

I-5. 液体金属の Dynamical Structure Factor

原子力研(東海) 千原 順三

液体金属は, ion と electron の mixture であり, electron は Fermi 縮退を起しているので量子効果は無視できない。これを取扱うために, 先ず Hartree equation の一般化を行い, 次いでこれを binary quantum mixture に拡張する。

Mori の方法に従うと,

$$\rho_{k,Q} \equiv a_{k+Q}^+ a_k, \quad [a_k^+, a_k, \text{creation, annihilation op.}]$$

についての relaxation function, $A_Q^{k,k'}(z)$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} A_Q^{k,k'}(z) &\equiv \int_0^\infty e^{-zt} \langle \rho_{k,Q}(t); \rho_{k',Q} \rangle dt \\ &= \sum_{k''} (k | \{ z - i\omega_0 + \varphi(z) \}^{-1} | k'') \chi_Q^{k'',k'} \end{aligned} \quad (1)$$

ここで,

$$\langle A : B \rangle \equiv \beta^{-1} \int_0^\beta \langle e^{\lambda H} A e^{-\lambda H} B \rangle d\lambda, \quad \beta^{-1} \equiv k_B T,$$

$$(k | i\omega_0 | k') \equiv \sum_{k''} \langle \dot{\rho}_{k,Q} : \rho_{k'',Q} \rangle [\langle \rho_{k'',Q} : \rho_{k',Q} \rangle]^{-1},$$

$(k | A | k') :$ matrix A の (k, k') element.

$\varphi(t) :$ damping function,

ここでは $\varphi(z)=0$ の近似を用いる。 $\chi_Q^{k,k'}$ を求めることは困難なので次の3条件を満たすように仮定する。

1), interaction がない時は free particle の $x_Q^{0k, k'}$ になる。

$$x_Q^{k, k'} = x_Q^{0k, k'} \equiv \delta_{kk'} f_Q(k), \quad \text{ここで}$$

$$f_Q(k) = (n_{k+Q} - n_k) / (-\beta \hbar \omega_{k, Q}^0),$$

$$\hbar \omega_{k, Q}^0 \equiv \epsilon_{k+Q} - \epsilon_k$$

$$n_k = 1 / (e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - \eta), \quad \eta = +1 (\text{boson}), -1 (\text{fermion})$$

$$2), \quad \sum_{k, k'} x_Q^{k, k'} = \langle \rho_{-Q} : \rho_Q \rangle \equiv x_Q$$

$$3), \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} x_Q^{k, k'} = \delta_{k, k'} f_M(k) + f_M(k) f_M(k') \{S(Q) - 1\}$$

ここで, $f_M(k)$ は Maxwell 分布, $S(Q) \equiv \langle \rho_Q \rho_{-Q} \rangle$

この3条件より $x_Q^{k, k'}$ を次のように仮定する。

$$\begin{aligned} x_Q^{k, k'} &= \langle \rho_{k, Q} : \rho_{k', Q} \rangle = \delta_{k, k'} f_Q(k) \\ &\quad + f_Q(k) f_Q(k') \{x_Q / x_Q^0 - 1\} / x_Q^0 \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{ここで, } x_Q^0 = \sum_k f_Q(k) = (-\beta^{-1}) \sum_k \{n_{k+Q} - n_k\} / (\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k),$$

また一方次式が容易に得られる。

$$\langle \dot{\rho}_{k, Q} : \rho_{k', Q} \rangle = (-i \beta^{-1} \hbar^{-1}) [n_{k+Q} - n_k] \equiv g_Q(k) \quad (3)$$

(2) 式と (3) 式より,

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{k} | i \omega_0 | \mathbf{k}') &= \frac{i}{\hbar} \omega_{\mathbf{k}, \mathbf{Q}}^0 \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \\
 &\quad - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}^0} - \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}} \right\} \frac{i}{\hbar} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - n_{\mathbf{k}})
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

