# 量子固体の動的記述　I

## ーフォノンー

成蹊大工学部
生井沢　寛

（5月20日受理）

## §1.　序

通常の固体においては，原子間ポテンシャルが運動エネルギーに比べ圧倒的に大きく，原子は夫々の格子点に強く束縛されている。原子が隣り合う格子点に在る他の原子と出合う確率は無視し得る。そこで，ボルンとカルマンに始まる従来の格子力学[1]（古典的格子力学と呼ぶ事にしよう）は，平衡点の近傍の静的なポテンシャルの様子が，全体としての格子の力学的振舞いをどの様に支配するかを論ずるだけで良かった。

しかしながら自然界には，この古典的格子力学の描像が通用しない固体が存在する。それは，固体ヘリウムに代表される量子固体である。[2] 第Ⅷ族原子の様に閉殻構造を持ち，そのうえ更に質量が軽い原子であれば，静的ポテンシャルに比べ，運動エネルギーが無視出来なくなる。ヘリウムの例では，零点振動の大いさが，その振幅で最近接格子間距離の，30％にも達する。量子固体では，格子を組んでいながら，原子同志が出会う確率が無視出来なくなり，互いの間の相互作用のハードコア領域をも侵し合う。この点，量子固体中では，原子の運動に際して，原子間の近距離相関が重要となる。ヘリウムの例で明らかな様に，絶対零度でも固化にはかなりの圧力が必要となり，実際に格子を組む格子間距離が，静的ポテンシャルの谷の位置から大きく押出されて，むしろ，その山の位置に迄移動させられてしまう。これらの特徴，即ち，

① 大きい零点振動，

② ハードコア効果＝短距離相関，

の取扱いは，古典的格子力学の枠外に在る。量子固体の物理的記述には，新しい格子力学－量子的格子力学－が必要である。量子的格子力学は，①及び②を，同時に正しく取扱う事を可能にするのでなければならない。

量子固体の理論的取扱いは，まず，その基底エネルギーの計算から出発した[3]。種々の方法の中で，岩本－生井沢[4]による方法は，①と②の取扱いを可能にするセルフコンシステントな定式化で，更に，簡単であいまいさの無い近似によって数値的に計算されて，基底エネルギー値をよく再現した。この方法は，物理的直観から出発して提出されたものであったが，最近，同じ著者によって，その正しさが証明された。その本質は，セルフコンシステントな外場（ハートリー場ではない）によって，夫々の格子点付近に曲在化された2個の原子が，自由な2原子間に働く（ハードコアを有する）ポテンシャルを通じて相互作用する2体問題を正しく解き，その解によって“有効相互作用”ないしは“K行列”を定義し，このK行列”によって基底エネルギーを展開する，という点にある。セルフコンシステンシイは，原子を局在化した外場が，2体のK行列により，残る他の原子からの力の和で与えられるという要請に帰する。

基底状態の取扱いに有効であったこの描像は，それでは，量子固体の動的振舞いの記述の基礎ともなり得るのではないだろうか？この間に答えるのがこの論文の目的である。まず，この第Ｉ稿において量子固体中の音波の取扱いとその分散関係の導出[6]を，次稿において交換力の問題の定式化を前述の描像に基いて与える。これらの定式化に対する近似法と，それに基く数値的な仕事とは，次の段階として，まとまり次第発表したい。

この稿では，量子固体中の音波の問題について，岩本－生井沢による前述の描像に立つ定式化を与える。第2章において全ハミルトニアンを，一体場に対しワニエ表示の波動函数を用いて書き下す。零点振動は大きくても，依然として原子は各格子点のまわりに充分良く束縛されているものとし，格子点移動を起す項，交換項は無視出来るものとして，近似的ハミルトニアンを得る。原子間ポテンシャル，セルフコンシステントな外場は，夫々ＩＮ－2によるK行列式の方法で与えられた展開を用いる。

第3章においては準粒子演算子を定義し，前章で得た近似的ハミルトニアンの下でのこの演算子の運動方程式に対して，ランダムフエイズ近似を行う。得られた固有方程式が，少くともK行列の一次までを取る時，波数$\vec{k}\to 0$の極限で振動数$\omega\to 0$となる解を有する事を示す。この解がフォノンモードに対応する事を明らかにする為に，第4章において，原子の位置の格子点からのずれと

同じ振舞いをする自由度を取り出す射影演算子を導入する。第3章で得た固有方程式をこの演算子によって射影し，制限された固有方程式を得る。これを解いて，分散関係を得る。解は，$\vec{k}\to 0$ で $\omega\propto|k|$ となるスペクトルを持ち，このモードが，基底状態で破られていた平行移動不変性を，励起状態で回復する“ゴールドストン粒子”，即ちフォノンに他ならない事を示している。この満足すべき結果を保証したのは，セルフコンシステントな外場に対する我々の定義に他ならないという点を強調しておこう。この定義が，出発のハミルトニアンの有していた平衡移動性を正しく反映して，正しい（フォノンの）分散関係に導いたのである。ここにおいて，量子固体中を伝播する音波に対する我々の描像は，単にアインシュタイン振動子ーこれはＩＮ－１とＩＮ－２で求まっているーを互いに結合させたデバイ流の音波の描像とは異なっている。後者においては平行移動不変性の取扱いは容易でなく，$\vec{k}\to 0$ でギャップの無い解を得る事は自明ではない。

