

О двух подходах к описанию разреженных сверхтекучих бозе-систем

С.И. Шевченко, А.С. Рукин

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: shevchenko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 21 февраля 2012 г.

На примере атомов щелочных металлов изучен вопрос об адекватности описания газа сложных частиц, состоящих из четного числа фермионов, как точечных бозонов. В приближении низкой плотности получено уравнение для комплексного параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, имеющего смысл волновой функции атомов с учетом внутреннего движения валентных электронов. Для сверхтекучих систем, образованных частицами с внутренними степенями свободы, это уравнение заменяет уравнение Гросса–Питаевского. Показано, что в общем случае обменные эффекты необходимо учитывать в том же приближении, что и эффекты прямого взаимодействия атомов друг с другом. В частности, в случае чисто кулоновского взаимодействия пренебрежение обменными эффектами приводит к качественно неверным результатам. Исследована проблема спонтанной электрической поляризации сверхтекучих систем. Получено выражение для электрической поляризации неоднородной сверхтекучей системы.

На прикладі атомів лужних металів вивчено питання про адекватність опису газу складних частинок, які містять парну кількість ферміонів, як точкових бозонів. У наближенні низької густини отримано рівняння для комплексного параметра порядку $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, що має значення хвильової функції атомів з урахуванням внутрішнього руху валентних електронів. Для надплинних систем, які утворено частинками з внутрішніми ступенями свободи, це рівняння замінює рівняння Гросса–Пітаєвського. Показано, що в загальному випадку обмінні ефекти необхідно враховувати в тому ж наближенні, що й ефекти прямої взаємодії атомів один з одним. Зокрема, у випадку чисто кулонівської взаємодії нехтування обмінними ефектами призводить до якісно невірних результатів. Досліджено проблему спонтанної електричної поляризації надплинних систем. Отримано вираз для електричної поляризації неоднорідної надплинної системи.

PACS: 67.90.+z Другие темы в квантовых жидкостях и твердых телах;
67.25.D– Сверхтекучая фаза.

Ключевые слова: составные бозоны, обменное взаимодействие, сверхтекучесть, поляризация.

Введение

Как хорошо известно, принадлежность сложной частицы к бозону или фермиону определяется количеством входящих в нее фермионов (электронов, протонов и нейтронов). Обычно, установив, что данная частица является, например, бозоном, описывают свойства системы таких частиц как точечных бозонов, «забывая» о ее сложной внутренней структуре. Однако в некоторых случаях явление, которым интересуются в теории или в эксперименте, обусловлено различными внутренними состояниями образующих систему частиц. И возникает вопрос о разработке методов описа-

ния поведения совокупности сложных частиц с учетом их внутренних степеней свободы. Один из таких методов еще много лет назад был предложен Зубаревым [1,2]. Идея метода состоит во введении полевых операторов, описывающих рождение и уничтожение частицы в i -м возбужденном состоянии, и потенциалов взаимодействия, которые приводят к переходам частиц из состояний i, j в состояния k, l (подробности см. ниже). Для этих полевых операторов получены уравнения движения, с помощью которых найдены законы сохранения, позволяющие исследовать релаксацию внутренних степеней свободы. Метод Зубарева развивался, в частности, Покровским [3,4].

В работах [1–4] речь шла о нормальных (не сверхтекучих) системах. В недавно выполненном во ФТИНТе цикле экспериментов [5,6] было обнаружено, что относительное движение нормальной и сверхтекучей компонент ^4He сопровождается появлением в системе электрических полей. Эти эксперименты свидетельствуют о необходимости применения теории, учитывающей внутреннее движение сложных частиц, для сверхтекучих систем. Один из возможных способов микроскопического описания наблюдаемых эффектов состоит в применении к этим системам метода Зубарева (феноменологические подходы к проблеме можно найти в теоретических работах [7–16]). Для разреженных бозе-систем, для которых только и может быть построена последовательная микроскопическая теория, основным результатом может быть получен заменой полевых операторов в i -м возбужденном состоянии на S -числа. При этом полученная Зубаревым система уравнений для полевых операторов переходит в систему уравнений типа Гросса–Питаевского для конденсатов частиц в i -м возбужденном состоянии. Описание сложных бозе-частиц с помощью системы таких уравнений было использовано в [17].

Но еще до работы [17] в нескольких работах авторов [18–21] для описания эффектов, связанных с внутренним движением сложных бозонов, развивался принципиально другой подход. Авторы моделировали бозе-систему разреженным электрон-дырочным газом, частицы которого взаимодействуют друг с другом по кулоновскому закону. Электроны и дырки образуют связанные пары, и макроскопическое поведение газа электрон-дырочных пар описывалось комплексным параметром порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Его отличие от S -числового параметра порядка, удовлетворяющего системе уравнений Гросса–Питаевского, состоит в том, что $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ есть функция двух координат (электрона и дырки), что позволяет по известной $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ найти дипольный момент системы. С помощью предложенной Келдышем волновой функции электрон-дырочного газа удалось вычислить энергию газа как функционал от $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и получить интегро-дифференциальное уравнение для $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Решив это уравнение, авторы нашли дипольный момент системы.

Однако оказалось, что случай бозе-частиц, взаимодействующих друг с другом по кулоновскому закону, является выделенным, и, ограничившись этим видом взаимодействия, мы не учитываем часть существенных для реальных физических систем эффектов. В качестве модели в настоящей работе используется разреженный газ, образованный атомами какого-либо щелочного металла, что позволяет сделать простое, но важное обобщение полученных ранее результатов. Рассмотрен также вопрос об адекватности метода Зубарева и подхода работ [18–21] и показано, что в первом из них полностью теряется вклад в результаты обменного

взаимодействия. Подробно исследована гипотеза о возможности спонтанной поляризации в сверхтекучих системах.

Материал статьи организован следующим образом. В первом разделе рассмотрен метод Зубарева описания частиц с внутренними степенями свободы. В случае сверхтекучей системы получены уравнения для конденсатных волновых функций методом уравнений движения Зубарева, а также методом когерентных состояний. Во втором разделе найдено уравнение для параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и приведено выражение для поляризации \mathbf{P} через $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Третий раздел посвящен сравнению указанных двух подходов. Устанавливается причина неэквивалентности когерентных состояний бозонов и пар фермионов. В четвертом разделе найдено условие появления двух бозе-конденсатов в однородной системе и возникновения ее спонтанной электрической поляризации. В пятом разделе рассматривается неоднородная система атомов, демонстрируется, что неоднородность приводит к поляризации, изучается вклад прямого и обменного взаимодействий в поляризацию системы.

