1994 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 36, № 4
1994 SOLID STATE PHYSICS Vol. 36, N 4

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ОДНОМЕРНОМ БОЗЕ-ГАЗЕ НА КОНЕЧНОМ ОТРЕЗКЕ В СЛУЧАЕ ПРИТЯЖЕНИЯ

И.Ю.Данилов

Изучается одномерный Бозе-газ на конечном интервале. Взаимодействие частиц с поверхностью (границами интервала) описывается потенциалом нулевого радиуса. Изучение этой модели ведется при помощи техники координатного анзаца Бете. Получены выражения для волновых функций системы и для ее спектра. Найден новый класс поверхностных связанных состояний для этой модели.

При изучении экстенсивных (объемных) свойств многочастичных систем обычно решают задачу в конечной области (в случае одного измерения — на конечном отрезке) с выбранными из соображений удобства периодическими граничными условиями. Затем устремляют объем области (и пропорционально число частиц) к бесконечности. При таком способе решения задачи мы полностью теряем информацию о процессах, протекающих на границе изучаемой физической системы, так как периодические граничные условия фактически исключают поверхность из рассмотрения. В связи с тем что реально существующие физические объекты всегда имеют конечные размеры и, следовательно, имеют поверхность, представляет интерес изучение влияния поверхности на спектр широко исследуемых в математической физике интегрируемых квантовых систем (квантовое нелинейное уравнение Шредингера, магнетик Гейзенберга и др.), хорошо изученных в случае периодических граничных условий [1].

В указанном направлении уже была проделана определенная работа. В пионерской статье Годена [2] получены выражения для волновой функции и энергии основного состояния одномерного Бозе-газа на отрезке с нулевыми граничными условиями, а также приведено выражение для волновой функции XXZ-модели со свободными концами. В [3] получен спектр поверхностных возбуждений ферромагнитной XXZ-модели со свободными концами. В [4,5] изучалась модель Хаббарда и одномерный Ферми-газ на конечном интервале. При помощи техники квантового метода обратной задачи XXZ-модель рассматривалась в случае произвольных граничных условий в работе [6]. Непосредственное отношение к рассматриваемому кругу задач имеет работа [7]. В этой работе строится волновая функция системы Бозе-частиц на конечном интервале. Взаимодействие с поверхностью описывается потенциалами нулевого радиуса. В [7] рассматриваются связанные с поверхностью состояния в случае отталкивания между частицами и некоторый класс связанных состояний при притяжении между частицами.

В настоящем сообщении изучается Бозе-газ, значит, координатная часть его волновой функции симметрична. Это имеет непосредственную аналогию с моделью Хаббарда на конечной цепочке для двух Ферми-частиц с противоположно направленными спинами. Обе модели описываются похожими уравнениями на квазиимпульсы. Но в модели Хаббарда для симметричных решений существуют два типа квазиимпульсов, дающих два разных типа поверхностных связанных состояний (Работа находится в печати). Возможность симметричных решений для модели Хаббарда ограничена случаем двух частиц с противоположным спином, поэтому распространить два этих типа поверхностных связанных состояний на модель Хаббарда для N частиц не удается. Однако в одномерном Бозе-газе существует как раз N-частичные волновые функции. И поэтому следует ожидать наличия аналогичных решений и их комбинации. Подтверждению этой гипотезы и посвящена настоящая работа.

В разделе 1 формулируется задача и описывается общий вид волновой функции. В разделе 2 обсуждается вид волновой функции и энергия поверхностных связанных состояний для n-частиц в случае притяжения. В разделе 3 обсуждаются всевозможные решения при притяжении между частицами и рассматривается общий вид спектра системы. В конце статьи дано описание некоторых интересных задач, связанных с затронутым кругом проблем.

