ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 13, № 3 (2009) 3004(28 с.)

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 13, No. 3 (2009) 3004(28 p.)

ПОВНА МАТРИЦЯ ГУСТИНИ БАГАТОБОЗОННОЇ СИСТЕМИ З УРАХУВАННЯМ ТРИ- ТА ЧОТИРИЧАСТИНКОВИХ ПРЯМИХ КОРЕЛЯЦІЙ

І. О. Вакарчук, О. І. Григорчак
Кафедра теоретичної фізики
Львівського національного університету імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна

(Отримано 25 червня 2009 р.)

Виходячи з перших принципів, за допомогою запропонованого в цій статті методу розрахунку знайдено повну матрицю густини взаємодіючих бозе-частинок у координатному зображенні для широкого інтервалу температур із урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій. У границі низьких температур знайдений вираз для матриці густини переходить у вже відомий [И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновський, Теор. мат. физ **40**, 100 (1979)] і має вигляд добутку хвильових функцій основного стану з урахуванням три- та чотиричастинкових прямих кореляцій на фактор $e^{-E_0/T}$, де T — температура системи, E_0 — енерґія основного стану в наближенні "двох сум за хвильовим вектором". При високих температурах у квазікласичній межі отриманий вираз дорівнює добутку статистичної суми класичного ідеального газу на больцманівський фактор. Результати роботи можна застосувати для розрахунку термодинамічних та структурних функцій рідкого ^{4}He з метою кількісної перевірки теоретичних й експериментальних даних, особливо в ділянці λ-переходу.

Ключові слова: рідкий ^{4}He, матриця густини.

PACS number(s): 05.30.Jp, 67.20.+k, 67.40.−w, 67.40.Db, 67.40.Kh

I. ВСТУП

Дослідження квантових рідин і їхніх властивостей має історію, яка починається з праці Сат'єндранатга Бозе "Закон Планка та гіпотеза світлових квантів" 1924 р. [1]. У тому ж році Альберт Айнштайн, рецензуючи цю роботу, запозичив розроблений у ній метод і за його допомогою отримав розподіл квантового ідеального газу частинок із ненульовою масою спокою [2], а в наступній праці вказав на явище, яке згодом назвали "Бозе–Айнштайнівська конденсація" [3], суть якої полягала в нагромадженні частинок у стані з нульовим імпульсом.

Одним із перших об'єктів вивчення в цій галузі був рідкий гелій-4, у температурній поведінці теплоємності якого Кеєзом виявив аномалії ще в 1932 [4]. Форма кривої теплоємності нагадувала грецьку букву λ, а сама аномалія отримала назву "λ-переходу". Спочатку вважали, що λ-подібний хід теплоємності рідкого гелію-4 в околі точки λ-переходу при переході в надплинний стан має характер логарифмічної розбіжності [5–8]. Понад півстоліття це подавали як експериментально доведений факт, який увійшов у всі підручники й монографії. Однак експерименти [9, 10] виявили відсутність указаної розбіжності. Теорія, заснована на методі ренормалізаційної групи [11], давала не логарифмічну поведінку теплоємності в околі λ-точки, а степеневу $\sim (|T-T_\lambda|/T_\lambda)^{-\alpha}$, де T_λ — критична температура, α — критичний показник теплоємності C_p, причому $\alpha < 0$. Числове значення α визначали як у теоретичних працях [12, 13], так і в експериментальних [9, 14]. У праці [9] отримано значення критичного показника теплоємності $\alpha = -0.01285 \pm 0.00038$, а в наступній [10] ці ж автори вказують, що результат має бути дещо іншим, а саме: $\alpha = -0.01056$. Пізніші теоретичні дослідження, базуючись на процедурі пересумовування розбіжних рядів теорії збурень, показали, що в точці λ-переходу теплоємність має скінченне значення.

Останній факт підтверджує припущення, яке ще в 1938 р. висловив Лондон [15, 16] про те, що явище "λ-переходу" пов'язане з Бозе–Айнштайнівською конденсацією, яка здеформована міжатомною взаємодією. У тому ж році Капіца [17] відкрив явище надплинності рідкого гелію-4, феноменологічну теорію якого запропонував Ландау [18]. Аналізуючи роботу Ландау, Фейнман указав [8], що в цьому підході не використовується той факт, якою статистикою, Бозе чи Фермі, описується досліджувана система багатьох частинок, а тому запропонована теорія не може бути коректною для опису бозе-рідини.

Після цього було зроблено ще багато значних кроків у дослідженні квантових рідин, серед яких потрібно особливо виділити дві ідеї, які заклали основи нового витка у вивченні квантових рідин і, зокрема, дали поштовх дослідженням, проведеним у цій роботі: оригінальний метод наближеного вторинного квантування Боголюбова [19], а також ідею колективних змінних Боголюбова й Зубарєва [20]. Боголюбов уперше з перших принципів розрахував спектр елементарних збуджень слабонеідеального газу [19], використавши при цьому припущення, що слабка взаємодія тільки незначною мірою змінює картину конденсації Бозе–Айнштайна в ідеальному бозе-газі, а тому кількість частинок у конденсаті при низьких температурах можна вважати макроскопічною. Таке припущення дало змогу значно спростити гамільтоніан системи й після його діагоналізації в першому наближенні отримати енерґетичний спектр квазічастинок, що описуються статистикою Бозе–Айнштайна. Хоча в моделі Боголюбова міжатомна взаємодія повинна бути слабкою, однак одержані результати виявилися коректними і для рідкого гелію-4 в границі низьких температур. Подальший розвиток ідея Боголюбова знайшла в роботі Гуґенгольца й Пайнса [21]. Своєю чергою Бєляєв застосував для опису багатобозонної системи розвинутий у теорії поля формалізм [22], що дало змогу йому в наступній роботі [23] з отриманого виразу функції Ґріна для бозе-системи багатьох частинок знайти енерґетичний спектр збуджень у неідеальному бозе-газі, а також енерґію основного стану й розподіл у ньому частинок за імпульсами.

Ідея колективних змінних, окрім згаданих вище робіт, паралельно розроблялася також у працях Сунакави *та ін.* [24, 25], в роботах Юхновського [26, 27], Вакарчука і Юхновського [28, 29], Вакарчука і Глушака [30, 31]. Зокрема у згаданих працях Сунакави *та ін.* вивчається питання про фізичну інтерпретацію оператора похідної за колективною змінною і його зв'язок із оператором швидкості у квантовій гідродинаміці, а в пізнішій праці [32] уперше знайдено самоспряжений гамільтоніан багатобозонної системи в представленні колективних змінних.

Ще одним важливим напрямком теоретичних досліджень гелію-4 є чисельні розрахунки термодинамічних, кінетичних та структурних його властивостей, які дають змогу здійснювати опис як основного стану, тобто при температурі, рівній нулеві, так і за скінченних температур. Для розрахунків основного стану застосовують дифузійний метод Монте-Карло, а для обчислення в області скінченних температур — метод Монте-Карло з використанням інтеґралів за траєкторіями [33]. Крім згаданих, існує також метод Монте-Карло з використанням функцій Ґріна [34]. При застосуванні методу Монте-Карло виникає потреба в заданні міжатомного потенціалу взаємодії в гелії, який уперше спробували знайти Слетер і Кірквуд [35]. Тривалий час найкращим для згаданих цілей вважали потенціал Леннарда-Джонса, а пізніше найпоширенішими стали потенціали Азіза–Сламана [36, 37].

Згадані теоретичні підходи зосереджували свою увагу, в основному, в ділянці низьких температур, тоді як високотемпературна область потребувала ще значного дослідження.

Дуже ефективною виявилася ідея застосування повної матриці густини у представленні колективних змінних для побудови теорії рідкого гелію-4 [38, 39]. Ця матриця несе повну і детальну інформацію про систему з N частинок. Для того, щоб розглядати поведінку s частинок з сукупності N частинок, нам потрібно використовувати s-частинкові матриці густини [40], які отримуються інтеґруванням повної матриці густини за координатами $N-s$ частинок. Уперше в явному вигляді s-частинкові матриці густини були знайдені в роботі [41], а в широкотемпературному діапазоні вирази для одно- і двочастинкових матриць густини були запропоновані в [42]. Однак, незважаючи на всі досягнуті успіхи, у теорії рідкого гелію залишається ще ряд важливих і не до кінця розв'язаних проблем, таких, як проблема кількісного опису структурних і термодинамічних функцій та Бозе–Айнштайнівської конденсації в околі λ-точки, що яскраво видно з аналізу експериментальних даних для кінетичної, потенціальної та повної енерґії [43–45], структурного фактора [46, 47], теплоємності [33,48,49]. Значною мірою це пов'язано з тим, що матрицю густини багатобозонної системи, за допомогою якої розраховують ці величини, взято з урахуванням лише парних кореляцій. У працях [30,31,50] показано, що внесок від три- та чотиричастинкових кореляцій при низьких температурах значно поліпшує результати для основного стану. У роботі [51] розраховано кінетичну, потенціальну, повну енерґію та теплоємність рідкого гелію-4 з урахуванням непрямих три- і чотиричастинкових кореляцій, а також проведено порівняння з експериментальними даними. Врахування непрямих три- і чотиричастинкових кореляцій привело до більшої узгодженості теоретичних результатів з експериментальними даними, однак розбіжності все ж таки залишаються.

Для подальшого покращання теоретичних висновків і більшої узгодженості з експериментом необхідно всі розрахунки вести з матрицею густини, яка враховує три- і чотиричастинкові прямі кореляції. Користуючись результатами роботи [28], можемо знайти вигляд цієї матриці, однак тільки при температурі $T = 0$. Для всього діапазону температур обчислення матриці густини багатобозонної системи з урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій являє собою більш математичну, аніж фізичну проблему у зв'язку із громіздкістю виразів, які виникають при розрахунках. Однак, використовуючи певні "математичні трюки", виявляється можливим значно спростити ці розрахунки і знайти явний вираз для матриці густини.

Метою цієї праці є розрахунок повної матриці густини багатобозонної системи в представленні колективних змінних з урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій у наближенні "двох сум за хвильовим вектором" в широкому інтервалі температур. У розділах II, III, IV, V і VI викладені міркування, що лежать в основі запропонованого методу розрахунку матриці густини. Розділи VII, VIII і IX зосереджують увагу на математичних аспектах розрахунку. У розділі X отриманий результат у границі низьких температур, а в розділі XII в границі високих температур порівнюється з уже відомим, відповідно, в роботах [28, 39].

II. ВИХІДНІ РІВНЯННЯ

За означенням, повна матриця густини системи N безспінових частинок із координатами $x \equiv (\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_N)$, які рухаються в об'ємі V, має вигляд:

$$R_N(x|x') = \sum_n \psi_n^*(x') e^{-\beta H} \psi_n(x), \tag{2.1}$$

де $\psi_n(x)$ — повна система функцій, симетричних стосовно перестановок частинок; індекс n нумерує квантові стани; H — гамільтоніан системи частинок; $\beta = 1/T$ — обернена температура.

Матриця густини задовольняє рівняння Блоха:

$$-\frac{\partial R_N(x|x')}{\partial\beta} = H(x)R_N(x|x'), \tag{2.2}$$

при $\beta = 0$ матриця густини

$$R_N(x|x') = \sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x) = \delta(x - x'). \tag{2.3}$$

Тут для багатобозонної системи ми ввели символьне позначення

$$\delta(x - x') = \frac{1}{N!}\sum_Q \prod_{j=1}^{N} \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r'}_{Qj}). \tag{2.4}$$

У наведеному вище виразі Q — це оператор перестановки індексів (1,...,N); $\sum\limits_Q$ — сума за всіма $N!$ перестановками.

На основі рівностей (2.1)—(2.3) вираз для матриці густини можна зобразити ще й так:

$$R_N(x|x') = e^{-\beta H}\delta(x - x'), \tag{2.5}$$

тут $H = H(x)$.

Оскільки матриця густини є дійсною, то, очевидно, що вона є і симетричною стосовно заміни штрихованих змінних на нештриховані й навпаки: $R_N(x|x') = R_N(x'|x)$. Тому вираз для неї можна записати ще й так:

$$R_N(x|x') = e^{-\beta H'}\delta(x - x'), \tag{2.6}$$

де $H' = H(x')$. Зрозуміло, що для будь-якого значення величини β_1 має силу й наступна рівність:

$$R_N(x|x') = e^{-\beta_1 H}e^{-(\beta-\beta_1)H'}\delta(x - x'). \tag{2.7}$$

При наближених розрахунках, коли потрібно контролювати умову симетричності в кожному порядку теорії збурень, ураховуючи рівності (2.5) і (2.6), а також те, що δ-функція є симетричною, зручно рівність (2.7) записати так:

$$\begin{aligned} R_N(x|x') &= e^{-\beta_1 H}e^{-(\beta-\beta_1)H'}\delta(x - x') \\ &= e^{-\beta_1 H'}e^{-(\beta-\beta_1)H}\delta(x - x'). \end{aligned}$$

Звідси $\beta_1 = \beta - \beta_1$ і $\beta_1 = \beta/2$. Отже, в явно симетричному вигляді повну матрицю густини можна записати у вигляді:

$$R_N(x|x') = e^{-\beta(H+H')/2}\delta(x - x'). \tag{2.8}$$

Для конкретних розрахунків отримана вище формула є малопридатною, тому в наступних розділах будуть проведені перетворення, які дадуть нам змогу записати її у зручній для обчислення формі.

III. КОЛЕКТИВНІ КООРДИНАТИ

Конкретизуємо гамільтоніан нашої системи:

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \Phi(\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_N), \tag{3.1}$$

де $\hat{\mathbf{p}}_j = -i\hbar\nabla_j$ — оператор імпульсу j-тої частинки, а потенціальна енерґія складається із суми попарних взаємодій між частинками:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_N) = \sum_{1\le i<j\le N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \tag{3.2}$$

Для багатобозонної системи, коли хвильові функції $\psi_n(x)$ є симетричними щодо перестановок частинок, замість N змінних x, можна використати нескінченну сукупність величин $\rho_\mathbf{q}$, які є коефіцієнтами Фур'є флуктуації густини частинок системи:

$$\rho_\mathbf{q} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}. \tag{3.3}$$

Вектор $\mathbf{q} = (2\pi n_1/L, 2\pi n_2/L, \ldots, 2\pi n_D/L)$ — хвильовий вектор з компонентами, кратними до $2\pi/L$, де $n_1, n_2, \ldots, n_D = 0, \pm1, \pm2, \ldots,$ L — ребро D-вимірного куба, об'єм якого $V = L^D$. Підсумовування за хвильовим вектором $\mathbf{q}$ означає таке:

$$\sum_\mathbf{q} \equiv \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{n_D=-\infty}^{\infty},$$

а в термодинамічній межі ця сума переходить в інтеґрал за правилом:

$$\sum_\mathbf{q} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dn_1 \ldots \int\limits_{-\infty}^{\infty} dn_D = \frac{V}{(2\pi)^D}\int d\mathbf{q}. \tag{3.4}$$

Гамільтоніан у цих змінних, які називаються колективними змінними, має вигляд:

$$\begin{aligned} H\left(\rho_\mathbf{q};\, \frac{\partial}{\partial\rho_\mathbf{q}}\right) &= \sum_{\mathbf{q}\neq0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\left(\rho_\mathbf{q}\frac{\partial}{\partial\rho_\mathbf{q}} - \frac{\partial}{\partial\rho_\mathbf{q}}\frac{\partial}{\partial\rho_{-\mathbf{q}}}\right) \\ &+ \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\nu_q(\rho_\mathbf{q}\rho_{-\mathbf{q}} - 1) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\sum_{\mathbf{q'}\neq0}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}\mathbf{q'})\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{q'}}\frac{\partial}{\partial\rho_\mathbf{q}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q'}}}, \end{aligned} \tag{3.5}$$

а потенціальна енерґія

$$\Phi = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq0}\nu_q(\rho_\mathbf{q}\rho_{-\mathbf{q}} - 1), \tag{3.6}$$

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

Зауважимо, що написаний вище гамільтоніан у представленні колективних змінних (3.5) є неермітовим. Хоча для розрахунку фізичних величин у межах методу колективних змінних достатньо провести ермітизацію лише головного адитивного доданка, що вперше запропонували і зробили Боголюбов і Зубарєв [20], а після цього розвивати теорію збурень для неермітової частини гамільтоніана, в нашому випадку для практичних розрахунків зручно використовувати повністю ермітизований гамільтоніан, який дасть змогу провести ряд необхідних перетворень, про що буде сказано пізніше.

