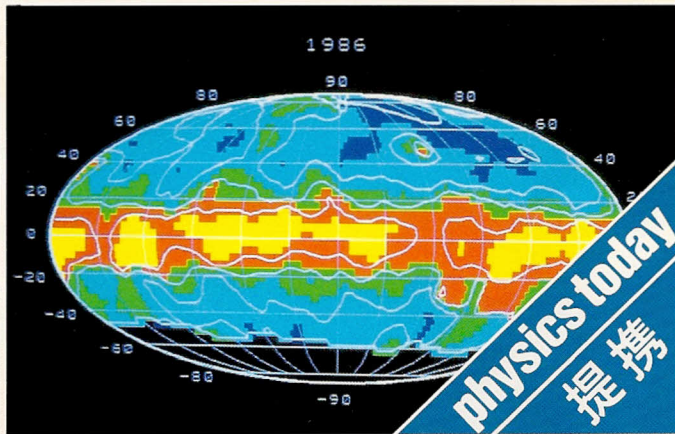
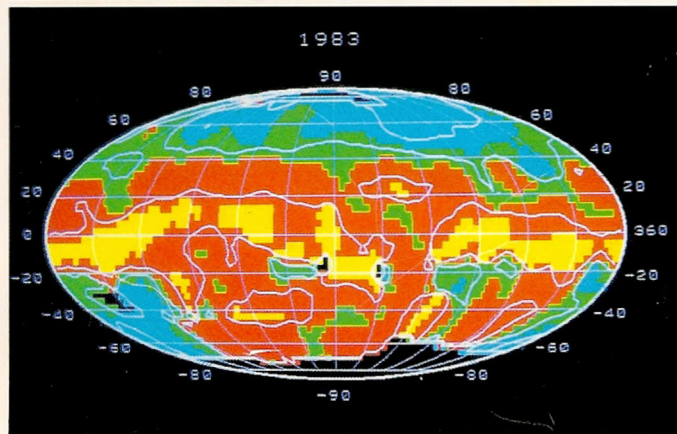
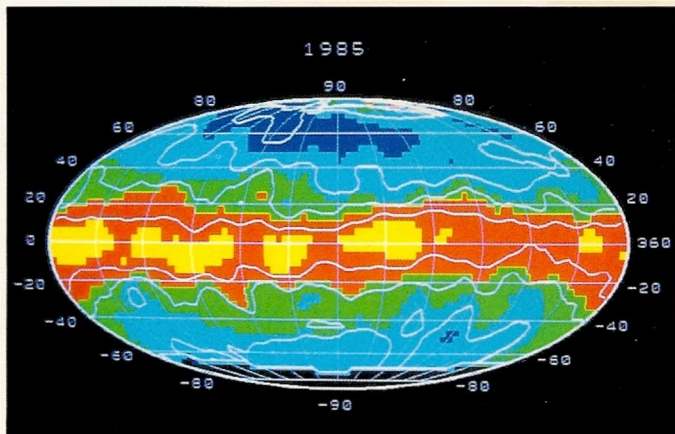
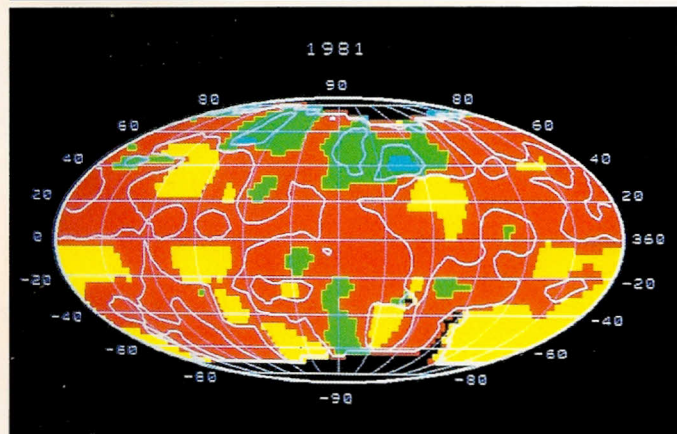
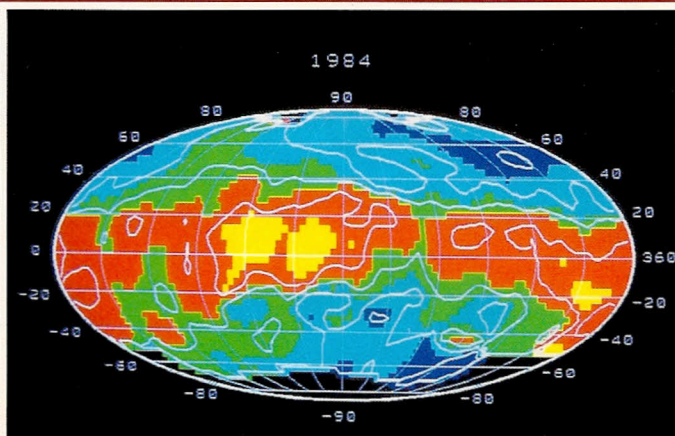
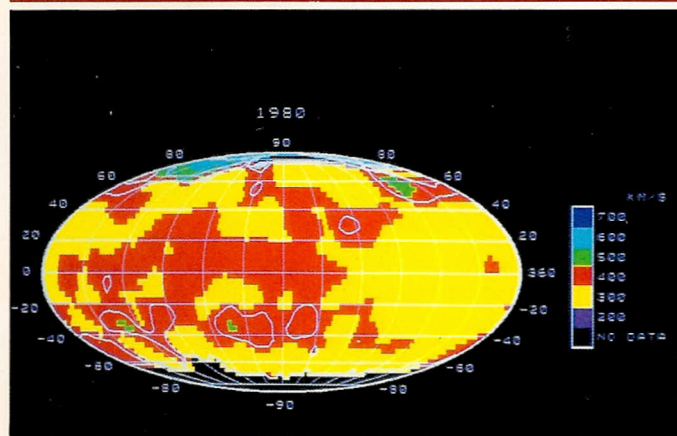


R.F. Bishop and H.G. Kuemmel
*"Confronting the Many-Body Problem:
The Effectiveness of the Coupled Cluster Method"*,
(in Japanese) *Parity* **2** (No. 12) (1987), 14–25

味覚と嗅覚の物理 | 球状星団の力学的進化

トピックス: 高温超伝導の新展開(VIII) | 多体問題への挑戦

1987年ノーベル物理学賞・化学賞 | SSC獲得レース | 高温超伝導とSSCの設計 | 泡とは何か



physics today
提携

多体問題への挑戦

結合クラスターの有効性

レイモンド・ビショップ, ハーマン・キュメル

多粒子系の波動関数をいくつかの有限な数からなる粒子群が励起される確率振幅に分解することによって、多体問題における応用の広い、高い精度の手法が得られる。

流体、固体、原子、分子、あるいは原子核といったものはすべて、明らかにそれぞれ相互作用をもつ多体系である。単一の核子でさえ多粒子系とみなされる¹⁾場合もある。なぜなら、現在、核子はグルーオンを通じて相互作用する3つのクォークから成り立っていることが知られていることはもちろんだが、場の量子論によれば、真空から多数の粒子が仮想的に励起されている可能性があると考えられているからである。〈表1〉に、われわれが実際に出会う、数センチメートルから数フェルミの尺度にある多粒子系をいくつか掲げておく。これからの系のほとんどがもっている性格なのだが、たとえば固体における超伝導や、原子核の分裂などのように、系の構成物質とその間の相互作用がわかっているだけでは理解できず、何か新しい概念か考え方を導入して始めて解釈できるといった現象がよくある。多体系の物理学とは理論物理学の1分野であるが、とくにある多粒子系について、ひとまず“素”とみなされる構成物質と、その間に働く相互作用から出発して、この系に生じる新しい、あるいは“自然発生的な性質(emergent properties)”とでもいうべき現象を研究する学問である。同時にまた、多体系に特徴的な性質を記述するための精密な計算方法を提供し、その答と実験値の比較から、理論で仮定しておいた構成物質の性質や相互作用などを検証することを目的にしている。

