

S(k, ω) の巾について

— 柳 正 和 (阪大工)

中性子の非弾性散乱の cross section に関する液体 He の dynamical structure factor S(k, ω)

$$\begin{aligned} S(k, \omega) &= \frac{1}{n} \langle 0 | \rho_k^\dagger \delta(H - \omega) \rho_k | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_i \delta(\omega_i - \omega) \cdot |\langle i | \rho_k | 0 \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1)$$

を考える。ρ_k は density fluctuation operator, ω_i は中間状態の energy. 今 ρ_k が系の良い collective variable であれば、S(k, ω) の巾は zero である。しかし、良く知られているように、十分小さい k でも、ρ_k はあまりよい変数でない。すなわち state ρ_k|0> は系の固有状態でない。

Huang-Klein [Ann. Phys. 30 203 ('64)] は

$$S(k, \omega) = S(k) \cdot \frac{\Gamma_k / 2\pi}{(\omega - \langle k \rangle)^2 + \Gamma_k^2 / 4} \quad (2)$$

であることを示した。このことは phonon は系の single state に対応せず状態密度が

$$\frac{\Gamma_k / 2\pi}{(\omega - \langle k \rangle)^2 + \Gamma_k^2 / 4} \quad (3)$$

と与えられる一群の states に対応することになる。

S(k, ω) のこのような巾の原因として、まず phonon-phonon 相互作用が考えられる。phonon-phonon 相互作用は back-flow の効果であることは良く知られている。例えば ρ_k と正確に canonical conjugate である v_k を導入した Sunakawa らの Hamiltonian を使えば、phonon-phonon 相互作用まで考えると我々は

$$\dot{\rho}_k(t) \cong -i\omega_k \cdot \rho_k(t) - i \sum_q \omega_q \cdot \frac{k \cdot q}{q^2} \rho_{k-q} \rho_q(+)$$
(4)

$$\omega^2(k) = \frac{k^2}{2m} \left(\frac{k^2}{2m} + 2nv(k) \right)$$
(5)

を得る。才二項は Feynman 流の back-flow の効果が入つて来る。より正確には、二時間グリーン関数を用いることにより行える。結果だけ示すと、 $S(k, \omega)$ 二種類の peak の重ね合せであることが分る。すなわち

(1) $\omega = \omega_k$ にある peak

(2) $\omega \pm \sqrt{\omega_k^2 + \omega_p^2}$ にある peak. (p については総和する)

このことは $S(k, \omega)$ の巾は、たしかに phonon-phonon 相互作用によつて決まることを示している。

ところで sum rule であるが、 $k \rightarrow 0$ では才 1 の peak でつくされることになり、 ω_k は Feynman の spectrum となる。

$$\omega_k = \frac{k^2}{2m} \frac{1}{S(k)}$$
(6)

最後に、式(6)より potential $v(k)$ をもとめると

$$v(k) = \frac{k^2}{2m} [S^{-2}(k) - 1]$$
(7)

この式の中に $S(k)$ の実験値を入れて、 $v(r)$ を一次元でもとめると、Lennard-Jones potential に非常に近い形が得られることを記しておく。