

БОЗЕ-КОНДЕНСАТ У ДВОКОМПОНЕНТНІЙ БОЗЕ-РІДИНІ

І. О. Вакарчук, В. С. Пастухов

Кафедра теоретичної фізики

*Львівського національного університету імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 31 березня 2008р.)

Із використанням знайденого в роботі [І. О. Вакарчук, В. С. Пастухов, Журн. фіз. досл. **12**, 1001 (2008)] виразу для повної матриці густини двокомпонентної бозе-рідини розраховано явні вирази s -частинкових матриць. Досліджено вплив домішки на явище бозе-айнштайнівської конденсації в рідкому гелії. Із використанням експериментально виміряного структурного фактора рідкого ${}^4\text{He}$ отримано температурну залежність відносної кількості конденсату для рідини з параметрами системи ${}^4\text{He}$ - ${}^6\text{He}$ при різних концентраціях.

Ключові слова: двокомпонентна бозе-рідина, матриця густини, структурні фактори, конденсатна фракція

PACS number(s): 03.77.Mn, 67.55.Lf

I. ВСТУП

Пошук теоретичних досліджень властивостей охолоджених газів зумовлено частково простотою опису таких сильнорозріджених систем і можливістю їх практичної реалізації. Хоча основні результати в теорії багаточастинкових систем були отримані наприкінці 1950-х початку 1970-х років, надійна експериментальна перевірка стала можливою тільки нещодавно. Сучасні дослідження спрямовані на розв'язування ефективних рівнянь для конкретної геометрії пасток, які локалізують атоми, або спрощення розгляду заміною вихідного гамільтоніана гратковим, що дозволяє вивчати граничний випадок сильної, зазвичай точкової взаємодії. При цьому навіть у наближенні середнього поля двокомпонентний бозонний гамільтоніан типу Габбарда передбачає існування доволі реалістичної фазової діаграми, що містить два λ -переходи [2] і область розшарування [3]. Окрім цього, комп'ютерні симуляції з двосортними бозе-системами [4] підтверджують основні результати найпростіших наближень теоретичних розрахунків. У межах таких простих моделей вдається описати низку квантових фазових переходів. Останнім часом активізувалося вивчення бозе-систем із використанням так званих ефективних теоретико-польових методів (див., наприклад, [5] і посилання там). Нещодавно цим методом була досліджена модель ϕ^4 двокомпонентного бозонного нерелятивістського поля в так званому однопотловому наближенні [6, 7].

У цій статті зроблено вихід за межі так званого наближення хаотичних фаз (RPA) для матриці густини двокомпонентної бозе-рідини ефективним урахуванням вищих кореляцій і розрахунком на її основі структурних факторів і функцій розподілу на прикладі розчину атомів ${}^6\text{He}$ в рідкому ${}^4\text{He}$.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянуто двосортну систему $N = N_A + N_B$ безспінових частинок в об'ємі V з попарною взаємодією й повною матрицею густини

$$R_{N_A N_B}(x'|x) = R_{N_A}^0(x'_A|x_A)R_{N_B}^0(x'_B|x_B)P(x'|x), \quad (2.1)$$

де $x = (x_A, x_B) = (\mathbf{r}_1^A, \dots, \mathbf{r}_{N_A}^A, \mathbf{r}_1^B, \dots, \mathbf{r}_{N_B}^B)$ — сукупність індивідуальних координат частинок, і ефективно, через матриці ідеального бозе-газу $R_{N_a}^0(x'_a|x_a)$ (індекс $a = A, B$ фіксує сорт атомів) ураховано внесок вищих порівняно з парними кореляцій. У цьому випадку взаємодія врахована лише в RPA-наближенні:

$$P(x'|x) = P_0 P_A(\rho'_A|\rho_A) P_B(\rho'_B|\rho_B) \times P_{AB}(\rho'_A, \rho'_B|\rho_A, \rho_B), \quad (2.2)$$

$$\ln P_A(\rho'_A|\rho_A) = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\lambda_{AA}(k)(\rho_{\mathbf{k}}'^A \rho_{-\mathbf{k}}'^A + \rho_{\mathbf{k}}^A \rho_{-\mathbf{k}}^A) + \tilde{\lambda}_{AA}(k)(\rho_{\mathbf{k}}'^A \rho_{-\mathbf{k}}^A + \rho_{\mathbf{k}}^A \rho_{-\mathbf{k}}'^A)],$$

$$P_B(\rho'_B|\rho_B) = P_A(\rho'_A|\rho_A)|_{A \rightarrow B},$$

$$\ln P_{AB}(\rho'_A, \rho'_B|\rho_A, \rho_B) = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\lambda_{AB}(k)(\rho_{\mathbf{k}}'^A \rho_{-\mathbf{k}}'^B + \rho_{\mathbf{k}}'^B \rho_{-\mathbf{k}}'^A + \rho_{\mathbf{k}}^A \rho_{-\mathbf{k}}^B + \rho_{\mathbf{k}}^B \rho_{-\mathbf{k}}^A) + \tilde{\lambda}_{AB}(k)(\rho_{\mathbf{k}}'^A \rho_{-\mathbf{k}}^B + \rho_{\mathbf{k}}^B \rho_{-\mathbf{k}}'^A + \rho_{\mathbf{k}}^A \rho_{-\mathbf{k}}'^B + \rho_{\mathbf{k}}'^B \rho_{-\mathbf{k}}^A)],$$

