Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Григорчак

Орест Іванович

УДК 538.94

МІКРОСКОПІЧНА ТЕОРІЯ БОЗЕ-РІДИНИ З УРАХУВАННЯМ ПРЯМИХ ТРИ- І ЧОТИРИЧАСТИНКОВИХ КОРЕЛЯЦІЙ

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ — 2016

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор ***Вакарчук Іван Олександрович.***

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор ***Стасюк Ігор Васильович***, головний науковий співробітник відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем НАН України

член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор ***Лев Богдан Іванович***, завідувач відділу синергетики Інституту теоретичної фізики імені М. М. Боголюбова НАН України

Захист відбудеться “____” ____________________р. о_____год._____хв. на засіданні спеціалізованої Вченої ради Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8, фізичний факультет, аудиторія Велика Фізична.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Драгоманова, 5.

Автореферат розіслано “_____”______________________р.

Вчений секретар
спеціалізованої Вченої ради
доктор фіз.-мат. наук, професор Павлик Б. В.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Роботи, в яких двадцять років тому була продемонстрована експериментальна можливість отримання бозе-конденсату в системі, що складається з макроскопічно невеликої кількості атомів (йдеться про атоми таких лужних металів як ^{87}Rb, ^{7}Li, Na), значно оживили зацікавленість наукового світу вивченням бозе-систем. Тут доречним буде сказати, що в 2001 році саме за дослідження в цій галузі була присвоєна Нобелівська премія з фізики за "досягнення у вивченні процесів конденсації Бозе-Айнштайна в середовищі вироджених газів і за початкові фундаментальні дослідження характеристик конденсатів". Отримавши новий поштовх для розвитку, ця тематика і сьогодні не втрачає своєї актуальності, а спектр досліджуваних проблем стає щораз ширшим. Найбільш інтенсивно сьогодні вивчаються суміші ^{3}He і ^{4}He, твердий ^{4}He, бозе-системи у різних середовищах і вимірностях простору.

Незважаючи на велику різноманітність досліджуваних систем, своєрідну інтригу продовжує зберігати історично перший об'єкт вивчення в цій галузі: рідкий ^{4}He. Попри більш, ніж 80-літню історію наукових пошуків, належного мікроскопічного теоретичного опису, який би добре працював в усій області температур, створити ще не вдалося. Особливу увагу привертає область λ-переходу, де і сьогодні активно проводяться теоретичні та експериментальні дослідження.

Для теоретичного вивчення багаточастинкових систем, зокрема тих, які описуються статистикою Бозе-Айнштайна, досить ефективною виявилася ідея колективних змінних. З її допомогою вдалося побудувати мікроскопічну теорію рідкого ^{4}He в широкотемпературній області через розрахунок матриці густини багатобозонної системи. В результаті було знайдено термодинамічні і структурні функції рідкого ^{4}He, температурну залежність частки бозе-конденсату тощо. Однак більшість цих результатів отримані виключно в наближенні хаотичних фаз, яке враховує лише парні міжчастинкові кореляції. Відомо, однак, що врахування три- та чотиричастинкових кореляцій може мати доволі суттєвий вплив на теоретичні висновки щодо досліджуваної системи. В границі низьких температур це питання було вивчене значно раніше. Натомість відкритою і актуальною залишається проблема якісного і кількісного аналізу температурної поведінки внесків прямих три- та чотиричастинкових кореляцій в теоретичний опис фізичних процесів в бозе-рідині.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у Львівському національному університеті імені Івана Франка та згідно держбюджетних тем Фф-55Ф «Теоретичні дослідження нових квантових систем» (2006-2008 рр., номер державної реєстрації № 0106U001294), Фф-14Ф «Нові методи дослідження квантових систем декількох і багатьох частинок» (2009-2011 рр., номер державної реєстрації № 0109U002096) та Фф-110Ф «Нові ефекти у квантових рідинах і газах та системах з деформованою алгеброю Гайзенберґа» (2012-

2014 рр., номер державної реєстрації № 0112U001275).

Мета і задачі дослідження. Основною метою дисертаційної роботи є побудова мікроскопічної теорії бозе-рідини в post-RPA наближенні (RPA – наближення хаотичних фаз), яке враховує внесок не тільки парних, але й прямих три- та чотиричастинкових (ту частину з них, яка зображується у вигляді двох сум за хвильовим вектором) кореляцій, а також її апробація при описі такої багатобозонної системи, як рідкий ^{4}He. Завдання полягає в тому, щоб стартуючи з ермітизованого гамільтоніана, записаного через колективні змінні в так званому наближенні «двох сум за хвильовим вектором», отримати коректні аналітичні вирази для повної матриці густини, а також для термодинамічних та структурних функцій, для яких вхідна інформація про міжчастинкову взаємодію може бути взята з експериментально добре вимірюваних величин. Крім того, ці вирази повинні відтворювати відомі результати в границі високих і низьких температур, а також в границі вимкнення взаємодії. На шляху вирішення поставленого завдання важливе значення має виділення матриці густини ідеального бозе-газу з виразу для повної матриці густини з подальшим розрахунком відповідних величин. Це, фактично, означає, що ми моделюємо нашу бозе-систему ідеальним бозе-газом, дещо здеформованим міжчастинковою взаємодією.

Серед поставлених у роботі задач варто виокремити пошук виразу для ефективної маси атома ^{4}He, який вимагає відходу від чисто мікроскопічного опису і застосування феноменологічного підходу. Однак такий крок є необхідним і виправданим, оскільки дає можливість ефективно врахувати багаточастинкові кореляції і в такий спосіб усунути інфрачервоні розбіжності, отримати правильне значення для критичної температури та належну температурну поведінку термодинамічних і структурних величин.

Отже, *об'єктом дослідження* виступають явища, які мають місце в бозе-рідині, зокрема такій, як рідкий ^{4}He. *Предметом дослідження* є матриця густини, термодинамічні і структурні функції, швидкість звуку як в нормальній, так і надплинній фазах бозе-рідини.

Методом дослідження виступає метод колективних змінних, теорії збурень, кумулянтних розкладів, вторинного квантування і функціонального інтегрування.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше запропоновано мікроскопічний опис багатобозонної системи на основі методу колективних змінних в широкій області температур, який враховує внесок прямих три- і чотиричастинкових кореляцій.

Вперше знайдено вираз для матриці густини і статистичної суми багатобозонної системи в post-RPA наближенні, а також показано, як з допомогою функціонального інтегрування та кумулянтних розкладів побудувати якобіан переходу від декартових до колективних змінних, в який «заховані» внески від матриці густини ідеального бозе-газу.

Вперше методом теорії збурень отримано коректний вираз для температурної поведінки ефективної маси атома ^{4}He, який усуває інфрачервоні розбіжності. Знайдено також вузьку флуктуаційну область температур ($0.97 \le T/T_c \le 1$), в якій запропонований пертурбативний метод розрахунку ефективної маси не працює.

Вперше проаналізовано вплив прямих три- та чотиричастинкових кореляцій на температурну поведінку термодинамічних і структурних функцій рідкого ^{4}He, а також проведено кількісну оцінку величини внеску цих кореляцій в широкій області температур.

Вперше на основі довгохвильової асимптотики двочастинкового структурного фактора в наближенні «однієї суми за хвильовим вектором» отримано температурну залежність швидкості першого звуку в рідкому ^{4}He в post-RPA наближенні. Знайдений вираз, на відміну від виразу в наближенні хаотичних фаз, правильно відтворює температурну поведінку цієї величини.

Практичне значення отриманих результатів. Результати, отримані в роботі, можуть бути використані для глибшого осмислення і розуміння фізичних явищ та процесів, які мають місце в такій багатобозонній системі, як рідкий ^{4}He, зокрема в ділянці λ-переходу. Розроблену методику врахування три- та чотиричастинкових кореляцій можна поширити і на кореляції комплексів з більшого числа частинок. Отримані в роботі аналітичні вирази відкривають шлях для знаходження інших важливих фізичних величин бозе-рідини в post-RPA наближенні в широкотемпературній області, зокрема теплоємності і бозе-конденсатної фракції. Розроблені теоретичні підходи після відповідної модифікації можна використати для опису як багатобозонних, так і багатоферміонних систем; йдеться, зокрема, про заряджений бозе-газ, атомарний водень, суміші ^{3}He і ^{4}He тощо.

