ИНСТИТУТ СПЕКТРОСКОПИИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Астрахарчик Григорий Евгеньевич

Исследование фазовой диаграммы и физических свойств многочастичных систем методом Монте-Карло.

Специальность 01.04.02 — «Теоретическая и Математическая физика»

диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель: зав. лаб. спектроскопии наноструктур, Ю. Е. Лозовик

Введение

1	Метод классического Монте Карло					
	1.1	Введение	12			
	Интегрирование методом Монте Карло	12				
		1.2.1 Алгоритм Метрополиса	14			
		1.2.2 Эффективность алгоритма и выбор пробных движений	15			
	1.3	Статитстическая погрешность	16			
	1.4	Другие методы моделирования	17			
2	Ква	Квантовый Метод Монте Карло				
	2.1	Введение	19			
	2.2 Уравнение Шредингера					
	2.3 Функция Грина					
	2.4 Алгоритм диффузионного Монте Карло		24			
	2.5	Вычисляемые величины	25			
		2.5.1 Энергия	25			
		2.5.2 Сверхтекучая плотность	26			
		2.5.3 Одночастичная матрица плотности и доля частиц в конденсате	30			
		2.5.4 Экстраполяция вариационной и смешанной оценок на чистую	31			
3	Дву	умерные мезоскопические кластеры пылевой плазмы	33			
	3.1	Введение	33			
	3.2 Конфигурации глобальных минимумов					
	3.3	Фазовые переходы	42			
3.4 Выводы						

 $\mathbf{5}$

Оглавление

4	Короткодействующее взаимодействие 4			
	4.1 Введение			
	4.2	Корреляционные функции	50	
	4.3 Гамильтониан Либа-Линигера			
	4.4 Метод Диффузионного Монте-Карло			
	4.5	Однородная система	59	
	4.6	Система в ловушке	64	
	4.7	Выводы	71	
5	Реж	ким «сверх-Тонкса»	73	
	5.1	Введение	73	
	5.2	Модель	74	
	5.3	Метод Монте Карло	76	
	5.4	Результаты	76	
	5.5	Заключение	82	
6	Длиннодействующее дипольное взаимодействие			
	6.1	Обзор литературы	83	
	6.2	Физическая реализация и модель системы	84	
	6.3	Корреляционные функции и метод Монте Карло	85	
	6.4	Результаты	86	
	6.5	Выводы	94	
7	Лат	тинжеровская жидкость	95	
	7.1	Статическая корреляционная функция плотности	95	
	7.2	Зависящая от времени корреляционная функция плотности	98	
	7.3	Вычисление с нелогарифмической точностью	99	
	7.4	Динамический форм фактор	100	
	7.5	Коэффициент Попова	101	
8	Фep	омионная система	104	
	8.1	Введение	104	
	8.2	Модель	106	
	8.3	Результаты	107	

3

8.4	Заключение	112		
Приложение 122				
.1	Метод масштабирования	123		
.2	Вычисление сжимаемости из уравнения состояния	128		
.3	Подгонка уравнения состояния сглаживающей функцией	129		
Благодарности 130				
Литература 13				

Введение

Малые заряженные частицы «пыли» в нейтрализующей плазме — весьма распространенная система, которую можно наблюдать на разных масштабах и в разных средах: кластеры пыли в межзвездной среде и в верхних слоях атмосферы, упорядоченные структуры в газовом разряде, используемом при технологической обработке различных материалов, дают далеко не полный перечень подобных систем. В последнее время значительное внимание уделяется эксперментальному исследованию «пылевой плазмы», системе углеродных, кремневых или полимерных микрочастиц в высокочастотном газовом разряде [39, 13, 189, 55], ламинарной струе слабоионизованной термической плазмы [13, 189, 188] и даже в условиях микрогравитации без использования электрических ловушек для удержания частиц [13, 189]. Одной из основных причин внимания к таким искусственно приготовленным объектам является возможность непосредственного наблюдения, например, при помощи лазерной интерференции, типа и динамики образования упорядоченных структур частиц «пыли». Исследования кристаллов и жидкостей пыльной плазмы in situ, проводящиеся в ряде лабораторий мира [13, 189], не только важны для понимания физики плазмы, но также являются мощным средством для изучения процессов плавления, отжига и формирования в кристаллической фазе дефектов различного рода. С другой стороны, в последние годы вызывает большой научный и прикладной интерес изучение микрокластеров, интересных сильной структурной чувствительностью к числу частиц, необычными перестройками структуры с ростом температуры и т.п. [8, 107, 108, 110, 10]. Интерес к системам малого числа частиц подкрепляется также значительным экспериментальным и теоретическим материалом, свидетельствующим о том, что кластеры могут сохранять свою индивидуальность внутри массивного тела, влияя на его свойства.

Реализация бозе-конденсации в щелочных газах, уже ставшая вехой в истории физики [130, 25], впервые дала возможность непосредственного хорошо контролируемого экспериментального создания и исследования систем разреженных квантовых газов. Полученные

Оглавление



Рис. 1: Пример экспериментальной реализации квазиодномерной бозонной системы (взято из [61]). Две лазерные стоячие волны ориентированы перпендикулярно относительно друг друга и создают узкую двумерную оптическую решетку. В поперечном направлении газ находится в основном состоянии удерживающего потенциала. Возбуждение последующих уровней сильно подавлено низкой температурой $kT/\hbar\omega_{\perp} < 6 \cdot 10^{-3}$ и малым значением доступной одномерной энергией $\mu/\hbar\omega_{\perp} - 1 < 0, 1$. Такая система является эффективно одномерной. В цитируемом эксперименте исследовались частоты коллективных осцилляций. На Рисунке показаны колебания центра масс (дипольная мода) и колебание сжатия («дыхания»).

сверхнизкие температуры (т.е. много ниже температуры конденсации в бозонных системах и температуры Ферми в фермионных системах) позволяют исследовать основное состояние системы. Появившаяся возможность наблюдения «нового состояния вещества» — конденсата вызвала новую волну исследований, как со стороны экспериментаторов, так и со стороны теоретиков. За прошедшие после открытия годы, бозе-конденсация была достигнута как в большом количестве разных видов газов (различные бозонные газы, конденсация композитных бозонов — фермионных молекул), так и в разнообразнейших пространственных формах получаемого конденсата (шаровое облако, вытянутый эллипсоид, решетка из конденсатов имеющих форму «сигар», см. Рис 1, и т.д.). При температурах ниже критической T_c макроскопическая часть частиц переходит в одно и то же состояние, волновая функция которого называется волновой функцией конденсата. Ее эволюция во времени подчиняется уравнению Гросса-Питаевского [14], условие применимости которого ограничено малостью газового параметра na^3 , где n = N/V — плотность газа, а a — длина *s*-рассеяния частиц.

Интересной и многообещающей темой является изучение газов при низких температу-

рах в низкоразмерных системах (см. пример на Рис. 1). Пониженная размерность усиливает эффекты взаимодействия и такая система обладает рядом существенных отличий от обычных трехмерных систем. Даже само явление бозе-конденсации в однородной системе, понимаемое как дальний порядок недиагонального элемента матрицы плотности, присутствует в однородной двухмерной системе только при температурах отличных от нуля и полностью отсутствует в одномерной однородной системе при всех температурах. Так же перестановочная специфика одномерной системы (для того что бы поменять две частицы местами, одна обязательно должна «пройти» через другую) приводит к «фермионизации» системы бозонов в режиме сильных квантовых корреляций в системе с отталкиванием. Наличие такой фермионизации недавно было экспериментально подтверждено [140].

Явление конденсации специфично для частиц подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна, однако, сама структура бозонных частиц при этом не имеет значения. В частности, конденсация может произойти и в системе композитных бозонов. Таковыми, при особых условиях, являются молекулы (связанные состояния) фермионов (электронов или атомов). Наличие конденсации таких бозонных молекул было недавно обнаружено экспериментально [161, 134, 79]. Другой важной реализацией композитных бозонов являются экситонные системы, где пара электрон - дырка образуют связанное состояние. Конденсация экситонов была получена недавно [177]. Типичный потенциал взаимодействия между атомами щелочных газов является очень сложным и содержит большое количество уровней. На практике описание такого потенциала основывается на измерении длины рассеяния таких атомов и в теоретических моделях чаще всего используется модель — короткодействующий потенциал с такой же длиной *s*-рассеяния. В частности, при применении уравнения Гросса-Питаевского для объяснения свойств конденсата предполагается, что потенциал взаимодействия — короткодействующий и может быть приближен контактным псевдопотенциалом. Ситуация совсем иная в экситонных системах, где отталкивание между экситонами вызвано кулоновским взаимодействием электронов (дырок) между собой, и, как следствие, имеет дальнодействующий характер. Если размер экситона много меньше среднего расстояния между частицами, то межчастичный потенциал описывается дипольдипольным взаимодействием. Дальнодействующий тип взаимодействия между бозонами так же может быть реализован и в атомных газах. Перспективными в этом направлении являются атомы хрома [51, 59, 46, 118] обладающие большим постоянным магнитным моментом. Использование наведенных моментов в электрическом поле более сложно с точки

осуществления эксперимента, однако привело бы к реализации системы где доминирует диполь-дипольное взаимодействие.

Одной из целей этой диссертационной работы является всестороннее исследование свойств квазиодномерных бозонных систем. При всем многообразии видов взаимодействия мы выделяем несколько основных типов:

- 1. взаимодействие, которое может быть описано процессом *s*-рассеяния (*короткодействие*). Рассеяние при малых энергиях *универсально*, т.е. одинаково для различных потенциалов, обладающих одинаковой длиной *s*-рассеяния *a*. Из класса таких потенциалов мы выбираем контактный потенциал $V_{int}(z) = g_{1D}\delta(z)$. Различаются два случая, которые в бозонной системе приводят к принципиально различным состояниям
 - а) Отталкивание, $g_{1D} > 0$. Основным состоянием системы является газоподобное состояние с положительной энергией E > 0.
 - 6) Притяжение, $g_{1D} < 0$. Т.к. на бозонные частицы не действует принцип Паули запрещающий двум частицам занимать состояние с одинаковыми квантовыми числами, то основное состояние системы может соответствовать большому заполнению одного связанного состояния с энергией E < 0 (отметим, что в одномерной системе связанное состояние образуется при сколь угодно слабом взаимодействии, в отличии от трехмерной системы, где существует пороговая глубина потенциала). Однако, газоподобное состояние может быть получено переходом через резонанс $a_{1D} < 0 \rightarrow a_{1D} = 0 \rightarrow a_{1D} > 0$. Динамическая стабильность (а значит, и возможность экспериментального наблюдения) такого сильновозбужденного состояния является открытым вопросом.
- 2. взаимодействие, которое простирается на большие расстояния и не может быть описано процессом *s*-рассеяния (*дальнодействие*). Характерным примером такого взаимодействия является диполь-дипольный потенциал.

Для перечисленных типов потенциалов ставится задача нахождения фазовой диаграммы. Энергетические и структурные свойства многочастичных систем могут быть найдены численно при помощи методов Монте Карло (см., напр, [35, 3, 16, 1]) Для выполнения исследования идеально подходит метод диффузионного Монте-Карло (ДМК) (см, напр. [2, 172, 17, 18, 158, 155, 23, 58, 77]), как дающего энергию основного состояния бозонной

системы *точно*. Для получения подробного описания пространственных корреляционных свойств ставится задача найти: одночастичную матрицу плотности, функцию парного распределения, трехчастичный коррелятор. Т.к. во многих экспериментах более доступны импульсные характеристики системы, то мы вычислим корреляционные функции, а именно статический структурный фактор и импульсное распределение, также и в импульсном пространстве. Эффект продольного гармонического удержания будет изучен, как в приближении локальной плотности, так и для небольшого количества частиц методом ДМК. Мы найдем частоты коллективных осцилляций[23, 84, 57], как имеющих непосредственное отношение к эксперименту.

Структура диссертационной работы следующая. Первые две главы посвящены изложению стохастических методов, использовавшихся в диссертации. В главе 1 излагаются основы классического метода Монте Карло. Формулируется алгоритм Метрополиса §1.2.1, используемый для генерации марковской цепи имеющей желаемое распределение. В §1.2.2 обсуждаются различные виды пробного движения, используемые в алгоритме Метрополиса. В §1.4 вкратце обсуждаются другие методы статистического моделирования (в частности, метод молекулярной динамики). В главе 2 излагаются методы квантового Монте Карло. Метод диффузионного Монте Карло (ДМК) основывается на численном решении уравнения Шредингера во мнимом времени. Если волновая функция в начальный момент мнимого времени au не ортогональна основному состоянию системы, то при эволюции волновой функции ее проекции на возбужденные состояния затухают экспоненциально быстро и полученное решение асимптотически сходится к волновой функции основного состояния ϕ_0 (см. §2.2). Полная функция Грина $\langle \mathbf{R} | e^{-\hat{H}\tau} | \mathbf{R}' \rangle$, знание которой необходимо для нахождения эволюции, в общем случае аналитически не известна, однако при малых τ может быть аппроксимирована комбинацией более простых компонент (как то: диффузия, «дрейф», ветвление), нахождению которых посвящен §2.3. Алгоритм ДМК излагается в §2.4. Особое внимание уделено (§2.5) способам измерения различных физических величин, таких как потенциальная и кинетическая энергия (§2.5.1), плотность сверхтекучей компоненты (§2.5.2), одночастичная матрица плотности (§2.5.3). Оценки одночастичной матрицы плотности g_1 являются «смешанными», т.е. среднее $\langle \psi_T | g_1 | \phi_0 \rangle$ зависит от выбора пробной волновой функции ψ_T , в отличии от энергии и плотности сверхтекучей компоненты, оценки которых являются «чистыми» (т.е. типа $\langle \phi_0 | \hat{A} | \phi_0 \rangle$). В §2.5.4 излагается метод экстраполяции вариационной $\langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle$ и «смешанной» $\langle \psi_T | \hat{A} | \phi_0 \rangle$ оценок на «чи-

стую» оценку. Последующая часть диссертации посвящена применению изложенных в первых главах методов для решения актуальных задач современной физики. В главе 3 изучается классическая система двумерных кластеров пылевой плазмы в гармонической ловушке. Находятся конфигурации глобальных минимумов, а также собственные частоты и вектора для различного числа частиц в мезоскопическом кластере. Показано, что изменение дебаевской длины экранирования заряда частиц в плазме R может приводить к перестройкам структуры основного состояния системы, что проявляется в виде фазовых переходов первого или второго рода по параметру R. В главе 4 рассматриваются свойства квантовой одномерной системы с контактным отталкивающим потенциалом (модель Либа-Линигера). Определения корреляционных функций дается в §4.2. Гамильтониан Либа-Линигера вводится в §4.3. Объясняется связь одномерной константы связи с трехмерной длинной *s*-рассеяния при движении в волноводе (резонанс Ольшаного). Известные аналитические свойства модели Либа-Линигера резюмируются так же в §4.3. В частности, в режиме малой плотности (газ Тонкса-Жирардо) происходит «фермионизация» бозонной системы. Тонкости применения метода ДМК к такой модели излагаются в §4.4. Найденные свойства однородной системы рассматриваются в §4.5. Производится сравнение с точными аналитическими методами и экспериментом. Длинноволновые корреляции правильно описываются фононной моделью (латтинжеровская жидокость). Свойства конечной системы в гармонической ловушке обсуждаются в §4.6. Производится сравнение результатов метода ДМК и метода локальной плотности. В главе 5 рассматривается короткодействующая система с притяжением. Газоподобное состояние при малой одномерной длине s-рассеяния *а*_{1D} устойчиво и обладает сильными корреляциями (газ «сверх»-Тонкса). В параграфе 5.2 обсуждается модельный гамильтониан и объясняется аналогия с газом твердых сфер. Используемые модификации квантового метода Монте Карло для этой системы излагаются в §5.3. Параграф §5.4 посвящен объяснению и обсуждению свойств газа «сверх»-Тонкса. Изучению свойств системы с диполь-дипольным взаимодействием посвящена глава 6. Модельный гамильтониан системы обсуждается в §6.2. Модификации метода ДМК разъясняются в §6.3. Найденные свойства (в том числе фазовая диаграмма, корреляционные функции, частоты коллективных осцилляций) дипольной системы объясняются в §6.4. Глава 7 посвящена аналитическому выводу длинноволновых асимптотик в одномерной фононной системе. В Главе 8 мы переходим к рассмотрению системы двухкомпонентных фермионов. В первой части этой главы мы находим уравнение состояния для системы

с потенциалом притяжения между частицами с различными спинами при помощи квантового метода Монте Карло. Из уравнения состояния находятся химический потенциал и скорость звука в области всего перехода. Находится парная корреляционная функция для параллельной и антипараллельной ориентации спинов. Во второй части Главы 8 мы изучаем частоты коллективных осцилляций газа в гармонической ловушке. Пользуясь методом масштабирования, превосходная точность которого доказана сравнением с точными решениями гидродинамических уравнений, мы определяем частоты низшей моды сжатия при T = 0 в терминах характерного безразмерного параметра. Рассматриваются два уравнения состояния однородной системы: среднего поля (менее точное) и полученное методом Монте Карло в первой части главы (более точное).

Глава 1

Метод классического Монте Карло

1.1 Введение

Методы численного (компьютерного) моделирования очень важны, т.к. позволяют заполнить нишу между теорией и экспериментом. При аналитическом рассмотрении обычно делаются какие-то приближения, например, приближение среднего поля, в то время как первопринципное численное моделирование, опирающееся на базовую формулу статистики для определения термодинамического значения величины как среднего по пространству состояний, позволяет точно находить свойства системы, описываемой данным гамильтонианом.

Другим достоинством численного эксперимента является доступ ко всем характеристикам системы, многие из которых тяжело или даже невозможно измерить в обычном эксперименте.

В данной главе излагается метод интегрирования функций многих переменных Монте Карло. В силу своей общности этот метод интересен не только в физических приложениях, но также может быть применен для широкого класса чисто математических задач.

1.2 Интегрирование методом Монте Карло

Рассмотрим систему из N частиц описываемой функцией гамильтониана $H(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N)$, где $\vec{r}_i, i = \overline{1, N}$ задает все степени свободы одной частицы (например $\vec{r} = \{x, y, z, p_x, p_y, p_z\}$). Вектор $\mathbf{R} = (\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N)$ задает одно состояние системы. Множество состояний системы составляет доступное ей фазовое пространство Ω . Тогда среднее значение величины A, являющейся функцией состояния системы, дается интегралом

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\Omega} A(\mathbf{R}) p(H(\mathbf{R})) \, \mathbf{dR},$$
 (1.1)

где p - функция распределения, а в знаменателе находится статистическая сумма

$$Z = \int_{\Omega} p(H(\mathbf{R})) \, \mathbf{dR} \tag{1.2}$$

Если система состоит из небольшого числа частиц и размерность пространства Ω мала, то интеграл (1.1) можно вычислить, используя обычные формулы для приближенного численного вычисления интегралов с заданной точностью. Однако при большом N, когда кратность интеграла становится большой, такой подход малопродуктивен, т.к. затраты на вычисления зависят экспоненциально от N.

Другой способ, носящий имя метода Монте Карло¹, основан на стохастическом переборе точек в фазовом пространстве с предпочтительной выборкой тех областей из Ω , которые дают существенный вклад в интеграл (1.1).

Таким образом, в соответствии с функцией распределения *p* генерируется цепь состояний в фазовом пространстве, вдоль которой и вычисляется интеграл (1.1). При количестве элементов в цепи, стремящемся к бесконечности, мы получаем точное значение среднего. При конечной же длине цепи погрешность такого способа вычисления интеграла гораздо меньше погрешности получаемой обычными методами при тех же затратах.

Обычно генерируется *марковская цепь*, т.е. такая последовательность, в которой последующее состояние зависит только от настоящего состояния и не зависит «от прошлого». Математически это означает, что условная вероятность $P(\mathbf{R_n}|\mathbf{R_{n-1}},...,\mathbf{R_0})$ появления состояния R_n после последовательности $\mathbf{R_{n-1}},...,\mathbf{R_0}$ равна вероятности $P(\mathbf{R_n}|\mathbf{R_{n-1}})$.

Один из возможных способов реализации марковского процесса, обладающего заданной функцией распределения, излагается ниже в параграфе 1.2.1. А сейчас мы конкретизируем вид распределения.

Для классической системы в тепловом равновесии при температуре *T* функция распределения дается законом Больцмана:

$$p(\mathbf{R}) = C \exp\left(-\frac{H(\mathbf{R})}{kT}\right) \tag{1.3}$$

¹Название метода происходит от знаменитого европейского города с игорными заведениями: лотереями, рулетками и т.п. — Монте Карло, где испытывается «фортуна», а на языке математики в большом числе производятся статистичесие испытания, как в обсуждаемом методе.

Глава 1. МЕТОД КЛАССИЧЕСКОГО МОНТЕ КАРЛО

Если часть H, зависящая от импульсов, отделяется от координатной части, и энергия взаимодействия частиц не зависит от импульсов, как имеет место для пылевой плазмы (см. главу 3), а величина A не зависит от импульсов частиц (например, конфигурации минимумов, корреляционные функции), то интеграл по импульсам в формуле (1.1) выносится из числителя и знаменателя и сокращается. Тем самым достаточно рассмотреть не все фазовое пространство, а только его конфигурационную часть.

Для квантовой системы среднее от величин, операторы которых диагональны в координатном представлении, описывается все той же формулой (1.1), где функция распределения теперь задается квадратом модуля волновой функции.

$$p(\mathbf{R}) = |\psi(\mathbf{R})|^2 \tag{1.4}$$

Этот метод для пробной вариационной волновой функции рассматривается в главе 2.

Однако для квантовой системы возможен и другой подход, использующий матрицу плотности $\rho = \exp(-\hat{H}/kT)$. Тогда математическое ожидание величины A, которой соответствует оператор \hat{A} , при любом значении температуры T может быть вычислено по формуле

$$\langle A \rangle = \frac{\operatorname{tr}(\hat{A}\rho)}{\operatorname{tr}(\rho)} = \frac{\int \langle \mathbf{R} | \hat{A} | \mathbf{R}' \rangle \,\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', T) \, \mathbf{dRdR'}}{\int \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}, T) \, \mathbf{dR}}$$
(1.5)

Этот интеграл можно взять при помощи метода Монте Карло интегрирования по траекториям (см. обзоры [35],[1].

1.2.1 Алгоритм Метрополиса

Вычисление термодинамических величин производится усреднением по марковской эргодической цепи. Марковская цепь генерируется при помощи алгоритма Метрополиса², позволяющего построить последовательность состояний с заданной функцией распределения. Ниже излагается краткое обоснование этого алгоритма.

Целью алгоритма Метрополиса является создание такой последовательности состояний $a_1, a_2, ..., a_m$, что в пределе $m \to \infty$ распределение становится больцмановским. И если система достигла равновесия, то среднее значение величины можно найти усреднением по цепи состояний

$$\langle A \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} A(a_i) \tag{1.6}$$

 $^{^{2}}$ В литературе на этот алгоритм часто ссылаются как на метод $M(RT)^{2}$, где название составлено из аббревиатуры фамилий авторов [186].

Более подробную информацию о цепях Маркова можно получить, например, в [15], [6].

Сформулируем теперь сам алгоритм Метрополиса. Вероятность $P(b \leftarrow a)$ принятия пробного движения преводящего систему из состояния a в состояние b задается равной

$$P(b \leftarrow a) = \begin{cases} 1, & \text{если } p(a) < p(b) \\ p(b)/p(a), & \text{если } p(a) \ge p(b) \end{cases}$$
(1.7)

Можно показать, условие детального баланса выполнено и распределение состояний a_1, a_2, \dots в фазовом простанстве дается функцией $p(\mathbf{R})$.

1.2.2 Эффективность алгоритма и выбор пробных движений

Используя алгоритм Метрополиса, можно построить цепочку состояний длины m, такую, что усреднение по ней в пределе $m \to \infty$ даст правильное значение термодинамических величин. В то же время понятно, что из-за невозможности на практике промоделировать бесконечную цепочку, приходится обходиться последовательностями конечной длины. Таким образом, возникает вопрос о построении последовательности наиболее эффективным способом, так чтобы для достижения заданной точности требовалось наименьшее количество машинного времени. Отметим, что точность тем лучше, чем больше количество *независимых* (см. параграф 1.3) измерений.

Самым простым способом организовать пробное движение является изменение координат какой-то одной частицы i

$$\vec{r_i} \leftarrow \vec{r_i} + \vec{\delta\xi},\tag{1.8}$$

где δ — случайная величина с координатами $\delta_{\alpha} \in (-1, 1), \alpha = 1, 2, а длина \xi$ подбирается таким образом, что бы вероятность принятия такого изменения положения была равна желаемой³.

Такой тип пробного движения хорош тем, что вероятность его принятия высока, однако коллективное движение будет описываться крайне плохо. Возможен и другой тип пробного движения — перемещающий сразу несколько частиц. В этом случае вероятность принятия ниже, т.к. достаточно того, чтобы хотя бы одна частица попала в «неблагоприятный» район для того чтобы движение всех частиц было отвергнуто, но, с другой стороны, при естественном для системы типе движения можно очень эффективно продвигать систему в фазовом пространстве и уменьшить длину корреляций.

³Обычно принимают эту вероятность равной примерно 50%.

Глава 1. МЕТОД КЛАССИЧЕСКОГО МОНТЕ КАРЛО

Приведем пример, показывающий каким может быть коллективный тип движения для кластера пылевой плазмы в гармонической ловушке (энергия такой системы дается формулой (3.2)). Спецификой удерживающего потенциала, обладающего аксиальной симметрией, является та особенность, что при небольшом количестве частиц возможно образование «оболочечной структуры», когда частицы располагаются в виде кольца (оболочки). В этих случаях выгодно применение следующего пробного шага:

$$\vec{r_i} \leftarrow \vec{r_i}(1 + \delta \cos(\varphi_i n)), \tag{1.9}$$

где φ_i — угол *i*-й частицы из данной оболочки, n — целое число и δ — случайная величина, одинаковая для всех частиц из данной оболочки. Значение n = 0 соответствует симметричному «дыханию» частиц внутри оболочки.

Помимо очевидных типов коллективного движения (типа «дыхание» или вращение оболочки) вблизи любого локального минимума, движение можно выразить как независимое движение по нормальным координатам с собственными частотами. Понятно, что даже если такое представление и не является абсолютно точным, использование движения вдоль собственных нормальных векторов будет характерным для системы и ведет к ее быстрой эволюции и быстрейшему получению независимых состояний.

Обычно для лучшей устойчивости алгоритма применяются по очереди различные типы пробного движения.

1.3 Статитстическая погрешность

Среднее от физической величины A получается достаточно просто, нужно только усреднить ее значения вдоль траектории системы в фазовом пространстве, пользуясь формулой (1.6). Гораздо сложнее оказывается найти погрешность полученного численного результата. В этом параграфе будем рассматривать погрешности только статистического характера. Различные источники систематических погрешностей в методе диффузионного Монте Карло подробно рассматриваются в [2].

Если $a_1, ..., a_m$ — независимые измерения, то погрешность при вычислении среднего выражается обычным образом через дисперсию

$$\Delta A = \frac{1}{\sqrt{m}} D(A), \tag{1.10}$$

где мы учли, что *m* — большое, а дисперсию можно найти как

$$D = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \approx \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m A^2(a_i) - \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m A(a_i)\right)^2}$$
(1.11)

Если же усреднение производится по скоррелированным состояниям, то число таких состояний M уже не совпадает с m. Нужно найти время корреляции τ — минимальное число элементов последовательности, отделяющее независимые состояния, и положить $m = M/\tau$.

Одним из способов расчета погрешности является предварительное усреднение данных по блокам длина которых больше τ . Тогда среднее от величины A определяется формулой (1.10), а статистическая погрешность - формулой (1.11), где m — число блоков, а a_i среднее от A по i-тому блоку.

В измерениях при помощи метода диффузионного Монте Карло (глава 2) обычно длина корреляционного времени τ составляла величину порядка 1000.

1.4 Другие методы моделирования

Помимо прямого вычисления стохастическими методами среднего (1.1) как интеграла по доступной области Ω фазового пространства существуют и другие методы, основанные на интегрировании уравнений движения в фазовом пространстве. Такие методы, в отличии от методов Монте Карло, — детерминистические.

Например, в основе классического метода молекулярной динамики лежит решение уравнений Ньютона для всей системы. Дифференциальное уравнение дискретизируется схемой нужного порядка (чаще низкого порядка, т.к. такие схемы работают более быстро, экономично и устойчиво) и численно интегрируются. А термодинамическое значение для величины *A* аппроксимируется усреднением по времени

$$\langle A \rangle_t = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t A(\mathbf{R}(t)) dt$$
(1.12)

Оба метода, молекулярной динамики и Монте Карло, должны давать одинаковый результат, т.к. вследствие эргодичности системы временное среднее совпадает со средним по ансамблю $\langle A \rangle_{\Omega}$, т.е.

$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle_\Omega \tag{1.13}$$

Глава 1. МЕТОД КЛАССИЧЕСКОГО МОНТЕ КАРЛО

Метод молекулярной динамики позволяет описывать временну́ю динамику системы и дает возможность вычислить, например, временны́е корреляционные функции. В методах же Монте Карло, напротив, время отсутствует как таковое, и возможно находить лишь информацию о стационарных состояниях. Использование метода молекулярной динамики критическим образом зависит от начальных данных, т.к. неразумно заданные значения координат и импульсов могут «забросить» систему в такую область фазового пространства, из которого система просто не выберется за конечное время моделирования. Методы же Монте Карло очень устойчивы к начальным данным, и даже если в какой то момент моделирования произойдет аппаратный сбой и порча таблицы координат, то через некоторое количество шагов метод вернет систему в равновесное состояние.

В квантовом случае метод решения уравнений движения отсутствует по той причине, что нельзя определить точную траекторию частицы⁴, т.к. каждая частица «размазана» в соответствии с неопределенностью Гейзенберга. Следует использовать квантовое описание системы через волновые функции. Прямое решение уравнения Шредингера в его дифференциальной форме возможно только лишь для небольшого числа частиц. Поэтому по сути единственным способом исследования квантовых систем являются методы Монте Карло.

⁴Мы не касаемся здесь моделирования связанным с вигнеровским подходом к квантовой механике

Глава 2

Квантовый Метод Монте Карло

2.1 Введение

Квантовые методы Монте Карло являются мощным средством для исследования квантовой задачи многих тел (для обзора см., например, [152]).

Самый простой из квантовых методов Монте Карло является метод *вариационного Монте Карло* (ВМК). Суть метода состоит в поиске наилучшей аппроксимации ψ_T (пробной волновой функции) для точной волновой функции системы и вычислению средних величин, используя квадрат этой пробной волновой функции, как плотность распределения $p(r) = |\psi(r)|^2$. В частности, усреднение локальной энергии $E_L = \psi_T^{-1} H \psi_T$ по неточной волновой функции ψ_T дает заведомо завышенное значение для энергии основного состояния, тем самым определяя оценку сверху. При всей простоте этого метода, для успешного применения необходимо правильно угадать структуру волновой функции, что, конечно, не может быть автоматизировано, и зачастую наибольшие человеческие ресурсы тратятся именно на поиск подходящего приближения для волновой функции. Чем ближе пробная волновая функция к собственной волновой функции, тем меньше дисперсия локальной энергии $\langle \psi_T | H^2 | \psi_T \rangle - \langle \psi_T | H | \psi_T \rangle^2$. В общем случае пробная волновая функция зависит от координат частиц и добавочных параметров $\psi_T = \psi_T(r_1, ..., r_N, a, b, ...)$. Минимизация вариационной энергии по этим параметрам дает наилучшее приближение для истинной волновой функции на заданном классе пробных функций.

Другой метод называемый методом *диффузионного Монте Карло* (ДМК) нашел успешное применение при исследовании свойств систем в области низких температур. Суть метода состоит в решении уравнения Шредингера во мнимом времени. Является возможным найти точное (в статистическом смысле) значение энергии основного состояния. Этот метод будет подробно обсуждаться ниже.

Метод Монте Карло интегрирования по траекториям основан на вычислении дискретизованного феймановского интеграла во мнимом времени, что позволяет найти температурную матрицу плотности системы. Главным достоинством этого метода является то, что он работает при конечных температурах, тем самым позволяя изучать термодинамические свойства, например, вблизи фазовых переходов [37], [152],[1].

В данном исследовании мы ограничимся использованием методов ВМК и ДМК, т.к. мы заинтересованы в исследовании свойств системы в основном состоянии.

2.2 Уравнение Шредингера

Волновая функция системы удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi(\mathbf{R}, \tau) = \hat{H} \varphi(\mathbf{R}, \tau),$$
 (2.1)

где $\mathbf{R} = (\vec{r_1}, \vec{r_2}, ...)$ обозначает координаты частиц. Это же уравнение может быть выписано во мнимом времени $t = i\tau/\hbar$.

$$-\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\mathbf{R},t) = (\hat{H} - E)\varphi(\mathbf{R},t), \qquad (2.2)$$

Точка отсчета энергии *E* вводится явно для улучшения численной устойчивости метода, как будет объяснено ниже.

Уравнение (2.2) может быть непосредственно проинтегрировано по мнимому времени, что дает

$$\psi(\mathbf{R},t) = e^{-(\hat{H}-E)t}\psi(\mathbf{R},0) \tag{2.3}$$

Разложение волновой функции $\psi(\mathbf{R}, t)$ по волновым функциям стационарных состояний ϕ_n ($\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n, E_0 < E_1 < ...$) имеет вид

$$\psi(\mathbf{R},t) = \sum_{n} c_n \phi_n(\mathbf{R},t) = \sum_{n} c_n \phi_n(\mathbf{R},0) e^{-(E_n - E)t}$$
(2.4)

Амплитуды слагаемых при эволюции изменяются во времени, либо увеличиваясь, либо уменьшаясь в зависимости от знака $(E_n - E)$. В любом случае, на больших временах преобладает компонента, соответствующая проекции на основное состояние. По сравнению с ней проекции на возбужденные состояния затухают экспоненциально быстро

$$\psi(\mathbf{R},t) \to c_0 \phi_0(\mathbf{R},0) e^{-(E_0 - E)t} \quad \text{if } t \to \infty$$

$$(2.5)$$

По прохождении достаточно большого промежутка времени норма волновой функции останется конечной только в том случае, если параметр E в точности равен E_0 . Таким образом, энергия основного состояния E_0 может быть найдена из подстройки параметра E с тем, чтобы норма волновой функции $\psi(\mathbf{R}, t)$ была константой.

Рассмотрим систему из N частиц, введя в гамильтониан двух
частичное взаимодействие

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i + \sum_{i< j}^{N} V(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|)$$
(2.6)

Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{R},t) = -D\sum_{i=1}^{N}\Delta_{i}\psi(\mathbf{R},t) + V(\mathbf{R})\psi(\mathbf{R},t) - E\psi(\mathbf{R},t), \qquad (2.7)$$

где использованы обозначения: $D = \hbar^2/2m$ и $V(\mathbf{R}) = \sum_{i < j} V(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|)$. Без ущерба для последующих рассуждений в $V(\mathbf{R})$ можно включить также и любое внешнее поле, зависящее только от координат частиц и не зависящее от их импульсов. Метод работает гораздо более эффективно при использовании выборки по важности. Для этого уравнение Шредингера должно решаться для измененной волновой функции¹

$$f(\mathbf{R},t) = \psi_T(\mathbf{R},t)\psi(\mathbf{R},t)$$
(2.8)

Здесь $\psi_T(\mathbf{R}, t)$ — пробная волновая функция, аппроксимирующая точную волновую функцию системы $\psi(\mathbf{R}, t)$. Уравнение на функцию распределения f есть

$$-\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{R},t) = -D\sum_{i=1}^{N} \Delta_{i}f(\mathbf{R},t) + D\vec{\nabla}(\vec{F}f(\mathbf{R},t)) + (E_{L}(\mathbf{R}) - E)f(\mathbf{R},t), \qquad (2.9)$$

где E_L обозначает локальную энергию, т.е. среднее от гамильтониана по пробной волновой функции

$$E_L(\mathbf{R}) = \frac{\psi_T^*(\mathbf{R}) \dot{H} \psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T^*(\mathbf{R}) \psi_T(\mathbf{R})}$$
(2.10)

а $\vec{F} - cuла \ \partial pe \check{u} \phi a$, пропорциональная градиенту пробной волной функции, и, как след-

¹Другая причина использования произведения волновых функций в качестве распределения вероятности вместо усреднения непосредственно по ψ заключается в том, что такое среднее $\langle A \rangle = \int A \psi \, dR \, / \int \psi \, dR$ не имеет прямого физического смысла, в то время как среднее по произведению волновых функций обладает смыслом смешанного среднего $\langle A \rangle = \int \psi_T A \psi \, dR / \int \psi_T \psi \, dR$

ствие, действующая в сторону возрастания ψ_T^2

$$\vec{F} = \frac{2}{\psi_T(\mathbf{R})} \vec{\nabla} \psi_T(\mathbf{R}) \tag{2.11}$$

2.3 Функция Грина

Формальное решение уравнения Шредингера, записанное в координатном представлении, выглядит как

$$\langle \mathbf{R}|f(t)\rangle = \sum_{\mathbf{R}'} \langle \mathbf{R}|e^{-(\hat{H}-E)t}|\mathbf{R}'\rangle \langle \mathbf{R}'|f(0)\rangle, \qquad (2.12)$$

или же, введя функцию Грина $G(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \langle \mathbf{R} | e^{-(\hat{H} - E)t} | \mathbf{R}' \rangle$, имеем

$$f(\mathbf{R},t) = \int G(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)f(\mathbf{R}',0)\,\mathbf{dR}'$$
(2.13)

Таким образом, дифференциальное уравнение Шредингера (2.3) свелось к интегральному уравнению (2.13), которое может быть решено методами Монте Карло. В общем случае функция Грина $G(\mathbf{R}', \mathbf{R}, t)$ неизвестна, однако ее можно аппроксимировать для малых времен t, и пошагово решать уравнение (2.13)

$$f(\mathbf{R}, t + \Delta t) = \int G(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \Delta t) f(\mathbf{R}', t) \, \mathbf{dR}'$$
(2.14)

Для удобства разобьем гамильтониан на три оператора

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \tag{2.15}$$

где

$$\hat{H}_1 = -D\Delta,$$

$$\hat{H}_2 = D((\vec{\nabla}\vec{F}) + \vec{F}\vec{\nabla})),$$

$$\hat{H}_3 = E_L(\mathbf{R}) - E$$
(2.16)

и введем соответствующие функции Грина

$$G_i(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \langle \mathbf{R} | e^{-H_i t} | \mathbf{R}' \rangle, \qquad i = 1, 2, 3$$
(2.17)

²Это же самое выражение для силы дрейфа можно получить из наглядной аналогии с классической физикой, где распределение частиц во внешнем поле V дается больцмановским весом $p = \exp(-V)$. В квантовой механике распределение определяется квадратом волновой функции $p = \psi_T^2$, что можно переписать в «классическом» виде, введя «потенциал» $V = -\ln \psi_T^2$. Обычное определение силы, как антиградиента потенциала $F = -\nabla V$ и дает формулу (2.11).

