

A Method of Collective Description of Elementary Excitations in Liquid He II.

II. Roton Excitations

東理大理・物理 五十嵐 靖 則
鈴木 良 治

(9 月 3 0 日 受 理)

Abstract 内部 Hamiltonian によって記述される内部運動の内に含まれている新しい励起を, 先に求めておいた内部座標を用いて, 運動方程式の方法で基準振動の形に求め, 実験とかなりよく一致する結果を得た。

§ 1. まえがき

先に⁽¹⁾, 液体ヘリウム II に於ける phonon excitation を Tomonaga の方法を応用して興味ある結果を得たが, 今度は, 内部 Hamiltonian によって記述される内部運動の内に含まれている新しい励起を, 先に求めておいた内部座標を用いて, 基準振動の形に求めることにする。ここでは H_{in} のうち long-range dipole-dipole interaction term は省略して計算を進めることにする。

§ 2. 内部 Hamiltonian と基準座標

内部 Hamiltonian H_{in} は次の形に求まっている⁽¹⁾。

$$\begin{aligned} H_{in} = & \sum_n \frac{P_n^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \sum_{|\mathbf{k}| > k_c} V_{\mathbf{k}} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \\ & - \sum_{n \neq n'} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{k_c (\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_n)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{n'})}{2Nm k^2} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \\ & + \sum_{n \neq n'} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{k_c \hbar [(\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_n) - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{n'})]}{4Nm} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2} N^2 V_{\kappa} (\kappa=0) - \frac{1}{2} N \sum_{\mathbf{k} \neq 0}^{k_c} V_{\mathbf{k}}, \quad (2.1)$$

$$\text{ここで } m^* = m / \left(1 - \frac{S}{3N}\right).$$

H_{in} は一見すると, $\mathbf{r}_n, \mathbf{P}_n$ で記述されているように見えるのであるが, 正しい意味での H_{in} の変数は内部変数 $\mathbf{R}_n, \mathbf{P}_n$ と考えられる。この $\mathbf{R}_n$ は先に⁽¹⁾ 次の形に求まっていた。

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{r}_n + \frac{1}{N} \sum_{n' \neq n} \sum_{\mathbf{q} \neq 0}^{k_c} \frac{\mathbf{q}}{q^2} \cdot \sin \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) \quad (2.2)$$

全系の Hamiltonian によって記述される運動の mode のうち S 個は longitudinal wave 即ち, phonon mode として既に Collective coordinate の方法で取り扱ったので, 残りの $(3N-S)$ の自由度を記述する部分は内部 Hamiltonian と考えられ, その内部運動には transverse 的な運動の mode が存在しているかも知れない。そこで我々は roton excitation をこの残りの内部 Hamiltonian に含まれる内部励起であると考え, 内部座標 $\mathbf{R}_n$ を用いて H_{in} を基準振動の形に求めることにする。

基準座標としては次の形に採るのが都合がよい。

$$\xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (|\mathbf{k}| > k_c) \quad (2.3)$$

$|\mathbf{k}| < k_c$ では $\xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} = 0$ となっている。

$\xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}}$ を旧い変数で書けば, (2.2) を用いて,

$$\xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n + i \sum_{n' \neq n} g(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \quad (2.4)$$

$$\text{ここで, } g(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0}^{k_c} \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q})}{q^2} \sin \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})$$

§ 3. Calculation of internal excitation energy

— Roton excitation energy —

ここでは計算を簡単にするために, long-range dipole-dipole interaction は後で考慮することにして無視し, R.P.A を用い, 運動方程式の方法で計算を行うことにする。

$$\begin{aligned}
 \ddot{\xi}_r^k &= (i/\hbar) [H_{in}, \dot{\xi}_r^k] \\
 &= \frac{i}{2m^*N} \sum_n \{ \hbar (k + \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj})^2 \cdot e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} \\
 &\quad + 2(k + \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj}) \cdot e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} \cdot p_n \\
 &\quad + \hbar \sum_{i \neq n} (\nabla_n g_{in})^2 \cdot e^{ik \cdot r_i + i \sum_{n \neq i} g_{in}} \\
 &\quad + 2 \sum_{i \neq n} \nabla_n g_{in} \cdot e^{ik \cdot r_i + i \sum_{n \neq i} g_{in}} \cdot p_n \} \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \ddot{\xi}_r^k &= (i/\hbar) [H_{in}, \dot{\xi}_r^k] \\
 &= (i/\hbar) \left[\sum_n \frac{p_n^2}{2m^*}, \dot{\xi}_r^k \right] + (i/\hbar) \left[\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \sum_{|\kappa| > k_c} V_\kappa e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})}, \dot{\xi}_r^k \right] \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

