

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



С326  
П-757

P4 - 7209

3576/2-73

В.Б.Приезжев

КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ  
ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

**1973**

ЛАБОРАТОРИЯ  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Р4 - 7209

В.Б.Приезжев

КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ  
ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

Направлено в сборник "Физика жидкостей".  
Изд. Киевского государственного университета.

## 1. Введение

Микроскопическое изучение свойств жидкого гелия сводится к задаче отыскания волновой функции  $N$  бозонов массы  $m$ , заключенных в объем  $V$  и образующих систему с гамильтонианом

$$H = \hbar^2 / 2m \sum_{i=1}^N V_i^2 + \sum_{i < j}^N v(|r_i - r_j|), \quad /1/$$

где в качестве межатомного потенциала  $v(r)$  выбирается, как правило, потенциал Леннарда-Джонса. При  $T=0^\circ\text{K}$  система в основном состоянии описывается волновой функцией  $\Psi_0$ . Поскольку потенциал на малых расстояниях  $r_{ij}$  между частицами становится очень большим, функция  $\Psi_0$  должна обращаться в нуль при  $r_{ij} \rightarrow 0$  для любых  $i$  и  $j$ . Простейшая волновая функция основного состояния /Ф.О.С./, написанная с учетом этого обстоятельства, имеет вид:

$$\Psi_0 = \prod_{i < j}^N I(|r_i - r_j|), \quad /2/$$

где  $I(r)$  - джастровская функция <sup>/11/</sup>. Такой вид  $\Psi_0$  неоднократно использовался для исследования основного состояния жидкого гелия вариационным способом <sup>/4-6/</sup>. Целью данной работы является изучение, помимо основного, также возбужденных состояний системы - фононов при  $T=0$  на основе квазикристаллической модели /К.М./ <sup>/5-11/</sup>. Для этой цели форма /2/ Ф.О.С.  $\Psi_0$  оказывается неудобной. Прежде чем приступить к построению специфической формы  $\Psi_0$ , коротко остановимся на основных предположениях, используемых в К.М. <sup>/10/</sup>.

Описание К.М. Реальная система /классическая или квантовая жидкость/ заменяется модельной, представляющей собой аморфное твердое тело. Рассматривается ансамбль модельных систем. В каждой системе ансамбля фононные частоты определяются функцией Грина

$$g(\omega) = (\omega^2 - D)^{-1}, \quad /3/$$

где  $D$  - динамическая матрица. Для усредненной по ансамблю функции Грина определяется эффективная динамическая матрица  $\mathcal{D}$ :  $\langle g(\omega) \rangle = (\omega^2 - \mathcal{D})^{-1}$ . Далее, для матрицы  $\mathcal{D}$  принимается приближение  $\mathcal{D} \approx \langle D \rangle$ , а полюса функции  $\langle g(\omega) \rangle$  отождествляются с фононными возбуждениями реальной системы. Выражение для динамической матрицы  $\mathcal{D}$  имеет вид /10/

$$\mathcal{D}^{\alpha\beta}(k) = \langle 1/N \sum_n \sum_{m \neq n} D^{\alpha\beta}(n, m) [1 - \exp\{-ik(n-m)\}] \rangle. /4/$$

Здесь  $N$  - число частиц в системе,  $n$  и  $m$  - равновесные координаты частиц, а суммирование проводится по всем значениям  $n$  и  $m$  данной конфигурации в модельной системе. Проблема отыскания фононного спектра теперь распадается на 2 вопроса: 1. Как вычислить динамическую матрицу модельной системы  $D^{\alpha\beta}$  с учетом ангармонизма межатомного потенциала и больших нулевых колебаний; 2. Как корректно провести усреднение по ансамблю в выражении /4/. Первый вопрос является основным содержанием теории квантовых кристаллов /12/, и мы можем воспользоваться результатами этой теории, если в качестве Ф.О.С. модельной системы  $\Psi_0$  выберем функцию, сходную с  $\Psi_0$  для квантового кристалла. Именно, в духе К.М. положим

$$\Psi_0 = \sum_{\rho} P_{\rho} \prod_{i=1}^N \phi^{(i)}(R_i - r_{\rho}) \prod_{i < j}^N f(|r_i - r_j|). \quad /5/$$

