

Поляризационные свойства атомарного газа в когерентном состоянии

Ю.М. Полуэктов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина

E-mail: yuripoluektov@kipt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 7 февраля 2011 г., после переработки 3 июня 2011 г.

Изучена возможность поляризации газа водородоподобных атомов, находящихся при нулевой температуре в бозе-эйнштейновском конденсате, в равновесных и нестационарных условиях. Уравнение Гросса–Питаевского обобщено для газа атомов с учетом их электронной структуры. Показано, что волновая функция системы взаимодействующих бозе-частиц, находящихся в одночастичном конденсате при нулевой температуре, имеет вид глауберовского когерентного состояния. С помощью обобщенного уравнения Гросса–Питаевского исследованы поляризационные свойства атомарного газа в состоянии бозе-эйнштейновской конденсации. Показано, что стационарные состояния электронов в атомах газа, находящегося в когерентном состоянии, могут отличаться от стационарных состояний электронов в свободных атомах, вследствие чего сверхтекучая система способна спонтанно поляризоваться, даже если свободные атомы в стационарных состояниях не обладают собственным дипольным моментом. Более детально изучены поляризационные свойства системы двухуровневых водородоподобных атомов в бозе-эйнштейновском конденсате. Распространение как звуковых, так и высокочастотных малых возмущений в когерентной системе поляризованных атомов сопровождается колебаниями поляризации. Обсуждается применимость развиваемых представлений к анализу электрических явлений в сверхтекучем гелии.

Вивчено можливість поляризації газу водньоподібних атомів, що знаходяться при нульовій температурі в бозе-ейнштейнівському конденсаті, у рівноважних і нестационарних умовах. Рівняння Гросса–Пітаєвського узагальнено для газу атомів з урахуванням їхньої електронної структури. Показано, що хвильова функція системи взаємодіючих бозе-частинок, що знаходяться в одночастинковому конденсаті при нульовій температурі, має вигляд глауберівського когерентного стану. За допомогою узагальненого рівняння Гросса–Пітаєвського досліджено поляризаційні властивості атомарного газу в стані бозе-ейнштейнівської конденсації. Показано, що стаціонарні стани електронів в атомах газу, що знаходяться в когерентному стані, можуть відрізнятися від стаціонарних станів електронів у вільних атомах, унаслідок чого надплинна система здатна спонтанно поляризуватися, навіть якщо вільні атоми в стаціонарних станах не мають власного дипольного моменту. Більш детально вивчено поляризаційні властивості системи дворівневих водньоподібних атомів у бозе-ейнштейнівському конденсаті. Поширення як звукових, так і високочастотних малих збурень у когерентній системі поляризованих атомів супроводжується коливаннями поляризації. Обговорюється застосовність уявлень, що розвиваються, до аналізу електричних явищ у надплинному гелії.

PACS: 67.85.Jk Другие явления бозе-эйнштейновской конденсации;

67.10.-j Квантовые жидкости: основные свойства;

67.85.-d Ультрахолодные газы, газы в ловушках;

67.25.D– Сверхтекучая фаза ^4He .

Ключевые слова: когерентное состояние, уравнение Гросса–Питаевского, дипольный момент, поляризация, двухуровневая система.

1. Введение

В большинстве работ, посвященных микроскопической теории сверхтекучести бозе-газа или бозе-жидкости, выполненных до настоящего времени, атомы рассматриваются как бесструктурные частицы, характеризующиеся массой и, иногда, проекцией спина. Взаимодействие атомов описывается либо одной постоянной, либо модельным потенциалом. Необходимости в учете структуры атомов как сложных объектов, состоящих из ядра и электронной подсистемы, не возникало по той причине, что отсутствовали эксперименты, которые требовали бы такого более детального рассмотрения.

Однако в последние годы был выполнен целый ряд интересных экспериментов, указывающих на особый характер взаимодействия при низких температурах электромагнитного поля с многочастичными системами электрически нейтральных атомов, подчиняющихся статистике Бозе–Эйнштейна. Так, при изучении распространения света в атомарных газах, находящихся в конденсатном состоянии [1–3], в эксперименте [4] удалось добиться уменьшения групповой скорости света на шесть-семь порядков. В серии экспериментов [5–7] неожиданно обнаружена повышенная электрическая активность сверхтекучего ^4He , которая оказалась существенно выше, чем электрическая активность жидкого ^4He в нормальной фазе. Эти эксперименты дают основание предполагать, что при переходе многоатомной системы в состояние с бозе-эйнштейновским конденсатом, при наличии которого система приобретает сверхтекучие свойства, качественно изменяются и электронные состояния в атомах.

Динамика бозе-эйнштейновского конденсата взаимодействующих частиц хорошо описывается уравнением Гросса–Питаевского (ГП) [8–10]. Однако для последовательного описания взаимодействия системы нейтральных бозе-атомов, находящихся в состоянии конденсации, с электромагнитным полем стандартного уравнения ГП недостаточно. Чтобы такое описание стало возможным, следует в рамках аналогичного подхода учесть электронные степени свободы атомов. В данной работе теория ГП обобщена для водородоподобных атомов посредством учета их электронной структуры. Найдена многочастичная волновая функция состояния системы бозе-частиц, описывающихся уравнением ГП, имеющая вид глауберовского когерентного состояния. Показано, что для сверхтекучих систем с нарушенной фазовой симметрией поляризуемость в состоянии термодинамического равновесия определяется не только диагональными матричными элементами оператора дипольного момента, но и его недиагональными элементами. Вследствие этого в когерентном состоянии многоатомная сверхтекучая система способна спонтанно поляризоваться, даже если

свободные атомы в стационарных состояниях не обладают собственным дипольным моментом.

Более детально изучена система атомов, в которых учитываются только два электронных уровня с различной пространственной четностью. В этом случае при достаточно интенсивном межатомном взаимодействии и большой плотности, когда расстояние между уровнями не превышает некоторого критического значения, электроны атомов конденсата находятся в стационарном состоянии, являющемся суперпозицией состояний на нижнем и верхнем уровнях. При уровнях с различной четностью каждый атом конденсата в таком состоянии может приобретать одинаковый дипольный момент, а система в целом поляризоваться. Изучены малые колебания в когерентной системе двухуровневых атомов. Показано, что в спонтанно поляризованной системе имеется характерная собственная частота пространственно-однородных колебаний числа частиц на верхнем и нижнем уровнях и разности фаз этих состояний. Эти колебания, как и длинноволновые звуковые колебания в такой системе, сопровождаются колебаниями поляризации. Если условия существования спонтанной поляризации не выполнены, то атомы находятся в состояниях с электроном на одном уровне. В этом случае возможно динамическое возникновение поляризации вследствие когерентного перехода электронов с одного уровня на другой в процессе распространения волны в конденсате. Обсуждается применимость развиваемого подхода к явлениям в атомарных газах и сверхтекучем гелии.

2. Когерентное состояние бозе-эйнштейновского конденсата взаимодействующих частиц

Начнем с рассмотрения системы бесструктурных бозе-частиц массой m , которая описывается в представлении вторичного квантования гамильтонианом

$$H = -\int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где μ — химический потенциал, $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — потенциал взаимодействия частиц, а полевые операторы рождения $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ и уничтожения $\Psi(\mathbf{r})$ частиц подчинены известным условиям коммутации бозе-частиц

$$\begin{aligned} [\Psi(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ [\Psi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}')] &= [\Psi^\dagger(\mathbf{r}), \Psi^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Вектор вакуумного состояния $|0\rangle$ определен так, что $\Psi(\mathbf{r})|0\rangle = 0$, откуда следует $H|0\rangle = 0$. В гейзенберговском представлении полевые операторы удовлетворяют уравнению $i\hbar \partial \Psi(\mathbf{r}, t) / \partial t = [\Psi(\mathbf{r}, t), H]$, которое с

учетом вида гамильтониана (1) и коммутационных соотношений (2) принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu \right) \Psi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi^+(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Система невзаимодействующих бозе-частиц при нулевой температуре, как известно, находится в состоянии, где все частицы в пространственно-однородном случае в отсутствие потока имеют нулевой импульс (бозе-эйнштейновская конденсация). Согласно идее Боголюбова [11], в конденсатном состоянии взаимодействующих частиц операторы рождения и уничтожения частиц могут быть заменены c -числами, т.е. можно пренебречь их коммутационными свойствами. При слабом межчастичном взаимодействии и малой плотности естественно предположить, что полевой оператор может быть представлен в виде суммы классической (конденсатной) части $\chi(\mathbf{r}, t)$ и операторной добавки $\theta(\mathbf{r}, t)$, так что

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \chi(\mathbf{r}, t) + \theta(\mathbf{r}, t). \quad (4)$$

Пренебрегая в нулевом приближении операторной частью $\theta(\mathbf{r}, t)$, можно заменить полевой оператор $\Psi(\mathbf{r}, t)$ на функцию $\chi(\mathbf{r}, t)$, которая, как и оператор, удовлетворяет уравнению (3). Оператор полного числа частиц

$$N = \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

при замене полевых операторов на функции становится c -числом и определяет полное число частиц в одночастичном конденсате $N = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}, t)$, где $n(\mathbf{r}, t) = |\chi(\mathbf{r}, t)|^2$ — плотность числа частиц в конденсате. Если рассматривать только состояния, в которых макроскопическая волновая функция $\chi(\mathbf{r}, t)$ существенно меняется на расстояниях, превосходящих радиус действия межчастичного потенциала r_0 , то в уравнении (3) функции можно вынести из-под знака интеграла и перейти к дифференциальному уравнению. Выразив химический потенциал $\mu = gn_0$ через равновесную плотность числа частиц n_0 , приходим к уравнению, полученному впервые Гроссом [8] и Питаевским [9]:

$$i\hbar \frac{\partial \chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \chi(\mathbf{r}, t) + g(|\chi(\mathbf{r}, t)|^2 - n_0) \chi(\mathbf{r}, t), \quad (6)$$

где $g = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и предполагается, что потенциал зависит только от расстояния между частицами: $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$.

Выше кратко воспроизведены качественные соображения, которые обычно используются при получении уравнения ГП (6). Обсудим переход от операторного уравнения (3) к уравнению для конденсатной волновой функции (6) несколько подробнее с иной

точки зрения. Чтобы сопоставить оператору функцию, нужно вычислить среднее от оператора по некоторому состоянию. В зависимости от состояния, по которому происходит усреднение, получим различные результаты. Естественно поставить вопрос: «По какому состоянию следует усреднить полевой оператор $\Psi(\mathbf{r}, t)$, чтобы это среднее было отлично от нуля и подчинялось уравнению Гросса–Питаевского?» Очевидно, что таким состоянием не может быть состояние идеального газа, все N частиц которого находятся в конденсате и имеют нулевой импульс. Усреднение полевого оператора, который может быть представлен в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

по состоянию идеального газа, описываемому волновой функцией

$$|N\rangle = \frac{(a_0^+)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (7)$$

($a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения частицы с волновым вектором \mathbf{k}), дает нуль. Чтобы построить требуемое состояние, введем в рассмотрение унитарный оператор

$$V = e^{\beta^+ - \beta}, \quad (8)$$

где

$$\beta = \int d\mathbf{r} \chi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \beta^+ = \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r}, t) \Psi^+(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

а $\chi(\mathbf{r}, t)$ — некоторая комплексная функция, нормированная условием $\int d\mathbf{r} |\chi(\mathbf{r}, t)|^2 = N$, где, согласно (5), N — среднее число частиц. Операторы (9) подчиняются условию коммутации $[\beta, \beta^+] = N$ (остальные коммутаторы равны нулю). Для оператора (8) справедливы соотношения

$$V^+ \Psi(\mathbf{r}, t) V = \Psi(\mathbf{r}, t) + \chi(\mathbf{r}, t), \quad (10)$$

$$V^+ \Psi^+(\mathbf{r}, t) V = \Psi^+(\mathbf{r}, t) + \chi^*(\mathbf{r}, t),$$

где $V^+ = V^{-1}$. Таким образом, оператор (8) осуществляет сдвиг исходного полевого оператора на функцию $\chi(\mathbf{r}, t)$. Усреднив соотношения (10) по вакуумному состоянию, такому что $\Psi(\mathbf{r}, t) |0\rangle = 0$, находим

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \langle \chi | \Psi(\mathbf{r}, t) | \chi \rangle, \quad \chi^*(\mathbf{r}, t) = \langle \chi | \Psi^+(\mathbf{r}, t) | \chi \rangle, \quad (11)$$

где волновая функция, по которой в (11) усредняются полевые операторы, имеет вид

$$|\chi\rangle = V |0\rangle = e^{\beta^+ - \beta} |0\rangle. \quad (12)$$

Действуя на функцию (12) оператором $\Psi(\mathbf{r}, t)$, убеждаемся, что

$$\Psi(\mathbf{r}, t) |\chi\rangle = \chi(\mathbf{r}, t) |\chi\rangle, \quad (13)$$

так что $|\chi\rangle$ является собственной функцией оператора уничтожения. Такие состояния, как известно, называ-

ются когерентными (или глауберовскими) состояниями и широко используются как в квантовой оптике [12], так и в других областях физики [13]. На то, что в пренебрежении влиянием квазичастиц бозе-эйнштейновский конденсат находится в когерентном состоянии, обращено внимание в [14,15]. В отличие от бозе-эйнштейновского конденсата идеального бозе-газа [16], характеризующегося волновой функцией (7), конденсат газа взаимодействующих частиц с волновой функцией (12) естественно называть когерентным конденсатом.