まず最初に第一項を計算する。

$$\begin{aligned}
 (i/\hbar) \left[\sum_n \frac{p_n^2}{2m^*}, \dot{\xi}_r^k \right] &= - \frac{(1/\hbar)}{4m^{*2}N} \sum_n e^{ik \cdot r_n + i \sum_{i \neq n} g_{ni}} \{ \\
 &\quad \hbar^3 (k + \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj})^4 + 2\hbar^3 (k + \sum_{n \neq i} \nabla_i g_{in})^2 (\sum_{n \neq i} \nabla_n g_{in})^2 \\
 &\quad + 3\hbar^2 (k + \sum_{n \neq i} \nabla_i g_{in})^2 \cdot \sum_i \nabla_n g_{in} \cdot p_n \\
 &\quad + 4\hbar \cdot (k + \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj})^2 \cdot p_n^2 \\
 &\quad + 8\hbar \cdot (k + \sum_{i \neq n} \nabla_n g_{ni}) \cdot \sum_{i \neq n} \nabla_i g_{ni} \cdot p_n^2 \} \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \doteq - \frac{\hbar^2}{4m^*N} \cdot \sum_n e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} \{ (k + \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj})^4 \\
& + 2(k + \sum_{n \neq i} \nabla_i g_{in})^2 (\sum_{n \neq i} \nabla_n g_{in})^2 \} \quad (3.4)
\end{aligned}$$

ここで我々は、重心系に移し $\sum_n p_n$ の項を消し、Bose condensation による近似を用いて p^2 の項を無視した。

次に(3.2)式の第二項の計算を実行する。

$$\begin{aligned}
(i/\hbar) \left[\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \sum_{|\kappa| > k_c} V_\kappa e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})}, \xi_r^k \right] &= \frac{1}{2m^*N} \{ \\
& \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \cdot \sum_{n \neq n'} \sum_{k} e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& + \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \cdot \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n} \sum_{n'} \nabla_n g_{nj} e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& - \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \cdot \sum_{n \neq n'} \sum_{k} e^{ik \cdot r_{n'} + i \sum_{j \neq n'} g_{n'j}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& - \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n'} \sum_{n'} \nabla_{n'} g_{n'j} e^{ik \cdot r_{n'} + i \sum_{j \neq n'} g_{n'j}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& + \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n} \sum_{n} \nabla_n g_{nj} e^{ik \cdot r_j + i \sum_{n \neq j} g_{jn}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& - \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n'} \sum_{n} \nabla_n g_{jn'} e^{ik \cdot r_j + i \sum_{n' \neq j} g_{jn'}} e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \}
\end{aligned}$$

ここで、 $e^{ik \cdot r_n + i \sum_{j \neq n} g_{nj}} \simeq e^{ik \cdot r_n}$ と近似すれば、

$$\begin{aligned}
& \doteq \frac{1}{2m^*N} \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \left\{ k \sum_{n \neq n'} e^{i(k+\kappa)(r_n - r_{n'})} \cdot e^{ik \cdot r_{n'}} \right. \\
& + \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{nj} e^{i(k+\kappa) \cdot (r_n - r_{n'})} \cdot e^{ik \cdot r_{n'}} \\
& + k \cdot \sum_{n \neq n'} e^{-i(k-\kappa) \cdot (r_n - r_{n'})} \cdot e^{ik \cdot r_n} \\
& - \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n'} \nabla_{n'} g_{n'j} e^{-i(k-\kappa) \cdot (r_n - r_{n'})} \cdot e^{ik \cdot r_n} \\
& + \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n} \nabla_n g_{jn} e^{ik \cdot r_j} \cdot e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \\
& \left. - \sum_{n \neq n'} \sum_{j \neq n'} \nabla_{n'} g_{jn'} e^{ik \cdot r_j} \cdot e^{i\kappa \cdot (r_n - r_{n'})} \right\} \\
& = \frac{1}{2m^*N} \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_\kappa \cdot \sum_n e^{ik \cdot r_n} \left\{ k [S(k+\kappa) - 1] \right. \\
& + \int -\nabla g(r) P_1(r) dr \cdot [S(k+\kappa) - 1] \\
& + 2 \cdot \int \nabla g(r) P_1(r) \cdot e^{i(k+\kappa) \cdot r} \cdot dr \\
& - k \cdot [S(k-\kappa) - 1] \\
& - \int -\nabla g(r) P_1(r) dr \cdot [S(k-\kappa) - 1] \\
& \left. - 2 \cdot \int \nabla g(r) P_1(r) e^{i(k-\kappa) \cdot r} dr \right\} \quad (3.5)
\end{aligned}$$

