

## ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ПАРНОЇ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ РІДКОГО ${}^4\text{He}$

Р. О. Притула, І. О. Вакарчук

*Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 31 березня 2009 р.; в остаточному вигляді — 15 червня 2009 р.)

За допомогою знайденого в праці [І. О. Вакарчук, Р. О. Притула, Журн. фіз. досл. **12**, 4001 (2008)] виразу для парного структурного фактора бозе-рідини в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій розраховано парну функцію розподілу та пряму кореляційну функцію рідкого гелію-4. Усі кінцеві вирази записано через експериментально вимірюваний структурний фактор, екстрапольований до  $T \rightarrow 0$ , який узято як вихідну інформацію замість потенціалу міжчастинкової взаємодії. На основі отриманих виразів чисельно розраховано температурні залежності парної функції розподілу, які добре збігаються з експериментальними даними, та прямої кореляційної функції.

**Ключові слова:** рідкий  ${}^4\text{He}$ , структурний фактор, парна функція розподілу.

PACS number(s): 05.30.Jp, 67.20.+k, 67.25.bd, 67.40.-w, 67.40.Db, 67.40.Kh

### I. ВСТУП

Одна з основних задач фізики рідин — установити зв'язок між парною функцією розподілу  $F_2(R)$  і потенціалом попарної міжчастинкової взаємодії  $\Phi(R)$ . Івон уперше отримав ланцюжок рівнянь для  $s$ -частинкових функцій розподілу (див. [1, 2] і поклики там), а пізніше їх незалежно сформулювали у працях Боголюбов [3], Борн і Грін [4]. Результатом цих праць є нескінченна система лінійних інтегральних рівнянь, яку можна розв'язувати шляхом відповідних наближень. Ці наближення зводяться до обривання ланцюжка рівнянь. Кірквуд у праці [5] запропонував суперпозиційне наближення для тричастинкової функції розподілу і отримав замкнуте інтегродиференціальне рівняння для парної функції розподілу. В серії праць [6–15] автори різними методами одержували вищі наближення для суперпозиційного наближення Кірквуда [5]. Ще однією величиною, яка відіграє важливу роль у теорії рідин, є пряма кореляційна функція [1, 2, 16]. У працях [17–25] автори встановили зв'язок між прямою кореляційною функцією та парною функцією розподілу.

Уперше вираз для парної функції розподілу слабо-неідеального бозе-газу знайшов Боголюбов у працях з теорії надплинності [3]. Розрахована в такому наближенні парна функція розподілу непридатна для дослідження такої сильнонеідеальної бозе-системи, як рідкий гелій-4: на малих відстанях вона виявляється від'ємною, однак, за означенням, — додатно визначена функція. У серії праць [26–28] запропоновано метод, який допомагає уникнути цих труднощів: матриці густини мають експоненціальну форму, що забезпечує додатність функцій як на великих, так і на малих відстанях. Перші два члени розкладу експоненти в ряд відтворюють вираз для парної функції розподілу в наближенні Боголюбова [3]. У праці [26] для одновимірної бозе-системи експоненціальна форма виразу парної функції розподілу дала змогу отримати просту

залежність енергії основного стану від параметра взаємодії. Така залежність справедлива як для слабкої, так і сильної міжчастинкових взаємодій. Для потенціалу твердих сфер вираз для парної функції розподілу [26] на великих відстанях відтворює відомі вирази праць [29–32]. Вираз для парної функції розподілу основного стану рідкого гелію-4 в наближенні прямих три- та чотиричастинкових кореляцій знайдено в праці [28]. У ній для моделі класичного електронного газу в компенсуючому полі отримано для парної функції розподілу відомі вирази в теорії електролітів [33], що свідчить про застосовність виразу і в теорії класичних рідин. У праці [34] розвинено теорію збурень для бозе-конденсатної фракції рідкого гелію-4 через парну функцію розподілу. На сьогодні не знайдено температурної залежності парної функції розподілу для рідкого гелію-4.

