ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

На правах рукопису

Ровенчак Андрій Адамович

УДК 538.941+539.186

Самоузгоджений розрахунок міжатомних потенціалів та термодинамічних функцій гелію-4 в надплинній і нормальній фазах

01.04.02 — Теоретична фізика

Дисертація на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

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

ЛЬВІВ — 2003

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

а. о. м.	атомна однниця маси
постRPA	наближення, наступне після хаотичних фаз
РҐ	Ренормалізаційна ґрупа, ренорм-ґруповий
AHS	Almost Hard Spheres (Майже тверді сфери)
DMC	Diffusion Monte Carlo (Дифузійний метод Монте-Карло)
GFMC	Green's Function Monte Carlo (Метод Монте-Карло з використанням функцій Ґріна)
HS	Hard Spheres (Тверді сфери)
PIMC	Path Integral Monte Carlo (Метод Монте-Карло з використанням інтеґралів за траєкторіями)
PY	Percus–Yevick, (наближення) Перкуса–Євіка
RPA	Random Phase Approximation (Наближення хаотичних фаз)

ВСТУП

Актуальність теми. За останні декілька років у дослідженнях квантових Бозе-систем досягнуто значного проґресу. На сучасному етапі, крім рідкого гелію-4 та сумішей квантових рідин ^{3}He–^{4}He, предметом вивчення, як теоретичного, так і експериментального, стали спін-поляризований водень, екситонний газ в напівпровідниках, високотемпературні надпровідники, лазерно-охолоджені розріджені гази лужних металів [1]. Влітку 1995 року ґрупі вчених в Баулдері (Колорадо) вдалося експериментально отримати стан речовини, який є Бозе-конденсатом, охолодивши 2000 атомів ^{87}Rb до температури 20 нК [2], а приблизно тоді ж аналоґічні досліди було проведено з натрієм у Масачусетському технолоґічному інституті [3]. Ці експерименти стимулювали нові теоретичні дослідження в галузі квантових газів і рідин, до яких зокрема належить і рідкий гелій-4, який був історично першим об'єктом вивчення у цьому напрямку, однак, попри значні зусилля, вже протягом кількох десятиліть теорія процесів у ^{4}He залишається ще остаточно не створеною.

Якщо, скажімо, для газів лужних металів можна застосувати модель слабонеідеального Бозе-газу, а екситони в оксиді міді Cu_2O взагалі можна трактувати як ідеальний квантовий газ, то явища в рідкому гелії-4 чи в сумішах ^{3}He–^{4}He потребують спеціального підходу, пов'язаного з описом сильновзаємодіючих квантових систем.

Найпопулярнішою методикою в цьому напрямку зараз є числові розрахунки, успіх яких значною мірою пов'язаний як з розробкою нових методів, так і з появою великих обчислювальних потужностей, за допомогою яких ці методи можна реалізовувати. Проте доброї теоретичної моделі, яка би працювала без залучення спеціальних числових методик для різних температур, у надплинній і нормальній фазах, створити не вдалося. У цій роботі буде продемонстровано один з можливих підходів до розв'язання цієї проблеми.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у Львівському національному університеті імені Івана Франка та згідно держбюджетної теми Фф-39Б "Нелінійні флюктуації в квантових рідинах" (номер державної реєстрації № 0100U001447).

Мета і задачі дослідження. Головною метою дисертаційної роботи є побудова опису багатобозонної системи, якою є рідкий гелій-4, в широкому температурному інтервалі. При цьому завдання полягає в отриманні аналітичних виразів з перших принципів, тобто з використанням якнайменшої кількости експериментальної інформації. Мається на увазі, що в остаточні вирази якщо й будуть входити експериментальні величини, то лише такі, які добре, безпосередньо і надійно вимірюються (наприклад, статичний структурний фактор або швидкість звуку). Далі за цими формулами можна провести чисельні розрахунки залежностей термодинамічних і структурних функцій ^{4}He від температури.

Таким чином, *об'єктом дослідження* виступають явища, які відбуваються у квантовій багатобозонній системі, а *предметом дослідження* є термодинаміка і структурні властивості однієї з таких систем, а саме рідкого гелію-4, в надплинній і нормальній фазах.

Для дослідження безмежної бозонної системи у роботі використано *метод колективних змінних*, при цьому для розрахунку температурних залежностей термодинамічних величин застосовано *формалізм двочасових температурних функцій Ґріна.* Для опису системи, що складається з небагатьох бозонів, використано $1/N$-розклад (де N — кількість частинок) з подальшою екстраполяцією результатів на випадок $N \to \infty$.

У першому розділі проаналізовано історію досліджень рідкого гелію-4 та подано сучасний стан цієї проблеми.

У другому розділі розглянуто задачу про відновлення потенціалу міжатомної взаємодії за експериментальними даними про розсіяння (нейтронне та X-променеве). На відміну від класичної системи, де така задача розв'язується відносно просто, для квантової, якою є гелій-4, отримати вираз для міжатомного потенціалу через структурний фактор значно складніше. Розраховано також парний потенціал із явно заданою моделлю для короткосяжних відштовхувальних взаємодій. У цьому розділі, крім парного, розраховано також тричастинковий потенціал міжатомної взаємодії.

У третьому розділі за допомогою методу двочасових температурних функцій Ґріна отримано вирази для термодинамічних та структурних функцій рідкого гелію-4. Відповідні функції побудовані на операторах колективних змінних. У наближенні "двох сум за хвильовим вектором" одержано замкнену систему рівнянь руху для цих функцій. На підставі отриманих виразів із використанням самоузгодженого наближення для врахування поза-RPA ефектів розраховано термодинамічні функції гелію-4 в широкому інтервалі температур. Особливу увагу звернено на поведінку теплоємности. Досліджено також питання ефективної маси атома гелію-4.

У четвертому розділі досліджено властивості системи небагатьох взаємодіючих Бозе-частинок. На підставі методу, який дає добрі результати у випадку ідеального Бозе-газу, сконструйовано формули, за допомогою яких можна обчислювати термодинамічні величини для взаємодіючих систем.

П'ятий розділ містить розрахунок конденсатної фракції в гелії-4 при $T = 0$ К на підставі означення цієї величини через одночастинкову функцію розподілу. Показано, що явне врахування короткосяжної відштовхувальної частини потенціалу, що має ефект часткового підсумовування ряду поза наближенням хаотичних фаз, дає добре узгодження результатів розрахунку з даними експерименту. Отримано також залежність конденсатної фракції від температури, що якісно узгоджується з експериментом.

Завершується дисертаційна робота **Висновками**, **Списком використаних джерел** та **Додатком А**, в якому у вигляді таблиць зібрано інформацію про деякі розраховані в роботі величини, і **Додатком Б** з рівняннями руху для функцій Ґріна, що не ввійшли в основний текст.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше розраховано з перших принципів через структурний фактор потенціали міжатомних взаємодій багатобозонної системи з використанням зображення колективних змінних: парний — у наближенні "двох сум за хвильовим вектором" (зокрема, із явно заданими короткосяжними взаємодіями, для яких запропоновано модель "майже твердих сфер"); тричастинковий — у наближенні хаотичних фаз.

Вперше на підставі рівнянь руху для двочасових температурних функцій Ґріна типу "густина–густина", побудованих на операторах колективних змінних, записано вираз, що дає можливість самоузгодженим чином розрахувати енерґію і теплоємність багатобозонної системи в широкому температурному інтервалі.

Вперше отримано розклади термодинамічних функцій взаємодіючої багатобозонної системи за степенями $1/N^{\varepsilon}$, де N — кількість частинок. Для моделі взаємодії у вигляді твердих сфер методом числової інтерполяції визначено показник степеня ε і розраховано питому теплоємність гелію-4, при цьому "пікове" значення становить 13.6 (відповідні експериментальні дані становлять приблизно 16 без врахування поправок на скінченність зразка).

Практичне значення одержаних результатів. Отримані в роботі кількісні та якісні результати сприяють глибшому розумінню фізичних явищ у багатобозонній системі, якою є рідкий гелій-4, зокрема, з погляду ролі багаточастинкових ефектів порівняно з двочастинковими. Отримані аналітичні вирази можна використовувати з метою розрахунків термодинамічних функцій, потенціалів, конденсатної фракції рідкого гелію-4 у вищих наближеннях, застосовуючи відповідні обчислювальні потужності. Розроблену методику опису безмежних систем після певних модифікацій можна застосувати для заряджених бозонних систем, для спін-поляризованого атомарного водню, а техніку розкладу за степенями $1/N^{\varepsilon}$ — для дослідження нових квантових газів лазерно-охолоджених атомів лужних металів.

Особистий внесок здобувача. У роботах, виконаних зі співавторами, здобувачу належить:

- виконання чисельних розрахунків фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в рідкому гелії-4 та отримання на його основі потенціальної кривої [4, 5];
- вибір способу задання короткосяжних взаємодій у вигляді "майже твердих сфер" [5], моделювання їх за допомогою функції Маєра, аналіз залежности форми кривої потенціалу від способу задання короткосяжних взаємодій та впливу на неї неаналітичностей короткосяжного потенціалу;
- аналітичні розклади для статистичної суми взаємодіючої Бозе-системи, обчислення на їх підставі термодинамічних функцій в наближенні твердих сфер, аналіз отриманих залежностей від кількости частинок та вибір послідовностей для екстраполяції результатів на випадок безмежної системи [6].

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, включені до дисертації, були представлені автором особисто на таких конференціях і семінарах: “Ізинґівські читання–99” (Львів, 1999) [9]; Звітна наукова конференція Львівського національного університету імені Івана Франка за 2000 рік (Львів, 2001); Conference on Computational Physics 2001 (Aachen, Germany, 2001) [10]; Physics of Liquid Matter: Modern Problems (Київ, 2001) [11]; Звітна наукова конференція Львівського національного університету імені Івана Франка за 2001 рік (Львів, 2002); семінар Інституту теоретичної фізики університету Йогана Кеплера (Лінц, Австрія, 2002); II Робоча нарада-семінар молодих вчених (Львів, ІФКС, 2002). Крім того, стендова доповідь була представлена на конференції “EPS-11: Trends in Physics”. 11th General Conference of the European Physical Society (London, 1999) [12].

Результати, подані в роботі, також неодноразово обговорювалися на семінарах кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Публікації. Матеріали дисертації опубліковано у п’яти журнальних статтях [4–8] і чотирьох тезах конференцій [9–12].

РОЗДІЛ 1

Огляд літератури

Перші кроки у дослідженні систем частинок із цілим спіном, які згодом назвали бозонами, було зроблено індійським вченим Сат'єндранатгом Бозе, який 1924 р. у праці "Закон Планка та гіпотеза світлових квантів" [13] запропонував виведення формули Планка, виходячи з простого статистико-механічного підрахунку. Згодом Айнштайн використав цей метод для отримання розподілу квантового ідеального газу частинок з масою спокою, відмінною від нуля [14], а в наступній статті [15] вказав на явище нагромадження атомів на рівні з нульовим імпульсом, яке і назвав "конденсацією".

У природі існує загалом небагато систем, які з одного боку виявляють суттєво квантові властивості, а з іншого — можуть розглядатися як такі, що складаються з невзаємодіючих бозонів. Прикладом можна назвати випромінювання, про яке й писав Бозе, а також (з певними застереженнями) — "газ" куперівських пар у надпровіднику. Із простих атомарних рідин під цю характеристику міг би підійти рідкий гелій-4, атоми якого є легкими бозонами, отже, їх поведінка суттєво квантова, хоча міжатомна взаємодія у цій системі надто сильна, щоб розглядати її як невзаємодіючу навіть наближено. Квантовим Бозе-газом є також система спін-поляризованих атомів водню, проте отримати її та проводити з цим газом досліди технічно складно, вперше стабілізувати атомарний водень вдалося Сильвері та Вальравену 1980 року в Амстердамі [16, 17].

Сам фазовий перехід у рідкому гелії вперше виявив Кеєзом зі співробітниками, проводячи 1932 року низькотемпературні дослідження у лабораторії Камерлінга-Оннеса [18–20]. Незвична форма кривої теплоємности з пікоподібним ходом в околі температури $T \simeq 2$ K дала підставу для назви цього явища — λ-перехід.

Лондон [21, 22] 1938 року висловив припущення про зв'язок цього явища з Бозе-Айнштайнівською конденсацією, що відбувається при пониженні температури в ідеальному Бозе-газі. Попри те, що така аналоґія видається не дуже вдалою, зважаючи на досить сильну взаємодію між атомами гелію, на даний час виглядає, що саме цей мікроскопічний підхід дає змогу добре описувати поведінку ^{4}He.

Того ж 1938 року Капіца [23] та незалежно від нього Аллен і Майснер [24] відкрили явище надплинности в рідкому ^{4}He, тобто здатність цієї рідини текти капілярами без тертя. Згідно з працею [25], експериментально виміряну в'язкість гелію-4 при температурі, меншій за температуру фазового переходу, оцінено як принаймні у 1 500 разів нижчу за в'язкість нормальної модифікації гелію при 4.22 K. Автор [25] також вказав на те, що відома на той час надзвичайно висока теплопровідність ^{4}He може бути наслідком його надплинности.

Ідею Лондона про зв'язок між властивостями гелію при низьких температурах і конденсацією Бозе–Айнштайна в ідеальному газі використав Тіса при побудові своєї дворідинної моделі [26–28]. Він запропонував розглядати рідкий гелій-4 як суміш "нормальної" (зі звичайними властивостями) і "надплинної" компонент. Тіса, однак, ототожнював Бозе-конденсат з надплинною компонентою, що не зовсім коректно, оскільки конденсатна фракція в гелії-4 навіть при нульовій температурі становить, мабуть, не більше, ніж 10% [29, 30].

Розвиток ця ідея отримала у дворідинній моделі Ландау [31], яка дещо відрізняється від моделі Тіси. При її побудові суттєвим моментом стало постулювання енерґетичного спектру елементарних збуджень в гелії у вигляді фононної та ротонної частин. Підбір трьох параметрів цієї кривої дозволив отримати дуже добрий опис гелію-4 на макроскопічному рівні. Проте, Ландау так і не вдалося побудувати мікроскопічну теорію, яка би пояснювала такий спектр.

Дещо пізніше Файнману [32] вдалося отримати подібну енерґетичну криву, яка, однак, мала завищений удвічі "ротонний" мінімум, а згодом він разом з Коеном [33] запропонував модифікацію методу [32], що дозволило знизити значення мінімуму з 19.1 K до 11.5 K, тоді як на кривій Ландау воно становить 9.6 K. У цих розрахунках у вираз для хвильової функції вводили множники, що відповідали фононним і ротонним збудженням, і далі застосовували варіаційний принцип для енерґії. Раніше, 1953 р., Файнман опублікував працю [34], у якій розвинув ідею Лондона щодо Бозе-конденсації як механізму λ-переходу, давши опис багатобозонної системи через інтеґрали за траєкторіями, а також ввівши поняття ефективної маси атома гелію, пов'язаної зі взаємодією з оточенням.

За кілька років до того Боголюбов для опису взаємодіючого Бозе-газу використав ориґінальний метод наближеного вторинного квантування [35]. При цьому було використано припущення про те, що слабка взаємодія тільки незначною мірою змінює картину конденсації Бозе–Айнштайна в ідеальному Бозе-газі. Тому кількість частинок у конденсаті можна вважати макроскопічною (при малих температурах), а оператори породження і знищення частинок з нульовим імпульсом наближено замінити на c-числа $\sqrt{N}$, де N — кількість частинок у системі. Тоді після діаґоналізації гамільтоніана у першому наближенні отримаємо енерґетичний спектр нових квазічастинок, які є бозонами. Незважаючи на те, що для застосування цієї моделі міжатомна взаємодія повинна бути слабкою, результати Боголюбова виявилися коректними в границі низьких температур і для рідкого гелію-4.

Бєляєв [36] застосував до опису багаточастинкової Бозе-системи формалізм, розвинутий у теорії поля. Це дозволило йому знайти в наступній роботі [37] вираз для спектру неідеального Бозе-газу. Розглядаючи модель пружних кульок, автор отримав у наближенні великих імпульсів таку залежність енерґії ε від імпульсу p:

$$\varepsilon \simeq \frac{p^2}{2} + 4\pi n_0 a \left(2\,\frac{\sin pa}{pa} - 1 \right),$$

де a — діаметр кульки, а n_0 — густина (концентрація) системи. Така крива якісно подібна на криву Ландау, але при газових концентраціях згин у "ротонній" області є несуттєвим. Проте формальне збільшення значення концентрації дозволяє відтворити спектр Ландау, з чого Бєляєв робить висновок про лише кількісну, а не якісну різницю між реальним гелієм (рідиною) і неідеальним Бозе-газом.

Ми розглядатимемо багатобозонну систему, якою є рідкий гелій-4, у підході *колективних змінних* [38], який виявився потужним інструментом для дослідження квантових систем багатьох частинок. Ця праця Боголюбова і Зубарєва швидко викликала інтерес у всьому світі, пор., напр., [39]. Ідея методу полягає у тому, що замість індивідуальних координат частинок, для яких розв'язок чи квантово-механічної, чи статистико-механічної задачі є практично неможливим, вводять так звані "колективні координати", які описують систему в цілому. Для Бозе-системи можна перейти від координат частинок $\mathbf{r}_j, j = 1, \ldots, N$, де N — кількість частинок, до колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$, які є фур'є-компонентами флюктуацій густини системи:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}. \tag{1.1}$$

Такі змінні можна ввести і для фермі-системи [40], але у цьому випадку неможливо коректно перейти від квантово-механічного опису в індивідуальних координатах до колективних координат: через антисиметричність статистики хвильова функція змінює знак при перестановці двох частинок, а змінні $\rho_{\mathbf{k}}$ є симетричними за $\mathbf{r}_j$. Розв'язок цієї проблеми полягає у змішаному $(\rho_{\mathbf{k}};\, \mathbf{r}_j)$ описі.

Зрозуміло, що кількість змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ є безмежною, тому при переході до зображення колективних змінних виникає питання ермітовости гамільтоніана, відповідь на яке є нетривіальною. Так, відразу не очевидно, який вигляд буде мати оператор, канонічно спряжений до $\rho_{\mathbf{k}}$. Наприклад, у праці Абе [39], в роботах Сунакави *та ін.* [41, 42] вивчається питання про фізичну інтерпретацію оператора $\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}}$, зокрема вивчено його зв'язок з оператором швидкости у квантовій гідродинаміці.

Значний розвиток метод колективних змінних отримав у працях Юхновського [43,44]. Розроблена в цих працях техніка дозволила досліджувати багаточастинкові системи в суттєво квантовій області (при низьких температурах).

Застосування колективних змінних до опису багатобозонної системи поєднане зі специфічним видом теорії збурень, у якій порядок наближення пов'язаний з кількістю підсумовувань у просторі хвильового вектора або кількістю інтеґрувань в координатному просторі. Виявляється, однак, що безпосередньо описувати рідкий гелій-4 за цією методикою трохи складно, — кращі результати вдається отримати, якщо враховувати короткосяжне відштовхування між атомами ^{4}He явно [45].

Ці методи пов'язані з проблемою обчислення матриць густини багатобозоної системи, відповідна мікроскопічна теорія явищ в рідкому гелії-4 була запропонована Вакарчуком [46] для опису основного та слабозбуджених станів. Вивчення термодинаміки та структурних властивостей рідкого ^{4}He при низьких температурах було проведено у роботах Вакарчука та Глушака [47, 48]. Вирази для матриць густини у ширшому температурному діапазоні запропоновано також у праці [49].

Для обчислення середніх величин у роботі ми маємо намір скористатися функціями Ґріна. Оскільки нас цікавитиме не лише основний стан системи ($T = 0$ К), а й температурні залежності фізичних величин, то ми використаємо *метод двочасових температурних функцій Ґріна* [50].

Як правило, для обчислень за допомогою функцій Ґріна як базис вибирають оператори породження-знищення $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ і $a_{\mathbf{k}}$ [51]. У роботах Церковнікова з цією метою використано пару операторів $\rho_{\mathbf{k}}\,; a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ [52], а також оператори густини $\rho_{\mathbf{k}}$ та потоків $\rho_{\mathbf{k}}^{j}$, $\rho_{\mathbf{k}}^{jl}$ [53]:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}, \qquad \rho_{\mathbf{k}}^{j} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{k_j}{2m} + \frac{p_j}{m} \right) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}},$$

$$\rho_{\mathbf{k}}^{jl} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{p_j(p_l + k_l) + (p_j + k_j)p_l}{2m^2} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}.$$

(виписане тут означення оператора $\rho_{\mathbf{k}}$ є еквівалентним до (1.1)).

У випадку використання операторів породження-знищення виникає одна проблема, пов'язана з особливим трактуванням стану з нульовим імпульсом. Відповідні функції Ґріна, побудовані з використанням операторів a_0 або $a_0^{\dagger}$, називають "аномальними". При цьому такі доданки доводиться виокремлювати штучно, що взагалі можна вважати недоліком методу.

Аналізуючи тематику робіт останніх років, можна сказати, що теоретичні дослідження, які стосуються гелію-4, на даний час ведуться в основному в таких напрямках:

1) чисельні розрахунки термодинамічних, кінетичних та структурних властивостей гелію-4 (це, як правило, різні варіації методу Монте-Карло);

2) ренорм-ґруповий підхід для з'ясування поведінки системи в навко-

локритичній області.

Перший з цих методів дає змогу здійснювати опис як основного стану ($T = 0$ K), так і випадку скінчених температур, однак для околу фазового λ-переходу набагато кращі результати дає другий, тобто метод ренорм-ґрупи (РҐ).

Для розрахунків основного стану системи застосовують *дифузійний метод Монте-Карло* (Diffusion Monte Carlo, DMC), а для обчислень в області скінчених температур — *метод Монте-Карло з використанням інтеґралів за траєкторіями* (Path Integral Monte Carlo, PIMC). Обчислення цими методами проводять починаючи з 60-х років. На сьогодні найефективнішим є використання PIMC, до суттєвих недоліків якого можна віднести хіба що неможливість його застосування до основного стану ($T = 0$ K) [54]. Однак цю проблему можна обійти, розглядаючи границю результатів при $T \to 0$ K. Крім згаданих, існує також *метод Монте-Карло з використанням функцій Ґріна* (Green's Function Monte Carlo, GFMC), який фактично був започаткований у працях Калоса, див., напр., [55].

При застосуванні методу Монте-Карло виникає потреба в заданні міжатомного потенціалу взаємодії в гелії. Перша спроба отримання такого потенціалу належить Слетеру і Кірквуду [56], згодом тривалий час за найкращий вважали потенціал Ленарда-Джонса. Зараз з цією метою найчастіше використовують потенціали Азіза–Сламана [57–60].

Існують також роботи, в яких потенціал міжатомної взаємодії розраховують шляхом безпосереднього розв'язування квантово-механічної задачі. Автори Андерсон, Трейнор, Богосян [61] з цією метою інтеґрують стаціонарне рівняння Шредінґера, використовуючи складні пробні функції. Отримані в роботі 8 точок дуже добре збігаються з кривою потенціалу Азіза–Сламана [58].

Хоча й парні взаємодії, як правило, дають найсуттєвіші внески в термодинамічні та структурні характеристики системи, іноді виникає потреба у поправках на багаточастинкові процеси. Насамперед це, звичайно, найпростіші з них — тричастинкові. Тут варіантів проаналізовано значно менше, ніж у випадку з двочастинковим потенціалом, та й взагалі ця проблема не є детально дослідженою.

Першою спробою можна вважати тричастинковий потенціал Аксильрода–Теллера [62], який враховує диполь–диполь–дипольні (DDD) взаємодії: $V_3(r_{12}, r_{13}, r_{23}) \sim 1/r_{12}^3 r_{13}^3 r_{23}^3$, r_{ij} — міжатомні відстані. Такий доданок дотепер входить у більшість сучасних потенціалів. Серед них — тричастинковий аналітичний потенціал Паріша–Дикстри [63]. Автори враховують для покращення результатів ще вищі взаємодії: диполь–диполь–квадрупольні (DDQ) та інші. Отримані радіальні залежності можна записати так:

$$V_3(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = \frac{A_{DDD}}{r_{12}^3 r_{13}^3 r_{23}^3} + \frac{A_{DDQ}}{r_{12}^3 r_{13}^4 r_{23}^4} + \dots\ ,$$

де коефіцієнти A містять кутові залежності.

Насправді врахування тричастинкових взаємодій дає внесок в енерґетичні характеристики гелію ~ 1 K. Відповідний аналіз для основного стану ($T = 0$ K) проведено у [64] методом Монте-Карло.

На початку 1970-х рр. λ-перехід почали вивчати за допомогою методу ренормалізаційної ґрупи (РҐ) для теорії з виродженим двокомпонентним параметром порядку. Строге обґрунтування цього підходу на підставі методу функціонального інтеґрування наведено в працях Ланґера [65] і Вакарчука [66]. У праці [66] автор застосував зображення когерентних станів з комплексним параметром порядку, модуль якого дорівнює $\sqrt{N_0}$, де N_0 — кількість атомів у Бозе-конденсаті. За допомогою цього підходу вдалося обчислити критичний показник теплоємності $\alpha = 1/8$ [46], що відповідає степеневій, а не лоґарифмічній розбіжності, для якої $\alpha = 0$.

Однак, зважаючи на мале абсолютне значення цього показника, для експериментального підтвердження були потрібні дуже точні вимірювання, які вдалося здійснити лише порівняно недавно [67]. До того не було навіть певности щодо знаку величини α. Вимірювання показали, що показник теплоємности є малою, але від'ємною величиною, і, отже, на відміну від того, що вважалося правильним довгий час, теплоємність рідкого гелію в точці λ-переходу є скінченною.

РҐ-метод дає дуже добре узгодження з останніми експериментальними даними [67] про характер поведінки термодинамічних функцій в околі λ-точки. Скажімо, у роботах Кляйнерта отримані значення критичного показника α теплоємности C_p: $\alpha = -0.01294 \pm 0.00060$ [68], $\alpha = -0.0120 \pm 0.0009$ [69], тоді як експеримент свідчить про значення $\alpha = -0.01285 \pm 0.00038$ [67] (У праці Ліпи *та ін.* [70] є примітка про те, що такий (вказаний раніше цими ж авторами) результат не зовсім правильний, повинно бути $\alpha = -0.01056$). Дещо інший підхід до визначення критичних показників можна знайти в роботі Кампостріні *та ін.* [71]. Автори отримали значення $\alpha = 0.0150 \pm 0.0017$.

Проведення експериментів з виявлення критичної поведінки речовини пов'язане з потребою врахування ефектів скінченности розмірів зразка. Перерахунок на безмежний випадок (*анґл.* bulk) роблять за допомогою певних масштабних перетворень [70].

Однак для опису системи в усьому інтервалі температур, включно з точкою фазового переходу, окремо кожного з цих методів виявляється недостатньо.

Поза цими найбільшими напрямками сучасних досліджень можна виділити і деякі роботи, які не вдається класифікувати в окреслених межах. Наприклад, мікроскопічна модель гелію-4 наводиться у праці Маркеса [72]. Автор розглядає неідеальний Бозе-газ, вводячи "ззовні" тільки два параметри: глибину потенціальної ями ΔE на кривій міжатомної взаємодії в гелії та довжину розсіяння a. Результати отримуються у напівкласичному наближенні з гамільтоніана, записаного через польові оператори $\psi(\mathbf{x}) = V^{-1/2}\sum b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kx}}$ (тут $b_{\mathbf{k}}$ — оператор знищення). Наближення полягає в тому, що ці оператори розкладають в ряд в околі деякої класичної конфіґурації: $\psi = \psi_c + \eta$. Далі, використовуючи параметри ΔE та a, взяті з потенціалу Ленарда-Джонса та фононно-ротонний енерґетичний спектр, автор отримує 12 фізичних характеристик системи, які можна порівняти з експериментом. Зокрема, рівноважна густина $\rho = 2.45 \cdot 10^{22}$ атом/см^3 (експеримент: $2.17 \cdot 10^{22}$ атом/см^3), енерґія основного стану $E_0 = -10.4$ кал/моль (-7.1 кал/моль), швидкість звуку $v_s = 150$ м/с (210 м/с), критична температура $T_\lambda = 2$ K (2.18 K). Експериментальні дані, подані в дужках, наведено автором у самій роботі. Як бачимо, для температури переходу узгодження є дуже добрим, для енерґії основного стану — добрим. Прекрасний збіг виявляють також результати для густини нормальної компоненти в надплинній фазі. Однак застосувати цю модель як близько до λ-точки, так і при високих температурах навряд чи вдасться. Це випливає навіть із тверджень самого автора: "... неідеальний газ при *малих температурах* є згрубша нечутливим до деталей міжатомних сил" (виділення моє.— *Р. А.*). Тому високі температури описувати моделлю лише з двома параметрами ΔE та a вже буде не зовсім коректно.

Модель слабонеідеального Бозе-газу у різних модифікаціях порівняно з підходом Боголюбова також застосовується для опису термодинаміки рідкого гелію. Зокрема, Ярунін [73] пропонує поєднати її з квазікласичним описом. Як результат у цій праці отримано криву температурної залежности теплоємности, яка досить добре збігається з експериментальною на інтервалі температур $0 < T < 1.6$ K та $2.2 < T < 2.9$ K.

Кабрера *та ін.* [74] пропонують дещо модифікований метод Боголюбова, який полягає у тому, що число частинок у Бозе-конденсаті не вважається сумірним з N — загальною кількістю частинок, як це робиться в ориґінальній роботі Боголюбова [35], однак конденсатні оператори породження–знищення $a_0^\dagger$ та a_0 розглядаються як c-числа. Таке трактування слабонеідеального Бозе-газу дає підставу розглядати значення температур, близьких до точки фазового переходу, де кількість частинок з нульовим імпульсом вже не є макроскопічною навіть в ідеальному газі. Внаслідок діаґоналізації вихідного гамільтоніана (після розділення його на звичайну та конденсатну частини) виникають оператори породження–знищення псевдочастинок з ненульовим значенням енерґії при прямуванні імпульсу до нуля. За рахунок цього залишкового значення отримується розбіжність теплоємности у λ-точці. Відповідний доданок має вигляд

$$\Delta c_V \sim \frac{\gamma^2 T^{2\gamma}}{T^{2\gamma-2}\sqrt{1-(T/T_c)^\gamma}},$$

де T_c — критична температура, а γ описує температурну залежність відносної кількости конденсату n_0:

$$n_0(T) = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^\gamma .$$

Першу оцінку цієї величини (відносної кількости Бозе-конденсатної фракції) у рідкому ^{4}He зробили Пенроуз та Онзаґер 1956 року [75]. Їхній результат — 8% — дотепер залишається цілком задовільною оцінкою цієї величини. Для його отримання автори використали грубе наближення для хвильової функції (атоми трактуються як класичні тверді сфери). Цікаво, що відносну кількість Бозе-конденсату у цій праці не визначають через відношення густини надплинної компоненти до густини самої рідини ϱ_s/ϱ, як це можна зробити в рамках дворідинної моделі. Натомість запропонований критерій існування явища конденсації через відношення n_M/N, де N — загальна кількість частинок, а n_M — максимальне власне значення одночастинкової матриці густини:

$$n_M/N = e^{O(1)} \longleftrightarrow \text{є Бозе-конденсація.}$$

Тут $e^{O(1)}$ означає скінченну величину, на відміну від $o(1)$ — нескінченно малої. Іншими словами, автори стверджують, що "...Бозе–Айнштайнівська конденсація присутня у просторово однорідній системі з періодичними граничними умовами, якщо скінченна доля частинок має однакові імпульси" [75].

Щоправда, результат Пенроуза–Онзаґера можна вважати радше випадковим збігом, оскільки розрахунки в межах їхньої моделі є дуже чутливими до підбору параметрів. Скажімо, за діаметр твердої сфери взято 2.6 Å (приблизно таке значення — 2.556 Å — фіґурує в потенціалі Ленарда-Джонса як точка, у якій потенціал набуває значення 0 і при подальшому зближенні атомів зростає). Натомість експерименти з нейтронного розсіяння вказують на значення 2.2 Å [76].

Експериментальний метод визначення розподілу частинок за імпульсами в рідкому гелії–4, а також виявлення існування Бозе-конденсату при $T < T_\lambda$, був запропонований 1966 року Гогенберґом та Пляцманом [77]. Ідея полягала у застосуванні розсіяння високоенерґетичних нейтронів на гелієвій "ванні". При цьому про наявність в системі Бозе-конденсату мало свідчити існування дельта-подібного піку в околі точки $k = 0$, де k — переданий імпульс.

Однак втілення цього методу пов'язане зі значними технічними труднощами, тому дотепер немає справді надійних даних ні щодо частки конденсату при $T = 0$ K, ні про її температурну залежність.

Протягом останніх двадцяти років для визначення відносної кількости Бозе-конденсату використовували різні методи вимірювань і способи теоретичних розрахунків. Розширений аналіз досліджень процесів збудження в рідкому гелії-4 наведено, напр., у книзі [78]. Зокрема, за результатами нейтронного розсіяння можна встановити розподіл за імпульсами, а з нього, своєю чергою, — саму конденсатну фракцію. Сірс *та ін.* [79] отримали цим способом значення 13.9%, а дещо пізніше подібний результат (13.3%) — з даних про температурні зміни середньої кінетичної енерґії [80].

Числові розрахунки за допомогою варіаційного методу проведено в серії робіт Манусакіса *та ін.* [81–83]. При цьому автори використали джастровську хвильову функцію [84] з поправками на тричастинкові ефекти. Результати цих робіт лежать в межах $8.2 \div 10.3\%$.

Чисельну оцінку конденсатної фракції зроблено також у низці робіт Вакарчука *та ін.* [85–87]. Відповідні результати — $3.7 \div 8.8\%$. Одним з методів, використаних у цих працях, є середньосферичне наближення для структурних функцій рідкого гелію-4 при нулі температур [85]. Застосовано було також безпосереднє квантово-механічне обчислення з перших принципів [86, 87].

Сокол зі співробітниками [88–90] отримав значення приблизно 10% за допомогою глибоко-непружного розсіяння нейтронів при високих імпульсах передачі.

