液体 ^{4}He における Ripplon の集団運動について

東理大工　唐島　照介　　中島　滉

（11月13日受理）

§1. まえがき

1953年に Atkins[1] によって液体 ^{4}He の表面張力の温度依存性の理論($\omega(k) \sim k^{3/2}$, $\sigma(T) \sim T^{7/3}$)が提出されて以来，液体 ^{4}He の表面素励起（Ripplon）や表面張力などについて多くの研究がなされてきた。最近 Edward 達[2] は Atkins-Narahara[3] の理論に圧縮性，phonon の分散，及び Gibbs の surface mass の効果を取り入れて表面張力と表面エントロピーを調べた。その結果，Reut と Fisher[4] が前に指摘したように Ripplon のスペクトルが roton と類似の最小値を持つことを明示した。一方，Ebner と Saam[5] は密度汎関数の理論を使って，かなり精密に ^{4}He の表面を取扱っている。従がって液体 ^{4}He の表面励起の問題は量子力学的多粒子系の運動と考えられるので，このノートではそれ等の集団運動の取扱いとして Tomonaga の方法[6] を応用して3次元の場合に対して集団座標と運動量を作ることを試みる。

§2. 集団座標と集団運動量

液体ヘリウムの表面は平衡状態で $z=0$ にあり，Ripplon の波はその $x-y$ 面上に伝わり，$z<0$ の方向に次第に減衰してゆく。そこで速度ポテンシャルとして $x-y$ 面内の振動と z －方向の減衰を含んだ形を取るので，一般的には3次元の振動を考え，後で複素ベクトルの式で書換えることにより Ripplon の場合の関係式を導くことが出来る。

単位体積中に N 個の粒子を含んだ系で，非圧縮性で渦の無い流体において2体力によって互いに作用し合っている集団状態を考える。$\nabla^2\phi=0$ を満足する displacement potential として $\phi=\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ を考えることが出来る。ここで集団座標として次の式をとる：

$$\xi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{N}\sum_{n}\phi_{\mathbf{k}}(\boldsymbol{r}_n) = \frac{1}{N}\sum_{n} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n}\ ;\ \xi_{-\boldsymbol{k}} = \xi_{\boldsymbol{k}}^{*} \tag{1}$$

今集団運動量演算子としてTomonagaの方法により

$$\pi_{\boldsymbol{k}}^{(0)} = \sum_{n}\frac{1}{k^2}\nabla_n\phi_{-\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}_n)\cdot\boldsymbol{P}_n \tag{2}$$

を作り(1)と(2)の交換関係を調べると

$$[\pi_{\boldsymbol{k}}^{(0)},\ \xi_{\boldsymbol{k}'}] = -i\hbar\delta_{k,k'} - i\hbar\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'}{k^2}\xi_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}}\ , \tag{3a}$$

$$[\pi_{\boldsymbol{k}}^{(0)},\ \pi_{\boldsymbol{k}'}^{(0)}] = -i(-i\hbar)^2\sum_{n}\frac{1}{k^2\cdot k'^2}\sum_{n} e^{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot r_n}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\nabla_n. \tag{3b}$$

となって明らかに正準共役な関係を満していない。交換関係を検討するに当って(3b)を次のように書換える。

$$[\pi_{\boldsymbol{k}}^{(0)},\ \pi_{\boldsymbol{k}'}^{(0)}] = -i\hbar(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')\{(k^2-k'^2)\pi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'}^{(0)} + 2(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}')\cdot\Phi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'}\}\ , \tag{4}$$

ここで

$$\pi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'} = \frac{-i}{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'|^2}\sum_{n}\exp\{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_n\}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{P}_n\ , \tag{5}$$

$$\Phi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'} = \frac{-i}{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'|^2}\sum_{n}\exp\{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_n\}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\times\boldsymbol{P}_n. \tag{6}$$

更に(6)の内容を調べるために

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}')\exp\{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_n\} \tag{7}$$

