2. 講義ノート2.

「ボーズ・フエルミ粒子系の変分原理」

東京教育大学理学部　沢　田　克　郎

§1. 変分法の現状

多体系の力学の取り扱いは、一般には近似的にしか行うことができない。Andersonによれば、その近似すらも「Hartree-Fock に毛が生えた程度のもの」という事になる。多体系における重要な問題は、粒子間のcorrelation であるが、そのうちdynamical correlation は、摂動と変分という二通りの方法で近似的に取り入れる事ができる。またもうひとつのstatistical correlation は、波動函数をSlater-determinantの形に書くことによつて、一般には厳密に取り入れられる。しかし、dynamical correlation の計算を楽にするために、statistical correlationの要請をゆるめてやるという。BCS理論ののような例もある。これから、dynamical correlation を入れた変分法について述べるのだが、そのまえに変分法の現状について述べよう。変分の方法をその型によつて分類すると次のようになる。

i) 普通のHartree-Fock

多数の粒子間相互に働く力をもとに、一体のポテンシャルを物理的に決め、それをもとにして話を進める。statistical correlationは、多体系の波動函数として、Slater-determinantまたは対称化された函数を使うことによつて厳密に取り入れられ、dynamical correlation は摂動によつて扱われる。この方法では摂動展開が収斂するという大きな仮定が必要だが、この方法を使うと、多くのことがいえるし、また物理的なpicture をえがきやすいという利点がある。また励起状態についても、かなりハツキリしたものがつかめる。Brueckcrer理論はHartree-Fock をもとにして二体のCorrelation をなるべく多く入れようとしたもので、特にNuclear matter では三体の寄与は小さいとされている。[1)]

ii) Jastrow-Dingle 型

まず最初に2体のcorrelation[2]を入れた波動函数を物理的に決め、それから変分を行う。しかし、多くの場合、変分だけでは話が片づかなくなり、この方法によるほとんどのものは(Dyson の方法以外は)さらにcluster expansion を取り入れている。[3]したがつて、ここでも収斂性の問題が生ずる。2体のcorrelationを取り入れて厳密に解けているのは、high density limit におけるcharged-boson[4]の問題である。Feynman の方法以外は、励起状態については何も判らない。

iii) Kohn 型

一体をThomas-Fermi で処理する。厳密ではあるが、余りいろいろなことは云えない。[5]

iv) Green 函数

変分らしい変分はない。

なお上記のcharged-boson の問題でGiradeauとArnowittが求めたエネルギーの上限に$r_s^{3/4}$と$\ln r_s$に比例する項がでてくるが、これは変分法にはよらずにGreen 函数を使ったWrightの結果と一致している。[6]このことからmost divergent な項を集めることとii)の方法は同じものであるといえるかもしれない。

§2. 多体粒子系の相互作用の物理的な考察

これから私がやるのは、2体のcorrelationで一番強いhard-core の問題と、さらにそれにattractive potentialが加わつた時である。二体の相互作用によつて、粒子の運動は自由な時とどう違うだろうか。今2個の粒子を考える。今、ひとつの粒子が粒子Aに衝突するものとすると(図1, 2)、入

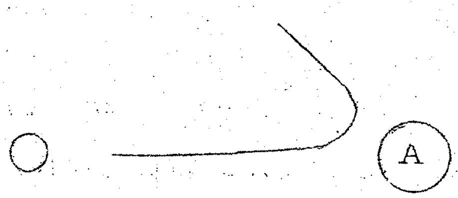

図1 相互作用がrepulsive の時

講義ノート2．

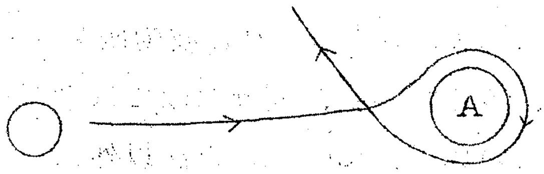

図2　相互作用がattractveの時

射粒子は粒子Aとの相互作用によつて散乱される。この散乱される粒子の発散する波のwave packetはrを粒子Aからの距離、mを粒子の質量、aをscattering leugthとして

