

# Исследование структуры составного конденсата для He-II при $T = 0$

Максим Томченко

*Институт теоретической физики НАН Украины  
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина  
E-mail: mtomchenko@bitp.kiev.ua*

Статья поступила в редакцию 5 апреля 2005 г., после переработки 21 июня 2005 г.

Вычисляется волновая функция основного состояния He-II,  $\Psi_0$ , в приближении «двух сумм по  $\mathbf{k}$ », т.е. в виде функции Джастрова и первой поправки:

$$\ln \Psi_0 = \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{3!} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0}} a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2},$$

при этом функция  $a_2(k)$  находится численно из уравнения Вакарчука, связывающего  $a_2(k)$  и  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  со структурным фактором. Зная  $\Psi_0$ , мы вычислили количество одночастичного и двухчастичного конденсатов в He-II при  $T = 0$ ; формула для двухчастичного конденсата в приближении «двух сумм» получена впервые. Модель не содержит каких-либо подгоночных параметров или функций. Результаты для конденсатов оказались сильно зависящими от количества учтенных поправок  $a_n$  в разложении  $\ln \Psi_0$ : в приближении «одной суммы» ( $a_3 = 0$ ) в одночастичном конденсате находятся 27% атомов, а в двухчастичном — около 53% атомов с импульсом  $k > 0$ ; в более точном приближении «двух сумм» ( $a_3 \neq 0$ ) получено соответственно 6% и 16%. Для приближения «двух сумм» мы также нашли, что высшие  $s$ -частичные конденсаты ( $s \geq 3$ ) отсутствуют в He-II при  $T = 0$ .

Обчислено хвильову функцію основного стану He-II,  $\Psi_0$ , в наближенні «двох сум по  $\mathbf{k}$ », тобто у вигляді функції Джастрова та першої поправки:

$$\ln \Psi_0 = \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{3!} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0}} a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2},$$

при цьому функцію  $a_2(k)$  знайдено чисельно з рівняння Вакарчука, яке пов'язує  $a_2(k)$  та  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  зі структурним фактором. Знаючи  $\Psi_0$ , обчислено кількість одночастинкового та двочастинкового конденсатів у He-II при  $T = 0$ ; формула для двочастинкового конденсату в наближенні «двох сум» отримана вперше. Модель не містить будь-яких підгоночних параметрів або функцій. Результати для конденсатів помітно залежать від кількості врахованих поправок  $a_n$  у розкладі  $\ln \Psi_0$ : в наближенні «одної суми» ( $a_3 = 0$ ) в одночастинковому конденсаті знаходяться 27% атомів, а в двочастинковому — близько 53% атомів з імпульсом  $k > 0$ ; в більш точному наближенні «двох сум» ( $a_3 \neq 0$ ) отримано відповідно 6% та 16%. Для наближення «двох сум» ми також знайшли, що вищі  $s$ -частинкові конденсати ( $s \geq 3$ ) відсутні у He-II при  $T = 0$ .

PACS: 67.40.Db

**Ключевые слова:** He-II, волновая функция, двухчастичный конденсат

## 1. Введение

Важный и актуальный вопрос в физике He-II — вопрос о роли и структуре составного конденсата [1–10]. Пока не вполне ясно, необходим ли конденсат для сверхтекучести или он возникает лишь как

сопутствующий фактор. По-видимому [3,11], для сверхтекучести необходимо наличие в жидкости недиагонального дальнего порядка, ODLRO (или хотя бы квазидальнего, для двумерия), а наличие такого упорядочения «автоматически» приводит к

появлению в системе макроскопически заполненного состояния с волновым вектором  $k = 0$ . Структура составного конденсата представляет чисто познавательный интерес для понимания микроструктуры гелия-II. Высказывалась идея [6,7,10], пока необоснованная, что сверхтекучая компонента  $\rho_s$  состоит именно из атомов составного конденсата, представляющего собой суперпозицию одночастичного, двухчастичного и высших конденсатов. Подчеркнем, что в теоретико-полевых подходах [1,4,5,10] спектр квазичастиц  $E(k)$  и энергия основного состояния  $E_0$  выражаются явно через одночастичные и двухчастичные конденсаты, возможна зависимость и от высших конденсатов. В [12] и в настоящей работе исследован другой подход для описания микроструктуры He-II, основанный на вычислении волновых функций  $\Psi_0$  и  $\Psi_{\mathbf{k}}$  — основного и первого возбужденного состояний He-II. В рамках этого подхода  $E(k)$  и  $E_0$  выводятся из  $\Psi_0$  и  $\Psi_{\mathbf{k}}$ , а параметры конденсатов не входят в формулы явно, но могут быть найдены из  $\Psi_0$  и  $\Psi_{\mathbf{k}}$ .

Особый интерес представляет микроскопическая природа  $\lambda$ -перехода в He-II, которая пока не вполне ясна. Предложены разные модели, каждая из которых содержит достаточно грубые приближения. Мы считаем, что при  $\lambda$ -переходе, видимо, происходит переход от состояния со слабым взаимодействием между квазичастицами к состоянию с сильным взаимодействием (так что понятие квазичастицы в значительной степени теряет смысл, и структура  $\Psi_{\mathbf{k}}$  меняется), среда становится микротурбулентной [13], что приводит к разрушению ODLRO и конденсата. Кроме того,  $\lambda$ -переход сопровождается (или даже инициируется, но это под вопросом) образованием вихревого клубка [14].

Настоящая работа посвящена исследованию структуры составного конденсата для основного состояния He-II в приближении термодинамического предела. Использован метод коллективных переменных, предложенный в пионерской работе Боголюбова и Зубарева [15] и в дальнейшем обоснованный и развитый в работах Юхновского и Вакарчука [16–21].

Расчет одночастичных конденсатов при  $T = 0$  проведен во многих работах: получено 8% [2,17], 4% [21], 9% [22,23], 14% [24], 7% [10]. Но без подгоночных параметров вычисления проведены лишь в [17,21]. Расчет двухчастичных конденсатов проведен в [7,25] с использованием подгоночных параметров. В [7] получено, что соотношение между одночастичными и двухчастичными конденсатами может быть разным и зависит от потенциала взаимодействия для атомов гелия; согласно предположению [10], в двухчастичных конденсатах находятся

все атомы, не входящие в одночастичные (о результатах [25] см. подробнее в разд. 4). Мы провели расчет одночастичного и двухчастичного конденсатов без использования подгоночных параметров и в более точном, чем в [17,21,25], приближении. Трехчастичные и более «высокие» конденсаты, насколько нам известно, пока не вычислялись, а только упоминались.

В работе получены следующие новые результаты:

1) в приближении «двух сумм» вычислено количество одночастичного конденсата в He-II при  $T = 0$ , получено  $N_0/N \approx 0,06$ , раньше [13,21,23]  $N_0$  вычислялось только для менее точного приближения «одной суммы»;

2) в приближении «двух сумм» мы получили формулу для двухчастичного конденсата в He-II для  $T = 0$  и нашли, что в двухчастичных конденсате находится около 16% атомов гелия; полученная нами формула уточняет формулу Ристига [25], найденную другим методом в приближении «одной суммы»;

3) в приближении «двух сумм» показано, что трехчастичный и более «высокие» конденсаты в He-II при  $T = 0$  отсутствуют;

4) показано, что в слабонеидеальном бозе-газе при  $T = 0$  в двухчастичном конденсате находятся все атомы, не входящие в одночастичный конденсат.

Результаты работы в кратком виде представлены также в [26].

