ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 1 (1996) с. 25–38

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 1 (1996) p. 25–38

СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР СИСТЕМИ ТОТОЖНИХ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЧАСТИНОК У КООРДИНАТНОМУ ЗОБРАЖЕННІ

І. О. Вакарчук
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики
Україна, 290005, Львів, вул. Драгоманова, 12
(Отримано 29 грудня 1995)

Отримано новий вираз для повної матриці густини системи тотожних взаємодіючих частинок у координатному зображенні у вигляді добутку матриці густини ідеального квантового ґазу з перенормованою за рахунок взаємодії масою частинок та фактора, що враховує міжчастинкову взаємодію, який при низьких температурах зводиться до добутку хвильових функцій основного стану багатобозонної системи.

Ключові слова: матриця густини, рідкий гелій, λ-перехід, Бозе–конденсат, ефективна маса.

PACS number(s): 05.30.-d; 67.40.-w; 67.55.-s

І. ВСТУП

Проблема розрахунку статистичного оператора багаточастинкової системи в координатному зображенні, тобто повної матриці густини, має давню історію, започатковану працями Є. Віґнера [1], Дж. Уленбека і Л. Ґроппера [2] та Дж. Кірквуда [3], в яких отримані квантові поправки до класичних виразів у наближенні $\hbar^2$. Ці дослідження давно увійшли до підручників та монографій [4–7]. Пізніші дослідження були присвячені підрахунку цих квазікласичних поправок для матриць густини та термодинамічних функцій до $\hbar^4$. У 90-х роках відновився інтерес до квазікласичних поправок у зв'язку із вимірюваннями середньої кінетичної енергії рідкого та твердого станів важких атомів благородних ґазів. У [8] підраховано середню кінетичну енергію до членів $\hbar^6$ і, як виявилось, квантові поправки, зокрема для таких систем, як неон [8] і арґон [9], є значними.

У 60-х роках І. Юхновський [10–12] для дослідження багаточастинкових систем запропонував метод зміщень та колективних змінних, центральним перетворенням у якому було виділення зі статистичного оператора в координатному зображенні його неоператорної частини. Для неї було знайдене рівняння, розв'язок якого, як виявилось, відповідає підсумовуванню певного класу членів квазікласичного ряду теорії збурень. Це у свою чергу дозволило поширити отримані результати у суттєво квантову область низьких температур.

Для багатобозонної системи в границі низьких температур повну матрицю густини як функцію координат частинок різними методами було знайдено в [13–17], з урахуванням парних, три- та чотиричастинкових кореляцій. У цьому ж так званому наближенні двох сум за хвильовими векторами нами були знайдені часткові матриці густини, що визначають просторовий розподіл атомів, та їхній розподіл за імпульсами, що дало змогу детально дослідити явище Бозе–Айнштайнівської конденсації в околі абсолютного нуля температур [15, 16, 18–24].

Проблема, яку тут обговорюємо, є цікавою також у зв'язку з теорією λ-переходу в рідкому ^{4}He. Окреслені вище підходи до розрахунку повної матриці густини не працюють в околі точки фазового переходу гелію-4 в надплинний стан. Цей перехід ще з 30-х років за припущенням Ф. Лондона пов'язується з Бозе–Айнштайнівською конденсацією, явищем, відкритим А. Айнштайном у 1925 р. Зауважимо, що строго цей зв'язок не доведено. З метою дослідження λ-переходу Р. Файнман [25, 26] запропонував із феноменологічних міркувань координатне зображення матриці густини у вигляді добутку матриці густини ідеального бозе–ґазу з перенормованою масою атомів на фактор, що враховує їхню непроникність. Феноменологічні міркування приводять до фазового переходу, як і в ідеальному бозе–ґазі, хоча розвитку ця ідея не одержала.

Зазначимо, що незважаючи на великі успіхи теорії фазових переходів, зумовлені введенням ідеї масштабної інваріантності та методів ренормалізаційної групи [27], теорія λ-переходу до цього часу не є вирішеною. Застосування методу ренормалізаційної групи стало можливим завдяки зображенню статистичної суми взаємодіючих бозе–частинок у вигляді функціонального інтеграла за власними значеннями операторів знищення частинок — так зване зображення когерентних станів [28]. Цей метод, однак, працює лише у найближчому околі точки фазового переходу і дає змогу розрахувати тільки критичні показники, що визначають ведучі асимптотики термодинамічних величин.

Отже, λ-перехід у рідкому гелії-4 залишається викликом для фізиків–теоретиків: нікому, зокрема, не вдалося отримати з перших принципів спостережуваний в експерименті логарифмічний хід теплоємності в околі λ-точки.

Тому з'ясування механізмів "деформації" Бозе–Айнштайнівської конденсації ідеального бозе–ґазу включенням міжчастинкової взаємодії є важливим для вияснення зв'язку цього явища з λ-переходом у рідкому гелії-4. Саме це і стимулювало дослідження автора, результати яких наведені нижче.

II. ВИХІДНІ РІВНЯННЯ

Розглянемо систему N тотожних частинок масою m в об'ємі V з координатами $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ і гамільтоніаном

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \Phi. \tag{1}$$

Перший доданок — це оператор кінетичної енергії, $\hat{\mathbf{p}}_j = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}_j$ — оператор імпульсу j-ї частинки; другий доданок — потенціальна енергія частинок.

Нас цікавить статистичний оператор у координатному зображенні, або, іншими словами, повна матриця густини

$$\begin{aligned} &R_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \qquad (2) \\ &= \sum_{\alpha} \psi^*_{\alpha}(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)\, e^{-\beta\hat{H}}\, \psi_{\alpha}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \end{aligned}$$

де $\beta = 1/T$, T — температура; $\psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — повний набір хвильових функцій симетризованих відповідно до статистики, якою описуються частинки; α — набір квантових чисел, що задають стан N-частинкової системи.

Виберемо як такий повний набір хвильові функції вільних частинок

$$\begin{aligned} &\psi_{\mathbf{k}_1,\dots,\mathbf{k}_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \qquad (3) \\ &= \left(\prod_{j=1}^{N} N_{\mathbf{k}_j}!/V^N N! \right)^{1/2} \sum_{Q} (\pm)^Q \exp\left(i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj}\mathbf{r}_j \right), \end{aligned}$$

де $\alpha \equiv (\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N)$ — сукупність хвильових векторів, що нумерують стани окремих частинок, причому компоненти кожного вектора набувають дискретні значення, кратні до $2\pi/V^{1/3}$ з усієї дійсної осі. Підсумовування по Q проводиться по всіх перестановках різних індексів $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N$; верхній знак відповідає статистиці Бозе, нижній — статистиці Фермі. Число $N_{\mathbf{k}_j}$ дорівнює числу індексів із $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N$, що мають значення $\mathbf{k}_j$ (для статистики Фермі, очевидно, $N_{\mathbf{k}_j} = 0, 1$, отже $N_{\mathbf{k}_j}! = 1$; для статистики Бозе $N_{\mathbf{k}_j} = 0, 1, \dots, N$).

