

УДК 538.94

PACS 64.60.De, 67.85.Jk

ЕНЕРГІЯ ОСНОВНОГО СТАНУ І РОЗМИТТЯ БОЗЕ-КОНДЕНСАТУ В БОЗЕ-ГАЗІ З ДАЛЕКОДІЮЧИМИ СИЛАМИ

О. Григорчак, В. Пастухов

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна
e-mail: HrOrest@gmail.com*

У роботі розглянуто бозе-газ із далекодіючим потенціалом міжчастинкової взаємодії зі степеневою поведінкою коефіцієнта Фур'є енергії парної міжчастинкової взаємодії $\nu_q \sim 1/q^s$, $0.5 < s < 3$. В наближенні Боголюбова знайдено залежність енергії основного стану бозе-системи і розмиття бозе-конденсату від параметра s . У частковому випадку кулонівського потенціалу ($s = 2$) знайдені значення енергії основного стану і розмиття бозе-конденсату відтворюють вже відомі теоретичні результати. Чисельні розрахунки згаданих величин проведено із наперед заданою точністю.

Ключові слова: далекодіючий потенціал, енергія основного стану, бозе-газ, бозе-конденсат.

Вступ

Використання модельних потенціалів для дослідження поведінки взаємодіючих систем є важливим інструментом вивчення природи явищ і процесів у реальних системах. Напевно, найдавнішою і найпростішою модельною системою у статистичній фізиці є модель ідеального газу. Величезна кількість робіт присвячена також моделі твердих сфер. Твердосферний потенціал належить до класу близькодіючих потенціалів. У цій статті ми зосередимо свою увагу на моделі з далекодіючим потенціалом зі степеневою поведінкою його Фур'є компоненти. Перші роботи, в яких вивчалися бозе-системи із далекодіючими силами — це роботи Фолді [1, 2]. У них в RPA наближенні було досліджено основний стан зарядженого бозе-газу в компенсуючому полі. При цьому для теоретичного опису, зрозуміло, що використовувався кулонівський модельний потенціал: $U(r) \sim 1/r$. Згодом Бракнер [3] для такого ж модельного потенціалу, використовуючи діаграмну техніку, з точністю до другого порядку у розкладі за густиною, обчислив енергію основного стану густого газу заряджених бозонів. Кулонівський потенціал, але вже у двовимірному просторі: $U(r) \sim \ln(r/L)$ був застосований для вивчення бозе-системи у роботі [4]; показано, що в основному

стані двовимірної рідини заряджених бозонів не виникає бозе-конденсату, хоча одночастинкова матриця густини демонструє алгебраїчний позадіагональний порядок. В наступній роботі [5] ці результати були відтворені, а розрахунок матриці густини поширений на скінченні температури. Було також знайдено, що плазмонна щільна у одночастинковому спектрі у довгохвильовій області зменшується з ростом температури і зникає при критичній температурі разом із зникненням надплинності. У роботі [6] також вивчався газ заряджених бозонів з логарифмічною взаємодією, і для цієї системи було знайдено структурний фактор, енергію основного стану і спектр колективних збуджень.

Кулонівський потенціал — це лише частковий випадок далекодіючого потенціалу зі степеневу поведінкою коефіцієнта Фур'є енергії парної міжчастинкової взаємодії. Загалом його можна записати так:

$$\nu_q = \frac{\lambda_s}{q^s}, \quad s > 0. \quad (1)$$

При $s = 2$ маємо кулонівський потенціал, а при $s = 0$ — потенціал твердих сфер. У тривимірному прямому просторі він набуде вигляду:

$$U(r) = \frac{\lambda_s}{2^s \pi^{\frac{3}{2}}} \frac{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}s)}{\Gamma(\frac{1}{2}s)} \frac{1}{r^{3-s}}. \quad (2)$$

Потенціал такого вигляду у ренормгруповому підході був використаний у роботі [7] для якісного опису основного стану бозе-системи у просторі з довільною вимірністю d у границі $p = -1$, причому при $d = 1$ отримано результат, який узгоджується з точним розв'язком. В роботі [8] для бозе-газу з таким потенціалом було розраховано критичну температуру як функцію параметра s , а також проаналізовано параметри спектра колективних збуджень та отримано довгохвильову асимптотику структурного фактора системи в надкритичній області.

