

## 第一原理からの多電子問題：

今、何故、これが物理理論の中で一番重要と考えるのか？

高田 康民

平成 21 年 11 月 22 日

### 1 はじめに

#### 1.1 自然の階層構造と物性理論

われわれの自然はおよそ  $10^{-33}\text{cm}$  のプランク長で特徴づけられる素粒子から  $10^{29}\text{cm}$  程度の大きさの宇宙に至る 60 桁以上の拡がりを持つ存在であるが、その顕著な特色は階層構造の形成である。そして、その構造を担う各階層は 6–8 桁程度の拡がりとそのスケールでの現象を適切に記述する物理法則を持つ。したがって、自然の全容解明のためには、まず、各階層を支配する物理法則を発見し、次に、その発現様式を十分に把握すると共に、それらの物理法則を階層を越えてお互いに関連づけることが必要になる。

さて、その階層構造の中で物性理論が対象とする物性科学の階層は、 $10^{-12}\text{cm}$  を中心に広がる原子核物理の階層よりは上で、 $1\text{cm}$  を中心とした生物学の階層よりは下である。そして、その構成要素は正の点電荷としての原子核と負の点電荷の電子であり、これら構成要素間には電磁気力が働いていて、その相互作用下の運動状況は量子力学と統計力学で記述される。このように、この階層は極度に単純化された系に還元されるものであり、しかも、その系を支配する物理法則もそれを記述する物理理論も既知である。しかしながら、銅酸化物超伝導体の高温超伝導機構を同定しきれないことから明らかかなように、現在の物性理論の発展段階では、この簡単な系での単純な物理法則の発現様式を十分には把握していない状況である。

ところで、物性科学の階層を出発点として上下の階層を眺めると、上部構造（生物学や宇宙物理の範疇）は当然であるが、予想外にも、この単純な階層を生み出しているはずの下部構造（原子核物理から素粒子物理が守備範囲とするもの）もずっと入り組んだ“複雑系”の様相を持つ世界であることが判明してきた。そして、その世界を支配する基本の物理法則も必然的に複雑になっている。さらには、素粒子物理の究極は自然界の四つの力の統一であり、その場合、極微の極致は重力場の理論を通して宇宙物理という極大の世界に直接的に結びつく。この意味で、自然の階層構造は一直線に並んだ“開放端”というよりは、端のない“周期的”なものと捉えた方が正しい（図 1 参照）が、この環状構造の中で物性科学の階層は最も単純な物理系といえるものであり、それゆえ、この階層を対象とする物性理論を窮めることはもっと複雑な系を対象としている他のあらゆる物理理論に率先して遂行されるべきものであり、その成功が他の物理理論を先導するものと考えられる。

このように認識すれば、現段階における物性理論の最重要課題はクーロン相互作用下の原子核電子複合系（いわゆる第一原理系）を正確に解き、その系に内在されている物理を余すところなく抽出することであろう。

#### 1.2 断熱近似下の第一原理系

通常、この第一原理系を取り扱う場合、原子核と電子の圧倒的な質量差（原子核の中で一番軽い陽子と比べても電子の質量は約 2 千分の 1）に注目して、ボルン・オッペンハイマーの断熱近似が

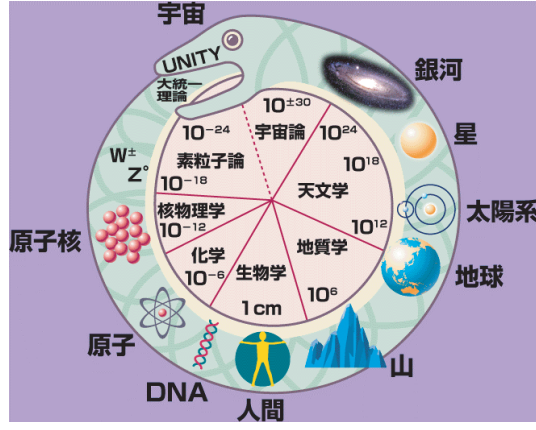


図 1: 素粒子物理学者 Sheldon L. Glashow が提唱するウロボロス (Ouroboros) の概念 [1]。

採用される。すると、問題は与えられた原子核の空間配置から作り出される 1 体ポテンシャル  $v(\mathbf{r})$  の下でクーロンの斥力相互作用ポテンシャル  $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\equiv e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  が働いている多電子系を解くことに還元される。これは不均一密度の電子ガス系といわれるもので、それを規定するハミルトニアン  $H$  は第 2 量子化の表現で [2]

$$H = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left( -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + v(\mathbf{r}) - \mu \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

のように書き下すことができる。ここで、 $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$  は質量  $m$ 、スピン  $\sigma$  で特徴づけられる電子場の消滅演算子であり、 $\mu$  は化学ポテンシャルである。

この多電子系の基底状態  $|\Phi_0\rangle$  に関しては、それが正常状態である限り、その全エネルギー  $E_0 (\equiv \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle / \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle + \mu N)$  や電子密度  $n(\mathbf{r}) (\equiv \langle \Phi_0 | \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle / \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle)$  などの物理量を精度よく評価する理論の基礎は既によく確立されている。そして、具体的な計算方法の選択肢も多いが、考えている系の全電子数  $N (\equiv \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r})$  の違いによって理論手法を次のように選ぶのが一般的であろう。すなわち、 $N$  が数個から 10 個程度の場合、これは系全体の電気的中性条件から原子核の数も数個程度なので、原子や小さい分子の系を取り扱うことになる。したがって、量子化学で精緻に開発されている様々な手法、とりわけ、配置間相互作用 (CI: Configuration Interaction) 法 [3] を用いればよい。 $N$  がそれ以上に大きい、しかし、せいぜい 100 個のオーダーである場合は量子モンテカルロ法、特に、拡散モンテカルロ (DMC: Diffusion Monte Carlo) 法 [4] がよい。これらの方法は原理的には厳密解を与えるものではあるが、実際の実行上、CI では基底数の制限がある、DMC ではフェルミオンの負符号問題のために節固定近似を採用するなどのために、得られる結果はかなり正確であるとはいっても必ずしも厳密とはいえない。

$N$  が更に大きくなり、事実上無限大と見なされる場合、上述した数値的手法は適用できず、より解析的な手法が採用される。この際、大きく分けて 2 種類のアプローチがある。一つは  $H$  の中の相互作用項について摂動展開するものであり、もう一つは  $|\Phi_0\rangle$  の形を仮定して変分法的な考え方に沿って計算するものである。いずれのアプローチでも、まず、相互作用の効果を 1 体的な平均場の考え方で捉え、その結果として 1 体ポテンシャルが  $v(\mathbf{r})$  から有効的に  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  に変化した状況下での 1 体問題を記述するハミルトニアン  $H_0$  を

$$H_0 \equiv \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left( -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \tilde{v}(\mathbf{r}) - \mu \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