## 2. Волновая функция и матрицы плотности для основного состояния He-II

Согласно работам Боголюбова и Зубарева [15], а также Юхновского и Вакарчука [18], волновая функция основного состояния гелия-II  $\Psi_0$  имеет вид

$$\Psi_0 = \frac{e^{S_0}}{\sqrt{Q}}, \quad S_0 = \sum_{n \geq 2} \frac{N^{1-n/2}}{n!} \times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \neq 0} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) a_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n}, \quad (1)$$

где  $\delta$  — символ Кронекера,  $N$  — полное число атомов гелия,  $Q$  — постоянная нормировки,  $\rho_{\mathbf{k}}$  — коллективные переменные

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \quad (\mathbf{k} \neq 0). \quad (2)$$

Нулевое приближение для  $\Psi_0$ :

$$\ln \Psi_0 = -\frac{1}{2} \ln Q + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{a_2(\mathbf{k})}{2} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}, \quad a_{n \geq 3} = 0. \quad (3)$$

Это приближение «одной суммы по  $\mathbf{k}$ ».  $\Psi_0$  (3) совпадает с функцией Джастрова

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{Q}} \prod_{i,j} e^{S_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (4)$$

в которой

$$S_1(r) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{a_2(k)}{2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{V}{N} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{a_2(k)}{2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (5)$$

$V$  — объем системы. Как известно, функция Джастрова (3), (4) описывает только двухчастичные

корреляции, а учет в (1) слагаемых с  $a_n$  позволяет учесть соответственно  $n$ -частичные корреляции.

Вычислим  $\Psi_0$  в первом приближении, когда в (1) учитываются суммы с  $a_2$  и  $a_3$ , а  $a_{n \geq 4} = 0$ . Это приближение «двух сумм» (если при вычислениях в разложениях учитываются все суммы до суммы  $n$ -й кратности по  $\mathbf{k}$  включительно, то это приближение « $n$  сумм» [20,21]). Подстановка  $\Psi_0$  в уравнение Шредингера позволяет получить цепочку уравнений для функций  $a_n$  [16]. В первом приближении

$$a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -\frac{2a_2(k_1)a_2(k_2)\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 + 2a_2(k_1)a_2(k_3)\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 + 2a_2(k_2)a_2(k_3)\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3}{k_1^2[1 - 2a_2(k_1)] + k_2^2[1 - 2a_2(k_2)] + k_3^2[1 - 2a_2(k_3)]}. \quad (6)$$

В  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$  (6) всегда  $\mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ , поэтому для краткости будем писать  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ . В настоящей работе  $\mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \neq 0$ . В работах Вакарчука [20,21] разработан метод вычисления  $s$ -частичных матриц плотности  $F_s$  для основного состояния бозе-жидкости; в приближении «двух сумм» найдены  $F_s$  и получено уравнение, связывающее  $\Psi_0$  со структурным фактором  $S(k)$ :

$$2a_2(k) = 1 - \frac{1}{S(k)} - \frac{\Sigma_1(k)}{S(k)[1 - 2a_2(k)]} - \frac{\Sigma_2(k)}{S(k)}, \quad (7)$$

где

$$\Sigma_1(k) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{a_2(q)a_2(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + a_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})[1 + a_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})]}{[1 - 2a_2(q)][1 - 2a_2(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}, \quad (8)$$

$$\Sigma_2(k) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{a_3^2(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{[1 - 2a_2(q)][1 - 2a_2(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}. \quad (9)$$

Для одночастичного конденсата  $N_0 = NF_1(r \rightarrow \infty)$  в [21] получено

$$\ln(N_0/N) = I_{1A} + I_{2A} + I_{2B} + I_{2C}, \quad (10)$$

$$I_{1A} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{a_2^2(k)}{1 - 2a_2(k)}, \quad (11)$$

$$I_{2A} = -\frac{1}{8N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} \left( \prod_{j=1}^3 \frac{2a_2(k_j)}{1 - 2a_2(k_j)} \right) \frac{1}{1 - 2a_2(k_1)}, \quad (12)$$

$$I_{2B} = -\frac{1}{2N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} \left( \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)} \right) a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \times \left\{ \frac{2a_2(k_1) + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)}{1 - 2a_2(k_1)} + 2a_2(k_1)[1 - a_2(k_2)] \right\}, \quad (13)$$

$$I_{2C} = \frac{1}{2N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} a_3^2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)}. \quad (14)$$

Формулы (7) и (10) отличаются от полученных в [21] наличием дополнительных слагаемых  $\Sigma_2$  и  $I_{2C}$  соответственно (вывод поправок  $\Sigma_2$  и  $I_{2C}$  см. ниже).

С помощью метода, развитого в [20], мы повторили вычисление  $s$ -частичных матриц плотности для основного состояния бозе-жидкости и нашли, что в приближении «двух сумм»  $F_s$  определяются формулой

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = F_s^{(1)} F_s^{(2)} F_s^{(2c)}, \quad (15)$$

где  $F_s^{(1)}$  соответствует приближению одной суммы по  $\mathbf{k}$ ;  $F_s^{(1)}$  и  $F_s^{(2)}$  найдены в [20] (см. ниже (25), (45)), а  $F_s^{(2c)}$  определяется формулой

$$\begin{aligned} \ln F_s^{(2c)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) = \\ = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} a_3^2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) |\xi_{\mathbf{k}_1} + \xi'_{\mathbf{k}_1}|^2 \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Отметим, что приближением «двух сумм» мы называем следующее приближение: для  $\Psi_0$  (1) считаем  $a_{n \geq 4} = 0$  (в [20] в сумме с  $a_4$  учитывалась двойная по  $\mathbf{k}$  сумма), и для такой  $\Psi_0$  вычисляем  $F_s^{(2c)}$  с учетом всех возникающих двойных сумм по  $\mathbf{k}$ .

Дополнительный множитель  $F_s^{(2c)}$  появился из-за того, что при вычислении средних вида  $\overline{\Delta\hat{U}\Delta\hat{U}'} - \overline{\Delta\hat{U}} \cdot \overline{\Delta\hat{U}'}$  в [20] не были учтены слагаемые типа  $\frac{\partial}{\partial x_{\mathbf{k}_1}} \frac{\partial}{\partial x_{\mathbf{k}_2}} \xi_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} \Delta\hat{U}'$ .

Справедливо

$$\overline{\Delta\hat{U}\Delta\hat{U}'} - \overline{\Delta\hat{U}} \cdot \overline{\Delta\hat{U}'} = \frac{1}{3!N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} a_3^2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \left(1 - \frac{s}{N}\right)^3 \times \prod_{j=1}^3 \frac{1}{f(k_j)} \left\{ 1 + \frac{3}{f(k_1)} \left( y_{-\mathbf{k}_1} + \frac{\xi'_{-\mathbf{k}_1} f(k_1)}{\sqrt{1-s/N}} \right) \times \left( y_{\mathbf{k}_1} + (1+q) \frac{\xi_{\mathbf{k}_1} f(k_1)}{\sqrt{1-s/N}} \right) \right\}, \quad (17)$$

где  $f(k_j) = 1 - 2a_2(k_j)(1 - s/N)$ ,  $q = 1$  (в [20]  $q = 0$ ). Во всех формулах сохраняем обозначения работы [20]. Среднее  $\overline{\Delta\hat{U}'\Delta\hat{U}} - \overline{\Delta\hat{U}'} \cdot \overline{\Delta\hat{U}}$  получаем из (17), поменяв местами  $\xi$  и  $\xi'$  ( $\overline{\Delta\hat{U}'\Delta\hat{U}} \neq \overline{\Delta\hat{U}\Delta\hat{U}'}$ ). Заменяв в (17)  $\xi'$  на  $\xi$ , получим среднее  $\overline{(\Delta\hat{U})^2} - \left(\overline{\Delta\hat{U}}\right)^2$ , а заменой  $\xi$  на  $\xi'$  получим  $\overline{(\Delta\hat{U}')^2} - \left(\overline{\Delta\hat{U}'}\right)^2$ . Также в [20] в формуле (2.15) выражение для  $v_1$  нужно домножить на два. Учет  $F_s^{(2c)}$  приводит к  $g(r \rightarrow \infty) = e^{4I_2C} \neq 1$  и к  $\sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} \equiv F_1(0)N \neq N$ , так как  $F_1(0) = e^{2I_2C} \neq 1$ . Следует ожидать, что в более точных приближениях « $n$  сумм» требуемые асимптотики  $g(r \rightarrow \infty) = F_1(0) = 1$  восстановятся при  $n \rightarrow \infty$ .