1. Постановка задачи и волновая функция

Уравнение Шредингера для рассматриваемой системы N частиц имеет следующий вид:

$$-\frac{1}{2}\frac{N}{\sum_{i=1}}\frac{\partial^2}{\partial^2 x_i}\Phi + c\sum_{j<1}\delta(x_i - x_j)\Phi = E\Phi, \quad x_l \in [0, L]. \tag{1}$$

Это уравнение необходимо дополнить граничными условиями на концах интервала. Наиболее общие линейные граничные условия, дающие самосопряженный гамильтониан, имеют вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\Phi - \gamma_1\Phi\right)\Big|_{x_i=0} = 0, \tag{2a}$$

$$i = 1, \ldots, N,$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\Phi + \gamma_2\Phi\right)\Big|_{x_i=L} = 0. \tag{2b}$$

Такие граничные условия отвечают наличию на поверхностях бесконечно глубоких и бесконечно узких ям (потенциалов нулевого радиуса). Случаю нулевых граничных условий отвечают $\gamma_1 = \gamma_2 = \infty$.

Отметим, что любые значения $\gamma_{1,2} < \infty$ (как положительные, так и отрицательные) отвечают притяжению частиц к поверхности. В случае $\gamma_{1,2} < 0$ притяжение приводит в одночастичной задаче к появлению связанных поверхностных состояний, имеющих в пределе бесконечного интервала энергию $E_{1,2} = -1/2\gamma_{1,2}$.

Волновая функция Бозе-газа должна быть симметричной относительно перестановки координат частиц, поэтому уравнение (1) достаточно решать только в области $0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N < L$.

Согласно работе [7], будем иметь следующее выражение для волновой функции, удовлетворяющей уравнению Шредингера (1) и граничному условию на одном конце (2a):

$$\Phi_{\{k\}}\{x\} = \sum_{\{\varepsilon\}} \sum_{P} \frac{N}{\prod_{l=1}} \left(1 - \frac{i\gamma_1}{\varepsilon_l k_l}\right) \prod_{i<j} \left(1 - \frac{ic}{\varepsilon_i k_i + \varepsilon_j k_j}\right) \times$$

$$\times \left(1 + \frac{ic}{\varepsilon_i k_i - \varepsilon_j k_j}\right) \exp\left[i\left(\varepsilon_{P1} k_{P1} x_1 + \ldots + \varepsilon_{PN} k_{PN} x_{PN}\right)\right], \tag{3}$$

где

$$\{k\} = (k_1 \ldots k_N), \quad \{x\} = (x_1 \ldots x_N), \quad \{\varepsilon\} = (\varepsilon_1 \ldots \varepsilon_N), \quad \mathrm{Re}\, k_i \in (0, \infty).$$

Суммирование в (3) идет по i, j соответствующим всем наборам знаков $\varepsilon_i = \pm 1$, и по всевозможным перестановкам P.

Отметим, что волновая функция содержит $2^N N!$ отдельных слагаемых. Подставляя волновую функцию в граничное условие (2b) при $x_N = L$, мы получим набор трансцендентных уравнений, которым должны удовлетворять импульсы k_i

$$\exp(2ik_iL) = \frac{k_i + i\gamma_1 k_i + i\gamma_2}{k_i - i\gamma_2 k_i - i\gamma_2} \prod_{j(\neq i)}^{N} \frac{k_i - k_j + ic}{k_i - k_j - ic} \frac{k_i + k_j + ic}{k_i + k_j - ic}. \tag{4}$$

Энергия дается формулой

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} k_i^2. \tag{5}$$

В работе [7] также изучался Бозе-газ в термодинамическом пределе, когда $N, L \to \infty$; $N/L = \rho = \mathrm{const}$ в случае отталкивания $(c > 0)$. Такой переход в случае конечной плотности при притяжении между частицами $(c < 0)$ невозможен, так как система с бесконечным числом частиц претерпевает коллапс.

2. Поверхностные связанные состояния для n-частиц Бозе-газа

При переходе к пределу $L \to \infty$ левая часть уравнения (4) при $k = a + ib$ $(b > 0)$ будет стремиться к нулю. Тогда правая часть тоже должна равняться нулю, и мы получаем простое условие на квазиимпульсы k. Возможно, что $k_1 = -i\gamma_1$. Из всего многообразия импульсов можно выбрать две последовательности. Первая — это последовательность квазиимпульсов вида

$$k_l^D = i\gamma_1 - icl, \quad l = 1, \ldots, m^D. \tag{6}$$

Назовем эту последовательность последовательностью импульсов D-типа. Вторая — это последовательность квазиимпульсов

$$k_l^B = -i\gamma_1 - icl, \quad l = 1, \ldots, m^B. \tag{7}$$

Назовем эту последовательность последовательностью импульсов B-типа.

