Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

ПАНОЧКО

Галина Іванівна

УДК 530.145+538.941

ДОМІШКОВІ СТАНИ БАГАТОБОЗОННОЇ СИСТЕМИ НА ПРИКЛАДІ ІЗОТОПІВ ГЕЛІЮ

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2018

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор **Вакарчук Іван Олександрович**, професор кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, головний науковий співробітник відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем НАН України;

доктор фізико-математичних наук, професор **Ткач Микола Васильович,** завідувач кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича

Захист відбудеться "____" _____ 2018 р. о 15 год. 00 хв. на засіданні спеціалізованої Вченої ради Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8, фізичний факультет, аудиторія Велика Фізична.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Драгоманова, 5.

Автореферат розіслано "____" _____ 2018 р.

Вчений секретар
спеціалізованої Вченої ради
доктор фіз.-мат. наук

Ровенчак А. А.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Історично склалось так, що напрями досліджень багатобозонних систем розвивались поступово, і поряд з ними зростав інтерес до аналізу поведінки домішок у двокомпонентних сумішах на основі ізотопів гелію ^{3}He, ^{4}He та ^{6}He [T. V. Davison, Phys. Rev. **178**, 306 (1969); K. E. Kurten, Phys. Rev. B: **37**, 3359 (1988); Phys. Rev. A **61**, 063613 (2000); M. Lemeshko, Phys. Rev. Lett. **118**, 095301 (2017), M. Boninsergni, J. Chem. Phys. **148**, 102308 (2018)], а згодом ізотопів рубідію ^{87}Rb [M. G. Hu, Phys. Rev. Lett., **117**, 055301 (2016); N. B. Jorgensen, Phys. Rev. Lett., **117**, 055302 (2016)] та стронцію ^{84}Sr [F. Camargo, Phys. Rev. Lett., **120**, 083401 (2018)]. Насамперед, це пов’язано з експериментальною можливістю отримувати бозе-конденсат на основі атомів ультрахолодних газів; спостерігати наявність конденсатної фракції для багатобозонних систем, що знаходяться в пастках; досліджувати виснаження бозе-конденсату рухомими домішками. А це вже є вагомим кроком у дослідженні домішкових станів в квантових рідинах, зокрема, статистичних та динамічних властивостей окремих бозе-поляронів (квазічастинок, які утворюються внаслідок взаємодії домішкового атома з бозе-середовищем), а також вивчення ефектів взаємодії багатополяронних систем.

Підходи, що дають змогу досліджувати домішкові стани у взаємодіючих бозе-системах, грунтуються на Монте-Карло симуляціях [Pena Ardila, Phys. Rev. A, **94**, № 6, 063640 (2016)], варіаційних [W. Li, Phys. Rev. A, **90**, № 1, 013618, (2014)] та ренормгрупових [F. Grustd, Phys. Rev. B, **93**, № 14, 144302, (2016)] методах і розрахунках, де використовується діаграмна техніка [R. S. Christensen, Phys. Rev. Lett, **115**, № 16, 160401, (2015)]. І хоча інформація про основний стан класичного полярона є повною, причому, розв'язок в границі слабкого зв'язку отриманий Фрьоліхом, а в границі сильного – Пекаром, точного розв'язку для бозе-полярона немає ні для модельних систем, ні для домішкового атома, що рухається в такій сильно неідеальній системі, як рідкий гелій-4. Також залишається відкритим питання щодо моделювання бозон-домішкової взаємодії при довільних імпульсах домішок і навіть у довгохвильовій границі. Окрім того, до кінця не вирішеною є проблема опису багаточастинкових кореляцій у бозе-рідині.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у Львівському національному університеті імені Івана Франка та згідно держбюджетних тем Фф-55Ф «Теоретичні дослідження нових квантових систем» (2006-2008 рр., номер д/р №0106U001294), Фф-110Ф «Нові ефекти у квантових рідинах і газах та системах з деформованою алгеброю Гайзенберґа» (2012–2014 рр., номер д/р 0112U001275), Фф-30Ф «Класичні і квантові системи з

нестандартними комутаційними співвідношеннями і статистиками» (2016 р., номер д/р 0116U001539).

Мета і задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи є вивчення впливу бозе-середовища на поведінку домішкових атомів а також побудова самоузгодженої схеми розрахунку мікроскопічних характеристик такої багаточастинкової системи.

Основними завданнями дисертаційної роботи є дослідження домішкових станів та знаходження параметрів домішкового спектра в слабковзаємодіючому бозе-газі і у рідкому гелії-4, що є сильноскорельованою системою.

Об'єктом дослідження є багатобозонні системи з малою концентрацією домішок, зокрема, ізотопів гелію. *Предметом дослідження* є термодинамічні та структурні характеристики системи вцілому а також властивості домішкового спектра багатобозонної системи, в границі низьких температур. *Методами дослідження* виступають методи теорії збурень, колективних змінних, варіаційний та теоретико-польовий підхід, а також метод врахування багаточастинкових кореляцій деформуванням комутаційних співвідношень між колективними координатами та імпульсами.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше проаналізовано межі застосовності теорії збурень на прикладі проблеми стабільності бозе-полярона у слабковзаємодіючому бозе-газі.

В рамках варіаційного підходу вперше знайдено повний структурний фактор системи "бозе-рідина плюс домішковий атом" з урахуванням парціального внеску, що описує вплив домішки на поведінку бозе-рідини. В границі слабкої бозон-домішкової взаємодії вперше обчислено енергію домішкового атома для різних густин бозе-середовища, на прикладі домішки ^{3}He, що занурена в рідкий гелій-4 з урахуванням непрямих кореляцій між бозе-частинками.

Вперше запропоновано спосіб врахування нелінійних флуктуації густини атомів бозе-рідини шляхом деформації комутаційних співвідношень для колективних координат та імпульсів. Вперше в лінійному наближенні за параметром деформації аналітично та чисельно розраховано енергію та ефективну масу домішкового атома на прикладі домішки ^{3}He в залежності від густини рідкого гелію-4.

Для власноенергетичної частини домішкового спектра використано скелетну діаграмну техніку, яка передбачає розв'язування рівнянь для вершинної функції методом послідовних наближень. На підставі цього вперше проведено самоузгоджений розрахунок ефективної маси бозе-полярона.

Практичне значення отриманих результатів. Підходи, розвинуті в дисертаційній роботі можна застосовувати до моделей, які передбачають розгляд домішкових станів в бозе-середовищі за теорією збурень. Результати щодо

параметрів спектра бозе-полярона можна використати для аналізу сучасних експериментів з холодними газами. Способи врахування багатобозонних кореляцій можуть бути корисними при вивченні домішкових станів у потенціальних пастках. Процедура врахування скелетних діаграм може бути використана для аналізу домішкового спектра низькорозмірних систем. Усі результати дисертаційної роботи можна узагальнити на випадок поведінки домішкових атомів рідкісноземельних газів в сильноскорельованих бозе-середовищах.

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи проф. І. О. Вакарчук. Усі викладені в дисертації результати автор отримав самостійно або при своїй безпосередній участі.

У статті [1], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: варіаційний розрахунок повної енергії системи “домішка плюс бозе-рідина” з урахуванням непрямих бозонних кореляцій у хвильовій функції бозе-рідини; знаходження повного структурного фактора системи “домішка плюс бозе-рідина”; чисельний розрахунок енергії розділення домішкового атома ^{3}He при різних густинах рідкого гелію-4; чисельні результати для одночастинкової матриці густини на прикладі ізотопів гелію; оцінка відносної кількості бозе-конденсату за наявності домішкових атомів.

