

PACS: 05.30.Ch; 05.30.Fk; 05.70.-a

THE EQUATION OF STATE AND THE QUASIPARTICLE MASS IN THE DEGENERATE FERMI SYSTEM WITH AN EFFECTIVE INTERACTION

Yu.M. Poluektov, A.A. Soroka

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

1, Akademicheskaya Str., 61108 Kharkov, Ukraine

e-mail: yuripoluektov@kipt.kharkov.ua

Received August 31, 2015

General formulas are derived for the quasiparticle effective mass and the equation of state of the Fermi system with account of the interparticle attraction at long distances and repulsion at short distances. Calculations are carried out of the equation of state and the effective mass of the Fermi system at zero temperature with the use of the modified Morse potential. It is shown that pair repulsive forces promote decrease of the effective mass, and attractive forces promote its increase. With certain choice of parameters of the potential the dependence of the pressure on the density has a nonmonotonic character, which enables to describe the coexistence of the liquid and gaseous phases. The influence of three-body interactions on the equation of state and the effective mass is considered. The calculation results are compared with experimental data concerning the quasiparticle effective mass in the liquid ^3He .

KEY WORDS: normal Fermi liquid, effective mass, quasiparticle, equation of state, interaction

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И МАССА КВАЗИЧАСТИЦЫ В ВЫРОЖДЕННОЙ ФЕРМИ-СИСТЕМЕ С ЭФФЕКТИВНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Ю.М. Полуктов, А.А. Сорока

Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"

61108, Академическая, 1, Харьков, Украина

Получены общие формулы для эффективной массы квазичастицы и уравнения состояния в ферми-системе с учетом межчастичного притяжения на далеких и отталкивания на малых расстояниях. Выполнены расчеты уравнения состояния и эффективной массы для ферми-системы при нулевой температуре с использованием модифицированного потенциала Морзе. Показано, что парные силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. При определенном выборе параметров потенциала зависимость давления от плотности имеет немонотонный характер, что позволяет описать сосуществование жидкой и газообразной фаз. Рассмотрено влияние на уравнение состояния и эффективную массу трехчастичных взаимодействий. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными об эффективной массе квазичастицы в жидком ^3He .

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: нормальная ферми-жидкость, эффективная масса, квазичастица, уравнение состояния, потенциал взаимодействия

РІВНЯННЯ СТАНУ І МАССА КВАЗИЧАСТИНКИ У ВИРОДЖЕНІЙ ФЕРМІ-СИСТЕМІ З ЕФЕКТИВНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

Ю.М. Полуктов, О.О. Сорока

Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"

61108, вул. Академічна, 1, Харків, Україна

Отримано загальні формули для ефективної маси квазичастинок і рівняння стану в фермі-системі з урахуванням міжчастинкового притягання на далеких і відштовхування на малих відстанях. Проведено розрахунки рівняння стану та ефективної маси для фермі-системи при нульовій температурі з використанням модифікованого потенціалу Морзе. Показано, що парні сили відштовхування сприяють зменшенню ефективної маси, а сили притягання – її зростанню. При певному виборі параметрів потенціалу залежність тиску від щільності має немонотонний характер, що дозволяє описати співіснування рідкої та газової фаз. Розглянуто вплив на рівняння стану і ефективну масу трьохчастинкових взаємодій. Результати розрахунків порівнюються з експериментальними даними щодо ефективної маси квазичастинок в рідкому ^3He .

КЛЮЧОВІ СЛОВА: нормальна фермі-система, ефективна маса, квазичастинка, рівняння стану, потенціал взаємодії

Термодинамические свойства вырожденной ферми-жидкости определяются квазичастицами вблизи поверхности Ферми, закон дисперсии которых имеет такой же вид, как и у свободных частиц, но с эффективной массой, зависящей от термодинамических величин [1,2]. В ферми-жидкостном подходе эффективная масса выражается через феноменологическую амплитуду, описывающую взаимодействие квазичастиц. На микроскопическом уровне эффективная масса вычислялась для слабо неидеального ферми-газа [3]. Однако такие расчеты справедливы только для разреженных систем, в предположении применимости борновского приближения, когда взаимодействие между частицами может быть охарактеризовано единственным параметром – длиной рассеяния, которая может быть либо положительной, либо отрицательной, как в случае атомов ^3He .

При более реалистическом описании с помощью модельных потенциалов следует учитывать, что взаимодействие между частицами на малых расстояниях имеет характер сильного отталкивания, а на больших – притяжения. Поэтому в достаточно плотных средах характеристики системы существенно зависят от

конкретного вида потенциала взаимодействия частиц и его параметров, а также плотности. При малой плотности числа частиц, когда среднее расстояние между ними сравнимо или превосходит радиус действия сил притяжения, существенную роль играют именно дальнедействующая составляющая межчастичного потенциала. С увеличением плотности и уменьшением среднего расстояния между частицами, все больше проявляются эффекты сильного отталкивания между частицами. При упрощенном описании взаимодействия с помощью единственного параметра, длины рассеяния, эффекты, связанные с вкладами дальнедействующего притяжения и короткодействующего отталкивания, естественно, учтены быть не могут. Отметим также, что для реалистических потенциалов с отталкиванием на малых расстояниях борновское приближение, как правило, неприменимо. Известно, что учет сильного отталкивания (жесткая сердцевина) на малых расстояниях приводит к значительным трудностям при расчетах в модели самосогласованного поля [4,5]. В частности, вклад в энергию системы короткодействующих сил оказывается существенно завышенным. Чтобы обойти эту трудность в данной работе предлагается использовать эффективный потенциал взаимодействия между частицами, отличный от потенциала взаимодействия свободных частиц, как это принято в расчетах методом самосогласованного поля в ядерной физике [6,7]. При этом «жесткая» сердцевина заменяется «мягкой», величина которой является подгоночным параметром.

