

Санкт-Петербургский государственный университет

Ульяновская ул., д.3

Кафедра Статистической физики



**ПРОФИЛЬ ВОЗЕ-КОНДЕНСАТА
В ОГРАНИЧЕННОЙ СИСТЕМЕ, В \mathbb{R}^3**

Бакалаврская работа студента
дневного отделения

Молоткова Юрия Георгиевича

Научный руководитель:

д.ф.-м. н., проф. Налимов М.Ю.

Рецензент:

к.ф.-м.н. Кириенко Ю.В

Санкт-Петербург

2015

Оглавление

1	Введение	3
2	Вычисление профиля бозе-конденсата	6
2.1	Уравнение на профиль	6
2.2	Беспетлевое приближение	13
2.3	Пропагатор	18
3	Теория возмущений	21
4	Заключение.	24
	Список литературы	25
A	Профиль конденсата.	26
B	Коэффициенты в пропагаторе.	27

Обозначения

S — замкнутый шар в \mathbb{R}^3

∂S — граница S

$$\beta = \frac{1}{T}$$

$$dx = dt dx dy dz$$

$\Psi(\vec{x}, \tau), \Psi^+(\vec{x}, \tau)$ — обозначаются как $\Psi(x), \Psi^+(x)$, это касается и всех остальных величин. При необходимости, действия с отдельными компонентами оговариваются отдельно.

$$\hbar = k = 1$$

Глава 1

Введение

Как известно, теория критических явлений является наиболее эффективным средством описания сильно неравновесных явлений, к числу которых, несомненно, принадлежат фазовые переходы I и II рода или, как сейчас принято говорить, дискретные и непрерывные фазовые переходы. Типичным примером подобного непрерывного перехода является конденсация Бозе-Эйнштейна. Самое базовое изложение этого явления исходит из модели идеального газа, состоящего из бозе-частиц. Рассматривается одночастичный гамильтониан следующего вида:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \mu. \quad (1.1)$$

Далее, в любом курсе статистической физики показывается, что уравнение состояния идеального Бозе-газа выглядит следующим образом:

$$N = A \cdot VT^{\frac{3}{2}} \zeta_{\frac{3}{2}}(a) \quad (1.2)$$

где $a = e^{-\frac{\mu}{T}}$, $A = \frac{gm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}$, $g = 2S + 1$, S — спин. Из него видно, что постепенно понижая температуру системы, рано или поздно получим, что дзета функция до-растет (вследствии возрастания химического потенциала, он обязан возрасти, ибо иначе при понижении температуры a станет больше единицы.) до $\zeta_{\frac{3}{2}}(1)$, однако, так как вывод (1.2) делался в условии $a \leq 1$, то уравнение перестает выполняться при

$T < T_c$. T_c — критическая температура, определяемая в модели идеального газа как:

$$T_c = \left(\frac{n}{\zeta_{\frac{3}{2}}(1)} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{2\pi m}$$

В дальнейшем, на этом месте разные авторы поступают по разному: Ландау, к примеру, говорит о том, что нулевое состояние бозе-газа нужно рассматривать отдельно, в БКФ меняют плотность состояний, добавляя к ней дельта-функцию от импульса. Однако, легко видеть, что это не более чем попытка руками исправить полученное противоречие. На самом деле, проблема решается только в рамках добавления взаимодействия, так как при низких температурах, предположение о том, что бозоны не взаимодействуют, как минимум абсурдно. На этом месте можно идти двумя путями: первый рассмотрение науки со взаимодействием в формализме обобщенных-операторнозначных функций с правильными коммутационными соотношениями, второй — формализм функционального интеграла (интеграла по путям). Мы будем придерживаться второго пути, за счет тех преимуществ, которые он дает (в функциональном интеграле нет нужды в заботе об коммутационных соотношениях).

В этот момент, наша точная модель подменяется флуктуационной моделью с бозонными полями $\psi(x)$, $\psi^+(x)$. Математическая возможность такой подмены не доказана даже для самых простых моделей и до сих пор обсуждается. В этой работе, этого, естественно мы не касаемся. Однако, как показал опыт, сама подмена и рассмотрение флуктуационной модели для описания поведения вблизи критической точки приводит к плодотворным результатам, которые подтверждаются экспериментами. Итак, гамильтониан нашей модели, именуемой моделью $\psi\psi^+\psi\psi^+$, есть:

$$H = \int_0^\beta d\tau \int dx \psi^+(x) (\partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu) \psi(x) + \int dx' \psi^+(x) \psi(x) V(x-x') \psi^+(x') \psi(x')$$

Работаем мы в формализме температурных функций Грина. В нем, H называют “действием“ и обозначают буквой S , но это всего лишь название и никакого смысла за ним не кроется. Также используется стандартное приближение „твердых сфер“, а именно, говорится, что $V(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{\lambda}{2} \delta(\vec{x} - \vec{x}')$ (Пренебрегаем релятивистскими эф-

фактами). Обычно все фазовые переходы рассматриваются в термодинамическом предельном переходе, поэтому, можно получить (мы получаем аналогичное уравнение в (2.19)):

$$n = n_{norm} + |\alpha|^2. \quad (1.3)$$

Тут n_{norm} — нормальная плотность газа (число несконденсированных частиц), а $|\alpha|^2$ — возникающий бозе-конденсат (число сконденсированных частиц).

Основным объектом вычисления является профиль Бозе-конденсата α , который определен в (2.10). Однако сам по себе профиль физического смысла не имеет, но физический смысл есть у Бозе-конденсата, определяемого как $\frac{1}{V\beta} \int d\vec{x} d\tau \alpha \alpha^\dagger$ (2.19).

Основная задача данной работы, попытка рассмотрения фазовых переходов (на примере бозе-конденсации) в ограниченной системе. Широко известно, что такие переходы невозможны в конечных системах, однако все упирается в то, что мы называем фазовым переходом. Мы говорим, что произошел фазовый переход второго рода, если химический потенциал сменил знак (в нашем случае, это эквивалентно появлению конденсата). Само явление Бозе-конденсации важно в том ключе, что именно через него возможно динамическое описание свертекучей жидкости.