Поправка  $\Sigma_2$  в (7) влияет на асимптотики при  $k \rightarrow 0$  функции  $a_2(k)$  и спектра квазичастиц  $E(k)$  (формулы для  $E(k)$  см. в [12,19]):

$$2a_2(k \rightarrow 0) = -\frac{1 + \Sigma_2(0)}{S(k)}, \quad (18)$$

$$E(k \rightarrow 0) = ck = \frac{\hbar^2 k^2}{2mS(k)} (1 + \Sigma_2(0)), \quad (19)$$

где

$$\Sigma_2(0) = \frac{8}{N} \sum_{q \neq 0} \left[ \frac{a_2(q)}{1 - 2a_2(q)} \right]^4 > 0.$$

Для  $a_2(k)$  в первом приближении (6)–(9)  $\Sigma_2(0) = 0,66$  (см. численное решение в разд. 3), а для  $a_2(k)$  в нулевом приближении (3), для которого

$$2a_2(k) = 1 - \frac{1}{S(k)}, \quad a_{n \geq 3} = 0, \quad (20)$$

мы получили  $\Sigma_2(0) = 0,33$ . Как повлияет на асимптотику  $a_2(k \rightarrow 0)$  и  $E(k \rightarrow 0)$  учет в  $\ln \Psi_0$  (1) сле-

дующих поправок,  $a_{n \geq 4}$ , нам неизвестно, но в рассмотренном приближении, как видно, формула Фейнмана  $E(k) = \hbar^2 k^2 / (2mS(k))$  оказывается неточной даже при  $k \rightarrow 0$ . Также из (19) видно, что

$$S(k \rightarrow 0) = \frac{\hbar k}{2mc} (1 + \Sigma_2(0)).$$

### 3. Численное решение для $\Psi_0$ и одночастичного конденсата

Для получения  $\Psi_0$  в первом приближении необходимо знать функции  $a_2(k)$  и  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ :  $a_3$  определяется уравнением (6), а для нахождения  $a_2(k)$  необходимо численно решить уравнение (7) с учетом (6), (8), (9). Мы использовали экспериментальные данные для  $S(k)$  из [27], которые, по-видимому, наиболее точные, и учли экстраполяцию к  $T = 0$ . Когда нужно, суммы заменяем интегралами по правилу

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}. \quad (21)$$

Интегральное уравнение (7) удалось решить численно методом Ньютона [28]. Решение для  $a_2(k)$  приведено на рис. 1.

Интерес также представляет функция  $S_1(r)$  (5). Как видно из (4), значения  $S_1(r)$  при малых  $r$  определяют, насколько быстро убывает  $\Psi_0$  при перекрытии двух атомов. Численное решение для  $S_1(r)$  приведено на рис. 2. Для  $\Psi_0$  в нулевом приближении (3), (20) имеем  $S_1(0) \approx -1,7$ , т.е. при полном перекрытии двух атомов  ${}^4\text{He}$   $\Psi_0$  убывает в  $e^{2|S_1(0)|} \approx 30$  раз; а плотность вероятности  $\Psi_0^2$  убывает значительно сильнее (в 900 раз) по сравнению с  $\Psi_0^2$  для равномерного распределения атомов без перекрытий. В первом приближении для  $\Psi_0$  (6)–(9) получаем

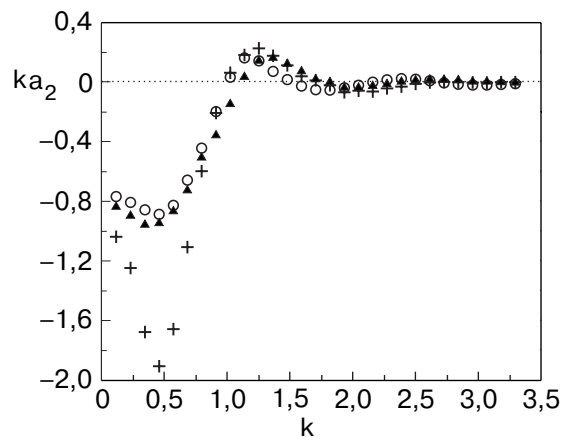


Рис. 1. Зависимость величины  $ka_2$  от  $k$  ( $k$  в единицах  $k_d = 2\pi/d = 1,756 \text{ \AA}^{-1}$ ): нулевое приближение (○) (20); первое приближение (+); второе приближение, найденное из модельного «эллиптического» потенциала с  $U(r = 0) = 60 \text{ K}$  [12] (▲).

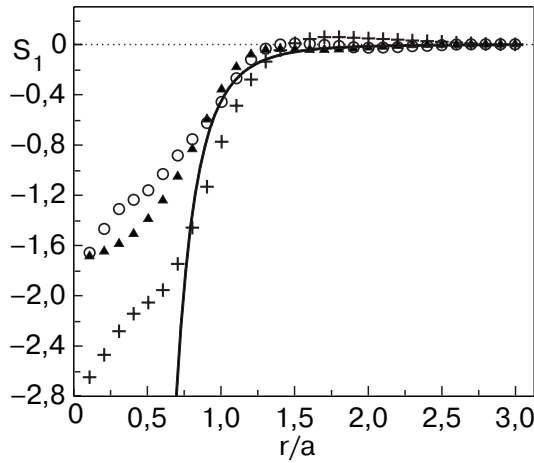


Рис. 2. Функция  $S_1(r/a)$  (5) ( $a = 2,64 \text{ \AA}$  — «диаметр» атома  $^4\text{He}$  [29]). Обозначения соответствуют тем же приближениям для  $a_2(k)$ , что и на рис. 1; сплошная линия — форма МакМиллана (39).

$S_1(0) \approx -2,7$ , это соответствует более сильному убыванию  $\Psi_0$  и  $\Psi_0^2$  при перекрытии двух атомов — в 300 и  $10^5$  раз соответственно. Таким образом, перекрытия атомов чрезвычайно маловероятны — подавляющее число конфигураций атомов составляют конфигурации с нерегулярным и в среднем равномерным распределением атомов. Вид  $S_1(r)$  на рис. 2 свидетельствует о том, что сближение двух атомов на расстояние, меньшее  $d_c \approx 1,5-2 \text{ \AA}$ , маловероятно. Парная функция распределения  $g(r)$  для He-II также близка к нулю при  $r < 2 \text{ \AA}$  (см. рис. 5). Эти свойства  $S_1(r)$  и  $g(r)$  можно интерпретировать как свидетельство того, что атом гелия имеет твердую «сердцевину» диаметром  $d_c$ . Конечно, модель не описывает строго структуру атома  $^4\text{He}$ , ведь для этого нужно было бы находить волновую функцию не для  $N$  «точечных» атомов, а для  $N$  ядер и  $2N$  электронов, что сделать невозможно. Все известные нам модели He-II не учитывают в явном виде эту структуру; в нашем подходе это вполне оправдано, так как рассчитанная при таком предположении вероятность перекрытия двух атомов оказывается очень малой.

Количество атомов в одночастичном конденсате вычисляем по формулам (10)–(14) с учетом (21). В [21] расчет одночастичного конденсата выполнен в приближении  $\Sigma_1, \Sigma_2 = 0$  в (7). Мы выяснили, что учет в (7) поправок  $\Sigma_1$  (8) и особенно  $\Sigma_2$  (9) заметно изменяет решения для  $a_2(k)$ ,  $S_1(r)$  и количества конденсата. Результаты следующие. Для нулевого приближения (3), (20)  $n_1 \equiv (N_0/N) \cdot 100\% = 27,2\%$ ; для приближения, в котором  $2a_2(k) = 1 - (1/S(k))$  и  $a_3$  определено в (6), имеем  $n_1 = 28,5\%$ . А в первом приближении (6)–(9)  $n_1$  оказывается существенно

меньше ( $n_1 = 6,1\%$ ) и хорошо согласуется с экспериментом.