で定義し、この  $H_0$  の基底状態 (スレーター行列式)  $|0\rangle$  を理論の出発点とする。そして、元の  $H$  を  $H = H_0 + H_1$  と書き直し、 $H_0|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$  を満たす  $H_0$  の固有関数系  $\{|n\rangle\}$  を考えて、 $H_1$  に関

する通常の摂動展開理論を適用すると、 $H_1(t) = e^{iH_0t}H_1e^{-iH_0t}$  として、 $|\Phi_0\rangle$  は

$$|\Phi_0\rangle = |0\rangle + \sum_{n \neq 0} |n\rangle \frac{\langle n|H_1|0\rangle}{\epsilon_0 - \epsilon_n} + \dots = T_t \exp \left[ -i \int_{-\infty}^0 dt e^{0^+t} H_1(t) \right] |0\rangle \quad (3)$$

のように書き下すことができる [5]。この最右辺で定義されている演算子  $T_t$  はいわゆる  $T$  積といわれるもので、 $T_t[H_1(t_1) \cdots H_1(t_i) \cdots H_1(t_n)]$  は  $t_i$  の大きさにしたがって左から順に  $H_1(t_i)$  を  $n$  個並べた積を意味する。この式 (3) で与えられる  $|\Phi_0\rangle$  は  $H_1$  の級数としてみた場合、 $|0\rangle$  と解析的につながるもので、正常状態では厳密に正しい解であり、この表式が摂動展開理論の基礎である。

一方、変分的なアプローチでは  $|\Phi_0\rangle = F|0\rangle$  と書いて電子間の相関効果を記述する演算子  $F$  の形を仮定する。たとえば、2 体相関だけを取り込む目的でジャストロー関数 [6] やグッツビラー関数 [7] などを仮定し、そこに含まれる各種のパラメータを何らかの方法で最適化する。この際、この関数形の選び方や最適化のやり方の違いで相関基底関数 (CBF: Correlated-Basis Function) 法 [8]、FHNC (Fermi Hypernetted Chain) 法 [9]、トランスコリレーテッド法 [10] など枚挙に暇がないが、残念なことに、これらの理論はその出発点の段階で近似理論に過ぎないという宿命を背負っている。このカテゴリーに含まれる理論手法のうちで原理的には厳密解を与えうるのは CC (Coupled-Cluster) 法 [11] と EPX (Effective-Potential Expansion) 法 [12] のみである。両者共に  $|\Phi_0\rangle$  の形は全く同じで、それは基本的に式 (3) の形に還元されるものである。ただ、物理量の計算に際して違いがあって、EPX は変分計算のスキームに忠実なものであるが、CC はそうではなく、たとえば、基底状態エネルギーは  $E_0 = \langle 0|H|\Phi_0\rangle / \langle 0|\Phi_0\rangle$  で評価される。

### 1.3 密度汎関数理論の特異性

さて、一様密度電子ガス系 (ジェリウム模型) やそれから大きくは変化していない系、たとえば、表面のあるジェリウム模型や電子イオン相互作用が弱い擬ポテンシャルで記述されるアルカリ金属結晶のように単純な系で  $v(\mathbf{r})$  も簡単な場合、 $E_0$  や  $n(\mathbf{r})$  などは CC や EPX ではもちろんのこと、CBF や FHNC であっても高精度の結果が得られる。しかしながら、このような通常の多体理論に基礎を置く計算法に従うと、たとえ  $n(\mathbf{r})$  のように “1 体的な情報” ですら、(ジェリウム模型を除けば) あまり簡単には計算できず、しかも、厳密な結果が得られるという可能性はほとんどない。その理由は “BBGKY (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon) の階層構造” [13] の存在である。すなわち、 $n(\mathbf{r})$  を厳密に決定するための方程式を書き上げると、その方程式には必ず 2 体の密度相関関数  $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  が現れるが、その  $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  を決めるための方程式を書き下すと 3 体の密度相関関数  $n_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  が現れるというように、無限に続く密度相関関数の階層構造と真正面から向き合うことになるからである。したがって、具体的に  $n(\mathbf{r})$  を得ようとすれば、この構造をどこかで断ち切るという近似を導入せねばならず、それゆえ、その計算で与えられる  $n(\mathbf{r})$  はその切断近似がうまく働いて精度のよい結果が得られるということがあったとしても、原理上は常に近似値に過ぎないということになる。

ところで、多体理論におけるこの常識は密度汎関数理論 (DFT: Density Functional Theory) [14] の登場で覆された。すなわち、DFT では  $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  や  $n_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$  に関係なく、 $E_0$  や  $n(\mathbf{r})$  が原理上厳密に決定されることが証明されたのである。しかも、現実の計算においても、式 (2) 中の  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  を適切に選べば、 $n(\mathbf{r})$  は  $\langle 0 | \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) | 0 \rangle$  で厳密に与えられるという驚くべきものである。なお、高次の密度相関関数に無関係に、単に 1 体問題を解くだけで  $n(\mathbf{r})$  が厳密に決定されるということは、BBGKY の階層構造で記述される物理的実体と直接的には無関係に  $n(\mathbf{r})$  が決まるということなので、DFT で現れるこの  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  は物理的な実体ではあり得ない。ちなみに、この  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  を基礎にした固有関数系で多体理論を構成する際の第一歩にしようという提案がよくなされるが、この  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  の非物理性を考慮すれば、この提案が必ずしも物理的に適切とはいえないことは容易に想像できよう。

このように、BBGKY 階層構造の呪縛から逃れた DFT は数多ある多体理論の中でも特異なものといえるが、残念ながら、その理論の内部に  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  を具体的に決定する仕組みを持たない。確かに形式的には、いわゆる交換相関エネルギーの密度に関する汎関数  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  が与えられれば、 $\tilde{v}(\mathbf{r})$  はその汎関数微分を用いて一意的に決められるが、この  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  の汎関数形を正確に作り出す処方箋が DFT の内部に存在しないのである。そこで、通常が多体理論はこの  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  を近似的に構成するために用いられることになる。実際、電子ガス系に対する研究から、局所密度近似 (LDA: Local Density Approximation) や一般化された勾配近似 (GGA: Generalized Gradient Approximation) が考案された。これらの近似を越えて、より高い精度を与え、より広い汎用性を持つ汎関数形を考案するためには、電子ガス系よりももっと複雑な系に適切な多体理論を適用して  $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$  を研究することが不可避であり、これが DFT における喫緊の重要課題のひとつであろう。

