ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 3, № 3 (1999) с. 264–271

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 3, No. 3 (1999) p. 264–271

ЩЕ РАЗ ПРО НАДПЛИННИЙ ^{4}He

І. О. Вакарчук
Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра теоретичної фізики,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна
(Отримано 28 жовтня 1999)

Шляхом розв'язку рівнянь руху для флюктуацій густини багаточастинкової системи знайдено вирази для енерґетичного спектра, структурного фактора та вільної енерґії, які при температурі $T \to 0$ K дають результати теорії Боголюбова, а при високих температурах переходять у відповідні вирази для класичних систем у наближенні хаотичних фаз. Враховано також внесок нелінійних флюктуацій. Знайдені вирази дають змогу досліджувати λ–перехід у рідкому ^{4}He.

Ключові слова: гелій, структурний фактор, флюктуація густини, енерґетичний спектр, нелінійні флюктуації, λ–перехід.

PACS numbers: 05.30.–d; 67.40.–w; 67.55.–s

ВСТУП

Послідовна молекулярна теорія явища надплинности, яку побудував М. М. Боголюбов у 1947 році і яка ґрунтується на моделі слабонеідеального бозе–газу, викликала й стимулювала численні дослідження у фізиці квантових рідин [1]. Фактично в цій праці вперше також було показано, як обчислювати спектр енерґії конденсованого тіла, а ориґінальний метод наближеного вторинного квантування, що запровадив Боголюбов, використовували в багатьох інших задачах статистичної механіки. Теорія Боголюбова ґрунтується на припущенні існування бозе–конденсату в системі і на його вирішальній ролі у формуванні її властивостей. У зв'язку з цим теорія добре працює в області температур значно нижчих, ніж температура бозе–конденсації. Як показали пізніше експериментальні й теоретичні дослідження, доля бозе–конденсату в рідкому ^{4}He навіть при абсолютному нулі температури є незначною і складає величину порядку $(2 \div 10)\%$. Теорія Боголюбова–Зубарєва 1955 року [2], яка ґрунтується на розв'язку рівняння Шредінґера для системи багатьох бозонів за допомогою представлення колективних змінних, у ролі яких обрані компоненти Фур'є флюктуацій густини частинок досліджуваної системи, відтворює в наближенні хаотичних фаз результати теорії слабонеідеального бозе–газу без припущення про існування бозе–конденсатної фракції: бозе–конденсат у цій теорії виникає природним чином. Незважаючи на те, що ці підходи ґрунтуються на припущенні слабкої взаємодії, їх можна застосувати до кількісного дослідження властивостей і реального надплинного ^{4}He, де взаємодія між частинками не є слабкою [3]. Це досягається тим, що в ролі вихідної інформації, замість потенціяльної енерґії взаємодії між частинками, використано таку спостережувальну величину, як рідинний структурний фактор. "Переписування" формул тільки через структурний фактор відповідає підсумовуванню певного класу членів ряду теорії збурень для слабонеідеального бозе–газу.

Проблемою залишається поширення цих результатів на вищі температури і, зокрема, на область температур в околі λ–переходу рідкого ^{4}He у надплинний стан. Теоретичні дослідження λ–переходу, які ґрунтуються на методі ренормалізаційної групи, дозволяють коректно обчислювати лише критичні показники термодинамічних величин. Довший час уважали, що λ–подібний хід теплоємности в околі фазового переходу $T = T_\lambda$ має характер логарифмічної розбіжности з критичним показником $\alpha = 0$. Метод ренорм–групи не дозволив отримати логарифмічну розбіжність: α було малим додатним числом. В експериментах, однак, виявилось, що насправді розбіжности теплоємности немає і, як свідчить експеримент, величина α є від'ємним малим числом [4]: $|\alpha| \sim 0.01$. Отже, ми повертаємось до старої ідеї, яку, мабуть, уперше висловив Лондон, що λ–перехід є нічим іншим, як спотвореною взаємодією бозе–конденсацією, притаманною ідеальному бозе–газові, яка є причиною характерного пікоподібного ходу теплоємности в околі точки бозе–конденсації $T = T_c$.