В эксперименте  $n_1$  для конденсата найден не очень точно: в большинстве экспериментов [31–33]  $n_1 \approx 6-12\%$  для  $T = 0$ , а если учесть все работы, то  $n_1$  колеблется в широком интервале от 0 до 18%.

#### 4. Расчет для двухчастичного конденсата для основного состояния He-II

Используя формулы (15), (16), (25), (45), нетрудно показать, что для  $s$ -частичной матрицы плотности гелия-II  $F_s$  для трехмерия справедливо

$$\lim_{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j| \rightarrow \infty} F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) \Big|_B = F_s(\infty) = [F_1(\infty)]^s = \text{const} > 0, \quad (22)$$

где условие В:  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, |\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j|$  фиксированы;  $i, j = 1, \dots, s$ . Свойство (22) отражает наличие ODLRO у  $s$ -частичной матрицы плотности. Хотя (22) получено для  $F_s$ , найденных в приближении «двух сумм», можно предположить, что эта формула будет справедлива и для точных функций  $F_s$ .

Перейдем к анализу двухчастичного конденсата. Исходя из общих принципов запишем вероятность  $W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$  того, что в основном состоянии He-II два произвольных атома имеют импульсы  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ :

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} &= \\ &= \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \left| \int \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right|^2 = \\ &= \frac{1}{V^4} \int F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) + i\mathbf{k}_2(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2. \end{aligned} \quad (23)$$

Как можно убедиться,

$$\sum_{\mathbf{k}_2} W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 F_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)} \equiv \frac{N_{\mathbf{k}_1}}{N}. \quad (24)$$

Для нахождения количества атомов в двухчастичном конденсате нужно из (23) найти  $W_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}$ . Рассмотрим сначала приближение «одной суммы» для  $\Psi_0$  и  $F_2$ . В этом приближении  $\Psi_0$  определяется формулой (3), а матрица плотности  $F_s = F_s^{(1)}$  найдена в [20]:

$$\begin{aligned} F_s^{(1)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[ \frac{f_1(k)}{2} (|\xi_{\mathbf{k}}|^2 + |\xi'_{\mathbf{k}}|^2) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{s}{N} \frac{a_2(k)}{1 - 2a_2(k)} + f_2(k) \xi_{\mathbf{k}} \xi'_{-\mathbf{k}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$f_1(k) = a_2(k) + f_2(k), \quad f_2(k) = \frac{a_2^2(k)}{1 - 2a_2(k)}, \quad (26)$$

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^s e^{-i\mathbf{k}r_j}, \quad \xi'_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^s e^{-i\mathbf{k}r'_j}. \quad (27)$$

Удобно представить  $F_2^{(1)}$  в виде

$$\begin{aligned} \ln F_2^{(1)} = & \ln F_2(\infty) + \varphi_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \varphi_1(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) + \\ & + \varphi_2(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) + \varphi_2(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2) + \varphi_2(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1) + \varphi_2(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} f_i(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (29)$$

причем  $\varphi_i(r \rightarrow \infty) \sim \frac{1}{r^2} \rightarrow 0$ . Для  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}$  из (23) получаем

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}} = & \frac{F_2(\infty)}{V^4} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \times \\ & \times \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) - i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)] \exp[\varphi_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \\ & + \varphi_1(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) + \varphi_2(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) + \varphi_2(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2) + \\ & + \varphi_2(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1) + \varphi_2(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2)]. \end{aligned} \quad (30)$$

Чтобы вычислить  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}$  (30), разложим экспоненту с суммой всех  $\varphi_i$  в ряд. Можно показать, что для величины  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}$  существенны только интегралы от слагаемых вида

$$\varphi_1^{l_1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \varphi_1^{l_2}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \text{ и } \varphi_2^{l_3}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1) \varphi_2^{l_4}(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2), \quad (31)$$

где  $l_j = 1, 2, 3, \dots$  (всевозможные натуральные числа). Интегралы от других наборов  $\varphi_i$  в  $N$  раз меньше или равны нулю. С учетом этого получаем

$$W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}} = \frac{F_2(\infty)}{N^2} [\Phi_1^2(k) + \Phi_2^2(k)] \quad (k \neq 0), \quad (32)$$

$$\Phi_i(k) = \frac{N}{V} \int e^{\varphi_i(\mathbf{R})} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R}, \quad F_2(\infty) = F_1^2(\infty). \quad (33)$$

Следуя обозначениям работ [25], запишем  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}$  (32) в виде

$$N^2 W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}} N_{-\mathbf{k}} + \chi_{\mathbf{k}} \chi_{-\mathbf{k}} \quad (k \neq 0), \quad (34)$$

где

$$N_{\mathbf{k}} = F_1(\infty) \Phi_2(k), \quad \chi_{\mathbf{k}} = F_1(\infty) \Phi_1(k), \quad (35)$$

$N_{\mathbf{k}}$  соответствует (24), это число атомов с импульсом  $\mathbf{k}$ . Для  $k = 0$  имеем одночастичный конденсат:  $\varphi_2(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ ,  $\Phi_2(0) = N$  и  $N_0 = NF_1(\infty)$ . В (32), (35)  $F_i(\infty)$  соответствуют приближению «одной суммы»:  $N_0/N \equiv F_1(\infty) = e^{I_{1A}}$  (см. (10), (11)). Как видно из (34),  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}$  состоит из двух слагаемых: первое слагаемое  $N_{\mathbf{k}}^2/N^2$  — просто произведение относительного числа атомов с импульсом  $\mathbf{k}$  на относительное число атомов с импульсом  $-\mathbf{k}$ , это слагаемое не содержит корреляций; второе слагаемое  $|\chi_{\mathbf{k}}|^2/N^2$  описывает собственно корреляции в парах  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Двухчастичный конденсат естественно соотносить именно с корреляционным слагаемым  $|\chi_{\mathbf{k}}|^2/N^2$ .

Возникает вопрос, что называть двухчастичным конденсатом. В работах Ристига [25] двухчастичный конденсат определяется величиной

$$P_2 = \frac{\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \chi_{\mathbf{k}}^2}{\sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\chi_{\mathbf{k}}^2 + N_{\mathbf{k}}^2)}, \quad (36)$$

$P_2$  можно интерпретировать как среднюю степень скоррелированности пар атомов с  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$ ,  $\mathbf{k}_i \neq 0$ . Мы считаем, что более наглядно определить число атомов в двухчастичном конденсате следующим образом:

$$N_2 = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} N_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}, \quad (37)$$

где  $c_{\mathbf{k}}$  — «коэффициент корреляций»:

$$c_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \frac{|\chi_{\mathbf{k}}|}{N_{\mathbf{k}}} & \text{при } |\chi_{\mathbf{k}}| < N_{\mathbf{k}}, \\ 1 & \text{при } |\chi_{\mathbf{k}}| \geq N_{\mathbf{k}}. \end{cases} \quad (38)$$

Используя значения  $a_2(k)$ , найденные в разд. 3 в приближении «одной суммы», из (26)–(35) получим функции  $\chi_{\mathbf{k}}$  и  $N_{\mathbf{k}}$  (см. рис. 3) и найдем

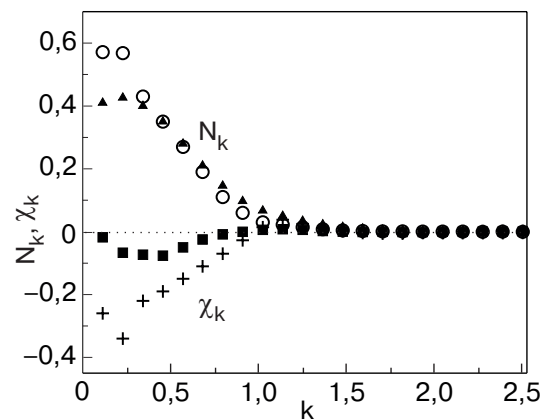


Рис. 3. Функции  $N_{\mathbf{k}}$  и  $\chi_{\mathbf{k}}$  от  $k$  ( $k$  в единицах  $k_d = 2\pi/d$ ): приближение «одной суммы» ( $\circ, +$ ); приближение «двух сумм» ( $\blacktriangle, \blacksquare$ ).