最後に第５章で簡単な議論を与える。尚，この論文を通して我々は，$T=0^{\circ}K$ の場合のみを扱う。有限温度への拡張はたやすい。また簡単の為，単位格子内に一個の原子しか無い場合を考える。これの拡張もたやすい。

## §2. 近似的ハミルトニアン

この章では全ハミルトニアンから，いくつかの仮定の下に，近似的ハミルトニアンを取り出す。準粒子演算子を定義し，これが近似的ハミルトニアンの下で従う運動方程式を求め，それをランダムフェイズ近似によって線型化して一般的な固有方程式を得る。この固有方程式が，波数 $\vec{k}\to 0$ で，振動数 $\omega\to 0$ となる解を有する事を示す。

量子固体の全ハミルトニアンは次の通りである；

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+\mathscr{H}_I, \qquad (2.1)$$

ここに，

$$\mathscr{H}_0=\int d\vec{r}\,\psi^{+}(\vec{r})\left(\vec{p}^{\,2}/2m+U(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}), \qquad (2.2)$$

$$\mathscr{H}_I = -\int d\vec{r}\, \psi^+(\vec{r})(\vec{p}^2/2m + U(\vec{r}))\psi(\vec{r})$$
$$+\frac{1}{2}\int d\vec{r}\, d\vec{r}'\, \psi^+(\vec{r})\psi(\vec{r}')v(\vec{r}-\vec{r}')\psi(\vec{r}')\psi(\vec{r}) \tag{2.3}$$

上において，$\psi(\vec{r})$ は原子の場演算子，$U(\vec{r})$ は原子を格子に配列する外場，$v(\vec{r}-\vec{r}')$ は2原子間力である。外場 $U(\vec{r})$ 中の一体問題は解けているとする；

$$H(\vec{r})\phi_{m\vec{k}}(\vec{r}) = (p^2/2m + U(\vec{r}))\phi_{mk}(\vec{r}) = \varepsilon_m(\vec{k})\phi_{m\vec{k}}(\vec{r}). \tag{2.4}$$

ここに $\vec{k}$ は波数ベクトル，mはバンド番号及び必要ならスピンラベルを兼ねるものとする。外場は格子の周期を持つから，$\phi_{m\vec{k}}(\vec{r})$ はブロッホ波である。我々は $\psi(\vec{r})$ を $\phi_{m\vec{k}}(\vec{r})$ で展開せず，そのユニタリ変換であるワニエ波動函数wで展開する；

$$\psi(\vec{r}) = \sum_m \sum_i b_m(\vec{R}_i)\, w_m(\vec{r}-\vec{R}_i) \tag{2.5}$$

ここに，$\vec{R}_i$ $(i=1, 2, \cdots\cdots, N)$ は格子ベクトル，また，

$$w_m(\vec{r}-\vec{R}i) = N^{-1/2}\sum e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}\phi_{m\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2.6}$$

ワニエ波の生成消滅演算子 $b^+$，bは次の交換関係をみたす；

$$\left.\begin{array}{l} [b_m(\vec{R}_i),\ b_n(\vec{R}_j)^+]_\pm = \delta_{mn}\delta_{\vec{R}_i\vec{R}_j} \\ [b_m(\vec{R}_i),\ b_n(\vec{R}_j)]_\pm = [b_m(\vec{R}_i)^+,\ b_n(\vec{R}_j)^+]_\pm = 0 \end{array}\right\} \tag{2.7}$$

ここに，$[\quad]_\pm$ は，原子の統計に従って，反交換(+)，または交換(−)関係である。一体場に（2．5）の表現及び交換関係を用いれば，全ハミルトニアンは次の様に書ける；

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0^{(a)} + \mathscr{H}_0^{(b)} + \mathscr{H}_I^{(ad)} + \mathscr{H}_I^{(ae)} + \mathscr{H}_I^{(b)}, \tag{2.8}$$

ここに，

$$\mathscr{H}_0^{(a)} = \sum_{i}\sum_{m} \epsilon_m \; b_m(\vec{R}_i)^+ b_m(\vec{R}_i) \;, \qquad (2.9)$$

$$\mathscr{H}_0^{(b)} = \sum_{i \neq j}\sum_{m} \epsilon_m(\vec{R}_i - \vec{R}_j)\, b_m(\vec{R}_j)^+ b_m(\vec{R}_i) \;, \qquad (2.10)$$

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_I^{(ad)} = &- \sum_{i}\sum_{m,n} U(n\vec{R}_i\,;m\vec{R}_i)\, b_n(\vec{R}_i)^+ b_m(\vec{R}_i) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{i \neq j}\sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} v(n_1\vec{R}_i\, n_2\vec{R}_j\,;m_1\vec{R}_i\, m_2\vec{R}_j) \\ &\times b_{n_1}(\vec{R}_i)^+ b_{n_2}(\vec{R}_j)^+ b_{m_2}(\vec{R}_j)\, b_{m_1}(\vec{R}_i) \;, \end{aligned} \qquad (2.11)$$