1. Частицы с внутренними степенями свободы

Пусть мы имеем систему (газ или жидкость), состоящую из сложных атомов или молекул. Тогда возможно возбуждение внутренних степеней свободы образующих систему частиц. Будем обозначать через \mathbf{r} совокупность переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$, описывающих внутренние степени свободы частиц, а через \mathbf{R} — координаты их центров масс. Гамильтониан системы запишем в виде

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a + \sum_{a>b} U(\mathbf{R}_a, \mathbf{r}_a; \mathbf{R}_b, \mathbf{r}_b). \quad (1)$$

Здесь \hat{H}_a — одночастичный гамильтониан, зависящий только от координат a -й частицы, а $U(\mathbf{R}_a, \mathbf{r}_a; \mathbf{R}_b, \mathbf{r}_b)$ описывает взаимодействие между частицами a и b .

$$\hat{H}_a = \hat{K}(\mathbf{R}_a) + \hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_a), \quad (2)$$

где $\hat{K}(\mathbf{R}_a)$ — оператор кинетической энергии частицы

$$\hat{K}(\mathbf{R}_a) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_a^2}, \quad (3)$$

а $\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_a)$ — гамильтониан ее внутренних степеней свободы, причем

$$\hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}_a) \phi_i(\mathbf{r}_a) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}_a), \quad (4)$$

где $\phi_i(\mathbf{r}_a)$ и ε_i — собственная функция и энергия внутреннего состояния. Следуя Зубареву [2], запишем гамильтониан (1) в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left\{ \hat{K}(\mathbf{R}) + \hat{H}_{\text{int}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}', \mathbf{r}') U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{R}', \mathbf{r}') d\mathbf{R}' d\mathbf{r}' \right\} \hat{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) d\mathbf{R} d\mathbf{r}. \quad (5)$$

Здесь

$$\hat{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, i} \hat{a}_{\mathbf{k}i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \phi_i(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}i}$ — операторы вторичного квантования в пространстве чисел заполнения \mathbf{k} и i . Продолжая следовать Зубареву [2], введем операторы $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$, описывающие подсистему с данным квантовым числом i ,

$$\hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (7)$$

Старые операторы $\hat{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, очевидно, связаны с операторами $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ с помощью соотношения

$$\hat{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}). \quad (8)$$

В случае рассматриваемых ниже бозе-систем операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}i}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям для бозе-частиц, и в результате операторы $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) \hat{\Psi}_j^+(\mathbf{R}') - \hat{\Psi}_j^+(\mathbf{R}') \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \\ \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) \hat{\Psi}_j(\mathbf{R}') - \hat{\Psi}_j(\mathbf{R}') \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

С помощью операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ гамильтониан (5) системы сложных частиц записывается в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i \int \hat{\Psi}_i^+(\mathbf{R}) \left[\hat{K}(\mathbf{R}) + \varepsilon_i \right] \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \int \hat{\Psi}_i^+(\mathbf{R}) \hat{\Psi}_j^+(\mathbf{R}') U_{ij,kl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \hat{\Psi}_k(\mathbf{R}') \hat{\Psi}_l(\mathbf{R}) d\mathbf{R} d\mathbf{R}', \end{aligned} \quad (10)$$

где функции $U_{ij,kl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ равны

$$U_{ij,kl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (11)$$

Они играют роль потенциалов взаимодействия между частицами в состояниях k и l , в результате которого они превращаются в частицы в состояниях i и j .

Гамильтониан (10) позволяет оперировать со сложными частицами как с бесструктурными. С его помощью легко получить следующие уравнения движения для операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_i(\mathbf{R})}{\partial t} &= \left[\hat{K}(\mathbf{R}) + \varepsilon_i \right] \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j,k,l} \int \hat{\Psi}_j^+(\mathbf{R}') \left[U_{ij,kl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') + U_{ji,lk}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \right] \hat{\Psi}_k(\mathbf{R}') \hat{\Psi}_l(\mathbf{R}) d\mathbf{R}'. \end{aligned} \quad (12)$$

Изложенный метод можно применить для анализа сверхтекучих систем, в частности разреженных бозе-газов. Как известно, поведение разреженного бозе-газа можно описывать с помощью параметра порядка $\Psi(\mathbf{R})$, который совпадает с волновой функцией частиц в бозе-конденсате. В идеальном газе при $T=0$ в бозе-конденсате находятся все частицы газа, взаимодействие приводит к истощению конденсата, но число надконденсатных частиц мало, и им в первом приближении можно пренебрегать. Уравнение для параметра порядка $\Psi(\mathbf{R})$ можно получить, заменяя в уравнениях движения для полевого оператора $\hat{\Psi}(\mathbf{R})$ этот оператор на C -число $\Psi(\mathbf{R})$. Если допустить, что в результате взаимодействия в системе возникает сразу несколько бозе-конденсатов, описываемых своими параметрами порядка $\Psi_i(\mathbf{R})$, то уравнения для этих параметров порядка можно получить, заменяя в уравнениях (12) полевые операторы на C -числа. Получающаяся система уравнений для $\Psi_i(\mathbf{R})$ представляет собой обобщение уравнения Гросса-Питаевского на случай нескольких бозе-конденсатов. Фактически параметры порядка $\Psi_i(\mathbf{R})$ — комплексные функции, определенные как ожидаемая величина полевого оператора $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$, т.е.

$$\Psi_i(\mathbf{R}) = \langle \Phi_0 | \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) | \Phi_0 \rangle, \quad (13)$$

где $|\Phi_0\rangle$ — волновая функция основного состояния многочастичной системы. Модуль функции $\Psi_i(\mathbf{R})$ определяет плотность n_{0i} бозе-конденсата в состоянии i , точнее $n_{0i}(\mathbf{R}) = |\Psi_i(\mathbf{R})|^2$.

Полезно также получить уравнение для функций $\Psi_i(\mathbf{R})$ другим образом. Для этого учтем, что равенство (13), очевидно, будет удовлетворяться, если $|\Phi_0\rangle$ — собственная функция операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$

$$\hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) |\Phi_0\rangle = \Psi_i(\mathbf{R}) |\Phi_0\rangle. \quad (14)$$

Уравнение (14) легко решить. С этой целью используем для операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ разложение (7), а для функций $\Psi_i(\mathbf{R})$ — разложение

$$\Psi_i(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (15)$$

Учитывая, что собственные функции операторов уничтожения \hat{a} , отвечающие собственным значениям α , равны (см., например, [22])

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \text{h.c.}) |0\rangle, \quad (16)$$

где $|0\rangle$ — вакуумное состояние, находим выражение для собственных функций $|\Phi_0\rangle$

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}, i} \exp(\alpha_{\mathbf{k}i} \hat{a}_{\mathbf{k}i}^+ - \text{h.c.}) |0\rangle = \exp\left(\sum_i \int \Psi_i(\mathbf{R}) \hat{\Psi}_i^+(\mathbf{R}) d\mathbf{R} - \text{h.c.}\right) |0\rangle \equiv \hat{D}_B |0\rangle. \quad (17)$$

Индекс B обозначает, что оператор \hat{D}_B относится к бозонам, аналогичный оператор для фермионов в дальнейшем будет обозначен \hat{D}_F . Функции $\Psi_i(\mathbf{R})$ остаются пока произвольными, и их вид в стационарном случае, рассмотрением которого мы ниже ограничимся, можно найти следующим образом. Вычислим с помощью функций (17) энергию системы

$$E = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = \langle 0 | \hat{D}_B^+ \hat{H} \hat{D}_B | 0 \rangle. \quad (18)$$

Если ввести обозначения

$$\hat{\Psi}_i = \hat{D}_B^+ \hat{\Psi}_i \hat{D}_B, \quad (19)$$

то из унитарности оператора \hat{D} (см. (17)) следует, что

$$\hat{H} \equiv \hat{D}_B^+ \hat{H} (\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}) \hat{D}_B = \hat{H} (\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}). \quad (20)$$

Вычисление $\hat{\Psi}$ очень просто, поскольку, записав оператор \hat{D}_B в виде $\hat{D}_B = \exp \hat{A}$, находим

