

2. 講義ノート2.

「ボーズ・フェルミ粒子系の変分原理」

東京教育大学理学部 沢田克郎

§1. 変分法の現状

多体系の力学の取り扱い、一般には近似的にしか行うことができない。Andersonによれば、その近似すらも「Hartree-Fock に毛が生えた程度のもの」ということになる。多体系における重要な問題は、粒子間の correlation であるが、そのうち dynamical correlation は、摂動と変分という二通りの方法で近似的に取り入れる事ができる。またもうひとつの statistical correlation は、波動函数を Slater-determinant の形に書くことによつて、一般には厳密に取り入れられる。しかし、dynamical correlation の計算を楽にするために、statistical correlation の要請をゆめめてやるという。BCS理論ののような例もある。これから、dynamical correlation を入れた変分法について述べるのだが、そのまえに変分法の現状について述べよう。変分の方法をその型によつて分類すると次のようになる。

i) 普通の Hartree-Fock

多数の粒子間相互に働く力をもとに、一体のポテンシャルを物理的に決め、それをもとにして話を進める。statistical correlation は、多体系の波動函数として、Slater-determinant または対称化された函数を使うことによつて厳密に取り入れられ、dynamical correlation は摂動によつて扱われる。この方法では摂動展開が収斂するという大きな仮定が必要だが、この方法を使うと、多くのことがいえるし、また物理的な picture をえがきやすいという利点がある。また励起状態についても、かなりハッキリしたものが見つかる。Brueckner理論は Hartree-Fock をもとにして二体の Correlation をなるべく多く入れようとしたもので、特に Nuclear matter では三体の寄与は小さいとされている。¹⁾

講義ノート 2 .

ii) Jastrow-Dingle 型

まず最初に 2 体の correlation²⁾ を入れた波動函数を物理的に決め、それから変分を行う。しかし、多くの場合、変分だけでは話が片づかなくなり、この方法によるほとんどのものは (Dyson の方法以外は) さらに cluster expansion を取り入れている。³⁾したがって、ここでも収斂性の問題が生ずる。2 体の correlation を取り入れて厳密に解けているのは、high density limit における charged-boson⁴⁾ の問題である。Feynman の方法以外は、励起状態については何も判らない。

iii) Kohn 型

一体を Thomas-Fermi で処理する。厳密ではあるが、余りいろいろなことは云えない。⁵⁾

iv) Green 函数

変分らしい変分はない。

なお上記の charged-boson の問題で Girardeau と Arnowitt が求めたエネルギーの上限に $r_s^{3/4}$ と $\ln r_s$ に比例する項がでてくるが、これは変分法にはよらずに Green 函数を使った Wright の結果と一致している。⁶⁾このことから most divergent な項を集めることと ii) の方法は同じものであるといえるかもしれない。

§2. 多体粒子系の相互作用の物理的な考察

これから私がやるのは、2 体の correlation で一番強い hard-core の問題と、さらにそれに attractive potential が加わった時である。二体の相互作用によつて、粒子の運動は自由な時とどう違うだろうか。今 2 個の粒子を考える。今、ひとつの粒子が粒子 A に衝突するものとする (図 1, 2), 入

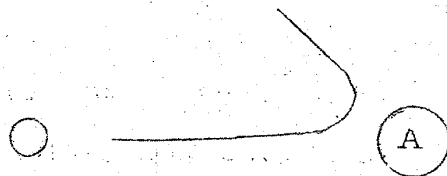


図 1 相互作用が repulsive の時

講義ノート 2

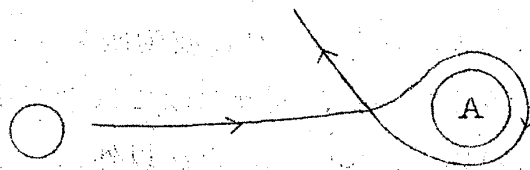


図2 相互作用が attractive の時

射粒子は粒子Aとの相互作用によつて散乱される。この散乱される粒子の発散する波の wave packet は r を粒子Aからの距離、 m を粒子の質量、 a を scattering length として

$$\frac{i}{r} e^{ik(r-2a) - i\frac{k^2}{2m}t} + \int f(k) dk$$

で与えられる。相互作用が repulsive なら $a > 0$, attractive なら $a < 0$ である。そうすると入射波が散乱後Aから r だけ離れた点に到達する迄に要する時間 t は、

$$\frac{\partial}{\partial k} \left\{ k(r-2a) - \frac{k^2}{2m} t \right\} \simeq 0$$