Здесь  $\phi(R_i - r_{\rho})$  - одночастичная волновая функция,  $r_i$  - координата  $i$ -го атома,  $R_i$  - координата максимума одночастичной волновой функции, совпадающая со средним значением  $r_i$ ,  $P_{\rho}$  - оператор бозевской перестановки частиц, фактор  $\prod_{i < j} I_{ij}$  имеет тот же смысл, что и в формуле /2/. Такая форма  $\Psi_0$  отличается от Ф.О.С. кван-

тового кристалла только тем, что в последней координаты  $R_i$  образуют кристаллическую решетку, а в формуле /5/ подразумеваются распределенными случайно, с функцией распределения, которую мы обозначим  $G(r)$ . Следующий пункт посвящен нахождению вида  $\Psi_0$  вариационным способом.

## II. Функция основного состояния

а/ Выражение для энергии основного состояния. Для нахождения Ф.О.С. из условия минимума энергии в теории квантовых кристаллов используется кластерное разложение /13/. Если система находится в состоянии с волновой функцией типа /5/, представление среднего значения какого-либо оператора, скажем, гамильтониана системы  $H$  в виде кластерного разложения осуществляется следующим образом. Вводится ряд промежуточных операторов, включающих координаты только  $k$  частиц:

$$\begin{aligned}
 H_1 &= -(\hbar^2/2M) \nabla_1^2 \\
 H_2 &= -(\hbar^2/2M)(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + v(|r_1 - r_2|) \\
 &\dots\dots\dots \\
 H_n &= -(\hbar^2/2M) \sum_i^r \nabla_i^2 + \sum_{i < j < \dots < n} v(|r_i - r_j|).
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Этому набору операторов ставится в соответствие набор волновых функций  $\Psi_n$ , также зависящих от координат  $n$  частиц

$$\begin{aligned}
 \Psi_1 &= \phi(R_1 - r_1) \\
 \Psi_2 &= [\phi(R_1 - r_1)\phi(R_2 - r_2) + \phi(R_1 - r_2)\phi(R_2 - r_1)] \times \\
 &\times f(|r_1 - r_2|) \\
 &\dots\dots\dots \\
 \Psi_n &= \sum_f^n P_f \prod_{i=1}^n \phi(R_i - r_{if}) \prod_{i < j}^n f(|r_i - r_j|).
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

В терминах операторов /6/ и волновых функций /7/ среднее значение гамильтониана записывается в виде суммы  $E_0 = \sum_{n=1}^N E_{0n}$ . Величины  $E_{0n}$  представляют собой добавку к энергии, возникающую из-за учета  $n$ -частичного взаимодействия, если  $(n-1)$ -частичное взаимодействие уже учтено. Первый член суммы имеет вид

$$E_{01} = \sum_{i=1}^N C_1(i),$$

где

$$C_1(i) = \langle \Psi_1(r_i) | H(r_i) | \Psi_1(r_i) \rangle / \langle \Psi_1(r_i) | \Psi_1(r_i) \rangle. \quad /8/$$

Выпишем еще второй член разложения, не выписывая общего, который строится по тому же принципу

$$E_{02} = \sum_{i < j}^N C_2(i, j), \quad \text{где}$$

$$C_2(i, j) = \langle \Psi_2(r_i, r_j) | H_2(i, j) | \Psi_2(r_i, r_j) \rangle / \langle \Psi_2 | \Psi_2 \rangle - C_1(i) - C_1(j). \quad /9/$$

Точно так же можно получить разложения для других физических величин, характеризующих систему. В дальнейшем нам потребуется выражение для парной корреляционной функции  $g(r)$  в виде разложения по кластерным волновым функциям /7/. Оператор, соответствующий  $g(r)$ , обозначим  $\hat{g}$ :

$$\hat{g}(1-2) = \rho^{-2} \sum_{i < j}^N [\delta(1-r_i) \delta(2-r_j) + \delta(1-r_j) \delta(2-r_i)], \quad /10/$$

