Доклады Академии наук СССР
1955. Том 101, № 6

*ФИЗИКА*

В. В. ТОЛМАЧЕВ

# О ВЫЧИСЛЕНИИ ФУНКЦИИ ВРЕМЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ ДЛЯ СЛАБО НЕИДЕАЛЬНОГО БОЗЕ-ГАЗА

*(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 22 I 1955)*

В недавней работе (1) ван Говом было получено общее выражение для корреляционной функции системы частиц для корреляции между положением частицы системы в какой-то пространственной точке $\mathbf{r}_0$ в какой-то момент времени $t_0$ и положением другой (может быть, той же самой) частицы в пространственной точке $\mathbf{r}_0+\mathbf{r}$ в момент времени $t_0+t$. Эта зависящая от времени корреляционная функция $G(\mathbf{r}, t)$ может быть подсчитана при помощи формулы (которая может рассматриваться как формальное определение $G(\mathbf{r}, t)$):

$$G(\mathbf{r}, t)=N^{-1}\left\langle\sum_{l,j=1}^{N}\int d\mathbf{r}'\,\delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}_l(0)-\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_j(t))\right\rangle, \qquad (1)$$

в которой $N$ — число частиц системы; $\mathbf{r}_l(0)$ и $\mathbf{r}_j(t)$ — операторы положения $l$-й частицы в нулевой момент времени и $j$-й частицы в момент времени $t$; $\langle\ldots\rangle$ обозначает статистическое усреднение по всем состояниям рассматриваемой системы, т. е. $\langle\ldots\rangle=\sum_{n_0}p_{n_0}$, где $p_{n_0}$ — статистический вес состояния $n_0$ ($p_{n_0}$ пропорционально больцмановскому фактору $\exp[-E_{n_0}/kT]$, где $E_{n_0}$ — энергия состояния $n_0$).

Ван Говом был произведен расчет $G(\mathbf{r}, t)$ для нескольких конкретных физических систем (идеальные газы, кристалл, спиновые волны в ферромагнетике) (1, 2). В настоящей заметке производится расчет функции $G(\mathbf{r}, t)$ для слабо вырожденного слабо неидеального бозе-газа на основе знания в первом приближении волновых функций такой системы, получаемых путем применения к системе метода «дополнительных переменных» Н. Н. Боголюбова и Д. Н. Зубарева (3, 4).

«Дополнительные» или коллективные переменные $\rho_{\mathbf{k}}$ формально вводятся как фурье-компоненты оператора плотности $\rho(\mathbf{r})=\sum_{j=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)$:

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

Волновая функция для слабо вырожденного состояния слабо неидеального бозе-газа в первом приближении дается выражением

$$\varphi=\exp\left(\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ k_z>0}}[(\rho_{\mathbf{k}}^{c})^2+(\rho_{\mathbf{k}}^{s})^2]\right)\Phi, \qquad (3)$$

где

$$\Phi=\prod_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ k_z>0}}\exp\left(-\frac{(\rho_{\mathbf{k}}^{c})^2+(\rho_{\mathbf{k}}^{s})^2}{2\lambda_{\mathbf{k}}^2}\right)H_{n_1^{\mathbf{k}}}\left(\frac{\rho_{\mathbf{k}}^{c}}{\lambda_{\mathbf{k}}}\right)H_{n_2^{\mathbf{k}}}\left(\frac{\rho_{\mathbf{k}}^{s}}{\lambda_{\mathbf{k}}}\right). \qquad (4)$$