Ще однією проблемою в теорії рідкого гелію, тісно пов'язаною з цією, є те, як узгодити теорію Боголюбова, яка працює при низьких температурах, з теорією класичних систем у наближенні хаотичних фаз. Це наближення, як відомо, для системи заряджених частинок дає результати теорії Дебая–Гюккеля для сильних електролітів. Іншими словами, стоїть питання, чи можливо записати для термодинамічних функцій вираз, придатний до аналітичних та чисельних розрахунків, який у межі $T \to 0$ K дає результати теорії Боголюбова для слабонеідеального бозе–газу, а при високих температурах у квазікласичній межі виводить нас на наближення хаотичних фаз теорії класичного неідеального газу. Від такого виразу можна очікувати достатньо добрих результатів і в проміжній області температур, у якій знаходиться λ–точка. Спроба вирішення цієї задачі представлена в нашій статті.

I. РІВНЯННЯ РУХУ ДЛЯ ФЛЮКТУАЦІЙ ГУСТИНИ

Розглянемо рівноважну систему N безспінових взаємодіючих бозе–частинок маси m з координатами $\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_N$, що рухаються в об'ємі величиною V. Гамільтоніян такої системи

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \sum_{1 \le i < j \le N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

де перший доданок — це оператор кінетичної енерґії, а другий доданок представляє потенціяльну енерґію попарної взаємодії між частинками.

Наші дослідження ґрунтуються на розв'язку рівняння руху для величин

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \quad \mathbf{k} \ne 0,$$

які є коефіцієнтами Фур'є флюктуації густини частинок

$$\Delta n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - \rho,$$

де локальна густина частинок

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),$$

$\rho = N/V$ — середня густина:

$$\Delta n(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{N}}{V} \sum_{\mathbf{k}\ne 0} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Delta n(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

де компоненти хвильового вектора $\mathbf{k}$ пробігають значення, кратні до $2\pi/V^{1/D}$, D — вимірність простору. При переході до термодинамічної межі $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = \text{const}$ суми за хвильовими векторами переходять у відповідні інтеґрали з безмежними межами за кожною компонентою: $\sum_{\mathbf{k}} \to V \int d\mathbf{k}/(2\pi)^D$.

У цих величинах потенціяльну енерґію системи запишемо так:

$$\Phi = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\ne 0} \frac{N}{2V} \nu_q (\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - 1),$$

де $\nu_q = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi(r) d\mathbf{r}$ — коефіцієнт Фур'є енерґії взаємодії між двома частинками.

Візьмемо першу похідну за часом від величини $\rho_{\mathbf{k}}$, відповідно до гайзенберґівських рівнянь руху:

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}} = \frac{[\rho_{\mathbf{k}}, \hat{H}]}{i\hbar}.$$

Обчислюємо цей комутатор і знаходимо

$$\hat{\dot{\rho}}_{\mathbf{k}} = \frac{i\hbar}{2m} k^2 \rho_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{(-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)}{m}.$$

Обчислимо тепер другу похідну за часом від $\rho_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{\ddot{\rho}}_{\mathbf{k}} = -\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 \rho_{\mathbf{k}} + \frac{i\hbar}{m} k^2 \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{(-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)}{m}$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{(-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2}{m^2} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{(-i\mathbf{k}\hat{\dot{\mathbf{p}}}_j)}{m}.$$

Далі використаємо гайзенберґівські рівняння руху для оператора імпульсу:

$$\frac{(-i\mathbf{k}\hat{\dot{\mathbf{p}}}_j)}{m} = \frac{(i\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}_j)\Phi}{m} = \frac{i\mathbf{k}}{m} \sum_{\mathbf{q}\ne 0} (-i\mathbf{q}) \frac{\sqrt{N}}{V} \nu_q \rho_{-\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}.$$

Тепер ми можемо записати остаточний вигляд квантового рівняння руху для флюктуацій локальної густини частинок:

$$\hat{\ddot{\rho}}_{\mathbf{k}} = -\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 \rho_{\mathbf{k}} - \frac{k^2}{m} \nu_k \frac{N}{V} \rho_{\mathbf{k}}$$

$$+ \sum_{\substack{\mathbf{q}\ne 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\ne 0}} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})}{m} \frac{\sqrt{N}}{V} \nu_q \rho_{-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$$

$$- \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \frac{(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2 - \hbar k^2 (\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)}{m^2}.$$

II. РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ РУХУ ДЛЯ ФЛЮКТУАЦІЙ ГУСТИНИ

Розв'язувати точні рівняння руху для $\rho_{\mathbf{k}}$ немає змоги. Наше завдання полягає в тому, щоб знайти наближені розв'язки. Для цього спростимо саме рівняння, використовуючи деякі припущення. Перейдемо до цих наближень. По–перше, не будемо враховувати членів $\sim \rho_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}$, тобто квадратичних за флюктуаціями густини. По–друге, проведемо усереднення множників з операторами імпульсів. У класичному випадку йому відповідає усереднення за швидкостями частинок. У квантовому випадку є додаткове наближення, яке полягає в розчепленні усереднень за координатами та швидкостями. Отже, нехай

$$(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2 \to \langle(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2\rangle = \frac{1}{3}k^2\langle\hat{\mathbf{p}}_j^2\rangle$$

$$= \frac{1}{3}k^2 2m\langle\frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m}\rangle = \frac{2}{3}mk^2\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N},$$