У статті [2], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: знаходження хвильової функції бозе-рідини з деформованими колективними координатами та імпульсами; розрахунок термодинамічних та структурних функцій бозе-рідини з деформованими колективними координатами.

У статті [3], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: аналітичний розрахунок внеску у власноенергетичну частину домішкової функції Гріна у першому наближенні; чисельний розрахунок в першому наближенні ефективної маси та енергії занурення домішкового атома на прикладі ізотопів гелію в бозе-середовище методом функціонального інтегрування.

У статті [4], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: знаходження енергії основного стану системи “домішковий атом плюс бозе-рідина” з урахуванням модельного параметра деформації; чисельний розрахунок енергії розділення та ефективної маси домішкового атома при різних густинах бозе-середовища з урахуванням деформації а також вплив домішкових атомів на бозе-рідину;

У статті [5], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: дослідження рівнянь для домішкового спектру та його загасання пертурбативними методами; обчислення поправки до домішкового спектра в границі теорії збурень Релея-Шредінгера; чисельний розрахунок енергії та ефективної маси притягального та відштовхувального бозе-поляронів;

У статті [6], виконаній зі співавторами, здобувачеві належить: аналітичний розрахунок внеску у власноенергетичну частину домішкової функції Гріна в другому наближенні; аналіз рівняння для вершинної функції методом послідовних наближень; чисельний розрахунок ефективної маси та енергії занурення домішкового атома в бозе-середовище теоретико-польовим методом.

Результати статей, їхню інтерпретацію та застосовність використаних підходів співавтори обговорювали на паритетних засадах.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що включені до дисертації, здобувач представляла особисто на таких конференціях та семінарах: “International Conference on Quantum Fluids and Solids” (Grenoble, France 2010) [7]; International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Kyiv, 2010) [8]; Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2011 (Ужгород, 2011) [9]; III Young Scientists Conference “Modern Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, 2011) [10]; 12-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, (Львів, 2012) [11]; “International Conference on Quantum Fluids and Solids” (Lancaster, UK, 2012) [12]; Різдвяні дискусії 2012 (Львів, 2012) [13]; “5th Workshop on Current Problems in Physics”, (Lviv, 2012) [14]; “6th Workshop on Current Problems in Physics ” (Zielona Góra, Poland 2013) [15]; VI International Conference “Physics of Disordered Systems”, (Lviv, 2013) [16]; Різдвяні дискусії 2014 (Львів, 2014) [17]; 15-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2015) [18]; 7th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Kyiv, 2016) [19]; Різдвяні дискусії 2017 (Львів, 2017) [20]; 17-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2017) [21]; “Workshop on Current Problems in Physics” (Zielona Góra, Poland 2017) [22].

Подані в роботі результати неодноразово обговорювали на наукових семінарах кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковано в шести журнальних статтях [1–6], із яких 5 — у виданнях, що індексуються у Scopus [1, 2, 4–6] та сімнадцятьох тезах доповідей на конференціях [7–23].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, п’яти розділів, висновків та списку використаних джерел. Обсяг дисертації становить 150 сторінок включно зі списком використаних джерел, що містить 199 найменувань. Роботу проілюстровано 20 рисунками та 3 таблицями.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність досліджень, наведено зв'язок дисертаційної роботи з науковими темами, сформульовано мету роботи, висвітлено новизну отриманих результатів.

У **першому розділі** окреслено історичні передумови та сучасний стан досліджень бозе-поляронів а також висвітлено підходи, що є застосовними до вивчення домішкових станів у взаємодіючих багатобозонних середовищах.

У другому розділі «*Домішковий атом у слабковзаємодіючому бозе-газі*» вивчено властивості домішки, що рухається в розрідженому бозе-газі, моделюючи бозон-домішкову взаємодію короткодіючим потенціалом.

Сукупність N бозе-частинок, які слабко взаємодіють між собою та домішковим атомом можна описати гамільтоніаном фрьолівського типу, який складається з оператора кінетичної енергії домішки $\widehat{H}_I = \frac{\widehat{\mathbf{P}}^2}{2M}$, гамільтоніана багатобозонної підсистеми $\widehat{H}_B$, що враховує взаємодію бозе-частинок у наближенні Боголюбова, а також оператора $\widehat{H}_{int}$, що враховує найпростіші процеси розсіяння домішкового атома на боголюбівських квазічастинках:

$$\widehat{H}_B = E_B + \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \hbar\omega_k \hat{b}^+_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \tag{1}$$

$$\widehat{H}_{int} = \rho\bar{v}(0) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \bar{v}(k) \sqrt{\frac{\varepsilon_k}{\hbar\omega_k}} \left(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}^+_{-\mathbf{k}}\right) e^{i\mathbf{kr}} \tag{2}$$

тут E_B – енергія основного стану бозе-частинок, $\hbar\omega_k$ – спектр Боголюбова, ρ - густина бозе-середовища, $\mathbf{r}$ – координата домішки. Величина $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$ є вільночастинковим спектром бозе-частинок, а $\bar{v}(k)$ є фур'є-образом потенціалу бозон-домішкової взаємодії.

Домішка, рухаючись в середовищі бозонів з імпульсом $\hbar\mathbf{q}$, завжди втрачатиме енергію. Якщо домішка в середовищі зазнаватиме відштовхування (відштовхувальний бозе-полярон), то її енергія $\Delta\varepsilon_q$ буде іти на випромінювання фононів, і $\Delta\varepsilon_q > 0$. Якщо ж взаємодія між частинками буде притягальною (притягальний полярон), то $\Delta\varepsilon_q$ може набувати довільних значень. Причому, у випадку сильної притягальної бозон-домішкової взаємодії, домішка самолокалізується, і можуть утворитись полярон-бозонні зв'язані стани «домішка плюс частинки середовища». Швидкість втрати енергії домішкою визначатиметься загасанням домішкового спектра Γ_q, і його величина фактично вказуватиме на час життя бозе-полярона. За умови $\Gamma_p/\Delta\varepsilon_p \ll 1$, домішкові стани у сильно розрідженому бозе-середовищі будуть завжди добре визначеними.

Скориставшись теорією збурень Релея-Шредінгера, нами отримано повну імпульсну залежність домішкового спектра:

$$\Delta\tilde{\varepsilon}_p = \frac{p^2}{2\gamma} + \frac{\bar{a}}{a}\frac{1+\gamma}{2\gamma}\left[1 + \frac{\bar{a}}{a}\sqrt{\frac{\rho a^3}{\pi}}\,\epsilon_p(\gamma)\right] \tag{3}$$

тут $\gamma = M/m$, $\Delta\tilde{\varepsilon}_p = \Delta\varepsilon_p/mc^2$, $p = \hbar q/mc$ – знерозмірені маса, енергія, імпульс відповідно. Для мікроскопічних параметрів системи використано стандартні позначення: c – швидкість звуку в середовищі, $\bar{a}$ – довжина *s*-розсіяння домішки на бозе-частинці, ρa^3 – газовий параметр, який визначає інтенсивність відштовхування між бозе-частинками. Величина $\epsilon_p(\gamma)$ є знерозміреною поправкою до спектра домішки, що обчислена нами в термодинамічній границі, з точністю до другого порядку звичайної теорії збурень.

