

^4He 液滴の表面振動と表面のぼけ

埼玉工大 田村 明

1. 研究の目的

構成粒子数が100以下の ^4He 液滴の表面固有振動数は、急峻な表面を仮定した液滴模型では説明できない¹⁻⁴。本研究では、液滴表面の”ぼけ”の効果を摂動論的に考慮し、適正な表面固有振動の分散関係を求め、さらに2次元系の ^4He 薄膜の場合に拡張し、その表面固有振動の分散関係を導出する。

2. ^4He 液滴表面振動の摂動論

表面のぼけは、質量密度がFermi-Dirac型であると仮定し、以下の表式を採用する。

$$\rho(r) = \frac{\rho_d}{1 + \exp\{[r - R(\theta, \phi)]/d\}} \quad (1)$$

ここに d は表面のぼけを示すパラメーター、 $R(\theta, \phi)$ は原点から (θ, ϕ) 方向の表面までの距離で

$$R(\theta, \phi) = R_d + R_d \sum_{lm} \alpha_{lm}^* Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2)$$

と球面調和関数で展開する。 α_{lm}^* は表面変形振動の規準座標を表わす。表面のぼけの量は

$$\rho_d(r) = \frac{\rho_d}{1 + \exp[(r - R_d)/d]} \quad (3)$$

において、 $\rho_d(r_1) = 0.9\rho_d$ および $\rho_d(r_2) = 0.1\rho_d$ を満たす r_1 と r_2 の差 $D = r_2 - r_1 = 4.4d$ で定義する。密度汎関数法による計算結果³では $D = 7\text{\AA}$ である。質量密度(1)を $d = 0$ の近傍で

$$\rho(r) = \rho_d [S(R(\theta, \phi) - r) - (\pi^2/6) d^2 \delta'(r - R(\theta, \phi)) + \dots] \quad (4)$$

と展開し、さらに $r = R_d$ のまわりで上式を展開すると

$$\begin{aligned} \rho(r) = \rho_d \{ & S(R_d - r) + (\delta R) \delta(r - R_d) - \frac{1}{2} (\delta R)^2 \delta'(r - R_d) + \dots \\ & - (\pi^2/6) d^2 [\delta'(r - R_d) - (\delta R) \delta''(r - R_d) + \frac{1}{2} (\delta R)^2 \delta'''(r - R_d) + \dots] \end{aligned} \quad (5)$$

が得られる。ここに $\delta R = R(\theta, \phi) - R_d$ 、関数 S は階段関数を表わし、一行目までは急峻な表面をもつ液滴に対応する。本研究では第4項 $\delta\rho(r) = -\rho_d(\pi^2/6) d^2 \delta'(r - R_d)$ を摂動項として、表面振動を論ずる。総原子数 N は表面振動には無関係に一定であるから

$$\begin{aligned} \int \rho(r) dr &= (4\pi/3) \rho_d R_d^3 (1 + \pi^2 \tau^2) + \rho_d R_d^3 \left[\sqrt{4\pi} [1 + (\pi^2/3) \tau^2] \alpha_{00}^* + \sum_{lm} |\alpha_{lm}^*|^2 \right] \\ &= Nm \end{aligned} \quad (6)$$

となり、 N は α_{lm} によらないので係数 α_{lm} に関して以下の関係式が成り立つ。

$$\sqrt{4\pi} [1+(\pi^2/3)\tau^2] \dot{\alpha}_{00} + \sum_{lm} |\dot{\alpha}_{lm}|^2 = 0 \quad (7)$$

質量密度の変化 $\delta\rho(r)$ を摂動として系のハミルトニアンを導出するために非摂動質量密度を $\rho_0(r) = \rho_d S(R_d - r)$ 、非摂動速度ポテンシャルを χ_0 として摂動パラメター ε を用い

$$\rho = \rho_0 + \varepsilon \delta\rho \quad (8)$$

$$\chi = \chi_0 + \varepsilon \delta\chi \quad (9)$$

と展開し、連続の式に代入する。質量密度の時間に関する偏微分の項を無視し、空間微分のみに着目すると、速度ポテンシャルの1次補正項は

$$\nabla^2 \delta\chi = -\rho_0^{-1} (\nabla \chi_0) \cdot (\nabla \delta\rho) \quad (10)$$

で与えられる。非摂動速度ポテンシャルは

$$\chi_0(r, t) = \sum_{lm} \dot{c}_{lm}(t) r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (11)$$

となるので、速度ポテンシャルの摂動項 $\delta\chi$ はGreen関数を用いて次のように導かれる。

$$\delta\chi_{lm}(r, t) = (\pi^2/6) d^2 l [r^{l-1} \delta(r - R_d) - 2l R_0^{2l-1} r^{-(l+1)} S(r - R_d)] \dot{c}_{lm}(t) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (12)$$

3. 表面振動のハミルトニアン

表面振動の運動エネルギーは1次補正項まで考慮すると

$$T = \frac{1}{2} \int dr \rho(r) |\nabla \chi(r)|^2 = T_0 + \varepsilon (T_{11} + T_{12}) + O(\varepsilon^2) \quad (13)$$

