

二维费密液体理论 (II)

^3He 朗道参数的计算

崔世民 蔡建华¹⁾

上海交通大学凝聚态物理研究所, 上海, 200030

1989年4月17日收到

本文采用相关基波函数 (CBF) 方法研究了二维 ^3He 液体的性质. 基于集团展开利用配分函数的变分原理, 将这一方法推广到有限温度情形. 从 Lennard-Jones 势出发, 在二级微扰近似下数值计算了二维 ^3He 液体的基态能、准粒子谱和朗道参数.

PACC: 6750

一、引言

近年来 ^3He 薄膜的研究引起了实验工作者的兴趣. 在超流 ^4He 表面上^[1]可以形成在垂直表面方向处在束缚态的 ^3He 单原子层, 也可以在碳膜上形成吸附的 ^3He 单原子层^[2], 它们都具有二维简并费密液体的性质. 但至今理论的研究仍限于套用三维朗道费密液体理论来唯象计算其性质^[3]. 已经证明^[4]朗道费密液体理论是适用于二维情形的, 本文拟从第一性原理出发来研究二维 ^3He 液体的特性.

液态 ^3He 是一个稠密并具有强相互作用的费密系统, 用微观理论来研究其特性极其困难. 最初 Bruecker 等人从独立粒子基的瑞利微扰出发, 由发散的 U 矩阵组合出 G 矩阵, 曾被认为可用来解释稠密系统特性, 但用于 ^3He 并不成功. 与之相比, 迄今为止最为有效的是 CBF 方法. 最近 Yoshikoshi 等人^[6]提出的配分函数变分原理, 使得我们可用 CBF 方法来计算朗道参数.

二、理论公式

考虑具有相互作用的 N 个全同粒子组成的二维体系, 用模型波函数描述其基态

$$|\phi_0\rangle = F|\phi_0\rangle. \quad (1)$$

式中 $|\phi_0\rangle$ 为 Slater 行列式, 描述无相互作用费密系. F 为关联因子 (或算符), 描述粒子的短程强相互作用, 通常采用下述形式:

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心.

$$F = \prod_{i < j} f(r_{ij}). \quad (2)$$

式中 $f(r_{ij})$ 要求满足: 在 $r_{ij} \rightarrow 0$ 时, $f(r_{ij}) \rightarrow 0$, 在 $f(r_{ij}) \rightarrow \infty$ 时, $f(r_{ij}) \rightarrow 1$.

同样, 选择一组非正交基波函数 $|\phi_m\rangle$ 来描述系统的激发态

$$|\phi_m\rangle = F |\phi_m\rangle. \quad (3)$$

式中 $|\phi_m\rangle$ 为一组完备正交的归一化波函数. $|\phi_m\rangle$ 归一化后作线性组合产生一组正交基, 得到

$$\det \|E_{mn} - EN_{mn}\| = 0, \quad (4)$$

式中矩阵元为

$$E_{mn} = \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle, \quad (5)$$

$$N_{mn} = \langle \phi_m | \phi_n \rangle. \quad (6)$$

方程(4)可利用瑞利-薛定谔微扰方法求解, 其中的矩阵元 E_{mn} 和 N_{mn} 则可用集团展开法求得. 关于进行数值计算所用的矩阵元表式可参见文献[5].

如能量为准粒子分布函数的泛函, 则可直接求得朗道参数. 配分函数的变分原理^[6]提供了这种可能性.

设 $|m\rangle$ 为纯态 $|\phi_m\rangle$, $\psi = \sum_m C_m |\phi_m\rangle$ 为组合态, $|m\rangle$ 为一完备集, 纯态能 $\langle E \rangle$ 为

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_m E_{mm} e^{-\beta E_{mm}}}{\sum_m e^{-\beta E_{mm}}}. \quad (7)$$

$m = (m_1, m_2, \dots, m_N)$ 为 N 个(准)粒子的动量标号, $\beta = 1/(k_B T)$. 首先考虑 E_{mm} 中仅与 m_i 有关项 $\sum_i \varepsilon_{m_i}$, 有

$$\frac{\sum_m \sum_i \varepsilon_{m_i} e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}}{\sum_m e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}} = \sum_i \varepsilon_i n_i.$$

式中分布函数 n_i 为

$$n_i = N \frac{\sum'_m e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}}{\sum_m e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}}. \quad (8)$$

式中求和号上的一撇指 m 中含 i 但不对 i 求和. 同理 E_{mm} 中与 m_i, m_j 两指标有关项可类似变换, 如 $\sum_{m_i m_j} X_{m_i m_j}$ 成为 $\sum_{ij} X_{ij} n_i n_j$. 推广可得, 纯态能 $\langle E \rangle$ 可表达为对 E_{mm} 表达式中求和号下的每一项增加相应的因子 n (如对 i 求和增加因子 n_i).