Важливою причиною для дослідження парної функції розподілу є те, що ми можемо порівнювати її з експериментальними даними. Ця обставина відкриває можливість точнішої і чутливішої перевірки теоретичних моделей порівняно з простим дослідженням термодинамічних функцій. Експериментальні роботи з визначення парної функції розподілу базуються на дослідженні структурного фактора рідини, який безпосередньо добре визначається з дослідів із розсіяння рентгенівських променів, нейтронів чи електронів [35–40].

### II. ВИХІДНІ РІВНЯННЯ

У нашій попередній праці [41] за допомогою квантово-статистичного підходу на основі повної матриці густини [42] розраховано вираз для парного структурного фактора бозе-рідини в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій:

$$S(q) = \frac{\bar{S}_0(q)}{1 + [\lambda_q + \bar{\Pi}_q] \bar{S}_0(q)}, \quad (1)$$

де так званий масовий, або поляризаційний оператор

$$\bar{\Pi}_q = \frac{1}{2N\bar{S}_0^2(q)} \sum_{\substack{\mathbf{q}' \neq 0 \\ \mathbf{q}+\mathbf{q}' \neq 0}} \frac{\lambda_{q'}}{1 + \lambda_{q'}\bar{S}_0(q')} \left[ \bar{S}_0^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q}') - \frac{\lambda_{|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|}}{1 + \lambda_{|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|}\bar{S}_0(|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|)} \left[ \bar{S}_0^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q} - \mathbf{q}') \right]^2 \right]. \quad (2)$$

Тут  $N$  — кількість безспінових взаємодіючих бозе-частинок системи, що рухаються в об'ємі  $V$ , кожна з яких має масу  $m$ .

Величина

$$\lambda_q = \alpha_q \operatorname{th} \left( \frac{\beta E_q}{2} \right) - \operatorname{th} \left( \frac{\beta \bar{\varepsilon}_q}{2} \right) \quad (3)$$

визначає парні міжчастинкові кореляції,  $\beta = 1/T$  — обернена температура системи;

$$\bar{\varepsilon}_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2\bar{m}} \quad (4)$$

— це перенормований спектр вільної частинки. Величину  $\bar{m}$  трактуємо як повну ефективну масу частинки:

$$\frac{m^*}{\bar{m}} = 1 + F(T), \quad (5)$$

де

$$F(T) = \frac{1}{2\pi^2\rho} \int_0^\infty q^2 dq \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q\bar{S}_0(q)} \bar{n}_q (1 + \bar{n}_q) \times \left[ \frac{2}{3} \beta \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} (1 + 2\bar{n}_q) - 1 \right], \quad (6)$$

а  $m^*$  — “затравочна” ефективна маса частинки, через яку враховуємо внесок прямих багаточастинкових кореляцій:

$$\frac{m}{m^*} = 1 - \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2}{(1 + \lambda_q)(2 + \lambda_q)}. \quad (7)$$

Зауважимо, що у виразі (7) величину  $\lambda_q$  (3) беремо при  $\bar{m} = m$ :  $\lambda_q = \lambda_q|_{\bar{m}=m}$ . Поняття ефективної маси для рідкого гелію-4 вперше ввів Файнман [43]. Величина

$$\bar{n}_p = \frac{1}{\bar{z}^{-1} e^{\beta \bar{\varepsilon}_p} - 1} \quad (8)$$

— середня кількість бозе-частинок ідеального газу зі спектром  $\bar{\varepsilon}_p$ ,  $\bar{z}$  — його активність. Активність  $\bar{z}$  виключаємо з рівняння:

$$\sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_p = N. \quad (9)$$

Наступна величина з (3):

$$E_q = \alpha_q \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

— це спектр елементарних збуджень Боголюбова, де

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{2N}{V} \nu_q \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} \quad (10)$$

— боголюбівський фактор, а

$$\nu_q = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \Phi(R) d\mathbf{R} \quad (11)$$

— фур'є-образ потенціалу попарної міжчастинкової взаємодії  $\Phi(R)$ .