Іншим способом вирішення цієї проблеми можуть бути обчислення методами Монте-Карло. Результат Вітлок і Панофа [91] становить $\simeq 9\%$ (GFMC). Сеперлі та Поллок [92] отримали значення $\simeq 7\%$ при температурі 1.18 K, використовуючи методику PIMC. Крім того, Мороні *та ін.* [93] подають результат 7.2% з DMC симуляцій.

Приблизно у цей самий час експериментально було отримано значення $\simeq 6\%$ (Азуа *та ін.* [29]).

Недавні високоточні вимірювання динамічного структурного фактора дозволили Ґлайду *та ін.* [30] отримати інформацію як про значення конденсатної фракції при нульовій температурі, так і про її температурну залежність. Їхнє значення становить $7.25 \pm 0.75\%$ при 0 K.

Напівфеноменолоґічний спосіб визначення конденсатної фракції був запропонований Рінатом і Тараґіном [94]. Автори отримали низку значень при різних температурах і екстраполювали їх до $T = 0$ K як $9.0 \pm 0.3\%$.

Існують також праці, у яких розглядається вплив парних кореляцій (на противагу одночастинковому Бозе-конденсатові) як основа для пояснення енерґетичного спектру та надплинности рідкого гелію-4 [95, 96]. Зокрема, у [96] за допомогою підбору декількох параметрів отримано енерґетичну криву, яка добре узгоджується з експериментом на значній ділянці довжин хвильового вектора.

Показником інтересу до проблеми квантових рідин може бути також той факт, що протягом останнього десятиліття відповідні дослідження двічі відзначалися Нобелівською премією з фізики. Спочатку, 1996 р., Дейвід Лі (David M. Lee), Даґлас Ошерофф (Douglas D. Osheroff) та Роберт Річардсон (Robert C. Richardson) — за відкриття надплинности в гелії-3 [97, 98].

В останні декілька років також інтенсивно розробляються методи досліджень систем небагатьох бозонів, що пов'язано зі вже згаданим експериментальним відкриттям у 1995–96 рр. явища Бозе-конденсації в розріджених газах атомів лужних металів [2, 3]. За ці праці 2001 року було присуджено Нобелівську премію з фізики Еріку Корнелу (Eric A. Cornell), Вольфґанґу Кетерле (Wolfgang Ketterle) та Карлу Віману (Carl E. Wieman) (офіційне формулювання: "за отримання Бозе–Айнштайнівської конденсації в розріджених газах лужних атомів і за початкове фундаментальне вивчення властивостей конденсатів" [99]).

Як бачимо, незважаючи на майже вісімдесятилітню історію від появи першої праці [13], інтерес до квантових систем бозонів не послаблюється і сьогодні. Саме дослідженню термодинимічних і структурних властивостей однієї з них, рідкого гелію-4, і присвячена дисертаційна робота.

РОЗДІЛ 2

Відновлення потенціалів міжатомних взаємодій за експериментальними даними

2.1. Вступ

При побудові з перших принципів теорії систем багатьох частинок центральною величиною в ролі вихідної інформації виступає потенціальна енерґія, яка задає характер міжчастинкової взаємодії. Звичайно приймається, що вона має парний характер і зображується сумою усіх попарних взаємодій між частинками. Коли ми говоримо про парний потенціал, то фактично маємо на увазі певну ефективну двочастинкову взаємодію, яка веде до узгодження результатів теорії зі спостережуваними за умов повного нехтування багаточастинковими взаємодіями, внесок яких у термодинамічні функції системи, як відомо, в деяких випадках є достатньо значним [100, 101].

Існує декілька підходів до визначення потенціальної енерґії. По-перше — це прямий квантово-механічний розрахунок. По-друге, можна приймати певний модельний вигляд потенціалу, параметри якого визначають за узгодженням розрахованих і експериментально спостережуваних значень фізичних величин [57–60]. Ще одна можливість виникає при розв'язанні оберненої задачі в теорії розсіяння частинок, коли потенціал визначають за перерізом розсіяння. Якщо розсіяння відбувається на конденсованих тілах, то потенціал можна відтворити за експериментальними значеннями так званого структурного фактора.

У класичному підході [100, 101], маючи парний структурний фактор S_q системи N частинок, легко отримати радіальну функцію розподілу

$$F_2(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} (S_q - 1) \exp(-i\mathbf{qr}).$$

Далі з рівнянь Боголюбова–Борна–Ґріна–Кірквуда–Івона в певних наближеннях за відомою функцією $F_2(\mathbf{r})$ можна отримати парний міжчастинковий потенціал $\Phi(\mathbf{r})$. Такі дослідження були проведені для простих рідин типу арґону та рідких металів [101]. У випадку простих рідин отримано потенціал на зразок потенціалу Ленарда-Джонса, а для рідких металів — так звані далекодіючі осцилюючі потенціали.

Цікавою є задача про "відтворення" парного потенціалу міжчастинкової взаємодії $\Phi(\mathbf{r})$ в ^{4}He з експериментальних значень парного структурного фактора S_q. Зрозуміло, що класична схема є непридатною при низьких температурах, оскільки у цій області рідкий ^{4}He слід описувати в термінах квантової механіки.

2.2. Вихідні рівняння

Гамільтоніан системи N частинок з урахуванням багаточастинкових взаємодій:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} + \sum_{1 \leq j < l \leq N} \Phi(|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_l|) + \sum_{1 \leq j < l < m \leq N} \Phi_3(\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m) + \dots, \quad (2.1)$$

де $\Phi(R)$ і $\Phi_3(\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m)$ — парний і тричастинковий потенціали відповідно, а крапки відповідають доданкам з чотиричастинковими й вищими взаємодіями в потенціальної енерґії. У зображенні колективних змінних матимемо:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\varepsilon_k\left(\rho_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}} - \partial_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}}\right) + \frac{N}{2V}\tilde{\nu}_k\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right\} + \\
&+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{kq}\,\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\partial_{-\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{q}} + \right. \\
&+ \left.\frac{N^2}{6V^2}\nu_3(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{k},-\mathbf{q})\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{q}} + \chi(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q})\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right\},
\end{aligned}
\tag{2.2}
$$

де ми ввели для скорочення записів позначення для оператора похідної за $\rho_{\mathbf{k}}$:

$$
\partial_{\mathbf{k}} = \partial/\partial\rho_{-\mathbf{k}}. \tag{2.3}
$$

Легко зауважити, що в кожному множнику сума векторних індексів біля операторів $\rho_{\mathbf{k}}$ і $\partial_{\mathbf{k}}$ дорівнює нулеві, це є наслідком закону збереження імпульсу.

Величина $\tilde{\nu}_k$ пов'язана з фур'є-зображеннями парного і тричастинкового потенціалів таким чином:

$$
\tilde{\nu}_k = \nu_k + \frac{N}{V}\nu_3(\mathbf{k},-\mathbf{k},0) - \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_3(\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{k}-\mathbf{q}). \tag{2.4}
$$

Доданок під двома сумами за хвильовим вектором, який містить три оператори $\rho_{\mathbf{k}}$, відповідає за тричастинкові взаємодії. Множник $\nu_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)$ — це фур'є-зображення тричастинкового потенціалу міжатомних взаємодій Φ_3:

$$
\nu_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3) = \iint\limits_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3=0} d\mathbf{R}_1\, d\mathbf{R}_2\ \Phi_3(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3)\, e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_3)+i\mathbf{k}_2(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_3)} \tag{2.5}
$$

Доданок, пропорційний до добутку чотирьох операторів $\rho_{\mathbf{k}}$, відповідає чотиричастинковим взаємодіям. Множник $\chi(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q})$ пов'язаний з фур'є-зображенням чотиричастинкового потенціалу. Надалі цим доданком ми нехтуватимемо: $\chi(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q}) \equiv 0$.

Лоґарифм хвильової функції основного стану багатобозонної системи можна записати у вигляді ряду за "степенями" колективних змінних [87, 102]. Для самої функції матимемо:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) &= C\exp\left\{\sum_{n\geq 2}\frac{N^{1-n/2}}{n!}\sum_{\mathbf{k}_1\neq 0}\ldots\right.\\ &\left.\ldots\sum_{\mathbf{k}_n\neq 0}\delta(\mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_n)a_n(\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_n)\rho_{\mathbf{k}_1}\ldots\rho_{\mathbf{k}_n}\right\}. \end{aligned} \tag{2.6}$$

З рівняння Шредінґера $\hat{H}\Psi = E_0\Psi$, позбиравши доданки при відповідних "степенях" змінних $\rho_{\mathbf{k}}$, у наближенні "двох сум за хвильовим вектором" отримаємо таку систему рівнянь:

$$\begin{aligned}\frac{N}{2V}\tilde{\nu}_k &+ \varepsilon_k\, a_2(\mathbf{k}) - \varepsilon_k\, a_2^2(\mathbf{k}) - \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\varepsilon_q\, a_4(\mathbf{q},-\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k}) + \\ &+ \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{q}(-\mathbf{k}-\mathbf{q})\, a_3(\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{k}-\mathbf{q}) = 0,\end{aligned} \tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}&\frac{N^2}{V^2}\nu_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3) + \\ &+ \frac{\hbar^2}{m}[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\, a_2(\mathbf{k}_1)a_2(\mathbf{k}_2) + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_3\, a_2(\mathbf{k}_1)a_2(\mathbf{k}_3) + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\, a_2(\mathbf{k}_2)a_2(\mathbf{k}_3)] + \\ &+ a_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)\Big\{\varepsilon_{k_1}[1-2a_2(\mathbf{k}_1)] + \varepsilon_{k_2}[1-2a_2(\mathbf{k}_2)] + \varepsilon_{k_3}[1-2a_2(\mathbf{k}_3)]\Big\} = 0,\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$-a_4(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q})\{\varepsilon_k\,[1-2a_2(\mathbf{k})]+\varepsilon_q\,[1-2a_2(\mathbf{q})]\}+$$

$$+\,[\varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}a_3^2(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{k},-\mathbf{q})+\varepsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}a_3^2(\mathbf{k}-\mathbf{q},-\mathbf{k},\mathbf{q})]+$$

$$+\,\frac{\hbar^2}{m}[\mathbf{k}(\mathbf{k}+\mathbf{q})a_2(\mathbf{k})+\mathbf{q}(\mathbf{q}+\mathbf{k})a_2(\mathbf{q})]a_3(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{k},-\mathbf{q})+$$

$$+\,[\mathbf{k}(\mathbf{k}-\mathbf{q})a_2(\mathbf{k})+\mathbf{q}(\mathbf{q}-\mathbf{k})a_2(\mathbf{q})]a_3(\mathbf{k}-\mathbf{q},-\mathbf{k},\mathbf{q})=$$

$$=4\chi(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q})\equiv 0. \tag{2.9}$$

Енерґія основного стану E_0 записується так:

$$\begin{aligned} E_0 \;=\; & \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0-\frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\nu_k-\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\varepsilon_k a_2(\mathbf{k})+ \qquad (2.10)\\ + \; & \frac{N(N-1)(N-2)}{6V^2}\nu_3(0,0,0)+\frac{N}{3V^2}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_3(\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{k}-\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Ми маємо на меті відновити потенціали міжатомних взаємодій (парний $\Phi(\mathbf{r})$ і тричастинковий $\Phi_3(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3)$) з S_q, виміряного в експериментах з розсіяння теплових нейтронів у надплинному ^{4}He [76], в рамках квантовомеханічного опису. Для цього потрібно мати зв'язок між фур'є-образом парного потенціалу взаємодії ν_q та S_q, який є значно складнішим, ніж у класичному випадку. Розв'язок такої задачі в наближенні двох сум за хвильовим вектором випливає з результатів робіт [45,87,102], у яких розглядалася багатобозонна неідеальна система при $T=0$ K (тобто з погляду квантової механіки в основному стані). У [102] було отримано ланцюг рівнянь для коефіцієнтних функцій $a_2,a_3,a_4,\ldots$ у розкладі (2.6). Якщо у рівняннях (2.7)–(2.10) знехтувати багаточастинковими потенціалами, то відповідні вирази будуть збігатися з наведеними в [87, 102].

У роботах [87, 102] було отримано вирази, які ми тут не виписуємо, для s-частинкових матриць густини $F_s(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_s)$ через функції a_2, a_3, a_4. Таким чином, з урахованням простого зв'язку парної функції розподілу з парним структурним фактором системи, фактично йдеться про співвідношення у наближенні "двох сум за хвильовим вектором" між a_2, a_3, a_4 і S_q при абсолютному нулі температури:

$$a_2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{S_q}\right) - \frac{1}{2}\Sigma(\mathbf{q}), \tag{2.11}$$

де $\Sigma(\mathbf{q})$ є складним функціоналом a_2:

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{q}) \;=\; & \frac{2}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{q}=0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \frac{1}{[1 - 2a_2(\mathbf{k}_1)]\,[1 - 2a_2(\mathbf{k}_2)]} \times \\ & \times \{a_2(\mathbf{k}_1) a_2(\mathbf{k}_2) + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q})\,[1 + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q})]\} + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{a_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{q})}{[1 - 2a_2(\mathbf{k})]}. \end{aligned} \tag{2.12}$$

У співвідношенні (2.11) $\Sigma(\mathbf{q})$ достатньо розраховувати на функціях $a_2(\mathbf{q})$ у наближенні хаотичних фаз:

$$a_2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{S_q}\right), \tag{2.13}$$

Таке саме означення функції $a_2(\mathbf{k})$ стосується також виразів (2.8), (2.9), оскільки при обчисленні енерґії функції $\nu_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ і $\chi(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{q})$ знаходяться під двома сумами за хвильовим вектором (2.2)

Тепер з (2.4), (2.7), (2.8) у прийнятому наближенні визначаємо фур'є-зображення парного потенціалу ν_q та тричастинкового $\nu_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$, причому для a_3, a_4 досить обмежитись RPA-наближенням, тобто підставити у праві сторони (2.8, 2.9) a_2, визначене з (2.13). Перехід до $\Phi(\mathbf{r})$ проводиться звичайним способом

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}} \nu_q, \tag{2.14}$$

а тричастинковий потенціал отримуємо з (2.5).

2.3. Парний потенціал без врахування тричастинкових взаємодій

Для простоти покладемо тричастинковий потенціал рівним нулеві: $\nu_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \equiv 0$. Тоді система рівнянь (2.7)–(2.12) замкнеться через нульове наближення для $a_2(\mathbf{k})$ (2.13).

Для чисельних розрахунків ми використовували експериментальні значення структурного фактора надплинного ^{4}He із роботи [76], які відповідають густині $\rho = 0.02185$ Å^{-3} і температурі $T = 1$ K. Оскільки у вихідні вирази входить S_q при $T = 0$ K, ми "продовжили" ці значення в $T = 0$ K на підставі співвідношення [103]

$$S_q = S_q(T) \operatorname{th} \frac{E_q}{2T},$$

$$E_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2mS_q},$$

$$S_q = S_q\Big|_{T=0},$$

яке розглядали як рівняння на $S_q|_{T=0}$ при заданому $S_q(T)$. Графік згладженого структурного фактора з [76], а також розрахованого вказаним способом $S_q|_{T=0}$, подано на рис. 2.1. Таблиця значень $S_q|_{T=0}$ міститься у Додатку А (табл. А.1).

Із використанням отриманого в такий спосіб $S_q|_{T=0}$ нами було про-

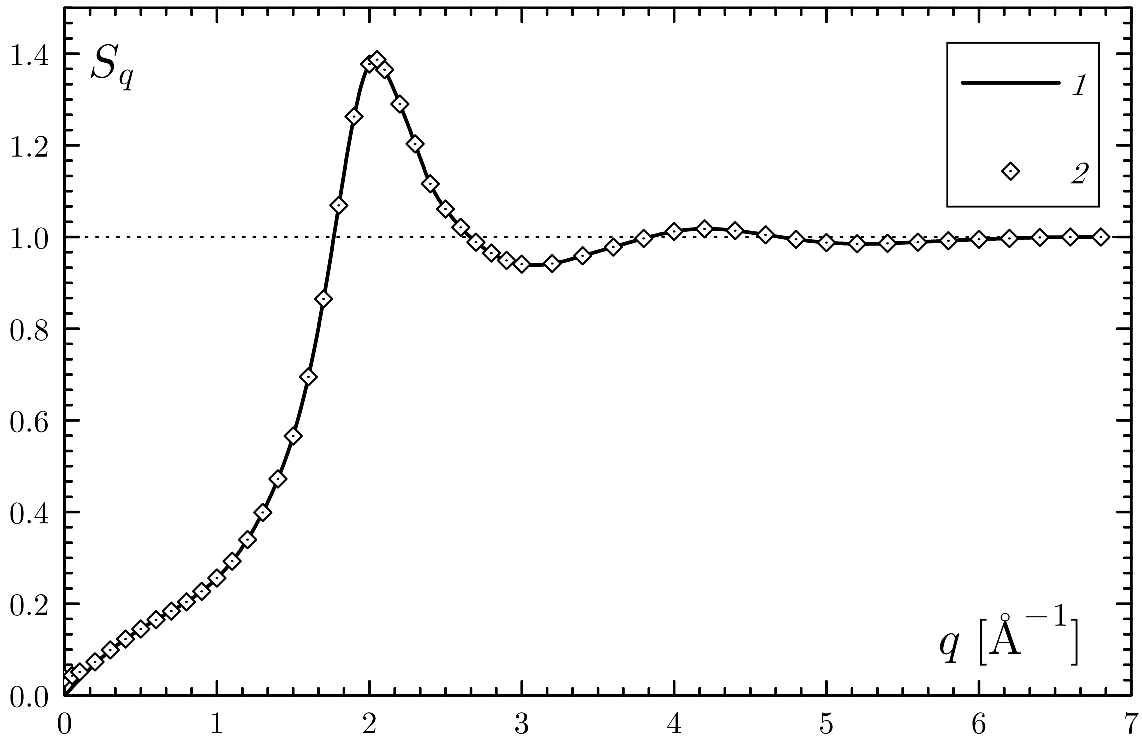


Рис. 2.1: Структурний фактор ^{4}He. *1* — результати розрахунку для основного стану, $T = 0$ K; *2* — експериментальні дані [76].

ведено числові розрахунки ν_q та $\Phi(\mathbf{r})$ у наближенні хаотичних фаз та наступному, наближенні "двох сум за хвильовим вектором". Наближення хаотичних фаз відповідає тому, що в (2.7) потрібно відкинути всі доданки, що містять суми за хвильовим вектором і взяти a_2 з (2.13), тобто

$$\nu_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\frac{1}{2\rho}\left(\frac{1}{S_q^2} - 1\right). \tag{2.15}$$

Результати обчислень наведено в табл. A.2–A.3 та на рис. 2.2–2.4.

Цікаво визначити з отриманого ν_0 швидкість першого звуку c в надплинному ^{4}He:

$$c = \sqrt{\frac{\rho\nu_0}{m}}. \tag{2.16}$$

Отримаємо результат $c = 291$ м/с, експериментальне значення $c_{\mathrm{exp}} = 237$ м/с.

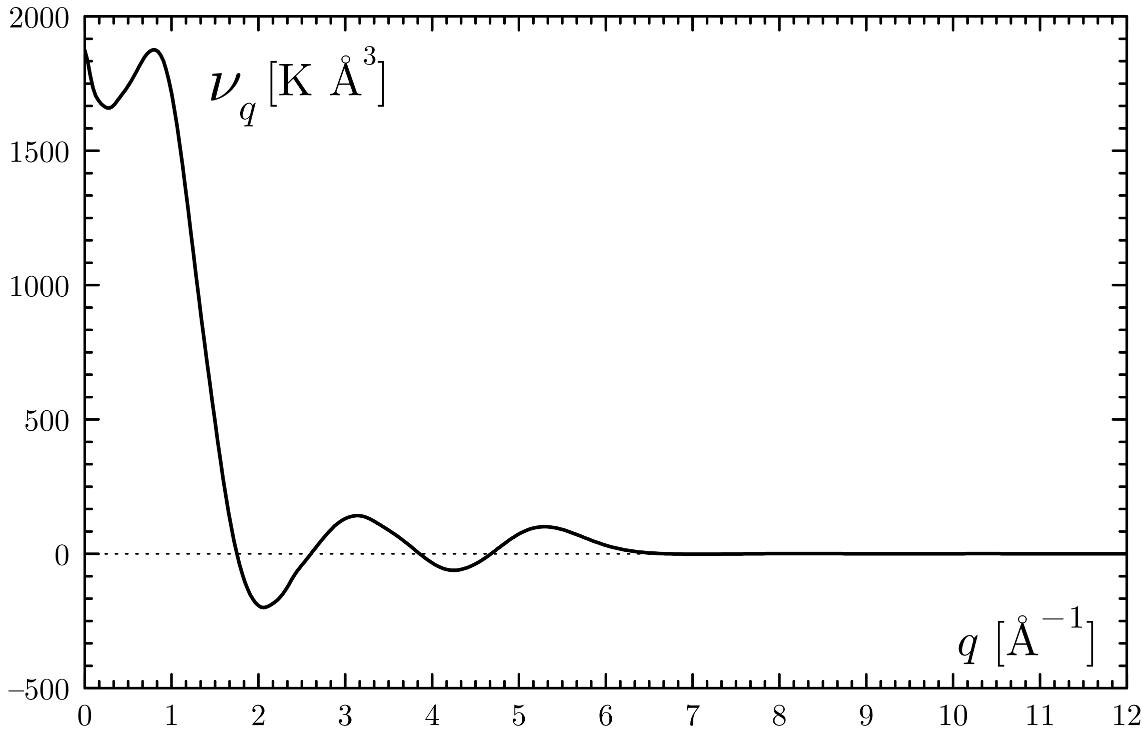


Рис. 2.2: Фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в ^{4}He

Таблиця 2.1: Порівняння деяких параметрів потенціальної кривої

	$r_{\min}$, Å	$\Phi(r_{\min})$, K	$\Phi(0)$, K
(0-ве) RPA-наближення	3.31	–17.08	$\simeq 242$
(1-ше) постRPA-наближення	3.34	–10.58	$\simeq 230$
Модельний потенціал Азіза [60]	2.99	–11.04	$\simeq 2 \cdot 10^6$

На рис. 2.3 для порівняння зображений модельний потенціал Азіза [60]. Як видно з рис. 2.4 та табл. 2.1, наближення двох сум за хвильовим вектором суттєво покращує значення для глибини потенціальної ями, майже не змінюючи при цьому положення мінімуму потенціалу (рівноважної віддалі між атомами) порівняно з наближенням хаотичних фаз, тобто вплив три- і чотиричастинкових кореляцій є значним.

Отримані в цьому розділі результати буде використано для подальшої побудови теорії з перших принципів.

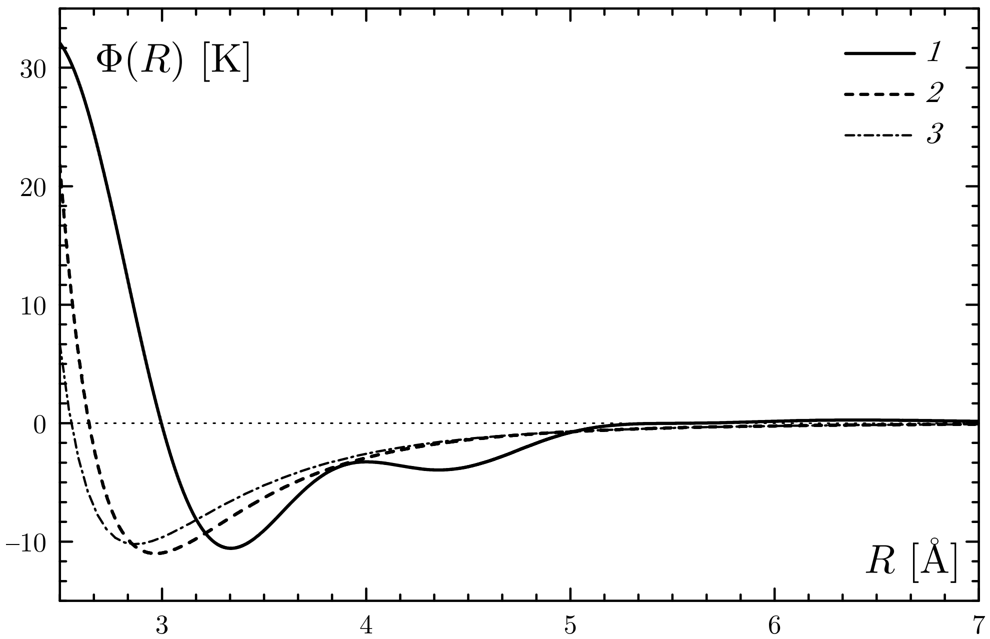


Рис. 2.3: Потенціал міжатомної взаємодії в ^{4}He — порівняння з модельними потенціалами. *1* — результати розрахунку в постRPA; *2* — модельний потенціал Азіза [60]; *3* — модельний потенціал Ленарда-Джонса.

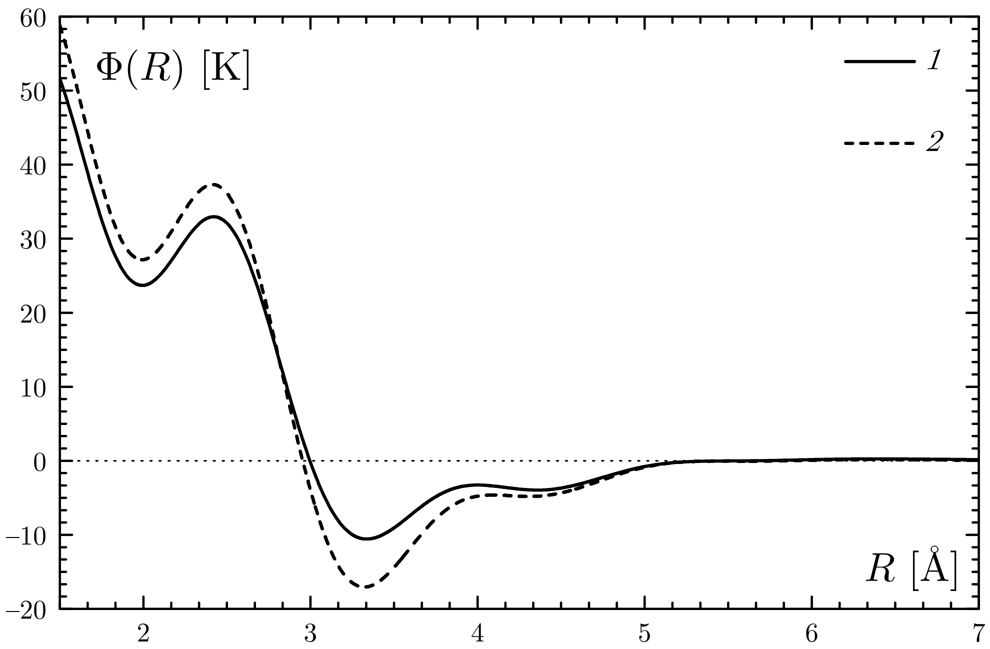


Рис. 2.4: Потенціал міжатомної взаємодії в ^{4}He — порівняння ітерацій. *1* — наближення “дві суми за хвильовим вектором”; *2* — наближення хаотичних фаз.

2.4. Явне врахування короткосяжних взаємодій

У цьому підрозділі насамперед розглянемо короткосяжний потенціал як взаємодію твердих сфер:

$$\Phi^0(R) = \begin{cases} \infty, & R \le a \\ 0, & R > a \end{cases}, \tag{2.17}$$

де a — діаметр сфери.

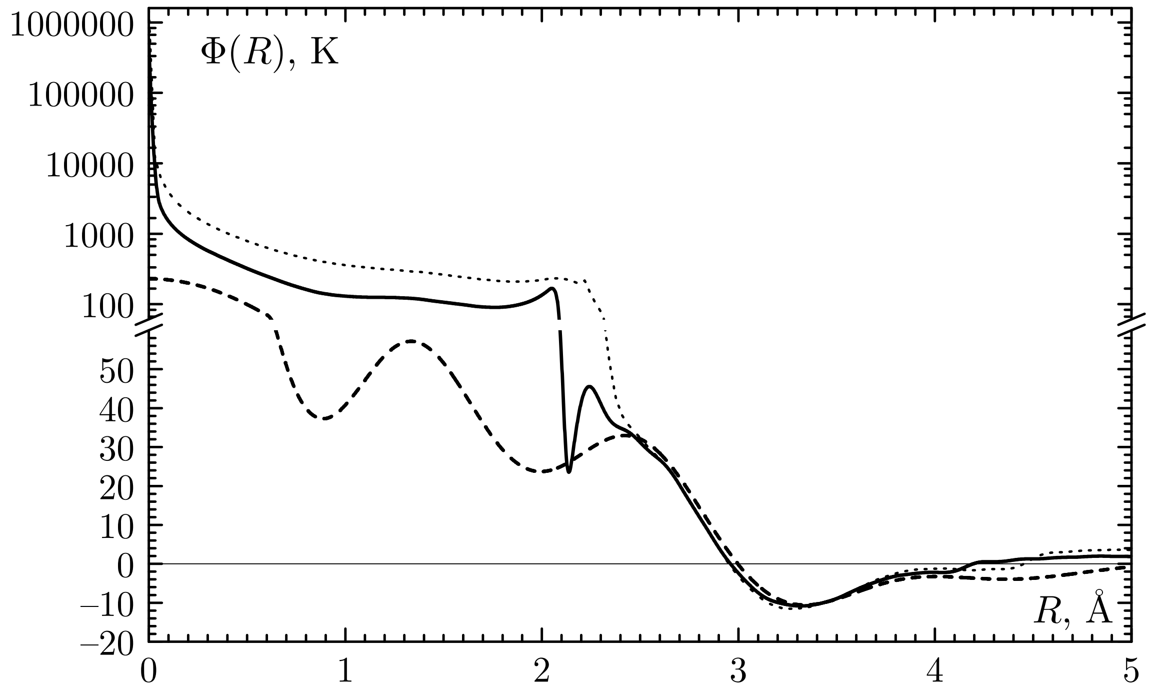
Такому потенціалу віповідає структурний фактор $S_q^0 = S_q^{\mathrm{HS}}$, де індекс "HS" означає "тверді сфери" (Hard Spheres). Ми розраховували його з парної функції розподілу, у якій знехтували доданками, пропорційними до густини у степенях, вищих за 2. Це наближення називатимемо тут ρ^2-наближенням або HS–ρ^2.

Відомо [104], що наближення Перкуса–Євіка (PY) у випадку короткосяжних взаємодій дає досить добрий опис. Воно також має ще одну перевагу: існує точний розв'язок рівняння Орнштайна–Церніке для системи твердих сфер у цьому наближенні [104]. Отриманий таким способом структурний фактор позначатимемо S_q^{PY}.

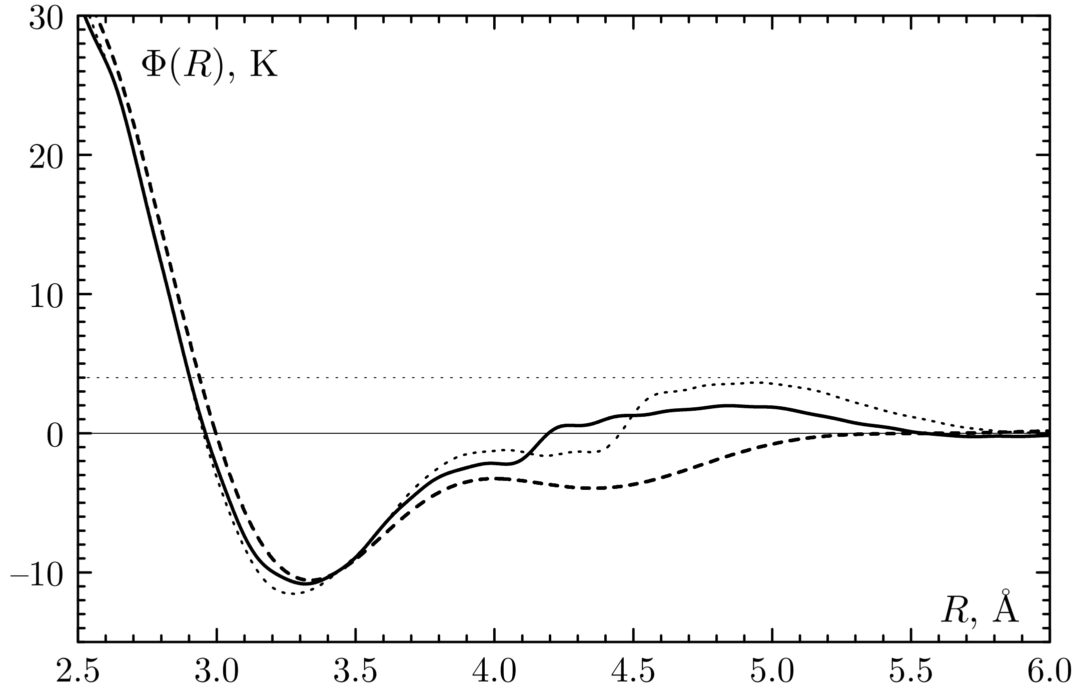
Величини $(S_q^{\mathrm{HS}} - 1)$ і $(S_q^{\mathrm{PY}} - 1)$ виявляють слабке загасання $\propto 1/q^2$ при великих значеннях хвильового вектора. Це спричиняє труднощі в обчислювальній процедурі, оскільки потрібно суттєво розширювати межі інтеґрування при фур'є-перетворенні величини ν_q. Точніше кажучи, загасання ν_q виявляється також слабким, і ми використали екстраполяцію при великих q, щоб отримати правильну поведінку потенціалу $\Phi(R)$ на малих відстанях.

Ми обчислили фур'є-зображення ν_q та потенціал $\Phi(R)$, використовуючи як HS–ρ^2, так і PY-наближення. Як видно з рис. 2.5, далекосяжна поведінка потенціалу не є задовільною, на відміну від короткосяжної.

З рис. 2.5 видно, що потенціальна крива має додатковий "горб" при 5 Å. Ми спробуємо з'ясувати причини його появи.



