Письма в ЖЭТФ, том 51, вып. 8, стр. 403 – 405 *25 апреля 1990 г.*

К ТЕОРИИ ПЛАВЛЕНИЯ

А.Г.Храпак

В рамках дырочной теории жидкости и с учетом квантовой природы дырок (баблонов) получена асимптотика уравнения Симона $p \sim T^{8/5}$, хорошо согласующаяся с экспериментом в инертных газах.

Связь между давлением p и температурой T на кривой плавления нормальных веществ с хорошей точностью описывается эмпирическим уравнением Симона (см., напр. [1, 2])

$$p = AT^C + B. \tag{1}$$

Несмотря на ряд попыток, это уравнение не удалось удовлетворительно обосновать ни из первых принципов, ни даже из других законов плавления, таких, например, как полуэмпирическое уравнение Линдемана [3]. В настоящей работе делается попытка получить асимптотику уравнения Симона в рамках квазикристаллической (или дырочной) модели расплава [1, 4], где в качестве дефектов (или дырок) рассматриваются новые коллективные возбуждения – баблоны [5].

В [5] показано, что в жидкости не возможно создать микроскопический пузырек не возбудив одновременно его стенок. Квантование спектра этих колебаний и обязательное наличие нулевых колебаний приводит к заключению о наличии щели в энергетическом спектре пузырьков и невозможности создания пузырьков сколь угодно малого радиуса. Оценки, выполненные для He^4 дали для амплитуды нулевых колебаний R_0 значение близкое к радиусу элементарной ячейки, а для энергии нулевых колебаний E_0 покоящегося пузырька значение 19,4 К, близкое к 17 К – величине щели "многофононной" ветви спектра коллективных возбуждений жидкого He^4. Близость свойств пузырьков в основном состоянии к свойствам вакансионов в квантовых кристаллах [6] позволила говорить о них как о новых коллективных возбуждениях – баблонах, существующих в жидкости наряду с фононами и ротонами.

В [5] определен энергетический спектр баблонов только для случая нулевого давления. Однако, учитывая в энергии пузырька наряду с поверхностным членом $4\pi\sigma R^2$, также и объемный член $(4\pi/3)R^3 p$, нетрудно обобщить результаты на случай произвольных p. На рис. 1 приведены результаты расчета энергии основного состояния покоящегося баблона в идеальной несжимаемой жидкости с плотностью ρ и поверхностным натяжением σ, характерными для жидкого He^4.

Качественный вид зависимости $E_0(p)$ можно проанализировать не прибегая к квантованию уравнений гидродинамики несжимаемой жидкости, а исходя лишь из соображений размерности. Действительно, при $p = 0$, энергия нулевых колебаний полости в идеальной несжимаемой жидкости может быть функцией только трех параметров – ρ, σ и $\hbar$. Из этих параметров можно составить единственную комбинацию размерности энергии

$$E_0(0) \sim \hbar^{4/7} \sigma^{5/7} \rho^{-2/7} \tag{2}$$

Естественно это выражение с точностью до множителя порядка единицы совпадает с полученным в [5]. В предельном случае больших p можно пренебречь ролью поверхностных сил и положить $\sigma = 0$. Тогда из параметров ρ, p и $\hbar$ также можно составить лишь одну комбинацию размерности энергии

$$E_0(p) \sim \hbar^{3/4} \rho^{-3/8} p^{5/8}. \tag{3}$$

Эта зависимость при $p \to \infty$ хорошо аппроксимирует показанные на рис. 1 результаты гидродинамического расчета. Переход с одного режима на другой происходит в области, где безразмерный параметр

$$K = \hbar^2 p^7 \sigma^{-8} \rho^{-1} \tag{4}$$

становится равным единице. Отметим, что в He^4 при $T = 0$ $K = 1$ при давлении близком к давлению кристаллизации.

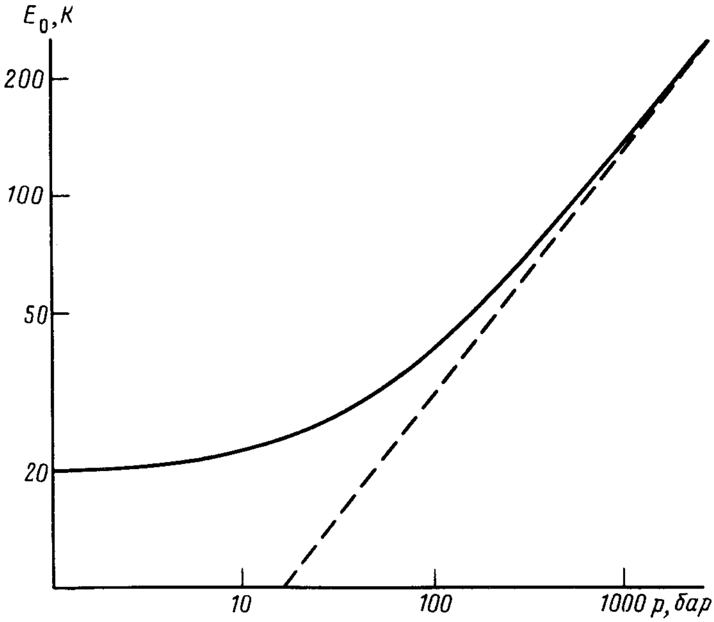

Рис. 1. Зависимость минимальной энергии образования баблона E_0 от давления p в жидком He^4. Пунктир – $E_0 \sim p^{5/8}$

