

# Федеральное агентство по образованию

УДК 536.7; 538.956; 541.12; 541.67  
ГРНТИ 29.19.22, 29.19.25, 29.19.03  
Инв. № 111-09-059/1

## **АННОТАЦИЯ**

о выполнении Государственного контракта  
№ П1919 от 29 октября 2009 г.

<b>Исполнитель:</b> Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Иркутский государственный университет"
<b>Программа (мероприятие):</b> Федеральная целевая программ «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., в рамках реализации мероприятия № 1.3.2 Проведение научных исследований целевыми аспирантами.
<b>Проект: Наименование исследований:</b> Физика конденсированных сред. <b>Наименование проблемы исследования:</b> Метод функции распределения в исследовании классических и квантовых жидкостей.
<b>Научный руководитель:</b> Аграфонов Юрий Васильевич
<b>Руководитель проекта:</b> Меленчук Иван Александрович

**Иркутск**  
**2009 г.**

На современном этапе интенсивно развивающимся направлением физики конденсированного состояния и физического материаловедения является исследование свойств наноразмерных материалов и разработка технических приложений на их основе. Возможности синтеза и управления функциональными свойствами на уровне отдельных молекул или кластеров привели к тому, что изучение наноструктур стало актуальным как в практическом, так и теоретическом плане. По сути, интерес исследователей сместился к изучению физических объектов, лежащих на стыке классической и квантовой физики. Число взаимодействующих частиц в этих объектах (магнитные сплавы, углеродные нанотрубки, нанокapли жидкого гелия, классические и квантовые наноразмерные структуры) сравнительно невелико – несколько десятков или сотен. Для описания таких систем необходима разработка методов исследования локальной микроструктуры (ближний порядок), учитывающих как классические, так и квантовые молекулярные корреляции.

Ближний порядок в расположении частиц изучается как в классических системах, например, в теории жидкостей, так и в квантовых, например, сильно коррелированные ферми-системы в конденсированных средах. При этом необходимо учитывать различие в пространственных масштабах молекулярных корреляций в классических и квантовых системах. В классических системах парные корреляции (ближний порядок) обусловлены межмолекулярными взаимодействиями и быстро убывают с расстоянием. В квантовых системах парные корреляции обусловлены обменным взаимодействием и существуют даже в идеальном газе, убывая с расстоянием гораздо быстрее. В том случае, когда размеры системы существенно превышают длину корреляции, детали молекулярного взаимодействия становятся несущественными. Именно поэтому осуществляется перенормировка потенциала в теории ферми-жидкости. В том случае, когда длина корреляции сравнима с размерами системы (тонкие пленки, нанокapли) - детали молекулярного взаимодействия и, соответственно, ближний порядок необходимо учитывать.

Поведение квантовых жидкостей (к примеру, гелия или водорода) в пространствах сокращенной размерности – одна из наиболее интересных задач физики низких температур. Среди множества возможных систем особое внимание исследователей привлекают монослойные пленки, жидкости и газы в узких порах и микрополостях, где ближний порядок, связанный с межмолекулярными взаимодействиями, играет существенную роль. При низких температурах необходимо учитывать квантовые эффекты. Сочетание эффектов взаимодействия и квантовых эффектов могут

кардинальным образом влиять на термодинамические характеристики и энергетический спектр таких систем.

Коллективные возбуждения жидкого гелия, заключенного в различные пористые структуры, интенсивно изучаются с начала 90-х. К настоящему времени имеется большое количество публикаций по исследованию гелия-3 и гелия-4 в пористых структурах.

Открытие в начале 90-х годов углеродных нанотрубок лишь усилило интерес к квазиодномерным жидкостям.

Поэтому представляет интерес описание ближнего порядка (пространственных корреляций) в квантовых жидкостях на языке  $l$ -частичных функций распределения, которое мы проводим по аналогии с описанием классических жидкостей.

Количественной характеристикой таких корреляций выступает парная корреляционная функция  $h_{12}(r) = G_{12}(r) - 1$ , где двухчастичная (радиальная) функция распределения  $G_{12}(r)$  определяет полное число атомов  $\frac{N}{V} G_{12}(r) 4\pi r^2 dr$  в сферическом слое радиуса  $r$  толщиной  $dr$ .