де

$$\rho_{\mathbf{k}}^a = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{1 \leq j \leq N_a} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j^a}, \quad a = A, B, \quad (2.3)$$

явні вирази функцій $\lambda_{ab}(k)$, $\tilde{\lambda}_{ab}(k)$, P_0 подані в додатку. В кінцевих виразах підсумовування за хвильовими векторами \mathbf{k} замінюються інтегруванням, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int d\mathbf{k}/(2\pi)^3$.

Фактично вираз (2.1) є двосортним аналогом формули Пенроуза [8], який додатково був переписаний, так як це зроблено в статті [9]. Цей трюк дозволяє поєднати в одному виразі, з одного боку, правильну низькотемпературну поведінку термодинамічних величин, з іншого — передбачає існування фазового переходу – бозе-конденсації ідеального газу, трохи “здеформованого” взаємодією. Зрозуміло, що в такому підході не можна сподіватись отримати “правильних” асимптотик поведінки термодинамічних величин в околі критичних точок. Очевидно, що для обчислення критичних індексів потрібно будувати теорію в межах ренорм-групового підходу. Побудова з перших принципів статистичної суми багатобозонної системи у вигляді функціонального інтеграла за власними значеннями оператора знищення числа частинок, який використовується в методі ренорм-групи, подано в [10, 11], а критичні індекси розраховані в [12].

III. РОЗРАХУНОК СТРУКТУРНИХ ФАКТОРІВ

За означенням, статистичне усереднення в координатному представленні зводиться до розрахунку такого інтеграла:

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z} \int dx [(\dots) R_{N_A N_B}(x'|x)]_{x' \rightarrow x}, \quad (3.4)$$

де $Z = \int dx R_{N_A N_B}(x|x)$ — статистична сума. В цьому підході всі термодинамічні величини виражатимуться

через n -частинкові структурні фактори, тому попередньо розрахуємо їх. При наближених обчисленнях цей шлях є ефективнішим, ніж прямий розрахунок статистичної суми. Окрім того, опосередкована заміна прямого потенціалу взаємодії парним структурним фактором надає можливість порівнювати результати розрахунку з експериментальними даними. Для складних систем, що містять частинки кількох сортів, важливе значення мають так звані змішані парні фактори, за допомогою яких можна аналізувати умови стійкості системи щодо розшарування. Розгляд, поданий нижче, буде використаний для розрахунку s -частинкових матриць густини і був частково поданий у роботі [13], де розраховані термодинамічні функції рідкого ⁴He в наближенні двох сум за хвильовим вектором і що важливо, показана узгодженість теорії з експериментом.

Отже, усереднення (3.4) величин типу $\langle \rho_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n}^{a_n} \rangle$ з використанням (2.1) зводиться до такого розрахунку:

$$\langle \rho_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n}^{a_n} \rangle = \frac{1}{\langle P(x|x) \rangle_0} \langle \rho_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n}^{a_n} P(x|x) \rangle_0,$$

де ламані дужки з “нуликом” позначають усереднення за станами ідеальних підсистем. Подальший розгляд, враховуючи гауссовість функції $P(x|x)$ в $\rho_{\mathbf{k}}^a$ -зображенні та наступний перехід до інтегрування за спряженими полями $\varphi_{\mathbf{k}}^a$, тривіалізує її усереднення і тому не потребує додаткових пояснень:

$$\begin{aligned} \langle P(x|x) \rangle_0 &\sim \int d\varphi^A d\varphi^B \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{a,b=A,B} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \Lambda_{ab}^{-1}(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}^a \varphi_{-\mathbf{k}}^b \right\} \left\langle \exp \left\{ i \sum_{a=A,B} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varphi_{-\mathbf{k}}^a \rho_{\mathbf{k}}^a \right\} \right\rangle_0 \\ &\int d\varphi^a \{ \dots \} \equiv \prod'_{\mathbf{q} \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} d\text{Re} \varphi_{\mathbf{q}}^a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} d\text{Im} \varphi_{\mathbf{q}}^a \{ \dots \}, \quad a = A, B \end{aligned}$$

(штрих означає, що хвильовий вектор набуває значень тільки з півпростору, наприклад $k_z > 0$).

