§ 5. Неидеальный бозе-газ. Сверхтекучесть

Перейдем теперь к рассмотрению неидеального газа бозе-частиц.

Будем считать, что между частицами бозе-газа существует некоторое достаточно слабое взаимодействие. Оно может иметь характер как сил притяжения, так и сил отталкивания.

Гамильтониан системы частиц в x-представлении имеет вид

$$\hat{H} = -\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\alpha + \frac{1}{2} \sum U(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|),$$

где N — полное число частиц в системе и $U(|\boldsymbol{r}_\alpha - \boldsymbol{r}_\beta|)$ — энергия взаимодействия между частицами α и β. В разреженном газе можно учитывать только парные взаимодействия.

Для дальнейшего удобно считать газ заключенным в куб с ребром L. Тогда оператор Гамильтона свободной частицы

$$\hat{H}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\alpha$$

будет иметь дискретный спектр. Импульс свободной частицы будет иметь проекции, пробегающие дискретный ряд значений

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x, \qquad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y, \qquad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z,$$

где n_x, n_y, n_z — произвольные целые числа, включая и нуль. Собственные функции оператора $\hat{H}_\alpha$, нормированные на объем $V = L^3$, имеют вид

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}.$$

Применим теперь к рассмотрению системы взаимодействующих частиц метод вторичного квантования. Гамильтониан системы с парным взаимодействием дается формулой (99,25) ч. V.

$$\hat{H} = \sum E(\boldsymbol{p}_k) \hat{a}^+_{p_k} \hat{a}_{p_k} + \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} (lm|U|ki) \hat{a}^+_{p_l} \hat{a}^+_{p_m} \hat{a}_{p_k} \hat{a}_{p_i} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \tag{5,1}$$

Суммирование ведется по всем возможным дискретным значениям импульсов (как положительным, так и отрицательным). Энергия $E(\boldsymbol{p}_k)$ представляет энергию свободной частицы

$$E(\boldsymbol{p}_k) = \frac{p_k^2}{2m}.$$

Входящая в матричный элемент гамильтониана энергия взаимодействия U в силу сказанного зависит только от координат двух частиц.

Для вычисления матричного элемента можно воспользоваться волновыми функциями свободной частицы. Это дает

$$(lm|\,U\,|ik) = \frac{1}{V^2}\int_V e^{-\frac{i}{\hbar}(p_l r_1 + p_m r_2)}\,U(|\,r_1 - r_2\,|)\,e^{\frac{i}{\hbar}(p_i r_1 + p_k r_2)}\,dV_1\,dV_2.$$

Вводя новые переменные $q = r_1 - r_2$ и $R = (r_1 + r_2)/2$ и интегрируя, с учетом того, что

$$\int_V e^{\frac{i}{\hbar}pr}\,dV = \begin{cases} V & \text{при } p = 0, \\ 0 & \text{при } p \neq 0, \end{cases}$$

получаем

$$(lm|\,U\,|ik) = \begin{cases} \frac{1}{V}\nu(p_l - p_i) & \text{при } p_l + p_m = p_i + p_k, \\ 0 & \text{при } p_l + p_m \neq p_i + p_k, \end{cases} \tag{5,2}$$

где

$$\nu(p) = \int U(|\,q\,|)\,e^{-ipq}\,dq.$$

Интегрирование по всем углам можно выполнить непосредственно, поскольку U зависит только от абсолютной величины вектора q. Это дает:

$$\nu(p) = \int U(|\,q\,|)\,q^2\,dq \int e^{-ipq\cos\theta}\sin\theta\,d\theta \int d\varphi = 4\pi\int U(|\,q\,|)\frac{\sin(pq)}{pq}\,q^2\,dq.$$

Мы видим, что функция $\nu(p)$ является вещественной и для нее выполнено равенство $\nu(p) = \nu(-p)$. Оператор полной энергии системы частиц в соответствии с формулой (99,25) ч. V можно представить в виде

$$\hat{H} = \sum_{v_k}\frac{p_k^2}{2m}\hat{a}^+_{p_k}\hat{a}_{p_k} + \frac{1}{2}\sum\frac{1}{V}\nu(p_l - p_i)\,\hat{a}^+_{p_l}\hat{a}^+_{p_m}\hat{a}_{p_j}\hat{a}_{p_k}. \tag{5,3}$$

Во втором члене формулы (5,3) сумма берется только по таким значениям импульсов p_i, p_k, p_l, p_m, для которых выполняется соотношение

$$p_l + p_m = p_i + p_k.$$

Дальнейшая задача заключается в определении собственных значений гамильтониана (5,3), т. е. в приведении матрицы энергии к диагональному виду.