Рівняння Блоха для матриці густини у представленні колективних змінних запишімо так:

$$-\frac{\partial R(\rho|\rho')}{\partial\beta} = H\left(\rho_{\mathbf{q}}; \frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}}}\right) R(\rho|\rho'), \tag{3.7}$$

де ρ і ρ' позначають усю сукупність змінних $\rho_{\mathbf{q}}$ і $\rho'_{\mathbf{q}}$ відповідно.

Щодо граничної умови при $\beta = 0$, то очевидно, що повинно виконуватися співвідношення:

$$\frac{1}{N!}\sum_{Q}\prod_{j=1}^{N}\delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}'_{Qj}) \sim {\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}'\delta(\rho_{\mathbf{q}} - \rho'_{\mathbf{q}}). \tag{3.8}$$

Штрих біля добутку за $\mathbf{q}$ означає, що беремо до уваги лише півпростір можливих значень змінних $\mathbf{q}$, оскільки існує залежність $\rho^*_{\mathbf{q}} = \rho_{-\mathbf{q}}$. Штрих біля $\rho'_{\mathbf{q}}$ позначає штриховані індивідуальні координати частинок:

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

Точна рівність для граничної умови при $\beta = 0$ є такою [28, 52, 53]:

$$R(\rho|\rho') = \frac{1}{\sqrt{J(\rho)J(\rho')}}{\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}'\delta(\rho_{\mathbf{q}} - \rho'_{\mathbf{q}}), \tag{3.9}$$

де вагова функція $J(\rho)$ — це "якобіан переходу" від скінченної кількості змінних x до безмежної кількості змінних $\rho_{\mathbf{q}}$:

$$\int dx \equiv \int d\mathbf{r}_j \ldots \int d\mathbf{r}_N = \int (d\rho) J(\rho). \tag{3.10}$$

Зауважимо, що при такому переході виникає питання ермітовості гамільтоніана в представленні колективних змінних, відповідь на яке не є тривіальною, про що вже згадувалося раніше.

Явний вигляд вагової функції $J(\rho)$ поданий у книзі [53]:

$$\ln J(\rho) = \ln C + \sum_{n\geq 2}\frac{(-1)^{n-1}}{n(n-1)(\sqrt{N})^{n-2}} \times \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n=0}}\ldots\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\rho_{\mathbf{q}_1}\ldots\rho_{\mathbf{q}_n}. \tag{3.11}$$

Сталу C знаходимо з умови нормування:

$$\int J(\rho)(d\rho) = V^N. \tag{3.12}$$

У термодинамічній межі

$$\int (d\rho) = {\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}'\int_{-\infty}^{\infty} d\rho^c_{\mathbf{q}}\int_{-\infty}^{\infty} d\rho^s_{\mathbf{q}}, \tag{3.13}$$

де

$$\begin{aligned}
\rho_{\mathbf{q}} &= \rho^c_{\mathbf{q}} - i\rho^s_{\mathbf{q}},\\
\rho^c_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_j),\\
\rho^s_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\sin(\mathbf{q}\mathbf{r}_j).
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Уведімо нову матрицю густини $\overline{R}(\rho|\rho')$ так:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = \sqrt{J(\rho)J(\rho')}R(\rho|\rho'). \tag{3.15}$$

Ця матриця також задовольняє рівняння Блоха (3.7), з тією лише відмінністю, що, замість гамільтоніана $H(\rho_{\mathbf{q}}; \partial/\partial\rho_{\mathbf{q}})$, у правій частині рівняння стоїть вираз $\sqrt{J(\rho)}H(\rho_{\mathbf{q}}; \partial/\partial\rho_{\mathbf{q}})/\sqrt{J(\rho)}$, який у наступних наших розрахунках ми знову позначатимемо через H. Цей новий гамільтоніан є ермітовим і може бути записаний так [30–32]:

$$H = H_0 + \Delta H, \tag{3.16}$$

де

$$\begin{aligned}
H_0 = \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}\left[-\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{q}}\partial\rho_{-\mathbf{q}}} + \frac{1}{4}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2}\right]\\
+ \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 + \frac{N}{2V}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_q(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} - 1),
\end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
\Delta H = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\sum_{\mathbf{q}'\neq 0}\frac{\hbar^2(\mathbf{q}\mathbf{q}')}{2m}\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{q}}\partial\rho_{\mathbf{q}'}}\\
+ \sum_{n\geq 3}\frac{(-1)^n}{4n(n-1)N^{n/2-1}}\\
\times \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n=0}}\ldots\sum_{\mathbf{q}_n\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}(q_1^2 + \ldots + q_n^2)\rho_{\mathbf{q}_1}\ldots\rho_{\mathbf{q}_n}.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

При $\beta = 0$

$$\overline{R}(\rho|\rho') = {\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}'\delta(\rho_{\mathbf{q}} - \rho'_{\mathbf{q}}). \tag{3.19}$$

Уперше самоспряжений гамільтоніан у представленні колективних змінних отримали в [32], де в ролі незалежних змінних використовували величини $\rho_{\mathbf{q}}$ і оператор швидкості $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}$, канонічно спряжений до $\rho_{\mathbf{q}}$. Перехід до цих змінних є унітарним, на відміну від переходу до змінних $\rho_{\mathbf{q}}$ і $\partial/\partial\rho_{\mathbf{q}}$, через які представлений оператор (3.16). Однак обидва ці підходи еквівалентні і приводять до однакових результатів.

IV. ФОРМАЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ БЛОХА

Отже, вираз для матриці густини мона записати так:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = e^{-\beta(H+H')/2}{\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}' \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \rho'_{\mathbf{q}}), \tag{4.1}$$

де

$$H' = H'_0 + \Delta H'. \tag{4.2}$$

Оператори H'_0 і $\Delta H'$ — це ті ж самі оператори, що й H_0 і ΔH, з тією лише відмінністю, що в них нештриховані колективні змінні замінені на штриховані. Використовуючи вирази (3.16) і (4.2), зробімо таке перетворення статистичного оператора:

$$\begin{aligned} e^{-\beta(H+H')/2} &= e^{-\beta(H_0+\Delta H + H'_0 + \Delta H')/2} \\ &= \hat{\sigma} e^{-\beta(H_0+H'_0)/2}, \end{aligned} \tag{4.3}$$

де $\hat{\sigma}$ — невідомий оператор, який необхідно знайти. Таке перетворення споріднене із зображенням взаємодії, однак відрізняється від нього порядком розміщення операторів $\hat{\sigma}$ і $e^{-\beta(H_0+H'_0)/2}$ у правій частині написаного вище рівняння.

Диференціюючи останню рівність (4.3) по β і помноживши все рівняння на $e^{\beta(H_0+H'_0)/2}$, отримаємо:

$$-\frac{\partial\hat{\sigma}}{\partial\beta} = \frac{1}{2}\hat{\sigma}\left[\Delta H\left(\frac{\beta}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta}{2}\right)\right], \tag{4.4}$$

де

$$\begin{aligned} \Delta H\left(\frac{\beta}{2}\right) &= e^{-\beta H_0/2}\Delta H e^{\beta H_0/2}, \\ \Delta H'\left(\frac{\beta}{2}\right) &= e^{-\beta H'_0/2}\Delta H' e^{\beta H'_0/2}. \end{aligned} \tag{4.5}$$

При

$$\beta = 0, \qquad \hat{\sigma} = 1.$$

Проітеруймо рівняння (4.4):

$$\hat{\sigma} = 1 + \hat{\sigma}^{(1)} + \hat{\sigma}^{(2)} + \ldots. \tag{4.6}$$

Перша ітерація:

$$-\frac{\partial\hat{\sigma}^{(1)}}{\partial\beta} = \frac{1}{2}\left[\Delta H\left(\frac{\beta}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta}{2}\right)\right],$$

$$\hat{\sigma}^{(1)} = 0 \qquad \text{при} \qquad \beta = 0,$$

$$\hat{\sigma}^{(1)} = -\frac{1}{2}\int_0^\beta d\beta_1 \left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right].$$

Друга ітерація:

$$-\frac{\partial\hat{\sigma}^{(2)}}{\partial\beta} = \hat{\sigma}^{(1)}\frac{1}{2}\left[\Delta H\left(\frac{\beta}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta}{2}\right)\right],$$

$$\hat{\sigma}^{(2)} = 0 \qquad \text{при} \qquad \beta = 0,$$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 &\left[\Delta H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right)\right] \\ \times &\left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right], \end{aligned}$$

. . . .

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^{(n)} = \left(-\frac{1}{2}\right)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \ldots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n & \\ \times \left[\Delta H\left(\frac{\beta_n}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_n}{2}\right)\right] & \\ \times \left[\Delta H\left(\frac{\beta_{n-1}}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_{n-1}}{2}\right)\right] \ldots & \\ \times \left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]. & \end{aligned} \tag{4.7}$$

Це впорядкування операторів за зростаючим значенням параметра β є протилежним до стандартного впорядкування, яке маємо в "зображенні взаємодії". Формально ряд для оператора $\hat{\sigma}$ можна зібрати й записати його через оператор упорядкування "часів" β, який ми позначаємо через $\hat{T}_1$ (щоб відрізнити його від стандартного $\hat{T}$-впорядкування):

$$\hat{\sigma} = \hat{T}_1 \exp\left\{-\int_0^\beta d\beta_1 \left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]\right\}. \tag{4.8}$$

Будемо вважати оператор $\Delta H + \Delta H'$ збуренням. Отже, в головному наближенні покладімо $\Delta H + \Delta H' = 0$, $\hat{\sigma} = 1$, і матриця густини (4.1) набуде вигляду:

$$\overline{R}_0(\rho|\rho') = e^{-\beta(H_0+H'_0)/2}{\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}' \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \rho'_{\mathbf{q}}). \tag{4.9}$$

Тому повну матрицю густини можна подати так:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = \hat{\sigma}\overline{R_0}(\rho|\rho'). \tag{4.10}$$

Ця формула є головною для подальших розрахунків. Явний вигляд матриці густини в наближенні парних кореляцій $\overline{R}_0(\rho|\rho')$ відомий [39, 41, 54]:

$$\begin{aligned} \overline{R}_0(\rho|\rho') = e^{-\beta F_0}{\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}' \frac{\alpha_q}{\pi}\,\mathrm{th}\left[\frac{\beta E_q}{2}\right] & \\ \times \exp\Bigg(-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\alpha_q}{\mathrm{th}[\beta E_q]}(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}}) & \\ + \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\alpha_q}{\mathrm{sh}[\beta E_q]}(\rho_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}})\Bigg), & \end{aligned} \tag{4.11}$$

де вільна енерґія

$$F_0 = E_0^{\mathrm{B}} + \frac{1}{\beta}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\ln\left(1 - e^{-\beta E_q}\right),$$

а E_0^{B} — це енерґія основного стану багатобозонної системи в наближенні Боголюбова:

$$E_0^{\mathrm{B}} = \frac{N(N-1)}{2V}\nu_0 - \sum_{\mathbf{q}\neq 0}\frac{\hbar^2 q^2}{8m}(\alpha_q - 1)^2. \qquad (4.12)$$

Вираз (4.11) — це так зване наближення хаотичних фаз для матриці густини або RPA-наближення.

Наша задача полягає в тому, щоб знайти явний вигляд матриці густини в постRPA-наближенні. Тому наступним кроком у наших розрахунках має бути дослідження дії оператора $\hat{\sigma}$ на матрицю густини в наближенні парних кореляцій $\overline{R}_0(\rho|\rho')$. З цією метою спочатку необхідно знайти явну залежність операторів $\Delta H\,(\beta_1/2)$ і $\Delta H'\,(\beta_1/2)$ від β_1, оскільки вони безпосередньо входять у вираз для $\hat{\sigma}$ (4.8).

V. ОПЕРАТОРИ ЗБУРЕННЯ У НОВОМУ ПРЕДСТАВЛЕННІ

Розгляньмо спершу оператор $\Delta H\,(\beta_1/2)$, знайдемо його явну залежність від β_1, а потім всі отримані результати узагальнимо й на оператор $\Delta H'\,(\beta_1/2)$.

Уведімо оператори породження і знищення [20]:

$$\hat{b}^+_{\mathbf{q}} = -\frac{\partial}{\partial \xi_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{2}\xi_{-\mathbf{q}}, \qquad (5.1)$$

$$\hat{b}_{\mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial \xi_{-\mathbf{q}}} + \frac{1}{2}\xi_{\mathbf{q}}, \qquad (5.2)$$

де

$$\xi_{\mathbf{q}} = \sqrt{\alpha_q}\rho_{\mathbf{q}}, \qquad (5.3)$$

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{2N}{V}\nu_q \Big/ \frac{\hbar^2 q^2}{2m}}. \qquad (5.4)$$

Звідси

$$\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha_q}}(\hat{b}^+_{-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}), \qquad (5.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} = \frac{1}{2}\sqrt{\alpha_q}(\hat{b}_{-\mathbf{q}} - \hat{b}^+_{\mathbf{q}}). \qquad (5.6)$$

Використовуючи введені вище оператори $\hat{b}^+_{\mathbf{q}}, \hat{b}_{\mathbf{q}}$, знайдемо такі співвідношення:

$$\Delta H = \Delta H\left(\rho_{\mathbf{q}}; \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}}\right) = \Delta H\left(\frac{1}{\sqrt{\alpha_q}}\left[\hat{b}^+_{-\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}\right]; \frac{\sqrt{\alpha_q}}{2}\left[\hat{b}_{-\mathbf{q}} - \hat{b}^+_{\mathbf{q}}\right]\right),$$

$$\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \Delta H\left(\frac{\hat{b}^+_{-\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \hat{b}_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right)}{\sqrt{\alpha_q}}; \frac{\sqrt{\alpha_q}}{2}\left[\hat{b}_{-\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) - \hat{b}^+_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]\right), \qquad (5.7)$$

де

$$\hat{b}^+_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = e^{-\beta_1 H_0/2}\hat{b}^+_{\mathbf{q}}e^{\beta_1 H_0/2},$$

$$\hat{b}_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = e^{-\beta_1 H_0/2}\hat{b}_{\mathbf{q}}e^{\beta_1 H_0/2}. \qquad (5.8)$$

Ураховуючи те, що гамільтоніан H_0 можна записати за допомогою введених операторів породження і знищення так:

$$H_0 = E_0^{\mathrm{B}} + \sum_{\mathbf{q}\neq 0} E_q \hat{b}^+_{\mathbf{q}}\hat{b}_{\mathbf{q}}, \qquad (5.9)$$

де E_q — спектр елементарних збуджень у наближенні Боголюбова:

$$E_q = \alpha_q \varepsilon_q = \alpha_q\frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \qquad (5.10)$$

на основі рівностей (5.8) отримаємо:

$$\hat{b}^+_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \hat{b}^+_{\mathbf{q}}e^{-\beta_1 E_q/2},$$

$$\hat{b}_{\mathbf{q}}\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \hat{b}_{\mathbf{q}}e^{\beta_1 E_q/2}. \qquad (5.11)$$

Отже, беручи до уваги вирази (5.1), (5.2) і (5.3), знайдемо, що

$$\hat{b}^+_{-\mathbf{q}}e^{-\beta_1 E_q/2} + \hat{b}_{\mathbf{q}}e^{\beta_1 E_q/2} = \frac{2}{\sqrt{\alpha_q}}\operatorname{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial \rho_{-\mathbf{q}}} + \sqrt{\alpha_q}\operatorname{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{\mathbf{q}},$$

$$\hat{b}_{-\mathbf{q}}e^{-\beta_1 E_q/2} - \hat{b}^+_{\mathbf{q}}e^{\beta_1 E_q/2} = \frac{2}{\sqrt{\alpha_q}}\operatorname{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} + \sqrt{\alpha_q}\operatorname{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{-\mathbf{q}}.$$

Використовуючи формули (5.11), знайдені щойно співвідношення дають нам можливість записати вираз (5.7) у такому вигляді:

$$\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \Delta H\left(\operatorname{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\alpha_q}\operatorname{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial \rho_{-\mathbf{q}}}; \operatorname{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_q}{2}\operatorname{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{-\mathbf{q}}\right). \qquad (5.12)$$

Очевидно, що при $\beta_1 = 0$

$$\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}=0\right) = \Delta H\left(\rho_{\mathbf{q}}; \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}}\right).$$

Отже, $\Delta H\,(\beta_1/2)$ отримуємо з вихідного гамільтоніана $\Delta H\,(\rho_{\mathbf{q}}; \partial/\partial\rho_{\mathbf{q}})$ при заміні

$$\rho_{\mathbf{q}} \to \mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\alpha_q}\,\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial\rho_{-\mathbf{q}}},$$
$$\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}}} \to \mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_q}{2}\,\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\rho_{-\mathbf{q}}.$$

Одержані результати для оператора $\Delta H\,(\beta_1/2)$ очевидно поширюються й на оператор $\Delta H'\,(\beta_1/2)$, з тією лише відмінністю, що роль нештрихованих змінних у другому випадку виконують штриховані.