Здесь $\rho_{\mathbf{k}}^c$ и $\rho_{\mathbf{k}}^s$ имеют смысл действительной и мнимой частей фурье-компоненты оператора плотности $\rho_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}}^c + i\rho_{\mathbf{k}}^s$; суммирование в (3) ведется по всем дискретным значениям волнового вектора $\mathbf{k}$, не равным нулю и имеющим положительную $z$-компоненту (бозе-газ предполагается заключенным в достаточно большой объем $V$; впоследствии в конечных формулах предполагается выполненным предельный переход $V \to \infty$, $N \to \infty$, $\rho = N/V$ остается постоянной), аналогичный смысл имеет произведение в (4). $H_{n_1^{\mathbf{k}}}\left(\frac{\rho_{\mathbf{k}}^c}{\lambda_{\mathbf{k}}}\right)$ и $H_{n_2^{\mathbf{k}}}\left(\frac{\rho_{\mathbf{k}}^s}{\lambda_{\mathbf{k}}}\right)$ — полиномы Эрмита порядка $n_1^{\mathbf{k}}$ и $n_2^{\mathbf{k}}$ ($n_1^{\mathbf{k}}$ и $n_2^{\mathbf{k}}$ — целые неотрицательные числа, зависящие от $\mathbf{k}$). $\lambda_{\mathbf{k}}$ определяется из условия

$$\lambda_{\mathbf{k}}^4\left(\frac{N}{V}\nu(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{4m}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{4m}, \tag{5}$$

в котором $N$ — число частиц бозе-газа; $V$ — его объем; $m$ — масса отдельной частицы; $\nu(k)$ — фурье-трансформанта потенциальной энергии $\Phi(\mathbf{r})$ взаимодействия двух частиц бозе-газа (предполагается зависящей только от взаимного расстояния частиц $|\mathbf{r}|$):

$$\nu(k) = \int \Phi(|\mathbf{r}|)\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}, \tag{6}$$

где интегрирование распространяется на все бесконечное пространство.

Для среднего значения какого-либо оператора $A$, выражаемого через $\rho_{\mathbf{k}}$ (но не через $\rho_{\mathbf{k}}$ и их производные $\partial/\partial\rho_{\mathbf{k}}$) в первом приближении ([4]):

$$(\varphi|A(\ldots\rho_{\mathbf{k}}\ldots)|\psi) = \frac{\int\ldots\int \Phi\Psi A(\ldots\rho_{\mathbf{k}}\ldots) \prod\limits_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ k_z>0}} d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s}{\left\{\int\ldots\int \Phi^2 \prod\limits_{\substack{\mathbf{k}\neq 0\\ k_z>0}} d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s\right\}^{1/2}\left\{\int\ldots\int \Psi^2 \prod\limits_{\substack{\mathbf{k}=0\\ k_z>0}} d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s\right\}^{1/2}}, \tag{7}$$

где $\Phi$ и $\Psi$ связаны с $\varphi$ и $\psi$ при помощи формул (3) и (4), а интегрирование ведется по бесконечной области изменения переменных $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s$. Представляя (1) в виде

$$G(\mathbf{r},\ t) = \rho + (2\pi)^{-3}\sum_{n_0} p_{n_0} \sum_n e^{\frac{it}{\hbar}(E_n - E_{n_0})} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} |[\rho_{\mathbf{k}}]_{n_0}^n|^2 d\mathbf{k} \tag{8}$$

(где $\rho$ — плотность частиц системы $\rho = N/v$, $[\rho_{\mathbf{k}}]_{n_0}^n$ обозначает матричный элемент оператора $\rho_{\mathbf{k}}$ между начальным состоянием $n_0$ и конечным состоянием $n$) и пользуясь формулой (7), получим (ради краткости мы опускаем довольно громоздкую, но элементарную выкладку):

$$G(\mathbf{r},\ t) = \rho + (2\pi)^{-3}\int \frac{\hbar^2 k^2}{2mE(k)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + \frac{it}{\hbar}E(k)} d\mathbf{k} +$$

$$+ (2\pi)^{-3}\int \frac{\hbar^2 k^2}{2mE(k)} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + \frac{it}{\hbar}E(k)}}{e^{\frac{1}{\theta}E(k)} - 1} d\mathbf{k} +$$

$$+ (2\pi)^{-3}\int \frac{\hbar^2 k^2}{2mE(k)} \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{it}{\hbar}E(k)}}{e^{\frac{1}{\theta}E(k)} - 1} d\mathbf{k} \tag{9}$$

$(E(k) = \sqrt{\frac{N}{V}\nu(k)\frac{\hbar^2k^2}{m} + \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)^2}$ представляет собой энергию элементарного возбуждения с волновым вектором $\mathbf{k}$ ([5]); $\vartheta = kT$, где $k$ — больцмановская газовая постоянная, $T$ — абсолютная температура газа; интегрирование ведется по всему бесконечному пространству).

