

# 15. 固体ヘリウムの基底エネルギー (2次の摂動項について)

名 大・工 本 間 重 雄  
東大・教養 永 井 克 彦  
東大・教養 生 井 沢 寛

我々の目的は、Iwamoto - Namaizawa<sup>1)</sup> 及び Namaizawa<sup>2)</sup> によって提出された固体ヘリウムの理論に基いて、基底エネルギーの摂動展開と音波の分散関係、及びそれから導出される熱力学量を計算する事である。計算は未だ完了していないので、これまでに得た結果を簡単に報告したい。

上の定式化<sup>1), 2)</sup> によればエネルギーと音波分散は反応行列 K によって計算される。K は以下の Self-consistent な方程式の組を解いて得られる。

$$H_i \phi_i(n) = (\vec{p}_i^2 / 2m + U_i) \phi_i(n) = \epsilon_n \phi_i(n) \quad (1)$$

$$(H_i + H_j + \bar{v}_{ij}) \psi_{ij} = e_{ij} \psi_{ij} \quad (2)$$

$$\langle n | U_i | m \rangle = \sum_{j(\neq i)} \langle n 0 | K_{ij} | m 0 \rangle \quad (3)$$

$$K_{ij} \phi_i(0) \phi_j(0) = U_{ij} \psi_{ij} \quad (4)$$

ここに  $\psi_{ij}$  は(2)の基底状態であり、 $\langle n | U_i | m \rangle$  等の行列要素は(1)の1体状態についてとる。2体作用  $\bar{v}_{ij}$  としては、IIで示めされた例のうち、生の作用  $v_{ij}$  そのものとするやり方を取る ( $v_{ij}$  は Lennard-Jones とする) :

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} \quad (5)$$

この時、基底エネルギーは

$$\left. \begin{aligned} E_0 - N\epsilon_0 &= E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \dots \\ E^{(1)} &= - \sum_{i>j} K_{ij}(00:00) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

$$E^{(2)} = 2 \sum_{i>j} \sum_{m \neq 0} \frac{|K_{ij}(m0:00)|^2}{\epsilon_m - \epsilon_0} \quad \Bigg\}$$

音波の分散は次で与えられる。

$$\det \left[ \delta_{nm} - 2 \frac{(\epsilon_m - \epsilon_0)}{(\omega(\vec{k})^2 - (\epsilon_m - \epsilon_0)^2)} K_{nm,00}(\vec{k}) \right]_{n,m \neq 0} = 0 \quad (7)$$

ここに  $K_{nm;00}(\vec{k})$  は  $K_{ij}(n0:m0)$  フーリエ変換。Self-consistent な組 (1)~(4) を解くに当たっては I で提出された“調和振動子近似” 便利である。等方的な場合には、この近似は 1 体場を

$$U_i = U(\vec{r} - \vec{R}_i) = U(0) + \frac{1}{2}m\omega^2(\vec{r} - \vec{R}_i)^2 + \dots \quad (8)$$

と展開して ( $\vec{R}_i$  は格子点),  $U(0)$ ,  $\omega$  (or  $\alpha^2 = m\omega/\hbar$ ) ..... を (1)~(4) に代入して、これら展開係数を Self-consistent に決める事になる。I では 2 体方程式 近似解

$$\left. \begin{aligned} \psi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') &\propto e^{-\alpha^2 \frac{\vec{X}^2}{2}} \times e^{-\frac{\alpha^2}{4} \eta^2} \times \xi^{-1} U_0(\xi) \\ U_0(\xi) &= \exp \left\{ -(50)^{-1/2} \lambda^{-1} \xi^{-s} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

を用いた。これはハードコアは充分良く処理している。ただし、

$$\vec{X} = \frac{1}{2}(\vec{r} - \vec{R}_i + \vec{r}' - \vec{R}_j), \quad \vec{\eta} = \vec{r} - \vec{R}_i - (\vec{r}' - \vec{R}_j), \quad \eta = |\vec{\eta}|$$

$$\xi = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

とした。また  $\lambda$  は 2 体作用のパラメーター  $|v_0|$ ,  $r_0$  (ポテンシャル最小の値と位置) より決る無次元数

$$\lambda^2 = \hbar^2 (2m r_0^2 |v_0|)^{-1}$$

2 体方程式(2)の解を解析的により詳しく追求するのは大変なので、ここでは(9)を再び採用する。数値的に(2)を解く前に、(9)の近似で(6), (7)からどんな結果が出るかを見て置く事は意味のある事である。

本間重雄, 永井克彦, 生井沢 寛

現在までに計算したのはエネルギーの2次の項までである。(6)ないし(7)の中のK行列要素は, (8)の調和振動子ポテンシャルの解を用いて近似する。これは, 余り高いエネルギーレベルまでを用いない限り, 格子原子の局在性から許される近似である。この時1粒子状態は主量子数  $n$ , 角運動量  $l$ , その  $z$  成分  $m$  で指定され, K行列要素は次の様になる。

$$\begin{aligned}
 & K_{ij}(n_1 l_1 m_1, n_2 l_2 m_2; 0, 0) \\
 &= \sqrt{2} \sum_n \sum_l \sqrt{2l+1} \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l 0 \rangle \langle n l 0 0; l | n_1 l_1 n_2 l_2; l \rangle^* \\
 & \quad \times K_{n l}(R_{ij}; \alpha^2) / I(R_{ij}; \alpha^2/2) \tag{10}
 \end{aligned}$$