Відповідні вирази для парного, три- та незвідного чотиричастинкового структурних факторів ідеального бозе-газу є такими:

$$\bar{S}_0(q) = 1 + 2\frac{n_0}{N} n_q + \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{p} \neq 0 \\ \mathbf{p}+\mathbf{q} \neq 0}} \bar{n}_p \bar{n}_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_0^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q} - \mathbf{q}') &= 2\frac{n_0}{N} [\bar{n}_q \bar{n}_{q'} + \bar{n}_q \bar{n}_{|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|} + \bar{n}_{q'} \bar{n}_{|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|}] + \bar{S}_0(q) + \bar{S}_0(q') + \bar{S}_0(|-\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) - 2 \\ &+ \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_p \bar{n}_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|} \bar{n}_{|\mathbf{p}-\mathbf{q}'|}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_0^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q}') &= 2\frac{n_0}{N} [\bar{n}_{|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|} + \bar{n}_{|\mathbf{q}+\mathbf{q}'|}] \\ &\times [\bar{n}_q (1 + \bar{n}_q) + \bar{n}_{q'} (1 + \bar{n}_{q'})] \\ &+ 2 \left[ \bar{S}_0^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', -\mathbf{q} - \mathbf{q}') - \bar{S}_0(q) - \bar{S}_0(q') + 1 \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Тут параметр  $n_0/N$  — це бозе-конденсатна фракція вільних частинок зі спектром (4). В останньому доданку виразу (13) в кожному середньому  $\bar{n}_p$  хвильовий вектор  $\mathbf{p} \neq 0$ . Риска над величинами означає, що вони записані через перенормований спектр вільних частинок (4).

Компоненти хвильового вектора  $\mathbf{q}$  набувають цілочисельних значень, кратних до  $2\pi/V^{1/3}$ , а підсумовування за  $\mathbf{q}$  в термодинамічній межі:  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ ,  $N/V \rightarrow \text{const}$ , переходить в інтеграл:

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \dots$$

Як показано в праці [41], чисельні розрахунки парного структурного фактора (1) в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій добре узгоджуються з відповідними експериментальними значеннями.

### III. ПАРНА ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ

Усю термодинаміку системи можна побудувати за допомогою перших матриць густини, зокрема одно- та двочастинкової. У праці [44] запропоновано теорію збурень для розрахунку  $s$ -частинкових матриць густини. За допомогою такого підходу розраховано одно- частинкову матрицю густини для широкотемпературного діапазону. Наше завдання — розрахувати парну функцію розподілу.

Як відомо, парний структурний фактор бозе-рідини пов'язаний із парною, або бінарною, функцією розподілу таким виразом [45]:

$$S(q) = 1 + \frac{N-1}{V} \int [F_2(R) - 1] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d\mathbf{R}. \quad (15)$$

На великих відстаннях між частинками взаємодія спадає і їхнє взаємне розташування не скорельоване. Тому функція  $F_2(R) \rightarrow 1$ , при  $R \rightarrow \infty$ .

Зворотне перетворення Фур'є виразу (15), за означенням, дає нам залежність парної функції розподілу від парного структурного фактора бозе-рідини:

$$F_2(R) = 1 + \frac{1}{N-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} [S(q) - 1] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (16)$$

Ця формула дає змогу обчислити парну функцію розподілу через парний структурний фактор бозе-рідини, який добре визначається безпосередньо з дослідів із розсіяння рентгенівських променів, нейтронів чи електронів [35–40]. Саме такими виразами користуються експериментатори, опрацьовуючи дані для структурного фактора бозе-рідини.

За допомогою парного структурного фактора бозе-рідини можна також визначити пряму кореляційну функцію:

$$C(R) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left[ 1 - \frac{1}{S(q)} \right] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (17)$$

Як бачимо, всі кореляційні функції досить легко виразити через парний структурний фактор бозе-рідини, який досить добре визначається з експериментів.