ちなみに、通常 DFT では  $E_0$  や  $n(\mathbf{r})$  以外に有用な物理情報は得られない。(むしろ、これらの物理量の厳密計算のみに焦点を合わせた理論を構成したのである。) これに不満を覚えて、これら以外に  $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  などと同時に決定されるように DFT を拡張する試みが多数提案されてきた。私見では、このような試みは DFT 本来の哲学に反するがゆえに決して成功しないものと考えられる。そもそも、 $n(\mathbf{r})$  とは異なり、 $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  を具体的に決める方程式は 1 体問題には還元できず、それゆえ、この 2 体密度相関関数を決定する問題の難しさは通常が多体理論におけるそれと同等になるので、DFT を標榜する利点が失われる。言い換えれば、 $n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  を議論すると、忽ち DFT は数多の多体理論の群れの中に埋没してしまうのである。

#### 1.4 励起状態と準粒子

これまで基底状態を議論してきた。確かに、これを調べれば、物質の静的構造を知ることができる。しかし、電磁場などの印加による外部摂動攪乱下の動的応答を調べるには、不均一密度の電子ガス系の励起状態も知らねばならない。この多体系の(少なくとも励起エネルギーが小さい低励起状態)は基底状態という舞台の上のほとんど独立な素励起の集まりで記述できる。場の量子論的な見方でいえば、基底状態はいわば“宇宙の真空”であり、素励起はその真空中に出現した“粒子”である。したがって、これら素励起の種類、それぞれの素励起の性質、および、それらの間の相互作用を明確にし、制御することが主要課題となる。そして、この課題を研究することによって、外部摂動による動的応答の実験観測結果が解析され、理解されることになる。

この素励起描像の立場をもう少し具体化してみよう。固体物理学の長年にわたる研究から、我々は固体中の多電子系は、多くの場合、1 電子近似で少なくとも定性的にはよく理解されるという事実を知っている。これは、普通、固体中の素励起として電子そのものの性質によく似た性格の“粒子”(裸の、すなわち、相互作用の効果を受けていない電子に対して、それと区別する意味で“準粒子”と呼ばれるもの)が十分に長い寿命を持って存在するためであると解釈されている。クーロン斥力で強く相互作用している多電子から成る凝縮系で、どうしてこのような準粒子が存在しうるかという疑問に対して、ランダウのフェルミ流体理論 [15] では、準粒子の性質を具体的に計算する処方箋は与えられないものの、その存在理由のシナリオは描かれている。

そこで、問題はその計算のための処方箋を与えることであり、それによって裸の電子が多体効果によってどのように準粒子に変身していくかを明確にすることである。とりわけ、この準粒子は動的な(かつ、一般的には非局所的な)1 体ポテンシャル場(いわゆる自己エネルギー)の中の電子として捉えられるがゆえに、準粒子の性質が自身の持つエネルギーに如何に依存しているかを知ることがこの問題の要諦である。また、クーロン相互作用の長距離性に起因する集団励起を量子化した“プラズモン”と呼ばれる素励起の出現やそれと準粒子との相互作用の記述も必須である [16]。

この準粒子の性質を調べるために、その存在を仮定した上で、基底状態の変分的な波動関数  $|\Phi_0\rangle = F|0\rangle$  の計算を基にして準粒子の分散関係を定量的に評価しようという試みがある。基本的にいえば、

これは系の励起状態  $|\Phi_n\rangle$  は基底状態を記述する相関演算子  $F$  と同じ  $F$  を用いて、 $H_0$  の励起状態  $|n\rangle$  に対して  $|\Phi_n\rangle = F|n\rangle$  と考えることから励起エネルギーを求めようとするもので、HF(Hartree-Fock) 近似におけるクーブマンの定理を拡張しようという試みでもある。しかしながら、このやり方で自己エネルギーのエネルギー依存性を正しく取り込むことは簡単ではなく、また、プラズモンとの相互作用の効果を見ることも至難である。ちなみに、この立場で正しい分散関係（有効質量）を得るためには、まず、ランダウ・パラメータを微視的に計算し、その後、フェルミ流体理論に則った議論を展開しなければならない [17]。

## 1.5 1 電子遅延グリーン関数

さて、われわれが微視的な計算を通して本当に明確にしたいことは準粒子の概念そのものの有効性であり、その適用範囲の確定であるといえる。この目的完遂のために有効な方法は唯一つで、それは1電子遅延グリーン関数  $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  を計算することである。この関数は時刻  $t = 0$  で位置  $\mathbf{r}'$  のところにスピン  $\sigma'$  の裸の電子を系に注入し、（あるいは、位置  $\mathbf{r}$  でスピン  $\sigma$  の電子を取り出して正孔を作り、）スピンの変換可能性も含めて、その電子（あるいは、正孔）の経時変化をみるものである。とりわけ、時刻  $t (> 0)$  で位置  $\mathbf{r}$  においてスピン  $\sigma$  の裸の電子（あるいは、位置  $\mathbf{r}'$  においてスピン  $\sigma'$  の裸の正孔）のままに留まっている確率振幅が核心の物理量であり、数学的には、

$$G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \equiv -i\theta(t)\langle\{\psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')\}\rangle \quad (4)$$

のように定義される。ここで、 $\theta(t)$  はヘビサイドの階段関数であり、時間軸方向の境界条件は遅延型で因果則が成り立つものである。また、演算子に対する時間依存性はハイゼンベルグ表示で考えて、 $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \equiv e^{iHt}\psi_\sigma(\mathbf{r})e^{-iHt}$  であり、そして、平均操作  $\langle \dots \rangle$  は熱平均  $e^{\beta\Omega\text{tr}}(e^{-\beta H} \dots)$  を意味する。ただし、 $T$  を温度として  $\beta \equiv 1/T$  であり、また、 $\Omega$  は熱力学的ポテンシャルで、 $\Omega \equiv -T \ln[\text{tr}(e^{-\beta H})]$  によって計算される。

この準粒子を実験的に観測する手段は角度分解型光電子分光（ARPES: Angle-Resolved Photo-Emission Spectroscopy）[18] である。この場合、 $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  ではなく、そのフーリエ変換  $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$ 、特に、その虚部である1電子スペクトル関数  $A_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$  が問題になる。これらの関数は

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - 0^+ t} G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{A_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{\omega + i0^+ - E} \end{aligned} \quad (5)$$

$$A_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \quad (6)$$

という関係でお互いに結びついている。なお、式 (5) の  $t$  積分で、 $t \rightarrow +\infty$  で積分が収束するように収束因子  $e^{-0^+ t}$  の導入を暗黙裏に仮定したが、これは  $\omega$  を  $\omega + i0^+$  のように考えること、すなわち、 $\omega$  平面において上半面から実軸に近づくことを意味している。また、スペクトル関数に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE A_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (7)$$

