

(оператор кинетической энергии написан в симметризованном виде $\hat{v}\hat{\rho}'\hat{v}/2$, чтобы быть эрмитовым). При этом существенно, что именно ρ и ϕ являются канонически сопряженными «обобщенными координатами и импульсами», через которые должен быть выражен гамильтониан. Это видно из того, что правило коммутации (24,7), которому удовлетворяют операторы (24,10), является точным — в его выводе малость колебаний нигде не использовалась.

Члены более высоких (третьей и т. д.) степеней в разложении этого гамильтониана выражают собой ангармоничность звуковых колебаний, а в терминах фононной картины — описывают взаимодействие фононов. Эти члены имеют матричные элементы для переходов с одновременным изменением нескольких чисел заполнения фононов и тем самым играют роль возмущения, вызывающего различные процессы рассеяния и распада фононов. При этом матричные элементы самих операторов \hat{c}_k и \hat{c}_k^\dagger имеют, разумеется, прежний вид (24,9), поскольку (как это всегда делается в теории возмущений) используется представление, в котором диагонален невозмущенный гамильтониан. Приведем здесь выражения членов третьего и четвертого порядков

$$\hat{H}^{(3)} = \int \left[\frac{\hat{v}\hat{\rho}'\hat{v}}{2} + \left(\frac{d}{d\rho_0} \frac{u^2}{\rho_0} \right) \frac{\hat{\rho}'^3}{6} \right] d^3x, \quad (24,12)$$

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{1}{24} \left(\frac{d^2}{d\rho_0^2} \frac{u^2}{\rho_0} \right) \int \hat{\rho}'^4 d^3x. \quad (24,13)$$

§ 25. Вырожденный почти идеальный бозе-газ

Основные свойства энергетического спектра бозевского типа ясно видны на модели слабо неидеального бозе-газа при близких к нулю температурах. Эта модель будет рассмотрена в этом параграфе аналогично тому, как это было сделано в § 6 для ферми-газа¹⁾. Все сказанное в § 6 в связи с общей характеристикой моделей вырожденного почти идеального газа относится и к настоящему случаю. В частности, условие слабой неидеальности (газовый параметр $a(N/V)^{1/3} \ll 1$; a — длина рассеяния) может быть по-прежнему сформулировано в виде условия (6,1) малости импульсов частиц: $\rho a/\hbar \ll 1$ ²⁾.

¹⁾ Излагаемый ниже метод принадлежит Н. Н. Боголюбову (1947). Применение им этого метода к бозе-газу явилось первым примером последовательного микроскопического вывода энергетического спектра «квантовых жидкостей».

²⁾ Мы увидим ниже, что в вырожденном бозе-газе основная масса частиц (вне «конденсата») обладает импульсами $p \sim \hbar \sqrt{aN/V}$, для которых указанное неравенство действительно справедливо.

Гамильтониан системы парно взаимодействующих бозонов (которые мы будем предполагать бесспиновыми) имеет вид, отличающийся от (6,6) лишь отсутствием спиновых индексов:

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \frac{1}{2} \sum \langle p_1 p_2 | U | p_1 p_2 \rangle \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \hat{a}_{p_2} \hat{a}_{p_1} \quad (25,1)$$

(суммирование по всем импульсам, фигурирующим в индексах). Операторы же уничтожения и рождения частиц удовлетворяют теперь правилам коммутации

$$\hat{a}_p \hat{a}_p^+ - \hat{a}_p^+ \hat{a}_p = 1.$$

Как и в § 6, снова заменяем, в соответствии с предположением о малости импульсов, все матричные элементы в (25,1) их значением при нулевых импульсах; тогда

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \frac{U_0}{2V} \sum \hat{a}_{p_1}^+ \hat{a}_{p_2}^+ \hat{a}_{p_2} \hat{a}_{p_1}. \quad (25,2)$$

Исходным пунктом применения теории возмущений к этому гамильтониану является следующее замечание. В основном состоянии идеального бозе-газа все частицы находятся в конденсате — состоянии нулевой энергии; числа заполнения $N_{p=0} \equiv N_0 = N$, $N_p = 0$ при $p \neq 0$ (см. V § 62). В почти идеальном же газе в основном и в слабо возбужденных состояниях числа N_p отличны от нуля, но очень малы по сравнению с макроскопически большим числом N_0 . Тот факт, что величина $\hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = N_0 \approx N$ весьма велика по сравнению с единицей, означает, что выражение

$$\hat{a}_0 \hat{a}_0^+ - \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = 1$$

мало по сравнению с самими \hat{a}_0 , \hat{a}_0^+ , и потому можно рассматривать последние как обычные (равные $\sqrt{N_0}$) числа, пренебрегая их некоммутативностью.

