ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 2 (1997) с. 156–168

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 2 (1997) p. 156–168

НОВІ РЕЗУЛЬТАТИ ДЛЯ ФУНКЦІЙ РОЗПОДІЛУ КВАНТОВИХ СИСТЕМ БАГАТЬОХ ЧАСТИНОК

І. О. Вакарчук
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики
Україна, 290005, Львів, вул. Драгоманова, 12
(Отримано 30 грудня 1996)

Запропоновано метод розрахунку матриць густини системи тотожних частинок, який ґрунтується на частковому підсумовуванні рядів, що виникають при розкладі повної N-частинкової матриці густини ідеального квантового газу за матрицями густини нижчого $N-s$ порядку. Знайдено у явному вигляді вирази для одно- і двочастинкової матриць густини багатобозонної системи, які при низьких температурах переходять у відомі вирази з теорії основного стану бозе–рідини. Як і для ідеального газу, виникає точка неаналітичності цих величин, яка пов'язана з конденсацією Бозе–Айнштайна. Отримані результати легко узагальнюються на випадок багатоферміонних систем, що дасть змогу досліджувати не лише властивості надплинного ^{4}He, а й таких систем, як електронний газ та рідкий ^{3}He.
Ключові слова: матриця густини, рідкий гелій, λ-перехід, бозе–конденсат.

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

I. ВСТУП

Мета наших досліджень — розрахунок s-частинкових матриць густини ($s = 1, 2, \ldots$) системи N взаємодіючих частинок на основі отриманого автором раніше [1] нового виразу для статистичного оператора в координатному зображенні. Ці величини несуть важливу інформацію про властивості багаточастинкових систем. Фур'є–зображення одночастинкової матриці густини являє собою функцію розподілу частинок за імпульсами, яка, зокрема, дозволяє досліджувати таке цікаве явище, як конденсацію Бозе–Айнштайна в багатобозонній системі. Діагональні елементи двочастинкової матриці густини є парною функцією розподілу, яка визначає просторове розташування двох частинок і експериментально добре визначається у дифракційних дослідах. За допомогою цих функцій можна також розрахувати термодинамічні величини системи багатьох тіл. Література з теорії функцій розподілу та матриць густини в проблемі багатьох тіл є надзвичайно численною і ми відсилаємо читача до відповідних джерел журнального та монографічного характеру, починаючи з фундаментальних праць М. М. Боголюбова [2–4].

Почнемо з того, що наведемо тут з [1] результат для повної матриці густини системи N безспінових частинок маси m, розташованих в об'ємі V з координатами $\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N$:

$$R_N(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N|\mathbf{r}_1', \ldots, \mathbf{r}_N') = R_N^o(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N|\mathbf{r}_1', \ldots, \mathbf{r}_N')$$
$$\times P_N(\mathbf{r_1}, \ldots, \mathbf{r_N}|\mathbf{r}_1', \ldots, \mathbf{r}_N'), \tag{1.1}$$

тут перший множник — матриця густини ідеального газу частинок з перенормованою внаслідок міжчастинкової взаємодії масою,

$$R_N^o(\mathbf{r_1}, \ldots, \mathbf{r_N}|\mathbf{r}_1', \ldots, \mathbf{r}_N') = \frac{1}{N!}\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2}$$
$$\times \sum_Q (\pm)^Q e^{-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}\sum_{j=1}^N (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{Qj}')^2}. \tag{1.2}$$

Підсумовування за Q в цьому виразі відбувається по усіх різних перестановках індексів штрихованих координат частинок, причому верхній знак "+" відповідає статистиці Бозе–Айнштайна, а нижній "−" — статистиці Фермі–Дірака. Підсумовування за хвильовими векторами $\mathbf{q}$ в термодинамічній границі ($N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = const$), як відомо, переходить в інтеґрування за правилом $\sum_\mathbf{q} \to V\int d\mathbf{q}/(2\pi)^3$. Параметр $\beta = 1/T$, де T — температура системи. Перенормована маса m^* у границі низьких температур визначається з рівняння

$$\frac{m}{m^*} = 1 - \frac{1}{3N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q(\alpha_q + 1)}, \tag{1.3}$$

де

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{2N}{V}\nu_q / \frac{\hbar^2 q^2}{2m}},$$

$\nu_q = \int e^{-i\mathbf{qR}}\Phi(\mathbf{R})d\mathbf{R}$ — коефіцієнт Фур'є енергії взаємодії пари частинок $\Phi(\mathbf{R})$.

Другий множник у виразі (1.1) відповідальний за взаємодію між частинками. Він забороняє перекривання частинок, що є наслідком їхнього сильного відштовхування на малих відстанях. У границі високих температур цей множник дорівнює класичному больцманівському фактору, а в границі низьких температур

$$P_N(\mathbf{r_1},...,\mathbf{r_N}|\mathbf{r}_1^{'},...,\mathbf{r}_N^{'}) \tag{1.4}$$
$$= \exp\left[a_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho_{\mathbf{q}}^{'}\rho_{-\mathbf{q}}^{'})\right],$$

де функція

$$a_2(q) = -\frac{1}{2}(\alpha_q - 1), \tag{1.5}$$

$$\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \tag{1.6}$$

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

Величина $a_0 = -\beta E_0$, де енергія E_0 дорівнює енергії основного стану системи бозе–частинок у наближенні Боголюбова [3, 4],

$$E_0 = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 - \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}(\alpha_q - 1)^2. \tag{1.7}$$

Зауважимо, що ми навели тут вираз (1.4) для величини P_N у так званому наближенні хаотичних фаз. В цьому наближенні вона не залежить від статистики. В наступному наближенні, яке враховує тричастинкові і вищі кореляції, фактор P_N залежить і від статистики частинок, і від взаємодії між ними. Більш детальна інформація, в тому числі й температурна залежність величин $m^*, a_0, a_2(q)$, наведена в [1].