これから次の generalized Hartree equation を得る。

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_{\mathbf{k} \mathbf{Q}} &= (z - i \omega_{\mathbf{k}, \mathbf{Q}}^0) \rho_{\mathbf{k}, \mathbf{Q}} \\
 &\quad - \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}^0} - \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}} \right\} \frac{i}{\hbar} \{ n_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - n_{\mathbf{k}} \} \sum_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}', \mathbf{Q}}
 \end{aligned}$$

これは普通の Hartree equation と比べて,

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{Q}) = -\frac{1}{\beta} \left\{ \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}^0} - \frac{1}{\chi_{\mathbf{Q}}} \right\}$$

となっている点で異なる。(4) 式を用いると, (1) 式は次のようになる。

$$\begin{aligned}
 A_{\mathbf{Q}}^{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(z) &= \frac{1}{z} \{ \chi_{\mathbf{Q}}^{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - \chi_{\mathbf{Q}}^{\mathbf{k} \mathbf{k}'}(z) \}, \\
 \chi_{\mathbf{Q}}^{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(z) &\equiv \int_0^\infty e^{-zt} \langle [\rho_{\mathbf{k}, \mathbf{Q}}; \rho_{\mathbf{k}', \mathbf{Q}}^+] \rangle dt \\
 &= \frac{\varphi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})}{A(z, \mathbf{k})} + V_{\text{eff}} \frac{\varphi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})}{A(z, \mathbf{k})} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{Q}, z)} \cdot \frac{\varphi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}')}{A(z, \mathbf{k}')}
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

ここで, $A(z, \mathbf{k}) = z - i \omega_{\mathbf{k}, \mathbf{Q}}^0$

$$\varepsilon(\mathbf{Q}, z) = 1 - V_{\text{eff}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varphi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})}{A(\mathbf{k})}$$

これから,

$$S(Q, \omega) = \frac{\beta \hbar \omega}{2} \left\{ 1 + \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right\} \Gamma_Q(\omega),$$

$$\Gamma_Q(\omega) \equiv \text{Re} \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{Q}}^{\mathbf{k} \mathbf{k}'}(i\omega) \right] = \frac{1}{\omega} \frac{1}{V_{\text{eff}}} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\epsilon(Q, i\omega)} \right\} \quad (6)$$

dispersion relation は, $\epsilon_{Q,z} = 0$, より

$$\omega_Q^2 = \frac{Q^2}{m\beta} \left\{ \frac{1}{\chi_Q} - \frac{1}{\chi_Q^0} \right\} \quad (7)$$

i), classical な場合は, $\chi_Q^0 = 1$, $\chi_Q = S(Q)$ だから,

$$\omega_Q^2 = \frac{Q^2}{m\beta} \left\{ \frac{1}{S(Q)} - 1 \right\}$$

ii), quantal な場合は, $\Gamma_Q(\omega) = \chi_Q \{ \delta(\omega - \omega_Q) + \delta(\omega + \omega_Q) \} / 2$

とすると,

$$\beta \chi_Q = S(Q) / \frac{\hbar \omega_Q}{2} \coth \frac{\beta \hbar \omega_Q}{2} \cong S(Q) / \frac{\hbar \omega_Q}{2}$$

これを用いると,

イ), Boson の場合, $\omega_Q = \hbar Q^2 / 2mS(Q)$

ロ), Fermion の場合,

$$\omega_Q^2 = \frac{Q^2}{m} \left\{ \frac{\hbar}{2} \omega_Q / S(Q) - g(\epsilon_F) W(Q/2k_F) \right\}$$

$$W(Q/2k_F) \equiv W(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

以上の結果を, 変数として,

$$a \equiv \begin{vmatrix} \rho_{\mathbf{k}, Q}^{(1)} \\ \rho_{\mathbf{k}, Q}^{(2)} \end{vmatrix}$$