а)



б)

Рис. 2.5: Потенціал $\Phi(R)$ з короткосяжною взаємодією у наближенні твердих сфер. Наближення HS-ρ^2 — суцільна лінія і PY — пунктирна лінія — порівнюються з результатами нашої роботи [4] (штрихова лінія).

2.4.1. Пом'якшена взаємодія. Справжня відштовхувальна частина потенціалу повинна бути дещо "пом'якшеною". Це "пом'якшення" легше сформулювати в термінах функції Маєра $f(R)$:

$$f(R) = e^{-\beta\Phi(R)} - 1, \tag{2.18}$$

яка залишається скінченою, тоді як $\Phi(R)$ може бути безмежним, див. (2.17).

Для системи твердих сфер $f(R)$ є такою:

$$f^{\mathrm{HS}}(R) = \theta(R-a) - 1 = \begin{cases} -1, & R \leq a \\ 0, & R > a \end{cases}. \tag{2.19}$$

У цих термінах пом'якшення означає, що прямокутна сходинка функції Маєра для твердих сфер мусить бути трохи "заокругленою". Далі ми розглянемо способи цього "заокруглення".

Припустимо, що потенціал $\Phi^0(R)$ має степеневу залежність від відстані: $\Phi^0(R) \propto 1/R^n$. Тоді оператор кінетичної енерґії в рівнянні Шредінґера дає:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial R^2}\, e^{-(A/R)^n} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2}{R^2}\left(\frac{A}{R}\right)^{2n} e^{-(A/R)^n} + \\ &+ O(1/R^{n+2}). \end{aligned} \tag{2.20}$$

Отже, показник $2n+2$ мусить дорівнювати показнику степеня оберненої відстані в реальному потенціалі. Вважаючи, що це потенціал Ленарда-Джонса, отримаємо $n = 5$.

Іншим способом заокруглення кутів сходинки функції Маєра може бути безпосереднє задання її форми. Наприклад, подібно до попереднього випадку:

$$f(R) = e^{-(A/R)^n} - 1. \qquad (2.21)$$

Значення n потрібно взяти великим (більшим за 5), щоб краще відтворити сходинку, отриману для твердих сфер. Параметр A не залежить від температури, на відміну від показника експоненти у виразі (2.18), який записано для класичних систем. Причина полягає у тому, що ми розглядаємо квантову систему в основному стані, а температурні залежності не вивчаємо.

Перший випадок (відштовхування за Ленардом-Джонсом, $n = 5$) назвемо "м'якими сферами" (SS від *анґл.* "soft spheres"), а другий (безпосередньо задане відштовхування) позначатимемо AHS (від *анґл.* "almost hard spheres" — майже тверді сфери).

Виберемо такі значення величин для AHS у функції (2.21):

$$A = 2.1 \text{ Å}, \qquad n = 12. \qquad (2.22)$$

Тоді функція Маєра стає дуже близькою до сходинки твердих сфер, див. рис. 2.6. Це і є причиною того, що ми називаємо цей потенціал "майже твердими сферами".

Ми обчислили структурний фактор пом'якшеної відштовхувальної частини потенціалу використовуючи PY-наближення. Оскільки велика точність нам не потрібна, у рівнянні Орнштайна–Церніке було взято лише першу ітерацію. Результати показують, що крива потенціалу суттєво не відрізняється від отриманої в попередньому підрозділі, див. також [4]. Для ілюстрації сказаного наводимо рис. 2.7.

Попри значну різницю в показниках степеня $1/R$ (5 і 12), результати не вказують на якусь суттєво різну поведінку цих моделей при малих R: вона й далі подібна до отриманої раніше [4]. Із цього можна зробити висновок про те, що причина іншого вигляду кривої потенціалу в моделі твердих сфер полягає у фундаментальній різниці між цими двома типами відштовхування. Мається на увазі аналітичність чи неаналітичність функції Маєра, що пов'язано з типом загасання структурного фактора і фур'є-зображення потенціалу при великих q.

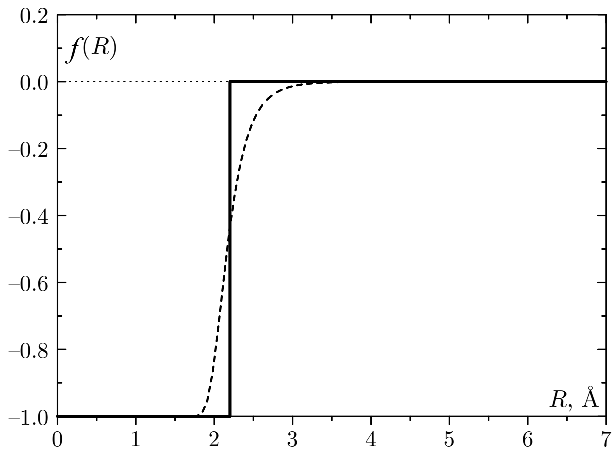


Рис. 2.6: Функція Маєра для твердих сфер (суцільна лінія) і майже твердих сфер (штрихова лінія).

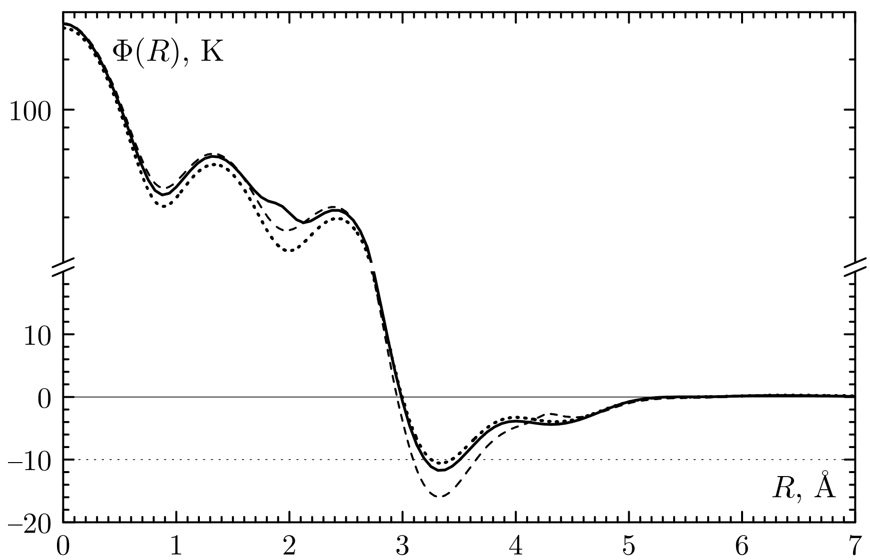


Рис. 2.7: Потенціал $\Phi(R)$ з короткосяжною взаємодією. SS — штрихова лінія; AHS — суцільна лінія, порівнюємо ці дані з результатами нашої роботи [4] (пунктирна лінія).

Розглянемо ще ділянку потенціальної ями. Можна побачити, що підвищення степеня $1/R$ від 5 до 12 зсуває глибину ями ближче до значення, отриманого з наближення твердих сфер. З іншого боку, подібне значення було отримано в [4], воно не відрізняється суттєво від результатів комп'ютерних симуляцій [61, 105] і розрахунків з параметрами підгонки [57–60]. Порівняння цих даних наведено в табл. 2.2.

Таблиця 2.2: Параметри потенціальної кривої для різних типів потенціалів.

Потенціал	$\Phi(0)$, K	Потенціальна яма	Додатковий горб
Праця [4]	$\simeq 240$	-10.59 K при 3.34 Å	0.26 K при 6.41 Å
HS – ρ^2	∞	-10.86 K при 3.32 Å	1.99 K при 4.84 Å
HS – PY	∞	-11.55 K при 3.27 Å	3.64 K при 4.94 Å
AHS	$\simeq 240$	-11.76 K при 3.34 Å	0.23 K при 6.31 Å
SS	$\simeq 230$	-15.95 K при 3.32 Å	0.27 K при 6.44 Å
Комбінований	∞	-11.72 K при 3.33 Å	0.23 K при 6.31 Å
Праця [61]	—	-11.01 K при 3.0 Å	немає
Праця [60]	$2 \cdot 10^6$	-11.04 K при 2.99 Å	немає

Так званий додатковий горб на кривій потенціалу отримано при міжатомних відстанях $\simeq 5 \div 7$ Å. Ми розглядаємо його як наслідок розв'язування задачі про взаємодію між атомами гелію через квантові рівняння. Однак занадто великі значення максимуму горба у випадку короткосяжної взаємодії у моделі твердих сфер потрібно трактувати як наслідок неаналітичности функції Маєра. Це твердження має підґрунтям те, що для моделі м'яких і майже твердих сфер, коли функція Маєра є гладкою, відповідні значення сумірні з отриманими в [4].

Область малих значень R є, мабуть, найскладнішою. Виглядає на те, що для отримання правильної поведінки тут потрібно прийняти наближення твердих сфер. Ми спробували об'єднати переваги короткосяжної частини потенціалу у PY-наближенні з перевагами опису далекосяжних взаємодій у моделі майже твердих сфер. У результаті було запропоновано просто об'єднати ("склеїти") ці два набори даних в точці 3.25 Å. Ліва частина ($R < 3.25$ Å) відповідає PY, права — майже твердим сферам.

Розраховані значення потенціалу на малих відстанях, а саме при $R < 2.5$ Å, не варто розглядати як кількісно правильні, а лише як якісні. Після фур'є-перетворення даних для потенціалу $\Phi(R)$, розрахованих у різних наближеннях, ми отримаємо величини ν_q. У випадку твердих сфер ν_q повільно загасає при великих q і дає внесок у потенціал $\propto 1/R$ на малих віддалях. Якщо ж відштовхування є пом'якшеним, то потенціал залишається скінченим при $R = 0$ Å.

Можна зауважити, що існує стала додатна різниця між точкою мінімуму (рівноважною міжатомною віддаллю) потенціалів, які обговорюємо тут, і точкою мінімуму потенціалів, розрахованих Азізом *та ін.* [57–60]. Ми вважаємо це наслідком ефективної природи наших потенціалів. Для пояснення цього твердження проілюструємо його таким прикладом. Нехай маємо систему твердих сфер діаметром a. Рівноважна відстань між двома атомами у системі двох атомів є, очевидно, a. Проте, якщо розглянути систему трьох частинок, то середня відстань дещо зросте (приблизно на 5%). Отже, різницю близько 10 відсотків у нашому випадку можна принаймні частково пояснити як наслідок такого геометричного ефекту, своєрідного "розштовхування".

2.4.2. Енерґія і швидкість звуку. Потенціальну енерґію Φ системи при 0 K можна обчислити за співвідношенням [106]:

$$\Phi = N\frac{\rho\nu_0}{2} + \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{0}} \frac{\rho\nu_q}{2}\left(\frac{1}{\alpha_q} - 1\right), \tag{2.23}$$

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{2\rho\nu_q}{\varepsilon_q}}, \qquad \varepsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}. \tag{2.24}$$

(Спосіб отримання цих виразів з дещо інших міркувань буде наведено в наступному розділі).

Повна енерґія E тоді записується так:

$$E = \Phi + \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{0}} \frac{\varepsilon_q}{4} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q}. \tag{2.25}$$

У цих виразах величину $\rho\nu_0$ потрібно замінити на mc^2, де c — швидкість звуку в ^{4}He. Значення $mc^2 = \rho\nu_0$ відповідає наближенню хаотичних фаз, а ми хочемо мати наступне, постRPA-наближення. Відповідно скореґоване співвідношення має вигляд [107]:

$$mc^2 = \rho\nu_0 - \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{0}} \varepsilon_q \frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q}. \tag{2.26}$$

Результати обчислень для енерґії і швидкости звуку подаємо у табл. 2.3. Значення c зліва відповідають RPA ($mc^2 = \rho\nu_0$), тоді як значення справа відображають поправку [45].

Бачимо, що модель твердих сфер для короткосяжних взаємодій дає неправильні значення енерґії та швидкости звуку. На жаль, не вдалося знайти універсальний потенціал, який би давав для повної енерґії та потенціальної енерґії однакову точність. Найкращим для опису цих двох величин виявляється комбінований потенціал, проте спосіб його отримання виглядає дуже штучним.

Результат для потенціальної енерґії найкращий у випадку наближення майже твердих сфер для короткосяжного відштовхування. З іншого боку, отриманий раніше потенціал [4] залишається найкращим з розглянутих тут стосовно результатів для повної енерґії та швидкости звуку.

Таблиця 2.3: Енерґія та швидкість звуку для різних потенціалів.

Потенціал	Φ/N, K	E/N, K	c, м/с
[4]	-15.5	-7.8	292 ; 238
HS-ρ^2 [a])	$+18.1$	$+38.8$	407 ; 524
AHS	-21.6	-12.0	297 ; 240
SS	-29.1	-18.6	254 ; 182
Комбінований	-16.7	-8.0	324 ; 262
[64] [b])	-21.7	-7.1	241
Експеримент		-7.17 [c])	240.3 [d])

Примітки:

[a]) Ми не наводимо даних для потенціалу, розрахованого з використанням S^{PY}, оскільки у цьому випадку не вдається отримати "доброго" α_q: значення виразу $1 + 2\rho\nu_q/\varepsilon_q$ є від'ємним для деяких q.

[b]) Обчислення з використанням потенціалу [57].

[c]) [108].

[d]) Це значення відповідає швидкості звуку при тиску насиченої пари для $T = 0.1$ K [109]. У [110] подано 237.8 м/с при $T = 0.8$ K. Ці значення не є безпосередньо експериментальними, але їх можна розглядати як деякі усереднені експериментальні дані, оскільки вони розраховані за добре проаналізованими рівняннями стану.

Таким чином, для подальших обчислень використовуватимемо такі потенціали: отриманий раніше в підрозділі 2.3 (ці розрахунки наведено у праці [4]), потенціал з короткосяжним відштовхуванням у моделі майже твердих сфер. Застосування комбінованого потенціалу через згадану вище штучність отримання становить радше методичний інтерес.

2.5. Тричастинкові взаємодії

Спочатку розглянемо внесок від тричастинкових взаємодій в енерґію основного стану E_0. Останній доданок в (2.10) дорівнює нулеві з урахуванням симетрії виразів для функцій a_2 та a_3:

$$\frac{N}{3V^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \nu_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{k}-\mathbf{q}) = 0.$$

Дещо складніша ситуація з коефіцієнтом Фур'є $\nu_3(0,0,0)$, оскільки подвійну границю $\lim_{k_1\to 0,\ k_2\to 0} \nu_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, взагалі кажучи, не можна визначити однозначно, вона визначається формою поверхні, яка обмежує об'єм.

На підставі виразів, наведених у праці [102], можна показати, що коефіцієнт a_3 в (2.8) пов'язаний з тричастинковим структурним фактором S_3 системи співвідношенням

$$S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = S_{k_1} S_{k_2} S_{k_3} \left[1 + 2a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)\right], \tag{2.27}$$

де, як звичайно, виконується умова $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$. Цей вираз можна отримати, якщо врахувати, що потрійний структурний фактор визначається як варіаційна похідна за a_3 від конфіґураційного інтеґралу

$Q = \int (d\rho)\, |\Psi|^2$ [102], де інтеґрування проводиться за всіма змінними $\rho_{\mathbf{k}}$:

$$S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \frac{\delta Q}{\delta a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)}, \tag{2.28}$$

У загальному випадку цей вираз задає зв'язок коефіцієнтної функції $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ з потрійним структурним фактором системи $S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$, який треба вимірювати у дослідах з розсіяння, як це робиться для парного структурного фактора. Однак такі експерименти є технічно складними, і відповідних даних не достатньо. Подібні вимірювання описано у працях [111–113], де автори вивчають потрійний диференціальний переріз розсіяння.

Іншим способом розв'язку цієї проблеми є розрахунок тричастинкового структурного фактора через тричастинкову функцію розподілу F_3, фур'є-зображенням якої він є. У цьому випадку можна використати суперпозиційне наближення Кірквуда:

$$F_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) = F_2(\mathbf{R}_1) F_2(\mathbf{R}_2) F_2(\mathbf{R}_3), \tag{2.29}$$

де $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$. В імпульсному просторі для структурного фактора S_3 матимемо такий результат:

$$\begin{aligned} S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \;&=\; S_{k_1} S_{k_2} S_{k_3} - (S_{k_1} S_{k_2} + S_{k_1} S_{k_3} + S_{k_2} S_{k_3}) + \\ &\quad + 2(S_{k_1} + S_{k_2} + S_{k_3}) - 3. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Звідси для коефіцієнта a_3 матимемо:

$$a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \frac{2(S_{k_1} + S_{k_2} + S_{k_3}) - (S_{k_1} S_{k_2} + S_{k_1} S_{k_3} + S_{k_2} S_{k_3}) - 3}{S_{k_1} S_{k_2} S_{k_3}}. \tag{2.31}$$

Факторизацію в координатному просторі можна дещо покращити, застосувавши формулу Абе [114]. У цьому випадку, щоправда, виникає технічна складність, пов'язана з потребою розрахунку шестивимірних інтеґралів при фур'є-перетворенні. Методи для таких обчислень наведено, зокрема, в [115, 116], проте до осцилюючих функцій, якою є тричастинкова функція розподілу, їх потрібно застосовувати із застереженнями, а доступні нам алґоритми швидкого багатовимірного фур'є-перетворення (FFTW [117]) неможливо застосувати через технічні обмеження.

У зв'язку зі сказаним вище ми використовуватимемо факторизацію тричастинкового структурного фактора в імпульсному просторі:

$$S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = S_{k_1} S_{k_2} S_{k_3}. \tag{2.32}$$

Це наближення відоме як конволюційне [118], воно виявляється дещо кращим за суперпозиційне наближення у випадку великої густини [119, 120]. Крім того, для нашої мети його зручніше використовувати, оскільки вираз у суперпозиційному наближенні (2.30) допускає лише числові розрахунки, натомість з (2.32) можна отримати деякі результати аналітично.

Враховуючи вираз (2.27), бачимо, що конволюційному наближенню (2.32) відповідає $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \equiv 0$. Це автоматично дає і для функції $a_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{q}) \equiv 0$, див. вираз (2.9), якщо знехтувати чотиричастинковими взаємодіями. Тому функціонал $\Sigma(\mathbf{q})$ (2.12) значно спрощується, і для $a_2(\mathbf{q})$ маємо:

$$a_2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{S_q}\right) - \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}(S_k - 1)(S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - 1), \tag{2.33}$$

де враховано, що під знаками суми a_2 визначається з (2.13)

Як наслідок, з (2.8) у конволюційному наближенні для фур'є-зображення тричастинкового потенціалу маємо:

$$
\begin{aligned}
\frac{N^2}{V^2}\nu_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3) &= -\frac{\hbar^2}{m}\Big\{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\, a_2(\mathbf{k}_1)a_2(\mathbf{k}_2) + \\
&\quad + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_3\, a_2(\mathbf{k}_1)a_2(\mathbf{k}_3) + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\, a_2(\mathbf{k}_3)a_2(\mathbf{k}_3)\Big\}.
\end{aligned} \tag{2.34}
$$

Перехід до координатного простору дає просту залежність:

$$
\begin{aligned}
\Phi_3(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3) &= \frac{\hbar^2}{4m}\left\{\frac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2}{R_1R_2}C'(R_1)C'(R_2) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_3}{R_1R_3}C'(R_1)C'(R_3) - \frac{\mathbf{R}_2\mathbf{R}_3}{R_2R_3}C'(R_2)C'(R_3)\right\},
\end{aligned} \tag{2.35}
$$

де $C(R)$ — пряма кореляційна функція, а штрихи означають похідну за арґументом. Звернемо увагу на те, що наведений вираз є симетричним щодо перестановок частинок, як і повинно бути. Це якраз забезпечується наявністю одного знака “мінус”: при переставлянні, скажімо, 1-шої та 2-гої частинок вектор $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ також змінює знак.

У випадку, коли короткосяжне відштовхування задане явно, цей вираз переходить у такий:

$$
\begin{aligned}
\Phi_3(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3) &= \frac{\hbar^2}{4m}\left\{\frac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2}{R_1R_2}[C'(R_1) - C_0'(R_1)][C'(R_2) - C_0'(R_2)] + \right. \\
&+ \frac{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_3}{R_1R_3}[C'(R_1) - C_0'(R_1)][C'(R_3) - C_0'(R_3)] - \\
&- \left. \frac{\mathbf{R}_2\mathbf{R}_3}{R_2R_3}[C'(R_2) - C_0'(R_2)][C'(R_3) - C_0'(R_3)]\right\},
\end{aligned} \tag{2.36}
$$

де $C_0(R)$ позначає пряму кореляційну функцію, яка відповідає короткосяжному потенціалу.

Для моделі майже твердих сфер цю величину ми розрахували за рівнянням Орнштайна–Церніке з використанням замикання Перкуса–

Євіка [104], результат наведено на рис. 2.8. Легко бачити, що вже перша ітерація дає добре наближення, що, своєю чергою, виправдовує припущення, висловлене на сторінці 38.

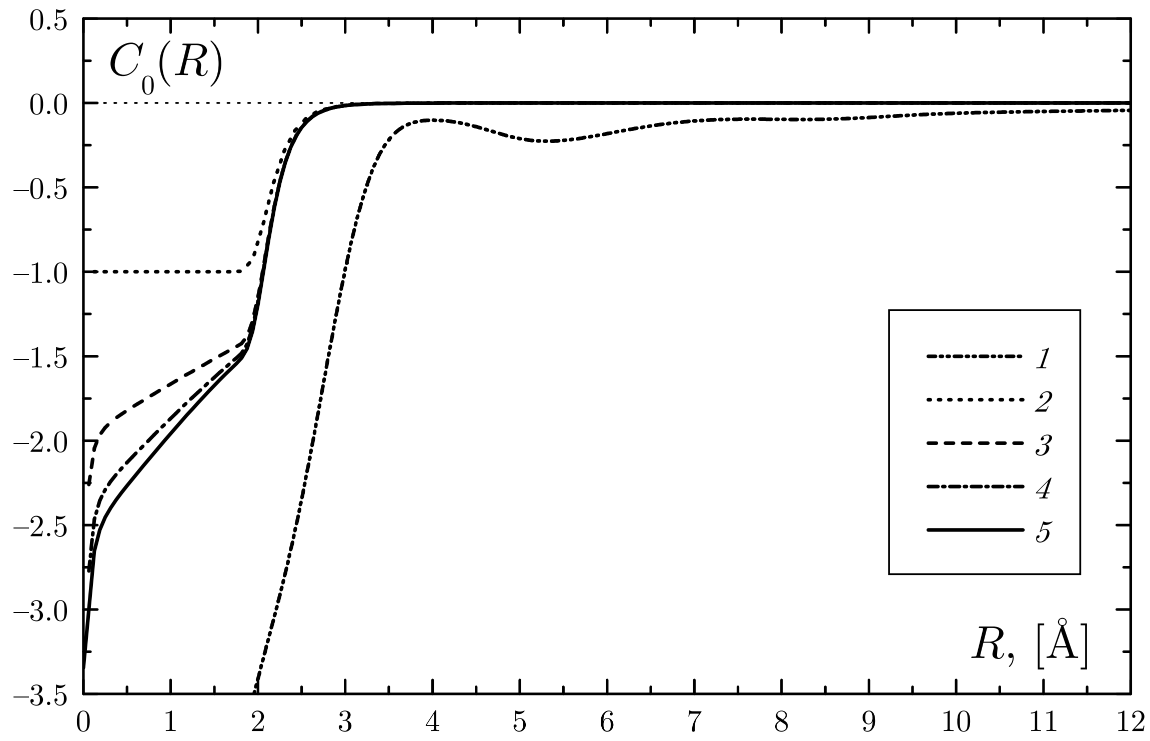


Рис. 2.8: Пряма кореляційна функція $C_0(R)$ для моделі майже твердих сфер. *1* — для порівняння наведено пряму кореляційну функцію рідкого гелію-4, $C(R = 0 \text{ Å}) = -7.1$; *2* — початкова (нульова) ітерація — функція Маєра; *3* — перша ітерація; *4* — друга ітерація; *5* — сьома ітерація.

Враховуючи, що пряма кореляційна функція поводиться на великих віддалях як $1/R^2$ [121], з виразу (2.35) бачимо, що тричастинковий потенціал у цьому випадку буде поводитися як $\sum_{i,j} 1/(R_i^3 R_j^3)$, що за формою нагадує диполь-дипольні взаємодії. Така залежність є наслідком лінійности парного структурного фактора при малих значеннях хвильового вектора. У протилежному випадку ми би отримали результат для прямої кореляційної функції $\propto 1/R^4$ [100] і, як наслідок, $\Phi_3 \propto \sum_{i,j} 1/(R_i^5 R_j^5)$. Така ситуація виникла б у тому випадку, коли в енерґетичному спектрі E_q була би відсутня звукова гілка коливань $E_q \propto q$. Тобто для систем, де виконується критерій надплинности Ландау [31], залежність для Φ_3 є суттєво іншою, ніж для нормальних рідин. Для цього останнього випадку результат нагадує диполь-диполь-дипольні взаємодії: степінь $3 + 3 + 3 = 9$, що досить близько до $10 = 5 + 5$.

Результати обчислень потенціалу $\Phi_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3)$ наведено на рис. 2.9, де зображено проекцію на площину (R_1, R_2) для випадку $\theta = \widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} = \pi/3$ та $\pi/2$. Крім того, на рис. 2.10 показано вертикальні "зрізи" тричастинкового потенціалу при $R_1 = R_2$. Можна побачити, що рівноважними, згідно з нашими результатами, виявляються конфіґурації з $\theta > \pi/3$.

Треба звернути увагу на аномально глибокі мінімуми у випадку лінійного та близьких до нього розташувань атомів ($\widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} \simeq \pi$). Якщо у цьому випадку від'ємні значення тричастинкового потенціалу є, мабуть, завеликими, то все ж якісно його поведінка збігається, напр., з поведінкою потенціалу Аксильрода–Теллера [62], для якого саме такі (майже лінійні) конфіґурації дають внесок зі знаком "мінус".

Розрахуємо тепер парний потенціал, виокремивши ефекти, пов'язані з тричастинковими взаємодіями, див. (2.4):

$$\nu_k = \tilde{\nu}_k - \frac{N}{V}\nu_3(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, 0) + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}), \tag{2.37}$$

звідки парний потенціал отримаємо за допомогою фур'є-перетворення (2.14).

Виявляється, що першим помітним ефектом є зсув мінімуму потенціалу "на місце", до значення 3.0 Å (див. рис. 2.11). При цьому, щоправда, глибина потенціалу є завеликою, навіть порівняно з результатами постRPA. Сподіваємося, що виходом з цієї проблеми могло би стати врахування чотиричастинкових взаємодій, якими ми знехтували.

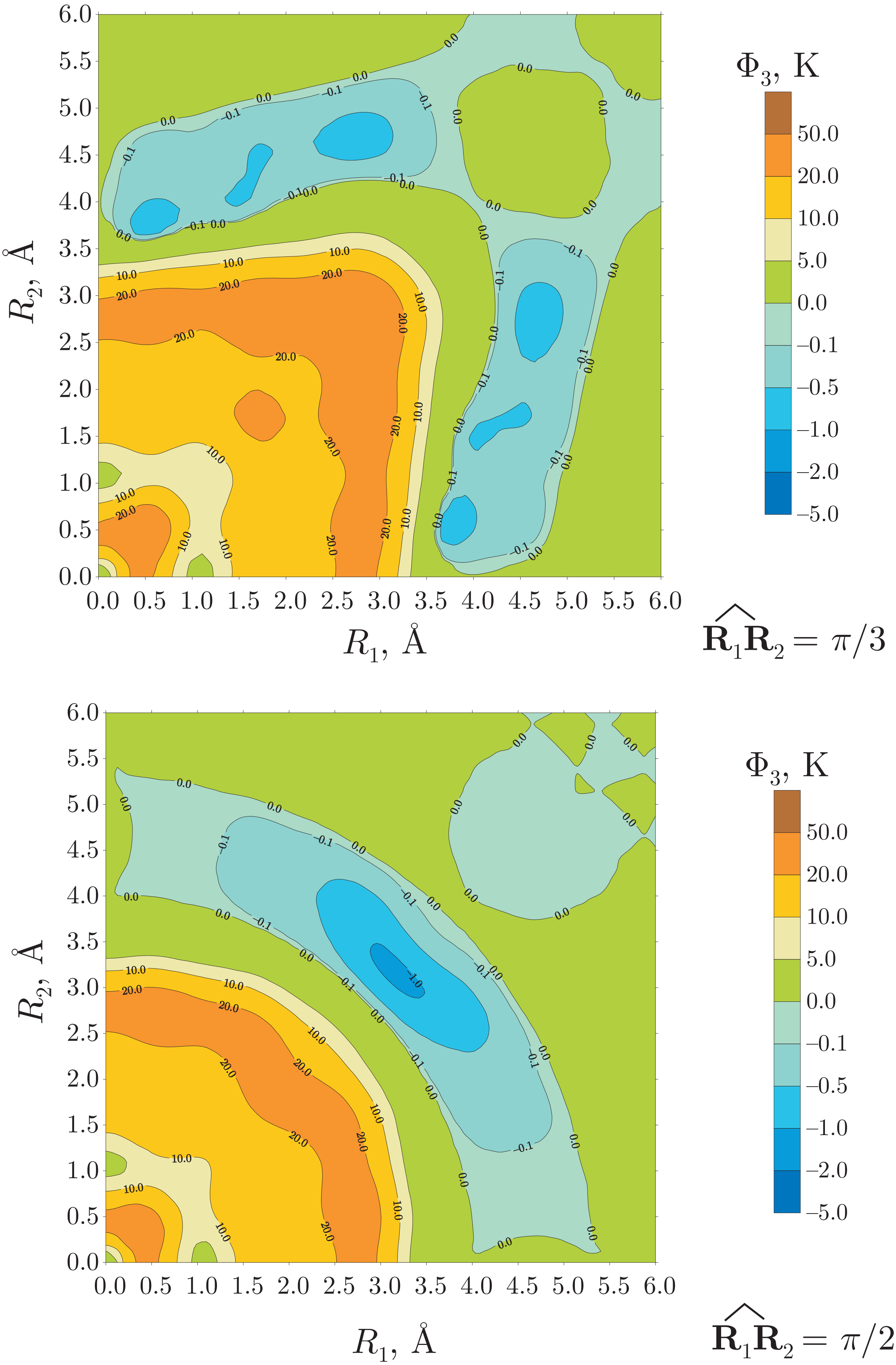
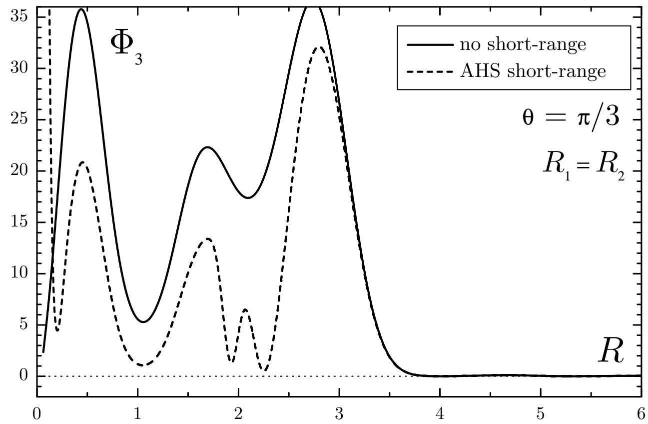
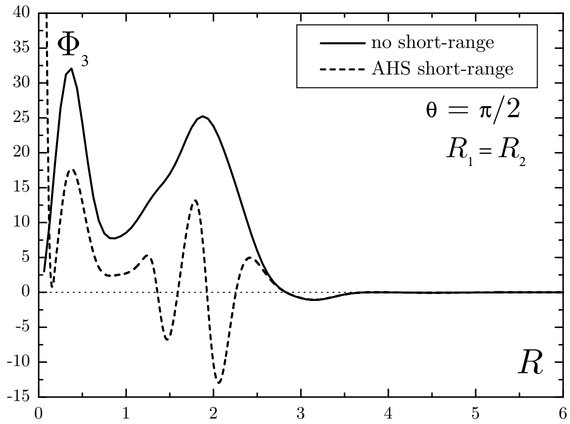


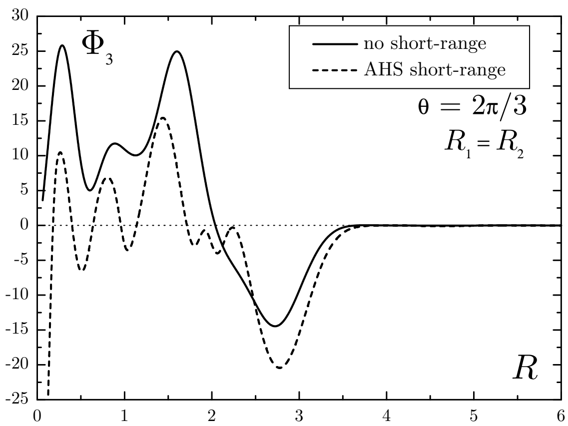
Рис. 2.9: Проекція тричастинкового потенціалу на площину



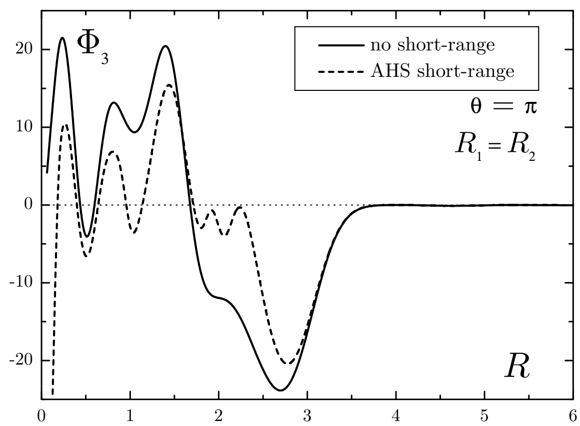
$\widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} = \frac{\pi}{3}$



$\widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} = \frac{\pi}{2}$



$\widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} = \frac{2\pi}{3}$



$\widehat{\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2} = \pi$

Рис. 2.10: Тричастинковий потенціал при $R_1 = R_2$. Пунктирна лінія відповідає розрахункам з явним урахуванням короткосяжних взаємодій (2.36) у моделі майже твердих сфер, суцільна лінія — результати обчислень без явного задання короткосяжного відштовхування (2.35).

