二次元 ^{3}He-^{4}He 混合系의 에너지 스펙트럼과 바닥狀態에너지

姜 永 奉*

Energy Spectrum and Ground State Energy in Two-Dimensional ^{3}He-^{4}He Mixtures

*Kang Young-bong**

Summary

The energy spectrum and the ground state energy in two dimensional ^{3}He$-^4$He mixtures are obtained from the grand partition function which is determined by the mixed ring-diagram method. In addition, the excess area coefficient is obtained from the ground state energy which expresses the Baym form.

序 論

^{3}He$-^4$He 용액에 대하여 Bardeen등(1966) (이후 BBP)은 현상론적으로 계의 바닥상태에너지를 N원자 ^{4}He의 바닥상태에너지와 N_3원자 ^{3}He의 과잉영점에너지로 구분하여 얻었다. 이 에너지 형태를 이용하여 ^{3}He 준입자 사이의 유효 상호작용 및 과잉부피계수(excess volume coefficient 혹은 differential volume coefficient) 등을 구하였다.

그 후 많은 물리학자들이 여러가지의 미시적 이론을 사용하여 ^{3}He$-^4$He 용액을 기술하였다. McMillan(1969)은 액체 ^{4}He에 2개의 ^{3}He 원자를 고려하여 유효상호작용과 질량을 계산하였다. Woo 등 (1969)은 변분법에 기초를 두고 ^{3}He$-^4$He 용액을 다루었다. Saam(1969)은 포논-준입자

* 師範大學 專任講師

상호작용을 미시적으로 계산했다. 최근에 와서 Lee와 Goodman(1980)은 Monte Carlo 방법을 사용하였고, Fabrocini와 Polls(1982)은 Jastrow 형태의 파동함수를 사용하여 에너지와 화학퍼텐셜 등을 계산하였다. Isihara와 Kojima(1980, 1981)는 Ring-diagram 방법을 사용하여 바닥상태에너지와 화학퍼텐셜 등을 구하였다.

본 논문에서는 Ring-diagram 방법을 사용하여 2차원 $^3He-^4He$ 용액의 바닥상태에너지 등을 미시적으로 구한다. 그런데 2차원 혼합계에 대한 실험값이 거의 없기 때문에 이론값을 분석하는데는 많은 어려움이 있다. 그래서 우리의 결과를 3차원에서의 BBP의 현상론적 결과와, 그리고 순수한 2차원 액체 ^4He에 대한 Isihara와 Um(1978)의 결과와 비교, 분석한다. Isihara와 Um(1978)은 2차원 ^4He에 대하여 Chain-diagram 근사를 적용하여 이체분포함수(pair distribution function)를 계산하여, 이로부터 바닥상태에너지 등을 구하였는데, 이 때 얻어진 이체분포 함수에 의한 내부에너지는 입자 사이의 first order direct coupling과 Ring-diagram 근사를 이용한 큰 분배함수(grand partition function)로부터 계산된 내부에너지와 일치한다. 그래서 본 논문에서는 2차원 $^3He-^4He$ 용액에 대한 큰 분배함수의 기여를 이상기체, first order direct coupling, Ring-diagram 등으로 제한한다.

^3He와 ^3He, ^4He와 ^4He 그리고 ^3He와 ^4He 사이의 상호작용 퍼텐셜은 정확하게 같지는 않지만, BBP, Guyer와 Miller(1980) 그리고 Ristig 등(1983)의 이론에서처럼 모든 원자들 사이의 퍼텐셜은 같다고 가정한다. 그리고 다음과 같은 Lennard-Jones형 꼬리를 갖는 soft 퍼텐셜을 도입하기로 한다.

$$\phi(r) = \begin{cases} V_0 & (r < a) \\ \varepsilon^*[(a/r)^{12} - (a/r)^6], & (r \geq a). \end{cases} \quad \cdots\cdots (1)$$

