УДК 539

ОТ ПОТЕНЦИАЛА КУЛОНА К ЭФФЕКТИВНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ: ПРИЛОЖЕНИЕ К КОНДЕНСАЦИИ БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА

С. А. Тригер[1,2]

На основе кулоновского взаимодействия получено выражение для эффективного потенциала взаимодействия "квазиядер". Рассматриваемая модель представляет собой равновесную кулоновскую систему взаимодействующих электронов и идентичных ядер. При этом используется адиабатическое приближение для ядер, а взаимодействие в электронной подсистеме (вырожденной или невырожденной) может быть сильным. Показано, что фурье-компонента эффективного парного потенциала между "квазиядрами" при слабом взаимодействии электронной и ядерной подсистем является разрывной функцией при волновом векторе $q = 0$. Разрывность важна для бозе-конденсированных систем, таких как HeII и разреженные газы щелочных металлов при температурах ниже, чем бозе-конденсационный переход, когда существует макроскопическое количество квазичастиц с импульсом $q = 0$. Показано, что для одночастичных возбуждений может существовать щель в спектре, которая исчезает в нормальном состоянии.

Ключевые слова: кулоновское взаимодействие, эффективный потенциал, конденсация Бозе–Эйнштейна, щель в спектре возбуждений.

Точные модели для описания равновесных систем взаимодействующих частиц имеют фундаментальное значение. Наиболее адекватной моделью реальной материи является квазинейтральная нерелятивистская система взаимодействующих по закону Кулона электронов и ядер. В кулоновской системе (КС) свойства вещества практически

[1] Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Россия, Москва, Ижорская ул., 2.
[2] ИОФ РАН, 199119 Россия, Москва, ул. Вавилова, 38; e-mail: satron@mail.ru.

полностью контролируются коллективным поведением электронов и ядер. Этот подход в статистической физике изначально развивался в пионерских публикациях [1–3]. Современный взгляд на проблему и расширенный список литературы описаны в [4].

Рассмотрение КС является наиболее общим, поскольку не содержит подгоночных параметров потенциала взаимодействия. Однако даже в простейшем случае одинаковых ядер существует четыре независимых параметра, а именно: параметр взаимодействия $\Gamma = e^2 n_e^{1/3}/T$, параметры вырождения для электронов и ядер $\lambda_e = \hbar^2 n_e^{2/3}/m_e T$, $\lambda_i = \hbar^2 Z n_e^{2/3}/m_i T$ и заряд ядер Z, что приводит к большому разнообразию возможных состояний и особенностей для свойств КС. Для водорода $Z = 1$ и ситуация более проста (см. диаграмму, введенную в [5] (см. также, напр., [6])).

Во многих случаях, при относительно низких температурах и плотностях используется модель "простого" (или "нейтрального", или "обычного") вещества, которое представляет собой систему идентичных составных частиц (фактически квазичастиц для статистических систем, таких как, напр., газ атомов), взаимодействующих друг с другом через эффективные короткодействующие потенциалы взаимодействия. Модель "простой" материи может рассматриваться как полезный подход, основанный на введении квазичастиц (напр., "атомов" в газах и конденсированных фазах вещества), подходящих для определенного диапазона термодинамических параметров [1, 7]. Статистическая теория "простой" материи основана на предположении, что потенциалы взаимодействия "атомов" известны заранее (см., напр., [7]). Хотя такой подход существенно упрощает описание свойств вещества, он связан с значительной неоднозначностью в определении потенциалов взаимодействия.

Последовательное определение эффективного потенциала взаимодействия "атомов" непосредственно связано с проблемой перехода от концепции КС (или т.н. "физической" модели электрон-ядерной материи) к "химической" модели вещества (которая вводит атомы и молекулы в качестве основных компонентов) и является сложной проблемой.

