ЖЭТФ, 2018, том 154, вып. 5 (11), стр. 964–971

КВАНТОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И ТЕОРИЯ ГРОССА – ПИТАЕВСКОГО

С. Стрингари[* **]

INO-CNR BEC Center and Dipartimento di Fisica, Università di Trento 38123, Povo, Italy

Поступила в редакцию 7 апреля 2018 г.

Используя линеаризованную версию нестационарного уравнения Гросса – Питаевского, мы находим динамический отклик вырожденного бозе-газа на периодические возмущения плотности и бозе-амплитуды. Для вычисления соответствующих таким элементарным возбуждениям квантовых флуктуаций в основном состоянии используется флуктуационно-диссипационная теорема в пределе нулевой температуры. В однородных условиях предсказания теории Боголюбова, в том числе инфракрасная расходимость функции распределения частиц и квантовое истощение конденсата, точно воспроизводятся в теории Гросса – Питаевского. Также получены результаты для перекрестной функции отклика бозе-амплитуда/плотность и рассмотрено обобщение изложенного формализма на неоднородные системы. В завершение, обсуждается обобщение уравнений Гросса – Питаевского с выходом за границы среднеполевого приближения и найдено явное выражение для химического потенциала, согласующееся с предсказанием теории Ли – Хуанга – Янга.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 85-летию Л. П. Питаевского

DOI: 10.1134/S0044451018110044

1. ВВЕДЕНИЕ

Теории Боголюбова [1] и Гросса – Питаевского [2, 3] являются основными подходами для описания слабо взаимодействующего бозе-газа. В то время как теория Боголюбова основана на квантовом описании, где операторы рождения и уничтожения частиц преобразуются в таковые для квазичастиц, тем самым обеспечивая явную диагонализацию квантового гамильтониана, содержание теории Гросса – Питаевского заключается в уравнении для параметра порядка, т. е. для классического поля, связанного со спонтанным нарушением калибровочной симметрии.

Основная цель настоящей работы — показать, что квантовые флуктуации, проявляемые взаимодействующим бозе-эйнштейновским конденсатом, могут быть правильно рассчитаны с использованием формализма нестационарной теории Гросса – Питаевского (Time Dependent Gross–Pitaevskii Theory, TDGP), воспроизводящей результаты теории Боголюбова и допускающей приложения к неоднородным конфигурациям. Другой рассматриваемый в этой работе важный аспект, кроме флуктуаций плотности, касается вычисления флуктуаций бозе-амплитуды, величина которых позволяет определить распределение по импульсам и квантовое истощение конденсата. Мы также излагаем обобщение уравнений Гросса – Питаевского, учитывая эффекты за рамками теории среднего поля.

Мы будем явно использовать флуктуационно-диссипационную теорему [4], которая связывает флуктуации заданного физического оператора $\hat{F}$ с мнимой частью соответствующей динамической восприимчивости. При нулевой температуре теорема принимает вид (см., например, [5])

$$\langle\{(F^\dagger - \langle F^\dagger\rangle), (F - \langle F\rangle)\}\rangle = = \frac{\hbar}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi''_F(\omega)\,\mathrm{sign}(\omega), \quad (1)$$

где $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ — антикоммутатор операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Тождество (1) подчеркивает кванто-

[*] E-mail: sandro.stringari@unitn.it

[**] Sandro Stringari

вую природу флуктуаций[1)]. Ее также можно представить в эквивалентном виде (опять при нулевой температуре)

$$\langle (F^\dagger - \langle F^\dagger\rangle)(F - \langle F\rangle)\rangle = \frac{\hbar}{\pi}\int\limits_0^\infty d\omega \chi_F''(\omega). \qquad (2)$$

Ключевой составляющей, входящей в формулы (1), (2), является динамическая восприимчивость, определяемая отклонениями средних значений оператора $F^\dagger$:

$$\delta\langle \hat{F}^\dagger\rangle = \lambda e^{\eta t}[e^{-i\omega t}\chi_F(\omega) + e^{i\omega t}\chi_{F^\dagger}(-\omega)], \qquad (3)$$

вызываемыми внешним, зависящим от времени возмущением вида

$$H_{pert} = -\lambda e^{\eta t}\left(\hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{+i\omega t}\right), \qquad (4)$$

где η — малая положительная величина, так что при $t = -\infty$ эволюция системы определяется невозмущенным гамильтонианом. Теория возмущений дает следующее выражение для динамической восприимчивости при нулевой температуре [4]:

$$\chi_F(\omega) \equiv \chi_{\hat{F}^\dagger,\hat{F}} = = -\frac{1}{\hbar}\sum_n \left[\frac{\langle 0|\hat{F}^\dagger|n\rangle\langle n|\hat{F}|0\rangle}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{\langle 0|\hat{F}|n\rangle\langle n|\hat{F}^\dagger|0\rangle}{\omega + \omega_{n0} + i\eta}\right]. \qquad (5)$$

Если оператор $\hat{F}$ не сохраняет полное число частиц, то оказывается удобным использовать большой канонический ансамбль, добавляя член $-\mu\hat{N}$ к невозмущенному гамильтониану.

