

# ВЫЧИСЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ОСНОВНОГО И СЛАБОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ГЕЛИЯ-II

М. Д. Томченко\*

*Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова Национальной академии наук Украины  
03143, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 29 июля 2004 г.

С помощью метода коллективных переменных, предложенного Боголюбовым и Зубаревым и развитого в работах Юхновского и Вакарчука, найдены волновые функции основного ( $\Psi_0$ ) и первого возбужденного ( $\Psi_k$ ) состояний He-II во втором приближении, т. е. с точностью до двух первых поправок к соответствующим решениям для слабонеидеального бозе-газа. Функции  $\Psi_0$  и  $\Psi_k$  находятся как собственные функции  $N$ -частичного уравнения Шредингера из системы зацепляющихся уравнений для  $\Psi_0$ ,  $\Psi_k = \psi_k \Psi_0$  и спектра квазичастиц гелия-II  $E(k)$ . Результаты состоят в том, что 1) эти уравнения были решены численно для более точного приближения, чем то, которое было исследовано раньше (первое приближение); 2)  $\Psi_0$  и  $\psi_k$  выводятся из модельного потенциала взаимодействия атомов He<sup>4</sup> (а не из структурного фактора, как раньше), в котором потенциальный барьер «сшивается» с известным из эксперимента потенциалом притяжения. Высота потенциального барьера  $V_0$  — свободный параметр. Кроме  $V_0$ , задача не содержит каких-либо подгоночных параметров или функций. Вычисленные структурный фактор, энергия основного состояния ( $E_0$ ) и спектр квазичастиц He-II,  $E(k)$ , согласуются с экспериментом при  $V_0 \approx 100$  К. Учет второй поправки к логарифму  $\Psi_0$  заметно влияет на значение  $E_0$  и обеспечивает асимптотику  $E(k \rightarrow 0) = ck$ , а учет второй поправки к  $\Psi_k$  мало изменяет  $E(k)$ . Вторые поправки к  $\psi_0$  и  $\psi_k$  уже меньше влияют на результаты, чем первые, и теория согласуется с экспериментом, поэтому можно считать, что рассмотренные «укороченные»  $\Psi_0$  и  $\psi_k$  неплохо описывают микроструктуру He-II. Так что допустимо обрывать ряды для  $\Psi_0$  и  $\Psi_k$ , несмотря на не совсем малое значение ( $\sim 1/2$ ) параметра разложения.

PACS: 67.40.Db

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени пионерских работ Ландау [1, 2] предложено множество различных моделей для объяснения свойств гелия-II [3–30]. По нашему мнению, наиболее строгое, с точки зрения микротехории, описание гелия-II дают два подхода.

I. Теоретико-полевой формализм, в котором развиваются идеи Боголюбова [31], Беляева [32], Бракнера и Савады [5] (недавно интересные результаты получены Пашицким [28]).

II. Квантово-механический подход, в котором прямо или косвенно решается  $N$ -частичное уравнение Шредингера для основного и первого возбужденного состояний He-II, — в работах Фейнмана [3, 4], Юхновского и Вакарчука [15–17], Фейнберга [9], в методах «correlated basis function» (CBF) [10,

11], «hypernetted chain» (HNC) [12, 13] и «shadow wave function» (SWF) [14].

В первом подходе важную роль играет конденсат, во втором конденсат остается «за кадром», но эти два подхода дополняют друг друга. Наличие указанных выше работ позволяет утверждать, что микротехория He-II в значительной степени уже построена, но не завершена (к сожалению, во всех известных нам моделях He-II при переходе от исходных точных микроскопических уравнений к конечным приближенным отбрасываются немалые слагаемые — не удается построить теорию возмущений, в которой бы все разложения проводились только по малым параметрам; кроме того, обычно используются несколько подгоночных параметров). Ниже исследован основанный на подходе II метод коллективных переменных (КП), предложенный Боголюбовым и Зубаревым [33] и развитый Юхновским и

\*E-mail: mtomchenko@bitp.kiev.ua

Вакарчуком [15–19].

Интерес представляет описание микроструктуры тонких пленок гелия-II толщиной в несколько атомных слоев и меньше. Из-за конечного размера реальных пленок одночастичный конденсат, по-видимому, в пленках должен присутствовать [34]. Достаточно строгий расчет структуры конденсата для этого случая никем не сделан. Вероятно, в пленках конденсат с уровня  $k = 0$  «размывается» по нескольким низколежащим уровням с  $k > 0$  (точнее,  $k \sim \pi/L$ , где  $L$  — ширина пленки). Однако, если окажется, что конденсата нет или очень мало, то в рамках теоретико-полевых моделей описать микроструктуру пленок затруднительно, но модели типа II позволяют это сделать (см., например, [13]). Метод КП мы выбрали, учитывая это обстоятельство.

В работе будут рассматриваться только возбуждения фононного типа, другие типы возбуждений (например, вихри) не рассматриваются. Боголюбов и Зубарев [33] показали, что для слабонеидеального бозе-газа состояние с одной квазичастицей описывается волновой функцией

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \rho_{-\mathbf{k}} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1)$$

где  $\Psi_0$  — волновая функция основного состояния, а спектр квазичастиц

$$E_b(k) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + 2n\nu(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}. \quad (2)$$

Спектр квазичастиц He-II впервые был предсказан в известной работе Ландау [2]. Фейнман [3], а затем Фейнман и Коэн [4], построили приближенную микромодель He-II, используя вариационный метод. Сначала для  $\Psi_{\mathbf{k}}$  было получено решение (1), при котором спектр квазичастиц имеет вид

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2mS(k)}. \quad (3)$$

Это спектр слабонеидеального бозе-газа [33], и он только качественно согласуется с экспериментальным спектром He-II. Исходя из интуитивных соображений, Фейнман [4] предложил более точную формулу для  $\Psi_{\mathbf{k}}$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}} &\equiv \psi_{\mathbf{k}} \Psi_0 \approx \\ &\approx \left( \rho_{-\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}} A \frac{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}}{k_1^2} \rho_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}_1} \right) \Psi_0, \quad (4) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}} &= \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \left[ 1 + \sum_{j \neq l} g(r_{lj}) \right] \Psi_0, \quad (5) \\ g(r) &= A \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{r^3}. \end{aligned}$$

Параметр  $A$  выбирался так, чтобы опустить спектр  $E(k)$  как можно ниже. Был получен спектр

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^* S(k)}, \quad (6)$$

где  $m^*$  — эффективная масса, слабо зависящая от  $k$ :  $m^* = m$  при  $k \rightarrow 0$ , и  $m^* \approx 1.5m$  для  $k$  в области ротонного минимума. Такая формула дает неплохое согласие с экспериментальным спектром He-II.

Идеи Фейнмана получили развитие в ряде работ, в частности в [20], в подходах CBF [10, 11], HNC [12] и SWF [14]. В подходах CBF, HNC и SWF развиваются различные не прямые методы решения  $N$ -частичного уравнения Шредингера и найденный спектр квазичастиц He-II оказывается в хорошем согласии с экспериментальным. Функция Фейнмана-Коэна уточнена также в работах Сунакавы [21], где уравнения выведены на основе исследования полного гамильтониана системы бозе-частиц и для расчета спектра квазичастиц использовался модельный потенциал с несколькими подгоночными параметрами. Недостатки следующие: 1) во всех подходах типа II [6–22, 30] разложения проводятся по не вполне малому параметру, но ряды приходится обрывать; 2) в большинстве моделей типа II, например CBF [11], SWF [14], HNC [12], в работах [21] и во всех теоретико-полевых моделях используется несколько подгоночных параметров; 3) часто [6, 8, 11, 14] в решении используются пробные функции простого вида с подгоночными параметрами (как и в подходе Фейнмана (4), (5)) — поскольку численное решение точных микроскопических уравнений затруднительно.

Мы будем использовать для вычисления  $\Psi_0$ ,  $\Psi_{\mathbf{k}}$  и  $E(k)$  метод КП. Преимущество нашего подхода состоит в том, что 1) удается получить решение с использованием только одного подгоночного параметра (а в [15, 30, 35] — вовсе без каких-либо подгоночных параметров); 2) не используются подгоночные функции, все функции в решении находятся численно из исходных микроскопических уравнений, единственная неточность которых связана с обрывом рядов для  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$ .