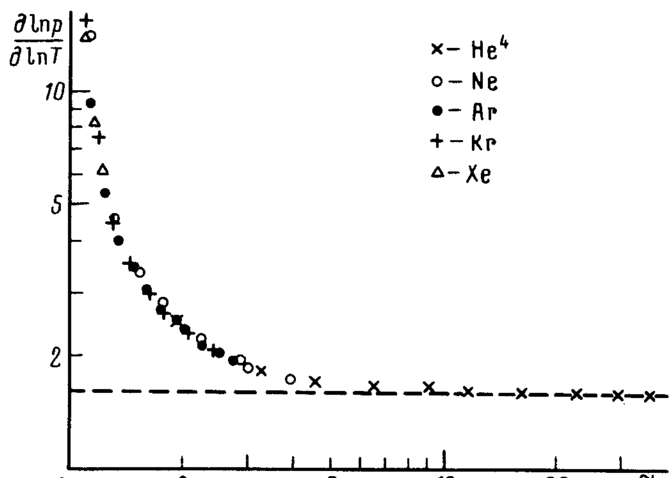

Рис. 2. Зависимость величины $\partial \ln p / \partial \ln T$ от приведенной температуры T на кривой плавления [7]. Пунктир – $\partial \ln p / \partial \ln T = C = 1{,}6$

Перейдем теперь к рассмотрению процесса плавления. В целом ряде простых веществ, в частности в инертных газах, относительное изменение объема при плавлении в области высоких давлений является константой. В рамках дырочной теории жидкости этот факт свидетельствует о постоянстве концентрации баблонов N_b на кривой плавления. Но так как $N_b \sim T^{\alpha}\exp(-E_0(p)/T)$, причем $E_0/T \gg 1$, то отсюда следует, что на кривой плавления $E_0(p) \sim T$. Учитывая (3), получаем, что при высоких давлениях связь между давлением и температурой на кривой плавления имеет вид

$$p \sim T^{8/5}, \qquad (5)$$

что совпадает с асимптотикой уравнения Симона при $C = 1{,}6$. Это значение хорошо согласуется с приведенными в таблице экспериментальными значениями C, полученными при обработке методом наименьших квадратов результатов измерений во всей области изменения параметров, вплоть до тройной точки (λ – точки в случае He^4) [7]

He^4	Ne	Ar	Kr	Xe
1,555	1,517	1,523	1,547	1,593

На рис. 2 отчетливо наблюдается выполнение закона подобия для зависимости величины $\partial \ln p/\partial \ln T$ от приведенной температуры $\tilde{T} = T/T_t$, где T_t – температура тройной точки (в случае He^4 $T_t = 0{,}774$ К – подгоночный параметр). Согласно уравнению Симона (1), при больших p эта величина должна стремиться к C, причем согласно нашей модели для всех нормальных веществ $C = 1{,}6$. Как видно из рис. 2, по крайней мере для инертных газов, этот факт хорошо согласуется с экспериментом и может быть использован для экстраполяции параметров кривой плавления в область экстремально высоких давлений и температур.

Предложенная модель неприменима к аномальным веществам, в которых при плавлении происходят резкие изменения структуры. Область применимости ограничена также классом тех веществ, для которых относительное изменение объема при плавлении постоянно вдоль всей кривой плавления. Теоретическое обоснование этого результата, делающего модель полуэмпирической, является предметом дальнейших исследований.

Автор выражает признательность С.И.Анисимову за обсуждение, полезные замечания.

Литература

1. *Уббелоде А.* Плавление и кристаллическая структура. М.: Мир, 1969.
2. *Стишов С.М.* УФН, 1968, **96**, 467.
3. *Crawford R.K.* Rare Gas Solids, vol. 2 (edited by M.L.Klein and J.A. Venables), Academic Press, N.Y., 1977, p. 663.
4. *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкостей. М.; Л.: Наука, 1975.
5. *Храпак А.Г.* Письма в ЖЭТФ, 1988, **47**, 372.
6. *Андреев А.Ф., Лифшиц И.М.* ЖЭТФ, 1969, **56**, 2055.
7. *Putten L., Schouten J.A.* High Temp.-High. Pressures, 1986, **18**, 393; 1987, **19**, 621.

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 марта 1990 г.