Письма в ЖЭТФ, том 106, вып. 6, с. 365 – 367 © 2017 г. 25 сентября

Термодинамика квантового газа и двухчастичная функция Грина

В. Б. Бобров[1)]

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Национальный исследовательский университет "МЭИ", 111250 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 июля 2017 г.

После переработки 7 августа 2017 г.

С использованием теоремы вириала и уравнения движения для одночастичной функции Грина показано, что термодинамические свойства однокомпонентного квантового газа полностью определяются двухчастичной функцией Грина вне рамок теории возмущений.

DOI: 10.7868/S0370274X17180084

Благодаря экспериментальным достижениям сверхнизких температур все больше возрастает интерес к исследованиям квантовых газов (см. [1–5] и ссылки там). Наиболее распространенный подход к исследованию термодинамических свойств таких систем основан на использовании методов квантовой теории поля и соответствующей диаграммной техники теории возмущений по межчастичному взаимодействию [6, 7]. В этом случае основополагающим объектом является температурная одночастичная функция Грина (ОФГ), что обусловлено возможностью представления термодинамического потенциала для пространственно однородной и изотропной однокомпонентной системы как функционала ОФГ. На этой основе может быть построена динамическая вариационная процедура Латтинжера–Ворда [8] и Каданова–Бейма [9]. Однако явный вид подобных функционалов может быть представлен только в виде бесконечного функционального ряда теории возмущений по межчастичному взаимодействию (см. подробнее [10, 11]). Тем самым возникает традиционная проблема "обрыва" такого ряда, т.е. обоснования методов последовательного приближенного вычисления как ОФГ, так и термодинамических функций квантового газа. В данной ситуации особое значение приобретают точные соотношения между функцией Грина и термодинамическим потенциалом квантового газа вне рамок теории возмущений.

Рассмотрим пространственно однородную и изотропную однокомпонентную систему точечных частиц с массой m и спином s, которая занимает объем V и характеризуется гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_p \varepsilon_0(p)\hat{a}_p^+\hat{a}_p + \frac{1}{2V}\sum_{p,k,q}\nu(q)\hat{a}_p^+\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q},$$

$$\varepsilon_0(p) = \frac{\hbar^2\mathbf{p}^2}{2m}. \tag{1}$$

Здесь и далее используем общепринятые обозначения:

$$p \equiv (\mathbf{p}, \sigma_1),\ k \equiv (\mathbf{k}, \sigma_2),\ q \equiv \mathbf{q}, \tag{2}$$

$\hat{a}_p^+$ и $\hat{a}_p$ – соответственно операторы рождения и уничтожения частиц в состоянии, характеризуемом импульсом $\hbar\mathbf{p}$ и проекцией спина σ_1, $\sigma_1, \sigma_2 = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$;

$$\nu(q) = \int \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\varphi(|\mathbf{r}|)d^3r, \tag{3}$$

$\varphi(|\mathbf{r}|)$ – центральный парный короткодействующий потенциал взаимодействия между частицами, который считается заданным.

Отметим, что установление явного вида потенциала межчастичного взаимодействия представляет собой важную задачу, решение которой выходит за рамки настоящей работы.

Термодинамический потенциал $\Omega(V,T,\mu)$ для рассматриваемой системы, находящейся в объеме V при температуре T (в энергетических единицах) и характеризующейся химическим потенциалом μ, равен

$$\Omega(V,T,\mu) = -T\ln\mathrm{Tr}\exp(-(\hat{H} - \mu\hat{N})/T), \tag{4}$$

где $\hat{N} = \Sigma_p\hat{a}_p^+\hat{a}_p$ – оператор полного числа частиц в системе.

Как было отмечено выше, термодинамический потенциал $\Omega(V,T,\mu)$, который полностью определяет термодинамические свойства квантового газа, яв-

[1)]e-mail: vic5907@mail.ru

ляется функционалом ОФГ $g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; \mathrm{i}\omega_n)$: $\Omega = \Omega[g]$ [8–11]. Здесь и далее

$$g(\hat{A}, \hat{B}; \mathrm{i}\omega_n) \equiv -1/2 \int_{-1/T}^{1/T} \exp(\mathrm{i}\omega_n \tau) \langle \hat{T}_\tau (\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)) \rangle d\tau, \tag{5}$$

$$\hat{A}(\tau) = \exp((\hat{H} - \mu\hat{N})\tau)\hat{A}\exp(-(\hat{H} - \mu\hat{N})\tau), \tag{6}$$

$\hat{T}_\tau$ – оператор τ-упорядочения, угловые скобки обозначают усреднение с большим каноническим распределением Гиббса (см. (4)). При этом величина ω_n равна $2n\pi T$ для системы бозонов и $(2n+1)\pi T$ для системы фермионов, где n – целое число, включая нуль [6].

