

# 液氦量子效应的路径积分蒙特卡罗模拟

周 杨, 徐荣政, 霍 雷

(哈尔滨工业大学 物理系, 哈尔滨 150001, zyzm7227@yahoo.com.cn)

**摘 要:** 为研究液氦中的量子效应, 采用路径积分蒙特卡罗(PIMC)的方法对液氦体系进行模拟. 在 pimc++ 的平台上计算了体系中发生交换的原子数、对关联函数、结构因子以及超流分数等物理量. 模拟的结果表明: 对关联函数以及结构因子的值与实验数据符合得很好, PIMC 可以对液氦中原子的微观排布进行精确的模拟. 在 4 K 的范围内, 随着温度的降低, 发生交换的粒子数目越来越多, 体系的量子效应越来越明显. 温度在临界温度 2.17 K 左右的时候, 体系出现超流, 超流分数随着温度的降低而升高. 路径积分蒙特卡罗可以精确地模拟液氦的结构, 并且反映出全同粒子交换和超流相变等量子效应.

**关键词:** 液氦; 量子效应; 路径积分蒙特卡罗; 超流

中图分类号: O0512.1

文献标志码: A

文章编号: 0367-6234(2010)03-0424-03

## Simulation of quantum effects in liquid helium using path integral Monte Carlo

ZHOU Yang, XU Rong-zheng, HUO Lei

(Dept. of Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China, zyzm7227@yahoo.com.cn)

**Abstract:** In order to study the quantum effects in the liquid helium, we use path integral Monte Carlo (PIMC) method to simulate the liquid helium system. We calculate the number of atoms which permute with others, the pair-correlation function, the structure factor and the superfluid fraction on the platform of pimc++. Comparison between experiments and the results of pair-correlation and structure factor computed by PIMC manifests the precision of this method and the strength of this approach in simulating the microscopic arrangement of atoms in liquid helium. Below 4K, the number of atoms which permute with others increases as the temperature goes down, the quantum effects become more and more apparent. At about 2.17 K, the system will undergo a phase transition and turn into superfluid. The superfluid fraction will increase as the temperature goes down, and eventually equals to 1. Path integral Monte Carlo can simulate the structure of liquid helium with high precision and reflect the quantum effects of particle permutation and transition to the superfluid state.

**Key words:** liquid helium; quantum effect; path integral Monte Carlo; superfluid

氦 4 有气态、正常液体、超流和其它几种晶体相. 在 25.3 bar 压强以下, 直到绝对零度氦 4 都保持液体状态, 即是所谓的永久液体. 这个性质使液氦成为研究宏观量子效应的系统之一<sup>[1]</sup>. 液氦中最重要的性质之一就是超流效应. 当液氦的温度冷却到 2.17 K 以下, 会发生从正常液体到超流液体的相变. 超流态的液氦可以无摩擦地流过毛细

管; 当以不大的速度旋转盛有液氦的圆桶时, 液氦会保持它的初始运动状态; 超流态液氦的热导率趋于无穷.

路径积分蒙特卡罗方法(PIMC)的实现过程反映了费曼的路径积分思想, 同时反映了体系的全同粒子交换效应, 它可以对固态、液态、气态物质进行模拟, 得到相应的观测量<sup>[2-3]</sup>. 尤其当系统维度非常高时, PIMC 方法同样可以进行有效的计算. 除计算基态性质, 还可以对激发态进行计算<sup>[4]</sup>.

本文主要关注 PIMC 方法的实现和它所反映

收稿日期: 2009-05-26.

作者简介: 周 杨(1984—), 男, 硕士研究生;

霍 雷(1963—), 男, 教授, 博士生导师.

的液氦中的物理. PIMC 方法中使用了 Metropolis Monte Carlo 的方法对氦原子的路径进行了抽样. 计算的结果必须反映液氦的物理. 随着温度的降低, 体系的量子效应越来越明显. 当德布罗意波长和粒子的间距可以比较时, 粒子之间会发生交换. 当液氦温度低于 2.17 K 时, 会发生一个二次相变, 体系从正常态变到超流态.

## 1 路径积分蒙特卡罗方法的实现

PIMC 方法用密度矩阵来表示热力学量, 并且将其改写成虚时路径积分的形式. 同时引入玻色对称性的影响, 通过 Metropolis Monte Carlo 方法对路径抽样从而实现观测量的计算.

### 1.1 观测量的路径积分

对于一个具有固定的粒子数  $N$ 、温度  $T$  和体积  $V$  的统计系综, 假设其哈密顿量为  $H$ , 它对应的波函数及其本征值是  $\phi_i$  和  $E_i$ , 平衡时算符  $O$  对应的平均值为

$$\langle O \rangle = Z^{-1} \sum_i \langle \phi_i | O | \phi_i \rangle e^{-\beta E_i}. \quad (1)$$

式中:  $Z$  为配分函数,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$  为温度为  $T$  时第  $i$  个态被占据的概率<sup>[5]</sup>.