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_I^{(ae)} = &(\mp)\frac{1}{2}\sum_{i \neq j}\sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} v(n_2\vec{R}_j\, n_1\vec{R}_i\,;m_1\vec{R}_i\, m_2\vec{R}_j) \times \\ &\times b_{n_1}(\vec{R}_i)^+ b_{n_2}(\vec{R}_j)^+ b_{m_2}(\vec{R}_j)\, b_{m_1}(\vec{R}_i) \;, \end{aligned} \qquad (2.12)$$

及び，

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_I^{(b)} = &- \sum_{i \neq j}\sum_{mn} U(n\vec{R}_j\,;m\vec{R}_i)\, b_n(\vec{R}_j)^+ b_m(\vec{R}_i) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{(i'j') \neq (i\;j)}\sum_{m_1 m_2 n_1 n_2} v(n_1\vec{R}_i'\; n_2\vec{R}_j'\;;m_1\vec{R}_i m_2\vec{R}_j) \\ &\times b_{n_1}(\vec{R}_i')^+ b_{n_2}(\vec{R}_j')^+ b_{m_2}(\vec{R}_j)\, b_{m_1}(\vec{R}_i) \;, \end{aligned}$$

$$(2.13)$$

ただし，上において，

$$\epsilon_m = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \epsilon_m(\vec{k}) \qquad (2.14)$$

$$\epsilon_m(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = N^{-1}\sum_{\vec{k}} \epsilon_m(\vec{k})\, e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \;, \qquad (2.15)$$

とする。明らかな様に，$\mathscr{H}_0^{(a)}$ ，$\mathscr{H}_I^{(ad)}$ 及び$\mathscr{H}_I^{(ae)}$は格子点位置の変化を起さな

い項 $-\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(ad)}$ は直接項，$\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(ae)}$ は交換項－，また，$\mathcal{H}_{0}^{(b)}$ 及び $\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(b)}$ は格子点位置変化を起す項である。同一格子点に，2個の原子が入っていて相互作用するという項は省略した。

量子固体に在っては，原子は，激しい零点振動のせいで，格子点付近にかなり広がって分布している。しかしながら，今ある原子が，その平衡格子点から離れて，近接する他の格子原子に近付いて来たとしよう。両者が近付けば近付く程，2原子間ポテンシャルのより強い斥力を及ぼし合って，より強く押しのけ合う事となろう。たとえ広がりが大きくとも，原子が平衡格子点から飛び出て，別の格子点に移ってしまう確率は，このハードコア効果で非常に小さくされてしまう。言いかえると，短距離相関の効果が大で，広がりは大きいが，原子が近接する格子点で持つ実質的な存在確率，あるいは，原子同志の波動函数の重なり，は小さい。そこで，上に分類したハミルトニアンの各項のうち，格子点位置変更を起す項 ($\mathcal{H}_{0}^{(b)}$，$\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(b)}$ ) 及び，格子点の入れ換え項 ($\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(ae)}$) は小さいものとして無視しよう。これは，実験的に，交換エネルギーが凝集エネルギーに比べ充分小さい事実からも許される。[2)]

こうして我々は近似的ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}' = \mathcal{H}_{0}^{(a)} + \mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(ad)} , \qquad (2.16)$$

に取る。$\mathcal{H}'$ によって記述される系は，格子点位置変化も交換も起らないから，各原子は，その平衡格子点に束縛され，対応する格子ベクトルによって識別される。この仮定に基いて基底エネルギーを計算する定式化がＩＮ－２に与えられている。それによれば，2原子間の有効相互作用乃至は，K行列によって，$\mathcal{H}_{\mathrm{I}}^{(ad)}$ 中の2体相互作用 v，及び，外場Uとが，夫々次の様に与えられる；

$$v_{ij}(n_1 n_2 ; m_1 m_2) \equiv v(n_1 \vec{R}_i\, n_2 \vec{R}_j ; m_1 \vec{R}_i\, m_2 \vec{R}_j)$$

$$= K_{ij}(n_1 n_2 ; m_1 m_2) - \sum_{(q_1, q_2) \neq (0,0)} \frac{K_{ij}(n_1 n_2 ; q_1 q_2) K_{ij}(q_1 q_2 ; m_1 m_2)}{\varepsilon(00) - \varepsilon(q_1 q_2)}$$

$$+\cdots\cdots, \tag{2.17}$$

及び,

$$U_i(n;m)\equiv U(n\vec{R}_i;m\vec{R}_i)=\sum_{j(\neq i)}K_{ij}(n0;m0), \tag{2.18}$$