Для приближенного вычисления экспоненты от суммы воспользуемся примитивной аппроксимацией (неточность вызвана некоммутативностью операторов \hat{H}_i 's, i = 1, 2, 3)³

$$e^{-\hat{H}t} = e^{-\hat{H}_1 t} e^{-\hat{H}_2 t} e^{-\hat{H}_3 t} + O(t^2)$$
(2.18)

Эта формула, записанная в координатном представлении, дает приближенное выражение для функции Грина

$$G(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \int \int G_1(\mathbf{R}, \mathbf{R}_1, t) G_2(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, t) G_3(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}', t) \, \mathbf{d}\mathbf{R}_1 \mathbf{d}\mathbf{R}_2$$
(2.19)

Для нахождения функции Грина необходимо решить три дифференциальных уравнения

$$\begin{cases}
-\frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{R},\mathbf{R}',t) = H_i G(\mathbf{R},\mathbf{R}',t), \quad i = 1,2,3 \\
G(\mathbf{R},\mathbf{R}',0) = \delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}')
\end{cases}$$
(2.20)

Выпишем уравнение для кинетического слагаемого явным образом:

$$-\frac{\partial G_1(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)}{\partial t} = -D \triangle G_1(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$$
(2.21)

Это уравнение имеет вид уравнения диффузии с константой диффузии $D = \hbar^2/2m$. Таким образом, эта функция Грина вызывает «размазку» частиц и выражает эффект квантовых флуктуаций. Решение уравнения диффузии описывается гауссовской функцией

$$G_1(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = (4\pi Dt)^{-3N/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2}{4Dt}\right)$$
(2.22)

Уравнение на функцию Грина, соответствующую силе дрейфа, запишется как

$$-\frac{\partial G_2(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)}{\partial t} = -D\vec{\nabla}(\vec{F}G_2(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t))$$
(2.23)

с решением, даваемым формулой

$$G_2(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}(t)), \qquad (2.24)$$

где $\mathbf{R}(t)$ — решение классического уравнения движения

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{d}\mathbf{R}(t)}{dt} = DF(\mathbf{R}(t)), \\ \mathbf{R}(0) = \mathbf{R}' \end{cases}$$
(2.25)

³Наряду с простыми формулами типа (2.18) можно использовать и разложения следующих порядков точности, например $\exp(-\hat{H}t) = \exp(-\hat{H}_3t/2)\exp(-\hat{H}_2t/2)\exp(-\hat{H}_1t)\exp(-\hat{H}_2t/2)\exp(-\hat{H}_3t/2) + O(t^3)$, однако для простоты изложения в этой главе будут приведены формулы только для примитивной аппроксимации, а в вычислениях используется указанное выше разложение.

И, наконец, последнее уравнение из (2.20) имеет тривиальное решение, описывающее изменение нормы волновой функции

$$G_3(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \exp((E - E_L(\mathbf{R}))t)\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$$
(2.26)

2.4 Алгоритм диффузионного Монте Карло

Если волновая функция системы $\psi(\mathbf{R},t)$ везде действительна и неотрицательна, как например, в основном состоянии системы бозе-частиц, то она может быть использована как плотность распределения популяции⁴

$$f(\mathbf{R},t) = \sum_{i=1}^{N_W} C\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i(t)), \qquad (2.27)$$

C – положительная константа, $\mathbf{R}_{i}(t)$ – координаты элемента популяции в 3N-мерном конфигурационном пространстве,

 $f(\mathbf{R},t)\mathbf{dR}$ дает вероятность найти элемент популяции в момент времени t в окрестности \mathbf{dR} точки \mathbf{R} .

Дадим интерпретацию действию каждого из трех слагаемых гамильтониана (2.15) на распределение популяции, или, что тоже, действию соответствующих функций Грина (2.22, 2.24,2.26). В терминах марковских цепей функция Грина $G(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$ является матрицей перехода, определяющий эволюцию распределения (см. (2.14)).

Первое слагаемое отвечает $\partial u \phi \phi y z u u$ элемента популяции в конфигурационном пространстве:

$$\mathbf{R}^{(1)}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \chi, \qquad (2.28)$$

где $\chi-$ случайная величина обладающая гауссовским распределением $\exp(-\chi^2/(4D \triangle t)).$

Второе слагаемое описывает действие силы дрейфа, которая направляет элементы популяции в области конфигурационного пространства, обладающие наибольшим весом пробной волновой функции.

$$\mathbf{R}^{(2)}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \Delta t D F(\mathbf{R})$$
(2.29)

⁴Формулу (2.27) нужно понимать в статистическом смысле, среднее от произвольного оператора A по распределениям из правой и левой частей формулы (2.27) совпадают в пределе большого размера популяции $N_W \int A(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR} = \lim_{N_W \to \infty} \int A(\mathbf{R}) \sum_{i=1}^{N_W} C \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i(t)) \, \mathbf{dR}$

Эти две функции Грина (2.22 - 2.24) нормированы на единицу

 $\int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \, \mathbf{dx} = 1$, т.е. норма волновой функции f при их действии остается постоянной, что означает сохранение размера популяции.

Третье слагаемое отвечает за рост популяции

$$f^{(3)}(\mathbf{R}, t + \Delta t) = \exp\left(-(E_L(\mathbf{R}) - E)\Delta t\right) f(\mathbf{R}, t)$$
(2.30)

Здесь функция Грина (2.26) уже более не нормирована и, если число под экспонентой отрицательно (что означает большую локальную энергию), то размер плотности популяции уменьшается и наоборот.

2.5 Вычисляемые величины

Большим достоинством диффузионного метода Монте Карло по сравнению с вариационными методами является возможность находить чистые (не смешанные) оценки, которые более не зависят от выбора пробной волновой функции. Такие оценки можно найти для столь важных физических величин как энергия, функции распределения (распределение плотности, парное распределение), сверхтекучая плотность. Для остальных же величин (напр. одночастичная матрица плотности) является возможным найти смешанные оценки, которые вместе с результатами вариационного метода Монте Карло, могут быть использованы для экстраполяции на чистые значения.

2.5.1 Энергия

Энергия системы считается напрямую в алгоритме ДМК. Действительно, размер популяции стабилен только в том случае, когда сдвиг по энергии *E* в точности равен энергии основного состояния.

Энергия основного состояния может быть записана как отношение интегралов:

$$E_0 = \frac{\int \psi_T(\mathbf{R}) \hat{H} \phi_0(\mathbf{R}) d\mathbf{R}}{\int \psi_T(\mathbf{R}) \phi_0(\mathbf{R}) d\mathbf{R}},$$
(2.31)

где $\phi_0(\mathbf{R})$ — собственная функция основного состояния гамильтониана $\hat{H}\phi_0(\mathbf{R}) = E_0\phi_0(\mathbf{R})$. Домножив и поделив подынтегральное выражение в числителе на $\psi_T(\mathbf{R})$, получим

$$E_0 = \frac{\int \psi_T^{-1}(\mathbf{R}) \hat{H} \psi_T(\mathbf{R}) \psi_T(\mathbf{R}) \phi_0(\mathbf{R}) \, \mathbf{dR}}{\int \psi_T(\mathbf{R}) \phi_0(\mathbf{R}) \, \mathbf{dR}}$$
(2.32)

Среднее от гамильтониана по пробной волновой функции дает локальную энергию (см. определение (2.10)). В пределе больших времен функция распределения f пропорциональна произведению пробной волновой функции и волновой функции основного состояния (см. (2.5))

$$\lim_{t \to \infty} f(\mathbf{R}, t) = c_0 \psi_T(\mathbf{R}) \phi_0(\mathbf{R}, t)$$
(2.33)

Таким образом, вычисление средней локальной энергии популяции дает энергию основного состояния⁵

$$E_0 = \frac{\int E_L(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}) d\mathbf{R}}{\int f(\mathbf{R}) d\mathbf{R}} = \frac{1}{N_W} \sum_{i=1}^{N_W} E_L(\mathbf{R}_i)$$
(2.34)

2.5.2 Сверхтекучая плотность

Нормальная и сверхтекучая компоненты жидкости могут быть найдены из измерения момента инерции вращающегося диска. Рассмотрим жидкость, заключенную между двумя цилиндрическими стенками радиусов R и R + d. Если $d \ll R$, то можно приближенно считать, что жидкость течет между двумя плоскостями. Обозначим за E_v энергию основного состояния системы в равновесии со стенками движущимися со скоростью v и за E_0 — энергию покоящейся системы. Разница между E_v и E_0 вызвана наличием сверхтекучей составляющей, которая остается неподвижной в отличии от нормальной компоненты, которая увлекается движущимися стенками. Таким образом сверхтекучая доля может быть введена ρ_s/ρ как

$$\frac{Nm\upsilon^2}{2}\frac{\rho_s}{\rho} = E_\upsilon - E_0 \tag{2.35}$$

Определим волновые функции f_0 и f_v , связанные с волновыми функциями в покоящейся и движущийся системах

$$f_0(\mathbf{R},t) = \psi_T(\mathbf{R})\phi_0(\mathbf{R},t), \qquad (2.36)$$

$$f_{\nu}(\mathbf{R},t) = \psi_{T}(\mathbf{R})\phi_{\nu}(\mathbf{R},t) \qquad (2.37)$$

⁵Однако, при моделировании бесконечных систем верхний предел интегрирования обрезается на L/2. Неучтенная энергия обычно мала и меньше, чем 1% от полной энергии и может быть аппроксимирована в трехмерной системе интегралом $E_{tail} = n \int_{L/2}^{\infty} E_L(r) 4\pi r^2 dr$. Идея состоит в том, что на больших расстояниях, где и вычисляется этот интеграл, распределение частиц можно приближенно считать однородным.

Эти волновые функции удовлетворяют уравнениям Шредингера со следующими гамильтонианами:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \sum_i (-i\hbar\nabla_i)^2 + V(\mathbf{R})$$
(2.38)

для неподвижой системы и

$$\hat{H}_{\upsilon} = \frac{1}{2m} \sum_{i} (-\imath \hbar \nabla_i - m\vec{\upsilon})^2 + V(\mathbf{R})$$
(2.39)

для системы, движущийся со скоростью v.

Таким образом в покоящейся системе можно записать

$$-\frac{\partial}{\partial t}f_0(\mathbf{R},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \left[\Delta_i f_0(\mathbf{R},t) - \nabla_i \left(\vec{F}f_0(\mathbf{R},t)\right) \right] + (E_L(\mathbf{R}) - E_0)f_0(\mathbf{R},t) \quad (2.40)$$

В движущийся же системе уравнение Шредингера выглядит так

$$-\frac{\partial}{\partial t}f_{v}(\mathbf{R},t) = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\sum_{i=1}^{N} \left[\Delta_{i}f_{v}(\mathbf{R},t) - \nabla_{i} \left(\vec{F}f_{v}(\mathbf{R},t)\right) \right] + (E_{L}(\mathbf{R}) - E_{v})f_{v}(\mathbf{R},t) + \frac{Nmv^{2}}{2}f_{v}(\mathbf{R},t) + \sum_{i=1}^{N}i\hbar\vec{v}\nabla_{i}f_{v}(\mathbf{R},t) - \frac{i\hbar}{2}\vec{v}\vec{F}f_{v}(\mathbf{R},t)$$

$$(2.41)$$

Исходя из (2.40) и (2.41) можно написать уравнения Блоха для гриновских функций: в неподвижной системе $G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$ и в движущейся $G_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$:

$$-\frac{\partial}{\partial t}G_0(\mathbf{R},\mathbf{R}',t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \left[\Delta_i - (\nabla_i \vec{F}) - \vec{F}\nabla_i\right] + E_L(\mathbf{R}) - E_0\right)G_0(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)$$
(2.42)

И

$$-\frac{\partial}{\partial t}G_{v}(\mathbf{R},\mathbf{R}',t) = \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\sum_{i=1}^{N}\left[\triangle_{i}-(\nabla_{i}\vec{F})-\vec{F}\nabla_{i}\right]+E_{L}(\mathbf{R})-E_{v}+\frac{Nmv^{2}}{2}\right)G_{v}(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)+\left(\sum_{i=1}^{N}i\hbar\vec{v}\nabla_{i}-\frac{i\hbar}{2}\vec{v}\vec{F}\right)G_{v}(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)\right)$$

$$+ \left(\sum_{i=1}^{N}i\hbar\vec{v}\nabla_{i}-\frac{i\hbar}{2}\vec{v}\vec{F}\right)G_{v}(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)$$

$$(2.43)$$

Волновая функция $\psi(\mathbf{R},t)$ системы удовлетворяет уравнению Шредингера (2.2), и ее эволюция описывается законом

$$\psi(\mathbf{R},t) = e^{-(\hat{H}-E)t}\psi(\mathbf{R},0) \tag{2.44}$$

А волновая функция f во времени ведет себя как

$$f(\mathbf{R},t) = e^{-At} f(\mathbf{R},0) \tag{2.45}$$

Подстановка (2.36) и (2.37) в (2.45) дает

$$\psi_T(\mathbf{R})\psi(\mathbf{R},t) = e^{-At}\psi_T(\mathbf{R})\psi(\mathbf{R},0)$$
(2.46)

Объединяя вместе (2.44) и (2.46), имеем

$$e^{-At} = \psi_T(\mathbf{R})e^{-(\hat{H}-E)t}\psi_T^{-1}(\mathbf{R}) = Be^{-(\hat{H}-E)t}B^{-1},$$
(2.47)

где оператор B определяется как $B|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \langle \mathbf{R} | \psi \rangle | \mathbf{R} \rangle.$

Найдем след функции Грина. Из (2.47) следует, что этот след T равен

$$T = \int G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR} = \int \langle \mathbf{R} | e^{-tA} | \mathbf{R} \rangle \, \mathbf{dR} = \int \langle \mathbf{R} | B e^{-t(\hat{H} - E)} B^{-1} | \mathbf{R} \rangle \, \mathbf{dR}$$
(2.48)

Мы можем воспользоваться перестановочным свойством следа $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$:

$$T = \int \langle \mathbf{R} | e^{-t(\hat{H} - E)} | \mathbf{R} \rangle \, \mathbf{dR}$$
(2.49)

Смысл этой формулы состоит в том, что след функции Грина не изменяется даже при наличии пробной волновой функции ψ_T .

$$T = \sum_{k,l} \int \langle \mathbf{R} | \phi_k \rangle \langle \phi_k | e^{-t(\hat{H} - E)} | \phi_l \rangle \langle \phi_l | \mathbf{R} \rangle \, \mathbf{dR} = \sum_k e^{-(E_k - E)t}$$
(2.50)

Через достаточно длительный промежуток времени, эволюция функции Грина G_0 задается энергией основного состояния

$$\int G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR} \to e^{-E_0 t}, \quad t \to \infty,$$
(2.51)

Приближение (2.51) работает на временах t таких, что

$$t \gg 1/E_0 \tag{2.52}$$

Аналогично, след $G_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t)$ определяется энергией основного состояния в движущийся системе E_v

$$\int G_{\nu}(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR} \to e^{-tE_{\nu}} \quad t \to \infty,$$
(2.53)

Функция Грина должна удовлетворять периодическим граничным условиям, т.е. оставаться неизменной при сдвиге какого-либо из аргументов на длину периода \vec{L}

$$G_0(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_i + \vec{L}, ..., \vec{r}_N, \mathbf{R}', t) = G_0(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_i, ..., \vec{r}_N, \mathbf{R}', t),$$
(2.54)

$$G_{\upsilon}(\vec{r}_{1},...,\vec{r}_{i}+\vec{L},...,\vec{r}_{N},\mathbf{R}',t) = G_{\upsilon}(\vec{r}_{1},...,\vec{r}_{i},...,\vec{r}_{N},\mathbf{R}',t)$$
(2.55)

Введем новую функцию Грина $\tilde{G}(\mathbf{R},\mathbf{R}',t)$ таким образом, что

$$G_{v}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = exp\left(i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\sum_{i}(\vec{r_{i}} - \vec{r_{i}}')\right)\tilde{G}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$$
(2.56)

Функция Грина $\tilde{G}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$ удовлетворяет тому же уравнению Блоха (2.42), что и $G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)$, но с отличающимися от (2.54, 2.55) граничными условиями наличием фазового фактора.

$$\tilde{G}(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_i + \vec{L}, ..., \vec{r}_N, \mathbf{R}', t) = exp\left(-i\frac{m}{\hbar}\vec{v}\vec{L}\right)\tilde{G}(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_i, ..., \vec{r}_N, \mathbf{R}', t),$$
(2.57)

Из формул (2.51) и (2.53) следует соотношение

$$\frac{\int \tilde{G}(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}}{\int G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}} = \frac{\int G_v(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}}{\int G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}} \approx \frac{e^{-tE_v}}{e^{-tE_0}}$$
(2.58)

Полагая, что $t(E_v-E_0)\ll 1$ получим

$$\frac{e^{-tE_{\nu}}}{e^{-tE_{0}}} \approx 1 - t(E_{\nu} - E_{0}) \tag{2.59}$$

Отношение следов связано с разницей энергий

$$\frac{\int \tilde{G}(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}}{\int G_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}, t) \, \mathbf{dR}} = 1 - t(E_v - E_0) \tag{2.60}$$

Функция Грина \tilde{G} совпадает с G_0 , за исключением граничных условий. Введем число⁶ W [152], которое считает, сколько раз использовались граничные условия в процессе эволюции

$$1 - t(E_v - E_0) = \frac{\int |f(\mathbf{R}, t)|^2 e^{-i\frac{m}{\hbar}\vec{v} \cdot W\vec{L}} \, \mathbf{dR}}{\int |f(\mathbf{R}, t)|^2 \, \mathbf{dR}}$$
(2.61)

В случае медленно движущихся стенок ($\vec{v} \frac{m}{\hbar} W \vec{L} \ll 1$), можно воспользоваться разложением экспоненты в ряд Тейлора

$$e^{-i\frac{m}{\hbar}\vec{v}W\vec{L}} \approx 1 - i\frac{m}{\hbar}\vec{v}W\vec{L} - \frac{m^2}{\hbar^2}(\vec{v}W\vec{L})^2$$
(2.62)

Свяжем W с расстоянием, пройденным частицами за время t

$$W\vec{L} = \sum_{i=1}^{N} \left(\vec{r_i}(t) - \vec{r_i}(0) \right)$$
(2.63)

Среднее от линейного слагаемого равно нулю, и конечный результат запишется в виде

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{6N} \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \frac{\int |f(\mathbf{R}, t)|^2 (WL)^2 \, \mathbf{dR}}{\int |f(\mathbf{R}, t)|^2 \, \mathbf{dR}}$$
(2.64)

Эта формула показывает, что сверхтекучая доля равна отношению констант диффузии центра масс D_v и константы свободной диффузии D_0^7

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{D_v}{D_0},\tag{2.65}$$

 $^{^{6}}$ число W в английской терминологии называется "winding number"

⁷Необходимо заметить, что «диффузия» происходит во мнимом времени, и не имеет никакого отношения к диффузии в реальном пространстве.

где константы диффузии определены как

$$D_0 = \frac{\hbar^2}{2m},\tag{2.66}$$

$$D_{v} = \lim_{t \to \infty} \frac{N}{6t} \frac{\int f(\mathbf{R}, t) \left(\vec{R}_{CM}(t) - \vec{R}_{CM}(0)\right)^{2} \mathbf{dR}}{\int f(\mathbf{R}, t) \mathbf{dR}}, \qquad (2.67)$$

а центр масс как обычно равен:

$$\vec{R}_{CM}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i(t)$$
(2.68)

Измерение D_v/D_0 как функции времени показывает, что это отношение начинается с 1 при малом времени, уменьшается при увеличении t, и, в конце-концов, достигает плато. На практике, наилучшим способом является фитирование отношения D_v/D_0 функцией $C_0 + C_1(1 - exp(-C_2t))/t$, где C_0 , C_1 , C_2 — параметры [156].

Следует особо отметить, что вычисление сверхтекучей доли ρ_s/ρ не зависит от выбора пробной функции и, следовательно, является «чистой» оценкой.

2.5.3 Одночастичная матрица плотности и доля частиц в конденсате

Одночастичная матрица плотности однородной системы определяется через многочастичную волновую функция системы $\psi(r_1, ..., r_N)$ как

$$\rho(|\vec{r}' - \vec{r}''|) = N \frac{\int \dots \int \phi_0^*(\vec{r}', \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \phi_0(\vec{r}'', \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \, d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{\int \dots \int |\phi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}.$$
(2.69)

В методе ДМК вместо выборки по распределению вероятности основного состояния ϕ_0^2 , делается выборка по смешанному распределению $\psi_T \phi_0$, что позволяет подсчитать смешанную одночастичную матрицу плотности

$$\rho_{mixed}(r) = N \frac{\int \dots \int \psi_T^*(\vec{r}'' + \vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \phi_0(\vec{r}'', \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \, d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{\int \dots \int \psi_T^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \, d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N},\tag{2.70}$$

Эту формулу можно раскрыть дальше

$$\rho_{mixed}(r) = N \frac{\int \dots \int \psi_T^*(\vec{r_1} + \vec{r}, \vec{r_2}, \dots, \vec{r_N}) \phi_0(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \dots, \vec{r_N}) \delta(\vec{r_1} - \vec{r''}) d\vec{r_1} \dots d\vec{r_N}}{\int \dots \int \psi_T^*(\vec{r_1}, \dots, \vec{r_N}) \phi_0(\vec{r_1}, \dots, \vec{r_N}) d\vec{r_1} \dots d\vec{r_N}} = n \frac{\int \dots \int [\psi_T^*(\vec{r_1} + \vec{r}, \vec{r_2}, \dots, \vec{r_N}) (\psi_T^*(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \dots, \vec{r_N}))^{-1}] f(\vec{r_1}, \dots, \vec{r_N}) d\vec{r_1} \dots d\vec{r_N}}{\int \dots \int f(\vec{r_1}, \dots, \vec{r_N}) d\vec{r_1} \dots d\vec{r_N}}, \quad t \to \infty$$
(2.71)

где использовалась асимптотическое выражение (2.33). Если волновая функция выбрана в виде произведения парных волновых функций, то, используя обозначения $\mu(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|) =$ $\ln g(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|))$ получим

$$\psi_T(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N) = \prod_{i < j} e^{\mu(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}$$
(2.72)

и отношение пробных волновых функций в (2.71) превращается в

$$\frac{\psi_T(\vec{r}_1 + \vec{r}, ..., \vec{r}_N)}{\psi_T(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_N)} = \prod_{j>1} exp\left(\mu(|\vec{r}_1 + \vec{r} - \vec{r}_j|) - \mu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_j|)\right) = exp\left(\sum_{j>1} \mu(|\vec{r}_1 + \vec{r} - \vec{r}_j|) - \mu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_j|)\right).$$
(2.73)

Для получения лучшей статистики усреднение нужно производить по всем частицам

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{\psi_{T}(\vec{r_{1}},...,\vec{r_{i}}+\vec{r},...,\vec{r_{N}})}{\psi_{T}(\vec{r_{1}},...,\vec{r_{N}})} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\exp\left(\sum_{j\neq i}^{N}\mu(|\vec{r_{i}}+\vec{r}-\vec{r_{j}}|) - \mu(|\vec{r_{i}}-\vec{r_{j}}|)\right)$$

Асимптотика одночастичной матрицы плотности дает долю сконденсировавшихся частиц

$$\lim_{r \to \infty} \rho(r) = \frac{N_0}{V} \tag{2.74}$$

и доля частиц в конденсате дается асимптотическим значением

$$\lim_{r \to \infty} \frac{\rho(r)}{\rho} = \frac{N_0}{N} \tag{2.75}$$

2.5.4 Экстраполяция вариационной и смешанной оценок на чистую

Одночастичная матрица плотности, измеренная по формуле (2.71), соответствует смешанной оценке, т.е. такой, когда среднее от величины A считается асимметричным способом $\langle \phi_0 | \hat{A} | \psi_T \rangle$. Если пробная волновая функция близка к волновой функции основного состояния ϕ_0 , то можно приближенно получить чистое среднее (т.е. среднее по основному состоянию) $\langle \phi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle$.

Обозначим разницу между пробной волновой функцией и волновой функцией основного состояния как $\delta\psi$

$$\phi_0 = \psi_T + \delta\psi \tag{2.76}$$

Тогда усреднение по основному состоянию может быть переписано как

$$\langle \phi_0 | \hat{A} | \phi_0 \rangle = \langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle + 2 \langle \phi_0 | \hat{A} | \delta \psi \rangle + \langle \delta \psi | \hat{A} | \delta \psi \rangle$$
(2.77)

Если $\delta \psi$ — мало́, то слагаемым $\langle \delta \psi | \hat{A} | \delta \psi \rangle$ можно пренебречь. После подстановки $\langle \phi_0 | \hat{A} | \delta \psi \rangle = \langle \psi_T | \hat{A} | \phi_0 \rangle - \langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle$ экстраполяционная формула принимает вид

$$\langle A \rangle = \langle \phi_0 | \hat{A} | \phi_0 \rangle = 2 \langle \phi_0 | \hat{A} | \psi_T \rangle - \langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle$$
(2.78)

Для того же порядка точности можно написать еще одну экстраполяционную формулу.

$$\langle A \rangle = \langle \phi_0 | \hat{A} | \phi_0 \rangle = \frac{\langle \phi_0 | \hat{A} | \psi_T \rangle^2}{\langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle}$$
(2.79)

Формула (2.79) предпочтительнее при измерении малых значений неотрицательной величины (например длинноволновых асимптотик одночастичной матрицы плотности в одномерной системе), т.к. экстраполяция сделанная по этой формуле сохраняет знак усредняемой величины. Совпадение результатов экстраполяций (2.79,2.79) доказывает *a posteriori* малость пренебрегаемых слагаемых и применимость метода экстраполяции.

Глава З

Двумерные мезоскопические кластеры пылевой плазмы

3.1 Введение

Целью настоящей работы является исследование статических и термодинамических свойств малых кластеров «пыли» в плазме. В проводящихся в настоящее время экспериментах малые частицы, погруженные в плазму приобретают значительный отрицательный (как правило) заряд -Ze, $Z \sim 10^3$ вследствие более высокой подвижности и температуры электронов плазмы. Дебаевское экранирование заряда частиц модифицирует кулоновское взаимодействие между частицами и, с хорошей точностью (обсуждение этого вопроса см. в работе [162, 127, 171]), межчастичное взаимодействие может быть описано парным потенциалом Юкавы¹. В случае малого кластера, все частицы располагаются в одном (приэлектродном) слое и мы имеем двумерный кластер N «пылевых» частиц в плазме, выражение для энергии которого может быть представлено в виде:

$$E = (Ze)^{2} \sum_{i < j} \frac{\exp\left(-|\mathbf{r}_{ij}|/R\right)}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \alpha \sum_{i=1}^{N} |\mathbf{r}_{i}|^{2}$$
(3.1)

Здесь предполагается, что частицы удерживаются квадратичным внешним потенциалом силы α . Дебаевская длина экранирования заряда частиц в плазме определяется как

¹в проводящихся в настоящее время экспериментах поперечные размеры «облака» частиц в плазме значительно превышают дебаевскую длину экранирования R_D и, поэтому, даже для рассматриваемых в настоящей статье «двумерных» кластеров, использование потенциала Юкавы, вызванного трехмерной экранировкой заряда частиц плазмой вполне оправдано

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫЗ4 $R = (4\pi q_i^2 n_i/k_b T_i + 4\pi e^2 n_e/k_b T_e)^{-1/2}$, где q_i, n_i и T_i — заряд, средняя плотность и температура ионов, а e, n_e, T_e — соответствующие величины для электронов плазмы.

С использованием безразмерных единиц для расстояния $r_0 = (Ze)^{2/3}/\alpha^{1/3}$ и энергии $E_0 = \alpha r_0^2$, выражение для энергии кластера принимает вид:

$$E = \sum_{i < j} \frac{\exp\left(-\gamma |\mathbf{r}_{ij}|\right)}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \sum_{i=1}^{N} |\mathbf{r}_i|^2$$
(3.2)

Таким образом, термодинамическое состояние кластера заданного числа частиц определяется двумя безразмерными параметрами: обратной длиной экранирования $\gamma = r_0/R$ и безразмерной температурой системы $\Theta = k_b T/E_0$. Управление характерным радиусом взаимодействия частиц $1/\gamma$ может осуществляться изменением дебаевского радиуса экранирования R, являющегося функцией плотности и температуры плазмы.

В настоящей работе проведено исследование свойств двумерных кластеров «пылевой плазмы» (3.2) как функции управляющего параметра γ и температуры Θ . Для ряда кластеров, содержащих N < 40 частиц, найдены структуры «пылевых кластеров», спектры гармонических колебаний и энергии основных состояний (Раздел 3.2). Изменение дебаевского радиуса экранирования (параметра γ) приводит к перестройкам структуры основного состояния при некоторых γ^* , что может рассматриваться как осуществление фазовых переходов различного рода по параметру γ . На примерах кластеров, состоящих из N = 10, 33, 37 частиц показано, что исследуемые системы могут испытывать ряд фазовых переходов первого и второго родов в широкой области значений $\gamma \in [0, 30]$. Для рассмотрения термодинамических свойств малых систем «пылевой плазмы» и исследования явлений разупорядочения (плавления) различных типов применялись методы молекулярной динамики (МД) и Монте Карло (МК) в каноническом ансамбле (Раздел 3.3). Мы покажем, что термодинамическим состоянием малых кластеров частиц «пыли» можно управлять не только температурой кластера, но также и длиной экранирования Дебая, т.е. плотностью и температурой плазмы, в которую погружены частицы. При этом незначительные изменения в параметрах проведения эксперимента могут привести к значительному изменению структуры кластеров, температур «фазовых переходов» и даже к исчезновению явлений разупорядочения некоторых типов.

3.2 Конфигурации глобальных минимумов

Для нахождения конфигураций, доставляющих системе (3.2) глобальный минимум, мы использовали модифицированный метод Ньютона [21, 168, 167]; и комбинированный метод «Случайный поиск + градиентный спуск» [5]. Конфигурации всех глобальных минимумов, представленные ниже (см. Рис. 3.1-3.3 и Табл. 3.2), находились *независимо* обоими методами, что позволило повысить надежность результатов. Разумеется, никакой из существующих ныне методов поиска минимума функции многих переменных не в состоянии гарантировать, что полученная конфигурация соответствует глобальному минимуму. Чтобы обойти эту трудность, в качестве начальных мы рассматривали до 200 произвольно распределенных конфигураций. Такой подход позволяет также исследовать локальные минимумы и области сходимости к ним («удельные веса» локальных минимумов).

В пределе слабого экранирования зарядов частиц в плазме, $\gamma \ll 1$, модель (3.2) описывает кулоновский кластер в гармоническом удерживающем потенциале — систему, активно исследовавшуюся как экспериментально [146, 93], так и методами компьютерного моделирования [8, 107, 108, 21, 168, 167, 90]. В частности, проведенные ранее расчеты кулоновских кластеров показали, что конечные системы не слишком большого числа частиц удобно классифицировать в соответствии с их оболочечной структурой (см. Табл. 3.2). По характеру заполнения концентрических оболочек система приписывается одному из периодов таблицы типа периодической таблицы Менделеева.

Наличие параметра γ , определяющего радиус действия потенциала взаимодействия частиц в кластере, позволяет исследовать влияние короткодействия потенциала взаимодействия частиц на структуру и свойства основных состояний кластеров. Факт зависимости структуры кластеров от параметров потенциала взаимодействия становится очевидным при рассмотрении Табл. 3.2, в которой приведены некоторые основные конфигурации 2D кластеров в гармонической ловушке (по мере увеличения дальнодействия парного потенциала взаимодействия): дипольных, кулоновских и логарифмических кластеров. В рассматриваемом случае «пылевых кластеров», по мере изменения величины γ (радиуса экранирования Дебая $1/\gamma$) будут осуществляться перестройки основного состояния системы, причем о каждой точке γ^* , в которой имеет место какое-либо структурное изменение, можно говорить как о точке фазового перехода того или иного рода.

Род перехода может быть определен из графика энергии системы как функции управляющего параметра γ : разрыв *n*-й производной энергии основного состояния $E(\gamma)$ по па-

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОИ ПЛАЗМ

N	$1/r^{3}$	1/r	$-\ln r$
9	2,7	2,7	1,8
10	3,7	2,8	2,8
11	3,8	3,8	2,9
32	1,6,12,13	$1,\!5,\!11,\!15$	4,11,17
33	1,6,12,14	$1,\!6,\!11,\!15$	5,11,17
34	1,6,12,15	$1,\!6,\!12,\!15$	1,5,11,17
36	1,6,12,17	$1,\!6,\!12,\!17$	1,6,12,17
37	1,6,1,13,16	1,7,12,17	1,6,12,18
38	2,8,13,15	1,7,13,17	1,6,12,19

Таблица 3.1: Распределение частиц по оболочкам $\{N_1, N_2, ...\}$ основных состояний кластеров N частиц в гармоническом удерживающем потенциале с дипольным, кулоновским и логарифмическим взаимодействием.

раметру γ в некоторой точке γ^* формально соответствует фазовому переходу *n*-го рода в точке γ^* . Вывод о роде фазового перехода в точке изменения конфигурации системы может быть также сделан при исследовании набора 2N собственных частот нормальных колебаний кластера $\omega_i(\gamma), i = \overline{1, 2N}$ вблизи глобального минимума $E(\gamma)$, а именно: разрыв каких-либо частот свидетельствует о фазовом переходе первого рода, тогда как обращение в ноль частоты какого-либо движения («смягчение» моды соответствующего движения) позволяет утверждать о том, что в данной точке имеет место фазовый переход второго рода [142].

На Рис. 3.1а показаны результаты расчетов собственных частот динамической матрицы кластера N = 10 частиц для различных величин параметра экранировки $\gamma \in [0, 10]$. Спектр собственных колебаний и соответствующие собственные вектора находились при помощи алгоритма Хаусхолдера. Хорошо заметно прерывное поведение ряда частот в точках $\gamma \approx 1,4$ и $\gamma \approx 8,2$. Исследование конфигураций основных состояний кластера показывает (см. Рис. 3.1b), что, по мере увеличения короткодействия потенциала взаимодействия, с ростом γ сначала (при $\gamma \approx 1.4$) происходит изменение распределения частиц по оболочкам, характерное для перехода от случая кулоновского взаимодействия к ди-
польному ($\{2,8\} \rightarrow \{3,7\}$). Дальнейшее уменьшение радиуса экранирования переводит кластер (при $\gamma \approx 8,2$) в состояние с более плотной упаковкой (с конфигурацией $\{2,8\}$), характерной для системы твердых сфер.

На Рис. 3.2 показаны результаты расчета основных конфигураций кластера N = 33 частиц. На вставке Рис. 3.2а хорошо заметен скачок первой производной энергии основного состояния по параметру γ в точке $\gamma^* \approx 3,751$. В этой точке, с увеличением короткодействия потенциала, происходит изменение чисел заполнения двух внешних оболочек: $\{1, 6, 11, 15\} \rightarrow \{1, 6, 12, 14\}$. Точка γ^* фазового перехода первого рода может быть определена как точка, в которой сравниваются энергии основного и нижайшего возбужденного (метастабильного) состояний. Иллюстрацией этому может служить Рис. 3.2b, на котором приведены графики энергии основного состояния $E(\gamma)$ и энергии нижайшего локального минимума $E^{(1)}(\gamma)$ в области фазового перехода кластера N = 33 частиц. Из рисунка видно, что конфигурации, доставлявшие системе глобальный минимум до перехода (скажем, $\{1, 6, 11, 15\}$ при $\gamma < \gamma^*$), образуют метастабильную ветвь системы в непосредственной окрестности точки γ^* за переходом.

