

МІЖАТОМНІ ПОТЕНЦІАЛИ РОЗРІДЖЕНОЇ БАГАТОБОЗОННОЇ СИСТЕМИ

А. А. Ровенчак

Кафедра теоретичної фізики,
Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005
e-mail: andrij@ktf.franko.lviv.ua

У роботі розглянуто задачу розрахунку міжатомного потенціалу системи бозонів. На підставі виразів, що пов'язують Фур'є-зображення міжатомного потенціалу зі структурним фактором, у границі малої густини отримано нелінійне інтегральне рівняння для розрахунку Фур'є-зображення потенціалу. За початкове наближення взято модель "майже твердих сфер", яка у граничному випадку переходить у модель твердих сфер, однак у ній відсутні неаналітичності, які спричиняють труднощі у числових розрахунках.

Вступ

Експериментальні успіхи в дослідженні явища Бозе-Айнштайнівської конденсації в лазерно-охолоджених розріджених газах лужних металів [1,2], за які було присуджено Нобелівську премію з фізики 2001 року, дали новий поштовх зусиллям, спрямованим на побудову теоретичних моделей опису Бозе-систем [3].

Хоча в багатьох випадках для встановлення властивостей розрідженої системи достатньо задати лише основні параметри міжатомної взаємодії, такі, наприклад, як радіус (при моделюванні твердими кульками), все ж з'ясування деталей потенціальної кривої становить інтерес з огляду на перспективу точніших розрахунків термодинамічних і структурних функцій, а також конденсатної фракції.

Дослідження парного потенціалу, його зв'язку зі структурою, проводилося для різних речовин. Оскільки розрахунки в роботі здійснено для рубідію-87, то цікаво

вказати деякі праці, що стосуються цього газу. В основному такі дослідження виконували за суттєво інших умов порівняно з тими, що відповідають Бозе-конденсації [4-6]. Скажімо, у праці [4] значення температури становить 1900 К, а в [6] — 185 К. Фактично йдеться про рідкий рубідій, а нас цікавитиме газ при температурах ~1 нК. Зважаючи на порівняну новизну в цьому питанні, відповідних експериментальних і теоретичних даних для порівняння бракує.

Вихідні вирази

На підставі отриманих раніше результатів для багатобозонної системи на прикладі гелію-4 [7,8] запишемо вирази для міжатомного потенціалу сильно-розрідженої системи. Відповідне рівняння для Фур'є-зображення потенціалу у/с отримується в межах формалізму колективних змінних. Воно має вигляд [7,8]

$$\begin{aligned} \frac{N}{2V} v_k + \varepsilon_k a_2(\mathbf{k}) - \varepsilon_k a_2^2(\mathbf{k}) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \varepsilon_q a_4(\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k}) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

тут ϵ_k — енергія вільної частинки, N — кількість частинок, V — об'єм системи. Коефіцієнтні функції a_n складним чином виражаються через структурний фактор.

Якщо у всіх співвідношеннях зберегти лише доданки, лінійні за густиною N/V (таке наближення є цілком виправданим, зважаючи на типові значення густини $\sim 10^{11} \text{ \AA}^{-3}$ [1]), то для Фур'є-зображення міжатомного потенціалу $v(x)$ у знерозміреній формі отримаємо:

$$v(x) = v_0(x) + \frac{1}{x} \int_0^{\infty} dy \int_{|x-y|}^{x+y} dp \, py \frac{v(p)}{p^2} \left[\frac{v(x)}{x^2} (x^2 + p^2 - y^2) + \frac{v(y)}{y^2} (x^2 + p^2 + y^2) \right], \quad (2)$$

при цьому, попри позірну розбіжність, насправді цей інтеграл виявляється збіжним, що можна показати за допомогою детального аналізу. У цьому виразі одиницею вимірювання Фур'є-зображення потенціалу виступає $4\pi\hbar^2 a/m$, а хвильового вектора — $2\pi/a$, де a — параметр довжини, зміст якого з'ясовано нижче. Така форма запису дозволяє відразу отримати результати для різних речовин, що відповідає різним значенням a та m .

Початкове наближення для $v_0(x)$ можна вибрати, виходячи з потенціалу “майже твердих сфер” [9]. У даній роботі з цією метою використано пробну функцію Маєра у вигляді

$$f(R) = \exp \left[- \left(\frac{a}{R} \right)^n \right] - 1, \quad n = 36. \quad (3)$$

У випадку Rb^{87} взято значення $a = 58.2 \text{ \AA}$ (довжина розсіяння s -хвилі) [3]. При цьому, виходячи з форми кривої, яка отримується внаслідок ітераційного розв'язування інтегрального рівняння, можна сказати, що розв'язок для Фур'є-зображення потенціалу парної взаємодії потрібно шукати у вигляді суперпозиції функцій типу

$$\frac{\cos 2\pi n x}{x^{2m}}, \quad \frac{\sin 2\pi n x}{x^{2m+1}} \quad (4)$$

із деяким загасаючим множником. Попередній аналіз вказує, що достатньо обмежитися значеннями $m, n < 4$. Однак, через складність аналітичних викладок, а також через неможливість отримати аналітичні результати навіть на проміжних етапах

розв'язування рівняння (2) (це пов'язано з його нелінійністю), було застосовано ітераційну процедуру, аналогічну до [8].

