

Фазовый переход гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в гелии

П. Н. Николаев^{1,*}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 21.01.2024; после доработки 06.02.2024; подписана в печать 09.02.2023)

В работе рассчитаны характеристики фазового перехода гранецентрированный кубический кристалл – однородная фаза в гелии на основе корреляционного ячеечно-кластерного разложения. Проведено сравнение теоретических данных с данными эксперимента и получено хорошее совпадение. Обсуждается использование данных о фазовых переходах в гелии для оценки термодинамических характеристик фазового перехода в квантовой системе твердых сфер.

PACS: 05.70.Ce, 05.70.Fh. УДК: 536

Ключевые слова: термодинамические функции и уравнения состояния, фазовые переходы.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.79.2420102](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.79.2420102)

ВВЕДЕНИЕ

Фазовая диаграмма гелия на протяжении длительного времени является предметом интенсивных исследований [1–18]. Причина состоит в том, что здесь наблюдается целый ряд принципиально новых наблюдаемых эффектов, которых нет в других системах, а также важность объяснения этих эффектов для решения целого ряда прикладных инженерных проблем [1, 4, 6, 18].

Самым поразительным фактом является то, что гелий не затвердевает даже при $T = 0$ (здесь T — абсолютная температура), пока не будет приложено внешнее необходимое давление [18]. Среди простых моделей, способных объяснить это явление, следует отметить квантовую систему твердых сфер, исследование которой во многом определялось именно стремлением понять природу фазовых переходов в гелии [19–25].

В последнее время стали интенсивно исследоваться кинетические эффекты в кластерных системах, состоящих из атомов, способных образовывать квантовые кристаллы (к таким атомам, кроме гелия, обычно относят также неон, аргон, криптон, ксенон и радон), их необычные термодинамические свойства, а также поведение атомов данного типа в порах и в смесях [26–37]. Свойства веществ значительно отличаются в зависимости от того, находятся ли они в больших объемах или в микрополостях, что важно для технологических применений, а также при описании фазовых переходов [29, 30].

Много работ посвящено бинарным смесям ^4He и ^3He , где были обнаружены свойства, существенно отличающиеся от свойств обычных веществ [38–42]. Изучение малых гелиевых кластеров дает возмож-

ность найти связь между квантовым микромиром и термодинамическим макромиром [26, 43, 44].

Необычное поведение гелия проявляется и при высоких температурах [3–6, 11]. Оно во многом обусловлено малой массой и слабым взаимодействием между частицами [2]. В результате даже в этой области температур описание такой системы должно быть квантово-механическим [4, 7, 12, 27, 36].

Несмотря на то, что квантовые кристаллы даже при низких температурах являются сильно ангармоническими [1, 2, 37, 42], то есть здесь при разложении в ряд по степеням отклонения от положения равновесия нельзя ограничиться лишь квадратичными членами, для их исследования обычно используют представление о фонах [2]. Для этого проводится перенормировка и вводится эффективный потенциал, учитывающий короткодействующие корреляции [18].

Но данный подход приводит в области фазового перехода к плохо сходящимся рядам для квантовых кристаллов, у которых смещения из положения равновесия значительны [7, 10]. Для решения данной проблемы в настоящей работе используется корреляционное ячеечно-кластерное разложение [45]. Данное разложение позволяет описать не только кристаллическую, но и однородную фазу, а также фазовый переход между ними [34]. В целом фазовая диаграмма гелия имеет исключительно сложную структуру, которая до настоящего времени полностью не исследована [1, 5, 8, 9, 17, 41].

Редкий изотоп гелия ^3He стал доступен после Второй мировой войны как побочный продукт при создании ядерного оружия, а в достаточных количествах — примерно с 1965 г. [46]. После этого начались интенсивные исследования как данного изотопа, так и смесей изотопов гелия, их смесей с другими веществами, поведения кластеров данных изотопов [38–41].

* E-mail: nikolaev@phys.msu.ru

Одним из наиболее важных результатов этих работ было обнаружение в ${}^3\text{He}$ сверхтекучести [39, 40, 46, 47]. Таким образом, сверхтекучесть — это также общее свойство обоих изотопов, но характерное для различных областей их фазовых диаграмм [46].