где  $\rho$  - плотность числа частиц, а 1 и 2 - координаты двух произвольных точек в рассматриваемом объеме. Первый не исчезающий член разложения этого оператора имеет вид:

$$g_{02}(1-2) = 2\rho^{-2} \sum_{i < j}^N [\phi(1-R_i) \phi(2-R_j) + \phi(1-R_j) \phi(2-R_i)] \quad /11/$$

$$+ \phi(1-R_i)\phi(2-R_i)]^2 / \int d^3r_i d^3r_j |\Psi_2|^2.$$

Напомним, что  $R_i$  - координаты максимумов одночастичных волновых функций. В работе Носанова<sup>11</sup>, а также в работах<sup>14-15</sup> показано, что в случае твердого гелия кластерное разложение можно оборвать на втором члене и получить таким образом замкнутое выражение для энергии основного состояния  $E_0$ . Предполагая применимость К.М. к жидкому гелию, мы тем самым предположим сходимость кластерного разложения в этой модели. Поэтому, согласно<sup>13</sup>, мы ограничимся вычислением первых двух членов кластерного разложения, т.е. положим

$$E_0 = E_{01} + E_{02}, \quad /12/$$

$$g(r) = g_{02}(r).$$

Выражение /11/ для  $g_{02}(r)$  может быть переписано в интегральной форме, если воспользоваться функцией распределения координат  $R_i$   $G(R_1, R_2)$ , введенной в п.1:

$$g_{02}(r) = f^2(r) \int d^3R_1 d^3R_2 G(R_1, R_2) [\phi(R_1)\phi(R_2-r) + \phi(R_2)\phi(R_1-r)]^2 / \omega(R_1, R_2), \quad /13/$$

где

$$\omega(R_1, R_2) = \int d^3r_1 d^3r_2 [\phi(R_1-r_1)\phi(R_2-r_2) + \phi(R_2-r_1)\phi(R_1-r_2)]^2 f^2(|r_1-r_2|).$$

Выражение /13/ наряду с /11/ можно рассматривать как определение функции  $G(R_1, R_2)$ . Ввиду однородности системы, очевидно, что  $G(R_1, R_2) = G(|R_1-R_2|)$ .

Прежде чем выписать более подробное выражение для  $E_0$ , введем прямые  $\langle \dots \rangle_d$ , обменные  $\langle \dots \rangle_x$  и полные  $\langle \dots \rangle$  средние некоторой функции  $P(r_i, r_j)$  следующим образом:

$$\langle P(r_i, r_j) \rangle_d = \omega^{-1}(R_i, R_j) \int d^3r_i d^3r_j \phi^2(R_i-r_i) \times \\ \times \phi^2(R_j-r_j) f^2(|r_i-r_j|) P(r_i, r_j),$$

$$\begin{aligned} \langle P(r_i, r_j) \rangle &= \omega^{-I}(R_i, R_j) \int d^3 r_i d^3 r_j \phi(R_i - r_i) \times \\ &\times \phi(R_j - r_j) \phi(R_i - r_j) \phi(R_j - r_j) f^2(|r_i - r_j|) P(r_i, r_j), \quad /14/ \\ \langle P(r_i, r_j) \rangle &= 2 \langle P(r_i, r_j) \rangle_d + 2 \langle P(r_i, r_j) \rangle_x. \end{aligned}$$

Согласно результатам работы /13/, в обозначениях /14/ имеем

$$\begin{aligned} E_{01} &= \sum_i C_I(i) = 1/2 \sum_i \int d^3 r_i \phi(R_i - r_i) (-\hbar^2/2m) \times \\ &\times \nabla_i^2 \phi(R_i - r_i) / \int d^3 r_i \phi^2(R_i - r_i), \\ E_{02} &= \sum_{i < j}^N (\langle v(|r_i - r_j|) \rangle + \langle F(|r_i - r_j|) \rangle) + \quad /15/ \\ &+ \sum_{i < j}^N (\langle T(i) \rangle / 2 + \langle T(j) \rangle / 2 - C_I(i) - C_I(j)) + \\ &+ \sum_{i < j}^N \langle T_i(j) + T_j(i) \rangle_x, \end{aligned}$$

где

$$T(i) = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 \ln \phi(R_i - r_i), \quad /16/$$

$$F(|r_i - r_j|) = -(\hbar^2/2m) \nabla^2 \ln f(|r_i - r_j|), \quad /17/$$

$$\begin{aligned} T_i(j) &= -(\hbar^2/2m) \left[ \frac{\nabla^2 \phi(R_i - r_i)}{\phi(R_i - r_i)} - \right. \\ &\left. - \frac{\nabla \phi(R_j - r_j)}{\phi(R_j - r_j)} \frac{\nabla \phi(R_i - r_i)}{\phi(R_i - r_i)} \right]. \quad /18/ \end{aligned}$$

