

# Временные корреляционные функции и обобщенные коэффициенты переноса полуквантового гелия

В. В. Игнатюк<sup>1</sup>, И. М. Мрыглод<sup>1,2</sup>, М. В. Токарчук<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Украина, 290011, г. Львов, ул. Свенцицкого, 1*  
E-mail: ignat@icmp.lviv.ua

<sup>2</sup> *Institute of Theoretical Physics, University Linz, 69 Altenberger Str. A-4040 Linz, Austria*

Статья поступила в редакцию 6 апреля 1999 г.

Проведен анализ динамических свойств полуквантового <sup>4</sup>Не при двух температурах выше перехода в сверхтекучее состояние. Исследования проводились в рамках динамической термовязкой модели жидкости в области малых и промежуточных значений волнового вектора. Вычислены временные корреляционные функции «импульс–импульс» и «энтальпия–энтальпия», а также выделены парциальные вклады коллективных возбуждений в указанные функции. На основании рекуррентных соотношений для функций памяти проведен расчет пространственно-временной дисперсии обобщенных коэффициентов переноса.

Проведено аналіз динамічних властивостей напівквантового <sup>4</sup>Не при двох температурах вище переходу в надплинний стан. Дослідження виконано в рамках динамічної термов'язкої моделі рідини в області малих та проміжних значень хвильового вектора. Обчислено часові кореляційні функції «імпульс–імпульс» та «ентальпія–ентальпія» з виділенням парціальних вкладів колективних збуджень. На основі рекуррентних співвідношень для функцій пам'яті проведено розрахунок просторово-часової дисперсії узагальнених коефіцієнтів переносу.

PACS: 67.20.+k, 67.40.-w

## Введение

Динамические свойства различных жидкостей (простых [1,2], многокомпонентных [3,4], полярных [5], квантовых [6,7]) вызывают интерес среди экспериментаторов и теоретиков уже довольно продолжительное время. Эксперименты по изучению неравновесных характеристик указанных объектов в основном связаны с рассеянием нейтронов [8]. И хотя накоплено достаточное количество данных, некоторые характерные особенности все еще ожидают своего объяснения.

В частности, одним из таких открытых вопросов остается изучение кинетических свойств полуквантовых жидкостей, т.е. жидкостей, температура которых превышает значение квантового вырождения, однако значительно меньше по сравнению с температурой Дебая [9]. В данном случае ситуация осложняется тем, что не существует адекватной модели для описания как равновесных, так и неравновесных свойств жидкостей, кроме

небольшого числа самых простых [9,10]. Указанные трудности связаны, во-первых, с необходимостью применения аппарата квантовой механики, во-вторых, с необходимостью учета ангармоничности гамильтониана по операторам рождения и уничтожения частиц. Ситуация для <sup>4</sup>Не ниже  $\lambda$ -точки является более простой, поскольку здесь, несмотря на наличие бозе-конденсата и необходимости введения квазисредних, удается получить явные выражения для соответствующих восприимчивостей, а также проанализировать цепочку уравнений для функций Грина (по крайней мере, в гидродинамическом пределе [11,12]).

Изучение динамических свойств указанных объектов является интересным и для экспериментаторов, поскольку помогает лучше понять процессы зарождающейся бозе-конденсации вследствие нарушения симметрии системы. Задача, таким образом, состоит в определении микроскопической картины происходящего, в частности, выделении

и описании определенных временных и пространственных интервалов, соответствующих процессам разной природы.

Одной из таких моделей, хорошо зарекомендовавшей себя при описании классических жидкостей [13,14], является термовязкая модель, включающая в себя наряду с гидродинамическими плотностями (которые по своей сути являются наиболее медленно изменяющимися величинами) и кинетические переменные, соответствующие микроскопическим потокам тепла и импульса (продольная компонента микроскопического тензора напряжений). Данная модель использовалась в рамках теории обобщенных коллективных мод в работе [14]. Она является обобщением гидродинамической модели жидкости [2] и позволяет получить выражения, точные в гидродинамическом пределе (когда значения волнового вектора  $k$  и частоты  $\omega$  малы), которые также хорошо описывают область промежуточных  $k$  и  $\omega$ . Модель становится особенно привлекательной при построении компьютерно-адаптированных теорий для описания динамики жидкостей без использования каких-либо подгоночных параметров, когда входными данными служат статические корреляционные функции (СКФ) и корреляционные времена релаксации, а все расчеты сводятся к задаче на собственные векторы и собственные значения. Кроме того, физические процессы разной временной продолжительности (медленные гидродинамические и быстрые кинетические) в рамках термовязкой модели изначально разделены.

Данная работа является логическим продолжением работы [15], в которой был проведен расчет спектра коллективных возбуждений полуквантового  ${}^4\text{He}$  при температурах 4 и 8 К, а также симметризованного динамического структурного фактора. Для верификации результатов и определения исходных параметров модели были использованы данные независимых термодинамических измерений и рассеяния нейтронов. Целью настоящей работы является изучение в рамках термовязкой модели других временных корреляционных функций, которые представляют интерес для экспериментальных исследований и компьютерного моделирования. В частности, мы рассмотрим парциальные вклады в корреляционные функции «импульс–импульс» и «энергия–энергия». Фурье-образ первой из этих функций может быть получен из экспериментов по рассеянию, изучение

второго важно с точки зрения интерпретации данных молекулярной динамики.

Другой интересной задачей является определение пространственно-временной дисперсии коэффициентов переноса, что позволяет адекватно описывать нелокальные процессы переноса импульса и энергии. Вычисление пространственно-временных характеристик соответствующих коэффициентов переноса также можно эффективно проводить в рамках термовязкой модели.

Следует отметить, что авторы работ [16,17] первоначально использовали термовязкую модель, однако затем пошли по пути упрощения модели и уменьшения числа динамических переменных. Ими была использована модель затухающего гармонического осциллятора, и многие особенности динамического поведения остались вне модели. Более того, обоснованность некоторых сделанных при этом предположений вызывает сомнение. Например, в работах [16,17] в исходной динамической матрице не учитывались недиагональные функции памяти, роль которых в промежуточной области  $k$  и  $\omega$  является существенной.

