УДК 538.9

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ВЫРОЖДЕННОГО БОЗЕ-ГАЗА С ДЕЛЬТАОБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В. Б. Бобров[1,2] А. Г. Загородний[3], С. А. Тригер[1,4]

В рамках самосогласованного приближения Хартри–Фока проведено рассмотрение равновесного слабонеидеального бозе-газа с дельтаобразным потенциалом взаимодействия при наличии конденсата Бозе–Эйнштейна без использования квазисредних. На этой основе с использованием теоремы вириала и методов диаграммной техники теории возмущений для равновесной системы, находящейся в макроскопическом объеме, получено уравнение состояния, обеспечивающее конечность изотермической сжимаемости, включая область существования конденсата Бозе–Эйнштейна.

Ключевые слова: конденсат Бозе–Эйнштейна, самосогласованное приближение Хартри–Фока, вырожденный бозе-газ.

Экспериментальное наблюдение конденсата Бозе–Эйнштейна (КБЭ) в ультрахолодных газах щелочных металлов [1] послужило мощным толчком для развития теоретических исследований слабонеидеальных бозе-систем (см. [2] и цитированную там литературу). При этом подавляющее число работ, посвященных исследованию систем с КБЭ, основано на использовании гипотезы Боголюбова [3] о C-числовом поведении операторов рождения и уничтожения частиц с нулевым импульсом, что приводит к появлению так называемых “квазисредних” в статистической теории (см., напр., [4]).

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

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

[3] Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, 03680 Украина, Киев, ул. Метрологическая, д. 14-б.

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

Однако гипотеза Боголюбова не может быть доказана строго математически, что вызывает серьезные сомнения в возможности использования формализма квазисредних для описания систем многих частиц с КБЭ (см. [5–9] и цитированную там литературу). Альтернативный вариант при рассмотрении равновесных свойств таких систем основан на использовании стандартной диаграммной техники теории возмущений для равновесной системы, находящейся в большом, но конечном объеме [10]. Для перехода к термодинамическому пределу необходимо учесть, как это имеет место в идеальном бозе-газе, макроскопическое число частиц в состоянии с нулевым импульсом, что соответствует наличию КБЭ. Но при использовании стандартной диаграммной техники возникает существенная трудность, обусловленная аномальными свойствами идеального бозе-газа, в частности, бесконечным значением его изотермической сжимаемости при температурах ниже температуры перехода в состояние с КБЭ. Это означает, что нельзя использовать модель идеального бозе-газа в качестве исходного, нулевого приближения. Именно этим обстоятельством обусловлено само появление гипотезы Боголюбова [3] для неидеального бозе-газа. Другими словами, для рассмотрения системы с КБЭ необходимо изначально учитывать межчастичное взаимодействие, что отвечает применению общих функциональных методов квантовой теории поля для функций Грина (см., напр., [11]). При этом соответствующее рассмотрение необходимо проводить для системы, находящейся в очень большом, но конечном объеме с последующим переходом к термодинамическому пределу с учетом КБЭ. По этой причине мы будем использовать подход, предложенный в [12] для вычисления "высших" функций Грина через так называемые "регулярные" части этих функций и соответствующие средние более низкого порядка, что позволяет составить систему зацепляющихся интегральных уравнений по отношению к "регулярным" частям функций Грина. Для учета КБЭ в равновесной системе бозонов с нулевым спином, находящихся в макроскопическом объеме V при температуре T, необходимо вычислить одночастичную функцию распределения (ОФР) $f_V(\mathbf{p})$ по импульсам $\hbar\mathbf{p}$. С этой целью используем связь ОФР со спектральной функцией $A_V(\mathbf{p},\omega)$, которая однозначно определяет одночастичную функцию Грина [11],

$$f_V(\mathbf{p}) \equiv \langle \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle_V = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_V(\mathbf{p},\omega)}{\exp\{(\hbar\omega - \mu_V)/T\} - 1}. \qquad (1)$$

Здесь $\hat{a}^+_{\mathbf{p}}$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ – операторы рождения и уничтожения частиц с импульсом $\hbar\mathbf{p}$, соответственно, а угловые скобки обозначают усреднение с большим каноническим распределением Гиббса и химическим потенциалом μ_V. Для спектральной функции $A_V(\mathbf{p},\omega)$

выполняются точные соотношения, называемые правилами сумм (см., напр., [13])

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_V(\mathbf{p},\omega) = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega A_V(\mathbf{p},\omega) = E_V(\mathbf{p}), \tag{2}$$

$$E_V(\mathbf{p}) = \varepsilon_p + v(0)\bar{n} + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) f_V(\mathbf{q}+\mathbf{p}), \tag{3}$$

где $\varepsilon_p = \hbar^2 p^2/2m$ – энергетический спектр свободной частицы массы $m, v(\mathbf{q}) = \int\limits_V d^3r \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})U(\mathbf{r})$ – фурье-образ для парного потенциала межчастичного взаимодействия $U(\mathbf{r}), \bar{n}(T,\mu_V) = V^{-1}\sum_{\mathbf{p}} f_V(\mathbf{p})$ – средняя плотность числа частиц в рассматриваемой системе.