이 퍼텐셜의 운동량 공간에서의 표현은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} u(q) = {} & 2\pi a^2 V_0 J_1(qa)/qa + 2\pi a^2 \varepsilon^* [-\frac{(qa)^9}{(10!!)^2} + \\ & \frac{4}{10!!}(qa)^7 - \frac{64}{10!!}(qa)^5 \div \{ \frac{6}{10 \times 10!!} - \\ & \frac{1}{(4!!)^2} \}(qa)^2 + \{ \frac{4}{(4!!)^2} - \frac{4 \times 48}{5 \times 10!!} \} \times \\ & (qa)] J_1(qa) + 2\pi a^2 \varepsilon^* [\frac{2}{10!!}(qa)^8 - \\ & \frac{2559}{10 \times 8 \times 10!!}(qa)^6 + \frac{1}{10 \times 10!!}(qa)^4 \\ & + \frac{3}{10^2}(qa)^2 - \frac{3}{20}] J_0(qa) - 2\pi a^2 \varepsilon^* \times \\ & [\frac{(qa)^4}{(4!!)^2} + \frac{(qa)^{10}}{10!!}] \times [r_0 + \ln qa - C_i(qa) \\ & - \sum_{k=1} \frac{(-1)^k (\frac{1}{2}qa)^{2k}}{2k(k!)^2}], \quad (r_0 = 0.57712) \end{aligned} \quad \cdots\cdots (2)$$

여기서 q는 파 벡터의 크기이다. q가 작을 때 우변은 다음과 같이 전개된다.

$$2nu(q) = A_0^2 + A_1^2 q^2 + A_2^2 q^4 + \cdots\cdots, \quad \cdots (3)$$

여기서

$$A_0^2 = 2\pi n a^2 V^*, \quad V^* = V_0 - \frac{3}{10}\varepsilon^*,$$

$$A_1^2 = \frac{1}{4}\pi n a^4 (\frac{3}{2}\varepsilon^* - V_0),$$

$$A_2^2 = \frac{1}{96}\pi n a^6 \{ V_0 - \varepsilon^*(2 - \frac{3}{2} r_0) \}$$

이다. q가 클 때는 우변 첫 항이 지배적 역할을 하며, q가 0일 때

$$u(0) = \pi a^2 V^* \quad \cdots\cdots (4)$$

로 주어진다.

1절에서 $^3He-^4He$ 혼합계의 총 큰 분배함수를 구하고, 2절에서는 에너지 스펙트럼과 절대영도 극한에서의 바닥상태에너지 그리고 과잉면적계수

(excess area coefficient) 등을 계산한다. 아울러 계산 결과를 BBP의 에너지 형태 및 Isihara와 Um(1978)의 결과와 비교, 분석한다.

1. 큰 분배함수

³He－⁴He 혼합계의 큰 분배함수는 이상기체의 기여와 입자들사이의 direct coupling의 기여, 그리고 혼합 Ring-diagram의 기여로 구분하여 계산된다.

1) 이상기체의 기여

³He 및 ⁴He에 대한 이상기체의 큰 분배함수는 다음과 같다.

$$\ln \Xi_0 = \frac{1}{2}\frac{A\beta P_F^2\hbar^2}{2m_F} n_F + A n_B, \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (5)$$

여기서 우변은 각각 ³He와 ⁴He에 대한 큰 분배함수이다. A는 계의 총 면적이며, m_F는 ³He의 질량, n_F와 n_B는 각각 ³He와 ⁴He의 수밀도, 그리고 $\hbar p_F$는 페르미온의 운동량이며, $P_F^2=2\pi n_F$의 관계가 있다. $\beta=1/k_BT$이다.

2) First order direct coupling의 기여

³He－⁴He혼합계의 first order direct coupling의 기여는 다음과 같이 세 가지 형태가 있다. 먼저 ³He-³He 결합에서의 큰 분배함수는

$$\ln \Xi_1^F = -\frac{A\beta}{8\pi^4}\int d\vec{p}\, d\vec{p}'\, u(o)\, f_F(p) f_F(p') = -\frac{A\beta P_F^4}{8\pi}\, u(0) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (6)$$

로 주어진다. 여기서 무게인자는 2이며 $f_F(P)$는 페르미 통계의 분배함수이다. 다음으로 ⁴He-⁴He 결합에서의 큰 분배함수는

$$\ln \Xi_1^B = -\frac{A\beta}{32\pi^4}\int d\vec{p}\, d\vec{p}'\, u(0)\, f_B(p) f_B(p') = -\frac{1}{2}A\beta U(0)\, n_B^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (7)$$

이다. 여기서 스핀무게인자는 없으며 $f_B(P)$는보오스 통계의 분포함수이다. 마지막으로 ³He－⁴He 결합에서의 큰 분배함수는

$$\ln \Xi_1^{FB} = -\frac{A\beta}{8\pi^4}\int d\vec{p}\, d\vec{p}'\, u(0)\, f_B(p) f_F(p') = -A\beta U(0)\, n_B n_F \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (8)$$

