Физика низких температур, 1998, т. 24, № 2, с. 176–179

Бозе-эйнштейновская конденсация и теплоемкость неидеального газа

В. С. Ярунин

Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Россия, Дубна

Теория Н. Н. Боголюбова неидеального газа применена для квазиклассического описания нелинейной динамики плотности бозе-конденсата. Аналитические вычисления приводят к температурной зависимости теплоемкости C_v, присущей сверхтекучему ^{4}He при температурах ниже и выше критической T_c, кроме интервала 1,6 К < T < 2,2 К.

Теорію М. М. Боголюбова неідеального газу застосовано для квазікласичного опису нелінійної динаміки густини бозе-конденсата. Аналітичні обчислення приводять до температурної залежності теплоємності C_v, яка властива надплинному ^{4}He при температурах нижче та вище критичної T_c, окрім інтервалу 1,6 К < T < 2,2 К.

PACS: **05.30.–d**, **67.40.–w**

Модель неидеального газа Боголюбова обычно применяется к низкотемпературным (T ~ 0 К) состояниям бозе-конденсата. Это вызвано, в частности, тем, что в пределе малых плотностей конденсата $\rho \sim 0$ ($T \sim T_c$) спектр возбуждений модели далек от экспериментального. Однако исследование квазиклассической динамики ρ в модели Боголюбова показывает, что ее термодинамические свойства зависят более от вида решения нелинейных уравнений движения, чем от деталей спектра возбуждений. В результате удается найти приближение, приводящее к описанию теплоемкости C_v в согласии с экспериментами для сверхтекучего ^{4}He при температурах ниже и выше критической T_c, кроме интервала 1,6–2,2 К.

Рассмотрим модель Боголюбова неидеального бозе-газа [1]

$$H = h + \sum_{k\neq 0}\left[\Omega_k b_k^+ b_k + \frac{g_k}{2V}\left(b_k^+ b_{-k}^+ a^2 + b_k b_{-k} a^{*2} + 2b_k^+ b_k |a|^2\right) + \frac{g_0}{V} b_k^+ b_k |a|^2\right],$$
$$h = g_0 \frac{|a|^4}{2V}, \quad \Omega_k = \frac{k^3}{\mu}, \quad \mu = 2m . \tag{1}$$

Здесь числовые переменные a, a^* описывают амплитуду частиц конденсата с импульсом $k = 0$; b^+, b — операторы рождения и уничтожения надконденсатных частиц. Гамильтониан H имеет «квазиклассический» интеграл движения [2]

$$\frac{dn}{dt} = \frac{d}{dt}\left(|a|^2 + \sum_{k\neq 0} b_k^+ b_k\right) =$$
$$= \{H, |a|^2\} + i\left[H, \sum_{k\neq 0} b_k^+ b_k\right] = 0 ,$$

в результате чего статистическая сумма Q системы (1) может быть записана в виде интеграла по траекториям со связью:

$$Q = \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta H}\delta_{N,n}\right) =$$
$$= \int d^2 a \prod_{k\neq 0} \int Db_k^* D\, b_k \int_{-\pi}^{\pi} dy \, \exp\left[iy(n - N) + S(0, \beta)\right].$$

Рассматривая в статистической сумме бозе-кондесат как «медленную» подсистему и интегрируя по «быстрым» надконденсатным траекториям b_k^*, b_k, получаем квазиклассическое эффективное действие конденсата S_{ef} [3]:

$$Q = \int d\rho d\nu \, \exp\left[S_{\text{ef}}(\rho, \nu)\right],$$

$$S_{\text{ef}} = -\beta V\left(\frac{g_0\rho^2}{2} - \nu\rho + \nu R\right) + $$
$$+ cV \int k^2 \left[\frac{(\omega_k - \nu)\beta}{2} - 2 \ln \operatorname{sh}\left(\frac{\beta E_k}{4}\right)\right] dk ,$$

$$E_k = \left[(\Omega_k + \rho g_0 - \nu)^2 + 2\rho g_k(\Omega_k + \rho g_0 - \nu)\right]^{1/2},$$

$$\nu = i\,\frac{y}{\beta}, \quad \rho = \frac{|a|^2}{V}, \quad R = \frac{N}{V}, \quad c^{-1} = 2\pi^2 h^3 .$$