### IV. ЧИСЕЛЬНІ РОЗРАХУНКИ

Щоб чисельно розрахувати знайдені вирази для рідкого гелію-4, використаємо як вихідну інформацію, замість коефіцієнта фур'є-енергії парної міжчастинкової взаємодії  $\nu_q$ , експериментально вимірюваний структурний фактор рідкого гелію-4  $S^{\text{exp}}(q)$ , екстрапольований до температури  $T \rightarrow 0$ .

Ураховуючи, що при  $T \rightarrow 0$  структурний фактор ідеального бозе-газу  $\tilde{S}_0(q) \rightarrow 1$ , парний структурний фактор бозе-рідини  $S(q)$  у формулі (1) заміняємо на експериментальний структурний фактор  $S^{\text{exp}}(q)$ , а з (3)  $\lambda_q \rightarrow \alpha_q - 1$ , то в низькотемпературній межі з формули (1) знаходимо величину

$$\alpha_q = \frac{1}{S^{\text{exp}}(q)} + \frac{1}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{q}_2 \neq 0 \\ \mathbf{q}_3 \neq 0 \\ \mathbf{q} + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = 0}} \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{q_2}} \right) \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{q_3}} \right) \quad (18)$$

в наближенні однієї суми за хвильовим вектором  $\mathbf{q}$ . Це є ітераційне рівняння для визначення величини  $\alpha_q$  при відомому експериментальному структурному факторі  $S^{\text{exp}}(q)$ . Усі інші величини можна переписати лише через  $\alpha_q$ . Фактично це рівність, яка закладає в нашій теорії збурень, замість потенціалу міжчастинкової взаємодії, точно вимірювану на сьогодні величину — парний експериментальний структурний фактор бозе-рідини.

Чисельні розрахунки ми проводили при рівноважній густині гелію  $\rho = 0.02185 \text{ \AA}^{-3}$ , масі частинок  $m = 4.0026$  а.о.м., швидкості звуку  $c = 238.2$  м/с у границі  $T \rightarrow 0$  [35] і критичній температурі ідеального бозе-газу  $T_c = 3.138$  К. Експериментальний структурний фактор рідкого  $^4\text{He}$ , екстрапольований до  $T = 0$ , беремо з праці [46].

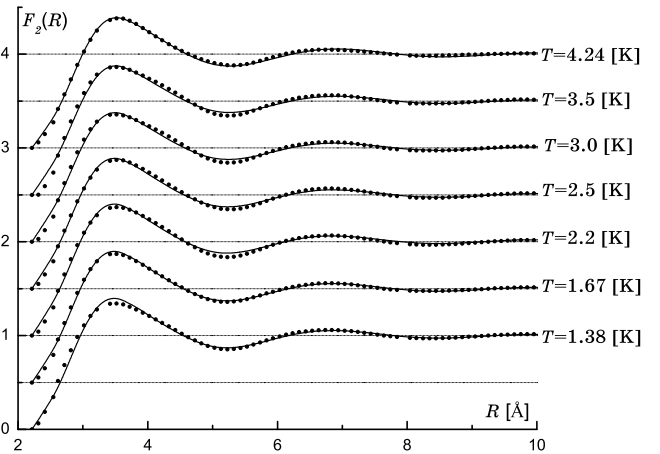


Рис. 1. Парна функція розподілу рідкого гелію-4. Суцільна лінія — в наближенні три- та чотиричастинкових непрямих кореляцій (16), пунктирна — експериментальні дані, взяті з праці [37] (для зручності ілюстрації графіків криві зміщено одна стосовно одної на 0.5).