Первую сумму в выражении /15/ можно преобразовать, вводя потенциал  $V(r) = v(r) - (\hbar^2/2m) \nabla^2 \ln f(r)$ . Заменяя суммирование по данной конфигурации  $\{R_i\}$  интегрированием с функцией  $G(R)$  и принимая во внимание определение /13/, получим в приближении /12/:



$$\begin{aligned} & \sum_{i < j} (\langle v(|r_i - r_j|) \rangle + \langle F(|r_i - r_j|) \rangle) = \\ & = \rho^2 / 2 \int d^3 R_1 d^3 R_2 G(|R_1 - R_2|) \langle V(|r_i - r_j|) \rangle \quad /19/ \\ & = \frac{\rho^2 N}{2} \int d^3 r g(r) V(r). \end{aligned}$$

Примем теперь первое приближение для Ф.О.С., а именно, будем искать одночастичную волновую функцию в виде

$$\phi(r) = \exp(-A r^2 / 2), \quad /20/$$

В этом приближении имеем  $C_i(i) = (1/2) \langle T(i) \rangle = (3/4) \hbar^2 A / m$ , и выражение для энергии основного состояния принимает вид

$$\begin{aligned} E_0 = & \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 AN}{m} + \frac{\rho^2 N}{2} \int d^3 r g(r) V(r) + \\ & + \frac{\rho^2}{2} \int d^3 R_1 d^3 R_2 G(|R_1 - R_2|) \langle T_1(2) + T_2(1) \rangle_x, \quad /21/ \end{aligned}$$

где последний член содержит поправку к кинетической энергии за счет эффектов обмена. Полученное выражение позволяет найти Ф.О.С., соответствующую минимуму энергии основного состояния вариационным способом.

б/ Вариационная процедура. В рассматриваемой модели Ф.О.С. определяется значением параметра  $A$  и видом функции  $f(r)$  при заданной конфигурации  $\{R_j\}$ . Функция  $f(r)$  должна быть такой, чтобы при некотором значении параметра  $A$  достигался минимум энергии  $E_0$ . Особенностью вариационной процедуры в данном случае является дополнительное ограничение на функции  $\phi$  и  $f$ , возникающее из уравнения /13/. Другими словами, функция  $f(r)$  и параметр  $A$  должны быть такими, чтобы существовала действительная и положительная функция  $G(r)$ , дающая в левой части уравнения /13/ парную функцию распределения  $g(r)$ , которую мы берем из эксперимента.

Будем искать вариацию  $\delta E(f, A) / \delta f$  при фиксированном значении параметра  $A$ , ограничив область изменения  $f(r)$  требованием разрешимости интегрального уравнения /13/ относительно функции  $G(r)$  при данном значении

А. Кроме этого потребуем, чтобы всюду в области определения  $f(r) < 1$ ; это означает, что джасторовская функция учитывает только эффекты отталкивания между частицами. После выполнения указанной вариации минимум энергии  $E_{0 \min}$  определяется из условия  $\partial E_0 / \partial A = 0$ .

Итак, для нахождения  $E_{0 \min}$  необходимо, прежде всего, определить при каждом значении  $A$  множество функций  $\{f\}_A$ , для которых уравнение /13/ разрешимо относительно функций  $G(r)$ . Поскольку функция  $g(r)$  уже фиксирована, оказывается практически более удобным рассматривать не множество  $\{f\}_A$ , а множество функций  $\{a(r)\}_A$  таких, что

$$a(r) = g(r) / f^2(r), \quad /22/$$

т.к. эти функции имеют более простое асимптотическое поведение при малых значениях аргумента. Джасторовская функция  $f(r)$  описывает парную корреляцию между частицами, поэтому значение  $f(r)$  при  $r \gg \sigma$  /  $\sigma$  - радиус твердой сердцевины / должно приближаться к 1, т.к. на больших расстояниях корреляция исчезает. При  $r \ll \sigma$ , напротив, корреляция значительна, причем многочастичным характером корреляции можно пренебречь. Тогда функция  $f^2(r)$  при  $r \ll \sigma$  должна быть равна парной корреляционной функции  $g(r)$  так, что функция  $a(r)$  на малых расстояниях между частицами стремится к 1.