Чтобы конкретизировать вид нашей системы, ибо теперь это важно, и граничные условия, для определенности будем рассматривать замкнутый шар, как одно из самых простых трехмерных многообразий. В данной работе была сделана попытка описания фазового перехода в конечной системе, описать возникающую теорию возмущения, исследовать ее критические индексы.

Глава 2

Вычисление профиля бозе-конденсата

2.1 Уравнение на профиль

Отправным пунктом нашего исследования будет служить формализм тепловых функций Грина. В нём, статистическая сумма, равная следу статистического оператора, определяется следующим образом [1]:

$$\Sigma = C \int D[\psi]D[\psi^+]e^{-S_\beta(\psi,\psi^+)} \quad (2.1)$$

В этом выражении, C — нормировочная константа, введенная таким образом, чтобы в отсутствие взаимодействия, результат (2.1) совпадал со статистической суммой идеального бозе-газа, $\int D[\psi]D[\psi^+]$ — операция континуального интегрирования по полям ψ , ψ^+ , $S_\beta(\psi,\psi^+)$ — температурное действие, определяемое выражением:

$$S_\beta = \int_0^\beta d\tau \left(\int_S dx \psi^+(x)K\psi(x) + \frac{\lambda}{2} \psi^+(x)\psi(x)\psi^+(x)\psi(x) \right), \quad (2.2)$$

где $K = \partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu$. Для того, чтобы это выражение соответствовало статистическому оператору, необходимо наложить дополнительное условие на поле ψ , а именно, интегрирование в (2.1) ведется в функциональном пространстве, по функциям, пе-

риодическим по времени, другими словами, должно быть выполнено условие:

$$\psi(\vec{x}, \tau = 0) = \psi(\vec{x}, \tau = \beta)$$

Так как константа C , как правило, не является важной, из-за того ее вклад в плотность можно убрать, наложим на наше поле ψ еще одно условие, а именно, что $(\psi^+(\vec{x}, \tau))^+ = \psi(\vec{x}, -\tau)$. Вся термодинамика описывается соответствующими потенциалами. Рассмотрим большой термодинамический потенциал Ω . Статистическая сумма и Ω связаны известным соотношением $\Omega = -T \ln \Sigma = -T(\ln C + \ln \int D[\psi]D[\psi^+]e^{-S_\beta(\psi, \psi^+)})$. Отсюда мы можем получить плотность числа частиц:

$$n = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V} = \frac{T}{V} \frac{\int D[\psi]D[\psi^+] \int dx \psi^+ \psi e^{-S_\beta(\psi, \psi^+)}}{\int D[\psi]D[\psi^+] e^{-S_\beta(\psi, \psi^+)}} = \frac{kT}{V} \int dx \langle \psi^+(x) \psi(x) \rangle \quad (2.3)$$

Тут предположено, что константа C не зависит от β и μ , однако это не так. Нормировочная константа C содержит в себе некоторый функциональный детерминант линейного дифференциального оператора. Как правило, такие детерминанты неопределены и нуждаются в доопределении. Можно показать, что существует такая регуляризация этих детерминантов, что вклад C в плотность исчезает [2].

Для того, чтобы вычислять корреляционные функции и не только, вводят так называемый производящий функционал полных функций Грина следующим равенством:

$$\mathcal{G}(A, A^+) = C \int D[\psi]D[\psi^+] e^{\psi^+(-\partial_\tau + \frac{\Delta}{2m} + \mu)\psi - \frac{\lambda}{2}(\psi\psi^+)^2 + \psi^+ A + A^+ \psi} \quad (2.4)$$

Для того, чтобы получить производящие свойства, мы ввели фиктивные внешние поля A и A^+ , которые равны нулю в нашей системе. Также введем так называемый производящий функционал связанных корреляционных функций Грина следующим равенством:

$$W(A, A^+) = \ln \mathcal{G}(A, A^+) \quad (2.5)$$

Тогда плотность (2.3) можно переписать как:

$$n = \frac{1}{\beta V} \left(\frac{\partial W}{\partial \mu} \right)_\beta. \quad (2.6)$$

Отправной точкой для нас будет уравнение Швингера, которое в нашем формализме выглядит следующим образом:

$$\int D[\psi]D[\psi^+] \frac{\delta}{\delta\psi^+} e^{-S_\beta + \psi^+ A + A^+ \psi} = 0 \quad (2.7)$$

Взяв явно функциональную производную по ψ^+ получим следующее выражение:

$$\int D[\psi]D[\psi^+] e^{-S_\beta + \psi^+ A + A^+ \psi} \left(-\frac{\delta S_\beta}{\delta\psi^+} + A \right) = 0 \quad (2.8)$$

Вспоминая вид действия, после явного дифференцирования получаем уравнение:

$$\int D[\psi]D[\psi^+] e^{-S_\beta + \psi^+ A + A^+ \psi} \left(K\psi - \frac{\lambda}{2}\psi\psi^+\psi + A \right) = 0 \quad (2.9)$$

Для дальнейшего удобства нужно сделать функциональное преобразование Лежандра и перейти от $W(A, A^+)$ к $\Gamma(\alpha, \alpha^+) = W(A, A^+) - A^+\alpha - A\alpha$ (интегрирование по x переменным опущено), где

$$\begin{aligned} \alpha(x) &= \frac{\delta W}{\delta A^+(x)} \\ \alpha^+(x) &= \frac{\delta W}{\delta A(x)}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

α называют профилем Бозе-конденсата, его физический смысл будет определен в дальнейшем. Γ называют производящим функционалом 1-частичных неприводимых функций Грина. С другой стороны непосредственно проверяется, что дифференцирование по α и α^+ функционала Γ дает следующие два равенства, обратных верхним двум. Это так называемые уравнения стационарности:

$$\begin{aligned} A(x) &= -\frac{\delta\Gamma}{\delta\alpha^+(x)} \\ A^+(x) &= -\frac{\delta\Gamma}{\delta\alpha(x)}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Так как в исходной задаче никаких внешних полей A не было, то уравнения получаются, когда кладем левую часть равной нулю.