Введемо скорочені позначення:

$$x \equiv (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \;\; k \equiv (\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N).$$

У цих позначеннях повна матриця густини

$$R_N(x|x') = \sum_k \psi^*_k(x')\, e^{-\beta\hat{H}}\, \psi_k(x).$$

Введемо далі функцію

$$\chi_k(x, \beta') = e^{-\beta'\hat{H}} \psi_k(x).$$

Користуючись повнотою системи хвильових функцій $\psi_k(x)$, легко показати, що

$$R_N(x|x') = \sum_k \chi^*_k(x'; \beta - \beta')\, \chi_k(x; \beta'), \tag{4}$$

де параметр β' набуває будь-які значення і його можна вибрати з міркувань зручності — матриця густини не залежить від β'. Зокрема, тут нам буде зручно прийняти, що β' змінюється в "природних" межах, $0 \le \beta' \le \beta$. Незважаючи на очевидність цієї рівності, вона відіграє центральну роль у наступних розрахунках.

Розглянемо тепер функцію $\chi_k(x; \beta')$, яку з урахуванням (3) перепишемо таким чином:

$$\chi_k(x; \beta') = \left(\frac{\prod\limits_{j=1}^{N} N_{\mathbf{k}_j}!}{N!\, V^N} \right)^{1/2} \sum_Q (\pm)^Q \, \exp\left(-\beta'\hat{H} \right) \exp\left(i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj}\mathbf{r}_j \right).$$

Наступний крок полягає у пронесенні правої експоненти через операторну експоненту, при цьому оператор імпульсу в гамільтоніані (1) зсувається на величину імпульсу частинки, $\mathbf{p}_j \to \mathbf{p}_j + \hbar\mathbf{k}_{Qj}$:

$$\chi_k(x;\beta') = \left(\frac{\prod\limits_{j=1}^{N} N_{\mathbf{k}_j}!}{V^N N!} \right)^{1/2} \sum_Q (\pm)^Q \exp\left(-\beta' \sum_{j=1}^{N} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_j^2}{2m} + i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj} \mathbf{r}_j \right) \exp\left(-\beta' \hat{H} + \frac{i\hbar^2}{m} \beta' \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj} \nabla_j \right).$$

Операторна експонента діє тут лише сама на себе і дає деяку функцію змінних x, k та параметра β'. У класичній границі $\hbar \to 0$ операторна експонента дорівнює больцманівському фактору з потенціальною енергією міжчастинкової взаємодії Φ. Тому результат цієї дії природно зобразити у вигляді експоненти, в показнику якої є функція $U = U(x, k; \beta')$. Отже, нехай

$$\exp\left(-\beta' \hat{H} + \frac{i\hbar^2}{m} \beta' \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj} \nabla_j \right) = e^U, \tag{5}$$

причому очевидно $U(x, k, 0) = 0$. Таким чином

$$\chi_k(x;\beta') = \left(\frac{\prod\limits_{j=1}^{N} N_{\mathbf{k}_j}!}{V^N N!} \right)^{1/2} \sum_Q (\pm)^Q \exp\left(-\beta' \sum_{j=1}^{N} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_j^2}{2m} + i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj} \mathbf{r}_j + U(x, k; \beta') \right).$$

Підставимо тепер цей вираз у рівняння (4) і отримаємо

$$R_N(x|x') = \sum_k \left(\frac{\prod\limits_{j=1}^{N} N_{\mathbf{k}_j}!}{V^N N!} \right)^{1/2} \sum_Q \sum_{Q'} (\pm)^{Q+Q'} \exp\left(-\beta \sum_{j=1}^{N} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_j^2}{2m} - i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Q'j} \mathbf{r}'_j \right. \tag{6}$$
$$\left. + i \sum_{j=1}^{N} \mathbf{k}_{Qj} \mathbf{r}_j + U(x', -k; \beta - \beta') + U(x, k; \beta') \right).$$

Ми врахували, що, як випливає із самого означення, комплексно спряжена функція

$$U^*(x, k; \beta - \beta') = U(x', -k; \beta - \beta'),$$
$$-k \equiv (-\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2, \ldots, -\mathbf{k}_N).$$

Поговоримо про параметр β'. Якщо задача розв'язується точно, то можна покласти $\beta' = \beta$ і отримане нами нове зображення (6) для матриці густини зводиться просто до означення (2), з якого ми виходили, не даючи ніяких переваг. Інша ситуація виникає, коли задача не має точного аналітичного розв'язку, і ми змушені використовувати наближені методи розрахунку функції U. В цьому випадку розрахунок матриці $R_N(x|x')$ за її означенням (тобто при $\beta' = \beta$) приводить у деякому конкретному наближенні до матриці, що є несиметричною відносно змінних x та x'. Це суперечить самому означенню (2) матриці $R_N(x|x') = R_N(x'|x)$. Нічого дивного в цьому немає — ми робимо різні наближення для внеску від штрихованих та нештрихованих змінних, на які діє статистичний оператор. Навіть для нетривіальних задач, що мають точний розв'язок, наприклад, для системи тотожних частинок, зв'язаних осциляторними силами, явна ілюстрація цієї симетрії вимагає в остаточних виразах достатньо громіздких перетворень [29].

У новому запропонованому нами зображенні (6) для матриці $R_N(x|x')$ ця проблема симетрії вирішується у загальному випадку. Справді, скористаємося тим, що матриця густини $R_N(x|x')$ не залежить від параметра β', і підберемо його таким чином, щоб

$$U(x', -k; \beta - \beta') = U(x', -k; \beta'),$$

тобто покладемо $\beta - \beta' = \beta'$, або $\beta' = \beta/2$.

У цьому випадку

$$U(x',-k;\beta-\beta')=U(x',-k;\beta/2),$$
$$U(x,k;\beta')=U(x,k;\beta/2).$$

Тепер повна матриця густини

$$R_N(x|x')=\frac{1}{N!\,V^N}\sum_{\mathbf{k}_1}\cdots\sum_{\mathbf{k}_N}\left(\prod_{j=1}^N N_{\mathbf{k}_j}!\right)\sum_Q\sum_{Q'}(\pm)^{Q+Q'}\ \exp\left(-\beta\sum_{j=1}^N\frac{\hbar^2\mathbf{k}_j^2}{2m}\right.$$
$$\left.+\ i\sum_{j=1}^N(\mathbf{k}_{Qj}\mathbf{r}_j-\mathbf{k}_{Q'j}\mathbf{r}'_j)+U(x',-k;\beta/2)+U(x,k;\beta/2)\right). \tag{7}$$

Симетрія відносно змінних x та x' очевидна: у виразі для $R_N(x'|x)$ підсумовування за “німими” індексами $\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_N$ замінимо підсумовуванням за $-\mathbf{k}_1,\ldots,-\mathbf{k}_N$ і ми отримаємо вираз для $R_N(x|x')$, отже, $R_N(x'|x)=R_N(x|x')$.

Отриманий вираз (7) є вихідним для всіх наступних розрахунків.

III. ФУНКЦІЯ U

Повернемось до виразу (5). Диференціюючи цю рівність зліва і справа по параметру β', знаходимо рівняння для функції U:

$$-\frac{\partial U}{\partial\beta'}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^N\left(\nabla_j^2U+(\nabla_jU)^2\right)+\Phi-\frac{i\hbar^2}{m}\sum_{j=1}^N\mathbf{k}_{Qj}\boldsymbol{\nabla}_jU, \tag{8}$$

$U=0$ при $\beta'=0$. Якщо в цьому рівнянні покласти $\mathbf{k}_{Qj}=0$, то отримаємо відоме рівняння згаданого вище методу зміщень та колективних змінних [10–12].

