

초유체 ${}^4\text{He}$ 내의 ${}^3\text{He}$ 묽은 용액의 통계역학

강 영 봉*

Statistical Mechanics of Dilute Solutions of
 ${}^3\text{He}$ in Superfluid ${}^4\text{He}$

Kang Young-Bong

Abstract

The theory of statistical mechanics of dilute solutions of ${}^3\text{He}$ in the superfluid ${}^4\text{He}$ is presented. The grand partition function is obtained by the ring-diagram approximation. The ground state energy of dilute solutions is derived from the grand partition function, and depends linearly on the concentration of ${}^3\text{He}$. In addition, we have derived the excess volume coefficient from the form of the ground state energy. From the energy, the pressure, osmotic pressure, chemical potential and effective potential are obtained also.

I. 서론

초유체 ${}^4\text{He}$ 에 미소량의 ${}^3\text{He}$ 원자가 녹아 있는 혼합 용액내의 ${}^4\text{He}$ 원자는 초유체 성질을 가지는 반면에 ${}^3\text{He}$ 원자는 초유체 흐름에 참여하지 않는다. ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 묽은 용액의 연구를 개척한 Landau와 Pomeranchuk¹⁾은 초유체 ${}^4\text{He}$ 내의 ${}^3\text{He}$ 원자는 불순물로 행동한다고 제시하였다. 그들이 ${}^3\text{H}$ 입자가 유효질량을 가지고 초유체 속에서 자유롭게 운동하고 있다는 모델을 제시한 후 Edwards²⁾등과 Wheatley³⁾는 비열과 삼투압 등의 측정값을 통하여 Landau와 Pomeranchuk의 모델이 타당함을 보였다. Bardeen, Baym과 Pines⁴⁾ (이후 BBP) 그리고 Emery⁵⁾는 묽은 용액내의 입자는 인력유효상호작용을 가지고 서로 상호작용함을 현상론적으로 보였다. 묽은 용액

* 제주대학교 사범대학 과학교육과

에 대한 현상론적 이론이 제시된 후 많은 미시적 이론이 다양한 방법으로 연구되었다. McMillan⁶⁾은 강하게 상호작용하는 보오존에 두개의 분자를 고려하여 운동량 종속 유효퍼텐셜을 계산하였다. Massey⁷⁾등은 변분법에 기초를 둔 바닥상태에너지의 섭동을 고려하여 유효퍼텐셜과 유효질량 등을 유도하였다. Pandharipande와 Itoh⁸⁾은 Jastrow형 파동함수에 근거한 변분법 근사를 써서 유효질량을 다루었다. Saam⁹⁾은 포논-준입자 상호작용을 미시적으로 계산하여 얻은 유효퍼텐셜을 BBP의 유효퍼텐셜과 비교하였다. Lee와 Goodman¹⁰⁾은 Monte Carlo방법을 써서 여러 농도에서 원자당 결합에너지, 원자의 운동량분포 등을 얻었다. Chakraborty¹¹⁾는 절대영도에서 이원 보오존 혼합계의 변분이론에 대해 연구하였다. Jackson¹²⁾은 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 묶은 용액에 대한 Woo - Tan - Massey 양자역학이론을 확장하여 내부에너지, 엔트로피, 압력, 화학퍼텐셜 등을 구하였다. Fabrocini와 Polls¹³⁾은 Jastrow형 파동함수를 이용하여 변분법을 써서 화학퍼텐셜과 과잉부피계수를 유도하였고 그 결과를 실험값과 비교하였다. 이상에서 보듯이 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합계의 미시적 연구가 변분법에 의해 많이 행하여지고 있음을 알 수 있다. 그리고 이들의 대부분은 Lennard - Jones형 퍼텐셜을 적용하고 있으며 가능한 입자쌍 ${}^3\text{He} - {}^3\text{He}$, ${}^4\text{He} - {}^4\text{He}$ 그리고 ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ 의 상호작용 퍼텐셜을 같다고 가정하였다. 한편 Isihara 와 Kojima¹⁴⁾는 고리다이아그램 근사를 사용하여 BBP의 현상론적 이론에 대응하는 미시적 이론을 제시하였다. Isihara 와 Kojima는 Soft -sphere와 Hard -sphere경우 동시에 취급할 수 있는 운동량 제곱 방정식 형태의 퍼텐셜을 사용하여 ${}^3\text{He}$ 농도의 선형함수로 표현되는 바닥상태에너지, 과잉부피계수, 화학퍼텐셜, 삼투압 등을 유도하였다. 이상과 같이 ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ 묶은 용액에 대한 미시적 이론의 연구와 더불어 많은 실험이 이루어졌다.¹⁵⁾

삼투압에 관한 연구는 묶은 용액의 성질을 파악하는데 중요한 역할을 한다. 앞에서 언급한 바와 같이 묶은 용액내의 ${}^3\text{He}$ 원자는 초유체 흐름에 참여하지 않은 반면에 오직 ${}^4\text{He}$ 만이 저온에서 초유체 흐름에 참여한다. 만약 HeII가 매우 미세한 관을 통하여 용기 밖으로 나오는 것이 허용되었다면 오직 초유체만이 미세관을 통과하여 용기 밖으로 나오고 모든 정상유체는 용기 내에 남아 있을 것이다. 한 용기에 순수한 초유체 HeII가 담겨 있고 다른 용기에 ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ 묶은 용액에 담겨 있는 두 용기가 매우 미세한 관으로 연결되어 있을 때, ${}^3\text{He}$ 의 삼투압이 과잉유체정압에 의해 균형이 이루어질 때까지 초유체 ${}^4\text{He}$ 는 한 용기에서 다른 용기로 이동할 것이다. 초유체가 이동한 후, 평형상태에서 삼투압은 정의된다. Wheatley는 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 와 ${}^3\text{He}$ 의 농도가 x (n_F/n)인 ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ 묶은 용액이 미세관으로 서로 연결되어 있는 계에서 미세관을 통하여 초유체의 이동이 있을 후 계가 확산적 평형상태에 있을 때 ${}^4\text{He}$ 의 화학퍼텐셜을 이용하여 삼투압을 고찰하였다. Landau와 Tough등¹⁶⁾도 역시 두 용기

를 고려하여 온도 영역 0.027 - 0.65k, 유체정압 0.26, 10 그리고 20기압 하에서 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합 용액의 삼투압을 측정하였다. 그리고 Disatinik 과 Brucker¹⁷⁾ 는 이론적으로 삼투압을 ${}^4\text{He}$ 화학퍼텐셜 관계식으로부터 유도하였다. 최근에 와서 Guyer 와 Miller¹⁸⁾는 삼투압을 Slater - Jastrow과동함수를 적용하여 얻은 ${}^4\text{He}$ 화학퍼텐셜 관계식으로부터 계산하였으며 그 결과가 실험값¹⁹⁾과 일치함을 보였다. Castelijns등²⁰⁾은 극 저온에서 묶은 용액내의 ${}^3\text{He}$ 의 농도와 온도를 측정하여 삼투압을 얻었다.

본 논문은 Isihara와 Kojima의 혼합고리다이하그램을 적용하여 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 묶은 용액의 미시적 이론을 제시한다. 여기에 사용된 상호작용 퍼텐셜은 Lennard - Jones형 꼬리를 갖는 퍼텐셜이며 가능한 입자쌍간의 퍼텐셜은 같다고 가정한다. 그리고 ${}^4\text{He}$ 원자는 물론 유한 농도의 ${}^3\text{He}$ 원자를 다루겠는데 수학적 어려움을 피하기 위해 초유체 ${}^4\text{He}$ 에 미소량 ${}^3\text{He}$ 의 입자가 녹아 있는 경우로 제한한다.

II절에서 혼합 용액의 전체 큰분배함수를 유도한다. 이 큰분배함수는 보오존과 페르미온에 대한 이상기체 기여, 1차 교환다이하그램 기여, 1차 직접결합 기여, 혼합고리다이하그램 기여 항으로 구분하여 계산된다. III절에서 바닥상태에너지를 큰분배함수로부터 유도하여 Baym의 에너지 형태로 표현할 수 있음을 보이고 과잉부피계수를 계산한다. IV절에서 혼합 용액의 압력을 유도하고 더불어서 삼투압을 얻는다. V절에서는 ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ 의 화학퍼텐셜을 바닥상태에너지로부터 유도하고 ${}^3\text{He}$ 화학퍼텐셜 관계식으로부터 운동량이 영일 때의 유효퍼텐셜을 구한다. 마지막으로 VI절에서는 위의 결과들을 분석한다.