де $\langle\hat{K}\rangle$ — середнє значення кінетичної енерґії системи N частинок, тобто середнє від оператора

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

Ми скористались тим, що для $D = 3$ усереднення за напрямками дає $1/3$. Крім того, середнє значення $\hat{\mathbf{p}}_j^2$ очевидно не залежить від індексу j. Далі:

$$(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j) \to \langle(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)\rangle = (\mathbf{k}\langle\hat{\mathbf{p}}_j\rangle) = 0, \quad \langle\hat{\mathbf{p}}_j\rangle = 0$$

— оскільки система, як ціле, нерухома, то середнє значення імпульсу частинки дорівнює нулеві.

Після цих наближень для флюктуацій густини маємо таке рівняння:

$$\ddot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}} + \omega_k^2\rho_{\mathbf{k}} = 0,$$

де частота

$$\omega_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 + \frac{k^2}{m}\nu_k\frac{N}{V} + \frac{k^2}{m}\frac{2}{3}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}}.$$

Отже ми, як і сподівались, отримали квантове рівняння для гармонічного осцилятора з частотою ω_k. Розв'язок його

$$\rho_{\mathbf{k}} \sim e^{i\omega_k t}$$

описує незагасаючі гармонічні коливанння густини частинок системи.

Важливим є також те, що при переході до класичного випадку формальним прямуванням сталої Планка до нуля ($\hbar \to 0$), коли при цьому $\langle\hat{K}\rangle \to 3NT/2$, ми отримуємо для частоти класичний вираз:

$$\omega_k = \sqrt{\frac{k^2N}{mV}\nu_k + \frac{k^2T}{m}}.$$

Це є ознакою узгодженості нашого опису та прийнятих наближень у класичному і квантовому випадках.

Розв'язки квантових рівнянь руху для коефіцієнта Фур'є флюктуації густини частинок $\rho_{\mathbf{k}}$, які ми знайшли, вказують на те, що в системі існують елементарні збудження з енерґією $E_k = \hbar\omega_k$:

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)^2 + \frac{\hbar^2k^2}{m}\left(\frac{N}{V}\nu_k + \frac{2}{3}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\right)}.$$

Якщо в цьому виразі використати нульове наближення для середнього значення кінетичної енерґії $\langle\hat{K}\rangle$ системи бозе–частинок, тобто взяти енерґію ідеального бозе–газу $\langle\hat{K}\rangle = 0$ при $T = 0$ K, то ми отримаємо формулу Боголюбова [1,2]:

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)^2 + \frac{\hbar^2k^2N}{mV}\nu_k}.$$

Цей вираз М. Боголюбов знайшов ще в 1947 році за допомогою оригінального методу наближеного вторинного квантування. Фактично в цій його праці вперше було показано, як обчислювати енерґетичний спектр конденсованого тіла

Для такої системи, як рідкий гелій, при $k \to 0$ формула для E_k описує звукові коливання, тобто фононну область спектра:

$$E_k = c\hbar k,$$

де

$$c = \sqrt{\frac{1}{m}\left(\nu_0\frac{N}{V} + \frac{2}{3}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\right)}$$

— швидкість звуку.

Ми говорили тут про енерґетичний спектр рідкого ^{4}He. Спектр рідкого ^{3}He, як системи ферміонів з яскравим виявом індивідуальних характеристик частинок, відрізняється від спектра багатобозонної системи, і для його опису необхідні інші підходи. Ми, однак, спробуємо дослідити колективну гілку спектра рідкого ^{3}He, природа якої — це також коливання густини. Причому не братимемо до уваги й те, що рідкий ^{3}He при наднизьких температурах є надплинним. Отже, у так званій гідродинамічній межі, коли $k \to 0$, маємо звукові коливання з лінійною залежністю енерґії від хвильового вектора, яку ми виписали вище. Запишемо рівняння для швидкостей звуку двох рідин, ^{4}He та ^{3}He:

$$m_4c_4^2 = \rho_4\nu_0 + \frac{2}{3}\left(\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\right)_4,$$

$$m_3c_3^2 = \rho_3\nu_0 + \frac{2}{3}\left(\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\right)_3,$$

значки "3" та "4" біля величини вказують, що вони стосуються ^{3}He та ^{4}He відповідно. Важливо, що коефіцієнт Фур'є ν_0 для обох систем є однаковим.