ここに$\varepsilon(q_1q_2)$は次で定める;

$$\varepsilon(q_1q_2)=\varepsilon_{q_1}+\varepsilon_{q_2}, \tag{2.19}$$

(2.17)の左辺には,$K^3$以上を書かなかった。また,我々の方法におけるセルフコンシステンシイの要請は,外場Uの定義(2.18)に帰着される。更に,注意すべきことは,近似的ハミルトニアン(2.16)を導いた仮定によって,"格子点移動エネルギー"$\varepsilon_m(R_i-R_j)$は,"平均バンドエネルギー"$\varepsilon_m$に比べ無視し得るから,

$$H(\vec{r})w_m(\vec{r}-\vec{R}_i)=\sum_j\varepsilon_m(\vec{R}_i-\vec{R}_j)w_m(\vec{r}-\vec{R}_j)$$

$$=\varepsilon_m w_m(\vec{r}-\vec{R}_i)+\sum_{j(\neq i)}{}'\varepsilon_m(\vec{R}_i-\vec{R}_j)w_m(\vec{r}-\vec{R}_j)$$

$$\approx\varepsilon_m w_m(\vec{r}-\vec{R}_i), \tag{2.20}$$

となって,ワニエ波が一体ハミルトニアン$H(r)$の良い近似の固有状態となる点である。原子間力vの展開(2.17)における中間状態をワニエ波で取り,(2.19)によるエネルギー分母を取ったのは,この事に基く。

平行移動不変性と反転対称性とから,

$$K_{ij}\equiv K_{\vec{R}_i\vec{R}_j}=K_{\vec{R}_i-\vec{R}_j}=K_{\vec{R}_j-\vec{R}_i}. \tag{2.21}$$

この時,定義より,$U_i$は$i$によらない;

$$U_i(n;m)=U(n;m). \tag{2.22}$$

これは,(2.18)の定義が,外場$U(\vec{r})$のみたすべき周期性を正しく反

映している事を示す。

## §3. 準粒子演算子とランダムフエイズ近似

この章では準粒子演算子を導入し，これと前章の近似的ハミルトニアンとの交換関係を求め，それをランダムフエイズ近似により線型化して分散関係を得る。この分散関係が，$\vec{k}\to 0$ で $\omega\to 0$ となるスペクトルを有する事を示す。

最初に次の演算子を考えよう；

$$B_{nm}(\vec{R}_i)=b_n(\vec{R}_i)^+ b_m(R_i)=B_{mn}(R_i)^+. \qquad (3.1)$$

交換関係（2．7）より

$$[B_{nm}(\vec{R}_i),\, B_{n'm'}(\vec{R}_j)]_- =\delta_{\vec{R}_i\vec{R}_j}\{\delta_{mn'}B_{nm'}(\vec{R}_i)-\delta_{nm'}B_{n'm}(\vec{R}_i)\}. \qquad (3.2)$$

前章の近似的ハミルトニアン $\mathscr{H}'$ をB－演算子で書き換えよう；

$$\mathscr{H}_0^{(a)}=\sum_i\sum_m \epsilon_m B_{mm}(\vec{R}_i) \quad , \qquad (3.3)$$

$$\mathscr{H}_I^{(ad)}=-\sum_i\sum_{mn} U_i(n;m)B_{nm}(R_i) +\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{m_1m_2n_1n_2} v_{ij}(n_1n_2;m_1m_2)\, B_{n_1m_2}(\vec{R}_i)B_{nm}(\vec{R}_j). \qquad (3.4)$$

上において，$v_{ij}$ 及び $U_i$ は夫々，（2．17）及び（2．18）によりK行列で与えられている。$\mathscr{H}'=\mathscr{H}_0^{(a)}+\mathscr{H}_I^{(ad)}$ の下でB－演算子の従う運動方程式は

$$[B_{nm}(\vec{R}_i),\mathscr{H}']_- =(\epsilon_m-\epsilon_n)B_{nm}(\vec{R}_i) +\sum_{n'}U_i(n',n)B_{n'm}(\vec{R}_i)-\sum_{m'}U_i(m,m')B_{nm'}(\vec{R}_i)$$

$$- \sum_{j(\neq i)} \sum_{m_1 m_2 n_1} \{ v_{ij}(m_1 m_2 ; n n_1) B_{m_1 m}(\vec{R}_i) B_{m_2 n_1}(\vec{R}_j)$$

$$- v_{ij}(m n_1 ; m_1 m_2) B_{n m_1}(\vec{R}_i) B_{n_1 m_2}(\vec{R}_j) \}. \tag{3.5}$$

ランダムフエイズ近似[7]は，上式の右辺の最後の項に対してなされる；

$$\left.\begin{aligned} B_{m_1 m}(\vec{R}_i) B_{m_2 n_1}(\vec{R}_j) &\approx \delta_{m_2 0} \delta_{n_1 0} B_{m_1 m}(\vec{R}_i) \nu_0(\vec{R}_j) \\ &\quad + \delta_{m_1 0} \delta_{m 0} B_{m_2 n_1}(\vec{R}_j) \nu_0(\vec{R}_i) \\ B_{n m_1}(\vec{R}_i) B_{n_1 m_2}(\vec{R}_j) &\approx \delta_{n_1 0} \delta_{m_2 0} B_{n m_1}(\vec{R}_i) \nu_0(\vec{R}_j) \\ &\quad + \delta_{n 0} \delta_{m_1 0} B_{n_1 m_2}(\vec{R}_j) \nu_0(\vec{R}_i) \end{aligned}\right\} \tag{3.6}$$