Аналіз поведінки спектра (3) та його загасання $\tilde{\Gamma}_p = \Gamma_p/mc^2$ (явний вигляд якого ми не наводимо, через громіздкість запису), узгоджується з відомими результатами в теорії бозе-полярона: $\Delta\tilde{\varepsilon}_p|_{p\to\infty}\sim p^2$, $\Delta\tilde{\varepsilon}_p|_{p\to 0} \to \Delta\tilde{\varepsilon}_0 \neq 0$, $\tilde{\Gamma}_p|_{p\to 0} \to 0$. Також нами показано, що спектр домішки (3) буде загасати лише за умови $p > \gamma$. Це означає, що домішка з імпульсом $\hbar\mathbf{q}$, передаватиме свою енергію бозонам доти, поки її швидкість не перевищуватиме швидкості звуку в середовищі. У границі $p \to \infty$, загасання $\tilde{\Gamma}_p$ лінійно зростає зі збільшенням швидкості домішки.

Цікавими до обговорення є результати щодо параметрів спектра бозе-полярона, які отримані в рамках теорії Брілюена-Вігнера (Рис. 1 – Рис. 3). Зокрема, у випадку притягальної бозон-домішкової взаємодії, важчі домішки залишатимуть потенціальну яму, сформовану бозе-середовищем (Рис. 1, ліворуч). За умови як слабкого так і сильного відштовхування між домішкою та бозонами, її енергія завжди зростатиме (Рис. 2, ліворуч). Нетривіальним результатом є наявність загасання в границі нерухомої домішки, тобто, $\tilde{\Gamma}_p|_{p\to 0} \to \tilde{\Gamma}_0 \neq 0$. Причому, спектр домішки загасатиме, коли енергія бозе-полярона набуватиме додатніх значень $\Delta\tilde{\varepsilon}_0 > 0$: у разі сильного притягання (Рис. 1, праворуч) та відштовхувальної бозон-домішкової взаємодії (Рис. 2, праворуч). Як правило, ненульове значення загасання пов'язують з проблемою нестійкості бозе-полярона, досліджуючи наближено його властивості в околі $\tilde{\Gamma}_0/\Delta\tilde{\varepsilon}_0 \simeq 1$ [W. Li., Phys. Rev. A, **90**, 1, 013618 (2014)]. В нашому підході це відношення визначає лише межі застосовності апроксимаційної схеми розрахунків. До прикладу, коли газовий параметр $\rho a^3 = 5 \times 10^{-4}$, то притягальний полярон є добре визначеним для значень $|\bar{a}|/a = 15 \div 16$ (Рис. 1, праворуч), в той же час швидкість загасання спектра відштовхувального полярона є того ж порядку, що й енергія, при $\bar{a}/a \simeq 20$ (Рис. 2, праворуч). Залежність ефективної маси M^* домішки від величини притягальної та відштовхувальної бозон-домішкової взаємодії зображено графічно (Рис. 3). Причому, для $\rho a^3 = 3 \times$

10^{-2}, наші розрахунки якісно відтворюють результати більш складного *T*-матричного наближення [S. Rath, Phys. Rev. A, **88**, 053632 (2013)].

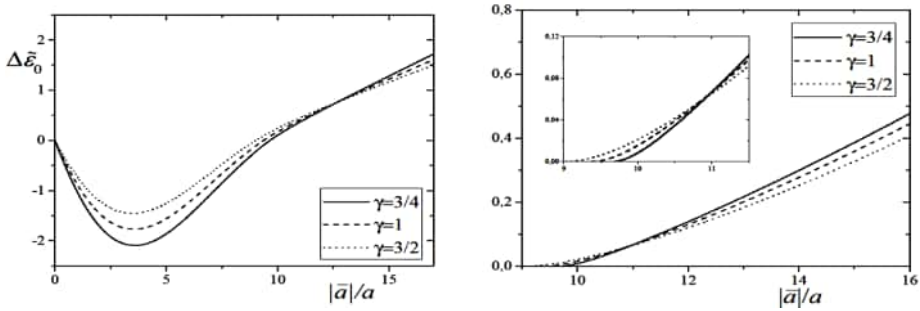

Рис. 1. Притягальний бозе-полярон: ліворуч – енергія домішкового атома, праворуч – відношення швидкості загасання спектра до енергії домішки. Газовий параметр $\rho a^3 = 5 \times 10^{-4}$. Суцільна, пунктирна, точкова лінії відповідають різним співвідношенням мас між домішкою та частинками середовища.

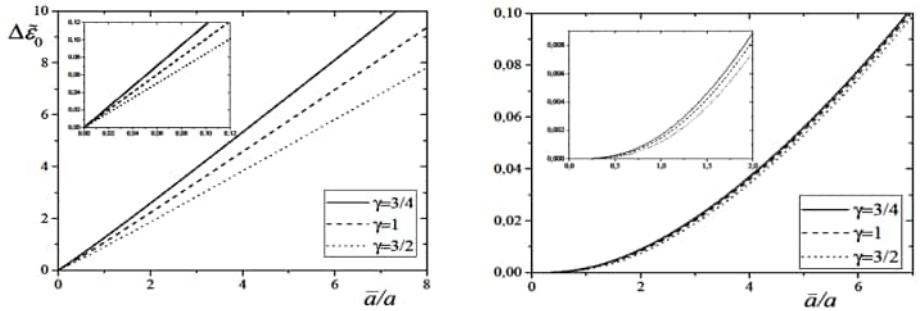

Рис. 2. Відштовхувальний бозе-полярон: ліворуч – енергія домішкового атома, праворуч – відношення швидкості загасання спектра до енергії домішки. Газовий параметр $\rho a^3 = 5 \times 10^{-4}$. Суцільна, пунктирна, точкова лінії відповідають різним співвідношенням мас між домішкою та частинками середовища.

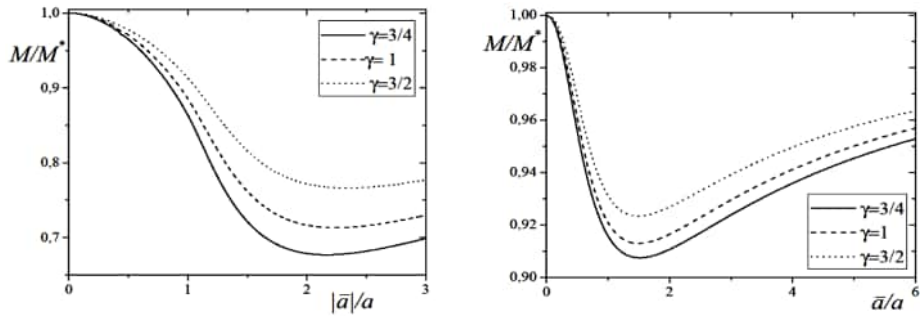

Рис. 3. Ефективна маса домішкового атома: ліворуч – притягальний бозе-полярон, праворуч – відштовхувальний бозе-полярон. Газовий параметр $\rho a^3 = 3 \times 10^{-2}$. Суцільна, пунктирна, точкова лінії відповідають різним співвідношенням мас між домішкою та частинками середовища.

У **третьому розділі** «*Домішковий атом в рідкому гелії-4*» досліджено властивості домішки у сильноскорельованій багатобозонній системі варіаційним методом в границі низьких температур.

Для опису властивостей домішки, що рухається в бозе-рідині, стартуватимемо з гамільтоніану, який містить оператори кінетичної енергії домішки $\widehat{H}_I = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2}$ та бозон-домішкової взаємодії $\widehat{H}_{int} = \sum_{1\le j\le N} V\left(\left|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}\right|\right)$, а також гамільтоніан бозе-рідини $\widehat{H}_B$ з урахуванням лише парної бозон-бозонної взаємодії у потенціальній енергії:

$$\widehat{H}_B = \sum_{j=1}^{N} \frac{\widehat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \sum_{1\le i<j\le N} \Phi\left(\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|\right) \tag{4}$$

Стани системи «домішка плюс бозе-рідина» будемо постулювати «пробною» хвильовою функцією:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{C}} \psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) e^{U(\mathbf{r})} \tag{5}$$

тут $\psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ – хвильова функція основного стану взаємодіючих бозе-частинок, величина $e^{U(\mathbf{r})}$ враховує наявність домішки в бозе-рідині.