В многочисленных исследованиях было установлено, что в свойствах фазовых диаграмм изотопов гелия, с одной стороны, есть целый ряд общих характеристик, а с другой — их диаграммы значительно отличаются от диаграмм неона, аргона, криптона, ксенона и радона, то есть других инертных газов [18]. Поиск причин этого составляет предмет целого ряда исследований [1, 18, 40]. Это касается не только равновесных, но и неравновесных свойств [48–53].

Целью настоящей работы является изучение фазового перехода гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в гелии, происходящего при относительно высоких температурах. Фазовый переход данного типа обычно исследуется в системе твердых сфер [20–24], а полученные результаты часто сравниваются с результатами для гелия [18, 20–22, 25]. В работе обсуждается правомерность такого сравнения.

1. КОРРЕЛЯЦИОННОЕ ЯЧЕЕЧНО-КЛАСТЕРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

В настоящей работе мы будем рассматривать простейший случай системы из N одинаковых одноатомных молекул, заключенных в некотором макроскопическом объеме V [45]. В этом случае положение молекулы полностью определено заданием вектора q_i ($i = 1, 2, \dots, N$), декартовы координаты которого равны q_i^α ($\alpha = 1, 2, 3$). Для атомов гелия гамильтониан можно представить в виде

$$H_N = \sum_{\substack{1 \leq i \leq N \\ \alpha=1,2,3}} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^{\alpha 2}} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|q_i - q_j|). \quad (1)$$

В выражении (1) $\Phi(r)$ — двухпараметрический потенциал Леннарда–Джонса [13, 18] с параметрами ε и σ , m — масса молекулы. Наряду с потенциалом Леннарда–Джонса существуют и более точные потенциалы взаимодействия между атомами гелия [14, 15, 35]. Но проведенные вычисления показывают, что основные особенности фазового перехода в рассматриваемой области, то есть при относительно высоких температурах, можно получить и с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса.

В работе рассматривается фазовый переход при температурах выше тройной точки, в которой находятся в равновесии две кристаллические структуры — гексагональная плотноупакованная и гранецентрированная кубическая, а также однородная фаза [1, 18]. Для ${}^4\text{He}$ температура этой тройной точки равна 14.9K , а для ${}^3\text{He}$ — 17.8K [18, 39]. У этих изотопов критические температуры соответственно равны 5.19K и 3.31K [39]. То есть рассматриваемые температуры значительно выше критической. Для

рассматриваемых температур мы можем использовать больцмановскую статистику [18, 52].

Будем использовать корреляционное ячеечно-кластерное разложение. Оно основано на методе Урселла, предполагающем разложение для больцмановских факторов специального типа [45, 52, 54].

Разобьем объем рассматриваемой системы на N одинаковых ячеек [45]. Отметим, что, вводя ячеечную структуру в системе, мы не накладываем никаких ограничений на поведение системы. Такое разбиение вводится для построения теории возмущений.

Определим связный s -частичный кластер как систему, состоящую из s ячеек, каждая из которых имеет по крайней мере с одной из ячеек данной совокупности общую границу размерности $(d - 1)$, где d — размерность пространства. Из определения непосредственно следует, что одна ячейка представляет собой одночастичный связный кластер. Тогда разбиение объема на N ячеек — это разбиение на N одночастичных кластеров.

Любая из частиц системы, находящаяся в объеме V , будет также находиться в одной из ячеек. В основном (или нулевом, как обычно принято называть) приближении учитываем влияние на рассматриваемую частицу со стороны остальных $(N - 1)$ -й частиц в виде некоторого эффективного поля, которое в данной работе выбираем в виде приближения самосогласованного поля [45, 52]. То есть в данном приближении гамильтониан системы — это сумма независимых гамильтонианов H_1 .

Определим эффективное поле для i -й частицы, находящейся в ячейке с номером k , в виде

$$u_1^k(q_i) = \sum_{\substack{1 \leq m \leq N \\ (m \neq k)}} \varphi_m^k(q_i), \quad (2)$$

где $\varphi_m^k(q_i)$ — некоторая функция, характеризующая суммарное влияние частиц, находящихся в ячейке m , на частицу в ячейке k с координатой q_i . Обычно φ_m^k в (2) используют в приближении самосогласованного поля.

