

# 液态 $^4\text{He}$ 系统对关联函数的路径积分蒙特卡罗模拟<sup>\*</sup>

赵杏文<sup>1)</sup> 程新路<sup>1)</sup>† 张 红<sup>2)</sup>

1) 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2008 年 10 月 14 日收到, 2009 年 5 月 10 日收到修改稿)

利用路径积分蒙特卡罗 (PIMC) 模拟方法研究了由 256 个 $^4\text{He}$ 原子组成的系统在不同条件下的对关联函数  $g(r)$ . 在标准大气压下 (SVP), 分别在 1.38 K, 1.67 K, 2.50 K 和 4.24 K 等四个温度时对系统不同势能的情况的对关联函数进行了计算; 另外还讨论了系统的温度和密度对对关联函数的影响. 结果发现, 系统的势能变化及密度变化都或大或小影响对关联函数, 而温度对其影响不是很大. 虽然 PIMC 方法存在有限尺度效应, 但是由 128 和 256 个 $^4\text{He}$ 原子组成系统的对关联函数存在极小的差异, 因此可以得到: 随着模拟系统尺度的增大, 所模拟的有限尺度的系统已逐渐接近于真实系统. 所以所得的 256 原子系统的性质可近似说明液态系统性质.

关键词: 路径积分蒙特卡罗, 对关联函数, 相互作用势, 有限尺度效应

PACC: 6700, 6740, 7115Q

## 1. 引言

氦原子是低温物理领域的基本粒子之一, 由于其在常压下不能固化的性质, 在理论上是研究宏观量子效应的几乎完美的系统. 在实际应用中, 用于气冷式核反应堆的工作流体和超低温冷冻剂. 作为氦的非常重要的同位素, 液态 $^4\text{He}$ 是标准的玻色系统, 唯一简单的玻色超流体, 在凝聚态物理中地位仅次于 Hubbard 模型和 Ising 模型的另外一个基本模型. 利用路径积分蒙特卡罗 (PIMC) 模拟方法<sup>[1]</sup>,  $^4\text{He}$ 的许多性质, 如能量和动量分布、超流体密度、固态时的交换频率以及掺杂现象都被很好地模拟计算出来<sup>[2-16]</sup>. 2001 年, 美国宾夕法尼亚州立大学的研究人员摩西·陈创造出世界第一种“超固体”——超固体氦. 然而, 理论物理学家对陈的研究结果提出质疑. 2005 年 Ceperley 等用 PIMC 对固态 $^4\text{He}$ 进行了计算<sup>[17]</sup>, 从理论上揭示出该结果的不合理性.

虽然 $^4\text{He}$ 的大部分性质都得到计算和研究, 但到目前为止对对关联函数  $g(r)$  的研究却很少. 对关联函数通常指的是给定某个粒子的坐标, 其他粒子在空间的分布概率 (离给定粒子多远), 所以对关联函数函数既可以用来研究物质的有序性, 也可以用来

描述电子的相关性, 用它可监视介质的微结构变化, 如相变. 对关联函数在很多学科中都占据很重要的地位, 比如说在流体力学中, 由于原子尺度有限, 并且与其他原子之间有相互作用, 因此原子之间的关联效应普遍存在. 空间关联效应由关联函数给出, 对关联函数  $g(r)$  是各种关联函数中最重要的一个, 任何一个与对势有关的物理量都可以写成关于  $g(r)$  的一个积分的形式, 以压强为例,

$$P = \frac{Nk_B T}{V} - \frac{N^2}{6V^2} \int_V r \frac{du}{dr} g(r) dr, \quad (1)$$

其中  $N$  为所研究系统的粒子数,  $V$  为系统体积,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为系统温度,  $r$  为所取的一个体系粒子之间的距离,  $P$  为系统的压强.