Целью данной работы является расчет эффективной массы и нахождение уравнения состояния ферми-системы в микроскопическом подходе в рамках варианта модели самосогласованного поля, сформулированного в работах [8,9], с помощью потенциалов взаимодействия, учитывающих как отталкивание, так и притяжения частиц. Получена общая формула для эффективной массы квазичастицы в ферми-системе. Исследовано влияние короткодействующих сил отталкивания и дальнедействующих сил межчастичного притяжения на величину эффективной массы и уравнение состояния. Показано, что силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. Конкретные расчеты эффективной массы и уравнения состояния проведены для нулевой температуры с использованием модифицированного потенциала Морзе. При определенном выборе параметров потенциала зависимость полного давления от плотности оказывается немонотонной, и уравнение состояния описывает сосуществование газообразной и жидкой фаз. С увеличением плотности вычисленная эффективная масса квазичастицы убывает, что не соответствует экспериментальным данным для жидкого ${}^3\text{He}$. В работе высказано предположение, что возможная причина несоответствия связана с эффектами трехчастичных сил в ферми-жидкости. Рассмотрена роль трехчастичных взаимодействий и показано, что учет трехчастичных сил притяжения способствует росту эффективной массы.

ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА И УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

В данном разделе получим общие формулы для эффективной массы квазичастицы и давления. Волновая функция квазичастицы ферми-системы $\phi_j(q)$ в рамках модели самосогласованного поля в формулировке работ [8,9] находится из уравнения

$$\int dq' [H(q, q') + W(q, q')] \phi_j(q') = \varepsilon_j \phi_j(q), \quad (1)$$

где $H(q, q') = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \delta(q - q') - \mu \delta(q - q')$, m – масса свободного фермиона, μ – химический потенциал, $q \equiv (\mathbf{r}, \sigma)$ обозначает пространственную координату \mathbf{r} и проекцию спина σ , $j \equiv (\nu, \sigma')$, где ν – полный набор квантовых чисел, описывающих состояние частицы, за исключением проекции спина σ' . Полагаем спин $s = 1/2$. В формуле (1) самосогласованный потенциал $W(q, q')$ имеет смысл среднего поля, действующего на отдельную частицу [8,9]. В отсутствие внешнего поля в пространственно-однородных условиях состояние отдельной частицы может быть охарактеризовано ее волновым вектором \mathbf{k} , а ее волновая функция имеет вид плоской волны:

$$\phi_j(q) = \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

В этих условиях в пренебрежении магнитными эффектами самосогласованный потенциал имеет вид $W(q, q') = \delta_{\sigma\sigma'} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, где

$$W(\mathbf{r}) = W_0 \delta(\mathbf{r}) + W_C(r). \quad (3)$$

Вид полей $W_0, W_C(r)$, обусловленных прямым и обменным взаимодействиями, приведен ниже. В пространственно-однородных условиях из (1) следует выражение для энергии квазичастицы

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + W_0 + \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty dr r W_C(r) \sin kr. \quad (4)$$

При низких, но конечных температурах для вырожденной системы волновое число Ферми определим

соотношением

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \mu + W_0 + \frac{4\pi}{k_F} \int_0^\infty dr r W_C(r) \sin k_F r = 0. \quad (5)$$

Это соотношение устанавливает связь химического потенциала с волновым числом Ферми. С помощью формулы (5), исключая из (4) химический потенциал, имеем

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + 4\pi \int_0^\infty dr r W_C(r) \left(\frac{\sin kr}{k} - \frac{\sin k_F r}{k_F} \right). \quad (6)$$

Вблизи поверхности Ферми $k = k_F + \Delta k$, и эффективная масса определяется соотношением

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{m_*} k_F \Delta k = \frac{\hbar^2}{m_*} k_F (k - k_F). \text{ Она может быть представлена в виде}$$

$$\frac{m}{m_*} = 1 + \frac{2k_F m}{\pi \hbar^2} J, \quad (7)$$

где

$$J \equiv -\frac{2\pi^2}{k_F^2} \int_0^\infty dr r^3 W_C(r) j_1(k_F r), \quad (8)$$

$j_1(x) = (\sin x - x \cos x)/x^2$ – сферическая функция Бесселя. В таком виде формула для эффективной массы справедлива при конечной температуре и произвольном характере межчастичного взаимодействия, и применима как для парных, так и для многочастичных сил. Отметим, что определение эффективной массы может быть дано несколько иначе, а именно $m_* = \hbar k_F / v_F$, где $v_F = \partial \varepsilon_k / \hbar \partial k|_{k=k_F}$ [3], но приводит к тому же результату (7).

Полное давление в ферми-системе в модели самосогласованного поля определяется суммой двух вкладов $p = p_F + p_I$: положительным давлением газа квазичастиц с эффективной массой

$$p_F = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{5} \frac{\hbar^2}{m_*} n^{5/3}, \quad (9)$$

и давлением, обусловленным парным межчастичным взаимодействием, которое может иметь как положительный, так и отрицательный знак:

$$p_I = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 U(r) (2\rho^2(0) - \rho^2(r)) = 2\pi n^2 \int_0^\infty dr r^2 U(r) g(k_F r), \quad (10)$$

где n – плотность числа частиц, $g(k_F r) \equiv 1 - \frac{9}{2} \left(\frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right)^2$. Поскольку парная корреляционная функция $g(k_F r)$

везде положительна, то, короткодействующая положительная часть потенциала вносит в давление положительный вклад, а дальнедействующая часть – отрицательный.

ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Потенциальная энергия системы N частиц, обладающих внутренней структурой, может быть представлена в виде суммы парных, тройных и т.д. взаимодействий

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i < j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i < j < k} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \quad (11)$$

где $U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$, $U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)$ – симметричная по всем перестановкам координат функция. Теория самосогласованного поля для ферми систем с учетом вклада трехчастичных взаимодействий рассмотрена в работе [9].

Обсудим вопрос о выборе потенциалов межчастичного взаимодействия. Начнем с анализа парных потенциалов. Для описания взаимодействия частиц используются модельные потенциалы, зависящие в простейшем случае только от расстояния между частицами. Примером таких потенциалов может служить часто употребляемый потенциал Леннарда-Джонса

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (12)$$

содержащий два параметра: расстояние σ и энергию ε . На малых расстояниях этот потенциал быстро стремится к бесконечности. При $r_* = \sigma$ он обращается в нуль, становясь при $r > r_*$ отрицательным. Потенциал (12) и ему подобные можно записать в общем виде

$$U(r) = \begin{cases} U_C(r), & r < r_*, \\ U_L(r), & r > r_*, \end{cases} \quad (13)$$

где $U_C(r) > 0$ – короткодействующая часть потенциала, для которой во многих случаях полагают $U_C(r) \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$, а $U_L(r) < 0$ – далекодействующая часть потенциала, такая что $U_L(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Использование в квантово-механических расчетах потенциалов с твердой сердцевиной, как известно [4,5], приводит к значительным трудностям. Для потенциалов с бесконечной сердцевиной отсутствует Фурье-образ, и самосогласованное поле при использовании этих потенциалов обращается в бесконечность. Иногда это обстоятельство используется в качестве аргумента в подтверждение неприменимости модели самосогласованного поля в том или ином случае, например для описания жидкости [10]. Использование потенциала, быстро стремящегося к бесконечности на малых расстояниях, означает, что атом или другая сложная частица сохраняет свою индивидуальность при как угодно высоких давлениях. Между тем очевидно, что должно существовать критическое давление, при котором атомы сблизятся настолько, что будут «раздавлены» и потеряют свою индивидуальность. Поэтому требование абсолютной непроницаемости частиц при как угодно больших давлениях является излишне жестким и нефизичным и, на наш взгляд, более правильно использовать потенциалы, стремящиеся к конечному значению при малых расстояниях. Примером такого потенциала является известный потенциал Морзе

$$U_M(r) = \varepsilon \left\{ \exp[-2(r-r_0)/a] - 2 \exp[-(r-r_0)/a] \right\}, \quad (14)$$

ε – параметр размерности энергии, r_0 , a – характерные расстояния. Необходимо также отметить, что квантово-химические расчеты приводят к потенциалам с конечной величиной энергии в нуле [11,12]. Эта энергия оказывается довольно большой. Так для потенциала взаимодействия гелий-гелий она имеет порядок 10^6 К.

Но даже при конечной, но большой энергии отталкивания роль эффектов, обусловленных твердой сердцевиной, оказывается значительно завышенной. Это связано с тем, что если для описания состояния квазичастицы, как это обычно бывает, использовать волновую функцию, модуль которой медленно меняется в пространстве, то твердая сердцевина дает существенно завышенный вклад в энергию и другие характеристики системы, на что давно было обращено внимание Ястровым [4,5]. Действительно, наличие твердой сердцевины, не позволяет частицам сблизиться на расстояния, меньше ее радиуса, так что реальная волновая функция, в отличие, например, от плоской волны, должна быстро убывать на таких расстояниях. Чтобы исправить отмеченный недостаток, Ястровым [4] была предложена волновая функция, учитывающая данное обстоятельство, однако использовать такую функцию в расчетах оказалось весьма сложно.

Можно попытаться исправить ситуацию другим способом, а именно, сохранив описание квазичастиц с помощью плоских волн, отказаться от использования «реалистических» потенциалов, с помощью которых взаимодействуют свободные частицы. Вместо «жестких» потенциалов с большим значением энергии отталкивания на малых расстояниях можно использовать «мягкие» эффективные потенциалы, у которых энергия на малых расстояниях является феноменологическим подгоночным параметром, определяемым из сравнения с экспериментом для какой-либо измеримой величины. Именно такая идея положена в основу расчетов методом самосогласованного поля в ядрах [6,7]. В таких расчетах, чтобы обойти проблемы, возникающие из-за сильной отталкивающей сердцевины [13], вводят эффективное взаимодействие вне связи с базисным взаимодействием свободных нуклонов [6,7].

Простейшим способом модификации потенциалов (13) может служить замена их короткодействующей части постоянной величиной, так что

$$\tilde{U}(r) = \begin{cases} U_m, & r < r_*, \\ U_L(r), & r > r_*, \end{cases} \quad (15)$$

где $U_m > 0$. В качестве далекодействующей части может быть выбран какой-либо из известных модельных потенциалов. Так для потенциала Сюзерленда

$$U_L(r) = -\varepsilon (\sigma/r)^6. \quad (16)$$

Более реалистичным является потенциал Кихары

$$U_L(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r-a} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r-a} \right)^6 \right], \quad (17)$$

который в сравнении с потенциалом Леннард-Джонса содержит добавочный параметр размерности длины a и переходит в потенциал Леннард-Джонса при $a = 0$ (12).

