

К теории динамических свойств полуквантового гелия

В. В. Игнатюк, И. М. Мрыглод, М. В. Токарчук

*Институт физики конденсированных систем НАН Украины,
Украина, 290011, г. Львов, ул. Свенцицкого, 1
E-mail: ignat@icmp.lviv.ua*

Статья поступила в редакцию 8 декабря 1998 г.

На основании метода неравновесного статистического оператора предложена общая схема теоретического описания динамических свойств полуквантовых жидкостей. Получена система уравнений обобщенной гидродинамики и детально проанализирован частный случай термовязкой модели жидкости в гидродинамическом пределе. Обсуждаются также случаи промежуточных и больших значений волнового вектора. На основании марковского приближения для ядер переноса получена замкнутая система уравнений для временных корреляционных функций. Рассмотрение проводится в контексте взаимосвязи с экспериментами по рассеянию нейтронов, а также с известными теоретическими результатами.

На основі методу нерівноважного статистичного оператора запропоновано загальну схему теоретичного опису динамічних властивостей напівквантових рідин. Отримано систему рівнянь узагальненої гідродинаміки та детально проаналізовано частковий випадок термов'язкої моделі рідини в гідродинамічній границі. Обговорюються також випадки проміжних та великих значень хвильового вектора. На основі марківського наближення для ядер переносу отримано замкнуту систему рівнянь для часових кореляційних функцій. Розгляд проводиться в контексті взаємозв'язку з експериментами з розсіяння нейтронів та з відомими теоретичними результатами.

PACS: 05.70.Lh, 05.60.+w, 67.20.+k, 67.40.-w.

1. Введение

Жидкий гелий ^4He представляет классический пример квантовых жидкостей, привлекающих интерес экспериментаторов и теоретиков уже довольно продолжительное время [1–3]. Являясь по своей природе объектом, подчиняющимся статистике Бозе, жидкий ^4He вместе с целым рядом других бозе- и ферми-систем требует применения аппарата квантовой механики для описания термодинамических и неравновесных (динамических) свойств [3,4].

Известно, что любая квантовая система может характеризоваться заданием ряда эффективных температур, важных для понимания ее свойств. Одним из таких характерных параметров служит температура квантового вырождения $T_d = \hbar/\tau$, которая зависит от плотности числа частиц n и эффективной массы частицы m^* : $T_d \sim n^{2/3}/m^*$. Величина τ может рассматриваться как время квантовой делокализации частицы. Другой характерной температурой для квантовой системы, опи-

сывающей роль фононных процессов, является температура Дебая $T_D = \hbar\Omega_D$ [3]. Ее можно оценить посредством соотношения $T_D \sim cn^{1/3}$, где c — адиабатическая скорость звука.

Для квантовых систем обычно реализуется неравенство $T_d \ll T_D$. В зависимости от величины равновесной температуры T все квантовые жидкости (у которых температура плавления много меньше T_D) можно разделить на два основных класса:

а) жидкости, для которых $T < T_d$, поэтому квантовые эффекты в них являются определяющими;

б) жидкости (и газы), для которых $T_d < T \ll \ll T_D$.

Для описания кинетических процессов в жидкости а), согласно картине Френкеля [5], существенно то, что частота колебаний ω атомов около равновесных положений намного больше обратного времени τ^{-1} «перескока» частицы между двумя близлежащими состояниями. Таким образом, при-

менима феноменологическая модель системы частиц с достаточно большой частотой колебаний, находящихся у дна потенциальной ямы, которые через время τ переходят в ближайшее равновесное положение. В картине Френкеля переходы частиц жидкости в несимметричной потенциальной яме играют роль элементарных возбуждений. При условии $\omega\tau \gg 1$ эти возбуждения фоннного типа достаточно хорошо определены и должны давать вклад как в термодинамику, так и в динамику системы. Поскольку в жидкости не существует дальнего порядка и положения локального равновесия распределены нерегулярно, такие жидкости должны обладать рядом свойств, присущих низкотемпературным стеклам. Единственное отличие состоит в том, что в квантовом случае все барьеры проницаемы. Такая феноменологическая картина дала возможность Андрееву ввести в научный обиход понятие «полуквантовых» жидкостей и определить для них ряд термодинамических [6] и кинетических [7] свойств. В частности, получена линейная зависимость удельной теплоемкости от температуры в диапазоне, характерном для жидкостей класса б), что отличается от фоннного поведения $c_V(T) \sim T^3$, характерного для квантовых объектов типа а) (например, для вырожденного неидеального бозе-газа [8]). Что касается динамических свойств полуквантовых жидкостей, то здесь в области частот $\hbar\omega \ll T$ были найдены [7] следующие температурные зависимости для вязкости η и теплопроводности λ : $\eta \sim T^{-1}$, $\lambda \sim T$. В работе [9] изучалось также поглощение ультразвука в полуквантовых жидкостях. В предположении слабой зависимости плотности состояний от энергии возбуждения была произведена оценка частотной зависимости коэффициента поглощения.

Естественно при этом задаться вопросом: могут ли такие слабо дисперсионные возбуждения быть обнаружены в экспериментах по рассеянию, и в какой области волновых векторов k можно ожидать их проявления? В этом контексте следует упомянуть исследования, выполненные для двух термодинамических состояний ${}^4\text{He}$: $T = 4$ К, $p = 1$ бар и $T = 8$ К, $p = 18,7$ бар [10,11]. Предметом изучения в работах [10,11] был симметризованный динамический структурный фактор $S_{\text{sym}}(k, \omega)$. Более подробно на обсуждении результатов этих экспериментов мы остановимся в последующих разделах. Здесь же отметим, что в серии работ [10,11] на основании концепции обобщенных мод была построена полуфеноменологическая модель для описания экспериментальных данных в рамках формализма 2-х (модель

затухающего гармонического осциллятора) и 3-х переменных (гидродинамическая модель). В рамках указанных моделей неизвестные параметры для $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ играли роль подгоночных. Рассмотренные модели не позволяют в полной мере понять сущность динамических процессов, происходящих в системе, поэтому можно согласиться с утверждением работы [12] о том, что «спектр сильно затухающих фононов вполне может оказаться артефактом определенной подгонки».