Как известно, для большого класса КС условие квазинейтральности $n_e = Z_n n_i$ (где Z_n – заряд ядра или точечного иона), обеспечивает устранение (сокращение) расходящихся членов с нулевым волновым вектором $\sum_{a,b} n_a n_b v_{a,b}(q = 0)$ в ряду теории возмущений. Здесь индексы a, b являются обозначениями для электронов и ядер, взаимодействующих через кулоновские потенциалы $v_{a,b}(q) = e_a e_b/q^2$ (или для электронов и точечных ионов с зарядом Z в моделях электрон-ионной плазмы). Здесь q – переданный импульс. Однако в [8] было показано, что для совпадения результатов для канонического ансамбля и большого ансамбля условие квазинейтральности недостаточно.

Необходимо более сильное условие для кулоновских потенциалов

$$v_{a,b}(\mathbf{q}=0)=0, \tag{1}$$

позволяющее обеспечить самосогласованное описание КС. По-видимому, условие (1) впервые было использовано в [2] при рассмотрении термодинамических свойств слабонеидеальной плазмы в большом ансамбле. Условие (1) имеет глубокий физический смысл, поскольку не существует физического носителя взаимодействия с импульсом $\hbar q = 0$.

Установление явной формы потенциала взаимодействия между заряженными частицами (закон Кулона), как функции расстояния между ними, в теории поля основано на преобразовании Фурье уравнений Максвелла. Согласно теории поля кулоновский потенциал определяет электростатическое взаимодействие заряженных частиц, поэтому для определения преобразования фурье-потенциала потенциала кулоновского взаимодействия используется уравнение Пуассона, которое приводит к следующему результату для $q \neq 0$

$$v_{a,b}(\mathbf{q})=\frac{4\pi e_a e_b}{q^2}. \tag{2}$$

В этом случае значение $v_{a,b}(\mathbf{q}=0)$, согласно уравнению Пуассона, остается неопределенным. Такая неопределенность, на первый взгляд, несущественна, так как согласно классической теории поля она не сказывается на физически измеряемых величинах. Кроме того, с учетом (2) легко установить закон Кулона с помощью интегрального преобразования Фурье

$$v_{a,b}(\mathbf{r})=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\exp(i\mathbf{qr})v_{a,b}(\mathbf{q})=\frac{e_a e_b}{r}. \tag{3}$$

При этом, условие (1) не влияет на форму потенциала кулоновского взаимодействия (3) в $\mathbf{r}$-пространстве, но играет важную роль для бозе-конденсированных систем, где конденсация происходит в состояние с $q = 0$. Однако, как показано в [8] (см. также [9]), равенство (1) не может быть строго обосновано в рамках классической теории и требует рассмотрения на основе квантовой электродинамики. При построении статистической теории для квантовой нерелятивистской КС вместо интегрального фурье-преобразования (2) для кулоновского потенциала, должен использоваться ряд Фурье

$$v_{a,b}(\mathbf{r})=\frac{1}{V}\sum_q \exp(i\mathbf{qr})\,v_{a,b}(\mathbf{q})=\frac{e_a e_b}{r}. \tag{4}$$

В настоящее время при расчете значения $v_{a,b}(\mathbf{q} = 0)$ в большинстве случаев принято исходить из того, что потенциал $v_{a,b}(\mathbf{r})$ известен в том смысле, что его значение определяется экспериментально законом Кулона. В этом случае согласно определению преобразования Фурье для потенциала $v_{a,b}(\mathbf{r})$ (3)

$$v_{a,b}(\mathbf{q} = 0) = \int_V d^3 r v_{a,b}(\mathbf{r}), \qquad \lim_{V\to\infty} V^{-1} v_{a,b}(\mathbf{q} = 0) = 0, \tag{5}$$

поскольку интеграл в (5) расходится как $V^{2/3}$. Исходя из этого, при определении термодинамических свойств слабонеидеальной плазмы в [2] и заряженного бозе-газа [10], утверждение $v_{a,b}(\mathbf{q} = 0) = 0$ было сформулировано из интуитивных соображений с учетом условия квазинейтральности $\sum_{a,b} n_a n_b v_{a,b}(q = 0)$ в термодинамическом пределе.

