Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. А. Вакарчук, Одночастичная матрица плотности
жидкого ${}^4\text{He}$, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 9–30

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6149>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 13:42:06

© 2008 г.

И. А. Вакарчук*

ОДНОЧАСТИЧНАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ ЖИДКОГО ^4He

С помощью выражения для полной матрицы плотности системы N взаимодействующих бозе-частиц, найденного в наших предыдущих работах, рассчитана одночастичная матрица плотности в координатном представлении. При низких температурах эта матрица в главном приближении позволяет воспроизвести результаты теории Боголюбова. В классическом пределе предложенная теория позволяет воспроизвести результаты теории классических жидкостей в приближении хаотических фаз. Из одночастичной матрицы плотности найдены функция распределения частиц по импульсам, средняя кинетическая энергия бозе-жидкости, исследовано явление бозе-эйнштейновской конденсации.

Ключевые слова: бозе-жидкость, λ -переход, бозе-конденсат.

Автор с благодарностью и теплотой вспоминает неоднократные встречи и разговоры с Дмитрием Николаевичем Зубаревым, его советы и неизменную поддержку и посвящает эту статью светлой памяти ученого, так много сделавшего для развития основ статистической механики, человека высокой культуры, тонкой души и исключительной интеллигентности.

1. ВВЕДЕНИЕ

Эта работа является продолжением наших предыдущих исследований [1], где в приближении парных корреляций была рассчитана полная матрица плотности и термодинамические функции системы N взаимодействующих бесспиновых бозе-частиц в объеме V при температуре T . Целью настоящих исследований является расчет одночастичной матрицы, которая позволяет изучать распределение частиц по импульсам и явление бозе-эйнштейновской конденсации, а также вычислять среднее значение кинетической энергии.

Особенность полученных в работе [1] результатов состоит в том, что при высоких температурах в квазиклассическом пределе диагональные элементы полной матрицы плотности переходят, как и должно быть, в обычный больцмановский фактор

*Львовский национальный университет им. Ивана Франко, Львов, Украина.
E-mail: chair@sotka.ktf.franko.lviv.ua

с потенциальной энергией системы частиц, а при низких температурах ($T \rightarrow 0$) получаем матрицу плотности с волновой функцией основного состояния в приближении Боголюбова–Зубарева [2]. Такое же поведение выявляют и термодинамические функции. Таким образом, полученные в работе [1] выражения справедливы в широкой области температур, и можно ожидать, что и для одночастичной матрицы плотности они также дадут разумные результаты для промежуточных температур, в частности в окрестности λ -перехода в жидком ^4He .

Наши вычисления мы будем проводить с использованием предложенного в работе [3] метода, который основывается на разложениях полной матрицы плотности по перестановкам частиц. Такой подход является естественным для изучения λ -перехода, связанного с явлением бозе-эйнштейновской конденсации, математический механизм которого состоит именно в учете перестановок все большего числа частиц, а в точке перехода одинаково важными становятся перестановки всех N частиц системы. Принимая во внимание тот факт, что для основного состояния и при $T \rightarrow 0$ приближение парных корреляций, как показано в [4], дает хорошие количественные результаты для такой сильнонеидеальной системы, как жидкий ^4He , от такого подхода можно ожидать не только качественных результатов в окрестности λ -перехода.

Литература по теории функций распределения многобозонной системы чрезвычайно многочисленна, отметим хорошо известные специалистам монографии и ссылки, приведенные в них, и прежде всего фундаментальные работы Н. Н. Боголюбова и пионерскую работу Д. Н. Зубарева [5]–[12].

2. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Начнем с выражения для полной матрицы плотности системы N частиц в объеме V с декартовыми координатами $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ в D -мерном пространстве при температуре T [1]:

$$\begin{aligned} R_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) &= \\ &= R_N^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N), \end{aligned} \quad (2.1)$$

где первый множитель – матрица плотности идеального бозе-газа

$$R_N^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = \frac{1}{N!} \Delta_N(1, \dots, N \mid 1', \dots, N'), \quad (2.2)$$

перманент

$$\Delta_N(1, \dots, N \mid 1', \dots, N') = \begin{vmatrix} K_{11'} & K_{12'} & K_{13'} & \dots & K_{1N'} \\ K_{21'} & K_{22'} & K_{23'} & \dots & K_{2N'} \\ K_{31'} & K_{32'} & K_{33'} & \dots & K_{3N'} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{N1'} & K_{N2'} & K_{N3'} & \dots & K_{NN'} \end{vmatrix}_+ \quad (2.3)$$

раскрываем как обыкновенный определитель, однако все слагаемые берем со знаком плюс, что и обозначено в (2.3) индексом “+”. Здесь и далее, с целью упрощения

записей, мы используем для координат частиц также и обозначения $(1, \dots, N) \equiv (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, $(1', \dots, N') \equiv (\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)$. Величины $K_{ij'}$ определяются выражением

$$K_{ij'} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} K_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j)}, \quad K_{\mathbf{p}} = e^{-\beta \hbar^2 p^2 / (2m^*)}, \quad (2.4)$$

$\beta = 1/T$ – обратная температура. Суммирование по волновому вектору $\mathbf{p}$ в (2.4) происходит по целочисленным значениям его компонент, кратным $2\pi/V^{1/D}$, в бесконечных пределах, а при переходе к термодинамическому пределу $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const}$, сумма по $\mathbf{p} \neq 0$ переходит в D -кратные интегралы: $\sum_{\mathbf{p} \neq 0} \rightarrow V \int d\mathbf{p} / (2\pi)^D$. Очевидно, $K_{ij'} = 1/V$, $T = 0$, поскольку при $T = 0$ в (2.4) остается только слагаемое с $\mathbf{p} = 0$, поэтому

$$K_{ij'} = \left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{D/2} e^{-m^*(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j)^2 / (2\beta\hbar^2)} + \frac{1}{V}. \quad (2.5)$$

Таким образом, при температуре абсолютного нуля

$$R_N^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = \frac{1}{V^N}, \quad T = 0,$$

а при высоких температурах, когда слагаемое $1/V$ в (2.5) станет исчезающе малым в термодинамическом пределе,

$$R_N^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = \frac{1}{N!} \left(\frac{m^*}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{DN/2} \sum_Q \exp \left[-\frac{m^*}{2\beta\hbar^2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{r}'_j - \mathbf{r}_{Qj})^2 \right], \quad (2.6)$$

где суммирование по Q – это суммирование по всем $N!$ перестановкам индексов, которые нумеруют координаты частиц. Под массой m^* в (2.6) мы понимаем некоторую эффективную массу, которая при отсутствии взаимодействия равна исходной массе частицы m . Величину m^* рассматриваем как некоторый параметр, который эффективно учитывает часть перекрестных вкладов от высших межчастичных квантовых корреляций и прямых взаимодействий и может служить для самосогласования теории. Этот вопрос детально обсуждается в работе [1].

Второй множитель в правой части выражения (2.1) учитывает межчастичное взаимодействие, и если принимать во внимание парные корреляции в приближении хаотических фаз (RPA-приближение), он равен [1]

$$\begin{aligned} P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) = \\ = \exp \left\{ c_0 + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \rho'_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} + \rho'_{\mathbf{q}} \rho'_{-\mathbf{q}}) \right\}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где коэффициенты

$$\begin{aligned} c_0 &= -\beta E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \ln \left[\alpha_q \frac{1 - e^{-2\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*)}}{1 - e^{-2\beta E(q)}} \right], \\ c_1(q) &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\alpha_q}{\text{sh}(\beta E(q))} - \frac{1}{\text{sh}(\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*))} \right\}, \\ c_2(q) &= \frac{1}{2} \left\{ \alpha_q \text{cth}(\beta E(q)) - \text{cth} \left(\beta \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

коэффициент Фурье энергии парного прямого взаимодействия между частицами $\Phi(R)$

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \left(\frac{2N}{V} \nu_q \right) / \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right)}, \quad (2.9)$$

$$\nu_q = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \Phi(R) d\mathbf{R}, \quad (2.10)$$

энергия элементарных возбуждений в приближении Боголюбова [5]

$$E(q) = \alpha_q \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad (2.11)$$

энергия основного состояния

$$E_0 = \frac{N(N-1)}{2V} \nu_0 - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{8m} (\alpha_q - 1)^2 \quad (2.12)$$

и, наконец, коэффициенты Фурье флуктуаций плотности частиц

$$\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \quad \rho'_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'_j}, \quad (2.13)$$

причем здесь волновой вектор $\mathbf{q} \neq 0$.