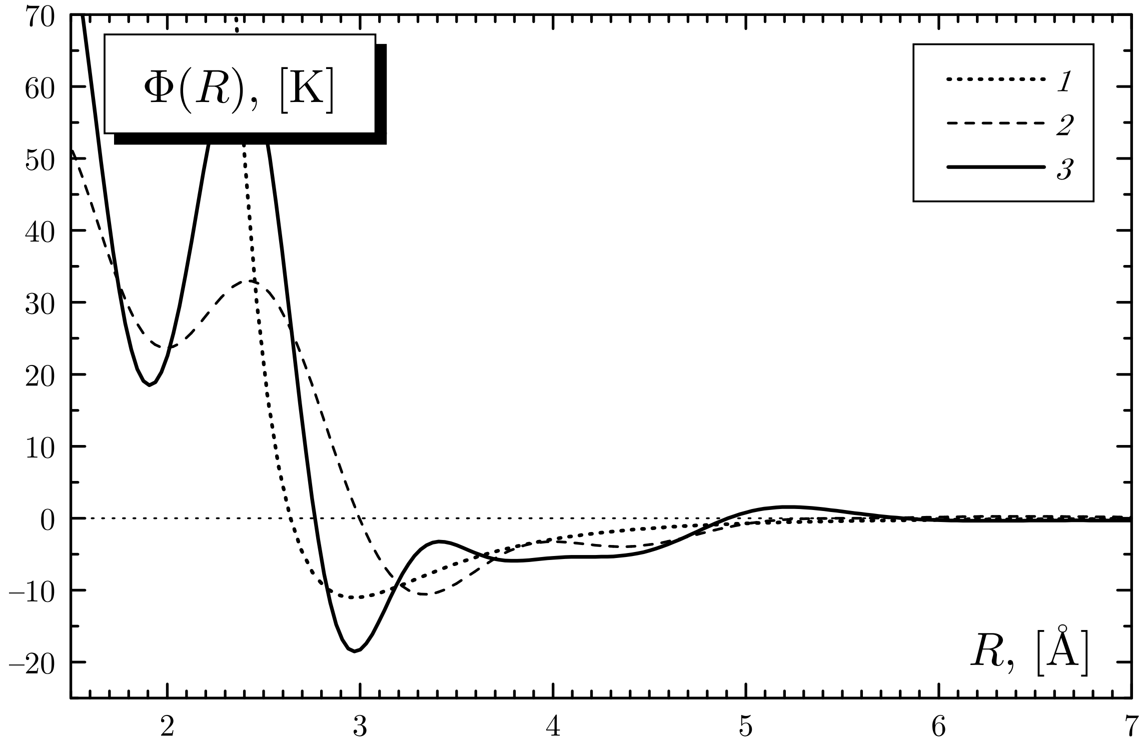


Рис. 2.11: Потенціал $\Phi(R)$ з виокремленими тричастинковими ефектами (суцільна лінія, *3*) у порівнянні з результатами нашої роботи [4] (штрихова лінія, *2*) і з потенціалом Азіза *та ін.* [60] (пунктирна лінія, *1*).

Для оцінки впливу тричастинкових взаємодій на результати для термодинамічних функцій проведемо порівняльний аналіз результатів для питомої потенціальної енерґії Φ/N, отриманої за допомогою різних потенціалів. Розраховуватимемо її в координатному просторі, використовуючи експериментальну функцію розподілу $F_2(R)$ [122]:

$$\frac{\Phi}{N} = \frac{N}{2V} \int d\mathbf{R}\, \Phi(R) F_2(R), \tag{2.38}$$

де $\Phi(R)$ — парний потенціал. Обмежимо інтеґрування (після переходу до сферичних координат) зверху величиною $R_{\max} = 16.0$ Å.

Внесок тричастинкових взаємодій ΔE_3 в енерґію визначається виразом:

$$\Delta E_3 = \frac{N^2}{6V^2} \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \, \Phi_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3) F_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3). \tag{2.39}$$

Щоб оцінити цю величину, використаємо для функції $F_3(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3)$ суперпозиційне наближення. Інтеґрування виконаємо за допомогою співвідношень, наведених у [123]. У результаті отримаємо таке значення:

$$\Delta E_3 \simeq 1.6 \text{ K}. \tag{2.40}$$

Така поправка відповідає кількавідсотковому внеску в потенціальну енерґію, що свідчить про потребу врахування тричастинкових ефектів.

Порівняння наших обчислень з іншими (модельними) потенціалами наведено в табл. 2.4.

Таблиця 2.4: Потенціальна енерґія для різних потенціалів.

Потенціал	Φ/N, K
парний, постRPA [4]	-15.5
парний, з короткосяжним AHS [5]	-21.6
з виокремленими 3-част. ефектами	-23.8
з урахуванням 3-част. ефектів	-22.2
Азіз *та ін.* [60]	-22.1
Ленард-Джонс	-21.3
Слетер–Кірквуд [56]	-21.0

2.6. Висновки до розділу 2

У розділі отримано основний результат, який використовується як вхідна інформація у наступних числових розрахунках, — фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в гелії-4. Обчислення проведено з перших принципів на підставі експериментальних даних для статичного структурного фактора.

Окремо вивчено вплив явного врахування короткосяжних взаємодій на потенціальну криву.

Отримано аналітичний вираз через пряму кореляційну функцію для тричастинкового потенціалу з використанням конволюційного наближення для тричастинкового структурного фактора, за яким обчислено цей потенціал, а також розраховано вплив тричастинкових взаємодій на потенціальну енерґію рідкого ^{4}He. Виявлено, що врахування тричастинкових ефектів покращує результати, наближаючи їх до тих, які отримуються за допомогою модельних потенціалів.

РОЗДІЛ 3

Обчислення термодинамічних функцій гелію-4

3.1. Вступ

У цьому розділі вихідним пунктом для теоретичних побудов буде добре вивчене наближення хаотичних фаз, яке дозволяє отримувати правильні низькотемпературні асимптотики термодинамічних та структурних функцій рідкого гелію-4. Після деяких простих і, на наш погляд, досить природних припущень, можна розвинути т. зв. ефективне постRPA наближення, де термін "ефективне" пояснюється тим, що постRPA-поправки враховуються неявно. У принципі, такий підхід може дати змогу просунутися суттєво вперед від низькотемпературної області. Однак, на жаль, застосований спосіб розв'язування записаних рівнянь не дозволяє охопити ділянку температур $|T/T_c - 1| \lesssim 1/3$, де T_c — точка фазового переходу, проте ця складність має радше технічну природу, а не є принциповою проблемою моделі.

Ми будемо притримуватися погляду Лондона про те, що явища в рідкому гелії-4 пов'язані з Бозе-конденсацією, відомою для ідеального Бозе-газу, але є значною мірою "зіпсованими" внаслідок сильної міжатомної взаємодії. Це, зокрема, дозволить на підставі результату для ідеального газу отримати температуру фазового переходу, яка зсувається до значення, близького з експериментальним, внаслідок перенормування маси атома ^{4}He.

Основні результати цього розділу викладено в роботах [7, 8].

3.2. Вихідні положення

Ми розраховуватимемо термодинамічні функції ^{4}He на підставі виразу для енерґії E. Отримавши для неї залежність від температури, можна далі легко отримати, наприклад, теплоємність, яка якраз і виявляє цікаву λ-подібну поведінку [18].

Енерґія системи дається усередненням гамільтоніана:

$$E = \langle \hat{H} \rangle, \tag{3.1}$$

де кутові дужки означають одночасно конфіґураційне й термодинамічне усереднення.

Враховуючи (2.2), отримаємо для енерґії:

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left\{ \varepsilon_k \left(\langle \rho_{\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_{\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{k}} \rangle \right) + \frac{N}{2V} \tilde{\nu}_k \langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle \right\} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}\mathbf{q} \left\langle \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \partial_{-\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{q}} \right\rangle + \right. \\ &+ \left. \frac{N^2}{6V^2} \nu_3(\mathbf{k}+\mathbf{q}, -\mathbf{k}, -\mathbf{q}) \langle \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle \right\}, \end{aligned} \tag{3.2}$$

де E_0 — енерґія основного стану (2.10).

Отже, нам потрібно знати такі середні: $\langle \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rangle$, $\langle \rho_{-\mathbf{k}} \partial_{\mathbf{k}} \rangle$, $\langle \partial_{-\mathbf{k}} \partial_{\mathbf{k}} \rangle$, $\langle \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \partial_{-\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{q}} \rangle$, $\langle \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle$.

Середні від добутків операторів можна знайти, використовуючи двочасові температурні функції Ґріна, визначені таким чином [124]:

$$\langle\!\langle A(t) | B(t') \rangle\!\rangle = i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle, \tag{3.3}$$

де оператори задано у зображенні Гайзенберґа, а θ є функцією Гевісайда.

Самі середні розраховуватимемо, використовуючи частотне зображення функцій Ґріна, як це показано в [124]:

$$\langle AB\rangle \equiv \hat{\mathcal{A}}\, G_{BA}(\hbar\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} d\hbar\omega \frac{G_{BA}(\hbar\omega+i\varepsilon)-G_{BA}(\hbar\omega-i\varepsilon)}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\Big|_{\varepsilon\to+0}, \quad (3.4)$$

де позначення G_{BA} використано для функції $\langle\langle B|A\rangle\rangle$, а оператор $\hat{\mathcal{A}}$ введено для зручності (правила роботи з ним виписано в Додатку Б). Ми вважатимемо, що часові арґументи операторів $A(t)$ та $B(t')$ збігаються: $t-t'=0$. Це дасть статичні властивості системи, у протилежному випадку можна отримати динамічні характеристики, наприклад, динамічний структурний фактор як $\langle\rho(t)\rho(t')\rangle$.

Використовуватимемо позначення $G_{\rho\rho}(\mathbf{k})$ для функції $\langle\langle\rho_{\mathbf{k}}\,|\,\rho_{-\mathbf{k}}\rangle\rangle$, $G_{\rho\rho\rho}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)$ для $\langle\langle\rho_{\mathbf{k}_1}\,\rho_{\mathbf{k}_2}\,|\,\rho_{\mathbf{k}_3}\rangle\rangle$ і $G'_{\rho\rho\rho}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)$ для $\langle\langle\rho_{\mathbf{k}_1}\,|\,\rho_{\mathbf{k}_2}\,\rho_{\mathbf{k}_3}\rangle\rangle$ і т. д.

Потрібно зауважити, що середнє від добутку трьох операторів $\langle ABC\rangle$, взагалі кажучи, можна записати як через G_{ABC}, так і через G'_{ABC}. Тому існує деякий параметр s, такий що:

$$\langle ABC\rangle = s\,\hat{\mathcal{A}}\,G_{ABC} + (1-s)\,\hat{\mathcal{A}}\,G'_{ABC}, \qquad 0\le s\le 1. \quad (3.5)$$

3.3. Система рівнянь руху для функцій Ґріна

Розглядатимемо двочасові температурні функції Ґріна, побудовані на операторах $\rho_{\mathbf{k}}$ і $\partial_{\mathbf{k}}$. Комутаційне співвідношення для них має вигляд

$$[\rho_{\mathbf{k}}, \partial_{\mathbf{k}'}] = -\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (3.6)$$

Використовуючи загальний вираз для рівняння руху в частотному зображенні [124]

$$\hbar\omega\langle\!\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle\!\rangle = \frac{1}{2\pi}\,\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle + \langle\!\langle[\hat{A},\hat{H}]|\hat{B}\rangle\!\rangle, \tag{3.7}$$

у результаті отримаємо таку систему рівнянь у наближенні "двох сум за хвильовим вектором" або постRPA:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) &= -\varepsilon_k G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) + 2\varepsilon_k G_{\partial\rho}(\mathbf{k}) - \\
&- \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}\mathbf{q}\, G_{\rho\partial\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}); \\
\hbar\omega G_{\partial\rho}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2\pi} + \varepsilon_k G_{\partial\rho}(\mathbf{k}) + \frac{N}{V}\nu_k G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) - \\
&- \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{q}\, G_{\partial\partial\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}) - \right. \\
&\left. - \frac{N^2}{2V^2}\,\nu_3(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q},-\mathbf{k}) G_{\rho\rho\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}) \right\}; \\
\hbar\omega G_{\rho\partial}(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2\pi} - \varepsilon_k G_{\rho\partial}(\mathbf{k}) + 2\varepsilon_k G_{\partial\partial}(\mathbf{k}) - \\
&- \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}\mathbf{q}\, G_{\rho\partial\partial}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}); \\
\hbar\omega G_{\partial\partial}(\mathbf{k}) &= \varepsilon_k G_{\partial\partial}(\mathbf{k}) + \frac{N}{V}\nu_k G_{\rho\partial}(\mathbf{k}) - \\
&- \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{q}\, G_{\partial\partial\partial}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}) - \right. \\
&\left. - \frac{N^2}{2V^2}\,\nu_3(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q},-\mathbf{k}) G_{\rho\rho\partial}(\mathbf{k}+\mathbf{q},-\mathbf{q};-\mathbf{k}) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

При цьому маємо на увазі, що *дві* суми за q будуть містити інтеґральні характеристики системи, напр., енерґія. Відкиданням доданків з підсумовуванням за хвильовим вектором можна просто отримати вирази у наближенні хаотичних фаз, записані Боголюбовим [35] для слабонеідеального Бозе-газу:

$$G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) = \frac{2\varepsilon_k}{\hbar^2\omega^2 - \varepsilon_k^2\tilde{\alpha}_k^2}\,\frac{1}{2\pi}, \tag{3.9}$$

$$S_k(T) = \hat{\mathcal{A}}\,G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\tilde{\alpha}_k}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\varepsilon_k\tilde{\alpha}_k}{2}. \tag{3.10}$$

У цьому виразі $S_k(T)$ — структурний фактор Бозе-рідини. Тильда над α_k означає наявність доданків, відповідальних за тричастинкові взаємодії. Якщо ними знехтувати, то отримаємо точно боголюбівське α_k:

$$\alpha_k = \left(1 + \frac{2N}{V}\frac{\nu_k}{\varepsilon_k}\right)^{1/2} \tag{3.11}$$

Для потрійних функцій Ґріна ($G_{\rho\rho\rho}, G_{\rho\partial\rho}$ і т. д.) достатньо мати рівняння руху у наближенні хаотичних фаз, оскільки у всіх виразах ці функції вже знаходяться під знаком суми за хвильовим вектором. Використаємо ще таке розщеплення для середніх від добутків чотирьох операторів:

$$\langle\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C} \,|\, \hat{D}\rangle\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle\,\langle\langle \hat{C} \,|\, \hat{D}\rangle\rangle + \langle \hat{A}\hat{C}\rangle\,\langle\langle \hat{B} \,|\, \hat{D}\rangle\rangle + \langle \hat{B}\hat{C}\rangle\,\langle\langle \hat{A} \,|\, \hat{D}\rangle\rangle. \tag{3.12}$$

Ми використовуємо скорочений запис для потрійних функцій $G(123) \equiv G(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$. Рівняння руху запишуться так:

$$\hbar\omega\, G_{\rho\rho\rho}(123) \;=\; g_{\rho\rho\rho} - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\, G_{\rho\rho\rho}(123) + 2\varepsilon_1\, G_{\partial\rho\rho}(123) + 2\varepsilon_2\, G_{\rho\partial\rho}(123);$$

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\, G_{\rho\partial\rho}(123) &= g_{\rho\partial\rho} + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)\, G_{\rho\partial\rho}(123) + 2\varepsilon_1\, G_{\partial\partial\rho}(123) + \frac{N}{V}\,\nu_2\, G_{\rho\rho\rho}(123);\\
\hbar\omega\, G_{\partial\rho\rho}(123) &= g_{\partial\rho\rho} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\, G_{\partial\rho\rho}(123) + 2\varepsilon_2\, G_{\partial\partial\rho}(123) + \frac{N}{V}\,\nu_1\, G_{\rho\rho\rho}(123);\\
\hbar\omega\, G_{\partial\partial\rho}(123) &= g_{\partial\partial\rho} + (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\, G_{\partial\partial\rho}(123) +\\
&\quad + \frac{N}{V}\,\nu_1\, G_{\rho\partial\rho}(123) + \frac{N}{V}\,\nu_2\, G_{\partial\rho\rho}(123), \qquad (3.13)
\end{aligned}$$

а рівняння для функцій $G_{\rho\rho\partial}, G_{\rho\partial\partial}, G_{\partial\rho\rho}, G_{\partial\partial\partial}$ можна отримати простою заміною третього індекса ρ на ∂. Вирази для g, отримані з використанням розщеплення (3.12), будуть такими:

$$\begin{aligned}
g_{\rho\rho\rho} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\Big[-(\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3 S_1 + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 S_2)G_{\partial\rho}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\frac{1}{2}(S_1+S_2)G_{\rho\rho}(3)\Big];\\
g_{\rho\rho\partial} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\Big[-(\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3 S_1 + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 S_2)G_{\partial\partial}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\frac{1}{2}(S_1+S_2)G_{\rho\partial}(3)\Big];\\
g_{\rho\partial\rho} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3\frac{1}{2}(S_1-S_2)G_{\partial\rho}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 D_2 G_{\rho\rho}(3)\right];\\
g_{\rho\partial\partial} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3\frac{1}{2}(S_1-S_2)G_{\partial\partial}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 D_2 G_{\rho\partial}(3)\right];\\
g_{\partial\rho\rho} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\frac{1}{2}(S_2-S_1)G_{\partial\rho}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 D_1 G_{\rho\rho}(3)\right];\\
g_{\partial\rho\partial} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\frac{1}{2}(S_2-S_1)G_{\partial\partial}(3) - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 D_1 G_{\rho\partial}(3)\right];\\
g_{\partial\partial\rho} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 D_1 + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_3 D_2\right] G_{\partial\rho}(3);\\
g_{\partial\partial\partial} &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 D_1 + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_3 D_2\right] G_{\partial\partial}(3). \qquad (3.14)
\end{aligned}$$

Тут для скорочення в індексах пропущено позначення для хвильового вектора, тобто $\varepsilon_i \equiv \varepsilon_{k_i}$ і т. д., а середні від попарних добутків в наближенні хаотичних фаз записуються так:

$$\begin{aligned}
\langle \rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv S_k = \frac{1}{\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k\alpha_k}{2T}, \\
\langle \rho_{-\mathbf{k}}\partial_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv D''_k = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k\alpha_k}{2T} - 1\right) = \frac{1}{2}\left(S_k - 1\right), \\
\langle \partial_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv D'_k = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k\alpha_k}{2T} - 1\right) = \frac{1}{2}\left(S_k + 1\right), \\
\langle \partial_{-\mathbf{k}}\partial_{\mathbf{k}} \rangle &\equiv D_k = \frac{1-\alpha_k^2}{4\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k\alpha_k}{2T} = \frac{1-\alpha_k^2}{4}S_k. \qquad (3.15)
\end{aligned}$$

Рівняння для потрійних функцій Ґріна $G'_{\rho\rho\rho}, G'_{\rho\partial\rho}$ і т. д. також достатньо мати в RPA. Їх легко отримати на підставі RPA-рівнянь для функцій $G_{\rho\rho}, G_{\rho\partial\rho}$ і т. д. Однак далі ми розглянемо певним чином спрощену задачу, для якої явних виразів для потрійних функцій Ґріна не потрібно. Справа в тому, що хоча й систему рівнянь (3.13) розв'язати вдається, але результати вийдуть дуже громіздкими, тому ми їх тут і не наводимо, і обчислення з ними проводити складно. На додаток, їх врахування дасть мабуть поправки вищого порядку порівняно з наближенням хаотичних фаз лише у низькотемпературній границі, а нам би хотілося отримати температурну залежність на ширшій ділянці. З цією метою розглянемо, як поза-PRA ефекти можна врахувати іншим способом.

3.4. Ефективне врахування постRPA-доданків

Варто відзначити, що замкнену систему рівнянь у постRPA-наближенні можна отримати, використовуючи дещо інші оператори, а саме, $\rho_{\mathbf{k}}$ та

$$\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{r}_j}\frac{\hbar}{m}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\hat{\mathbf{p}}_j. \qquad (3.16)$$

При цьому в наближенні хаотичних фаз зручно ввести оператор (т. зв. струм або потік, див., напр., [125])

$$\hat{\pi}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{\theta}_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j), \tag{3.17}$$

де використано звичне означення оператора імпульсу: $\hat{\mathbf{p}}_j = -i\hbar \boldsymbol{\nabla}_j$.

Можна також показати, що оператор кінетичної енерґії через згадані $\rho_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ записується так (пор. з відповідними доданками (2.2)):

$$\hat{K}_\rho = \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left\{ \frac{1}{2} \rho_{-\mathbf{k}} \hat{\pi}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{4\varepsilon_k} \hat{\pi}_{-\mathbf{k}} \hat{\pi}_{\mathbf{k}} \right\}, \tag{3.18}$$

і в наближенні хаотичних фаз маємо систему рівнянь:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\, G_{\rho\rho}(\omega) &= -\varepsilon_k\, G_{\rho\rho}(\omega) + G_{\pi\rho}(\omega), \\
\hbar\omega\, G_{\pi\rho}(\omega) &= \varepsilon_k\, G_{\pi\rho}(\omega) + \varepsilon_k^2(\alpha_k^2 - 1)\, G_{\rho\rho}(\omega) + \frac{1}{\pi}\varepsilon_k, \\
\hbar\omega\, G_{\pi\pi}(\omega) &= \varepsilon_k\, G_{\pi\pi}(\omega) + \varepsilon_k^2(\alpha_k^2 - 1)\, G_{\rho\pi}(\omega), \\
\hbar\omega\, G_{\rho\pi}(\omega) &= -\varepsilon_k\, G_{\rho\pi}(\omega) + G_{\pi\pi}(\omega) - \frac{1}{\pi}\varepsilon_k,
\end{aligned} \tag{3.19}$$

(див. також Додаток Б, де виписано рівняння для функцій, побудованих на операторах $\rho_{\mathbf{k}}$, $\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$ в постRPA).

Середні від добутків операторів $\rho_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ отримуються аналоґічно до (3.15):

$$\langle \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \hat{\mathcal{A}}\, G_{\rho\rho}(\mathbf{k}) \equiv S_k = \frac{1}{\alpha_k} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_k \alpha_k}{2T}, \tag{3.20}$$

$$\langle \rho_{-\mathbf{k}} \hat{\pi}_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \hat{\mathcal{A}}\, G_{\pi\rho}(\mathbf{k}) \equiv \Pi_k'' = \varepsilon_k \left(\frac{1}{\alpha_k} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_k \alpha_k}{2T} - 1 \right) = \varepsilon_k \left(S_k - 1 \right),$$

$$\langle\hat{\pi}_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{\mathbf{k}}\rangle \equiv \hat{\mathcal{A}}\,G_{\pi\pi}(\mathbf{k}) \equiv \Pi_k = \varepsilon_k^2\frac{1-\alpha_k^2}{\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k\alpha_k}{2T} = \varepsilon_k^2\left(1-\alpha_k^2\right)\,S_k.$$

У межах наближення хаотичних фаз несуттєво, яким набором операторів користуватися ($\rho_{\mathbf{k}}, \partial_{\mathbf{k}}$ чи $\rho_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}$). Як видно з рівнянь (3.15) і (3.20), різниця пов'язана лише з множником розмірности енерґії. Справді, оператор $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ пов'язаний з $\partial_{\mathbf{k}}$ так:

$$\varepsilon_k\partial_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\hat{\pi}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{kq}\,\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\partial_{-\mathbf{q}}, \tag{3.21}$$

тобто різниця накопичується в постRPA-поправці. Виключно з міркувань зручнішого порівняння зображення колективних змінних і точного координатного запису для кінетичної енерґії, на різниці між якими й буде ґрунтуватися ефективне врахування постRPA поправок, ми далі тут використаємо оператор $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ замість $\partial_{\mathbf{k}}$.

Точний вираз для кінетичної енерґії є, очевидно, таким:

$$\hat{K} = \sum_{j=1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m}, \tag{3.22}$$

Для потенціальної енерґії збережемо вигляд у зображенні колективних змінних.

До речі, саме внаслідок дії оператора імпульсу в кінетичній енерґії при конструюванні рівнянь руху виникають оператори $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$, і в цьому факті якраз полягає зручність їх використання замість $\partial_{\mathbf{k}}$.

У цьому випадку рівняння руху є такими:

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\,\bar{G}_{\rho\rho}(\omega) &= -\varepsilon_k\,\bar{G}_{\rho\rho}(\omega) + \bar{G}_{\pi\rho}(\omega),\\
\hbar\omega\,\bar{G}_{\pi\rho}(\omega) &= -\varepsilon_k\,\bar{G}_{\pi\rho}(\omega) + \varepsilon_k^2(\alpha_k^2-1)\,\bar{G}_{\rho\rho}(\omega) + \bar{G}_{\xi\rho}(\omega) + \frac{1}{\pi}\varepsilon_k,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hbar\omega\,\bar{G}_{\pi\pi}(\omega) &= -\varepsilon_k\,\bar{G}_{\pi\pi}(\omega) + \varepsilon_k^2(\alpha_k^2-1)\,\bar{G}_{\rho\pi}(\omega) + \bar{G}_{\xi\pi}(\omega),\\ \hbar\omega\,\bar{G}_{\rho\pi}(\omega) &= -\varepsilon_k\,\bar{G}_{\rho\pi}(\omega) + \bar{G}_{\pi\pi}(\omega) - \frac{1}{\pi}\varepsilon_k. \end{aligned} \tag{3.23}$$

У функції Ґріна $\bar{G}_{\xi\rho}$ використано оператор

$$\hat{\xi}_{\mathbf{k}} \;=\; \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\left(\frac{\hbar}{m}\right)^2(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2. \tag{3.24}$$

На відміну від попереднього випадку, коли оператор кінетичної енерґії було записано у ρ-зображенні, тепер виявляється неможливим розв'язати цю систему відносно $\bar{G}_{\rho\rho}$ навіть у наближенні хаотичних фаз. Проблема полягає в тому, що в кожному наступному рівнянні для функцій $\bar{G}_{\xi\rho}$ і т. д. виникають нові функції з вищими степенями оператора $(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)$, пор. з (3.7). Це пов'язано з дією оператора кінетичної енерґії (3.22): у рівняннях руху він ґенерує нові оператори виду

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\left(\frac{\hbar}{m}\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j\right)^n, \qquad n = 2, 3, \ldots,$$

які не можна виразити через $\rho_{\mathbf{k}}$ та $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$ (ані через $\partial_{\mathbf{k}}$ або й $\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$). Тому для того, щоб отримати замкнену систему рівнянь, потрібно застосувати якесь наближення. Розглянемо систему двох рівнянь для функцій $\bar{G}_{\rho\rho}$ і $\bar{G}_{\pi\rho}$, припускаючи таку властивість:

$$\bar{G}_{\xi\rho} - 2\varepsilon_k\,\bar{G}_{\pi\rho} = 2\gamma_k(T)\varepsilon_k^2\,\bar{G}_{\rho\rho}, \tag{3.25}$$

де множник $\gamma_k(T)$ має розмірність енерґії, про його вигляд поговоримо пізніше. Така заміна знову повертає нас до системи рівнянь (3.19), отриманої в ρ-зображенні, проте величина α_k вже має дещо інший вигляд,

$$\bar{\alpha}_k \;=\; \sqrt{1+\frac{2\varrho\nu_k}{\varepsilon_k}+\frac{2\gamma_k(T)}{\varepsilon_k}} \tag{3.26}$$

Аналоґічну властивість припустимо для трійки функцій $\bar{G}_{\rho\pi}, \bar{G}_{\pi\pi}, \bar{G}_{\xi\pi}$. Треба пам'ятати, що риска над літерою означає “точний відносно наближення хаотичних фаз”. Далі ми не писатимемо її — це не спричинюватиме непорозумінь.

Треба сказати, що вираз (3.25) означає фактично певне усереднення, за допомогою якого “відщеплюється” дія $(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2$ в $\hat{\xi}_{\mathbf{k}}$ від оператора $\rho_{\mathbf{k}}$.

Для з'ясування загальних властивостей $\gamma_k(T)$ розглянемо граничні випадки високих і низьких температур. У високотемпературній границі маємо такий вираз для структурного фактора:

$$S_k(T)\Big|_{T\to\infty} = \frac{1}{1+\varrho\nu_k/T}. \tag{3.27}$$

Звідси випливає, що

$$2\gamma_k(T)\Big|_{T\to\infty} = 2T = \frac{4}{3}K, \tag{3.28}$$

де K — кінетична енерґія, яка у границі високих температур збігається з класичним виразом $K = 3T/2$.

У низькотемпературній границі правильними є результати, отримані в ρ-зображенні (теорія Боголюбова). Тому:

$$\gamma_k(T)\Big|_{T\to 0} = 0. \tag{3.29}$$

3.5. Обчислення енерґії

Вільну енерґію системи можна розрахувати, використовуючи метод, запропонований в [121]:

$$F = F_0 + \int_0^1 d\lambda\, \Phi(\lambda), \tag{3.30}$$

де F_0 — вільна енерґія невзаємодіючої системи, λ — параметр увімкнення взаємодії, Φ — потенціальна енерґія, для якої маємо вираз:

$$\frac{\Phi}{N} = \frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\varrho\nu_k\left(\frac{1}{\alpha_k}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_k\alpha_k - 1\right). \tag{3.31}$$

У виразі (3.30) інтеґруватимемо за змінною α_k замість λ. Така процедура спричинить появу похідної $\partial\gamma_k/\partial\lambda$, вираз для якої невідомий, якщо немає явної залежности $\gamma_k(\lambda)$. У цій ситуації найпростіше буде піти тим самим шляхом, що й у [121], записавши замість звичайної похідної так звану першу різницю:

Припущення 1:

$$\frac{\partial\gamma_k}{\partial\lambda} = \frac{\gamma_k - \gamma_k^0}{\Delta\lambda} = \gamma_k - \gamma_k^0 \tag{3.32}$$

оскільки $\Delta\lambda = 1$.

3.5.1. Низькі температури, $T < T_\lambda$.

Для визначення величини $\gamma_k(T)$ використаємо співвідношення, яке схематично можна зобразити так:

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Енерґія, отримана}\\ \text{з усередненого}\\ \text{RPA-гамільтоніана}\end{array}} = \boxed{\begin{array}{l}\text{Енерґія, обчислена}\\ \text{з вільної енерґії}\\ \text{як}\quad E = \dfrac{\partial\,\beta F}{\partial\beta}\end{array}}. \tag{3.33}$$

При цьому в усіх RPA-виразах α_q вже містить $\gamma_q(T)$. Ліва частина рівняння (3.33) дорівнює:

$$\begin{aligned}\frac{E}{N} &= \frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\left(\frac{1}{2}\Pi_k'' - \frac{1}{4\varepsilon_k}\Pi_k\right) + \frac{1}{2}\varrho\nu_k(S_k - 1)\right\} \equiv \\ &\equiv \frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\varepsilon_k\left(D_k'' - D_k\right) + \frac{1}{2}\varrho\nu_k(S_k - 1)\right\},\end{aligned} \tag{3.34}$$

де враховано співвідношення (3.15), (3.20).

Для вільної енерґії матимемо:

$$\begin{aligned}\frac{F}{N} &= \frac{F_0}{N} + \frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\varrho\nu_k\left\{\frac{\varepsilon_k(\alpha_k - \alpha_k^0)}{\varrho\nu_k + \gamma_k - \gamma_k^0} - 1 + \right. \\ &\left. + \frac{2T}{\varrho\nu_k + \gamma_k - \gamma_k^0}\ln\frac{1 - \exp\left(-\beta\varepsilon_k\alpha_k\right)}{1 - \exp\left(-\beta\varepsilon_k\alpha_k^0\right)}\right\}.\end{aligned} \tag{3.35}$$

У результаті (3.33) переписується таким чином:

$$\frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left[\left(\varepsilon_q\alpha_q - \frac{\gamma_q}{\alpha_q}\right)\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_q\alpha_q}{2T} - \varepsilon_q - \varrho\nu_q\right] =$$

$$= K_0(T) + \frac{\varrho\nu_0}{2} + \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\varrho\nu_q\left\{\frac{2(\gamma_q^{0\prime} - \gamma_q')}{(\varrho\nu_q + \gamma_q - \gamma_q^0)^2}\ln\frac{\operatorname{sh}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q}{\operatorname{sh}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q^0} + \right.$$

$$+ \frac{\varepsilon_q}{\varrho\nu_q + \gamma_q - \gamma_q^0}\left[\left(\alpha_q - \beta\alpha_q'\right)\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q - \right.$$

$$- \left(\alpha_q^0 - \beta\alpha_q^{0\prime}\right) \operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q^0\Big] - 1 \Bigg\}, \tag{3.36}$$

де штрихи означають похідну за β.

Для похідних від α_q, α_q^0 матимемо:

$$\alpha_q' = \frac{\gamma_q'}{\varepsilon_q\alpha_q}, \qquad \alpha_q^{0\prime} = \frac{\gamma_q^{0\prime}}{\varepsilon_q\alpha_q^0}. \tag{3.37}$$

Величина γ_q^0 поки що залишається невідомою. Спробуємо знайти її, використовуючи термодинамічні співвідношення для ідеального Бозе-газу.