II. 큰분배함수

${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합계의 전체 큰분배함수는 상호작용이 없는 ${}^3\text{He}$ 입자와 ${}^4\text{He}$ 입자의 기여, ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ 1차 교환다이하그램 기여, 1차 직접결합 기여 그리고 혼합 고리다이하그램 기여로 구분하여 유도된다.

1. 이상기체 기여

상호작용이 없는 ${}^3\text{He}$ 입자의 큰분배함수는 다음과 같이 주어진다.

$$\ln \Xi_0^F = \frac{8\pi V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty p^2 \ln(1+z_F \exp \frac{-\beta \hbar^2 p^2}{2m_F}) dp \quad (2-1)$$

4 초유체 ^4He 내의 ^3He 묶은 용액의 통계역학

여기서 m_F 는 페르미온의 질량, V 는 혼합계의 전체 부피, z_F 는 페르미온의 절대활성도이다. 그리고 스핀무게인자(Spin Weight Factor) 2를 곱하였다. (2-1)식은

$$\ln \Xi_0^F = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m_F}{\beta \hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^{x-\xi} + 1} dx \quad (2-2)$$

로 고쳐 쓸 수 있다. 여기서

$$x = \frac{\beta \hbar^2 p^2}{2m_F}, \quad \xi = \ln Z_F = \frac{\beta \hbar^2 P_F^2}{2m_F}$$

로 치환하였다. (2-2)식의 적분은 Sommerfeld 전개

$$\int_0^\infty \frac{\psi(x) dx}{e^{x-\xi} + 1} = \int_0^\xi \psi(x) + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{x=\xi} + \frac{7\pi^2}{360} \left(\frac{d^3\psi(x)}{dx^3} \right)_{x=\xi} + \dots \quad (2-3)$$

에 의하여 근사적으로 계산되며, 낮은 온도에서

$$\ln \Xi_0^F = \frac{2V}{15\pi^2} \frac{\beta \hbar^2 p_F^5}{2m_F} \quad (2-4)$$

를 얻는다. 여기서 $\hbar p_F$ 는 페르미 운동량이며, 이상기체 수밀도 $n_F^{(0)}$ 와 다음과 같은 관계가 있다.

$$p_F^3 = 3\pi^2 n_F^{(0)} \quad (2-5)$$

^4He 자유입자의 큰분배함수는 다음과 같다.

$$\ln \Xi_0^B = \frac{4\pi V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \left(p^2 \ln(1 - z_B \exp \frac{-\beta \hbar^2 p^2}{2m_B}) \right) dp \quad (2-6)$$

여기서 z_B 는 보오존의 절대 활성도, m_B 는 보오존의 질량이다. (2-6)을 고쳐 쓰면

$$\ln \Xi_0^B = \frac{V}{6\pi^2} \left(\frac{2m_B}{\beta \hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z_B^{-1} e^x - 1} dx \quad (2-7)$$

로 표현된다. 여기서 x 를 $\beta \hbar^2 p^2 / 2m_B$ 로 치환하였다. (2-7)식의 적분은

$$\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z_B^{-1} e^x - 1} dx = \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) g_{5/2}(z_B) \quad (2-8)$$

기서 $\Gamma(S)$ 는 감마함수 (Gamma Function)이며, $g_s(z_B)$ 는

$$g_s(z_B) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z_B^l}{l^s}$$

이다. 따라서 ${}^4\text{He}$ 자유입자의 큰분배함수는

$$\ln \Xi_0^B = V \frac{g_{5/2}(z_B)}{\lambda^3} - \ln(1-z_B) \quad (2-9)$$

λ 는 열적 파장(Thermal Wavelength)이다. 절대 활성도와 보오존 이상기체의 수밀도 $n_B^{(0)}$ 사이에는 다음의 관계가 있다.

$$n_B^{(0)} = \frac{g_{3/2}(z_B)}{\lambda^3} + \frac{N_0}{V}, \quad \lambda^2 = \frac{2\pi\beta\hbar^2}{m_B} \quad (2-10)$$

여기서 N_0 는 바닥상태에 있는 보오존의 전체 수이다.

2. 1차 교환다이아그램 기여

큰 분배함수에 1차 교환다이아그램 기여는 다음과 같이 주어진다.

$$\ln \Xi_{1x}^i = \pm \frac{V\beta}{2(2\pi)^6} \int dp dq U_i(q) f_i(p) f_i(p+q) \quad (2-11)$$

여기서 i 는 F 혹은 B이며 각각은 페르미온 혹은 보오존의 큰분배함수를 나타낸다. 그리고 $f(p)$ 는 ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ 의 분포함수이며, $+$ 와 $-$ 부호는 각각 페르미 통계와 보오존 통계에 대응된다. $U_i(q)$ 는 상호작용 퍼텐셜이며 가능한 입자쌍 ${}^3\text{He}$ - ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$, ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 사이의 각 퍼텐셜 U_F , U_B , U_{FB} 들은 BBP이론이나 그 외의 모델에서처럼 같다고 가정한다.

본 논문에서는 다음과 같은 Lennard-Jones형 꼬리를 갖는 soft 퍼텐셜을 도입한

$$\phi(r) = \begin{cases} V_0 & , r < a \\ \varepsilon \cdot [(\frac{a}{r})^{12} - (\frac{a}{r})^6] & , r \geq a \end{cases}$$

이 퍼텐셜의 Fourier 변환은

$$\begin{aligned} U(q) = & 4\pi a^3 \varepsilon \cdot \left\{ \left[\sum_{m=0}^4 \frac{(-1)^m (qa)^{2m}}{(10)(9)\dots(10-2m)} - \left(\frac{1}{4} - \frac{(qa)^2}{4!} \right) \right] \frac{\sin qa}{qa} \right. \\ & + \left[\sum_{m=0}^4 \frac{(-1)^m (qa)^{2m}}{(10)(9)\dots(10-(2m+1))} - \left(\frac{1}{4 \cdot 3} - \frac{1}{4!} (qa)^2 \right) \right] \cos qa \\ & \left. + \left(\frac{(qa)^3}{4!} + \frac{(qa)^9}{10!} \right) \text{si}(qa) \right\} + \frac{4\pi a^3 V_0}{(qa)^3} (\sin qa - qa \cos qa) \end{aligned} \quad (2-12)$$

이 된다. 여기서 q 는 파 벡터의 크기이다. $qa \leq 1$ 일 때 (2-12) 식의 우변은

$$U(q) = A_0 + A_1 q^2 + A_2 q^3 + A_3 q^4 + \dots$$

로 전개된다. 여기서

$$A_0 = \frac{4\pi a^3}{3} V^*, \quad V^* = V_0 - \frac{2}{3} \varepsilon^*$$

$$A_1 = 4\pi a^5 \left(\frac{1}{7} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right),$$

$$A_2 = -\frac{1}{12} \pi^2 a^6 \varepsilon^*,$$

$$A_3 = 4\pi a^7 \left(\frac{V_0}{840} + \frac{\varepsilon^*}{100} \right),$$

\vdots

이다. 반면에 q 가 $1/a$ 보다 클 때에 $U(q)$ 의 지배적 역할은 (2-12) 식의 마지막 항이 한다. ^4He 에 대한 1차 교환다이아그램 기여는 고리다이아그램 기여와 결합된다. ^3He 에 대한 1차 교환다이아그램 기여는 Lennard-Jones 형 꼬리를 갖는 퍼텐셜을 적용하고 혼합 용액의 ^3He 의 농도가 매우 적을 경우로 제한하면 다음과 같이 상세히 유도된다. ^3He 페르미온의 큰분배함수에 1차 교환다이아그램 기여는 (2-11) 식에 스핀무게인자 2를 곱한 다음과 같은 형태로 주어진다.