Далі:

$$\ln \left\langle \exp \left\{ i \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varphi_{-\mathbf{k}}^a \rho_{\mathbf{k}}^a \right\} \right\rangle_0 = \sum_{n \geq 2} \frac{i^n}{n!} \frac{1}{N_a^{n/2-1}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n = 0}} \dots \sum_{\mathbf{k}_n \neq 0} M_a^{(n)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \varphi_{\mathbf{k}_1}^a \dots \varphi_{\mathbf{k}_n}^a,$$

$$M_a^{(2)}(\mathbf{k}) = S_a^0(\mathbf{k}),$$

$$M_a^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = S_{3a}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3),$$

$$M_a^{(4)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) = S_{4a}^0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) - S_a^0(k_1) S_a^0(k_3) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)$$

$$- S_a^0(k_1) S_a^0(k_4) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3) \delta(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) - S_a^0(k_1) S_a^0(k_2) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) \delta(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3),$$

...

де величини $M_a^{(n)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n)$ є кумулянтами відповідного порядку, $S_a^0(k)$ – парний, а $S_{na}^0(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n)$ – n -частинковий структурний фактор ідеального бозе-газу ($n \geq 3$) і для зручності введено позначення

$$\Lambda_{ab}(k) = \lambda_{ab}(k) + \tilde{\lambda}_{ab}(k). \quad (3.5)$$

Остаточно обчислення можна звести до такого параметричного диференціювання:

$$\langle \rho_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n}^{a_n} \rangle = \overline{\left(-i\partial/\partial\varphi_{-\mathbf{k}_1}^{a_1} + i\Lambda_{a_1 b_1}^{-1}(k_1)\varphi_{\mathbf{k}_1}^{b_1} \right) \dots \left(-i\partial/\partial\varphi_{-\mathbf{k}_n}^{a_n} + i\Lambda_{a_n b_n}^{-1}(k_n)\varphi_{\mathbf{k}_n}^{b_n} \right)}, \quad (3.6)$$

(тут знак суми за німими індексами b_1, \dots, b_n опущений)

$$\begin{aligned} \overline{(\dots)} &= \langle (\dots)e^{U(\varphi)} \rangle_G, \\ U(\varphi) &= \sum_{a=A,B} \sum_{n \geq 3} \frac{i^n}{n!} \frac{1}{N_a^{n/2-1}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n = 0}} \dots \sum_{\mathbf{k}_n \neq 0} \\ &\times M_a^{(n)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \varphi_{\mathbf{k}_1}^a \dots \varphi_{\mathbf{k}_n}^a, \end{aligned} \quad (3.7)$$

де $\langle \dots \rangle_G$ – позначає усереднення з гауссовим розподілом:

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{a,b=A,B} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\Lambda_{ab}^{-1}(k) + \delta_{ab} S_a^0(k)) \varphi_{\mathbf{k}}^a \varphi_{-\mathbf{k}}^b \right\},$$

$\Lambda_{ab}^{-1}(k)$ – елементи оберненої до $\Lambda_{ab}(k)$ матриці. Формула (3.6) дозволяє переписати вирази для структурних функцій через ряд за кореляторами $\overline{\varphi_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \dots \varphi_{\mathbf{k}_n}^{a_n}}$. Зокрема парні структурні фактори

$$\langle \rho_{\mathbf{k}}^a \rho_{-\mathbf{k}}^b \rangle = \Lambda_{ab}^{-1}(k) - \sum_{c,d=A,B} \Lambda_{ac}^{-1}(k) \overline{\varphi_{\mathbf{k}}^c \varphi_{-\mathbf{k}}^d} \Lambda_{db}^{-1}(k), \quad (3.8)$$

повністю визначаються відповідними кореляторами:

$$\overline{\varphi_{\mathbf{k}}^a \varphi_{-\mathbf{k}}^b} = \tilde{\Lambda}_{ab}(k), \quad (3.9)$$

$$\tilde{\Lambda}_{ab}^{-1}(k) = \Lambda_{ab}^{-1}(k) + \delta_{ab} S_a^0(k) - \Sigma_{ab}(k). \quad (3.10)$$