Следующей работой, важной с точки зрения описания динамики полуквантовых систем, является работа [13], в которой наряду с экспериментальными данными для газообразного гелия при $T = 13,3$ К, $p = 203$ бар в области $3 \text{ нм}^{-1} \leq k \leq 11 \text{ нм}^{-1}$ приведены результаты расчетов, полученные в 5-и переменном формализме (термовязкая модель). Обобщенная динамическая матрица определялась как для промежуточных значений волнового вектора, так и в гидродинамическом пределе $k \rightarrow 0$, когда соответствующие недиссипативные элементы стремятся к своим термодинамическим значениям, а коэффициенты переноса можно рассматривать как экспериментальные. При этом показано, что в данном случае в отличие от классических жидкостей динамический структурный фактор имеет четко прослеживаемый боковой резонанс в промежуточной области волновых векторов. Однако странным выглядит утверждение работы [13] о чисто тепловой природе пропагаторного возбуждения, которое в пределе $k \rightarrow 0$ переходит в обычный звук.

Целью настоящей работы является исследование природы коллективных возбуждений в полуквантовом ${}^4\text{He}$, исходя из микроскопических предпосылок. Для этого использована концепция обобщенных коллективных мод, хорошо зарекомендовавшая себя при изучении плотных классических жидкостей [14–16]. Анализируя спектр простой леннард-джонсовской жидкости [17], можно предположить, что слабо дисперсионные возбуждения, наблюдаемые экспериментально в полуквантовом гелии, являются в действительности кинетическими пропагаторными модами, которые возникают вследствие взаимодействия вязких и тепловых процессов. В классической жидкости эти моды — сильно затухающие, однако их можно наблюдать в ряде случаев как в простых жидкостях [15,16], так и в бинарных смесях [18–20], где они порождают такое интересное явление, как «быстрый звук».

Работа имеет следующую структуру. В разд. 2 даны определения временных корреляционных функций и их взаимосвязь с экспериментально

наблюдаемыми величинами. В разд. 3 приведены уравнения для временных корреляционных функций, а также выражения для обобщенных термодинамических величин и ядер переноса через соответствующие микроскопические плотности и потоки. В разд. 4 произведен анализ спектра коллективных возбуждений в гидродинамическом пределе, рассмотрены некоторые проблемы, возникающие при исследовании промежуточной области волновых векторов и коротковолнового предела. В заключении обсуждаются полученные результаты.

2. Корреляционные функции и экспериментально наблюдаемые величины

Предметом исследования данной работы являются временные корреляционные функции (ВКФ) $\Phi_{AB}(k, t)$, которые определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_{AB}(k, t) &= (\hat{A}(k, t), \hat{B}(-k))_0 = \\ &= \int_0^1 dt \text{Sp}[\Delta \hat{A}(k, t) \rho_0^\tau \Delta \hat{B}(-k) \rho_0^{1-\tau}], \quad (1) \\ \Delta \hat{A}(k, t) &= \hat{A}(k, t) - \text{Sp}[\rho_0 \hat{A}(0, 0)], \end{aligned}$$

где ρ_0 — равновесный статистический оператор, а временная зависимость введена посредством представления Гейзенберга.

Функции $\Phi_{AB}(k, t)$ естественным образом появляются в методе неравновесного статистического оператора [21] и непосредственно связаны с корреляционными функциями Грина. Фурье-образ $\Phi_{nn}(k, \omega)$ функции $\Phi_{nn}(k, t)$, построенной на операторах плотности числа частиц \hat{n}_k ,

$$\Phi_{AB}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \Phi_{AB}(k, t), \quad A, B = n, \quad (2)$$

можно связать с экспериментально наблюдаемым динамическим структурным фактором

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \text{Sp}[\rho_0 \hat{n}_k(t) \hat{n}_{-k}] \quad (3)$$

посредством уравнения

$$\Phi_{nn}(k, \omega) \equiv S_{\text{sym}}(k, \omega) = \frac{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}{\beta\hbar\omega} S(k, \omega), \quad (4)$$

где $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ — симметризованный динамический структурный фактор [10,11], а $\beta = 1/k_B T$, где k_B — константа Больцмана. Отметим, что (4) непосредственно следует из определения ВКФ (1). В дальнейшем будем иметь дело только с симметричными ВКФ, определенными выражениями (1), (2).

Запишем также взаимосвязь между симметризованным статическим структурным фактором $S_{\text{sym}}(k)$ и $S_{\text{sym}}(k, \omega)$:

$$S_{\text{sym}}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S_{\text{sym}}(k, \omega). \quad (5)$$

Нетрудно показать, что в пределе $k \rightarrow 0$ именно для $S_{\text{sym}}(k)$ справедливо соотношение $S_{\text{sym}}(k \rightarrow 0) = k_B T \kappa_T$, известное в теории классических жидкостей, где κ_T — изотермическая сжимаемость системы.

3. Уравнения для временных корреляционных функций

Для описания термодинамических и динамических свойств полуквантового ^4He зададим набор базисных динамических переменных, в который включены как гидродинамическая плотность числа частиц \hat{n}_k , продольная составляющая импульса \hat{J}_k и обобщенная энтальпия \hat{h}_k ,

$$\hat{n}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \hat{a}_{p-k/2}^+ \hat{a}_{p+k/2}, \quad (6)$$

$$\hat{J}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{k^2} \hat{a}_{p-k/2}^+ \hat{a}_{p+k/2}, \quad (7)$$

$$\hat{h}_k = \hat{\varepsilon}_k - (\hat{\varepsilon}_k, \hat{n}_{-k})_0 (\hat{n}_k, \hat{n}_{-k})_0^{-1} \hat{n}_k, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{k^2}{8m} \right) \hat{a}_{p-k/2}^+ \hat{a}_{p+k/2} + \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_p \sum_q v(\mathbf{q}) \hat{a}_{p+(q-k)/2}^+ \hat{n}_q \hat{a}_{p-(q-k)/2} \end{aligned}$$

