Лекция №6

Теория слабо неидеальных квантовых газов (2).

В предыдущей лекции мы получили функции распределения для идеальных газов бозонов и фермионов. Нами было показано, что в случае идеального газа бозонов в области низких температур возможно явление, которое носит название бозе-эйнштейновской конденсации. Оно связано с тем обстоятельством, что в области низких температур, в силу бозе-статистики, число частиц в состоянии с импульсом, равным нулю, в отличие от состояний с импульсом, отличным от нуля, является макроскопической величиной. То есть, число таких частиц пропорционально объему. При температурах, равных нулю, все частицы находятся в состоянии бозе-конденсата. Напомним, что плотность числа бозонов $\nu_{\mathbf{p}}$ с импульсом $\mathbf{p}$,

$$\nu = \int d^3 p \nu_{\mathbf{p}} ,$$

дается выражением

$$\nu_{\mathbf{p}} = \nu \left(1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right) \delta(\mathbf{p}) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p} - 1}. \tag{1}$$

Как легко видеть из этой формулы, при понижении температуры плотность частиц в состоянии бозе-конденсата увеличивается. При $T = 0$ все частицы вещества находятся в состоянии бозе-конденсата.

Однако идеальный газ является всего лишь удобной для многих вычислений моделью. На самом деле между частицами всегда существует взаимодействие, которое должно, как мы уже неоднократно говорили, существенно влиять на свойства и поведение всей системы. Как уже отмечалось, взаимодействие между **структурными единицами вещества** определяет свойства и структуру конденсированных систем. В то же время, описание конденсированных систем связано зачастую с непреодолимыми математическими трудностями. Возникает вопрос, каким образом можно использовать легкость описания систем в рамках модели идеального газа в теории конденсированного состояния, в частности теории твердого тела? В данном случае на помощь приходит методика описания конденсированных сред в рамках квазичастичного подхода. Некоторые возможные способы введения в теорию квазичастиц продемонстрируем на примере описания явления бозе-конденсации в газе со слабым взаимодействием.

Явление бозе-конденсации в газе со слабым взаимодействием имеет существенные особенности. Например, даже при нулевых температурах, как увидим далее, не все частицы системы пребывают в состоянии бозеэйнштейновского конденсата. Появляются так называемые **надконденсатные частицы**. Здесь необходимо сделать следующее замечание. Бозе-конденсация является коллективным эффектом. По этой причине нельзя сказать, какие частицы участвуют в формировании бозе-конденсата, а какие – нет. Однако в литературе часто употребляются термины «конденсатные» и «надконденсатные» частицы. При этом под термином конденсатные частицы понимают долю от общего числа структурных единиц, участвующую в формировании бозе-конденсатного компонента системы. Разность между общим числом структурных единиц системы и конденсатными частицами называют надконденсатными частицами. В соответствии с таким делением первое слагаемое в формуле (1) соответствует доле конденсатных частиц, второе – надконденсатных. Как уже упоминалось ранее, при $T \to 0$ доля надконденсатных частиц в идеальном газе структурных единиц тоже стремится к нулю. Таким образом, в идеальном газе структурных единиц существование надконденсатных частиц вызвано тепловыми эффектами.

Итак, рассмотрим явление бозе-эйнштейновской конденсации в газе структурных единиц со слабым взаимодействием между частицами. Подчеркнутый термин «слабое взаимодействие» намекает на возможность развития теории возмущений по этому взаимодействию.