Будемо шукати функцію U у вигляді ряду за степенями величин $\mathbf{k}_{Qj}$. Коефіцієнти такого ряду будуть функціями координат частинок $\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N$. У свою чергу ці коефіцієнтні функції зобразимо у вигляді розкладу за кореляціями: парними, потрійними і т.д. Якщо працювати не в координатному, а в імпульсному зображенні, то врахування парних кореляцій відповідає так званому наближенню хаотичних фаз (RPA), або наближенню однієї суми за хвильовим вектором $\mathbf{q}$. Вищі кореляції потребують розкладу в ряд за щораз більшою кількістю сум за хвильовими векторами $\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_N$. На підставі сказаного зобразимо функцію U у вигляді розкладу:

$$U=a_0+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}a_2(q)\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}+\sum_{\mathbf{q}\neq0}u_1(q)\rho_{\mathbf{q}}(\mathbf{q}\boldsymbol{\pi}_{-\mathbf{q}})+\sum_{\mathbf{q}\neq0}\ u_2(q)\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N(\mathbf{q}\mathbf{k}_{Qj})^2$$
$$+\ \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}u_3(q)\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N(\mathbf{q}\mathbf{k}_{Qj})^2+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}u_4(q)|\mathbf{q}\boldsymbol{\pi}_{-q}|^2+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq0}u_5(q)\rho_{\mathbf{q}}\varkappa_{-\mathbf{q}}+\ldots, \tag{9}$$

де введені такі позначення:

$$\rho_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j},\qquad \boldsymbol{\pi}_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^N\mathbf{k}_{Qj}\ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j},\qquad \varkappa_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^N(\mathbf{q}\mathbf{k}_{Qj})^2\ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}. \tag{10}$$

Крапками у виразі (9) позначені внески від доданків зі степенями $\mathbf{k}_{Qj}$ вищими ніж квадрат, та доданки, що містять дві і більше сум за хвильовими векторами q, тобто пост–RPA наближення. Коефіцієнтні функції $a_0,a_2(q),u_1(q),\ldots$ є функціями параметра β', для простоти запису ця залежність явно не вказана. Крім того, для функцій a_0 та $a_2(q)$ ми зберегли позначення з [11].

Рівняння для коефіцієнтних функцій ряду (9) отримують підстановкою його у рівняння (8) та прирівнюванням множників зліва і справа при однакових степенях величин (10). Для одержання явного вигляду цих рівнянь припускаємо, що потенціальна енергія Φ дорівнює сумі попарних взаємодій між частинками:

$$\Phi = \sum_{1\le i<j\le N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{N(N-1)}{2V}\,\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} \nu_q(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - 1),$$

де коефіцієнт Фур'є енергії взаємодії двох частинок

$$\nu_q = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}}\Phi(R)d\mathbf{R}.$$

Тепер відповідно до сказаного нескладні перетворення приводять до такої системи рівнянь у наближенні хаотичних фаз:

$$\begin{aligned}
&-\frac{da_0}{d\beta'} = -\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2q^2}{2m}a_2(q) + \frac{N(N-1)}{2V}\,\nu_0 - \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_q,\\
&-\frac{1}{2}\frac{da_2(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}a_2(q) - \frac{\hbar^2q^2}{2m}a_2^2(q) + \frac{N}{2V}\,\nu_q,\\
&-\frac{1}{2}\frac{du_1(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}u_1(q) + \frac{\hbar^2}{2m}a_2(q) - \frac{\hbar^2q^2}{2m}a_2(q)u_1(q),\\
&\frac{du_2(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}\left[u_3(q) + u_4(q) + u_5(q)\right],\\
&-\frac{1}{2}\frac{du_3(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}\left[u_3(q)(1-2a_2(q)) - a_2(q)u_5(q) + u_1^2(q)\right],\\
&-\frac{1}{2}\frac{du_4(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}u_4(q) - 2\frac{\hbar^2}{2m}u_1(q) + \frac{\hbar^2q^2}{2m}u_1^2(q),\\
&-\frac{1}{2}\frac{du_5(q)}{d\beta'} = \frac{\hbar^2q^2}{2m}u_5(q) + 2\frac{\hbar^2}{2m}u_1(q) - \frac{\hbar^2q^2}{2m}a_2(q)u_5(q);
\end{aligned} \tag{11}$$

при $\beta' = 0$, $a_0 = a_2 = u_1(q) = \ldots = u_5(q) = 0$.

Розв'язування цієї системи рівнянь слід починати з рівняння для $a_2(q)$, яке є замкненим, а потім послідовно переходити до наступних рівнянь. Перші два рівняння розв'язуються елементарно:

$$a_2(q) = -\frac{\alpha_q - 1}{2}\,\frac{1 - e^{-2\beta' E(q)}}{1 + \frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)}}, \qquad \alpha_q = \sqrt{1 + \frac{2N}{V}\,\nu_q\Big/\frac{\hbar^2q^2}{2m}}, \qquad E(q) = \frac{\hbar^2q^2}{2m}\alpha_q, \tag{12}$$

$$a_0 = -\beta' E_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left\{\frac{1 + \frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)}}{1 + \frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}}\right\}, \qquad E_0 = \frac{N(N-1)}{2V}\,\nu_0 - \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(\alpha_q - 1)^2\frac{\hbar^2q^2}{2m}.$$

Ці розв'язки, як уже вказувалось, були отримані в [11]. Зазначимо, що величина $E(q)$ є нічим іншим, як спектром енергій квазічастинок у теорії надплинності М. Боголюбова, а E_0 — це енергія основного стану системи взаємодіючих бозе–частинок [30].

Наступні розв'язки нашої системи рівнянь (11) отримуємо після нескладних, але доволі громіздких та втомливих розрахунків:

$$u_1(q) = \frac{1}{q^2\left(1 + \frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)}\right)}\left\{\frac{\alpha_q - 1}{\alpha_q + 1} + e^{-2\beta' E(q)} - \frac{2\alpha_q}{\alpha_q + 1}e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}\right\}, \tag{13}$$

$$u_3(q) = \frac{e^{-2\beta' E(q)}}{q^4(1+\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)})^2}\left\{\frac{1}{\alpha_q}\left(\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\right)^2\left(e^{2\beta' E(q)}-1\right) - \frac{16\alpha_q(\alpha_q-1)}{(\alpha_q+1)^3}\left(e^{-2\beta'(\alpha_q+1)\frac{\hbar^2q^2}{2m}}-1\right)\right.$$

$$-\frac{8\alpha_q(\alpha_q-1)}{(\alpha_q+1)^2}\,\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}\left(e^{-\beta'(\alpha_q+1)\frac{\hbar^2q^2}{2m}}+1\right)+\frac{1}{\alpha_q}\left(1-e^{-2\beta' E(q)}\right)-\left(\frac{2\alpha_q}{\alpha_q+1}\right)^2\left(1-e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}}\right)$$

$$\left.+\,4\left(\frac{1}{\alpha_q+1}-\frac{2\alpha_q}{\alpha_q+1}\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}\right)\left(e^{\beta'(\alpha_q-1)\frac{\hbar^2q^2}{2m}}-1\right)+4\left(1+\frac{2\alpha_q}{\alpha_q+1}\right)\frac{e^{\beta'(\alpha_q-1)\frac{\hbar^2q^2}{2m}}-1-\beta'(\alpha_q-1)\frac{\hbar^2q^2}{2m}}{(\alpha_q-1)}\right\},$$