— плотность энергии, так и «кинетические» переменные, определенные выражениями

$$\hat{\pi}_k = (1 - \mathcal{P}_0) \hat{J}_k, \quad (9)$$

$$\hat{Q}_k = (1 - \mathcal{P}_0) \hat{h}_k. \quad (10)$$

В уравнениях (6)–(10), как обычно, \hat{a}_p^+ , \hat{a}_p — операторы рождения и уничтожения квазичастиц с импульсом \mathbf{p} , удовлетворяющие перестановочным соотношениям $[\hat{a}_p^+, \hat{a}_q] = \delta_{pq}$, $[\hat{a}_p, \hat{a}_q] = [\hat{a}_p^+, \hat{a}_q^+] = 0$; $v(q) = \int \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \Phi(|\mathbf{r}|) d\mathbf{r}$ — фурье-образ межчастичного потенциала взаимодействия $\Phi(|\mathbf{r}|)$; V — объем системы и N — число частиц. Величины $(\epsilon_{\mathbf{k}}, \hat{n}_{-\mathbf{k}})_0$, $(\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{n}_{-\mathbf{k}})_0$ в выражении (8) — равновесные (статические) квантовые корреляционные функции (СКФ), определенные следующим образом:

$$\Phi_{AB}(k) = (\hat{A}(\mathbf{k}), \hat{B}(-\mathbf{k}))_0 = \text{Sp} \left[\Delta \hat{A}(\mathbf{k}) \int_0^1 d\tau \rho_0^\tau \Delta \hat{B}(-\mathbf{k}) \rho_0^{1-\tau} \right]. \quad (11)$$

Операторы $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$, $\hat{Q}_{\mathbf{k}}$ связаны с микроскопическим тензором вязких напряжений и потоком энтальпии, спроектированными на пространство гидродинамических переменных $B(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{\mathbf{k}}\}$. В этом смысле $\hat{\pi}_{\mathbf{k}}$, $\hat{Q}_{\mathbf{k}}$, являясь быстрыми переменными, определяются как кинетические. В уравнениях (9), (10) \mathcal{P}_0 обозначает проекционный оператор Мори, построенный на гидродинамических переменных, и его действие определено как

$$\mathcal{P}_0 \hat{A} = \sum_{l=1}^3 \sum_{\mathbf{k}} (\hat{A}, \hat{B}_l(-\mathbf{k}))_0 (\hat{B}_l(\mathbf{k}), \hat{B}_l(-\mathbf{k}))_0^{-1} \hat{B}_l(\mathbf{k}). \quad (12)$$

Оператор Лиувилля $i\hat{L}$ определяется стандартным образом:

$$\dot{\hat{A}} \equiv i\hat{L}\hat{A} = \frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}], \quad (13)$$

где

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}} v(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{k}/2}^+ \hat{n}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{k}/2}. \quad (14)$$

Используя метод неравновесного статистического оператора [21], можно получить [22] систему уравнений для лаплас-образов ВКФ $\tilde{\Phi}_{AB}(k, z) =$

$$= \int_0^\infty \exp(-zt) \Phi_{AB}(k, t) dt \quad (z = i\omega + \epsilon, \epsilon = +0),$$

которую мы запишем в матричной форме

$$z\tilde{\Phi}(k, z) - i\Omega(k)\tilde{\Phi}(k, z) + \tilde{\varphi}(k, z)\tilde{\Phi}(k, z) = \tilde{\Phi}(k), \quad (15)$$

где использованы обозначения:

$$i\Omega_{ij}(k) = (i\hat{L}\hat{Y}_i(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0 (\hat{Y}_i(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0^{-1},$$

$$\hat{Y}_i(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{\mathbf{k}}, \hat{\pi}_{\mathbf{k}}, \hat{Q}_{\mathbf{k}}\} \quad (16)$$

— для элементов частотной матрицы $i\Omega(k)$ и

$$\tilde{\varphi}_{ij}(k, z) = \left((1 - \mathcal{P}) \dot{\hat{Y}}_i(\mathbf{k}), \frac{1}{z - (1 - \mathcal{P})i\hat{L}} (1 - \mathcal{P}) \dot{\hat{Y}}_j(-\mathbf{k}) \right) \times (\hat{Y}_i(\mathbf{k}), \hat{Y}_j(-\mathbf{k}))_0^{-1} \quad (17)$$

— для элементов матрицы функций памяти $\tilde{\varphi}(k, z)$. Проекционный оператор \mathcal{P} действует подобно (12), однако он определен на полном наборе базисных переменных $\{\hat{Y}_i(\mathbf{k})\}$, $i = 1, \dots, 5$. Легко показать, что ненулевыми элементами матрицы функций памяти являются только $\tilde{\varphi}_{\pi\pi}(k, z)$, $\tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, z)$, $\tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, z)$, и $\tilde{\varphi}_{QQ}(k, z)$, которые построены на кинетических переменных (9), (10). Систему уравнений (15) (или подобную систему уравнений переноса) можно решить относительно кинетических переменных и после подстановки полученных результатов в первые уравнения свести начальную проблему к 3-х переменному формализму. При этом обобщенные коэффициенты переноса, зависящие от модуля волнового вектора и частоты, будут выражаться через высшие функции памяти, построенные на кинетических коэффициентах переноса [23]. В свою очередь, элементы частотной матрицы для продольных флуктуаций можно записать через обобщенные термодинамические функции:

$$i\Omega_{Jn}(k) = \frac{ik}{n\kappa_T(k)}, \quad i\Omega_{nJ}(k) = \frac{ik}{m},$$

$$i\Omega_{Jh}(k) = \frac{ik}{nc_V(k)} \frac{\alpha(k)}{\kappa_T(k)}, \quad i\Omega_{hJ}(k) = \frac{ik}{mn\beta} \frac{\alpha(k)}{\kappa_T(k)}, \quad (18)$$

где использованы обозначения: $c_V(k) = 1/k_B T^2 \times (\hat{h}_{\mathbf{k}}, \hat{h}_{-\mathbf{k}})_0$ — для обобщенной удельной теплоемкости при постоянном объеме; $\alpha(k)$ — для обобщенного коэффициента температурного расширения и $\kappa_T(k)$ — для обобщенной сжимаемости.