При исследовании низших энергетических состояний теория возмущений неприменима. Наглядно это видно из того, что в нижних энергетических состояниях, т. е. при малых значениях импульса, кинетическая энергия системы стремится к нулю. Наоборот, энергия взаимодействия имеет конечное значение и велика по сравнению с кинетической энергией. Поэтому для исследования слабо возбужденных состояний Н. Н. Боголюбовым был развит особый приближенный метод. Рассмотрим сначала систему, в которой взаимодействие отсутствует. В основном энергетическом состоянии такой системы импульсы всех частиц равны нулю, т. е.

$$\left.\begin{aligned} n_p &= 0 \quad \text{при} \quad p \neq 0, \\ n_p &= N \quad \text{при} \quad p = 0, \end{aligned}\right\} \tag{5,4}$$

где n_p — число частиц с импульсом p. Естественно думать, что и при наличии слабого взаимодействия в низшем состоянии системы большинство частиц будет находиться с импульсами, равными нулю.

В соответствии со сказанным примем, что

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_0^+\hat{a}_0 &= n_0 \approx N, \\ \hat{a}_p^+\hat{a}_p &= n_p \ll N. \end{aligned}\right\} \tag{5,5}$$

Операторы $\hat{a}_0^+$ и $\hat{a}_0$ удовлетворяют перестановочному соотношению (99,9) ч. V

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

Поскольку $\hat{a}_0^+\hat{a}_0 = n_0$ велико по сравнению с единицей, в дальнейшем будем пренебрегать некоммутативностью этих операторов, т. е. будем заменять операторы $\hat{a}_0$ и $\hat{a}_0^+$ обычными числами.

Предположения (5,4), (5,5) существенно упрощают выражение для гамильтониана взаимодействия. Именно, в сумме по всем импульсам следует оставить только большие слагаемые, в которых множители $\hat{a}_0^+$ или $\hat{a}_0$ входят попарно или четырехкратно. Такими слагаемыми являются

$$\hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_0\hat{a}_0, \qquad \hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_p\hat{a}_p, \qquad \hat{a}_0^+\hat{a}_p^+\hat{a}_0\hat{a}_p^+$$

и т. п.

Наоборот, слагаемые типа $\hat{a}_0^+\hat{a}_{p_m}^+\hat{a}_{p_l}\hat{a}_{p_k}$, где $p_m \neq 0$, $p_l \neq 0$ и $p_k \neq 0$, малы и могут быть опущены.

Таким образом, для $\hat{H}'$ находим:

$$\hat{H}' = \sum_{p_l+p_m=p_i+p_k} \nu(p_l - p_i)\, \hat{a}^+_{p_l} \hat{a}^+_{p_m} \hat{a}_{p_i} \hat{a}_{p_k} \simeq$$

$$\simeq \sum_{p \neq 0} \nu(p) \left\{ \hat{a}^+_p \hat{a}^+_0 \hat{a}_p \hat{a}_0 + \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_p \hat{a}_0 \hat{a}_p + \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}_p \hat{a}_p + \hat{a}^+_{-p} \hat{a}^+_{-p} \hat{a}_0 \hat{a}_0 \right\} +$$

$$+ \nu(0)\, \hat{a}^+_0 \hat{a}^+_0 \hat{a}_0 \hat{a}_0 \simeq \nu(0)\, n^2 + \sum_{p \neq 0} \nu(p) \left\{ 2\hat{a}^+_p \hat{a}_p n_0 + \hat{a}^+_p \hat{a}^+_p n_0 + \hat{a}_{-p} \hat{a}_{-p} n_0 \right\}.$$