から

$$t = \frac{1}{v}(r-2a)$$

になる。相互作用がなければ、この時間は r/v だから、相互作用が repulsive ならば散乱された粒子は相互作用がない時にくらべて $2a/v$ だけ早くAの近辺から離れてしまうし、attractive ならば $2|a|/v$ だけよけいにAの周りに居残ろうとする。

+ Schiff, P.105の一番上の式の $A_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$ を入れて、s-wave に対して $\delta_0 = -ka$ という hard core の値を入れた。この時、s-wave の入射波は

$$\frac{1}{r} e^{ikr - i\frac{k^2}{2m}t}$$

で収斂する球面波。

講義ノート 2 .

次にAのまわりに他にもたくさんの粒子がある場合を考えよう。粒子間の相互作用がrepulsiveだとすると(図3)、散乱波はAのまわりにいる他の粒子によつてAの方に押し戻される。だから上の時間は実質的に小さくなる。相互作用がattractiveな時(図4)には、散乱波は $2|a|/v$ だけ長くAのまわりにいたいのだが、他の粒子からのattractionによつて $2|a|/v$ より早目にAから離れていく。もちろんまわりからはねかえつても来るけれど、はねかえりは、波がAからdisperseしたものが再散乱されて、再びdisperseしたものであるから、その割合は小さい。いいかえれば、二体間の相互作用は、repulsiveであるにしろ、attractiveであるにしろ、まわりに他の粒子がない時と比較すると弱くなる。

また入射粒子が特定の散乱粒子から遠く離れた時には、遠くへ行くまでに何

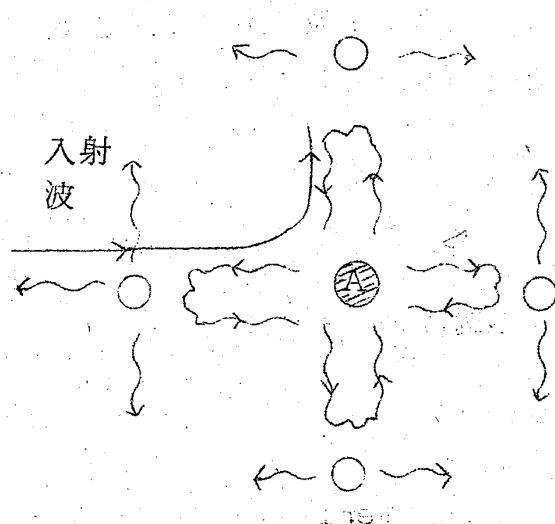


図3. repulsiveの時
($a > 0$)

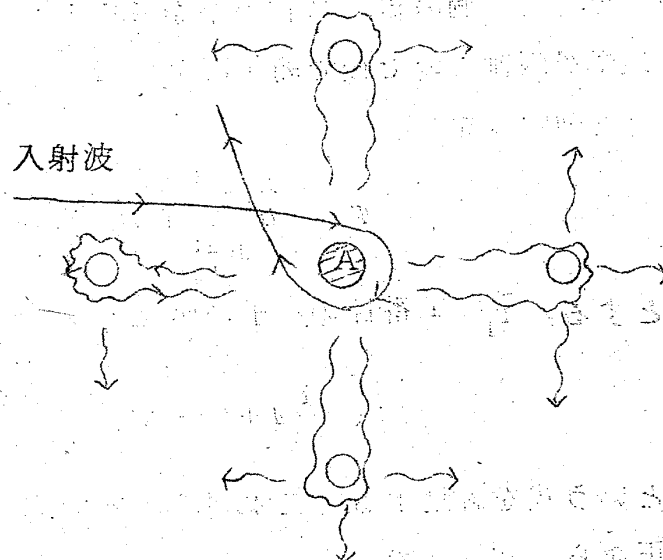


図4. attractiveの時
($a < 0$)