Можна показати, що перше наближення для величин $\Sigma_{ab}(k)$ є таким:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ab}(k) &= \delta_{ab} \sum_{m \geq 2} \sum_{0 \leq l \leq \lfloor \frac{m}{2} \rfloor} \frac{(-)^m}{2^l l! (m-2l)!} \frac{1}{N_a^{m/2}} \sum_{a'=A,B} \frac{1}{N_{a'}^{m/2-1}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l \neq 0} \\ &\times \sum_{\substack{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l} \neq 0 \\ \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_{m-2l} = 0}} M_a^{(m+2)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l, -\mathbf{k}_l, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l}) \\ &\times \tilde{\Lambda}_{aa}(k_1) \dots \tilde{\Lambda}_{aa}(k_l) \tilde{\Lambda}_{aa'}(q_1) \dots \tilde{\Lambda}_{aa'}(q_{m-2l}) M_{a'}^{(m-2l)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l}) \\ &+ \sum_{m, m' \geq 3} \sum_{0 \leq l \leq \lfloor \frac{m-1}{2} \rfloor} \sum_{\substack{0 \leq l' \leq \lfloor \frac{m'-1}{2} \rfloor \\ m-2l = m'-2l'}} \frac{(-)^{(m+m')/2}}{2^{l+l'} l! l'! (m-2l-1)!} \frac{1}{N_a^{m/2-1}} \frac{1}{N_b^{m'/2-1}} \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l \neq 0} \sum_{\mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_{l'} \neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l-1} \neq 0 \\ \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_{m-2l-1} = 0}} \tilde{\Lambda}_{aa}(k_1) \dots \tilde{\Lambda}_{aa}(k_l) \\ &\times M_a^{(m)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l, -\mathbf{k}_l, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l-1}) \tilde{\Lambda}_{ab}(q_1) \dots \tilde{\Lambda}_{ab}(q_{m-2l-1}) \\ &\times M_b^{(m')}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{m-2l-1}, \mathbf{k}'_1, -\mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_{l'}, -\mathbf{k}'_{l'}, -\mathbf{k}) \tilde{\Lambda}_{bb}(k'_1) \dots \tilde{\Lambda}_{bb}(k'_{l'}), \end{aligned} \quad (3.11)$$

(при обчисленні цього виразу для матриці $\tilde{\Lambda}_{ab}(k)$ слід використати її нульове наближення $[\Lambda^{-1}(k) + S_0(k)]_{ab}^{-1}$). Очевидно, що точне врахування всіх членів ряду ускладнене, і для конкретних розрахунків потрібно обмежуватися лише кількома першими доданками. Так будується теорія збурень, де вираз кожного наступного порядку відрізняється від попереднього додатковим підсумовуванням за хвильовим вектором, що для модельних систем є розкладом за характерним для них малим параметром. Може виникнути питання взагалі про необхідність урахування ряду (3.11), оскільки вихідна матриця густини розрахована в RPA-наближенні. Щодо цього, то таке врахування має сенс лише для відмінних від нуля температур, коли вільночастинковий множник матриці густини не переходить у фактор $1/V^{N_A+N_B}$.

Неважко отримати головні внески і для вищих φ -кореляторів, зокрема

$$\overline{\varphi_{\mathbf{k}_1}^{a_1} \varphi_{\mathbf{k}_2}^{a_2} \varphi_{\mathbf{k}_3}^{a_3}} = \sum_{b=A,B} \frac{i^3}{\sqrt{N_b}} M_b^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \times \tilde{\Lambda}_{ba_1}(k_1) \tilde{\Lambda}_{ba_2}(k_2) \tilde{\Lambda}_{ba_3}(k_3) + \dots, \quad (3.12)$$

Формально запропонований варіант розрахунку структурних факторів можна використати для класичних систем. При обчисленні конфігураційного інтеграла для системи з парною взаємодією кумулянти $M_a^{(n)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n)$ переходять у дельта-символи, а в кожному члені ряду (3.7) підсумовування виконується за сукупністю хвильових векторів, що утворюють незвідну групу [14]. У цьому випадку вираз для величин (3.11) можна записати в компактній формі (тут варто відзначити, що при переході до класичної межі живляють тільки ті доданки, які містять M -функції одного порядку за індексом n)

$$\Sigma_{ab}(k) = -\sqrt{\rho_a \rho_b} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ e^{-\Lambda_{ab}(r)} - 1 + \Lambda_{ab}(r) \right\},$$

$$\Lambda_{ab}(r) = \frac{1}{\sqrt{N_a N_b}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Lambda_{ab}(k), \quad \rho_a = \frac{N_a}{V},$$

наприклад, для моделі класичного електронного газу функції $\Lambda_{ab}(k)$ є екранованими потенціалами. Остаточно наводимо (використовуючи символічний матричний запис) статистичну суму в прийнятому наближенні

$$Z = P_0 Z_A^0 Z_B^0 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{Sp} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln [1 + \Lambda(k) \times (S_0(k) - \Sigma(k))] + \dots \right\}. \quad (3.13)$$