在材料科学和生物学中, 研究者都试图得到二元空间结构<sup>[18-23]</sup>的几何特性, 目前主要采用的方法是空间统计学中的二阶法<sup>[24-26]</sup>; 另外, 各物态物质的原子对关联函数形状和趋势是不同的, 在所有的情况下,  $r \rightarrow 0$ ,  $g(r) \rightarrow 0$ , 表示两个原子不能占据同一位置; 在气态和液态时,  $r \rightarrow \infty$ ,  $g(r) \rightarrow 1$ , 意味着无序体系在大尺度下趋于均匀分布; 非晶态与晶态的  $g(r)$  在  $r$  较小时都有峰值出现, 表示短程有序的存在. 对于晶态, 在  $r$  很大时仍有峰值, 这就是长程有序, 而非晶态是长程无序的, 故距离较远时,

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金委员会和中国工程物理研究院联合基金 (批准号: 10676025) 和教育部归国学者研究基金资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zhengxl@scu.edu.cn

峰值就很不明显. 通过测定  $g(r)$  可以判定非晶模型的准确程度.

由于电子之间有库仑斥力, 还有由于波函数反对称化的作用, 所以对关联函数的具体形式比较复杂, 目前尚未有解析的表达. 在实验方面对关联函数的认识大多是通过中子和 X 射线散射实验而得到的, 在理论方面, 无论用哪种程序计算系统的对关联函数, 都离不开设定系统势能, 系统温度密度压强这几个基本条件. 能否得到与实验值相符合的结果, 除了理论原理正确与否外, 这几个条件的影响也不能忽视. 因此在本文中, 我们以低温物理中非常重要的<sup>4</sup>He系统为研究对象, 利用能精确求解一般的量子力学问题的 PIMC 模拟方法, 对<sup>4</sup>He系统在不同条件下的对关联函数进行计算, 研究和分析系统条件的变化对对关联函数的影响, 以期对涉及对关联函数, 即系统微结构变化的实验研究进行理论上的指引. 在第二部分, 给出 PIMC 方法的简要说明; 第三部分列举我们的实验结果及其与实验数据的比较; 第四部分给出结论.

## 2. 计算细节

### 2.1. PIMC 方法

随着科技的不断进步, 计算机模拟已广泛地应用于科学研究, 并已与实验、理论三足鼎立、相辅相成, 成为科学研究常用的方法之一<sup>[27-34]</sup>.

在研究物理问题时常用的计算机模拟方法有两种: 1) 随机模拟方法或统计试验方法, 又称蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法. 它是通过不断产生随机数序列来模拟过程. 自然界中有的过程本身就是随机的过程, 物理现象中如粒子的衰变过程、粒子在介质中的输运过程等. 当然 Monte Carlo 方法也可以借助概

率模型来解决不直接具有随机性的确定性问题. 2) 确定性模拟方法, 即统计物理学中称为分子动力学 (molecular dynamics) 的方法, 它是通过数值求解一个个的粒子运动方程来模拟整个系统的行为.

Monte Carlo 方法又叫做随机模拟 (random simulation) 方法, 有的文献中也称作随机抽样 (random sampling) 技术或统计试验 (statistical testing) 方法. 随着现代计算机技术的飞速发展, 蒙特卡罗方法已经在原子弹工程的科学研究中发挥了极其重要的作用, 并正在日益广泛地应用于现代化科学技术的各个方面, 如气体放电中的粒子输运过程等. 统计物理、典型数学问题、真空技术、激光技术以及医学、生物、探矿等方面<sup>[35-40]</sup>.

多体体系的量子力学、玻色凝聚和超流性在理论研究中是有一定的难度的. 1953 年, 费曼指出由于量子体系的热力学性质与一种特殊结构的经典聚合物的热力学性质一致, 而经典聚合物的性质可以用计算机模拟准确计算出来. 费曼这一思想导致了 PIMC 方法的产生. PIMC 是能精确求解一般的量子力学问题的方法, 能够对超流现象进行理论研究, 能解决高压下的掺杂问题<sup>[41, 42]</sup>.