量子力学的多体論の最初の基礎が築かれたのは、量子力学が定式化されてまもなくディラック(Paul A. M. Dirac)とハイゼンベルク(Werner Heisenberg)が各々発表した、多数の

同一粒子から成る系の波動関数のもつ対称性に関する論文によってであった。それ以来、さまざまな専門分野の物理学者たちによって、量子的多体系の性質を近似的ではあるが、信頼性のある予測値を算出する種々の方法や技術が開発されている。15ページのかこみ記事にこういった技法のいくつかをあげておいた。このかこみ記事に掲げているものは、最初開発された時点では、ある特別な状況や問題を対象としていたけれども、のちにより、一般的な内容をもっていることがわかった例のみを集めてある。実際のところ、これらの技法は多体問題を取り扱うための“理論物理学の工具箱(toolbox of theoretical physics)”の中の道具とでもよんでみたい。なぜならこれらの方法は、構成粒子の間に働く相互作用が知られていさえすれば、どんな多体系のいかに問わず使えるからである。

ここでは、量子的多体系に対する1つの手法である結合クラスター法(coupled cluster method, CCM)を紹介することにする²⁾。この方法は量子化学から原子核物理にいたる幅広い範囲にわたって、非常に有効であることが確かめられている。CCMにおいては、量子多体系の波動関数を、いくつかの粒子からなるいろいろな粒子群(クラスター)が励起されることに対応する確率振幅に分解した形で表現する。こういった分解は物理的に見て理解しやすい形になっているので、この手法を用いて実際の計算をするさいに、ある近似が導入されることがあるが、これらを系統的に改善していくことが可能になる。〈表2〉でこれらのいろいろな“道具(tool)”を、それぞれの(1)適用範囲、(2)相互作用のいろいろな

小玉 剛 訳

The coupled-cluster method

Raymond F. Bishop and
Hermann G. Kümmerl

Raymond F. Bishop is reader in theoretical physics at the department of mathematics of the University of Manchester Institute of Science and Technology, Manchester, England. Hermann G. Kümmerl is professor of physics at the Institute for Theoretical Physics, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, West Germany.

© 1987 American Institute of Physics

系	粒子	相互作用	無限系
分子の集合 希ガス原子の集合	たとえば CO ₂ 分子 たとえば He または Ar 原子	ファン・デル・ワールス力(斥力コアと引力の尾) ファン・デル・ワールスなどの原子間相互作用ポテンシャル	気体, 流体, 分子結晶系 希ガス流体, 結晶系
金属原子の集合 原子および分子 原子核	たとえば Na, または Ag 原子 電子と原子核 アルファ粒子(A=2Z)	原子間相互作用ポテンシャル クーロンポテンシャル 現象論的な 2 体ポテンシャル(斥力コアと引力の尾); 時に 3 体ポテンシャル	金属結晶系 無限のトーマス-フェルミ原子 アルファ物質
	核子 核子と中間子	同上 中間子交換力	“標準的”な核物質 “バリオンと中間子のスープ”とみた核物質
核子とその他のハドロン	クォークとグルーオン クォークとグルーオン	QCD からのヒント QCD	クォーク物質 それ自体

〈表 1〉 多体系の例

形や、系の密度の範囲が異なる場合の対応性の良さ、そして(3)精度について比較しておく。この表で明らかなように CCM はボース粒子系にでも、フェルミ粒子系にでも、相互作用の形や到達距離に無関係に、系の基底状態あるいは低い励起状態に対する結果を高い精度で得ることができる。だから、この手法は多体問題に対する普遍的な方法と考えてよい。ただし今のところ、まだ CCM の標準的な計算法が実質的にまったく役に立たなくなるケース(たとえば、2 粒子間に、ある程度の近距離内で強い斥力があり、その外では長い到達距離をもつ引力の尾をひくような相互作用をもつ系において、非常に密度が高い場合など)もあるが、われわれは近い将来こういった困難も打開されるものと信じている。次にこの方法で得られたいくつかの例における結果を論議し、他の方法で得られたものと比較検討してみることにする。

高精度のテクニク

今日、われわれは量子力学の正当性を信じているが、その正当性の基盤は一部、われわれが複雑な原子とか分子の系に対する多体シュレーディンガー方程式を実際に解くことができ、なおかつ、得られた結果(たとえばエネルギースペクトルなど)を実験の測定値と精密に比較することができるということにある。こういった理論値と実験値の比較や検討は科学を進めていく上で不

可欠なことである。多体系物理学において、どういった比較をするにしても、その比較が無意味でなく、計算による不確定性がないことを保証するためには、その計算に使った方法が高い精度をもっていることが要求される。この要求はしばしばほかのいろいろな条件、たとえば方法が使いやすいとか、近似的な数値計算における計算機の使用時間の削減といったことよりも重要なことがある。

多体問題の計算で、たとえば量子化学においてどの程度の精度が必要になるのかを見るためにエチレン分子を考えてみよう。この分子のエネルギーの

最良の見積値は、配位-相互作用法を使って得られた -78.35451 ハートリー(hartree)であるのに対し、多体問題の一番簡単な近似法であるハートリー-フォック法(Hartree-Fock approximation)では -78.04520 ハートリーとなる(ハートリーは e^2/a_0 と定義され、おおよそ 27.2 電子ボルトの値をもつが、原子内の電子のエルギーをはかる自然な単位として用いられる)。実験的に計測する量は、化学反応における放出、または吸収のエネルギーなどであるが、これらはこの分子の全エネルギーのほんの少しの部分でしかない。だから、この正しい見積値とハー

多体問題の理論屋の道具箱

モンテカルロによるグリーン関数の方法: N 体のシュレーディンガー方程式を、ランダムな確率変数を使ったシミュレーションにより直接解くもの。一般には粒子数 250 以下くらいのものに使われる。

時間に依存しない摂動論: 結合定数についてのべき級数展開が得られ、ゴールドストーン図形が導かれる。最終的には、重要でないと思われる項や、計算できないような項を捨てることになる。

グリーン関数の方法: 時間依存する摂動論を書き直したもの。最終的には結合定数のべきで展開せざるをえない。体系内の粒子群の伝播を記述する行列要素の時間発展に対する方程式の形で定式化されており、ファインマン図形を導びく。

変分法: 試行関数(普通はジャストロウ(Jastrow)型)のを使ってエネルギー期待値 $\langle H \rangle$ を計算する $\langle H \rangle$ を直接勘定する種々の技法あり。(たとえば、モンテカルロ法または、hypernetted chain 近似など)

相関をもつ基底関数の方法: 変分法を系統的に改良するもので、初めから至近距離における相関をくり入れておくことが可能。

配位-相互作用法: 多体系の全ヒルベルト空間内のある有限の部分空間をとり、そのなかでハミルトニアンを対角化するもの。

結合クラスター法: 本文参照。CCM の基本方程式を逐次代入していけば時間に依存しない摂動論に帰着するが、CCM 方程式を解くにはこうする必要はない。

	GFMC	TIPT	GF	VAR	CBF	CI	CCM
主な応用範囲							
原子	(●)	●		●		●	●
分子	(●)	●		●		●	●
固体		●	●		●		(●)
気体	(主にボース系)		●	●	●		●
流体	(主にボース系)		(●)	●	●		拡張されたやり方で
原子核		●	(●)	●	●		●
素粒子			●				(●)
適応性							
取り扱える相互作用の形	単純 (状態依存性のほとんどがないもの)	弱いもののみ (または弱い力のコアの外側に中距離の弱い力をもつもの)	すべて	単純 (状態依存のほとんどないもの)	すべて	ソフトなもののみ	すべて
密度範囲 (ある相互作用を決めたとき)	広い	狭い (相互作用が近距離, または中距離ならば中程度)	中程度	広い	広い	中程度	中程度 (拡張されたやり方では広い)
中程度の難易度の相互作用で与られた計算時間内で求められる精度	高し	低い (項の和を足しかえたものでは中程度)	中程度 (QEDでは高い)	中程度	中程度	中程度	高し
本質的に正解が求まる量	● 基底状態	● 基底状態	● S-行列, 和則	● 基底状態	● 基底状態, 低励起状態	● 基底状態, 低励起状態	● 基底状態, 低励起状態, 和則
GFMC: モンテカルロによるグリーン関数の方法 TIPT: 時間依存しない摂動論 GF: グリーン関数の方法 VAR: 変分法 CBF: 相関をもつ基底関数の方法 CI: 配位-相互作用法 CCM: 結合クラスター法							

