

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

К 289

P5-87-231

В.А.Касчиева, М.С.Касчиев, Л.И.Меньшиков\*,  
И.В.Пузынин

МОЛЕКУЛА ИЗ ДВУХ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ  
В ДВУМЕРНОМ БОЗЕ-ГАЗЕ

Основные уравнения

---

\* Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова,  
Москва

1987

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Известно <sup>/1/</sup> (см. также <sup>/2/</sup>), что при наличии бозе-конденсата  $\hat{\Psi}$ -оператор (далее для удобства обозначим его через  $\hat{\phi}$ ) атомов газа может быть представлен в виде

$$\hat{\phi}(\vec{r}) = \phi_0(\vec{r}) + \hat{\xi}(\vec{r}), \quad (1)$$

где  $\phi_0(\vec{r})$  — волновая функция (ВФ) бозе-конденсата (С-число),  $\hat{\xi}$  — оператор, описывающий малые квантовые флуктуации.

Возникает вопрос о нахождении волновой функции  $\phi_0$ , при которой достигается минимальное значение энергии газа. Из многочисленных экспериментов со сверхтекучим гелием известно, что минимальной энергии обычного трехмерного бозе-газа соответствует однородный бозе-конденсат  $\phi_0(\vec{r}) = \text{const}$ . В данной работе исследуется вопрос о виде  $\phi_0(\vec{r})$  для двумерного бозе-газа, примером которого может служить газ атомов, адсорбированных на поверхности вещества. Для простоты рассмотрен случай нулевой температуры ( $T = 0$ ), когда двумерный бозе-конденсат не разрушается тепловыми флуктуациями.

Основное предположение данной работы, основанное на физических соображениях, которые приводятся ниже, заключается в том, что в двумерном случае для некоторых зависимостей  $\phi_0(\vec{r}) \neq \text{const}$  предположение о малости квантовых флуктуаций не выполняется. Локальные неоднородности конденсата эквивалентны возникновению потенциальных ям для атомов газа (смотри формулу (32)). В двумерной потенциальной яме, в отличие от трехмерной, всегда имеется хотя бы одно связанное состояние <sup>/3/</sup>. Выигрыш в энергии, возникающий при переходе атома из конденсата в это связанное состояние, может скомпенсировать энергию, затрачиваемую на создание неоднородности конденсата. В этом случае однородный конденсат уже не будет соответствовать наименьшей энергии газа.

В данной работе обсуждаются основные типы неоднородностей конденсата двумерного бозе-газа и получено выражение для энергии неоднородностей с учетом квантовых поправок, то есть указанного выше выигрыша в энергии.

## ОСНОВНЫЕ ТИПЫ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ ДВУМЕРНОГО БОЗЕ-КОНДЕНСАТА

Гамильтониан двумерного бозе-газа имеет вид <sup>/4/</sup> ( $\hbar = 1$ ):

$$\hat{H} = \int d^2 r \left[ \hat{\phi}^\dagger \left( -\frac{\nabla^2}{2M} - \mu \right) \hat{\phi} + \frac{\lambda}{2} (\hat{\phi}^\dagger)^2 (\hat{\phi})^2 \right], \quad (2)$$

где  $M$  — масса атомов,

$$\lambda = \frac{4\pi}{M\Lambda_0}, \quad \Lambda_0 = \ln\left(\frac{1}{\pi a^2}\right), \quad (3)$$

$n$  ( $\text{см}^{-2}$ ) — плотность газа,  $a$  — радиус действия межатомного потенциала,

$$\mu = \lambda n_0 - \quad (4)$$

химический потенциал газа<sup>/1,2/</sup>,  $n_0$  — плотность конденсатных атомов. Формула (2) справедлива при условиях

$$M|u_0|a^2\Lambda_0 \gg 1, \quad \Lambda_0 \gg 1, \quad (5)$$

где  $u_0$  — характерная величина потенциала межатомного взаимодействия.

Отметим, что при условиях (5) константа  $\lambda$  не зависит от  $u_0$ , что является спецификой двумерного рассеяния медленных атомов<sup>/4/</sup>.

Формула (2) для гамильтониана вместе с коммутационным соотношением

$$[\hat{\phi}(\vec{r}), \hat{\phi}^+(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (6)$$

в принципе полностью определяют поведение квантового газа. Однако в таком виде задача остается неразрешимой, поэтому, следуя<sup>/1/</sup>, мы применим приближенные методы.