Сравнивая (9) при отсутствии взаимодействия между частицами бозе-газа $\Phi(|\mathbf{r}|) \equiv 0$ с результатом ван Гова ([1]) для идеального бозе-газа в области конденсации, убеждаемся, что (9) совпадает с ним при $\vartheta$ достаточно малых. Критерием служит условие.

$$\rho \gg \rho_c(\vartheta), \tag{10}$$

где $\rho$ — плотность частиц газа, $\rho_c(\vartheta)$ — критическая плотность начала конденсации при температуре $\vartheta$, определяемая интегралом

$$\rho_c(\vartheta) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{d\mathbf{k}}{e^{\hbar^2k^2/2m\vartheta} - 1}, \tag{11}$$

взятым по всему бесконечному пространству. Из (11) непосредственно видно, что при $\vartheta \to 0$ $\rho_c(\vartheta) \to 0$, и, следовательно, при достаточно низких температурах условие (10) будет удовлетворяться для любой фиксированной плотности $\rho$. Следует заметить, что совпадение (9) при $\Phi(|\mathbf{r}|) \equiv 0$ с результатом для идеального бозе-газа в области конденсации можно ожидать только при малых температурах, так как, к сожалению, приближенные выражения для волновых функций (3) и (4), которыми мы пользовались при выводе (9), дают хорошее приближение только для состояний, мало отличающихся от состояния полного вырождения бозе-газа. Чем больше температура, тем больше статистический вес состояний, сильно отличающихся от состояния полного вырождения бозе-газа, а следовательно, тем менее оправдан наш приближенный метод расчета. Грубым критерием размеров температурной области вблизи нулевой температуры, для которой справедлива формула (9) для $G(\mathbf{r}, t)$, вероятно, может служить то же условие (10).

При $t = 0$ и $\vartheta = 0$ формула (9) для $G(\mathbf{r}, t)$ принимает вид

$$G(\mathbf{r}, 0) = \rho + (2\pi)^{-3}\int \frac{\hbar^2k^2}{2mE(k)} e^{-i\mathbf{kr}}\, d\mathbf{k}. \tag{12}$$

Вводя обозначение

$$S(\mathbf{k}) = \int e^{-i\mathbf{kr}}\,[G(\mathbf{r}, 0) - \rho]\, d\mathbf{r}, \tag{13}$$

где интегрирование, как всюду, производится в бесконечных пределах, формулу (12) легко привести к виду

$$E(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2mS(k)}, \tag{14}$$

что совпадает с формулой, полученной Фейнманом ([6]) и примененной им для определения энергетического спектра гелия II, исходя из экспериментов по рассеянию медленных нейтронов на гелии II ([7]).

Применим теперь формулу (9) для $G(\mathbf{r}, t)$ к задаче о рассеянии нейтронов на гелии II. При этом для гелия II мы считаем пригодной модель слабо вырожденного слабо неидеального бозе-газа. Для потенциала взаимодействия нейтронов с ядрами гелия II примем, как обычно это делается в подобных задачах, псевдопотенциал Ферми $V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi a\hbar^2}{m}\delta(\mathbf{r})$, где $m$ — масса нейтрона, $a$ — константа взаимодействия, которая связана с полным сечением рассеяния нейтрона отдельным ядром соотношением $\sigma = 4\pi a^2$. Получим в приближении Борна для дифференциального эффективного поперечного сечения на единицу телесного угла и единицу передаваемой нейтроном энергии $\varepsilon$ выражение:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = N\frac{a^2\hbar}{2m}\frac{k}{k_0}\frac{\varkappa^2}{E(\varkappa)}\frac{1}{e^{\frac{1}{\theta}E(\varkappa)}-1}\left[e^{E(\varkappa)/\theta}\delta\left(\omega-\frac{E(\varkappa)}{\hbar}\right)+\delta\left(\omega+\frac{E(\varkappa)}{\hbar}\right)\right], \quad (15)$$