度も外の粒子と散乱しているから、特定粒子との相関はなくなると考えられる。

このような多体中の2体問題の波動函数を f_2 と書くと、この波動函数は

$$\left(-\frac{1}{m} \Delta + \bar{v}\right) f_2 = 0$$

という方程式を満たす。 $\bar{v}$ は相互作用のポテンシャルであつて、上述の様な多体効果で、じゅんすいな二体のポテンシャルではない。右辺をゼロにとつたの

講義ノート 2 .

は、二体間の距離 r が大きい所では、correlation がなくなる場合をとつたからである。したがって例えば s -wave については、

$$f_2 = \frac{\sin k(r-a)}{kr} \Big|_{k \rightarrow 0} = 1 - \frac{a}{r} \quad (a: \text{scattering length})$$

であつて、 $f_2(r \rightarrow \infty) = 1$ となる。さらに、遠くに離れると特定の粒子との相関がなくなるためには、phase shift も当然ゼロでないと困る（どれに散乱されたか記憶していない）ので、気体中の f_2 は $a=0$ になるように、modified potential $\bar{v}$ はなっているはずである。

§3 N 個のボーズ粒子系

そこで N 個のボーズ粒子系を考えることにする。フェルミ粒子系については、計算が困難なので後で簡単に触れておくことにとどめる。考えるボーズ粒子系の波動関数を

$$\Psi = \prod_{i>j=1}^N f(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (1)$$

とする。 $\vec{r}_i$ は i 番目の粒子の座標である。前節の議論によつて f は

$$\left(-\frac{1}{m} \Delta + (v + v')\right) f = 0 \quad (2)$$

という式を満足する。二体間のポテンシャルによる scattering length が正なら、 $v' < 0$ で、scattering length が負なら、 $v' > 0$ である。 v' 値や形は今までの考察では勿論判らないが、 $(v + v')$ というポテンシャルによる scattering length ゼロになるようになるよようにとる。エネルギー表式は

$$E' = \frac{\langle \Psi, \left(\sum_i \frac{-\Delta_i}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) \Psi \rangle_N}{\langle \Psi, \Psi \rangle_N} \quad (3)$$

ただし

$$\langle F_N \rangle = \int \cdots \int d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N F(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N).$$

(1) 式を(3)式に入れて部分積分を行うと、

$$E' = \frac{\langle \prod_{i>j}^N f^2(r_{ij}) \frac{1}{2} \sum_{i>j}^{i \neq j} (v_{ij} - \frac{1}{2m} \frac{\Delta f_{ij}}{f_{ij}} + \frac{1}{2m} (\frac{\nabla_i f_{ij}}{f_{ij}})^2) \rangle_N}{\langle \prod_{i>j}^N f^2(r_{ij}) \rangle_N} \quad (4)$$

となる。ただし表面積分は落としてやる。このことは、

$$f(r \rightarrow \infty) = 1 + O\left(\frac{1}{r^{1+\alpha}}\right), \quad \alpha > 0 \quad (5)$$

を仮定したことを意味する。しかし前節の議論で scattering length はゼロになるようにしたのだから式(5)という仮定は許される。以下簡単のために

$$f(r > a') = 1 \quad a' : \text{有限} \quad (6)$$

としておく。ただし、 $O(\frac{1}{r^2})$ の項が励起状態の説明に重要であろうという現象論的議論もある。⁷⁾

条件(6)を使うと(4)式は、

$$E' = \frac{1}{\langle \prod_{i>j}^N f_{ij}^2 \rangle} \left\langle \frac{1}{2} \sum_{i>j}^{i \neq j} \left\{ \frac{v_{ij} - v'_{ij}}{2} f_{ij}^2 + \frac{1}{2m} (\nabla_i f_{ij})^2 \right\} \right\rangle.$$

$$\cdot \prod_{k \neq i, j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \cdot \prod_{k \neq i, j} f_{kl}^2 \rangle_N \quad (7)$$

となる。 v_{ij} , v'_{ij} をそれぞれ repulsive part と attractive part に分けてやって

$$v_{ij} = v_{ij}^A + v_{ij}^R$$

$$v'_{ij} = v'_{ij}^A + v'_{ij}^R$$

講義ノート2.

