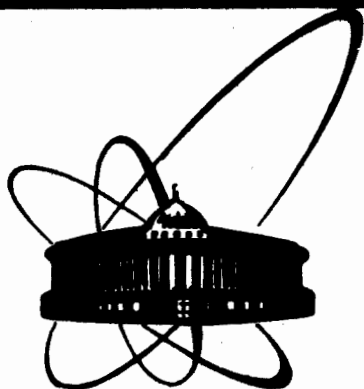


87-231



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

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

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Известно ^{/1/} (см. также ^{/2/}), 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 ϕ_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 ^{/3/}. 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 ^{/4/} ($\hbar = 1$):

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

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

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

химический потенциал газа^{/1,2/}, 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 λ не зависит от u_0 , что является спецификой двумерного рассеяния медленных атомов^{/4/}.

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^{/1/}, мы применим приближенные методы.

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

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

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

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^{/1/} получаем оценку для плотности n_H надконденсатных атомов, то есть атомов с нулевыми импульсами:

$$n_H \sim n_0 / \Lambda_0 \ll n_0. \quad (11)$$

Наиболее интересными из неоднородных решений уравнения (9) являются квантовые вихри Питаевского^{/2/}. Представим ϕ_0 в виде

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

где F и Φ — 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

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

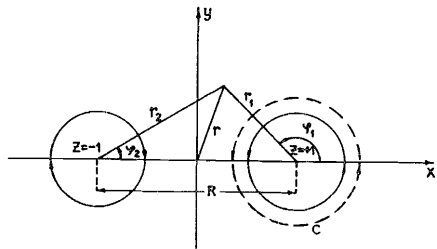
где r — расстояние от центра вихря, ϕ — азимутальный угол, $z = \pm 1, \pm 2, \dots$ — заряд вихря. Функция $F_0(r)$ приведена в^{/2/}. Вблизи центра вихря ($r \rightarrow 0$)

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

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 ϕ_1 и ϕ_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^{3/}.

ϕ — 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

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

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:

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

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

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

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

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

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:

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

Согласно (31) волновая функция конденсата должна быть нормирована на 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

$$N_n \sim n_n r_0^2 \sim 1$$

надконденсатных атомов и

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

конденсатных. Так как $N_k \gg N_n$, то вкладом надконденсатных атомов в энергию молекулы можно пренебречь и учитывать в дальнейшем только конденсатное (ϕ_0) и дискретные (ϕ_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_μ мы положили $n_0 \sim n$, что вносит несущественную погрешность ($\sim 1/\Lambda_0$) в E_μ .

Введем безразмерные переменные и функции \vec{R} , Ψ_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

$$E_\mu(\Psi_0, X_n) = \frac{n}{M} [\xi_0(\Psi_0) + \xi_{\text{кв}}(X_n, \Psi_0)], \quad (45)$$

$$\xi_0(\Psi_0) = \frac{1}{4} \gamma_0, \quad \gamma_0 = \int d^2 R (1 - |\Psi_0|^4), \quad (46)$$

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

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

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

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 :

$$E_\mu(\Psi_0) = \frac{n}{M} [\xi_0(\Psi_0) + \xi_{\text{кв}}(\Psi_0)], \quad (49)$$

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

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.

Касчиева В.А. и др.

P5-87-231

Молекула из двух квантовых вихрей в двумерном бозе-газе. Основные уравнения

В приближении Хартри-Фока получено выражение для энергии неоднородности двумерного бозе-газа с учетом квантовых поправок. Показано, что неоднородность бозе-конденсата эквивалентна возникновению потенциальной ямы, в которой в двумерном случае всегда имеются связанные состояния для атомов газа. Переход атомов из бозе-конденсата в эти состояния дает выигрыш в энергии, в чем и заключается физический смысл квантовых поправок. В качестве неоднородности рассмотрена молекула, составленная из двух квантовых вихрей с противоположными направлениями вращения сверхтекучей компоненты.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Kaschieva V.A. et al.

P5-87-231

Molecule Consisting of Two Quantum Vortexes in Two-Dimensional Bose-Gas. Principal Equations

In the Hartree-Fock approximation an expression for nonhomogeneity energy for a two-dimensional Bose gas is obtained taking into account the quantum corrections. It is shown that the nonhomogeneity of the Bose-condensate is equivalent to the existence of a potential well in which bound states for the gas atoms always exist (for the two-dimensional case). When atoms pass from the Bose-condensate to these states, there is an energy gain — the physical meaning of quantum corrections. As an example of nonhomogeneity, a molecule consisting of two quantum vortexes with opposite rotation of the superflowing component is considered.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987