Кроме работ [15–19], метод КП исследовался раньше, по-видимому, в работе Редже и соавторов [22], в первом приближении и с модельным по-

тенциалом. Дальнейшие исследования He-II с помощью метода КП являются актуальными, представляет интерес вычисление следующих поправок к  $\psi_{\mathbf{k}}$  и  $\Psi_0$ , так как параметр разложения не малый, около 1/2.

Результат данной работы — численное решение уравнений в более точном по сравнению с [15, 22] приближении — мы нашли не одну, а две первые поправки к нулевому приближению для  $\Psi_0$ ,  $\psi_{\mathbf{k}}$  и спектра квазичастиц  $E(k)$  слабонеидеального бозе-газа [33]. В связи с неизвестностью потенциала взаимодействия атомов He<sup>4</sup> на малых расстояниях в работах [15, 30] волновые функции  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  выводились из структурного фактора. Мы же вычислили  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$ , исходя из модельного потенциала взаимодействия атомов He<sup>4</sup>. В таком подходе удается численно найти логарифм  $\Psi_0$  в более точном приближении, а также исследовать зависимости энергии основного состояния, спектра квазичастиц и структурного фактора от вида модельного потенциала, что представляет интерес.

## 2. ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ He-II

Подробное изложение метода КП можно найти в работах [15–17, 33]. Согласно [16, 17, 33] решение для логарифма волновой функции основного состояния имеет вид

$$\begin{aligned} \ln \Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = & \sum_{\mathbf{k}_1 \neq 0} \sigma(k_1) \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} + \\ & + \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0}} \frac{f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)}{\sqrt{N}} \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2} + \\ & + \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \neq 0}} \frac{g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)}{N} \times \\ & \times \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_3} + \dots, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\rho_{\mathbf{k}}$  — коллективные переменные

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (\mathbf{k} \neq 0). \quad (8)$$

Следующими поправками к  $\ln \Psi_0$  пренебрегаем. Везде в работе  $\mathbf{k} \neq 0$  и принимает дискретные значения, например, в одномерном случае  $k_i = i \cdot 2\pi/L$ ,  $i = 1, 2, \dots$ ;  $L$  — размер системы.

Для жидкостей подавляющее число конфигураций  $\{\mathbf{r}_j\}$  атомов соответствует нерегулярному и в среднем равномерному распределению атомов в пространстве. Рассмотрим одномерный случай, тогда

$k_i = i \cdot 2\pi/L$ . При случайном разбросе атомов значение  $\rho_{\mathbf{k}}$  изменяется при переходе от  $k_i$  к  $k_{i+1}$  также случайным образом. Для разных  $k$  величины  $\text{Re } \rho_{\mathbf{k}}$ ,  $\text{Im } \rho_{\mathbf{k}}$  принимают случайные значения из отрезка  $[-1, 1]$ , редко выходя за его пределы. С учетом этого можно показать, что для нерегулярных конфигураций  $N$  атомов первые  $i \ll N^{1/3}$  слагаемых в разложении  $\ln \Psi_0$  (7) имеют порядок  $N$ , а в разложении  $\psi_{\mathbf{k}}$  (27) — порядка единицы. Это следует также и из ортонормированности базиса  $\psi_{-\mathbf{k}_1}(\rho)$ ,  $\psi_{-\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2}(\rho), \dots$  волновых функций для системы  $N$  невзаимодействующих бозонов [16]. В работе Бийла [36] была получена неточная оценка  $\ln \Psi_0 \sim \sqrt{N}$  (для нескольких первых поправок), так как  $\ln \Psi_0$  раскладывался в ряд по взаимодействию, а нужно — по корреляционным слагаемым (7). Поскольку  $\ln \Psi_0 \sim N$ , ясно, что в ряд (7) нужно раскладывать именно логарифм  $\Psi_0$ , а не  $\Psi_0$ .

Из  $N$ -частичного уравнения Шредингера выводится система уравнений для неизвестных функций  $\sigma, f, g$  (7) и энергии основного состояния  $E_0$ :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sigma(k_1) k_1^2 + \frac{n\nu(k_1)m}{4\hbar^2} - \sigma^2(k_1) k_1^2 = \\ & = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_2} f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) 0.5(k_2^2 + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_2} 1.5k_2^2 [g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1) + g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_2)], \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} & f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) [e(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + e(k_1) + e(k_2)] + \\ & + \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{k}_3} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = -2\sigma(k_1)2\sigma(k_2)\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{k}_3 g(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) + \\ & + (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)\mathbf{k}_3 g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_3) - \\ & - 2\mathbf{k}_3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} 3g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & \\ = & \frac{U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)}{e(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) + e(\mathbf{k}_1) + e(\mathbf{k}_2) + e(\mathbf{k}_3)} + \\ & + (\mathbf{k}_3 \leftrightarrow \mathbf{k}_1) + (\mathbf{k}_3 \leftrightarrow \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & \\ = & -4\sigma(k_3)\mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)f_s(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (13)$$

$$NE_0 = \frac{1}{2}Nn\nu(0) - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{k}} \nu(k) - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{m} \sigma(k), \quad (14)$$

где  $n = N/\Omega$ ,  $\Omega$  — объем системы и

$$e(k) = k^2(1 - 4\sigma(k)), \quad (15)$$

$$f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + f(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) + f(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2), \quad (16)$$

$$\nu(k) = \int V(r)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (17)$$

$V(r)$  — потенциал взаимодействия. При выводе учтено, что [33]

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{n\nu(k)}{2} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} N n \nu(0) - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{k}} \nu(k).$$

Уравнения, эквивалентные (9)–(17), были раньше получены Юхновским и Вакарчуком [16, 17]. Мы получили уравнения для  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  (см. ниже (28)–(34)) в несколько другой форме, чем в [16, 17], чтобы упростить уравнения и уменьшить ошибку численного метода. Мы не симметризовали функции  $f$  и  $g$  для  $\Psi_0$  (и  $P, Q$  для  $\psi_{\mathbf{k}}$ ), как это сделано в [16, 17], — у нас не выполняются, например,  $f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = f(\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ ,  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = P(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1)$ . Уравнения для наблюдаемых  $E_0, S(k), E(k)$  можно записать в виде, содержащем только симметризованные  $f_s, P_s$ , и т. д.

### 3. АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Сначала рассмотрим предел слабонеидеального бозе-газа,  $n\nu(k) \rightarrow 0$ . Нулевое приближение для  $\Psi_0$  (7) соответствует  $f = 0, g = 0$ . Для  $\sigma(k)$  из (9) получим [33]

$$4\sigma(k) = 1 - \frac{E_b(k)2m}{\hbar^2 k^2}. \quad (18)$$

Рассмотрим (9)–(17) в первом приближении,  $g = 0$ . Задача состоит в нахождении из (9)–(17) неизвестных функций  $\sigma$  и  $f$ . Из (10) получаем

$$f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{2\sigma(k_1)2\sigma(k_2)\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{e(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + e(k_1) + e(k_2)}, \quad (19)$$

а  $\sigma(k)$  нужно найти из (9), зная потенциал  $\nu(k)$ .

Эффективный потенциал  $V(r)$  взаимодействия между двумя атомами  $\text{He}^4$  будем моделировать следующим образом (рис. 1, 2). Для области  $r \geq a \approx 2.64 \text{ \AA}$  потенциал хорошо известен из эксперимента, здесь погрешность не превышает  $\pm 5\%$ .

