chi(\mathbf{q},\omega)$ の表式が得られる．したがって (5—6) 式の $g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ の導入によってスピン帯磁率を enhance していることが後でわかる．弱い外部磁場による $f_{\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ の平衡値 $f^{0}_{\sigma}(\mathbf{p})$ からのずれ $f^{(1)}_{\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を次で定義する．

$$f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f_\sigma(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - f_\sigma^0(\mathbf{p}) \quad . \tag{5-7}$$

(5—4) 式を線型化すると次のように $f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ についての方程式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t}f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}f_\sigma^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3p' \; e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{l}/\hbar}[H(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-H(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)]\mu_\sigma f_\sigma^0(\mathbf{p}')$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3r' d^3p' d^3p'' \; e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{l}/\hbar}[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}}{2})-V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}}{2})]$$

$$\times f_\sigma^0(\mathbf{p}')\sum_{\sigma'} f_{\sigma'}^{(1)}(\mathbf{r}',\mathbf{p}'',t)g_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 0 \quad . \tag{5-8}$$

$F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を次のように定義する。

$$F(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = f_\uparrow^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - f_\downarrow^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) \tag{5-9}$$

(5—8) 式から $F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に関する次の方程式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t}F(\mathbf{r},\mathbf{p};t) + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3p' \; e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{l}/\hbar}[H(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-H(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)]\frac{1}{2}g\mu_B f^0(\mathbf{p}')$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l d^3r' d^3p' d^3p'' \; e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{l}/\hbar}[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}}{2})-V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}}{2})]$$

$$\times f^0(\mathbf{p}')F(\mathbf{r}',\mathbf{p}'';t)\tilde{g}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 0 \quad . \tag{5-10}$$

ここで

$$f^0(\mathbf{p}) = f^0_{\uparrow}(\mathbf{p}) + f^0_{\downarrow}(\mathbf{p}) \tag{5-11}$$

$$\tilde{g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\{g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})-g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})\} . \tag{5-12}$$

(5－10) 式を導く際，$f^0_{\uparrow}(\mathbf{p})=f^0_{\downarrow}(\mathbf{p})$，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})=g_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r})$ および $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})=g_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r})$ なる関係が用いられた．第 4 章と同様にして (5－10) 式をフーリエ変換して次式が得られる．

$$\int d^3p\ F(\mathbf{q},\mathbf{p};\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q},\omega)\,(\frac{1}{2}g\mu_B)H(\mathbf{q},\omega)}{1-\int\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\,\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}';\omega)\tilde{g}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{V}(\mathbf{q}')} , \tag{5-13}$$

ここで $\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q},\omega)$ は (4－13) 式で定義される自由電子の拡張された分極率，$\tilde{g}(\mathbf{q})$，$V(\mathbf{q})$，$H(\mathbf{q},\omega)$ および $F(\mathbf{q},\mathbf{p},\omega)$ は，それぞれ $\tilde{g}(\mathbf{r})$，$V(\mathbf{r})$，$H(\mathbf{r},t)$ および $F(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ のフーリエ成分である．$\chi_0(\mathbf{q},\omega)$ は (2－18) 式で与えられる通常の自由電子の分極率である．(5－13) 式から $\chi(\mathbf{q},\omega)$ は次のように得られる．

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = \frac{\frac{1}{4}(g\mu_B)^2\chi_0(\mathbf{q},\omega)}{1-J(\mathbf{q},\omega)} , \tag{5-14}$$

ここで

$$J(\mathbf{q},\omega) = \int d^3q'\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}',\omega)\,[\tilde{S}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')-1]\mathbf{V}(\mathbf{q}') . \tag{5-15}$$

(5－15) 式の磁気的構造因子 $\tilde{S}(\mathbf{q})$ は

$$\tilde{S}(\mathbf{q}) = 1 + n\tilde{g}(\mathbf{q}) \quad , \tag{5-16}$$

で与えられる。(5－14) 式は古典論での Lobo 達[26] の結果の量子論への拡張である。(5－1), (5－14) および (5－15) 式は self－consistent に解かれるべき方程式の組である。次節では, self－consistent な方法により $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が数値計算され, この結果を用いて全金属電子密度における $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$, $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ の値が計算される。

## §5－3. スピンに依存する対分布関数とスピン帯磁率

第 3 章で $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ について行った方法と同様にして, (5－1), (5－14) および (5－15) 式を self－consistent な数値計算によって解き, $r_s = 1 \sim 6$ に対して収束した $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ と $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の値が得られた。表10 に $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の収束した値を示す。

### 5－3－1. スピンに依存する対分布関数

表10 に示された $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の収束値を用い, $\tilde{g}(\mathbf{r})$ は次のように計算される。

$$\tilde{g}(r) = \frac{3}{2}\int_0^\infty dq\{\tilde{S}(q)-1\}\frac{\sin qr}{r} \quad , \tag{5-17}$$

ここで r は $q_f^{-1}$ を単位として測る。この $\tilde{g}(\mathbf{r})$ と第 4 章で求めら $g(\mathbf{r})$ の値を用いると, $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ は次式によって求められる。

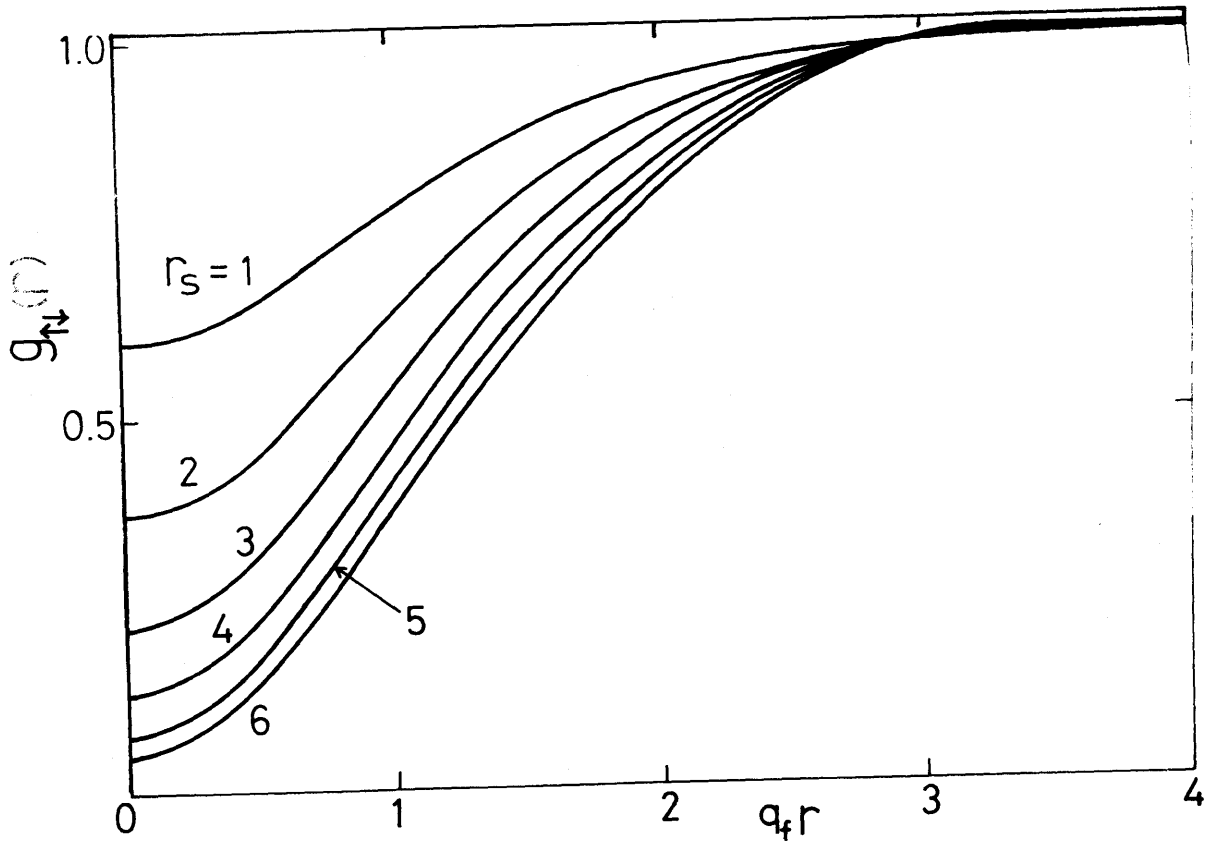
表 10　　$\tilde{S}(q)$ の値

| $q/q_F$ \ $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.1 | 0.08892 | 0.10820 | 0.1275 | 0.1300 | 0.1672 | 0.1900 |
| 0.2 | 0.1683 | 0.1907 | 0.2133 | 0.2425 | 0.2782 | 0.3494 |
| 0.3 | 0.2510 | 0.2806 | 0.3080 | 0.3441 | 0.3803 | 0.4403 |
| 0.4 | 0.3280 | 0.3622 | 0.3929 | 0.4308 | 0.4710 | 0.5164 |
| 0.5 | 0.4055 | 0.4432 | 0.4760 | 0.5143 | 0.5577 | 0.5927 |
| 0.6 | 0.4759 | 0.5156 | 0.5492 | 0.5864 | 0.6291 | 0.6568 |
| 0.7 | 0.5461 | 0.5865 | 0.6197 | 0.6545 | 0.6919 | 0.7168 |
| 0.8 | 0.6100 | 0.6495 | 0.6813 | 0.7134 | 0.7444 | 0.7675 |
| 0.9 | 0.6714 | 0.7096 | 0.7397 | 0.7686 | 0.7943 | 0.8152 |
| 1.0 | 0.7320 | 0.7681 | 0.7958 | 0.8211 | 0.8424 | 0.8610 |
| 1.1 | 0.7810 | 0.8141 | 0.8391 | 0.8616 | 0.8789 | 0.8943 |
| 1.2 | 0.8288 | 0.8590 | 0.8813 | 0.9008 | 0.9148 | 0.9275 |
| 1.3 | 0.8740 | 0.9011 | 0.9208 | 0.9373 | 0.9485 | 0.9588 |
| 1.4 | 0.9102 | 0.9337 | 0.9504 | 0.9642 | 0.9728 | 0.9804 |
| 1.5 | 0.9418 | 0.9621 | 0.9762 | 0.9877 | 0.9941 | 0.9996 |
| 1.6 | 0.9679 | 0.9850 | 0.9967 | 1.0061 | 1.0106 | 1.0143 |
| 1.7 | 0.9909 | 1.0051 | 1.0147 | 1.0221 | 1.0251 | 1.0276 |
| 1.8 | 1.0054 | 1.0109 | 1.0246 | 1.0302 | 1.0320 | 1.0333 |
| 1.9 | 1.0105 | 1.0197 | 1.0256 | 1.0302 | 1.0309 | 1.0311 |
| 2.0 | 1.0129 | 1.0201 | 1.0247 | 1.0280 | 1.0282 | 1.0280 |
| 2.1 | 1.0104 | 1.0159 | 1.0194 | 1.0217 | 1.0215 | 1.0210 |
| 2.2 | 1.0084 | 1.0124 | 1.0149 | 1.0164 | 1.0158 | 1.0150 |
| 2.3 | 1.0067 | 1.0097 | 1.0114 | 1.0124 | 1.0116 | 1.0110 |
| 2.4 | 1.0054 | 1.0076 | 1.0088 | 1.0094 | 1.0086 | 1.0077 |
| 2.5 | 1.0044 | 1.0062 | 1.0072 | 1.0076 | 1.0068 | 1.0060 |
| 2.6 | 1.0039 | 1.0055 | 1.0063 | 1.0067 | 1.0060 | 1.0053 |
| 2.8 | 1.0029 | 1.0040 | 1.0046 | 1.0048 | 1.0043 | 1.0038 |
| 3.0 | 1.0019 | 1.0026 | 1.0029 | 1.0030 | 1.0026 | 1.0023 |
| 3.5 | 1.0010 | 1.0013 | 1.0015 | 1.0015 | 1.0014 | 1.0012 |
| 4.0 | 1.0006 | 1.0008 | 1.0009 | 1.0009 | 1.0008 | 1.0008 |