Для дослідження властивостей основного стану запропонованої тут моделі варіаційним методом, доцільно працювати в зображенні колективних координат $\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}$, які з фізичної точки зору є спеціально перенормованими коефіцієнтами Фур'є флуктуацій густини бозе-частинок. В цьому представленні оберемо $\psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ в гаусовому наближенні, що своєю чергою означає врахування лише непрямих три, чотири та вищих кореляцій між бозе-частинками. Якщо функцію $U(\mathbf{r})$ виберемо у вигляді $U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \lambda_i(k) \rho_{\mathbf{k}}\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, тим самим відтворюючи структуру $\widehat{H}_{int}$ в $\rho_{\mathbf{k}}$–представленні, то варіаційний параметр $\lambda_i(k)$ фактично визначатиме величину взаємодії домішки з бозе-рідиною. Громіздких розрахунків в $\rho_{\mathbf{k}}$ -представленні ми уникнули завдяки використанню кумулянтних розкладів. Зокрема, нами отримано парний корелятор $\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle$ та парціальний внесок $\langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle$, які входять у вираз для енергії основного стану та у повний структурний фактор системи «домішка плюс бозе-рідина». Бозонний корелятор «густина-густина» безпосередньо пов'язаний з структурним фактором бозе-рідини $S(k)$, а також містить доданки, що пов'язані з впливом бозе-середовища на поведінку домішки.

З огляду на сучасні роботи, що стосуються самолокалізації домішок в конденсованих середовищах, важливо виміряти так звану енергію розділення B,

яку потрібно затратити, щоб замінити домішковий атом на атом середовища, за умови малої концентрації домішок. У нашій роботі ця енергія виражається через енергію бозе-рідини з розрахунком на одну частинку E_0/N, енергію нерухомої домішки у бозе-рідині E_i та часткову похідну, що є хімічним потенціалом бозе-середовища: $-B = E_0/N + E_i - \left(\frac{\partial E_0}{\partial N}\right)_T$. Розрахунок енергії розділення B нами проведено на прикладі домішки ^{3}He, зануреної у рідкий гелій-4. Причому, результати обчислень залежатимуть від способу моделювання потенціалу бозон-домішкової взаємодії. Ми вважатимемо, що енергія взаємодії між атомами ^{3}He та ^{4}He рівна потенціальній енергії двох атомів ^{4}He, і приймемо, що $\bar{v}(k) = v(k)$. Таке припущення буде правдивим для домішкових атомів, у яких повністю заповнена *s*-оболонка (насамперед це інертні гази та атоми рідкоземельних елементів). Порівнюючи боголюбівський та фейнманівський спектри рідкого гелію-4, виберемо $\bar{v}(k)$ у вигляді $\bar{v}(k) = \varepsilon_k(1/S^2(k) - 1)/2\rho$, де структурний фактор для рідкого гелію-4 є добре вимірюваною величиною. Результати обчислення енергії розділення наведено у Табл.1. Зауважимо, що для однієї домішки ^{3}He у рідкому гелії-4 за рівноважних умов (при $T = 0$, $\rho = 0.0218$ Å^{-3}, $c = 238.2$ м/с) експериментальне значення цієї енергії рівне 2.76 K.

Наявність малої концентрації домішок в середовищі приводить до зміни тиску в системі. З цим тиском пов'язана ефективна зміна об'єму: $\alpha = -\frac{V}{mc^2}\left(\frac{\partial \Delta E}{\partial V}\right)_T$, яку в роботі [J. Boronat, Phys. Rev. B, **59**, 8844 – 8851 (1999)] обчислено методом дифузійного Монте-Карло: $\alpha = 0.284(10)$ для однієї домішки ^{3}He, за рівноважної густини рідкого гелію-4. Наш підхід дає завищене значення цього параметра $\alpha = 0.50$. Це насамперед пов'язано з нехтуванням прямих три- та чотиричастинкових бозонних кореляцій вже на рівні вибору хвильової функції (5), а також необхідністю перенормування боголюбівського фактора та параметрів взаємодії між частинками системи через експериментально вимірюваний структурний фактор рідкого гелію-4. Зауважимо також, що запропонований нами тут варіаційний підхід не передбачає оцінки ефективної маси домішкового атома, адже хвильова функція (5) описує стани системи, коли домішка не рухається в бозе-рідині.

Ймовірність знайти домішку з імпульсом $\hbar\mathbf{q}$ в бозе-середовищі визначається Фур'є образом одночастинкової матриці густини системи, яка згідно означення записується так:

$$F_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = V \int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) \tag{6}$$

причому, $F_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}) = 1$. За умови $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \longrightarrow \infty$, величина $F_1(\infty)$ є ймовірністю того, що домішковий атом має імпульс рівний нулеві. Розрахунок інтегралу

$\int e^{i\mathbf{qR}}[F_1(R) - F_1(\infty)]\, d\mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, дає густину ймовірності знайти частинку з ненульовим імпульсом в бозе-середовищі. Результати чисельної оцінки для одночастинкової матриці густини $F_1(R)$ та функції $F_1(\infty)$, на прикладі домішок – ізотопів гелію, наведено на Рис. 4 та Рис. 5 відповідно. Зокрема, обчислена нами матриця для випадку $\gamma = 1$ (домішка – атом ^{4}He), відтворює результат для одночастинкової матриці густини багатобозонної системи у наближенні парних кореляцій. А значення $F_1(\infty) = 0.26$ [I. O. Vakarchuk, Ukr. J. Phys. **54**, 686 – 695 (2009)] у випадку домішки ^{4}He, є своєрідною перевіркою для відносної кількості бозе-конденсату рідкого гелію-4.

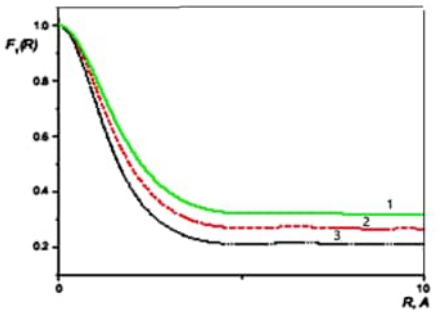

Рис. 4. Одночастинкова матриця густини системи «домішковий атом плюс бозе-рідина». Лінії 1, 2, 3 відповідають наявності домішкового атома ^{4}He, ^{6}He та ^{3}He у рідкому гелії-4 відповідно.

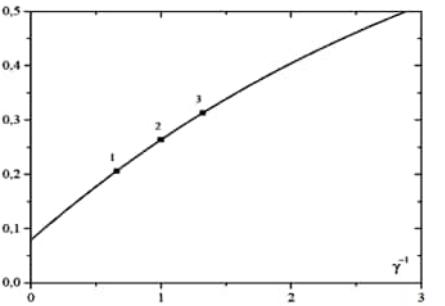

Рис. 5. Імовірність знайти домішковий атом з нульовим імпульсом у системі «домішка плюс бозе-рідина». Точки: 1 – домішка ^{6}He, $F_1(\infty) = 0.21$; 2 – домішка ^{4}He, $F_1(\infty) = 0.26$; 3 – домішка ^{3}He $F_1(\infty) = 0.31$. Вісь абсцис – співвідношення між масами частинок бозе-середовища та домішки.