$$u_4(q) = \frac{(\alpha_q-1)(\alpha_q+3)}{q^4(\alpha_q+1)^2}\left(1-e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}}\right)-\frac{16\alpha_q}{q^4(\alpha_q+1)^4}\left(e^{-2\beta'\alpha_q\frac{\hbar^2q^2}{2m}}-e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}}\right)$$

$$+\frac{16\alpha_q}{q^4(\alpha_q+1)^3}\left(e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}-e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}}\right)+\frac{4\alpha_q}{q^4(\alpha_q+1)^2}\frac{e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}}{1+\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)}}$$

$$\times\left(1-\frac{2}{\alpha_q+1}e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q-1)}\right)^2-\frac{2(\alpha_q-1)^2}{q^4(\alpha_q+1)^3}\,e^{-2\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}},$$

$$u_5(q) = -\frac{4}{q^4}\frac{1}{\left(1+\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-2\beta' E(q)}\right)}\left\{\frac{\alpha_q-1}{(\alpha_q+1)^2}\left(1-e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}\right)-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\,e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}\right.$$

$$\left.-\,e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q+1)}\;\frac{e^{-\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q-1)}-1+\beta'\frac{\hbar^2q^2}{2m}(\alpha_q-1)}{(\alpha_q-1)}\right\}.$$

Функція $u_2(q)$ отримується простим інтеґруванням,

$$u_2(q) = \int_0^{\beta'}\frac{\hbar^2q^2}{2m}\left[u_3(q)+u_4(q)+u_5(q)\right]d\beta',$$

однак, зважаючи на громіздкий вираз, її явного вигляду тут не наводимо.

Наведемо також низькотемпературні границі цих величин:

$$a_0(q) = -\beta' E_0 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left(\frac{\alpha_q+1}{2\alpha_q}\right), \tag{14}$$

$$a_2(q) = -\frac{\alpha_q-1}{2},$$

$$u_1(q) = \frac{1}{q^2}\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1},$$

$$u_2(q) = \beta'\frac{\hbar^2}{2mq^2}\frac{(\alpha_q-1)^2}{\alpha_q(\alpha_q+1)},$$

$$u_3(q) = \frac{1}{q^4\alpha_q}\left(\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\right)^2,$$

$$u_4(q) = \frac{\alpha_q-1}{q^4}\frac{\alpha_q+3}{(\alpha_q+1)^2},$$

$$u_5(q) = -\frac{4}{q^4}\frac{\alpha_q-1}{(\alpha_q+1)^2}.$$

IV. ІНТЕҐРУВАННЯ ЗА ІМПУЛЬСАМИ

Маючи на увазі термодинамічну границю ($N \to \infty$, $V \to \infty, N/V = \rho = \mathrm{const}$), перейдемо у виразі (7) від підсумовування за імпульсами $\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_N$ до інтеґрування:

$$\sum_{\mathbf{k}_1}\cdots\sum_{\mathbf{k}_N} \to \frac{1}{N!}\left[\frac{V}{(2\pi)^3}\right]^N\int d\mathbf{k}_1\ldots\int d\mathbf{k}_N.$$

Інтегрування за всіма компонентами векторів $\mathbf{k}_j$ відбувається в безмежних межах. При цьому ми вважаємо, що однакових імпульсів для випадку статистики Бозе немає, отже, $N_{\mathbf{k}_j}! = 1$. Тим самим для бозе–частинок розглядається невироджений випадок. Пізніше ми окремо розглянемо випадок виродження, коли $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \ldots = 0$. Множник $1/N!$ враховує, що перестановки частинок не змінюють стану. Цей множник у фазовий об'єм вводив ще Ґіббс, щоб позбутися відомого парадоксу, який має його ім'я.

Далі врахуємо, що під знаком суми по Q виконуються рівності:

$$\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_{Qj})^2=\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_j)^2,$$

$$\sum_{j=1}^{N}\mathbf{k}_{Qj}\mathbf{r}_j=\sum_{j=1}^{N}\mathbf{k}_j\mathbf{r}_{Qj},$$

$$\boldsymbol{\pi}_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\mathbf{k}_{Qj}e^{-i\mathbf{qr}_j}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\mathbf{k}_je^{-i\mathbf{qr}_{Qj}},$$

$$\varkappa_{\mathbf{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_{Qj})^2e^{-i\mathbf{qr}_j}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_j)^2e^{-i\mathbf{qr}_{Qj}}.$$

Аналогічні рівності, очевидно, мають силу і для величин, помічених індексом Q'.

Звернемо тепер особливу увагу на четвертий доданок у функції U, який не містить координат частинок і є квадратичним по $\mathbf{k}_j$. Переходимо в ньому від підсумовування до інтеґрування по $\mathbf{q}$ та, виконуючи інтеґрування по кутах у сферичній системі координат, отримуємо, повертаючись знову до суми по $\mathbf{q}$:

$$\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_2(q)\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_j)^2=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}k_j{}^2\frac{1}{3}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_2(q)q^2. \quad (15)$$

Як бачимо, цей доданок можна об'єднати з першим вільночастинковим членом в експоненті у виразі (7) для матриці густини, що приведе до перенормування маси частинок; а з другим вільночастинковим членом об'єднуємо третій доданок з (9), лінійний по k_j.

Отже, з урахунням сказаного вище і явного вигляду функції U у межах прийнятих наближень для матриці густини отримуємо:

$$R(x|x')=\frac{1}{(N!)^2}\frac{1}{(2\pi)^{3N}}\sum_{Q}\sum_{Q'}(\pm)^{Q+Q'}\exp\left[2a_0+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}+\rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\right] \quad (16)$$

$$\times\int d\mathbf{k}_1\ldots\int d\mathbf{k}_N\exp\left[-\beta\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2k_j^2}{2m^*}+i\sum_{j=1}^{N}\mathbf{k}_j\mathbf{R}_j+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_3(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}+\rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{qk}_j)^2\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_4(q)(|\mathbf{q}\boldsymbol{\pi}_{\mathbf{q}}|^2+|\mathbf{q}\boldsymbol{\pi}'_{\mathbf{q}}|^2)+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_5(q)(\rho_{\mathbf{q}}\varkappa_{-\mathbf{q}}+\rho'_{\mathbf{q}}\varkappa'_{-\mathbf{q}})\right].$$

Нагадаємо, що тут у коефіцієнтних функціях параметр $\beta'=\beta/2$. Обернена ефективна маса

$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{m}-\frac{4m}{3N\beta\hbar^2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}q^2u_2(q); \quad (17)$$

величина

$$\mathbf{R}_j=\mathbf{r}^*_{Qj}-\mathbf{r}'^*_{Q'j}, \quad (18)$$

$$\mathbf{r}^*_j=\mathbf{r}_j-i\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_1(q)\mathbf{q}\rho_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{qr}_j}=\mathbf{r}_j-\nabla_jU_1,$$

$$U_1=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}u_1(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}-1)=\sum_{1\le i<j\le N}\tilde{u}_1(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|),$$

$$\tilde{u}_1(R)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}u_1(q)e^{i\mathbf{qR}}.$$

У (16) штриховані величини (10) означають штриховані координати частинок у них.