Нестационарная теория Гросса – Питаевского хорошо подходит для вычисления функции отклика $\chi(\omega)$ и, следовательно, обеспечивает прямой доступ к квантовым флуктуациям оператора $\hat{F}$ посредством формул (1), (2). Важным примером являются флуктуации плотности, связанные с $\mathbf{q}$-компонентой

$$\hat{\rho}_\mathbf{q} = \sum_\mathbf{p} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}\hat{a}_\mathbf{p}$$

оператора плотности, где $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}$ — это обычные операторы рождения и уничтожения частиц. В этом случае формула (1) позволяет найти флуктуации плотности и, в частности, статический структурный фактор

$$S(q) = \frac{1}{N}\langle \hat{\rho}^\dagger_\mathbf{q}\hat{\rho}_\mathbf{q}\rangle - \frac{1}{N}|\langle\hat{\rho}_\mathbf{q}\rangle|^2. \qquad (6)$$

[1)] При конечной температуре функцию $\mathrm{sign}(\omega)$ необходимо заменить на $\mathrm{ctg}(\beta\hbar\omega/2)$.

Другой важный вопрос, который будет обсуждаться в работе, касается флуктуаций бозе-амплитуды (которой соответствует оператор уничтожения частиц $\hat{a}_\mathbf{p}$, где $\mathbf{p}$ — импульс частицы). В этом случае левая часть уравнения (2) позволяет найти функцию распределения

$$n_p = \langle \hat{a}^\dagger_\mathbf{p}\hat{a}_\mathbf{p}\rangle, \qquad (7)$$

для которой при бозе-эйнштейновской конденсации, как известно, характерна инфракрасная расходимость на малых импульсах [6], и интеграл от которой позволяет вычислить квантовое истощение конденсата. На первый взгляд может показаться удивительным, что такой, казалось бы, классический подход, как теория Гросса – Питаевского, объясняет эти существенно квантовые флуктуации. Фактически квантовая природа теории TDGP неявно учитывается флуктуционно-диссипационной теоремой.

2. ФЛУКТУАЦИИ В ТЕОРИИ БОГОЛЮБОВА

Теория Боголюбова, обычно применяемая для однородных конфигураций, подразумевает замену $\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger \equiv \sqrt{N_0}$, где $\hat{a}_0$ и $\hat{a}_0^\dagger$ — операторы уничтожения и рождения в одночастичном состоянии с $\mathbf{p} = 0$, в которое происходит конденсация Бозе – Эйнштейна, а $N_0 \sim N$ — число атомов в конденсате. Преобразование Боголюбова соответствует предположению о спонтанном нарушении калибровочной симметрии. Оно применяется к большому каноническому гамильтониану

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r}\left[-\hat{\Psi}^\dagger\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\hat{\Psi} + \frac{1}{2}g\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi} - \mu\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\right] \quad (8)$$

после выражения полевого оператора $\hat{\Psi}$ в терминах операторов уничтожения частиц:

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\hat{a}_\mathbf{p} \qquad (9)$$

и сохранения только членов, квадратичных по $\hat{a}_\mathbf{p}$, $\hat{a}^\dagger_\mathbf{p}$. Константа взаимодействия g, входящая в гамильтониан (8), связана с длиной s-волнового трехмерного рассеяния соотношением $g = 4\pi\hbar^2 a/m$.

Используя преобразования Боголюбова

$$\begin{aligned} \hat{a}_\mathbf{p} &= u_\mathbf{p}\hat{b}_\mathbf{p} + v^*_{-\mathbf{p}}\hat{b}^\dagger_{-\mathbf{p}}, \\ \hat{a}^\dagger_\mathbf{p} &= u^*_\mathbf{p}\hat{b}^\dagger_\mathbf{p} + v_{-\mathbf{p}}\hat{b}_{-\mathbf{p}}, \end{aligned} \qquad (10)$$

которые выражают операторы частиц ($\hat{a}_\mathbf{p}$, $\hat{a}^\dagger_\mathbf{p}$) через операторы квазичастиц ($\hat{b}_\mathbf{p}$, $\hat{b}^\dagger_\mathbf{p}$), многочастичный гамильтониан (8) можно привести к диагональному виду

$$\hat{H} + \mu N = E_0 + \sum_{\mathbf{p}} \epsilon(p) \hat{b}^\dagger_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \,, \tag{11}$$

где

$$\epsilon(p) = \sqrt{\frac{gn}{m} p^2 + \left(\frac{p^2}{2m}\right)^2} \tag{12}$$