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи проф. І. О. Вакарчук. Усі викладені в дисертації результати автор отримав самостійно або при своїй безпосередній участі. У роботах, виконаних зі співавторами, здобувачеві належить:

- розрахунок повної матриці густини і статистичної суми багатобозонної системи в широкотемпературній області в так званому наближенні «двох сум за хвильовим вектором», яке враховує прямі три- і чотиричастинкові кореляції, а також детальний аналіз їхніх виразів в границі низьких і високих температур та при «вимкненні» взаємодії [1,2]; побудова методу знаходження якобіана переходу від декартових до колективних змінних, в який «заховані» внески від матриці густини ідеального бозе-газу [2];
- отримання температурної поведінки ефективної маси атома ^{4}He в рідині; проведення чисельного аналізу здобутих результатів; знаходження так званого малого критичного індексу і ширини флуктуаційної області для рідкого ^{4}He, де є незастосовний пертурбативний метод розрахунку ефективної маси [6];

- знаходження виразів для дво-, три- і чотиричастинкового структурних факторів багатобозонної системи в post-RPA наближенні, яке враховує прямі три- і чотиричастинкові кореляції; чисельний розрахунок двочастинкового структурного фактора для різних значень температури [3];
- отримання аналітичних виразів для середніх значень кінетичної, потенціальної і повної внутрішньої енергії багатобозонної системи в наближенні «двох сум за хвильовим вектором» в широкій області температур, їх чисельний розрахунок; аналіз отриманих результатів і їх порівняння з експериментальними даними [4].

Результати статей, їхню інтерпретацію та застосовність використаних підходів співавтори обговорювали на паритетних засадах.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що включені до дисертації, здобувач представляв особисто на таких конференціях та семінарах: Міжнародна конференція «Еврика-2007» (Львів, 2007) [7]; Міжнародна конференція «Еврика-2008» (Львів, 2008) [9]; Міжнародна конференція ІЕФ-2009 (Ужгород, 2009) [10]; X Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених (Львів, 2010) [12]; Звітна наукова конференція Львівського національного університету імені Івана Франка за 2010 рік (Львів, 2011); XII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених (Львів, 2012) [13]; Різдвяні дискусії 2013 (Львів, 2013) [14], Різдвяні дискусії 2014 (Львів, 2014) [15], Workshop on Current Problems in Physics: Zielona Góra – Lviv (Zielona Góra, 2015) [16].

Подані в роботі результати неодноразово обговорювали на наукових семінарах кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковані в шести журнальних статтях [1-6] та десятьох тезах доповідей на конференціях [7-16].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, семи розділів, висновків та списку використаних джерел. Обсяг дисертації становить 185 сторінок включно зі списком використаних джерел, що містить 255 найменувань. Результати роботи проілюстровано на 19 рисунках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність досліджень, які становлять зміст дисертації, висвітлено новизну одержаних результатів, подано зв’язок досліджень із науковими темами, у виконанні яких брав участь автор, окреслено мету роботи.

У **першому розділі** проведений короткий аналіз історії досліджень ^{4}He, починаючи з його відкриття у 1868 році у спектрі сонячного світла, а також проаналізовано сучасний стан проблем, пов'язаних з його вивченням.

У **другому розділі**, використовуючи квантово-статистичний підхід на основі ермітизованого гамільтоніана багатобозонної системи в представленні колективних змінних, була знайдена повна матриця густини в широкій області температур в post-RPA наближенні. Вихідне означення для матриці густини $R(x\,|\,x') = \sum\limits_n \psi_n^*(x') e^{-\beta\hat{H}} \psi_n(x)$, де $\psi_n(x)$ – повна система функцій, симетричних стосовно перестановок частинок, $\hat{H} = \sum\limits_{j=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ – гамільтоніан системи, β – обернена температура, за допомогою рівняння Блоха може бути записане в такий спосіб: $R(x\,|\,x') = e^{-\beta\hat{H}} \delta(x - x')$, де $\delta(x - x') = \frac{1}{N!} \sum\limits_Q \prod\limits_{j=1}^{N} \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}'_{Qj})$, Q – оператор перестановки індексів $(1,\ldots,N)$, $\sum\limits_Q$ – сума за всіма $N!$ перестановками. Для багатобозонної системи замість N змінних $\mathbf{r}$ можна використати нескінченну сукупність величин $\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum\limits_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}$, які є коефіцієнтами Фур'є флуктуації густини частинок системи. Гамільтоніан у цих нових змінних не матиме явно ермітового вигляду, але його можна ермітизувати за допомогою вагової функції $J(\rho) = C \exp\left[\sum\limits_{n\ge 2} \frac{(-1)^{n-1}}{n(n-1)\sqrt{N^{n-2}}} \sum\limits_{\mathbf{q}_1 \ne 0} \cdots \sum\limits_{\substack{\mathbf{q}_n \ne 0 \\ \mathbf{q}_1 + \cdots + \mathbf{q}_n = 0}} \rho_{\mathbf{q}_1} \cdots \rho_{\mathbf{q}_n} \right]$, яка відіграє роль якобіана переходу від декартових до колективних змінних. В результаті, ермітизований гамільтоніан запишеться так: $J^{\frac{1}{2}}(\rho) \hat{H} J^{-\frac{1}{2}}(\rho)$, і його можна подати у вигляді суми двох доданків $\hat{H}_0$ і $\Delta\hat{H}$, другий з яких ми надалі розглядатимемо як збурення:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{q} \ne 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left[-\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{q}} \partial\rho_{-\mathbf{q}}} + \frac{1}{4}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \right] + \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{q} \ne 0} \nu_q (\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - 1),$$

$$\Delta\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q} \ne 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}' \ne 0 \\ \mathbf{q}+\mathbf{q}' \ne 0}} \frac{\hbar^2 (\mathbf{q}\mathbf{q}')}{2m} \rho_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{q}} \partial\rho_{\mathbf{q}'}} + \sum_{n \ge 3} \frac{(-1)^n}{4n(n-1)N^{n/2-1}} \sum_{\mathbf{q}_1 \ne 0} \cdots \sum_{\substack{\mathbf{q}_n \ne 0 \\ \mathbf{q}_1 + \cdots + \mathbf{q}_n = 0}} \frac{\hbar^2}{2m} (q_1^2 + \cdots q_n^2) \rho_{\mathbf{q}_1} \cdots \rho_{\mathbf{q}_n},$$

де $\nu_{\mathbf{q}} = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi(r) d\mathbf{r}$ – коефіцієнт Фур'є енергії парної взаємодії між частинками. Після цього вираз для матриці густини $\overline{R}(\rho\,|\,\rho') = \sqrt{J(\rho)J(\rho')} R(\rho\,|\,\rho')$ можна записати так: $\overline{R}(\rho\,|\,\rho') = \hat{\sigma} \overline{R}_0(\rho\,|\,\rho')$, де $\hat{\sigma} = \hat{T}_1 \exp\left\{ -\int\limits_0^{\beta} d\beta_1 \left[\Delta\hat{H}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta\hat{H}'\left(\frac{\beta_1}{2}\right) \right] \right\}$, $\Delta\hat{H}'$ – це оператор $\Delta\hat{H}$, в якому нештриховані колективні змінні замінені на штриховані (і навпаки), $\overline{R}_0(\rho\,|\,\rho')$ – матриця густини в наближенні парних кореляцій [Vakarchuk I. O., J. Phys. Stud., **8**, 223 (2004)]. Впорядкування операторів за зростаючим значенням параметра β позначене через $\hat{T}_1$, щоб відрізнити його від стандартного $\hat{T}$-впорядкування. Ввівши оператори породження $\hat{b}^{+}_{\mathbf{q}} = -\frac{\partial}{\partial \xi_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{2}\xi_{-\mathbf{q}}$ і знищення $\hat{b}_{\mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial \xi_{-\mathbf{q}}} + \frac{1}{2}\xi_{\mathbf{q}}$, де $\xi_{\mathbf{q}} = \sqrt{\alpha_q}\rho_{\mathbf{q}}$, $\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{4mN}{\hbar^2 q^2 V}\nu_q}$, виразивши через них $\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_q}}\left(\hat{b}^{+}_{-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}\right)$ і $\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha_q}\left(\hat{b}_{-\mathbf{q}} - \hat{b}^{+}_{\mathbf{q}}\right)$ та врахувавши, що $\hat{H}_0 = E_0^B + \sum_{\mathbf{q}\neq 0} E_q \hat{b}^{+}_{\mathbf{q}}\hat{b}_{\mathbf{q}}$, $\hat{b}^{+}_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \hat{b}^{+}_{\mathbf{q}} e^{-\beta_1 E_q/2}$, $\hat{b}_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \hat{b}_{\mathbf{q}} e^{\beta_1 E_q/2}$, після пронесення $\overline{R}_0(\rho\,|\,\rho')$ через оператор $\hat{\sigma}$ отримаємо: $\overline{R}(\rho\,|\,\rho') = \overline{R}_0(\rho\,|\,\rho')\sigma$, $\sigma = 1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \dots$, причому: $\sigma_n = \left(-\frac{1}{2}\right)^n \int_0^{\beta} d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \cdots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \left[\Delta\hat{H}\left(\frac{\beta_n}{2}\right) + \Delta\hat{H}'\left(\frac{\beta_n}{2}\right)\right]\cdots\left[\Delta\hat{H}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta\hat{H}'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]$,