이다. 여기서 쌍(pair)의 수는 $N_F N_B$이며 순수한 ³He 및 ⁴He의 경우에는 각각 $N^2_F/2$, $N^2_B/2$이다. 이상의 가능한 결합에 대한 큰 분배함수를 합하여 정리하면

$$\ln \Xi_1 = -\frac{1}{2}A\beta U(0)\, n^2 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (9)$$

이 된다. 여기서 $n=n_B+n_F$이다.

3) Ring-diagram의 기여

혼합계의 Ring-diagram의 기여는 Isihard와 Kojima(1980)의 계산 결과를 2차원에 대하여 고쳐쓰면

$$\ln \Xi_r = \frac{A}{2(2\pi)^2}\int d\vec{q} \sum_{j=-\infty}^{\infty}\{u(q)\Lambda_j - \ln(1+u(q)\Lambda_j)\} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (10)$$

로 주어진다. 여기서 Λ_j는 Ring-diagram의 유효 고유값이며보오존과 페르미온 전파인자의 고유값의 합이다. 이는 다음과 같이 근사적으로 쓸 수 있다.

$$\Lambda_j = \frac{4m_B n_B/\hbar^2}{q^2+(4\pi j m_B/\beta q\hbar^2)^2}\left[1+y\left\{1-\frac{2\delta m(4\pi j m_B/\beta q\hbar^2)^2}{q^2+(4\pi j m_B/\beta q\hbar^2)^2}\right\}\right], \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (11)$$

여기서

$$\delta m = \frac{m_F - m_B}{m_B}, \qquad y = \frac{n_F}{n_B}$$

이다. (11)식을 (10)식에 대입하여 합을 취하면

$$\ln \Xi_r = \frac{\beta A}{2(2\pi)^2}\left(\frac{1+y-\delta m y}{1+y}\right)\int d\vec{q}\;\Big[u(q)\, n_B(1+y) - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}\{q^2+\gamma_q^2(1+y)\}^{\frac{1}{2}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}\Big] \quad \cdots\cdots (12)$$

이 된다. 여기서

$$\gamma_q^2 = 4 m_B n_B u(q)/\hbar^2$$

이다. ³He−⁴He 혼합계의 총 큰 분배함수는 (5)식과 (9)식 그리고 (12)식을 합한 것이며, 다음과 같다.

$$\ln \Xi = \ln \Xi_0 + \ln \Xi_1 + \ln \Xi_r \quad \cdots\cdots (13)$$

우변 마지막 항의 적분 계산은 2절에서 다루어 진다.

2. 에너지 스펙트럼과 바닥상태에너지

³He−⁴He 혼합계의 내부에너지는 (13)식을 이용하여 계산된다.

$$U = -\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta}\right)_{A,z} \quad \cdots\cdots (14)$$

(14)식의 계산 결과에 절대영도 극한을 취하고 n_F^2 항을 무시하면
바닥상태에너지는 다음과 같이 된다.

$$E/A = \frac{1}{2}u(0)n^2 + \frac{1}{2(2\pi)^2}\left(\frac{1+y-\delta m y}{1+y}\right)\int d\vec{q}\;\Big[\frac{\hbar^2 q}{2m_B}\{q^2+\gamma_q^2(1+y)\}^{\frac{1}{2}} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B} - u(q)\, n_B(1+y)\Big] \quad \cdots\cdots (15)$$

(15)식은 Isihara와 Um(1978)이 순수한 액체 ⁴He에 대한 계산 결과와 좋은 대응관계를 준다. 만약 y=0일 때, 즉, ³He의 농도가 영일 때 (15)식은 이들의 결과와 완전히 일치한다. 그리고 이들의 순수한 ⁴He의 에너지 스펙트럼은 다음과 같다.

$$\varepsilon(q) = \Big[\Big(\frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}\Big)^2 + 2 n_B u(q)\frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}\Big]^{\frac{1}{2}} \quad \cdots (16)$$

(15)식과 Isihara와 Um(1978)의 계산 결과를 비교하여 볼 때, ³He−⁴He 혼합계의 에너지 스펙트럼은

$$\varepsilon(q) = \frac{1+y-\delta m y}{1+y}\,\frac{\hbar^2 q}{2m_B}\{q^2+\gamma_q^2(1+y)\}^{\frac{1}{2}} \quad \cdots\cdots (17)$$