Вариационные уравнения $\delta S_{\text{ef}}(\rho, \nu) = 0$ имеют вид

$$R = \rho + r, \quad \frac{\nu}{g_0} - 2r = \rho\left[1 - \frac{G(\rho)}{g_0}\right], \qquad (2)$$

явное выражение для плотности надконденсатных частиц $r(\rho, \nu)$ и эффективного взаимодействия между конденсатными и надконденсатными частицами $G(\rho, \nu)$ приведено в [3,4]; g_0 — взаимодействие между частицами конденсата.

После подстановки решений уравнений (2) в эффективное действие S_{ef} получаем формулы для статистической суммы Q и свободной энергии F

$$Q \simeq (\sqrt{\beta g_0}\,)^{-1}\, e^{S_{\text{ef}}|_0}, \quad F = -\frac{1}{V\beta}\, S_{\text{ef}}|_0 .$$

Введем модель взаимодействия между атомами бозе-газа:

$$g_k = \begin{cases} g_0(1 - k^2/k_0^2) \geq 0 & (0 \leq k \leq k_0), \\ g_0[(k - 2k_0)^2/k_0^2 - 1] \leq 0 & (k_0 \leq k \leq 2k_0) . \end{cases}$$

Можно показать [3,5], что две ветви спектра для значений параметра связи $\nu_1 = \rho g_0$ и $\nu_2 = 3\rho g_0$ удовлетворяют условию $E_k \to 0$, $k \to 0$ отсутствия щели энергии возбуждений. Первая из них — ветвь возбуждений теории Боголюбова, вторая аналогична описанной в [6].

Проанализируем уравнения $\delta S_{\text{ef}}(\rho, \nu) = 0$ для нахождения значений ρ и β, совместимых с $\nu_{1,2}$. Заметим прежде всего, что низкотемпературное приближение для описания бозе-конденсации может быть выражено неравенством $\beta E_k > 4$. Далее, условие $r \geq 0$ приводит к ограничению температуры значением T_c в случае ν_1, но не сказывается в случае ν_2, так что уравнения (2) принимают вид

$$R = \rho_1 + r_1, \quad 2g_0 r_1 = \rho_1 G(\rho_1) \quad (\nu = \nu_1),$$
$$T < T_c \equiv \frac{R g_0}{4k_B} \simeq 3\ \text{K}, \qquad (3)$$

$$R = \rho_2 + r_2,\ 2g_0 r_2 = \rho_2[2g_0 + G(\rho_2)]\ (\nu = \nu_2),\ T < \infty . \qquad (4)$$

Нулевое приближение для G в уравнениях (3), (4) в виде «нетривиального» и «тривиального» значений плотности идеального бозе-газа

$$G(\rho_{1,2}) \to G_0(\rho_{1,2}^0), \quad \rho_1^0 = R[1 - (T/T_c)^{3/2}], \quad \rho_2^0 \equiv 0$$

приводит к «нетривиальному» и «тривиальному» решениям этих уравнений:

$$\rho_1 = \frac{R}{1 + x_1}, \quad r_1 = \frac{R x_1}{1 + x_1},$$

$$x_1 = \frac{G_0(\rho_1^0)}{2g_0} = \frac{r_1}{\rho_1}, \quad T < T_c ,$$

$$\rho_2 = \frac{r_2}{1 + x_2} < r_2 = \frac{R(1 + x_2)}{2 + x_2},$$

$$x_2 = \frac{G_0(\rho_2^0)}{2g_0}, \quad \frac{r_2}{\rho_2} = x_2 + 1 .$$

Можно показать [5], что свободные энергии, соответствующие этим решениям, связаны неравенством $F_1 < F_2$, и поэтому решения справедливы при температурах, меньших и больших критической, так что теплоемкость определяется формулами

$$C_v = -VT\,\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}, \quad F = \begin{cases} F_1, & T < T_c, \\ F_2, & T > T_c . \end{cases}$$