IV. s -ЧАСТИНКОВІ МАТРИЦІ ГУСТИНИ

За означенням, s -частинкові матриці густини рівні

$$F_{s_A s_B}(x'_{s_A} x'_{s_B} | x_{s_A} x_{s_B}) = \frac{1}{Z} \prod_{a=A,B} \left\{ V^{s_a} \int d\mathbf{r}_{s_a+1}^a \dots d\mathbf{r}_{N_a}^a \right\} \times R_{N_A N_B}(x'|x) \Big|_{\mathbf{r}'_{s_a+1}^a, \dots \rightarrow \mathbf{r}_{s_a+1}^a, \dots} \quad (4.14)$$

(тут x_{s_a} — сукупність координат s_a частинок сорту a). Основна ідея подальшого розрахунку полягає в переході від інтегрування за індивідуальними координатами сукупності $(N_A - s_A)$, $(N_B - s_B)$ частинок до інтегрування за колективними координатами, тобто за величинами, означеними формулою (2.3), у яких кількість частинок N_a замінена на $N_a - s_a$. Інтегрування в просторі колективних змінних відбувається з вагою функцією, яка в прийнятому наближенні має гауссівський характер. Відповідний перехід у P -факторі повної матриці густини (2.2) є елементарним, а для вільночастинкових множників використаємо такий розклад [15]:

$$R_N^0(x'|x) \Big|_{\mathbf{r}'_{s+1}, \dots \rightarrow \mathbf{r}_{s+1}, \dots} = \frac{1}{N!} \sum_{1 \leq j_1 \neq \dots \neq j_s \leq s+1 \leq j_{s+1} \neq \dots \neq j_N \leq N} \{ K_{1'j_1} \dots K_{s'j_s} K_{s+1j_{s+1}} \dots K_{Nj_N} + \dots \},$$

де в кожному наступному доданку “зміщується” все більша кількість штрихованих і нештрихованих змінних. Далі зручно знову переписати тепер уже функцію $P(x'_{s_A}, x_{N-s}|x)$ через функціональний інтеграл за полями $\varphi_{\mathbf{k}}^a$ і почергово виконати інтегрування за колективними змінними сукупності $N_A - s_A + N_B - s_B$ частинок, а після того в φ -просторі. Остаточно отримуємо такий формальний вираз s -частинкових матриць:

$$F_{s_A s_B}(x'_{s_A} x'_{s_B} | x_{s_A} x_{s_B}) = P_0 P_A(\xi'_A | \xi_A) P_B(\xi'_B | \xi_B) P_{AB}(\xi'_A, \xi'_B | \xi_A, \xi_B) \times \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{a=A,B} \frac{s_a}{N_a} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \tilde{\Lambda}_{aa}(k) + \frac{1}{8} \sum_{a,b=A,B} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \Lambda_{ab}(k) \eta_{-\mathbf{k}}^a \eta_{\mathbf{k}}^b \right\} \times |Q_A(|\mathbf{r}_i^A - \mathbf{r}_j^A|)|_+^{s_A} |Q_B(|\mathbf{r}_i^B - \mathbf{r}_j^B|)|_+^{s_B} \exp \left\{ -\frac{1}{8} \sum_{a,b=A,B} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \tilde{\Lambda}_{ab}(k) \eta_{-\mathbf{k}}^a \eta_{\mathbf{k}}^b + \dots \right\}, \quad (4.15)$$

де для зручності введено позначення

$$\xi_{\mathbf{k}}^a = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{1 \leq j \leq s_a} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j^a}, \quad \eta_{\mathbf{k}}^a = \xi_{\mathbf{k}}^{\prime a} + \xi_{\mathbf{k}}^a,$$

$|\dots|_+^{s_a}$ — перманент розміром $s_a \times s_a$, і означено оператори

$$Q_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) + \int_V d\mathbf{r}_1 K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|) I_a(\mathbf{r}_1) K_a(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|) \\ + \int_V d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|) I_a(\mathbf{r}_1) K_a(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) I_a(\mathbf{r}_2) K_a(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}|) + \dots,$$

$$I_a(\mathbf{r}) = \exp' \left\{ \frac{2}{\sqrt{N_a}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \eta_{\mathbf{k}}^a} \right\},$$

штрих позначає той факт, що розклад у ряд операторної експоненти відбувається за незвідними групами хвильових векторів.