Спочатку розглянемо довільну систему. Структурний фактор у границі малих q має вигляд:

$$S_q(T)\Big|_{q\to 0} = \lim_{q\to 0}\frac{1}{\alpha_q}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q = \frac{T}{\varepsilon_0 + \varrho\nu_0 + \gamma_0}. \tag{3.38}$$

У цьому виразі ε_0, очевидно, дорівнює нулеві, але ми зберігаємо цей доданок у сенсі його границі при прямуванні $q \to 0$, що буде потрібно для випадку ідеального газу. Отже,

$$\gamma_0 = \frac{T}{S_0(T)} - \varrho\nu_0 - \varepsilon_0 = \frac{1}{\varrho\varkappa_T} - \varrho\nu_0 - \varepsilon_0, \tag{3.39}$$

де враховано зв'язок структурного фактора при $q = 0$ з ізотермічною стисливістю $\varkappa_T$. Для ідеального газу $\nu_q = 0$, тому при низьких температурах матимемо:

$$\gamma_0^0 = \left(\frac{\partial P_0}{\partial\varrho}\right)_T = 0 \quad \text{для} \quad T < T_c, \tag{3.40}$$

де P_0 — тиск ідеального Бозе-газу, а T_c — температура Бозе-конденсації. У результаті для структурного фактора ідеального Бозе-газу S_q^0 матимемо:

$$S_q^0(T)\Big|_{q\to 0} = \frac{2T}{\varepsilon_q} \propto \frac{1}{q^2}, \tag{3.41}$$

як і повинно бути [126].

Тепер для спрощення приймемо, що залежності від хвильового вектора і температури у величинах γ_q і γ_q^0 розділяються:

Припущення 2:

$$\gamma_q(T) = \gamma(T) f_q, \quad \gamma_q^0(T) = \gamma^0(T) f_q^0, \qquad f_0 = f_0^0 = 1. \tag{3.42}$$

Це означає виділення "першорядної" температурної залежности порівняно з "другорядною" залежністю від хвильового вектора, яка при обчисленні термодинамічних функцій заінтеґрується. Умова ж $f_0 = f_0^0 = 1$ — це просто своєрідне нормування.

Тепер з $\gamma_0^0 = 0$ маємо $\gamma^0 = 0$, і, враховуючи (3.37), відповідно $\gamma_q^{0\prime} = 0$, $\alpha_q^{0\prime} = 0$. Нагадаємо, що ці рівності справджуються лише у випадку низьких температур $T < T_c$.

Щоб отримати рівняння для $\gamma_q(T)$, розглянемо розклад (3.36) за степенями γ. Із точністю до γ включно матимемо:

$$T\dot{\gamma}(T) \int_0^\infty q^2 f_q \left\{ \frac{2T}{\varrho\nu_q} \ln \frac{\operatorname{sh} \frac{\varepsilon_q \alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T}}{\operatorname{sh} \frac{\varepsilon_q}{2T}} - \frac{1}{\varrho\nu_q} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_q \alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T} \right\} + \tag{3.43}$$

$$+ \gamma(T) \int_0^\infty q^2 f_q \left\{ \frac{1}{\alpha_q^{\mathrm{B}}} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_q \alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T} + \frac{\varepsilon_q}{\varrho\nu_q} \left[\operatorname{cth} \frac{\varepsilon_q}{2T} - \alpha_q^{\mathrm{B}} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_q \alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T} \right] \right\} = 0,$$

де крапка позначає похідну за температурою, а верхній індекс "B" означає боголюбівські вирази,

$$\alpha_q^{\mathrm{B}} = \left(1 + \frac{2\varrho\nu_q}{\varepsilon_q}\right)^{1/2}. \tag{3.44}$$

Розкладаючи аналоґічним способом енерґію (3.34), отримаємо:

$$\begin{aligned} E &= E^{\mathrm{B}} - \gamma\frac{1}{4\pi^2\varrho}\int_0^\infty dq\, q^2 f_q \frac{1}{2T}\varepsilon_q \frac{1}{\mathrm{sh}^2\,\frac{\varepsilon_q\alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T}} \qquad (3.45)\\ &+ \gamma^2\frac{1}{4\pi^2\varrho}\int_0^\infty dq\, q^2\, f_q^2 \left\{\frac{1}{4T\alpha_q^{\mathrm{B}}}\left[\frac{1}{\alpha_q^{\mathrm{B}}} + \frac{\varepsilon_q \,\mathrm{cth}\,\frac{\varepsilon_q\alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T}}{T}\right]\frac{1}{\mathrm{sh}^2\,\frac{\varepsilon_q\alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T}}\right.\\ &\left. + \frac{1}{2T\varepsilon_q{\alpha_q^{\mathrm{B}}}^3}\,\mathrm{cth}\,\frac{\varepsilon_q\alpha_q^{\mathrm{B}}}{2T}\right\} + O(\gamma^3). \end{aligned}$$

Для збіжности останнього доданка у другому інтеґралі необхідно, щоби при $q \to \infty$ виконувалася умова $f_q \neq \mathrm{const}$, що можна забезпечити відповідним підбором функції f_q.

Наступна проблема з цим доданком полягає у тому, що він дає некоректну поведінку теплоємности при низьких температурах. Як ми покажемо далі, $\gamma(T)$ пропорційне до T, коли $T \to 0$. Це дасть лінійну залежність теплоємности замість кубічної $\propto T^3$. Ми уникнемо цього спеціальним вибором f_q, а саме, вимагатимемо, щоб:

$$\int_0^\infty dq\, q^2\, f_q^2\, \frac{1}{\varepsilon_q{\alpha_q^{\mathrm{B}}}^3} = 0. \tag{3.46}$$

Подібну проблему з доданком γ^3, який дає квадратичну залежність від температури, обійдемо за допомогою другої вимоги:

$$\int_0^\infty dq\, q^2\, f_q^3\, \frac{1}{\varepsilon_q^2{\alpha_q^{\mathrm{B}}}^5} = 0. \tag{3.47}$$

Лише комплексне f_q може задовольнити обидва рівняння (3.46), (3.47). З міркувань простоти обчислень ми вибрали f_q у такій формі:

$$f_q = \begin{cases} 1, & 0 \le q < q_1 \\ i f_{\mathrm{II}}, & q_1 \le q < q_2 \\ -f_{\mathrm{III}}, & q_2 \le q < q_3 \\ -i f_{\mathrm{IV}}, & q_3 \le q < q_4 \\ 0, & \text{в іншому випадку} \end{cases} \tag{3.48}$$

з рівномірно розподіленими інтервалами $q_n = n \times 3$ Å^{-1}. Три величини $f_{\mathrm{II}}, f_{\mathrm{III}}, f_{\mathrm{IV}}$ необхідні для того, щоб рівність виконувалася як для дійсної, так і для уявної частини рівнянь (3.46)–(3.47).

Комплексна функція f_q означає певне температурне загасання елементарних збуджень, спектр яких набуває вигляду $E_q = \mathcal{E}_q + i\Gamma_q$, де у першому наближенні $\mathcal{E}_q = \varepsilon_q \alpha_q^{\mathrm{B}} + \gamma(T)\, \mathfrak{Re}\, f_q/\alpha_q^{\mathrm{B}}$; $\Gamma_q = \gamma(T)\, \mathfrak{Im}\, f_q/\alpha_q^{\mathrm{B}}$. При розрахунках термодинамічних характеристик у виразі (3.45) потрібно взяти дійсну частину, уявна частина виявляється на порядок меншою.

За допомогою числового інтеґрування можна показати, що розв'язки для f_q будуть такими:

$$f_{\mathrm{II}} = 1.061, \qquad f_{\mathrm{III}} = 2.015, \qquad f_{\mathrm{IV}} = 1.886. \tag{3.49}$$

Перепишемо рівняння для γ у скороченому вигляді:

$$a_1(T)\, T\dot{\gamma} + a_0(T)\gamma + O(\gamma^2) = 0 \tag{3.50}$$

Нехтуючи доданками вищих порядків, будемо мати:

$$\gamma(T) = CT \exp\left\{ -\int^T \frac{d\tau}{\tau} \left[\frac{a_0(\tau)}{a_1(\tau)} + 1 \right] \right\}, \tag{3.51}$$

де константу C можна визначити за характером поведінки ізотермічної стисливості $T = 0$ К (3.39). Усереднивши результати інтерполяції табличних даних [110] при найнижчих температурах за чотирма, п'ятьма та шістьма точками, ми отримали значення

$$C \equiv \dot{\gamma}(0) \simeq 5.89\,. \tag{3.52}$$

Цікаво, що функція $\gamma(T)$ виявляється лінійною не лише в границі $T \to 0$, але й несуттєво відхиляється від такого закону при підвищенні температури.

Треба зауважити, що правильних результатів слід очікувати не для всіх температур, а лише для тих, при яких коректним є нехтування вищими доданками в рівнянні для γ_q (3.43). Іншими словами, якщо $2\gamma_q/\varepsilon_q > 1$, то результати вже не є правильними. Враховуючи, що для рідкого гелію-4 характерним значенням хвильового вектора є 2 Å, що відповідає першому максимумові на парному структурному факторі, отримаємо верхню границю застосовности наших результатів як $T/T_c \simeq 2/3$.

3.5.2. Високі температури, $T > T_\lambda$. У цьому випадку можна застосувати методику, використану у випадку низьких температур, але це виявляється досить складним завданням, оскільки у цій ситуації не будуть, наприклад, справедливими твердження про рівність функції $\gamma_q^0(T)$ нулеві. Крім того, величина $\gamma_q(T)$ у цій області вже не є малою, і за нею розкладати в ряд не можна, а розв'язати рівняння (3.36) не вдається. Тому для спрощення розрахунків ми вирішили замінити $\gamma_q(T)$ на $2K/3$, див. (3.28), де K — кінетична енерґія системи.

Ми переписали вираз для вільної енерґії (3.35) з метою отримання рівняння для величини $\Delta K \equiv K - K_0$:

$$\begin{aligned}\Delta K \;=\; & \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty dq\, q^2\ \nu_q \Big\{ \frac{1}{Z_q}\varepsilon_q \left[\alpha_q \operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q - \alpha_q^0 \operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q^0\right] - \\ & -\frac{1}{\alpha_q}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q + \frac{2}{3}\frac{\partial \Delta K}{\partial T}\Big[\frac{T}{Z_q^2}\varepsilon_q(\alpha_q - \alpha_q^0) - \frac{T}{Z_q}\frac{1}{\alpha_q}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q +\end{aligned}$$

$$
+\frac{2T^2}{Z_q^2}\Big(\ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon_q\alpha_q}\right)-\ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon_q\alpha_q^0}\right)\Big)\Big]+
$$

$$
+\frac{2}{3}\dot{K}_0\frac{T}{Z_q}\Big[\frac{1}{\alpha_q^0}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q^0-\frac{1}{\alpha_q}\operatorname{cth}\frac{\beta}{2}\varepsilon_q\alpha_q\Big]\Big\}, \qquad (3.53)
$$

$$
Z_q = \varrho\nu_q+\frac{2}{3}\Delta K,
$$

$$
\alpha_q = \sqrt{1+\frac{2\varrho\nu_q}{\varepsilon_q}+\frac{4}{3}\frac{\Delta K+K_0}{\varepsilon_q}}, \qquad \alpha_q^0=\sqrt{1+\frac{4}{3}\frac{K_0}{\varepsilon_q}},
$$

де крапка означає похідну за T: $\dot{K}_0=\partial K/\partial T$.

Результати розрахунків теплоємности наведено на рис. 3.1 та в табл. 3.1.

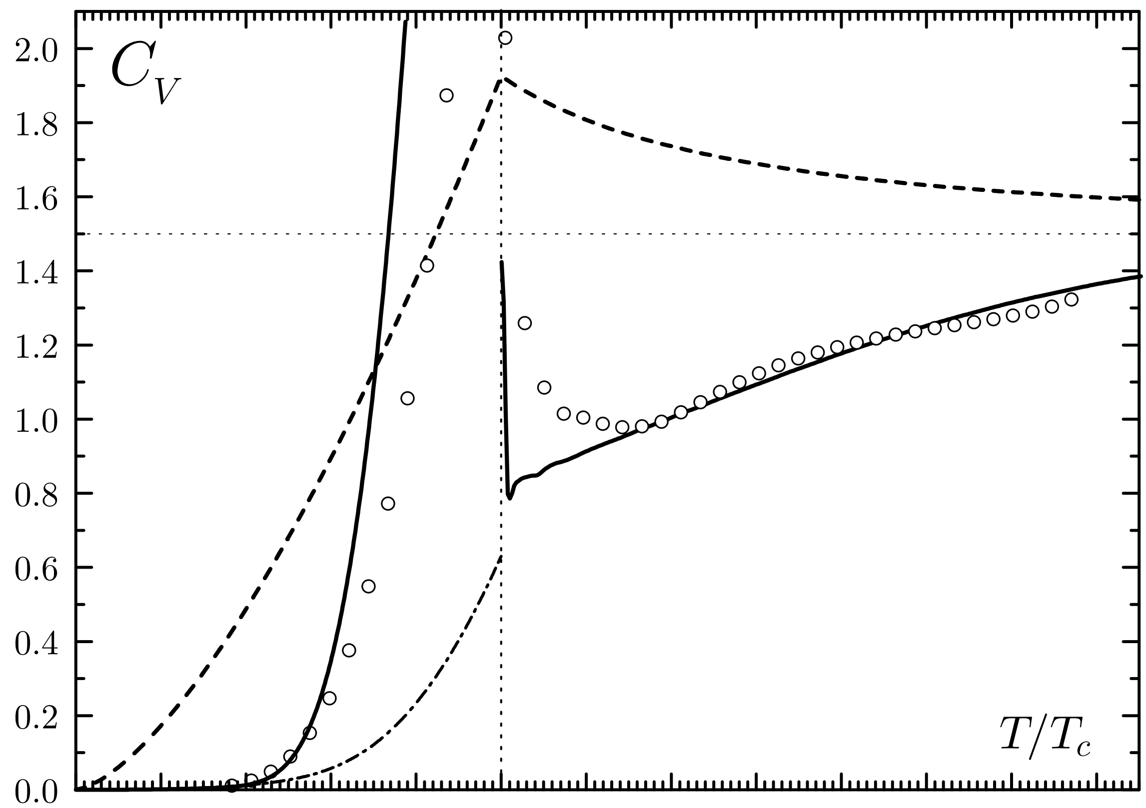


Рис. 3.1: Теплоємність рідкого гелію-4. Суцільна лінія — обчислена теплоємність; штрихова лінія — теплоємність ідеального Бозе-газу; штрихпунктирна лінія — наближення Боголюбова. Кружечки показують експериментальні дані, зібрані з різних джерел.

Таблиця 3.1: Питома теплоємність ^{4}He

T, K	T/T_c	C_V NIST	C_V теор.	C_V^{B}
0.80	0.367	0.011	0.008	0.010
0.85	0.390	0.016	0.011	0.012
0.90	0.413	0.024	0.016	0.014
0.95	0.436	0.034	0.024	0.016
1.00	0.459	0.048	0.036	0.019
1.05	0.482	0.066	0.054	0.023
1.10	0.505	0.089	0.082	0.028
1.15	0.528	0.118	0.120	0.033
1.20	0.551	0.153	0.172	0.039
1.25	0.574	0.195	0.243	0.047
1.30	0.597	0.246	0.333	0.056
1.35	0.620	0.306	0.449	0.067
1.40	0.643	0.375	0.593	0.080
1.50	0.689	0.548	0.976	0.113
1.60	0.735	0.772	1.49	0.155
1.70	0.781	1.06	2.17	0.208
1.80	0.826	1.41	2.99	0.272
1.90	0.872	1.87	3.94	0.350
2.00	0.918	2.49	5.52	0.440
2.15	0.987	4.43	6.57	0.597
2.30	1.056	1.26	0.842	—
2.50	1.148	1.01	0.887	—
2.70	1.240	0.987	0.932	—
2.90	1.331	0.980	0.974	—
3.10	1.423	1.02	1.01	—
3.30	1.515	1.07	1.06	—
3.50	1.607	1.12	1.10	—
3.70	1.699	1.16	1.14	—
3.90	1.791	1.19	1.17	—
4.10	1.882	1.22	1.21	—
4.30	1.974	1.24	1.24	—
4.50	2.066	1.25	1.27	—
4.70	2.158	1.27	1.30	—
4.90	2.250	1.29	1.33	—
5.10	2.342	1.32	1.35	—

C_V NIST — дані [110]; C_V теор. — результати розрахунків, що відповідають (3.45), (3.53); C_V^{B} — теплоємність взаємодіючого Бозе-газу у наближенні Боголюбова.

Як видно з рис. 3.1, ми справді отримали добрий опис на ділянці $0 \leq T/T_c < 0.65$, як і сподівалися. На додаток, з наближенням до точки фазового переходу зберігається якісно правильна поведінка теплоємності. В області нормальної фази ($T > T_c$) подібна ситуація для температур $T/T_c > 1.32$. Треба сказати, що температура фазового переходу T_c у нашому випадку буде збігатися з відповідною температурою для ідеального газу. Для того, щоб отримати значення, близьке до експериментального, необхідно врахувати, що масу атома ^{4}He в усіх виразах потрібно замінити на деяку ефективну масу m^*, яка приблазно дорівнює $m^* \simeq 1.58\,m$ при $T = 0$ K [8]. Спосіб самоузгодженого обчислення ефективної маси в межах формалізму функцій Ґріна буде описано в наступному підрозділі.

3.6. Ефективна маса та енерґетичний спектр

Поняття ефективної маси для атома гелію-4 було застосоване Файнманом 1953 року [34]. Він стверджував, що у виразі для матриці густини замість "чистої" маси m потрібно підставити деяку ефективну масу m^*, яка є дещо більшою.

Ісіхара і Самульський [127] використали значення $m^* = 1.71\,m$ для того, щоб отримати добре узгодження теоретичних розрахунків з даними для звукової гілки енерґетичного спектра.

На відміну від цих феноменолоґічних припущень, виявилося можливим також розрахувати ефективну масу на підставі експериментальних значень для структурного фактора рідкого гелію-4 [128], результат $m^* = 1.70\,m$ був отриманий Вакарчуком.

Для розрахунку застосуємо тут зображення колективних змінних і ще раз запишемо гамільтоніан Бозе-системи, знехтувавши тричастинковими та вищими взаємодіями:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\varepsilon_k\Big[\rho_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}} - \partial_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}}\Big] + \frac{N}{2V}\nu_k\Big[\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - 1\Big]\right\} + \\ + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{kq}\,\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\partial_{-\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{q}}, \tag{3.54}$$

Доданок з одною сумою за хвильовим вектором у виразі (3.54) відповідає наближенню хаотичних фаз, а наступний (з двома сумами) — це деяка поправка. Припустімо, що наша система описується точно RPA-гамільтоніаном $\hat{H}^{(*)}$, тобто:

$$\hat{H}^{(*)} = \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\varepsilon^*_k\Big[\rho_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}} - \partial_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}}\Big] + \frac{N}{2V}\nu_k\Big[\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - 1\Big]\right\}, \tag{3.55}$$

де $\varepsilon^*_k = \hbar^2 k^2/2m^*$, m^* — ефективна маса атома ^{4}He. Ця величина — єдина, що підходить на роль ефективної, оскільки ми хочемо зберегти міжатомний потенціал як вихідну інформацію. Таке означення відповідає частковому "перенесенню" взаємодії та вищих поправок на кінетичний доданок енерґії, що певним чином співвідноситься з підходом Файнмана [34]. Крім того, як було показано Вакарчуком [49, 106], подібне перенормування приводить до виразів, отриманих для ефективної маси домішкового атома ^{3}He в рідині ^{4}He, але із заміною "чистої" маси атома ^{3}He на масу атома ^{4}He.

Можна визначити m^*, вимагаючи, щоб ефективний гамільтоніан (3.55) давав таку ж енерґію основного стану, що й вихідний гамільтоніан (3.54), тобто $\langle\hat{H}^{(*)}\rangle = \langle\hat{H}\rangle$:

$$\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\left\{\varepsilon^*_k\Big[\langle\rho_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}}\rangle^{(*)} - \langle\partial_{\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{k}}\rangle^{(*)}\Big] + \frac{N}{2V}\nu_k\Big[\langle\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\rangle^{(*)} - 1\Big]\right\} =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left\{ \varepsilon_k [\langle \rho_{\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_{\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{k}} \rangle] + \frac{N}{2V} \nu_k [\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle - 1] \right\} +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{kq} \, \langle \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \partial_{-\mathbf{k}} \partial_{-\mathbf{q}} \rangle, \tag{3.56}$$

де індекс $(*)$ біля кутових дужок введено для зручности, його зміст стане зрозумілим пізніше.

Далі розглянемо добуток трьох операторів $\langle ABC \rangle$. Як вже згадувалося на початку розділу, його можна обчислити як за допомогою функції Ґріна $G'_{CAB} \equiv \langle\langle C|AB \rangle\rangle$, так і функції $G_{BCA} \equiv \langle\langle BC|A \rangle\rangle$. Ми припустимо, що справджується перша можливість:

$$\langle ABC \rangle = \hat{\mathcal{A}}\, G'_{CAB} \equiv \langle\langle C|AB \rangle\rangle. \tag{3.57}$$

Іншими словами, знехтуємо для спрощення функціями типу $G_{BCA} \equiv \langle\langle BC|A \rangle\rangle$ (стосовно рівнянь руху це означає, що при побудові рівнянь руху використано лише RPA-доданок у гамільтоніані (3.54)). Такий вибір відповідає значенню $s = 0$ для параметра s з (3.5).

У наближенні хаотичних фаз для функцій Ґріна $G'_{\partial\rho\partial}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \equiv \langle\langle \partial_{\mathbf{k}_1} | \rho_{\mathbf{k}_2} \partial_{\mathbf{k}_3} \rangle\rangle$ матимемо таку систему рівнянь:

$$(\hbar\omega - \varepsilon_{k_2}) G'_{\partial\rho\rho}(-\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1) = \varrho \nu_{k_2} G'_{\rho\rho\partial}(-\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1) - g_{\partial\rho\partial}(\omega)$$

$$(\hbar\omega + \varepsilon_{k_2}) G'_{\rho\rho\partial}(-\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1) = 2\varepsilon_{k_2} G'_{\partial\rho\rho}(-\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1) - g_{\rho\rho\partial}(\omega), \tag{3.58}$$

де чотиричастинкові функції були розщеплені таким чином (даючи в результаті неоднорідну систему рівнянь):

$$\begin{aligned}\langle\langle AB|CD\rangle\rangle &= \langle BD\rangle\langle\langle A|C\rangle\rangle + \langle CA\rangle\langle\langle B|D\rangle\rangle + \\ &+ \langle AD\rangle\langle\langle B|C\rangle\rangle + \langle CB\rangle\langle\langle A|D\rangle\rangle. \end{aligned} \tag{3.59}$$

Самі неоднорідні члени в (3.58) мають вигляд:

$$\begin{aligned} g_{\rho\rho\partial}(\omega) &= \frac{\hbar^2}{2m}\Big[\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\, 2D_{k_1}G_{\rho\rho}(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2) + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\, S_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2|}G_{\partial\partial}(\mathbf{k}_1) + \\ &+ \mathbf{k}_2(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)\, D''_{k_1}G_{\partial\rho}(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2) + \mathbf{k}_2(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)\, D''_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2|}G_{\rho\partial}(\mathbf{k}_1)\Big], \\ g_{\partial\rho\partial}(\omega) &= \frac{\hbar^2}{m}\Big[\mathbf{k}_1(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)\, D_{k_1}G_{\partial\rho}(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2) + \mathbf{k}_1(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)\, D''_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2|}G_{\partial\partial}(\mathbf{k}_1)\Big]. \end{aligned} \tag{3.60}$$

Для середніх від парних добутків збережено позначення (3.15).

Тепер повернемося до співвідношення (3.56), при цьому значення індекса (*) стає зрозумілим: у лівій стороні цього рівняння потрібно замінити m на m^* у всіх виразах, включно з α_k, яке виникне при обчисленні середніх.

В основному стані ($T = 0$ K) гіперболічні котанґенси у рівнянні (3.15) дорівнюють одиниці. Таким чином, самоузгоджене рівняння для визначення m^* набуває вигляду:

$$-\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\varepsilon_k^*}{4}\left(\alpha_k^*-1\right)^2 = -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\neq 0}\frac{\varepsilon_k}{4}\left(\alpha_k-1\right)^2 -$$

$$-\frac{1}{N^2}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\frac{\mathbf{kq}}{\alpha_k\alpha_q\alpha_p}\times$$

$$\times\Big[\left(\frac{1}{\varepsilon_k\alpha_k+\varepsilon_q\alpha_q}+\frac{1}{\varepsilon_q\alpha_q+\varepsilon_p\alpha_p}\right)\left(\mathbf{kq}\frac{\varrho\nu_k\varrho\nu_q}{\varepsilon_k\varepsilon_q}+\mathbf{kp}\frac{\varrho\nu_k}{2\varepsilon_k}+\mathbf{qp}\frac{\varrho\nu_q}{2\varepsilon_q}\right)+$$
$$+\mathbf{kp}\frac{\varrho\nu_k}{2\varepsilon_k}\left(\frac{-\alpha_p}{\varepsilon_k\alpha_k+\varepsilon_q\alpha_q}+\frac{\alpha_q\alpha_p}{\varepsilon_q\alpha_q+\varepsilon_p\alpha_p}\right)-$$
$$-\mathbf{qp}\frac{\varrho\nu_q}{2\varepsilon_q}\left(\frac{\alpha_p}{\varepsilon_k\alpha_k+\varepsilon_q\alpha_q}+\frac{\alpha_k}{\varepsilon_q\alpha_q+\varepsilon_p\alpha_p}\right)\Big] \tag{3.61}$$

де $\mathbf{p}=\mathbf{k}+\mathbf{q}$. Крім того, тут записано вираз для питомої енерґії за допомогою введення множника $1/N$. Треба зауважити, що для невзаємодіючої системи, коли $\nu_k=0$, записане вище рівняння задовільняється тривіально: у цьому випадку $\alpha_k=\alpha_k^*=1$. Зокрема, середнє від добутку трьох операторів $\langle\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\partial_{-\mathbf{k}}\partial_{-\mathbf{q}}\rangle$ у (3.56) дорівнює нулеві, що приводить до добре відомого виразу для ідеального Бозе-газу:

$$E_{\text{ід.}}=\sum_{\mathbf{k}\neq0}\frac{\varepsilon_k}{2}\left[\operatorname{cth}\frac{\varepsilon_k}{2T}-1\right]=\sum_{\mathbf{k}\neq0}\frac{\varepsilon_k}{e^{\varepsilon_k/T}-1}.$$

Числові розрахунки було проведено за таких даних: рівноважна густина гелію-4 $\varrho=0.02185$ Å^{-3}; маса атома $m=4.0026$ а. о. м. Для фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії ν_k використано результати праці [4]. Перехід від підсумовування до інтеґрування здійснено звичайним шляхом: $\sum_{\mathbf{k}}\to V\int d\mathbf{k}/(2\pi)^3$. За верхню межу інтеґрування прийнято значення 16.0 Å^{-1}.

Розв'язком рівняння (3.61) за наведених умов є:

$$m^*=1.58\,m. \tag{3.62}$$

За допомогою функцій Ґріна можна також визначити спектр елементарних збуджень. Розв'язки системи (3.8) у наближенні хаотичних фаз (з відкиданням доданків з підсумовуванням за $\mathbf{q}$) є пропорційними до

$1/(\hbar^2\omega^2 - \varepsilon_k^2\alpha_k^2)$, що дає спектр

$$E_k = \pm\varepsilon_k\alpha_k \tag{3.63}$$

— дуже добре відомий результат [38]. Якщо ж замість звичайної маси використати ефективну в означенні ε_k та α_k, то отримана крива задовільно узгоджується з експериментальними результатами, див. Рис. 3.2.

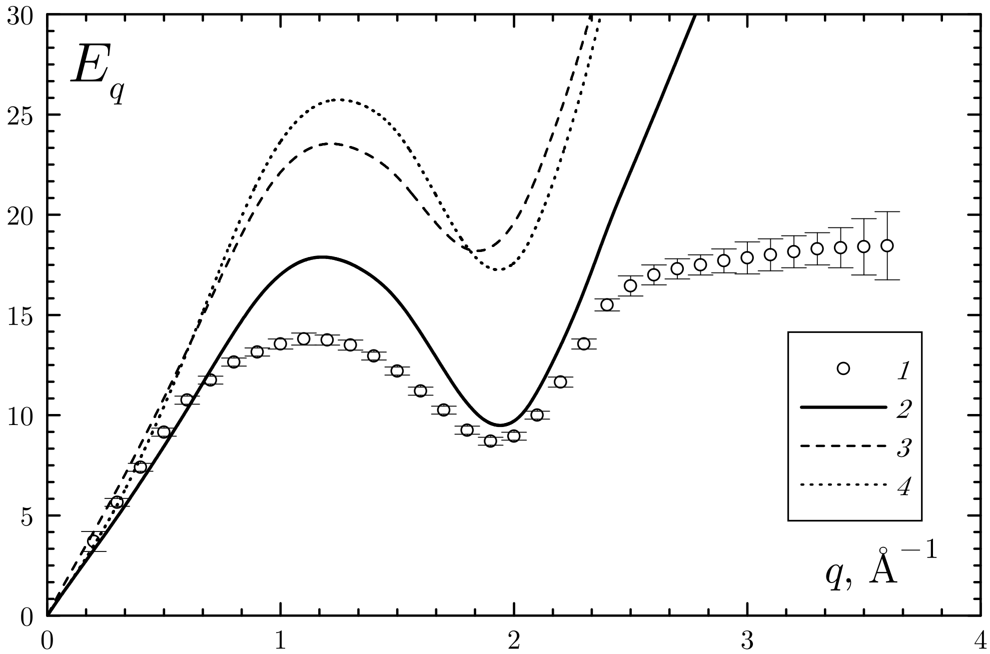


Рис. 3.2: Енерґетичний спектр рідкого гелію-4. *1* — експериментальні дані [129]; *2* — розрахунок (3.63) із врахуванням ефективної маси $m^* = 1.58\,m$ [8]; *3* — розрахунок (3.63) без врахування ефективної маси, $m^* = m$; *4* — спектр Файнмана $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2mS_k}$, де S_k — структурний фактор.

Легко бачити, що фононна гілка спектру відображена цілком добре, забезпечуючи значення швидкости звуку приблизно 230 м/с порівняно з експериментальним значенням 238 м/с при $T = 0.8$ K [110] або 240 м/с при $T = 0.1$ K [109]. Так званий "ротонний" мінімум також має значення, близьке до експериментального.

На додаток до сказаного, обчислене значення ефективної маси зсуває температуру Бозе-конденсації від $T_c = 3.14$ K для "чистої" маси до $T_c = 1.99$ K, тоді як експериментальне значення температури λ-переходу становить $T_\lambda = 2.17$ K.

3.7. Висновки до розділу 3

У розділі на підставі зображення колективних змінних за допомогою формалізму двочасових температурних функцій Ґріна було отримано вирази для термодинамічних функцій гелію-4 в широкому температурному інтервалі. За ними проведено числовий розрахунок питомої теплоємности як функції температури.

При цьому на проміжному етапі розрахунків одержано систему рівнянь для функцій Ґріна типу "густина–густина", яка в постRPA-наближенні виявляється замкненою, однак рівняння для потрійних функцій Ґріна є досить складними для того, щоб користуватися їх розв'язками в аналітичних викладках. Тому натомість для врахування поправок до наближення хаотичних фаз введено допоміжну функцію, для якої записано самоузгоджене рівняння. У межах цього ж формалізму проведено самоузгоджений розрахунок ефективної маси атома ^{4}He.

Основні одержані результати (температурна залежність питомої теплоємности, температура фазового переходу) добре узгоджуються з експериментальними даними.

РОЗДІЛ 4

Бозе-система з малою кількістю частинок

4.1. Вступ

Метою цього розділу є отримання термодинамічного опису взаємодіючої багаточастинкової Бозе-системи на підставі результатів для системи з малою кількістю частинок N. Ми почнемо аналіз з $N = 2,\ 3,\ 4$, і т.д., щоб потім екстраполювати ці результати на випадок $N = \infty$ після того, як виявимо певні залежності від N і від температури. Особливу увагу буде зосереджено на тому, що навіть система, яка складається з декількох частинок, виявляє деякі особливості на кривій теплоємности (такі як максимум, що означає фазовий перехід у границі $N \to \infty$). Покажемо, що вже система з 12–13 частинок якісно поводиться як майже безмежна у широкому температурному інтервалі.

Системи бозонів з відносно малою кількістю частинок експериментально вдалося отримати лише декілька років тому як частинки в "пастках" [2, 3]. Це дає змогу розвивати методи дослідження таких систем, результати яких згодом можна порівнювати з експериментальними даними.

Для обчислення термодинамічних функцій вільної Бозе-системи ми використовуватимемо формалізм статистичної суми. Дещо подібний метод — рекурентну формулу для статистичної суми, запропоновану Борманом і Франке [130] — застосували Ден і Шмідт [131, 132] для вивчення скінчених систем упійманих бозонів (trapped bosons). На відміну від цих робіт, наші вирази не мають того обмеження, що енерґія системи мусить бути записана як сума одночастинкових енерґій. Тобто її можна застосувати не лише для опису ідеального газу, але й для взаємодіючої системи.

Загалом, неможливо отримати точку неаналітичности функції теплоємности, маючи скінчену кількість частинок. Таким чином, ніякого "чистого" фазового переходу у цій моделі ми не виявимо. Але ми очікуємо, що наші результати будуть якісно узгоджуватися з експериментальними даними, чого цілком достатньо для такої моделі.

4.2. Вихідні вирази

Розглядатимемо систему N частинок, гамільтоніан якої $\hat{H}_N$, а статистична сума $Z_N = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta \hat{H}_N}$, де β є оберненою температурою, $\beta = 1/T$.