Справді, енерґію міжатомної взаємодії визначають структури електронних оболонок, які для атомів ^{3}He і ^{4}He є однаковими, а не маси їхніх ядер. Зрозуміло, що ми відволікаємось від несуттєвої різниці, яка виникає в постадіябатичному наближенні, внесок якого в міжатомний потенціял пропорційний до кореня квадратного з відношення маси електрона до маси ядра. Отже, ми маємо змогу вилучити з цих двох рівнянь величину ν_0 і встановити співвідношення

$$\rho_3\left[m_4c_4^2-\frac{2}{3}\left(\frac{\langle\hat K\rangle}{N}\right)_4\right]=\rho_4\left[m_3c_3^2-\frac{2}{3}\left(\frac{\langle\hat K\rangle}{N}\right)_3\right],$$

з якого можна визначити, наприклад, середні значення кінетичної енерґії.

III. СТРУКТУРНИЙ ФАКТОР

Перейдемо до розрахунку структурного фактора

$$S_k=\langle|\rho_{\mathbf k}|^2\rangle=\langle\rho_{\mathbf k}\rho_{-\mathbf k}\rangle.$$

Переставні, або комутаційні, співвідношення між оператором флюктуації густини частинок $\rho_{-\mathbf k}$ та її першою похідної за часом легко знайти:

$$\rho_{-\mathbf k}\widehat{\dot\rho}_{\mathbf k}-\widehat{\dot\rho}_{\mathbf k}\rho_{-\mathbf k}=i\hbar\frac{k^2}{m}.$$

З уваги на те, що рівняння руху для $\rho_{-\mathbf k}$ у прийнятому наближенні є рівнянням для гармонічного осцилятора, скористаємось аналогією з квантовим лінійним гармонічним осцилятором масою m та частотою ω, для якого переставні співвідношення мають вигляд:

$$x\widehat{\dot x}-\widehat{\dot x}x=i\hbar\frac{1}{m},$$

а середнє

$$\langle x^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(1+2\langle n\rangle),$$

n — квантове число, що нумерує стан осцилятора.

За аналогією знаходимо середньоквадратичну флюктуацію густини (пам'ятаймо про заміну $m\to m/k^2$):

$$\langle|\rho_{\mathbf k}|^2\rangle=\frac{\hbar k^2}{2m\omega_k}(1+2\langle n_{\mathbf k}\rangle).$$

Уведемо зручні позначення:

$$\nu_k^*=\nu_k+\frac{2}{3}\frac{V}{N^2}\langle\hat K\rangle$$

— ефективний коефіцієнт Фур'є енерґії міжчастинкової взаємодії і

$$\alpha_k=\sqrt{1+\frac{2N}{V}\nu_k^*\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m}}.$$

Тепер частота:

$$\omega_k=\frac{\hbar k^2}{2m}\alpha_k,$$

а структурний фактор квантової рідини

$$S_k=\langle|\rho_{\mathbf k}|^2\rangle=\frac{1+2\langle n_{\mathbf k}\rangle}{\alpha_k},$$

або

$$S_k=\frac{\hbar k^2}{2m\omega_k}\left(1+\frac{2}{e^{\hbar\omega_k/T}-1}\right)=\frac{\hbar k^2}{2m\omega_k}\mathrm{cth}\left(\frac{\hbar\omega_k}{2T}\right).$$

Цікаво подивитись на ці вирази в низько– та високотемпературних межах. У першому випадку, коли $T\to 0$, котанґенс гіперболічний прямує до одиниці і

$$S_k=\frac{\hbar k^2}{2m\omega_k}=\frac{1}{\alpha_k}.$$

Причому у виразі для α_k середнє значення кінетичної енерґії $\langle\hat K\rangle$ потрібно також брати при температурі абсолютного нуля.

В області високих температур $T\to\infty$ маємо перехід до класичної механіки ($\hbar\to 0$). У цьому випадку використаємо розклад котанґенса при малих значеннях арґумента:

$$S_k=\frac{\hbar k^2}{2m\omega_k}\left\{\frac{2T}{\hbar\omega_k}+\dots\right\}.$$

Таким чином, у цьому наближенні

$$S_k=\frac{Tk^2}{m\omega_k^2}=\frac{k^2T}{m\left(\frac{k^2}{m}\nu_k\frac{N}{V}+\frac{k^2}{m}\frac{2}{3}\frac{\langle\hat K\rangle}{N}\right)}.$$

Для кінетичної енерґії беремо класичний вираз $\langle\hat K\rangle=3NT/2$ і остаточно ($\beta=1/T$):

$$S_k=\frac{1}{1+\beta\frac{N}{V}\nu_k}$$

— як і повинно бути в наближенні хаотичних фаз.