— знаменитый боголюбовский спектр элементарных возбуждений, задаваемый константой взаимодействия g, здесь n — плотность, а E_0 — энергия основного состояния, вычисление которой требует надлежащей перенормировки, чтобы избежать возникновения ультрафиолетовых расходимостей [7,8]. Спектр возбуждения $\epsilon(\mathbf{p})$ демонстрирует типичную фононную дисперсию $\epsilon(p) = cp$ при малых импульсах со скоростью звука, определяемой выражением $c = \sqrt{gn/m}$, и одночастичную дисперсию $p^2/2m$ на больших импульсах. Значения амплитуд Боголюбова, которые диагонализуют гамильтониан, задаются формулой

$$u_{\mathbf{p}}, v_{-\mathbf{p}} = \pm\sqrt{\frac{p^2/2m + gn}{2\epsilon(p)} \pm \frac{1}{2}} \tag{13}$$

и удовлетворяют условию нормировки $|u_{\mathbf{p}}|^2 - |v_{-\mathbf{p}}|^2 = 1$. В подходе Боголюбова элементарное возбуждение с импульсом $\mathbf{p}$ создается оператором $\hat{b}^\dagger_{\mathbf{p}}$, примененным к основному состоянию, которое определено как вакуум квазичастиц:

$$\hat{b}_{\mathbf{p}} |0\rangle_{Bog} = 0 \tag{14}$$

для любого $\mathbf{p} \neq 0$. Как следствие, флуктуации плотности и бозе-амплитуд в основном состоянии прямо вычисляются с использованием преобразований Боголюбова (10) и коммутационных соотношений $[\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}^\dagger_{\mathbf{p}}] = 1$. Например, используя боголюбовскую процедуру и заменяя приближенно N_0 на N, мы можем написать оператор плотности в виде

$$\hat{F} = \rho_{\mathbf{q}} = \sqrt{N}(\hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{p}})$$

с $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$, что дает результат

$$\langle \hat{\rho}^\dagger_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle = N \frac{\hbar^2 q^2/2m}{\epsilon(\hbar q)} \tag{15}$$

для флуктуаций плотности в однородных условиях. Если выбрать $\hat{F} = \hat{a}_{\mathbf{p}}$, где $\mathbf{p} \neq 0$, то вместо этого получим

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{p^2/2m + gn}{2\epsilon(p)} - \frac{1}{2} \tag{16}$$

для функции распределения частиц. Заметим, что $n_{\mathbf{p}}$ тождественно обращается в нуль при отсутствии взаимодействия ($g = 0$). Это приводит к инфракрасной расходимости [6,9] $n_{\mathbf{p}} \to mc/2p$ при $p \to 0$ и дает выражение

$$\delta N_0/N = (8/3\sqrt{\pi})(na^3)^{1/2}$$

для квантового истощения конденсата. Недавний эксперимент по измерению квантового истощения в однородном трехмерном газе с бозе-эйнштейновской конденсацией [10] подтвердил предсказание теории Боголюбова.

3. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПОЛЕВОГО ОПЕРАТОРА

Как уже упоминалось во Введении, нестационарная теория Гросса – Питаевского хорошо подходит для изучения динамического отклика системы на зависящие от координат и времени внешние поля. Чтобы взглянуть на проблему в широком контексте, полезно построить теорию Гросса – Питаевского, исходя из уравнения Гейзенберга

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H} + \hat{H}_{pert}] \tag{17}$$

для временнóй эволюции полевого оператора, где $\hat{H}_{pert}$ отвечает за возмущение (4).

Вычисление коммутатора, содержащего невозмущенный гамильтониан (8), дает результат

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) - \mu\right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \tag{18}$$

где, для общности, мы учли внешний потенциал ловушки.

Чтобы учесть эффект возмущения, удобно записать $\hat{H}_{pert}$ в терминах полевых операторов. В случае с $\mathbf{q}$-компонентой оператора плотности используем

$$\hat{F} = \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r}\, \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

и соответствующий коммутатор принимает вид

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_{pert}] = -\lambda e^{\eta t} \left(e^{+i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}\right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \tag{19}$$

В случае с $\mathbf{p}$-компонентой полевого оператора выберем

$$\hat{F} = \hat{\Psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \hat{\Psi}(\mathbf{r})$$

и соответствующий коммутатор вместо этого принимает вид

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r},t),\hat{H}_{pert}]=-\lambda e^{\eta t}(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar-\omega t)}\,. \tag{20}$$

Теперь мы готовы изучать функцию отклика в рамках теории Гросса – Питаевского, где полевой оператор заменяется классическим полем.