〈表2〉 多体問題の道具

トリー-フォック近似の差にあたる0.30931 ハートリーという値は、相関エネルギーといわれているが、非常に大事な役割をもっていることになる。一例として水素とアセチレンからエチレンをつくる際の熱はたったの 66.99 ± 0.4 ミリハートリー (1 ミリハートリーは1モル当り0.627キロカロリー)でしかない。かくして、分子エネルギーの近似計算というものは相関エネルギーを勘定に入れた上、全エネルギーの0.01%以内の精度の結果を出さなければならないのである。

高い精度の計算が必要であること理由として、今述べたように、実験値との比較が無意味にならないように、理論値が十分な精度をもたねばならないということもあるがまた別の側面もある。つまりある理論の予言値を実験でテストして、これがずれていることがわかった場合、これからその理論では考えられない、何か新しい効果とか現象が存在しているのだということがいえるようであればならない。電子

と光子の量子場の理論である量子電磁力学は、ほかのどんな理論よりも精度の高い値を算出することができるけれども、これは高精度計算のもつ意味を示す、非常によい例である。この理論は、いろいろな発散という問題を内包していて、それはくりこみというめんどろな手続きでしか消せない。それにもかかわらず、一例としては電子の異常磁気モーメントについて1千万分の1以下まで理論値と実験値をびたりと合わせており、こんな精度はこの理論の正しさを議論の余地のなく示す証明と考えられている。

結合クラスター法の歴史は、この数十年における理論物理学の発展の一面をよく反映している。これが原子核物理学で最初に使われたとき³⁾は1957年という比較的早い時期であったにもかかわらず、長い間この手法は明確にされないまま見すごされてきた。現在の知識をもってすれば、あの時点においてはまだ核力の性質がよく解明されていなかったこともあり、CCMによ

ってはじめて可能な高精度の計算などは当時の最先端でも必要でもなかったからだとということがわかる。実際、当時、原子核の性質を論議するさい、核力を単純な線形近似から脱してその非線形性による相関の影響を考慮したものとしては、ブルックナー(K. A. Brueckner)の自己無撞着理論⁴⁾が唯一の例として上げられるのみである。しかし、量子化学の分野では事情はおおいにちがっていた。分子構造や結合エネルギーを、量子力学による微視的な計算によって正確に決定することは、化学結合の量子論の発展以来、量子化学者にとって最重要な問題であったのである。これらの量子化学者たちは原子核物理で考案されたCCMを応用していろいろな形に発展させていった⁵⁾。この方法で得られた量子化学におけるさまざまな結果をずっと見てくると、CCMをこのように発展させた量子化学者たちの業績はどんなに高く評価されてもよいと思われる。以下にCCMが成巧裡に使われた凝縮物質の

問題のいくつかを論議していこう。なおこの手法は最近になって場の量子論においても適用されている。誤解をさけるために最初から強調しておくが、CCMは決して単に閉殻構造をもった量子系の基底状態のエネルギーのためだけの理論ではない。たしかにこの理論が最初に考案されたのはこういった場合についてであったし、この解説でもそのような例のみをとりあげるが、これは単に解説をわかりやすくするためのものと理解していただきたい。

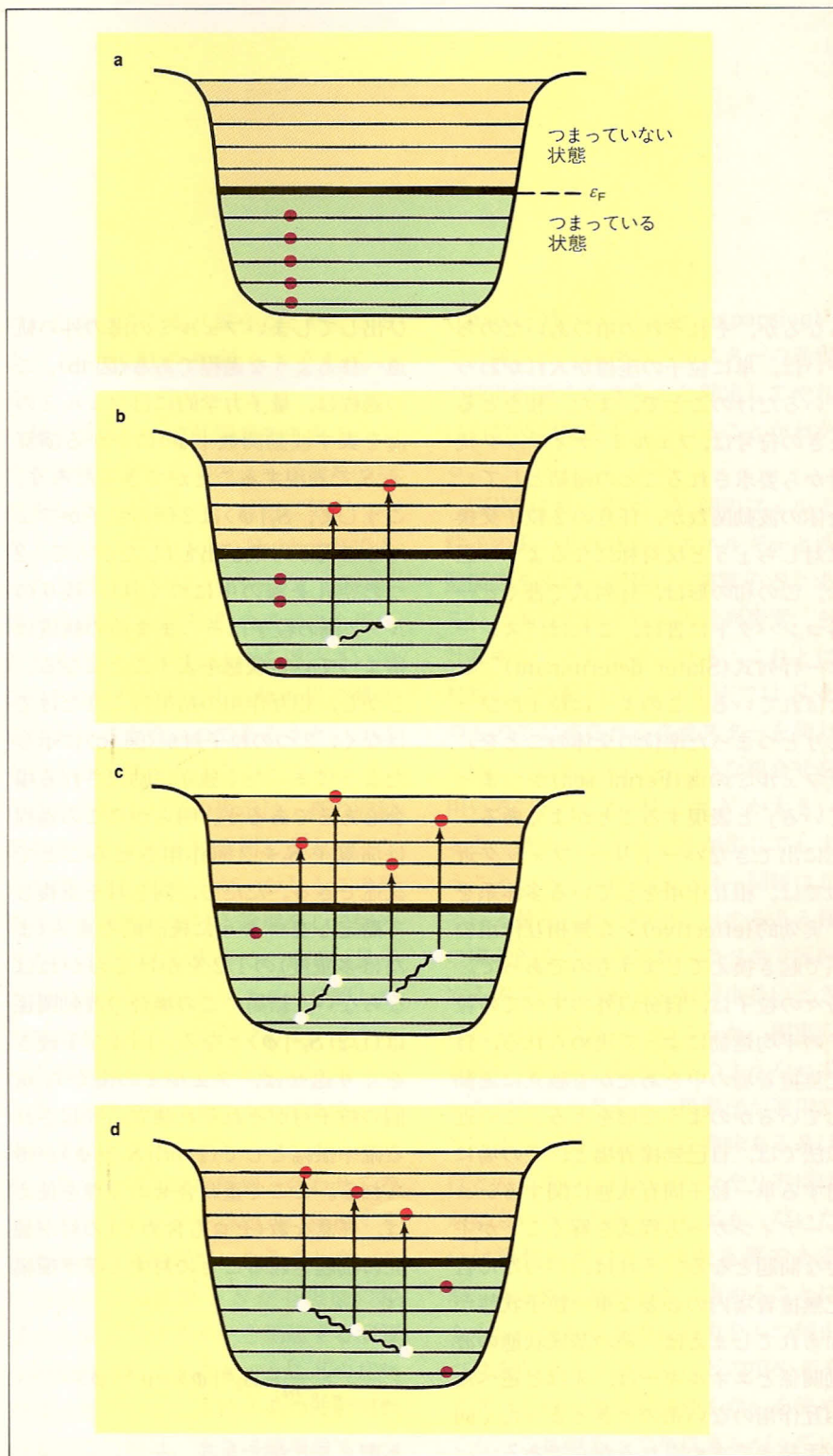
基底状態に対するCCM

量子力学的ハミルトン演算子 H で記述される相互作用をもつ、 N 個のフェルミ粒子系の基底状態の波動関数 $|\Psi\rangle$ とエネルギー E を求める問題を考えよう。いいかえれば、時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1)$$