Отже, знайдені значення структурного фактора в цих граничних випадках демонструють повну узгодженість класичного і квантового опису структурних характеристик системи багатьох частинок, який ми запропонували. Ми отримали важливий результат:

завдяки тому, що у вираз для α_k входить середнє значення кінетичної енерґії, знайдені формули працюють у низькотемпературній, тобто квантовій, області і виявляють можливість неперервного переходу до класичного випадку. Об'єднання в одному виразі цих двох граничних випадків у теорії багаточастинкових систем є радше винятком, ніж правилом.

IV. ВІЛЬНА ЕНЕРҐІЯ

Маючи вираз для структурного фактора квантової системи, знайдемо середнє значення потенціяльної енерґії:

$$\langle\Phi\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q(S_q-1)$$

$$= \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q\left\{\frac{1+2\langle n_q\rangle}{\alpha_q}-1\right\}.$$

Перед тим, як переходити до обчислення вільної енерґії, зробимо таке зауваження. Скористаємось тим фактом, що парна функція розподілу

$$F_2(R) = 1 + \frac{1}{N-1}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(S_q-1)e^{i\mathbf{qR}}$$

для такої бозе–рідини, як ^{4}He, дорівнює нулеві при $R=0$, оскільки атоми мають розміри і ймовірність їх взаємного розташування на відстані меншій, ніж "діяметр" атома, дорівнює нулеві. Отже,

$$\frac{1}{N-1}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(S_q-1) = -1.$$

Це дає змогу записати середню потенціяльну енерґію так:

$$\langle\Phi\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\left(\nu_q^* - \frac{2}{3}\frac{V}{N^2}\langle\hat K\rangle\right)(S_q-1) = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0$$

$$-\frac{\langle\hat K\rangle}{3N}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(S_q-1) + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q^*(S_q-1) = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0^* + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q^*(S_q-1).$$

Тобто вдалось записати величини $\langle\Phi\rangle$ та S_q лише через ефективний коефіцієнт Фур'є міжатомної взаємодії ν_q^*.

Уведемо параметр вмикання взаємодії, $\nu_q \to \lambda\nu_q$, $0\le\lambda\le 1$, і обчислимо вільну енерґію

$$F = F_{\rm id} + \int_0^1 \langle\Phi\rangle d\lambda,$$

де $F_{\rm id}$ — вільна енерґія ідеального газу, а

$$\langle\lambda\Phi\rangle = \frac{N(N-1)}{2V}\lambda\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q\lambda\left\{\frac{1+2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle}{\alpha_q}-1\right\},$$

$$\alpha_q = \sqrt{1+\frac{2N}{V}\lambda\nu_q\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{4}{3}\frac{\langle K\rangle_\lambda}{N}\Big/\frac{\hbar^2q^2}{2m}}.$$

Значок λ при середньому значенні кінетичної енерґії $\langle K\rangle_\lambda$ підкреслює її залежність від параметра вмикання взаємодії λ. Таким чином:

$$F = F_{\rm id} + \int_0^1 d\lambda\left\{\frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q\left[\frac{1+2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle}{\alpha_q}-1\right]\right\}$$

$$= F_{\rm id} + \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q\left[\int_0^1\frac{1+2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle}{\alpha_q}d\lambda - 1\right].$$

Зосередимо увагу на інтеґралі за λ і зробимо в ньому заміну змінних:

$$\int_0^1 \frac{1+2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle}{\alpha_q} d\lambda = \int_{\alpha_q^0}^{\alpha_q} \frac{1+2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle}{\alpha_q} \frac{d\lambda}{d\alpha_q} d\alpha_q,$$