ここで $P_1(r)$, $S(k)$ は二体相関関数とそのフーリエ成分である。二体相関関数 $P_1(r)$ を近似的に Fig 3-1 のようにとって (3.5) 式の計算を実行すれば,

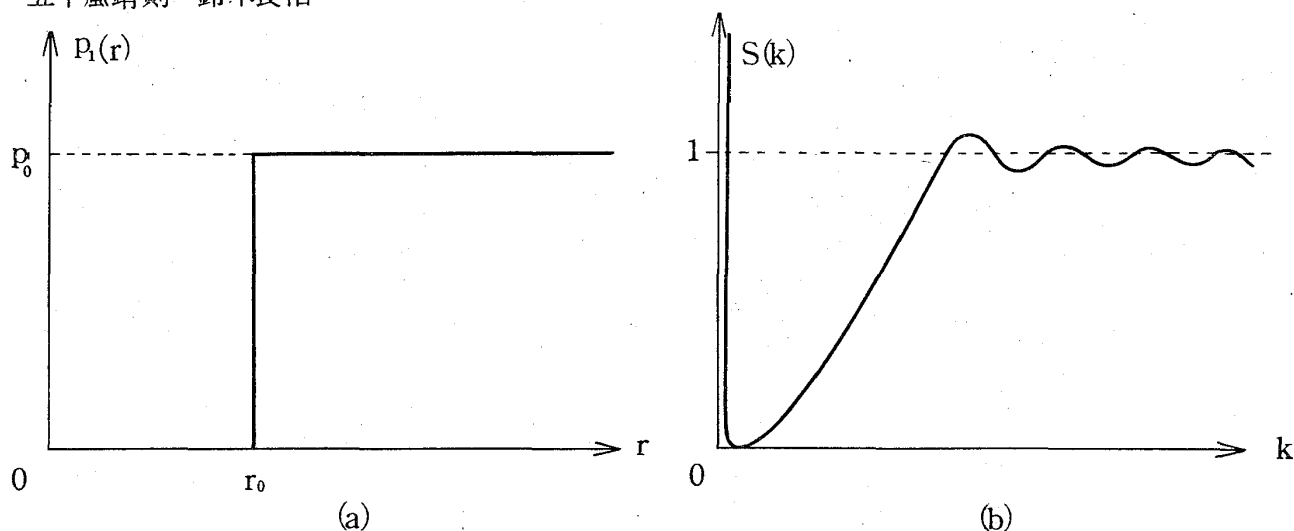


Fig 3-1

$$\begin{aligned}
 \ddot{\xi}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} = & -\frac{1}{2m^*N} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{n}}} \left\{ 2(\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{k} V_{\mathbf{k}} \right. \\
 & + 2(\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_{\kappa} \cdot 3 \frac{j_1(|\mathbf{k} + \kappa| \cdot r_0)}{|\mathbf{k} + \kappa| \cdot r_0} \\
 & \left. - 2 \cdot \int \nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} + \kappa) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_{\kappa} \right\} \quad (3.5')
 \end{aligned}$$

従って, (3.4), (3.5'), (3.2) から

$$\begin{aligned}
 \ddot{\xi}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} + & \left[\frac{\hbar^2}{4m^{*2}N} \left\{ (\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r})^4 \right. \right. \\
 & + 2(\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r})^2 \cdot (\int -\nabla g(\mathbf{r}') P_1(\mathbf{r}') d\mathbf{r}')^2 \\
 & + \frac{N}{m^*} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) V_{\mathbf{k}} \\
 & + \frac{1}{m^*} (\mathbf{k} + \int -\nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_{\kappa} \cdot 3 \frac{j_1(|\mathbf{k} + \kappa| \cdot r_0)}{|\mathbf{k} + \kappa| \cdot r_0} \\
 & \left. \left. - \frac{2}{m^*} \int \nabla g(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} + \kappa) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa V_{\kappa} \right\} \cdot \xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} \right] \ddot{\xi}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}} = 0 \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