と書くことにすると、

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \langle \prod_{i>j} f_{ij}^2 \rangle < \frac{1}{4} \sum_{i>j}^{i \neq j} \{ (v_{ij}^A - v_{ij}^R) f_{ij}^2 +$$

$$+ (v_{ij}^R - v_{ij}^A) f_{ij}^2 + \frac{1}{m} (\nabla_i f_{ij})^2 \prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \cdot \prod_{k \neq i,j} f_{kl}^2 \rangle > N. \quad (8)$$

変分函数に条件をつけると、エネルギーの値はそうよくないものになってしまうかもしれない。しかし、以下の議論を簡単にするために、

$$0 < f \leq 1 \quad (9)$$

になるように、 v をとつてやることにしよう。

そうすると $\langle E \rangle$ の上限を出すためには(8)式の第2行で (positive)

$$\prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \leq 1$$

とおき、また同じ式の第1行 (negative) では

$$\prod_{k \neq i,j} f_{ik}^2 f_{jk}^2 \geq 1 - \sum_{k \neq i,j} (1 - f_{ik}^2 f_{jk}^2)^+$$

とすることができる。その結果エネルギー $\langle E \rangle$ の上限は

$$\langle E \rangle \leq \frac{1}{N} \langle \prod_{i>j} f_{ij}^2 \rangle < \frac{1}{4} \sum_{i>j}^{i \neq j} \{ (v_{ij}^A - v_{ij}^R) f_{ij}^2 (1 - \sum_{k \neq i,j} (1 - f_{ik}^2 f_{jk}^2))$$

+ $0 < g_k < 1$ とすると

$$(1-g_1)(1-g_2) = 1 - g_1 - g_2 + g_1 g_2 > 1 - g_1 g_2$$

$$\prod_{i=1}^2 (1-g_i)(1-g_i) > (1 - \sum_{i=1}^2 g_i)(1 - g_3) = 1 - \sum_{i=1}^2 g_i + \sum_{i=1}^2 g_i g_3 > 1 - \sum_{i=1}^3 g_i$$

以下同様にして

$$\prod_k (1-g_k) > 1 - \sum_k g_k$$

$$+ (v_{ij}^k - v_{ij}^l) f_{ij}^2 + \frac{1}{m} (\nabla_i f_{ij})^2 \cdot \prod_{\substack{k>l \\ (k \neq 1, j)}} f_{kl}^2 > N.$$

となり i, j の重心系を使つて f_{ij} の満たす式(2)を使うと ($\vec{R}$: 重心の座標、 ϱ : 体積、 N は粒子数、 ρ : 密度)

$$\begin{aligned} \langle E' \rangle \leq & \frac{1}{\langle \prod f^2 \rangle_N} \frac{N^2 \varrho}{4} \int d\vec{r} \{ (v^A(r) - v^R(r)) f^2(r) (1 - \rho \int d\vec{R} (1 - f^2(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}) f(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}))) \\ & + (-v^A(r) - v^R(r)) f^2(r) \} \cdot \langle \prod_3 f^2 \rangle_{N-2}. \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} \langle E' \rangle \leq & \frac{N^2 \varrho}{2} \int d\vec{r} \{ -v(r) f^2(r) + \frac{1}{2} \rho (v_N^R(r) - v^A(r)) f^2(r) \} \int d\vec{R} (1 + f^2(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}) f(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2})) \times \\ & \times \frac{\langle \prod_3 f^2 \rangle_{N-2}}{\langle \prod_1 f^2 \rangle_N} \quad (10) \end{aligned}$$

となり最後の factor については、

$$\frac{1}{\varrho^2 (1 - \rho \int (1 - f^2) dr)^2} \geq \frac{\langle \prod f^2 \rangle_{N-2}}{\langle \prod f^2 \rangle_N} \geq \frac{1}{\varrho^2}$$