тут верхня межа

$$\alpha_q = \sqrt{1+\frac{2N}{V}\nu_q \Big/ \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{4}{3}\frac{\langle K\rangle}{N} \Big/ \frac{\hbar^2 q^2}{2m}},$$

$$\langle K\rangle = \langle K\rangle_{\lambda=1}$$

— кінетична енерґія системи взаємодіючих частинок, а нижня межа

$$\alpha_q^0 = \sqrt{1+\frac{4}{3}\frac{\langle K\rangle_0}{N} \Big/ \frac{\hbar^2 q^2}{2m}},$$

$$\langle K\rangle_0 = \langle K\rangle_{\lambda=0}$$

— кінетична енерґія ідеального газу. Тепер

$$\frac{d\alpha_q}{d\lambda} = \frac{1}{2\alpha_q}\frac{2N}{V}\left(\nu_q + \frac{2}{3}\frac{V}{N^2}\frac{d\langle K\rangle_\lambda}{d\lambda}\right) \Big/ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Якщо ми обмежимось наближенням, коли у виразі для функції α_k середнє значення кінетичної енерґії покладено рівним нулеві, $\langle\hat{K}\rangle = 0$, то це відповідатиме теорії Боголюбова, яка є справедливою при температурах, близьких до абсолютного нуля. При вищих температурах, зокрема для дослідження властивостей рідкого ^{4}He в околі точки λ–переходу в надплинний стан, потрібно враховувати величину $\langle\hat{K}\rangle$ у функції α_k. Про це свідчить те, що вже ідеальний бозе–газ, де повна внутрішня енерґія дорівнює $\langle\hat{K}\rangle$, виявляє фазовий перехід. Фазовий перехід у рідкому ^{4}He є "спотвореним" міжатомною взаємодією фазовим переходом в ідеальному бозе–газі. Тобто механізм λ–переходу диктується статистикою Бозе–Айнштайна, якій підкоряються атоми ^{4}He.

Ми не маємо явної залежности величини $\langle K\rangle_\lambda$ від параметра λ, тому скористаємось для похідної $d\langle K\rangle_\lambda/d\lambda$ її деяким усередненим значенням:

$$\frac{d\langle K\rangle_\lambda}{d\lambda} = \frac{\langle K\rangle_{\lambda=1} - \langle K\rangle_{\lambda=0}}{\Delta\lambda} = \langle K\rangle - \langle K\rangle_0,$$

оскільки $\Delta\lambda = 1$. Або можна записати ще й так:

$$\frac{d\langle K\rangle_\lambda}{d\lambda} = \overline{\frac{d\langle K\rangle_\lambda}{d\lambda}} = \int_0^1 \frac{dK}{d\lambda} d\lambda \Big/ \int_0^1 d\lambda = \langle K\rangle - \langle K\rangle_0.$$

Можна також скористатись наближеним виразом для $\langle K\rangle_\lambda$, що відповідає теорії Боголюбова. Однак він є добрим лише при низьких температурах.

Після такого усереднення потрібний нам інтеґрал легко береться. Випишемо результат для вільної енерґії:

$$\begin{aligned} F &= F_{\rm id} + \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{N}{2V}\nu_q \\ &\times \left[\frac{(\alpha_q-\alpha_q^0)\hbar^2q^2/m}{2N\nu_q/V + 4(\langle K\rangle - \langle K\rangle_0)/3N} - 1\right] \\ &+ \frac{1}{\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{2N\nu_q/V}{2N\nu_q/V + 4(\langle K\rangle - \langle K\rangle_0)/3N} \\ &\times \left\{\ln\left(1-e^{-\beta\hbar^2k^2\alpha_q/2m}\right) - \ln\left(1-e^{-\beta\hbar^2k^2\alpha_q^0/2m}\right)\right\}, \end{aligned}$$

де $F_{\rm id}$ — вільна енерґія ідеального бозе–газу.

Якщо прийняти тут, що $\langle K\rangle = \langle K\rangle_0 = 0$, то для вільної енерґії F ми приходимо до теорії Боголюбова. Важливою є також інша властивість цієї формули: у квазікласичній границі, коли формально покласти $\hbar \to 0$, вона переходить у вільну енерґію класичної системи частинок у наближенні RPA. Справді, при такому переході перший доданок у квадратних дужках дорівнює нулеві, а різниця логарифмів

$$\begin{aligned} &\left\{\ln\left(1-e^{-\beta\hbar^2k^2\alpha_q/2m}\right) - \ln\left(1-e^{-\beta\hbar^2k^2\alpha_q^0/2m}\right)\right\} \\ &\underset{\hbar\to 0}{=} \ln(\alpha_q/\alpha_q^0) \underset{\hbar\to 0}{=} \ln\sqrt{\left(\frac{2N}{V}\nu_q + \frac{4}{3}\frac{\langle K\rangle}{N}\right) \Big/ \frac{4}{3}\frac{\langle K\rangle_0}{N}} \\ &= \frac{1}{2}\ln\left(1+\beta\frac{N}{V}\nu_q\right). \end{aligned}$$

Ми врахували, що в цій границі середня кінетична енерґія $\langle K\rangle = \langle K\rangle_0 = 3T/2$. У результаті для вільної енерґії отримуємо вираз:

$$\begin{aligned} F &= F_{\rm id} + \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 \\ &+ \frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\left[\ln\left(1+\beta\frac{N}{V}\nu_q\right) - \frac{N}{V}\nu_q\right] \end{aligned}$$

— відоме наближення RPA для класичних систем.