이 된다. 만약 ³He의 농도가 영일 경우에 (17)식은 (16)식과 완전히 일치한다. 그리고 위 식은 3차원에서의 Isihara와 Kojima(1978)의 에너지 스펙트럼과 일치함을 볼 수 있는데, 이는 q가 작을 경우에 2차원과 3차원에서의 전파인자의 고유값이 같은 형태로 표현되기 때문이며 이 식을 이용하면 3차원에서와 마찬가지로 2차원에서의 포논속도를 ³He의 농도의 함수로 얻을 수 있다.

(15)식의 적분 계산을 위하여 Lennard−Jones형 꼬리를 갖는 soft 퍼텐셜을 적용하면, 바닥상태에너지는

$$\frac{E}{A} = \frac{1}{2}n^2 u(0)\Big\{1-\frac{f}{4\pi n a^2}\Big\} + \frac{n_F}{8\pi a^2}u(0)\,\delta m f \quad \cdots\cdots (18)$$

로 주어진다. 여기서

$$f = 1-\frac{4}{3a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{a^2\gamma^2(1+y)} + 2a^2\gamma^2(1+y)\Big(\frac{V_0}{V^*}\Big)^2\delta + \frac{1}{16V^*}\Big(\frac{3}{2}\varepsilon^* - V_0\Big),$$

$$\gamma^2 = 4 m_B n_B u(0)/\hbar^2,$$

$$\delta = -0.0112$$

이다. 우변 첫 항은 N입자 ^{4}He의 바닥상태에너지를 나타내며 $y=0$일 때 Isihara와 Um(1978)이 계산한 순수한 ^{4}He의 바닥상태에너지와 일치한다. 그리고 마지막 항은 $m_B=m_F$일 때 없어진다.

BBP는 현상론적으로 다음과 같은 에너지 형태를 제시하였다.

$$E(N) = E_0(N) + N_F E(N), \quad \cdots\cdots (19)$$

여기서 $E_0(N)$은 N ^{4}He 원자의 바닥상태에너지이며, $N_F E_1(N)$은 ^{3}He의 과잉 영점에너지이다. (18)식을 Baym(1966)의 에너지 형태로 쓰면 다음과 같다.

$$E_0(N) = \frac{1}{2}\, nN\, u(0)\, \left\{ 1 - \frac{f}{4\pi n a^2} \right\} \quad \cdots (20)$$

$$E_1 = \frac{\delta m}{8\pi a^2}\, u(0) f \quad \cdots\cdots (21)$$

(20)식과 (21)식은 Isihara와 Kojima(1980)가 3차원에서 얻은 결과와 거의 같은 형태를 하고 있다.

Baym(1966)은 일정한 압력과 온도에서 ^{4}He 원자를 ^{3}He원자로 바꾸어 넣었을 경우, 부피의 상대적 증가를 나타내는 과잉부피계수를 다음과 같이 정의했다.

$$\alpha = \frac{E_1'(N)}{E_0''(N)} \quad \cdots\cdots (22)$$

여기서 프라임(prime)은 총 입자수에 대한 미분을 나타낸다. 3차원에서처럼 2차원에서도 과잉면적계수 α를 (22)식과 동일하게 정의할 수 있으며, 순수한 ^{4}He에 대하여

$$\alpha = \frac{\dfrac{\delta m}{8\pi \bar{n}_B a^2} \left\{ \dfrac{2}{3a\bar{\gamma}} - \dfrac{1}{a^2\bar{\gamma}^2} + 2a^2\bar{\gamma}^2 \left(\dfrac{V_0}{V^*}\right)^2 \delta \right\}}{1 - \dfrac{1}{8\pi \bar{n}_B a^2} \left\{ \dfrac{2}{a\bar{\gamma}} + 4a^2\bar{\gamma}^2 \left(\dfrac{V_0}{V^*}\right)^2 \delta \right\}} \quad \cdots\cdots (23)$$

로 주어진다. 여기서 n_B는 순수한 ^{4}He의 수밀도이며 $\bar{\gamma}^2=4m_B\bar{n}_B u(0)/\hbar^2$이다. 그리고 α는 ^{3}He 준입자의 유효상호작용을, ^{3}He－^{4}He혼합계의 수밀도 n와 순수한 ^{4}He의 수밀도 $\bar{n}_B$의 관계식을 표현하는데 중요한 역할을 한다. α의 수치적 계산과 α의 역할에 대한 상세한 계산은 본 논문 밖에 있다.