У **четвертому розділі** «*Система* “*домішка плюс рідкий гелій-4*” *в просторі з деформованою алгеброю Гейзенберга*» розглянуто задачу про рух домішки в бозе-рідині у деформованому просторі узагальнених координат та імпульсів.

Дослідження домішкових станів бозе-рідини в представленні колективних координат суттєво ускладнюється, якщо брати до уваги нелінійні флуктуацій густини атомів рідини. Якщо ж бозе-рідину трактувати як сукупність невзаємодіючих гармонічних осциляторів, що коливаються з фіксованою частотою, а внесок від ангармонічності цих коливань описати деформацією комутаційних співвідношень:

$$\begin{aligned} &[\hat{Q}_{\mathbf{k},\mu}, \hat{P}_{\mathbf{k}',\mu'}] = i\hbar\left(1 + \beta_k \hat{Q}^2_{\mathbf{k}',\mu'}\right)\delta_{\mathbf{kk}'}\ \delta_{\mu\mu'}; \\ &[\hat{Q}_{\mathbf{k},\mu}, \hat{Q}_{\mathbf{k}',\mu'}] = 0; \qquad [\hat{P}_{\mathbf{k},\mu}, \hat{P}_{\mathbf{k}',\mu'}] = 0 \end{aligned} \tag{7}$$

де узагальненими координатами $\hat{Q}_{\mathbf{k},\mu}$ є комплексні змінні $\rho_{\mathbf{k},\mu}$ (індекс μ номерує дійсну та уявну частину колективної координати $\rho_{\mathbf{k}}$), а відповідним узагальненим імпульсом $\hat{P}_{\mathbf{k}',\mu'}$ є оператор диференціювання $-i\hbar\,\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}',\mu'}$, тоді знерозмірений параметр деформації β_k враховуватиме прямі та непрямі багаточастинкові кореляції бозе-рідини.

Аналіз розв'язків стаціонарного рівняння Шредінгера для сукупності осциляторів в просторі з деформацією (7) показав, що для рідкого гелію-4 параметр деформації слід обирати від'ємним. Зокрема, за умови $\beta_k < 0$, спектр елементарних збуджень багатобозонної системи

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2mS(k)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\beta_k \tag{8}$$

краще відтворюватиме експериментально виміряний спектр рідкого гелію-4, який, як відомо, лежить значно нижче розрахованого в наближенні Боголюбова. Окрім того, коли $\beta_k < 0$, внески у енергію основного стану бозе-рідини E_0, зумовлені деформацією (7), понижуватимуть її значення. А як відомо, саме врахування три- та чотиричастинкових кореляцій в рідкому гелії-4, приводить до зменшення енергії основного стану. До того ж, для алгебри (7) існує обмеження на параметр деформації $|\beta_k| < 2/S(k)$. Тому, ми пропонуємо обрати його у вигляді функції $\beta_k = -S(k)|S(k) - 1|^3$, де дані для структурного фактора рідкого гелію-4 екстрапольовані до $T = 0$ К.

Нехай в середовище бозе-частинок, які перебувають в основному стані з енергією E_0, влітає домішка з енергією $\hbar^2 q^2/2M$. Тоді, початковий квантовий стан системи «домішка плюс бозе-рідина» в представленні деформованих колективних координат можна задати так:

$$|\mathbf{q}, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{qr}} \sqrt{\frac{\Gamma(\zeta + 1/2)}{\Gamma(\zeta)\sqrt{\pi|\beta_k|}}} \cosh^{-\zeta}\left(\sqrt{|\beta_k|}\, x_{\mathbf{k},\mu}\right) \tag{9}$$

тут змінній $x_{\mathbf{k},\mu}$ відповідає канонічно-спряжений оператор імпульсу $\hat{p}_{\mathbf{k},\mu}$. Також позначено $\zeta = -\frac{1}{2} + \frac{\alpha_k}{|\beta_k|}\sqrt{1 + \left(\frac{\beta_k}{2\alpha_k}\right)^2}$. В припущенні, що оператор бозон-домішкової взаємодії $\hat{H}_{int}$ ефективно враховує одночастинкові процеси непружнього розсіяння домішки на колективі бозе-частинок, стан системи після розсіяння, визначатиметься першим збудженим станом:

$$|\mathbf{q}', \mathbf{k}'\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \sqrt{2(\zeta - 1)} \sinh\left(\sqrt{|\beta_k|}\, x_{\mathbf{k}',\mu}\right)|0\rangle \tag{10}$$

Обчислюючи недіагональний матричний елемент оператора збурення $\hat{H}_{int}$ на хвильових функціях (9) і (10), за умови слабкої бозон-домішкової взаємодії, нами

отримано енергію розділення B (Табл. 1) та ефективну масу домішкового атома M^* (Табл. 2). З огляду на закладений нами фізичний зміст параметра деформації, недеформований випадок $\beta_k = 0$ відповідає наближенню Боголюбова. Наявність багатобозонних кореляцій суттєво впливає на величину енергії розділення (Табл. 1, $[a]$). Хоча, в границі $\beta_k \to 0$ (Табл. 1, $[b]$) отримано добре узгодження з величиною енергії B, розрахованої нами варіаційним методом за рівноважної густини рідкого гелію-4 (Табл. 1, $[c]$). Ефективну масу атома ^{3}He наведено в порівнянні з експериментальними даними (Табл. 2, $[c]$) та результатами симуляцій Монте-Карло (Табл. 2, $[d]$, [e]).

Табл.1. Енергія розділення домішкового атома ^{3}He в залежності від густини рідкого гелію-4. $[a]$ – з урахуванням деформації (8); $[b]$ – недеформований випадок; $[c]$ – отримана нами варіаційним підходом; $[d]$ – теорія збурень Брілюена –Вігнера, T. B. Davison, E. Feenberg, Phys. Rev.1969, Vol. 178, No. 1, P. 306 – 314

$\rho, \text{Å}^{-3}$	B, K $[a]$	B, K $[b]$	B, K $[c]$	B, K $[d]$
0.0218	4.56	2.09	2.02	1.39
0.0226	4.09	1.66	2.05	1.15
0.0234	3.58	1.21	2.09	0.88
0.0242	3.05	0.74	2.09	0.51
0.0250	2.53	0.27	2.05	0.13
0.0258	2.00	−0.16	1.98	−0.36

Табл.2. Ефективна маса домішкового атома ^{3}He в залежності від густини рідкого гелію-4. $[a]$ – з урахуванням деформації (8), $[b]$ – недеформований випадок, $[c]$ – R. Simons, Robert M. Mueller, Czech. J. Phys., 1996.,Vol. 46, No. 1, P. 201 – 202, $[d]$ – J. Boronat, J. Casulleras, Phys. Rev.B., 1999., Vol. 59, No. 13, P. 8844 – 8851, $[e]$ – E. Krotscheck, M. Saarela, K. Schorkhuber, R. Zillich, Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 80. P. 4709 – 4712

$\rho, \text{Å}^{-3}$	$M^*/M, [a]$	$M^*/M, [b]$	$M^*/M, [c]$	$M^*/M, [d]$	$M^*/M, [e]$
0.0218	1.78	1.71	2.15	2.02	2.09
0.0240	2.13	2.00	2.39	2.36	2.34
0.0254	2.49	2.27	2.69	2.72	2.55

У п'ятому розділі «*Метод функціонального інтегрування в теорії бозе-полярона*» розглянуто задачу про рух спін-поляризованих фермі-домішок малої концентрації в рідкому гелії-4 стандартними методами теорії поля в границі низьких температур.