Для «нетривиального» решения можно рассмотреть две области температур. 1) При низких температурах ($T \ll T_c$, $\rho \simeq R$) вклад фононных возбуждений $E_{k1} \simeq k k_c/\mu$ в C_v дает

$$C_v \simeq \frac{k_B V (k_B T)^3}{\varepsilon_c^{3/2}}\, J_1 ,$$

$$\varepsilon_c = \frac{k_c^2}{\mu} = g_0\, \rho_1^0 = g_0 R\left[1 - (T/T_c)^{3/2}\right] \simeq g_0 R ,$$

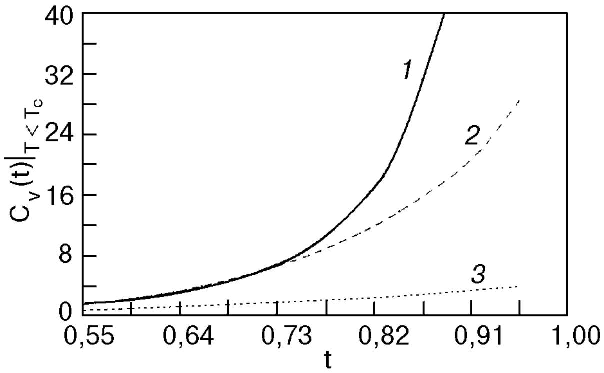

Рис. 1. Теплоемкость бозе-газа как функция t при $T < T_c$: расчет (*1*); экспериментальные данные [7] (*2*); расчет по формуле $C_v \sim T^3$ (*3*).

$$J_1 = \kappa J_1 0\ ,\quad \kappa = \mu^{3/2}\,\frac{c}{2}\ ,\quad J_1^0 \simeq \int\limits_4^{\beta_c E_{k_0 1}} y^3 dy\ .$$

2) При температурах близких к T_c ($T < T_c$, $\rho << R$) зависимость $\varepsilon_c = g_0\rho_1^0$ от температуры приводит к формулам

$$C_v(t) = \frac{VTJ_2}{\varepsilon_c^{3/2}}\,\frac{\partial^2 (k_BT)^4}{\partial T^2} = 3k_BV(k_BT_c)^{3/2}J_2\zeta(t)\ ,$$

$$t = \frac{T}{T_c}\ ,\quad \zeta(t) = \frac{4t^3}{(1-t^{3/2})^{3/2}}\ ,\quad J_2 = 2\kappa J_2^0\ ,$$

$$J_2^0 = \int\limits_{y_0}^{\infty} y^2 e^{-y/2} dy\ ,$$

параметр $y_0 > 4$ разделяет области температур выше и ниже критрической.

Для «тривиального» ($T > T_c$, $\rho << R$) решения используем разложение в степенной ряд функции $F_2(x)$ при $x = \gamma\sqrt{k_BT} << 1$

$$C_v(\tau) = 8k_BV(k_BT_c)^3R^{-1}J_3^0\,\xi(\tau)\ ,$$

$$\xi(\tau) = \frac{1}{4}\,\tau^{-1/2} - \frac{3}{4}\,\tau^{1/2} + \tau\ ,$$

$$F_2(x) \simeq \frac{g_0R^2}{8}\Big[4 + a_1(k_BT)^{1/2} - a_2(k_BT) + {}$$
$$+ a_3\,(k_BT)^{3/2} + a_4(k_BT)^2\Big]\ ,$$

$$a_1 = \gamma\ ,\quad a_2 = 2\gamma^2\ ,\quad a_3 = 2\gamma^3\ ,\quad a_4 = -0{,}5\gamma^4\ ,$$

$$\gamma = g_0\kappa\,J_3^0\ ,\quad J_3^0 = \int\limits_4^{y_0} \frac{dy}{\sqrt{y}}\ .$$