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) &= \hat{\Psi}_i - \left[\hat{A}, \hat{\Psi}_i \right] + \frac{1}{2} \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{\Psi}_i \right] \right] - \dots = \\ &= \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) - \left[\int \left(\sum_j \Psi_j(\mathbf{R}_1) \hat{\Psi}_j^+(\mathbf{R}_1) d\mathbf{R}_1 - \text{h.c.} \right), \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) \right] + \dots = \\ &= \hat{\Psi}_i(\mathbf{R}) + \Psi_i(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь учтено, что операторы $\hat{\Psi}_i, \hat{\Psi}_i^+$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (9). Легко видеть, что ряд (21) обрывается на втором слагаемом, так как коммутатор $\left[\hat{A}, \hat{\Psi}_i \right]$ является C -числом и коммутирует в дальнейшем с любым оператором. Подставляя полученные выражения для $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ в $\hat{H}(\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi})$, приходим к выражению для энергии системы

$$E = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = H(\Psi^*, \Psi), \quad (22)$$

где $H(\Psi^*, \Psi)$ — функционал энергии, который получается из гамильтониана \hat{H} в (10) заменой операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ и $\hat{\Psi}_i^+(\mathbf{R})$ на C -числовые функции $\Psi_i(\mathbf{R})$ и $\Psi_i^*(\mathbf{R})$ соответственно. Варьируя функционал $H(\Psi^*, \Psi)$ по $\Psi_i^*(\mathbf{R})$, приходим к уравнениям для $\Psi_i(\mathbf{R})$, которые в точности совпадают с уравнениями, следующими из (12) в стационарном случае. Анализ этих уравнений посвящен разд. 3.

2. Когерентное состояние фермионных пар

Хотя изложенный выше подход к описанию поведения системы частиц с внутренними степенями свободы представляется весьма естественным, в действи-

тельности он является не вполне адекватным. Причина в том, что связанный комплекс из двух или любого четного числа фермионов не ведет себя в общем случае как бозон. По-видимому, впервые с этой проблемой столкнулись Бардин, Купер и Шриффер [23] при построении теории сверхпроводимости на основании идеи об образовании между электронами куперовских пар. Теория БКШ описывает системы с высокой плотностью, в которых размер куперовских пар велик по сравнению с расстоянием между парами. Позже Келдыш и Козлов показали [24], что и в системах с низкой плотностью, где размер электрон-дырочных пар мал по сравнению со средним расстоянием между парами, нельзя пренебрегать отклонением статистики экситонов от бозевской. Они показали, что эти отклонения проявляются в том же порядке, что и эффекты, связанные с неидеальностью бозе-газа пар. Шриффер [25] для описания состояния с куперовскими парами предложил использовать когерентное состояние (17), в котором операторы рождения бозонов заменены на операторы рождения куперовских пар $\hat{b}_{\mathbf{k}}^+ = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+$ ($\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ — операторы рождения электронов), получив тем самым волновую функцию БКШ. Легко убедиться, что операторы $\hat{b}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям, отличным от бозевских. Они удовлетворяют статистике Бозе при $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ и принципу Паули $\hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ = \hat{b}_{\mathbf{k}}^2 = 0$ при $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Келдыш [26] поступил аналогичным образом. Он постулировал в качестве волновой функции сверхтекучего состояния электрон-дырочных пар когерентное состояние, в котором операторы бозонов заменены на операторы рождения экситонов $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{k}}^+$, где $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ — оператор рождения электрона, $\hat{b}_{-\mathbf{k}}^+$ — оператор рождения дырки.

Авторы в ряде работ [18–21], развивая подход Келдыша, изучили свойства разреженной электрон-дырочной системы, обусловленные их внутренней структурой. В этом разделе мы обобщим теорию [18–21] на случай атомов щелочных металлов. Интерес к бозе-газам, образованным атомами щелочных металлов, стимулируется многочисленными экспериментами, выполненными за последние годы с парами щелочных металлов при сверхнизких температурах (см., например, [27] и цитируемую там литературу). При этом мы установим принципиальное отличие электрон-дырочных систем, в которых, как известно, частицы взаимодействуют по кулоновскому закону, от других бозе-систем.

Итак, рассмотрим разреженный газ, образованный атомами некоторого щелочного металла, при равной нулю температуре. Будем рассматривать каждый атом как систему, образованную двумя фермионами: валентным электроном с отрицательным зарядом $-|e|$ и атомным «остовом» с положительным зарядом $|e|$. Гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования запишем в виде

$$H_F = \int \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}_e(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{r}') U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (23)$$

Здесь α и β пробегает значения e и c для электронов и атомных остовов (cores) соответственно, $\hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r})$ и $\hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r})$ — операторы рождения электрона и атомного остова в точке \mathbf{r} , удовлетворяющие фермиевским коммутационным соотношениям. Таким образом, в нашей теории учитываются не все внутренние движения в атоме, а лишь движение валентного электрона и движение атомного остова как целого. Оправданием такого приближения служит то обстоятельство, что энергия связи на один электрон, находящийся на внутренней оболочке, гораздо больше, чем для электрона, находящегося на внешней оболочке. Например, отрыв первого (валентного) электрона у лития требует затраты энергии 5,4 эВ. При отрыве второго и третьего электронов, лежащих на внутренней оболочке, требуется затратить соответственно энергию 76 и 122 эВ.

Поскольку электрон и атомный остов образуют связанное состояние, то можно ожидать, что волновая функция основного состояния системы представляет собой когерентное состояние, которое мы, следуя работам [26,18,19], запишем в виде

$$|\Phi_0\rangle = \exp \left\{ \int \left[\hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r}_1) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}_2) - \text{h.c.} \right] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right\} |0\rangle \equiv \hat{D}_F |0\rangle \quad (24)$$

Здесь неизвестная пока функция $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (параметр порядка) может быть найдена в рассматриваемом нами стационарном случае из требования минимума энергии системы атомов, вычисленной с помощью волновой функции (24). Эта энергия равна

$$E = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle = \langle 0 | \hat{D}_F^+ \hat{H} \hat{D}_F | 0 \rangle \quad (25)$$

Используя обозначение

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \hat{D}_F^+ \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{D}_F \quad (26)$$

и учитывая унитарность оператора D_F , находим

$$\hat{D}_F^+ \hat{H}(\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}) \hat{D}_F = \hat{H}(\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}) \equiv \hat{H} \quad (27)$$

Проблема состоит в том, чтобы найти операторы $\hat{\Psi}_\alpha$. Оказывается (ср. с [26]), что оператор D_F осуществляет линейное преобразование операторов $\hat{\Psi}_\alpha$, и результат имеет вид

$$\hat{\Psi}_e(\mathbf{r}) = \int \left[C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_e(\mathbf{r}') + S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r}') \right] d\mathbf{r}' \quad (28)$$

$$\hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) = \int \left[\hat{\Psi}_c(\mathbf{r}') \tilde{C}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) - \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}') S(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \right] d\mathbf{r}' \quad (29)$$

где функции $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и $S(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ даются выражениями

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (\Phi \Phi^+)^n \quad (30)$$

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \Phi(\Phi^+ \Phi)^n \quad (31)$$

Здесь $\Phi^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Phi^*(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ и перемножение функций Φ и Φ^+ понимается в смысле интегральных сверток.