При численных расчетах в данной работе мы в качестве далекодействующей части будем использовать потенциал Морзе (14). Хотя потенциал Морзе конечен при всех расстояниях, но значение энергии в нуле у него все еще велико, так что положительную часть этого потенциала, в соответствии со сказанным выше, будем заменять постоянной величиной, вводя тем самым дополнительный подгоночный параметр размерности

энергии.

Что касается выбора потенциала для трехчастичных взаимодействий, то о таких потенциалах известно очень мало. Отметим, что нахождение из первых принципов потенциала взаимодействия трех атомов как бесструктурных единиц является сложной квантово-механической задачей [14]. Обзор современного состояния проблемы трехчастичных сил дан в работе [15].

В частности, трехчастичный потенциал может быть выбран в виде, предложенном в [16]:

$$U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|) = u_0 \exp[-(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| + |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|)/r_0]. \quad (18)$$

Возможен также выбор потенциала в виде гауссовой функции:

$$U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|) = \frac{u_0}{\pi^{3/2} r_0^3} \exp\left\{-\frac{[(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 + (\mathbf{r}-\mathbf{r}'')^2]}{r_0^2}\right\}. \quad (19)$$

Такой выбор характерен тем, что в пределе $r_0 \rightarrow 0$ потенциал (19) переходит в трехчастичный потенциал нулевого радиуса, который, как показано в работе [9], не дает вклад в самосогласованное поле. В принципе, возможен выбор модельного трехчастичного потенциала, зависящего от трех расстояний между тремя частицами

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') = U_3(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, |\mathbf{r}-\mathbf{r}''|, |\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|). \quad (20)$$

В данной работе в расчетах будем использовать потенциал именно такого типа, взятого в виде потенциала «полупрозрачной сферы»:

$$U_3(r, r', r'') = \begin{cases} U_{3m}, & r < r_3, \quad r' < r_3, \quad r'' < r_3, \\ 0, & \text{else.} \end{cases} \quad (21)$$

Потенциал (21) отличен от нуля только в том случае, если расстояние между каждой парой из тройки частиц меньше r_3 .

В самосогласованный потенциал (3) дают вклад как парные, так и трехчастичные взаимодействия $W_0 = W_0^{(2)} + W_0^{(3)}$, $W_C(r) = W_C^{(2)}(r) + W_C^{(3)}(r)$. В случае парных сил

$$W_0^{(2)} = nU_0, \quad W_C^{(2)} = -U(r)\rho(r). \quad (22)$$

Здесь $U(r)$ – потенциал парного взаимодействия, $U_0 = \int U(r) dr$. Одночастичная матрица плотности имеет вид

$$\rho(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dk k \sin(kr) f(\varepsilon_k), \quad (23)$$

где $f(\varepsilon_k) = (\exp \beta \varepsilon_k + 1)^{-1}$, а плотность числа частиц $n = 2\rho(0)$.

Вклад трехчастичных сил определяется соотношениями [9]:

$$W_0^{(3)} = 2b_1 - b_2, \quad W_C^{(3)} = a_1(r) - 2\rho(r)a_2(r). \quad (24)$$

Для трехчастичного потенциала, зависящего от расстояний между частицами (20):

$$\begin{aligned} a_1(r) &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty \underline{U}_{3l}(r, r') \rho_l(r, r') \rho(r') r'^2 dr', & a_2(r) &= 4\pi \rho(0) \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') r'^2 dr', \\ b_1 &= 16\pi^2 \rho^2(0) \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') r'^2 dr', & b_2 &= 16\pi^2 \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\infty \underline{U}_{30}(r, r') \rho^2(r') r'^2 dr'. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь

$$U_3(r, r', |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \sum_{l=0}^{\infty} \underline{U}_{3l}(r, r') P_l(\cos \theta), \quad (26)$$

$$\underline{U}_{3l}(r, r') = \frac{(2l+1)}{2} \int_{-1}^1 U_3(r, r', \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'x}) P_l(x) dx,$$

$$\rho(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \sum_{l=0}^{\infty} \rho_l(r, r') P_l(\cos \theta), \quad (27)$$

$$\rho_l(r, r') = \frac{2l+1}{2\pi^2} \int_0^\infty f(\varepsilon_k) j_l(kr) j_l(kr') k^2 dk.$$

ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА, УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЕ И ХИМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ

В данном разделе приведем результаты расчета зависимостей эффективной массы, давления и химического потенциала от плотности числа частиц при нулевой температуре, для эффективного парного

потенциала типа (15), выбрав в качестве дальнедействующей части потенциал Морзе (14). Результаты расчетов будем сравнивать с экспериментальными данными для жидкого ${}^3\text{He}$ [17,18] при температуре близкой к нулю. Заметим, что в данной работе рассматривается нормальная ферми-система, тогда как ${}^3\text{He}$ при низких температурах переходит в сверхтекучее состояние [18]. Однако, поскольку температура сверхтекучего перехода T_C весьма низка, порядка нескольких милликельвинов, и она много меньше температуры Ферми $T_F \sim 1\text{K}$, то при выполнении условия $T_C < T \ll T_F$ с достаточной точностью можно рассматривать нормальную систему, полагая, что она находится при нулевой температуре.