Весьма интересная картина структурных перестроек с изменением радиуса экранирования ожидалась от кластера N = 37 частиц. В соответствующей дипольной системе одна частица находится между второй и третьей оболочками, образуя «дефект внедрения» (аналог дефекта Френкеля в кристаллах) и разбиение на оболочки основной конфигурации неоднозначно [5]. Исследование этого кластера при различных величинах параметра γ показало, что в области $\gamma \in [0; 1, 6]$ имеют место четыре фазовых перехода (см. Рис. 3.3a): два перехода втогого рода (при $\gamma\approx 0,78$
и $\gamma\approx 1,22,$ где зануляется минимальная собственная частота нормальных колебаний) и два перехода первого рода (при $\gamma \approx 0, 52$ и $\gamma \approx 1, 34$). Из Рис. 3.3а видно, что при $\gamma \approx 0,52$ происходит изменение числа заполнения внешних оболочек. Аналогичная перестройка осуществляется в точке $\gamma = 0,52$ кластера 37 частиц. Такие резкие изменения структуры кластеров характерны для фазовых переходов первого рода. Однако, рассматривая область второго фазового перехода первого рода, происходящего при $\gamma \approx 1,34$, можно обнаружить, что никаких отчетливых изменений структуры кластера не происходит. Более детальный анализ показывает, что в рассматриваемой области осуществляется проворот третьей оболочки относительно четвертой, что можно видеть из Рис. 3.3b. Для количественного описания таких ориентационных перестроек на Рис. 3.3 представлены зависимости параметра взаимного ориентационного порядка $g_{s_1s_2}$ различ-



Рис. 3.1: Собственные частоты (а) и наименьшая ненулевая собственная частота ω_{min} (b) кластера «пылевой» плазмы N = 10 частиц. На вставках показаны основные конфигурации системы (а также собственные векторы нормальной моды частоты ω_{min}) в трех различных областях управляющего параметра γ .



Рис. 3.2: Система N = 33 частиц. (а) Производная энергии основного состояния системы по параметру γ . На вставке показана область перехода первого рода. (b) Энергии и конфигурации нижайшего локального минимума ($E^{(1)}$ отсчитанного от энергии глобального минимума E) кластера в области фазового перехода.

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ40 ных пар оболочек $\{s_1, s_2\}$ (см. ниже, (3.4)), весьма чувствительного к изменению взаимной ориентации оболочек.

Дальнейшее увеличение параметра γ (уменьшение радиуса действия межчастичного потенциала взаимодействия), приводит к осуществлению еще двух переходов первого рода, показанных на Рис. 3.3b. В результате первого из них (при $\gamma \approx 7,015$) одна из частиц внедряется между второй и третьей оболочками (см. Табл. 3.2 и обсуждение выше). Соответствующая перестройка может быть записана как $\{1,7,13,16\} \rightarrow \{1,6,\overline{1},12,17\}$. При $\gamma \approx 19$ кластер приобретает четко выраженную огранку и переходит в наиболее симметричное состояние $\{1,6,12,18\}$ с наиболее плотной упаковкой. Последующее увеличение короткодействия потенциала взаимодействия не приводит к каким-либо перестройкам в системе. Любопытно отметить, что собственные колебания минимальной ненулевой частоты ω_{min} (см. Рис. 3.3b), соответствуют в рассматриваемой области γ дважды вырожденному колебанию всего кластера как целого в гармонической ловушке с частотой $\omega_{min} = \sqrt{2}$.

Результаты исследования кулоновских и дипольных кластеров показали, что основой большинства основных конфигураций этих систем являются части кристаллической решетки с гексагональной симметрией [5, 90]. При описании и анализе свойств таких конфигураций представляется удобным ввести в рассмотрение «кристаллические оболочки» (Cr_c) — концентрические группы узлов идеального 2D кристалла, в центре которых находится c частиц¹. Исследование конечных систем «пылевой» плазмы показало (см. Рис. 3.1-3.3), что изменения конфигураций кластеров, имеющие место с увеличением параметра γ (т.е. с уменьшением дальнодействия потенциала взаимодействия) происходят в таком направлении, в котором заполняется максимальное число кристаллических оболочек.

В заключение этого раздела отметим, что характерной чертой всех обнаруженных нами фазовых переходов первого рода в кластерах N < 40 и в широком интервале управляющего параметра γ являлось резкое изменение структуры кластера. Обычно эта особенность проявляется как изменение чисел заполнения соседних оболочек системы, что имеет место в рассмотренных выше случаях кластеров N = 10 и N = 33 частиц (см. Рис. 3.1-3.2). Однако, изменения структуры могут также происходить таким образом, что в точке фазового перехода первого рода одновременно изменяются числа заполнения удаленных друг от друга оболочек. Именно этот случай имеет место в областях $\gamma \approx 7,015$ и $\gamma \approx 19$

¹Очевидно, что в силу изотропии удерживающего потенциала основной интерес представляет конечное число наиболее симметричных кристаллических оболочек, которые, по количеству узлов в центре, могут быть разбиты на следующие группы Cr_1 , Cr_2 , Cr_3 , Cr_4 .



Рис. 3.3: Система N = 37 частиц. а) Нижайшая ненулевая собственная частота ω_{min} и взаимный ориентационный параметр порядка различных пар оболочек кластера как функции γ . b) Область сильного экранирования заряда частиц в плазме. Собственные колебания наименьшей ненулевой частоты при $\gamma > 19$ соответствуют движению всего кластера как целого в гармоническом потенциале.

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ42

для системы 37 частиц, см. Рис. 3.36. Другим интересным примером перестроек такого рода может служить кластер N = 26 частиц, поведение которого сходно с картиной изменений в кластере 10 частиц: с уменьшением короткодействия потенциала взаимодействия частиц последовательно имеют место два перехода первого рода с одновременным изменением чисел частиц в первой и третьей оболочках: $\{3, 9, 14\} \rightarrow \{4, 9, 13\}$ при $\gamma \approx 1.6$ и $\{4, 9, 13\} \rightarrow \{3, 9, 14\}$ при $\gamma \approx 12$.

3.3 Фазовые переходы.

Важной отличительной особенностью малых кластеров является возможность существования у таких систем двух типов явлений разупорядочения [8, 107, 108, 110]: межоболочечного разупорядочения (ориентационного плавления оболочек s_1 и s_2 при температуре $\Theta_{s_1s_2}$) и радиального разупорядочения (полного плавления при температуре Θ_f). Анализ собственных частот колебаний показывает, что для кластеров с малыми величинами нижайших собственных частот ω_{min} соответствующие собственные векторы в основном направлены по касательной к оболочкам и соответствуют взаимному провороту последних (см. Рис. 3.1) [21, 168, 167]. Такие кластеры будут обладать малыми температурами $\Theta_{s_1s_2}$ межоболочечного разупорядочения, когда оболочки s_1 и s_2 проворачиваются друг относительно друга, теряя взаимный ориентационный порядок ¹.

Очевидно, что изменение структуры кластеров при варьировании управляющего параметра γ должно привести к изменению температур ориентационного и полного разупорядочений. Возможно также полное исчезновение явления ориентационного плавления в случае когда кластер имеет «хорошо упакованную» структуру. Представленные ниже результаты наших расчетов подтверждают это предположение.

Обычным способом исследования ориентационного разупорядочения в кластерах является измерение среднеквадратичного относительного углового смещения двух оболочек, аналогичного среднеквадратичным смещениям (см. ниже, (3.5). В подобном подходе температуру $\Theta_{s_1s_2}$ ориентационного плавления оболочек s_1 и s_2 определяют как температуру, при которой происходит резкое изменение величины среднеквадратичного углового сме-

¹Отметим, что, в отличие от систем большого числа частиц N > 40, ориентационное плавление в малых кластерах может иметь место для всех пар оболочек, т.е. могут существовать температуры плавления Θ_{21} , $\Theta_{32}, \Theta_{43}...$. Проведенные ранее расчеты кулоновских, дипольных и логарифмических кластеров показали, что в больших кластерах возможно лишь ориентационное плавление внешней оболочки.

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ43

щения. Мы используем несколько иной способ определения температуры ориентационного плавления как точки обращения в ноль *параметра взаимного ориентационного порядка* оболочек s₁ и s₂ [5]. Определим эту величину следующим образом. Для каждой оболочки номера s с числом частиц N_s рассмотрим комплексную величину ψ_s такую, что:

$$\psi_s = \frac{1}{N_s} \sum_{i_s} \exp\left(jN_s\varphi_i\right), \quad j^2 = -1 \tag{3.3}$$

Сумма в (3.3) берется по всем частицам, принадлежащим данной оболочке. Параметр взаимного ориентационного порядка определим затем как

$$g_{s_1s_2} = \psi_{s_1}\psi_{s_2}^* \tag{3.4}$$

Очевидно, что величина $\langle g_{s_1s_2} \rangle$ обращается в ноль в точке относительного разупорядочения (проворота) оболочек s_1 и s_2 . Характеристикой угловой упорядоченности частиц внутри оболочки *s* может служить величина $\langle g_{ss} \rangle = \langle |\psi_s|^2 \rangle$. Отметим, что величины ψ_s и $\langle g_{s_1s_2} \rangle$ являются аналогами ориентационного параметра ψ_6 и корреляционной функции $g_6(r)$ в неограниченных 2D системах, где обращение корреляционной функции в ноль $g_6(r) \to 0$, $r \to \infty$ при отсутствии трансляционного порядка свидетельствует об относительной ориентационной разупорядоченности удаленных частей системы.

На Рис. 3.1а приведены зависимости термодинамического среднего $\langle g_{21} \rangle$ величины взаимного ориентационного порядка двуоболочечного кластера N = 10 частиц от температуры для разных значений параметра γ . Из рисунка видно, что изменение конфигурации системы $\{2,8\} \rightarrow \{3,7\}$ (которое происходит при $\gamma \approx 1,4$, см. Рис. 1) приводит к резкому уменьшению температуры ориентационного разупорядочения: с $\Theta_{21} \approx 1,3 \cdot 10^{-4}$ на $\Theta_{21} \approx 0,7 \cdot 10^{-5}$.

В области $\gamma > 8, 2$, где кластер имеет плотную упаковку (см. Рис. 3.1), ориентационное плавление отсутствует и повышение температуры приводит к обмену частиц между оболочками, которое имеет место при $\Theta_f \approx 10^{-3}$. Это можно видеть из температурной зависимости среднеквадратичных радиальных смещений u_r^2 частиц системы:

$$u_r^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[\left\langle |\mathbf{r}_i|^2 \right\rangle - \left\langle |\mathbf{r}_i| \right\rangle^2 \right] \tag{3.5}$$

Соответствующая зависимость представлена на Рис. 3.46. Показаны также аналогичные кривые для систем с $\gamma = 1$ и $\gamma = 2$. Из рисунка видно, что даже незначительное изменение величины управляющего параметра может на порядок изменить температуру полного плавления в системе.



Рис. 3.4: Двухоболочечный кластер 10 частиц. а) Термодинамическое среднее взаимного ориентационного параметра порядка первой и второй оболочек при различных величинах параметра γ . b) Среднеквадратичные радиальные смещения как функция температуры $u_r^2(\Theta)$.

Глава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ45



Рис. 3.5: Четырехоболочечный кластер 33 частиц. Среднеквадратичные радиальные смещения как функция температуры $u_r^2(\Theta)$.

Варьирование параметров потенциала взаимодействия приводит к изменениям структуры изоэнергетической поверхности системы, определяющей тип и характерные особенности происходящих фазовых переходов. Поэтому представляется возможным, что при определенных значениях управляющего параметра γ система может иметь весьма интересные термодинамические свойства, связанные с особенностями такой структуры.

На Рис. 3.5 приведена зависимость среднеквадратичных радиальных смещений (3.5) четырехоболочечного кластера N = 33 частиц при $\gamma = 3,76$ как функция температуры. График имеет ряд плато, находящихся в различных температурных интервалах. Детальное исследование показало, что области резкого роста величины u_r^2 соответствуют последовательному разупорядочению различных пар оболочек кластера: обмен частицами третьей и четвертой оболочек начинается при температуре $\Theta^{3,4} \approx 10^{-4}$, второй и третьей — при $\Theta^{2,3} \approx 0,005$. Полное плавление кластера имеет место при $\Theta_f \approx 0,01$.

Интересную информацию о характере происходящих процессов с увеличением температуры можно получить, исследуя распределение системы по локальным минимумам $\rho(E^{(loc)})$. Для оценки этой гистограммы на каждом шаге измерений мы осуществляли



Рис. 3.6: Четырехоболочечный кластер 33 частиц. Гистограммы распределения по локальным минимумам $\rho(E^{(loc)})$ в упорядоченном состоянии (при $\Theta = 10^{-4}$) и при температуре $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$, при которой осуществляется обмен частицами между третьей и четвертой оболочками.

несколько сотен итераций метода градиентного спуска, что позволило определить ближайший локальный минимум, в окрестности которого находится система, и энергию этого минимума $E^{(loc)}$. На Рис. 3.6 приведены распределения системы 33 частиц при $\gamma = 3,76$ по локальным минимумам при температурах $\Theta = 10^{-4}$ (упорядоченное состояние) и $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$ (обмен частицами четвертой и третьей оболочек). В полностью упорядоченном состоянии система все время находится в окрестности глобального минимума энергии E = 64,795946, соответствующего структуре $\{1,6,12,14\}$. При $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$ с конечной вероятностью заселяется нижайший локальный минимум $E^{(1)} = 64,795975$, конфигурация системы в окрестности которого может быть записана как $\{1,6,11,15\}$, см. Рис. 3.2b.

Рассматривая эти результаты совместно с изложенными выше результатами поиска глобального минимума, см. Рис. 3.2, можно сделать вывод, что первое разупорядочение, ясно видное на графике радиальных смещений $u_r^2(\Theta)$ в интервале температур $\Theta \in$ $[10^{-4}, 10^{-3}]$ соответствует конечной вероятности заселения состояния {1, 6, 11, 15}, метастабильного при данном значении параметра γ (см. Рис. 3.2b). Подобная перестройка распределения частиц по оболочкам требует преодоления потенциального барьера, что, в совокупности с большими удельными весами «основного» и «возбужденного» состояний, позволяет рассматривать указанную температурную область как область динамического сосуществования двух форм кластера: {1, 6, 12, 14} \leftrightarrow {1, 6, 11, 15} [181, 182, 117].

3.4 Выводы.

В настоящей работе была рассмотрена конечная система частиц «пылевой плазмы», физической реализацией которой являются микрочастицы в столбе тлеющего разряда постоянного тока или в слабоизолированной плазме высокочастотного разряда при низком давлении. Для различных значений радиуса экранирования Дебая R были определены конфигурации основного состояния кластеров, состоящих из $N \leq 40$ частиц, собственные частоты и соответствующие собственные векторы их нормальных колебаний. С изменением длины экранирования кластеры испытывают структурные перестройки, которые проявляются как фазовые переходы первого или второго рода по параметру R. В точках фазовых переходов первого рода скачкообразно изменяются координаты частиц кластера, что происходит либо с изменением распределения частиц по оболочкам, либо как проворот пар оболочек друг относительно друга. В точке фазового перехода второго рода происГлава 3. ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ48 ходит смягчение (зануление) одной из собственных мод и положения частиц меняются непрерывно.

Исследование фазовых переходов в системе показало, что изменением R (например, варьированием плотности или температуры плазмы) можно модулировать термодинамические свойства системы, изменяя температуры ориентационного и полного разупорядочений (плавлений) на порядки. Оказалось также, что при некоторых значениях радиуса экранирования Дебая возможно исчезновение ориентационного проворота различных оболочек системы, когда повышение температуры сразу приводит к обмену частиц между оболочками.

Анализ изменения распределения по локальным минимумам с изменением температуры показывает, что при определенных значениях *R*, вблизи точек фазовых переходов, плавление в ряде кластеров может проходить по многостадийному механизму, когда в различных температурных интервалах происходит разупорядочение различных областей кластера. В этом случае возможно наблюдение явления динамического сосуществования различных форм кластеров.

Глава 4

Короткодействующее взаимодействие

4.1 Введение

Большим достижением последнего времени является получение бозе-конденсации в квазиодномерных системах [159, 157, 64, 123, 61, 133]. В эксперименте одномерный режим может быть достигнут, если поместить газ в сильно анизотропную ловушку, где продольная удерживающая ловушки очень слаба, а поперечное движение заморожено в основном состоянии поперечного удержания. Другой возможной реализацией квазиодномерной системы является холодный газ на микрочипе.Может быть использована комбинация магнитного поля провода с текущим по нему током и постоянного внешнего поля для создания удерживающего потенциала в поперечном направлении, в то время как в продольном направлении система может простираться на большие расстояния[20, 128].

Недавно достигнутая возможность экспериментального наблюдения одномерного разреженного газа вызвала новый интерес к построению адекватного аналитического описания. В первом приближении (слабонеидеальный газ) достаточно одного параметра, длины *s*-рассеяния a_{1D} , для описания межчастичного взаимодействия, которое в этом случае может быть описано δ -псевдопотенциалом. Множество свойств такой модели, как-то энергия основного состояния[99], спектр возбуждений[98], термодинамические функции при конечной температуре[184], были получены уже в 60-е года при помощи метода подстановки Бете. Годен в своей книге[70] посвященной этому мощному методу пишет, что, однако, почти ничего не известно о корреляционных функциях, кроме частного случая непроницаемых бозонов[97, 179, 187]. Сейчас ведется активная работа в этом направлении: появились вычисления разложения одночастичной матрицы плотности на малых расстояниях[139],

Глава 4. КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩЕЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

значения в нуле двухчастичной корреляционной функции[69]. Тем не менее вплоть до настоящего времени корреляционные функций точно не известны.

Для исследования основного состояния системы одномерных бозонов с δ-взаимодействием мы применяем диффузионный метод Монте-Карло2 позволяющий делать *точные*¹ измерения. Мы утверждаем, что предлагаемая нами пробная волновая функция дает очень хорошее описание настоящей волновой функции основного состояния. В качестве проверки мы вычисляем энергию основного состояния, которая известна точно из метода подстановки Бете[99], и находим точное согласие между двумя методами.

Впервые дается полное описание одночастичной матрицы плотности и функции парного распределения. Полученные результаты находятся в согласии с известными аналитическими предсказаниями. Мы находим функцию импульсного распределения и статический структурный фактор, которые могут быть измерены экспериментально. Мы также вычисляем значение в нуле трехчастичной корреляционной функции, которое является очень важной величиной, т.к. оно обусловливает выпадение частиц из конденсата за счет неупругого рассеяния. Мы находим аналитическое выражение для коэффициента асимптотического затухания, являющегося точным в режиме среднего поля. И, наконец, мы исследуем влияние внешнего удержания.

4.2 Корреляционные функции

Мы дадим определение корреляционных функций, записав их в представлении первичного квантования и выразив через многочастичную волновую функцию $\Psi(z_1, ..., z_N)$ системы, где $z_1, ..., z_N$ – координаты N частиц. Мы рассмотрим предел нулевой температуры и обозначим волновую функцию основного состояния как Ψ_0 .

Одночастичная матрица плотности g_1 описывает пространственные корреляции между двумя точками z_1, z_2 . В однородной системе g_1 зависит только от разности $z = z_1 - z_2$:

$$g_1(z) = \frac{N}{n} \frac{\int \Psi_0^*(z_1 + z, ..., z_N) \Psi_0(z_1, ..., z_N) dz_2 ... dz_N}{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_1 ... dz_N},$$
(4.1)

где n = N/L — погонная плотность.

Функция $g_1(z)$ нормирована таким образом, чтобы ее значение в нуле было единичным $g_1(0) = 1$. Как мы убедимся позже, на больших расстояниях одночастичная матрица плот-

¹конечно, с точностью до статистической погрешности, которая может быть уменьшена путем увеличения длины численного расчета

ности одномерной однородной системы при нулевой температуре затухает полиномиально быстро, что свидетельствует об отсутствии бозе-конденсата в такой системе[164].

Функция парного распределения $g_2(|z_1 - z_2|)$ дает вероятность того, что одна частица будет найдена в положении z_1 в то время как другая находится в z_2

$$g_2(|z_1 - z_2|) = \frac{N(N-1)}{n^2} \frac{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_3 ... dz_N}{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_1 ... dz_N}$$
(4.2)

На больших расстояниях g_2 выходит на $1 - \frac{1}{N}$ и стремится к единичному значению в термодинамическом пределе $N \to \infty$.

Значение в нуле трехчастичной матрицы плотности дает вероятность обнаружить три частицы в одном и том же месте:

$$g_3(0) = \frac{N(N-1)(N-2)}{n^3} \frac{\int |\Psi_0(0,0,0,z_4,...,z_N)|^2 dz_4...dz_N}{\int |\Psi_0(z_1,...,z_N)|^2 dz_1...dz_N}$$
(4.3)

Зависимость этой величины от плотности представляет большой практический интеpec, т.к. она позволяет предсказать потерю частиц из конденсата за счет трехчастичной рекомбинации.

Фурье-преобразование связывает изложенные функции с не менее интересными функциями. А именно, импульсное распределение n(k) связано с одночастичной матрицей плотностью (4.1):

$$n(k) = n \int e^{ikz} g_1(z) \, dz \tag{4.4}$$

а статический структурный фактор S(k) прямо связан с функцией парного распределения (4.2):

$$S(k) = 1 + n \int e^{ikz} (g_2(z) - 1) dz$$
(4.5)

Информация об импульсном распределении может быть получена из наблюдения за скоростью расширении конденсата после выключения ловушки. Статический структурный фактор может быть измерен при помощи метода бреговской спектроскопии.

4.3 Гамильтониан Либа-Линигера

Холодный бозонный газ в сильно анизотропной ловушке или в волноводе может быть описан в терминах одномерной модели, когда энергии продольного движения не достаточно, чтобы возбудить уровни поперечного удержания. В том случае, когда радиус действия межчастичного взаимодействия намного меньше характерных размеров внешнего удержания, для описания межчастичного потенциала достаточно одного параметра, длины *s* рассеяния. В этом случае межчастичное взаимодействие может быть с хорошей точностью описано δ-псевдопотенциалом. Такая однородная система описывается гамильтонианом Либа-Линигера:

$$\hat{H}_{LL} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + g_{1D} \sum_{i < j} \delta(z_i - z_j), \qquad (4.6)$$

где одномерная константа связи зависит от одномерной длины *s*-рассеяния как $g_{1D} = -2\hbar^2/ma_{1D}$, где m – масса одной частицы. Как показал М.А. Ольшаный [138] в присутствии сильного поперечного удержания (мы обозначим его осцилляторную длину как a_{\perp}), одномерная длина рассеяния a_{1D} имеет резонансное поведение от a_{3D} из-за виртуальных возбуждений высших поперечных уровней осциллятора.

$$a_{1D} = -a_{\perp} \left(\frac{a_{\perp}}{a_{3D}} - 1,0326 \right) \tag{4.7}$$

Регулируя длину трех-мерного рассеяния a_{3D} напр. при помощи резонанса Фешбаха можно менять значение a_{1D} в большом диапазоне значений. Для обычных газов в отсутствии фешбаховского резонанса, выполняется условие $a_{3D} \ll a_{\perp}$. В этом случае выражение (4.7) упрощается еще $a_{1D} = -a_{\perp}^2/a_{3D}$.

Все свойства этой модели зависят от одного характерного параметра — безразмерной плотности². В отличии от трехмерной системы, где разреженный газ является слабо взаимодействующим, в одномерной системе малые значения параметра na_{1D} соответствуют наличию сильных квантовых корреляций. Истоки этой «странной», как казалось бы на первый взгляд, особенности присущей одномерной системе могут быть легко поняты сравнивая характерное значение кинетической энергии $\hbar^2 n^{2/D}/2m$ (D — размерность системы) с характерной энергией среднего поля gn. Зависимость от плотности в обеих случаях степенная, но какая степень выигрывает, 2/D или 1, зависит от размерности пространства.

Уравнение состояния впервые получено Либом и Линигером[99] используя подстановку Бете. Энергию системы удобно записать как $E/N = e(n|a_{1D}|)\hbar^2 n^2/2m$, где функция $e(n|a_{1D}|)$ находится путем численного или итеративного решения интегральных уравнений. В режиме среднего поля $na_{1D} \gg 1$ (режим Гросса-Питаевского) энергия при-

²По аналогии с трехмерным случаем, где управляющей величиной является газовый параметр na^3 , мы будем называть безразмерную погонную плотность na_{1D} одномерным газовым параметром



Рис. 4.1: Энергия на одну частицу: метод подстановки Бете (сплошная линия), ДМК (кружки), режим Гросса-Питаевского (пунктирная линия), режим Тонкса-Жирардо (точечная линия). Энергии приведены в единицах $\hbar^2/(ma_{1D}^2)$.

ходящаяся на одну частицу (а так же хим. потенциал) линейно зависит от плотности $E^{GP}/N = g_{1D}n/2$, в то время как в режиме сильных корреляций зависимость квадратичная $E^{TG}/N = \pi^2 n^2/6m$. Однако явное выражение для энергии газа при произвольном значении na_{1D} не существует. Зависимость энергии от плотности найденная путем численного решения интегральных уравнений Либа-Линигера приведена на Рис. 4.1. На Рисунке мы также показываем результаты полученные методом ДМК (см. главу 4.4). Результаты обеих методов находятся в превосходном согласии.

Химический потенциал определяется как производная полной энергии по числу частиц $\mu = \partial E/\partial N$. Корреляционная длина $\xi = \hbar/(\sqrt{2}mc)$ зависит от скорости звука в среде c, которая, в свою очередь, может быть связана с хим. потенциалом $mc^2 = n \frac{\partial}{\partial n} \mu$. Все эти величины могут быть выражены явно в режиме сильных корреляций $na_{1D} \ll 1$. В этом случае энергии налетающей частицы недостаточно что бы протуннелировать через межчастичный потенциал. Две частицы никогда не могут находится в одном и том же положении, что вместе с особенностью одномерной системы (две соседние частицы нельзя физически

поменять местами без туннелирования) формирует, по сути, эффективный принцип Ферми. Действительно, в этом случае бозоны приобретают многие фермионоподобные свойства и, как показал Жирардо [72], волновая функция сильновзаимодействующих бозонов может быть отображена на волновую функцию невзаимодействующих фермионов (волновая функция бозонов равна модулю волновой функции фермионов). Мы будем называть этот режим режимом Тонкса-Жирардо³. Скорость звука в этом случае связана с фермиимпульсом системы бесспиновых (однокомпонентных) фермионов $c = p_F/m = \pi n\hbar/m$, а хим. потенциал равен просто соответствующей ферми энергии $\mu = \pi^2 n^2/2m$ (см. предел $na_{1D} \ll 1$ на Рис. 4.1).

Благодаря такому сходству волновых функций мы тут же знаем функцию парного распределения, она такая же как и в соответствующей ферми системе⁴

$$g_2(z) = 1 - \frac{\sin^2 \pi n}{(\pi n)^2} \tag{4.8}$$

Так же статический структурный фактор газа Тонкса-Жирардо известен точно

$$S(k) = \begin{cases} |k|/(2\pi n), & |k| < 2\pi n \\ 1, & |k| > 2\pi n \end{cases}$$
(4.9)

Для одночастичной матрицы плотности $g_1(z)$ известно разложение в степенной ряд на малых и на больших расстояниях[97, 179, 187]. Еч медленное затухание на больших расстояниях

$$g_1(z) = \frac{\sqrt{\pi e^2 2^{-1/3} A^{-6}}}{\sqrt{zn}}, \quad n|a_{1D}| \ll 1$$
 (4.10)

приводит к инфракрасной расходимости в импульсном распределении $n(k) \propto 1/\sqrt{|k|}$.

Вне режима Тонкса-Жирардо полные выражения корреляционных функций не известны. Длинноволновые асимптотики (т.е. расстояния больше чем корреляционная длина ξ) могут быть найдены из гидродинамической теории низкоэнергетических фононных возбуждений [160, 165, 78, 89].

$$g_1(z) = \frac{C_{asympt}}{|zn|^{\alpha}},\tag{4.11}$$

³Тонкс решил задачу для одномерных классических твердых сфер радиуса R[176]. Квантовая задача была решена Жирардо[72]. Случаю δ -псевдопотенциала соответствует значение R = 0

⁴Действительно, средние от *локальных* операторов будут такими же как и для ферми системы, однако *нелокальные* величины будут другими. Например, импульсное распределение будет вовсе не «ступенькой»!

где $\alpha = mc/(2\pi\hbar n)$ и коэффициент C_{asympt} дается формулой (4.20). В режиме Тонкса-Жирардо $c = \pi\hbar n/m$, а значит степень затухания $\alpha = 1/2$, как и ожидалось. В противоположном режиме $n|a_{1D}| \gg 1$ (режим Гросса-Питаевского) степень затухания $\alpha = 1/(\pi\sqrt{2n|a_{1Dd}|})$ уменьшается с увеличением $n|a_{1D}|$. В этом режиме коэффициент пропорциональности в выражении (4.11) был впервые установлен Поповым[153]. Конечно, наличие степенного затухания недиагонального элемента одночастичной матрицы плотности (4.10,4.11) свидетельствует об отсутствии бозе-конденсации в одномерной системе даже при нулевой температуре[164]. Асимптотическое поведение импульсного распределения для $|k| \ll 1/\xi$ следует напрямую из соотношения (4.11):

$$n(k) = C_{asympt} \left| \frac{2n}{k} \right|^{1-\alpha} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right)}$$
(4.12)

Гидродинамическая теория позволяет найти статический структурный фактор в длинноволновом пределе $|k| \ll 1/\xi$. Впервые такое вычисление было произведено Фейнманом[66] и дает следующий ответ:

$$S(k) = \frac{\hbar|k|}{2mc} \tag{4.13}$$

Недавно были получены выражения для одно-, двух- и трех-частичных корреляционных функций на малых расстояниях. Значение в в точке z = 0 функции парного распределения может быть получено из теоремы Гельмана-Фейнмана для произвольной плотности[69]:

$$g_2(0) = -\frac{(n|a_{1D}|)^2}{2}e', \qquad (4.14)$$

где производная от e берется по $n|a_{1D}|$. Значение $g_2(0)$ зануляется в режиме Тонкса-Жирардо и стремится к единице в режиме Гросса-Питаевского.

Значение трехчастичной функции в нуле известно только для предельных случаев плотностей: в режиме сильных корреляций, а так же по теории возмущений в режиме среднего поля[69]. Как и $g_2(0)$, трехчастичная корреляционная функция быстро затухает в режиме газа Тонкса-Жирардо

$$g_3(0) = \frac{(\pi n a_{1D})^6}{60}, \quad n a_{1D} \ll 1,$$
 (4.15)

и выходит на постоянное значение в режиме газа Гросса-Питаевского

$$g_3 = 1 - \frac{6\sqrt{2}}{\pi\sqrt{na_{1D}}}, \quad na_{1D} \gg 1.$$
 (4.16)

Помимо того, Ольшаный [139] получил выражение для первых нескольких слагаемых в разложении одночастичной матрицы плотности

$$g_1(z) = 1 - \frac{1}{2}(e + e'n|a_{1D}|)|nz|^2 + \frac{e'}{6}|nz|^3$$
(4.17)

Это выражение работает при любой плотности на расстояниях $|nz| \ll 1$.

4.4 Метод Диффузионного Монте-Карло

Мы воспользуемся методом Диффузионного Монте Карло (ДМК) 2. Удачный подбор пробной волновой функции может сильно облегчить задачу. Чтобы доказать, что предлагаемая нами пробная волновая функция действительно близка к волновой функции основного состояния, мы вычисляем вариационную энергию E_{VMC} , которая заведомо больше энергии основного состояния (см. Таблицу 4.4). Мы находим, что значение вариационной энергии очень близко к точному значению энергии, получаемой или методом ДМК или же решением интегральных уравнений Либа-Линигера (см, также, Рис. 4.1).

В однородной системе мы используем вариационную конструкцию Ястрова:

$$\psi_T(z_1, ..., z_N) = \prod_{i < j} f_2(z_{ij}), \tag{4.18}$$

где $f_2(z)$ — двухчастичное слагаемое, которое мы выбираем в виде

$$f_2(z) = \begin{cases} A \cos[k(|z| - B)], & |z| < Z\\ \sin^\beta(\pi |z|/L), & |z| > Z \end{cases}$$
(4.19)

При z < Z функция $f_2(z)$ является точным решением двух-частичной задачи и обеспечивает правильное описание корреляций на ближних расстояниях. Корреляции дальнего действия (z > Z), которые возникают за счет длинноволновых фононных возбуждений описываются известной функциональной зависимостью функции $f_2(z)$ [160]. Волновая функция при рассеянии частицы на δ -потенциале терпит излом в z = 0, это граничное условие $f'_2(0^+) - f'_2(0^-) = 2f_2(0)/|a_{1D}|$ фиксирует значение k через уравнение $k|a_{1D}|$ tg kB = 1. Оставшиеся параметры A, B, β фиксируются условием гладкости: непрерывности в точке сшивки z = Z функции $f_2(z)$, ее производной $f'_2(z)$ и локальной энергии $-2f''_2(z)/f_2(z)$. Само место сшивки Z является вариационным параметром и оптимизируется методом ВМК. При особом наборе параметров: Z = B = L/2 и $kL = \pi$ пробная волновая функция ψ_T совпадает с волновой функцией Тонкса-Жирардо[72] $\Psi_0^{TG} = \prod_{i<j} |\sin[\pi(z_i - z_j)/L]|$.

na_{1D}	E_{LL}/N	E_{VMC}/N			
10^{-3}	$1,6408 \ 10^{-6}$	$1,64(1) \ 10^{-6}$			
0,03	$1,3949 \ 10^{-3}$	$1,3956(3) \ 10^{-3}$			
0,3	$9,0595 \ 10^{-2}$	$9,089(3) \ 10^{-2}$			
1	0,5252	0,535(3)			
30	26,842	27,121(3)			
10^{3}	981, 15	981,72(6)			

Таблица 4.1: Энергия приходящаяся на одну частицу как функция безразмерной плотности na_{1D} : точное значение E_{LL} полученное численным решением интегральных уравнений Либа-Линигера, вариационная энергия E_{VMC} полученная оптимизацией пробной волновой функции 4.19. Вариационная энергия дает верхнюю грань на энергию основного состояния. Результаты диффузионного вычисления E_{DMC} находятся в полном согласии с результатами E_{LL} полученные независимым методом.

Точность выбора пробной волновой функции особенно важна для вычисления одночастичной матрицы плотности $g_1(z)$. Действительно, функция парного распределения $g_2(z)$ вычисляется методом «чистой» оценки не зависящей от выбора пробной волновой функции[33]. Из-за нелокальности недиагонального элемента одночастичной матрицы плотности «чистое значение» функции $g_1(z)$ не может быть вычислено прямо, однако, оно может быть аппроксимировано экстраполяционным методом. Для оператора \hat{A} не коммутирующего с гамильтонианом, диффузионный метод дает «смешанную» оценку $\langle \Psi_0 | \hat{A} | \psi_T \rangle$. На выходе вариационного метода мы имеем вариационную оценку $\langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle$. Полученные результаты могут быть использованы для экстраполяции «чистой» оценки, например по правилу $\langle \Psi_0 | \hat{A} | \Psi_0 \rangle = 2 \langle \Psi_0 | \hat{A} | \psi_T \rangle - \langle \psi_T | \hat{A} | \psi_T \rangle$. Конечно, для того что бы эта процедура была достаточно аккуратной нужно что бы пробная волновая функция хорошо описывала волновую функцию основного состояния $\psi_T \simeq \Psi_0$. Результаты вычисления $g_1(z)$ методами ДМК и ВМК близки друг к другу и следовательно мы можем с полной уверенностью положиться на экстраполяционный прием (см. параграф 2.5.4) в этом случае.

Мы рассматриваем N частиц в ящике размера L с периодическими граничными условиями. При построении пробной волновой функции мы накладываем требование, что бы двучастичная компонента Ястрова f_2 не обладала корреляциями на границах ящика $f_2(\pm L/2) = 1$. Для исследования свойств модели в термодинамическом пределе мы



Рис. 4.2: Исследование эффектов конечности системы на примере одночастичной матрицы при большой плотности $na_{1D} = 30$, где эффект наиболее заметен.

вычисляем интересующие нас величины в конечной системе состоящей из N частиц, а затем рассматриваем сходимость при увеличении N. Зависимость от количества частиц более выражена при большой плотности, когда корреляции простираются на бо́льшие расстояния. Из тех величин, которые мы здесь исследуем, наиболее чувствительной к эффекту конечности системы является одночастичная матрица плотности $g_1(z)$. На Рис. 4.2 мы приводим в логарифмическом масштабе $g_1(z)$ для 50, 100, 200, 500 частиц и плотности $na_{1D} = 30$. Также мы приводим асимптотическое ($z \to \infty$) поведение. Видно, что эффекты конечности системы максимальны на расстоянии L/2, т.е. на максимально доступной для измерения длине для данного числа частиц. Так же сам коэффициент наклона зависит от количества частиц. Уже для 500 частиц наклон не отличается от термодинамического его значения. При меньших плотностях требуется меньшее количество частиц для достижения термодинамического значения наклона.



Рис. 4.3: Функция парного распределения при различных значениях газового параметра. Плотность: в порядке возрастания значений в нуле $n|a_{1D}| = 10^{-3}; 0, 3; 1; 30; 10^3$. Стрелочками показано значение в нуле $g_2(0)$ найденное по формуле (4.14).