После подстановки (1) в (2) с точностью  $\sim \hat{\xi}^2$  получаем

$$\hat{H} = E_0(\phi_0) + \hat{H}_{\text{кв}}(\hat{\xi}), \quad (7)$$

$$E_0(\phi_0) = \int d^2r [\phi_0^* \left(-\frac{\nabla^2}{2M} - \mu\right) \phi_0 + \frac{\lambda}{2} |\phi_0|^4], \quad (8)$$

где  $\hat{H}_{\text{кв}}(\hat{\xi})$  — гамильтониан Боголюбова квантовых флуктуаций, квадратичный по  $\hat{\xi}$  (конкретный вид его в данной работе нам не понадобится). Линейные по  $\hat{\xi}$  члены выпадают из  $\hat{H}$ , если  $\phi_0(\vec{r})$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\nabla^2}{2M} \phi_0 + \lambda |\phi_0|^2 \phi_0 = \mu \phi_0, \quad (9)$$

которое является также условием минимума функционала

$$\delta E_0(\phi_0) / \delta \phi_0^*(\vec{r}) = 0.$$

Для случая однородного конденсата

$$\phi_0 = \sqrt{n_0} = \text{const} \quad (10)$$

по методу Боголюбова<sup>/1/</sup> получаем оценку для плотности  $n_{\text{H}}$  надконденсатных атомов, то есть атомов с нулевыми импульсами:

$$n_{\text{H}} \sim n_0 / \Lambda_0 \ll n_0. \quad (11)$$

Наиболее интересными из неоднородных решений уравнения (9) являются квантовые вихри Питаевского<sup>/2/</sup>. Представим  $\phi_0$  в виде

$$\phi_0(\vec{r}) = F(\vec{r}) \exp[i\Phi(\vec{r})], \quad (12)$$

где  $F$  и  $\Phi$  — действительные функции.

Из (9) и (12) получаем

$$-\frac{1}{2M} \nabla^2 F + \frac{1}{2M} (\nabla \Phi)^2 F + \lambda F^3 - \lambda n_0 F = 0, \quad (13)$$

$$\nabla(F^2 \nabla \Phi) = 0. \quad (14)$$

Для одиночного вихря

$$F(\vec{r}) = F_0(r), \quad \Phi = z\phi, \quad (15)$$

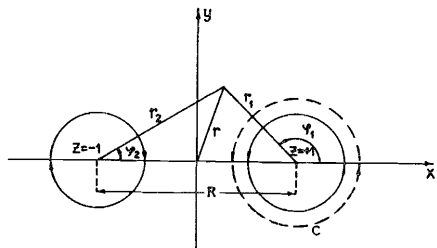
где  $r$  — расстояние от центра вихря,  $\phi$  — азимутальный угол,  $z = \pm 1, \pm 2, \dots$  — заряд вихря. Функция  $F_0(r)$  приведена в<sup>/2/</sup>. Вблизи центра вихря ( $r \rightarrow 0$ )

$$F_0(r) \sim r^{|z|} \rightarrow 0. \quad (16)$$

Энергия одиночного вихря расходится на больших расстояниях и поэтому зависит от размера газа  $L$ :

$$E_0 \approx \int d^2r \frac{F^2}{2M} (\nabla \Phi)^2 \approx \frac{\pi n_0 z^2}{M} \ln\left(\frac{L}{r_0}\right), \quad (17)$$

$$r_0 \sim \frac{1}{\sqrt{\lambda M n_0}} \sim \sqrt{\frac{\Lambda_0}{n_0}} \quad (18)$$



характерный размер вихря. Далее мы будем рассматривать вихри с  $z = \pm 1$ , энергия которых минимальна.

Энергия системы "молекулы" из двух вихрей с противоположными  $z$  оказывается конечной, поэтому такая неоднородность конденсата нуждается в детальном исследовании.

Покажем, что у вихрей, расположенных на конечном расстоянии друг от друга, существуют центры со свойствами (15) и (16), то есть что сердцевинки вихрей при их сближении не "размываются". На рисунке изображено качественно поле скоростей конденсата

$$\vec{v}_s = \nabla \Phi \quad (19)$$

для рассматриваемого случая.