という“総和則 (Sum rule)”も容易に証明される。

## 1.6 1 電子温度グリーン関数

$N$  がごく小さい少数電子系では、この  $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  は厳密対角化などの数値手法で正しく求められるが、巨視系 ( $N \rightarrow \infty$ ) ではグリーン関数法などの場の量子論的手法を用いることになる。そし

て、その場合、 $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$  を直接計算するのではなく、まず、 $\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \equiv e^{H\tau} \psi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-H\tau}$  として、

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \equiv -\langle T_\tau \psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \rangle \quad (8)$$

で定義される 1 電子温度グリーン関数  $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  を求めることになる。なお、 $T_\tau$  は虚時間  $\tau$  に関する  $T$  積演算子である。そして、この定義式 (8) から直ちに  $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau + \beta) = -G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  が証明されるが、これは  $\tau$  の関数としてみれば、 $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  は周期  $\beta$  の反周期関数であるということなので、次のようなフーリエ級数展開ができる。

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = T \sum_{\omega_p} e^{-i\omega_p \tau} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) \quad (9)$$

ここで、フェルミオンの松原振動数  $\omega_p$  は  $p$  を整数 ( $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) とすれば、 $\omega_p = \pi T(2p+1)$  である。そして、対応するフーリエ逆展開は

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_p \tau} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{A_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{i\omega_p - E} \quad (10)$$

となるので、この温度グリーン関数  $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p)$  が一旦求められれば、式 (5) と比較すれば容易に分かるように、 $\omega$  平面上の解析接続  $i\omega_p \rightarrow \omega + i0^+$  により  $G_{\sigma\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$  が得られることになる。

ちなみに、 $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p)$  は抽象表現  $G(i\omega_p) = 1/(i\omega_p - H)$  の座標表示

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) = \langle \mathbf{r}\sigma \left| \frac{1}{i\omega_p - H} \right| \mathbf{r}'\sigma' \rangle \quad (11)$$

として解釈できるので、今後はしばしば、 $G(i\omega_p)$ 、あるいは、単に  $G$  という表記で 1 電子温度グリーン関数を表すことになるが、具体的な座標表示が欲しければ、座標表示の基底関数系  $\{|\mathbf{r}\sigma\rangle\}$  を使って成分表示すればよい。

## 1.7 ダイソン方程式

この  $G(i\omega_p)$  を系統的に摂動計算するために、 $H$  を相互作用  $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  に依存しない部分  $H_0$ 、すなわち、式 (2) で  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  を  $v(\mathbf{r})$  と選んだものと  $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  に依存する部分  $H_1$  に分割しよう。そして、 $H_0$  に対応する 1 電子温度グリーン関数を  $G_0(i\omega_p)$  と書くと、これは  $G_0(i\omega_p) = 1/(i\omega_p - H_0)$ 、すなわち、 $(i\omega_p - H_0)G_0(i\omega_p) = 1$  なので、これを座標表示で具体的に書き下すと、

$$\left( i\omega_p + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - v(\mathbf{r}) + \mu \right) G_{\sigma\sigma',0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \quad (12)$$

ということになる。したがって、1 体ポテンシャル  $v(\mathbf{r})$  (と適当な境界条件) さえ具体的に与えられれば、 $G_0(i\omega_p)$  の正確な座標表示の関数形が得られる。

ところで、 $G(i\omega_p)$  と  $G_0(i\omega_p)$  は恒等式

$$\frac{1}{i\omega_p - H} = \frac{1}{i\omega_p - H_0} + \frac{1}{i\omega_p - H_0} H_1 \frac{1}{i\omega_p - H} \quad (13)$$

を使うと、 $G(i\omega_p) = G_0(i\omega_p) + G_0(i\omega_p) \tilde{\Sigma}(i\omega_p) G(i\omega_p)$  という関係でお互いに結びついていることが分かる。ここで、 $\tilde{\Sigma}(i\omega_p)$  はその座標表示

$$\tilde{\Sigma}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) = \langle \mathbf{r}\sigma | H_1 | \mathbf{r}'\sigma' \rangle \quad (14)$$

を通して定義されている。この式 (14) は、一見、単純そうに見えるが、その評価は決して簡単ではない。ただ、2 体ポテンシャル  $H_1$  を単純に切断近似して 1 体ポテンシャル化した場合、すなわち、

$\psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r})\langle\psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\rangle - \psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\langle\psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r})\rangle$  と近似すれば、平均を取った量  $\langle\psi^+\psi\rangle$  は  $G(\tau = -0^+)$  で書き表されることに注意すると、

$$\tilde{\Sigma}_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) \rightarrow \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\sigma\sigma'}\Sigma_H(\mathbf{r}) + \delta_{\sigma\sigma'}\Sigma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (15)$$

が得られる。ここで、静的局所 1 体ポテンシャルのハートリー項  $\Sigma_H(\mathbf{r})$  は

$$\begin{aligned} \Sigma_H(\mathbf{r}) &\equiv \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') T \sum_{\omega_p} G_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'; i\omega_p) e^{i\omega_p 0^+} \\ &= \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (16)$$

で定義され、静的非局所 1 体ポテンシャルのフォック項  $\Sigma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  は

$$\Sigma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv -u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') T \sum_{\omega_p} G_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p) e^{i\omega_p 0^+} \quad (17)$$

で与えられる。

そこで、 $\tilde{\Sigma}(i\omega_p)$  から  $\Sigma_H$  を取り除いた部分を  $\Sigma(i\omega_p) [\equiv \tilde{\Sigma}(i\omega_p) - \Sigma_H]$  と書くと、これは  $\Sigma_F$  を含む非局所 1 体ポテンシャルであり、一般的には  $\omega_p$  に依存する動的なもので、“自己エネルギー”と呼ばれる。そして、 $G$  は

$$G = G_0 + G_0 (\Sigma_H + \Sigma) G \quad (18)$$

という関係式を満たす。したがって、一旦、 $\Sigma$  が分かれば、“ダイソン方程式”と呼ばれるこの重要な関係式 (18) を用いて  $G$  を決めることができる。

## 1.8 相互作用表示と摂動展開

自己エネルギーを式 (15) の HF 近似を越えて計算する際、式 (14) は便利な出発点とはいえ、一旦、 $G(\tau)$  の定義式 (8) に戻るのがよい。そして、 $\tau$  依存性を  $H$  ではなく、 $H_0$  を通したものに交換しよう。すなわち、 $U(\tau) \equiv e^{H_0\tau} e^{-H\tau}$  で変換行列を定義して、 $\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) = U(\tau)^{-1} e^{H_0\tau} \psi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-H_0\tau} U(\tau)$  と書き直し、今後は  $\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau)$  といえば  $e^{H_0\tau} \psi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-H_0\tau}$  という“相互作用表示”での時間依存性を指すものとする。同様に、 $H_1(\tau) = e^{H_0\tau} H_1 e^{-H_0\tau}$  とする。