となり T_0 、 T_{11} および T_{12} はそれぞれ次のように定義される。

$$\begin{aligned} T_0 &= \frac{1}{2} \int dr \rho_0(r) |\nabla \chi_0(r)|^2 = \frac{1}{2} \rho_d \sum_{lm} l R_d^{2l+1} |c_{lm}|^2 = \frac{1}{2} \rho_d R_d^5 \sum_{lm} \frac{1}{l} |\dot{\alpha}_{lm}|^2 \\ T_{11} &= \frac{1}{2} \int dr \rho_0(r) [\nabla \chi_0^*(r) \cdot \nabla \delta\chi(r) + \nabla \chi_0(r) \cdot \nabla \delta\chi^*(r)] = \rho_d R_d^5 (\pi^2/6) \tau^2 \sum_{lm} (2l+1) |\dot{\alpha}_{lm}|^2 \\ T_{12} &= \frac{1}{2} \int dr \delta\rho(r) |\nabla \chi_0(r)|^2 = -\rho_d R_d^5 (\pi^2/6) \tau^2 \sum_{lm} l |\dot{\alpha}_{lm}|^2 \end{aligned} \quad (14)$$

ここに、表面における速度の法線方向の連続条件 $\partial\chi/\partial r = \dot{R}(\theta, \varphi)$ を考慮し、係数 c_{lm} と $\dot{\alpha}_{lm}$ の関係式 $c_{lm} = (R_d^{2l-1}/l) \dot{\alpha}_{lm}$ を用いた。したがって、全運動エネルギーは次のようになる。

$$T = T_0 + \varepsilon (T_{11} + T_{12}) = \frac{1}{2} \rho_d R_d^5 \sum_{lm} \frac{1}{l} [1 + \varepsilon (\pi^2/3) \tau^2 l(l+1)] |\dot{\alpha}_{lm}|^2 \quad (15)$$

ここに τ は表面のぼけを表わす無次元パラメター $\tau = d/R_d$ である。

ポテンシャルエネルギーは半径 R_d の球からの表面積の変化分に比例するものとして

$$V = \frac{1}{2} \sigma R_d^2 \sum_{lm} [(l-1)(l+2) + (4\pi^2/3) \tau^2] |\dot{\alpha}_{lm}|^2 \quad (16)$$

で与えられる。 σ は表面張力を表わし、上式を導くにあたって式(7)を用いた。

以上より、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{lm} \left\{ l/(\rho_d R_d^5) [1 + (\pi^2/3)\tau^2 l(l+1)]^{-1} |\pi_{lm}|^2 + \sigma R_d^2 [(l-1)(l+2) + (4\pi^2/3)\tau^2] |\alpha_{lm}|^2 \right\} \quad (17)$$

で与えられ、正準運動量は

$$\pi_{lm} = (\rho_d R_d^5 / l) [1 + (\pi^2/3)l(l+1)\tau^2] \dot{\alpha}_{lm} \quad (18)$$

で定義される。したがって表面固有振動数は

$$\omega_{ld}^2 = [\sigma / (\rho_d R_d^3)] l [(l-1)(l+2) + (4\pi^2/3)\tau^2] / [1 + (\pi^2/3)l(l+1)\tau^2] \quad (19)$$