Поскольку полное число частиц в системе N равно

$$N = n_0 + \sum_{p \neq 0} \hat{a}^+_p \hat{a}_p,$$

где второе слагаемое мало́ по сравнению с первым, в том же приближении имеем

$$\hat{H}' = \sum \nu(p_l - p_i)\, \hat{a}^+_{p_l} \hat{a}^+_{p_m} \hat{a}_{p_i} \hat{a}_{p_k} \simeq$$

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

$$+ N \sum_{p \neq 0} \nu(p) \left(\hat{a}^+_p \hat{a}_{-p} + \hat{a}^+_{-p} \hat{a}_p \right). \qquad (5,6)$$

Опущенные слагаемые имеют порядок $\sqrt{N}$. Полный гамильтониан $\hat{H}$ с точностью до величины порядка N приобретает вид

$$\hat{H} = \sum_{p \neq 0} \left\{ \frac{p^2}{2m} + \frac{n_0}{V} \nu(p) \right\} \hat{a}^+_p \hat{a}_p + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \nu(0) +$$

$$+ \frac{N}{2V} \sum_{p \neq 0} \nu(p)\, \hat{a}^+_p \hat{a}^+_{-p} + \frac{N}{2V} \sum_{p \neq 0} \nu(p)\, \hat{a}_p \hat{a}_{-p}. \qquad (5,7)$$

Введем новые операторы $\hat{b}^+_p$ и $\hat{b}_p$, которые определим следующим образом:

$$\hat{b}_p = \frac{\hat{a}^+_0 \hat{a}_p}{\sqrt{n_0}}, \qquad \hat{b}^+_p = \frac{\hat{a}_0 \hat{a}^+_p}{\sqrt{n_0}}. \qquad (5,8)$$

Определенные таким образом операторы $\hat{b}_p$ и $\hat{b}^+_p$ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и операторы $\hat{a}_p$ и $\hat{a}^+_p$, поскольку a_0 и a^+_0 мы считаем обычными числами. Кроме того, как легко видеть,

$$\hat{b}^+_p \hat{b}_p = \hat{a}^+_p \hat{a}_p = n_p, \qquad (5,9)$$

так как $a_0^+a_0 = n_0$. С помощью операторов $\hat{b}_p$ и $\hat{b}_p^+$ гамильтониан (5,7) можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_{p \neq 0} \frac{p^2}{2m} \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \nu(0) + \frac{n_0}{2V} \sum_{p \neq 0} \nu(p) \left[\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+ + \hat{b}_p \hat{b}_{-p} + 2\hat{b}_p^+ \hat{b}_p \right]. \qquad (5,10)$$

Для приведения гамильтониана (5,10) к диагональному виду совершим линейное преобразование к новым операторам $\hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p^+$ по формулам

$$\left. \begin{aligned} \hat{b}_p &= u_p \hat{\xi}_p + v_p \hat{\xi}_{-p}^+, \\ \hat{b}_p^+ &= u_p \hat{\xi}_p^+ + v_p \hat{\xi}_{-p}, \end{aligned} \right\} \qquad (5,11)$$

где

$$u_p^2 - v_p^2 = 1; \qquad u_p = u_{-p}; \qquad v_p = v_{-p}.$$

Если u_p и v_p — вещественные функции импульса p, то новые бозе-операторы $\hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p^+$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (99,9) ч. V. Подставляя (5,11) в (5,10) и требуя, чтобы коэффициенты при операторах типа $\hat{\xi}_p^+\hat{\xi}_p$ и $\hat{\xi}_p\hat{\xi}_p$ обращались в нуль, найдем функции u_p и v_p. Простое, но несколько длинное вычисление дает

$$u_p = \frac{1}{\sqrt{1 - A_p^2}}, \qquad v_p = \frac{A_p}{\sqrt{1 - A_p^2}},$$

$$A_p = \frac{V}{n_0 \nu(p)} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - \frac{n_0}{V} \nu(p) \right\},$$

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\frac{n_0}{V} \frac{p^2 \nu(p)}{m} + \frac{p^4}{4m^2}}. \qquad (5,12)$$

При этом в операторе $\hat{H}$ сохраняются только диагональные члены и он приводится к виду

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) \hat{\xi}_p^+ \hat{\xi}_p. \qquad (5,13)$$

Собственные значения оператора Гамильтона (5,13) равны

$$E = E_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) n'(p), \qquad (5,14)$$

где

$$E_0 = \frac{N^2}{2V} \nu(0) + \sum_{p \neq 0} \frac{1}{2} \left[\varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - \frac{n_0}{V} \nu(p) \right], \qquad (5,15)$$

а $n'(p)$ — произвольные целые числа.

