Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 1, с. 38 – 42

Энергия основного состояния квантовых жидкостей

А. М. Дюгаев[+*], *П. Д. Григорьев*[+], *Е. В. Лебедева*[×1)]

[+]*Институт теоретической физики им. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

[*]*Max-Plank-Institut for the Physics of Complex Systems, D-01187 Dresden, Germany*

[×]*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

Поступила в редакцию 10 апреля 2013 г.

После переработки 4 июня 2013 г.

На основе закона соответственных состояний для квантовых жидкостей и опытных данных по зависимости энергий $E_4^0(n)$, $E_3^0(n)$ основного состояния от плотности n изотопов He^4, He^3 определены кинетические ($K_4^0(n)$ и $K_3^0(n)$) и потенциальные ($V_4^0(n)$ и $V_3^0(n)$) энергии атомов He^4 и He^3. В приближении бесструктурной квантовой жидкости потенциальные энергии равны, $V_4^0(n) = V_3^0(n)$, а кинетические обратно пропорциональны массе атома: $K_4^0(n) = \frac{3}{4}K_3^0(n)$. Потенциальная энергия, определенная выражением $V^0 = 4E_4^0 - 3E_3^0$, с большой точностью линейно зависит от плотности n, что связано со слабо представленным ближним порядком в жидком гелии. Кинетическая энергия жидкого He^4 определяется соотношением $K_4^0 = 3(E_3^0 - E_4^0)$, которое согласуется с опытными данными по рассеянию нейтронов в жидком He^4. Величины $K_4^0(n)$ и $K_3^0(n)$ определяют масштаб всех термодинамических характеристик жидкости в области температур, где можно пренебречь эффектами статистики частиц.

DOI: 10.7868/S0370274X13130080

1. В экспериментах по рассеянию быстрых нейтронов в жидком гелии измеряется структурный фактор $S(k,\omega)$, интегрально связанный с функцией импульсного распределения частиц n_p [1]:

$$S(k,\omega) = \frac{1}{n}\int \frac{n_p}{(2\pi)^3}\delta\left(\omega - \frac{k^2}{2M} + \frac{\mathbf{kp}}{M}\right)d^3\mathbf{p}, \quad (1)$$

где n – плотность жидкости, M – масса атома. Определив n_p из (1), можно найти среднюю кинетическую энергию частиц K:

$$K = \frac{\hbar^2}{2M}\bar{p^2}; \quad \bar{p^2} = \frac{1}{n}\int \frac{n_p p^2}{(2\pi)^3}d^3\mathbf{p}; \quad n = \int \frac{n_p}{(2\pi)^3}d^3\mathbf{p}. \quad (2)$$

Для классических систем на примере жидкого Ne при температуре $T \cong 30\,\mathrm{K}$ установлено, что $K = \frac{3}{2}T$ с точностью 10% [2]. Это указывает на малость квантовых эффектов. Для Ne параметр де Бура мал: $\Lambda^2 = 0.36$. Величина Λ^2 определена известной связью с M, масштабом r_0 и глубиной ε_0 потенциала атом-атомного взаимодействия $v(r)$ [3]:

$$\Lambda^2 = \frac{h^2}{Mr_0^2\varepsilon_0}. \quad (3)$$

Сходимость интеграла (2), определяющего средний квадрат импульса частиц $\bar{p^2}$, в классическом пределе обеспечивается гауссовой зависимостью n_p от p:

$$n_p \sim \exp\left(-\frac{\hbar^2 p^2}{2MT}\right). \quad (4)$$

Для жидкого гелия и водорода (и только для них) параметр де Бура не мал: $\Lambda^2 = 9.5$ (He^3), $\Lambda^2 = 7.2$ (He^4), $\Lambda^2 = 3$ (H_2) и $\Lambda^2 = 1.5$ (D_2). Так как гелий остается жидким при $T = 0$, встает вопрос об определении K из (2) при низких T, когда (4) не имеет места. При $T = 0$ в газовом приближении n_p определено как для бозе-систем [4], так и для ферми-систем [5].

Для больших p согласно теории $n_p \sim 1/p^4$ и интеграл, определяющий $\bar{p^2}$ (2), формально расходится. Для жидкого гелия определение $K(n, T \to 0)$ из (1), (2) и опытных данных для $S(k,\omega)$ относится к числу трудных, физически плохо поставленных задач. В самом деле, параметр $\bar{p^2}$ (2) определяется областью больших p, где функция n_p мала. Область же малых p, где проявляется статистика частиц и происходит сильное изменение n_p при понижении T, не дает существенного вклада в величину $K(n, T = 0) \equiv K^0(n)$.