$|m\rangle$ 的非正交性使得在组合正交基时产生非纯态项贡献. 采用极值条件构造的正交基态满足与纯态一一对应的关系, 由配分函数 Q 可得 E

$$Q = \sum_m e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}, \quad (9)$$

$$E = \frac{\sum_m \langle m | H | m \rangle e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}}{\sum_m e^{-\beta \langle m | H | m \rangle}}. \quad (10)$$

由于组合态 $|m\rangle$ 和纯态 $|m\rangle$ 一一对应, 用纯态代替组合态计算物理量仅差一可忽略小量, 则

$$E = \sum_m \langle m|H|m\rangle e^{-\beta\langle m|H|m\rangle} / \sum_m e^{-\beta\langle m|H|m\rangle}. \quad (11)$$

$\langle m|H|m\rangle$ 是以 $\{m|H|m\}$ 为零级进行展开的

$$\langle m|H|m\rangle = E_{mm} - \sum_{n \neq m} \frac{U_{mn}U_{nm}}{U_{nn}} + \sum_{r, n, m} \frac{U_{nm}U_{nr}U_{rn}}{U_{nn}U_{rr}} + \dots \quad (12)$$

式中 U_{mn}, U_{mm} 为

$$U_{mn} = \frac{1}{2} J_{mn}(E_{mm} + E_{nn} - 2E_{00}) + W_{mn}, \quad (13)$$

$$U_{mm} = E_{mm} - E_{00}, \quad (14)$$

$$N_{mn} = \delta_{mn} + J_{mn}, \quad (15)$$

$$E_{mn} = \frac{1}{2} N_{mn}(E_{mm} + E_{nn}) + W_{mn}. \quad (16)$$

将(12)式代入(11)式后, 第一项就是纯态能贡献. 按上述方法, 设 $\{m, n\}$ 有 d 个量子数不同, $m = (m_1, m_2, \dots, m_d, m_{d+1}, \dots, m_N)$, $n = (n_1, n_2, \dots, n_d, m_{d+1}, \dots, m_N)$, 则关于第二项有

$$- \sum_m \sum_n \frac{U_{nm}U_{mn}}{U_{mm}} n_{m_1} \dots n_{m_d} (1 - n_{n_1}) \dots (1 - n_{n_d}) n_{d+1} \dots n_{m_N}.$$

可依此类推.

综合以上考虑, E 可以写成

$$E = \sum_{k_1 \dots k_n} \mathcal{G}_{k_1 \dots k_n}(N) n_{k_1} \dots n_{k_n}. \quad (17)$$

准粒子能量为

$$\epsilon_k = \epsilon_k^{(1)} + \epsilon_k^{(0)}. \quad (18)$$

式中 $\epsilon_k^{(1)}$ 为 E 中求和项对 k 的变分, $\epsilon_k^{(0)}$ 为系数 $\mathcal{G}(N)$ 对 N 的微商, 与 k 无关.

$$\epsilon_k^{(1)} = \sum_{k_1 \dots k_n} (\mathcal{G}_{k k_2 \dots k_n} + \mathcal{G}_{k_2 k \dots k_n} + \dots + \mathcal{G}_{k_2 \dots k}) n_{k_2} \dots n_{k_n}, \quad (19)$$

$$\epsilon_k^{(0)} = \sum_{k_1 \dots k_n} \frac{\partial}{\partial N} \mathcal{G}_{k_1 \dots k_n}(N) n_{k_1} \dots n_{k_n}. \quad (20)$$

