

§ 117. Корреляция флуктуаций плотности в вырожденном газе

Как уже было отмечено в предыдущем параграфе, в классическом идеальном газе никакой корреляции между положениями различных частиц вообще нет. В квантовой механике, однако, такая корреляция возникает ввиду косвенного взаимодействия частиц идеального газа в силу принципа симметрии волновых функций¹⁾.

Задача об определении корреляционной функции в вырожденном газе наиболее просто может быть решена методом вторичного квантования (который уже был применен в § 80 для вычисления энергии электронного газа).

Как известно, в этом методе плотности числа частиц отвечает оператор

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r});$$

после подстановки ψ -операторов (80,5) он выражается суммой

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma\sigma'} \hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p'\sigma'} \hat{\psi}_{p\sigma}^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{p'\sigma'}(\mathbf{r}), \quad (117,1)$$

где суммирование производится по всем значениям импульсов \mathbf{p} , \mathbf{p}' (для свободных частиц в объеме V) и по проекциям спина σ , σ' ²⁾. Но ввиду ортогональности спиновых волновых функций, отвечающих различным значениям σ , фактически отличны от нуля лишь члены суммы с $\sigma = \sigma'$. В произведениях $\hat{\psi}_{p\sigma}^* \hat{\psi}_{p'\sigma}$ нормированные спиновые множители дают единицу, так что волновые функции можно писать просто в виде координатных плоских волн

$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (117,2)$$

Легко видеть, что диагональные члены суммы (117,1) ($\mathbf{p} = \mathbf{p}'$) дают как раз среднюю плотность \bar{n} : поскольку оператор $\hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma}$ есть просто число частиц $n_{p\sigma}$ в данном квантовом состоянии, то сумма этих членов равна

$$\frac{1}{V} \sum_{\sigma\mathbf{p}} n_{p\sigma} = \frac{N}{V} = \bar{n}.$$

¹⁾ Корреляция флуктуаций в ферми-газе была рассмотрена В. С. Фурсовым (1937), а в бозе-газе — А. Д. Галаниным (1940).

²⁾ Напомним, что волновые функции частицы со спином представляют собой спиноры и произведение волновых функций в (117,1) является в действительности «скалярным произведением» ковариантного и контрвариантного спиноров с соответствующим суммированием по спиновым индексам (с которыми не следует смешивать индексы σ , σ' , указывающие собственные значения проекции спина в данных состояниях).

Поэтому можно написать

$$\Delta \hat{n} = \hat{n}(\mathbf{r}) - \bar{n} = \sum'_{\sigma \rho \rho'} \hat{a}_{\rho \sigma}^+ \hat{a}_{\rho' \sigma} \Psi_{\rho}^* \Psi_{\rho'}, \quad (117,3)$$

где штрих у знака суммы означает, что диагональные члены в ней должны быть опущены. С помощью этого выражения не представляет труда вычислить интересующее нас среднее значение $\langle \Delta n_1 \Delta n_2 \rangle$.

Вычисление среднего значения производится в два этапа. Прежде всего надо произвести квантовомеханическое усреднение по состояниям частиц. Это усреднение сводится к взятию соответствующего диагонального матричного элемента данной величины. Перемножив два оператора (117,3), относящиеся к двум различным точкам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , мы получим сумму членов, содержащих различного рода произведения операторов $\hat{a}_{\rho \sigma}$, $\hat{a}_{\rho \sigma}^+$, взятых по четыре. Но из всех этих произведений имеют диагональные матричные элементы лишь те, которые содержат две пары операторов $\hat{a}_{\rho \sigma}$, $\hat{a}_{\rho \sigma}^+$ с одинаковыми индексами, т. е. члены

$$\sum'_{\sigma \rho \rho'} \hat{a}_{\rho \sigma}^+ \hat{a}_{\rho' \sigma} \hat{a}_{\rho' \sigma}^+ \hat{a}_{\rho \sigma} \Psi_{\rho}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{\rho'}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\rho'}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{\rho}(\mathbf{r}_2).$$

Эти члены представляют собой диагональные матрицы, причем

$$\hat{a}_{\rho' \sigma} \hat{a}_{\rho \sigma}^+ = 1 \mp n_{\rho' \sigma}, \quad \hat{a}_{\rho \sigma}^+ \hat{a}_{\rho \sigma} = n_{\rho \sigma}$$

