

「殆んど自由な電子」の多体理論と 周期場中の陽電子消滅

東大教養 藤原 邦 男

(5月9日受理)

§ 1, はじめに

従来の多体の電子理論は、おおむね、電子ガスを対象として発展して来たように見える。確かに、周期場の影響を無視しても物理の本質が見失われないような問題は数多い。だが、金属中の電子が関与する現象の中には、電子ガス模型が全く無力であるような例も、稀にはあるが見出される。これから述べようとする周期場中の陽電子消滅の問題は、その典型的な一例といえる。

伝導電子のフェルミ面の一部がブリルアン帯境界に一致しているような物質の中で電子対消滅が行なわれた時に発生するガンマー線対の角相関曲線は、その帯境界に対応する角度でどのような形の切断を見せるかという議論は、1958年、Berko と Plaskett¹⁾により初めてなされた。彼らは陰陽電子間の相互作用を無視し、陰電子を殆んど自由な電子近似で取り扱って、問題の位置での角相関曲線の切断には Umklapp 過程に起因する大きなボケが伴なうという結論に到達した。(§ 2, § 6 参照) その際同時に行なわれた Cu 及び Al の単結晶に対する実験では、分解能が悪すぎたために理論の検証を行なうことができなかったが、彼らの理論的結論は内外の研究者の間に常識として広まるに至った。

ところで、1965年、筆者等は $^{63}\text{Cu}(n, r)^{64}\text{Cu}$ 反応を利用して Cu や Cu 合金単結晶試料の内部に陽電子放射体 ^{64}Cu を大量に生産する技法を開発して、²⁾ Cu を含む物質に対する角相関測定 of 精度を飛躍的に向上させることに成功し、その結果、Cu の角相関曲線が (111) ブリルアン帯境界に相当する位置で、予想外に鋭い切断を見せることを明らかにした。³⁾ 筆者等はこの結果を、陰陽電子対に対する周期場の影響がある程度まで相殺するからであろうと解釈した。⁴⁾ 第1図は、二年程前、筆者等により再び測定された Cu の角相関曲線の一部を示す。⁵⁾ スリット系の分解能を考慮すると帯境界での切断

は確かにかなり鋭いといつてよい。

一方、筆者等の実験と相前後して行なわれた Stewart 等の Be に対する実験⁶⁾ および Erskine 等の Ge, Si に対する実験⁷⁾ では、ほぼ Berko 等の理論に適合する結果が報告されている。また、Berko 等は、最近、Cu に対する再測定を行ない、⁸⁾ $\langle 111 \rangle$ 方向の角相関曲線は帯境界位置より高角度に尾を引いている事実を明確に示している。

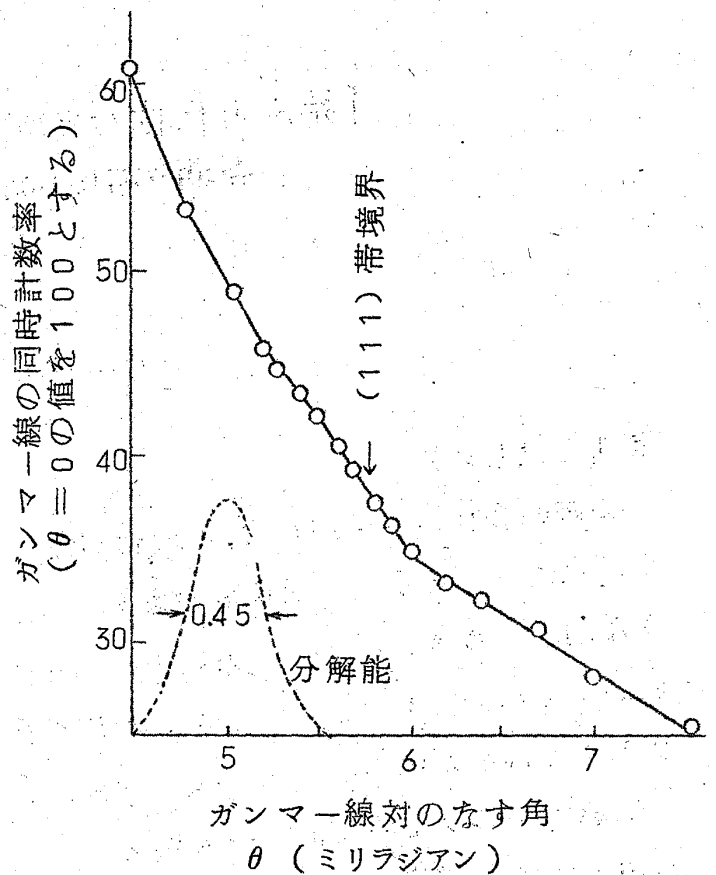
このように一見全く相対立するように見える内外の実験結果を整理してみると、次のようになる。

(1) フェルミ面と帯境界との接触面積が大きな物質 (Be, Si, Ge) では、Berko-Plaskett 理論から予想されるような緩やかな切断が見られる。

(2) 接触面積の比較的小さい物質 (Cu) では、角相関曲線は帯境界を越えて尾を引いているにも拘らず、見かけ上、理論よりも鋭い切断が見られる。

(3) 更に補足事項として、筆者等の Cu 及び Cu 合金に対する一連の角相関測定によれば、フェルミ面のネックの部分の寄与は、ベリ一部分に比べより強調されて観測される。⁹⁾

これらの事実は、周期場の影響および陰陽電子間の相互作用を採り入れた理論によつてのみ説明されるべき性質のものである。この論文では、先ず、そのための武器として、殆んど自由な電子に対する必要最小限度の多体理論が作り上げられる。即ち、§ 2 では後節のための準備として二波近似における殆んど自由な電子理論が概観され、§ 3, 4 で、『ブロッホ対』に対する演算子とグリーン関数が導入される。§ 5 では、ブロッホ対模型と在来の電子ガス模型を組み合わせた便宜的な模型が提案され、§ 6 では、陰陽電子間の相互作用を無



第 1 図

視した Berko-Plaskett の理論を摂動論を用いて再導出する試みがなされる。§ 7 以降では、相互作用を採り入れて簡単な一次のグラフについての計算がなされ、更に一次元および準三次元結晶について数値計算が行なわれる。それらの結果は、少なくとも上記 (1), (2) の事実に対し納得のゆく説明を与える。

§ 2. 二波近似における「殆んど自由な電子理論」の概略

以下の数節に対する準備として、よく知られた標題の理論を重点的に整理しておこう。周期場を運動する陰および陽電子のハミルトニアンは、それぞれ

$$\left. \begin{aligned} H_e &= \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m} - eV(\mathbf{r}) \\ H_p &= \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m} + eV(\mathbf{r}) \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

ここで $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{h}} v_{\mathbf{h}} \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r})$, 且つ $\mathbf{h} = 2\pi \times (\text{逆格子ベクトル})$ 。以下の議論では簡単化のため $v_0 = 0$ とし、また、粒子のスピンは考えぬことにする。更に、 $V(\mathbf{r})$ は実数で且つ中心対称性を持つと考え

$$v_{\mathbf{h}} = v_{-\mathbf{h}} \equiv \theta_{\mathbf{h}} \cdot |v_{\mathbf{h}}|, \quad \theta_{\mathbf{h}} = +1 \text{ 又は } -1$$