4.5 Однородная система

Мы получили функцию парного распределения в широком диапазоне плотностей: начиная от режима Тонкса-Жирардо ($na_{1D} \ll 1$) и вплоть до режима Гросса-Питаевского ($na_{1D} \gg 1$). Полученные результаты приведены на Рис. 4.3. В режиме Гросса-Питаевского межчастичные корреляции очень слабы и функция $g_2(z)$ быстро выходит на постоянное значение. Уменьшая $|a_{1D}|$ и, таким образом, увеличивая константу связи g_{1D} , мы усиливаем эффекты, не описываемые теорией среднего поля. При малых плотностях мы находим осцилляции в функции парного распределения, свойство, которое более характерны жидкости, чем газу. При наименьшей из рассмотренных плотностей $na_{1D} = 10^{-3}$ сравнение полученного нами результата с функцией распределения газа Тонкса-Жирардо показывает что в пределах точности измерений функции совпадают.

На том же рисунке мы приводим точный результат (4.14) для значения функции в нуле и обнаруживаем полное согласие между теорией и проделанными вычислениями. В режиме газа Тонкса-Жирардо константа связи делается бесконечно большой, частицы не



Рис. 4.4: Статический структурный фактор для тех же значений газового параметра, что и на Рис. 4.3 (сплошная линия). Штрихованные линии показывают длинноволновые асимптотики (4.13).

могут занимать одно и то же положение, следовательно, $g_2(0) = 0$. Уменьшение силы межчастичного взаимодействия приводит к тому, что вероятность встречи двух частиц становится конечной. Дальнейшее уменьшение силы взаимодействия делает частицы все более «прозрачными» (режим Гросса-Питаевского) и в пределе идеального газа значение в нуле стремится к максимуму $g_2(0) = 1$.

На Рис. 4.4 мы приводим статический структурный фактор полученный из $g_2(z)$ в соответствии с соотношением (4.5). При наименьшей плотности $n|a_{1D}| = 10^{-3}$ точки наших измерений легли прямо на кривую S(k) газа Тонкса-Жирардо (4.9). При всех плотностях низко-импульсная часть структурного фактора соответствует испусканию фонона. Мы сравниваем результат метода ДМК с феймановской формулой (4.13). Мы находим, что в режиме сильных корреляций фононная модель дает хорошее описание даже вплоть до импульсов порядка обратного межчастичного расстояния n^{-1} , в тоже время в режиме Гросса-Питаевского корреляционная длина становится заметно больше, чем среднее межчастичное расстояние и, как следствие, отклонения наступают раньше.

Мы вычислили значение трех-частичной корреляционной функции в нуле (4.3) в боль-

шом диапазоне плотностей. Вероятность трех-частичных столкновений велика при большой плотности, такой как, скажем, $n|a_{1D}| = 10^4$. Уменьшая плотность мы находим уменьшение значения $g_3(0)$. Область среднего поля описывается теорией Боголюбова (см. Рис. 4.5 и формулу (4.16)). Дальнейшее уменьшение плотности приводит к быстрому увеличению трехчастичных столкновений и значение $g_3(0)$ резко затухает к нулю когда газовый параметр становится меньше единицы. Для наглядного представления скорости этого затухания мы строим результаты в логарифмических осях (вставка Рис. 4.5). Мы обнаруживаем пропорциональность 6⁻ степени газового параметра в согласии с (4.15). Численное нахождение величины $g_3(0)$ при малых плотностях становится трудоемким за счет необходимости большого количества статистических данных вызванной тем, что значение усредняемой величины очень мало. Интересно отметить, что $g_3(0)$ качественно ведет себя как куб значения в нуле функции парного распределения $g_2^3(0)$. Такая оценка была использована в [133] для сравнения с коэффициентом трехчастичных потерь в экспериментах с глубокой двухмерной оптической решеткой.

Мы вычислили пространственную зависимость одночастичной матрицы плотности при различных плотностях. На малых расстояниях имеется аналитическое разложение (4.17) и мы находим согласие вплоть до длин $zn \leq 1$ (см. Рис. 4.6). Ожидается, что гидродинамическая теория будет давать верное описание на расстояниях больших корреляционной длины. Действительно, затухание имеет степенной закон (см. Рис. 4.7), как и ожидалось по формуле (4.11). Коэффициент пропорциональности C_{asympt} в законе (4.11) мы определяем фитируя численные данные и, таким образом, получив описание от малых расстояний до больших завершаем полное описание пространственной зависимости $g_1(z)$. Отклонения от степенного закона (см. Рис. 4.7) на больших расстояниях ($z \approx L/2$) вызвано эффектом конечности системы.

Помимо численной подгонки коэффициента пропорциональности C_{asympt} мы также получили его приближенное значение используя гидродинамический подход предполагая слабое взаимодействие и малые флуктуации плотности. Ответ выражается через константу Эйлера $\gamma = 0,577$ формулой

$$C_{asympt} = \left(\frac{e^{1-\gamma}}{8\pi\alpha}\right)^{\alpha} (1+\alpha) \tag{4.20}$$

Не смотря на то, что формально полученное выражение справедливо в режиме слабого взаимодействия $\alpha \ll 1$, оно дает удивительно точное описание для любых значений газо-



Рис. 4.5: Значение в нуле трехчастичной корреляционной функции $g_3(0)$ (символы), предел Гросса-Питаевского (4.16) (штрихованная линия), куб значения в нуле функции парного распределения (4.14) (сплошная линия). На вставке, область малых плотностей на логарифмической шкале, $g_3(0)$ (кружки), предел Тонкса-Жирардо (4.15) (штрихованная линия), g_2^3 (сплошная линия).

na_{1D}	C_{asympt}^{DMC}	C_{asympt}^{popov}	C_{asympt}
1000	1,02	1,0226	1,0226
30	1,06	1,0588	$1,\!0579$
1	0,951	0,9646	0,9480
0,3	0,760	0,8145	0,7814
0,001	0,530	0,5746	0,5227

Таблица 4.2: Коэффициент пропорциональности длинноволнового затухания (4.11). Первая колонка — одномерный газовый параметр, вторая колонка — результат численной подгонки данных метода ДМК (4.7), третья колонка — результат полученный Поповым, четвертая колонка — формула 4.20. Наименьшая плотность $na_{1D} = 0,001$ находится глубоко в режиме Тонкса-Жирардо, соответственно применимо точное выражение (4.10) дающее $C_{asympt}^{TG} = 0,5214$

вого параметра. Действительно, коэффициент полученный численной подгонкой Функции g_1 (см. Рис. 4.7) совпадает с формулой (4.20) с точностью до статистической погрешности результатов. В режиме Тонкса-Жирардо (т.е. в «самом плохом» случае) формула (4.20) может быть сверена с точным результатом (4.10). Разница составляет меньше 0, 3%. Впервые выражение для C_{asympt} было получено Поповым[153] (также получено позже в [125]) $C_{asympt}^{popov} = \left(\frac{e^{2-\gamma}}{8\pi\alpha}\right)^{\alpha}$. Оба выражения совпадают для малых значений α , хотя коэффициент Попова в целом является менее точным и ведет к максимальной погрешности 10%, как было отмечено в [34]. Результаты различным методов получения коэффициента приводятся в таблице 4.5.

Мы находим распределение по импульсам делая преобразование Фурье (см. Ур. 4.4) полного выражения одночастичной матрицы плотности (т.е. численных результатов вплоть до средних расстояний и степенной асимптотики на больших расстояниях). В неограниченной однородной системе импульсное распределение имеет инфракрасную расходимость (4.12). Для более наглядного представления результатов на Рис. 4.8 мы строим конечное в нуле сочетание kn(k). Заметим, что асимптотическое инфракрасное поведение наблюдается для значений волнового вектора k значительно меньшего, чем обратная корреляционная длина $1/\xi$. При больших значениях k численный шум в численных данных слишком велик, что бы можно было увидеть признаки поведения $1/k^4$, которое было предсказано в [139].



Рис. 4.6: Коротковолновое поведение одночастичной матрицы плотности (штрихованные линии), разложение (4.17) в нуле (сплошные линии). Значения плотности такие же, как и на Рис. 4.7.

4.6 Система в ловушке

Обсудим теперь влияние удерживающего потенциала. Мы рассмотрим самый распространенный тип ловушки — гармонический анизотропный осциллятор. Эффективный одномерный гамильтониан запишется как

$$\hat{H}_{LL}^{trap} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + \frac{m\omega_z^2}{2} \sum_{i=1}^N z_i^2 + g_{1D} \sum_{i < j} \delta(z_i - z_j), \qquad (4.21)$$

где эффективная константа связи зависит как от трехмерной длины *s*-рассеяния, так и от осцилляторной длины поперечного удержания $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ соотношением $g_{1D} = -2\hbar^2 a/ma_{\perp}^2$. Характерными параметрами задачи являются: отношение a_{3D}/a_{\perp} , параметр анизотропии $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp}$ и число частиц N.

В конструкции пробной волновой функции используемой в методе ДМК мы вводим одночастичную компоненту Ястрова $f_1(z_i)$ в дополнение к двухчастичной компоненте $f_2(z_{ij})$ уже содержащейся в пробной волновой функции однородной системы

$$\psi_T(z_1, ..., z_N) = \prod_{i=1}^N f_1(z_i) \prod_{i < j} f_2(z_{ij})$$
(4.22)



Рис. 4.7: Длинноволновое поведение одночастичной матрицы плотности (сплошные линии), численная подгонка по асимптотической формуле (4.11) (штрихованные линии). Значение плотности такие же, как и на Рис. 4.7. Стрелкой отмечена корреляционная длина ξn : самое левое значение соответствует $n|a_{1D}| = 10^{-3}$, самое правое $n|a_{1D}| = 10^3$



Рис. 4.8: Импульсное распределение для тех же значений газового параметра $n|a_{1D}|$, что и на Рис. 4.7 (сплошная линия). Штрихованной линией показана инфракрасная расходимость, формула 4.12. Стрелкам соответствуют значениям корреляционной длины $1/(\xi n)$: самое правая стрелка – $n|a_{1D}| = 10^{-3}$,самая левая – $n|a_{1D}| = 10^3$.

Исходя из природы внешнего потенциала мы выбираем одночастичную компоненту в гауссовском виде $f_1(z) = \exp(-\alpha_z z^2)$, где α_z — вариационный параметр. Корреляторы на расстояниях больших осцилляторной длины продольного удержания $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ определяются удерживающим потенциалом. Мы выбираем двухчастичную компоненту $f_2(z)$ в виде (4.19) для расстояний $|z| < \tilde{Z}$ и $f_2(z) = 1$ для $|z| > \tilde{Z}$, где \tilde{Z} — вариационный параметр больший, чем a_z .

Мы рассматриваем следующий набор параметров: $a_{3D}/a_{\perp} = 0.2$, $\lambda = 10^{-3}$ и число частиц N = 5, 20, 100. Мы ожидаем, что для этих конфигураций энергия основного состояния и профиль плотности будет хорошо описываться приближением локальной плотности.

В присутствии внешнего потенциала трансляционная симметрия нарушается и, соответственно, определения корреляционных функций данные в Главе 4.2 для однородной среды не могут более использоваться. Если ранее одночастичная матрица плотности зависела только от разности аргументов $g_1(|z_1-z_2|)$, то теперь зависимость является полной, т.е. важны значения обеих аргументов:

$$n\left(\frac{z'+z}{2}\right)g_1(z,z') = \frac{N\int\Psi_0^*(z,..,z_N)\Psi_0(z',..,z_N)\,dz_{2..}dz_N}{\int|\Psi_0(z_1,..,z_N)|^2\,dz_{1..}dz_N},\tag{4.23}$$

где n(z) — профиль плотности. Как в однородной системе импульсное распределение может быть получено из одночастичной матрицы плотности

$$n(k) = \iint g_1 \left(Z + \frac{z'}{2}, Z - \frac{z'}{2} \right) n(Z) \ e^{ikz'} \, dZ \, dz', \tag{4.24}$$

Функция парного распределения определяется как

$$g_2(z) = \frac{\int \delta(z_1 - z_2 - z) |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_1 ... dz_N}{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_1 ... dz_N}$$
(4.25)

и нормализована на единицу $\int g_2(z) dz = 1.$

На Рис. 4.9 изображена функция парного распределения для 5, 20 и 100 частиц. Межчастичное взаимодействие задает поведение на малых расстояниях. А поведение на больших расстояниях обусловлено удерживающим потенциалом.

Мы используем общее соотношение статического структурного фактора и функции импульсного распределения n_k :

$$S(k) = \frac{1}{N} (\langle n_{-k} n_k \rangle - |\langle n_k \rangle|^2)$$
(4.26)

В отличии от случая однородной системы, при $k \neq 0$ не происходит зануления в последнем слагаемом в (4.26). На Рис. 4.10 мы приводим статический структурный фактор



Рис. 4.9: Функция парного распределения системы в ловушке для 5, 20, 100 частиц и $a_{3D}/a_{\perp} = 0, 2; \lambda = 10^{-3}.$

при том же наборе параметров. Интересным вопросом является возможность наблюдения линейной зависимости в S(k), которая была бы характерна для фононов и доминирует для малых k в однородной системе. Мы находим, что формула Фейнмана (4.13), где скорость звука определяется по центральной плотности в ловушке, дает достаточно неплохое описание для S(k) в ловушке. Конечно, для низких значений импульсов имеются отличия вызванные конечностью системы.

Для наименьшего числа частиц (N = 5) плотность мала в любой точке z профиля $n(z)a_{1D} < 0,18$. Мы можем этим воспользоваться для получения явного выражения структурного фактора S(k) в ловушке при помощи приближения Тонкса-Жирардо в режиме малых плотностей (4.9). Мы воспользуемся выражением для профиля плотности даваемым приближением локальной плотности $n(z) = max\{0, \sqrt{2N(1-z^2/R_z^2)}/(\pi a_z)\}$, где $R_z = \sqrt{2N}a_z$ – размер облака. Теперь статический структурный фактор может быть найден явно как усреднение по профилю плотности:

$$S^{LDA}(k) = \frac{1}{N} \int_{-R_z}^{R_z} n(z) S^{TG}(k, n(z)) dz =$$



Рис. 4.10: Статический структурный фактор (сплошная линия) для $a_{3D}/a_{\perp} = 0, 2, \lambda = 10^{-3}$ и 5, 20, 100 частиц (считая линии сверху-вниз). Пунктиром показана линейная зависимость (4.13) характерная длинноволновым фононам. Входящая в формулу скорость звука рассчитывается по плотности в центре ловушки. Штрих-пунктирная линия для 5 частиц получена в приближении локальной плотности и уравнения состояния Тонкса-Жирардо и дается уравнением (4.27)

$$= \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left(\arcsin kx_{cr} + kx_{cr}\sqrt{1 - (kx^{cr})^2} \right), & |kx_{cr}| < 1 \\ 1, & |kx_{cr}| > 1 \end{cases}$$
(4.27)

Значение критического импульса равно $x_{cr}^{-1} = \sqrt{8N}/a_z$. Полученное выражение для S(k) построено на Рис. 4.10. Аналитическое описание достаточно неплохо передает свойства структурного фактора. Линейное поведение при малых k выходит на асимптотическую константу более мягко, чем то было в однородной систему (см. S(k) газа Тонкса-Жирардо на Рис. 4.4).

На Рис. 4.11 приводится распределение частиц по импульсам n(k). В отличии от случая бесконечных систем, где имеется инфракрасная расходимость (4.12), в ловушке есть естественное ограничение на минимальное значение волнового вектора $k_{min} \simeq 1/R_z$ связанное с размером облака R_z , а значит импульсное распределение всегда остается конеч-



Рис. 4.11: Распределение частиц по импульсам для системы в ловушке. Вставка: импульсное распределение N = 100 частиц (сплошная линия) в логарифмическом масштабе. Штрихованная линия — подгонка результатов функцией $C/k^{1-\alpha}$, где C — фитируемый параметр, а скорость затухания $\alpha = 0, 19$ соответствует плотности системы в центре. Импульсное распределение приведено в единицах $a_z = \sqrt{\hbar/(m\omega_z)}$.

ным. Интересным вопросом будет возможность увидеть следы расходимости в конечной системе. Распределения в случаях N = 5 и N = 20 частиц «сглаживаются» на расстояниях $k \sim k_{min}$ и расходимость полностью исчезает. Для наибольшего количества частиц N = 100 мы обнаруживаем следы инфракрасной расходимости в области $1/R_z < k < 1/\xi$ значений волнового вектора. Характерное значение корреляционной длины мы извлекаем из плотности в центре ловушки $n_0|a_{1D}| \simeq 1, 1$ и получаем коэффициент расходимости и $\alpha \simeq 0, 19$. Результирующее поведение изображено на вставке Рис. 4.11). Видно, что в импульсном распределении появляется область напоминающая расходимость однородной системы, однако для более чистого совпадения требуется большее количество частиц.

4.7 Выводы

В этой главе мы рассмотрели при нулевой температуре корреляционные свойства одномерного бозе-газа взаимодействующего отталкивающимся псевдопотенциалом. В однородной системе характерным параметром является произведение погонной плотности n и одномерной длины рассеяния a_{1D} . В режиме сильного взаимодействия $na_{1D} \ll 1$ происходит «фермионизация» системы бозонов и волновая функция может быть отражена на волновую функцию невзаимодействующих бесспиновых фермионов. В этом пределе известны аналитически энергия E, одночастичная матрица плотности $g_1(|z|)$, функция парного распределения $g_2(|z|)$, которые такие же, как и у фермионной системы. Вне этого предельного случая пока что аналитическое описание не известно. Добавление внешнего поля приводит к существенным изменением, вследствие появления нового управляющего параметра — осцилляторной длины.

Квазиодномерные системы были реализованы в экспериментах с вытянутыми ловушками. Ожидается, что появятся многие эксперименты как в установках того же типа, так и в волноводах, и на микрочипе. Управляющий параметр na_{1D} может варьироваться изменением числа частиц в конденсате, частоты ловушки или меняя длину рассеяния при помощи фешбаховского резонанса. Импульсное распределение доступно из экспериментов по баллистическому расширению, структурный фактор может быть измерен методикой бреговского рассеяния.

Впервые найдено полноценное описание корреляционных функций в широком диапазоне значений управляющего параметра na_{1D} , начиная от режиме среднего поля (Гросс-Питаевский) и вплоть до режима сильных корреляций (Тонкс-Жирардо). Мы проверяем работоспособность метода диффузионного Монте-Карло сверяя энергию основного состояния с точно известной и найденной численным решением интегральных уравнений Либа-Линигера. Мы полностью подтверждаем все свойства газа Тонкса-Жирардо и известные асимптотики корреляционных функций и импульсного распределения. Мы находим одночастичную матрицу плотности $g_1(z)$ и парную функцию распределения $g_2(z)$ для всех плотностей. В частности, мы получаем полное описание в нетривиальном режиме $na_{1D} \approx 1$, который является доступным для текущих экспериментов.

Мы изучили зависимость значения в нуле трехчастичной корреляционной функции $g_3(0)$ от плотности na_{1D} и показали, что она может быть достаточно хорошо приближена функцией парного распределения $g_2^3(0)$, для значения в нуле которой существует анали-

Глава 4. КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩЕЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

тическое выражение. Знание значения $g_3(0)$ представляет собой очень большой интерес, так как оно напрямую связано со скоростью трехчастичной рекомбинации, которая ведет к потере атомов из конденсата.

При помощи преобразования Фурье получены импульсное распределение n(k) и статический структурный фактор S(k). Низкоимпульсная часть описывается гидродинамическим подходом, который применим на расстояниях |z| больших корреляционной длины ξ . Мы обнаружили, что, однако, фононная степенная расходимость в n(k) проявляется для значений k заметно меньших, чем $1/\xi$.

В завершении главы мы рассматриваем, как присутствие гармонического осцилляторного удержания модифицирует корреляционные функции. Мы приводим функцию парного распределения для характерных для экспериментов параметров. Мы обсуждаем возможность нахождения следов характерной для одномерной системы расходимости импульсного распределения n(k) в ловушке.
Глава 5

Режим «сверх-Тонкса»

5.1 Введение

Исследование свойств квазиодномерных газов в режиме квантового вырождения — богатая и быстроразвивающаяся область исследований. Роль корреляций и квантовых флуктуаций усиливается в системах с низкой размерностью, и одномерные газы хорошо подходят для изучения эффектов не описываемых методом среднего поля[145]. Одним из, пожалуй, самых интересных проявлений таких эффектов является фермионизация одномерного бозе-газа в режиме Тонкса-Жирардо, где система сильновзаимодействующих бозонов ведет себя, как если бы частицы были идеальными фермионами[72]. Помимо такого отображения бозонной системы на фермионную, одномерная системы богата и другими универсальными свойствами. Низкоэнергетические свойства описываются моделью Латтинжера как для системы бозонов, так и для бесщелевых фермионов[180, 7]. Концепция латтинжеровской жидкости играет важную роль в теории физики одномерных систем и возможность прямого наблюдения в холодных газах очень интересна[124].

Одномерный бозонный газ уже был реализован экспериментально. Полное вымерзание поперечных степеней свободы и одномерная кинематика системы наблюдались в газах удерживаемых глубокой двухмерной оптической решеткой[61, 133]. Режим сильного взаимодействия был достигнут наложением поперечного периодического поля[178, 140]. Другой метод увеличения силы межчастичного взаимодействия, уже примененный к трехмерным системам, как бозонным, так и фермионным[132, 190], но еще не реализованный в одномерном случае, заключается в применении фешбаховского резонансного рассеяния. Воспользовавшись этой методикой можно менять эффективную одномерную константу

связи в резонансе Ольшаного [138] и получить, по сути, любое желаемое значение, включая нулевое, минус и плюс бесконечности. При больших положительных значениях $g_{1D} \to \infty$ система описывается моделью Тонкса-Жирардо непроницаемых частиц нулевого размера. Если константа связи g_{1D} большая и отрицательная, то как будет показано в этой главе, достигается новый газообразный режим (сверх-Тонкс), в котором эффективный размер непроницаемых становится конечным, что ведет к межчастичным корреляциям еще более сильным, чем в сильнокоррелированном газе Тонкса-Жирардо. В этой главе мы исследуем уравнение состояния и корреляционные функции одномерного однородного бозе газа в режиме сверх-тонкса. Мы обнаруживаем, что межчастичные корреляции затухают быстрее, чем в режиме ТЖ, а в статическом структурном факторе возникает резко выраженный пик. Импульсное распределение и структурный фактор могут быть измерены экспериментально, используя соответственно метод расширения облака после выключения ловушки и двух-фотонной бреговской спектроскопии [178, 140]. Измерение частот групповых колебаний дает еще один метод исследования роли взаимодействия и эффектов не описываемых теорией среднего поля[61]. Воспользовавшись приближением локальной плотности в системах с гармоническим удерживающим потенциалом, мы находим частоты колебаний как функции силы взаимодействия. В режиме сверх-Тонкса частота колебаний больше, чем в режиме газа ТЖ.

5.2 Модель

Рассмотрим одномерную систему состоящую из N бесспиновых бозонов описываемых Гамильтонианом с контактным взаимодействием:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + g_{1D} \sum_{i < j} \delta(z_{ij}), \qquad (5.1)$$

где m — масса частицы, $z_{ij} = z_i - z_j$ — расстояние между частицами i и j, а константа связи g_{1D} — отрицательная и большая по величине $g_{1D} \to -\infty$. М.А. Ольшаный нашел решение задачи рассеяния двух части в узком волноводе[138]. Задача рассеяния позволяет связать эффективную одномерную константу связи g_{1D} с трехмерной длинной *s*-рассеяния a_{3D} :

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}} = \frac{2\hbar^2 a_{3D}}{ma_{\perp}^2} \frac{1}{1 - Aa_{3D}/a_{\perp}},$$
(5.2)

где $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ — осцилляторная длина поперечного гармонического удержания образующего волновод, а коэффициент $A = |\zeta(1/2)|\sqrt{2} = 1,0326$ выражается через дзета функцию Римана $\zeta(\cdot)$. Резонанс Ольшаного наступает при критическом значении $a_{3D}^c = a_{\perp}/A$ и соответствует резкому изменению g_{1D} с больших положительных значений $(a_{3D} < a_{3D}^c)$ на большие отрицательные $(a_{3D} > a_{3D}^c)$.

При положительных значениях g_{1D} (т.е. газ с отталкиванием) гамильтониан (5.1) описывает модель Либа-Линигера (ЛЛ). Спектр возбуждений и энергия основного состояния гамильтониана ЛЛ были найдены в основопологающей работе[99] и, в частности, режим Тонкса-Жирардо соответствует пределу $g_{1D} \to +\infty$. Основное состояние гамильтониана (5.1) при $g_{1D} < 0$ (т.е. газ с притяжением) дается солитоноподобным решением с сильно отрицательной энергие
й $E/N=-mg_{1D}^2(N^2-1)/24\hbar^2[119].$ Низшее газоподобное состояние гамильтониана (5.1) с $g_{1D} < 0$ является сильно возбужденным. Такое состояние стабильно если газовый параметр мал $na_{1D} \ll 1$, где n = N/L — погонная плотность, а a_{1D} — эффективная одномерная длинна s-рассеяния определенная в ур. (5.2). Система может быть приведена в такое состояние при адиабатическом пересечении резонанса Ольшаного. Критерий стабильности этого газоподобного состояния может быть приближенно найден из оценки энергии частиц. Для контактного потенциала энергия межчастичного взаимодействия $E_{int}/N = g_{1D}ng_2(0)/2$ может быть выражена через значение в нуле функции парного распределения $g_2(0) = \langle \psi^{\dagger}(z)\psi^{\dagger}(z)\psi(z)\rangle/n^2$, где ψ^{\dagger}, ψ — операторы рождения и уничтожения. В пределе $g_{1D} \to -\infty$ (почти газ Тонкса-Жирардо) получается разложение [69]: $g_2(0) \simeq \pi^2 n^2 a_{1D}^2/3$. Заметим, что в этом приближении результат не зависит от знака g_{1D} . В том же пределе мы можем оценить и кинетическую энергию $E_{kin}/N \simeq \pi^2 \hbar^2 n^2/(6m)$, соответствующую энергии газа ТЖ. Для полной энергии $E = E_{kin} + E_{int}$ мы получаем $E/N \simeq \pi^2 \hbar^2 n^2/(6m) - \pi^2 \hbar^2 n^3 a_{1D}/(3m)$, где газовый параметр подразумевается малым $na_{1D} \ll 1.$ При $na_{1D} < 0,25$ сжимаемость системы положительна $mc^2 = n\partial \mu/\partial n,$ где $\mu = dE/dN$ — химический потенциал, c — скорость звука, отвечающая газоподобному состоянию. При бо́льших значениях плотности сжимаемость становится отрицательной, а скорость звука — мнимой, что означает неустойчивость системы. Как будет показано далее, более точное вычисление показывает, что газоподобное состояние устойчиво относительно коллапса в кластерное состояние при $na_{1D} < 0, 35$.

5.3 Метод Монте Карло

Анализ газоподобного уравнения состояния производится при помощи метода Вариационного Монте Карло. Пробная волновая функция строится в виде $\psi_T(z_1, ..., z_N) = \prod_{i < j} f(z_{ij})$, где двухчастичная компонента Ястрова выбрана как

$$f(z) = \begin{cases} \cos[k(|z| - \bar{Z})] & \text{при} \quad |z| \le \bar{Z} \\ 1 & \text{при} \quad |z| > \bar{Z} \end{cases}$$
(5.3)

Длина обрезания \overline{Z} является вариационным параметром, в то время как волновой вектор k при заданном \overline{Z} выбирается так, что бы удовлетворялось граничное условие в z=0в соответствии с условием рассеяния на δ -потенциале: $-k \operatorname{tg}(k\overline{Z}) = 1/a_{1D}$. Для длин меньших параметра обрезания, $|z| \leq \overline{Z}$, этот выбор пробной волновой функции соответствует точному решению двухчастичной задачи рассеяния $g_{1D}\delta(z)$ и отвечающему состоянию с положительной энергией. При переходе от отталкивания к притяжению $g_{1D} < 0$ (а значит $a_{1D} > 0$) точка пересечении аналитического продолжения функция f(z) меняет знак. Точка пересечения для $\bar{Z} \gg a_{1D}$ (рассеяние с малой энергией) находится на расстоянии равном длине s-рассеяния $|z| = a_{1D}$. Вариационная энергия вычисляется как ожидание гамильтониана (5.1) на пробной волновой функции $E = \langle \psi_T | H | \psi_T \rangle / \langle \psi_T | \psi_T \rangle$. Пробная волновая функция, используемая нами, дает точное описание коротковолновых корреляций, а они дают основной вклад в энергию. То же построение волновой функции при $g_{1D} > 0$ дает ожидание энергии отличающееся меньше чем на 2% от точной энергии основного состояния модели Либа-Линигера. Такую же точность мы ожидаем и при $g_{1D} < 0$. В наших вычислениях мы использовали N = 100 частиц с периодическими граничными условиями. Вариационная энергия уменьшается при увеличении вариационного параметра \bar{Z} и выходит на насыщение при больших \overline{Z} . Исходя из этого во всех вычислениях мы использовали $\bar{Z}=L/2,$ гдеL– размер ящика. Вычисления проведенные с бо́льшим количеством частиц N (вплоть до N = 400) демонстрируют отсутствие дальнейших эффектов конечности системы.

5.4 Результаты

Вариационные значения энергии как функции газового параметра na_{1D} обозначены на Рис. 5.1 сплошными значками. При малых значениях газового параметра наши вариационные результаты находятся в хорошем совпадении с уравнением состояния газа твердых

Глава 5. РЕЖИМ «СВЕРХ-ТОНКСА»

сфер радиуса a_{1D} (жирная штрихованная линия). Энергия газа твердых сфер может быть получена из энергии газа Тонкса-Жирардо приняв во внимание исключенный объем[72]

$$\frac{E_{HR}}{N} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{6m} \frac{1}{(1 - na_{1D})^2}$$
(5.4)

При бо́льших значениях na_{1D} , вариационная энергия увеличивается медленнее чем в уравнении состояния твердых сфер(5.4) и разница становится очевидна. Делая численную подгонку наших вариационных результатов степенной функцией мы получаем результаты отображенные на Рис. 5.1 жирной сплошной линией. Обратная восприимчивость полученная из этой подгонки изображена на Рис. 5.1 тонкой сплошной линией и сравнивается со значением mc^2 газа твердых сфер (тонкая штрихованная линия). Значение mc^2 как функция газового параметра имеет максимум, а потом резко падает до нуля. Обнуление скорости звука означает, что система становится механически неустойчивой относительно образования связанных кластеров. Наш вариационный подход позволяет оценить критическое значение при котором начинается неустойчивость $na_{1D} \simeq 0, 35$. Это значение совпадает с критическим значением плотности в центре ловушки, при которой коллапсирует газ удерживаемый гармонической ловушкой[158].

Несмотря на то, что пробная волновая функция $\psi_T(z_1, ..., z_N) = \prod_{i < j} f(z_{ij})$ (где f(z) определено, как (5.3)) корректно описывает коротковолновые корреляции, она не дает правильно длинноволновые корреляции. При малых значениях газового параметра na_{1D} ($na_{1D} < 0, 2$), как видно из Рис. 5.1, модель твердых сфер предсказывает правильно значение энергии частиц и скорости звука. Эта модель дает также хорошее описание корреляционных функций в этом режиме. Корреляционные функции газа твердых сфер радиуса a_{1D} могут быть найдены усреднением по точной волновой функции[126] $\psi_{HR} = \prod_{i < j} |\sin[\pi(z'_i - z'_j)/L]|$, где координаты $\{z'_j\}$ получены из $\{z_j\}$ упорядочением $z_1 < z_2 - a_{1D} < z_3 - 2a_{1D} < ... < z_N - (N-1)a_{1D}$ используя преобразование $z'_j = z_j - ja_{1D}$, где перебираются все частицы j = 1, 2, ..., N. Мы вычисляем статический структурный фактор S(k), который мы выражаем через флуктуации оператора плотности $\rho_k = \sum_{i=1}^N e^{ikz_i}$:

$$S(k) = \frac{1}{N} \frac{\langle \psi_{HR} | \rho_k \rho_{-k} | \psi_{HR} \rangle}{\langle \psi_{HR} | \psi_{HR} \rangle} , \qquad (5.5)$$

Мы так же находим пространственную зависимость одночастичной матрицы плотности:

$$g_1(z) = \frac{N}{n} \frac{\int \psi_{HR}^*(z_1 + z, ..., z_N) \psi_{HR}(z_1, ..., z_N) \, dz_2 ... dz_N}{\int |\psi_{HR}(z_1, ..., z_N)|^2 \, dz_1 ... dz_N}$$
(5.6)



Рис. 5.1: Энергия на одну частицу и обратная сжимаемость как функции газового параметра na_{1D} . Сплошные значки и жирная сплошная линия: результаты вариационного вычисления и степенная подгонка; жирная штрихованная линия: уравнение состояния твердых сфер, Ур. 5.4. Статистическая погрешность меньше размеров значков. Тонкие линии: значение mc^2 полученное из подгонки вариационного уравнения состояния и из уравнения состояния твердых сфер.

Глава 5. РЕЖИМ «СВЕРХ-ТОНКСА»

В отличии от особого случая газа Тонкса-Жирардо, аналитические выражения для $g_1(z)$ и S(k) не известны даже в модели твердых сфер. Мы вычисляем эти функции делая усреднение методом Монте Карло по точной волновой функции $|\psi_{HR}|^{21}$. Статический структурный фактор приведен на Рис. 5.2. По сравнению с S(k) газа Тонкса-Жирардо, мы обнаруживаем формирование пика для импульсов k равных двум импульсам ферми $k_F = \pi n$. Этот пик становится выше с увеличением na_{1D} . Изменение угла наклона при малых k отражает увеличение скорости звука c при увеличении плотности na_{1D}. Длинноволновое поведение $g_1(z)$ может быть найдено из гидродинамической теории для слабых возбуждений[160]. При $|z| \gg \xi$, где $\xi = \hbar/(\sqrt{2}mc)$ — корреляционная длина, имеет место степенное затухание $g_1(z) \propto 1/|z|^{\alpha}$, где экспонента α определяется характерным параметром $\alpha = mc/(2\pi\hbar n)$. Для газа Тонкса-Жирардо $mc = \pi\hbar n$ и $\alpha_{TG} = 1/2$. В газе твердых сфер имеем $\alpha = \alpha_{TG}/(1 - na_{1D})^2$ и таким образом получаем $\alpha > \alpha_{TG}$. Наличие степенного поведения очевидно из Рис. 5.3, на котором мы сравниваем $g_1(z)$ газа для плотностей $na_{1D} = 0, 1$ и 0, 2 с ответом для газа Тонкса-Жирардо[187]. Наличие медленного степенного затухания в $g_1(z)$ приводит к инфракрасной расходимости импульсного распределения $n(k) \propto 1/|k|^{1-\alpha}$, $|k| \ll 1/\xi$. По сравнению с газом Тонкса-Жирардо расходимость становится более слабой. Наличие степенного затухания в $q_1(z)$ и линейной зависимости в S(k)при малых импульсах свидетельствуют о том, что газ сверх-Тонкса принадлежит классу латтинжеровских жидкостей [180, 7]. Большее значение α и наличие пика в статическом структурном факторе S(k) показывают, что корреляции в этой системе еще более сильные, чем в газе Тонкса-Жирардо²

Измерение частот коллективных осцилляций дает еще один метод экспериментального наблюдения характерных свойств газа сверх-Тонкса. Для этой цели мы вычисляем частоты нижней моды сжатия системы N частиц находящихся в гармоническом внешнем потенциале $V_{ext} = \sum_{i=1}^{N} m \omega_z^2 z_i^2 / 2$. Мы воспользуемся приближением локальной плотности, позволяющим найти химический потенциал $\tilde{\mu}$ и плотность газа в ловушке n(z) из условий локального равновесия $\tilde{\mu} = \mu[n(z)] + m \omega_z^2 z^2 / 2$ и нормировки $N = \int_{-R}^{R} n(z) dz$, где $R = \sqrt{2\tilde{\mu}/(m\omega_z^2)}$ — размер облака. Для плотностей n, меньших, чем критическая, $\mu[n]$ опре-

¹Отметим, что в этом случае вариационный метод Монте-Карло позволяет получить описание корреляционных функций *точно*

²Отметим необычность такой ситуации. Действительно, среди класса одномерных псевдопотенциалов с константой связи $g_{1D} > 0$ (модель Либа-Линигера) самые сильные корреляции наблюдаются при $g_{1D} \rightarrow \infty$, т.е. в газе Тонкса-Жирардо. Как мы показали, корреляции в газе сверх-Тонкса еще более сильные!



Рис. 5.2: Статический структурный фактор S(k) газа твердых сфер для различных значениях газового параметра na_{1D} (значки) и газа Тонкса-Жирардо (штрихованная линия).



Рис. 5.3: Одночастичная матрица плотности $g_1(z)$ газа твердых сфер для различных значениях газового параметра na_{1D} (значки) и газа Тонкса-Жирардо (штрихованная линия).



Рис. 5.4: Квадрат частоты моды сжатия ω^2 , как функция характерного параметра одномерного газа в ловушке Na_{1D}^2/a_z^2 для гамильтониана Либа-Линигера ($g_{1D} > 0$) и режима сверх-Тонкса ($g_{1D} < 0$). Штрихованные линии получены из разложения уравнения состояния газа твердых сфер.