Для описания выделенной совокупности s частиц нашей системы введем по Боголюбову s -частичные матрицы плотности [5], [6]:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \frac{V^s}{Z_N} \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N \times \\ \times R_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s, \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N), \quad s = 1, 2, \dots, \quad (2.14)$$

$s/N \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const}$, статистическая сумма

$$Z_N = \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N R_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.15)$$

Диагональные элементы этих матриц нормированы на единицу:

$$\frac{1}{V^s} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_s F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = 1, \quad V \rightarrow \infty. \quad (2.16)$$

Нашей задачей является расчет одночастичной матрицы плотности $F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1)$ в таком же приближении, в котором найдена полная матрица плотности (2.1).

3. РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ ПО ПЕРЕСТАНОВКАМ ЧАСТИЦ

Перейдем теперь к вычислению одночастичной матрицы плотности $F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1)$, воспользовавшись методом, предложенным в работе [3]. Для этого рассмотрим перманент (2.3), диагональный по всем индексам, кроме первого. Именно он нужен нам для нахождения одночастичной матрицы плотности в соответствии с определением (2.14). Итак, представим $\Delta_N(1, 2, \dots, N \mid 1', 2, \dots, N)$ в виде разложения

по перманентам все меньшего порядка, до перманента нулевого порядка $\Delta_{N=0} = 1$, явно выделяя в каждом члене величины $K_{11'}$ и K_{1j} , $K_{j1'}$ при $j > 1$:

$$\begin{aligned}
 \Delta_N(1, 2, \dots, N \mid 1', 2, \dots, N) &= K_{11'} \Delta_{N-1}^{(1)} + \sum_{1 < i \leq N} K_{1i} K_{i1'} \Delta_{N-2}^{(1,i)} + \\
 &+ \sum_{1 < i < j \leq N} (K_{1i} K_{ij} K_{j1'} + K_{1j} K_{ji} K_{i1'}) \Delta_{N-3}^{(1,i,j)} + \\
 &+ \sum_{1 < i < j < l \leq N} (K_{1i} K_{ij} K_{jl} K_{l1'} + K_{1i} K_{il} K_{lj} K_{j1'} + \\
 &+ K_{1j} K_{ji} K_{il} K_{l1'} + K_{1j} K_{jl} K_{li} K_{i1'} + K_{1l} K_{lj} K_{ji} K_{i1'} + \\
 &+ K_{1l} K_{li} K_{ij} K_{j1'}) \Delta_{N-4}^{(1,i,j,l)} + \dots \\
 &\dots + \sum_{1 < i < j < l < \dots < n \leq N} (K_{1i} K_{ij} K_{jl} \dots K_{nn} + \text{оставшиеся слагаемые} \\
 &\text{из всех } N-1 \text{ перестановок индексов } i, j, l, \dots, n), \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

где $\Delta_{N-1}^{(1)}$ – перманент $(N-1)$ -го порядка, в котором отсутствует индекс 1 и диагональный по всем остальным индексам, $\Delta_{N-1}^{(1)} = \Delta_{N-1}(2, \dots, N \mid 2, \dots, N)$; $\Delta_{N-2}^{(1,i)}$ – перманенты $(N-2)$ -го порядка, в которых отсутствуют индексы $(1, i)$ и диагональные по всем остальным индексам, и т.д. Справедливость формулы (3.1) можно также проверить, разлагая перманенты для случаев $N = 2, 3, 4, \dots$. Заметим, что для перманента $\Delta_N(1, \dots, N \mid 1', \dots, N')$, когда все его правые индексы являются штрихованными, также справедлива рекуррентная формула, подобная (3.1), если все вторые индексы в величинах K_{ij} снабдить штрихами, т.е. будем иметь $K_{ij'}$, а в перманентах $\Delta_{N-s}^{(1,i,\dots)}$ будут как нештрихованные, так и штрихованные индексы.

Перейдем к непосредственному расчету матрицы $F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1)$. Положим в выражении (2.14) $s = 1$, подставим в него полную матрицу плотности (2.1) и с учетом разложения (3.1) для полной матрицы плотности идеального бозе-газа (2.2) находим

$$\begin{aligned}
 F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) &= \frac{V}{N} \left\{ K_{11'} P_1^{(N-1)}(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) + \int d\mathbf{r}_2 K_{12} K_{21'} P_2^{(N-2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \mid \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) + \right. \\
 &+ \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 K_{12} K_{23} K_{31'} P_3^{(N-3)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \mid \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \\
 &+ \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 K_{12} K_{23} K_{34} K_{41'} P_4^{(N-4)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4 \mid \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) + \dots \\
 &\left. \dots + \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_N K_{12} K_{23} \dots K_{N1'} P_N^{(0)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \right\}, \tag{3.2}
 \end{aligned}$$

где мы ввели матрицу

$$\begin{aligned}
 P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \\
 &= \frac{1}{Z_N} \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N R_{N-s}^0(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \times \\
 &\times P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s, \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N). \tag{3.3}
 \end{aligned}$$

Разложение (3.2) можно записать в компактной форме, если ввести оператор $\widehat{K}$ с матричными элементами $(\widehat{K})_{ij} = K_{ij}$ и определить операцию усреднения, которую мы обозначим чертой над выражением:

$$\begin{aligned}\overline{(\widehat{K})_{11'}} &= K_{11'} P_1^{(N-1)}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1), \\ \overline{(\widehat{K}^2)_{11'}} &= \int d\mathbf{r}_2 K_{12} K_{21'} P_2^{(N-2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2), \\ \overline{(\widehat{K}^3)_{11'}} &= \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 K_{12} K_{23} K_{31'} P_3^{(N-3)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_3), \quad \dots\end{aligned}\quad (3.4)$$

Теперь, как легко видеть, разложение (3.2) является геометрической прогрессией, суммируя которую, находим

$$F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = \frac{V}{N} \overline{\left(\widehat{K} \frac{1 - \widehat{K}^N}{1 - \widehat{K}} \right)_{11'}}. \quad (3.5)$$

Рассмотрим термодинамический предельный переход $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const}$. В этом случае в (3.2) будем иметь бесконечную геометрическую прогрессию и одночастичная матрица плотности (3.5) принимает вид

$$F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = \frac{V}{N} \overline{\left(\frac{\widehat{K}}{1 - \widehat{K}} \right)_{11'}}, \quad (3.6)$$

где при усреднении, введенном соотношениями (3.4), функции $P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_s)$ в (3.3) уже заменены их предельными значениями:

$$\overline{P}_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \lim_{N \rightarrow \infty} P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s). \quad (3.7)$$

Вопрос об определении радиуса сходимости этой прогрессии мы откладываем до получения явных выражений для матриц (3.7).

Следующий наш шаг – это вычисление матриц $P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s)$ согласно определению (3.3) с дальнейшим расчетом матриц $\overline{P}_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s)$ путем выполнения термодинамического предельного перехода (3.7), который здесь, как оказывается, не является лишь тривиальным переобозначением.