Настоящая работа имеет следующую структуру. Во втором разделе проведен расчет временных корреляционных функций «импульс–импульс» и «энтальпия–энтальпия» с учетом вклада каждой коллективной моды. В разд. 3 на основании рекуррентных соотношений для функций памяти проводится вычисление пространственно-временной дисперсии коэффициентов переноса. Краткое обсуждение полученных результатов содержится в заключительном разделе.

## 2. Временные корреляционные функции полуквантового ${}^4\text{He}$

В работе [15] нами была получена система уравнений для временных корреляционных функций (ВКФ)  $\Phi_{AB}(k, t)$ , определяемых следующим образом\*

$$\Phi_{AB}(k, t) = (\hat{A}(\mathbf{k}, t), \hat{B}(-\mathbf{k}))_0 = \int_0^1 d\tau \text{Sp} (\rho_0 \Delta \hat{A}(\mathbf{k}, t + i\beta\hbar\tau) \Delta \hat{B}(-\mathbf{k})) , \quad (1)$$

$$\Delta \hat{A}(\mathbf{k}, t) = \hat{A}(\mathbf{k}, t) - \text{Sp} [\rho_0 \hat{A}(0, 0)] ,$$

где  $\rho_0$  — равновесный статистический оператор;  $\beta = 1/k_B T$  — обратная температура;  $k_B$  — кон-

\* Обозначение ВКФ мы будем также использовать для фурье и лаплас-образов соответствующих временных корреляционных функций

станта Больцмана, а временная зависимость введена посредством представления Гейзенберга. Мы работали в рамках 5-ти переменной термовязкой модели, которая наряду с гидродинамическими плотностями числа частиц  $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ , продольной составляющей импульса  $\hat{J}_{\mathbf{k}}$  и обобщенной энтальпии  $\hat{h}_{\mathbf{k}}$  содержит также и переменные  $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{Q}_{\mathbf{k}}$ , связанные, соответственно, с продольной компонентой микроскопического тензора вязких напряжений и потоком энтальпии, из которых вычтена линейная комбинация гидродинамических переменных  $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{J}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{h}_{\mathbf{k}}$ . В этом смысле  $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{Q}_{\mathbf{k}}$ , являясь быстрыми переменными, определяются как кинетические.

Систему уравнений для лаплас-образов ВКФ

$$\tilde{\Phi}_{AB}(k, z) = \int_0^{\infty} \exp(-zt) \Phi_{AB}(k, t) dt$$

( $z = i\omega + \varepsilon$ ,  $\varepsilon \rightarrow +0$ ) можно представить в матричной форме [18,19]:

$$z\tilde{\Phi}(k, z) - i\Omega(k)\tilde{\Phi}(k, z) + \tilde{\varphi}(k, z)\tilde{\Phi}(k, z) = \Phi(k), \quad (2)$$

где использованы обозначения:

$$i\Omega_{ij}(k) = (i\hat{L}\hat{Y}_i(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0 (\hat{Y}_j(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0^{-1};$$

$$\hat{Y}_i(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{J}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}, \hat{Q}_{\mathbf{k}}\} \quad (3)$$

— для элементов частотной матрицы  $i\Omega(k)$  и

$$\tilde{\varphi}_{ij}(k, z) = \left( (1 - \mathcal{P})\hat{Y}_i(\mathbf{k}), \frac{1}{z - (1 - \mathcal{P})i\hat{L}} (1 - \mathcal{P})\hat{Y}_j(-\mathbf{k}) \right)_0 (\hat{Y}_j(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0^{-1} \quad (4)$$

— для элементов матрицы функций памяти  $\tilde{\varphi}(k, z)$ . В выражениях (3), (4) оператор Лиувилля  $i\hat{L}$  определяется стандартным образом:

$$\hat{A} \equiv i\hat{L}\hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \quad (5)$$

через коммутатор с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}} v(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ \hat{n}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2}, \quad (6)$$

где  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  — операторы рождения и уничтожения квазичастиц с импульсом  $\mathbf{p}$ , удовлетворяющие перестановочным соотношениям  $[\hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{a}_{\mathbf{q}}] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}}$ ;  $[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}] = [\hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{a}_{\mathbf{q}}^+] = 0$ ;  $v(\mathbf{q}) = \int \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$  — фурье-образ межчастичного потенциала взаимодействия  $\Phi(\mathbf{r})$ ;  $V$  — объем системы и  $N$  — число частиц, а  $\mathcal{P}$  обозначает проекционный оператор Мори [18], определенный на полном базисном наборе динамических переменных  $\hat{Y}_i(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{J}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}, \hat{Q}_{\mathbf{k}}\}$ , которые также можно записать в представлении вторичного квантования. Заметим, что ВКФ  $\Phi_{nn}(k, t)$ , построенная на операторах плотности числа частиц, непосредственно связана

с симметризованным динамическим структурным фактором  $S_{\text{sym}}(k, \omega)$  [15].