在位形空间中,  $O$  可以为

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int dR dR' \rho(R, R'; \beta) \langle R | O | R' \rangle. \quad (2)$$

式中:  $\rho(R, R'; \beta)$  是密度矩阵, 具体形式为

$$\rho(R, R'; \beta) = \langle R | e^{-\beta H} | R' \rangle = \sum_i \Phi_i^*(R) \Phi_i(R') e^{-\beta E_i}. \quad (3)$$

配分函数为

$$Z = \int dR \rho(R, R; \beta). \quad (4)$$

在坐标表象中作展开, 这样密度矩阵所有的矩阵元都非负, 并且可以被解释为概率. 计算中只关注观测量的对角性质, 对角意味着算符只依赖于  $\rho(R, R; \beta)$  及其导数的值, 而不依赖于  $\rho(R, R'; \beta)$  的值. 将式(4)写作对角的路径积分形式为

$$\rho(R_0, R_0; \beta) = \int dR_1 \cdots dR_{M-1} \rho(R_0, R_1; \tau) \cdot \rho(R_1, R_2; \tau) \cdots \rho(R_{M-1}, R_0; \tau). \quad (5)$$

式中:  $\tau = \beta/M$ , 对于所有的  $M \geq 1$ , 式(5)都精确成立.  $M$  为有限时对应着一条离散路径, 在  $M \rightarrow \infty$  的极限下, 可以得到一条连续路径  $\{R_t\}$ , 此处  $0 \leq t \leq \beta$ <sup>[6]</sup>.

考虑到粒子的全同性, 密度矩阵必须写成完全对称的形式, 这样系统具有新的边界条件  $PR_m = R_0$ , 此处  $P$  为粒子置换算符. 路径末位置进

行交换以后同样闭合, 形成更大的闭合路径. 配分函数里面包含了所有  $N!$  个闭合回路的贡献. 在零温度时所有置换具有相同的贡献, 在高温时只有全同置换具有贡献, 系统变为一个经典系统.

### 1.2 路径抽样方法

当体系的维度不大的时候, 可以解析地对求解问题. 否则, 必须进行近似处理或者进行数值计算. 在 PIMC 方法在实现的过程中:

1) 对路径进行抽样;

2) 计算观测量的值;

3) 对路径进行平均. 如果抽取了  $N$  条这样的路径, 算符  $O$  的期望值可以表示为

$$\langle \hat{O} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N O(R_j^i, R_{j+1}^i; \tau). \quad (6)$$

式中:  $j$  指代第  $j$  条路径  $R_j$ .

路径的产生分为置换抽样和路径抽样两个过程. 考虑到体系的玻色效应, 必须首先进行置换抽样. 这一过程采用 Metropolis 蒙特卡罗方法, 针对不同的置换计算出相应的概率, 构造一张置换表, 然后再产生随机数进行抽样. 在路径抽样过程中, 使用了二分法. 在抽样过程中, 两个端点是固定的. 首先抽取虚时演化到一半的点, 这种算法接着抽取剩下两段的中点, 这种过程一直重复下去, 直到抽取完整条路径.

## 2 液氦的路径积分计算

### 2.1 对关联函数和结构因子

对关联函数  $g(r)$  以及它的傅立叶变换——结构因子  $S(k)$  描述了液氦中原子的微观排布, 可以通过中子散射或者 X 射线实验得到精确测量. 如图 1 和图 2 所示, 图 1 中红线为在 2.5 K 时 PIMC 的计算结果, 黑点为相同温度下 X 射线散射实验的结果<sup>[7]</sup>. 计算结果表明, 在大于 2 Å 的范围内, 距离选定的原子越近, 原子的分布越稠密, 找到一个原子的可能性越大, 对应的对关联函数的值越大. 当距离非常远时, 其余原子对于指定的氦原子近似于各向同性的均匀分布, 找到一个原子的概率相等, 对关联函数的值趋近于 1. 从图 1 中可以看出, PIMC 可以对液氦进行精确模拟.

### 2.2 粒子置换随温度变化情况

在 PIMC 方法中, 用一个数组来表示系统中的粒子, 每一个粒子都指定了一个标号  $i$ , 用  $P_i$  表示与粒子  $i$  发生置换的粒子标号<sup>[8]</sup>. 列出粒子之间可能出现的所有置换, 并且计算其概率, 列出置换表. 由于超过 4 个粒子的圈置换很难发生, 所以置换表截断到 4 个粒子置换. 对于一个比较大的

系统,可以设定一个比较小的正数  $\varepsilon$ , 跃迁概率  $< \varepsilon$  的置换可以作丢弃处理. 当造好置换表以后, 可以通过产生一个  $0 \sim 1$  之间均匀分布的随机数  $\xi$  来抽取置换. 记置换表里第  $i$  项概率为  $P_i$ , 可以定义累积概率  $c_j$  为

$$c_j = \sum_{i \leq j} p_i. \tag{7}$$

当  $c_{k-1} < \xi < c_k$  时, 则抽取  $P_i$  对应的置换.