Якщо обмежитися лише першим доданком у показнику останньої експоненти формули (4.15), то оператор $I_a(\mathbf{r})$ можна розглядати як такий, що не “діє на себе”. В цьому випадку легко проглядається структура ряду. Для простоти продемонструймо це на прикладі одночастинкової матриці

$$F_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = \exp \left\{ -\frac{1}{4N_a} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\lambda_{aa}(k) - \tilde{\lambda}_{aa}(k) - \tilde{\Lambda}_{aa}(k)] (1 - e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})}) + \dots \right\} \\ \times \left\{ K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) + \int_V d\mathbf{r}_1 K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|) e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|)} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|)} K_a(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|) \right. \\ \left. + \int_V d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 K_a(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|) e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1|)} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|)} K_a(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{-\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)} \right. \\ \left. \times K_a(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}|) e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|)} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\Lambda}_{aa}(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}|)} + \dots \right\}. \quad (4.16)$$

Вирази для величин $K_a(r)$ формально збігаються з відповідними для випадку ідеального газу, але містять перенормовані активності.

$$K_a(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-\beta(\varepsilon_a(\mathbf{q}) - \mu_a)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \\ \mu_a = \mu_a^0 + \frac{1}{2\beta N_a} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \tilde{\Lambda}_{aa}(k) \frac{\partial}{\partial \rho_a} \rho_a [S_a^0(k) - 1],$$

μ_a^0 — хімічні потенціали ідеальних газів, а доданок із сумою є незначущим членом розкладу передекспонентного множника в ряд за степенями s_a/N_a (деталі розрахунку можна знайти в роботі [15], де отримано однокомпонентний аналог формули (4.16), для $\Sigma(k) = 0$). Хоча й нескладно відтворити кожен наступний член ряду в фігурних дужках формули (4.16), точно врахувати його неможливо. За відсутності взаємодії вираз згортається в прогресію. З цього випли-

ває, що для того, щоб описати фазовий перехід, важливо враховувати (з тою чи іншою точністю) внесок кожного доданка. Найпростіша оцінка зверху приводить до прогресії з новими функціями $\tilde{K}_a(r)$. У цьому випадку несуттєво змінюється й температура бозеконденсації. Тепер очевидна структура подібних рядів для матриць густини вищих порядків, хоча конкретний їх розрахунок не простий.

V. ОЦІНКА ВІДНОСНОЇ КІЛЬКОСТІ КОНДЕНСАТУ ДВОКОМПОНЕНТНОЇ БОЗЕ-РІДИНИ

Одержавши явні вирази одночастинкових матриць, неважко провести розрахунок конденсатної фракції як для кожної з компонент, так і для сумарного відносного числа атомів з нульовим імпульсом. За означенням, однокомпонентний внесок в бозе-конденсат:

$$\frac{N_a^0(T)}{N_a} = F_a(r)|_{r \rightarrow \infty} = n_a^0(T) \exp \left\{ -\frac{1}{4N_a} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\lambda_{aa}(\mathbf{k}) - \tilde{\lambda}_{aa}(\mathbf{k}) - \tilde{\Lambda}_{aa}(\mathbf{k})] \right\}, \quad (5.17)$$

($n_a^0(T)$ — відповідний внесок ідеального бозе-газу). Для спрощення обчислень знехтуємо взаємодією в післяекспонентному ряді для одностинкової матриці (4.16). При температурі $T = 0$ формула (5.17) відтворює результат роботи [16].

Для визначеності розрахуємо вплив домішки ${}^6\text{He}$ в рідкому ${}^4\text{He}$. При ненульовій температурі умови стійкості такої системи вперше вивчали в роботі [17]. Окрім можливої експериментальної реалізації [18], ця суміш цікава ще й тим, що в адиабатичному наближенні для потенціалів міжатомної взаємодії (в цьому випадку вони є однаковими) нижня гілка спектра в довгохвильовій ділянці вже не є лінійною за хвильовим вектором і система при низьких температурах перебуває на межі розшарування. Розрахунок для моделі твердих сфер у вищих наближеннях показує суттєву залежність умов стійкості від співвідношення між параметрами взаємодії і масами частинок [19].

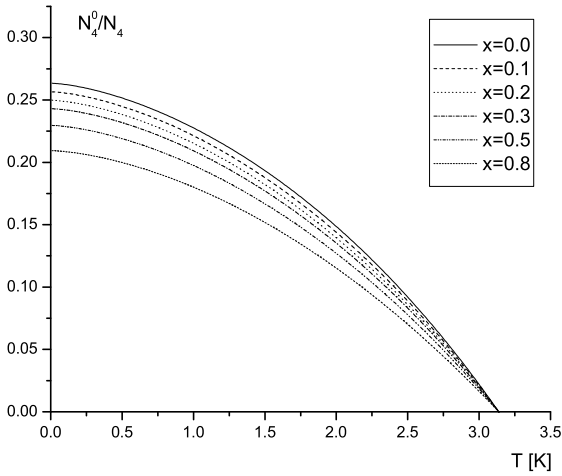


Рис. 1. Температурна залежність конденсатної фракції рідкого ${}^4\text{He}$ в суміші для різних концентрацій x домішки ${}^6\text{He}$.