4. ОТКЛИК ПЛОТНОСТИ В ТЕОРИИ ГРОССА – ПИТАЕВСКОГО

Заменяя полевой оператор $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ классическим полем $\Psi(\mathbf{r})$ в уравнениях (17), (18), (19), получаем нестационарное уравнение Гросса – Питаевского с учетом возмущения плотности

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V_{ext}+g|\Psi(\mathbf{r},t)|^2-\mu\right)\times \\ \times\Psi(\mathbf{r},t)-\lambda\sqrt{n(\mathbf{r})}e^{\eta t}\left(e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}+e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\right), \tag{21}$$

где в последнем члене уравнения мы взяли невозмущенное значение $\Psi(\mathbf{r},t)=\sqrt{n(\mathbf{r})}$, в соответствии с правилами теории возмущений.

В однородных условиях анзац

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\Psi_0+e^{\eta t}\left(ue^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}+v^*e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\right) \tag{22}$$

решает нестационарное уравнение Гросса – Питаевского как в отсутствие, так и при наличии внешнего возмущения плотности. В приведенном выше уравнении Ψ_0 — параметр порядка, вычисленный в состоянии равновесия. В отсутствие внешнего возмущения получаются хорошо известные колебательные решения с частотой

$$\omega(q)=\sqrt{\frac{gn}{m}q^2+\hbar^2\left(\frac{q^2}{2m}\right)^2}. \tag{23}$$

Этот результат полностью согласуется с дисперсионным соотношением (12), предсказываемым теорией Боголюбова, с учетом правила квантования де Бройля

$$\epsilon(\mathbf{p})=\hbar\omega(\mathbf{q}),\quad \mathbf{p}=\hbar\mathbf{q}.$$

При наличии периодического возмущения плотности уравнение (21) также может быть решено аналитически, откуда получаем значения амплитуд u и v:

$$u=-\lambda\sqrt{n}\,\frac{\hbar\omega+p^2/2m}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}, \\ v=-\lambda\sqrt{n}\,\frac{-\hbar\omega+p^2/2m}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}, \tag{24}$$

где использовано равенство $\mu=gn$, причем $\epsilon(p)$ — боголюбовское дисперсионное соотношение (12), а $n=N/V$ — плотность системы. Подставляя изменение плотности

$$\delta\rho^*_{\mathbf{q}}=\sqrt{n}\int d\mathbf{r}\,e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}(\delta\Psi(\mathbf{r},t)+\delta\Psi^*(\mathbf{r},t)),$$

вызванное возмущением, и используя определение (3), мы, наконец, получаем результат

$$\chi_{density}(\mathbf{q},\omega)=-N\frac{p^2/m}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}= \\ =-N\left[\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-\epsilon(p)}-\frac{1}{\hbar\omega+i\eta+\epsilon(p)}\right]\frac{p^2/m}{2\epsilon(p)} \tag{25}$$

для функции отклика плотность/плотность однородного газа ($\mathbf{p}=\hbar\mathbf{q}$). Если взять мнимую часть функции отклика и использовать флуктуационно-диссипационную теорему (1), то мы сразу воспроизведем формулу Боголюбова (15) для флуктуаций плотности. Выражение (25) имеет одинаковый вид в каноническом и в большом каноническом формализме, так как оператор возмущения $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ коммутирует с $\hat{N}$. В случае канонического ансамбля анзац для параметра порядка, удовлетворяющего нестационарному уравнению Гросса – Питаевского, просто получается умножением выражения (22) на $\exp(-i\mu t)$.

5. ОТКЛИК БОЗЕ-АМПЛИТУДЫ В ТЕОРИИ ГРОССА – ПИТАЕВСКОГО

После замены полевого оператора $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ классическим полем $\Psi(\mathbf{r},t)$ в уравнениях (17), (18), (20) получим нестационарное уравнение Гросса – Питаевского:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V_{ext}+g|\Psi(\mathbf{r},t)|^2-\mu\right)\times \\ \times\Psi(\mathbf{r},t)-\lambda\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar-\omega t)}e^{\eta t} \tag{26}$$

с учетом связи с $\mathbf{p}$-компонентой $\hat{F}=\hat{\Psi}(\mathbf{p})$ полевого оператора. Мы можем по-прежнему использовать анзац (22) для решения уравнения Гросса – Питаевского, и в этом случае получим следующие выражения для амплитуд u и v:

$$u=\frac{\lambda}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\frac{gn}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}, \\ v=\frac{\lambda}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\frac{\hbar\omega-p^2/2m-gn}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}. \tag{27}$$

Для поиска функции отклика далее найдем флуктуации, наведенные в **p**-компоненте классического поля

$$\delta\Psi^*(\mathbf{p},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d\mathbf{r}\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\delta\Psi^*(\mathbf{r},t).$$

В однородных условиях удобно записать **p**-компоненту $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ полевого оператора через оператор уничтожения частиц