В дальнейшем нам потребуется ввести матрицы вторых производных функционалов $W(A, A^+)$ и $\Gamma(\alpha, \alpha^+)$, поэтому по определению вводим следующее:

$$W_2 = W_2(A, A^+) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial A \partial A} & \frac{\partial^2 W}{\partial A \partial A^+} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial A^+ \partial A} & \frac{\partial^2 W}{\partial A^+ \partial A^+} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_2 = \Gamma_2(\alpha, \alpha^+) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \alpha^+ \partial \alpha^+} & \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \alpha \partial \alpha^+} \\ \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \alpha^+ \partial \alpha} & \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \alpha \partial \alpha} \end{pmatrix}$$

В силу того, что Γ — преобразование Лежандра W , то отсюда следует очень важное равенство для матриц вторых производных этих двух функционалов, а именно, имеет место равенство:

$$W_2 \Gamma_2 = -1 \quad (2.12)$$

Будем называть пропагатором $W_2 = -(\Gamma_2)^{-1}$. Обозначим $\frac{\delta^2 W}{\delta A(x_1) \delta A(x_2)} = \text{---}$, а $\frac{\delta^2 W}{\delta A(x_1) \delta A^+(x_2)} = \text{---}$ (Стрелка идет от поля A к полю A^+). Теперь перепишем уравнение Швингера через наш функционал Γ . Для этого вспомним (2.5), тогда $\int D[\psi] D[\psi^+] e^{\psi^+(-\partial_\tau + \frac{\Delta}{2m} + \mu)\psi - \frac{\lambda}{2}(\psi\psi^+)^2 + \psi^+ A + A^+ \psi} = \mathcal{G}(A, A^+) = e^{W(A, A^+)}$ И наше уравнение Швингера представляется следующим образом:

$$\left(K \frac{\delta}{\delta A^+} + \lambda \frac{\delta^2}{\delta A^+ \delta A} \frac{\delta}{\delta A} - A \right) e^{W(A, A^+)} = 0 \quad (2.13)$$

Далее рассмотрим каждый оператор дифференцирования в отдельности и перепишем его в терминах функционала Γ и новых полей α и α^+ .

Первый вкладом является $\frac{\delta}{\delta A^+}$:

$$\frac{\delta}{\delta A^+} e^{W(A, A^+)} = e^W \frac{\delta W}{\delta A^+} = e^W \cdot \alpha \quad (2.14)$$

Второй вклад более сложен $\frac{\delta^2}{\delta A^+ \delta A} \frac{\delta}{\delta A}$

$$\frac{\delta^2}{\delta A^+ \delta A} \frac{\delta}{\delta A} e^{W(A, A^+)} = \left(\frac{\delta^3 W}{\delta A \delta A^2} + 2 \frac{\delta^2 W}{\delta A \delta A^+} \frac{\delta W}{\delta A^+} + \frac{\delta^2 W}{\delta A^+ \delta A} \frac{\delta W}{\delta A} + \frac{\delta W}{\delta A} \frac{\delta W}{\delta A^+} \frac{\delta W}{\delta A^+} \right) e^{W(A, A^+)} \quad (2.15)$$

Третий вклад очевидно равен $\alpha\alpha\alpha^+$. Остальные же прежде чем представлять через α необходимо преобразовать. Предпоследние два являются элементами матрицы W_2 . Введем следующие обозначения:

$$\frac{\delta^2 W}{\delta A^2} = \text{O}$$

$$\frac{\delta^2 W}{\delta A^+ \delta A} = \text{O}$$

Для слагаемого с третьей функциональной производной можно продифференцировать основное тождество для гессианов W и Γ и переписать его в терминах Γ_2 и Γ_3 . Окончательно (подставляя (2.14), (2.15) в (2.13)) получаем следующее уравнение на α :

$$K\alpha - \lambda\alpha\alpha^+\alpha + \text{O}\alpha^+ + \text{O}\alpha + \dots = -\frac{\delta\Gamma}{\delta\alpha^+} = 0 \quad (2.16)$$

Отсюда получаем вид Γ :

$$\Gamma = \Gamma_0 - \alpha^+ K\alpha + \lambda\alpha\alpha^+\alpha\alpha^+ + \dots, \quad (2.17)$$

где Γ_0 — связанный с константой C из (2.1) вклад, независящий от α и α^+ . Далее вспомним, что плотность системы есть (2.6), однако в силу того, что W и Γ связаны преобразованием Лежандра следует:

$$n = \frac{1}{\beta V} \left(\frac{\partial\Gamma}{\partial\mu} \right)_\beta = \frac{\partial\Gamma_0}{\partial\mu} \quad (2.18)$$

Аналогичным образом получаются уравнения на Γ_k для $k = 2, 3, \dots$. Это бесконечная цепочка уравнений на α . Решать подобные системы лучше всего итерационно, поэтому откидывая в Γ_1 все петли получаем нулевое приближение для α . Это приближение называют приближением среднего поля или приближением Ландау. В этом приближении имеем следующее выражение для плотности:

$$n = \frac{\partial\Gamma_0}{\partial\mu} + \frac{1}{V\beta} \int d\vec{x} d\tau \alpha\alpha^+, \quad (2.19)$$

где первое слагаемое обозначают n_{norm} , его физический смысл — плотность числа несконденсированных частиц, и второе слагаемое, которое называют бозе-конденсатом, его физический смысл — плотность числа сконденсированных частиц. Отличие от (1.3) состоит в том, что в однородной системе бозе-конденсат не зависит от точки в пространстве.