4. РАСЧЕТ МАТРИЦ ПЛОТНОСТИ $P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s)$

Подставим теперь в определение (3.3) выражение (2.7), предварительно сняв в нем штрихи с $N - s$ координат частиц. После этого отделим в величинах $\rho_{\mathbf{q}}$ и $\rho'_{\mathbf{q}}$ (2.13) слагаемые с теми $N - s$ координатами, по которым происходит интегрирование в (3.3). В результате эти простые преобразования дают

$$\begin{aligned}P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \\ &= \frac{1}{Z_N} \exp \left[\sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi'_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}} \xi'_{-\mathbf{q}}) \right] \times \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N P_{N-s}(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N | \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \times\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times R_{N-s}^0(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q \sqrt{\frac{N-s}{N}} (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

где

$$P_{N-s}(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N) = \exp \left\{ c_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q \left[\frac{N-s}{N} \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \rho_{-\mathbf{q}}^{(N-s)} \right] \right\}, \quad (4.2)$$

$$\lambda_q = 2[c_2(q) - c_1(q)] = \alpha_q \operatorname{th} \left(\frac{\beta E(q)}{2} \right) - \operatorname{th} \left(\frac{\beta \hbar^2 q^2}{4m^*} \right), \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^s e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, & \xi'_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^s e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'_j}, \\ \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} &= \frac{1}{\sqrt{N-s}} \sum_{j=s+1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

так что

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{N-s}{N}} \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} + \xi_{\mathbf{q}}.$$

Очевидно также, что

$$\rho_{\mathbf{q}}^{(N)} = \rho_{\mathbf{q}}, \quad \xi_{\mathbf{q}} = \xi'_{\mathbf{q}} = 0 \quad \text{при} \quad s = 0. \quad (4.5)$$

Интегрирования в (4.1) можно рассматривать как усреднение по системе $N-s$ взаимодействующих частиц, которые мы обозначим угловыми скобками $\langle \dots \rangle_{N-s}$:

$$\begin{aligned} P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \\ &= \frac{Z_{N-s}}{Z_N} \exp \left[\sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi'_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}} \xi'_{-\mathbf{q}}) \right] \times \\ &\times \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q \sqrt{\frac{N-s}{N}} (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \right\} \right\rangle_{N-s}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Величину Z_{N-s} условно назовем статистической суммой $N-s$ взаимодействующих частиц, не забывая, что величина α_q , которая входит в функции λ_q и c_0 , зависит от плотности N/V , а не $(N-s)/V$, а кроме того, функция λ_q имеет дополнительный множитель $(N-s)/N$. Среднее в (4.6) можно рассчитать с помощью неприводимых средних, ограничившись первым не исчезающим вкладом, который будет отвечать приближению хаотических фаз, в котором найдена полная матрица плотности с фактором (2.7):

$$\begin{aligned} P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \\ &= \frac{Z_{N-s}}{Z_N} \exp \left[\sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi'_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}} \xi'_{-\mathbf{q}}) \right] \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q^2 S^{(N-s)}(q) \frac{N-s}{N} (\xi_{\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}}) (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}}) \right\}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

где

$$Z_{N-s} = \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N P_{N-s}(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N) \times \\ \times R_{N-s}^0(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (4.8)$$

а структурный фактор

$$S^{(N-s)}(q) = \langle \rho_{\mathbf{q}}^{N-s} \rho_{-\mathbf{q}}^{N-s} \rangle_{N-s}.$$

Можно идти и другим путем, рассматривая интегрирование в формуле (4.1) как операцию усреднения с весовой функцией, которая равна матрице плотности системы $N - s$ невзаимодействующих бозе-частиц:

$$P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \\ = \frac{Z_{N-s}^0}{Z_N} \exp \left[c_0 + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi'_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}} \xi'_{-\mathbf{q}}) \right] \times \\ \times \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q \left[\frac{N-s}{N} \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \rho_{-\mathbf{q}}^{(N-s)} + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \sqrt{\frac{N-s}{N}} (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}}) \rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \right] \right\} \right\rangle_{N-s}^0, \quad (4.9)$$

где угловые скобки обозначают это усреднение,

$$\langle \dots \rangle_{N-s}^0 = \frac{1}{Z_{N-s}^0} \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N (\dots) R_{N-s}^0(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (4.10)$$

а статистическая сумма $N - s$ идеальных бозе-частиц

$$Z_{N-s}^0 = \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N R_{N-s}^0(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N \mid \mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N).$$

Перейдем теперь в (4.10) от интегрирования по индивидуальным координатам частиц $(\mathbf{r}_{s+1}, \dots, \mathbf{r}_N)$ к интегрированию по переменным $\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)}$. Такое интегрирование по новым переменным выполняется с весовой функцией $J(\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)})$. Такой метод впервые был предложен Д. Н. Зубаревым для вычисления функций распределения по импульсам в основном состоянии слабонеидеального бозе-газа [7].

В выбранном нами приближении парных корреляций весовая функция

$$J(\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)}) = \left(\prod_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{1}{\sqrt{\pi S_0^{(N-s)}(q)}} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)} \rho_{-\mathbf{q}}^{(N-s)}}{S_0^{(N-s)}(q)} \right],$$

где $S_0^{(N-s)}(q) = \langle |\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)}|^2 \rangle_{N-s}^0$ — структурный фактор $N - s$ невзаимодействующих бозе-частиц. Процедура его вычисления подробно описана в работе [1].

После такого перехода усреднение в (4.10) сводится к взятию обычных интегралов Пуассона по действительной и мнимой частям переменной $\rho_{\mathbf{q}}^{(N-s)}$, и в результате получаем

$$P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \frac{Z_{N-s}^0}{Z_N} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \exp \left[c_0 + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi_{\mathbf{q}}' \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}}' \xi_{-\mathbf{q}}') \right] \times \\
& \times \left[\prod_{\mathbf{q} \neq 0} \left(1 + \lambda_q S_0^{(N-s)}(q) \frac{N-s}{N} \right)^{-1/2} \right] \times \\
& \times \exp \left\{ \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2 S_0^{(N-s)}(q)}{1 + \lambda_q ((N-s)/N) S_0^{(N-s)}(q)} \frac{N-s}{N} (\xi_{\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}}') (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi_{-\mathbf{q}}') \right\}. \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Сравнивая это выражение с (4.7), находим структурный фактор

$$S^{(N-s)}(q) = \frac{S_0^{(N-s)}(q)}{1 + \lambda_q ((N-s)/N) S_0^{(N-s)}(q)}, \quad (4.12)$$

статистическая сумма имеет вид

$$Z_{N-s} = Z_{N-s}^0 \exp \left\{ c_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \ln \left[1 + \lambda_q \frac{N-s}{N} S_0^{(N-s)}(q) \right] \right\}. \quad (4.13)$$

Теперь имеем

$$\begin{aligned}
P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_s') &= \\
&= \frac{Z_{N-s}}{Z_N} \exp \left\{ \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi_{\mathbf{q}}' \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}}' \xi_{-\mathbf{q}}') + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2 S_0^{(N-s)}(q)}{1 + \lambda_q S_0^{(N-s)}(q)} \frac{N-s}{N} (\xi_{\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{q}}') (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi_{-\mathbf{q}}') \right\}. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Нашей целью является вычисление предельных функций $\bar{P}_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_s')$, определенных в (3.7). Для этого нужно осуществить в (4.14) термодинамический предельный переход.

5. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД. МАТРИЦЫ $\bar{P}_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1', \dots, \mathbf{r}_s')$

Имея в виду термодинамический предельный переход в выражении (4.14), устремляем величину s/N к нулю и принимаем во внимание величины порядка $O(1)$. Начнем с множителя перед экспонентой в (4.14):

$$\begin{aligned}
\frac{Z_{N-s}}{Z_N} &= \exp(\ln Z_{N-s} - \ln Z_N) = \\
&= \exp \left[-s \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} - \frac{s}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q \frac{\delta \ln Z_N}{\delta \lambda_q} + O\left(\frac{1}{N}\right) \right] = \\
&= \exp \left[-s \frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} + \frac{s}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q S^{(N)}(q) + O\left(\frac{1}{N}\right) \right]. \quad (5.1)
\end{aligned}$$

Здесь второе слагаемое в показателе экспоненты учитывает тот факт, что функция λ_q входит в Z_{N-s} с множителем $(N-s)/N$, а вариационная производная, по

определению взятая с множителем -2 , равна структурному фактору $S^{(N)}(q)$ системы N взаимодействующих частиц. В показателе экспоненты в (4.14) также сохраняем члены порядка $O(1)$ и, выделяя для удобства постоянную величину, которую объединяем с множителем перед экспонентой, окончательно находим

$$\bar{P}_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = z^s p_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s), \quad (5.2)$$

где величина

$$z = \exp\left(-\frac{\partial \ln Z_N}{\partial N} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \lambda_q S^{(N)}(q) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)}\right) \quad (5.3)$$

имеет смысл активности системы и выступает как параметр, который будем исключать из условия $F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}_1) = 1$, а матрица

$$\begin{aligned} p_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \\ = \exp\left\{\frac{s}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_1(q) \xi'_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_2(q) (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}} \xi'_{-\mathbf{q}}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2 S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)} (\xi_{\mathbf{q}} + \xi'_{\mathbf{q}}) (\xi_{-\mathbf{q}} + \xi'_{-\mathbf{q}})\right\}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Здесь и далее структурный фактор системы N невзаимодействующих частиц обозначаем через $S_0(q) \equiv S_0^{(N)}(q)$.

Первое слагаемое в показателе экспоненты в (5.4) – это постоянная величина, которую мы прибавили и вычли в (4.14) для удобства обозначения матриц (5.4). Будем называть матрицы (5.4) также p -матрицами плотности, чтобы отличить их от исходных матриц (2.14).

Величину z можно приближенно вычислить с помощью выражения для статистической суммы (4.13) при $s = 1$,

$$Z_N = Z_N^0 \exp\left\{c_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \ln[1 + \lambda_q S_0(q)]\right\}. \quad (5.5)$$

Возьмем от этого выражения производную по N при постоянных величинах C_0 , λ_q , m^* , структурный фактор $S^{(N)}(q)$ определен в (4.12), и, подставляя эти выражения в (5.3), находим

$$\begin{aligned} z = z_0 \exp\left\{\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{\partial S_0(q)}{\partial N} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)}\right\}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где $z_0 = e^{-\partial \ln Z_N^0 / \partial N}$ – активность идеального бозе-газа. Производную по N от $S_0(q)$ в (5.6) записываем через производную по плотности $\rho = N/V$ и получаем

$$z = z_0 \exp\left\{\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho[S_0(q) - 1])\right\}. \quad (5.7)$$

Перейдем к исследованию найденных матриц (5.4). Прежде всего выпишем выражение для диагональных элементов:

$$p_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} (\xi_{\mathbf{q}} \xi_{-\mathbf{q}} - s) \right\}. \quad (5.8)$$

Подставив в это соотношение явные выражения для величин (2.8), (4.4), получим

$$p_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = \prod_{1 \leq i < j \leq s} p_2(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (5.9)$$

где парная функция распределения

$$p_2(R) = e^{-\tilde{\Phi}(R)}, \quad (5.10)$$

а эффективный потенциал

$$\tilde{\Phi}(R) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (5.11)$$

Как видно из (5.8), роль первого слагаемого в показателе экспоненты в (5.4) состоит в точном сокращении постоянных величин в эффективном потенциале (5.11).

Выпишем теперь низкотемпературный предел эффективного потенциала. Поскольку в пределе $\beta \rightarrow \infty$ структурный фактор идеального бозе-газа $S_0(q) \rightarrow 1$, имеем

$$\tilde{\Phi}(R) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left(1 - \frac{1}{\alpha_q} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (5.12)$$

Выражение (5.10) для парной функции распределения системы взаимодействующих бозе-частиц при $T = 0$ с эффективным потенциалом (5.12) впервые было найдено нами в [13].

При высоких температурах в квазиклассическом пределе $\beta \rightarrow 0$, $\hbar \rightarrow 0$, $S_0(q) \rightarrow 1$, $m^* \rightarrow m$, с учетом (2.9), (4.3) имеем $\lambda_q \rightarrow \beta N \nu(q)/V$ и из (5.11) легко получаем хорошо известный в теории классических жидкостей экранированный потенциал:

$$\tilde{\Phi}(R) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\beta \nu_q}{1 + \beta N \nu_q / V} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}. \quad (5.13)$$

Выражения (5.10)–(5.13) являются еще одной иллюстрацией самосогласованности нашей теории. Действительно, из одного выражения без каких-либо дополнительных допущений вытекают точные предельные результаты как в существенно квантовой области температур, так и в классическом пределе. Очевидно, что мы принимаем во внимание только парные межчастичные корреляции или, точнее, приближения хаотических фаз.

Отметим также, что диагональные элементы p -матриц плотности нормированы на единицу, как и матрицы плотности (2.14) условием (2.16):

$$\frac{1}{V^s} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_s p_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = 1, \quad V \rightarrow \infty. \quad (5.14)$$

Получим теперь из (5.4) одночастичную p -матрицу плотности. Положив в (5.4) $s = 1$ и учитывая (4.4) и (2.8), находим

$$p_1(R) = p_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = \exp \left\{ \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left[\frac{\alpha_q}{\text{sh}(\beta E(q))} - \frac{1}{\text{sh}(\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*))} \right] (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} - 1) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2 S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} - 1) \right\}, \quad (5.15)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1$. Заметим, что диагональный элемент $p_1(0) = 1$.

Для основного состояния при $\beta \rightarrow \infty$ имеем

$$p_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) = \exp \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{4\alpha_q} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} - 1) \right\} \quad (5.16)$$

– результат, впервые найденный нами в работе [13].

Выпишем s -частичную p -матрицу плотности, которая недиагональна по первой координате и диагональна по всем остальным. Выполнив простые вычисления, аналогичные предыдущим, находим

$$p_s(1, 2, \dots, s | 1', 2, \dots, s) = p_1(1 | 1') \left[\prod_{2 \leq i < j \leq s} p_2(i | j) \right] \prod_{j=2}^s \sqrt{p_2(1 | j) p_2(1' | j)}. \quad (5.17)$$

Для удобства мы возвращаемся к обозначениям координат, введенных в разделе 3:

$$p_1(1 | 1') = p_1(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'_1|), \quad p_2(i | j) = p_2(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

Выпишем также двухчастичную p -матрицу:

$$p_2(1, 2 | 1', 2') = \sqrt{p_2(1 | 2) p_2(1' | 2')} \frac{p_1(1 | 1') p_1(1' | 2) p_1(1 | 2') p_1(2 | 2')}{p_1(1 | 2) p_1(1' | 2')}. \quad (5.18)$$

Наконец приведем s -частичную p -матрицу, недиагональную лишь по первым двум индексам:

$$p_s(1, 2, 3, \dots, s | 1', 2', 3, \dots, s) = p_2(1, 2 | 1', 2') \times \\ \times \left[\prod_{3 \leq i < j \leq s} p_2(i | j) \right] \prod_{j=3}^s \sqrt{p_2(1 | j) p_2(2 | j) p_2(1' | j) p_2(2' | j)}. \quad (5.19)$$

Матрицы высших порядков можно легко выписать, поскольку из соотношений (5.17)–(5.19) просматривается простая закономерность в их структуре.

6. ОДНОЧАСТИЧНАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО КОРРЕЛЯТОРАМ

Обратимся к формуле (3.2) и выпишем несколько членов разложения матрицы $F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1)$, используя выражения (3.4), в которых в соответствии с операцией усред-

нения в (3.2) функции $P_s^{(N-s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s \mid \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$ заменяем на соответствующие предельные функции (5.2). Итак, с учетом (5.17) имеем

$$\begin{aligned}
 \overline{(\widehat{K})}_{11'} &= z K_{11'} p_1(1 \mid 1'), \\
 \overline{(\widehat{K}^2)_{11'}} &= z^2 p_1(1 \mid 1') \int d\mathbf{r}_2 K_{12} K_{21'} \sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(2 \mid 1')}, \\
 \overline{(\widehat{K}^3)_{11'}} &= z^3 p_1(1 \mid 1') \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 K_{12} K_{23} K_{31'} p_2(2 \mid 3) \times \\
 &\quad \times \sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(1 \mid 3) p_2(2 \mid 1') p_2(3 \mid 1')}, \\
 \overline{(\widehat{K}^4)_{11'}} &= z^4 p_1(1 \mid 1') \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 K_{12} K_{23} K_{34} K_{41'} \times \\
 &\quad \times p_2(2 \mid 3) p_2(2 \mid 4) p_2(3 \mid 4) \times \\
 &\quad \times \sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(1 \mid 3) p_2(1 \mid 4) p_2(2 \mid 1') p_2(3 \mid 1') p_2(4 \mid 1')}, \quad \dots
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Отметим, что величины K_{1i} и $K_{j1'}$ сопровождаются в этих выражениях соответствующими множителями $\sqrt{p_2(1 \mid i)}$ и $\sqrt{p_2(j \mid 1')}$, а остальные K_{ij} имеют множители $p_2(i \mid j)$. Если бы не было этих множителей, то ряд (3.6) для одночастичной матрицы плотности легко суммировался бы переходом к импульсному представлению. Именно так происходит для идеального бозе-газа, когда все p -матрицы равны единице. Будем учитывать указанные дополнительные множители под интегралами в (6.1) по теории возмущений. Например, во второй формуле (6.1) этот множитель равен $\sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(2 \mid 1')}$. Отклонения этих множителей от единицы считаем возмущениями. В результате собираем главную последовательность разложения для $F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1)$ в геометрическую прогрессию и находим

$$\begin{aligned}
 F_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) &= p_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) \frac{V}{N} \left\{ \left(\frac{z \widehat{K}}{1 - z \widehat{K}} \right)_{11'} + \right. \\
 &\quad + z^2 \int d\mathbf{r}_2 K_{12} K_{21'} (\sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(2 \mid 1')} - 1) + \\
 &\quad + z^3 \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 K_{12} K_{23} K_{31'} \times \\
 &\quad \times (p_2(2 \mid 3) \sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(1 \mid 3) p_2(2 \mid 1') p_2(3 \mid 1')} - 1) + \\
 &\quad + z^4 \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 K_{12} K_{23} K_{34} K_{41'} \times \\
 &\quad \times (p_2(2 \mid 3) p_2(2 \mid 4) p_2(3 \mid 4) \times \\
 &\quad \times \sqrt{p_2(1 \mid 2) p_2(1 \mid 3) p_2(1 \mid 4) p_2(2 \mid 1') p_2(3 \mid 1') p_2(4 \mid 1')} - 1) + \dots \left. \right\}. \tag{6.2}
 \end{aligned}$$

Первый член в фигурных скобках является нулевым приближением – он определяет матрицу плотности идеального бозе-газа с перенормированной активностью z :

$$F_1^0(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) = g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|; z), \tag{6.3}$$

где введена функция

$$g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|; z) = \frac{V}{N} \left(\frac{z \widehat{K}}{1 - z \widehat{K}} \right)_{11'}, \tag{6.4}$$

которая с учетом фурье-разложения (2.4) для величины K_{ij} имеет вид

$$g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|; z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{zK_p}{1 - zK_p} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\hbar^2 p^2/(2m^*)} - 1}. \quad (6.5)$$

Остальные члены ряда (6.2) будем считать поправками. В этих поправках также можно выделить главные вклады. Например, прибавляя и вычитая в круглых скобках каждого члена ряда (6.2) начиная с третьего корреляционную функцию $[\sqrt{p_2(1|2)p_2(2|1')} - 1]$, можно снова просуммировать в (6.2) некоторую последовательность ряда по величинам K_{ij} . Она опять сводится к геометрической прогрессии. Эту процедуру можно упростить, если использовать следующее равенство:

$$z\hat{K} = \frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \frac{1}{1 + z\hat{K}/(1 - z\hat{K})} = \frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \left[1 - \frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} + \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)^2 - \dots \right]. \quad (6.6)$$

Предполагая, что $z < 1$, подставим оператор $z\hat{K}$ в виде этого разложения в каждый член ряда (6.2) и запишем его в виде суммы перенормированных слагаемых с нарастающим числом интегрирований по координатам:

$$\begin{aligned} F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) &= p_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) \frac{V}{N} \times \\ &\times \left\{ \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{11'} + \int d\mathbf{r}_2 \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{12} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{21'} [\sqrt{p_2(1|2)p_2(2|1')} - 1] + \right. \\ &+ \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{12} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{23} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{31'} \times \\ &\times [p_2(2|3)\sqrt{p_2(1|2)p_2(1|3)p_2(2|1')p_2(3|1')} - \\ &- \sqrt{p_2(1|2)p_2(2|1')} - \sqrt{p_2(1|3)p_2(3|1')} + 1] + \\ &+ \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{12} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{23} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{34} \left(\frac{z\hat{K}}{1 - z\hat{K}} \right)_{41'} \times \\ &\times [p_2(2|3)p_2(2|4)p_2(3|4) \times \\ &\times \sqrt{p_2(1|2)p_2(1|3)p_2(1|4)p_2(2|1')p_2(3|1')p_2(4|1')} - \\ &- p_2(2|3)\sqrt{p_2(1|2)p_2(1|3)p_2(2|1')p_2(3|1')} - \\ &- p_2(2|4)\sqrt{p_2(1|2)p_2(1|4)p_2(2|1')p_2(4|1')} - \\ &- p_2(3|4)\sqrt{p_2(1|3)p_2(1|4)p_2(3|1')p_2(4|1')} + \sqrt{p_2(1|2)p_2(2|1')} + \\ &+ \sqrt{p_2(1|3)p_2(3|1')} + \sqrt{p_2(1|4)p_2(4|1')} - 1] + \dots \Big\}. \quad (6.7) \end{aligned}$$

Следующий шаг состоит в переписывании произведений величин $(z\hat{K}/(1 - z\hat{K}))_{ij}$, стоящих под интегралами в (6.7), через матрицы плотности идеального бозе-газа $F_s^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$. Выражения для этих величин нетрудно рассчитать, используя, например, представления вторичного квантования, и из формулы (6.7) находим окончательное выражение для одночастичной матрицы плотности системы

взаимодействующих бозе-частиц:

$$F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = p_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1)[F_1^0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) + I(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1)], \quad I(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = \sum_{l \geq 1} I_l(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1). \quad (6.8)$$