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{V}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\hat{a}_{\mathbf{p}}, \tag{28}$$

так что функция отклика $\chi_{field}(\mathbf{p},\omega)$ по отношению к полевому оператору $\hat{F} = \hat{\psi}(\mathbf{p})$ в импульсном пространстве может быть выражена через функцию отклика бозе-амплитуды $\chi_{particle}(\mathbf{p},\omega)$ (т. е. по отношению к оператору уничтожения частиц $\hat{F} = \hat{a}_{\mathbf{p}}$):

$$\chi_{field}(\mathbf{p},\omega) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\chi_{particle}(\mathbf{p},\omega)\;. \tag{29}$$

Используя выражения (27) для u и v, окончательно получаем следующий результат для функции отклика бозе-амплитуды:

$$\chi_{particle}(\mathbf{p},\omega) = \frac{\hbar\omega - p^2/2m - gn}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)} = -\frac{1}{2\epsilon(p)}\times$$
$$\times\left(\frac{p^2/2m+gn-\epsilon(p)}{\hbar\omega+i\eta-\epsilon(p)} - \frac{p^2/2m+gn+\epsilon(p)}{\hbar\omega+i\eta+\epsilon(p)}\right), \tag{30}$$

откуда получается выражение

$$A(\mathbf{p},\omega) = \frac{1}{2\epsilon(p)}\left[\left(\frac{p^2}{2m}+gn-\epsilon(p)\right)\delta(\hbar\omega-\epsilon(p)) - \right.$$
$$\left. - \left(\frac{p^2}{2m}+gn+\epsilon(p)\right)\delta(\hbar\omega+\epsilon(p))\right] \tag{31}$$

для спектральной функции, соответствующей мнимой части χ. Результат (30) показывает, что в большом каноническом формализме функция отклика по отношению к операторам рождения имеет те же полюсы, что и функция отклика по отношению к плотности (25). Уравнения (30), (31) можно легко переписать для канонического ансамбля, просто заменив частоту ω на $\omega + \mu/\hbar$. Это связано с тем, что оператор $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}$ ($\hat{a}_{\mathbf{p}}$) добавляет (убирает) частицу одновременно с рождением или уничтожением элементарного возбуждения в системе. В каноническом ансамбле решение для параметра порядка фактически приняло бы вид

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{-i\mu t}\Psi_0 +$$
$$+ e^{\eta t}\left(u e^{-2i\mu t}e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + v^* e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\right). \tag{32}$$

При больших значениях ω функция отклика приближается к $1/(\hbar\omega)$ в соответствии с общим результатом

$$\chi_F(\omega\to\infty) = \frac{1}{\hbar\omega}\langle[\hat{F},\hat{F}^\dagger]\rangle, \tag{33}$$

содержащим коммутатор $\hat{F}$ и $\hat{F}^\dagger$ (см. (5)) и выполняющимся для динамической восприимчивости [5] в пределе больших ω.

Используя флуктуационно-диссипационную теорему (2), можно точно воспроизвести результат (16), предсказываемый теорией Боголюбова для функции распределения частиц, характеризующейся инфракрасной расходимостью, $n_{\mathbf{p}} \to mc/p$, при малых p и ответственной за квантовое истощение конденсата.

Аналогично, можно также вывести формулу для перекрестной функции отклика бозе-амплитуда/плотность, описывающей колебания, индуцированные в среднем значении оператора рождения частиц $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}$ внешним возмущением, сопряженным к оператору плотности $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$, где $\mathbf{q} = \mathbf{p}/\hbar$. Такое возмущение изменяет волновую функцию конденсата согласно уравнениям (22), (24). Таким образом, получается

$$\chi_{particle-density}(\mathbf{p},\omega) =$$
$$= -\frac{1}{\hbar}\sum_n\left[\frac{\langle 0|\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}|n\rangle\langle n|\hat{\rho}_{\mathbf{q}}|0\rangle}{\omega-\omega_n+i\eta} - \frac{\langle 0|\hat{\rho}_{\mathbf{q}}|n\rangle\langle n|\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}|0\rangle}{\omega+\omega_m+i\eta}\right] =$$
$$= \sqrt{N}\,\frac{\hbar\omega - p^2/2m}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon^2(p)}. \tag{34}$$

Результат (34) при больших ω согласуется с асимптотикой

$$\chi_{particle-density} \to -\langle[\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}},\hat{\rho}_{\mathbf{q}}]\rangle/(\hbar\omega),$$

которая следует из правила сумм [11]. В каноническом ансамбле физический смысл уравнения (34) соответствует замене оператора $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}$ на сохраняющий число частиц оператор $\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}\hat{a}_0/\sqrt{N_0}$.

