液体He II のなかの He^3

── 松田・松原論文へのコメント ──

碓井恒丸（基研）
長岡洋介（〃）

（11月18日受理）

1° 本誌前々号にのつた松田・松原の論文「液体He^3−He^4 の二相分離」[1)]（以下MMと略称）を読んで，またコロキウムで松田さんの話をきいて，若干の疑問をもつた。MMは松田・松原のHe II の格子模型によつて問題をあつかうのであるが，その際基本的な仮定としてHe^3 atom は液体He^4 のなかで一定体積の cavity をつくつて局在するとする。He^4 とほとんど同じ質量をもつHe^3 が局在するということがまずわかりにくいことなのであるが，さらに詳しく云うとつぎのような点に疑問を感じたのである。

1）純粋のHe^4 の液体のなかの1ケのHe^4 を不純物におきかえても，もしも不純物の質量がHe^4 と同じであれば，基底状態のエネルギーは変化せず，おきかえに要するエネルギーは0のはずである。しかしMMによるとこれが0にならない。

2）2ケのHe^3−atom が入つたときHe^3 間に働く effective な力を求めるのに，He^3 の位置は止めて考えている。これは断熱近似をしたことになつているが，He^4 よりも軽いHe^3 について断熱近似は許されないだろう。

3）He^3 は Fermion だから，互に近寄りにくいはずであるが，この統計の効果は考慮されているか？

このような疑問から出発して，問題をいろいろ考えているうちに気のついたことを，二，三ノートしておこうと思う。以下，大雑ぱな推論も多いが，

批判・討論をいただければ幸いである。

2° 　MMにならつて，まず1ケのHe^3 atom がHe^4の純粋な液体のなかにある場合を考えてみよう。$0^\circ K$で考えることにする。いま，$(N+1)$ケのHe^4の系Ⅰと，そのうち1ケがHe^3におきかわつた系Ⅱとを比べてみる。系のHamiltonian はそれぞれ

$$H_{\mathrm{I}}=\frac{1}{2m}\sum_i^{N+1} p_i{}^2+\frac{1}{2}\sum_i^{N+1}\sum_j v(x_i-x_j) \qquad (1)$$

$$H_{\mathrm{II}}=\frac{1}{2m}\sum_i^{N} p_i{}^2+\frac{1}{2m'}p_a{}^2+\frac{1}{2}\sum_i^{N}\sum_j v(x_i-x_j)+\sum_i^{N} v(x_a-x_i) \qquad (2)$$

と書ける。添字i，jはHe^4，aはHe^3を示す。m，m'はそれぞれHe^4，He^3の質量。いまⅠの基底状態の波動函数を$\Psi_{\mathrm{I}}(x_1\cdots x_N, x_{N+1})$，そのエネルギーを$E_{\mathrm{I}}$としよう。$m=m'$であればⅡの基底状態の波動函数は

$$\Psi_{\mathrm{II}}^{(0)}(x_1\cdots x_N\ x_a)=\Psi_{\mathrm{I}}(x_1\cdots x_N\ x_{N+1}) \qquad (3)$$

となるはずである。そこで第0近似として(3)を採用し，H_{II}の期待値を求めてみる。(2)は

$$H_{\mathrm{II}}=H_{\mathrm{I}}\{N+1\rightarrow a\text{のおきかえ}\}+\frac{m-m'}{2mm'}p_a{}^2$$

と書きかえられるが，第一項を(3)ではさんだものはE_{I}を与えるから，結局

$$E_{\mathrm{II}}^{(1)}=E_{\mathrm{I}}+\frac{m-m'}{m'}<\frac{p^2}{2m}> \qquad (4)$$

となる。$<p^2/2m>$はⅠでのHe^4 1ケあたりの平均の運動エネルギー。(4)が正しいE_{II}に対する上限を与えることは明かである。

$\langle p^2/2m\rangle$についてはLondon の estimation があるが，[2)] それによると29 cal/mol である。この値を用いると$(m-m')/m'=1/3$だから，われわれは

$$\triangle E=E_{\mathrm{II}}-E_{\mathrm{I}}\lesssim 9.6\ \mathrm{cal/mol}. \tag{5}$$