Согласно последним опытным данным [6, 7] для жидкого He^4 конденсатная фракция атомов n_0 мала и почти исчезает с ростом давления p: $n_0 = 0.073$ при $p = 0$ и $n_0 = 0.032$ при $p = 24$ бар. В случае жидкого

1) e-mail: lebedeva@issp.ac.ru

He^3 статистика частиц заметна только при $T < 0.3$ K, где теоретические представления [8–11] и эксперимент [12–14] указывают на возможность формирования фермиевского конденсата атомов He^3. Эффекты бозевской и фермиевской конденсации дают малый вклад в кинетическую энергию $K_4^0(n)$, $K_3^0(n)$ жидких изотопов гелия. Поэтому представляет интерес найти эти величины на основе теории квантовых невырожденных жидкостей, предложенной в [15–17], без использования опытных данных по рассеянию быстрых нейтронов.

2. Мы исходим из связи полной энергии на один атом E с его кинетической (K; см. (2)) и потенциальной (V) энергией:

$$E(n,T) = K(n,T) + V(n,T),$$
$$V(n,T) = \frac{n}{2}\int v(r) g(r,n,T) d^3\mathbf{r}. \tag{5}$$

Парные корреляционные функции g_3 для He^3 и g_4 для He^4 хорошо определены в экспериментах по рассеянию рентгеновских лучей [18] при низких T. Исследование, проведенное в [15], показало, что функции g_3 и g_4 настолько близки, что очень хорошо работает приближение

$$V_3(n,0) = V_4(n,0) \equiv V^0(n). \tag{6}$$

Слабая зависимость функций g_3 и g_4 от массы атома и статистики частиц подтверждается также результатами, полученными численными методами [19, 20]. Согласно теории квантовых невырожденных жидкостей [15–17] равенство (6) есть следствие большой величины параметра де Бура (3) для жидкого гелия. В пределе $\Lambda^2 \to \infty$ (6) становится точным, а корреляционная функция g перестает зависеть от плотности n. При этом $V_0(n) \sim n$. В этом же пределе, $\Lambda^2 \gg 1$, с точностью до малых эффектов статистики частиц из работ [16, 17] следует, что

$$K_3^0(n) = \frac{4}{3} K_4^0(n). \tag{7}$$

Отметим, что независимость импульсного распределения n_p и $\bar{p^2}$ (2) от массы атома M и постоянной Планка $\hbar$ видна и в газовом приближении [4, 5]. Параметр K (2) обратно пропорционален массе атома M. Выражений (5)–(7) достаточно для того, чтобы определить как K_4^0, K_3^0, так и V^0:

$$V^0(n) = 4E_4^0(n) - 3E_3^0(n);$$
$$K_4^0(n) = 3\left[E_3^0(n) - E_4^0(n)\right]. \tag{8}$$

Это главная формула нашей работы. Она содержит только числа 3, 4 и наблюдаемые энергии основного состояния жидких He^4 и He^3. Данная формула была получена еще в 1989 г. [16, 17]. Однако тогда не было опытных данных по рассеянию нейтронов в жидком He^3, подтверждающих связь K_3^0 и K_4^0 (7). Последняя представляет собой низкотемпературный предел более общего выражения:

$$K_3(n,T) = \frac{4}{3} K_4\left(n, \frac{3}{4}T\right), \tag{9}$$

справедливого и в классическом пределе $K = \frac{3}{2}T$.

3. Займемся теперь следствиями выражений (8). Энергии основных состояний $E_4^0(n)$, $E_3^0(n)$ с очень хорошей точностью определены по экспериментальным зависимостям давления p и скорости звука u от плотности n [21–23]

$$p = n^2 \frac{\partial E^0}{\partial n}; \quad Mu^2 = \frac{\partial p}{\partial n}. \tag{10}$$

При малых отклонениях x от равновесных плотностей n_4^0 и n_3^0 применимо параболическое приближение:

$$E_4^0(n) = -\mu_4^0 + \varepsilon_4^0 x_4^2; \quad x_4 = \frac{n}{n_4^0} - 1;$$
$$E_3^0(n) = -\mu_3^0 + \varepsilon_3^0 x_3^2; \quad x_3 = \frac{n}{n_3^0} - 1. \tag{11}$$