В статическом пределе результат

$$\chi_{particle-density}(\mathbf{p},\omega=0) = \sqrt{N}(p^2/2m)/\epsilon^2(p)$$

может использоваться для исследования влияния статического периодического возмущения вида

$$H_{pert} = -\lambda(\hat{\rho}_{\mathbf{q}}+\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}) = -2\lambda\sum_j\cos(qz_j)$$

на функцию распределения по импульсам, которая, как оказывается, характеризуется возникновением макроскопического заполнения

$$N_{\mathbf{p}} = N[\lambda(p^2/2m)/\epsilon^2(p)]^2$$

одночастичного состояния с импульсом $\mathbf{p}$ (и аналогично для $-\mathbf{p}$). Этот эффект также должен быть доступен для экспериментального наблюдения при относительно малых значениях λ в системах с выраженным ротонным минимумом, как это происходит при надлежащих условиях в случае с дальнодействующим дипольным взаимодействием [12–14]. Связь между возбуждениями плотности и бозе-амплитуды, определяемая уравнением (34), отражает своеобразное свойство бозе-эйнштейновского конденсата и исчезает в отсутствие когерентности, как доказано экспериментально в случае сильного внешнего поля, когда система переходит в изолирующее состояние [15].

6. ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА В НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМАХ

Полученные выше результаты могут быть непосредственно обобщены на случай неоднородного вырожденного бозе-газа в ловушке, когда гамильтониан содержит внешний статический потенциал V_{ext}. В этом случае функция отклика плотность/плотность принимает вид

$$\chi_{density}(\mathbf{q},\omega) = \\ = -\sum_n \frac{|\int d\mathbf{r}(u_n(\mathbf{r})+v_n(\mathbf{r}))\Psi_0(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|^2}{(\hbar\omega+i\eta)^2-\epsilon_n^2}, \quad (35)$$

а функция отклика по отношению к полевому оператору $F=\hat{\Psi}(\mathbf{p})$ в импульсном пространстве равна

$$\chi_{field}(\mathbf{p}) = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum_n\left[\frac{|\int d\mathbf{r}\, v_n(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}|^2}{(\hbar\omega+i\eta)-\epsilon_n} - \right. \\ \left. - \frac{|\int d\mathbf{r}\, u_n(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}|^2}{(\hbar\omega+i\eta)-\epsilon_n}\right]. \quad (36)$$

В обоих уравнениях (35) и (36) параметры u_n, v_n и ϵ_n определяются решениями связанных уравнений Гросса – Питаевского

$$\epsilon_n u_n = (H_0-\mu+2gn(\mathbf{r}))\,u_n(\mathbf{r})+gn(\mathbf{r})v_n(\mathbf{r}) - \\ -\epsilon_n v_n = (H_0-\mu+2gn(\mathbf{r}))\,v_n(\mathbf{r})+gn(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}), \quad (37)$$

которые являются аналогами уравнений Боголюбова для однородного состояния, а сумма по n включает в себя все возбуждения системы. Здесь

$$H_0 = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V_{ext}$$

— одночастичный гамильтониан. Амплитуды u_n и v_n ортогональны, удовлетворяют условию нормировки

$$\int d\mathbf{r}(u_n^* u_m - v_n^* v_m) = \delta_{nm}$$

и в однородном газе принимают вид

$$u_n \equiv u_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = u_\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

(аналогично для v_n).

Формула (36), вместе с результатом (2), позволяет вычислить распределение по импульсам

$$n(\mathbf{p}) = \langle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{p})\hat{\Psi}(\mathbf{p})\rangle = \\ = |\Psi_0(\mathbf{p})|^2 + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum_n\left|\int d\mathbf{r}\, v_n(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\right|^2. \quad (38)$$

В дополнение к среднеполевому вкладу $|\Psi_0(\mathbf{p})|^2$, фиксированному преобразованием Фурье

$$\Psi_0(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\Psi_0(\mathbf{r})$$

параметра порядка в состоянии равновесия и обеспечивающему главный вклад для $p < \hbar/R$, где R — характерный размер конденсата, уравнение (38) учитывает квантовые флуктуации, вызываемые элементарными возбуждениями системы, и дает ведущий вклад при бóльших значениях $\mathbf{p}$. Экспериментальное определение $n(\mathbf{p})$ для больших значений $\mathbf{p}$ было предметом недавнего исследования времяпролетной методикой [16]. Однако наличие взаимодействий во время расширения не позволяет в этом эксперименте обеспечить надежное определение *in situ* распределения по импульсам [17].