Как правило, оператор K — дифференциальный оператор по переменным τ и x . В традиционной ситуации, все переходы рассматриваются в термодинамическом предельном переходе, поэтому в тех системах имеется трансляционная инвариантность по пространственным переменным. В нашем же случае, никакой инвариантности нет, поэтому возникает задача решения дифференциального уравнения в частных производных. Однако от производной по τ можно избавиться уже на этом этапе. Оператор K в нашем случае выглядит следующим образом:

$$K = \partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} - \mu \quad (2.20)$$

Обозначим, для удобства, невременную часть оператора как ϵ . Для того, чтобы избавиться от временной производной нам необходимо разложить α на две функции.

Представим α в следующем виде (Возможность подобного разложения прежде всего вопрос того функционального пространства в котором мы работаем, подобные вопросы рассматриваются в [2]):

$$\alpha = a + ib \quad (2.21)$$

α^+ получается формальным сопряжением выражения (2.21). Теперь вернувшись к уравнению Швингера, вспомним, что дифференцировали мы по ψ^+ , но с тем же успехом могли дифференцировать и по ψ . Таким образом, получим сопряженное уравнение. В силу же того, что $(\psi^+(\tau))^+ = \psi(-\tau)$ имеем (на примере a):

$$\begin{aligned} \partial_\tau a + \epsilon a + \lambda a(a^2 + b^2) + \dots &= 0 \\ -\partial_\tau a + \epsilon b + \lambda b(a^2 + b^2) + \dots &= 0 \end{aligned}$$

И аналогичное уравнение на b . Замечаем, что при сложении этих двух уравнений, производная по τ выпадает из рассмотрения. Таким образом, вместо исходного оператора K можно рассматривать некий другой оператор \bar{K} , в который не входит оператор дифференцирования по τ .

2.2 Беспетлевое приближение

Получили уравнение на функцию конденсата α , будем рассматривать его в беспетлевом приближении. Выкинув все петли, мы получим следующее выражение:

$$\left(-\frac{\Delta}{2m} - \mu\right)\alpha + \lambda|\alpha|^2\alpha = 0 \quad (2.22)$$

При этом имеем дополнительное граничное условие, а именно отсутствие конденсата на границе замкнутого шара. Итого имеем следующее дифференциальное уравнение с граничным условием:

$$\begin{cases} \left(-\frac{\Delta}{2m} - \mu\right)\alpha + \lambda\alpha^+\alpha = 0 \\ \alpha|_{\partial S} = 0 \end{cases}$$

Это уравнение носит название уравнения Гросса-Питаевского. Решать его будем при помощи разложения α по собственным функциям оператора Лапласа, другими словами рассмотрим следующую систему:

$$\begin{cases} \Delta\alpha = -\lambda\alpha \\ \alpha|_{\partial S} = 0 \end{cases}$$

Введем сферические координаты (r, φ, θ) , и запишем через них оператор Лапласа. Разделяя переменные в исходном уравнении, то есть представляя исходную функцию как $\alpha = A(r) \cdot B(\varphi, \theta)$ имеем:

$$r^2 \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{A}{A} + \lambda \cdot r^2 = -\frac{\Delta_{\varphi, \theta} B}{B}$$

Окончательно, получаем два уравнения:

$$\begin{cases} \Delta_{\varphi, \theta} B = -\mu B \\ r^2 \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{A}{A} + \lambda \cdot r^2 = \mu \end{cases}$$

Решение первого уравнения, сферические функции с $\mu = n(n+1)$, где $n \in \mathbb{Z}^+$. После постановки μ получаем уравнение на $A(r)$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} A + \left(\lambda - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) A = 0$$

Сделаем замену $A(r) = \frac{y(r)}{\sqrt{r}}$, при помощи нее уравнение приводится к уравнению Бесселя следующего вида:

$$r^2 y'' + r y' - \left(r^2 \lambda - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right) y = 0 \quad (2.23)$$

Его решение – это $y = C_1 J_{n+\frac{1}{2}}(\sqrt{\lambda}r) + C_2 Y_{n+\frac{1}{2}}(\sqrt{\lambda}r)$ [3]. Из того факта, что радиальная функция должна быть непрерывна в нуле, получаем, что $y = C_1 J_{n+\frac{1}{2}}(\sqrt{\lambda}r)$.

Удовлетворяя граничному условию, имеем равенство на $\lambda = \left(\frac{\nu_f^{n+\frac{1}{2}}}{R} \right)^2$

Итого имеем:

$$\alpha_{mnf}(r, \varphi, \theta) = I \cdot \frac{J_{n+1/2}\left(\frac{\nu_f^{n+\frac{1}{2}}}{R} r\right)}{\sqrt{r}} Y_n^m(\varphi, \theta) \quad (2.24)$$

ν - корень функции Бесселя, I - нормировочная константа.

Имея на руках систему ортонормированных собственных функций [3], попытаемся теперь исходное уравнение решить при помощи формального ряда $\alpha = \sum_{l,m,n} c_{lmn} \alpha_{lmn}$ с найденными собственными функциями. Сходимость этого разложения обсуждается после его построения. Подставляя данный ряд в исходное уравнение, имеем бесконечную рекуррентную алгебраическую систему уравнений на коэффициенты c . У нас есть собственные функции $\alpha_{mnf}(r, \varphi, \theta) = I \cdot \frac{J_{n+1/2}\left(\frac{\nu_f^{n+\frac{1}{2}}}{R} r\right)}{\sqrt{r}} Y_n^m(\varphi, \theta)$. Подставляя это разложение в (2.22) получаем следующее

$$\sum_{mnf} c_{mnf} \left(\frac{\nu_f^n}{R} \right)^2 \alpha_{mnf} - \tilde{\mu} \sum_{mnf} c_{mnf} \alpha_{mnf} + \tilde{\lambda} \sum_{mnf} k_{mnf} \alpha_{mnf} = 0 \quad (2.25)$$