$$\begin{aligned} \ln \Xi_F &= \frac{V\beta}{(2\pi)^6} \int dq dp U(q) f_F(p) f_F(p+q) \\ &= \frac{2V\beta}{(2\pi)^4} \int_0^\infty dp p^2 f_F(p) \int_0^\pi \sin\theta \left[\int_0^\infty q^2 U(q) f_F(p+q) dq \right] d\theta \end{aligned} \quad (2-13)$$

(2-13) 식에 Lennard-Jones형 꼬리를 갖는 Soft 퍼텐셜을 도입하고, 절대영도 근처에서의 페르미 분포함수의 성질

$$f_F(p) = \begin{cases} 0, & p^2 > p_F^2 \\ 1, & p^2 < p_F^2 \end{cases}$$

과 적분공식

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\sin\theta \cos^2\theta}{\Delta} d\theta &= \frac{K^2}{p^2} + \left(\frac{K^3}{2p^3} - \frac{k}{2p} \right) \left[\ln\left(1 - \frac{p}{K}\right) - \ln\left(1 + \frac{p}{K}\right) \right], \\ \int_0^\pi \sin\theta \Delta d\theta &= 1 - \left(\frac{K}{2p} - \frac{p}{2K} \right) \left[\ln\left(1 - \frac{p}{K}\right) - \ln\left(1 + \frac{p}{K}\right) \right], \\ \int_0^\pi \frac{\cos^4\theta \sin\theta}{\Delta} d\theta &= \left[\frac{5}{4} \left(\frac{K}{p} \right)^2 - \frac{3}{4} \left(\frac{K}{p} \right)^4 \right] - \left[\frac{3}{8} \frac{K}{p} - \frac{3}{4} \left(\frac{K}{p} \right)^3 + \frac{3}{8} \left(\frac{K}{p} \right)^5 \right] \times \left[\ln\left(1 - \frac{p}{K}\right) - \ln\left(1 + \frac{p}{K}\right) \right], \\ \Delta &= \sqrt{1 - (p/k) \sin^2\theta} \end{aligned}$$

를 적용하면, (2-13)식은 다음과 같이

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\text{Lx}}^{\text{F}} &= \frac{2V\beta}{(2\pi)^4} \int_0^\infty dp f_{\text{F}}(p) p^2 \left[\frac{2}{3} p_{\text{F}}^3 A_0 + \frac{2}{5} p_{\text{F}}^5 A_1 + \frac{2}{3} p^2 p_{\text{F}}^3 A_1 \right] \\ &= \frac{V\beta p_{\text{F}}^6 U(0)}{36\pi^4} \left(1 + \frac{6}{5} \frac{A_1}{A_0} p_{\text{F}}^2 \right) \end{aligned} \quad (2-14)$$

로 근사된다. 여기서 $U(0)$ 는 A_0 이다. P_{F} 는 페르미 이상기체의 수밀도 $n_{\text{F}}^{(0)}$ 와 $P_{\text{F}}^3 = 3\pi^2 n_{\text{F}}^{(0)}$ 의 관계를 갖는다. 그리고 혼합계의 ${}^3\text{He}$ 의 농도가 매우 적은 경우를 다루고 있으므로 P_{F} 는 극히 적은 양이다.

한편 ${}^4\text{He}$ 보오존의 1차 교환 다이어그램 기여는

$$\ln \Xi_{\text{Lx}}^{\text{B}} = - \frac{V\beta}{2(2\pi)^6} \int dq dp f_{\text{B}}(p) f_{\text{B}}(p) (p+q) U(q) \quad (2-15)$$

로(2-11)식을 고쳐 쓸 수 있으며, 보오존의 유효전파인자(Effective Propagator)의 고유치

$$\begin{aligned} \lambda_j^{\text{B}}(q) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int dp f_{\text{B}}(p) [1 + F_{\text{B}}(p+q)] \times \\ &\quad \int_0^\beta d\alpha \exp \left\{ \alpha \left[-\frac{p^2 - (p+q)^2}{2m} + \frac{2\pi i j}{\beta} \right] \right\} \end{aligned}$$

를 도입하여 (2-15)식을 다시 쓰면

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\text{Lx}}^{\text{B}} &= - \frac{V}{2(2\pi)^3} \int dq U(q) \lambda_j^{\text{B}}(q) \\ &\quad - \frac{V\beta}{2(2\pi)^3} \int dq U(q) \left(\frac{g_{32}(z_{\text{B}})}{\lambda^3} + \frac{N_0}{V} \right) \end{aligned} \quad (2-16)$$

로 주어진다. 여기서 $\lambda_j^{\text{B}}(q)$ 는 고리다이어그램 기여의 계산에서 나타나는 보오존 유효전자파인자의 고유치이다. 그리고 N_0 는 바닥상태에 있는 보오존의 수이며, λ 는 열적파장이다.

3. 1차 직접결합 기여

${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합계에서 두 입자 사이의 1차 직접 결합의 큰분배함수에 기여는 다음과 같은 세가지 형태가 있다.

먼저 ${}^3\text{He}$ - ${}^3\text{He}$ 결합의 큰분배함수에 기여는

$$\begin{aligned}\ln \Xi_1^F &= - \frac{V\beta}{32\pi^6} \int dp dp' U(0) f_F(p) f_F(p') \\ &= - \frac{2V\beta p_F^6}{36\pi^4} U(0)\end{aligned}\quad (2-17)$$

로 주어진다. 여기서 스핀 무게인자는 두 개의 독립된 스핀으로 인해 1차 교환에서 무게인자의 두 배이다.

다음으로 ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 직접결합의 기여는

$$\begin{aligned}\ln \Xi_1^B &= - \frac{V\beta}{128\pi^6} \int dp dp' U(0) f_B(p) f_B(p') \\ &= - \frac{v\beta}{2} \left[\frac{g_{32}(z_B)}{\lambda^3} + \frac{N_0}{V} \right]^2 U(0)\end{aligned}\quad (2-18)$$

이 된다. 여기서 스핀 무게인자는 없다.

마지막으로 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 직접결합의 기여는

$$\begin{aligned}\ln \Xi_1^{FB} &= - \frac{V\beta}{32\pi^6} \int dp dp' U(0) f_B(p) f_F(p') \\ &= - V\beta \left[\frac{g_{32}(z_B)}{\lambda^3} + \frac{N_0}{V} \right] \left(\frac{p_F^3}{3\pi^2} \right) U(0)\end{aligned}\quad (2-19)$$

이다. ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 쌍의 전체 수는 $N_F N_B$ 이며, 반면에 ${}^3\text{He}$ - ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 의 경우는 각각 $N_F^2/2$ 와 $N_B^2/2$ 이다.

4. 고리다이하그램 기여

고리다이하그램 기여는 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \ln \Xi_i &= \frac{V}{2(2\pi)^3} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \int dq [U(q) \lambda_j^i(q)]^n \\ &= \frac{V}{2(2\pi)^3} \int dq \sum_j \{U(q) \lambda_j^i(q) - \ln[1 + U(q) \lambda_j^i(q)]\} \end{aligned} \quad (2-20)$$

여기서 위 첨자 i 는 B와 F로 대치되며 각각은 페르미온과 보오존에 대한 것이다. 그리고 $\lambda_j(q)$ 는 유효전자파인자의 고유치이며, ${}^4\text{He}$ 보오존의 경우 극 저온에서 다음과 같이 근사적으로 표현된다

$$\lambda_j^B(q) = \frac{4m_B n_B^{(0)} / \hbar^2}{q^2 + \left(\frac{4\pi j m_B}{\beta q \hbar^2} \right)} \quad (2-21)$$

그리고 ${}^3\text{He}$ 페르미온 유효전자파인자의 고유치는

$$\lambda_j^F(q) = \frac{4m_F \pi p_F}{\hbar^2} F(s, t) \quad (2-22)$$

로 주어진다. 여기서

$$\begin{aligned} F(s, t) &= 1 - \frac{1}{8s^3} (s^2(s^2-4)-t) \ln \left| \frac{(s^2+2s)^2+t}{(s^2-2s)^2+t} \right| \\ &\quad - \frac{t}{2s} \left(\tan^{-1} \left(\frac{s^2+2s}{t} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{s^2-2s}{t} \right) \right), \\ s &= \frac{q}{p_F}, \quad t = \frac{4\pi j m_F}{\beta p_F^2 \hbar^2} \end{aligned}$$

