

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Міністерство освіти і науки України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Булахов Микита Сергійович

(Прізвище Ім'я по батькові здобувача)

УДК 530.145 + 536.775 + 539.186.3

ДИСЕРТАЦІЯ
«РОЛЬ НЕЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В УЛЬТРАХОЛОДНИХ
БОЗЕ-ГАЗАХ З УРАХУВАННЯМ СПІНОВИХ СТУПЕНІВ
СВОБОДИ»

Спеціальність 105 – «Прикладна фізика і наноматеріали»

(Галузь знань 10 – Природничі науки)

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

М.С. Булахов

(ініціали та прізвище здобувача)

Науковий керівник: Слюсаренко Юрій Вікторович, доктор
фізико-математичних наук, професор, академік НАН України

Харків – 2023

АНОТАЦІЯ

Булахов М.С. **Роль нелокальної взаємодії в ультрахолодних бозе-газах з урахуванням спінових ступенів свободи.** — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика і наноматеріали (Галузь знань 10 – Природничі науки). — Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2023.

Дисертація присвячена дослідженню впливу нелокальності взаємодії: по-перше, на термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу як у верхньому околі температури переходу (вище, але близько до неї) до стану з бозе-ейнштейнівським конденсатом (БЕК), так і в стані з БЕК за нульової температури; по-друге, на ефекти, пов'язані зі спіном, а також на структуру спектру одночастинкових збуджень слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим або одиничним спіном в стані з БЕК за нульової температури.

Розділ 1 присвячено викладанню матеріалу, який склав основу й послугував точкою відліку досліджень здобувача, а саме: термодинамічної теорії збурень, теорії Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу й узагальнення канонічних перетворень Боголюбова.

Розділ 2 присвячено побудові термодинаміки бозе-газу в верхньому околі температури фазового переходу до стану з БЕК із урахуванням поправок першого і другого порядку за взаємодією до основних термодинамічних величин. Теоретичний опис побудований у рамках термодинамічної теорії збурень. Результати проаналізовано за допомогою чисельних методів для локальної й нелокальної моделей потенційної взаємодії.

У *розділі 3* аналізується система рівнянь, яка дає змогу визначити такі термодинамічні характеристики слабковзаємодійного ультрахолодного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК, як: хімічний потенціал і

густину частинок конденсату. Означена система рівнянь враховує внесок від квадратичних за операторами народження й знищення доданків і дозволяє досліджувати систему для низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії. Повний аналіз проведено з використанням чисельних методів для двох нелокальних моделей потенціалу взаємодії: модель півпрозорих сфер і модель з профілем гаусового (нормального) розподілу.

У розділі 4 вивчається термодинаміка й магнітні властивості всіх можливих станів БЕК у бозе-газі частинок зі спіном $S = 1$ за наявності зовнішнього магнітного поля. На відміну від попередніх досліджень спінорних конденсатів міжатомна взаємодія вважається нелокальною. У цьому випадку відповідний гамільтоніан будується з урахуванням спінових і квадрупольних ступенів свободи, які елегантно вводяться на рівних правах крізь призму алгебри $SU(3)$. Зв'язок із зовнішнім магнітним полем забезпечується за допомогою як спінового оператора (лінійний ефект Зеемана), так і за допомогою оператора квадрупольного моменту (квадратичний ефект Зеемана).

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає у таких її результатах:

1. застосовано термодинамічну теорію збурень для обчислення поправок першого й другого порядку за взаємодією до термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії й теплоємності за сталого об'єму — котрі характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;
2. вдосконалено алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса за допомогою введення понять матриці й визначника Віка;
3. показано, що вплив нелокальності взаємодії на характеристики слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан із БЕК незначний, а, отже, припущення контактності взаємодії під час опису зазначеної системи є достатнім;
4. для слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК розв'язана система рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату за нульової температури, з урахуванням

внеску квадратичних за операторами народження і знищення доданків та використанням низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії;

5. показано, що внесок квадратичних доданків, згаданих вище, може бути такий самий за порядком величини, як і тих доданків, які походять з s -числової частини гамільтоніану;
6. продемонстровано, що внесок квадратичних членів у хімічний потенціал призводить, загалом, до енергетичної щілини в одночастинковому енергетичному спектрі збуджень;
7. знайдено й досліджено новий режим стану з порушеною осьовою симетрією слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним одиничним спіном;
8. побудовано для згаданого режиму діаграму магнітних станів, яка заснована на їхній намагніченості;
9. в рамках теорії збурень для магнітного стану БЕК із порушеною осьовою симетрією в слабковзаємодійному бозе-газі атомів із повним одиничним спіном отримано енергетичний спектр одночастинкових збуджень за нульової температури й з урахуванням поправок, що спричинені нелокальністю взаємодії.

Щодо практичного значення отриманих результатів, то передусім вони, як можна зрозуміти з теми дисертації, допомагають сформулювати розуміння того, наскільки значною є роль нелокальної взаємодії з точки зору впливу на фізичні властивості ультрахолодного бозе-газу. Зокрема, деякі характеристики однієї й тієї ж бозе-системи залежно від того, чи знаходиться вона в стані з БЕК, чи ні, можуть як досить суттєво змінювати свою теоретично передбачувану поведінку, так і майже не зазнавати якісних змін унаслідок нелокальності взаємодії, відповідно. Вочевидь, такий факт є важливим не тільки під час планування експериментальних досліджень, а й під час тлумачення їхніх результатів.

Окремо слід звернути увагу на вдосконалення алгоритму підрахунку середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса. Цей результат стане в нагоді будь-кому, хто стикнеться з необхідністю підрахунку середніх за згаданою

теоремою. Саме тому таке вдосконалення має стати бажаним доповненням до курсу кінетичної теорії газоподібних систем, фізики систем багатьох частинок тощо, які викладаються студентам відповідних спеціальностей.

Підґрунтям для подальших теоретичних й експериментальних досліджень також можуть стати такі питання: експериментальне підтвердження передбаченого режиму стану з порушеною осью симетрії, щілин в отриманих спектрах одночастинкових збуджень; подальші дослідження системи рівнянь, яка визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу, а також інших термодинамічних характеристик (ентропії, питомої теплоємності за сталого об'єму тощо) за ненульової температури.

Загалом, результати роботи є корисними для вивчення таких макроскопічних явищ у квантових системах, як: надплинність, надпровідність, надплинність кристалу тощо — оскільки явище БЕК стоїть за ними.

Ключові слова: квантова система, ультрахолодний бозе-газ, бозе-ейнштейнівський конденсат, фазовий перехід, термодинаміка, енергетичний спектр, теорія Боголюбова, теорія збурень, хімічний потенціал, спіни, надплинність, надпровідність, магнітне поле, магнітна властивість, чисельний метод.

ABSTRACT

Bulakhov M.S. The role of non-local interaction in ultracold Bose gases with consideration of spin degrees of freedom. Qualification scholarly paper: a manuscript.

Thesis submitted for obtaining the Doctor of Philosophy in Natural Sciences, Speciality 105 – Applied physics and nanomaterials. – V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2023.

The dissertation is devoted to studying the effect of the nonlocality of interaction on: first, thermodynamic quantities of a weakly interacting Bose gas both in the upper neighbourhood of the transition temperature (higher, but close to it) to the state with Bose-Einstein condensate (BEC) and in the state with

BEC at zero temperature; second, spin-related effects and the structure of the single-particle excitation spectrum of a weakly interacting Bose gas of spinless or spin-1 atoms with BEC at zero temperature.

Chapter 1 deals with the presentation of the basic approaches and the reference point of the author's research: thermodynamic perturbation theory, Bogoliubov theory of a weakly interacting Bose gas, and generalization of Bogoliubov canonical transformation.

Chapter 2 is devoted to the constructing thermodynamics of a Bose gas in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC taking into account the first and second order corrections in interaction to the main thermodynamic quantities. The theoretical description is based on the thermodynamic perturbations theory. The results are analyzed by using numerical methods for local and non-local models of the interaction potential.

Chapter 3 analyzes the system of equations that allows one to determine such thermodynamic characteristics of a weakly interacting ultracold Bose gas of spinless atoms with BEC as chemical potential and condensate particles density. It involves the contribution of quadratic terms in the creation and annihilation operators and enables to study the system for a number of model non-local interaction potentials. The complete analysis was carried out by employing the numerical methods for two models of non-local interaction potential: a model of semitransparent spheres and a model with Gauss (normal) distribution profile.

In *Chapter 4* the author explores thermodynamics and magnetic properties of all possible magnetic states of a Bose gas of spin-1 atoms with BEC in the presence of an external magnetic field. In contrast to previous studies of spinor condensates, the interatomic interaction is considered to be non-local. In this case, the corresponding Hamiltonian must be constructed taking into account the spin and quadrupole degrees of freedom, which are elegantly introduced on an equal footing through the prism of the $SU(3)$ algebra. The coupling with the external magnetic field is provided both by the spin operator (the linear Zeeman effect) and by the quadrupole moment operator (the quadratic Zeeman effect).

The scientific novelty of the dissertation consists in its following results:

1. the author employed the thermodynamic perturbation theory to compute the first and second order corrections in interaction to the following thermodynamic quantities: pressure, chemical potential, entropy, and heat capacity at constant volume, which characterize a weakly interacting Bose gas of spinless atoms in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC;
2. the author improved the algorithm to find the averages according to the Wick-Bloch-Dominissis theorem by introducing the concepts of the Wick matrix and determinant;
3. the author showed that the effect of the non-locality of interaction on the thermodynamics quantities of a weakly interacting Bose gas of spinless atoms in the upper neighbourhood of the phase transition temperature to the state with BEC is insignificant, and, therefore, it is sufficient to assume that the interaction as a contact one when describing the specified system;
4. for a number of model non-local interaction potentials, the author solved the system of equations which determines the chemical potential and the condensate density of a weakly interacting Bose gas of spinless atoms with BEC up to quadratic terms in the creation and annihilation operators.
5. the author showed that the contribution of the quadratic terms mentioned above can be of the same order of magnitude as those that originate from the c -number part of the Hamiltonian;
6. the author demonstrated that the contribution of the quadratic terms to the chemical potential leads, in general, to a gap in the energy spectrum of single-particle excitation;
7. the author found and studied the new regime of the broken-axisymmetry state of a weakly interacting Bose gas of spin-1 atoms with BEC;
8. the author constructed the diagram of magnetic states with the foregoing regime in terms of their magnetization;
9. within the perturbation theory the author obtained the energy spectrum of

single-particle excitation for the broken-axisymmetry state of a weakly interacting Bose gas of spin-1 atoms with BEC in a magnetic field at zero temperature taking into account the corrections caused by the interaction nonlocality.

As for the practical importance of the obtained results, first of all, as can be understood from the dissertation topic, they help to form the insight of how significant is the role of non-local interaction when describing the physical properties of ultracold Bose gas. In particular, due to the nonlocality of interaction, the physical characteristics of the same Bose system can either change their theoretically predicted behaviour quite significantly or undergo almost no qualitative changes depending on whether it is in a state with BEC or not, respectively. Obviously, this fact is important not only when planning an experimental study but also when interpreting its results.

In addition, it is worth stressing the result associated with the improved algorithm for averages computing according to the Wick-Bloch-Dominicis theorem. It will be helpful to anyone who deals with the indicated problem. Therefore, the obtained result should be an apt addition to the course of the kinetic theory of gaseous systems, physics of many-body systems, etc., which are taught to students of the relevant specialties.

The following issues can also become the basis for further theoretical and experimental study: experimental confirmation of the predicted regime of the broken-axisymmetry state and experimental evidence of the energy gap in the single-particle excitation spectra; the further analysis of the system of equations that determines the chemical potential and the condensate particles density of a weakly interacting Bose gas at finite temperature as well as the computation of other thermodynamic quantities (entropy, specific heat capacity at constant volume, etc.).

In general, the obtained results are useful for studying such macroscopic phenomena in quantum systems as superfluidity, superconductivity, supersolidity, etc., since their nature is closely related to BEC.

Key words: quantum system, ultracold Bose gas, Bose-Einstein condensate,

phase transition, thermodynamics, energy spectrum, Bogoliubov theory, perturbation theory, chemical potential, spin, superfluidity, superconductivity, magnetic field, magnetic property, numerical method.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації у періодичних наукових виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus або Web of Science:

1. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Re-examining the quadratic approximation in theory of a weakly interacting Bose gas with condensate: the role of nonlocal interaction potentials. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2018. Vol. 51. P. 205302. DOI: 10.1088/1361-6455/aae061 (Q2 (2018))

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

2. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. *Phys. Scr.* 2021. Vol. 96. P. 045401. DOI: 10.1088/1402-4896/abdcf5 (Q2 (2021))

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок.

3. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and magnetic state diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55 P. 405003. DOI: 10.1088/1751-8121/ac9098 (Q2 (2022))

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Quadratic approximation in theory of a weakly interacting bose gas with condensate: the role of non-local interaction potentials. *8th International Conference «Physics of Liquid Matter: Modern Problems»*: Abstracts (May 18 – 22, Kyiv, Ukraine, 2018, очна). Kyiv, 2018. P. 73.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

2. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Quadratic approximation in theory of a weakly interacting bose gas with condensate: the role of non-local interaction potentials. *IX International Conference for Professionals and Young Scientists «Low Temperature Physics»*: Conference Program and Book of Abstract (June 4 – 8, Kharkiv, Ukraine, 2018, очна). Kharkiv, 2018. P. 189.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

3. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Role of nonlocal interaction in theory of a weakly non-ideal Bose gas with condensate. *The 5th Conference «Statistical Physics: Modern Trends and Applications»*: Program and Abstracts (July 3-6, Lviv, Ukraine, 2019, очна). Lviv, 2019. P. 95.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

4. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. *International Advanced Study Conference «Condensed Matter and Low Temperature Physics 2020»*: Conference Program and Book of Abstract (June 8 – 14, Kharkiv, Ukraine, 2020, заочна). Kharkiv, 2020. P. 169.

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок.

5. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. 735. *WE-Heraeus-Seminar «Exploring Quantum Many-Body Physics with Ultracold Atoms and Molecules»*: Booklet with abstracts (December 14 – 18, Bad Honnef, Germany, 2020, заочна). Bad Honnef, 2020. P. 61.

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок.

6. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and phase diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *Всеукраїнська конференція наукових дослідників: тези доповідей* (19 – 25 вересня, Львів, Україна, 2021, очна) Львів, 2021. 188 с.

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

7. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and phase diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *III International Advanced Study «Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics»*: Book of Abstract (June 5 – 11, Kharkiv, Ukraine, 2023, заочна) Kharkiv, 2023. P. 186.

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	16
ВСТУП	17
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	27
1.1. Засади термодинамічної теорії збурень	27
1.2. Теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу і канонічні перетворення	32
1.2.1. Теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу . . .	32
1.2.2. Узагальнення канонічних перетворень Боголюбова . . .	42
Висновки до розділу 1	48
РОЗДІЛ 2. ТЕРМОДИНАМІКА СЛАБКОВЗАЄМОДІЙНОГО БОЗЕ- ГАЗУ У ВЕРХНЬОМУ ОКОЛІ ТЕМПЕРАТУРИ ПЕРЕ- ХОДУ	49
2.1. Гамільтоніан слабковзаємодійного бозе-газу	49
2.2. Визначник Віка	51
2.3. Головні термодинамічні величини	53
2.3.1. Хімічний потенціал	53
2.3.2. Тиск	60
2.3.3. Ентропія та питома теплоємність	62
2.4. Нелокальна взаємодія: структура в просторі імпульсів	66
Висновки до розділу 2	67
РОЗДІЛ 3. РОЛЬ НЕЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СЛАБКОВЗАЄ- МОДІЙНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ АТОМІВ З НУЛЬОВИМ СПІ- НОМ У СТАНІ З БЕК	70
3.1. Аналіз рівнянь квадратичного наближення за нульової тем- ператури та різних модельних потенціалів	70
3.2. Фізичний аспект отриманих результатів	79
3.3. Деякі міркування щодо більш складних модельних потенці- алів взаємодії	83

3.4. Обговорення питання наявності щілини в спектрі одночастинкових збуджень	86
Висновки до розділу 3	88
РОЗДІЛ 4. РОЛЬ НЕЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СЛАБКОВЗАЄМОДІЙНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ АТОМІВ З ОДИНИЧНИМ СПІНОМ У СТАНІ З БЕК	90
4.1. Гамільтоніан з квадрупольними ступенями свободи	90
4.2. Рівняння стану БЕК для системи частинок із одиничним спіном у моделі Боголюбова	98
4.2.1. Розв’язок системи рівнянь на компоненти векторного параметра порядку	101
4.3. Стан з порушеною осьюовою симетрією	106
4.4. Умови стійкості й діаграми магнітних станів	115
4.5. Обговорення результатів	120
Висновки до розділу 4	123
ВИСНОВКИ	125
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	128
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ	137
ПОДЯКИ	141

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

БЕК	—	Бозе-Ейнштейнівський конденсат
ТТЗ	—	Термодинамічна теорія збурень
F	—	Феромагнітний стан
P	—	Парамагнітний стан
Q	—	Квадрупольний стан
BA	—	Стан з порушеною осью симетрії
Ω	—	Великий термодинамічний потенціал
w	—	Статистичний оператор Гіббса
n	—	Густина частинок
β	—	Зворотна температура
T	—	Температура
μ	—	Хімічний потенціал
n_0	—	Густина частинок конденсату

ВСТУП

Вже майже три десятиліття вивчення фізичних властивостей квантових бозе-газів є предметом інтенсивних теоретичних і експериментальних досліджень [1–4]. Такий інтерес обумовлено експериментальною реалізацією конденсації Бозе-Ейнштейна (БЕК) у розріджених атомних газах лужних металів [5–7] завдяки методам лазерного охолодження та захоплення нейтральних атомів. Тепер ультрахолодні атомні гази забезпечують чудові можливості для вивчення й моделювання різних ефектів і явищ у квантових багаточастинкових системах. Зокрема, ультрахолодні високоспінові гази з БЕК дозволяють проводити дослідження різних магнітних станів і відповідних фазових переходів [8, 9]. Унікальність таких систем полягає в тому, що вони демонструють одночасний прояв надплинних і магнітних властивостей. Перші теоретичні дослідження [10–13] так званих спінових конденсатів стимулювалися оптичним захопленням атомів натрію [14], за якого атоми захоплюються незалежно від орієнтації їх спіну.

Теоретичний опис БЕК зазвичай базується на оригінальній мікроскопічній теорії Боголюбова [15] або нелінійному залежному від часу рівнянні Гросса-Пітаєвського [16, 17]. Обидва підходи застосовні для розріджених слабковзаємодійних бозе газів і описують, відповідно, їх однорідні і неоднорідні стани за нульової температури. Хоча підхід Гросса-Пітаєвського виявився вдалим інструментом у описі неоднорідних структур, що мають відношення до експериментів (наприклад, вихри, солітони, профілі густини і дихальні режими [1, 2, 18]), специфічна мікроскопічна теорія Боголюбова має більш сувору математичну постановку і добре виправдана з точки зору статистичної фізики. Остання також узагальнена для вивчення рівноважних просторово-неоднорідних станів (періодичних структур) [19], виведення кінетичних рівнянь для функції розподілу квазічастинок і густини конденсату [20, 21], а також гідродинамічного рівняння надплинної рідини [22–24]. Крім того, паралельно з бозонною версією Хартрі-Фока-Боголюбова та Φ -орієнтованими

наближеннями [4] були розроблені інші схеми для опису фази БЕК, що не пов'язані з формалізмом s -чисел (див. [25–31]).

Експерименти підтвердили ряд передбачень, зроблених теорією слабковзаємодійного бозе-газу з конденсатом, розробленою Боголюбовим [15, 32]. Це була чи не перша теорія, де при описі ефектів взаємодії необхідно було по суті відмовитись від методів стандартного термодинамічного пертурбативного підходу через появу розбіжних доданків у ряді термодинамічної теорії збурень за малих значень імпульсу. Водночас теорія Боголюбова містить неаналітичність у взаємодії [33], яка не дозволяє здійснювати послідовне розкладення за взаємодією, як у стандартному термодинамічному пертурбативному підході. Ще одним слабким місцем є те, що вона справедлива за надзвичайно низької температури, близької до абсолютного нуля.

У фізиці холодних атомних газів широко використовується наближення довжини s -розсіювання, коли Фур'є-образ реальної міжатомної взаємодії замінюється сталою величиною [1, 2, 18]. Незважаючи на те, що це наближення є дійсно потужним інструментом для опису ефектів взаємодії, воно має низку слабких місць. Зокрема, під час спроби обчислити хімічний потенціал або енергію основного стану у рамках підходу Боголюбова [15] з урахуванням відповідних доданків з квадратичної частини усіченого гамільтоніана виникають розбіжності відповідних інтегралів при великих імпульсах. Для усунення цієї розбіжності необхідна певна процедура перенормування, застосована до членів другого порядку за операторами створення і знищення [1, 2, 18] та членів вищого порядку також [34]. Виникнення розбіжності пов'язане з тим, що наближення довжини розсіювання нехтує нелокальним характером міжчастинкової взаємодії, який, тим не менш, завжди їй притаманний. Зокрема, для спінових конденсатів це наближення не відтворює повну структуру одночастинкового спектра збудження [35]. Роль нелокальної взаємодії у фізиці ультрахолодних бозе- і фермі-газів нещодавно обговорювалася у [36–39]. Крім того, застосовність наближення довжини s -розсіювання обмежена вибором потенціалу взаємодії. Дійсно, якщо взаємодія $V \propto r^{-n}$, тоді для

$n > 3$ це наближення підходить.

Зазвичай теоретичний опис спінових конденсатів базується на гамільтоніані взаємодії з константами зв'язку, параметризованими s -хвильовими довжинами розсіювання [10–12]. У цьому випадку попарний багаточастинковий гамільтоніан атомів зі спіном 1 визначається двома довжинами розсіювання a_0 і a_2 , що відповідають зіткненням двох атомів із загальним спіном $S = 0, 2$. Таким чином, він містить два члени взаємодії: перший не залежить від операторів спіну, а другий член є білінійним щодо них. З урахуванням лінійного і квадратичного ефекту Зеемана цей гамільтоніан породжує феромагнітний, квадрупольний (полярний), парамагнітний (антиферомагнітний) стани та стан з порушеною осью симетрії [8, 9]. На відміну від інших магнітних станів, стан з порушеною осью симетрії реалізується лише для системи, в якій має місце лінійний і квадратичний ефекти Зеемана водночас. Для конкретних режимів магнітних полів це було досліджено як теоретично [40], так і експериментально [41–43].

Слід звернути увагу, що більшість теоретичних досліджень були зосереджені на температурному режимі, значно нижчому за перехід до стану з БЕК [1–4], а окол самої температури переходу в слабковзаємодійних бозе-газах набагато менш вивчений. Зокрема, існуючі теоретичні підходи не дають однозначної відповіді на основні питання, наприклад: як критична температура залежить від амплітуди потенціалу взаємодії або як розвиваються термодинамічні величини вище температури переходу в порівнянні з ідеальними бозе-газами.

Мета дослідження — дослідити вплив нелокальності взаємодії на термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу як у верхньому околі температури переходу (вище, але близько до неї) до стану з БЕК, так і в стані з БЕК за нульової температури; крім того, дослідити вплив нелокальності взаємодії на ефекти, пов'язані зі спіном, а також на структуру спектру одночастинкових збуджень слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим або одиничним спіном в стані з БЕК за нульової

температури.

Завдання дослідження:

— побудувати термодинаміку слабковзаємодійного бозе-газу для верхнього околу температури переходу в стан з БЕК, загалом вважаючи взаємодію нелокальною;

— порівняти за припущення локальної та нелокальної взаємодії температурні залежності термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії і теплоємності за сталого об'єму — котрі характеризують слабковзаємодійний бозе-газ у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;

— проаналізувати аналітично і чисельно спектр одночастинкових збуджень і термодинамічні величини: хімічний потенціал, густину частинок в конденсаті і густину термодинамічного потенціалу — які характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів з повним спіном нуль в стані з БЕК за нульової температури, вважаючи взаємодію нелокальною;

— з'ясувати вплив різних модельних потенціалів взаємодії на структуру спектра одночастинкових збуджень і термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим спіном в стані з БЕК за нульової температури;

— побудувати, вважаючи взаємодію нелокальною, гамільтоніан слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним спіном один у зовнішньому магнітному полі за нульової температури, який би повною мірою враховував внесок від індукованих спіном атома ступенів свободи: власне спінових і квадрупольних;

— отримати вектори всіх можливих магнітних станів і відповідні залежності термодинамічних величин: хімічного потенціалу, густини термодинамічного потенціалу та намагніченості — що характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів з повним одиничним спіном у зовнішньому магнітному полі в стані з БЕК за нульової температури, котрий описується гамільтоніаном, отриманим в попередній позиції;

— дослідити структуру гілок спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осью симетрії й, особливо, вплив нелокальності взаємодії

на неї;

- встановити умови стабільності знайдених магнітних станів і значень параметрів зовнішнього магнітного поля, за яких можливий перехід із одного магнітного стану в інший;

- побудувати діаграму магнітних станів слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним спіном один у зовнішньому магнітному полі в стані з БЕК за нульової температури, спираючись на результат, отриманий в попередній позиції.

Об’єкт дослідження — слабковзаємодійний бозе-газ атомів з повним спіном нуль або один як у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК, так і в стані з БЕК за нульової температури.

Предмет дослідження — вплив нелокальності взаємодії на термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу як у верхньому околі температури переходу в стан із БЕК, так і в стані з БЕК за нульової температури; окремо, вплив нелокальності взаємодії на ефекти, пов’язані зі спіном, а також на структуру спектру одночастинкових збуджень слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим або одиничним спіном у стані з БЕК за нульової температури.

Методи дослідження:

- вторинне квантування для побудови гамільтоніанів і операторів термодинамічних величин, що характеризують досліджувані бозе-системи;

- термодинамічна теорія збурень для побудови термодинаміки слабковзаємодійного бозе-газу в верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;

- теорема Віка-Блоха-Домінісіса для обчислення поправок в рамках термодинамічної теорії збурень;

- теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу в стані з БЕК для опису відповідних систем з нульовим і одиничним повним спіном атомів;

- канонічні перетворення Боголюбова для діагоналізації гамільтоніану, що описує слабковзаємодійний бозе-газ у стані з БЕК, і здобуття спектрів одночастинкових збуджень;

— низка алгебраїчних методів: часткове диференціювання, інтегрування, обчислення визначників матриць, розкладання функцій в ряд Тейлора, пошук власних значень і векторів матриці, метод простої ітерації для пошуку розв'язку системи нелінійних рівнянь і поправок до величин в рамках термодинамічної теорії збурень;

— низка чисельних методів: чисельне інтегрування з використанням алгоритму Гауса-Кронрода; чисельне диференціювання за двоточковим алгоритмом.

Наукова новизна отриманих результатів:

1. уперше застосовано термодинамічну теорію збурень для обчислення поправок першого й другого порядку за взаємодією до термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії й теплоємності за сталого об'єму — котрі характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;
2. уперше вдосконалено алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса за допомогою введення понять матриці й визначника Віка;
3. уперше показано, що вплив нелокальності взаємодії на характеристики слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан із БЕК незначний, а, отже, припущення контактності взаємодії під час опису зазначеної системи є достатнім;
4. уперше для слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК розв'язана система рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату за нульової температури, з урахуванням внеску квадратичних за операторами народження і знищення доданків та використанням низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії;
5. уперше показано, що внесок квадратичних доданків, згаданих вище, може бути такий самий за порядком величини, як і тих доданків, які походять з c -числової частини гамільтоніану;
6. уперше продемонстровано, що внесок квадратичних членів у хімічний потенціал призводить, загалом, до енергетичної щілини в одночастинковому

енергетичному спектрі збуджень;

7. уперше знайдено й досліджено новий режим стану з порушеною осьовою симетрією слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним одиничним спіном;
8. уперше побудовано для згаданого режиму діаграму магнітних станів, яка заснована на їхній намагніченості;
9. уперше в рамках теорії збурень для магнітного стану БЕК із порушеною осьовою симетрією в слабковзаємодійному бозе-газі атомів із повним одиничним спіном отримано енергетичний спектр одночастинкових збуджень за нульової температури й з урахуванням поправок, що спричинені нелокальністю взаємодії.

Особистий внесок здобувача. Роботи, покладені в основу дисертації, виконано в співавторстві. В роботі [44] здобувач вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок. В роботі [45] здобувач написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії. В роботі [46] здобувач розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією. Здобувач також брав участь у формулюванні всіх задач, розв'язаних у дисертації.

Апробація матеріалів дисертації. Результати доповідалися на:

1. Зй міжнародній конференції перспективних досліджень «Фізика кон-

денсованого стану та низьких температур» (5 – 11 червня, 2023 року, м. Харків, Україна);

2. Всеукраїнській конференції наукових дослідників (19 – 25 вересня 2021 року, м. Львів, Україна);

3. 735-му семінарі імені Вільгельма і Ельзи Гераус «Дослідження квантових багаточастинкових систем з ультра холодними атомами і молекулами» (14 - 18 грудня 2020 року, м. Бад-Гоннеф, Німеччина);

4. Міжнародній конференції перспективних досліджень «Фізика конденсованого стану та низьких температур» (2 – 14 червня, 2020 року, м. Харків, Україна);

5. П'ятій конференції «Статистична фізика: сучасні тренди і застосування» (3 - 6 липня 2019 року, м. Львів, Україна);

6. Дев'ятій міжнародній конференції для професійних і молодих учених «Фізика низьких температур» (4 – 8 червня, 2018 року, м. Харків, Україна);

7. Восьмій міжнародній конференції «Фізика рідини: сучасні проблеми» (18 – 22 травня, 2018 року, м. Київ, Україна).

Структура та обсяг дисертації.

Дисертаційна робота складається зі вступу, 4 розділів, загальних висновків, списку використаних джерел та 1 додатку. Обсяг загального тексту дисертації складає 141 сторінку, з них основного тексту 111 сторінок. Робота ілюстрована 6 таблицями та 14 рисунками. Список використаних джерел містить 96 найменувань.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами. Дисертаційну роботу виконано в Навчально-науковому інституті «Фізико-технічний факультет» Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна відповідно до тематичних планів фундаментальних науково-дослідних робіт. Результати досліджень дисертаційної роботи були здобуті в межах виконання науково-дослідної роботи з таких держбюджетних тем:

— «Вплив внутрішніх ступенів вільності частинок на фізичні характеристики квантових систем поблизу фазових переходів», № ДР 0120U102252

(2020–2022 рр.);

— «Магнітні властивості мезоскопічних систем із внутрішніми ступенями вільності», № ДР 0122U001575 (2022–2024 рр.).

Дослідження, що ввійшли до дисертаційної роботи, виконувались в рамках відомчого замовлення Національної академії наук України на проведення наукових досліджень з атомної науки і техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» за темами:

— «Дослідження класичних і квантових симетрій у теоретико-польових та струнних моделях та проблем статистичної механіки конденсованих середовищ» (№ ДР 0116U007065, 2016–2020 рр.);

— «Розвиток методів статистичної фізики та квантової теорії поля для дослідження проблем фізики квантових систем багатьох частинок та індукованої гравітації й калібрувальних полів у теорії (супер)струн і бран» (№ ДР 0121U108722, 2021–2025 рр.).

Дослідження також проводились в рамках науково-дослідного проєкту, що фінансувався за рахунок грантової підтримки Національного фонду досліджень України, за темою «Просторові кореляції та впорядковані фази, обумовлені ефектами взаємодії в ультрахолодних квантових газах» (№ ДР 0120U104963, 2020–2023 рр.).

Практичне значення отриманих результатів. Передусім отримані результати, як можна зрозуміти з теми дисертації, допомагають сформуванню розуміння того, наскільки значною є роль нелокальної взаємодії з точки зору впливу на фізичні властивості ультрахолодного бозе-газу. Зокрема, деякі характеристики однієї й тієї ж бозе-системи залежно від того, чи знаходиться вона в стані з БЕК, чи ні, можуть як досить суттєво змінювати свою теоретично передбачувану поведінку, так і майже не зазнавати якісних змін унаслідок нелокальності взаємодії, відповідно. Вочевидь, такий факт є важливим не тільки під час планування експериментальних досліджень, а й під час тлумачення їхніх результатів.

Окремо слід звернути увагу на вдосконалення алгоритму підрахунку

середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса. Цей результат стане в нагоді будь-кому, хто стикнеться з необхідністю підрахунку середніх за згаданою теоремою. Саме тому таке вдосконалення має стати бажаним доповненням до курсу кінетичної теорії газоподібних систем, фізики систем багатьох частинок тощо, які викладаються студентам відповідних спеціальностей.

Підґрунтям для подальших теоретичних й експериментальних досліджень також можуть стати такі питання: експериментальне підтвердження передбаченого режиму стану з порушеною осьовою симетрією, щілин в отриманих спектрах одночастинкових збуджень; подальші дослідження системи рівнянь, яка визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу, а також інших термодинамічних характеристик (ентропії, питомої теплоємності за сталого об'єму тощо) за ненульової температури.

Загалом, результати роботи є корисними для вивчення таких макроскопічних явищ у квантових системах, як: надплинність, надпровідність, надплинний кристал тощо — оскільки явище БЕК стоїть за ними.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Цей розділ присвячено викладанню того, що склало основу стало точкою відліку досліджень здобувача: термодинамічна теорія збурень, теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу і узагальнення канонічних перетворень Боголюбова.

1.1. Засади термодинамічної теорії збурень

Із метою аналізу поведінки термодинамічних характеристик слабковзаємодійного бозе-газу в безпосередньому околі над температурою переходу до стану з БЕК, будемо послуговуватися термодинамічною теорією збурень, але перед тим нагадаємо її основні положення.

Розглянемо багаточастинкову систему в термодинамічній рівновазі, що описується статистичним оператором Гіббса

$$w = \exp [\beta (\Omega - H - \mu N)], \quad (1.1)$$

де

$\beta = 1/T$ — обернена температура в одиницях енергії;

Ω — великий термодинамічний потенціал;

μ — хімічний потенціал;

N — оператор числа частинок.

Ми припускаємо, що гамільтоніан системи H можна розділити на дві частини, такі, що

$$H = H_0 + \mathcal{V}, \quad (1.2)$$

де

H_0 — доданок вільних частинок;

$\mathcal{V}$ описує взаємодію між частинками.