$$\int \frac{1}{r} \ell^{ik(r-2a)-i\frac{k^2}{2m}t} f(k)dk^{+}$$

で与えられる。相互作用がrepulsiveならa>0, attractiveならa<0である。そうすると入射波が散乱後Aからrだけ離れた点に到達する迄に要する時間tは、

$$\frac{\partial}{\partial k}\{k(r-2a)-\frac{k^2}{2m}t\} \simeq 0$$

から

$$t=\frac{1}{v}(r-2a)$$

になる。相互作用がなければ、この時間はr/vだから、相互作用がrepulsiveならば散乱された粒子は相互作用がない時にくらべて$2a/v$だけ早くAの近辺から離れてしまうし、attractiveならば$2|a|/v$だけよけいにAの周りに居残ろうとする。

+　Schiff, P.105の一番上の式の$A_l=(2\ell+1)i^l e^{i\delta_l}$を入れて、s-waveに対して$\delta_0=-ka$というhard coreの値を入れた。この時、s-waveの入射波は

$$\frac{1}{r}e^{ikr-i\frac{k^2}{2m}t}$$

で収斂する球面波。

次にAのまわりに他にもたくさんの粒子がある場合を考えよう。粒子間の相互作用がrepulsive だとすると（図3）、散乱波はAのまわりにいる他の粒子によつてAの方に押し戻される。だから上の時間は実質的に小さくなる。相互作用がattractiveな時（図4）には、散乱波は$2|a|/v$だけ長くAのまわりにいたいのだが、他の粒子からのattractionによつて$2|a|/v$より早目にAから離れていく。もちろんまわりからはねかえつても来るけれど、はねかえりは、波がAからdisperseしたものが再散乱されて、再びdisperseしたものだから、その割合は小さい。いいかえれば、二体間の相互作用は、repulsiveであるにしろ、attractive であるにしろ、まわりに他の粒子がない時と比較すると弱くなる。