деляется как из подгонки к результатам метода Монте-Карло (см. Рис. 5.1). Зная профиль плотности n(z) можно найти средний квадратичный размер облака $\langle z^2 \rangle = \int_{-R}^{R} n(z) z^2 dz / N$ и воспользовавшись отношением[121] $\omega^2 = -2\langle z^2 \rangle/(d\langle z^2 \rangle/d\omega_z^2)$, найти частоту ω нижней моды сжатия. В подходе локальной плотности результаты выражаются через характерный безразмерный параметр Na_{1D}^2/a_z^2 , где $a_z=\sqrt{\hbar/m\omega_z}$ — осцилляторная длина. При $g_{1D} > 0$, т.е. в случае гамильтониана Либа-Линигера, частота моды сжатия увеличивается с $\omega=\sqrt{3}\omega_z$ в слабовзаимодействующем режиме среднего поля $(Na_{1D}^2/a_z^2\gg1)$ до $\omega=2\omega_z$ в режиме сильного взаимодействия газа Тонкса-Жирардо $(Na_{1D}^2/a_z^2\ll 1)$. Частоты ω в режиме газа сверх-Тонкса приведены на Рис. 5.4 как функция характерного параметра. В режиме $Na_{1D}^2/a_z^2 \ll 1$, где применима модель твердых сфер, мы вычисляем первую поправку к частоте газа Тонкса-Жирардо аналитически $\omega = 2\omega_z [1 + (16\sqrt{2}/15\pi^2)(Na_{1D}^2/a_z^2)^{1/2} + ...].$ Из Рис. 5.4 видно, что эта поправка точно описывает частоту нижней моды сжатия при $Na_{1D}^2/a_z^2 \ll 1.$ При больших значениях характерного параметра частота достигает максимума и потом падает до нуля при $Na_{1D}^2/a_z^2 \simeq 0.6$. Экспериментальное наблюдение частоты моды сжатия большей чем $2\omega_z$ свидетельствовало бы о наблюдении газа в режиме сверх-Тонкса.

5.5 Заключение

В этой главе мы показали существование в квазиодномерном бозе-газе режима корреляций более сильных, чем в газе Тонкса-Жирардо. Такой режим может быть достигнут при помощи резонанса Ольшаного. Мы вычислили уравнение состояния газа в режиме сверх-Тонкса используя вариационный метод Монте-Карло и нашли критическое значение плотности, при которой начинается неустойчивость относительно образования кластеров. Статический структурный фактор и одночастичная матрица плотности найдены точно в модели газа твердых сфер, которая обеспечивает точное описание свойств системы при малых значениях газового параметра. Мы нашли частоты низшей моды сжатия газа удерживаемого гармоническим потенциалом. Эта частота может быть измерена в эксперименте.

Глава 6

Длиннодействующее дипольное взаимодействие

6.1 Обзор литературы

Конденсация Бозе-Эйнштейна (БЭК) была получена в разнообразнейшем наборе атомных и молекулярных газов. В большинстве газов взаимодействие между частицами является короткодействующим, а значит для достаточно малых плотностей и низких температур может быть описано длиной *s*-рассеяния и, зачастую, приближенно описывается псевдопотенциалом (например, именно так поступают в подавляющем большинстве работ использующих уравнение Гросса-Питаевского). В настоящее время ведутся работы по получению дипольных конденсатов [51, 59, 46, 118, 112, 113, 111, 22, 4]. В отличие от случая короткодействующих потенциалов, диполь-дипольное взаимодействие является дальнодействующим заметно изменяя свойства системы (такие, как например, фазовая диаграмма и пространственные корреляции) и требует особого описания (заметим, что свойства *всех* короткодействующих разреженных систем идентичны). Также дипольные системы интересны тем, что силой дипольного взаимодействия можно легко управлять при помощи быстрого магнитного поля [71]. Дипольные частицы рассматриваются как многообещающий кандидат для реализации квантового компьютера [65, 28, 50].

Теория дипольных конденсатов строилась в основном исходя из полу-классических приближений, как подход Гросса-Питаевского [116] или Боголюбова[135]. Описание дипольного газа в оптической ловушке при помощи модельного гамильтониана Бозе-Хаббарда предсказывается наличие богатой фазовой диаграммы[73, 191, 9, 112, 113, 111, 22]. К сожалению, до настоящего времени полноценное микроскопическое моделирование так и не было сделано даже для однородной системы. Одной из задач данной диссертационной работы было восполнение этого пробела.

Недавно метод квантового Монте Карло применялся для изучении свойств гелия и молекулярного водорода в нанотрубках[92, 74]. Пространственное ограничение в нанотрубке делает жидкость эффективно одномерной, тем самым совершенно меняя свойства обыкновенной трехмерной системы.

6.2 Физическая реализация и модель системы

Мы рассмотрим N отталкивающихся диполей массы M расположенных на одной линии. Диполи считаются ориентированными перпендикулярно этой линии. Гамильтониан такой системы запишется как

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + \frac{C_{dd}}{4\pi} \sum_{i < j} \frac{1}{|z_i - z_j|^3}$$
(6.1)

Такая модель подходит для описания различных физических систем:

1) Холодные бозонные атомы с большим дипольным моментом удерживаемые столь узкой ловушкой, что возбуждение поперечных уровней невозможно, так, что система ведет себя динамически одномерной. Сами дипольные моменты могут быть как постоянными, так и наведенными. Если диполи наведены электрическим полем E, то константа связи в (6.1) будет $C_{dd} = E^2 \alpha^2$, где α — статическая поляризуемость. Если рассматриваются постоянные диполи, ориентированные внешним магнитным полем, то $C_{dd} = m^2$, где m магнитный дипольный момент. Межатомное взаимодействие помимо дипольной составляющей обладает так же и короткодействующей вкладом, который принято описывать длиной *s*-рассеяния *a*. Обычно этот вклад много больше дипольного, однако недавно введенная техника фешбаховского резонанса позволяет управлять длинной рассеяния *a* и даже занулять его, открывая тем самым заманчивую возможность получения чисто дипольного газа. Величина дипольной константы связи C_{dd} в случае наведенных диполей регулируется изменением электрического поля, а в случае постоянных диполей может регулироваться методом быстрого вращения внешнего магнитного поля [71].

Пространственно разделенные экситоны [42, 105, 106, 104, 101, 103, 109, 166, 102, 11, 12, 114, 115, 62, 47, 137, 85, 38, 67, 91, 169, 52, 175, 141] в двух квантовых проводах. Квантовый провод — это полупроводниковая наноструктура, где электрон или дырка могут

двигаться только в одном направлении. В двух квантовых проводах, где один содержит только электроны, а другой только дырки, электрон-дырка образуют непрямой экситон. Если расстояние между экситонами достаточно велико, то такая система становится динамически одномерной. В этом случае $C_{dd} = e^2 D^2 / \varepsilon$, где e - электронный заряд, ε - диэлектрическая константа полупроводника и D - расстояние между квантовыми проводами.

Выражая длины в единицах $\tilde{z} = z/r_0$, где $r_0 = MC_{dd}/(2\pi\hbar^2)$, а энергии в единицах $\mathcal{E}_0 = \hbar^2/Mr_0^2$ обезразмерим гамильтониан (6.1):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + \sum_{i < j} \frac{1}{|z_i - z_j|^3}$$
(6.2)

Все стационарные свойства основного состояния зависят от управляющего параметра nr_0 , где погонная плотность обозначена как n = N/L, а размер системы как L.

6.3 Корреляционные функции и метод Монте Карло

Мы займемся определением энергии основного состояния в жидкой и кристаллической фазах и определением квантовой фазовой диаграммы при нулевой температуре. Для описания структурных свойств системы в различных фазах мы сосчитаем функцию парного распределения, которую можно записать через волновую функцию основного состояния Ψ_0 :

$$g_2(|z_1 - z_2|) = \frac{N(N-1)}{n^2} \frac{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_3 ... dz_N}{\int |\Psi_0(z_1, ..., z_N)|^2 dz_1 ... dz_N}$$
(6.3)

Статический структурный фактор напрямую связан с функцией парного распределения

$$S(k) = 1 + n \int e^{ikz} [g_2(z) - 1] dz$$
(6.4)

В экспериментах с бозонными атомами статический структурный фактор может быть измерен при помощи техники бреговского рассеяния. В системе непрямых экситонов измерение пространственной зависимости фотоиллюмиценции может выявить наличие кристаллизации.

Мы воспользуемся техникой Диффузионного Монте-Карло (см. главу 2), который является, пожалуй, самым эффективным методом исследования свойств основного состояния[24]. Пробную волновую функцию Ψ_T мы запишем в виде Ястрова содержащего одночастичные и двучастичные комоненты:

$$\Psi_T(z_1, ..., z_N) = \prod_{i=1}^N f_1(z_i) \prod_{j < k} f_2(|z_j - z_k|)$$
(6.5)

Одного второго слагаемого уже достаточно для описания жидкой фазы, т.к. условие трансляционной симметрии удовлетворяется, когда первое слагаемое отсутствует. Второе же слагаемое описывает парные корреляции. Мы его выберем в виде $f_2(|z|) = \exp\{-[A/(n|z|)]^B\}$, где вариационные параметры A и B определяются минимизацией вариационной энергии используя технику вариационного метода Монте-Карло (ВМК). Как будет объяснено позже, в пределе малых плотностей волновая функция стремится к известной в явном виде функции Тонкса-Жирардо $f_2^{TG}(|z|) = |\sin(\pi z/L)|$ [72, 17]. Мы проверили, что в этом пределе разница между асимптотически точной функцией $f_2^{TG}(|z|)$ и хорошо оптимизированной функцией $f_2(|z|)$ мала даже на вариационном уровне. А это означает, что наше описание волновой функции жидкой фазы работает хорошо даже в режиме сильных квантовых флуктуаций (см. [17]).

При описании твердой фазы необходимо учесть в явном виде структуру кристалла, для чего мы вводим одночастичное слагаемое в (6.5) в виде гауссианов ширины C и находящихся в узлах кристалла $f_1(z_i) = \exp\{-[n(z_i - z_i^c)]^2/(2C^2)\}$. Сами узлы z_i^c мы распределяем равноудаленным образом, так что расстояния между ними определяется плотностью n^{-1} . Ширина «размазки» узла C трактуется как вариационный параметр и определяется при помощи оптимизации в вариационном вычислении. При моделировании твердой фазы двухчастичное слагаемое в (6.5) мы выбираем в том же виде, что и при моделировании жидкой фазы, т.е. f_2 , хотя, конечно, значения оптимальных параметров при том же значении управляющего параметра могут быть другими.

6.4 Результаты

На Рис. 6.1 приведена вариационная энергия жидкой и кристаллоподобной фазы для значений обезразмеренной плотности $nr_0 = 0,01 - 0,1$. Мы находим, что для плотностей меньших критической $n_c \approx 0,085r_0^{-1}$ жидкая фаза является энергетически выгодной, я для больших плотностей — кристаллоподобная. Таким образом мы обнаруживаем, что при нулевой температуре дипольная система претерпевает квантовый фазовый переход по плотности. Важно отметить, что такой переход если взаимодействие между частицами описывать короткодействующим псевдопотенциалом[99]. Несмотря на то, что разница энергий различных фаз относительно мала, структурные свойства претерпевают значительные изменения.



Рис. 6.1: Разница энергий жидкой и твердой фазы $(E_{solid} - E_{liquid})/E$ как функция обезразмеренной плотности nr_0 .

Если система сильно разрежена, то (1) в процессе двухчастичных столкновений налетающая частица всегда будет отброшена назад из-за отталкивающего потенциала взаимодействия, сила которого при малых расстояниях велика. (2) б Большинство времени частицы находятся на больших расстояниях друг от друга, и потенциальная энергия мала по сравнению с кинетической энергией. Из вышесказанного следует, что система эквивалентна газу непроницаемых бозонов (так называемый газ Тонкса-Жирардо). Как показал Жирардо[72], волновая функция такой бозонной системы может быть сопоставлена волновой функции невзаимодействующих *фермионов*. За счет этого система бозонов обладает многими фермионо-подобными свойствами (фермионизация): энергия совпадает с энергией одномерного газа бесспиновых фермионов

$$E^{TG}/N = \mathcal{E}_0 \pi^2 (nr_0)^2/6, \tag{6.6}$$

осцилляции Фриделя проявляются в функция парного распределения

$$g_2^{TG}(z) = 1 - \sin^2(\pi n z) / (\pi n z)^2 \tag{6.7}$$

На Рис. 6.2 показывается энергия приходящаяся на одну частицу как функция плот-

N	E(z < L/2)	Р	K	E
10	$2,285(2) \ 10^{-2}$	$4 \ 10^{-5}$	$1,19805 \ 10^{-3}$	$2.409(2) \ 10^{-2}$
50	$2,387(2) \ 10^{-2}$	$1, 6 \ 10^{-6}$	$9,42112 \ 10^{-5}$	$2.396(2) \ 10^{-2}$
100	$2,393(3) \ 10^{-2}$	$4 \ 10^{-7}$	$3,15119 \ 10^{-5}$	$2.396(3) \ 10^{-2}$
200	$2,395(4) \ 10^{-2}$	10^{-7}	$1,05402 \ 10^{-5}$	$2.396(4) \ 10^{-2}$

Таблица 6.1: Проверка влияния ограниченности системы на значение энергии. Первая колонка — количество частиц N находящихся в ящике с периодическими граничными условиями. Вторая колонка — локальная энергия, вычисляемая в методе ДМК, обрезание происходит на расстоянии L/2. Третья колонка — «хвост» потенциальной энергии, оцениваемый как $P = n \int [V_{int}(z)] 2dz$. Четвертая колонка — «хвост» кинетической энергии $K = nh^2/m \int [-f''(z)/f(z) + (f'(z)/f(z))^2] 2dz$. Пятая колонка — полная энергия (сумма трех предыдущих колонок).

ности. В разреженной системе $nr_0 \ll 1$ энергия такая же как и у газа Тонкса-Жирардо E^{TG} , что означает фермионизацию системы в этой области значений параметров. При большой плотности частицы локализуются в узлах кристалла, при этом потенциальная энергия $E^{str.int.}/N = \mathcal{E}_0\zeta(3)(nr_0)^3$ является доминирующей. Здесь зависимость энергии от плотности очень сильна, действительно, она кубична, против линейной зависимости в режиме газа Гросса-Питаевского и квадратичной зависимости для взаимодействия типа $1/z^2$, которое допускает точное решение[174, 31]. Такая сильная зависимость от плотности вызвана расходимостью дипольного взаимодействия на малых расстояниях. В отличии от трехмерного случая, где диполь-дипольное взаимодействие является дальнодействующим, в одномерном случае оно таковым уже не является (см. например[54]), и специальные методики типа эвальдовского суммирования не являются необходимыми.

Мы исследовали зависимость энергии от размеров системы (см. Таблицу 6.4). Энергия рассчитывается как сумма вкладов двух типов: первый — суммирование локальной энергии пар с расстоянием меньшим L/2 (этот клад рассчитывается явно при моделировании методом ДМК), второй тип — энергия «хвоста», которую можно аппроксимировать предположив, что на расстояниях |z| > L/2 парные корреляции уже вышли на константу. Мы обнаружили, что энергия быстро выходит на свое термодинамическое значение, и результаты полученные для N = 50,100,200 частиц совпадают в пределах статистической погрешности. Мы также обнаружили, что вклад «хвостовой» энергии меньше 0, 2% от пол-



Рис. 6.2: Энергия приходящаяся на одну частицу как функция обезразмеренной плотности (сплошная линия), энергия газа Тонкса-Жирардо E^{TG} (6.6) (пунктирная линия), потенциальная энергия кристалла (точка-тире). Единица измерения энергии \hbar^2/mr_0^2 .

ной энергии. Все измерения представляемые в диссертационной работе были проделаны для системы из N = 100 частиц.

Функция парного распределения (6.3) приведена на Рис. 6.3. В разреженной системе пространственные осцилляции быстро затухают с увеличением расстояния, как то характерно для жидкости. В частности, для наименьшей из рассматриваемых плотностей $nr_0 = 10^{-3}$ почти невозможно различить функции парного распределения газа Тонкса-Жирардо (6.7) и системы диполей, что находится в согласии с изложенной выше аргументацией. При увеличении плотности осцилляции становятся более явно выражены и при достижении критического значения плотности $n_c r_0 \approx 0,08$ система переходит в фазу с нарушенной трансляционной симметрией. При дальнейшем увеличении плотности $nr_0 = 1 - 10$ локализация частиц в узлах кристалла становится ярко выраженной.

Ещч одна особенность одномерной системы заключается в том, что в ней квантовый фазовый переход отсутствует при любой конечной температуре. Даже при нулевой температуре структурный параметр порядка $\psi = \sum_{j} e^{i2\pi n z_j}$, столь привычный для трехмерных



Рис. 6.3: Функция парного распределения (6.3) полученная методом ДМК для обезразмеренных плотностей $nr_0 = 10^{-2}; 0, 1; 1; 10$ (бо́льшие плотности соответствуют более высоким пикам).

кристаллов, исчезает в термодинамическом пределе[151, 122]. Действительно, амплитуда осцилляций функции парного распределения затухает даже при самой большой из рассматриваемых плотностей (см. Рис. 6.2) (хотя и медленно).

Информация о статическом структурном факторе (6.4) может быть получена из функции парного распределения при помощи преобразования Фурье. Величина S(k) очень важна, т.к. она доступна экспериментально методом брегговской спектроскопии. Длинноволновая часть структурного фактора ведет себя линейно в соответствии с формулой Фейнмана $S(k) = \hbar |k|/(2Mc)$ и определяется скоростью звука с. В пределе малых плотностей структурный фактор принимает очень простую форму: линейное поведение переходит в константу в точке $|k| = 2\pi n$ задающейся плотностью¹. Резкое увеличение высоты пика явно свидетельствует о наличие квантового перехода жидкость - твердая фаза.

 $^{^{1}}$ На самом деле такое значение k соответствует просто ферми-импульсу идеального газа бесспиновых частиц при той же плотности. Таким образом мы находим еще одно проявление фермионизации бозонной системы!



Рис. 6.4: Статический структурный фактор полученный при помощи метода ДМК для обезразмеренных плотностей $nr_0 = 10^{-3};0,1;1$ (бо́льшие плотности соответствуют более высоким пикам)

Положение пика соответствует среднему межчастичному расстоянию, которое в твердой фазе имеет смысл периода кристалла. Наличие острого пика в S(k) — следствие дипольдипольного взаимодействия. Для сравнения в системе с короткодействующим псевдопотенциалом структурный фактор наоборот «сглаживается» при увеличении плотности (сравн. с Рис. 4.4). В режиме большой плотности мы видим появление вторичных пиков для значений волновых чисел кратных $2\pi n$. Эти пики соответствуют корреляциям на длинах в несколько межчатичных расстояний.

Одним из доступных сейчас экспериментальных методов изучения эффектов взаимодействия между частицами в системе заключается в непосредственном измерении частот осцилляций образца в гармоническом удерживающей потенциале. Для этого бозоны помещаются во внешнее гармоническое поле и возбуждаются малые осцилляции системы. Можно различить несколько способов возмущения равновесной системы. Если возмущение провоцируется сдвигом центра ловушки, то движение центра масс не зависит от типа взаимодействия между частицами и определяется только частотой ловушки (по сути, этот способ может быть использован для того, чтобы узнать силу эффективного гармонического потенциала который испытывают частицы). Если же возмущение создается внезапным изменением продольной частоты удерживающего потенциала, то возникающие колебания имеют вид сжатие - расширение системы (иногда такое колебание называют колебанием «дыхания») и центр масс остается на прежнем месте. Частота такого колебания сжатия зависит напрямую от характера взаимодействия между частицами и является доступным способом его исследования.

Если число частиц достаточно велико и энергия приходящаяся на одну частицу много больше расстоянием между уровнями осциллятора $E/N \gg \hbar \omega_z$, то можно применить метод локальной плотности (см. так же параграф 5.4). Тогда свойства удерживаемой системы могут быть предсказаны основываясь на знании уравнения состояния однородной системы и зависят от универсального параметра $\Delta = N^{1/2} r_0/a_z$, где $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ — осцилляторная длина продольного удержания. Для наиболее точного описания уравнения состояния мы находим энергию однородной системы при помощи диффузионного метода Монте-Карло. Полученная зависимость от плотности подгоняется функцией $E/N = C_{TG}n^2 + C_{cr}n^3 + n^{2/3}(a_1 + a_2n^{a_3}),$ где первые два слагаемые фиксируются асимптотиками при малой и большой плотности соответственно (эти асимптотики изображены на Рис. 6.2), а оставшиеся три вариационных параметра a_1, a_2, a_3 фиксируются подгонкой методом наименьших среднеквадратичных отклонений к результатам диффузионного вычисления. Полученная аналитическая формула дифференциируется и извлекается зависимость химического потенциала $\mu_{loc}(n)$ от плотности. Химический потенциал системы в ловушке фиксируется из условия нормировки $N = \int \mu_{loc}^{-1} (\mu - 1/2 \ m \omega_z^2 z^2) \, dz$. Полученное радиальное распределение частиц используется для определения среднеквадратичного размера облака, дифференцируя которое мы находим частоту осцилляций [121].

Квадрат частоты моды сжатия изображен на Рис. 6.5. В режиме малой плотности происходит фермионизация системы и частота колебаний такая же, как для идеального ферми- газа $\Omega = 2\omega_z$. С увеличением плотности частота колебаний увеличивается, что свидетельствует о наличии более сильных корреляциях в системе. Заметим, что такое поведение частоты кардинально отличается от поведения в газе короткодействующего потенциала Либа-Линигера. В частности, если в системе присутствует как диполь-дипольное взаимодействие, так и канал *s*-рассеяния, то рост частоты (против понижения) с увеличением параметра Δ свидетельствует об эффекте дипольного взаимодействия.



Рис. 6.5: Квадрат частоты моды сжатия как функция универсального параметра $\Delta = N^{1/2} r_0 / a_z$. Для сравнения также приведен результат для гамильтониана Либа-Линигера.

Для исследования сверхтекучих свойств системы мы воспользуемся методикой предложенной в[152]. Сверхтекучая доля дается как отношение коэффициента диффузии во мнимом времени, рассчитанного для рассматриваемой системы и для свободной частицы[172]. В отличии от энергии, где перестановочная симметрия не имеет большого влияния на ответ, здесь это свойство волновой функции имеет первостепенное значение. Пробная волновая функция жидкой фазы уже правильно учитывает бозонную симметрию. В случае же твердой фазы мы вводим явное суммирование по всем узлам решетки $f_1(z_i) = \sum_j \exp\{-[n(z_i - z_j^c)]^2/(2C^2)\}$. Мы не находим сколько нибудь значительной разницы в значении энергии (такой же результат был получен Сиперли при моделировании ⁴He, см. [36]), что подтверждает удачность нашего выбора пробной волновой функции Ψ_T . Мы находим, что система сверхтекуча в жидкой фазе и нормальна глубоко в кристаллоподобной области.

Мы утверждаем, что критическая плотность квантового фазового перехода может быть достигнута в экспериментах с непрямыми экситонами в двух квантовых проводах. Эта система является одномерным аналогом двухмерной экситонной системы в связанных квантовых ямах, в которых сверхтекучесть и другие свойства исследовались очень активно как со стороны теории[42, 105, 106, 104, 101, 103, 109, 166, 102, 11, 12, 114, 115, 62, 47, 137], так и эксперимента [85, 38, 67, 91]. Как объяснялось выше свойства таких одномерных и двухмерных систем заметно отличаются (режим Тонкса-Жирардо, и т.п.). Рассмотрим для примера параметры GaAs: $\varepsilon = 12, 5$, масса $m_e = 0.07m_0$, масса дырки $m_h = 0.15m_0$, где m_0 – масса свободного электрона. При этих параметрах масса экситона равна $0, 22m_0$. Поместив квантовые провода на расстоянии D друг от друга, скажем 5, мы получим $r_0 \approx 10^{-6}$ и $\mathcal{E}_0 \approx 3$. Тогда критическое значение безразмерной плотности квантового фазового перехода $nr_0 = 0.08 - 0.09$ соответствует достижимой в нынешних экспериментах погонной плотности экситонов $n \approx 10^{5-1}$. Кристаллическая и жидкая фазы могут быть реализованы изменением плотности экситонов в квантовых проводах.

Взаимодействие между атомами хрома может быть эффективно контролироваться как предложено в [71]. Атомы хрома имеют преимущество перед атомами щелочных газов в том, что постоянный магнитный момент хрома велик. Исследование по реализации бозеконденсации в газе атомов хрома — горячая тема современных исследований[51, 59, 46, 118]. Отношение силы диполь-дипольного взаимодействия к силе *s*-рассеяния составляет 0, 27 для 52 Cr. При помощи фешбаховского резонанса длина *s*-рассеяния может быть эффективно занулена оставляя в системе доминирующим диполь-дипольное взаимодействие. Использование наведенных электрических диполей экспериментально является более трудной задачей, однако дало бы заметные результаты. В такой системе отношение силы дипольного взаимодействия к силе *s*-рассеяния может достигать порядка 10^2 , что привело бы к реализации почти чистой диполь-дипольной системы.

6.5 Выводы

В завершение, в этой главе мы исследовали свойства основного состояния системы дипольных моментов при помощи метода квантового Монте-Карло. Мы обнаружили наличие квантового кроссовера: при малых плотностях nr_0 система находится в жидкой фазе, в то время как в более сжатой системе кристаллоподобная фаза является энергетически выгодной. Мы нашли функцию парного распределения и статический структурный фактор, которые могут быть измерены экспериментально. Разреженная бозонная система ведет себя сходно с системой идеальных бесспиновых фермионов (фермионизация) и свойства системы описываются моделью газа Тонкса-Жирардо. Наконец, мы утверждаем, что критическая плотность квантового кроссовера может быть достигнута в текущих экспериментах с экситонами в проводах и мы приводим параметры возможного эксперимента.

Глава 7

Латтинжеровская жидкость

7.1 Статическая корреляционная функция плотности

Длинноволновые свойства слабовзаимодействующего одномерного бозе газа могут быть получены из макроскопического представления полевого оператора $\hat{\Psi}(x) = \sqrt{\rho_0 + \hat{\rho}'(x)} e^{i\hat{\varphi}(x)}$, где ρ_0 — средняя плотность, а $\hat{\varphi}(x)$ — оператор фазы. Эти операторы могут быть выражены через операторы рождения и аннигиляции (см., например, [150] Ур-я.(6.65-6.66) и рассмотрите одномерный случай):

$$\hat{\varphi} = -i \sum_{k} \sqrt{\frac{\pi}{\eta |k| L}} (\hat{b}_k e^{ikx} - \hat{b}_k^{\dagger} e^{-ikx})$$
(7.1)

$$\hat{\rho}' = \sum_{k} \sqrt{\frac{\eta |k|}{4\pi L}} (\hat{b}_k e^{ikx} + \hat{b}_k^{\dagger} e^{-ikx}), \qquad (7.2)$$

где мы ввели важный параметр описывающий силу взаимодействия между частицами:

$$\eta = \frac{2\pi\hbar\rho_0}{Mc} \tag{7.3}$$

Операторы (7.1,7.2) удовлетворяют коммутационным соотношениям $[\hat{\varphi}(x), \hat{\rho}'(x')] = -i\delta(x-x').$

Этот метод применим в слабовзаимодействующем газе $\rho_0 \to \infty$. Глубоко в этом режиме скорость звука зависит как корень от плотности $c = \sqrt{g\rho_0/M}$ и коэффициент η велик $\eta = 2\pi\hbar\sqrt{\rho_0/Mg}$. В противоположном режиме сильных корреляций $\rho \to 0$ (режим Тонкса-Жирардо) волновая функция бозонной системы непроницаемых частиц отражается на волновую функцию идеальных фермионов[72] в которой скорость звука определяется значением ферми- импульса $c_F = \pi\hbar\rho_0/M$ и пропорциональна плотности. В этом режиме

имеем $\eta = 2$. Обобщая определение скорости Ферми с режима Тонкса-Жирардо, где бозонная система фермионизуется на произвольное значение плотности, получим простую трактовку параметра (7.3) $\eta = 2c_F/c$. Скорость звука в системе с контактным потенциалом отталкивания не может быть больше, чем скорость Ферми, а значит в модели Либа-Линигера (4.3) $\eta \ge 2$. Ситуация становится иной в газе твердых сфер радиуса a. Наличие исключенный объема уменьшает доступное фазовое пространство $L \rightarrow L - Na$ и ренормализует скорость звука $c \rightarrow \pi \hbar \rho_0 / M / (1 - \rho_0 a)$. В этом особом случае газа сверх-Тонкса (см. Главу 5) параметр η (7.3) может быть меньше двух.

Следуя [78] мы вводим новое поле $\hat{\vartheta}(x)$, такое что $\nabla \hat{\vartheta}(x) = \pi [\rho_0 + \hat{\rho}'(x)]$. Оператор $\hat{\vartheta}$ удовлетворяет граничным условиям $\hat{\vartheta}(x+L) = \hat{\vartheta}(x) + \pi N$ и монотонно увеличивается на π каждый раз, когда x проходит через положение следующей частицы. Таким образом частицы находятся в точках, фаза $\hat{\vartheta}(x)$ кратна π . Оператор плотности может быть выражен как $\hat{\rho}(x) = \nabla \hat{\vartheta}(x) \{ \sum_n \delta [\hat{\vartheta}(x) - \pi \rho] \}$ или, эквивалентно,

$$\hat{\rho}(x) = \left[\rho_0 + \hat{\rho}'(x)\right] \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp[i2m\hat{\vartheta}(x)]$$
(7.4)

Интегрируя (7.2) мы получаем выражение полевого оператора через операторы рождения и уничтожения:

$$\hat{\vartheta}(x) = \vartheta_0 + \pi \rho_0 x - i \sum_k \sqrt{\frac{\pi \eta}{4|k|L}} \operatorname{sign} k \left(\hat{b}_k e^{ikx} - \hat{b}_k^{\dagger} e^{-ikx} \right)$$
(7.5)

Мы начнем с нахождения асимптотик корреляционной функции плотности (функция парного распределения):

$$\langle \hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle \approx (\rho_0^2 + \langle \hat{\rho}'(x)\hat{\rho}'(0)\rangle) \langle \sum_{m,m'} \exp[i2(m\hat{\vartheta}(x) + m'\hat{\vartheta}(0))]\rangle$$
(7.6)

Сначала мы найдем вклад даваемый флуктуациями плотности $\rho'(x)$:

$$\langle \hat{\rho}'(x)\hat{\rho}'(0)\rangle = \langle \sum_{k,k'} \frac{\eta\sqrt{|kk'|}}{4\pi L} (\hat{b}_k e^{ikx} + \hat{b}_k^{\dagger} e^{-ikx})(\hat{b}_{k'} + \hat{b}_{k'}^{\dagger})\rangle$$
(7.7)

Операторы рождения и уничтожения удовлетворяют бозонным коммутационным отношениям $[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^{\dagger}] = \delta_{k,k'}$. При нулевой температуре возбуждения отсутствуют $\langle \hat{b}_k^{\dagger} \hat{b}_k \rangle = 0$, и при усреднении по основному состоянию в выражении (7.7) мы получаем отличный от нуля результат только для слагаемых $\langle \hat{b}_k \hat{b}_k^{\dagger} \rangle = 1$, т.е

$$\langle \hat{\rho}'(x)\hat{\rho}'(0)\rangle = \sum_{k} \frac{\eta |k| e^{ikx}}{4\pi L} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta |k|}{4\pi Mc} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} = \frac{\eta}{4\pi^2} \left(\frac{1}{x^2} - \frac{ik}{x}\right) e^{ikx} \Big|_{0}^{\infty}$$
(7.8)

Мы рассмотрим вклад только от нижнего предела интегрирования k = 0 (отвечающий большим расстояниям в координатном пространстве) и получим

$$\langle \hat{\rho}'(x)\hat{\rho}'(0)\rangle = \frac{\eta}{4\pi^2}x^{-2}$$
 (7.9)

Теперь найдем вклад фазовых флуктуаций в (7.6):

$$\langle \sum_{m,m'} \exp[i2(m\hat{\vartheta}(x) + m'\hat{\vartheta}(0))] \rangle =$$

$$= \langle \sum_{m,m'} \exp\left\{i2(m+m')\vartheta_0 + i2\pi m\rho_0 x + \sum_k \sqrt{\frac{\pi\eta}{|k|L}} \operatorname{sign} k\left(\hat{b}_k(me^{ikx} + m') - \hat{b}_k^{\dagger}(me^{-ikx} + m'))\right)\right\}$$

Среднее от фононного оператора \hat{A} является гауссовым и удовлетворяет равенству $\langle \exp\{\hat{A}\}\rangle = \exp\{\langle \hat{A}^2 \rangle/2\}$. Это дает нам возможность перейти от среднего от экспоненты к экспоненте от среднего:

При нулевой температуре возбуждения отсутствуют и усреднение в (7.11) дает $\langle ... \rangle = -(me^{-ikx} + m')(me^{ikx} + m') = -(m^2 + m'^2 + 2mm'\cos kx)$. Мы заменяем суммирование по k в экспоненте (7.11) на интегрирование:

$$-\sum_{k} \frac{\pi\eta}{2|k|L} (m^2 + m'^2 + 2mm'\cos kx) = -2\int_{0}^{\infty} \frac{\pi\eta}{2k} (m^2 + m'^2 + 2mm'\cos kx) \frac{dk}{2\pi}$$
(7.12)

Этот интеграл расходится, если только не выполняется условие m' = -m, так что мы рассмотрим только эти слагаемые. Теперь интеграл сходится при малых k и набирает наибольший вклад в интервале $1/x < k < 1/\xi$, где ξ — минимальная длина, на которой применим гидродинамический подход. В этом режиме можно пренебречь вкладом от осциллирующего косинуса. Мы получаем

$$-4m^{2} \int_{1/x}^{1/\xi} \frac{\pi\eta}{2k} \frac{dk}{2\pi} = -m^{2}\eta(\ln(1/\xi) - \ln(1/x)) = -\eta m^{2}\ln(x/\xi)$$
(7.13)

Наконец, собирая вместе (7.9,7.10,7.13) мы получаем выражение для стационарной корреляционной функции плотности

$$\frac{\langle \hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle}{\rho_0^2} = \left(1 + \frac{\eta}{4\pi^2}(\rho_0 x)^{-2}\right) \left(1 + 2\sum_{m=1}^{\infty} C_i \cos(2\pi m \rho_0 x) \left(\frac{x}{\xi}\right)^{-\eta m^2}\right)$$
(7.14)

7.2 Зависящая от времени корреляционная функция плотности

В этом параграфе мы изложим метод, который позволяет найти корреляции между различными моментами времени. Мы заменим стационарные выражения гидродинамических операторов фазы и плотности (7.1,7.2) на соответствующие выражения зависящие от времени (см, например, [100], Ур-я.(24.10)):

$$\hat{\varphi}(x,t) = -i \sum_{k} \sqrt{\frac{\pi}{\eta |k| L}} (\hat{b}_k e^{i(kx-|k|ct)} - \hat{b}_k^{\dagger} e^{-i(kx-|k|ct)}), \qquad (7.15)$$

$$\hat{\rho}'(x,t) = \sum_{k} \sqrt{\frac{\eta|k|}{4\pi L}} (\hat{b}_k e^{i(kx-|k|ct)} + \hat{b}_k^{\dagger} e^{-i(kx-|k|ct)})$$
(7.16)

Легко заметить (см. Ур-я. (7.1,7.2), что время t всегда входит в выражение (kx - |k|ct), это означает, что решение зависящее от времени может быть получено заменой $kx \rightarrow kx - |k|ct$ в подынтегральных выражениях и проведением соответствующего интегрирования заново. Коррелятор плотности (7.7) дается тогда выражением

$$\langle \hat{\rho}'(x,t)\hat{\rho}'(0,0)\rangle = \int_0^\infty \frac{\eta k}{4\pi} (e^{ik(x-ct)} + e^{ik(x+ct)})\frac{dk}{2\pi} = \frac{\eta}{8\pi^2} \left(\frac{1}{(x+ct)^2} + \frac{1}{(x-ct)^2}\right)$$
(7.17)

Здесь, как и прежде, мы рассмотрели только вклад от нижнего предела интегрирования k = 0.