Метою даної роботи є розглянути бозе-систему об'ємом V при температурі $T = 0$, яка складається з N безспінових частинок, коефіцієнт енергії парної міжчастинкової взаємодії між якими має вигляд (1) і знайти залежність енергії основного стану такої системи і величину розмиття бозе-конденсату від параметра s в наближенні Боголюбова. Для цього ми користуватимемося добре відомими формулами [9]:

$$E_B = -\frac{1}{4} \sum_{q \neq 0} \varepsilon_q (\alpha_q - 1)^2, \quad (3)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{q \neq 0} \frac{(\alpha_q - 1)^2}{4\alpha_q}, \quad (4)$$

де

$$\alpha_q = \sqrt{1 + \frac{\rho \nu_q}{\varepsilon_q}}, \quad \varepsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}. \quad (5)$$

У виразі для енергії ми знехтували доданком $\frac{N(N-1)}{2V}\nu_0$, оскільки $\nu_0 = 0$. Ця умова є повністю аналогічною до тієї, яка є в моделі зарядженого бозе-газу в компенсуючому полі (там вона впливає із електронейтральності цілої системи і забезпечує її стійкість в термодинамічній границі).

З умови збіжності сум у наведених виразах (3) і (4) ми отримаємо нижню і верхню оцінку для параметра s , а саме: $0.5 < s < 3$ (це буде показано далі в роботі).

Розрахунок енергії основного стану

У формулі для енергії основного стану (3) перейдемо від підсумовування до інтегрування і отримаємо:

$$E_B/N = -\frac{\hbar^2}{16\pi^2 \rho m} \int_0^\infty q^4 \left(\sqrt{1 + \frac{2m\rho}{\hbar^2} \frac{\lambda_s}{q^{s+2}}} - 1 \right)^2 dq. \quad (6)$$

Зробимо заміну змінних $q = \left(\frac{2m\rho\lambda_s}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{s+2}} \xi$. Тоді

$$E_B/N = -\frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{16m\pi^2} \gamma \int_0^\infty \xi^4 \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1 \right)^2 d\xi, \quad (7)$$

де $\gamma = \rho^{-\frac{5}{3}} \left(\frac{2m\rho\lambda_s}{\hbar^2} \right)^{\frac{5}{s+2}}$ — параметр взаємодії.

Для чисельного аналізу отриманого виразу запишемо його так:

$$E_B/N = -\frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{16m\pi^2} \gamma \left(\int_0^1 \xi^4 \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1 \right)^2 d\xi + \int_1^\infty \xi^4 \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1 \right)^2 d\xi \right). \quad (8)$$

У першому інтегралі віднімемо від підінтегральної функції декілька членів розкладу в околі нуля цієї ж функції, а в другому зробимо те саме, лише розклад проведемо в околі безмежності. В результаті отримаємо:

$$\begin{aligned} E_B/N &= -\frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{16m\pi^2} \gamma I_1(s) = \\ &= -\frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{16m\pi^2} \gamma \left(\int_0^1 \xi^4 \left\{ \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1 \right)^2 - \frac{1}{\xi^{s+2}} + \frac{2}{\xi^{s/2+1}} - 2 \right\} d\xi + \right. \\ &+ \frac{1}{3-s} - \frac{2}{4-s/2} + \frac{2}{5} + \\ &+ \int_1^\infty \xi^4 \left\{ \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4\xi^{2s+4}} + \frac{1}{8\xi^{3s+6}} - \frac{5}{64\xi^{4s+8}} \right\} d\xi + \\ &+ \left. \frac{1}{4(2s-1)} - \frac{1}{8(3s+1)} + \frac{5}{64(4s+3)} \right). \quad (9) \end{aligned}$$

Завдяки зробленим перетворенням отримані інтеграли є значно швидше збіжними в порівнянні з вихідними, а це дає змогу легше їх чисельно порахувати. Крім того, головні члени розкладу в околі нуля і безмежності дають нам обмеження на параметр s : $0.5 < s < 3$. Поза цими значеннями s один з інтегралів буде розбіжним.