II. РОЗКЛАДИ ДЛЯ ВИЗНАЧНИКІВ

Матрицю густини ідеального газу (1.2) можна записати у такому вигляді:

$$R_N^o(r_1,...,r_N|\mathbf{r}_1^{'},...,\mathbf{r}_N^{'}) \tag{2.1}$$
$$= \frac{1}{N!}\Delta_N(1,2,...,N|1^{'},2^{'},...,N^{'}),$$

де величина

$$\Delta_N(1,2,...,N|1^{'},2^{'},...,N^{'}) \tag{2.2}$$
$$= \begin{vmatrix} K_{11'} & K_{12'} & K_{13'} & \dots & K_{1N'} \\ K_{21'} & K_{22'} & K_{23'} & \dots & K_{2N'} \\ K_{31'} & K_{32'} & K_{33'} & \dots & K_{3N'} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{N1'} & K_{N2'} & K_{N3'} & \dots & K_{NN'} \end{vmatrix}_{\pm},$$

$$K_{ij'} = \left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j^{'})^2} \tag{2.3}$$

у випадку багатоферміонної системи є звичайним визначником N-го порядку. Для випадку багатобозонної системи ця величина під назвою перманент також розкривається за правилом для визначників, однак усі доданки беруться зі знаком “плюс”. Ці два випадки позначені у (2.2) значком “±”. У зв’язку з цим будемо вживати для обох випадків назву “визначник”. Надалі для визначеності ми будемо розглядати систему бозе–частинок. Остаточні результати легко узагальнюються і на багатоферміонні системи, що й буде зроблено.

З метою зручності та спрощення записів ми введемо тут скорочене позначення для координат частинок

$$(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2},...,\mathbf{r_N}) \to (1,2,...,N)$$

$$(\mathbf{r}_1^{'},\mathbf{r}_2^{'},...,\mathbf{r}_N^{'}) \to (1^{'},2^{'},...,N^{'}),$$

якими надалі будемо користуватись однаковою мірою з попередніми, спеціально не роблячи щодо цього застережень.

Спробуємо тепер зобразити визначник N-го порядку у вигляді розкладу за визначниками щораз меншого порядку, аж до визначника нульового порядку $\Delta_{N=0} = 1$. Будемо розглядати часткові випадки. Спочатку візьмемо визначник (2.2), діагональний по усіх індексах, і запишемо його у вигляді

$$\Delta_N(1,2,...,N|1,2,...,N) = K_{11}\Delta_{N-1}^{(1)} + \sum_{1<i\le N} K_{1i}K_{i1}\Delta_{N-2}^{(1,i)} + \sum_{1<i<j\le N}(K_{1i}K_{ij}K_{j1}$$
$$+K_{1j}K_{ji}K_{i1})\Delta_{N-3}^{(1,i,j)} + \sum_{1<i<j<l\le N}(K_{1i}K_{ij}K_{jl}K_{l1} + K_{1i}K_{il}K_{lj}K_{j1} + K_{1j}K_{ji}K_{il}K_{l1}$$
$$+K_{1j}K_{jl}K_{li}K_{i1} + K_{1l}K_{lj}K_{ji}K_{i1} + K_{1l}K_{li}K_{ij}K_{j1})\Delta_{N-4}^{(1,i,j,l)} + \dots \tag{2.4}$$

Ми ввели скорочені позначення: $\Delta^{(1)}_{N-1}$ — визначник $N-1$ порядку без індексу 1 і діягональний по усіх решта індексах $\Delta^{(1)}_{N-1} = \Delta_{N-1}(2,3,...,N|2,3,...,N)$; $\Delta^{(1,i)}_{N-2}$ — визначник $N-2$ порядку без індексів 1 та i і діягональний по усіх решта індексах і т.д. Цей розклад можна отримати, розписуючи на першому кроці вихідний визначник по першому стовпчику. На другому кроці отримані визначники $N-1$ порядку знову розписуємо таким чином, щоб у них не було величин K_{ij} з індексом 1. Послідовно діючи таким чином, ми отримаємо вираз (2.4).

Розглянемо тепер визначник (2.2) діягональний по усіх індексах, окрім першого. Діючи таким самим способом, що й у попередньому випадку, знайдемо

$$\Delta_N(1,2,...,N|1',2,3,...,N) = K_{11'}\Delta^{(1)}_{N-1} + \sum_{1<i\le N} K_{1i}K_{i1'}\Delta^{(1,i)}_{N-2} + \sum_{1<i<j\le N}(K_{1i}K_{ij}K_{j1'}$$
$$+K_{1j}K_{ji}K_{i1'})\Delta^{(1,i,j)}_{N-3} + \sum_{1<i<j<l\le N}(K_{1i}K_{ij}K_{jl}K_{l1'} + K_{1i}K_{il}K_{lj}K_{j1'} + K_{1j}K_{ji}K_{il}K_{l1'}$$
$$+K_{1j}K_{jl}K_{li}K_{i1'} + K_{1l}K_{lj}K_{ji}K_{i1'} + K_{1l}K_{li}K_{ij}K_{j1'})\Delta^{(1,i,j,l)}_{N-4} + \dots \tag{2.5}$$

Випишемо також розклад для випадку визначника з двома першими недіягональними індексами

$$\Delta_N(1,2,3,...,N|1',2',3,...,N) = K_{11'}\Delta_{N-1}(2,3,...,N|2',3,...,N)$$
$$+K_{22'}\left[\Delta_{N-1}(1,3,...,N|1',3,...,N) - K_{11'}\Delta^{(1,2)}_{N-2}\right]$$
$$+K_{12'}\Delta_{N-1}(2,3,...,N|1',3,...,N) + K_{21'}\left[\Delta_{N-1}(1,3,...,N|2',3,...,N) - K_{12'}\Delta^{(1,2)}_{N-2}\right]$$
$$+\Delta^*(1,2,3,...,N|1',2',3,...,N) + \Delta^*(1,2,3,...,N|2',1',3,...,N), \tag{2.6}$$

де визначники $N-1$ порядку задаються розкладами (2.5), а величина

$$\Delta^*(1,2,3,...,N|1',2',3,...,N) = \sum_{3\le i}\sum_{<j\le N}(K_{1i}K_{i1'}K_{2j}K_{j2'} + K_{1j}K_{j1'}K_{2i}K_{i2'})\Delta^{(1,2,i,j)}_{N-4}$$
$$+\sum_{3\le i<j<l\le N}\Big[(K_{1i}K_{il}K_{l1'}K_{2j}K_{j2'} + K_{1l}K_{li}K_{i1'}K_{2j}K_{j2'} + K_{1i}K_{ij}K_{j1'}K_{2l}K_{l2'}$$
$$+K_{1l}K_{lj}K_{j1'}K_{2i}K_{i2'} + K_{1j}K_{ji}K_{i1'}K_{2l}K_{l2'} + K_{1j}K_{jl}K_{l1'}K_{2i}K_{i2'}) \tag{2.7}$$
$$+(K_{1i}K_{i1'}K_{2j}K_{jl}K_{l2'} + K_{1i}K_{i1'}K_{2l}K_{li}K_{i2'} + K_{1j}K_{j1'}K_{2i}K_{il}K_{l2'} + K_{1j}K_{j1'}K_{2j}K_{ji}K_{i2'})\Big]\Delta^{(1,2,i,j,l)}_{N-5} + \dots$$

Ми не будемо наводити розклади для наступних часткових випадків, зважаючи на їхню громіздкість. Тим більше, що розглянутих нижче розкладів, як ми побачимо далі, достатньо для узагальнення остаточних результатів на довільний випадок.