Цепочка уравнений для ВКФ (2) является незамкнутой. Для функций памяти  $\tilde{\varphi}_{ij}(k, z)$  также можно записать систему уравнений, в которой будут фигурировать высшие производные исходных базисных переменных [20]. Естественным требованием является расщепление данной системы. Учитывая тот факт, что времена релаксации функций памяти (4), построенных на «быстрых» (кинетических) переменных, значительно меньше характерных временных масштабов эволюции гидродинамических величин, обычно используют марковское приближение для  $\tilde{\varphi}_{ij}(k, z)$ , полагая

$$\tilde{\varphi}_{ij}(k, z) \approx \tilde{\varphi}_{ij}(k, 0) = \int_0^{\infty} \varphi_{ij}(k, t) dt. \quad (7)$$

При этом систему уравнений (2) можно представить в следующем виде:

$$z\tilde{\Phi}(k, z) + \tilde{T}(k)\tilde{\Phi}(k, z) = \Phi(k), \quad (8)$$

где обобщенная гидродинамическая матрица  $\tilde{T}(k)$  имеет следующую структуру:

$$\tilde{T}(k) = \begin{bmatrix} 0 & -i\Omega_{nJ} & 0 & 0 & 0 \\ -i\Omega_{Jn} & 0 & -i\Omega_{Jh} & -i\Omega_{J\pi} & 0 \\ 0 & -i\Omega_{hJ} & 0 & 0 & -i\Omega_{hQ} \\ 0 & -i\Omega_{\pi J} & 0 & \tilde{\Phi}_{\pi\pi} & -i\Omega_{\pi Q} + \tilde{\Phi}_{\pi Q} \\ 0 & 0 & -i\Omega_{Qh} & -i\Omega_{Q\pi} + \tilde{\Phi}_{Q\pi} & \tilde{\Phi}_{QQ} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

В марковском приближении решение системы уравнений для ВКФ можно записать в аналитическом виде через собственные значения  $z_\alpha$  и собственные векторы  $X_\alpha = \|X_{i\alpha}\|$  матрицы  $\tilde{T}(k)$  [13,19], а именно:

$$\tilde{\Phi}_{il}(k, z) = \sum_{\alpha=1}^5 \frac{G_\alpha^{il}(k)}{z + z_\alpha(k)}, \quad (10)$$

где для амплитуд  $G_\alpha^{il}(k)$  имеем

$$G_\alpha^{il}(k) = X_{i\alpha}(k)[X(k)]_{i\alpha}^{-1}\Phi_{il}(k, 0), \quad (11)$$

$X^{-1}$  обозначает обратную матрицу к  $X = \|X_{i\alpha}\|$ .

Следует подчеркнуть, что марковское приближение (7) является точным в пределе  $k \rightarrow 0$ . Кроме того, использование 5-ти переменной термовязкой модели, как это было показано в работе [21], позволяет получить точные выражения для частотных моментов динамического структурного фактора вплоть до 4-го порядка включительно. Выражения (8)–(11) в наиболее полном виде представляют сущность термовязкой модели жидкости и могут быть использованы для любых фиксированных значений  $k$ . В области малых и промежуточных значений волнового вектора задача существенно упрощается, поскольку большинство элементов матрицы  $\tilde{T}(k)$  можно выразить через термодинамические величины и гидродинамические коэффициенты переноса. Отметим также, что компьютерные расчеты для леннард-джонсовской жидкости показали [13], что дальнейшее расширение уровня описания (т.е. количества динамических базисных переменных) не является необходимым, поскольку результаты для термовязкой и 7-ми переменной моделей очень близки.

В работе [15] был дан детальный анализ спектра коллективных мод полуквантового  ${}^4\text{He}$  в квазигидродинамической области и их вклада в динамический структурный фактор. Интересной особенностью спектра являлось то, что дисперсионная кривая кинетического пропагаторного возбуждения при температуре  $T = 4$  К пересекает звуковую кривую и наблюдается явление, известное в ли-

тературе под названием «быстрый звук» [3]. Другой характерной особенностью было исчезновение центрального (теплового) пика, что может служить сигналом зарождающегося нарушения симметрии бозе-системы. При температуре 8 К поведение  $S_{\text{sym}}(k, \omega)$  было более классическим и триплет Рэлея-Бриллюэна наблюдался во всей области волновых векторов  $k = 1-3 \text{ нм}^{-1}$ . Также оказалось, что при этой температуре кинетическая мода, которая становится пропагаторной при меньших значениях волнового вектора, наряду с тепловой участвует в формировании центрального пика.

Естественно, интересно задаться вопросом о поведении других ВКФ. В частности, ВКФ «импульс-импульс» связана с динамическим структурным фактором простым соотношением

$$\tilde{\Phi}_{JJ}(k, \omega) = \frac{m^2 \omega^2}{k^2} S_{\text{sym}}(k, \omega), \quad (12)$$

поэтому также может быть получена из результатов эксперимента по рассеянию нейтронов. Временная корреляционная функция «энергия-энергия» в эксперименте непосредственно не измеряется, однако ее можно получить путем расчетов молекулярной динамики.

На рис. 1 и 2 представлены результаты расчета ВКФ «импульс-импульс» и «энтальпия-энтальпия», которая связана с ВКФ «энергия-энергия» простым соотношением:

$$\tilde{\Phi}_{hh}(k, \omega) = \tilde{\Phi}_{\varepsilon\varepsilon}(k, \omega) - \frac{\Phi_{n\varepsilon}(k)}{\Phi_{nn}(k)} \times \left( 2\tilde{\Phi}_{n\varepsilon}(k, \omega) - \frac{\Phi_{n\varepsilon}(k)}{\Phi_{nn}(k)} \tilde{\Phi}_{nn}(k, \omega) \right), \quad (13)$$

где  $\Phi_{n\varepsilon}(k)$  и  $\Phi_{\varepsilon\varepsilon}(k)$  — статические корреляционные функции [15].

