УДК 538.9

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ КОНДЕНСАТА БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА И НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В. Б. Бобров[1,2], С. А. Тригер[1,3]

Представлен вывод нелинейного уравнения Шредингера для волновой функции основного состояния неоднородной системы бозонов в самосогласованном приближении Хартри–Фока без использования формализма аномальных средних. Полученные результаты соответствуют уравнению Гросса–Питаевского для волновой функции конденсата Бозе–Эйнштейна при использовании дельтаобразного потенциала взаимодействия бозонов.

Ключевые слова: конденсат Бозе–Эйнштейна, уравнение Гросса–Питаевского, нелинейное уравнение Шредингера.

Наблюдение конденсата Бозе–Эйнштейна (Bose-Einstein condensate – BEC) в ультрахолодных газах щелочных металлов осуществляется в магнитных ловушках, что обусловлено наличием магнитного момента у атомов щелочных металлов [1]. Наличие магнитных ловушек приводит к сильной неоднородности ультрахолодного газа, благодаря которой квантовые эффекты играют решающую роль на макроскопических масштабах [2]. Для описания неоднородного BEC широко применяется уравнение Гросса–Питаевского [3 ,4] для волновой функции конденсата в приближении среднего поля. Такое описание, как и теория Боголюбова для однородного газа с BEC [5], основано на использовании "аномальных" средних [2, 6]. Однако в настоящее время имеются обоснованные сомнения в справедливости гипотезы о существовании аномальных средних, строгое математическое доказательство которой отсутствует (см. [7–15] и цитированную там литературу). В настоящей работе мы покажем, что при рассмотрении слабонеидеальной неоднородной системы, состоящей из конечного числа бозонов, для получения

[1] Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Россия, Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

[2] Национальный исследовательский университет "МЭИ", 111250 Россия, Москва, Красноказарменная ул., д. 14.

[3] ИОФ РАН, 119991 Россия, Москва, ул. Вавилова, 38; e-mail: satron@mail.ru.

уравнения Гросса–Питаевского нет необходимости в использовании формализма аномальных средних.

Рассмотрим неоднородную систему, состоящую из N бозонов, находящихся в статическом внешнем поле с потенциалом $\nu^{(\text{ext})}(\mathbf{r})$, которое обеспечивает финитное движение в ограниченной области пространства. Гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования, обеспечивающем учет тождественности частиц, имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r})\Delta_r\hat{\Psi}(\mathbf{r})d^3r + \frac{1}{2}\int u(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2+ \qquad (1)$$

$$+\int \nu^{(\text{ext})}(\mathbf{r})\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})d^3r,$$

где $\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ – соответственно, полевые операторы рождения и уничтожения, удовлетворяющие коммутационным соотношениям для бозонов, $u(\mathbf{r})$ – парный потенциал взаимодействия бозонов с массой m. Для определенности далее будем считать, что рассматриваемые бозоны имеют нулевой спин. В представлении чисел заполнения полевые операторы могут быть записаны как $\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \varphi^*_\alpha(\mathbf{r})\hat{a}^{+}_\alpha$, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(\mathbf{r})\hat{a}_\alpha$. Здесь $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$ – полная система одночастичных волновых функций, характеризующихся некоторым набором квантовых чисел $\alpha, \hat{a}^{+}_\alpha$, и $\hat{a}_\alpha$ – соответственно, операторы рождения и уничтожения бозонов в состоянии, отвечающем одночастичной волновой функции $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$.

В этом случае система взаимодействующих частиц характеризуется волновой функцией $\tilde{\Phi}(N_0, N_1, ..., N_\alpha, ...; t)$ в представлении чисел заполнения в пространстве Фока [16], где $N_\alpha = 0, 1, 2, ...$ – число частиц в состоянии с набором квантовых чисел α.

Волновая функция $\tilde{\Phi}$ удовлетворяет уравнению Шредингера $i\hbar\partial\tilde{\Phi}/\partial t = \hat{H}\tilde{\Phi}$. Решение этого уравнения для рассматриваемой системы в статическом внешнем поле имеет вид $\tilde{\Phi} = \Phi\exp(iE_\Phi t/\hbar)$, где стационарная волновая функция Φ удовлетворяет уравнению $\hat{H}\Phi = E_\Phi\Phi$.