VI. ДІЯ ОПЕРАТОРА $\hat{\sigma}$

Повернімося до рівняння (4.10) і запишімо його так:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = \hat{\sigma}\exp\left[\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')\right]. \tag{6.1}$$

Використовуючи явний вигляд оператора $\hat{\sigma}$ (4.8), пронесімо в останній формулі експоненту наліво через цей оператор. При цьому оператори похідної $\partial/\partial\rho_{\mathbf{q}}$ і $\partial/\partial\rho_{-\mathbf{q}}$ у виразі (5.12) зсуваються на величини $\partial\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')/\partial\rho_{\mathbf{q}}$ і $\partial\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')/\partial\rho_{-\mathbf{q}}$ відповідно. Це саме стосується і до операторів похідної за штрихованими колективними змінними у виразі для $\Delta H'\,(\beta_1/2)$. Тоді, беручи до уваги вираз (4.11), знайдемо, що

$$\frac{\partial\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')}{\partial\rho_{\mathbf{q}}} = -\frac{\alpha_q}{2\,\mathrm{th}[\beta E_q]}\rho_{-\mathbf{q}} + \frac{\alpha_q}{2\,\mathrm{sh}[\beta E_q]}\rho'_{-\mathbf{q}},$$
$$\frac{\partial\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')}{\partial\rho'_{\mathbf{q}}} = -\frac{\alpha_q}{2\,\mathrm{th}[\beta E_q]}\rho'_{-\mathbf{q}} + \frac{\alpha_q}{2\,\mathrm{sh}[\beta E_q]}\rho_{-\mathbf{q}}. \tag{6.2}$$

Це дає нам змогу отримати таке співвідношення для матриці густини $\overline{R}(\rho|\rho')$:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = \overline{R_0}(\rho|\rho')\sigma, \tag{6.3}$$

де величина

$$\sigma = \frac{1}{\overline{R_0}(\rho|\rho')}\hat{\sigma}\overline{R_0}(\rho|\rho') \tag{6.4}$$
$$= \hat{T}_1\exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^{\beta}d\beta_1\left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]\right\}.$$

У написаному вище виразі (6.4) величина $\Delta H\,(\beta_1/2) = \Delta H\,(\rho_{\mathbf{q}}; \partial/\partial\rho_{\mathbf{q}})$ при заміні

$$\rho_{\mathbf{q}} \to \left(\mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right] - \frac{\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]}{\mathrm{th}[\beta E_q]}\right)\rho_{\mathbf{q}} +$$
$$+ \frac{\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]}{\mathrm{sh}[\beta E_q]}\rho'_{\mathbf{q}} + \frac{2}{\alpha_q}\,\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial\rho_{-\mathbf{q}}}, \tag{6.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}}} \to \mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_q}{2}\frac{\mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]}{\mathrm{sh}[\beta E_q]}\rho'_{-\mathbf{q}}$$
$$+ \frac{\alpha_q}{2}\left(\mathrm{sh}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right] - \frac{\mathrm{ch}\left[\frac{\beta_1}{2}E_q\right]}{\mathrm{th}[\beta E_q]}\right)\rho_{-\mathbf{q}}. \tag{6.6}$$

Сказане щодо величини $\Delta H\,(\beta_1/2)$ тією ж мірою стосується й величини $\Delta H'\,(\beta_1/2)$, яка теж входить у вираз (6.4), з тією лише різницею, що роль штрихованих змінних у другому випадку відіграють нештриховані в першому і навпаки.

Величина σ вже не є оператором, оскільки ми пронесли матрицю густини в наближенні парних кореляцій $\overline{R_0}(\rho|\rho') = \exp[\ln\overline{R_0}(\rho|\rho')]$ крізь оператор $\hat{\sigma}$ і тепер похідні $\partial/\partial\rho_{\mathbf{q}}$ і $\partial/\partial\rho'_{\mathbf{q}}$, що входять в означення $\Delta H\,(\beta_1/2)$ і $\Delta H'\,(\beta_1/2)$, діють лише на величини $\rho_{\mathbf{q}}$ та $\rho'_{\mathbf{q}}$ відповідно, які є в складі названих вище операторів.

Для подальших обчислень розписуємо величину σ рядом:

$$\sigma = 1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \ldots,$$

де

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\int_0^{\beta}d\beta_1\overline{\left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}, \tag{6.7}$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{4}\int_0^{\beta}d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2\overline{\left[\Delta H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right)\right]}$$
$$\times\overline{\left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}. \tag{6.8}$$

. . . .

Риска над операторами позначає той факт, що похідні $\partial/\partial\rho_{\mathbf{q}}$, $\partial/\partial\rho'_{\mathbf{q}}$ діють лише всередині цих виразів.

Після того, як знайдемо величини σ_1, $\sigma_2, \ldots$ (їх кількість залежить від точності, якої хочемо досягти), використаємо концепцію незвідних середніх і зобразимо величину σ так:

$$\sigma = \exp\left(\sigma_1 + \left[\sigma_2 - \frac{\sigma_1^2}{2}\right] + \ldots\right). \tag{6.9}$$

Це наша остаточна формула, за допомогою якої в наступних розділах будемо проводити безпосередні розрахунки, щоб отримати кінцевий вираз для матриці густини.

VII. ПостRPA-НАБЛИЖЕННЯ. ПЕРШИЙ ПОРЯДОК ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ

Запишімо оператори ΔH і $\Delta H'$ (3.18) у вигляді трьох доданків відповідно до того, що ми працюємо в межах наближення "двох сум за хвильовим вектором":

$$\Delta H = \Delta_1 H + \Delta_2 H + \Delta_3 H, \tag{7.1}$$

$$\Delta H' = \Delta_1 H' + \Delta_2 H' + \Delta_3 H', \tag{7.2}$$

де

$$\Delta_1 H = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \times (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2) \rho_{-\mathbf{q}_3} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1} \partial \rho_{\mathbf{q}_2}}, \tag{7.3}$$

$$\Delta_2 H = -\frac{1}{12\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \times (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_3) \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3}, \tag{7.4}$$

$$\Delta_3 H = \frac{1}{48N} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_4=0}} \cdots \sum_{\mathbf{q}_4 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \times (\mathbf{q}_1^2 + \mathbf{q}_2^2 + \mathbf{q}_3^2 + \mathbf{q}_4^2) \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \rho_{\mathbf{q}_4}. \tag{7.5}$$

У наближенні "двох сум за хвильовим вектором", враховуючи, що в цьому наближенні умови $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = 0$ і $\mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4 = 0$, $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3 = 0$ і $\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4 = 0$, $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_4 = 0$ і $\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = 0$ є рівноцінними, вираз для $\Delta_3 H$ набуде такого вигляду:

$$\Delta_3 H = \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q}_1^2 + \mathbf{q}_2^2) \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{-\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{-\mathbf{q}_2}. \tag{7.6}$$

Для величин $\Delta_1 H'$, $\Delta_2 H'$, $\Delta_3 H'$ отримаємо ті ж вирази, що й для величин $\Delta_1 H$ (7.3), $\Delta_2 H$ (7.4), $\Delta_3 H$ (7.6), лише в них, замість нештрихованих колективних змінних, стоять штриховані.

Беручи до уваги співвідношення (7.1) і (7.2), вираз (6.7) можна переписати так:

$$\sigma_1 = \Delta_1 \sigma_1 + \Delta_2 \sigma_1 + \Delta_3 \sigma_1, \tag{7.7}$$

де

$$\Delta_1 \sigma_1 = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\beta_1 \overline{\left[\Delta_1 H \left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_1 H' \left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}, \tag{7.8}$$

$$\Delta_2 \sigma_1 = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\beta_1 \overline{\left[\Delta_2 H \left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_2 H' \left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}, \tag{7.9}$$

$$\Delta_3 \sigma_1 = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\beta_1 \overline{\left[\Delta_3 H \left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_3 H' \left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}. \tag{7.10}$$

Щоб спростити подальші обчислення, уведімо такі позначення:

$$\begin{aligned}
&\mathrm{sh}\left[\left(\beta - \frac{\beta_j}{2}\right) E_{q_i}\right] = S_j(i), \qquad \mathrm{sh}\left[\frac{\beta_j}{2} E_{q_i}\right] = S_j(i'), \\
&\mathrm{ch}\left[\left(\beta - \frac{\beta_j}{2}\right) E_{q_i}\right] = C_j(i), \qquad \mathrm{ch}\left[\frac{\beta_j}{2} E_{q_i}\right] = C_j(i'), \\
&\mathrm{sh}[\beta E_{q_i}] = S(i'), \\
&S_j(i_1) S_j(i_2') \ldots S_j(i_n) = S_j(i_1, i_2', \ldots, i_n), \\
&C_j(i_1') C_j(i_2) \ldots C_j(i_n) = C_j(i_1', i_2, \ldots, i_n), \\
&C_j(i_1) C_j(i_k') S_j(i_{k+1}) \ldots S_j(i_n') \\
&\quad = F_j(i_1, \ldots, i_k' | i_{k+1}, \ldots, i_n'),
\end{aligned} \tag{7.11}$$

де $j = 1,\, 2;\ i = 1,\, 2,\, 3.$

Отже, на основі виразів (6.5), (6.6) і (7.3), (7.4), (7.6) та аналогічних виразів для штрихованих величин, враховуючи, що риска над операторами в рівностях (7.8), (7.9), (7.10) позначає той факт, що похідні діють тільки всередині цих операторів, а також беручи до уваги введені вище позначення, отримаємо:

$$\Delta_1 \sigma_1 = -\frac{1}{8\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2) \alpha_{q_1} \alpha_{q_2}}{S(1', 2', 3')} \times \sum_{i_1=0}^{1} \sum_{i_2=0}^{1} \sum_{i_3=0}^{1} (-1)^{i_1+i_2} \left[J_1(1^{i_1}, 2^{i_2} | 3^{i_3}) + J_1(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2} | 3^{1-i_3})\right] \rho_{\mathbf{q}_1}^{i_1} \rho_{\mathbf{q}_2}^{i_2} \rho_{\mathbf{q}_3}^{i_3}, \tag{7.12}$$

$$\Delta_2 \sigma_1 = -\frac{1}{8\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3 \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2)}{S(1', 2', 3')} \times \sum_{i_1=0}^{1} \sum_{i_2=0}^{1} \sum_{i_3=0}^{1} \left[J_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}) + J_2(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2}, 3^{1-i_3})\right] \rho_{\mathbf{q}_1}^{i_1} \rho_{\mathbf{q}_2}^{i_2} \rho_{\mathbf{q}_3}^{i_3}, \tag{7.13}$$

$$
\begin{aligned}
\Delta_3\sigma_1 = &-\frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)\left\{\frac{4}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}S(1',2')}J_3(1',1,2',2)\right.\\
&+\frac{2}{\alpha_{q_2}}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1}\frac{1}{S(1',1',2')}\left[J_3(1^{j_1},1^{i_1},2',2)+J_3(1^{1-j_1},1^{1-i_1},2',2)\right]\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\\
&+\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{i_2=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\frac{1}{2S(1',1',2',2')}\\
&\left.\times\left[J_3(1^{j_1},1^{i_1},2^{j_2},2^{i_2})+J_3(1^{1-j_1},1^{1-i_1},2^{1-j_2},2^{1-i_2})\right]\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{i_2}\right\},
\end{aligned}
\tag{7.14}
$$

де

$$
J_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3}) = \int_0^\beta F_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3})d\beta_1 = \frac{(-1)^{1-i_3}}{4}\sum_{n_1=0}^{1}\sum_{n_2=0}^{1}(-1)^{n_2}\frac{\mathrm{ch}[\beta(f^{n_1n_2}+g^{n_1n_2})]-\mathrm{ch}[\beta g^{n_1n_2}]}{f^{n_1n_2}}, \tag{7.15}
$$

$$
\begin{aligned}
J_2(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3}) &= \int_0^\beta S_1(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})d\beta_1\\
&= \frac{(-1)^{i_1+i_2+i_3-1}}{4}\sum_{n_1=0}^{1}\sum_{n_2=0}^{1}(-1)^{n_1+n_2}\frac{\mathrm{ch}[\beta(f^{n_1n_2}+g^{n_1n_2})]-\mathrm{ch}[\beta g^{n_1n_2}]}{f^{n_1n_2}},
\end{aligned}
\tag{7.16}
$$

$$
\begin{aligned}
J_3(1^{j_1},1^{i_1},2^{j_2},2^{i_2}) &= \int_0^\beta S_1(1^{j_1},1^{i_1},2^{j_2},2^{i_2})d\beta_1\\
&= \frac{(-1)^{j_1+i_1+j_2+i_2}}{8}\sum_{n_1=0}^{1}\sum_{n_2=0}^{1}\sum_{n_3=0}^{1}(-1)^{n_1+n_2}Q_1(n_1,n_2,n_3,i_1,i_2,j_1,j_2),
\end{aligned}
\tag{7.17}
$$

причому $Q_1(n_1,n_2,n_3,i_1,i_2,j_1,j_2)$ (далі просто Q_1) можна подати так:

$$
Q_1 = \begin{cases}\dfrac{\mathrm{sh}[\beta(f^{n_1n_2n_3}+g^{n_1n_2n_3})]-\mathrm{sh}[\beta g^{n_1n_2n_3}]}{f^{n_1n_2n_3}}, & f^{n_1n_2n_3}\neq 0,\\[2ex] \beta\,\mathrm{ch}[\beta g^{n_1n_2n_3}], & f^{n_1n_2n_3}=0,\end{cases} \tag{7.18}
$$

$$
f^{n_1n_2} = \frac{E_{q_1}+(-1)^{n_1}E_{q_2}+(-1)^{n_2}E_{q_3}}{2}, \tag{7.19}
$$

$$
g^{n_1n_2} = (i_1-1)E_{q_1}+(-1)^{n_1}(i_2-1)E_{q_2}+(-1)^{n_2}(i_3-1)E_{q_3}, \tag{7.20}
$$

$$
f^{n_1n_2n_3} = \frac{E_{q_1}+(-1)^{n_1}E_{q_1}+(-1)^{n_3}E_{q_2}+(-1)^{n_2+n_3}E_{q_2}}{2}, \tag{7.21}
$$

$$
g^{n_1n_2n_3} = (i_1-1)E_{q_1}+(-1)^{n_1}(j_1-1)E_{q_1}+(-1)^{n_3}(i_2-1)E_{q_2}+(-1)^{n_2+n_3}(j_2-1)E_{q_2}. \tag{7.22}
$$

Знайдені вирази для величин $\Delta_1\sigma_1$ (7.12), $\Delta_2\sigma_1$ (7.13), $\Delta_3\sigma_1$ (7.14) можна спростити, провівши такі перетворення.

$$
\begin{aligned}
&J_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3})+J_1(1^{1-i_1},2^{1-i_2}|3^{1-i_3})\\
&\quad=\int_0^\beta F_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3};\beta_1/2)d\beta_1\\
&\quad+\int_0^\beta F_1(1^{1-i_1},2^{1-i_2}|3^{1-i_3};\beta_1/2)d\beta_1.
\end{aligned}
\tag{7.23}
$$

У першому інтеґралі зробімо заміну змінних $\beta_1/2=\beta_1'$, а в другому $\beta-\beta_1/2=\beta_1'$. Відтак перепозначмо β_1' на β_1 і отримаємо:

$$
\begin{aligned}
&J_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3})+J_1(1^{1-i_1},2^{1-i_2}|3^{1-i_3})\\
&\quad=2\int_0^{\frac{\beta}{2}} F_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3};\beta_1)d\beta_1\\
&\quad+2\int_{\frac{\beta}{2}}^{\beta} F_1(1^{1-i_1},2^{1-i_2}|3^{1-i_3};\beta-\beta_1)d\beta_1.
\end{aligned}
\tag{7.24}
$$

Позначення $F_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3};\beta_1/2)$ еквівалентне введеному раніше $F_1(1^{i_1},2^{i_2}|3^{i_3})$ (7.11), а позначення

$F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}; \beta_1)$ і $F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}; \beta-\beta_1)$ означають, що у виразі для $F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$ всюди величину $\beta_1/2$ замінюємо на величини β_1 і $\beta-\beta_1$ відповідно. Беручи до уваги вираз для $F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$ (7.11), а також усе сказане вище, знайдемо, що $F_1(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2}|3^{1-i_3}; \beta-\beta_1) = F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}; \beta_1)$, а отже:

$$\begin{aligned} &J_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}) + J_1(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2}|3^{1-i_3}) \\ &\quad = 2\int_0^\beta F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}; \beta_1)\, d\beta_1. \end{aligned} \tag{7.25}$$

Уведімо позначення:

$$L_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}) = \int_0^\beta F_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}; \beta_1) d\beta_1. \tag{7.26}$$

Усе сказане про вираз $J_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$ тією ж мірою стосується також величин $J_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})$ і $J_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})$, тому введемо такі позначення:

$$L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}) = \int_0^\beta S_1(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}; \beta_1) d\beta_1, \tag{7.27}$$

$$L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2}) = \int_0^\beta S_1(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2}; \beta_1) d\beta_1. \tag{7.28}$$

Щоб отримати явні вирази для величин $L_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$, $L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})$, $L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})$, потрібно відповідно у виразах для $J_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$ (7.15), $J_2(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$ (7.16), $J_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})$(7.17) величини $f^{n_1 n_2}$ (7.19) і $f^{n_1 n_2 n_3}$ (7.21) замінити вдвічі більшими значеннями.