ここに，$\nu_0(\vec{R}_i)$は，$\mathscr{H}'$の基底状態においての格子点$\vec{R}_i$に存在する，バンド0（一体の基底エネルギーバンド）の粒子の数。今，$\mathscr{H}'$の基底状態を$\mathscr{H}_0^{(a)}$の基底状態

$$\Phi_0 = \prod_{i=1}^{N} w_0(\vec{r}_i - \vec{R}_i), \tag{3.7}$$

で近似すれば，

$$\nu_0(R_i) = B_{00}(R_i) \sim 1, \tag{3.8}$$

となる。こうして運動方程式は次の様に線型化される；

$$[B_{nm}(\vec{R}_i), \mathscr{H}']_- \cong (\varepsilon_m - \varepsilon_n) B_{nm}(\vec{R}_i)$$

$$+ \sum_{m'} \{ \sum_{j(\neq i)} v_{ij}(m0 ; m'0) - U_i(m ; m') \} B_{nm'}(\vec{R}_i)$$

$$- \sum_{n'} \left\{ \sum_{j(\neq i)} v_{ij}\,(n'{}_0 ; n_0) - U_i\,(n' ; n) \right\} B_{n'm}(\vec{R}_i)$$

$$+ \Delta_{nm} \sum_{j(\neq i)} \sum_{m'n'} v_{ij}\,(mm' ; nn')\,B_{m'n'}(\vec{R}_j)\ ,$$

(3．9)

ただし

$$\Delta_{nm} = \delta_{n0} - \delta_{m0} \quad . \qquad (3．10)$$

前章に与えられたK行列による$U_i$の定義（２．１８）及び$v_{ij}$の展開（２．１７）を代入すれば

$$[B_{nm}(\vec{R}_i),\mathscr{H}']_- \cong (\epsilon_m - \epsilon_n)\,B_{nm}(\vec{R}_i)$$

$$+ \Delta_{nm} \sum_{j(\neq i)} \sum_{m'n'} K_{ij}\,(mm' ; nn')\,Bm'n'\,(R_i)$$

$$+ \cdots\cdots, \qquad (3．11)$$

ここにKについて２次以上は書き下さなかった。

Ｂ－演算子とK行列の格子ベクトル依存性をフーリエ変換しよう；（２．２１）に注意して，

$$B_{nm}(\vec{R}_i) = N^{-1} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} A_{nm}(\vec{k}) \quad , \qquad (3．12)$$

$$K_{ij}\,(mm' ; nn') = N^{-1} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} K_{mm',nn'}(\vec{k}) .$$

(3．13)

これらを代入すれば（３．１１）は

$$[A_{mn}(\vec{k}),\mathscr{H}'] \cong (\epsilon_m - \epsilon_n)\,A_{nm}(\vec{k})$$

$$+ \Delta_{nm} \sum_{m'n'} K_{nn',mm'}(\vec{k})\,A_{n'm'}(\vec{k}) + \cdots ,$$

(3．14)

となる。ここではワニエ波が実である事から，

$$K_{mm',nn'}(\vec{k})=K_{nm',mn'}(\vec{k})=K_{mn',nm'}(\vec{k})$$
$$=K_{nn',mm'}(\vec{k}) \ , \qquad (3.15)$$

である事を使った。

今，$\mathscr{H}'$ のある固有状態を $\Psi'$，そのエネルギーを $E'$，また基底状態を $\Psi_0'$，基底エネルギーを $E_0'$ としよう；

$$\mathscr{H}'\,|\Psi'\rangle=E'\,|\Psi'\rangle \ ,$$

及び

$$\mathscr{H}'\,|\Psi_0'\rangle=E_0'\,|\Psi_0'\rangle \ .$$

さらに，

$$\left.\begin{array}{l} f_{nm}(\vec{k})\equiv\langle\Psi'\,|A_{nm}(\vec{k})\,|\Psi_0'\rangle \\ \text{及び} \\ E'-E_0'\equiv\ \omega \end{array}\right\} , \qquad (3.16)$$

とおく。この時，（3．14）は次になる；

$$\omega f_{nm}(\vec{k})\cong(\varepsilon_m-\varepsilon_n)f_{nm}(\vec{k})$$
$$+\Delta_{nm}\sum_{m'n'}K_{nn',mm'}(\vec{k})f_{n'm'}(\vec{k})+\cdots . \qquad (3.17)$$

この固有方程式の一般解を求める事は難かしいし，必要でもない。ここではまず，解のうちに，$\vec{k}\to 0$ で $\omega\to 0$ となる解が存在する事を示そう。今，

$$f_{nm}(\vec{k})=0 \quad \text{for} \quad m,n\neq 0 \quad \text{or} \quad m=n=0, \qquad (3.18)$$

なる解をさがそう。K行列の対称性（3．15）に注意し，（3．17）でそえ字mまたはnを0とし，$K^2$ 以上の項を落せば，$n\neq 0$ に対し，

$$(\omega+\epsilon_0-\epsilon_n)\, f_{n0}(\vec{k}) = \sum_{n'\fallingdotseq 0} K_{nn',00}(\vec{k})\, f_{n'0}(\vec{k}) + \sum_{m'\fallingdotseq 0} K_{nm',00}(\vec{k})\, f_{0m'}(\vec{k}), \qquad (3.19)$$