Члены этого ряда, переписанные через произведения парных корреляторов p -матриц, имеют вид

$$I_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = \frac{N}{V} \int d\mathbf{r}_2 [F_2^0(1, 2 | 1', 2) - F_1^0(1 | 1')](\sqrt{p_2(1 | 2)p_2(2 | 1')} - 1), \quad (6.9)$$

$$\begin{aligned} I_2(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) = & \frac{1}{2} \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_3 [F_3^0(1, 2, 3 | 1', 2, 3) - F_1^0(1 | 1')F_2^0(2, 3 | 2, 3) - \\ & - F_2^0(1, 2 | 1', 2) - F_2^0(1, 3 | 1', 3) + 2F_1^0(1 | 1')] \times \\ & \times [(p_2(2 | 3) - 1)(\sqrt{p_2(1 | 2)p_2(2 | 1')} - 1)(\sqrt{p_2(1 | 3)p_2(3 | 1')} - 1) + \\ & + (p_2(2 | 3) - 1)(\sqrt{p_2(1 | 2)p_2(2 | 1')} - 1) + \\ & + (p_2(2 | 3) - 1)(\sqrt{p_2(1 | 3)p_2(3 | 1')} - 1) + \\ & + (\sqrt{p_2(1 | 2)p_2(2 | 1')} - 1)(\sqrt{p_2(1 | 3)p_2(3 | 1')} - 1) + \\ & + (p_2(2 | 3) - 1)], \quad \dots \end{aligned} \quad (6.10)$$

Как видим, величины $I_l(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1)$ являются свертками корреляционных функций $(l + 1)$ -го порядка идеального бозе-газа и соответствующих корреляторов такого же порядка, которые порождены P_N -фактором полной матрицы плотности (2.1) и включают межчастичные корреляции. При этом необходимо учитывать, что в ряде (6.8) мы можем принимать во внимание лишь несколько его первых членов, поскольку исходная полная матрица плотности найдена нами только в приближении хаотических фаз. Поэтому учет высших членов этого ряда требует также учета постRPA-вкладов и в полной матрице плотности (2.1). Фактически, как показывает простой анализ, достаточно учитывать только явно выписанные величины (6.9), (6.10).

Мы получили выражение (6.8) в предположении, что параметр $z < 1$. Однако в такой записи можно рассматривать и случай $z = 1$, т.е. ниже температуры бозе-конденсации, если для матриц плотности в идеальном бозе-газе взять соответствующие формулы с явным выделением относительного количества фракции бозе-конденсации. Очевидно, что результат для $z = 1$ можно получить и более длинным путем, отдельно выделяя член $1/V$ в величине K_{ij} из (2.5) в ряде (6.2) и собирая в этом ряде слагаемые $\sim z^l/V$, $l = 1, 2, \dots$, которые суммируются как геометрическая прогрессия, что дает величину $z/(1 - z)V$. Последняя величина связана с числом частиц идеального бозе-газа, имеющих импульс, равный нулю, $n_0 = z/(1 - z)$, и при $z \rightarrow 1$ становится макроскопической, $\sim N$ [8]. Действуя таким образом, мы придем к результату (6.8) с величинами (6.9), (6.10), в которых явно выделена фракция бозе-конденсации n_0/N . В частности, одночастичная матрица

$$F_1^0(1 | 1') = \frac{n_0}{N} + g(R), \quad R = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|, \quad (6.11)$$

где функция

$$g(R) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} n_p e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}}, \quad n_p = \frac{1}{e^{\beta \hbar^2 p^2 / (2m^*)} - 1}, \quad (6.12)$$

равна $g(R; z)$ из (6.5) при $z = 1$ и без учета вклада от $\mathbf{p} = 0$. Двухчастичная и трехчастичная матрицы имеют вид

$$F_2^0(1, 2 \mid 1', 2) = F_1^0(1 \mid 1') + \frac{n_0}{N} [g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + g(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1|)] + \\ + g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)g(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1|), \quad (6.13)$$

$$F_3^0(1, 2, 3 \mid 1', 2', 3') = \left(\frac{n_0}{N}\right)^3 + \left(\frac{n_0}{N}\right)^2 \times \\ \times (g_{11'} + g_{12'} + g_{13'} + g_{21'} + g_{22'} + g_{23'} + g_{31'} + g_{32'} + g_{33'}) + \\ + \frac{n_0}{N} (g_{11'}g_{22'} + g_{11'}g_{23'} + g_{11'}g_{32'} + g_{11'}g_{33'} + \\ + g_{12'}g_{21'} + g_{12'}g_{23'} + g_{12'}g_{31'} + \\ + g_{13'}g_{31'} + g_{13'}g_{21'} + g_{13'}g_{32'} + g_{22'}g_{13'} + g_{22'}g_{31'} + g_{22'}g_{33'} + \\ + g_{21'}g_{32'} + g_{23'}g_{32'} + g_{23'}g_{31'} + g_{33'}g_{12'} + g_{33'}g_{21'}) + \\ + g_{11'}g_{22'}g_{33'} + g_{11'}g_{23'}g_{32'} + g_{12'}g_{23'}g_{31'} + \\ + g_{12'}g_{21'}g_{33'} + g_{13'}g_{21'}g_{32'} + g_{22'}g_{13'}g_{31'}, \quad (6.14)$$

где введено обозначение $g_{ij'} \equiv g(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_{j'}|)$.

Матрица плотности (6.8) зависит от разности $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1$, а точнее от “расстояния” $R = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|$, т.е. $p_1(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) = p(R)$, $F_1^0(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) = F_1(R)$, $I(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}'_1) = I(R)$. Поэтому удобно в выражениях (6.9), (6.10) перейти от интегрирования по $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_3$ к интегрированию по относительным координатам $\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $\mathbf{R}_2 = \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_3$, или $\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$. В результате с учетом (6.13), (6.14) окончательно находим

$$F_1(R) = p_1(R) \left[\frac{n_0}{N} + g(R) + I(R) \right], \quad (6.15)$$

$$I(R) = \sum_{l \geq 1} I_l(R), \quad (6.16)$$

$$I_1(R) = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R}_1 g(R_1) \left[2 \frac{n_0}{N} + g(|\mathbf{R} + \mathbf{R}_1|) \right] \left[\sqrt{p_2(R_1)p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}|)} - 1 \right], \quad (6.17)$$

$$I_2(R) = \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d\mathbf{R}_1 \int d\mathbf{R}_2 \left\{ \frac{n_0}{N} [g(R_1)g(R_2) + g(R_1)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) + \right. \\ \left. + g(R_2)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|)] + g(R_1)g(R_2)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) \right\} \times \\ \times \left\{ [p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) - 1] [\sqrt{p_2(R_1)p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}|)} - 1] \times \right. \\ \times [\sqrt{p_2(R_2)p_2(|\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|)} - 1] + \\ \left. + [p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) - 1] [\sqrt{p_2(R_1)p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}|)} - 1] \times \right. \\ \left. \times [p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) - 1] [\sqrt{p_2(R_2)p_2(|\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|)} - 1] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + [\sqrt{p_2(R_1)p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}|)} - 1] [\sqrt{p_2(R_2)p_2(|\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|)} - 1] + \\
& + [p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) - 1] \Big\}, \quad \dots
\end{aligned} \tag{6.18}$$

Теперь выражения (6.15)–(6.18) справедливы во всей области температур: как ниже точки бозе-конденсации, когда $z = 1$, так и при $z < 1$, когда параметр фракции бозе-конденсации $n_0/N = 0$, а функцию $g(R)$ задает формула (6.5).

Наконец, отметим, что матрица плотности (6.8) должна удовлетворять условию

$$F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) = 1,$$

которое фиксирует тот факт, что число частиц в системе равно N . Отсюда с учетом того, что $p_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) = 1$, имеем

$$F_1^0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) + \sum_{l \geq 1} I_l(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) = 1. \tag{6.19}$$

Это условие служит для определения параметра z как функции температуры и плотности. Отметим, что при $z = z_0$ матрица идеального бозе-газа $F_1^0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) = 1$, однако в наших выражениях для матриц $F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s)$ имеем не активность идеального бозе-газа z_0 , а величину z , которая определена уравнением (6.19).

Сделаем важное замечание относительно параметра z . Для температур, которые ниже температуры конденсации идеального бозе-газа (см. ниже (8.12)), величина $z_0 = 1$. В связи с этим структурный фактор идеального газа $S_0(q)$ является таким, что величина $\rho[S_0(q) - 1]$ не зависит от плотности ρ , и из формулы (5.7) следует, что $z = z_0$. Таким образом, для температур ниже температуры бозе-конденсации в идеальном газе параметр $z = 1$.