Отже, для величини σ_1 (7.7) отримаємо такий вираз:

$$\begin{aligned} \sigma_1 = &-\frac{1}{12\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{S(1', 2', 3')} \sum_{\substack{1\le a<b\le 3 \\ a,b\neq c\le 3}} (\mathbf{q}_a \mathbf{q}_b) \\ &\times \sum_{i_1=0}^{1} \sum_{i_2=0}^{1} \sum_{i_3=0}^{1} \left[(-1)^{i_a+i_b} \alpha_{q_a} \alpha_{q_b} L_1(a^{i_a}, b^{i_b}|c^{i_c}) + L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})\right] \rho^{i_1}_{\mathbf{q}_1} \rho^{i_2}_{\mathbf{q}_2} \rho^{i_3}_{\mathbf{q}_3} \\ &- \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q}_1^2 + \mathbf{q}_2^2) \left[\frac{4}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2} S(1', 2')} L_3(1', 1, 2', 2) + \frac{4}{\alpha_{q_2}} \sum_{i_1=0}^{1} \sum_{j_1=0}^{1} \frac{L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2', 2)}{S(1', 1', 2')} \rho^{j_1}_{\mathbf{q}_1} \rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1} \right. \\ &\left. + \sum_{i_1=0}^{1} \sum_{i_2=0}^{1} \sum_{j_1=0}^{1} \sum_{j_2=0}^{1} \frac{L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})}{S(1', 1', 2', 2')} \rho^{j_1}_{\mathbf{q}_1} \rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1} \rho^{j_2}_{\mathbf{q}_2} \rho^{i_2}_{-\mathbf{q}_2} \right]. \end{aligned} \tag{7.29}$$

Досліджуючи явні вирази для $L_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3})$, $L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})$, $L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})$, можна зауважити такі властивості цих величин:

$$L_1(1^{i_1}, 2^{i_2}|3^{i_3}) = L_1(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2}|3^{1-i_3}),$$

$$L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}) = L_2(1^{1-i_1}, 2^{1-i_2}, 3^{1-i_3}),$$

$$L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2}) = L_3(1^{1-j_1}, 1^{1-i_1}, 2^{1-j_2}, 2^{1-i_2}).$$

Цей факт свідчить про те, що вираз для σ_1 є симетричним стосовно заміни нештрихованих змінних на штриховані і навпаки.

Вираз для величини σ_1 можна записати і в іншій формі (Додаток A).

VIII. ПостRPA-НАБЛИЖЕННЯ. ДРУГИЙ ПОРЯДОК ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ

Запишімо вираз, який потрібно розрахувати (6.8):

$$\sigma_2 = \frac{1}{4}\int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2$$

$$\times \overline{\left[\Delta H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right)\right]\left[\Delta H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}.$$

Ми працюємо в наближенні "двох сум за хвильовим вектором", тому з операторів $\Delta H(\beta_2/2)$ і $\Delta H'(\beta_2/2)$ потрібно залишити лише внески, що породжують це наближення й не виводять за його межі. Як бачимо з виразів для $\Delta_1 H(\beta_2/2)$ (7.3), $\Delta_2 H(\beta_2/2)$ (7.4), $\Delta_3 H(\beta_2/2)$ (7.6), з яких складається оператор $\Delta H(\beta_2/2)$, і відповідних виразів для $\Delta_1 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_3 H'(\beta_2/2)$, з яких складається оператор $\Delta H'(\beta_2/2)$, нам достатньо працювати лише з операторами $\Delta_1 H(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H(\beta_2/2)$ і $\Delta_1 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_2/2)$. Вони мають множник $\sim 1/\sqrt{N}$, так що їхній внесок у $\sigma_2 \sim 1/N$, а це означає, що "наближення двох сум за хвильовим вектором" $\sim 1/N \sum\limits_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum\limits_{\mathbf{q}_2\neq 0} (\ldots)$. Якщо записати й оператор $\Delta_3 H(\beta_2/2)$, який $\sim 1/N$, то ми будемо мати доданки в $\sigma_2 \sim 1/N^{3/2}$. Такий внесок має підсумовування за трьома хвильовими векторами.

Отже, в прийнятому тут наближенні "двох сум за хвильовим вектором" величина σ_2 дорівнює:

$$\sigma_2 = \frac{1}{4}\int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \overline{\left[\Delta_1 H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta_1 H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta_2 H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) + \Delta_2 H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right)\right]} \times \overline{\left[\Delta_1 H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_1 H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_2 H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) + \Delta_2 H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right)\right]}. \tag{8.1}$$

Наступним кроком є розрахунок величин $\Delta_1 H(\beta_1/2)$, $\Delta_1 H'(\beta_1/2)$, $\Delta_2 H(\beta_1/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_1/2)$, $\Delta_1 H(\beta_2/2)$, $\Delta_1 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_2/2)$. При цьому ми користуємося тими ж формулами (6.5), (6.6), (7.3), (7.4), що й у випадку розрахунку величини σ_1. Однак, враховуючи, що похідні у виразі для σ_2, як уже згадувалося раніше, діють лише всередині цього виразу, що позначається рискою над операторами, ми не беремо до уваги доданків, які містять похідні у виразах для $\Delta_1 H(\beta_1/2)$, $\Delta_1 H'(\beta_1/2)$, $\Delta_2 H(\beta_1/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_1/2)$, оскільки вони, діючи вправо на одиницю, дають нуль. У виразах для $\Delta_1 H(\beta_2/2)$, $\Delta_1 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_2/2)$ ми нехтуємо доданками, які не містять похідних, оскільки вони даватимуть шестичастинкові кореляції, врахування яких виходить за межі поставленої задачі.

Таким чином отримаємо:

$$\Delta_1 H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{S(1',2',3')} \sum_{j_1=0}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\sum_{j_3=0}^{1}(-1)^{j_1+j_2} F_1(1^{j_1},2^{j_2}|3^{j_3})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{j_3}, \tag{8.2}$$

$$\Delta_2 H\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{1}{S(1',2',3')} \sum_{j_1=0}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\sum_{j_3=0}^{1} S_1(1^{j_1},2^{j_2},3^{j_3})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{j_3}, \tag{8.3}$$

$$\begin{aligned}\Delta_1 H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} &\Bigg[(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{2}{\alpha_{q_3}}F_2(1',2'|3')\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_1}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}} \\ &+ \frac{1}{S(1')}\sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta\leq 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)\frac{\alpha_{q_1}}{\alpha_{q_\eta}}\sum_{\substack{i_1=0 \\ i_2=i_3=1}}^{1}(-1)^{i_\mu+i_\nu}F_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu}|\eta^{i_\eta})\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}} \\ &+ \frac{1}{2S(1',2')}\sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta\leq 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_\eta}}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{\substack{i_2=0 \\ i_3=1}}^{1}(-1)^{i_\mu+i_\nu}F_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu}|\eta^{i_\eta})\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{i_2}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}}\Bigg],\end{aligned} \tag{8.4}$$

$$\begin{aligned}\Delta_2 H\left(\frac{\beta_2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} &\Bigg[(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{2}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}S_2(1',2',3')\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_1}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}} \\ &+ \frac{1}{S(1')}\frac{1}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}\sum_{i_1=0}^{1}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)S_2(1^{i_1},2',3')\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}} \\ &+ \frac{1}{2S(1',2')}\frac{1}{\alpha_{q_3}}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{i_2=0}^{1}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)S_2(1^{i_1},2^{i_2},3')\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{i_2}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{q}_3}}\Bigg].\end{aligned} \tag{8.5}$$

Так само для величин $\Delta_1 H'(\beta_1/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_1/2)$, $\Delta_1 H'(\beta_2/2)$, $\Delta_2 H'(\beta_2/2)$ одержимо такі вирази:

$$\Delta_1 H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{S(1',2',3')} \sum_{j_1=0}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\sum_{j_3=0}^{1}(-1)^{j_1+j_2} F_1(1^{1-j_1},2^{1-j_2}|3^{1-j_3})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{j_3}, \tag{8.6}$$

$$\Delta_2 H'\left(\frac{\beta_1}{2}\right) = \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_3\neq 0} \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{1}{S(1',2',3')} \sum_{j_1=0}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\sum_{j_3=0}^{1} S_1(1^{1-j_1},2^{1-j_2},3^{1-j_3})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{j_3}, \tag{8.7}$$

$$\Delta_1 H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{2}{\alpha_{q_3}} F_2(1',2'|3')\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_1}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}} \right.$$

$$+ \frac{1}{S(1')} \sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta}} (\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)\frac{\alpha_{q_1}}{\alpha_{q_\eta}} \sum_{\substack{i_1=0 \\ i_2=i_3=1}}^{1} (-1)^{i_\mu+i_\nu} F_2(\mu^{1-i_\mu},\nu^{1-i_\nu}|\eta^{1-i_\eta})\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}}$$

$$\left. + \frac{1}{2S(1',2')} \sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta}} (\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_\eta}} \sum_{i_1=0}^{1}\sum_{\substack{i_2=0 \\ i_3=1}}^{1} (-1)^{i_\mu+i_\nu} F_2(\mu^{1-i_\mu},\nu^{1-i_\nu}|\eta^{1-i_\eta})\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}\rho^{i_2}_{-\mathbf{q}_2}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}} \right], \tag{8.8}$$

$$\Delta_2 H'\left(\frac{\beta_2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)\frac{2}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}} S_2(1',2',3')\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_1}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}} \right.$$

$$+ \frac{1}{S(1')}\frac{1}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}} \sum_{i_1=0}^{1} (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3) S_2(1^{1-i_1},2',3')\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_2}}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}}$$

$$\left. + \frac{1}{2S(1',2')}\frac{1}{\alpha_{q_3}} \sum_{i_1=0}^{1}\sum_{i_2=0}^{1} (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3) S_2(1^{1-i_1},2^{1-i_2},3')\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}\rho^{i_2}_{-\mathbf{q}_2}\frac{\partial}{\partial\rho'_{\mathbf{q}_3}} \right]. \tag{8.9}$$

Підставляючи вирази (8.2), (8.3), (8.4), (8.5), (8.6), (8.7), (8.8), (8.9) у формулу (8.1) і провівши відповідні перетворення, отримаємо вираз для величини σ_2 в наближенні “двох сум за хвильовим вектором”:

$$\sigma_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)}{2\alpha_{q_3}} \sum_{j=0}^{1} \left[\sum_{\substack{1\leq a<b\leq 3 \\ a,b\neq c\leq 3}} \frac{(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} I^{00}\begin{pmatrix} 1' & 2' & 3' \\ a^j & b^j & c^j \end{pmatrix} \right.$$

$$+ \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} I^{10}\begin{pmatrix} 1' & 2' & 3' \\ 1^j & 2^j & 3^j \end{pmatrix} + \frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}} \sum_{\substack{1\leq a<b\leq 3 \\ a,b\neq c\leq 3}} \frac{(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} I^{01}\begin{pmatrix} 1' & 2' & 3' \\ a^j & b^j & c^j \end{pmatrix}$$

$$\left. + \frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}} \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} I^{11}\begin{pmatrix} 1' & 2' & 3' \\ 1^j & 2^j & 3^j \end{pmatrix} \right]$$

$$+ \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0} \sum_{\mathbf{q}_2\neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \sum_{i=0}^{1}\sum_{j=0}^{1} \sum_{\substack{i_1=0 \\ i_2=i_3=1-i}}^{1} \sum_{\substack{j_1=0 \\ j_2=j_3=i}}^{1} \left[\sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta\leq 3}} \sum_{\substack{1\leq a<b\leq 3 \\ a,b\neq c\leq 3}} \frac{(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} \right.$$

$$\times \frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_\eta}} (-1)^{i_\mu+i_\nu+j_a+j_b} I^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|} \\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|} \end{pmatrix}$$

$$+ \sum_{\substack{1\leq\mu<\nu\leq 3 \\ \mu,\nu\neq\eta\leq 3}} \frac{(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} \frac{\alpha_{q_1}}{\alpha_{q_\eta}} (-1)^{i_\mu+i_\nu} I^{10}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|} \\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|} \end{pmatrix}$$

$$+ \sum_{\substack{1\leq a<b\leq 3 \\ a,b\neq c\leq 3}} \frac{(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} (-1)^{j_a+j_b} \frac{\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}} I^{01}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3' \\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|} \end{pmatrix}$$

$$\left. + \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)^2}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} I^{11}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3' \\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|} \end{pmatrix} \right] \rho^{j_1}_{\mathbf{q}_1}\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}$$

$$
\begin{aligned}
&+\frac{1}{16N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\sum_{i=0}^{1}\sum_{j=0}^{1}\sum_{\substack{i_1=0\\ i_3=1-i}}^{1}\sum_{i_2=0}^{1}\sum_{\substack{j_1=0\\ j_3=i}}^{1}\sum_{j_2=0}^{1}\left[\sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\neq\eta\le 3}}\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}\frac{(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_3}]\left(\prod_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2}\right.\\
&\times\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_\eta}}(-1)^{i_\mu+i_\nu+j_a+j_b}I^{00}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}\\
&+\sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\neq\eta\le 3}}\frac{(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_3}]\left(\prod_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2}\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_\eta}}(-1)^{i_\mu+i_\nu}I^{10}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|j-j_2|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}\\
&+\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}\frac{(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_3}]\left(\prod_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2}(-1)^{j_a+j_b}\frac{\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_3}}I^{01}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2^{|i-i_2|} & 3'\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}\\
&\left.+\frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)^2}{\alpha_{q_3}\operatorname{sh}[\beta E_{q_3}]\left(\prod_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2}I^{11}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2^{|i-i_2|} & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|j-j_2|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}\right]\rho^{j_1}_{\mathbf{q}_1}\rho^{i_1}_{-\mathbf{q}_1}\rho^{j_2}_{\mathbf{q}_2}\rho^{i_2}_{-\mathbf{q}_2},
\end{aligned}
\tag{8.10}
$$

де

$$
\begin{aligned}
I^{00}\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix} &= \int_0^\beta d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2 F_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu}|\eta^{i_\eta})F_1(a^{j_a},b^{j_b}|c^{j_c}),\\
I^{10}\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix} &= \int_0^\beta d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2 F_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu}|\eta^{i_\eta})S_1(a^{j_a},b^{j_b},c^{j_c}),\\
I^{01}\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix} &= \int_0^\beta d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2 S_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu},\eta^{i_\eta})F_1(a^{j_a},b^{j_b}|c^{j_c}),\\
I^{11}\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix} &= \int_0^\beta d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2 S_2(\mu^{i_\mu},\nu^{i_\nu},\eta^{i_\eta})S_1(a^{j_a},b^{j_b},c^{j_c}).
\end{aligned}
\tag{8.11}
$$

Ці чотири типи інтеґралів після обчислення можна записати в компактному вигляді так:

$$
\begin{aligned}
&I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix}\\
&\quad=(-1)^{(j_a+j_b)p_1}(-1)^{(i_\mu+i_\nu)p_2}(-1)^{j_c+i_\eta}\sum_{n_1=0}^{1}\sum_{m_1=0}^{1}(-1)^{m_1p_1+n_1p_2}I\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}n_1\\ m_1\end{pmatrix},
\end{aligned}
\tag{8.12}
$$