Приведем численные значения параметров в (11):

$$\mu_4^0 = 7.17\,\text{K}; \quad \mu_3^0 = 2.47\,\text{K};$$
$$\varepsilon_4^0 = 13.67\,\text{K}; \quad \varepsilon_3^0 = 6.07\,\text{K};$$
$$n_4^0 = 0.021836\,\text{Å}^{-3}; \quad n_3^0 = 0.016355\,\text{Å}^{-3};$$
$$n_3^0/n_4^0 = 0.749. \tag{12}$$

Из (8), (11) находим

$$K_4^0(n_4^0) = 16.13\,\text{K}; \quad K_3^0(n_3^0) = 15.34\,\text{K}. \tag{13}$$

Усложним (11) учетом следующего члена в разложении E по x с физическим требованием $E(n = 0) = 0$:

$$E_4^0(n) = -\mu_4^0 + \varepsilon_4^0 x_4^2 (1 + \lambda_4^0 x_4),$$
$$E_3^0(n) = -\mu_3^0 + \varepsilon_3^0 x_3^2 (1 + \lambda_3^0 x_3), \tag{14}$$
$$\lambda_4^0 = 1 - \frac{\mu_4^0}{\varepsilon_4^0} = 0.475; \quad \lambda_3^0 = 1 - \frac{\mu_3^0}{\varepsilon_3^0} = 0.593.$$

Выражение (14) отвечает разложению E^0 в вириальный ряд по степеням плотности n, совпадающему при $n \approx n^0$ с параболическим приближением (11). Оно воспроизводит экспериментальные данные работ [21–23] с точностью 10^{-2}. Из (8), (14) получаем

$$K_4^0(n_4^0) = 16.54\,\text{K}; \quad K_3^0(n_3^0) = 15.75\,\text{K}. \tag{15}$$

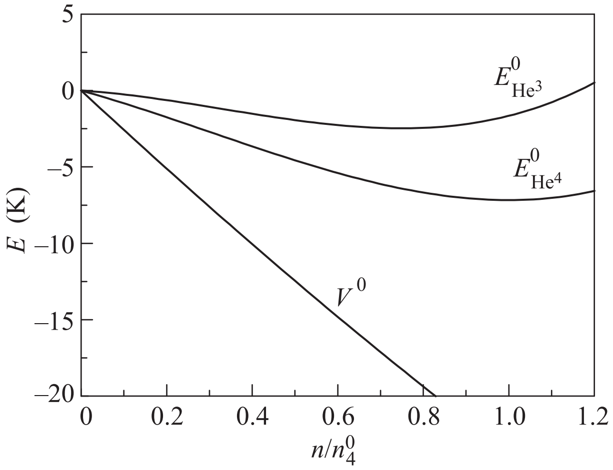

Рис. 1. Зависимости энергии $E_3^0(n)$ и $E_4^0(n)$ жидких He^3 и He^4 на один атом. Потенциальная энергия $V^0(n)$ определена формулой (8); n_4^0 – равновесная плотность жидкого He^4

Сравнение (13), (15) показывает слабую зависимость $K_4^0(n_4^0)$, $K_3^0(n_3^0)$ от точности разложений E^0 (11), (14). Графики $E_4^0(n)$, $E_3^0(n)$ (14) и потенциальной энергии $V^0(n)$ (8) приведены на рис. 1. Они иллюстрируют почти линейную зависимость V^0 от n.

$$V^0(n) = -25.96\frac{n}{n_4^0} \times \left[1 - 0.075\frac{n}{n_4^0} - 0.012\left(\frac{n}{n_4^0}\right)^2\right] \text{K}. \quad (16)$$

Приведем также выражение для кинетической энергии $K_4^0(n)$, полученной на основе (8), (14):

$$K_4^0(n) = -18.12\frac{n}{n_4^0} \times \left[1 - 0.428\frac{n}{n_4^0} + 0.341\left(\frac{n}{n_4^0}\right)^2\right] \text{K}. \quad (17)$$

Быстрая сходимость вириального ряда для $V^0(n)$ (16) приводит к красивому физическому эффекту. Оказывается, что для шести величин (12), определяющих равновесные свойства жидких He^4 и He^3, существуют две приближенные связи, которые становятся точными, если $V^0 \sim n$, т.е. в (16) $0.075 \approx 0$, $0.012 \approx 0$:

$$4(\varepsilon_4^0 - \mu_4^0) \cong 3(\varepsilon_3^0 - \mu_3^0)\left(\frac{n_4^0}{n_3^0}\right)^3 \to 26 \cong 25.68;$$

$$4(3\mu_4^0 - 2\varepsilon_4^0) \cong 3(3\mu_3^0 - 2\varepsilon_3^0)\left(\frac{n_4^0}{n_2^0}\right)^2 \to 23.3 \cong 25. \quad (18)$$