と書く。以下でわれわれは、一对の逆格子点 $\mathbf{h}, -\mathbf{h}$ のつくる帯境界にのみ着目することにし、 $\mathbf{h}$ 方向に x 軸をとる。

電子の波数ベクトルが、 $-\mathbf{h}$ に対する帯境界に近いとき、即ち

$$k_x \simeq -h/2, \quad h = |\mathbf{h}|$$

のときには、2 波だけを考える近似が有効であり、その場合の固有解は

$$\phi_{\mathbf{k}}^{(j)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[u_0^{(j)}(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{h}}^{(j)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}} \right], \quad (j=1, 2) \quad (2.2)$$

と書ける。ここで j はバンド記号であり、 $j=1$ は下のバンド、 $j=2$ は上のバンドに対応する。

さて、波数ベクトル $\mathbf{k}$ の、帯境界からのはずれを表すパラメーター、 $\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k})$ を

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\mathbf{k} - \left(-\frac{\mathbf{h}}{2} \right) \right] \cdot \mathbf{h} = \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \cdot e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}| \quad (2.3A)$$

あるいは

$$\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) = \hbar^2 [(\mathbf{k} + \mathbf{h})^2 - \mathbf{k}^2] / (4me |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|) \quad (2.3B)$$

によつて定義すると、¹⁾ 上、下バンドのエネルギーは次のようになる。

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}}^{(2)} &= \epsilon_{\mathbf{k}} + e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}| \cdot \left[\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})} \right] \\ &= \frac{1}{2} (\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}) \pm e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}| \cdot \sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (2.4)$$

ここで

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m \quad (2.5)$$

(2.4) は陰、陽電子に対して共通であるが、(2.2) における二つのフーリエ成分の比には荷電の符号が反映されて

$$u_{\mathbf{h}}^{(2)}(\mathbf{k}) / u_0^{(1)}(\mathbf{k}) = \begin{cases} -\theta_{\mathbf{h}} \left[\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})} \right] \cdots \\ \cdots \text{electron} \\ +\theta_{\mathbf{h}} \left[\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})} \right] \cdots \\ \cdots \text{positron} \end{cases} \quad (2.6)$$

となる。各成分の絶対値の 2 乗は、陰陽共、

$$|u_0^{(1)}(\mathbf{k})|^2 = \frac{1}{2} \mp \frac{\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k})}{2\sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})}} \quad (2.7A)$$

$$|u_{\mathbf{h}}^{(2)}(\mathbf{k})|^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k})}{2\sqrt{1 + \xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})}} \quad (2.7B)$$

で与えられる。

§ 3. 「対等励起のブロッホ対」に対する演算子

以下の数節では、前節の理論を多体論的に取り扱い方法を考える。先ず、自由粒子に対する生成消滅演算子を用いて (2.1) に対応するハミルトニアン演算子を書き下すと

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - e \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{h} \neq 0} v_{\mathbf{h}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}^+ a_{\mathbf{k}} \cdots \text{electron} \quad (3.1A)$$

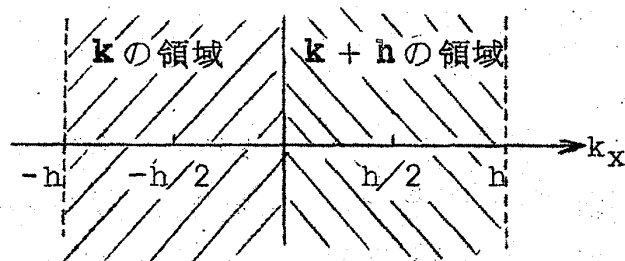
$$H_p = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + e \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{h} \neq 0} v_{\mathbf{h}} b_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}^+ b_{\mathbf{k}} \cdots \text{positron} \quad (3.1B)$$

となる。周期場の影響を採り入れるのに、自由粒子を非摂動系にとり、(3.1) の第2項を摂動と考えるやり方は、すでに、結晶による高速電子の回折理論で採用されており、実際、筆者は、1961年、Dirac 方程式について無限次まで摂動項を求め、¹⁰⁾ その後、大槻等は¹¹⁾ グリーン関数法による定式化を行なっている。この行き方を採用すれば、たとえば (2.7A) の下のバンドの式は、

$$|u_0^{(1)}(\mathbf{k})|^2 = 1 - \frac{1}{4\xi_{-\mathbf{h}}^2(\mathbf{k})} + \frac{3}{16} \frac{1}{\xi_{-\mathbf{h}}^4(\mathbf{k})} - \cdots \quad (3.2)$$

という風に、 $1/\xi^2$ の級数の形で得られる。したがって、これは ξ が大きいところ、即ち帯境界から遠いところで有効な方法であり、現在の問題を扱うには明らかに適当でない。

この論文では、帯境界附近で極めて有力な方法を展開しよう。以下、§ 2 と同様、二波近似の立場に立つことにして、先ず、(3.1) で $v_{\mathbf{h}}$, $v_{-\mathbf{h}}$ 以外の項を落し、更に、波数ベクトルに関する和を一義的行なうために、第2図のごとく、 k_x が $[-h, 0)$ なる範囲を $\mathbf{k}$ の領域、 $[0, h)$ を $\mathbf{k} + \mathbf{h}$ の領域と定める。 $[-h, h)$ 以外からの寄与は小さいとして無視することにする。さて陰電子の場合を例にとり、(3.1A) のハミルトニアン演算子の編成替えを行なうと、



第 2 図

$$H_e = \sum_{-h \leq k_x < 0} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}} - e v_{\mathbf{h}} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}^+ a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}) \right] \quad (3.3)$$

ここで、自由粒子の演算子に対し次のような変換

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi(\mathbf{k}) & -\theta_{\mathbf{h}} \sin \phi(\mathbf{k}) \\ \theta_{\mathbf{h}} \sin \phi(\mathbf{k}) & \cos \phi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}} \\ B_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

を施すと、(3.3) は $A_{\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}}$ を用いて

$$H_e = \sum_{-h \leq k_x < 0} \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cos^2 \phi + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} \sin^2 \phi - e |v_{\mathbf{h}}| \sin 2\phi \right) A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}} + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sin^2 \phi + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} \cos^2 \phi + e |v_{\mathbf{h}}| \sin 2\phi \right) B_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}} - \left\{ \frac{\theta_{\mathbf{h}}}{2} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} \right) \sin 2\phi + e v_{\mathbf{h}} \cos 2\phi \right\} (A_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}}) \right] \quad (3.5)$$

と書ける。(3.5) を完全に対角化するための条件は、同式の第 3 項と (2.3E) とより、

$$\tan 2\phi(\mathbf{k}) = 1/\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \quad (3.6)$$

で与えられる。 $\phi(\mathbf{k})$ がこの条件をみたす時 $A_{\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}}$ はそれぞれ § 2 でのべた下及び上のバンドの消滅演算子としての意味を持つ。だが、このような変換

は後述の具体的計算を複雑にするので、以下ではその代りに

$$\phi(\mathbf{k}) = \pi/4 \quad (3.7)$$

なる変換を採用する。そしてこの時の $A_{\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}}$ をそれぞれ $\alpha_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}}$ と書くことにする。(3.4) に (3.7) を代入すれば,

$$\begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{\theta_{\mathbf{h}}}{\sqrt{2}} \\ \frac{\theta_{\mathbf{h}}}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