在量子力学中, 密度矩阵是一个基本物理量, 在热平衡时系统的所有的静力学及动力学性质在理论上都可以通过密度矩阵得到<sup>[43]</sup>. 假设一个有  $N$  个粒子的系统, 在热平衡时, 物理量  $o$  可以表示为

$$o = \frac{\int d\mathbf{R} \mathbf{R} | o e^{-\beta H} | \mathbf{R}}{\int d\mathbf{R} \mathbf{R} | e^{-\beta H} | \mathbf{R}}, \quad (2)$$

其中  $\beta = \frac{1}{k_B} T$ ;  $\mathbf{R} = \{r_1, \dots, r_N\}$ ,  $r_i$  是第  $i$  个粒子的位置;  $\rho = e^{-\beta H}$  就是密度矩阵. 将密度矩阵  $\rho$  作如下变形:  $e^{-\beta H} = (e^{-\tau H})^M$ , 并在位形空间中展开:  $\langle \mathbf{R} | \rho | \mathbf{R}' \rangle = \langle \mathbf{R} | e^{-\tau H} | \mathbf{R}' \rangle$  (2) 式变为

$$o = \frac{\int \dots \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_{M-1} \mathbf{R} | o e^{-\tau H} | \mathbf{R}_1 \langle \mathbf{R}_1 | \rho | \mathbf{R}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{R}_{M-1} | \rho | \mathbf{R} \rangle}{\int \dots \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_{M-1} \langle \mathbf{R} | \rho | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | \rho | \mathbf{R}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{R}_{M-1} | \rho | \mathbf{R} \rangle}. \quad (3)$$

要求解这个  $3N(M-1)$  重积分, 需利用 Metropolis 蒙特卡罗方法<sup>[44]</sup>. 每个起始于  $\{\mathbf{R}\}$  的路径, 经过  $M-1$  步, 又终止于起始点  $\{\mathbf{R}\}$ , 形成一个闭合环路. 如果忽略量子统计效应, 根据与乘积  $\langle \mathbf{R} | \rho | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | \rho | \mathbf{R}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{R}_{M-1} | \rho | \mathbf{R} \rangle$  成比例的概率分布对始于

不同  $\{\mathbf{R}\}$  的路径进行抽样.

当时间步长  $\tau$  足够小时 (即较高温度), 可以得到足够精确的密度矩阵, 但是为了提高计算效率, 要尽量减小  $M$  的值. 利用对密度矩阵可以同时照顾到上述结果的精度和计算效率两个方面:

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \tau) \approx \rho^0(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \tau) \prod_{i < j} \exp[-u(r_{ij}, r'_{ij}; \tau)], \tag{4}$$

$$u(r_{ij}, r'_{ij}; \tau) = (\tau/2 [V(r_{ij}) + V(r'_{ij})]), \tag{5}$$

这里  $\rho^0(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \tau)$  是自由粒子密度矩阵,  $r_{ij}$  和  $r'_{ij}$  分别是粒子  $i, j$  在  $\{\mathbf{R}\}$  和  $\{\mathbf{R}'\}$  位形空间中的距离,  $u(r_{ij}, r'_{ij}; \tau)$  就是两个粒子之间的对密度矩阵, 这个密度矩阵比初级近似下的密度矩阵要精确的多.  $V(r)$  是粒子之间的相互作用势.

2.2. 相互作用势和计算模型

文献 [45] 对理论工作中存在的问题进行了仔细的分析, 认为体系中原子之间相互作用势对系统的各种性质有一定的影响. 原子间相互作用势中主要是如何准确表述多体作用. 对凝聚介质的凝聚特性的 PIMC 模拟中, 模拟的结果准确与否也与系统内的原子间相互作用势是否能准确描述原子间的相互作用密切相关. 原子间选用不同的势能相互作用对计算结果也有很大影响<sup>[46-47]</sup>, 我们在两种不同的势: HFD-B3-FCII<sup>[48]</sup> 和 SAPT<sup>[49-50]</sup> 情况下, 分别计算 <sup>4</sup>He 系统的对关联函数.

本文利用 UPI 程序进行计算, 在饱和蒸气压下, 温度和密度之间的关系参见文献 [51]; 时间步长设为 0.025 K<sup>-1</sup>, 能量和长度单位分别为 K 和 Å.