де

$$
\begin{aligned}
I\begin{pmatrix}\mu^{i_\mu} & \nu^{i_\nu} & \eta^{i_\eta}\\ a^{j_a} & b^{j_b} & c^{j_c}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}n_1\\ m_1\end{pmatrix} &= \frac{1}{32}\sum_{n_2=0}^{1}\sum_{m_2=0}^{1}\sum_{l=0}^{1}(-1)^{n_2+m_2}Q_2(a,b,c,\mu,\nu,\eta,n_1,n_2,m_1,m_2,l,i_1,i_2,i_3,j_1,j_2,j_3)\\
&\quad-\frac{1}{16}\sum_{n_2=0}^{1}\sum_{m_2=0}^{1}(-1)^{n_2+m_2}\frac{\operatorname{ch}\left[\beta\tilde{g}^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\right]}{f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}}\frac{\operatorname{ch}\left[\beta\left(f^{m_1m_2}_{abc}+g^{m_1m_2}_{abc}\right)\right]-\operatorname{ch}\left[\beta g^{m_1m_2}_{abc}\right]}{f^{m_1m_2}_{abc}},
\end{aligned}
\tag{8.13}
$$

причому $Q_2(a,b,c,\mu,\nu,\eta,n_1,n_2,m_1,m_2,l,i_1,i_2,i_3,j_1,j_2,j_3)$ (далі просто Q_2) можна подати в такому вигляді:

$$
Q_2=\begin{cases}\dfrac{\operatorname{ch}\left\{\beta\left[f^{m_1m_2}_{abc}+g^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l\left(f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}+\tilde{g}^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\right)\right]\right\}-\operatorname{ch}\left[\beta\left(g^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l\tilde{g}^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\right)\right]}{f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\left(f^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\right)}, & f^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\neq 0,\\[3ex] \beta\dfrac{\operatorname{sh}\left[\beta\left(g^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l\tilde{g}^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}\right)\right]}{f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}}, & f^{m_1m_2}_{abc}+(-1)^l f^{n_1n_2}_{\mu\nu\eta}=0,\end{cases}
$$

$$
f^{m_1m_2}_{abc}=\frac{E_{q_a}+(-1)^{m_1}E_{q_b}+(-1)^{m_2}E_{q_c}}{2},
$$

$$f_{\mu\nu\eta}^{n_1n_2} = \frac{E_{q_\mu} + (-1)^{n_1}E_{q_\nu} + (-1)^{n_2}E_{q_\eta}}{2},$$
$$g_{abc}^{m_1m_2} = (j_a - 1)E_{q_a} + (-1)^{m_1}(j_b - 1)E_{q_b} + (-1)^{m_2}(j_c - 1)E_{q_c},$$
$$\tilde{g}_{\mu\nu\eta}^{n_1n_2} = (i_\mu - 1)E_{q_\mu} + (-1)^{n_1}(i_\nu - 1)E_{q_\nu} + (-1)^{n_2}(i_\eta - 1)E_{q_\eta}.$$

У написаних вище виразах індекси μ, ν, η, a, b, c пробігають значення $1, 2, 3$, а індекси i_μ, i_ν, i_η, i_a, i_b, i_c, i, j, p_1, p_2, m_1, m_2, n_1, n_2, l — значення $0, 1$.

IX. ПОВНА МАТРИЦЯ ГУСТИНИ В постRPA-НАБЛИЖЕННІ

У наближенні “двох сум за хвильовим вектором” з урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій, беручи до уваги вираз (6.9) і явний вигляд величин σ_1 (7.29) і σ_2 (8.10), рівняння (6.3) набере такого вигляду:

$$\overline{R}(\rho|\rho') = \overline{R_0}(\rho|\rho') \exp(\sigma_1 + \sigma_2). \tag{9.1}$$

Щоб знайти вираз для матриці густини $R(\rho|\rho')$, ми скористаємося формулою (3.15) і тим, що вагова функція (3.11) у наближенні “двох сум за хвильовим вектором” така:

$$J(\rho) = C_J \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \frac{1}{6\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3} - \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right]. \tag{9.2}$$

Сталу нормування C_J можна знайти з умови нормування (3.12), коли вагова функція $J(\rho)$ взята у прийнятому наближенні (9.2):

$$C_J = V^N\left\{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} + \frac{1}{6\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3} - \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right](d\rho)\right\}^{-1} \tag{9.3}$$

Підставляючи у формулу (9.1) явні вирази для величин σ_1 і σ_2, та користуючись формулами (3.15), (9.2), знайдемо матрицю густини $R(\rho|\rho')$. Далі спробуємо подати матрицю густини $R(\rho|\rho')$ у вигляді добутку матриці густини ідеального бозе-газу $R_N^0(r|r')$ на фактор $P_{\text{int}}(\rho|\rho')$, що враховує міжчастинкову взаємодію:

$$R(\rho|\rho') = R_N^0(r|r')P_{\text{int}}(\rho|\rho'), \tag{9.4}$$

$$R_N^0(r|r') = \frac{1}{N!}\left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2} \times \sum_Q \exp\left[-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2}\sum_{j=1}^N (r'_j - r_{Qj})^2\right]. \tag{9.5}$$

Зауважимо, що координатне зображення матриці густини у вигляді добутку матриці густини ідеального бозе-газу з перенормованою масою m^* атомів на фактор, що враховує їхню непроникність, із феноменологічних міркувань запропонував Р. Файнман [8,55] з метою дослідження λ-переходу. Таке ж зображення матриці густини за деяких припущень було також отримане в роботі [38], безпосередньо виходячи з означення матриці густини.

У наближенні “двох сум за хвильовим вектором”, яке ми прийняли, у представленні колективних змінних $R_N^0(r|r') = R_N^0(\rho|\rho')$. Вираз для $R_N^0(\rho|\rho')$ отримуємо з виразу для матриці густини $R(\rho|\rho')$, якщо в останній виключити міжчастинкову взаємодію, що практично реалізується через покладання рівними одиниці величин $\alpha_{q_1}, \alpha_{q_2}, \alpha_{q_3}$, які входять у вираз для $R(\rho|\rho')$. Усе сказане дає нам рецепт розрахунку фактора $P_{\text{int}}(\rho|\rho')$ і разом з тим побудови матриці густини $R(\rho|\rho')$ у вигляді (9.4):

$$P_{\text{int}}(\rho|\rho') = \frac{R(\rho|\rho')}{R(\rho|\rho')|_{\alpha_{q_1}=\alpha_{q_2}=\alpha_{q_3}=1}}. \tag{9.6}$$

Величину $P_{\text{int}}(\rho|\rho')$ зобразимо як добуток фактора $P_{\text{pair}}(\rho|\rho')$, що враховує парні кореляції, на фактор $P(\rho|\rho')$, який враховує дво-, три- і чотиричастинкові прямі кореляції в наближенні “двох сум за хвильовим вектором”.

$$P_{\text{int}}(\rho|\rho') = P_{\text{pair}}(\rho|\rho')P(\rho|\rho'). \tag{9.7}$$

Вираз для $P_{\text{pair}}(\rho|\rho')$ є відомим [39]. Запишімо його в зручних для нас позначеннях:

$$P_{\text{pair}}(\rho|\rho') = \exp\left[c_0^p + \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1} c_2^p(1^{j1},-1^{i_1})(\mathbf{q}_1)\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\right], \tag{9.8}$$

де

$$c_0^p = -\beta E_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\ln\left[\frac{\alpha_{q_1}\,\text{th}\left(\frac{\beta E_{q_1}}{2}\right)}{\text{th}\left(\frac{\beta\varepsilon_{q_1}}{2}\right)}\right] + \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\ln\left(\frac{1-e^{-\beta\varepsilon_{q_1}}}{1-e^{-\beta E_{q_1}}}\right), \tag{9.9}$$

$$c_2^p(1,-1)(\mathbf{q}_1) = c_2^p(1',-1')(\mathbf{q}_1) = -\frac{1}{4}\left[\alpha_{q_1}\,\text{cth}(\beta E_{q_1}) - \text{cth}(\beta\varepsilon_{q_1})\right], \tag{9.10}$$

$$c_2^p(1',-1)(\mathbf{q}_1) = c_2^p(1,-1')(\mathbf{q}_1) = \frac{1}{4}\left[\frac{\alpha_{q_1}}{\text{sh}(\beta E_{q_1})} - \frac{1}{\text{sh}(\beta\varepsilon_{q_1})}\right]. \tag{9.11}$$

Отже, матрицю густини $R(\rho|\rho')$ можна записати так:

$$R(\rho|\rho') = R_N^0(r|r')P_{\text{pair}}(\rho|\rho')P(\rho|\rho'). \tag{9.12}$$

Вирази для $R_N^0(r|r')$ і $P_{\text{pair}}(\rho|\rho')$ були вже наведені вище. Залишається записати вираз для величини $P(\rho|\rho')$. Отже,

$$\begin{aligned} P(\rho|\rho') = \exp\Bigg[& c_0 + \sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1} c_2(1^{j1},-1^{i_1})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\sum_{i_1,i_2,i_3=0}^{1} c_3(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})\rho_{\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{i_2}\rho_{\mathbf{q}_3}^{i_3} \\ & + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{i_1,i_2=0}^{1}\sum_{j_1,j_2=0}^{1} c_4(1^{j_1},-1^{i_1},2^{j_2},-2^{i_2})\rho_{\mathbf{q}_1}^{j_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}^{i_1}\rho_{\mathbf{q}_2}^{j_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}^{i_2}\Bigg], \end{aligned} \tag{9.13}$$

де

$$\begin{aligned} c_0 = & -\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)Y_1^{00}(1',1,2',2) + \frac{1}{2N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2) \\ & \times\sum_{j=0}^{1}\Bigg[\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)Y^{00}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3'\\ a^j & b^j & c^j\end{pmatrix} + (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)Y^{10}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3'\\ 1^j & 2^j & 3^j\end{pmatrix} \\ & + \sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)Y^{01}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3'\\ a^j & b^j & c^j\end{pmatrix} + (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)Y^{11}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3'\\ 1^j & 2^j & 3^j\end{pmatrix}\Bigg], \end{aligned} \tag{9.14}$$

$$\begin{aligned} c_2(1^{j_1},-1^{i_1}) = & -\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)Y_1^{10}(1^{j_1},1^{i_1},2',2) + \frac{1}{8N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_2\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \\ & \times\sum_{\substack{i=0\\ i_2=i_3=1-i\\ j_2=j_3=i}}^{1}\sum_{j=0}^{1}\Bigg[\sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\neq\eta\le 3}}\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(-1)^{i_\mu+i_\nu+j_a+j_b}Y_2^{00}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix} \\ & + \sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\neq\eta\le 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(-1)^{i_\mu+i_\nu}Y_2^{10}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix} \\ & + \sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(-1)^{j_a+j_b}Y_2^{01}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix} \\ & + (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)^2 Y_2^{11}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}\Bigg], \end{aligned} \tag{9.15}$$

$$c_3(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3}) = -\frac{1}{12}\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\ne c\le 3}}(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)Y_3(a^{i_a}, b^{i_b}, c^{i_c}), \tag{9.16}$$

$$c_4(1^{j_1}, -1^{i_1}, 2^{j_2}, -2^{i_2}) = -\frac{1}{8}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)Y_1^{11}(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2}) + \frac{1}{16}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\ne 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2$$
$$\times\sum_{\substack{i=0\\ i_3=1-i}}^{1}\sum_{\substack{j=0\\ j_3=i}}^{1}\left[\sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\ne\eta\le 3}}\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\ne c\le 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(-1)^{i_\mu+i_\nu+j_a+j_b}Y_4^{00}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}\right.$$
$$+\sum_{\substack{1\le\mu<\nu\le 3\\ \mu,\nu\ne\eta\le 3}}(\mathbf{q}_\mu\mathbf{q}_\nu)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(-1)^{i_\mu+i_\nu}Y_4^{10}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|j-j_2|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}$$
$$+\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\ne c\le 3}}(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(-1)^{j_a+j_b}Y_4^{01}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2^{|i-i_2|} & 3'\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}$$
$$\left.+(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)^2Y_4^{11}\begin{pmatrix}1^{|i-i_1|} & 2^{|i-i_2|} & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|j-j_2|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}\right]. \tag{9.17}$$

У написаних вище виразах ми ввели такі позначення:

$$Y^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix} = \frac{(\alpha_{q_a}\alpha_{q_b})^{1-p_1}I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\left(\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]\right)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2})^{p_2}\alpha_{q_3}}$$
$$-\frac{I_0^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]}, \tag{9.18}$$

$$Y_1^{p_1p_2}(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2}) = \frac{L_3(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})}{(\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}])^{1+p_1}(\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}])^{1+p_2}\alpha_{q_1}^{1-p_1}\alpha_{q_2}^{1-p_2}} - \frac{L_3^0(1^{j_1}, 1^{i_1}, 2^{j_2}, 2^{i_2})}{(\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_1}])^{1+p_1}(\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_2}])^{1+p_2}}, \tag{9.19}$$

$$Y_2^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix} = \frac{(\alpha_{q_a}\alpha_{q_b})^{1-p_1}I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\left(\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]\right)(\alpha_{q_2}\alpha_{q_3})^{p_2}\alpha_{q_1}^{p_2-1}\alpha_{q_\eta}^{1-p_2}}$$
$$-\frac{I_0^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]}, \tag{9.20}$$

$$Y_3(a^{i_a}, b^{i_b}, c^{i_c}) = \frac{\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}(-1)^{i_a+i_b}L_1(a^{i_a}, b^{i_b}|c^{i_c}) + L_2(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$
$$-\frac{(-1)^{i_a+i_b}L_1^0(a^{i_a}, b^{i_b}|c^{i_c}) + L_2^0(1^{i_1}, 2^{i_2}, 3^{i_3})}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]}, \tag{9.21}$$

$$Y_4^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}=\frac{(\alpha_{q_a}\alpha_{q_b})^{1-p_1}I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\left(\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]\right)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2})^{p_2-1}\alpha_{q_3}^{p_2}\alpha_{q_\eta}^{1-p_2}}$$
$$-\frac{I_0^{p_1p_2}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]},\tag{9.22}$$

де J_1^0, J_2^0, J_3^0, $I_0^{p_1p_2}$ — це відповідні величини J_1, J_2, J_3, $I^{p_1p_2}$, у яких всюди у виразах прийнято $\alpha_{q_1}=\alpha_{q_2}=\alpha_{q_3}=1$. Такий прийом, як уже згадувалося раніше, дав нам змогу зі знайденої повної матриці густини виділити матрицю густини невзаємодіючих бозе-частинок, оскільки умова $\alpha_q=1$ еквівалентна відсутності взаємодії між бозе-частинками.

Аналізуючи знайдений вираз для матриці густини, можемо зауважити, що він є симетричним стосовно заміни нештрихованих змінних на штриховані й навпаки, що вказує на коректність наших розрахунків. Крім того, величини $c_3(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})$ симетричні стосовно перестановок хвильових векторів $\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3$, а величини $c_4(1^{j_1},-1^{i_1},2^{j_2},-2^{i_2})$ — стосовно перестановок хвильових векторів $\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2$.

X. МАТРИЦЯ ГУСТИНИ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ АБСОЛЮТНОГО НУЛЯ

Спрямувавши у знайденому виразі для матриці густини (9.12) $\beta\to\infty$ ($T\to 0$), ми отримаємо величину, яку зможемо порівняти з уже відомою [28]. Однак для спрощення розрахунків будемо працювати з виразом для матриці густини $\overline{R}(\rho|\rho')$, а після спрямування $\beta\to\infty$ за допомогою формули (3.15) перейдемо до матриці густини $R(\rho|\rho')$. Для цього нам необхідно знайти вирази для відповідних інтегралів L_1, L_2, L_3, $I^{p_1p_2}$ при $\beta\to\infty$. Результати розрахунків наведено в Додатку B. Отримані значення вказаних величин у границі низьких температур підставимо у формулу (9.1), використовуючи при цьому явні вирази для σ_1 (7.29) і σ_2 (8.10). Відтак в отриманому виразі перейдемо від знайдених величин A_1 (B.12), A_2 (B.13), A_3 (B.14), A_4 (B.15) до нових величин K_1,K_2,K_3,K_4, які виражаються через старі так:

$$K_1=A_1+A_4,\qquad K_2=A_2-A_4,$$
$$K_3=A_3+A_4,\qquad K_4=K_1+K_2+K_3,\tag{10.1}$$

і, використовуючи співвідношення

$$\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}{\mathbf{q}_i}^2,\tag{10.2}$$

$$\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)(\alpha_{q_i}+\alpha_{q_j})=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}{\mathbf{q}_i}^2\alpha_{q_i},\tag{10.3}$$

отримаємо вираз для матриці густини $\overline{R}(\rho|\rho')$ в границі низьких температур, з якого за допомогою формул (3.15) і (9.2) знайдемо $R(\rho|\rho')$ у цій же границі, врахувавши при цьому, що матриця густини в наближенні парних кореляцій $R_0(\rho|\rho')$ при $\beta\to\infty$, як вперше показали Боголюбов і Зубарєв [20], дорівнює:

$$R_0(\rho|\rho')=R_N^0(r|r')P_{\mathrm{pair}}(\rho|\rho')=\frac{1}{V^N}\left({\prod_{\mathbf{q}\neq 0}}'\alpha_q\right)e^{-\beta E_0^B}$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(\alpha_q-1)(\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}+\rho'_{\mathbf{q}}\rho'_{-\mathbf{q}})\right].\tag{10.4}$$

У написаному вище виразі використано той факт, що матриця густини ідеального бозе-газу в границі низьких температур $R_N^0(r|r')=1/V^N$.