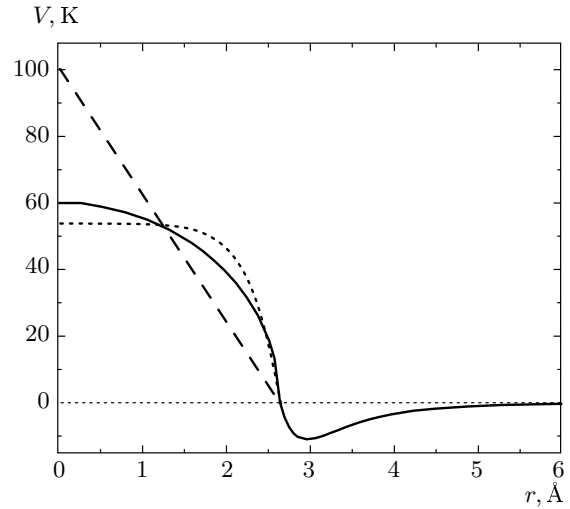


Рис. 1. Исследованные потенциалы взаимодействия. Сплошная линия — эллиптический барьер (21),  $V_0 = 60 \text{ K}$ ; штриховая линия — потенциал (22),  $b = 1, V_0 = 100 \text{ K}$ ; пунктир — потенциал (22),  $b = 8, V_0 = 54 \text{ K}$ ;  $V(r) < 0$  — потенциал Леннарда–Джонса (20)

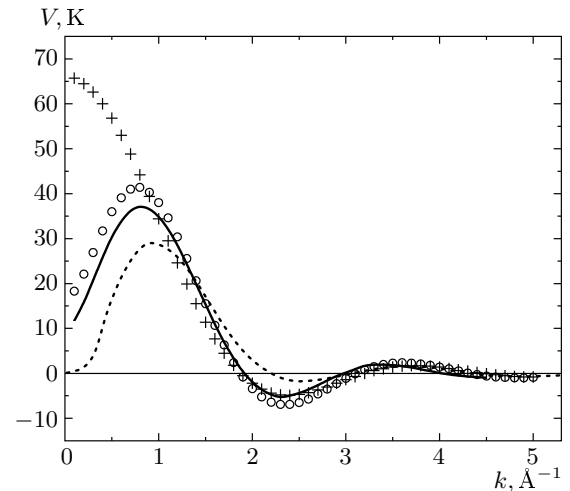


Рис. 2. Фурье-образы  $V(k) = n\nu(k)$  для потенциалов, изображенных на рис. 1, у которых потенциальный барьер отталкивания в точке  $r = a$  сшивается с потенциалом Леннарда–Джонса. Сплошная линия — потенциал (20), (21),  $V_0 = 60 \text{ K}$ ; пунктир — потенциал (20), (22),  $b = 1, V_0 = 100 \text{ K}$ ; кружки — потенциал (20), (22),  $b = 8, V_0 = 54 \text{ K}$ ; крестики — модель полупрозрачных сфер: при  $r \leq a$  потенциал (22),  $b = 8, V_0 = 54 \text{ K}$ , при  $r > a$   $V(r) = 0$

Анализ возможных потенциалов проведен, в частности, в [37, 38]. В этой области  $V(r) < 0$  и потенциал очень близок к потенциалу Леннарда–Джонса, параметры  $a$  и  $\varepsilon$  берем из [37]:

$$V(r) = 4\varepsilon \left( \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^6 \right), \quad (20)$$

$$\varepsilon = 11 \text{ К}, \quad a = 2.64 \text{ \AA}, \quad r \geq a.$$

При  $r < a$  потенциал примерно известен для  $r \geq 2 \text{ \AA}$ , а при меньших  $r$  в разных работах [30, 37–40] получены разные оценки для потенциала. В [37] высота барьера  $V(r = 0) \sim 2 \cdot 10^6 \text{ К}$ , а в [30, 35, 40], где потенциал восстанавливался по структурному фактору,  $V(r = 0) \approx 200 \text{ К}$ . Другие оценки [38, 39] находятся в этих же пределах. Высокое значение  $V(r = 0) \sim 10^6 \text{ К}$  получено в приближении среднего поля [37, 41] или путем аппроксимации потенциала, найденного для  $r \geq 2 \text{ \AA}$ , в область малых  $r$  с использованием квазиклассического приближения [39]. В [28] указывается на необходимость учета кулоновского отталкивания между ядрами. Иногда авторы настаивают на необходимости использования именно потенциала Азиза [37], который почему-то считается наилучшим. Однако потенциал в области  $r \lesssim 2 \text{ \AA}$  имеет только символический, эффективный смысл, так как реально при сильном перекрытии двух атомов  $\text{He}^4$  важна уже структура атомов, которую можно описать корректно только при явном учете взаимодействия двух ядер и четырех электронов (вместо двух «точечных» атомов гелия), что затруднительно. Поэтому для области  $r \lesssim 2 \text{ \AA}$  могут быть получены очень разные модельные потенциалы в зависимости от рассматриваемого физического процесса, математического метода и приближения. Естественной мерой высоты потенциального барьера является энергия связи электрона в атоме — электронвольт, или  $10^4 \text{ К}$ .

Но реально можно строить модели He-II типов I, II, только считая атомы точечными, а структуру атомов приближенно учитывая в эффективном потенциале. Как будет видно ниже, в таком приближении мы получим, что вероятность перекрытия двух атомов очень мала, т. е. приближение оправдано. Точное знание потенциала при  $r \lesssim 2 \text{ \AA}$  не очень нужно (правда, значение  $E_0$  «чувствует» и небольшие вариации потенциала, см. разд. 3), но оказывается, что потенциальный барьер не должен быть слишком высоким,  $V(0) \lesssim 10^3 \text{ К}$  (см. разд. 4).

Ввиду эффективности потенциала при малых  $r$  для его моделирования использовались простые функции (см. рис. 1, 2):

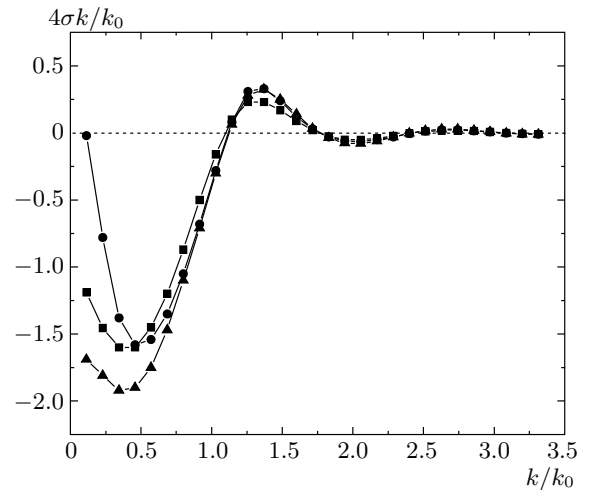


Рис. 3. Функция  $4\sigma k/k_0$  для потенциала (20), (21),  $V_0 = 60 \text{ К}$ . Здесь  $k_0 = 2\pi/d$ , где  $d = 3.578 \text{ \AA}$  — среднее межатомное расстояние. Квадраты — нулевое приближение (18) для  $\sigma(k)$ ; кружки — первое приближение; треугольники — второе приближение

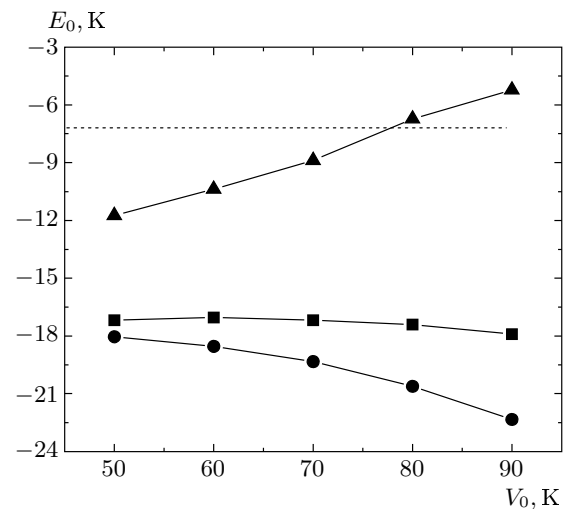


Рис. 4. Энергия  $E_0$  основного состояния He-II, приходящаяся на один атом как функция от  $V_0$  для потенциала (20), (21). Те же приближения для  $\sigma(k)$ , что и на рис. 3; пунктир — экспериментальное  $E_0 = -7.16 \text{ К}$

$$V(r) = V_0 \sqrt{1 - \left(\frac{r}{a}\right)^2}, \quad r \leq a, \quad (21)$$

$$V(r) = V_0 \left(1 - \left(\frac{r}{a}\right)^b\right), \quad r \leq a, \quad (22)$$

$V_0$  — свободный параметр. Рассмотрены  $b = 1; 4; 8$ .

Результаты вычислений величин  $\sigma(k)$  и  $E_0$  в первом приближении для потенциала (20), (21) показана

ны на рис. 3, 4. Для He-II экспериментальное значение энергии основного состояния, приходящейся на один атом, есть  $E_0 = -7.16 \text{ K} \pm 0.02 \text{ K}$  [42]. Уравнение (9) мы решали методом итераций. Погрешность численного метода для  $\sigma(k)$  и  $E_0$  составляет не более  $\pm 2\%$ .