Применение теории возмущений означает теперь формально разложение четверной сѹммы в (25,2) по степеням малых величин \hat{a}_p , \hat{a}_p^+ ($p \neq 0$). Нулевой член разложения равен

$$\hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 = a_0^4. \quad (25,3)$$

Члены первого порядка отсутствуют (ввиду невозможности соблюдения в них закона сохранения импульса). Члены второго порядка

$$a_0^2 \sum_{p \neq 0} (\hat{a}_p \hat{a}_{-p} + \hat{a}_p^+ \hat{a}_{-p}^+ + 4\hat{a}_p^+ \hat{a}_p). \quad (25,4)$$

Ограничиваясь точностью до величин второго порядка, можно заменить в (25,4) $a_0^2 = N_0$ на полное число частиц N . В члене же

(25,3) следует учесть более точное соотношение

$$a_0^2 + \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p = N.$$

В результате сумма членов (25,3—4) становится равной

$$N^2 + N \sum_{p \neq 0} (\hat{a}_p \hat{a}_{-p} + \hat{a}_p^+ \hat{a}_{-p}^+ + 2\hat{a}_p^+ \hat{a}_p),$$

и после подстановки в (25,2) получаем следующее выражение для гамильтониана:

$$\hat{H} = \frac{N^2}{2V} U_0 + \sum_p \frac{p^2}{2m} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \frac{N}{2V} U_0 \sum_{p \neq 0} (\hat{a}_p \hat{a}_{-p} + \hat{a}_p^+ \hat{a}_{-p}^+ + 2\hat{a}_p^+ \hat{a}_p). \quad (25,5)$$

Первый член этого выражения определяет, в первом приближении, энергию E_0 основного состояния газа, а его производная по N — соответственно химический потенциал μ при $T=0$:

$$E_0 = \frac{N^2}{2V} U_0, \quad \mu = \frac{N}{V} U_0. \quad (25,6)$$

Остальные же члены в (25,5) определяют поправку к E_0 и спектр слабо возбужденных состояний газа.

Входящий в (25,5) интеграл U_0 должен еще быть выражен через реальную физическую величину — длину рассеяния a . В членах второго порядка это может быть сделано прямо по формуле (6,2): $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$. В первом же члене нужна более точная формула (6,5), учитывающая второе борновское приближение в амплитуде рассеяния. При этом речь идет о столкновении двух частиц конденсата, соответственно чему в сумме в (6,5) надо положить $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}$, так что будет

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p^2} \right).$$

Подставив это в (25,5), получим для гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N^2}{V} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p^2} \right) + \\ & + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N}{V} \sum_{p \neq 0} (\hat{a}_p \hat{a}_{-p} + \hat{a}_p^+ \hat{a}_{-p}^+ + 2\hat{a}_p^+ \hat{a}_p) + \sum_p \frac{p^2}{2m} \hat{a}_p^+ \hat{a}_p. \quad (25,7) \end{aligned}$$

Для определения уровней энергии надо привести гамильтониан к диагональному виду, что осуществляется надлежащим линейным преобразованием операторов \hat{a}_p , \hat{a}_p^+ . Введем новые операторы \hat{b}_p , \hat{b}_p^+ , согласно определению,

$$\hat{a}_p = u_p \hat{b}_p + v_p \hat{b}_{-p}^+, \quad \hat{a}_p^+ = u_p \hat{b}_p^+ + v_p \hat{b}_{-p},$$

причем потребуем, чтобы они удовлетворяли таким же соотношениям коммутации

$$\hat{b}_p \hat{b}_{p'} - \hat{b}_{p'} \hat{b}_p = 0, \quad \hat{b}_p \hat{b}_p^+ - \hat{b}_p^+ \hat{b}_p = \delta_{pp'},$$

каким удовлетворяют операторы \hat{a}_p , \hat{a}_p^+ . Легко видеть, что для этого должны быть $u_p^2 - v_p^2 = 1$. Учтем это, написав линейное преобразование в виде

$$\hat{a}_p = \frac{\hat{b}_p + L_p \hat{b}_{-p}^+}{\sqrt{1 - L_p^2}}, \quad \hat{a}_p^+ = \frac{\hat{b}_p^+ + L_p \hat{b}_{-p}}{\sqrt{1 - L_p^2}}. \quad (25,8)$$

Величину L_p надо определить таким образом, чтобы в гамильтониане выпали недиагональные члены ($\hat{b}_p \hat{b}_{-p}$, $\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+$). Простое вычисление дает

$$L_p = \frac{1}{mu^2} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 \right\}, \quad (25,9)$$

где введены обозначения;

$$\varepsilon(p) = \left[u^2 p^2 + \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (25,10)$$

$$u = \left(\frac{4\pi\hbar^2 a N}{m^2 V} \right)^{1/2}. \quad (25,11)$$

При этом гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) \hat{b}_p^+ \hat{b}_p, \quad (25,12)$$

где

$$E_0 = \frac{N}{2} mu^2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 + \frac{m^3 u^4}{p^2} \right\}. \quad (25,13)$$

Вид гамильтониана (25,12) и бозевские соотношения коммутации для операторов \hat{b}_p , \hat{b}_p^+ позволяют заключить, что \hat{b}_p^+ и \hat{b}_p представляют собой операторы рождения и уничтожения квазичастиц с энергией $\varepsilon(p)$, подчиняющихся статистике Бозе. Собственные значения диагонального оператора $\hat{b}_p^+ \hat{b}_p$ представляют собой числа n_p квазичастиц с импульсом p , а формула (25,10) определяет зависимость их энергии от импульса (числа заполнения квазичастиц снова обозначены посредством n_p , в отличие от чисел заполнения N_p истинных частиц газа). Тем самым полностью определен энергетический спектр слабо возбужденных состояний рассматриваемого газа.