の最小固有値 E とそれに対応する固有関数 $|\Psi\rangle$ を求めたい。ここでのわれわれの目的は、要するにCCMの基本的な考え方を論議することにあるのだから、以下に示すようにフェルミ粒子系の基底状態の波動関数をどうやってきちんと求めるかさえやっておけばよいであろう。同様の考え方は、低い励起状態を求めること、外界からの摂動に対する動的な応答、そして応答関数の和則を求めることなどへ拡張されている。

もし多体系内でフェルミ粒子が互いに相互作用をしないと仮定してみよう。このとき、多体の波動関数に対する唯一の制約はパウリの排他原理であって、これによれば各々のフェルミ粒子は各々異なった単一粒子状態に配位されなければならない。こういった単



純化された描象の場合、 N 個の粒子の基底状態は、〈図 1a〉に示すように N 個の単一粒子状態を低い方から順につめていくことによって得られる。系の全体の波動関数は“粒子がつまっている状態 (occupied states)” の一体波動関数のいろいろな形の積をたし合わせたものとなる。この和は、 $N!$ の項か

〈図 1〉 多体系のエネルギー準位を図式的に示したもの

(a)はつまっているフェルミの海の状態、(b)は 관련된 1 対の粒子の組がフェルミの海から励起された状態、(c)では 2 組の対が独立に励起されたもの、(d)は 3 体のクラスターが励起された状態を示す。多数子波動関数は、CCM ではこういった有限の粒子から成るクラスターが励起される確率を考慮して合成される。

らなるが、それぞれの項のあいだのちがいは、単に粒子の座標が入れかわっているだけのことで、また、和をとるときの符号は、フェルミ-ディラック統計から要求されることの帰結として、全体の波動関数が、任意の2粒子交換に対しちょうど反対称になるように選ぶ。この和の形は、行列式で書くと一番コンパクトに書け、これは“スレーター行列式(Slater determinant)”とよばれている。このように粒子がびつしりとつまった準位の全体のことを、「フェルミの海(Fermi sea)がつまっている」と表現することがよくある。先に出てきたハートリー-フォック近似では、相互作用をしている多体系を“実効的(effective)”な無相互作用の系で置き換えてしまうものであって、各々の粒子は、自分以外のすべての粒子の平均運動によって決められる、自己無撞着場の中をあたかも独立に運動しているかのような形をとる。この近似法では、自己無撞着場と、その場に対する単一粒子固有状態に関するシュレーディンガー方程式を解くことが主要な問題となる。それは、いったん自己無撞着場内の必要な単一粒子状態が知られてしまえば、系の基底状態の波動関数とエネルギーは、先ほど述べた相互作用のない系のときとまったく同じ手続きで求められるからである。

さて、ここで、すきまなく粒子のつまったフェルミの海という描象が、相互作用によって誘起される相関によって、どのような変化を受けるのかを考えてみたい。相互作用を導入することによって起きるものでまず第1に考えられることは、それまではフェルミの海の中でじっとしていた粒子が、2粒子間で相互作用した結果、そこから飛び

び出してしまいフェルミの海の外の軌道へ移るような過程である(図1b)。この過程は、量子力学的にはフェルミの海を表す波動関数 $|\phi\rangle$ にかかる演算子 S_2 で表現することができるだろう。こうして、 $S_2|\phi\rangle$ は2個の粒子がフェルミの海から飛び出し(したがって、2つの空孔を海の中につくり)、残りの $N-2$ 個の粒子はそのまま前の軌道に留まっている状態を表すことになる。しかし、相互作用の結果はこれだけではなく、2つの粒子対が(図1c)に示したようにまったく独立に励起される場合もあるであろう。明らかにこの過程は演算子 S_2 を2回作用させることで記述できる。ただし、同じ対を重複して勘定しないように統計的な重み(または多重度)の $1/2$ をかけておかねばならない。結局、この場合の波動関数は $(1/2)S_2^2|\phi\rangle$ となる。同様な手続きをくり返せば、フェルミの海から m 個の粒子対がそれぞれ独立に励起される確率振幅として $(1/m!)S_2^m|\phi\rangle$ が得られる。ここで重ね合せの原理を使えば、任意な数(ゼロも含めて)の対が独立に励起されることに対する確率振幅は

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} S_2^m |\phi\rangle = e^{S_2} |\phi\rangle$$

と書くことができる。

次に、(図1d)に示すような、3個の粒子の組が一度に励起されるような過程を考えよう。こういった過程は、全波動関数に $S_3|\phi\rangle$ という形で入ってくる。粒子対の励起の場合と同じように考えれば、 n 個の3つ組の粒子群がそれぞれ独立に励起されることに対応する確率振幅の寄与は $(1/n!)S_3^n|\phi\rangle$ となるはずである。さらにまた、いくつか

の粒子対と3体のクラスターが同時に励起される可能性も考えなければならぬ。再び、重ね合せの原理を使えば、 m 個の粒子対と、 m 個の3体クラスターが同時にフェルミの海から励起される確率振幅として $(1/m!n!)S_2^n S_3^m |\phi\rangle$ が得られる。ここでは演算子 S_2 と S_3 の積の順序は気にしなくてもよい。なぜかといえば、 S_2 と S_3 はそれぞれ独立な過程を記述しているため、2つは交換可能だからである。 m と n のすべての可能な値について和をとってやれば、粒子対と3体のクラスターが励起される全効果として

$$e^{S_2+S_3} |\phi\rangle$$

なる確率振幅が得られる。

この手続きを、4体、5体、…、 N 体のクラスターが励起される過程についてくり返してやれば最終的な波動関数として

$$e^{(S_2+S_3+\dots+S_N)} |\phi\rangle$$

となることがわかる。

ここまでの波動関数の議論については、いくつかの粒子の間の相互作用によって、ただ1個の粒子がフェルミの海から飛び出し、残りのものはそのままであるような過程は考えに入れていない。これはなぜかという、サウレス(David Thouless)によって証明された定理によっている⁴⁾。この定理によれば、ある与えられたスレーター行列式 $|\phi\rangle$ に対し、粒子-空孔励起を起こすような適当な演算子 S_1 を選んでやれば、 $|\phi\rangle$ に直交はしないが、その他はまったく任意の一般的な行列式型の波動関数 $|\phi'\rangle$ は必ず

$$|\phi'\rangle = \exp(S_1) |\phi\rangle$$

の形をしているのである。したがって、いい方を逆にするなら、フェルミの海から単一粒子が1つだけ励起される可能性を組み入れることは、もとのスレーター行列式の単一粒子軌道を選びなおすことに等しい。

CCM の実際の応用においては、最初の出発点となるスレーター行列式の波動関数をできるだけ本当の波動関数に近くなるようにしておくのが望ましい。こうしておけば、演算子 S_2, S_3, \dots, S_n によって誘起される相関は小さくなり、摂動論的に取り扱うことができる。このことから、単一粒子軌道はふつう、スレーター行列式と本当の波動関数の重なり合いが最大になるように選ばれることが多い。こういった条件で決めたときには、単一励起を別扱いする必要はなくなってしまう。こうして得られた N 個のフェルミ粒子系の波動関数に対する表示、

$$|\Psi\rangle = e^S |\phi\rangle \quad (2)$$

$$S = \sum_{n=1}^N S_n$$

は、相互作用について何の近似もしていないまったく一般的なものである。ただし1つだけ注意しておかなければいけないことがある。式(2)による波動関数は、出発点のスレーター行列式が本当の波動関数と少しでも重なり合いがあるときのみ、系の基底状態を表すことができる。ところが、どんなにうまく単一粒子軌道を選んでも、この重なり合いがない場合は、とりもなおさず相互作用のある系の基底状態が無相互作用の系とは本質的に異なった対称性をもっていることであって、結局、系の基底状態は式(2)からでは求めることができないのである。ただし、こ