となる。この時、ハミルトニアン (3.5) は (2.3B) を考慮して

$$\begin{aligned} H_e = \sum'_{-\mathbf{h} \leq \mathbf{k}_x < 0} & \left[E_{\mathbf{k}\alpha} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}\beta} \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} \right. \\ & \left. + e v_{\mathbf{h}} \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \cdot (\beta_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

となる。ここで

$$\left. \begin{aligned} E_{\mathbf{k}\alpha} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} \right) - e |v_{\mathbf{h}}| \\ E_{\mathbf{k}\beta} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}+\mathbf{h})^2}{2m} \right) + e |v_{\mathbf{h}}| \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

とおいた。(3.8) から明らかなように、 α^+ , β^+ は $\mathbf{k}$ 波と $\mathbf{k} + \mathbf{h}$ 波とを同時に 1 : 1 で生成せしめる演算子であり、この意味で、「対等励起のプロッホ対の演算子」という呼び名が適切である。 α , β は帯境界上ではそれぞれ厳密に下および上のバンドの演算子としての意味を持つが、 $\xi \neq 0$ に対しては、近似的な存在でしかあり得ない。(2.6) から明らかなように $\xi \neq 0$ の場合には、 $\mathbf{k}$ 波と $\mathbf{k} + \mathbf{h}$ 波との振巾は等しくないから、下のバンドには β が、上のバンドには α が混入してくるはずであり、それらを正しく考慮するためには (3.9) における交叉項

$$H_e' \equiv e v_{\mathbf{h}} \sum_{-\mathbf{h} \leq \mathbf{k}_x < 0} \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \cdot (\beta_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \quad (3.11)$$

を摂動として補正計算を行なわなければならない。(§ 4 (B) 参照)

α , β に関する交換関係は, 自由粒子の演算子を用いて簡単に計算できて

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'}^+ + \alpha_{\mathbf{k}'}^+ \alpha_{\mathbf{k}} &= \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'}^+ + \beta_{\mathbf{k}'}^+ \beta_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \\ \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'} + \alpha_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}} &= \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'} + \beta_{\mathbf{k}'} \beta_{\mathbf{k}} = \dots\dots\dots \\ &= \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'}^+ + \beta_{\mathbf{k}'}^+ \alpha_{\mathbf{k}} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.12)$$

となる。

陽電子の場合には, (2.6) より明らかなように, 二波の位相関係が陰電子の場合と逆になることから

$$\begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}+\mathbf{h}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & \theta_{\mathbf{h}}/\sqrt{2} \\ -\theta_{\mathbf{h}}/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{\mathbf{k}} \\ \delta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

という変換によつてブロッホ対の演算子 $r_{\mathbf{k}}$, $\delta_{\mathbf{k}}$ を導入すると, (3.9), (3.10) に対応して

$$\begin{aligned} H_p = \sum_{-\mathbf{h} \leq \mathbf{k}_x < 0} [& E_{\mathbf{k}r} r_{\mathbf{k}}^+ r_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}\delta} \delta_{\mathbf{k}}^+ \delta_{\mathbf{k}} \\ & - e v_{\mathbf{h}} \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \cdot (\delta_{\mathbf{k}}^+ r_{\mathbf{k}} + r_{\mathbf{k}}^+ \delta_{\mathbf{k}})] \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$E_{\mathbf{k}r} = E_{\mathbf{k}\alpha}, \quad E_{\mathbf{k}\delta} = E_{\mathbf{k}\beta} \quad (3.15)$$

が得られる。

§ 4. ブロッホ対に対するグリーン関数

A) 対等励起のブロッホ対に対するグリーン関数

先ず, (3.9) を用いて時間に依存する演算子

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}}(t) &= e^{iH_{\text{et}}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{-iH_{\text{et}}} = \alpha_{\mathbf{k}} e^{-iE_{\mathbf{k}\alpha} t/\hbar} \\ \beta_{\mathbf{k}}(t) &= \beta_{\mathbf{k}} e^{-iE_{\mathbf{k}\beta} t/\hbar} \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

を導入し、相互作用のないブロッホ対の集団の基底状態における期待値を $\langle \dots \rangle_0$ なる記号で表わすことにすると、そのような状態における対等励起のブロッホ対のグリーン関数は、因子 $-i$ を省略して次のように書ける。

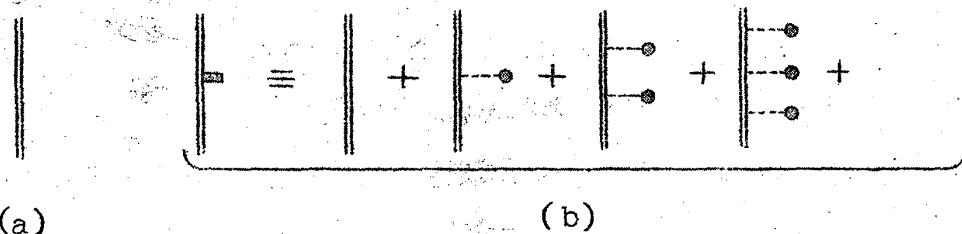
$$\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 = \begin{cases} (1-n_{\mathbf{k}\alpha}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[-i E_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')/\hbar] & \dots t > t' \\ -n_{\mathbf{k}\alpha} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[-i E_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')/\hbar] & \dots t < t' \end{cases}$$

$$\langle T \beta_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 = \begin{cases} (1-n_{\mathbf{k}\beta}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[-i E_{\mathbf{k}\beta}(t-t')/\hbar] & \dots t > t' \\ -n_{\mathbf{k}\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[-i E_{\mathbf{k}\beta}(t-t')/\hbar] & \dots t < t' \end{cases}$$

$$\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 = \langle T \beta_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 = 0 \quad (4.2)$$

ここで $n_{\mathbf{k}\alpha}$, $n_{\mathbf{k}\beta}$ はそれぞれ $(\mathbf{k}, \alpha)$ 及び $(\mathbf{k}, \beta)$ なる状態を占めるブロッホ対の数を表す。

以下、われわれは (4.2) のときブロッホ対のグリーン関数を第3図 (a) のように2本の縦線で表すことにしよう。ここで注意しなければならないのは、(3.8) から予想されるように、たとえば自由電子の演算子 $a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}$ とブロッホ対の演算子 $\alpha_{\mathbf{k}}^+$ 又は $\beta_{\mathbf{k}}^+$ との間のコントラクションが消えないことである。



第 3 図

一例をあげると、

$$\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}(t) \alpha_{\mathbf{k}}^+(t') \rangle_0 = \frac{\theta_{\mathbf{h}}}{\sqrt{2}} (1-n_{\mathbf{k}\alpha}) \exp[-i E_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')/\hbar] \quad (4.3)$$

藤原邦男

となる。

陽電子の場合には，(4.2) 及び (4.3) で，単に $\alpha \rightarrow r$ ， $\beta \rightarrow \delta$ ， $a \rightarrow b$ ， $\theta_h \rightarrow -\theta_h$ なる置きかえを行なえばよい。