をとり, Binary quantum system に適用すると次の結果を得る。

$$\begin{aligned} \chi_{ii}^{kk'}(Q, z) &\equiv \int_0^\infty e^{-tz} \langle [\rho_{\mathbf{k}, Q}^{(i)} \rho_{\mathbf{k}', Q}^{(i)}] \rangle dt \\ &= \frac{g_i}{A_i} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + V_i^*(Q, z) \frac{g_i(\mathbf{k})}{A_i(\mathbf{k})} \frac{1}{\tilde{\epsilon}_i(Q, z)} \cdot \frac{g_i(\mathbf{k}')}{A_i(\mathbf{k}')} \end{aligned} \quad (8)$$

$$S_{ii}(Q, \omega) = \frac{F_\beta(\omega)}{\omega} \operatorname{Im} \left[\frac{1}{V_i^*(Q, i\omega)} \left\{ \frac{1}{\tilde{\epsilon}_i(Q, \omega)} - 1 \right\} \right] \quad (9)$$

$$S_{ij}(Q, \omega) = \frac{F_\beta(\omega)}{\omega} \frac{V_{12}}{V_1 V_2} \operatorname{Im} \left[\frac{(\epsilon_2 - 1)(\epsilon_1 - 1)}{\epsilon_1 + \epsilon_2 - 1} \right] \quad (10)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \beta V_i &= - \left[H_i + H_1 H_2 \chi_i^0 - H_{12} \chi_i^0 H_{12} \right] \\ &\quad \times \left[1 + \chi_1^0 H_1 + \chi_2^0 H_2 + \chi_1^0 H_1 \chi_2^0 H_2 \right. \\ &\quad \left. - H_{12} \chi_1^0 \chi_2^0 \right]^{-1}, \end{aligned}$$

$\beta V_{ij} = -H_{12} / A$: A は上式の第2因子(分母), $\bar{1}=2$, $\bar{2}=1$,

$$H_i = \{ \chi_i(Q) / \chi_i^0(Q) - 1 \} / \chi_i^0(Q),$$

$$H_{ij} \equiv \chi_{ij}(Q) / \chi_i^0 \chi_j^0,$$

$$\tilde{\epsilon}_i(Q, z) = 1 - V_i^*(Q, z) \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_i}{A_i},$$

$$\epsilon_i = 1 - V_i \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_i}{A_i},$$

$$g_i = -\frac{1}{\beta} \frac{i}{\hbar} \langle n_{\mathbf{k}+Q}^{(i)} - n_{\mathbf{k}}^{(i)} \rangle, \quad A_j \equiv z - i\omega_{\mathbf{k}, Q}^{(j)0}$$

$$V_i^* = V_i / \epsilon_i(Q, z),$$

$$F_\beta(\omega) = \frac{\hbar \omega \beta}{2} \left\{ 1 + \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right\}$$

この結果は ion-ion interaction が,

$$V_{\text{eff}}^{I-I} = V_{I-I} / \epsilon_{\text{elect}}(Q, z)$$

で与えられ, さらに V_{I-I} , ϵ_{elect} が χ_Q^I , χ_Q^e の関数になっていることを示している。

$\epsilon_e(Q, z) \approx \epsilon_e(Q, 0)$ とすると,

$$\beta V_{\text{eff}}^{I-I} = \left\{ \frac{1}{S(Q)} - 1 \right\} \frac{1}{1 + \frac{4\pi e^2}{Q^2} \{1 - G(q)\} \chi_Q^e} + \frac{\chi_{I-e}^2(Q)}{S(Q) \chi_Q^{0e}},$$

$$G(q) \equiv -\frac{1}{n} \int \frac{q q'}{2} [S_e(q - q') - 1] \frac{d q'}{(2\pi)^3} \approx \frac{1}{2} \frac{q^2}{q^2 + q_F^2}$$

$$\chi_Q^{0e} \equiv g(\epsilon_F) \cdot W(Q/2k_F)$$

電子ガスのない場合の $\beta V_{\text{eff}}(Q) = \frac{1}{S(Q)} - 1$, との違いがあらわれている。