Во втором приближении необходимо решить систему уравнений (9)–(12). В (12) пренебрегаем малой квадратичной поправкой  $f_s^2$  ( $f_s^2 \sim 0.01$  при  $k \sim k_0$ ), в этом случае уравнение (10) линеаризуется относительно  $f$ . Имеем (9) — одномерное и нелинейное уравнение для  $\sigma(k)$  и (10) — трехмерное линейное интегральное уравнение для  $f = f(k_1, k_2, \theta)$ ,  $\theta$  — угол между  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ . На современных персональных компьютерах уже можно решать такие уравнения, если  $f$  достаточно гладкая. Мы исследовали 4 численных метода для решения (10) — методы итераций, Положего, разложения по базису и квадратур [43]. Соплились только два последних метода, а мощности ПК Selegon-2000 хватило на один из них — метод квадратур. Система (9)–(11) в целом решалась методом итераций с затравочным  $\sigma(k)$  (2). По  $k$  мы интегрировали от 0 до  $3.2k_0$ , где  $k_0 = 2\pi/d$ ,  $d = 3.578 \text{ \AA}$  — среднее межатомное расстояние при плотности He-II  $\rho = 0.1451 \text{ г/см}^3$  ( $T = 0 \text{ K}$ , svp) [44]. В области  $k > 3k_0$  функции  $\sigma, f, g$  пренебрежимо малы. Интеграл заменялся суммой по методу трапеций, 30 шагов по  $k$ , 12 шагов по  $\theta$ , и 24 шага по  $\varphi$  (угол между  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_3$ ). После 30 итераций (15 часов счета) колебания решения не превышали 0.01%. Погрешность определения  $\sigma(k)$  не превышает  $\pm 10\%$ , а для  $E_0$  — около  $\pm 1\text{--}2 \text{ K}$ . Учет  $g$  перенормирует  $f$  в среднем примерно в 1.5 раза. Результаты изображены на рис. 3, 4.

На рис. 5 показаны значения функции

$$S_1(r) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sigma(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{n(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \sigma(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (23)$$

для  $V_0 = 60 \text{ K}$ . Так как  $\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sigma(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} = \sum_{i,j} S_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ , значения  $S_1(r)$  согласно (7) при малых  $r$  определяют, насколько быстро  $\Psi_0$  убывает при перекрытии атомов. Согласно рис. 5,  $S_1(0) \approx -1.8$ , т. е. при перекрытии двух атомов  $\Psi_0$  уменьшается не очень резко, в  $e^{-2S_1(0)} \approx 30$  раз. Но плотность вероятности уменьшается сильно, в 1000 раз; учитывая значения  $S_1(r)$  (рис. 5), можно говорить о наличии у атомов гелия достаточно твердой «сердцевинки» диаметром  $d_c \approx 2 \text{ \AA}$ . Поэтому при  $r \lesssim d_c$  взаимодействие атомов He-II действительно можно описывать эффективным потенциалом. Это согласуется с результата-

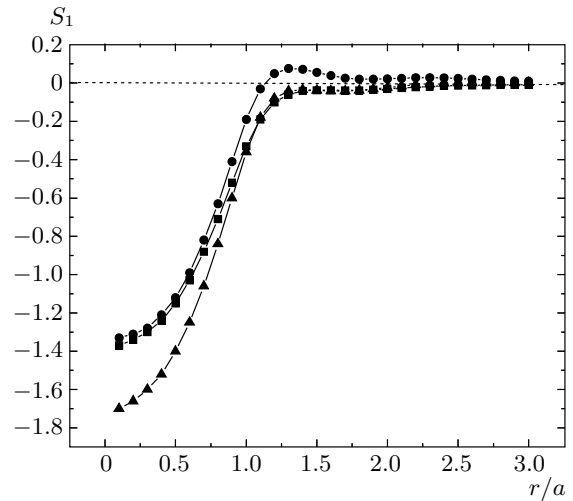


Рис. 5. Функция  $S_1(r/a)$  (23) для потенциала (20), (21),  $V_0 = 60 \text{ K}$ , те же приближения для  $\sigma(k)$ , что и на рис. 3

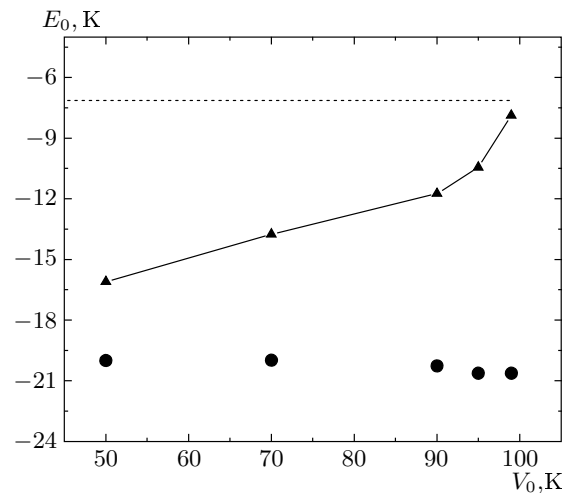


Рис. 6. Зависимость  $E_0(V_0)$  для потенциала (20), (22),  $b = 1$ ; кружки — нулевое и первое приближения для  $\sigma(k)$ ; треугольники — второе приближение; пунктир — экспериментальное  $E_0$

ми [45, 46], где получено, что парная функция распределения гелия-II  $g(r)$  при  $r \leq 2 \text{ \AA}$  близка к нулю.

Мы также исследовали зависимость результатов от формы потенциального барьера и провели вычисления с потенциалом (22) вместо (21). Результаты для  $E_0$  показаны на рис. 6, 7. Для рассмотренных  $b = 1, 4, 8$  подбором  $V_0$  удается получить согласие теоретического  $E_0$  с экспериментальным при  $V_0 = 60\text{--}100 \text{ K}$ .

Значение  $E_0$  очень чувствительно к изменению ширины барьера  $a$  и глубины «ямочки»  $\varepsilon$  в (20), (21). Например, при экспериментальных  $a = 2.64 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon = -11 \text{ К}$  имеем  $E_0 = -11 \text{ К}$  для  $V_0 = 60 \text{ К}$ , а при несколько отличных  $a = 2.6 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon = -10 \text{ К}$ , еще допустимых экспериментом,  $E_0 = -7 \text{ К}$  для того же  $V_0$  (все во втором приближении). Значение  $|E_0|$  много меньше высоты барьера  $V_0$ , и небольшие (по сравнению с  $V_0$ ) изменения потенциала  $V(r)$  приводят к значительному изменению  $E_0$ . Поэтому вычисление энергии основного состояния — это вычисление «тон-

кого эффекта» — нужно с высокой точностью знать потенциал взаимодействия (и для области  $r \lesssim 2 \text{ \AA}$ ), а также, возможно, учитывать следующие поправки к (7). Все существующие в настоящее время модели, на наш взгляд, дают только грубую оценку  $E_0$ , поскольку ни одна из моделей типа I, II не описывает вполне корректно структуру атомов, т. е. область  $r \lesssim 2 \text{ \AA}$ .

Важным для проверки модели является вычисление структурного фактора He-II  $S(k)$ , который вычисляется по формуле Вакарчука ((2.7) в [19]):

$$1 - \frac{1}{S(k)} = 4\sigma(k) + \int d\mathbf{q} \frac{8\sigma(q)\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + 4f_s(\mathbf{q}, \mathbf{k}) + 8f_s^2(\mathbf{q}, \mathbf{k})}{[1 - 4\sigma(q)][1 - 4\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q})]} + \\ + \int d\mathbf{q} \frac{2\sigma(k)(k^2 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}) + 2\sigma(q)(q^2 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}) + (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 f_s(\mathbf{q}, \mathbf{k})}{[1 - 4\sigma(q)][e(k) + e(q)]} 8f_s(\mathbf{q}, \mathbf{k}).$$

На рис. 8 показан результат вычисления  $S(k)$  для двух потенциалов, функции  $\sigma$  и  $f_s$  найдены во втором приближении. Можно считать согласие теоретического  $S(k)$  с экспериментальным удовлетворительным.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ДЛЯ $\Psi_0$

Как видно на рис. 4–8, в нашем подходе удается вывести структурный фактор и энергию  $E_0$  основного состояния He-II, выбирая только один параметр  $V_0$ , при  $V_0 \approx 60\text{--}80 \text{ К}$ . Причем  $E_0$  согласуется с экспериментом только при учете в разложении  $\ln \Psi_0$  второй поправки к функции Джастрова.