ういったケースを取り扱うことができるように、CCM の拡張もなされている²⁾。

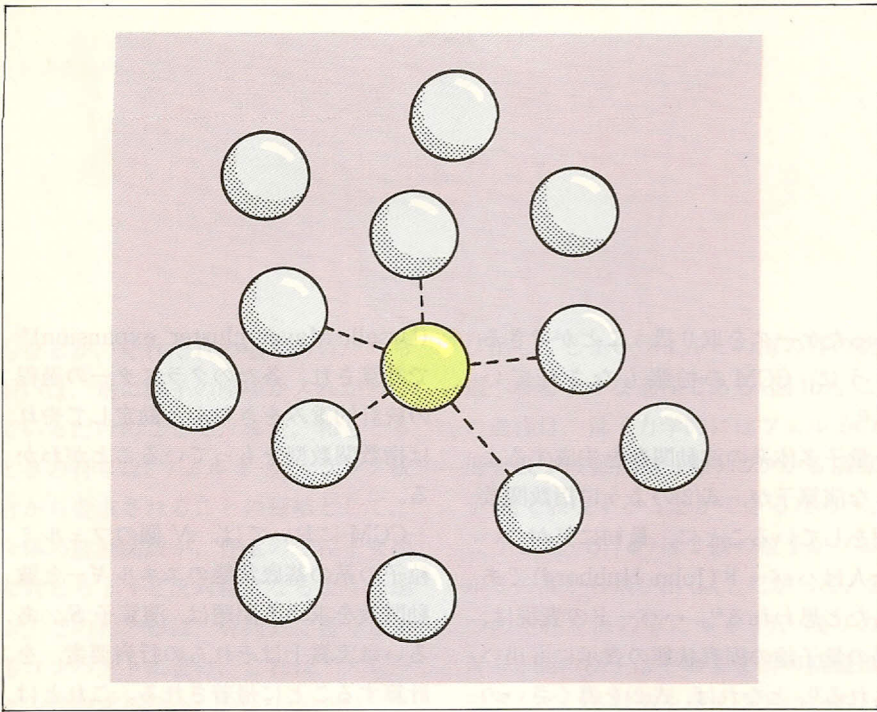
量子多体系の波動関数を生成するような演算子が、式(2)のように指数関数型をしていることに、最初に気がついた人はハバード(John Hubbard)であったと思われる⁶⁾。ハバードの表現は、場の量子論の固有状態の表示にも用いられる⁷⁾。となれば、式(2)を導くさいのCCM の物理的考え方自体も場の量子論においても役立つであろうということは十分に考えられることである。

この指数関数型の表示は、真の波動関数を完全直交系で展開したもの、とみなすこともできるが、むしろこの形を導びく過程における論理を心に留めておくことの方が大事で、式(2)は量子力学的確率振幅をクラスター分解したものと考える方が便利である。こういった解釈は、CCM を実際に応用するとき、非常に役に立つものである。さらにまた、このクラスターによる描象を、量子力学的確率解釈と合わせて考えると、スレーター行列式に作用する演算子が指数関数型になることや、その指数部分の演算子 S が有限個の粒子から成るクラスターを励起する演算子の線形の和になるということの意味がはっきりする。多粒子系の波動関数のもつこの形は、まさに確率論でいうところの、「統計的に独立な事象が起きる確率は個々の事象の確率の積である」という法則の直接の結果なのである。古典統計力学における分配関数、いわばこの量からすべての熱力学的関数が導かれるわけであるが、これもまた、大きさを指定したいろいろな独立のクラスターを調べることによって、アーセル-メイアークラスター展開

(Ursell-Mayer cluster expansion)⁸⁾で計算され、各々のクラスターの過程の統計的重みをきちんと勘定してやれば指数関数型をもっていることがわかる。

CCM においては、 N 個のフェルミ粒子の系の基底状態のエネルギーと波動関数を求める問題は、演算子 S_n 、あるいは実質上はそれらの行列要素、を計算することに帰着される。これとは対称的に、配列-相互作用法では S_n そのもので記述されるクラスターを使わないで、これらのいろいろな組合せを用いる。そのため、粒子数 N が大きいとき、数値的な不安定性が生じてしまうことがある。摂動法では、問題にしている量を、相互作用に対するある種の実効的な“結合定数”のべきで展開するので、この結合定数が小さいときに最も有効である。ところが、現実の世界では、量子電磁力学のようなわずかな例外をのぞくと、摂動法が適用できる条件を満たすような興味ある系はほとんどない。摂動論的なやり方はほかにいろいろあるけれども、だいたいは摂動級数のどの項が重要であるか、ある程度勘をもとに決めることになる。一見かなりの説得力をもつ理由づけをして「その次にはどの項やダイアグラムが一番重要に効くか」を決めても、これがあとで単にまちがっていたり、また結局同じことになるが、不完全な近似であることがわかった例がこれまでに山ほどあるのである。以下にCCM 方程式の近似解を求める方法を解説し、これを摂動論によるやり方と比べてみよう。

演算子 S_n の行列要素に対するCCM 方程式を求めるには、シュレーディンガー方程式



〈図2〉 相互作用

1つの多体系において、全系が何かの形で位相的に強く相関していないかぎり、個々の粒子は、平均すれば比較的少数の他の粒子としか相互作用しない。この図では、緑色で示した粒子がそのすぐ近傍の5個の粒子によってとりこまれている。実際の系では、このような相関したクラスターが、中心にある粒子とその外にある粒子の間の相互作用を実質的にしゃへいしてしまう。

$$e^{-S} He^S |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (3)$$

を、フェルミの海をつくっている状態と、その海から一般的な n 個の粒子-空孔をつくる状態とで張る N 体空間上に射影してやればよく、比較的簡単に導くことができる。この手続で、一連の連立方程式が得られるが、その1つずつの式は有限の項しか含んでいない。そのうち、一番最初の式は直接エネルギー E を与える。式(3)の形のシュレーディンガー方程式は、ちょうど都合の良い形をしていて、最初の式以外には、エネルギー E や、そのほかの巨視的な量に関係する項を含まないようになり、したがってこの連立方程式は、もとのシュレーディンガー方程式を、 n 体のクラスターの運動を微視的に記述するような真の分解になっているのである。これらの方程式は本質的に非線形である。相互作用が粒子の対に対してに働くような通常の場合では、演算子 S_i の行列要素の4次のべきまで現れる。また、ある S_n の行列要素に関する式は、 i が $n+2$ 以下のすべての S_i に関する式と連立している。これらの式を、形式的に相互作用のポテンシャルに関するべきについて逐次代入していくと、ただちに時間に依存しない場

合の摂動論であるゴールドストーン (Jeffrey Goldstone) による連結クラスター展開⁹⁾が得られる。ただし、ここで強調しておきたいのは、CCM 方程式を実際に解くのに何も摂動展開による必要はまったくない。むしろ、摂動展開は、CCM が解をもっている場合でも、非常にしばしば発散してしまうことがある。CCM では、摂動級数のいくつかの項を自然なグループにまとめているので、発散が現れないのである。

近似の手段

現実の多体系では正確な解が求められるような場合はほとんどない。したがって、ここまではCCMによって基底状態のエネルギーと波動関数を求める問題を、いっさい近似なしに定式化してきたが、この先、実際にCCMの連立方程式を解こうとすればなんらかの近似解法を導入しなければならない。先ほど、CCMの連立方程式から、どのように、時間に存在しない摂動論が導かれるかを述べたが、このやり方は、多体問題では、相互作用が小さいとき非常に広汎に使われる手法である。しかしながら、CCMの大きな利点は、その波動関数の物理的意味そのものが、単に数学的な便宜上の観点によるよりも、それぞれの問題の物理的なしくみに立ち入った形の近似法を導びけるようになってきていることにある。例として、ある程度低密度であるか、または相互作用が比較的弱いような系では、数個以上の粒子が同時に近づき合って相互作用しその結果、全部フェルミの海から飛び出してしまうようなことは、ほとんどないと考えて良いだろう。実質的にはせいぜい2個か3個以下といったところであろう(〈図2参照〉)。この