Мы видим кардинальное отличие выражений (28) и (29) от аналогичных выражений (21) предыдущего раздела. Из-за такого отличия в данном случае энергия системы $E = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle$ представляет собой функционал в виде бесконечного ряда по степеням Φ и Φ^+ . Соответственно и уравнение для функции $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, которая минимизирует энергию, содержит Φ в произвольной степени. Ряды по Φ можно оборвать при рассмотрении системы низкой плотности, в которой расстояние между атомами намного превосходит их размер. В этом случае в выражениях (30) и (31) достаточно оставить только два первых члена. При этом функционал энергии (вернее, разность $E - \mu N$, где N — полное число атомов в системе) записывается в виде

$$E \left\{ \Phi^*, \Phi \right\} - \mu N \equiv \langle 0 | (\hat{H} - \mu \hat{N}) | 0 \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - U_{ce}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \mu \right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \frac{1}{2} \int R_d(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4) \Phi^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Phi^+(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \Phi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_4 + \frac{1}{2} \int R_{ex}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4) \Phi^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) \Phi^+(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \Phi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_4 \quad (32)$$

Здесь ядра R_d и R_{ex} обусловлены соответственно прямым и обменным взаимодействием между атомами и равны

$$R_d = U_{ee}(r_{24}) + U_{cc}(r_{13}) + U_{ec}(r_{23}) + U_{ce}(r_{14});$$

$$R_{ex} = - \left\{ \frac{1}{2} [U_{ce}(r_{14}) + U_{ec}(r_{34}) + U_{ce}(r_{32}) + U_{ec}(r_{12})] + U_{ee}(r_{42}) + U_{cc}(r_{31}) \right\} \quad (33)$$

В этих выражениях $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Отметим, что ядро R_d совпадает с введенным в разд. 1 потенциалом $U(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_{12}; \mathbf{R}_{34}, \mathbf{r}_{34})$.

Варьируя разность $E - \mu N$ из (32) и приравнявая результат нулю, получим уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_c} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_2^2} + U_{ce}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \mu \right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \int R_d(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Phi^+(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \Phi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 + \int R_{ex}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) \Phi^+(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_3) \Phi(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 = 0. \quad (34)$$

Уравнение (34) есть искомое уравнение для параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, учитывающего внутренние степени свободы частиц. Важно, что это уравнение является не только нелинейным и интегральным, но и нелокальным. Вопрос о соотношении описаний в терминах параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и введенных в предыдущем разделе функций $\Psi_l(\mathbf{R})$ будет обсуждаться ниже.

Уравнение вида (34) было получено ранее для разуженного электрон-дырочного газа в работах авторов [18,19], однако оно содержало только ядро обменного взаимодействия. Как будет показано далее, прямое взаимодействие электрон-дырочных пар не дает вклада в обсуждаемые нами эффекты. В общем случае в уравнении (34) должно быть учтено как обменное, так и прямое взаимодействие.

Зная $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, легко исследовать электрические свойства системы, например, ее дипольный момент. Действительно, если перейти от координат \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 к

координате центра масс $\mathbf{R}_{12} = (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2) / (m_1 + m_2)$ и относительной координате $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, то для рассматриваемых систем низкой плотности дипольный момент единицы объема \mathbf{P} будет равен

$$\mathbf{P}(\mathbf{R}) = e \int \Phi^*(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \mathbf{r} \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (35)$$

Задача, таким образом, состоит в том, чтобы решить уравнение (34), не предполагая аргументы функции $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ совпадающими и не пренебрегая эффектами нелокальности.

3. Сравнение двух подходов

Установим теперь соответствие между двумя изложенными выше подходами к описанию поведения системы частиц с учетом их внутренних степеней свободы. Для этого перейдем к координате центра масс и относительной координате и, учитывая полноту системы собственных функций гамильтониана внутренних степеней свободы \hat{H}_{int} (см. (4)), запишем функцию $\Phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ в виде

$$\Phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r}_{ij}) \Psi_k(\mathbf{R}_{ij}). \quad (36)$$

Подставляя (36) в уравнение для параметра порядка (32), умножая полученное уравнение на собственную функцию $\phi_i^*(\mathbf{r}_{12})$, отвечающую энергии ε_i , и интегрируя результат по \mathbf{r}_{12} , получим систему уравнений

$$\varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{R}_{12}) + \hat{K} \Psi_i(\mathbf{R}_{12}) + \int \left[R_d \phi_i^*(\mathbf{r}_{12}) \phi_j(\mathbf{r}_{12}) \phi_k^*(\mathbf{r}_{34}) \phi_l(\mathbf{r}_{34}) \Psi_j(\mathbf{R}_{12}) \Psi_k^*(\mathbf{R}_{34}) \Psi_l(\mathbf{R}_{34}) + R_{ex} \phi_i^*(\mathbf{r}_{12}) \phi_j(\mathbf{r}_{14}) \phi_k^*(\mathbf{r}_{34}) \phi_l(\mathbf{r}_{32}) \Psi_j(\mathbf{R}_{14}) \Psi_k^*(\mathbf{R}_{34}) \Psi_l(\mathbf{R}_{32}) \right] d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_{12} = \mu \Psi_i(\mathbf{R}_{12}). \quad (37)$$

По дважды повторяющимся индексам предполагается суммирование, как в (36).

Рассмотрим отдельно слагаемое, отвечающее прямому взаимодействию (член с R_d) и обменному взаимодействию (член с R_{ex}). Они имеют существенно разную структуру. Первое слагаемое после перехода к новым переменным

$$\mathbf{R}' = \frac{m_1 \mathbf{r}_3 + m_2 \mathbf{r}_4}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4 \quad (38)$$

может быть записано в виде

$$\int U_{ijkl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \Psi_j(\mathbf{R}) \Psi_k^*(\mathbf{R}') \Psi_l(\mathbf{R}') d\mathbf{R}', \quad (39)$$

где

$$U_{ijkl}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \int R_d(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (40)$$

При этом мы сделали замены $\mathbf{R}_{12} \rightarrow \mathbf{R}$ и $\mathbf{r}_{12} \rightarrow \mathbf{r}$.

Нетрудно убедиться, что выражение (39) в точности совпадает со слагаемыми, описывающими взаимодействие конденсатов, в уравнении, которое следует из (12) после замены операторов $\hat{\Psi}_i(\mathbf{R})$ на C -числа $\Psi_i(\mathbf{R})$. Можно также убедиться, что, если опустить в (37) слагаемое с обменным взаимодействием, то полученные уравнения будут совпадать с обобщением уравнений Гросса–Питаевского на случай нескольких бозе-конденсатов, в которых произведена замена $i\hbar(\partial \Psi_i / \partial t) \rightarrow \mu \Psi_i$. В результате мы приходим к заключению, что описание системы частиц с внутренними степенями свободы в терминах параметров порядка $\Psi_i(\mathbf{R})$, относящихся к конденсатам атомов в i -м возбужденном состоянии, является адекватным только в пренебрежении обменными эффектами.