где, $\tilde{\mu} = 2m \cdot \mu$ и $\tilde{\lambda} = 2m \cdot \lambda$. По самому определению разложения имеем следующее $\alpha\alpha^*\alpha = \sum_{mnf} k_{mnf}\alpha_{mnf}$, откуда легко получить выражение на коэффициенты k_{mnf}

$$k_{mnf} = (\alpha\alpha^*\alpha, \alpha_{mnf})_{S^2} = \iiint_S \alpha\alpha^*\alpha \cdot \alpha_{mnf} \cdot r^2 \cdot \sin\theta dr d\varphi d\theta$$

Или, это же самое уравнение можно переписать в следующем виде:

$$k_{mnf} = \sum_{a,b,c} \sum_{a',b',c'} \sum_{a'',b'',c''} c_{abc} c_{a'b'c'}^* c_{a''b''c''} \cdot A_{mnf}^{abc,a'b'c',a''b''c''} \quad (2.26)$$

где, $A_{mnf}^{abc,a'b'c',a''b''c''} = (\alpha_{abc}\alpha_{a'b'c'}^*\alpha_{a''b''c''}, \alpha_{mnf})_{S^2}$. В дальнейшем, из физических соображений, связанных с граничным условием, интересуемся симметричными решениями по углам, то есть полагаем $n = m = 0$. Данную бесконечную систему рекуррентных уравнений на коэффициенты $c_{l00} = c_l$ будем решать методом последовательных приближений а именно, пускай $\alpha = c_0\alpha_0$. Тогда подставляя это выражение в (2.25) имеем следующее решение:

$$c_0 \cdot \left(\frac{\nu_1^{\frac{1}{2}}}{R}\right)^2 - \tilde{\mu}c_0 + \tilde{\lambda} \cdot c_0^3 \cdot B = 0$$

Откуда находим что, $c_0 = 0$, и это является тривиальным решением, или что:

$$|c_0| = \sqrt{\frac{\tilde{\mu} - \left(\frac{\nu_1^{\frac{1}{2}}}{R}\right)^2}{B \cdot \tilde{\lambda}}} \quad (2.27)$$

Так как модуль величина неотрицательная, то для нетривиального решение необходимо, чтобы выполнялось следующее неравенство: $\mu > \left(\frac{\nu_1^{\frac{1}{2}}}{R}\right)^2$. Обозначая

$$\delta\mu = \tilde{\mu} - \left(\frac{\nu_1^{\frac{1}{2}}}{R}\right)^2, \quad (2.28)$$

имеем $c_0 = \frac{\delta\mu^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{B \cdot \tilde{\lambda}}}$. Таким образом коэффициенты будут находиться в виде ряда по малому параметру $\delta\mu$. Вычислим первых несколько коэффициентов и поправок для

них. Другими словами представляем коэффициенты c_n в виде:

$$c_n = \sum_{i=1}^N a_n^{(i)} \delta \mu^{\frac{i}{2}} \quad (2.29)$$

После вычислений при помощи теории возмущений уравнение (2.22) будет иметь решение в следующем в виде:

$$\alpha = \sum_{i=1}^k c_i * \frac{\sin \frac{i\pi r}{R}}{r} \quad (2.30)$$

В этом выражении, коэффициенты c_i содержат указанное разложение по $\delta \mu$. Конкретные выражения для коэффициентов c_i приведены в приложении А.

Таким образом получили необходимое решение нулевого приближения для бозе-конденсации в ограниченной системе, под нулевым приближением понимается само уравнение Гросса-Питаевского (2.22). Сходимость данного ряда можно обсудить с точки зрения сходимости соответствующих графиков $\alpha(r)$ при $k = 1, 2, 3, 4$.

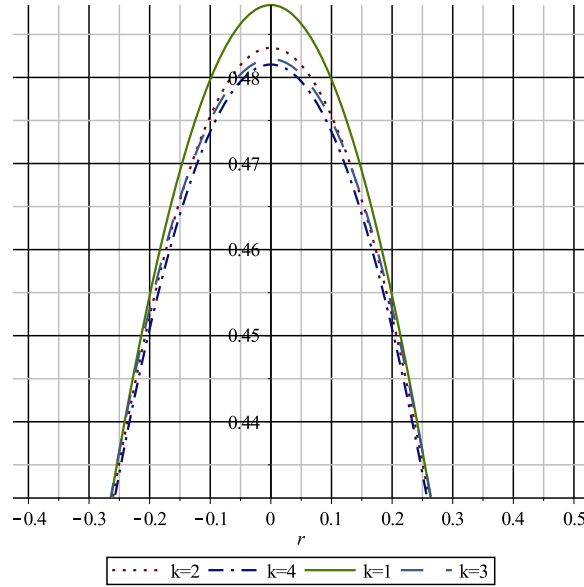


Рис. 2.1. Зависимость $\alpha(r)$ от числа учтенных слагаемых из ряда (2.30).

График построен вблизи максимумов функций $\alpha_k(r)$, общий вид зависимости $\alpha(r)$ приведен в приложении. Из этого графика явствует, что ряд из функций $\alpha_k(r)$ сходится достаточно быстро. Таким образом было построено решение уравнения Гросса-Питаевского (2.22).

Теперь имея на руках нулевое приближение, хотим найти пропагатор для нашей системы

2.3 Пропагатор

Пропагатором нашей системы по определению является величина $(\Gamma_2)^{-1}$. Для того, чтобы найти его, продифференцируем (2.16) по α . Таким образом, находим, что Γ_2 есть:

$$-\Gamma_2 = \bar{K} + \lambda\alpha\alpha^+ + \dots \quad (2.31)$$

В этом выражении, опущены петлевые вклады в пропагатор. Так как α найдено нами из (2.22), то мы можем найти наш пропагатор в нулевом порядке. Откинув все петлевые вклады, получаем, что

$$-(\Gamma_2)^{-1} = (\bar{K} + \lambda\alpha\alpha^+)^{-1} \quad (2.32)$$

Пусть $R = 1$ (для простоты счета), обозначая $G = (\Gamma_2)^{-1}$ имеем следующее уравнение:

$$(-\Delta - \mu + \lambda\alpha^2)G = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.33)$$

Тут, α — найденный профиль конденсата из уравнения Гросса-Питаевского (2.22), а G — искомый пропагатор. Обычно используется преобразование Фурье по координате, однако в нашем случае система конечна в пространстве. В том числе поэтому, решение этого уравнения ищут в виде спектрального разложения для пропагатора (или для функции Грина, что эквивалентно).

