

12. 2分枝スペクトルでの $S(q, \omega)$ の解析

東教大・理 宗 田 敏 雄

沢 田 克 郎

永 田 恒 夫

この前の仕事¹⁾で液体ヘリウムの2分枝スペクトルのピークにおける散乱の強度の大きさを Sum rule と2分枝の実数の one-phonon と two-phonon のエネルギーと静的構造因子 S_q で説明を行ったが、今回は運動量 $q \leq 0.6 \text{ \AA}^{-1}$ での実験²⁾で得られた動的構造因子 $S(q, \omega)$ を one-phonon と two-phonon のエネルギーとその減衰率で表わし、実験からの S_q と $S(q, \omega)$ の極値を取るエネルギーの値の情報で $S(q, \omega)$ の Curve を理論的に再現する。但し two-phonon エネルギーと減衰率は小さい運動量の領域では ω independent と仮定する。

次の密度のゆらぎの伝播関数を考える。

$$G(k, z) = \langle 0 | \rho_k^+ (z - H)^{-1} \rho_k | 0 \rangle \quad (1)$$

ここで ρ_k は密度演算子の Fourier 成分で、 H は系の全ハミルトニアンで $|0\rangle$ は基底状態で z は複素数である。 $S(q, \omega)$ は

$$S(k, \omega) = -\pi \text{ Im } G(k, \omega) \quad (2)$$

で与えられる。 ω は実数である。今、平均の励起エネルギーを

$$\langle H \rangle_k = \langle \rho_k^+ H \rho_k \rangle / \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle = k^2 / 2mS_k \quad (3)$$

で定義する。ここで $|\rho_k\rangle$ は $\rho_k |0\rangle$ の略である。今、 $G(k, z)$ を $\langle H \rangle_k$ で展開する。

$$\begin{aligned} G(k, z) &= \frac{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{z - \langle H \rangle_k} + \frac{1}{z - \langle H \rangle_k} \langle \rho_k^+ \frac{H - \langle H \rangle_k}{z - H} \rho_k \rangle \\ &= \frac{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{z - \langle H \rangle_k} + \frac{1}{z - \langle H \rangle_k} \langle \rho_k^+ \left[\frac{H - \langle H \rangle_k}{z - H} - \frac{H - \langle H \rangle_k}{z - \langle H \rangle_k} \right] \rho_k \rangle \end{aligned}$$

宗田敏雄, 沢田克郎, 永田恒夫

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{z - \langle H \rangle_k} + \frac{1}{(z - \langle H \rangle_k)^2} \langle \rho_k^+ \frac{(H - \langle H \rangle_k)^2}{z - H} \rho_k \rangle \\
 &= \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \left[\frac{1}{z - \langle H \rangle_k} - \frac{\langle \rho_k^+ \frac{(H - \langle H \rangle_k)^2}{z - H} \rho_k \rangle \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}}{1 + \frac{1}{z - \langle H \rangle_k} \langle \rho_k^+ \frac{(H - \langle H \rangle_k)^2}{H - H} \rho_k \rangle \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}} \right]^{-1} \quad (4)
 \end{aligned}$$

この式から z の大きい所で $G(k, z)$ は次の漸近的振舞いを示す。

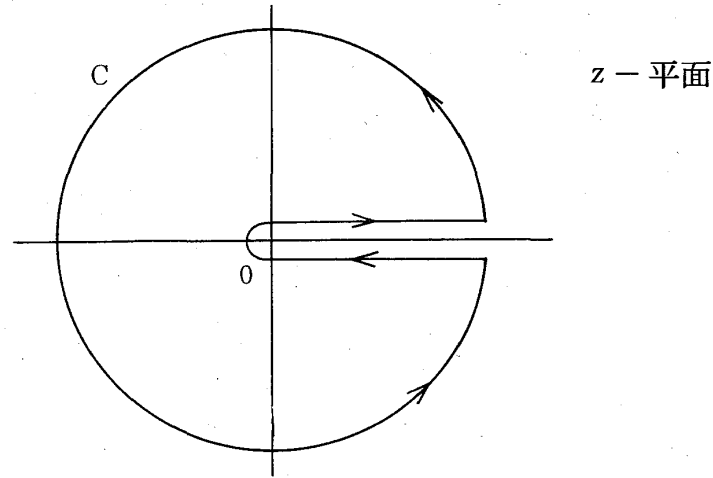
$$G(k, z) \Big|_{z \rightarrow \infty} = \frac{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{z} + \frac{\langle \rho_k^+ H \rho_k \rangle}{z^2} + \dots \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
 G^{-1}(k, z) \Big|_{z \rightarrow \infty} &= \frac{z}{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} (1 - z^{-1} \langle H \rangle_k + \dots) \\
 &= \frac{z - \langle H \rangle_k}{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} + O\left(\frac{1}{z}\right). \quad (6)
 \end{aligned}$$