というベクトルの式を考えると(6)は rot $\boldsymbol{A}$ を使って表わすことが出来る。すなわち

$$(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}')\cdot\Phi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'|^2}\sum_{n}\mathrm{rot}\ \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}_n \tag{8}$$

この(8)をみると，最初のモデルである渦なし流体という集団運動に対して，新たに rot $\boldsymbol{A}$という量の自由度が付加したことがわかる。この項は我々の集団運動の中では，なにか摩擦的な力が生じたことと解釈出来る。それ故 rot $\boldsymbol{A}\,|>=0$ を仮定する。 この仮定が成り立つために，ある状態ベクトル $|>$ に constraint $|>\simeq 0$ という条件を付け加える。すなわち

$$\Phi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'}|0>=0$$

これにより $[\Phi_{k},\Phi_{k'}]\,|>=0$.

これ等の cnnstraint を付加条件とする限り，(8)は任意の状態に対して明らかに消去される。次に粒子の運動量$\boldsymbol{P}_{n}$ は集団運動と内部運動 ($\boldsymbol{\Omega}$) の部分よりなり立っているので，次の式に表わすことが出来る。

$$\boldsymbol{P}_{n}=\sum_{n}\nabla_{n}\xi_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\pi}_{\boldsymbol{k}}+\sum_{s}\nabla_{n}\eta_{s}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{s} \tag{9}$$

ここに η_{s} は内部運動の座標を表わす。 $\pi_{k}=\sum_{n}f_{n}(\boldsymbol{r}_{n})\cdot\boldsymbol{P}_{n}$ として(9)に代入し $\pi_{\boldsymbol{k}}$と η_{k} との直交条件を考慮する。得られた積分方程式において π_{k} を $\pi_{k}^{(0)}$と置きなおし (3a) の関係を使うと， ξ_{k} に正準共役な運動量として結局次の式を求めることが出来る。

$$\pi_{k}=\pi_{k}^{(0)}-\sum_{k'}{}'\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'}{\boldsymbol{k}^{2}}\xi_{k'-k}\,\pi_{k'} \tag{10}$$

$$[\pi_{k},\xi_{k}]=-i\hbar,\quad [\pi_{k},\pi_{k'}]=0 \tag{11}$$

§ 3. 結　論

Tomonaga の方法は集団運動を記述するのに非常に有効な理論であるが，それを 3 次元の場合に拡張しょうとすると ξ に正準共役な運動量を作ることに困難な問題が生じる。§ 2 で述べたような constraint を考える範囲では ξ_{k} と π_{k} とを正準共役な形に求めることが出来る。ここで Ripplon の場合に対して §2 のはじめに述べたことを考慮して式を求めると次の関係が得られる。

$$\pi_{k}=\pi_{k}^{(0)}-\sum_{k'}{}'\frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'+kk')}{2k^{2}\gamma_{2k}}\xi_{k'-k}\,\pi_{k'}$$

$$= -i\hbar\left\{\frac{-i}{2k^2\gamma_{2k}}\sum_n e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\rho_n} e^{kz_n}(\boldsymbol{k}+ik\boldsymbol{e}_3)\cdot\nabla_n\right\}$$

$$-i\hbar\sum_{k'}{}' \frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'+kk')}{2k^2\gamma_{2k}}\xi_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}}\cdot\frac{i}{2k'^2\gamma_{2k'}}\sum_n e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\rho_n}e^{k'z_n}(\boldsymbol{k}'+ik'\boldsymbol{e}_3)\cdot\nabla_n+\cdots \tag{12}$$

ここで $\gamma_{2k}=1/2k(1-\exp(-2k\delta))$ を表わし δ は原子間の平均距離である。Hamiltonian の中の集団運動部分 H_c は

$$H_c=T_c+T_{in}^{(2)}+V_{\boldsymbol{k}}^{(2)}\xi_{-\boldsymbol{k}}\xi_{\boldsymbol{k}} \tag{13}$$