そこで、この  $U(\tau)$  を使って“ $S$  行列演算子”を  $S(\tau, \tau') \equiv U(\tau)U(\tau')^{-1}$  で定義しよう。すると、初期条件  $S(\tau', \tau') = 1$  は自明であり、また、その時間発展を記述する運動方程式も容易に

$$\frac{\partial S(\tau, \tau')}{\partial \tau} = e^{H_0\tau} (H_0 - H) e^{-H\tau} U(\tau')^{-1} = -H_1(\tau) S(\tau, \tau') \quad (19)$$

であることが分かる。したがって、この  $S$  行列演算子の形式解は

$$S(\tau, \tau') = T_\tau \exp \left[ - \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 H_1(\tau_1) \right] \quad (20)$$

ということになる。そして、熱力学ポテンシャル  $\Omega$  は

$$e^{-\beta\Omega} = \text{tr}(e^{-\beta H}) = e^{-\beta\Omega_0} \langle S(\beta, 0) \rangle_0 \quad (21)$$

で与えられる。ここで、 $\Omega_0$  は  $e^{-\beta\Omega_0} = \text{tr}(e^{-\beta H_0})$  で与えられ、また、平均操作  $\langle \dots \rangle_0$  は相互作用の無い系での熱平均  $e^{\beta\Omega_0} \text{tr}(e^{-\beta H_0} \dots)$  を意味する。

この  $S(\beta, 0)$  を用いると、式 (8) は

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -\frac{\langle T_\tau [S(\beta, 0) \psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')] \rangle_0}{\langle S(\beta, 0) \rangle_0} \quad (22)$$

のように書き直すことができる。

ところで、式 (21) や式 (22) に現れる平均操作は全て無摂動状態での熱平均値を計算するものなので、(手間はかかるが) その操作自体は簡単に遂行できる。特に、任意の個数の電子場演算子の期待値は生成消滅の各演算子 1 つずつの組の期待値の積 (に適当な符号を付けた項) の和の形に分解・還元できる (プロット・ドオドミニシスの定理)。そして、このような計算を分母と分子のそれぞれについて行くと大規模な相殺が起こる。その結果、式 (22) の計算において、 $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$  の元々の定義の中の電子場、 $\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau)$  が  $\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')$ 、の少なくとも一方を含むような項につながる項だけを残せばよいことになる (連結クラスター定理)。これを記号的に添え字「 $c$ 」を使って表せば、

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = -\langle T_\tau [S(\beta, 0) \psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')] \rangle_{0c} \quad (23)$$

ということになる。そして、 $G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_p)$  はこのフーリエ変換である。

## 1.9 骨格図形

そこで、式 (23) に式 (20) で与えられる  $S(\beta, 0)$  を代入し、その指数関数部分を  $H_1$  の次数で展開すれば、 $G$  の摂動展開級数が組織的に得られる。具体的には、0 次の項  $G^{(0)}$  は  $G_0$  そのものであり、また、1 次の項  $G^{(1)}$  は

$$G^{(1)} = G_0 \Sigma_H[G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F[G_0] G_0 \quad (24)$$

である。ここで、 $\Sigma_H[G_0]$  や  $\Sigma_F[G_0]$  は式 (16) や式 (17) で定義されたハートリー項  $\Sigma_H$  やフォック項  $\Sigma_F$  で、 $G$  の代わりに  $G_0$  を用いて計算される量であり、ファインマン・ダイアグラムでは図 2 の (1) で表現される。

次に、2 次の項  $G^{(2)}$  は図 2 の (2) で定義されている直接項  $\Sigma_{2a}[G_0]$  や交換項  $\Sigma_{2b}[G_0]$  を用いれば、

$$\begin{aligned} G^{(2)} = & G_0 \Sigma_{2a}[G_0] G_0 + G_0 \Sigma_{2b}[G_0] G_0 \\ & + G_0 \Sigma_H[G_0 \Sigma_H[G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H[G_0 \Sigma_F[G_0] G_0] G_0 \\ & + G_0 \Sigma_F[G_0 \Sigma_H[G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F[G_0 \Sigma_F[G_0] G_0] G_0 \\ & + G_0 \Sigma_H[G_0] G_0 \Sigma_H[G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H[G_0] G_0 \Sigma_F[G_0] G_0 \\ & + G_0 \Sigma_F[G_0] G_0 \Sigma_H[G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F[G_0] G_0 \Sigma_F[G_0] G_0 \end{aligned} \quad (25)$$

で与えられるが、式 (24) を参考にし、 $\Sigma_1[G_0] \equiv \Sigma_H[G_0] + \Sigma_F[G_0]$  と書くと、式 (25) の第 3 項以降の部分は

$$G_0 \Sigma_1[G^{(1)}] G_0 + G_0 \Sigma_1[G_0] G^{(1)} \quad (26)$$

と書き換えられることが分かるので、2 次で現れる本質的に新しい項は最初の 2 項だけということになる。そこで、この 2 つを表すダイアグラムを 2 次の“骨格図形”と呼び、その和を  $\Sigma_2[G_0]$  と書こう。ちなみに、1 次の骨格図形は  $\Sigma_H[G_0]$  と  $\Sigma_F[G_0]$  を表すダイアグラムである。

同様の考え方をより高次の項にも適用すると、一般に  $n$  次で現れる本質的に新しい項 ( $n$  次の骨格図形で表されるもの) の和を  $\Sigma_n[G_0]$  と書けば、結局、 $G$  は“骨格” $\Sigma_n[G_0]$  において  $G_0$  を  $G$  に入れ替えて“肉付け”した  $\Sigma_n[G]$  を使って、

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} G^{(n)} = G_0 + G_0 \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n[G] G \quad (27)$$



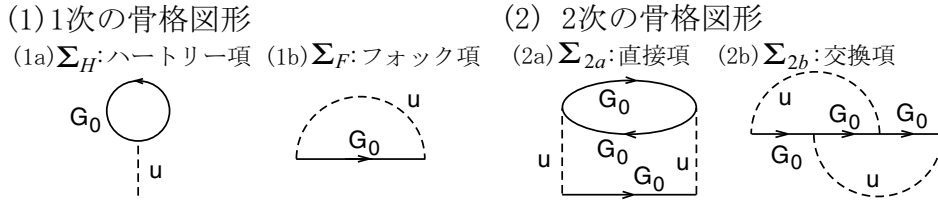


図 2: 自己エネルギーの骨格図形: (1) は 1 次、(2) は 2 次のもの。

で与えられることになる。なお、 $\Sigma_H[G]$  や  $\Sigma_F[G]$  は  $\Sigma_H$  や  $\Sigma_F$  に他ならない。