Эффективное поле для системы в целом определяется как

$$u_1(q_i) = \sum_{1 \leq k \leq N} u_1^k(q_i). \quad (3)$$

Запишем гамильтониан для i -й частицы, движущейся в этом эффективном поле:

$$H_1(i) = \sum_{\alpha=1,2,3} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^{\alpha 2}} + u_1(q_i). \quad (4)$$

В данном одночастичном приближении движения частиц независимы и гамильтониан системы в целом равен сумме гамильтонианов отдельных частиц, определяемых соотношениями (3) и (4).

Для последовательного учета корреляций необходимо ввести двух-, трех-, ..., s -частичные связные кластеры.

Двухчастичный связный кластер состоит из двух соседних ячеек вне зависимости от размерности пространства. Введем эффективное поле для двух частиц, находящихся в ячейках k и l , относящихся к одному двухчастичному связному кластеру

$$u_2^{kl}(q_i, q_j) = \sum_{\substack{1 \leq m \leq N \\ (m \neq k, l)}} [\varphi_m^k(q_i) + \varphi_m^l(q_j)]. \quad (5)$$

Тогда эффективное поле двухчастичных кластеров (5) для системы в целом определится как

$$u_2(q_i, q_j) = \sum_{k, l} u_2^{kl}(q_i, q_j), \quad (6)$$

где в (6) суммирование по k и l осуществляется так, чтобы они одновременно относились к одному и тому же двухчастичному связному кластеру.

Если же ячейки, где находятся частицы i и j , относятся к различным двухчастичным кластерам, то

$$u_2(q_i, q_j) = u_1(q_i) + u_1(q_j). \quad (7)$$

То есть корреляции двух частиц сохраняется лишь в двухчастичных связных кластерах, а в разных двухчастичных кластерах этой корреляции нет. Эффективное поле (6) становится равным сумме полей двух одночастичных кластеров (7).

При наличии взаимодействия частиц посредством двухчастичного потенциала $\Phi(r)$ двухчастичный гамильтониан для i -й и j -й частиц будет равен:

$$H_2(i, j) = \sum_{\alpha=1,2,3} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^{\alpha 2}} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_j^{\alpha 2}} \right) + \Phi(|q_i - q_j|) + u_2(q_i, q_j). \quad (8)$$

Для учета трехчастичных корреляций вводятся трехчастичные связные кластеры, на которые де-

лится весь занимаемый системой объем. Эффективное поле для трех частиц, находящихся в ячейках k , l и p , относящихся к одному трехчастичному связному кластеру, определим соотношением

$$u_3^{klp}(q_i, q_j, q_n) = \sum_{\substack{1 \leq m \leq N \\ (m \neq k, l, p)}} [\varphi_m^k(q_i) + \varphi_m^l(q_j) + \varphi_m^p(q_n)]. \quad (9)$$

Для системы в целом эффективное поле трехчастичных связных кластеров (9) определится как

$$u_3(q_i, q_j, q_n) = \sum_{k, l, p} u_3^{klp}(q_i, q_j, q_n), \quad (10)$$

где суммирование в (10) по k , l и p осуществляется так, чтобы они одновременно относились к одному и тому же трехчастичному связному кластеру.

Если одна из частиц, например n , находится в другом трехчастичном связном кластере, то

$$u_3(q_i, q_j, q_n) = u_2(q_i, q_j) + u_1(q_n). \quad (11)$$

Что касается вида $u_2(q_i, q_j)$ в (11), то его вид определяется тем, находятся ли частицы i и j в связном двухчастичном кластере, принадлежащем данному связному трехчастичному кластеру, или нет. В первом случае используется соотношение (6), а во втором — (7).

Если же все три частицы находятся в различных связных трехчастичных кластерах, то

$$u_3(q_i, q_j, q_n) = u_1(q_i) + u_1(q_j) + u_1(q_n). \quad (12)$$

Соотношения (10), (11) и (12) исчерпывают все варианты, которые возникают при рассмотрении трехчастичного эффективного потенциала на совокупности связных трехчастичных кластеров. Они обеспечивают, с одной стороны, учет многократного заполнения ячеек, а с другой — выполнение условий ослабления корреляций.

