сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-87-199

Д.И.Пушкаров, Е.Д.Атанасова

ДЕФЕКТОННАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ АНОМАЛИЯ ТВЕРДОГО ^{3}He

1987

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена изучению теплоемкости твердого ^{3}He и, в частности, объяснению так называемой высокотемпературной аномалии, обнаруженной в ряде экспериментов /1-5/ при температурах Т ~ 0,5 - 1 К и не нашедшей до сих пор удовлетворительного объяснения. Как известно, аномалия состоит в следующем. Если предположить, что твердый гелий является идеальным классическим кристаллом, то его теплоемкость должна состоять из двух частей. Первая часть связана с колебаниями решетки /дебаевская теплоемкость/ и дается выражением

$$C_D = \gamma\left(\frac{T}{\theta}\right)^3, \qquad /1/$$

где θ - температура Дебая, а $\gamma = 12\pi^4/5$. Вторая часть связана с магнитной подсистемой /спиновая теплоемкость C_s/. Поскольку при указанных температурах кристалл находится в парамагнитном состоянии, то

$$C_s = 3J^2/T^2, \qquad /2/$$

где J - обменный интеграл. Таким образом, полная теплоемкость равна

$$C = \gamma\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 + 3\left(\frac{J}{T}\right)^2 . \qquad /3/$$

Формула /3/ правильно описывает экспериментальные данные по теплоемкости при достаточно низких температурах / $T/\theta \lesssim 0,02$/. Во избежание недоразумений напомним, что в некоторых более ранних работах /3,4/ экспериментальные результаты плохо согласовывались с /3/, что привело к появлению проблемы так называемой низкотемпературной аномалии. Предполагалось, что эта аномалия связана с какими-то внутренними свойствами кристалла, приводящими к появлению неизвестной фермиевской ветви возбуждений с линейной по температуре теплоемкостью /6/ . Как показал Грейуол /5/ , "обнаружение" такой аномалии явилось следствием экспериментальных неточностей.

С повышением температуры, однако, наблюдается другое отклонение экспериментально наблюдаемой теплоемкости от формулы /3/, получившее название высокотемпературной аномалии. Объяснению этой аномалии посвящено большое число работ /см.,например/[5,7-10]/. Так, в работах[9,10] предполагалось, что наблюдаемая добавочная теплоемкость связана с квантовым состоянием кристалла. Выдвинутая там модель гибридного кристалла привела к добавке типа

$$\Delta C = C_o T^{-5/4}\, e^{-\phi_o/T}, \qquad /4/$$

где C_o и ϕ_o - постоянные.

Другая точка зрения[5,7,8,11] основана на предположении, что добавочная теплоемкость связана с термоактивированными вакансиями. Такое предположение весьма правдоподобно, так как аномалия наблюдается при температурах, близких к температурам плавления, и, следовательно, можно ожидать, что число равновесных вакансий относительно велико. При этом, согласно современным представлениям физики квантовых кристаллов[12,13], вакансии должны быть делокализованы.

Если пренебречь шириной вакансионной зоны, то вакансионный вклад в теплоемкость описывается формулой Шоттки для двухуровневой системы

$$C_ш = \left(\frac{\phi}{T}\right)^2 e^{-\frac{\phi}{T}}, \qquad /5/$$

где ϕ - энергия активации вакансии. Как показал Грейуол[5], учет теплоемкости вакансий по формуле /5/ значительно улучшает согласие теории с экспериментом, но не дает возможности полностью объяснить аномалию /см. рис. 1/. Для дальнейшего улучшения совпадения теории с экспериментом необходимо, вообще говоря, учесть также конечность ширины вакансионной зоны. Для этой цели Гайером[7] была предложена поправка к /5/ в виде множителя, учитывающая заполнение вакансионной зоны с ростом температуры. Однако, как указано в[5], она только ухудшает согласие с экспериментом. Мы еще вернемся ниже к этому вопросу. Но прежде чем пойти дальше рассмотрим более подробно теплоемкость дефектонного газа в квантовых кристаллах.

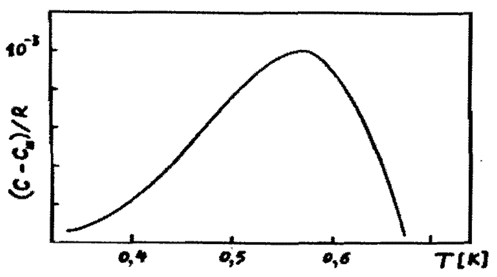

Рис. 1. Отклонение теплоемкости от закона /5/ для V_m= 24,454 см^3 по данным[5].