При реализации подхода [12] в качестве исходного приближения выступает самосогласованное приближение Хартри–Фока (СПХФ), в рамках которого спектральная функция равна [11]

$$A_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p},\omega) = 2\pi\hbar\delta\left(\hbar\omega - E_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p})\right). \tag{4}$$

Подставляя (4) в (1)–(3), нетрудно убедиться, что ОФР $f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p})$ в СПХФ удовлетворяет системе уравнений

$$f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp\{(E_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p}) - \mu_V)/T\} - 1}, \quad \bar{n}_{\mathrm{SHF}} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p}), \tag{5}$$

$$E_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p}) = \varepsilon_p + v(0)\bar{n}_{\mathrm{SHF}} + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{q}+\mathbf{p}). \tag{6}$$

Очевидно, что система уравнений (5), (6) не может быть решена при произвольном виде фурье-образа потенциала межчастичного взаимодействия $v(\mathbf{q})$. Исключение составляет случай дельтаобразного потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r}) = v_0\delta(\mathbf{r})(v_0 > 0)$, который широко используется в теории квантовых газов [3, 4]. В этом случае из (5), (6) непосредственно следует

$$f_V^{v_0}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp\{(\varepsilon_p - \mu_V^{id})/T\} - 1}, \quad \bar{n}_{v_0} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} f_V^{v_0}(\mathbf{p}), \tag{7}$$

$$\mu_V^{id} = \mu_V - 2v_0\bar{n}_{v_0}(T,\mu_V). \tag{8}$$

Другими словами, ОФР $f_V^{v_0}(\mathbf{p})$ для бозе-газа с дельтаобразным потенциалом в СПХФ соответствует ОФР идеального газа с точностью до замены химического потенциала μ_V

на химический потенциал μ_V^{id} для идеального газа бозонов (8). В этой связи отметим, что модель системы частиц, взаимодействующих между собой посредством дельтаобразного потенциала, отвечает идеальному газу точечных частиц, упруго сталкивающихся друг с другом. В этом случае переход к термодинамическому пределу $\langle\hat{N}\rangle \to \infty$, $V \to \infty$, $\bar{n} = \langle\hat{N}\rangle/V = \mathrm{const}$, где $\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}^+_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}$ – оператор полного числа частиц в системе, которая занимает объем V и характеризуется заданной средней плотностью числа частиц $\bar{n}$, осуществляется аналогично процедуре, имеющей место в идеальном газе бозонов (см., напр., [14]). В результате при температурах $T < T_{\mathrm{BEC}}$, где $T_{\mathrm{BEC}} = 2\pi\hbar^2\bar{n}^{2/3}/\zeta(3/2)m$ – температура перехода в состояние с КБЭ, ОФР $f_V^{v_0}(\mathbf{p})$ имеет вид после перехода к термодинамическому пределу

$$f_{v_0}(\mathbf{p}) = \lim_{V\to\infty} f_V^{v_0}(\mathbf{p}) = \langle\hat{a}_0^+\hat{a}_0\rangle\delta_{\mathbf{p},,0} + f_{\mathrm{over}}(p)(1-\delta_{\mathbf{p},,0}), \tag{9}$$

а плотность числа частиц в рассматриваемой системе равна

$$\bar{n} = \bar{n}_{\mathrm{BEC}} + \bar{n}_{\mathrm{over}},\ \bar{n}_{\mathrm{BEC}} = \lim_{V\to\infty}\langle\hat{a}_0^+\hat{a}_0\rangle/V = \bar{n}\{1-(T/T_{\mathrm{BEC}})^{3/2}\}, \tag{10}$$

$$\bar{n}_{\mathrm{over}} = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}\neq 0} f_V^{v_0}(\mathbf{p}) = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}f_{\mathrm{over}}(p) = \bar{n}\left(\frac{T}{T_{\mathrm{BEC}}}\right)^{3/2}. \tag{11}$$

