УДК 538.9

О СВОЙСТВАХ СИСТЕМ С КОНДЕНСАТОМ БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА В КУЛОНОВСКОЙ МОДЕЛИ ВЕЩЕСТВА

В. Б. Бобров[1,2], С. А. Тригер[1,3]

Представлено альтернативное описание равновесной системы взаимодействующих бозонов при наличии конденсата Бозе–Эйнштейна, основанное на первоначальном рассмотрении системы в очень большом, но конечном объеме. С использованием точных правил сумм для спектральной функции показано наличие разрыва в энергетическом спектре квазичастиц при малых импульсах, связанного с наличием конденсата и кулоновского взаимодействия. Установлена возможность существования эффекта Мейснера в сверхтекучем гелии как кулоновской системе с конденсатом Бозе–Эйнштейна для ядер.

Ключевые слова: конденсат Бозе–Эйнштейна, кулоновская модель вещества, спектральная функция, эффект Мейснера.

Общее утверждение о конденсате Бозе–Эйнштейна (Bose–Einstein condensate (BEC)) в системе взаимодействующих бозонов, которое было впервые предложено Пенроузом и Онзагером [1, 2], связано с аномальным пространственным поведением одночастичной матрицы плотности и получило название недиагонального дальнего порядка (off-diagonal long-range order (ODLRO)) [3]. В формализме вторичного квантования одночастичная матрица плотности равна $\gamma(\mathbf{r},\mathbf{r}') \equiv \langle \hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r}')\rangle$, где $\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ – соответственно полевые операторы рождения и уничтожения для рассматриваемой системы исходных бозе-частиц, угловые скобки означают усреднение с большим каноническим распределением Гиббса. Для однородной и изотропной системы, в которой одночастичная матрица плотности имеет вид $\gamma(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \gamma(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ существование ODLRO означает

[1] Объединенный институт высоких температур РАН.

[2] Национальный исследовательский университет "МЭИ".

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

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\to\infty}\gamma(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = n_0 \neq 0, \tag{1}$$

где n_0 – средняя плотность числа частиц в BEC. Для нормальной жидкости $n_0 = 0$.

При этом необходимо учитывать, что состояние термодинамического равновесия соответствует так называемому термодинамическому пределу $\langle\hat{N}\rangle \to \infty$, $V \to \infty$, $\bar{n} = \langle\hat{N}\rangle/V = \mathrm{const}$, где $\langle\hat{N}\rangle$ – среднее полное число частиц в рассматриваемой системе, которая занимает объем V и характеризуется заданной средней плотностью числа частиц $\bar{n}$, $\hat{N}$ – оператор полного числа частиц [4]. Это означает, что при вычислении средних величин необходимо первоначально рассматривать исходную систему в очень большом, но конечном объеме V, а затем осуществлять термодинамический предельный переход (см., напр., [5]). Соответствующая процедура подразумевает представление полевых операторов рождения $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$ и уничтожения $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ в виде

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{\mathbf{p}}\exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}),\quad \hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}), \tag{2}$$

где $\hat{a}^+_{\mathbf{p}}$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ – соответственно, операторы рождения и уничтожения частиц с импульсом $\hbar\mathbf{p}$. Здесь и далее спиновые индексы опущены. Следовательно, мы можем представить одночастичную матрицу плотности для однородной системы в виде ряда Фурье

$$\gamma(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} f_V(\mathbf{p})\exp(i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})), \tag{3}$$

где $f_V(\mathbf{p})$ – среднее число заполнения частиц в состоянии с импульсом $\hbar\mathbf{p}$ (или одночастичная функция распределения по импульсам), индекс V означает, что соответствующая функция отвечает системе в очень большом (макроскопическом), но конечном объеме V. Для перехода к термодинамическому пределу представим соотношение (3) в виде

$$\gamma(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{f_V(\mathbf{p}=0)}{V} + \frac{1}{V}\sum_{p=0} f_V(\mathbf{p})\exp(i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})). \tag{4}$$