4. Из (12), (15) следует, что для жидкого He^3 выполнено сильное неравенство $\mu_3^0 \ll K_3^0(n_3^0)$. Малая отрицательная энергия на один атом равновесного ($n = n_3^0$) жидкого He^3 есть результат сокращения двух больших величин разного знака: $K_3^0(n_3^0) = 15.75\,\text{K}$ и $V^0(n_3^0) \cong -18.22\,\text{K}$. На наш взгляд, представляет интерес определить зависимость энергии $E^0(n)$ от массы атома M, рассмотрев функцию двух переменных $E_M(n)$. Это можно сделать на основе (5)–(7):

$$E_M(n) = 4E_4(n)\left(1 - \frac{3}{M}\right) + 3E_3(n)\left(\frac{4}{M} - 1\right). \quad (19)$$

Зависимость $E_M(n)$ для характерных значений M представлена на рис. 2. Существуют три области M.

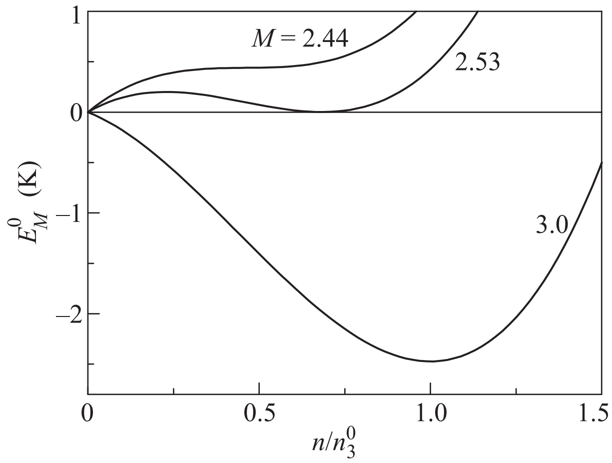

Рис. 2. Зависимости энергии $E_M(n)$ на один атом от приведенной плотности n/n_3^0 для нескольких значений массы атома M, рассчитанные на основе (19)

При $M < 2.44$ жидкая фаза гелия не реализуется даже как метастабильная, а функция $E_M(n)$ имеет только один газовый минимум при $n = 0$. В метастабильной области $2.44 < M < 2.53$ минимальное жидкостное значение $E_M(n_M^0)$ больше нуля. И наконец, при $M > M_c = 2.53$ жидкая фаза гелия становится стабильной: $E_M(n_M^0) < 0$ (рис. 3). Так как критическое значение M_c близко к 3, само существование жидкого He^3 следует рассматривать как случайный подарок для физики низких температур. В более общем виде закон соответственных состояний для квантовых жидкостей обоснован в [16, 17] в применении к жидкому гелию и конденсированным спин-ориентированным изотопам водорода ($H_\uparrow$, $D_\uparrow$, $T_\uparrow$). Жидкая фаза квантовых жидкостей существует, если параметр де Бура (3) меньше критического значения $\Lambda_c^2 \cong 11.2$. Следовательно, существует широкий интервал $1 < \Lambda^2 < \Lambda_c^2$ для параметра де Бура (3), где конденсированная среда является кван-

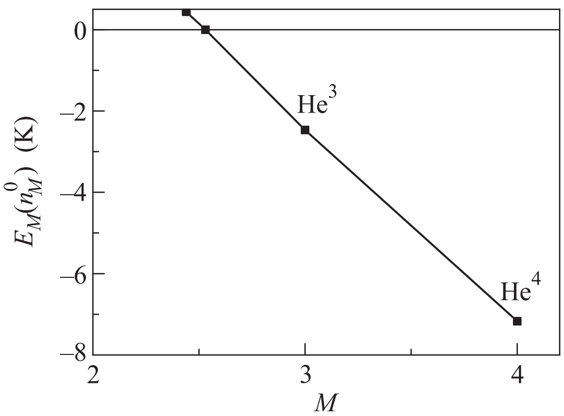

Рис. 3. Минимальное значение энергии на один атом жидкого гелия $E_M(n_M^0)$ как функция массы M. Область $M > 2.53$ отвечает стабильной жидкости. В области $2.44 < M < 2.53$ жидкость метастабильна

товой жидкостью. Жидкий гелий находится вблизи границы этого интервала.