Выбор в качестве дальнедействующей части потенциала Морзе удобен в частности, потому, что он допускает получение в некоторых случаях аналитических выражений. Так интеграл (8), определяющий эффективную массу (7), в этом случае дается формулой:

$$J = \frac{U_m}{k_F^3} B_2(k_F r_*) + \frac{\varepsilon}{k_F^3} \left[e^{2\gamma} I_M \left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0} \right) - 2e^\gamma I_M \left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0} \right) \right]. \quad (28)$$

Здесь использованы обозначения:

$$B_2(z) \equiv \int_0^z y^2 j_1^2(y) dy, \quad I_M(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} j_1^2(y) y^2 dy, \quad (29)$$

$\gamma = r_0/a$ и $r_*/r_0 = 1 - \ln 2/\gamma$. С учетом связи волнового числа Ферми с плотностью $n = k_F^3/3\pi^2$, формулы (7), (8), (28) определяют зависимость эффективной массы от плотности, которая показана на рис. 1 (кривая 1). Выбор подгоночных параметров в парном потенциале обсудим ниже. Как видим, эффективная масса квазичастицы при малых плотностях возрастает с увеличением плотности, что находится в качественном соответствии с расчетом для разреженного ферми-газа [3], а затем с ростом плотности убывает. Качественно этот результат можно понять на основе общей формулы (7). Как можно убедиться, положительная часть потенциала, описывающая отталкивание, приводит к уменьшению эффективной массы, а его притягивающая отрицательная часть дает вклад, увеличивающий эффективную массу. С увеличением плотности, среднее расстояние между частицами уменьшается и, следовательно, возрастает роль межчастичного отталкивания, приводящего к уменьшению массы. Полученный результат не отвечает экспериментально наблюдаемой зависимости эффективной массы от давления в жидком ${}^3\text{He}$, которая возрастает с увеличением давления [17,18]. Возможную причину несоответствия обсудим в следующем разделе.

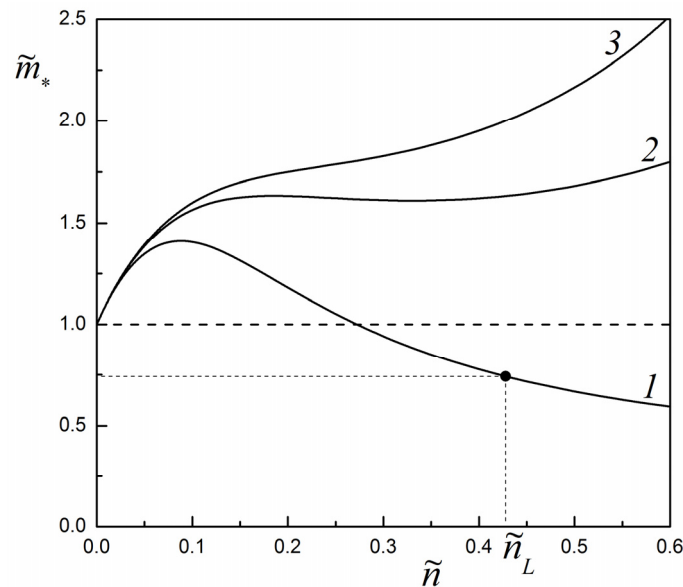


Рис. 1. Зависимости эффективной массы квазичастиц ферми-жидкости $\tilde{m}_* = m_*/m$ от безразмерной плотности $\tilde{n} = n/n_0$, где $n_0 = r_0^{-3}$. Кривая 1 рассчитана с эффективным парным потенциалом Морзе и параметрами $U_m = 46,55\text{K}$, $\gamma = 4,16$. Значение $\tilde{n}_L = 0,43$ соответствует плотности жидкого ${}^3\text{He}$ при нулевом давлении и температуре, $\tilde{m}_*(\tilde{n}_L) = 0,74$. Кривые 2 и 3 показывают зависимости эффективной массы при учете как парных, так и трехчастичных сил для параметров: 2 – $U_{3m} = -4\varepsilon_0$, $r_3 = 1,27r_0$, 3 – $U_{3m} = -4\varepsilon_0$, $r_3 = 1,30r_0$.

Вклад в давление, обусловленный взаимодействием, для модифицированного потенциала Морзе определяется формулой

$$p_l = \frac{2\pi n^2}{k_F^3} \left\{ U_m I_{P1}(k_F r_*) + \varepsilon \left[e^{2\gamma} I_{P2} \left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0} \right) - 2e^\gamma I_{P2} \left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0} \right) \right] \right\}, \quad (30)$$

где

$$I_{P1}(z) \equiv \int_0^z g(y) y^2 dy, \quad I_{P2}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} g(y) y^2 dy, \quad g(y) \equiv 1 - \frac{9}{2} \left(\frac{j_1(y)}{y} \right)^2. \quad (31)$$

Зависимость полного давления $p = p_f + p_l$ от плотности показана на рис. 2.