(6)式で $(z - \langle H \rangle_k) \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}$ は実軸以外では零の値を取らず, $z \rightarrow \infty$ で $G^{-1}(k, z) - (z - \langle H \rangle_k) \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}$ は零に近づくので, Cauchy の定理により次の形になる。

$$\begin{aligned}
 G^{-1}(k, z) - \frac{z - \langle H \rangle_k}{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{dz'}{z' - z} (G^{-1}(k, z') - \frac{z' - \langle H \rangle_k}{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}) \quad (7)
 \end{aligned}$$

Contour を第1図の様に取ると



第1図

$$G^{-1}(k, z) = \frac{z - \langle H \rangle_k}{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\omega' - z} \text{Im } G^{-1}(k, \omega')$$

$$= \left[\frac{\langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{z - \langle H \rangle_k + \pi^{-1} \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\omega' - z} \text{Im } G^{-1}(k, \omega')} \right]^{-1} \quad (8)$$

の様に書ける。

今, $M_{\text{off}, k}(z)$ を次に定義する。

$$M_{\text{off}, k}(z) = -\pi^{-1} \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\omega' - z} \text{Im } G^{-1}(k, \omega') \quad (9)$$

そうすると(4式より $M_{\text{off}, k}(z)$ は

$$M_{\text{off}, k}(z) = \frac{\langle \rho_k^+ \frac{(H - \langle H \rangle_k)^2}{z - H} \rho_k \rangle \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}}{1 + (z - \langle H \rangle_k)^{-1} \langle \rho_k^+ \frac{(H - \langle H \rangle_k)^2}{z - H} \rho_k \rangle \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle^{-1}} \quad (10)$$

宗田敏雄, 沢田克郎, 永田恒夫

で表わせる。前と同様に $M_{\text{off}, k}(z)$ と $M_{\text{off}, k}(z)^{-1}$ $z \rightarrow \infty$ での振舞いは

$$M_{\text{off}, k}(z) = \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k}{z \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} + \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 H \rangle_k}{z^2 \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle} + O\left(\frac{1}{z^3}\right) \quad (11)$$

$$M_{\text{off}, k}(z)^{-1} = \frac{z \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle}{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} \left(1 - \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 H \rangle_k}{z \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} \right) + O\left(\frac{1}{z^2}\right) \quad (12)$$

となり, Cauchy 積分で第1図の様な Contourを取ると次の形になる。

$$\begin{aligned} M_{\text{off}, k}(z)^{-1} &= \frac{z}{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} - \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 H \rangle_k}{[\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k]^2} \\ &+ \pi^{-1} \int_0^\infty d\omega' \frac{1}{\omega' - z} \text{Im } M_{\text{off}, k}(z) \\ &= \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k^{-1} \left[z - \langle H \rangle_k - \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^3 \rangle_k}{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} \right. \\ &\quad \left. + \pi^{-1} \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k \int_0^\infty d\omega' \frac{1}{\omega' - z} \text{Im } M_{\text{off}, k}(z) \right] \quad (13) \end{aligned}$$

従って $G(k, \omega + i\delta)$ は

$$G(k, \omega + i\delta) = \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \left[\omega + i\delta - \langle H \rangle_k \right.$$

$$\left. - \left\{ \omega + i\delta - \langle H \rangle_k - \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k)^3 \rangle_k}{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} + \right. \right.$$

$$+ \pi^{-1} \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\omega' - z} \text{Im } M_{\text{off}, k}(z)^{-1} \}^{-1} \}^{-1} \quad (14)$$