Отже, ми маємо в розпорядженні для вільної енерґії формулу, яку узгоджено на всьому інтервалі температур. І це дає змогу досліджувати властивості рідкого ^{4}He в області λ–переходу.

V. УРАХУВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ФЛЮКТУАЦІЙ

Зупинимось тепер на аналізі рівняння руху для флюктуацій локальної густини частинок з урахуванням нелінійних членів.

Повернемось до вихідного рівняння для $\rho_{\mathbf{q}}$, де зроблена заміна величин $(\mathbf{k}\mathbf{p}_j)$ та $(\mathbf{k}\mathbf{p}_j)^2$ на їхні середні значення:

$$\hat{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}} = -\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 \rho_{\mathbf{k}} - \frac{k^2}{m}\nu_k \frac{N}{V}\rho_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})}{m}\frac{\sqrt{N}}{V}\nu_q \rho_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \frac{2}{3}\frac{k^2}{m}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\rho_{\mathbf{k}}.$$

Наступний крок — це наближене врахування нелінійного доданка $\sim \rho_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Ми свідомі того, що усереднення за імпульсами проведено дуже спрощено: без урахування того факту, що у квантовомеханічному випадку усереднення за імпульсами й усереднення за координатами не є незалежними. Акуратніше усереднення породить у рівнянні додатковий член, який також матиме підсумовування за хвильовим вектором $\mathbf{q}$. Тобто його внесок буде такого ж типу, як і залишеного нелінійного доданка в рівнянні. Крім того, він приведе вже до загасаючих коливань для флюктуацій густини частинок системи. Уважаємо, що обговорюваний доданок у рівнянні руху є пропорційним до $\rho_{\mathbf{k}}$, а множник пропорційности знаходимо множенням цієї рівности на $\rho_{-\mathbf{k}}$ з наступним усередненням:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\frac{(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2 - \hbar k^2(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)}{m^2} = B_k\rho_{\mathbf{k}},$$

$$B_k = \frac{1}{S_k}\langle \rho_{-\mathbf{k}}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}\frac{(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)^2 - \hbar k^2(\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}_j)}{m^2}\rangle.$$

Якщо усереднення за імпульсами та координатами розчеплюється, як це є у класичній межі, то ми отримаємо знайомий результат: $B_k = 2k^2\langle\hat{K}\rangle/3m^2N$. Для точнішого врахування квантовомеханічного усереднення потрібні складніші розчеплення в цьому виразі, можна також уважати B_k "вільним параметром" теорії, але послідовний підхід — це знову писати рівняння руху для обговорюваної величини. Ми не будемо брати цього до розгляду, а продовжимо аналіз виписаного рівняння.

Величину $\rho_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ замінюємо таким виразом:

$$\rho_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{k}}\frac{1}{\sqrt{N}}\frac{S_3(-\mathbf{k},-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q})}{S_k},$$

де $S_3(-\mathbf{k},-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q})$ — тричастинковий структурний фактор. Якщо помножити це рівняння на $\rho_{-\mathbf{k}}$ і взяти середнє, то отримаємо тотожність. У результаті рівняння для величини $\rho_{\mathbf{k}}$ знову набуває вигляду рівняння для гармонічного осцилятора:

$$\hat{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}} + \omega_k^2\rho_{\mathbf{k}} = 0,$$

з частотою ω_k:

$$\omega_k^2 = \left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 + \frac{k^2}{m}\frac{N}{V}\nu_k + \frac{2}{3}\frac{k^2}{m}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N} - \frac{1}{V}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}}\frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})}{m}\nu_q\frac{S_3(-\mathbf{k},-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q})}{S_k}.$$

Використаємо конволюційне наближення для тричастинкового структурного фактора:

$$S_3(-\mathbf{k},-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}) = S_k S_q S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|},$$

тоді частота

$$\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}\left\{1 + \frac{2N}{V}\nu_k^* \Big/ \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{2}{V}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}}\frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})}{k^2}\nu_q S_q S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right\}^{1/2}.$$