Гамильтониан такой системы был выписан нами в лекции №4:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\int d^3x \nabla\hat{\psi}^+(\mathbf{x})\nabla\hat{\psi}(\mathbf{x}), \tag{2}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1)\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\hat{\psi}(\mathbf{x}_2)\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),$$

где m - масса частицы. При описании явления бозе-конденсации по-прежнему будем исходить из распределение Гиббса

$$w = \exp\left\{\Omega - \beta\left(\hat{H} - \mathbf{u}\hat{\mathbf{P}} - \mu\hat{N}\right)\right\}, \tag{3}$$

где Ω - большой термодинамический потенциал, определяемый из условия

$$Spw = 1, \tag{4}$$

а величины T (температура), $\mathbf{u}$ (средняя скорость системы как целого) и μ (химический потенциал) должны находиться из уравнений:

$$Spw\hat{H} = W, \; Spw\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{P}, \quad Spw\hat{N} = N, \tag{5}$$

где W - полная энергия системы, $\mathbf{P}$ - средний импульс системы как целого

$$\hat{P}_i = -\frac{i}{2}\int d^3x \left\{ \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{x})}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{\psi}^+(\mathbf{x})}{\partial x_i} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \right\}, \qquad (6)$$

и N - полное число частиц в системе:

$$\hat{N} = \int d^3x \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \qquad (7)$$

В формулах (2), (6), (7) для упрощения выкладок нами не учитывался спин структурных единиц.

В дальнейшем удобно перейти к импульсному представлению для операторов физических величин, входящих в распределение Гиббса. Для этого используем формулы:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{px}}, \qquad \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{px}}. \qquad (8)$$

В этих выражениях и в дальнейшем мы используем систему единиц, в которых $\hbar$ полагается равным единице; после всех вычислений зависимость от $\hbar$ может быть легко восстановлена. Подставляя (8) в (2), (6), (7), придем к следующим выражениям для соответствующих операторов

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \qquad \hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \qquad (9)$$

и, наконец, для оператора Гамильтона имеем:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad \varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \qquad (10)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2\Upsilon} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4} \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) \hat{a}^+_{\mathbf{p}_1} \hat{a}^+_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4},$$

где $\nu(\mathbf{p})$ - Фурье-образ взаимодействия двух частиц

$$\nu(\mathbf{p}) = \int d^3x V(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{px}).$$

Символ Кронеккера в формуле (10) отражает закон сохранения импульса при взаимодействии частиц. Из-за того обстоятельства, что в состоянии с импульсом $\mathbf{p} = 0$ находится макроскопически большое число частиц (явление бозе-эйнштейновской конденсации), операторы рождения и уничтожения частиц $\hat{a}^+_0$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ можно считать не операторами, а обычными числами

$$\hat{a}_0^+ \to a_0, \qquad \hat{a}_0 \to a_0. \tag{11}$$

Строго математически этот факт был доказан в работах Н.Н.Боголюбова.
Из (9) следует

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = a_0 a_0 + \hat{N}', \qquad \hat{N}' = \sum_{\mathbf{p}\neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}, \tag{12}$$

ввиду чего удобно ввести обозначение $a_0^2 = n_0$, и в дальнейшем можем полагать

$$\hat{a}_0^+ \to \sqrt{n_0}, \;\; \hat{a}_0 \to \sqrt{n_0}. \tag{13}$$

Легко установить, что оператор суммарного импульса и гамильтониан свободных частиц приобретают вид

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{p}\neq 0} \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}, \qquad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}\neq 0} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \tag{14}$$

(слагаемые с $\mathbf{p} = 0$ в таких операторах, очевидно, отсутствуют). Оператор же взаимодействия $\hat{V}$ может быть приведен к виду:

$$\hat{V} \to \hat{V}(n_0) = f(n_0) + \frac{\partial f(n_0)}{\partial n_0} \hat{N}' + n_0 \hat{V}_2 + n_0^{1/2} \hat{V}_3 + \hat{V}_4, \tag{15}$$

где

$$f(n_0) = \frac{\nu(0) n_0^2}{2\Upsilon} \tag{16}$$

и

$$\hat{V}_2 = \frac{1}{2\Upsilon} \sum_{\mathbf{p}\neq 0} \nu(\mathbf{p}) \left\{ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ \right\} + h.c., \tag{17}$$

$$\hat{V}_3 = \frac{1}{\Upsilon} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 \neq 0} \nu(\mathbf{p}_2) \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3} + h.c.,$$

$$\hat{V}_4 = \frac{1}{\Upsilon} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 \neq 0} \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} + h.c..$$