Чисельні розрахунки проводили для рівноважної густини $\rho = 0.02185 \text{ \AA}^{-3}$ з використанням експери-

ментально виміряного структурного фактора гелію-4 [20], замість потенціалів взаємодії, і в нульовому наближенні теорії ($\Sigma_{ab}(\mathbf{k}) = 0$). Результати подані на рисунках (N_0/N — відносна кількість конденсату, а N_4^0/N_4 — відповідно внесок атомів ${}^4\text{He}$ при різних температурах і для кількох конкретних концентрацій x гелію-6 в суміші).

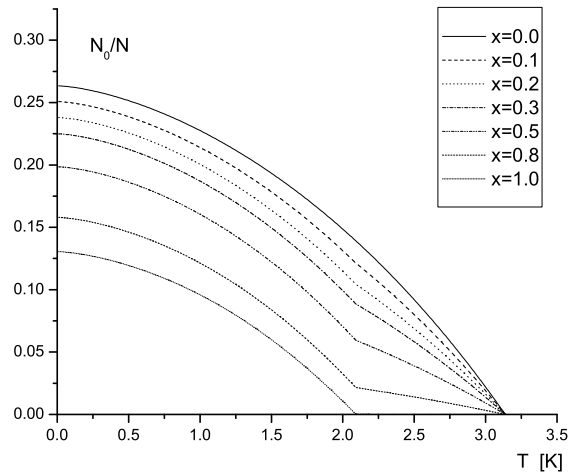


Рис. 2. Температурна залежність повного відносного числа атомів в бозе-конденсаті суміші ${}^4\text{He}$ – ${}^6\text{He}$ для різних концентрацій x домішки ${}^6\text{He}$.

Як і очікувалося, внесення домішки приводить до часткового розмиття бозе-конденсату. Отриманий результат якісно правильно відтворює поведінку кривої конденсатної фракції, хоча значення відносної кількості атомів, що перебувають на найнижчому енергетичному рівні, є перебільшене. Враховуючи результати розрахунків для однокомпонентної бозе-рідини [21], слід сподіватися, що наступне наближення для матриці густини суттєво зменшить це число.

Автори висловлюють подяку Романові Притулі за виконання чисельних розрахунків та обговорення результатів роботи.

VI. ДОДАТОК

У додатку подаємо вирази зі статті [1] для коефіцієнтних функцій повної матриці густини.

$$P_0 = e^{-\beta E_0} \prod_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ \frac{E_1(\mathbf{k}) E_2(\mathbf{k}) (1 - e^{-2\beta \varepsilon_A(\mathbf{k})}) (1 - e^{-2\beta \varepsilon_B(\mathbf{k})})}{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k}) (1 - e^{-2\beta E_1(\mathbf{k})}) (1 - e^{-2\beta E_2(\mathbf{k})})} \right\}^{1/2}.$$

Енергія основного стану

$$E_0 = \frac{N_A N_B}{V} \nu_{AB}(0) + \sum_{a=A,B} \frac{N_a(N_a - 1)}{2V} \nu_a(0) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ \sum_{j=1,2} E_j(\mathbf{k}) - \sum_{a=A,B} \left[\frac{N_a}{V} \nu_a(\mathbf{k}) + \varepsilon_a(\mathbf{k}) \right] \right\},$$

дві гілки спектра

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(E_A^2(\mathbf{k}) + E_B^2(\mathbf{k}) \pm \sqrt{[E_A^2(\mathbf{k}) - E_B^2(\mathbf{k})]^2 + 16\rho_A \rho_B \varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k}) \nu_{AB}^2(\mathbf{k})} \right)^{1/2},$$

де $\varepsilon_a(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_a}$; $\nu_A(\mathbf{k})$, $\nu_B(\mathbf{k})$, $\nu_{AB}(\mathbf{k})$ — фур'є-образи відповідних потенціалів міжчастинкової взаємодії. $E_a^2(\mathbf{k}) = \varepsilon_a^2 + 2\rho_a \nu_a(\mathbf{k}) \varepsilon_a$; $E_A(\mathbf{k})$, $E_B(\mathbf{k})$ — спектри теорії Боголюбова. Коefіцієнти квадратичної форми показника експоненти P -фактора взаємодії у формулі (2.1) основного тексту:

$$\lambda_{AA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[\frac{E_1(\mathbf{k})}{\varepsilon_A(\mathbf{k})} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \coth[\beta E_1(\mathbf{k})] - 2 \coth[\beta \varepsilon_A(\mathbf{k})] + \frac{E_2(\mathbf{k})}{\varepsilon_A(\mathbf{k})} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \coth[\beta E_2(\mathbf{k})] \right],$$

$$\lambda_{BB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[\frac{E_2(\mathbf{k})}{\varepsilon_B(\mathbf{k})} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \coth[\beta E_2(\mathbf{k})] - 2 \coth[\beta \varepsilon_B(\mathbf{k})] + \frac{E_1(\mathbf{k})}{\varepsilon_B(\mathbf{k})} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \coth[\beta E_1(\mathbf{k})] \right],$$