また入射粒子が特定の散乱粒子から遠く離れた時には、遠くへ行くまでに何

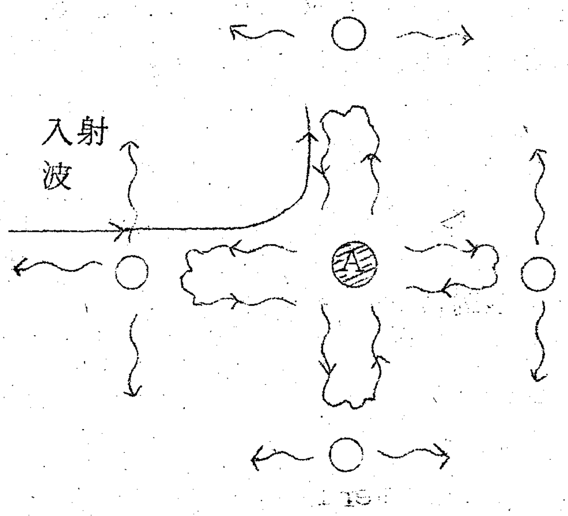

図3．repulsiveの時
$(a>0)$

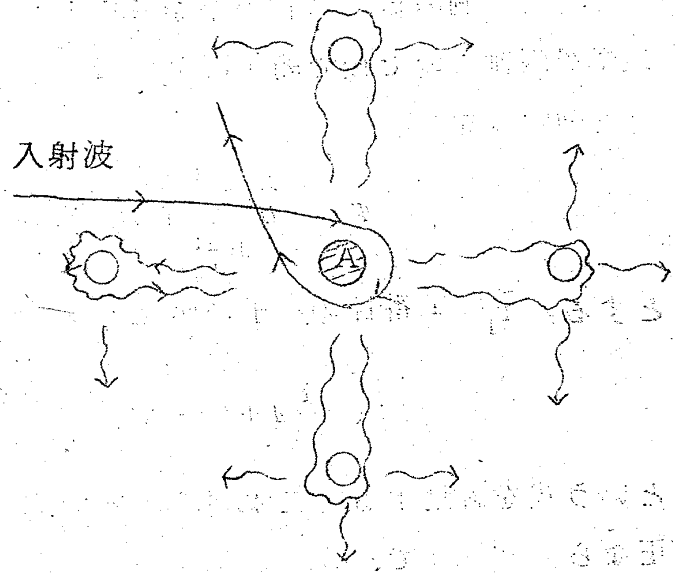

図4．attractiveの時
$(a<0)$

度も外の粒子と散乱しているから、特定粒子との相関はなくなると考えられる。

このような多体中の2体問題の波動函数をf_2と書くと、この波動函数は

$$\left(-\frac{1}{m}\Delta+\bar{v}\right)f_2=0$$

という方程式を満たす。$\bar{v}$は相互作用のポテンシャルであつて、上述の様な多体効果で、じゆんすいな二体のポテンシャルではない。右辺をゼロにとつたの

は、二体間の距離rが大きい所では、correlationがなくなる場合をとつたからである。したがつて例えばs-waveについては、

$$f_2 = \frac{\sin k(r-a)}{kr}\Big|_{k\to 0} = 1 - \frac{a}{r} \qquad (a; \text{scatteving length})$$

であつて、$f_2(r\to\infty) = 1$となる。さらに、遠くに離れると特定の粒子との相関がなくなるためには、plrase shift も当然ゼロでないと困る（どれに散乱されたか記憶していない）ので、気体中のf_2は$a=0$ になるように、modified potential $\bar{v}$はなつているはずである。

§3　N個のボーズ粒子系

そこでN個のボーズ粒子系を考えることにする。フエルミ粒子系については、計算が困難なので後で簡単に触れておくことにとどめる。考えるボーズ粒子系の波動函数を

$$\Psi = \prod_{i>j=1}^{N} f(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \tag{1}$$

とする。$\vec{r}_i$はi番目の粒子の座標である。前節の議論によつてfは

$$\left(-\frac{1}{m}\Delta + (v+v')\right)f = 0 \tag{2}$$

という式を満足する。二体間のポテンシヤルによるscattering lengthが正なら、$v'<0$で、scattering lengthが負なら、$v'>0$である。v'値や形は今までの考察では勿論判らないが、$(v+v')$というポテンシヤルによるscattering lengthゼロになるようになるようにとる。エネルギー表式は

$$E' = \frac{\left\langle \Psi, \left(\sum_i \frac{-\Delta_i}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\right)\Psi \right\rangle_N}{\langle \Psi, \Psi \rangle_N}. \tag{3}$$

ただし

$$<F_N> = \int \cdots \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \, F(\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N) .$$

(1)式を(3)式に入れて部分積分を行うと、

$$E' = \frac{< \prod_{i>j}^{N} f^2(r_{ij}) \frac{1}{2} \sum_{i>j}^{i \neq j} (v_{ij} - \frac{1}{2m} \frac{\Delta f_{ij}}{f_{ij}} + \frac{1}{2m} (\frac{\nabla_i f_{ij}}{f_{ij}})^2) >_N}{< \prod_{i>j}^{N} f^2(r_{ij}) >_N} \tag{4}$$

となる。ただし表面積分は落としてやる。このことは、

$$f(r \to \infty) = 1 + 0(\frac{1}{r^{1+\alpha}}), \quad \alpha > 0 \tag{5}$$

を仮定したことを意味する。しかし前節の議論でscattering lengthはゼロになるようにしたのだから式(5)という仮定は許される。以下簡単のために

$$f(r > a') = 1 \qquad a' \text{ ; 有限} \tag{6}$$

としておく。ただし、$0(\frac{1}{r^2})$ の項が励起状態の説明に重要であろうという現象論的議論もある。[7)]

条件(6)を使うと(4)式は、

$$'E' = \frac{1}{< \prod_{i>j}^{N} f_{ij}^2 >} < \frac{1}{2} \sum_{i>j}^{i \neq j} \{ \frac{v_{ij} - v'_{ij}}{2} f_{ij}^2 + \frac{1}{2m} (\nabla_i f_{ij})^2 \} \cdot$$

$$\cdot \prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \cdot \prod_{\substack{k>l \\ \neq i,j}} f_{kl}^2 >_N \tag{7}$$