Поэтому будем рассматривать изменение функции  $a(r)$  на интервале  $(\eta, \xi)$ , за пределами которого положим:

$$a(r) = \begin{cases} 1 & r < \eta \\ g(r) & r > \xi \end{cases} \quad /23/$$

Внутри интервала  $a(r)$  выберем в виде  $a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3$  с тем, чтобы производить в дальнейшем варьирование по параметрам  $A$ ,  $a_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ). Условия /23/ связывают коэффициенты  $a_i$  между собой, кроме этого имеется еще естественное требование касания функций  $a(r)$  и  $g(r)$  в точке  $\xi$ . Таким образом, функция  $a(r)$  определяется тремя независимыми параметрами  $\eta$ ,  $\xi$  и одним из параметров  $a_i$ , например,  $a_3$ .

Экспериментальная кривая  $g(r)$  обращается в нуль при значении  $r = 2,184 \text{ \AA}^{1/6}$ ; точность данного эксперимента не позволяет получить более детальную информацию о

поведении  $g(r)$  при малых значениях  $r$ . Можно ожидать, что при  $r < 2,184 \text{ \AA}$  основной вклад в  $g(r)$  дает парная корреляция между частицами. Поэтому значение параметра  $\eta$  определим из условия сшивания точного решения задачи двух тел  $f(r) = \exp[-2(2,51/r)^5]^{1/2}$  с экспериментальной кривой  $g(r)$ . Найденное таким способом значение  $\eta = 2,156 \text{ \AA}$ . Окончательно функция  $a(r)$  определяется двумя параметрами  $a_3$  и  $\xi$ .

Энергию основного состояния  $E_0$  можно теперь рассматривать как функцию трех переменных  $A, a_3, \xi$ , заданную выражением /21/. Минимум энергии  $E_{0min}$  находится прямым вычислением на ЭВМ функции  $E_0(A, a_3, \xi)$ , когда ее аргументы пробегают значения в области определения. Остановимся теперь на том, как из условия разрешимости уравнения /13/ найти область определения  $\{A, a_3, \xi\}$  функции  $E_0$ .

в/ Интегральное уравнение /13/. Запишем уравнение /13/ с учетом приближения /20/ и определения /22/:

$$\begin{aligned}
 a(r) = & \omega^{-1}(R_1, R_2) \int d^3R_1 d^3R_2 \exp(-AR_1^2) \exp(-A(r-R_2)^2) \times \\
 & \times G(|R_1 - R_2|) + \omega^{-1}(R_1, R_2) \int d^3R_1 d^3R_2 \exp(-A/2(R_1^2 + R_2^2)) \times \\
 & \times \exp(-A/2(r-R_1)^2) \exp(-A/2(r-R_2)^2) G(|R_1 - R_2|),
 \end{aligned}$$

/13a/

где второй интеграл учитывает эффекты обмена. Функция  $a(r)$  в левой части уравнения представляет собой по определению модификацию парной функции распределения и имеет при  $r > \eta$  один или несколько максимумов, каждый из которых обладает некоторой характерной шириной  $\Lambda$ . Если ширина гауссовской кривой  $1/A > \Lambda_{min}$ , то не существует положительно определенной функции  $G(r)$ , удовлетворяющей уравнению /13a/. Это качественное рассуждение показывает, что для каждого конкретного

выбора  $a(r)$  существует минимальное значение параметра  $A$ , при котором уравнение /13а/ еще разрешимо относительно  $G(R)$ .

Поэтому для определения области  $\{A, a_3, \xi\}$  будем задавать произвольные значения параметров  $a_3$  и  $\xi$ , определяющих функцию  $a(r)$  и, решая уравнение /13а/ относительно  $G(r)$ , находить  $A_{min}$  при этих значениях  $a_3$  и  $\xi$ . В принципе, уравнение /13а/ можно решить одним из стандартных методов, например, итерациями. Но для наших целей оказывается достаточным задавать модельную форму функции  $G(R)$  в виде набора  $\delta$ -функций с неопределенными коэффициентами, а затем находить эти коэффициенты алгебраическим способом. Точнее, мы выберем  $G(R)$  в виде:

$$G(R) = c_1 \delta(R - \rho_1) + c_2 \delta(R - \rho_2) + \theta(R - \rho_3), \quad /24/$$

т.е. будем искать приближенно распределение максимумов волновых функций двух ближайших соседей относительно выделенного, считая остальные атомы равномерно распределенными, начиная с некоторого расстояния  $\rho_3$ .