考え方をもとにすると、いわゆる、“自然な”またはSUB n とよばれる近似の階層系列が得られることになる。SUB n とは $n+1$ 体以上のクラスターを全部無視し、残った n 個の連立方程式をできるだけ正確に解くというものである。この方法は、原子や分子の系では、非常に有効であることが知られている。SUB2近似は、単一粒子の励起がハートリー-フォック軌道にくりこんであるとして、ハートリー-フォック近似の次の階層の近似になっているが、良く知られている次の3つの近似法をその中に含む大幅な改良となっている。

- ▶ ベーテ-ゴールドストーン近似：
多体系物質内で2つの粒子がくり返し散乱しあう過程を記述する、はしご形ダイアグラムを足し合せたもの
- ▶ これに類似のガリツキー近似：
すべてが空孔-空孔である場合、および、空孔-空孔、粒子-粒子の混ざった場合はしご形の項をとり入れるもの

▶ 乱雑位相(random phase)

SUB2近似はまた、あとの2つの場合をともに含むような項として、たとえば散乱の中間状態の効果など、をも取り入れてあることがわかる。こういった項は、粒子も空孔もともに自分自身以外の媒体による(自己無撞着な)場の中を運動していることから生じるものである。したがって、核物質や有限の大きさの原子核の計算に非常にしばしば使われるいわゆるブルックナー-ベーテ-ゴールドストーン理論はそのまま、完全にSUB2近似の中に組み込まれていることになる。単にそれだけではなく、SUB2近似は、上記の3つの近似を全部矛盾なく合せたよりも、もっと

豊富な内容をもっているのである。SUB2近似は、フェルミ統計からくる波動関数の全体の対称性を満たすようになっているため、ある種の粒子-空孔散乱を表す、はしご形の過程に対応する項をも含むことになる。このことについてのもっと詳しい事情については、読者は文献¹⁰⁾を参照されたい。

上に述べた方法以外にも種々の近似法があり、そのうちいくつかは、ある特別な場合を取り扱うためのオーダーメード的なものもある。例をあげれば、ハードコア法(HC-SUB n)とよばれ、核物理における場合のように非常に強い斥力の中心核を取り扱うためのもの、また、そのほか、固体中の電子を取り扱う場合に起きるような、粒子間の長い到達距離をもっているようなときに、非常にうまくいく方法などがある。こういったいろいろな近似法を細かく説明していくことはしないが、ただ、現在までに蓄積された多くの経験から、ある与えられた問題について、こういったCCMの近似法が最適であるかを知る目安がついているとだけいっておこう。

CCM から得られる成果

さて、CCMを使って現実の問題を解いた結果の例をいくつか紹介し、これが他の方法とどう異なるかを比較してみよう。

■量子化学

量子化学では、CCMは現在、標準的な手法の1つとみなされていて、適用可能なたいいの問題にまず第一番に試してみられるほどになっている。ここでは、こういった量子化学のあまたある問題に対するCCMの応用のうち、1つだけを選んで紹介する。Li H分子

の結合エネルギーを求める問題である。CCMの計算にはいろいろとむずかしい問題がでてくることがあるが、これらはたいていは解決できるのであって、このLi Hの例は、こういったことを示すのに非常に都合がよい。

複雑な幾何学的構造をもつ分子の場合、出発点となる行列式型の波動関数をうまく求めることさえ(たとえばハートリー-フォックの自己無撞着方程式を使ったとしても)、かなりたいへんな仕事になる。この問題を解くことは、それ自体、量子化学での主要な仕事になっているのだが、しかし、単にこれを一生涯懸命やっただけでは、 S_2 、 S_3 、…などによる相関の効果は出てこない。高精度の数値を求めることができない。たいいの場合には、相関エネルギーが小さいので、出発点の行列式さえよければ比較的直接的な摂動論によって適当に取り扱うことができる。こういったときは、CCMは、そのフルパワーを発揮する必要がない。だが、相関が大きくなったとき、効果的に働くのはCCMのみのようである。この水素化リチウムは、まずうまい出発点の行列式を求めるのが、たいへんむずかしく、どうやっても、どれかの S_n の行列要素が大きくなるような多体系の1つである。こういった系をわれわれは“検定器的な系(decisive system)”とよんでいる。LiHに対する良好な結果を見て、読者がCCMの本当のパワーについて納得してくれることを期待しているわけである。

電子間に働くクーロン力は短距離で特異点を持ち、波動関数はここで尖った点をつくってしまう。こういった力の場合には、また、CCMの方程式を展開するのに用いる単一粒子軌道の基底を

選ぶのに特別な注意を払わなければならない。ふつうの量子化学の問題では、一般に、単一粒子軌道の完全系として、そのうちの最も低いエネルギー状態のいくつかでスレーター行列式自身をつくるように選ぶ。しかし、こうすると、波動関数の特異な尖った点は少々の単一粒子軌道で展開して表すというわけにいかないで、CCMの方程式の解が数値的に不安定になってしまうことが多い。この問題をさけるために、最近ではあらわに相関を含んだ関数で単一粒子軌道を置き換えてしまうテクニックを用い、これはジェミナル(geminal)展開とよばれている。典型的なジェミナルは、単一電子軌道の対の積に、2電子間の距離に依存する(通常はガウス型)の因子をあわせて積をとるものである。このようにして基底をとり替えてやれば、クラスターの振幅を欲しい精度で求めるために必要な項の数を桁がちに減らせる。したがって計算時間も減ることになる。もっとも、ジェミナル基底は複雑なので、項の数が減るほどには計算時間が減るわけではない。以下に述べるLiHに対する結果はジェミナル基底を用いて得られたもの¹¹⁾である。

SUB2近似レベルのCCMによると、LiH分子の結合エネルギーは、8.06867ハートリーとなるが、真の値(最良の実験値と最良の理論的見積り値による)は 8.07036 ± 0.0001 ハートリーである。ハートリーフォックのエネルギーはこのうち7.98716ハートリーであるから、相関のエネルギーは-83.2リハートリーで、CCMはこの値に対したったの1.69ミリハートリーしか狂っていない。つまり、CCMはSUB2レベルですでにミリハートリー程度の

精度までこぎつけるわけである。初めに述べたように、こういった精度を得ることが、量子化学の最終目的なのである。なお、計算を系統的に改良しようと思えば、高次の S_n による相関を順次くり入れていきさえすればよいのである。

CCMの計算がどのくらい計算機使用時間をとるのか再びエチレン分子の例をとってみよう。この系も前に述べた意味で検定器的な系である。炭素原子間の距離を、平衡点から50%程度増やしてやると、原子配位が平面的なものから、振じれた非平面的なものへと変わる。ということは、この系は平衡状態においても、ほぼ縮退していて、2つの異なったスレーター行列式が互いに張り合っていることを示す。この分子に対しては、百万以上の配位を用いて配位-相互作用法で遂行した、基準とでもいうべき計算があり、当然のことながら相当な計算機時間を使用して得られたものである。前にこの計算による非常にすばらしい値をあげておいた。だが、CCMを使うと、これと実質的に同程度の精度を大まかにいって10分の1の時間で求めることができるのである¹²⁾。こういった例は、今では量子化学の分野でまったく一般的になっている。もちろん、同じだけの計算時間をCCMにを使えば、配位-相互作用法の精度を大幅に上回る精度が得られることはいうまでもない。逆に、たとえもし計算時間をさらに10分の1にしても、CCMはまだ十分よい結果を求めることができるであろう。