Теперь мы можем записать выражение для трехчастичного гамильтониана:

$$H_3(i, j, n) = \sum_{\alpha=1,2,3} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_i^{\alpha 2}} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_j^{\alpha 2}} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q_n^{\alpha 2}} \right) + \Phi(|q_i - q_j|) + \Phi(|q_i - q_n|) + \Phi(|q_j - q_n|) + u_3(q_i, q_j, q_n). \quad (13)$$

Аналогичным образом строятся и другие i -частичные гамильтонианы H_i .

Введем теперь i -частичные больцмановские факторы соотношениями

$$W_i = e^{-\frac{1}{\theta} H_i}. \quad (14)$$

Здесь $\theta = kT$, T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана, а H_i определяются выражениями (4), (8), (13) и далее по аналогии. Следуя Урселлу [45, 52–54], осуществим групповое разложение для больцмановских факторов (14). Оно представляет переход к корреляционным операторам G_i ($i = 2, \dots, N$):

рам G_i ($i = 2, \dots, N$):

$$\begin{aligned} W_2(1, 2) &= W_1(1)W_1(2) + G_2(1, 2), \\ W_3(1, 2, 3) &= W_1(1)W_1(2)W_1(3) + W_1(1)G_2(2, 3) + \\ &+ W_1(2)G_2(3, 1) + W_1(3)G_2(1, 2) + G_3(1, 2, 3), \\ &\dots \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} e^{-\frac{1}{\theta} H_N} &\equiv W_N(1, 2, \dots, N) = \prod_{1 \leq i \leq N} W_1(i) + \\ &+ \sum_{1 \leq i < j \leq N} G_2(i, j) \prod_{\substack{1 \leq k \leq N \\ (k \neq i, j)}} W_1(k) + \dots \end{aligned}$$

Данное разложение, по сравнению с майеровским,

обладает большей общностью и применимо к квантово-механическим системам.

Новые операторы G_i однозначно определяются бoльцмановскими факторами W_i из соотношений (15):

$$\begin{aligned} G_2(1, 2) &= W_2(1, 2) - W_1(1)W_1(2), \\ G_3(1, 2, 3) &= W_3(1, 2, 3) - W_1(1)W_2(2, 3) - \\ &\quad - W_1(2)W_2(3, 1) - W_1(3)W_2(1, 2) + \\ &\quad + 2W_1(1)W_1(2)W_1(3), \\ &\quad \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Вместе с тем, операторы G_i ($i = 2, \dots, N$), выраженные через W_i , однозначно определяют бoльцмановские факторы согласно (15).

N -частичный бoльцмановский фактор, определяющий статистическую сумму, может быть выражен в виде ряда по комбинациям бoльцмановских факторов W_i . В результате преобразований находим ряд теории возмущений для свободной энергии:

$$\begin{aligned} F &= -\theta \ln \frac{Z_1^N}{N!} - \frac{N(N-1)}{2Z_1^2} \theta \times \\ &\quad \times \text{Tr}_{1,2} (W_2(1, 2) - W_1(1)W_1(2)) + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь

$$Z_1 = \text{Tr} W_1(1). \quad (18)$$

Полученное выражение для свободной энергии (17) с Z_1 , определяемым выражением (18), позволяет построить термодинамику рассматриваемой системы, в том числе и описать фазовый переход. В качестве основного приближения используем приближение самосогласованного поля [18, 52].

Для вычисления свободной энергии с точностью, достаточной для описания фазового перехода графцентрированный кубический кристалл — однородная фаза в гелии, как показали расчеты, информация о которых представлена ниже, в выражении (17) достаточно учитывать корреляции до трехчастичных включительно. В качестве критерия выступает согласие с данными эксперимента [18] в пределах их точности.

2. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД И ЕГО ХАРАКТЕРИСТИКИ

При исследовании фазового перехода необходимо получить выражение для химического потенциала μ , связанного со свободной энергией системы (17) соотношением

$$\mu = \frac{F}{N} + pv, \quad (19)$$

где $v = \frac{V}{N}$ — объем в расчете на одну частицу, p — давление, определяемое на основе выражения для свободной энергии

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_\theta = - \left(\frac{\partial F/N}{\partial v} \right)_\theta. \quad (20)$$

Найденное из (19) выражение для химического потенциала с использованием соотношений (17) и (20) является функцией v и θ . Для перехода к переменным p и θ соотношение (20) необходимо разрешить относительно $v = v(p, \theta)$ и подставить в (19). В тех случаях, когда это составляет сложную проблему, можно использовать соотношения (19) и (20) для параметрического задания функции $\mu(p, \theta)$, считая v параметром.

Для проведения численных расчетов переходим к безразмерным переменным. При этом используем два параметра: длины, в качестве которой используем параметр потенциала Леннарда-Джонса σ , и энергии ε_0 , выбирая $\varepsilon_0 = \frac{h^2}{2\pi m \sigma^2} = \frac{2\pi \hbar^2}{m \sigma^2} = \frac{\Lambda^2}{2\pi} \varepsilon$, где $\Lambda = \frac{h}{\sigma \sqrt{m \varepsilon}}$ — параметр де Бура [18]. Данный параметр характеризует роль квантовых эффектов веществ. Для рассматриваемых кристаллов он равен: для ${}^4\text{He}$ $\Lambda = 2.7$ и для ${}^3\text{He}$ $\Lambda = 3.1$.

В приведенных переменных гамильтониан системы запишется в форме:

$$\bar{H}_N = \sum_{\substack{1 \leq i \leq N \\ \alpha=1,2,3}} -\frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_i \alpha^2} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \bar{\Phi}(|x_i - x_j|). \quad (21)$$

Здесь $\bar{H}_N = H_N/\varepsilon_0$, $x_i = q_i/\sigma$,

$$\bar{\Phi}(\bar{r}) = \frac{\Phi}{\varepsilon_0} = \frac{8\pi}{\Lambda^2} \left[\frac{1}{\bar{r}^{12}} - \frac{1}{\bar{r}^6} \right], \quad (22)$$

$\bar{r} = r/\sigma$. Таким образом, отличие уравнений состояния для ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ в рассматриваемом приближении определяется параметром де Бура Λ .

Аналогичным образом определяются приведенные функции $\bar{u}_i = u_i/\varepsilon_0$ и гамильтонианы $\bar{H}_i = H_i/\varepsilon_0$.

При использовании гамильтониана системы (1) в форме (21) с потенциалом взаимодействия в форме (22) запишем выражение для свободной энергии (17) также в приведенном виде, используя для этого выражения $\bar{F} = F/\varepsilon_0$, $\bar{\theta} = \theta/\varepsilon_0$:

$$\begin{aligned} \bar{F} &= -\bar{\theta} \ln \frac{Z_1^N}{N!} - \frac{N(N-1)}{2Z_1^2} \bar{\theta} \times \\ &\quad \times \text{Tr}_{1,2} (W_2(1, 2) - W_1(1)W_1(2)) + \dots \end{aligned} \quad (23)$$

Аналогично представим выражение для химического потенциала (19)

$$\bar{\mu} = \frac{\bar{F}}{N} + \bar{p}\bar{v}. \quad (24)$$

Здесь $\bar{\mu} = \mu/\varepsilon_0$, $\bar{p} = p\sigma^3/\varepsilon_0$, $\bar{v} = v/\sigma^3$.

И, наконец, выражение для давления (20) в приведенном виде запишется как

$$\bar{p} = - \left(\frac{\partial \bar{F}/N}{\partial \bar{v}} \right)_\theta. \quad (25)$$

Соотношения (23)–(25) позволяют вычислить основные характеристики фазового перехода. Все расчеты проводились в статистическом пределе, то есть при $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $V/N = \text{const}$.

Решение уравнений (23)–(25) проводилось численно. Нахождение одночастичных, двухчастичных и трехчастичных статистических сумм сводится к решению соответствующих вариационных задач. Пробные функции для двух- и трехчастичной задач выбирались с использованием функций Ястрова [18].

При расчетах рассмотрены два случая выбора основного приближения — это либо система мягких сфер, либо система твердых сфер [52]. Мы получаем $\varphi_m^k(q_i)$ в (2) как решение задачи в приближении самосогласованного поля для этих двух случаев и строим два варианта теории возмущений.