Розмиття бозе-конденсату

Подібно як і у попередньому випадку, у формулі (4) (для частки бозе-конденсату) перейдемо від підсумовування до інтегрування, зробивши таку саму заміну змінних. Тоді отримаємо:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\gamma^{\frac{3}{5}}}{8\pi^2} \int_0^\infty \xi^2 \frac{\left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1\right)^2}{\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}}} d\xi. \quad (10)$$

І знову розбиття області інтегрування на дві підобласті і проведення відповідних перетворень у кожній з них веде до значно швидшої збіжності інтегралів. Отож після перетворення будемо мати:

$$\begin{aligned} \frac{N_0}{N} = 1 - \frac{\gamma^{\frac{3}{5}}}{8\pi^2} I_2(s) = 1 - \frac{\gamma^{\frac{3}{5}}}{8\pi^2} & \left(\int_0^1 \xi^2 \left\{ \frac{\left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1\right)^2}{\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}}} - \frac{1}{\xi^{s/2+1}} + 2 \right\} d\xi + \right. \\ & + \frac{1}{(2-s/2)} - \frac{2}{3} + \int_0^\infty \xi^2 \left\{ \frac{\left(\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}} - 1\right)^2}{\sqrt{1 + \frac{1}{\xi^{s+2}}}} - \frac{1}{4\xi^{2s+4}} + \frac{1}{4\xi^{3s+6}} - \frac{15}{64\xi^{4s+8}} \right\} d\xi + \\ & \left. + \frac{1}{4(2s+1)} - \frac{1}{4(3s+3)} + \frac{15}{64(4s+5)} \right). \quad (11) \end{aligned}$$

Головні члени розкладу в околі нуля і безмежності дають нам обмеження на параметр s . В цьому разі маємо: $-0.5 < s < 4$. Як бачимо, верхнє і нижнє обмеження є слабшими, ніж у попередньому випадку.

Ми будемо проводити обчислення в області, де як енергія основного стану, так і розмиття бозе-конденсату скінченні, тобто в області: $0.5 < s < 3$.

Чисельні розрахунки

Чисельне інтегрування величин $I_1(s)$ і $I_2(s)$ у виразах для енергії основного стану (9) і частки бозе-конденсату (11) будемо проводити найпростішим методом: методом прямокутників. Задамося тепер допустимою абсолютною похибкою результату: $\Delta < 0.001$. У нашому випадку є дві причини похибки чисельних розрахунків: 1) обрізання верхньої межі інтегрування; 2) скінченна кількість точок розбиття проміжку при чисельному інтегруванні. Завдання полягає в тому, щоб, виходячи з заданої точності Δ , визначити верхню межу Ξ і крок інтегрування h .

Розглянемо формулу (9). У другому інтегралі підінтегральна функція в околі безмежності поводить як $-\frac{7}{128}q^{-5s-6}$. В результаті, похибку, яка походить від обрізання верхньої межі, можна оцінити, беручи до уваги, що модуль підінтегральної функції всюди менший за $\frac{7}{128}q^{-5s-6}$, так:

$$\frac{7}{128(5s+6)\Xi^{5s+6}} < \Delta_1. \quad (12)$$

Тепер запишемо похибку, яка є наслідком скінченності кроку інтегрування. Загальна формула для абсолютної похибки при інтегуванні методом прямокутників така:

$$\Delta(f) \leq h \frac{b-a}{2} \max_{[a,b]} |f'(x)|, \quad (13)$$

де a і b — відповідно верхня і нижня межа інтегрування, h — крок інтегрування, $f(x)$ — підінтегральна функція.

Модуль похідної підінтегральної функції I інтеграла (у виразі для енергії основного стану) — це монотонно зростаюча функція. Максимум на проміжку $[0,1]$: $|f'(1)| = 3.7530$. Похідна підінтегральної функції II інтеграла — це додатна монотонно спадна функція. Максимум на проміжку $[1,\infty]$: $|f'(1)| = 0.3799$. Тому ми легко можемо оцінити Δ_2 і Δ_3 на проміжках $[0,1]$ і $[1,\infty]$ відповідно. Із заключної умови $\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 < \Delta$ знаходимо умови на межу обрізання Ξ і крок інтегрування h . Ці значення будуть функціями s . Результат чисельних розрахунків можна представити у вигляді графіка (Рис. 1).