Далі ми введемо наступний оператор:

$$K(\beta) = e^{\beta(H_0 - \mu N)} e^{-\beta(H - \mu N)}. \quad (1.3)$$

Для того, аби виписати розкладання в ряд за взаємодією $\mathcal{V}$ для цього оператора, зробимо кілька корисних спостережень за ним:

$$\frac{d}{d\beta} K(\beta) = -\mathcal{V} K(\beta), \quad (1.4)$$

$$K(0) = 1. \quad (1.5)$$

Тож, з диференційного рівняння (1.4) ми можемо отримати інтегральне рівняння,

$$K(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\lambda \mathcal{V}(\lambda) K(\lambda), \quad (1.6)$$

де

$$\mathcal{V}(\lambda_i) = e^{\lambda_i(H_0 - \mu N)} \mathcal{V} e^{-\lambda_i(H_0 - \mu N)}.$$

Шуканою функцією цього рівняння є $K(\beta)$, а $\mathcal{V}(\beta)$ виступає за інтегральне ядро. Тоді, вочевидь, користуючись рекурсивною процедурою, з рівняння (1.6) здобуваємо розкладання в ряд оператора $K(\beta)$ за $\mathcal{V}$ [47],

$$K(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\lambda_1 \cdots \int_0^\beta d\lambda_n T[\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)], \quad (1.7)$$

де

T — оператор упорядкування за змінною λ такий, що

$$T[\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)] = \mathcal{V}(\lambda_{i_1}) \dots \mathcal{V}(\lambda_{i_n}), \quad \lambda_{i_1} > \dots > \lambda_{i_n}.$$

Нарешті послуговуючись умовою нормування для w ($\text{Tr } w = 1$), визначенням

оператора Гіббса (1.1), визначенням оператора $K(\beta)$ (1.3) і його розкладан-
ням в ряд (1.7), можемо подати статистичний оператор як

$$w = \frac{w_0 K(\beta)}{\langle K(\beta) \rangle_0}, \quad (1.8)$$

а вже з (1.8) визначити термодинамічний потенціал системи слабковзаємо-
дійних частинок,

$$\Omega = \Omega_0 - \ln \langle K(\beta) \rangle_0 / \beta, \quad (1.9)$$

і, взагалі, середнє значення будь-якого довільного оператора A ,

$$\langle A \rangle \equiv \frac{\langle K(\beta) A \rangle_0}{\langle K(\beta) \rangle_0}, \quad (1.10)$$

де

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \text{Tr } w_0 \dots, \quad w_0 = \exp \{ \beta (\Omega_0 - H_0 - \mu N) \},$$

$$\begin{aligned} \langle K(\beta) \rangle_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\lambda_1 \dots \int_0^{\beta} d\lambda_n \langle T [\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)] \rangle_0, \\ \langle K(\beta) A \rangle_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\lambda_1 \dots \int_0^{\beta} d\lambda_n \langle T [\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)] A \rangle_0, \end{aligned}$$

а нульові індекси в формулах (1.8)–(1.10) і нижче відповідають системі
невзаємодійних частинок (ідеальний газ).

Оскільки ми формулюємо оператори, користуючись апаратом вторин-
ного квантування, за обчислення середніх нам доведеться мати справу з
деякими добутками таких операторів:

$$a^\dagger(\mathbf{p}, \beta) \equiv e^{\beta(H_0 - \mu N)} a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-\beta(H_0 - \mu N)} = a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}, \quad (1.11)$$

$$a(\mathbf{p}, \beta) \equiv e^{\beta(H_0 - \mu N)} a_{\mathbf{p}} e^{-\beta(H_0 - \mu N)} = a_{\mathbf{p}} e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}, \quad (1.12)$$

де

$a_{\mathbf{p}}^\dagger$ і $a_{\mathbf{p}}$ — оператори народження й знищення частинки в стані з імпульсом $\mathbf{p}$, відповідно. Залежно від статистики вони можуть підкорюватися або комутаційним (статистика Бозе-Ейнштейна),

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (1.13)$$

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}] = 0, \quad (1.14)$$

або антикомутаційним (статистика Фермі-Дірака),

$$\{a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (1.15)$$

$$\{a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}\} = 0. \quad (1.16)$$

Для обчислення ж середніх доцільно використовувати теорему Віка-Блоха-Домінісіса. Тож, уведемо позначення спарення між операторами заданих формулами (1.11) і (1.12):

$$\begin{aligned} \overline{a^\dagger(\mathbf{p}_1, \beta_1)} a(\mathbf{p}_2, \beta_2) &= \langle T [a^\dagger(\mathbf{p}_1, \beta_1) a(\mathbf{p}_2, \beta_2)] \rangle_0 \\ &= e^{(\beta_1 - \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \cdot \begin{cases} \langle a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2} \rangle_0 = f_{\mathbf{p}_1} \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}, & \beta_1 > \beta_2 \\ \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}^\dagger \rangle_0 = (1 \pm f_{\mathbf{p}_1}) \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}, & \beta_1 < \beta_2 \end{cases}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

де верхній знак «плюс» відповідає статистиці Бозе-Ейнштейна (див. формули (1.13), (1.14)), а нижній знак «мінус» — статистиці Фермі-Дірака (див. формули (1.15), (1.16)). Для випадку, коли спарюються однакові оператори, все тривіально:

$$\overline{a^\dagger(\mathbf{p}_1, \beta_1)} a^\dagger(\mathbf{p}_2, \beta_2) = \overline{a_{\mathbf{p}_1}^\dagger} a_{\mathbf{p}_2}^\dagger e^{(\beta_1 + \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = \langle a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger \rangle_0 e^{(\beta_1 + \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = 0, \quad (1.18)$$

$$\overline{a(\mathbf{p}_1, \beta_1)} a(\mathbf{p}_2, \beta_2) = \overline{a_{\mathbf{p}_1}} a_{\mathbf{p}_2} e^{-(\beta_1 + \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_2} \rangle_0 e^{-(\beta_1 + \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = 0. \quad (1.19)$$

Таким чином, враховуючи визначення (1.11)–(1.19), ми можемо сформулю-

вати теорему Віка-Блоха-Домінісіса в наступному вигляді:

$$\langle T [b_1 \dots b_{2n}] \rangle_0 = \sum_{\mathcal{P}} \delta_{\mathcal{P}} \overbrace{b_{i_1} b_{i_2}} \dots \overbrace{b_{i_{2n-1}} b_{i_{2n}}}, \quad (1.20)$$

$$\langle T [b_1 \dots b_{2n+1}] \rangle_0 = 0, \quad (1.21)$$

де

b_j може бути як оператором народження, $a_j^\dagger$, так і оператором знищення, a_j ;

n — натуральне число;

$\mathcal{P}$ позначає певну перестановку, спричинену необхідністю розташування спарюваних операторів поруч;

значення $\delta_{\mathcal{P}}$ залежить від статистики частинок: для ферміонів воно дорівнює -1 , якщо перестановка непарна, і 1 , якщо перестановка парна; для бозонів воно дорівнює 1 незалежно від парності перестановки.

Повернемося до формул (1.9) і (1.10), яким тепер можна надати більш детального вигляду завдяки теоремі Віка-Блоха-Домінісіса (див. (1.20) і (1.21)). А саме, ці формули можна додатково спростити шляхом підсумовування за неспареними доданками, тобто тими, які містять групу множників $\mathcal{V}(\lambda_{i_1}) \dots \mathcal{V}(\lambda_{i_k})$ поєднаних лише між собою, під час обчислення середніх значень згідно з теоремою Віка-Блоха-Домінісіса. Іншими словами, неспареними доданками другого або вищого порядку розкладення є ті, які не містять жодного оператора, що входить до $\mathcal{V}(\lambda_a)$ і заплутаного з оператором із $\mathcal{V}(\lambda_b)$ через зв'язки (щодо парної взаємодії див. нижче). Це дозволяє звести формули (1.9) і (1.10) (див. [47, 48]) до

$$\Omega = \Omega_0 - (\langle K(\beta) \rangle_0^c - 1) / \beta, \quad (1.22)$$

$$\langle A \rangle \equiv \frac{\langle K(\beta) A \rangle_0^c}{\langle K(\beta) \rangle_0^c}, \quad (1.23)$$

де

$$\begin{aligned}\langle K(\beta) \rangle_0^c &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\lambda_1 \cdots \int_0^\beta d\lambda_n \langle T[\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)] \rangle_0^c, \\ \langle K(\beta) A \rangle_0^c &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\lambda_1 \cdots \int_0^\beta d\lambda_n \langle T[\mathcal{V}(\lambda_1) \dots \mathcal{V}(\lambda_n)] A \rangle_0^c,\end{aligned}$$

а індекс c означає, що лише спарені доданки враховуються. Варто додати, що для отримання формули (1.22) з (1.9) необхідно скористатися також формулою Маклорена $\ln(1+x) \approx x$, коли $x \rightarrow 0$.

Кілька слів хочеться присвятити більш простому або хоча б більш наочному поясненню різниці між спареними і неспареними доданками. Звісно, це пояснення через візуалізацію, наприклад, за допомогою діаграмної техніки Феймана, за якою лініям зіставляються частинки, а вершинам — їхня взаємодія. Тоді спареному доданку буде відповідати діаграма, в якій можна знайти принаймні одну послідовність вершин і ліній таку, що можна «прокласти» шлях між будь-якими двома вершинами, не відриваючи олівця. Та ж аналогія справедлива й під час обчислення середнього від довільного оператора A — достатньо вважати оператор A додатковою вершиною (див. (1.23)).

1.2. Теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу і кано-нічні перетворення

1.2.1. Теорія Боголюбова слабковзаємодійного бозе-газу

Під час дослідження нормального стану багаточастинкової системи слабковзаємодійних частинок зазвичай використовують стандартний пертурбативний підхід за взаємодією [47] (або термодинамічна теорія збурень) для знаходження поправок до статистичного оператора, термодинамічного потенціалу та багаточастинкові функції розподілу (див., наприклад, підрозділ

1.1). Однак, як правило, стандартна техніка теорії збурень стає непридатною для систем зі спонтанно порушеною симетрією, тому опис вимагає розвитку нових асимптотичних методів. Зокрема, стандартний пертурбативний підхід не описує рівноважного стану неідеального бозе-газу з БЕК, навіть якщо взаємодія між частинками слабка. Це пов'язано з тим, що розходяться доданки, які з'являються в ряді звичайної теорії збурень. З цієї причини необхідно будувати відповідну теорію для опису бозе-газу в стані з БЕК, яка враховувала порушення калібрувальної симетрії.

Така специфічна теорія була розроблена Боголюбовим [15]. Оскільки число конденсованих частинок стає макроскопічно великою, пропорційною до об'єму системи V , він запропонував розглядати оператори народження й знищення частинок з нульовим імпульсом як c -числа, тобто $a_0^\dagger$ і a_0 замінюються на $N_0^{1/2}$ у всіх операторах відповідних фізичних величин, де N_0 — число частинок, конденсованих у стан з $\mathbf{p} = 0$. Однак більш суворі обґрунтування цієї процедури не настільки тривіальні [49]. Пізніше було доведено, що за досить загальних умов для потенціалу взаємодії двох тіл заміна Боголюбова дає точний результат для тиску в границі нескінченного об'єму [50]. Зазначимо, що зв'язок заміни операторів c -числом і порушення калібрувальної симетрії в теорії БЕК мав широке обговорення в ряді відносно нещодавніх досліджень [32, 51–54].

Далі з метою ілюстрації підходів теорії Боголюбова розглянемо багаточастинкову систему взаємодійних бозе атомів, яка описується наступним мікроскопічним гамільтоніаном з парною взаємодією:

$$H = H_0 + \mathcal{V} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} \quad (1.24)$$

де

$\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2/2m$ — кінетична енергія атома;

m — маса атома;

$\nu(\mathbf{p})$ – Фур’є-образ потенціальної енергії взаємодії для двох атомів;
 $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ і $a_{\mathbf{p}}$ – оператори народження й знищення бозонів. У гамільтоніані (1.24) для простоти не враховується спінові ступенів свободи та обмінна взаємодія між атомами. Узагальнення підходу Боголюбова, яке включає спінові ступені свободи, вивчалось в роботах [55, 56] і буде розглянуто далі в роботі. Оператор числа частинок

$$N = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} \quad (1.25)$$

комутує з вищезазначеним гамільтоніаном, що гарантує збереження загального числа частинок. Виконаємо згадану заміну операторів $a_0^{\dagger}$ і a_0 на $N_0^{1/2}$ в рівнянні (1.24) і отримаємо:

$$H(N_0) = H_0 + f(N_0) + \frac{\partial f(N_0)}{\partial N_0} N' + N_0 \mathcal{V}^{(2)} + N_0^{1/2} \mathcal{V}^{(3)} + \mathcal{V}^{(4)} \quad (1.26)$$

де

$$\begin{aligned} f(N_0) &= \frac{\nu(0) N_0^2}{2V}, \\ N' &= \sum_{\mathbf{p} \neq 0} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}, \\ \mathcal{V}^{(2)} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \nu(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \nu(\mathbf{p}) \left[a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{-\mathbf{p}}^{\dagger} + a_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}} \right], \\ \mathcal{V}^{(3)} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_3 \neq 0} \nu(\mathbf{p}_2) \left[a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3} \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3} + a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_3} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3} \right], \\ \mathcal{V}^{(4)} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4 \neq 0} \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4) a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \end{aligned}$$

Далі Боголюбов запропонував врахувати в гамільтоніані (1.26) тільки с-числові доданки і ті, що квадратичні за операторами народження та знищення частинок із ненульовим імпульсом [15]. У випадку слабкої взаємодії доданками, що містять три і чотири оператори, можна знехтувати. Вони повинні бути належним чином враховані під час опису ефектів, що виникають

за взаємодії квазічастинок. Такий усічений гамільтоніан лежить в основі квадратичного наближення, що дозволяє природним чином вводити поняття квазічастинок і обчислювати основні термодинамічні величини й спектр одночастинкових збуджень.

Однак через те, що симетрія $U(1)$ урізаного гамільтоніана порушена, він більше не комутує з оператором числа частинок. Тому до проблеми можна підходити, розглядаючи великий канонічний ансамбль. Статистичний оператор Гіббса, що відповідає великому канонічному ансамблю виглядає так:

$$w(N_0) = \exp(\beta [\Omega - \mathcal{H}(N_0)]), \quad (1.27)$$

де

$$\mathcal{H}(N_0) = H(N_0) - \mu N_0 - \mu N';$$

$\beta = 1/T$ — зворотна температура;

μ — хімічний потенціал (або множник Лагранжа), що гарантує збереження загального числа частинок.

Після c -числової заміни оператор числа частинок (див. (1.25)) зводиться до $N(N_0) = N_0 + N'$. Великий термодинамічний потенціал Ω як функція β , μ , та N_0 визначається з умови нормування $\text{Tr} [w(N_0)] = 1$, де слід рахується в просторі чисел заповнення бозонів з $\mathbf{p} \neq 0$.

Варто також розуміти, що, оскільки досліджувана система знаходиться в стані термодинамічної рівноваги, на великий термодинамічного потенціал Ω накладається наступна умова мінімуму:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial N_0} = 0. \quad (1.28)$$

Зауважимо, часткова похідна в рівнянні (1.28) повинна знаходитися за всіх інших сталих параметрів стану системи (температури T , хімічного потенціалу μ і об'єму V), тобто обчислюватися тільки за явною залежністю від числа конденсованих частинок N_0 .

Наступний крок полягає в урізанні гамільтоніана, заданного рівнянням (1.26) так, щоб він містив лише c -числові й квадратичні за операторами народження та знищення доданки. Такий усічений гамільтоніан лежить в основі так званого квадратичного наближення й після відповідної діагоналізації дозволяє описати систему слабковзаємодійних частинок мовою вільних квазічастинок. Отже, в межах квадратичного наближення маємо:

$$\mathcal{H}^{(2)}(N_0) = f(N_0) - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[\alpha_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \beta_{\mathbf{p}} \left(a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{-\mathbf{p}}^{\dagger} + a_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}} \right) \right], \quad (1.29)$$

де

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{p}} &= \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu + \nu(0)n_0 + \beta_{\mathbf{p}}, \\ \beta_{\mathbf{p}} &= \nu(\mathbf{p})n_0, \end{aligned} \quad (1.30)$$

$n_0 = N_0/V$ – густина частинок конденсату.

Тут і нижче верхній індекс “(2)” позначає фізичні величини виписані до другого порядку за операторами $a_{\mathbf{p}}$ і $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$. Тоді, підставляючи квадратичний гамільтоніан (1.29) до визначення (1.27), отримуємо статистичний оператор у квадратичному наближенні

$$w(N_0) \simeq w^{(2)}(N_0) = \exp \left[\beta \left(\Omega^{(2)} - \mathcal{H}^{(2)}(N_0) \right) \right] \quad (1.31)$$

Великий термодинамічний потенціал у квадратичному наближенні, $\Omega^{(2)}$, знаходиться з умови нормування такого статистичного оператора, (1.31), — $\text{Tr} [w^{(2)}(N_0)] = 1$.

На цьому етапі Боголюбов вводить поняття канонічного перетворення, яке дозволяє діагоналізувати за операторами народження і знищення квадратичний гамільтоніан $\mathcal{H}^{(2)}(N_0)$ (також і статистичний оператор $w^{(2)}(N_0)$) унітарним перетворенням U :

$$U \mathcal{H}^{(2)}(N_0) U^{\dagger} = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \omega_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + \mathcal{E}_0^{(2)}, \quad U U^{\dagger} = 1, \quad (1.32)$$

де

$\omega_{\mathbf{p}}$ — спектр збудження квазічастинок;

$\mathcal{E}_0^{(2)}$ — енергія основного стану (зауважимо, що $\mathcal{H}^{(2)}(N_0)$ не є справжнім гамільтоніаном).

Для діагоналізації $\mathcal{H}^{(2)}(N_0)$ скористаємося унітарним оператором U , який змішує оператори народження $a_{-\mathbf{p}}^\dagger$ і знищення $a_{\mathbf{p}}$:

$$U a_{\mathbf{p}}^\dagger U^\dagger = u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger + v_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}, \quad (1.33)$$

$$U a_{\mathbf{p}} U^\dagger = u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}^\dagger. \quad (1.34)$$

Ці нові оператори повинні задовольняти тим самим бозонним комутаційним співвідношенням (1.13) і (1.14), тобто перетворення повинні бути канонічними. Ця вимога призводить до наступних умов на $u_{\mathbf{p}}$ і $v_{\mathbf{p}}$:

$$u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2 = 1, \quad (1.35)$$

$$u_{\mathbf{p}} v_{-\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}} u_{-\mathbf{p}} = 0. \quad (1.36)$$

Аби здобути вираз для спектру збудження квазічастинок $\omega_{\mathbf{p}}$ (див. [15]), розглянемо комутатор $U [a_{\mathbf{p}}, \mathcal{H}^{(2)}(N_0)] U^\dagger$, який з однієї сторони, використовуючи формулу (1.32), перетворення операторів народження і знищення (1.33) та (1.34), можна обчислити як

$$U [a_{\mathbf{p}}, \mathcal{H}^{(2)}(N_0)] U^\dagger = [U a_{\mathbf{p}} U^\dagger, U \mathcal{H}^{(2)}(N_0) U^\dagger] = \omega_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} - \omega_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}^\dagger. \quad (1.37)$$

З іншого боку можна застосувати унітарні перетворення не перед обчисленням комутатора, а — після. Тоді, знов використовуючи перетворення (1.33) і (1.34) та квадратичний гамільтоніан (1.29), маємо

$$\begin{aligned} U [a_{\mathbf{p}}, \mathcal{H}^{(2)}(N_0)] U^\dagger &= U \left(\alpha_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}^\dagger \right) U^\dagger \\ &= (\alpha_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}) a_{\mathbf{p}} + (\alpha_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}}) a_{-\mathbf{p}}^\dagger. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Нарешті, порівнюючи вирази (1.37) і (1.38), здобуваємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} \alpha_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} = \omega_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} \\ \beta_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} + \alpha_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} = -\omega_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \end{cases}. \quad (1.39)$$

Систему рівнянь (1.39) нескладно розв'язати, використовуючи добре відомі алгебраїчні методи. Отже, знайдемо спектр квазічастинок:

$$\omega_{\mathbf{p}} = (\alpha_{\mathbf{p}}^2 - \beta_{\mathbf{p}}^2)^{1/2}. \quad (1.40)$$

Здобудемо також функції $u_{\mathbf{p}}$ і $v_{\mathbf{p}}$, які визначають канонічне перетворення U :

$$u_{\mathbf{p}}^2 = \frac{(\alpha_{\mathbf{p}} + \omega_{\mathbf{p}})}{2\omega_{\mathbf{p}}}, \quad (1.41)$$

$$v_{\mathbf{p}}^2 = \frac{(\alpha_{\mathbf{p}} - \omega_{\mathbf{p}})}{2\omega_{\mathbf{p}}}. \quad (1.42)$$

Для того, щоб визначити енергію основного стану $\mathcal{E}_0^{(2)}$, введемо вектор $|0\rangle$, що відповідає чистому стану БЕК, тобто такому стану, який не містить надконденсатних частинок: $a_{\mathbf{p}}|0\rangle = 0$. Тоді з формули (1.29) маємо

$$\langle 0|\mathcal{H}^{(2)}(N_0)|0\rangle = f(N_0) - \mu N_0. \quad (1.43)$$

З іншого боку ми розуміємо з діагонального квадратичного гамільтоніана (1.32), що

$$\mathcal{H}^{(2)}(N_0) = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \omega_{\mathbf{p}} U^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger U U^\dagger a_{\mathbf{p}} U + \mathcal{E}_0^{(2)}, \quad (1.44)$$

а тому знайдемо зворотні перетворення з прямих (1.33) і (1.34) за допомогою рівнянь (1.35) і (1.36):

$$U^\dagger a_{\mathbf{p}}^\dagger U = u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger - v_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}, \quad (1.45)$$

$$U^\dagger a_{\mathbf{p}} U = u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}}^\dagger. \quad (1.46)$$

Підставляємо знайдені перетворення (1.45) і (1.46) до рівняння (1.44):

$$\mathcal{H}^{(2)}(N_0) = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \omega_{\mathbf{p}} \left(a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} (u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2) + v_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} a_{-\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{-\mathbf{p}}^\dagger \right) + \mathcal{E}_0^{(2)}. \quad (1.47)$$

Беручи середнє від рівняння (1.47) за чистим БЕК станом, знаходимо:

$$\langle 0 | \mathcal{H}^{(2)}(N_0) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \omega_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}^2 + \mathcal{E}_0^{(2)}. \quad (1.48)$$

Нарешті, підставляючи явний вигляд $v_{\mathbf{p}}^2$ (див. рівняння (1.41) і (1.42)) і порівнюючи вирази (1.43) та (1.48), здобуваємо:

$$\mathcal{E}_0^{(2)} = f(N_0) - \mu N_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\omega_{\mathbf{p}} - \alpha_{\mathbf{p}}). \quad (1.49)$$

Також із допомогою перетворень (1.33) і (1.34) ми можемо звести статистичний оператор Гіббса у квадратичному наближенні (1.31) до діагональної форми:

$$U w^{(2)}(N_0) U^\dagger = \exp \left[\beta \left(\tilde{\Omega}^{(2)} - \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \omega_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} \right) \right], \quad (1.50)$$

де ввели позначення великого термодинамічного потенціалу газу невзаємодійних квазічастинок,

$$\tilde{\Omega}^{(2)} \equiv \Omega^{(2)} - \mathcal{E}_0^{(2)} = \beta^{-1} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \ln (1 - e^{-\beta \omega_{\mathbf{p}}}). \quad (1.51)$$

Функцію розподілу квазічастинок тоді можна визначити з (1.51):

$$f_{\mathbf{p}} = \frac{\partial \tilde{\Omega}^{(2)}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} = \frac{1}{e^{\beta \omega_{\mathbf{p}}} - 1}. \quad (1.52)$$

Для подальшого аналізу зручно ввести густину потенціалу $\mathcal{W} = \Omega/V$, що є релятивістськи інваріантом і з точністю до знака збігається з тиском P [57, 58]. Тоді з рівняння (1.51) маємо:

$$\mathcal{W}^{(2)} = -P = \frac{1}{V} \left[\mathcal{E}_0^{(2)} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \ln(1 - e^{-\beta \omega_{\mathbf{p}}}) \right]. \quad (1.53)$$

Наразі можемо вивести зв'язані рівняння, що описують рівноважні властивості слабковзаємодійного газу з БЕК у квадратичному наближенні. Спочатку визначимо загальну густину частинок $n = N/V$. Згідно з рівнянням (1.25) вона дорівнює:

$$n = n_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \text{Tr} \left[U w^{(2)}(N_0) U^\dagger U a_{\mathbf{p}}^\dagger U^\dagger U a_{\mathbf{p}} U^\dagger \right]. \quad (1.54)$$

Потім, послуговуючись перетвореннями (1.33) і (1.34), умовами (1.35) і (1.36) та виразами (1.40) – (1.42), (1.50) і (1.52), знаходимо з (1.54):

$$n = n_0 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} (2f_{\mathbf{p}} + 1) - 1 \right]. \quad (1.55)$$

Далі звернемося до рівняння (1.28), що забезпечує мінімум великого термодинамічного потенціалу. Таким чином, у квадратичному наближенні умова мінімуму набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} \mu &\simeq \nu(0)n_0 \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} [\nu(0) + \nu(\mathbf{p})] \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} (2f_{\mathbf{p}} + 1) - 1 \right] - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{\nu^2(\mathbf{p})n_0}{\omega_{\mathbf{p}}} (2f_{\mathbf{p}} + 1). \end{aligned} \quad (1.56)$$

З рівнянь (1.55) і (1.56) можна скласти систему, розв'язання якої дозволяє знайти хімічний потенціал μ і густину частинок конденсату n_0 як функції температури T і загальної густини частинок n в квадратичному наближенні. Зауважимо, що перший доданок у рівнянні (1.56) пов'язаний з s -числовою частиною усіченого гамільтоніану $\mathcal{H}^{(2)}(N_0)$ (див. (1.29)), тоді як інші доданки походять з його квадратичної за операторами народження і знищення частини.

За нульової температури функція розподілу квазічастинок прямує до нуля (див. формулу (1.52)). Таким чином, система рівняння (1.55) і (1.56) набуває вигляду:

$$n = n_0 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - 1 \right], \quad (1.57)$$

$$\mu \simeq \nu(0)n_0 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} [\nu(0) + \nu(\mathbf{p})] \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - 1 \right] - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{\nu^2(\mathbf{p})n_0}{\omega_{\mathbf{p}}}. \quad (1.58)$$

Також в границі нульової температури з рівнянь (1.49) і (1.53) густина великого термодинамічного потенціалу основного стану визначається наступною формулою:

$$\mathcal{W}^{(2)} = \frac{\nu(0)n_0^2}{2} - \mu n_0 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\omega_{\mathbf{p}} - \alpha_{\mathbf{p}}). \quad (1.59)$$

У стандартному наближенні Боголюбова, що діє за нульової температури, хімічний потенціал визначається s -числовою частиною усіченого гамільтоніана (див. (1.29)):

$$\mu \simeq \nu(0)n_0. \quad (1.60)$$

Цей хімічний потенціал задовольняє відношенню Гугенхольца-Пайнса [59] і призводить до безперервного спектру одночастинкових збуджень (див. (1.40)). Також, ідучи за Боголюбовим, в границі малих імпульсів, підстав-

ляючи рівняння (1.60) до (1.40), знайдемо спектр квазічастинок:

$$\omega_{\mathbf{p}} = c_s p, \quad c_s = \sqrt{\frac{\nu(0)n_0}{m}}. \quad (1.61)$$

Як бачимо з (1.61), спектр квазічастинок має фононний характер, а c_s збігається зі швидкістю звуку (хвиль густини): $\sqrt{\frac{1}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial n_0} \right)} = \sqrt{\frac{\nu(0)n_0}{m}}$, обчисленого за добре відомою формулою з підстановкою лише c -числової частини виразу для тиску (див. формулу (1.59)).

1.2.2. Узагальнення канонічних перетворень Боголюбова

Алгоритм діагоналізації гамільтоніана, викладений у підрозділі 1.2.1, справедливий для випадку багаточастинкової системи бозонів без внутрішніх ступенів свободи. Вочевидь, він потребує вдосконалення, коли ми хочемо врахувати також внесок внутрішніх ступенів свободи частинок бозе-газу в стані з БЕК. Зокрема, така система описується не просто c -числом, векторним параметром порядку — хвильовою функцією конденсату.

Тож, давайте роздивимось довільну квадратичну форму за бозе-операторами народження і знищення, яку можна подати як

$$H = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger A_{\alpha\beta} a_{\mathbf{p}\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger B_{\alpha\beta} a_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\alpha} B_{\alpha\beta}^* a_{-\mathbf{p}\beta}, \quad (1.62)$$

де

$a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger$ і $a_{\mathbf{p}\alpha}$ — оператори народження і знищення бозе-частинки з імпульсом $\mathbf{p}$ і в стані α , відповідно;

тут і далі вважаємо, що підсумовування відбувається за всіма індексами, що повторюються і позначаються грецькими літерами.

Тоді, додатково припускаючи, що ця форма є ермітовим оператором, маємо вимагати, аби $A = A^\dagger$, $B = B^T$. Бозе оператори народження і знищення,

вочевидь, підкорюються таким комутаційним співвідношенням:

$$\left[a_{\mathbf{p}\alpha}, a_{\mathbf{p}\beta}^\dagger \right] = \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.63)$$

$$\left[a_{\mathbf{p}\alpha}, a_{\mathbf{p}\beta} \right] = 0. \quad (1.64)$$

Для діагоналізації форми (1.62) введемо нові оператори

$$b_{\mathbf{p}\beta}^\dagger = u_{\beta\alpha} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger - v_{\beta\alpha} a_{-\mathbf{p}\alpha}, \quad (1.65)$$

$$b_{\mathbf{p}\beta} = u_{\beta\alpha}^* a_{\mathbf{p}\alpha} - v_{\beta\alpha}^* a_{-\mathbf{p}\alpha}^\dagger. \quad (1.66)$$

Перш за все, помітимо, що величини $A_{\alpha\beta}$, $B_{\alpha\beta}$, $u_{\alpha\beta}$, $v_{\alpha\beta}$ дефолтно є функціями імпульсу, але позначення опущено з міркувань зручності викладення. Для того, аби перетворення (1.65) і (1.66) були канонічними, тобто такими, що нові оператори також будуть бозе-операторами, необхідно виконання, вочевидь, таких комутаційних співвідношень:

$$\left[b_{\mathbf{p}\alpha}, b_{\mathbf{p}\beta}^\dagger \right] = \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.67)$$

$$\left[b_{\mathbf{p}\alpha}, b_{\mathbf{p}\beta} \right] = 0. \quad (1.68)$$

Вимагаючи виконання співвідношень (1.67) і (1.68), отримуємо наступні властивості матриць $U \equiv (u_{\alpha\gamma})$ і $V \equiv (v_{\alpha\gamma})$:

$$u_{\alpha\gamma}^* u_{\beta\gamma} - v_{\alpha\gamma}^* v_{\beta\gamma} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.69)$$

$$u_{\alpha\gamma} v_{\beta\gamma} - u_{\beta\gamma} v_{\alpha\gamma} = 0. \quad (1.70)$$

Також нескладно виписати зворотні перетворення операторів

$$a_{\mathbf{p}\beta}^\dagger = u_{\beta\alpha}^* b_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger + v_{\beta\alpha} b_{-\mathbf{p}\alpha}, \quad (1.71)$$

$$a_{\mathbf{p}\beta} = u_{\beta\alpha} b_{\mathbf{p}\alpha} + v_{\beta\alpha}^* b_{-\mathbf{p}\alpha}^\dagger. \quad (1.72)$$

Потребуючи канонічність вже зворотних перетворень (1.71) і (1.72) (тобто

виконання рівнянь (1.63) і (1.64)), отримуємо ще пару умов на матриці $U \equiv (u_{\alpha\gamma})$ і $V \equiv (v_{\alpha\gamma})$:

$$u_{\alpha\gamma}u_{\beta\gamma}^* - v_{\beta\gamma}v_{\alpha\gamma}^* = \delta_{\alpha\beta}, \quad (1.73)$$

$$u_{\alpha\gamma}v_{\beta\gamma}^* - u_{\beta\gamma}v_{\alpha\gamma}^* = 0. \quad (1.74)$$

Діагоналізована квадратична форма (1.62) має такий вигляд

$$H = \sum_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger C_{\alpha\beta} b_{\mathbf{p}\beta} + D, \quad (1.75)$$

де

$$C_{\alpha\beta} = \omega^{[\alpha]} \delta_{\alpha\beta};$$

$$\omega^{[\alpha]} \in \mathbb{R};$$

$$D = D^\dagger \text{ — певне число};$$

[...] — квадратні дужки навколо грецького індексу позначають, що залежність величини від індексу є, але немає підсумовування за ним.