よって, 我々の $\xi_{\mathbf{r}}^{\mathbf{k}}$ は H_{in} の基準座標になって居り, 求める energy $\varepsilon_{\mathbf{r}}(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{\mathbf{r}}(\mathbf{k}) = & \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \{ (\mathbf{k} + \int -\nabla \varphi(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r})^4 \right. \\
 & + 2 (\mathbf{k} + \int -\nabla \varphi(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r})^2 (\int -\nabla \varphi(\mathbf{r}') P_1(\mathbf{r}') d\mathbf{r}')^2 \} \\
 & + \frac{N}{m^*} \hbar^2 \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} + \int -\nabla \varphi(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) \mathbf{V}_{\mathbf{k}} \\
 & + \frac{\hbar^2}{m^*} (\mathbf{k} + \int -\nabla \varphi(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}) \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa \mathbf{V}_{\kappa} \cdot 3 \frac{j_1(|\mathbf{k} + \kappa| r_0)}{|\mathbf{k} + \kappa| \cdot r_0} \\
 & \left. - \frac{2}{m^*} \hbar^2 \cdot \int \nabla \varphi(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} + \kappa) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \cdot \sum_{|\kappa| > k_c} \kappa \mathbf{V}_{\kappa} \right]^{1/2} \\
 & (|\mathbf{k}| > k_c) \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

ここで $j_1(x)$ は第一種球ベッセル関数の一次を表わしている。

§ 4. Estimation of excitation energy

ポテンシャルとして Slater-Kirkwood Potential⁽²⁾に soft-core を付け加えたポテンシャルを採って excitation energy を算出してみることにする。

$$\begin{aligned}
 V(r) &= V_0 \quad (0 \leq r < b) \\
 &= \alpha e^{-\mu r} - \beta \cdot r^{-6} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

$$\text{ここで, } \left\{ \begin{array}{l} \alpha = 5.67 \times 10^6 [\text{°K}] \\ \beta = 1.08 \cdot \sigma^6 \\ \quad = 1.08 \times 10^{-44} [\text{°K} \cdot \text{cm}^6] \\ \sigma = 4.64 [\text{Å}] \\ \mu = 21.5 / \sigma \\ \quad = 4.63 \times 10^8 [\text{cm}^{-1}] \end{array} \right.$$

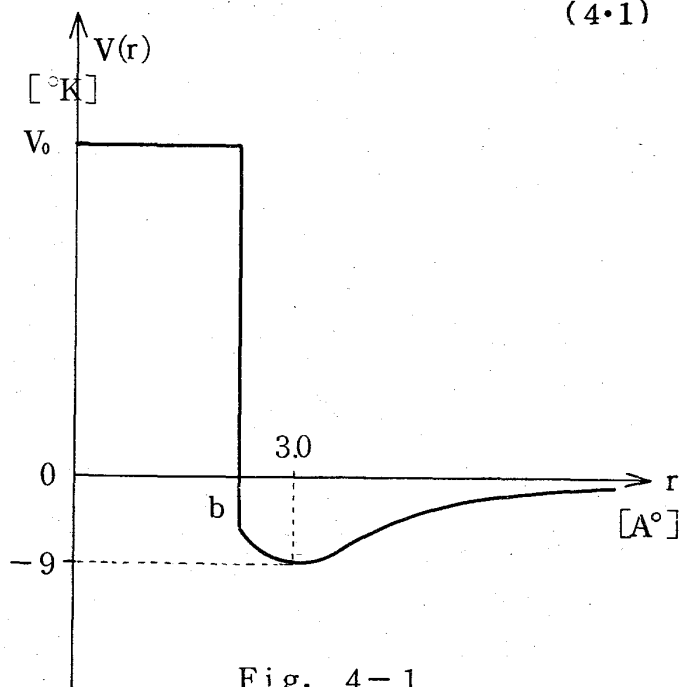


Fig. 4-1

effective soft-core radius b を, $b = 2.7 [\text{\AA}]$ にとれば, $V_0 = 37.0 [^\circ\text{K}]$ と, phonon theory の関係から決まる。 $V(r)$ の Fourier-Component V_k は,

$$\begin{aligned}
 V_k = 4\pi \bigg[& V_0 b^3 \frac{j_1(kb)}{kb} + \frac{\alpha \cdot e^{-\mu b}}{\mu^2 + k^2} \{ \mu b^2 j_0(kb) + b \cos kb \\
 & + \frac{1}{\mu^2 + k^2} ((\mu^2 - k^2) b j_0(kb) + 2\mu \cos kb) \} \\
 & - \beta \{ (\frac{1}{4} \frac{1}{b^3} - \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 2} \frac{k^2}{b}) j_0(kb) \\
 & + (\frac{1}{4 \cdot 3} \frac{1}{b^3} - \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 2} \frac{k^2}{b}) \cos kb \\
 & + \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 2} k^3 \cdot (\frac{\pi}{2} - S_i(kb)) \} \bigg] \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