7. УСТРАНЕНИЕ ИНФРАКРАСНЫХ РАСХОДИМОСТЕЙ

Несложный анализ величины $I_2(R)$ выявляет в ней расходящиеся слагаемые. Если мы возьмем в выражении (6.18) интегралы от произведения величин $g_1(R_1)$, $g_2(R_2)$ в первой фигурной скобке на последнее слагаемое во второй фигурной скобке, получим

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d\mathbf{R}_1 \int d\mathbf{R}_2 g(R_1)g(R_2) \left[\frac{n_0}{N} + g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) \right] [p_2(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}|) - 1] = \\
& = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} n_p^2 \Delta_p e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}},
\end{aligned} \tag{7.1}$$

где

$$\Delta_p = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} \left[\frac{n_0}{N} + g(R) \right] [p_2(R) - 1]. \tag{7.2}$$

Поскольку ниже точки бозе-конденсации, когда $z = 1$, величина $n_p \sim 1/p^2$, $p \rightarrow 0$, $\Delta_{p=0} = \text{const}$, то выражение (7.1), очевидно, расходится – имеет место явление “инфракрасной катастрофы”.

Причина этой расходимости связана с тем, что в p_s -факторе матрицы плотности мы учли только парные корреляции. Учет высших (трех- и четырехчастичных)

межчастичных корреляций компенсирует расходящиеся члены типа (7.1). Однако эту расходимость можно устранить и в принятом приближении парных корреляций перенормированием энергетического спектра идеальных частиц, считая эффективную массу m^* , которая является “свободным” параметром нашей теории, зависящей от p :

$$m^* \rightarrow m^*(p), \quad \frac{\hbar^2 p^2}{2m^*} \rightarrow \varepsilon_p^* = \frac{\hbar^2 p^2}{2m^*(p)}.$$

Эта замена касается, очевидно, и формул (2.4)–(2.8). Функцию $m^*(p)$ подбираем так, чтобы при $p \rightarrow 0$ выполнялось $\varepsilon_p^* \sim p^\nu$, $\nu < 3/2$, тогда выражение (7.1) становится сходящимся.

8. БОЗЕ-КОНДЕНСАТ

Относительное число частиц, импульс которых равен нулю (бозе-конденсат), можно найти как предельное значение одночастичной матрицы плотности при стремлении ее аргументов к бесконечности:

$$\frac{N_0(T)}{N} = \lim_{R \rightarrow \infty} F_1(R). \quad (8.1)$$

В нашем случае из (6.15) имеем

$$\frac{N_0(T)}{N} = \lim_{R \rightarrow \infty} p_1(R) \left[\frac{n_0}{N} + g(R) + \sum_{l \geq 1} I_l(R) \right]. \quad (8.2)$$

Обратимся к выражению (5.15). В показателе экспоненты под знаком сумм по $\mathbf{q} \neq 0$ функции с множителем $e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}$ при $R \rightarrow \infty$ быстро осциллируют и дают нулевой вклад (при условии сходимости интеграла по $\mathbf{q}$), поэтому в этом пределе сохраняется только слагаемое, не содержащее этого множителя:

$$p_1(\infty) = \exp \left\{ -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left[\frac{\alpha_q}{\text{sh}(\beta E(q))} - \frac{1}{\text{sh}(\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*))} \right] - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q^2 S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)} \right\}. \quad (8.3)$$

В выражении (6.12) для $g(R)$ под знаком суммы по $\mathbf{p} \neq 0$ также имеем быстро-осциллирующую функцию, и поэтому при $R \rightarrow \infty$ функция $q(R) \rightarrow 0$. В результате получаем

$$\frac{N_0(T)}{N} = p_1(\infty) \left[\frac{n_0}{N} + \sum_{l \geq 1} I_l(\infty) \right], \quad (8.4)$$

а из (6.17), (6.18) и с учетом (5.10) легко находим два первых члена ряда в (8.2):

$$I_1(\infty) = 2 \frac{n_0}{N} J, \quad I_2(\infty) = \frac{n_0}{N} J^2, \quad (8.5)$$

где

$$J = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} g(R) (e^{-\tilde{\Phi}(R)/2} - 1). \quad (8.6)$$

В этом приближении относительное число бозе-конденсата равно

$$\frac{N_0(T)}{N} = p_1(\infty) \frac{n_0}{N} (1 + J)^2. \quad (8.7)$$

Параметр n_0/N исключаем из условия (6.19), которое с точностью до первых двух членов имеет вид

$$\frac{n_0}{N} + g(0) + I_1(0) + I_2(0) = 1, \quad (8.8)$$

где

$$\begin{aligned} I_1(0) &= \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} g(R) \left[2 \frac{n_0}{N} + g(R) \right] (e^{-\tilde{\Phi}(R)} - 1), \\ I_2(0) &= \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int d\mathbf{R}_1 \int d\mathbf{R}_2 \left\{ \frac{n_0}{N} [g(R_1)g(R_2) + g(R_1)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|) + \right. \\ &\quad \left. + g(R_2)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|)] + g(R_1)g(R_2)g(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|) \right\} \times \\ &\quad \times [(e^{-\tilde{\Phi}(R_1)} - 1)(e^{-\tilde{\Phi}(R_2)} - 1)(e^{-\tilde{\Phi}(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|)} - 1) + \\ &\quad + (e^{-\tilde{\Phi}(R_1)} - 1)(e^{-\tilde{\Phi}(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|)} - 1) + \\ &\quad + (e^{-\tilde{\Phi}(R_2)} - 1)(e^{-\tilde{\Phi}(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|)} - 1) + (e^{-\tilde{\Phi}(|\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|)} - 1)]. \end{aligned} \quad (8.9)$$

Если учитывать только вклад от $I_1(0)$, то условие (8.8) примет вид

$$\frac{n_0}{N} = \frac{1 - g(0) - J_2}{1 + 2J_1}, \quad (8.10)$$

где

$$J_1 = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} g(R) (e^{-\tilde{\Phi}(R)} - 1), \quad J_2 = \frac{N}{V} \int d\mathbf{R} g^2(R) (e^{-\tilde{\Phi}(R)} - 1), \quad (8.11)$$

а величину $g(0)$ легко вычисляем из формулы (6.12):

$$g(0) = \left(\frac{T}{T_c^*} \right)^{3/2}, \quad T_c^* = \frac{2\pi\hbar^2}{m_c^*} \left[\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \quad (8.12)$$

где эффективная масса частицы $m_c^* = m^*(T = T_c^*)$, $\zeta(3/2) \simeq 2.612$ – дзета-функция Римана.

Окончательно для относительного числа бозе-конденсата имеем

$$\frac{N_0(T)}{N} = p_1(\infty) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c^*} \right)^{3/2} - J_2 \right] \frac{(1 + J)^2}{1 + 2J_1}. \quad (8.13)$$

Поскольку при $T \rightarrow 0$ величина $g(R) \rightarrow 0$, при температуре абсолютного нуля из (8.7) следует, что величины J , J_1 , J_2 равны нулю, тогда из (8.13) имеем

$$\frac{N_0(0)}{N} = \exp \left(-\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q} \right). \quad (8.14)$$

Это выражение впервые найдено в работе [13]. Первые два члена разложения экспонент дают результат теории Н. Н. Боголюбова, найденный также Д. Н. Зубаревым [6].

Размывание бозе-конденсата, которое дает формула (8.14), обусловлено межчастичным взаимодействием. Можно говорить о размывании бозе-конденсата колебаниями бозе-жидкости при нулевой температуре. Для идеального бозе-газа, когда $\alpha_q = 1$, очевидно, что величина $N_0(0) = N$.