■原子核物理

CCMが、核物理の問題を解くのにいかに有効であるか、すでに正確な解が求まっている1つの問題を取りあげて

述べてみたい。マルフリエ-ジョン(Malfliet-Tjon)V型とよばれる純粋な中心力で核子間の相互作用を記述した(したがって粗っぽく単純化しすぎてはいるが)アルファ粒子の模型を考える。アルファ粒子内の4つの核子は、それぞれ異なったスピン-アイソスピン状態になければならないので、あたかもボース粒子として考えてよく、これらの粒子は前述の状態依存しない力の場を運動しているとする。こういった特別の場合は、4体のシュレーディンガー方程式を、モンテカルロを使ったグリーン関数の方法で解くことができ、本質的に正確な答を出せる。モンテカルロ法に付随する統計的誤差も、原理的には好きなだけ小さくすることが可能なので¹³⁾、この方法で求めた答は正確な答を示す基準と考えられる。

23ページのかこみ記事に、このモンテカルロによるグリーン関数の方法で求めた“真の”答と、前節に述べた近似階層の第2、第3のレベルに当る、HC-SUB2とHC-SUB3を比較してある。また、1つの古典的な変分計算の結果も示してある。変分法は、ある程度正確で、また、計算機で実行するには有力な手法であるが、高精度のテクニックとはいいがたい。このかこみ記事にあげた近似値を変分法で改善しようとするれば、相関をもつ基底関数の技法を使わなければならないと実行上たいへん困難になり、計算時間も急増してしまうからである。このほかに、量子的な4体問題を形式的には正しく解く手法がいくつかあることをいっておくべきかもしれない。ただし、これらの方法は今のモデルに応用されたけれども、エネルギーが基準値の-31メガ電子ボルトに対し、たったの-28メガ電

結合クラスター法の結果

この表で、(1)アルファ粒子のエネルギー、(2)電子ガスの相関エネルギー、(3)非調和振動子のエネルギー準位、についての結果をまとめておく。どの場合にも CCM の答は実に良好であるが、これは多くの仮想励起状態(おそらくは集団運動の)が取り入れられているためである。

手 法	エネルギー (メガ電子ボルト)	物質半径	時間 (秒)
モンテカルロによるグリーン関数の方法	-31.3±2	1.36±0.01	3600
結合クラスター(HC-SUB2)	-30.24	1.41	20
結合クラスター(HC-SUB3)	-31.24	1.36	300
変分法	-30.7	—	30

原子核物理

下の表とは、アルファ粒子のエネルギー E と、物質半径 r_m をマルフリエーション V 型とよばれるポテンシャルを使っていろいろな方法で計算したもの。それぞれの方法は本文には述べてある。“時間”と書いてある項は、大型計算機(CDC7600)で実行するさいにかかる時間の目安である。

手 法	結合定数 r_s				
	1	2	5	10	20
モンテカルロによるグリーン関数の方法	-120	-90.2	-56.3	-37.22	-23.00
結合クラスター(SUB4)	-122	-90.4	-56.0	-37.0	-23.6

電子ガス

3次元電子ガスの相関エネルギーを、無次元結合定数 r_s (本文中に定義してある)のいろいろな値について、結合クラスター法とモンテカルロによるグリーン関数の方法を用いて計算したものを比較する。エネルギーはミリリュードベリで与えてある。

非調和振動子

結合定数 λ が正で 1000 以下の場合の 4 次の非調和振動子の基底状態と最初の 2 つの励起状態のエネルギーを、結合クラスター法で求めたときの、真の解からの最大誤差を示す

- ▶ 真空 $|0\rangle$ について標準的な CCM の SUB4 を用いたとき、すなわち $|\Psi\rangle = e^S |0\rangle$ とした場合、誤差 3% 以下。
- ▶ 試行状態 $|\Psi\rangle = e^{S_2} |0\rangle$ から出発して、エネルギーを最少化し、さらに $|\Psi\rangle$ に SUB4 を適用したもの、すなわち $|\Psi\rangle = e^{S_2 + S_4} |0\rangle$ としたとき、誤差 0.25% 以下。
- ▶ 試行状態 $|\Psi\rangle = e^{S_2} |0\rangle$ から出発してエネルギーを最少化し、さらに、 $|\Psi\rangle$ に対する自明の基底で定義された 3×3 の行列を対角化すると誤差は 1% 以下。
- ▶ 試行状態 $|\Psi\rangle = e^{S_2} |0\rangle$ から出発して、エネルギーを最少化し、さらに $|\Psi\rangle$ に対する自明の基底で定義された 10×10 の行列を対角化すると誤差は $10^{-4}\%$ 以下。

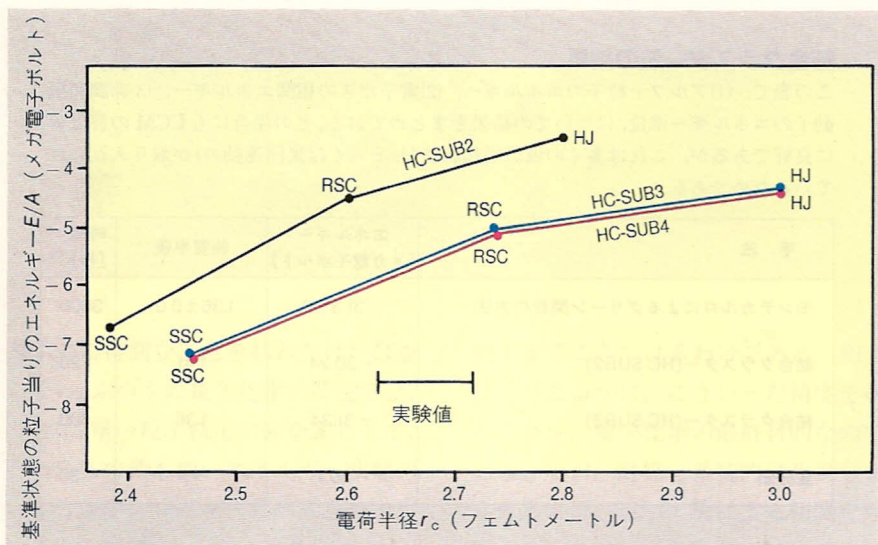
子ボルトしか求められないのである。このいわゆる“正解”な計算値は、何時間(右に示したかこみ記事内の表に使ったのと同じはかり方で)も計算機を使用し、実行可能な時間内で適用可能な最良の数値近似をほどこした上で得られたものである。このことから、一般的な教訓として、多体問題の理論においては、正確な方法を一発で解こうとするよりも、高精度の近似法で、その近似を系統的に逐次改良していくやりの方が実際的であることがわかる。

電子ガス

電子ガス、あるいは“ジェリウム(jellium)”は、理想化された、無限の広がりをもつ一様な電子の系で、電気的中性を保たせるために、それ自身は力学的な自由度をもたない一様な正の電荷を背景としてもっている。固体中の伝導電子の単純化された模型として用いられる。量子多体系のうち一番よく研究されている系であるのも当然のことであろう。この系では、クーロン相互作用の特殊な性質をうまく利用して、統計的誤差の小さい(そして、知られている限りではシステムティックエラーの無視できる)モンテカルロによるグリーン関数の方法までも、使える工夫がなされている(モンテカルロ法で調べられるフェルミ粒子の多体系はほとんどないのである)。

前にも触れたが、クーロン・ポテンシャルの長い到達距離を上手に扱うために CCM では、かなり凝ったやり方が考案されている。この近似法では、さらに 3 体および 4 体の CCM 方程式を実際に解くことなく、3 体と 4 体のクラスターの効果の重要な部分を取り入れることが可能になっている。この

系には、強い相関が存在するために、CCM を高精度で使うという点からは、3 体、4 体のクラスターの効果はたいへん重要な役割をもつ。上に示したかこみ記事に、相関エネルギーの計算値をいくつかの密度について(密度は電子間の平均距離をボーア半径で割っ