Расчеты, проведенные для ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$, показали хорошее совпадение найденных теоретических результатов с данными эксперимента (их различие находится в пределах точности экспериментальных данных), если в качестве основного приближения использовать систему мягких сфер, то есть оттачивающую часть потенциала (22). В работе приведены результаты расчетов для ${}^4\text{He}$, так здесь известно большее количество экспериментальных данных.

На рис. 1 приведена зависимость давления от температуры в приведенных единицах при фазовом переходе гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в ${}^4\text{He}$. Сплошная линия — результаты теоретических расчетов при учете трехчастичных корреляций включительно, в качестве основного приближения используется система мягких сфер, а пунктирная линия — в качестве основного приближения используется система твердых сфер. Точками обозначены экспериментальные данные, размер которых соответствует точности эксперимента [18].

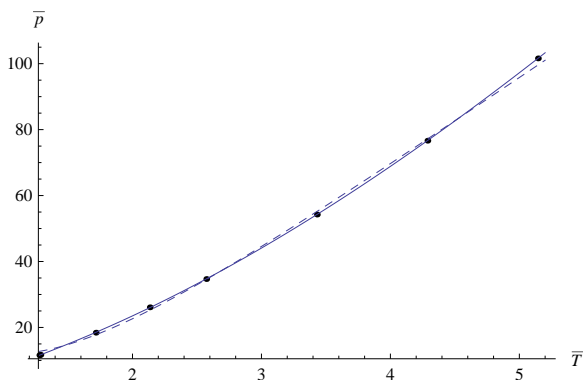


Рис. 1. Зависимость давления от температуры в приведенных единицах при фазовом переходе гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в ${}^4\text{He}$. Сплошная линия — результаты теоретических расчетов при учете трехчастичных корреляций включительно, в качестве основного приближения используется система мягких сфер, а пунктирная — когда в качестве основного приближения используется система твердых сфер. Точками обозначены экспериментальные данные

Из рисунка видно, что если в качестве основного приближения использовать систему мягких сфер,

то совпадение хорошее, а если использовать систему твердых сфер как основное приближение, то совпадение теоретических результатов и эксперимента становится хуже, но удовлетворительно при качественном рассмотрении.

Зависимость объема, приходящегося на одну частицу, в приведенных единицах для твердой и однородной фаз в зависимости от температуры в приведенных единицах при фазовом переходе гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в ${}^4\text{He}$ приведены на рис. 2. Экспериментальные данные обозначены квадратами для однородной фазы и кружками — для твердого тела, размер которых соответствует точности эксперимента [18]. Сплошные линии — результаты теоретических расчетов при учете трехчастичных корреляций включительно, в качестве основного приближения используется система мягких сфер, а пунктирные — когда в качестве основного приближения используется система твердых сфер.

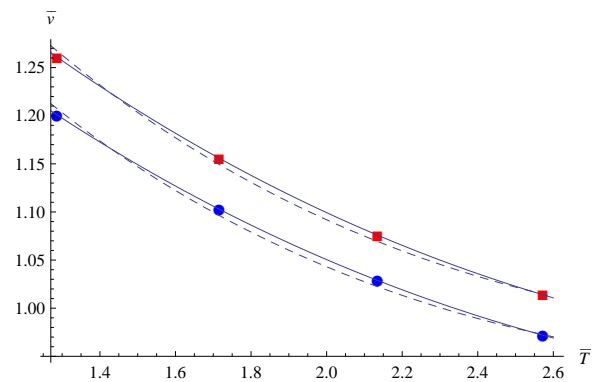


Рис. 2. Зависимость объема, приходящегося на одну частицу, в приведенных единицах для твердой и однородной фаз в зависимости от температуры в приведенных единицах при фазовом переходе гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в ${}^4\text{He}$. Экспериментальные данные обозначены квадратами для однородной фазы и кружками — для твердого тела. Сплошные линии — результаты теоретических расчетов при учете трехчастичных корреляций включительно, в качестве основного приближения используется система мягких сфер, а пунктирные — когда в качестве основного приближения используется система твердых сфер

И в данном случае мы можем сделать вывод о хорошем совпадении теоретических результатов с экспериментальными данными, если в качестве основного приближения используется система мягких сфер, а если использовать систему твердых сфер как основное приближение, то совпадение теоретических результатов и эксперимента становится хуже, но удовлетворительно при качественном рассмотрении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассчитаны характеристики фазового перехода гранецентрированный кубический кристалл — однородная фаза в гелии на основе корреляционного ячеечно-кластерного разложения, происходящего при относительно высоких температурах.