Результаты не очень сильно зависят от формы потенциального барьера, так что потенциал можно моделировать с одним только подгоночным параметром — высотой барьера.

В ряде работ получена оценка для высоты барьера  $V_0 \sim 10^6 \text{ К}$ . В рамках нашего подхода такой высокий барьер исключен. 1) Как видно на рис. 4–12, даже небольшое увеличение высоты барьера на несколько десятков кельвинов заметно изменяет  $E_0$ ,  $S(k)$  и спектр He-II, и согласие с экспериментом теряется. При потенциале  $V_0 \sim 10^6 \text{ К}$  для  $k < k_0$  имеем  $n\nu(k) \sim 10^6 \text{ К}$ . При больших  $k$  величины  $n\nu(k)$  и  $\sigma(k)$  быстро убывают с ростом  $k$  и осциллируют, меняя знак. Учитывая, что  $\hbar^2 k_0^2 / 2m \approx 18.5 \text{ К}$ , из формул (9), (14) видно, что при таком  $n\nu(k)$  должно быть  $\sigma k / k_0 \sim 10^4$  при  $k < k_0$ , чтобы сумма (14) дала малое экспериментальное  $E_0 = -7 \text{ К}$ . При та-

ких больших  $\sigma(k)$  ряд (7), очевидно, просто разойдется, так как параметр разложения в (7),  $\sigma k / k_0$ , будет порядка  $10^4$  при  $k \leq k_0$ . 2) В эксперименте характерные энергии для спектра He-II — это  $10 \text{ К}$ . Масштаб энергий задается в уравнениях потенциалом взаимодействия. При потенциале  $10^6 \text{ К}$  значения  $\sigma(k)$  большие, тогда каждое слагаемое в правой части уравнения для спектра (28), в том числе и отброшенные слагаемые, будет порядка  $10^4$ , но сумма этих слагаемых должна давать число порядка единицы при всех  $k$ . Такое совпадение невероятно. Нельзя, конечно, исключить небольшую перенормировку, не более чем на порядок. Таким образом, высота  $V_0$  барьера не должна заметно превышать  $10^3 \text{ К}$ .

В работах [30, 35, 40] по структурному фактору восстановлен потенциал взаимодействия атомов He<sup>4</sup>. Высота потенциального барьера оказалась  $\sim 200 \text{ К}$ , что согласуется с нашей оценкой  $V_0$ .

В большинстве работ [7, 8, 14]  $\Psi_0$  и  $E_0$  для He-II получены вариационным методом, при этом функциональный вид  $\Psi_0$  обычно выбирается «руками», с использованием нескольких подгоночных параметров. Таким образом, удается получить экспериментальную величину  $E_0$ . Найденная нами функция  $S_1(r)$  (рис. 4) является значительно более плавной кривой, чем популярные «вариационные» функции вида [7, 8]

$$S_1(r) = - \left( \frac{a}{r} \right)^b, \quad b \sim 5, \quad a \approx 2.6 \text{ \AA}. \quad (24)$$

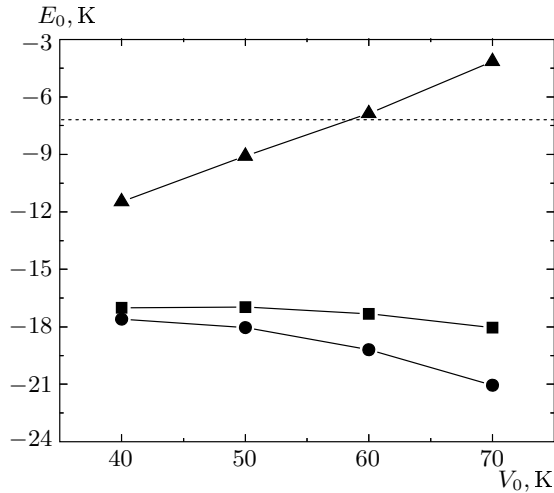


Рис. 7.  $E_0(V_0)$  для потенциала (20), (22),  $b = 8$ ; квадратики — нулевое приближение для  $\sigma(k)$ ; кружки — первое приближение; треугольники — второе приближение; пунктир — экспериментальное  $E_0$

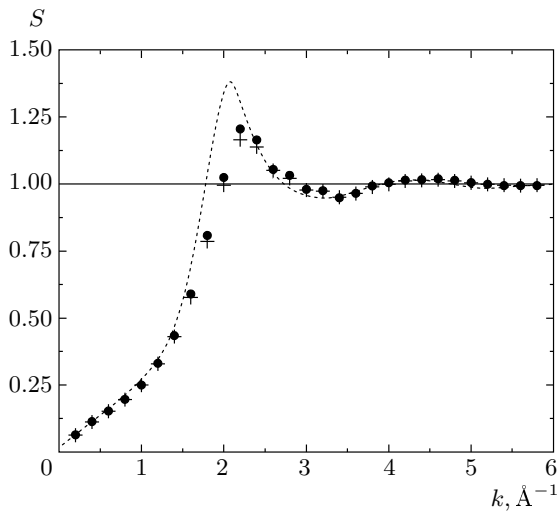


Рис. 8. Теоретический структурный фактор,  $S(k)$ , для He-II. Крестики — для потенциала (20), (21),  $V_0 = 60$  К; кружки — для потенциала (20), (22),  $b = 8$ ,  $V_0 = 50$  К; пунктир — экспериментальное значение  $S(k)$  [46], приведенное к  $T = 0$

В работах [7] использовались потенциалы с высоким барьером,  $V_0 \geq 10^6$  К. При этом правильное значение  $E_0 \approx -7$  К получается, поскольку а) функция  $S_1(r)$  выбирается такой, что  $\Psi_0$  очень быстро убывает при перекрытии двух атомов, полностью «зарезая» потенциальный барьер, и б) в области  $r > a$ , где атомы не перекрываются, потенциал характе-

ризуется «ямочкой» глубиной около  $1.5E_0$ . Однако вместо [24] можно подобрать множество других [6] функций  $S_1(r)$ , дающих требуемую  $E_0 \approx -7$  К, но разные значения для конденсатов и разный спектр квазичастиц. Поэтому лучше выводить  $S_1(r)$ ,  $\Psi_0$  и  $E_0$  точнее — из точных микроскопических уравнений (хотя и в этом случае при  $r < a$  функция  $S_1(r)$  будет определена не совсем точно, из-за неточной модели взаимодействия для  $r < a$ ). Наше решение получено именно так, и для него барьер отталкивания оказывается небольшим, порядка 100 К. Раньше быстрое действие компьютеров было небольшим и вариационный метод был единственной возможностью получения какого-то решения.

### 5. ПЕРВОЕ ВОЗБУЖДЕННОЕ СОСТОЯНИЕ He-II И СПЕКТР КВАЗИЧАСТИЦ

При температурах  $T \leq 1$  К квазичастицы в He-II можно считать невзаимодействующими. В этом случае волновая функция He-II записывается в виде [4]

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^n (\psi_{\mathbf{k}_i})^{n_i} \Psi_0, \quad (25)$$

где  $\psi_{\mathbf{k}_i}$  описывает фотон с импульсом  $\mathbf{k}_i$ ,  $n_i$  — число таких фотонов. При  $T \rightarrow T_\lambda$  такое описание становится неточным. Рассмотрим состояние с одной квазичастицей. Волновая функция этого состояния имеет вид [17]

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_{\mathbf{k}} \Psi_0, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}} = & \rho_{-\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}_1 \neq 0}^{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}} \frac{P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)}{\sqrt{N}} \rho_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}_1} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0}^{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq \mathbf{k}} \frac{Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)}{N} \rho_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_2} + \dots \end{aligned} \quad (27)$$

Следующими поправками к  $\psi_{\mathbf{k}}$  пренебрегаем. Мы ищем решение для  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  в «минимальной» калибровке для сумм, являющейся, по-видимому, оптимальной. Отметим, что если немного поработать с переменными  $\rho_{\mathbf{k}}$  и знать нулевое приближение для  $\psi_{\mathbf{k}}$ , то формула (27) становится почти очевидной. Фейнман и Коэн искали решение в другой форме (5), формула (5) уже не столь очевидна, и она была угадана интуитивно с использованием рассуждений о «backflow».