5. На опыте [21–23] для жидкого гелия доступна узкая область плотностей: $n_3^0 < n_3 < 1.4n_3^0$ для He^3 и $n_4^0 < n_4 < 1.2n_4^0$ для He^4. При больших плотностях гелий кристаллизуется. Встает вопрос об определении параметров $K_3^0(n)$ и $K_4^0(n)$ в области n, где жидкий гелий метастабилен, а аппроксимация $E_3^0(n)$ и $E_4^0(n)$ полиномом третьей степени (14) уже неприменима. На основе теории [16, 17] оказывается возможным найти $K_4^0(n)$ по асимптотике энтропии S_4 и теплоемкости C_4 на одну частицу в классической области температур T:

$$S_4(T) = (1+\nu)\left(\frac{3}{2}\ln\frac{T}{T_S} + \frac{T_C}{T}\right);$$

$$C_4(T) = (1+\nu)\left(\frac{3}{2} - \frac{T_C}{T}\right). \qquad (20)$$

В отличие от He^3, жидкий He^4 детально исследован в широкой области температур ($3\,\text{K} < T < 20\,\text{K}$) и плотностей ($n_4 < 1.4n_4^0$) [24]. При таких T эффектами статистики частиц можно пренебречь. На основе опытных данных [24] мы определили параметры ν, T_C, T_S в (20) для девяти значений приведенной плотности $\rho = n_4/n_K$, где $n_K = 0.01035\,\text{Å}^{-3}$; $n_4^0 = n_K \cdot 2.11$. Зависимость энтропии S_4 от ρ и T оказалась однопараметрической [16, 17]:

$$S_4(\rho, T) = (1+\nu)S_4^*\left(\frac{T}{T_S}\right). \qquad (21)$$

Функции $S_4(\rho, T)$ и $S_4^*(T/T_S)$ приведены на рис. 4 и 5. Параметр ν в (20) мал: $\nu \ll 1$. Это связано

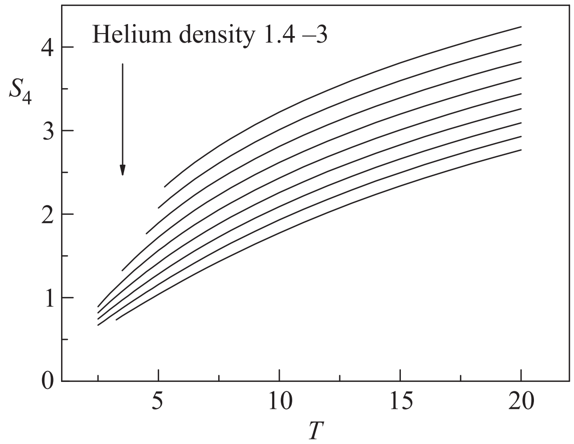

Рис. 4. Энтропия на один атом жидкого He^4 при разных значениях приведенной плотности $\rho = n_4/n_K$ [24]

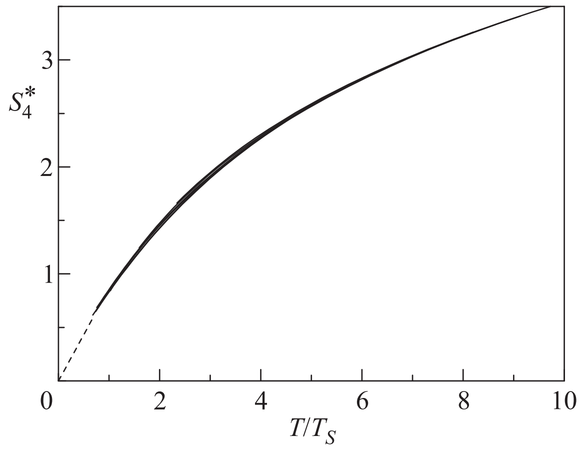

Рис. 5. Зависимость приведенной энтропии жидкого He^4 (21) от приведенной температуры (20)