となる。v_{ij}, v'_{ij}をそれぞれrepulsive partとattractive partに分けてやって

$$v_{ij} = v_{ij}^A + v_{ij}^R$$

$$v'_{ij} = v'^A_{ij} + v'^R_{ij}$$

と書くことにすると、

$$'E' = \frac{1}{N \langle \prod_{i>j} f_{ij}^2 \rangle_N} \langle \frac{1}{4} \sum_{i>j}^{i \neq j} \{ (v_{ij}^A - v_{ij}'^R) f_{ij}^2 + \tag{8}$$

$$+ (v_{ij}^R - v_{ij}'^A) f_{ij}^2 + \frac{1}{m} (\nabla_i f_{ij})^2 \} \prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \cdot \prod_{\substack{k>l \\ \neq i,j}} f_{kl}^2 \rangle_N .$$

変分函数に条件をつけると、エネルギーの値はそうよくないものになつてしまうかもしれない。しかし、以下の議論を簡単にするために、

$$0 < f \leqq 1 \tag{9}$$

になるように、v′をとつてやることにしよう。

そうすると'E' の上限を出すためには(8)式の第2行で (positive)

$$\prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \leq 1$$

とおき、また同じ式の第1行(negative)では

$$\prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \geqq 1 - \sum_{k \neq i,j} (1 - f_{ik}^2 f_{jk}^2)^{+}$$

とすることができる。その結果エネルギー'E' の上限は

$$'E' \leq \frac{1}{N \langle \prod_{i>j} f_{ij}^2 \rangle} \langle \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{i \neq j} \{ (v_{ij}^A - v_{ij}^R) f_{ij}^2 (1 - \sum_{k \neq i,j} (1 - f_{ik}^2 f_{jk}^2))$$

+ $0 < g_k < 1$ とすると

$$(1-g_1)(1-g_2) = 1 - g_1 - g_2 + g_1 g_2 > 1 - g_1 g_2$$

$$\prod_{i=1}^{2} (1-g_i)(1-g_i) > (1 - \sum_{i=1}^{2} g_i)(1-g_3) = 1 - \sum_{i=1}^{3} g_i + \sum_{i=1}^{2} g_i g_3 > 1 - \sum_{i=1}^{3} g_i$$

以下同様にして

$$\prod_k (1 - g_k) > 1 - \sum_k g_k$$

$$+ (v_{ij}^{k} - v_{ij}^{k}) f_{ij}^{2} + \frac{1}{m} (\nabla_i f_{ij})^{2} \} \cdot \prod_{\substack{k>l \\ (\neq i,j)}} f_{kl}^{2} >_N .$$

となり i,j の重心系を使って f_{ij} の満たす式(2)を使うと（$\vec{R}$；重心の座標、Ω；体積、Nは粒子数、ρ；密度）

$$'E' \leq \frac{1}{<\Pi f^2>_N} \frac{N^2 \Omega}{4} \int d\vec{r} \{ (v^A(r) - v'^R(r)) f^2(r) (1 - \rho \int d\vec{R} (1 - f^2(\vec{R}+\frac{\vec{r}}{2}) f(\vec{R}-\frac{\vec{r}}{2})))$$

$$+ (-v^A(r) - v'^R(r)) f^2(r) \} \cdot < \prod_3^N f^2 >_{N-2} .$$

したがって

$$'E' \leq \frac{N^2 \Omega}{2} \int d\vec{r} \{ -v'(r) f^2(r) + \frac{1}{2} \rho (v'^R(r) - v^A(r)) f^2(r) \int d\vec{R} (1 - f^2(\vec{R}+\frac{\vec{r}}{2}) f(\vec{R}-\frac{r}{2})) \} \times$$

$$\times \frac{<\prod_3^N f^2>_{N-2}}{<\prod_1^N f^2>_N} \qquad (10)$$

となり最後の factor については、

$$\frac{1}{\Omega^2 (1 - \rho \int (1 - f^2) dr)^2} \geq \frac{<\Pi f^2>_{N-2}}{<\Pi f^2>_N} \geq \frac{1}{\Omega^2}$$