B) 補正されたブロッホ対のグリーン関数

(4.2) に示された対等励起のブロッホ対のグリーン関数は，波数ベクトル $\mathbf{k}$ の，帯境界からのはずれを表すパラメーター $\xi_{-h}(\mathbf{k})$ を含んでいない，この点を改善するためには，たとえば，(4.2) の $\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0$ の代りには

$$\begin{aligned} \langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0^c &\equiv \langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots dt_n \langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \\ &\times H_e'(t_1) \cdots H_e'(t_n) \rangle_{0L} \end{aligned} \quad (4.4)$$

を採用すればよい。ここで添字 C は補正された期待値を意味し，L はつながったグラフについての和を示す。また， $H_e'(t)$ は

$$\begin{aligned} H_e'(t) &= e^{v_h} \sum_{-h \leq k_x < 0} \xi_{-h}(\mathbf{k}) \\ &\times [\beta_{\mathbf{k}}^+(t) \alpha_{\mathbf{k}}(t) + \alpha_{\mathbf{k}}^+(t) \beta_{\mathbf{k}}(t)] \end{aligned} \quad (4.5)$$

である。(4.5) によるブロッホ対の散乱過程を，横点線に黒丸をつけたもので表すことにすると，(4.4) は第 3 図 (b) の右辺に示された一連のグラフの総和に対応する。以下，これらの総和，即ち補正されたブロッホ対のグリーン関数を，同図 (b) の左辺のような記号で表すことにする。実際の計算上，特に有用な近似は，(4.4) を第一次の項までで打ち切るものである。この近似での結果を列挙すると

$$\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0^c = \langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 \quad (4.6A)$$

$$\langle T \beta_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0^c = \langle T \beta_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0 \quad (4.6B)$$

$$\begin{aligned}
\langle T \alpha_{\mathbf{k}}(t) \beta_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0^c &= \langle T \beta_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}'}^+(t') \rangle_0^c \\
&= \begin{cases} \frac{\theta_{\mathbf{h}}}{2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \left[(1-n_{\mathbf{k}\beta}) \exp \{-i E_{\mathbf{k}\beta}(t-t')/\hbar\} \right. \\ \quad \left. - (1-n_{\mathbf{k}\alpha}) \exp \{-i E_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')/\hbar\} \right] \dots t > t' \\ \\ -\frac{\theta_{\mathbf{h}}}{2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \left[n_{\mathbf{k}\beta} \exp \{-i E_{\mathbf{k}\beta}(t-t')/\hbar\} \right. \\ \quad \left. - n_{\mathbf{k}\alpha} \exp \{-i E_{\mathbf{k}\alpha}(t-t')/\hbar\} \right] \dots t < t' \end{cases} \quad (4.6c)
\end{aligned}$$

陽電子の場合には、今度も (4.6) で $\alpha \rightarrow r$, $\beta \rightarrow \delta$, $\theta_{\mathbf{h}} \rightarrow -\theta_{\mathbf{h}}$ なる置き換えをやればよい。ブロッホ対のグリーン関数として、(4.2) を用いた場合と (4.6) を用いた場合の実際上の差異については § 6 で明らかになる。

§ 5. 電子ガスとブロッホ対の組合わせ模型

さて、前節 (b) の (4.6) を用いて、 $\langle T a_{\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}}^+(t^+) \rangle_0^c$ および $\langle T a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}^+(t^+) \rangle_0^c$ を計算すれば、それぞれ、(2.7) の $|u_0^{(j)}(\mathbf{k})|^2$ および $|u_{\mathbf{h}}^{(j)}(\mathbf{k})|^2$ の表式を ε の巾級数に展開した結果が得られる。これらの級数の収束半径は 1 であるから、ブロッホ対の理論は $|\varepsilon| \geq 1$ に対しては使えない。そしてそのような領域ではむしろ電子ガス近似がかなりの精度で成り立っていると考えられる。したがって、以下では、 $|\varepsilon| = 1$ なる面を境として電子ガス模型とブロッホ対模型とを接続することを考えよう。今、波数ベクトル空間で、問題の帯境界から $|\varepsilon| = 1$ なる点までの距離を ε と書くことにすると、(2.3B) により

$$\varepsilon = \frac{e|V_{\mathbf{h}}|}{\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{h}^2} \cdot |\mathbf{h}| \quad (5.1)$$

となる。この ε を用いて、第 4 図の斜線部分、即ち

$$-\frac{h}{2} - \epsilon < k_x < -\frac{h}{2} + \epsilon \quad \text{および} \quad \frac{h}{2} - \epsilon < k_x < \frac{h}{2} + \epsilon$$

なる領域では対等励起のブロッホ対模型を採用し、その他の領域では伝統的な電子ガス模型を採用することにする。そうすると、陰電子に対する場の演算子は

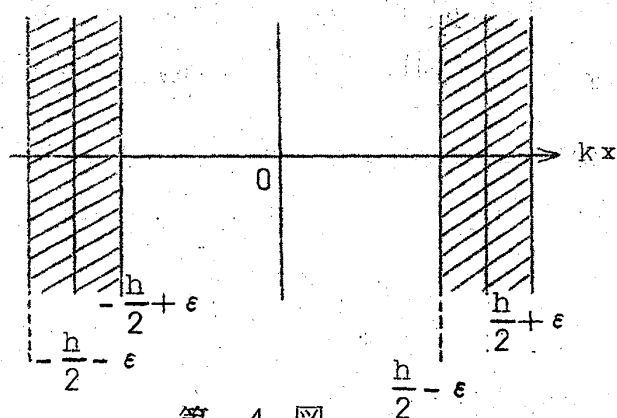
$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{\sqrt{V}} \left[\sum'_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum''_{\mathbf{k}} \{ \alpha_{\mathbf{k}}(t) (e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \theta_h e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{h})\mathbf{r}}) \\ & \left. + \beta_{\mathbf{k}}(t) (-\theta_h e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{h})\mathbf{r}}) \} \right] \quad (5.2) \end{aligned}$$

と書ける。ここで V は結晶の体積， $\sum'$ は電子ガス領域に関する和， $\sum''$ はブロッホ対領域の左半分，即ち $-\frac{h}{2} - \epsilon < k_x < -\frac{h}{2} + \epsilon$ についての和を表す。(3.8) を用いて，(5.2) の $\alpha_{\mathbf{k}}$ ， $\beta_{\mathbf{k}}$ を $a_{\mathbf{k}}$ ， $a_{\mathbf{k}+\mathbf{h}}$ で書き変えたと，当然のことながら (5.2) は

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\text{all } \mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}'}(t) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \quad (5.3)$$

の形となる。この式は，波数ベクトル $\mathbf{k}$ を持つ上，下バンドのブロッホ対が共に励起されている状態は，運動量 $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k} + \mathbf{h}$ とを持つ2個の自由電子が励起された状態と等しいことを示している。

最後に，陽電子に対する場の演算子は，



第 4 図

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{\sqrt{V}} \left[\sum_{\mathbf{l}} b_{\mathbf{l}}(t) e^{i\mathbf{l}\mathbf{r}} \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum'_{\mathbf{l}} \{ r_{\mathbf{l}}(t) (e^{i\mathbf{l}\mathbf{r}} - \theta_h e^{i(\mathbf{l}+\mathbf{h})\mathbf{r}}) \\ & \left. + \delta_{\mathbf{l}}(t) (\theta_h e^{i\mathbf{l}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{l}+\mathbf{h})\mathbf{r}}) \} \right] \quad (5.4) \end{aligned}$$

$$+ \delta_{\mathbf{l}}(t) (\theta_h e^{i\mathbf{l}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{l}+\mathbf{h})\mathbf{r}}) \} \quad (5.4)$$