со слабо представленным ближним порядком в жидком гелии. Отношение же $K_4^0(n)$ к $T_S(n)$ слабо зависит от плотности n: $K_4^0(n)/T_S \cong 6.9$–7.1. Следовательно, энергетический масштаб $K_4^0(n)$, определенный при $T = 0$ (17), может быть также найден по классическому пределу энтропии $S_4(T)$ (20). На основе термодинамического тождества [25]:

$$K = -M\frac{\partial F}{\partial M}, \quad F = E - TS, \qquad (22)$$

связывающего кинетическую энергию K и свободную энергию F и (20), определяется зависимость параметра T_S от массы M:

$$T_S \sim M^{-1/1+\nu} \cong 1/M.$$

Так как параметр ν мал, T_S, так же как и K_4^0, обратно пропорциональна массе атома M. Это позволяет найти связи между термодинамическими функциями жидких He^4 и He^3 [16, 17], например

$$C_3(T,n) = C_4\left(\frac{3}{4}T, n\right);$$

$$S_3(T,n) = S_4\left(\frac{3}{4}T, n\right) + \ln 2. \qquad (23)$$

6. Приведенные выше результаты дополняют теорию квантовых невырожденных жидкостей, предложенную в [16, 17]. Зависимость параметра K_4^0 от n (17) подтверждается как на опыте, так и численным счетом [26, 27]. Однако параметр $K_3^0(n)$, определенный как (17), (7), только с точностью в 30% согласуется с данными работ [28, 29]. Причина такого заметного расхождения теории и опыта нам пока неясна.

Работа поддержана грантом РФФИ #13-02-00178.

---

1. P. C. Hohenberg and P. M. Platzman, Phys. Rev. **152**, 198 (1966).
2. V. F. Sears, Can. J. Phys. **59**, 555 (1981).
3. J. de Boer, Physica **14**, 139 (1948).
4. С. Т. Беляев, ЖЭТФ **34**, 433 (1958).
5. В. А. Беляков, ЖЭТФ **40**, 1210 (1961).
6. C. Andreani, D. Colognesi, J. Mayers et al., Adv. Phys. **54**(5), 377 (2005).
7. H. R. Glyde, S. O. Diallo, R. T. Azuah et al., PRB **84**, 184506 (2011).
8. V. A. Khodel, J. W. Clark, V. R. Shaginyan, and M. V. Zverev, JETP Letters, **92**(8), 532 (2010).
9. V. A. Khodel, J. W. Clark, and M. V. Zverev, Physics of Atomic Nuclei **74**(9), 1237 (2011).
10. J. W. Clark, V. A. Khodel, and M. V. Zverev, PRB **71**, 012401 (2005).
11. V. A. Khodel, J. W. Clark, and M. V. Zverev, PRB **78**, 075120 (2008).
12. C. Bauerle, Yu. V. Bunkov, A. S. Chen et al., J. Low Temp. Phys.**110**, 333 (1998).
13. C. Bauerle, J. Bossy, Yu. M. Bunkov et al., J. Low Temp. Phys. **110**, 345 (1998).
14. A. Casey, H. Patel, J. Nyeki et al., Phys. PRL **90**, 115301 (2003).
15. А. М. Дюгаев, ЖЭТФ **89**, 1220 (1985).
16. А. М. Дюгаев, Письма в ЖЭТФ **42**, 442 (1985); ЖЭТФ **95**, 838 (1989).
17. A. M. Dyugaev, J. Low. Temp. Phys. **78**, 79 (1990).
18. F. K. Achter and L. Meyer, Phys. Rev. **188**, 291 (1969).
19. W. E. Massey, Phys. Rev. **151**, 153 (1966).
20. C. W. Woo, Phys. Rev. **151**, 138 (1966).
21. R. de Bruynouboter and C. N. Yang, Physica B **144**, 127 (1987).
22. R. A. Aziz and R. K. Pathria, Phys. Rev. A **7**, 809 (1973).
23. B. M. Abraham, Y. Eckstein, J. B. Ketterson et al., Phys.Rev. A **1**, 250 (1970).
24. R. W. Hill and O. V. Lounasmaa, Phil. Trans. Roy. Soc. (London) A **252**, 357 (1960).
25. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, М.: Наука, 1976, с. 67.
26. H. R. Glyde, R. T. Azuah, and W. G. Stirling, Phys. Rev. B **62**, 14337 (2000).
27. R. Senesi, C. Andreani, A. L. Fielding et al., Phys. Rev. B **68**, 214522 (2003).
28. R. Senesi, C. Andreani, D. Colognesi et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 4584 (2001).
29. R. Dimeo, P. E. Sokol, R. T. Azuah et al., Physica B **241**, 497 (1976).