Для контура  $C$  имеем

$$\oint_C d^2 \vec{r} \vec{v}_s = \Delta \Phi_c > 0, \quad (20)$$

так как направления  $\vec{v}_s$  и  $d\vec{r}$  во всех точках контура совпадают. Из требования однозначности  $\phi_0(\vec{r})$  при обходе контура получаем (см. (12))

$$\exp(i\Delta \Phi_c) = 1, \quad \Delta \Phi_c = 2\pi z = 2\pi \quad (z = 1). \quad (21)$$

По формуле Стокса

$$\oint_C d^2 \vec{r} \vec{v}_s = \int d\vec{s} \text{rot} \vec{v}_s, \quad d\vec{s} = d^2 r \hat{k}, \quad (22)$$

где  $\hat{k}$  — нормаль к плоскости рисунка, интегрирование по  $d^2 r$  проводится по области, охватываемой контуром  $C$ .

В несингулярных точках, где  $|\nabla \Phi| \neq \infty$ ,  $\text{rot} \vec{v}_s = 0$ , поэтому из (20)-(22) заключаем, что внутри контура существует сингулярная  $\vec{r}_0$ :

$$\text{rot} \vec{v}_s = 2\pi k \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (23)$$

в противном случае интеграл по поверхности обращается в нуль. Из (19) и (23) следует, что вблизи этой точки фаза изменяется по закону (15). При этом второй член в уравнении (13) становится сингулярным и сокращается с первым, если выполняется (16).

Рассмотрим сначала предельный случай

$$R \gg r_0, \quad (24)$$

где  $R$  — расстояние между центрами вихрей. Вдали от вихрей

$$r_{1,2} \gg r_0, \quad (25)$$

где  $r_{1,2}$  — расстояние от рассматриваемой точки до первого ( $z = +1$ ) и второго ( $z = -1$ ) вихря соответственно, уравнения (13) и (14) упрощаются:

$$F = \sqrt{n_0} (1 - \eta), \quad \eta = \frac{(\nabla \Phi)^2}{2\lambda M n_0} \ll 1. \quad (26)$$

Вблизи вихрей имеем

$$\Phi \approx \begin{cases} \phi_1 + \text{const}, & r_1 \ll R, \\ -\phi_2 + \text{const}, & r_2 \ll R, \end{cases} \quad (27)$$

где  $\phi_1$  и  $\phi_2$  — азимутальные углы (см. рисунок). Из уравнения (26) и граничного условия (27) заключаем, что в области (25)

$$\Phi \approx \phi_1 - \phi_2. \quad (28)$$

При  $r \rightarrow \infty$   $\Phi \rightarrow 0$ , поэтому расходимость в энергии (17) молекулы, характерная для одиночного вихря, отсутствует:

$$E_0(R \gg r_0) \approx \frac{2\pi n_0}{M} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right). \quad (29)$$

Отметим, что при уменьшении  $R$  энергия  $E_0$  уменьшается, поэтому возникает необходимость в расчете энергии молекулы при  $R \sim r_0$ .

### ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛЫ

Для вычисления энергии молекулы используем приближенный метод, аналогичный методу Хартри-Фока<sup>3/</sup>.

$\hat{\phi}$  — оператор атомов разложим по полному ортонормированному набору функций  $\phi_n(\vec{r})$ , включающему и функцию  $\phi_0(\vec{r})$ :

$$\hat{\phi}(\vec{r}) = \sum_n \hat{a}_n \phi_n(\vec{r}), \quad (30)$$

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}, \quad \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (31)$$

Из формул (6), (30) и (31) следует

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_n^+] = \delta_{nn}, \quad \hat{N} = \int d^2 r \hat{\phi}^+ \hat{\phi} = \sum_n \hat{N}_n, \quad \hat{N}_n = \hat{a}_n^+ \hat{a}_n,$$

то есть в базисе (31) операторы  $\hat{a}_n$  и  $\hat{N}_n$  имеют обычный смысл операторов уничтожения частицы и числа частиц в  $n$ -м состоянии.