Дія досліджуваної системи в рамках теоретико-польового підходу задається сумою: $S = S_0 + S_B + S_{int}$. Перший доданок є дією невзаємодіючих ферміонів з вільночастинковим спектром $\varepsilon_f(p) = \hbar^2 q^2/2M$ та хімічним потенціалом μ: $S_0 = \sum_{\mathrm{P}} \left(i\nu_n - \varepsilon_f(p) + \mu\right) \psi_{\mathrm{P}}^* \psi_{\mathrm{P}}$, де величини $\psi_{\mathrm{P}}^*, \psi_{\mathrm{P}}$ є комплексними грасмановими полями, що описують ступені вільності ферміонів. Також введено позначення для чотиривектора $\mathrm{P} = (\nu_n, \mathbf{p})$ та ферміонної мацубарівської частоти ν_n. Скориставшись підходом Попова, що грунтується на способі обчислення функціонального інтегралу не за комплексними бозонними полями, а за дійсними змінними фаза-густина, дію взаємодіючих бозонів S_B можна записати виключно через флуктуації густини:

$$S_B = -\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{K}} D_0(\mathrm{K})\, \rho_{\mathrm{K}} \rho_{-\mathrm{K}} - \frac{1}{3!}\sqrt{\frac{T}{V}} \sum_{\mathrm{K}_1+\mathrm{K}_2+\mathrm{K}_3=0} D_0(\mathrm{K}_1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3)\, \rho_{\mathrm{K}_1} \rho_{\mathrm{K}_2} \rho_{\mathrm{K}_3} \quad (11)$$

тут $\mathrm{K} = (\omega_n, \mathbf{k})$, ω_n – бозонна мацубарівська частота. Величина $D_0(\mathrm{K})$ містить наближення Боголюбова, а $D_0(\mathrm{K}_1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3)$ описує найпростіші процеси розсіяння боголюбівських збуджень. Взаємодію бозе-системи з домішковими станами ідеального фермі-газу описуватимемо так:

$$S_{int} = -\rho\bar{v}(0) \sum_{\mathrm{P}} \psi_{\mathrm{P}}^* \psi_{\mathrm{P}} - \sqrt{\frac{T}{V}} \sum_{\mathrm{K,P}} \bar{v}(k)\, \rho_{\mathrm{K}} \psi_{\mathrm{P}}^* \psi_{\mathrm{P-K}} \quad (12)$$

Для знаходження параметрів спектра домішкового атома в представленні інтегралів за траєкторіями введемо одночастинкову мацубарівську функцію Гріна ферміонів: $G(\mathrm{P}) = \langle \psi_{\mathrm{P}}^* \psi_{\mathrm{P}} \rangle = \left\{ i\nu_n - \varepsilon_f(p) + \mu - \rho\bar{v}(0) - \sum(\mathrm{P}) \right\}^{-1}$, де статистичне середнє обчислюється з ваговою функцією e^S. Інформація про взаємодію домішки з бозе-системою міститься у власноенергетичній частині $\sum(\mathrm{P})$, для якої наведено діаграмне представлення на рис. 6. Це співвідношення визначає точну одночастинкову функцію Гріна домішки $G(\mathrm{P})$, а усі наближення ми будуємо лише для вершинної функції $\Gamma(\mathrm{P}, \mathrm{P}+\mathrm{K})$, яка характеризує перенормовану бозон-домішкову взаємодію, і своєю чергою залежить від $G(\mathrm{P})$ та точного бозонного корелятора.

Рис.6. Діаграмне представлення власноенергетичної частини домішки $\Sigma(\mathrm{P})$. Суцільна лінія – точна одночастинкова функція Гріна домішки $\langle \psi_{\mathrm{P+K}}^* \psi_{\mathrm{P+K}} \rangle$. Пунктирна – точний бозонний корелятор $\langle \rho_K \rho_{-K} \rangle$. Темний кружечок – точна вершинна функція $\Gamma(P, P+K)$. Світлий кружечок – нульове наближення для вершинної функції $\bar{v}(k)$.

Уникаючи трудностей з повним чисельним розв'язком задачі про знаходження енергії домішки в бозе-рідині, ми обираємо одночастинкову функцію Гріна у вигляді: $G(\mathrm{P}) = \left\{i\nu_n - \varepsilon_f^*(p)\right\}^{-1}$, що дозволяє нам уникнути нефізичної ситуації, коли загасання спектра одночастинкових збуджень нерухомої домішки не рівне нулеві. А також припускаємо, що інформація про поведінку парного корелятора "густина-густина" є відомою.

Для аналізу $\sum(\mathrm{P})$ ми використали скелетну діаграмну техніку, в якій усі діаграми, що виникають внаслідок бозон-домішкової взаємодії, містять підсумований ряд з безмежної кількості діаграм звичайної теорії збурень. Зокрема, в звичайній теорії збурень усі вершини беруться в нульовому наближенні, бозонні корелятори обчислюються з дією S_B в наближенні Боголюбова, а $\langle\psi_{\mathrm{P}}^*\psi_{\mathrm{P}}\rangle$ має структуру, ідентичну до одночастинкової функції Гріна ідеальних ферміонів, але з перенормованим спектром $\varepsilon_f^*(p) = \hbar^2p^2/2M^*$, де M^* - ефективна маса домішки. Запропонована нами модифікація скелетної техніки передбачає розв'язок рівняння для вершинної функції послідовними наближеннями. Зокрема, в першому порядку теорії збурень для точної вершини слід брати її нульове наближення, в другому порядку потрібно враховувати поправки до вершинної функції. Перевагою такої теоретико-польової скелетної техніки є можливість не враховувати діаграм типу власноенергетичних вставок у $\sum(\mathrm{P})$. Знаходження внесків у $\sum(\mathrm{P})$ з урахуванням вершинної функції в другому порядку теорії збурень зводиться до обчислення діаграм, наведених на рис. 7.

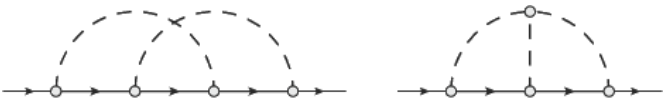

Рис. 7. Діаграми, що описують власноенергетичну частину домішки в другому наближенні. Ліворуч – врахування ефективної бозон-домішкової взаємодії. Праворуч – врахування ангармонізмів боголюбівських збуджень, причому, тут світлий кружечок з якого відходять три штрихованими лініями є вершиною $D_0(\mathrm{K}_1, \mathrm{K}_2, \mathrm{K}_3)$.

Послідовність розрахунку параметрів домішкового спектра є такою: спочатку розкладаючи в ряд різницю $\Sigma_R\left(\varepsilon_f^*(p), p\right) - \Sigma_R(0,0)$ (де $\Sigma_R(\nu, p)$ є дійсною частиною $\sum(\mathrm{P})$ після аналітичного продовження у верхню комплексну півплощину) при малих хвильових векторах, ми самоузгоджено знаходимо ефективну масу домішки, а далі отриманий результат підставляємо у формулу для хімічного потенціалу фермі-підсистеми $\mu = \rho\bar{v}(0) + \Sigma_R(0,0)$, який має зміст енергії занурення в границі однієї домішки. Результати обчислень представленні на рис. 8 на прикладі домішкового атома, що занурений в рідкий гелій-4.