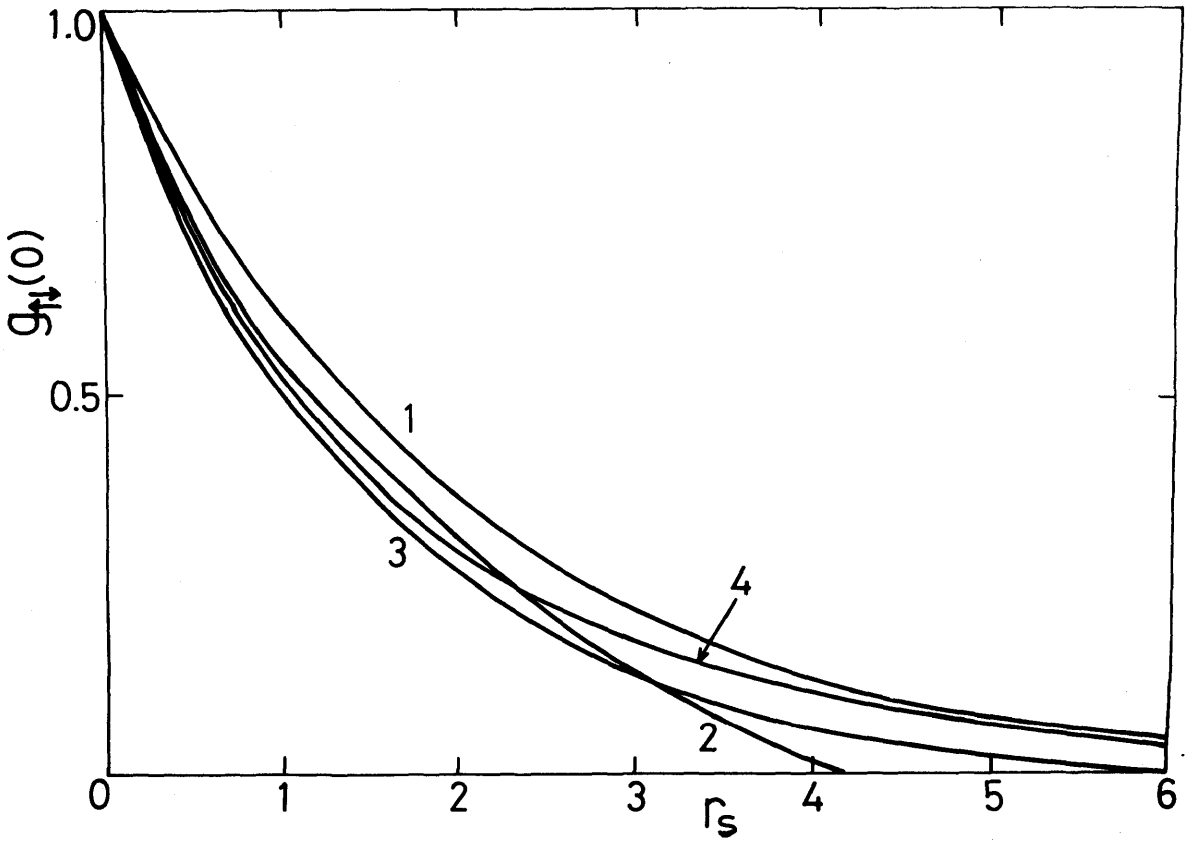
$$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) + \tilde{g}(\mathbf{r}) \tag{5-18}$$

$$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) - \tilde{g}(\mathbf{r}) \tag{5-19}$$

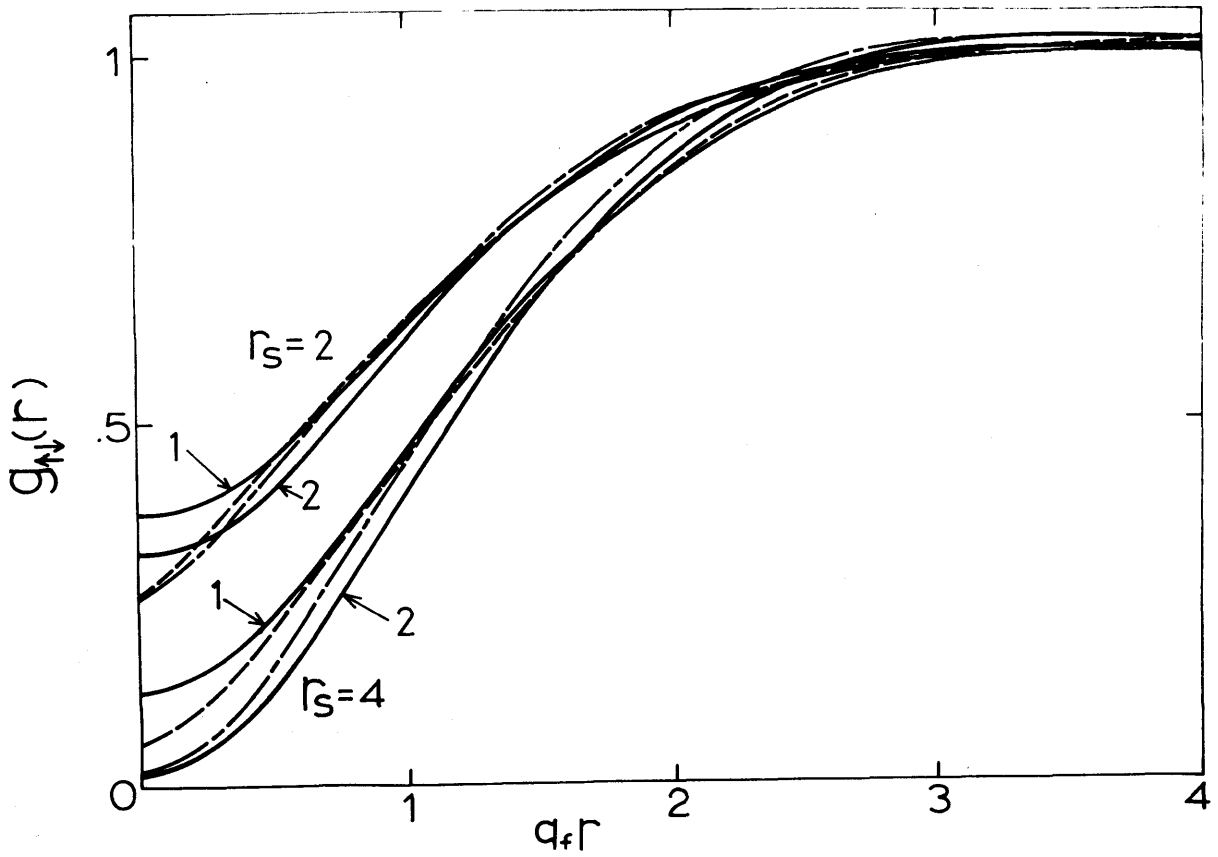
図19 に $r_s = 1 \sim 6$ に対するこの章の $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果が示される．図19 からわかるように全金属電子密度，$r_s \leq 6$，で $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ は常に正となり，正定値符号の条件を満たす．図 20 では，$r_s$ の関数としての $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ の結果が他の結果と比較される．図 20 で曲線1 はこの章の結果，曲線 2 は第 3 章の結果，曲線 3 は Lobo 達[26] の結果で曲線 4 は摂動論による Yasuhara[74),75)] の結果である．この章の理論による $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ の結果は Yasuhara[74),75)] の結果より少し大きいがこれに近い．図 21 に $r_s = 2$ と $r_s = 4$ に対して求められた $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果が他の結果と比較されている．図 21 で，実線1 はこの章での結果，実線 2 は第 3 章の結果，破線は Lobo 達[26] の結果，鎖線は SSTL[31] の結果である．図 21 からわかるように，この章の $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の結果は $r = 0$ 近傍で他のどの結果よりも大きいので，他のどの結果よりも $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件を満たしている傾向にあることがわかる．図 22 において，この章で計算された $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ の結果が他の結果と比較される．曲線1 はこの章の結果，曲線 2 は第 3 章の結果，曲線 3 は Hartree－Fock 近似の結果で，曲線 4 は Lobo 達[26] の結果である．曲線 5 と 6 は，それぞれ $r_s = 2$ と $r_s = 4$ に対する SSTL[31] の結果である．SSTL[31] の結果以外はすべて $r_s$ によらない．図 22 から，この章の $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$



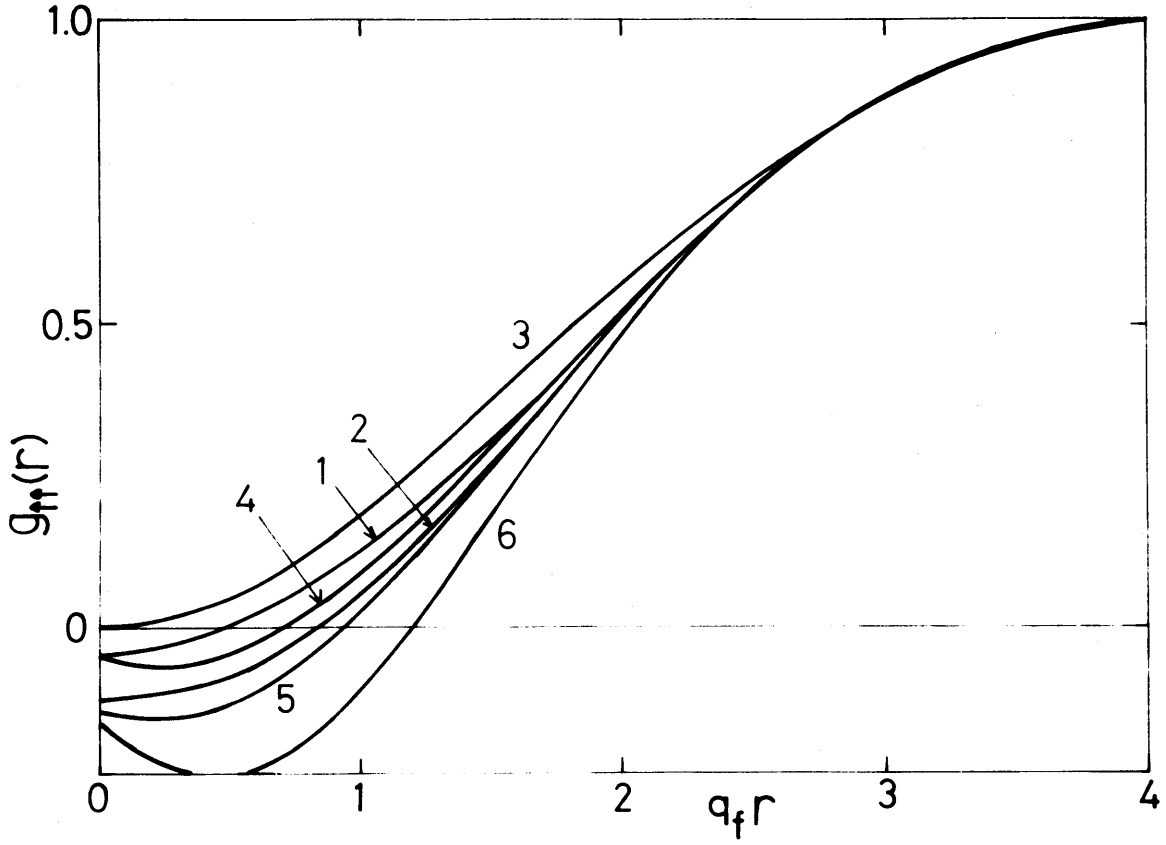

第19 図：$r_s$= 1～6 に対する対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(r)$ 対 $q_f r$.




第 20 図：$r_s$ の関数としての原点での対分布関数の値 $g_{\uparrow\downarrow}(0)$. 曲線 1 は第 5 章の結果，曲線 2，3 および 4 は，それぞれ第 3 章，Lobo 達[26] および Yasuhara[74), 75)] の結果である.