Причину потери обменных эффектов в подходе, изложенном в первом разделе, нетрудно понять. Она состоит в неэквивалентности волновых функций (17) и (24). Действительно, записывая операторы $\hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r})$ в

виде разложения по собственным функциям внутреннего движения

$$\hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \hat{c}_i^+ \quad (41)$$

(\hat{c}_i^+ — фермиевские операторы) и заменяя $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ разложением из (36), мы можем переписать показатель экспоненты в (24) следующим образом:

$$\int \left[\hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) - \text{h.c.} \right] d\mathbf{R} d\mathbf{r} = \sum_i \int \Psi_i(\mathbf{R}) \hat{c}_i^+ \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R}) d\mathbf{R} - \text{h.c.} \quad (42)$$

Волновые функции (17) и (42) будут совпадать, если считать, что произведение двух фермиевских операторов $\hat{c}_i^+ \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R})$ является бозевским оператором. Однако это не так. Учитывая, что фермионные операторы $\hat{\Psi}_c(\mathbf{R})$ и \hat{c}_i удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{R}) \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}') + \hat{\Psi}^+(\mathbf{R}') \hat{\Psi}(\mathbf{R}) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \quad (43)$$

$$\hat{c}_i \hat{c}_j^+ + \hat{c}_j^+ \hat{c}_i = \delta_{ij}, \quad (44)$$

легко найти коммутатор

$$\hat{c}_j \hat{\Psi}_c(\mathbf{R}') \hat{c}_i^+ \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R}) - \hat{c}_i^+ \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R}) \hat{c}_j \hat{\Psi}_c(\mathbf{R}') = \delta_{ij} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') - \delta_{ij} \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{R}) \hat{\Psi}_c(\mathbf{R}') - \hat{c}_i^+ \hat{c}_j \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'). \quad (45)$$

Сравнение (45) и (9) показывает, что выражение (45) отличается двумя «лишними» слагаемыми (вторым и третьим) от выражения для коммутатора истинных бозонов. Можно показать, что эти слагаемые приводят к поправкам, пропорциональным $(a_B/a)^3$, где a — среднее расстояние между частицами, т.е. эти поправки малы для разреженной системы, в которой среднее расстояние между образующими систему частицами a много больше «размера» частиц a_B . Однако выражение для интересующей нас поляризации системы также содержит множитель na_B^3 , где n — плотность частиц (см. ниже). Поэтому для корректного описания поведения системы необходимо учитывать эффекты такого порядка, и замена волновой функции (24) на функцию (17) приводит к потере обменных эффектов.

Рассмотрим теперь слагаемое, отвечающее обменному взаимодействию. Его важное отличие от слагаемого, обусловленного прямым взаимодействием, состоит в том, что в нем не удастся выполнить интегрирование по внутренним координатам атомов и оно не может быть представлено в виде (39), т.е. в виде произведения $\Psi_j(\mathbf{R}) \Psi_k^*(\mathbf{R}') \Psi_l(\mathbf{R}')$ на некоторую функцию от \mathbf{R} и \mathbf{R}' . По существу, это слагаемое остается функционалом двухчастичного параметра порядка, и переход к описанию системы в терминах параметров $\Psi_i(\mathbf{R})$ при учете обменного взаимодействия является непродуктивным. Исключением является случай одно-

родной системы, когда Ψ_i не зависят от \mathbf{R} . Остановимся подробнее на этом случае.

4. Однородный случай

В однородном случае система интегро-дифференциальных уравнений (37) переходит в систему алгебраических уравнений:

$$\varepsilon_i \Psi_i + \sum_{j,k,l} g_{ijkl} \Psi_j \Psi_k^* \Psi_l = \mu \Psi_i. \quad (46)$$

Здесь константы взаимодействия g_{ijkl} равны:

$$g_{ijkl} = g_{ijkl}^d + g_{ijkl}^{\text{ex}}, \quad (47)$$

где

$$g_{ijkl}^d = \int R_d(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_4) \phi_i^*(\mathbf{r}_{12}) \phi_j^*(\mathbf{r}_{34}) \phi_k(\mathbf{r}_{34}) \phi_l(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_{12}, \quad (48)$$

$$g_{ijkl}^{\text{ex}} = \int R_{\text{ex}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_4) \phi_i^*(\mathbf{r}_{12}) \phi_j(\mathbf{r}_{14}) \phi_k^*(\mathbf{r}_{34}) \phi_l(\mathbf{r}_{32}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_{12}. \quad (49)$$

Система уравнений (46) определяет долю i -го конденсата в основном состоянии бозе-газа. Разумеется, эта система не может быть решена в общем случае. Чтобы понять на качественном уровне, при каких условиях в основном состоянии может возникать несколько бозе-конденсатов, рассмотрим случай двухуровневой системы (ср. с [17]), когда параметр порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ можно записать в виде

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_0(\mathbf{r}) \Psi_0 + \phi_1(\mathbf{r}) \Psi_1, \quad (50)$$

где $\phi_0(\mathbf{r})$ отвечает основному состоянию атома в отсутствие взаимодействия с другими атомами, а $\phi_1(\mathbf{r})$ отвечает первому возбужденному уровню. Возбужденный уровень обычно является вырожденным, но мы будем этим пренебрегать, считая, что энергии этого уровня ε_1 соответствует только одно состояние $\phi_1(\mathbf{r})$. Функция основного состояния $\phi_0(\mathbf{r})$, очевидно, является четной функцией \mathbf{r} , а функцию возбужденного состояния $\phi_1(\mathbf{r})$ будем считать нечетной функцией \mathbf{r} . Учитывая, что ядра R_d и R_{ex} являются четными функциями своих аргументов, легко убедиться, что отличными от нуля будут только те константы взаимодействия g_{ijkl} , в которых индекс возбужденного состояния (т.е. 1) будет повторяться четное число раз.

Вводя обозначения

$$g_0 = \sum_{i=d,\text{ex}} g_{0000}^i, \quad (51)$$

$$g_1 = \sum_{i=d,\text{ex}} g_{1111}^i, \quad (52)$$

$$f = \sum_{i=d,\text{ex}} \left(g_{0110}^i + g_{0101}^i + g_{0011}^i \right), \quad (53)$$

можно привести систему (46) к виду

$$\varepsilon_0 \Psi_0 + g_0 \Psi_0^3 + f \Psi_1^2 \Psi_0 = \mu \Psi_0, \quad (54)$$

$$\varepsilon_1 \Psi_1 + g_1 \Psi_1^3 + f \Psi_0^2 \Psi_1 = \mu \Psi_1. \quad (55)$$

Уравнения (54), (55) необходимо дополнить условием нормировки

$$\Psi_0^2 + \Psi_1^2 = n, \quad (56)$$

где n — плотность атомов в бозе-газе. При написании уравнений (54), (55) мы ограничились случаем вещественных Ψ_i . Решая эти уравнения, находим, что кроме тривиального решения $\Psi_1 = 0$, означающего, что в системе имеется только один конденсат, имеется также нетривиальное решение:

$$\Psi_1^2 = \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_1 + n(g_0 - f)}{g_0 + g_1 - 2f}. \quad (57)$$

Отвечающая этому решению плотность энергии бозе-газа равна (см. (32))

$$E = \varepsilon_0(n - \Psi_1^2) + \varepsilon_1 \Psi_1^2 + \frac{1}{2} g_1 \Psi_1^4 + \frac{1}{2} g_0(n - \Psi_1^2)^2 + f \Psi_1^2(n - \Psi_1^2). \quad (58)$$