У координатному зображенні маємо

$$Z_N = \int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_N \; R_N(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N \,|\, \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N), \tag{4.1}$$

тут R_N — матриця густини. Вважатимемо частинки бозонами масою m (атоми ^{4}He), координати $\mathbf{r}_i$ яких обмежені об'ємом V, що є кубом з періодичними граничними умовами. У цьому випадку R_N задається таким чином [49, 106]:

$$\begin{aligned} R_N(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N \,|\, \mathbf{r}'_1, \ldots, \mathbf{r}'_N) \;&=\; P_N(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \times \\ &\times \frac{1}{N!} \frac{1}{\lambda^{3N}} \sum_Q \exp\left(-\frac{\pi}{\lambda^2} \sum_{j=1}^{N} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}'_{Q_j})^2 \right), \end{aligned} \tag{4.2}$$

де Q означає всі можливі перестановки $(1, \ldots, N)$, а λ — довжина теплової хвилі де Бройля:

$$\lambda = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{1/2}. \tag{4.3}$$

Множник P_N необхідний для врахування взаємодії, про нього йтиметься пізніше.

Для вільної енерґії F_N матимемо

$$F_N = -\frac{1}{\beta} \ln Z_N, \tag{4.4}$$

повна енерґія

$$E_N = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F_N), \tag{4.5}$$

а питома теплоємність

$$C_N = \beta^2 \left[\frac{Z_N''}{Z_N} - \left(\frac{Z_N'}{Z_N} \right)^2 \right], \tag{4.6}$$

штрихи тут означають похідну за β.

4.3. Ідеальний і взаємодіючий Бозе-газ

Ідеальний Бозе-газ є добре вивченою системою, вирази для термодинамічних функцій якої відомі. Отже, він може бути добрим тестовим прикладом застосовности методу, який ми маємо намір використати.

Обчислення термодинамічних функцій ідеальної Бозе-системи з малою кількістю частинок і порівняння їх з відомими результатами для безмежної системи дає можливість виявити закономірності, зокрема знайти таке значення N, коли декілька частинок починають виявляти статистичну поведінку.

Вираз для статистичної суми N ідеальних бозонів можна знайти явно. Для цього запишемо матрицю густини R_N таким чином:

$$R_N(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N \,|\, \mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{N!}\frac{1}{\lambda^{3N}}\Delta_N, \tag{4.7}$$

де

$$\Delta_N = \begin{vmatrix} 1 & K_{12} & K_{13} & \ldots & K_{1N} \\ K_{21} & 1 & K_{23} & \ldots & K_{2N} \\ \vdots & & \ddots & & \\ K_{N1} & K_{N2} & K_{N3} & \ldots & 1 \end{vmatrix}_+ , \tag{4.8}$$

а

$$K_{ij} \;\equiv\; K(r_{ij}) = e^{-\pi r_{ij}^2/\lambda^2}, \qquad r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|, \qquad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j. \tag{4.9}$$

Індекс "+" означає, що кожен "−" у виразі для визначника треба замінити на "+" (такий об'єкт ще називають перманентом).

Статистична сума перепишеться так:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\frac{1}{\lambda^{3N}}\int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_N\, \Delta_N. \tag{4.10}$$

Перманент (4.8) можна записати так [49, 106]:

$$\begin{aligned} \Delta_N \;=\; & \Delta_{N-1}^{(1)} + \sum_{1<i\le N} K_{1i}K_{i1}\Delta_{N-2}^{(1,j)} + \\ & + \sum_{1<i<j\le N} (K_{1i}K_{ij}K_{j1} + K_{1j}K_{ji}K_{i1})\Delta_{N-3}^{(1,i,j)} + \ldots , \end{aligned} \tag{4.11}$$

Верхні індекси в Δ_{N-l} означають відсутність відповідних рядків і стовпців у виразі для Δ_{N-l}.

Інтеґруючи (4.10), отримаємо:

$$Z_N = \frac{1}{N}\left\{\frac{V}{\lambda^3}Z_{N-1} + \frac{1}{(\lambda^3)^2}Z_{N-2}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\, K_{12}K_{21} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{(\lambda^3)^3}Z_{N-3}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3\, K_{12}K_{23}K_{31} + \ldots\right\}. \quad (4.12)$$

Після фур'є-перетворення матимемо:

$$K(r) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}}K_{\mathbf{q}},$$
$$K_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{qr}}K(r) = \lambda^3 e^{-\lambda^2 q^2/4\pi}. \quad (4.13)$$

статистична сума буде

$$Z_N = \frac{1}{\rho\lambda^3}\sum_{l=1}^{N}\frac{Z_{N-l}}{l^{3/2}}, \qquad Z_0 \equiv 1. \quad (4.14)$$

Ці вирази вже можна застосовувати для обчислення статистичної суми і, таким чином, термодинамічних функцій.

Можна послідовно розрахувати питомі теплоємності C_N ідеальної системи $N = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$ частинок, використовуючи (4.6) і (4.14). На додаток, можна явно визначити низько- та високотемпературну асимптотики C_N, а саме:

$$\left.\frac{C_N}{N}\right|_{T\to\infty} = \frac{3}{2}, \quad (4.15)$$
$$\left.\frac{C_N}{N}\right|_{T\to 0} = \frac{3}{2}\frac{1}{N} + A_N T^{3/2}, \qquad A_N = \text{const відносно } T. \quad (4.16)$$

У випадку $N = \infty$ ці температурні залежності збігаються з відомими результатами для ідеального Бозе-газу [133]. Для низьких температур маємо:

$$\left.\frac{C_N}{N}\right|_{N=\infty} = \frac{15}{4}\frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}; \tag{4.17}$$

високотемпературна границя дорівнює 3/2. Критична температура T_c (точка неаналітичности на кривій теплоємности) у цьому випадку визначається з рівняння:

$$\rho\lambda_c^3 = \zeta(3/2), \tag{4.18}$$

де λ_c довжина теплової хвилі де Бройля для T_c, а ζ означає ζ-функцію Рімана, $\zeta(3/2) = 2.612\ldots$. Беручи $\rho = 0.02185$ Å^{-3} для рідкого ^{4}He, отримаємо $T_c = 3.138$ K.

У цій роботі ми розглядатимемо системи з різними N від 2 до 1200. Як вже згадувалося раніше, неможливо отримати неаналітичну функцію теплоємности у випадку скінченої системи, тому за критичну температуру $T_c^{(N)}$ братимемо значення максимуму функції C_N.

Виявляється, що ці значення можна добре описати лінійною залежністю:

$$\rho\left[\lambda_c^{(N)}\right]^3 \simeq 2.61 - \frac{c}{N^{1/3}}, \quad c \simeq 1.9, \tag{4.19}$$

де $\lambda_c^{(N)}$ — довжина теплової хвилі де Бройля для $T_c^{(N)}$. Легко зауважити, що 2.61 дуже близьке до $\zeta(3/2) = 2.612\ldots$.

Подібне співвідношення маємо також для максимумів $C_N^{\max}/N$ функцій C_N. Отже, треба очікувати, що границя $N \to \infty$ дасть правильну криву (див. рис. 4.1 і 4.2).

Результати також наведено в Таблиці 4.1.

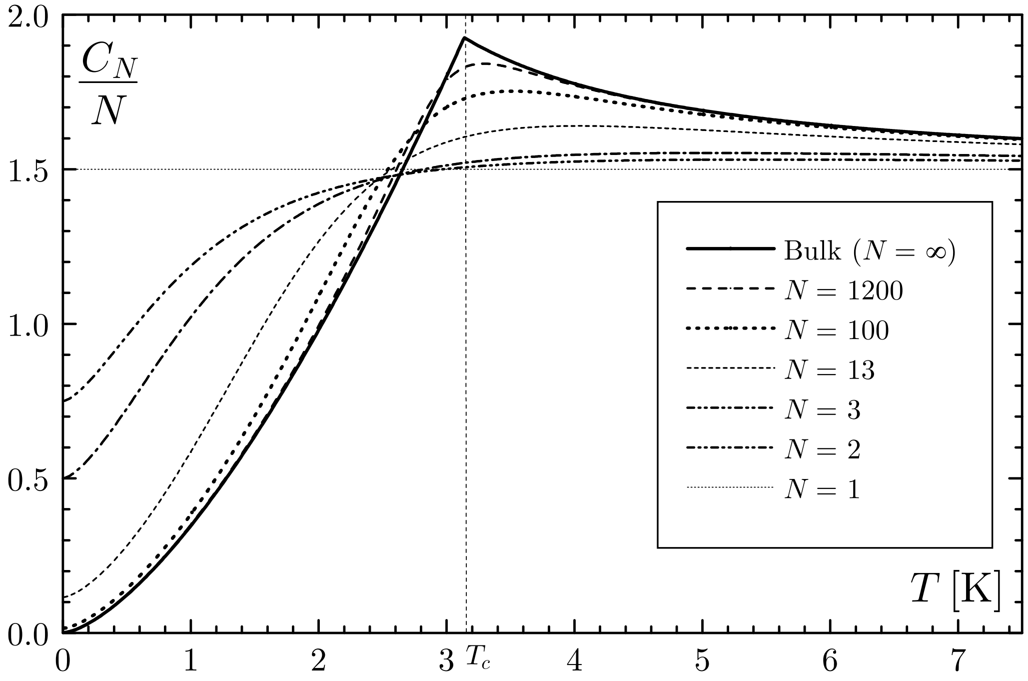


Рис. 4.1: Питомі теплоємності ідеальної Бозе-системи.

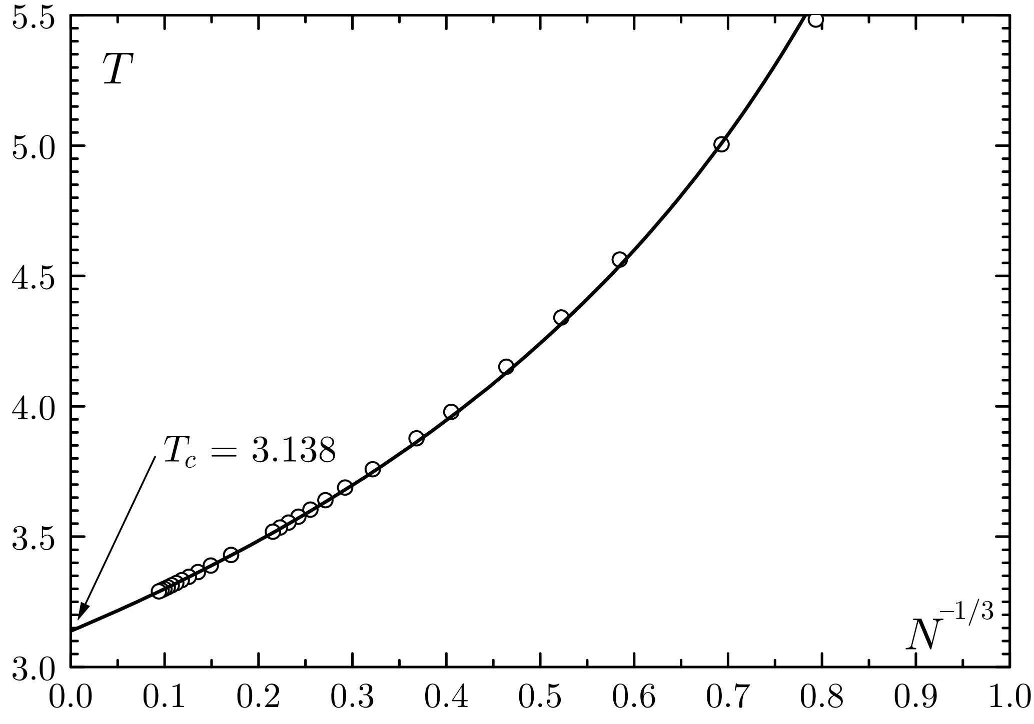


Рис. 4.2: Температура максимумів функції C_N/N в ідеальному випадку. Суцільна лінія показує залежність (4.19), кружечки відповідають даним з Таблиці 4.1.

Таблиця 4.1: Основні результати для ідеальної системи

N	$\rho\left[\lambda_c^{(N)}\right]^3$	$C_N^{\max}/N$	N	$\rho\left[\lambda_c^{(N)}\right]^3$	$C_N^{\max}/N$
1	—	1.500	90	2.185	1.747
2	1.131	1.532	100	2.200	1.753
3	1.297	1.553	200	2.286	1.783
5	1.490	1.582	300	2.328	1.799
7	1.606	1.602	400	2.354	1.809
10	1.717	1.624	500	2.373	1.816
15	1.830	1.649	600	2.387	1.822
20	1.902	1.666	700	2.399	1.827
30	1.993	1.690	800	2.408	1.831
40	2.050	1.706	900	2.416	1.834
50	2.091	1.718	1000	2.423	1.837
60	2.123	1.727	1100	2.429	1.839
70	2.147	1.735	1200	2.434	1.842
80	2.168	1.742	∞	2.612	1.926

Із рис. 4.1 легко бачити, що добре якісне і задовільне кількісне узгодження досягається при $N = 100$. Хоча, характерні елементи кривої теплоємности з'являються і при менших N, напр., чітко виражений максимум маємо вже при $N = 10 \div 15$. Як буде показано далі, саме ці значення можна розглядати як границю між "індивідуальною" та статистичною поведінкою системи N частинок.

Враховувати взаємодії в багаточастинковій системі — дуже складна задача, яка досі не розв'язана повністю (якщо не враховувати безпосередні числові розрахунки). Натомість для системи з малою кількістю частинок таку задачу можна розглядати, ґрунтуючись на перших принципах, тобто включити взаємодію в розрахунки у явному вигляді. З математичного погляду обчислення значно ускладнюються при зростанні кількости частинок, і пряме врахування взаємодії швидко стає неможливим.

Ми братимемо за основу вираз для матриці густини R_N у випадку ідеальних частинок. У таких системах як ^{4}He суттєвими є малі міжатомні віддалі, коли атоми поводяться майже як тверді сфери. Отже, хвильові функції повинні швидко загасати при наближенні двох атомів на відстань, що дорівнює діаметру такої сфери.

У зв'язку з цим ми враховуватимемо взаємодію шляхом заміни Δ_N у (4.10) на $\Delta_N P_N$, де P_N є функцією координат частинок:

$$Z_N = \frac{1}{N!}\frac{1}{\lambda^{3N}}\int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_N\, \Delta_N P_N. \tag{4.20}$$

Для простоти вважатимемо взаємодії парними, оскільки ми очікуємо, що наші результати повинні мати радше якісний, ніж кількісний характер. У випадку потенціалу твердих сфер отримаємо

$$\begin{aligned} &P_N(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{N-1}\prod_{j=2}^{N} P(i,j), \\ &P(i,j) = P(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = P(r_{ij}), \\ &P(i,j) = 1 + f(i,j) = \begin{cases} 0, & r_{ij} \le a \\ 1, & r_{ij} > a \end{cases}, \end{aligned} \tag{4.21}$$

a — діаметр твердої сфери.

Тоді статистичну суму можна записати так:

$$Z_N = \frac{1}{\rho\lambda^3}\sum_{l=1}^{N} b'_l(N) Z_{N-l}, \qquad Z_0 \equiv 1, \tag{4.22}$$

$$\lambda = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m^*} \right)^{1/2}, \tag{4.23}$$

де m^* — ефективна маса атома ^{4}He, $m^* \simeq 1.58\, m$ (3.62).

Вираз (4.20) інтеґруватимемо у два етапи. Першим буде *кільцеве наближення* , а друге — *наближення вільного об'єму* .

1) Кільцеве наближення полягає в тому, що міжчастинкові взаємодії враховуємо тільки в кільці 1—2—3—...—N—1. Іншими словами, нехтуємо взаємодією між першою і третьою, четвертою і т.д. частинками, між другою і четвертою, п'ятою і т. д., ... Це дозволяє інтеґрувати (4.20), використовуючи Фур'є-перетворення, як це було зроблено в (4.10)–(4.13). Використовуючи ще наближення вільного об'єму, отримаємо для коефіцієнтів $b_l'(N)$:

$$b_l'(N) = \begin{cases} \left[1 - \frac{v_0}{V}(N-l)\right]^2 \left[1 - \frac{v_0}{V}(N-3)\right] \prod\limits_{k=3}^{l-1} \left[1 - \frac{v_0}{V}(N-k)\right] I_{l-1}, & l > 3 \\ \left[1 - \frac{v_0}{V}(N-l)\right]^l I_{l-1}, & l \le 3 \end{cases} \tag{4.24}$$

Тут ми використали такі позначення:

$$v_0 = \frac{4}{3}\pi a^3, \tag{4.25}$$

$$I_n = \begin{cases} 8(4\pi)^{n-1} \int\limits_0^\infty dQ\; Q^2 \left(\frac{1}{4\pi} e^{-Q^2/4\pi} - \frac{1}{Q} \int_0^{a/\lambda} x \;\sin Qx\; e^{-\pi x^2}\, dx \right)^{n+1}, & n > 0 \\ 1, & n = 0 \end{cases} \tag{4.26}$$

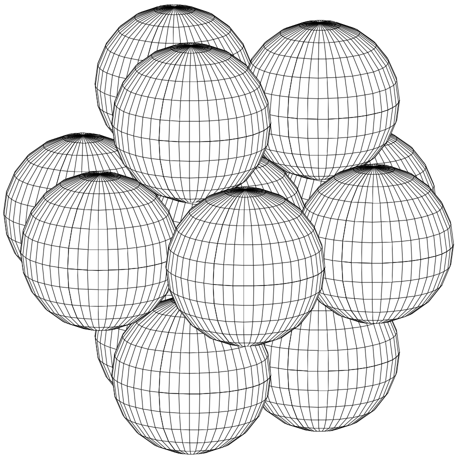
2) У наближенні вільного об'єму ми опосередковано врахуємо ті взаємодії, якими знехтували в кільцевому наближенні. З цією метою кожен інтеґрал за $\mathbf{r}_i$, $i = 1, \ldots, l$ помножимо на $(1 - nv_0/V)$, де n дорівнює кількості множників $P(i, j)$, які не взято до уваги при Фур'є-перетворенні. Щоб прояснити це твердження, розглянемо найпростіший нетривіальний приклад з $N = 4$. Відповідно до (4.24) маємо:

- $b_1'(4) = \left[1 - \dfrac{3v_0}{V}\right] I_0$. Інтеґрал за $\mathbf{r}_1$ "зачіпляє" такі *три* множники: $P(1, 2)$, $P(1, 3)$, $P(1, 4)$.
- $b_2'(4) = \left[1 - \dfrac{2v_0}{V}\right]^2 I_1$. Інтеґрал за $\mathbf{r}_1$ "зачіпляє" $P(1, 2)$, $P(1, 3)$, $P(1, 4)$, але $P(1, 2)$ вже включено в I_1. Інтеґрал за $\mathbf{r}_2$ "зачіпляє" ще $P(2, 3)$ та $P(2, 4)$.
- $b_3'(4) = \left[1 - \dfrac{v_0}{V}\right]^3 I_2$. Кожен інтеґрал за $\mathbf{r}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ "зачіпляє" додатково $P(i, 2)$.
- $b_4'(4) = \left[1 - \dfrac{v_0}{V}\right]^2 I_3$. $P(1, 3)$ та $P(2, 4)$ не включено в I_3.

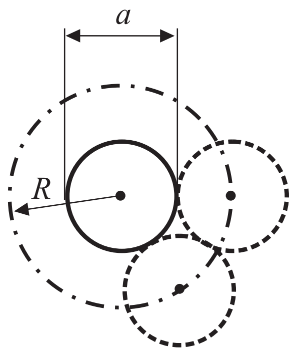
Таким чином, наближення вільного об'єму покращує кільцеве наближення. Однак, виявляється неможливим застосувати його для великих значень l та N, оскільки в цьому випадку велика кількість множників $P(i, j)$ вже інтеґрується не безпосередньо, а враховується через формальні коефіцієнти.

В обчисленнях вважатимемо діаметр твердої сфери $a = 2.2$ Å. Це значення можна отримати кількома способами. Один з них полягає в тому, що пакування атомів (твердих сфер) розглядатимемо як щільне (12 атомів навколо одного центрального). Для ілюстрації наведено рис. 4.3.

Хоча така структура дещо не відповідає дійсності, оскільки перше координаційне число для рідкого гелію-4 менше за 12 (воно становить 8.1 при $T = 4.24$ K і зростає до 8.6 при $T = 2.25$ K, див., напр., [134]), проте цією різницею нехтуватимемо.



(а)



(б)

Рис. 4.3: Атоми гелію-4 як тверді сфери. (а) Перша замкнена сфера з 12 атомів, що оточує центральний атом. Одного атома не видно, оскільки він розміщений безпосередньо за центральним атомом. (б) Суцільна лінія показує “поверхню атома”, штрихова лінія показує “поверхню чужих атомів”, штрих-пунктирна лінія — “поверхня недоступного простору”. Таким чином, вважаючи об’єм “недоступного простору” $4\pi R^3/3$ за об’єм, який займає один атом, можна отримати, що діаметр твердої сфери $a = 2.219$ Å.

З іншого боку, з парної функції розподілу [122] діаметр твердої сфери $a = 2.212$ Å, що добре узгоджується з оцінкою $a = 2.2$ Å.

Взагалі кажучи, з урахуванням незалежности множника $P(i, j)$ від температури, а також вигляду функції I_n, можна зробити висновок про те, що температура буде перемасштабовуватись відповідно до зміни величин a та m^*. Справді, з (4.26) бачимо, що температура входить у комбінації a/λ, тобто визначається добутком $a^2 m^*$. Враховуючи значення цих величин з [6] ($a = 2.1$ Å, $m^* = 1.70\, m$), отримаємо такий зв’язок: $T = 1.02\, T_{[6]}$, де T позначає температуру, якою користуватимемось тут, а $T_{[6]}$ — температурну шкалу з [6].

Розрахунок показує, що зі зростанням N положення максимумів кривих теплоємности швидко прямують до значення з проміжку 2.15–2.25 K. Точна температура λ-переходу становить 2.17 K.

Як уже згадувалося, у випадку ідеального газу лінійна (за $N^{-\varepsilon}$) залежність описує послідовність максимумів C_N/N цілком добре:

$$\frac{C_N^{\max}}{N} \simeq C_\infty^{\max} - aN^{-\varepsilon}, \quad \varepsilon = 1/3. \tag{4.27}$$

Припускаючи, що така сама форма збережеться й у випадку взаємодіючої системи, можна знайти: $C_\infty^{\max} = 13.6$ і $\varepsilon = 0.0608$, що робить послідовність максимумів такою:

$$\frac{C_N^{\max}}{N} \simeq 13.6 - 12.9\, N^{-\varepsilon}, \quad \varepsilon = 0.0608, \tag{4.28}$$

див. також рис. 4.4

Хоча й малі значення N, такі як 12, 13, ще не дозволяють визначати поведінку при $N \to \infty$, проте отримуємо максимальне значення питомої теплоємности в межах експериментальних даних [67, 110, 135].

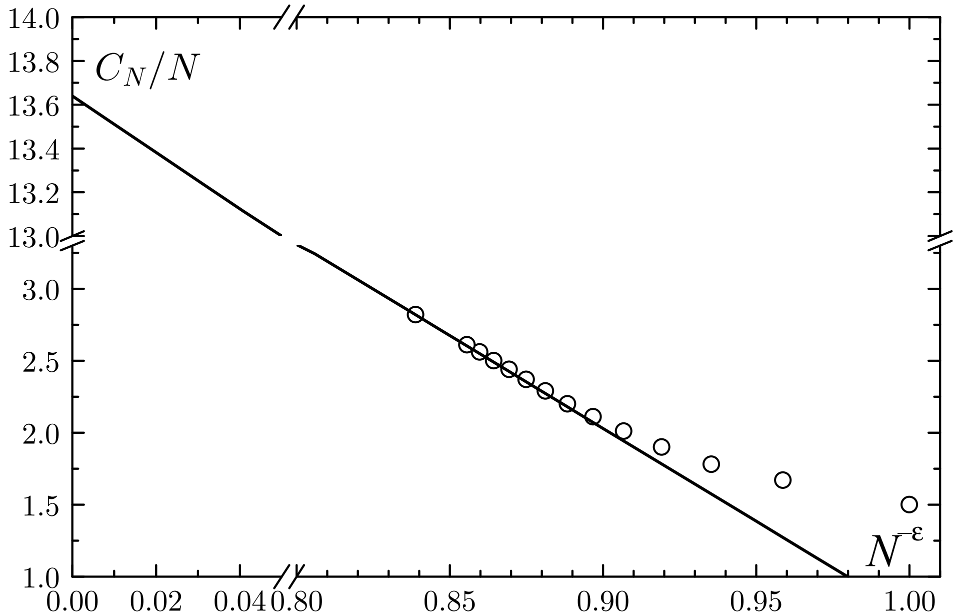


Рис. 4.4: Значення $C_N^{\max}/N$ для системи твердих сфер. Суцільна лінія показує залежність (4.28), кружечки відповідають даним з Таблиці 4.2.

Таблиця 4.2: Результати для взаємодіючої системи

N	Наближення		Точні значення	
	$T_c^{(N)}$	$C_N^{\max}/N$	$T_c^{(N)}$	$C_N^{\max}/N$
1	—	1.50	—	1.50
2	2.80	1.67	2.80	1.67
3	2.49	1.78	2.15	1.83
4	2.24	1.90	—	—
5	2.21	2.01	—	—
6	2.20	2.11	—	—
7	2.19	2.20	—	—
8	2.19	2.29	—	—
9	2.19	2.37	—	—
10	2.19	2.44	—	—
11	2.19	2.50	—	—
12	2.19	2.56	—	—
13*	2.19	2.61	—	—
18	2.19	2.82	—	—
∞	2.15–2.25	13.6**	—	—

Примітки:

* Ми припускаємо, що вже система з 12–13 частинок поводиться майже як безмежна, оскільки атоми ^{4}He “запаковані” досить компактно, щоб сказати, що один атом оточений 12 іншими атомами. Таким чином, 13 атомів становлять першу замкнену сферу (див. Рис. 5).

** Експериментальне значення становить $\simeq 16$. Питому теплоємність в λ-точці довго вважали безмежною, але останні експерименти вказують на скінчений пік [67].

На рис. 4.5 зображено графіки питомої теплоємности як функції температури для кількох значень N.

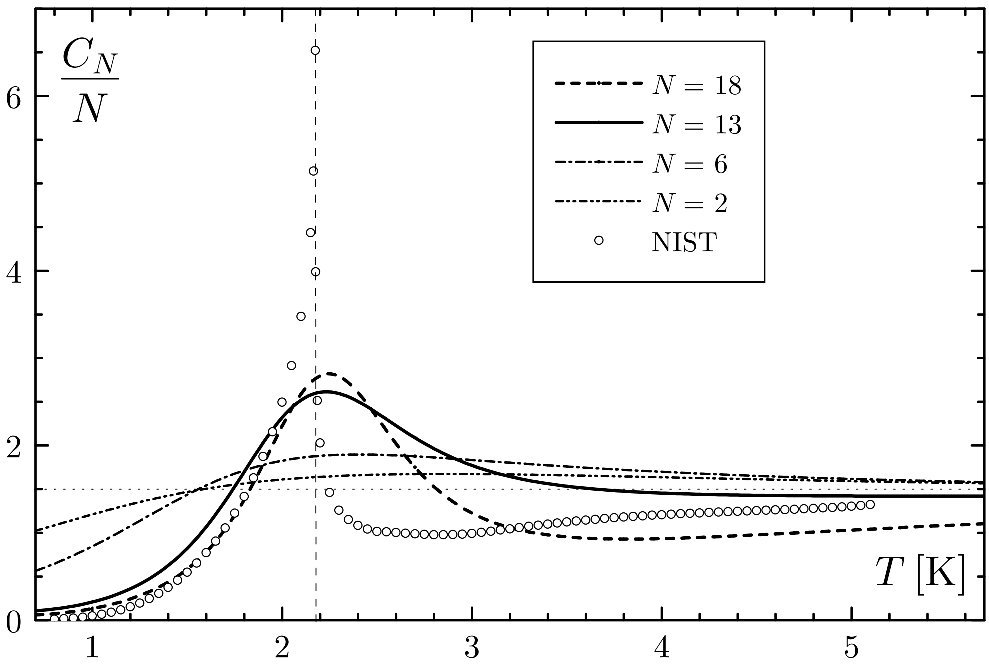


Рис. 4.5: Питома теплоємність у наближенні вільного об'єму та в кільцевому наближенні. Кружечками показано дані NIST для C_V [110].

Можна записати також точні вирази для статистичної суми подібно до випадку кільцевого наближення та наближення вільного об'єму:

$$Z_N = \frac{1}{\rho\lambda^3} \sum_{l=1}^{N} b_l^*(N) Z_{N-l}, \qquad Z_0 \equiv 1. \tag{4.29}$$

Із розкладу (4.11) і формули (4.20) отримаємо (без наближень):

$$\begin{aligned} b_l^*(N) &= \frac{1}{V} \frac{1}{(N-l)!} \frac{1}{(\lambda^3)^{N-1}} \int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_l \; K_{12} \ldots K_{l-1,l} K_{l1} \times \\ &\times \prod_{i=1}^{l-1} \prod_{j=i+1}^{l} P(i,j) \; \mathcal{B}_{lN}(1, \ldots, l), \end{aligned} \tag{4.30}$$

де коефіцієнти $\mathcal{B}_{lN}(1,\ldots,l)$ визначаються виразом:

$$\mathcal{B}_{lN}(1,\ldots,l)=\int d\mathbf{r}_{l+1}\ldots\int d\mathbf{r}_N\frac{\Delta_{N-l}^{(1,\ldots,l)}P_{N-l}^{(1,\ldots,l)}\prod\limits_{i=1}^{l}\prod\limits_{j=l+1}^{N}P(i,j)}{Z_{N-l}},\qquad(4.31)$$

де

$$P_{N-l}^{(1,\ldots,l)}=\prod_{i=l+1}^{N-1}\prod_{j=i+1}^{N}P(i,j).\qquad(4.32)$$

Введемо додаткове позначення для спрощення записів:

$$R(1,2)=\int d\mathbf{r}_3\ P(1,3)P(2,3),\qquad(4.33)$$

$$\widetilde{K}_{ij}=K_{ij}P(i,j).\qquad(4.34)$$

Тоді незалежно від міжатомного потенціалу, тобто для довільного P_N, отримаємо такі коефіцієнти $b_l^*(N)$:

$$\begin{aligned}
b_1^*(1) &= 1,\\
b_1^*(2) &= \frac{1}{V^2}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\ P(1,2),\\
b_1^*(3) &= \frac{\displaystyle\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\, P(1,2)R(1,2)\left(1+K_{12}K_{21}\right)}{\displaystyle\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\, P(1,2)\left(1+K_{12}K_{21}\right)},\\
b_2^*(2) &= \frac{1}{V}\frac{1}{\lambda^3}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\, K_{12}K_{21}P(1,2),\\
b_2^*(3) &= \frac{1}{V^2}\frac{1}{\lambda^3}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\, K_{12}K_{21}P(1,2)R(1,2),\\
b_3^*(3) &= \frac{1}{V}\frac{1}{(\lambda^3)^2}\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3\, \widetilde{K}_{12}\widetilde{K}_{23}\widetilde{K}_{31}.
\end{aligned}\qquad(4.35)$$

Ці вирази можна переписати через однократні інтеґрали:

$$
\begin{aligned}
b_1^*(2) &= \frac{4\pi}{V}\int_0^\infty P(r_{12}) r_{12}^2\, dr_{12}, \\
b_2^*(2) &= \frac{4\pi}{\lambda^3}\int_0^\infty K_{12}^2 P(r_{12}) r_{12}^2\, dr_{12}, \\
R(r_{12}) &= \frac{8}{r_{12}}\int_0^\infty \frac{dq}{q}\sin qr_{12}\left\{\int_0^\infty rP(r)\sin qr\, dr\right\}^2, \\
b_3^*(3) &= \frac{32\pi}{(\lambda^3)^2}\int_0^\infty \frac{dq}{q}\left\{\int_0^\infty K_{12}P(r_{12}) r_{12}\sin qr_{12}\, dr_{12}\right\}^3, \\
b_2^*(3) &= \frac{4\pi}{V\lambda^3}\int_0^\infty K_{12}^2 P(r_{12}) R(r_{12}) r_{12}^2\; dr_{12}.
\end{aligned}
\tag{4.36}
$$

У наближенні твердих сфер інтеґрування проводиться просто. Отримаємо:

$$
\begin{aligned}
b_1^*(1) &= 1, \\
b_1^*(2) &= 1 - \frac{v_0}{V}, \\
b_2^*(2) &= \frac{1}{2^{3/2}}\left\{1 - \mathrm{erf}\left(\frac{a}{\lambda}\sqrt{2\pi}\right)\right\} + \frac{a}{\lambda}e^{-2\pi a^2/\lambda^2}, \\
b_1^*(3) &= \frac{V - 3v_0 + \frac{81}{32}\frac{v_0^2}{V} + \lambda^3 b_2^*(3)}{Vb_1^*(2) + \lambda^3 b_2^*(2)}, \\
b_2^*(3) &= \frac{V - v_0}{V}\left\{\frac{a}{\lambda}\left(e^{-2\pi a^2/\lambda^2} - 2e^{-8\pi a^2/\lambda^2}\right) + \right. \\
&\qquad \left. + \frac{1}{2^{3/2}}\left(\mathrm{erf}\left(2\frac{a}{\lambda}\sqrt{2\pi}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{a}{\lambda}\sqrt{2\pi}\right)\right)\right\} + \\
&\quad + \frac{\pi a^2\lambda}{V}\left\{\frac{a^2}{\lambda^2}\left(e^{-2\pi a^2/\lambda^2} - 4e^{-8\pi a^2/\lambda^2}\right) + \frac{1}{2\pi}\left(e^{-2\pi a^2/\lambda^2} - e^{-8\pi a^2/\lambda^2}\right)\right\} +
\end{aligned}
$$

$$+\frac{\pi\lambda^3}{12V}\left\{e^{-2\pi a^2/\lambda^2}\left(\frac{a^4}{\lambda^4}+\frac{1}{\pi}\frac{a^2}{\lambda^2}+\frac{1}{2\pi^2}\right)-\right.$$

$$\left.-e^{-8\pi a^2/\lambda^2}\left(16\frac{a^4}{\lambda^4}+\frac{4}{\pi}\frac{a^2}{\lambda^2}+\frac{1}{2\pi^2}\right)\right\}+$$

$$+\frac{V-2v_0}{V}\left\{\frac{1}{2^{3/2}}\left(1-\operatorname{erf}\left(2\frac{a}{\lambda}\sqrt{2\pi}\right)\right)+2\frac{a}{\lambda}e^{-8\pi a^2/\lambda^2}\right\},$$

$$b_3^*(3) = 32\pi\int_0^\infty\frac{dQ}{Q}\left\{\frac{Q}{4\pi}e^{-Q^2/4\pi}-\int_0^{a/\lambda}x\ \sin Qx\ e^{-\pi x^2}\ dx\right\}^3. \tag{4.37}$$

Наше R збігається з відповідною функцією з [136]:

$$R(r_{12})=\int d\mathbf{r}_3\ (1+f_{13})(1+f_{23})=V-2v_0+g_1(r_{12}), \tag{4.38}$$

Функція $g_1(r_{12})$ задається виразом

$$g_1(r)=\int d\mathbf{r}_3\, f_{13}f_{23}=\begin{cases}\frac{2}{3}\pi a^3\left(2-\frac{3}{2}\frac{r}{a}+\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right), & r<2a\\ 0, & r\geq 2a\end{cases}. \tag{4.39}$$

Порівняння точних результатів з наближеними наведено в табл. 4.2.