III. РОЗКЛАДИ ДЛЯ МАТРИЦЬ ГУСТИНИ

За означенням [3] одночастинкова матриця

$$F_1(\mathbf{r}_1|\mathbf{r}_1') = \frac{V}{Z_N}\int d\mathbf{r}_2\dots\int d\mathbf{r}_N R_N(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_N), \tag{3.1}$$

де статистична сума

$$Z_N = \int d\mathbf{r}_1\dots\int d\mathbf{r}_N R_N(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N). \tag{3.2}$$

З урахуванням (1.1), (2.1) та (2.5) отримаємо розклад для одночастинкової матриці густини:

$$
\begin{aligned}
&F_1(\mathbf{r}_1|\mathbf{r}_1^{'}) = \frac{V}{Z_N}\int d\mathbf{r}_2 \ldots \int d\mathbf{r}_N P_N(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_1^{'},\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_N)\frac{1}{N!}\Delta_N(1,2,...,N|1^{'},2,...,N)\\
&= \frac{N}{N!}\left\{K_{11'}P_1^{(N-1)}(1|1^{'})(N-1)! + (N-1)(N-2)!\int K_{12}K_{21'}P_2^{(N-2)}(1,2|1^{'},2)d\mathbf{r}_2\right.\\
&+\frac{(N-1)(N-2)}{2!}2(N-3)!\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3 K_{12}K_{23}K_{31'}P_3^{(N-3)}(1,2,3|1^{'},2,3)\\
&\left.+\frac{(N-1)(N-2)(N-3)}{3!}2\cdot 3(N-4)!\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3\int d\mathbf{r}_4 K_{12}K_{23}K_{34}K_{41'}P_4^{(N-4)}(1,2,3,4|1^{'},2,3,4)+\ldots\right\},
\end{aligned}
\tag{3.3}
$$

де

$$
\begin{aligned}
&P_s^{(N-s)}(1,2,...,s|1^{'},2,...,s) = \frac{1}{Z_N}\int ... \int \frac{\Delta_{N-s}(s+1,...,N|s+1,...,N)}{(N-s)!}\\
&\times P_N(1,2,...,N|1^{'},2,...,N)dr_{s+1}...dr_N.
\end{aligned}
\tag{3.4}
$$

Введемо оператор $\hat{K}$ такий, що

$$
\begin{aligned}
&(\hat{K})_{11'} = K_{11'},\\
&(\hat{K}^2)_{11'} = \int K_{12}K_{21'}d\mathbf{r}_2,\\
&(\hat{K}^3)_{11'} = \int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3 K_{12}K_{23}K_{31'},\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

Введемо також операцію усереднення:

$$
\begin{aligned}
&\overline{(\hat{K})}_{11'} = K_{11'}P_1^{(N-1)}(1|1^{'}),\\
&\overline{(\hat{K}^2)}_{11'} = \int d\mathbf{r}_2 K_{12}K_{21'}P_2^{(N-2)}(1,2|1^{'},2)\\
&\overline{(\hat{K}^3)}_{11'} = \int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3 K_{12}K_{23}K_{31'}P_3^{(N-3)}(1,2,3|1^{'},2,3),\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

У результаті ряд (3.3) згортається, і в символічній формі отримуємо остаточний вираз для одночастинкової матриці густини

$$
F_1(\mathbf{r}_1|\mathbf{r}_1^{'}) = \frac{V}{N}\overline{\left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}}\right)_{11'}}.
\tag{3.7}
$$

Ми повернемось пізніше до розрахунку функцій $P_s^{(N-s)}(1,2,...,s|1^{'},2^{'},...,s^{'})$, а зараз займемось двочастинковою матрицею густини

$$
\begin{aligned}
&F_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1^{'},\mathbf{r}_2^{'}) = \frac{V}{Z_N}\int d\mathbf{r}_3...\int d\mathbf{r}_N\\
&\times R_N(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,...,\mathbf{r_N}|\mathbf{r}_1^{'},\mathbf{r}_2^{'},\mathbf{r_3},...,\mathbf{r_N}).
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

Підставимо в це означення вирази (1.1), (2.1) та розклади (2.6), (2.7). Будемо по черзі досліджувати доданки, які виникають при цьому. Розглянемо перший доданок, що відповідає першому члену з розкладу (2.6). Використовуючи розклади (2.5), (2.6), для першого доданку в (3.8) маємо

$$
\begin{aligned}
&\frac{V^2}{N!Z_N}K_{11'}\int d\mathbf{r}_3...\int d\mathbf{r}_N\Delta_{N-1}(2,3,...,N|2^{'},3,...,N)P_N(1,2,3,...N|1^{'},2^{'},3...N)\\
&= \frac{V^2}{N!}K_{11'}\left\{(N-2)!K_{22'}P_2^{(N-2)}(1,2|1^{'},2^{'}) + (N-2)(N-3)!\int d\mathbf{r}_3 K_{23}K_{32'}P_3^{(N-3)}(1,2,3|1^{'},2^{'},3)\right.\\
&\left.+(N-2)(N-3)(N-4)!\int d\mathbf{r}_3\int d\mathbf{r}_4 K_{23}K_{34}K_{42'}P_4^{(N-4)}(1,2,3,4|1^{'},2^{'},3,4)+...\right\}
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

$$= \frac{V^2}{N(N-1)} \left\{ \overline{K_{11'} K_{22'}} + \overline{K_{11'} (\hat{K}^2)_{22'}} + \overline{K_{11'} (\hat{K}^3)_{22'}} + ... \right\} = \frac{V^2}{N(N-1)} \times \overline{K_{11'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{22'}}.$$

Так само знаходимо вирази і для решти доданків:

$$F_2(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1^{'}\mathbf{r}_2^{'}) = \frac{V^2}{N(N-1)} \left\{ \overline{K_{11'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{22'}} + \overline{K_{22'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{11'}} \right. \tag{3.10}$$

$$+ \overline{K_{12'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{21'}} + \overline{K_{21'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{12'}}$$

$$- \overline{K_{11'} K_{22'}} - \overline{K_{21'} K_{12'}} + \overline{\left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} - \hat{K} \right)_{11'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} - \hat{K} \right)_{22'}}$$

$$\left. + \overline{\left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} - \hat{K} \right)_{12'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} - \hat{K} \right)_{21'}} \right\}.$$

