

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 - Nemaizawa¹⁾ 及び Nemaizawa²⁾ 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。

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

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

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

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

ここに 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), $U(0)$, 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

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

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 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。

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。

$$K_{ij}(n_1 \ell_1 m_1, n_2 \ell_2 m_2; 0, 0) \\ = \sqrt{2} \sum_n \sum_\ell \sqrt{2\ell+1} \langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell 0 \rangle \langle n \ell 0 0; \ell | n_1 \ell_1 n_2 \ell_2; \ell \rangle^* \\ \times K_{n\ell}(R_{ij}; \alpha^2) / I(R_{ij}; \alpha^2/2) \quad (10)$$

ここに

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

また, $\langle \ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | \ell m \rangle$ は C-G 係数, $\langle n \ell N A; \lambda | n_1 \ell_1 n_2 \ell_2; \lambda \rangle$ は Talmi 係数³⁾ 更に

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

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

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;

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

我々は中間状態として最も低い

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

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 He³ 結果を実験値⁴⁾ (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 $\sim 1\%$ 程度。全般的に実験値より 4 $\sim$ 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。 $E^{(2)}$ 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 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 $E^{(2)}$ の相対的寄与は $(N\epsilon_0 + E^{(1)})$ 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

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

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

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