де у виразі для $\Delta\hat{H}$ потрібно провести таку заміну (і аналогічну у виразі для $\Delta\hat{H}'$):

$$\rho_{\mathbf{q}} \to \left(ch[(\beta_1/2)E_q] - \frac{sh[(\beta_1/2)E_q]}{th[\beta E_q]}\right)\rho_{\mathbf{q}} + \frac{sh[(\beta_1/2)E_q]}{sh[\beta E_q]}\rho'_{\mathbf{q}} + \frac{2}{\alpha_q} sh[(\beta_1/2)E_q]\frac{\partial}{\partial \rho_{-\mathbf{q}}},$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \to ch[(\beta_1/2)E_q]\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_q}{2}\frac{ch[(\beta_1/2)E_q]}{sh[\beta E_q]}\rho'_{-\mathbf{q}} + \frac{\alpha_q}{2}\left(sh[(\beta_1/2)E_q] - \frac{ch[(\beta_1/2)E_q]}{th[\beta E_q]}\right)\rho_{-\mathbf{q}}.$$

Використавши концепцію незвідних середніх, величину σ можна зобразити так: $\sigma = \exp\left(\sigma_1 + \left[\sigma_2 - \sigma_1^2/2\right] + \dots\right)$. Не вдаючись у деталі математичних розрахунків, запишемо кінцевий вираз для повної матриці густини в прийнятому нами наближенні «двох сум за хвильовим вектором» (після виділення матриці густини ідеального бозе-газу): $R(\rho\,|\,\rho') = R_N^0(r\,|\,r')P_{pair}(\rho\,|\,\rho')P(\rho\,|\,\rho')$, де $R_N^0(r\,|\,r')$ – матриця густини ідеального бозе-газу, $P_{pair}(\rho\,|\,\rho')$ – фактор, який враховує парні кореляції, а

$$P(\rho\,|\,\rho') = \exp\Bigg[c_0 + \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1} c_2(1^{j_1}, -1^{i_1})\left(\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1} + \rho_{\mathbf{q}_1}^{1-j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{1-i_1}\right) + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{i_1,i_2,i_3=0}^{3} c_3(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}) \times$$

$$\times\left(\rho_{\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{i_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{i_3} + \rho_{\mathbf{q}_1}^{1-i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{1-i_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{1-i_3}\right) + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{i_1,i_2=0}^{1}\sum_{j_1,j_2=0}^{1} c_4(1^{j_1}, -1^{i_1}, 2^{j_2}, -2^{i_2})\left(\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{i_2} + \rho_{\mathbf{q}_1}^{1-j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{1-i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{1-j_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{1-i_2}\right)\Bigg]$$

Індекси i_1, i_2, i_3, j_1, j_2, які стоять біля величин $\rho_{\mathbf{q}}$, можуть набирати значення 0 або 1, причому значення 0 означає відсутність штриха, а 1 його присутність ($1^{j_1}, -1^{i_1}, 2^{i_2}, \dots$ – це скорочене позначення величин $\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}$, $\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}$, $\rho_{\mathbf{q}_2}^{i_2}$,... відповідно). Вирази для величин c_0, $c_2(1^{j_1}, -1^{i_1})$, $c_3(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})$, $c_4(1^{j_1}, -1^{i_1}, 2^{j_2}, -2^{i_2})$ є дуже громіздкими і наведені в дисертаційній роботі. В границі низьких температур матриця густини набуває вигляду: $R(\rho\,|\,\rho') = e^{-\beta E_0}\psi_0(\rho)\psi_0(\rho')$, де E_0 – енергія основного стану системи взаємодіючих бозе-частинок в наближенні “двох сум за хвильовим вектором”, $\psi_0(\rho)$ – нормована хвильова функція основного стану цієї системи. В границі високих температур $R(\rho\,|\,\rho)=\frac{1}{N!}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2}e^{-\beta\Phi}$, де Φ – потенціальна енергія системи.

У **третьому розділі** вираз для статистичної суми записаний як інтеграл за 3N декартовими координатами від діагональних елементів повної матриці густини багатобозонної системи, а потім зроблено перехід до колективних змінних: $Z=\frac{Z_N^0}{V^N}\int J_0(\rho)P_{pair}(\rho\,|\,\rho)P(\rho\,|\,\rho)(d\rho)$, де Z_N^0 – статистична сума ідеального бозе-газу, $J_0(\rho)=V^N\int d\mathbf{r}_1\ldots\int d\mathbf{r}_N R_N^0(r\,|\,r)\prod_{\mathbf{q}\neq 0}{}'\delta\big(\rho_{\mathbf{q}}-\chi_{\mathbf{q}}(r)\big)$ – якобіан переходу від декартових до колективних змінних, який виникає в результаті усереднення функції переходу Зубарєва [Зубарев Д. Н., ДАН СССР, **95**, 757 (1954)] з діагональними елементами матриці густини ідеального бозе-газу (тому ми кажемо, що в ньому “заховані” внески від цієї матриці), $\chi_{\mathbf{q}}(r)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}$; штрих біля символу добутку за $\mathbf{q}$ означає, що ми беремо до уваги лише півпростір значень хвильового вектора $\mathbf{q}$. Записавши δ-функцію у вигляді інтеграла за сукупністю змінних $\omega_{\mathbf{q}}$, скориставшись концепцією кумулянтних розкладів і провівши усереднення добутку величин $\chi_{\mathbf{q}}$ з матрицею густини ідеального бозе-газу, попередньо переписавши їх у представленні вторинного квантування: $\chi_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, в наближенні «двох сум за хвильовим вектором» отримаємо:

$$J_0(\rho)=\int(d\omega_{\mathbf{q}})e^{\pi i\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\omega_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}}}\exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}(\pi i)^2\omega_{\mathbf{q}}\omega_{-\mathbf{q}}S_0(q)-\frac{1}{3!\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq0}(\pi i)^3\omega_{\mathbf{q}_1}\omega_{\mathbf{q}_2}\omega_{\mathbf{q}_3}S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}(\pi i)^4\omega_{\mathbf{q}_1}\omega_{-\mathbf{q}_1}\omega_{\mathbf{q}_2}\omega_{-\mathbf{q}_2}S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)\right\},$$

де $S_0(q)$, $S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)$, $S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)$ – це відповідно парний, три- і чотиричастинковий структурні фактори ідеального бозе-газу. Отриманий вираз можна подати в наступний спосіб [Юхновський І. Р. Препринт ИТФ АН УССР, 71-26Р (1971)]: $J_0(\rho)=V^N\prod_{\mathbf{q}\neq0}{}'\frac{1}{\pi S_0(q)}\exp\left\{\sum_{n\geq3}\hat{D}_n(\rho)\right\}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\frac{\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}}{S_0(q)}\right\}$, де оператор $\hat{D}_n(\rho)$ має такий вигляд: $\hat{D}_n(\rho)=\frac{(-1)^n}{n!}\frac{1}{N^{\frac{n-2}{2}}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n\\ \mathbf{q}_1+\cdots+\mathbf{q}_n=0}}S_0^{(n)}(\rho_{\mathbf{q}_1},\ldots,\rho_{\mathbf{q}_n})\frac{\partial^n}{\partial\rho_{\mathbf{q}_1}\ldots\partial\rho_{\mathbf{q}_n}}$. Щоб забезпечити прийняте наближення, достатньо взяти тільки два члени ряду, а саме: $\hat{D}_3(\rho)$ і

$\hat{D}_4(\rho)$. Пронісши праву експоненту через оператори похідних, будемо мати: $J_0(\rho) = V^N \prod_{\mathbf{q}\neq 0}' \frac{1}{\pi} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}}{S_0(q)} \right\} e^{\hat{A}}$, де $\hat{A}$– це відомий оператор. Введемо параметр λ і запишемо, що $e^{\lambda\hat{A}} = e^{U(\lambda)}\hat{\sigma}(\lambda)$, де $U(\lambda)$ і $\hat{\sigma}(\lambda)$– це невідомі функція і оператор. Диференціюючи останню рівність за λ, проносячи функцію $e^{U(\lambda)}$ через оператор $\hat{A}$ і вибираючи $U(\lambda)$ у вигляді:

$$U(\lambda) = \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} U_2(\mathbf{q}_1)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} U_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3} + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} U_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2},$$

ми отримаємо систему рівнянь для величин $U_2(\mathbf{q}_1)$, $U_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)$, $U_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)$. В результаті знайдемо вираз для якобіана переходу $J_0(\rho)$, який в границі низьких температур переходить у звичайну вагову функцію (вона виникає з умови ермітовості гамільтоніана багатобозонної системи у представленні колективних змінних):

$$J_0(\rho) = V^N \prod_{\mathbf{q}\neq 0}' \frac{1}{\pi S_0(q)} \exp\left\{ -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}}{S_0(q)} \right\} \exp\left\{ \frac{1}{6N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left(\frac{\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]^2}{S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|)} - \frac{3}{4}\frac{S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)}{S_0(q_1)S_0(q_2)} \right) + \frac{1}{6\sqrt{N}} \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \frac{S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)}{S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(q_3)}\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3} - \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left(\frac{\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]^2}{S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|)} - \frac{3}{4}\frac{S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)}{S_0(q_1)S_0(q_2)} \right)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2} \right\}.$$

