Физика низких температур, 2005, т. 31, № 10, с. 1100–1103

Динамическая электрострикция бозе-конденсата и системы нейтральных атомов

А.М. Косевич

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 30 мая 2005 г., после переработки 25 июля 2005 г.

Показано, что конденсат бозе-газа нейтральных атомов обладает электрическими свойствами, которые проявляются при динамике конденсата и не сводятся к тривиальной поляризации атомных газов во внешнем электрическом поле. Использовано понятие изотропного квадрупольного момента атома, распределение которого создает распределение макроскопического электрического потенциала $\langle\varphi\rangle$ в системе нейтральных атомов. Неоднородное распределение атомов, возникающее, например, в звуковой волне, порождает электрическое поле, поведение которого определяется динамикой $\langle\varphi\rangle$.

Показано, що конденсат бозе-газу нейтральних атомів має електричні властивості, що виявляються при динаміці конденсату і не зводяться до тривіальної поляризації атомних газів у зовнішньому електричному полі. Використано поняття ізотропного квадрупольного моменту атома, розподіл якого породжує розподіл макроскопічного електричного потенціалу $\langle\varphi\rangle$ у системі нейтральних атомів. Неоднорідний розподіл атомів, що виникає, наприклад, у звуковій хвилі, породжує електричне поле, поводження якого визначається динамікою $\langle\varphi\rangle$.

PACS: 47.27.Eq, 67.40.Db

Рассмотрим бозе-конденсат нейтрального газа, атомы которого находятся в основном S-состоянии и, следовательно, не обладают собственными дипольными моментами. Электрический потенциал вне такого атома равен нулю. Но в атоме существует внутриатомный электрический потенциал, созданный в основном положительно заряженным ядром. Его значение нетрудно найти, а макроскопический смысл легко понять, исходя из соображений классической электродинамики. Для оценки этого потенциала изучим модельное распределение электрического потенциала внутри атома. В длинноволновом приближении такой потенциал характеризуется его средним значением. Используем простейшую модель атома в S-состоянии, считая электроны распределенными равномерно на сфере радиуса a с полным зарядом $-Z|e|$. Средний электростатический потенциал внутри такой сферы-атома объемом $V_0 = 4\pi a^3/3$ равен $\varphi_0 = 3Z|e|/(2a)$. Следовательно, атом создает потенциал, при макроскопическом описании равный

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_0 V_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \qquad (1)$$

где $\mathbf{x}_0$ — координата центра тяжести атома.

Соотношению (1) легко дать строгий вывод, указав степень приближения. Пусть φ — электрический потенциал атома, определяемый уравнением Пуассона $\Delta\varphi = -4\pi\rho_{\rm el}$, где $\rho_{\rm el}$ — плотность заряда в атоме:

$$\rho_{\rm el}(\mathbf{x}) = |e|[Z\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \eta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)]; \qquad (2)$$

$\eta(\mathbf{x})$ — плотность распределения электронов в атоме.

Вычисления удобно выполнять в $\mathbf{k}$-представлении, введя компоненты фурье-потенциала и плотности заряда:

$$\varphi_k = \int \varphi(\mathbf{x})\, e^{-i\mathbf{kx}} dV, \quad \rho_k = |e|(Z - \eta_k)\, e^{-i\mathbf{kx}_0}.$$

Эти компонентны связаны соотношением, вытекающим очевидным образом из уравнения Пуассона, поэтому

$$k^2\varphi_k = 4\pi\rho_k = 4\pi|e|(Z - \eta_k)\, e^{-i\mathbf{kx}_0}. \qquad (3)$$

Желая получить замкнутые формулы, будем считать, что распределение электронного заряда величины Z в атоме описывается квадратом модуля волновой функции S-состояния электрона в водородоподобном атоме:

$$\eta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)=\eta(|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|)=\frac{Z}{\pi a^3}\exp\left(-\frac{2\,|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|}{a}\right),$$

где a — боровский радиус. Тогда компонента Фурье будет равна

$$\eta_k=\frac{Z}{(1+\kappa^2)^2},\quad \kappa=\frac{ak}{2}\,. \tag{4}$$

Подставляя (4) в (3), находим

$$\varphi_k=\pi Z|e|a^2\left(\frac{1}{1+\kappa^2}+\frac{1}{(1+\kappa^2)^2}\right)\mathrm{e}^{-i\mathbf{kx}_0}. \tag{5}$$