Вклад фазовых флуктуаций (7.10) вычисляется аналогично (7.12):

$$-\eta m^{2} \left[\int_{0}^{\infty} \frac{[1 - \cos k(x + ct)]}{k} dk + \int_{0}^{\infty} \frac{[1 - \cos k(x - ct)]}{k} dk \right]$$
(7.18)

Основной вклад в интегралы набирается на импульсах $1/(x + ct) < k < 1/\xi$ в первом интеграле и $1/(x - ct) < k < 1/\xi$ во втором. Мы заинтересованы в описании асимптотически больших расстояний и условие x > ct всегда выполнено. Интегрирование дает

$$-\frac{1}{2}\eta m^2 \left[\ln \frac{x+ct}{\xi} + \ln \frac{x-ct}{\xi} \right] = -\frac{1}{2}\eta m^2 \ln \frac{x^2 - c^2 t^2}{\xi^2}$$
(7.19)

Таким образом мы находим асимптотическое поведение зависящей от времени корреляционной функции плотности:

$$\frac{\langle \hat{\rho}(x,t)\hat{\rho}(0,0)\rangle}{\rho_0^2} = 1 + \frac{\eta}{8\pi^2\rho_0^2} \left(\frac{1}{(x+ct)^2} + \frac{1}{(x-ct)^2}\right) + 2\sum_{m=1}^{\infty} C_i \cos(2\pi m\rho_0 x) \left(\frac{x^2 - c^2 t^2}{\xi^2}\right)^{-\frac{1}{2}\eta m^2} (7.20)$$

7.3 Вычисление с нелогарифмической точностью

Фононная дисперсия $\omega = c|k|$ используемая в приведенных выше вычислениях, приводит к инфракрасной расходимости при интегрировании по импульсу (7.12). Расходимость была убрана усечением интеграла. Однако, эта проблема может быть решена используя более точное боголюбовское дисперсионное отношение:

$$\omega(k) = \sqrt{(kc)^2 + \left(\frac{\hbar k^2}{2M}\right)^2} \tag{7.21}$$

Легко заметить, что результаты для нового дисперсионного отношения могут быть получены заменяя формально скорость звука $c|k| \rightarrow c|k|\sqrt{1 + (\hbar k/2Mc)^2}$ в определении гидродинамических операторов (7.15-7.16. Это приводит к сходимости интеграла (7.12):

$$-2\int_{0}^{\infty} \frac{\eta\pi 2m^{2}(1-\cos kx)}{2k\sqrt{1+(\hbar k/2Mc)^{2}}}\frac{dk}{2\pi} = -\eta m^{2}\int_{0}^{\infty} \frac{1-\cos z}{\sqrt{1+\varepsilon^{2}z^{2}}}\frac{dz}{z},$$
(7.22)

Здесь мы ввели новые обозначения z = xk и $\varepsilon = \hbar/2Mcx$. Разобьем интеграл (7.22) на две части:

$$\int_{0}^{\infty} \frac{1 - \cos z}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} \frac{dz}{z} \approx \int_{0}^{N} (1 - \cos z) \frac{dz}{z} + \int_{N}^{\infty} \frac{dz}{z\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}},\tag{7.23}$$

таким образом, что $1 \ll N \ll 1/\varepsilon$ и вкладом от $(1 + \varepsilon^2 z^2)$ можно пренебречь при интегрировании до N, а вкладом от осциллирующего слагаемого можно пренебречь на бо́льших расстояниях. Сдвинем предел нижнего интегрирования на малое положительное расстояние $\epsilon \to 0$. Тогда первый интеграл станет равным $\ln N/\epsilon - \operatorname{Ci} N + \operatorname{Ci} \epsilon$. Второй интеграл может быть легко найден при помощи подстановки $y^2 = 1 + \varepsilon^2 z^2$ и дает $\frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{1+\varepsilon^2 N^2}+1}{\sqrt{1+\varepsilon^2 N^2}-1}$. Собирая все вместе и разлагая по малому параметру ϵ , после сокращений получим

$$\int_{0}^{\infty} \frac{1 - \cos z}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} \frac{dz}{z} \approx \gamma + \ln \frac{4Mcx}{\hbar} = \gamma + \ln \frac{8\pi\rho_0 x}{\eta},\tag{7.24}$$

где $\gamma \approx 0,577-$ константа Эйлера.

Статическая корреляционная функция плотности (7.14) (а точнее, вклад в нее от гармоник $m \neq 0$) равна

$$\frac{\langle \hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle}{\rho_0^2} = 1 + 2\sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\eta}{8\pi C}\right)^{\eta m^2} \frac{\cos(2\pi m\rho_0 x)}{(\rho_0 x)^{\eta m^2}},\tag{7.25}$$

где $C = e^{\gamma} \approx 1,781.$

Зависящая от времени корреляционная функция плотности отличается от стационарного случая (7.25) заменой $x \to \sqrt{x^2 - c^2 t^2}$ в знаменателе, как видно сравнивая (7.14) и (7.20) и равна

$$\frac{\langle \hat{\rho}(x,t)\hat{\rho}(0,0)\rangle}{\rho_0^2} = 1 + 2\sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{\eta}{8\pi C}\right)^{\eta m^2} \frac{\cos(2\pi m\rho_0 x)}{(\rho_0 \sqrt{x^2 - c^2 t^2})^{m^2 \eta}},\tag{7.26}$$

7.4 Динамический форм фактор

Динамический форм фактор связан с временной корреляционной функцией плотности посредством преобразования Фурье

$$S(k,\omega) = \frac{\rho_0}{\hbar} \iint e^{i(\omega t - kx)} \left[\frac{\langle \hat{\rho}(x,t)\hat{\rho}(0,0)\rangle}{\rho_0^2} - 1 \right] dx dt$$
(7.27)

Корреляционная функция была посчитана с нелогарифмической точностью и дается выражением (7.26). Вычисление прямого преобразования Фурье (7.27), в принципе, дает выражение для динамического форм фактора. Оказывается, что при вычислении проще поступить другим способом, а именно угадать вид *m*-й гармоники в $S(k, \omega)$

$$S(k,\omega) = A(\omega^2 - c^2(k - 2mk_F)^2)^{\frac{m^2\eta}{2} - 1},$$
(7.28)

сделать обратное преобразование Фурье (перейдя таким образом от (k, ω) к (x, t)) и сравнивая полученный результат с (7.26) определить значение константы A. Используем также обозначение $k_F = \pi \rho_0$. Произведем сначала интегрирование по импульсу $S(x, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} S(k, \omega) \frac{dk}{2\pi}$. Введя обозначение $\Delta k = k + 2mk_F$ получим, что интеграл ограничен пределами $(-\omega/c, \omega/c)$:

$$S(x,\omega) = Ac^{m^2\eta - 2}e^{i2mk_Fx} \int_{-\omega/c}^{\omega/c} \cos(\bigtriangleup kx) \left[\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\bigtriangleup k)^2 \right]^{\frac{m^2\eta}{2} - 1} \frac{d(\bigtriangleup k)}{2\pi}$$
(7.29)

Для сравнения используем формулу 3.771(464/465) из книги Градштейна-Рыжика[75]:

$$\int_0^u (u^2 - x^2)^{\nu - \frac{1}{2}} \cos(ax) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{2u}{a}\right)^\nu \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right) J_\nu(au), \quad \left[a > 0, u > 0, \operatorname{Re}\nu > -\frac{1}{2}\right]$$

Заменяя $u = \omega/c, a = x, \nu = (m^2 \eta - 1)/2$ получим желаемое выражение в координатах (x, ω)

$$S(x,\omega) = \frac{Ae^{i2mk_Fx}}{2\sqrt{\pi}c} \left(\frac{2\omega c}{x}\right)^{\frac{m^2\eta-1}{2}} \Gamma\left(\frac{m^2\eta}{2}\right) J_{\frac{m^2\eta-1}{2}}\left(\frac{\omega x}{c}\right),\tag{7.30}$$

где $J_n(x)$ — функция Бесселя первого рода. Интегрирование по частотам $S(x,t) = \int_0^\infty e^{-i\omega t} S(x,\omega) \frac{d\omega}{dt}$ может быть произведено воспользовавшись формулой (6.699.5) из той же книги [75]

$$\int_0^\infty x^\nu \cos(ax) J_\nu(bx) \, dx = 2^\nu \frac{b^\nu}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \nu\right) (b^2 - a^2)^{-\nu - \frac{1}{2}} \quad \left[0 < a < b, \quad |\operatorname{Re}\nu| < \frac{1}{2}\right]$$

и дает

$$S(x,t) = A \frac{(2c)^{m^2\eta - 1}}{2\pi^2} \Gamma^2 \left(\frac{m^2\eta}{2}\right) \frac{\cos(2mk_F)}{(x^2 - c^2t^2)^{\frac{m^2\eta}{2}}}$$
(7.31)

Сравнивая результат с (7.25) мы находим константу пропорциональности $A = \frac{8\pi^2 c \rho_0}{\hbar \Gamma^2 (m^2 \eta/2)} \left(\frac{\hbar}{8Cmc^2}\right)^n$ и получаем конечный ответ

$$S(k,\omega) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{8\pi^2 \rho_0 c}{\Gamma^2 \left(\frac{m^2 \eta}{2}\right) \hbar} \left(\frac{\hbar}{8CMc^2}\right)^{m^2 \eta} \left[\left(\omega^2 - c^2 (k - 2mk_F)^2\right)^{\frac{m^2 \eta}{2} - 1} + \left(\omega^2 - c^2 (k + 2mk_F)^2\right)^{\frac{m^2 \eta}{2} - 1} \right] 7.32)$$

7.5 Коэффициент Попова

Приведенный выше метод позволяет также найти асимптотическое поведение одночастичной матрицы плотности на больших расстояниях и найти коэффициент затухания¹. Приближенно мы разобьем среднее как

$$g_1(x) = \langle \sqrt{\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)} e^{i(\hat{\varphi}(x) - \hat{\varphi}(0))} \rangle \approx \langle \sqrt{\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)} \rangle \langle e^{i(\hat{\varphi}(x) - \hat{\varphi}(0))} \rangle$$
(7.33)

Сначала найдем вклад фазовый флуктуаций

$$g_1^{phase}(x) = \langle e^{i(\hat{\varphi}(x) - \hat{\varphi}(0))} \rangle = \left\langle \exp\left\{ \sum_k \sqrt{\frac{Mc}{2L\rho_0 \hbar |k|}} (\hat{b}_k(e^{ikx} - 1) - \hat{b}_k^{\dagger}(e^{-ikx} - 1) \right\} \right\rangle$$
(7.34)

Среднее от экспоненты может быть найдено воспользовавшись формулой гауссовского среднего $\langle \exp A \rangle = \exp \left\langle \frac{1}{2} A^2 \right\rangle$. При нулевой температуре возбуждения отсутствуют и только среднее $\left\langle \hat{b}_k \hat{b}_k^\dagger \right\rangle = 1$ отлично от нуля. Получим, таким образом

$$g_1^{phase}(x) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_k \frac{Mc}{2L\rho_0\hbar|k|} (e^{ikx} - 1)(e^{-ikx} - 1)\right\} = \exp\left\{-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Mc(1 - \cos kx)}{2\rho_0\hbar|k|} \frac{dk}{2\pi}\right\}.35)$$

Заменим фононное дисперсионное отношение на более точное боголюбовское. Это может быть сделано формальной заменой $c \to c \sqrt{1 + (\hbar k/2Mc)^2}$. Зависимость интеграла от критической экспоненты η выглядит как

$$g_1^{phase}(x) = \exp\left\{-\frac{1}{\eta} \int_0^\infty \frac{\sqrt{1 + (\hbar k/2Mc)^2}(1 - \cos kx)dk}{k}\right\}$$
(7.36)

¹Полученные в этом параграфе результаты были использованы в статье [19]

Формально, интеграл расходится. Однако воспользуемся свойством дельта-функции

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cos \frac{kx}{2\pi} = \delta(x) \tag{7.37}$$

Поскольку мы заинтересованы в длинноволновой асимптотике, вычтем выражение (7.37) из (7.36) и рассмотрим сходящееся выражение

$$g_1^{phase}(x) = \exp\left\{-\frac{1}{\eta} \int_0^\infty \left(\frac{\sqrt{1 + (\hbar k/2Mc)^2}}{k} - 1\right) (1 - \cos kx)\right\} dk$$
(7.38)

Интегрирование по частям используя обозначения $\varepsilon = \hbar/(2xMc) \ll 1$ и z = kx дает

$$g_1^{phase}(x) = \exp\left\{-\frac{1}{\eta} \int_0^\infty \frac{z - \sin z}{z^2 \sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}}\right\} dz$$
 (7.39)

Этот интеграл может быть найден с нелогарифмической точностью пр
и $x\gg\xi$ разбивая интеграл на три части $1\ll N\ll 1/\varepsilon$

$$\int_{0}^{\infty} \frac{z - \sin z}{z^2 \sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} dz = \int_{\lambda}^{N} \frac{1}{z} dz - \int_{\lambda}^{N} \frac{\sin z}{z^2} dz + \int_{N}^{\infty} \frac{1}{z\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} dz = \gamma - 1 - \ln \frac{\varepsilon}{2} = \gamma - 1 - \ln \frac{\hbar}{4xMc} (7.40)$$

Вычисление дает

$$g_1^{phase}(x) = \left(\frac{e^{1-\gamma}\eta}{8\pi\rho_0 x}\right)^{\frac{1}{\eta}}$$
(7.41)

Для того, что бы найти вклад флуктуаций плотности разложим (7.33) в ряд Тейлора $\sqrt{1+x} = 1 + x/2 - x^2/8 + \mathcal{O}(x^3)$, так, что $g_1^{\rho}(x) = \langle \sqrt{\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)} \rangle \approx \rho_0 + \frac{1}{4\rho_0} \langle [\hat{\rho}'(x) - \hat{\rho}'(0)] \hat{\rho}'(0) \rangle$. Выразив оператор плотности через операторы рождения и уничтожения (Ур-е 7.2) получим

$$g_{1}^{\rho}(x) = \rho_{0} + \frac{1}{4} \sum_{k} \frac{\rho_{0} \hbar |k|}{2LMc(k)} \langle (\hat{b}_{k}(e^{ikx} - 1) + \hat{b}_{k}^{\dagger}(e^{-ikx} - 1))(\hat{b}_{k} + \hat{b}_{k}^{\dagger}) \rangle = \rho_{0} + \frac{1}{4} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0} \hbar k}{Mc(k)} (\cos kx - 1) \frac{dk}{2\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{\rho_{0}$$

Заменим скорость звука в соответствии с боголюбовской дисперсией $c(k) = c\sqrt{1 + (\hbar k/2Mc)^2}$ и выразим интеграл в безразмерных величинах $\varepsilon = \hbar/(2Mcx)$ и z = kx:

$$\langle \sqrt{\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)} \rangle = \rho_0 + \frac{\rho_0 \hbar}{8\pi M c x^2} \int_0^\infty \frac{(\cos z - 1)z \, dz}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} \tag{7.42}$$

Этот интеграл может быть вычислен и разложен для малых ε

$$\int_{0}^{\infty} \frac{(\cos z - 1)z \, dz}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 z^2}} = \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{\pi}{2\varepsilon^2} \left(I_1\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) - L_{-1}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \right) \approx \frac{1}{\varepsilon^2} + (-1 - 3\varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^4)), \quad (7.43)$$

где $I_1(z)$ — модифицированная функция Бесселя первого рода и $L_{-1}(z)$ — модифицированная функция Струве.

Выражая через параметр η найдем

$$\langle \sqrt{\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)} \rangle = \rho_0 \left(1 + \frac{1}{\eta} - \frac{\eta}{16\pi\rho_0^2 x^2} \right)$$
 (7.44)

Учтя вместе (7.41) и (7.44), наконец, найдем полное выражение для длинноволнового асимптотического поведения одночастичной матрицы плотности

$$g_1(x) = \rho_0 \left(\frac{e^{1-\gamma}\eta}{8\pi}\right)^{\frac{1}{\eta}} \left(1 + \frac{1}{\eta} - \frac{\eta}{16\pi\rho_0^2 x^2}\right) (\rho_0 x)^{-\frac{1}{\eta}}$$
(7.45)

Глава 8

Фермионная система

8.1 Введение

В настоящее время стало доступным экспериментальное исследование свойств двухкомпонентного ферми- газа при сверхнизких температурах. Использование техники фешбаховского резонанса позволяет контролировать силу и знак межчастичного взаимодействия и, таким образом, экспериментально наблюдать весь переход от режима, где происходит бозеэйнштейновская конденсация (БЭК) вплоть до режима описываемого теорией сверхтекучести Бардина-Купера-Шриффера (БКШ). В этих системах сила взаимодействия управляется магнитным полем, которое может изменять амплитуду двухчастичного рассеяния в широких пределах. Для положительных значений длины s-рассеяния a, было экспериментально обнаружено, что атомы с различными спинами образуют связанные молекулы, которые при достаточно низкой температуры образуют бозе-конденсат [26, 76, 131]. Система может быть адиабатически переведена из состояния с молекулярным бозе-конденсатом в газ фермионов с a < 0 и $k_F |a| \ll 1$ [40, 63], где применима стандартная теория БКШ. В переходном режиме величина длины s-рассеяния |a| может быть на несколько порядков больше обратного значения волнового вектора Φ ерми k_F^{-1} (по сути, межчастичного расстояния) и система входит в новый сильно коррелированный режим известный в литературе под именем унитарного [190, 49, 63]. В сильно разреженных системах, где эффективный радиус взаимодействия R_0 много меньше среднего межчастичного расстояния, $k_F R_0 \ll 1$, ожидается найти универсальные свойства [80, 29, 192, 53]. При этих условиях единственным масштабом энергии будет ферми- энергия невзаимодействующего газа:

$$\epsilon_{FG} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \tag{8.1}$$

Глава 8. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

Аналитическое описание унитарного режима вызывает большие трудности из-за отсутствия простого малого параметра, который мог бы быть использован для построения корректной теории. Первые теоретические исследования перехода БЕК-БКШ при нулевой температуре были основаны на уравнениях среднего поля [96, 129, 56]. Более точные подходы учитывают также эффекты флуктуаций [148, 147] или же включают явное описание поля бозонных молекул [163, 136]. Такие методы дают точное описание глубоко в режиме БКШ, но дают лишь только качественное согласие в режимах унитарности и БЭК. В частности, в режиме бозе-конденсации длина рассеяния одной молекулы на другой может быть найдена из точного решения задачи рассеяния для 4 тел и связана с атомной длиной *s*-рассеяния *a* как $a_m = 0, 6 a$ [143]. Имеющиеся результаты для уравнения состояния в этом режиме не дают правильного описания взаимодействия отталкивания между молекулами [82].

Метод квантового Монте Карло (Глава 2) как нельзя более подходит для исследования свойств сильно коррелированных систем. Этот метод был успешно применен в недавней работе Карлсона и др. [173]. В этой работе была найдена энергия на одну частицу $E/N = \xi \epsilon_{FG}$ с $\xi = 0.44(1)$ разреженного ферми- газа в унитарном режиме при помощи метода Монте Карло функций Грина. В последующей работе [154], авторы распространили расчет уравнения состояния на всю область перехода БЭК-БКШ. В режиме бозеконденсации их результаты согласуются с наличием отталкивающихся молекул, однако уравнение состояния не найдено с достаточной точностью.

В данной Главе находится уравнение состояния ферми -газа в переходе БЭК-БКШ при помощи диффузионного метода Монте Карло Главу 2. Сила взаимодействия варьируется в широких пределах $-6 \leq -1/k_F a \leq 6$, включая значения соответствующие унитарному пределу, и глубоким режимам БЭК и БКШ. В унитарном пределе и в режиме БКШ мы находим согласие с результатами полученными в [173], а также с известными разложениями теории возмущений для ферми- газа со слабым взаимодействием [83, 95]. В режиме бозеконденсации мы находим газ молекул с взаимодействием отталкивания, и длина рассеяния молекулы на молекуле хорошо описывается как $a_m = 0.6a$. Получены парные корреляционные функции для параллельных и антипараллельных спинов в различных режимах. В режиме бозе-конденсации мы находим согласие с парной корреляционной функцией композитных бозонов найденной в боголюбовском приближении.

8.2 Модель

Однородный двух компонентный ферми- газ описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_{i=1}^{N_{\uparrow}} \Delta_i + \sum_{i'=1}^{N_{\downarrow}} \Delta_{i'} \right) + \sum_{i,i'} V(r_{ii'}), \qquad (8.2)$$

где m - масса частиц, а индексы i, j, ... и, соответственно, штрихованные индексы i', j', ...нумерует частицы с различной ориентацией спина (для удобства классифицируем ориентацию как «спин вверх» и «спин вниз») от единицы до $N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=N/2,$ где N- полное число частиц. Взаимодействие между частицами с различной ориентацией спина моделируется потенциалом прямоугольной ямы: $V(r) = -V_0$ для $r < R_0$, иначе V(r) = 0. Для соблюдения условия малости радиуса взаимодействия R_0 по сравнению со средним межчастичным расстоянием $n^{-1/3}$ мы выбираем R_0 так, что $nR_0^3 = 10^{-6}$, где плотность связана с волновым числом ф Ферми $n = k_F^3/(3\pi^2)$. Варьируя глубину потенциальной ямы V₀, мы можем контролировать величину длины s-рассеяния, которая для рассеяния на этом потенциале дается формулой $a = R_0 [1 - tg(K_0 R_0)/(K_0 R_0)]$, где $K_0^2 = mV_0/\hbar^2$. Характерный импульс K_0 меняется в диапазоне $0 < K_0 < \pi/R_0$. При $K_0R_0 < \pi/2$ двухчастичное связанное состояние отсутствует и длина s-рассеяния отрицательна a < 0. При $K_0 R_0 > \pi/2$, наоборот, длина s-рассеяния положительна a > 0, и имеется молекулярное состояние, энергия связи которого ϵ_b определяется из трансцендентного уравнения $\sqrt{|\epsilon_b|m/\hbar^2 R_0 \operatorname{tg}(\bar{K}R_0)/(\bar{K}R_0)} = -1$, где $\bar{K}^2 = K_0^2 - |\epsilon_b|m/\hbar^2$. Значение $K_0 = \pi/(2R_0)$ соответствует унитарному режиму, где длина s-рассеяния велика $|a| = \infty$, а энергия связи зануляется $\epsilon_b = 0$.

В данном исследовании мы воспользуемся методом диффузионного Монте Карло (см. Главу 2) с учетом поправок к методу вносимых для учета фермионной статистики. Мы предлагаем следующие пробные волновые функции:

а) волновая функция типа БКШ

$$\psi_{BCS}(\mathbf{R}) = \mathcal{A}\left(\phi(r_{11'})\phi(r_{22'})...\phi(r_{N_{\uparrow}N_{\downarrow}})\right) , \qquad (8.3)$$

б) волновая функция Ястрова-Слетера

$$\psi_{JS}(\mathbf{R}) = \prod_{i,i'} \varphi(r_{ii'}) \left[\mathcal{A} \prod_{i,\alpha} e^{i\mathbf{k}_{\alpha} \cdot \mathbf{r}_{i}} \right] \left[\mathcal{A} \prod_{i',\alpha} e^{i\mathbf{k}_{\alpha} \cdot \mathbf{r}_{i'}} \right] , \qquad (8.4)$$

где \mathcal{A} — оператор антисимметризации гарантирующий правильную симметрию при перестановке частиц местами.

Плоские волны в пробной волновой функции Ястрова-Слетера (8.4) имеют дискретные значения волновых чисел $\mathbf{k}_{\alpha} = (\ell_{\alpha x} \hat{x} + \ell_{\alpha y} \hat{y} + \ell_{\alpha z} \hat{z}) 2\pi/L$, где сторона L кубического ящика используемого для моделирования фиксируется плотностью и числом частиц $nL^3 = N$, а ℓ — целые числа. Орибитали $\phi(r)$ и $\varphi(r)$ в формулах (8.3)-(8.4) получаются решением уравнения Шредингера для двух частиц с потенциалом взаимодействия V(r). В частности, в режиме a > 0 орбиталью $\phi(r)$ будет волновая функция связанного состояния $\phi_{bs}(r)$ с энергией ϵ_b , а в области a < 0 волновая функция несвязанного состояния соответствующего рассеянию с нулевой энергией: $\phi_{us}(r) = (R_0 - a) \sin(K_0 r)/[r \sin(K_0 R_0)]$ при $r < R_0$ и $\phi_{us}(r) = 1 - a/r$ при $r > R_0$. В унитарном пределе ($|a| \to \infty$) имеется непрерывный переход $\phi_{bs}(r) = \phi_{us}(r)$.

Мы используем волновую функцию Ястрова-Слетера ψ_{JS} (8.4) только в режиме отрицательных длин рассеяния a < 0, с двух-частичной орбиталью Ястрова $\varphi(r) = \phi_{us}(r)$ при $r < \bar{R}$. Для уменьшения возможных эффектов, связанных с относительно медленным затуханием несвязанного состояния $\phi_{us}(r)$, мы полагаем $\varphi(r) = C_1 + C_2 \exp(-\alpha r)$ при $r > \bar{R}$, где $\bar{R} < L/2$ — точка сшивки. Коэффициенты C_1 и C_2 определяются из условий непрерывности на саму функцию $\varphi(r)$ и ее первую производную при $r = \bar{R}$, а параметр $\alpha > 0$ выбирается таким образом, что $\varphi(r)$ быстро выходит на константу. Оставшиеся эффекты конечности модельной системы определяются выполняя вычисления для увеличивающегося числа частиц N = 14, 38 и 66 (число частиц выбрано так, чтобы происходило полное заполнение энергетических оболочек и комплексные экспоненты в (8.4) образовывали полный базис). В ставке Рис. 8.1 мы показываем зависимость энергии на одну частицу E/N от числа частиц в системе N в унитарном пределе. Аналогичное исследование выполненное в режимах БЭК и БКШ показало, что размер системы N = 66 оптимален, т.к. поправки в энергии на конечный размер системы меньше приводимой статистической погрешности во всем переходе БЭК-БКШ. Также мы проверили, что эффекты из-за конечности радиуса взаимодействия R_0 пренебрежимо малы.

8.3 Результаты

Энергия, полученная методом диффузионного Монте Карло для системы из N = 66атомов с потенциалом взаимодействия V(r) и радиусом взаимодействия R_0 , таким что $nR_0^3 = 10^{-6}$, приведена на Рис. 8.1 и представлена в Таблице 8.3 как функция управляю-



Рис. 8.1: Энергия приходящаяся на одну частицу в переходе БКШ-БЭК. Сплошными значками обозначены результаты, полученные при использовании пробной волновой функции ψ_{BCS} , а полые значки — волновой функции ψ_{JS} . Красная штрих-пунктирная линия показывает разложение (8.5), применимое в режиме БКШ, а синяя пунктирная линия воспроизводит энергию связи $\epsilon_b/2$. Вставка: исследование эффектов конечности системы в унитарном режиме $-1/k_Fa = 0$.

щего параметра $-1/k_Fa$. Численный расчет производился с использованием как волновой функции типа БКШ. (8.3), так и волновой функции Ястрова-Слетера, (8.4). В области параметра $-1/k_Fa > 0.4$ мы обнаруживаем, что выбор ψ_{JS} дает меньшие значения энергии, в то время, как для меньших значений управляющего параметра $-1/k_Fa$, включая режимы унитарности и бозе-конденсации, волновая функция ψ_{BCS} энергетически выгодна.

Метод диффузионного Монте Карло для фермионов дает наилучшую энергию в классе волновых функций имеющих ту же поверхность нулевого значения функции, как и выбранная нами пробная волновая функция. Таким образом, результаты для фермионной задачи имеют вариационный характер в отличии от случая бозонов, для которого метод ДМК дает энергию основного состояния точно. Мы приходим к заключению, что в переходной области $-1/k_Fa \sim 0.4$, оба выбора пробной волновой функции: ψ_{BCS} и ψ_{JS} приводят к неточному описанию поверхности нулевого значения волновой функции, и, как следствие, к завышенному значению энергии. В области БКШ, $-1/k_Fa > 1$, наши результаты для энергии E/N находятся в согласии с разложением полученным по теории
возмущений в слабонеидеальном ферми- газе с притяжением¹ [83, 95]

$-1/k_F a$	E/N	$\epsilon_b/2$	$E/N - \epsilon_b/2$
-6	-73,170(2)	-73,1804	0,010(2)
-4	-30,336(2)	-30,3486	0,013(2)
-2	-7,071(2)	-7,1018	0,031(2)
-1	-1,649(3)	-1,7196	0,071(3)
-0,4	-0,087(6)	-0,2700	0,183(6)
-0,2	0,223(1)	-0,0671	0,29(1)
0	0,42(1)	0	0,42(1)
0,2	$0,\!62(3)$	0	0,62(3)
0,4	0,72(3)	0	0,72(3)
1	0,79(2)	0	0,79(2)
2	$0,\!87(1)$	0	0,87(1)
4	0,92(1)	0	0,92(1)
6	0,94(1)	0	0,94(1)

$$\frac{E}{N\epsilon_{FG}} = 1 + \frac{10}{9\pi}k_Fa + \frac{4(11 - 2\ln 2)}{21\pi^2}(k_Fa)^2 + \dots$$
(8.5)

Таблица 8.1: Энергия приходящаяся на одну частицу и энергия связи в режиме перехода БЭК-БКШ (единица энергии — ϵ_{FG}). В скобках указана погрешность приходящаяся на последнюю значащую цифру

В унитарном пределе мы находим $E/N = \xi \epsilon_{FG}$ с $\xi = 0.42(1)$. Это значение находится в согласии с результатами полученными в [173, 154] при помощи другой пробной волновой функции, включающей в себя, как волновую функцию Ястрова, так и орбитали БКШ. Значение параметра $\beta = \xi - 1$ было измерено в экспериментах с ферми- газами в ловушках [190, 49, 63], однако, точность этих экспериментов не позволяет сделать прецизионного сравнения с предсказаниями различных теоретических методов. В области положительной длины рассеяния энергия приходящаяся на одну частицу E/N уменьшается при уменьшении k_Fa . Примерно при при $-1/k_Fa \simeq -0.3$, энергия становится отрицательной, и при дальнейшем уменьшении k_Fa быстро выходит на энергию связи $\epsilon_b/2$ указывая тем самым

¹Заметим, что неаналитические поправки к энергии вызванные наличием щели в сверхтекучей системе (область БКШ $k_F |a| \ll 1$) экспоненциально малы.

на образование связанных молекул [154]. На Рис. 8.2 изображена энергия газа E/N за вычетом энергии связи $\epsilon_b/2$. Именно эта величина определяет частоты коллективных осцилляций, которые доступны к измерению экспериментально. В режиме бозе-конденсации, $-1/k_Fa < -1$, мы находим, что энергия полученная методом ДМК находится в согласии с уравнением состояния бозонного газа отталкивающихся молекул

$$\frac{E/N - \epsilon_b/2}{\epsilon_{FG}} = \frac{5}{18\pi} k_F a_m \left[1 + \frac{128}{15\sqrt{6\pi^3}} (k_F a_m)^{3/2} + \dots \right] , \qquad (8.6)$$

где первое слагаемое — энергия среднего поля (энергии однородного газа Гросса-Питаевского) газа молекул массы 2m, плотности n/2, с положительной длиной *s*-рассеяния a_m , а второе слагаемое — боголюбовская поправка [94]. Если положить длину a_m значение, найденное из задачи рассеяния Петровым и др. [143]: $a_m = 0.6a$, то мы получаем кривую изображенную на Рис. 8.2. Если же принять длину a_m параметром подгонки к результатам наших расчетов в области $-1/k_Fa \leq -1$, то получается значение $a_m/a = 0.62(1)$. Из лучшей подгонки к уравнению состояния, мы находим химический потенциал $\mu = dE/dN$ и обратную восприимчивость $mc^2 = n\partial\mu/\partial n$, где c — скорость звука. Полученные результаты показаны на Рис. 8.3 в единицах энергии Ферми $\mu_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ и скорости Ферми $v_F = \hbar k_F/m$ соответственно. Точное знание уравнения состояния однородной системы важно для определения частот коллективных осцилляций газа в гармоническом удержании [170], экспериментальное наблюдение которых было проведено недавно [88, 60, 40].

На Рис. 8.4 приводится парная корреляционная функция для параллельной, $g_2^{\uparrow\uparrow}(r)$, и антипараллельной, $g_2^{\uparrow\downarrow}(r)$. ориентации спина. Для параллельной ориентации, коррелятор $g_2^{\uparrow\uparrow}(r)$ зануляется на малых расстояниях в соответствии с принципом Паули. Спаривание в режиме БКШ не приводит к существенным корреляциям в парной функции и $g_2^{\uparrow\uparrow}(r)$, по сути, имеет такой же вид, как и в идеальном ферми -газе $g_2^{\uparrow\uparrow}(r) = 1 - 9/(k_F r)^4 [\sin(k_F r)/k_F r - \cos(k_F r)]^2$. Такое поведение имеет место вплоть до значения управляющего параметра $-1/k_F a = 0$, где такая картина находится в полном согласии с представлениями о газе в унитарном режиме, как идеальном ферми -газе с эффективной массой $m^* = m/\xi$. В режиме бозе конденсации, статический структурный фактор S(k) композитных бозонов может быть оценен из теории Боголюбова $S(k) = \hbar^2 k^2 / 2M\omega(k)$], где $\omega(k) = (\hbar^4 k^4 / 4M^2 + gn_m \hbar^2 k^2 / M)^{1/2}$ — боголюбовское дисперсионное отношение для частиц массы M = 2m, плотности $n_m = n/2$ и константы связи $g = 4\pi \hbar^2 a_m/M$. Парное распределение $g_2(r)$ композитных бозонов найденное, как $g_2(r) = 1 + 2/N \sum_{\mathbf{k}} [S(k) - 1]e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ с использованием длины рассеяния $a_m = 0$, 6a приведено на Рис. 8.4 для значения управ-



Рис. 8.2: Энергия, приходящаяся на одну частицу E/N, за вычетом энергии связи в области перехода БКШ-БЭК. Сплошные значки: результаты полученной при использовании пробной волновой функции ψ_{BCS} , полые значки — волновой функции ψ_{JS} . Красная линия (точка-тире) такая же, как и на Рис. 8.1, а синяя (штрихованная) линия показывает разложение (8.6), применимость которого ограничена режимом бозе-конденсации. Вставка: режим бозе-конденсации $-1/k_Fa \leq -1$. Сплошная синяя линия — энергия среднего поля (первое слагаемое в разложении (8.6)), штрихованная синяя линия — энергия с учетом высших поправок, Ур. 8.6.

ляющего параметра $-1/k_F a = -4$ и сравнивается я результатом ДМК. На больших расстояниях $r \gg a_m$, где применим боголюбовский подход, мы находим замечательное согласие. Этот результат согласуется с найденным уравнением состояния в режиме бозеконденсации и доказывает, что структурные свойства основного состояния композитных бозонов правильно описываются в примененном подходе. Парное распределение частиц с антипараллельным спином $g_2^{\uparrow\downarrow}(r)$ демонстрирует на малых расстояниях огромный пик, вызванный притяжением во взаимодействии. В режиме БЭК коротковолновая часть хорошо согласуется с экспоненциально быстрым затуханием $g_2^{\uparrow\downarrow}(r) \propto \exp(-2r\sqrt{|\epsilon_b|m}/\hbar)/r^2$ имеющим непосредственное отношение к волновой функции связанного состояния $\phi_{bs}(r)$. В унитарном пределе корреляции простираются на значительно бо́льшие расстояния, чем в режиме бозе-конденсации. В режиме БКШ, характерная протяженность $g_2^{\uparrow\downarrow}(r)$ много больше, чем k_F^{-1} и определяется длиной когерентности $\xi_0 = \hbar^2 k_F/(m\Delta)$, где Δ — величи-



Рис. 8.3: Химический потенциал μ (красная сплошная линия) и квадрат скорости звука c^2 (синяя линия, длинная штриховка) в переходе БКШ-БЭК, найденная подгонкой к уравнению состояния. Синяя линия, короткая штриховка, и синяя пунктирная линия показывают разложения c^2 найденные из формул (8.5) и (8.6).

на щели. В этом режиме используемые нами пробные волновые функции не учитывают правильно спаривание и не являются адекватными для точного исследования поведения функции $g_2^{\uparrow\downarrow}(r)$.

8.4 Заключение

При помощи метода диффузионного Монте Карло проведено детальное исследование уравнения состояния ферми- газа во всем переходе БКШ-БЭК. В режиме БКШ (а так же в режиме унитарности) найденные результаты хорошо согласуются с численными результатами полученными другими авторами [173] ([154], соответственно). В режиме бозеконденсации, мы находим, что уравнение состояния фермионной системы может быть хорошо описано моделью композитных бозонов - молекул, с эффективным отталкиванием между бозонами и длиной *s*-рассеяния молекулы на молекуле даваемой как $a_m = 0.6a$, в соответствии с недавними вычислениями [143]. Экспериментальное применение техники фешбаховского резонанса, дающей возможность непосредственного управления межатомным потенциалом взаимодействия при помощи контролируемого изменения магнитного



Рис. 8.4: Парная корреляционная функция для параллельной, $g_2^{\uparrow\uparrow}(r)$, и антипараллельной (вставка), $g_2^{\uparrow\downarrow}(r)$, ориентаций спинов для следующих значений управляющего параметра: $-1/k_F a = 0$ (унитарный предел), $-1/k_F a = -4$ (режим БЭК), $-1/k_F a = 4$ (режим БКШ), а так же для идеального ферми газа (обозначенного, как «FG»). Штрих-пунктирная линия показывает аналитическую кривую найденную по приближению Боголюбова для $-1/k_F a = -4$ и $a_m = 0.6a$.