Після цього розрахунок статистичної суми стає доволі простою задачею:

$$Z = Z_N^0 Z_{pair} \exp\left\{ \frac{1}{6N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left(\frac{\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]^2}{S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|)} - \frac{3}{4}\frac{S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)}{S_0(q_1)S_0(q_2)} \right) + \frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left[\prod_{i=1}^{2}\frac{\lambda_{q_i}}{1+\lambda_{q_i}S_0(q_i)} \right] \times \right.$$

$$\left. S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2) - \frac{1}{12N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) \right]^2 \left[\prod_{i=1}^{3}\frac{\lambda_{q_i}}{1+\lambda_{q_i}S_0(q_i)} + \sum_{i=1}^{3}\frac{1}{1+\lambda_{q_i}S_0(q_i)} \right] \right\} \exp\left\{ C_0 + \right.$$

$$+2\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} C_2(\mathbf{q}_1)\frac{S_0(q_1)}{1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\frac{S_0(q_1)}{1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)}\frac{S_0(q_2)}{1+\lambda_{q_2}S_0(q_2)} +$$

$$\left. +\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \frac{C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) + 6C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(q_3) \right]}{[1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)][1+\lambda_{q_2}S_0(q_2)][1+\lambda_{q_3}S_0(q_3)]} \right\},$$

де Z_{pair}– статистична сума в наближенні парних кореляцій, $\lambda_q = \alpha_q th[\beta E_q] - th[\beta\varepsilon_q]$, $C_i = \overline{C}_i - \overline{C}_i^0, i = 0,2,3,4; \overline{C}_i^0 = \overline{C}_i(\alpha_{q_1} = \alpha_{q_2} = \alpha_{q_3} = 1); \overline{C}_0 = \bar{c}_0; \overline{C}_2(\mathbf{q}_1) = \frac{1}{N}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1}\bar{c}_2(1^{j_1}, -1^{i_1});$

$\bar{C}_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)=\sum_{i_1,i_2,i_3=0}^{1}\bar{c}_3(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3});\bar{C}_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)=\sum_{i_1,i_2=0}^{1}\sum_{j_1,j_2=0}^{1}\bar{c}_4(1^{j_1},-1^{i_1},2^{j_2},-2^{i_2})$. Вирази для цих величин є доволі громіздкими і наведені у дисертаційній роботі. В границі низьких температур статистична сума має вигляд $Z=e^{-\beta E_0}$, а при високих температурах у квазікласичній межі відтворює відомий результат.

У **четвертому розділі** запропоновано метод розрахунку ефективної маси атома ^{4}He, що дозволяє усунути інфрачервоні розбіжності, присутні в чотиричастинковому структурному факторі ідеального бозе-газу. Як було показано в роботі [І. О. Вакарчук, Р. О. Притула, Журн. фіз. досл., **12**, 4001(2008)], вираз для такої ефективної маси $\bar{m}$ можна знайти з умови $\frac{m^*}{\bar{m}}=1+\lim_{p\to0}\frac{\Delta_p-\Delta_0}{\varepsilon_p}$, де $\Delta_p-\Delta_0=\frac{1}{N\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\frac{\lambda_q}{1+\lambda_q\bar{S}_0(q)}\left\{\bar{n}_{|\mathbf{q}+\mathbf{p}|}-\bar{n}_q\right\}$; риска над $\bar{n}_q$ і $\bar{S}_0(q)$ означає, що ці величини перенормовані з урахуванням ефективної маси $\bar{m}$. Температурну залежність "затравочної" маси m^*, яка враховує вплив оточення на атом ^{4}He в RPA наближенні, беремо з роботи [I.O. Vakarchuk et al., Ukr. Phys. J., **57**, 1214 (2012)]. Після цього з виразу для $\Delta_p-\Delta_0$ виділимо величину $\Delta_\infty=\frac{1}{N\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\frac{\lambda_q}{1+\lambda_q\bar{S}_0(q)}\left\{\frac{1}{\bar{z}_0^{-1}-1+\bar{z}_0^{-1}\beta\bar{\varepsilon}_{|\mathbf{q}+\mathbf{p}|}}-\frac{1}{\bar{z}_0^{-1}-1+\bar{z}_0^{-1}\beta\bar{\varepsilon}_q}\right\}$, яка містить всю неаналітичність і є зручнішою для аналізу. Наступний крок – це знайти розклад Δ_∞ в околі малих значень p і обмежитися доданками пропорційними до p^2, оскільки лише вони будуть давати вклад у величину ефективної маси. Перейшовши від підсумовування до інтегрування, зробивши заміну змінних: $q/p=x$, будемо мати: $\Delta_\infty=\frac{p_0^2\bar{z}_0p}{4\pi^2\beta\rho}\int_0^\infty\frac{\lambda_{px}}{1+\lambda_{px}\bar{S}_0(px)}\left\{\frac{x}{2}\ln\left|\frac{P_0^2/p^2+(x+1)^2}{P_0^2/p^2+(x-1)^2}\right|-\frac{2x^2}{P_0^2/p^2+x^2}\right\}dx$, де ρ – густина системи, $\bar{z}_0$– перенормована активність, $p_0^2=\frac{2\bar{m}}{\beta\hbar^2}$, $P_0=p_0\sqrt{1-\bar{z}_0}$. Аналіз, зокрема чисельний, цієї величини в докритичній і надкритичній області показує, що її внесок у значення ефективної маси є дуже малим в порівнянні з іншими внесками, тому ним можна знехтувати. Це твердження не стосується флуктуаційної області температур, що пов'язано із незастосовністю в ній пертурбативного методу розрахунку. Отримані чисельні оцінки показують, що ця область є вузькою: $0.97\le T/T_c\le1$. Для її аналізу потрібні інші методи, наприклад, ренормгруповий підхід. Безпосередньо в критичній точці для величини Δ_∞ будемо мати: $\Delta_\infty=\frac{p_0^2\chi p^2}{18\pi^2\beta\rho(1+\chi)|x_0|}\left(1-3\ln\left|\frac{p}{x_0}\right|\right)+o(p^2)$, де $x_0=-\gamma/(1+\chi)$, $\chi=\beta\rho\nu_0$, $\gamma=\frac{\bar{m}^2\nu_0}{2\hbar^4\beta}$. Отож величина Δ_∞/p^2 в критичній точці має логарифмічну розбіжність (по $p, p\to0$), яка є характерною для критичних явищ. Її можна трактувати як наслідок розкладу одночастинкового спектру бозе-рідини в критичній точці: $\frac{\hbar^2\tilde{p}^2}{2\overline{m}}\left(\frac{p}{\tilde{p}}\right)^{2-\eta} = \frac{\hbar^2 p^2}{2\overline{m}}\left(1-\eta\ln\left(\frac{p}{\tilde{p}}\right)\right) + o(\eta)$, що дає можливість знайти так званий малий критичний індекс $\eta = 4/(3\pi^2)$ і характерний масштаб хвильового вектора в околі критичної точки $\tilde{p} = |x_0|\exp[(\eta-3)/3\eta]$. Отримане значення критичного індексу відрізняється від результату Монте Карло симуляцій, оскільки воно було знайдене лише в наближенні хаотичних фаз, яке відтворює тільки перший член розкладу за оберненими степенями вимірності параметра порядку. В результаті для ефективної маси здобудемо такий результат:

$$\overline{m} = \frac{m^*}{1+F(T)}, \quad \text{де } F(T) = \frac{1}{2\pi^2\rho}\int_0^\infty \frac{\lambda_q q^2 dq}{1+\lambda_q \bar{S}_0(q)}\left(\bar{n}_q\left(1+\bar{n}_q\right)\left[\frac{2}{3}\beta\varepsilon_q\left(1+2\bar{n}_q\right)-1\right] - \frac{\bar{z}_0\left(\beta\bar{\varepsilon}_q - 3 + 3\bar{z}_0\right)}{3\left(\beta\bar{\varepsilon}_q + 1 - \bar{z}_0\right)^3}\right).$$

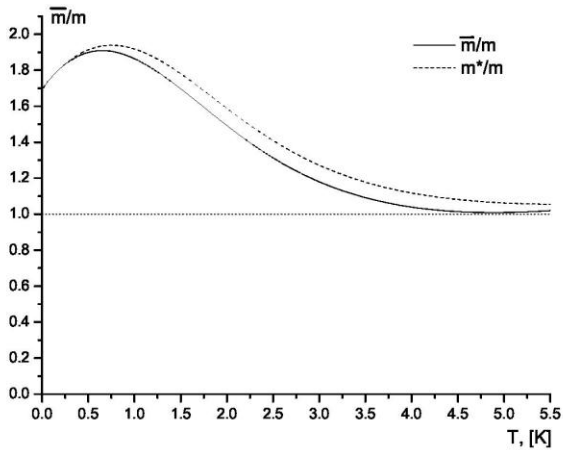


Рис. 1. Ефективна маса атома ^{4}He в нормальній і надплинній фазах.