Оскільки в показнику експоненти під інтеґралами у виразі (16) маємо квадратичну форму, інтеґрування можна виконати точно. Однак це буде перевищувати прийняті нами раніше наближення парних кореляцій, або наближення однієї суми по $\mathbf{q}$. Тому будемо розглядати при інтеґруванні по $\mathbf{k}_j$ у (16) члени з функціями $u_3(q), u_4(q)$ та $u_5(q)$ за теорією збурень. Спочатку виконуємо інтеґрування без урахування цих доданків, а інтеґрування з ними розглядається як усереднення. Отже, у межах прийнятих раніше наближень випишемо остаточний результат:

$$R(x|x') = \exp\left[2a_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0} u_4(q)\frac{m^* q^2}{\beta\hbar^2} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left[a_2(q) + \frac{m^* q^2}{\beta\hbar^2}(u_3(q)+u_5(q))\right](\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\right] \tag{19}$$

$$\times\left(\frac{1}{N!}\right)^2\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2}\sum_Q\sum_{Q'}(\pm)^{Q+Q'}\exp\left(-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}\sum_{j=1}^N R_j^2\right)$$

$$\times\exp\,[-\frac{1}{2}\left(\frac{m^*}{\beta\hbar^2}\right)^2\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\{u_3(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)^2 + u_4(q)(|\pi_1(\mathbf{q})|^2 + |\pi'_1(\mathbf{q})|^2)$$

$$+u_5(q)(\rho_{\mathbf{q}}\pi_2(-\mathbf{q}) + \rho'_{\mathbf{q}}\pi'_2(-\mathbf{q}))\}]\,,$$

де величини

$$\pi_n(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^N(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)^n e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j},\quad n=1,2,\ldots\ .$$

Як і раніше, штриховані величини означають штриховані координати в них.

Ми отримали явний вираз для статистичного оператора в координатному зображенні, в якому до вільночастинкового обмінного члена в показнику експоненти, пропорційного до R_j^2, що враховує тотожність частинок, додаються внески, які враховують як обмін, так і взаємодію між частинками. Причому ці внески також є квадратичними по $\mathbf{R}_j$, це у свою чергу зумовлено тим, що ми обмежились у функціональному ряді для функцій U квадратичними за імпульсами $\mathbf{k}_j$ членами. Врахування вищих степенів по $\mathbf{k}_j$ приведе, по-перше, до появи вищих степенів по $\mathbf{R}_j$, а по-друге, — до виникнення незалежних від статистики перехресних членів по штрихованих та нештрихованих змінних типу $\rho_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}}$. Поява цих доданків диктується явним виразом для низькотемпературної повної матриці густини, де такі доданки є [15–17]. Механізм виникнення таких перехресних можна з'ясувати, якщо підмітити очевидну рівність

$$\rho'_{\mathbf{q}} - \rho_{\mathbf{q}} = \sum_{n\geq 1}\frac{i^n}{n!}\pi_n(\mathbf{q}).$$

Виражаючи звідси в конкретному наближенні величини $\pi_n(\mathbf{q})$ з вищим значком n через нижчі і підставляючи їх у вираз (19), отримаємо ці перехресні внески. Ми залишимо це питання для подальших досліджень, у яких будуть враховані вищі степені по $\mathbf{k}_j$ у функції U зі збереженням наближення хаотичних фаз.

Зосередимо увагу на трьох доданках у показнику останньої експоненти у виразі (19). У першому доданку вважаємо, що величини $\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}$ та $\rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}}$ не залежать від напрямку вектора q. Якщо мати на увазі подальше усереднення цих величин, що дасть структурний фактор, який для невпорядкованих систем (ґаз, рідина, аморфне тіло) залежить лише від величини вектора q, то можна сподіватись, що таке припущення має силу: залежність від напрямку вектора q зникає в термодинамічній границі. Отже, виникає можливість заміни $(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)^2$ на $q^2R_j^2/3$, як це було зроблено в (15), та об'єднання цього доданка з вільночастинковим. Це приведе до наступного перенормування маси частинок, яка стає залежною від конфігурації $\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N$, тобто від локальної густини частинок. Ця залежність природно є слабкою і пропорційна до різниці між величиною $\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}$ та її середнім значенням, тобто структурним фактором.

У другому та третьому доданках, які тут обговорюємо, виділимо окремо внески від однакових індексів координат частинок. Вони також пропорційні до $(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)^2$ і приводять до перенормування маси частинок. У результаті приходимо до наступного виразу для статистичного оператора в координатному зображенні:

$$R_N(x|x') = \exp\left[2a_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}}) + \frac{m^*}{4\beta\hbar^2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}q^2u_5(q)\left[(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - 1) + (\rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}} - 1)\right]\right] \tag{20}$$

$$\times\left(\frac{1}{N!}\right)^2\left(\frac{m^{**}}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2}\sum_Q\sum_{Q'}(\pm)^{Q+Q'}\exp\left[-\frac{m^{**}}{2\pi\beta\hbar^2}\sum_{j=1}^N R_j^2 + W + W'\right],$$

де

$$W = -\left[\frac{m^*}{\beta\hbar^2}\right]^2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \sum_{1\leq i<j\leq N} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{Qi}-\mathbf{r}_{Qj})} \left[u_4(q)(\mathbf{q}\mathbf{R}_i)(\mathbf{q}\mathbf{R}_j) + u_5(q)(\mathbf{q}\mathbf{R}_j)^2\right], \tag{21}$$

а двічі перенормована маса

$$\frac{m^{**}}{m^*} = 1 + \frac{1}{3N}\frac{m^*}{\beta\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} q^2 \left[u_3(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}}) + 2u_4(q) + 2u_5(q)\right]. \tag{22}$$

Крім того, тут враховано, що в наближенні однієї суми по $\mathbf{q}$ має силу рівність:

$$\begin{aligned}\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2} &= \left(\frac{m^{**}}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2} \exp\left[-\frac{3}{2}N\ln\frac{m^{**}}{m^*}\right] \\ &= \left(\frac{m^{**}}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2} \exp\left[-\frac{m^*}{\beta\hbar^2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} q^2 \left[u_3(q)(\rho_q\rho_{-q} + \rho'_q\rho'_{-q})/2 + u_4(q) + u_5(q)\right]\right].\end{aligned}$$

Функція W' отримується з W взаємною заміною штрихованих та нештрихованих координат частинок. Легко переконатись, що функція W залежить лише від перестановок Q', а W' від перестановок Q. Отриманий вираз (20) є основним результатом нашої роботи.

Перший множник у ньому не залежить від статистики, якій підкоряються частинки. Як уже вказувалось, врахування вищих степенів по $\mathbf{k}_j$ у функції U приведе до появи в ньому перехресних доданків від штрихованих та нештрихованих координат. Другий множник відповідає за статистику частинок. Функція W в прийнятому наближенні є квадратичною по $\mathbf{R}_j$. Врахування вищих степенів $\mathbf{k}_j$ у функції U приведе до появи в ряді для W вищих степенів по $\mathbf{R}_j$, що може змінити квадратичний по R_j характер вільночастинкового члена, якщо підсумувати певні послідовності цього ряду. У свою чергу це може привести до зміни порівняно з ідеальним ґазом особливостей термодинамічних функцій в околі точки Бозе–Айнштайнівської конденсації.