Отже,

$$F_2(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1^{'}\mathbf{r}_2^{'}) = \frac{V^2}{N(N-1)} \left\{ \overline{\left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{11'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{22'}} + \overline{\left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{12'} \left(\frac{\hat{K}}{1-\hat{K}} \right)_{21'}} \right\} \tag{3.11}$$

Цей вираз можна зобразити у вигляді визначника:

$$F_2(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1^{'}\mathbf{r}_2^{'}) = \frac{V^2}{N(N-1)} \overline{\begin{vmatrix} \left(\frac{K}{1-K}\right)_{11'} & \left(\frac{K}{1-K}\right)_{12'} \\ \left(\frac{K}{1-K}\right)_{21'} & \left(\frac{K}{1-K}\right)_{22'} \end{vmatrix}}. \tag{3.12}$$

Просте відстежування знаків у розкладах визначників у розділі II дає змогу узагальнити цей результат і на антисиметричну статистику:

$$F_2(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1^{'}\mathbf{r}_2^{'}) = \frac{V^2}{N(N-1)} \overline{\begin{vmatrix} \left(\frac{\hat{K}}{1\mp\hat{K}}\right)_{11'} & \left(\frac{\hat{K}}{1\mp\hat{K}}\right)_{12'} \\ \left(\frac{\hat{K}}{1\mp\hat{K}}\right)_{21'} & \left(\frac{\hat{K}}{1\mp\hat{K}}\right)_{22'} \end{vmatrix}_{\pm}}. \tag{3.13}$$

Очевидним є також узагальнення на випадок s-частинкової матриці густини:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_s|\mathbf{r}_1^{'}, \mathbf{r}_2^{'}, ..., \mathbf{r}_s^{'}) = \frac{V^2}{N(N-1)...(N-s+1)} \overline{\mathrm{Det} \left(\frac{\hat{K}}{1 \mp \hat{K}} \right)_{ij'}}, \tag{3.14}$$

$$i = 1, ..., s; \; j^{'} = 1^{'}, ..., s^{'},$$

де символ Det означає визначник або перманент s-го порядку.

IV. ФУНКЦІЇ $P_s^{(N-s)}(1,2,...,s|1^{'},2^{'},...,s^{'})$

Будемо розглядати вираз для матриці (3.4) як середнє значення по ідеальному розподілу для системи з $(N-s)$ частинок. Причому розглянемо більш загальний випадок, коли всі праві індекси матриці $P_s^{(N-s)}$ є штрихованими:

$$P_s^{(N-s)}(1,2,...,s|1^{'},2^{'},...,s^{'}) = \frac{Z^0_{N-s}}{Z_N}\langle P_N(1,2,...,s,s+1,...,N|1^{'},2^{'},...,s^{'},s+1,...,N)\rangle^0_{N-s}, \tag{4.1}$$

де символ усереднення

$$\langle ...\rangle^0_{N-s} = \frac{1}{Z^0_{N-s}}\int d\mathbf{r}_{s+1}...\int d\mathbf{r}_N(...)R^0_N(s+1,...,N|s+1,...,N), \tag{4.2}$$

а статистична сума системи $(N-s)$ ідеальних частинок

$$Z^0_{N-s} = \int d\mathbf{r}_{s+1}...\int d\mathbf{r}_N R^0_N(s+1,...,N|s+1,...,N). \tag{4.3}$$

Тепер врахуємо в (5.1) явний вигляд (1.4) матриці P_N:

$$P_s(1,2,...,s|1^{'},2^{'},...,s^{'}) = \frac{Z^0_{N-s}}{Z_N}e^{2a_0}\langle \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}} + \rho^{'}_{\mathbf{q}}\rho^{'}_{\mathbf{q}})\right]\rangle^0_{N-s}. \tag{4.4}$$

Введемо величини

$$\xi_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{s}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \qquad \xi^{'}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{s}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}^{'}_j}, \tag{4.5}$$

так що

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{N-s}{N}}\rho^{N-s}_{\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}}, \qquad \rho^{'}_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{N-s}{N}}\rho^{N-s}_{\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}}, \qquad \rho^{N-s}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N-s}}\sum_{j=1+s}^{N}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}. \tag{4.6}$$

Очевидно, що при $s=0$, $\rho^N_{\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}}$, $\xi_{\mathbf{q}} = \xi^{'}_{\mathbf{q}} = 0$.

Тепер

$$P_s^{(N-s)}(1,2,...,s|1^{'},2^{'},...,s^{'}) = \frac{Z^0_{N-s}}{Z_N}e^{2a_0}\exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)(\xi_{\mathbf{q}}\xi_{-\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}}\xi^{'}_{-\mathbf{q}})\right]$$
$$\langle \exp\left[\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)\sqrt{\frac{N-s}{N}}\rho^{N-s}_{\mathbf{q}}(\xi_{\mathbf{q}} + \xi^{'}_{-\mathbf{q}})\right]\exp\left[\sum_{q}a_2(q)\frac{N-s}{N}\rho^{N-s}_{\mathbf{q}}\rho^{N-s}_{-\mathbf{q}}\right]\rangle^{N-s}_0. \tag{4.7}$$

Зауважимо, що статистичну суму Z_N також можна записати у вигляді середнього значення за ідеальним розподілом системи з N частинок

$$Z_N = Z^0_N e^{2a_0}\langle \exp\sum_{\mathbf{q}\neq 0}a_2(q)\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\rangle^N_0. \tag{4.8}$$

Вираз (5.4) можна також записати і як усереднення за розподілом системи $(N-s)$ взаємодіючих частинок:

$$P_s^{(N-s)}(1,2,...s|1^{'},2^{'},...,s^{'}) = \frac{Z^{'}_{N-s}}{Z_{N'}} \exp\left[\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)(\xi_{\mathbf{q}}\xi{-\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}}\xi^{'}_{-\mathbf{q}})\right] \tag{4.9}$$

$$\times \langle \exp\left[\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)\frac{N-s}{N}\rho_{\mathbf{q}}^{N-s}(\xi_{\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}})\right]\rangle_{N-s},$$

$$\langle(...)\rangle_{N-s} = \frac{1}{Z^{'}_{N-s}}\int d\mathbf{r}_{s+1}...\int d\mathbf{r}_N(...)\exp\left[\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)\frac{N-s}{N}\rho_{\mathbf{q}}^{N-s}\rho_{-\mathbf{q}}^{N-s}\right] R^0_{N-s}(\mathbf{r}_{s+1},...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_{s+1},...,\mathbf{r}_N),$$