Здесь $\bar{n}_{\mathrm{BEC}}$ – плотность числа частиц в КБЭ, $\bar{n}_{\mathrm{over}}$ – плотность числа частиц в так называемых “надконденсатных” состояниях (в состояниях с ненулевым импульсом), $\zeta(x)$ – ζ-функция Римана, $f_{\mathrm{over}}(p) = \{\exp(\varepsilon_p/T) - 1\}^{-1}$. При этом $\mu_{id} = \lim_{V\to\infty}\mu_V^{id} = 0$, так что согласно (8) при температурах $T < T_{\mathrm{BEC}}$ химический потенциал рассматриваемой системы равен $\mu = \lim_{V\to\infty}\mu_V = 2v_0\bar{n}_{v_0}(T,\mu)$. Следовательно,

$$(\partial\bar{n}_{v_0}(T,\mu)/\partial\mu)_T = (2v_0)^{-1}. \tag{12}$$

Чтобы убедиться в справедливости равенства (12), рассмотрим термодинамический потенциал Гиббса $\Omega(T,\mu_V,V)$ для системы в макроскопическом объеме V. Согласно результатам статистической термодинамики $\Omega(T,\mu_V,V) = -P(T,\mu_V)V$, где $P(T,\mu_V)$ – давление в рассматриваемой системе [14]. С другой стороны, согласно теореме вириала [15] для системы с дельтаобразным потенциалом взаимодействия имеем

$$P(T,\mu_V)V = 2\langle\hat{K}\rangle_V/3 + \langle\hat{U}\rangle_V, \tag{13}$$

где $\langle\hat{K}\rangle_V$ и $\langle\hat{U}\rangle_V$ – точные средние значения кинетической и потенциальной энергии, соответственно. Учитывая точные выражения [11], получим

$$\langle\hat{K}\rangle_V = \sum_{\mathbf{p}}\varepsilon_p f_V^{v_0}(\mathbf{p}),\ \langle\hat{U}\rangle_V = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{p}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{2\omega}{2\pi}\frac{(\hbar\omega-\varepsilon_p)A_V(\mathbf{p},\omega)}{\exp\{(\hbar\omega-\mu_V)/T\}-1}. \tag{14}$$

Теперь, учитывая (4)–(6), находим давление для системы бозонов, находящейся в макроскопическом объеме V, в рамках СПХФ

$$P^{\mathrm{SHF}}(T,\mu_V) = \frac{1}{2}v(0)(\bar{n}_{\mathrm{SHF}})^2 + \tag{15}$$

$$+\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}}\left\{\varepsilon_p + \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{q}+\mathbf{p})\right\} f_V^{\mathrm{SHF}}(\mathbf{p}).$$

Из (15) согласно (7)–(11) непосредственно следует, что в термодинамическом пределе давление для бозе-газа с дельтаобразным потенциалом взаимодействия при температурах $T < T_{\mathrm{BEC}}$ равно

$$P_{v_0}(T,\mu) = \lim_{V\to\infty} P_{v_0}(T,\mu_V) = P_{id}(t) + v_0(\bar{n}_{v_0})^2, \tag{16}$$

где $P_{id}(T) = \zeta(5/2)(mT/2\pi\hbar^2)^{3/2}T$ – давление идеального бозе-газа [14]. Сравнивая соотношения (12) и (16), нетрудно убедиться в справедливости общего термодинамического равенства [15]

$$n^{-1}(\partial P/\partial n)_T = \{(\partial n/\partial \mu)_T\}^{-1}, \tag{17}$$

что подтверждает результаты проведенного рассмотрения для вырожденного бозе-газа при наличии КБЭ.

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

Л И Т Е Р А Т У Р А

[1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, et al., Science **269**, 198 (1995).

[2] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases.* 2-nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).

[3] Н. Н. Боголюбов, Известия АН СССР, сер. физ. **11**, 77 (1947).

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

[5] V. B. Bobrov, P. P. J. M. Schram, and S. A. Trigger, Physica **A208**, 493 (1994).

[6] C.-H. Zhang and H. A. Fertig, Phys. Rev. **A74**, 023613 (2006).

[7] P. Navez and K. Bongs, Europhys. Lett. **88**, 60008 (2009).

[8] A. M. Ettouhami, Progr. Theor. Phys. **127**, 453 (2012).

[9] В. Б. Бобров, А. Г. Загородний, С. А. Тригер, ФНТ **41**, 1154 (2015).

[10] В. Б. Бобров, С. А. Тригер, П. Шрам, ЖЭТФ **107**, 1526 (1995).

[11] L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).

[12] В. Д. Озрин, ТМФ **4**, 66 (1970).

[13] О. К. Калашников, Е. С. Фрадкин, ТМФ **5**, 417 (1970).

[14] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Wiley, New York, 1975).

[15] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (М., Наука, 1971).

Поступила в редакцию 16 мая 2016 г.