이다. $F(s, t)$ 는 다음과 같이 두 극한으로 나누어서 쓸 수 있다.

$$F(s, t) = \begin{cases} \frac{4}{3s^2}, & (s \gg 1) \\ \frac{8}{3t^2} s^2, & (s \ll 1), (t \neq 0) \end{cases}$$

여기서 $p_F = (3\pi^2 n_F^{(0)})^{1/3}$ 임을 상기할 때에 $\lambda_j^F(q)$ 와 유사한 형태를 하고 있음을 알

수 있다. q 가 작을 경우 $\lambda_j^F(q)$ 는 다음과 같이 $\lambda_j^B(q)$ 와 유사한 형태로 근사한다.

$$\lambda_j^F(q) = \frac{4m_F n_F^{(0)} / \hbar^2}{q^2 + \left(\frac{4\pi j m_F}{\beta q \hbar^2} \right)} \quad (2-23)$$

${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합계에서 ${}^3\text{He}$ 입자와 ${}^4\text{He}$ 입자 사이에 상호작용이 있을때, 큰분배함수에 혼합 고라다디아그램 기여는 다음과 같이 주어진다.

$$\ln \Xi_r^{FB} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dq \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2N} [U(q)]^{2N} [\lambda_j^{\sim F}(q) \lambda_j^{\sim B}(q)]^N \quad (2-24)$$

여기서 유효 고유치 λ_j^{\sim} 는

$$\begin{aligned} \lambda_j^{\sim F} &= \lambda_j^F(q) / [1 + U(q) \lambda_j^F(q)] \\ \lambda_j^{\sim B} &= \lambda_j^B(q) / [1 + U(q) \lambda_j^B(q)] \end{aligned} \quad (2-25)$$

이다. (2-24)식에서 모든 N 에 대하여 합을 취하면 Montroll과 Ward의 단일 성분 계에 대한 일반화된 공식인

$$\ln \Xi_r^{FB} = \frac{V}{2(2\pi)^3} \int dq \sum_j (U(q) \Lambda_j(q) - \ln [1 + U(q) \Lambda_j(q)]) \quad (2-26)$$

로 주어진다. 여기서 $\Lambda_j(q)$ 는 혼합 고리에서의 유효 고유치인데 (2-21)식과 (2-22)식을 활용하면 다음과 같이 고쳐 쓸 수있다.

$$\begin{aligned} \Lambda_j(q) &= \frac{4m_B n_B^{(0)} / \hbar^2}{q^2 + (4\pi j m_B / \beta q \hbar^2)^2} \\ &\times \left(1 + y \left[1 - \frac{2(\delta m)(4\pi j m_B / \beta q \hbar^2)^2}{q^2 + (4\pi j m_B / \beta q \hbar^2)^2} \right] \right) \end{aligned} \quad (2-27)$$

여기서

$$\delta m = \frac{m_F - m_B}{m_B}, \quad y = \frac{n_F^{(0)}}{n_B^{(0)}}$$

이다. (2-26)식의 우변 첫 항을 계산하기 위하여 모든 정수에 대한 합을 다음과 같이 적분으로 대체시킨다.

$$\sum_j U(q) \Lambda_j(q) = -\frac{\beta \hbar^2 q^2}{4\pi m_B} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\gamma^2(q)}{q^2+x^2} \left[1+y \left(1 - \frac{2(\delta m)x^2}{q^2+x^2} \right) \right] \quad (2-28)$$

여기서

$$x = \frac{4\pi j m_B}{\beta \hbar^2 q^2}, \quad \gamma^2(q) = \frac{4m_B^{(0)} U(q)}{\hbar^2}$$

이다. (2-28)식은

$$\sum_j U(q) \Lambda_j(q) = \beta n_B^{(0)} U(q) (1+y-\delta my) \quad (2-29)$$

로 유도된다. (2-26)식의 둘째 항 역시 위와 같은 방법을 다음과 같이 고쳐 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \sum_j \ln[1+U(q)\Lambda_j(q)] &= \frac{\beta \hbar^2 q}{4\pi m_B} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ln \left(1 + \frac{\gamma^2(q)}{q^2+x^2} \left[1+y \left(1 - \frac{2(\delta m)x^2}{q^2+x^2} \right) \right] \right) \\ &= \frac{\beta \hbar^2 q^2}{2m_B} \left[\frac{b+2\sqrt{a}}{h} (\sqrt{g}-\sqrt{f}) - 2q \right] \end{aligned} \quad (2-30)$$

여기서

$$a = q^2[q^2 + \gamma^2(q)(1+y)], \quad b = 2q^2 + \gamma^2(q)(1+y - 2\delta my),$$

$$h = (b^2 - 4a)^{\frac{1}{2}}, \quad g = \frac{1}{2}(b+h),$$

$$f = \frac{1}{2}(b-h)$$

q 가 작을 경우, 그리고 액체 ${}^4\text{He}$ 에 ${}^3\text{He}$ 가 미소량 녹아 있는 묶은 용액에 대해 다루고 있으므로 (2-30)식은 다음과 같이 계산된다.

$$\sum_j \ln[1+U(q)\Lambda_j(q)] = \frac{1+y-\delta my}{1+y} \frac{\beta \hbar^2 q}{2m_B} \left([q^2 + \gamma^2(q)(1+y)]^{\frac{1}{2}} - q \right) \quad (2-31)$$

(2-29)식과 (2-31)식을 (2-26)식에 대입하면 틀 얻는다.

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\gamma}^{FB} &= \frac{\beta V}{2(2\pi)^3} \left(\frac{1+y-\delta my}{1+y} \right) \int dq \left(U(q) n_B^{(0)} (1+y) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar^2 q}{2m_B} [q^2 + \gamma^2(q)(1+y)] + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B} \right) \end{aligned} \quad (2-32)$$

(2-32)식에서 $y=0$ 일 때는 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 에 대한 큰분배함수에 고리다이아그램 기여이며, 다음과 같이 표현된다.

$$\ln \Xi_{\gamma}^B = \frac{\beta V}{2(2\pi)^3} \int dq \left\{ U(q) n_B^{(0)} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B} [q^2 + \gamma^2(q)]^{\frac{1}{2}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B} \right\} \quad (2-33)$$

이는 보오존에 대한 (2-20) 식을 계산한 결과와 일치한다. Lennard-Jones형 꼬리를 갖는 퍼텐셜을 도입하여 (2-32) 식을 다시 쓰면

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\gamma}^{FB} = & \frac{\beta V}{(2\pi)^2} \left(\frac{1+y-\delta m y}{1+y} \right) \{ n_B^{(0)} (1+y) [\int_0^{\frac{1}{a}} (A_0 + A_1 q^2 + \dots) q^2 dq \\ & + \int_{\frac{1}{a}}^{\infty} \frac{4\pi a^3 V_0}{(qa)^3} (\sin qa - qa \cos qa) q^2 dq] \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_B} \int_0^{\frac{1}{a}} [q^3 (q^2 + \gamma^2(0)) (1 + \frac{A_1}{A_0} q^2) (1+y)^{\frac{1}{2}} - q^4] dq \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_B} \int_{\frac{1}{a}}^{\infty} [q^3 (q^2 + \frac{4m_B n_B^{(0)}}{\hbar^2} (\frac{4\pi V_0}{q^3}) (\sin qa - qa \cos qa))^{\frac{1}{2}} - q^4] dq \} \end{aligned} \quad (2-34)$$