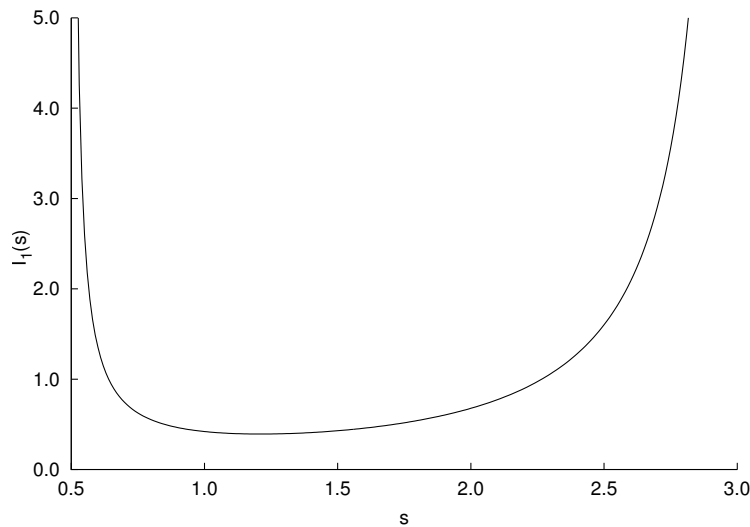


Рис. 1. Залежність величини $I_1(s)$ від параметра s .

У випадку розрахунку частки бозе-конденсату маємо, що у другому інтегралі формули (11) модуль підінтегральної функції всюди менший за $\frac{7}{32}q^{-5s-8}$. Похідна підінтегральної функції першого інтегралу у формулі (11) — це додатна монотонно

спадна функція. Максимальне значення модуля функції похідної на проміжку $[0,1]$: $|f'(1)| = 3.3739$. Похідна підінтегральної функції другого інтегралу у формулі (11) — це додатна спадна функція. Максимальне значення модуля функції похідної на проміжку $[1,\infty]$: $|f'(1)| = 1.5614$. Виходячи з цих даних, ми знаходимо умови на верхню межу обрізання і крок інтегрування. Результати чисельних розрахунків наведені нижче (Рис.2).

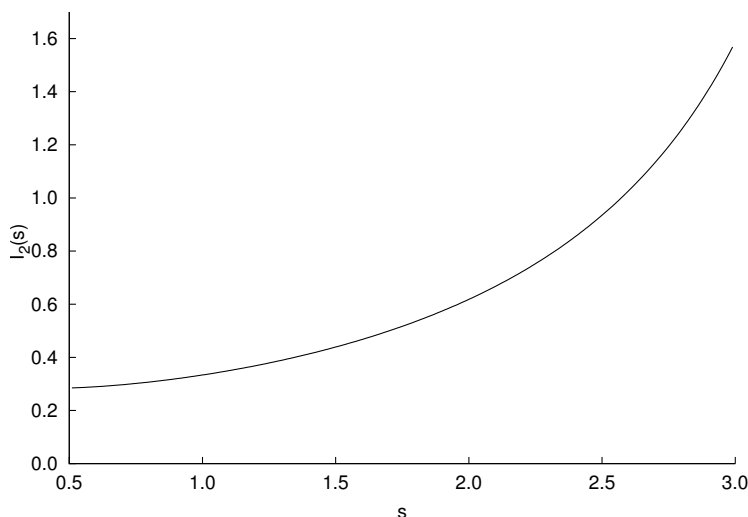


Рис. 2. Залежність величини $I_2(s)$ від параметра s .

Висновки

У роботі в наближенні Боголюбова були розраховані енергія основного стану і розмиття взаємодією бозе-конденсату для далекодіючого модельного потенціалу зі степеневою поведінкою коефіцієнта Фур'є енергії парної міжчастинкової взаємодії: $\nu_q \sim 1/q^s$. Знайдено область значень s ($0.5 < s < 3$), для яких такий розрахунок має сенс. Результати представлені графічно у вигляді залежності згаданих величин від параметра s . У частковому випадку кулонівського потенціалу ($s = 0$) знайдені значення енергії основного стану і розмиття бозе-конденсату відтворюють вже відомі теоретичні результати. Чисельні розрахунки були проведені із наперед заданою точністю (абсолютна похибка результату не перевищує 0.001).