В рамках процедури пошуку явного вигляду матриць U і V знаходимо

$$[b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger, H] = -b_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger C_{\alpha\gamma}, \quad (1.76)$$

$$[b_{\mathbf{p}\gamma}, H] = b_{\mathbf{p}\alpha} C_{\alpha\gamma}, \quad (1.77)$$

де вочевидь була використана квадратична форма H у вигляді (1.75). Тепер, використовуючи вже вигляд квадратичної форми H заданий формулою (1.62), підрахуємо

$$[a_{\mathbf{p}\gamma}, H] = A_{\gamma\beta} a_{\mathbf{p}\beta} + B_{\gamma\beta} a_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger, \quad (1.78)$$

$$[H, a_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger] = a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger A_{\alpha\gamma} + a_{-\mathbf{p}\alpha} B_{\alpha\gamma}^*. \quad (1.79)$$

Підставляючи зворотні перетворення (1.71) і (1.72) до рівнянь (1.78) і (1.79) та враховуючи комутаційні співвідношення (1.76) і (1.77), здобуваємо,

Відповідно:

$$\begin{aligned} & \left(u_{\gamma\alpha} b_{\mathbf{p}\beta} - v_{\gamma\alpha}^* b_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger \right) C_{\alpha\beta} = \\ & A_{\gamma\beta} u_{\beta\alpha} b_{\mathbf{p}\alpha} + A_{\gamma\beta} v_{\beta\alpha}^* b_{-\mathbf{p}\alpha}^\dagger + B_{\gamma\beta} u_{\beta\alpha}^* b_{-\mathbf{p}\alpha}^\dagger + B_{\gamma\beta} v_{\beta\alpha} b_{\mathbf{p}\alpha}, \end{aligned} \quad (1.80)$$

$$\begin{aligned} & \left(u_{\gamma\alpha}^* b_{\mathbf{p}\beta}^\dagger - v_{\gamma\alpha} b_{-\mathbf{p}\beta} \right) C_{\alpha\beta} = \\ & A_{\alpha\gamma} u_{\alpha\beta}^* b_{\mathbf{p}\beta}^\dagger + A_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta} b_{-\mathbf{p}\beta} + B_{\alpha\gamma}^* u_{\alpha\beta} b_{-\mathbf{p}\beta} + B_{\alpha\gamma}^* v_{\alpha\beta}^* b_{\mathbf{p}\beta}^\dagger \end{aligned} \quad (1.81)$$

Дорівнюючи коефіцієнти в рівняннях (1.80) і (1.81) біля операторів $b_{-\mathbf{p}\alpha}^\dagger$ і $b_{\mathbf{p}\alpha}$ (в кожному окремо), отримуємо систему рівнянь на знаходження матриць C , U і V :

$$\begin{cases} A_{\gamma\alpha} u_{\alpha\beta} + B_{\gamma\alpha} v_{\alpha\beta} = u_{\gamma\alpha} C_{\alpha\beta} \\ A_{\gamma\alpha}^* v_{\alpha\beta} + B_{\gamma\alpha}^* u_{\alpha\beta} = -v_{\gamma\alpha} C_{\alpha\beta} \end{cases}, \quad (1.82)$$

$$\begin{cases} A_{\alpha\gamma}^* u_{\alpha\beta} + B_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta} = u_{\gamma\alpha} C_{\alpha\beta} \\ A_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta} + B_{\alpha\gamma}^* u_{\alpha\beta} = -v_{\gamma\alpha} C_{\alpha\beta} \end{cases}. \quad (1.83)$$

Систему рівнянь (1.82) також можна подати у вигляді блокових матриць:

$$\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline B^* & A^* \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} U \\ V \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} UC \\ -VC \end{array} \right). \quad (1.84)$$

Тоді, якщо скористатись визначенням матриці C , $C_{\alpha\beta} = \omega^{[\alpha]} \delta_{\alpha\beta}$, і зафіксувати певний стовпець з правої сторони рівняння (1.84) (для визначеності нехай це буде стовпець з номером μ), маємо

$$\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline B^* & A^* \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} U \\ V \end{array} \right)_\mu = \omega^{[\mu]} \left(\begin{array}{c} U \\ -V \end{array} \right)_\mu. \quad (1.85)$$

Тепер знайдемо доданок D з діагоналізованої квадратичної форми (1.75). Для початку підставимо до початкового гамільтоніану (1.62) перетворення (1.71) і (1.72):

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger + v_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} \right) A_{\alpha\beta} \left(u_{\beta\sigma} b_{\mathbf{p}\sigma} + v_{\beta\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\sigma}^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger + v_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} \right) B_{\alpha\beta} \left(u_{\beta\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\sigma}^\dagger + v_{\beta\sigma} b_{\mathbf{p}\sigma} \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma}^* b_{-\mathbf{p}\gamma}^\dagger + v_{\alpha\gamma} b_{\mathbf{p}\gamma} \right) A_{\alpha\beta} \left(u_{\beta\sigma} b_{-\mathbf{p}\sigma} + v_{\beta\sigma}^* b_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma} b_{\mathbf{p}\gamma} + v_{\alpha\gamma}^* b_{-\mathbf{p}\gamma}^\dagger \right) B_{\alpha\beta}^* \left(u_{\beta\sigma} b_{-\mathbf{p}\sigma} + v_{\beta\sigma}^* b_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \right). \quad (1.86)
\end{aligned}$$

Потім, розкриваючи ліву пару дужок в перших двох доданках і праву пару дужок в останніх двох доданках виразу (1.86), користуємося рівняннями (1.82) і (1.83) та отримуємо

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger + v_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} \right) \left(u_{\alpha\sigma} b_{\mathbf{p}\beta} - v_{\alpha\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger \right) C_{\sigma\beta} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger - v_{\alpha\sigma} b_{\mathbf{p}\beta} \right) C_{\sigma\beta} \left(u_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} + v_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger \right). \quad (1.87)
\end{aligned}$$

Тепер розкриємо всі дужки в виразі (1.87) і, застосувавши умову (1.70), маємо

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(u_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger u_{\alpha\sigma} b_{\mathbf{p}\beta} - v_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} v_{\alpha\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger \right. \\
& \left. + u_{\alpha\sigma}^* b_{-\mathbf{p}\beta}^\dagger u_{\alpha\gamma} b_{-\mathbf{p}\gamma} - v_{\alpha\sigma} b_{\mathbf{p}\beta} v_{\alpha\gamma}^* b_{\mathbf{p}\gamma}^\dagger \right) C_{\sigma\beta}. \quad (1.88)
\end{aligned}$$

Залишилось лише скористатись комутаційним співвідношенням (1.67) і умовою (1.69):

$$H = \sum_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger C_{\alpha\beta} b_{\mathbf{p}\beta} - \omega^{[\beta]} v_{\alpha\beta} v_{\alpha\beta}^*. \quad (1.89)$$

Порівнюємо вирази (1.75) і (1.89) та нарешті здобуваємо визначення бажаного

доданку:

$$D = -\omega^{[\beta]} v_{\alpha\beta} v_{\alpha\beta}^*. \quad (1.90)$$

Як бачимо з рівняння (1.85) і визначення (1.90), нам вдалося повністю звести початкову задачу з діагоналізації квадратичної операторної форми до задачі, що подібна задачі з пошуку власних значень і власних векторів матриці, що стоїть у правій частині рівняння (1.85).

Кілька слів треба додати щодо блокових матриць. Це такі об'єкти, які з точки зору математики нічим не відрізняються від звичайних матриць, а саме слово «блоковий» вказує лише на принцип їхньої побудови: він полягає в конкатенації строк і стовпців складових матриць в послідовності, що визначається в цій роботі вертикальними та горизонтальними суцільними лініями.

В рамках концепції блокових матриць умови (1.69), (1.70), (1.73) і (1.74) можна подати у наступному вигляді

$$M^\dagger J M = J, \quad (1.91)$$

де

$$M^\dagger = \left(\begin{array}{c|c} U & -V^* \\ \hline -V & U^* \end{array} \right), \quad J = \left(\begin{array}{c|c} 0 & I \\ \hline -I & 0 \end{array} \right), \quad M = \left(\begin{array}{c|c} U^\dagger & -V^\dagger \\ \hline -V^T & U^T \end{array} \right),$$

$I \equiv \delta_{\alpha\beta}$ — одинична матриця.

Тотожність (1.91) — це, так звана, умова симплектичності матриці M . Якщо якась матриця втілює перетворення координат (операторів) і задовольняє згаданий умові, то вона зберігає (тобто залишає незмінним під дією перетворень) кососиметричний добуток координат, що в нашому випадку відповідає комутатору операторів народження і знищення (див. (1.67)).

Висновки до розділу 1

1. Викладено засади термодинамічної теорії збурень.
2. Викладено теорію слабковзаємодійного бозе-газу Боголюбова.
3. Отримано в рамках теорії Боголюбова систему рівнянь, яка визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу атомів з нульовим спіном за ненульової температури (див. рівняння (1.55) і (1.56)).
4. Зроблено узагальнення канонічних перетворень Боголюбова на випадок наявності в частинок бозе-газу додаткових внутрішніх ступенів свободи.

РОЗДІЛ 2

ТЕРМОДИНАМІКА СЛАБКОВЗАЄМОДІЙНОГО БОЗЕ-ГАЗУ У ВЕРХНЬОМУ ОКОЛІ ТЕМПЕРАТУРИ ПЕРЕХОДУ

Цей розділ присвячено побудові термодинаміки бозе-газу в верхньому околі температури переходу до стану з БЕК із урахуванням поправок першого і другого порядку за взаємодією до основних термодинамічних величин. Теоретичний опис побудований у рамках термодинамічної теорії збурень, вперше впроваджені Пайєрлсом [60–62]. Хоча в контексті слабковзаємодійних квантових газів цей теоретичний підхід був запропонований давно [47, 48], наскільки відомо, його ніколи не було застосовувано як для отримання конкретних термодинамічних характеристик слабковзаємодійного бозе-газу, так і для їх кількісного аналізу.

2.1. Гамільтоніан слабковзаємодійного бозе-газу

Перед тим, як зосередитись на термодинамічних властивостях слабковзаємодійного бозе-газу, необхідно уточнити гамільтоніан, яким ми описуємо систему в просторі чисел заповнення (див. формулу (1.2))

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} \nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \quad (2.2)$$

де

$a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ і $a_{\mathbf{p}}$ — оператори народження і знищення бозе-частинки з імпульсом $\mathbf{p}$, відповідно;

V — об'єм системи;

$\nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3} \equiv \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3)$ — Фур'є-образ парної взаємодії;

$\varepsilon_{\mathbf{p}}$ — кінетична енергія вільних частинок;

m — маса частинки;

$\delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4}$ — символ Кронекера.

Для простоти та визначеності ми розглянемо тривимірний газ, що складається з нерелятивістських безспінових частинок. Коли частинки не взаємодіють, газ описується гамільтоніаном (2.1) або стандартною функцією розподілу Бозе-Ейнштейна

$$f_p = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_p - \mu)] - 1}. \quad (2.3)$$

Маючи визначення оператора парної взаємодії $\mathcal{V}$ (див. формулу (2.2)) через оператори народження й знищення, неспареними є доданки на кшталт таких [48]:

$$\langle \mathcal{V}_1 \cdot \mathcal{V}_2 \rangle^{nc} \propto \overbrace{a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4}} \cdot \overbrace{a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6}^\dagger a_{\mathbf{p}_7} a_{\mathbf{p}_8}} + \dots \quad (2.4)$$

Водночас спареними є доданки

$$\langle \mathcal{V}_1 \cdot \mathcal{V}_2 \rangle^c \propto \overbrace{a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{p}_3} a_{\mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6}^\dagger a_{\mathbf{p}_7} a_{\mathbf{p}_8}} + \dots \quad (2.5)$$

Нагадаємо також, що в ідеальному бозе-газі нижче характерної температури відбувається перехід другого роду до фази з БЕК. Ця температура дається виразом:

$$T_0 = \frac{1}{2m} \left[\frac{4\pi^2 \hbar^3 n}{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \quad (2.6)$$

де

$\hbar$ — стала Планка;

$n = N/V$ — густина частинок газу;

$\Gamma(x)$ — гамма-функція;

$\zeta(x)$ — дзета-функція Рімана.

Слід звернути увагу, що в цьому дослідженні густина n утримується фі-

ксованою. Таким чином, температура переходу T_0 слугує нижче одиницею масштабування у всіх температурних й енергетичних залежностях. Вплив кінцевого числа частинок і кривизни пастки на термодинамічні характеристики слабковзаємодійного бозе-газу вище температури переходу можна знайти, наприклад, за посиланнями [63, 64].

Для подальших обчислень корисним буде також увести до розгляду додаткову масштабну величину в координатному просторі, а саме теплову довжину хвилі де Бройля частинок за $T = T_0$ (див. формулу (2.6)),

$$\Lambda_0 = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mT_0}}, \quad (2.7)$$

яка є порядку середньої відстані між двома частинками газу, $\Lambda_0 \sim n^{-1/3}$.

2.2. Визначник Віка

Перед тим, як перейти до обчислення термодинамічних характеристик слабковзаємодійного бозе-газу за допомогою термодинамічної теорії збурень (див. підрозділ 1.1), хотілось би обговорити певні технічні складнощі роботи з її апаратом і запропонувати вдосконалення сталого алгоритму обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса.

Нагадаємо, що у відповідності до формули (1.20) для обчислення середніх значень від добутку деякої кількості операторів народження й знищення частинок необхідно врахувати всі можливі їхні спарення (див. також (2.4) і (2.5)). Зазвичай, це пропонується робити графічно — за допомогою ліній (зв'язків) (див. формули (1.17), (2.4) і (2.5)). Такий спосіб є досить зручним і очевидним, але тільки доти, поки ліній порівняно небагато і є можливість розплутати вузли, слідувати за лініями, не зазнаючи помилок, або просто не оминати якийсь доданок. Саме тому під час роботи над задачею, якій присвячений даний розділ, виникла ідея запропонувати значне покращення алгоритму обчислення згаданих середніх.

Отже, для початку введемо поняття матриці або таблиці Віка, як таку, що заповнюється усіма можливими ненульовими спареннями операторів. Сама по собі вона виступає скоріше альтернативою лініям, оскільки означені вище помилки залишаються можливими, хіба що менше вірогідність прогавити якийсь доданок. Останнє впливає з того факту, що матриця Віка має заздалегідь відомий розмір, $n \times n$ (див. (1.20)), а тому пусте місце буде означати, що якийсь доданок пропущено.

Структура — це головна відмінність таблиць від зв'язків і вона може бути обернена на перевагу, якщо додати певний алгоритм або правило її заповнення. Тому, припускаючи, що нам треба обрахувати нетривіальне середнє від добутку операторів, пропонується почати заповнювати таблицю Віка з діагональних елементів, рахуючи зверху:

- першим елементом ставимо спарення крайнього зліва оператора з таким найближчим до нього оператором, що спарення з ним не дорівнює нулю;
- викреслюючи подумки оператори, використані у попередній позиції, діємо за тим самим принципом, поки всі діагональні клітинки не будуть зайняті;
- зіставляючи номери станів в спаренні у заповненій клітинці з номерами рядку і стовпця цієї клітинки (номер стану оператора знищення з номером рядка, а номер стану оператора народження з номером стовпчика), заповнюємо спареннями відповідно до станів всі інші клітинки таблиці, зберігаючи даний у добутку порядок операторів.

Нарешті ми можемо визначити середнє за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, якщо розкриємо отриману за алгоритмом вище матрицю Віка як визначник, але з тією поправкою, що знак перед кожним доданком буде визначатися не перестановкою елементів визначника, а перестановкою операторів відносно їх початкових позицій у даному добутку. Зокрема, в разі бозонів — це завжди буде плюс і ми здобуємо «симетричний» визначник.

Для прикладу давайте порахуємо середнє $\langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger a_{\mathbf{p}_4}^\dagger a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0$. Відпо-

відна матриця Віка має вигляд

$$\begin{pmatrix} \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \\ \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \\ \langle a_{\mathbf{p}_3}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_4}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 & \langle a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Обчислюючи визначник Віка матриці (2.8), отримуємо

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger a_{\mathbf{p}_4}^\dagger a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 &= \pm \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 \\ &+ \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_4}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 + \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_5}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 \\ &\pm \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_3}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 \pm \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_3}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_4}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0 \\ &+ \langle a_{\mathbf{p}_1} a_{\mathbf{p}_5}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_4}^\dagger \rangle_0 \langle a_{\mathbf{p}_3}^\dagger a_{\mathbf{p}_6} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

У рівнянні (2.9) враховано обидві квантові статистики: верхній знак відповідає статистиці Бозе-Ейнштейна, а нижній — статистиці Фермі-Дірака.

Помітимо, що обидва способи роботи з теоремою Віка-Блоха-Домінісіса залишають невирішеною проблему «автоматизації» визначення знака того чи іншого доданку у разі ферміонів. Однак така задача виходить за межі даної дисертації, оскільки стосується вже іншого об'єкту дослідження — багаточастинкових систем ферміонів.

2.3. Головні термодинамічні величини

2.3.1. Хімічний потенціал

Для визначення поправок термодинамічної теорії збурень до хімічного потенціалу й основних термодинамічних величин слабковзаємодійного бозе-газу звернемось до формул (1.17)–(1.22), враховуючи тільки доданки на кшталт (2.5), а не (2.4). Почнемо з розкладання термодинамічного потенціалу

в ряд до квадратичних поправок за взаємодією у такій формі:

$$\Omega(\mu) = \Omega_0(\mu) + \Omega_1(\mu) + \Omega_2(\mu) + \dots \quad (2.10)$$

Тоді $\Omega_0(\mu)$ — це великий термодинамічний потенціал ідеального газу, який, нагадаємо, має таке визначення:

$$\Omega_0(\mu) = -T \sum_{\mathbf{p}} \ln(1 + f_p). \quad (2.11)$$

Перша і друга поправки за взаємодією мають такий вигляд (номер поправки позначає передусім степінь взаємодії):

$$\Omega_1(\mu) = \langle \mathcal{V} \rangle_0^c = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} (\nu_0 + \nu_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}) f_p f_{p'}, \quad (2.12)$$

$$\Omega_2(\mu) = \Omega'_2(\mu) + \Omega''_2(\mu), \quad (2.13)$$

де

$$\begin{aligned} \Omega'_2(\mu) &= -\frac{\beta}{2V^2} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} [\nu_0^2 + 2\nu_0\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3}] f_{p_1} f_{p_2} f_{p_3} (f_{p_3} + 1), \\ \Omega''_2(\mu) &= -\frac{\beta}{4V^2} \sum_{\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_4} [\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}^2 + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_4}] f_{p_1} f_{p_2} (f_{p_3} + 1) (f_{p_4} + 1) \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4}, \end{aligned}$$

$\nu_0 \equiv \nu(\mathbf{p}-\mathbf{p}'=0)$, кількість рисок над поправкою позначає не тільки різницю в структурі доданків, а має і додатковий сенс, який стане зрозумілий згодом.

Важливо зазначити, що під час обчислення квадратичної поправки $\Omega''_2(\mu)$, як можна побачити з формул (1.17)–(1.22), під інтегралом повинен виникати множник $\exp\{(\beta_1 - \beta_2)(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}_3} - \varepsilon_{\mathbf{p}_4})\}$. Але він близький до одиниці, оскільки ми враховуємо тільки процеси пружного s -розсіювання: енергія відносного руху частинок дорівнює нулю і, як наслідок, виконується закон збереження їхньої кінетичної енергії, $\varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \varepsilon_{\mathbf{p}_2} - \varepsilon_{\mathbf{p}_3} - \varepsilon_{\mathbf{p}_4} = 0$. Таке припущення є цілком природним за температур близьких до температури

бозе-ейнштейнівського переходу й ультрахолодних газів в експериментах.

Визначимо повне число частинок N за допомогою співвідношення Максвелла,

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V}. \quad (2.14)$$

Підставляючи до рівняння (2.14) розкладання великого термодинамічного потенціалу (2.10)-(2.13), отримуємо повне число частинок:

$$N(\mu) = N_0(\mu) + N_1(\mu) + N_2(\mu) + \dots, \quad (2.15)$$

де повна кількість частинок ідеального газу має такий вигляд:

$$N_0(\mu) = \sum_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}}. \quad (2.16)$$

Перша і друга поправки знаходяться за аналогією з поправками до великого термодинамічного потенціалу (див. рівняння (2.12) і (2.12)):

$$N_1(\mu) = -\frac{\beta}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [\nu_0 + \nu_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}] f_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}} (f_{\mathbf{p}} + 1), \quad (2.17)$$

$$N_2(\mu) = N_2'(\mu) + N_2''(\mu), \quad (2.18)$$

де

$$\begin{aligned} N_2'(\mu) &= \frac{\beta^2}{2V^2} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} [\nu_0^2 + 2\nu_0\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3}] \\ &\quad \times f_{\mathbf{p}_1} f_{\mathbf{p}_2} f_{\mathbf{p}_3} (f_{\mathbf{p}_3} + 1) (2f_{\mathbf{p}_3} + f_{\mathbf{p}_1} + f_{\mathbf{p}_2} + 3), \\ N_2''(\mu) &= \frac{\beta^2}{4V^2} \sum_{\mathbf{p}_1\ldots\mathbf{p}_4} [\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}^2 + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_4}] f_{\mathbf{p}_1} f_{\mathbf{p}_2} (f_{\mathbf{p}_3} + 1) (f_{\mathbf{p}_4} + 1) \\ &\quad \times \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4} (f_{\mathbf{p}_1} + f_{\mathbf{p}_2} + f_{\mathbf{p}_3} + f_{\mathbf{p}_4} + 2). \end{aligned}$$

Зауважимо, що насправді цікаві нам термодинамічні величини є фун-

кціями хімічного потенціалу μ , а не повного числа частинок N . В експериментах контрольованим параметром є остання величина. Отже, для послідовного пертурбативного підходу необхідно розкласти хімічний потенціал до другого порядку за взаємодією,

$$\mu(T, V, N) = \mu_0 + \mu_1 + \mu_2 + \dots, \quad (2.19)$$

де поправки визначаються з розкладання в ряд Тейлора

$$\mu_1 \equiv \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \nu_{\mathbf{p}}} \right)_{T, V, N} \Big|_0 \nu_{\mathbf{p}}, \quad (2.20)$$

$$\mu_2 \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial \nu_{\mathbf{p}} \partial \nu_{\mathbf{p}'}} \right)_{T, V, N} \Big|_0 \nu_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}'}, \quad (2.21)$$

індекс 0 позначає підстановку $\mu = \mu_0$ і $\nu_{\mathbf{p}} \equiv \nu(\mathbf{p}) = 0$ після взяття похідної, μ_0 — хімічний потенціал ідеального газу.

Хімічний потенціал μ_0 (див. (2.19)) визначається з умови фіксованості повного числа частинок N (докладніше див., наприклад, [65, 66]), тобто як розв'язок рівняння (див. (2.16)):

$$N = N_0 = \sum_{\mathbf{p}} f_p(\mu_0). \quad (2.22)$$

Введені поправки вищого порядку μ_1 і μ_2 можна отримати з формул (2.15)-(2.18), шляхом накладення тієї ж умови замкненості термодинамічної системи, що математично означає відсутність залежності числа частинок від взаємодії:

$$\frac{\partial N}{\partial \nu_{\mathbf{p}}} = 0. \quad (2.23)$$

Нарешті, з рівнянь (2.20)-(2.23) отримуємо:

$$\mu_1 = -N_1(\mu_0) \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V}^{-1}, \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \mu_2 = & - \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V}^{-1} \times \\ & \times \left[\left(\frac{\partial^2 N_0(\mu_0)}{\partial \mu_0^2} \right)_{T,V} \frac{\mu_1^2}{2} + \left(\frac{\partial N_1(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V} \mu_1 + N_2(\mu_0) \right], \end{aligned} \quad (2.25)$$

де

$$\begin{aligned} N_1 &= \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial N}{\partial \nu_{\mathbf{p}}} \right) \nu_{\mathbf{p}}, \\ N_2 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial \nu_{\mathbf{p}} \partial \nu_{\mathbf{p}'}} \right) \nu_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}'}. \end{aligned}$$

У випадку локальної взаємодії, тобто незалежного від імпульсу її Фур'є-образу $\nu_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \nu_0$, поправки (2.24) і (2.25) приймають вигляд

$$\mu_1^{(loc)} = 2n\nu_0, \quad (2.26)$$

$$\mu_2^{(loc)} = -N_2''(\mu_0) \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V}^{-1}. \quad (2.27)$$

Для чисельного аналізу поправок термодинамічної теорії збурень до хімічного потенціалу впливу нелокальності взаємодії, необхідно визначитись із явним виглядом функціональної залежності, якою така взаємодія описується. Скористаємось для цього добре відомим потенціалом моделі півпрозорих сфер (прямокутний бар'єр):

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{3g}{4\pi r_0^3}, & r \leq r_0 \\ 0, & r > r_0 \end{cases}, \quad (2.28)$$

із Фур'є-образом

$$\nu_{\mathbf{p}} = 3g \frac{j_1(pr_0/\hbar)}{pr_0/\hbar}, \quad (2.29)$$

де

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m};$$

$\hbar$ — константа Планка;

a_s — довжина s -розсіювання;

$j_1(pr_0/\hbar)$ — сферична функція Бесселя.

Амплітуда обирається такою, аби в границі нульового ефективного радіусу r_0 модельний міжатомний потенціал переходив в локальну взаємодію, тобто

$$\lim_{r_0 \rightarrow 0} \nu_{\mathbf{p}} = g.$$

На Рис. 2.1 можемо побачити температурні залежності хімічного потенціалу аж до квадратичних поправок як для локальних (див. формули (2.26) і (2.27)), так і для нелокальних потенціалів (див. (2.29)). На цьому рисунку й далі, обчислення обмежується знизу за температурою T умовою: $|\mathcal{O}_2(T^*)| = 0,1|\mathcal{O}_1(T^*)|$, де $\mathcal{O}$ — термодинамічна величина, що нас цікавить (для узгодженості термодинамічних співвідношень ми обмежуємо розрахунки для хімічного потенціалу μ й для інших термодинамічних величин умовою для тиску P , див. нижче). Таким чином, характерна температура T^* може бути пов'язана з областю застосовності термодинамічної теорії збурень. Для певної густини частинок газу n і довжини розсіювання a_s , які обираються близькими до типових значень у розріджених ультрахолодних газах атомів лужних металів та наведених на Рис. 2.1, $T^* \approx 1,3T_0$.

З рівнянь (2.24)-(2.26) і [66] для $\mu_0(T)$ за фіксованої густини n бачимо, що лінійна поправка термодинамічної теорії збурень дає сталий додатний зсув хімічного потенціалу порівняно з невзаємодійною границею. Квадратична поправка призводить до незначного зменшення хімічного потенціалу μ , ближче до хімічного потенціалу ідеального газу μ_0 . Також можна помітити, що нелокальна взаємодія зменшує значення лінійної поправки, до чого можна прийти

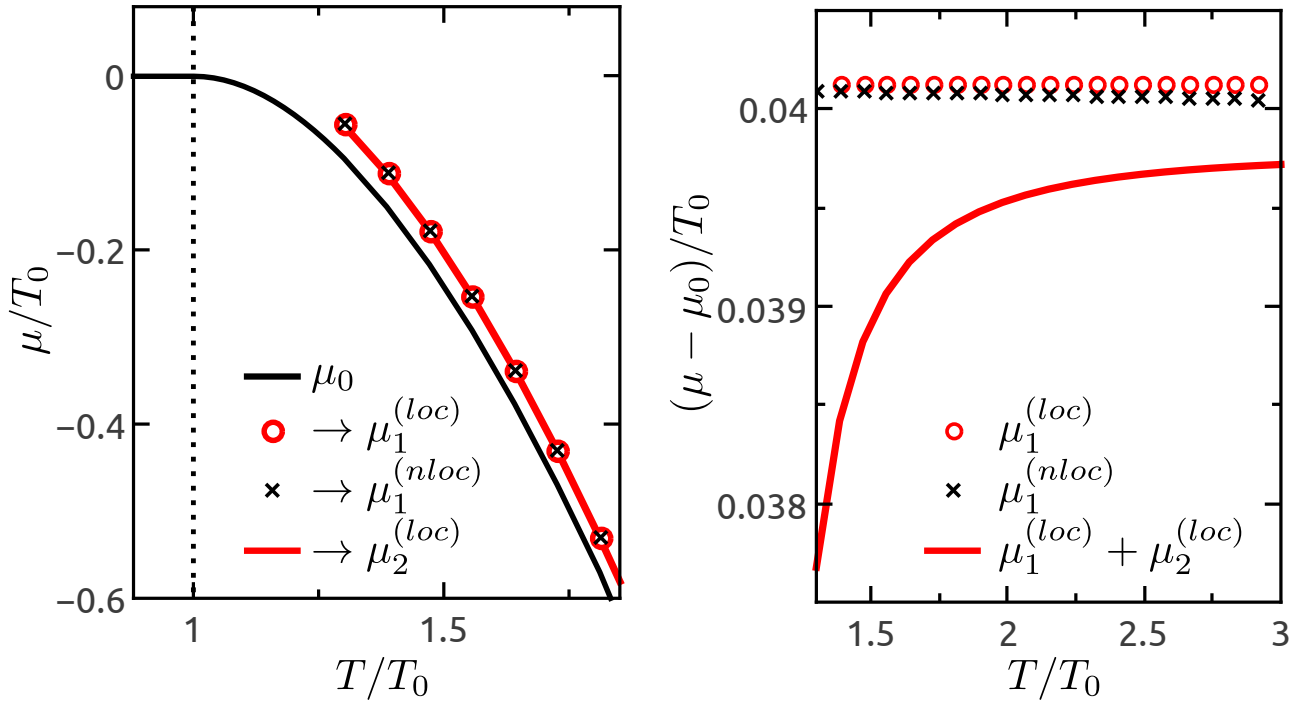


Рис. 2.1. Температурні залежності хімічного потенціалу (стрілки вказують на найвищі граничні порядки, що використовуються при розрахунках) і відповідні поправки, отримані в рамках ТТЗ для слабковзаємодійного бозе-газу. Параметри є такими $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $a_s = 100a_B$, і $r_0 = \Lambda_0/20 \approx 1300a_B$.

і з рівняння першої поправки до числа частинок (див. формулу (2.15)). Однак ефект стає помітним лише у випадку далекодієвих міжатомних потенціалів з $r_0 \gtrsim 10^3 a_B$, де a_B – радіус Бора (наприклад, ультрахолодні атоми Рідберга або гази атомів із значним природним дипольним моментом). Навпаки, для типових параметрів розріджених газів і потенціалів з $r_0 \ll 10^3 a_B$ (наприклад, ультрахолодні атоми лужних металів у основному стані), ці поправки є незначними у досліджуваному діапазоні застосовності термодинамічної теорії збурень за взаємодією (тобто за температури $T \gtrsim T^*$). Отже, ефекти взаємодії вище температури переходу можна добре описати за допомогою локального наближення, застосованому для опису ультрахолодного газу атомів із помірним ефективними радіусами міжатомного потенціалу взаємодії в координатному просторі (докладніше див. також підрозділ 2.4).

2.3.2. Тиск

Далі проаналізуємо тиск P , що пов'язаний із великим термодинамічним потенціалом наступною формулою

$$P = -\frac{\Omega}{V}. \quad (2.30)$$

Однак перш ніж використати рівняння (2.10)–(2.13) для знаходження тиску P , необхідно додатково розкласти великий термодинамічний потенціал Ω у ряд через те, що хімічний потенціал μ також містить функціональну залежність за взаємодією. Таким чином, ми знаходимо

$$P(\mu) = P_0(\mu_0) + P_1(\mu_0) + P_2(\mu_0) + \dots \quad (2.31)$$

В той час, як нульова поправка,

$$P_0(\mu_0) = -\frac{\Omega_0(\mu_0)}{V}, \quad (2.32)$$

повністю збігається з тиском ідеального газу, в першій і другій поправках,

$$P_1(\mu_0) = n\mu_1 - \frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [\nu_0 + \nu_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}] f_p f_{p'}, \quad (2.33)$$

$$P_2(\mu_0) = \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V} \frac{\mu_1^2}{2V} + N_1(\mu_0) \frac{\mu_1}{V} + P_2'(\mu_0) + P_2''(\mu_0) + n\mu_2, \quad (2.34)$$

де

$$P_2'(\mu_0) = \frac{\beta}{2V^3} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} (\nu_0^2 + 2\nu_0\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3} + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3}) f_{p_1} f_{p_2} f_{p_3} (f_{p_3} + 1),$$

$$P_2''(\mu_0) = \frac{\beta}{4V^3} \sum_{\mathbf{p}_1\ldots\mathbf{p}_4} (\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}^2 + \nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_3}\nu_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_4}) f_{p_1} f_{p_2} (f_{p_3} + 1) (f_{p_4} + 1) \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4},$$

ми можемо побачити, порівнявши вирази (2.10)–(2.13), (2.33) і (2.34), що простий зв'язок між тиском P і великим термодинамічним потенціалом

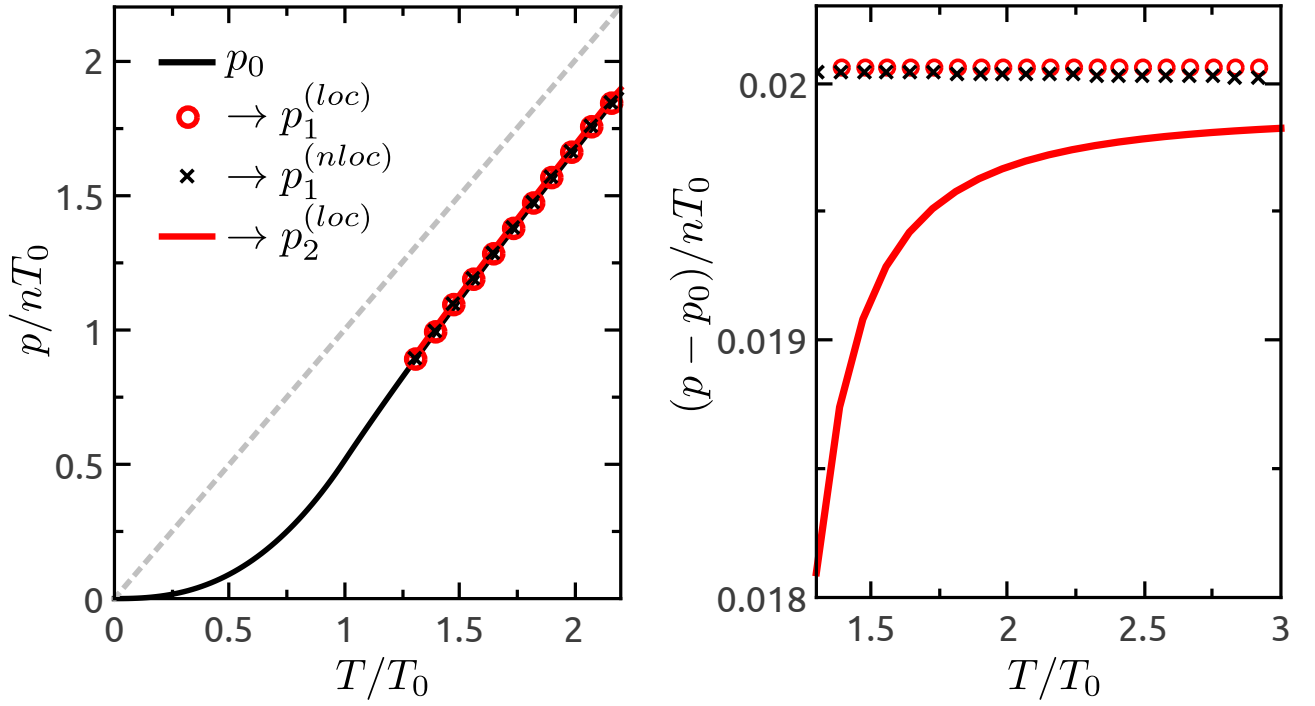


Рис. 2.2. Температурні залежності тиску і відповідні поправки, отримані в рамках ТТЗ для слабковзаємодійного бозе-газу. Пунктирна лінія відповідає класичному ідеальному газу. Параметри розрахунків обрано такими $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $a_s = 100a_B$ і $r_0 = \Lambda_0/20$

Ω порушено (див. рівняння (2.30)). Це є наслідком якраз необхідності розкладання хімічного потенціалу μ в ряд термодинамічної теорії збурень за взаємодією.

У разі локальної взаємодії тиск газу можна записати так:

$$P_1^{(loc)} = n^2 \nu_0, \quad (2.35)$$

$$P_2^{(loc)}(\mu_0) = P_{2loc}''(\mu_0) + n\mu_2^{(loc)}. \quad (2.36)$$

Числові результати розрахунків для тиску наведені на Рис. 2.2. Вони мають подібні до хімічного потенціалу якісні особливості: лінійна поправка термодинамічної теорії збурень не залежить від температури і є позитивною (див. (2.35)); квадратична поправка — від'ємна, але мала; нелокальність взаємодії незначно впливає на поправки за типових експериментальних значень ефективного радіусу взаємодії r_0 і густини газу n вище температури

застосовності термодинамічної теорії збурень T^* .