Соотношения (4)–(6) имеют смысл только после перехода к термодинамическому пределу Lim_T: $V \to \infty$, $\langle \hat{N} \rangle \to \infty$, $\bar{n} = \langle \hat{N} \rangle / V = \mathrm{const}$ [12]. В результате соотношение (4) принимает вид

$$P(T, \mu) = -\mathrm{Lim}_T \Omega(V, T, \mu)/V, \tag{7}$$

где $P(T, \mu)$ – давление в квантовом газе, который характеризуется средней плотностью числа частиц $\bar{n}$.

С другой стороны, согласно теореме вириала, имеющей место для любого из распределений Гиббса (см. [12, 13] и ссылки там), справедливо равенство

$$P(T, \mu) = \frac{2\langle k \rangle}{3} - \mathrm{Lim}_T \frac{\langle \mathbf{r} \cdot \nabla_\mathbf{r} \varphi(|\mathbf{r}|) \rangle}{3V}, \tag{8}$$

где $\langle k \rangle$ – средняя кинетическая энергия рассматриваемой системы, приходящаяся на единицу занимаемого ею объема V,

$$\langle k \rangle = \mathrm{Lim}_T \frac{1}{V} \sum_p \varepsilon_0(p) f(p), \quad f(p) = \langle \hat{a}_p^+ \hat{a}_p \rangle, \tag{9}$$

$f(p)$ – точная одночастичная функция распределения по импульсам, которая в приближении идеального газа соответствует распределениям Бозе–Эйнштейна или Ферми–Дирака, а величина $\langle \mathbf{r} \cdot \nabla_\mathbf{r} \varphi(|r|) \rangle$ является вириалом для потенциальной энергии,

$$\mathrm{Lim}_T \frac{1}{V} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla_\mathbf{r} \varphi(|r|) \rangle = \frac{1}{2} \bar{n}^2 \int d^3 r (\mathbf{r} \cdot \nabla_\mathbf{r} \varphi(r)) g_2(r), \tag{10}$$

где $g_2(r)$ – точная парная корреляционная функция, которая однозначно связана со статическим структурным фактором, непосредственно измеряемым в экспериментах по рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей [14],

$$S(q) = 1 + \bar{n} \int \exp(-\mathrm{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \{g_2(r) - 1\} d^3 r, \tag{11}$$

$$\bar{n} S(q) = \mathrm{Lim}_T V^{-1} \langle \delta\hat{n}_\mathbf{q} \delta\hat{n}_{-\mathbf{q}} \rangle,$$
$$\delta\hat{n}_\mathbf{q} = \sum_k \hat{a}_{k-q}^+ \hat{a}_k - \langle \hat{N} \rangle \delta_{\mathbf{q},0}. \tag{12}$$

Из выражений (10)–(12) непосредственно следует [15]:

$$\mathrm{Lim}_T \frac{\langle \mathbf{r} \cdot \nabla_\mathbf{r} \varphi(|\mathbf{r}|) \rangle}{3V} = -\frac{1}{2} \bar{n}^2 \nu(0) - \frac{\bar{n}}{6} \int [3\nu(q) + (\mathbf{q} \cdot \nabla_\mathbf{q} \nu(q))](S(q) - 1) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \tag{13}$$

Кроме того,

$$\bar{n}(T, \mu) = \mathrm{Lim}_T \frac{1}{V} \sum_p f(p). \tag{14}$$

Обратим внимание, что термодинамический предельный переход в форме $\mathrm{Lim}_T V^{-1} \Sigma_p \to \Sigma_\sigma \int d^3 p/(2\pi)^3$ имеет место только для нормальных систем.

Согласно (8)–(14) термодинамические функции квантового газа при использовании большого канонического распределения Гиббса однозначно определяются вне рамок теории возмущений, если известны одночастичная функция распределения $f(p)$ (9) и статический структурный фактор $S(q)$ (11), (12). Тем самым возникает необходимость самосогласованного вычисления функций $f(p)$ и $S(q)$, что обусловлено невозможностью точного вычисления этих функций при учете взаимодействия между частицами.

Чтобы упростить рассмотрение этой задачи, используем спектральное представление для ОФГ (см. подробнее [6])

$$g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; \mathrm{i}\omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\, G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{E - \mathrm{i}\omega_n} dE, \tag{15}$$

где $G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)$ – запаздывающая ОФГ, которая является аналитической функцией в верхней полуплоскости комплексных значений E,

$$G^R(\hat{A}, \hat{B}; E) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^\infty \exp(\mathrm{i}Et/\hbar) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_\eta \rangle dt, \tag{16}$$

$$\hat{A}(t) = \exp(\mathrm{i}(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar)\hat{A}\exp(-\mathrm{i}(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar), \tag{17}$$