を得ることになる。

ここで0°Kで純粋なHe^4とHe^3の二相が平衡にあり得るかという問題を考えてみよう。そのためには，1）1ケのHe^4がHe^3の相にうつった時のエネルギーの得失，　2）1ケのHe^3がHe^4の相にうつった時のエネルギーの得失，を知らねばならない。　1）に答えるにはHe^3の液体のなかのHe^4の問題を解決しなければならない。これは，上のように簡単にはいかないようである。そこでこれはひとまず諦めることにして，　2）の問題を考えてみよう。実験によると，純粋のHe^4の液体から1ケHe^4をとり出すのに要するエネルギーε_4は14.3 cal/mol，純粋のHe^3の液体から1ケHe^3をとり出すのに要するエネルギーε_3は5 cal/mol である。[2)]
(5) で不等号を等号にした値をとることにすると，

$$\varepsilon_3-\varepsilon_4+\triangle E=0.3\ \mathrm{cal/mol}=0.15^\circ\mathrm{K} \tag{6}$$

で，1ケのHe^3がHe^4の相にうつるとエネルギーはわずかながら損をする。つまりHe^3はHe^4の相に入りこまないという結論になる。しかし，問題は大分微妙なようである。第一に，ほんとうの$\triangle E$はもう少し小さくなり得る。第二に$\langle p^2/2m\rangle$の estimation に不確定さが残つている。(6) の符号が逆転する可能性は十分あると言わなければならない。だから，ε_3, ε_4の理論的な estimation ということを別にしても，変分によつて$\triangle E$がどの程度さがるかをみること，$\langle p^2/2m\rangle$のもう少し確実な estimation など，問題は残つているわけである。変分の問題としては，例えば，He^3はHe^4

より軽いので，He^4 のなかのHe^3 は若干まわりを押し広げているはずで，(3)のかわりにそのような効果を入れた変分函数をつかつて$\triangle E$ を求めることができるのではなかろうか？

ここでHe^3 と He^4 の統計のちがいの効果と，質量差の効果ということに言及しておこう。MMの重要な結論の一つは，統計の効果も二相分離をひきおこすことにきいているということであつた。はたして，この二つの効果は，(6)の値を大きくする方にきくか，小さくする方にきくか――すなわち，He^3 を He^4 の相に入りにくくするか，入りやすくするか？まず ε_3 と ε_4 の大きな差がある。この差には二つの効果がともにきいているはずだが，二つともが $(\varepsilon_3-\varepsilon_4)$ を減少させる方向に働いていることは自明であろう。一方$\triangle E$ は純粋に質量差の効果である。結局，合計すれば，質量差の方は(6)を増加させ，統計の効果は減少させる。He^3 が Fermion だということは，むしろ二相分離をおこりにくくさせていると言うべきだろう。

3°　再びMMにならつてHe^4 の液体のなかに2ケのHe^3 が入つている場合を考えよう。MMはHe^3 は x_a と x_b に止つているとして，そのまわりのHe^4 の系のエネルギーを求め，He^3 の間に effective に引力が働くことを示した。これはまさしく断熱近似である。この近似のよし悪しはあとで論じるとして，ここでは，断熱近似をとれば，別のやり方でも引力が出ることを示そう。

いま condensate の波動函数を$\Psi(x)$ とする。x_a と x_b に不純物が局在している場合を考えると，簡単のため相互作用はすべて δ 一型として，系のエネルギーは

$$E=-\frac{1}{2m}\int\Psi(x)\nabla^2\Psi(x)dx+v\int\Psi(x)^4dx$$

$$+v'\left[\Psi(x_a)^2+\Psi(x_b)^2\right] \tag{7}$$

となる。不純物との相互作用はHe^4同志の相互作用vとは異なり，v'であるとしてある。ここで$\Psi(x)$を

$$\Psi(x)=\sqrt{n_0}+\phi(x) \tag{8}$$

とおき，変分で$\phi(x)$を決めようというのである。粒子数の決つた閉じた系で考えるよりは，不純物を含まない大きな系と接した開いた系で考える方が都合がよい。すなわち，