Оскільки структурний фактор експериментально визначається для обмеженої області значень хвильового вектора  $\mathbf{q}$ :  $q_{\text{min}} < q < q_{\text{max}}$ , то перетворення Фур'є дає зайві максимуми та осциляції на залежності  $F_2(R)$  від  $R$ . Ми зіткнулися з відомою проблемою, коли потрібно згладжувати парну функцію розподілу (16) і покласти її рівною нулеві для відстаней  $R < 2.2 \text{ \AA}$ , щоб отримати правильну поведінку на малих відстаннях. Тому розрахунок парної функції розподілу за експериментальними точками структурного фактора й одержання для неї достовірних значень потребує значних зусиль. На рис. 1 подано порівняння парної функції розподілу, розрахованої в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій,

із відповідними експериментальними даними. Як бачимо з рис. 1, розрахована парна функція розподілу добре збігається з відповідними експериментальними даними.

На рис. 2 подано температурну залежність прямої кореляційної функції для рідкого гелію-4 в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій.

## V. ВИСНОВКИ

Наші розрахунки парної функції розподілу рідкого гелію-4 в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій ілюструють дуже добре узгодження запропонованої теорії з відповідними експериментальними вимірюваннями. Це зумовлене тим, що парний структурний фактор бозе-рідини, з якого ми стартуємо в нашій статті, виявляє, як це показано у праці [41], добре узгодження з експериментальними даними. За допомогою цього підходу також розраховано температурну залежність прямої кореляційної функції.

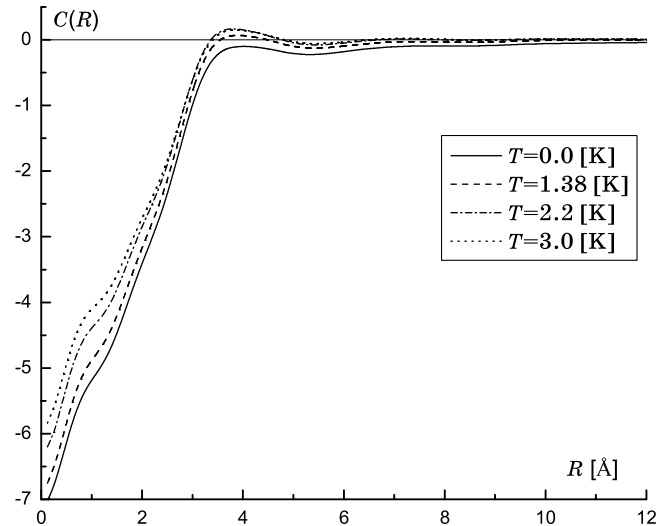


Рис. 2. Прямая кореляційна функція рідкого гелію-4 в наближенні непрямих три- та чотиричастинкових кореляцій.