を使つてやる。(10) 式の右辺の積分を K とおくと

$$0 < \langle E' \rangle \leq \frac{N\rho}{2} K (1 - \rho \int (1 - f^2(r)) dr)^2, \quad (K > 0 \text{ のとき}) \quad (11)$$

$$\langle E' \rangle \leq \frac{N\rho}{2} K < 0, \quad (K < 0 \text{ のとき}) \quad (12)$$

という結果が得られる。

§4. 具体例

i) hard-core

hard-core⁸⁾ の場合には前節よりも、もう少し簡単な議論ができてエネルギーに関して

講義ノート 2.

$$0 \leq E' \leq \frac{\frac{N\rho}{2} \int dr (-v'(r) f^2(r))}{1 - \rho \int (1 - f^2(r)) dr} \quad (11)$$

という式が出せる。ポテンシャルは (図 5)

$$v(r) = \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

で与えられ v については

$$v(r) = \begin{cases} 0 & r < a, r > a' \\ -V_0 & a < r < a' \end{cases}$$

とおく。この場合には、 $0 \leq f \leq 1$,

$f(r > a') = 1$ という条件のもとに

式(2)を解くことができる

$$(V_0 m)^{\frac{1}{2}} = \frac{\lambda}{a' - a}$$

とおくと

$$(V_0 m)^{\frac{1}{2}} = \frac{\tan \lambda - \lambda}{a}, \quad a' = \frac{\tan \lambda}{\tan \lambda - \lambda} a$$

と書ける。すなわち、変分のパラメーターは 1 個だけになる。 λ によつて (11)

式の一番右を書いてやると図 6 のようなグラフが得られる。

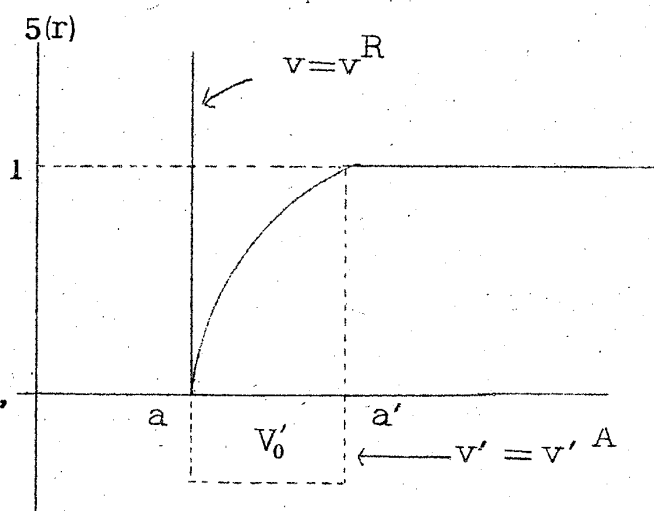


図 5 Hard-core ポテンシャル
と波動関数 f

講義ノート2.