2.3.3. Ентропія та питома теплоємність

Для визначення ентропії ми використовуємо співвідношення Максвелла

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V}. \quad (2.37)$$

Таким чином, підставляючи до формули (2.37) явні вирази (2.10)–(2.13) і додаткового розкладаючи залежності хімічного потенціалу μ в ряд за взаємодією $\nu_{\mathbf{p}}$, отримуємо

$$S(\mu) = S_0(\mu_0) + S_1(\mu_0) + S_2(\mu_0) + \dots \quad (2.38)$$

Причому головний член збігається з комбінаторним визначенням ентропії ідеального газу:

$$S_0(\mu_0) = \sum_{\mathbf{p}} [(1 + f_p) \ln(1 + f_p) - f_p \ln f_p] \quad (2.39)$$

Першу поправку зручно подати у такому вигляді:

$$S_1(\mu_0) = \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial T} \right)_{\mu_0, V} \mu_1 + S_1''(\mu_0), \quad (2.40)$$

де

$$S_1''(\mu_0) = -\frac{\beta^2}{V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} [\nu_0 + \nu_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}] (\varepsilon_p - \mu) f_{p'} f_p (f_p + 1).$$

А квадратичну поправку можна записати в наступному вигляді

$$S_2(\mu_0) = \left(\frac{\partial^2 S_0(\mu_0)}{\partial \mu_0^2} \right)_{T, V} \frac{\mu_1^2}{2} + \left(\frac{\partial S_1''(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T, V} \mu_1 + S_2'(\mu_0) + S_2''(\mu_0)$$

$$+ \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial T} \right)_{\mu_0, V} \mu_2, \quad (2.41)$$

де

$$\begin{aligned} S'_2(\mu_0) &= -\beta \Omega'_2(\mu_0) + \frac{\beta^3}{2V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3} [\nu_0^2 + 2\nu_0 \nu_{\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3} + \nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3} \nu_{\mathbf{p}_2 \mathbf{p}_3}] \\ &\quad \times f_{p_1} f_{p_2} f_{p_3} (f_{p_3} + 1) [(f_{p_1} + 1) (\varepsilon_{p_1} - \mu_0) \\ &\quad + (f_{p_2} + 1) (\varepsilon_{p_2} - \mu_0) + (2f_{p_3} + 1) (\varepsilon_{p_3} - \mu_0)], \\ S''_2(\mu_0) &= -\beta \Omega''_2(\mu_0) + \frac{\beta^3}{4V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} [\nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3}^2 + \nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_3} \nu_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_4}] f_{p_1} f_{p_2} (f_{p_3} + 1) \\ &\quad \times (f_{p_4} + 1) \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} [(f_{p_1} + 1) (\varepsilon_{p_1} - \mu_0) + (f_{p_2} + 1) (\varepsilon_{p_2} - \mu_0) \\ &\quad + f_{p_3} (\varepsilon_{p_3} - \mu_0) + f_{p_4} (\varepsilon_{p_4} - \mu_0)]. \end{aligned}$$

Слід звернути увагу, що в границі локальної взаємодії поправка першого порядку термодинамічної теорії збурень до ентропії (див. (2.40)) зникає,

$$S_1^{(loc)}(\mu_0) = 0, \quad (2.42)$$

а доданок другого порядку (2.41) можна записати в більш компактній формі:

$$S_2^{(loc)}(\mu_0) = S_2''^{(loc)}(\mu_0) + \left(\frac{\partial N_0(\mu_0)}{\partial T} \right)_{\mu_0, V} \mu_2^{(loc)}. \quad (2.43)$$

Результати як для локальної (див. формули (2.42) і (2.43)), так і нелокальної параметризації взаємодії наведені на Рис. 2.3 і мають слабку відмінність від випадку ідеального газу.

Тепер визначимо питому теплоємність за сталого об'ємі формулою [62]

$$C_V = T \left[\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\mu, V} - \left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu, V}^2 \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T, V}^{-1} \right]. \quad (2.44)$$

Оскільки похідні входять до виразу (2.44) нелінійно, його необхідно додатково розкласти в ряд термодинамічної теорії збурень. Звідси, зручно подавати

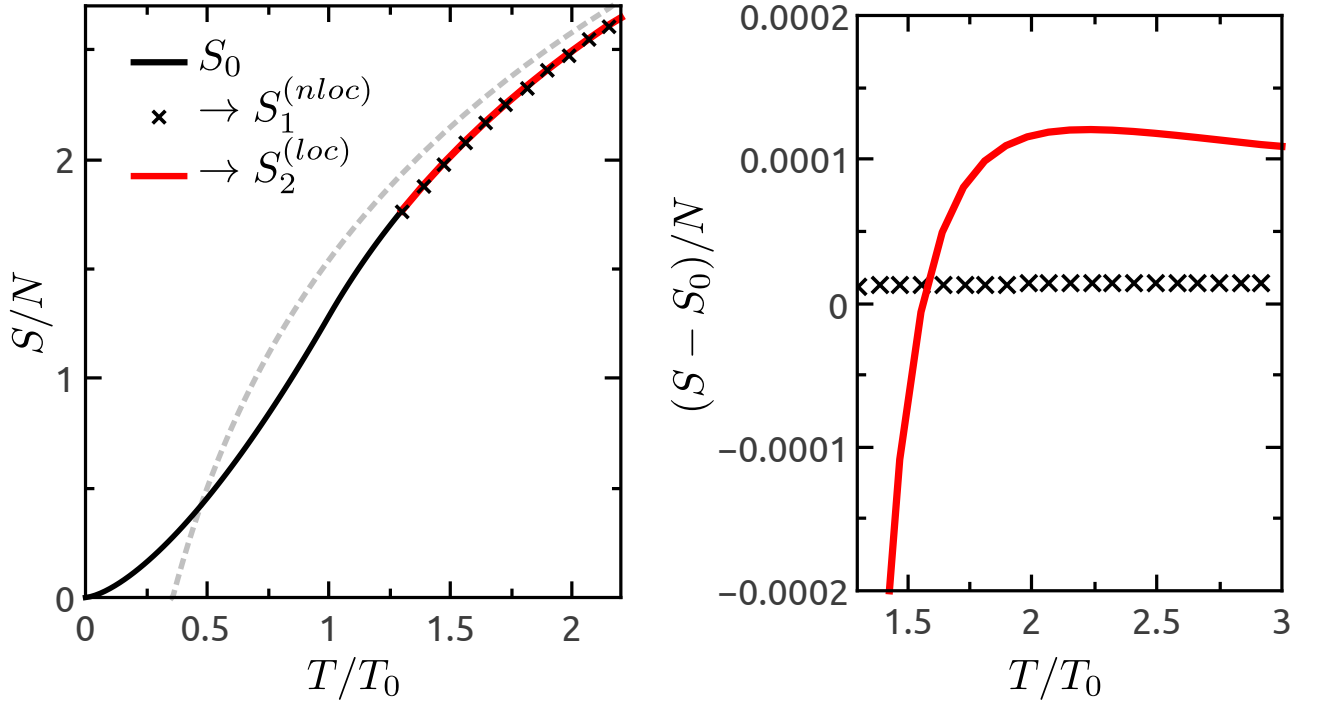


Рис. 2.3. Температурні залежності ентропії та відповідні поправки, отримані в рамках ТТЗ для слабковзаємодійного бозе-газу. Пунктирна лінія відповідає класичному ідеальному газу. Параметри є такимим $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $a_s = 100a_B$ і $r_0 = \Lambda_0/20$.

питому теплоємність так само, як це робиться для хімічного потенціалу (див. рівняння (2.19)-(2.21)):

$$C_V(\mu) = C_{V0}(\mu_0) + C_{V1}(\mu_0) + C_{V2}(\mu_0) + \dots, \quad (2.45)$$

де

$$C_{V1}(\mu_0) \equiv \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial C_V(\mu)}{\partial \nu_{\mathbf{p}}} \right)_{T,V} \bigg|_0 \nu_{\mathbf{p}},$$

$$C_{V2}(\mu_0) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial^2 C_V(\mu)}{\partial \nu_{\mathbf{p}} \partial \nu_{\mathbf{p}'}} \right)_{T,V} \bigg|_0 \nu_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}'}.$$

Таким чином, послуговуючись формулами (2.15)-(2.18) і (2.38)-(2.41), у загальному випадку лінійну поправку термодинамічної теорії збурень до

питомої теплоємності (2.45) можна записати у такій формі:

$$C_{V1}(\mu_0) = \left(\frac{\partial C_{V0}(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V} \mu_1 + C''_{V1}(\mu_0), \quad (2.46)$$

де

$$C''_{V1}(\mu) = T \left[\left(\frac{\partial S''_1(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} - 2 \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V} + \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-2} \right] \Big|_0.$$

Квадратичну поправку термодинамічної теорії збурень можна подати як

$$C_{V2}(\mu_0) = \left(\frac{\partial^2 C_{V0}(\mu_0)}{\partial \mu_0^2} \right)_{T,V} \frac{\mu_1^2}{2} + C'_{V2}(\mu_0) + C''_{V2}(\mu_0) + \left(\frac{\partial C_{V1\nu}(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V} \mu_1 + \left(\frac{\partial C_{V0}(\mu_0)}{\partial \mu_0} \right)_{T,V} \mu_2, \quad (2.47)$$

де

$$C'_{V2}(\mu) = T \left[\left(\frac{\partial S'_2(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} - 2 \left(\frac{\partial N'_2(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} + 2 \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} - \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} - \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 \left(\frac{\partial N_1(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^2 \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-3} + \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 \left(\frac{\partial N'_2(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-2} \right] \Big|_0,$$

$$C''_{V2}(\mu) = T \left[\left(\frac{\partial S''_2(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} - 2 \left(\frac{\partial N''_2(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} + \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 \left(\frac{\partial N''_2(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V} \left(\frac{\partial N_0(\mu)}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-2} \right] \Big|_0.$$

Поправки (2.46) і (2.47) мають досить компакту форму за локальної

взаємодії. Подібно ентропії лінійний доданок зникає (див. формулу (2.42)),

$$C_{V1}^{(loc)}(\mu_0) = 0, \quad (2.48)$$

а квадратичну поправку термодинамічної теорії збурень в локальному наближенні можна записати як

$$C_{V2}^{(loc)}(\mu_0) = C_{V2}^{\prime\prime (loc)}(\mu_0) + \left(\frac{\partial C_{V0}(\mu_0)}{\partial T} \right)_{\mu_0, V} \mu_2^{(loc)}, \quad (2.49)$$

З Рис. 2.4 ми бачимо, що поправки термодинамічної теорії збурень до питомої теплоємності відносно невеликі в границі застосовності теоретичного підходу та для параметрів газу, типових для експериментів з ультрахолодними атомами. Помітимо, що теплоємність обчислена тільки для локального потенціалу взаємодії (див. формули (2.48) і (2.49)), оскільки нелокальний випадок потребує значно більше аналітичних обчислень (див. формули (2.46) і (2.47)), а очікувати результатів, які б помітно кількісно і якісно відрізнялись від локального випадку, не доводиться через відсутність такого для всіх інших величин (див. Рис. 2.1 – Рис. 2.3).

2.4. Нелокальна взаємодія: структура в просторі імпульсів

Цей підрозділ присвячений обговоренню малості нелокальних ефектів поправок термодинамічної теорії збурень до основних досліджуваних термодинамічних величин. З Рис. 2.5 видно, що для типових експериментальних параметрів ефективний радіус взаємодії $r_0 = \Lambda_0/20$ (див. формулу (2.7)) відносно невеликий, оскільки його профіль майже плоский порівняно зі змінням функції розподілу Бозе-Ейнштейна (див. формулу (2.3)) та пов'язаних з нею величин за типових температур газу. Це означає, що локальне наближення залишається точним у рамках застосовності термодинамічної теорії збурень. Такий висновок контрастує з дослідженнями бозе-газу в стані з БЕК за нульової температури в рамках цілком послідовного квадратичного

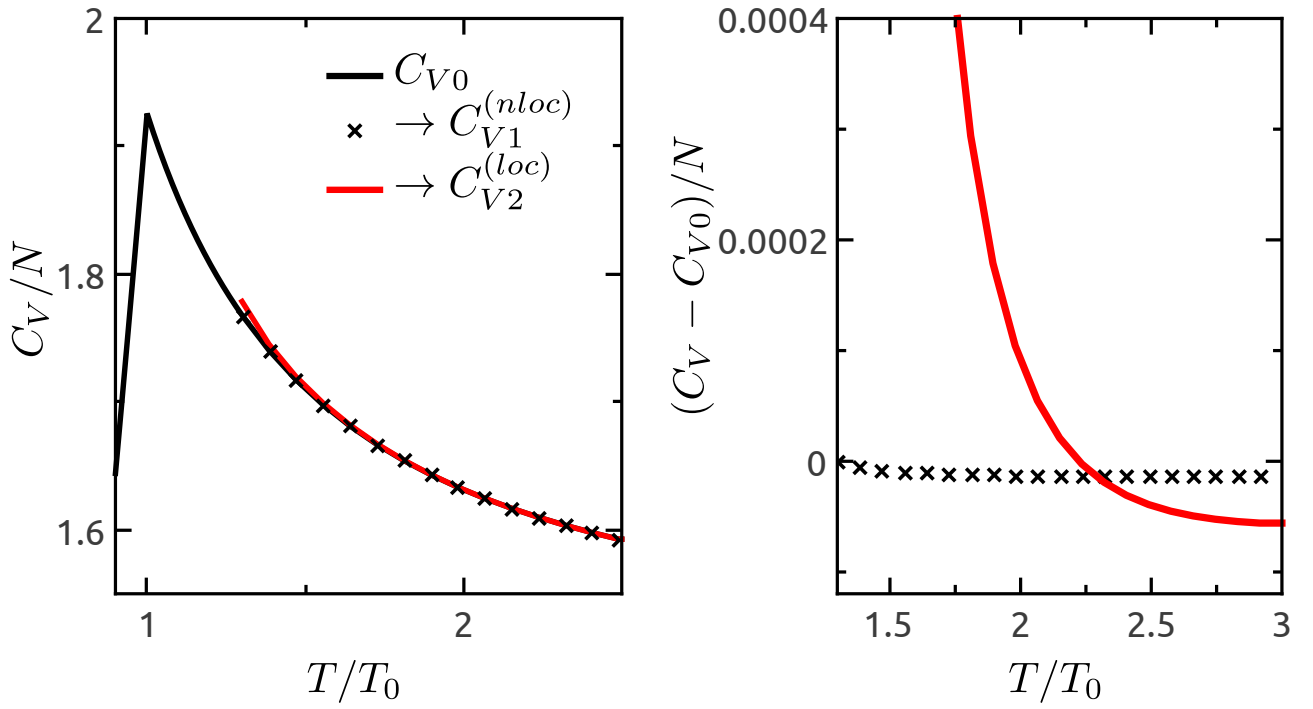


Рис. 2.4. Температурні залежності питомої теплоємності та відповідні поправки, отримані в рамках ТТЗ для слабковзаємодійного бозе-газу. Параметри є такими $n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $a_s = 100a_B$ і $r_0 = \Lambda_0/20$.

наближення (див. [33] і розділ 3), де основне рівняння, що забезпечує мінімум термодинамічного потенціалу, не має розв'язку навіть після застосування добре відомої процедури перенормування для константи зв'язку, заданої довжиною розсіювання [1, 2].

Водночас з Рис. 2.5 стає зрозуміло, що як тільки взаємодія стає далекодієюною, тобто характеристичний радіус r_0 має той самий порядок, що і середня відстань між частинками, нелокальні ефекти стають більш вираженими. Імовірно, ці ефекти можна дослідити за допомогою ультрахолодних газів атомів Рідберга або атомів з великим природним дипольним моментом.

Висновки до розділу 2

1. Застосовано термодинамічну теорію збурень для обчислення поправок першого і другого порядку за взаємодією до термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії й теплоємності за сталого об'єму — котрі

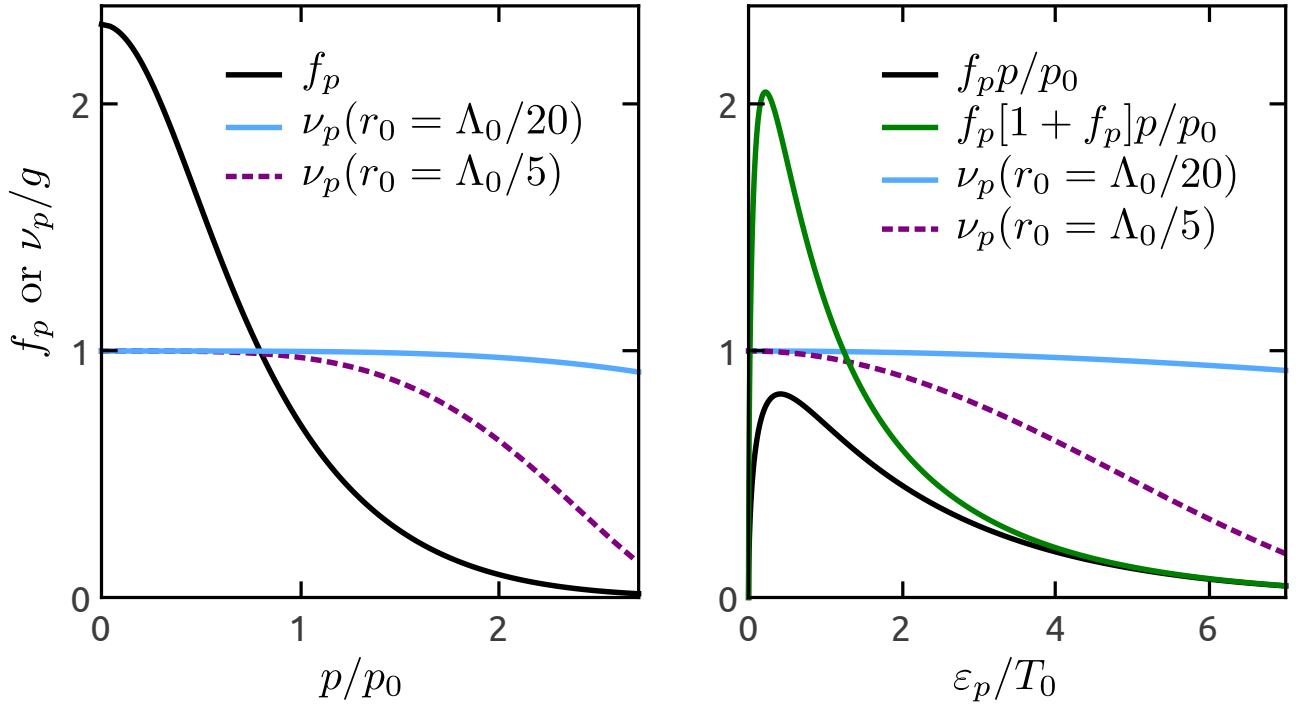


Рис. 2.5. Профілі потенціалів взаємодії разом зі структурою функції розподілу газу за $T = 1.9T_0$.

характеризують слабковзаємодійний бозе-газ у верхньому околі температури переходу до стану з БЕК.

2. Вдосконалено алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса за допомогою введення понять матриці і визначника Віка.
3. Проаналізовано температурні залежності основних термодинамічних величин як аналітично, так і чисельно для контактних (локальних) та нелокальних потенціалів взаємодії.
4. Продемонстровано, що локальна взаємодія, обумовлена довжиною розсіювання, добре описує взаємодійний бозе-газ вище температури переходу. Водночас ефекти нелокальності роблять помітний внесок у термодинаміку слабковзаємодійних газів, як тільки ефективний радіус дії атомних потенціалів наближається до середньої відстані між частинками. Це важливо з огляду на дослідження холодних газів атомів з далекодієюю взаємодією, наприклад, приготованих в станах Рідберґа або великим природним дипольним моментом.
5. Показано, що взаємодія найбільшим чином позначається на поведінці

хімічного потенціалу μ і тиску P . Для локальної взаємодії, яка визначається однією величиною — довжиною розсіювання a_s — лінійні поправки до ентропії S і питомої теплоємності C_V дорівнюють нулю. Ентропія S і питома теплоємність C_V добре описуються в рамках наближення ідеального газу для типових експериментальних параметрів ультрахолодних атомних газів. Отримані залежності (особливо, для хімічного потенціалу) також забезпечують надійну асимптотичну поведінку вище температури переходу як для існуючих теоретичних (середньопольовий підхід і квантові алгоритми Монте-Карло), так і для експериментальних досліджень, див., наприклад, [67, 68] та посилання в них.

РОЗДІЛ 3

РОЛЬ НЕЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СЛАБКОВЗАЄМОДІЙНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ АТОМІВ З НУЛЬОВИМ СПІНОМ У СТАНІ З БЕК

У цьому розділі аналізується система рівнянь (1.57) і (1.58), яка дає змогу визначити хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу атомів з повним нульовим спіном у стані з БЕК за нульової температури, з урахуванням внеску квадратичних за операторами народження і знищення доданків та використання низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії. Спроби аналітично вирішити систему нелінійних й інтегральних рівнянь (1.57) і (1.58) стикаються зі значними труднощами навіть в межах пертурбативного підходу, оскільки, як зазначено в [33], результати містять неаналітичність щодо слабкої взаємодії. Ці рівняння повністю аналізуються з використанням чисельних методів для двох нелокальних моделей потенціалу взаємодії: модель півпрозорих сфер і модель з профілем гаусового (нормального) розподілу. Головною перевагою зазначених вище потенціалів є те, що вони дозволяють уникнути розбіжностей у відповідних інтегралах, оскільки їхні Фур'є-образи прямують до нуля за великих імпульсів і, водночас, містять контактну (локальну) взаємодію як граничний випадок.

3.1. Аналіз рівнянь квадратичного наближення за нульової температури та різних модельних потенціалів

Для чисельного аналізу рівнянь (1.57)-(1.59), необхідно визначитися з Фур'є-образом потенціалу взаємодії:

$$\nu(\mathbf{p}) = \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar) \mathcal{V}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

де

$\mathcal{V}(\mathbf{r})$ — потенціал взаємодії двох тіл в координатному просторі.

Припускаючи, що взаємодія сферично-симетрична, розглянемо три модельні потенціали (див. Рис. 3.1).

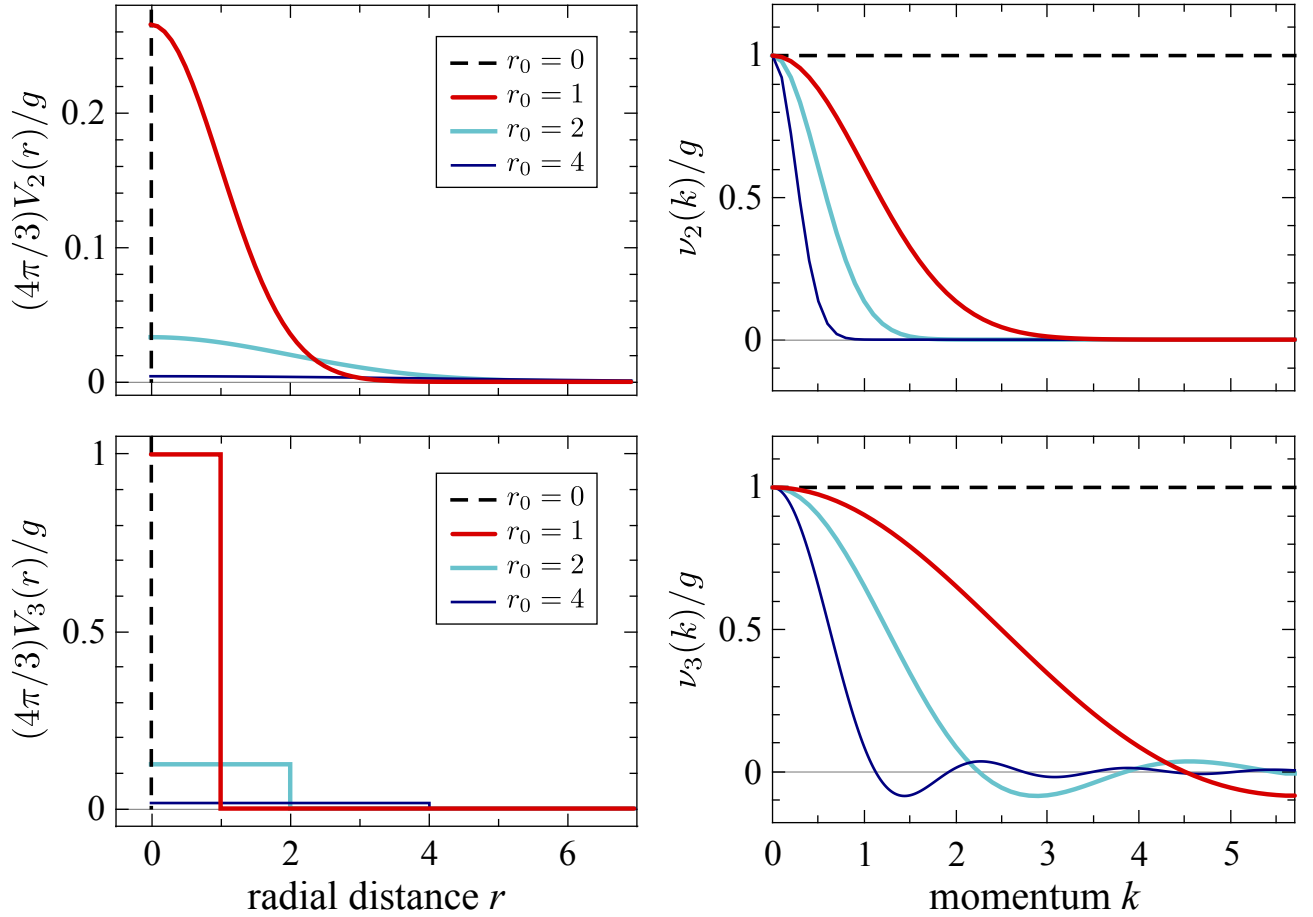


Рис. 3.1. Координатні (ліві) й імпульсні (праворуч) розподіли псевдопотенціалів гаусового типу $\mathcal{V}_2$ (верхній ряд) і півпрозорих сфер $\mathcal{V}_3$ (нижній ряд) за різних ефективних радіусів дій потенціалів r_0 . Потенціал локальної взаємодії $\mathcal{V}_1$ та його Фур'є-образ ν_1 відповідають границі $r_0 = 0$

Почнемо з потенціалу контактної (локальної) взаємодії, що широко використовується у фізиці ультрахолодних газів [1,2,18]. Цей потенціал може бути поданий у координатному просторі як

$$\mathcal{V}_1(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Потенціалу (3.2) відповідає наступний Фур'є-образ (див. формулу (3.1)):

$$\nu_1(\mathbf{p}) = g. \quad (3.3)$$

У цьому випадку рівняння (1.58) набуває вигляду:

$$\mu_1 = gn_0 + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - \frac{gn_0}{2\omega_{\mathbf{p}}} - 1 \right] \quad (3.4)$$

або, переходячи від підсумовування до інтегрування в (3.4),

$$\mu_1 = gn_0 + \frac{g}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp p^2 \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - \frac{gn_0}{2\omega_{\mathbf{p}}} - 1 \right], \quad (3.5)$$

де, відповідно до рівнянь (1.30) і (1.40),

$$\alpha_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} - \mu + 2gn_0;$$

$$\omega_{\mathbf{p}} = \left[\left(\frac{p^2}{2m} - \mu + 2gn_0 \right)^2 - g^2 n_0^2 \right]^{1/2}.$$

Очевидно, що підінтегральний вираз в рівняння (3.5) має наступну асимптотичну поведінку в границі нескінченного імпульсу:

$$p^2 \left(\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - \frac{gn_0}{2\omega_{\mathbf{p}}} - 1 \right) \approx -gn_0 m. \quad (3.6)$$

Тому, підставляючи асимптотику (3.6) до рівняння (3.5), бачимо, відповідний інтеграл розбігається на верхній границі (див. Рис. 3.2). Ця розбіжність пов'язана з тим, що Фур'є-образ потенціалу локальної взаємодії є константою (див. формулу (3.3)). Та сама проблема також виникає під час обчислення енергії основного стану слабовзаємодійного бозе-газу (див., наприклад, [1, 2]) і Рис. 3.2). Її можна подолати наступним перенормуванням константи зв'язку g в першому доданку рівняння (3.4):

$$\nu_1(\mathbf{p}) \rightarrow \tilde{\nu}_1(\mathbf{p}) = g + \frac{g^2}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{2m}{p^2}. \quad (3.7)$$

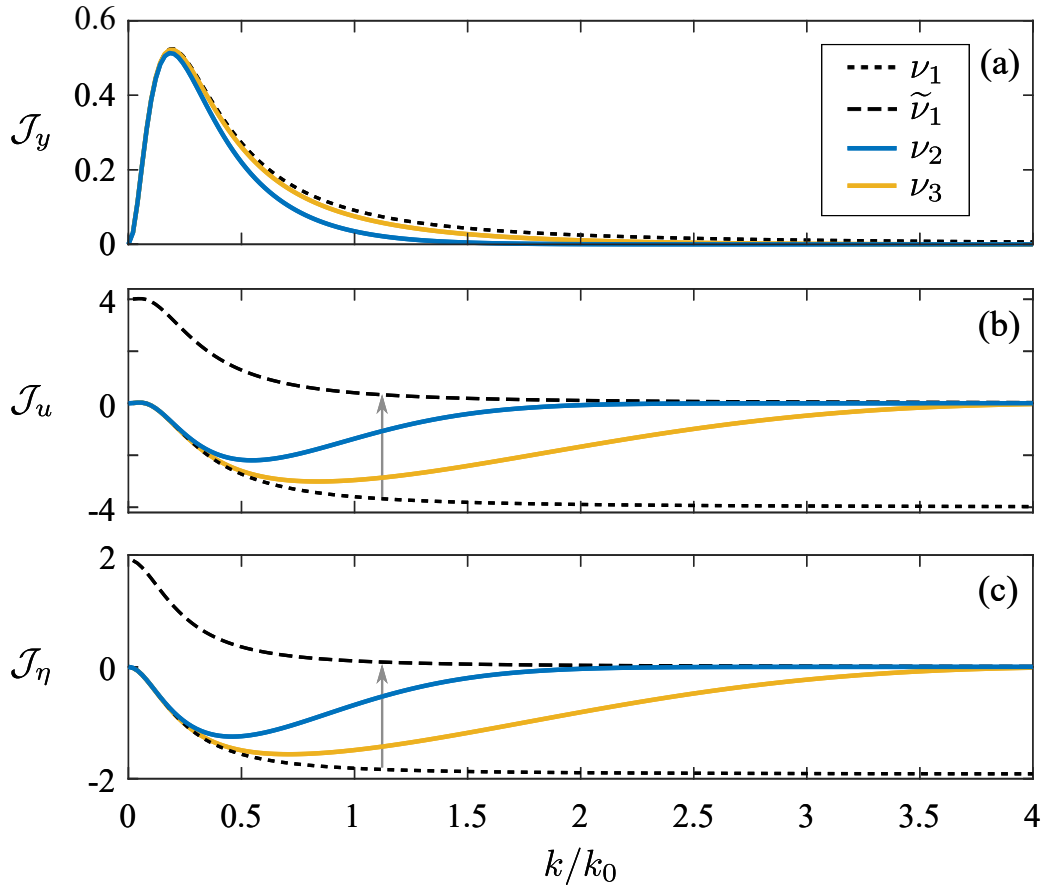


Рис. 3.2. Характерні імпульсні залежності підінтегральних виразів, що входять в рівняння для густини газу (а), хімічного потенціалу (b) і густини термодинамічного потенціалу (с), див. рівняння (3.5), (3.8) та (3.18)-(3.20) за $\gamma = 7.4 \times 10^{-4}$, $y = 0.98$, $u = 0.8$ і три різних псевдопотенціалів з фіксованим $k_0 = 0.105$. Цей випадок відповідає $n = 5 \times 10^{15} \text{см}^{-3}$, $a_s^B = 100a_0$ та $r_0 = 8 \text{nm}$. Стрілки відповідають процедурі перенормування $\nu_1 \rightarrow \tilde{\nu}_1$

Таким чином, користуючись виразом (3.7), з рівняння (3.5) отримуємо:

$$\tilde{\mu}_1 = gn_0 + \frac{g}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp p^2 \left[\frac{\alpha_{\mathbf{p}}}{\omega_{\mathbf{p}}} - \frac{gn_0}{2\omega_{\mathbf{p}}} - 1 + gn_0 \frac{m}{p^2} \right]. \quad (3.8)$$

Тепер інтеграл в рівнянні (3.8) збігається, але має бути обчислений в області фізичних параметрів, де спектр квазічастинок є дійсним. Аби розібратися з цим введемо поняття щільності спектру збуджень квазічастинок, тобто його

значенню за $\mathbf{p} = 0$, виходячи з виразів (1.30) і (1.40):

$$\omega_0^2 = (\nu(0)n_0 - \mu)(3\nu(0)n_0 - \mu). \quad (3.9)$$

Одразу бачимо, ця щілина дійсно зникає, якщо хімічний потенціал задовольняє відомому співвідношенню Гугенгольца-Пайнса [59], $\mu = \nu(0)n_0$. Якщо бути точним, то щілина залишається дійсною величиною, коли $\omega_0^2 \in (-\infty; \nu(0)n_0] \cup [3\nu(0)n_0; +\infty)$. Більш детальний аналіз формули (1.40) разом із (3.9) призводить до висновку, що потенціал тяжіння ($g < 0$) не задовольняє вимозі дійсності спектру за довільного імпульсу. Для відштовхувальної взаємодії ($g > 0$) ситуація протилежна і спектр залишається завжди дійсним за умови, якщо $\mu \leq gn_0$. Однак навіть у цьому випадку рівняння (3.8) не має розв'язків, оскільки відповідний інтеграл завжди позитивний і ніколи не обертається в нуль (див. Рис. 3.2(b) для $\tilde{\nu}_1$).

Проте слід зазначити, що рівняння (1.57), (3.4) і (3.8) формально відтворюють добре відомі результати для поправок відповідних величин в термінах газового параметра, $\gamma = na^3$. Дійсно, якщо розглядати s -числові доданки в усіченому гамільтоніані (див. (1.29)) як головні члени, тобто $\mu = gn_0$, спектр одночастинкового збудження стає безщілинним і набуває боголюбівської форми:

$$\omega_{\mathbf{p}} = \left[\left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 + \frac{p^2}{m} gn_0 \right]^{1/2}. \quad (3.10)$$

Підстановка $\mu = gn_0$ і виразу (3.10) в ліву частину рівняння (3.8), яке враховує перенормування, з відповідним інтегруванням (тут $\tilde{\mu}_1 \equiv \mu$) призводить до наступного:

$$\mu = gn_0 \left[1 + \frac{40}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{n_0 a_s^3} \right], \quad (3.11)$$

де

a_s — довжина s -розсіювання, яка детально обговорюється далі.

Аналогічним чином інтегрування рівняння (1.57) з Фур'є-образом потенціалу взаємодії $\nu_1(\mathbf{p})$ (див. (3.3)) дає густину частинок

$$n = n_0 \left[1 + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{n_0 a_s^3} \right]. \quad (3.12)$$

Далі, використовуючи рівняння (3.11) і (3.12), здобуваємо

$$\mu = gn \left[1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{n_0 a_s^3} \right]. \quad (3.13)$$

Як бачимо, рівняння (3.13) забезпечує зв'язок між хімічним потенціалом μ і густиною частинок n . Другий доданок у правій частині рівняння (3.12) описує так зване квантове виснаження конденсату. Воно виражається через параметр газовості $\gamma = na^3$, який повинен бути малим: $\gamma \ll 1$ ($n_0 \approx n$). Доданки, що містять газовий параметр, походять з квадратичної частини усіченого гамільтоніана і зазвичай розглядаються як поправки до відповідних величин.