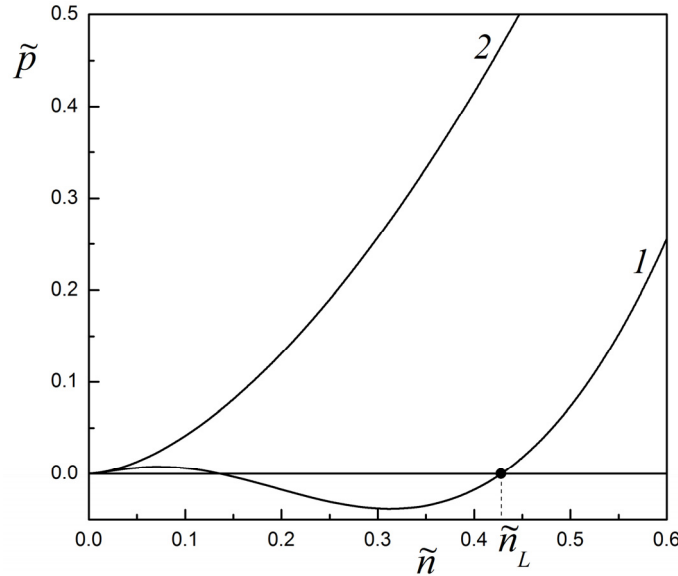


Рис. 2. Зависимость полного давления $\tilde{p} = p / p_0$ ($p_0 = \hbar^2 / m r_0^5$) от плотности $\tilde{n} = n / n_0$, где $n_0 = r_0^{-3}$. Кривая 1 отвечает ферми-жидкости с эффективным парным потенциалом Морзе ($U_m = 46,55$ K, $\gamma = 4,16$), а кривая 2 – идеальному ферми-газу.

Как видим, учет взаимодействия между атомами приводит к качественному изменению зависимости давления от плотности в сравнении с ферми-газом. При выбранных параметрах потенциала межчастичного взаимодействия давление оказывается немонотонной функцией плотности. Имеется интервал давлений, в котором каждому значению давления соответствует две плотности, большая из которых отвечает жидкости, а меньшая – газу. Для нахождения условия равновесия между фазами, из формулы (5) рассчитаем химический потенциал, который для модифицированного потенциала Морзе имеет вид

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \frac{4U_m}{9\pi} \left[(k_F r_*)^3 - \frac{9}{2} I_{\mu 2}(k_F r_*) \right] + \frac{4}{3\pi} \varepsilon e^{2\gamma} \left[I_{\mu 1} \left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0} \right) - \frac{3}{2} I_{\mu 3} \left(k_F r_*, \frac{2\gamma}{k_F r_0} \right) \right] - \frac{8}{3\pi} \varepsilon e^\gamma \left[I_{\mu 1} \left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0} \right) - \frac{3}{2} I_{\mu 3} \left(k_F r_*, \frac{\gamma}{k_F r_0} \right) \right]. \quad (32)$$

Здесь использованы обозначения:

$$I_{\mu 1}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} y^2 dy, \quad I_{\mu 2}(z) \equiv \int_z^\infty j_1(y) \sin(y) dy, \quad I_{\mu 3}(z, \alpha) \equiv \int_z^\infty e^{-\alpha y} j_1(y) \sin(y) dy. \quad (33)$$

Зависимость химического потенциала от плотности показана на рис. 3. В идеальном ферми-газе при нулевой температуре химический потенциал положителен и совпадает с энергией Ферми. Наличие взаимодействия между частицами, в частности, притяжения на далеких расстояниях, приводит к существенному изменению зависимости химического потенциала от плотности числа частиц в сравнении со случаем идеального газа. Как видим (рис. 3), эта зависимость может оказаться немонотонной, а знак химического потенциала отрицательным.

Обсудим вопрос о выборе параметров эффективного потенциала. Расстояние до минимума и глубина ямы стандартных модельных потенциалов известны [19]. Для гелия они равны $\varepsilon = 10,7$ K, $r_0 = 2,97 \text{ \AA}$. Вообще говоря, при использовании эффективного потенциала, нет оснований выбирать значения этих параметров равными параметрам потенциала взаимодействия свободных частиц. Тем не менее, при численных расчетах в данной работе предполагаем, что ε, r_0 не отличаются существенно от приведенных выше значений. Остаются два подгоночных параметра $\gamma = r_0/a$ и U_m , которые необходимо выбрать из дополнительных соображений.

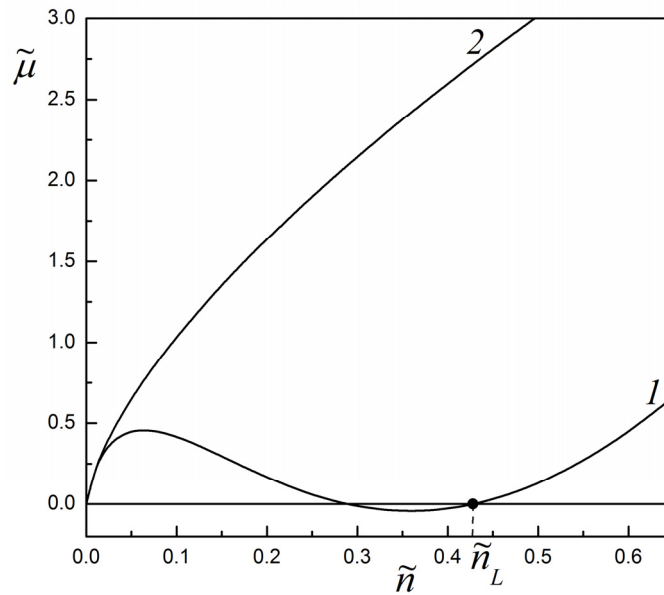


Рис. 3. Зависимости химического потенциала $\tilde{\mu} = \mu / \varepsilon_0$ ($\varepsilon_0 = \hbar^2 / mr_0^2$) от плотности $\tilde{n} = n / n_0$, где $n_0 = r_0^{-3}$. Кривая 1 отвечает ферми-жидкости с эффективным парным потенциалом Морзе ($U_m = 46,55 \text{ K}$, $\gamma = 4,16$), а кривая 2 – идеальному ферми-газу.