Перепишем наше уравнение в следующем виде:

$$\hat{K}_{\vec{x}}G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.34)$$

В нем, оператор $\hat{K}_{\vec{x}} = (-\Delta - \mu + \lambda\alpha^2)$. Теперь представим G в виде ряда по собственным функциям Ψ_{mnf} оператора $\hat{K}_{\vec{x}}$ (при этом заранее перейдем в сферические координаты):

$$G(r, r', \varphi, \varphi', \theta, \theta') = \sum_{m,n,f} a_{mnf}(r', \varphi', \theta') \Psi_{mnf}(r, \varphi, \theta) \quad (2.35)$$

Подставляя это разложение в уравнение (2.34) будем иметь следующее выражение:

$$\sum_{mnf} a_{mnf}(r', \varphi', \theta) \hat{K}_{r, \varphi, \theta} \Psi_{mnf}(r, \varphi, \theta) = \frac{\delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\theta - \theta')}{r^2 \sin \theta} \quad (2.36)$$

Если бы мы знали спектр оператора, стоящего перед функцией Грина, то никаких проблем не возникало бы, однако спектр для нас неизвестен. С другой же стороны оператор \hat{K} представляется в виде: $\hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{K}_1$, где спектр оператора \hat{K}_0 нам известен, а добавка к нему, так или иначе пропорциональна нашего малому параметру $\delta\mu$. Таким образом мы можем представить искомый спектр в следующем виде:

$$\hat{K} \Psi_{mnf} = \left(\left(\frac{\nu_f^{n+\frac{1}{2}}}{R} \right)^2 - \mu + \beta_{nf}(\delta\mu) \right) \Psi_{mnf} \quad (2.37)$$

Первая поправка к спектру дается формулой [4]:

$$\beta_{nf} = \int_0^1 r^2 \sin(\theta) \alpha^2 \alpha_{mnf}^2 dr d\Omega \quad (2.38)$$

Как легко заметить, спектр вырожден по одному из значков, но, в данном случае, нас это мало волнует. Теперь домножим обе части равенства (2.36), скалярно, на $\Psi_{m'n'f'}^+(r, \varphi, \theta)$, тогда получим выражение для коэффициентов $a_{mnf}(r', \varphi', \theta')$, а именно:

$$a_{mnf}(r', \varphi', \theta') = \frac{\Psi_{mnf}^+(r', \varphi', \theta')}{\left(\frac{\nu_f^{n+\frac{1}{2}}}{R} \right)^2 - \mu + \beta_{nf}(\delta\mu)} \quad (2.39)$$

Для сферы единичного радиуса получили представление пропагатора в виде:

$$G = \sum_{m,n,f} \frac{\Psi_{mnf}(r, \varphi, \theta) \Psi_{mnf}^+(r', \varphi', \theta')}{(\nu_f^{n+\frac{1}{2}})^2 - (\nu_1^{\frac{1}{2}})^2 - \delta\mu + \frac{g}{4} \beta_{nf}(\delta\mu)} \quad (2.40)$$

В этом выражении химический потенциал заменен с использованием (2.28), а $\beta_{nf}(\delta\mu)$ — ряд по $\delta\mu$, коэффициенты которого достаточно хорошо убывают. Несколько первых коэффициентов этого ряда были сосчитаны и будут приведены в приложении. Из этого выражения для пропагатора непосредственно явствует, что при $\delta\mu \rightarrow 0$ слагаемые соответствующие $n = 0, f = 0$ расходятся, что интерпретируется обычно,

как то, что никакой фазовый переход в конечной системе невозможен. (По аналогии, с тем, что в двухмерном пространстве нет никакой бозе-конденсации нет) Однако можно подойти к этой проблеме немного с другой стороны.

Глава 3

Теория возмущений

Пусть $T > T_c$ и никакого фазового перехода еще не произошло, это соответствует тому, что $\alpha = 0$. Тогда такая система может быть описана в рамках формализма функционального интеграла, а именно рассмотрим наше выражение:

$$\int D[\psi]D[\psi^+]\psi\psi^+e^{\psi^+(\frac{\Delta}{2m}+\mu)\psi-\frac{\lambda}{2}(\psi\psi^+)^2} \quad (3.1)$$

Основная проблема, с которой мы столкнулись при вычислении петли скрывается, по всей видимости, в нулевой моде оператора Лапласа, поэтому такое представление функционального интеграла нам сейчас не очень подходит. Однако мы можем воспользоваться другим видом нашего интеграла. Мы знаем, что любые функции из соответствующего функционального пространства могут быть разложены в ряд по полной системе, в этом пространстве, ортонормированных функций. Поэтому разложим наши поля ψ и ψ^+ по полной системе собственных функций оператора Лапласа на шаре, то есть по шаровым функциям.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{mnf} c_{mnf} \alpha_{mnf}(x) \\ \psi^+(x) &= \sum_{mnf} \bar{c}_{mnf} \bar{\alpha}_{mnf}(x) \end{aligned} \quad (3.2)$$

В этом выражении α_{mnf} определены в (2.24). Вычисляя их нормировку, нетрудно убедиться, что $I \sim \frac{1}{R}$ [3]. Наш исходный функциональный интеграл (3.1) переписывается в следующем виде (Так как мы рассматриваем функциональный интеграл,