(3.7) 式に於て,

$$\begin{aligned}
 r &\equiv \frac{1}{k^4} \{ (k + \int -\nabla \varphi(r) P_1(r) dr)^4 \\
 &+ 2(k + \int -\nabla \varphi(r) P_1(r) dr)^2 \times \\
 &\times (\int -\nabla \varphi(r') P_1(r') dr')^2 \} \\
 \delta &\equiv \frac{1}{k} \cdot (k + \int -\nabla \varphi(r) P_1(r) dr) \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

とおき, 第4項及び第5項を無視し, 主要項だけに限れば,

$$\epsilon_r(k) \doteq \left[\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 r k^4 + \frac{N}{m^*} \hbar^2 \delta k^2 V_k \right]^{1/2} \quad (4.4)$$

$k > k_c$ ($k_c = 0.8 [\text{\AA}^{-1}]$, $b = 2.7 [\text{\AA}]$) に対する $\epsilon_r(k)$ の概算の数値は次に示す表の通りである。

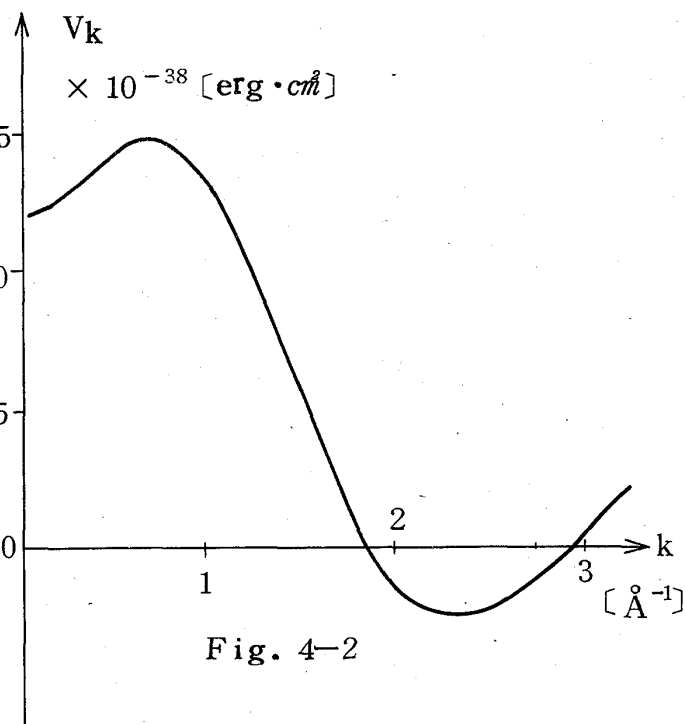


Fig. 4-2

A Method of Collective Description of
Elementary Excitations in Liquid He II.

$$b = 2.7 [\text{\AA}^\circ], \quad k_c = 0.8 [\text{\AA}^{-1}], \quad S/N \doteq 0.4$$

$k[\text{\AA}^{-1}]$	$\varepsilon_r(k) [\text{erg}]$	$\varepsilon_r(k)/\kappa [^\circ\text{K}]$	Exp. (H.W.) ⁽⁴⁾ [°K]
0.8	21.0	15.2	12.7
1.0	24.5	17.7	13.6
1.2	25.7	18.6	13.8
1.4	24.4	17.7	13.0
1.6	20.6	14.9	11.2
1.8	15.1	10.9	9.3
1.9	11.4	8.3	8.7
2.0	9.8	7.1	9.0
2.1	10.5	7.6	10.0
2.2	13.2	9.5	11.7
2.3	17.1	12.4	13.6
2.4	22.3	16.2	15.5