Корреляционное ячеечно-кластерное разложение осуществляется для свободной энергии системы по методу Урселла с использованием связанных кластеров. В результате учитывается и возможность многократного заполнения ячеек. Такой метод позволяет описать как однородную, так и упорядоченную фазы с единых позиций, а также фазовый переход между ними.

Найденное выражение для химического потенциала позволило вычислить давление при фазовом пе-

реходе как функцию температуры, а также зависимость от температуры объема, приходящегося на одну частицу. В работе используется потенциал взаимодействия между частицами Леннарда-Джонса, который, как показали расчеты, позволяет хорошо описать фазовый переход в рассматриваемой области для ^3He и ^4He , если в качестве основного приближения использовать системы мягких сфер. В данном случае различие результатов для ^3He и ^4He определяется параметром де Бюра.

Если же в качестве основного приближения использовать систему твердых сфер, то совпадение теоретических результатов с экспериментом становится хуже, но удовлетворительно при качественном рассмотрении. Это можно использовать для оценки термодинамических характеристик фазового перехода в квантовой системе твердых сфер.

-
- [1] *Nomura R., Okuda Y.* // *Rev. Mod. Phys.* **92**. 041003. (2020).
- [2] *Wiebe H., Underwood T.L., Ackland G.J.* // *J. Chem. Phys.* **153**. 074502. (2020).
- [3] *Crawford R.K., Daniels W.B.* // *J. Chem. Phys.* **53**. 5651. (1971).
- [4] *Gal J., Friedlander L.* // *Physica B: Cond. Matt.* **625**. 413445. (2022).
- [5] *Urlin V.D.* // *JETP* **127**. 121. (2018).
- [6] *Datchi F., Loubeyre P., LeToullec R.* // *Phys. Rev. B* **61**. 6535. (2000).
- [7] *Ree F.H., Kim J.H.* // *Mol. Phys.* **95**. N 2. 331. (1998).
- [8] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 2. 31. (2014). (*Nikolaev P.N.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **69**. 134. (2014)).
- [9] *Vos W.L., van Hinsberg M.G.E., Schouten J.A.* // *Phys. Rev. B* **42**. 6106. (1990).
- [10] *Driessen A., van der Poll E., Silvera I.F.* // *Phys. Rev. B* **33**. 3269. (1986).
- [11] *Mills R.L., Liebenberg D.H., Bronson J.C.* // *Phys. Rev. B* **21**. 5137. (1980).
- [12] *Rosenfeld Y., Thieberger R.* // *Phys. Rev. A* **15**. 1269. (1977).
- [13] *De Boer J., Michels A.* // *Physica* **5**. 945. (1938).
- [14] *De Beck D.E.* // *Mol. Phys.* **14**. 311. (1968).
- [15] *De Beck D.E.* // *Mol. Phys.* **15**. 332. (1968).
- [16] *Restrepo M.M., Myers E.G.* // *Phys. Rev. Lett.* **131**. 243002. (2023).
- [17] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 2. 43. (2014). (*Nikolaev P.N.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **69**. 146. (2014)).
- [18] *Rare gas solids.* **2**. London, Acad. Press, 1978.
- [19] *Jancovich B.* // *Phys. Rev.* **178**. 295. (1969).
- [20] *Hansen J.-P., Levesque D., Schiff D.* // *Phys. Rev. A* **3**. 776. (1971).
- [21] *Kalos M.H., Levesque D., Verlet L.* // *Phys. Rev. A* **9**. 2178. (1974).
- [22] *Runge K.J., Chester G.V.* // *Phys. Rev. B* **38**. 135. (1988).
- [23] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 3. 3 (2011). (*Nikolaev P.N.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **66**. 207. (2011)).
- [24] *Sese L.M.* // *J. Chem. Phys.* **139**. 044502. (2013).
- [25] *Стушов С.М.* // *УФН* **189**. 659. (2019).
- [26] *Kunitski M., Guan Q., Maschkiwitz H. et al.* // *Nature Phys.* **17**. 174. (2021).
- [27] *Brieuc F., Schran C., Uhl F. et al.* // *J. Chem. Phys.* **152**. 210901. (2020).