Таким образом, функции $\chi(\mathbf{r},t)$, $\chi^*(\mathbf{r},t)$, входящие в определение операторов (8), (9), совпадают со средними от полевых операторов $\Psi(\mathbf{r},t)$, $\Psi^+(\mathbf{r},t)$ по когерентному состоянию (12). Дифференцируя соотношение (10) по времени, используя уравнение движения для полевого оператора и усредняя по вакуумному состоянию, приходим к соотношению

$$i\hbar \frac{\partial \chi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \langle 0 | \left[\Psi(\mathbf{r},t), V^+ HV \right] | 0 \rangle + i \langle 0 | \left[\Psi(\mathbf{r},t), V^+ \frac{\partial V}{\partial t} \right] | 0 \rangle. \quad (14)$$

До сих пор на функцию $\chi(\mathbf{r},t)$ не накладывалось никаких ограничений, и соотношения (10), (14) справедливы для произвольной функции $\chi(\mathbf{r},t)$. Потребуем, чтобы эта функция удовлетворяла также уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \chi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \langle 0 | \left[\Psi(\mathbf{r},t), V^+ HV \right] | 0 \rangle. \quad (15)$$

Это требование находится в согласии с общим соотношением (14), поскольку если $\chi(\mathbf{r},t)$ удовлетворяет уравнению (15), то второе слагаемое в правой части уравнения (14) обращается в нуль. Нетрудно убедиться, что с учетом вида гамильтониана (1) и необходимых приближений из (15) следует уравнение ГП. Таким образом, если многочастичная бозе-система описывается уравнением ГП, то волновая функция этой системы имеет вид глауберовского когерентного состояния (12). Знание волновой функции многочастичной системы позволяет найти среднее значение любого оператора, характеризующего данную систему.

Проанализируем подробнее структуру волновой функции когерентного состояния (12), представив ее в виде

$$|\chi\rangle = e^{-\frac{N}{2}} e^{\sqrt{N} \tilde{\beta}^+} |0\rangle, \quad (16)$$

где операторы $\tilde{\beta}^+ = \beta^+ / \sqrt{N}$ и $\tilde{\beta} = \beta / \sqrt{N}$ подчиняются стандартному соотношению коммутации $[\tilde{\beta}, \tilde{\beta}^+] = 1$, и их следует рассматривать как операторы рождения и уничтожения частицы с волновой функцией $\tilde{\chi}(\mathbf{r},t) = \chi(\mathbf{r},t) / \sqrt{N}$. Таким образом, в бозе-эйнштейновском конденсате взаимодействующих частиц все частицы находятся в абсолютно одинаковых состояни-

ях с волновой функцией $\tilde{\chi}(\mathbf{r},t)$. Аномальные средние (11) от неэрмитовых операторов $\Psi(\mathbf{r},t)$, $\Psi^+(\mathbf{r},t)$ с точностью до нормировочного множителя совпадают с волновой функцией частицы в конденсате. Важно отметить, что волновая функция (12), (16) описывает состояние, в котором число частиц системы не фиксировано, т.е. эта функция не является собственной функцией оператора числа частиц. Это общая черта систем, обладающих сверхтекучими или сверхпроводящими свойствами. Например, волновая функция БКШ, как известно [17], также описывает состояние с неопределенным числом частиц. Именно благодаря указанному свойству волновой функции среднее от полевого оператора оказывается отличным от нуля.

Описанный подход к исследованию бозе-эйнштейновской конденсации взаимодействующих частиц недостаточен для изучения поляризационных свойств многоатомного газа, поскольку он не учитывает электронной структуры атомов. Для исследования поляризационных свойств бозе-газа, находящегося в когерентном состоянии, следует обобщить теорию ГП на газ частиц, обладающих внутренней структурой.

3. Уравнение для когерентного состояния системы бозе-частиц с внутренними степенями свободы

Рассмотрим газ водородоподобных атомов в электрическом поле \mathbf{E} . Выбор водородоподобных атомов обусловлен, с одной стороны, стремлением к более простой формулировке задачи, а также тем, что энергетический спектр атома водорода и водородоподобных атомов хорошо известен. С другой стороны, изучение газа именно таких атомов представляет реальный интерес, поскольку в экспериментах по исследованию конденсата атомарных газов используются преимущественно именно водородоподобные атомы щелочных металлов, таких как ${}^7\text{Li}$, ${}^{23}\text{Na}$, ${}^{39}\text{K}$, ${}^{85}\text{Rb}$, ${}^{133}\text{Cs}$ и других. Как могут измениться результаты для атомов с двумя электронами (${}^4\text{He}$), кратко обсудим в заключении.

Гамильтониан одного водородоподобного атома с учетом его взаимодействия в дипольном приближении с электрическим полем имеет вид

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(r) - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}, \quad (17)$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор центра масс атома, \mathbf{r} — радиус-вектор электрона с началом в центре масс атома, $M = M_0 + m_0$ — полная масса атома, $m = m_0 M_0 / (M_0 + m_0)$ — приведенная масса, M_0 — масса атомного «остова», m_0 — масса электрона. Потенциал в (17) для водорода имеет кулоновский вид $U(r) = -e^2/r$, e — заряд электрона, а для водородоподобных атомов он близок к кулоновскому и заметно отличается от него только на малых расстояниях. Оператор дипольного момента в (17) $\mathbf{d} = -|e|\mathbf{r}$.

Будем предполагать, что известны решения одночастичного уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(r) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\nu} \phi_i(\mathbf{r}), \quad (18)$$

где i — набор квантовых чисел, характеризующий состояние электрона, а ν — набор квантовых чисел, определяющий его энергию. При движении в центрально-симметричном поле волновая функция электрона имеет вид [18]

$$\phi_i(\mathbf{r}) \equiv \phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega), \quad (19)$$

где $Y_{lm}(\Omega) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции. Энергия электрона зависит только от главного квантового числа n и азимутального квантового числа l , так что $\varepsilon_{\nu} \equiv \varepsilon_{nl}$ и $\nu \equiv (n, l)$, а $i \equiv (\nu, m)$. В случае атома водорода имеется специфическое «случайное» вырождение, в силу которого энергия электрона зависит только от n и не зависит от l . В водородоподобных атомах на малых расстояниях потенциал отличается от кулоновского, и поэтому «случайное» вырождение снимается. В дальнейшем будем считать, что потенциал в (18) слегка отличается от кулоновского и «случайное» вырождение отсутствует. Волновые функции (19) ортогональны $\int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}$. Для потенциалов, обращающихся в нуль на бесконечности, кроме дискретного спектра имеется и непрерывный спектр. Уход электрона в область непрерывного спектра означает ионизацию атома. Рассматривая систему атомов при нулевой температуре, будем пренебрегать возможностью ионизации атома и не учитывать состояния непрерывного спектра.

Поскольку спин замкнутой электронной оболочки в основном состоянии равен нулю, то водородоподобные атомы имеют целый спин и подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна, если спин ядра полуцелый. Так, атом водорода, спин ядра которого равен 1/2, может иметь полный спин 0 или 1, а атом ${}^7\text{Li}$, спин ядра которого равен 3/2, может иметь полный спин 1 или 2. Будем считать, что все атомы газа находятся в одинаковом спиновом состоянии, и пренебрегать возможными переходами между различными спиновыми состояниями.

Для микроскопического описания сверхтекучих систем, как было видно выше, эффективен аппарат вторичного квантования, впервые примененный для этой цели Боголюбовым [11]. Однако этот аппарат развит для описания многочастичных систем частиц, рассматриваемых как элементарные, без учета их внутренней структуры. В силу этого в своей обычной формулировке для описания атомарных газов он может быть использован, только если пренебречь их структурой. Этого недостаточно, чтобы изучать поляризационные свойства газа и особенности его взаимодействия с

электромагнитным полем. Возникает необходимость обобщения аппарата вторичного квантования на частицы с учетом их внутренних степеней свободы. В работе [19] развит аппарат вторичного квантования, учитывающий наряду со связанными состояниями возможность распада атомов. Поскольку при низких температурах вероятность ионизации атома крайне мала и, как отмечалось, этими процессами будем полностью пренебрегать, учесть внутреннюю структуру атомов можно в более простой формулировке, предложенной в [20,21].

Введем подчиняющиеся бозе-статистике операторы рождения $a_{\mathbf{k}i}^+$ и уничтожения $a_{\mathbf{k}i}$ атома с волновым вектором \mathbf{k} , электрон которого находится в состоянии i , и построим полевые операторы

$$\Psi_i(\mathbf{R}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad \Psi_i^+(\mathbf{R}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}i}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad (20)$$

для которых, очевидно, справедливо коммутационное соотношение

$$[\Psi_i(\mathbf{R}), \Psi_i^+(\mathbf{R}')] = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta_{ii'}$$

(остальные коммутаторы равны нулю). Эти операторы описывают атомы, находящиеся в i -состоянии в точке \mathbf{R} . Определим полевой оператор

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{R}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}, i} a_{\mathbf{k}i} \phi_i(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \quad (21)$$

(аналогично для $\Psi^+(\mathbf{R}, \mathbf{r})$), который, как можно убедиться, учитывая условие полноты

$$\sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

подчиняется условию коммутации

$$[\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \Psi^+(\mathbf{R}', \mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

(остальные коммутаторы равны нулю). Оператор многочастичной системы водородоподобных атомов с учетом их внутренней структуры, но без учета их взаимодействия, принимая во внимание (17), в представлении вторичного квантования может быть записан в виде [20,21]

$$H_0 = \int d\mathbf{R} d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \times \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(r) - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (22)$$

Здесь учтено взаимодействие атома с электрическим полем в дипольном приближении. Подставляя в (22) полевой оператор (21) и учитывая уравнение (18), приходим к следующей форме гамильтониана невзаимодействующих атомов:

$$H_0 = \sum_i \int d\mathbf{R} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + \varepsilon_v \right] \Psi_i(\mathbf{R}) - \mathbf{E} \cdot \sum_{i,i'} \int d\mathbf{R} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \mathbf{d}_{ii'} \Psi_{i'}(\mathbf{R}), \quad (23)$$

где

$$\mathbf{d}_{ii'} = -|e| \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \phi_{i'}(\mathbf{r}) \quad (24)$$

— матричный элемент оператора дипольного момента атома.

Оператор взаимодействия атомов в представлении вторичного квантования в данном случае имеет вид

$$H_I = \frac{1}{2} \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}' d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^+(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{R}', \mathbf{r}') \times U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{R}', \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (25)$$

где $U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}')$ — потенциал взаимодействия атома, центр масс которого находится в точке \mathbf{R} , а его электрон имеет координату \mathbf{r} , с другим атомом с соответствующими координатами \mathbf{R}' , \mathbf{r}' . Отметим, что выполнено условие симметрии $U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') = U(\mathbf{R}', \mathbf{r}'; \mathbf{R}, \mathbf{r})$.