С повышением температуры бозе-конденсат размывается и при температуре T_c исчезает. Существуют два механизма размывания бозе-конденсата. Во-первых, при увеличении температуры уменьшается влияние квантово-механической тождественности частиц, как и в идеальном бозе-газе, но этот эффект несколько деформирован взаимодействием, формирующим эффективную массу m^* . Во-вторых, бозе-конденсат истощается вследствие межчастичных взаимодействий, которые проявляют себя уже не только в колебаниях бозе-жидкости при нулевой температуре, но и в возникновении фононов в жидкости, т.е. имеем тепловое размывание бозе-конденсата. Оба эти механизма описываются формулой (8.13). Если размывание, обусловленное межчастичными корреляциями, приводит к постепенному уменьшению числа бозе-конденсата, то разрушение бозе-конденсата из-за температурного подавления эффекта квантово-механической тождественности частиц дает эффект фазового перехода – в точке T_c бозе-конденсат исчезает. Температуру T_c находим из уравнения, следующего из (8.13) при $N_0(T_c) = 0$:

$$1 - \left(\frac{T_c}{T_c^0} \right)^{3/2} - J_2 = 0, \quad (8.15)$$

где величина $J_2 = J_2|_{T=T_c}$ определена в формуле (8.11) при $T = T_c$.

9. СРЕДНЯЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ

Одночастичная матрица плотности позволяет найти среднюю кинетическую энергию системы $\langle K \rangle$. По определению

$$\langle K \rangle = -N \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 F_1(R)]_{\mathbf{R}=0}. \quad (9.1)$$

Вычислим это среднее значение, используя для одночастичной матрицы плотности формулу (6.15):

$$\langle K \rangle = -N \frac{\hbar^2}{2m} \{ [\nabla^2 p_1(R)]_{\mathbf{R}=0} + [\nabla^2 g(R)]_{\mathbf{R}=0} \}. \quad (9.2)$$

Вклад в величину $\langle K \rangle$ дают только вторые производные от функции $g(R)$ и от показателя экспоненты одночастичной p -матрицы плотности (5.15). Градиент от каждой из них при $\mathbf{R} = 0$ равен нулю, кроме того $g(0) = 1$, $p_1(0) = 1$. В результате имеем

$$\begin{aligned} \langle K \rangle = & \sum_{\mathbf{p}} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*)} - 1} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left[\frac{\alpha_q}{\text{sh}(\beta E(q))} - \frac{1}{\text{sh}(\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*))} \right] + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{\lambda_q^2 S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)} - N \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 I(R)]_{\mathbf{R}=0}. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Последнее слагаемое вычисляем в приближении одной суммы по $\mathbf{q}$. Для этого достаточно в выражении для $I(R)$ учесть только первые два слагаемых (6.17), (6.18) в линейном приближении по λ_q . Легко показать, что в этом случае

$$I^{(1)}(R) = -\frac{N}{V} \int d\mathbf{R}_1 g^0(R_1) g^0(|\mathbf{R} + \mathbf{R}_1|) \tilde{\Phi}(R_1) =$$

$$= -\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + S_0(q)\lambda_q} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} n_p n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}, \quad (9.4)$$

$$\begin{aligned} I^{(2)}(R) &= -\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d\mathbf{R}_1 \int d\mathbf{R}_2 g^0(R_1) g^0(R_2) g^0(|\mathbf{R} + \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2|) \tilde{\Phi}(R_2) = \\ &= -\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} n_p^2 n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}, \end{aligned} \quad (9.5)$$

и, таким образом, в искомом приближении

$$I(R) = I^{(1)}(R) + I^{(2)}(R) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|} n_p (1 + n_p). \quad (9.6)$$

Тогда

$$\begin{aligned} -N \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 I(R)]_{\mathbf{R}=0} &= \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\hbar^2 p^2}{2m} n_p (1 + n_p) n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|} = \\ &= -\sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} n_p n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|} \right) = -\sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{\partial S_0(q)}{\partial \beta}, \end{aligned} \quad (9.7)$$

где мы использовали соотношение

$$\frac{\partial n_p}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2 p^2}{2m^*} n_p (1 + n_p)$$

и определение структурного фактора идеального бозе-газа

$$S_0(q) = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} n_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|},$$

причем производная по β от величины z не берется и, кроме того, величину z в этом приближении можно положить равной z_0 .

Окончательно среднее значение кинетической энергии в приближении одной суммы по $\mathbf{q}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*)} - 1} - \frac{m^*}{2m} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\lambda_q}{1 + \lambda_q S_0(q)} \frac{\partial S_0(q)}{\partial \beta} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left(\frac{\alpha_q}{\text{sh}(\beta E(q))} - \frac{1}{\text{sh}(\beta \hbar^2 q^2 / (2m^*))} \right) + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{\lambda_q^2 S_0(q)}{1 + \lambda_q S_0(q)}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Здесь первое слагаемое – это “деформированная” межчастичным взаимодействием средняя кинетическая энергия идеального бозе-газа, и в отсутствие взаимодействия, когда $m^* = m, z = z_0$, она равна

$$\langle K \rangle_0 = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{1}{z_0^{-1} e^{\beta \hbar^2 q^2 / (2m)} - 1}. \quad (9.9)$$

Остальные слагаемые в отсутствие межчастичных взаимодействий равны нулю. При температуре абсолютного нуля первые три слагаемых в (9.8) равны нулю, а последнее дает хорошо известный результат:

$$\langle K \rangle = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2 q^2}{8m} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{\alpha_q}, \quad T = 0. \quad (9.10)$$

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Найденные нами выражения для одночастичной матрицы плотности, фракции бозе-конденсации и средней кинетической энергии бозе-жидкости справедливы во всем интервале температур. При низких температурах первые члены разложения этих выражений воспроизводят соответствующие выражения теорий Боголюбова и Боголюбова–Зубарева для слабонеидеального бозе-газа. А при высоких температурах в классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ наши формулы дают известные выражения для классических жидкостей. Численные результаты для средней энергии и теплоемкости жидкого ^4He , которые рассчитаны на основе полной матрицы плотности (2.1), (2.2), (2.7) и представлены в [14], обнаруживают хорошие совпадения с экспериментальными измерениями, включая и окрестность точки λ -перехода. Предварительные численные расчеты, основанные на найденных в этой работе выражениях для фракции бозе-конденсации и средней кинетической энергии, которые мы здесь не приводим, также дают хорошие количественные результаты.

Список литературы

- [1] I. O. Vakarchuk, *J. Phys. Stud.*, **8**:3 (2004), 223.
- [2] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, *ЖЭТФ*, **28** (1955), 129.
- [3] I. O. Vakarchuk, *J. Phys. Stud.*, **1** (1997), 156.
- [4] И. А. Вакарчук, *ТМФ*, **65**:2 (1985), 285; **80**:3 (1989), 439; **82**:3 (1990), 438.
- [5] Н. Н. Боголюбов, *Изв. АН СССР. Сер. физ.*, **11** (1947), 77.
- [6] Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды. В 3-х томах*, Т. 2, Наукова думка, Киев, 1969.
- [7] Д. Н. Зубарев, *ЖЭТФ*, **29** (1955), 881.
- [8] К. Хуанг, *Статистическая механика*, Мир, М., 1966.
- [9] Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике*, Мир, М., 1969.
- [10] E. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids*, Academic Press, New York–London, 1969.
- [11] А. Исихара, *Статистическая механика*, Мир, М., 1973.
- [12] Р. Фейнман, *Статистическая механика*, Мир, М., 1975.
- [13] И. А. Вакарчук, *ТМФ*, **23**:2 (1975), 260.
- [14] I. O. Vakarchuk, R. O. Prytula, A. A. Rovenchak, *J. Phys. Stud.*, **11**:3 (2007), 259.

Поступила в редакцию 2.07.2007