Характер зависимости полного давления от плотности зависит от выбора параметра γ . При достаточно большом значении этого параметра давление монотонно возрастает с увеличением плотности. С уменьшением указанного параметра зависимость $p = p(n)$ становится немонотонной как показано на рис. 2. Термодинамически устойчивыми являются участки, на которых $\partial p / \partial n > 0$. Существует область давлений, которой отвечает два значения плотности, меньшая плотность отвечает пару, а большая – жидкости. Из эксперимента известно [17], что давление насыщенных паров ${}^3\text{He}$ стремится к нулю со стремлением к нулю температуры. Поэтому одним из условий, которое должно удовлетворяться при выборе подгоночных параметров является требование, чтобы большая, отличная от нуля плотность, при нулевом давлении совпадала с наблюдаемой плотностью жидкого гелия.

Поскольку условием равновесия фаз является равенство их химических потенциалов, то второе условие, которое следует удовлетворить – это равенство нулю химического потенциала жидкости, равного химическому потенциалу пара при стремлении его плотности к нулю. Таким образом, два подгоночных параметра эффективного потенциала определяются из условий

$$\mu(n_L; \gamma, U_m) = 0, \quad p(n_L; \gamma, U_m) = 0. \quad (34)$$

С учетом того, что плотность жидкого ${}^3\text{He}$ вблизи нулевой температуры $n_L = 1,635 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, находим $\gamma = 4,16$, $U_m = 46,55 \text{ K}$. Зависимости эффективной массы, давления и химического потенциала от плотности на рис. 1–3 рассчитаны с такими значениями этих параметров. Следует отметить, что величина подгоночного параметра U_m существенно меньше значения потенциала Морзе (14) в нуле $U_M(0) \approx 4 \cdot 10^4 \text{ K}$.

Рассчитанная с указанными значениями параметров эффективная масса $m_*/m \approx 0,74$ оказывается примерно в четыре раза меньше, чем эффективная масса квазичастицы в жидком ${}^3\text{He}$ и, как показано на рис. 1, убывает с увеличением плотности. Это не соответствует наблюдаемой зависимости роста эффективной массы с давлением [17,18]. Отмеченное обстоятельство, по-видимому, не связано с выбором конкретного эффективного потенциала, поскольку качественно подобные зависимости получаются и при использовании эффективных потенциалов, отличных от использованного в данной работе потенциала Морзе. Можно предположить, что отмеченное несоответствие связано с вкладом трехчастичных сил, роль которых рассмотрим в следующем разделе.

ВКЛАД ТРЕХЧАСТИЧНЫХ СИЛ

В качестве возможной причины объяснения возрастания эффективной массы с увеличением давления а, следовательно, и плотности, рассмотрим вклад трехчастичных взаимодействий [15]. Роль трехчастичных взаимодействий в ферми-системе теоретически рассматривалась в работе [9], где, в частности, было показано, что трехчастичные силы дают вклад в самосогласованный потенциал только при учете их нелокальности. Вклад трехчастичных сил в самосогласованный потенциал дается общими формулами (24–27). Так, для потенциала взаимодействия типа «полупрозрачной сферы» (21), имеем:

$$\underline{U}_{3l}(r, r') = U_{3m} \theta(r_3 - r) \theta(r_3 - r') (2l+1) \left[\theta(r_3 - r - r') \delta_{l0} + \theta(r + r' - r_3) \frac{1}{2} \int_{x_0}^1 P_l(x) dx \right], \quad (35)$$

где $x_0 = (r^2 + r'^2 - r_3^2) / 2rr'$. При нулевой температуре $f_k = \theta(k_F - k)$ и

$$\rho(r) = \frac{k_F^2}{2\pi^2 r} j_1(k_F r), \quad \rho(0) = \frac{n}{2} = \frac{k_F^3}{6\pi^2}, \quad \rho_l(r, r') = \frac{2l+1}{2\pi^2} \cdot \int_0^{k_F} dk k^2 j_l(kr) j_l(kr'). \quad (36)$$

С учетом последних соотношений, находим

$$a_1(r) = U_{3m} \theta(r_3 - r) \frac{k_F^3}{2\pi^3} \cdot \frac{1}{k_F r} \left[j_0^2(k_F r_3) - j_0(k_F r_3) j_0(k_F(r_3 - r)) + \int_{-k_F(r_3 - r)}^{k_F r_3} j_0(k_F r - y) j_1(y) dy \right],$$

$$a_2(r) = \frac{U_{3m}}{72\pi} (k_F r_3)^3 \theta(r_3 - r) \left[\left(\frac{r}{r_3} \right)^3 - 12 \left(\frac{r}{r_3} \right) + 16 \right], \quad (37)$$

$$b_1 = \frac{5\pi^2}{6} \rho^2(0) U_{3m} r_3^6 = \frac{5}{216\pi^2} U_{3m} (k_F r_3)^6 = 0,0023 \cdot U_{3m} (k_F r_3)^6,$$

$$b_2 = \frac{U_{3m}}{12\pi^2} \left[B_3(k_F r_3) - 12(k_F r_3)^2 B_1(k_F r_3) + 16(k_F r_3)^3 B_0(k_F r_3) \right],$$

где $B_n(z) \equiv \int_0^z y^n j_1^2(y) dy$. Рассчитанные по приведенным формулам зависимости эффективной массы от