3. 结果与讨论

3.1. 氦的对关联函数

由于流体氦是等立方结构, 其对关联函数只是原子间距离的函数, 因此又被称为径向分布函数. 对关联函数的大量信息都是从散射实验<sup>[52]</sup>中得到的, 其定义为<sup>[53]</sup>

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N^2} \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}), \tag{6}$$

其中  $V$  为所研究系统的体积,  $N$  为系统粒子数,  $r_{ij}$  为系统内任意两个粒子之间的距离. 由于原子核之间的排斥作用, 不可能在距离  $r$  趋于 0 时找到另一个粒子, 因此  $g(r)$  也趋于零; 另一方面, 距离  $r$  远远大于粒子的相互作用尺度, 那么粒子间彼此不再相关, 因此  $g(r)$  趋于 1<sup>[54-56]</sup>; 当距离  $r$  是散射波长数量级时,  $g(r)$  随  $r$  的变化而变化, 我们要研究的正是这个范围.

我们首先对比含 128 和 256 个 <sup>4</sup>He 原子体系的

对关联函数(系统间的相互作用势规定为 SAPT, HFD-B3-FCII 情况下的结果相同) 结果见图 1. 从图中可以看出, 虽然 PIMC 方法存在有效尺度效应<sup>[57]</sup>, 但是由 128 和 256 个 <sup>4</sup>He 原子组成系统的对关联函数存在极小的差异, 因此我们可以得到: 随着模拟系统尺度的增大, 所模拟的有限尺度的系统已逐渐接近于真实系统. 所以本文所得的 256 原子系统的性质可近似说明液态系统性质.

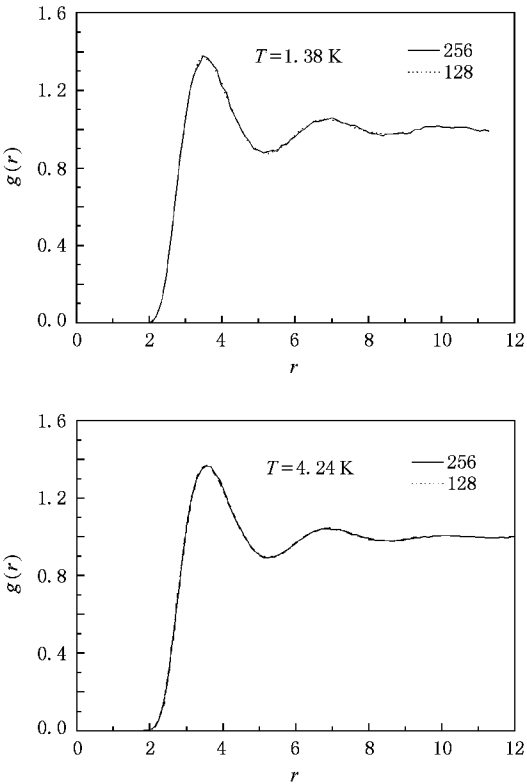


图 1 饱和蒸气压下, 含有 128 和 256 个原子的系统的对关联函数的比较

3.2. 系统间势能对对关联函数的影响

我们对饱和蒸气压下由 256 个 <sup>4</sup>He 粒子构成的系统, 分别在相互作用势 HFD-B3-FCII 和 SAPT 情况下, 在四个不同温度 1.38 K, 1.67 K, 2.50 K 和 4.24 K 时实施 PIMC 计算, 获得相应温度下, 不同势能条件计算所得的对关联函数与实验值的比较如图 2 所示. 我们看到由于系统的有效尺度效应, 计算结果和实验值在波谷和波峰处有差异, 但是相互作用为 SAPT 时差异要比 HFD-B3-FCII 小些, 证明相互作用势对对关联函数有影响, 越是精确的势, 越能较好的描述实际离子间的相互作用, 所得的反应微观结构的对关联函数也与实验值更符合些.