Наші вирази для статистичної суми мають правильну класичну границю $Z_N^{(\mathrm{cl})}$: $(\hbar\to 0)$ [137].

$$Z_N^{(\mathrm{cl})}=\frac{1}{N!}\frac{1}{\lambda^{3N/2}}\int d\mathbf{r}_1\ldots\int d\mathbf{r}_N\prod_{1\leq i<j\leq N}P(i,j). \tag{4.40}$$

Це є свідченням застосовности описаного методу в широкому температурному діапазоні.

4.4. Висновки до розділу 4

Показано, що запропонований метод дає добре узгодження обчислених результатів з експериментальними даними. Ми отримали не лише якісний, але й цілком задовільний кількісний збіг.

Розклад за $1/N$, знайдений тут, вказує на існування деякого параметра ε, який має значення $1/3$ у випадку ідеальної системи. Із чисельного аналізу наших результатів ми оцінили його як $\varepsilon = 0.0608$ для взаємодіючої системи.

РОЗДІЛ 5

Конденсатна фракція в рідкому гелії-4

Розрахунок частки Бозе-конденсату (конденсатної фракції) в рідкому ^{4}He виявляється завданням, теоретичний підхід до якого становить складну проблему.

На додаток до згаданих у розділі 1 методів проаналізуємо ще один. Враховуючи те, що експериментальне визначення кількости Бозе-конденсату відбувається непрямо, а числові методи потребують значних обчислювальних потужностей, то найпростішим з технічного погляду є напівфеноменологічний підхід, який, однак, суттєво залежить від точности та надійности вхідних даних. Зокрема, цікавий спосіб визначення конденсатної фракції запропонований Маєрсом у праці [138]. Він ґрунтується на припущенні про те, що інтенсивність структурного фактора S_q системи в області надплинної фази зменшується в $(1-f)^2$ разів, де f — відносна кількість Бозе-конденсату. Це твердження справедливе для когерентного розсіяння, а саме таким є випадок малих q. Для значення S_0 маємо таку температурну залежність:

$$S_0(T) = \varrho\kappa_T T = \gamma T/mc^2\kappa_T,$$

де ϱ — густина ^{4}He, κ_T — ізотермічна стисливість, γ — відношення теплоємностей, m — маса атома ^{4}He, c — швидкість звуку. Ці величини, в принципі, можна виміряти на експерименті, відповідні дані існують. Тоді з припущення, що температурна зміна S_0 цілком завдячує еволюції конденсату, отримаємо:

$$\begin{aligned}\varrho\kappa_T &= \alpha(1-f)^2, \qquad \alpha = \text{const},\\ f(T) &= 1-\sqrt{\frac{\varrho(T)\kappa_T(T)}{\varrho(T_\lambda)\kappa_T(T_\lambda)}} = 1-\frac{c(T_\lambda)}{c(T)}\sqrt{\frac{\gamma(T_\lambda)}{\gamma(T)}} \approx 1-\frac{c(T_\lambda)}{c(T)},\end{aligned}$$

оскільки $f(T_\lambda) = 0$.

Як результат обчислень автор подає значення $f = 9.9\%$, що, однак, викликає певні сумніви. Одною з причин є те, що для розрахунків використано значення $c(T_\lambda) = 219$ м/с, тоді як новіші експерименти вказують на 226–230 м/с [109, 110]. Із врахування цього перерахунок дає $f = 5.4 \div 6.1\%$. Крім того, цей же автор отримав результат $15 \pm 4\%$ при 1.3 K з вимірювань високоенерґетичного розсіяння [139].

У цьому розділі ми вкажемо один зі способів розрахунку конденсатної фракції без використання якихось значних обчислювальних потужностей, фактично з перших принципів.

Сам метод був розроблений Вакарчуком у праці [87]. Конденсатна фракція розраховується безпосередньо з одночастинкової функції розподілу $F_1(R)$ як її далекосяжна границя:

$$f = N_0/N = \lim_{R\to\infty} F_1(R),$$

де N_0 — кількість частинок з нульовим імпульсом, а N — загальна кількість частинок у системі.

Цей метод працює без залучення феноменолоґічних припущень. Для обчислень як вхідні дані використовуватимемо лише парний статичний структурний фактор системи при нульовій температурі, отримуючи таким чином перевагу перед тими методами, в яких потрібна така величина як динамічний структурний фактор. Точне вимірювання останнього є значно складнішою задачею порівняно з вимірюванням статичного структурного фактора.

Метод є також повністю контрольованим, тобто ми завжди знаємо, якими ефектами знехтували, і наступні наближення нескладно врахувати (у принципі). Ми наведемо тут розрахунки лише для першого наближення (RPA), хоча всі вирази нескладно розширити з метою врахування тонших ефектів, якими є багаточастинкові взаємодії.

Єдина проблема, що постає перед нами при поширенні методу, полягає в тому, що тричастинковий структурний фактор системи невідомий, і для його розрахунку потрібно робити якісь припущення. Можна, зокрема, запропонувати таку схему: вираз для тричастинкової функції розподілу F_3 (поза суперпозиційним наближенням, напр., у формі, запропонованій Абе [114]), що містить парну функцію розподілу (відому) $\to$ 6-вимірне фур'є-перетворення F_3 дає тричастинковий структурний фактор. Існує варіант застосування з цією метою усереднення функції Ґріна $G_{\rho\rho\rho}$ (3.13) або $G'_{\rho\rho\rho}$, див. вираз (3.5).

Розглядатимемо три наближення для короткосяжних відштовхувальних взаємодій:

- короткосяжні взаємодії явно не враховуються;
- модель майже твердих сфер (AHS) [5], див. розділ 2.
- модель твердих сфер з діаметром 2.1 Å (HS).

Очікуємо, що два останніх наближення дадуть ближчі до експериментальних результати.

5.1. Обчислювальна процедура

Принципова схема обчислень складається з таких кроків:

I. **Ввід**: Експериментальні дані для структурного фактора [76] (їх потрібно екстраполювати до нульової температури [4]);

II. **Ввід**: Модель короткосяжних взаємодій (HS, AHS або ніякі) [5];

III. **Вивід**: Структурний фактор модельної системи, що відповідає короткосяжному відштовхуванню;

IV. **Вивід**: Фур'є-перетворення потенціалу міжатомної взаємодії (ефективної) [4, 5];

V. **Вивід**: Парна функція розподілу $F_2(R)$ [76];

VI. **Результат**: Конденсатна фракція.

Для розрахунку конденсатної фракції використовуватимемо формули, отримані раніше в [86]:

$$\begin{aligned} & f = \exp\left(I_{1A} + \Delta_1 J + \ldots\right), \\ & I_{1A} = -\frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(\alpha_q - 1)^2/\alpha_q, \\ & \Delta_1 J = \varrho \int d\mathbf{R}\left[2h^*(R) - h(R) + h^2(R)/4\right], \\ & h(R) = F_2(R) - 1, \qquad h^*(R) = \sqrt{F_2(R)} - 1, \end{aligned} \tag{5.1}$$

де крапками позначено доданки, які мають більше, ніж одне підсумовування за хвильовим вектором або інтеґрування за координатою, $F_2(R)$ — парна функція розподілу, N — кількість атомів у системі, а

$$\alpha_q = \sqrt{1 + 2\varrho\nu_q \big/ \varepsilon_q}, \tag{5.2}$$

де ϱ — густина гелію, $\varrho = 0.02185$ Å^{-3}, m — маса атома гелію, $m = 4.0026$ а. о. м., q — хвильовий вектор.

Реально ці вирази вимагають звичайного однократного інтеґрування, оскільки після переходу до сферичних координат інтеґрали за кутами просто зводяться до числових коефіцієнтів. У вищих наближеннях, однак, кількість інтеґрувань суттєво зростає.

Вираз для парної функції розподілу у прийнятому наближенні було отримано Вакарчуком [86]:

$$F_2(R) = \exp\left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{2a_2(\mathbf{q})}{1 - 2a_2(\mathbf{q})} e^{i\mathbf{qR}} + \dots \right\}, \tag{5.3}$$

тоді як самоузгоджений опис коротко- і далекосяжних кореляцій в рідкому ^{4}He приводить до такого результату для функції a_2 [45]:

$$a_2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{S_q^0} - \frac{1}{S_q} \right), \tag{5.4}$$

де S_q^0 — структурний фактор модельної системи (він дорівнює одиниці у випадку, коли короткосяжне відштовхування явно не враховується). S_q — експериментальний структурний фактор (при 0 K). Ці вирази містять ν_q — фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в гелії, який було розраховано з перших принципів в Розділі 2, див. також [4].

Ми зіткнулися з очікуваною проблемою на кроці (V.) обчислювальної процедури, де потрібно було згладити функцію $F_2(R)$, розраховану з (5.3), і покласти її рівною нулеві для відстаней $R < 2.2$ Å, щоб отримати правильну поведінку на малих відстанях [122]. Обчислену парну функцію розподілу подаємо на рис. 5.1 у порівнянні з експериментальною [122].

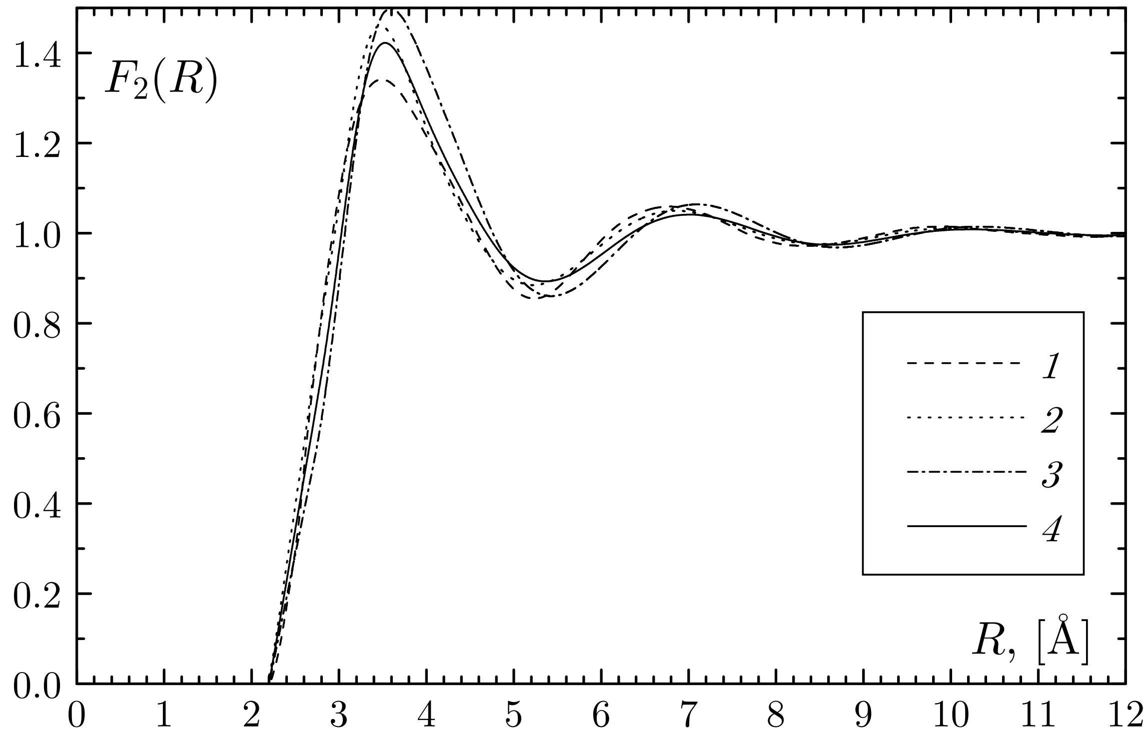


Рис. 5.1: Парна функція розподілу. Штрихова лінія (*1*) відповідає експериментальним даним Робкофа і Галока [122] при 1.38 K. Пунктирною лінією (*2*) показано згладжені розраховані дані для випадку, коли короткосяжні взаємодії явно не задані. Штрих-пунктирна (*3*) і суцільна лінії (*4*) — парні функції розподілу для HS і AHS короткосяжних взаємодій відповідно.

5.2. Результати розрахунку конденсатної фракції

Ми розрахували конденсатну фракцію в рідкому ^{4}He при нульовій температурі, використовуючи різні моделі для короткосяжної відштовхувальної частини потенціалу.

Обчислені значення f такі:

- Без явного задання короткосяжних взаємодій $f = 14\%$;
- Короткосяжний потенціал AHS $f = 11\%$;
- Короткосяжний потенціал HS $f = 8.8\%$.

Треба очікувати, що реальні значення будуть на $10 \div 30\%$ меншими за розраховані завдяки внескам від доданків вищих порядків, як це описано в [86]. Проте в першому наближенні така точність для f у рідкому гелії-4 вже є доброю.

Наш результат потрапляє в межі теоретичних, числових та експериментальних оцінок. Оскільки вирази, які було використано для розрахунків, виведені з перших принципів, то розраховане значення f могло би стати тестовим для перевірки експериментальної інформації, отриманої непрямо з експериментальних вимірювань. Для цього, щоправда, необхідно розрахувати ще одне-два наступних наближення. На даний момент, на жаль, ми не володіємо відповідними обчислювальними потужностями.

Для порівняння наведемо ще результати обчислення температурної залежности конденсатної фракції для випадку відсутности явного задання короткосяжних взаємодії. З цією метою візьмемо величину α_q з (5.1) у формі (3.26), що містить залежність від T через введену раніше в Розділі 3 функцію $\gamma_q(T)$. Поправку $\Delta_1 J$ залишимо без змін. Прості обчислення за описаною в попередньому підрозділі процедурою дають таку криву:

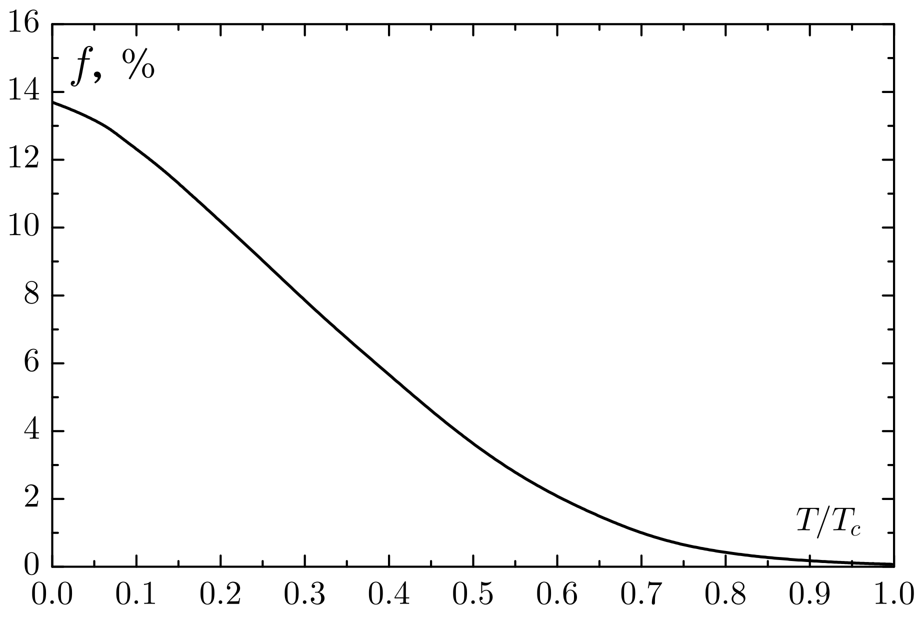


Рис. 5.2: Температурна залежність конденсатної фракції.

Температурна залежність у границі $T \to 0$ є, мабуть, дещо різкішою порівняно з експериментом, проте ми отримуємо правильний хід кривої при наближенні до точки фазового переходу: розраховані значення конденсатної фракції більш ніж на 2 порядки менші за $f(T = 0\ \text{K})$.

5.3. Висновки до розділу 5

Ми виявили, що короткосяжна відштовхувальна частина потенціалу має значний вплив на результат розрахунку конденсатної фракції. Було зауважено, що у випадку явного задання короткосяжних взаємодій обчислене значення суттєво залежить від "жорсткости" серцевини. Відповідну модель можна підібрати більш точно після того, як у виразах (5.1), (5.3) буде взято більше доданків. Причиною є те, що підсумовування цілого ряду, у принципі, відповідає правильному врахуванню короткосяжних взаємодій [45]. З іншого боку, конденсатна фракція в рідкому гелії-4 є величиною, дуже чутливою до порядку наближення [121]. Тому треба очікувати, що знаходження відповідної моделі дасть можливість використовувати прості вирази, подібні до отриманих в наближенні хаотичних фаз, замість вищих наближень. На даний момент найвідповіднішою моделлю для цієї мети є потенціал майже твердих сфер з параметрами ($n = 12$, $A = 2.1$ Å).

Розрахунок температурної залежности конденсатної фракції ми розглядаємо у сенсі якісного збігу зі спостережуваними даними експериментів, оскільки кількісна оцінка при $T = 0$ K у моделі без явно заданого короткосяжного відштовхування є гіршою, ніж у двох інших моделях.

ВИСНОВКИ

Метою дисертаційної роботи була побудова опису сильновзаємодіючої багатобозонної системи, якою є рідкий гелій-4, в надплинній і нормальній фазах.

Було розв'язано такі основні завдання:

- отримано потенціали міжатомних взаємодій, парний і тричастинковий, причому перший розраховано в наближенні постRPA, а другий — у наближенні RPA, що в результаті дає той самий порядок точности. Розглянуто також різні підходи до проблеми явного задання короткосяжних взаємодій в гелії-4. Обчислені фур'є-зображення потенціалів згодом використано для розрахунку термодинамічних характеристик та частки Бозе-конденсату;

- у межах формалізму колективних змінних і двочасових температурних функцій Ґріна записано аналітичні вирази для термодинамічних функцій, за якими проведено числові розрахунки. Результати для теплоємности дають добре узгодження з експериментальними даними на температурних ділянках $0 < T/T_c < 0.65$ та $T/T_c > 1.32$, де T_c — температура фазового переходу, оцінена як $T_c = 1.99$ K порівняно з експериментальним 2.17 K;

- для системи небагатьох бозонів отримано розклад за степенями величини, оберненої до кількости частинок, за яким виконано екстраполяцію результатів на безмежну систему;

- конденсатну фракцію (частку Бозе-конденсату) розраховано при

$T = 0$ K для трьох різних способів задання короткосяжних взаємодій. Отримане у першому наближенні значення 11% у моделі майже твердих сфер добре узгоджується з останніми експериментальними оцінками та даними комп'ютерного моделювання. Отримано також температурну залежність конденсатної фракції, що якісно відтворює спостережувані факти.

Основні результати отримані у вигляді формул, графіків і таблиць числових даних.

У більшості розрахунків використано функцію ν_q — фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії (рис. 2.2), таблиця значень для нього наведена у Додатку А (табл. А.2). Відповідний потенціал наведено на рис. 2.3 (табл. А.3). Важливим є також результат для моделі короткосяжних взаємодій (рис. 2.7).

Цікавим є вираз (2.35) для тричастинкового потенціалу через пряму кореляційну функцію (2.21)–(2.22), якому відповідають рис. 2.9–2.10.

Крива температурної залежности теплоємности, якій відповідає табл. 3.1, є основним результатом стосовно термодинаміки рідкого ^{4}He, оскільки вона наочно виявляє особливості, пов'язані з фазовим переходом. Найважливішими аналітичними результатами є самоузгоджені вирази для енерґії (3.36), (3.53) та допоміжної функції $\gamma_q(T)$ (3.48)–(3.51), за допомогою яких ефективно враховуються поправки у наближеннях, вищих за наближення хаотичних фаз, а також система рівнянь руху для функцій Ґріна (3.8), (3.14), (3.58).

Отримані для системи твердих сфер з гелієвими параметрами розклади за степенями $1/N^{\varepsilon}$, де N — кількість частинок, а встановлене внаслідок числової інтерполяції значення показника $\varepsilon = 0.0608$, та відповідні криві (рис. 4.4–4.5) є найважливішими результатами Розділу 4.

Обчислене у Розділі 5 значення конденсатної фракції 11% дає можливість зафіксувати одну з можливих моделей короткосяжних взаємодій в рідкому гелії (майже тверді сфери), що спрощує числові розрахунки у вищих наближеннях.

Результати розрахунків, здійснених у дисертаційній роботі, добре узгоджуються з відомими експериментальними даними, що є підтвердженням відповідности прийнятої моделі та застосованих наближень. Розроблену методику можна поширити для опису інших, як сильно-, так і слабовзаємодіючих квантових систем, суттєвий прорив ув експериментальному дослідженні яких зроблено останнім часом, що відкриває можливості перевірки теоретичних моделей.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Bose–Einstein Condensation / Ed. by *A. Griffin, D. W. Snoke, S. Stringari.*— Cambridge: Cambridge University Press, 1995.— xiii + 602 p.

[2] *Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., Cornell E. A.* Observation of Bose–Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor // Science.— 1995.— V. 269, No. 5221.— P. 198–201.

[3] *Davis K. B, Mewes M.-O., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M., Ketterle W.* Bose–Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms // Phys. Rev. Lett.— 1995.— Vol. 75, No. 22.— P. 3969–3973.

[4] *Vakarchuk I. O., Babin V. V., Rovenchak A. A.* A potential energy of interaction between helium atoms // Journal of Physical Studies.— 2000.— V. 4, № 1.— P. 16–22.

[5] *Vakarchuk I. O., Rovenchak A. A.* Representation of the short-range interactions in liquid helium via modified hard sphere potentials // Journal of Physical Studies.— 2001.— V. 5, № 2.— P. 126–130.

[6] *Vakarchuk I. O., Rovenchak A. A.* Thermodynamics of the Bose-system with a small number of particles // Condens. Matter Phys.— 2001.— V. 4, No. 3(27).— P. 431–447.

[7] *Rovenchak A. A.* Helium-4 Energy and Specific Heat in Superfluid and Normal Phase // Journal of Physical Studies.— 2002.— V. 6, № 3.— P. 298–304.

[8] *Rovenchak A. A.* Effective mass of atom and the excitation spectrum in liquid helium-4 at $T = 0$ K // Fiz. Nizk. Temp.— 2003.— V. 29, No. 2.— P. 145–148.

[9] *Ровенчак А.* Потенціал взаємодії між атомами гелію // "Ізинґівські читання–99", Львів, 20 травня 1999 р. / Препринт Інституту фізики конденсованих систем ICMP–99–16.— С. 12–18.

[10] *Rovenchak A. A., Vakarchuk I. O.* Calculation of the condensate fraction in liquid Helium-4 // Europhysics Conference on Computational Physics, Aachen, Germany, 5–8 September 2001: Book of Abstracts / Ed. by *F. Hossfeld, K. Binder.*— P. B59.

[11] *Rovenchak A. A.* Calculation of Bose-Liquid Thermodynamics via Green's Functions of "Density-Density" Type // International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, Kyiv, September 14–19, 2001: Abstracts.— P. 169.

[12] *Vakarchuk I. O., Babin V. V., Rovenchak A. A.* He^4 Interatomic Potential Restoring Using Experimental Scattering Data // EPS–11: Trends in Physics, London, 6–10 Sept. 1999: Abstr. Book.— London, 1999.— P. 21.

[13] *Bose [S.]* Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese // Zeitschrift für Physik.— 1924.— B. 26, Hft. 3.— S. 178–181.

[14] *Einstein A.* Quantentheorie des einatomigen idealen Gases // Sitzungsber. Preuss. Königl. Akad. Wiss.: phys.-math. Klasse.— 1924.— S. 261–267.

[15] *Einstein A.* Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung // Sitzungsber. Preuss. Königl. Akad. Wiss.: phys.-math. Klasse.— 1925.— S. 3–14.

[16] *Silvera I. F., Walraven J. T. M.* Stabilization of Atomic Hydrogen at Low Temperature // Phys. Rev. Lett.— 1980.— V. 44, No. 3.— P. 164–168.

[17] *Walraven J. T. M., Silvera I. F.* Density, Magnetization Compression, and Thermal Leakage of Low-Temperature Atomic Hydrogen // Phys. Rev. Lett.— 1980.— V. 44, No. 3.— P. 168–171.

[18] *Keesom W. H., Keesom A. P.* On the anomaly in the specific heat of liquid helium // Communications from the Physical Laboratory of Leiden.— 1932.— № 221d.— P. 19–26.

[19] *Keesom W. H., Clusius K.* Ueber die spezifische Wärme des flüssigen Heliums // Proc. Roy. Acad. Amsterdam.— 1932.— V. 35.— P. 307–320.

[20] *Кеезом В.* Гелий.— М.: Изд-во иностр. лит., 1949.— 542 с.

[21] *London F.* The λ-Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy // Nature.— 1938.— Vol. 141, No. 3571.— P. 643–644.

[22] *London F.* On the Bose–Einstein Condensation // Phys. Rev.— 1938.— V. 54, No. 11.— P. 947–954.

[23] *Kapitza P.* Viscosity of Liquid Helium below the λ-Point // Nature.— 1938.— Vol. 141, No. 3538.— P. 74.

[24] *Allen J. F., Misener A. D.* Flow of Liquid Helium II // Nature.— 1938.— Vol. 141, No. 3538.— P. 75.

[25] *Капица П. Л.* Вязкость жидкого гелия при температурах ниже точки λ // Докл. АН СССР.— 1938.— Т. XVIII, №1.— С. 21–23.

[26] *Tisza L.* Sur la Théorie des Liquides Quantiques. Application a l'Hélium Liquide. I // Journal de Physique et Radium.— 1940.— V. 1, № 5.— P. 164–172.

[27] *Tisza L.* Sur la Théorie des Liquides Quantiques. Application a l'Hélium Liquide. II // Journal de Physique et Radium.— 1940.— V. 1, № 8.— P. 350–358.

[28] *Tisza L.* The Theory of Liquid Helium // Phys. Rev.— 1947.— V. 72, No. 9.— P. 838–854.

[29] *Azuah R. T., Stirling W. G., Glyde H. R., Boninsegni M., Sokol P. E., Bennington S. M.* Condensate and final-state effects in superfluid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1997.— V. 56, No. 22.— P. 14620–14630.

[30] *Glyde H. R., Azuah R. T., Stirling W. G.* Condensate, momentum distribution, and final-state effects in liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 2000.— V. 62, No. 21.— P. 14337–14349.

[31] *Ландау Л.* Теория сверхтекучести гелия-II // Журн. эксп. теор. физ.— 1941.— Т. 11, Вып. 6.— С. 592–614.

[32] *Feynman R.* Atomic Theory of the Two-Fluid Model of Liquid Helium // Phys. Rev.— 1954.— V. 94, No. 2.— P. 262–277.

[33] *Feynman R. P., Cohen M.* Energy spectrum of the Excitations in Liquid Helium // Phys. Rev.— 1956.— V. 102, No. 5.— P. 1189–1204.

[34] *Feynman R.* Atomic Theory of the λ Transition in Helium // Phys. Rev.— 1953.— V. 91, No. 6.— P. 1291–1301.

[35] *Боголюбов Н. Н.* К теории сверхтекучести // Изв. АН СССР. Сер. физ.— 1947.— Т. 11.— №1.— С. 77–90;

Боголюбов Н. Н. К теории сверхтекучести // *Боголюбов Н. Н.* Избранные труды в трех томах.— К.: Наук. думка, 1970.— Т. 2.— С. 210–224.

[36] *Беляев С. Т.* Применение методов квантовой теории поля к системе бозе-частиц // Журн. эксп. и теор. физ.— 1958.— Т. 34, Вып. 2.— С.417–432.

[37] *Беляев С. Т.* Энергетический спектр неидеального бозе-газа // Журн. эксп. и теор. физ.— 1958.— Т. 34, Вып. 2.— С.433–446.

[38] *Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н.* Волновая функция нижнего состояния системы взаимодействующих бозе-частиц.— Журн. эксп. теор. физ.— 1955.— Т. 28, Вып. 2.— С. 129–139.

[39] 阿部龍蔵boson系の量子流体力学// 物性論研究.— 1955.— 第90巻.— 第61–78面. [*Абе Р.* Квантова гідродинаміка бозонної системи // Буссейрон Кенкю.— 1955.— Т. 90.— С. 61–78.]

[40] *Pines D., Bohm D.* A Collective Description of Electron Interactions: II. Collective *vs* Individual Particle Aspects of the Interaction // Phys. Rev.— 1952.— V. 85, No. 2.— P. 338–353.

[41] *Sunakawa S., Yoko-o Y., Nakatani H.* Collective description of a System of Interacting Bose Particles. I // Progress of Theoretical Physics.— 1962.— V. 27, No. 3.— P. 589–599.

[42] *Sunakawa S., Nakatani H., Yoko-o Y.* Collective description of a System of Interacting Bose Particles. II // Progress of Theoretical Physics.— 1962.— V. 27, No. 3.— P. 600–607.

[43] *Юхновський І. Р.* Статистичний оператор та колективні змінні // Укр. фіз. журн.— 1964.— Т. IX, № 7.— С. 702–714.

[44] *Юхновський І. Р.* Квантова статистична сума і колективні змінні // Укр. фіз. журн.— 1964.— Т. IX, № 8.— С. 827–838.

[45] *Вакарчук И. А., Юхновский И. Р.* Самосогласованное описание дальнодействующих и короткодействующих корреляций в теории жидкого He^4. I // Теор. мат. физ.— 1979.— Т. 40, № 1.— С. 100–111.

[46] *Вакарчук И. А.* Микроскопическая теория бозе-жидкости: Дис.... докт. физ.-мат. наук: 01.04.02.— К., 1979.— 270 с.

[47] *Вакарчук І. О., Глушак П. А.* Розрахунок термодинамічних функцій надплинного $^4\mathrm{He}$ при низьких температурах. 1. Вільна енергія // Укр. фіз. журн.— 1996.— Т. 41.— С. 569-576.

[48] *Глушак П. А.* Исследование равновесных свойств сверхтекучего гелия-4 при низких температурах: Дис.... канд. физ.-мат. наук: 01.04.02.— Львов, 1992.— 119 с.

[49] *Вакарчук І. О.* Нові результати для функцій розподілу квантових систем багатьох частинок // Журн. фіз. досл.— 1997.— Т. 1, № 2.— С. 156–168.

[50] *Зубарев Д. Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // Усп. физ. наук.— 1960.— Т. 71, Вып. 1.— С.71–116.

[51] *Марч Н., Янг У., Сампантхар С.* Проблема многих тел в квантовой механике.— М.: Мир, 1969.— 496 с.

[52] *Церковников Ю. А.* Приближение хаотических фаз в теории неидеального бозе-газа // Докл. Акад. наук СССР.— 1964.— Т. 159, № 5.— С. 1023–1026.

[53] *Церковников Ю. А.* Вычисление двухвременных корреляционных функций неидеальных квантовых систем: Дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.02.— М., 1976.— 252 с.

[54] *Ceperley D. M.* Path Integrals in the Theory of Condensed Helium // Rev. Mod. Phys.— 1995.— V. 67, No. 2.— P. 279–355.

[55] *Kalos M. H.* Monte Carlo Calculations of the Ground State of Three- and Four-Body Nuclei // Phys. Rev.— 1962.— V. 128, No. 4.— P. 1791–1795.

[56] *Slater J. C., Kirkwood J. G.* The van der Waals Forces in Gases // Phys. Rev.— 1931.— V. 37, No. 6.— P. 682–697.

[57] *Aziz R. A., Nain V. P. S., Carley J. S., Taylor W. L., McConville G. T.* An accurate intermolecular potential for helium // J. Chem. Phys.— 1979.— V. 70, No. 9.— P. 4330–4342. (1979).

[58] *Aziz R. A., Slaman M. J.* An examination of *ab initio* results for the helium potential energy curve // J. Chem. Phys.— 1991.— V. 94, No. 12.— P. 8047–8053.

[59] *Aziz R. A., Slaman M. J., Koide A., Allnatt A. R., Meath W. J.* Exchange-Coulomb potential energy curves for He–He and related physical properties // Mol. Phys.— 1992.— V. 77, No. 2.— P. 321–337.

[60] *Janzen A. R., Aziz R. A.* An accurate potential energy curve for helium based on *ab initio* calculations // J. Chem. Phys.— 1997.— V. 107, No. 3.— P. 914–919.

[61] *Anderson J. B., Traynor C. A., Boghosian B. M.* An exact quantum Monte Carlo calculation of the helium-helium intermolecular potential // J. Chem. Phys.— 1993.— V. 99, No. 1.— P. 345–351.

[62] *Axilrod B. M, Teller E.* Interaction of the van der Waals Type Between Three Atoms // J. Chem. Phys.— 1943.— Vol. 11, No. 6.— P. 299–300.

[63] *Parish C. A., Dykstra C. E.* Three-body analytical potential for interacting helium atoms // J. Chem. Phys.— 1994.— V. 101, No. 9.— P. 7618–7624.

[64] *Boronat J., Casulleras J.* Monte Carlo analysis of an interatomic potential for He // Phys. Rev. B.— 1994.— V. 49, No. 13.— P. 8920–8930.