Далее мы ограничимся рассмотрением слабонеидеальной системы бозонов и используем самосогласованное приближение Хартри–Фока (SHF). В этом случае ожидаемое значение “нормального” произведения одинакового числа операторов рождения и уничтожения представляется в виде суммы всевозможных произведений ожидаемых значений пар операторов рождения и уничтожения в соответствии с теоремой Вика–Блоха–Доминикиса [17] в применении к квантовой механике, причем

$$\langle\Phi^{\text{SHF}}|\hat{a}^{+}_\alpha\hat{a}_\beta|\Phi^{\text{SHF}}\rangle = N_\alpha\delta_{\alpha,\beta},\ \sum_\alpha N_\alpha = N. \qquad (2)$$

С учетом сказанного выше, значение энергии E_Φ, отвечающее стационарной волновой функции Φ^{SHF} в самосогласованном приближении Хартри–Фока, имеет вид

$$E_\Phi^{\text{SHF}} = \langle\Phi^{\text{SHF}}|\hat{H}|\Phi^{\text{SHF}}\rangle = \sum_\alpha N_\alpha \int \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \nu^{(\text{ext})}(\mathbf{r})\right\} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) d^3r +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_\alpha N_\alpha(N_\alpha - 1)\int u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\varphi_\alpha(\mathbf{r}_2)|^2|\varphi_\alpha(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1 d^3r_2 + \quad (3)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_\alpha\sum_{\beta\neq\alpha} N_\alpha N_\beta \int u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\{|\varphi_\alpha(\mathbf{r}_2)|^2|\varphi_\beta(\mathbf{r}_1)|^2 + \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\varphi_\alpha(\mathbf{r}_2)\varphi_\beta^*(\mathbf{r}_2)\varphi_\beta(\mathbf{r}_1)\} d^3r_1 d^3r_2.$$

При этом состоянию с волновой функцией Φ^{SHF} при заданном числе частиц N (2) отвечает вполне определенный набор ненулевых значений чисел заполнения $\{N_\alpha\}$. Это означает, что, если соответствующий набор $\{N_\alpha\}$, удовлетворяющий условию (2), известен, энергия рассматриваемой системы E_Φ^{SHF} в заданном внешнем поле $\nu^{(\text{ext})}(\mathbf{r})$ является функционалом волновых функций $\varphi_\alpha(\mathbf{r}) : E_\Phi^{\text{SHF}} = E_\Phi^{\text{SHF}}[\varphi_\alpha]$.

Для определения энергии основного состояния E_0^{SHF} такой системы, казалось бы, можно применить неравенство

$$E_0^{\text{SHF}} \leq E_\Phi^{\text{SHF}}[\varphi_\alpha]. \quad (4)$$

Однако, для того чтобы использовать неравенство (4) в вариационной процедуре, принятой в квантовой механике (см., напр., [18]), нам необходимо установить набор ненулевых значений чисел заполнения $\{N_\alpha\}$, отвечающий основному состоянию рассматриваемой системы бозонов. Здесь проявляется принципиальное отличие системы бозонов от системы фермионов, для которой соответствующий набор чисел заполнения нетрудно установить, учитывая, что допустимыми значениями N_α для фермионов в силу принципа Паули являются 0 или 1. В результате для системы фермионов второе слагаемое в (3) обращается в нуль, в третьем слагаемом в фигурных скобках должен стоять знак минус, а все числа N_α равны 1 с учетом последнего равенства в (2) при рассмотрении основного состояния.

Таким образом, для установления минимального значения энергии E_0^{SHF} для системы бозонов, нам необходимо рассматривать энергию E_Φ^{SHF} не только как функционал волновых функций φ_α, но и как функцию от чисел заполнения N_α, т.е. $E_\Phi^{\text{SHF}} = E_\Phi^{\text{SHF}}([\varphi_\alpha], \{N_\alpha\})$ с учетом условия (2). Аналогичное утверждение имеет место и в отношении волновых функций $\varphi_\alpha = \varphi_\alpha(\mathbf{r}, \{N_\alpha\})$. Решение такой задачи в настоящее время не представляется возможным, поэтому далее мы будем исходить из "традиционного" допущения о том, что в слабонеидеальном газе бозонов основному состоянию соответствует нахождение всех частиц в одном и том же одночастичном состоянии (см., напр., [19]). Фактически предполагается, что учет взаимодействия между бозонами (два последних слагаемых в правой части (3)) не влияет на ситуацию, которая имеет место для невзаимодействующих бозонов (учет только первого слагаемого в правой части (3)). Это означает, что в основном состоянии рассматриваемой неоднородной системы бозонов

$$N_0 = N,\ N_{\alpha\neq 0} = 0, \tag{5}$$

где N_0 – число частиц в одночастичном состоянии с наименьшей энергией ϵ_0, которое характеризуется одночастичной волновой функцией $\varphi_0(\mathbf{r})$, удовлетворяющей нелинейному уравнению

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \nu^{(\mathrm{ext})}(\mathbf{r}) + (N-1)\int u(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})|\varphi_0(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1\right\}\varphi_0(\mathbf{r}) = \epsilon_0\varphi_0(\mathbf{r}) \tag{6}$$

и условию нормировки $\int|\varphi_0(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1$. Уравнение (6) непосредственно следует из неравенства (4), рассматриваемого как условие минимума функционала (3) с учетом (5).

