京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

京都大学
KYOTO UNIVERSITY

Title	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 (「量子液体と量子固体の理論」研究会報告,基研短期研究会報告)
Author(s)	本間, 重雄; 永井, 克彦; 生井沢, 寛
Citation	物性研究 (1972), 18(6): G50-G54
Issue Date	1972-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88501
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Kyoto University

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[1]及びNamaizawa[2]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，及びそれら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[1),2)]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。

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

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

$$\langle n|U_i|m\rangle = \sum_{j(\neq i)} \langle n0|K_{ij}|m0\rangle \tag{3}$$

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

こゝにψ_{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採る（v_{ij}はLennard－Jonesとする）：

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} \tag{5}$$

この時，基底エネルギーは

$$\left.\begin{aligned} E_0 - N\varepsilon_0 &= E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \cdots\cdots \\ E^{(1)} &= -\sum_{i>j} K_{ij}(00:00) \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

$$E^{(2)} = 2 \sum_{i>j} \sum_{m \neq 0} \frac{|K_{ij}(m0:00)|^2}{\varepsilon_m - \varepsilon_0} \Bigg)$$

音波の分散は次で与えられる。

$$\det \left[\delta_{nm} - 2 \frac{(\varepsilon_m - \varepsilon_0)}{\{\omega(\vec{k})^2 - (\varepsilon_m - \varepsilon_0)^2\}} K_{nm,00}(\vec{k}) \right]_{n,m \neq 0} = 0 \qquad (7)$$

ここに$K_{nm;00}(\vec{\kappa})$ 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

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

と展開して（$\vec{R}_i$ は格子点），$U(0)$, ω（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

$$\left.\begin{aligned} \psi_{ij}(\vec{r}, \vec{r}') &\propto e^{-\alpha^2 \vec{X}^2} \times e^{-\frac{\alpha}{4}^2 \eta^2} \times \xi^{-1} U_0(\xi) \\ u_0(\xi) &= \exp\{-(50)^{-1/2} \lambda^{-1} \xi^{-s}\} \end{aligned}\right\} \qquad (9)$$

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 λ 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。

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。

$$K_{ij}(n_1\ell_1m_1, n_2\ell_2m_2\ ;\ 0,\ 0)$$

$$=\sqrt{2}\sum_{n}\sum_{\ell}\sqrt{2\ell+1}\ \ <\ell_1m_1\ell_2m_2\ |\ \ell 0><n\ell\ 0\ 0;\ell\ |\ n_1\ell_1n_2\ell_2;\ell^*>$$

$$\times\ K_{n\ell}(R_{ij}\ ;\ \alpha^2)\ /\ I(R_{ij}\ ;\ \alpha^2/2) \qquad (10)$$

ここに

$$\begin{cases} 2n_1+\ell_1+2n_2+\ell_2=2n+\ell\ \equiv\ \rho \\ |\ \ell_1-\ell_2\ |\ \leq\ \ell\ \leq\ |\ \ell_1+\ell_2\ | \end{cases} \qquad (11)$$

また，$<\ell_1m_1\ell_2m_2\ |\ \ell m>$ はC－G係数，$<n\ell\ N\Lambda;\lambda\ |\ n_1\ell_1n_2\ell_2;\lambda>$ はTalmi 係数[3] 更に

$$K_{n\ell}(x:\alpha^2)=\int\int_{\xi+\eta\geq x\geq|\xi-\eta|} d\xi\, d\eta\, u(\xi)\, u_0(\xi)\ \bar{R}_{n\ell}(\eta;\alpha^2)\times P_\ell\left(\frac{\xi^2-\eta^2-x^2}{2\eta x}\right)$$

$$I(x:\alpha^2/2)=\int_0^\infty d\xi\, u_0(\xi)\left(e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-\xi)^2}-e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x+\xi)^2}\right)$$

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

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

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

我々は中間状態として最も低い

$$(n,\ell)=(1,0),\ \ (0,2)$$

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^3 結果を実験値[4]（破線）と共に示す。格子点は１３Neighboursまで入れた。点線は1次までのエネルギー

$$N\varepsilon_0 \quad + \quad E^{(1)}$$

である。この項への更に遠いNeigbours からの寄与は　～%程度。全般的に実験値より４～５cal／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

$$N\varepsilon_0 \quad + \quad E^{(1)} \quad + \quad E^{(2)}$$

を示す。$E^{(2)}$に対しては4 th Neighbours　以降からの寄与は無視し得る。$E^{(2)}$により３cal／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４０cal／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る点である。従って$E^{(2)}$の相対的寄与は（$N\varepsilon_0 + E^{(1)}$）と比べてはいけない。$E^{(1)}$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。$E^{(3)}$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。[2]

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^2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。

③　Ⅱに提出されたもうひとつの例

$$\bar{v}_{ij} = v_{ij} - (K_i\hat{j} + K_j\hat{i}) \qquad (5')$$

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

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。

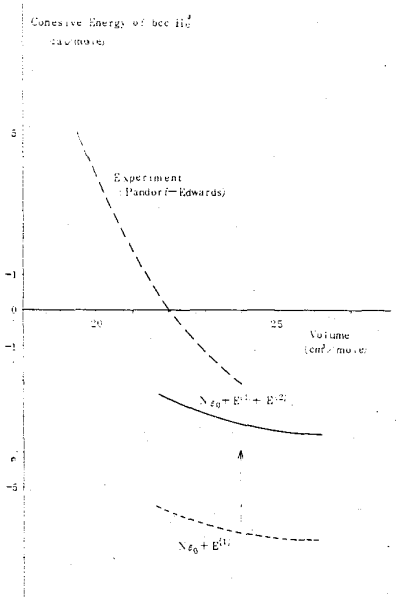
⑤　両方の例に対して3次項 $E^{(3)}$ の大きさを当たって収束性をチエックする。

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