及び

$$(\omega+\epsilon_0-\epsilon_n)\, f_{n0}(\vec{k}) = -\sum_{n'\fallingdotseq 0} K_{nn',00}(\vec{k})\, f_{n'0}(\vec{k}) - \sum_{m'\fallingdotseq 0} K_{nm',00}(\vec{k})\, f_{0m'}(\vec{k}). \qquad (3.20)$$

これより

$$(\omega+\epsilon_0-\epsilon_n)\, f_{n0}(\vec{k}) + (\omega+\epsilon_n-\epsilon_0)\, f_{n0}(\vec{k}) = 0\ . \qquad (3.21)$$

そこで，

$$C_n(\vec{k}) = \sum_{n'\fallingdotseq 0} \left(\frac{\epsilon_{n'}-\epsilon_0}{\omega+\epsilon_{n'}-\epsilon_0}\right) K_{nn',00}(\vec{k})\, f_{n'0}(\vec{k}), \qquad (3.22)$$

とすれば，$f_{n0}$ は $C_n$ によって

$$f_{n0}(\vec{k}) = \frac{2}{\omega-\epsilon_n+\epsilon_0}\, C_n(\vec{k}) \ , \qquad (3.23)$$

と与えられ，$C_n$ は次の固有方程式をみたす；

$$C_n(\vec{k}) = 2\sum_{n'\fallingdotseq 0} \left(\frac{\epsilon_{n'}-\epsilon_0}{\omega^2-(\epsilon_{n'}-\epsilon_0)^2}\right) K_{nn',00}(\vec{k})\, C_{n'}(\vec{k})\ . \qquad (3.24)$$

こうして，$C_n(\vec{k})$ がハミルトニアン $\mathcal{H}'$ の，何らかの固有状態に対応するならば，そのモードは次の分散関係をみたす；

$$\det\left[\delta_{nn'} - 2\left(\frac{\epsilon_{n'}-\epsilon_0}{\omega^2-(\epsilon_{n'}-\epsilon_0)^2}\right) K_{nn',00}(\vec{k})\right] = 0\ . \qquad (3.25)$$

$$(n,\ n'\fallingdotseq 0)$$

この分散関係が $\vec{k}\to 0$ で $\omega\to 0$ を与える事を示そう。明らかにそのようなモードの存在条件は，

$$\det\left[\delta_{nn'}+\frac{2K_{nn',00}(0)}{\varepsilon_{n'}-\varepsilon_0}\right]=0, \qquad (3.26)$$

である。一方，(2.20)によりワニエ函数が，一体ハミルトニアンの良い固有状態となっているから，(2.18)に注意して[8)]

$$(\varepsilon_n-\varepsilon_m)\langle n\vec{R}_i|\vec{p}|m\vec{R}_i\rangle=\langle n\vec{R}_i|[H,\vec{p}]|m\vec{R}_i\rangle$$

$$=\sum_{m',n'}\Delta_{m'n'}K_{nn',mm'}(\vec{k}=0)\langle n'\vec{R}_i|\vec{p}|m'\vec{R}_i\rangle \quad . \qquad (3.27)$$

ワニエ函数は実だから，

$$\langle n\vec{R}_i|\vec{p}|m\vec{R}_i\rangle=-\langle m\vec{R}_i|\vec{p}|n\vec{R}_i\rangle \qquad (3.28)$$

である事に注意して次を得る；

$$(\varepsilon_n-\varepsilon_0)\langle n\vec{R}_i|p|0\vec{R}_i\rangle=-2\sum_{n'\neq 0}K_{nn',00}(0)\langle n'\vec{R}_i|p|0\vec{R}_i\rangle \, . \qquad (3.29)$$

これから(3.26)を示す事はたやすい。

こうして固有方程式(3.17)が，$\vec{k}\to 0$ で $\omega\to 0$ となるモードを解にもつ事が示された。次章において，この解がフォノンモードに対応する解である事を示そう。

## §4. フォノンとその分散関係

前章に得た固有方程式から，フォノンモードの解を取り出す為に，通常の格子力学の出発点に戻って考えてみよう。そこではフォノン演算子を，格子点からの位置のずれ

$$\vec{u}_i=\vec{r}_i-\vec{R}_i \quad ,$$

及び，対応する運動量 $\vec{p}_i = -i\hbar\vec{\nabla}_i$ の，$i=1\sim N$ までの互いに独立で共役な2組の演算子の線型結合によって導入した。これは，格子間隔に比して余り大きくない程度の平行移動の自由度についての励起を取り出すのに，最も自然で直接的なやり方である。この古典的な描像に沿ってフォノンモードを抽き出そう。

まず明らかな事は，$f_{nm}(\vec{k})$ のそえ字についての対称性に注目して，この振幅が平行移動自由度の励起をあらわすなら，次の様な対応が成立する；

$$\left.\begin{aligned} f^{(+)}_{nm}(\vec{k}) &\sim \vec{u}_{nm}(\vec{k}) \\ f^{(-)}_{nm}(\vec{k}) &\sim \vec{p}_{nm}(\vec{k}) \end{aligned}\right\} \tag{4.2}$$