В случае $N \gg 1$ мы можем заменить одночастичную волновую $\varphi_0(\mathbf{r})$ в (6) на так называемую волновую функцию BEC

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{N}\varphi_0(\mathbf{r}), \tag{7}$$

определяемую из нелинейного уравнения Шредингера

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \nu^{(\mathrm{ext})}(\mathbf{r}) + \int u(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})|\Phi_0(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1\right\}\Phi_0(\mathbf{r}) = \epsilon_0\Phi_0(\mathbf{r}),\ \int|\Phi_0(\mathbf{r})|^2 d^3r = N. \tag{8}$$

Введение в рассмотрение волновой функции BEC является формальным математическим приемом, который позволяет, всего лишь, исключить из уравнения Шредингера (6) число частиц N, перенеся учет величины N в условие нормировки (8). Прямой физический смысл имеет одночастичная волновая функция φ_0 (6), отвечающая основному состоянию частицы в самосогласованном поле остальных $(N-1)$ частиц.

Из (8) непосредственно следует, что

$$N\epsilon_0 = \int\Phi_0^*(\mathbf{r})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \nu^{(\mathrm{ext})}(\mathbf{r}) + \int u(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})|\Phi_0(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1\right\}\Phi_0(\mathbf{r})d^3r. \tag{9}$$

При этом энергия основного состояния системы бозонов согласно (3)–(7) равна

$$E_0^{\mathrm{SHF}} = N\epsilon_0 - \frac{1}{2}\int u(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)|\Phi_0(\mathbf{r}_2)|^2|\Phi_0(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1 d^3r_2, \tag{10}$$

т.е. энергия основного состояния E_0^{SHF} системы бозонов в рассматриваемом приближении не определяется только величиной $N\epsilon_0$ (9).

Далее, переходя к координатному представлению для волновой функции системы бозонов с учетом (5), мы можем обобщить определение (8) для нестационарной волновой функции BEC $\Phi_0(\mathbf{r},t)$, которая в рассматриваемом приближении удовлетворяет нестационарному нелинейному уравнению Шредингера

$$ih\frac{\partial\Phi_0(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \nu^{(\text{ext})}(\mathbf{r}) + \int u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})|\Phi_0(\mathbf{r}_1,t)|^2 d^3r_1\right\}\Phi_0(\mathbf{r},t). \qquad (11)$$

При использовании потенциала взаимодействия $u(\mathbf{r}) = u_0\delta(\mathbf{r})$ из (11) непосредственно следует уравнение Гросса–Питаевского [3, 4]. Однако, как следует из проведенного рассмотрения, это уравнение не описывает динамику всей системы бозонов (см., напр., (10)). Таким образом, представленные выше результаты свидетельствуют об отсутствии необходимости в использовании формализма аномальных средних при описании BEC.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14—19–01492).

Авторы благодарны А. Г. Загороднему, А. М. Игнатову, А. А. Рухадзе за полезные обсуждения работы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, et al., Science **269**, 198 (1995).
[2] Л. П. Питаевский, УФН **168**, 641 (1998).
[3] E. P. Gross, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961).
[4] Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **40**, 646 (1961).
[5] Н. Н. Боголюбов, Известия АН СССР, сер. физ. **11**, 77 (1947).
[6] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
[7] W. H. Bassichis and L. L. Foldy, Phys. Rev. **A133**, 435 (1964).
[8] H. Stolz, Physica **A86**, 11 (1977).
[9] C.-H. Zhang and H. A. Fertig, Phys. Rev. **A74**, 023613 (2006).
[10] P. Navez and K. Bongs, EPL **88**, 60008 (2009).
[11] V. B. Bobrov, S. A. Trigger, and I. M. Yurin, Phys. Lett. **A374**, 1938 (2010).
[12] A. M. Ettouhami, Progr. Theor. Phys. **127**, 453 (2012).
[13] В. Б. Бобров, С. А. Тригер, Краткие сообщения по физике ФИАН **42**(12), 58 (2014).

[14] В. Б. Бобров, А. Г. Загородний, С. А. Тригер, ДАН **461**, 400 (2015).

[15] В. Б. Бобров, А. Г. Загородний, С. А. Тригер, Физика низких температур **41**, 1154 (2015).

[16] V. A. Fock, Zs. Phys. **75**, 622 (1932).

[17] C. Bloch and C. de Dominicis, Nucl. Phys. **7**, 459 (1958).

[18] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1974).

[19] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика.* Часть 2 (М., Наука,1978).

Поступила в редакцию 28 марта 2016 г.