この式 (27) を式 (18) と比較すると、自己エネルギー  $\Sigma$  は

$$\Sigma = \Sigma_F[G] + \sum_{n=2}^{\infty} \Sigma_n[G] \quad (28)$$

ということになる。このように、 $\Sigma$  は (ハートリー項を除く) 肉付けされた骨格図形の全体で与えられるので、自己エネルギーの摂動計算に際しては、この骨格図形という概念が中心的な役割を演じていて、数多ある摂動展開項の中で考慮すべき必要十分な項の形と数を規定していることが分かる。

### 1.10 ラuttinger・ワード理論

この骨格図形の数 は 2 次を越えると急激に増えてくるので、それらを具体的に与えることは高次になればなるほど困難になってくる。この困難を緩和するために、ラuttinger とワードは骨格図形を作り出す “母汎関数” ともいふべき “ラuttinger・ワード (LW: Luttinger-Ward) のエネルギー汎関数”  $\Phi[G_0]$  という概念を導入した [19]。この  $\Phi[G_0]$  も摂動次数によって分類され、その  $n$  次の項  $\Phi_n[G_0]$  は汎関数微分

$$\frac{\delta \Phi_n[G_0]}{\delta G_0} \equiv \Sigma_n[G_0] \quad (29)$$

で定義される。あるいは、全く同等のことだが、

$$\Phi[G_0] = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n[G_0] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \text{tr} \left( G_0 \Sigma_n[G_0] \right) \quad (30)$$

で与えられる。ここで、トレース演算  $\text{tr}(\dots)$  においては空間座標の対角成分についての積分だけでなく、松原振動数についての和 (すなわち、 $T \sum_{\omega_p}$ ) も含むものとする。この  $\Phi[G_0]$  に含まれる 3 次までの全ての項をファインマン・ダイアグラムで書くと図 3 のようになる。

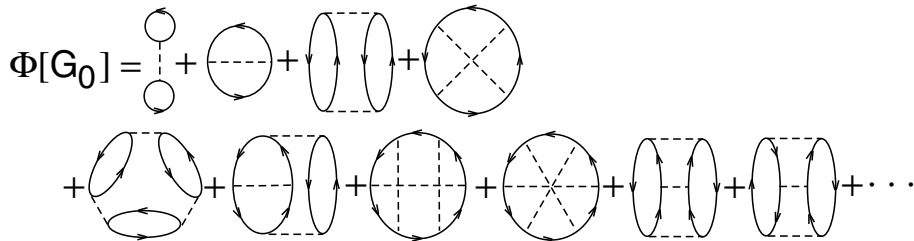


図 3: ラuttinger・ワードのエネルギー汎関数  $\Phi[G_0]$ 。

なお、 $\Phi[G_0]$  を  $G_0$  で汎関数微分するというのは、 $\Phi[G_0]$  の各項を表すダイアグラムで  $G_0$  線を 1 本取り去ることなので、たとえば、第 1 項を汎関数微分するとハートリー項  $\Sigma_H[G_0]$ 、第 2 項はフォック項  $\Sigma_F[G_0]$ 、以下、 $\Sigma_{2a}[G_0]$ 、 $\Sigma_{2b}[G_0]$  などが順に導き出せることが容易に分かる。ちなみに、 $n$

次の項には  $2n$  本の  $G_0$  線があるので、式 (30) の係数  $1/2n$  は汎関数微分の際に相殺される。いずれにしても、3次以上の高次では、 $\Phi_n[G_0]$  のように“積分形”で項の形を与える方が“微分形”である  $\Sigma_n[G_0]$  の場合よりも考えるべき項の数はずっと少なくてすむということがポイントである。

このようにして導入された  $\Phi[G_0]$  において、 $G_0$  を  $G$  に置き換えて肉付けした  $\Phi[G]$  を用いれば、自己エネルギー  $\Sigma$  は

$$\Sigma_H + \Sigma = \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n[G] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta \Phi_n[G]}{\delta G} = \frac{\delta \Phi[G]}{\delta G} \quad (31)$$

で与えられることになる。

しかしながら、この  $\Phi[G]$  を導入した意義はこれだけに止まらない。実際、この  $\Phi[G]$  が直接的に熱力学ポテンシャル  $\Omega$  を与えることが LW 理論の核心といえる。具体的にいえば、 $\Omega$  は

$$\Omega = -\text{tr} \left[ e^{i\omega_p 0^+} \ln(-G(i\omega_p)^{-1}) + G(i\omega_p)(\Sigma_H + \Sigma(i\omega_p)) \right] + \Phi[G] \quad (32)$$

であることが証明される。なお、式 (18) によれば、 $\Sigma_H + \Sigma = G_0^{-1} - G^{-1}$  であるから、自己エネルギーも  $G$  の汎関数とみなせる。したがって、式 (32) の右辺は全体としても  $G$  の汎関数となる。そこで、この汎関数  $\Omega[G]$  を  $G$  に関して汎関数微分すると、

$$\frac{\delta \Omega[G]}{\delta G} = -G \frac{\delta}{\delta G} (G^{-1} + \Sigma_H + \Sigma) - \Sigma_H - \Sigma + \frac{\delta \Phi}{\delta G} \quad (33)$$

となるが、式 (18) や式 (31) を代入すると、 $\delta \Omega[G]/\delta G = 0$  となることが分かる。すなわち、正確な  $G$  は  $\Omega[G]$  の停留点を与えることになる。

もちろん、この LW 理論は無摂動系から出発した摂動級数が収束することを仮定している（あるいは、 $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  の関数として収束半径内の領域で考えている）ことはいうまでもない。これはフェルミ流体系の正常状態を取り扱っているといってもよい。実際、この理論を発展させて、ノジュールとラッティンジャーはランダウのフェルミ流体理論の微視的な基礎付けを行った [20]。

以上の厳密な形式理論を基礎にして具体的な結果を得ようとすれば、何らかの近似を導入して  $\Phi[G]$  の汎関数形を決定し、その後、式 (31) を使って自己エネルギーの汎関数形  $\Sigma[G]$  を与え、その  $\Sigma[G]$  とダイソン方程式 (18) を連立して解くことになる。この手順は“ベーム・カダノフの保存近似”として知られているもので、全粒子数や全運動量などのマクロな保存則を自動的に満たす性質のよい近似手法であることが分かっている [21]。