плотности числа частиц с учетом трехчастичных сил показаны на рис. 1 (кривые 2, 3). Учет трехчастичных сил с отрицательной постоянной взаимодействия $U_{3m} < 0$ приводит к возрастанию эффективной массы при увеличении плотности, что находится в качественном соответствии с экспериментально наблюдаемой зависимостью эффективной массы от давления в ^3He [17,18]. Заметим, однако, что при этом уменьшается скорость роста давления с увеличением плотности. Хотя учет трехчастичных сил притяжения дает более близкую к эксперименту зависимость эффективной массы от плотности, тем не менее, задача объяснения наблюдаемой зависимости на микроскопическом уровне остается актуальной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе варианта теории самосогласованного поля для ферми-систем, сформулированного в [8,9], получены общие формулы для эффективной массы и уравнения состояния. Обсуждается вопрос об учете влияния сильного отталкивания частиц на малых расстояниях (жесткой сердцевины) при расчетах в модели самосогласованного поля. В силу того, что расчеты с волновыми функциями вида плоской волны не учитывают невозможность сближения частиц на расстояние меньше размера жесткой сердцевины, вклад отталкивания во все величины в таких расчетах оказывается существенно завышенным [4]. Чтобы обойти указанную трудность, в данной работе предлагается при расчетах использовать эффективные потенциалы, отличные от потенциалов взаимодействия свободных атомов, аналогично тому, как это делается при самосогласованных расчетах атомных ядер [6,7]. Дальнедействующая часть эффективного потенциала, описывающая притяжение, выбирается такой же, как и в обычных модельных потенциалах, а энергия отталкивания является подгоночным параметром, который находится из сравнения с экспериментальными величинами.

Численные расчеты эффективной массы квазичастицы, давления и химического потенциала при нулевой температуре выполнены для эффективного потенциала с дальнедействующей частью в виде потенциала Морзе. Показано, что силы отталкивания способствуют уменьшению эффективной массы, а силы притяжения – ее возрастанию. При определенном выборе параметров потенциала зависимость давления от плотности имеет немонотонный характер, что позволяет описать сосуществование жидкой и газовой фаз. Рассчитанная эффективная масса квазичастицы убывает с увеличением плотности, что не соответствует экспериментально наблюдаемой зависимости в жидком ^3He . Высказано предположение, что причиной отмеченного расхождения могут являться эффекты, обусловленные действием трехчастичных сил. Рассмотрено влияние трехчастичных взаимодействий на уравнение состояния и эффективную массу и показано, что в случае притяжения трехчастичные силы приводят к росту эффективной массы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Landau L.D. The theory of a Fermi liquid // Sov. Phys. JETP. – 1957. – Vol. – No. 6. – P. 920-925.
2. Pines D., Nozieres P. The theory of quantum liquids. Vol. I. – New York: Benjamin, 1966.
3. Lifshitz E.M., Pitaevskii L.P. Statistical physics. Vol. 9 (Part 2). – Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980.
4. Jastrow R. Many-body problem with strong forces // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 98. – No.5. – P. 1479-1484.
5. Thouless D.J. The quantum mechanics of many-body systems. – New York: Academic Press, 1972.

6. Skyrme T.H.R. The effective nuclear potential // Nucl. Phys. – 1959. – Vol. 9. – P. 615-634.
7. Barts B.I., Bolotin Yu.L., Inopin E.V., Gonchar V.Yu. Metod Hartri-Foka v teorii jadra (in Russian). – Kiev: Naukova Dumka, 1982.
8. Poluektov Yu.M. On the quantum-field description of many-particle Fermi systems with spontaneously broken symmetry // Ukr. J. Phys. – 2005. – Vol. 50. – No. 11. – P. 1303-1316; [arXiv:1303.4913](https://arxiv.org/abs/1303.4913) [cond-mat.stat-mech].
9. Poluektov Yu.M., Soroka A.A., Shulga S.N. The self-consistent field model for Fermi systems with account of three-body interactions // [arXiv:1503.02428](https://arxiv.org/abs/1503.02428) [cond-mat.stat-mech].
10. Bazarov I.P. Statisticheskaja teorija kristallicheskogo sostojanija (in Russian). – Moskva: Izd. Moskovskogo universiteta, 1972.
11. Aziz R.A., Slaman M.J. An examination of *ab initio* result for the helium potential energy curve // J. Chem. Phys. – 1991. – Vol. 94. – No.12. – P. 8047-8053.
12. Anderson J.B., Traynor C.A., Boghosian B.M. An exact quantum Monte Carlo calculation of the helium-helium intermolecular potential // J. Chem. Phys. – 1993. – Vol. 99. – No.1. – P. 345-351.
13. Brueckner K.A. Teorija jadernoi materii (in Russian). – Moskva: Mir, 1964.
14. Sarry A.M., Sarry M.F. On multiparticle interaction // Tech. Phys. – 2014. – Vol.9. – No. 4. – P. 474-481.
15. Hammer H-W., Nogga A., Schwenk A. Colloquium: Three-body forces: From cold atoms to nuclei // Rev. Mod. Phys. – 2013. – Vol. 85. – No.1. – P. 197-216.
16. Sarkar A.K., Sengupta S. Three body interaction in ionic crystals // Solid State Commun. – 1969. – Vol. 7. – P. 135-137.
17. Peshkov V.P. Properties of ^3He and of its solutions in ^4He // Sov. Phys. Usp. – 1968. – Vol.11. – P. 209-228.
18. Wheatley J.C. Experimental properties of the extraordinary phases of liquid ^3He at millikelvin temperatures // Physica. – 1973. – Vol. 73. – P. 218-244; (see also «Sverhtekuchest geliya-3, Ed. by I.M. Khalatnikov. – Moskva: Mir, 1975).
19. Radzig A.A., Smirnov B.M. Spravochnik po atomnoi i molekularnoj fizike (in Russian). – Moskva: Atomizdat, 1980.