となる。

§ 6. 相互作用を無視した場合の陰陽電子対の運動量分布, (Berko 等の理論に対する摂動論的アプローチ)

消滅時における陽電子の運動量はゼロとみてよいから, 陰陽電子間に相互作用を考えない場合の電子対の運動量分布は陰電子のみのそれに他ならない。このような近似における運動量分布の議論は, 前述のごとく, すでに Berko と Plaskett¹⁾ により与えられている。この節では, ブロッホ対のグリーン関数を用いて彼らの理論に対する摂動論的な接近を試みる。現在問題になっているのは, 電子のフェルミ面の一部又は全部がブリルアン帯境界に接触している場合の話であるから, 以下の計算では, そのような場合に重点をおくことにする。たとえば, 下のバンドが完全に満たされ, 上のバンドが完全に空で, フェルミ面が第1ゾーンの境界と完全に一致している時には, 各状態の占有数は

$$n_{\mathbf{k}\alpha} = 1, n_{\mathbf{k}\beta} = 0 \dots\dots -\frac{h}{2} - \epsilon < k_x < -\frac{h}{2} + \epsilon$$

$$n_{\mathbf{k}} = \left\{ \begin{array}{l} 1 \dots\dots -\frac{h}{2} + \epsilon \leq k_x \leq \frac{h}{2} - \epsilon \\ 0 \dots\dots k_x \geq \frac{h}{2} + \epsilon, \quad k_x \leq -\frac{h}{2} - \epsilon \end{array} \right\} \quad (6.1)$$

となる。ここで $n_{\mathbf{k}}$ はガス領域の状態の占有数である。陽電子に対しては, 静止の仮定により,

$$n_{\mathbf{l}}' = \delta_{\mathbf{l},0} \dots\dots \text{gas region} \quad (6.2)$$

$$n_{\mathbf{l}r}' = n_{\mathbf{l}\delta}' = 0 \dots\dots -\frac{h}{2} - \epsilon < l_x < -\frac{h}{2} + \epsilon$$

となる。ただし陽電子に対しては n にプライムをつけた。

さて, Kohana 等¹²⁾ によれば, 電子対が全運動量 $\mathbf{k}$ をもって消滅する rate は

$$R(\mathbf{K}) = \frac{A}{V} (-i)^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} G_{\text{ep}}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}t; \mathbf{r}'t^+, \mathbf{r}'t^+) \quad (6.3)$$

藤原邦男

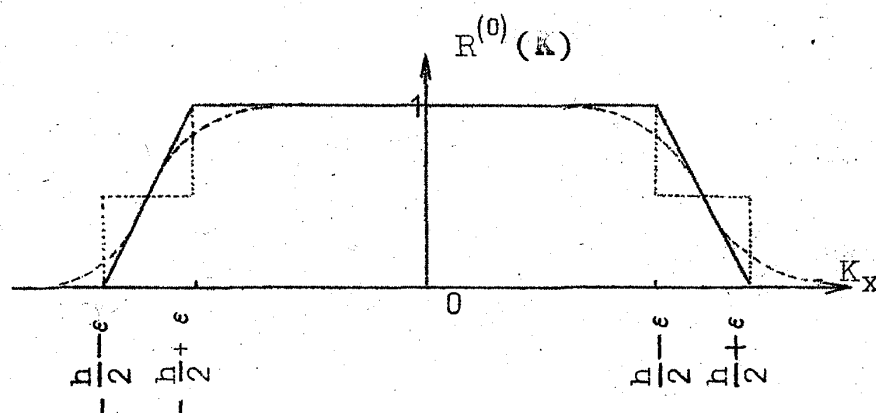
で与えられる。ここで G_{ep} は二体のグリーン関数、また A はポジトロニウムの一重基底状態に関連したある定数である。この節では二体の相関を考慮しないから (6.3) は

$$R^{(0)}(\mathbf{K}) = \frac{A}{V} (-i)^4 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ \times \langle T \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^+(\mathbf{r}', t^+) \rangle_0 \langle T \Phi(\mathbf{r}, t) \Phi^+(\mathbf{r}', t^+) \rangle_0 \quad (6.4)$$

と書ける。これに (5.2), (5.3) を代入し、且つ、補正されないブロッホ対のグリーン関数 (4.2) を用いると、(6.2) を考慮に入れて

$$R^{(0)}(\mathbf{K}) = \begin{cases} \frac{A}{2V} (n_{\mathbf{K}\alpha} + n_{\mathbf{K}\beta}) \cdots \cdots -\frac{\hbar}{2} - \epsilon < K_x < -\frac{\hbar}{2} + \epsilon \\ \frac{A}{2V} (n_{\mathbf{K}-\mathbf{h}, \alpha} + n_{\mathbf{K}-\mathbf{h}, \beta}) \cdots \cdots \frac{\hbar}{2} - \epsilon < K_x < \frac{\hbar}{2} + \epsilon \\ \frac{A}{V} n_{\mathbf{K}} \cdots \cdots \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.5)$$

を得る。ここで例えば、(6.1) の場合について (6.5) をグラフに表せば、第5図の点線のごとき階段関数となる。Berko等の理論によれば、(6.1) の場合の $R^{(0)}(\mathbf{K})$ は (2.7) を用いて



第5図

$$R^{(0)}(\mathbf{K}) = \begin{cases} \frac{A}{V} |u_0^{(1)}(\mathbf{K})|^2 = \frac{A}{V} \left(\frac{1}{2} + \frac{\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K})}{2\sqrt{1+\xi^2}} \right) \dots K_x < 0 \\ \frac{A}{V} |u_{\mathbf{h}}^{(1)}(\mathbf{K}-\mathbf{h})|^2 = \frac{A}{V} \left(\frac{1}{2} - \frac{\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K})}{2\sqrt{1+\xi^2}} \right) \dots K_x > 0 \end{cases} \quad (6.6)$$

と表され、第5図の破線のごとくになる。したがって、(6.5)は(6.6)を極めて粗っぽく近似した形になっている。この近似を改善するためには(6.4)において

$$< \quad >_0 \rightarrow < \quad >_0^0 \quad (6.7)$$

なるおきかえを行ない、(4.6)の補正されたグリーン関数を用いて計算すればよい。結果は

$$R^{(0)}(\mathbf{K}) = \begin{cases} \frac{A}{2V} [1 + \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K})] \dots \dots \dots -\frac{\hbar}{2} - \epsilon < K_x < -\frac{\hbar}{2} + \epsilon \\ \frac{A}{2V} [1 - \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K})] \dots \dots \dots \frac{\hbar}{2} - \epsilon < K_x < \frac{\hbar}{2} + \epsilon \end{cases} \quad (6.8)$$

であり、第5図の実線のごとくになる。更に近似を上げたい場合には、(4.4)を用いてブロッホ対に対し、更に高次の補正を施すと共に、電子ガスに対して(3.2)のような摂動論的補正を行なえばよいが、その詳細は割愛する。