поля, вызвала большое количество как экспериментальных, так и теоретических исследованиях системы холодных ферми-газов в переходе БЭК-БКШ[183]. Несколько ключевых и уже измеренных величин (таких как профиль плотности, частоты коллективных осцилляций, высвобожденная кинетическая энергия) связаны чувствительным образом с уравнением состояния однородного газа, которое сильно меняется в рассматриваемой области перехода. При малых и отрицательных значениях длины *s*-рассеяния *a*, применима модель слабонеидельного ферми- газа, в то время как, при малых и положительных значениях может происходит формирование связанных молекул и, при нулевой температуре, наступает бозе- конденсация композитных бозонов. В промежуточной области вопрос адекватного математического описания остается открытым. Например, межмолекулярная длина *s*-рассеяния в режиме БЭК (конденсации Бозе-Эйнштейна) имеет нетривиальную зависимость от длины *s*-рассеяния атомов[148, 143, 144]. Более того, ожидается наличие поправок (например, боголюбовских [95, 94]) к уравнению состояния бозонной модели среднего поля (т.е., уравнения Гросса-Питаевского). Другой тип поправок может возник-

Глава 8. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

нуть из-за фермионной природы композитных бозонов. Наконец, вблизи резонанса, где длина *s*-рассеяния становится много больше, чем среднее межчастичное расстояние, простое описание многочастичной сильно скоррелированной системы отсутствует. Численные методы применялись для вычисления уравнения состояния однородного взаимодействующего ферми-газа при T = 0 в области перехода. Менее точный подход основан на решении самосогласованной системы уравнений среднего поля обобщенных из теории БКШ (см., напр., [56] и ссылки внутри). Более точный метод использует методы квантового Монте Карло для решения уравнения Шредингера во мнимом времени, см. [173, 58] и параграфы §§8.1-8.4.

Так как частоты коллективных осцилляций могут быть экспериментально измерены с большой точностью, является важным исследование их точной связи с уравнением состояния в области перехода. Тщательный и систематический анализ частот коллективных осцилляций может дать ценную информацию о фактическом уравнении состояния. Как указывалось ранее [170], такие частоты при в сверхтекучем ферми-газе, удерживаемом в гармонической ловушке при T = 0, принимают хорошо определенные значения в таких важных режимах как: БКШ, БЭК (бозе- конденсации), унитарном режиме, так как ведущая зависимость химического потенциала от плотности может быть получена из общих рассуждений. Существует ряд современных исследований [41, 81, 30, 86, 87, 45, 44] описывающих поведение частот в промежуточных режимах, основанных на гидродинамической теории для сверхтекучих жидкостей и некой параметризации уравнения состояния. В тоже время стали доступны результаты первые экспериментальных исследований[60, 40], в которых были измерены частоты продольных и поперечных мод сжатия в холодных газах ⁶Li при переходе через резонанс Фешбаха.

Целью данной работы было установить точность, которую необходимо достигнуть при прецизионном измерении частот коллективных осцилляций, для экспериментального определения уравнения состояния газа. Мы обсудим два основных подхода, используемых для предсказания уравнения состояния, дающих ощутимо различные результаты для зависимости химического потенциала от плотности в области перехода. А именно, мы воспользуемся предсказаниями метода среднего поля, а также квантового метода Монте Карло. Для дальнейшего построения теории мы используем гидродинамическую теорию, применимость которой при T = 0 обоснована сверхтекучестью системы, а также успешным применением для описания свойств сконденсировавшихся бозе-газов в ловушках. Мы

Глава 8. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

рассмотрим область с положительной длиной рассеяния, в которой условия экспериментального достижения сверхтекучего гидродинамического режима менее обременительны, в отличии от режима БКШ, где малость энергетической щели приводит к более жестким ограничениям[45]. Определение частот коллективных осцилляций для данного уравнения состояния является очень непростой задачей, т.к. в общем случае решения должны искаться численно в несимметричных пространственных конфигурациях соответствующих современным экспериментам. Более того, из-за того, что частоты меняются слабо при изменении длины рассеяния, анализ должен проводиться с очень высокой точностью. В последующем мы сосредоточимся только на низших модах, а именно, монопольной моде в сферической ловушке и низших осевых модах сжатия в вытянутой анизотропной ловушке.

Мы начнем с подробного обсуждения двух уравнений состояний, а именно с зависимости от плотности *n* химического потенциала $\mu(n)$. Часто, помимо плотности, будет удобно пользоваться волновым вектором Ферми k_F определенного, как $k_F^3 = 3\pi^2 n$. Мы остановимся на случае широкого резонанса Фешбаха, когда длина рассеяния *a* является единственным параметром при описания двухчастичного взаимодействия. Заметим, что такая ситуация имеет место [43] в основном резонансе в атомах лития ⁶Li, а так же калия ⁴⁰K.

Мы вводим безразмерный управляющий параметр $1/k_F a$, значение которого меняется от нули до бесконечности при переходе от унитарного предела к режиму бозе-конденсации, где образуются молекулы². Мы выражаем химический потенциал в единицах энергии Ферми³: $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Уравнения состояния изображены на Рис. 8.5.

В унитарном пределе значение химического потенциала $\mu/E_F = 0.44$, полученное методами Монте Карло[173, 58], находится в неплохом согласии с экспериментом [120, 49], в то время как теория среднего поля дает завышенное значение $\mu/E_F = 0.59$. Оба метода дают сходное значение наклона в унитарном пределе, однако в режиме бозе-конденсации поведение отличается за счет различной длины *s*-рассеяния молекулы на молекуле a_m : метод Монте Карло дает $a_m = 0, 6 a$ и совпадает с недавно предсказанным значением [143, 144], в то время, как метод среднего поля [56] дает значительно большее значение $a_M = a$.

²Отметим, что определение управляющего параметра отличается знаком от использованного в начале Главы 2. Другой выбор сделан для удобства, т.к. ниже будет рассматриваться только одна часть перехода, где введенный по новому параметр будет положительным

³Для избежания недоразумений подчеркнем разницу между энергией идеального ферми-газа и энергии Ферми, которая орпеделяется как химический потенциал идеального ферми-газа.



Рис. 8.5: Химический потенциал $\mu(n)$ (за вычетом половины энергии связи молекулы (для псевдопотенциала энергия связи записывается как $\hbar^2/2ma^2$) в единицах энергии Ферми E_F как функция управляющего параметра $1/k_Fa$.

Для определения частот коллективных осцилляций, различные авторы шли различными путями. В одном классе методов уравнение состояния аппроксимируется политропной функцией $\mu(n) \simeq n^{\gamma}$ и используется аналитический результат (см. [48] и ссылки внутри) известный для этого случая. Отметим, что политропный метод может быть применен для определения предельных частот в режиме бозе-конденсации, где $\mu = gn$, так и в режиме унитарности, где $\mu \propto n^{2/3}$. Другие методы основаны на численном решении гидродинамических уравнений [68]. Здесь мы рассмотрим другой подход основанный на применении метода масштабирования. Такой метод уже успешно применялся для описания динамического поведения бозе-конденсатов[32, 185]. Мы покажем, что результаты метода масштабирования находится в превосходном согласии с точными решениями гидродинамических уравнений во всех рассмотренных случаях представляющих практический интерес. Преимущество данного подхода заключается в его полной применимости к анизотропным ловушкам, где точные аналитические решения не всегда могут быть получены. С другой стороны, этот метод может быть применен и в режимах выходящих за грани политропного уравнения.

В нашем применении метода масштабирования мы предположим следующую про-

странственную зависимость профиля плотности:

$$n(x_1, x_2, x_3, t) = \gamma(t) n_0(a_1(t) x_1, a_2(t) x_2, a_3(t) x_3),$$
(8.7)

где $n_0(\mathbf{r})$ — равновесное распределение и $\gamma(t) = \prod_i a_i(t)$. Множитель $\gamma(t)$ обеспечивает правильную нормировку $\int d\mathbf{r} \, n(\mathbf{r}, t)$, а так же сохранение числа частиц. Скорость сверхтекучего движения выбирается как $v_{s,i}(\mathbf{r}) = -(\dot{a}_i/a_i)x_i$, что автоматически гарантирует выполнение условия непрерывности $\dot{n}(\mathbf{r}) + \nabla [n(\mathbf{r}) \mathbf{v}_s(\mathbf{r})] = 0$. Мы подставляем плотность (8.7) и поле скоростей в гидродинамический лагранжиан сверхтекучей жидкости при нулевой температуре:

$$\mathcal{L} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} m n(\mathbf{r}) \mathbf{v}_s^2(\mathbf{r}) - e(n(\mathbf{r})) - n(\mathbf{r}) V_h(\mathbf{r}) \right]$$
(8.8)

Здесь *m* обозначает атомную массу и химический потенциал $\mu(n)$ связан с энергией на единицу объема e(n) как $\mu(n) = \partial e(n)/\partial n$. Слагаемое в энергии e(n), зависящее от плотности было получено в приближении локальной плотности, которое совместимо с гидродинамическим описанием.

В последующим мы рассмотрим случай малых осцилляций, при которых коллективные колебания происходят в линейном режиме. Мы вводим отклонения $a_i = 1 + \epsilon_i$, где деформация мала $\epsilon_i \ll 1$, в уравнения движения найденные из лагранжиана (8.8) и делаем вычисления, удерживая слагаемые первого порядка малости по коэффициентам деформации ϵ_i . Проделав вычисления, мы приходим к следующим простым выражениям на собственные частоты ω :

$$\Gamma \,\omega_i^2 \sum_j \epsilon_j + 2 \,\omega_i^2 \,\epsilon_i = \omega^2 \,\epsilon_i, \tag{8.9}$$

где мы воспользовались $\ddot{\epsilon}_i = -\omega^2 \epsilon_i$ и ввели важный естественный безразмерный параметр:

$$\Gamma = \frac{3}{2} \frac{\langle n \frac{\partial \mu}{\partial n} \rangle}{\langle V_{ho} \rangle} - 1, \qquad (8.10)$$

где $V_{ho}(\mathbf{r}) = \sum_{i} (1/2) m \omega_{i}^{2} r_{i}^{2}$ — гармонический удерживающий потенциал с $r_{1} = x, r_{2} = y$ и $r_{3} = z$. Треугольные скобки означают усреднение по равновесному состоянию газового облака (таким образом $\langle V_{ho} \rangle = \int d\mathbf{r} n_{0}(\mathbf{r}) V_{ho}(\mathbf{r})$), а плотность вычисляется в приближении Томаса-Ферми $\mu(n) + V_{ho}(\mathbf{r}) = \mu_{0}$, согласующимся с гидродинамическим описанием. Отметим, что параметр Г не зависит от анизотропии ловушки. Используя теорему вириала легко получить, что для политропного уравнения состояния $\mu(n) \propto n^{\gamma}$, параметр Γ совпадает с показателем γ . Например, в унитарном пределе $\Gamma = 2/3$, в в пределе бозеконденсации $\Gamma = 1$. В общем случае, коэффициент Γ — функция безразмерной комбинации $k_F(0)a$, где значение $k_F(0)$ определяется из плотности облака Томаса-Ферми в центре как $k_F^3(0) = 3\pi^2 n(0)$. Конкретная зависимость Γ от $k_F(0)a$ определяется только уравнением состояния $\mu(n)$. Наконец, приведенный выше вывод может быть сформулирован аналогичным образом исходя из вариационного принципа для гидродинамических частот.

В случае сферической ловушки, когда $\omega_i = \Omega$, частота квадрупольной моды не зависит от уравнения состояния и определяется осцилляторной частотой $\omega^2 = 2\Omega^2$. Из Ур. (8.9) мы находим, что частота монопольной моды сжатия $\omega^2 = (3\Gamma + 2)\Omega^2$ (см. Приложение .1). В режиме бозе-конденсации ($\Gamma = \gamma = 1$) мы получаем хорошо известный результат $\omega = \sqrt{5\Omega}$. В вытянутой анизотропной ловушке ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_{\perp}, \omega_1 = \omega_z$) помимо колебания с квадрупольной частотой $\omega^2 = 2\omega_{\perp}^2$, имеются еще два решения для моды сжатия (m = 0):

$$\omega^{2} = \frac{1}{2} \left[2(\Gamma+1)\omega_{\perp}^{2} + (\Gamma+2)\omega_{z}^{2} \pm \sqrt{\left[2(\Gamma+1)\omega_{\perp}^{2} - (\Gamma+2)\omega_{z}^{2} \right]^{2} + 8\Gamma^{2}\omega_{\perp}^{2}\omega_{z}^{2}} \right]$$
(8.11)

Вывод приводится в Приложении .1.

В важном случае сильно вытянутой конфигурации $\omega_z \ll \omega_{\perp}$ («сигара») мы находим выражение $\omega^2 = \omega_z^2 (3 - 1/(\Gamma + 1))$ для низшей частоты продольной моды сжатия, получая, таким образом, $\omega/\omega_z = \sqrt{5/2}$ в режиме бозе-конденсации. Для поперечной моды сжатия мы получаем $\omega^2 = 2(\Gamma + 1) \omega_1^2$.

Мы докажем, что метод масштабирования чрезвычайно точен прямым сравнением с по сути, точными решениями гидродинамических уравнений. Метод используемый для сравнения [68], использует известные точные решения для общего класса модельных уравнений состояний $\mu_{anal}(n)$. Тогда каждая конкретная зависимость $\mu(n)$ может быть точно приближена одним из модельных уравнений состояний. Более того, эффект малой разницы между точным $\mu(n)$ и модельными $\mu_{anal}(n)$ состояниями учитывается по теории возмущения (то, что в литературе называется «скорректированной» моделью). Абсолютная точность такого метода равна, как минимум, 10^{-3} [68]. Для применения метода и вычисления коллективных частот необходимо знать плотность газа в центре ловушки $\bar{n}(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r})/n_0$ и соответствующий химический потенциал $\bar{\mu}(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r})/\mu_0$ (обе величины нормированы на значение в центре ловушки, n_0 и μ_0 , соответственно). Класс точно решаемых моделей описывается законом $\bar{n} = \bar{\mu}^p \exp \left[\sum_{k=0}^{K} P_k \bar{\mu}^k\right]$, где p и P_k — параметры модели. Мы рассмотрим только случаи K = 0 (т.е. политропную модель $\bar{n} = \bar{\mu}^p$) и K = 1, потому что уже эта аппроксимация дает достаточную для нас точность. Модель K = 1 называется «квазиполиномиальной». В последнем случае решение не является полностью аналитическим, но сводится к нахождению надлежащего корня полинома низкой степени, что является достаточно простой численной задачей[68].

Мы произвели вычисления частот коллективных осцилляций в двух физически различных режимах. В первом случае мы рассматриваем сферически-симметричную конфигурацию, которая хорошо подходит для вывода точных решений гидродинамических уравнений. Во втором случае мы исследуем случай сильно удлиненной анизотропной ловушки (экспериментальную «сигару»). Отметим, что разница между частотами в унитарном режиме $\nu^2 = 4$ и режиме бозе-конденсации $\nu^2 = 5$ в сферической ловушке более выражена, чем в «сигаре», где частота низшей моды равняется $\nu^2 = 2, 4$ и $\nu^2 = 2, 5$ в соответствующих режимах.



Рис. 8.6: Квадрат частоты низший моды сжатия в сферической ловушке $\nu^2 = \omega^2/\Omega^2$ как функция $1/k_F(0)a$, где $k_F(0)$ — волновой вектор Ферми в центре ловушки, для двух различных уравнений состояния: (MC) - подгонка к результатам метода Монте Карло, (MF-BCS) обобщение теории БКШ методом среднего поля. Сплошная линия показывает результаты полученные нами при использовании двух различных подходов (подробнее см. в тексте), разница между результатами двух подходов не видна на масштабе рисунка. Вставка, методы: квазиполиномный (без коррекции) — линия штрих-точка, политропный с коррекцией — сплошная линия, масштабирование — штрихованная линия. Все значения приведены по сравнению с квазиполиномиальным методом с коррекцией.

Глава 8. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

Мы приводим полученные результаты для сферической ловушки на Рис. 8.6. Проводится сравнение двух уравнений состояния: полученного методом Монте Карло и из приближения среднего поля-БКШ. Метод масштабирования в обоих случаях дает поразительную точность, т.к. на масштабе рисунка разница с точным решением не видна. Такое превосходное совпадение не случайно, метод масштабирования является точным не только для политропного случая, но и включает в себя следующую поправку к политропному уравнению состояния, как может быть показано вариационным методом. Для более полной оценки нашего метода мы строим наши результаты на вставке в Рис. 8.6 в более мелком масштабе рассматривая уравнения состояния полученное методом Монте Карло в качестве тестового примера. Более точно, мы взяли за эталон частоту ν_{ancorr}^2 , полученную с помощью квазиполиномиального метода с коррекцией, который, как мы полагаем, является наиболее аккуратным. Действительно, мы находим, что разница между методом масштабирования и политропной моделью с коррекцией очень мала, численное отличие результатов составляет всего $8 \cdot 10^{-4}$ максимум. Так же это означает, что сходимость к точному ответу уже почти достигнута на шаге поправки к политропной модели, а следующий шаг — квазиполиномиальный метод с коррекцией будет чрезвычайно точен, т.к. еще без поправки его точность составляет 10⁻². Следующий поразительный и замечательный результат заключается в выдающейся точности метода масштабирования в сравнении с точным результатом, погрешность не превышает 3 · 10⁻³ для уравнения состояния полученного техникой Монте-Карло (для техники среднего поля совпадение еще лучше). Это дает полное обоснование применения метода масштабирования.

Из рассмотрения Рис. 8.6 приводит к заключению существенного вывода — различные методы вычисления уравнения состояния однородной системы и обладающие различными точностями (метод среднего поля и более точный метод Монте Карло) приводят к различиям в частотах, которые заведомо больше неопределенности вызванной использованием гидродинамического описания сверхтекучего газа при T = 0. А это значит, что разница может быть измерена экспериментально. В частности, наблюдение частоты ν^2 большей, чем 2,5 при $k_F^0 a \sim 1$ доказало бы наличие боголюбовских поправок[95, 94, 149, 27], которые отсутствуют в методе среднего поля.

В завершение рассмотрим сильно вытянутую конфигурацию («сигару»). Мы анализируем частоту низший моды сжатия, сравнивая предсказания метода масштабирования с точными результатами, как объяснено в [44]. Снова, мы находим отличное согласие. На



Рис. 8.7: Квадрат продольной частоты сжатия $\nu^2 = \omega^2/\omega_z^2$ в сильно удлиненной ловушке для уравнения состояния полученного методом Монте Карло (MC) и среднего поля (MF-BCS) как функция $k_F^0 a$, где $k_F^0 = 1, 7N^{1/6}/a_{ho}$ — волновой вектор Ферми идеального ферми -газа в гармонической ловушке и $a_{ho} = (\hbar/m\bar{\omega})^{1/2}$, где $\bar{\omega} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$. Экспериментальные результаты взяты из [40].

Рис. 8.7 мы приводим полученные результаты для уравнений состояния найденные техникой Монте Карло и среднего поля. На том же рисунке мы показываем экспериментальные результаты для частоты продольного колебания⁴ взятые из [40]. Интересно отметить, что экспериментальные результаты находятся в лучшем согласии с предсказаниями теории среднего поля, чем с предсказаниями более точного метода Монте Карло. Такое совпадение может быть вызвано температурными эффектами. Однако ясно, что необходимо дальнейшее экспериментальное исследование для разрешения этого вопроса и для изучения деталей уравнения состояния во всей области перехода БЭК-БКШ.

⁴Наш метод может быть применен для предсказания частоты радиальной моды сжатия (решение Ур. 8.11 обладающее большей частотой). Однако, в сравнении с текущими экспериментальными возможностями, применимость гидродинамического описания к этой «высокочастотной» моде может и не удовлетворятся ввиду малости энергетической щели.

Приложение

.1 Метод масштабирования

Предположим, что при слабых осцилляциях газа в гармонической ловушке выполняется предположение масштабирования

$$n(\mathbf{r},t) = a(t) \ b(t) \ c(t) \ n_0(a(t)x, b(t)y, c(t)z)$$
(12)

Здесь $n_0(bfr)$ обозначает равновесный профиль плотности нормализованный, как обычно, на полное число частиц в системе $\int n_0 \, \mathbf{dr} = \int n \, \mathbf{dr} = N$. Временная зависимость профиля плотности целиком определяется параметрами масштабирования a, b, c. Предположение (12) справедливо при слабых осцилляциях сжатия (или, как часто говорится, «дыхания»).

Потенциальная часть энергетического потенциала газа в гармонической ловушке может быть записана в виде

$$E_{pot} = \int e[n] \, \mathbf{dr} + \int \left(\frac{m\omega_x^2 x^2}{2} + \frac{m\omega_y^2 y^2}{2} + \frac{m\omega_z^2 z^2}{2} \right) \, \mathbf{dr} \tag{13}$$

где e(n) — плотность энергии однородной системы. Рассмотрим эволюцию (13) с течением времени. В интеграле (13) удобно сделать замену переменных $xa(t) \to x, ya(t) \to y, za(t) \to z$ и ввести обозначение $\tilde{\gamma} = abc$:

$$E_{pot}^{hom} = \int e[n(\mathbf{r}, t)] \, \mathbf{dr} = \int e[\tilde{\gamma} \, n(\tilde{\gamma} \mathbf{r})] \, \mathbf{dr} = \frac{1}{\tilde{\gamma}} \int e[\, \tilde{\gamma} n(\mathbf{r})] \, \mathbf{dr}, \tag{14}$$

Потенциальная энергия осциллятора при этом преобразуется как

$$E_{ho}^{x}(t) = \frac{1}{2}m\omega_{x}^{2}\int x^{2}n(\tilde{\gamma}\mathbf{r})\,\mathbf{dr} = \frac{m\omega_{x}^{2}}{2a^{2}}\int x^{2}n(\mathbf{r})\,\mathbf{dr}$$
(15)

$$E_{ho}^{y}(t) = \frac{1}{2}m\omega_{y}^{2}\int y^{2}n(\tilde{\gamma}\mathbf{r})\,\mathbf{dr} = \frac{m\omega_{y}^{2}}{2b^{2}}\int y^{2}n(\mathbf{r})\,\mathbf{dr}$$
(16)

$$E_{ho}^{z}(t) = \frac{1}{2}m\omega_{z}^{2}\int z^{2}n(\tilde{\gamma}\mathbf{r})\,\mathbf{dr} = \frac{m\omega_{z}^{2}}{2c^{2}}\int z^{2}n(\mathbf{r})\,\mathbf{dr}$$
(17)

В дальнейшем мы будем рассматривать ситуацию, когда деформация мала $\tilde{\gamma} = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$. Мы сделаем разложение по малому параметру деформации ε и будем учитывать

слагаемые вплоть до квадратичных. С этой точностью запишем $\frac{1}{\tilde{\gamma}} = 1 - \varepsilon + \varepsilon^2$ и разложим плотность энергии однородной энергии в ряд Тейлора $e[\tilde{\gamma} n] = e[n + \varepsilon n] = e[n] + \varepsilon n \frac{\partial e[n]}{\partial n} + \frac{1}{2} \varepsilon^2 n^2 \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2}$. Тогда часть (14) энергетического функционала запишется как

$$E_{pot}^{hom}(t) = \frac{1}{\tilde{\gamma}} \int e[\tilde{\gamma}n(\tilde{\gamma})] \, d\mathbf{r} = \int e[n] \, \mathbf{dr} + \varepsilon \int \left(n \frac{\partial e[n]}{\partial n} - e[n] \right) \mathbf{dr} + \varepsilon^2 \int \left(\frac{n^2}{2} \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2} - n \frac{\partial e[n]}{\partial n} + e[n] \right) \mathbf{dr}$$
(18)

а часть отвечающая потенциальной энергии ловушки как

$$\frac{m\omega_x^2}{2a^2} \int x^2 n(\tilde{\gamma}\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = E_{ho}^x (1 - 2\varepsilon_a + 3\varepsilon_a^2), \tag{19}$$

$$\frac{m\omega_y^2}{2b^2} \int y^2 n(\tilde{\gamma}\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = E_{ho}^y (1 - 2\varepsilon_b + 3\varepsilon_b^2), \tag{20}$$

$$\frac{m\omega_z^2}{2c^2} \int z^2 n(\tilde{\gamma}\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = E_{ho}^z (1 - 2\varepsilon_c + 3\varepsilon_c^2), \tag{21}$$

где мы ввели параметры осевой деформации $\varepsilon_a = a - 1$, $\varepsilon_b = b - 1$, $\varepsilon_c = c - 1$. Полный деформационный параметр запишется как

$$\varepsilon = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c + \varepsilon_a \varepsilon_b + \varepsilon_a \varepsilon_c + \varepsilon_b \varepsilon_c \tag{22}$$

$$\varepsilon^2 = (\varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c)^2$$
 (23)

Подставив полученные разложения в потенциальную часть энергетического функционала (13) имеем:

$$E_{pot} = E(0) + (\varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c) \int \left(n \frac{\partial e[n]}{\partial n} - e[n] \right) d\mathbf{r} + \\ + (\varepsilon_a \varepsilon_b + \varepsilon_a \varepsilon_c + \varepsilon_b \varepsilon_c) \int \left(n \frac{\partial e[n]}{\partial n} - e[n] \right) d\mathbf{r} + \\ + (\varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c)^2 \int \left(\frac{n^2}{2} \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2} - n \frac{\partial e[n]}{\partial n} + e[n] \right) d\mathbf{r} - \\ - 2(\varepsilon_a E_{ho}^x + \varepsilon_b E_{ho}^y + \varepsilon_c E_{ho}^z) + \\ + 3(\varepsilon_a^2 E_{ho}^x + \varepsilon_b^2 E_{ho}^y + \varepsilon_c^2 E_{ho}^z)$$
(24)

Слагаемые, линейные по параметры деформации, должны исчезнуть в соответствии с вариационным принципом. Мы получим теорему вириала:

$$E_{ho}^{x} = E_{ho}^{y} = E_{ho}^{z} = \frac{1}{2} \int \left(n \frac{\partial e[n]}{\partial n} - e[n] \right) \mathbf{dr}$$
(25)

Воспользовавшись соотношением (25) мы можем упростить энергетический функционал далее:

$$E_{pot} = E(0) + (\varepsilon_a \varepsilon_b + \varepsilon_a \varepsilon_c + \varepsilon_b \varepsilon_c) 2E_{ho} + (\varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c)^2 \left(\int \frac{n^2}{2} \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2} dr - 2E_{ho} \right) + \\ + 3(\varepsilon_a^2 E_{ho}^x + \varepsilon_b^2 E_{ho}^y + \varepsilon_c^2 E_{ho}^z)$$
(26)

Отметим, что уравнение состояния однородной системы входит явным видом только через вторую производную (по сути, через сжимаемость), а значит описание становится удобным при введении естественного параметра:

$$\Xi = \frac{\int n^2 \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2} \, \mathbf{dr}}{\frac{1}{3} \int \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \mathbf{dr}} = \frac{\langle n \frac{\partial^2 e[n]}{\partial n^2} \rangle}{\frac{N}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle} \tag{27}$$

Используя это обозначение получим

$$E_{pot} = E(0) + E_{ho} \left(\left(\varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2 + \varepsilon_c^2\right) \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right) + 2\left(\varepsilon_a \varepsilon_b + \varepsilon_a \varepsilon_c + \varepsilon_b \varepsilon_c\right) \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) \right)$$
(28)

Для вычисления кинетической составляющей обратимся к гидродинамической теории. Предположим, что гидродинамический подход справедлив и волновая функция может быть выражена через операторы плотности и фазы $\Psi(\mathbf{r},t) = \sqrt{n(\mathbf{r},t)}e^{i\phi(\mathbf{r},t)}$. Разложим оператор фазы до квадратичных слагаемых:

$$\phi = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\alpha_x}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{\alpha_y}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{\alpha_z}{2} m \omega_z^2 z^2 \right), \tag{29}$$

где параметры $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ в общем случае зависят от времени.

Действие системы определяется как

$$A = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \, \mathbf{dr} dt + E_{pot} + E_{kin} \tag{30}$$

Первая часть из (30) преобразуется как

$$-i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \, \mathbf{dr} dt = i\hbar \int n(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \phi \, \mathbf{dr} dt =$$

$$= \int abc \, n(ax, by, cz) \left[\frac{\dot{\alpha}_x}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{\dot{\alpha}_y}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{\dot{\alpha}_z}{2} m \omega_z^2 z^2 \right] \, \mathbf{dr} dt =$$

$$= \left(\frac{\dot{\alpha}_x}{a^2} + \frac{\dot{\alpha}_y}{b^2} + \frac{\dot{\alpha}_z}{c^2} \right) E_{ho} = \left(\dot{\alpha}_x + \dot{\alpha}_y + \dot{\alpha}_z - 2\varepsilon_a \dot{\alpha}_x - 2\varepsilon_b \dot{\alpha}_y - 2\varepsilon_c \dot{\alpha}_z \right)$$
(31)

В нашем описании кинетической энергии воспользуемся приближением Томаса-Ферми, т.е. предположим, что основной вклад в кинетическую энергию дается флуктуациями фазы

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int n |\nabla \phi|^2 \mathbf{dr} = E_{ho} (\alpha_x^2 \omega_x^2 + \alpha_y^2 \omega_y^2 + \alpha_z^2 \omega_z^2)$$
(32)

Собрав вместе потенциальное (13) и кинетическое (32) составляющие получим изменение действия во времени

$$\Delta A = E_{ho} \int \left[\begin{array}{c} (\varepsilon_a^2 + \varepsilon_b^2 + \varepsilon_c^2)(\frac{\Xi}{2} + 1) + 2(\varepsilon_a \varepsilon_b + \varepsilon_a \varepsilon_c + \varepsilon_b \varepsilon_c) \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) \\ -2(\varepsilon_a \dot{\alpha}_x + \varepsilon_b \dot{\alpha}_y + \varepsilon_c \dot{\alpha}_z) + (\alpha_x^2 \omega_x^2 + \alpha_y^2 \omega_y^2 + \alpha_z^2 \omega_z^2) \end{array} \right] dt$$
(33)

Рассмотрим случай удлиненной ловушки с равными поперечными частотами $\omega_x = \omega_y = \omega_\perp$, $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_\perp$. Для этого случая имеем:

$$\Delta A = E_{ho} \int \left[(2\varepsilon_{\perp}^2 + \varepsilon_z^2) \left(\frac{\Xi}{2} + 1 \right) + 2(\varepsilon_{\perp}^2 + 2\varepsilon_{\perp}\varepsilon_z) \left(\frac{\Xi}{2} - 1 \right) - 4\varepsilon_{\perp}\dot{\alpha}_{\perp} - 2\varepsilon_z\dot{\alpha}_z + 2\alpha_{\perp}^2\omega_{\perp}^2 + \alpha_z^2\omega_z^2 \right] dt$$
(34)

В соответствии с вариационным принципом, вариации действия должны быть равны нулю, а значит все первые частные производные по вариационным параметрам от действия $\triangle A$ должны занулятся. Исходя из этого мы получим следующие условия: • вариация по ε_{\perp}

$$\Xi \varepsilon_{\perp} + \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) \varepsilon_z - \dot{\alpha}_{\perp} = 0 \tag{35}$$

• вариация по ε_z

$$\varepsilon_z \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right) + 2\varepsilon_\perp \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) - \dot{\alpha}_z = 0 \tag{36}$$

Удобно полученное выражение для действия проинтегрировать по частям для того, что бы заменить временны́е производные $\dot{\alpha}$ на вариации от α :

$$\Delta A = E_{ho} \int \left[\left(2\varepsilon_{\perp}^2 + \varepsilon_z^2 \right) \left(\frac{\Xi}{2} + 1 \right) + 2\left(\varepsilon_{\perp}^2 + 2\varepsilon_{\perp}\varepsilon_z \right) \left(\frac{\Xi}{2} - 1 \right) + 4\dot{\varepsilon}_{\perp}\alpha_{\perp} + 2\dot{\varepsilon}_z\alpha_z + 2\alpha_{\perp}^2\omega_{\perp}^2 + \alpha_z^2\omega_z^2 \right] dt$$
(37)

• вариации по α_{\perp} и α_{z}

$$\dot{\varepsilon}_{\perp} + \alpha_{\perp} \omega_{\perp}^2 = 0, \tag{38}$$

$$\dot{\varepsilon}_z + \alpha_z \omega_z^2 = 0 \tag{39}$$

Еще раз продифференцировав по времени получим

$$\ddot{\varepsilon}_{\perp} + \omega_{\perp}^2 \dot{\alpha}_{\perp} = 0, \tag{40}$$

$$\ddot{\varepsilon}_z + \omega_z^2 \dot{\alpha}_z = 0 \tag{41}$$

Мы рассмотрим осцилляции моды сжатия («дыхания»), когда деформация облака меняется во времени периодически, с частотой коллективного колебания ω , т.е. $\varepsilon_{\perp}(t) = \varepsilon_{\perp}(0) \exp(i\omega t), \varepsilon_{z}(t) = \varepsilon_{z}(0) \exp(i\omega t)$. В этом случае вместо (40-41) получим

$$\dot{\alpha}_{\perp} = \frac{\omega^2}{\omega_{\perp}^2} \varepsilon_{\perp}, \tag{42}$$

$$\dot{\alpha}_z = \frac{\omega^2}{\omega_z^2} \varepsilon_z \tag{43}$$

Теперь мы можем исключить $\dot{\alpha}$ из уравнений (35-36)

$$\Xi \varepsilon_{\perp} + \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) \varepsilon_z - \frac{\omega^2}{\omega_{\perp}^2} \varepsilon_{\perp} = 0 \tag{44}$$

$$\varepsilon_z \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right) + 2\varepsilon_\perp \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) - \frac{\omega^2}{\omega_z^2} \varepsilon_z = 0 \tag{45}$$

Полученная линейная система

$$\begin{cases} \left(\Xi - \frac{\omega^2}{\omega_\perp^2}\right)\varepsilon_\perp + \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right)\varepsilon_z = 0\\ 2\varepsilon_\perp \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) + \left(\frac{\Xi}{2} + 1 - \frac{\omega^2}{\omega_z^2}\right)\varepsilon_z = 0 \end{cases}$$
(46)

имеет нетривиальное решение, когда ее детерминант равен нулю. А значит, должно выполняться условие

$$\left(\Xi - \frac{\omega^2}{\omega_\perp^2}\right) \left(\frac{\Xi}{2} + 1 - \frac{\omega^2}{\omega_z^2}\right) - 2\left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) \left(\frac{\Xi}{2} - 1\right) = 0$$

$$(47)$$

Выражение (47) имеет вид квадратного уравнения на квадрат частоты коллективной осцилляции ω^2 :

$$\left(\omega^2\right)^2 - \left(\Xi\omega_{\perp}^2 + \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right)\omega_z^2\right)\omega^2 + (3\Xi - 2)\omega_{\perp}^2\omega_z^2 = 0$$
(48)

Соответственно, имеются два решения:

$$\omega^{2} = \frac{1}{2} \left(\Xi \omega_{\perp}^{2} + \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right) \omega_{z}^{2} \pm \sqrt{\left(\Xi \omega_{\perp}^{2} + \left(\frac{\Xi}{2} + 1\right) \omega_{z}^{2}\right)^{2} - 4(3\Xi - 2)\omega_{\perp}^{2}\omega_{z}^{2}} \right)$$
(49)

Это основной результат данного подхода.

В пределе сильновытянутой ловушки («сигары») $\omega_{\perp} \gg \omega_z$, являющимся важным для текущих экспериментов, выражение для частот (49) может быть упрощенно

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = 3 - \frac{2}{\Xi} + \frac{(2-\Xi)^2 (2-3\Xi)}{2\Xi^3} \left(\frac{\omega_z}{\omega_\perp}\right)^2 \tag{50}$$

$$\frac{\omega^2}{\omega_\perp^2} = \Xi + \frac{(2-\Xi)^2}{2\Xi} \left(\frac{\omega_z}{\omega_\perp}\right)^2 \tag{51}$$

В случае изотропной сферической ловушки, когда все частоты равны $\omega_{\perp} = \omega_z = \omega_{ho}$ имеются два решения (49). Одно соответствует колебанию центра масс и зависит только от частоты удержания $\omega^2/\omega_{ho}^2 = 2$. Частота другого решения зависит от взаимодействия между частицами. Эта частота равна

$$\omega^2 / \omega_{ho}^2 = \frac{3}{2} \Xi - 1 \tag{52}$$

.2 Вычисление сжимаемости из уравнения состояния

Скорость звука с связана с сжимаемость системы

$$mc^2 = n \frac{\partial \mu}{\partial n},\tag{53}$$

Обозначим энергию на одну частицу как e(n) = E(n)/N (эта величина может быть численно найдена при помощи методов Монте Карло) и воспользуемся определением химического потенциала $\mu = \frac{\partial E}{\partial N}$. Из (53) имеем:

$$mc^{2} = n \frac{\partial^{2}}{\partial n^{2}} [n e(n)]$$
(54)

Естественным управляющим параметром в системе двухкомпонентных фермионов является безразмерная комбинация $x = -(k_F a)^{-1} = -(3\pi^2 n a^3)^{-1/3}$. В этих обозначениях сжимаемость (54) найдется как

$$mc^2 = -\frac{2}{9}xe' + \frac{e''}{9}x^2 \tag{55}$$

Введем безразмерную энергию (см. Рис. 8.1) как $\mathcal{E}(x) = e(x)/E_f$ (заметим еще раз, что стоит различать энергию $E_f = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$ идеального ферми- газа и энегию Ферми, как обычно, равную химическому потенциалу идеального Ферми газа), $e(x) = \frac{3\mathcal{E}(x)}{10x^2}$. Величина $\mathcal{E}(x)$ фитируется, как объясняется в следующем параграфе, и скорость звука получается дифференцированием:

$$\tilde{c}^2 = \frac{mc^2}{\frac{10}{9}E_f} = \mathcal{E}(x) - \frac{3x}{5}\mathcal{E}'(x) + \frac{x^2}{10}\mathcal{E}''(x)$$
(56)

Рассмотрим подробнее аналитические пределы

x ≪ 1, т.е. режим бозе-конденсации (БЭК). Уравнение состояние описывается композитным бозе-газом. Масса композитных бозонов (молекул) 2*m*, их плотность *n*/2, длина *s*-рассеяния равна 0, 6*a*:

$$\mathcal{E}(x) = \frac{50,6}{18\pi|x|} \left(1 + \frac{1280.6^{3/2}}{15\sqrt{6\pi^3}} |x|^{-3/2} \right)$$
(57)

Полученное выражение для сжимаемости имеет два слагаемых: описывающее эффект среднего поля и боголюбовской поправки

$$\frac{mc^2}{E_F} = \frac{0,6}{2\pi|x|} + \frac{8}{\sqrt{6\pi^5}} \frac{0,6^{5/2}}{|x|^{5/2}}$$
(58)

Глава 8. ФЕРМИОННАЯ СИСТЕМА

• $x \gg 1$, т.е. режим БКШ. Воспользуемся энергией слабонеидеального ферми газа

$$\mathcal{E}(x) = 1 - \frac{10}{9\pi x} + \frac{4}{21\pi^2 x^2} (11 - 2\ln 2)$$
(59)

Сжимаемость в этом режиме выражается как

$$\frac{mc^2}{E_F} = \frac{10}{9} - \frac{20}{9\pi x} + \frac{176 - 32\ln 2}{27\pi^2 x^2}$$
(60)

Политропный индекс $\gamma = n/\mu \, \partial \mu / \partial n$ равен:

• режим БЭК

$$\gamma = 1 + 4 \left(\frac{2\ 0,6}{3\pi x}\right)^{3/2} = 1 + 0,181729\ x^{-3/2} \tag{61}$$

• режим БКШ

$$\gamma = \frac{2}{3} - \frac{4}{9\pi x} + \frac{8(23 - 6\ln 2)}{135\pi^2 x^2} = \frac{2}{3} - 0,141471 \ x^{-1} + 0,113126 \ x^{-2}$$
(62)

заметим, что политропный индекс имеет минимум $\gamma = 0,622437$ при x = 1,6.