V. ЕФЕКТИВНА МАСА

Важливим і на перший погляд несподіваним результатом наведених розрахунків є поява в теорії ефективної маси частинок m^* та m^{**}. Якщо у виразі (22) штриховані й нештриховані величини $\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}$ замінити їхніми середніми значеннями, тобто структурним фактором $S_q =< \rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} >=< \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}} >$ (у прийнятих наближеннях можна вважати, що це усереднення проводиться за повним розподілом), то ефективна маса

$$\frac{m^{**}}{m^*} = 1 + \frac{2m^*}{3\beta\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} q^2 \left[S_q u_3(q) + u_4(q) + u_5(q)\right]. \tag{23}$$

Нагадаємо, що значення S_q залежить від статистики, а отже, і ефективна маса m^{**} буде залежати від статистики, якій підкоряються частинки. В низькотемпературній границі ($\beta \to \infty$), очевидно, $m^{**} = m^*$. З урахуванням (14) з (17) для ефективної маси при температурі абсолютного нуля, яку ми позначимо через m_0^*, отримуємо:

$$\frac{m}{m_0^*} = 1 - \frac{1}{3N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q(\alpha_q + 1)}. \tag{24}$$

Для багатобозонної системи, якою є рідкий ^{4}He, цей вираз можна переписати через спостережувальну величину — рідинний структурний фактор S_q. Справді, якщо взяти до уваги, що в прийнятому тут наближенні хаотичних фаз при $T = 0$ K [15–19]

$$S_q = 1/\alpha_q,$$

то

$$\frac{m}{m_0^*} = 1 - \frac{1}{3N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{(S_q - 1)^2}{S_q + 1}. \tag{25}$$

Принагідно вкажемо, що для рідкого ^{4}He при нормальній густині $\rho = 0.02185\,\text{Å}^{-3}$ використання експериментальних значень структурного фактора [33–37] в цій формулі дає [24, 38] $m_0^* = 1.7m$.

Зробимо тут цікаве зауваження, яке стосується зв'язку цього виразу з виразом для ефективної маси M^* домішкового атома ^{3}He в рідкому ^{4}He. Вперше на основі мікроскопічного підходу ця задача розглядалась ще в працях Т. Девісона і Е. Фінберґа [31] та В. Слюсарева і М. Стржемечного [32]. Нами також ще в 70-х роках був знайдений вираз для ефективної маси відносно маси ізольованого атома через структурний фактор при температурі абсолютного нуля:

$$\frac{M}{M^*} = 1 - \frac{1}{3N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{(S_q-1)^2}{S_q+\frac{M}{m}}\left[1-(1-\frac{M}{m})\frac{S_q}{S_q+\frac{M}{m}}\right]^2.$$

Без множника в квадратних дужках, який дещо зменшує значення M^*, отримуємо результат з [32]. Якщо в цьому виразі формально вважати масу зовнішнього атома $M = m$, тобто масі атома ^{4}He, то ми отримуємо вираз (25). Це вказує на певну узгодженість теорії, яку ми розвиваємо у цій роботі. Слід, однак, зазначити, що для температур, відмінних від нуля, такого узгодження не може бути, оскільки ефективна маса атома ^{3}He отримується після усереднення по станах рідкого ^{4}He. Внаслідок того, що середнє значення взаємодії "домішка–рідина" дорівнює сталій величині, то вираз для ефективної маси M^* отримується лише в другому порядку теорії збурень за ν_q, тобто під знаком суми по $\mathbf{q}$ ми маємо величини, пропорційні до $(\alpha_q-1)^2$. Водночас вираз (17) для ефективної маси m^* отримується, зрозуміло, без такого усереднення, отже, ми очікуємо тут внеску лінійного по ν_q або (α_q-1).

Цікаво навести явні вирази ефективної маси для двох модельних систем: бозе–ґазу заряджених частинок у компенсуючому полі та бозе–ґазу твердих сфер. У першому випадку ($\nu_q = 4\pi e^2/q^2$, $q\neq 0$, e — заряд частинки) з урахуванням (12) з (24) знаходимо

$$\frac{m}{m_0^*} = 1 - \frac{q_0^3}{6\pi^2\rho}\cdot\frac{\Gamma^2(1/4)}{84\sqrt{\pi}},$$

$$q_0 = (16\pi\rho/a_B)^{1/4},$$

$a_B = \hbar^2/me^2$ — радіус Бора, гама-функція $\Gamma(1/4) = 3.625609$.

У другому випадку ($\nu_q = 4\pi\hbar^2 a/m$, a — діаметр твердої сфери)

$$\frac{m}{m_0^*} = 1 - \frac{64}{45}\sqrt{\frac{\rho a^3}{\pi}}.$$

Якщо для ^{4}He визначати діаметр твердої сфери з умови рівності нулю експериментально знайденої парної функції розподілу, то $a\simeq 2.2\,\text{Å}$. Для нормальної густини рідкого ^{4}He $\rho = 0.02185\,\text{Å}^{-3}$ звідси знаходимо $m_0^*/m \simeq 1.63$.

Температурну залежність ефективної маси m^{**}, яка розраховується з (17), (23) за допомогою явних виразів коефіцієнтних функцій $u_n(q)$ з (13) і при низьких температурах є лінійною функцією T, ми детально розглянемо в окремій роботі. Тут наведемо лише головне, лінійне наближення по "параметру" (α_q-1)

$$\frac{m}{m^*} = \frac{m}{m_0^*} - \frac{8}{3N}\frac{m}{\beta\hbar^2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{(\alpha_q-1)(3\alpha_q+1)}{q^2\alpha_q(\alpha_q+1)^3}.$$

Наступні члени розкладу m^* та m^{**} є квадратичними по цьому "параметру". Якщо цей вираз переписати через структурний фактор, то

$$m/m^* = m/m_0^* + T/T^*,$$

$$1/T^* = \frac{8m}{3\hbar^2}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{S_q^2(S_q-1)(S_q+3)}{q^2(S_q+1)^3}.$$

У випадку фермі–рідини (наприклад, рідкий ^{3}He в нормальному стані) також можна використати зв'язок між рідинним структурним фактором S_q та функцією α_q, який ми наводимо тут без доведення:

$$S_q = \frac{S_q^0}{1+(\alpha_q-1)S_q^0},$$

де S_q^0 — структурний фактор ідеального фермі–ґазу.

На закінчення цього параграфа зробимо одне важливе зауваження. При обчисленні ефективної маси не з рівнянь динаміки, а термодинамічним шляхом (як це ми робимо в цій статті) необхідно акуратно розділити у вільній енергії частину, зв'язану з ентропійним внеском і внеском у внутрішню енергію. Саме останній внесок і є ефективною масою, яку визначають з рівнянь динаміки, зокрема методом функцій Ґріна.

VI. КОНДЕНСАТНЕ НАБЛИЖЕННЯ

Для багатобозонної системи важливий внесок у матрицю густини та інші термодинамічні функції дає стан, що описує вільночастинковий бозе–конденсат, тобто стан, в якому імпульси всіх частинок дорівнюють нулю: $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \ldots = \mathbf{k}_N = 0$. Для фермі–систем такого стану очевидно нема.

Розглянемо внесок у матрицю густини (7) цього "першого" доданка і назвемо це наближення конденсатним:

$$R_N(x|x') = \frac{1}{V^N}\exp\left[U(x',0;\beta/2)+U(x,0;\beta/2)\right]$$

$$= \frac{1}{V^N} \exp\left[2a_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\right],$$

тут a_0 та $a_2(q)$ беремо з (12) при $\beta' = \beta/2$. Звідси в границі низьких температур $\beta \to \infty$ для матриці густини маємо

$$R_N(x|x') = e^{-\beta E_0}\psi_0(x')\psi_0(x),$$

де хвильова функція основного стану системи взаємодіючих бозонів [39, 16, 40]

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{V^N}}\left(\prod_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{1}{\sqrt{\alpha_q}}\right) \times \exp\left[-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(\alpha_q - 1)\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right].$$

Ми отримуємо таким чином правильний вираз для матриці густини при абсолютному нулі температури лише з урахуванням внеску конденсатного стану, коли імпульси всіх частинок дорівнюють нулю.