ここに，対称化された振幅 $f^{(\pm)}_{nm}$ は

$$f^{(\pm)}_{nm}(\vec{k}) = \frac{1}{2}(f_{nm}(\vec{k}) \pm f_{mn}(\vec{k})) , \tag{4.3}$$

と定義し，$f^{(-)}_{nm}$ の符号は $n>m$ に対し定める事とする。また $\vec{u}_{nm}(\vec{k})$，$\vec{p}_{nm}(\vec{k})$ は，夫々

$$\left.\begin{aligned} \vec{u}_{nm}(\vec{R}_i) &= \langle n\vec{R}_i | \vec{u}_i | m\vec{R}_i \rangle = \vec{u}_{mn}(\vec{R}_i) \\ \vec{p}_{nm}(\vec{R}_i) &= \langle n\vec{R}_i | \vec{p}_i | m\vec{R}_i \rangle = -\vec{p}_{mn}(\vec{R}_i) \end{aligned}\right\}$$

の格子点依存についてのフーリエ変換である；

$$\left.\begin{aligned} \vec{u}_{nm}(\vec{k}) &= N^{-1/2}\sum_i e^{i\vec{k}\vec{R}_i}\vec{u}_{nm}(\vec{R}_i) \\ \vec{p}_{nm}(\vec{k}) &= N^{-1/2}\sum_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}\vec{p}_{nm}(\vec{R}_i) \end{aligned}\right\} \tag{4.4}$$

正準交換関係

$$i\,[\vec{p}(\vec{R}_i), \vec{u}(\vec{R}_j)]_- = \vec{1}\ \delta_{\vec{R}_i\vec{R}_j} , \tag{4.5}$$

よりただちに

$$i\,[\vec{p}(\vec{k}), \vec{u}(\vec{k})]_- = \vec{1}\ \delta_{\vec{k}\vec{k}'} . \tag{4.6}$$

この交換関係から，$\vec{u}_{nm}(\vec{k})$ の射影演算子が容易に得られる；実際それは次で与えられる，

$$\Pi_{nm,n'm'}=\sum_{\vec{k}} i\vec{u}_{nm}(\vec{k})\,\vec{p}_{n'm'}(\vec{k})\,\Delta_{n'm'} \qquad (4.7)$$

この射影演算子によって，（４．２）の対応に注意し，固有方程式（３．１７）あるいは，その対称化

$$\left[\omega^2-(\varepsilon_n-\varepsilon_m)^2\right] f^{(+)}_{nm}(\vec{k})$$
$$=-\sum_{n'm'}\Delta_{nm}(\varepsilon_n-\varepsilon_m)K_{nn',mm'}(\vec{k})\,f^{(+)}_{n'm'}(\vec{k}) \;,$$
$$(4.8)$$

から，格子点からのずれの自由度の振舞いをする部分だけを取り出そう。前章に求めた解（３．１８）を頭において，新しい振幅 $\bar{f}_{nm}$ を導入すると便利である；

$$\bar{f}_{nm}(\vec{k})=f^{(+)}_{nm}(\vec{k})/\tau_{nm}=\bar{f}_{mn}(\vec{k}) \;, \qquad (4.9)$$

ここに，

$$\tau_{nm}=-\Delta_{nm}(\varepsilon_n-\varepsilon_m)=\tau_{mn} \;. \qquad (4.10)$$

新しい振幅によって（４．８）を書きかえよう；

$$\omega^2\,\underset{\sim}{\bar{f}}(\vec{k})=G(\vec{k})\,\underset{\sim}{\bar{f}}(\vec{k}) \qquad (4.11)$$

ただし，

$$G_{nm,n'm'}(\vec{k})=(\varepsilon_n-\varepsilon_m)^2\delta_{nn'}\delta_{mm'}+K_{nn',mm'}(\vec{k})\,\tau_{n'm'} \;,$$
$$(4.12)$$

次に，固有方程式（４．１１）を，射影演算子 $\underset{\sim}{\Pi}$ によって，平行移動自由度の励起のみの部分空間に限る；

$$\omega^2(\underset{\sim}{\Pi}\,\underset{\sim}{\bar{f}}(\vec{k}))=(\underset{\sim}{\Pi}\,\underset{\sim}{G}(\vec{k})\,\underset{\sim}{\Pi})(\underset{\sim}{\Pi}\,\underset{\sim}{\bar{f}}(\vec{k})) . \qquad (4.13)$$

これが我々の解くべき固有方程式である。これが3つの独立な解を持つ事は，

$$T_r(\underset{\sim}{\Pi}) = 3$$

より明らか。3つの解は，フォノンの2つの横波，ひとつの縦波のモードに対応するものと予想される。

制限された固有方程式（4．13）を解く事はたやすい。和法則（3．27）及び，

$$\vec{p}_{nm}(\vec{k})\Delta_{nm} = -(im)\tau_{nm}\vec{u}_{nm}(\vec{k}), \qquad (4.14)$$