.3 Подгонка уравнения состояния сглаживающей функцией

Для нахождения химического потенциала и сжимаемости мы делаем подгонку сглаживающей функцией данных приведенных на Рис. 8.1. В этом параграфе мы подробно опишем построение используемой подгоночной функции.

По аналогии с процедурой построения кубических сплайнов мы приближаем уравнение состояния $\mathcal{E}(x)$ суммой степенных функций и полагаем условие непрерывности функции и нескольких ее производных в точках сшивки. Дополнительно, мы воспользуемся тем, что некоторые коэффициенты разложения в режимах БЭК и БКШ известны аналитически.

Используется следующая подгоночная функция:

$$f(r) = \begin{cases} \frac{a_1}{x} + \frac{a_2}{x^{5/2}} + \frac{a_4}{x^4} + \frac{a_5}{x^5} + \frac{a_6}{x^6}, & x < x_1 \\ b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + b_4 x^4 + b_5 x^5 + b_6 x^6, & x_1 < x < x_2 \\ 1 + \frac{c_1}{x} + \frac{c_2}{x^2} + \frac{c_3}{x^3} + \frac{c_4}{x^4} + \frac{c_5}{x^5} + \frac{c_6}{x^6} & x_2 < x \end{cases}$$
(63)

таким образом имеются 18 коэффициентов разложения и две позиции сшивки, все вместе — 20 параметров подгонки. Четыре параметра известны аналитически. А именно:

$$a_1 = \frac{5}{18\pi} \frac{a_M}{a} = 0,05305164769729845 \tag{64}$$

$$a_2 = \frac{64(a_M/a)^{5/2}}{27\sqrt{6}\pi^{5/2}} = 0,015425669735546753$$
(65)

$$c_1 = -\frac{10}{9\pi} = -0,353677651315323 \tag{66}$$

$$c_2 = \frac{4(11-2\ln 2)}{21\pi^2} = 0,18553753038483$$
(67)

Наложив условие непрерывности в точки сшивки на саму функцию и четыре первых производных получим дополнительно 10 условий, которым должны удовлетворять параметры подгонки. Таким образом остаются свободными 6 параметров. Для удобства мы их выбираем следующим образом b_1, b_2, c_3, a_4 — параметры подгонки для левой и правой части графика и x_1, x_2 — точки сшивки.

Полученная функция является гладкой и удобной для дифференцирования для получения скорости звука (сжимаемости) по формулам (56). Этим способом был получен Рис. 8.3 из данных приведенных на Рис 8.1 и затабулированых в Таблице 8.3. В свою очередь, использование метода масштабирования, изложенного в параграфе .1, применительно к полученной сжимаемости и уравнению состояния позволяет найти частоты коллективных осцилляций газа в ловушке, как показано на Рис. 8.6.

Благодарности

В заключение хочется выразить особую благодарность моему научному руководителю Юрию Ефремовичу Лозовику за постановку задачи, научное руководство и постоянный контроль. А так же моральную поддержку и взаимопонимание, которые создавали творческие условия в работе.

Часть работы была выполнена в сотрудничестве с теоретической группой университета г. Тренто, Италия. Автор благодарит академика Л.П. Питаевского, доктора С. Джиорджини, проф. С. Стрингари за неоценимую помощь, которую они мне оказали при выполнении работы.

Литература

- Астрахарчик, Г. Е. Квантовое моделирование мезоскопических кластеров. бакалаврская дипломная работа, Московский ордена трудового красного знамени физико-технический институт, 2000.
- [2] Астрахарчик, Г. Е. Моделирование физических систем классическим и квантовым методами монте карло. — дипломная работа, Московский ордена трудового красного знамени физико-технический институт, 2002.
- [3] Астрахарчик, Г. Е. Двумерные мезоскопические кластеры пылевой плазмы: структура и фазовые переходы / Г. Е. Астрахарчик, А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик // ЖЭТФ. – 1999. – Т. 116. – С. 1300.
- [4] Белоусов, А. И. Квантовые флуктуации параметра порядка в двумерной системе мезоскопических джозефсоновских контактов / А. И. Белоусов, С. А. Верзаков, Ю. Е. Лозовик // ЖЭТФ. 1998. Т. 113. С. 261.
- [5] Белоусов, А. И. / А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 68. — С. 817.
- [6] Боровков, А. А. Теория вероятностей. 2-е издание. / А. А. Боровков. Наука, 1986.
- [7] Левитов, Л. С. Функции Грина. Задачи и решения. 2-е изд., дополн. / Л. С. Левитов,
 А. В. Шитов. М.:Физматлит., 2002.
- [8] Лозовик, Ю. Е. Ионные и электронные кластеры / Ю. Е. Лозовик // УФН. 1987. Т. 153. — С. 356.
- [9] Лозовик, Ю. Е. Сверхтекучесть непрямых биэкситонов в сверхрешетках / Ю. Е. Лозовик, О. Л. Берман, М. Вилландер // ЖЭТФ. — 1999. — Т. 115(5). — С. 1786.

- [10] Лозовик, Ю. Е. Структура и плавление дипольных кластеров / Ю. Е. Лозовик,
 Е. А. Ракоч // Физика твердого тела. 1998. Т. 40(7). С. 1379.
- [11] Лозовик, Ю. Е. О возможности сверхтекучести разделенных в пространстве электронов и дырок при их спаривании : новый механизм сверхпроводимости / Ю. Е. Лозовик, В. И. Юдсон // Письма в ЖЭТФ. – 1975. – Т. 22(11). – С. 556.
- [12] Лозовик, Ю. Е. Новый механизм сверхпроводимости: спаривание между пространственно разделенными электронами и дырками / Ю. Е. Лозовик, В. И. Юдсон // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 71. – С. 738.
- [13] Нефедов, А. П. / А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов // УФН. 1997. Т.
 167. С. 1215.
- [14] Питаевский, Л. П. / Л. П. Питаевский // ЖЭТФ. 1961. Vol. 13. Р. 451.
- [15] Тутубалин, В. Н. Теория вероятностей и случайных процессов / В. Н. Тутубалин. Издательство МГУ, 1992.
- [16] Astrakharchik, G. E. Properties of two-dimensional dusty plasma clusters / G. E. Astrakharchik, A. I. Belousov, Yu. E. Lozovik // Phys. Lett. A. 1999. Vol. 258. P. 123.
- [17] Astrakharchik, G. E. Quantum monte carlo study of the three- to one-dimensional crossover for a trapped bose gas / G. E. Astrakharchik, S. Giorgini // Phys. Rev. A. – 2002. – Vol. 66. – P. 053614.
- [18] Astrakharchik, G. E. Correlation functions and momentum distribution of onedimensional bose systems / G. E. Astrakharchik, S. Giorgini // Phys. Rev. A. - 2003. --Vol. 68. - P. 031602.
- [19] Astrakharchik, G. E. Motion of a heavy impurity through a bose-einstein condensate / G. E. Astrakharchik, L. P. Pitaevskii // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 70. P. 013608.
- [20] Atoms and wires: Toward atom chips / M. Bartenstein, D. Cassettari, T. Calarco et al. // IEEE JOURNAL OF QUANTUM ELECTRONICS. - 2000. - Vol. 36. - P. 1364.
- [21] Bedanov, V. M. / V. M. Bedanov, F. M. Peeters // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49. P. 2662.

- [22] Belousov, A. I. Josephson array of mesoscopic objects. modulation of system properties through the chemical potential / A. I. Belousov, S. A. Verzakov, Yu. E. Lozovik // Sov. Phys. JETP. - 1998. - Vol. 114. - P. 322.
- [23] Beyond tonks-girardeau: strongly correlated regime in quasi-one-dimensional bose gases /
 G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, S. Giorgini. 2004.
- [24] Boronat, J. Monte carlo analysis of an interatomic potential for he / J. Boronat, J. Casulleras // Phys. Rev. B. - 1994. - Vol. 49. - P. 8920.
- [25] Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms / K. B. Davis, M.-O. Mewes,
 M. R. Andrews et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 75. P. 3969.
- [26] Bose-einstein condensation of molecules / S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer et al. // Science. - 2003. - Vol. 302. - P. 2101.
- [27] Braaten, E. Semiclassical corrections to the oscillation frequencies of a trapped boseeinstein condensate / E. Braaten, J. Pearson // Phys. Rev. Lett. - 1999. - Vol. 82. -P. 255.
- [28] Brennen, G. K. Quantum logic for trapped atoms via molecular hyperfine interactions / G. K. Brennen, I. H. Deutsch, C. J. Williams // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65. P. 022313.
- [29] Bruun, G. M. Two-component fermi gas with a resonant interaction / G. M. Bruun // Phys. Rev. A. - 2004. - Vol. 70. - P. 053602.
- [30] Bulgac, A. Collective oscillations of a trapped fermi gas near the unitary limit / A. Bulgac,
 G. Bertsch // Phys. Rev. Lett. 2005. P. 070401.
- [31] Calogero, F. Solution of a three-body problem in one-dimension / F. Calogero // J. Math. Phys. - 1969. - Vol. 10. - P. 2191.
- [32] Castin, Y. Bose-einstein condensates in time dependent traps / Y. Castin, R. Dum // Phys. Rev. Lett. - 1996. - Vol. 77. - P. 5315.
- [33] Casulleras, J. Unbiased estimators in quantum monte carlo methods: Application to liquid ⁴he / J. Casulleras, J. Boronat // Phys. Rev. B. - 1995. - Vol. 52. - P. 3654.

- [34] Cazalilla, M. A. Bosonizing one-dimensional cold atomic gases / M. A. Cazalilla // Journal of Physics B: AMOP. - 2004. - Vol. 37. - P. S1.
- [35] Ceperley, D. M. Path integrals in the theory of condensed helium / D. M. Ceperley // Reviews of Modern Physics. - 1995. - Vol. 67. - P. 279.
- [36] Ceperley, D. M. Monte Carlo Methods in Statistical Physics / D. M. Ceperley, M. H. Kalos; Ed. by K. Binder. – Springer, 1979.
- [37] Ceperley, D. M. Path-integral simulation of the superfluid transition in two-dimensional ⁴he / D. M. Ceperley, E. L. Pollock // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 39. P. 2084.
- [38] Charge separation of dense two-dimensional electron-hole gases: Mechanism for exciton ring pattern formation / R. Rapaport, G. Chen, D. Snoke et al. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 92. – P. 117405.
- [39] Chiang, C. H. / C. H. Chiang, et al. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 646.
- [40] Collective excitations of a degenerate gas at the bec-bcs crossover / M. Bartenstein,
 A. Altmeyer, S. Riedl et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 203201.
- [41] Collective modes and ballistic expansion of a fermi gas in the bcs-bec crossover / H. Hu,
 A. Minguzzi, X.-J. Liu, M. P. Tosi // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 190403.
- [42] Collective properties of indirect excitons in coupled quantum wells in a random field / O. L. Berman, Y. E. Lozovik, D. W. Snoke, R. D. Coalson // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 5310.
- [43] Combescot, R. Feshbach resonance in dense ultracold fermi gases / R. Combescot // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 120401.
- [44] Combescot, R. Axial collective excitations of a degenerate fermi gas in the bec to unitarity crossover / R. Combescot, X. Leyronas // Europhys. Lett. - 2004. - Vol. 68. - P. 762.
- [45] Combescot, R. Comment on "collective excitations of a degenerate gas at the bec-bcs crossover-/ R. Combescot, X. Leyronas // Phys. Rev. Lett. - 2004. - Vol. 93. - P. 138901.
- [46] Continuous loading of a magnetic trap / J. Stuhler, P. O. Schmidt, S. Hensler et al. // Phys. Rev. A. - 2001. - Vol. 64. - P. 031405.

- [47] Conti, S. Engineering superfluidity in electron-hole double layers / S. Conti, G. Vignale,
 A. H. MacDonald // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. R6846.
- [48] Cozzini, M. Fermi gases in slowly rotating traps: Superfluid versus collisional hydrodynamics / M. Cozzini, S. Stringari // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 070401.
- [49] Crossover from a molecular bose-einstein condensate to a degenerate fermi gas /
 M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 120401.
- [50] DeMille. Quantum computation with trapped polar molecules / DeMille // Phys. Rev. Lett. - 2002. - Vol. 88. - P. 067901.
- [51] Determination of the s-wave scattering length of chromium / P. O. Schmidt, S. Hensler,
 J. Werner et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 193201.
- [52] Dielectrically enhanced excitons in semiconductor-insulator quantum wires: Theory and experiment / E. A. Muljarov, E. A. Zhukov, V. S. Dneprovskii, Y. Masumoto // Phys. Rev. B. - 2000. - Vol. 62. - P. 7420.
- [53] Diener, R. B. The condition for universality at resonance and direct measurement of pair wavefunctions using rf spectroscopy / R. B. Diener, T.-L. Ho. – 2004.
- [54] Dynamics and thermodynamics of systems with long-range interactions / Ed. by T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, M. Wilkens. — Springer, Berlin, 2002.
- [55] Dynamics of the ordered structure formation in a thermal dusty plasma / Y. K. Khodataev, S. A. Krapak, A. P. Nefedov, O. F. Petrov // Phys. Rev. E. – 1998. – Vol. 57. – P. 7086.
- [56] Engelbrecht, J. R. Bcs to bose crossover: Broken-symmetry state / J. R. Engelbrecht,
 M. Randeria, C. A. R. S. de Melo // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55. P. 15153.
- [57] Equation of state and collective frequencies of a trapped fermi gas along the bec-unitarity crossover / G. E. Astrakharchik, R. Combescot, X. Leyronas, S. Stringari. – 2005.
- [58] Equation of state of a fermi gas in the bec-bcs crossover: a quantum monte carlo study /
 G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, S. Giorgini // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 200404.

- [59] Evaporative cooling of atomic chromium / J. D. Weinstein, R. deCarvalho, C. I. Hancox,
 J. M. Doyle // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65. P. 021604.
- [60] Evidence for superfluidity in a resonantly interacting fermi gas / J. Kinast, S. L. Hemmer,
 M. E. Gehm et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 150402.
- [61] Exciting collective oscillations in a trapped 1d gas / H. Moritz, T. Stoferle, M. Kohl, T. Esslinger // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 250402.
- [62] Exciton condensate in semiconductor quantum well structures / X. Zhu, P. Littlewood,
 M. Hybertsen, T. Rice // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 1633.
- [63] Experimental study of the bec-bcs crossover region in lithium 6 / T. Bourdel,
 L. Khaykovich, J. Cubizolles et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 050401.
- [64] Exploring phase coherence in a 2d lattice of bose-einstein condensates / M. Greiner,
 I. Bloch, O. Mandel et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 160405.
- [65] Fast quantum gates for neutral atoms / D. Jaksch, J. I. Cirac, P. Zoller et al. // Phys. Rev. Lett. - 2000. - Vol. 85. - P. 2208.
- [66] Feynmann, R. P. Atomic theory of the two-fluid model of liquid helium / R. P. Feynmann // Phys. Rev. - 1954. - Vol. 94. - P. 262.
- [67] Formation mechanism and low-temperature instability of exciton rings / L. V. Butov,
 L. S. Levitov, A. V. Mintsev et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 117404.
- [68] Fuchs, J. N. Hydrodynamic modes of a one-dimensional trapped bose gas / J. N. Fuchs,
 X. Leyronas, R. Combescot // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 68. P. 043610.
- [69] Gangardt, D. M. Stability and phase coherence of trapped 1d bose gases / D. M. Gangardt, G. Shlyapnikov // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 90. - P. 010401.
- [70] Gaudin, M. La Fonction d'Onde de Bethe / M. Gaudin. Paris, Masson, 1983.
- [71] Giovanazzi, S. Tuning the dipolar interaction in quantum gases / S. Giovanazzi,
 A. Görlitz, T. Pfau // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 130401.
- [72] Girardeau, M. / M. Girardeau // J. Math. Phys. (N.Y.). 1960. Vol. 1. P. 516.

- [73] Góral, K. Quantum phases of dipolar bosons in optical lattices / K. Góral, L. Santos,
 M. Lewenstein // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 170406.
- [74] Gordillo, M. C. Zero-temperature equation of state of quasi-one-dimensional h₂ / M. C. Gordillo, J. Boronat, J. Casulleras // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 2348.
- [75] Gradstein, I. S. Tables of Integrals, Series and Products / I. S. Gradstein, I. M. Ryzhik. Academic, New York, 1980.
- [76] Greiner, M. / M. Greiner, C. A. Regal, D. S. Jin // Nature. 2003. Vol. 426. P. 537.
- [77] Ground-state properties of a one-dimensional system of dipoles / A. S. Arkhipov,
 G. E. Astrakharchik, A. V. Belikov, Yu. E. Lozovik. 2005.
- [78] Haldane, F. D. M. Effective harmonic-fluid approach to low-energy properties of onedimensional quantum fluids / F. D. M. Haldane // Phys. Rev. Lett. - 1981. - Vol. 47. -P. 1840.
- [79] Heat capacity of a strongly interacting fermi gas / J. Kinast, A. Turlapov, J. E. Thomas et al. - 2005.
- [80] Heiselberg, H. Fermi systems with long scattering lengths / H. Heiselberg // Phys. Rev. A. - 2001. - Vol. 63. - P. 043606.
- [81] Heiselberg, H. Collective modes of trapped gases at the bec-bcs crossover / H. Heiselberg // Phys. Rev. Lett. - 2004. - Vol. 93. - P. 040402.
- [82] Holland, M. J. The role of boson-fermion correlations in the resonance theory of superfluids / M. J. Holland, C. Menotti, L. Viverit. – 2004.
- [83] Huang, K. Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction / K. Huang, C. Yang // Phys. Rev. 1957. Vol. 105. P. 767.
- [84] Interacting fermions in quasi-one-dimensional harmonic traps / G. E. Astrakharchik,
 D. Blume, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 050402.
- [85] Interwell radiative recombination in the presence of random potential fluctuations in gaas/algaas biased double quantum wells / V. B. Timofeev, A. V. Larionov, A. S. Ioselevich et al. // JETP lett. - 2002. - Vol. 76. - P. 450.

- [86] Kim, J. E. Time-dependent density-functional theory for trapped strongly interacting fermionic atoms / J. E. Kim, A. L. Zubarev // Phys. Rev. A. - 2004. - Vol. 70. -P. 033612.
- [87] Kim, Y. E. Collective excitations of strongly interacting fermi gases of atoms in a harmonic trap / Y. E. Kim, A. L. Zubarev. – 2005.
- [88] Kinast, J. Breakdown of hydrodynamics in the radial breathing mode of a stronglyinteracting fermi gas / J. Kinast, A. Turlapov, J. E. Thomas // Phys. Rev. A. - 2004. --Vol. 70. - P. 051401(R).
- [89] Korepin, V. E. Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions / V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, A. G. Izergin. — Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [90] Koulakov, A. A. / A. A. Koulakov, B. I. Shklovskii // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. P. 2352.
- [91] Krivolapchuk, V. V. Specific features of the indirect exciton luminescence line in gaas/al_xga_{1-x}as double quantum wells / V. V. Krivolapchuk, E. S. Moskalenko, A. L. Zhmodikov // Phys. Rev. B. - 2001. - Vol. 64. - P. 045313.
- [92] Krotscheck, E. Variational approach to the many-boson problem in one dimension /
 E. Krotscheck, M. D. Miller, J. Wojdylo // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 13028.
- [93] Large ion crystals in a linear paul trap / M. Drewsen, C. Brodensen, L. Hornekar, J. S. Hangst // Phys. Rev. Lett. - 1998. - Vol. 81. - P. 2878.
- [95] Lee, T. D. Many-body problem in quantum mechanics and quantum statistical mechanics / T. D. Lee, C. N. Yang // Phys. Rev. - 1957. - Vol. 105. - P. 1119.
- [96] Leggett, A. J. Modern Trends in the Theory of Condensed Matter / A. J. Leggett. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [97] Lenard, A. / A. Lenard // J. Math. Phys. 1964. Vol. 5. P. 930.

- [98] Lieb, E. H. Exact analysis of an interacting bose gas. ii. the excitation spectrum /
 E. H. Lieb // Phys. Rev. 1963. Vol. 130. P. 1616.
- [99] Lieb, E. H. Exact analysis of an interacting bose gas. i. the general solution and the ground state / E. H. Lieb, W. Liniger // Phys. Rev. - 1963. - Vol. 130. - P. 1605.
- [100] Lifshitz, E. M. Statistical Physics, Part 2 / E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii. Pergamon Press, Oxford, 1980.
- [101] Lozovik, Yu. E. Phase transitions in a system of two coupled quantum wells / Yu. E. Lozovik, O. K. Berman // JETP Lett. - 1996. - Vol. 64. - P. 573.
- [102] Lozovik, Yu. E. Superfluidity of indirect excitons and biexcitons in coupled quantum wells and superlattices / Yu. E. Lozovik, O. L. Berman, M.Willander // J. Phys. C. - 2002. – Vol. 14. – P. 12457.
- [103] Lozovik, Yu. E. Superfluidity of «dirty» excitons / Yu. E. Lozovik, O. L. Berman,
 A. M. Ruvinskii // JETP Lett. 1999. Vol. 69. P. 616.
- [104] Lozovik, Yu. E. Phase transitions of electron-hole and unbalanced electron systems in coupled quantum wells in high magnetic fields / Yu. E. Lozovik, O. L. Berman, V. G. Tsvetus // Phys. Rev. B. - 1999. - Vol. 59. - P. 5627.
- [105] Lozovik, Yu. E. / Yu. E. Lozovik, et. al. // phys. stat. sol. 2004. Vol. b241. P. 85.
- [106] Lozovik, Yu. E. / Yu. E. Lozovik, et. al. // Sov. Phys. JETP. 2004. Vol. 98. P. 582.
- [107] Lozovik, Yu. E. Coulomb clusters in a trap / Yu. E. Lozovik, V. A. Mandel'stam // Phys. Lett. A. - 1990. - Vol. 145. - P. 269.
- [108] Lozovik, Yu. E. Classical and quantum melting of a coulomb cluster in a trap / Yu. E. Lozovik, V. A. Mandel'stam // Phys. Lett. A. - 1992. - Vol. 165. - P. 469.
- [109] Lozovik, Yu. E. Magnetism and josephson effect in the coupled quantum well electronhole system / Yu. E. Lozovik, A. V. Poushnov // Phys. Lett. - 1997. - Vol. A 228. -P. 399.
- [110] Lozovik, Yu. E. Energy barriers, structure and two stage melting of vortexes / Yu. E. Lozovik, E. A. Rakoch // Phys. Rev. B. - 1998. - Vol. 57. - P. 1214.

- [111] Lozovik, Yu. E. / Yu. E. Lozovik, S. A. Verzakov, M. Willander // Phys. Rev. A. 1999. – Vol. 260. – P. 405.
- [112] Lozovik, Yu. E. Superfluidity of indirect excitons in a quantum dot / Yu. E. Lozovik,
 S. A. Verzakov, M. Willander // Phys. Lett. A. 1999. Vol. 260 N5. P. 400.
- [114] Lozovik, Yu.. E. Electron hole superconductivity. influence of structure defects /
 Yu.. E. Lozovik, V. I. Yudson // Sol. St. Comms. 1977. Vol. 21. P. 211.
- [115] Lozovik, Yu. E. On the ground state of the two dimensional non ideal bose gas / Yu. E. Lozovik, V. I. Yudson // Physica A. 1978. Vol. 93. P. 493.
- [116] Lushnikov, P. M. Collapse of bose-einstein condensates with dipole-dipole interactions /
 P. M. Lushnikov // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 051601.
- [117] Lynden-Bell, R. M. / R. M. Lynden-Bell, D. J. Wales // J. Chem. Phys. 1994. Vol. 101. - P. 1460.
- [118] Magneto-optical trapping of chromium atoms / C. C. Bradley, J. J. McClelland, W. R. Anderson, R. J. Celotta // Phys. Rev. A. - 2000. - Vol. 61. - P. 053407.
- [119] McGuire, J. B. / J. B. McGuire // J. Math. Phys (N.Y.). 1964. Vol. 5. P. 622.
- [120] Measurement of interaction energy near a feshbach resonance in a ⁶li fermi gas / T. Bourdel, J. Cubizolles, L. Khaykovich et al. // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 020402.
- [121] Menotti, C. Collective oscillations of a 1d trapped bose gas / C. Menotti, S. Stringari // Phys. Rev. A. - 2002. - Vol. 66. - P. 043610.
- [122] Mermin, N. D. Crystalline order in two dimensions / N. D. Mermin // Phys. Rev. 1968. – Vol. 176. – P. 250.
- [123] Momentum spectroscopy of 1d phase fluctuations in bose-einstein condensates /
 S. Richard, F. Gerbier, J. H. Thywissen et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 010405.

- [124] Monien, H. Trapped one-dimensional bose gas as a luttinger liquid / H. Monien, M. Linn,
 N. Elstner // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 58. P. R3395.
- [125] Mora, C. Extension of bogoliubov theory to quasicondensates / C. Mora, Y. Castin // Phys. Rev. A. - 2002. - Vol. 67. - P. 053615.
- [126] Nagamiya, T. / T. Nagamiya // Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. 1940. Vol. 22. P. 705.
- [127] Namby, M. / M. Namby, S. V. Vladimirov, P. K. Shukla // Phys. Lett. A. 1995. Vol. 203. - P. 40.
- [128] Nanofabricated atom optics: atom chips / K. Brugger, T. Calarco, D. Cassettari et al. // Journal of modern optics. - 2000. - Vol. 47. - P. 2789.
- [129] Nozières, P. / P. Nozières, S. Schmitt-Rink // J. Low Temp. Phys. 1985. Vol. 59. P. 195.
- [130] Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor / M. H. Anderson,
 J. R. Ensher, M. R. Matthews et al. // Science. 1995. Vol. 269. P. 198.
- [131] Observation of bose-einstein condensation of molecules / M. W. Zwierlein, C. A. Stan,
 C. H. Schunck et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 250401.
- [132] Observation of feshbach resonances in a bose-einstein condensate / S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger et al. // Nature. - 1998. - Vol. 392. - P. 151.
- [133] Observation of reduced three-body recombination in a correlated 1d degenerate bose gas /
 B. L. Tolra, K. M. O'Hara, J. H. Huckans et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 190401.
- [134] Observation of the pairing gap in a strongly interacting fermi gas / C. Chin, M. Bartenstein, A. Altmeyer et al. // Science. - 2004. - Vol. 305. - P. 1128.
- [135] O'Dell, D. H. J. Exact hydrodynamics of a trapped dipolar bose-einstein condensate /
 D. H. J. O'Dell, S. Giovanazzi, C. Eberlein // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 250401.
- [136] Ohashi, Y. Superfluidity and collective modes in a uniform gas of fermi atoms with a feshbach resonance / Y. Ohashi, A. Griffin // Phys. Rev. A. - 2003. - Vol. 67. -P. 063612.

- [137] Olivares-Robles, M. A. Interaction potential between dynamic dipoles: Polarized excitons in strong magnetic fields / M. A. Olivares-Robles, S. E. Ulloa // Phys. Rev. B. - 2001. --Vol. 64. - P. 115302.
- [138] Olshanii, M. Atomic scattering in the presence of an external confinement and a gas of impenetrable bosons / M. Olshanii // Phys. Rev. Lett. - 1998. - Vol. 81. - P. 938.
- [139] Olshanii, M. Short-distance correlation properties of the lieb-liniger system and momentum distributions of trapped one-dimensional atomic gases / M. Olshanii, V. Dunjko // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 090401.
- [140] One-dimensional bosons and fermions in optical traps / B. Paredes, A. Widera, V. Murg et al. // Nature. - 2004. - Vol. 429. - P. 277.
- [141] Palo, S. D. Excitonic condensation in a symmetric electron-hole bilayer / S. D. Palo,
 F. Rapisauda, G. Senatore // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 206401.
- [142] Partoens, B. / B. Partoens, V. A. Shweigert, F. M. Peeters // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 79. P. 3990.
- [143] Petrov, D. S. Weakly bound dimers of fermionic atoms / D. S. Petrov, C. Salomon,
 G. Shlyapnikov // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. P. 090404.
- [144] Petrov, D. S. Scattering properties of weakly bound dimers of fermionic atoms /
 D. S. Petrov, C. Salomon, G. Shlyapnikov // Phys. Rev. A. 2005. Vol. 71. P. 012708.
- [145] Petrov, D. S. Regimes of quantum degeneracy in trapped 1d gases / D. S. Petrov,
 G. V. Shlyapnikov, J. T. M. Walraven // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 3745.
- [146] Phase transitions of stored laser-cooled ions / R. Blümel, J. M. Chen, E. Peik et al. // Nature. - 1998. - Vol. 334. - P. 309.
- [147] Pieri, P. Bcs-bec crossover at finite temperature in the broken-symmetry phase / P. Pieri,
 L. Pisani, G. Strinati // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 094508.
- [148] Pieri, P. Strong-coupling limit in the evolution from bcs superconductivity to boseeinstein condensation / P. Pieri, G. Strinati // Phys. Rev. B. - 2000. - Vol. 61. -P. 15370.

- [150] Pitaevskii, L. P. Bose-Einstein Condensation / L. P. Pitaevskii, S. Stringari. Oxford University Press, Oxford, 2003.
- [151] Pitaevskii, L. / L. Pitaevskii, S. Stringari // J. Low. Temp. Phys. 1991. Vol. 85. P. 377.
- [152] Pollock, E. L. Path-integral computation of superfluid densities / E. L. Pollock,
 D. M. Ceperley // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 36. P. 8343.
- [153] Popov, V. N. / V. N. Popov // Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1980. Vol. 31. P. 560.
- [154] Quantum monte carlo studies of superfluid fermi gases / S.-Y. Chang, V. R. Pandharipande, J. Carlson, K. E. Schmidt. – 2004.
- [155] Quantum monte carlo study of quasi-one-dimensional bose gases / G. E. Astrakharchik,
 D. Blume, S. Giorgini, B. E. Granger // J. Phys. B. 2004. Vol. 37, no. 7. P. S205.
- [156] Quantum simulations of the superfluid-insulator transition for two-dimensional, disordered, hard-core-bosons / S. Zhang, N.Kawashima, J. Carlson, J. E. Gubernatis // Phys. Rev. Lett. - 1995. - Vol. 74. - P. 1500.
- [157] Quasipure bose-einstein condensate immersed in a fermi sea / F. Schreck, L. Khaykovich,
 K. L. Corwin et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 080403.
- [158] Quasi-one-dimensional bose gases with large scattering length / G. E. Astrakharchik,
 D. Blume, S. Giorgini, B. E. Granger // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 030402.
- [159] Realization of bose-einstein condensates in lower dimensions / A. Görlitz, J. M. Vogels,
 A. E. Leanhardt et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 130402.
- [160] Reatto, L. Phonons and the properties of a bose system / L. Reatto, G. V. Chester // Phys. Rev. - 1967. - Vol. 155. - P. 88.
- [161] Regal, C. A. Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs / C. A. Regal,
 M. Greiner, D. S. Jin // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 040403.
- [162] Resendes, D. P. / D. P. Resendes, J. T. Mendonca, P. K. Shukla // Phys. Lett. A. 1998. – Vol. 239. – P. 181.
- [163] Resonance superfluidity in a quantum degenerate fermi gas / M. Holland, S. J. J. M. F. Kokkelmans, M. L. Chiofalo, R. Walser // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 120406.
- [164] Schultz, T. D. / T. D. Schultz // J. Math. Phys. 1963. Vol. 4. P. 666.
- [165] Schwartz, M. Off-diagonal long-range behavior of interacting bose systems /
 M. Schwartz // Phys. Rev. B. 1977. Vol. 15. P. 1399.
- [166] Shevchenko, S. I. Phase diagram of systems with pairing of spatially separated electrons and holes / S. I. Shevchenko // Phys. Rev. Lett. - 1994. - Vol. 72. - P. 3242.
- [167] Shweigert, I. V. / I. V. Shweigert, V. A. Shweigert, F. M. Peeters // Phys. Rev. B. 1996. – Vol. 54. – P. 10827.
- [168] Shweigert, V. / V. Shweigert, F. M. Peeters // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51. P. 7700.
- [169] Size dependence of lateral quantum-confinement effects of the optical response in in_{0.53}ga_{0.47}as/inp quantum wires / M. Notomi, S. Nojima, M. Okamoto et al. // Phys. Rev. B. - 1995. - Vol. 52. - P. 11073.
- [170] Stringari, S. / S. Stringari // Europhys. Lett. 2004. Vol. 65. P. 749.
- [171] Structure and stability of the plasma crystal / A. Melzer, V. A. Shveigert, I. V. Sweigert et al. // Phys. Rev. E. - 1996. - Vol. 54. - P. R46.
- [172] Superfluidity versus bose-einstein condensation in a bose gas with disorder / G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, S. Giorgini // Phys. Rev. A. - 2002. - Vol. 66. -P. 023603.
- [173] Superfluid fermi gases with large scattering length / J. Carlson, S.-Y. Chang, V. R. Pandharipande, K. E. Schmidt // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 050401.
- [174] Sutherland, B. Quantum many body problem in one dimension: Ground state / B. Sutherland // J. Math. Phys. – 1971. – Vol. 12, no. 2. – P. 246.

- [175] Time-resolved differential reflectivity as a probe of on-resonance exciton dynamics in quantum wells / F. Fernández-Alonso, M. Righini, A. Franco, S. Selci // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 67. – P. 165328.
- [176] Tonks, L. The complete equation of state of one, two and three-dimensional gases of hard elastic spheres / L. Tonks // Phys. Rev. - 1936. - Vol. 50. - P. 955.
- [177] Towards boseLleinstein condensation of excitons in potential traps / L. V. Butov,
 C. W. Lai, A. L. Ivanov et al. // Nature. 2002. Vol. 417. P. 47.
- [178] Transition from a strongly interacting 1d superfluid to a mott insulator / T. Stöferle,
 H. Moritz, C. Schori et al. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 130403.
- [179] Vaidya, H. G. One-particle reduced density matrix of impenetrable bosons in one dimension at zero temperature / H. G. Vaidya, C. A. Tracy // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42. – P. 3.
- [180] Voit, J. / J. Voit // Rep. Prog. Phys. 1995. Vol. 58. P. 977.
- [181] Wales, D. J. / D. J. Wales, R. S. Berry // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 73. P. 2875.
- [182] Wales, D. J. / D. J. Wales, R. S. Berry // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 63. P. 1156.
- [183] Workshop on ultracold fermi gases, levico (march 2004). March 2004.
- [184] Yang, C. N. / C. N. Yang, C. P. Yang // J. Math. Phys. 1969. Vol. 10. P. 1115.
- [185] Yu Kagan, E. L. S. Evolution of a bose gas in anisotropic time-dependent traps /
 E. L. S. Yu Kagan, G. V. Shlyapnikov // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 55. P. R18.
- [187] M. Jimbo, T. Miwa, Y. Mori, M. Sato // Physica (Amsterdam). 1980. Vol. 1D. P. 80.
- [188] В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др. // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. С. 467.
- [189] В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. С. Ваулина, др. // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 2004.

- [190] K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, M. E. Gehm et al. // Science. 2002. Vol. 298. -P. 2179.
- [191] M. Baranov, L. Dobrek, K. Goral et al. // Physica Scripta. 2002. Vol. 102. P. 74.
- [192] S. D. Palo, M. L. Chiofalo, M. J. Holland, S. J. J. M. F. Kokkelmans. 2004.