Список використаної літератури

1. *Foldy L.L.* Charged Boson Gas / L.L. Foldy //Phys. Rev. – 1961.– V. 124. – P. 649–651.
2. *Foldy L.L.* Charged Boson Gas (Errata) / L.L. Foldy //Phys. Rev. – 1962.– V. 125. – P. 2208.

3. *K.A. Brueckner* Charged Boson Gas at High Density/ *K.A. Brueckner* // *Phys. Rev.* – 1967. – V. 156. – P. 204–206.
4. *Magro W.R.* Ground-State Properties of the Two-Dimensional Bose Coulomb Liquid/ *W. R. Magro, D. M. Ceperley* // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 73. – P. 826–829.
5. *Minguzzi A.* Single-particle density matrix and superfluidity in the two-dimensional Bose Coulomb fluid / *A. Minguzzi, B. Davoudi, M. P. Tosi* // *Phys. Rev. B* – 2002. – V. 66. – P. 054538(7).
6. *Davoudi B.* Ground-state properties of the two-dimensional charged Bose gas/ *B. Davoudi, E. Strepparola, B. Tanatar, and M. P. Tosi*// *Phys. Rev. B* – 2001. – V. 63. – P. 104505(6).
7. *Kolomeisky E. B.* Ground-state properties of Bose liquids with long-range interactions in d spatial dimensions/ *E. B. Kolomeisky, J.P. Straley* // *Phys. Rev. B* – 1992. – V. 46. – P. 13942–13950.
8. *Пастухов В. С.* Розрахунок критичної температури бозе-газу з далекодійними силами/ *В. С. Пастухов*// *Укр. фіз. журн.* – 2012. – Т. 57. – С. 54–62.
9. *Вакарчук І. О.* Вступ до проблем багатьох тіл / *І. О. Вакарчук.* – Л. : ЛНУ імені Івана Франка, 1999. – 220 с.
Вакарчук І. О. Квантова механіка / *І. О. Вакарчук.* – Л. : ЛНУ імені Івана Франка, 1999. – 220 с.

Стаття надійшла до редакції 09.12.2016

прийнята до друку 27.06.2017

GROUND STATE ENERGY AND BOSE CONDENSATE DEPLETION IN BOSE GAS WITH LONG-RANGE FORCES

O. Hryhorchak, V. Pastukhov

*Ivan Franko National University of Lviv,
12, Drahomanov Str., Lviv, UA-79005, Ukraine
e-mail: HrOrest@gmail.com*

Bose gas with the long-range interparticle interaction potential which has a power behavior of the Fourier coefficient of the pair interparticle interaction energy $\nu_q \sim 1/q^s$, $0.5 < s < 3$ is considered in this paper. The dependence of the ground state energy of the Bose system and the depletion of the Bose condensate on the parameter s is found in the Bogoliubov approach. In the particular case of the Coulomb potential ($s = 2$) the gained values of the ground state energy and the depletion of a Bose condensate coincide with the well-known theoretical results. The numerical calculations of these values are performed with the predetermined accuracy.

Key words: long-range potential, ground state energy, Bose gas, Bose condensate.

**ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И РАЗМЫТИЕ
БОЗЕ-КОНДЕНСАТА В БОЗЕ-ГАЗЕ С
ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИМИ СИЛАМИ**

О. Григорчак, В. Пастухов

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко
ул. Драгоманова, 12, Львов, 79005, Украина
e-mail: HrOrest@gmail.com*

В работе рассмотрен бозе-газ с дальнедействующим потенциалом межчастичного взаимодействия со степенным поведением коэффициента Фурье энергии парного межчастичного взаимодействия $\nu_q \sim 1/q^s$, $0.5 < s < 3$. В приближении Боголюбова найдена зависимость энергии основного состояния бозе-системы и размытие бозе-конденсата от параметра s . В частном случае кулоновского потенциала ($s = 2$) найденные значения энергии основного состояния и размытия бозе-конденсата воспроизводят уже известные теоретические результаты. Численные расчеты упомянутых величин проведено с заранее заданной точностью.

Ключевые слова: дальнедействующий потенциал, энергия основного состояния, бозе-газ, бозе-конденсат