В результате переход к термодинамическому пределу в соотношении (3) связан с заменой

$$f_V(\mathbf{p}) = \langle\hat{N}_0\rangle\delta_{\mathbf{p},0} + f^T(p)(1-\delta_{\mathbf{p},0}), \tag{5}$$

где $f^T(p)$ – одночастичная функция распределения для “надконденсатных” частиц, т.е. частиц с $\mathbf{p} \neq 0$. Таким образом, средняя плотность числа частиц в BEC равна

$$n_0 = f_V(\mathbf{p}=0)/V. \tag{6}$$

Это означает, что среднее число заполнения частиц $\langle \hat{N}_0 \rangle$ с нулевым импульсом $\mathbf{p} = 0$ является макроскопическим $\langle \hat{N}_0 \rangle \equiv \langle \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \rangle = n_0 V$, что и является определением BEC. Таким образом, при исследовании равновесной системы с BEC необходимо сначала рассматривать исходную систему бозонов в очень большом, но конечном объеме V, и только после выделения сингулярных членов, соответствующих макроскопическому числу частиц в BEC, переходить к термодинамическому пределу.

Для этого, как показано в [6], можно использовать стандартные методы квантовой теории поля, применяемые для нормальных систем, но для конечного объема. Это означает, что при переходе в диаграммной технике теории возмущений от координатного представления к импульсному представлению необходимо использовать не интегральное преобразование Фурье (см., напр., [7]), а преобразование в виде ряда Фурье (см. (3)).

В этой связи отметим, что реализация подхода, основанного на рассмотрении системы в конечном макроскопическом объеме, вплоть до температуры перехода T_{BEC} в состояние с BEC, не вызывает трудностей. Согласно методам квантовой теории поля [7] термодинамические функции системы бозонов, находящейся в объеме V при температуре T, полностью определяются одночастичной температурной функцией Грина $G_V(\mathbf{p}, i\omega_n)$, заданной для дискретных мнимых частот $i\omega_n$, $\omega_n = 2\pi nT$ (n полагается равным 1), n – целое число, включая нуль. По известной функции Грина $G_V(\mathbf{p}, \omega_n)$ может быть определена функция распределения $f_V(\mathbf{p})$ с помощью соотношения [7]

$$f_V(\mathbf{p}) = \lim_{\tau \to +0} \sum_n G_V(\mathbf{p}, i\omega_n) \exp(i\omega_n \tau). \tag{7}$$

В свою очередь, вычисление функции Грина в подавляющем большинстве случаев основано на использовании уравнения Дайсона

$$G_V(\mathbf{p}, i\omega_n) = G_V^{(0)}(\mathbf{p}, i\omega_n) + G_V^{(0)}(\mathbf{p}, i\omega_n) \Sigma_V(\mathbf{p}, i\omega_n) G_V(\mathbf{p}, i\omega_n), \tag{8}$$

где $G_V^{(0)}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu_V)\}^{-1}$ – одночастичная функция Грина для идеального газа бозонов, $\epsilon_{\mathbf{p}} = \hbar^2 p^2/2m$, m – масса частицы, $\sum_V(\mathbf{p}, i\omega_n)$ – собственно энергетическая функция, включающая все эффекты межчастичного взаимодействия, μ_V – химический потенциал в макроскопическом объеме V, который определяет химический потенциал системы μ в термодинамическом пределе $\mu = \lim\limits_{V \to \infty} \mu_V$.

Введение в рассмотрение химического потенциала μ_V, отвечающего системе в очень большом, но конечном объеме V, позволяет последовательно рассматривать систему бозонов при наличии BEC (см. подробнее [6]). При этом температура перехода T_{BEC} в состояние с BEC определяется условием $\mu = \Sigma(0,0)$, где $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \lim\limits_{V\to\infty} \Sigma_V(\mathbf{p}, i\omega_n)$, $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$ – собственно энергетическая функция, отвечающая термодинамическому пределу.