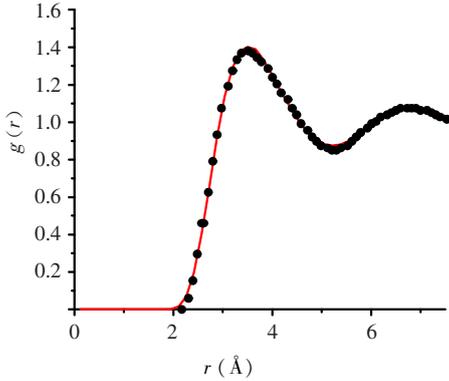


图 1 结构因子

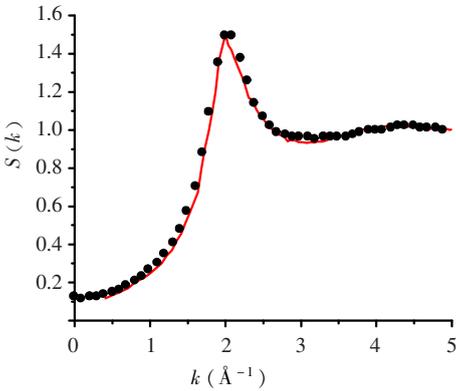


图 2 对关联函数

随着温度的降低, 粒子的波动性表现得越来越明显. 当粒子的热波长等于粒子的间距, 波包发生重叠, 两个粒子发生交换. PIMC 方法可以计算不同温度下发生全同交换的粒子数. 图 3 是对 32 个氦原子在饱和气压下计算得出的结果, 从图 3 中可以看出, 随着温度的降低, 发生交换的粒子越来越多, 量子效应变得越来越明显.

### 2.3 周期性边界条件中的超流

二流体模型认为, 在相变温度以下, 液氦由正常氦和超流氦组成. 实验上超流性可以用系统对其边界的响应来表征. 旋转装有超流体的圆桶时, 如果转速不快, 正常成分会随着桶壁旋转, 超流成分会保持静止.

PIMC 方法采用周期性边界条件对液氦进行模拟<sup>[9]</sup>. 圆桶中的液氦可以看成是在平均半径为  $R$ 、间距为  $d$  的两个同心柱体之间运动. 引入绕数  $W$ , 它等于路径从一个方向穿过环路的次数与环路周长的乘积<sup>[10]</sup>. 超流密度和绕数的方均值成正

比, 如果路径的绕数非零就意味着系统中出现了超流<sup>[11]</sup>.

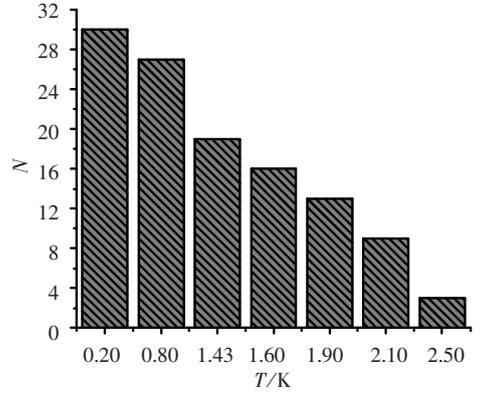


图 3 交换粒子数随温度变化图

图 4 是 Donnelley 的实验结果, 黑点是 PIMC 对 32 个氦原子拟合得到的结果. 从图 4 中可以看出随着温度的升高, 超流分数越来越低, 当温度高于 2.17 K 的时候, 超流密度变为零, 体系从超流态转变到正常态. PIMC 的计算结果反映了这一过程, 只要结果足够精确, 就可以通过计算得到超流相变温度.

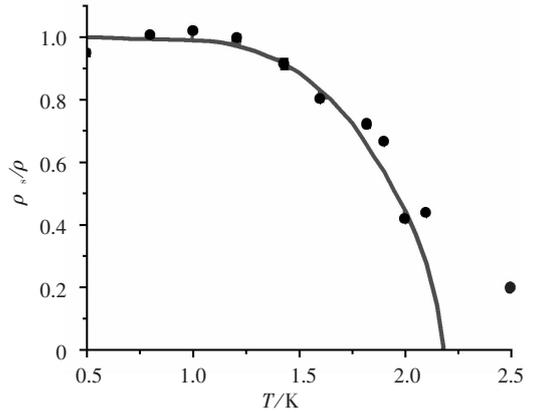


图 4 超流分数图

## 3 结 论

1) 从对液氦的计算可以看出, PIMC 的计算结果和实验符合得很好.

2) PIMC 的计算结果表明, 随着温度的降低, 量子效应变得越来越重要, 系统中发生交换的粒子数越来越多. 发生交换时, 粒子的路径形成更大的闭合回路, 当出现贯穿整个拟合元胞的路径时, 系统就变成了超流态.

## 参考文献:

[1] CEPERLEY D M. Path integrals in the theory of condensed helium[J]. Rev Mod Phys, 1995, 67(2): 279 - 355.