если отвлечься от очень малых углов рассеяния. В формуле (15) $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0+\vec{\varkappa}$ обозначают начальный и конечный волновой вектор нейтрона; $\varepsilon=\hbar\omega=\frac{\hbar^2(k_0^2-k^2)}{2m}$ — энергия, переданная нейтроном при рассеянии. Смысл формулы (15) очень прост. Первая $\delta$-функция в скобках учитывает однофононный процесс, идущий с возбуждением фонона при рассеянии; вторая $\delta$-функция учитывает однофононный процесс, идущий с поглощением фонона нейтроном. При $\theta\to 0$ экспоненциальный множитель при первой $\delta$-функции возрастает, а вместе с тем возрастает и роль однофононных процессов, идущий с возбуждением фононов, по сравнению с ролью процессов, идущих с поглощением фонона нейтроном, что и следовало ожидать. Наш приближенный метод, годный при достаточно малых температурах, естественно, не учитывает многофононных процессов.

При $k\sim k_0$ имеем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N\frac{a^2\hbar^2}{2m}\frac{\varkappa^2}{E(\varkappa)}\frac{e^{\frac{1}{\theta}E(\varkappa)}+1}{e^{\frac{1}{\theta}E(\varkappa)}-1}. \quad (16)$$

Представляется возможным использовать формулу (16) для уточнения энергетического спектра гелия II, полученного, исходя из экспериментов по рассеянию нейтронов на гелии II. Это уточнило бы результаты Фейнмана ([6]) в том отношении, что формула (16) учла бы температурную зависимость дифференциального эффективного поперечного сечения $d\sigma/d\Omega$, которой Фейнман пренебрегал. (Правда, необходимо все время помнить, что пределы применимости формулы (9) для $G(\mathbf{r}, t)$ ограничены сравнительно небольшой областью около нулевой температуры.) Однако, как нетрудно убедиться из рассмотрения экспериментальных данных ([7]), формула (16) не улучшает положения дела с расхождением величины ротонного минимума энергетического спектра гелия II, полученной из экспериментов по теплоемкости гелия II, его энтропии и скорости «второго звука» в нем $\frac{\Delta}{k}=9{,}6^\circ\,\mathrm{K}$ ([8]) и полученной из экспериментов по рассеянию нейтронов на гелии II $\frac{\Delta}{k}=18^\circ\,\mathrm{K}$ ([6,7]) ($k$ — постоянная Больцмана), так как температурный фактор в (16) при температуре опыта ([7]) в 4,2°K в области ротонного минимума очень близок к единице, и, следовательно, величина ротонного минимума энергетического спектра, вычисленная по формуле (16), очень близка к $\frac{\Delta}{k}=18^\circ\,\mathrm{K}$.

В заключение считаю своим долгом выразить благодарность акад. Н. Н. Боголюбову, под непосредственным руководством которого выполнена эта работа.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
11 I 1955

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] L. van Hove, Phys. Rev., 95, 249 (1954). [2] L. van Hove, Phys. Rev., 95, 1374 (1954). [3] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ, 28, № 2, 129 (1955). [4] Д. Н. Зубарев, Диссертация, МГУ, 1954. [5] Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР, сер. физ., 11, 67 (1947). [6] R. P. Feynman, Phys. Rev., 94, 262 (1954). [7] D. G. Henshaw, D. G. Hurst, Phys. Rev., 91, 1222 (1953). [8] Л. Д. Ландау, J. of Phys., 11, 91 (1947).