Появление второго бозе-конденсата, т.е. отличного от нуля Ψ_1 , понижает энергию системы, если

$$g_1 + g_0 - 2f > 0. \quad (59)$$

Учитывая это неравенство, находим из (57), что условием появления второго бозе-конденсата является следующее:

$$n(g_0 - f) > \varepsilon_1 - \varepsilon_0. \quad (60)$$

Ранее аналогичное неравенство в пренебрежении обменными эффектами было получено в работе [17]. В какой мере допустимо пренебрегать обменными эффектами? Это зависит от характера сил взаимодействия в системе. В случае электрон-дырочных пар ядро R_d равно

$$R_d(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = e^2 \left(\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{24}} - \frac{1}{r_{14}} - \frac{1}{r_{23}} \right). \quad (61)$$

Подставляя это выражение в (48), найдем коэффициенты g_{ijkl}^d . Для дальнейшего удобно перейти к относительным координатам $\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{34}$ и координатам центров масс \mathbf{R}_{12} и \mathbf{R}_{34} и ввести переменные $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{12}$, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_{34}$, а также $\mathbf{R} = \mathbf{R}_{12}$, $\mathbf{R}' = \mathbf{R}_{34} - \mathbf{R}_{12}$. Тогда выражение (48) запишется в виде

$$g_{ijkl}^d = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left[\phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}') \int R_d(\mathbf{R}', \mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{R}' \right], \quad (62)$$

где

$$R_d(\mathbf{R}', \mathbf{r}, \mathbf{r}') = e^2 \left(\frac{1}{|\mathbf{R}' + \mathbf{a}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}' + \mathbf{b}|} - \frac{1}{|\mathbf{R}' + \mathbf{c}|} - \frac{1}{|\mathbf{R}' + \mathbf{d}|} \right). \quad (63)$$

Здесь $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ — линейные комбинации \mathbf{r} и \mathbf{r}' :

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \frac{m_e}{M} \mathbf{r}' - \frac{m_e}{M} \mathbf{r}, & \mathbf{b} &= -\frac{m_c}{M} \mathbf{r}' + \frac{m_c}{M} \mathbf{r}, \\ \mathbf{c} &= -\frac{m_c}{M} \mathbf{r}' - \frac{m_e}{M} \mathbf{r}, & \mathbf{d} &= \frac{m_e}{M} \mathbf{r}' + \frac{m_c}{M} \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (64)$$

Выполняя интегрирование по \mathbf{R}' по всему пространству, находим $g_{ijkl}^d \equiv 0$. Таким образом, в случае, когда потенциал взаимодействия между частицами системы имеет чисто кулоновский вид, неучет обменных эффектов приводит к абсурдным результатам.

В общем случае потенциал взаимодействия не является чисто кулоновским, и вклад прямого и обменного взаимодействий в g_{ijkl} может быть одного порядка. Найти эти коэффициенты, не зная вида потенциала взаимодействия, конечно, невозможно. Для чисто кулоновского обменного взаимодействия $g_{0000}^{\text{ex}} = \frac{13}{3} \pi e^2 a_B^2$ [19]. По-видимому, такого же порядка будут коэффициенты g_0, g_1 и f в общем случае. Энергия ε_0 порядка энергии связи внешнего (валентного) электрона в атоме, т.е. порядка e^2/a_B . Что касается энергии ε_1 , то тут возможно два случая: $\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \sim \varepsilon_0$ и $\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \ll \varepsilon_0$. В первом случае в правой стороне неравенства (60) стоит энергия порядка энергии связи валентного электрона с ядром, а в левой стороне — энергия порядка энергии взаимодействия между атомами. Превышение последней над первой, как того требует неравенство (60), строго говоря, означает выход за пределы применимости нашей теории. Во втором случае мы находимся в пределах применимости теории, но мы видим, что появление двух бозе-конденсатов в системе оказывается пороговым по n явлением и может иметь место лишь при достаточно больших n . Отметим также, что наличие двух близкорасположенных уровней ($\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \ll \varepsilon_0$) приведет к большому значению поляризуемости атома. Подчеркнем, что речь сейчас идет об однородном случае.

Выясним, выполняется ли неравенство (60) для каких-либо известных сверхтекучих систем. В случае разреженного газа щелочных металлов плотность частиц n не превышает $10^{13} \dots 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Поэтому с учетом приведенной выше оценки для $g_0 \approx 4e^2 a_B^2$ величина, стоящая в левой стороне, не превышает $10^{-5} \dots 10^{-4} \text{ К}$. А в правой стороне стоит величина порядка $\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \sim 10^5 \text{ К}$. В результате для газа щелочных металлов неравенство (60) нарушается с огромным превышением, и нет никаких оснований ожидать в этих системах наличия сразу нескольких конденсатов атомов. В случае сверхтекучего ^4He , для которого наша теория, по-видимому, дает качественно правильные результаты, в левую сторону (60) следует подставить характерную энергию взаимодействия атомов гелия в конденсированной фазе. Эта энергия порядка температуры ожижения ^4He , которая, как известно, равна

4,2 К. В правой стороне должна стоять энергия ионизации атома ${}^4\text{He}$, на несколько порядков превосходящая 4 К. Таким образом, и в сверхтекучем ${}^4\text{He}$ не может реализоваться ситуация с двумя бозе-конденсатами. Стоит упомянуть еще об одной системе, в которой, как ожидается, возможен переход в сверхтекучее состояние. Речь идет о системах со спариванием пространственно разделенных электронов и дырок (см., например, [28–30]). В этих системах потенциал как прямого, так и обменного взаимодействия зависит от расстояния между проводящими слоями d , и в зависимости от величины d соотношение между прямым и обменным взаимодействием может изменяться. Изменяя величину d , можно также изменять энергию первого возбужденного уровня ϵ_1 . Позволяет ли это добиться выполнения неравенства (60), в настоящее время не известно.

На этом мы закончим обсуждение однородного случая, отметив лишь, что если для систем со спариванием пространственно разделенных электронов и дырок удастся реализовать ситуацию с бозе-конденсатом в состоянии с нечетной по \mathbf{r} волновой функцией $\phi_1(\mathbf{r})$, то этот конденсат в соответствии с выражением (35) будет приводить к появлению в системе однородного дипольного момента. Поскольку в поле центральных сил функция $\phi_1(\mathbf{r})$ зависит от углов θ и ϕ , отсчитываемых от осей z и x , произвольным образом ориентированных в пространстве, то вектор поляризации \mathbf{P} также будет произвольно ориентирован, что означает спонтанную поляризацию бозе-газа в этом случае (ср. с [17]).