Розглянемо тепер, який внесок дають стани з $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \ldots = \mathbf{k}_N = 0$ в термодинамічні функції. Причому матрицю густини візьмемо з довільним параметром β':

$$R_N(x|x') = \frac{1}{V^N}\exp\left[a_0(\beta-\beta') + a_0(\beta') + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(a_2(q,\beta-\beta')\ \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}} + (a_2(q,\beta')\ \rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}})\right].$$

Розрахуємо статистичну суму

$$Z_N = \int d\mathbf{r}_1 \ldots \int d\mathbf{r}_N\ R_N(x|x)$$

в наближенні хаотичних фаз:

$$Z_N = \exp\left[a_0(\beta-\beta') + a_0(\beta') - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\ln\left(1 - a_2(q,\beta-\beta') - a_2(q,\beta')\right)\right].$$

Підставляючи у цей вираз явний вигляд коефіцієнтних функцій з (12), знаходимо після нескладних перетворень для вільної енергії:

$$F = E_0 - \frac{1}{\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left(\frac{2\sqrt{\alpha_q}}{\alpha_q+1}\right) + \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left[1 - \left(\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\right)^2 e^{-2\beta E(q)}\right]. \tag{26}$$

Важливо, що, як і повинно бути, параметр β' випав з остаточних результатів, на що наголошувалося в параграфі другому. Внутрішня енергія

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{E(q)}{\left(\frac{\alpha_q+1}{\alpha_q-1}\right)^2 e^{2\beta E(q)} - 1}. \tag{27}$$

У границі низьких температур ($T \to 0$) важливі лише малі значення хвильового вектора, коли $\alpha_q = 2mc/\hbar q$, $q \to 0$, де $c = \sqrt{\rho\nu_0/m}$ — швидкість першого звуку, з (27) ми отримуємо відомий закон Стефана–Больцмана

$$E = E_0 + \frac{\pi^2 V}{30\hbar^3 c^3}\left(\frac{T}{2}\right)^4,$$

але з "половинною" температурою. Отже, можна зробити висновок, що конденсатний внесок у термодинамічні функції правильно визначає їхню залежність від температури, однак для отримання точних виразів необхідно враховувати надконденсатні стани: "одноімпульсні" $\alpha = (\mathbf{k}, 0, \ldots, 0)$ та "двоімпульсні" $\alpha = (\mathbf{k}, -\mathbf{k}, 0, \ldots, 0)$.

Розглянемо тепер область високих температур $\beta \to 0$ і квазікласичну границю $\hbar \to 0$. Для вільної енергії (26) знаходимо добре відомий вираз

$$F = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 - \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_q + \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln(1+\beta\frac{N}{V}\nu_q).$$

Йдеться лише про ту частину вільної енергії, яка визначається міжчастинковою взаємодією. Отже, внесок конденсатних станів для багатобозонних систем значною мірою визначає поведінку термодинамічних функцій як у суттєво квантовій області низьких температур, так і в квазікласичній границі.

VII. ВИСНОВКИ

У вступі ми наголошували, що нашою метою є спроба зробити ще один крок до вирішення проблеми λ-переходу в рідкому ^{4}He. Тут ще раз спеціально зазначимо, що ми отримали вирази, які працюють як для симетричної, так і для антисиметричної статистики. Природно, пов'язуючи λ-перехід з явищем Бозе–Айнштайнівської конденсації в ідеальному ґазі, зберегти в повній матриці густини вільночастинковий внесок як основний, а взаємодію враховувати лише як таку, що "деформує" математичний механізм конденсації частинок в імпульсному просторі. У зв'язку з цим для дослідження термодинамічних функцій в околі критичної точки, тобто точки Бозе–Айнштайнівської конденсації, ми можемо далі спростити знайдені вирази. По-перше, не брати до уваги функції W та W' з (21) у виразі (20), і отже, нехтувати внесками із "заплутаними" міжчастинковою взаємодією та обмінними ефектами. По-друге, ефективну масу m^{**} вважати незалежною від локальної густини, як це наведено у формулі (23). По-третє, у виразі (24) для величини r_j^* виконати усереднення другого доданка, $< \boldsymbol{\nabla}_j \mathbf{U}_1 >= 0$. Отже, з такими припущеннями

$$R_N(x|x') = P_N(x|x')\ R_N^0(x|x'), \tag{28}$$

$$R_N^0(x|x') = \frac{1}{N!}\left[\frac{m^{**}}{2\pi\beta\hbar^2}\right]^{3N/2}\sum_Q(\pm)^Q\exp\left[-\frac{m^{**}}{2\beta\hbar^2}\sum_{j=1}^N(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}'_{Qj})^2\right],$$

$$P(x|x') = \exp\left[2a_0^* + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2^*(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\right],$$

де величини

$$a_0^* = a_0 - \frac{m^{**}}{4\beta\hbar^2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}q^2u_5(q),$$

$$a_2^*(q) = a_2(q) + \frac{m^{**}}{2\beta\hbar^2}\ q^2u_5(q).$$

Вільночастинкова матриця густини в (28) $R_N^0(x|x')$ відповідає за виникнення Бозе–Айнштайнівської конденсації. Причому суттєвим є те, що маса частинок перенормована ($m \to m^{**}$) і $m^{**} > m$. Це приводить до зменшення температури бозе–конденсації T_c. Нагадаємо, що для ідеального бозе–ґазу критична температура обернено пропорційна до маси частинок: $T_c = 2\pi\hbar^2[\rho/\zeta(3/2)]^{2/3}/m^{**}$, $\zeta(3/2) = 2.612$ — дзета-функція Рімана. Фактор $P_N(x|x')$ найперше враховує сильне відштовхування атомів на малих відстанях, тобто "непроникність" атомів. Як видно з виразу для цього фактора, він при низьких температурах збігається з конденсатним наближенням, яке, у свою чергу, зводиться до добутку хвильових функцій основного стану багатобозонної системи. Якісно вплив його зводиться до зменшення вільного об'єму для частинок, а отже, до збільшення T_c. Таким чином, ми маємо два конкуруючі механізми творення спостережувального значення критичної температури, вважаючи, що температура бозе–конденсації T_c збігається з температурою λ-переходу T_λ. Оскільки ефективна маса залежить від густини ρ, можна пояснити експериментальну залежність від тиску величини T_λ в рідкому ^{4}He.

Розрахунки термодинамічних функцій на основі знайденої тут повної матриці густини будуть виконані в окремій роботі. А на завершення звернемо ще раз увагу на логарифмічну розбіжність теплоємності рідкого ^{4}He в λ-точці. Для виявлення механізму цієї розбіжності необхідно підсумувати певну послідовність ряду (9) за степенями імпульсів для функції U, або застосувати при розв'язуванні рівняння (8) непертурбаційний підхід щодо врахування імпульсів $\mathbf{k}_j$.

Це може змінити вільночастинковий, гаусівський характер обмінних членів у матриці густини. А це в свою чергу приведе до зміни особливостей термодинамічних функцій у критичній точці.