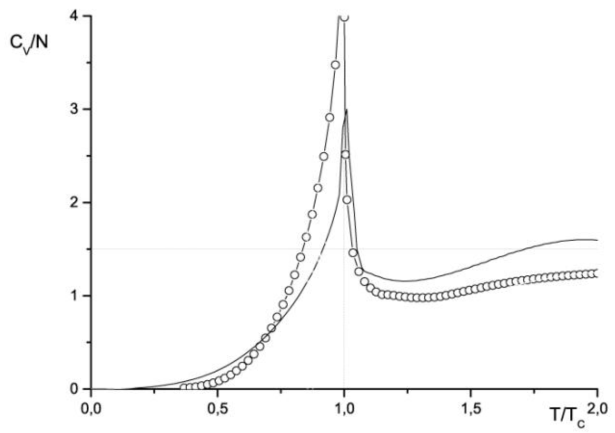


Рис. 2. Теплоємність рідкого ^{4}He. *Суцільна крива – з урахуванням ефективної маси; крива з кружечками – експериментальні дані [Ceperley D. M., Rev. Mod. Phys.,* ***67****, 279 (1995), V. D. Arp., Int. J. Thermophys.,* ***26****, 1477 (2005); V. D. Arp et al., Natl. Inst. Stand. Technol. Note, 1334 (1998)].*

Вираз для ефективної маси виявляє коректну поведінку в широкій ділянці температур (за винятком вузької флуктуаційної області). У границі низьких температур він дає значення, близьке до знайдених різними методами раніше. Введення ефективної маси дозволяє «поправити» хід кривої теплоємності, зокрема в околі λ-переходу, а також змістити температуру бозе-конденсації від $T_C \approx 3.14\,\mathrm{K}$ для ідеального бозе-газу до $T_C = 2.18\,\mathrm{K}$, що є дуже близьким до експериментального значення температури λ-переходу для рідкого ^{4}He ($T_\lambda \approx 2.168\,\mathrm{K}$).

У п'ятому розділі на основі повної матриці густини розраховано дво-, три- і чотиричастинковий структурні фактори в наближенні «однієї суми за хвильовим вектором». Згідно з означенням, n-частинковий структурний фактор має вигляд: $S^{(n)}(\rho_{\mathbf{q}_1},\ldots,\rho_{\mathbf{q}_n}) = N^{n/2-1}\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\ldots\rho_{\mathbf{q}_n}\rangle$, де $\langle\cdots\rangle$ означає усереднення з повною матрицею густини взаємодіючих бозе-частинок. Тоді вираз для двочастинкового структурного фактора в post-RPA наближенні запишемо так:

$$\left\langle \rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} \right\rangle = -\frac{d}{d\lambda_q}\ln\left\{\int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_N R_N^0(r\,|\,r)\exp\left[b_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\lambda_q \rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\right\} - \frac{d}{d\lambda_q}\ln\left\{\left\langle P(\rho\,|\,\rho)\right\rangle\right\},$$ де

$$\left\langle P(\rho\,|\,\rho)\right\rangle = \exp\left\{C_0 + 2\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{C_2(\mathbf{q})S_0(q)}{1+\lambda_q S_0(q)} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\frac{S_0(q_1)}{1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)}\frac{S_0(q_2)}{1+\lambda_{q_2}S_0(q_2)} + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\frac{C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) + 6C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)S_0(q_1)S_0(q_2)S_0(q_3)\right]}{[1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)][1+\lambda_{q_2}S_0(q_2)][1+\lambda_{q_3}S_0(q_3)]}\right\}.$$

В результаті, для парного структурного фактора будемо мати: $S(q) = \dfrac{S_0(q)}{1+(\lambda_q + \Pi_q)S_0(q)}$,

$$\Pi_q = \Pi_q^d + \Pi_q^{ind},\ \Pi_q^{ind} = \frac{1}{2NS_0^2(q)}\left(\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\lambda_k S_0^{(4)}(\mathbf{q},-\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k})}{1+\lambda_k S_0(k)} - \sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}+\mathbf{p}=0}}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\frac{\lambda_k\lambda_p\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{p})\right]^2}{[1+\lambda_k S_0(k)][1+\lambda_p S_0(p)]}\right),$$

$$\Pi_q^d = -4C_2(\mathbf{q}) - \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{C_4(\mathbf{q},\mathbf{k})S_0(k)}{1+\lambda_k S_0(k)} - \frac{12}{N}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}+\mathbf{p}=0}}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\frac{C_3(\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{p})\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{p})/S_0(q) + 6C_3(\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{p})S_0(k)S_0(p)\right]}{[1+\lambda_k S_0(k)][1+\lambda_p S_0(p)]}\Bigg\},$$

де величина Π_q^d враховує внесок прямих кореляцій, а Π_q^{ind} – непрямих.

Для тричастинкового структурного фактора отримаємо:

$$S^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) = \sqrt{N}\left\langle \rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\right\rangle = \frac{N}{2}\frac{\delta\ln\left\langle P(\rho\,|\,\rho)\right\rangle}{\delta C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)} = \frac{S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) + 12C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\prod_{i=1}^{3}S_0(q_i)}{[1+\lambda_{q_1}S_0(q_1)][1+\lambda_{q_2}S_0(q_2)][1+\lambda_{q_3}S_0(q_3)]}.$$

Незвідний чотиричастинковий структурний фактор запишеться так:

$$S^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2) = N\left[\left\langle \rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right\rangle - \left\langle \rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\right\rangle\left\langle \rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right\rangle\right] =$$

$$= \frac{1}{\prod_{i=1}^{2}[1+\lambda_{q_i}S_0(q_i)]^2}\left\{S_0^{(4)}(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2) - \frac{2\lambda_{|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|}\left[S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]^2}{1+\lambda_{|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|}S_0(|\,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2\,|)} + \frac{48S_0^{(3)}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)}{1+\lambda_{|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|}S_0(|\,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2\,|)}\times\right.$$

$$\left.\times C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\prod_{i=1}^{2}S_0(q_i) + 16\prod_{i=1}^{2}S_0^2(q_i)\left[C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2) + 18\frac{C_3^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)S_0(|\,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2\,|)}{1+\lambda_{|\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2|}S_0(|\,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2\,|)}\right]\right\}.$$

При високих температурах знайдені величини редукуються до виразів для структурних факторів ідеального бозе-газу. В границі низьких температур парний і тричастинковий структурні фактори відтворюють вже відомі результати [И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ., **82**, 438 (1990), A. A. Rovenchak, Centr. Eur. J. Phys., **3**, 47 (2005)], а в квазікласичній межі ($\hbar \to 0$) ми отримаємо добре знаний вираз з теорії класичних рідин (в post-RPA наближенні).