Отже для матриці густини взаємодіючих бозе-частинок із урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій у границі низьких температур отримаємо такий вираз:

$$R(\rho|\rho')=R_0(\rho|\rho')e^{C_0}\exp\left\{-\frac{\hbar^2\beta}{48mN}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\left[(q_1^2+q_2^2+q_3^2)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_1}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_2}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_3}}\right)\right.\right.$$
$$\left.-\left(\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)(\alpha_{q_i}-1)(\alpha_{q_j}-1)\right)^2\Bigg/\left(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}\sum_{j=1}^{3}q_i^2\alpha_{q_i}\right)\right]$$
$$-\frac{\hbar^2\beta}{24mN}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_i}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_j}}\right)$$

$$+\ \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left[\frac{q_2^2}{2q_1^2\alpha_{q_1}}a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)+\frac{(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)}{2q_1^2\alpha_{q_1}}a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]$$
$$\times(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1})+\frac{1}{6\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{\mathbf{q}_3})$$
$$\left.+\ \frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2})\right\}, \tag{10.5}$$

де C_0 — це константа, про яку докладніше буде сказано в наступному розділі,

$$a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)=-\frac{\sum\limits_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)(\alpha_{q_i}-1)(\alpha_{q_j}-1)}{2\sum\limits_{j=1}^{3}\mathbf{q}_j^2\alpha_{q_j}}, \tag{10.6}$$

$$a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)=\frac{(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)^2a_3^2(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_2)+(\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)^2a_3^2(\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)}{q_1^2\alpha_{q_1}+q_2^2\alpha_{q_2}}$$
$$-\ \frac{[(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1)(\alpha_{q_1}-1)+(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)(\alpha_{q_2}-1)]a_3(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_2)}{q_1^2\alpha_{q_1}+q_2^2\alpha_{q_2}}$$
$$-\ \frac{[(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)(\alpha_{q_1}-1)+(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1)(\alpha_{q_2}-1)]a_3(\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)}{q_1^2\alpha_{q_1}+q_2^2\alpha_{q_2}}. \tag{10.7}$$

XI. СТАЛА НОРМУВАННЯ

У цьому розділі дослідимо сталу нормування C_0 (C.1).

У границі низьких температур матрицю густини $R(\rho|\rho')$ можна подати у вигляді:

$$R(\rho|\rho')=e^{-\beta E_0}\psi_0(\rho')\psi_0(\rho), \tag{11.1}$$

де $\psi_0(\rho)$ — нормована хвильова функція основного стану системи взаємодіючих бозе-частинок, E_0 — енерґія основного стану цієї системи. У прийнятому тут наближенні

$$E_0=E_0^B+\frac{\hbar^2\beta}{48mN}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\Bigg[(q_1^2+q_2^2+q_3^2)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_1}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_2}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_3}}\right)$$
$$-\left(\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)(\alpha_{q_i}-1)(\alpha_{q_j}-1)\right)^2\Bigg/\left(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}\sum_{j=1}^{3}q_i^2\alpha_{q_i}\right)\Bigg]$$
$$+\ \frac{\hbar^2\beta}{24mN}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{1\le i<j\le 3}(\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_i}}\right)\left(1-\frac{1}{\alpha_{q_j}}\right), \tag{11.2}$$

$$\psi_0(\rho)=A\exp\left[-\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(\alpha_q-1)\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\exp\left\{\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left[\frac{q_2^2}{2q_1^2\alpha_{q_1}}a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)\right.\right.$$
$$\left.+\ \frac{(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)}{2q_1^2\alpha_{q_1}}a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}+\frac{1}{6\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}$$
$$\left.+\ \frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right\}, \tag{11.3}$$

де A — це константа, яку можна знайти з умови нормування хвильової функції $\psi_0(\rho)$:

$$\int \psi_0^2(\rho)J(\rho)(d\rho) = 1.$$

У наближенні "двох сум за хвильовим вектором" отримаємо:

$$A = \frac{1}{\sqrt{C_J}}\left(\prod_{\mathbf{q}\neq 0}{}' \sqrt{\frac{\alpha_q}{\pi}}\right)\exp\left\{-\frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\left[\frac{q_2^2}{2q_1^2\alpha_{q_1}^2}a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2) + \frac{(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)}{2q_1^2\alpha_{q_1}^2}a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\right]\right.$$
$$\left.-\frac{1}{6N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\frac{\left[a_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)+\frac{1}{2}\right]^2}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}} - \frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{a_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)-1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}\right\}, \tag{11.4}$$

причому константа C_J визначається рівністю (9.3).

На основі сказаного, покладаючи у формулі (11.1) $\rho' = \rho$ й інтеґруючи праву та ліву частини цього виразу з ваговою функцією $J(\rho)$ (9.2), а також беручи до уваги на основі формули (3.15), що $R(\rho|\rho)J(\rho) = \overline{R}(\rho|\rho)$, одержимо:

$$\int R(\rho|\rho)J(\rho)(d\rho) = \int \overline{R}(\rho|\rho)(d\rho) = e^{-\beta E_0}. \tag{11.5}$$

Користуючись рівністю (9.1), а також, як це видно з аналізу формули (4.11), тим, що при $\beta\to\infty$ матриця густини

$$\overline{R_0}(\rho|\rho) = e^{-\beta E_0^B}\left(\prod_{\mathbf{q}\neq 0}{}'\frac{\alpha_q}{\pi}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right],$$

здобудемо такий вираз для величини $\overline{R}(\rho|\rho)$ в границі низьких температур:

$$\overline{R}(\rho|\rho) = e^{-\beta E_0}\left(\prod_{\mathbf{q}\neq 0}{}'\frac{\alpha_q}{\pi}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]$$
$$\times\exp\left[C_0 + C_J + 2\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}C_2(\mathbf{q}_1)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\right.$$
$$+\frac{2}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}$$
$$\left.+\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right], \tag{11.6}$$

де величини C_2, C_3, C_4 — це коефіцієнти відповідно при "двох, трьох і чотирьох ρ", а $C_0 + C_J$ — величина "без ρ" у виразі для $\sigma_1+\sigma_2$ у границі низьких температур. У Додатку C подані вирази для величин $C_0 + C_J, C_2, C_3, {C_3}^2, C_4$ у зручному для подальшого аналізу вигляді. Зауважимо також, що

$$C_0 = c_0, \qquad C_2(\mathbf{q}_1) = \frac{1}{2}\sum_{i_1=0}^{1}\sum_{j_1=0}^{1}c_2(1^{j1},-1^{i_1}),$$

$$C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) = \frac{1}{2}\sum_{i_1,i_2,i_3=0}^{1}c_3(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3}),$$

$$C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2) = \frac{1}{2}\sum_{i_1,i_2=0}^{1}\sum_{j_1,j_2=0}^{1}c_4(1^{j_1},-1^{i_1},2^{j_2},-2^{i_2}), \tag{11.7}$$

якщо величини c_0, $c_2(1^{j1},-1^{i_1})$, $c_3(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})$, $c_4(1^{j_1},-1^{i_1},2^{j_2},-2^{i_2})$ взяти в границі низьких температур.

Розрахунок величини $\int\overline{R}(\rho|\rho)(d\rho)$ проведено в Додатку D, що дає змогу знайти нову рівність, еквівалентну рівності (11.5):

$$C_0 + C_J + 2\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\frac{C_2(\mathbf{q}_1)}{\alpha_{q_1}} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}$$
$$+\frac{12}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\frac{{C_3}^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}} = 0. \tag{11.8}$$

Провівши відповідні перетворення, отримаємо вирази для величин C_0 (C.1), $C_2(\mathbf{q}_1)$ (C.2), ${C_3}^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)$ (C.4), $C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)$ (C.5), які є зручними для аналізу (11.8). У результаті дійдемо висновку, що рівність (11.8), а отже й рівність (11.5), виконуються внаслідок справедливості співвідношень, які можна перевірити безпосередньою підстановкою значень величин, що входять до них:

$$-\frac{E_{q_1}^2+E_{q_2}^2}{E_{q_1}E_{q_2}(E_{q_1}+E_{q_2})} - \frac{1}{E_{q_1}+E_{q_2}} + \frac{E_{q_1}^2+E_{q_1}E_{q_2}+E_{q_2}^2}{E_{q_1}E_{q_2}(E_{q_1}+E_{q_2})} = 0, \tag{11.9}$$

$$-2A_1(q_1,q_2,q_3) - 2A_3(q_2,q_3,q_1) + 2A_2(q_3,q_2,q_1) + B_1(q_1,q_2,q_3)$$
$$-B_2(q_1,q_3,q_2) - B_2(q_3,q_2,q_1) + \frac{2}{(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_1})^2} + 4U_1(q_1,q_2,q_3) = 0, \tag{11.10}$$

$$2A_4(q_1,q_2,q_3)+2A_4(q_2,q_3,q_1)+2A_4(q_3,q_2,q_1)+B_1(q_1,q_2,q_3)+B_1(q_1,q_3,q_2) \\ +B_1(q_3,q_2,q_1)+\frac{2}{(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_1})^2}+4U_2(q_1,q_2,q_3)=0, \tag{11.11}$$

$$-2A_3(q_1,q_3,q_2)+2A_2(q_3,q_1,q_2)-2A_1(q_2,q_1,q_3)+B_1(q_1,q_2,q_3)-B_2(q_3,q_1,q_2) \\ -B_2(q_3,q_2,q_1)+\frac{2}{(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_1})^2}+4U_1(q_1,q_2,q_3)=0. \tag{11.12}$$

Явні вирази для величин $A_1(q_1,q_2,q_3)$, $A_2(q_1,q_2,q_3)$, $A_3(q_1,q_2,q_3)$, $A_4(q_1,q_2,q_3)$, $B_1(q_1,q_2,q_3)$, $B_2(q_1,q_2,q_3)$, $U_1(q_1,q_2,q_3)$, $U_2(q_1,q_2,q_3)$ подані у додатку B.

Рівність (11.5) служить нам додатковою перевіркою коректності проведених розрахунків.

XII. МАТРИЦЯ ГУСТИНИ В ГРАНИЦІ ВИСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Система частинок починає виявляти квантові властивості, коли довжина теплової хвилі де Бройля $\lambda=(2\pi\hbar^2/mT)^{1/2}$ стає сумірною з середньою відстанню між частинками. У границі високих температур довжина хвилі де Бройля безмежно зростає, а отже, квантові ефекти стають несумірно малими, тому вираз для матриці густини $R(\rho|\rho')$, яка описує систему взаємодіючих бозе-частинок у границі високих температур, мав би переходити у класичний, якщо покласти $\rho'=\rho$:

$$R(\rho|\rho)=\frac{1}{N!}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3N/2}e^{-\beta\Phi}, \tag{12.1}$$

де Φ — це потенціальна енергія, вираз для якої в представленні колективних змінних був записаний дещо раніше (3.6).

Проаналізуймо вираз для фактора $P(\rho|\rho')$ (9.13), який ураховує три- і чотиричастинкові кореляції, а також усі величини, які входять у цей вираз, у границі високих температур. Для цього передусім потрібно знайти значення інтеґралів L_1, L_2, L_3, $I^{p_1p_2}$ і відповідно L_1^0, L_2^0, L_3^0, $I_0^{p_1p_2}$ при $\beta\to 0$. У Додатку E наведені результати чисельних розрахунків, беручи до уваги які, дійдемо висновку, що величини Y (9.18), Y_1 (9.19), Y_2 (9.20), Y_3 (9.21), Y_4 (9.22) дорівнюють нулеві, а отже фактор $P(\rho|\rho')=1$. Це означає, що при $\beta\to 0$ матриця густини $R(\rho|\rho')$ (9.12) еквівалентна матриці густини в наближенні парних кореляцій, діагональні елементи якої своєю чергою, як було показано в [39], у границі високих температур дають класичний вираз (12.1).

XIII. ВИСНОВОК

У цій статті, виходячи з перших принципів, нам удалося розвинути метод розрахунку повної матриці густини багатобозонної системи в координатному зображенні для широкого інтервалу температур із урахуванням три- і чотиричастинкових прямих кореляцій у наближенні "двох сум за хвильовим вектором". У граничному випадку низьких температур, $\beta\to\infty$, вираз для знайденої матриці густини має очікуваний вигляд добутку хвильових функцій основного стану на больцманівський фактор з енерґією основного стану і збігається з уже відомим [28]. У границі високих температур, $\beta\to 0$, він відтворює класичний результат [39], що, по-перше, підтверджує коректність наших розрахунків, а, по-друге, дає підстави очікувати добрих кількісних розрахунків в околі λ-переходу. Хоча знайдений вираз для матриці густини в постRPA-наближенні і доволі громіздкий, а тому не дуже легкий для сприймання, однак його перевагою є те, що він зручний для використання при чисельному розрахунку термодинамічних і структурних функцій, що й буде предметом нашої наступної статті.

Автори висловлюють щиру подяку Романові Притулі і Андрієві Ровенчакові за конструктивні зауваження, корисні поради та пропозиції.

ДОДАТОК A

$$\sigma_1=\Delta_1\sigma_1+\Delta_2\sigma_1+\Delta_3\sigma_1.$$

$$\Delta_1\sigma_1+\Delta_2\sigma_1=-\frac{1}{3!}\frac{1}{4\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\frac{1}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_1}]\operatorname{sh}[\beta E_{q_2}]\operatorname{sh}[\beta E_{q_3}]} \\ \times\left[\overline{A}_1(1,2,3)(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{\mathbf{q}_3})+\overline{A}_2(1,2,3)(\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}+\rho_{\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{\mathbf{q}_3})\right. \\ \left.+\overline{A}_2(3,2,1)(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho'_{\mathbf{q}_3}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3})+\overline{A}_2(2,1,3)(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho'_{\mathbf{q}_3})\right],$$

де

$$\overline{A}_1(1,2,3) = \overline{A}(1,2,3)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})]-1}{2} + \overline{B}(1,2|3)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_3}-E_{q_1}-E_{q_2})]-1}{2}$$
$$+ \overline{B}(1,3|2)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_2}-E_{q_1}-E_{q_3})]-1}{2} + \overline{B}(2,3|1)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_1}-E_{q_2}-E_{q_3})]-1}{2},$$

$$\overline{A}_2(1,2,3) = \overline{A}(1,2,3)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_2}+E_{q_3})]-\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]}{2} + \overline{B}(1,2|3)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_2}-E_{q_3})]-\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]}{2}$$
$$+ \overline{B}(1,3|2)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_3}-E_{q_2})]-\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]}{2} + \overline{B}(3,2|1)\frac{\mathrm{ch}[\beta(E_{q_2}+E_{q_3})]-\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]}{2},$$

$$\overline{A}(1,2,3) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}+1)+(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_3}+1)+(\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}+1)}{E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3}},$$

$$\overline{B}(1,2|3) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}+1)-(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)(\alpha_{q_1}\alpha_{q_3}-1)-(\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3)(\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}-1)}{E_{q_1}+E_{q_2}-E_{q_3}}.$$

$$\Delta_3\sigma_1 = -\frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)\left\{\frac{1}{\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_2}]}\ \big[c_1(1,2)\left(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2}\right)\right.$$
$$+ 2c_2(1,2)\left(\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}+\rho_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2}\right) + 2c_2(2,1)\left(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2}\right)$$
$$+ c_3(1,2)\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2} + c_3(2,1)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2} + 4c_4(1,2)\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\big]$$
$$+ \frac{2}{\alpha_{q_2}\,\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]}c_2(2,1)\left(\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}+\rho'_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1}\right) + \frac{2}{\alpha_{q_1}\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_2}]}c_2(1,2)\left(\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}+\rho'_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2}\right)$$
$$+ \frac{4}{\alpha_{q_2}\,\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]}c_4(2,1)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho'_{-\mathbf{q}_1} + \frac{4}{\alpha_{q_1}\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}^2[\beta E_{q_2}]}c_4(1,2)\rho_{\mathbf{q}_2}\rho'_{-\mathbf{q}_2}$$
$$\left. + \frac{4}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]}c_4(2,1)\right\},$$