朗道参数为

$$f_{k, k'} = f_{k, k'}^{(1)} + f_{k, k'}^{(0)}, \quad (21)$$

$$f_{k, k'}^{(0)} = f_{k, k'}^{(0,0)} + f_{k, k'}^{(1,0)} + f_{k, k'}^{(0,1)}, \quad (22)$$

$$f_{k, k'}^{(1)} = \sum_{k_2 \dots k_n} (\mathcal{G}_{k k' k_2 \dots k_n} + \mathcal{G}_{k_2 k k' \dots k_n} + \dots) n_{k_2} n_{k_3} \dots n_{k_n}, \quad (23)$$

$$f_{k, k'}^{(0,0)} = \sum_{k_2 \dots k_n} \frac{\partial}{\partial N} (\mathcal{G}_{k k_2 \dots k_n} + \dots + \mathcal{G}_{k_2 \dots k_n k}) n_{k_2} \dots n_{k_n}, \quad (24)$$

$$f_{k, k'}^{(0,1)} = \sum_{k_2 \dots k_n} \frac{\partial^2}{\partial N^2} \mathcal{G}_{k_2 \dots k_n} n_{k_2} \dots n_{k_n}, \quad (25)$$

$$f_{k, k'}^{(0,1)} = f_{k', k}^{(1,0)} \quad (26)$$

$f_{k,k'}^{0,0}$ 与 k, k' 皆无关, $f_{k,k'}^{1,0}$ 和 $f_{k,k'}^{0,1}$ 不与 k, k' 同时有关, 仅对 f_0 有贡献。因而求 f_l 和 $f_l (l \geq 1)$ 只需要 $f_{k,k'}^{1,0}, f_0$ 则可通过等式 $N \frac{d\mu}{dN} = \frac{k_F^2}{2m} \cdot \frac{1 + 2F_0^l}{1 + F_0^l/2}$ 得到, 其中 $\frac{d\mu}{dN}$ 和 F_0^l 由直接计算获得。

三、数值计算

二维 ^3He 系统的哈密顿量可描述为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v(r_{ij}) \quad v(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (27)$$

选择参数如下: $\varepsilon = 10.22\text{K}$, $\sigma = 2.556 \text{ \AA}$, $m = 5.01 \times 10^{-24}\text{g}$

1. CBF 波函数

通过对纯态能的泛函变分得到一级近似下欧拉方程

$$f(r)v(r)g(r) - \frac{\hbar^2}{m} \nabla(\nabla f(r)g(r)) = 0$$

式中

$$g(r) = \frac{1}{2} \sum_{ij} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \sqrt{2!} \phi_{m_i m_i}^*(1, 2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{12}) \phi_{m_i}(1) \phi_{m_i}(2) n_i n_j.$$

取 $f(r)$ 为

$$f(r) = \exp[-u(r)].$$

若仅考虑短程关联, 有 $u \sim (\sigma/r)^5$. 若仅考虑长程关联, 有 $u \sim (\sigma/r)^4$, 因此我们假定

$$f(r) = \exp[-b(\sigma/r)^5] \cdot \{1 + \lambda[1 - \exp(-b(\sigma/r)^4)]\}. \quad (28)$$

利用平均泡利条件^[8]来确定参数 b 和 λ , 同时保证微扰展开可行。

$$\int d\mathbf{r} [1 - f(r)] g(r) = 0. \quad (29)$$

进一步通过变分获得参数 b

$$\partial E / \partial b = 0. \quad (30)$$

数值计算表明 b, λ 随密度略有变化, 同时表明微扰展式是按小参量 ω 展开的。表 1 给出了 b, λ, ω 随密度的变化。图 1 给出了关联因子形状。

表 1 关联因子的参数随密度的变化

$k_F \sigma$	0.10	0.60	1.00	1.35	1.43	1.52	1.56	1.64	1.73
b	1.44	1.37	1.33	1.31	1.31	1.31	1.30	1.30	1.30
λ	1.83	1.57	1.49	1.49	1.50	1.51	1.51	1.52	1.53
ω	0.001	0.043	0.127	0.242	0.278	0.318	0.339	0.384	0.432