Сделаем ряд замечаний относительно связи полученных результатов с результатами работы [11]:

— явная форма гидродинамической матрицы в работе [11] напрямую следует из уравнения (15) в марковском приближении;

— недиагональные элементы матрицы функций памяти $\tilde{\varphi}_{\pi Q}(k, z)$ и $\tilde{\varphi}_{Q\pi}(k, z)$, которые не учитывались в [11], являются весьма важными в про-

межуточной области k и ω . Это подтверждается расчетами, выполненными для леннард-джонсовской жидкости [14,15];

— переход от 5-и к 3-х или 2-х переменному описанию выполнен в работе [11] не совсем корректно. На самом деле, исключение «лишних» переменных приводит к возникновению пространственно-временной дисперсии коэффициентов переноса, что является важным при описании динамики системы для конечных k и ω [16,17].

4. Спектр коллективных возбуждений

Для замыкания цепочки уравнений (15) для ВКФ используем марковское приближение для функций памяти (17):

$$\tilde{T}(k) = \begin{bmatrix} 0 & -i\Omega_{nJ} & 0 & 0 & 0 \\ -i\Omega_{Jn} & 0 & -i\Omega_{Jh} & -i\Omega_{J\pi} & 0 \\ 0 & -i\Omega_{hJ} & 0 & 0 & -i\Omega_{hQ} \\ 0 & -i\Omega_{\pi J} & 0 & \tilde{\Phi}_{\pi\pi} & -i\Omega_{\pi Q} + \tilde{\Phi}_{\pi Q} \\ 0 & 0 & -i\Omega_{Qh} & -i\Omega_{Q\pi} + \tilde{\Phi}_{Q\pi} & \tilde{\Phi}_{QQ} \end{bmatrix}. \quad (21)$$

В марковском приближении решение системы уравнений для ВКФ можно записать в аналитическом виде через собственные значения z_α и собственные векторы $X_\alpha = \|X_{i\alpha}\|$ матрицы $\tilde{T}(k)$ [15,22], а именно:

$$\tilde{\Phi}_{il}(k, z) = \sum_{\alpha=1}^5 \frac{G_\alpha^{il}(k)}{z + z_\alpha(k)}, \quad (22)$$

где для амплитуд $G_\alpha^{il}(k)$ имеем

$$G_\alpha^{il}(k) = X_{i\alpha}(k)[X(k)^{-1}]_{l\alpha}\Phi_{il}(k, 0), \quad (23)$$

X^{-1} обозначает обратную матрицу к $X = \|X_{i\alpha}\|$. Во временном представлении имеем соответственно

$$\Phi_{ij}(k, t) = \sum_{\alpha=1}^5 G_\alpha^{ij}(k) \exp\{-z_\alpha(k)t\}, \quad (24)$$

так что ВКФ представляют собой сумму взвешенных экспонент, причем каждое слагаемое соответствует той или иной коллективной моде.

Проанализируем теперь спектр коллективных возбуждений при разных значениях волнового вектора.

4.1. Гидродинамическая область

В пределе $k \rightarrow 0$ имеем следующие коллективные возбуждения:

$$\tilde{\Phi}_{ij}(k, z) \approx \tilde{\Phi}_{ij}(k, 0) = \int_0^\infty \Phi_{ij}(k, t) dt. \quad (19)$$

При этом систему уравнений (15) можно представить в следующем виде:

$$z\tilde{\Phi}(k, z) + \tilde{T}(k)\tilde{\Phi}(k, z) = \Phi(k), \quad (20)$$

где обобщенная гидродинамическая матрица $\tilde{T}(k)$ имеет следующую структуру:

тепловую моду:

$$z_h(k) = D_T k^2 + o(k^4); \quad (25)$$

две комплексно сопряженные звуковые моды:

$$z_\pm(k) = \pm ick + \Gamma k^2 + o(k^3); \quad (26)$$

две исчезающие при $k=0$ кинетические моды:

$$z_\pi(k) = \Phi_{\pi\pi}(0,0) + o(k^2), \quad (27)$$

$$z_Q(k) = \Phi_{QQ}(0,0) + o(k^2). \quad (28)$$

В выражениях (25)–(28) использованы обозначения: D_T — коэффициент термодиффузии,

$$D_T = \frac{1}{mk_B T^2 c_p(0)} \frac{\tilde{\Phi}_{QQ}(0,0)}{\tilde{\Phi}_{QQ}(0,0)} = \frac{\lambda(0,0)}{m\tau c_p(0)}; \quad (29)$$

$c_p(0)$ — удельная теплоемкость при постоянном давлении (нуль в скобках обозначает термодинамический предел $c_p(k \rightarrow 0)$); $\lambda(0,0)$ — обобщенный коэффициент теплопроводности при $k=0$, $z=0$; $c = \gamma/mT\kappa_T$ — адиабатическая скорость звука, где $\gamma = c_p(0)/c_v(0)$;

$$\Gamma = \frac{1}{2}(\gamma - 1)D_T + \frac{1}{2}\eta^l \quad (30)$$

— коэффициент затухания звука, причем

$$\eta^{\parallel} = \frac{\tilde{\Phi}_{\pi\pi}(0,0)}{m\tilde{\Phi}(0,0)} = \left(\frac{4}{3} \eta(0,0) + \zeta(0,0) \right) / nm, \quad (31)$$

где $\eta(0,0)$ и $\zeta(0,0)$ обозначают сдвиговую и объемную вязкости.

Анализируя (25)–(28), легко видеть, что недиагональные элементы матрицы функций памяти не проявляются в пределе $k \rightarrow 0$ (можно показать, что они $\sim k$). Тем не менее, как это уже отмечалось выше, они могут быть существенными при анализе экспериментальных данных даже в области малых значений k . Например, выписав в явном виде выражение для динамического структурного фактора на нулевой частоте, нетрудно показать, что слагаемое $(-i\Omega_{Q\pi} + \tilde{\Phi}_{Q\pi})$ входит в $S_{\text{sym}}(k, 0)$ в том же порядке по k ($\sim k^0$), что и величина $\tilde{\Phi}_{\pi\pi}$. С другой стороны, тепловые процессы (связанные с учетом $\tilde{\Phi}_{QQ}$) в пределе малых значений волнового вектора являются доминирующими и дают вклад $\sim 1/k^2$ в функцию $S_{\text{sym}}(k, 0)$. Переходя к анализу экспериментальных данных, заметим, что только учет всех ненулевых элементов матрицы функций памяти $\tilde{T}(k)$ дает возможность адекватно описать поведение динамического структурного фактора в области малых значений k и ω .