Величина же E_0 есть энергия основного состояния газа. Заменяв суммирование по дискретным значениям p (в объеме V)

интегрированием по $Vd^3p/(2\pi\hbar)^3$ и произведя вычисления, получим следующее выражение:

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV} \left[1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right] \quad (25,14)$$

(*T. D. Lee, C. N. Yang, 1957*). Для химического потенциала газа (при $T=0$) соответственно имеем

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \frac{4\pi\hbar^2 a N}{mV} \left[1 + \frac{32}{3} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right]. \quad (25,15)$$

Эти формулы представляют собой два первых члена разложения по степеням $(a^3 N/V)^{1/2}$. Но уже следующий член не мог бы быть вычислен изложенным способом. Он должен содержать объем как V^{-2} , а величина этого порядка зависит уже не только от двойных, но и от тройных столкновений.

При больших значениях импульса ($p \gg \mu$) энергия квазичастиц (25,10) стремится к $p^2/2m$, т. е. к кинетической энергии отдельной частицы газа.

При малых же импульсах ($p \ll \mu$) имеем $\epsilon \approx up$. Легко видеть, что коэффициент u совпадает со скоростью звука в газе, так что это выражение отвечает фононам в соответствии с общими утверждениями § 22. При $T=0$ свободная энергия совпадает с энергией E_0 ; и взяв главный член в разложении последней, находим давление

$$P = - \frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV^2}.$$

Скорость же звука получается как $u = \sqrt{\partial P / \partial \rho}$ (где $\rho = mN/V$ — плотность газа) и совпадает с (25,11).

Отметим, что в рассматриваемой модели бозе-газа длина рассеяния a непременно должна быть положительной величиной (отталкивательное взаимодействие между частицами). Это видно формально уже из того, что в полученных формулах для энергии при $a < 0$ появились бы мнимые члены. Термодинамический же смысл условия $a > 0$ заключается в том, что оно необходимо для соблюдения в данной модели бозе-газа неравенства $(\partial P / \partial V)_T < 0$.

Статистическое распределение элементарных возбуждений (средние значения n_p их чисел заполнения) при отличной от нуля температуре дается просто формулой распределения Бозе (22,2). Распределение же \bar{N}_p истинных частиц газа по импульсам можно вычислить усреднением оператора $\hat{a}_p^+ \hat{a}_p$. Используя (25,8) и учитывая, что произведения $\hat{b}_{-p} \hat{b}_p$ и $\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+$ не имеют

диагональных матричных элементов, получим

$$\bar{N}_p = \frac{\bar{n}_p + L_p^2 (\bar{n}_p + 1)}{1 - L_p^2}. \quad (25,16)$$

Это выражение справедливо, разумеется, лишь при $p \neq 0$. Число же частиц с нулевым импульсом

$$\bar{N}_0 = N - \sum_{p \neq 0} \bar{N}_p = N - \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \bar{N}_p d^3p. \quad (25,17)$$

В частности, при абсолютном нуле все $n_p = 0$, и с помощью (25,9) получим из (25,16) функцию распределения в виде ¹⁾

$$N_p = \frac{m^2 u^4}{2\varepsilon(p) \{ \varepsilon(p) + p^2/2m + mu^2 \}} \quad (25,18)$$

(при $T=0$ средние значения N_p совпадают с точными значениями; поэтому черту над буквой опускаем). Неидеальность бозе-газа приводит, естественно, к появлению частиц с отличным от нуля импульсом и при абсолютном нуле; интегрирование в (25,17) с N_p из (25,18) производится элементарно и дает

$$N_0 = N \left[1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{Na^3}{\pi V}} \right]. \quad (25,19)$$

Наконец, сделаем еще следующее замечание по поводу полученного здесь спектра. При малых p производная $d^2\varepsilon/dp^2 > 0$, т. е. кривая $\varepsilon(p)$ загибается вверх от начальной касательной $\varepsilon = up$. В таком случае (см. ниже § 34) возникает неустойчивость спектра, связанная с возможностью самопроизвольного распада квазичастиц (фононов). Соответствующая ширина урвней, однако, мала (пропорциональна p^2 при малых p) и не затрагивает выражений, получающихся в рассмотренных приближениях.

§ 26. Волновая функция конденсата

Как уже упоминалось в § 23; появление или исчезновение сверхтекучести в жидком гелии происходит путем фазового перехода второго рода. Такой переход всегда связан с каким-либо качественным изменением свойств тела. В случае λ -точки жидкого гелия это изменение может быть описано макроскопи-

¹⁾ Отметим, что максимум числа частиц с заданной величиной импульса ($\sim p^2 N_p$) лежит при $p/\hbar \sim \sqrt{aN/V}$, где происходит переход от одного предельного выражения $\varepsilon(p)$ к другому. Это обстоятельство было уже упомянуто в примечании на стр. 123.