Підсумовуючи зроблене, розуміємо, що локальний потенціал взаємодії призводить до розбіжностей у квадратичному наближенні і навіть після процедури перенормування, спрямованої на їх усунення, відповідне рівняння умови мінімуму термодинамічного потенціалу не задовольняється. Тому здається логічним розглянути цю проблему, послуговуючись «більш реалістичними» нелокальними потенціалами з нетривіальними імпульсними залежностями їхніх Фур'є-образів. Варто підкреслити, що оригінальна теорія Боголюбова [15] не використовує потенціал контактної взаємодії. А ефекти пов'язані з кінцевим ефективним радіусом потенціалу взаємодії також властиві системам атомів, які мають значні дипольні моменти, тобто їхня взаємодія визначається диполь-дипольними далекодійними силами.

Отже, у якості другого варіанту, розглянемо нелокальну взаємодію, що

характеризується розподілом Гаусса (нормальний розподіл):

$$\mathcal{V}_2(r) = \frac{g}{(2\pi r_0^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right), \quad (3.14)$$

де

r_0 — характерний радіус дії потенціалу або дисперсія у математичному сенсі, що характеризує ефективну відстань дії модельного потенціалу (див. також Рис. 3.1).

Згідно з формулою (3.1) Фур'є-образ потенціалу (3.14) має вигляд:

$$\nu_2(\mathbf{p}) = g \exp\left(-\frac{p^2}{2p_0^2}\right), \quad (3.15)$$

де

$$p_0 = \hbar/r_0.$$

Третім випадком оберемо потенціал півпрозорих сфер:

$$\mathcal{V}_3(r) = \begin{cases} \frac{3g}{4\pi r_0^3}, & r \leq r_0 \\ 0, & r > r_0 \end{cases}, \quad (3.16)$$

(див. Рис. 3.1). Потенціалу (3.16) відповідає такий Фур'є-образ:

$$\nu_3(\mathbf{p}) = 3g \frac{j_1(p/p_0)}{p/p_0}, \quad (3.17)$$

де

$j_1(x)$ — сферична функція Беселя ($j_1(x) = \sin(x)/x^2 - \cos(x)/x$);

$$p_0 = \hbar/r_0.$$

Зауважимо, що вибрані модельні потенціали $\nu_{2,3}$, задані формулами (3.15) і (3.17), в границі $r_0 \rightarrow 0$, збігаються з контактною взаємодією ν_1 (див. Рис. 3.1). Таким чином, дозволяючи нетривіальну імпульсну залежність потенціалів парної взаємодії частинок, крім просторового параметра в якості довжини розсіювання a_s , потрібно ввести ще один параметр — ефективний

радіус дії потенціалу r_0 .

Для проведення чисельного аналізу, зручно подати отримані рівняння у безрозмірній формі. Замінивши підсумовування інтегруванням і використовуючи сферичні координати, рівняння (1.57)-(1.59) можна звести до наступного вигляду, відповідно:

$$1 = y + \frac{2\pi}{\gamma} \int_0^\infty k^2 dk \left[\frac{a(k)}{w(k)} - 1 \right], \quad (3.18)$$

$$u = 1 + \frac{2\pi}{y\gamma} \int_0^\infty k^2 dk \left\{ \frac{a(k)[1 + s(k)] - bs^2(k)}{w(k)} - [1 + s(k)] \right\}, \quad (3.19)$$

$$\eta = \frac{y^2}{2} - uy^2 + \frac{\pi^2}{\gamma^2} \int_0^\infty k^2 dk [w(k) - a(k)], \quad (3.20)$$

де

$$a(k) = k^2 + b[1 - u + s(k)];$$

$$w(k) = \sqrt{\{k^2 + b[1 - u + s(k)]\}^2 - b^2 s^2(k)} - \text{безрозмірна одночастинкова дисперсія } (\omega_{\mathbf{p}} = [\pi g/2(a_s^B)^3]w(k));$$

$$y = n_0/n - \text{частка конденсату};$$

$$u = \mu/(gn_0) - \text{безрозмірний хімічний потенціал (u=1 в «стандартному» підході Боголюбова)};$$

$$\eta = \mathcal{W}^{(2)}/gn^2 - \text{безрозмірна густина термодинамічного потенціалу};$$

$$\gamma = n(a_s^B)^3 - \text{величина, що може бути пов'язана з газовим параметром } (\gamma \ll 1);$$

$$b = 2y\gamma/\pi;$$

$$k - \text{безрозмірна величина інтегрування, що пов'язана з імпульсом частинки як } p = (2\pi\hbar/a_s^B)k;$$

$$s(k) - \text{функція, що визначає дисперсію модельного потенціалу в імпульсному просторі, масштабованому в одиницях безрозмірного імпульсу } k.$$

Зокрема, для контактної взаємодії $s_1(k) = 1$, для гаусового потенціалу $s_2(k) = \exp[-k^2/(2k_0^2)]$, а для півпрозорих сфер $s_3(k) = 3j_1(k/k_0)/(k/k_0)$, де $k_0 = a_s^B/(2\pi r_0)$.

Довжина розсіювання в першому борнівському наближенні визначає-

ться за формулою:

$$a_s^B = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} \mathcal{V}(\mathbf{r}) \quad (3.21)$$

і безпосередньо пов'язана з амплітудою g як локального, так і нелокального потенціалу $\nu(\mathbf{p})$, тому вона використовується як параметр масштабування в чисельному аналізі. Зв'язок між величиною a_s^B і фактичною довжиною розсіювання як $a_s = a_s(g, r_0)$ визначається й обговорюється далі.

Розглянемо аналітичні властивості функцій в інтегралах рівнянь (3.18)–(3.20). Природно вважати, що $b > 0$ та $w(k) \geq 0$ є дійсними. Інтеграл у рівнянні (3.18) збігаються для всіх досліджуваних псевдопотенціалів. Основний внесок у цей інтеграл визначає параметр газовості γ , а значення ефективного радіуса r_0 майже не впливає на результат, якщо його не обрано занадто великим, або умова $\gamma \ll 1$ не виконується. Водночас інтеграли в рівняннях (3.19) і (3.20) розбігаються лінійно для $s_1(k)$ (див. (3.6)), а для імпульсно-залежних потенціалів $s_{2,3}(k)$ розбіжності в границі $k \rightarrow \infty$ усуваються. Відповідна поведінка всіх досліджуваних інтегрантів зібрана на Рис. 3.2.

Для опису фізичних характеристик ультрахолодних газів є лише три просторові параметри, які можна налаштувати: відстань між частинками, що визначається густиною газу n , довжина розсіювання a_s , що регулюється за допомогою фешбахівського резонансу, параметр r_0 , який визначає форму й просторову дисперсію потенціалу як в імпульсному, так і в координатному просторах. Два перші є специфічними для системи, а останній є специфічним для моделі взаємодії параметром. Характеристики використаних модельних потенціалів як у координатному, так і в імпульсному просторах наведені в підписі до Рис. 3.1.

Наостанок для модельних потенціалів взаємодії необхідно вказати фізичні обмеження їхнього ефективного радіуса r_0 . По-перше, цей параметр повинен перевищувати типовий розмір атома, який є порядку радіуса Бора

a_0 . По-друге, ефективний радіус дії потенціалу r_0 повинен характеризувати тільки процеси взаємодії між двома частинками, тому верхньою границею треба обрати середню відстань між частинками, $n^{-1/3}$. Таким чином, отримуємо наступну подвійну умову:

$$a_0 \ll r_0 \ll n^{-1/3}. \quad (3.22)$$

3.2. Фізичний аспект отриманих результатів

Почнемо з чисельного аналізу залежностей основних спостережуваних термодинамічних величин, таких як: густина конденсату n_0 , хімічний потенціал μ , і щільність одночастинкового спектру збуджень ω_0 від густини газу. Для цього обираємо значення довжини розсіювання a_s і густини газу n типовими для експериментів з ультрахолодними розрідженими газами атомів лужних металів. Також вимагаємо, щоб для ефективного радіуса взаємодії r_0 виконувались нерівності (3.22). Відповідні результати для фіксованої амплітуди взаємодії g , параметризованої через a_s^B (фіксоване r_0) в залежності від густини газу n наведені на Рис. 3.3.

Аналіз системи рівнянь (3.18) і (3.19) показує, що сам хімічний потенціал відрізняється від величини $\mu_0 = gn_0$. Це призводить до відмінностей у залежностях термодинамічних величин і, очевидно, спричинено тим фактом, що внесок квадратичних доданків усіченого гамільтоніана до хімічного потенціалу має такий же порядок величини, як і внесок c -числових доданків. Щодо змін у поведінці величин, то для густини конденсату вони тільки кількісні (вона систематично більша, ніж у «стандартному» наближенні Боголюбова з $\mu = \mu_0$), одночастинковий спектр збудження набуває ненульової енергетичної щільності ($w(0) > 0$), порушуючи співвідношення Гугенхольца-Пайнса [59]. Як можна побачити на Рис. 3.3, густина термодинамічного потенціалу η завжди негативна (отже, тиск є позитивним), що вказує на стабільність системи.

Відзначимо, що отримані результати чутливі до вибору ефективного

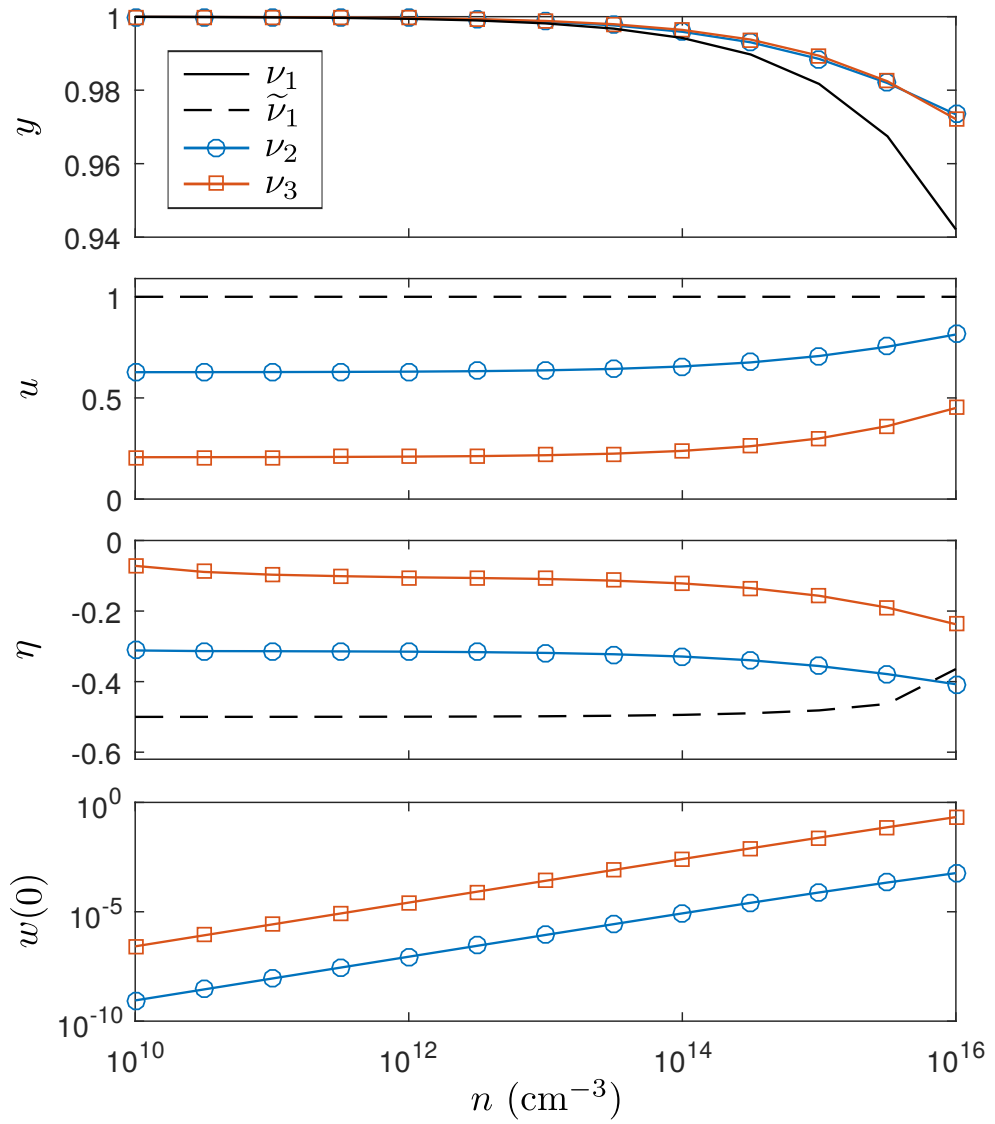


Рис. 3.3. Залежності $y = n_0/n$ — частки конденсату в системі, $u = \mu/gn_0$ — безрозмірного хімічного потенціала, $\eta = \mathcal{W}^{(2)}/gn^2$ — безрозмірного термодинамічного потенціала, та $w(0)$ — щільності спектру збуджень від густини газу n для трьох різних псевдопотенціалів ν_i за $a_s^B = 100a_0$ та $r_0 = 8\text{нм}$

радіуса r_0 досліджуваних псевдопотенціалів, оскільки в границі $r_0 \rightarrow 0$ (хоча ця границя не є «невинною» і порушує нерівність (3.22)), як обговорювалося вище, обидва потенціали $\mathcal{V}_2(r)$ та $\mathcal{V}_3(r)$ зводяться до дельта-функції. Як можна побачити на Рис. 3.2, у даному випадку за відсутності перенормування інтегралів як хімічний потенціал, так і термодинамічна густина потенціалу розбігаються. Зокрема, згідно з рівнянням (3.4), $\mu_1 \rightarrow -\infty$, що призводить до розбіжності спектру квазічастинок і квазічастинковий опис стає недійсним в рамках квадратичного наближення.

Тепер давайте порівняємо спектри одночастинкових збуджень квазічастинок, отримані в рамках розробленого підходу, зі стандартним наближенням Боголюбова ($u = 1$) для двох модельних потенціалів $\mathcal{V}_2(r)$ та $\mathcal{V}_3(r)$. Як показано на Рис. 3.4, на додачу до ненульової щілини порядку 10^{-14} еВ, що приблизно на порядок менше за значення, отримані в експериментальних вимірах [69], спостерігається нелінійний характер поведінки за малих імпульсів. На Рис. 3.4 також видно, що зі зменшенням амплітуди взаємодії g щілина $w(0)$ зменшується. Чисельний аналіз вказує, що в границі $g \rightarrow 0$ (з фіксованим r_0) внесок з квадратичних членів усіченого гамільтоніана, тобто інтеграла в рівнянні (3.19), стає малим у порівнянні з c -числовим доданком. Тому в цій границі безщілинний спектр Боголюбова можна приблизно відновити. Спектр точно не має щілини тільки для конкретних профілів потенціалів $s(k)$, які обертають інтеграл у рівнянні (3.19) в нуль.

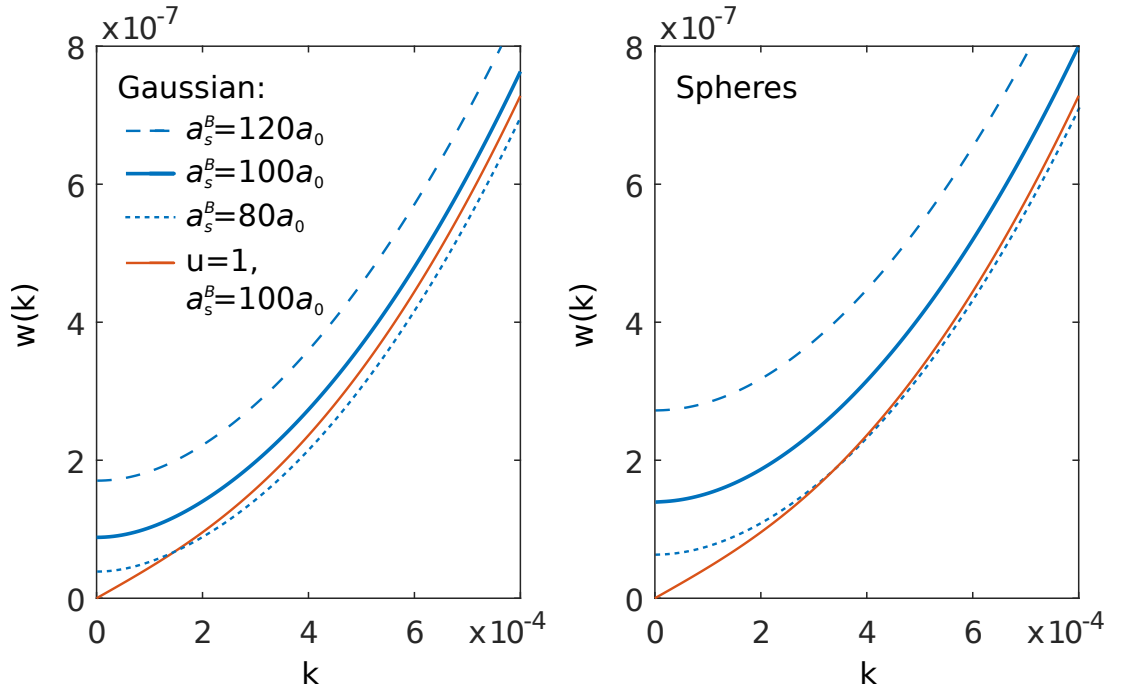


Рис. 3.4. Спектр одночастинкових збуджень квазічастинок для двох модельних нелокальних потенціалів $\mathcal{V}_2$ (ліворуч) і $\mathcal{V}_3$ (праворуч) за $r_0 = 8$ нм, $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, і різних амплітуд g , параметризовані відповідними a_s^B

Нарешті, варто окремо розглянути питання про фактичну довжину

розсіювання. У цьому дослідженні амплітуди нелокальних потенціалів $\mathcal{V}_2(r)$ та $\mathcal{V}_3(r)$ параметризуються константою зв'язку g для того, щоб отримати контактну взаємодію $\mathcal{V}_1(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r})$ в границі $r_0 \rightarrow 0$. Однак очевидно, що для нелокальних потенціалів довжина розсіювання повинна визначатися як ефективним радіусом, так і амплітудою потенціалу, тобто як функція двох параметрів $a_s = a_s(g, r_0)$. Це досить складна проблема, але вона може бути аналітично розв'язана для ряду модельних потенціалів.

Зокрема, для потенціалу півпрозорих сфер фазовий зсув визначається як [70]

$$\delta_0 = \arctg \left[k \frac{\text{th}(K_0 r_0)}{K_0} \right] - k r_0, \quad k r_0 \ll 1,$$

де

k — хвильовий вектор;

$$K_0^2 = (2m_* \mathcal{V}_0 / \hbar^2);$$

m_* — ефективна маса частинки.

А довжина розсіювання пов'язана з фазовим зсувом δ_0 наступним чином:

$$a_s = -\frac{\text{tg } \delta_0}{k} \approx r_0 - \frac{1}{K_0} \text{th}(K_0 r_0). \quad (3.23)$$

Отже, для потенціалу $\mathcal{V}_3(r)$, визначеного формулою (3.17), маємо

$$a_s = r_0 \left[1 - \sqrt{\frac{r_0}{3a_s^B}} \text{th} \left(\sqrt{\frac{3a_s^B}{r_0}} \right) \right]. \quad (3.24)$$

Для значень, використаних у наведеному чисельному аналізі: $r_0 = 8 \text{ нм} \approx 151a_0$ і $a_s^B = 100a_0$ — $a_s \approx 56a_0$.

Для гаусового потенціалу, якщо він визначений за формулою $\mathcal{V}(r) =$

$\frac{\mathcal{V}_0}{2L^2} \exp\left(-\frac{r^2}{L^2}\right)$, довжина розсіювання як функція $\mathcal{V}_0$ і L була задана в [71]:

$$\frac{a_s}{L} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\mathcal{V}_0}{\mathcal{V}_0 + \frac{2\hbar^2}{m_*}}. \quad (3.25)$$

Порівнюючи цей потенціал з $\mathcal{V}_2(r)$ (див. формулу (3.15)), маємо $L \equiv \sqrt{2}r_0$, $\mathcal{V}_0 \equiv g\sqrt{2}/(\pi^{3/2}r_0)$ і, отже, рівняння. (3.25) набуває вигляду:

$$a_s = r_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{r_0}{a_s^B}}. \quad (3.26)$$

Знову ж таки, беручи значення $r_0 = 8 \text{ нм} \approx 151a_0$ і $a_s^B = 100a_0$, отримуємо $a_s \approx 65a_0$.

Обидва розрахункові значення a_s відповідають помірному режиму взаємодії в розріджених ультрахолодних газах атомів лужних металів.

3.3. Деякі міркування щодо більш складних модельних потенціалів взаємодії

Задамося тепер природним питанням, чи відбудеться якісна зміна здобутих вище результатів у випадку більш реалістичних моделей потенціалу міжатомної взаємодії, тобто таких, які містять як відштовхувальні, так і притягувальні області в координатному просторі (наприклад, потенціал типу Леннарда-Джонса)? З поверхневого аналізу зв'язаних рівнянь (1.57) і (1.58) можна зробити висновок, що цього не має бути: розв'язок залежить скоріше від асимптотичної поведінки модельних потенціалів в імпульсному просторі, коли $p \rightarrow \infty$.

Щоб бути більш конкретним і навіть навести деякі кількісні оцінки щодо впливу на результати моделей потенціалу, які демонструють зміну знаку взаємодії в певних областях своєї залежності від координат, виконаємо

додатковий аналіз з використанням наступного потенціалу:

$$\mathcal{V}_4(\mathbf{r}) = \frac{g}{2\pi^2 r_0^3} \frac{j_1(r/r_0)}{r/r_0}. \quad (3.27)$$

Цей потенціал є оберненим відносно Фур'є-перетворень до потенціалу півпросторних сфер (див. (3.17) й Рис. 3.1). Тож, йому відповідає Фур'є-образ:

$$\nu_4(\mathbf{p}) = g \theta(p_0 - p), \quad (3.28)$$

де

$\theta(x)$ — функція Хевісайда;

$$p_0 = \hbar/r_0.$$

Потенціал $\mathcal{V}_4(\mathbf{r})$ (див. формулу (3.27)) має як відштовхувальну, так і притягальну області (див. також Рис. 3.1), однак $\mathcal{V}_4(\mathbf{r})$ не може бути пов'язаний з дельта-функцією, на відміну від потенціалів $\mathcal{V}_2(\mathbf{r})$ і $\mathcal{V}_3(\mathbf{r})$. Тим не менш, його Фур'є-образ $\nu_4(\mathbf{p})$ має належну асимптотичну поведінку в границі $p \rightarrow \infty$, щоб забезпечити збіжність інтегралів (див. рівняння (3.18) – (3.20)).

На Рис. 3.5 наведено результати відповідного чисельного аналізу для даного модельного потенціалу. Вони підтверджують вищезгадане припущення, що форма потенціалу нелокальної взаємодії має лише кількісний вплив на досліджувані фізичні величини. Зокрема, для заданих параметрів a_s і r_0 результати для потенціалу $\mathcal{V}_4(\mathbf{r})$ нагадують випадок потенціалу з гаусовим профілем $\mathcal{V}_2(\mathbf{r})$ з незначною відмінністю.

У літературі [38] з ультрахолодних газів також згадується такий потенціал:

$$\mathcal{V}_5(\mathbf{r}) = -\frac{g}{8\pi r_0^3} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (3.29)$$

Потенціал (3.29) використовують, щоб, зокрема, відтворити притягальний хвіст взаємодії. Цей потенціал має чітко визначені аналітичні вирази для

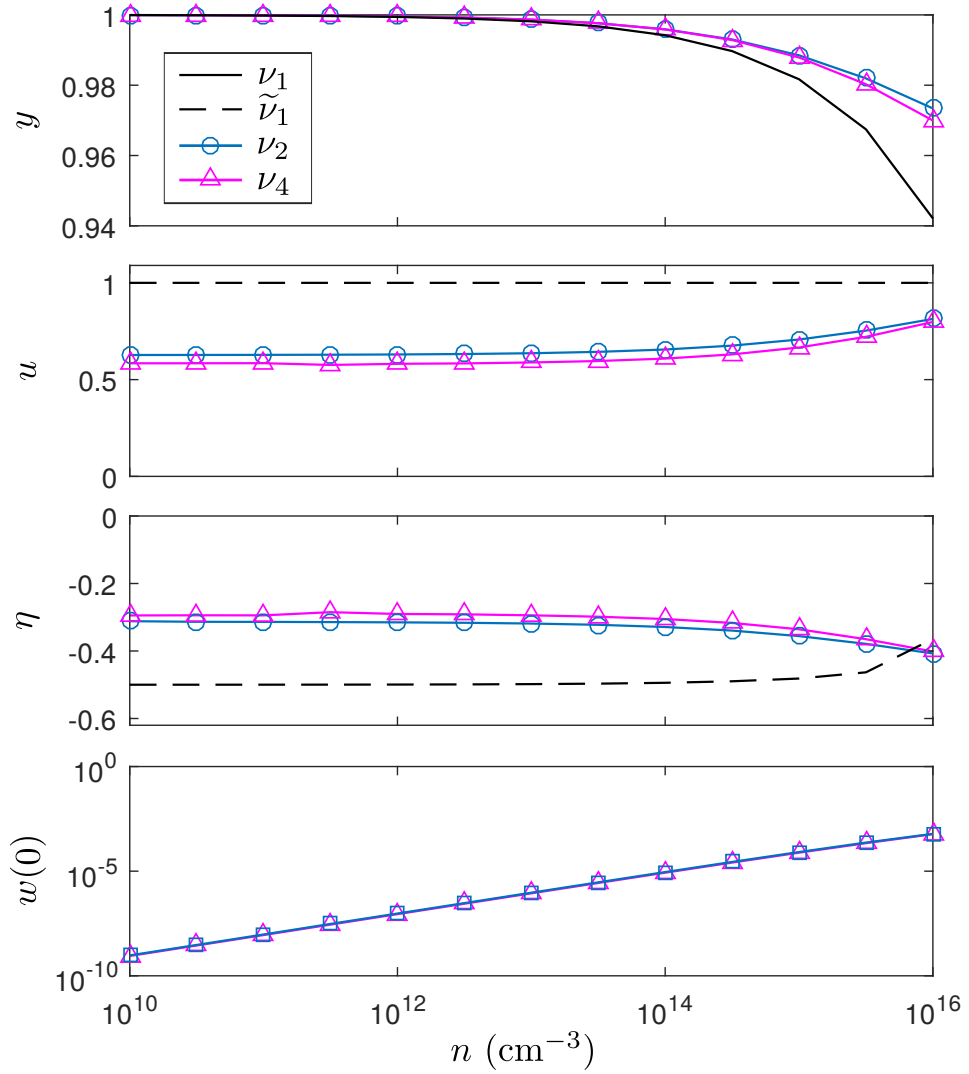


Рис. 3.5. Залежність частки конденсату $y = n_0/n$, хімічного потенціалу $u = gn_0$, термодинамічного потенціалу $\eta = \mathcal{W}^{(2)}/gn^2$, та щілини спектру збудження квазічастинок $w(0)$ від густини газу n для трьох різних псевдопотенціалів ν_i за $a_s^B = 100a_0$ і $r_0 = 8\text{нм}$

відповідної довжини розсіювання $a_s = a_s(g, r_0)$ [72], і власний Фур'є-образ:

$$\nu_5(\mathbf{p}) = \frac{-g}{\left(1 + \frac{p^2}{p_0^2}\right)^2}, \quad (3.30)$$

де

$$p_0 = \hbar/r_0.$$

Однак потенціал (3.30) не може бути використаний в рамках розробленого підходу для $g > 0$, тому що у відповідності до формули (1.40) енергія

квазічастинки стає комплексною величиною для деяких значень імпульсу p . Це означає, що опис за допомогою запропонованого квазічастинкового підходу стає непридатним. Проте, в лінійній комбінації з (іншим) позитивно визначеним потенціалом (відтворюючи відштовхувальну частину відповідного потенціалу Леннарда-Джонса, наприклад, $\mathcal{V}_{2,3}(r)$), потенціал $\mathcal{V}_5(\mathbf{r})$ (див. рівняння (3.29) і (3.30)) може використовуватися в режимах, коли отриманий квазічастинковий спектр залишається дійсним. Такий напрямок досліджень має право на існування, але за рахунок збільшення кількості параметрів задачі потребує додаткового детального вивчення.

3.4. Обговорення питання наявності щілини в спектрі одночастинкових збуджень

Як було зазначено в підрозділі 3.2, спектр одночастинкових збуджень набуває щілини, якщо врахувати внесок квадратичних доданків до умови мінімуму великого термодинамічного потенціалу (див. рівняння (1.58)). Такий результат може здатися досить неочікуваним, а тому потребує додаткового обговорення.

Для системи з БЕК хімічний потенціал був отриманий в першу чергу Беляєвим [73] і, згодом, Гугенхольцем і Пайнсом [59], використовуючи часткове підсумовування ряду теорії збурень функції Гріна. Вони виписали не степеневий ряд (наприклад, присутня логарифмічна залежність) за газовим параметром для енергії основного стану й хімічного потенціалу, де взаємодія параметризується постійною амплітудою розсіювання. Згідно з цими результатами, головний член розкладання хімічного потенціалу походить з s -числа урізаного гамільтоніана і призводить до безщілинного спектра одночастинкових збуджень. Інші доданки, включаючи ті, що походять з квадратичної частини гамільтоніана, зазвичай набагато менші і можуть бути знехтувані у головному наближенні. Проте, як пізніше було показано Пайнсом [74], правильність цього твердження залежить від обґрунтованості розкладання

в ряд теорії збурень. Крім того, існували певні сумніви щодо правильної обробки ефекту виснаження та незв'язаних діаграм у пертурбативній техніці Гугенхольца-Пайнса [75]. Однак історично більшість існуючих екстраполяцій залучають припущення фононної природи спектру або використовують локальний характер міжатомної взаємодії, таким чином, апріорі виключаючи можливе існування щілини в спектрі одночастинкового збудження.

Вагомим аргументом на користь відсутності щілини також є теорема Голдстоуна. Оскільки загальноприйнятим є те, що спектр Боголюбова одночастинкових збуджень описує колективний режим Голдстоуна, пов'язаний з порушеною симетрією $U(1)$, енергія цих збуджень не повинна мати щілини.

Крім того, в роботі [76] було показано, що спектр визначається полюсами одночастинкової функції Гріна, що збігаються з полюсами двохчастинкових функцій Гріна. Полюси одночастинкових функцій Гріна стосуються одночастинкових збуджень, а полюси двохчастинкових функцій Гріна — колективних збуджень (фонони). Однак ретельний аналіз польово-пертурбативних розширень для одно- і двохчастинкових функцій Гріна, виконаних в роботах [77, 78], показав, що їхні полюси не збігаються на відміну від висновку в роботі [76]. До того ж інші дослідження також підтвердили різний характер одночастинкових і колективних збуджень [79, 80]. Зокрема, ширина спектру колективних мод прямує до нуля в довгохвильовій границі, тоді як спектр квазічастинок (одночастинкові збудження) точно залишається кінцевим [80], а режим Голдстоуна може з'явитися як полюс двохчастинкової функції Гріна [79]. Аналогічні висновки щодо різної природи збуджень у взаємодійній бозе-системі з БЕК були нещодавно повідомлені в [29, 81]. Таким чином, спектр збуджень може складатися з двох гілок [27, 29, 30, 82], аналогічно до теорії БКШ нейтральної надплинної рідини. Перша гілка являє собою одночастинкові збудження, які можуть мати щілину, а друга характеризує безщілинну колективну моду (коливання густини). Розділення одночастинкових і колективних збуджень, мабуть, менш проявляється в бозе-системі, ніж у фермі-системі, як наслідок гібридизації гілок спричинену наявністю

конденсату. Тому структура спектра збуджень взаємодійної бозе-системи з БЕК може бути більш складною, ніж це зазвичай вважається, у зв'язку з чим необхідні додаткові теоретичні та експериментальні дослідження.

Щодо експериментів, то область малих імпульсів дотепер не була безпосереднього досліджена, унаслідок чого не існує однозначних експериментальних доказів наявності або відсутності щілини в одночастинковому спектрі збуджень (див., наприклад, [69, 83]). З цієї причини обробка експериментальних даних дозволяє використовувати як спектри з щілиною, так і без.

Висновки до розділу 3

1. Розв'язана система рівнянь (1.57) і (1.58), в якій перше визначає повну кількість частинок системи, а друге гарантує мінімум термодинамічного потенціалу. Причому в останньому рівнянні враховано внесок квадратичних членів за операторами народження і знищення на відміну від стандартних підходів [1, 2, 18]. Аналіз згаданої системи рівнянь було проведено чисельно для низки модельних потенціалів, які мають чітко визначені аналітичні вирази як в реальному, так і в імпульсному просторах.
2. Показано, що інтеграли в загальних рівняннях квадратичного наближення розбігаються в області великих імпульсів у випадку потенціалу контактної взаємодії. Навіть після стандартної процедури перенормування, спрямованої на усунення розбіжностей, відповідні рівняння не мають розв'язків, хоча відомі результати, такі як поправки до хімічного потенціалу і густини конденсату в термінах газового параметра, можуть бути формально відтворені.
3. Показано, що у випадку нелокальних потенціалів взаємодії, які є відштовхувальними і переходять у контактну взаємодію в границі нульового радіуса взаємодії, всі досліджувані інтеграли збігаються (див. рівняння (3.18) – (3.20)) і, відповідно, досліджувана система рівнянь має нетривіальний

розв'язок для типових експериментальних параметрів ультрахолодних атомних газів. Внесок доданків, пов'язаних із квадратичною частиною усіченого гамільтоніану, може мати той самий порядок, що і від доданків, які походять із його с-числової частини. Із цією обставиною пов'язане існування ненульової щілини в спектрі одночастинкових збуджень, чим ситуація кардинально відрізняється від ситуації з перенормованим потенціалом контактної взаємодії. З цієї точки зору експериментальне підтвердження наявності щілини в одночастинковому спектрі збудження може свідчити про те, що заміни складних міжатомних потенціалів контактною взаємодією недостатньо для правильного опису всієї фізики слабковзаємодійних атомних газів із БЕК.

4. Показано за допомогою чисельного аналізу з використанням нелокальних модельних потенціалів, що результати чутливі до вибору потенціалу лише кількісно, але не якісно. Однак можна очікувати, що якісний бік цього дослідження справедливий для більш реалістичних фізичних потенціалів. Основне обмеження до вибору модельного потенціалу (наприклад, потенціалу Леннард-Джонса) в рамках розробленого підходу стосується тільки існування його Фур'є-образу, тобто точного представлення міжатомного потенціалу в імпульсному просторі.

5. Отримані результати дозволяють стверджувати, що квадратичного наближення можна застосовувати до широкого діапазону нелокальних потенціалів, включаючи такі, що мають як відштовхувальні, так і притягувальні області в координатному просторі.

РОЗДІЛ 4

РОЛЬ НЕЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ В СЛАБКОВЗАЄМОДІЙНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ АТОМІВ З ОДИНИЧНИМ СПІНОМ У СТАНІ З БЕК

У цьому розділі досліджуються всі можливі магнітні стани БЕК у бозе-газі частинок зі спіном $S = 1$ за наявності зовнішнього магнітного поля. На відміну від попередніх досліджень спінових конденсатів (див., наприклад, [10–13]), міжатомна взаємодія вважається нелокальною. У цьому випадку відповідний гамільтоніан має бути побудований з урахуванням спінових і квадрупольних ступенів свободи, які елегантно вводяться на рівних правах крізь призму алгебри $SU(3)$ [35]. Зв'язок із зовнішнім магнітним полем забезпечується за допомогою як спінового оператора (лінійний ефект Зеемана), так і за допомогою оператора квадрупольного моменту (квадратичний ефект Зеемана).