Тепер структурний фактор при $T = 0$ К

$$S_k = \frac{\hbar k^2}{2m\omega_k},$$

$$S_k = \left\{1 + \frac{2N}{V}\nu_k\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{4}{3}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{2}{V}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}}\frac{(\mathbf{k}\mathbf{q})}{k^2}\nu_q S_q S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right\}^{-1/2}.$$

Цей вираз можна розглядати як інтеґральне рівняння для структурного фактора S_k при відомому потенціялі міжатомної взаємодії ν_k. За ним можна також розв'язувати й обернену задачу про відтворення енерґії міжчастинкової взаємодії, якщо задати структурний фактор. Виконаємо деякі перетворення:

$$\frac{1}{S_k^2} = 1 + \frac{2N}{V}\nu_k\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{4}{3}\frac{\langle\hat{K}\rangle}{N}\Big/\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$- \frac{2}{V} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}} \frac{(\mathbf{kq})}{k^2} \nu_q S_q S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} \Big/ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Для швидшої збіжности суми за $\mathbf{q}$ запишемо цей вираз так:

$$\frac{1}{S_k^2} = 1 + \frac{2N}{V}\nu_k \Big/ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{4}{3}\,\frac{\langle \hat{K}\rangle}{N} \Big/ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$- \frac{2}{V} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}} \frac{(\mathbf{kq})}{k^2} \nu_q S_q (S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - 1) \Big/ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Тобто ми додали й відняли нуль:

$$\frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}} (\mathbf{kq})\nu_q S_q = 0,$$

оскільки підсумовування за вектором $\mathbf{q}$ іде по всьому простору, то число від'ємних і додатних, однакових за модулем доданків у цій сумі є однаковим (припускаємо, що потенціял ν_q забезпечує збіжність). Внесок одного вилученого доданка з умовою $\mathbf{q}+\mathbf{k} \neq 0$ не беремо до уваги, тому що він $\sim 1/V$ і прямує до нуля в термодинамічній межі. Далі маємо

$$\nu_k = \frac{V}{2N}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{1}{S_k^2} - 1\right)$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}} \frac{(\mathbf{kq})}{k^2} \nu_q S_q (S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - 1) - \frac{2V}{3N^2}\langle \hat{K}\rangle.$$

Як нульове наближення беремо перший доданок у правій частині цього рівняння:

$$\nu_k = \frac{V}{2N}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{1}{S_k^2} - 1\right).$$

У наступному наближенні під знак суми підставляємо це значення ν_q і зберігаємо останній доданок у попередній формулі, що є пропорційним до середнього значення кінетичної енерґії:

$$\nu_k = \frac{V}{2N}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{1}{S_k^2} - 1\right) + \frac{V}{2N^2} \sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ \mathbf{q}+\mathbf{k}\neq 0}} \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\frac{(\mathbf{kq})}{k^2}$$

$$\times \left(\frac{1}{S_q} - S_q\right)(S_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - 1) - \frac{2V}{3N^2}\langle \hat{K}\rangle.$$

Цей вираз уже цілком придатний для проведення комп'ютерних розрахунків фур'є-образу міжатомного потенціялу ν_k, за яким обернененим перетворенням Фур'є знайдемо і сам потенціял $\Phi(R)$.

Отримані вирази для структурного фактора з урахуванням нелінійних флюктуацій можна використати для дослідження як квантових, так і класичних модельних систем та рідкого ^{4}He.

[1] Н. Н. Боголюбов, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. **11**, 77 (1947); *Избранные труды в трех томах. Том второй* (Наукова думка, Київ, 1970).

[2] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Журн. эксп. теор. физ. **28**, 129 (1955).

[3] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **65**, 285 (1985); Теор. мат. физ. **80**, 439 (1989); Теор. мат. физ. **82**, 438 (1990).

[4] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, Phys. Rev. Lett. **76**, 944 (1996).

ONCE MORE ON THE SUPERFLUID ^{4}HE

I. O. Vakarchuk

The Ivan Franko National University of Lviv, Chair of Theoretical Physics

12 Drahomanov Str., Lviv, UA–79005, Ukraine

Through the solution of motion equations for the density fluctuations of the many–particle system expressions for the energy spectrum, structural factor and free energy have been found. At the temperature $T \to 0$ K they yield the results of Bogoliubov theory and at high temperatures they tend to the corresponding expressions for the classical systems in the random phases approximation. The contribution of the non–linear fluctuations has also been taken into account. The obtained expressions are conducive to the study of λ–transition in liquid ^{4}He.