2. 基态能

从(12)和(10)式得到基态能

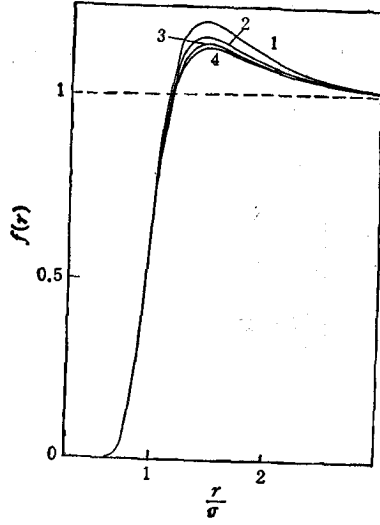


图 1 关联因子的形状

曲线 1 为 $k_F\sigma = 1.73$; 曲线 2 为 $k_F\sigma = 1.64$;
曲线 3 为 $k_F\sigma = 1.56$; 曲线 4 为 $k_F\sigma \leq 0.60$

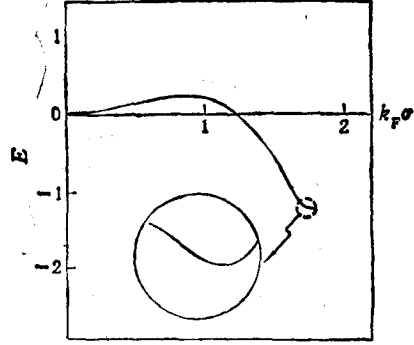


图 2 基态能随密度的变化

$$E = E_{00} + \delta E_1 + \delta E_2 + \delta E_3. \quad (31)$$

式中 E_{00} 为基态纯态能, $\delta E_1, \delta E_2$ 和 δE_3 为

$$\delta E_1 = -\frac{1}{4} \sum_{ijkl} e_{ij,kl}^{(2)} n_i n_j (1 - n_k) (1 - n_l), \quad (32a)$$

$$\delta E_2 = \frac{1}{8} \sum_{ijklmn} e_{ij,kl,mn}^{(3)} n_i n_j (1 - n_k) (1 - n_l) (1 - n_m) (1 - n_n), \quad (32b)$$

$$\delta E_3 = -\frac{1}{36} \sum_{ijklmn} e_{ij,kl,mn}^{(2)} n_i n_j n_k (1 - n_l) (1 - n_m) (1 - n_n), \quad (32c)$$

$$e_{ij,kl}^{(2)} = \left[\frac{1}{2} J_{ij(kl)} (u_k + u_l - u_i - u_j) + W_{ij(kl)} \right]^2 \cdot (u_k + u_l - u_i - u_j)^{-1}, \quad (33a)$$

$$e_{ij,kl,mn}^{(3)} = \left[\frac{1}{2} J_{ij(kl)} (u_k + u_l - u_i - u_j) + W_{ij(kl)} \right] \cdot \left[\frac{1}{2} J_{kl(mn)} (u_k + u_l + u_m + u_n - 2u_i - 2u_j) + W_{kl(mn)} \right] \cdot \left[\frac{1}{2} J_{mn(ij)} (u_m + u_n - u_i - u_j) + W_{mn(ij)} \right] \cdot (u_k + u_l - u_i - u_j)^{-1} \cdot (u_m + u_n - u_i - u_j)^{-1}, \quad (33b)$$

$$e_{ij,kl,mn}^{(2)} = \left[\frac{1}{2} J_{ijk(lmn)} (u_l + u_m + u_n - u_i - u_j - u_k) + W_{ijk(lmn)} \right]^2 \cdot (u_l + u_m + u_n - u_i - u_j - u_k)^{-1}. \quad (33c)$$

式中 J, W 可由(15)和(16)式得到, u_i 为

$$u_i = \frac{\delta E_{00}}{\delta n_i}. \quad (34)$$

表 2 和图 2 给出了能量随密度的变化。二维 ^3He 的平衡密度约为 $k_F\sigma \sim 1.56$ 。

表 2 基态能随密度的变化

$k_F\sigma$	0.10	0.60	1.00	1.35	1.43	1.52	1.56	1.64	1.73
E/ε_F	0.50	0.35	0.31	0.06	-0.02	-0.12	-0.46	-0.32	-0.22