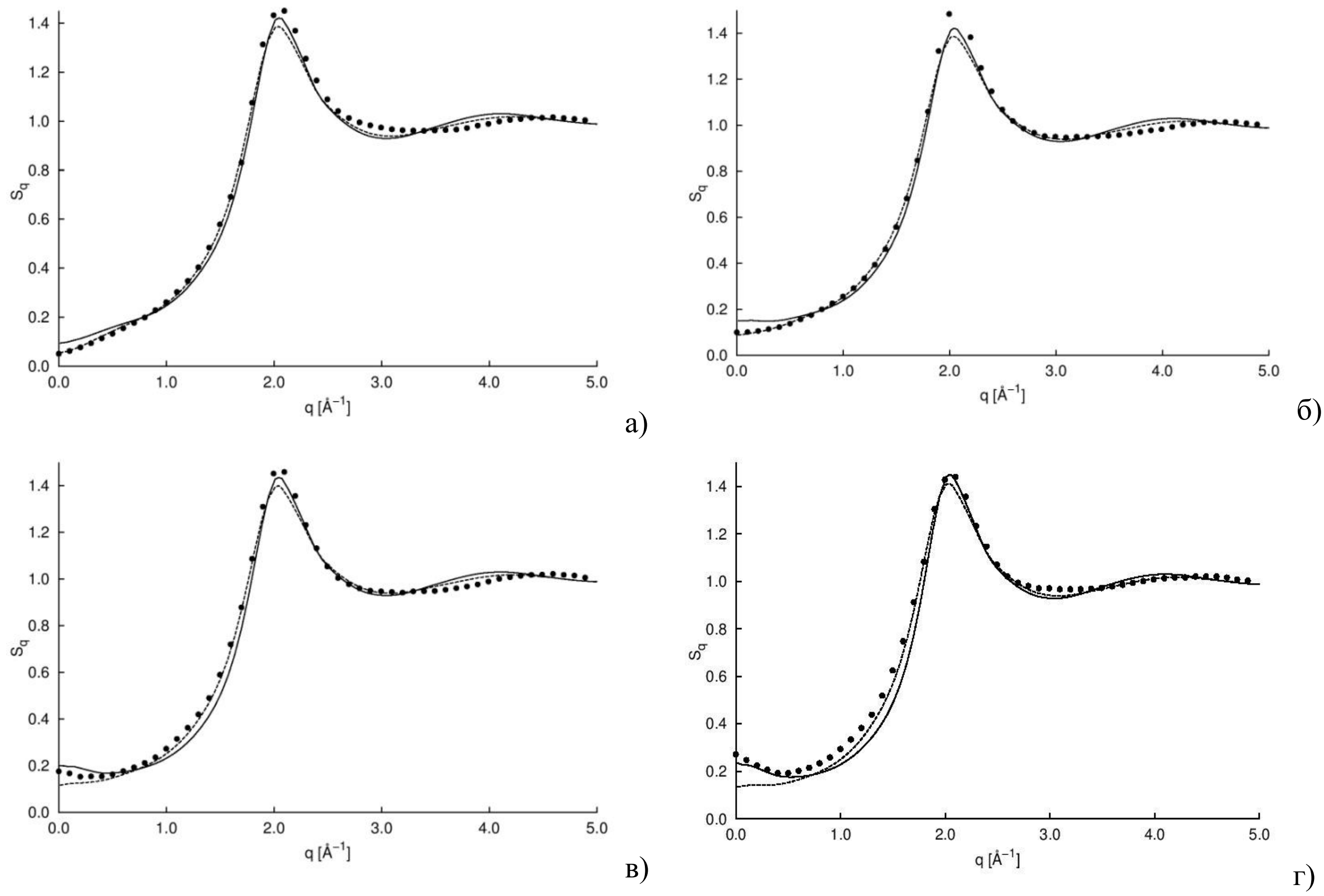


Рис. 3. Структурний фактор рідкого ^{4}He при температурі 1.38K (а), 2.2K(б), 3.0K(в), 3.5K(г).
Штрихована крива – RPA наближення, суцільна лінія – post-RPA наближення, крапки – експеримент [E .C. Svennson et al. Phys. Rev. B, ***21****, 3638 (1980), H. N. Robkoff, R. B. Hallok, Phys. Rev. B,* ***24****, 159 (1981)].*

У **шостому розділі**, користуючись точним співвідношенням $\lim_{q\to 0} S(q) = T/\left[mc^2(T)\right]$, де у лівій частині рівності стоїть довгохвильова границя двочастинкового структурного фактора, було знайдено температурну поведінку швидкості першого звуку в бозе-рідині $c(T)$ як в докритичній, так і надкритичній області в наближенні «однієї суми за хвильовим вектором», що відповідає post-RPA наближенню:

$$c^2(T) = \frac{T}{m}\lim_{q\to 0}\left[\frac{1}{S_0(q)} + \lambda_q + \Pi_q\right] = \rho\nu_0 + \frac{T}{m}\left(S_2^0(T) + \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\lambda_k S_4^0(k,T)}{[1+\lambda_k S_0(k)]} - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\lambda_k\left[S_3^0(k,T)\right]^2}{[1+\lambda_k S_0(k)]^2} + \right.$$

$$\left. + 4C_2^0(T) + \frac{12}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{C_3^0(k,T)S_3^0(k,T)}{[1+\lambda_k S_0(k)]^2} + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{C_4^0(k,T)S_0(k)}{1+\lambda_k S_0(k)} + \frac{72}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\left[C_3^0(k,T)S_0(k)\right]^2}{[1+\lambda_k S_0(k)]^2}\right),$$

де $C_2^0(T)$, $C_3^0(k,T)$, $C_4^0(k,T)$ – це відповідні величини $C_2(\mathbf{q})$, $C_3(\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{p})$, $C_4(\mathbf{q},\mathbf{k})$ в границі $q \to 0$, а $S_2^0(T) \equiv \lim\limits_{q\to 0} \dfrac{1}{S_0(q)}$, $S_3^0(k,T) \equiv \lim\limits_{q\to 0} \dfrac{S_0^{(3)}(\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{q}-\mathbf{k})}{S_0(q)}$, $S_4^0(k,T) \equiv \lim\limits_{q\to 0} \dfrac{S^{(4)}(\mathbf{q},-\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k})}{S_0(q)}$. У границі низьких температур цей вираз дає відоме значення [И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновський, Теор. мат. физ. **40**, 100 (1979)]:

$$c^2 \equiv \lim_{T\to 0} c^2(T) = \frac{\rho \nu_0}{m} - \frac{1}{8mN}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\varepsilon_q(\alpha_q^2-1)^2}{\alpha_q^3},$$

так само як і у високотемпературній області: $c(T) = \sqrt{(T+\rho\nu_0)/m}$. Спостерігається також добре узгодження з експериментальними даними в широкій області температур. Це є важливим результатом post-RPA наближення, оскільки швидкість звуку, розрахована лише в наближенні хаотичних фаз, веде до сталості значення в докритичній області і дає повільний ріст в надкритичній, що навіть якісно погано узгоджується з експериментом. Натомість post-RPA наближення дає якісно правильну температурну поведінку швидкості першого звуку в рідкому ^{4}He.

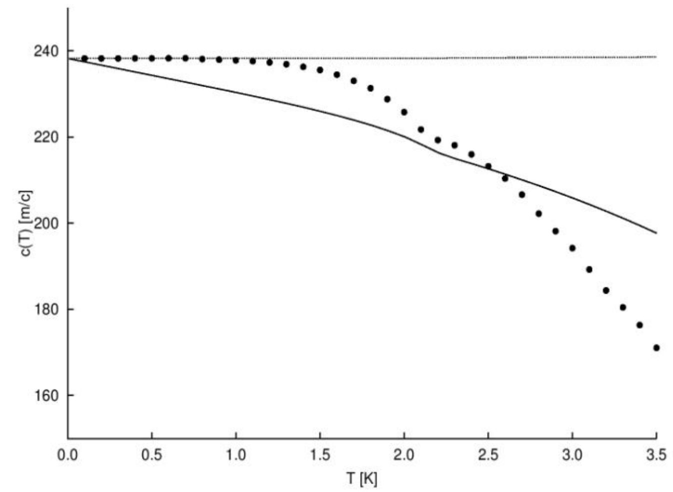


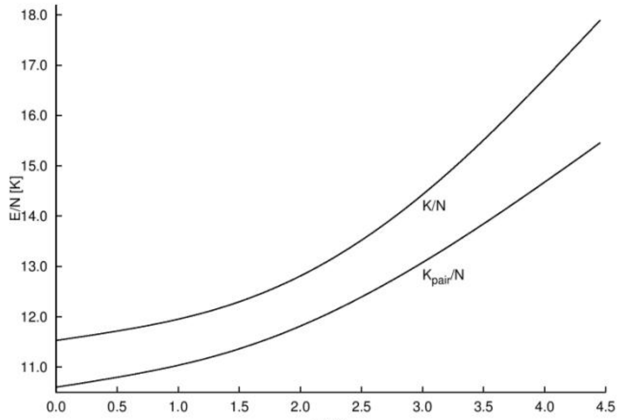
Рис. 4. Температурна залежність швидкості першого звуку в рідкому ^{4}He. *Штрихована лінія – RPA наближення, суцільна крива – post-RPA наближення, крапки – непрямі експериментальні дані на основі робіт [V. D. Arp et al., Natl. Inst. Stand. Technol. Note, 1334 (1998); R. J. Donnelly, C. F. Barenghi., Phys. Chem. Ref. Data, **27**, 1217 (1998)].*

У **сьомому розділі**, виходячи з виразів для повної матриці густини, а також для дво-, три- та чотиричастинкового структурних факторів багатобозонної системи, знайдено температурну поведінку середніх значень кінетичної, потенціальної і повної внутрішньої енергії в наближенні «двох сум за хвильовим вектором». Середнє значення кінетичної енергії може бути записане як сума трьох доданків: $\langle K\rangle = \langle K_1\rangle + \langle K_2\rangle + \langle K_3\rangle$, де $\langle K_1\rangle = \dfrac{\partial}{\partial\beta'}\ln\left\{\int d\mathbf{r}_1\ldots\int d\mathbf{r}_N P_{pair}(\rho\,|\,\rho)R_N^0(r\,|\,r;\beta')\right\}_{\beta'=\beta} + \dfrac{\partial}{\partial\beta'}\ln\left\{\langle P(\rho\,|\,\rho)\rangle\right\}_{\beta'=\beta}$,