- 
- [1] *Физика простых жидкостей*, под ред. Г. Темперли, Дж. Роулисона, Дж. Рашбрука (Мир, Москва, 1971).
  - [2] К. Крокстон, *Физика жидкого состояния* (Мир, Москва, 1978).
  - [3] М. М. Боголюбов, *Лекції з квантової статистики* (Радянська школа, Київ, 1949); *Избранные труды в трех томах* (Наукова Думка, Киев, 1970).
  - [4] N. Born, H. S. Green, Proc. R. Soc., London, Ser. A **188**, 10 (1946).
  - [5] J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. **3**, 300 (1935).
  - [6] J. S. Rowlinson, Mol. Phys. **6**, 517 (1963).
  - [7] M. J. D. Powell, Mol. Phys. **7**, 591 (1964).
  - [8] H. L. Weissberg, S. Prager, Phys. Fluids **5**, 1390 (1921).
  - [9] E. E. Salpeter, Ann. Phys. **5**, 183 (1958).
  - [10] E. Maeron, J. Chem. Phys. **27**, 1238 (1957).
  - [11] G. H. A. Cole, J. Chem. Phys. **28**, 912 (1958).
  - [12] G. H. A. Cole, Adv. Phys. **8**, 225 (1959).
  - [13] И. З. Фишер, Усп. физ. наук **76**, 499 (1962).
  - [14] R. Abe, Prog. Theor. Phys. **19**, 57 (1958).
  - [15] R. Abe, Prog. Theor. Phys. **19**, 407 (1958).
  - [16] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевський, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1978).
  - [17] L. S. Ornstein, F. Zernike, Proc. Nat. Acad. Sci. Amst. **17**, 793 (1914).
  - [18] J. S. Rowlinson, Rep. Prog. Phys. **28**, 169 (1965).
  - [19] G. S. Rushbrooke, Physica **26**, 259 (1960).
  - [20] J. K. Percus, G. H. Yevick, Phys. Rev. **110**, 1 (1958).
  - [21] J. K. Percus, Phys. Rev. Lett. **8**, 462 (1958).
  - [22] M. Klein, Phys. Fluids **7**, 391 (1964).
  - [23] E. Meeron, J. Math. Phys. **1**, 192 (1960).
  - [24] T. Morita, K. Hiroike, Prog. Theor. Phys. **23**, 103 (1960).
  - [25] L. Verlet, D. Levesque, Physica **28**, 1124 (1962).
  - [26] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **23**, 260 (1975).
  - [27] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **32**, 247 (1977).
  - [28] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **82**, 438 (1990).
  - [29] H. Hara, H. Ichimura, T. Morita, Progr. Theor. Phys. **39**, 907 (1968).
  - [30] К. Хуанг, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1966).
  - [31] K. Huang, Phys. Rev. **119**, 1129 (1960).
  - [32] A. Isihara, D. D. H. Yee, Phys. Rev. **124**, 618 (1960).
  - [33] А. Исихара, *Статистическая физика* (Мир, Москва, 1973).
  - [34] І. О. Вакарчук, Укр. физ. журн. **35**, 1261 (1990).
  - [35] R. J. Donnelly, C. F. Varenghi, J. Phys. Chem. Ref. Data **27**, 1217 (1998).
  - [36] F. K. Achter, L. Meyer, Phys. Rev. **188**, 291 (1969).
  - [37] H. N. Robkoff, R. B. Hallock, Phys. Rev. B **24**, 159 (1981).
  - [38] А. Ф. Скрипчевський, *Структурный анализ жидкостей и аморфных тел* (Выш. школа, Москва, 1980).
  - [39] E. C. Swenson, V. F. Sears, A. D. B. Woods, P. Martel, Phys. Rev. B **21**, 8 (1980).
  - [40] J. L. Yarnell, M. J. Katz, R. G. Wenzel, S. H. Koenig, Phys. Rev. A **7**, 2130 (1973).
  - [41] І. О. Вакарчук, Р. О. Притула, Журн. фіз. досл. **12**, 4001 (2008).
  - [42] І. О. Вакарчук, J. Phys. Stud. **8**, 223 (2004).
  - [43] R. P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1291 (1953).
  - [44] І. А. Вакарчук, Theor. Math. Phys. **154**, 6 (2008).
  - [45] І. О. Вакарчук, *Вступ до проблем багатьох тіл* (Місіонер, Львів, 1999).
  - [46] І. О. Вакарчук, V. V. Babin, A. A. Rovenchak, J. Phys. Stud. **4**, 16 (2000).

**TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE PAIR DISTRIBUTION FUNCTION  
OF THE LIQUID  $^4\text{He}$**

R. O. Prytula, I. O. Vakarchuk

*Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,  
12 Drahomanov St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The expression for the pair structure factor of the Bose-liquid in a wide temperature range is used in the approximation of three- and four-particle indirect correlations [I. O. Vakarchuk, R. O. Prytula *J. Phys. Stud.* **12**, 4001 (2008)]. We obtained the expressions for the pair distribution function and direct correlation function of the liquid helium-4. All the final formulae are written solely via the liquid structure factor extrapolated to  $T \rightarrow 0$  taken as a source information instead of the interatomic potential. We make numerical calculation for the temperature dependence of the pair distribution function and the direct correlation function. A good agreement of the temperature dependence of the pair distribution function with the corresponding experimental data is found.