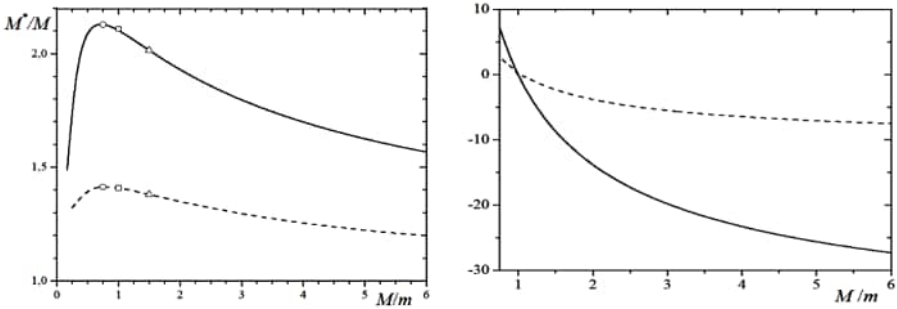

Рис. 8. Ліворуч: Ефективна маса домішки M^* в рідкому ^{4}He як функція відношення мас. Коло, квадрат, трикутник – домішки ^{3}He, ^{4}He, ^{6}He відповідно. Праворуч: Енергія занурення домішкового атома $\mu(M/m) - \mu(1)$, в кельвінах. Штрихована та суцільна лінії – перша та друга апроксимація.

Дисертаційна робота завершується **Висновками** та **Списком використаних джерел**.

Основні результати та висновки дисертації можна викласти у вигляді таких тверджень:

- Досліджено властивості спектра домішкового атома, що рухається в сильно розрідженому бозе-конденсаті. В рамках теорії збурень Брілюена-Вігнера вперше отримано параметри спектра притягального та відштовхувального бозе-поляронів в довгохвильовій границі. Проаналізовано межі застосовності теорії збурень на прикладі проблеми стабільності бозе-полярона.
- В рамках варіаційного підходу отримано термодинамічні та структурні характеристики системи “ домішковий атом плюс сильноскорельоване бозе-середовище” в границі низьких температур, з урахуванням непрямих кореляцій між бозе-частинками. На прикладі домішок – ізотопів гелію, що занурені у рідкий гелій-4, знайдено розподіл частинок за імпульсами в бозе-рідині.
- Запропонований нами спосіб врахування багатобозонних кореляцій шляхом деформації комутаційних співвідношень для колективних координат та відповідних узагальнених імпульсів дає добре узгодження з експериментальними даними для ефективної маси домішки ^{3}He, що рухається в рідкому гелії-4. З модельним параметром деформації вперше обчислено енергію основного стану, оцінено кількість бозе-конденсату, відтворено спектр елементарних збуджень бозе-рідини.
- Досліджено властивості бозе-полярона на прикладі домішки ^{3}He в надплинному гелії-4, з використанням методу функціонального

інтегрування. Використовуючи самоузгоджену процедуру розрахунку власноенергетичної частини одночастинкової функції Гріна домішкового атома, ми знайшли ефективну масу та енергію бозе-полярона.

- Усі чисельні розрахунки характеристик системи проведено на підставі переписування параметрів міжчастинкової взаємодії через структурний фактор рідкого гелію-4.

Основні результати дисертації опубліковано в таких роботах:

[1] *Вакарчук І. О., Паночко Г. І.* Домішкові стани в багатобозонній системі // Журн. фіз. дослідж.— 2012.— Т. 16, №4.— Ст. 4601.— 8 с.

[2] *Vakarchuk I. O., Panochko G. I.* Theory of a many-boson system with deformed Heisenberg algebra // Condens. Matter Phys.— 2015.— Vol. 18, No. 3.— Art. 33002.— 14 p.

[3] *Вакарчук І. О., Паночко Г. І., Пастухов В.* С. Метод функціонального інтегрування у проблемі бозе-полярона // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз.— 2016.— Вип. 52.— С. 17-27.

[4] *Vakarchuk I. O., Panochko G.* The effective mass of an impurity atom in the Bose liquid with a deformed Heisenberg algebra // Ukr. J. Phys.— 2017.— Vol. 62, No. 2.— P. 123-131.

[5] *Panochko G., Pastukhov V., Vakarchuk I.* Behavior of the impurity atom in a weakly-interacting Bose gas // Condens. Matter Phys.— 2017.— Vol. 20, No. 1.— Art. 13604.— 11 p.

[6] *Panochko G., Pastukhov V., Vakarchuk I.* Impurity self-energy in the strongly-correlated Bose systems // Int. J. Mod. Phys. B.— 2018.— Vol. 32, No. 5.— Art. 1850053.— 9 p.

[7] *Panochko G., Vakarchuk I.* Density matrix of the system "Bose liquids + impurities" in the approximation of pair correlations // QFS 2010. International Symposium on Quantum Fluids and Solids. August 1-7, 2010. Grenoble, France: List of contributions.— P. 96.

[8] *Vakarchuk I. O., Panochko H. I.* Heisenberg's deformed algebra in the theory of many-boson system // International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems", May 21-24, 2010, Kyiv, Ukraine: Abstracts.— P. 335.

[9] *Паночко Г.* Повна матриця густини системи "бозе-рідина + домішка" в границі низьких температур // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2011, Ужгород, 24-27 травня 2011 р.: Програма і тези доповідей.— С. 88.

[10] *Vakarchuk I. O., Panochko H. I.* One-particle density matrix of the system "Bose-liquid + impurity" in the limit of low temperatures // III Young Scientists Conference "Modern Problems of Theoretical Physics", December 21-23, 2011, Kyiv, Ukraine: Program & Abstracts.— P. 63.

[11] *Вакарчук І. О., Паночко Г.* Структурні фактори системи “бозе-рідина+домішковий атом” в наближенні парних кореляцій // 12-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 30 травня - 1 червня 2012. Інститут фізики конденсованих систем НАН України: Збірка тез.— С. 39.

[12] *Panochko G., Vakarchuk I. O.* The ^{3}He impurity states in ^{4}He // International Conference on Quantum Fluids and Solids 2012, 15th-21st August 2012, Lancaster University, UK: Conference Handbook.— [P. 46] (P1.38).

[13] *Вакарчук І., Паночко Г.* Повна матриця густини системи "бозе-рідина + домішка" в наближенні парних кореляцій [Різдвяні дискусії 2012, Львів, 3-4 січня 2012] // Журн. фіз. дослідж.— 2012.— Т. 16, №1/2.— С. 1998-5.

[14] *Panochko G.* One-particle density matrix of the Bose-system + impurity atom at finite temperatures [Workshop on Current Problems in Physics, Lviv, 10-11 July 2012] // J. Phys. Stud.— 2012.— Vol. 16, No. 3.— 3998.— P. 4.

[15] *Vakarchuk I., Panochko G.* The ^{3}He impurity states in ^{4}He // 6th Workshop on Current Problems in Physics: Zielona Góra – Lviv, 23-25 September 2013, Zielona Góra, Poland: Book of abstracts.— P. 25.

[16] *Vakarchuk I. O., Panochko G.* The impurity states in the liquid Helium-4// Proceedings of VI International Conference "Physics of Disordered Systems", Lviv, Ukraine, 14-16 October, 2013.— P. 36.

[17] *Паночко Г.* Урахування три- та чотиричастинкових кореляцій у деформованому просторі Гайзенберґа на прикладі рідкого ^{4}He [Різдвяні дискусії 2014, Львів, 9-10 січня 2014] // Журн. фіз. дослідж.— 2014.— Т. 18, №1.— С. 1998-5.