Можно найти также полный импульс системы частиц. Он оказывается равным

$$\boldsymbol{P}=\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\boldsymbol{p}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}=\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}.$$

Если в последнем равенстве от операторов $\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ и $\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ перейти к операторам $\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ и $\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}$, то получим

$$\boldsymbol{P}=\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}=\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}n_{\boldsymbol{p}}'. \tag{5,16}$$

Формулы (5,14) и (5,16) допускают простую корпускулярную трактовку. Мы видим, что энергия системы представлена в виде суммы двух членов. Первый член E_0 представляет собой энергию основного (низшего) состояния. Второй член можно трактовать как энергию квазичастиц, представляющих коллективные возбуждения системы, $n_{\boldsymbol{p}}'$ — число элементарных возбуждений в состоянии с импульсом $\boldsymbol{p}$. Энергия каждого элементарного возбуждения равна $\varepsilon(\boldsymbol{p})$ (5,12).

При малых импульсах энергия возбуждения представляется в виде

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\sqrt{\frac{\nu(0)}{mV_0}}\,|\boldsymbol{p}|. \tag{5,17}$$

Здесь $V_0=\frac{V}{n_0}\approx\frac{V}{N}$ представляет объем, приходящийся на одну частицу. Из формулы (5,17) следует, что должно выполняться неравенство

$$\nu(0)=\int U(q)\,d\boldsymbol{q}>0, \tag{5,18}$$

что отвечает преобладанию сил отталкивания. Если, наоборот, $\nu(0)<0$, то энергия оказывается мнимой, что соответствует неустойчивому состоянию системы.

При больших импульсах энергия имеет вид

$$\varepsilon(p)=\frac{p^2}{2m}+\frac{\nu(p)}{V_0}. \tag{5,19}$$

Следует заметить, что существование элементарных возбуждений представляет собой коллективный эффект всей системы. Каждое возбуждение связано с состоянием системы в целом, а не с состоянием отдельной частицы. Идеальный газ возбуждений, характеризуемый гамильтонианом (5,13), подчиняется статистике Бозе, так как операторы $\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}^{+}$ и $\hat{\xi}_{\boldsymbol{p}}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям (99,9) ч. V.

Легко показать, что рассматриваемая система обладает свойством сверхтекучести. Предположим, что всей совокупности частиц сообщена какая-то дополнительная скорость $\boldsymbol{v}$ по отношению к некоторой неподвижной системе, например, по отношению к стенкам трубки или сосуда, содержащего неидеальный бозе-газ. Тогда можно считать, что все полученные результаты будут справедливы в системе, движущейся со скоростью $\boldsymbol{v}$, по отношению к некоторой неподвижной. Если энергия в движущейся системе равна E, а в неподвижной E^v, то между ними существует соотношение

$$E^v = E + \frac{Nmv^2}{2} + \boldsymbol{vP}, \tag{5,20}$$

где $\boldsymbol{P}$ — полный импульс бозе-газа в подвижной системе. Используя выражение (5,14) и (5,16), получаем

$$E^v = E_0 + \frac{Nmv^2}{2} + \sum_p n'_p \{\varepsilon(p) + \boldsymbol{vp}\}. \tag{5,21}$$

Для того чтобы совокупность частиц затормозилась, надо чтобы появились возбуждения с импульсами, направленными против скорости $\boldsymbol{v}$. Приращение энергии при появлении одного такого возбуждения равно

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(p) - |\boldsymbol{v}||\boldsymbol{p}|. \tag{5,22}$$