$$\lambda_{AB}(\mathbf{k}) = \lambda_{BA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \left[\frac{E_1(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k})}} \coth[\beta E_1(\mathbf{k})] - \frac{E_2(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k})}} \coth[\beta E_2(\mathbf{k})] \right],$$

$$\tilde{\lambda}_{AA}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \left[\frac{E_1(\mathbf{k})}{\varepsilon_A(\mathbf{k})} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \frac{1}{\sinh[\beta E_1(\mathbf{k})]} - \frac{2}{\sinh[\beta \varepsilon_A(\mathbf{k})]} + \frac{E_2(\mathbf{k})}{\varepsilon_A(\mathbf{k})} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \frac{1}{\sinh[\beta E_2(\mathbf{k})]} \right],$$

$$\tilde{\lambda}_{BB}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \left[\frac{E_2(\mathbf{k})}{\varepsilon_B(\mathbf{k})} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \frac{1}{\sinh[\beta E_2(\mathbf{k})]} - \frac{2}{\sinh[\beta \varepsilon_B(\mathbf{k})]} + \frac{E_1(\mathbf{k})}{\varepsilon_B(\mathbf{k})} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \right) \frac{1}{\sinh[\beta E_1(\mathbf{k})]} \right],$$

$$\tilde{\lambda}_{AB}(\mathbf{k}) = \tilde{\lambda}_{BA}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{\sqrt{1 + \Delta_k^2}} \left[\frac{E_1(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k})}} \frac{1}{\sinh[\beta E_1(\mathbf{k})]} - \frac{E_2(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k})}} \frac{1}{\sinh[\beta E_2(\mathbf{k})]} \right],$$

де для спрощення запису використано чергове позначення:

$$\Delta_k = 4\sqrt{\varepsilon_A(\mathbf{k}) \varepsilon_B(\mathbf{k}) \rho_A \rho_B \nu_{AB}(\mathbf{k}) / [E_A^2(\mathbf{k}) - E_B^2(\mathbf{k})]}.$$

- [1] I. O. Вакарчук, В. С. Пастухов, Журн. фіз. досл. **12**, 1001 (2008).
 [2] J. Lauwers, A. Verbeure, Physica A **293**, 233 (2001).
 [3] M. Boninsegni, Phys. Rev. Lett. **87**, 087201 (2001).
 [4] Hong Ma, Tau Pang, Phys. Lett. A **351**, 92 (2006).
 [5] J. O. Andersen, Rev. Mod. Phys. **76**, 599 (2004).
 [6] M. B. Pinto, R. O. Ramos, F. F. de Souza Cruz, Phys. Rev. A **74**, 033618 (2006).
 [7] R. O. Ramos, M. B. Pinto, J. Phys. A **39**, 6687 (2006).
 [8] O. Penrose, Philos. Mag. **42**, 1373 (1951).
 [9] I. O. Vakarchuk, J. Phys. Stud. **8**, 223 (2004).
 [10] J. S. Langer, Phys. Rev. **167**, 183 (1968).
 [11] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **35**, 76 (1978).
 [12] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **36**, 122 (1978).
 [13] I. O. Вакарчук, Р. О. Притула, А. А. Ровенчак, Журн. фіз. досл. **3**, 11 (2007).
 [14] И. Р. Юхновский, Журн. эксп. теор. физ. **34**, 379 (1958).
 [15] I. A. Vakarchuk, Theor. Math. Phys. **154**, 6 (2008).
 [16] Г. О. Балабанян, Теор. мат. физ. **71**, 114 (1987).
 [17] К. Е. Куртен, М. Л. Ристиг, Phys. Rev. B **37**, 3359 (1988).
 [18] L. Guttman, J. R. Arnold, Phys. Rev. **92**, 547 (1953).
 [19] H. Shi, W.-M. Zheng, S.-T. Chui, Phys. Rev. A **61**, 063613 (2000).
 [20] H. N. Robkoff, Phys. Rev. B **24**, 159 (1981).
 [21] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **65**, 285 (1985); **82**, 438 (1990).

BOSE-CONDENSATE IN TWO-COMPONENT BOSE-LIQUID

I. O. Vakarchuk, V. S. Pastukhov

*Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,
 12 Drahomanov St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The explicit expressions for reduced s -particle density matrices are evaluated using the density matrix of a two-component Bose-liquid calculated earlier [I. O. Vakarchuk, V. S. Pastukhov, J. Phys. Stud. **12**, 1001 (2008)]. The impurity influence on the Bose–Einstein condensation phenomenon in liquid helium is studied. Temperature dependence of condensation fraction for a mixture with ^4He – ^6He parameters at different concentrations is carried out numerically using liquid helium-4 structure factor measurements.