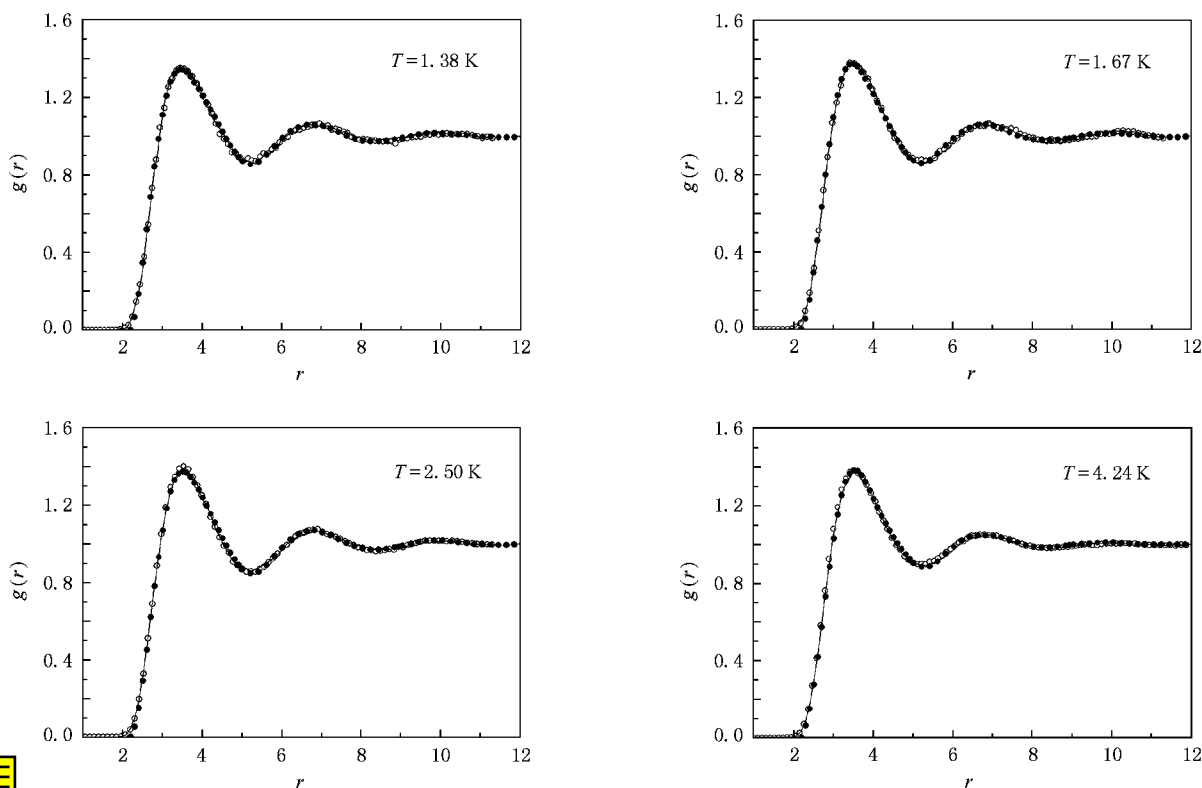


图2 饱和蒸气压下四个不同温度时,系统在 HFD-B3-FCII 和 SAPT 势能相互作用下所得  $g(r)$  与相应温度下实验值的比较(●代表实验值<sup>[58]</sup>,○和——分别代表 HFD-B3-FCII 和 SAPT 相互作用下的计算结果)

### 3.3. 系统的温度和密度对对关联函数的影响

我们还计算了<sup>4</sup>He系统的温度和密度两者之一发生变化时对关联函数的变化情况,结果见图3和图4.从图上可以看出系统密度变化对对关联函数的影响比较大,而温度发生变化时对关联函数几乎不变.这个结果是显而易见的,正如前面所说,对关联函数是给定一个粒子的位置,在距其 $r$ 远处找到其他粒子的概率.对于较短距离,这个概率与粒子是怎样排列在一起的有关.以粒子的硬球模型为例,由于各硬球之间不可交叠,因此两原子中心的最近距离就是该原子的直径,因此当指定的两原子间距小于原子直径时,找到另一原子的概率为0;以一个原子为研究对象,在其周围360°范围内或近或远的围着一圈原子,外圈原子又被再外圈的原子围住……这样就形成一个个圆形的层状结构,随着与最中心原子距离的逐渐增大,这些层状就越发的不规则,这时找到两个间距为 $r$ 的原子的概率就和密度有关:因为在一个有限的尺度范围内,密度越大,所包含的原子就多,找到符合条件的原子的可能性就大,距离再大,外层原子与处于最中心的那个原子没有关联,

因此对关联函数就趋于一个稳定值1.而在这样低的温度下,温度的有限升高不足以使原子排列发生变化,因此温度对对关联函数的影响不明显.