[18] *Вакарчук І. О., Паночко Г. І.* Домішка в рідкому ^{4}He з деформованою алгеброю Гайзенберга // 15-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 4-5 червня 2015. Інститут фізики конденсованих систем НАН України: Збірка тез.— С. 26.

[19] *Vakarchuk I. O., Panochko G. I.* The separation energy of the impurity atom in the liquid ^{4}He with the deformed Heisenberg algebra // 7th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems", May 27-30, 2016, Kyiv, Ukraine: Abstracts.— P. 43.

[20] *Вакарчук І. О., Паночко Г.* Ефективна маса домішкового атома в розрідженому бозе-газі [Різдвяні дискусії 2017, Львів, 11-12 січня 2017] // Журн. фіз. дослідж.— 2017.— Т. 21, №1/2.— С. 1998-3.

[21] *Паночко Г. І.* Спектр домішки в сильноскорельованій бозе-системі // 17-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 8-9 червня 2017. Інститут фізики конденсованих систем НАН України: Збірка тез.— С. 38.

[22] *Panochko G., Vakarchuk I.* Self-energy of the Bose polaron // Workshop on Current Problems in Physics: Zielona Góra – Lviv, Zielona Góra – October 16-19 2017: Abstracts.— P. 9.
[23] *Panochko G., Vakarchuk I. O.* The liquid helium-4 in a deformed Heisenberg space in low temperatures limit // LT27: 27th International Conference on Low Temperature Physics, August 6-13, 2014, Buenos Aires, Argentina: Abstract Book.— P. 143.

АНОТАЦІЯ

Паночко Г. І. Домішкові стани багатобозонної системи на прикладі ізотопів гелію. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2018.

Дисертацію присвячено вивченню впливу багатобозонних систем на властивості домішкових атомів. Зокрема, в роботі досліджено статистичні та динамічні властивості окремих квазічастинок (так званих бозе-поляронів), які виникають внаслідок взаємодії домішкового атома з бозе-середовищем. В рамках теорії збурень Брілюена-Вігнера знайдено спектральні характеристики домішкового атома, що занурений в сильно розріджений бозе-газ. Також досліджено основний стан моделі “бозе-рідина плюс домішковий атом” варіаційним методом, з урахуванням лише непрямих кореляцій між частинками середовища. В роботі запропоновано оригінальний спосіб врахування багатобозонних кореляцій між атомами бозе-рідини. За допомогою деформації комутаційних співвідношень між узагальненими координатами та імпульсами. Окрім того, досліджено домішкові стани у взаємодіючому бозе-середовищі теоретико-польовим методом з використанням інтегралів за траєкторіями. Усі розрахунки проведено на прикладі ізотопів гелію в рідкому гелії-4 і показано добру узгодженість з експериментальними даними та результатами симуляцій Монте-Карло.

Ключові слова: домішкові стани, бозе-рідина, бозе-полярон, деформовані комутаційні співвідношення, колективні координати, ефективна маса, теорія збурень, варіаційний метод, функціональні інтеграли.

АННОТАЦИЯ

Паночко Г. И. Примесные состояния многобозонной системы на примере изотопов гелия. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2018.

Диссертация посвящена изучению влияния многобозонных систем на свойства примесных атомов. В частности, в работе исследованы статистические и динамические свойства отдельных квазичастиц (так называемых бозе-поляронов), которые возникают вследствие взаимодействия примесного атома с бозе-средой. В рамках теории возмущений Бриллюэна-Вигнера найдены спектральные характеристики примесного атома, погруженного в сильно разреженный бозе-газ. Также исследовано основное состояние модели “бозе-жидкость плюс примесной атом” вариационным методом, с учетом только косвенных корреляций между частицами среды. В работе предложен оригинальный способ учета многобозонных корреляций между атомами бозе-жидкости с помощью деформации коммутационных соотношений между обобщенными координатами и импульсами. Кроме того, исследованы примесные состояния во взаимодействующей бозе-среде теоретико-полевым методом с использованием интегралов по траекториям. Все расчеты проведены на примере изотопов гелия в жидком гелии-4 и показана хорошая согласованность с экспериментальными данными и результатами симуляций Монте-Карло.

Ключевые слова: примесные состояния, бозе-жидкость, бозе-полярон, деформированные коммутационные соотношения, коллективные координаты, эффективная масса, теория возмущений, функциональные интегралы.

ABSTRACT

Panochko G. I. Impurity states of the many boson system in the case of helium isotopes – Manuscript.

A thesis for a Candidate of Sciences degree on the specialty 01.04.02 – theoretical physics, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, 2018.

A thesis is devoted of the study of the influence of many boson systems on the properties of impurity atoms. In the work it is investigated the statistical and dynamic properties quasiparticles (so-called Bose polarons), formed as a result of the boson-impurity interaction. Methods that can be used to find the spectral characteristics of the Bose polaron are rapidly developing. But there is no exact solution for the Bose polaron in the case of the model systems and for impurities moving in a strongly correlated Bose system.

We propose a variational calculation of impurity states in a strongly correlated system studyng of the properties the impurity atom moving in the Bose liquid as an

example. With this approach we obtaine in the thermodynamic limit the ground state energy of the system, the one-particle density matrix in the low-temperature limit, and momenta distribution of the system. We chose the variational wave function of the system "impurity atom plus liquid Helium-4" we chose in the representation of collective variables taking into account indirect boson correlations.

The study of the impurity states of the Bose liquid in the representation of collective coordinates is considerably more complicated if we take into account many-boson correlations between the atoms of liquid. So, we suggeste to describe the nonlinear fluctuations between atoms of the medium by deformation of the commutation relation for generalized coordinates and momenta. The deformation parameter take into account the influence of the four particles correlations on the behavior of the Bose system. The boson-impurity interaction describes the one-phonon scattering processes of the impurity atom on the Bose particles. Assuming then the boson-impurity interaction is a small perturbation, we obtaine the energy and the effective mass of the impurity atom.

We suggeste a self-consistent calculation of the spectrum parameters of the Bose polaron on the example of the model of a very dilute spin-polarized Fermi gas interacting with the Bose medium. By means of the field-theoretical approach we have considered the impurity states in liquid ^{4}He. We found an exact diagrammatic representation of the self-energy of the impurity atom. Our skeleton-graph expansion makes it possible to take into account the boson-impurity interaction by solving of the equation for the vertex function by successive iterations. The simple ansatz for the exact Green's function of the impurity atom allowed us to obtain analytical contributions to the self-energy of the impurity Green's function in the first and second approximations.

We find the spectral characteristics of the impurity atom immersed in a very dilute bose condensate by the method of the Brillouin-Wigner perturbations theory. In particular, our results for the effective mass of the attractive and repulsive Bose polarons reproduce the behavior of the effective mass by self-consistent T-matrix approach. Our results for the spectrum damping of the single-particles excitations of the Bose polaron determine the limits of the applicability of the perturbation theory. The spectrum damping associated with the problem of instability the Bose polaron.

We test all analytical and numerical results for the spectral characteristics of the Bose polaron using impurities – Helium isotopes, immersed in a strongly-correlated Bose liquid as an example. In particular, the obtained value for the effective mass of the ^{3}He atom immersed in a liquid Helium-4 coincides well both with the experiments and the results of the Monte Carlo simulations. Our analytical expression for the self-energy of the impurity can be used to describe the behavior of a single atom in ultra-cold gases of alkali metals. Our calculations can be easily extended onto low-dimensional systems.

Key words: impurity states, Bose liquid, Bose polaron, deformed commutation relations, collective variables, effective mass, path integral, perturbation theory.