を使ってやる。(10) 式の右辺の積分をKとおくと

$$0 < 'E' \leq \frac{N\rho}{2} K (1 - \rho \int (1 - f^2(r)) dr)^{-2}, \quad (K > 0 \text{ のとき}) \qquad (11)$$

$$'E' \leq \frac{N\rho}{2} K < 0 , \quad (K < 0 \text{ のとき}) \qquad (12)$$

という結果が得られる。

§4. 具体例

i) hard-core

hard-core[8] の場合には前節よりも、もう少し簡単な議論ができてエネルギーに関して

講義ノート２.

$$0 \leq {}'E' \leq \frac{\frac{N\rho}{2}\int dr(-)v'(r)f^2(r)}{1-\rho\int(1-f^2(r))\,dr} \qquad (11)$$

という式が出せる。ポテンシャルは（図５）

$$v(r)=\begin{cases}\infty & r<a\\ 0 & r>a\end{cases}$$

で与えられｖについては

$$v(\vec{r})=\begin{cases}0 & r<a,\ r>a'\\ -V_0' & a<r<a'\end{cases}$$

とおく。この場合には、$0\leqq f\leqq 1$, $f(r>a')=1$という条件のもとに式(2)を解くことができて

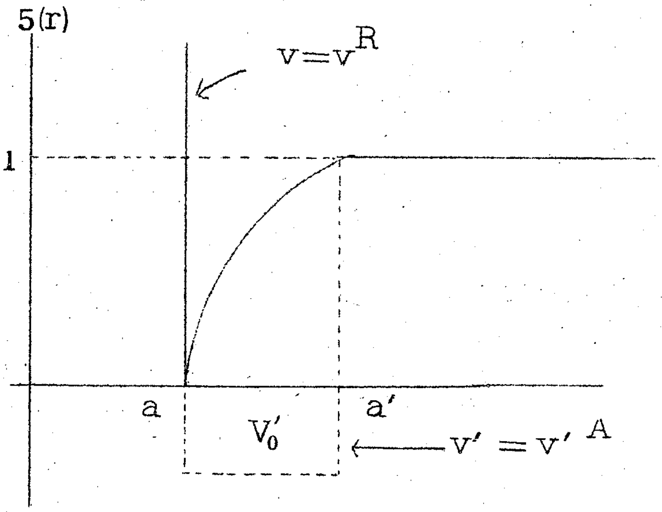

図５　Hard-core ポテンシアルと波動函数 f

$$(V_0'\ m)^{\frac{1}{2}}=\frac{\lambda}{a'-a}$$

とおくと

$$(V_0'\ m)^{\frac{1}{2}}=\frac{\tan\lambda-\lambda}{a}, \qquad a'=\frac{\tan\lambda}{\tan\lambda-\lambda}\,a$$