第 21 図：$r_s = 2$ と $r_s = 4$ に対する対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(r)$ 対 $q_f r$. 実線1は第 5 章の結果であり実線 2 は第 3 章の結果である．破線と鎖線は，それぞれ Lobo 達[26] と SSTL[31] の結果である．




第 22 図：対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ 対 $q_f r$. 曲線1 と 2 は，それぞれ第 5 章および第 3 章の結果である．曲線 3 と 4 は，それぞれ Hartree—Fock 近似および Lobo 達[26] の結果である．曲線 5 と 6 は，それぞれ $r_s=2$ と $r_s=4$ に対する SSTL[31] の結果である． SSTL[31] の結果以外はほとんど $r_s$ によらない．

の結果は，r が小さいとき，依然として負となり正定値符号の条件を満たしていないが，Lobo 達[26]，第 3 章および SSTL[31] の結果よりは，r が小さいとき，大きくなり，正定値符号の条件を満たす方向へ改善されていることがわかる．また図 22 からわかるように，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ は $r_s$ によらないから，平行スピンの電子間の相関はクーロン相互作用よりも Pauli の排他律に強く支配されていることがわかる．

### 5－3－2．　スピン帯磁率

スピン帯磁率 $\chi$ は $r_s$ の関数として次のように与えられる。

$$\chi = \lim_{\mathbf{q}\to 0}\chi(\mathbf{q},0) = \frac{\chi_f}{1-4\alpha r_s\tilde{\gamma}/\pi} \quad , \tag{5-20}$$

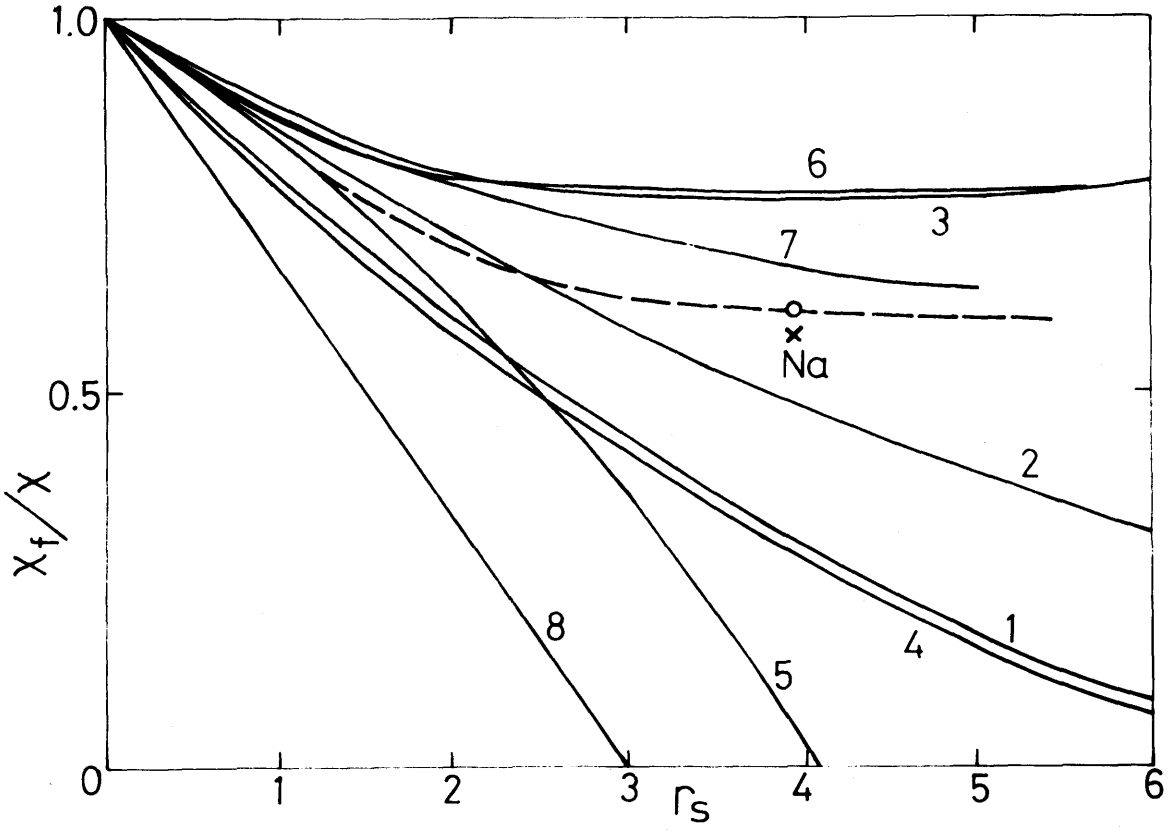
ここで

$$\tilde{\gamma} = \frac{3}{8}\int_0^\infty dx\ [\tilde{S}(x)-1]\{-1+\frac{4}{x^2}-\frac{x^4-16}{4x^3}\ln\left|\frac{x-2}{x+2}\right|\} \quad , \tag{5-21}$$

$\chi_f$ は自由電子近似のスピン帯磁率である．表10 に示される収束した $\tilde{S}(\mathbf{q})$ の結果を（5－21）式に用いて $\tilde{\gamma}$ を求め，この $\tilde{\gamma}$ の値を（5－20）式に用いれば，$\chi$ が得られる．表11 にこの結果が $r_s=1$ ～5 に対して示されている。図 23 に，この章で求められた $\chi$ の計

表 11　$\frac{\chi_f}{\chi}$ の値

| $r_s$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| $\frac{\chi_f}{\chi}$ | 0.7845 | 0.5974 | 0.4314 | 0.2885 | 0.1749 |




第 23 図：自由電子気体のスピン帯磁率と相互作用をしている電子気体に対するスピン帯磁率の比対 $r_s$. 曲線1 と 2 は，それぞれ第5章および第 3 章の結果である。曲線 3, 4, 5, 6, 7 および 8 は，それぞれ SSTL[31], Lobo 達[26], Brueckner と Sawada[41], Silverstein[43], Hedin と Lundqvist[64] および Hubbard 近似の結果である． 破線は Na に対するスピン帯磁率の圧力依存性の測定から Kushida 達[76] によって推定された曲線である．丸印と×印は，それぞれ Na に対する Kushida 達[76] および Schumacher と Vehse[28] の実験値である．

算結果が他の結果および Na の実験値[28), 76)] と比較されている。図 23 において，曲線 1 はこの章の結果，曲線 2，3，4，5，6，7 および 8 は，それぞれ第 3 章，SSTL[31)]，Lobo 達[26)]，Brueckner と Sawada[41)]，Silverstein[43)]，Hedin と Lundqvist[64)] および Hubbard 近似の結果である。破線は Na に対する $\chi$ の圧力依存性の測定から Kushida 達[76)] により推定された曲線である。この章の $\chi$ の結果は Lobo 達[26)] の結果に非常に近く，Na と Li の実験値[27), 28), 76)] に比べて 2 倍くらい大きくなっている。このことは，(5－20) 式で与えられる $\chi$ とエネルギーを磁化で微分して求めた $\chi$ とが一致することを要求する帯磁率 sum rule[77), 78)] が満たされていないことを意味する。これは第 4 章の計算結果が圧縮率 sum rule を満たさないことに類似している。しかし，この章の結果では，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件は満たされたが，Na の実験値に近い $\chi$ の結果を与える SSTL[31)] および第 3 章の理論では，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件は満足されなかった。今までに $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ を常に正にし，かつ帯磁率 sum rule を満たす理論は存在していない。

## §5－4. 結論と討論

この章では，第 4 章の Wigner 分布関数による量子論的な $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の取り扱いがスピン相関の問題に拡張され，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ が self－consistent に計算された。さらにこの数値計算された $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の結果を用いてスピンに依存する対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率が全金属電子密度において計算された。$\chi$ の計算値は

Na と Li の実験値に比べて 2 倍くらい大きくなっているが，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の計算結果は全金属電子密度領域のすべての $r_s$ に対して正となり，正定値符号の条件を満足した．より正確な $\chi$ の値を求めるためには，Wigner 分布関数の方法を用い，第 3 章で古典論で考えたように，対分布関数に対する外場の影響を近似的に取り入れ，三体相関も考慮することによって，$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を self－consistent に解くことが必要であると考えられる．この考えを発展させて $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ と $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ が正定値符号の条件を満足し，圧縮率 sum rule も満足し，かつより正確なスピン帯磁率の値を与えるような理論を作ることは今後の課題である。

## 第6章　磁場中における電子気体のプラズマ振動の分散関係

### §6－1．　序

前章まで，電子気体系に無限小の外場をかけて系の応答関数である誘電関数および一般化帯磁率を求め，この2つの量から平衡状態のいろいろな物理的な性質が調べられた。この章では，電子気体系に一様な有限の磁場をかけた場合のプラズマ振動の分散関係が調べられる。磁場がかかると Landau 状態[52] の出現のため集団運動であるプラズマ振動の分散関係が磁場のない場合と違ってくるからである。とくに，磁場中における電子気体のプラズマ振動の長波長の極限での分散関係に対する exchange scattering の寄与が拡張された RPA の範囲内で運動方程式の方法を用いて調べられる．電子気体のプラズマ振動は最初，Bohm と Pines[8), 9)] によって RPA によって調べられ，exchange scattering の効果は Kanazawa 達[57] によってグリーン関数の方法により，波数 q の 2 次の項に寄与することが見いだされた．磁場中の電子気体の集団励起スペクトルは，はじめ Zyryanov[53] が RPA で求め，$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ の極からプラズマ振動の分散関係およびダンピングを求めた．Mermin と Canel[56] はプラズマ振動の複雑な分散関係を RPA で詳しく調べ，いろいろな集団励起状態を示し，またそのダンピングを計算した．　この章では，Edwards[58] が磁場中のスピン波を求めた方法に類似な運動方程式の方法で Kanazawa 達[57] が取り扱った exchange scattering の効果が磁場中のプラズマ振動に対して計算される。その結果，磁場方向の波数ベクトル $\mathbf{q}$ をもつプラズマ振動の分散関係に対して　ex—

change scattering は q の 2 次の項に寄与し，磁場に垂直方向のそれに対しては定数項に寄与することが見いだされた。

## §6－2. 定式化

磁場中で一辺 L の体積 $\Omega = L^3$ の立方体内に閉じ込められた N 個の電子からなる電子気体を考える．磁場 H に平行な z 軸をもつ直交座標系を考える．この系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_0(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i, s_z) + \frac{1}{2}\sum_{i=j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad , \tag{6-1}$$

ここで $V(\mathbf{r})$ はクーロン相互作用，$\mathcal{H}_0(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i, s_z)$ は磁場中の i 番目の電子のハミルトニアンで次のように与えられる．

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right]^2 - g\mu_B s_z H, \tag{6-2}$$

ここで $s_z$ はスピンオペレーターの z 成分，ベクトルポテンシャル $A(\mathbf{r})$ は $A(\mathbf{r}) = (0, Hx, 0)$ ととる．一電子ハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ の固有関数はよく知られた Landau 状態に対応して次の形をとる。

$$\psi_{n,k_y,k_z,\sigma} = \frac{1}{L}\xi_{n,k_y}(x)\, e^{i(k_y y + k_z z)}\chi_\sigma, \tag{6-3}$$

ここで $\sigma = \pm 1/2$，関数 $\xi_{n,k_y}(x)$ は点 $x = -\hbar k_y / m\omega_c$ に中心をもつ調和振動子の n 番目の規格化された固有関数で次のように書かれる。

$$\xi_{n,k_y}(x) = \xi_n\left(x + \frac{\hbar k_y}{m\omega_c}\right) \quad , \tag{6-4}$$

$$\xi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{n!\,2^n\sqrt{\pi}}}\;e^{-\frac{1}{2}(\alpha x)^2}\;H_n(\alpha x). \tag{6-5}$$

ここで $\alpha=\sqrt{m\omega_c/\hbar}$, $H_n(x)$ はエルミート多項式．$k_y$ と $k_z$ はそれぞれ $y$, $z$ 方向の周期境界条件に合致する値をとる． また $k_y$ は $|k_y|<m\omega_c L/2\hbar$ の範囲内の値に制限される． $\chi_\sigma$は規格化されたスピン関数． $\omega_c$ はサイクロトン振動数で $eH/mc$． (6－3) 式に対応した一電子エネルギー $\varepsilon(n,k_z,\sigma)$ は

$$\varepsilon(n,k_z,\sigma)=\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c-g\mu_B\sigma H. \tag{6-6}$$