$N_2 \approx 0,53 N$ ,  $P_2 \approx 0,31$ . В [25]  $P_2 \approx 0,09$ , при этом вычисления проводились с  $\Psi_0$  в приближении Джастрова (4), что совпадает с нашим приближением для  $\Psi_0$  (3), но функция  $S_1(r)$  в (4) выбрана в грубом приближении, найденном вариационным методом:

$$S_1(r) = -\frac{r_0^5}{4r^5}, \quad r_0 = 2,963 \text{ \AA}. \quad (39)$$

Из-за простоты вывода и вида, решения, подобные (39), достаточно популярны. Наш метод позволяет найти  $S_1(r)$  значительно более точно, поскольку мы находим  $a_2(k)$ , а значит, и  $S_1(r)$  (5) из точного  $N$ -частичного уравнения Шредингера без использования подгоночных параметров, приближение состоит только в обрыве рядов в (1) для  $\ln \Psi_0$  ( $a_{n \geq 3} = 0$ ) и в (55) для  $S(k)$ . Как видно на рис. 2, полученная таким образом функция  $S_1(r)$  сильно отличается от (39), поэтому отличаются и значения  $P_2$ , хотя формулы для  $\chi_{\mathbf{k}}$  (см. (52)) и  $P_2$  совпадают. Отметим, что  $S_1(r \rightarrow \infty) \sim 1/r^2$ , так как  $a_2(k \rightarrow 0) \sim 1/k$  (7).

Мы нашли также следующие вероятности  $W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ :

$$N^2 W_{0,0} = N_0^2, \quad (40)$$

$$N^2 W_{\mathbf{k},0} = N_0 N_{\mathbf{k}} + 2N_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}} \quad (k \neq 0), \quad (41)$$

$$N^2 W_{\mathbf{k},\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}}^2 + N_{\mathbf{k}}^2 \quad (k \neq 0), \quad (42)$$

$$N^2 W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = N_{\mathbf{k}_1} N_{\mathbf{k}_2} \quad (k_1, k_2 \neq 0, \mathbf{k}_1 \neq \pm \mathbf{k}_2). \quad (43)$$

Как видно, кроме пар  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ , корреляции свойственны также парам  $(\mathbf{k}, 0)$  и парам  $(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ , с одинаковым импульсом у атомов, причем для последних  $c_{\mathbf{k}} = 1$ , — согласно (37), в «двухчастичном конденсате»  $(\mathbf{k}, \mathbf{k})$  находятся все атомы с  $k > 0$ . Отметим, что в парах  $(0,0)$  нет корреляций (40), поэтому в двухчастичный конденсат  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$  входят лишь атомы с  $k > 0$ .

Изучим теперь двухчастичный конденсат в более точном приближении «двух сумм». В этом приближении  $\Psi_0$  (1) определяется функциями  $a_2(k)$  (7) и  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  (6), а  $a_{n \geq 4} = 0$ . Матрица плотности в этом случае вычисляется по формуле (15), где  $F_s^{(1)}$  и  $F_s^{(2c)}$  определены согласно (25), (16), а  $F_s^{(2)}$  найдена в [20]:

$$\begin{aligned} \ln F_s^{(2)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) &= \frac{1}{3! \sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} \left[ \prod_{j=1}^3 \left( \frac{\xi_{\mathbf{k}_j} + \xi'_{\mathbf{k}_j}}{2} \right) - \frac{s}{N \sqrt{N}} \right] \prod_{j=1}^3 \frac{2a_2(k_j)}{1 - 2a_2(k_j)} + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} \left\{ \frac{1}{2} \frac{a_2(k_1)}{1 - 2a_2(k_1)} \prod_{j=1}^3 \frac{2a_2(k_j)}{1 - 2a_2(k_j)} + [2a_2(k_1) + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)] \frac{a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)}{1 - 2a_2(k_1)} \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)} \right\} \times \\ &\times \left( \frac{|\xi_{\mathbf{k}_1} + \xi'_{\mathbf{k}_1}|^2}{4} - \frac{s}{N} \right) + \frac{1}{3! \sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \left[ \eta_{\mathbf{k}_1} \eta_{\mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}_3} + \eta'_{\mathbf{k}_1} \eta'_{\mathbf{k}_2} \eta'_{\mathbf{k}_3} - \frac{2s}{N \sqrt{N}} \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)} \right], \quad (44) \end{aligned}$$

$$\eta_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} + \frac{a_2(k)}{1 - 2a_2(k)} (\xi_{\mathbf{k}} + \xi'_{\mathbf{k}}). \quad (45)$$

Как показал анализ, функцию  $\ln F_2 = \ln F_2^{(1)} + \ln F_2^{(2)} + \ln F_2^{(2c)}$  можно представить в форме (28) и суммы дополнительных слагаемых с «двойными экспонентами» вида

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \exp[i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_1) + i\mathbf{k}_2(\mathbf{r}'_2 - \mathbf{r}_2)]. \quad (46)$$

Слагаемые вида (46), возникающие из произведений  $\prod_{j=1}^3 \eta_{\mathbf{k}_j}$  и  $\prod_{j=1}^3 (\xi_{\mathbf{k}_j} + \xi'_{\mathbf{k}_j})$  в (44), дают вклад в

$W_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}$ , равный нулю или в  $N$  раз меньший вклада слагаемых вида (31). В результате получаем, что в

приближении «двух сумм»  $W_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}$  определяется, как и раньше, формулами (32)–(35) с  $\varphi_i$  (29), но теперь  $F_i(\infty)$  соответствуют приближению «двух сумм» (формулы (10)–(14) для  $F_1(\infty) = N_0/N$ ), а  $f_1(k)$  и  $f_2(k)$  имеют вид

$$f_1(k) = a_2(k) + f_2(k) + \delta_1(k), \quad (47)$$

$$\delta_1(k) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{a_3(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{1 - 2a_2(\mathbf{k} + \mathbf{q})}, \quad (48)$$

$$f_2(k) = \frac{a_2^2(k)}{1 - 2a_2(k)} + \delta_2(k) + \delta_3(k), \quad (49)$$

$$\delta_2(k_1) = \frac{1}{N} \frac{1}{1 - 2a_2(k_1)} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \prod_{j=1}^3 \frac{a_2(k_j)}{1 - 2a_2(k_j)}, \quad (50)$$

$$\delta_3(k_1) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \left( \prod_{j=1}^3 \frac{1}{1 - 2a_2(k_j)} \right) a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \times$$

$$\times \left[ \frac{a_2(k_1) + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)[1 - a_2(k_1)]}{1 - 2a_2(k_1)} + \right.$$

$$\left. + a_2(k_1)[1 - 2a_2(k_2)] + a_2(k_2)a_2(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \right]. \quad (51)$$

Функцию  $\chi_{\mathbf{k}}$  в приближении «двух сумм» можно представить в виде

$$\chi_{\mathbf{k}} = \frac{N}{V} \int dr e^{2S_1(r) + S_2^*(r)} F_1(r) e^{i\mathbf{k}r}, \quad k \neq 0, \quad (52)$$

где  $F_1(r) = (N_0/N) e^{\Phi_2(r)}$  (это одночастичная матрица плотности в приближении «двух сумм», см. рис. 4),  $S_1(r)$  определена согласно (5) и

$$S_2^*(r) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \delta_1(k) e^{i\mathbf{k}r}. \quad (53)$$

В приближении «одной суммы»  $\delta_1(k) \equiv 0$ ,  $S_2^*(r) = 0$ ,  $F_1(r) = F_1^{(1)}(r)$  и (52) совпадает с полученной ранее [25] формулой Ристига для  $\chi_{\mathbf{k}}$  (с точностью до множителя  $N/V$ , возникшего из-за разной нормировки  $F_1$ , также мы выбрали другой знак функции  $\chi_{\mathbf{k}}$ ). Формула (52) выведена впервые.