ここに

$$\begin{cases} 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 = 2n + l \equiv \rho \\ |l_1 - l_2| \leq l \leq |l_1 + l_2| \end{cases} \tag{11}$$

また,  $\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l m \rangle$  は C-G 係数,  $\langle n l N A; \lambda | n_1 l_1 n_2 l_2; \lambda \rangle$  は Talmi 係数<sup>3)</sup> 更に

$$\begin{aligned}
 K_{n l}(x; \alpha^2) &= \int_{\xi+\eta \geq x} \int_{x \geq |\xi-\eta|} d\xi d\eta u(\xi) u_0(\xi) \bar{R}_{n l}(\eta; \alpha^2) \\
 & \quad \times P_l \left( \frac{\xi^2 - \eta^2 - x^2}{2\eta x} \right) \\
 I(x; \alpha^2/2) &= \int_0^\infty d\xi u_0(\xi) \left( e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-\xi)^2} - e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x+\xi)^2} \right)
 \end{aligned}$$

$$\bar{R}_{n l}(\eta; \alpha^2) = 2^{-1/4} \pi^{1/4} \alpha^{1/2} \eta R_{n l}(\eta; \alpha^2/2)$$

たゞ  $R_{n l}$  は  $\phi_{n l m}$  の軌道部分, こうして(6)の2次項  $E^{(2)}$  は次となる;

$$E^{(2)} = (2\lambda^2 \alpha^2)^{-1} \sum_{i \neq j} \sum_{(n, l) \neq (0, 0)} \frac{|K_{ij}(n l 0, 0; 0, 0)|^2}{(2n + l)} \tag{12}$$

我々は中間状態として最も低い

$$(n, l) = (1, 0), (0, 2)$$

固体ヘリウムの基底エネルギーのみを取った (odd  $l$  はパリティ保存から無い)。例として bcc He<sup>3</sup> 結果を実験値<sup>4)</sup> (破線) と共に示す。格子点は 13 Neighbours まで入れた。点線は 1 次までのエネルギー

$$N\epsilon_0 + E^{(1)}$$

である。この項への更に遠い Neighbours からの寄与は ~% 程度。全般的に実験値より 4~5 cal/mole 下りすぎの値を与える。一方実線は 2 次までのエネルギー

$$N\epsilon_0 + E^{(1)} + E^{(2)}$$

を示す。E<sup>(2)</sup> に対しては 4 th Neighbours 以降からの寄与は無視し得る。E<sup>(2)</sup> により 3 cal/mole 程エネルギーは上昇して、実際値との一致が充分良くなる。強調すべき事は、1 次までのエネルギー計算においては、大きさが 40 cal/mole 程度の互いに拮抗する正エネルギー (運動エネルギー) と負エネルギー (ポテンシャルエネルギー) とが相殺して、小さな凝集エネルギーを与えるという事情である。これこそ固体ヘリウムの様な “量子固体” の取扱いを困難にした事情であり、通常の固体と全く異なる点である。従って E<sup>(2)</sup> の相対的寄与は (Nε<sub>0</sub> + E<sup>(1)</sup>) と比べてはいけない。E<sup>(1)</sup> と比べるべきであって、この場合

$$|E^{(2)} / E^{(1)}| \sim 3/40 \lesssim 1/10$$

となっていて充分小さい。E<sup>(3)</sup> については、今までの結果を使って当たれる項のみを調べると一応

$$|E^{(3)} / E^{(2)}| \sim 1/10$$

となっている。摂動展開の収束は良い様である。<sup>2)</sup>

図から見て我々の計算は実験に比して、体積依存性が弱い。この原因は (2) の近似解を (9) にとった為であろう。(9) は α<sup>2</sup> を通じてのみ体積依存する。(2) をもっと詳しく解けば、更に体積に依存する項が入るはずである。

上の結果から自信を得たので、計算を更に進めるつもりである。今後の計画としては、

- ① 近似解 (9) を使って音波分散を出す。
- ② 2 体方程式 (2) を数値的に解いて、エネルギーと音波分散を計算する。

本間重雄, 永井克彦, 生井沢 寛

③ IIに提出されたもうひとつの例

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} - (K_{ij}\hat{i} + K_j\hat{i}) \quad (5)$$

$$\langle \phi_i(n) | K_{ij}\hat{j} | \phi_i(m) \rangle = K_{ij}(n_0, m_0)$$

に対して(1)~(4)を解き, エネルギーと音波分散を出し, (5)の選択と比較する。

④ 両方の例につき, 圧力, Compressibility, 比熱等を出す。

⑤ 両方の例に対して3次項  $E^{(3)}$ の大きさを当たって収束性をチェックする。

我々の研究は, 71年度後半の基研モレキュール型研究会として始められた。今後も上述の計画に沿って研究を進めて行くつもりであるが, 以上を報告の一端とし, 基研に感謝したい。

### 参 考 文 献

1) F. Iwamoto and H. Namaizawa, Prog. Theor. Phys. Suppl. 37 and 38 ('66) 234 及び Prog. Theor. Phys. 45 ('71) 682

以下には前者を I, 後者を II と呼ぶ。

2) H. Namaizawa Prog. Theor. Phys. 48 ('72) to be appeared

3) I. Talmi Helv. Phys. Acta. 25 ('52) 185

A. Arima and T. Terasawa, Prog. Theor. Phys. 23 ('60) 115

T. A. Brody and M. Moshinsky, "Tables of Transformation Brackets", Gordon and Breach, New York 1967

4) R. C. Pandorf and D. O. Edwards, Phys. Rev. 169 ('68) 222