〈図3〉 基底状態のエネルギー(粒子当り) E/A を閉殻核 ^{16}O について電荷半径の関数として示したもの

CCMの理論値は相関したクラスターの確率振幅 S_n を $n=2$ (黒線), $n=3$ (青線), $n=4$ (赤線)のところまで考慮して得られたもの。核子間のポテンシャルは最終的には知られていないので、それぞれの場合について2体の実験データを正しく再現する3種類の現象論的ポテンシャルを用いて計算した。[SSC: 超ソフトコアポテンシャル, RSC: リード(Reid)のソフトコアポテンシャル, およびHJ: 浜田-ジョンストン(Johnston)ポテンシャル]。近似の次数について非常に早く収束している。どの2体ポテンシャルの結果も実験値を再現しない事実は、原子核が核子間の2体力のみで相互作用する多体系ではないことを示しているようである。

た無次元の結合定数 r_s で表してある)比較しておく。この表には、モンテカルロによるグリーン関数の方法以外の結果はのせなかった。実際、CCMの数値は、ほかのどんな計算値よりもモンテカルロによるグリーン関数の方法の“真”の値に近いのである。

■非線形振動子

最近、いろいろな1次元非線形振動子が、非線形場の理論の単純化された模型として、研究されることが多い¹⁴⁾。よく用いられる4次の非線形振動子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \lambda q^4$$

で与えられ、ここで q は無限にのびた直線上の座標演算子であり、 p はそれに正準共役な運動量である。ベンダー(Carl Bender)とウー(Tai T. Wu)は結合定数 λ がどんな値をとっても、この場合は摂動論が発散してしまうことを証明した。この問題は、直接ハミルトニアンを対角化するやり方で解くことができるが、ある程度、正確な答を出すためには、非常に大きな行列を用いなければならない。23ページのかこみ記事に掲げたものは、 S_2 と S_4 だけを取り入れたCCMのいろいろな近似による計算値である。奇数次のクラスターは、この問題では入ってこない。ここに掲げたような4つの近似の仕方

は、CCM方程式は非常に簡単な形になり、第4番目の方法だけはちょっと無理かもしれないが、それ以外はプログラム機能のある性能のよいポケット計算器で答が得られる。

CCMと核力

CCMを使うと精密で立ち入った計算が可能になるわけだが、これによってどんなに物事の理解を深めるのに役立つかを示す例として再び原子核の問題に立ち戻り、原子核内部の核力についてどの程度理解されているかを調べてみよう。核子間における中間子の交換が、核子をまとめて原子核を形成する上で重要な役割をもっているということが知られてすでに久しい(話を簡単にするため、ここではクォークを考慮してない)。しかし、現実には、こういった過程そのものがよく理解されていないので、中間子の交換の影響を、2体ポテンシャルで置き換えて表現する、という立場が原子核物理の、初期の現象論の時代以来とられてきている。この2体ポテンシャルは、核子-散乱の実験から求められ、散乱のデータは、それなりに正確に再現することができる。しかし、2体ポテンシャルでは、たとえば3核子系などで初めて起きうる、新しい中間子交換の過程、つまり2体間の中間子の交換の組合せには還元できないような効果は完全に無視されている。

いったい、核内での核子間の力は、このような2体のポテンシャルで十分に書き表せるものであろうか？ それとも、最良の2体ポテンシャルでも書き表せないような多体ポテンシャルが存在するのであろうか？ こういった間には、少なくとも10年前まで

は、とても答えることが不可能であった。なぜならそもそも2体ポテンシャルを使って計算した値が不正確だったので、測定値との狂いが計算の近似によるものか、あるいは多体効果が存在する証拠を示しているのか、どちらとも決められなかったからなのである。しかし、現在では、3体問題に対する正確な解¹⁵⁾や、種々の重い核に対する精密な計算²⁾があって、これらによると最良の2体ポテンシャルを用いても、実験データを再現できないことが知られている。〈図3〉に、こういった計算のうち、閉殻である¹⁶Oの基底状態のエネルギーを求めたものを示す。CCMは、この場合収束が早く、各々3体あるいは4体で打ち切った計算は、ほとんど同一の結果をもたらす。〈図3〉で示されるような、実験値と計算値の大きな開きからみると、原子核は内部の核子どうしが、2体ポテンシャルで相互作用するような系ではないのだと考えざるをえない。このことは長い間、その可能性が云々されてきたとはいえ、こういった計算で初めて、原子核はその最も簡単なものの基底状態についてさえ、2体ポテンシャルによる模型でうまく記述できない、という事実が定量的に証拠立てられたことになる。

ここで紹介したわずかな例から、読者がCCMの効力とその応用性の多様さについて少しでも納得してもらえれば幸いである。この手法はまた、審美的観点からいっても魅力的である。物理で取り扱う現象が多様化していくにつれ、物理学者たちはますます細分化された狭い分野に専門化していかざるをえない現状において、CCMのように、その考え方がほとんどすべての多体系の研究に有効な手法が存在するこ

とは心強い限りである。最後に結論として、この方法は素粒子論や、場の量子論にも拡張できるだろうということをおきたい。過去において他の分野がそうであったように、素粒子物理においても、もはや、1%レベルの精度をもつ答が必要とされているのである。CCMはこういった分野でも、正しく発展させさえすれば、有力な道具となるであろうことを信じて疑わない。

参考文献

- 1) たとえば G. E. Brown, M. Rho: physics today, February 1983, p. 24 をみよ。
- 2) CCM の解説については H. Kümmel, K. H. Lührmann, J. G. Zabolitzky: Phys. Rep. **36C**, 1 (1978); V. Kvasnicka, V. Laurinc, S. Biskupic: Phys. Rep. **90**, 160 (1982); H. Kümmel: in *Nucleon-Nucleon Interaction and Nuclear Many-Body Problems*, S. S. Wu, T. T. S. Kuo, eds., World Scientific, Singapore (1984), p. 46; R. F. Bishop: in *Nucleon-Nucleon Interaction and Nuclear Many Body Problems*, S. S. Wu, T. T. S. Kuo, eds., World Scientific, Singapore (1984), p. 604; J. Arponen: Ann. Phys. (N. Y.) **151**, 311 (1983).
- 3) F. Coester: Nucl. Phys. **7**, 421 (1958). F. Coester, H. Kümmel: Nucl. Phys. **17**, 477 (1960).
- 4) たとえば, A. L. Fetter, J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York (1971); D. J. Thouless: *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems*, Academic Press, New York (1961) をみよ。
- 5) J. Cizek: J. Chem. Phys. **45**, 4256 (1966); Adv. Chem. Phys. **14**, 35 (1969).
- 6) J. Hubbard: Proc. R. Soc. London, Ser. **A240**, 539 (1957).
- 7) たとえば, S. S. Schweber: *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Harper and Row, New York (1964) をみよ。
- 8) J. E. Mayer, M. G. Mayer: *Statistical Mechanics*, 2nd ed., Wiley, New York (1977).
- 9) J. Goldstone: Proc. R. Soc. London, Ser. **A239**, 267 (1957).
- 10) R. F. Bishop, K. H. Lührmann: Phys. Rev. **B17**, 3757 (1978); Phys. Rev. **B26**, 5523 (1982). K. Emrich, J. G. Zabolitzky: Phys. Rev. **B30**, 2049 (1984).

- 11) K. Szalewicz, J. G. Zabolitzky, B. Jeziorski, H. J. Monkhorst: J. Chem. Phys. **81**, 2723 (1984).
- 12) W. D. Laidig, G. D. Purvis, R. J. Bartlett: J. Phys. Chem. **89**, 2161 (1985).
- 13) J. G. Zabolitzky, M. H. Kalos: Nucl. Phys. **A 356**, 114 (1981).
- 14) C. S. Hsue, J. L. Chern: Phys. Rev. **D 29**, 643 (1984).
- 15) W. D. Glöckle: *The Quantum Mechanical Few-Body Problem*, Springer-Verlag, Heidelberg (1983).