§ 7. 相互作用を考慮した場合の陰陽電子対の運動量分布

この節では、陰陽電子間に相互作用を採り入れて摂動論により電子対の運動量分布(6.3)を計算する。ただし、問題の本質を見失わない範囲で計算をできるだけ簡単化するために、対消滅を行なう陰陽電子は他の陰電子に媒介されることなく直接に静的な相互作用

$$V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (1/V) \cdot \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \exp [i \mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \quad (7.1)$$

を行なうと仮定し、最も単純な一次のグラフについてのみ計算を行なうことに

藤原邦男

する。そして、問題の電子対による陰電子の海に分極の影響は、単にクローン
引力にしゃへいのパラメター λ をとりれるという形でのみ考慮することにする。
したがって相互作用(7.1)のフーリエ成分は

$$\nu(\mathbf{q}) = -4\pi e^2 / (\mathbf{q}^2 + \lambda^2) \quad (7.2)$$

となる。相互作用の演算子

$$\begin{aligned} H'_{e-p}(t) = & \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^+(\mathbf{r}t) \Phi^+(\mathbf{r}'t) \\ & \times \nu(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \Phi(\mathbf{r}'t) \Psi(\mathbf{r}t) \end{aligned} \quad (7.3)$$

の具体的な形は、場の演算子(5.2), (5.4)を用いて計算されるが、その際
相互作用の前後で陰陽電子が第4図のどの領域にいるかに従って適当に α ,
 β , γ , δ , a , b 等のオペレーターを使い分けなければならない。

さて、(7.3)を摂動とする摂動論によれば、(6.5)又は(6.8)に対する
一次の摂動補正は

$$\begin{aligned} R^{(1)}(\mathbf{K}) = & \frac{A}{V} \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \\ & \times \langle T a_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{K}-\mathbf{k}'}^+(t_1^+) a_{\mathbf{k}'}^+(t_1^+) H'_{e-p}(t_1) \rangle_{0L} \end{aligned} \quad (7.4)$$

によつて与えられる。ところで、われわれが特に興味を持つのは、前節で考察
した帯境界附近の運動量分布が、相互作用を採り入れることによつてどのよう
に変わるかということである。したがって、以下、われわれは、(7.4)におけ
る $\mathbf{K}$ の x 成分の範囲を

$$-\frac{\hbar}{2} - \epsilon < K_x < -\frac{\hbar}{2} + \epsilon \quad (7.5)$$

に限ることとし、更に $\mathbf{q}$ の x 成分の値に応じて便宜上次の三つの場合に分けて
計算を進めることにする。

[a] $|q_x|$ が十分小さくて、相互作用の前後で陰電子は常にブロッホ対の領域にあり、陽電子は原点附近のガス領域に存在する場合。したがって、(7.3) には演算子の積が

$$\alpha^+ b^+ b \alpha, \quad \beta^+ b^+ b \beta$$

の形で登場する。(7.6) 参照)

[b] $|q_x|$ は [a] の場合より大きいが、 $\frac{\hbar}{2} - \epsilon$ より小さくて、したがって陽電子は常に第1ゾーンのガス領域にあるが、陰電子はブロッホ対の領域へと転移を行なう場合。このとき、 H'_{e-p} には

$$a^+ b^+ b \alpha, \quad a^+ b^+ b \beta$$

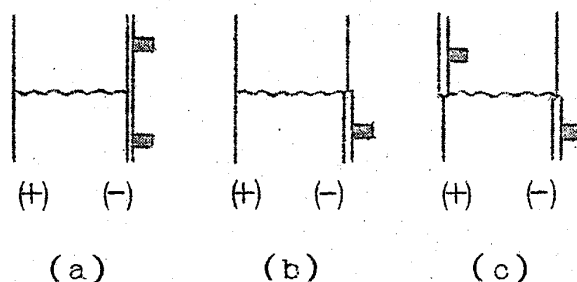
か又はそれらにエルミット共軛な演算子積が含まれる。

[c] $(\hbar/2) - \epsilon < |q_x| < (\hbar/2) + \epsilon$ になるとき。この場合には陰電子はブロッホ対領域からガス領域に転移し、陽電子はその逆を行なう。したがって相互作用には

$$a^+ r^+ b \alpha, \quad a^+ r^+ b \beta, \quad a^+ \delta^+ b \alpha, \quad a^+ \delta^+ b \beta$$

およびそれらにエルミット共軛な演算子積が含まれる。

以上の三つの場合に対応するグラフを第6図に示す。 $|q_x|$ が更に大きくなった場合の計算も可能ではあるが、それらの寄与は比較的小さいことと、電子の海の分極の効果をも(7.2) のように形式的にとり入れる近似



第6図

は、 $|q|$ が大きくなるにつれて悪くなることを考慮して、計算は [c] の場合までで打ち切ることにする。

一例として、[a] の場合に対する相互作用の演算子を書き下すと、

$$H'_{e-p}^{(a)}(t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}}^{(a)} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{l}} v(\mathbf{q}) b_{\mathbf{l}-\mathbf{q}}^+(t) b_{\mathbf{l}}(t) \times [\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t) \alpha_{\mathbf{k}}(t) + \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t) \beta_{\mathbf{k}}(t)] \quad (7.6)$$

ここで $\sum_{\mathbf{q}}^{(a)}$ は

$$-\epsilon - \eta_x < q_x < \epsilon - \eta_x$$

なる条件下での $\mathbf{q}$ についての和を表す。但し, (7.5) の $\mathbf{K}$ に対して

$$\mathbf{K} \equiv -\frac{\hbar}{2} + \boldsymbol{\eta} \quad (7.7)$$

とおいた。 $\boldsymbol{\eta}$ の x 成分と $\xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K})$ との関係は

$$\eta_x = \frac{e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|}{\frac{\hbar^2}{2m} \hbar^2} \cdot |\mathbf{h}| \cdot \xi_{-\mathbf{h}}(\mathbf{K}) \quad (7.8)$$

で与えられる。(7.6) では, バンド間転移的な演算子積 $\beta^+ b^+ b \alpha$, $\alpha^+ b^+ b \beta$ は現れていない。これらは現在の理論では, $|q_x| \sim |\mathbf{h}|$ のときにはじめて現れる。

さて, (7.6) 等を (7.4) に代入し, 更にブロッホ対に対しては (6.7) なるおきかえを行なつて補正されたグリーン関数 (4.6) による計算を進め, 且つ陽電子に対する (6.2) の条件に注意すると, [a] ~ [c] 各場合についての $R^{(1)}(\mathbf{K})$ が得られる。ただし, ここでは紙面の都合上,

$$n_{\mathbf{k}\beta} = 0 \quad \text{for all } \mathbf{k}'\text{'s} \quad (7.9)$$