4.1. Гамільтоніан з квадрупольними ступенями свободи

Коротко нагадаємо основні етапи теоретичного опису взаємодійного газу атомів зі спіном $S = 1$. Для низькоенергетичних зіткнень, які преважують в ультрахолодних газах, парна взаємодія атомів із одиничним спіном визначається двома константами зв'язку, пов'язані із довжинами розсіювання a_0 і a_2 . Останні відповідають зіткненням двох атомів із сумарними спінами $\mathcal{F} = 0$ та $\mathcal{F} = 2$, відповідно. Розсіювання з $\mathcal{F} = 1$ заборонено вимогою симетричності хвильової функції процесу щодо переставлення двох атомів. Таким чином, гамільтоніан взаємодії містить два доданки: перший не залежить від спінових операторів, а другий є білінійним за ними [10–12]. Цей опис передбачає точкову (або локальну) взаємодію між атомами.

Однак для нелокальної взаємодії згаданого гамільтоніана недостатньо для коректного опису системи через те, що наближення довжини розсіювання

не виконується, й розсіювання двох атомів із сумарним спіном $\mathcal{F} = 1$ загалом можливе. У цьому випадку гамільтоніан взаємодії має бути побудований зі спінового та квадрупольного операторів, які вводяться на рівних через призму алгебри $SU(3)$ [35, 84]. Зокрема, вісім генераторів Гелл-Манна λ^a ($a = 1, \dots, 8$) розбиваються на дві групи: три оператори відповідають компонентам оператора спіну у декартовому базисі:

$$S^x = \lambda^7, \quad S^y = -\lambda^5, \quad S^z = \lambda^2, \quad (4.1)$$

і п'ять квадрупольних операторів формують деякий вектор

$$q^b = (-\lambda^1, -\lambda^3, -\lambda^4, -\lambda^6, \lambda^8). \quad (4.2)$$

Помітимо, що для компонент оператора спіну, заданих як (4.1), також виконується співвідношення $(S^i)_{kl} = -i\varepsilon_{ikl}$. А матриці Гелл-Мана, що входять до (4.2) можна виразити через оператори компонент спіну наступним чином:

$$\begin{aligned} \lambda^1 &= -\{S^x, S^y\}, \\ \lambda^3 &= (S^y)^2 - (S^x)^2, \\ \lambda^4 &= -\{S^x, S^z\}, \\ \lambda^6 &= -\{S^y, S^z\}, \\ \lambda^8 &= \sqrt{3}(S^z)^2 - \frac{2}{\sqrt{3}}I, \end{aligned} \quad (4.3)$$

де

$\{a, b\} = ab + ba$ позначає антикомутатор;

I — одиничний оператор.

Компоненти вектора q^b визначають елементи квадрупольної матриці (або нематичного тензора) (див., наприклад, [85, 86]), визначеного формулою:

$$Q^{ik} = S^i S^k + S^k S^i - \frac{4}{3}\delta^{ik}. \quad (4.4)$$

Тоді, користуючись рівняннями (4.3), з формули (4.4) дістаємо

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} -\lambda^3 - \lambda^8/\sqrt{3} & -\lambda^1 & -\lambda^4 \\ -\lambda^1 & \lambda^3 - \lambda^8/\sqrt{3} & -\lambda^6 \\ -\lambda^4 & -\lambda^6 & 2\lambda^8/\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Середнє значення квадрупольної матриці описує анізотропію спінових флуктуацій. Таким чином, так само, як електричний заряд породжує всі електричні моменти, спин частинки — всі магнітні моменти.

Великий канонічний гамільтоніан (оператор, який входить до статистичного оператора Гіббса й відповідає великому канонічному ансамблю) системи можна записати у такому вигляді:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}_U + \mathcal{V}_J + \mathcal{V}_K, \quad (4.6)$$

де

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger \left[(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \delta_{\alpha\beta} - h^i S_{\alpha\beta}^i - \frac{1}{2} b^i \mathcal{Q}_{\alpha\beta}^{ik} b^k \right] a_{\mathbf{p}\beta}, \quad (4.7)$$

— частина гамільтоніана (4.6), що не містить взаємодії між частинками;

$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m$ — кінетична енергія атома;

μ — хімічний потенціал;

$a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger$ ($a_{\mathbf{p}\alpha}$) — оператор народження (знищення) бозону в стані з імпульсом $\mathbf{p}$ і проекцією спіну α ;

доданки, що містять h^i та b^i , описують зв'язок спіну й квадрупольного моменту з зовнішнім магнітним полем, відповідно.

Взаємодія визначається незалежним від спіну членом $\mathcal{V}_U$, а також членами $\mathcal{V}_J$

і $\mathcal{V}_K$, що описують спін-обмінну та квадруполь-обмінну взаємодії, відповідно:

$$\mathcal{V}_U = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger a_{\mathbf{p}_3 \alpha} a_{\mathbf{p}_4 \beta} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}, \quad (4.8)$$

$$\mathcal{V}_J = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} J(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger S_{\alpha \gamma}^i S_{\beta \delta}^i a_{\mathbf{p}_3 \gamma} a_{\mathbf{p}_4 \delta} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}, \quad (4.9)$$

$$\mathcal{V}_K = \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} K(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger \mathcal{Q}_{\alpha \gamma}^{ik} \mathcal{Q}_{\beta \delta}^{ki} a_{\mathbf{p}_3 \gamma} a_{\mathbf{p}_4 \delta} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \quad (4.10)$$

Помічаючи з рівнянь (4.3), що $\mathcal{Q}_{\alpha \gamma}^{ik} \mathcal{Q}_{\beta \delta}^{ki} = 2q_{\alpha \gamma}^b q_{\beta \delta}^b$, можемо подати вираз (4.10) як [35, 84]

$$\mathcal{V}_K = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} K(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger q_{\alpha \gamma}^b q_{\beta \delta}^b a_{\mathbf{p}_3 \gamma} a_{\mathbf{p}_4 \delta} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \quad (4.11)$$

Останнє, помічаючи тотожність

$$\frac{1}{2} q_{\alpha \gamma}^b q_{\beta \delta}^b = S_{\alpha \sigma}^i S_{\beta \rho}^i S_{\sigma \gamma}^k S_{\rho \delta}^k + \frac{1}{2} S_{\alpha \gamma}^i S_{\beta \delta}^i - \frac{4}{3} \delta_{\alpha \gamma} \delta_{\beta \delta}, \quad (4.12)$$

дає нам змогу стверджувати, що наявність квадрупольних ступенів свободи в гамільтоніані взаємодії еквівалентна тому, що він містить як білінійні, так і біквадратичні члени за операторами спіну. Очевидно, що гамільтоніан, заданий рівняннями (4.8)- (4.11), має SU(2) симетрію, як і білінійний гамільтоніан типу Гейзенберга з параметризацією довжиною s -розсіюванням, який використовується в [10, 12, 40] для вивчення магнітних властивостей бозе-газу атомів із одиничним спіном у стані з БЕК. Однак відмінність полягає в тому, що розглядуваний нами гамільтоніан є більш загальним: він включає додаткові квадрупольні ступені вільності як у своїй вільній частині, так і у взаємодії. Для квантових газів така структура має сенс, якщо міжатомна взаємодія характеризується ненульовим ефективним радіусом взаємодії. У такому випадку гамільтоніан визначається трьома Фур'є-образами відповідних енергій взаємодії. Крім того, якщо $J(\mathbf{p}) = K(\mathbf{p})$ гамільтоніан взаємодії взагалі стає SU(3) інваріантним. Подібний гамільтоніан із нелокальною

взаємодією та білінійним членом у спінових операторах використовувався для аналізу магнітних станів спін- S конденсату, кожен з яких був заселений лише окремим компонентом параметра порядку [13, 56].

Загалом, явний вигляд функцій $U(\mathbf{p})$, $J(\mathbf{p})$ і $K(\mathbf{p})$ слід знаходити з взаємодії Кулона, що є дуже складною та невирішеною задачею. Однак їх значення в нулі: $U(0)$, $J(0)$ і $K(0)$ — можна пов'язати з довжинами s -розсіювання. За наближення довжиною s -розсіювання ми можемо представити взаємодію як

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathcal{F}=0}^2 g_{\mathcal{F}} P_{\mathcal{F}}, \quad (4.13)$$

де

$\mathcal{F}$ — повний спін каналу розсіювання;

$g_{\mathcal{F}}$ — відповідна константа зв'язку;

$P_{\mathcal{F}}$ — відповідний проекційний оператор.

Останній, звичайно, має такі властивості:

$$\sum_{\mathcal{F}=0}^2 P_{\mathcal{F}} = 1, \quad (4.14)$$

$$P_{\mathcal{F}} P_{\mathcal{F}'} = P_{\mathcal{F}} \delta_{\mathcal{F}\mathcal{F}'}. \quad (4.15)$$

Водночас ми розуміємо, що справедлива тотожність, яка зв'язує оператори спінів тотожних розсіюваних частинок, $\mathbf{S}_1$ і $\mathbf{S}_2$, із проекційними операторами, $P_{\mathcal{F}}$:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \sum_{\mathcal{F}=0}^2 \gamma_{\mathcal{F}} P_{\mathcal{F}}, \quad (4.16)$$

де

$$\gamma_{\mathcal{F}} = \frac{1}{2} [\mathcal{F}(\mathcal{F} + 1) - 2S(S + 1)];$$

S — спін розсіюваної частинки.

Тоді, комбінуючи властивості (4.14), (4.15) з тотожністю (4.16), отримуємо

систему рівнянь:

$$\begin{cases} P_0 + P_1 + P_2 = 1 \\ -2P_0 - P_1 + P_2 = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ 4P_0 + P_1 + P_2 = (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 \end{cases} . \quad (4.17)$$

Розв'язуючи систему рівнянь (4.17) відносно проекційних операторів, знаходимо:

$$P_0 = \frac{1}{3} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 - 1] , \quad (4.18)$$

$$P_1 = 1 - \frac{1}{2} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2] , \quad (4.19)$$

$$P_2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + \frac{1}{6}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2. \quad (4.20)$$

Оскільки s -розсіювання двох однакових атомів зі спіном $S = 1$ і з сумарним спіном $\mathcal{F} = 1$ виключається вимогою симетричності хвильової функції відносно переставлення атомів, відповідний проекційний оператор дорівнює нулю (детальніше див. [35]):

$$P_1 = 0 \quad (4.21)$$

З іншого боку, припускаючи взаємодію контактною й ураховуючи рівняння (4.8)-(4.11), ми отримуємо

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger [U(0)\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + J(0)S_{\alpha\gamma}^i S_{\beta\delta}^i + K(0)q_{\alpha\gamma}^b q_{\beta\delta}^b] a_{\mathbf{p}_3 \gamma} a_{\mathbf{p}_4 \delta} \times \\ \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Далі, підставляючи тотожність (4.12) до виразу (4.22) і використовуючи визначення оператора проектування в явному вигляді (див. формулу (4.19)),

$$(P_1)_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \frac{1}{2} (S_{\alpha\gamma}^i S_{\beta\delta}^i + S_{\alpha\sigma}^i S_{\beta\rho}^i S_{\sigma\gamma}^k S_{\rho\delta}^k) , \quad (4.23)$$

разом з умовою (4.21) здобуваємо

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 \beta}^\dagger \left[\left(U(0) + \frac{4}{3} K(0) \right) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \left(J(0) - K(0) \right) S_{\alpha\gamma}^i S_{\beta\delta}^i \right] \times \\ a_{\mathbf{p}_3 \gamma} a_{\mathbf{p}_4 \delta} \delta_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4}. \quad (4.24)$$

З іншого боку, підставляючи рівняння (4.18)-(4.20) до формули (4.13), можемо подати взаємодію в наступному вигляді:

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathcal{F}=0}^2 b_{\mathcal{F}} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^{\mathcal{F}}, \quad (4.25)$$

де

$$b_0 = g_1 + \frac{1}{3} (g_2 - g_0), \quad (4.26)$$

$$b_1 = \frac{1}{2} (g_2 - g_1), \quad (4.27)$$

$$b_2 = \frac{1}{6} (2g_0 - 3g_1 + g_2). \quad (4.28)$$

Далі ми так само, послуговуючись формулами (4.19) і (4.21), можемо виключити $(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2$ з формули (4.25), а також повинні покласти рівним нулю g_1 в рівняннях (4.26)-(4.28). Тож, маємо

$$\mathcal{V} = \sum_{\mathcal{F}=0}^1 c_{\mathcal{F}} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^{\mathcal{F}}, \quad (4.29)$$

де

$$c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}, \quad (4.30)$$

$$c_1 = \frac{g_2 - g_0}{3}. \quad (4.31)$$

Нарешті, порівнюючи формули (4.29)-(4.31) із формулою (4.24), ми можемо зробити висновок, що взаємодія в системі багатьох частинок із одиничним

спіном може бути визначена двома константами зв'язку:

$$c_0 \equiv U(0) + \frac{4}{3}K(0) = \frac{g_0 + 2g_2}{3}, \quad (4.32)$$

$$c_1 \equiv J(0) - K(0) = \frac{g_2 - g_0}{3}, \quad (4.33)$$

де

$$g_0 = 4\pi\hbar^2 a_0/m;$$

$$g_2 = 4\pi\hbar^2 a_2/m;$$

a_0 і a_2 — довжини s -розсіяння, що відповідають розсіянню двох атомів із сумарним спіном $\mathcal{F} = 0$ і $\mathcal{F} = 2$, відповідно.

Роль $K(0)$ може бути істотною для дальньої взаємодії атомів. Зокрема, атоми з великими магнітними моментами зазнають диполь-дипольної взаємодії і величини $U(0)$, $J(0)$ і $K(0)$ можуть бути одного порядку.

Повернемося до гамільтоніана $\mathcal{H}_0$ (див. формулу (4.7)). Якщо припустити, що вектори h^i і b^i спрямовані вздовж осі z , $h^i = (0, 0, h)$ і $b^i = (0, 0, \sqrt{\chi})$, отримуємо

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger [(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \tilde{\mu})\delta_{\alpha\beta} - hS_{\alpha\beta}^z - \chi(S^z)_{\alpha\beta}^2] a_{\mathbf{p}\beta}, \quad (4.34)$$

де

$$\tilde{\mu} = \mu - \frac{2}{3}\chi. \quad (4.35)$$

Скажімо кілька слів про параметри h і χ . Доданки hS^z і $\chi(S^z)^2$ пов'язані з внеском в енергію від лінійного і квадратичного ефектів Зеемана, відповідно. Так, що $h = g\mu_B B$, де g — надтонкий фактор Ленде, μ_B — магнетон Бора, а B — зовнішнє магнітне поле, спрямоване вздовж осі z . Параметр χ містить внесок зовнішнього поля B , $\chi_B = (g\mu_B B)^2/\Delta E$, де $\Delta E = E_m - E_g$, E_m і E_g — енергії збудженого і основного станів. Інший внесок у χ експериментально можливий завдяки мікрохвильовому [87, 88] або світловому [89] полю. Останнє дає змогу змінювати коефіцієнти h і χ

незалежно [41]. Варто зазначити, що квадратичний член Зеемана природним чином з'являється в гамільтоніані (див. формулу (4.7)), коли ми намагаємося врахувати взаємодію квадрупольних ступенів свободи (або квадрупольного моменту) з зовнішнім полем. Отже, ми можемо стверджувати, що квадратичний член Зеемана визначає магнітну анізотропію ультрахолодних квантових газів.

4.2. Рівняння стану БЕК для системи частинок із одиничним спіном у моделі Боголюбова

Після того, як ми побудували великий канонічний гамільтоніан, заданий рівняннями (4.6), (4.8)-(4.11) і (4.34), можемо приступити до вивчення магнітних станів, які можуть виникати в слабковзаємодійному газі атомів зі спіном 1 і БЕК. З цією метою ми застосуємо модель Боголюбова (див. підрозділи 1.2.1 і 1.2.2, а також [15, 90]), за якою оператори народження і знищення з нульовим імпульсом замінюються на c -числа в усіх відповідних операторах фізичних величин:

$$\begin{aligned} a_{0\alpha} &\rightarrow \sqrt{V}\Psi_{\alpha}, \\ a_{0\alpha}^{\dagger} &\rightarrow \sqrt{V}\Psi_{\alpha}^*, \end{aligned} \tag{4.36}$$

де

Ψ_{α} — параметр порядку або хвильова функція конденсату.

Якщо обмежитись c -числовими й квадратичними членами за операторами народження та знищення атомів з ненульовим імпульсом, але знехтувати членами вищого порядку (вони будуть доречними під час опису взаємодії між квазічастинками), великий канонічний гамільтоніан після підстановки, заданої формулами (4.36), набуває наступного вигляду:

$$\mathcal{H}(\Psi) \approx \mathcal{H}^{(0)}(\Psi) + \mathcal{H}^{(2)}(\Psi), \tag{4.37}$$

де

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \mathcal{H}^{(0)}(\Psi) = & \frac{U(0)}{2} (\Psi^* \Psi)^2 + \frac{J(0)}{2} (\Psi^* S^i \Psi)^2 + \frac{K(0)}{2} (\Psi^* q^b \Psi)^2 \\ & - h(\Psi^* S^z \Psi) - \chi(\Psi^* (S^z)^2 \Psi) - \tilde{\mu}(\Psi^* \Psi). \end{aligned} \quad (4.38)$$

— його c -числова частина, що і визначає основний стан.

Тут і далі слід розуміти дужки як підсумовування за індексами, що повторюються, наприклад: $(\Psi^* \Psi) \equiv \Psi_\alpha^* \Psi_\alpha$ or $(\Psi^* q^b \Psi)^2 \equiv (\Psi_\alpha^* q_{\alpha\beta}^b \Psi_\beta)(\Psi_\gamma^* q_{\gamma\delta}^b \Psi_\delta)$. Частина гамільтоніана, яка є квадратичною за операторами народження і знищення з ненульовим імпульсом, $\mathcal{H}^{(2)}(\Psi)$, (див. формулу (4.37)) має вигляд

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)}(\Psi) = & \sum_{\mathbf{p} \neq 0} a_{\mathbf{p}\alpha}^\dagger [(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \tilde{\mu})\delta_{\alpha\beta} - hS_{\alpha\beta}^z - \chi(S^z)_{\alpha\beta}^2] a_{\mathbf{p}\beta} \\ & + U(0) \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\Psi^* \Psi)(a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}) + J(0) \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\Psi^* S^i \Psi)(a_{\mathbf{p}}^\dagger S^i a_{\mathbf{p}}) \\ & + K(0) \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\Psi^* q^b \Psi)(a_{\mathbf{p}}^\dagger q^b a_{\mathbf{p}}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} U(\mathbf{p}) \left[(a_{\mathbf{p}}^\dagger \Psi)(\Psi^* a_{\mathbf{p}}) + (a_{\mathbf{p}}^\dagger \Psi)(a_{-\mathbf{p}}^\dagger \Psi) + \text{h.c.} \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} J(\mathbf{p}) \left[(a_{\mathbf{p}}^\dagger S^i \Psi)(\Psi^* S^i a_{\mathbf{p}}) + (a_{\mathbf{p}}^\dagger S^i \Psi)(a_{-\mathbf{p}}^\dagger S^i \Psi) + \text{h.c.} \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} K(\mathbf{p}) \left[(a_{\mathbf{p}}^\dagger q^b \Psi)(\Psi^* q^b a_{\mathbf{p}}) + (a_{\mathbf{p}}^\dagger q^b \Psi)(a_{-\mathbf{p}}^\dagger q^b \Psi) + \text{h.c.} \right]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Після відповідної діагоналізації квадратичної частини гамільтоніана $\mathcal{H}^{(2)}(\Psi)$ відносно операторів народження й знищення ми зможемо визначити спектр одночастинкових збуджень для даного основного стану.

Однак, перш ніж перейти до діагоналізації, варто конкретизувати вигляд статистичного оператора Гіббса для нашої задачі:

$$w(\Psi) \approx \exp(\beta [\Omega(\Psi) - \mathcal{H}(\Psi)]), \quad (4.40)$$

де

$\beta = 1/T$ — зворотна температура;

$\Omega(\Psi)$ — великий термодинамічний потенціал, який визначається з умови нормування $\text{Tr } w(\Psi) = 1$.

Таким чином, нормуючи статистичний оператор (4.40), отримуємо

$$\Omega(\Psi) = \mathcal{H}^{(0)}(\Psi) - \frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[\exp(-\beta \mathcal{H}^{(2)}(\Psi)) \right]. \quad (4.41)$$

Далі зручно ввести густину термодинамічного потенціалу,

$$\mathcal{W}(\Psi) = \frac{\Omega(\Psi)}{V}. \quad (4.42)$$

Вона з точністю до знака збігається з тиском P , $\mathcal{W} = -P$. Термодинамічна стабільність системи вимагає, щоб тиск був додатним ($\mathcal{W}$ має бути від'ємним, $\mathcal{W} < 0$). Тож, в головному наближенні моделі (коли нехтуємо квадратичною за операторами народження і знищення частиною гамільтоніана $\mathcal{H}^2(\Psi)$ (див. формулу (4.39))), підставляючи рівняння (4.38) і (4.41) до визначення (4.42), знаходимо густину термодинамічного потенціалу:

$$\begin{aligned} \mathcal{W} \approx & \frac{U(0)}{2}(\Psi^* \Psi)^2 + \frac{J(0)}{2}(\Psi^* S^i \Psi)^2 + \frac{K(0)}{2}(\Psi^* q^b \Psi)^2 - h(\Psi^* S^z \Psi) \\ & - \chi(\Psi^* (S^z)^2 \Psi) - \tilde{\mu}(\Psi^* \Psi). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Тоді, згідно з моделлю Боголюбова, основний стан системи можна визначити шляхом мінімізації густини термодинамічного потенціалу $\mathcal{W}$ відносно хвильової функції конденсату:

$$\left(\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \Psi_\alpha^*} \right) = 0. \quad (4.44)$$

Тож, підставляючи рівняння (4.43) до умови мінімуму (4.44), отримуємо нарешті рівняння, що визначає основний стан системи:

$$U(0)(\Psi^*\Psi)\Psi_\alpha + J(0)(\Psi^*S^i\Psi)S_{\alpha\beta}^i\Psi_\beta + K(0)(\Psi^*q^b\Psi)q_{\alpha\beta}^b\Psi_\beta - hS_{\alpha\beta}^z\Psi_\beta - \chi(S^z)_{\alpha\beta}^2\Psi_\beta - \tilde{\mu}\Psi_\alpha = 0. \quad (4.45)$$

Рівняння (4.45) можна ще спростити, якщо ввести таку заміну:

$$\Psi_\alpha = \sqrt{n_0}\zeta_\alpha, \quad (4.46)$$

$$\zeta_\alpha\zeta_\alpha^* = 1. \quad (4.47)$$

де n_0 — густина конденсату. Таким чином, користуючись рівняннями (4.46) і (4.47), отримуємо з рівняння (4.45)

$$\tilde{\mu}\zeta_\alpha + hS_{\alpha\beta}^z\zeta_\beta + \chi(S^z)_{\alpha\beta}^2\zeta_\beta - n_0U(0)\zeta_\alpha - n_0J(0)(\zeta^*S^i\zeta)S_{\alpha\beta}^i\zeta_\beta - n_0K(0)(\zeta^*q^b\zeta)q_{\alpha\beta}^b\zeta_\beta = 0. \quad (4.48)$$

4.2.1. Розв'язок системи рівнянь на компоненти векторного параметра порядку

Оскільки проекцій спіну три, рівняння (4.48) являє собою не одне, а цілу систему зв'язаних рівнянь, яка має такий явний вигляд:

$$\begin{cases} a\zeta_x + c(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)\zeta_x^* - ih\zeta_y = 0 \\ a\zeta_y + c(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)\zeta_y^* + ih\zeta_x = 0 \\ (a - \chi)\zeta_z + c(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)\zeta_z^* = 0 \end{cases}, \quad (4.49)$$

де

$$a = \tilde{\mu} + \chi - v - c, \quad (4.50)$$

$$v = n_0 \left(U(0) + \frac{4}{3}K(0) \right), \quad (4.51)$$

$$c = n_0 \left(J(0) - K(0) \right). \quad (4.52)$$

Параметри v і c , задані рівняннями (4.51) та (4.52), вже зустрічались під час вивчення контактної взаємодії вище (див. рівняння (4.24), (4.32) і (4.33)).

Аби розв'язати систему нелінійних рівнянь (4.49), зручно перейти від декартового базису до, так званого, сферичного базису. Нагадаємо, що $\zeta = (\zeta_x, \zeta_y, \zeta_z)^T$ є параметром порядку в декартовому базисі (індекс T позначає операцію транспонування), який визначається як $S^i|i\rangle = 0$, $i = x, y, z$. У цьому базисі проблема взаємодії атомів зі спіном 1 формулюється елегантно, оскільки відповідні спінові матриці $(S^i)_{kl} = -i\varepsilon_{ikl}$ утворюють підалгебру серед генераторів Гелл-Манна групи $SU(3)$. Сферичний базис $|m\rangle$ визначається як власний базис векторів оператора S^z , $S^z|m\rangle = m|m\rangle$, де $m = -1, 0, 1$ — проекції спіну. Спінорні параметри порядку в цих двох базисах пов'язані між собою унітарним перетворенням:

$$\zeta' = R\zeta, \quad R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad R^\dagger R = 1, \quad (4.53)$$

де

$\zeta' = (\zeta_+, \zeta_0, \zeta_-)^T$ — вектор стану в сферичному базисі.

Застосовуючи перетворення (4.53) з наступною алгебраїчною обробкою, ми можемо записати систему рівнянь (4.49) через компоненти вектора стану в сферичному базисі:

$$\begin{cases} (a - h)\zeta_- + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) \zeta_+^* = 0 \\ (\chi - a)\zeta_0 + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) \zeta_0^* = 0 \\ (a + h)\zeta_+ + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) \zeta_-^* = 0 \end{cases} \quad (4.54)$$

Почнемо розв'язок системи рівнянь (4.54) з випадків, коли одна з компонент вектора стану ζ_i ($i = \{+, 0, -\}$) вважається рівною нулю. По-

перше, якщо $\zeta_0 = 0$, то отримуємо зведену систему рівнянь для двох невідомих змінних:

$$\begin{cases} (a - h + 2c|\zeta_+|^2) \zeta_- = 0 \\ (a + h + 2c|\zeta_-|^2) \zeta_+ = 0 \end{cases}. \quad (4.55)$$

Прирівнюючи нулеві в системі рівнянь (4.55) ще якусь координату вектора стану: ζ_+ або ζ_- — розуміємо з умови нормування (4.47), що координата, яка залишилась, має дорівнювати одиниці. Таким чином, виникає умова на параметр a , разом з якою маємо:

$$\begin{aligned} a = +h, \quad \zeta_0 = \zeta_+ = 0, \quad \zeta_- = 1; \\ a = -h, \quad \zeta_0 = \zeta_- = 0, \quad \zeta_+ = 1. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Тепер, якщо прирівняти нулеві вирази в дужках рівнянь системи (4.55) і знов скористатись умовою нормування (4.47), здобуваємо другий, принципово інший, розв'язок:

$$a = -c, \quad \zeta_0 = 0, \quad \begin{cases} |\zeta_+|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{h}{c}\right) \\ |\zeta_-|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{h}{c}\right) \end{cases}. \quad (4.57)$$

Розв'язок (4.56) будемо називати феромагнітним (F) станом, а розв'язок (4.57) — парамагнітним (P) станом (див. [84]).

По-друге, якщо ми покладемо $\zeta_{\pm} = 0$, ще один розв'язок буде таким:

$$a = \chi - c, \quad \zeta_{\mp} = 0, \quad \zeta_0 = 1. \quad (4.58)$$

Очевидно, що на цей раз ми маємо справу з квадрупольним (Q) станом (див. [84]).

Нарешті приступимо до найбільш нетривіального розв'язку, коли всі

компонентами вектора стану будуть ненульовими: $\zeta_i \neq 0$ ($i = \{+, 0, -\}$). Для цього помножимо кожне рівняння з системи (4.54) на ζ_+ , ζ_0 і ζ_- , відповідно,

$$\begin{cases} (a - h)\zeta_- \zeta_+ + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) |\zeta_+|^2 = 0 \\ (\chi - a)\zeta_0^2 + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) |\zeta_0|^2 = 0 \\ (a + h)\zeta_- \zeta_+ + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) |\zeta_-|^2 = 0 \end{cases} \quad (4.59)$$

Підсумуємо всі три рівняння в системі (4.59):

$$2a\zeta_- \zeta_+ + (\chi - a)\zeta_0^2 + c(2\zeta_- \zeta_+ - \zeta_0^2) (|\zeta_+|^2 + |\zeta_0|^2 + |\zeta_-|^2) = 0. \quad (4.60)$$

Використовуючи умову нормування (4.47), виразимо комбінацію $2\zeta_+ \zeta_-$ через ζ_0^2 з рівняння (4.60):

$$2\zeta_+ \zeta_- = \frac{a + c - \chi}{a + c} \zeta_0^2. \quad (4.61)$$

Тепер підставимо співвідношення (4.61) до кожного з рівнянь системи (4.59):

$$\begin{cases} (a - h) \frac{a + c - \chi}{2(a + c)} + c \left(\frac{a + c - \chi}{a + c} - 1 \right) |\zeta_+|^2 = 0 \\ (\chi - a) + c \left(\frac{a + c - \chi}{a + c} - 1 \right) |\zeta_0|^2 = 0 \\ (a + h) \frac{a + c - \chi}{2(a + c)} + c \left(\frac{a + c - \chi}{a + c} - \zeta_0^2 \right) |\zeta_-|^2 = 0 \end{cases} \quad (4.62)$$

Як бачимо з системи рівнянь (4.62), компоненти вектору стану більше не змішані, а, отже, ніщо не заважає нам виписати значення їхніх модулів:

$$|\zeta_+| = \sqrt{\frac{(a - h)(a + c - \chi)}{2c\chi}}, \quad (4.63)$$

$$|\zeta_0| = \sqrt{\frac{(\chi - a)(a + c)}{c\chi}}, \quad (4.64)$$

$$|\zeta_-| = \sqrt{\frac{(a+h)(a+c-\chi)}{2c\chi}}. \quad (4.65)$$

На жаль, продемонстрований вище алгоритм не дозволяє встановити співвідношення для хімічного потенціалу $\tilde{\mu}$ (див. (4.35)). Для цього потрібно піти трохи іншим шляхом і для початку замінити ζ_0^2 в другому рівнянні системи (4.54) за допомогою рівняння (4.61):

$$(\chi - a)\zeta_0 + 2c\zeta_- \zeta_+ \left(1 - \frac{a+c}{a+c-\chi}\right) \zeta_0^* = 0. \quad (4.66)$$

Заміняючи в рівнянні (4.66) кожний з компонентів вектору стану добутком $\zeta_i = |\zeta_i|e^{i\phi_i}$, отримуємо

$$(a - \chi)e^{i\phi_0} = \frac{2c\chi}{a+c-\chi} |\zeta_+| |\zeta_-| e^{i(\phi_+ + \phi_- - \phi_0)}. \quad (4.67)$$

Як бачимо, рівняння (4.67), крім модулів компонент вектору стану, містить також їхні фази, що говорить про наявність зв'язку між цюма фазами. Але спершу розберемося з хімічним потенціалом $\tilde{\mu}$, підставивши формули (4.63)–(4.65) до рівняння (4.67):

$$|a - \chi| \operatorname{sign}(a - \chi) e^{i\phi_0} = |\sqrt{a^2 - h^2}| \operatorname{sign}(\sqrt{a^2 - h^2}) e^{i(\phi_+ + \phi_- - \phi_0)}. \quad (4.68)$$

Прирівнюючи модулі комплексних чисел на обох сторонах тотожності (4.68), нарешті здобуваємо умову на параметр a :

$$a = \frac{h^2 + \chi^2}{2\chi}. \quad (4.69)$$

А вже з умови (4.69), користуючись рівнянням (4.50), знаходимо, нарешті, хімічний потенціал $\tilde{\mu}$:

$$\tilde{\mu} = \frac{h^2 - \chi^2}{2\chi} + v + c. \quad (4.70)$$

Повертаючись до умови на фази, її можна знайти, підставивши тотожність (4.69) до рівняння (4.68):

$$e^{i(\phi_+ + \phi_- - 2\phi_0)} = \text{sign}(h^2 - \chi^2). \quad (4.71)$$

Таким чином, система зв'язаних рівнянь (4.48) має чотири розв'язки (інші відсутні). Три з них: феромагнітний (F), парамагнітний (P) і квадрупольний (Q) — відповідають тим, що були знайдені раніше для системи, в гамільтоніані якої враховувався лише внесок від лінійного ефекту Зеемана (див. [84]). Тоді як поява в системі четвертого стану — стану з порушеною осью симетрією (BA) — пов'язана виключно з квадратичним ефектом Зеемана або, як було сказано вище, із взаємодією квадрупольного моменту атома з зовнішнім магнітним полем (назва стану стане зрозумілою нижче). Всі знайдені вище вектори станів підсумовані задля зручності в Таблиці 4.1 у двох згаданих базисах, декартовому і сферичному, попередньо виключивши параметр a з формул (4.63) – (4.65) за допомогою формули (4.69). Слід звернути увагу, що вектор феромагнітного стану (F_+) відрізняється знаком від використаного в роботі [84]. Насправді обидва вектори стану еквівалентні через фазову інваріантність рівняння (4.48). Різниця в знакові пояснюється тим, що необхідно забезпечити правильне перетворення між явленнями спінових матриць і векторів стану в декартовому й сферичному базисах.

Крім того, в Таблиці 4.2 зібрано хімічні потенціали всіх магнітних станів, знайдені з формули (4.50) за допомогою рівнянь (4.56) – (4.58) і (4.70), відповідно.

4.3. Стан з порушеною осью симетрією

Четвертий розв'язок рівняння (4.48) виникає завдяки члену $\chi(S^z)_{\alpha\beta}^2$, який описує спряження квадрупольного моменту із зовнішнім полем. Згідно з [40, 42], ми називаємо стан, що відповідає цьому розв'язку, станом з

Таблиця 4.1

Вектори феромагнітного (F), квадрупольного (Q), парамагнітного (P) станів і стану з порушеною осью симетрією (BA) БЕК у газі частинок із одиничним спіном у декартовому й сферичному базисах

Стан	Вектор стану	
	ζ (Декартові)	ζ' (Сферичні)
$F_{\pm}$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mp 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ або $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
Q	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
P	$\begin{pmatrix} -\frac{e^{i\phi_+}}{2} \sqrt{1 + \frac{h}{c}} - \frac{e^{i\phi_-}}{2} \sqrt{1 - \frac{h}{c}} \\ -i \frac{e^{i\phi_+}}{2} \sqrt{1 + \frac{h}{c}} + i \frac{e^{i\phi_-}}{2} \sqrt{1 - \frac{h}{c}} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{e^{i\phi_+}}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{h}{c}} \\ 0 \\ -\frac{e^{i\phi_-}}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{h}{c}} \end{pmatrix}$
BA	$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_- - \zeta_+) \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}(\zeta_+ + \zeta_-) \\ \zeta_0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{(h - \chi)^2(h^2 - \chi^2 + 2c\chi)}{8c\chi^3}} e^{i\phi_+} \\ \sqrt{\frac{\chi^2 - h^2(h^2 + \chi^2 + 2c\chi)}{4c\chi^3}} e^{i\phi_0} \\ \sqrt{\frac{(h + \chi)^2(h^2 - \chi^2 + 2c\chi)}{8c\chi^3}} e^{i\phi_-} \end{pmatrix}$

порушеною осью симетрією. Причина такої назви буде зрозуміла нижче.