На тех же рисунках показаны вклады каждого коллективного возбуждения в соответствующие ВКФ. Анализируя парциальные вклады коллективных мод в ВКФ «импульс-импульс», заметим, что в пределе малых  $k$  тепловая мода не

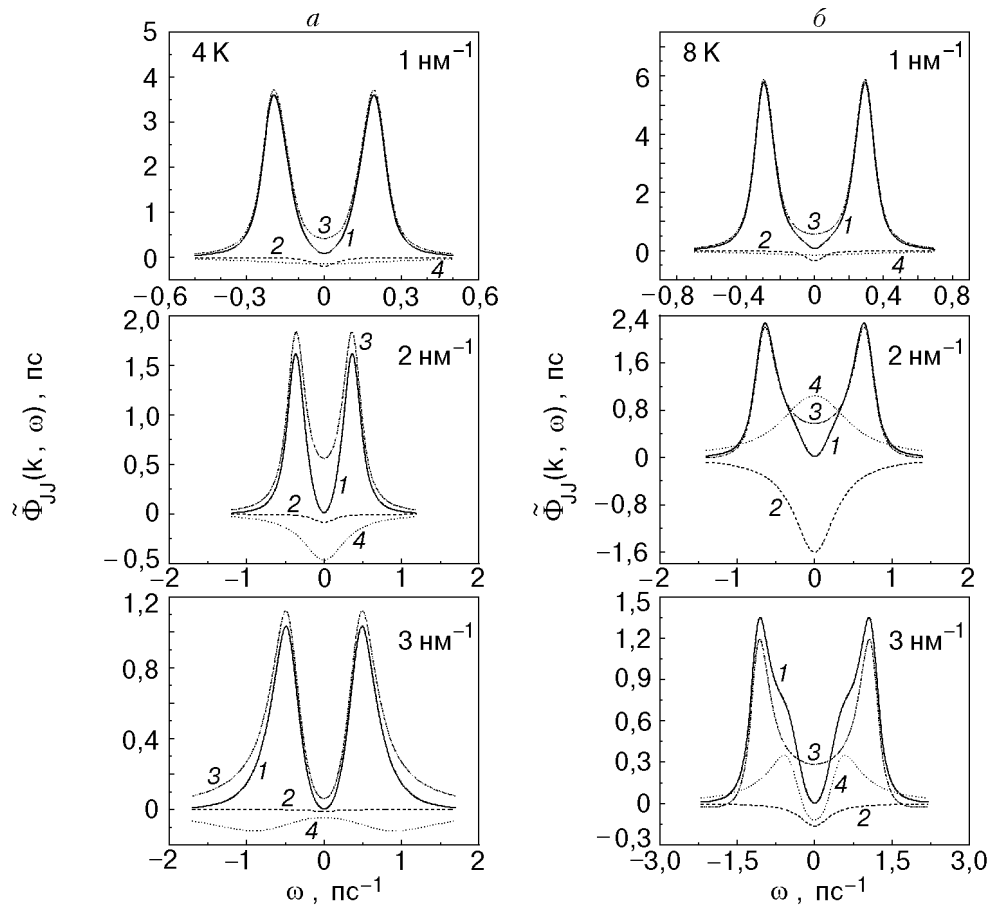


Рис. 1. Временная корреляционная функция  $\tilde{\Phi}_{JJ}(k, \omega)$  (1) для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (a) и  $T = 8 \text{ K}$  (б) при  $k = 1, 2$  и  $3 \text{ nm}^{-1}$ . Вклады в  $\tilde{\Phi}_{JJ}(k, \omega)$ : тепловой моды (2), звуковой моды (3) и кинетических мод (4).

вносит вклад в  $\tilde{\Phi}_{JJ}(k, \omega)$ , поскольку соответствующий весовой множитель имеет порядок  $\propto k^2$  и форма линий спектральной функции полностью определяется звуковым возбуждением. При  $T = 4 \text{ K}$  упомянутая особенность сохраняется и в области промежуточных значений волновых чисел, хотя при  $k = 2$  и  $3 \text{ nm}^{-1}$  уже вполне отчетливо прослеживается вклад кинетических возбуждений. С другой стороны, в газообразном  ${}^4\text{He}$  при  $T = 8 \text{ K}$  и  $k = 2 \text{ nm}^{-1}$  именно вклад тепловой моды является существенным при малых частотах, а при  $k = 3 \text{ nm}^{-1}$  ее амплитуда резко уменьшается, зато пропагаторное кинетическое возбуждение дает чуть заметный резонанс на частоте  $\omega = 0,7 \text{ ps}^{-1}$ .

Что касается нормированной ВКФ  $\tilde{\Phi}_{hh}(k, \omega)/\Phi_{hh}(k)$ , то в области малых значений  $k$  тепловая мода определяет форму центрального пика, звуковая мода — форму боковых резонансов, тогда как вкладом кинетических возбуждений можно пренебречь, поскольку их весовые множители пропорциональны  $k^4$ . Ситуация абсолютно тождественна случаю  $S_{\text{sym}}(k, \omega)$  [15]. Однако в отличие от результата для динамического структурного фактора, где при  $T = 4 \text{ K}$  в области  $k = 2\text{--}3 \text{ nm}^{-1}$  наблюдалось полное исчезновение

вклада теплового возбуждения, уменьшение амплитуды тепловой моды становится заметным лишь при  $k = 3 \text{ nm}^{-1}$ , когда форма линий  $\tilde{\Phi}_{hh}(k, \omega)/\Phi_{hh}(k)$  в равной мере определяется всеми видами возбуждений. Интересным фактом является резкое уменьшение практически до нуля амплитуды тепловой моды при  $T = 8 \text{ K}$ ,  $k = 3 \text{ nm}^{-1}$ , когда форма центрального резонанса полностью определяется кинетическим возбуждением.

Следует отметить следующее обстоятельство. Положение бокового пика не всегда связано с частотой определенного пропагаторного возбуждения. В частности, на рис. 2 ( $T = 4 \text{ K}$ ,  $k = 3 \text{ nm}^{-1}$ ) хорошо видно, что в силу отрицательности весового коэффициента для звуковой моды частота звуковых возбуждений определяет положение локального минимума, а не максимума ВКФ «энтальпия–энтальпия». Аналитически такой результат становится понятным, если проанализировать выражения (10), (11). Точки экстремума (по частоте) той или иной ВКФ определяются как модами, так и амплитудами коллективных возбуждений. В этом примере проявляется различие между «интуитивным» определением коллективного