なる条件をもつ基底状態に対する $R^{(1a)}(\mathbf{K})$, $R^{(1b)}(\mathbf{K})$ の表式のみを掲げる。

$$\begin{aligned} R^{(1a)}(\mathbf{K}) = & \frac{A}{4V^2} n_{\mathbf{K}\alpha} \sum_{\mathbf{q}}^{(a)} \nu(\mathbf{q}) \\ & \times \left[\left(\frac{\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q} \cdot \mathbf{h}}{e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|} + \frac{\frac{\hbar^2}{2m} [\mathbf{h}(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta})] \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\eta}}{e^2 |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|^2} \right) \times \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta}) + e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|} \right. \\ & \left. - \left(2 + \frac{\frac{\hbar^2}{2m} [\mathbf{h}(\mathbf{q} + 2\boldsymbol{\eta})]}{e |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|} + \frac{\frac{\hbar^2}{2m} [\mathbf{h}(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta})] \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\eta}}{e^2 |\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|^2} \right) \times \frac{1 - n_{\mathbf{K} + \mathbf{q}, \alpha}}{\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta})} \right] \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$R^{(1b)}(\mathbf{K}) = \frac{A}{V^2} n_{\mathbf{K}\alpha} \frac{e|\mathbf{v}_{\mathbf{h}}| + \frac{\hbar^2}{2m} \eta_{\mathbf{h}}}{e|\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|} \times \sum_{\mathbf{q}}^{(b)} \nu(\mathbf{q}) \frac{1 - n_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}}{\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{h}-2\mathbf{q}) (\eta+\mathbf{q}) - e|\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|} \quad (7.11)$$

ここで $\sum_{\mathbf{q}}^{(b)}$ は

$$-\frac{\hbar}{2} + \epsilon \leq q_x \leq -\epsilon - \eta_x$$

又は

$$\epsilon - \eta_x \leq q_x \leq \frac{\hbar}{2} - \epsilon$$

(7.11)

のいずれかの条件をみたす $\mathbf{q}$ についての和を表す。[c] の場合についても同様な式が得られる。この場合、陰電子はブロッホ対領域からガス領域に移るわけであるが、第1ゾーン内の $|\mathbf{k}_x| \sim 0$ なるガス領域はすでに殆んどつまっているのので、第2ゾーンの $|\mathbf{k}_x| \sim \hbar$ なるガス領域に移らなければならない。この結果、エネルギー分母がかなり大きくなって、實際上 $R^{(1c)}(\mathbf{K})$ の寄与は小さくなる。したがって、ここではその表式を掲げるのを止め、次節で数値計算の結果得られた値を示すにとどめる。

§ 8. $R(\mathbf{K})$ の数値的評価と結果についての討論

この論文の第一の目的は、筆者等の銅単結晶に対する「異常な」実験結果を説明することにある。前節までに展開された理論は極めて初等的なものであるから、実験と理論との定量的な比較は望むべくもないが、それでも、一応、この節では、 $|\mathbf{h}|$, $e|\mathbf{v}_{\mathbf{h}}|$ 等に実際の銅に対する値を代入して前節までの結果の数値的評価を試みることにする。まず、 $\mathbf{h}$ として銅の (111) 逆格子ベクトルを採用すると、 $\hbar^2 \mathbf{h}^2 / 2m = 35 \text{ eV}$ を得る。次に、銅のバンドギャップ $2e|\mathbf{v}_{111}|$ ¹³⁾ としては、4.2 ~ 7.0 eV なる値が報告されているが、ここでは便宜上

$$e|v_h| = \frac{1}{10} \left(\frac{\hbar^2}{2m} n^2 \right) = 3.5 \text{ eV}$$

を採用する。そうすると、(5.1)により、 $\epsilon = |h|/10$ となる。(7.2)におけるしゃべいのパラメターとしては、銅に対する Thomas-Fermi の値に近い値として、便宜上

$$\lambda = |h|/2 = 1.6 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

を採用する。

A) 一次元モデルの場合

問題の本質を明らかにするために、先ず一次元の簡単なモデルについて考察しよう。ここで採り上げるのは、相互作用のない場合の各状態の占有数が(6.1)で与えられる場合である。一次元のときは(7.2)の $\nu(q)$ は適当でないから、ここでは、相互作用として井戸型ポテンシャル

$$V(x-x') = \begin{cases} -e V_0 & |x-x'| \leq \rho_0 \\ 0 & |x-x'| > \rho_0 \end{cases} \quad (8.1)$$

を仮定し、そのフーリエ係数

$$\nu(q) = -2e V_0 \frac{\sin q \rho_0}{q} \quad (8.2)$$

を採用する。そして、やや任意ではあるが $\rho_0 = d_{111}/2 = \pi/|h|$ を仮定することにする。

前節の [a], [b], [c] 三つの場合からの寄与の度合を比較するために、第一表には(8.1)で $V_0/|v_h| = 2$ の場合について、数種の $\xi_{-h}(k)$ に対する $R(k)$ の各項の数値をかかげる。(c)の寄与は、前節の末尾にのべたごとく小さいことがわかる。第7図には、

$$V_0/|v_h| = -2, 0, +2, +4$$

第一表

$\xi_{-h}(K)$	$R^{(0)}(K)$	$R^{(1a)}(K)$	$R^{(1b)}(K)$	$R^{(1c)}(K)$	$R^{(0)} + R^{(1)}$
1.0	1.00	0.10	0.17	0.05	1.32
0.5	0.75	0.05	0.16	0.04	1.00
0.0	0.50	0.00	0.13	0.03	0.66
-0.5	0.25	-0.05	0.08	0.02	0.30
-1.0	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.10

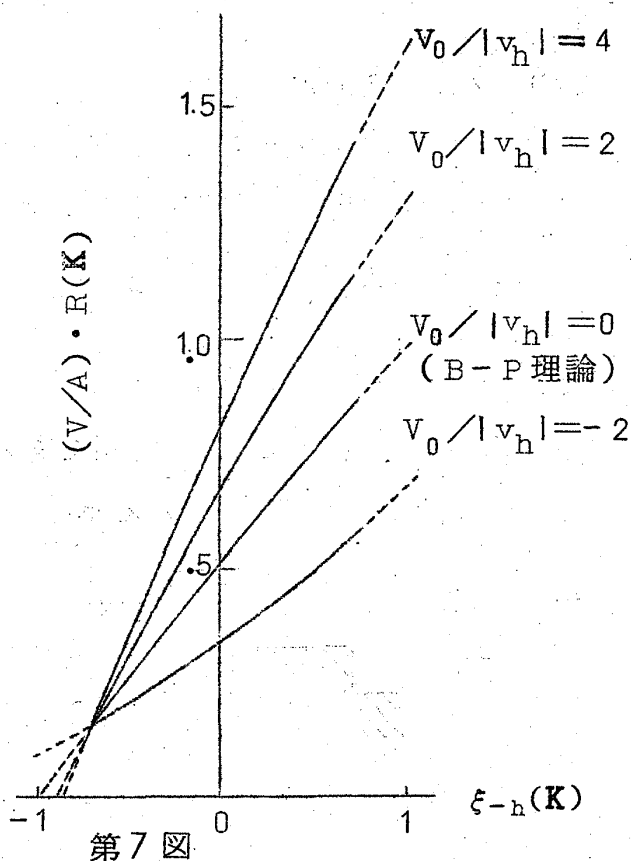
の四種の場合について帯境界附近の電子対の運動量分布を

$$R(K) \simeq R^{(0)}(K) + R^{(1a)}(K) + R^{(1b)}(K) + R^{(1c)}(K)$$

の近似において示した。 $V_0/|v_h| = 0$ とは、相互作用のない場合のことであるから、これは Berko 等の曲線に対する直線近似を与える。

$V_0/|v_h|$ が正、即ち、陰陽電子間に引力を考慮する時には、境界面での傾斜は Berko 等のそれに比べてかなり急となり、逆に、あり得べからざる仮定ではあるが、斥力を考えたときは、Berko 等の理論よりも境界面での切断はよりゆるやかになつてしまう。§ 1 でのべたように、筆者等が Cu