Условия (31) автоматически выполняются, если функции удовлетворяют уравнению Шредингера:

$$-\frac{1}{2M} \nabla^2 \phi_n + \lambda |\phi_0|^2 \phi_n = E_n \phi_n, \quad (32)$$

которое при  $n = 0$  и

$$E_0 = \lambda n_0 \quad (33)$$

совпадает с (9). При этом

$$\phi_0 \rightarrow \sqrt{n_0} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (34)$$

в соответствии с (10), и с учетом неравенства

$$u(\vec{r}) = \lambda |\phi_0|^2 > 0$$

заключаем, что  $E_n > 0$ . При этом состояния с энергией  $0 < E_n < E_0$  являются дискретными:

$$\phi_n(\vec{r}) \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow \infty), \quad \int |\phi_n|^2 d^2 r = 1,$$

а состояния с  $E_n > E_0$  образуют непрерывный спектр, в котором находятся надконденсатные атомы.

В дальнейшем будем явным образом учитывать постоянство числа атомов на поверхности, поэтому в формуле (2) опускаем слагаемое с химическим потенциалом:

$$\hat{H} = \int d^2 r \left[ \hat{\phi}^+ \left( -\frac{\nabla^2}{2M} \right) \hat{\phi} + \frac{\lambda}{2} (\hat{\phi}^+)^2 (\hat{\phi})^2 \right]. \quad (35)$$

Согласно (31) волновая функция конденсата должна быть нормирована условием

$$\int d^2 r |\phi_0|^2 = 1,$$

откуда следует

$$\phi_0(\vec{r}) = (s - \beta_0)^{-1/2} \Psi_0(\vec{r}), \quad \Psi_0(\vec{r}) \rightarrow 1 \quad (r \rightarrow \infty), \quad (36)$$

где  $s$  — площадь поверхности, занимаемой газом,

$$\beta_0 = \int d^2 r (1 - |\Psi_0|^2).$$

Характерный размер молекулы составляет  $\sim r_0$ , поэтому из (11) и (18) заключаем, что над "ямой", образованной молекулой, находятся

$$N_H \sim n_H r_0^2 \sim 1$$

надконденсатных атомов и

$$N_K \sim n_0 r_0^2 \sim \Lambda_0 \quad (37)$$

конденсатных. Так как  $N_K \gg N_H$ , то вкладом надконденсатных атомов в энергию молекулы можно пренебречь и учитывать в дальнейшем только конденсатное ( $\phi_0$ ) и дискретные ( $\phi_n = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_s)$ ) состояния:

$$\hat{\phi}(\vec{r}) = \hat{a}_0 \phi_0 + \sum_n \hat{a}_n \phi_n, \quad (38)$$

здесь и далее индекс "n" относится только к дискретным состояниям. Таким образом, вместо полного гильбертова пространства состояний рассматриваем только его подпространство:

$$\bar{\Psi} = |N_0, N_1, N_2, \dots, N_s\rangle, \quad N_0 + \sum_{n=1}^s N_n = N, \quad (39)$$

где  $N = \text{const}$  — число атомов.

Предполагаем (см. (37)), что  $N_n \sim \Lambda_0 \gg 1$ , поэтому можно пренебречь флуктуациями чисел заполнения  $N_n$  и в качестве энергии молекулы брать средние значения по  $\bar{\Psi}$ :

$$E(\Psi_0; N_0, N_n) = \langle \bar{\Psi} | \hat{H} | \bar{\Psi} \rangle = T_0 n_0 + \sum_n T_n N_n + \frac{\lambda N_0^2}{2s} + \frac{\lambda}{2} n_0^2 \delta_0 + \frac{\lambda}{2} \sum_n B_{nn} N_n^2 + 2\lambda n_0 \sum_n B_n N_n + \lambda \sum_{n_1 \neq n_2} B_{n_1 n_2} N_{n_1} N_{n_2}, \quad (40)$$

$$T_0 = \int d^2 r \Psi_0^* \left( -\frac{\nabla^2}{2M} \right) \Psi_0, \quad T_n = \int d^2 r \phi_n^* \left( -\frac{\nabla^2}{2M} \right) \phi_n,$$

$$\delta_0 = \int d^2 r (1 - |\Psi_0|^2)^2, \quad B_n = \int d^2 r |\Psi_0|^2 |\phi_n|^2,$$

$$B_{nn} = \int d^2 r |\phi_n|^4, \quad B_{n_1 n_2} = \int d^2 r |\phi_{n_1}|^2 |\phi_{n_2}|^2,$$