이 된다. 여기서

$$\gamma^2(0) = \frac{4m_B n_B^{(0)} U(0)}{\hbar^2} \quad (2-35)$$

이다. 다음의 적분 공식

$$\begin{aligned} \int_1^{\infty} \frac{1}{x} \sin x \, dx &= -\text{si}(1) \\ \int_1^{\infty} x^3 (x^2 a + b)^{\frac{1}{2}} \, dx &= \left(\frac{x^2}{5a} - \frac{2b}{15a^2} \right) (x^2 a + b)^{3/2}, \\ \int_1^{\infty} \frac{\cos^2 x}{x^4} \, dx &= \frac{1}{6} [1 - \sin 2 - \cos 2 - 4\text{si}(2)], \\ \int_1^{\infty} \sin x \cos \frac{x}{x^5} \, dx &= \frac{1}{12} \left[\frac{1}{2} \sin 2 - \cos 2 - 4\text{si}(2) \right], \\ \int_1^{\infty} \frac{\sin 2x}{x^6} \, dx &= \frac{1}{30} [3 + 5\sin 2 - 4\cos 2 - 4\text{si}(2)] \end{aligned}$$

를 활용하여 (2-34) 식을 계산하면, 큰분배함수에 혼합 고리다이하그램 기여는 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \ln \Xi_{\gamma}^{FB} = & \frac{1+y-\delta m y}{1+y} \frac{\beta V n_B^{(0)} (1+y) V^*}{9\pi} \left[1 - \frac{9}{5a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} \right. \\ & + \frac{6}{5a^2 \gamma^2 (1+y)} - \frac{9}{20} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \\ & \left. + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \end{aligned} \quad (2-36)$$

여기서

$$\gamma^2 = \gamma^2(0),$$

$$\delta_1 = -4 + \frac{7}{2} \sin 2 + 2 \cos 2 + 2 \text{Si}(2)$$

이다.

5. 혼합계의 전체 큰분배함수

${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 혼합계의 전체 큰분배함수는 앞 절에서 유도한 두 개의 이상기체 항과 ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ 에 대한 1차 교환다이아그램 항과 세가지 가능한 입자쌍에 대한 1차 직접결합 항 및 혼합 고리다이아그램 기여 항으로 다음과 같이 구성된다.

$$\frac{1}{V} \ln \Xi_{\gamma}^{FB} = \frac{2}{5} \left(\frac{\beta \hbar^2 p_F^2}{2m_F} \right) n_F + n_B^{(0)} + \frac{1}{4} \beta U(0) [n_F^{(0)}]^2$$

$$- \frac{1}{2} \beta [n^{(0)}]^2 U(0) \left[1 - \frac{f_1}{6\pi^2 n^{(0)} a^3} \right] - \frac{\rho n_F^{(0)} U(0)}{12\pi^2 a^3} (\delta_m) f_1 \quad (2-37)$$

여기서

$$n^{(0)} = n_B^{(0)} + n_F^{(0)},$$

$$f_1 = 1 - \frac{9}{5\alpha\gamma(1+y)} + \frac{6}{5a^2\gamma^2(1+y)} - \frac{9}{20} a^2\gamma^2(1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1$$

$$+ \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{6} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \quad (2-38)$$

이다.

III. 바닥상태에너지

혼합계의 내부에너지는 앞 절에서 얻은 전체 큰분배함수를 β 에 대해 미분함으로써 다음과 같이 유도된다.

$$\frac{E}{V} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{V} \ln \Xi \right)_{z_B, z_F, V}$$

$$= \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 p_F^5}{2m_F} + \frac{3}{2} \frac{n_B^{(0)}}{\beta} + \frac{1}{2} [n_F^{(0)}]^2 U(0)$$

$$- [n^{(0)}]^2 U(0) \left(1 - \frac{1}{24\pi^2 n^{(0)} a^3} \left[1 + \frac{9}{10\alpha\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} - \frac{12}{5a^2\gamma^2(1+y)} \right] \right)$$

$$- \frac{9}{5} a^2\gamma^2(1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right)$$

$$- \frac{n_F^{(0)} U(0) (\delta_m)}{24\pi^2 a^3} \left[1 + \frac{9}{10\alpha\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} - \frac{12}{5a^2\gamma^2(1+y)} \right]$$

$$- \frac{9}{5} a^2\gamma^2(1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \quad (3-1)$$

내부에너지를 혼합계의 수 밀도의 함수로 나타내기 위해서는 이상기체의 수 밀도

$$n_F^{(0)} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_F}{\beta \hbar^2} \ln z_F \right)^{3/2},$$

$$n_B^{(0)} = g_{3/2}(z_B) \lambda^3 + \frac{N_0}{V}$$

를 혼합계의 수 밀도 n_B 와 n_F 로 표현되어야 한다. 전체 큰분배함수를 이용하면 이상 기체의 수 밀도를 혼합계의 수 밀도로 표현이 가능하며 페르미온의 경우 다음과 같이 얻어진다.

$$\begin{aligned} n_F^{(0)} = & n_F - \frac{3}{4} \frac{n_F^2}{\epsilon_F} U(0) + \frac{3nn_F}{2\epsilon_F} U(0) \left\{ 1 - \frac{1}{12\pi^2 na^3} \left[1 - \frac{9}{10a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{9}{10} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \epsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \right\} \\ & + \frac{n_F U(0)(\delta m)}{8\epsilon_F \pi^2 a^3} \left[1 - \frac{9}{5a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} - \frac{6}{5a^2 \gamma^2 (1+y)} \right. \\ & \left. - \frac{9}{20} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \epsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \\ & + \frac{n_F^2 U(0)(\delta m)}{8\epsilon_F \pi^2 na^3} \left[\frac{9}{10a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} - \frac{6}{5a^2 \gamma^2 (1+y)} \right. \\ & \left. - \frac{9}{20} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \end{aligned} \quad (3-2)$$

여기서 $\gamma(1+y)^{1/2}$ 항의 $n_B^{(0)}$ 와 $n_F^{(0)}$ 는 n_B 와 n_F 로 근사적으로 대치했으며 비록 $n_B^{(0)}$ 와 $n_F^{(0)}$ 가 n_B 와 n_F 로 대치되었다 하더라도 같은 표기 $\gamma(1+y)^{1/2}$ 를 사용한다. 그리고 ϵ_F 는 페르미 에너지 $\hbar^2 p_F^2 / 2m_F$ 이며 n 은 $n_B + n_F$ 이다.

보오존에 대해서도 혼합계의 전체 큰분배함수를 활용하면 다음과 같은 관계식을 얻는다.

$$\begin{aligned} n_B^{(0)} = & n_B + \beta n n_B U(0) \left\{ 1 - \frac{1}{12\pi^2 na^3} \left[1 - \frac{9}{10a} \gamma(1+y)^{\frac{1}{2}} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{9}{10} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \epsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \right\} \\ & + \frac{\beta n_B n_F U(0)}{12\pi^2 na^3} (\delta m) \left[\frac{9}{10a\gamma(1+y)^{\frac{1}{2}}} - \frac{6}{5a^2 \gamma^2 (1+y)} \right. \\ & \left. - \frac{9}{20} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \end{aligned} \quad (3-3)$$

여기서도 $\gamma(1+\gamma)$ 항의 $n_B^{(0)}$ 와 $n_F^{(0)}$ 를 n_B 와 n_F 로 대체한다.

(3-1)식에 (3-2)과 (3-3)식을 대입하여 절대영도 극한을 취하면

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 p_0^5}{2m_F} - \frac{1}{4} n_F^2 U(0) + \frac{1}{2} n^2 U(0) \left(1 - \frac{f_1}{6\pi^2 n a^3}\right) + \frac{n_F U(0)}{12\pi^2 a^3} (\delta m) f_1 \quad (3-4)$$

이 된다. 여기서 p_0^3 는 $3\pi^2 n_F$ 이며, f_1 는 앞 절에서 정의되었는데 그 때와는 달리 n_B 와 n_F 를 포함하고 있다.

순수한 액체 ^4He 의 바닥상태에너지는 (3-4)식으로부터 다음과 같이 얻어진다

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{2} \bar{n}_B^2 U(0) \left(1 - \frac{1}{6\pi^2} \frac{1}{\bar{n}_B a^3} (\delta m) \bar{f}_1\right) \quad (3-5)$$

여기서 n_B 는 순수한 액체 ^4He 의 수 밀도이며, 그리고

$$f_1 = 1 - \frac{9}{5a\gamma} + \frac{6}{5a^2\gamma^2} - \frac{9}{20} a^2 \gamma^{-2} \left(\frac{V_0}{V^*}\right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \varepsilon^* - \frac{4}{5!} V_0\right),$$

$$\gamma^{-2} = \frac{4m_B \bar{n}_B U(0)}{\hbar^2} \quad (3-6)$$

이다.