Если приращение энергии системы $\Delta\varepsilon > 0$, то появление возбуждений энергетически невыгодно. Это означает, что система будет неопределенно долго двигаться со скоростью $\boldsymbol{v}$ без появления таких возбуждений. Торможение в системе отсутствует и она обладает свойством сверхтекучести. Сформулируем теперь условие сверхтекучести. Для того чтобы величина $\Delta\varepsilon$ была положительной, необходимо выполнение неравенства

$$\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|} > |\boldsymbol{v}|$$

при произвольных $\boldsymbol{p}$. Обозначим минимальную величину отношения $\varepsilon(\boldsymbol{p})/|\boldsymbol{p}|$ через $\boldsymbol{v}^*$. Тогда при движении со скоростью $\boldsymbol{v} < \boldsymbol{v}^*$ имеет место сверхтекучесть. Следовательно, сверхтекучесть в системе возможна, если выполняется неравенство

$$|\boldsymbol{v}^*| = \text{мин}\left(\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|}\right) > 0. \tag{5,23}$$

Из выражения (5,12) для $\varepsilon(\boldsymbol{p})$ следует, что

$$v^* = \left(\frac{\varepsilon(p)}{|\boldsymbol{p}|}\right)_{p\to 0} = \left(\sqrt{\frac{n_0\nu(p)}{Vm} + \frac{p^2}{4m^2}}\right)_{p\to 0} = \sqrt{\frac{n_0\nu(0)}{mV}}.$$

Если $\nu(0) > 0$, то v^* вещественна и положительна. Таким образом, в случае преобладания сил отталкивания в неидеальном бозе-газе существует вещественное и положительное значение v^* и бозе-газ обладает свойством сверхтекучести.

В случае, если взаимодействие между частицами отсутствует (идеальный бозе-газ), то $U(q) = 0$, $\nu(p) = 0$ и энергия возбуждений дается формулой

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}. \tag{5,24}$$

При этом $v^* = 0$, так что идеальный бозе-газ не обладает сверхтекучестью.

Таким образом, мы видим, что свойство сверхтекучести проявляется в неидеальном и отсутствует в идеальном бозе-газе. Сверхтекучесть не связана со спецификой системы бозе-частиц. Для ее существования требуется особая формула энергетического спектра коллективных возбуждений системы. Именно, согласно (5,23), для этого нужно, чтобы отношение минимальной энергии возбуждения системы как целого к импульсу этого возбуждения имело конечное значение.

Спектр возбуждений газа невзаимодействующих бозе-частиц при малых возбуждениях имеет вид (5,24) и не удовлетворяет (5,23).

Спектр возбуждений газа взаимодействующих бозе-частиц удовлетворяет условию (5,23) только в случае наличия сил отталкивания между частицами. Силы притяжения не приводят к сверхтекучести системы взаимодействующих бозе-частиц. Необходимо, однако, подчеркнуть, что при получении этого результата было существенно использовано свойство бозе-частиц: мы полагали, что основная масса взаимодействующих частиц находится в состоянии с импульсом равным нулю, т. е. образует конденсат в пространстве импульсов. Это служит необходимым условием для появления сверхтекучести бозе-газа; однако указанное условие не является достаточным, поскольку в идеальном бозе-газе также образуется конденсат, но нет сверхтекучести. Различие между конденсатом идеального и неидеального бозе-газа видно из следующего рассуждения: пусть идеальный бозе-газ как целое движется с некоторой скоростью v относительно стенок сосуда. Если одна из частиц в результате взаимодействия со стенкой остановится, то остальная масса газа будет продолжать движение с меньшей кинетической энергией. Последовательное повторение этого процесса в конечном счете затормозит газ.

Иначе обстоит дело в случае газа, частицы которого связаны между собой силами отталкивания. Остановка отдельных частиц здесь невозможна. Взаимодействие со стенкой должно тормозить или, что то же самое, возбуждать всю систему как целое. При скорости движения $v < v^*$ это оказывается невозможным.

Представлялось естественным перенести этот вывод, полученный для неидеального бозе-газа, на бозе-жидкость. Хотя формально предположение о парном характере взаимодействия в жидкости не выполнено, качественные рассуждения о спектре малых возбуждений коллективного движения относятся и к бозе-жидкости[1]).

---

[1]) См. K. Brueckner, K. Sawada, Phys. Rev. **106**, 1117, 1128 (1957). О сверхтекучести см. И. М. Халатников, Введение в теорию сверхтекучести, «Наука», 1965.