Следуя [9], для решения задачи о значении $v_{a,b}(\mathbf{q} = 0) = 0$ обратимся к результатам квантовой теории поля, согласно которой заряженные частицы взаимодействуют друг с другом через квантованное электромагнитное поле. В квантовой статистической электродинамике [11] можно говорить о соответствии функции Грина для квантованного электромагнитного поля $D_{\mu,\nu}(k)$ ($\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$; $k = (\omega/c, \mathbf{q})$) и потенциалов взаимодействия между заряженными частицами. При этом следует использовать дискретное представление по импульсам (см. (4)) [9]. В этом случае 4-вектор потенциала, соответствующий квантованному электромагнитному полю, не содержит члена с $\mathbf{q} = 0$. Следовательно, волновой вектор $\mathbf{q}$ в функции Грина $D_{\mu,\nu}(k)$ не может быть нулем, поскольку не существует физической субстанции, которая является носителем взаимодействия, которое приводит к передаче нулевого импульса.

В присутствии ансамбля заряженных частиц функция Грина квантованного электромагнитного поля $D_{00}^{(0)}(k) = 4\pi/k^2\varepsilon^l(k)$, где $\varepsilon^l(k)$ – продольная диэлектрическая проницаемость системы заряженных частиц описывает экранированное кулоновское взаимодействие [1]. Таким образом, согласно квантовой статистике в электродинамике утверждение (1) для $v_{a,b}(q = 0)$ выполняется в том смысле, что потенциалы кулоновского взаимодействия $v_{a,b}(r)$ можно записать в виде ряда Фурье (4), в котором отсутствует член с $q = 0$. Подробное обсуждение соотношения (1) и условия квазинейтральности недавно проведено в [5] на основе [8, 9].

Следовательно, возникает существенный для рассмотрения бозе-конденсированных систем из составных бозонов с нулевым импульсом вопрос о влиянии соотношения (1) на форму эффективного потенциала.

Рассмотрим простую модель эффективного потенциала для случая слабого кулоновского взаимодействия между электронной и ядерной подсистемами. Из-за разницы масс ($m_e \ll M_n$, где m_e и M_n – массы электрона и ядра соответственно) используем адиабатическое приближение. Как известно, преобразование Фурье эффективного потенциала $v_{n,n}^{\text{eff}}$ между ионами (или ядрами) можно записать в виде

$$v_{n,n}^{\text{eff}}(\mathbf{q}) = v_{n,n}(\mathbf{q}) + v_{e,n}^2(\mathbf{q})\frac{\Pi_e(\mathbf{q})}{\varepsilon_e^l(\mathbf{q})}, \qquad \varepsilon_e^l(\mathbf{q}) \equiv 1 - v_{e,e}(q)\Pi_e(\mathbf{q}), \tag{6}$$

где $\Pi_e(\mathbf{q})$ – поляризационная функция электронной жидкости с произвольно сильным взаимодействием, $v_{e,n} = -4\pi Z_n e^2/q^2$ и $v_{n,n} = 4\pi Z_n^2 e^2/q^2$. Согласно соотношению (1) значение $v_{n,n}^{\text{eff}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}) = 0$, так как $\Pi_e(\mathbf{q} = \mathbf{0})$ конечно. В то же время, для $q \to 0$ из (6) мы приходим к ненулевому значению $v_{n,n}^{\text{eff}}(\mathbf{q} \to 0)$

$$v_{n,n}^{\text{eff}}(\mathbf{q} \to 0) = -\frac{Z_n^2}{\Pi_e(\mathbf{q}{=}\mathbf{0})}. \tag{7}$$