Baym은 N_B ^4He 원자에 N_F ^3He 원자가 용해된 계의 해밀토니안을 다음과 같이 도입하였다.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_B} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\gamma_i - \gamma_j) + \sum_{j=1}^{N_F} \frac{p_j^2}{6m_B} \quad (3-7)$$

위의 식은 $1/m_F = 1/m_B + 1/3m_B$ 를 도입한 것이다. 여기서 m_F 는 ^3He 의 질량이며, m_B 는 ^4He 의 질량이다. 그리고 $N = N_B + N_F$ 이다. 첫째항의 합은 ^3He 입자의 ^4He 입자 모두에 대한 합이며, 반면 마지막 항은 오직 ^3He 입자에 대한 합이다. 그리고 중간항은 $\frac{1}{2} N(N-1)$ 개의 입자쌍에 대한 합이다. 그리고 Baym은 혼합계에서 가능한 입자쌍 $^3\text{He}-^3\text{He}$ 그리고 $^3\text{He}-^4\text{He}$ 에 대한 퍼텐셜을 같다고 가정하였다. (3-7)식에서 처음 두 항은 N ^4He 원자에 대한 해밀토니안이다. 그리고 마지막 항은 ^3He 와 ^4He 입자의 질량 차로 인한 운동에너지 섭동이다. Baym은 유효상호작용을 구하기 위해 N ^4He 원자의 바닥상태 파동함수를 시행 파동함수로 취하여 다음과 같은 형태의 바닥상태에너지를 얻었다.

$$E = E_0(N) + N_F E_1(N) \quad (3-8)$$

여기서 $E_0(N)$ 은 N ${}^4\text{He}$ 원자의 바닥상태에너지이고 $E_1(N)=\langle p^2/6m_B \rangle$ 는 N ${}^4\text{He}$ 원자 계에서 입자당 평균운동에너지의 $1/3$ 이다. $E_0(N)$ 에 대한 상세한 미시적 계산은 이루어지지 않았다.

본 논문에서는 미시적으로 계산된 바닥상태에너지 (3-4)식을 Baym의 에너지 형태 (3-8)식으로 표현할 수 있음을 보이고 이 에너지 형태로부터 다른 물리량, 즉 유효 상호작용, 화학퍼텐셜, 압력 및 삼투압 등을 얻으려 한다.

액체 ${}^4\text{He}$ 의 미소량의 ${}^3\text{He}$ 가 녹아 있는 경우에는 는 아주 작은 값이다. (3-4)식에서 페르미 이상기체 기여 항과 항을 무시하면 (3-40)식은 Baym의 에너지 형태로 쓸 수 있다.

$$E_0(N) = \frac{1}{2} nNU(0) \left(1 - \frac{1}{6\pi^2 n a^3} f_1\right), \quad (3-9)$$

$$E_1(N) = \frac{U(0)(\delta m)}{12\pi^2 a^3} f_1 \quad (3-10)$$

Baym은 (3-8)식으로부터 ${}^3\text{He}$ 의 화학퍼텐셜

$$\mu_B = \left. \frac{\partial E}{\partial N_B} \right)_{N_F} = E_0'(N) + N_F E_1'(N), \quad (3-11)$$

$$\mu_F = \left. \frac{\partial E}{\partial N_F} \right)_{N_B} = E_0'(N) + N_F E_1'(N) \quad (3-12)$$

를 얻었다. 프라임(')은 N 에 대한 미분을 나타낸다. 일정한 압력 하에서 $N_F=0$ 와 $N_F=1$ 일 때의 화학퍼텐셜을 비교한다. 그런데 일정한 압력을 유지하기 위해서는 계의 체적 V 가 약간 변해야 한다. 거시계에서 화학퍼텐셜은 오직 입자밀도에 의존하기 때문에 체적을 변화시키는 대신에 전체 입자수를 재조정함으로써 일정한 압력을 유지시킬 수 있다.

N 의 유효변화는 다음에 의해 결정된다. 일정온도에서 관계식

$$V dp = N_F d\mu_F + N_B d\mu_B \quad (3-13)$$

은 ${}^3\text{He}$ 입자의 미소극한에서 일정압력의 조건은 일정한 μ_B 임을 시사한다. (3-11)과 (3-12)식에서 $N_F=0$ 에 대해 $\mu_B = E_0'(N_B), N_B = n_B$ 이며, 여기서 n_B 은 ${}^3\text{He}$ 의 농도가 0인 순수한 ${}^4\text{He}$ 입자만으로 이루어진 계의 수밀도이다. $N_F=1$ 에 대해 $N = N_B + \delta N$ 이다. 이 때 μ_B 가 일정하다는 것은

$$E_0'(\bar{N}_B) = E_0'(\bar{N}_B + \delta N) + E_1'(\bar{N}_B + \delta N) \quad (3-14)$$

를 의미한다. (3-14)식을 Taylor급수 전개하고 정리하면

$$\delta N = -E_1'(\bar{N}_B)/E_1'(\bar{N}_B) = -\alpha \quad (3-15)$$

이 된다. 여기서 α -는 부피의 상대적 변화를 나타내는 과잉부피계수 (Excess Volume Coefficient)이다. 순수한 액체 'He에 한 개의 ³He입자를 첨가 했을 때의 μ_F 의 변화는 (3-12)와 (3-15)식으로부터

$$\begin{aligned} \delta \mu_F = & E_0'(\bar{N}_B + \delta N) + E_1(\bar{N}_B + \delta N) + E_1'(\bar{N}_B + \delta N) \\ & - E_0'(N) - (E_1 \bar{N}_B) = -\alpha^2 E''(\bar{N}_B) \end{aligned} \quad (3-16)$$

로 유도된다. Baym은 (3-8), (3-11)식 및 (3-15)식을 이용하여 과잉부피계수를 계산하였다. 본 논문에서는 미시적으로 계산된 바닥상태에너지 (3-9), (3-10)식 및 (3-15)식을 이용하여 과잉부피계수를 상세히 유도하려 한다. (3-15)식은 ³He의 농도가 0일 때에 정의된다. $n_F=0$ 일 때 (3-9)식과 (3-10)식은 각각 다음과 같다.

$$E_0(\bar{N}_B) = \frac{1}{2} \bar{n}_B \bar{N}_B U(0) \left(1 - \frac{1}{6\pi^2} \frac{1}{\bar{n}_B a^3} \bar{f}_1\right) \quad (3-17)$$

$$E_1(\bar{N}_B) = \frac{U(0)(\delta m)}{12\pi^2 a^3} \bar{f}_1 \quad (3-18)$$

Baym의 과잉부피계수에 대한 정의식을 이용하여 α 을 계산하면

$$\alpha = \frac{\frac{3(\delta m)}{40\pi^2 \bar{n}_B a^3} \left[\frac{1}{a\gamma} - \frac{4}{3a^2 \gamma^2} \left(\frac{V_0}{V^*}\right)^2 \delta_1 \right]}{1 - \frac{3}{40\pi^2 \bar{n}_B a^3} \left[\frac{1}{2a\gamma} - a^2 \gamma^2 \left(\frac{V_0}{V^*}\right)^2 \delta_1 \right]} \quad (3-19)$$

이 된다. 지금까지 3차원 바닥상태에너지를 미시적으로 상세히 유도하여 Baym의 에너지 형태와 일치하는 표현을 얻었으며, 이로부터 과잉부피계수를 유도하였다. 만약 적절한 퍼텐셜 매개변수 값이 주어진다면 수치적 계산이 가능하다. 자세한 논의는 VI절에서 한다.