На рис. 1 представлены экспериментальные данные для $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ при $k = 1-4 \text{ нм}^{-1}$, полученные в работе [11]. Видно, что при малых k ($k < 2 \text{ нм}^{-1}$) наблюдается чисто гидродинамическое поведение, типичное для классических жидкостей: $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ состоит из триплета Рэля–Бриллюэна, центральная линия которого характеризует флуктуации энтропии, а боковые пики связаны с процессами распространения звука. При $k >$

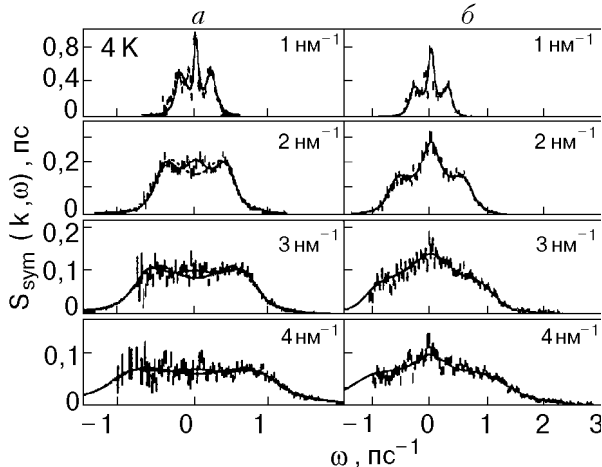


Рис. 1. Симметризованный динамический структурный фактор $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ для ${}^4\text{He}$ при $T = 4 \text{ К}$ (а) и $T = 8 \text{ К}$ (б) для $k = 1, 2, 3, 4 \text{ нм}^{-1}$. Эксперимент (вертикальные линии), результаты подгонки при 3-х переменном (сплошная линия) и 2-х переменном (штриховая линия) формализме (из работы [11]).

$> 3 \text{ нм}^{-1}$ центральная линия исчезает. Интересным представляется тот факт, что при $T = 8 \text{ К}$ исчезновение теплового пика происходит при более высоких значениях волнового вектора. При обеих температурах гелий остается невырожденным и нет бозе-конденсата. Отметим, однако, что на динамическом уровне система начинает чувствовать «приближение» к точке фазового перехода уже при этих температурах, что и наблюдается в поведении центрального пика. Размеры кластеров, соответствующих зарождающейся несимметричности, естественно, больше при $T = 4 \text{ К}$, поэтому при этой температуре переход от триплета Рэля–Бриллюэна к более сложной форме динамического структурного фактора происходит при меньших значениях k .

С другой стороны, при увеличении k форма динамического структурного фактора изменяется также вследствие влияния кинетических мод. В частности, известно, что в леннард-джонсовской жидкости результатом влияния кинетических процессов является возникновение, начиная с некоторого значения k^* , нового пропагаторного возбуждения со слабой дисперсией при больших k [17]. В зависимости от формы потенциала взаимодействия и рассматриваемой термодинамической точки эти возбуждения могут проявляться в динамическом структурном факторе в виде новых боковых пиков. В литературе такой эффект известен как «быстрый» звук [15]. Подобная картина наблюдается и в бинарных смесях [20]. При этом величина k^* , при которой происходит переход от двух релаксационных кинетических мод (27), (28) к паре кинетических пропагаторных мод, часто определяется как граница применимости гидродинамического описания.

С целью проверки предположения о влиянии пропагаторных кинетических возбуждений на поведение динамического структурного фактора в полуквантовом гелии нами были выполнены расчеты, результаты которых представлены на рис. 2. При этом мы исходили из выражений (20), (21) в пределе малых, но конечных значений k . На данном рисунке показаны вклады тепловой, звуковой и кинетических мод в $S_{\text{sym}}(k, \omega)$, которые можно определить на основании выражений (22), (23). Исходными данными для матрицы $\tilde{T}(k)$ служили термодинамические параметры, связанные с элементами частотной матрицы (18) в пределе малых k , а также коэффициенты переноса, взятые из работы [11]. Для определения трех неизвестных величин $\tilde{\Phi}_{\pi\pi}$, $\tilde{\Phi}_{QQ}$ и $-i\Omega_{\pi Q} + \tilde{\Phi}_{\pi Q}$ самосогласованно решалась система уравнений для трех экспериментальных точек при $k = 1 \text{ нм}^{-1}$, а именно