В результате распределение Гиббса принимает вид:

$$w(n_0) = \exp\left\{ \Omega - \beta \left(\hat{H}(n_0) - \mathbf{u}\hat{\mathbf{P}} - \mu n_0 - \mu \hat{N}' \right) \right\}, \tag{18}$$

где

$$\hat{H}(n_0) = \hat{H}_0 + \hat{V}(n_0). \qquad (19)$$

Мы видим, что в термодинамический потенциал Ω (Ω находится из уравнения $Spw = 1$) величина n_0 входит как произвольный параметр. Между тем ясно, что n_0 - число частиц в конденсате – должно быть вполне определенным параметром. Это число должно находиться из условия минимума потенциала Ω

$$\frac{\partial \Omega}{\partial n_0} = 0.$$

Так как

$$e^{-\Omega} = Spe^{\beta\left(\hat{H}(n_0) - \mathbf{u}\hat{P} - \mu n_0 - \mu \hat{N}'\right)},$$

то

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial n_0} = \beta\left\{\mu - Spw(n_0)\frac{\partial \hat{V}(n_0)}{\partial n_0}\right\}. \qquad (20)$$

Полученные до сих пор выражения являются точными. Предположим теперь, что взаимодействие между частицами является слабым. При этом мы должны принимать во внимание, что величина

$$n_0 / \Upsilon$$

будет большим параметром, так как число частиц в конденсате n_0 является макроскопическим, то есть, пропорциональным объему. Поэтому наибольшими слагаемыми в выражении для $\hat{V}(n_0)$ будет $f(n_0)$, потом следующими по величине $\mu\hat{N}'$ и $n_0\hat{V}_2$. Слагаемые же $n_0^{1/2}\hat{V}_3$ и $\hat{V}_4$ мы учитывать здесь вообще не будем. Забегая наперед, скажем, что их необходимо учитывать только в случае рассмотрения взаимодействия между квазичастицами.

Таким образом, из условия минимума термодинамического потенциала находим выражение для определения числа частиц в конденсате:

$$\mu \approx \frac{\partial f(n_0)}{\partial n_0} = \frac{n_0}{\Upsilon}\nu(0). \qquad (21)$$

С учетом этого выражения в пренебрежении слагаемыми $n_0^{1/2}\hat{V}_3$ и $\hat{V}_4$ получим

$$w(n_0) \approx w_0(n_0) = \exp\left\{\mathbf{\Omega}_0 - \beta\left(\hat{H}_q(n_0) - \mathbf{u}\hat{\mathbf{P}}\right)\right\}, \tag{22}$$

где

$$\hat{H}_q(n_0) = \hat{H}_0 + n_0\hat{V}_2 - f(n_0), \tag{23}$$

а Ω_0 определяется из условия

$$Spw_0(n_0) = 1.$$

Заметим, что в данном приближении потенциал Ω_0 совпадает с потенциалом Ω.

Используя далее явное выражение для $\hat{V}_2$, гамильтониан $\hat{H}_q(n_0)$ можно представить в виде:

$$\hat{H}_q(n_0) = \sum_{\mathbf{p}\neq 0}\left\{\alpha_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\beta_{\mathbf{p}}\left(\hat{a}^+_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}\hat{a}_{-\mathbf{p}}\right)\right\} - f(n_0), \tag{24}$$

где введены обозначения

$$\alpha_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}, \qquad \varepsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m, \qquad \beta_{\mathbf{p}} = \nu(\mathbf{p})n_0/\Upsilon.$$

Мы видим, что в рассматриваемом приближении вид гамильтониана системы значительно упростился. Однако, как отмечалось выше, хотелось бы построить такую теорию, которая была бы максимально близкой к теории идеального газа. А для этого необходимо придумать преобразования, которые сводят гамильтониан $\hat{H}_q(n_0)$ к диагональному виду.