VI. 압력 및 삼투압

혼합계의 전체 압력은 내부에너지를 부피에 대하여 비문함으로서 입자수 밀도의 함수로 표현된다. 절대 영도에서 혼합계의 압력은

$$\begin{aligned}
 P = & \frac{2}{5} \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} n_F^2 - \frac{1}{4} U(0) n_F^2 \\
 & + \frac{1}{2} n^2 U(0) \left\{ 1 - \frac{3}{20\pi^2 n a^3} \left[\frac{1}{a\gamma(1+y)^{1/2}} - \frac{4}{3a^3\gamma^2(1+y)} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{1}{2} a^2 \bar{\gamma}^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} + \frac{3n_F U(0)}{40\pi^2 a^3} (\delta m) \left[\frac{1}{a\gamma(1+y)^{1/2}} \right. \\
 & \left. - \frac{4}{3a^2\gamma^2(1+y)} - \frac{1}{2} a^2 \bar{\gamma}^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \quad (4-1)
 \end{aligned}$$

이다. 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 의 압력은 (4-1)식으로부터

$$\begin{aligned}
 P_0 = & \frac{1}{2} \bar{n}_B^2 U(0) \left\{ 1 - \frac{3}{20\pi^2 \bar{n}_B a^3} \left[\frac{1}{a\bar{\gamma}} - \frac{4}{3a^2 \bar{\gamma}^2} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{1}{2} a^2 \bar{\gamma}^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} \quad (4-2)
 \end{aligned}$$

로 주어진다. Baym이 표현한 물부피와 과잉부피계수사이의 관계식을 수밀도로 고쳐 쓰면

$$\frac{\bar{n}_B}{n} = 1 + \alpha x \quad (4-3)$$

이된다. 여기서 $x = n_F/n$ 은 묶은 용액의 ${}^3\text{He}$ 농도이다. (4-3)식을 적용하면

$$\gamma(1+y)^{1/2} = \bar{\gamma} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha n_F}{\bar{n}_B} \right) \quad (4-4)$$

$$\gamma^2(1+y) \approx \bar{\gamma}^2 \left(1 - \alpha \frac{n_F}{\bar{n}_B} \right) \quad (4-5)$$

를 얻는다. (4-3), (4-4)식 및 (4-5)식을 사용하여 (4-1)식을 다시쓰면 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
 P = & P_0 + \frac{2}{5} \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} n_F^2 + a^2 n_F^2 \frac{m_B}{n_B} \frac{C_B^2}{n_B} \\
 & + \frac{1}{2} U(0) a^2 n_F^2 \left\{ + \frac{3}{40\pi^2 \bar{n}_B a^3} \left[\frac{1}{a\bar{\gamma}} - \frac{8}{3a^2 \bar{\gamma}^2} \right. \right. \\
 & \left. \left. + a^2 \bar{\gamma}^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} \quad (4-6)
 \end{aligned}$$

여기서 C_B 은 액체 ${}^4\text{He}$ 의 음속이며 자세한 계산은 다음 절에서 다룬다. (4-6)식을 유도하는데 적용된 C_B 의 관계식은

$$C_B^2 = \frac{\bar{n}_B U(0)}{m_B} \left\{ 1 - \frac{3}{40\pi^2} \frac{1}{n_B a^3} \left[\frac{1}{a r} - a^2 \bar{\gamma}^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} \quad (4-7)$$

이다.

삼투압은 헬륨 람다점 이하의 온도를 유지하는 두 개의 용기를 고려함으로써 정의될 수 있다. 한 용기는 오직 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 로 채워져 있고 다른 용기는 농도 $X = n_F/n$ 을 갖는 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 묶은 용액으로 채워져 있다. 그리고 두 용기는 초유체 ${}^4\text{He}$ 는 통과할 수 없는 이상적인 미세관으로 연결되어 있다. 미세관을 열었을 때 초유체는 평형상태가 이루어질 때까지 이동할 것이다. 완화 시간이 지난 후 순수한 ${}^4\text{He}$ 의 압력이 P_0 , 묶은 용액의 압력이 $P = P_0 + \Pi$ 가 되도록 삼투압 Π 을 정의한다. 이 때에 구하고자 하는 삼투압은 (4-5)식으로부터

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{2}{5} \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} n_F^2 + a^2 n_F^2 \frac{m_B C_B^2}{n_B} - \frac{1}{4} U(0) n_F^2 \\ & + \frac{1}{2} U(0) a^2 n_F^2 \left\{ 1 + \frac{3}{40\pi^2} \frac{1}{n_B a^3} \left[\frac{1}{a r} - \frac{8}{3a^2 \bar{\gamma}^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + a^2 \bar{\gamma}^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (4-8)$$

로 주어진다. 이처럼 삼투압은 농도의 함수로 나타내어지며 농도의 증가에 따라서 급하게 증가한다.

V. 화학퍼텐셜

Baym이론에서 화학퍼텐셜은 상세한 유도 없이 소개되었다. 그 표현은 혼합 용액 이론에서 중요한 역할을 한다. 화학퍼텐셜은 과잉 부피계수와 음속등에 의해 표현되는 유효퍼텐셜을 포함하고 있다. 이 절에서는 화학퍼텐셜은 미시적으로 상세히 유도할 뿐만 아니라 이로부터 유효퍼텐셜을 도출할 수 있음을 보인다.

화학퍼텐셜은 내부에너지를 입자 수에 대해 미분함으로써 유도된다.

혼합 용액의 ${}^4\text{He}$ 화학퍼텐셜은

$$\begin{aligned} \mu_B &= \left. \frac{\partial E(n)}{\partial N_B} \right|_{N_F} \\ &= nU(0) \left\{ 1 - \frac{1}{12\pi^2 n a^2} \left[1 - \frac{9}{10\gamma(1+y)^{1/2}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{10} a^2 \gamma^2 (1+y) \times \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \epsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \right\} \\ &\quad + \frac{3n_F U(0)(\delta m)}{40\pi^2 n a^3} \left[\frac{1}{\alpha\gamma(1+y)^{1/2}} - \frac{4}{3a^2 \gamma^2 (1+y)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} a^2 \gamma^2 (1+y) \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \end{aligned} \quad (5-1)$$

로 주어진다.

${}^3\text{He}$ 의 화학퍼텐셜은

$$\begin{aligned} \mu_F &= \left. \frac{\partial E(N)}{\partial N_F} \right|_{N_B} \\ &= \mu_B(n_B, n_F, P) + \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} - \frac{1}{2} U(0) n_F + \frac{U(0)(\delta m)}{12\pi^2 a^2} f_1 \end{aligned} \quad (5-2)$$

이다. 여기서 P 는 절대영도에서 혼합계의 압력이다. 앞 절에서처럼 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 가 채워있는 용기와 농도 x 인 ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ 묶은 용액으로 채워져 있는 용기가 미세관으로 서로 연결되었다 하자 그리고 미세관은 초유체 ${}^4\text{He}$ 가 이동하여 평형상태가 되었다. 그리고 각각의 압력은 P_0 와 $P_0 + \Pi$ 이다. 평형상태에서 ${}^4\text{He}$ 의 화학퍼텐셜은

$$\mu_B(X, P_0 + \Pi) = \mu_B(O, P_0) \quad (5-3)$$

의 관계식을 준다.