де штрихована статистична сума

$$Z^{'}_{N-s} = \int d\mathbf{r}_1...d\mathbf{r}_N \exp\left[\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)\frac{N-s}{N}\rho_{\mathbf{q}}^{N-s}\rho_{-\mathbf{q}}^{N-s}\right] R^0_{N-s}(\mathbf{r}_{s+1},...,\mathbf{r}_N|\mathbf{r}_{s+1},...,\mathbf{r}_N). \tag{4.10}$$

Усереднення легко виконати в наближенні “однієї суми по $\mathbf{q}$”, зображаючи результат у вигляді експоненти від суми незвідних середніх від величини $\rho_{\mathbf{q}}^{N-s}$. Враховуючи, що внаслідок трансляційної інваріянтності $\langle\rho_{\mathbf{q}}^{N-s}\rangle_{N-s} = 0$, а середнє

$$\langle\rho_{\mathbf{q}_1}^{N-s}\rho_{\mathbf{q}_2}^{N-s}\rangle_{N-s} = S^{N-s}(q)\delta_{\mathbf{q}_1,\,-\mathbf{q}_2} \tag{4.11}$$

відмінне від нуля лише за умови, що $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = 0$, де $S_{N-s}(q)$ — парний структурний фактор системи $N-s$ взаємодіючих частинок, знаходимо

$$P_s^{(N-s)}(1,...,s|1^{'},...,s^{'}) = \frac{Z^{'}_{N-s}}{Z^{'}_N} \tag{4.12}$$

$$\times \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)(\xi_{\mathbf{q}}\xi_{-\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}}\xi^{'}_{-\mathbf{q}}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2^2(q)\frac{N-s}{N}S^{N-s}(q)(\xi_{\mathbf{q}} + \xi^{'}_{\mathbf{q}})(\xi_{-\mathbf{q}} + \xi^{'}_{-\mathbf{q}})\right\}$$

У цьому ж наближенні легко отримується і статистична сума (5.11)

$$Z^{'}_{N-s} = Z^0_{N-s}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left[1 - 2a_2(q)\frac{N-s}{N}S_0^{N-s}(q)\right]\right\}, \tag{4.13}$$

де $S_0^{N-s}(q)$ — парний структурний фактор системи $N-s$ ідеальних частинок.

Структурний фактор, зважаючи на означення (4.11), можна зобразити як функціональну похідну по $a_2(q)$ від логарифма статистичної суми і з урахуванням (4.13) знаходимо, що

$$S^{N-s}(q) = \frac{S_0^{N-s}}{1 - 2a_2(q)S_0^{N-s}(q)}. \tag{4.14}$$

Надалі нас буде цікавити термодинамічна границя, коли $N\to\infty$, $V\to\infty$, а густина $N/V = \rho = \mathrm{const}$. Для статистичної суми (5.14) з урахуванням того, що s/N є малою величиною, знаходимо

$$Z^{'}_{N-s} = Z^0_{N-s}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln[1 - 2a_2(q)S_0(q)] - \frac{s}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{a_2(q)S_0(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)} - \frac{s}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{a_2(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}\rho\frac{\partial S_0(q)}{\partial\rho}\right\} \tag{4.15}$$

Для отримання цього результату ми скористались тим, що при $s/N \to 0$

$$S_0^{N-s}(q) = S_0^N(q) - \frac{\partial S_0^N(q)}{\partial N} + ... = S_0(q) - \frac{s}{V}\frac{\partial S_0}{\partial \rho} + ... = S_0(q) - \frac{s}{N}\rho\frac{\partial S_0(q)}{\partial \rho} + ..., \tag{4.16}$$

де парний структурний фактор системи N ідеальних частинок у термодинамічній границі $S_0(q) = S_0^N(q)$, а крапками позначені внески, що зникають в цій границі у виразі для Z'_{N-s}.

Для парного структурного фактора системи N взаємодіючих частинок $S(q) = S^N(q)$, з (4.14) знаходимо

$$S(q) = \frac{S_0(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}. \tag{4.17}$$

Тепер ми можемо записати остаточний результат для матриць з (4.12) у термодинамічній границі:

$$P_s^{(N-s)}(1, ..., s|1', ..., s') = z^s p_s(1, ..., s|1', ..., s'), \tag{4.18}$$

$$p_s(1, ..., s|1', ..., s') = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0} a_2(q)(\xi_{\mathbf{q}}\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}}\xi'_{-\mathbf{q}})\right. \tag{4.19}$$

$$\left. + \ \frac{1}{2}\sum_{q} a_2^2(q)\frac{S_0(q)}{1 - 2a_2S_0(q)}(\xi_{\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}})(\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}}) - \frac{s}{N}\sum_{s\neq 0}\frac{a_2(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}\right\},$$

а параметр

$$z = z_0 \exp\left\{-\frac{1}{N}\sum_{q\neq 0}\frac{a_2(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}\frac{\partial}{\partial \rho}[\rho(S_0(q) - 1)]\right\}, \tag{4.20}$$

де $z_0 = \lim_{N\to\infty} Z_{N-1}^0/Z_N^0$ — активність системи ідеальних частинок.

Легко знаходимо діягональні елементи матриці (4.19), які мають вигляд больцманівського розподілу

$$p_s(1, ..., s|1, ..., s) = e^{-\sum_{1\leq i<j\leq s}\tilde{\Phi}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)} \tag{4.21}$$

з ефективним безрозмірним потенціялом

$$\tilde{\Phi}(R) = -\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{2a_2(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}e^{i\mathbf{qR}}. \tag{4.22}$$

Одночастинкова матриця густини

$$p_1(1|1') = p_1(R) \tag{4.23}$$

$$= \exp\left\{\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{a_2^2(q)S_0(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}(e^{i\mathbf{qR}} - 1)\right\},$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1. \tag{4.24}$$

У випадку багатобозонної системи при $T \to 0$, коли $S_0(q) \to 1$, ці вирази збігаються з виразами, отриманими автором раніше [5]. Причому звідси можна отримати відносну кількість частинок, що мають імпульси, які дорівнюють нулю (бозе–конденсат):

$$N_0/N = \lim_{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|\to\infty} p_1(1|1')$$

$$\times \exp\left\{-\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{a_2^2(q)S_0(q)}{1 - 2a_2(q)S_0(q)}\right\} \tag{4.25}$$

Знайдемо з (4.19) необхідні для нас матриці, недіягональні лише за першими індексами. Елементарні обчислення дають

$$p_s(1, 2, ..., s|1', 2, ..., s) = p_1(1|1')$$

$$\times(\prod_{j=2}^{s}\sqrt{p_2(1,j)p_2(1',j)})\prod_{2\le i<j\le s}p_2(i,j), \tag{4.26}$$

