

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБМЕННЫХ ИНТЕГРАЛОВ В ТВЕРДОМ ${}^3\text{He}$

В.В.Авилов, С.В.Иорданский

В квазиклассическом приближении вычислены два первых члена в разложении логарифма обменного интеграла по степеням параметра решетки квантового кристалла ${}^3\text{He}$. Численные расчеты проделаны для обмена пары, тройки и четверки соседних атомов.

Целью настоящей работы было микроскопическое вычисление некоторых обменных интегралов, с тем, чтобы выяснить вклад процессов многочастичного обмена [1] в гамильтониан ${}^3\text{He}$. Методом, описанным в работе [2], вычислялись обменные интегралы для трех процессов: $J_{пл}$ – обмен пары ближайших соседей, I_t – обмен тройки атомов и K_p – планарный обмен четверки атомов в ОИК фазе ${}^3\text{He}$.

Для расчета использовано квазиклассическое приближение для волновой функции N – атомного квантового кристалла $\Psi(X)$, где X есть $3N$ -мерный вектор координат всех атомов [2]. Обменный процесс в квантовом кристалле заключается в том, что система, первоначально локализованная вблизи точки $X = X_1$, являющейся минимумом потенциальной энергии $U(X)$, переходит (туннелирует) в точку X_2 , отвечающую другому минимуму потенциальной энергии. Квазиклассическое приближение требует вычисления траектории туннелирования $X(t)$, из X_1 в X_2 , определяемой из условия минимальности действия. Точка X_2 отличается от X_1 перестановкой координат пары, тройки или четверки атомов, однако при вычислении вдоль траектории туннелирования необходимо учитывать смещения и других атомов решетки – задача вычисления траектории туннелирования оказывается многочастичной.

Дополнительная трудность связана с тем, что в ${}^3\text{He}$ потенциальную энергию $U(X)$ нельзя представить в виде простой суммы парного межатомного потенциала $v(r)$ по всем парам атомов. Вклад каждой пары в $U(X)$ должен быть усреднен по нулевым колебаниям. Мы использовали для потенциальной энергии следующую аппроксимацию:

$$U(X) = \frac{M}{2} \sum_k \omega^2(k) \zeta^2(k) + U_a(X). \quad (1)$$

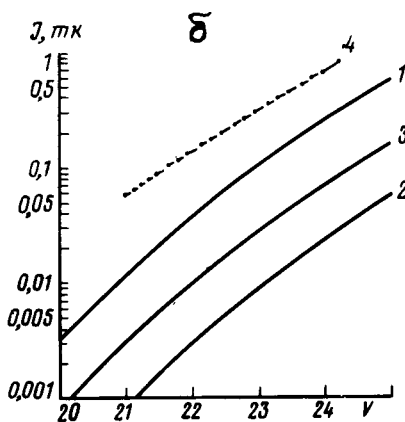
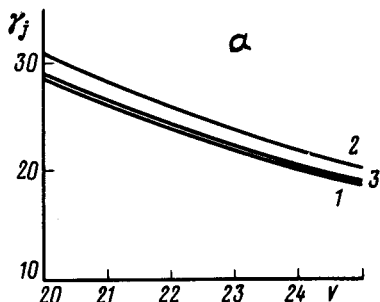
Первое слагаемое есть энергия решетки в гармоническом приближении, суммирование производится по переменной k , включающей волновой вектор и поляризацию фонона, $\zeta(k)$ и $\omega(k)$ есть амплитуда и частота фононов. При вычислении $\omega(k)$ использовано приближение упругой изотропной среды (модель Дебая). Скорость звука определялись по экспериментальным данным: дебаевской температуре и упругим модулям [3]. Второе слагаемое в (1) есть ангармонические добавки $U_a(X)$. Существенно отметить, что U_a определяется только суммой по небольшому числу атомов, тех, для которых смещения нельзя считать малыми. При вычислении U_a мы использовали интерполяционную формулу; вклад пары атомов в U_a есть нуль, если межатомное расстояние близ-

ко к равновесному, и совпадает с отталкивающей частью потенциала Леннарда – Джонса, если атомы сильно сблизились.