Другим поучительным примером является расчет флуктуаций полевого оператора $\hat{F}=\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ в координатном представлении. Получающаяся формула

$$n(\mathbf{r}) = \langle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})\rangle = |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 + \sum_n |v_n(\mathbf{r})|^2 \quad (39)$$

задает естественное разложение плотности в виде суммы значения $|\Psi_0(\mathbf{r})|^2$, получающегося из теории Гросса – Питаевского, и вклада, вызванного флуктуациями конденсата. В однородных конфигурациях значение $v_\mathbf{p}$ определяется уравнением (24), и разложение соответствует записи $N = N_0 + \delta N_0$ с $\delta N_0 = \sum_\mathbf{p} |v_p|^2 = N(8/3\sqrt{\pi})(na^3)^{1/2}$. В неоднородных конфигурациях использование уравнения (39) требует более аккуратного анализа. Фактически, в то время как флуктуации полевого оператора пропорциональны параметру возмущения, который масштабируется как $a^{3/2}$, в теории Гросса – Питаевского при вычислении параметра порядка Ψ_0 игнорируются поправки того же порядка, возникающие в результате перенормировки константы связи, как предсказано в теории Ли–Хуанга–Янга (Lee–Huang–Yang, LHY) [7, 8]. Оценивая параметр порядка Ψ_0 при помощи теории Гросса–Питаевского в приближении Томаса–Ферми (Thomas–Fermi, TF или Local Density Approximation, LDA), на самом деле легко показать, что предсказание (39) отличается от полной плотности, которую можно вывести, учитывая поправку LHY к уравнению состояния [18] (см. также работу [5], разд. 11.5). Следует отметить, что как LHY, так и флуктуационная поправка влияют на профиль плотности в той же физической области, где $r < R_{TF}$ и плотность значительно большет нуля. Эта ситуация отличается от таковой с распределением по импульсам, которое, как уже указывалось, флуктуации конденсата изменяют в области $p > \hbar/R_{TF}$, где значение $\Psi_0(\mathbf{p})$ пренебрежимо мало.

7. ХИМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ И ПОПРАВКИ К ТЕОРИИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Уравнение Гросса–Питаевского для параметра порядка (см. (21) и (26)) было получено заменой полевого оператора $\hat{\Psi}$ на классическое поле Ψ в уравнении для полевого оператора (17). В этой процедуре, применяемой к среднему значению (17), пренебрегается флуктуациями величины $\langle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\rangle$, которые можно удобно записать в виде

$$\langle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\rangle = \langle\hat{n}(\mathbf{r},t)\rangle\langle\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\rangle + \langle\delta\hat{n}(\mathbf{r},t)\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\rangle, \quad (40)$$

где $\hat{n} = \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}$, $\delta\hat{n} = \hat{n} - \langle\hat{n}\rangle$ и $\delta\hat{\Psi} = \hat{\Psi} - \langle\hat{\Psi}\rangle$. Первый член в правой части этого равенства совпадает с величиной $n(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$ и, в пренебрежении эффектами квантового истощения плотности, т. е. в предположении, что $n(\mathbf{r},t) = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)$, дает обычный член взаимодействия в уравнении Гросса–Питаевского. Второй член, напротив, связан с флуктуациями плотность/бозе-амплитуда, рассмотренными в предыдущей части статьи (см. (34)), и игнорируется при выводе уравнения Гросса–Питаевского. Явно принимая во внимание эти флуктуации, можно пертурбативно уточнить уравнение для параметра порядка с учетом поправок к теории среднего поля[2)].

[2)] Поправки к уравнениям Гросса–Питаевского, учитывающие эффекты за рамками теории среднего поля, также обсуждались в работе [19].

Первый важный результат можно получить из условия стационарности однородного решения при отсутствии внешних возмущений. Если написать

$$\delta\hat{n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\hat{\rho}_{\mathbf{q}}, \quad \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\hat{a}_{\mathbf{p}}$$

и заметить, что в однородном состоянии неисчезающий вклад дают только члены с $\mathbf{p} = -\hbar\mathbf{q}$, то уравнение для параметра порядка Ψ_0 примет вид

$$\mu\Psi_0 = gn\left(1 + \frac{g}{V}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\frac{m}{p^2}\right)\Psi_0 + g\frac{1}{V\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{p}\neq 0}\langle\hat{\rho}_{-\mathbf{p}/\hbar}\hat{a}_{\mathbf{p}}\rangle, \quad (41)$$

где, следуя алгоритму учета поправок к теории среднего поля, мы использовали перенормировку

$$g \to g\left(1 + g/V\sum_{\mathbf{p}\neq 0} m/p^2\right)$$

константы связи, позволяющей избавиться от ультрафиолетовых расходимостей. Используя тождество

$$\langle\hat{\rho}_{-\mathbf{p}/\hbar}\hat{a}_{\mathbf{p}}\rangle = \langle\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}\hat{\rho}_{\mathbf{p}/\hbar}\rangle^* = \langle\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}}\hat{\rho}_{\mathbf{p}/\hbar}\rangle$$