## 1.11 ヘディン理論

ところで、LW 理論の  $\Phi[G]$  に近似を直接的に導入しないで、形式理論をさらに推し進めて、 $\Sigma$  に関する一連の厳密な方程式をまず書き下して、それを出発点にして具体的な結果を得ようとする立場がある。これはヘディンが提唱したものの [22] で、その理論の基礎は5つの物理量、すなわち、1電子グリーン関数  $G$ 、自己エネルギー  $\Sigma$ 、分極関数  $\Pi$ 、電子間有効相互作用  $W$ 、そして、3点バーテックス関数  $\Gamma$ 、を自己無撞着に決定する5つの方程式群である。なお、 $\Gamma$  は電子の電荷が裸の  $-e$  から多電子系で時間的にも空間的にも変化する有効電荷  $-e^*$  ( $\equiv -e\Gamma$ ) に変化する様子を記述する。

この方程式群はいろいろな方法で導出できるが、一つの方法は LW 理論で明らかになった  $\Sigma$  の構造をダイアグラムの立場から解析することである。ここではその解析を具体的に述べないが、得られる結果は図 4 に一括して示されている。このうち、第1式はダイソン方程式 (18)、第2、3、4式は、それぞれ、 $\Sigma$ 、 $\Pi$ 、 $W$  を決定する方程式である。そして、第5式は  $\Gamma$  を決めるベータ・サルベーター方程式であり、その積分核は  $\tilde{I} \equiv \partial \Sigma / \partial G$  で与えられる。この5つの方程式は  $G$ 、 $\Sigma$ 、 $\Pi$ 、 $W$ 、 $\Gamma$  のそれぞれが厳密に正確な量であるときにお互いに自己無撞着に満たすべき一群の関係式を

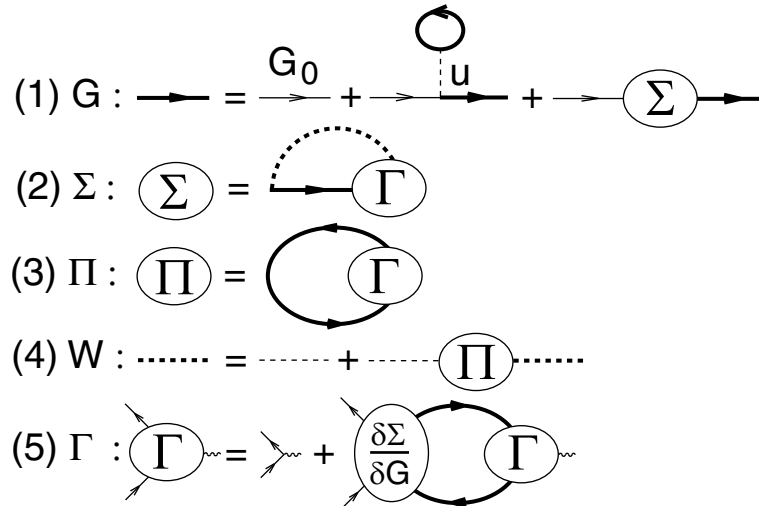


図 4: ヘディンの方程式群のダイアグラムによる表記。

与えている。しかも、この5つの量の間で閉じた関係になっており、その他の物理量が介在していないことが本質的に重要なことである。ちなみに、既約電子正孔有効相互作用と呼ばれる  $\tilde{I}$  は交換相関効果に密接に関連していて、フェルミ流体理論でいえばランダウ・パラメータに、電子液体系では局所場補正因子に対応し、“電子同士の避け合い”を定量的に記述する重要な物理量である。

### 1.12 GW 近似

元来、摂動展開をナイーブに実行すれば、その無限級数の基本変数は裸の1電子グリーン関数  $G_0$  と裸の相互作用  $u$  になる。ところが、LW 理論は  $u$  をそのまま基本変数にしているものの、1電子グリーン関数については  $G_0$  ではなく、 $G$  を採用している。これは相互作用のある系では裸の電子は実在しないが、準粒子は実在し、それを記述する  $G$  がより適切な基本変数になるとの考え方に従うものと解釈できる。しかるに、この実在性の観点からは、相互作用についても  $u$  ではなく、実際に準粒子間に働く有効相互作用  $W$  を採用すべきものと考えられる。

実際、ヘディン理論の基本変数は  $G$  と  $W$  と見なせる。そして、準粒子間の相互作用は一般に弱いと期待される（そもそも、そうでなければ準粒子がよく定義された実体であり得ない）ので、 $u$  を  $W$  に代えると無限摂動級数の収束が加速されるという利点がある。したがって、たとえ  $W$  の最低次近似で図4の5つの方程式を解いたとしても良好な結果が期待されそうである。

この最低次近似では  $\Gamma = 1$  と選ぶので、 $\Sigma = -GW$  となる。この  $\Sigma$  の近似形を指して“GW 近似”と呼んでいる。物理的には、この近似は HF 近似の一般化であり、裸の相互作用  $u$  ではなく、動的に遮蔽された有効相互作用  $W$  を使って（相関効果を含む）交換項を考えることである。そして、これによって HF 近似を金属に適用した場合の非物理的な困難点（たとえば、フェルミ準位での有効質量がゼロになることなど）が回避できる。

ベウム・カダノフの保存近似の立場から見ると、 $\Phi[G]$  として図3の第2、3、5番目などの各次数のリング型のダイアグラムだけを無限次まで全て選択した近似に対応するので、この GW 近似の  $\Sigma$  をダイソン方程式と連立して自己無撞着に解いて得られる結果はマクロな保存則を全て満たすことになる。

近年、この GW 近似に沿った数値計算が第一原理系に忠実な立場で盛んに行われている [23]。もっとも、実際の計算では  $G$  を自己無撞着には決めずに  $G_0$  のままで  $\Pi$  や  $\Sigma$  を評価する（これをワンショット GW 近似、あるいは、 $G_0 W_0$  近似と呼ぶ）場合が多い。そして、実験との比較では、保存近似である GW 近似よりも却って  $G_0 W_0$  近似の方がずっとよい結果を与えることが知られていて、

その理由を巡って、長年、いろいろな意見が出ていた。

### 1.13 GWT 法

ところで、電磁相互作用では局所ゲージ変換不変性が成り立つ。そして、その不変則からは局所的な電子数保存則が導かれ、それをグリーン関数法の言葉に翻訳すると、 $\Sigma$  と  $\Gamma$  の間に成り立つワード恒等式 (WI: Ward Identity) に結びつく。しかるに、 $\Gamma = 1$  にもかかわらず  $\Sigma \neq 0$  である GW 近似はこの WI を満たさないで、これは (マクロな保存則を満たすものの、ミクロには電子数保存則を満たさない) 非物理的な近似理論といわざるを得ない。