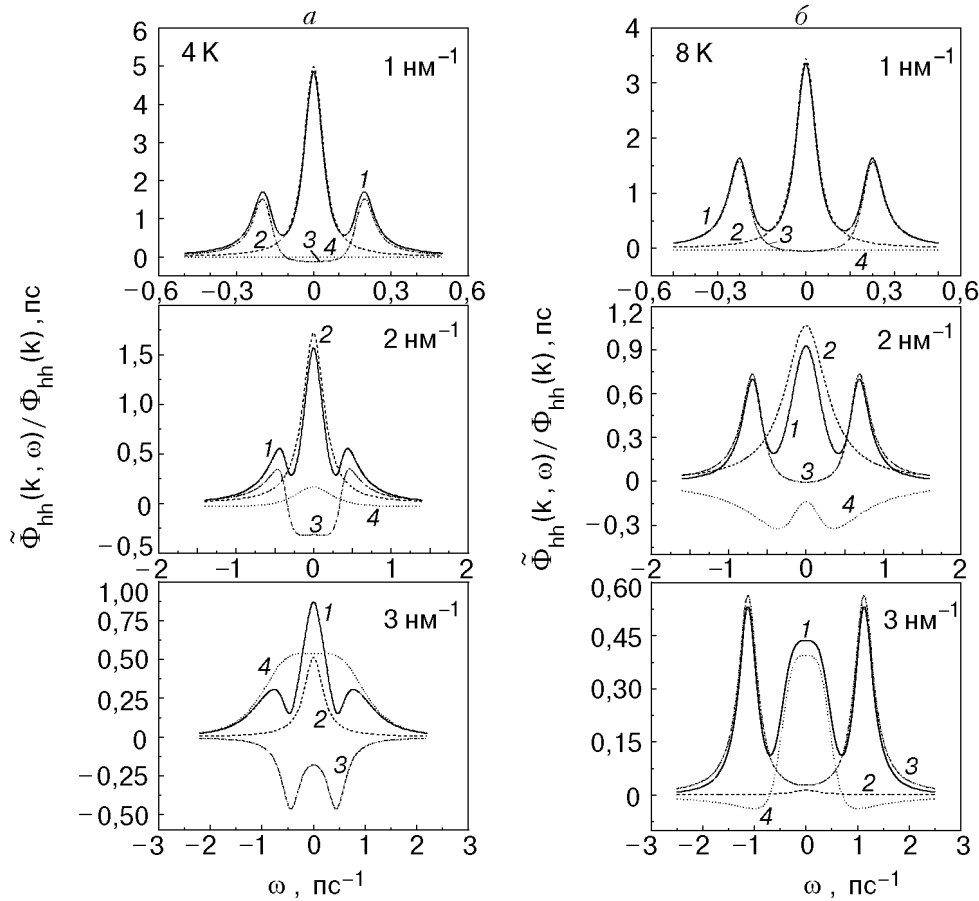


Рис. 2. Нормированная временная корреляционная функция  $\tilde{\Phi}_{hh}(k, \omega) / \Phi_{hh}(k)$  (1) для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (a) и  $T = 8 \text{ K}$  (б) при  $k = 1, 2, 3 \text{ nm}^{-1}$ . Вклады в  $\tilde{\Phi}_{hh}(k, \omega) / \Phi_{hh}(k)$ : тепловой моды (2), звуковой моды (3) и кинетических мод (4).

возбуждения по положению и форме экстремума определенной ВКФ и более строгим определением коллективных возбуждений непосредственно как полюсов соответствующих функций Грина. Заметим, что фурье-образ ВКФ (1) связан с запаздывающими корреляционными функциями Грина [18,22].

Таким образом, выводы авторов работы [23] относительно того, что наличие дополнительного бокового пика в полуквантовом  ${}^4\text{He}$  при  $T = 13,3 \text{ K}$  связано с тепловой волной в промежуточной области  $k$  представляются довольно спорными, поскольку исследуемые ими резонансы ВКФ «энергия–энергия» определяются целым рядом факторов, о чем шла речь выше. Еще более странным является утверждение, что при  $k \rightarrow 0$  обобщенная тепловая волна переходит в обычную звуковую. Заметим также, что дисперсия пропагаторных возбуждений, полученная в работе [23], по своей качественной структуре напоминает результаты [16] при  $T = 8 \text{ K}$ , т.е. кривая кинетической моды расположена ниже дисперсионной кривой обобщенного

звукового возбуждения. В этом контексте особый интерес представляло бы исследование полуквантового гелия и при других температурах в интервале 3–8 K, для того, чтобы однозначно ответить на вопрос: является ли наличие «быстрого звука» неотъемлемой особенностью низкотемпературного полуквантового  ${}^4\text{He}$  или же это результат обработки экспериментальных данных лишь для определенной термодинамической точки.

### 3. Пространственно-временная дисперсия коэффициентов переноса

Используя метод неравновесного статистического оператора (НСО) [18], можно получить систему уравнений переноса для фурье-образов динамических переменных  $\langle \Delta \hat{Y}_i(k) \rangle^\omega = \{ \langle \Delta \hat{n}_k \rangle^\omega, \langle \Delta \hat{J}_k \rangle^\omega, \langle \Delta \hat{h}_k \rangle^\omega, \langle \Delta \hat{\pi}_k \rangle^\omega, \langle \Delta \hat{Q}_k \rangle^\omega \}$ , усредненных по НСО:

$$i\omega \langle \Delta \hat{Y}(k) \rangle^\omega - i\Omega(k) \langle \Delta \hat{Y}(k) \rangle^\omega + \tilde{\Phi}(k, \omega) \langle \Delta \hat{Y}(k) \rangle^\omega = 0, \quad (14)$$

которая по своей структуре напоминает систему уравнений (2) для ВКФ. Заметим, что аналогичный вид будет иметь система трех уравнений, построенная на гидродинамическом базисе. В этом случае функции памяти  $\tilde{\varphi}_{JJ}(k, \omega)$ ,  $\tilde{\varphi}_{hh}(k, \omega)$  и  $\tilde{\varphi}_{hJ}(k, \omega)$  уже отличны от нуля и будут определять обобщенные коэффициенты продольной