3. 准粒子能谱

利用(18)式得到

$$e(i) = e_i^{(1)} + C. \quad (35)$$

常数 C 使得 $e(k_F) = \mu$ 。

$$e_i^{(1)} = u_i + \delta e_1 + \delta e_2 + \delta e_3, \quad (36)$$

$$\delta e_1 = \frac{1}{2} \sum_{jkl} [e_{kl,ij}^{(2)} n_k n_l (1 - n_j) - e_{ij,kl}^{(2)} n_j (1 - n_k)(1 - n_l)], \quad (37a)$$

$$\delta e_2 = \frac{1}{4} \sum_{ijklmn} [e_{ij,kl,lmn}^{(3)} n_j (1 - n_k)(1 - n_l) - 2e_{kl,ij,lmn}^{(3)} n_k n_l (1 - n_j)] \cdot (1 - n_m)(1 - n_n), \quad (37b)$$

$$\delta e_3 = \frac{1}{12} \sum_{ijklmn} [e_{lmn,ijk}^{(2)} n_l n_m n_n (1 - n_j)(1 - n_k) - e_{ijk,lmn}^{(2)} n_j n_k (1 - n_l)(1 - n_m)(1 - n_n)]. \quad (37c)$$

图 3 给出了准粒子能谱。

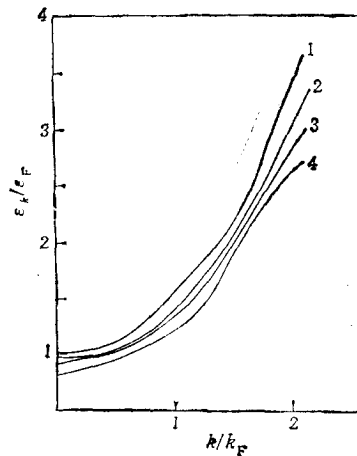


图 3 准粒子能与密度关系

曲线 1 为 $k_F\sigma = 1.73$; 曲线 2 为 $k_F\sigma = 1.56$; 曲线 3 为 $k_F\sigma = 1.43$; 曲线 4 为 $k_F\sigma = 0.10$

4. 朗道参数

从(21)式得到朗道参数

$$f_{ij}^{(1)} = \frac{\delta u_i}{\delta n_j} + \delta f_1 + \delta f_2 + \delta f_3, \quad (38)$$

$$\delta f_1 = -\frac{1}{2} \sum_{kl} [e_{ij,kl}^{(2)}(1-n_k)(1-n_l) + e_{kl,ij}^{(2)}n_k n_l - 2(e_{ik,il}^{(2)} + e_{jk,il}^{(2)})n_k(1-n_l)], \quad (39a)$$

$$\delta f_2 = \sum_{klmn} \left[\frac{1}{4} e_{ij,klmn}^{(3)}(1-n_k)(1-n_l)(1-n_m)(1-n_n) + \frac{1}{2} e_{kl,ijmn}^{(3)}n_k n_l(1-n_m)(1-n_n) - (e_{ik,ilmn}^{(3)} + e_{jk,ilmn}^{(3)})n_k(1-n_l)(1-n_m)(1-n_n) + \frac{1}{2} (e_{kl,imjn}^{(3)} + e_{kl,jimn}^{(3)})n_k n_l(1-n_m)(1-n_n) \right], \quad (39b)$$

$$\delta f_3 = -\frac{1}{b} \sum_{klmn} [e_{ij,klmn}^{(2)}n_k(1-n_l)(1-n_m)(1-n_n) + e_{lmn,ijk}^{(2)}n_l n_m n_n(1-n_k) - 2(e_{ikl,imn}^{(2)} + e_{jkl,imn}^{(2)})n_k n_l(1-n_m)(1-n_n)]. \quad (39c)$$