г/ Результаты численного расчета Ф.О.С. На рис. 1 изображена зависимость энергии основного состояния  $E_0$  от одного из вариационных параметров  $\xi$  при значениях двух других  $A$  и  $a_3$ , соответствующих минимуму  $E_0$ .  $E_{0 min}$  достигается при значениях  $A = 0,65 \text{ \AA}^{-2}$ ,  $a_3 = 0, \xi = 3,8 \text{ \AA}$  и составляет  $-1,2^\circ\text{K}$ . На рис. 2 изображен квадрат джасторовской функции  $f^2(r)$  при найденных значениях  $a_3$  и  $\xi$ . Для параметров, характеризующих функцию  $G(r)$ , получены значения  $\rho_1 = 3,8 \text{ \AA}$ ,  $\rho_2 = 6,7 \text{ \AA}$ ,  $\rho_3 = 5,75 \text{ \AA}$ .

Экспериментальное значение энергии основного состояния жидкого гелия  $E_{0 \text{ эксп.}} = -7,14^\circ\text{K}$ ; разница между этим значением и полученным выше  $\Delta E \approx 6^\circ\text{K}$ . Интересно сравнить эти результаты с вычисленными Носановым /13/ значениями  $E_0$  для твердого гелия. Для удельного объема  $22 \text{ см}^3/\text{моль}$  в работе /13/ получены значения  $E_0 = 6,2^\circ\text{K}$  при  $E_{0 \text{ эксп.}} = 0^\circ\text{K}$ , так что  $\Delta E \approx 6^\circ\text{K}$ . Соответствие значений  $\Delta E$  в жидком и твердом гелии, полученных в одном и том же порядке кластерного разложения, позволяет надеяться, что КМ правильно схватывает некоторые особенности атомного движения в жидком гелии.

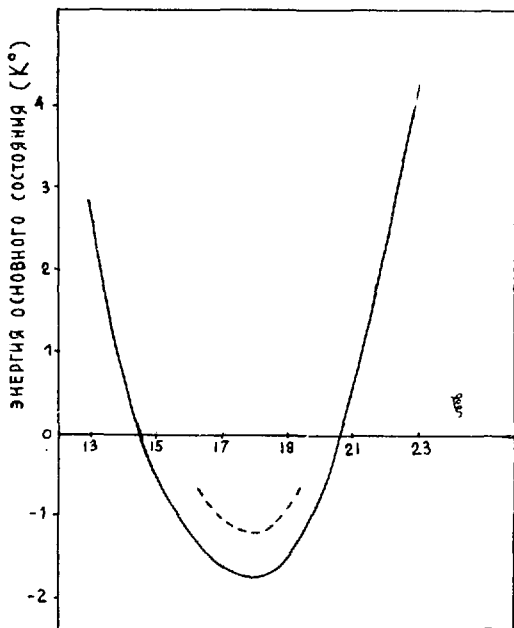


Рис. 1. Энергия основного состояния как функция одного из вариационных параметров  $\xi$ .

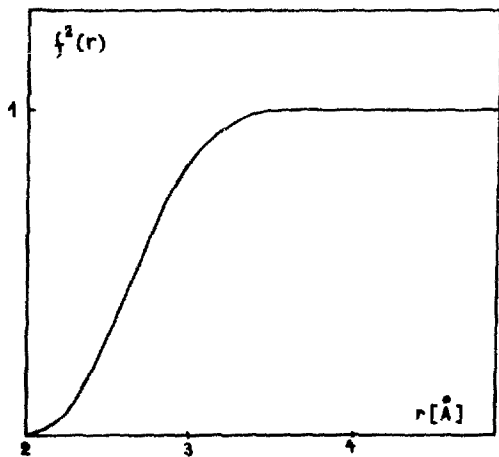


Рис. 2. Квадрат джасторовской функции при значениях вариационных параметров, соответствующих минимуму энергии.