これは $k_y$ によらないため $(n,k_z,\sigma)$ 状態は縮重度 $m\omega_c L^2/h$ をもつ．状態 $\psi_{n,k_y,k_z,\sigma}$ に一電子を作る Fermi 粒子生成演算子 $C^{+}_{n,k_y,k_z,\sigma}$ によってハミルトニアン (6－1) を第 2 量子化すると

$$\mathcal{H}=\sum_{n,k_y,k_z,\sigma}\varepsilon(n,k_z,\sigma)C^{+}_{n,k_y,k_z,\sigma}C_{n,k_y,k_z,\sigma}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{q}{}'v(q)\sum_{\substack{n_1,n_1',n_2,n_2',\\ k_y,k_y',k_z,k_z',\alpha,\beta}}U_{q_x}\begin{pmatrix}n_1', k_y-q_y\\ n_1, k_y\end{pmatrix}U_{-q_x}\begin{pmatrix}n_2', k_y'+q_y\\ n_2, k_y'\end{pmatrix}\times$$

$$C^{+}_{n_1',k_y-q_y,k_z-q_z,\alpha}\,C^{+}_{n_2',k_y'+q_y,k_z'+q_z,\beta}\,C_{n_2,k_y',k_z',\beta}\,C_{n_1,k_y,k_z,\alpha} \tag{6-7}$$

ここで

$$U_{q_x}\begin{pmatrix}n, k_y\\ n', k_y'\end{pmatrix}=\int dx\;e^{-iq_x x}\,\xi_{n,k_y}(x)\,\xi_{n',k_y'}(x)\,, \tag{6-8}$$

(6—7) 式の右辺の第 2 項の $n_1$, $n_2$, $n_1'$, $n_2'$ に関する和は正のすべての整数について行う．また $\mathbf{q}$ の和のプライム記号は $\mathbf{q}=0$ の成分を和から除く意味である．一般性を失わないで $\mathbf{q}=(q_x, 0, q_z)$ とおくことができる。波数ベクトル $\mathbf{q}$ をもつ磁場中の電子気体の基準振動の演算子 $A_{\mathbf{q}}$ は

$$A_{\mathbf{q}}=\sum_{\substack{n,n'\\ p_y,p_z,\sigma}} f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)\,C^{+}_{n,p_y,p_z+q_z,\sigma}\,C_{n',p_y,p_z,\sigma}. \qquad (6\text{-}9)$$

で定義される．ここで $f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ は関係式

$$\hbar\omega A^{+}_{\mathbf{q}}=[\mathcal{H}, A^{+}_{\mathbf{q}}]\ . \qquad (6\text{-}10)$$

を満たすように決められる．$\omega$ は基準振動の振動数を与える．(6—10) 式の右辺を計算する際に次のような拡張された RPA

$$C^{\dagger}_i C^{\dagger}_j C_l C_n = C^{\dagger}_i C_n N_j \delta_{j,l} - C^{\dagger}_i C_l N_j \delta_{j,n} + C^{\dagger}_j C_l N_i \delta_{i,n} - C^{\dagger}_j C_n N_i \delta_{i,l}\ , \qquad (6\text{-}11)$$

を用いる．ただし，$N_i=\langle C^{+}_i C_i\rangle$。すると (6—10) 式から次の $f$ を決める式が得られる．

$$\{\hbar\omega-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)\}\,f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$$

$$=\sum_{\ell_x}{}' V(\ell_x,0,q_z)\sum_{\substack{n_1,n_2\\ k_y,k_z,\alpha}} U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n_1,k_y\\ n_2,k_y\end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix}n,p_y\\ n',p_y\end{pmatrix}(N_{n_1,k_z,\alpha}-$$

$$N_{n_2,k_z+q_z,\alpha})\,f^{\alpha}_{n_2,n_1}(k_y,k_z;q_x,q_z)$$

$$-\sum_{\ell}{}' V(\ell)\sum_{n_1,n_2} U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n,p_y\\ n_1,p_y+\ell_y\end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix}n_2,p_y+\ell_y\\ n',p_y\end{pmatrix}(N_{n_2,p_z+\ell_z,\sigma}-$$

$$N_{n_1,\, p_z+\ell_z+q_z,\, \sigma})\ f^{\sigma}_{n_1,n_2}(p_y+\ell_y,\, p_z+\ell_z;\, q_x,\, q_z)$$

$$-\sum_{\ell}{}' V(\ell) \sum_{n_1,n_2} U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_2,\, p_y+\ell_y \\ n,\ p_y \end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n_1,\, p_y \\ n_2,\, p_y+\ell_y \end{pmatrix} N_{n_2,\, p_z+\ell_z+q_z,\, \sigma}$$

$$\times f^{\sigma}_{n_1,n'}(p_y,\, p_z;\, q_x,\, q_z)$$

$$+\sum_{\ell}{}' V(\ell) \sum_{n_1,n_2} U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_1,\, p_y+\ell_y \\ n',\, p_y \end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n_2,\, p_y \\ n_1,\, p_y+\ell_y \end{pmatrix} N_{n_1,\, p_z+\ell_z,\, \sigma}$$

$$\times f^{\sigma}_{n,n_2}(p_y,\, p_z;\, q_x,\, q_z)\ . \qquad (6\text{-}12)$$

(6—12) 式において右辺の第1項のみ残し第2項以下を無視すると，Mermin と Canel[56] が RPA によって得た分散関係が得られる。そして弱磁場，長波長の極限で第2項以下は第1項に比べて小さいので逐次近似で解く。まず第2項以下を無視して

$$\{\hbar\omega-\varepsilon(n,\, p_z+q_z,\, \sigma)+\varepsilon(n',\, p_z,\, \sigma)\}\, f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,\, p_z;\, q_x,\, q_z)$$

$$=\sum_{\ell_x}{}' V(\ell_x,\, 0,\, q_z) \sum_{\substack{n_1\, n_2 \\ k_y,\, k_z,\, \sigma}} U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_1,\, k_y \\ n_2,\, k_y \end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n,\, p_y \\ n',\, p_y \end{pmatrix} (N_{n_1,\, k_z,\, \alpha}$$

$$-N_{n_2,\, k_z+q_z,\, \alpha})\ f^{\alpha}_{n_2,\, n_1}(k_y,\, k_z;\, q_x,\, q_z) \qquad (6\text{-}13)$$

(6—13) 式の右辺は $n$, $n'$, $p_y$, $q_x$, $q_z$ にのみよるから，規格化定数 $\mathcal{N}(q_x, q_z)$ を用い

$$f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,\, p_z;\, q_x,\, q_z)=\frac{U_{-q_x}\begin{pmatrix} n,\, p_y \\ n',\, p_y \end{pmatrix} \mathcal{N}(q_x,\, q_z)}{\hbar\omega-\varepsilon(n,\, p_z+q_z,\, \sigma)+\varepsilon(n',\, p_z,\, \sigma)}\ . \qquad (6\text{-}14)$$

とおいて，(6—13) 式に代入すると

$$U_{-q_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix} \mathcal{N}(q_x, q_z)$$

$$= \sum_{\ell_x}{}' V(\ell_x, 0, q_z) \sum_{\substack{n_1, n_2 \\ k_y, k_z, \sigma}} U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_1, k_y \\ n_2, k_y \end{pmatrix} U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix} (N_{n_1, k_z, \sigma}$$

$$- N_{n_2, k_z+q_z, \sigma}) \frac{U_{-q_x}\begin{pmatrix} n_1, k_y \\ n_2, k_y \end{pmatrix} \mathcal{N}(q_x, q_z)}{\hbar\omega - \varepsilon(n_2, k_z+q_z, \sigma) + \varepsilon(n_1, k_z, \sigma)} . \tag{6-15}$$

さて変数変換により

$$\sum_{k_y} U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_1, k_y \\ n_2, k_y \end{pmatrix} U_{-q_x}\begin{pmatrix} n_2, k_y \\ n_1, k_y \end{pmatrix} = \frac{L^2}{2\pi} \frac{m\ \omega_c}{\hbar^2} \delta_{q_x, \ell_x} \left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n_2, 0 \end{pmatrix} \right|^2 \tag{6-16}$$

が成り立ち，これを用いて（6－15）式は

$$1 = \frac{L^2}{2\pi} \frac{m\ \omega_c}{\hbar^2} v(q_x, 0, q_z) \sum_{\substack{n_1, n_2 \\ k_z, \sigma}} \left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n_2, 0 \end{pmatrix} \right|^2$$

$$\times \frac{(N_{n_1, k_z, \sigma} - N_{n_2, k_z+q_z, \sigma})}{\hbar\omega - \varepsilon(n_2, k_z+q_z, \sigma) + \varepsilon(n_1, k_z, \sigma)} . \tag{6-17}$$

となり，この式が RPA におけるプラズマ振動の分散関係を与えている．ここで $\left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n_2, 0 \end{pmatrix} \right|^2$ は Mermin と Canel[56] の $C_{n_1, n_2}$ に対応する。$q_x$ が小さいとき

$$\left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n, 0 \\ n, 0 \end{pmatrix} \right|^2 = 1 - \frac{1}{\alpha^2}\left(n + \frac{1}{2}\right) q_x^2 + \frac{(3n^2 + 3n + 1)}{8\alpha^4} q_x^4 + O(q_x^6) , \tag{6-18}$$

$$\left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n, 0 \\ n+1, 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n+1, 0 \\ n, 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{(n+1)}{8\alpha^2} q_x^2 - \frac{(n+1)^2}{4\alpha^4} q_x^4 + O(q_x^6) , \tag{6-19}$$

$$\left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n, 0 \\ n+2, 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n+2, 0 \\ n, 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{(n+1)(n+2)}{16\alpha^4} q_x^4 + O(q_x^6) , \tag{6-20}$$

一般に

$$|U_{q_x}\begin{pmatrix} n,0 \\ n+\mu,0 \end{pmatrix}|^2 = A_{n,\mu}\, q_x^{2|\mu|} \quad . \tag{6-21}$$

ここで $A_{n,\mu}$ は定数である．（6－17）式から q が小さい場合のプラズマ振動の分散関係を求める．まず q＝0 の場合 $n_1 = n_2$ のみ考え，

$$\frac{m\omega_c L^2}{2\pi\hbar} \sum_{n,k_z,\sigma} N_{n,k_z,\sigma} = N \ , \tag{6-22}$$

を考慮すれば，（6－17）式は

$$1 = \omega_p^2 \left\{ \frac{\sin^2\theta}{\omega^2 - \omega_c^2} + \frac{\cos^2\theta}{\omega^2} \right\} \ , \tag{6-23}$$

ここで $\omega_p$ はプラズマ振動数で $\omega_p^2 = 4\pi N e^2/\Omega m$ で与えられる。

1．H∥q （$\sin\theta \cong 0$）の場合

$$\omega_+^2 = \omega_p^2 + \omega_p^2\omega_c^2\sin^2\theta \ / \ (\omega_p^2 - \omega_c^2) \tag{6-24}$$

$$\omega_-^2 = \omega_c^2 - \omega_p^2\omega_c^2\sin^2\theta \ / \ (\omega_p^2 - \omega_c^2) \tag{6-25}$$

2．H⊥q （$\cos\theta \cong 0$）の場合

$$\omega_+^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2 - \omega_p^2\omega_c^2\cos^2\theta \ / \ (\omega_p^2 + \omega_c^2) \tag{6-26}$$

$$\omega_-^2 = \omega_p^2\omega_c^2\cos^2\theta \ / \ (\omega_c^2 + \omega_p^2) \tag{6-27}$$

（6－17）式の q＝0 の解に対する $q^2$ に比例する補正項を求めるた

めに $n_1=n_2$, $n_2\pm1$, $n_2\pm2$ の項を考慮すると

$$\frac{1}{\omega_p^2}=\frac{\cos^2\theta}{\omega^2}+\frac{\sin^2\theta}{\omega^2-\omega_c^2}+\frac{q^2}{m}\{\frac{6T\cos^4\theta}{\omega^4}+2T\sin^2\theta\cos^2\theta\frac{3\omega^2+\omega_c^2}{(\omega^2-\omega_c^2)^3}$$

$$+W\sin^2\theta\cos^2\theta\frac{3\omega^2-\omega_c^2}{\omega^2(\omega^2-\omega_c^2)^2}+\frac{3W\sin^2\theta}{(\omega^2-\omega_c^2)(\omega^2-4\omega_c^2)}\}\quad,\quad(6\text{-}28)$$

ここで

$$T=\sum_{\substack{n,k_y,k_z,\\ \sigma}}\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}N_{n,k_z,\sigma}\quad,\qquad(6\text{-}29)$$

$$W=\sum_{n,k_y,k_z,\sigma}\hbar\omega_c(n+\frac{1}{2})N_{n,k_z,\sigma}\quad.\qquad(6\text{-}30)$$