де парні функції розподілу

$$p_2(i,j)\equiv p_2(i,j|i,j)=p_2(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|)$$
$$=e^{-\tilde{\Phi}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|)}. \tag{4.27}$$

Нарешті запишемо ще один частковий випадок:

$$p_2(1,2|1^{'},2^{'})=p_1(1|1^{'})p_1(2|2^{'})$$
$$\times\frac{p_1(1|2^{'})p_1(2|1^{'})}{p_1(1|2)p_1(1^{'}|2^{'})}\sqrt{p_2(1,2)p_2(1',2')}. \tag{4.28}$$

V. ОДНОЧАСТИНКОВА МАТРИЦЯ ГУСТИНИ

Повернемось до виразу (3.7). Розглянемо випадок симетричної статистики. З урахуванням (4.18) та (4.26), випишемо послідовно члени розкладу (3.7), які подані виразами (3.6). Отже,

$$\overline{(\hat{K})_{11'}}=zp_1(1|1^{'})K_{11'},$$
$$\overline{(\hat{K}^2)_{11'}}=z^2p_1(1|1^{'})\int d\mathbf{r}_2K_{12}\sqrt{p_2(1,2)}K_{21}\sqrt{p_2(2,1)},$$
$$\overline{(\hat{K}^3)_{11'}}=z^3p_1(1|1^{'})\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3K_{12}\sqrt{p_2(1,2)}K_{23}p_2(2,3)K_{31'}\sqrt{p_2(3,1')}\sqrt{p_2(3,1)p_2(1',2)}, \tag{5.1}$$
$$\overline{(\hat{K}^4)_{11'}}=z^4p_1(1|1^{'})\int d\mathbf{r}_2\int d\mathbf{r}_3\int d\mathbf{r}_4K_{12}\sqrt{p_2(1,2)}$$
$$\times K_{23}p_2(2,3)K_{34}p_2(3,4)K_{41'}\sqrt{p_2(4,1')}p_2(2,4)\sqrt{p_2(1,3)p_2(1,4)p_2(1',2)p_2(1',3)},$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots .$$

Ядра K_{1i} та $K_{j1'}$ в цих виразах супроводжуються множником $\sqrt{p_2(1,i)}$ та $\sqrt{p_2(j,1')}$; інші ядра K_{ij} мають множник $p_2(i,j)$. Якби не було ще додаткових множників, то ряд (3.7) для одночастинкової матриці легко підсумовується шляхом переходу до імпульсного зображення. Тому напрошується думка врахувати ці додаткові множники як поправки. Для цього додаємо одиницю до кожного з них і віднімаємо її — відхилення від одиниці і є поправкою. Таким чином отримаємо результат:

$$F_1(1|1^{'})=p_1(1|1^{'})g(1|1^{'}), \tag{5.2}$$

$$g(1|1^{'})=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\left\{\frac{(zK_q^*)^2}{1-zK_q}+ze^{-\beta\frac{\hbar^2q^2}{2m}}+\sum_{l\ge3}z^lD_q^{(l)}\right\}, \tag{5.3}$$

де коефіцієнти Фур'є

$$K_q^*=\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2}\int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}}p_2^{1/2}(R)e^{-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}R^2}d\mathbf{R},$$
$$K_q=\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2}\int e^{-iq\mathbf{R}}p_2(R)e^{-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}R^2}d\mathbf{R}, \tag{5.4}$$

а поправки

$$D_q^{(l)}=\int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}}D^{(l)}(1|1^{'})d\mathbf{R},\quad \mathbf{R}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1^{'},$$

$$D^{(3)}(1|1^{'}) = \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 K_{12} \sqrt{p_2(1,2)} K_{23} p_2(2,3) K_{21'} \sqrt{p_2(3,1')} \left\{ \sqrt{p_2(1,3) p_2(1',2)} - 1 \right\}, \tag{5.5}$$

$$D^{(4)}(1|1^{'}) = \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 K_{12} \sqrt{p_2(1,2)} K_{23} p_(2,3) K_{34} p_2(3,4)$$

$$\times K_{41'} \sqrt{p_2(4,1')} \left\{ p_2(3,4) \sqrt{p_2(1,3) p_2(1,4) p_2(1',2) p_2(1',3)} - 1 \right\},$$

. . . .

Кожна наступна поправка має додаткове інтеґрування за координатами частинок.

Цей результат без доведення та без урахування поправок був опублікований нами попередньо в [6].

Поправки $D_q^{(n)}$, що враховують багаточастинкові кореляції можна, перенормувавши величину K_q, записати і в знаменнику першого доданка в (5.3):

$$g(1|1^{'}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qR}} \tag{5.6}$$

$$\times \left[\frac{(zK_q^*)^2}{1 - z\tilde{K}_q} + z e^{-\beta \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}} \right],$$

$$\tilde{K}_q = \left[K_q + \frac{1 - zK_q}{(K_q^*)^2} \sum_{n \geq 3} z^{n-3} D_q^{(n)} \right] \tag{5.7}$$

$$\times \left[1 + \frac{1 - zK_q}{(K_q^*)^2} \sum_{n \geq 3} z^{n-2} D_q^{(n)} \right]^{(-1)}.$$

З урахуванням першої поправки

$$\tilde{K}_q = K_q + \left(\frac{1 - zK_q}{K_q^*} \right)^2 D_q^{(3)} + \ldots \tag{5.8}$$

Параметр z виключається за допомогою очевидної умови $F_1(1|1) = 1$, яка фіксує той факт, що кількість частинок дорівнює N:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{(zK_q^*)^2}{1 - z\tilde{K}_q} + z e^{-\beta \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}} \right] = 1. \tag{5.9}$$

Розподіл частинок за імпульсами дається Фур'є–зображенням матриці (5.3)

$$N_p = \frac{N}{V} \int e^{-i\mathbf{pR}} F_1(1|1^{'}) d\mathbf{R}, \tag{5.10}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1^{'}.$$

Отже, кількість частинок, що мають імпульс $\mathbf{p}$,

$$N_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} N^0_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \left[\frac{(zK_q^*)^2}{1 - z\tilde{K}_q} + z e^{-\beta \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} \right], \tag{5.11}$$

де функція

$$N_p^0 = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{pR}} p_1(R) d\mathbf{R} \tag{5.12}$$

визначає розподіл за імпульсами при низьких температурах. При виключенні взаємодії, як легко бачити, вирази (5.6) (5.9) (5.11) переходять у відповідні вирази теорії ідеального квантового бозе–газу.