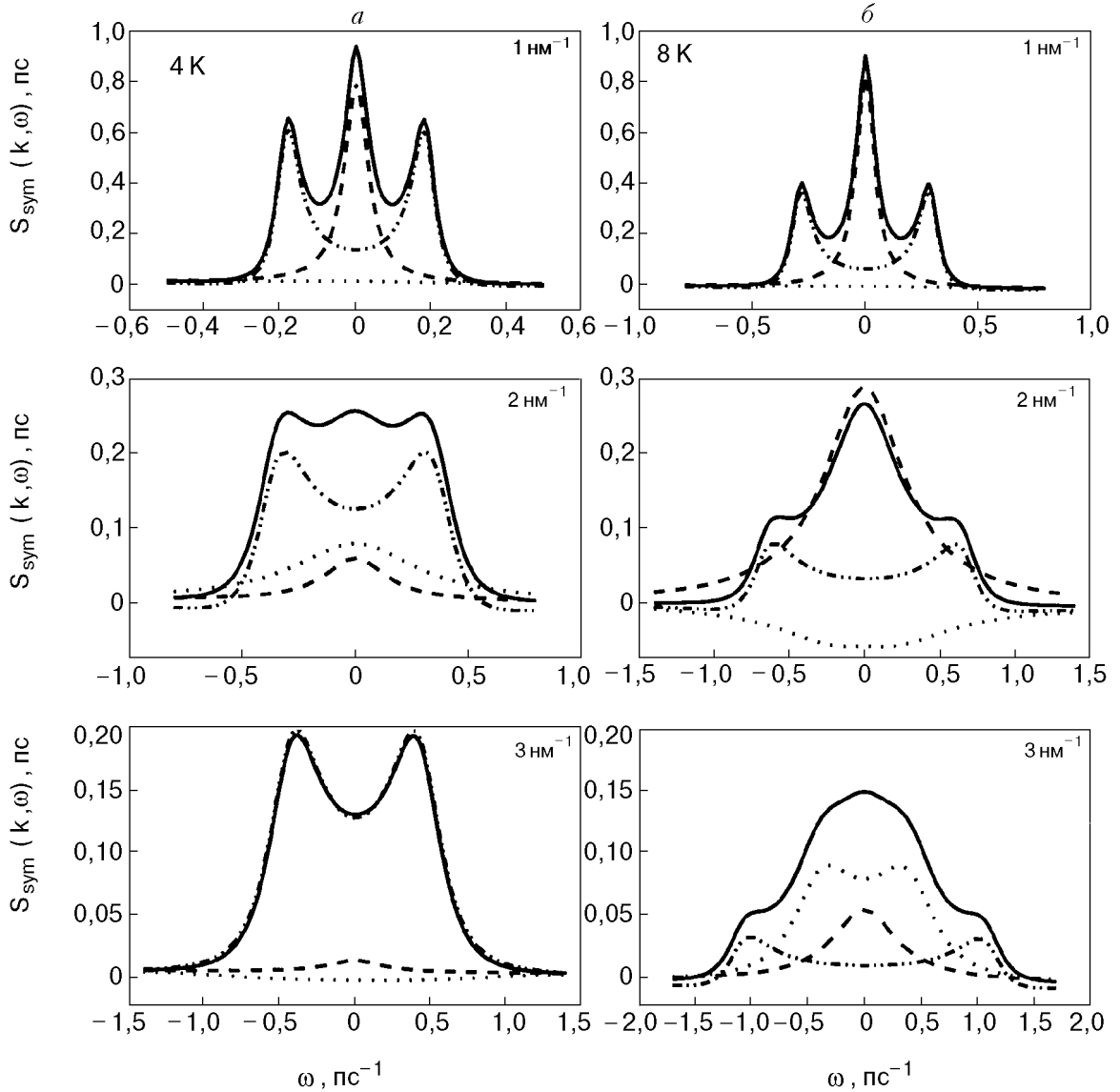


Рис. 2. Симметризованный динамический структурный фактор $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ для ${}^4\text{He}$ при $T = 4 \text{ K}$ (а) и $T = 8 \text{ K}$ (б) для $k = 1, 2$ и 3 nm^{-1} при 5-и переменном формализме (сплошная линия). Вклады в $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ тепловой моды (штриховая линия), звуковой моды (штрих-пунктир) и кинетических мод (точки).

— значений $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ при $\omega = 0$, а также в точках минимума и максимума $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ по ω . Далее, в предположении о квазигидродинамическом поведении $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ были получены результаты и для двух последующих значений волнового вектора $k = 2, 3 \text{ nm}^{-1}$.

На рис. 3 показаны дисперсии пропагаторных возбуждений при $T = 4$ и 8 K . Чтобы проанализировать природу коллективных возбуждений и их вклад в динамический структурный фактор, остановимся более подробно на обсуждении рис. 2 и 3.

Во-первых, из рис. 3 следует, что поведение пропагаторного кинетического возбуждения газообразного ${}^4\text{He}$ при $T = 8 \text{ K}$ имеет большее сходство с классическими жидкостями [15]. Хотя при

этой температуре пропагаторное кинетическое возбуждение появляется при меньшем значении k , его дисперсионная кривая лежит под звуковой. При $T = 4 \text{ K}$ уже при $k \sim 2,7 \text{ nm}^{-1}$ мы имеем типичное поведение типа «быстрый звук» — пропагаторная кинетическая мода пересекает дисперсионную кривую звукового возбуждения и при дальнейшем увеличении k находится значительно выше. С другой стороны, как это хорошо видно на рис. 2, для $T = 4 \text{ K}$ амплитуда этой моды стремительно падает при $k = 3 \text{ nm}^{-1}$. При $T = 8 \text{ K}$ ситуация абсолютно противоположна, вклад кинетической моды при $k = 3 \text{ nm}^{-1}$ становится определяющим в области малых ω .

Во-вторых, следует отметить характерное поведение тепловой моды, амплитуда которой при

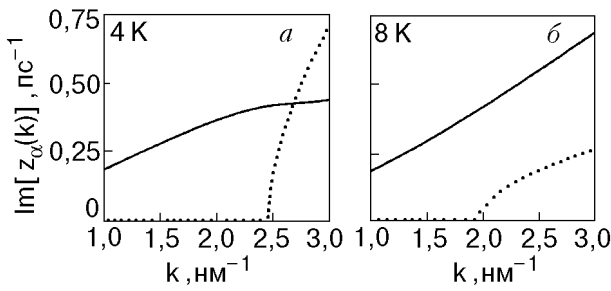


Рис. 3. Дисперсии пропагаторных возбуждений ${}^4\text{He}$ при $T = 4 \text{ K}$ (а) и $T = 8 \text{ K}$ (б): звуковая мода (сплошная линия) и кинетическая мода (точки).

$T = 4 \text{ K}$ резко падает по мере роста k , и уже при $k = 2 \text{ nm}^{-1}$ эта мода дает малый вклад в динамический структурный фактор, форма которого определяется главным образом звуковым возбуждением. Именно фактическое исчезновение тепловой моды и приводит к появлению «плато» на поведении динамического структурного фактора при $T = 4 \text{ K}$, что служит предвестником зарождающегося нарушения симметрии бозе-системы. При $T = 8 \text{ K}$ вклад теплового возбуждения прослеживается для всех значений волновых векторов и поведение $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ является более классическим.

Отметим, что процедура определения параметров $\tilde{\Phi}_{\pi\pi}$, $\tilde{\Phi}_{\pi Q}$ и $-i\Omega_{\pi Q} + \tilde{\Phi}_{\pi Q}$ довольно чувствительна к изменению значений динамического структурного фактора в реперных точках, однако в пределах точности эксперимента (см. рис. 1) наши расчеты дают хорошее совпадение с экспериментальными данными.