$H\to0$ のとき，T は運動エネルギーの1／3，W は 2／3 になる．

1．$H/\!/q$ のとき

$$\omega_+^2=\omega_p^2+\frac{6T}{m}q^2\quad,\qquad(6\text{-}31)$$

$$\omega_-^2=\omega_c^2\qquad(6\text{-}32)$$

2．$H\perp q$ のとき

$$\omega_+^2=\omega_p^2+\omega_c^2+\frac{3W}{m}\frac{\omega_p^2}{\omega_p^2-3\omega_c^2}q^2\quad,\qquad(6\text{-}33)$$

$$\omega_-^2=0\qquad(6\text{-}34)$$

$H\to0$ のとき $\omega_+$ は Bohm と Pines[8), 9)] の結果に一致する．（6－31）式から（6－34）式までの四つの式は磁場 H が存在しているときのプラズマ振動の長波長の極限での RPA によって得られる分散関係を与えている。

## §6－3． 交換散乱項による補正

(6－12) 式の右辺の第 2 項以下が exchange scattering を表している項で，この項は，弱磁場，長波長の極限で，第1 項に比べて小さいので，$f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ と $\omega$ をそれぞれ $f^{0\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)+\Delta f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ と $\omega_0+\Delta\omega$ で置き換える．$f^{0\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ と $\omega_0$ は (6－12) 式の右辺の第 2 項以下を無視した式を満足し，$\Delta f^{\sigma}_{n,n'}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ と $\Delta\omega$ は exchange scattering による補正を表している．このようにおいた (6－12) 式の両辺に

$$\frac{U_{q_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix}(N_{n',p_z,\sigma}-N_{n,p_z+q_z,\sigma})}{\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)}, \tag{6-35}$$

をかけて $n$, $n'$, $p_y$, $p_z$, $\sigma$ について和をとる．$\Delta f^{\sigma}_{n,n}(p_y,p_z;q_x,q_z)$ と $\Delta\omega$ に関して1 次の項のみ残して

$$\hbar\Delta\omega\sum_{\substack{n,n',\\ p_y,p_z,\sigma}}\frac{\left|U_{q_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix}\right|^2(N_{n',p_z,\sigma}-N_{n,p_z+q_z,\sigma})}{\{\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)\}^2}$$

$$=-\sum_{\substack{n,n',\\ p_y,p_z,\sigma}}\sum_{\ell}{}'\,v(\ell)\sum_{n_1,n_2}\Bigg\{\frac{U_{q_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix}\;U_{-q_x}\begin{pmatrix} n_1, p_y+\ell_y \\ n_2, p_y+\ell_y \end{pmatrix}}{\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)}$$

$$\times\frac{U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n_1, p_y+\ell_y \end{pmatrix}\;U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n_2, p_y+\ell_y \\ n', p_y \end{pmatrix}}{\hbar\omega_0-\varepsilon(n_1,p_z+\ell_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n_2,p_z+\ell_z,\sigma)}(N_{n',p_z,\sigma}-N_{n,p_z+q_z,\sigma})$$

$$\times(N_{n_2,p_z+\ell_z,\sigma}-N_{n_1,p_z+\ell_z,\sigma})$$

$$-\frac{U_{q_x}\begin{pmatrix} n, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix}\;U_{-q_x}\begin{pmatrix} n_1, p_y \\ n', p_y \end{pmatrix}\;U_{\ell_x}\begin{pmatrix} n_1, p_y+\ell_y \\ n, p_y \end{pmatrix}\;U_{-\ell_x}\begin{pmatrix} n_1, p_y \\ n_2, p_y+\ell_y \end{pmatrix}}{[\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)][\hbar\omega_0-\varepsilon(n_1,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)]}$$

$$\times N_{n_2,\,p_z+\ell_z+q_z,\,\sigma}\,(N_{n',\,p_z,\,\sigma}-N_{n,\,p_z+q_z\,\sigma})$$

$$+\frac{U_{q_x}\begin{pmatrix}n,\,p_y\\ n',\,p_y\end{pmatrix}U_{-q_x}\begin{pmatrix}n,\,p_y\\ n_2,\,p_y\end{pmatrix}U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n_1,\,p_y+\ell_y\\ n',\,p_y\end{pmatrix}U_{-\ell_x}\begin{pmatrix}n_2,\,p_y\\ n_1,\,p_y+\ell_y\end{pmatrix}}{[\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)][\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n_2,p_z,\sigma)]}$$

$$\times(N_{n',\,p_z,\,\sigma}-N_{n,\,p_z+q_z,\,\sigma})\,N_{n_1,\,p_z+\ell_z,\,\sigma}\ , \qquad (6\text{-}36)$$

この式を導くときに（6－17）式を用いた．変数変換により

$$U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n,\,p_y\\ n',\,p_y+\ell_y\end{pmatrix}=e^{i\ell_x\hbar p_y/(m\,\omega_c)}\,U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,\ell_y\end{pmatrix}\ , \qquad (6\text{-}37)$$

が成り立つことがわかる．ここで

$$U_{l_x}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,l_y\end{pmatrix}=e^{il_x\hbar l_y/(m\omega_c)}\int dt\ e^{-il_x t}\,\xi_n\left(t+\frac{\hbar l_y}{2m\omega_c}\right)\xi_{n'}\left(t-\frac{\hbar l_y}{2m\omega_c}\right)\ . \qquad (6\text{-}38)$$

右辺の積分の値は Mermin と Canel[56] の Appendix A に与えられている $d_{n,n'}$ に対応している．したがって $l_x=l_\perp\cos\varphi$, $l_y=l_\perp\sin\varphi$ と書くと

$$U_{\ell_x}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,\ell_y\end{pmatrix}=e^{i\ell_x\hbar\ell_y/(2m\,\omega_c)}\,e^{i(n'-n)\varphi}\,U_{\ell_\perp}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,0\end{pmatrix}\ . \qquad (6\text{-}39)$$

となる。（6－37）と（6－39）式を用いると，exchange scattering によるプラズマ振動の振動数への寄与を与える式（6－36）は次のようになる．

$$\hbar\Delta\omega\sum_{\substack{n,\,n',\\ p_y,p_z,\sigma}}\frac{\left|U_{q_x}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,0\end{pmatrix}\right|^2(N_{n',\,p_z,\,\sigma}-N_{n,\,p_z+q_z,\,\sigma})}{\{\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',\,p_z,\,\sigma)\}^2}$$

$$=-\sum_{\substack{n,\,n',\\ p_y,p_z,\sigma}}\sum_{\ell}{}'\,v(\ell)\Big[\sum_{n_1,n_2}\frac{e^{iq_x\hbar\ell_\perp\cos\varphi/(m\,\omega_c)}\,U_{q_x}\begin{pmatrix}n,\,0\\ n',\,0\end{pmatrix}}{\{\hbar\omega_0-\varepsilon(n,p_z+q_z,\sigma)+\varepsilon(n',p_z,\sigma)\}}$$

$$\times \frac{U_{-q_x}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n_2, 0 \end{pmatrix} U_{\ell_\perp}\begin{pmatrix} n & 0 \\ n_1, 0 \end{pmatrix} U_{-\ell_\perp}\begin{pmatrix} n_2, 0 \\ n', 0 \end{pmatrix} e^{i\varphi(n'-n+n_1-n_2)}}{\{\hbar\omega_0 - \varepsilon(n_1, p_z+\ell_z+q_z, \sigma) + \varepsilon(n_2, p_z+\ell_z, \sigma)\}}$$

$$\times (N_{n', p_z, \sigma} - N_{n, p_z+\ell_z, \sigma})(N_{n_2, p_z+q_z, \sigma} - N_{n, p_z+\ell_z+q_z, \sigma})$$

$$+ \sum_{n_1} \frac{\left| U_{q_x}\begin{pmatrix} n, 0 \\ n', 0 \end{pmatrix} \right|^2 (N_{n', p_z, \sigma} - N_{n, p_z+q_z, \sigma})}{\{\hbar\omega_0 - \varepsilon(n, p_z+q_z, \sigma) + \varepsilon(n', p_z, \sigma)\}^2} \{N_{n_1, p_z+\ell_z, \sigma} \left| U_{\ell_\perp}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n', 0 \end{pmatrix} \right|^2$$

$$- N_{n_1, p_z+\ell_z+q_z, \sigma} \left| U_{\ell_\perp}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n, 0 \end{pmatrix} \right|^2 \} \Big] . \qquad (6\text{-}40)$$

この式は一般の方向の波数ベクトル q について評価するのが難しいので，q // H と q ⊥ H の二つの場合について考える。

1。q // H の場合

$$U_0\begin{pmatrix} n, 0 \\ n', 0 \end{pmatrix} = \delta_{n, n'} \quad , \qquad (6\text{-}41)$$

を用いると，q が小さい場合を考え，$\Delta\omega$ を q で展開しその 2 次の項まで求めると

$$\Delta\omega = -\frac{q^2}{2Nm\,\omega_p} \sum_{n, p_y, p_z, \sigma} \sum_{\ell}{}' v(\ell) \sum_{n_1} \left| U_{\ell_\perp}\begin{pmatrix} n_1, 0 \\ n, 0 \end{pmatrix} \right|^2$$

$$\times \frac{\partial N_{n, p_z, \sigma}}{\partial p_z} \quad \frac{\partial N_{n_1, p_z+\ell_z, \sigma}}{\partial (p_z+\ell_z)} \quad \ell_z p_z \quad . \qquad (6\text{-}42)$$

この式を求めるときに $\omega_0$ として (6－24) 式により $\omega_p$ の値を用いた。(6－42) 式から exchange scattering の効果は H＝0 の場合，すなわち滋場のないときの電子気体のプラズマ振動の分散関係の場

合のように波数ベクトル q の 2 次の項に寄与することがわかる．

2. $q \perp H$ の場合

長波長，弱磁場の場合，RPA で求めたプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の補正は

$$\Delta\omega = -\frac{\omega_p^2+2\omega_c^2}{2N\hbar\omega_c\sqrt{\omega_p^2+\omega_c^2}} \sum_{n,p_y,p_z,\sigma} \sum_{\mathbf{l}}{}' V(\mathbf{l}) \sum_{n_1} (N_{n+1,p_z,\sigma}-N_{n,p_z,\sigma})$$

$$\times[\sqrt{(n+1)\ (n_1+1)}\ U_{l_\perp}\binom{n\ ,0}{n_1,0} U_{-l_\perp}\binom{n_1+1,0}{n+1\ ,0} (N_{n_1+1,p_z+l_z,\sigma}$$

$$-N_{n_1,p_z+l_z,\sigma}) - (n+1)(|U_{l_\perp}\binom{n_1,0}{n+1,0}|^2 - |U_{l_\perp}\binom{n_1,0}{n\ ,0}|^2)$$

$$\times N_{n_1,p_z+l_z,\sigma}] \quad . \tag{6-43}$$

(6—43) 式からわかるように $q \perp H$ の場合には exchange scattering は q の 0 次の項に寄与する．しかし，磁場 H を零とすると，次の理由によって (6—43) 式で与えられる $\Delta\omega$ は消える．このことは，磁場のないときの電子気体のプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の寄与は，波数ベクトル $\mathbf{q}$ の 2 次の項から始まることから当然である．Fermi 分布関数を $f(\varepsilon)$ と書くと $H \to 0$ の極限で

$$N_{n+1,p_z,\sigma}-N_{n,p_z,\sigma} = f\left(\frac{\hbar^2 p_z^2}{2m}+(n+1+\frac{1}{2})\hbar\omega_c - g\mu_B\sigma H\right)$$

$$-f\left(\frac{\hbar^2 p_z^2}{2m}+(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c - g\mu_B\sigma H\right)$$

$$=\hbar\omega_c f'\left(\frac{\hbar^2 p_z^2}{2m}\right) \tag{6-44}$$

(6－44) 式を用いると (6－43) 式の右辺の分母の $\omega_c$ は打ち消しあって消える．さらに $U_{l_\perp}\begin{pmatrix} n & ,0 \\ n+n' & ,0 \end{pmatrix}$ はラゲールの多項式 $L^{n'}_{n+n'}(x)$ を用いて次のように表され

$$U_{l_\perp}\begin{pmatrix} n+n',0 \\ n,0 \end{pmatrix}=U_{l_\perp}\begin{pmatrix} n,0 \\ n+n',0 \end{pmatrix}=(i)^{n'}\left(\frac{\bar{l}^2}{2}\right)^{\frac{n'}{2}}e^{-(\bar{l})^2/4}\frac{\sqrt{n!}}{\sqrt{\{(n+n')!\}^3}}L^{n'}_{n'+n}\left(\frac{\bar{l}^2}{2}\right), \tag{6-45}$$