Початкове наближення $v_q^{(0)}$ виражається через структурний фактор S_q так [8]:

$$v_q^{(0)} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{V}{2N} \left(\frac{1}{S_q^2} - 1 \right), \quad (5)$$

тут вжито розмірні величини.

Обмежуючись лише доданками, лінійними за густиною, можна показати, що

$$v_q^{(0)} = -4\pi \frac{\hbar^2}{2m} q \int_0^{\infty} dR \, R \sin qR \, f(R), \quad (6)$$

де $f(R)$ — функція Маєра (3) (див., наприклад, [10], де наведено вираз для парної функції розподілу у вигляді ряду за густиною).

Результати і обговорення

Обчислення проведемо, підставляючи в інтегральний доданок у формулі (2) на місце $v(y)$ і $v(p)$ початкове наближення, відповідно, $v_0(y)$ і $v_0(p)$. Перейшовши потім до координатного простору

$$\Phi(R) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} v_{\mathbf{q}}, \quad (7)$$

для потенціалу $\Phi(R)$ матимемо криву, зображену на рис. 1. Треба зауважити, що, незважаючи на сильне відштовхування у моделі, така процедура, пов'язана з Фур'є-перетворенням, є коректною — згадаймо, наприклад, псевдопотенціал для

твердих сфер [11]. Зазначмо ще між іншим, що початкове наближення $v_0(x)$, отримане в моделі твердих сфер, не можна безпосередньо використовувати для ітерацій, оскільки інтегральний доданок у рівнянні (2) виявляється розбіжним. Проте цю незручність можна обійти, вводячи певний обрізуючий множник — експоненту з малим показником.

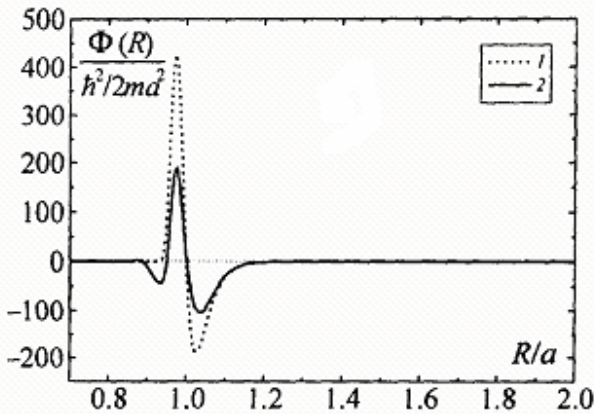


Рис. 1: Потенціал взаємодії між атомами Rb^{87} . 1 — початкове наближення, 2 — перша ітерація.

Як видно з рис. 1, на потенціальній кривій з'являється мінімум, що означає притягання між атомами. Така поведінка потенціалу свідчить про те, що застосоване наближення є кращим від, скажімо, наближення звичайних твердих сфер, у якому присутнє тільки короткосяжне відштовхування. Що стосується нульових чи від'ємних значень потенціалу на малих міжатомних віддальх і можливості квантово-механічного тунелювання крізь потенціальний бар'єр, то ймовірність такої події при малих температурах (нанокельвіновий діапазон), коли спостерігається Бозе-конденсація, є нехтівно малою.

Здійснення точнішого (неітераційного) розв'язування рівняння (2) буде предметом окремого дослідження, так само як і вивчення впливу параметрів моделі початкового наближення на результати розрахунків. На даному етапі можна стверджувати, що поведінка першої ітерації стосовно початкової якісно відображає спостережуваний раніше ефект у випадку гелію-4 [8], що дає підстави розвивати запропоновану методику.

Література

1. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* 269, No. 5221, 198 (1995).
2. K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969 (1995).
3. C. J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, 2001).
4. I. L. McLaughlin, W. H. Young, *J. Phys. F: Met. Phys.* 14, 1 (1984).
5. R. T. Arlinghaus, P. T. Cummings, *J. Phys. F: Met. Phys.* 17, 797 (1987).
6. R. N. Singh, R. P. Jaju, I. Ali, *Physica B* 299, 108 (2001).
7. И. А. Вакарчук, *Теор. мат. физ.* 80, 439 (1989); *Теор. мат. физ.* 82, 438 (1990).
8. I. O. Vakarchuk, V. V. Babin, A. A. Rovenchak, *J. Phys. Stud. (Lviv)* 4, 16 (2000).
9. I. O. Vakarchuk, A. A. Rovenchak, *J. Phys. Stud. (Lviv)* 5, 126 (2001).
10. Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1* (Мир, Москва, 1978).
11. К. Хуанг, *Статистическая механика* (Москва, Мир, 1966).

INTERATOMIC POTENTIALS OF DILUTE MANY-BOSON SYSTEM

A. A. Rovenchak

Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,
12 Drahomanov St., Lviv, 79005
e-mail: andrij@ktf.franko.lviv.ua

A problem of the interatomic potential calculation for the boson system is considered. Expressions relating the Fourier-image of the interatomic potential and the structure factor are utilized to obtain a non-linear integral equation in the low-density limit. The model of 'almost hard spheres' is used as the initial approximation. This model in the limiting case turns into the hard spheres but it has no non-analiticities which cause difficulties in the numerical computations.