Учитывая (21), этот оператор может быть выражен через полевые операторы (20):

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\{i\}} \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}' \Psi_{i_1}^+(\mathbf{R}) \Psi_{i_2}^+(\mathbf{R}') \times U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \Psi_{i_3}(\mathbf{R}') \Psi_{i_4}(\mathbf{R}), \quad (26)$$

где матричный элемент взаимодействия

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{i_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{i_2}^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') \phi_{i_3}(\mathbf{r}') \phi_{i_4}(\mathbf{r}). \quad (27)$$

Эти матричные элементы удовлетворяют следующим очевидным условиям симметрии:

$$U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = U_{i_2 i_1 i_4 i_3}(\mathbf{R}', \mathbf{R}) = U_{i_4 i_3 i_2 i_1}^*(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = U_{i_3 i_4 i_1 i_2}^*(\mathbf{R}', \mathbf{R}). \quad (28)$$

Таким образом, полный гамильтониан многочастичной системы бозе-частиц в представлении вторичного квантования может быть представлен в виде

$$H = \sum_i \int d\mathbf{R} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + \varepsilon_v - \mu \right] \Psi_i(\mathbf{R}) - \mathbf{E} \cdot \sum_{i,i'} \int d\mathbf{R} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \mathbf{d}_{ii'} \Psi_{i'}(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} \sum_{\{i_n\}} \int d\mathbf{R} d\mathbf{R}' \Psi_{i_1}^+(\mathbf{R}) \Psi_{i_2}^+(\mathbf{R}') U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \Psi_{i_3}(\mathbf{R}') \Psi_{i_4}(\mathbf{R}), \quad (29)$$

где введено слагаемое с химическим потенциалом μ , который находится из условия равенства среднего числа частиц заданному значению. Принимая во внимание вид гамильтониана (29), находим уравнения движения для полевого оператора в гейзенберговском представлении

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \varepsilon_v + \mu \right) \Psi_i(\mathbf{R}, t) - \mathbf{E} \cdot \sum_{i'} \mathbf{d}_{ii'} \Psi_{i'}(\mathbf{R}, t) + \sum_{\{i_n\}} \int d\mathbf{R}' U_{i_1 i_2 i_3}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \Psi_{i_1}^+(\mathbf{R}', t) \Psi_{i_2}(\mathbf{R}', t) \Psi_{i_3}(\mathbf{R}, t). \quad (30)$$

Эти уравнения являются обобщением операторного уравнения (3) на случай частиц с внутренней структурой. Оператор полного числа атомов $N = \sum_i N_i$ равен сумме операторов числа атомов, находящихся в состоянии i :

$$N_i = \int d\mathbf{R} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \Psi_i(\mathbf{R}). \quad (31)$$

Оператор вектора диэлектрической поляризации (дипольного момента единицы объема) определяется выражением

$$\mathbf{P}(\mathbf{R}) = \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \Psi_i^+(\mathbf{R}) \Psi_{i'}(\mathbf{R}). \quad (32)$$

Следует обратить внимание на важное для дальнейшего обстоятельство, что в определение оператора (32) входят не только диагональные элементы оператора дипольного момента атома ($i = i'$), но и недиагональные элементы ($i \neq i'$).

Так же, как было сделано выше для случая бесструктурных частиц, введем когерентные состояния, определив унитарный оператор

$$V = \prod_i V_i, \quad V_i = e^{\beta_i^+ - \beta_i}, \quad (33)$$

где

$$\beta_i = \int d\mathbf{R} \chi_i^*(\mathbf{R}, t) \Psi_i(\mathbf{R}, t), \quad (34)$$

$$\beta_i^+ = \int d\mathbf{R} \chi_i(\mathbf{R}, t) \Psi_i^+(\mathbf{R}, t),$$

а индекс i соответствует атому, электрон которого находится в состоянии с волновой функцией $\phi_i(\mathbf{r})$. В данном случае $\chi_i(\mathbf{R}, t)$ — комплексная функция, нормированная условием $\int d\mathbf{R} |\chi_i(\mathbf{R}, t)|^2 = N_i$, где N_i — среднее число атомов в i -м состоянии. Операторы (34) подчиняются условию коммутации $[\beta_i, \beta_i^+] = N_i$ (остальные коммутаторы равны нулю). Оператор V_i осуществляет сдвиг полевых операторов на функцию

$$\begin{aligned} V_i^+ \Psi_i(\mathbf{R}, t) V_i &= \Psi_i(\mathbf{R}, t) + \chi_i(\mathbf{R}, t), \\ V_i^+ \Psi_i^+(\mathbf{R}, t) V_i &= \Psi_i^+(\mathbf{R}, t) + \chi_i^*(\mathbf{R}, t). \end{aligned} \quad (35)$$

Усредняя последние соотношения по вакуумному состоянию, такому что $\Psi_i |0\rangle = 0$, находим

$$\begin{aligned} \chi_i(\mathbf{R}, t) &= \langle \chi_i | \Psi_i(\mathbf{R}, t) | \chi_i \rangle, \\ \chi_i^*(\mathbf{R}, t) &= \langle \chi_i | \Psi_i^+(\mathbf{R}, t) | \chi_i \rangle, \end{aligned} \quad (36)$$

где волновая функция, по которой усредняются полевые операторы, имеет вид

$$|\chi_i\rangle = V_i |0\rangle = e^{\beta_i^+ - \beta_i} |0\rangle. \quad (37)$$

Действуя на функцию (37) оператором уничтожения, находим

$$\Psi_i(\mathbf{R}, t) |\chi_i\rangle = \chi_i(\mathbf{R}, t) |\chi_i\rangle. \quad (38)$$

Как видим, волновая функция (37) является собственной функцией оператора уничтожения, а следовательно, когерентным состоянием. Полное когерентное состояние всей системы, очевидно, имеет вид

$$|\chi\rangle = V |0\rangle = \prod_i V_i |0\rangle = \prod_i e^{\beta_i^+ - \beta_i} |0\rangle \quad (39)$$

и является собственной функцией оператора $\Psi_i(\mathbf{R}, t)$ при произвольном i .

Таким образом, функции $\chi_i(\mathbf{R}, t)$, $\chi_i^*(\mathbf{R}, t)$, входящие в определение оператора V_i , совпадают со средними от полевых операторов $\Psi_i(\mathbf{R}, t)$, $\Psi_i^+(\mathbf{R}, t)$ по когерентному состоянию (39) и, так же как для случая бесструктурных частиц (15), удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \chi_i(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = \langle 0 | [\Psi_i(\mathbf{R}, t), V^+ H V] | 0 \rangle. \quad (40)$$

Из (40) следует система уравнений для атомов бозе-эйнштейновского конденсата, находящихся в различных возбужденных состояниях:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \chi_i(\mathbf{R}, t)}{\partial t} &= - \left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \varepsilon_v + \mu \right) \chi_i(\mathbf{R}, t) - \mathbf{E} \cdot \sum_{i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{i'}(\mathbf{R}, t) + \\ &+ \sum_{\{i_n\}} \int d\mathbf{R}' U_{i_1 i_2 i_3}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \chi_{i_1}^*(\mathbf{R}', t) \chi_{i_2}(\mathbf{R}', t) \chi_{i_3}(\mathbf{R}, t). \end{aligned} \quad (41)$$

Если, как и в случае бесструктурных частиц, рассматривать состояния, в которых макроскопическая волновая функция $\chi_i(\mathbf{R}, t)$ существенно меняется только на расстояниях, превосходящих радиус действия межчастичного потенциала r_0 , то (41) может быть записана как система нелинейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \chi_i(\mathbf{R}, t)}{\partial t} &= - \left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \varepsilon_v + \mu \right) \chi_i(\mathbf{R}, t) - \mathbf{E} \cdot \sum_{i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{i'}(\mathbf{R}, t) + \\ &+ \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3} \chi_{i_1}^*(\mathbf{R}, t) \chi_{i_2}(\mathbf{R}, t) \chi_{i_3}(\mathbf{R}, t), \end{aligned} \quad (42)$$

где постоянные взаимодействия

$$g_{i_1 i_2 i_3 i_4} = \int d\mathbf{R}' U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (43)$$

в силу соотношений (28) удовлетворяют условиям симметрии

$$g_{i_1 i_2 i_3 i_4} = g_{i_2 i_1 i_4 i_3} = g_{i_4 i_3 i_2 i_1}^* = g_{i_3 i_4 i_1 i_2}^*. \quad (44)$$

Мы предполагали, что потенциал взаимодействия в (41) зависит от разности координат $U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = U_{i_1 i_2 i_3 i_4}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$.

Уравнения (42) описывают бездиссипативные обратимые процессы в многочастичной системе. В силу этого они должны быть инвариантны относительно операции обращения времени. В квантовой механике это означает, что если функции $\chi_i(\mathbf{R}, t)$ являются решениями (42), то и функции $\chi_i^T(\mathbf{R}, t) = \chi_i^*(\mathbf{R}, -t)$ также должны быть решениями этих уравнений [22]. Данное условие будет выполнено, если постоянные взаимодействия в (42) вещественны, так что $g_{i_1 i_2 i_3 i_4} = g_{i_1 i_2 i_3 i_4}^*$.

Система уравнений (42) обобщает уравнение ГП (6) на случай бозе-эйнштейновского конденсата водородоподобных атомов с учетом их электронных степеней свободы. Формально эта система содержит столько же уравнений, сколько имеется в атоме электронных состояний. Однако из физических соображений очевидно, что в конденсате большинство атомов будут находиться в основном состоянии, а вероятность находиться атому в более высоком состоянии будет тем меньше, чем больше энергия уровня. Поэтому в системе уравнений (42) в действительности достаточно учесть лишь небольшое число низлежащих уровней.

Отметим также, что если атомы обладают дипольным моментом, то между ними действуют дальнедействующие диполь-дипольные силы (см. Приложение 1, формула (П.3)). При этом могут проявляться эффекты, обусловленные конечностью радиуса межчастичного взаимодействия, для описания которых следует использовать уравнение в нелокальной форме (41) [23,24]. В настоящей работе такими эффектами будем пренебрегать и пользоваться уравнениями в локальной форме (42).

В стационарном пространственно-однородном равновесном случае уравнения (42) принимают вид

$$(\mu - \varepsilon_v) \chi_{0i} - \mathbf{E} \cdot \sum_{i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{0i'} + \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3} \chi_{0i_1}^* \chi_{0i_2} \chi_{0i_3} = 0. \quad (45)$$

Умножая уравнения (45) на χ_{0i}^* и суммируя по всем уровням, приходим к выражению, определяющему химический потенциал:

$$\mu n_0 = \sum_i \varepsilon_v |\chi_{0i}|^2 - \mathbf{E} \cdot \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{0i}^* \chi_{0i'} + \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3 i_4} \chi_{0i_1}^* \chi_{0i_2}^* \chi_{0i_3} \chi_{0i_4}, \quad (46)$$

где полная равновесная плотность числа атомов

$$n_0 = \sum_i n_{0i}, \quad (47)$$

а $n_{0i} = |\chi_{0i}|^2$ — равновесная средняя плотность числа атомов, находящихся в состоянии i . Уравнения (45), (46) совместно с условием (47) позволяют выразить равновесные значения конденсатных волновых функций χ_{0i} и химический потенциал через постоянные взаимодействия и полную плотность числа частиц. Из гамильтониана (29) с учетом выражения (39) для волновой функции следует формула для равновесного термодинамического потенциала

$$\frac{\Omega}{V} = \sum_i (\varepsilon_v - \mu) |\chi_{0i}|^2 - \mathbf{E} \cdot \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{0i}^* \chi_{0i'} + \frac{1}{2} \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3 i_4} \chi_{0i_1}^* \chi_{0i_2}^* \chi_{0i_3} \chi_{0i_4}. \quad (48)$$

Принимая во внимание соотношение $\Omega = -pV$, из (48) можно получить давление p газа атомов в конденсате с учетом влияния их внутренней структуры. Для термодинамической устойчивости системы должно выполняться неравенство $p > 0$. Полная энергия $E = \Omega + \mu N$ определяется соотношением

$$\frac{E}{V} = \sum_i \varepsilon_v |\chi_{0i}|^2 - \mathbf{E} \cdot \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_{0i}^* \chi_{0i'} + \frac{1}{2} \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3 i_4} \chi_{0i_1}^* \chi_{0i_2}^* \chi_{0i_3} \chi_{0i_4}. \quad (49)$$

Вектор диэлектрической поляризации газа, находящегося в конденсатном состоянии, находится путем усреднения оператора (32) по когерентному состоянию (39):

$$\mathbf{P}(\mathbf{R}) = \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \langle \chi | \Psi_i^+(\mathbf{R}) \Psi_{i'}(\mathbf{R}) | \chi \rangle = \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{ii'} \chi_i^*(\mathbf{R}) \chi_{i'}(\mathbf{R}). \quad (50)$$

Вторые слагаемые в правой части формул (48), (49) описывают вклад взаимодействия поляризации системы с электрическим полем.