Автору приємно висловити подяку своїм колегам з кафедри теоретичної фізики Львівського університету, а також проф. В. І. Лендьелу та учасникам керованого ним семінару кафедри теоретичної фізики Ужгородського університету за обговорення проблем, що тут розглядалися. Ці дослідження частково були підтримані ґрантом № IXN000 від Міжнародного наукового фонду.

[1] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
[2] G. E. Uhlenbeck, L. Gropper, Phys. Rev. **41**, 79 (1932).
[3] J. G. Kirkwood, Phys. Rev. **44**, 31 (1933); **45**, 116 (1934).
[4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1996).
[5] К. Хуанг, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1966).
[6] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (Наука, Москва, 1971).
[7] Д. Ж. Майер, Гепперт–Майер, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1980).
[8] M. Asger, Q. N. Usmani, Phys. Rev. B **49**, 12262 (1994).
[9] M. A. Fradkin, S.–X. Zeng, Phys. Rev. B **49**, 3197 (1994).
[10] І. Р. Юхновський, Вісн. Львів. ун-ту, сер. фіз. **1(8)**, 63 (1962).
[11] І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **9**, 703 (1964); **9**, 827 (1964).
[12] И. Р. Юхновский, Препринт Ин-та теор. физ. АН УССР, № ИТФ–71–26Р, Киев, 1971.
[13] E. Feenberg, Ann. Phys. (USA) **70**, 133 (1972).
[14] Y. C. Lu, Phys. Rev. **A5**, 2244 (1972).
[15] И. А. Вакарчук, Препринт Ин-та теор. физ. АН УССР, № ИТФ–73–76Р, Киев, 1973.
[16] И. А. Вакарчук, ТМФ **23**, 260 (1975).
[17] И. А. Вакарчук, Препринт Ин-та теор. физ. АН УССР, № ИТФ–64Р, 1980.
[18] И. А. Вакарчук, ТМФ **32**, 247 (1977).
[19] И. А. Вакарчук, ТМФ **80**, 439 (1989); **82**, 438 (1990).
[20] И. А. Вакарчук, Укр. физ. журн. **29**, 1112 (1984).
[21] И. А. Вакарчук, ТМФ **65**, 285 (1985).
[22] И. А. Вакарчук, Укр. физ. журн. **35**, 1261 (1990).
[23] І. О. Вакарчук, Вісн. Львів. ун-ту, сер. фіз. **25**, 50 (1992).
[24] I. O. Vakarchuk, Int. Conf. "Physics in Ukraine" (Kiev, 22–27 June, 1993). Proceedings Contributed Papers: Statistical Physics and Phase Transitions, p. 145.
[25] R. P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1291 (1953); **91**, 1301 (1953); **94**, 262 (1954).
[26] Р. Файнман, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1975).
[27] К. Вильсон, Дж. Когут, *Ренормализационная группа и ε-разложение* (Мир, Москва, 1975).
[28] И. А. Вакарчук, ТМФ **35**, 76 (1978); **36**, 122 (1978).
[29] I. O. Vakarchuk, Cond. Matt. Phys. (Lviv) **5**, 203 (1995).
[30] Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР, сер. физ. **11**, 77 (1947).
[31] T. B. Davison, E. Feenberg, Phys. Rev. **178**, 306 (1969).
[32] В. Слюсарев, М. О. Стржемечний, Укр. фіз. журн. **14**, 450 (1969).
[33] E. K. Achter, L. Meyer, Phys. Rev. **188**, 291 (1969).
[34] R. Hallock, Phys. Rev. A **5**, 320 (1972).
[35] H. N. Robkoff, R. Hallock, Phys. Rev. B **24**, 159 (1981); **25**, 1572 (1982).
[36] V. F. Sears, E. C. Svensson, A. D. B. Woods, P. Martel, Atomic Energy Canada Limited Report, No AECL–6779 (1979); Phys. Rev. B **21**, 36 (1980).
[37] F. H. Wirth, R. B. Hallock, Phys. Rev. B **35**, 89 (1987).
[38] І. О. Вакарчук, Вісн. Львів. ун-ту, сер. фіз. **26**, 29 (1993).
[39] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ **28**, 129 (1955); **26**, 29 (1993).
[40] И .А. Вакарчук, И .Р. Юхновский, ТМФ **18**, 90 (1974); **40**, 100 (1979).

STATISTICAL OPERATOR OF A SYSTEM OF IDENTICAL INTERACTING PARTICLES IN COORDINATE REPRESENTATION

I. O. Vakarchuk
Ivan Franko Lviv State University, Chair of Theoretical Physics
12 Drahomanov Str., Lviv UA–290005, Ukraine

A new representation of the total density matrix of N identical interacting particles in coordinate representation was derived. It permits to obtain a symmetric matrix in calculations within the approximate aproaches. For a standard representation that follows from the definition the problem of non–symmetry arises due to the use of the approximate methods. To restore the symmetry it is necessary to sum up certain sequences of terms of infinite series of the perturbation theory.

On the basis of a new representation the density matrix in coordinate–momentum representation was calculated. For the logarithm of the kernel of the density matrix integral representation a functional series with the coefficient functions calculated explicitly in the approximation of pair interparticle correlations was obtained. As a result the density matrix integrated with respect to momenta was presented as a product of the density matrix of ideal Bose gas $R_N^0(x'|x)$ with the particles changed due to the interaction mass and the $P(x'|x)$ factor taking

into account the interaction of atoms at small distances. At low temperatures the latter is a product of the ground state wave functions of the many–boson system $\psi_0(x)$, $x = (\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ being the particles coordinates:

$$R_N(x|x') = P(x'|x) R_N^0(x'|x),$$

$$R_N^0(x|x') = \frac{1}{N!} \left[\frac{m_0^*}{2\pi\beta\hbar^2} \right]^{3N/2} \sum_Q (\pm)^Q \exp\left[-\frac{m_0^*}{2\beta\hbar^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}'_{Qj})^2 \right],$$

$$\frac{m}{m_0^*} = 1 - \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{(S_q - 1)^2}{S_q + 1},$$

where S_q is the structure factor of the liquid; the summation over Q is done with respect to all the permutations of different indeces j; the upper (lower) sign corresponds to Bose– (Fermi–) statistics.

The explicit form of the ground state wave functions and the calculation of the effective mass for liquid ^4He as well as for the two model systems are given in the present paper. The calculation of the density matrix for the many–boson system was performed within the so–called condensate approximation. Within the framework of this approximation only one state with zero momenta of the particles of a complete set of the basic wave function of a system of free particles is taken into consideration. It appears that this approximation yields correct low–temperature behaviour and a classical expression for the thermodynamical functions.

The explicit dependence of the effective mass on temperature, local density, statistics of particles as well as contributions that account explicitly for the exchange–correlation effects was found. An increase in the particle mass due to renormalization resulted in the decrease in Bose–condensation temperature in many–boson systems (in particular for liquid ^{4}He, $m_0^* \simeq 1.7m$). Taking into account the non–penetrability of atoms leads to the decreasing of free volume and then to a rise in Bose–condensation temperature. These two competitive mechanisms permit to obtain the observable dependence of transition temperature on density in liquid ^{4}He. Within the approach suggested a possibility of changing the Gaussian type free–particle kernel due to the accounting for many–particle correlations arises. This may lead to changes of the temperature dependence of the thermodynamical functions in the vicinity transition for liquid ^{4}He.