2. ТЕПЛОЕМКОСТЬ ДЕФЕКТОННОГО ГАЗА

Поскольку температура вырождения дефектонного газа мала /$T_o \sim \Delta\cdot x^{2/3}$, где Δ - ширина зоны, x - концентрация дефектов/, то статистику дефектонов можно считать больцмановской, и для нахождения теплоемкости можно исходить из классического статистического интеграла

$$Z = \frac{V^n}{n!}\left\{\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-\frac{\epsilon(\vec{k})}{T}}\, d^3k\right\}^n, \qquad /6/$$

где $V = Na^3$ - объем кристалла, n - число дефектонов. Закон дисперсии квазичастиц запишем в виде

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_o + \alpha\omega(\vec{k}), \qquad /7/$$

где $\omega(\vec{k})$ - безразмерная функция квазиволнового вектора, а ϵ_o - энергия образования локализованного дефекта. Величина α имеет порядок туннельной частоты A[11].

Таким образом,

$$Z = \frac{N^n}{n!}\, e^{-\frac{\epsilon_o}{T}n}\, Z_o^n, \qquad /8/$$

где

$$Z_o = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-\alpha\frac{\omega(\vec{k})}{T}}\, d^3k. \qquad /9/$$

Тогда свободная энергия на ячейку кристалла равна

$$F = x\epsilon_o + xT\ln\frac{x}{e} - xT\ln Z_o, \qquad /10/$$

а химический потенциал

$$\mu = \epsilon_o + T\ln x - T\ln Z_o. \qquad /11/$$

Рассмотрим сначала случай, когда число дефектонов сохраняется. Такая ситуация возникает для примесей.

Величина Z_o зависит от температуры только через отношение α/T. Поэтому теплоемкость можно записать в виде

$$C = x\frac{\alpha^2}{T^2}\left\{\frac{Z_o''}{Z_o} - \left(\frac{Z_o'}{Z_o}\right)^2 + \frac{T}{\alpha}\frac{Z_o'}{Z_o}\right\}, \qquad /12/$$

где штрихом обозначена производная по аргументу α/T.

случайное, совпадение ϕ с величиной $\theta_p^2 = (\frac{\hbar s}{2a})^2$ для всех молярных объемов / s - скорость звука//.

Как уже указывалось во введении, с помощью формулы Шоттки /5/ невозможно количественно объяснить аномалию в оцк ^3He. Не помогает в этом отношении и поправка Гайера.

Таблица

Значения ϕ в /5/ в зависимости от молярного объема V_m [/5/]

V_m см^3	θ [K]	ϕ [K]	θ_p^2[K^2]
24,454	18,95	5,99	5,95
23,786	20,53	6,99	6,93
23,081	21,90	8,05	7,90
22,425	23,54	9,24	9,12
21,459	26,04	11,22	11,16

3. ВАКАНСИОННАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ В ОЦК ^{3}He

Прежде чем перейти к количественному рассмотрению аномалии теплоемкости в ^{3}He, необходимо отметить следующее. Образование локализованной вакансии в хорошо упорядоченной решетке квантового кристалла энергетически невыгодно, и вакансии делокализуются, превращаясь в квазичастицы - вакансионы. При этом энергия вакансиона ниже энергии локализованной вакансии на полуширине его энергетической зоны. Однако при температурах эксперимента твердый ^{3}He находится в парамагнитном состоянии и, следовательно, не обладает трансляционной инвариантностью, необходимой для появления хорошей квазичастицы с большой длиной свободного пробега. В данной ситуации квазиимпульс является плохим квантовым числом. Поскольку, однако, обменное взаимодействие между спинами много меньше ширины вакансионной зоны, то оказывается [/14/], что вакансии выгодно затратить часть своей энергии, чтобы "выстроить" спины, устраивая таким образом необходимую для делокализации периодичность решетки. Как показал Андреев [/14/], это происходит в относительно небольшой области кристалла, охватывающей только первые координационные сферы. Этого, однако, достаточно для формирования закона дисперсии. Поэтому, хотя квазиимпульс и является недостаточно хорошей характеристикой и вакансионная зона характеризуется только плотностью состояний, можно считать, что систематика энергети-

ческих уровней такая же, как в хорошей зонной структуре. Поэтому для оцк решетки можем написать

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 + a\cos\frac{k_x}{2}\cos\frac{k_y}{2}\cos\frac{k_z}{2}, \qquad a = 4A. \qquad /26/$$

Соответственно

$$Z_0 = \frac{1}{\pi^3}\iiint_0^{\pi} e^{-2\beta\cos x\cos y\cos z}\,dx\,dy\,dz = \frac{2}{\pi}\int_0^1 I_0^2(\beta t)\frac{dt}{\sqrt{1-t^2}}, \qquad /27/$$

где β = 2A/T, а формула /19/ для теплоемкости принимает вид

$$C_{оцк} = \frac{\epsilon_0^2}{T^2}e^{-\frac{\epsilon_0}{T}}\frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} I_0^2\{(1-\delta\frac{I_1}{I_0}\cos x)^2 + \frac{\delta^2}{2}\cos^2 x - \frac{\delta^2}{4\beta}\frac{I_1}{I_0}\cos x\}dx, \quad /28/$$