(здесь и везде ниже верхний знак относится к случаю статистики Ферми, а нижний — к статистике Бозе). Подставляя также функции Ψ_{ρ} (117,2), получим

$$\frac{1}{V^2} \sum'_{\sigma \rho \rho'} (1 \mp n_{\rho' \sigma}) n_{\rho \sigma} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) / \hbar}.$$

Это выражение должно быть теперь усреднено в статистическом смысле, т. е. по равновесному распределению частиц по различным квантовым состояниям. Поскольку частицы, находящиеся в различных квантовых состояниях, ведут себя независимо друг от друга, то усреднение чисел $n_{\rho \sigma}$ и $n_{\rho' \sigma}$ производится независимо. В результате для искомого среднего значения находим

$$\langle \Delta n_1 \Delta n_2 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum'_{\sigma \rho \rho'} (1 \mp \bar{n}_{\rho' \sigma}) \bar{n}_{\rho \sigma} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) / \hbar}. \quad (117,4)$$

От суммирования по ρ , ρ' перейдем теперь обычным образом к интегрированию по $V d^3 \rho V d^3 \rho' / (2\pi \hbar)^6$ (при этом ограничение $\rho \neq \rho'$ становится несущественным). Интеграл разбивается на две части, из которых первая есть

$$\sum_{\sigma} \int \bar{n}_{\rho \sigma} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) / \hbar} \frac{d^3 \rho d^3 \rho'}{(2\pi \hbar)^6}.$$

Интегрирование по $d^3p'/(2\pi\hbar)^3$ дает δ -функцию $\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$, которая позволяет положить $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = 0$ в оставшемся подынтегральном выражении; после этого остается

$$\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \sum_{\sigma} \int \bar{n}_{p\sigma} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \bar{n} \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1).$$

Это есть как раз первый член в формуле (116,3). Поэтому для корреляционной функции (второй член в (116,3)) находим следующее выражение:

$$v(r) = \mp \frac{1}{n} \sum_{\sigma} \left| \int e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \bar{n}_{p\sigma} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \right|^2. \quad (117,5)$$

В равновесном газе распределение частиц по квантовым состояниям дается формулой распределения Ферми или Бозе

$$\bar{n}_{p\sigma} \equiv \bar{n}_p = [e^{(\varepsilon - \mu)/T} \pm 1]^{-1}. \quad (117,6)$$

Эти числа не зависят от σ ; поэтому суммирование по σ в (117,5) дает просто множитель $g = 2s + 1$ (s —спин частицы). Таким образом, получаем окончательно следующую формулу для корреляционной функции ¹⁾:

$$v(r) = \mp \frac{g}{n} \left| \int \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} \pm 1} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \right|^2, \quad (117,7)$$

или после интегрирования по направлениям \mathbf{p}

$$v(r) = \mp \frac{g}{4\pi^4 n r^2 \hbar^4} \left| \int_0^{\infty} \frac{\sin(pr/\hbar) p dp}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} \pm 1} \right|^2. \quad (117,8)$$

Приведем также формулу для средних квадратов компонент Фурье флуктуаций плотности, которую легко получить, подставляя $v(r)$ из (117,7) в общую формулу (116,13) и производя интегрирование по координатам ²⁾:

$$\langle |\Delta n_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \frac{g}{V} \int \bar{n}_p (1 \mp n_{p+\hbar\mathbf{k}}) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (117,9)$$

Из формулы (117,7) видно прежде всего, что для ферми-газа $v(r) < 0$, а для бозе-газа $v(r) > 0$. Другими словами, у бозе-газа присутствие в некоторой точке пространства частицы увеличивает вероятность нахождения другой частицы вблизи этой точки, т. е. частицы испытывают своеобразное притяжение. В ферми-газе, напротив, частицы проявляют аналогичное отталкивание (ср. замечание в конце § 56).

¹⁾ В случае бозе-газа эта формула относится только к температурам выше точки бозе-эйнштейновской конденсации (см. задачу 4).

²⁾ Не смешивать фурье-компоненты флуктуаций плотности газа $\Delta n_{\mathbf{k}}$ с числами заполнения квантовых состояний частиц $\bar{n}_{\mathbf{p}}$!

В соответствии со сказанным в начале этого параграфа в классическом пределе корреляционная функция обращается в нуль: при $\hbar \rightarrow 0$ частота осциллирующего множителя $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$ в подынтегральном выражении в (117,7) неограниченно возрастает, и интеграл стремится к нулю.