$V_{\boldsymbol{k}}^{(2)}$ は ξ について級数展開をおこなった時のポテンシャルの部分の係数である。$T_{in}^{(2)}$ は内部座標から内部運動エネルギーを求めた時 ξ について２次の項を含むものである。(13) より Ripplon のエネルギー，表面張力などを求めることが出来る。$V_{\boldsymbol{k}}^{(2)}$，及び内部座標を得るために，一般の関数 $f(\boldsymbol{r})$ にたいして

$$f(\boldsymbol{r})=f^{(0)}+\sum_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}\xi_{\boldsymbol{k}}+\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} f_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}^{(2)}\xi_{\boldsymbol{k}'}\xi_{\boldsymbol{k}} \tag{14}$$

の展開係数 $f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$，$f_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}^{(2)}$ はそれぞれ

$$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}=\frac{1}{\hbar}[\pi_{\boldsymbol{k}},\ f(\boldsymbol{r})]+\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\boldsymbol{k}'}[\pi_{\boldsymbol{k}'}[\pi_{\boldsymbol{k}},\ f(\boldsymbol{r})]]\xi_{\boldsymbol{k}'} \tag{15}$$

$$f_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}^{(2)}=\frac{1}{2\hbar^2}[\pi_{\boldsymbol{k}'}[\pi_{\boldsymbol{k}},f(\boldsymbol{r})]]. \tag{16}$$

の形に求まるので (15)，(16) を使って内部座標は $f^{(0)}$ の頃より

$$\eta_s^{(\ell)}=\boldsymbol{e}_\ell\cdot\boldsymbol{r}_s+\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{(\boldsymbol{k}+ik\boldsymbol{e}_3)\cdot\boldsymbol{e}_\ell}{2k^2\gamma_{2k}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\rho}_s}e^{RZ_s}\xi_{\boldsymbol{k}}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,q}\frac{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}-qk)}{2q^2\gamma_{2k}}\cdot\frac{(\boldsymbol{k}+ik\boldsymbol{e}_3)\cdot\boldsymbol{e}_\ell}{2k^2\gamma_{2k}}e^{-i(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\rho}_s}e^{(q+k)Z_s}\xi_q\xi_{\boldsymbol{k}}. \tag{16}$$

従って $T_{in}^{(2)}$ は $\Omega_{s'}^{+}(\sum_n \nabla_n \eta_{s'}^{*} \cdot \nabla_n \eta_s)\Omega_s$ の項を計算して ξ の２次の項を集めればよい。e^{2kz} の項は δ で平均をとると近似的に次式を得る。

$$T_{in}^{(2)} = \frac{1}{2m} \sum_k \left\{ \frac{5R}{\delta(1-\exp(-2k\delta))} + \frac{\pi^2 k}{12\delta^3 \cdot N\delta} \right\} \Omega_3^{+} \Omega_3 \tag{17}$$

一方ポテンシャル $V_k^{(2)}$ も (16) より求まる。T_c は $T_c = \frac{1}{2} m \sum_n \nabla_n \xi_{-k} \cdot \nabla_n \xi_k \pi_{-k} \pi_k$ より得られるのでこれ等の式から，ポテンシャルの形を与える事によって ω_c を計算することが出来る。

References

1) K. R. Atkins, Can. J. Phys. **31** (1953), 1165.
2) D. O. Edwards, J. R. Eckardt, and F. M. Gasparini, Phys. Rev. **A9** (1974), 2070.
3) K. R. Atkins and Y. Narahara, Phys. Rev. **138A** (1965), 437.
4) L. S. Reut and I. Z. Fisher, Sov. Phys. -JETP **33** (1971), 981.
5) C. Ebner and W. F. Saam, Phys. Rev. **B12** (1975), 923.
6) S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **13** (1955), 467, 482.