Для определения парной корреляционной функции в квантовых макроскопических и наноразмерных жидкостях необходимо сформулировать методологию согласованного описания квантовых и классических корреляций. Основой такого описания может быть аппарат частичных функций распределения.

Для классических молекулярных жидкостей частичные функции распределения находятся посредством решения бесконечной цепочки уравнений Боголюбова- Борна- Грина- Кирквуда- Ивона, либо из эквивалентной ей системе уравнений Орнштейна- Цернике для одно- и двухчастичной функций распределения. Наиболее предпочтительной является система уравнений Орнштейна- Цернике, так как в настоящее время она является основой для описания структурных характеристик (ближнего порядка) макроскопических жидкостей для различных параметров межмолекулярного взаимодействия, температуры и плотности. Эти же уравнения позволяют получать структурные характеристики пространственно- неоднородных молекулярных систем, в частности, наноразмерных структур.

Для ансамбля слабозаимодействующих квантовых газов энергетический спектр можно рассчитать с помощью стандартной квантовомеханической теории возмущений. Однако в квантовых жидкостях межмолекулярное взаимодействие отнюдь не является слабым, так что для выяснения энергетического спектра и термодинамических свойств макроскопических систем требуется рассмотрение бесконечных рядов теории возмущений. Для преодоления подобных трудностей разработан метод функций Грина

макроскопической системы. Однако рассчитать структурные характеристики метод функций Грина не позволяет.

Структурные характеристики и одновременно энергетический спектр, в принципе можно на основе метода N- частичных вигнеровских функций распределения. К сожалению, непосредственное использование уравнения движения для N- частичных квантовых вигнеровских функций распределения возможно лишь в некоторых частных случаях, например для системы слабовзаимодействующих частиц. С другой стороны, для вычисления макроскопических характеристик молекулярной системы обычно достаточно знать функции распределения, зависящие от переменных всего лишь одной или двух частиц, т.е. одночастичной и двухчастичной функций распределения.

Поэтому актуальной проблемой является разработка методов решения уравнений для вигнеровских функций распределения для пространственно- однородной молекулярной системы сильно взаимодействующих частиц, каковыми являются неидеальные газы и жидкости. Разработка таких методов позволит обобщить полученное решение на пространственно- неоднородные (макроскопические и наноразмерные) молекулярные структуры, например пленки и нанокapли квантовых жидкостей.

При реализации данной программы исследований решались следующие задачи:

- проведен анализ научной литературы по методам исследования энергетического спектра, термодинамических и структурных характеристик классических и квантовых жидкостей, в том числе сверхтекучих

- сделан вывод, что на данном этапе исследований достаточно ограничиться рассмотрением слабовозбужденных состояний предельно вырожденных несверхтекучих квантовых жидкостей и вычисления только энергии основного состояния

- в качестве объекта исследования выбрана нормальная ферми- жидкость

- воспроизведено известное из литературы решение для энергии основного состояния нормальной ферми- жидкости с точностью до слагаемых, учитывающих тройные столкновения

- показано, что метод вигнеровских функций распределения позволяет вычислять структурные характеристики (радиальная функция распределения)

- разработаны методы вычисления энергии основного состояния квантовой системы сильно взаимодействующих частиц, плотность которой соответствует реальной жидкости

- продемонстрирована работоспособность алгоритма вычисления радиальной функции распределения и энергии основного состояния как собственных функций и собственных значений вигнеровских функций распределения

- воспроизведены численные и аналитические результаты вычислений ближнего порядка (радиальной функции распределения) в классической физике макроскопических жидкостей

- получены формулы, описывающие изменение ближнего порядка в граничных слоях жидкостей под воздействием твердой ограничивающей поверхности, в том числе в плоскопараллельном зазоре

- показано, что среднее значение энергии, вычисленное на основе классической статистической физики, по заданной радиальной функции распределения, совпадает с собственным значением (энергией основного состояния);

- проведено согласование алгоритмов расчета макроскопических характеристик (энергия основного состояния, термодинамические величины) и микроскопических параметров (ближний порядок) нормальной ферми- жидкости

Полученные результаты дают основание для применения разработанной методики к согласованному описанию классических и квантовых эффектов в наноразмерных неидеальных ферми- газах и жидкостях