经过分析,如下关系近似成立:

$$r_0 = \frac{1}{2} r_1 = \frac{2}{3} r'_1 = \frac{1}{4} r_2 = \frac{4}{3} r'_2, \quad (7)$$

这里的 $r_n$ 代表对关联函数的第 $n$ 个波峰的位置,而 $r'_n$ 则是第 $n$ 个波谷的位置.

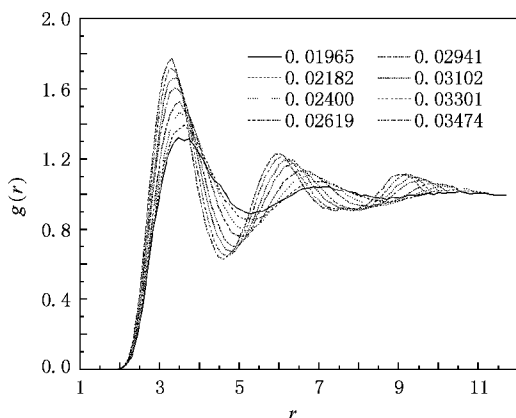


图3 0.5 K 温度下,密度对对关联函数的影响

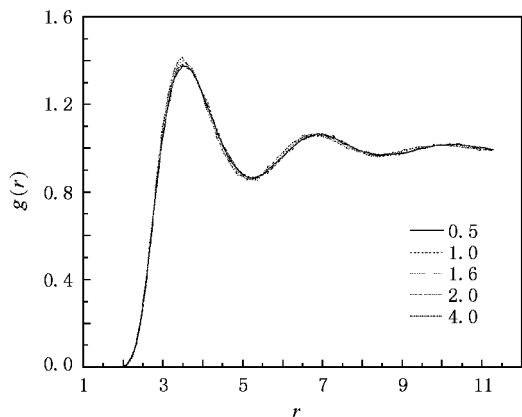


图4 密度为  $0.02182 \text{ \AA}^{-3}$  时, 温度分别为 0.5 K, 1.0 K, 1.6 K, 2.0 K 和 4.0 K 时的对关联函数

## 4. 结论与展望

PIMC 方法是一个功能强大的模拟方法, 在国外应用很广. 在这篇文章中, 我们利用 PIMC 方法研究了  $^4\text{He}$  系统的对关联函数, 计算结果除了显示出模拟方法不可避免的有效尺度效应外, 结果与实验值符合得很好, 而且我们还研究了  $^4\text{He}$  系统的温度及密度对对关联函数的影响. 本文的结果验证了路径积分蒙特卡罗方法以及描述  $^4\text{He}$  系统的 HFD-B3-FC11 势的精确性, 同时, 对温度和密度对对关联函数的影响的研究对实验中研究物质微观结构的变化等性质提供了指导意义.

感谢 D. M. Ceperley 在使用 PIMC 计算程序给予的帮助.