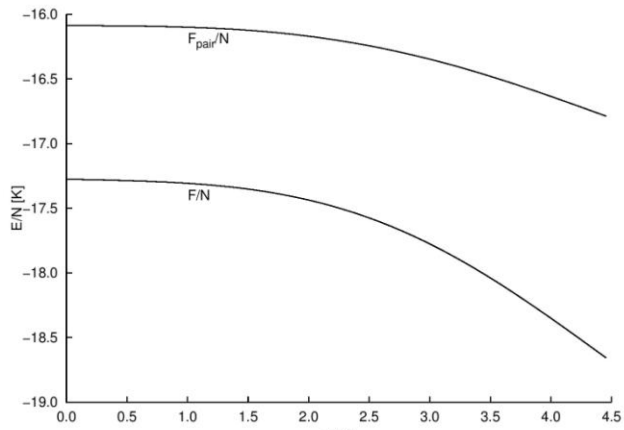
$$\langle \hat K_2\rangle = \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}\left(\left\langle \rho_{\mathbf{q}}\frac{\partial U}{\partial \rho_{\mathbf{q}}}\bigg|_{\rho'=\rho}\right\rangle - \left\langle \frac{\partial^2 U}{\partial\rho_{\mathbf{q}}\partial\rho_{-\mathbf{q}}}\bigg|_{\rho'=\rho}\right\rangle - \left\langle \frac{\partial U}{\partial\rho_{\mathbf{q}}}\frac{\partial U}{\partial\rho_{-\mathbf{q}}}\bigg|_{\rho'=\rho}\right\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)}{2m}\times$$

$$\times\left(\left\langle \rho_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}\frac{\partial^2 U}{\partial\rho_{\mathbf{q}_1}\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\bigg|_{\rho'=\rho}\right\rangle + \left\langle \rho_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}\frac{\partial U}{\partial\rho_{\mathbf{q}_1}}\frac{\partial U}{\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\bigg|_{\rho'=\rho}\right\rangle\right); \langle \hat K_3\rangle = -\frac{1}{2}\left\langle \hat K_2\big|_{U(\rho|\rho')=U(\rho|\rho)}\right\rangle,$$

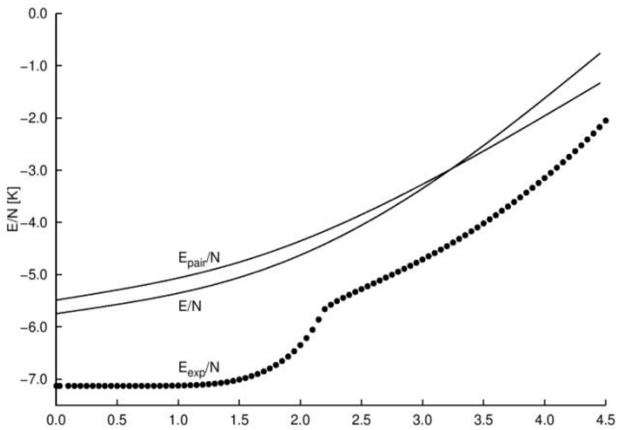
$U \equiv U(\rho\,|\,\rho') = \ln\left[R(\rho\,|\,\rho')/R_N^0(r\,|\,r')\right]$. Для середньої потенціальної енергії вираз є дещо простішим: $\Phi = \dfrac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\dfrac{\hbar^2 q^2}{2m}\left(\alpha_q^2-1\right)\left(\langle\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\rangle - 1\right)$. Для чисельних розрахунків необхідно виключити величину ν_0 з допомогою термодинамічного співвідношення $c^2 = \dfrac{N}{m}\dfrac{\partial^2 E_0}{\partial N^2}$. Чисельний розрахунок, як і у випадку структурного фактора, проводився з ефективною масою. Вхідною інформацією про потенціал міжчастинкової взаємодії послужили екстрапольовані до нуля температур експериментальні дані для структурного фактора і швидкості першого звуку в рідкому ^{4}He. З їх допомогою вдалося виразити фур'є-компоненту потенціалу парної міжчастинкової взаємодії. Явні вирази для середніх значень згаданих величин в силу їх громіздкості тут не наводяться; вони є представлені у дисертаційній роботі.



а)



б)



в)

Рис. 5. Температурна залежність середніх значень кінетичної (а), потенціальної (б) і повної внутрішньої енергії (в) рідкого ^{4}He**.** *Величини на рисунку з індексом* pair *– це RPA наближення, без індексу – post-RPA наближення, з індексом* exp *– експериментальні дані [V. D. Arp et al., Natl. Inst. Stand. Technol. Note, 1334 (1998)].*

В границі низьких температур середнє значення повної внутрішньої енергії відтворює відомий результат:

$$E_0 = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 - \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{8m}\left(\alpha_q - 1\right)^2 + \frac{\hbar^2}{48mN}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\left[\left(q_1^2+q_2^2+q_3^2\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_1}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_2}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_3}}\right) - \right.$$

$$\left. -\left(\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)(\alpha_{q_i}-1)(\alpha_{q_j}-1)\right)^2\left(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}\sum_{j=1}^{3}q_j^2\alpha_{q_j}\right)^{-1}\right] - \frac{\hbar^2}{48mN}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_i}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_j}}\right).$$

Ці самі слова будуть актуальними і стосовно області високих температур: $E = \left(\langle \hat{K} \rangle + \langle \hat{\Phi} \rangle \right)_{T\to\infty} = \frac{3}{2} NT + \frac{N(N-1)}{2V} \nu_0$.

Дисертаційна робота завершується **Висновками** та **Списком використаних джерел**.

Основні результати та висновки дисертації можна викласти у вигляді таких тверджень:

- Вперше за допомогою методу колективних змінних побудовано мікроскопічну теорію багатобозонної системи в широкотемпературній ділянці, яка дає можливість врахувати та оцінити внески прямих три- і чотиричастинкових кореляцій у вирази для величин, які мають безпосереднє відношення до опису бозе-рідини.
- З перших принципів в представленні колективних змінних вперше отримано вираз для повної матриці густини і статистичної суми в широкій області температур, яка містить не тільки парні, але також прямі три- та чотиричастинкові кореляції.
- За допомогою функціонального інтегрування і кумулянтних розкладів вперше знайдено вираз для якобіана переходу від декартових до колективних змінних в широкій області температур в так званому наближенні «двох сум за хвильовим вектором», який є результатом усереднення функції переходу Зубарєва за станами ідеального бозе-газу.
- Виходячи з умов, необхідних для усунення інфрачервоних розбіжностей, вперше за допомогою теорії збурень було знайдено коректний вираз для ефективної маси атома ^{4}He в широкій ділянці температур (за винятком вузької флуктуаційної області), завдяки якій вдалося змістити температуру бозе-конденсації до $T_c = 2.18\,\mathrm{K}$, а також «поправити» хід кривої теплоємності, зокрема в околі λ-переходу.
- Вперше знайдено вирази для таких структурних і термодинамічних функцій рідкого ^{4}He в широкотемпературній області в post-RPA наближенні: дво-, три- і чотиричастинковий структурні фактори, швидкість першого звуку, середні значення кінетичної, потенціальної і повної внутрішньої енергії. Зроблено порівняння внесків парних та три- і чотиричастинкових кореляцій, а також проведено чисельний розрахунок більшості із названих величин.

Список опублікованих праць за темою дисертації:

[1] Вакарчук І. О. Повна матриця густини багатобозонної системи з урахуванням три- та чотиричастинкових прямих кореляцій / І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак // Журн. фіз. дослідж. — 2009. — Т. 13, № 3. — С. 3004 (28 стор.).

[2] Вакарчук І. О. Статистична сума багатобозонної системи з урахуванням прямих три- та чотиричастинкових кореляцій / І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз. — 2011. — Т. 46. — С. 3–48.

[3] Вакарчук І. О. Структурні функції багатобозонної системи із урахуваннями пря-

мих три- і чотиричастинкових кореляцій / І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак // Укр. фіз. журн. — 2015. — Т.60, №12. — С. 1116–1126.

[4] Вакарчук І. О. Внутрішня енергія багатобозонної системи із врахуванням прямих три- ча чотиричастинкових кореляцій / І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак // Журн. фіз. дослідж. — 2015. — Т. 19, № 1/2. — С. 1005 (14 стор.).

[5] Hryhorchak O. I. First Sound Velocity in ^{4}He Liquid / O. I. Hryhorchak // Condens. Matter Phys. — 2015. — Vol.18, No 4. — P. 43001 (7 p.).

[6] Ефективна маса атома ^{4}He в надплинній і нормальній фазах / І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак, В. С. Пастухов, Р. О. Притула // Укр. фіз. журн. — 2016. — Т. 61, №1. — С. 31-39.

[7] Григорчак О. Матриця густини взаємодіючих бозе-частинок / О. Григорчак // Міжнародна Конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики "Еврика-2007". — Львів, 22-24 травня 2007 р.: Тези доповідей. — С. А15.

[8] Hryhorchak O. Three-particle Potential for Helium / O. Hryhorchak, A. Rovenchak // XIIIth International Seminar on Physics and Chemistry of Solids ISPCS'07. — Ustroń Śląski, 10-13 czerwca 2007: Abstracts. — P. 17.

[9] Григорчак О. Матриця густини багатобозонної системи з урахуванням три- та чотиричастинкових кореляцій / О. Григорчак // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики "Еврика-2008". — Львів, 19-21 травня 2008 р.: Тези доповідей. — С. А4.

[10] Григорчак О. І. Статистична сума системи взаємодіючих бозе-частинок із врахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій / О. І. Григорчак, І. О. Вакарчук // Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів ІЕФ-2009. — Ужгород, 25-28 травня 2009 р.: Програма і тези доповідей. — С. 121.