結果 및 考察

^{3}He－^{4}He 혼합 용액에 대하여, 이체분포함수에 나타나는 first order direct coupling과 Ring-diagram 근사를 이용하여 큰 분배함수를 구하였다. 그리고 바닥상태에너지를 큰 분배함수로 부터 계산하였으며 이 때 순수한 ^{4}He에 대한 Isihara와 Um(1978)의 결과와 좋은 대응 관계를 얻었다. 그리고 ^{3}He의 농도가 0일 때는 그들의 결과와 완전히 일치함을 보였다. 더불어서 혼합용액의 에너지 스펙트럼을 그들이 계산한 에너지 스펙트럼과 비교하여 유도할 수 있었다. 그리고 우리가 계산한 바닥상태에너지를 Baym (1966)의 현상론적 에너지 형태로 쓸 수 있었으며 이로부터 ^{3}He 준입자시아의 유효상호 작용을 구하는데 중요한 역할을 하는 과잉면적계수를 미시적으로 계산 하였다.

본 논문에서는 Lennard－Jones형 꼬리를 갖는 soft 퍼텐셜을 적용하였으며 모든 입자사이의 퍼텐셜은 같다고 가정하여 위의 결과들을 얻었다. 만약에 퍼텐셜 매개변수들의 값이 적절히 주어진다면 수치적으로도 좋은 결과를 주리라 확신한다.

摘　　要

2차원 ^{3}He－^{4}He 혼합계의 에너지 스펙트럼과 바닥상태에너지를 혼합 ring-diagram 근사로 부터 얻은 큰 분배함수를 사용하여 유도하였다. 더불어서 과잉면적계수를 Baym의 에너지 형태로 표현된 바닥상태 에너지로 부터 얻었다.

參 考 文 獻

Bardeen, J., G. Baym, and D. Pines. 1966. Interactions between H_e^3 atoms in dilute solutions of H_e^3 in superfluid H_e^4. *Phys. Rev. Lett.*, 17:372-375.

Baym, G. 1966. Effective long-wavelength interaction of H_e^3 atoms dissolved in superfluid ^{4}He, *Phys. Rev. Lett.*, 17: 952-954.

Fabrocini, A, and A. Polls. 1982. Variational study of ^{3}He-^{4}He mixtures, *Phys. Rev.*, B25: 4,533-4,540.

Guyer, R. A, and M. D. Miller. 1980. Grand state of isotopic fermion-boson mixtures, *Phys. Rev.*, B22: 142-153.

Isihara, A, and C. I. Um. 1978. Microscopic theory of two dimensional liquid helium, *Phys. Rev.*, B19: 5,725-5,734.

Isihara, A, and Y. Kojima. 1978. Phonon velocity in ^{3}He-^{4}He solutions, *Physica.*, B95; 391-394.

Isihara, A, and Y Kojima. 1980. Microscopic theory of ^{3}He-^{4}He solutions, *Z. Phys.*, B37: 1-8.

Isihara, A, and Y. Kojima. 1981. Statistical mechanics of dilute mixtures of ^{3}He in superfluid ^{4}He, *Physica.*, B103: 247-262.

Lee, W. K, and B. Goodman. 1980. Monte Carlo study of liquid ^{3}He-^{4}He solutions, *Phys. Rev.* B24: 2,515-2,525.

McMillan, W. L. 1969. Quantum liquid. II. Microscopic theory of liquid ^{3}He-^{4}He mixtures, *Phys. Rev.*, 182: 299-306.

Ristig, M. L., S. Fantoni, and K. E. Kurten. 1983. Ground state properties of boson-mixtures, *Z. Phys.*, B51: 1-9.

Saam, W. F. 1969. Microscopic theory of phonon-quasiparticle interactions in dilute solutions of ^{3}He in superfluid ^{4}He, *Ann. Phys.*, 53: 219-238.

Woo, C. W, H. T. Tan, and W. E. Massey. 1969. Theory of dilute solutions of H_e^3 in liquid H_e^4. *Phys. Rev.*, 185: 287-298.