При вычислении траектории туннелирования $X(t)$ из-за быстрого роста потенциала межатомного взаимодействия при сближении атомов, время действия ангармонизмов τ мало по сравнению с характерными временами для гармонических колебаний, $\omega_D \tau \ll 1$. Поэтому возмущение для смещения атомов не успевает распространиться по кристаллу до того, как траектория туннелирования пересечет точку $t = 0$, выбранную посередине траектории. Поиск траектории туннелирования производится "стрельбой". Строятся две траектории $X(t)$ и $X^*(t)$ такие, что при $t = -\infty$, $X(t) = X_1$, $X^*(t) = X_2$; в момент времени $t = 0$ обе траектории плавно сшиваются

$$X(0) = X^*(0), \quad \dot{X}(0) = -\dot{X}^*(0). \quad (2)$$

Причем, можно построить процесс "стрельбы" так, что проверка условий сшивки (2) производится только для тех атомов, для которых необходим учет ангармонизмов.



Постоянная Грюнайзена γ_j (а) и обменные интегралы (б) в зависимости от молярного объема V (в $\text{см}^3/\text{моль}$); кривые 1, 2, 3 отвечают соответственно парному, тройному и четверному обмену; кривая 4 – экспериментальные данные [3]

Можно перейти в формуле (1) к безразмерным смещениям, измеряя длины в долях a – постоянной решетки (в ОЦК кристалле за a примем ребро куба). Если зафиксировать безразмерное смещение, то U_a в (1), определяемое отталкивающей частью потенциала Леннарда – Джонса будет $\propto a^{-12}$. Эксперименты показывают [3], что в гелии характерные частоты приблизительно $\propto a^{-7}$, поэтому гармоническое слагаемое в (1) также $\propto a^{-12}$. По этой причине можно вычислить траекторию туннелирования и действие вдоль нее только при одном значении a , переходя к другим плотностям масштабным преобразованиями. Используя

результаты [2]. запишем для обменного интеграла

$$\ln |J| = -S_0 \gamma_0^{1/2} (\sigma/a)^5 - 9,5 \ln a + \ln A_0 \quad (3)$$

параметр $\gamma_0 = 4 \epsilon M (\sigma l / \hbar)^2$ появляется при переходе к безразмерным единицам ($\hbar = a = M = 1$) и характеризует квантовые свойства кристалла; $M = 5 \cdot 10^{-24}$ г; $\epsilon = 10,2$ К, $\sigma = 2,56 \text{ \AA}$, $l = 12$ — параметры отталкивающей части потенциала Леннарда — Джонса. Численные расчеты дали для S_0 значения 3,81; 4,08 и 3,86 соответственно для обмена пары, тройки и четверки атомов.

На рис. а представлена зависимость магнитной постоянной Грюнайзена $\gamma_f = \partial(\ln |J|) / \partial(\ln V)$ для трех обменных процессов как функция молярного объема V . Постоянная Грюнайзена, определенная по измерению давления гелия в магнитном поле [3], изменяется от 17,5 до 19,2 при изменении объема от 24 до 22 см³/моль. Если считать, что основной вклад в термодинамические величины вносят обмены J_{nn} и K_p , то расхождение между теорией и экспериментом порядка 10%. Для того, чтобы сравнить с экспериментом величины обменных интегралов, оценим предэкспоненту A в гармоническом приближении [2]. По порядку величины:

$$A \approx z n_e a \left(\frac{M \hbar}{\pi} \right)^{1/2} \omega_D^{3/2}, \quad (4)$$

где z — число эквивалентных путей туннелирования из X_1 в X_2 , n_e — число обменивающихся атомов. На рис. б приведены обменные интегралы как функции молярного объема. Все три обменных интеграла сравнимы по величине, что подтверждает необходимость включения процессов многочастичного обмена в гамильтониан Гайзенберга. Кривая 4 соответствует обработке данных для магнитного давления ³He согласно модели Гейзенберга с учетом только ближайших соседей. Если при обработке экспериментальных данных включить процессы многочастичного обмена, то кривая 4 пойдет ниже.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
27 апреля 1981 г.

Литература

- [1] A.Landesman. J. Physique Colloq., **39**, C6-1305, 1978.
[2] В.В.Авилов, С.В.Иорданский. ЖЭТФ, **69**, 1338, 1975.
[3] S.Trickey, W.Kirk, E.Adams. Rev. Mod. Phys., **44**, 668, 1977 (перевод в сб. "Квантовые кристаллы". М., 1975).