и уравнение (34) для функции отклика бозе-амплитуда/плотность, легко показать, что

$$\langle\hat{\rho}_{-\mathbf{p}/\hbar}\hat{a}_{\mathbf{p}}\rangle = \sqrt{N}/(2\epsilon(p))(p^2/2m - \epsilon(p)),$$

где $\epsilon(p)$ — боголюбовское выражение (12) для энергии элементарных возбуждений с импульсом p. Далее, заменяя величину $\sqrt{N/V}$ на параметр порядка Ψ_0 в последнем члене уравнения (41), мы окончательно получаем выражение для химического потенциала

$$\mu = gn + \frac{g}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbf{p}\left[\frac{p^2/2m - \epsilon(p)}{2\epsilon(p)} + \frac{gnm}{p^2}\right] = gn\left[1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2}\right], \quad (42)$$

которое включает в себя первую поправку к среднеполевому значению $\mu = gn$. Результат (42) совпадает со значением, которое можно вывести из формулы Ли–Хуанга–Янга

$$\frac{E_0}{V} = \frac{1}{2}gn^2 + \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3} \times \int d\mathbf{p}\left[\epsilon(p) - gn - \frac{p^2}{2m} + (gn)^2\frac{m}{p^2}\right] \quad (43)$$

для энергии основного состояния, что можно проверить явным вычислением при помощи термодинамического соотношения $\mu = \partial E_0/\partial N$. Для вычисления энергия Ли – Хуанга – Янга обычно проводится соответствующая диагонализация гамильтониана Боголюбова (см. вывод уравнения (11)) с учетом перенормировки константы взаимодействия, так что приведенный вывод снова демонстрирует глубокую связь между формализмом Боголюбова и таковым, основанным на уравнении для параметра порядка.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение, мы показали, что использование флуктуационно-диссипационной теоремы в пределе $T = 0$ позволяет вычислять квантовые флуктуации как оператора плотности, так и операторов рождения и уничтожения частиц вырожденного бозе-газа при помощи нестационарного уравнения Гросса – Питаевского для волновой функции конденсата — классического поля, описывающего параметр порядка системы. Этот подход особенно ярко выделяет глубокую эквивалентность подходов теории Боголюбова и теории Гросса – Питаевского, несмотря на их различную теоретическую формулировку. Пригодность подхода теории Гросса – Питаевского для описания неоднородных конфигураций может предоставить новые возможности для исследования природы флуктуаций при наличии квантовых дефектов, таких как солитоны и квантованные вихри. Мы также показали, что вычисление флуктуаций плотности частиц позволяет обобщить уравнение для параметра порядка и определить химический потенциал за рамками картины среднего поля, согласующийся с предсказаниями теории Ли – Хуанга – Янга.

Мне очень приятно поблагодарить Л. Питаевского за давнее научное сотрудничество и стимулирующие дискуссии, которые начались 30 лет назад после моего первого визита в Москву в Институт физических проблем им. П. Л. Капицы и успешно продолжаются до сих пор в Тренто.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. N. Bogoliubov, J. Phys (USSR) **11**, 23 (1947).

2. E. P. Gross, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961).

3. Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **40**, 646 (1961) [Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961)].

4. R. Kubo, Rep. Progr. Phys. **29**, 255 (1966).

5. L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose–Einstein Condensation and Superfluidity*, Oxford University Press (2016).

6. J. Gavoret and Ph. Nozieres, Ann. Phys. (NY) **28**, 349 (1964).

7. T. D. Lee and K. Huang, Phys. Rev. **105**, 1119 (1957).

8. T. D. Lee, K. Huang, and C. N. Yang, Phys. Rev. **136**, 1135 (1957).

9. L. P. Pitaevskii and S. Stringari, J. Low Temp. Phys. **85**, 377 (1991).

10. R. Lopes, Ch. Eigen, Nir Navon, D. Clément, R. P. Smith, and Z. Hadzibabic, Phys. Rev. Lett. **119**, 190404 (2017).

11. S. Stringari, Phys. Rev. B **46**, 2974 (1992).

12. L. Santos, G. V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, Phys. Rev. Lett. **90**, 250403 (2003).

13. L. Chomaz et al., Nature Phys. **14**, 442 (2018).

14. M. Jona-Lasinio, K. Lakomy, and L. Santos, Phys. Rev. A **88**, 025603 (2013).

15. M. Greiner et al., Nature **415**, 39 (2002).

16. R. Chang, Q. Bouton, H. Cayla, C. Qu, A. Aspect, C. I. Westbrook, and D. Clément, Phys. Rev. Lett. **117**, 235303 (2016).

17. Chunlei Qu, L. Pitaevskii, and S. Stringari, Phys. Rev. A **94**, 063635 (2016).

18. E. Timmermans, P. Tommasini, and K. Huang, Phys. Rev. A **55**, 3645 (1997).

19. Y. Castin and R. Dum, Phys. Rev. A **57**, 3008 (1998).