5. Неоднородный случай

Как отмечалось выше, в неоднородном случае при учете обменных эффектов представление двухчастичного параметра порядка (волновой функции) $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в виде (36) является неконструктивным. Поэтому при анализе неоднородного случая следует вернуться к основному уравнению (34), из которого необходимо найти $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Будем считать, что энергия связи валентного электрона с остовом ϵ_0 существенно превосходит энергию взаимодействия между атомами gn , где g — константа взаимодействия, и энергию, обусловленную неоднородностью в задаче $\hbar^2/2ML^2$, где M — масса атома, L — характерный масштаб неоднородности. При этом решение (32) можно искать в виде (ср. с [18,19])

$$\Phi = \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})\Psi(\mathbf{R}), \quad (65)$$

где

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \phi^{(0)}(\mathbf{r}) + \phi^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (66)$$

Функция $\Psi(\mathbf{R})$ описывает движение атома как целого, а $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ — движение валентного электрона в

поле остова. Химический потенциал записываем в виде, аналогичном (66),

$$\mu = \mu_0 + \mu_1. \quad (67)$$

Решение уравнения (32) ищем по теории возмущений, полагая, что в нулевом приближении взаимодействие между атомами отсутствует. Тогда $\phi^{(0)}(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r})$ и $\mu_0 = \epsilon_0$, где $\phi_0(\mathbf{r})$ и ϵ_0 — собственная функция и энергия основного состояния атома. В следующем приближении получаем уравнение

$$\begin{aligned} \mu_0 \phi^{(1)}\Psi = H_{\text{int}}\phi^{(1)}\Psi - \mu_1 \phi_0\Psi + \hat{K}\phi_0\Psi + \\ + \int R_d \phi_0(\mathbf{r}_{12})\phi_0(\mathbf{r}_{34})\phi_0(\mathbf{r}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{12})\Psi^*(\mathbf{R}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{34}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 + \\ + \int R_{\text{ex}} \phi_0(\mathbf{r}_{14})\phi_0(\mathbf{r}_{34})\phi_0(\mathbf{r}_{32})\Psi(\mathbf{R}_{14})\Psi^*(\mathbf{R}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{32}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4. \end{aligned} \quad (68)$$

Это уравнение для $\phi^{(1)}$ содержит всю информацию, которая нас интересует. Из условия его разрешимости мы получим уравнение для параметра порядка $\Psi(\mathbf{R})$, а решив (68) относительно $\phi^{(1)}$, мы найдем с помощью (35) поляризацию $\mathbf{P}(\mathbf{R})$. Условие разрешимости состоит в данном случае в обращении в нуль скалярного произведения функции $\phi_0(\mathbf{r}_{12})$ и неоднородной добавки. При этом при вычислении скалярного произведения в кубических по Ψ слагаемых можно считать, что аргументы всех Ψ равны \mathbf{R}_{12} . В результате условие разрешимости приводит к стационарному уравнению Гросса–Питаевского для Ψ :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{R}^2} - \mu_1 \Psi + g |\Psi(\mathbf{R})|^2 \Psi(\mathbf{R}) = 0. \quad (69)$$

Здесь константа взаимодействия содержит вклад как прямого, так и обменного взаимодействия и равна

$$\begin{aligned} g = g_0 = \int R_d \phi_0^2(\mathbf{r}_{12})\phi_0^2(\mathbf{r}_{34}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_{12} + \\ + \int R_{\text{ex}} \phi_0(\mathbf{r}_{14})\phi_0(\mathbf{r}_{34})\phi_0(\mathbf{r}_{32})\phi_0(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\mathbf{r}_{12}. \end{aligned} \quad (70)$$

Ранее в работе авторов [19] эта константа была найдена в кулоновском случае для обменного взаимодействия: $g_0 = g_{0000}^{\text{ex}} = \frac{13}{3} \pi e^2 a_B^2$. Первое слагаемое g_{0000}^d , как было показано выше, для кулоновского взаимодействия обращается в нуль, поэтому в [19] оно было опущено.

Перейдем к решению уравнения (68), т.е. к нахождению функции $\phi^{(1)}$. При этом подчеркнем, что нас интересует только нечетная по \mathbf{r}_{12} часть функции $\phi^{(1)}$. Именно эта часть приводит к отличному от нуля дипольному моменту пар \mathbf{P} .

Рассмотрим сначала член с прямым взаимодействием. Раскладывая произведение функций $\Psi(\mathbf{R}_{12})\Psi^*(\mathbf{R}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{34})$ вблизи \mathbf{R}_{12} по \mathbf{r}_i , получаем в первом порядке

$$\Psi(\mathbf{R}_{12})\Psi^*(\mathbf{R}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{34}) = \left\{ \left| \Psi(\mathbf{R}_{12}) \right|^2 + \frac{[m_c(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) + m_e(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2)]}{m_e + m_c} \frac{\partial |\Psi(\mathbf{R}_{12})|^2}{\partial \mathbf{R}_{12}} \right\} \Psi(\mathbf{R}_{12}). \quad (71)$$

Сразу отметим, что в слагаемом с обменным взаимодействием произведение $\Psi(\mathbf{R}_{14})\Psi^*(\mathbf{R}_{34})\Psi(\mathbf{R}_{32})$ имеет в точности такой же вид. Очень важно, что второе слагаемое в фигурных скобках в (71) является нечетным по координатам \mathbf{r}_i . Именно это приводит к появлению нечетной добавки к $\phi^{(1)}$, а следовательно, и к отличному от нуля дипольному моменту. Поэтому это слагаемое необходимо удерживать несмотря на то, что оно много меньше первого слагаемого.

Покажем, что в кулоновском случае прямое взаимодействие не дает вклада не только в константу взаимодействия, но и в дипольный момент. Рассмотрим входящий в правую часть уравнения (68) интеграл (в котором оставлены только множители, зависящие от $\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}_{34}$)

$$I = \int R_d(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_4) \phi_0^2(\mathbf{r}_{34}) d\mathbf{r}_{34} \equiv \int R_d(\mathbf{R}', \mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_0^2(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (72)$$

с кулоновским ядром R_d в виде (63). Раскладывая все слагаемые в ядре (63) в ряд по малым (по сравнению с расстоянием R') векторам $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$, находим в первом порядке

$$I_1 = \int \phi_0^2(\mathbf{r}') \frac{1}{R'^3} \mathbf{R}' \cdot (\mathbf{a} + \mathbf{b} - \mathbf{c} - \mathbf{d}) d\mathbf{r}'. \quad (73)$$

Это выражение равно нулю, поскольку из явного вида векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ (64) следует, что $\mathbf{a} + \mathbf{b} - \mathbf{c} - \mathbf{d} = 0$. Покажем, что выражение (72) равно нулю и во втором порядке разложения. Второй член разложения имеет вид

$$I_2 = \frac{1}{2} \int \phi_0^2(\mathbf{r}') \frac{\partial^2}{\partial R'_i \partial R'_j} \left(\frac{1}{R'} \right) [a_i a_j + b_i b_j - c_i c_j - d_i d_j] d\mathbf{r}'. \quad (74)$$

После подстановки сюда явных выражений для $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ получаем

$$a_i a_j + b_i b_j + c_i c_j + d_i d_j = -(r_i r'_j + r'_i r_j) \quad (75)$$

и убеждаемся, что ввиду нечетности подынтегрального выражения по \mathbf{r}' интеграл (74) обращается в нуль.

Вклад обменного взаимодействия в дипольный момент системы в кулоновском случае был найден нами ранее [19]. Решив уравнение (68) и вычислив дипольный момент с помощью (35), мы нашли, что

$$\mathbf{P} = A \gamma e n a_B^5 \frac{\partial n}{\partial \mathbf{R}}. \quad (76)$$

Здесь коэффициент $\gamma = \frac{m_c - m_e}{m_c + m_e}$ показывает, что по-

явление дипольного момента в системе связано с различием масс валентного электрона и остова. Безразмерный численный коэффициент равен [19] $A \approx 120$.