вязкости, теплопроводности и термовязкости соответственно. Решая (14) относительно  $\langle \Delta \hat{\pi}_{\mathbf{k}} \rangle^\omega$ ,  $\langle \Delta \hat{Q}_{\mathbf{k}} \rangle^\omega$ , подставляя полученные результаты в первые три уравнения системы и группируя слагаемые относительно  $\langle \Delta \hat{J}_{\mathbf{k}} \rangle^\omega$ ,  $\langle \Delta \hat{h}_{\mathbf{k}} \rangle^\omega$ , можно получить рекуррентные выражения для обобщенных коэффициентов переноса [22]:

$$4/3\eta(k, \omega) + \zeta(k, \omega) = \frac{nm}{k^2} \frac{-i\Omega_{\pi J}(k)}{i\omega + \tilde{\varphi}_{\pi\pi}(k, \omega) - (-i\Omega_{\pi Q}(k) + \tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, \omega))(-i\Omega_{Q\pi}(k) + \tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, \omega))/(i\omega + \tilde{\varphi}_{QQ}(k, \omega))} \quad (15)$$

— для обобщенной продольной вязкости, где  $\eta(k, \omega)$  обозначает обобщенную сдвиговую вязкость, а  $\zeta(k, \omega)$  — обобщенную объемную вязкость;

$$\lambda(k, \omega) = \frac{nc_V}{k^2} \frac{-i\Omega_{Qh}(k)}{i\omega + \tilde{\varphi}_{QQ}(k, \omega) - (i\Omega_{\pi Q}(k) + \tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, \omega))(-i\Omega_{Q\pi}(k) + \tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, \omega))/(i\omega + \tilde{\varphi}_{\pi\pi}(k, \omega))} \quad (16)$$

— для обобщенной теплопроводности  $\lambda(k, \omega)$  ( $c_V = 1/k_B T^2 (\hat{h}_{\mathbf{k}} \hat{h}_{-\mathbf{k}})_0$  — обобщенная удельная теплоемкость при постоянном объеме);

$$\xi(k, \omega) = \frac{nm}{k^2} \frac{i\Omega_{\pi J}(k)}{-i\Omega_{\pi Q}(k) + \tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, \omega) + (i\omega + \tilde{\varphi}_{\pi\pi})(i\omega + \tilde{\varphi}_{QQ})/(-i\Omega_{Q\pi}(k) + \tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, \omega))} \quad (17)$$

— для обобщенного коэффициента термовязкости  $\xi(k, \omega)$ .

В приведенных выше выражениях воспользуемся марковским приближением (7) для функций памяти. При этом в знаменателях (15)–(17) ограничимся слагаемыми, линейными по частоте, поскольку вклады высших порядков мы уже не учитываем, полагая  $\tilde{\varphi}_{ij}(k, \omega) = \tilde{\varphi}_{ij}(k, 0) + o(\omega^2)$ . Пространственная зависимость полностью определяется недиагональными элементами. Заметим, что такой же порядок по  $k$  дают и диагональные функции памяти ( $\tilde{\varphi}_{\pi\pi}(k, 0) = \tilde{\varphi}(0, 0) + o(k^2)$ ), однако тогда необходимо более детально анализировать их пространственную дисперсию. С точки зрения используемого нами подхода это соответствует введению двух дополнительных параметров подгонки. Такая зависимость от  $k$  нами учитывалась через недиагональные функции памяти.

Анализируя структуру (15)–(17), легко заметить, что обобщенные коэффициенты переноса также имеют лоренцеву форму (см. (10) для сравнения). В частности, полагая в области малых значений волнового вектора  $-i\Omega_{\pi Q}(k) + \tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, 0) = -ikT_{\pi Q}$ ,  $-i\Omega_{Q\pi}(k) + \tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, 0) = -ikT_{Q\pi}$  и  $i\Omega_{Qh}(k) = k^2\omega_{Qh}$ , для действительной части  $\lambda(k, \omega)$  запишем

$$\text{Re } \lambda(k, \omega) = \frac{\lambda(k)}{(\omega\tau_{hh}(k))^2 + 1}, \quad \lambda(k) = \frac{\lambda(0, 0)}{(L_{hh}k)^2 + 1}, \quad (18)$$

где

$$\tau_{hh}(k) = \left( \tilde{\varphi}_{QQ}(0, 0) + \frac{k^2 T_{\pi Q} T_{Q\pi}}{\tilde{\varphi}_{\pi\pi}(0, 0)} \right)^{-1}, \quad (19)$$

$$L_{hh} = \left( \frac{T_{\pi Q} T_{Q\pi}}{\tilde{\varphi}_{\pi\pi}(0, 0)} \right)^{1/2}, \quad \lambda(0, 0) = nc_V \omega_{Qh} \tau_{hh}(0).$$

Результаты расчета обобщенных коэффициентов переноса представлены на рис. 3–5. Видно, что коэффициент термовязкости имеет «обратную» четность по отношению к диагональным коэффициентам переноса: при  $\omega = 0$  отличной от нуля является только его мнимая часть, а в пределе  $k \rightarrow 0$  он стремится к нулю в полном соответствии с принципом Кюри [18]. Кроме того, величина этого коэффициента на порядок меньше коэффициента обобщенной теплопроводности.