Зауважимо також, що вираз (5.6) виявляє фазовий перехід — конденсацію Бозе–Айнштайна. Математичний механізм цього переходу пов'язаний з існуванням скінченного радіуса збіжності ряду для одночастинкової матриці густини. Радіус збіжності, що фіксує величину z, визначають з умови $z\tilde{K}_0 = 1$. Детальні дослідження цього явища будуть зроблені в окремій роботі. Ми не будемо зупинятись також і на доведенні узагальнення цих виразів на статистику Фермі — вони очевидні: в усіх розкладах по z перед парними степенями z знаки "+" необхідно замінити на "−".

VI. ПАРНА ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ

Для того, щоб отримати явний вираз двочастинкової матриці густини (3.11), треба розрахувати величини типу

$$\overline{\left(\frac{K}{1-K}\right)_{11'}\left(\frac{K}{1-K}\right)_{12'}} = \overline{(K_{11'} + \int K_{13}K_{31'}d\mathbf{r}_2 + ...)(K_{22'} + \int K_{24}K_{42'}d\mathbf{r}_4 + ...)}$$

$$= zK_{11'}zK_{22'}P_2(1,2|1^{'},2^{'}) + zK_{11'}z^2\int d\mathbf{r}_4K_{24}K_{42'}P_3(1,2,4|1^{'},2^{'},4)$$

$$+zK_{22'}z^2\int d\mathbf{r}_3K_{13}K_{31'}P_3(1,2,3|1^{'},2^{'},3) + ... = P_2(1,2|1^{'},2^{'})$$

$$\times\left\{zK_{11'}zK_{22'} + zK_{11'}z^2\int d\mathbf{r}_4K_{24}K_{42'}\sqrt{P_2(1,4)P_2(2,4)P_2(1',4)P_2(2',4)}\right.$$

$$\left.+zK_{22'}z^2\int d\mathbf{r}_3K_{13}K_{31'}\sqrt{P_2(1,3)P_2(2,3)P_2(1',3)P_2(2',3)} + ...\right\} = P_2(1,2|1^{'},2^{'})\{g(1|1^{'}g(2|2^{'}) + \text{поправки}\},$$

$$\text{поправки} = z^3K_{11'}\int d\mathbf{r}_3K_{23}\sqrt{P_2(2,3)}K_{32'}\sqrt{P_2(3,2')}(\sqrt{P_2(1,3)P_2(1',3)} - 1)$$

$$+z^3K_{22'}\int d\mathbf{r}_3K_{13}\sqrt{P_2(1,3)}K_{31'}\sqrt{P_2(3,1')}(\sqrt{P_2(2,3)P_2(2',3)} - 1) + \text{члени, пропорційні до } z^4 \text{ та вищі.}$$

Наведені вище перетворення виконані з урахуванням того, що, як випливає з (4.19), матриця

$$p_s(1,2,3,...,s|1^{'},2^{'},3^{'},...s) = p_2(1,2|1^{'},2^{'})\left(\prod_{1\le i`j`s}p_2(i,j)\right)\left(\prod_{j=3}^{s}\sqrt{p_2(i,j)p_2(2,j)p_2(1',j)p_2(2',j)}\right), \tag{6.1}$$

$$s = 3,4,...,$$

а вираз для двочастинкової матриці подано формулою (4.28).

Розраховуючи подібним чином другий доданок у (3.11), знаходимо:

$$F_2(1,2|1^{'},2^{'}) = p_2(1,2|1^{'},2^{'})\left\{g(1|1^{'})g(2|2^{'}) + g(1|2^{'})g(2|1^{'}) + \sum_{n\ge3}z^nD_2^{(n)}(1,2|1^{'},2^{'})\right\}, \tag{6.2}$$

де поправки

$$D_2^{(3)}(1,2|1^{'},2') = K_{11'}\int d\mathbf{r}_3K_{23}\sqrt{p_2(2,3)}K_{32'}\sqrt{p_2(3,2')}(\sqrt{p_2(1,3)p_2(1',3)} - 1)$$

$$+K_{22'}\int d\mathbf{r}_3K_{13}\sqrt{p_2(2,3)}K_{31'}\sqrt{p_2(3,1')}(\sqrt{p_2(2,3)p_2(1',3)} - 1)$$

$$+K_{12'}\int d\mathbf{r}_3K_{23}\sqrt{p_2(2,3)}K_{31'}\sqrt{p_2(3,1')}(\sqrt{p_2(1,3)p_2(2',3)} - 1)$$

$$+K_{2'1}\int d\mathbf{r}_3K_{23}\sqrt{p_2(2,3)}K_{31'}\sqrt{p_2(3,2')}(\sqrt{p_2(2',3)p_2(1,3)} - 1), \tag{6.3}$$

. . . .

Тут нами враховано, що у термодинамічній границі $V^2/N(N-1) \to (V/N)^2$.

Оцінка поправок $D_2^{(n)}(1,2|1^{'},2^{'})$ — це спеціальна задача, яка потребує числових розрахунків. Важливим, однак, є те, що і без цих поправок отримані вирази дають кількісні результати. Зокрема, в границі низьких температур матриці густини зводяться до матриць (4.19), за допомогою яких отримуються результати [5], що добре узгоджуються з експериментальними вимірюваннями.

Парна функція розподілу без урахування поправок

$$F_2(R) = F_2(1,2|1^{'},2^{'}) \\ = p_2(R)[1+g^2(R)], \quad \mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \tag{6.4}$$

Залишаючи читачам узагальнення цих результатів на випадок антисиметричної статистики, переходимо до розрахунку середніх значень кінетичної та потенціяльної енергій.

VII. КІНЕТИЧНА ТА ПОТЕНЦІЯЛЬНА ЕНЕРГІЇ БАГАТОБОЗОННОЇ СИСТЕМИ

За означенням середнє значення кінетичної енергії системи

$$\langle K\rangle = -N\frac{\hbar^2}{2m}\{\nabla_1^2 F_1(1|1^{'})\}_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_1^{'}}.$$

Розрахуємо це середнє значення, виходячи з виразу (5.2) для одночастинкової матриці густини без урахування поправок. Виявляється, що внесок дають лише другі похідні від функцій $p(1|1^{'})$ та $g(1|1^{'})$. Перехресний доданок з першими похідними дорівнює нулю внаслідок того, що кожна з них при $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1^{'}$ дорівнює нулю. Враховуючи, крім того, нормування цих матриць, отримаємо

$$\langle K\rangle = \sum_{\mathbf{q}=\neq 0}\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{a_2^2(q)S_0(q)}{1-2a_2(q)S_0(q)} \\ + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2q^2}{2m}\left[\frac{(zK_q^*)^2}{1-zK_q} + ze^{-\beta\frac{\hbar^2q^2}{2m^*}}\right]. \tag{7.1}$$