と書ける。すなわち、変分のパラメーターは１個だけになる。λによつて（11）式の一番右を書いてやると図６のようなグラフが得られる。

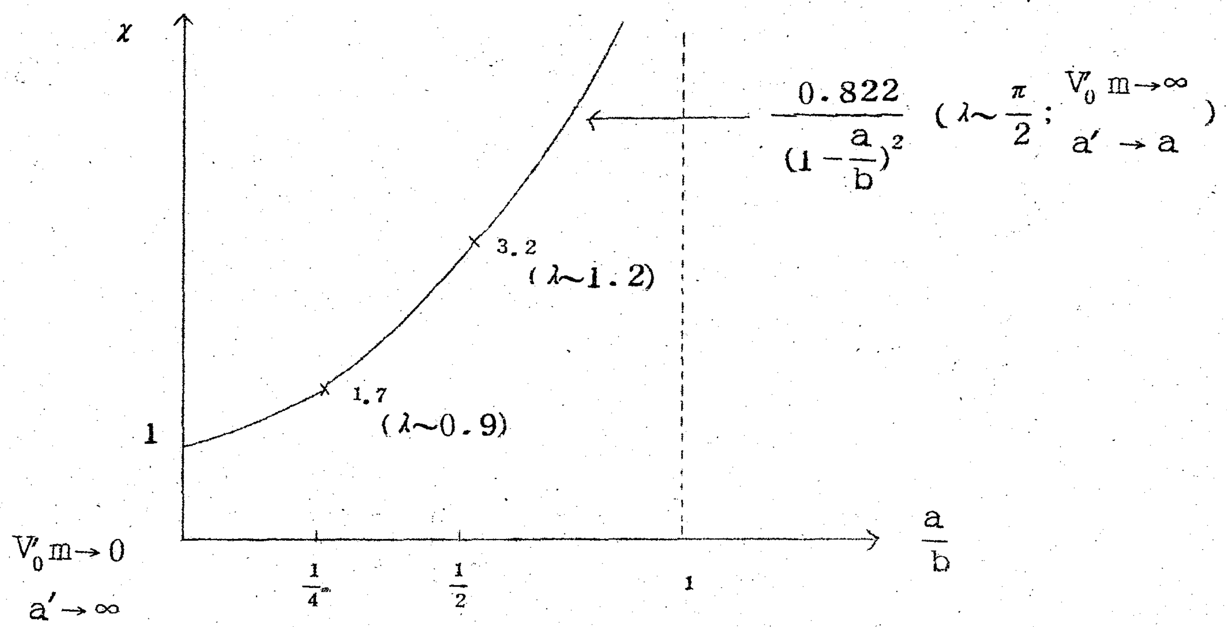

図6. $'E'\leq N\frac{2\pi\rho a}{m}x,\quad \frac{4\pi}{3}b^3\rho=1$

(ii) He^4

Scattering length は負で二体間のポテンシヤルは、図7のようになる。この時にはv′としては図の点線のようにとつてやればよいから′E′の上限が負

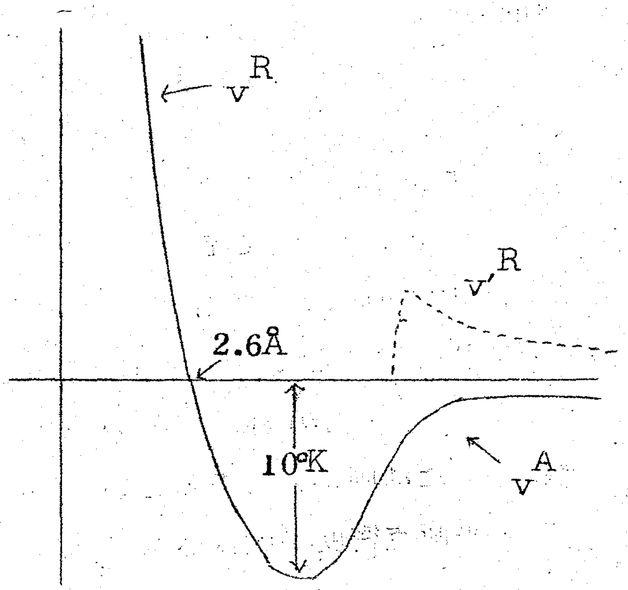

図7 H_l^4の二体間ポテンシアル

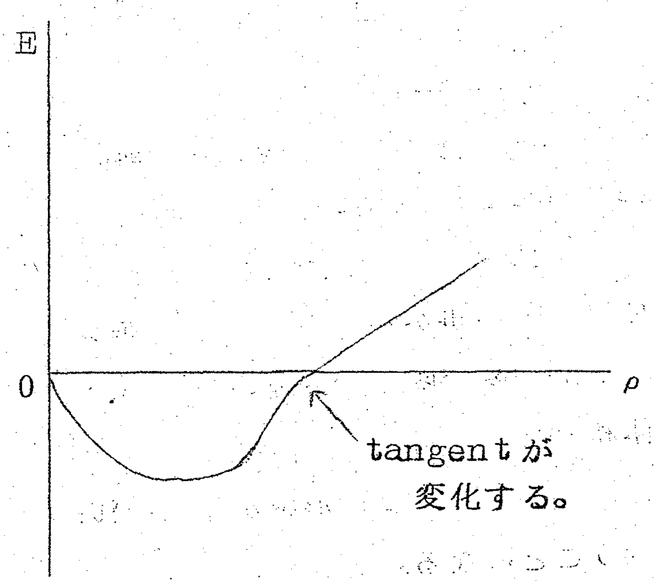

図8 E・ρ

になるρがあることはすぐわかつて、この変分によつて、図８のようなE−ρ曲線が得られる。*)