где $I_k = I_k(\beta\cos x)$, а $\delta = \Delta/\epsilon_0$. Если $\beta \ll 1$, то интеграл в /28/, умноженный на $2/\pi$, стремится к единице, а если $\delta \ll 1$, он переходит в /27/. Выражение /28/ можно записать также в форме /23/, выделяя поправочную функцию к закону Шоттки

$$F_\delta(T) = \frac{2e^{-2\beta}}{\pi(1-\frac{1}{2}\delta)^2}\int_0^{\pi/2} I_0^2\{(1-\delta\frac{I_1}{I_0}\cos x)^2 + \frac{\delta^2}{2}\cos^2 x - \frac{\delta^2}{4\beta}\frac{I_1}{I_0}\cos x\}dx. \quad /29/$$

Расчет теплоемкости по формуле /28/ правильно описывает экспериментальные данные [/5/] с той точностью, с которой удается провести сравнение. Из сравнения с экспериментальными результатами при V_m = 24,454 см^3 мы получили энергию активации вакансии ϵ_0 = 6,65 K и ширину зоны Δ = 6,42 K. На рис. 2 показана вакансионная теплоемкость, рассчитанная по формуле /5/ /кривая 1/ и по формуле /28/ /кривая 2/. В данном масштабе кривая 2 неотличима от экспериментальной.

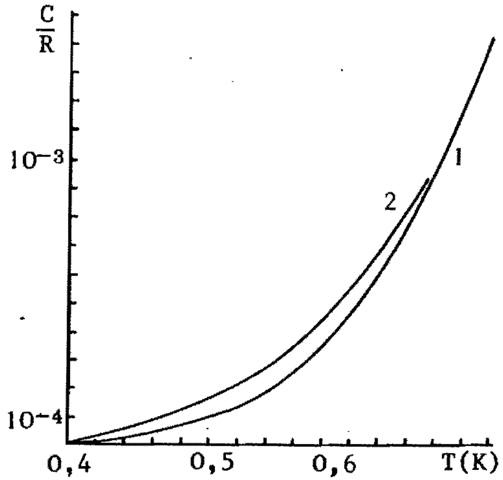

Рис.2.Вакансионная теплоемкость для V_m=24,454 см^3. 1 - по формуле /5/ с ϕ =5,99 K и 2 - по формуле /28/ с ϵ_0 =6,65 K и Δ = =6,42 K. В этом масштабе кривая 2 неотличима от экспериментальной [/5/].

В заключение авторы хотели бы выразить искреннюю благодарность В.А.Кузьмину за проведенные вычисления на ЭВМ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Heltemes E.C., Swenson C.A. - Phys.Rev., 1962, 128,p.1512.
2. Sample H.H., Swenson C.A. - Phys.Rev., 1967, 158, p.188.
3. Pandorf R.C., Edwards D.O. - Phys.Rev., 1968, 169, p.222.
4. Castles S.H., Adams E.D. - Phys.Rev.Lett., 1973, 30,p.1125.
5. Greywall D.S. - Phys.Rev. 1977, B15, p.2604.
6. Дзялошинский И.Е., Кондратенко П.С., Левченков В.С. - ЖЭТФ, 1972, 62, с.2318.
7. Guyer R.A. - J.Low Temp.Phys., 1972, 8, p.427.
8. Hetherington J.H. - J.Low Temp.Phys., 1978, 32, p.173.
9. Юкалов В.И. - ТМФ, 1976, 28, с.92.
10. Yukalov V.I. - Physica, 1977, 89A, p.363.
11. Pushkarov D.I. - phys.stat.sol.(b), 1977, 80, p.295.
12. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. - ЖЭТФ, 1969, 56, с.2057.
13. Пушкаров Д.И. - ЖЭТФ, 1970, 59, с.1755; ФНТ, 1975, 1, с.581, с.586.
14. Андреев А.Ф. - Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, с.608.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 марта 1987 года.

Пушкаров Д.И., Атанасова Е.Д.

Р17-87-199

Дефектонная теплоемкость и высокотемпературная аномалия твердого ^{3}He

Рассмотрена дефектонная теплоемкость в квантовых кристаллах типа твердого гелия. Показано, что высокотемпературная аномалия теплоемкости в оцк ^{3}He имеет вакансионное происхождение. Из экспериментальных данных по теплоемкости определена энергия активации и ширина зоны вакансиона.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Pushkarov D.I., Atanassova E.D.

P17-87-199

Defecton Heat Capacity and High-Temperature Anomaly of Solid ^{3}He

The defecton specific heat in quantum crystals is considered. It is shown that the high-temperature anomaly in b.c.c. ^{3}He is due to the vacancion excitations. The vacancy activation energy and vacancion band width are determined from the experimental data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987