де

$$c_1(1,2) = \frac{1}{4}\left\{\frac{\mathrm{sh}[2\beta(E_{q_1}+E_{q_2})]}{4(E_{q_1}+E_{q_2})} + \frac{\mathrm{sh}[2\beta(E_{q_1}-E_{q_2})]}{4(E_{q_1}-E_{q_2})} - \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_1}]}{2E_{q_1}} - \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_2}]}{2E_{q_2}} + \beta\right\},$$

$$c_2(1,2) = -\frac{\mathrm{sh}[\beta(E_{q_1}+E_{q_2})]}{8(E_{q_1}+E_{q_2})}\,\mathrm{ch}[\beta E_{q_2}] - \frac{\mathrm{sh}[\beta(E_{q_2}-E_{q_1})]}{8(E_{q_2}-E_{q_1})}\,\mathrm{ch}[\beta E_{q_2}] + \frac{\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[2\beta E_{q_2}]}{8E_{q_2}} - \frac{\beta}{4}\,\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}] + \frac{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]}{4E_{q_1}},$$

$$c_3(1,2) = \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_1}]+\mathrm{sh}[2\beta E_{q_2}]}{16(E_{q_1}+E_{q_2})} + \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_2}]-\mathrm{sh}[2\beta E_{q_1}]}{16(E_{q_2}-E_{q_1})} - \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_1}]}{8E_{q_1}} - \frac{\mathrm{sh}[2\beta E_{q_2}]}{8E_{q_2}} + \frac{\beta}{4},$$

$$c_4(1,2) = \frac{\beta}{4}\,\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{ch}[\beta E_{q_2}] - \frac{\mathrm{ch}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]}{4E_{q_2}} - \frac{\mathrm{ch}[\beta E_{q_2}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]}{4E_{q_1}} + \frac{\mathrm{sh}[\beta(E_{q_1}+E_{q_2})]}{8(E_{q_1}+E_{q_2})} + \frac{\mathrm{sh}[\beta(E_{q_2}-E_{q_1})]}{8(E_{q_2}-E_{q_1})}.$$

Зауважимо, що

$$c_1(2,1) = c_1(1,2), \qquad c_4(2,1) = c_4(1,2).$$

ДОДАТОК В

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{L_1(a^{i_a},b^{i_b},c^{i_c})}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \begin{cases}\dfrac{1}{E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3}}, & i_1=i_2=i_3\\[2ex] 0, & \text{в інших випадках}\end{cases}, \tag{B.1}$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{L_2(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})}{\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \begin{cases}\dfrac{1}{E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3}}, & i_1=i_2=i_3\\[2ex] 0, & \text{в інших випадках}\end{cases}, \tag{B.2}$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{L_3(1',1,2',2)}{\prod\limits_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]}=\frac{1}{4}\beta+\frac{E_{q_1}^2+E_{q_1}E_{q_2}+E_{q_2}^2}{4E_{q_1}E_{q_2}(E_{q_1}+E_{q_2})}, \tag{B.3}$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{L_3(1^{j_1},1^{i_1},2',2)}{(\operatorname{sh}[\beta E_{q_1}])^2\operatorname{sh}[\beta E_{q_2}]}=\begin{cases}\dfrac{E_{q_2}}{4E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})}, & j_1=i_1\\ 0, & \text{в інших випадках}\end{cases}, \tag{B.4}$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{L_3(1^{j_1},1^{i_1},2^{j_2},2^{i_2})}{\left(\prod\limits_{l=1}^{2}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2}=\begin{cases}\dfrac{1}{2(E_{q_1}+E_{q_2})}, & j_1=i_1=j_2=i_2\\ 0, & \text{в інших випадках}\end{cases}, \tag{B.5}$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3'\\ a^j & b^j & c^j\end{pmatrix}}{\prod\limits_{l=1}^{3}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]}=\begin{cases}\dfrac{\beta}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})}+G_1, & j=0,\quad p_2=0\\ \dfrac{\beta}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})}+G_2, & j=0,\quad p_2=1\\ \dfrac{1}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, & j=1\end{cases}, \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}G_1={}&\frac{-E_{q_1}^4E_{q_2}E_{q_3}+E_{q_1}^4E_{q_3}^2-E_{q_1}^4E_{q_2}^2-2E_{q_1}^3E_{q_2}E_{q_3}^2-2E_{q_1}^3E_{q_2}^3-6E_{q_1}^3E_{q_2}^2E_{q_3}+2E_{q_1}^3E_{q_3}^3}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}}\\ &+\frac{2E_{q_1}^2E_{q_2}E_{q_3}^3-5E_{q_1}^2E_{q_2}^2E_{q_3}^2+E_{q_1}^2E_{q_3}^4-E_{q_1}^2E_{q_2}^4-6E_{q_1}^2E_{q_2}^3E_{q_3}-2E_{q_1}E_{q_2}^3E_{q_3}^2}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}}\\ &+\frac{3E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}^4-E_{q_1}E_{q_2}^4E_{q_3}+2E_{q_1}E_{q_2}^2E_{q_3}^3+E_{q_2}^4E_{q_3}^2+E_{q_2}^2E_{q_3}^4+2E_{q_2}^3E_{q_3}^3}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}G_2={}&-\frac{E_{q_1}^4E_{q_3}^2+E_{q_1}^4E_{q_2}^2+E_{q_1}^4E_{q_2}E_{q_3}+6E_{q_1}^3E_{q_2}^2E_{q_3}+2E_{q_1}^3E_{q_2}^3+6E_{q_1}^3E_{q_2}E_{q_3}^2+2E_{q_1}^3E_{q_3}^3}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}}\\ &-\frac{6E_{q_1}^2E_{q_2}^3E_{q_3}+E_{q_1}^2E_{q_3}^4+E_{q_1}^2E_{q_2}^4+6E_{q_1}^2E_{q_2}E_{q_3}^3+9E_{q_1}^2E_{q_2}^2E_{q_3}^2+E_{q_1}E_{q_2}^4E_{q_3}}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}}\\ &-\frac{6E_{q_1}E_{q_2}^3E_{q_3}^2+6E_{q_1}E_{q_2}^2E_{q_3}^3+E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}^4+2E_{q_2}^3E_{q_3}^3+E_{q_2}^4E_{q_3}^2+E_{q_2}^2E_{q_3}^4}{4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_2}+E_{q_3})E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3}}.\end{aligned}$$

Введімо позначення

$$U_1=G_1+1/4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2, \tag{B.7}$$
$$U_2=G_2+1/4(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2. \tag{B.8}$$

$$\begin{aligned}&\lim_{\substack{\beta\to\infty\\ i_2=i_3=1-i\\ j_2=j_3=i}}\frac{I^{00}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_1}]\prod\limits_{l=1}^{3}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]}=\lim_{\substack{\beta\to\infty\\ i_2=i_3=1-i}}\frac{I^{10}\begin{pmatrix}\mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\operatorname{sh}[\beta E_{q_1}]\prod\limits_{l=1}^{3}\operatorname{sh}[\beta E_{q_l}]}\\ &=\begin{cases}A_1, & \begin{cases}i=j=0, & j_1=i_1=0\\ i=j=1, & j_1=i_1=1\end{cases},\quad \eta^{|i-i_\eta|}=3',\ c^{|j-j_c|}=1,2,3\\ A_2, & \begin{cases}i=j=0, & j_1=i_1=0\\ i=j=1, & j_1=i_1=1\end{cases},\quad \eta^{|i-i_\eta|}=1,\ c^{|j-j_c|}=1,2,3\\ A_3, & \begin{cases}i=j=0, & j_1=i_1=0\\ i=j=1, & j_1=i_1=1\end{cases},\quad \eta^{|i-i_\eta|}=2',\ c^{|j-j_c|}=1,2,3\\ 0, & \text{в інших випадках}\end{cases},\end{aligned} \tag{B.9}$$

$$\lim_{\substack{\beta\to\infty\\ j_2=j_3=i}} \frac{I^{01}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3' \\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|} \end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\beta\to\infty} \frac{I^{11}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3' \\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|} \end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} \tag{B.10}$$

$$= \begin{cases} A_4, \ \begin{cases} i=j=0, \ j_1=i_1=0 \\ i=j=1, \ j_1=i_1=1 \end{cases}, \quad c^{|j-j_c|}=1,2,3 \\ \\ 0, \qquad \text{в інших випадках} \end{cases}, \tag{B.11}$$

де

$$A_1 = \frac{(2E_{q_1}^2 + 2E_{q_1}E_{q_2} + 2E_{q_1}E_{q_3} + E_{q_2}E_{q_3} + E_{q_2}^2)E_{q_3}}{2E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, \tag{B.12}$$

$$A_2 = \frac{2E_{q_2}^2E_{q_1} + E_{q_3}E_{q_2}^2 + 6E_{q_1}^2E_{q_2} + 6E_{q_1}E_{q_2}E_{q_3} + E_{q_2}E_{q_3}^2}{2E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2} + \frac{4E_{q_1}^3 + 2E_{q_3}^2E_{q_1} + 6E_{q_1}^2E_{q_3}}{2E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, \tag{B.13}$$

$$A_3 = \frac{(2E_{q_1}^2 + 2E_{q_1}E_{q_2} + 2E_{q_1}E_{q_3} + E_{q_2}E_{q_3} + E_{q_3}^2)E_{q_2}}{2E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, \tag{B.14}$$

$$A_4 = \frac{(2E_{q_1} + E_{q_2} + E_{q_3})E_{q_2}E_{q_3}}{2E_{q_1}(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_3})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}. \tag{B.15}$$

Далі

$$\lim_{\substack{\beta\to\infty\\ i_3=1-i\\ j_3=i}} \frac{I^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|} \\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|} \end{pmatrix}}{\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\substack{\beta\to\infty\\ i_3=1-i}} \frac{I^{10}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|} \\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|} \end{pmatrix}}{\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$

$$= \begin{cases} B_1, \ \begin{cases} i=j=0, \ j_1=i_1=j_2=i_2=0 \\ i=j=1, \ j_1=i_1=j_2=i_2=1 \end{cases}, \quad \eta^{|i-i_\eta|}=3', \ \ c^{|j-j_c|}=1,2,3 \\ \\ B_2, \ \begin{cases} i=j=0, \ j_1=i_1=j_2=i_2=0 \\ i=j=1, \ j_1=i_1=j_2=i_2=1 \end{cases}, \quad \eta^{|i-i_\eta|}=1,2 \ \ c^{|j-j_c|}=1,2,3 \\ \\ 0, \qquad \text{в інших випадках} \end{cases}, \tag{B.16}$$

$$\lim_{\substack{\beta\to\infty\\ j_3=i}} \frac{I^{01}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3' \\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|} \end{pmatrix}}{\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\beta\to\infty} \frac{I^{11}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2^{|i-i_2|} & 3' \\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|j-j_2|} & 3^{|i-j|} \end{pmatrix}}{\prod\limits_{m=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_m}]\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$

$$= \begin{cases} B_1, \ \begin{cases} i=j=0, \ j_1=i_1=j_2=i_2=0 \\ i=j=1, \ j_1=i_1=j_2=i_2=1 \end{cases}, \quad c^{|j-j_c|}=1,2,3 \\ \\ 0, \qquad \text{в інших випадках} \end{cases}, \tag{B.17}$$

де

$$B_1 = \frac{E_{q_3}}{(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, \tag{B.18}$$

$$B_2 = \frac{2E_{q_1} + 2E_{q_2} + E_{q_3}}{(E_{q_1}+E_{q_2})(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}. \tag{B.19}$$

ДОДАТОК C

$$C_0 + C_J = \frac{1}{8N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}\frac{E_{q_1}^2+E_{q_1}E_{q_2}+E_{q_2}^2}{E_{q_1}E_{q_2}(E_{q_1}+E_{q_2})} + \frac{1}{2N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_3=0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2$$
$$\times\left\{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)^2\left(\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_3}}U_1(q_1,q_2,q_3)+\frac{1}{\alpha_{q_3}}\left[U_1(q_1,q_2,q_3)+U_2(q_1,q_2,q_3)\right]+\frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}U_2(q_1,q_2,q_3)\right)\right.$$
$$\left.+2(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)\left(\alpha_{q_1}U_1(q_1,q_2,q_3)+\frac{1}{\alpha_{q_3}}\left[U_1(q_1,q_2,q_3)+U_2(q_1,q_2,q_3)\right]+\frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}U_2(q_1,q_2,q_3)\right)\right\}, \tag{C.1}$$

$$C_2(\mathbf{q}_1) = -\frac{1}{16N}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)}{\alpha_{q_2}}\frac{E_{q_1}^2+E_{q_2}^2}{E_{q_1}E_{q_2}(E_{q_1}+E_{q_2})} + \frac{1}{8N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_2\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_3\neq 0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\left\{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)^2\left(\frac{\alpha_{q_1}^2\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_3}}\left[-A_1(q_1,q_2,q_3)\right.\right.\right.$$
$$-A_3(q_2,q_3,q_1)+A_2(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{\alpha_{q_1}}{\alpha_{q_3}}\big[-A_1(q_1,q_2,q_3)-A_3(q_2,q_3,q_1)+A_2(q_3,q_2,q_1)+A_4(q_1,q_2,q_3)$$
$$\left.+A_4(q_2,q_3,q_1)+A_4(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{\left[A_4(q_1,q_2,q_3)+A_4(q_2,q_3,q_1)+A_4(q_3,q_2,q_1)\right]}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}\right)$$
$$+(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)\Big(\alpha_{q_1}^2\big[-A_3(q_1,q_3,q_2)-A_1(q_1,q_2,q_3)+A_2(q_3,q_1,q_2)-A_1(q_2,q_1,q_3)$$
$$+A_2(q_3,q_2,q_1)-A_3(q_2,q_3,q_1)\big]+\frac{\alpha_{q_1}}{\alpha_{q_3}}\big[-A_3(q_1,q_3,q_2)+2A_4(q_1,q_2,q_3)+A_2(q_3,q_1,q_2)$$
$$+2A_4(q_2,q_3,q_1)-A_3(q_2,q_3,q_1)+2A_4(q_3,q_2,q_1)-A_1(q_1,q_2,q_3)-A_1(q_2,q_1,q_3)$$
$$\left.+A_2(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{2}{\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}\left[A_4(q_1,q_2,q_3)+A_4(q_2,q_3,q_1)+A_4(q_3,q_2,q_1)\right]\Big)\right\}, \tag{C.2}$$

$$C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) = -\frac{1}{12}\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\substack{1\le a<b\le 3\\ a,b\neq c\le 3}}\frac{(\mathbf{q}_a\mathbf{q}_b)(\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}+1)}{E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3}}, \tag{C.3}$$

$$C_3{}^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) = \frac{1}{48}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)^2(\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}+1)^2+2(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)(\alpha_{q_1}^2\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}+2\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}+1)}{(E_{q_1}+E_{q_2}+E_{q_3})^2}, \tag{C.4}$$

$$C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2) = -\frac{1}{16}\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1^2+\mathbf{q}_2^2)\frac{1}{(E_{q_1}+E_{q_2})}+\frac{1}{16}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\left\{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)^2\left(\frac{\alpha_{q_1}^2\alpha_{q_2}^2}{\alpha_{q_3}}\left[B_1(q_1,q_2,q_3)\right.\right.\right.$$
$$-B_2(q_1,q_3,q_2)-B_2(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_3}}\big[2B_1(q_1,q_2,q_3)+B_1(q_1,q_3,q_2)-B_2(q_1,q_3,q_2)$$
$$\left.+B_1(q_3,q_2,q_1)-B_2(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{\left[B_1(q_1,q_2,q_3)+B_1(q_1,q_3,q_2)+B_1(q_3,q_2,q_1)\right]}{\alpha_{q_3}}\right)$$
$$+(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3)\Big(\alpha_{q_1}^2\alpha_{q_2}\left[2B_1(q_1,q_2,q_3)-B_2(q_1,q_3,q_2)-B_2(q_3,q_1,q_2)-2B_2(q_3,q_2,q_1)\right]$$
$$+\frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}}{\alpha_{q_3}}\big[2B_1(q_1,q_3,q_2)-B_2(q_1,q_3,q_2)+4B_1(q_1,q_2,q_3)-B_2(q_3,q_1,q_2)+2B_1(q_3,q_2,q_1)$$
$$\left.-2B_2(q_3,q_2,q_1)\big]+\frac{2}{\alpha_{q_3}}\left[B_1(q_1,q_2,q_3)+B_1(q_1,q_3,q_2)+B_1(q_3,q_2,q_1)\right]\Big)\right\}. \tag{C.5}$$

Використані позначення $U_1(q_1,q_2,q_3)$, $U_2(q_1,q_2,q_3)$, $A_1(q_1,q_2,q_3)$, $A_2(q_1,q_2,q_3)$, $A_3(q_1,q_2,q_3)$, $A_4(q_1,q_2,q_3)$, $B_1(q_1,q_2,q_3)$, $B_2(q_1,q_2,q_3)$ відповідають тим самим величинам U_1 (B.7), U_2 (B.8), A_1 (B.12), A_2 (B.13), A_3 (B.14), A_4(B.15), B_1 (B.18), B_2 (B.19), що були знайдені раніше. Такі розширені позначення дають змогу описати величини, що утворюються з уже згаданих перестановкою хвильових векторів, наприклад, позначення $A_1(q_3,q_2,q_1)$ зображає величину A_1, у якій у всіх виразах, що входять до її складу, залежність від модуля хвильового вектора $\mathbf{q}_1$ замінюється на залежність від модуля хвильового вектора $\mathbf{q}_3$ і навпаки. У наших розрахунках ми використали також властивості симетрії величин U_1, U_2, A_4, B_1, B_2 стосовно перестановок хвильових векторів у їхніх виразах:

$$
\begin{aligned}
A_4(q_a,q_b,q_c) &= A_4(q_a,q_c,q_b),\\
B_1(q_a,q_b,q_c) &= B_1(q_b,q_a,q_c),\\
B_2(q_a,q_b,q_c) &= B_2(q_b,q_a,q_c),\\
U_1(q_a,q_b,q_c) &= U_1(q_b,q_a,q_c).
\end{aligned}
$$

Величина $U_2(q_1,q_2,q_3)$ є симетричною стосовно будь-яких перестановок модулів хвильових векторів $\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3$.