$$\Omega=E-\mu_0 N, \quad N=\int\Psi(x)^2 dx \tag{9}$$

をminimizeするように$\phi(x)$を決めるのである。μ_0は不純物を含まない時の化学ポテンシャルで，$\mu_0=n_0 v$である。簡単な計算で，$\phi(x)$を決める方程式は，最低次で

$$[\nabla^2-\kappa^2]\phi(x)=2m\sqrt{n_0}\ v'\left[\delta(x-x_a)+\delta(x-x_b)\right] \tag{10}$$

$$\kappa^2=4n_0 m v$$

となる。$x\to\infty$で0となるような解は

$$\phi(x)=-\frac{m\sqrt{n_0}\,v}{2\pi}\left\{\frac{e^{-\kappa|x-x_a|}}{|x-x_a|}+\frac{e^{-\kappa|x-x_b|}}{|x-x_b|}\right\} \tag{11}$$

と得られる。これを(9)に入れてeffectiveな相互作用が得られる。不純物の自己エネルギーにあたる部分が発散するが，これは相互作用をδ一型にしたせいだから気にしないことにしてeffectiveな相互作用の部分だけ書くと，

$$E_{int}(x_a, x_b)=-\frac{2mn_0 v'^2}{\pi}\frac{e^{-\kappa|x_a-x_b|}}{|x_a-x_b|} \tag{12}$$

となつてscreened Coulomb 型の引力が得られることになる。これは摂動でいうと，不純物がvirtual に1ケ phonon を交換することで生じる引力に相当していて，実際そのような計算をしても，全く同じ結果が得られる。[4)]

4° 3° でやつた計算は，実はx_a, x_b に止めた粒子が不純物である必要は全くない。純粋なHe^4 のなかで特定の二ケのHe^4 の位置を人為的に止めたとしても，$v'=v$ とするだけで結果は全く同じである。勿論，実際にはこのような力は存在しない。何故か？ どのHe^4 atom と止つてはいず，まわりのHe^4 と一緒に動きまわつているからである。

He^4 のなかのHe^3 の場合はどうだろうか？ この場合も基底状態では，He^3 はまわりのHe^4 の0点運動と一緒に動きまわつているはずである。そうであれば，(12) のような力はこの場合も働かないと考えるべきではなかろうか？

それではどう考えるべきで，力が働くとすればどんな力か？ われわれはつぎのように推論する。

He^4 のなかに少量のHe^3 がとけている場合，この系のphonon mode はHe^4 の density だけではなく，He^3 も含めたtotal density で書かれるはずである。このようにして，He^3 の自由度はその一部がcollective motion の方にもつていかれており，He^3 の individual motion はそれをさし引いた残りとして与えられることになる。その相互作用としてはつぎのようなものが期待される。

1） かりにHe^4 とHe^3 の質量が等しいとする。考えるHe^3 がともに$k\sim 0$の状態にあると，He^3 は流れのままにただようだけであつて，その存在によつて付近のHe^4 の運動はほとんど変化をうけないだろう。従つてHe^3 間の相互作用もない。しかしHe^3 の波数が0でなくなると，He^3 が動くことによつてまわりにback flow を作り，2つのHe^3 の back flow 同志がoverlap すればeffective にHe^3 の間に力を生じることになる。

この機構による相互作用は，作用しあうHe^3 の波数に依存し，波数が 0 のところでは消える。

2） 実際には$m'<m$であるから，$k\sim 0$でもHe^3 のまわりのHe^4 は少し押し広げられる。この質量差によるHe^3 のまわりのひずみ同志が overlap してもHe^3 同志の effective な相互作用が生じ得る。これは勿論$m'=m$とおくと消える。*)

最後に注意しなければならないのは，1），2）の機構による相互作用が引力に出たとしても，それだけで低温で二相分離がおこるということにはならないということである。もう一つ，He^3 が Fermion だということを考慮しなければならない。Fermion であるためにHe^3 の間には effective に斥力が働く。理論的にはHe^3 の真の individual motion に働く相互作用を求め，さらに統計の効果も考慮してはじめて答が得られるのではなかろうか？

reference

1） 松田・松原： 物研 1 (1963), 17.

2） London: "Superfluid II"

3） T. Soda: preprint

*) この機構による相互作用はある意味で断熱近似によつて求めることができよう。但し，そのときv' は質量差によるある effective な値をとらなければならない。