С этой целью введем в рассмотрение так называемые U-V преобразования Боголюбова:

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = U_{\mathbf{p}}\hat{b}_{\mathbf{p}} + V_{\mathbf{p}}\hat{b}^+_{-\mathbf{p}}, \qquad \hat{a}^+_{\mathbf{p}} = U^*_{\mathbf{p}}\hat{b}^+_{\mathbf{p}} + V^*_{\mathbf{p}}\hat{b}_{-\mathbf{p}}. \tag{25}$$

По сути, мы ввели операторы рождения $\hat{b}^+_{\mathbf{p}}$ и уничтожения $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ каких-то новых элементарных объектов. Потребуем, во-первых, чтобы для операторов $\hat{b}^+_{\mathbf{p}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ выполнялись бозонные коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}^+_{\mathbf{p}'}\right] = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}, \qquad \left[\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}'}\right] = 0,$$

которым удовлетворяют и исходные операторы рождения $\hat{a}^+_{\mathbf{p}}$ и уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{p}}$. Из этих требований следует, что функции $U_{\mathbf{p}}$ и $V_{\mathbf{p}}$ можно считать действительными и выбрать их в виде

$$U_{\mathbf{p}} = ch\varphi_{\mathbf{p}}, \;\; V_{\mathbf{p}} = sh\varphi_{\mathbf{p}}, \tag{25}$$

учитывая равенство $ch^2\varphi_{\mathbf{p}} - sh^2\varphi_{\mathbf{p}} = 1$. Во-вторых, подставляя в выражение (24) формулы (25) с учетом (26) потребуем, чтобы в терминах операторов $\hat{b}^+_{\mathbf{p}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ гамильтониан $\hat{H}_q(n_0)$ имел диагональный вид:

$$\hat{H}_q(n_0) = E_0 + \sum_{\mathbf{p}\neq 0} \omega_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}, \tag{26}$$

в котором E_0 - так называемая энергия основного состояния. При сведении гамильтониана $\hat{H}_q(n_0)$ к такому виду находятся величины $\omega_{\mathbf{p}}$ и $\varphi_{\mathbf{p}}$ (тем самым определяются и преобразования (25)):

$$\omega_{\mathbf{p}} = \sqrt{\alpha^2_{\mathbf{p}} - \beta^2_{\mathbf{p}}}, \quad th\varphi_{\mathbf{p}} = -\frac{\beta_{\mathbf{p}}}{\alpha_{\mathbf{p}}}, \tag{27}$$

а также энергия основного состояния E_0:

$$E_0 = -f(n_0) + \sum_{\mathbf{p}} \left(\alpha_{\mathbf{p}} sh\varphi_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}} ch\varphi_{\mathbf{p}}\right) sh\varphi_{\mathbf{p}}.$$

Как видно из этих формул, в данном приближении мы получили гамильтониан идеального газа каких-то новых объектов. Это и есть квазичастицы с законом дисперсии $\omega_{\mathbf{p}}$

$$\omega_{\mathbf{p}} = \sqrt{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)^2 + \frac{n_0}{\Upsilon}\frac{\nu(\mathbf{p})}{m}\mathbf{p}^2}. \tag{28}$$

Заметим, что в области больших $\mathbf{p}$ спектр этих элементарных возбуждений совпадает с энергией свободных частиц, тогда как в области малых импульсов спектр носит фононный характер:

$$\omega_{\mathbf{p}} = cp, \; c = \frac{n_0}{\Upsilon}\frac{\nu(0)}{m}. \tag{29}$$

Скорость c совпадает со скоростью звука при абсолютном нуле в слабонеидеальном бозе-газе.

Отметим также, что должно быть $c>0$, следовательно, $\nu(0)>0$. Принимая во внимание, что

$$\nu(0)=\int d^3xV(\mathbf{x}),$$

приходим к выводу, что в потенциале парного взаимодействия между бозонами вклад сил отталкивания должен преобладать над силами притяжения.

