

報告番号

※甲第 963 号

主論文の要旨

題名

金属電子密度における電子相関
の理論的研究

氏名 長谷川武光

主論文の要旨

報告番号

※甲第963号

氏名

長谷川武光

この論文では、金属電子密度における電子気体模型の物理的性質が理論的に研究される。すなわち、相関エネルギー、凝集エネルギー、圧縮率、プラズマ振動の分散関係、対分布関数、スピンの依存する対分布関数およびスピンド磁率が計算される。その際、まず古典的および量子論的粒子分布関数に対する運動方程式の解を利用する。この運動方程式の解から波数ベクトル q と振動数 ω に依存する誘電関数 $\epsilon(q, \omega)$ または一般化帯磁率 $\chi(q, \omega)$ が求められる。Nozières と Pines が示したように、 $\epsilon(q, \omega)$ または $\chi(q, \omega)$ から、電子気体の上記のようないろいろな物理量が求められる。この論文では、運動方程式を解くとき、二粒子分布関数が一粒子分布関数と対分布関数の積で近似され

主論文の要旨

報告番号	※甲第 号	氏名
<p>る。したがって、$\epsilon(\eta, \omega)$ または $\chi(\eta, \omega)$ は対分分布関数の汎関数として表現されるので、この二つの量は <i>self-consistent</i> に計算される。この論文の目的は、第一に、電子気体に対する、電子間のクーロン相互作用を、近似的に取り扱うことにより、次の二つの条件を満たすことである。すなわち、対分分布関数を常に正極限の得られ、$\epsilon(\eta, 0)$ の長波長状態のエネルギーの体積につき、微分エネラ得られ、圧縮率が一致すること、<i>sum rule</i> を満たすこと、である。電子気体の上記の物理的なる諸量を、この電子気体模型がより正確に求め、この電子気体模型がより近似的に</p>	<p>号</p>	<p>長谷川武光</p>

主論文の要旨

3

報告番号	※甲第	号	氏名
			長谷川武光
<p>り金属, たとえば Na や Li, の実験値と比較する。第三に, 磁場中における電子気体のプラズマ振動の分散関係に対する <i>exchange scattering</i> の寄与を求めるところである。第二章では, クーロン相関が重要な役割を演じている金属電子密度領域における電子気体について, 諸物理量に対するクーロン相互作用の影響を調べる。そのとき Singwi 達 (STLS) のように, 古典的リユージョ方程式が用いられ, 誘電関数が <i>self-consistent</i> に求められる。この古典的リユージョ方程式の中に現れる二粒子分布関数が次のように近似される。Schneider 達が提案したように, 対分布関数を平均電子密度で微分した項を誘電関数の表式の中に取り入れ, 三体相関の効果が近似的に考慮される。以上の近似</p>			

報告番号

※甲第

号

氏名

長谷川武光

を用い、電子気体について誘電関数が *self-consistent* に数値計算される。この結果を用い、相関エネルギー、圧縮率、対分佈関数、凝集エネルギー、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る。このようにして求められた対分佈関数は、一電子あたりの平均体積を球とみなしたときの半径 $r_s \geq 4$ (原子単位) で、二電子の間隔が小さいとき依然として負となつた。しかし、圧縮率 *sum rule* は近似的に満たされ、この結果は STLS の結果に比べてよいことが示される。第三章では、第二章における誘電関数を *self-consistent* に求める方法がスピンの相関の問題に拡張される。そして金属電子密度における一般化帯磁率が *self-consistent* に数値計算される。一般化帯磁率の表式の中に、

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名	長谷川武光			
<p>スピ ン に 依 存 す る 対 介 布 関 数 を 平 均 こ と 考 慮 s p i n c o n s i s t e n t 依 存 帯 算 果 す お び STLS 介 応 る び が の 量</p>	<p>子 と さ す 磁 率 は こ び 一 般 と 率 る こ 一 般 的 な 子 効 果</p>	<p>に 密 度 に よ る 計 算 結 果 分 布 電 子 と 見 出 す 磁 場 の 強 さ に よ る 依 存 す る 。実 験 が 三 帯 様 構 造 論 に よ る 。実 験 が 三 帯 様 構 造 論 に よ る 。実 験 が 三 帯 様 構 造 論 に よ る 。</p>	<p>す る 微 三 一 般 化 か 数 密 帯 か さ は の 自 由 子 な て に 入 り 。</p>	<p>対 介 布 関 数 密 帯 か さ は の 自 由 子 な て に 入 り 。</p>	<p>分 た 関 帯 ら お 度 磁 な れ た 電 子 の 誘 け ら 四 確 に</p>	<p>関 を 近 率 ス び お の よ 。関 お 古 れ 置 関 量 て 取</p>	<p>数 合 似 の self- s p i n c o n s i s t e n t の 計 算 一 二 お て 的 れ 換 お 効 る 。こ う。</p>

主論文の要旨

報告番号

※甲第

号

氏名

長谷川武光

そのために古典的リユージョ方程式
 の代りに、対応する量子論におけ
 る方程式であるWigner分布関数に
 する運動方程式を求めるとこの方
 程式を解いて直接に量子論的な誘
 電関数式の表式が求められた。この
 関数は、古典論のときと同様に、
 Wigner分布関数第二章と同様に
 似される。計算にこの計算結果を
 tentな値を計算する。この計算結果
 求められ関数、相関エネルギー、
 対分率および電子密度、圧
 縮係数が金属に属する。電子密度
 算分い分布関数。全金属に属する
 対見分いた。この結果は初条件を
 満たしたものである。この条件を