При рассмотрении температур $T < T_{\mathrm{BEC}}$ переход к термодинамическому пределу, как было отмечено выше, требует корректного учета BEC. В этом случае для одночастичной функции Грина при нулевом импульсе имеет место равенство

$$G_V(\mathbf{p}=0, i\omega_n) = \{i\omega_n + \mu_V - \Sigma_V(\mathbf{p}=0, i\omega_n)\}^{-1}, \tag{9}$$

поэтому мы можем утверждать, что в системе с BEC

$$G(\mathbf{p}=0, i\omega_n) = \langle \hat{N}_0\rangle \delta_{\omega_n,0} + G^T(0, i\omega_n)(1-\delta_{\omega_n,0}), \tag{10}$$

$$G^T(0, i\omega_n) = \{i\omega_n + \Sigma(0,0) - \Sigma(\mathbf{p}=0, i\omega_n)\}^{-1}. \tag{11}$$

Для одночастичной функций Грина с ненулевым импульсом ($\mathbf{p} \neq 0$) имеем

$$G(\mathbf{p}, i\omega_n) = \{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{p}} - \Sigma(0,0) - \Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)\}^{-1}. \tag{12}$$

Таким образом, для описания системы взаимодействующих бозонов с BEC задача сводится к вычислению собственно энергетической функции $\Sigma_V(\mathbf{p}, i\omega_n)$ в очень большом, но конечном объеме V в рамках обычной диаграммной техники с последующим переходом к термодинамическому пределу при корректном учете BEC.

Это означает, что при использовании уравнения Дайсона для систем взаимодействующих частиц следует учитывать точные соотношения для одночастичной функции Грина с тем, чтобы избежать возможных противоречий в рассматриваемом подходе. С этой целью используем известное представление для одночастичной функции Грина через спектральную функцию [7]

$$G_V(\mathbf{p}, i\omega_n) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{A_V(\mathbf{p},\omega)}{i\omega_n - \omega} d\omega, \;\; f_V(\mathbf{p}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{A_V(\mathbf{p},\omega)}{\exp(\hbar\omega/T)-1} \cdot \frac{d\omega}{2\pi}. \tag{13}$$

При этом для спектральной функции $A_V(\mathbf{p},\omega)$ выполняются точные соотношения, называемые правилами сумм (см., напр., [8])

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} A_V(\mathbf{p},\omega)\frac{d\omega}{2\pi} = 1, \;\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} \omega A_V(\mathbf{p},\omega)\frac{d\omega}{2\pi} = E_V(\mathbf{p}), \tag{14}$$

$$E_V(\mathbf{p}) = \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu_V + \bar{n}\nu(0) + \frac{1}{V}\sum_q \nu(\mathbf{q}) f_V(\mathbf{q}+\mathbf{p}), \qquad (15)$$

где $\nu(\mathbf{q})$ – фурье-образ парного потенциала межчастичного взаимодействия. Переход к термодинамическому пределу в правилах сумм (14), (15) для нормальной жидкости не представляет труда. При наличии BEC (5) находим

$$E(p) = \lim_{V\to\infty} E_V(\mathbf{p}) = \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu + \bar{n}\nu(0) + n_0\nu(p) + \int \nu(q) f^T(|\mathbf{q}+\mathbf{p}|)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \qquad (16)$$

так что при выполнении условия $\nu(0) = \lim\limits_{p\to 0}\nu(p)$ справедливо равенство

$$E(0) = \lim_{p\to 0} E(p) = (\bar{n}+n_0)\nu(0) - \mu + \int \nu(q) f^T(q)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \qquad (17)$$

Таким образом, величина $E(p)$, которая имеет непосредственное отношение к понятию спектра одночастичных возбуждений, является непрерывной величиной в точке $p = 0$ при рассмотрении модельной системы бозонов с короткодействующим потенциалом взаимодействия.

Однако ситуация радикально меняется при рассмотрении кулоновской системы, представляющей собой систему заряженных электронов и ядер, взаимодействующих между собой по закону Кулона. Дело в том, что фурье-образ потенциала кулоновского взаимодействия заряженных частиц сортов a и b имеет вид $\nu_{ab}(\mathbf{q} = 0) = 0$ и $\nu_{ab}(\mathbf{q} \neq 0) = 4\pi Z_a Z_b e^2/q^2$ (см. [9, 10] и цитированную там литературу).