Вычислим теперь количество атомов в двухчастичном конденсате;  $N_2$  и  $P_2$  находим по формулам (35)–(37) с учетом (47)–(52), при этом для функции  $a_2(k)$  используем численное решение уравнения (7), соответствующее приближению «двух сумм», и  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  определяем из (6). Полученные функции  $\chi_{\mathbf{k}}$  и  $N_{\mathbf{k}}$  изображены на рис. 3. Мы нашли, что  $N_2 \approx 0,16N$ ,  $P_2 \approx 0,025$ .

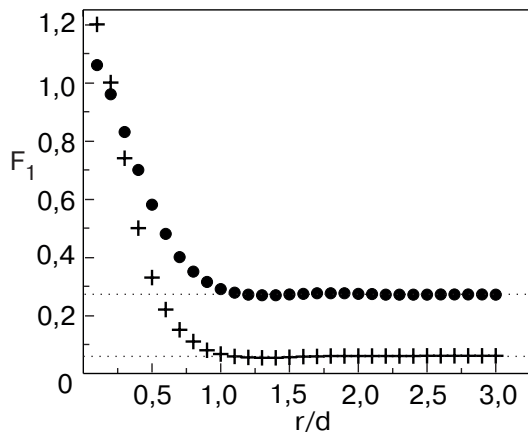


Рис. 4. Одночастичная матрица плотности  $F_1(r)$  для He-II: приближения «одной суммы» (●) и «двух сумм» (+), пунктир — одночастичный конденсат  $N_0/N = F_1(\infty)$  для этих приближений.

Отметим, что для приближения «двух сумм» с учетом (18) справедливо

$$N_{\mathbf{k}|k \rightarrow 0} = \frac{N_0}{N} \frac{a_2(k)|_{k \rightarrow 0}}{2} = \frac{N_0}{N} \frac{mc}{2\hbar k} (1 + \Sigma_2(0)),$$

$$\chi_{\mathbf{k}|k \rightarrow 0} = -N_{\mathbf{k}|k \rightarrow 0}.$$

Такая асимптотика для  $N_{\mathbf{k}}$  уточняет ранее найденную в [34,35]

$$N_{\mathbf{k}|k \rightarrow 0} = \frac{N_0}{N} \frac{mc}{2\hbar k}.$$

Для приближений «одной суммы» и «двух сумм» выполняются соотношения  $P_2 \approx (N_2/N)^2$ , что естественно, и  $N_2 \approx 2N_0$ .

На рис. 5 изображена функция

$$\chi(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}r} \chi_{\mathbf{k}} =$$

$$= \frac{N}{V} e^{2S_1(r) + S_2^*(r)} F_1(r) = \frac{N_0}{V} e^{\Phi_1(r)}, \quad (54)$$

а также парная корреляционная функция  $g(r)$ , найденная из уравнения

$$S(k) = 1 + \frac{N}{V} \int dr [g(r) - 1] e^{-i\mathbf{k}r}. \quad (55)$$

Как видно на рис. 5, в области  $r \lesssim d_c \approx 1,7 \text{ \AA}$  функция  $g(r)$ , к сожалению, находится неточно — из физических соображений ясно, что  $g(r)$  не может быть отрицательной и должна быть близка к нулю при  $r \lesssim d_c$ . Осцилляции  $g(r)$  при  $r \lesssim d_c$  получены и в других работах [27,30], они возникают из-за большой относительной погрешности измерения величины  $S(k) - 1$  при  $k \gtrsim 4 \text{ \AA}^{-1}$  и, возможно, из-за неучета многочастичных поправок в (55). По тем же причинам следует ожидать, что и функция  $S_1(r)$  определяется не совсем точно в области  $r \lesssim d_c$ .

Функция  $g(r)$  описывает зависимость корреляций в парах из двух атомов с произвольными импульсами  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  от размера пары  $r$ , а  $\chi(r)$  — то же для более узкого класса пар  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ . При разведении атомов на бесконечность корреляции исчезают, поэтому  $g(\infty)$  и  $\chi(\infty)$  дают значения  $g$  и  $\chi$  для нескоррелированных пар (для вполне хаотического распределения атомов было бы  $g(r) \equiv g(\infty)$  для всех  $r$  и то же для  $\chi(r)$ ).

Сравнивая  $g(r)$  и  $\chi(r)$  на рис. 5, видим, что эти функции сходны по форме, как и можно было ожидать. На малых расстояниях атомы сильно взаимодействуют, поэтому при  $r \lesssim d$  корреляции в парах уже заметны — значения  $g$  и  $\chi$  заметно отличаются от значений на бесконечности.

Авторы [24] считают, что допустимо говорить о наличии в He-II связанных пар атомов. На наш



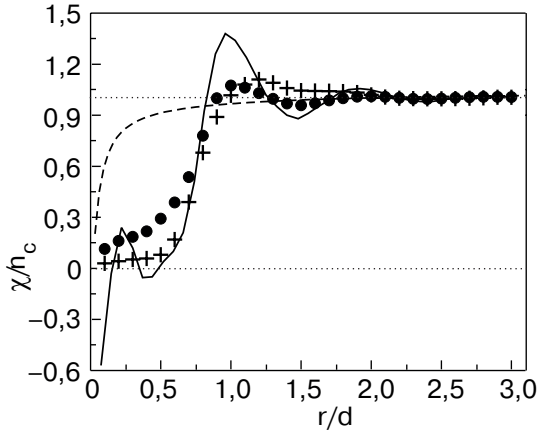


Рис. 5. Функция  $\chi(r)/n_c$  (54) ( $d = 3,578 \text{ \AA}$  — среднее расстояние между атомами He-II,  $n_c = N_0/V$ ): приближения «одной суммы» (●) и «двух сумм» (+); сплошная линия — функция  $g(r)$  для He-II, см. текст; штриховая линия — приближенный вид функций  $g(r)$  и  $\chi(r)/n_c$  для слабонеидеального бозе-газа; пунктир — уровни нуля и единицы.

взгляд, свойства  $\chi(r)$  и результаты [24] не дают оснований говорить о связанных состояниях, а только о корреляциях в парах. В [24] найдена энергия связи для пары,  $E_p \approx -0,05 \text{ К}$ , но эта энергия слишком мала для образования реальных связанных пар, ведь она на два порядка меньше энергии атома для основного состояния.

Образование связанных пар проблематично, поскольку атомы гелия сферически симметричны и не имеют «усов». Если бы в He-II было макроскопическое число молекул, состоящих из двух атомов, то квант циркуляции  $\kappa$  был бы заметно меньше, чем  $\hbar/m$  ( $m$  — масса атома гелия), но в эксперименте с хорошей точностью  $\kappa = \hbar/m$  [36].