В формуле (27) для  $\psi_{\mathbf{k}}$  неизвестны функции  $P$  и  $Q$ . Подставляя (27) в  $N$ -частичное уравнение Шредингера и пользуясь независимостью переменных



$\rho_{\mathbf{k}}$ , получим цепочку зацепляющихся уравнений для функций  $P, Q$  и  $E(k)$ :

$$\begin{aligned} \tilde{E}(k) = e(k) + \int d\mathbf{k}_1 P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) 2\mathbf{k}_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + \\ + \int d\mathbf{k}_1 (-2k_1^2) [Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_1) + 2Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{k}_1)], \quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \left[ e(k_1) + e(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) - \tilde{E}(k) \right] + \\ + \int d\mathbf{k}_2 F(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \\ = 4\sigma(k_1)\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_1 + 2k^2 f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1), \quad (29) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = 4\mathbf{k}_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \\ + 2\mathbf{k}_2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2), \quad (30) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \left[ e(k_1) + e(k_2) + e(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - \tilde{E}(k) \right] = \\ = P_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)G(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + L(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \quad (31) \end{aligned}$$

$$P_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \quad (32)$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = [2\sigma(k_1)\mathbf{k}_1 + 2\sigma(k_2)\mathbf{k}_2](\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + \\ + 2f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)^2, \quad (33) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = 2f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)\mathbf{k}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + \\ + 2k^2 [g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + 3g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k})]. \quad (34) \end{aligned}$$

Уравнения записаны в безразмерных переменных  $k' = k/k_0$ ,  $\tilde{E}(k') \equiv E(k)2m/\hbar^2 k_0^2$ , где  $k_0 = 2\pi/d$ . Штрихи опускаем.

Соответствие между обозначениями [16, 17] и нашими следующее:

$$a_2(\mathbf{k}) = 2\sigma(\mathbf{k}),$$

$$a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = 2f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2),$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{6}a_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) = g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) + \\ + g(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) + \\ + g(\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_3) + g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, -\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3), \end{aligned}$$

$$c_2(-\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i - \mathbf{k}; \mathbf{k}) = P_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}_i),$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}c_3(-\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}; \mathbf{k}) = Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \\ + Q(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2) + Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \end{aligned}$$

С точки зрения численных методов, как показал анализ, лучше решать уравнения (28)–(31) и (9)–(17), чем симметризованные уравнения из [16, 17] — спектр квазичастиц и  $E_0$  находятся во втором приближении на 1–2 К точнее.

Из физических соображений ясно, что в системе должна существовать классическая звуковая мода  $E(k \rightarrow 0) = ck$ . В теоретико-полевых моделях иногда возникают решения со щелью в спектре квазичастиц,  $E(k \rightarrow 0) = \text{const} > 0$ , как правило, из-за 2-частичного конденсата (см. ссылки и некоторое обсуждение в [27], а также [26]).

Оказывается, что в подходе КП (9)–(17), (28)–(34) звуковая мода получается ( $E(k)|_{k \rightarrow 0} = ck + \gamma k^3$  [17]), если выполняется  $\sigma(k)|_{k \rightarrow 0} \sim 1/k$ . Обозначим правую часть (9) как  $\delta(k_1)$ . Можно убедиться, что для первого приближения ( $g = 0$ ) справедливо

$$\delta(k_1)|_{k_1 \rightarrow 0} \approx \int 0.5k_2^2 \frac{(2\sigma(k_2)k_2)^2}{2\epsilon(k_2)} d\mathbf{k}_2 > 0. \quad (35)$$

Здесь  $k$  измеряется в единицах  $k_0 = 2\pi/d$ . При достаточно высоком барьере отталкивания,  $V_0 \geq 50$  К (как показывает численный анализ), перенормированный потенциал

$$n\tilde{\nu}(k_1) \equiv n\nu(k_1) - \frac{4\hbar^2}{m}\delta(k_1) \quad (36)$$

при  $k_1 \rightarrow 0$  оказывается меньше нуля, поэтому из (9) получаем мнимое  $\sigma(k_1 \rightarrow 0)$ .

Во втором приближении ( $g \neq 0$ ) выражение для  $\delta(k_1)$  усложняется и знак  $\delta(k_1)$  неясен. Численный анализ дает  $n\tilde{\nu}(k_1 \rightarrow 0) > 0$  для всех исследованных потенциалов, поэтому имеем  $\sigma(k_1 \rightarrow 0) \sim 1/k_1$ . Что будет в следующих приближениях, мы не можем сказать. Можно убедиться, что для слабонеидеального бозе-газа асимптотика  $\sigma(k_1 \rightarrow 0) \sim 1/k_1$  выполняется и при учете всех последующих поправок к (7).

Таким образом, из нашего анализа видно, что звуковая мода  $E(k)|_{k \rightarrow 0} = ck$  справедлива для спектра квазичастиц слабонеидеального бозе-газа, а как для He-II — неизвестно: в первом приближении эта асимптотика для ряда потенциалов не выполняется (см. рис. 9–11), во втором — выполняется для всех исследованных потенциалов, о следующих приближениях ничего сказать нельзя. Поэтому доказательство асимптотики  $E(k \rightarrow 0) = ck$  для спектра квазичастиц He-II является актуальным. Согласно расчету [23], для He-II справедливо  $E(k \rightarrow 0) = ck$ . Мы предполагаем, что и в нашем подходе, при учете всех поправок к  $\Psi_0$  для He-II будет получена асимптотика  $E(k)|_{k \rightarrow 0} = ck$ .

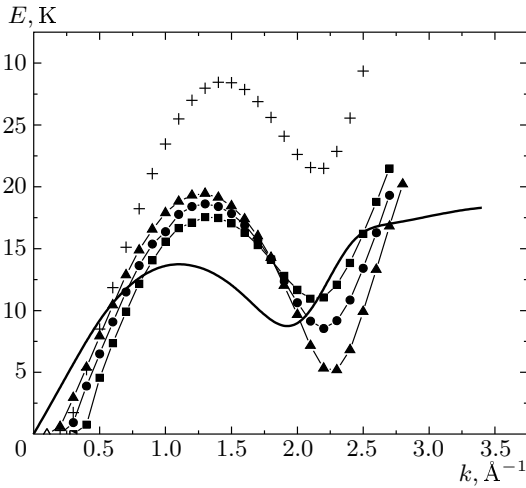


Рис. 9. Спектр квазичастиц гелия-II, для  $\Psi_0$  и  $\psi_k$  в первом приближении. Зависимость спектра от высоты барьера  $V_0$  для потенциала (20), (21). Квадраты —  $V_0 = 50$  К; кружки —  $V_0 = 67$  К; треугольники —  $V_0 = 90$  К; крестики — нулевое приближение для  $\psi_k$  ( $\psi_k = \rho_{-k}$ ,  $\tilde{E}(k) = e(k)$ ),  $V_0 = 67$  К; сплошная линия — экспериментальный спектр [47]

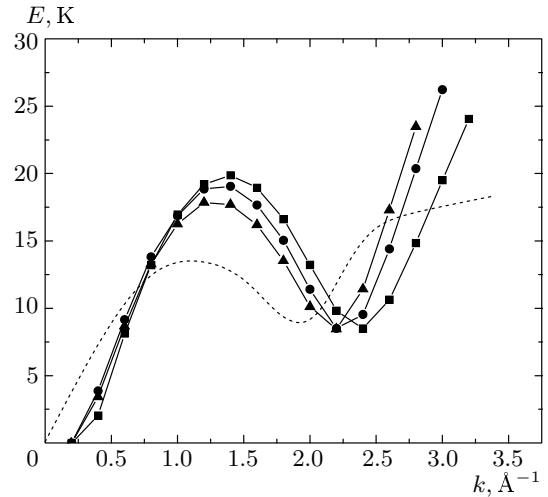


Рис. 11. Первое приближение для спектра квазичастиц He-II, зависимость спектра от формы потенциального барьера, потенциал (20), (22). Квадраты —  $b = 1$ ,  $V_0 = 140$  К; кружки —  $b = 4$ ,  $V_0 = 72$  К; треугольники —  $b = 8$ ,  $V_0 = 54$  К; пунктир — эксперимент