При этом для равновесной кулоновской системы должно выполняться условие квазинейтральности $\Sigma_a Z_a e\bar{n}_a = 0$, где $Z_a e$ – заряд частиц сорта a, которые характеризуются массой m_a, химическим потенциалом μ_a и средней плотностью числа частиц $\bar{n}_a$. Нетрудно убедиться, что в этом случае величина $E_V^{(n)}(\mathbf{p})$ для ядер (индекс (n)), которые являются бозонами с нулевым спином, имеет вид

$$E_V^{(n)}(\mathbf{p}) = \epsilon_{\mathbf{p}}^{(n)} - \mu_V^{(n)} + \frac{1}{V}\sum_{q=0}\nu_{nn}(\mathbf{q}) f_V^{(n)}(\mathbf{q}+\mathbf{p}). \qquad (18)$$

Таким образом, при наличии BEC, связанного с ядрами сорта n, находим в термодинамическом пределе

$$E^{(n)}(p=0) = -\mu_n + \int \nu_{nn}(q) f_n^T(q)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \qquad (19)$$

$$E^{(n)}(p\neq 0) = \epsilon_{\mathbf{p}}^{(n)} - \mu_n + \nu_{nn}(p) n_0^{(n)} + \int \nu_{nn}(q) f_n^T(|\mathbf{q}+\mathbf{p}|)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \qquad (20)$$

где $\epsilon_{\mathbf{p}}^{(n)} = \hbar^2 p^2/2m_n$, m_n – масса соответствующих ядер, которые характеризуются зарядом $Z_n e$, химическим потенциалом $\mu_n = \lim\limits_{V\to\infty} \mu_V^{(n)}$, средней плотностью $\bar{n}_n$, потенциалом взаимодействия между собой $\nu_{nn}(q) = 4\pi Z_n Z_n e^2/q^2$ и плотностью числа частиц в BEC $n_0^{(n)}$.

Согласно (19), (20) функция $E^{(n)}(p)$ испытывает в точке $p = 0$ бесконечный разрыв, величина которого обусловлена наличием BEC и расходимостью кулоновского потенциала взаимодействия $\nu_{nn}(p)$ при $p \to 0$. Это обстоятельство указывает на наличие соответствующей "щели" в энергетическом спектре "надконденсатных" квазичастиц над энергетическим уровнем BEC в кулоновской системе.

Возможность бесконечного разрыва в спектре одночастичных возбуждений при нулевом импульсе может быть устранена при учете эффектов экранирования кулоновского взаимодействия ядер электронами. В этом случае возникающая щель в энергетическом спектре будет иметь конечное значение, величина которого определяется плотностью BEC $n_0^{(n)}$.

Кулоновская модель является наиболее адекватной моделью вещества в нерелятивистском приближении, поэтому представленные выше результаты приводят к необходимости пересмотра «традиционных» результатов теории многочастичных систем с BEC. В частности, учитывая связь между существованием BEC и эффектом Мейснера в заряженном бозе-газе, рассматриваемом как кулоновская система [11, 12], мы можем утверждать, что эффект Мейснера должен иметь место в сверхтекучем гелии с наличием BEC для ядер.

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] O. Penrose, Philos. Mag. **42**, 1373 (1951).

[2] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).

[3] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).

[4] Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику* (М., Наука, 1984).

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

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

[7] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М., Наука, 1962).

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

[9] E. H. Lieb and J. P. Solovej, Comm. Math. Phys. **252**, 485 (2004).

[10] V. B. Bobrov, I. M. Sokolov and S. A. Trigger, Phys. Plasmas **19**, 062101 (2012).

[11] G. L. Sewell, J. Stat. Phys. **61**, 415 (1990).

[12] S. Koh, Phys. Rev. B **68**, 144502 (2003).

Поступила в редакцию 16 октября 2014 г.