4.2. Промежуточные значения k

Для исследования динамического структурного фактора в промежуточной области необходимо знать зависимость от k всех элементов матрицы (21). При выполнении конкретных расчетов эти данные могут быть получены либо из компьютерного эксперимента [15–17], либо путем аппроксимации в рамках того или иного феноменологического подхода [13,24].

На рис. 4 приведены результаты эксперимента по рассеянию нейтронов, полученные для промежуточных значений волнового вектора [11]. Отметим следующие характерные особенности:

- по мере роста k видно исчезновение центральной линии при обеих температурах. Боковые пики связаны с сильно затухающей пропагаторной модой и образуют две широкие линии, которые практически сливаются при $k > 10 \text{ nm}^{-1}$;
- в области максимума статического структурного фактора $k = 20 \text{ nm}^{-1}$ наблюдается сужение де Жена, характерное для классических жидкостей;

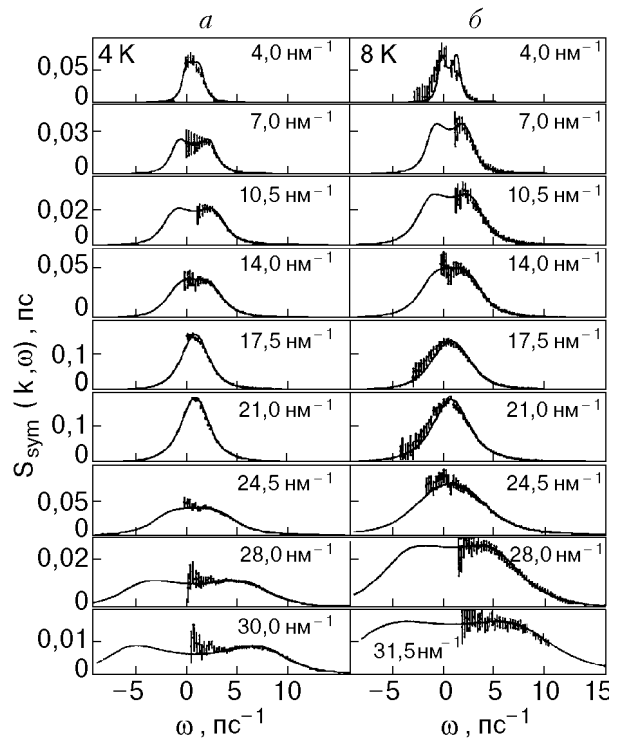


Рис. 4. Симметризованный динамический структурный фактор $S_{\text{sym}}(k, \omega)$ для ${}^4\text{He}$ при $T = 4 \text{ K}$ (а) и $T = 8 \text{ K}$ (б) для $k \geq 4 \text{ nm}^{-1}$. Эксперимент (вертикальные линии), результаты подгонки при 3-х переменном (сплошная линия) и 2-х переменном (штриховая линия) формализме (из работы [11]).

— при дальнейшем росте k боковые пики возникают снова, при этом их локализация слабо зависит от k . Таким образом, наблюдаются новые слабо дисперсионные пропагаторные возбуждения, которые в отличие от случая классических жидкостей хорошо разделены.

Несколько отличная картина наблюдалась в экспериментах по рассеянию при $T = 13,3 \text{ K}$ [13]. Здесь поведение динамического структурного фактора больше напоминает результаты для классических жидкостей. Особенно интересно поведение боковых пиков в области $k = 3\text{--}10 \text{ nm}^{-1}$, где имеются две пары комплексно сопряженных пропагаторных возбуждений, одна из которых связана с обобщенным звуком, а вторая — кинетическая пропагаторная мода. Авторы работы [13] попытались отождествить оба возбуждения с определенными физическими процессами. В частности, анализируя вклады от различных возбуждений в ВКФ «плотность–плотность», «импульс–импульс», «энергия–энергия», авторы пришли к выводу, что пропагаторную моду с большей частотой можно отождествить с тепловыми процессами. Хотя сама по себе такая интерпретация довольно интересна, странной, однако, представляется картина, в ко-

торой температурная волна переходит в обычную звуковую в гидродинамическом пределе.

4.3. Коротковолновый предел

В области больших значений k и ω эксперименты по рассеянию дают информацию о движении атомов на малых расстояниях и временных интервалах [25]. В этом случае длина волны налетающего нейтрона мала по сравнению с межатомным расстоянием, поэтому нейтрон эффективно взаимодействует лишь с одним атомом, рассеяние становится некогерентным и наблюдаются одночастичные эффекты. В жидком гелии некогерентный предел достигается при $k \geq 15 \text{ \AA}^{-1}$, хотя и при достаточно больших k сказывается влияние окружения атома. В работе [26] приведены выражения для несимметризованного динамического структурного фактора, полученные на основании куммулянтного разложения в (3). При этом учтены как эффекты влияния окружения (через моменты межчастичного потенциала взаимодействия), так и отклонение от максвелловского распределения частиц в пространстве импульсов. Вследствие появления отличных от нуля нечетных моментов чисто квантового происхождения резонанс $S(k, \omega)$ смещается на частоту свободной отдачи $\omega_r = \hbar k^2/2m$ частицы ${}^4\text{He}$. Отметим, что результаты коротковолнового рассеяния обычно используют для определения функции распределения $n(\mathbf{p})$ в пространстве импульсов [26].

К проблеме изучения динамики полуквантового ${}^4\text{He}$ можно подойти и с другой стороны — используя выражения (20), (21). В пределе $k \rightarrow \infty$ элементы матрицы $\tilde{T}(k)$ обретают свои асимптотические значения, для которых можно получить необходимые аналитические выражения. Из анализа, проведенного для простых жидкостей [14,15], известно, что в коротковолновом пределе все моды выходят на линейный режим: $z_\alpha \sim k$. Кроме того, в работе [27] показано, что в рамках концепции обобщенных коллективных мод существует взаимно однозначное соответствие между набором динамических переменных, включенных в рассмотрение, и первыми частотными моментами. В частности, для термовязкой модели, рассмотренной в этой работе, первые пять частотных моментов для динамического структурного фактора воспроизводятся правильно. Естественно, что в случае симметризованного динамического структурного фактора нечетные моменты равны нулю.