Из формулы (50) следует, что вектор поляризации газа атомов, находящихся в когерентном состоянии, определяется не только диагональными элементами оператора дипольного момента атома, но и его недиагональными элементами. Это означает, что даже если

атомы не обладают собственным дипольным моментом в основном и возбужденных состояниях, то в когерентном состоянии, даже в условиях равновесия, газ может быть спонтанно поляризован и обладать макроскопическим дипольным моментом за счет недиагональных элементов оператора дипольного момента атома. Подчеркнем, что такая возможность возникает именно потому, что волновая функция когерентного состояния не является собственной функцией оператора числа частиц. В этом случае многочастичная система находится в состоянии со спонтанно нарушенной фазовой симметрией и вследствие этого обладает сверхтекучими свойствами. Если бы, как это имеет место в нормальном состоянии многочастичной системы, ее волновая функция была бы собственной функцией оператора числа частиц, то макроскопический дипольный момент определялся бы только диагональными элементами оператора дипольного момента и был равен нулю в газе атомов, не имеющих дипольного момента в стационарных состояниях. Заметим, что недиагональные элементы оператора дипольного момента отличны от нуля только в том случае, если состояния i и i' имеют различную пространственную четность, т.е. их волновые функции по-разному преобразуются при замене $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Поскольку четность волновой функции электрона определяется величиной его орбитального момента $P = (-1)^l$ [18], при четных l состояние электрона четное, при нечетных l — нечетное.

Из уравнений (42) следуют уравнения непрерывности для парциальных плотностей

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j}_i = \mathbf{E} \cdot \mathbf{u}_i + J_i, \quad (51)$$

где $n_i = |\chi_i(\mathbf{R}, t)|^2$ — плотность числа атомов в состоянии i , а

$$\mathbf{j}_i = \frac{i\hbar}{2M} (\chi_i \nabla \chi_i^* - \chi_i^* \nabla \chi_i) \quad (52)$$

— плотность потока атомов, находящихся в этом состоянии. Полное число атомов в данном состоянии, очевидно, не сохраняется в силу наличия источников в правой части (51):

$$\mathbf{u}_i = \frac{i}{\hbar} \sum_{i'} (\mathbf{d}_{ii'} \chi_i^* \chi_{i'} - \mathbf{d}_{i'i}^* \chi_{i'}^* \chi_i), \quad (53)$$

$$J_i = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\{i_n\}} g_{i_1 i_2 i_3} (\chi_i^* \chi_{i_1}^* \chi_{i_2} \chi_{i_3} - \chi_{i_2}^* \chi_{i_3}^* \chi_i \chi_{i_1}). \quad (54)$$

Отсутствие сохранения числа атомов в i -состоянии связано как с влиянием электрического поля, так и межатомным взаимодействием. Поскольку $\sum_i \mathbf{u}_i = 0$ и $\sum_i J_i = 0$, естественно, выполняется закон сохранения полного числа частиц, так что

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (55)$$

где $\mathbf{j} = \sum_i \mathbf{j}_i = 0$ — полная плотность потока числа атомов. Из (50) и уравнений (42) следует уравнение, определяющее динамику вектора поляризации

$$\frac{\partial P_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \pi_{\alpha\beta}}{\partial R_\beta} = f_\alpha, \quad (56)$$

где

$$\pi_{\alpha\beta} = \frac{i\hbar}{2M} \sum_{i,i'} (\mathbf{d}_{i'i'})_\alpha (\chi_{i'} \nabla_\beta \chi_i^* - \chi_i^* \nabla_\beta \chi_{i'}) \quad (57)$$

— плотность потока вектора поляризации. Вектор поляризации не является сохраняющейся величиной, в силу чего уравнение (56) содержит в правой части источник поляризации

$$\begin{aligned} \mathbf{f} = & -\frac{i}{\hbar} \sum_{i,i'} \mathbf{d}_{i'i'} (\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) \chi_i^* \chi_{i'} - \\ & -\frac{i}{\hbar} \sum_{i,i',i''} \mathbf{d}_{i'i''} [(\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}_{i'i}) \chi_{i''}^* \chi_{i'} - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}_{i'i''}) \chi_i^* \chi_{i'}] - \\ & -\frac{i}{\hbar} \sum_{\{i\}} \mathbf{d}_{i'i'} g_{i_1 i_2 i_3} (\chi_i^* \chi_{i_1}^* \chi_{i_2} \chi_{i_3} - \chi_{i_2}^* \chi_{i_3}^* \chi_i \chi_{i_1}), \quad (58) \end{aligned}$$

который отличен от нуля из-за вклада недиагональных элементов оператора дипольного момента атома и обращается в нуль в равновесном состоянии.

Как отмечалось, в полученных выше уравнениях достаточно учесть небольшое число уровней с наименьшими энергиями. Более детально рассмотрим простейший случай, когда учитываются только два электронных уровня — основной и первый возбужденный.

4. Когерентное состояние системы двухуровневых атомов

Рассмотрим газ водородоподобных атомов, единственный электрон которых может занимать только два энергетических уровня. Низшему уровню с энергией ε_0 отвечает состояние с орбитальным моментом $l = 0$ и главным квантовым числом $n = 1$, а верхнему уровню с энергией $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$ — состояние с $l = 1$ и $n = 2$. Индекс главного квантового числа будем в дальнейшем опускать. Верхний уровень трехкратно вырожден по магнитному квантовому числу $m = 0, \pm 1$. Матричные элементы взаимодействия в данном случае имеют вид

$$\begin{aligned} g_{00,00,00,00} & \equiv g_0, \\ g_{1m_1,1m_2,1m_3,1m_4} & \equiv g_1 \delta_{m_1 m_4} \delta_{m_2 m_3}, \\ g_{1m_1,00,00,00} & = g_{00,1m_2,1m_3,1m_4} = 0, \\ g_{1m_1,1m_2,00,00} & = f_1 (-1)^{m_1} \delta_{m_1, -m_2}, \\ g_{1m_1,00,1m_3,00} & = f_1 \delta_{m_1 m_3}, \\ g_{1m_1,00,00,1m_4} & = f_2 \delta_{m_1 m_4}. \end{aligned} \quad (59)$$

Здесь постоянные g_0, g_1, f_2 положительны, а f_1 может иметь произвольный знак. Остальные матричные элементы находятся из (59) и условий симметрии (44). Вывод формул (59) приведен в Приложении 1.

С учетом (59) уравнения движения (42) для параметров порядка $\chi_0 = \chi_{00}(\mathbf{R}, t)$ и $\chi_{1m} = \chi_{1m}(\mathbf{R}, t)$ в двухуровневой системе принимают вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \chi_0}{\partial t} = & -\left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \varepsilon_0 + \mu\right) \chi_0 - \\ & - \mathbf{E} \cdot \sum_{m'} \mathbf{d}_{00,1m'} \chi_{1m'} + g_0 |\chi_0|^2 \chi_0 + \\ & + f_1 \chi_0^* \sum_{m'} (-1)^{m'} \chi_{1m'} \chi_{1-m'} + (f_1 + f_2) \chi_0 \sum_{m'} |\chi_{1m'}|^2, \quad (60) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \chi_{1m}}{\partial t} = & -\left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \varepsilon_1 + \mu\right) \chi_{1m} - \\ & - \mathbf{E} \cdot \mathbf{d}_{1m,00} \chi_0 + g_1 \chi_{1m} \sum_{m'} |\chi_{1m'}|^2 + \\ & + f_1 (-1)^m \chi_{1-m}^* \chi_0^2 + (f_1 + f_2) |\chi_0|^2 \chi_{1m}. \quad (61) \end{aligned}$$

Выражения для матричных элементов оператора дипольного момента приведены в Приложении 2. Поскольку рассматривается случай, когда волновые функции электрона с энергиями ε_0 и ε_1 имеют определенную четность, диагональные матричные элементы оператора дипольного момента в данном случае равны нулю, а отличны от нуля только недиагональные элементы.

Рассмотрим равновесное состояние системы в отсутствие внешнего электрического поля. Выразим комплексные параметры порядка через их модули и фазы: $\chi_0 = \rho_0 e^{i\varphi_0}$, $\chi_{1m} = \rho_{1m} e^{i\varphi_{1m}}$. В отсутствие внешнего поля система изотропна и, следовательно, вклад в полную плотность частиц с различными m должен быть одинаков. Поэтому будем полагать $\rho_{11} = \rho_{1-1} = \rho_{10}$. Из анализа уравнений (60), (61) следует, что для фаз в равновесном состоянии должно выполняться условие $\exp i(2\varphi_{10} - \varphi_{11} - \varphi_{1-1}) = -1$. С учетом этих замечаний получаем следующие уравнения, определяющие равновесное состояние:

$$\rho_0 \left[\varepsilon_0 - \mu + g_0 n_0 + (f_1 + f_2) n_1 + f_1 n_1 e^{-2i(\varphi_0 - \varphi_{10})} \right] = 0, \quad (62)$$

$$\rho_{11} \left[\varepsilon_1 - \mu + g_1 n_1 + (f_1 + f_2) n_0 + f_1 n_0 e^{2i(\varphi_0 - \varphi_{10})} \right] = 0, \quad (63)$$

где $n_0 = \rho_0^2$ — средняя плотность атомов с электроном на нижнем уровне, $n_1 = \sum_{m=0,\pm 1} \rho_{1m}^2$ — средняя плотность атомов с электроном на верхнем уровне. Выражение для полной энергии системы имеет вид

$$\frac{E}{V} = \varepsilon_0 n_0 + \varepsilon_1 n_1 + \frac{1}{2} \left\{ g_0 n_0^2 + g_1 n_1^2 + 2n_0 n_1 \left[f_1 + f_2 + f_1 \cos 2(\varphi_0 - \varphi_{10}) \right] \right\}. \quad (64)$$

Рассмотрим решение, когда отличны от нуля плотности числа частиц как на нижнем, так и на верхнем уровнях. В этом случае уравнения (62), (63) могут быть записаны в виде

$$\varepsilon_0 - \mu + g_0 n_0 + f n_1 = 0, \quad \varepsilon_1 - \mu + f n_0 + g_1 n_1 = 0, \quad (65)$$

$$\sin 2(\varphi_0 - \varphi_{10}) = 0, \quad (66)$$

где $f = f_2 + 2f_1 \cos^2(\varphi_0 - \varphi_{10})$. Как следует из (66), для равновесной разности фаз должны выполняться условия $\sin(\varphi_0 - \varphi_{10}) = 0$ или $\cos(\varphi_0 - \varphi_{10}) = 0$. Реализовываться будет тот случай, которому отвечает меньшая энергия. В случае $f_1 < 0$ энергия будет иметь минимальное значение при $\cos^2(\varphi_0 - \varphi_{10}) = 1$. Следовательно, для равновесного значения разности фаз можно принять либо $\varphi_0 = \varphi_{10}$, либо $\varphi_0 = \varphi_{10} + \pi$, при этом $f = f_2 + 2f_1$. В случае $f_1 > 0$ минимальное значение энергии достигается при $\cos(\varphi_0 - \varphi_{10}) = 0$, так что $\varphi_0 = \varphi_{10} + \pi/2$ либо $\varphi_0 = \varphi_{10} + 3\pi/2$. При этом $f = f_2$. Из формулы для энергии (64) очевиден смысл постоянных взаимодействия: g_0 описывает взаимодействие атомов, электрон которых находится на нижнем уровне, g_1 — на верхнем, а f — взаимодействие атомов, электроны которых находятся на разных уровнях. Из уравнений (65) и условия $n_0 + n_1 = n$, где n — равновесная полная плотность числа частиц, находится химический потенциал

$$\mu = \bar{\varepsilon} + g^{-1} \left[(g_0 g_1 - f^2) n + \frac{1}{2} (g_0 - g_1) \Delta \varepsilon \right], \quad (67)$$

где $\Delta \varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$, $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)/2$, $g = g_0 + g_1 - 2f$. Плотности числа частиц на нижнем и верхнем уровнях определяются соотношениями

$$n_0 = g^{-1} [(g_0 - f)n + \Delta \varepsilon], \quad n_1 = g^{-1} [(g_0 - f)n - \Delta \varepsilon]. \quad (68)$$

Полная энергия (64) как функция постоянных взаимодействия и полной плотности в данном случае имеет вид

$$\frac{E}{V} = \bar{\varepsilon} n + \frac{1}{2g} \left[(g_0 g_1 - f^2) n^2 + (g_0 - g_1) n \Delta \varepsilon - (\Delta \varepsilon)^2 \right], \quad (69)$$

а давление определяется формулой

$$p = \mu n - \frac{E}{V} = \frac{(\Delta \varepsilon)^2 + (g_0 g_1 - f^2) n^2}{2g}. \quad (70)$$

Очевидно, что выполнены термодинамические соотношения $\mu = \partial E / \partial N$ и $p = -\partial E / \partial V$. Одним из условий устойчивости системы является положительность квадрата скорости звука

$$C^2 = \frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial n} = \frac{(g_0 g_1 - f^2) n}{g M}. \quad (71)$$

Последнее условие выполнено, если справедливо неравенство $g_0 g_1 - f^2 > 0$, поскольку при этом также всегда $g > 0$. Приведенные неравенства обеспечивают и положительность давления. Кроме того, как следует из формул (68), данное решение с заселенностями нижнего и верхнего уровней возможно при выполнении неравенства

$$g_0 - f > \frac{\Delta \varepsilon}{n}. \quad (72)$$

Как видим, возможность существования состояния с одновременно заселенными нижним и верхним уровнями определяется соотношением между величиной межчастичного взаимодействия, разностью энергий уровней и плотностью числа частиц газа. При слабом взаимодействии, малой плотности и достаточно большом расстоянии между уровнями такие состояния оказываются невозможными.