Произведение ea^2 имеет размерность квадрупольного момента, и величина $q=-Z|e|a^2$ названа в [1] изотропным квадрупольным моментом (ИКМ) атома. В длинноволновом приближении ($ak<<1$) соотношение (5) сводится к

$$\varphi_k=2\pi Z|e|a^2\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{kx}_0}. \tag{6}$$

Ясно, что фурье-образу (6) в координатном представлении соответствует потенциал Ферми [2]

$$\varphi(\mathbf{x})=-\,2\pi q\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0), \tag{7}$$

который с точностью до обозначений совпадает с полученным путем качественных оценок потенциалом (1). Можно считать, что этим оправдывается использование формул (1) или (7) при длинноволновых расчетах. Однако мы продолжим вычисления и получим более точный явный вид функции $\varphi(\mathbf{x})$.

Используя сравнительно простой вид фурье-образа (5), вычислим сам потенциал:

$$\varphi(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\varphi\,\mathrm{e}^{i\mathbf{kx}}\,d^3k=\frac{Z|e|}{r}\left(1+\frac{r}{a}\right)\mathrm{e}^{-2r/a}, \tag{8}$$

где координата отсчитывается от ядра атома: $r=|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|$. «Достоверность» формулы (8) подтверждается разумным поведением потенциала в предельных случаях $r<<a$ и $r>>a$. Она описывает сильнолокализованное распределение потенциала, которое в длинноволновом приближении вполне может характеризоваться как дельтаобразное. Действительно, суммарный по всему объему потенциал (8) равен

$$\int\varphi(\mathbf{x})dV=2\pi Z|e|a^2,$$

что позволяет представить потенциал в виде (7).

Итак, вокруг нейтрального атома возникает быстро спадающее с расстоянием электрическое поле

$$\mathbf{E}=2\pi q\ \mathrm{grad}\ \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0).$$

Каждый атом создает локализованное на нем распределение электрического поля типа центра дилатации в теории упругости с равны нулю полным вектором $\langle\mathbf{E}\rangle$, но с отличным от нуля «продольным моментом» $\langle\mathbf{xE}\rangle\neq 0$. В используемой простой модели атома это поле возникает на сфере радиуса a, где сосредоточен двойной электрический слой, разделяющий внутреннюю часть атома (имеющую потенциал φ_0) и внешнюю часть пространства (где потенциал равен нулю). Направлено это поле по радиусу, т.е. нормально упомянутой сфере, образуя «электрический ёж». Считая толщину двойного слоя равной a, получаем величину электрического поля на атоме

$$E_0=\varphi_0/a=-\,3Z|e|/(2a^2)=2\pi q/(aV_0)\,.$$

Система атомов создает распределение электрического потенциала

$$\varphi(\mathbf{x})=2\pi q\;n(\mathbf{x}),\quad n(\mathbf{x})=\sum_\alpha\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha), \tag{9}$$

где $\mathbf{x}_\alpha$ — координата α-го атома, суммируется по всем атомам в системе, а $n(\mathbf{x})$ — микроскопически определенная плотность распределения атомов.

Необходимо отметить, что полученные выше формулы не специфичны для атомов бозе-конденсата, и в длинноволновом приближении описывают классические электрические свойства любых почти идеальных газов. Тем не менее, вычислим средние значения электрических характеристик в некотором состоянии конденсата, описывающем его основное или некоторое слабовозбужденное стационарное состояние. В когерентном конденсатном состоянии атомы образуют единую упорядоченную структуру, характеризующуюся волновой функцией

$$\Psi(\mathbf{x}_\alpha)=\Psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_3,\ldots). \tag{10}$$

Средняя плотность атомов в рассматриваемом состоянии

$$\langle n(\mathbf{x})\rangle=\sum_\alpha\langle\Psi|\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha)|\Psi\rangle=\sum_\alpha|\psi_\alpha(\mathbf{x})|^2, \tag{11}$$

где введена одночастичная плотность

$$|\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha)|^2=\int|\Psi(\ldots,\mathbf{x}_\beta,\ldots)|^2\prod_{\beta\neq\alpha}dV_\beta.$$

В почти идеальном бозе-газе для описания слабовозбужденных длинноволновых состояний можно воспользоваться приближением типа среднего поля, предполагая все атомы находящимися в одном и том же одночастичном квантовом состоянии, волновая функция которого $\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha)=\psi_0(\mathbf{x}_\alpha)$ (для всех α) удовлетворяет уравнению Гросса—Питаевского [3].