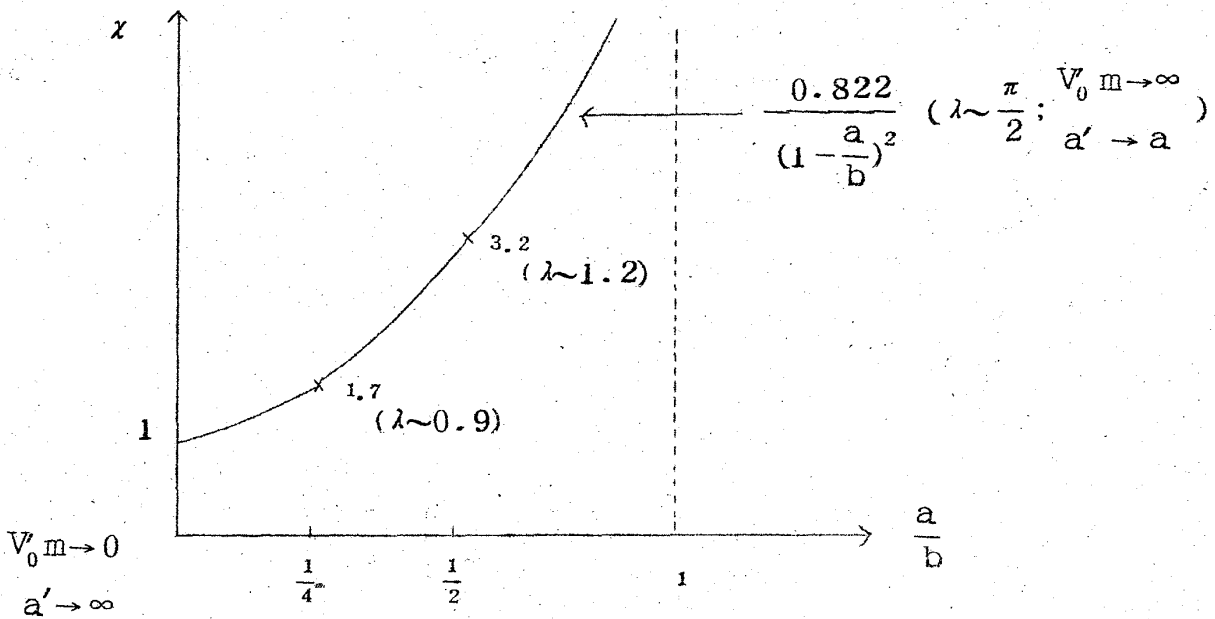


図6 . $'E' \leq N \frac{2\pi\rho a}{m} x, \quad \frac{4\pi}{3} b^3 \rho = 1$

(ii) He^4

Scattering length は負で二体間のポテンシャルは、図7のようになる。
この時には v' としては図の点線のようにとつてやればよいから $'E'$ の上限が負

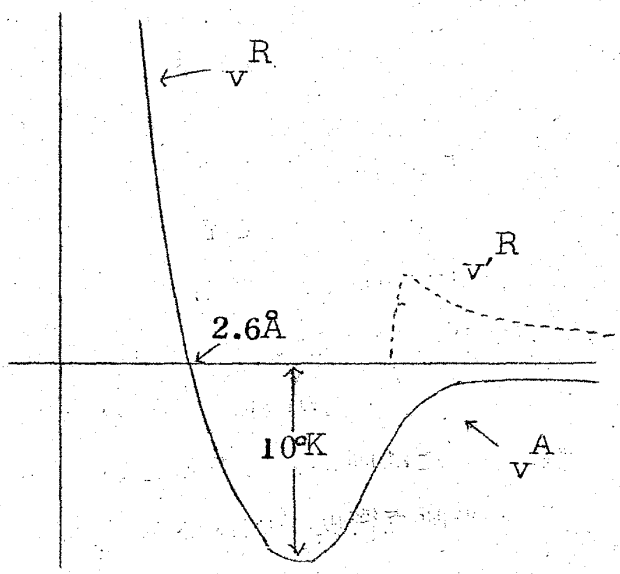


図7 He^4 の二体間ポテンシャル

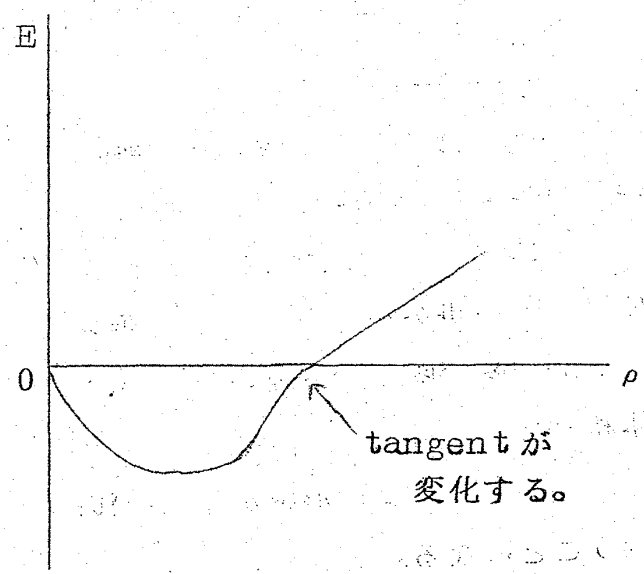


図8 $E \cdot \rho$

講義ノート 2 .