На рис. 6 представлена пространственная дисперсия обобщенных коэффициентов переноса. Для диагональных коэффициентов наблюдается зависимость (18), в то время как  $\xi(k, \omega = 0)$  уве-

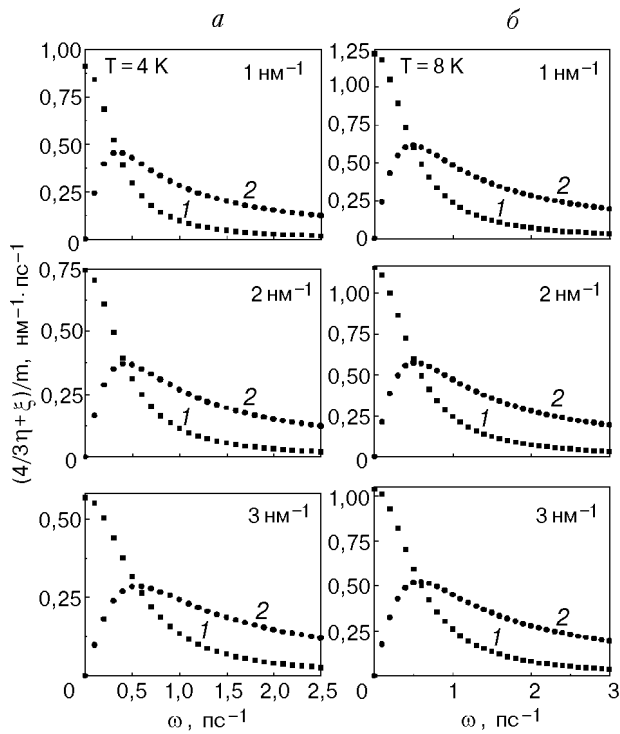


Рис. 3. Действительная (1) и мнимая (2) части обобщенного коэффициента продольной вязкости  $4/3\eta(k, \omega) + \zeta(k, \omega)$  для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (а) и  $T = 8 \text{ K}$  (б) при  $k = 1, 2$  и  $3 \text{ nm}^{-1}$ .

личивается  $\propto k$  в области малых значений волнового числа. Коэффициентом термовязкости  $\xi(k, \omega = 0)$  можно пренебречь в пределе  $k \rightarrow 0$ , однако в промежуточной области  $k$  он быстро увеличивается, что приводит к добавочному динамическому

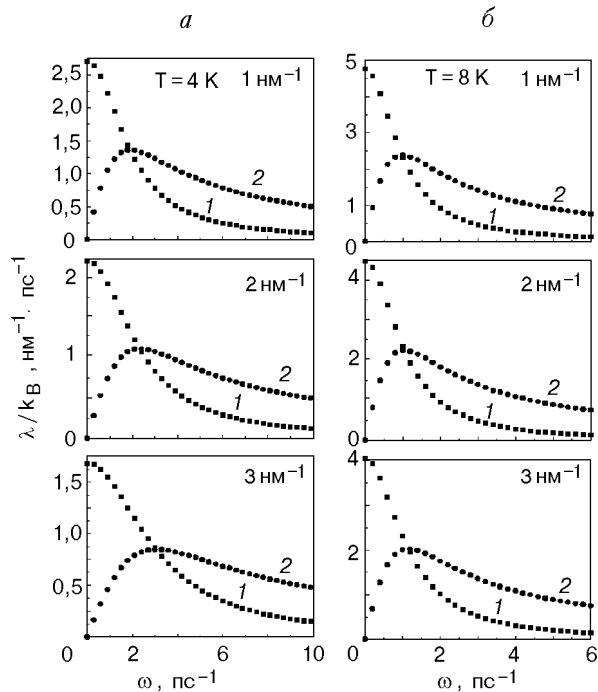


Рис. 4. Действительная (1) и мнимая (2) части обобщенного коэффициента теплопроводности  $\lambda(k, \omega)$  для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (а) и  $T = 8 \text{ K}$  (б) при  $k = 1, 2$  и  $3 \text{ nm}^{-1}$ .

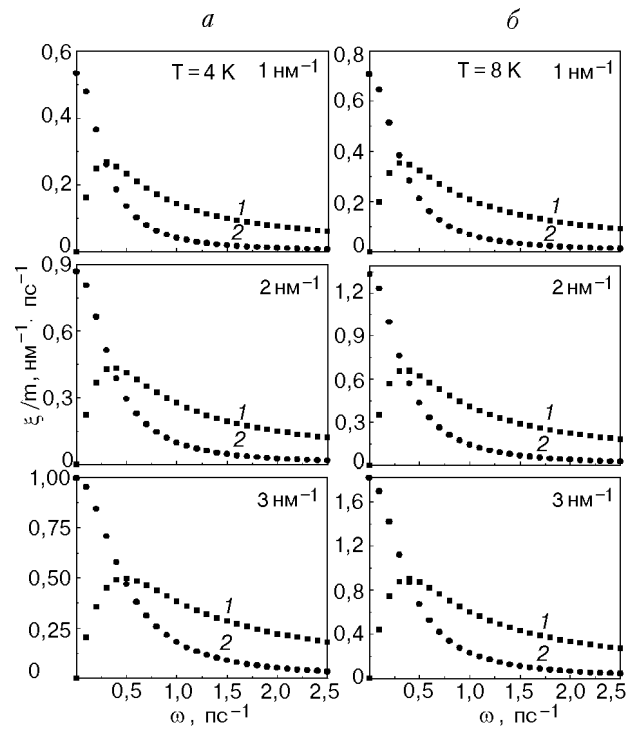


Рис. 5. Действительная (1) и мнимая (2) части обобщенного коэффициента термовязкости  $\xi(k, \omega)$  для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (а) и  $T = 8 \text{ K}$  (б) при  $k = 1, 2$  и  $3 \text{ nm}^{-1}$ .

взаимодействию между упругими и тепловыми процессами. В обычной гидродинамике существует лишь взаимодействие статического характера, пропорциональное коэффициенту теплового расширения  $\alpha$ .

### Заключение

В данной работе в рамках 5-ти переменной термовязкой модели проанализировано поведение ВКФ «импульс–импульс» и «энтальпия–энтальпия» полуквантового  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4$  и  $8 \text{ K}$  в квазигидродинамическом пределе с учетом парциальных вкладов всех коллективных возбуждений. Временная корреляционная функция «импульс–импульс» непосредственно связана с динамическим структурным фактором, измеряемым в экспе-

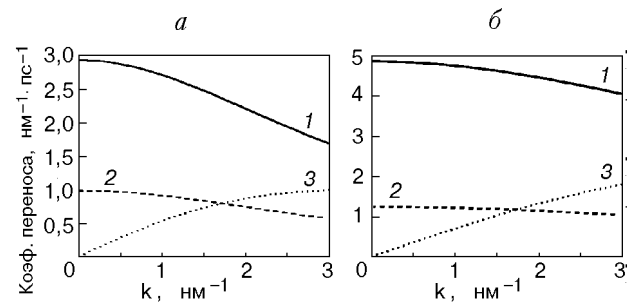


Рис. 6. Обобщенные коэффициенты теплопроводности  $\lambda(k, 0)$  (1), продольной вязкости  $4/3\eta(k, 0) + \zeta(k, 0)$  (2) и термовязкости  $\xi(k, 0)$  (3) для  ${}^4\text{He}$  при  $T = 4 \text{ K}$  (а) и  $T = 8 \text{ K}$  (б).