При $r \rightarrow 0$ функция $\nu(r)$ стремится к постоянному пределу:

$$\nu(0) = \mp \frac{g}{n} \left| \int \bar{n}_{\mathbf{p}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \right|^2 = \mp \frac{\bar{n}}{g}. \quad (117,10)$$

Применим формулу (117,8) к ферми-газу при $T=0$. В этом случае функция распределения есть ступенчатая функция: $\bar{n}_{\mathbf{p}} = 1$ при $p < p_F$ и $\bar{n}_{\mathbf{p}} = 0$ при $p > p_F$, где $p_F = \hbar(6\pi^2\bar{n}/g)^{1/3}$ — граничный импульс. Поэтому находим

$$\nu(r) = - \frac{g}{4\pi^4\hbar^4 n r^2} \left| \int_0^{p_F} p \sin \frac{pr}{\hbar} dp \right|^2.$$

Рассмотрим не слишком малые расстояния — будем считать, что $p_F/\hbar \gg 1$. Соответственно этому вычисляем интеграл, сохранив лишь член с наименьшей степенью $1/r$:

$$\nu(r) = - \frac{3\hbar}{2\pi^2 p_F r^4} \cos^2 \frac{p_F r}{\hbar}.$$

Квадрат косинуса быстро меняется на интервалах Δr , малых по сравнению с рассматриваемыми расстояниями. Усреднив по такому интервалу, найдем

$$\nu(r) = - \frac{3\hbar}{4\pi^2 p_F r^4}. \quad (117,11)$$

Задачи

1. Определить средний квадрат фурье-компонент (с малыми волновыми векторами: $k \ll p_F/\hbar$) флуктуаций плотности в ферми-газе при $T=0$.

Решение. Подынтегральное выражение в (117,9) отлично от нуля (и равно единице) лишь в точках, в которых $\bar{n}_{\mathbf{p}} = 1$, $\bar{n}_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}} = 0$, т. е. в точках, принадлежащих сфере радиуса p_F и в то же время не принадлежащих сфере того же радиуса с центром, сдвинутым на $\hbar\mathbf{k}$. Вычисляя объем этой области при $\hbar k \ll p_F$, получим

$$\langle |\Delta n_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = \frac{\pi g k p_F^2}{(2\pi)^3 \hbar^2 V} = \frac{3k\hbar}{4p_F} \frac{\bar{n}}{V}.$$

2. Определить корреляционную функцию для ферми-газа при температурах, низких по сравнению с температурой вырождения.

Решение. В интеграле в (117,8) полагаем $\mu \approx \varepsilon_F = p_F^2/2m$ и преобразуем его следующим образом:

$$I = \int_0^{\infty} \frac{p \sin(pr/\hbar) dp}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/T} + 1} = -\hbar \frac{\partial}{\partial r} \int_0^{\infty} \frac{\cos(pr/\hbar) dp}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/T} + 1}.$$

Производим интегрирование по частям, после чего вводим новую переменную $x = p_F (p - p_F) / mT$. Ввиду малости T подынтегральное выражение быстро убывает с ростом $|x|$, и потому интеграл по dx можно распространить от $-\infty$ до $+\infty$:

$$I = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \left(\frac{p_F}{\hbar} r + \lambda x r \right) \frac{dx}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} = \\ = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{\sin(p_F r / \hbar)}{r} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda r x} \frac{dx}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)} \right\}$$

(где $\lambda = mT / \hbar p_F$). Получившийся интеграл подстановкой $(e^x + 1)^{-1} = u$ приводится к B -интегралу Эйлера, и в результате получается

$$I = \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{\pi \lambda}{\operatorname{sh}(\pi \lambda r)} \sin \frac{p_F r}{\hbar} \right\}.$$

Для расстояний $r \gg \hbar / p_F$ усреднив быстро меняющийся квадрат косинуса, получаем окончательно

$$v(r) = -\frac{3(mT)^2}{4\hbar p_F^2 r^2} \operatorname{sh}^{-2} \left(\frac{\pi m T r}{\hbar p_F} \right)^2.$$

При $T \rightarrow 0$ эта формула переходит в (117,11). В асимптотической области, где $r p_F / \hbar$ велико не только по сравнению с 1, но и по сравнению с ε_F / T , имеем

$$v(r) = -\frac{3(mT)^2}{\hbar p_F^2 r^2} \exp \left(-\frac{2\pi m T r}{\hbar p_F} \right).$$

3. Определить корреляционную функцию для бозе-газа на больших расстояниях ($r \gg \hbar / \sqrt{mT}$) при температурах выше точки T_0 начала бозе-эйнштейновской конденсации, но близких к ней.