になる ρ があることはすぐわかつて、この変分によつて、図 8 のような $E-\rho$ 曲線が得られる。*)

実際の計算は計算機を使わないとできないが、図 9 のようなモデルを考える。そうすると、

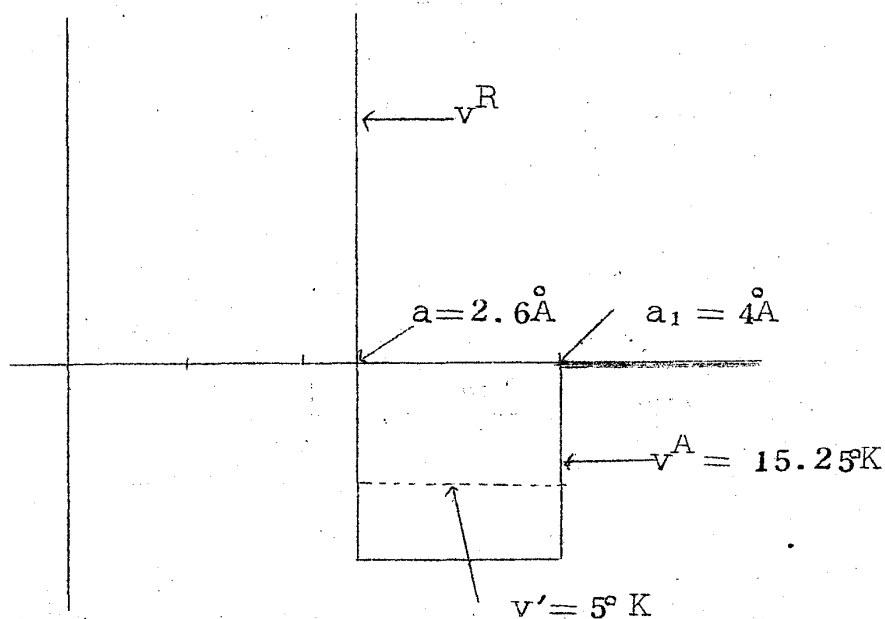


図 9

$$\int d\vec{R} (1 - f^2(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}) f^2(\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2})) \leq 2 \int d\vec{R} (1 - f^2(\vec{R}))$$

*) このことは H_e^4 にかぎらず一般的で、形が H_e^4 のようなポテンシャルで scattering length < 0 を与えるものがあると v^R をつけ加えて f を作れるから (12) 式で ρ が十分小さいと $'E' < 0$ となり、system は液体 (または個体) である事がわかる。ここで使った f は $0 \leq f \leq 1$ でおさえているから、とても悪い変分函数には違いないが、それでも scattering length < 0 の二体相互作用 (H_f^4 型) をしているボーズ系は、液体 (または固体) であるということがいえる。 f の形をかえてやればエネルギー・平衡点密度が改良されるということになる。

という不等式を使つて、 H_e^4 に対しては、

$$'E' \leq N(0.94\rho a_1^3(-5+46\rho a_1^3))^\circ K$$

となり、これを極小にする値は $\rho a_1^3 \sim 0.06(\sim 1)$ でそのとき $'E' \leq -0.14N^\circ K$ ($\sim 5^\circ K$)である。カツコ内にあげたのは実験値である。

§5. 問題点

- 1) H_e^4 の取り扱いで ρ -dependence をよくするには $f^2 < 1$ の制限をはずす必要があるだろう。hard-core があるため、この条件をはずすのは、容易だが、エネルギーの計算が面倒になる。
- 2) 個体では波動函数が Πf_{ij} , $\Pi \phi$ の型で translational invariance がなく、 $\sum_{i,j} \rightarrow N^2$ の様なおき代えができない。したがって格子点を決めて積分を行なわなければいけないので、ずい分面倒なことになる。ただ H_e^4 の時と同様な式を書きくだすことは可能である。
- 3) Fermi粒子系では波動函数が反対称化されるから、上の方法は今のところ役に立ちそうにない。
- 4) 励起状態については一切ノー・コメント。
- 5) 原子核の α -particle model での Binding energy の計算に使えるかもしれないが、クーロン静エネルギーの分離に注意を要する。