### 5. Высшие конденсаты для $T = 0$

Для вычисления  $s$ -частичного конденсата ( $s \geq 3$ ) необходимо найти вероятность

$$W_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_s} = \frac{1}{V^{2s}} \int F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s | \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s) \times \\ \times e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) + \dots + i\mathbf{k}_s(\mathbf{r}_s - \mathbf{r}'_s)} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_s d\mathbf{r}'_1 \dots d\mathbf{r}'_s, \quad (56)$$

где  $\mathbf{k}_s = -\mathbf{k}_1 - \dots - \mathbf{k}_{s-1}$ ,  $\mathbf{k}_i \neq 0$  для всех  $i = 1, 2, \dots, s$ ;  $s$ -частичный конденсат состоит из «тривиальной» части (когда все  $s$  атомов входят в какой-либо из «низших» конденсатов) и «нетривиальной» (хотя бы один из  $s$  атомов не входит в «низшие» конденсаты). «Тривиальная» часть состоит из «низших» конденсатов, ее можно не рассматривать.  $s$ -частичный конденсат будем отождествлять с «нетривиальной» частью, и для ее нахождения потребуем

$\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_l \neq 0$  для всех  $l = 2, \dots, s-1$ . В этом случае, как показал анализ, подобный проделанному для двухчастичного конденсата, если все волновые векторы  $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_s$  отличны друг от друга, то для приближений «одной суммы»,  $F_s = F_s^{(1)}$ , и «двух сумм» (15), (16), (25), (45) справедливо выражение

$$N^s W_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_s} = \prod_{j=1}^s N_{\mathbf{k}_j}. \quad (57)$$

А при совпадении импульсов  $\mathbf{k}_i$  у  $l$  атомов получим

$$N^s W_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_{l+1}, \dots, \mathbf{k}_s} = N^l W_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_1} N_{\mathbf{k}_{l+1}} \dots N_{\mathbf{k}_s}, \quad (58)$$

где  $N^l W_{\mathbf{k}, \dots, \mathbf{k}}$  ( $l$  атомов)  $= N_{\mathbf{k}}^l [1 + (l-1)!] > N_{\mathbf{k}}^l$ . В (57), (58)  $N_{\mathbf{k}}$  записаны для соответствующего приближения. Как видно из (57), (58), в группе из  $s$  атомов с нулевым импульсом группы корреляции есть не между всеми атомами, а лишь в подгруппах атомов с одинаковым импульсом, т.е.  $s$ -частичный конденсат отсутствует. По крайней мере нам не удалось найти в разложении экспоненты от  $\ln F_s$  (15) каких-либо слагаемых, которые дали бы корреляционную добавку в (57), (58). Мы полагаем, что тот же результат получится и при учете всех поправок  $a_n$  в (1).

Приближение «двух сумм» учитывает трехчастичные корреляции в  $\Psi_0$  (1), и для этого приближения можно было бы ожидать наличие трехчастичного конденсата. Как объяснить «на пальцах», что одно- и двухчастичный конденсаты есть, а высших нет? Ясно, что для того, чтобы в группе из трех атомов с импульсами  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$  были корреляции между всеми атомами, нужно, чтобы корреляции были во всех парах:  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ ,  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3)$ ,  $(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ , где  $k_i \neq 0$ . Однако, как показал наш анализ, при  $k_i \neq 0$  корреляции есть только в парах с  $\mathbf{k}_i = \pm \mathbf{k}_j$  (см. формулы (34), (42), (43), которые справедливы и для приближения «двух сумм»), но в тройках  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$  у нас всегда  $\mathbf{k}_i \neq -\mathbf{k}_j$ , и хотя бы в двух парах  $\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j$  (так как  $\mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ ). Почему скоррелированы лишь пары с  $\mathbf{k}_i = \pm \mathbf{k}_j$ , нам не вполне ясно с физической точки зрения. Может быть, в теоретико-полевых подходах это лучше видно.

Отметим также, что если при выводе  $\Psi_0$  учесть неточность атомов, многочастичное взаимодействие  $\sum_{l \geq 3} \sum_{i_1 < \dots < i_l} V_l(r_{i_1 i_2}, r_{i_1 i_3}, \dots, r_{i_{l-1} i_l})$  и многократное рассеяние [37] (в уравнении (55), из которого выводится (7) [20]), то это не приведет к появлению высших конденсатов, последние два фактора лишь незначительно уточняют выражения для  $a_n$  в (1).

Таким образом, вопреки распространенному убеждению, что при наличии одночастичного конденсата должны быть и высшие конденсаты, мы получили, что при  $T = 0$  составной конденсат в гелии-II — это суперпозиция только одночастичного и двухчастичного конденсатов, а высших конденсатов в He-II нет (есть только «тривиальная» часть, у которой все  $s$  атомов распределены между одночастичным и двухчастичным конденсатами). И далеко не все атомы гелия входят в этот составной конденсат, хотя нельзя исключить возможность того, что при учете всех  $a_n$  в (1) получим  $N_1 + N_2 = N$ .

Эти результаты важны для теоретико-полевых микромоделей гелия-II: существенно отсутствие высших конденсатов и небольшое значение для двухчастичного конденсата. Можно пробовать в таких моделях искать решения в виде разложений по двум малым параметрам — одночастичному и двухчастичному конденсатам. Не исключено, что это позволит построить «идеальную» (см. Заключение) микромодель He-II.

### 6. Двухчастичный конденсат для слабонеидеального бозе-газе при $T = 0$

Для основного состояния слабонеидеального бозе-газа (СНБГ) справедливо [15,18] соотношение

$$2a_2(k) = 1 - \frac{E_b(k)2m}{\hbar^2 k^2},$$

$$E_b(k) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} 2[n_0 v(k) + \delta v(k)]},$$
(59)

$$v(k) = \int U(r) e^{-ikr} d\mathbf{r}, \quad n_0 = \frac{N}{V},$$
(60)

здесь  $U(r)$  — потенциал взаимодействия между атомами,  $\delta v(k) = O(n_0^2 v^2)$ ,  $\delta v(0) \neq 0$ . С учетом  $n_0 v(0) > 0$  имеем

$$2a_2(k \rightarrow 0) \sim -\frac{\sqrt{n_0 v(0)}}{k}, \quad 2a_2(k \gg k_0) \approx -\frac{n_0 v(k)2m}{\hbar^2 k^2},$$

где

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = 2n_0 v(k_0) + 2\delta v(k_0).$$

Из (33), (29), (47)–(52) получим, что для СНБГ

$$\Phi_1(k) = f_1(k) + \delta(k), \quad \Phi_2(k) \approx f_2(k),$$
(61)

где  $\delta(k) = O(n_0^2 v^2)$ . Используя (47)–(52), нетрудно показать, что

$$\frac{|\chi_{\mathbf{k}}|}{N_{\mathbf{k}}} \geq 1 \text{ для всех } k > 0.$$
(62)

Согласно (37), это означает, что при  $T = 0$  все атомы слабонеидеального бозе-газа, не входящие в одночастичный конденсат, находятся в двухчастичном.

Вычислим для СНБГ значение  $P_2$  (36). Интегралы берутся в приближении  $v(k) = v(0)$ , незначительно влияющем на величину  $P_2$ . Получим  $P_2 = 6\pi/(9\pi - 8) \approx 0,93$ . В СНБГ пары атомов  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$  с  $k \gtrsim k_0$  очень скоррелированы, для них  $|\chi_{\mathbf{k}}| \gg N_{\mathbf{k}}$ . Поэтому в  $\mathbf{r}$ -пространстве должны быть более скоррелированы пары размером  $r \lesssim 2\pi/k_0 \approx d\sqrt{d/a_s}$ . Приближенный вид функций  $g(r)$  и  $\chi(r)$  для СНБГ показан на рис. 5 в предположении  $a_s = 30a = 0,03d$ , где  $a$  — радиус атома,  $a_s$  — длина рассеяния [38]. Как видно на рис. 5, у функций  $g(r)$  и  $\chi(r)$  для СНБГ нет выраженного максимума, соответствующего ближайшему порядку.

### 7. Заключение

Основной недостаток всех подходов, в рамках которых микроструктура He-II исследуется путем вычисления  $N$ -частичных волновых функций основного и возбужденных состояний He-II, — это отсутствие малого параметра в задаче. Например, в нашем подходе волновые функции и все вычисляемые величины фактически раскладываются в ряд по функции  $a_2(k)k/k_d$  ( $k_d = 2\pi/d$ ), среднее значение которой при  $k < k_d$  не мало (около  $-1/2$ , см. рис. 1). Поэтому учет для  $\Psi_0$  следующих поправок  $a_n$  приводит к заметному изменению результатов для спектра квазичастиц He-II  $E(k)$ , энергии основного состояния  $E_0$  и особенно для конденсатов (так как параметры конденсата определяются как экспонента от ряда, который приходится обрывать;  $E(k)$  и  $E_0$  менее чувствительны к поправкам, поскольку для них ряды не стоят в экспоненте [12,19]).