となり、 $d=0$ とすると、急峻な表面の場合のよく知られた固有振動数^{5,6}

$$\omega_{l0}^2 = [\sigma / (\rho_0 R_0^3)] l(l-1)(l+2) \quad (20)$$

が得られる。

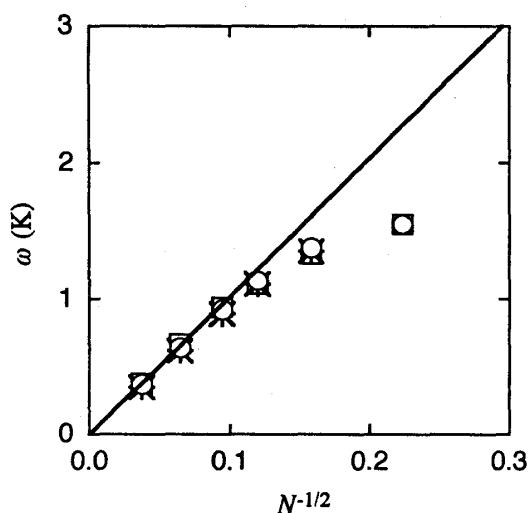


図1. $l=2$ の表面モードの固有振動数

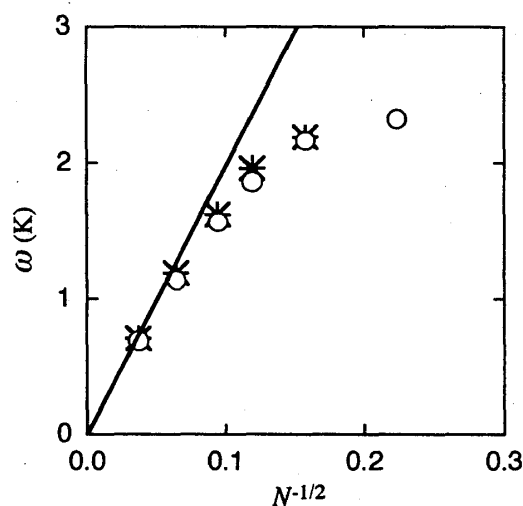


図2. $l=3$ の表面モードの固有振動数

以上の結果を $N=40, 70, 112, 240$ および 728 に対して図1と2に示す。図1は $l=2$ のモードの固有振動数を $N^{-1/2}$ でプロットしたもので直線は式(20)を表わす。白丸は本研究結果で、いずれも $D=6.0\text{\AA}$ で求めたものである。これらの結果は、Barranco and Hernandez⁷（アスタリスク）およびCasas等³（白四角）の密度汎関数法による結果と良く一致する。図2は $l=3$ のモードの固有振動数を示し、白丸は本研究結果で、いずれも $D=6.0\text{\AA}$ で求めたものである。結果はBarranco and Hernandez⁷および、Casas等³の結果とよく一致している。この D の値は他の方法による結果とほぼ等しい。

表面固有振動数の表面のぼけによる低下は、式(18)より明らかなように液滴の振動にともなう有効質量が増加するためである。また角運動量の増加ともなって振動数が低下

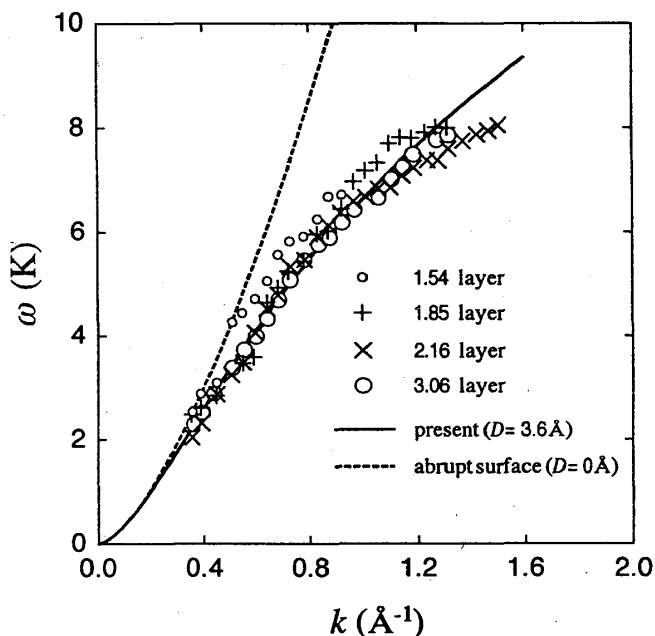
するのは角運動量が大きい振動モードはより表面近傍での振幅が大きく、ぼけをより感じやすくなっているためである。

4. ^4He 薄膜系への拡張

液滴の半径が大きい場合もしくは角運動量が大きい場合、系は2次元とみなすことができる。このとき表面平行方向の波数 k と角運動量 l の間に $l = kR_d$ が成り立ち、液滴表面の固有振動数(19)は、 ^4He 液体の表面振動の分散関係式

$$\omega_k = (\sigma/\rho_B)^{1/2} \frac{k^{3/2}}{[1 + (\pi^2/3)(D/4.4)^2 k^2]^{1/2}} \quad (22)$$

となる。図3に ^4He 多層膜に対する中性子非弾性散乱の実験結果⁸と本研究結果との比較を示す。 $D = 3.6\text{\AA}$ が良い一致を示すが、この値はバルクの ^4He 液体のHe原子が最密構造をとったときの面間隔に相当する。またClements等⁹の計算結果における多層膜最上層の D の値とほぼ同じである。



5. 結論

^4He 液滴の表面固有振動は、液滴模型の範囲内で、表面のぼけを考慮することにより、密度汎関数法による計算結果を再現できる。また得られた固有振動数の表式は2次元系に拡張でき、 ^4He 薄膜における分散関係の実験結果を良く説明する。

参考文献

- 1 M.Casa and S.Stringari, J. Low. Temp. Phys. **79**, 135 (1990).
- 2 S.Stringari, "Proc. of the International School of Physics", E.Fermi, Course CVII, Varenna, North Holland, p.199, 1988.
- 3 M.Casas, F.Dalfavo, A.Lastri, LI.Serra, and S.Stringari, Z. Phys. D**35**, 67 (1995).
- 4 A.Tamura, Phys. Rev. **B53**, 14475 (1995).
- 5 A.Bohr and B.R.Mottelson, *Nuclear Structure* (Benjamin, MA, 1975), vol.II, p.658.
- 6 A.Tamura and T.Ichinokawa, Surf. Science **136**, 437 (1984).
- 7 M.Barranco and E.S.Hernandez, Phys. Rev. **B49**, 12078(1992).
- 8 H.J.Lauter, H.Godfin, V.L.P.Frank, and P.Leiderer, Phys. Rev. Letters **68**, 2484(1992).
- 9 B.E.Clements, E.Krotscheck, and C.J.Tymezak, Phys. Rev. **B53**, 12253 (1996).