В таком приближении обычно находится спектр Боголюбова для слабовозбужденных состояний конденсата.

В записи (11) подразумевается, что плотность атомов в конденсате может быть функцией координат, однако существенно меняющихся на расстояниях, больших по сравнению с межатомными. Именно так трактуется возможность описания возбуждений конденсата в теории сверхтекучести [3].

Средний электрический потенциал получается усреднением (9) по положениям центров тяжести всех атомов, т.е. по состоянию, описываемому функцией (10):

$$\langle\varphi\rangle = \langle\Psi|\varphi|\Psi\rangle = -2\pi q \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{x})|^2 = -2\pi q\ \langle n(\mathbf{x})\rangle, \tag{12}$$

и определяется средней плотностью атомов.

Поскольку практически все атомы в бозе-конденсате находятся в состоянии с $\mathbf{p} = 0$, они чувствуют усредненный потенциал (12). Потенциал $\langle\varphi\rangle$ выступает как самостоятельная характеристика, определяющая распределение изотропного квадрупольного момента. Можно считать, что наличие поля $\langle\varphi\rangle$ — это проявление «дальнего порядка», свойственного конденсатному состоянию бозе-газа.

Взаимодействие нейтрального атома с электрическим полем в линейном по полю приближении имеет вид $\delta U_{\text{int}} = (1/2)q\Delta\varphi$, где q — ИКМ атома, а Δ — оператор Лапласа. Эта формула позволяет найти энергию парного электрического взаимодействия двух нейтральных атомов:

$$U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = -2\pi q^2 \Delta\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \tag{13}$$

компонента Фурье которой равна

$$U_k = \pi q^2 k^2. \tag{14}$$

Однако взаимодействие (13), которое является длинноволновым пределом прямого кулоновского взаимодействия, не исчерпывает описание возможных взаимодействий атомов в конденсате. Во-первых, в формуле (13) и во всех предыдущих расчетах предполагалось, что распределение электронов «жесткое» и не деформируется при контактном взаимодействии. Однако имеет место сильное дополнительное взаимодействие атомов, обусловленное деформацией электронных оболочек при сближении атомов и обладающее независящей от $\mathbf{k}$ компонентой Фурье (напоминаем, что анализируется случай $(ak)^2 \ll 1$), — оно в первую очередь учитывается как при расчете боголюбовского спектра колебаний конденсата, так и при формулировке уравнений Гросса—Питаевского [3]. Во-вторых, анализ такого атомного контактного взаимодействия, выполненный в работе [4], приводит к выводу, что в формуле для энергии парного взаимодействия $U(\mathbf{x}) = U_0\delta(\mathbf{x})$ следует учитывать конечный размер атома a. В сферических координатах это можно сделать, считая $r \gg a$ и беря энергию взаимодействия в виде $U(\mathbf{x}) = U_0/(4\pi a^2)\delta(r - a)$. В результате компонента Фурье U_k, кроме постоянной части U_0, приобретает дополнительную поправку, имеющую сравнимый с (14) порядок величины $(ak)^2$, но отличающуюся от (14) знаком. Поэтому энергию парного взаимодействия нейтральных атомов в длинноволновом приближении следует писать в виде

$$U(\mathbf{x}) = U_0\delta(\mathbf{x}) + U_1 a^2 \Delta\delta(\mathbf{x}), \tag{15}$$

где параметр U_1 имеет порядок величины U_0, но его значение и знак могут быть изучены лишь в результате микроскопического расчета. Тем не менее формул (7) и (12) достаточно для описания электрических явлений в конденсате, поскольку электрический эффект очень мал, и распределение атомов в системе может быть получено и описано без учета этого эффекта.

В пространственно-неоднородном случае, когда n_0 зависит от координат (в указанной выше степени), возникает среднее электрическое поле

$$\mathbf{E} = 2\pi q \ \mathrm{grad}\ n_0. \tag{16}$$

Заметим, что как электрические потенциал и поле, так и распределение электрического заряда непосредственно пропорциональны средней плотности распределения атомных изотропных квадрупольных моментов в газе, т.е. величине

$$Q = q\langle n(\mathbf{x})\rangle.$$

Однако, согласно электродинамике сплошных сред, неоднородное распределение плотности квадрупольных моментов даже в отсутствие внешнего электрического поля порождает поляризацию газа с вектором поляризации

$$\mathbf{P} = -\frac{1}{2}\,\mathrm{grad}\,Q. \tag{17}$$

Эквивалентная этому выражению формула используется автором [5] со ссылкой на [6] при обсуждении поляризации квантовой жидкости.