ここで $\bar{l}^2=(l_\perp/\alpha)^2=c\hbar l_\perp^2/eH$, $n'>0$, $n>0$ である。磁場 $H\to 0$ のとき $\bar{l}^2\to\infty$ となり，$U_{l_\perp}\begin{pmatrix} n+n',0 \\ n & ,0 \end{pmatrix}$ となるため，(6－43) 式で与えられる $\Delta\omega$ は消える．

## §6－4． 結論と討論

この章では，拡張された RPA により，磁場中の電子気体のプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の寄与を運動方程式の方法で調べ，長波長の極限で波数ベクトル $\mathbf{q}$ が磁場 H に平行の場合は q の 2 次の項に寄与し，垂直の場合は q の 0 次の項に寄与することが見いだされた．後者の寄与は磁場がない場合には現れなかったことである。

## 第7章　結論と討論

この論文では，電子気体模型のいろいろな物理的性質が，クーロン相互作用が重要な役割を演ずる金属電子密度領域，$2 \leq r_s \leq 6$ において，RPA を越えた近似によって調べられた。RPA は $r_s < 1$ でしか成立せず，$2 \leq r_s \leq 6$ では RPA よりよい近似が要求されるからである。Nozières と Pines[18] が示したように，系の外場に対する線型応答関数である誘電関数および一般化帯磁率を利用して平衡状態での電子気体の諸物理量を計算することができるので，ここでは RPA よりよい近似のもとで誘電関数と一般化帯磁率を計算し，これを用いて電子気体に関する諸物理量が求められた。

第 2 章では，STLS[23] の用いた古典的リュービュ方程式の方法を用い，外部電場のある場合の一粒子分布関数を求めて，誘電関数が self－consistent に数値計算された．この方程式を解く際に，この式の中の二粒子分布関数を，Schneider 達[32), 33)] が行ったように，一粒子分布関数と対分布関数の積で近似し，また，三体相関も近似的に取り入れられるように，この対分布関数に対する外場の影響を考慮した．このようにして求められた誘電関数から，相関エネルギー，対分布関数，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係が計算された．電子気体模型に対する理論の妥当性を示す一つの根拠は，対分布関数が常に正であり，かつ圧縮率 sum rule が満たされているということである．RPA によって求められる対分布関数は金属電子密度で，電子間隔が小さいとき，大きな負になることから，RPA はよい近似ではないことがわかる．第 2 章の計算では，対分布関数は

$r_s \leq 3$ では常に正であるが，$r_s \geq 4$ では電子間隔が小さくなると，その絶対値は小さいが依然として負となり，必ずしも常に対分布関数が正になるという条件が満たされないが，圧縮率 sum rule は近似的に満たされていることが見いだされた．現在まで，この二つの条件を共に満足する理論はない．第 2 章の相関エネルギーの結果は STLS[23] の結果にかなり近くなるが，これは相関エネルギーが誘電関数の波数ベクトル $\mathbf{q}$ と振動数 $\omega$ の積分によっているため，この関数の詳細な形に依存していないことを示す．しかし，第 2 章で得られた相関エネルギーの結果は近距離相関がかなり考慮されているため，RPA の結果よりかなり良い結果になった．

第 3 章では，第 2 章の方法をスピン相関に拡張し，微小外部磁場のある場合のスピンに依存する一粒子分布関数に対する古典的リュービュ方程式を解いて，一般化帯磁率をスピンに依存する対分布関数の汎関数として求めた．一方，スピンに依存する対分布関数のフーリエ成分は揺動散逸の定理から一般化帯磁率と厳密に結びついているので，この一般化帯磁率が self－consistent に計算された。この計算結果を用いて，平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$，反平行スピンの電子間の対分布関数 $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ およびスピン帯磁率 $\chi$ が金属電子密度において計算された。第 3 章の理論による $g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ の結果は $r_s$ によらず，これは平行スピンの電子間の相関はクーロン相互作用よりも主に Pauli の排他律に支配されていることを示している。$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の結果は他の理論[26), 31)] と同様に $r_s \leq 4$ では正であるが，$r_s \geq 5$ では電子間隔が小さいときやはり負となり，正定

値符号の条件を満たさない．一方，スピン帯磁率の計算結果は他の self－consistent な理論[26), 31)] よりも Na の実験値[28)] に近いことが見いだされた．これはスピン帯磁率の結果を改良するのに，非平衡状態の対分布関数に対する弱い外部磁場による影響を表す項が重要であったことを示している．

第 2 章では，STLS[23)] の方法にならって一粒子分布関数に対する，外部電場のある場合の古典的リュービュ方程式を解いて誘電関数を求め，この中に現れる自由電子に関する古典的な分極率を，対応する量子論的な量で置き換えることにより，量子論的な誘電関数が得られるとした．しかし，このようにして得られた誘電関数は厳密な量子論的な量ではなく[36)]，一つの近似であった．そこで第 4 章では，古典的な一粒子分布関数に対応する量子論的な量である Wigner 分布関数についての運動方程式を作り，この式を解いて直接に量子論的な誘電関数が求められた．この式を解く際，二粒子 Wigner 分布関数は，STLS[23)] が古典論で用いた近似と類似して，Wigner 分布関数と対分布関数の積で近似された．第 2 章と同様に self－consistent な数値計算によって誘電関数が求められ，この結果を用い，対分布関数，相関エネルギー，圧縮率およびプラズマ振動の分散関係が計算された．対分布関数の結果は全金属電子密度領域で常に正となることが見いだされ，初めて対分布関数の正定値符号の条件を満たすことができた．この条件を全金属電子密度で満たすことのできる理論は今までなかった．一方，第 4 章の計算結果では，圧縮率 sum rule は満たされなかった．今までの理論では，対分布関数の正

定値符号の条件と圧縮率 sum rule の二つの条件を同時に満足することはできず，一方を満たすようにすると他方は満たされなくなるという傾向にあった．しかも，片方の条件さえも厳密に満たされることはなかった．第 4 章の計算結果でもやはり両方の条件は同時には満たされないが，一方の条件である対分布関数の正定値符号の条件は金属電子密度領域において満たされているので，この計算をさらに圧縮率 sum rule をも満たすように改良することが今後の課題である．

第 5 章では，第 4 章の Wigner 分布関数の方法をスピン相関に拡張し，self－consistent に一般化帯磁率が数値計算された．この結果を用い，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$，$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ および $\chi$ が計算された．$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ は全金属電子密度で常に正となり，正定値符号の条件を満たすことが見いだされた．さらに他のどの理論よりも，$0 \leq r_s \leq 6$ で $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ は大きく，このことは第 5 章の理論による $g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の結果は他の理論よりも，任意の $r_s$ でも正定値符号の条件を満たすことを暗示している．$g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ に対する第 5 章の結果は以前の結果と大きな違いはなく，クーロン相関を取り入れるいろいろな近似にあまりよらないし，かつ $r_s$ に依存しないため，平行スピンの電子間の相関には Fermi 統計 の性質が強く支配していることが結論づけられる．一方，$\chi$ についての第 5 章の計算値は Na の実験値[28),176)] に一致しない．このことは第 2 章および第 4 章の誘電関数の議論で，圧縮率 sum rule と対分布関数の正定値符号の両方を同時に満たす理論がないことに類似している．すなわち，今までスピン帯磁率の計算値を実験

値によく一致させ，かつ平行および反平行スピンの電子間の対分布関数の正定値符号の条件を満足させる理論はなかった。第 5 章の理論では，$g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の正定値符号の条件が満たされているので，この理論を改良し，より正確にスピン帯磁率を求めることのできる理論を作ることが重要であり，今後の残された課題である。

第 6 章では，有限の磁場中のプラズマ振動の分散関係が調べられた．磁場中のプラズマ振動は Landau 準位の出現のため，磁場のないときとは違った振る舞いをする．この章では，拡張された RPA を用い，長波長の極限でのプラズマ振動の分散関係に対する exchange scattering の影響を調べ，磁場とプラズマ振動の波数ベクトル $\mathbf{q}$ が平行のときは $q^2$ の項に寄与し，垂直のときは q の 0 次の項に寄与することが見いだされた．後者の寄与は磁場のないときには現れなかったことである．

第 2 章と第 3 章の内容は Takemitsu Hasegawa and Masao Shimizu, Electron Correlations at Metallic Densities: J. Phys. Soc. Japan 35 (1973) 18 に発表された，第 4 章の内容は Takemitsu Hasegawa and Masao Shimizu, Electron Correlations at Metallic Densities II. Quantum Mechanical Expression of Dielectric Function with Wigner Distribution Function : J. Phys. Soc. Japan 38 (1975) No. 4 に発表された．第 5 章の

内容は Takemitsu Hasegawa and Masao Shimizu, Electron Correlations at Metallic Densities III. Generalized Spin Susceptibility and Spin Correlations: J. Phys. Soc. Japan に発表される予定である。第 6 章の内容は 長谷川武光，磁場中の電子気体のプラズマ分散：物性研究 18 (1972) 1 に発表された。

謝辞

本論文の研究について御指導下さり，また常に激励して下さった名古屋大学工学部志水正男教授に心から感謝いたします。数値計算について有益な助言を頂き，また常に本研究について激励して下さった名古屋大学工学部二宮市三教授に心から感謝いたします。いろいろと有益な議論をして頂いた志水研究室のかたがたに感謝いたします。　この論文の数値計算は名古屋大学大型計算機センターのFACOM 230－60 型大型電子計算機を用いて行われた。

付録　A

この付録では Wigner 分布関数に関する運動方程式が導かれる．外部ポテンシャル $U_e(r,t)$ のある場合の場の演算子 $\Psi_\alpha(\mathbf{r},t)$ に対する運動方程式は

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= [\Psi_\alpha(\mathbf{r},t),H] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2\Psi_\alpha(\mathbf{r},t) + \sum_\beta\int d^3r'\Psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}',t)V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\
&\quad\times\Psi_\beta(\mathbf{r}',t)\Psi_\alpha(\mathbf{r},t) + U_e(\mathbf{r},t)\Psi_\alpha(\mathbf{r},t) \quad . \qquad \text{(A-1)}
\end{aligned}
$$

ここで H は（4－3）式で与えられる全ハミルトニアンである。 Klimontovich[79] が導入した次の演算子 $\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ を考える．

$$
\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p};t) = \frac{1}{h^3}\sum_\alpha\int d^3l\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}\Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)\Psi_\alpha(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t) \quad , \qquad \text{(A-2)}
$$

$\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ の H の基底状態についての期待値は Wigner 分布関数である．すなわち

$$
\langle\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)\rangle = f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) \quad , \qquad \text{(A-3)}
$$

$\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)$ に対する運動方程式は（A－1）式を利用して

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}(r,p,t) &= \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}/\hbar}\{[\Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t),H]\Psi_\alpha(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t) \\
&\qquad + \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)[\Psi_\alpha(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t),H]\} \\
&= -\frac{1}{m}\mathbf{p}\cdot\nabla_r f(\mathbf{r},\mathbf{p};t) - \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l\,d^3r'\,d^3p_1\,d^3p_2
\end{aligned}
$$

$$\times\ e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\frac{\mathbf{l}}{2})-V(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\frac{\mathbf{l}}{2})]\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)$$

$$+\ \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l\,d^3p_1\ e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}$$

$$\times\ [U_e(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-U_e(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)]\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;t)\quad , \qquad \text{(A-4)}$$

ここで

$$\langle\hat{f}(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)\rangle = f(\mathbf{r},\mathbf{p}_1;\mathbf{r}',\mathbf{p}_2;t)\quad , \qquad \text{(A-5)}$$