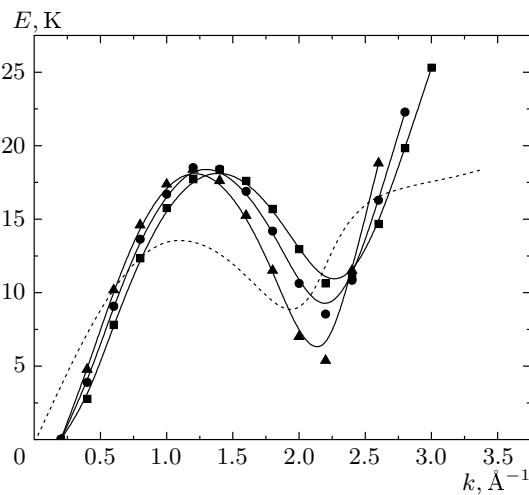


Рис. 10. Спектр квазичастиц He-II, первое приближение, зависимость спектра от ширины барьера  $a$  для потенциала (20), (21) при  $V_0 = 67$  К. Квадраты —  $a = 2.5$  Å; кружки —  $a = 2.64$  Å; треугольники —  $a = 2.8$  Å; пунктир — экспериментальный спектр. Для всех других рисунков  $a = 2.64$  Å

### 6. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ СПЕКТРА КВАЗИЧАСТИЦ

В нулевом приближении для  $\Psi_0$  и  $\psi_k$  имеем спектр Боголюбова  $E_b(k)$  (2). Рассмотрим первое

приближение:  $Q = 0$ ,  $g = 0$  в (28)–(34). Из формулы (29) имеем

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \frac{4\sigma(k_1)\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_1 + 2k^2 f_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{e(k_1) + e(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) - \tilde{E}(k)}. \quad (37)$$

Для первого приближения нужно решить (28) с  $P$  (37). Уравнение (28) мы решали численно методом итераций для разных  $V_0$ . Полученные спектры квазичастиц изображены на рис. 9. Спектру He-II лучше всего соответствует теоретический спектр для  $V_0 \approx 70$  К. На рис. 10 показано, как спектр зависит от ширины  $a$  (21), (20) потенциального барьера. На других рисунках приведены результаты для экспериментального  $a = (2.64 \pm 0.04)$  Å [37].

Мы также исследовали зависимость спектра квазичастиц от формы потенциального барьера, заменяя барьер (21) на (22) с  $b = 1; 4; 8$  (см. рис. 1, 2). Как видно на рис. 11, зависимость спектра от формы барьера существует, но она не критическая: для широкого класса форм выбором одного параметра  $V_0$  можно добиться приближенного согласия спектра с экспериментальным.

Во втором приближении необходимо решить систему уравнений (28)–(31). Мы решали уравнение (29) методом квадратур, а систему (28), (29) в целом — методом итераций. В первом приближении спектр квазичастиц находится с ошибкой  $\pm 2\%$ , а во втором ошибка численного метода возрастает

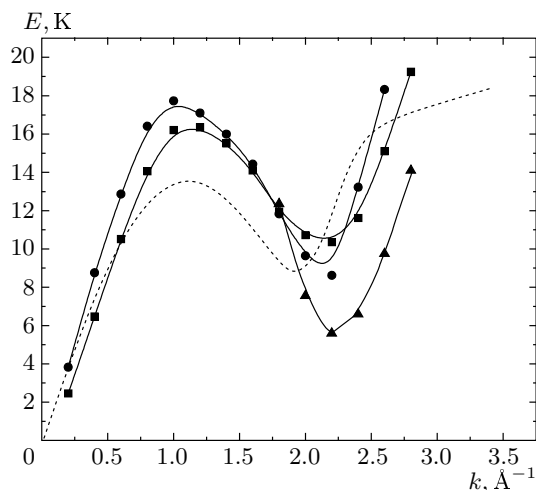


Рис. 12. Второе приближение для спектра квазичастиц He-II для потенциала (20), (21). Квадраты —  $V_0 = 50$  К (близкий спектр — для потенциала (20), (22),  $b = 8$  при  $V_0 = 42$  К); кружки —  $V_0 = 60$  К; треугольники —  $V_0 = 80$  К (показан только ротоновый минимум); пунктир — эксперимент

до  $\pm 5\%$ , а в некоторых точках до  $\pm 10\%$ . Значения затравочной  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$  (37) в среднем порядка единицы, не малые, а поправка к (37), идущая от  $W$  в (29), как правило, в несколько раз меньше.

Спектр во втором приближении лучше всего согласуется с экспериментальным [47] при  $V_0 \approx 60$  К, см. рис. 12.

Как видно на рис. 9, учет в  $\psi_{\mathbf{k}}$  поправки Фейнмана  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$  принципиально важен, она существенно улучшает согласие спектра с экспериментом (спектр для  $\psi_{\mathbf{k}}$  без этой поправки обозначен крестиками). Вторая поправка  $Q$  лишь немного подправляет спектр, что свидетельствует о разумности метода — первые поправки к спектру квазичастиц убывают, хотя параметр разложения не совсем малый ( $\sim 1/2$ ).

«Полочка»  $E(k \gtrsim 2.5 \text{ \AA}^{-1}) \approx 17$  К у экспериментального спектра квазичастиц He-II обусловлена, видимо, гибридизацией дисперсионной кривой одной квазичастицы с двухротонным уровнем [24].

## 7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ДЛЯ СПЕКТРА КВАЗИЧАСТИЦ

Согласно нашему анализу, спектр квазичастиц типа кривой Ландау с ротоновым минимумом является общим свойством для систем бозе-частиц, у которых взаимодействие между бозонами описывается

потенциалом с достаточно высоким барьером отталкивания (но не слишком высоким).

Вид спектра квазичастиц определяется потенциалом, причем в основном высотой и шириной потенциального барьера, а глубину «ямочки» Леннарда–Джонса можно заметно изменять — если ее уменьшить до нуля или увеличить в два раза по сравнению с экспериментальной  $\epsilon \approx -11$  К, то спектр квазичастиц это слабо чувствует, он смещается только на 1 К для  $k$  в максон-ротонной области. «Ямочка» нужна для получения связанного состояния и правильного значения энергии основного состояния. Модель твердых сфер [5] с перенормированным конечным потенциалом и модель полупрозрачных сфер [28] используют неточный потенциал без «ямочки», но при вычислении спектра квазичастиц это допустимо.

Ротоновый минимум возникает в спектре квазичастиц He-II из-за того, что при  $k \sim k_0$  фурье-образ  $\nu(k)$  потенциала обращается в нуль. Для получения спектра, подобного кривой Ландау, нужно, чтобы при  $k < k_0$  величина  $\nu(k)$  была положительной и убывала до нуля при приближении  $k$  к  $k_0$ , а при  $k > k_0$  модуль  $\nu(k)$  должен быть малым (см. рис. 2; у потенциала  $\nu(k)$  в модели полупрозрачных сфер эти свойства также наблюдаются). Для реальных потенциалов  $V(r)$  имеем осцилляции  $\nu(k)$  при больших  $k$ . Эти осцилляции неважны, важна малость  $|\nu(k)|$  при  $k > k_0$ . Если увеличить амплитуду осцилляций  $\nu(k)$  в 2 раза или больше, по сравнению с рис. 2, то спектр квазичастиц уже будет сильно отличаться от кривой Ландау.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода коллективных переменных, развитого в работах Юхновского и Вакарчука [15–17], мы нашли волновые функции основного ( $\Psi_0$ ) и первого возбужденного ( $\psi_{\mathbf{k}}$ ) состояний He-II с точностью до двух поправок к соответствующим решениям для слабонеидеального бозе-газа. Для этих приближений численно найдены спектр квазичастиц,  $E(k)$ , энергия основного состояния ( $E_0$ ) и структурный фактор гелия-II. Взаимодействие между атомами He<sup>4</sup> моделировалось эффективным потенциалом, в котором модельный потенциал отталкивания сшивался с экспериментальным потенциалом притяжения.  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  выводятся из точного  $N$ -частичного уравнения Шредингера и не содержат каких-либо подгоночных функций, а высота  $V_0$  потенциального барьера — единственный подгоночный параметр в задаче.