Согласно (50) и с учетом вида матричных элементов оператора дипольного момента (Приложение 2), при $f_1 < 0$ и $\varphi_0 = \varphi_{10}$ газ в равновесном состоянии обладает отличным от нуля вектором поляризации $\mathbf{P}_0 = P_0 \mathbf{n}$, где \mathbf{n} — единичный вектор,

$$P_0 = 2d \sqrt{n_0 n_1} = 2dng^{-1} \sqrt{\left(g_0 - f - \frac{\Delta \varepsilon}{n} \right) \left(g_1 - f + \frac{\Delta \varepsilon}{n} \right)} \quad (73)$$

— модуль вектора поляризации, а параметр d выражается через интеграл от радиальных частей волновых функций электрона на нижнем и верхнем уровнях:

$$d = \frac{|e|}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr r^3 R_0(r) R_1(r).$$

Если в качестве волновых функций взять функции атома водорода $R_0(r) = 2(a_B)^{-3/2} e^{-r/a_B}$ и $R_1(r) = (2\sqrt{6})^{-1} (a_B)^{-3/2} e^{-r/2a_B}$, то $d = 0,75|e|a_B$, где a_B — борковский радиус. Из (73) следует, что на один атом приходится средняя величина дипольного момента

$$\bar{d} = 2dg^{-1} \sqrt{\left(g_0 - f - \frac{\Delta \varepsilon}{n} \right) \left(g_1 - f + \frac{\Delta \varepsilon}{n} \right)}. \quad (74)$$

Отметим, что \bar{d} возрастает с увеличением плотности газа.

Таким образом, атомарный газ в когерентном состоянии может быть спонтанно поляризован в отсутствие внешнего электрического поля. В этом случае он является пирозлектриком с вектором индукции $\mathbf{D}_0 = 4\pi\mathbf{P}_0$. Однако здесь природа пирозлектричества иная, чем в кристаллах, где появление вектора \mathbf{D}_0 допускается в силу существования направления, которое остается неизменным при всех преобразованиях симметрии кристалла [25]. Так как в газе энергия в отсутствие поля не зависит от ориентации вектора \mathbf{P}_0 , то возникновение собственной поляризации обусловлено спонтанным нарушением симметрии относительно поворотов в координатном пространстве. Пространственное распределение вектора поляризации будет определяться внешними полями и граничными условиями. Так, внутри плоского конденсатора, в силу граничного условия для вектора электрической индукции, вектор поляризации, очевидно, должен быть направлен перпендикулярно его пластинам. Симметричная ситуация в спонтанно поляризованном газе аналогична той, что, например, имеет место в сверхтекучих фазах ^3He [26] или в жидких кристаллах [27]. Так, в А-фазе сверхтекучего ^3He параметр порядка характеризуется орбитальным и магнитным векторами, появление которых обусловлено спонтанным нарушением симметрии относительно поворотов в орбитальном и спиновом пространствах.

При $f_1 > 0$ и разности фаз $\varphi_0 - \varphi_{10} = \pi/2$ равновесная поляризация газа в состоянии с одновременно заселенными нижним и верхним уровнями равна нулю. Зависимость дипольного момента системы от разности фаз легко продемонстрировать на примере одного двухуровневого атома. Пусть состояние электрона в атоме характеризуется волновой функцией $|\phi\rangle = c_1 e^{i\varphi_1} |1\rangle + c_2 e^{i\varphi_2} |2\rangle$, где волновые функции уровней $|1\rangle, |2\rangle$ имеют разную четность и, так же как коэффициенты c_1, c_2 , вещественны. Тогда матричный элемент, определяющий z -компоненту дипольного момента $\langle\phi|z|\phi\rangle = 2c_1 c_2 \langle 1|z|2\rangle \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$, при $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi/2$ обращается в нуль, даже при отличном от нуля недиагональном элементе $\langle 1|z|2\rangle$.

Помимо решения (68), описывающего состояние с заселенными одновременно нижним и верхним уровнями, система уравнений (62), (63) всегда имеет решения, описывающие состояния, в которых у всех атомов занят только один уровень. В состоянии $n_0 = n, n_1 = 0$, в котором все электроны в атомах находятся на нижнем уровне, $\mu = \varepsilon_0 + g_0 n$, а полная энергия имеет вид

$$\frac{E_0}{V} = \varepsilon_0 n + \frac{g_0 n^2}{2}. \quad (75)$$

В инверсном состоянии $n_0 = 0, n_1 = n$, в котором все электроны в атомах находятся на верхнем уровне, $\mu = \varepsilon_1 + g_1 n$, а полная энергия

$$\frac{E_1}{V} = \varepsilon_1 n + \frac{g_1 n^2}{2}. \quad (76)$$

Сравнивая энергии (69), (75) и (76), нетрудно убедиться, что если параметры системы таковы, что существует решение (68) с одновременно заселенными уровнями, то его энергия всегда меньше энергии состояний с одним заселенным уровнем. Если же условие (72) не выполнено и состояние с одновременно заселенными уровнями невозможно, то для определения устойчивого решения следует сравнить энергии состояний с одним заселенным уровнем. Сравнивая энергии (75) и (76), находим, что если выполнено условие

$$g_1 > g_0 - \frac{2\Delta\varepsilon}{n}, \quad (77)$$

то стабильным оказывается состояние системы атомов с электронами на нижнем уровне. В противоположном (77) случае

$$g_1 < g_0 - \frac{2\Delta\varepsilon}{n} \quad (78)$$

оказывается энергетически выгодным инверсное состояние, в котором электроны занимают верхний уровень. Возможность существования стабильной системы атомов в конденсате с частично или полностью заполненными верхними уровнями, очевидно, связана с тем, что атом входит в состав коллектива взаимодействующих частиц, и стабильность электронной структуры атома определяется не минимумом энергии отдельного атома, а минимумом энергии системы в целом, с учетом энергии межатомного взаимодействия.

Рассмотрим на примере системы двухуровневых атомов более подробно природу спонтанной поляризации в когерентном состоянии. Будем для простоты считать, что на верхнем уровне электроны имеют единую проекцию орбитального момента m . Волновую функцию конденсата двухуровневых атомов, как и в случае бесструктурных частиц (16), можно записать в виде

$$|\chi_0, \chi_{1m}\rangle = e^{-N/2} e^{\sqrt{N}\alpha^+} |0\rangle, \quad (79)$$

где N — среднее число частиц системы, а

$$\alpha^+ = c_0 \tilde{\beta}_0^+ + c_1 \tilde{\beta}_{1m}^+, \quad (80)$$

где

$$\tilde{\beta}_i^+ = \int d\mathbf{R} \tilde{\chi}_i(\mathbf{R}) \Psi_i^+(\mathbf{R}) \quad (81)$$

при $i = (l=0) = 0$ является оператором рождения атома в основном состоянии с волновой функцией $\tilde{\chi}_0(\mathbf{R}) = \chi_0(\mathbf{R})/\sqrt{N_0}$, а при $i = (l=1, m) = 1m$ — оператором рождения атома в возбужденном состоянии с волновой функцией $\tilde{\chi}_{1m}(\mathbf{R}) = \chi_{1m}(\mathbf{R})/\sqrt{N_1}$. Поскольку в (80) $c_n = \sqrt{N_n/N}$ ($n=0, 1$), то операторы α^+, α подчиняются коммутационному соотношению $[\alpha, \alpha^+] = 1$ (остальные коммутаторы равны нулю). Их следует ин-

терпретировать как операторы рождения и уничтожения атома, находящегося в состоянии, которое представляет собой суперпозицию основного и возбужденного состояний. Такой атом с вероятностью $w_0 = |c_0|^2 = N_0/N$ находится в основном состоянии, а с вероятностью $w_1 = |c_1|^2 = N_1/N$ — в возбужденном. Хотя средняя энергия одного атома в таком состоянии больше энергии атома, находящегося в основном состоянии, но, как было показано выше, полная энергия многочастичной системы с учетом энергии межатомного взаимодействия, при выполнении определенных условий, может оказаться меньше, чем энергия многочастичной системы взаимодействующих атомов в основном состоянии. Если это так, то, естественно, атомы с электроном в состоянии суперпозиции волновых функций нижнего и верхнего уровней не могут излучать, поскольку в данном случае всякое изменение электронной структуры приведет к увеличению полной энергии системы. Если дипольный момент атома в основном и возбужденном состояниях отсутствует, то в состоянии, порождаемом оператором (80), при противоположных четностях основного и возбужденного состояний, распределение электронного заряда уже не является симметричным и атом может приобрести отличный от нуля средний дипольный момент.

Следует подчеркнуть, что наличие в когерентной многочастичной системе некоторого числа атомов с электроном на нижнем уровне и некоторого — на верхнем уровне вовсе не означает присутствия в бозе-эйнштейновском конденсате атомов в различных состояниях. Состояния атомов в конденсате совершенно одинаковы, но их волновая функция такова, что электрон в каждом из атомов с некоторой вероятностью может находиться либо на нижнем, либо на верхнем уровне.

В заключение данного раздела приведем некоторые оценки для реальных систем. Постоянные взаимодействия атомов в возбужденных и различных электронных состояниях неизвестны, и при оценках будем полагать, что они имеют тот же порядок, что и постоянные взаимодействия атомов в основном состоянии. Взаимодействие частиц в газах обычно характеризуют длиной рассеяния a , которая связана с постоянной взаимодействия g соотношением $a = gM/4\pi\hbar^2$. Через длину рассеяния условие существования спонтанной поляризации (72) может быть записано в виде $\tilde{a} > L$, где $\tilde{a} = (g_0 - f)M/4\pi\hbar^2$, а $L = \Delta\epsilon M/4\pi\hbar^2 n$ — параметр размерности длины. В конденсатах газов щелочных металлов плотности числа частиц достигают значений $n \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а длины рассеяния имеют порядок нескольких десятков или сотен ангстрем [28]. Для оценки L примем $\Delta\epsilon = 10 \text{ эВ}$ и $M = 10^{-23} \text{ г}$. Тогда получим значение параметра $L \approx 10^4 \text{ см}$, что на много порядков превосходит длину рассеяния. Таким образом, в конденсатах атомарных газов при указанных

параметрах спонтанно поляризованное состояние оказывается невозможным. Для реализации спонтанно поляризованного состояния следует многократно увеличить плотность числа частиц системы и иметь как можно меньшее расщепление уровней.

Для сверхтекучего гелия, как будет обсуждено ниже, предлагаемый подход непосредственно неприменим. Тем не менее если для оценки взять плотность числа частиц близкую к плотности в жидком гелии $n \approx 2,2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, то $L \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}$. Хотя и в этом случае условие существования спонтанной поляризации (72) все еще не выполняется, но величина параметра L значительно ближе к длине рассеяния, усредненное значение которой по данным работы [29] составляет $a_{\text{He}} \approx 0,7 \cdot 10^{-6} \text{ см}$. Учитывая приближения, которые были сделаны при формулировке рассмотренной модели, в частности, описание межатомного взаимодействия с помощью одного параметра, а также существенное отличие структуры когерентной системы сверхтекучего гелия от рассмотренной выше, приведенная оценка не исключает возможность существования спонтанной поляризации в сверхтекучем гелии.