今、次の量を定義する。

$$\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k = \langle \Delta \omega^2 \rangle_k \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \langle (H - \langle H \rangle_k)^3 \rangle_k \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k^{-1} &= \\ &= \frac{\langle (H - \langle H \rangle_k) H (H - \langle H \rangle_k) \rangle_k}{\langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle_k} - \langle H \rangle_k = \Delta_k^{(1)} \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_k'(\omega) + i \Gamma_k(\omega) &= \langle (H - \langle H \rangle_k)^2 \rangle \\ &\times \pi^{-1} \int_0^\infty d\omega' \frac{1}{\omega' - \omega - i\delta} \text{Im } M_{\text{off}, k}(z)^{-1} \quad (17) \end{aligned}$$

$$\Delta_k(\omega) = \Delta_k^{(1)} - \Delta_k'(\omega)$$

すると、 $S(k, \omega)$ は次の形で表わせる。

$$\begin{aligned} S(k, \omega) &= \frac{\pi^{-1} \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \Gamma_k(\omega) \langle \Delta \omega^2 \rangle_k}{[(\omega - \langle H \rangle_k)^2 - (\omega - \langle H \rangle_k) \Delta_k(\omega) - \langle \Delta \omega^2 \rangle_k]^2} \\ &\quad + (\omega - \langle H \rangle_k)^2 \Gamma_k(\omega)^2 \\ &\equiv \pi^{-1} \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle \Gamma_k(\omega) \langle \Delta \omega^2 \rangle_k f_k(\omega)^{-1} \quad (18) \end{aligned}$$

こゝで(16)式から解る様に $H - \langle H \rangle_k$ が two-phonon の密度のゆらぎの演算子、 $\rho_k^+ \rho_k$ に比例するから $\Delta_k^{(1)} + \langle H \rangle_k$ は two-phonon のエネルギーを表わし、 $\langle H \rangle_k$ は運動量の小さい所では one-phonon のエネルギーを殆んど exhaust することが sum rule で解り¹⁾ $\Delta_k'(\omega)$ は one-phonon, two-

宗田敏雄, 沢田克郎, 永田恒夫

phonon 以外の素励起のエネルギーを表わし, 「 $k(\omega)$ 」は運動量の小さい所では one-phonon と two-phonon の減衰エネルギーを表わし, また運動量の大きい所では他の素励起の減衰エネルギーも表わす。