Заключение

В работе исследован спектр коллективных возбуждений полуквантового ${}^4\text{He}$. В рамках термовязкой модели получены результаты для дисперсии пропагаторных возбуждений, выражения для $S_{\text{sym}}(k, \omega)$, проанализированы вклады от всех коллективных мод. Как показали расчеты, при значениях волнового вектора $\sim 2\text{--}3 \text{ nm}^{-1}$ все еще применимо квазигидродинамическое описание, однако вклад кинетических возбуждений становится довольно заметным. Поведение вклада от тепловой моды наглядно показывает, что система начинает «чувствовать» приближение фазового перехода в сверхтекучее состояние уже в высокотемпературной фазе.

По мере роста k следует уже иметь информацию о пространственной дисперсии элементов матрицы $\tilde{T}(k)$ во всей области k . При исследовании классических жидкостей в работах [15,16,17,20] для этой цели использовались результаты компьютерного эксперимента. В квантовом случае такое рассмотрение становится более проблематичным, поскольку компьютерные методы для расчета СКФ высших порядков развиты не настолько хорошо. Важность исследований в области промежуточных и больших значений k обусловлена тем, что только таким образом можно получить надежную информацию о роли пропагаторных кинетических возбуждений и выделить физические процессы, которые при этом являются доминирующими.

Отметим, что в сверхтекучем гелии одночастичные и многочастичные резонансы, как правило, разделены, что хорошо наблюдается в эксперименте [1,25], причем зацепление между гидродинамическими и одночастичными переменными \hat{a}_k, \hat{a}_k^+ вследствие наличия бозе-конденсата происходит уже на уровне СКФ [1,8,25]. В случае полуквантового ${}^4\text{He}$ подобное зацепление также можно получить, однако лишь на диссипативном уровне, расцепляя функции памяти в рамках теории взаимодействующих мод [28]. При этом получим систему уравнений для ВКФ гидродинамических переменных вместе с уравнением для одночастичной неравновесной функции $(\hat{a}_k^+, \hat{a}_k)_z$.

Исследование упомянутых проблем планируется провести в последующих работах.

В. В. И. выражает признательность Президенту Украины за финансовую поддержку. Работа также финансировалась Fonds für Forderung der Wissenschaftlichen Forschung, Project P12423 TRN (И. М. М.)

1. A. Griffin, D. E. Snoke, and S. Stringari, *Bose-Einstein condensation*, Cambridge University Press, New-York, (1993).
2. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*. Ч. 2, Наука, Москва, (1978).
3. J. Wilks, *An Introduction to Liquid Helium*, Clarendon Press, Oxford, (1970).
4. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor and Francis, London, (1990).
5. Я. И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Академия Наук, Москва, (1945).
6. А. Ф. Андреев, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 603 (1978).
7. А. Ф. Андреев, Ю. А. Косевич, *ЖЭТФ* **77**, 2518 (1979).
8. Ю. А. Церковников, *ТМФ* **93**, 412 (1992).
9. Л. Л. Буишвили, А. И. Тугуши, *ЖЭТФ* **84**, 970 (1983).
10. R. M. Crevecoeur, R. Verberg, I. M. de Schepper, L. A. de Graaf, and W. Montfrooij, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 5052 (1995).
11. R. M. Crevecoeur, *Analogies in the Microscopic Behaviour of Superfluid and Classical Helium Studied by Neutron Scattering*, PhD thesis, Delft (1996).
12. A. Griffin, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1759 (1996).
13. W. Montfrooij, L. A. de Graaf, and I. M. de Schepper, *Phys. Rev.* **B45**, 3111 (1992).
14. I. P. Omelyan and I. M. Mryglod, *Cond. Matt. Phys. (Lviv)* **4**, 128 (1994).
15. I. M. Mryglod, I. P. Omelyan, and M. V. Tokarchuk, *Mol. Phys.* **84**, 235 (1995).
16. I. M. Mryglod and I. P. Omelyan, *Mol. Phys.* **90**, 91 (1997); *ibid* **92**, 913 (1997).
17. I. M. Mryglod and I. P. Omelyan, *Phys. Lett.* **A205**, 401 (1995).
18. J. Bosse, G. Jacucci, M. Ronchetti, and W. Schirmacher, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3277 (1986).
19. P. Westerhuijs, W. Montfrooij, L. A. de Graaf, and I. M. de Schepper, *Phys. Rev.* **A45**, 3749 (1992).
20. Т. М. Брык, I. М. Мрыглод, and G. Kahl, *Phys. Rev.* **E56**, 2903 (1997).
21. D. Zubarev, V. Morozov, and G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, Akademie Verlag, Berlin (1996).
22. V. V. Ignatyuk, I. M. Mryglod, and M. V. Tokarchuk, *On the Theory of Dynamic Properties for Semi-Quantum Fluids*, Preprint ICMP-98-08E, Lviv (1998).
23. I. M. Mryglod and A. M. Hachkevych, *Cond. Matt. Phys. (Lviv)* **5**, 105 (1995).
24. P. Goldstein and L. S. Garcia-Colin, *J. Chem. Phys.* **99**, 3913 (1993).
25. H. R. Glyde, *Excitations in Liquid and Solid Helium*, Clarendon Press, Oxford (1994).
26. K. H. Andersen, W. G. Stirling, and H. R. Glyde, *Phys. Rev.* **B56**, 8978 (1997).
27. I. М. Мрыглод, *УФЖ* **43**, 252 (1998).
28. V. G. Morozov, *Physica* **A110**, 201 (1982); *ibid* **117**, 511 (1983).

To the theory of dynamic properties of semi-quantum helium

V. V. Ignatyuk, I. M. Mryglod, and M. V. Tokarchuk

On the basis of nonequilibrium statistical operator method a general theoretical scheme is developed to describe the dynamic properties of semi-quantum fluids. A set of equations of the generalized hydrodynamics is derived and a particular case of the thermo-viscoelastic model of a fluid is analysed in more details considering the hydrodynamic limit. The cases of intermediate and large values of the wave vector are discussed. The Markovian approximation for transport kernels is used to deduce a closed set of equations for time correlation functions. The problem is considered in the context of relation with the neutron scattering experiment data and the theoretical results known in the literature.