Учитывая, что длинноволновый предел поляризационной функции связан с длиной экранирования R_{sc} равенством $\Pi_e(\mathbf{q} = \mathbf{0}) = -1/(4\pi e^2 R_{sc}^2)$, мы находим разрыв в точке $q = 0$ для эффективного потенциала ядер, который равен

$$\Delta = v_{n,n}^{\text{eff}}(\mathbf{q} \to 0) - v_{n,n}^{eff}(\mathbf{q} \equiv 0) = Z_n^2 4\pi e_e^2 R_{sc}^2. \tag{8}$$

Для вырожденной электронной подсистемы со слабым взаимодействием длина экранирования равна $R_{sc} = 1/k_{TF} = (\varepsilon_F/6\pi n_e e^2)^{1/2}$, где ε_F – энергия Ферми. Для типичной электронной плотности в металлах $n_e \simeq 5 \cdot 10^{22} = 7.5 \cdot 10^{-3}/a_0^3$ значение $R_{sc} \simeq 1.3 \cdot 10^{-8} \simeq 2.4\, a_0$ и экранирование является очень эффективным. Характеристическое значение $\Delta \simeq Z_n^2 \cdot 30.1 \cdot e^2\, a_0^2$ и характеристическую энергию щели в спектре E_Δ можно оценить как $E_\Delta \geq \gamma n_n \cdot \Delta \simeq 0.4\gamma Z_n^3 Ry$, где $\gamma = n_c/n_n$ – отношение количества частиц (в рассматриваемой модели ядер) в конденсате n_c к полному числу частиц (ядер) n_n. Появление щели в спектре одночастичных возбуждений было предсказано в работах [12, 13]. Согласно этому предсказанию одночастичные возбуждения и фонон-ротонные коллективные возбуждения имеют различную форму в системах, где существует бозе-эйнштейновский конденсат. Наличие щели между конденсатом и возбужденными состояниями квазичастиц может обеспечивать сверхтекучесть при достаточно низкой скорости потока конденсата, а соответствующий критерий сверхтекучести Ландау приводит к исчезновению сверхтекучего движения при $n_c \to 0$. Учет сильного электрон-ядерного взаимодействия, при котором появляются атомы, на основе кулоновской модели вещества будет дан в отдельной работе.

Таким образом, в настоящей работе показано, что фурье-компонента эффективного парного потенциала между “квазиядрами” является разрывной функцией при волновом векторе $q = 0$, что приводит к существованию щели в спектре одночастичных возбуждений для бозе-конденсированных систем.

Автор благодарен Е. М. Апфельбауму, В. Б. Боброву, А. М. Игнатову, Г. А. Мартынову, P.P.J.M. Schram за полезные обсуждения. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № 17-02-00573).

Л И Т Е Р А Т У Р А

[1] W.-D. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling, and G. Ropke, *Quantum Statistics of Charged Particle Systems* (Plenum, New York, 1986).

[2] А. А. Веденов, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **36**, 1133 (1959).

[3] W. Ebeling, Ann. Physik **22**, 33, 383 (1968); W. Ebeling, Ann. Phys. Leipz. **19**, 104 (1967).

[4] W. Ebeling, V. Fortov, V. Filinov, *Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas, Springer Series in Plasma Science and Technology* (Switzerland, 2017).

[5] Н. И. Ключников, С. А. Тригер, ЖЭТФ **52**, 276 (1967).

[6] В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Физика неидеальной плазмы* (Физматлит, Москва, 2004).

[7] R. Balescu, *Equlibrium and Nonequlibrium Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, N.-Y., 1975).

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

[9] В. Б. Бобров, С. А. Тригер, А. Г. Загородний, Краткие сообщения по физике ФИАН **42**(11), 28 (2015).

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

[11] Е. М. Фрадкин, Труды ФИАН **29**, 7 (1965).

[12] S. A. Trigger, P.P.J.M. Schram, Physica B **107**, (1996).

[13] P. Navez, K. Bongs, Europhys. Letters **88**, 60008 (2009).

Поступила в редакцию 19 марта 2019 г.

После доработки 29 мая 2019 г.

Принята к публикации 30 мая 2019 г.