Решение. Вблизи точки T_0 химический потенциал $|\mu|$ мал (см. задачу к § 62). При этом интеграл в (117,7) (обозначим его I) определяется областью малых значений p : $\varepsilon / T \sim p^2 / mT \sim |\mu| / T \ll 1$. Поэтому, разлагая подынтегральное выражение по ε и μ , находим¹⁾

$$I \approx T \int \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{p^2/2m + |\mu|} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{mT}{2\pi\hbar^2 r} \exp \left\{ -r \frac{(2m|\mu|)^{1/2}}{\hbar} \right\}.$$

Окончательно

$$v(r) = \frac{gm^2 T^2}{4\pi^2 n \hbar^4 r^2} \exp \left\{ -r \frac{2(2m|\mu|)^{1/2}}{\hbar} \right\}.$$

1) Использована формула фурье-преобразования

$$\int \frac{e^{-\mathbf{x}\mathbf{r}}}{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV = \frac{4\pi}{\kappa^2 + k^2}, \quad \int \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\kappa^2 + k^2} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{e^{-\mathbf{x}\mathbf{r}}}{4\pi r}.$$

Ее проще всего можно получить, заметив, что функция $\varphi = e^{-\mathbf{x}\mathbf{r}}/r$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\Delta \varphi - \kappa^2 \varphi = -4\pi \delta(\mathbf{r}).$$

Умножив это уравнение с обеих сторон на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ и интегрируя по всему пространству (причем интеграл от $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Delta \varphi$ берется дважды по частям), получим требуемый результат.

4. Определить корреляционную функцию бозе-газа при $T < T_0$.

Решение. При $T < T_0$ конечная доля числа частиц ($N_{\epsilon=0}$) находится в состояниях с $\mathbf{p}=0$ (конденсат). Возвращаясь к выражению (117,4) надо предварительно (до перехода от суммирования к интегрированию) выделить в нем члены с равным нулю \mathbf{p} или \mathbf{p}' , учитывая при этом, что число частиц в каждом из квантовых состояний с $\mathbf{p}=0$: $n_{\mathbf{p}=0} = N_{\epsilon=0}/g$. После этого сумма преобразуется, как это было сделано в тексте, и в результате вместо (117,7) находим

$$v(r) = \frac{2n_0}{\bar{n}} I + \frac{g}{\bar{n}} I^2, \quad I = \int e^{i\mathbf{p}r/\hbar} \bar{n}_{\mathbf{p}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

(где $n_0 = N_{\epsilon=0}/g$), причем $\bar{n}_{\mathbf{p}}$ дается формулой распределения Бозе с $\mu=0$:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = [e^{\epsilon/T} - 1]^{-1}.$$

На расстояниях $r \gg \hbar/\sqrt{mT}$ интеграл $I = mT/2\pi\hbar^2 r$ (формула из предыдущей задачи с $\mu=0$), так что

$$v(r) = \frac{mTn_0}{\pi\hbar^2 r} + \frac{gm^2T^2}{4\pi^2\hbar^4 r^2};$$

вторым членом можно пренебречь, если только T не слишком близко к T_0 (так что n_0 не слишком мало). В обратном случае, на расстояниях $r \ll \hbar/\sqrt{mT}$, интеграл

$$I \approx \int \bar{n}_{\mathbf{p}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\bar{n} - n_0}{g},$$

так что

$$v(r) \approx v(0) = \frac{\bar{n}^2 - n_0^2}{gn}.$$

Отметим, что интеграл $\int v dV$ для бозе-газа при $T < T_0$ расходится, и потому вычисление по формуле (116,5) привело бы к бесконечному значению флуктуации числа частиц — в соответствии с замечанием, сделанным уже в § 113.

§ 118. Корреляция флуктуаций во времени

Рассмотрим какую-либо физическую величину, характеризующую находящуюся в термодинамическом равновесии замкнутую систему или ее отдельную часть (в первом случае это не должна быть величина, остающаяся для замкнутой системы по определению постоянной, например, ее энергия). С течением времени эта величина испытывает небольшие изменения, флуктуируя вокруг своего среднего значения. Обозначим снова посредством $x(t)$ разность между этой величиной и ее средним значением (так что $\bar{x} = 0$).

Между значениями $x(t)$ в разные моменты времени существует некоторая корреляция; это значит, что значение x в некоторый момент времени t влияет на вероятности различных ее значений в другой момент времени t' . Аналогично пространственной корреляции, рассмотренной в предыдущих параграфах, можно харак-