Тем не менее рассмотренная нами модель, несомненно, дает приближенное описание структуры гелия-II: модель не содержит подгоночных параметров, а результаты для спектра квазичастиц [17,39] и одночастичного конденсата приближенно согласуются с экспериментом.

Пока не предложен способ вычисления волновых функций гелия-II, в котором разложение проводилось бы по малому параметру. И прогресс может быть связан лишь с учетом в уравнениях следующих поправок  $a_n$  и численным решением полученных уравнений. Однако для достаточно точного описания нужно учесть, может быть, еще 10 поправок, но такие уравнения невозможно решить численно (а для конденсатов и формулу получить затруднительно). Возможно, более точное описание He-II смогут дать в будущем теоретико-полевые подходы. Все уравнения в микромоделе He-II нужно выводить из первопринципов, без подгоночных

параметров и необоснованных постулатов, а все разложения должны проводиться по малому параметру. Насколько нам известно, такая «идеальная» модель пока не предложена. Рассмотренный нами подход обладает всеми этими свойствами, кроме последнего.

Автор благодарит В.П. Гусынина, Ю.В. Штанова и А.А. Ровенчака за обсуждение некоторых вопросов и полезные замечания.

1. Н.Н. Боголюбов, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **11**, 77 (1947).
2. О. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956).
3. C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
4. К.А. Вруекнер and К. Savada, *Phys. Rev.* **106**, 1117, 1128 (1957); К. Бракнер, *Теория ядерной материи*, Мир, Москва (1964).
5. J.G. Valatin and D. Butler, *Nuovo Cimento* **10**, 37 (1958); W.A.V. Evans and Y. Imry, *Nuovo Cimento* **B63**, 155 (1969); A. Coniglio, F. Mancini, and M. Maturi, *Nuovo Cimento* **B63**, 227 (1969); R. Hastings and J.V. Halley, *Phys. Rev.* **B12**, 267 (1975).
6. С.И. Шевченко, *ФНТ* **11**, 339 (1985).
7. Ю.А. Непомнящий, Э.Я. Пашицкий, *ЖЭТФ* **98**, 178 (1990).
8. J.W. Halley, *J. Low Temp. Phys.* **93**, 853 (1993).
9. С.И. Вильчинский, Э.А. Пашицкий, П.И. Фомин, *ФНТ* **23**, 1267 (1997).
10. Е.А. Pashitskii, S.V. Mashkevich, and S.I. Vilchinsky, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 075301 (2002); *J. Low Temp. Phys.* **134**, 851 (2004).
11. Э.Б. Сонин, *ЖЭТФ* **59**, 1416 (1970); В.Л. Березинский, *ЖЭТФ* **61**, 1144 (1971); J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *J. Phys.* **C6**, 1181 (1973); В.Н. Попов, *ТМФ* **11**, 236, 354 (1972); *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике*, Атомиздат, Москва (1976).
12. М.Д. Томченко, *ЖЭТФ* **128**, вып. 6(12) (2005).
13. L. Onsager, *Nuovo Cimento* **6**, Suppl. 2, 249 (1949).
14. М.Д. Томченко, *ФНТ* **31**, 483 (2005).
15. Н.Н. Боголюбов, Д.Н. Зубарев, *ЖЭТФ* **28**, 129 (1955).
16. И.А. Вакарчук, И.Р. Юхновский, *ТМФ* **18**, 90 (1974).
17. И.Р. Юхновский, И.О. Вакарчук, *Вісник АН УРСР* №9, 32 (1977).
18. И.А. Вакарчук, И.Р. Юхновский, *ТМФ* **40**, 100 (1979).
19. И.А. Вакарчук, И.Р. Юхновский, *ТМФ* **42**, 112 (1980).
20. И.А. Вакарчук, *ТМФ* **80**, 439 (1989).
21. И.А. Вакарчук, *ТМФ* **82**, 438 (1990).
22. E. Manousakis, V.R. Pandharipande, and Q.N. Usmani, *Phys. Rev.* **B31**, 7022 (1985).
23. L. Reatto, G.L. Masserini, and S.A. Vitiello, *Physica* **B197**, 189 (1994).
24. M.L. Ristig, P. Hecking, P.M. Lam, and J.W. Clark, *Phys. Lett.* **A63**, 94 (1977); P.M. Lam and M.L. Ristig, *Phys. Rev.* **B20**, 1960 (1979).
25. M.L. Ristig, *Phys. Lett.* **A58**, 390 (1976); *Phys. Rev.* **B18**, 1207 (1978).
26. M. Tomchenko, submitted to *J. Low Temp. Phys.*
27. E.C. Svensson, V.F. Sears, A.D.B. Woods, and P. Martel, *Phys. Rev.* **B21**, 3638 (1980).
28. А.А. Самарский, А.В. Гулин, *Численные методы*, Наука, Москва (1989).
29. R.A. Aziz, V.P.S. Nain, J.S. Carley, W.L. Taylor, and G.T. McConville, *J. Chem. Phys.* **70**, 4330 (1979).
30. F.H. Wirth and R.B. Hallock, *Phys. Rev.* **B35**, 89 (1987).
31. И.В. Богоявленский, Л.В. Карнацевич, Ж.А. Козлов, А.В. Пучков, *ФНТ* **16**, 139 (1990).
32. H.R. Glyde, R.T. Azuah, and W.G. Stirling, *Phys. Rev.* **B62**, 14337 (2000).
33. T.R. Sosnick, W.M. Snow, and P.E. Sokol, *Phys. Rev.* **B41**, 11185 (1990).
34. J. Gavoret and P. Nozières, *Ann. Phys.* **28**, 349 (1964).
35. L. Reatto and G.V. Chester, *Phys. Rev.* **155**, 88 (1967).
36. G.W. Rayfield and F. Reif, *Phys. Rev. Lett.* **11**, 305 (1963); *УФН* **83**, 755 (1964); *Phys. Rev.* **136**, A1194 (1964); P.W. Karn, D.R. Starks, and W. Zimmermann, *Phys. Rev.* **B21**, 1797 (1980).
37. *Физика простых жидкостей. Статистическая теория*, гл. 2, Мир, Москва (1971) (*Physics of Simple Liquids*, North-Holl. Publ. Com., Amsterdam, ch. 2 (1968)).
38. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, Ч. 2, Наука, Москва (1978) (E. Lifshiz and L. Pitaevskii, *Statistical Physics*, Pergamon, Oxford, Part 2 (1980)).
39. М.Д. Томченко, *Ukr. J. Phys.* **50**, 720 (2005). (В [39] уравнение (7) решено с  $\Sigma_2(k) = 0$ .)

### Investigation of the structure of a composite condensate for He-II at $T = 0$

Maksim Tomchenko

We calculate the ground-state wave function of He-II,  $\Psi_0$ , in the approximation of «two sums», that is, as the Jastrow function and first correction,

$$\ln \Psi_0 = \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{3!} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0}^{k_1 + k_2 \neq 0} a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2},$$

in so doing we find numerically the function  $a_2(k)$  from the Vakarchuk equation that connects

$a_2(k)$  and  $a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  with the structure factor. Using  $\Psi_0$  we obtain the amount of the one-particle and two-particle condensates in He-II at  $T = 0$ ; a formula for the two-particle condensate in the approximation of «two sums» was derived for the first time. The model does not have any free parameters or functions. The theoretical amount of condensates turn out to be appreciably dependent on the number of corrections  $a_n$  involved in  $\ln \Psi_0$ : for the «one sum» approximation ( $a_3 = 0$ ) we have found that about 27% and

53% of helium atoms belong to the one-particle and two-particle condensates, respectively; for a more exact approximation of «two sums» ( $a_3 \neq 0$ ) we have found 6% (that agrees well with the experiment) and 16%, respectively. In the approximation of «two sums» we have also found that the higher  $s$ -particle condensates ( $s \geq 3$ ) are absent in He-II at  $T = 0$ .

**Keywords:** He-II, wave function, two-particle condensate