§6 文 献

S.A.Moszkowsky, Phys. Rev. 140, B283 (1965)

- 1) H.A.Bethe, Phys. Rev. 138, B804

R.Rajaraman, Phys. Rev. 131, 1244 (1963)

- 2) Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 (1955)

R.B.Dingle, Phil. Mag. 40, 573 (1949)

F.J.Dyson, Phys. Rev., 106, 20 (1956)

- 3) J.Blatt, Theory of Superconductivity, P261 以下

Nisiyama, Preprint

講義ノート 2 .

- E.M.Saunders, Phys. Rev., 126, 1724
- R.L.Garwin & A. Landesman, Phys. 2, 107 (1965)
- F.Iwamoto, Prog. Theor. Phys. 19, 595 (1958)
- F.Iwamoto & M.Yamada, Prog. Theor. Phys. 17, 543; 18, 345 (1957)
- F.Y.Wu & E.Feenberg, Phys. Rev. 128, 943 (1962)
- K.A.Brueckner & J.Frohberg, Prog. Theor. Phys. Suppl. (1965)
- R.Abe, Prog. Theor. Phys. 21, 421 (1959); 19, 57 (1958); 19, 407 (1958)
- Y.H.Smith & H.A.Gersch, Prog. Theor. Phys. 30, 421 (1963)
- H.A.Gersch & V.H.Smith, Phys. Rev. 119, 886 (1960)
- J.B.Aviles, Am. Phys. 5, 231 (1958)
- K.Hiroike, Prog. Theor. Phys. 27, 342 (1962)
- R.Drackman, Phys. Rev., 121, 643 (1961)
- J.W.Clerk & E.Feenly, Phys. Rev. 113, 388 (1959)
- H.W.Jackson et al. Ann. Phys. 15 266 (1961)
- L.H.Nassanew, Phys. Rev. 146, 120 (1966).
- F.Iwamoto et al, Bussei-Kenkyu
- C.Shakin & Y.R.Waghmare, Phys. Rev. Lett. 16, 403 (1966)
- R.P.Feynman, Phys. Rev. 94, 267 (1954)
- R.p.Feynman & M. Cohen, Phys. Rev. 102, 1189 (1956)
- M.Cohen & R.P.Feynman, Phys. Rev. 107, 13 (1957)
- Penrose & Onsager, Phys. Rev. 104, 576 (1956)
- Penrose, Phys. Lett. 11, 224 (1964)
- 二体の correlation function の積でとけるモデルを扱ったものとして
- J.M.Luttinger, J. Math. Phys. 4, 1154 (1963)
- D.C.Mattis, Physics 1, 183 (1964); Vol. 2
- D.C.Mattis & E.H.Lieh, J. Math. Phys. 6, 304 (1965)

講義ノート 2 .

- 4) E.H.Lieh, Phys. Rev. 130, 2518 (1963) ; 133 A899 (1964) ;
134 A312 (1964)
Giradeau & Arnowitt, Phys. Rev. 113, 755 (1959)
Lee & Feenberg, Phys. Rev. 137, A731 (1965)
- 5) P.Hohenberg & W.Kohn, Phys. Rev. 136 B864 (1965)
W.Kohn & L.J.Sham, Phys. Rev. 140 A1133 (1965)
- 6) D.Wright, Phys. Rev. 143, 91 (1966)
- 7) G.V.Chester & L. Reatto, preprint (April, 1966)
- 8) K.Sawada, Phys. Rev 140, A1564 (1965)
- 9) K.Sawada, Phys. Rev 148, 160 (1966)
- 10) Penrose, J.Math. Phys 4, 1488 (1963)

(ノート；東教大理 長島富太郎)