[65] *Langer I. S.* Coherent States in the Theory of Superfluidity // Phys. Rev.— 1968.— V. 167, No. 1.— P. 183–190.

[66] *Вакарчук И. А.* Представление когерентных состояний в теории многобозонных систем // Теор. мат. физ.— 1978.— V. 35, № 1.— С. 76–88.

[67] *Lipa J. A., Swanson D. R., and Nissen J. A.* Heat Capacity and Thermal Relaxation of Bulk Helium very near the Lambda Point // Phys. Rev. Lett.— 1996.— V. 76, No. 6.— P. 944–947.

[68] *Kleinert H.* Seven Loop Critical Exponents from Strong-Coupling ϕ^4-Theory in Three Dimensions // Phys. Rev. D.— 1999.— V. 60, No. 8.— 085001 (15 p.); (hep-th/9812197).

[69] *Kleinert H.* Theory and satellite experiment for critical exponent α of λ-transition in superfluid helium // Phys. Lett. A.— 2000.— V. 277, No. 4–5.— P. 205–211; (cond-mat/9906107).

[70] *Lipa J. A., Swanson D.R., Nissen J. A., Geng Z. K., Williamson P. R., Stricker D. A.* Specific Heat of Helium Confined to a 57-μm Planar Geometry near the Lambda Point // Phys. Rev. Lett.— 2000.— V. 84, No. 21.— P. 4894–4897.

[71] *Campostrini M., Pelissetto A., Rossi P., Vicari E.* High-precision determination of the critical exponents for the λ-transition of ^{4}He by im-

proved high-temperature expansion // Phys. Rev. B.— 2000.— V. 61, No. 9.— P. 5905–5908; (cond/mat-9905395).

[72] *Marques G. C.* Microscopic Model of Superfluid Helium-4 // International Journal of Modern Physics B.— 1994.— V. 8, Nos. 11–12.— P. 1577–1624.

[73] *Ярунин В. С.* Бозе-эйнштейновская конденсация и теплоемкость неидеального газа // Физ. низк. темп.— 1998.— Т. 24, № 2.— С. 176–179.

[74] *Cabrera I., Oliva D., Pérez Rojas H.* λ-Type Phase Transition for a Weakly Interacting Bose Gas // Brazilian Journal of Physics.— 2001.— V. 31, No. 4.— P. 527–532. (Див. також препринт cond-mat/9707044).

[75] *Penrose O., Onsager L.* Bose–Einstein Condensation and Liquid Helium // Phys. Rev.— 1956.— V. 104, No. 3.— P. 576–584.

[76] *Svensson E. C., Sears V. F., Woods A. D. B., Martel P.* Neutron-diffraction study of the static structure factor and pair correlations in liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1980.— V. 21, No. 8.— P. 3638–3651.

[77] *Hohenberg P. C., Platzman P. M.* High-Energy Neutron Scattering from Liquid He^4 // Phys. Rev.— 1966.— V. 152, No. 1.— P. 198–200.

[78] *Griffin A.* Excitations in a Bose-condensed liquid.— Cambridge: Cambridge University Press, 1993.— 308 p.

[79] *Sears V. F., Svensson E. C., Martel P., Woods A. D. B.* Neutron-Scattering Determination of the Momentum Distribution and the Condensate Fraction in Liquid ^{4}He // Phys. Rev. Lett.— 1982.— V. 49, No. 4.— P. 279–282.

[80] *Sears V. F.* Kinetic energy and condensate fraction of superfluid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1983.— V. 28, No. 9.— P. 5109–5116.

[81] *Manousakis E., Pandharipande V. R., Usmani Q. N.* Condensate fraction and momentum distribution in the ground state of liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1985.— V. 31, No. 11.— P. 7022–7028.

[82] *Manousakis E., Pandharipande V. R.* Structure of elementary excitations and temperature dependence of the momentum distribution in liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1985.— V. 31, No. 11.— P. 7029–7041.

[83] *Manousakis E., Pandharipande V. R., Usmani Q. N.* Condensate fraction and momentum distribution in the ground state of liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1991.— V. 43, No. 16.— P. 13587–13589.

[84] *Jastrow R.*Many-Body Problem with Strong Forces // Phys. Rev.— 1955.— V. 98, No. 5.— P. 1479–1484.

[85] *Вакарчук И. А., Мигаль В. М.* Среднесферическое приближение в теории основного состояния жидкого ^{4}He // Укр. физ. журн.— 1987.— Т. 32, № 5.— С. 786–790.

[86] *Вакарчук І. О.* Теорія бозе-ейнштейнівської конденсації в надплинному ^{4}He // Укр. физ. журн.— 1990.— Т. 35, № 8.— С. 1261–1267.

[87] *Вакарчук И. А.* Матрицы плотности сверхтекучего гелия-4. II // Теор. мат. физ.— 1990.— Т. 82, № 3.— С. 438–449.

[88] *Sosnick T. R., Snow W. M., Sokol P. E., Silver R. N.* Momentum Distributions in Liquid ^{4}He // Europhys. Lett.— 1989.— V. 9, No. 7.— P. 707–712.

[89] *Sosnick T. R., Snow W. M., Sokol P. E.* Deep-inelastic neutron scattering from liquid ^{4}He // Phys. Rev. B.— 1990.— V. 41, No. 16.— P. 11185–11202.

[90] *Sosnick T. R., Snow W. M., Silver R. N., Sokol P. E.* Deviations from

the impulse approximation in liquid ^{4}He: An experimental test at $Q = 23$ Å^{-1} // Phys. Rev. B.— 1991.— V. 43, No. 1.— P. 216–228.

[91] *Whitlock P., Panoff R. M.* Accurate momentum distributions from computations on ^{3}He and 4He // Can. J. Phys.— 1987.— V. 65.— P. 1409–1415.

[92] *Ceperley D. M., Pollock E. L.* The momentum distribution of normal and superfluid liquid ^{4}He // Can. J. Phys.— 1987.— V. 65.— P. 1416–1420.

[93] *Moroni S., Senatore G., Fantoni S.* Momentum distribution of liquid helium // Phys. Rev. B.— 1997.— V. 55, No. 2.— P. 1040-1049.

[94] *Rinat A. S., Taragin M. F.* A Novel Method for the Extraction of the Condensate Fraction of Liquid ^{4}He // J. Low. Temp. Phys.— 2001.— V. 123, Nos. 3/4.— P. 139-147.

[95] *Пашицкий Э. А.* Роль парных корреляций в формировании основного состояния и спектра элементарных вожбуждений сверхтекучей бозе-жидкости // Физ. низк. темп.— 1999.— Т. 25, № 2.— С. 115–140.

[96] *Пашицкий Э. А., Вильчинский С. И., Машкевич С. В.* Самосогласованный расчет спектра квазичастиц в сверхтекучей бозе-жидкости с подавленным бозе-эйнштейновским конденсатом // Физ. низк. темп.— 2002.— Т. 28, № 2.— С. 115–122.

[97] *Osheroff D. D., Richardson R. C., Lee D. M.* Evidence for a New Phase of Solid He^3 // Phys. Rev. Lett.— 1972.— V. 28, No. 14.— P. 885–888.

[98] *Osheroff D. D., Gully W. J, Richardson R. C., Lee D. M.*, New Magnetic Phenomena in Liquid He^3 below 3 mK // Phys. Rev. Lett.— 1972.— V. 29, No. 14.— P. 920–923.

[99] Advanced information on the Nobel Prize in Physics 2001. Bose-Einstein Condensation in Alkali Gases.— Stockholm: The Royal Swedish Academy of Sciences, 2001.— P. 1–14.

[100] Физика простых жидкостей / Под ред. *Г. Темперли, Дж. Роулисона, Дж. Рашбрука*.— М.: Мир, 1971.— 308 с.

[101] *Крокстон К.* Физика жидкого состояния. Статистическое введение.— М.: Мир, 1978.— 400 с.

[102] *Вакарчук И. А.* Матрицы плотности сверхтекучего гелия-4. I // Теор. мат. физ.— 1989.— Т. 80, № 3.— С. 439–451.

[103] *Боголюбов М. М.* Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем.— Київ: Рад. шк., 1949.— 228 с.

[104] *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика.— Т. 1.— М.: Мир, 1978.— 408 с.

[105] *Tang K. T., Toennies J. P., Yiu C. L.* Accurate Analytical He–He van der Waals Potential Based on Perturbation Theory // Phys. Rev. Lett.— 1995.— V. 74, No. 9.— P. 1546–1549.

[106] *Вакарчук І. О.* Статистичний оператор системи тотожних взаємодіючих частинок у координатному зображенні // Журн. фіз. досл.— 1996.— Т. 1, № 1.— С. 25–38.

[107] *Вакарчук И. А., Юхновский И. Р.* Микроскопическая теория энергетического спектра жидкого He II // Теор. мат. физ.— 1980.— Т. 42, № 1.— С. 112–1123.

[108] *De Bruyn Ouboter R., Yang C. N.* The thermodynamic properties of liquid ^{3}He–^{4}He mixtures between 0 and 20 atm in the limit of absolute zero temperature // Physica.— 1987.— V. 144B.— P. 127–144.

[109] *McCarty R. D.* The Thermodynamic Properties of Helium II from 0 K to the Lambda Transitions // Natl. Bur. Stand. Tech. Note 1029.— 1980.— iii + 56 p.

[110] *Arp V. D., McCarty R. D., Friend D. G.* Thermophysical Properties of Helium-4 from 0.8 to 1500 K with Pressures to 2000 MPa // Natl. Inst. Stand. Technol. Tech. Note 1334 (revised).— 1998.— 145 p.

[111] *Kheifets A. S., Bray I.* Helium Double Photoionization: An Accurate Solution of a Three-body Coulomb Problem // Australian Journal of Physics.— 1998.— V. 51, No. 4.— P. 655–664.

[112] *Colgan J., Pindzola M. S., Robicheaux F.* Fully quantal (γ, 2e) calculations for absolute differential cross sections of helium // J. Phys. B.— 2001.— V. 34, No. 15.— P. L457–L466.

[113] *Dawson C., Cvejanović S., Seccombe D. P., Reddish T. J., Maulbetsch F., Huetz A., Mazeau J., Kheifets A. S.* Helium (γ, 2e) triple differential cross sections at an excess energy of 60 eV // J. Phys. B.— 2001.— V. 34, No. 16.— P. L525–L533.

[114] *Feenberg E.* Theory of quantum liquids.— New-York; London: Academic Press, 1969.— 264 p. (Chap.2)

[115] *Rasch J., Lucey S. P., Whelan C. T., Walters H. R. J.* On the numerical evaluation of six dimensional integrals occuring in scattering problem // Computer Physics Communications.— 1997.— V. 101.— P. 197–205.

[116] *Rasch J., Whelan C. T., Lucey S. P., Dal Cappello C., Walters H. R. J.* 6-dimensional integrals and supercomputers // Computer Physics Communications.— 1998.— V. 114, No. 1–3.— P. 378–384.

[117] Опис алґоритму FFTW (Fastest Fourier Transform in the West) можна знайти за адресою `http://www.fftw.org`, де також міститься відповідний пакет проґрам.

[118] *Jackson H. W., Feenberg E.* Energy Spectrum of Elementary Excitations in Helium II // Rev. Mod. Phys.— 1962.— V. 34, No. 4.— P. 686–693.

[119] *Barrat J.-L., Hansen J.-P., Pastore G.* Factorization of the Triplet Direct Correlation Function in Dense Fluids // Phys. Rev. Lett.— 1987.— V. 58, No. 20.— P. 2075–2078.

[120] *Ignatyuk V. V.* Calculation of transport coefficients dispersion and a dynamic structure factor of simple liquid // Condens. Matter Phys. (Lviv).— 1999.— V. 2, No. 1(17).— P. 37–51.

[121] *Вакарчук І. О.* Вступ до проблеми багатьох тіл.— Львів: Львівський національний університет ім. І. Франка, 1999.— 220 с.

[122] *Robkoff H. N., Hallock R. B.* Structure-factor measurements in ^{4}He at saturated vapor pressure for $1.38 \le T \le 4.24$ K // Phys. Rev. B.— 1981.— V. 24, No. 1.— P. 159–182.

[123] *Attard P.* Pair-hypernetted-chain closure for three-body potentials: Results for argon with the Axilrod-Teller triple-dipole potential // Phys. Rev. A.— 1992.— V. 45, No. 6.— P. 3659–3669.

[124] *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.— М.: Наука, 1971.— 415 с.

[125] *Блажиєвський Л. Ф.* Обчислення вільної енергії на основі представлення взаємодії в колективних змінних // Укр. фіз. журн.— 1965.— Т. X, № 12.— С. 1299–1308.

[126] *Боголюбов Н. Н.* Квазисредние в задачах статистической механики. Гл. II. Теоремы об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$ в теории сверхтекучести Бозе- и Ферми-систем. // Избранные труды в трех томах.— К.: Наук. думка, 1971.— Т. 3.— С. 216.

[127] *Isihara A., Samulski T.* Exchange effects on the excitation spectrum of liquid helium // Phys. Rev. B.— 1977.— V. 16, No. 5.— P. 1969–1978.

[128] *Вакарчук І. О.* До теорії λ-переходу в рідкому ^{4}He // Вісн. Львівського ун-ту. Сер. фіз.— 1993.— Вип. 26.— С. 29–38.

[129] *Cowley R. A., Woods A. D. B.* Inelastic Scattering of Thermal Neutrons from Liquid Helium // Can. J. Phys.— 1971.— Vol. 49.— P. 177–200.

[130] *Borrmann P., Franke G.* Recursion formulas for quantum statistical partition functions // J. Chem. Phys.— 1993.— V. 98, No. 3.— P. 2484–2485.

[131] *Deng W., Hui P. M.* Bose-Einstein condensation of finite number of confined particles // Solid State Communications.— 1997.— V. 104, No. 12.— P. 729–734.

[132] *Schmidt H.-J., Schnack J.* Investigations on finite ideal quantum gases // Physica A.— 1998.— V. 260, No. 3–4.— P. 479–489.

[133] *Хуанг К.* Статистическая механика.— М.: Мир, 1966.— 520 с.

[134] *Скрышевский А. Ф.* Структурный анализ жидкостей и аморфных тел: Учеб. пособие для студентов вузов.— 2-е изд., перераб. и доп.— М.: Высш. школа, 1980.— 328 с., ил.

[135] *Coleman M., Lipa J. A.* Heat Capacity of Helium Confined to 8-μm Cylinders near the λ Point // Phys. Rev. Lett.— 1995.— V. 74, No. 2.— P. 286–289.

[136] *Nijboer B. R. A., Van Hove L.* Radial Distribution Function of a Gas of Hard Spheres and the Superposition Approximation // Phys. Rev.— 1952.— V. 85, No. 5.— P. 777–783.

[137] *Исихара А.* Статистическая физика.— М.: Мир, 1973.— 472 с.

[138] *Mayers J.*, A New Method of Determining the Bose Condensate Fraction in Superfluid ^{4}He // Rutherford Appleton Laboratory Technical Report RAL–TR–96–031 (1996).

[139] *Mayers J., Andreani C., Colognesi D.* Measurement of the kinetic energy in ^{4}He through the superfluid transition by very high-energy neutron scattering // J. Phys.: Condens. Matter.— 1997.— V. 9, No. 48.— P. 10639–10649.

ДОДАТОК А

Таблиці результатів

Таблиця А.1: Структурний фактор рідкого гелію-4 при $T = 0$ K

q, Å^{-1}	S_q	q, Å^{-1}	S_q	q, Å^{-1}	S_q	q, Å^{-1}	S_q
0.00	0.000	1.65	0.775	3.30	0.949	4.95	0.989
0.05	0.018	1.70	0.865	3.35	0.954	5.00	0.988
0.10	0.035	1.75	0.965	3.40	0.959	5.05	0.987
0.15	0.053	1.80	1.069	3.45	0.964	5.10	0.986
0.20	0.069	1.85	1.172	3.50	0.969	5.15	0.985
0.25	0.084	1.90	1.263	3.55	0.973	5.20	0.985
0.30	0.098	1.95	1.334	3.60	0.978	5.25	0.985
0.35	0.111	2.00	1.377	3.65	0.983	5.30	0.985
0.40	0.123	2.05	1.387	3.70	0.988	5.35	0.986
0.45	0.134	2.10	1.365	3.75	0.992	5.40	0.986
0.50	0.145	2.15	1.330	3.80	0.997	5.45	0.987
0.55	0.155	2.20	1.290	3.85	1.001	5.50	0.988
0.60	0.165	2.25	1.248	3.90	1.005	5.55	0.989
0.65	0.175	2.30	1.203	3.95	1.009	5.60	0.990
0.70	0.184	2.35	1.157	4.00	1.012	5.65	0.991
0.75	0.194	2.40	1.116	4.05	1.014	5.70	0.992
0.80	0.204	2.45	1.085	4.10	1.016	5.75	0.993
0.85	0.215	2.50	1.061	4.15	1.018	5.80	0.994
0.90	0.227	2.55	1.040	4.20	1.018	5.85	0.995
0.95	0.241	2.60	1.021	4.25	1.018	5.90	0.995
1.00	0.256	2.65	1.004	4.30	1.017	5.95	0.996
1.05	0.273	2.70	0.989	4.35	1.016	6.00	0.997
1.10	0.293	2.75	0.976	4.40	1.014	6.05	0.997
1.15	0.315	2.80	0.965	4.45	1.012	6.10	0.998
1.20	0.340	2.85	0.956	4.50	1.010	6.15	0.998
1.25	0.368	2.90	0.949	4.55	1.007	6.20	0.999
1.30	0.399	2.95	0.944	4.60	1.005	6.25	0.999
1.35	0.433	3.00	0.941	4.65	1.002	6.30	0.999
1.40	0.472	3.05	0.939	4.70	1.000	6.35	1.000
1.45	0.515	3.10	0.939	4.75	0.997	6.40	1.000
1.50	0.566	3.15	0.940	4.80	0.995	6.45	1.000
1.55	0.626	3.20	0.942	4.85	0.993	6.50	1.000
1.60	0.695	3.25	0.945	4.90	0.991	6.55	1.000

Таблиця А.2: Фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в ^{4}He

q, Å^{-1}	ν_q, K·Å^3		q, Å^{-1}	ν_q, K·Å^3		q, Å^{-1}	ν_q, K·Å^3		q, Å^{-1}	ν_q, K·Å^3
0.00	1854.642		3.30	127.463		6.60	1.384		9.90	0.267
0.10	1718.064		3.40	107.952		6.70	0.142		10.00	0.322
0.20	1668.719		3.50	87.575		6.80	−0.649		10.10	0.365
0.30	1658.420		3.60	66.019		6.90	−1.121		10.20	0.392
0.40	1696.887		3.70	41.253		7.00	−1.360		10.30	0.402
0.50	1741.339		3.80	14.865		7.10	−1.436		10.40	0.398
0.60	1797.841		3.90	−11.037		7.20	−1.360		10.50	0.381
0.70	1855.320		4.00	−33.892		7.30	−1.178		10.60	0.355
0.80	1878.750		4.10	−51.770		7.40	−0.920		10.70	0.320
0.90	1841.081		4.20	−61.046		7.50	−0.612		10.80	0.281
1.00	1711.954		4.30	−60.682		7.60	−0.282		10.90	0.240
1.10	1510.052		4.40	−52.211		7.70	0.041		11.00	0.200
1.20	1254.183		4.50	−37.724		7.80	0.333		11.10	0.161
1.30	985.829		4.60	−18.491		7.90	0.575		11.20	0.127
1.40	732.031		4.70	5.239		8.00	0.754		11.30	0.097
1.50	492.149		4.80	30.105		8.10	0.869		11.40	0.072
1.60	261.975		4.90	53.630		8.20	0.908		11.50	0.051
1.70	74.959		5.00	73.707		8.30	0.884		11.60	0.035
1.80	−62.007		5.10	89.292		8.40	0.807		11.70	0.023
1.90	−148.885		5.20	98.210		8.50	0.692		11.80	0.014
2.00	−193.077		5.30	100.844		8.60	0.554		11.90	0.008
2.10	−198.860		5.40	97.782		8.70	0.406		12.00	0.004
2.20	−178.040		5.50	90.167		8.80	0.263		12.10	0.001
2.30	−141.568		5.60	79.563		8.90	0.139		12.20	−0.000
2.40	−85.980		5.70	67.075		9.00	0.040		12.30	−0.001
2.50	−42.129		5.80	54.289		9.10	−0.032		12.40	−0.002
2.60	−1.734		5.90	42.231		9.20	−0.067		12.50	−0.002
2.70	39.482		6.00	31.578		9.30	−0.070		12.60	−0.001
2.80	78.124		6.10	22.495		9.40	−0.046		12.70	−0.001
2.90	110.073		6.20	15.420		9.50	0.000		12.80	−0.001
3.00	130.602		6.30	10.042		9.60	0.061		12.90	−0.001
3.10	141.836		6.40	6.110		9.70	0.131		13.00	−0.000
3.20	140.580		6.50	3.337		9.80	0.202		13.10	−0.000

Таблиця А.3: Потенціал міжатомної взаємодії в ^{4}He

r, Å	$\Phi(r)$, K	r, Å	$\Phi(r)$, K	r, Å	$\Phi(r)$, K	r, Å	$\Phi(r)$, K
0.00	229.852	3.80	−4.250	7.70	0.041	11.50	−0.039
0.10	222.056	3.90	−3.487	7.80	0.050	11.60	−0.038
0.20	200.262	4.00	−3.261	7.90	0.067	11.70	−0.036
0.30	168.745	4.10	−3.406	8.00	0.092	11.80	−0.033
0.40	133.153	4.20	−3.695	8.10	0.120	11.90	−0.030
0.50	99.024	4.30	−3.917	8.20	0.150	12.00	−0.028
0.60	70.679	4.40	−3.931	8.30	0.178	12.10	−0.025
0.70	50.694	4.50	−3.685	8.40	0.199	12.20	−0.022
0.80	39.840	4.60	−3.206	8.50	0.213	12.30	−0.018
0.90	37.253	4.70	−2.579	8.60	0.216	12.40	−0.014
1.00	40.735	4.80	−1.908	8.70	0.209	12.50	−0.010
1.10	47.228	4.90	−1.287	8.80	0.192	12.60	−0.005
1.20	53.506	5.00	−0.783	8.90	0.167	12.70	−0.000
1.30	56.975	5.10	−0.422	9.00	0.137	12.80	0.005
1.40	56.302	5.20	−0.198	9.10	0.104	12.90	0.010
1.50	51.624	5.30	−0.082	9.20	0.071	13.00	0.014
1.60	44.279	5.40	−0.034	9.30	0.041	13.10	0.018
1.70	36.209	5.50	−0.017	9.40	0.016	13.20	0.021
1.80	29.316	5.60	−0.004	9.50	−0.003	13.30	0.023
1.90	24.954	5.70	0.020	9.60	−0.014	13.40	0.025
2.00	23.656	5.80	0.058	9.70	−0.020	13.50	0.025
2.10	25.074	5.90	0.107	9.80	−0.019	13.60	0.025
2.20	28.115	6.00	0.159	9.90	−0.015	13.70	0.024
2.30	31.250	6.10	0.204	10.00	−0.009	13.80	0.023
2.40	32.953	6.20	0.237	10.10	−0.003	13.90	0.022
2.50	32.134	6.30	0.256	10.20	0.003	14.00	0.020
2.60	28.437	6.40	0.262	10.30	0.007	14.10	0.018
2.70	22.283	6.50	0.256	10.40	0.008	14.20	0.016
2.80	14.660	6.60	0.243	10.50	0.006	14.30	0.013
2.90	6.784	6.70	0.224	10.60	0.002	14.40	0.010
3.00	−0.238	6.80	0.203	10.70	−0.005	14.50	0.007
3.10	−5.631	6.90	0.180	10.80	−0.012	14.60	0.003
3.20	−9.036	7.00	0.156	10.90	−0.019	14.70	0.000
3.30	−10.486	7.10	0.131	11.00	−0.026	14.80	−0.003
3.40	−10.320	7.20	0.107	11.10	−0.032	14.90	−0.005
3.50	−9.064	7.30	0.084	11.20	−0.036	15.00	−0.007
3.60	−7.308	7.40	0.064	11.30	−0.039	15.10	−0.007
3.70	−5.580	7.50	0.049	11.40	−0.040	15.20	−0.007

ДОДАТОК Б

Рівняння руху для функцій Ґріна, побудованих на операторах $\rho_{\mathbf{k}}$, $\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$

Комутатори:

$$[\rho_{\mathbf{k}}, \hat{\theta}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}] = \frac{2}{\sqrt{N}} \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \tag{Б.1}$$

$$[\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \hat{\theta}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}] = \frac{2}{\sqrt{N}} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\mathbf{k}'\mathbf{q}' - \mathbf{k}\mathbf{q})\hat{\theta}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'} + (\mathbf{k}'\mathbf{q} - \mathbf{k}\mathbf{q}')\hat{\theta}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}\right].$$

Зокрема, для операторів $\hat{\pi}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{\theta}_{\mathbf{k},0}$:

$$[\hat{\pi}_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{q}}] = \frac{2}{\sqrt{N}} \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}\mathbf{q}\, \hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \tag{Б.2}$$

— саме ця властивість і спонукала до введення оператора $\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$.

Гамільтоніан системи у цих операторах має вигляд:

$$\begin{aligned}
\hat{H} \;&=\; \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \left\{ \frac{1}{2}\rho_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{4\varepsilon_k}\hat{\pi}_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{\mathbf{k}} + \frac{N}{2V}\nu_k\, \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \right\} \\
&+\; \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}\mathbf{q} \left[\frac{1}{2\varepsilon_q}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{4\varepsilon_k\varepsilon_q}\hat{\pi}_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\hat{\pi}_{-\mathbf{q}} \right] + \right. \\
&+\; \left. \frac{N^2}{6V^2}\nu_3(\mathbf{k}+\mathbf{q}, -\mathbf{k}, -\mathbf{q})\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{q}} \right\} +
\end{aligned}$$

$$+\ \frac{1}{N}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left\{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{kq}\right)^2\left[\frac{1}{2\varepsilon_k\varepsilon_q}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{\mathbf{k}} -\right.\right. \qquad (\text{Б.3})$$

$$\left.\left.-\ \frac{1}{4\varepsilon_k^2\varepsilon_q}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}\hat{\pi}_{-\mathbf{k}}\hat{\pi}_{\mathbf{k}}\right] + \chi(\mathbf{k},-\mathbf{k},\mathbf{q},-\mathbf{q})\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right\} + \ldots,$$

де крапками позначено вищі поправки. Порівняно з гамільтоніаном, записаним через $\rho_{\mathbf{k}}$, $\partial_{\mathbf{k}}$, цей вираз містить доданки з добутками чотирьох операторів не лише в потенціальній енерґії, але й у кінетичній.

Для подвійних функцій Ґріна маємо такі рівняння руху (в RPA):

$$\hbar\omega G_{\theta\rho}(\mathbf{kk}',-\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{\pi}\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}\right) + \left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}\right)G_{\theta\rho}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,-\mathbf{k}-\mathbf{k}') +$$

$$+\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}\right)\varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}(\alpha^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}-1)\,G_{\rho\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',-\mathbf{k}-\mathbf{k}'),$$

$$\hbar\omega G_{\theta\rho}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,-\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{\pi}\,\varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|} + \varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}\,G_{\theta\rho}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,-\mathbf{k}-\mathbf{k}') +$$

$$+\,\varepsilon^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}(\alpha^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}-1)\,G_{\rho\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',-\mathbf{k}-\mathbf{k}'),$$

$$\hbar\omega G_{\rho\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',-\mathbf{k}-\mathbf{k}') = -\varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}\,G_{\rho\rho}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',-\mathbf{k}-\mathbf{k}') +$$

$$+\,G_{\theta\rho}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,-\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \qquad (\text{Б.4})$$

А також друга трійка:

$$\hbar\omega G_{\theta\theta}(\mathbf{kk}',\mathbf{qq}') = \left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}\right)G_{\theta\theta}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,\mathbf{qq}') +$$

$$+\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'}\right)\varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}(\alpha^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}-1)\,G_{\rho\theta}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{qq}'),$$

$$\hbar\omega G_{\theta\theta}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,\mathbf{qq}') = \varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}\, G_{\theta\theta}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,\mathbf{qq}') +$$

$$+\, \varepsilon^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}(\alpha^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}-1)\, G_{\rho\theta}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{qq}'),$$

$$\hbar\omega G_{\rho\theta}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{qq}') = \frac{1}{\pi}\,(\varepsilon_{q'}-\varepsilon_q) - \varepsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}\, G_{\rho\theta}(\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{qq}') +$$

$$+\, G_{\theta\theta}(\{\mathbf{k}+\mathbf{k}'\}0,\mathbf{qq}'), \qquad (\text{Б.5})$$

Для потрійних функцій Ґріна матимемо:

$$\hbar\omega G_{\rho\rho\rho}(1,2,3) = -(\varepsilon_1+\varepsilon_2)G_{\rho\rho\rho}(1,2,3) + \left[G_{\rho\theta\rho}(1,20,3) + G_{\theta\rho\rho}(10,2,3)\right],$$

$$\hbar\omega G_{\rho\theta\rho}(1,22',3) = -\frac{1}{\pi}\,\frac{S_1}{\sqrt{N}}\,\frac{\hbar^2}{2m}\,(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}'_2)\mathbf{k}_3 -$$

$$-\, \varepsilon_1 G_{\rho\theta\rho}(1,22',3) + (\varepsilon_2-\varepsilon_{2'})G_{\rho\theta\rho}(1,\{2+2'\}0,3)$$

$$+\, G_{\theta\theta\rho}(10,22',3) + (\varepsilon_2-\varepsilon_{2'})\varepsilon_{2+2'}(\alpha^2_{2+2'}-1)G_{\rho\rho\rho}(1,2+2',3),$$

$$\hbar\omega G_{\theta\rho\rho}(22',1,3) = -\frac{1}{\pi}\,\frac{S_1}{\sqrt{N}}\,\frac{\hbar^2}{2m}\,(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}'_2)\mathbf{k}_3 -$$

$$-\, \varepsilon_1 G_{\theta\rho\rho}(22',1,3) + (\varepsilon_2-\varepsilon_{2'})G_{\theta\rho\rho}(\{2+2'\}0,1,3)$$

$$+\, G_{\theta\theta\rho}(22',10,3) + (\varepsilon_2-\varepsilon_{2'})\varepsilon_{2+2'}(\alpha^2_{2+2'}-1)G_{\rho\rho\rho}(2+2',1,3),$$

$$\hbar\omega G_{\theta\theta\rho}(11',22',3) = -\frac{1}{\pi}\,\frac{1}{\sqrt{N}}\,\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\mathbf{k}_3(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}'_1)\widetilde{\Theta}_{22'} +$$

$$+\, \mathbf{k}_3(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}'_2)(\widetilde{\Theta}_{11'}+2\varepsilon_1-2\varepsilon_2)\Big] +$$

$$+ (\varepsilon_1 - \varepsilon_{1'}) G_{\theta\theta\rho}(\{1+1'\}0, 22', 3) +$$

$$+ (\varepsilon_2 - \varepsilon_{2'}) G_{\theta\theta\rho}(11', \{2+2'\}0, 3) +$$

$$+ (\varepsilon_1 - \varepsilon_{1'}) \varepsilon_{1+1'} (\alpha^2_{1+1'} - 1) G_{\rho\theta\rho}(1+1', 22', 3) +$$

$$+ (\varepsilon_2 - \varepsilon_{2'}) \varepsilon_{2+2'} (\alpha^2_{2+2'} - 1) G_{\rho\theta\rho}(11', 2+2', 3), \qquad (\text{Б}.6)$$

де числовими арґументами й індексами позначено для скорочення запису відповідні вектори, $\mathbf{k}_1 \to 1$, $\mathbf{k}'_1 \to 1'$ і т. д. У всіх функціях Ґріна пара арґументів, не розділених комою, стосується оператора $\hat{\theta}$. Як і раніше, $S_1 = \langle \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1} \rangle$, а означення середнього $\widetilde{\Theta}_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_1}$ випишемо нижче.

Тут використано властивості $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$, $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}'_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ і т. п. (закон збереження імпульсу).

На підставі наведених виразів (Б.6) легко отримати рівняння руху для функцій Ґріна, у яких правому оператору відповідає не ρ, як у записаних вище виразах, а $\hat{\theta}$, напр., для $G_{\rho\rho\theta}$. Для цього необхідно підставити відповідні комутатори і змінити правий індекс ρ на θ (пор. також (Б.4) і (Б.5))

Розв'язавши системи (Б.4) і (Б.5) для парних функцій Ґріна, легко отримати нові середні, які виникають при конструюванні рівнянь руху для потрійних функцій. Вони мають вигляд (пор. з (3.20)):

$$\widetilde{\Theta}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \equiv \langle \rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \hat{\theta}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rangle = (\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})(S_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|} - 1), \qquad (\text{Б}.7)$$

$$\Theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{q}'} \equiv \langle \hat{\theta}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{\theta}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \rangle = (\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})(\varepsilon_q - \varepsilon_{q'})(1 - \alpha^2_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|})\, S_{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|}$$

Для спрощення операції отримання середніх за відповідними функціями Ґріна випишемо ще дію оператора усереднення:

$$\hat{\mathcal{A}}\, \frac{1}{\hbar\omega \pm \varepsilon} = \frac{2\pi}{e^{\mp\beta\varepsilon} - 1},$$

$$\hat{\mathcal{A}}\,\frac{1}{\hbar^2\omega^2-\varepsilon^2}=\frac{\pi}{\varepsilon}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\varepsilon}{2}, \tag{Б.8}$$

$$\hat{\mathcal{A}}\,\frac{1}{\hbar\omega}\stackrel{\mathrm{def}}{=}0.$$

В останньому доозначенні виникне потреба лише при розрахунку середніх типу $\langle\rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'}\,\hat{\theta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'\neq0}\rangle$, в інших ситуаціях такі вирази не з'являються.