как компактную запись теории возмущения, а для гауссова интеграла, подобное представление верно в силу того, что собственные функции α — есть собственные оператора лапласа):

$$\prod_{m,n,f}^{\infty} \int dc_{mnf} d\bar{c}_{mnf} \left(\sum_{mnf} c_{mnf} \alpha_{mnf}(x) \right) \left(\sum_{mnf} \bar{c}_{mnf} \bar{\alpha}_{mnf}(x) \right) e^{-S(c_{000}, \dots, c_{mnf})} \quad (3.3)$$

Уже на этом этапе видно, что предел $\delta\mu \rightarrow 0$ не является чем либо особенным для этого интеграла, ибо для любого числа полей c_{mnf} , у интеграла нет особенностей при $\delta\mu \rightarrow 0$. Для конкретики скажем, пусть в (3.3) есть только одно поле. Тогда этот интеграл переписывается через переход к полярным координатам к одномерному интегралу следующего типа:

$$4\pi \int_0^{\infty} dr r^3 e^{\delta\mu r^2 - \frac{d_1 r^4}{2}} = \frac{\pi\sqrt{2}\delta\mu e^{\frac{\delta\mu^2}{d_1}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}\delta\mu}{2\sqrt{d_1}}\right) + \pi\delta\mu\sqrt{2}e^{\frac{\delta\mu^2}{d_1}} + 2\sqrt{\pi}\sqrt{d_1}}{4\sqrt{\pi}d^{\frac{3}{2}}} \quad (3.4)$$

Отсюда видно, что данная функция — аналитическая функция параметра $\delta\mu$, следовательно никаких особенностей при $\delta\mu \rightarrow 0$ нет. Из этого можно сделать вывод, что для описания фазового перехода недостаточно учитывать лишь петли из (2.16), необходим учет поправок более высокого порядка. Однако обратимся к другому вопросу: плотность нашей системы представляет из себя (2.3), которое так или иначе зависит от радиуса Ω , поэтому можно задаться вопросом: а каков критический индекс (Так как скейлинг в терминах корреляционного радиуса можно переписать через радиус обычный) при $R \rightarrow \infty$?

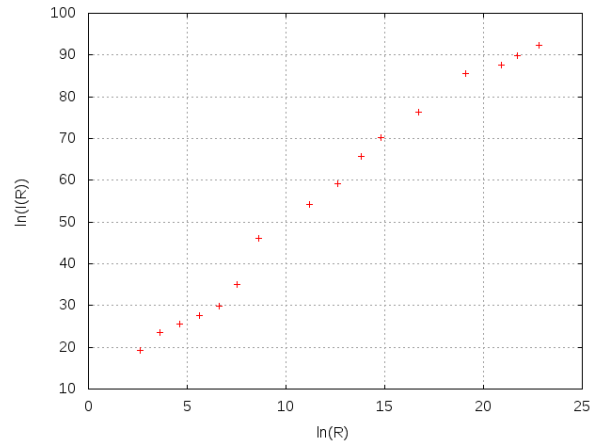
Положим $\delta\mu = 0$ и рассмотрим нулевое приближение, а именно зависимость корреляционной функции (заинтегрированной по x) из (2.3) при одной моде, от радиуса системы. Используя полярные координаты, получаем:

$$I(R) = Q \cdot \frac{\int_0^{\infty} dr \cdot r^3 e^{-\frac{d_1 r^4}{2}}}{\int_0^{\infty} dr \cdot r e^{-\frac{d_1 r^4}{2}}} = K \cdot R^{\frac{3}{2}} \quad (3.5)$$

Логарифмируя обе части равенства и рассматривая предел при $R \rightarrow \infty$ получаем:

$$\ln I(R) = \frac{3}{2} \ln R \quad (3.6)$$

Или, что тоже самое, что критический индекс в нулевом порядке равен $\frac{3}{2}$. Дальнейший расчет (численный расчет $\ln I(R) = \ln R$), к примеру, для двух мод, приводит к следующему графику:



Аппроксимация вблизи больших R приводит нас к критическому индексу равному 1.8. Однако, что-либо сказать о том, какой это критический индекс нельзя, необходимо включение большого числа мод для того, чтобы можно было судить об значении сосчитанной величины.

Глава 4

Заключение.

В данной работе была сделана попытка описания фазового перехода второго рода в конечной системе. В качестве которой был выбран шар заданного радиуса. При помощи, представления статистической суммы и плотности нашей системы через функциональные интегралы по бозонным полям была описана такая система, а именно, с использованием первого преобразования Лежандра, было получено уравнение на профиль Бозе-конденсата α , которое в нулевом, беспетлевом порядке, было решено итерационной процедурой. Был посчитан пропагатор нашей системы в нулевом порядке, увидели, что он имеет особенность при $\delta\mu \rightarrow 0$, однако позднее обнаружили, что это следствии того, что недостаточно учитывать лишь петли(уши) из (2.16). Была построена теория возмущений уровня, также была предпринята попытка вычислить критический индекс радиуса, однако, как показал расчет, в отличии от α , где достаточно удерживать лишь малое число членов, тут этого недостаточно и нужно рассматривать более высокие порядки для оценки точности подобного расчета.

Литература

- [1] Зинн-Жюстен. Континуальный интеграл в квантовой механике. М.: Физматлит, 2010. 356 с.
- [2] А.Н Васильев. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Спб.: Ленинград, 1976. 295 с.
- [3] Дж.Н.Ватсон. Теория бесселевых функций. М.: Издательство иностранной литературы, 1949. 783 с.
- [4] Л.Д.Ландау, Е.М Лифшиц. Теоретическая физика.Квантовая механика. М.: Физматлит, 2008. 800 с.

Приложение А

Профиль конденсата.