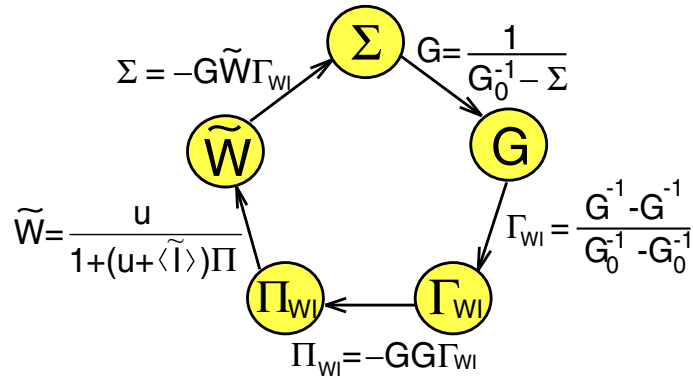


図 5: パーテックス補正を含む自己エネルギーの自己無撞着な決定スキーム。

そこで、この問題点を解消すべく、WI を常に満たす形で  $\Sigma$  と  $\Gamma$  を自己無撞着に決定する計算スキームが発表され [24]、GWT 法と名付けられた。(この方法は模式的に図 5 に示されているが、詳しくは原著論文を参考にされたい。)そして、半導体や絶縁体のようにエネルギーギャップがある系にこの GWT 法を適用すると、その準粒子の分散関係は  $G_0 W_0$  近似の結果にほぼ厳密に一致することが解析的に示された。これは  $\Sigma$  と  $\Gamma$  の高次の項の間に大規模な相殺があることを明瞭にしたもので、この相殺効果によって  $G_0 W_0$  近似が GW 近似よりも実験によく合うようになっていたことが分かった。

なお、金属ではこのような相殺効果は完全ではなくなり、GWT 法の結果は  $G_0 W_0$  近似のそれから (特にフェルミ準位近傍では) 大きく違ってくる。とりわけ、1 次元金属にこの GWT 法を適用すると、GW 近似とは異なり、朝永ラッティンジャー (TL: Tomonaga-Luttinger) 流体 [25] が正しく記述されることは特筆に値する。この事実は、TL 流体からフェルミ流体へのクロスオーバーも含めて、GWT 法は準粒子像の適否を客観的に判断する材料を与える大変に優れた理論手法であることを示している。

### 1.14 さいごに

以上、駆け足であったが、多体摂動論をそのごく基礎から最前線まで解説した。もちろん、12 ページ程度の紙幅でこれを完全に解説することなどははじめから不可能なことは分かっているが、全体の大きな流れを理解して頂ければ幸いである。なお、この理論を理論物理学の立場から詳しく深く学びたい読者には、拙著「多体問題」(朝倉物理学大系 9 巻、1999 年)、および、「多体問題特論」(朝倉物理学大系 15 巻、2009 年)を推薦する。2 冊合わせて約 750 ページに至る分厚いものであるが、本解説はその内容のハイライトを 12 ページに圧縮したものである。

## 参考文献

- [1] ウロポロスに関しては、須藤靖、「ものの大きさ」(UTPhysics 1、東京大学出版会、2006年) 77-79 ページ参照。
- [2] 本稿では、簡単のため、 $\hbar = k_B = 1$  と取る。
- [3] P.-O. Löwdin, *Adv. Chem. Phys.* **2**, 207 (1959); 原田義也、「量子化学」(裳華房、2007年) は量子化学の諸手法を論じた最近の教科書である。
- [4] B. L. Hammond, W. A. Lester, Jr. and P.J. Reynolds, *Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry* (World Scientific, 1994); W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001).
- [5] たとえば、高田康民、「多体問題」(朝倉物理学大系 9 巻、1999年) 85-89 ページ参照。
- [6] R. Jastrow, *Phys. Rev.* **98**, 1479 (1955).
- [7] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
- [8] E. Feenberg: *Theory of Quantum Fluids* (Academic, NY, 1969).
- [9] S. Fantoni and S. Rosati, *Nuovo Cimento* **25**, 593 (1975).
- [10] S. F. Boys and N. C. Handy, *Proc. Roy. Soc. A* **309**, 195; 209; **310**, 43; 46; **311**, 309 (1969).
- [11] F. Coester and H. Kümmel, *Nucl. Phys.* **17**, 477 (1960).
- [12] Y. Takada, *Phys. Rev. A* **28**, 2417 (1983); *Phys. Rev. B* **35**, 6923 (1987).
- [13] G. Sandri, *Ann. Phys. (NY)* **24**, 332 (1963); E. Gozzi and M. Reuter, *Phys. Rev. E* **47**, 726 (1993).
- [14] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, 864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965); W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999).
- [15] L. D. Landau, *Sov. Phys. JETP* **3**, 920 (1956); **5**, 101 (1957); **8**, 70 (1959).
- [16] D. Pines: *Elementary excitations in solids* (Benjamin, 1963).
- [17] Y. Takada, *Phys. Rev. B* **43**, 5979 (1991).
- [18] 光電子分光実験の解説書としては、小林俊一編、「物性測定の進歩 II (シリーズ物性物理の展開)」第 3 章電子分光(藤森淳)(丸善、1996); 日本表面科学界編、「X線光電子分光法」(丸善、1998); D. W. Lynch and C. G. Olsen, *Photoemission Studies of High-Temperature Superconductors* (Cambridge University Press, 1999); S. Hufner: *Photoelectron Spectroscopy* (Springer, Berlin, 2003); W. Schülke: *Electron Dynamics by Inelastic X-Ray Scattering* (Oxford University Press, 2007).
- [19] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 1417 (1960).
- [20] P. Nozières and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **127**, 1423 (1962); J. M. Luttinger and P. Nozières, *Phys. Rev.* **127**, 1431 (1962).
- [21] G. Baym and L. P. Kadanoff, *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961); G. Baym, *Phys. Rev.* **127**, 1391 (1961).
- [22] L. Hedin, *Phys. Rev.* **139**, A796 (1965).
- [23] GW 近似のレビューとしては、F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 237 (1998); W. G. Aulbur, L. Jönsson, and J. W. Wilkins, in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich and F. Spaepen (Academic, New York, 2000), Vol. 54, p.1.
- [24] Y. Takada, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 226402 (2001); Y. Takada and H. Yasuhara, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 216402 (2002); S. Ishii, H. Maebashi, and Y. Takada, unpublished.
- [25] I. E. Dzyaloshinskii and A. I. Larkin, *Soviet Phys. JETP* **38**, 202 (1974); W. Metzner, C. Castellani, C. D. Castro, *Adv. Phys.* **47**, 317 (1998).