において、Berko 等の理論よりも鋭い切断を観測し、且つ、消滅電子対は電氣的に中性のような状態にあるから、対全体に対する周期場の影響は減少するのであろうと解釈したことは、今や多体理論による裏付けを得たといつてよいだろう。ただ、一次元の計算だけでは、§ 1 でのべたような Cu と Be 等の違いについての説明は得られないので、次に簡単な三次元の数値計算を行なうこ



第7図

とにする。

B) 準三次元モデルの場合

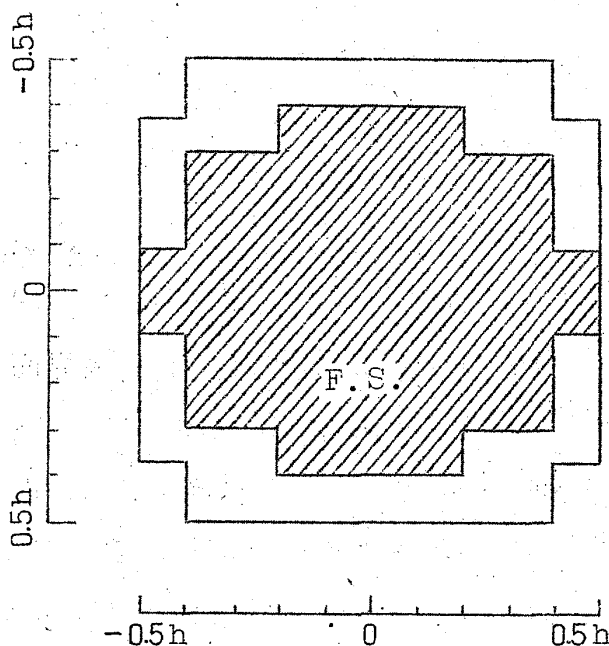
厳密な意味での三次元モデルでは，一對の境界面ばかりでなく，他の境界面の影響もすべて考慮しなければならないが，ここではあくまで二波近似の立場に立つて，準三次元的なモデルについて計算を進めることにする。更に，(7.5)の範囲のすべての K について $R(K)$ を数値的に評価するのは厄介であるので， K が h 軸上にある場合についてのみ $R^{(1a)}$ ， $R^{(1b)}$ を求めることにする。 $R^{(1c)}$ は今回は当初から省略する。計算は次のような2種の場合について行なう。

(n) フェルミ面がネックを有する場合

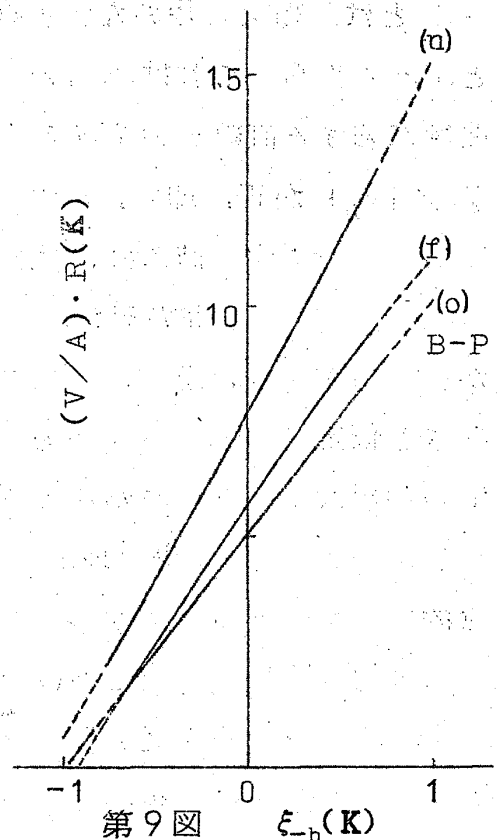
この場合のゾーンとフェルミ面の形状寸法を第8図に示す。これらは共に， h を軸とする同心円筒からなり，ネックの半径 $0.086|h|$ ，境界面の半径 $0.37|h|$ は Cu になぞらえて設定してある。その他の寸法も Cu のフェルミ面等の寸法からそれほどはずれてはいない。

(f) 第1ゾーンが完全につまっている場合

この場合，(6.1)が適用できる。 G_e ， S_i はこの場合に相当し， B_e もこのタイプに近いといえる。



第8図



第9図

「殆んど自由な電子」の多体理論と周期場中の陽電子消滅結果は第9図にそれぞれ (n), (f) の記号をつけた曲線で示されてある。いずれの場合も Berko 等の理論 (曲線 (0)) に比べてより鋭い切断を与えるが、(f) の場合には (0) との差異はそれほど著るしくない。これはパウリの排他律が物を言っているためである。このようにして、§ 1 で整理された実験事実のうち (1), (2) については定性的に納得のゆく説明が得られたといえる。Berko 等が再実験で高運動量成分を検出し得たのは、Cu の場合 (曲線 (n))、切断は鋭くなるといつても、高運動量成分 (図の $\epsilon < 0$ の部分) もまた相互作用によりエンハンスされているからである。

筆者等の実験では、⁵⁾ 切断部の勾配に関し、まだ決定的といえる数値を出すに至っていないが、それでも、第9図の (n) は、実測に比し、まだまだ勾配が小さいように思える。また、§ 1 の実験事項 (3) を理論的に調べるには、もっと広い範囲の k について計算を本格的に行なう必要があり、将来において、より高度の理論が現れることを期待したい。筆者等は、明春早々、より精度の高い実験と、その詳細な解析とを行なうべく、目下、種々準備中である。

筆をおくにあたり、御多忙中を再度にわたり御討論下さり、有意義な御助言を賜わった本学部岩本文明助教授に厚く感謝の意を表します。

文 献

- 1) S. Berko and J. S. Plaskett : Phys. Rev. 112 (1958) 1877
- 2) K. Fujiwara : J. Phys. Soc. Japan 20 (1965) 1533
- 3) K. Fujiwara and O. Sueoka : J. Phys. Soc. Japan 21 (1966) 1947
- 4) K. Fujiwara and O. Sueka : J. Phys. Soc. Japan 23 (1967) 1242
- 5) 藤原・末岡 : 日本物理学会講演 (1968年10月, 大阪), 未刊行。

藤原邦男

- 6) J.B. Shand and A.T. Stewart : "Positron Annihilation"
(Academic Press, N.Y., 1967) 291
- 7) J.C. Erskine and J.D. McGervey : Phys. Rev. 151 (1966)
615
- 8) S. Berko, S. Cushner and J.C. Erskine : Phys. Lett.
27A (1968) 668
- 9) K. Fujiwara, O. Sueoka and T. Imura : J. Phys. Soc. 24
(1968) 467
- 10) K. Fujiwara : J. Phys. Soc. Japan 16 (1961) 2226
- 11) K. Terakura, Y.H. Ohtsuki and S. Yanagawa : J. Phys.
Soc. Japan 21 (1966) 1973
- 12) J.P. Carbotte and S. Kahana : Phys. Rev. 139 (1965)
A213
- 13) Cf. "The Fermi Surface" (John Wiley and Sons, Inc.,
N.Y., 1960)