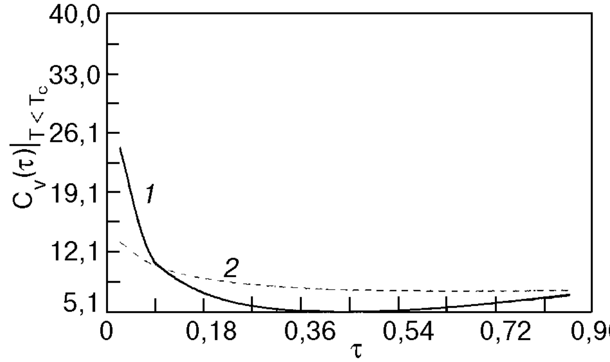

Рис. 2. Теплоемкость бозе-газа как функция τ при $T > T_c$: расчет (*1*); экспериментальные данные [7] (*2*).

Параметр y_0 находится из условия совмещения масштаба величин $C_v(t)$ для $T < T_c$ и $C_v(\tau)$ для $T > T_c$ в единицах Дж·(моль·К)$^{-1}$. Для этого испольэуются оценки интегралов

$$J_3^0 = 2(\sqrt{y_0} - 2)\ ,\quad J_2^0 \sim 2y_0^2 \exp(-y_0/2)\ .$$

В частности, для сверхтекучего ^{4}He экспериментально наблюдаемое соотношение масштабов $C_v(t)$ и $C_v(\tau)$ следует при использовании преобразования

$$\frac{J_3^0}{J_2^0} = \frac{\sqrt{y_0} - 2}{y_0^2 \exp(-y_0/2)} \to \frac{1}{20}\ ,\quad \xi(\tau) \to 20\xi(\tau)\ ,$$

что приводит к значению параметра $y_0 = 4{,}4$ и уравнению для функции $\tau(T)$

$$\frac{\tau}{\tau_0} = \frac{T - T_c}{T_0 - T_c}\ , \tag{5}$$

$\tau_0 \to 0$ при $T_0 \to T_c$.

Начальное значение температуры T_0 (при $\tau_0 = 0{,}03$) в уравнении (5) принято равным 2,2 К при температуре перехода $T_c = 2{,}18$ К, конечное значение температуры $T = 2{,}9$ К ($\tau = 0{,}86$). Результаты вычислений представлены на рис. 1 и 2 для $C_v|_{T<T_c}$ и $C_v|_{T>T_c}$ соответственно. По вертикальным осям отложены значения теплоемкости в единицах Дж·(моль·К)$^{-1}$. Сплошные линии изображают вычисления по приведенным выше формулам. Пунктир и точки на рис. 1 соответствуют экспериментальным данным [7] и формуле $C_v \sim T^3$ для фононной теплоемкости. Пунктир на рис. 2 соответствует экспериментальным данным [7]. На рисунках видно, что разумное совпадение теории с экспериментом [7] имеется при температурах 0 К < T < 1,6 К и 2,2 К < T < 2,9 К.

1. Н. Н. Боголюбов, *Изв. АН СССР, Сер. физ.* **11**, 77 (1947).
2. В. С. Ярунин, *Теор. и мат. физ.* **96**, 37 (1993).
3. V. S. Yarunin and L. A. Siurakshina, *Physica* **A215**, 261 (1995).
4. V. S. Yarunin, *Physica* **A232**, 436 (1996).
5. В. С. Ярунин, *Теор. и мат. физ.* **109**, 295 (1996).
6. V. I. Yukalov, *Mod. Phys. Lett.* **5**, 725 (1991).
7. O. V. Lounasmaa, *Cryogenics* **1**, 212 (1961).

Bose-Einstein condensation and heat capacity of nonideal gas

V. S. Yarunin

Bogoliubov theory of a nonideal gas is attributed to a quasiclassical nonlinear behavior of Bose-condensate density. Analytical calculation leads to a superfluid ^{4}He-like heat capacity C_v temperature dependence at the temperatures below and above T_c except the region 1.6 K < T < 2.2 K.