У границі низьких температур другий доданок для ідеального бозе–газу прямує до нуля як $T^{5/2}$. Перший доданок з урахуванням того, що при $T\to 0$ величина $S_0(q)\to 1$, дає:

$$\langle K_1\rangle = \sum_{\neq 0}\frac{\hbar^2 q}{2m}\frac{a_2^2(q)}{1-2a_2(q)}. \tag{7.2}$$

Якщо прийняти до уваги температурну залежність функції $a_2(q)$ [1],

$$a_2(q) = -\frac{\alpha_q-1}{2}\frac{1-e^{-\beta E(q)}}{1-\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}e^{-\beta E(q)}}, \tag{7.3}$$

то

$$\langle K_1\rangle = \sum_{\mathbf{q}=\neq 0}\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{(\alpha_q-1)^2}{4\alpha_q} \\ \times \frac{(1-e^{-\beta E(q)})^2}{1-\left(\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}\right)^2 e^{-2\beta E(q)}}. \tag{7.4}$$

Звідси при $T=0$ кінетична енергія

$$\langle K\rangle = \sum_{\mathbf{q}=\neq 0}\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{(\alpha_q-1)^2}{4\alpha_q}. \tag{7.5}$$

Потенціяльна енергія попарних міжчастинкових взаємодій

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

Її середнє значення, враховуючи (4.17),

$$\langle\Phi\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_q \\ \times\left[\frac{S_0(q)}{1-2a_2(q)S_0(q)}-1\right]. \tag{7.6}$$

Середнє значення можна розраховувати і за допомогою парної функції розподілу (6.4)

$$\langle\Phi\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\int\Phi(R)F_2(R)d\mathbf{R} \\ = \frac{N(N-1)}{2V}\int\Phi(R)p_2(R)d\mathbf{R} \\ + \frac{N(N-1)}{2V}\int\Phi(R)p_2(R)g^2(R)d\mathbf{R}. \tag{7.7}$$

Якщо нас цікавить низькотемпературна границя, то внесок дає лише перший доданок. У так званому “наближенні однієї суми по $\mathbf{q}$”, коли у виразі (4.27) для $p_2(R)$ беремо лише перші два члени розкладу для першого доданка в (7.7), маємо

$$\langle\Phi_1\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_q\frac{2a_2(q)}{1-2a_2(q)}. \tag{7.8}$$

а з урахуванням (7.3) знаходимо

$$\langle\Phi_1\rangle = -\sum_{\mathbf{q}=\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}\frac{(\alpha_q-1)^2}{4\alpha_q}(\alpha_q+1)$$
$$\times\frac{1-e^{-\beta E(q)}}{1-\frac{\alpha_q-1}{\alpha_q+1}e^{-\beta E(q)}}. \tag{7.9}$$

При абсолютному нулі температури

$$\langle\Phi\rangle = -\sum_{\mathbf{q}=\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}\frac{(\alpha_q-1)^2}{4\alpha_q}(\alpha_q+1) \tag{7.10}$$

середня енергія, що визначається сумою виразів (7.4) та (7.9)

$$\Delta E = \langle K_1\rangle + \langle\Phi_1\rangle \tag{7.11}$$
$$= E_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{E(q)}{\left(\frac{\alpha_q+1}{\alpha_q-1}\right)^2 e^{2\beta E(q)}-1},$$

де енергія основного стану E_0 дається формулою (1.7). Цей результат був отриманий нами в [1] у так званому конденсатному наближенні для статистичної суми, коли до уваги приймається лише внесок від частинок, що мають імпульси, які дорівнюють нулю. В границі $T \to 0$ звідси отримуємо для рідкого ^{4}He закон Стефана–Больцмана, але з половинною температурою. Більш детальний аналіз температурних залежностей цих величин буде предметом окремого дослідження.

VIII. ЗАКЛЮЧНІ ЗАУВАЖЕННЯ

Метою нашої роботи було одержження на основі нового зображення статистичного оператора [1] виразів для матриць густини, зокрема, для одно- та двочастинкової, а також для деяких термодинамічних величин, які б працювали в околі точки Бозе–Айнштайнівської конденсації. Саме тому, вважаючи механізмом λ-переходу в рідкому ^{4}He Бозе–Айнштайнівську конденсацію, ми отримали вирази для матриць густини на основі розкладів у ряди повної матриці густини ідеального бозе–газу. Тим самим міжчастинковій взаємодії ми відвели роль “деформації” або спотворення цієї конденсації. Радіус збіжності цих рядів визначає точку неаналітичності відповідних термодинамічних функцій, тобто точку λ-переходу.

Цікаво, що відповідні вирази легко узагальнюються і на випадок Фермі–Дірака: отже, їх можна застосувати як до дослідження рідкого ^{3}He (в нормальному стані), так і до електронного газу.

Детальний аналіз отриманих виразів потребує окремого дослідження. При високих температурах для енергії та вільної енергії ми отримали в [1] відповідні класичні вирази в наближенні хаотичних фаз. У границі низьких температур, як ми бачили, отримуються правильні результати розвинутих раніше теорій. Це дає підстави для твердження, що отримані результати дадуть точний опис квантових рідин і при низьких температурах, і в околі точки Бозе–Айнштайнівської конденсації.

[1] І. О. Вакарчук, Журн. фіз. досл. **1**, 25 (1996).
[2] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике* (ОГИЗ, Гостехиздат, М.–Л., 1946).
[3] Н. Н. Боголюбов, *Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем* (Радянська школа, Київ, 1949).
[4] Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды в трех томах. Том второй* (Наукова думка, Київ, 1970).
[5] И. А. Вакарчук, ТМФ **32**, 260 (1975); **32**, 247 (1977); **80**, 239 (1989); **82**, 438 (1990).
[6] І. О. Вакарчук, Вісн. Львів. ун-ту, сер. фіз. **26**, 29 (1993).

NEW RESULTS FOR THE DISTRIBUTION FUNCTIONS OF MANY–PARTICLE QUANTUM SYSTEMS

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

A method of calculation of the density matrices for a system of identical particles is suggested. The method is based on a partial summation of the series which appear during the expansion of a full N-particle density matrix of ideal quantum gas with respect to the lower matrices of the order $N-s$. The expressions for the one- and two-particle density matrices of many boson system were found in the explicit form. For the low temperatures they turn into the the well-known expressions of the theory of the ground state of Bose liquids. As for the ideal gas there arises a point of nonanalliticity of these expressions which is connected with the Bose-Einstein condensation. The obtained results may be easily generalized for the case of many-fermion systems, which allows to study not only the properties of the superfluid ^{4}He but also such systems as electron gas and liquid ^{3}He.