Представляет интерес обсудить возможность существования равновесного инверсного состояния. Через длины рассеяния условие (78) может быть переписано в виде $0 < a_1 < a_0 - 2L$, где $a_j = g_j M/4\pi\hbar^2$, $j = 0, 1$. Это условие довольно жесткое, поскольку может быть выполнено, если взаимодействие атомов с электроном на нижнем уровне сильное, так что длина рассеяния более чем в два раза превосходит параметр $L = \Delta\epsilon M/4\pi\hbar^2 n$, а взаимодействие атомов с электроном на верхнем уровне слабое. По-видимому, такие условия трудно выполнимы, хотя принципиальный запрет на существование когерентного конденсата с атомами в инверсном состоянии отсутствует.

5. Малые колебания в когерентной системе двухуровневых атомов

В динамических уравнениях, как и в равновесном случае, в силу изотропии системы в отсутствие внешнего поля, будем полагать, что число частиц на верхнем уровне с различными m одинаково $\rho_{11} = \rho_{1-1} = \rho_{10}$, а фазы связаны соотношением $\varphi_{11} = \varphi_{1-1} = \varphi_{10} + \pi/2$. Вводя определение сверхтекучих скоростей для атомов с электронами на нижнем $\mathbf{v}_0 = \hbar\nabla\varphi_0/M$ и верхнем $\mathbf{v}_1 = \hbar\nabla\varphi_{11}/M$ уровнях, а также разность фаз $\psi = \varphi_0 - \varphi_{10}$, получим систему уравнений следующего вида:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \text{div}(n_0 \mathbf{v}_0) = -2\hbar^{-1} f_1 n_0 n_1 \sin 2\psi, \quad (82)$$

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \text{div}(n_1 \mathbf{v}_1) = 2\hbar^{-1} f_1 n_0 n_1 \sin 2\psi, \quad (83)$$

$$\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = M(\tilde{\mu}_1 - \tilde{\mu}_0) + \Delta\epsilon + \frac{(\mathbf{v}_1^2 - \mathbf{v}_0^2)}{2}, \quad (84)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + (\mathbf{v}_0 \nabla) \mathbf{v}_0 = -\nabla \tilde{\mu}_0, \quad (85)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} + (\mathbf{v}_1 \nabla) \mathbf{v}_1 = -\nabla \tilde{\mu}_1, \quad (86)$$

где эффективные химические потенциалы определены выражениями

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_0 M &= g_0 n_0 + (f_2 + 2f_1 \cos^2 \psi) n_1 - \frac{\hbar^2}{4M\sqrt{n_0}} \nabla \left(\frac{\nabla n_0}{\sqrt{n_0}} \right), \\ \tilde{\mu}_1 M &= g_1 n_1 + (f_2 + 2f_1 \cos^2 \psi) n_0 - \frac{\hbar^2}{4M\sqrt{n_1}} \nabla \left(\frac{\nabla n_1}{\sqrt{n_1}} \right). \end{aligned} \quad (87)$$

Эти уравнения определяют три скалярные величины (плотности числа атомов с электронами на нижнем n_0 и верхнем n_1 уровнях, разность фаз ψ) и две векторные величины (сверхтекучие скорости \mathbf{v}_0 и \mathbf{v}_1). Предполагается, что внешнее электрическое поле отсутствует, поэтому в уравнения (82)–(86) не включено взаимодействие электрического поля с поляризацией (см. уравнения (60), (61)). Учет взаимодействия поляризации с собственным электрическим полем даст малые поправки к полученным ниже результатам, квадратичные по величине дипольного момента.

Рассмотрим малые колебания в системе двухуровневых атомов, описываемых системой уравнений (82)–(87). В дальнейшем равновесные величины будем записывать с индексом нуль в скобках вверху, а флуктуационные части величин — со штрихом. Вначале рассмотрим случай, когда отлична от нуля равновесная заселенность как нижнего, так и верхнего уровней. Представим плотности числа частиц и разность фаз в виде суммы равновесных частей и малых возмущений $n_0 = n_0^{(0)} + n_0'$, $n_1 = n_1^{(0)} + n_1'$, $\psi = \psi^{(0)} + \psi'$ и линеаризуем систему уравнений (82)–(87). Сверхтекучие скорости могут быть исключены из уравнений (82), (83) с помощью уравнений (85), (86). В результате получаем систему линеаризованных уравнений

$$\frac{\partial^2 n_0'}{\partial t^2} - n_0^{(0)} \Delta \tilde{\mu}_0' = -4\hbar^{-1} f_1 n_0^{(0)} n_1^{(0)} \cos 2\psi^{(0)} \frac{\partial \psi'}{\partial t}, \quad (88)$$

$$\frac{\partial^2 n_1'}{\partial t^2} - n_1^{(0)} \Delta \tilde{\mu}_1' = 4\hbar^{-1} f_1 n_0^{(0)} n_1^{(0)} \cos 2\psi^{(0)} \frac{\partial \psi'}{\partial t}, \quad (89)$$

$$\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = M (\tilde{\mu}_1' - \tilde{\mu}_0'), \quad (90)$$

где флуктуации эффективных химических потенциалов имеют вид

$$M \tilde{\mu}_0' = g_0 n_0' + f n_1' - \frac{\hbar^2}{4Mn_0^{(0)}} \Delta n_0',$$

$$M \tilde{\mu}_1' = g_1 n_1' + f n_0' - \frac{\hbar^2}{4Mn_1^{(0)}} \Delta n_1'.$$

Здесь $f = f_2 + 2f_1 \cos^2 \psi^{(0)}$ и учтено, что в равновесии, согласно (66), $\sin 2\psi^{(0)} = 0$. Формулы этого раздела справедливы при произвольном знаке постоянной f_1 , причем если $f_1 < 0$, то $f = f_2 + 2f_1$, а если $f_1 > 0$, то $f = f_2$.

Уравнения (88)–(90), в частности, имеют решения, описывающие пространственно-однородные колебания, в которых колеблется разность фаз ψ' и плотности числа атомов с электронами на нижнем и верхнем уровнях при постоянной полной плотности, так что $n_0' = -n_1'$, а $\psi' = \pm i g n_0' / \hbar \omega_0$. Квадрат частоты таких колебаний определяется формулой

$$\omega_0^2 = 4\hbar^{-2} |f_1| g n_0^{(0)} n_1^{(0)}, \quad (91)$$

где $g = g_0 + g_1 - 2f$. Пространственно-однородные колебания являются когерентными колебаниями вероятностей нахождения электрона в атоме на каждом из уровней и сопровождаются колебаниями поляризации. Флуктуация поляризации связана с флуктуацией числа частиц на нижнем уровне соотношениями:

$$\begin{aligned} \text{а) } P' &= -d \frac{(n_0^{(0)} - n_1^{(0)})}{\sqrt{n_0^{(0)} n_1^{(0)}}} n_0' \quad (\text{при } f_1 < 0), \\ \text{б) } P' &= -i \frac{2dg \sqrt{n_0^{(0)} n_1^{(0)}}}{\hbar \omega_0} n_0' \quad (\text{при } f_1 > 0). \end{aligned} \quad (92)$$

Такие колебания можно наблюдать в конденсаторе. Здесь имеются две крайние ситуации. Пусть вначале пластины конденсатора соединены проводником. Тогда они имеют одинаковый потенциал, и напряженность поля внутри конденсатора равна нулю. Поскольку вектор индукции \mathbf{D} , напряженность поля \mathbf{E} и вектор поляризации связаны соотношением $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, то в данном случае колебания поляризации сопровождаются колебанием вектора индукции $\mathbf{D}' = 4\pi\mathbf{P}'$. В силу граничных условий [25] колебания индукции связаны с колебанием плотности поверхностного заряда на пластинах конденсатора $D' = 4\pi\sigma'$, так что в проводнике, соединяющем пластины конденсатора, будет течь переменный ток с частотой колебаний поляризации. В другом случае, когда пластины конденсатора разомкнуты и плотность поверхностного заряда на пластинах фиксирована, оказывается постоянным вектор индукции и, следовательно, колебание поляризации сопровождается колебанием напряженности поля в конденсаторе $\mathbf{E}' = -4\pi\mathbf{P}'$ и разности потенциалов между обкладками конденсатора. В общем случае амплитуда колебаний напряженности существенно зависит от величины сопротивления в цепи.

Оценим частоту ω_0 в (91). Квадрат этой частоты удобно представить в виде $\omega_0^2 = \gamma \tilde{\omega}_0^2$, где отношение произведения парциальных плотностей к квадрату полной плотности $\gamma = n_0^{(0)} n_1^{(0)} / (n^{(0)})^2$ может меняться

от нуля до $0,25$, а квадрат частоты $\tilde{\omega}_0^2 = 4\hbar^{-2}|f_1|g(n^{(0)})^2$ определяется только постоянными взаимодействия и полной плотностью. Полагаем $g \approx |f_1|$, так что $\hbar\tilde{\omega}_0 \approx gn^{(0)}$. Для конденсата атомов щелочных металлов $n^{(0)} \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а при длине рассеяния $a = 10^{-6} \text{ см}$ и массе атома $M = 10^{-23} \text{ г}$ находим $\tilde{\omega}_0/2\pi \approx 10^5 \text{ Гц}$. Для параметров близких к параметрам жидкого гелия $n^{(0)} \approx 2,2 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $M = 6,65 \cdot 10^{-24} \text{ г}$ и $a = 10^{-6} \text{ см}$ частота $\tilde{\omega}_0/2\pi \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ Гц}$. Если предположить, что $\gamma \approx 10^{-1} - 10^{-2}$, то частота ω_0 (91) находится в области СВЧ диапазона. Обратим внимание, что резонансное поглощение электромагнитного излучения на СВЧ было недавно обнаружено в сверхтекучем гелии [30].

Для волн малой амплитуды из системы уравнений (88)–(90) следует дисперсионное уравнение

$$\omega^4 - (A_0 + A_1)\omega^2 + A_0A_1 - B_0B_1 = 0, \quad (93)$$

где

$$A_0 = 4\hbar^{-2}|f_1|n_0^{(0)}n_1^{(0)}(g_0 - f) + (g_0n_0^{(0)} + |f_1|n_1^{(0)})\frac{k^2}{M} + \frac{\hbar^2k^4}{4M^2},$$

$$B_0 = -4\hbar^{-2}|f_1|n_0^{(0)}n_1^{(0)}(g_0 - f) + (f - |f_1|)n_1^{(0)}\frac{k^2}{M},$$

k — волновое число. Выражения для A_1, B_1 получаются из приведенных формул для A_0, B_0 с помощью замен $g_0 \rightarrow g_1, n_0^{(0)} \leftrightarrow n_1^{(0)}$. Биквадратное уравнение (93) имеет два решения, одно из которых при малых k имеет вид

$$\omega_{\pm}^2 = \omega_0^2 + \left[(g_0 - f)^2 n_0^{(0)} + (g_1 - f)^2 n_1^{(0)} + g|f_1|n^{(0)} \right] \frac{k^2}{gM} \quad (94)$$

и описывает возмущения, в законе дисперсии которых имеется щель, определяемая формулой (91). В этом случае амплитуды колебаний сверхтекучих скоростей связаны с колебаниями плотности числа атомов в основном состоянии соотношениями

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{k} \frac{(g_0 - f)}{M\omega_0} n'_0, \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{k} \frac{(g_1 - f)}{M\omega_0} n'_0. \quad (95)$$

Второе решение при малых k описывает звуковые колебания

$$\omega_{-}^2 = \frac{(g_0g_1 - f^2)n^{(0)}k^2}{gM}. \quad (96)$$

Скорость этих звуковых колебаний

$$C = \sqrt{(g_0g_1 - f^2)n^{(0)}/gM}$$

была получена выше (формула (71)) другим способом как корень из производной давления по плотности. В звуковой волне амплитуды колебаний плотностей числа

частиц на нижнем и верхнем уровнях связаны с амплитудой колебания полной плотности соотношениями

$$n' = \frac{g}{g_1 - f} n'_0 = \frac{g}{g_0 - f} n'_1, \quad (97)$$

а амплитуда колебания разности фаз

$$\Psi' = \pm \frac{i\hbar k}{4MCg} \left[\frac{g_0 - f}{n_1^{(0)}} - \frac{g_1 - f}{n_0^{(0)}} \right] n' \quad (98)$$

стремится к нулю при уменьшении k . В этом пределе амплитуды колебаний сверхтекучих скоростей одинаковы:

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_1 = C \frac{n'}{n^{(0)}}. \quad (99)$$

Распространение длинноволновых звуковых волн также сопровождается колебаниями поляризации, которые связаны с колебаниями полной плотности соотношениями

$$P' = d \frac{[(g_0 - f)n_0^{(0)} + (g_1 - f)n_1^{(0)}]}{g\sqrt{n_0^{(0)}n_1^{(0)}}} n' \quad (\text{при } f_1 < 0), \quad (100)$$

$$P' = i \frac{d\hbar k}{2gMC} \frac{[(g_0 - f)n_0^{(0)} - (g_1 - f)n_1^{(0)}]}{\sqrt{n_0^{(0)}n_1^{(0)}}} n' \quad (\text{при } f_1 > 0). \quad (101)$$

Таким образом, распространение малых возмущений в конденсате атомов, состояние электронов которых представляет собой суперпозицию состояний нижнего и верхнего уровней, сопровождается колебанием поляризации как на высоких, так и на низких частотах. Однако если при наличии спонтанной поляризации (случай $f_1 < 0$) связь между колебаниями плотности и поляризации в звуковой волне не зависит от длины волны (формула (100)), то в случае отсутствия спонтанной поляризации ($f_1 > 0$, формула (101)) амплитуда колебаний поляризации уменьшается с увеличением длины волны. При больших k обе ветви, определяемые дисперсионным уравнением (93), переходят в закон дисперсии свободных атомов.