Наиболее существенным результатом проведенных вычислений является ненулевое значение параметра  $A$ , определяющего ширину одночастичной волновой функции  $\phi(r)$ . Этот результат позволяет непосредственно применить полученные данные для Ф.О.С. к вычислению динамической матрицы /4/ по известной схеме теории квантовых кристаллов /17-18/, не прибегая к каким-либо подгоночным параметрам.

### III. Фононные частоты

Зависимость частоты фонона  $\omega$  от волнового числа  $k$  содержится в выражении для динамической матрицы  $\mathcal{D}$ . Если известна функция распределения средних координат частиц  $n, m$  в модельной системе  $g^*(n, m)$ , то в /4/ можно произвести усреднение по ансамблю модельных систем /5-11/:

$$\mathcal{D}^{\alpha\beta}(k) = \frac{\rho}{m} \int d^3r g^*(r) \nabla \nabla v(r) [1 - \exp(ikr)]. \quad /25/$$

Функция  $g^*(r)$  не является экспериментально измеряемой, более того, она имеет смысл только в модельной системе, где средние положения атомов фиксированы. Поэтому в формулу /25/ обычно подставляют измеряемую функцию распределения  $g(r)$  /5-11/ - приближение, не нашедшее пока достаточного обоснования. Для Ф.О.С. модельной системы средние значения координат совпадают с координатами максимумов одночастичных волновых функций  $R_i$ ; функция распределения этих координат  $G(R)$  была вычислена в п. II так, что мы произведем усреднение по ансамблю именно с той функцией, не прибегая к приближенной замене  $g^* \rightarrow g$ .

Учет ангармонических эффектов, как показано в работе /18/, может быть сведен к замене межатомного потенциала средним эффективным потенциалом:

$$\begin{aligned} \tilde{v}(r) &= \int d^3x d^3x' \phi(x) \phi(x') v_{\text{эфф.}}(x-x'-r), \quad \text{где} \quad /26/ \\ \tilde{v}_{\text{эфф.}}(r) &= f^2(r) [\tilde{v}(r) - \hbar^2 / 2m \nabla^2 \ln f(r)]. \end{aligned}$$

В формуле /26/  $\phi(r)$  - одночастичная волновая функция,

$f(r)$  - джасторовская функция. Вид этих функций для основного состояния жидкого гелия также найден в п. II, и мы можем с учетом /25/, /26/ написать окончательное выражение для фононных частот, не содержащее неизвестных параметров:

$$\omega^2(k) = \frac{4\pi\rho}{M} \int dR G(R) \left\{ R^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2} \tilde{v}(R) \left[ \frac{1}{3} - \frac{\sin kR}{kR} - \frac{2 \cos kR}{(kR)^2} + \frac{2 \sin kR}{(kR)^3} \right] + \right. \\ \left. + 2R \frac{\partial}{\partial R} \tilde{v}(R) \left[ \frac{1}{3} + \frac{\cos kR}{(kR)^2} - \frac{\sin kR}{(kR)^3} \right] \right\}. \quad /27/$$

Результат численного расчета по формуле /27/ показан на рис. 3, где для сравнения приведены также результаты работ /11,19/ и экспериментальная кривая.

#### IV. Заключение

Изложенный выше подход позволяет найти Ф.О.С. жидкого гелия вариационным способом и вычислить дисперсионную зависимость  $\omega(k)$ , соответствующую минимуму энергии основного состояния. Полезно произвести сравнение полученных результатов с результатами работы /11/. В /11/ проводились расчеты  $\omega(k)$ , аналогичные проделанным в п. III, но усреднение по ансамблю модельных систем производилось с парной функцией  $g(r)$ , а параметр одночастичной волновой функции  $A$  находился из условия равенства скорости звука ее экспериментальному значению. Найденное таким образом значение  $A$  составляет  $1,30 \text{ \AA}^{-2}$ . Расчет по формуле /27/ с этим значением  $A$  и функцией  $g(r)$  приводит приблизительно к тем же результатам, что и расчет с Ф.О.С., найденное в п. II и функцией  $G(r)$ . Но в первом случае для значения  $A = 1,30 \text{ \AA}^{-2}$  кинетическая энергия системы  $E_k$  в 2 раза превышает  $E_k$  для значения  $A = 0,65 \text{ \AA}^{-2}$ , полученного в п. II и, следовательно, фононы в этом