[11] Vakarchuk I. O. Internal energy of many-boson system taking into account straight three- and four-particle correlations / I. O. Vakarchuk, Hryhorchak O. I. // International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problem". — Kyiv, Ukraine, May 21-24, 2010: Abstracts. — P. 337.

[12] Григорчак О. І. Структурні функції багатобозонної системи з урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій / О. І. Григорчак, І. О. Вакарчук // X Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. — Львів, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, 3-4 червня 2010: Збірка тез. — С. 49.

[13] Григорчак О. Парний структурний фактор багатобозонної системи із урахуванням три- і чотиричастинкових кореляцій. Чисельні результати / О. Григорчак // 12-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. — Львів, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, 30 травня - 1 червня 2012: Збірка тез. — С. 38.

[14] Григорчак О. І. Чисельні результати для енерґії основного стану рідкого гелію-4 в наближенні двох сум за хвильовим вектором [Різдвяні дискусії 2013, Львів, 3-4 січня 2013] / О. І. Григорчак // Журн. фіз. дослідж. — 2013. — Т. 17, № 1. — С.1998-5.

[15] Григорчак О. Самоузгоджений підхід до розрахунку ефективної маси рідкого гелію-4 і структурного фактора ідеального бозе-газу в широкотемпературній області [Різдвяні дискусії 2014, Львів, 9- 10 січня 2014] / О. Григорчак // Журн. фіз. дослідж. — 2014. — Т. 18, № 1. — С. 1998-4.

[16] Vakarchuk I. O., Hryhorchak O. I. Sound velocity in many-boson system // Workshop on Current Problems in Physics: Zielona Góra – Lviv, 19-22 October 2015, Zielona Góra, Poland: Book of abstracts.— [P.13].

АНОТАЦІЯ

Григорчак О. І. Мікроскопічна теорія бозе-рідини з урахуванням прямих три- і чотиричастинкових кореляцій. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2016.

Дисертацію присвячено побудові мікроскопічної теорії бозе-рідини, зокрема рідкого ^{4}He, в широкотемпературній ділянці з урахуванням прямих три- і чотиричастинкових кореляцій. У роботі з перших принципів отримано вираз для повної матриці густини в так званому наближенні “двох сум за хвильовим вектором” в широкій області температур. На її основі були розраховані термодинамічні і структурні функції бозе-рідини: статистична сума, дво-, три- і чотиричастинковий структурні фактори, швидкість першого звуку, середні значення кінетичної, потенціальної і повної внутрішньої енергії в post-RPA наближенні. В границі низьких та високих температур вирази для цих величин відтворюють відомі співвідношення, а в широкотемпературній області покращують результати, отримані раніше без урахування три- та чотиричастинкових кореляцій.

Виходячи з умов, необхідних для усунення інфрачервоних розбіжностей, знайдено вираз для ефективної маси атома ^{4}He. З його допомогою вдалося змістити температуру бозе-конденсації до $T_c = 2.18\,\mathrm{K}$, а також «поправити» хід кривої теплоємності, зокрема в околі λ-переходу. Для чисельного розрахунку вхідною інформацією про взаємодію послужили екстрапольовані до нуля температур експериментальні дані для структурного фактора і швидкості першого звуку в рідкому ^{4}He.

Ключові слова: багатобозонна система, рідкий ^{4}He, матриця густини, статистична сума, три- і чотиричастинкові кореляції, структурний фактор, внутрішня енергія, швидкість першого звуку.

АННОТАЦИЯ

Григорчак О. И. Микроскопическая теория бозе-жидкости с учетом прямых трех- и четырехчастичных корреляций. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2016.

Диссертация посвящена построению микроскопической теории бозе-жидкости, в частности жидкого ^{4}He, в широкотемпературном интервале с учетом прямых трех- и четырехчастичных корреляций. В работе из первых принципов получено выражение для полной матрицы плотности в так называемом приближении "двух сумм по волновому вектору" в широкой области температур. На этом основании рассчитаны такие термодинамические и структурные функции бозе-жидкости: статистическая сумма, двух-, трех- и четырехчастичный структурные факторы, скорость первого звука, средние значения кинетической, потенциальной и полной внутренней энергии в post-RPA приближении. В границе низких и высоких температур выражения для этих величин воспроизводят известные соотношения, а в широкотемпературной области улучшают результаты, полученные ранее без учета трех- и четырехчастичних корреляций.

Исходя из условий, необходимых для устранения инфракрасных расходимостей, найдено выражение для эффективной массы атома ^{4}He. С его помощью удалось сместить температуру бозе-конденсации до $T_c = 2.18$K, а также «поправить» ход кривой теплоемкости, в частности в окрестности λ-перехода. Для численного расчета входной информацией о взаимодействии послужили экстраполированные к нулю температури экспериментальные данные для структурного фактора и скорости первого звука в жидком ^{4}He.

Ключевые слова: многобозонная система, жидкий ^{4}He, матрица плотности, статистическая сумма, трех- и четырехчастичние корреляции, структурный фактор, внутренняя энергия, скорость первого звука.

ABSTRACT

O. I. Hryhorchak. The microscopic theory of Bose-liquid with direct three- and four-particle correlations taken into account.

A thesis for a Candidate of Sciences degree on the speciality 01.04.02 – theoretical physics, Ivan Franko National University of Lviv, 2016.

The thesis is devoted to the construction of the theory of the Bose-liquid, in particular ^{4}He liquid, which takes into account three- and four-particle direct correlations and to the investigation of the contribution of these correlations in the structure and thermodynamic functions.

We started from the Hamiltonian of the many-boson system and found the density

matrix of the interacting Bose-particles in the coordinate representation for a wide temperature domain in the so-called approximation of «two sums over the wave vector» from the first principles. Continuing the idea of Feynman we represented the density matrix as a product of the density matrix of the ideal Bose-gas and the factor which takes into account interparticle interaction. In the low temperature limit the obtained expression corresponds to the already known one and has the form of the product of the ground-state wave functions with three- and four-particle direct correlations taken into account and the factor $e^{-E_0/T}$, where T is the temperature of the system, E_0 is the ground-state energy in the post-RPA approximation. For high temperatures in the quasi-classical limit the obtained expression is equal to the product of the partition function of the classical ideal gas and the Boltzmann factor.

Using the functional integration and the cumulant method we calculated the partition function, two-, three-, and four- particle structure factors, average values of kinetic, potential and full internal energy of the many-boson system for a wide temperature domain with direct three- and four-particle correlations taken into account on the basis of the full density matrix. The suggested approach also allowed us to find the Jacobian of the transition from Cartesian to collective variables, in which the contributions of the density matrix of the ideal Bose-gas are «hidden». In the low temperature limit the expression for this Jacobian coincides with the well-known result.

The obtained expression for the structure and thermodynamic functions contains the infra-red divergences, which are typical for critical phenomena. In order to eliminate these divergences we introduced the effective mass of a ^{4}He atom. It is a phenomenological step but a necessary one, which allows to get rid of the essential consequences of the approximate calculations (a breaking of a series of the perturbation theory). Expression for the temperature dependence of the effective mass of a ^{4}He atom in superfluid and normal phases is applicable at all temperatures except narrow fluctuation region: $0.97 \le T/T_c \le 1$. It allowed to correct the phase transition temperature from $T_c \approx 3.14$ K for the ideal Bose-gas to $T_c \approx 2.18$ K for the ^{4}He liquid, which is very close to the experimental value $T_c \approx 2.168$ K. In the high and low temperature limits, as well as in the non-interacting limit, obtained expression gives the well-known result. We also calculated the temperature behaviour of the heat capacity using the effective mass instead of the real mass of a ^{4}He atom and showed a better matching with the experimental data. The small critical index η in the random phase approximation also was found; the obtained value reproduces the well-known result of this approximation.

Based on the exact relation that links the sound velocity with the long-wavelength limit of the two-particle structure factor we found the sound velocity temperature dependence in the post-RPA approximation and showed a fairly good agreement with the experimental data. At the same time the calculation through the structure factor in the

approximation of pair correlations only leads to the result that does not conform with the experimental data in the above-critical region. The resulting expression in the limit of low temperatures matches with the already known one. In the high temperature limit the contributions of three- and four-particle correlations are equal to zero and we also obtain a well-known classical expression in a high temperature region.

All final formulae for the structure and thermodynamic functions are written via the Fourier coefficient of the energy of the pair interparticle interaction. At the same time we are not interested in the explicit form of the interatomic potential because for our numeric calculations we express its Fourier coefficient from the experimentally measured structure factor and first sound velocity extrapolated to $T = 0$. The found average values for the kinetic, potential and full internal energy demonstrate that the accounting of three- and four-particle direct correlations gives a better matching of the theoretical results with the experimental data.

Key words: many-boson system, liquid ^{4}He, density matrix, partition function, three- and four-particle correlations, structure factor, internal energy, first sound velocity.