Построение графика функции $\alpha(r)$ при $R=1$, и трех значениях $\delta\mu$

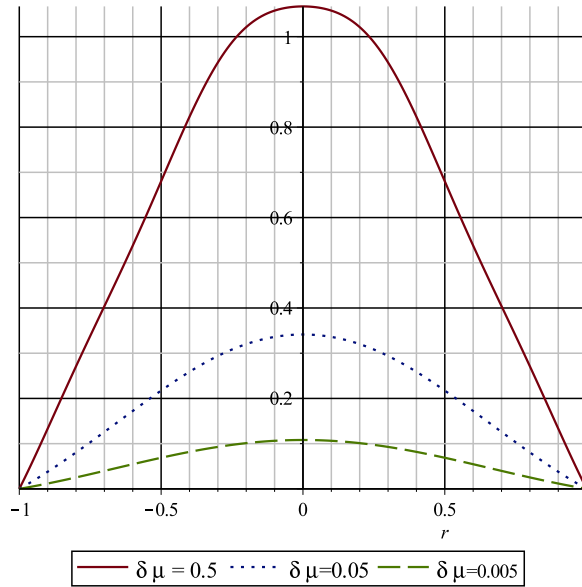


График показывает поведение $\alpha(r)$ при разных $\delta\mu$. Профиль конденсата:

$$\alpha(r) = \sum_{k=1}^4 c_k \frac{\sin\left(\frac{k\pi r}{R}\right)}{r}$$

$$c_1 = \frac{\sqrt{2R}(3.832148294\sqrt{\delta\mu R} + 0.06873432430\sqrt{\delta\mu R}R^2\delta\mu - 0.008577714695 * R^{\frac{9}{2}}\delta\mu^{\frac{5}{2}})}{2\pi^{\frac{3}{2}}}$$

$$c_2 = \frac{\sqrt{R}(-0.1089097737\sqrt{\delta\mu R}R^2\delta\mu + 0.01069225285R^{\frac{9}{2}}\delta\mu^{\frac{5}{2}} - 0.0001854804810\sqrt{\delta\mu R}R^6\delta\mu^3)}{2\pi^{\frac{3}{2}}}$$

$$c_3 = \frac{\sqrt{6}(0.2761415324R^3\delta\mu^{3/2} - 0.02204379184eR^5\delta\mu^{\frac{5}{2}} + (0.003319673796R^7 + 0.00001656150072)\delta\mu^{\frac{7}{2}})}{6\pi^{\frac{3}{2}}}$$

$$c_4 = \frac{\sqrt{8}(-0.2482075749R^3\delta\mu^{\frac{3}{2}} + 0.001616538668R^5\delta\mu^{\frac{5}{2}} + (0.0003557720597R^7 + 0.00002337917810)\delta\mu^{\frac{7}{2}})}{8\pi^{\frac{3}{2}}}$$

Приложение В

Коэффициенты в пропагаторе.

$$\begin{aligned}\beta_{11} &= 0.008062883599\delta\mu + 0.0001347864582\delta\mu^2 - 0.00001350574256\delta\mu^3 - 0.0000009472209237\delta\mu^4 \\ \beta_{12} &= 0.004248005060\delta\mu + 0.0001792076792\delta\mu^2 - 0.00001466139114\delta\mu^3 + 0.000005478344827\delta\mu^4 \\ \beta_{13} &= 0.002834967378\delta\mu + 0.0000296808328\delta\mu^2 - 0.000004483848970\delta\mu^3 + 0.000005388618824\delta\mu^4 \\ \beta_{14} &= 0.002126560568\delta\mu + 0.0000231791886\delta\mu^2 - 0.000003872394009\delta\mu^3 + 0.000004126703832\delta\mu^4 \\ \beta_{21} &= 0.003747066681\delta\mu + 0.00002372246876\delta\mu^2 - 0.000002867861378\delta\mu^3 - 0.000002179045822\delta\mu^4 \\ \beta_{22} &= 0.003033198631\delta\mu + 0.0001463067144\delta\mu^2 - 0.000009269273766\delta\mu^3 - 0.000001070075923\delta\mu^4 \\ \beta_{23} &= 0.002299733752\delta\mu + 0.00007230918986\delta\mu^2 - 0.000005459499926\delta\mu^3 + 0.000001819509848\delta\mu^4 \\ \beta_{24} &= 0.001829585848\delta\mu + 0.00004214794828\delta\mu^2 - 0.000004565812961\delta\mu^3 + 0.000002394938862\delta\mu^4 \\ \beta_{31} &= 0.002101218265\delta\mu + 0.00001178628519\delta\mu^2 - 0.000001025677697\delta\mu^3 - 0.000001123615245\delta\mu^4 \\ \beta_{32} &= 0.002213082277\delta\mu + 0.00007090815539\delta\mu^2 - 0.000003697528237\delta\mu^3 + 0.000002268264665\delta\mu^4 \\ \beta_{33} &= 0.00186715127\delta\mu + 0.00007606794937\delta\mu^2 - 0.000004975062178\delta\mu^3 - 0.0000002418742230\delta\mu^4 \\ \beta_{34} &= 0.001569245190\delta\mu + 0.00005309404862\delta\mu^2 - 0.000004293976184\delta\mu^3 + 0.0000008580991216\delta\mu^4 \\ \beta_{41} &= 0.001316011704\delta\mu + 0.00002026764086\delta\mu^2 - 0.0000009310727183\delta\mu^3 - 0.0000005654668409\delta\mu^4 \\ \beta_{42} &= 0.001661620273\delta\mu + 0.00002028893935\delta\mu^2 - 0.0000004213356950\delta\mu^3 - 0.000001970472583\delta\mu^4 \\ \beta_{43} &= 0.001529269663\delta\mu + 0.00005943330002\delta\mu^2 - 0.000003832839118\delta\mu^3 - 0.000001075235160\delta\mu^4 \\ \beta_{44} &= 0.001349262946\delta\mu + 0.00005288223642\delta\mu^2 - 0.000003624370666\delta\mu^3 - 0.0000001348501878\delta\mu^4\end{aligned}$$