今, 運動量の小さい所で

$$\Delta_k(\omega) = \Delta_k, \quad \Gamma_k(\omega) = \Gamma_k \quad (2)$$

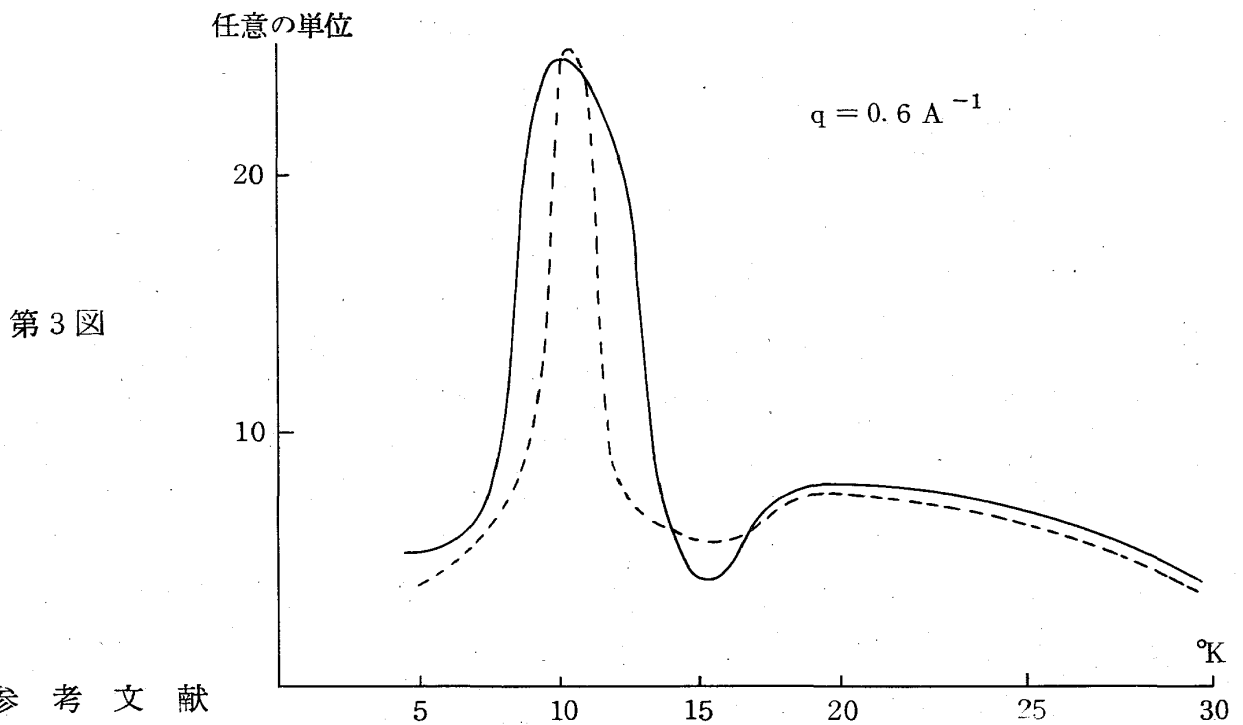
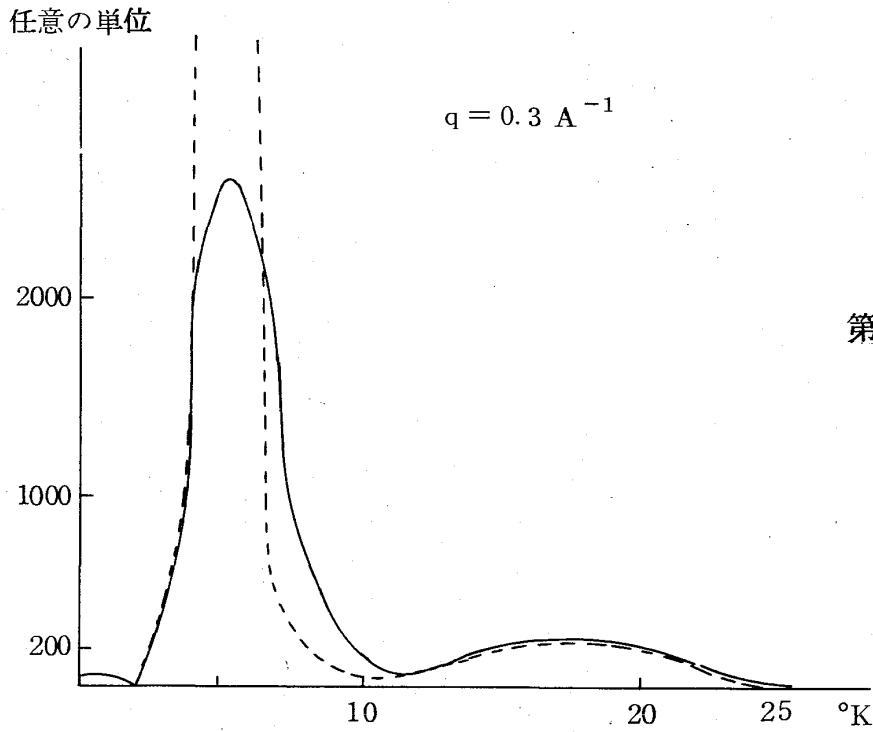
と仮定して, (19) 式で $\langle H \rangle_k$ の値を実験の S_k の値⁴⁾ と, 実験の $S(q, \omega)$ の極値の ω の値 (2つの極大と 1つの極小), 即ち

$$df_k / d\omega = 0 \quad (2)$$

の ω の値を用いて, パラメーターの値を $q = 0.3 \text{ \AA}^{-1}$ と $0.6 \text{ \AA}^{-1}$ で求めると次の様になる。

$q (\text{\AA}^{-1})$	$\Delta_k = \Delta_k^{(1)} - \Delta_k' (^\circ\text{K})$	$\langle \Delta \omega^2 \rangle_k ((^\circ\text{K})^2)$	$\Gamma_k^2 ((^\circ\text{K})^2)$
0.3	1 3.3 4	2 6 3	3.0 8
0.6	3.6 7	1 8.7 5	3.6 7

傾向としては q が大きくなると $\langle \Delta \omega^2 \rangle_k$ と Γ_k^2 が大きくなるのはうなづける。実際に $S(q, \omega)$ 曲線を再現すると, 次 第 2 図と第 3 図 様になる。実験は $q = 0.3 \text{ \AA}^{-1}$ は Woods, Svensson と Martel のもので $q = 0.6 \text{ \AA}^{-1}$ は Cowley と Woods のものである。理論曲線は点線で, 実線が実験で, この図は正確な計算の図の定性的な相似図である。



参考文献

- 1) T.Soda K.Sawada and T.Nagata, Prog. Theor. Phys 44 (1971) 860
- 2) R.A.Cowley and A.D.B.Woods, Can. J. Phys. 49 (1971) 177
A.D.B Woods, E.C.Svensson and P.Martel, Preprint (1972)
- 3) K.Huang and, A.Klein, Ann. Phys. (N.Y) 30 (1964) 203
- 4) E.K.Achter and L.Meyer, Phys. Rev. 188 (1969) 291
R.B.Hallock, Phys. Rev. A5 (1971) 320