Поскольку мы нашли диагональный гамильтониан в терминах операторов рождения и уничтожения квазичастиц, мы можем в этих терминах переписать и матрицу плотности $w_0\left(n_0\right)$

$$w_0\left(n_0\right)=\exp\left\{\tilde{\Omega}_0-\sum_{\mathbf{p}}\left(\omega_{\mathbf{p}}-\mathbf{pu}\right)\hat{b}_{\mathbf{p}}^{+}\hat{b}_{\mathbf{p}}\right\}, \qquad \tilde{\Omega}_0=\Omega_0-\frac{E_0}{T}.$$

Тем самым мы получили возможность вычислять все термодинамические характеристики такой системы вблизи ее основного состояния, характеризуемого энергией E_0.

Алгоритм таких вычислений следующий. Пусть нам необходимо вычислить среднее

$$Spw_0\left(n_0\right)\hat{a}_{\mathbf{p}_1}^{+}...\hat{a}_{\mathbf{p}_l}^{+}\hat{a}_{\mathbf{p}_1}...\hat{a}_{\mathbf{p}_l}.$$

В этой формуле мы должны взять матрицу плотности в полученном квазичастичном приближении, а операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}_1}^{+},...,\hat{a}_{\mathbf{p}_l}^{+},\hat{a}_{\mathbf{p}_1},...,\hat{a}_{\mathbf{p}_l}$ выразить через операторы $\hat{b}_{\mathbf{p}_1}^{+},...,\hat{b}_{\mathbf{p}_l}^{+},\hat{b}_{\mathbf{p}_1},...,\hat{b}_{\mathbf{p}_l}$ в соответствии с преобразованиями Боголюбова. При этом необходимо занулять средние, в которых присутствует разное количество операторов рождения и уничтожения квазичастиц.

На предыдущей лекции мы подробно рассматривали процедуру вывода функции распределения для идеального квантового газа. Повторяя ее с использованием полученной матрицы плотности, придем к следующему выражению для функции распределения квазичастиц в исследуемой нами системе:

$$f_{\mathbf{p}}=\frac{1}{e^{\beta\left(\omega_{\mathbf{p}}-\mathbf{pu}\right)}-1}.$$

Как и ожидалось, она имеет бозевский вид. Поскольку система отсчета у нас фиксирована (в ней покоится конденсат), то величину $\mathbf{u} = \mathbf{u}_n$ следует интерпретировать как скорость квазичастиц относительно конденсата. Эта скорость называется скоростью нормальной компоненты.

Поскольку

$$\mathbf{P} = Sp w_0 \left(n_0 \right) \hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}} \mathbf{p} ,$$

можем написать

$$\mathbf{P} = \Upsilon \rho_n^{(m)} \mathbf{u}_n , \qquad \rho_n^{(m)} = (2\pi)^{-3} \mathbf{u}_n^{-2} \int d^3 p \mathbf{p} \mathbf{u}_n f_{\mathbf{p}} .$$

Величину $\rho_n^{(m)}$ можно интерпретировать как плотность нормальной компоненты неидеального бозе-газа, то есть, как плотность газа квазичастиц. Величину же

$$\rho_S^{(m)} = \rho^{(m)} - \rho_n^{(m)} ,$$

где $\rho^{(m)}$ - плотность газа, интерпретируют как скорость сверхтекучей компоненты бозе-газа. Скорость сверхтекучей компоненты $\mathbf{u}_S$ в системе, где конденсат покоится, равна, естественно, нулю.

Заметим, что для того, чтобы распределение Гиббса $w_0 \left(n_0 \right)$ имело смысл, необходимо выполнения условия:

$$\left(\omega_{\mathbf{p}} - \mathbf{p}\mathbf{u} \right) > 0 .$$

Отсюда следует, что

$$u < u_0 , \qquad u_0 = \min_p \frac{\omega_{\mathbf{p}}}{p} .$$

Только при выполнении этого условия в системе будет существовать явление сверхтекучести (в системе покоя сверхтекучей компоненты).