- [1] Ceperley D M 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67** 279
- [2] Whitlock P A, Ceperley D M, Chester G V, Kalos M H 1979 *Phys. Rev. B* **19** 5598
- [3] Whitlock P A, Kalos M H, Chester G V, Ceperley D M 1980 *Phys. Rev. B* **21** 999
- [4] Ceperley D M, Pollock E L 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 351
- [5] Ceperley D M, Pollock E L 1987 *Can. J. Physics* **65** 1416
- [6] Sindzingre P, Klein M L, Ceperley D M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 1601
- [7] Wagner M, Ceperley D M 1993 *J. Low Temp. Phys.* **89** 581
- [8] Wagner M, Ceperley D M 1994 *J. Low Temp. Phys.* **94** 171
- [9] Ortiz G, Ceperley D M 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4642
- [10] Ceperley D M, Simmons R O, Blasdel R C 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 115
- [11] Boninsegni M, Ceperley D M 1996 *J. Low Temp. Phys.* **104** 339
- [12] Gordillo M C, Ceperley D M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 6447
- [13] Gordillo M C, Ceperley D M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8416
- [14] Draeger E W, Ceperley D M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12094
- [15] Khairallah S A, Ceperley D M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 185301
- [16] Clark B, Ceperley D M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 105301
- [17] Bernu B, Ceperley D M 2005 *J. of Phys. and Chem. of Solids* **66** 1462
- [18] Diggle P J 1981 *Biometrics* **37** 531
- [19] Jeulin D 1993 *J. Microsc.* **172** 13
- [20] Thovert J F, Salleas J, Adler P M 1993 *J. Microsc.* **170** 65
- [21] Mattfeldt T, Frey H, Rose C 1993 *J. Microsc.* **171** 143
- [22] Mattfeldt T, Vogel U, Gottfried H W, Frey H 1993 *Acta Stereol.* **12** 203
- [23] Mattfeldt T, Schmidt V, Reepschlaeger D, Rose C, Frey H 1996 *J. Microsc.* **183** 158
- [24] Hanisch K H, Stoyan D 1980 *J. Microsc.* **122** 131
- [25] Jensen E B, Kieffer U K, Gundersen H J G 1990 *Acta Stereol.* **9** 15
- [26] Vedel-Jensen E B, Kieffer U K 1992 *Acta Stereol.* **11** 569
- [27] Asakura S, Oosawa F 1954 *J. Chem. Phys.* **22** 1255
- [28] Crocker J C, Matteo J A, Dinsmore A D, Yodh A G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4352
- [29] Dinsmore A D, Wang D T, Nelson P, Yodh A G 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 409
- [30] Roth R, Gotzelmann B, Dietrich S. 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 448
- [31] Biben T, Bladon P, Frenkel D 1996 *J. Phys. Condens Matter* **8** 10799
- [32] Li W H, Ma H R 2002 *Phys. Rev. E* **66** 061407
- [33] Bennett C H 1976 *J. Comput. Phys.* **22** 245
- [34] Guo J Y, Chen Z S, Xiao C M 2005 *Acta Chem. Phys. Sin.* **18** 993 (in Chinese) [郭纪源、陈泽顺、肖长明 2005 化学物理学报 **18** 993]
- [35] Chen S, Wu Q Y, Chen Z G, Xu G G, Huang Z G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2011 (in Chinese) [陈珊、吴青云、陈志高、许桂贵、黄志高 2009 物理学报 **53** 2011]
- [36] Xu L Q, Li H, Xiao Z Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6030 (in Chinese) [徐兰青、李晖、肖郑颖 2008 物理学报 **57** 6030]
- [37] Ju Z P, Cao W F, Liu X W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 174 (in Chinese) [鞠志萍、曹午飞、刘小伟 2009 物理学报 **58** 174]
- [38] Zhao Z Q, Ding Y K, Gu Y Q, Wang X X, Hong W, Wang J, Hao Y D, Yuan Y T, Pu Y K 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7127 (in Chinese) [赵宗清、丁永坤、谷渝秋、王向贤、洪伟、王剑、郝轶聃、袁永腾、蒲以康 2007 物理学报 **56** 7127]
- [39] Shi W, Jia W L, Ji W L, Liu K 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6334 (in Chinese) [施卫、贾婉丽、纪卫莉、刘锴 2007 物理学报 **56** 6334]
- [40] Hao F H, Hu G C, Liu S P, Gong J, Xiang Y C, Huang R L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3523 (in Chinese) [郝樊华、胡广春、刘素萍、龚建、向永春、黄瑞良 2005 物理学报 **54** 3523]