- [28] *Long A., Eloranta J.* // *J. Chem. Phys.* **155**. 074102. (2021).
- [29] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 2. 32. (2019). (*Nikolaev P.N.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **74**. 124. (2019)).
- [30] *Ерошенко Ю.Н.* // *УФН* **192**. 1295. (2022).
- [31] *Von Jeinsen N.A., Myers E.G.* // *Phys. Rev. Lett.* **131**. 236202. (2023).
- [32] *Alvarez-Galera E., Marti J., Mazzanti F., Batet L.* // *J. Chem. Phys.* **159**. 024501. (2023).
- [33] *Soter A., Aghai-Khozani H., Barna D. et al.* // *Nature*. **603**. 411. (2022).
- [34] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 4. 12. (2008). (*Nikolaev P.N.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **63**. 238. (2008)).
- [35] *Stroker P., Hellman R., Meier K.* // *Phys. Rev. E*. **105**. 064129. (2022).
- [36] *Von Jeinsen N.A., Myers E.G.* // *Phys. Rev. Lett.* **131**. 077201. (2023).
- [37] *Бражский В.В.* // *УФН* **191**. 1107. (2021).
- [38] *Tkaczuk J., Bell I.H., Lemmon E.W. et al.* // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **49**. 023101. (2020).
- [39] *Pan C., Zhang H., Rouille C. et al.* // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **50**. 043102. (2021).
- [40] *Коэн Э.* // *УФН* **129**. 140. (1979).
- [41] *Пешиков В.П.* // *УФН* **94**. 607. (1968).
- [42] *Trickey S.B., Kirk W.P., Adams E.D.* // *Rev. Mod. Phys.* **44**. 668. (1972).
- [43] *Думеш Б.С., Сурин Л.А.* // *УФН* **176**. 1137. (2006).
- [44] *Думеш Б.С., Потапов А.В., Сурин Л.А.* // *УФН* **179**. 317. (2009).
- [45] *Bazarov I.P., Nikolaev P.N.* // *Theoretical and Mathematical Physics.* **94**. 109. (1993).
- [46] *Ричардсон Р.К.* // *УФН* **167**. 1340. (1997).
- [47] *Osheroff D.D., Richardson R.C., Lee D.M.* // *Phys. Rev. Lett.* **28**. 885. (1972).
- [48] *Takata S., Matsumoto T., Hattory M.* // *Phys. Rev. E* **92**. 062110. (2021).

- [49] *Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G.* // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. **94**. 615. (1978).
- [50] *Grmela M.* // *J. Stat. Phys.* **3**. 347. (1971).
- [51] *Inozemtseva N.G., Sadovnikov B.I.* // *Theoretical and Mathematical Physics*. **31**. 448. (1977).
- [52] *Barker J.A., Henderson D.* // *Rev. Mod. Phys.* **48**. 587. (1976).
- [53] *Николаев П.Н.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* № 6. 2360101. (2023). (Nikolaev P.N. // *Moscow Univ. Phys. Bull.* **78**. 744. (2023)).
- [54] *Ursell H.D.* // *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **23**. N 6. 685. (1927).

Phase transition face-centered cubic crystal — homogeneous phase in helium

P. N. Nikolaev

Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

E-mail: nikolaev@phys.msu.ru

In this work, the characteristics of the phase transition face-centered cubic crystal — homogeneous phase in helium are calculated based on the correlation cell-cluster expansion. The theoretical data were compared with experimental data and good agreement was obtained. It is discussed the use of data on phase transitions in helium to estimate thermodynamic characteristics phase transition in a quantum system of hard spheres.

PACS: 05.70.Ce, 05.70.Fh.

Keywords: thermodynamic functions, equations of state, phase transitions.

Received 21 January 2024.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2024. **79**, No. 2. Pp. .

Сведения об авторе

Николаев Павел Николаевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: nikolaev@phys.msu.ru.