

16. 固体 He の 理 論

東大・物性研 黒 田 義 浩

〃 栗 原 康 成

群馬大・工 石 村 礼 和

固体 He の理論に関して、岩本 & 生井沢 ('66, '71) (以下 I-N理論と呼ぶ) が、非常に興味深い議論を行なった。又、最近、それに類する多くの仕事になされて来ているが、たゞ、それらの議論は必ずしも多体論的に基礎付けがされている訳ではない。我々は、ここで I-N理論を吟味し、更にその一般化を試みる。

考えるモデルは、

$$H = T + V, \quad (T = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2, \quad V = \sum_{i < j} v_{ij})$$

で、2体相互作用 v_{ij} としては、例えば Hard Core を含む現象論的 Potential をとる。こゝで、勝手な2体相互作用 u_{ij} (但し、Hard Core を含まぬものとする。)を導入して、Hを形式的に、

$$H = H_0 + H_1, \quad (H_0 \equiv T + U, \quad H_1 \equiv V - U, \quad U \equiv \sum_{i < j} u_{ij})$$

と変形し、無摂動系 H_0 に対して、 H_1 を摂動として取扱うことを考える。従って、その際、 u_{ij} は摂動展開の収束が良くなるように、適当に選ばばよい。

さて、我々は、 u_{ij} の具体的な選び方として、例えば、基底状態のエネルギーを求める摂動展開に於いて、その中で、2体の多重散乱からの寄与 $\Delta E'$ ($\Delta E' = \langle 0 | \sum_{i < j}$

$$k_{ij} | 0 \rangle, \quad k_{ij} = -u_{ij} + \tilde{v}_{ij} - u_{ij} \cdot g_0 \cdot \tilde{v}_{ij} - \tilde{v}_{ij} \cdot g_0 \cdot u_{ij} - v_{ij} \cdot g_0 \cdot u_{ij} + \dots, \\ \tilde{v}_{ij} = [1 - v_{ij} \cdot g_0]^{-1} \cdot v_{ij}, \quad g_0 = \frac{1 - |0\rangle\langle 0|}{W_0 - H_0},$$

$$H_0 | 0 \rangle = W_0 | 0 \rangle$$

が零になるようにする。こゝで、 k_{ij} 最初の2項のみを用いて、

$$(-u_{ij} + \tilde{v}_{ij}) | 0 \rangle = 0$$

になるように u_{ij} を選べば, 本質的に I-N理論を与える。(厳密には H_0 に対して, Hartree近似更に Harmonic 近似を施したもの)

次に, k_{ij} を少し変形すると

$$k_{ij} = [1 + u_{ij} \cdot g_0]^{-1} \cdot [-u_{ij} + v_{ij}(1 + g \cdot k_{ij})] \quad \text{となり,}$$

$$[-u_{ij} + v_{ij}(1 + g_0 \cdot k_{ij})] | 0 \rangle \equiv 0 \quad \text{即ち,}$$

$$u_{ij} | 0 \rangle \equiv v_{ij} | ij \rangle, \quad (\text{但し, } (H_0 + v_{ij} - v_{ij} - w_0) | ij \rangle = 0)$$

となるように u_{ij} を選べば,

$$\Delta E' = \sum_{i < j} \langle 0 | v_{ij} - u_{ij} | ij \rangle = \sum_{i < j} \langle 0 | H_0 - W_0 | ij \rangle = 0$$

となる。後は, このようにして, 得られた H_0 に対して, Hartree 近似 + Harmonic 近似, 或は, 更に近似を上げて Self-Consistent-Phonon 近似を施してやれば上記の $|ij\rangle$ に関する固有値方程式は, 数値的に解ける形になる。

現在までに Preliminary な結果(前者の近似法を用い, 更に, 近似的に固有値方程式を解いた。)として, 基底状態エネルギー ϵ_T (molar volume 24.77 cc)

$\epsilon_T = -2.86^\circ\text{K}$ (c. f. 実験値 $\epsilon_x \simeq -0.6^\circ\text{K}$, I-N理論 $\epsilon_{IN} = -3.30^\circ\text{K}$), 又, R. P. A. phonon の dispersion curve として, 定性的に, 他の S. C. P. 近似の数値計算の例と余り変らぬ答を得た。