Отметим, что созданные неоднородностью величины Q электрическое поле и вектор поляризации таковы, что они не создают вектора индукции в газе:

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = 0.$$

Этот результат отражает отсутствие свободных сторонних зарядов в газе. Следовательно, низкочастотная динамика рассматриваемого газа не может породить длинноволновые поперечные колебания электромагнитного поля. Но, как показано, неоднородность распределения атомов в газе приводит к возникновению продольных электрического поля и поляризации газа.

Контролируемая неоднородность плотности в бозе-газе легче всего создается при распространении первого звука, амплитуда которого определяется осцилляциями давления p в газе. В таком случае при низких температурах имеем

$$\delta\varphi = -\frac{2\pi q}{ms^2}\delta p = \frac{2Z\pi|e|a^2}{ms^2}\delta p \ , \tag{18}$$

где m — масса атома, s — скорость звука. Возбуждение электрического поля градиентом давления в звуковой волне естественно назвать динамической электрострикцией.

Выше отмечалось, что формулы (7) и (12) не специфичны для атомов бозе-конденсата, и в длинноволновом приближении описывают электрические свойства любых атомов. В частности, формула (18) должна описывать электрическое поле в диэлектрической квантовой жидкости, например в He II. Однако смысл, величина и даже знак параметра q в (18), возможно, будут иными. Дело в том, что при записи основных формул предполагалось, что распределение электронов $n(\mathbf{x}-\mathbf{x})_0$ в рассматриваемом атоме зависит только от внутриатомных электрических взаимодействий — другие атомы далеки. В жидкости такое предположение неверно — взаимная электрическая поляризация соседних атомов существенно деформирует электронные оболочки, и плотность электронов становится иной. В первом приближении по эффекту поляризации средний дипольный момент каждого атома по-прежнему равен нулю. Однако в следующем приближении, в котором вычисляются обычно силы Ван дер Ваальса (см. [2]), возникает отличный от нуля эффект, пропорциональный средним квадратам флуктуаций индуцированных дипольных моментов, и в разложении (4) появляется дополнительное слагаемое, пропорциональное $(ak)^2$. В результате соотношение (16) принимает вид

$$\mathbf{E} = -\frac{2Z\pi|e|}{ms^2}\,\mathrm{grad}\,(l_0^2 p), \tag{19}$$

где параметр l_0^2 (естественно, зависящий от состояния системы) превращается в феноменологический параметр модели, величина которого должна определяться сравнением формулы (19) с экспериментально измеренным электрическим полем в нейтральной жидкости. Следовательно, представляет интерес экспериментальное наблюдение электрических осцилляций при прохождении первого звука в жидком гелии примерно в тех же условиях, при которых наблюдались электрические эффекты в сверхтекучем гелии при прохождении второго звука [7].

Автор благодарен Э.А. Пашицкому за обсуждение и В.Д. Нацику за критические замечания.

1. А.М. Косевич, *ФНТ* **31**, 50 (2005).
2. І.О. Вакарчук, *Квантова механіка*, Львів, ЛНУ (2004).
3. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, часть 2, Наука, Москва (1978).
4. K.A. Brueckner and K. Sawada, *Phys. Rev.* **106**, 1128 (1957).
5. L.A. Melnikovsky, arxiv: *cond-mat/0505102*, V1, 4 May (2005).
6. J. Prost and J.P. Marceron, *J. Phys.* **38**, 315 (1977).
7. А.С. Рыбалко, *ФНТ* **30**, 1321 (2004).

Dynamic electrostriction of Bose-condensate and a system of neutral atoms

A.M. Kosevich

It is shown that a condensate of Bose gas consisting of neutral atoms has got electrical properties which are shown in dynamics of the condensates and not reduced to trivial polarization of atomic gases in an external electric field. The concept of an isotropic quadrupole moment is used. Distribution of the isotropic quadrupole moment produces a distribution of macroscopic electric potential $\langle\varphi\rangle$ in a system of neutral atoms. A nonuniform distribution of atoms arising, for example, in a sound wave, produces the electrical field which dynamics is determined by the dynamics of $\langle\varphi\rangle$.