рименте по рассеянию нейтронов. Результаты для ВКФ «энтальпия–энтальпия» можно получить путем компьютерного моделирования.

Важной задачей является исследование процессов переноса. В общем случае уравнения переноса являются нелокальными, поэтому существует проблема расчета пространственно-временной дисперсии коэффициентов переноса. В данной работе ( $k, \omega$ )-зависимые коэффициенты были получены на основании рекуррентных соотношений путем последовательного исключения быстрых (кинетических) переменных.

При интерпретации экспериментальных данных в промежуточной области волновых векторов следует принимать во внимание пространственную дисперсию как коллективных мод, которые определяют положение и ширину соответствующих резонансов ВКФ, так и собственных векторов спектральной задачи, характеризующих амплитуды резонансов. Только такой комплексный анализ позволяет определить природу коллективных возбуждений полуквантовых жидкостей.

Проведенный анализ не претендует на точность и полноту, поскольку авторы не располагают информацией о пространственной дисперсии СКФ. Как правило, эту информацию получают, проводя молекулярно-динамические расчеты [13]. В квантовом случае такое рассмотрение становится более проблематичным [24], поскольку компьютерные методы для расчета СКФ высших порядков развиты не настолько хорошо. Тем не менее развитие компьютерно-адаптированных теорий для описания различных классических жидкостей [4,5,13] позволяет надеяться на успех и при описании полуквантовых объектов.

В. В. И. выражает признательность Президенту Украины за выделение стипендии для молодых ученых. Работа также частично финансировалась Fonds für Forderung der Wissenschaftlichen Forschung (Austria), Project P12423 TRH (И.М.М.)

1. J. R. D. Copley and S. W. Lovesey, *Rept. Progr. Phys.* **38**, 461 (1975).
2. J. P. Boon and S. Yip, *Molecular Hydrodynamics*, McGraw-Hill, New York (1980).
3. N. H. March and M. P. Tosi, *Atomic Dynamics in Liquids*, Macmillan Press, London (1976).
4. T. M. Bryk, I. M. Mryglod, and G. Kahl, *Phys. Rev.* **E56**, 2903 (1997).
5. I. P. Omelyan, *Physica A* **247**, 121 (1997).

6. D. L. Price, in: *The Physics of Liquid and Solid Helium*, J. B. Ketterson and K. H. Bennemann (eds.), Wiley Interscience, New York (1978).
7. H. R. Glyde, *Excitations in Liquid and Solid Helium*, Clarendon Press, Oxford (1994).
8. S. W. Lovesey, *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter*, Clarendon Press, Oxford (1984).
9. А. Ф. Андреев, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 603 (1978).
10. Л. Л. Буишвили, А. И. Тугуши, *ЖЭТФ* **84**, 970 (1983).
11. Ю. А. Церковников, *ТМФ* **93**, 412 (1992).
12. D. N. Zubarev and Yu. A. Tserkovnikov, *Proc. Steklov Institute Mathem.* **2**, 139 (1988).
13. I. M. Mryglod, I. P. Omelyan, and M. V. Tokarchuk, *Mol. Phys.* **84**, 235 (1995).
14. I. M. de Schepper, E. G. D. Cohen, C. Bruin, J. C. van Rijs, W. Montfrooij, and L. A. de Graaf, *Phys. Rev.* **A38**, 271 (1988).
15. В. В. Игнатюк, И. М. Мрыглод, М. В. Токарчук, *ФНТ* **25**, 407 (1999).
16. R. M. Crevecoeur, R. Verberg, I. M. de Schepper, L. A. de Graaf, and W. Montfrooij, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 5052 (1995).
17. R. M. Crevecoeur, H. E. Smorenburg, and I. M. de Schepper, *J. Low Temp. Phys.* **105**, 149 (1996).
18. D. Zubarev, V. Morozov, and G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, vol. 2, *Relaxation and Hydrodynamical Processes*, Akademie Verlag, Berlin (1996).
19. V. V. Ignatyuk, I. M. Mryglod, and M. V. Tokarchuk, *On the Theory of Dynamic Properties for Semi-Quantum Fluids*, Preprint ICMP-98-08E, Lviv (1998).
20. R. Zwanzig, *Lectures in Theoretical Physics*, Interscience, New York (1961).
21. I. M. Мрыглод, *Укр. Фіз. Журн.* **43**, 252 (1997).
22. I. M. Mryglod and A. M. Hachkevych, *Cond. Matt. Phys. (Lviv)* **5**, 105 (1995).
23. W. Montfrooij, L. A. de Graaf, and I. M. de Schepper, *Phys. Rev.* **B45**, 3111 (1992).
24. M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 1045 (1992).

### Time correlation functions and generalized transport coefficient of semiquantum helium

V. V. Ignatyuk, I. M. Mryglod, and M. V. Tokarchuk

The dynamic properties of semiquantum  ${}^4\text{He}$  are analyzed at two temperatures above the point of the superfluid phase transition. The studies were carried out within the dynamic thermal viscous model of a fluid at low and intermediate values of the wave vector. The time correlation «momentum–momentum» and «enthalpy–enthalpy» functions are estimated and the partial contributions of collective excitations to these functions are separated. The time-spatial dispersion of the generalized transport coefficients are calculated on the basis of the recursive relations of memory kernel.