実際の計算は計算機を使わないとできないが、図９のようなモデルを考える。そうすると、

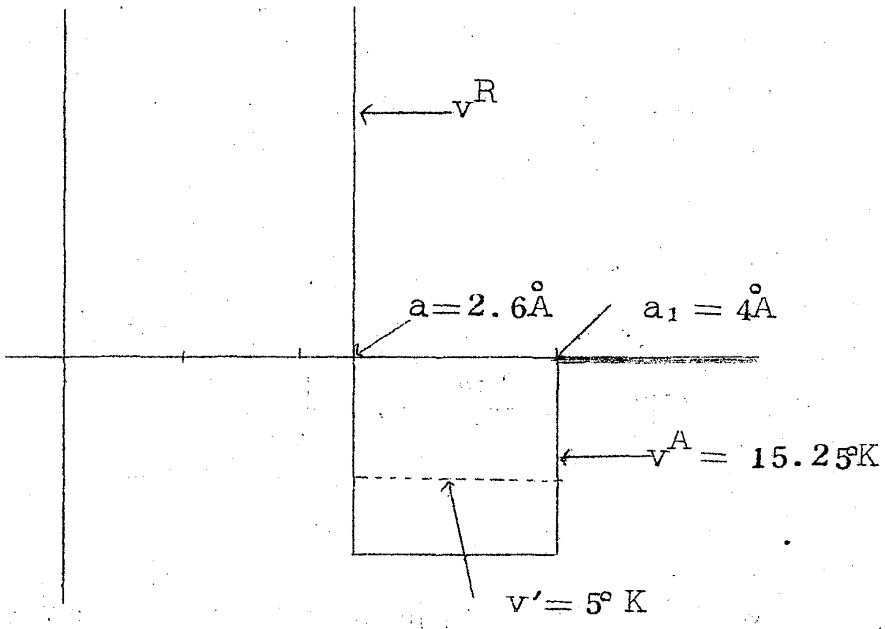

図９

$$\int d\vec{R}\left(1-f^2\left(\vec{R}+\frac{\vec{r}}{2}\right)f^2\left(\vec{R}-\frac{\vec{r}}{2}\right)\right)\leq 2\int d\vec{R}\,(1-f^2(R))$$

---

*) このことはH_e^4にかぎらず一般的で、形がH_e^4のようなポテンシヤルでscattering length <0 を与えるものがあるとv^Rをつけ加えてfを作れるから(12)式でρが十分小さいと'E'<0となり、systemは液体（または個体）である事がわかる。ここで使つたfは$0\leq f\leq 1$でおさえているから、とても悪い変分函数には違いないが、それでもscattering length < 0の二体相互作用（H_l^4型）をしているボーズ系は、液体（または固体）であるということがいえる。fの形をかえてやればエネルギー・平衡点密度が改良されるということになる。

という不等式を使つて、H_e^4 に対しては、

$$'E' \leq N(0.94\rho a_1^3(-5+46\rho a_1^3))^\circ K$$

となり、これを極小にする値は$\rho a_1^3 \sim 0.06(\sim 1)$ でそのとき$'E' \leq -0.14N^\circ K$ ($\sim 5^\circ K$)である。カツコ内にあげたのは実験値である。

§5. 問題点

1) H_e^4の取り扱いでρ-dependence をよくするには$f^2<1$の制限をはずす必要があるだろう。hard-core があるため、この条件をはずすのは、容易だが、エネルギーの計算が面倒になる。