здесь и далее мы отбросили слагаемые в  $E$ , исчезающие в пределе  $s \rightarrow \infty$ ,  $N_0/s = n_0 = \text{const}$ . Учтем постоянство числа атомов  $N$ , выразив  $N_0$  через  $N_n$  из (39):

$$E(\Psi_0, N_n) = \frac{\lambda N^2}{2s} + E_\mu(\Psi_0, N_n), \quad (41)$$

где первый член есть энергия газа с однородным конденсатом,

$$E_\mu = E_0(\Psi_0) + E_{\text{кв}}(\Psi_0, N_n) - \quad (42)$$

энергия неоднородности (молекулы),

$$E_0(\Psi_0) = T_0 n + \frac{\lambda n^2}{2} \delta_0 = \frac{\lambda n^2}{2} \gamma_0 - \quad (43)$$

классический вклад в энергию неоднородности,

$$\gamma_0 = \int d^2 r (1 - |\Psi_0|^4),$$

$$E_{\text{кв}}(\Psi_0, N_n) = - \sum_n f_n N_n + \frac{\lambda}{2} \sum_{n_1 n_2} c_{n_1 n_2} N_{n_1} N_{n_2} - \quad (44)$$

квантовомеханический выигрыш в энергии, возникающий при размещении атомов по связанным состояниям,

$$f_n = \lambda n - T_n - 2\lambda n B_n,$$

$$C_{nn'} = 2B_{nn'} - B_{nn'} \delta_{nn'}.$$

При выводе выражения для  $E_\mu$  мы положили  $n_0 = n$ , что вносит несущественную погрешность ( $\sim 1/\Lambda_0$ ) в  $E_\mu$ .

Введем безразмерные переменные и функции  $\vec{R}$ ,  $\Psi_n$  и  $X_n$ :

$$\vec{R} = (\lambda n M)^{1/2} \vec{r}, \quad \phi_n = (\lambda n M)^{-1/2} \Psi_n, \quad X_n = 4\pi N_n / \Lambda_0,$$

тогда получаем

$$E_\mu(\Psi_0, X_n) = \frac{n}{M} [\mathcal{E}_0(\Psi_0) + \mathcal{E}_{\text{кв}}(X_n, \Psi_0)], \quad (45)$$

$$\mathcal{E}_0(\Psi_0) = \frac{1}{4} \gamma_0, \quad \gamma_0 = \int d^2 R (1 - |\Psi_0|^4), \quad (46)$$

$$\mathcal{E}_{\text{кв}}(\Psi_0, X_n) = -4\pi \sum_n g_n X_n + 16\pi^2 \sum_n \beta_{nn} X_n^2 + 32\pi^2 \sum_{n \neq m} \beta_{nm} X_n X_m, \quad (47)$$

$$g_n = 1 - \epsilon_n - \beta_n,$$

$$\beta_n = \int d^2 R |\Psi_0|^2 |\Psi_n|^2, \quad \beta_{nm} = \int d^2 R |\Psi_n|^2 |\Psi_m|^2, \quad (48)$$

где функции  $\Psi_0(\vec{R})$  и  $\Psi_n(\vec{R})$  удовлетворяют уравнению

$$-\nabla^2 \Psi_n + |\Psi_0|^2 \Psi_n = \epsilon_n \Psi_n,$$

$$\epsilon_0 = 1, \quad 0 < \epsilon_n < 1,$$

$$\int d^2 R |\Psi_n|^2 = 1, \quad \Psi_0(\vec{R}) \rightarrow 1 (R \rightarrow \infty).$$

Энергия молекулы получается после минимизации  $E_\mu(\Psi_0, N_n)$  по заселенностям  $N_n$ :

$$E_\mu(\Psi_0) = \frac{n}{M} [\mathcal{E}_0(\Psi_0) + \mathcal{E}_{\text{кв}}(\Psi_0)], \quad (49)$$

$$\mathcal{E}_{\text{кв}}(\Psi_0) = \min [\mathcal{E}_{\text{кв}}(\Psi_0, X_n)] (X_n \geq 0), \quad (50)$$

формулы (45)-(50) были применены для расчета энергии молекулы из вихрей.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bogolubov N.N. *J. of Phys.*, 1947, v.11, p.23.
2. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Статистическая физика, ч.2. М.: Наука, 1978.*
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. М.: Наука, 1974.*
4. Попов В.Н. *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М.: Атомиздат, 1976.*

Рукопись поступила в издательский отдел  
9 апреля 1987 года.