Пусть теперь условие (72) не выполнено и существование атомов с суперпозицией электронных состояний нижнего и верхнего уровней невозможно. Рассмотрим распространение малых колебаний системы двухуровневых атомов, электроны которых находятся в основном состоянии на нижнем уровне. При этом, согласно (72) и (77), выполнены условия $n^{(0)}(g_0 - f) < \Delta\epsilon$ и $g_1 > g_0 - 2\Delta\epsilon/n^{(0)}$. Выбирая равновесную макроскопическую волновую функцию χ_{00} вещественной и линейно уравнивая уравнения (61) относительно равновесного состояния $n_0^{(0)} = \chi_{00}^2 = n^{(0)}, n_1^{(0)} = 0$, получаем динамические уравнения для макроскопической волновой

функции $\chi'_{11} = \chi'_{1-1}$ атомов с электронами на верхнем уровне

$$i\hbar \frac{\partial \chi'_{11}}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \varepsilon_1 + \mu \right) \chi'_{11} - f_1 n^{(0)} \chi'_{11} + (f_1 + f_2) n^{(0)} \chi'_{11}. \quad (102)$$

Для χ'_{10} уравнение отличается от (102) знаком перед вторым членом в правой части. Оба уравнения приводят к одинаковому закону дисперсии. В рассматриваемом случае в равновесии электроны в атомах находятся на нижнем уровне, но в динамике, при распространении малых возмущений, они когерентно совершают переходы между уровнями. Иными словами, электроны в неравновесных условиях некоторое время «живут» на верхнем уровне и вероятность пребывания электрона на верхнем уровне периодически меняется во времени. При решении уравнения (102) удобно от комплексной функции χ_{11} перейти к двум вещественным функциям $\chi_{11}^{(+)} = \chi'_{11} + \chi'_{11}^*$ и $\chi_{11}^{(-)} = i(\chi'_{11} - \chi'_{11}^*)$. Полагая $\chi_{11}^{(+)} \propto \chi_{11}^{(-)} \propto \exp i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})$, из (102) находим закон дисперсии распространения малых колебаний

$$\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 \omega_0^2 + 2 \left[\Delta \varepsilon - (g_0 - f_1 - f_2) n^{(0)} \right] \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right)^2, \quad (103)$$

где частота пространственно-однородных колебаний определена соотношением

$$\hbar^2 \omega_0^2 = \left[\Delta \varepsilon - (g_0 - f_2) n^{(0)} \right] \left[\Delta \varepsilon - (g_0 - f) n^{(0)} \right], \quad (104)$$

причем $f = 2f_1 + f_2$. Правая часть в (104) положительна вследствие приведенных выше условий существования рассматриваемого равновесного состояния. При больших k закон дисперсии (103) переходит в закон дисперсии свободных частиц. Распространение таких колебаний сопровождается колебанием поляризации:

$$P' = -d \sqrt{\frac{n^{(0)}}{3}} \left(2\chi_{11}^{(-)} - \chi_{10}^{(+)} \right). \quad (105)$$

Если плотность числа частиц мала, как в атомарных конденсатах, и $g_0 - f \ll \Delta \varepsilon$, то, согласно (104), колебания происходят с частотой, определяемой расстоянием между уровнями. Характерное расстояние между основным и возбужденным уровнями $\Delta \varepsilon \approx 10$ эВ, что соответствует оптическим частотам. В этом случае при распространении света в такой среде должны наблюдаться резонансные эффекты, следствием которых, возможно, является сильное уменьшение групповой скорости света, которое наблюдалось в [4]. Разумеется, этот вопрос нуждается в детальном изучении в рамках предложенного подхода. С увеличением плотности частота ω_0 смещается в область более низких частот.

Помимо высокочастотных колебаний с законом дисперсии (103) в данном случае могут распространяться и низкочастотные звуковые возмущения с брэгговским законом дисперсии

$$\hbar^2 \omega^2 = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} + 2g_0 n^{(0)} \right). \quad (106)$$

В этом случае переходы электронов на верхний уровень отсутствуют и также отсутствуют осцилляции поляризации. Отметим, что осцилляции поляризации должны, как известно [32], сопровождаться дипольным излучением, интенсивность которого пропорциональна $\dot{\mathbf{P}}^2 \approx \omega^4$. На низких частотах интенсивность такого излучения мала. Более подробно в данной работе этот вопрос не рассматривается.

Подводя итоги данного раздела, отметим следующее. Если система двухуровневых атомов находится в равновесном состоянии с отличной от нуля заселенностью как верхнего, так и нижнего уровня, то высокочастотные (91) и низкочастотные (96) малые осцилляции сопровождаются колебаниями поляризации (92), (100), (101). При наличии спонтанной поляризации амплитуда колебаний поляризации в звуковой волне не зависит от длины волны (100), а в отсутствие спонтанной поляризации уменьшается с увеличением длины волны (101). Если же в атомах в равновесии заселен только один уровень, то низкочастотные колебания (106) не сопровождаются колебаниями поляризации, а осцилляции поляризации возникают только при высокочастотных колебаниях (103).

Обнаружение низкочастотных колебаний напряжения в сверхтекучем гелии при распространении второго звука [5], в предположении, что описанная выше картина качественно справедлива и для гелия, говорит в пользу того, что сверхтекучий гелий может быть спонтанно поляризован в равновесном состоянии. Если это окажется так, то сверхтекучий гелий является анизотропной жидкостью (но со слабой анизотропией), в которой нарушена не только фазовая симметрия, но и симметрия относительно поворотов в координатном пространстве, аналогичной сверхтекучему ^3He [26] или жидким кристаллам [27].

6. Заключение

В работе изучены возможности возникновения в равновесии и в динамике дипольного момента в газе водородоподобных атомов, находящихся в состоянии когерентного бозе-эйнштейновского конденсата. Существенно, что отдельные такие атомы, за исключением водорода, в основном и возбужденных состояниях не имеют дипольного момента. Атом водорода имеет собственный дипольный момент в возбужденных состояниях вследствие так называемого «случайного» вырождения. Наличие такого вырождения проявляется

в существовании в атомах водорода линейного эффекта Штарка [18]. Однако в данной работе «случайное» вырождение уровней не учитывается, поэтому ее результаты применимы к водородоподобным атомам, но не к водороду.

Для изучения поляризационных свойств газа уравнение Гросса–Питаевского обобщено с учетом электронных степеней свободы атомов. Показано, что волновая функция многочастичной системы, находящейся в конденсатном состоянии, имеет вид глауберовского когерентного состояния (39). Из обобщенных уравнений ГП (42) следует, что состояние электрона в атоме, который входит в состав когерентного конденсата, вследствие взаимодействия с другими атомами может отличаться от электронного состояния в свободном атоме. В многоатомной системе с нарушенной фазовой симметрией, когда волновая функция такой системы не является собственной функцией оператора числа частиц, равновесный вектор поляризации системы (50) определяется не только диагональными матричными элементами оператора дипольного момента атома, но и его недиагональными элементами, которые отличны от нуля для состояний с различной пространственной четностью. Вследствие этого при достаточно сильном межатомном взаимодействии и высокой плотности система может приобретать равновесную спонтанную поляризацию. Однако оценки для атомарных конденсатов показывают, что по причине низкой плотности их состояние далеко от состояния со спонтанной поляризацией.

На примере двухуровневой системы атомов показано, что при наличии отличного от нуля недиагонального элемента оператора дипольного момента и достаточно высокой плотности волновая функция электрона в атоме бозе-эйнштейновского конденсата является суперпозицией состояний нижнего и верхнего уровней. Это означает, что с некоторой вероятностью электрон в атоме может находиться как на нижнем, так и на верхнем уровне, а в конденсате в среднем имеется конечное число атомов с электронами на различных уровнях. Помимо этого всегда возможны равновесные состояния, когда в атомах заполнен один, либо нижний (основное состояние), либо верхний (инверсное состояние) уровень. Если параметры системы допускают все три возможных состояния, то реализуется состояние с конечной заселенностью обоих уровней, поскольку ему отвечает меньшая энергия. Для существования равновесного инверсного состояния атомов в когерентном конденсате должно быть выполнено жесткое условие (78), которое может быть реализовано только при интенсивном взаимодействии атомов в основном состоянии и слабом — в инверсном.

Распространение малых возмущений на равновесном фоне с конечной заселенностью обоих уровней сопровождается осцилляциями поляризации (92), (100), (101), которые возникают вследствие когерент-

ных переходов электронов между уровнями. При этом возможны два типа возмущений: звуковые с законом дисперсии (96) и высокочастотные (94) со щелью в спектре (91). Имеется также два типа малых возмущений, распространяющихся на равновесном фоне с заселенностью только одного уровня. В этом случае длинноволновые возмущения характеризуются болюбовским законом дисперсии (106), и их распространение не сопровождается колебаниями поляризации. Однако высокочастотные колебания (103) со щелью в спектре (104) и в этом случае сопровождаются осцилляциями поляризации (105).

Обсудим возможность применения полученных результатов к анализу электрических эффектов в сверхтекучем гелии. Непосредственно формулы данной работы не могут быть применены к сверхтекучему гелию по ряду причин. Во-первых, в отличие от рассмотренных водородоподобных атомов в атоме гелия следует учитывать два электрона и взаимодействие между ними. Во-вторых, что более существенно, атомы при нуле температур находятся преимущественно в одночастичном конденсате только в системах с малой плотностью, таких как конденсаты атомарных газов [1–3]. В системах с большой плотностью, сравнимой с плотностью числа частиц в жидком гелии, одночастичного конденсата сравнительно мало, по-видимому, не более 10% [33]. Остальные частицы при нуле температур находятся в состоянии так называемого парного конденсата, который проявляется в существовании аномальных средних вида $\langle \Psi \Psi \rangle$, не сводящихся к произведению $\langle \Psi \rangle \langle \Psi \rangle$. В силу этого когерентное состояние в плотных бозе-системах, в частности, в жидком гелии, имеет более сложную структуру, чем при наличии только одночастичного бозе-эйнштейновского конденсата [14]. Тем не менее естественно предполагать, что физическая природа электрической активности сверхтекучего гелия та же, что рассмотренная в данной статье природа электрической активности атомарных газов. Вероятно, она связана с существованием в равновесном состоянии сверхтекучего гелия отличной от нуля спонтанной поляризации, а следовательно, как показано в работе, распространение в его когерентной подсистеме длинноволновых возмущений должно сопровождаться колебаниями поляризации. Причины, по которым колебания напряжения наблюдаются только в волне второго звука и отсутствуют в волне первого звука [5], нуждаются в отдельном исследовании. Можно, однако, предположить, что это вызвано тем, что возмущение когерентной подсистемы сверхтекучего гелия оказывается более сильным в волне второго звука, где колеблется температура, чем в волне первого звука, где колеблется давление и плотность. Следует также обратить внимание на то, что, как в атомарных газах имеются характерные частоты (91) и (104), так и в сверхтекучем гелии есть характер-

ная частота, близкая к ротонной, на которой наблюдалось поглощение СВЧ излучения [30]. Интересно, что оценка частоты по формуле (91) при параметрах, близких к параметрам жидкого гелия, и правдоподобном предположении о степени заселенности уровней дает, что она лежит в области СВЧ диапазона.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Украинского научно-технологического центра (проект № 12-5211/10).