2) 個体では波動函数がΠf_{ij}, $\Pi\phi$の型で translational invariance がなく、$\sum_{i,j} \to N^2$の様なおき代えができない。したがつて格子点を決めて積分を行なわなければいけないので、ずい分面倒なことになる。ただH_e^4 の時と同様な式を書きくだすことは可能である。

3) Fermi粒子系では波動函数が反対称化されるから、上の方法は今のところ役に立ちそうにない。

4) 励起状態については一切ノー・コメント。

5) 原子核のα-particle model でのBinding energy の計算に使えるかもしれないが、クーロン静エネルギーの分離に注意を要する。

§6 文　献

S.A.Moszkowsky, Phys. Rev. 140. B283 (1965)

1) H.A.Bethe, Phys. Rev. 138, B804

R.Rajaraman, Phys. Rev. 131, 1244 (1963)

2) Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 (1955)

R.B.Dingle, Phil. Mag, 40, 573 (1949)

F.J.Dyson, Phys. Rev., 106, 20 (1956)

3) J.Blatt, Theory of Superconductivity, P261 以下

Nisiyama, Preprint

E.M.Saunders, Phys. Rev., 126, 1724

R.L.Garwin & A. Landesman, Phys. 2, 107 (1965)

F.Iwamoto, Prog. Theor. Phys. 19, 595 (1958)

F.Iwamoto & M.Yamada, Prog. Theor. Phys. 17, 543; 18, 345 (1957)

F.Y.Wu & E.Feenberg, Phys. Rev. 128, 943 (1962)

K.A.Brueckner & J.Frohberg, Prog. Theor. Phys. Suppl, (1965)

R.Abe, Prog. Theor. Phys. 21, 421 (1959) ; 19, 57 (1958) ; 19, 407 (1958)

Y.H.Smith & H.A.Gersch, Prog. Theor. Phys. 30, 421 (1963)

H.A.Gersch & V.H.Smith, Phys. Rev. 119, 886 (1960)

J.B.Aviles, Am. Phys. 5, 231 (1958)

K.Hiroike, Prog. Theor. Phys. 27, 342 (1962)

R.Drackman, Phys. Rev., 121, 643 (1961)

J.W.Clerk & E.Feenly, Phys. Rev. 113, 388 (1959)

H.W.Jackson et al. Ann. Plays. 15 266 (1961)

L.H.Nassanew, Phys. Rev. 146, 120 (1966).

F.Iwamoto et al, Bussei-Kenkyu

C.Shakin & Y.R.Waghmare, Phys. Rev. Lett. 16, 403 (1966)

R.P.Feynman, Phys. Rev. 94, 267 (1954)

R.p.Feynman & M. Cohen, Phys. Rev. 102, 1189 (1956)

M.Cohen & R.P.Feynman, Phys. Rev. 107, 13 (1957)

Penrose & Onsager, Phys. Rev, 104, 576 (1956)

Penrose, Phys. Lett. 11, 224 (1964)

二体の correlation function の積でとけるモデルを扱つたものとして

J.M.Luttinger, J. Math. Phys. 4, 1154 (1963)

D.C.Mattis, Physics 1, 183 (1964) ; Vol.2

D.C.Mattis &E.H.Lieh, J.Math. Phys. 6, 304 (1965)

4) E.H.Lieh, Phys. Rev. 130, 2518 (1963) ; 133 A899 (1964) ; 134 A312 (1964)

Giradeau & Arnowitt, Phys. Rev. 113, 755 (1959)

Lee & Feenberg, Phys. Rev. 137, A731 (1965)

5) P.Hohenberg & W.Kohn, Phys. Rev. 136 B864 (1965)

W.Kohn & L.J.Sham, Phys. Rev. 140 A1133 (1965)

6) D.Wright, Phys. Rev. 143, 91 (1966)

7) G.V.Chester & L. Reatto, preprint (April, 1966)

8) K.Sawada, Phys. Rev 140, A1564 (1965)

9) K.Sawada, Phys. Rev 148, 160 (1966)

10) Penrose, J.Mathe. Phys 4, 1488 (1963)

(ノート；東教大理　長島富太郎)