（A－4）式を H の基底状態に関して期待値をとれば，（4－4）式が得られる．

付録　B

$\mathbf{r}$ の任意の関数 $F(\mathbf{r})$ （ただし $\mathbf{r}\to\infty$ で 0 に近づくとする）について成り立つ次の関係式

$$e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{p}/\hbar}\,F(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2}) = F(\mathbf{r}+\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}})\,e^{i\mathbf{l}\cdot\mathbf{p}/\hbar} \quad , \tag{B-1}$$

を利用すると，（4－8）式の　左辺の第 3 項は次のように書き換えられる．

$$\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l\,d^3p_1\,e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}[U_e(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{l}}{2},t)-U_e(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{l}}{2},t)]f^0(\mathbf{p}_1)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{h^3}\int d^3l\,d^3p_1 f^0(\mathbf{p}_1)[U_e(\mathbf{r}+\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)},t)-U_e(\mathbf{r}-\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)},t)]$$

$$\times\ e^{i\mathbf{l}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)/\hbar}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_1 f^0(\mathbf{p}_1)[U_e(\mathbf{r}-\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_1},t)-U_e(\mathbf{r}+\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_1},t)]\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_1 f^0(\mathbf{p}_1)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-2}{(2n+1)!}(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_1})^{2n+1}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)U_e(\mathbf{r},t)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_1\,\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_1})^{2n+1}f^0(\mathbf{p}_1)U_e(\mathbf{r},t)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}})^{2n+1}f^0(\mathbf{p})U_e(\mathbf{r},t) \quad . \tag{B-2}$$

（B－2）式の第 4 行目から第 5 行目に移る際，$\mathbf{p}_1$ に関する部分積分を行った．$\hbar\to 0$ の極限で（B－2）式は

$$-\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}U_e(\mathbf{r},t)\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p}) \tag{B-3}$$

になる．これは古典的リュービュ方程式に現れるよく知られた項である．すなわち，古典論では外力 $-\partial U_e(\mathbf{r},t)/\partial\mathbf{r}$ の形でしか式の中に現れない．フーリエ変換によって（B－2）式は次のようになる。

$$\frac{1}{i\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}\int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\int dt e^{-i\omega t}\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1}f^0(\mathbf{p})U_e(\mathbf{r},t)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)!}U_e(\mathbf{q},\omega)\left(-\mathbf{q}/i\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1}f^0(\mathbf{p})$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{(2n+1)!}U_e(\mathbf{q},\omega)\left(e^{\frac{\hbar\mathbf{q}}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}}-e^{\frac{-\hbar\mathbf{q}}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}}\right)f^0(\mathbf{p})$$

$$=\frac{1}{i\hbar}U_e(\mathbf{q},\omega)\left[f^0\left(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}}{2}\right)-f^0\left(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}}{2}\right)\right] \qquad \text{(B-4)}$$

同様の手続きにより（4－8）式の左辺の第 4 項は，$\partial/\partial(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ は $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ にのみ作用するとして

$$\frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 d^3r'\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left\{\left[\frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}-\mathbf{r})}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right]^{(2n+1)}\right.$$

$$\left.\times V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p};t)f^0(\mathbf{p}_2)+f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t)f^0(\mathbf{p})\right\}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 d^3R\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}g(\mathbf{R})\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1}V(\mathbf{R})f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)f^0(\mathbf{p}_2)$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 d^3r'\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2}{(2n+1)!}g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t)\left(\frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1}$$

$$\times V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')f^0(\mathbf{p}) \qquad \text{(B-5)}$$

（B－5）式の右辺の第 1 項は，被積分関数が $\mathbf{R}$ に関して奇関数であるので，消える．したがって，（B－5）式は次のようになる．

$$\frac{1}{i\hbar}\int d^3p\,d^3r' \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)!} g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t) \left(\frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1}$$

$$\times\ f^0(\mathbf{p})V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad \text{(B-6)}$$

$\hbar\to 0$ の極限では

$$-\int d^3p_2 d^3r' g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t)\frac{\partial}{\partial r}V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}f^0(\mathbf{p}) \qquad \text{(B-7)}$$

となり，これは古典論で STLS[23] によって得られた項である．（B－6）式は次の合成積で表現される．

$$\frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 d^3r \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)!} f^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{p}_2;t) V_{2n+1}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\mathbf{p}) \qquad \text{(B-8)}$$

ここで

$$V_{2n+1}(\mathbf{r},\mathbf{p}) = g(\mathbf{r})\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1} V(\mathbf{r}) f^0(\mathbf{p}) \qquad \text{(B-9)}$$

で定義される．したがって，（B－8）式のフーリエ変換は次のようになる．

$$\frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p}_2;\omega) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)!} V_{2n+1}(\mathbf{q},\mathbf{p})$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p}_2,\omega) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)!}\int d^3q' g(\mathbf{q}-\mathbf{q}') V(\mathbf{q}') \left(\mathbf{q}'\cdot\frac{\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\right)^{2n+1} f^0(\mathbf{p})$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p}_2,\omega)\int d^3q' g(\mathbf{q}-\mathbf{q}') V(\mathbf{q}') \left(e^{\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}} - e^{\frac{-\hbar\mathbf{q}'}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}}\right) f^0(\mathbf{p})$$

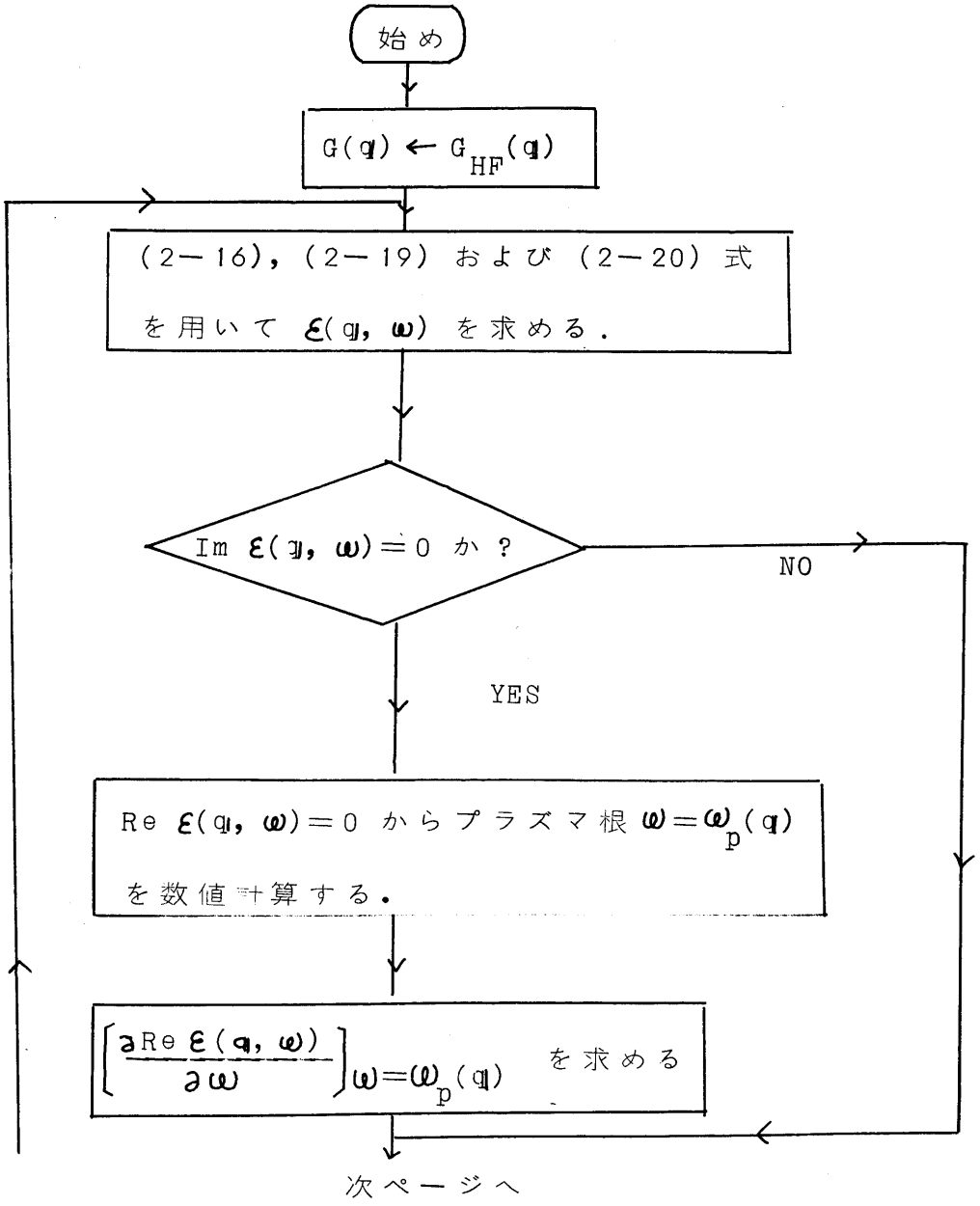
$$= \frac{1}{i\hbar}\int d^3p_2 f^{(1)}(\mathbf{q},\mathbf{p}_2,\omega)\int d^3q' g(\mathbf{q}-\mathbf{q}') V(\mathbf{q}') \left[f^0\left(\mathbf{p}+\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}\right) - f^0\left(\mathbf{p}-\frac{\hbar\mathbf{q}'}{2}\right)\right]$$

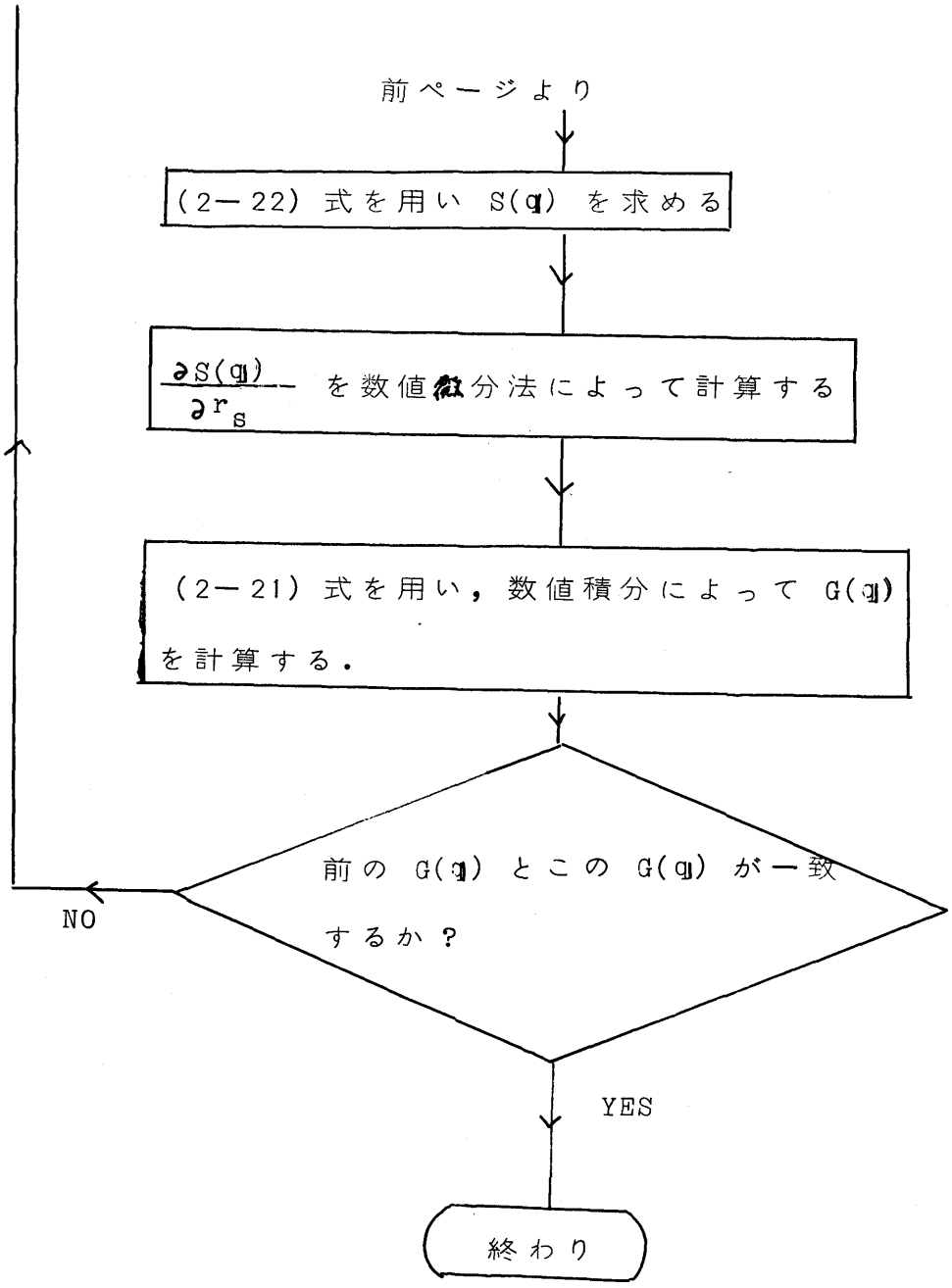
$$\text{(B-10)}$$

(B－10) 式は (4－10) 式の左辺の第 4 項である.