(5-3)식을 Taylor 급수전개하면

$$\mu_B(n_B, n_F, P_0) = \mu_B(\bar{n}_B, 0, P_0) - \Pi \bar{\nabla}_B \quad (5-4)$$

로 근사된다. 여기서 $\bar{\nabla}_B$ 는 평균부분부피이며

$$\bar{\nabla}_B = \frac{\partial \mu_B(O, P)}{\partial P}$$

이다. 앞 절에서 구한 삼투압과 (5-4)식을 이용하여 (5-2)식을 다시쓰면

$$\begin{aligned} \mu_F &= \mu_B(\bar{n}_B, 0, P_0) - \frac{1}{n_B} \frac{2}{5} \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} n_F + \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} \\ &\quad - \frac{1}{2} U(0) n_F + \frac{U(0)(\delta m)}{12\pi^2 a^2} f_1 \end{aligned} \quad (5-5)$$

이 된다. 여기서

$$\begin{aligned} \mu_B(\bar{n}_B, 0, P) &= \bar{n}_B U(0) \left\{ 1 - \frac{1}{12\pi^2 \bar{n}_B a^2} \left[1 - \frac{9}{10\alpha\gamma} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{10} a^2 \gamma^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 + \frac{9}{5V^*} \left(\frac{1}{7} \epsilon^* - \frac{4}{5!} V_0 \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5-6)$$

이다. 그리고 관계식

$$n = \bar{n}_B - \alpha n_F$$

를 적용하여 (5-5)식을 정리하면

$$\begin{aligned} \mu_F = [E_0] + \mu_{free} \left[1 - \frac{2}{5} \frac{x}{(1+\alpha x)} \right] - \frac{1}{2} U(0) n_F \\ - \alpha n_F \frac{3U(0)(\delta m)}{40\pi^2 n_B a^3} \left[\frac{1}{a\gamma} - \frac{4}{3a^2 \gamma^2} - \frac{1}{2} a^2 \gamma^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \end{aligned} \quad (5-7)$$

이 된다. 여기서

$$[E_0] = \mu_B(\bar{n}_B, 0, P_0) + \frac{U(0)(\delta m)}{12\pi^2 a^2} f_1 \quad (5-8)$$

$$\mu_{free} = \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m_F} \quad (5-9)$$

이다. 여기서 $[E_0]$ 는 결합에너지이며, μ_{free} 는 페르미 이상기체의 화학퍼텐셜이다. ${}^3\text{He}$ 의 화학퍼텐셜은 음속도를 도입함으로써 간단히 표현된다. 음속도 관계식은

$$C^2 = \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_{T, 0} \quad (5-10)$$

이다. 여기서 ρ 는 질량밀도이다. 액체 ${}^4\text{He}$ 의 음속도 (5-10)에 의해

$$C_B^2 = \frac{\bar{n}_B}{m_B} U(0) \left\{ 1 - \frac{3}{40\pi^2 n_B a^2} \left[\frac{1}{2a\gamma} - \frac{1}{2} a^2 \gamma^2 \left(\frac{V_0}{V^*} \right)^2 \delta_1 \right] \right\} \quad (5-11)$$

로 유도된다. (5-11)식을 이용하여 (5-7)식을 다시 쓰면

$$\begin{aligned} \mu_F = [E_0] + \mu_{free} \left[1 - \frac{2}{5} \frac{x}{(1+\alpha x)} \right] - \alpha^2 \frac{m_B C_B^2}{n_B} n_F \\ - \frac{1}{2} U(0) n_F \end{aligned} \quad (5-12)$$

으로 표현된다. 식 (5-12)은 BBP의 현상론적 화학퍼텐셜의 표현식

$$\begin{aligned} \mu_F(x) = \mu_{free}(T, x) + \mu'_F(x) \\ \mu'_F(x) = E_0 + n_F V(0) - \int V(p) \frac{dn}{(2\pi\hbar)^3}, (p < p_F) \end{aligned} \quad (5-13)$$

과 비교할 수 있다. $\mu_{\text{free}}(T, x)$ 는 $\mu_{\text{free}}\left[1 - \frac{2}{5} \frac{x}{(1+ux)}\right]$ 에 교환보정 (Exchange correction)에서 나타난 마지막 항 $\int V(p) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ 는 1차교환기여항 $\frac{1}{2}U(0)n_B$ 에 대응된다. 특히, 비교를 통하여 운동량이 영일 때의 유효퍼텐셜이

$$V(0) = -\alpha^2 \frac{m_B c_B^2}{n_B} \tag{5-14}$$

임을 알 수있으며, 이는 Baym의 유효퍼텐셜과 일치한다.

VI. 결과 및 논의

초유체 HeII에 미소량 ${}^3\text{He}$ 가 녹아 있는 혼합 용액에 대한 큰 배분함수를 단일 성분계에 대한 Mantroll and ward의 공식을 일반화한 성분고리다이하그램으로부터 구하였다. Baym은 바닥상태에너지에서 $E_0(N)$ 과 $E_1(N)$ 를 상세하게 계산하지 않았지만 본 논문에서는 입자수 밀도의 함수로 상세히 유도하였다. 그리고 과잉부피계수를 퍼텐셜 매개변수로 표현하였으며 그 수치적 값은 아래의 표와 같다. 더불어서 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 의 바닥상태에너지를 혼합 용액의 바닥상태에너지로부터 쉽게 얻을 수 있음을 보였다. 그리고 퍼텐셜 매개변수가

$$\varepsilon^* = 4.5 K, \quad V_0 = 11 K, \quad \alpha = 2.67 \text{ \AA}$$

일때 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 의 입자당 바닥상태에너지 $\varepsilon(N_B)$ 와 과잉부피계수 α 는 실험치와 거의 일치한다. (표참조)

표) 순수한 액체 ${}^4\text{He}$ 의 입자당 바닥상태에너지 $\varepsilon(N_B)$ 와 과잉부피계수 α

	$\bar{n}_B 10^{-2} (\text{ \AA}^{-3})$	$\varepsilon(\bar{N}_B)(K)$	α
Feenberg ⁽¹⁾	2.18	-5.97	0.297
Ristig et al ⁽²⁾	2.18	-4.6	0.32
Isihara-Kojima	2.1	-	0.146
Experiment	2.18	-7.2	0.284
Present Work	2.18	-5.73	0.283

또한 내부에너지로부터 압력과 삼투압, 그리고 화학퍼텐셜을 유도하였다. 마지막으로 ${}^3\text{He}$ 와 ${}^4\text{He}$ 의 화학퍼텐셜을 BBP의 현상론적 화학퍼텐셜과 같은 형태로 유도하였으며 이로부터 BBP의 현상론적 이론에서 제시한 형태와 일치하는 유효퍼텐셜을 얻었다.

참고문헌

- 1) L. D. Landau and I. Pomeranchuk, Dokl. Akad. Nauk (USSR), 59, 669(1948)
- 2) D. O. Edwards et al, Phys. Rev. L15, 773(1968)
- 3) J. C. Wheatley, Am. J. Phys. 36, 181(1965)
- 4) J. Bardeen, G. Baym, D. Pines, Phys. Rev. 156, 207(1967)
- 5) V. J. Emery, Phys. Rev. 161, 194(1967)
- 6) W. L. Mcmillan, Phys. Rev. 175, 226(1968):182, 299(1969)
- 7) W. E. Massey, C. W. Woo, H. T. Tan, Phys. Rev. A1, 519(1970)
- 8) V. R. Pandharipande, N. Itoh, Phys. Rev A8, 2564(1973)
- 9) W. F. Saam, Ann, Phys, 53, 216(1969)
- 10) W. K. Lee, B. Goodman, Phys. Rev. B24, 2515(1981)
- 11) T. Chakraborty, Phys. Rev. B25, 3177(1981)
- 12) H. W. Jackson, Phys. Rev. B26, 66(1982): B28, 1438(1982)
- 13) A. Faborcini, A. polls, Phys. Rev. B25, 4533(1982):B26, 1438(1982)
- 14) A. Isihara, Y. Kojima, Physica, 958, 391(1978):Z. Physik. B37, 1(1980)
- 15) T. McMullen, J. Low. Temp. Phys, 51, 33(1983):Y. Maemp, H. Haucke, J. C. Wheatley, Phys. Rev. Lett. 54, 340(1985): B. A. Frass, R. O. Simmons, Phys. Rev. B36, 97(1987)
- 16) J. Landau, T. T. Tough, Phys. Rev. A2, 2472(1970)
- 17) Y. Disatnik, H. Brucker, J. Low. Temp. Phys. 5, 491(1972)
- 18) R. A. Guyer, M. D. Diller, Phys. Rev. B22, 142(1980)
- 19) C. Ebner, D. O. Edwards, Phys. Rev. 2, 77(1971)
- 20) C. A. M. Castelinind, J. G. Muerten, A. T. A. M. de Waele, H. M. Gijzman, Phys. Rev. B22, 2870(1985)
- 21) E. Feenberg, "Theory of Quantum Fluids"(Academic, Newyork, 1969), Chap. 6 and 11
- 22) M. L. Ristig, S. Fantoni, K. E. Kuerten, Z. Phys. B15, 1(1983)