$[\hat{A}, \hat{B}]_\eta \equiv \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A}$, величина η равна $(+1)$ для системы бозонов и (-1) для системы фермионов. При этом [16, 17]:

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\, G^R(\hat{A}, \hat{B}; E)}{\exp(E/T) - \eta} dE, \tag{18}$$

$$EG^R(\hat{A},\hat{B};E) = \langle[\hat{A},\hat{B}]_\eta\rangle + G^R([\hat{A},\hat{H}-\mu\hat{N}]_{\eta=1},\hat{B};E). \quad (19)$$

Из (18), (19), учитывая (1), (9), (16), (17) и коммутационные соотношения для операторов $\hat{a}_p^+$ и $\hat{a}_p$, находим

$$f(p) = \langle\hat{a}_p^+\hat{a}_p\rangle = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{Im} G^R(\hat{a}_p,\hat{a}_p^+;E)}{\exp(E/T)-\eta}dE, \quad (20)$$

$$(E-\varepsilon_0(p)-\mu)G^R(\hat{a}_p,\hat{a}_p^+;E) =$$
$$= 1 + \frac{1}{V}\sum_{k,q}\nu(q)G^R(\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q},\hat{a}_p^+;E), \quad (21)$$

$$\langle\hat{a}_p^+\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q}\rangle = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{Im} G^R(\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q},\hat{a}_p^+;E)}{\exp(E/T)-\eta}dE. \quad (22)$$

Кроме того, согласно (12) при $q \neq 0$

$$\bar{n}(S(q)-1) = \mathrm{Lim}_T\frac{1}{V}\sum_{p,k}\langle\hat{a}_p^+\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q}\rangle. \quad (23)$$

При значении волнового вектора $q \equiv 0$ из (12) непосредственно следует известное соотношение (см. подробнее [18])

$$\bar{n}S(q\equiv 0) = T(\partial\bar{n}/\partial\mu)_T. \quad (24)$$

Таким образом, согласно (20)–(24) одночастичная функция распределения $f(p)$ (9) и статический структурный фактор $S(q)$ (12) вне рамок теории возмущений однозначно определяются двухчастичной функцией Грина $G^R(\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q},\hat{a}_p^+;E)$.

Аналогичное утверждение имеет место и в отношении термодинамических функций квантового газа в рамках большого канонического распределения Гиббса. Действительно, согласно (8)–(14), функций $f(p)$ (9) и $S(q)$ (12) достаточно для вычисления давления $P(T,\mu)$, а тем самым и термодинамического потенциала $\Omega(V,T,\mu)$ (см. (7)): $\Omega(V,T,\mu) = -P(T,\mu)V$. В свою очередь, термодинамический потенциал $\Omega(V,T,\mu)$ полностью определяет термодинамические функции рассматриваемой системы [6, 12].

Представленные выше результаты дают возможность для самосогласованного вычисления как функций $f(p)$ и $S(q)$, так и термодинамических функций квантового газа. Другими словами, через двухчастичную функцию Грина $G^R(\hat{a}_{k+q}^+\hat{a}_k\hat{a}_{p+q},\hat{a}_p^+;E)$ можно установить соответствие между равновесными корреляционными функциями $f(p)$ и $S(q)$ квантового газа, а также его термодинамическими свойствами.

Автор признателен С.А. Тригеру за полезные обсуждения. Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 14-50-00124).

1. S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
2. L. D. Carr, D. Demille, R. V. Krems, and J. Ye, New J. Phys. **11**, 055049 (2009).
3. S. Nascimbene, N. Navon, F. Chevy, and C. Salomon, New J. Phys. **12**, 103026 (2010).
4. A. Adams, L. D. Carr, Th. Schäfer, P. Steinberg, and J. E. Thomas, New J. Phys. **14**, 115009 (2012).
5. L. Salasnich and F. Toigo, Phys. Rep. **640**, 1 (2016).
6. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, ГИФМЛ, М. (1962).
7. I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
8. J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960).
9. G. Baym and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **124**, 287 (1961).
10. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006).
11. P. E. Blöchl, T. Pruschke, and M. Potthoff, Phys. Rev. B **88**, 205139 (2013).
12. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М. (1971).
13. V. B. Bobrov, S. A. Trigger, and A. Zagorodny, Phys. Rev. A **82**, 044105 (2010).
14. D. Pines and Ph. Nozieres, *The theory of quantum liquids*, W. A. Benjamin, N.Y. (1966).
15. V. Bobrov, S. Trigger, and D. Litinski, Z. Naturforsch. A **71**, 565 (2016).
16. Д. Н. Зубарев, УФН **71**, 71 (1960).
17. В. Д. Озрин, ТМФ **4**, 66 (1970).
18. V. B. Bobrov, N. I. Klyuchnikov, and S. A. Trigger, Physica A **181**, 156 (1992).