表 3 和图 4、图 5 给出 $f_{ij}(i=j=k_F)$ 的值。

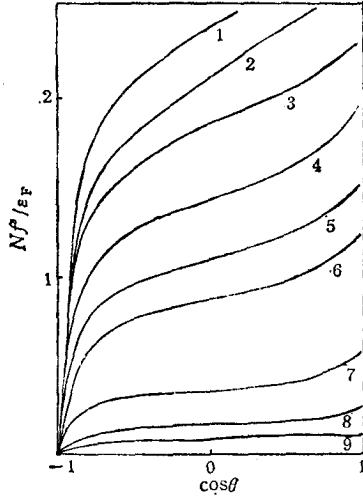


图 4 朗道参数 f^s 与密度关系
曲线 1 至 9 密度参数同表 3, 依次变小;
 θ 为两准粒子动量之间的夹角

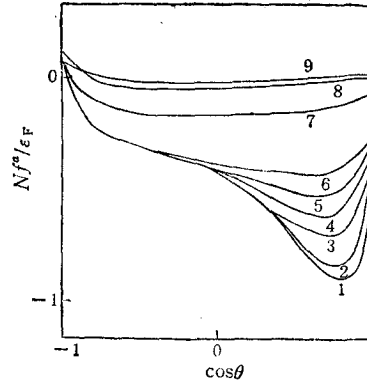


图 5 朗道参数 f^a 与密度关系
曲线说明同图 4

有了朗道参数,就可以研究其各种性质,并与实验进行比较。我们得到二维液体 ^3He 的主要特性参数为: 平衡态密度 $\rho = 0.059 \text{ \AA}^{-2}$, 基态能 $E/N\epsilon_{F0} = -0.46$, 有效质量 $m^*/m = 1.47$, 比热 $C_v/C_{v0} = 1.47$, 磁化率 $\chi/\chi_0 = 3.19$, 压缩率 $\kappa_T/\kappa_{T0} = 6.79$, 这里 $m, \epsilon_{F0}, C_{v0}, \chi_0$ 和 κ_{T0} 均为无相互作用情形下相应的物理量。

表 3 朗道参数

$k_F\sigma$	0.10	0.60	1.00	1.35	1.43	1.52	1.56	1.64	1.73
F_0^s	0.04	0.41	0.81	1.28	1.55	1.79	1.81	1.64	1.22
F_0^a	-0.13	-0.15	-0.38	-0.48	-0.43	-0.34	-0.27	-0.15	-0.14
F_1^s	0.25	0.97	1.54	1.28	1.15	1.00	0.94	0.81	0.67
F_1^a	-0.09	-0.20	-0.31	-0.05	+0.00	0.02	+0.00	-0.02	-0.09
F_2^s	-0.02	0.08	0.25	0.19	0.20	0.20	0.21	0.23	0.25
F_2^a	0.03	0.17	0.20	0.21	0.29	0.40	0.46	0.57	0.67
F_3^s	-0.00	0.17	0.33	0.26	0.12	-0.06	-0.15	-0.37	-0.58
F_3^a	+0.00	-0.02	+0.00	-0.02	-0.04	-0.06	-0.08	-0.11	-0.16
F_4^s	0.10	0.12	0.60	0.61	0.42	0.24	0.12	-0.06	-0.23
F_4^a	-0.04	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12	-0.16	-0.18	-0.24	-0.31

- [1] J.R. Eckardt, D. O. Edwards, P.P. Fatouros, F.M. Gasparini and S.Y. Shen, *Phys. Rev. Lett.* **32**(1974), 706; B.K. Bhattacharyya, M.J. Dipirro and F. M. Gasparini, *Phys. Rev.*, **B30** (1984), 5029.
- [2] D.P.Grimmer and K. Luszozynski, *J. Low Temp. Phys.*, **26**(1977),19; *ibid.*, **30** (1978), 153.
- [3] D. P. Grimmer, *Physica*, **B106** (1981), 9; K. Miyaka and W.J. Mullin, *Phys. Rev. Lett.*, **50** (1983), 197.
- [4] 崔世民、蔡建华, 物理学报, 本刊本期.
- [5] J.W. Clark and P. Westhaus, *Phys. Rev.*, **141** (1966), 833.
- [6] T. Yoshikoshi, H. Yamaoka and M. Yamada, *Prog. Theor. Phys.*, **74** (1985), 971.
- [7] F. Iwamoto and M. Yamada, *Prog. Theor. Phys.*, **17**(1957), 543.
- [8] J.W. Clark and M.L. Ristig, *Phys. Rev.*, **C5**(1972), 1553.

THEORY OF TWO-DIMENSIONAL FERMI LIQUIDS (II) —LANDAU PARAMETERS OF 2-D LIQUID ^3He

CUI SHI-MIN CAI JIAN-HUA

Institute of Condensed Matter Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai, 200030

(Received 17 April 1989)

ABSTRACT

2-D liquid ^3He is studied using the method of correlated basis functions (CBF). The cluster expansion technique is extended to treat finite temperature systems based on variational principle for the partition function. Adopting a Lennard-Jones potential, the ground state energy, quasi-particle energies and the Landau parameters are evaluated to the second order.

PACC: 6750