ДОДАТОК D

Оскільки проінтеґрувати точно вираз $\int \overline{R}(\rho|\rho)(d\rho)$ дуже складно, то перепишімо його як середнє за величиною $\exp\left[-1/2\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]$. Отже,

$$
\begin{aligned}
\int \overline{R}(\rho|\rho)(d\rho) = e^{-\beta E_0}\left(\prod_{\mathbf{q}\neq0}{}'\frac{\alpha_q}{\pi}\right)\exp\left[C_0+C_J\right]\int\exp\left[-\frac12\sum_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)\,\Bigg\langle\exp\Bigg[2\sum_{\mathbf{q}_1\neq0}C_2(\mathbf{q}_1)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\\
+\frac{2}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq0}C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}+\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\Bigg]\Bigg\rangle_p.
\end{aligned}
\tag{D.1}
$$

Інтеґрал, який стоїть у правій частині написаної вище рівності, легко знайти, звернувшись до означень (3.13), (3.14):

$$
\int\exp\left[-\frac12\sum_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)=\prod_{\mathbf{q}\neq0}{}'\int_{-\infty}^{\infty}d\rho^c_{\mathbf{q}}\int_{-\infty}^{\infty}d\rho^s_{\mathbf{q}}\exp\left[-\frac12\sum_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q({\rho^s_{\mathbf{q}}}^2+{\rho^c_{\mathbf{q}}}^2)\right]=\prod_{\mathbf{q}\neq0}{}'\frac{\pi}{\alpha_q}.
\tag{D.2}
$$

Відтак скористаймося концепцією кумулянтних розкладів, за допомогою якої в прийнятому наближенні “двох сум за хвильовим вектором” отримаємо:

$$
\begin{aligned}
\int \overline{R}(\rho|\rho)(d\rho) = e^{-\beta E_0}\exp\left[C_0+C_J\right]\exp\Bigg[2\sum_{\mathbf{q}_1\neq0}C_2(\mathbf{q}_1)\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\right\rangle_p\\
+\frac{2}{\sqrt{N}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq0}C_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\right\rangle_p+\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\right\rangle_p\\
+\frac{12}{N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq0\\ \mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3=0}}\sum_{\mathbf{q}_2\neq0}\sum_{\mathbf{q}_3\neq0}{C_3}^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)\left[\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_3}\right\rangle_p-\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\right\rangle_p\left\langle\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_3}\right\rangle_p\right]\Bigg],
\end{aligned}
\tag{D.3}
$$

де

$$
\left\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\right\rangle_p=\frac{\int\exp\left[-\frac12\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}(d\rho)}{\int\exp\left[-\frac12\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)}=\frac{-\frac{\delta}{\delta\alpha_{q_1}}\int\exp\left[-\frac12\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)}{\int\exp\left[-\frac12\sum\limits_{\mathbf{q}\neq0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)}=\frac{1}{\alpha_{q_1}},
\tag{D.4}
$$

$$\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\rangle_p = \frac{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}(d\rho)}{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)} = 0, \tag{D.5}$$

$$\begin{aligned}\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\rangle_p &= \frac{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}(d\rho)}{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)} \\ &= \frac{\frac{\delta^2}{\delta\alpha_{q_1}\delta\alpha_{q_2}}\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)}{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)} = \frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}},\end{aligned} \tag{D.6}$$

$$\begin{aligned}\langle\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\rho_{-\mathbf{q}_3}\rangle_p &= \frac{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right]\rho_{\mathbf{q}_1}\rho_{-\mathbf{q}_1}\rho_{\mathbf{q}_2}\rho_{-\mathbf{q}_2}\rho_{\mathbf{q}_3}\rho_{-\mathbf{q}_3}(d\rho)}{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)} \\ &= \frac{-\frac{\delta^3}{\delta\alpha_{q_1}\delta\alpha_{q_2}\delta\alpha_{q_3}}\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)}{\int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{q}\neq 0}\alpha_q\rho_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}}\right](d\rho)} = \frac{1}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}.\end{aligned} \tag{D.7}$$

З урахуванням знайдених величин (D.4), (D.5), (D.6), (D.7), вираз (D.3) набуде вигляду:

$$\int \overline{R}(\rho|\rho)(d\rho) = e^{-\beta E_0}e^{C_0+C_J}\exp\left[2\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\frac{C_2(\mathbf{q}_1)}{\alpha_{q_1}} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{q}_1\neq 0}\sum_{\mathbf{q}_2\neq 0}\frac{C_4(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2)}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}} + \frac{12}{N}\sum_{\substack{\mathbf{q}_1\neq 0 \\ \mathbf{q}_1+}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_2\neq 0 \\ \mathbf{q}_2+}}\sum_{\substack{\mathbf{q}_3\neq 0 \\ \mathbf{q}_3=0}}\frac{{C_3}^2(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3)}{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_3}}\right].$$

ДОДАТОК E

$$\lim_{\beta\to 0}\frac{L_1^0(a^{i_a},b^{i_b},c^{i_c})}{\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]} = \alpha_{q_a}\alpha_{q_b}\lim_{\beta\to 0}\frac{L_1(a^{i_a},b^{i_b},c^{i_c})}{\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \frac{T}{2\varepsilon_{q_a}\varepsilon_{q_b}}, \tag{E.1}$$

$$\lim_{\beta\to 0}\frac{L_2(1^{i_1},2^{i_2},3^{i_3})}{\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = 0, \tag{E.2}$$

$$\lim_{\beta\to 0}\frac{L_3(1',1,2',2)}{\prod\limits_{l=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\beta\to 0}\frac{L_3(1^{j_1},1^{i_1},2',2)}{\left(\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\right)^2\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]} = \lim_{\beta\to 0}\frac{L_3(1^{j_1},1^{i_1},2^{j_2},2^{i_2})}{\left(\prod\limits_{l=1}^{2}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]\right)^2} = 0, \tag{E.3}$$

$$\lim_{\beta\to 0}\frac{I^{p_1p_2}\begin{pmatrix}1' & 2' & 3' \\ a^j & b^j & c^j\end{pmatrix}}{\prod\limits_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = 0, \tag{E.4}$$

$$\lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_2=i_3=1-i\\ j_2=j_3=i}} \frac{I_0^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]} = \frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_\eta}} \lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_2=i_3=1-i\\ j_2=j_3=i}} \frac{I^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$
$$= K(\mu,\nu,\eta,i,j)\frac{\varepsilon_{q_\eta}}{\varepsilon_{q_1}\varepsilon_{q_a}\varepsilon_{q_b}}, \tag{E.5}$$

$$\lim_{\substack{\beta\to 0\\ j_2=j_3=i}} \frac{I^{01}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_2=i_3=1-i}} \frac{I^{10}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$
$$= \lim_{\beta\to 0} \frac{I^{11}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = 0.$$

Так само

$$\lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_3=1-i\\ j_3=i}} \frac{I_0^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_2}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta\varepsilon_{q_l}]} = \frac{\alpha_{q_1}\alpha_{q_2}\alpha_{q_a}\alpha_{q_b}}{\alpha_{q_\eta}} \lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_2=i_3=1-i\\ j_2=j_3=i}} \frac{I^{00}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ a^{|j-j_a|} & b^{|j-j_b|} & c^{|j-j_c|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$
$$= \widetilde{K}(\mu,\nu,\eta,i,j)\frac{T\varepsilon_{q_\eta}}{\varepsilon_{q_1}\varepsilon_{q_2}\varepsilon_{q_a}\varepsilon_{q_b}}, \tag{E.6}$$

де $K(\mu,\nu,\eta,i,j)$, $\widetilde{K}(\mu,\nu,\eta,i,j)$ — це константи, які залежать від величин, що записані в дужках. Для нашого аналізу їхні числові значення непотрібні, тому й не вказані явно. Далі

$$\lim_{\substack{\beta\to 0\\ j_3=i}} \frac{I^{01}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = \lim_{\substack{\beta\to 0\\ i_2=i_3=1-i}} \frac{I^{10}\begin{pmatrix} \mu^{|i-i_\mu|} & \nu^{|i-i_\nu|} & \eta^{|i-i_\eta|}\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]}$$
$$= \lim_{\beta\to 0} \frac{I^{11}\begin{pmatrix} 1^{|i-i_1|} & 2' & 3'\\ 1^{|j-j_1|} & 2^{|i-j|} & 3^{|i-j|}\end{pmatrix}}{\mathrm{sh}[\beta E_{q_1}]\,\mathrm{sh}[\beta E_{q_2}]\prod_{l=1}^{3}\mathrm{sh}[\beta E_{q_l}]} = 0. \tag{E.7}$$

---

[1] S. Bose, Z. Phys. **26**, 178 (1924).
[2] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Königl. Akad. Wiss.: phys.-math. Klasse, 261 (1924).
[3] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Königl. Akad. Wiss.: phys.-math. Klasse, 3 (1925).
[4] W. H. Keesom, A. P. Keesom, Commun. Phys. Lab. Leiden **221d**, 19 (1932).
[5] К. Хуанг, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1966).
[6] Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике* (Мир, Москва, 1969).
[7] А. Исихара, *Статистическая физика* (Мир, Москва, 1973).
[8] Р. Фейнман, *Статистическая механика* (Мир, Москва, 1978).
[9] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, T. C. P. Chui, U. E. Israelsson, Phys. Rev. Lett. **76**, 944 (1996).
[10] J. A. Lipa, D. R. Swanson, J. A. Nissen, Z. K. Geng, P. R. Williamson, D. A. Stricker, T. C. P. Chui, U. E. Israelsson, M. Larson, Phys. Rev. Lett. **84**, 4894 (2000).
[11] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **35**, 76 (1978); Теор. мат. физ. **36**, 122 (1978).
[12] H. Kleinert, Phys. Rev. D **60**, 085001 (1999).
[13] H. Kleinert, Phys. Lett. A **277**, 205 (2000).
[14] M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari, Phys. Rev. B **61**, 5905 (2000).
[15] F. London, Nature. **141**, 643 (1938).
[16] F. London, Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
[17] P. Kapitza, Nature. **141**, 74 (1938).
[18] Л. Д. Ландау, Журн. эксп. теор. физ. **11**, 592 (1941).
[19] Н. Н. Боголюбов, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. **11**, 77 (1947).

[20] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Журн. эксп. теор. физ. **28**, 129 (1955).
[21] N. M. Hugenholtz, D. Pines, Phys. Rev. **116**, 489 (1959).
[22] С. Т. Беляев, Журн. эксп. теор. физ. **34**, 417 (1958).
[23] С. Т. Беляев, Журн. эксп. теор. физ. **34**, 433 (1958).
[24] S. Sunakava, Y. Yoko-o, H. Nakatani, Prog. Theor. Phys. **27**, 589 (1962).
[25] S. Sunakava, Y. Yoko-o, H. Nakatani, Prog. Theor. Phys. **27**, 600 (1962).
[26] І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **9**, 702 (1964).
[27] І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **9**, 827 (1964).
[28] И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновський, Теор. мат. физ **40**, 100 (1979).
[29] И. Р. Юхновский, И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **42**, 112 (1980).
[30] И. А. Вакарчук, П. А. Глушак, Теор. мат. физ. **75**, 101 (1988).
[31] И. А. Вакарчук, П. А. Глушак, препринт АН УССР, № ИТФ–88–29Р, Киев, 1988.
[32] S. Sunakava, S. Yamasaki, T. Kebukava, Prog. Theor. Phys. **41**, 919 (1969).
[33] D. M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
[34] M. H. Kalos, Phys. Rev. **128**, 1791 (1962).
[35] J. C. Slater, J. G. Kirkwood, Phys. Rev. **37**, 682 (1931).
[36] R. A. Aziz, M. J. Slaman, J. Chem. Phys. **94**, 8047 (1991).
[37] R. A. Aziz, M. J. Slaman, A. Koide, A. R. Allnatt, W. J. Meath, Mol. Phys. **77**, 321 (1992).
[38] І. О. Вакарчук, Журн. фіз. досл. **1**, 25 (1996).
[39] I. O. Vakarchuk, J. Phys. Stud. **8**, 223 (2004).
[40] Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды, т. 2* (Наукова думка, Киев, 1969).
[41] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **23**, 260 (1975).
[42] І. О. Вакарчук, Журн. фіз. досл. **1**, 156 (1997).
[43] W. L. McMillan, Phys. Rev. A **138**, 442 (1965).
[44] D. Schiff, L. Verlet, Phys. Rev. **160**, 208 (1967).
[45] V. F. Sears, Phys. Rev. B **28**, 5109 (1983).
[46] F. K. Achter, L. Meyer, Phys. Rev. **188**, 291 (1969).
[47] H. N. Robkoff, Phys. Rev. B. **24**, 159 (1981).
[48] H. E. Stenley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971).
[49] V. D. Arp, R. D. McCarty, D. G. Friend, Natl. Inst. Stand. Technol. Tech. Note 1334 (1998).
[50] И. А. Вакарчук, Теор. мат. физ. **82**, 438 (1990).
[51] І. О. Вакарчук, Р. О. Притула, Журн. фіз. досл. **12**, 4001 (2008).
[52] И. А. Вакарчук, доктор. диссерт., Институт теоретической физики АН УССР, Киев (1979).
[53] І.О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2007).
[54] O. Penrose, Philos. Mag. **42**, 1373 (1951).
[55] R. P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1291 (1953); **91**, 1301 (1953); **94**, 262 (1954).

DENSITY MATRIX OF THE MANY-BOSON SYSTEM WITH THE CONSIDERATION OF THREE- AND FOUR-PARTICLE DIRECT CORRELATIONS

I. O. Vakarchuk, O. I. Hryhorchak
Chair for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,
12, Drahomanov St., Lviv, UA–79005, Ukraine

In this article the density matrix of the interacting Bose-particles with three- and four-particle direct correlations taken into account is found in the coordinate representation for a wide temperature domain from the first principles. In the low temperature limit the obtained expression for the density matrix agrees with the already known one [I. O. Vakarchuk, I. R. Yukhnovskii, Theor. Math. Phys **40**, 626 (1979)] and has the form of the product of the ground-state wave functions with three- and four-particle direct correlations taken into account and the factor $e^{-E_0/T}$, where T is the temperature of the system, E_0 is the ground state energy in the approximation of "two sums over the wave vector". For high temperatures in the quasi-classical limit the obtained expression is equal to the product of the partition function of classical ideal gas and the Boltzmann factor. The results of this work can be applied to the calculation of the thermodynamic and structure functions of liquid ^{4}He in order to check the theoretical and experimental results quantitavely, especially in the λ-transition region.