- [ 41 ] Ma Y M , Cui T , He W J , Zhao Q , Liu Z M , Zou G T 2003 *Acta Volt. Phys. Sin.* **2** 88 ( in Chinese ) [ 马琰铭、崔 田、何文炯、周 强、刘志明、邹广田 2003 高压物理学报 **2** 88 ]
- [ 42 ] Ma Y M , Cui T , He W J , Yin H W , Zou G T 2002 *Acta Volt. Phys. Sin.* **4** 276 ( in Chinese ) [ 马琰铭、崔 田、何文炯、尹宏伟、邹广田 2002 高压物理学报 **4** 276 ]
- [ 43 ] Feynman R P 1972 *Statistical Mechanics* ( Benjamin , New York )
- [ 44 ] Ceperley D M 2003 *The Monte Carlo Method in the Physical Sciences* ed. J. E. Gubernatis , *AIP Conference Proceedings* , Vol 690 , p85
- [ 45 ] Lingcang C , Fusheng L , Fuqian J 1998 *Theoretical isothermal compression curve for solid helium* ( J. High Pressure Physics ) P145
- [ 46 ] Cai L C , Jing F Q , Liu F S , Tian C L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1218 ( in Chinese ) [ 蔡灵仓、经福谦、刘福生、田春玲 2003 物理学报 **52** 1218 ]
- [ 47 ] Cai L C , Jing F Q , Liu F S , Tian C L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 764 ( in Chinese ) [ 蔡灵仓、经福谦、刘福生、田春玲 2006 物理学报 **55** 764 ]
- [ 48 ] Aziz R A , Janzen A R , Moldover M R 1995 *Phys. Rev. Letts.* **74** 1586
- [ 49 ] Janzen A R , Aziz R A 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 914
- [ 50 ] Korona T , Williams H L , Bukowskj R , Szalewicz K 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 5109
- [ 51 ] Crawford R K 1976 *Rare Gas Solids* ed. M. L. Klein and J. A. Venables ( Academic , New York ) , Vol. 1 , p 663
- [ 52 ] Compton A H , Allison S K 1935 *X-Rays in Theory and Experiment* ( Van Nostrand , New York ) p19
- [ 53 ] Allen M , Tildesley D 1987 *Computer Simulation of Liquids* ( Oxford University Press , New York ) p55
- [ 54 ] Lee T D , Kerso Huang , Yang C N 1957 *Phys. Rev. A* **106** 1135
- [ 55 ] Kalos M H , Levesque D , Verlet L 1974 *Phys. Rev. A* **9** 2178
- [ 56 ] Giorgini S , Boronat J , Casulleras J 1999 *Phys. Rev. A* **60** 5129
- [ 57 ] Zhao X W , Cheng X L 2008 *Commun. Theor. Phys.* **50** 987
- [ 58 ] Robkoff H N , Hallock R B 1981 *Phys. Rev. B* **24** 159

## Path integral Monte Carlo simulations for pair correlation function for liquid <sup>4</sup>He systems \*

Zhao Xing-Wen<sup>1)</sup> Cheng Xin-Lu<sup>1)†</sup> Zhang Hong<sup>2)</sup>

<sup>1</sup> *✉ Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China )*

<sup>2</sup> *✉ College of Physics Science and technology , Sichuan University , Chengdu 610064 , China )*

( Received 14 October 2008 ; revised manuscript received 10 May 2009 )

### Abstract

Path integral Monte Carlo ( PIMC ) simulation is a powerful tool in studying the interacting quantum systems at finite temperatures. In this article , we use PIMC to study the pair correlation function  $g(r)$  of the system consisting of 124 <sup>4</sup>He atoms in different conditions. At saturated-vapor-pressure ( SVP ) , we calculated the pair correlation function  $g(r)$  at four different temperatures respectively , that is ,  $T = 1.38$  K ,  $1.67$  K ,  $2.50$  K and  $4.24$  K. We also determined the changes in  $g(r)$  when either temperature or density is changed while the other remains fixed , and found that for different densities and the same temperature , the change in  $g(r)$  is remarkable , while for different temperatures but same density , the change is not obvious. We used the microcosmic point of view for  $g(r)$  to explain the above phenomenon. Although finite size effects exist in the PIMC method , when comparing the pair correlation function belonging to systems consisted of 128 and 256 <sup>4</sup>He atoms respectively , differences between them are small. And we can conclude that as the increasing of the simulated system size , differences between simulated system and the real one becomes smaller and smaller. So in this particle , the properties educed from the simulated system consisted of 256 <sup>4</sup>He atoms can represent those of the real liquid system.

**Keywords :** path integral Monte Carlo simulation , pair correlation function , interacting potential , finite size effect

**PACC :** 6700 , 6740 , 7115Q

\* Project supported by the Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China and China Academy of Engineering Physics ( Grant No. 10676025 ) and the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars , State Education Ministry.

† Corresponding author. E-mail : chengxl@scu.edu.cn