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名
			長谷川 武光
<p>全金属電子密度で満足することの できうる理論は今までなかつた。 方、この章の計算結果では圧縮率 sum rule は満たされなかつた。 で、理論では、対分分布関数の正定 値符号と同時に縮率sum ruleの二つ 条件を満たした。は満結果は満た か厳密の計算同時条号算すよ 章件は方値の符計た課題 一定この満の第五 こも満の第五 後第分 ner関の問 様</p>	<p>金属電子密度で満足することの できうる理論は今までなかつた。 方、この章の計算結果では圧縮率 sum rule は満たされなかつた。 で、理論では、対分分布関数の正定 値符号と同時に縮率sum ruleの二つ 条件を満たした。は満結果は満た か厳密の計算同時条号算すよ 章件は方値の符計た課題 一定この満の第五 こも満の第五 後第分 ner関の問 様</p>	<p>金属電子密度で満足することの できうる理論は今までなかつた。 方、この章の計算結果では圧縮率 sum rule は満たされなかつた。 で、理論では、対分分布関数の正定 値符号と同時に縮率sum ruleの二つ 条件を満たした。は満結果は満た か厳密の計算同時条号算すよ 章件は方値の符計た課題 一定この満の第五 こも満の第五 後第分 ner関の問 様</p>	<p>氏名</p> <p>長谷川 武光</p> <p>全金属電子密度で満足することの できうる理論は今までなかつた。 方、この章の計算結果では圧縮率 sum rule は満たされなかつた。 で、理論では、対分分布関数の正定 値符号と同時に縮率sum ruleの二つ 条件を満たした。は満結果は満た か厳密の計算同時条号算すよ 章件は方値の符計た課題 一定この満の第五 こも満の第五 後第分 ner関の問 様</p> <p>この満の第五 こも満の第五 後第分 ner関の問 様</p> <p>Wig- ン相 同般</p>

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名	長谷川武光
------	-----	---	----	-------

化帯磁率が self-consistent に求められた。スピ
 ンに依存する Wigner 分布関数に
 関する運動方程式を解くとき、ス
 ピンに依存する二粒子 Wigner 分
 布関数を、古典論のときと同様に、ス
 ピンに依存する Wigner 分布関数と
 対分布関数の積で近似した。以上
 の近似を用い、一般化帯磁率が self-
 consistent に数値計算される。この計
 算結果を用い、スピンの依存する対
 分布関数とスピンの磁率電密度間の
 対称性を示す。反平行なスピン電
 子密度は、正平行なスピン電密度
 と異なる。この結果は、スピンの
 対称性を示す。この結果は、スピ
 ンの対称性を示す。この結果は、ス
 ピンの対称性を示す。この結果は、

主論文の要旨

報告番号	※甲第	号	氏名							
<p>か 計 強 ら 算 こ 誘 sum の 論 な ス め 分 足 た ン 符 に の</p>	<p>が く れ 結 の 電 rule が わ セ ら 布 す 。 の 符 お 理</p>	<p>平 支 る 果 の 関 つ な ち ン れ 関 る こ 電 の い 論</p>	<p>に 行 配 。 は と 数 と の い 、 帯 、 数 よ の 子 条 て を</p>	<p>依 ス し 一 方 、 Na は の 対 条 こ 実 磁 か の う 章 間 件 満 た 張</p>	<p>存 ヒ ン い 、 実 二 論 布 を に 値 の ス 定 理 理 対 全 さ し</p>	<p>し の ス ス 、 二 章 に 関 同 類 に 正 セ 値 論 論 分 金 れ て よ</p>	<p>い 電 こ ヒ ン 値 お お 数 同 時 似 一 致 な に 号 今 は 関 電 い り</p>	<p>た 子 間 が 帯 一 び て 正 満 す 計 依 の ま 反 数 子 る 正</p>	<p>め 、 の 結 磁 致 第 四 圧 値 足 い る よ う が る を か ス 定 領 こ ヒ</p>	<p>Fermi 相 関 づ の 計 い 。 の 率 号 理 す な 求 対 満 こ ヒ</p>

主論文の要旨

報告番号

※甲第

号

氏名

長谷川武光

ン帯磁率を求めらるることのできる理
 論を作用したことが重要であり、今後
 の残さるべき課題である。
 第六章では、有限の磁場中にお
 ける電子気体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張
 びを舞いする。この章では拡張
 された Random Phase Approximation 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
 寄与が調べられる。磁場とプラズ
 マ振動の波数ベクトルが平行の
 と、この寄与は ω^2 に比例し、垂
 直のときは ω の0次の項を寄与
 することが見いだされた。後者の寄
 は磁場のないときには現れな
 った。この結論として、この論文の計算で

主論文の要旨

//

報告番号

※甲第

号

氏名

長谷川 武光

は、電子気体に対し、今までのところできただけ正確にクーロン相互作用が取り扱われ、対分相関数が常に正となる結果が得られた。このことから、この論文に用いられた方法がクーロン相互作用を正しく取り扱うのに有効であるといえる。この論文の結論が、圧縮率 $sum\ rule$ を満たす方法を、拡張することが必要であり、今後の課題である。