とによって，次を示す事が出来る；

$$(\underset{\sim}{\Pi}\,\underset{\sim}{G}(\vec{k})\,\underset{\sim}{\Pi})_{nm,n'm'} = -im^{-1}\sum_{i\neq j}(e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}-1)$$
$$\times\vec{u}_{nm}(\vec{R}_i)\cdot\langle 00;ij|\overrightarrow{\nabla}_i K_{ij}\overleftarrow{\nabla}_j|00;ij\rangle\cdot\vec{p}_{n'm'}(\vec{R}_j)\Delta_{n'm'}.$$

$$(4.15)$$

そこで，

$$\sum_{n'm'} i\vec{p}_{n'm'}(\vec{R}_j)\Delta_{n'm'}\vec{u}_{n'm'}(\vec{R}_{i'}) = \vec{1}\,\delta_{\vec{R}_j\vec{R}_{i'}},$$

に注意して，射影された振幅を次の形に置く；

$$(\underset{\sim}{\Pi}\,\underset{\sim}{\bar{f}}(\vec{k}))^{(\lambda)}_{nm} = \sum_{i'}\vec{u}_{nm}(\vec{R}_{i'})\vec{v}_{i'}^{(\lambda)}(\vec{k}), \qquad (4.16)$$

ここに，$\lambda = 1, 2, 3$は，3つの解を区別する指標である。この時（4．13）は次に帰する；

$$\omega^{(\lambda)}(\vec{k})^2\,\vec{v}_i^{(\lambda)}(\vec{k}) = m^{-1}\sum_{j(\neq i)}(1-e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)})$$
$$\times\langle 00;ij|\overrightarrow{\nabla}_i K_{ij}\overleftarrow{\nabla}_j|00;ij\rangle\cdot\vec{v}_j^{(\lambda)}(\vec{k}). \qquad (4.17)$$

この方程式が $\lambda=1.2.3$ で区別される3つの解を持つ事から，$\vec{v}_i^{(\lambda)}(\vec{k})$ は実は偏極ベクトルに他ならない事が判る；

$$\vec{v}_i^{(\lambda)}(\vec{k})=\vec{e}^{(\lambda)}(\vec{k}) . \qquad (4.18)$$

偏極ベクトルの直交性から，分散関係の陽な表現が得られる；

$$\omega^{(\lambda)}(\vec{k})^2\,\delta_{\lambda\lambda'}=m^{-1}\sum_{j(\neq i)}(1-e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)})$$
$$\times\vec{e}^{(\lambda)}(\vec{k})\cdot\langle 00;ij|\vec{\nabla}_i K_{ij}\overleftarrow{\nabla}_j|00;ij\rangle\cdot\vec{e}^{(\lambda)'}(\vec{k}) .$$
$$(4.19)$$

勿論この表現は，平行移動不変性によって $\vec{R}_i$ によらない。また，空間反射対称性（2．21）から，右辺は $\vec{k}^2$ の函数であり，従って充分小さい $|\vec{k}|$ に対して，

$$\omega(\vec{k})^2\underset{\vec{k}\to 0}{\sim}\vec{k}^2 , \qquad (4.20)$$

となり，音波モードのみたすべき分散関係となっている。この重要な結果に導いたのは，序にも強調した様に，一体場Uに対する定義（2．18）に他ならない。これによって，定まった格子構造を取る事によって基底状態が破っていた平行移動不変性を，励起状態において回復する“ゴールドストン粒子”即ちフォノンの出現が保証されたのである。

## §5. 簡単な議論

フォノンの分散関係（4．19）について見てみよう。この分散式，あるいは（3．25）の分散式からも判る通り，フォノンスペクトルの計算には，2体K行列の成分

$$K_{nn',00}(\vec{k})$$

の知識が必要である。ところで，I N－2で明らかにされたように，この行列要素は，そこに与えられた2体方程式の基底状態の知識さえあれば，すべて求

められる。こうして問題はセルフコンシステントな外場U($\vec{r}$) を含むこの2体方式の基底状態をいかに求めるかに帰するが，その最も簡単な試みが，既にIN－1において行われている。従って，この分散式は，数値的にも解き得るのであり，その実行も近い将来なされるであろう。

最後に，格子力学については全くの素人の著者に，この問題の重要性を指摘され，必要な知識の指導と，絶えざる“シツタゲキレイ”とを与えて下さった，東大教養物理の岩本文明氏に，心から感謝したい。

## 参 考 文 献


1) M. Born and K. Huang, “Dynamical Theory of Crystal Lattices”, (Oxford Oniversity Press, London, 1954).

2) R. A. Guyer, Solid State Phys. 23, 413(1969).
当座のレビューとして；これを見られたい。

3) 文献2)を見よ。

4) F. Iwamoto and H. Namaizawa,, Suppl. Prog. Theor. Phys. 37/38, 234(1966). 以下にIN－1と参照。

5) F. Iwamoto and H. Namaizawa, Prog. Theor. Phys. 45, 682 (1971). 以下にIN－2と参照。

6) 従来迄の方法のレビューと文献表については，N. R. Werthamer, Am. J. Phys. 37. 763(1969), を見よ。

7) K. Sawada, Phys. Rev. 106, 372(1957).

8) この和法則の重要性は，D. R. Fredkin and N. R. Werthamer, Phys. Rev. 138, A1527(1965), によって指摘された。