В общем случае в дипольный момент \mathbf{P} будет давать вклад как прямое, так и обменное взаимодействие. Дипольный момент \mathbf{P} должен быть пропорционален градиенту плотности: $\mathbf{P} = C(\partial n / \partial \mathbf{R})$. Коэффициент пропорциональности C можно оценить по порядку величины. С этой целью перейдем к безразмерным переменным. Длины будем измерять в боровских радиусах a_B , а энергии — в единицах e^2 / a_B . Тогда ϕ_0 есть произведение $a_B^{-3/2}$ на $\tilde{\phi}_0$, а ядра R_d и R_{ex} — произведения e^2 / a_B на \tilde{R}_d и \tilde{R}_{ex} соответственно, где функции с тильдой — безразмерные функции. Учитывая выражение (71) (в котором принимаем $m_c \gg m_e$), находим из (68)

$$\phi^{(1)} = C_1 \frac{1}{\mu_0} \frac{e^2}{a_B} a_B^{5/2} F(\tilde{r}) \frac{\partial n}{\partial \mathbf{R}} \cdot \mathbf{n}. \quad (77)$$

Здесь F — безразмерная функция \tilde{r} , C_1 — интеграл от безразмерных функций $\tilde{\phi}_0$ и \tilde{R} , а \mathbf{n} — единичный вектор в направлении вектора \mathbf{r} . Учитывая, что $\mu_0 = e^2 / a_B$ и подставляя (77) в выражение (66) для параметра порядка, получаем для \mathbf{P} следующее выражение:

$$\mathbf{P} = C_2 n e a_B^5 \frac{\partial n}{\partial \mathbf{R}}. \quad (78)$$

Здесь новая безразмерная константа C_2 — интеграл от $\tilde{\phi}_0$ и \tilde{R} . Хотя нет оснований ожидать, что этот коэффициент будет значительно отличаться от единицы, сравнение с кулоновским случаем показывает, что он может достигать 10^2 . Приведенный способ вычисления \mathbf{P} , к сожалению, не позволяет найти знак константы C_2 . Представляется, однако, что этот коэффициент, как и в случае кулоновского взаимодействия, будет положительным, и в результате дипольный момент \mathbf{P} направлен параллельно градиенту плотности (а не против него).

Полученные в этом разделе результаты показывают, что имеется существенное различие между однородной и неоднородной системами. Появление спонтанного дипольного момента в однородной системе является пороговым явлением и, по всей видимости, не реализуется в известных сверхтекучих системах. Пространственная неоднородность в системе с неизбежностью (без всякого порога) приводит к появлению дипольного момента $\mathbf{P} \sim \partial n / \partial \mathbf{R}$.

В заключение отметим, что полученный нами результат для поляризации неоднородной системы должен оставаться качественно справедливым для любых сверхтекучих систем, в том числе и для He II.

Заключение

Итак, в работе сравниваются два метода микроскопического описания систем, состоящих из составных бозонов, — описание в терминах набора одночастичных параметров порядка $\Psi_i(\mathbf{R})$ [2,17] и в терминах двухчастичного параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ [18–21]. Установлено, что между этими двумя подходами имеются принципиальные различия. При применении первого метода к составным бозонам полностью теряются эффекты, связанные с обменным взаимодействием, что в ряде случаев, в частности в случае кулоновского взаимодействия между частицами, приводит к качественно неверным результатам. Кроме того, даже в пренебрежении обменным взаимодействием система может быть адекватно описана с помощью набора одночастичных параметров порядка $\Psi_i(\mathbf{R})$ только в том случае, когда учитываются все внутренние состояния частиц. Но при этом необходимо решать бесконечную систему уравнений для $\Psi_i(\mathbf{R})$, что в действительности представляет собой неразрешимую проблему. При описании системы с помощью двухчастичного параметра порядка $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ учитывается сразу весь набор внутренних состояний частицы.

1. Д.Н. Зубарев, *ДАН СССР* **162**, 794 (1965).
2. Д.Н. Зубарев. *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
3. Л.А. Покровский, *Теор. и мат. физ.* **2**, 103 (1970).
4. Л.А. Покровский, *Теор. и мат. физ.* **3**, 143 (1970).
5. А.С. Рыбалко, *ФНТ* **30**, 1321 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 994 (2004)].
6. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, *ФНТ* **31**, 820 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 623 (2005)].
7. А.М. Косевич, *ФНТ* **31**, 50 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 37 (2005)].
8. L.A. Melnikovsky, *J. Low Temp. Phys.* **148**, 559 (2007).
9. В.Д. Нацик, *ФНТ* **31**, 1201 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 915 (2005)].
10. В.Д. Нацик, *ФНТ* **34**, 625 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 493 (2008)].
11. Э.А. Пашицкий, С.М. Рябченко, *ФНТ* **33**, 12 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 8 (2007)].
12. В.М. Локтев, М.Д. Томченко, *ФНТ* **34**, 337 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 262 (2008)].
13. В.П. Минеев, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 866 (2009).
14. V.M. Loktev and M.D. Tomchenko, *Phys. Rev. B* **82**, 172501 (2010).
15. Э.А. Пашицкий, А.А. Гурин, *ЖЭТФ* **138**, 1103 (2010).
16. M.D. Tomchenko, *Phys. Rev. B* **83**, 094512 (2011).
17. Ю.М. Полуэктов, *ФНТ* **37**, 1239 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 986 (2011)].
18. С.И. Шевченко, А.С. Рукин, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 46 (2009).
19. С.И. Шевченко, А.С. Рукин, *ФНТ* **36**, 186 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 146 (2010)].

20. С.И. Шевченко, А.С. Рукин, *ФНТ* **36**, 748 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 596 (2010)].
21. А.С. Рукин, С.И. Шевченко, *ФНТ* **37**, 1107 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 884 (2011)].
22. P. Carruthers and M. Nieto, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 411 (1968). Русский перевод в кн.: *Когерентные состояния в квантовой теории*, Мир, Москва (1972).
23. J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
24. Л.В. Келдыш, А.Н. Козлов, *ЖЭТФ* **54**, 978 (1968).
25. Дж. Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, Наука, Москва (1970).
26. Л.В. Келдыш, *Проблемы теоретической физики*, Наука, Москва (1972), с. 433.
27. F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
28. A.I. Bezuglyj and S.I. Shevchenko, *Phys. Rev. B* **75**, 075322 (2007).
29. D.V. Fil and S.I. Shevchenko, *ФНТ* **33**, 1023 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 780 (2007)].
30. А.И. Безуглый, С.И. Шевченко, *ФНТ* **37**, 736 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 583 (2011)].

Two methods of description of rarefied superfluid Bose-systems

S.I. Shevchenko and A.S. Rukin

The question about adequacy of the description of a gas of composite particles containing an even number of fermions as point bosons is studied for alkali metal atoms. In the low density approximation we obtained an equation for the complex order parameter of the rarefied alkali metal gas $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ which has a meaning of the wave function of the atoms taking into account the internal motion of valence electrons. For superfluid systems formed by particles with internal degrees of freedom this equation replaces the Gross–Pitaevskii equation. It is shown that the exchange effects must be taken into account in the same approximation as the effects of direct interaction of atoms with each other. In particular, in the case of exact Coulomb interaction neglecting the exchange effects leads to qualitatively incorrect results. The problem of spontaneous electric polarization of superfluid systems is investigated. The expression is obtained for electric polarization of inhomogeneous superfluid systems.

PACS: **67.90.+z** Other topics in quantum fluids and solids;
67.25.D– Superfluid phase.

Keywords: composite bosons, exchange interaction, superfluidity, polarization.