Новизна наших результатов состоит в том, что 1) мы нашли численные решения для  $\Psi_0$  и  $E(k)$  в более точном приближении, по сравнению с [15, 19, 22, 30]; 2) исследована зависимость решений от вида модельного потенциала, в то время как в [15, 19, 30] решения получены из структурного фактора.

Модель позволяет вывести с удовлетворительной точностью основные экспериментальные данные по микроструктуре He-II — спектр квазичастиц, структурный фактор и энергию основного состояния — при подборе только одного параметра  $V_0$ , для  $V_0 \approx 100$  К. Поэтому мы считаем, что модель приближенно верно описывает микроструктуру He-II, несмотря на то что параметр разложения  $2\sigma(k)k$  не совсем малый: его среднее значение составляет примерно  $-1/2$  для  $k \lesssim 1$  (в единицах  $k_0$ ), см. рис. 3.

К сожалению, абсолютно все известные нам методы вычисления  $\Psi_0$  и  $\psi_{\mathbf{k}}$  для He-II используют разложения по не совсем малым параметрам. «Идеальная» микроскопическая модель He-II, не содержащая подгоночных параметров и функций и использующая только разложения по малым параметрам, пока отсутствует. Насколько мы сейчас видим, есть небольшой шанс, что такую модель нужно построить в теоретико-полевого подходе, но мы не представляем, как это можно сделать в квантовомеханическом подходе. В теоретико-полевого подходе для этого, видимо, нужно [48] решать цепочку зацепляющихся уравнений для одночастичной, двухчастичной и высших функций Грина, и чтобы оборвать такую цепочку, нужно корректно построить теорию возмущений по нескольким малым параметрам (в качестве которых можно выбрать одночастичный конденсат и, вероятно, двухчастичный [49]; согласно [49] высшие  $s$ -частичные конденсаты ( $s \geq 3$ ) отсутствуют в He-II при  $T = 0$ ), но пока это не сделано.

Автор благодарен П. И. Фомину и Ю. В. Штанову за обсуждение результатов и полезные замечания, В. Е. Кирееву и В. В. Кузьмичеву за обсуждение численных методов, а также А. А. Ровенчаку за предоставление копий своих работ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. L. Landau, J. Phys. USSR **5**, 71 (1941).
2. L. Landau, J. Phys. USSR **11**, 91 (1947).
3. R. Feynman, Phys. Rev. **94**, 262 (1954).
4. R. P. Feynman and M. Cohen, Phys. Rev. **102**, 1189 (1956).
5. K. A. Brueckner and K. Savada, Phys. Rev. **106**, 1117, 1128 (1957); К. Бракнер, *Теория ядерной материи*, Мир, Москва (1964).
6. R. Jastrow, Phys. Rev. **98**, 1479 (1955).
7. W. L. McMillan, Phys. Rev. A **138**, 442 (1965); D. Schiff and L. Verlet, Phys. Rev. **160**, 208 (1967); M. H. Kalos, M. A. Lee, P. A. Whitlock et al., Phys. Rev. B **24**, 115 (1981); T. McFarland, S. A. Vitiello, L. Reatto et al., Phys. Rev. B **50**, 13577 (1994).
8. C.-W. Woo and R. L. Coldwell, Phys. Rev. Lett. **29**, 1062 (1972).
9. E. Feenberg, Ann. Phys. **84**, 128 (1974).
10. H. W. Jackson and E. Feenberg, Rev. Mod. Phys. **34**, 686 (1962); D. K. Lee and F. J. Lee, Phys. Rev. B **11**, 4318 (1975).
11. E. Manousakis and V. P. Pandharipande, Phys. Rev. B **30**, 5062 (1984).
12. C. E. Campbell, Phys. Lett. A **44**, 471 (1973); C. C. Chang and C. E. Campbell, Phys. Rev. B **15**, 4238 (1977); E. Krotscheck, Phys. Rev. B **33**, 3158 (1986).
13. B. E. Clements, H. Godfrin, E. Krotscheck et al., J. Low Temp. Phys. **102**, 1 (1996).
14. L. Reatto, G. L. Masserini, S. A. Vitiello, Physica B **197**, 189 (1994); D. E. Galli, L. Reatto and S. A. Vitiello, J. Low Temp. Phys. **101**, 755 (1995).
15. И. Р. Юхновский, И. О. Вакарчук, Вестник АН УРСР № 9, 32 (1977).
16. И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновский, ТМФ **40**, 100 (1979).
17. И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновский, ТМФ **42**, 112 (1980).
18. И. А. Вакарчук, ТМФ **80**, 439 (1989).
19. И. А. Вакарчук, ТМФ **82**, 438 (1990).
20. T. Nishiyama, Progr. Theor. Phys. **45**, 730 (1971).
21. S. Sunakawa, Sh. Yamasaki, and T. Kebukawa, Progr. Theor. Phys. **41**, 919 (1969); **44**, 565 (1970).
22. G. Barucchi, G. Ponzano, and T. Regge, in *Quanten und Felder*, Friedrich, Vieweg & Sohn, Braunschweig (1972), p. 279.
23. J. Gavoret and P. Nozieres, Ann. Phys. **28**, 349 (1964).

24. A. Zavadski, S. Ruvalds, and J. Solana, Phys. Rev. A **5**, 399 (1972).
25. D. Pines, Can. J. Phys. **65**, 1357 (1987).
26. H. R. Glyde and A. Griffin, Phys. Rev. Lett. **65**, 1454 (1990).
27. Ю. М. Полуектов, ФНТ **28**, 604 (2002); Э. А. Пашицкий, С. И. Вильчинский, ФНТ **27**, 253 (2000).
28. E. A. Pashitskii, S. V. Mashkevich, and S. I. Vilchinsky, Phys. Rev. Lett. **89**, 075301 (2002); J. Low Temp. Phys. **134**, 851 (2004).
29. А. А. Ровенчак, ФНТ **29**, 145 (2003).
30. M. D. Tomchenko, Ukr. J. Phys. **50**, 720 (2005).
31. Н. Н. Боголюбов, J. Phys. USSR **11**, 23 (1947).
32. С. Т. Беляев, ЖЭТФ **34**, 417, 433 (1958).
33. Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ **28**, 129 (1955).
34. Y. Imry, Ann. Phys. **51**, 1 (1969).
35. М. Д. Томченко, готовится к печати в JLTP.
36. A. Bijl, Physica **7**, 869 (1940).
37. R. A. Aziz, V. P. S. Nain, J. S. Carley et al., J. Chem. Phys. **70**, 4330 (1979); A. R. Jansen and R. A. Aziz, J. Chem. Phys. **107**, 914 (1997).
38. A. L. J. Burgmans, J. M. Farrar, and J. T. Lee, J. Chem. Phys. **64**, 1345 (1976).
39. R. Feltgen, H. Pauly, F. Torello et al., Phys. Rev. Lett. **30**, 820 (1973).
40. I. O. Vakarchuk, V. V. Babin, and A. A. Rovenchak, J. Phys. Stud. **4**, 16 (2000).
41. R. Ahlrichs, P. Penco, and G. Skoles, Chem. Phys. **19**, 119 (1976).
42. R. De Bruyn Ouboter, Physica B **144**, 127 (1987); P. R. Roach, J. B. Ketterson, C.-W. Woo, Phys. Rev. A **2**, 543 (1970).
43. А. Ф. Верлань, В. С. Сизиков, *Интегральные уравнения*, справочное пособие, Наукова Думка, Киев (1986).
44. Б. Н. Есельсон, В. Н. Григорьев, В. Г. Иванцов и др., *Свойства жидкого и твердого гелия*, Изд-во стандартов, Москва (1978).
45. F. H. Wirth and R. B. Hallock, Phys. Rev. B **35**, 89 (1987).
46. E. C. Svensson, V. F. Sears, A. D. B. Woods et al., Phys. Rev. **21**, 3638 (1980).
47. R. J. Donnelly, J. A. Donnelly, and R. N. Hills, J. Low Temp. Phys. **44**, 471 (1981).
48. Э. А. Пашицкий, частное сообщение.
49. М. Д. Томченко, ФНТ **32**, № 1 (2006).