Приложение 1. Постоянные взаимодействия в уравнении Гросса–Питаевского

Постоянные взаимодействия, входящие в обобщенное уравнение ГП (42), определяются соотношением (43), которое с учетом (27) представимо в виде

$$g_{i_1, i_2, i_3, i_4} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{i_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{i_2}^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_{i_3}(\mathbf{r}') \phi_{i_4}(\mathbf{r}), \quad (\text{П1.1})$$

где $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{R}'' U(\mathbf{R}''; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, а потенциал $U(\mathbf{R}''; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv U(\mathbf{R} - \mathbf{R}''; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, входящий в гамильтониан (25), описывает взаимодействия атома, центр масс которого находится в точке \mathbf{R} , а его электрон имеет координату \mathbf{r} , с другим атомом с соответствующими координатами \mathbf{R}' , \mathbf{r}' . Для кулоновского взаимодействия

$$U(\mathbf{R}; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{R} + \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} - \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|}. \quad (\text{П1.2})$$

В общем случае этот потенциал можно записать, выделив дальнедействующую часть диполь-дипольного взаимодействия, в виде

$$U(\mathbf{R}; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \tilde{U}(\mathbf{R}; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + e^2 \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') R^2 - 3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{R})}{R^5}, \quad (\text{П1.3})$$

где $\tilde{U}(\mathbf{R}; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — короткодействующая часть потенциала взаимодействия, быстро убывающая с расстоянием. Вклад второго слагаемого в (П1.3) следует учитывать на расстояниях $R > a_B$, где a_B — «размер» атома, в качестве которого можно выбрать борковский радиус.

Разлагая $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по полиномам Лежандра

$$v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} b^{(l)}(r, r') P_l(\mathbf{nn}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{b^{(l)}(r, r')}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega'), \quad (\text{П1.4})$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$, и принимая во внимание вид волновых функций электронов $\phi_i(\mathbf{r}) \equiv \phi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega)$, приходим к следующему виду постоянных взаимодействий:

$$g_{v_1 m_1, v_2 m_2, v_3 m_3, v_4 m_4} = \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_4+1)}{(2l_1+1)(2l_3+1)}} \times \sum_{l=0}^{\infty} b_{v_1, v_2, v_3, v_4}^{(l)} C_{l_4 0 l 0}^{l_1 0} C_{l_2 0 l 0}^{l_3 0} \sum_{m=-l}^l C_{l_4 m_4 l m}^{l_1 m_1} C_{l_2 m_2 l m}^{l_3 m_3}, \quad (\text{П1.5})$$

где $C_{l_2 m_2 l m}^{l_1 m_1}$ — коэффициенты Клебша–Гордана [31], а

$$b_{v_1, v_2, v_3, v_4}^{(l)} = \iint dr dr' r^2 r'^2 b^{(l)}(r, r') R_{v_1}(r) R_{v_4}(r) R_{v_2}(r') R_{v_3}(r'). \quad (\text{П1.6})$$

Здесь индекс $v \equiv (n, l)$ обозначает главное n и азимутальное l квантовые числа. Выполнены очевидные условия симметрии

$$b_{v_1, v_2, v_3, v_4}^{(l)} = b_{v_4, v_2, v_3, v_1}^{(l)} = b_{v_1, v_3, v_2, v_4}^{(l)} = b_{v_4, v_3, v_2, v_1}^{(l)}. \quad (\text{П1.7})$$

При расчете следует принимать во внимание соотношения для коэффициентов Клебша–Гордана:

$$\sum_{m=-l}^l C_{l_4 m_4 l m}^{l_1 m_1} C_{l_2 m_2 l m}^{l_3 m_3} = \sum_{m=-l}^l C_{l_1 m_1 l m}^{l_4 m_4} C_{l_3 m_3 l m}^{l_2 m_2}, \quad (\text{П1.8})$$

$$C_{l_2 0 l 0}^{l_1 0} = \sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}} (-1)^l C_{l_1 0 l 0}^{l_2 0}, \quad (\text{П1.9})$$

$$C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{l m} = (-1)^{l_1+l_2-l} C_{l_2 m_2 l_1 m_1}^{l m} = (-1)^{l_1+l_2-l} C_{l_1 -m_1 l_2 -m_2}^{l -m}. \quad (\text{П1.10})$$

Из (П1.5) следуют выражения для постоянных взаимодействия в двухуровневой системе (индекс главного квантового числа опускаем):

$$\begin{aligned} g_{00,00,00,00} &= b_{0,0,0,0}^{(0)}, \\ g_{1m_1,00,00,00} &= g_{1m_1,1m_2,1m_3,00} = 0, \\ g_{1m_1,1m_2,1m_3,1m_4} &= \left(b_{1,1,1,1}^{(0)} + \frac{2}{5} b_{1,1,1,1}^{(2)} \right) \delta_{m_1, m_4} \delta_{m_2, m_3}, \\ g_{1m_1,1m_2,00,00} &= g_{00,00,1m_1,1m_2} = \frac{(-1)^{m_1}}{3} b_{1,1,0,0}^{(1)} \delta_{m_1, -m_2}, \\ g_{1m_1,00,1m_2,00} &= g_{00,1m_1,00,1m_2} = \frac{1}{3} b_{1,0,1,0}^{(1)} \delta_{m_1, m_2}, \\ g_{1m_1,00,00,1m_2} &= g_{00,1m_1,1m_2,00} = b_{0,1,1,0}^{(0)} \delta_{m_1, m_2}. \end{aligned} \quad (\text{П1.11})$$

Таким образом, постоянные взаимодействия в (59) следующим образом выражаются через коэффициенты разложения (П1.4):

$$\begin{aligned} g_0 &= b_{0,0,0,0}^{(0)}, \quad g_1 = b_{1,1,1,1}^{(0)} + \frac{2}{5} b_{1,1,1,1}^{(2)}, \\ f_1 &= \frac{1}{3} b_{1,1,0,0}^{(1)}, \quad f_2 = b_{0,1,1,0}^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{П1.12})$$

Приложение 2. Матричные элементы оператора дипольного момента

Согласно определению (24),

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{ii'} &= \mathbf{d}_{nlm, n'l'm'} \equiv \langle nlm | \mathbf{d} | n'l'm' \rangle = \\ &= -|e| J_{nl, n'l'} \int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) \mathbf{n} Y_{l'm'}(\Omega), \end{aligned} \quad (\text{П2.1})$$

где

$$J_{nl, n'l'} \equiv \int dr r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r). \quad (\text{П2.2})$$

Выполнены условия симметрии

$$\langle nlm | \mathbf{d} | n'l'm' \rangle = \langle n'l'm' | \mathbf{d} | nlm \rangle^*, \quad (\text{П2.3})$$

$$\langle nlm | \mathbf{d} | n'l'm' \rangle = (-1)^{m+m'} \langle n'l', -m' | \mathbf{d} | nl, -m \rangle^*. \quad (\text{П2.4})$$

Для системы с двумя уровнями $l = 0$ и $l = 1$ (индекс n опускаем) матричные элементы имеют вид

$$\langle 00 | d_x | 10 \rangle = 0, \quad \langle 00 | d_x | 11 \rangle = \langle 00 | d_x | 1-1 \rangle = \frac{d}{\sqrt{2}}, \quad (\text{П2.5})$$

$$\langle 00 | d_y | 10 \rangle = 0, \quad \langle 00 | d_y | 11 \rangle = \langle 00 | d_y | 1-1 \rangle = i \frac{d}{\sqrt{2}}, \quad (\text{П2.6})$$

$$\langle 00 | d_z | 10 \rangle = -d, \quad \langle 00 | d_z | 11 \rangle = \langle 00 | d_z | 1-1 \rangle = 0, \quad (\text{П2.7})$$

где $d = |e| J / \sqrt{3}$, $J \equiv \int dr r^3 R_0(r) R_1(r)$.

1. K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
2. C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
3. M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
4. L.V. Hau, S.E. Harris, Z. Dutton, and C.H. Behroozi, *Nature* **397**, 594 (1999).
5. A.C. Рыбалко, *ФНТ* **30**, 1321 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 994 (2004)].
6. A.C. Рыбалко, С.П. Рубец, *ФНТ* **31**, 820 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 623 (2005)].
7. A. Rybalko, S. Rubets, E. Rudavskii, V. Tikhii, S. Tarapov, R. Golovashchenko, and V. Derkach, *Phys. Rev.* **B76**, 140503 (2007).
8. E.P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961).
9. Л.П. Питаевский, *ЖЭТФ* **40**, 646 (1961).
10. L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press, USA (2003).
11. Н.Н. Боголюбов, *Изв. АН СССР. Сер. Физ.* **11**, 77 (1947).
12. Дж. Клаудер, Э. Сударшан, *Основы квантовой оптики*, Мир, Москва (1970).
13. И.А. Малкин, В.И. Манько, *Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем*, Наука, Москва (1979).

14. Ю.М. Полуэктов, *ФНТ* **28**, 604 (2002) [*Low Temp. Phys.* **28**, 429 (2002)].
15. М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский, *Статистическая механика квантовых жидкостей и кристаллов*, Физматлит, Москва (2006).
16. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика, Часть 1*, Наука, Москва (1976).
17. П. де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).
18. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
19. S.V. Peletminskii and Y.V. Slysarenko, *J. Math. Phys.* **46**, 022301 (2005).
20. Д.Н. Зубарев, *ДАН СССР* **162**, 794 (1965).
21. Д.Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
22. У. Гибсон, Б. Поллард, *Принципы симметрии в физике элементарных частиц*, Атомиздат, Москва (1979).
23. V.V. Konotop and V.M. Perez-Garcia, *Phys. Rev.* **A62**, 033610 (2000).
24. A.P. Ivashin and Yu.M. Poluektov, *Central European Journal of Phys.* **9**, 857 (2011).
25. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
26. A.J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
27. Д. Форстер, *Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции*, Атомиздат, Москва (1980).
28. С.Н. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge University Press (2001).
29. M.J. Jamieson, A. Dalgarno, and M. Kimura, *Phys. Rev.* **A51**, 2626 (1995).
30. А.С. Рыбалко, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, В.А. Тихий, Ю.М. Полуэктов, Р.В. Головащенко, В.Н. Деркач, С.И. Тарапов, О.В. Усатенко, *ФНТ* **35**, 1073 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 837 (2009)].
31. Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
32. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1973).
33. И.В. Боговяленский, Л.В. Карнацевич, Ж.А. Козлов, А.В. Пучков, *ФНТ* **16**, 139 (1990) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **16**, 77 (1990)].

Polarization properties of atomic gas in a coherent state

Yu.M. Poluektov

A possibility of polarization of the gas of hydrogen-like atoms at zero temperature in the Bose-Einstein condensate is studied in equilibrium and non-equilibrium conditions. The Gross-Pitaevskii equation is generalized for gas of atoms with consideration of

their electronic structure. It is shown that the wave function of the system of interacting Bose particles in a single-particle condensate at zero temperature looks like the Glauber coherent state. With the help of the generalized Gross–Pitaevskii equation the polarization properties of atomic gas in the Bose–Einstein condensation state are investigated. It is shown that the electron stationary states in atoms of gas in a coherent state differ from stationary states of electrons in free atoms. Because of this the superfluid system can be spontaneously polarized, even if the free atoms in stationary states have no intrinsic electric dipole moment. The polarization properties of a system of double-level hydrogen-like atoms in the Bose–Einstein condensate are studied more comprehensively. The propagation

both of sound and high frequency small disturbances in the coherent system of polarized atoms is accompanied by oscillations of polarization. The applicability of the developed idea to the analysis of electrical phenomena in superfluid helium is discussed.

PACS: 67.85.Jk Other Bose–Einstein condensation phenomena;
67.10.-j Quantum fluids: general properties;
67.85.-d Ultracold gases, trapped gases;
67.25.D– Superfluid phase ⁴He.

Keywords: coherent state, Gross–Pitaevskii equation, electrical dipole moment, polarization, double-level system.