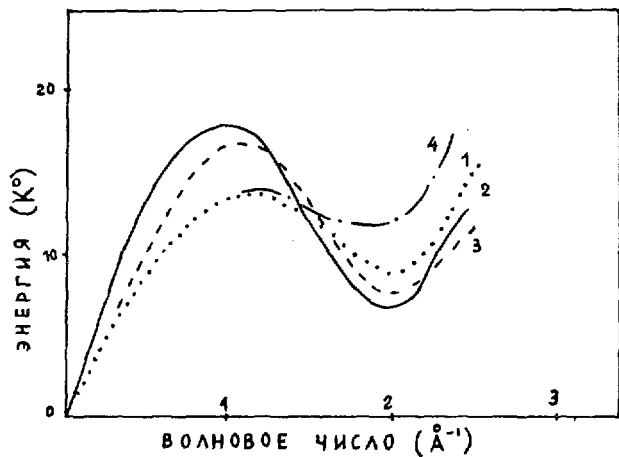


Рис. 3. Дисперсионные кривые: 1 - эксперимент, 3 - /111/, 4 - /119/, 2 - данная работа.

случае не являются возбуждениями основного состояния системы.

В<sup>111</sup> содержится утверждение, что КМ, оказывается неудовлетворительной для описания жидкого гелия при  $T < T_c$ , т.к. не даст особенности в температурном поведении ротонного минимума при  $T = T_c$ . Представленный здесь подход не позволяет получить ни свободную энергию системы, ни дисперсионную зависимость при  $T \neq 0$ . Но сравнение результатов работы<sup>111</sup> и настоящей работы при  $T = 0$  показывает, что прежде чем делать вывод о неприменимости модели при  $T < T_c$ , необходимо убедиться в выполнении условия минимума свободной энергии, т.к. только в этом случае фононы являются хорошо определенными возбуждениями системы.

В заключение мне хотелось бы поблагодарить Н.М.Плакиду и В.А.Загребнова за полезные обсуждения.

#### Литература

1. R.Jastrow. *Phys. Rev.*, 98, 1479, 1955.
2. A.Rahman. *Phys. Rev.*, 136, 1405, 1964.
3. D.Schief, L.Verlet. *Phys. Rev.*, 160, 208, 1967.
4. W.L.McMillan. *Phys. Rev.*, 138, A, 442, 1965.
5. P.Schofield. SM-104/135, *Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, 1968*.
6. В.Б.Презжев. *Препринт ОИЯИ, Р4-4502, Дубна, 1968*.
7. J.Hubbard, J.L.Beedy. *J.Phys.*, C2, 556, 1969.
8. В.М.Сысоев. *Письма в ЖЭТФ*, 14, 289, 1971.
9. В.Б.Приезжев. *Препринт ОИЯИ, Р4-5317, Дубна, 1970*.
10. S.Takeno, M.Goda. *Progr. of Theor. Phys.*, 47, No. 3, 790, 1972.
11. S.Takeno, M.Goda. *Progr. of Theor. Phys.*, 48, No. 3, 724, 1972.
12. R.A.Guger. *Solid State Physics*, v. 23, 413, 1969.
13. L.H.Nosanow. *Phys. Rev.*, 146, 120, 1966.
14. J.H.Hetherington, W.J.Mullin, L.H.Nosanow. *Phys. Rev.*, 154, 175, 1967.
15. W.J.Mullin, L.H.Nosanow. *Phys. Rev. Lett.*, 14, 133, 1965.
16. E.K.Achter, L.Mayer. *Phys. Rev.*, 188, 291, 1969.
17. N.S.Gilis, N.R.Werthamer. *Phys. Rev.*, 167, No 3, 607, 1968.
18. F.W. de Wette, L.H.Nosanow, N.R.Werthamer. *Phys. Rev.*, 162, 824, 1967.
19. R.P.Feynman, M.Cohen. *Phys. Rev.*, 102, 1189, 1956.

Рукопись поступила в издательский отдел  
30 мая 1973 года.