Перед тим, як дослідити термодинамічні характеристики отриманого стану, необхідно поладнати кілька питань, на які не звернули увагу під час власне отримання вектору стану в попередньому підрозділі. По-перше, подамо умову на фази ϕ_+ , ϕ_- і ϕ_0 , що задана рівнянням (4.71), у більш

Таблиця 4.2

Хімічний потенціал феромагнітного (F), квадрупольного (Q), парамагнітного (P) станів і стану з порушеною осьовою симетрією (BA) БЕК у газі частинок із одиничним спіном

Стан	Хімічний потенціал, $\tilde{\mu}$
$F_{\pm}$	$v + c - \chi \mp h$
Q	v
P	$v - \chi$
BA	$\frac{h^2 - \chi^2}{2\chi} + v + c$

зручному вигляді:

$$\phi_+ + \phi_- - 2\phi_0 = \begin{cases} 0, & \chi^2 - h^2 < 0 \\ \pi, & \chi^2 - h^2 > 0 \end{cases}. \quad (4.72)$$

По-друге, ми також повинні переконатися, що підкореневі вирази, котрі визначають компоненти вектору стану з порушеною осьовою симетрією (див. Таблицю 4.1), додатні. Отже, маємо наступні три випадки:

$$c\chi < 0, \quad \chi^2 - h^2 \leq 0, \quad h^2 - \chi^2 + 2c\chi \leq 0, \quad h^2 + \chi^2 + 2c\chi \geq 0, \quad (4.73)$$

$$c\chi < 0, \quad \chi^2 - h^2 \geq 0, \quad h^2 - \chi^2 + 2c\chi \leq 0, \quad h^2 + \chi^2 + 2c\chi \leq 0, \quad (4.74)$$

$$c\chi > 0, \quad \chi^2 - h^2 \geq 0, \quad h^2 - \chi^2 + 2c\chi \geq 0, \quad h^2 + \chi^2 + 2c\chi \geq 0. \quad (4.75)$$

Кожна з систем нерівностей (4.73) – (4.75) визначає конкретний режим реалізації стану з порушеною осьовою симетрією.

Слід зауважити, що режим (4.75) досліджувався раніше в [40, 41] на основі гамільтоніана зі спін-незалежною і білінійною спін-обмінною взаємодіями, параметризованими довжинами s -розсіювання. Для режиму (4.74) експериментально досліджено фазовий перехід від стану з порушеною осьовою симетрією до парамагнітного [42].

Визначивши вектор стану і відповідні умови (4.72) – (4.75), ми можемо отримати основні термодинамічні характеристики, такі як: намагніченість, густину термодинамічного потенціалу (або тиску), середнє значення квадрупольної матриці і одночастинковий спектр збудження.

Намагніченість визначається за наступною загальною формулою:

$$\langle S^i \rangle = \Psi_\alpha^* S_{\alpha\beta}^i \Psi_\beta, \quad (4.76)$$

де

Ψ_α визначається рівняннями (4.46) і (4.47).

Відповідно до визначення (4.76) знайдемо компоненти вектора намагніченості:

$$\langle S^x \rangle = \sqrt{2}n_0 \operatorname{Re} [\zeta_0^* (\zeta_- - \zeta_+)], \quad (4.77)$$

$$\langle S^y \rangle = \sqrt{2}n_0 \operatorname{Im} [\zeta_0^* (\zeta_- + \zeta_+)], \quad (4.78)$$

$$\langle S^z \rangle = n_0 (|\zeta_+|^2 - |\zeta_-|^2). \quad (4.79)$$

Підставляючи явні вирази компонент вектора стану з порушеною осьовою симетрією (див. Таблицю 4.1) до формул (4.77) – (4.79), отримуємо

$$\begin{aligned} \langle S^x \rangle &= \frac{n_0 \sqrt{(\chi^2 - h^2)((h^2 + 2c\chi)^2 - \chi^4)}}{4|c\chi|\chi^2} \\ &\times (|\chi + h| \cos(\phi_- - \phi_0) - |\chi - h| \cos(\phi_+ - \phi_0)), \end{aligned} \quad (4.80)$$

$$\begin{aligned} \langle S^y \rangle &= \frac{n_0 \sqrt{(\chi^2 - h^2)((h^2 + 2c\chi)^2 - \chi^4)}}{4|c\chi|\chi^2} \\ &\times (|\chi + h| \sin(\phi_- - \phi_0) + |\chi - h| \sin(\phi_+ - \phi_0)), \end{aligned} \quad (4.81)$$

$$\langle S^z \rangle = -n_0 h \frac{h^2 - \chi^2 + 2c\chi}{2c\chi^2}. \quad (4.82)$$

Як бачимо з нерівностей (4.73) – (4.75), значення компонента $\langle S^z \rangle$, задане рівнянням (4.82), однакове для всіх режимів магнітних полів. Однак ми не можемо те саме стверджувати для компонент $\langle S^x \rangle$ і $\langle S^y \rangle$. Тому, враховуючи

умови (4.72) – (4.75) під час розкриття модулів в виразах (4.80) і (4.81), для випадку $\chi^2 - h^2 < 0$ маємо:

$$\langle S^x \rangle = \langle S^\perp \rangle \cos \frac{\Delta\phi}{2} \text{sign}(\chi h), \quad (4.83)$$

$$\langle S^y \rangle = -\langle S^\perp \rangle \sin \frac{\Delta\phi}{2} \text{sign}(\chi h), \quad (4.84)$$

де

$$\langle S^\perp \rangle \equiv \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \langle S^y \rangle^2} = \frac{n_0}{2|c|\chi^2} \sqrt{(\chi^2 - h^2)((h^2 + 2c\chi)^2 - \chi^4)} \quad (4.85)$$

— перпендикулярна до напрямку зовнішнього магнітного поля складова вектора намагніченості;

$$\Delta\phi = \phi_+ - \phi_-.$$

Аналогічно для випадку $\chi^2 - h^2 > 0$ отримуємо:

$$\langle S^x \rangle = \langle S^\perp \rangle \sin \frac{\Delta\phi}{2}, \quad (4.86)$$

$$\langle S^y \rangle = \langle S^\perp \rangle \cos \frac{\Delta\phi}{2}. \quad (4.87)$$

З формул (4.82) і (4.85) зрозуміло, що намагніченість системи в стані з порушеною симетрією спрямована під певним кутом θ до напрямку магнітного поля (вісь z). Цей кут можна визначити наступним чином:

$$\text{tg } \theta = \frac{\langle S^\perp \rangle}{\langle S^z \rangle} = -\frac{\text{sign}(c)}{h} \frac{\sqrt{(\chi^2 - h^2)((h^2 + 2c\chi)^2 - \chi^4)}}{h^2 - \chi^2 + 2c\chi}. \quad (4.88)$$

Крім того, з рівнянь (4.83) – (4.88) ми можемо зробити висновок, що як осьова, так і більш загальна оберտальна симетрії системи порушені. Останній факт є унікальною ознакою стану, а тому він і обумовив назву — стан з порушеною осьовою симетрією.

Здобудемо також вираз для модуля вектора намагніченості, використо-

вуючи формули (4.85) і (4.82),

$$M \equiv |\langle \mathbf{S} \rangle| = \frac{n_0}{2|c\chi|} \left[4c^2\chi^2 - (\chi^2 - h^2)^2 \right]^{1/2}. \quad (4.89)$$

Для порівняння вектори і модулі намагніченостей всіх магнітних станів БЕК у газі частинок із одиничним спіном обчислені за загальною формулою (4.76) (див. також формули (4.82) – (4.87) і (4.89)) та зібрані в Таблиці 4.3 .

Густина термодинамічного потенціалу $\mathcal{W}$ як функція n_0 і μ для кожного магнітного стану отримується з рівняння (4.43) шляхом підстановки рівняння (4.47) і відповідного вектору стану ζ з Таблиці 4.1. Внаслідок цього $\mathcal{W}$ можна виразити через намагніченість,

$$\mathcal{W}(n_0) = n_0 \left(\frac{v}{2} - \frac{c}{2} \left(\frac{M}{n_0} \right)^2 + \frac{h^2 - \chi^2 + 2c\chi}{2\chi} - \tilde{\mu} \right). \quad (4.90)$$

Для стійкості системи необхідно, щоб густина термодинамічного потенціалу була від'ємною, $\mathcal{W} < 0$ (тиск має бути позитивним (див. наприклад, (1.53))). Густини термодинамічних потенціалів стану з порушеною осью симетрією (див. рівняння (4.90)) і всіх інших магнітних станів, знайдених за тим же алгоритмом, наведені в Таблиці 4.4.

Середнє значення квадрупольного оператора в стані з порушеною осью симетрією згідно з його визначенням (4.5), підставляючи відповідний вектор стану з Таблиці 4.1, буде таким:

$$\langle \mathcal{Q} \rangle \equiv \Psi_\alpha^* \mathcal{Q}_{\alpha\beta} \Psi_\beta = n_0 \begin{pmatrix} |\zeta_z|^2 - \frac{1}{3} - \gamma_{\text{BA}} \cos \Delta\phi & \gamma_{\text{BA}} \sin \Delta\phi & -\frac{h}{|\chi|} \langle S^x \rangle \\ \gamma_{\text{BA}} \sin \Delta\phi & |\zeta_z|^2 - \frac{1}{3} + \gamma_{\text{BA}} \cos \Delta\phi & -\frac{h}{|\chi|} \langle S^y \rangle \\ -\frac{h}{|\chi|} \langle S^x \rangle & -\frac{h}{|\chi|} \langle S^y \rangle & -2|\zeta_z|^2 + \frac{2}{3} \end{pmatrix}, \quad (4.91)$$

де

$$\gamma_{\text{BA}} = \frac{|(h^2 - \chi^2)(h^2 - \chi^2 + 2c\chi)|}{4|c\chi^3|},$$

$$\Delta\phi = \phi_+ - \phi_-.$$

Таблиця 4.3

Вектор та модуль намагніченості ферромагнітного (F), квадрупольного (Q), парамагнітного (P) станів і стану з порушеною осью симетрією (BA) БЕК у газі частинок із одиничним спіном

Стан	Вектор намагніченості, $\mathbf{M}/n_0$	Модуль намагніченості, M/n_0
$F_{\pm}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$	1
Q	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	0
P	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{h}{c} \end{pmatrix}$	$\frac{h}{c}$
BA ($\chi^2 - h^2 < 0$)	$\begin{pmatrix} \frac{\langle S^{\perp} \rangle}{n_0} \cos \frac{\Delta\phi}{2} \text{sign}(\chi h) \\ -\frac{\langle S^{\perp} \rangle}{n_0} \sin \frac{\Delta\phi}{2} \text{sign}(\chi h) \\ h \frac{\chi^2 - h^2 - 2c\chi}{2c\chi^2} \end{pmatrix}$	$\frac{\sqrt{4c^2\chi^2 - (\chi^2 - h^2)^2}}{2 c\chi }$
BA ($\chi^2 - h^2 > 0$)	$\begin{pmatrix} \frac{\langle S^{\perp} \rangle}{n_0} \sin \frac{\Delta\phi}{2} \\ \frac{\langle S^{\perp} \rangle}{n_0} \cos \frac{\Delta\phi}{2} \\ h \frac{\chi^2 - h^2 - 2c\chi}{2c\chi^2} \end{pmatrix}$	

Таблиця 4.4

Густина термодинамічного потенціалу феромагнітного (F), квадрупольного (Q), парамагнітного (P) станів і стану з порушеною осью симетрії (BA) БЕК у газі частинок із одиничним спіном

Стан	Густина потенціалу, $\mathcal{W}/n_0$
$F_{\pm}$	$\frac{v+c}{2} - \chi \mp h - \tilde{\mu}$
Q	$\frac{v}{2} - \tilde{\mu}$
P	$\frac{v}{2} - \frac{h^2}{2c} - \chi - \tilde{\mu}$
BA	$\frac{v}{2} - \frac{c}{2} \left(\frac{M}{n_0} \right)^2 + \frac{h^2 - \chi^2 + 2c\chi}{2\chi} - \tilde{\mu}$

Наприклад, той факт, що $\langle \mathcal{Q}^{xz} \rangle \neq \langle \mathcal{Q}^{yz} \rangle$ і $\langle \mathcal{Q}^{xx} \rangle \neq \langle \mathcal{Q}^{yy} \rangle$ демонструє, що осьова та оберտальна симетрії відносно z -осі, відповідно, порушені, як ми з'ясували вище. Ми бачимо, що стан із порушеною осью симетрії характеризується значною магнітною анізотропією, яку вводить квадрупольний оператор $\mathcal{Q}^{ik}$ (див. рівняння (4.7) і (4.34)). Слід звернути увагу, що існує система координат, де квадрупольний оператор $\langle \mathcal{Q} \rangle$ має діагональну форму і не залежить від фаз ϕ_+ і ϕ_- .

Спектр збудження квазічастинок можна отримати шляхом зведення загального гамільтоніана, визначеного рівняннями (4.37)-(4.39), до діагональної форми за допомогою алгоритму, описаного в підрозділі 1.2.2:

$$\mathcal{H}(\Psi) = \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}}^{[\alpha]} b_{\mathbf{p}\alpha}^{\dagger} b_{\mathbf{p}\alpha} + \mathcal{E}_0, \quad (4.92)$$

де

$b_{\mathbf{p}\alpha}^{\dagger}$ і $b_{\mathbf{p}\alpha}$ — оператори народження й знищення квазічастинок [35, 47];

$\mathcal{E}_0$ — величина, яка визначає термодинамічний потенціал основного стану в статистичному операторі Гіббса, включаючи внесок від квадратичних членів в операторах народження й знищення.

Діагоналізація гамільтоніана стає більш простою в системі координат, де квадрупольна матриця, задана формулою (4.91), має діагональну форму. Цього можна досягти шляхом попереднього ортогонального перетворення, яке також робить матрицю $\langle \mathcal{Q} \rangle$ фазонезалежною, а гамільтоніан залежним від фаз лише через тривіальний множник $e^{\pm i(\phi_+ + \phi_-)}$. Тому, на відміну від [8, 40], де фази прибираються штучно, ми можемо зробити це природним шляхом, застосовуючи ортогональне перетворення, яке, звичайно, не впливає на результат діагоналізації, оскільки відбувається не в просторі чисел заповнення.

Таким чином, діагоналізації гамільтоніана призводить до трьох гілок одночастинкового спектра збуджень (див. рівняння (4.92)). У лінійному порядку за $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ щільна гілка спектра має форму

$$\omega_{\mathbf{p}}^2 \approx \omega_0^2 - \left(4 \frac{h^2 + c\chi}{\chi} + G \right) \varepsilon_{\mathbf{p}}, \quad (4.93)$$

де

$$\omega_0^2 = (3h^2 + 2c\chi - \chi^2) (h^2 + \chi^2 + 2c\chi) / \chi^2 - \text{щілина}.$$

Оскільки вважається, що взаємодія має нелокальний характер, енергії збуджень також визначаються першими похідними від амплітуд взаємодії відносно кінетичної енергії за нульового імпульсу. Ці похідні роблять внесок у G ,

$$G = \frac{(h^2 - \chi^2)}{c} \left[1 + \frac{h^2(h^2 + 2c\chi + \chi^2)}{\chi^2(3h^2 + 2c\chi - \chi^2)} \right] n_0 J'(0) + 2 \left[4 \frac{h^2 + c\chi}{\chi} + \frac{(h^2 - \chi^2)}{c} \right] n_0 K'(0), \quad (4.94)$$

де

$$J'(0) \equiv \left. \frac{\partial J(\mathbf{p})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}}} \right|_{\mathbf{p}=0};$$

$$K'(0) \equiv \left. \frac{\partial K(\mathbf{p})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}}} \right|_{\mathbf{p}=0}.$$

Слід зауважити, що щілина у спектрі (4.93) зумовлена зовнішнім магнітним

полем. У рамках стандартних підходів Боголюбова чи Гросса-Пітаєвського з відповідним визначенням хімічного потенціалу енергетична щільність виникає і для молекулярних конденсатів [82,91]. У цьому випадку гамільтоніан включає процеси, пов'язані з переходом двох атомів у зв'язаний стан і навпаки.

Окрім отриманої гілки (4.93), маємо ще дві гілки:

$$\frac{\omega_{\mathbf{p}\pm}^2}{\varepsilon_{\mathbf{p}}} \approx v + c + \frac{h^2 - \chi^2}{2\chi} \pm \sqrt{\left(v + c - \frac{h^2 - \chi^2}{2\chi} + D\right)^2 - (v + c) \frac{2h^2(h^2 - \chi^2)^2}{c\chi^2(3h^2 + 2c\chi - \chi^2)}}, \quad (4.95)$$

де

$$D = n_0 \frac{(\chi^2 - h^2)(h^2 + 2c\chi - \chi^2)}{4c\chi^2} \left(\frac{h^2 + 2c\chi + \chi^2}{3h^2 + 2c\chi - \chi^2} J'(0) + K'(0) \right). \quad (4.96)$$

Помітимо, що гілки одночастинкових збуджень, задані виразами (4.95), є безщільними. Якщо знехтувати квадрупольним обміном, $K(0) = 0$, а також припустити контактність взаємодії, тобто $G = 0$ і $D = 0$ (див. рівняння (4.94) і (4.96)), енергії одночастинкових збуджень збігаються з енергіями, отриманими в [40].

4.4. Умови стійкості й діаграми магнітних станів

Необхідна умова термодинамічної стабільності кожного досліджуваного магнітного стану визначається від'ємним значенням відповідної густини термодинамічного потенціалу (див. Таблиця 4.4) після підставлення відповідного хімічного потенціалу (див. Таблицю 4.2). Ця вимога є еквівалентною вимозі додатності тиску ($\mathcal{W} = -P$) і накладає певні обмеження на параметри взаємодії, які підсумовано в Таблиці 4.5. Крім того, в цій таблиці також вказано додаткові нерівності, які гарантують додатність підкоренових виразів компонент вектора стану для парамагнітного стану і стану з порушеною

осьовою симетрією.

Таблиця 4.5

Умови стабільності феромагнітного (F), квадрупольного (Q), парамагнітного (P) станів і стану з порушеною осьовою симетрією (BA) БЕК у газі частинок із одиничним спіном

Стан	Умови стійкості
$F_{\pm}$	$v + c > 0$
Q	$v > 0$
P	$v + \frac{h^2}{c} > 0, \quad h \leq c $
BA	$v + \frac{c}{n_0^2} M^2(n_0) > 0, \quad \text{нерівності (4.73) – (4.75)}$

Наступним етапом побудови діаграми стану є визначення кривих, що розділяють області можливого існування досліджуваних магнітних станів. Ці сепаратрисы можна знайти шляхом дорівнювання хімічних потенціалів відповідної пари станів. Крім того, порівнюючи густини термодинамічних потенціалів, ми можемо визначити, який із двох станів є термодинамічно вигіднішим і, отже, переконалися в можливості фазового переходу на даній сепаратрисі. Тож, у Таблиці 4.6 наведено рівняння всіх сепаратрис, а також результати порівняння густин термодинамічних потенціалів для різних знаків параметра взаємодії c (див. (4.51) і (4.52)). Останній визначає магнітні властивості системи та характеризує міру порушення $SU(3)$ симетрії парної взаємодії. Фазовий перехід допускається до стану, що характеризується більшим за модулем значенням термодинамічного потенціалу.

Корисно візуалізувати результати викладені в Таблиці 4.6 у вигляді двох графів, показаних на Рис. 4.1. Оскільки система не може вийти з більш термодинамічно вигідного стану на сепаратрисі, зручно ввести поняття напрямку фазового переходу між магнітними станами. Тому на графіках є два види ребер: зі стрілками вказують напрямок фазового переходу на

Таблиця 4.6

Рівняння сепаратрис, термодинамічне превалювання магнітного стану для різного знаку c і рід фазового переходу

#	Пара станів	Сепаратриса	Превалювання		Рід фазового переходу
			$c > 0$	$c < 0$	
I _±	F _± / Q	$h = \pm c \mp \chi$	F _±	Q	1 st
II	Q / BA	$h = \sqrt{\chi^2 - 2c\chi}$	BA	Q	2 nd
III	P / BA	$h = \sqrt{-\chi^2 - 2c\chi}$	P	BA	2 nd
IV _±	F _± / P	$h = \pm c$	F _±	P	2 nd
V _±	F _± / BA	$h = \mp \chi$	F _±	BA	2 nd
VI	Q / P	$\chi = 0$	P	Q	1 st

сепаратрисі, а без них — на можливість двонапрявленого фазового переходу. Двонаправлений фазовий перехід може відбуватися через те, що деякі сепаратриса збігаються з умовами додатності підкоренових виразів, які визначають компоненти векторів відповідних станів ($|h| \leq |c|$ і нерівності (4.73) – (4.75), див. також Таблицю 4.5). На графах видно, що деякі магнітні стани система не може покинути (ферромагнітний стан на верхній панелі або квадрупольний стан на нижній) за зміни зовнішніх полів h і χ . Завдяки цьому залежно від початкового стану, в якому підготовлена система, діаграма магнітного стану може демонструвати або відносно бідну, або досить багату різноманітність фазових переходів, навіть «гістерезис».

Ба більше, кожний магнітний стан характеризується власною намагніченістю. Тому видається природним зобразити всі досліджувані стани на діаграмі в термінах намагніченості $\langle S^z \rangle$ і наведених зовнішніх полів h і χ . Припускаючи, що система підготовлена в стані з порушеною осьовою симетрією, ми будемо діаграми магнітного стану на Рис. 4.2 – Рис. 4.4 для кожного з трьох режимів, заданих нерівностями (4.73) – (4.75), відповідно, та різного знаку параметру взаємодії c . Звертаємо увагу, що на Рис. 4.4 зображено одну діаграму (відповідає системі нерівностей (4.75)) для обох

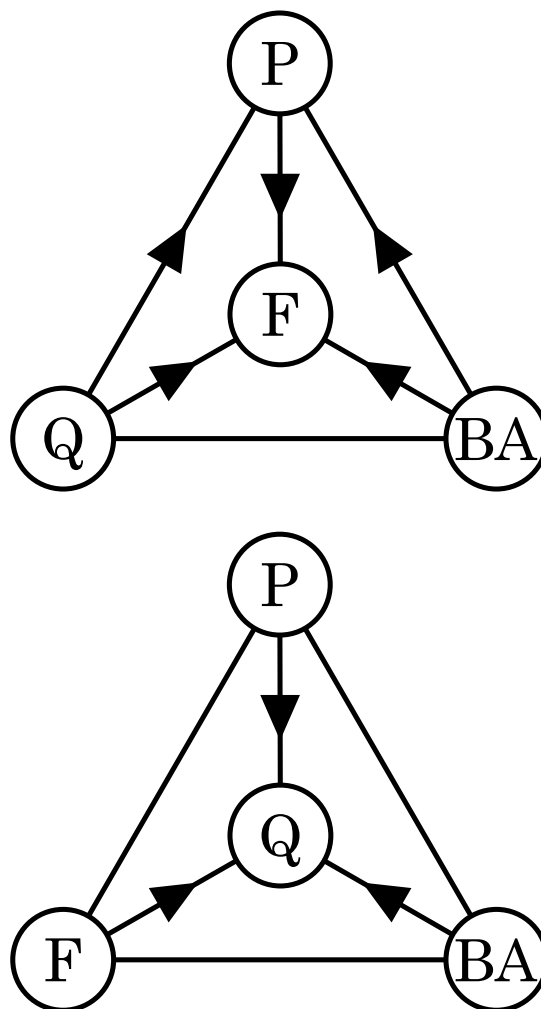


Рис. 4.1. Графи, які візуалізують напрямки і послідовність фазових переходів для $c > 0$ (верхня панель) $c < 0$ (нижня панель)

знаків параметру c , оскільки різниця між випадками відсутня. Всі діаграми можуть бути дзеркально відображені в нижній півплощині, тобто в області від'ємних значень h/c . Усі магнітні стани відмежовані сепаратрисами, ідентифікованими відповідними римськими цифрами в Таблиці 4.6. На білих лініях ми маємо справу з фазовим переходом другого роду, оскільки і намагніченість, і квадрупольні моменти безперервно змінюються. Тоді як на жовтих ми спостерігаємо стрибок намагніченості та квадрупольного моменту — відбувається фазовий перехід першого роду.

Звернімо увагу, що неможливо реалізувати кілька режимів стану з порушеною осью симетрії водночас на одній діаграмі. Варто підкреслити, що можлива послідовність фазових переходів на діаграмах реалізована

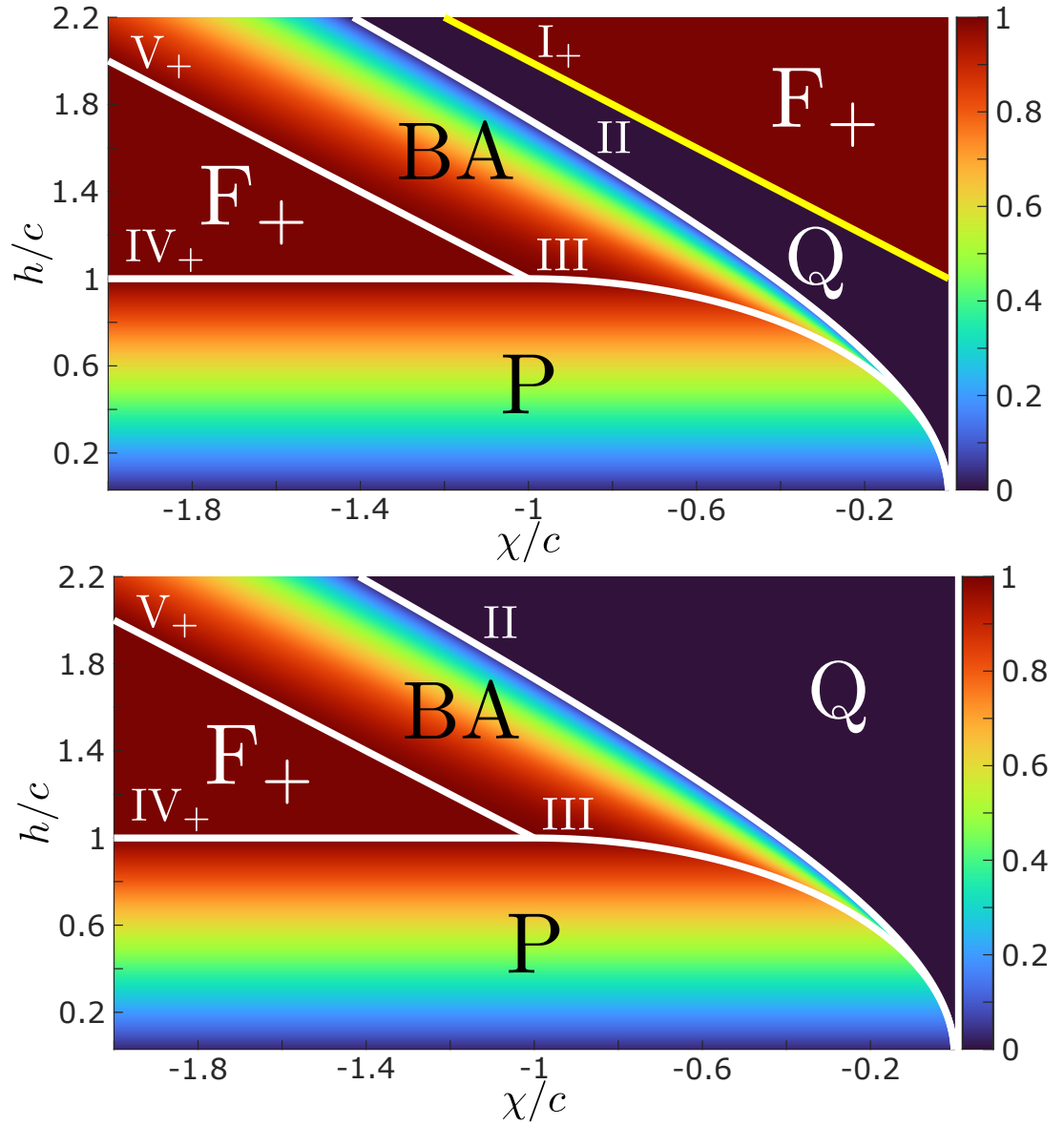


Рис. 4.2. Діаграма магнітних станів БЕК у слабковзаємодійному бозе-газі атомів зі спіном $S = 1$, що зображує зміну намагніченості $\langle S^z \rangle / n_0$ (кольором) за зміни безрозмірних магнітних полів χ/c і h/c для $c > 0$ (верхня панель) та $c < 0$ (нижня панель), що відповідає режимові заданому нерівністю (4.73). Білі і жовті лінії позначають другий і перший роди фазових переходів, відповідно (див. Табл. 4.6).

відповідно до наведених на Рис. 4.1 графів. Звичайно, ми вважаємо, що відповідні умови стабільності виконуються для кожного магнітного стану (див. Таблицю 4.5).

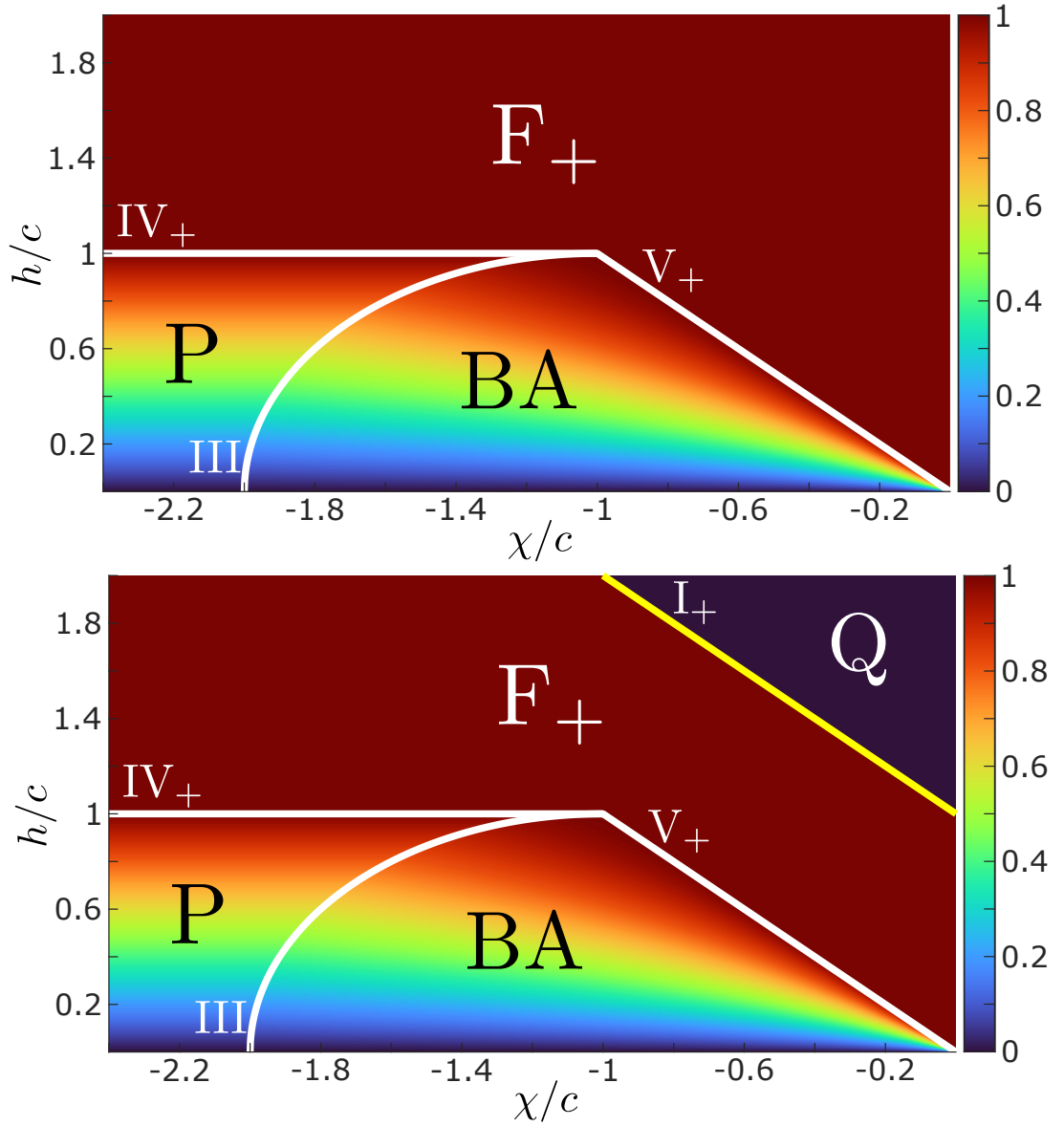


Рис. 4.3. Діаграма магнітних станів БЕК у слабковзаємодійному бозе-газі атомів зі спіном $S = 1$, що зображує зміну намагніченості $\langle S^z \rangle / n_0$ (кольором) за зміни безрозмірних магнітних полів χ/c і h/c для $c > 0$ (верхня панель) та $c < 0$ (нижня панель), що відповідає режимові заданому нерівністю (4.74). Білі і жовті лінії позначають другий і перший роди фазових переходів, відповідно (див. Таблиця 4.6).

4.5. Обговорення результатів

Ми вивчили всі можливі магнітні стани БЕК, що виникають у взаємодійному бозе-газі атомів з одиничним із загальним розглядом квадрупольних ступенів свободи. Як бачимо з Таблиць 4.1 – 4.4, вектори феромагнітного,

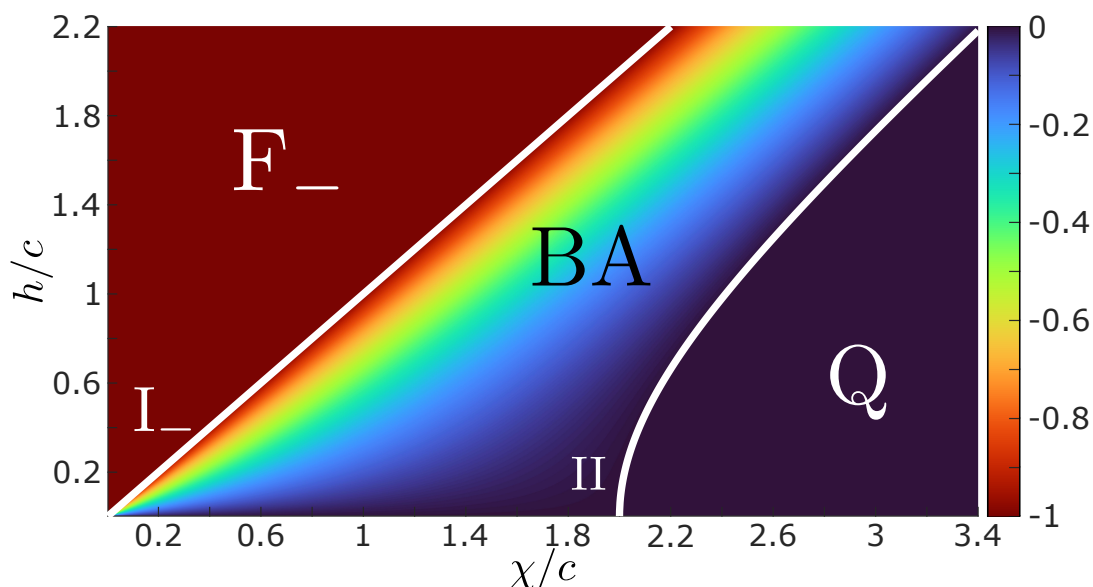


Рис. 4.4. Діаграма магнітних станів БЕК у слабковзаємодійному бозе-газі атомів зі спіном $S = 1$, що зображує зміну намагніченості $\langle S^z \rangle / n_0$ (кольором) за зміни безрозмірних магнітних полів χ/c і h/c , що відповідає режимові заданому нерівністю (4.75). Білі і жовті лінії позначають другий і перший роди фазових переходів, відповідно (див. Таблиця 4.6).