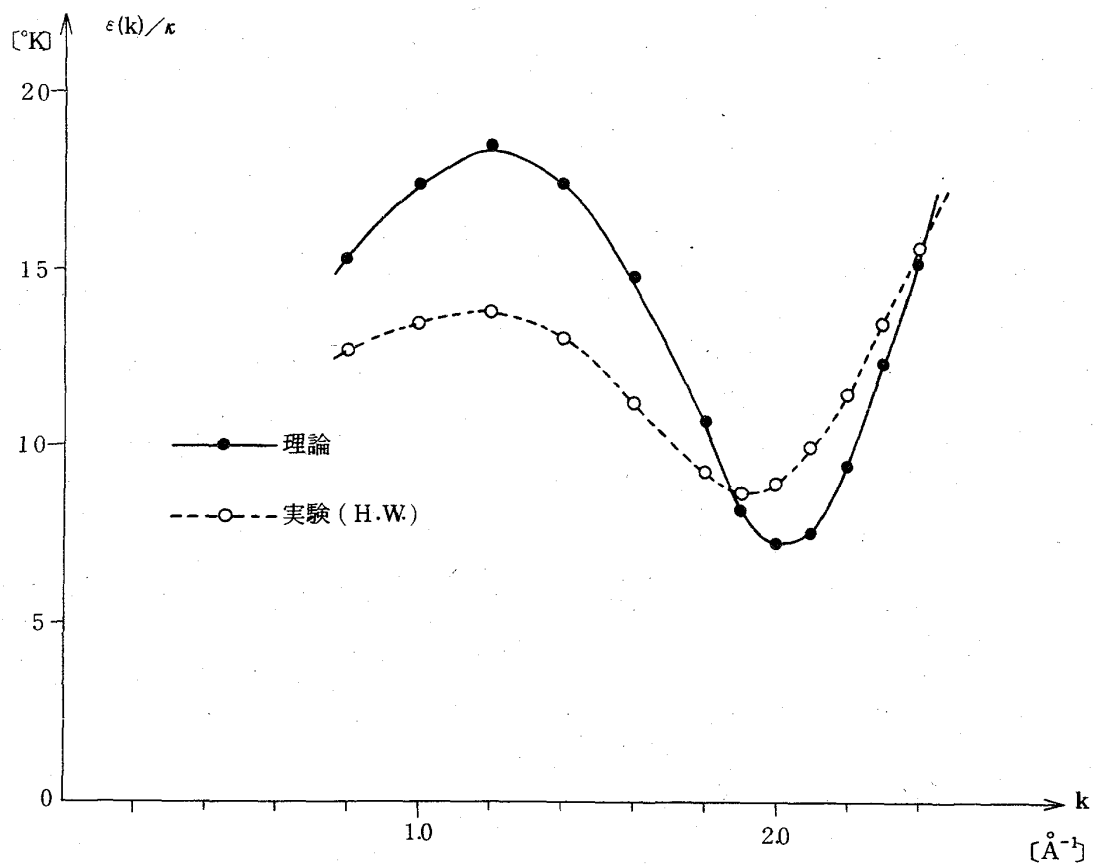


Fig. 3-4

§ 5. む す び

我々は roton excitation を phonon collective motion に対する internal motion による励起であるという立場から, internal Hamiltonian の normal mode を求めてきた。内部励起を記述する基準座標としては, 先に⁽¹⁾導入しておいた内部座標 $\mathbf{R}_n$ を用いて $\xi_r^{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}$ の形に仮定した。この座標を系の基底状態に operate してできる状態, $\xi_r^{\mathbf{k}} | 0 \rangle$ は系の励起状態を表わすことになるが, この励起状態はちょうど Feynman-Cohen⁽³⁾ たちの仮定した励起状態と同じ形になっている。

我々はこの計算では, long-range dipole-dipole interaction term を無視し, 又最後の計算で potential term の two-particle correlation term を無視して主要項だけを拾って概算してみたのであるが, 得られた Energy spectrum の形は実験とかなりよく一致している。ここで無視した項を拾って正しく, 精密に計算を実行すれば, より実験値に近い結果が得られることを期待できると思われる。更に, (2・3) 式に仮定した roton 座標に正準共役な運動量を見い出し, Tomonaga の方法を用いて内部 Hamiltonian H_{in} を roton Hamiltonian と他の部分に分離して計算を進めれば, 内部励起の問題がより精密に取り扱われ得るようになり, 内部励起の構造研究への新しい道が開けて行くであろう。

References

- (1) 五十嵐靖則, 鈴木良治, 物性研究 Vol. 18 No. 5 (1972) 195.
- (2) J.C. Slater and J.G. Kirkwood, Phys. Rev. 37 (1931) 682.
- (3) R.P. Feynman and M. Cohen, Phys. Rev. 102 (1956) 1189.
- (4) D.G. Henshaw and A.D.B. Woods, Phys. Rev. 121 (1961) 1266.
R.A. Cowley and A.D.B. Woods, Canadian Journal of Physics 49 (1971) 177.