付録　C

この付録では，第 2 章における $\varepsilon(\mathbf{q},\omega)$，$S(\mathbf{q})$ および $G(\mathbf{q})$ の self－consistent な数値計算の方法が図式的に説明される．始め，$S(\mathbf{q})$ の入力として（2－23）式で与えられる $S_{HF}(\mathbf{q})$ を（2－21）式に用いると，$G(\mathbf{q})$ が解析的に求められる．この $G(\mathbf{q})$ を $G_{HF}(\mathbf{q})$ と書いて，これを self－consistent な数値計算の初期値とする。




前ページより
(2—22) 式を用い S(q) を求める
$\frac{\partial S(q)}{\partial r_s}$ を数値微分法によって計算する
(2—21) 式を用い，数値積分によって G(q) を計算する．
前の G(q) とこの G(q) が一致するか？
NO
YES
終わり

付録　D

この付録では，第 4 章における $\varepsilon(q, \omega)$，$I(q, \omega)$ および $S(q)$ を self－consistent に数値計算する際に必要となる $\mathrm{Re}\ I(q, \omega)$ の計算法について説明される．（4－19）式に（4－20）式で与えられる $\mathrm{Re}\ \tilde{F}(t, q, \omega)$ を代入すると $\mathrm{Re}\ I(q, \omega)$ の表式が得られる．この表式の中の変数 t に関する積分は，$\frac{1}{t+d}\ln\left|\frac{1-t}{1+t}\right|$，ここで d は定数，というタイプの被積分関数の存在のため，解析的に実行されることができない．したがって，（4－19）と（4－20）式を用いて $\mathrm{Re}\ I(q, \omega)$ を計算するために，変数 $q'$ と t について 2 重積分を行うことが必要となる．しかし，この 2 重積分を正の q と $\omega$ の多くの値に対して数値的に毎回，実行することは，多くの計算時間を要し，かつ 1 重積分の数値計算の場合の誤差に比べてより大きな計算誤差が生じてしまうので，この 2 重積分を数値的に計算することは避けなければならない．そこで，この 2 重積分の数値計算を避けるため，後で説明されるように $\ln\left|\frac{1-t}{1+t}\right|$ を t の多項式で近似し，$\int_a^b dt\ \frac{1}{t+d}\ \ln\left|\frac{1-t}{1+t}\right|$ というタイプの積分が近似的に，かつ解析的に実行される。

関数近似について[80]．

1.　$\ln\left(\frac{1+t}{1-t}\right)=ctf^*(ct)$ ：$-\frac{1}{c}\leq t\leq\frac{1}{c}$　のとき，　(D-1)

2.　$\ln\left(\frac{t+1}{t-1}\right)=\frac{c}{t}f^*\left(\frac{c}{t}\right)$ ：$c\leq t$　または　$t\leq -c$　のとき，　(D-2)

ここで　$c=(\sqrt{2}+1)/(\sqrt{2}-1)\cong 1/0.17=5.83$ であり，$f^*(x)$ は

$$f^*(x) = a_o + a_1 x^2 + a_2 x^4 \quad , \tag{D-3}$$

$a_0 = 0.343145791438$, $a_1 = 0.003366358167$, $a_2 = 0.000061399745$ であり，この近似式の絶対誤差の最大値は $4.1 \times 10^{-8}$ である。変数 t が区間 [−1, 1] にあって区間 [−1／c, 1／c] にないときは次の関係式

$$\frac{1+t}{1-t} = 2^r \frac{1+T}{1-T} \tag{D-4}$$

によって t から T へ変数変換して，T が区間 [−1／c, 1／c] に存在するように正の変数 r を決定し，変数 T に関して (D−1) 式を使用する。また，変数 t が区間 (−∞, −1] または区間 [1, ∞) にあって，区間 (−∞, −c] および [c, ∞) にない ときは次の関係式

$$\frac{t+1}{t-1} = 2^r \frac{T+1}{T-1} \tag{D-5}$$

によって t から T に変数変換し，この変数 T が区間 (−∞, −c] または [c, ∞) に存在するように正の整数 r を決定し，変数 T に関して (D−2) 式を用いる。

参考文献


1) A. Sommerfeld : Z. Phys. 47 (1928) 1.

2) E. P. Wigner and F. Seitz : Phys. Rev. 43 (1933) 804 and 46 (1934) 506.

3) W. Pauli : Z. Phys. 41 (1927) 81.

4) U. Fock : Z. Phys. 61 (1930) 126.

5) J. Bardeen : Phys. Rev. 50 (1936) 1098.

6) E. P. Wigner : Phys. Rev. 46 (1934) 1002.

7) E. P. Wigner : Trans. Faraday Soc. 34 (1938) 678.

8) D. Pines and D. Bohm : Phys. Rev. 85 (1952) 338.

9) D. Bohm and D. Pines : Phys. Rev. 92 (1953) 609.

10) H. Ehrenreich and M. Cohen : Phys. Rev. 115 (1959) 786.

11) J. Goldstone and K. Gottfried : Nuovo Cimento [X]13 (1959) 849.

12) P. A. Wolff : Phys. Rev. 107 (1957) 450.

13) R. A. Ferrell : Phys. Rev. 114 (1959) 644.

14) W. Macke : Z. Naturforsch. 5a (1950) 192.

15) M. Gell-Mann and K. A. Brueckner : Phys. Rev. 106 (1957) 364.

16) K. Sawada : Phys. Rev. 106 (1957) 372.

17) K. Sawada, K. A. Brueckner, N. Fukuda and R. Brout : Phys. Rev. 108 (1957) 507.

18) P. Nozières and D. Pines : Nuovo Cimento IX (1958) 470.

19) J. Lindhard : Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-fys. Medd. 28 (1954) No.8.

20) J. Hubbard : Proc. Roy. Soc. (London) A243 (1957) 336.

21) P. Nozières and D. Pines : Phys. Rev. 111 (1958) 442.

22) T. Gaskell : Proc. Phys. Soc. (London) 77 (1961) 1182 and 80 (1962) 1091.

23) K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land and A. Sjölander : Phys. Rev. 176 (1968) 589.

24) J. Hubbard : Phys. Letters 25A (1967) 709.

25) D. Pines : Elementary Excitations in Solids, W. A. Benjamin, Inc., New York (1964) p.75, p.122,p.129, p.132.

26) R. Lobo, K. S. Singwi and M. P. Tosi : Phys. Rev. 186 (1969) 470.

27) R. T. Schumacher and C. P. Slichter : Phys. Rev. 101 (1956) 58.

28) R. T. Schumacher and W. E. Vehse : J. Phys. Chem. Solids 24 (1963) 297.

29) L. J. Sham : Proc. Roy. Soc. (London) A283 (1965) 33.

30) D. J. W. Geldart and S. H. Vosko : Canad. J. Phys. 44 (1966) 2137.

31) K. S. Singwi, A. Sjölander, M. P. Tosi and R. H. Land : Phys. Rev. B1 (1970) 1044.

32) T. Schneider, R. Brout, H. Thomas and J. Feder : Phys. Rev. Letters 25 (1970) 1423.

33) T. Schneider : Physica 52 (1971) 481.

34) P. Schofield : Proc. Phys. Soc. 88 (1966) 149.

35) P. Vashishta and K. S. Singwi : Phys. Rev. B6 (1972) 875.

36) L. J. Sham : Phys. Rev. B7 (1973) 4357.

37) G. Nicklasson, K. S. Singwi and A. Sjölander : to be published.

38) F. Bloch : Z. Phys. 61 (1929) 545.

39) J. B. Sampson and F. Seitz : Phys. Rev. 58 (1940) 633.

40) D. Pines : Solid State Physics Vol. 1, Academic Press, Inc., New York (1955) p.416.

41) K. A. Brueckner and K. Sawada : Phys. Rev. 112 (1958) 328.

42) M. Shimizu : J. Phys. Soc. Japan 15 (1960) 2220.

43) S. P. Silverstein : Phys. Rev. 130 (1963) 1703.

44) T. M. Rice : Ann. Phys. 31 (1965) 100.

45) L. D. Landau : Soviet Phys. JETP 3 (1957) 920.

46) P. A. Wolff : Phys. Rev. 120 (1960) 814.

47) T. Izuyama, D. J. Kim and, R. Kubo : J. Phys. Soc. Japan 18 (1963) 1025.

48) E. P. Wigner : Phys. Rev. 40 (1932) 749.

49) J. E. Moyal : Proc. Cambridge Phil. Soc. 45 (1949) 99.

50) J. Vlieger, P. Mazur and S. D. de Groot : Physica 27 (1961) 353.

51) R. Kubo : J. Phys. Soc. Japan 19 (1964) 2127.

52) L. D. Landau : Z. Phys. 64 (1930) 629.

53) P. S. Zyryanov : Soviet Phys. JETP 13 (1961) 751.

54) M. J. Stephen : Phys. Rev. 129 (1963) 997.

55) J. J. Quinn and S. Rodriguez : Phys. Rev. 128 (1962) 2487 and 2494.

56) N. D. Mermin and E. Canel : Ann. Phys. 76 (1964) 247.

57) H. Kanazawa, S. Misawa and E. Fujita : Progr. theor. Phys. 23 (1960) 426.

58) D. M. Edwards : J. Phys. C (Solid State Phys.) 2 (1969) 84.

59) P. Nozières and D. Pines : Phys. Rev. 109 (1958) 762.

60) F. Brouers : Phys. Status Solidi 19 (1967) 867.

61) D. Pines and P. Nozières : The Theory of Quantum Liquids, Vol. 1, W. A. Benjamin, Inc., New York (1966) p.209, p.335.

62) H. Brooks : Phys. Rev. 91 (1953) 1027.

63) G. N. Lewis and M. Randall : Thermodynamics (revised by K. S. Pitzer and L. Brewer) McGraw-Hill Co., New York (1961) Appendix 7.

64) L. Hedin and S. Lundqvist : Solid State Physics, Vol. 23, Academic Press, Inc., New York (1969) p.103.

65) F. Ham : Phys. Rev. 128 (1962) 2524.

66) R. Balescu : Statistical Mechanics of Charged Particles, Interscience Publishers, London (1963) p.287.

67) R. Dekeyser : Physica 38 (1968) 189.

68) K. N. Pathak and P. Vashishta : Phys. Rev. B7 (1973) 3649.

69) S. C. Jain and Madhu Jain : Phys. Rev. B8 (1973) 5557.

70) H. B. Singh and K. N. Pathak : Phys. Rev. B8 (1973) 6035.

71) F. Toigo and T. O. Woodruff : Phys. Rev. B2 (1970) 3958, B4 (1971) 371 and B4 (1971) 4312.

72) B. Goodman and A. Sjölander : Phys. Rev. B8 (1973) 200.

73) S. Ichimaru : Phys. Rev. A2 (1970) 494.

74) H. Yasuhara : Solid State Commu. 11 (1972) 1481.

75) H. Yasuhara : J. Phys. Soc. Japan 36 (1974) 361.

76) T. Kushida, J. C. Murphy and M. Hanabusa : Solid State Commu. 15 (1974) 1217.

77) H. Yasuhara and M. Watabe : Solid State Commu. 14 (1974) 313.

78) C.Caccamo, G. Pizzimenti, M. Parrinello and M. P. Tosi : to be published.

79) Iu. L. Klimontovich : Soviet Phys. JETP 6 (1958) 753.

80) 山内二郎，宇野利雄，一松　信 編：電子計算機のための数値計算法III. 培風館，1972，p81。