квадруполярного і парамагнітного станів ζ збігаються з тими, що були отримані в роботі [84], де в гамільтоніані розглядався внесок лише від лінійного ефекту Зеемана. Фізичні величини, такі як хімічний потенціал і густина термодинамічного потенціалу, стають такими, як в [84], якщо χ прирівняти нулю. Таким чином, ми можемо говорити про ізоморфізм згаданих розв'язків.

На відміну від феромагнітного, квадрупольного і парамагнітного станів, спряження квадрупольного моменту із зовнішнім полем є необхідною умовою існування стану з порушеною осьовою симетрією. Цей стан має низку унікальних властивостей: усі компоненти вектора стану (три проекції спіну) заселені, вектор намагніченості не паралельний наведеному магнітному полю, а середнє значення квадрупольного оператора не має нульових матричних елементів, що вказує на значну магнітну анізотропію. Тому можна стверджувати, що існування стану з порушеною осьовою симетрією викликано не самим квадратичним ефектом Зеемана, а пов'язаною з ним магнітною

анізотропією. Очевидно, останню можна отримати багатьма експериментальними способами [41, 42, 87–89]. Стан з порушеною осью симетрії у режимі (4.75) вперше досліджено експериментально в [41] і теоретично в [40] (див. Рис. 4.4). Фазовий перехід із стану з порушеною осью симетрії до парамагнітного через сепаратису III (див. Таблицю 4.6 і Рис. 4.3) експериментально досліджено в [42].

Роль квадрупольних ступенів свободи подвійна: вони забезпечують зв'язок між квадрупольним моментом і наведеним магнітним полем, а також генерують міжатомну квадрупольну обмінну взаємодію. У контексті ультрахолодного газу остання має сенс, коли враховуємо нелокальні ефекти міжатомної взаємодії. Дійсно, для сил Ван-дер-Ваальса ($\mathcal{V} \propto r^{-6}$) низькоенергетичне розсіювання можна безпечно описати локальним (δ -подібним) потенціалом, параметризованим довжиною s -розсіювання. Тоді, як ми зазначали, доданок $\mathcal{V}_K$ (див. (4.8), (4.9), (4.10) і (4.11)) не має значення. Такий опис справедливий для лужних атомів з дуже малим значенням магнітного моменту. Однак деякі атоми, наприклад Ербій (Er) [92], Диспрозій (Dy) [93] та їхні ізотопи мають великий магнітний момент порядку $5 - 10\mu_B$, а їхня взаємодія визначається далекодією дипольною силою

$$\mathcal{V}_{dd}(r, \theta) = \frac{\mu_0 \mu_M^2}{4\pi} \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3}, \quad (4.97)$$

де

μ_M — власний магнітний дипольний момент;

μ_0 — діелектрична проникність вакууму.

Тут ми припускаємо, що дипольні моменти орієнтовані вздовж одного напрямку, фіксованого зовнішнім полем (θ — кут між диполем і зовнішнім полем). Зручно характеризувати інтенсивність диполь-дипольної взаємодії (див. формулу (4.97)) наступним ефективним радіусом [94]:

$$r_{dd} = \frac{\mu_0 \mu_M^2 m}{12\pi \hbar^2}. \quad (4.98)$$

Таким чином, використовуючи співвідношення $\varepsilon_{dd} = r_{dd}/a$ і (4.98), ми можемо порівняти інтенсивність диполь-дипольної і контактної (характеризується довжиною розсіювання a) взаємодій. Радіуси, r_{dd} , для ^{168}Er і ^{164}Dy становлять 3,7 нм і 7 нм відповідно [94]. Довжини s -розсіювання, що виникають внаслідок короткодійних ефектів, мають порядок $100a_0$ (~ 5.3 нм) як для цих атомів, так і для їхніх ізотопів, де a_0 — радіус Бора (див. [95] для Ербію і [96] для Диспрозію). Тому $\varepsilon_{dd} \sim 1$ в обох випадках. Це вказує на значність дальньої (нелокальної) взаємодії в таких газах, оскільки величини $U(0)$, $J(0)$ і $K(0)$ можуть бути одного порядку величини. Отже, квадрупольну обмінну взаємодію $\mathcal{V}_K$, задану (4.11), необхідно враховувати.

Нарешті, оскільки ми обходимося двома величинами v і s , пов'язаними з двома константами зв'язку (див. рівняння (4.24), (4.51) і (4.52), а також Таблицю 4.2, Таблицю 4.4 і Таблицю 4.5), немає якісної різниці між діаграмами магнітних станів для локальних і нелокальних взаємодій. Тим не менш, ми отримали додаткові діаграми магнітних станів за інших режимів магнітного поля, які раніше не досліджувалися ні теоретично, ні експериментально (див. систему нерівностей (4.73) і Рис. 4.2). Це відкриває можливість їх експериментального підтвердження навіть у разі локальної взаємодії. Крім того, ефекти, пов'язані з нелокальністю взаємодії, проявляються в спектрі збуджень квазічастинок (див. (4.93)-(4.95)). Тому їх можна виявити в експериментальному дослідженні. Наскільки нам відомо, такі експерименти ще не проводилися, і ми сподіваємося, що вони стануть можливими в майбутньому.

Висновки до розділу 4

1. Вивчено термодинамічні характеристики всіх можливих магнітних станів: феромагнітного, квадрупольного, парамагнітного станів і стану з порушеною осьовою симетрією — що виникають у слабковзаємодійному бозегазі атомів з повним одиничним спіном у стані з БЕК. Причому квадрупольні ступені свободи було враховано під час опису системи найбільш загальним

чином: враховується як їхнє спряження з зовнішнім магнітним полем, так і квадрупольна обмінна взаємодія частинок. Необхідність врахування останньої також пов'язана із нелокальністю взаємодії.

2. Доведено, що саме спряження квадрупольних ступенів свободи із зовнішнім магнітним полем призводить до появи в системі стану з порушеною осьюовою симетрією.

3. Описано всі три можливі режими стану з порушеною осьюовою симетрією, серед яких один досі залишається не дослідженим експериментально (див. систему нерівностей (4.73) і Рис. 4.2).

4. Отримано спектр одночастинкових збуджень та середнє значення квадрупольного оператора в стані з порушеною осьюовою симетрією й досліджено структуру спектра з урахуванням поправок, пов'язаних із нелокальною взаємодією.

5. Встановлено, що стан з порушеною осьюовою симетрією має низку унікальних властивостей: усі компоненти вектора стану (три проекції спіну) заселені, вектор намагніченості не паралельний наведеному магнітному полю, а середнє значення квадрупольного оператора не має нульових матричних елементів, що вказує на значну магнітну анізотропію.

6. Побудовано діаграми магнітних станів для всіх режимів стану з порушеною осьюовою симетрією.

ВИСНОВКИ

Основні вперше отримані результати дисертаційної роботи:

1. застосовано термодинамічну теорію збурень для обчислення поправок першого й другого порядку за взаємодією до термодинамічних величин: тиску, хімічного потенціалу, ентропії й теплоємності за сталого об'єму — котрі характеризують слабковзаємодійний бозе-газ атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан з БЕК;
2. вдосконалено алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса за допомогою введення понять матриці й визначника Віка;
3. показано, що вплив нелокальності взаємодії на характеристики слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у верхньому околі температури переходу в стан із БЕК незначний, а, отже, припущення контактності взаємодії під час опису зазначеної системи є достатнім;
4. для слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним нульовим спіном у стані з БЕК розв'язана система рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату за нульової температури, з урахуванням внеску квадратичних за операторами народження і знищення доданків та використанням низки модельних потенціалів нелокальної взаємодії;
5. показано, що внесок квадратичних доданків, згаданих вище, може бути такий самий за порядком величини, як і тих доданків, які походять з s -числової частини гамільтоніану;
6. продемонстровано, що внесок квадратичних членів у хімічний потенціал призводить, загалом, до енергетичної щілини в одночастинковому енергетичному спектрі збуджень;
7. знайдено й досліджено новий режим стану з порушеною осьовою симетрією слабковзаємодійного бозе-газу атомів із повним одиничним спіном;
8. побудовано для згаданого режиму діаграму магнітних станів, яка заснована на їхній намагніченості;
9. в рамках теорії збурень для магнітного стану БЕК із порушеною осьо-

вою симетрією в слабковзаємодійному бозе-газі атомів із повним одиничним спіном отримано енергетичний спектр одночастинкових збуджень за нульової температури й з урахуванням поправок, що спричинені нелокальністю взаємодії.

Щодо практичного значення отриманих результатів, то передусім вони, як можна зрозуміти з теми дисертації, допомагають сформулювати розуміння того, наскільки значною є роль нелокальної взаємодії з точки зору впливу на фізичні властивості ультрахолодного бозе-газу. Зокрема, деякі характеристики однієї й тієї ж бозе-системи залежно від того, чи знаходиться вона в стані з БЕК, чи ні, можуть як досить суттєво змінювати свою теоретично передбачувану поведінку, так і майже не зазнавати якісних змін унаслідок нелокальності взаємодії, відповідно. Вочевидь, такий факт є важливим не тільки під час планування експериментальних досліджень, а й під час тлумачення їхніх результатів.

Окремо слід звернути увагу на вдосконалення алгоритму підрахунку середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса. Цей результат стане в нагоді будь-кому, хто стикнеться з необхідністю підрахунку середніх за згаданою теоремою. Саме тому таке вдосконалення має стати бажаним доповненням до курсу кінетичної теорії газоподібних систем, фізики систем багатьох частинок тощо, які викладаються студентам відповідних спеціальностей.

Підґрунтям для подальших теоретичних й експериментальних досліджень також можуть стати такі питання: експериментальне підтвердження передбаченого режиму стану з порушеною осьовою симетрією, щілин в отриманих спектрах одночастинкових збуджень; подальші дослідження системи рівнянь, яка визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату слабковзаємодійного бозе-газу, а також інших термодинамічних характеристик (ентропії, питомої теплоємності за сталого об'єму тощо) за ненульової температури.

Загалом, результати роботи є корисними для вивчення таких макроскопічних явищ у квантових системах, як: надплинність, надпровідність,

надплинний кристал тощо — оскільки явище БЕК стоїть за ними.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Pethick C. J., Smith H. Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. 2 edition. Cambridge University Press, 2008.
2. Pitaevskii L. P., Stringari S. Bose-Einstein condensation. Oxford University Press, 2003.
3. Haugset T., Haugerud H., Ravndal F. Thermodynamics of a weakly interacting bose-einstein gas. *Annals of Physics*. 1998. Vol. 266, No. 1. P. 27 – 62.
4. Andersen J. O. Theory of the weakly interacting bose gas. *Rev. Mod. Phys.* 2004. Vol. 76. P. 599–639.
5. Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., Cornell E. A. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*. 1995. Vol. 269, No. 5221. P. 198–201.
6. Davis K. B., Mewes M. O., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M., Ketterle W. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 75. P. 3969–3973.
7. Bradley C. C., Sackett C. A., Tollett J. J., Hulet R. G. Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 75. P. 1687–1690.
8. Kawaguchi Y., Ueda M. Spinor bose-einstein condensates. *Physics Reports*. 2012. Vol. 520, No. 5. P. 253.
9. Stamper-Kurn D. M., Ueda M. Spinor bose gases: Symmetries, magnetism, and quantum dynamics. *Rev. Mod. Phys.* 2013. Vol. 85. P. 1191.
10. Ohmi T., Machida K. Bose-einstein condensation with internal degrees of freedom in alkali atom gases. *J. Phys. Soc. Jpn.* 1998. Vol. 67, No. 6. P. 1822.
11. Law C. K., Pu H., Bigelow N. P. Quantum spins mixing in spinor bose-einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. P. 5257–5261.
12. Ho T.-L. Spinor bose condensates in optical traps. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. P. 742.
13. Akhiezer A. I., Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. Theory of a weakly

- nonideal Bose gas in a magnetic field. *JETP*. 1998. Vol. 86, No. 3. P. 501.
14. Stamper-Kurn D. M., Andrews M. R., Chikkatur A. P., Inouye S., Miesner H.-J., Stenger J., Ketterle W. Optical confinement of a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 2027–2030.
 15. Bogolyubov N. N. On the theory of superfluidity. *J. Phys. USSR*. 1947. Vol. 11. P. 23–32.
 16. Gross E. P. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento*. 1961. Vol. 20, No. 3. P. 454–477.
 17. Pitaevskii L. P. Vortex lines in an imperfect bose gas. *Sov. Phys. JETP*. 1961. Vol. 13. P. 451. [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40** 646 (1961)].
 18. Dalfovo F., Giorgini S., Pitaevskii L. P., Stringari S. Theory of bose-einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.* 1999. Vol. 71. P. 463–512.
 19. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Yu. V. Theory of a spatially periodic bose condensate in the weakly nonideal bose gas model. *Theor. Math. Phys.* 2000. Vol. 125, No. 1. P. 1431–1453. [Teor. Matem. Fiz. **125**, 152 (2000)]; *Laser Phys.* **12**, 162 (2002).
 20. Peletminskii S. V., Sokolovskii A. I., Shchelokov V. S. Kinetics of a spatially inhomogeneous bose gas in the presence of a condensate. *Theor. Math. Phys.* 1977. Vol. 30, No. 1. P. 35–45. [Teor. Matem. Fiz. **30**, 57 (1977)].
 21. Kirkpatrick T. R., Dorfman J. R. Transport in a dilute but condensed nonideal bose gas: Kinetic equations. *J. Low Temp. Phys.* 1985. Vol. 58, No. 3. P. 301–331.
 22. Peletminskii S. V., Sokolovskii A. I., Shchelokov V. S. Hydrodynamics of a superfluid bose liquid with allowance for dissipative processes in a model with weak interaction. *Theor. Math. Phys.* 1978. Vol. 34, No. 1. P. 51–61. [Teor. Matem. Fiz. **34**, 81 (1978)].
 23. Lavrinenko N. M., Peletminskii S. V., Slyusarenko Yu. V. Kinetics of systems with crystal structure. *Sov. Low Temp. Phys.* 1983. Vol. 9. P. 412. [Fiz. Nizk. Temp **9**, 795 (1983)].
 24. Kirkpatrick T. R., Dorfman J. R. Transport theory for a weakly interacting

- condensed bose gas. *Phys. Rev. A*. 1983. Vol. 28. P. 2576–2579.
25. Krasil'nikov V. V., Peletminskii S. V. The theory of the superfluid Bose liquid. *Phys. Part. Nucl.* 1993. Vol. 24. P. 200. [Fiz. Elem. Chastits Atom. Yadra **24**, 463 (1993)].
 26. Akhiezer A. I., Krasil'nikov V. V., Peletminskii S. V., Yatsenko A. A. Research on superfluidity and superconductivity on the basis of the fermi liquid concept. *Phys. Rep.* 1994. Vol. 245, No. 1. P. 1 – 110.
 27. Bobrov V. B., Trigger S. A., Yurin I. M. Coexistence of “bogolons” and the single-particle excitation spectrum with a gap in the degenerate bose gas. *Phys. Lett. A*. 2010. Vol. 374, No. 19. P. 1938 – 1942.
 28. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Poluektov Yu. M. Role of single-particle and pair condensates in bose systems with arbitrary intensity of interaction. *Condens. Matter Phys.* 2013. Vol. 16, No. 1. P. 13603.
 29. Bobrov V. B., Trigger S. A., Schram P. P. Degenerate bose gas without anomalous averages. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. Vol. 774, No. 1. P. 012149.
 30. Ettouhami A. M. Re-examining bogoliubov's theory of an interacting bose gas. *Progr. Theor. Phys.* 2012. Vol. 127, No. 3. P. 453–533.
 31. Poluektov Yu. M. A simple model of bose–einstein condensation of interacting particles. *J. Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 186, No. 5. P. 347–362.
 32. Zagrebnov V. A., Bru J.-B. The bogoliubov model of weakly imperfect bose gas. *Phys. Rep.* 2001. Vol. 350, No. 5. P. 291 – 434.
 33. Tolmachev V. Theory of a Bose gas. Moscow University Press, Moscow, 1969. [in Russian].
 34. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Yu. V. Bose–einstein condensation of heteronuclear bound states formed in a fermi gas of two atomic species: a microscopic approach. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2017. Vol. 50, No. 14. P. 145301.
 35. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. SU(3) symmetry in theory of a weakly interacting gas of spin-1 atoms with Bose-Einstein condensate. *Phys. Lett. A*. 2020. Vol. 384, No. 31. P. 126798.

36. Haas F., Eliasson B. Time-dependent variational approach for Bose–Einstein condensates with nonlocal interaction. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2018. Vol. 51, No. 17. P. 175302.
37. Hazlett E. L., Zhang Y., Stites R. W., O’Hara K. M. Realization of a resonant fermi gas with a large effective range. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. P. 045304.
38. Caballero-Benítez S. F., Paredes R., Romero-Rochín V. The contact in the bcs–bec crossover for finite range interacting ultracold fermi gases. *Physics Letters A*. 2013. Vol. 377, No. 28. P. 1756 – 1759.
39. Simonucci S., Garberoglio G., Taioli S. Finite-range effects in dilute fermi gases at unitarity. *Phys. Rev. A*. 2011. Vol. 84. P. 043639.
40. Murata K., Saito H., Ueda M. Broken-axisymmetry phase of a spin-1 ferromagnetic Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*. 2007. Vol. 75. P. 013607.
41. Stenger J., Inouye S., Stamper-Kurn D. M., Miesner H.-J., Chikkatur A. P., Ketterle W. Spin domains in ground-state bose–einstein condensates. *Nature*. 1998. Vol. 396, No. 6709. P. 345–348.
42. Jacob D., Shao L., Corre V., Zibold T., De Sarlo L., Mimoun E. et al. Phase diagram of spin-1 antiferromagnetic Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*. 2012. Vol. 86. P. 061601(R).
43. Anquez M., Robbins B. A., Bharath H. M., Boguslawski M., Hoang T. M., Chapman M. S. Quantum Kibble-Zurek mechanism in a spin-1 Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 116. P. 155301.
44. **Bulakhov M. S.**, Peletminskii A. S., Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G. Thermodynamics of a weakly interacting bose gas above the transition temperature. *Physica Scripta*. 2021. Vol. 96, No. 4. P. 045401.
45. **Bulakhov M. S.**, Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G. Re-examining the quadratic approximation in theory of a weakly interacting bose gas with condensate: the role of nonlocal interaction potentials. *J. Phys. B*. 2018. Vol. 51, No. 20. P. 205302.

46. **Bulakhov M.**, Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. Broken-axisymmetry state and magnetic state diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2022. Vol. 55, No. 40. P. 20. Id/No 405003.
47. Akhiezer A. I., Peletminskii S. V. Methods of statistical physics. Pergamon Press, Oxford, 1981. Vol. 104 of *International Series in Natural Philosophy*.
48. Abrikosov A., Gorkov L., Dzyaloshinski I. Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics. Pergamon Press, 1975.
49. Bogolubov N. On some problems of the theory of superconductivity. *Physica*. 1960. Vol. 26. P. S1 – S16. [Preprint JINR D-781, Dubna, (1961)].
50. Ginibre J. On the asymptotic exactness of the bogoliubov approximation for many boson systems. *Commun. Math. Phys.* 1968. Vol. 8, No. 1. P. 26–51.
51. Lieb E. H., Seiringer R., Yngvason J. Justification of c -number substitutions in bosonic hamiltonians. *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 080401.
52. Sütő A. Equivalence of bose-einstein condensation and symmetry breaking. *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 080402.
53. Sütő A. Bose-einstein condensation and symmetry breaking. *Phys. Rev. A*. 2005. Vol. 71. P. 023602.
54. Lieb E. H., Seiringer R., Solovej J. P., Yngvason J. The mathematics of the Bose gas and its condensation. Birkhäuser, Basel, 1995.
55. Akhiezer A. I., Peletminskii S. V., Slyusarenko Yu. V. Theory of a weakly nonideal bose gas in a magnetic field. *J. Exp. Theor. Phys.* 1998. Vol. 86, No. 3. P. 501–506. [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **113**, 918 (1998)].
56. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Yu. V. On microscopic theory of spin-s bose–einstein condensate in a magnetic field. *Physica A*. 2007. Vol. 380. P. 202 – 210.
57. Peletminskii A. S., Peletminskii S. V. Principle of stationary action in the theory of superfluid systems with spontaneously broken translational symmetry. *Theor. Math. Phys.* 2009. Vol. 160, No. 2. P. 1146–1160. [Teor. Matem. Fiz. **160**, 333 (2009)].

58. Peletminskii A. S. Classical and relativistic dynamics of supersolids: variational principle. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2009. Vol. 42, No. 4. P. 045501. *Phys. Lett. A* **373**, 3369 (2009).
59. Hugenholtz N. M., Pines D. Ground-state energy and excitation spectrum of a system of interacting bosons. *Phys. Rev.* 1959. Vol. 116. P. 489–506.
60. Peierls R. Zur theorie des diamagnetismus von leitungselektronen. *Z. Phys.* 1933. Vol. 80, No. 11. P. 763–791.
61. Matsubara T. A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics. *Progress of Theoretical Physics.* 1955. Vol. 14, No. 4. P. 351–378.
62. Landau L. D., Lifshitz E. M. Statistical physics. Course of theoretical physics. 3rd ed edition. Oxford: Pergamon Press, 1980.
63. Biswas A. Effect of realistic interatomic interactions and two-body correlation on the heat capacity of a trapped BEC. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* 2009. Vol. 42, No. 21. P. 215302.
64. Goswami S., Das T. K., Biswas A. Behavior of heat capacity of an attractive bose-einstein condensate approaching collapse. *Phys. Rev. A.* 2011. Vol. 84. P. 053617.
65. Pathria R. K., Beale P. D. Statistical mechanics. Burlington: Elsevier, 2011.
66. Sotnikov A. G., Sereda K. V., Slyusarenko Y. V. Chemical potentials and thermodynamic characteristics of ideal Bose- and Fermi-gases in the region of quantum degeneracy. *Low Temp. Phys.* 2017. Vol. 43, No. 1. P. 144–151.
67. Mordini C., Trypogeorgos D., Farolfi A., Wolswijk L., Stringari S., Lamporesi G., Ferrari G. Measurement of the canonical equation of state of a weakly interacting 3d bose gas. *Phys. Rev. Lett.* 2020. Vol. 125. P. 150404.
68. Ota M., Giorgini S. Thermodynamics of dilute bose gases: Beyond mean-field theory for binary mixtures of bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A.* 2020. Vol. 102. P. 063303.
69. Steinhauer J., Ozeri R., Katz N., Davidson N. Excitation spectrum of a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88. P. 120407.
70. Davydov A. S. Quantum mechanics. 2 edition. Pergamon Press, 1976.

71. Jeszenszki P., Cherny A. Y., Brand J. *s*-wave scattering length of a gaussian potential. *Phys. Rev. A*. 2018. Vol. 97. P. 042708.
72. Rarita W., Present R. D. On the nuclear two-, three- and four-body problems. *Phys. Rev.* 1937. Vol. 51. P. 788–798.
73. Beliaev S. T. Energy-spectrum of a non-ideal bose gas. *Sov. Phys. JETP*. 1958. Vol. 34. P. 299. [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **34**, 433 (1958)].
74. Pines D. The many-body problem. Benjamin, New York, 1961.
75. Misawa S. On hugenholtz-pines' theory about ground state energy of interacting bosons. *Progr. Theor. Phys.* 1960. Vol. 24, No. 6. P. 1224–1230.
76. Gavoret J., Nozières P. Structure of the perturbation expansion for the bose liquid at zero temperature. *Ann. Phys.* 1964. Vol. 28, No. 3. P. 349 – 399.
77. Kita T. Self-consistent perturbation expansion for bose-einstein condensates satisfying goldstone's theorem and conservation laws. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 214502.
78. Kita T. Exact results on the two-particle green's function of a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 214513.
79. Kita T. Properties of nambu–goldstone bosons in a single-component bose–einstein condensate. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2011. Vol. 80, No. 8. P. 084606.
80. Tsutsui K., Kato Y., Kita T. Are quasiparticles and phonons identical in bose–einstein condensates?. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2016. Vol. 85, No. 12. P. 124004.
81. Bobrov V. B., Zagorodny A. G., Trigger S. A. Coulomb interaction potential and bose-einstein condensate. *Low Temp. Phys.* 2015. Vol. 41, No. 11. P. 901–908. [*Fiz. Nizk. Temp.* **41**, 760 (2015)].
82. Poluektov Yu. M. Absorption of electromagnetic field energy by the superfluid system of atoms with a dipole moment. *Low Temp. Phys.* 2014. Vol. 40, No. 5. P. 389–396. [*Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 503 (2014)].
83. Beauvois K., Dawidowski J., Fåk B., Godfrin H., Krotscheck E., Ollivier J., Sultan A. Microscopic dynamics of superfluid ^4He : A comprehensive study by inelastic neutron scattering. *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 184520.

84. **Bulakhov M. S.**, Peletminskii A. S., Peletminskii S. V., Slyusarenko Y. V. Magnetic phases and phase diagram of spin-1 condensate with quadrupole degrees of freedom. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2021. Vol. 54, No. 16. P. 165001.
85. Hamley C. D., Gerving C. S., Hoang T. M., Bookjans E. M., Chapman M. S. Spin-nematic squeezed vacuum in a quantum gas. *Nature Physics.* 2012. Vol. 8, No. 4. P. 305–308.
86. Niesen I., Corboz P. Ground-state study of the spin-1 bilinear-biquadratic heisenberg model on the triangular lattice using tensor networks. *Phys. Rev. B.* 2018. Vol. 97. P. 245146.
87. Gerbier F., Widera A., Fölling S., Mandel O., Bloch I. Resonant control of spin dynamics in ultracold quantum gases by microwave dressing. *Phys. Rev. A.* 2006. Vol. 73. P. 041602(R).
88. Leslie S. R., Guzman J., Vengalattore M., Sau J. D., Cohen M. L., Stamper-Kurn D. M. Amplification of fluctuations in a spinor bose-einstein condensate. *Phys. Rev. A.* 2009. Vol. 79. P. 043631.
89. Santos L., Fattori M., Stuhler J., Pfau T. Spinor condensates with a laser-induced quadratic Zeeman effect. *Phys. Rev. A.* 2007. Vol. 75. P. 053606.
90. Bogolubov N. N., Bogolubov Jr N. N. Introduction to quantum statistical mechanics. World Scientific Publishing Company, 2009.
91. Radzihovsky L., Weichman P. B., Park J. I. Superfluidity and phase transitions in a resonant bose gas. *Annals of Physics.* 2008. Vol. 323, No. 10. P. 2376–2451.
92. Aikawa K., Frisch A., Mark M., Baier S., Rietzler A., Grimm R., Ferlaino F. Bose-einstein condensation of erbium. *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. P. 210401.
93. Lu M., Burdick N. Q., Youn S. H., Lev B. L. Strongly dipolar bose-einstein condensate of dysprosium. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. P. 190401.
94. Pitaevskii L., Stringari S. Bose-Einstein condensation and superfluidity. Oxford University Press, 2016. Vol. 164.
95. Patscheider A., Chomaz L., Natale G., Petter D., Mark M. J., Baier S. et al.

- Determination of the scattering length of erbium atoms. *Phys. Rev. A*. 2022. Vol. 105. P. 063307.
96. Tang Y., Sykes A., Burdick N. Q., Bohn J. L., Lev B. L. *s*-wave scattering lengths of the strongly dipolar bosons ^{162}Dy and ^{164}Dy . *Phys. Rev. A*. 2015. Vol. 92. P. 022703.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації у періодичних наукових виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus або Web of Science:

1. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Re-examining the quadratic approximation in theory of a weakly interacting Bose gas with condensate: the role of nonlocal interaction potentials. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2018. Vol. 51. P. 205302. DOI: 10.1088/1361-6455/aae061 (Q2 (2018))

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

2. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. *Phys. Scr.* 2021. Vol. 96. P. 045401. DOI: 10.1088/1402-4896/abdcf5 (Q2 (2021))

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок.

3. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and magnetic state diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55 P. 405003. DOI: 10.1088/1751-8121/ac9098 (Q2

(2022))

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осью симетрії; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Quadratic approximation in theory of a weakly interacting bose gas with condensate: the role of non-local interaction potentials. *8th International Conference «Physics of Liquid Matter: Modern Problems»*: Abstracts (May 18 – 22, Kyiv, Ukraine, 2018, очна). Kyiv, 2018. P. 73.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

2. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Quadratic approximation in theory of a weakly interacting bose gas with condensate: the role of non-local interaction potentials. *IX International Conference for Professionals and Young Scientists «Low Temperature Physics»*: Conference Program and Book of Abstract (June 4 – 8, Kharkiv, Ukraine, 2018, очна). Kharkiv, 2018. P. 189.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних

нелокальних потенціалів взаємодії.

3. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Peletminskii S.V., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Role of nonlocal interaction in theory of a weakly non-ideal Bose gas with condensate. *The 5th Conference «Statistical Physics: Modern Trends and Applications»*: Program and Abstracts (July 3-6, Lviv, Ukraine, 2019, очна). Lviv, 2019. P. 95.

Особистий внесок здобувача: написав чисельний алгоритм в середовищі розробки для розв'язку системи рівнянь, що визначає хімічний потенціал і густину частинок конденсату, та провів наступний чисельний аналіз термодинамічних величин, які характеризують систему, для всіх модельних нелокальних потенціалів взаємодії.

4. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. *International Advanced Study Conference «Condensed Matter and Low Temperature Physics 2020»*: Conference Program and Book of Abstract (June 8 – 14, Kharkiv, Ukraine, 2020, заочна). Kharkiv, 2020. P. 169.

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих поправок.

5. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., Slyusarenko Yu.V., and Sotnikov A.G. Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature. 735. *WE-Heraeus-Seminar «Exploring Quantum Many-Body Physics with Ultracold Atoms and Molecules»*: Booklet with abstracts (December 14 – 18, Bad Honnef, Germany, 2020, заочна). Bad Honnef, 2020. P. 61.

Особистий внесок здобувача: вдосконалив алгоритм обчислення середніх за теоремою Віка-Блоха-Домінісіса, отримав поправки за взаємодією до всіх обговорюваних термодинамічних величин, розробив відповідний чисельний алгоритм в середовищі розробки і виконав наступний чисельний аналіз цих

поправок.

6. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and phase diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *Всеукраїнська конференція наукових дослідників: тези доповідей* (19 – 25 вересня, Львів, Україна, 2021, очна) Львів, 2021. 188 с.

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

7. **Bulakhov M.S.**, Peletminskii A.S., and Slyusarenko Yu.V. Broken-axisymmetry state and phase diagram of spin-1 condensate through the prism of quadrupole degrees of freedom. *III International Advanced Study «Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics»: Book of Abstract* (June 5 – 11, Kharkiv, Ukraine, 2023, заочна) Kharkiv, 2023. P. 186.

Особистий внесок здобувача: розв'язав аналітично рівняння, що визначає вектори магнітних станів і відповідні хімічні потенціали; знайшов і дослідив структуру спектру одночастинкових збуджень в стані з порушеною осьовою симетрією; встановив умови стабільності магнітних станів і рівняння сепаратрис; побудував діаграми магнітних станів для усіх трьох режимів стану з порушеною симетрією.

ПОДЯКИ

Хотілось би подякувати передусім моєму науковому керівнику – доктору фіз.-мат. наук, професору, академіку НАН України Слюсаренку Юрію Вікторовичу, завдяки зусиллям і настановам якого я зміг пройти шлях від дипломної роботи бакалавра до дисертаційної роботи доктора філософії. Дійсно, та зустріч із ним біля 313 аудиторії корпусу, тоді ще не інституту, а просто – фізико-технічного факультету визначила мене, вектор моєї наукової уваги.

Окремо хотів би подякувати моїм колегам і співавторам: Пелетминському Олександрю й Сотнікову Андрію – які завжди щедро ділилися досвідом і кутком на спільній ділянці наукової ниви.

Безумовно я вдячний моїм батькам: мамі, Сапоненко Олені, й бабусі, Сапоненко Станіславі – які зростили мене; вдячний друзям: Куриленку Вадиму, Костюковій Марині й Волковій Юлії – які підтримували й слухали мене.

Я висловлюю подяку співробітникам ННІ «Фізико-технічний факультет» ХНУ імені В.Н. Каразіна й інституту теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера ННЦ «ХФТІ» НАН України, що навчали та допомагали на всьому моєму шляху від студентства до аспірантури.

Однак жодного слова не з'явилося би на цих сторінках, якщо б не було жертви жінок і чоловіків, що боронили та, на жаль, продовжують боронити від росії нашу Україну, власне мою можливість творити науку. Не знаю, чи зможу я колись віддячити їм повною мірою, але буду намагатись робити все для цього.

Онлайн сервіс створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

ПРОТОКОЛ
створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

Дата та час: 16:39:32 29.09.2023

Назва файлу з підписом: Bulakhov_diss.pdf
Розмір файлу з підписом: 6.2 МБ

Перевірені файли:
Назва файлу без підпису: Bulakhov_diss.pdf
Розмір файлу без підпису: 5.9 МБ

Результат перевірки підпису: Підпис створено та перевірено успішно. Цілісність даних підтверджено

Підписувач: БУЛАХОВ МИКИТА СЕРГІЙОВИЧ
П.І.Б.: БУЛАХОВ МИКИТА СЕРГІЙОВИЧ
Країна: Україна
РНОКПП: 3512712171
Організація (установа): ФІЗИЧНА ОСОБА
Час підпису (підтверджено кваліфікованою позначкою часу для підпису від Надавача): 16:39:32 29.09.2023
Сертифікат виданий: АЦСК АТ КБ «ПРИВАТБАНК»
Серійний номер: 248197DDFAB977E504000000721D1301FF734D04
Алгоритм підпису: ДСТУ-4145
Тип підпису: Удосконалений
Тип контейнера: Підпис PDF-файла (PAdES)
Формат підпису: З позначкою часу від ЕП (PAdES-B-T)
Сертифікат: Кваліфікований