Допустим теперь, что $m^B + m^D + 1 = N$, т.е. других квазиимпульсов нет. Подставляя эти импульсы в волновую функцию (3), будем иметь

$$\Phi\{x\} = \sum_{i=0}^{m^D} Z_i R_i R_{i-1} \ldots R_1 e, \tag{8}$$

где

$$e = \prod_{l=1}^{N} \left(1 - \frac{i\gamma_1}{k_l}\right) \prod_{i<j} \left(1 - \frac{ic}{k_i + k_j}\right) \exp\left[i\left(k_1^D x_1 + \ldots + k_{m^D}^D x_{m^D} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + k_1 x_{m^D+1} + k_1^B x_{m^D+2} + k_2^B x_{m^D+3} + \ldots + k_{m^B}^B x_{m^B+m^D+1}\right)\right]. \tag{9}$$

Оператор R_i меняет знак у k_i^D и ставит $-k_i^D$ перед $-k_{i-1}^D$, а R_1 ставит k_1^D перед k_1, причем каждая перестановка $-k$ с соседями сопровождается умножением на множитель

$$\left(1 + \frac{ic}{k_i + k_l}\right) \Big/ \left(1 - \frac{ic}{k_i + k_l}\right),$$

где k — импульс переставленного соседа; Z_i — это сумма всевозможных перестановок первых i импульсов со всеми остальными $N-1$, причем порядок набора из i импульсов и порядок набора $n - i$ импульсов сохраняется. Каждая перестановка соседних k_i и k_j сопровождается умножением e на

$$\left(1 + \frac{ic}{k_i - k_l}\right) \Big/ \left(1 - \frac{ic}{k_i - k_l}\right).$$

Энергия определяется выражением

$$E = -\frac{\gamma^2}{2} - \sum_{l=1}^{m^B} \frac{(cl+\gamma)^2}{2} - \sum_{l=1}^{m^D} \frac{(cl-\gamma)^2}{2}. \qquad (10)$$

Требование нормируемости дает условие на γ

$$\frac{c}{2}(m^D + 1) < \gamma < \frac{c}{2}(m^D - m^B). \qquad (11)$$

Мы видим, что волновая функция Φ имеет сложный вид (содержит несколько слагаемых). Но в том случае, если есть только импульсы B-типа, волновую функцию можно записать в более простом и симметричном виде

$$\Phi^{m^B} = \exp\left\{ \left(\gamma + c/2m^B\right) \sum_{i=1}^{m^B} x_i - c/2 \sum_{i<j} |x_i - x_j| \right\}. \qquad (12)$$

Форма, в которой записана эта функция, не зависит от выбранного сектора. Энергия может быть записана как

$$E = -\frac{m^B}{2}\left(\gamma + c/2m^B\right) - \frac{m^B(m^B-1)(m^B+1)}{24}c^2. \qquad (13)$$

Такие состояния существуют при $\gamma < -cm^B$. Эта волновая функция была получена в работе [7].

3. Спектр

Классифицируем все возможные квазиимпульсы данной задачи.

1. m^V квазиимпульсов вещественны. Физически это соответствует наличию m^V частиц, независимо друг от друга движущихся в объеме. Такие импульсы будем называть импульсами V-типа.

2. Существуют группы импульсов S-типа

$$k_{j,n}^S = \frac{K_n}{m_n^S} + ic\frac{m_n^S + 1 - 2j}{2} \quad \left(j = 1, \ldots, m_n^S\right), \qquad (14)$$

где

$$m_1^S + m_2^S + \ldots + m_l^S = m^S. \qquad (15)$$

Физически это соответствует наличию l комплексов частиц, где каждый комплекс есть объемное связанное состояние. Комплекс с номером n содержит m_n^S части, обладает суммарным импульсом K_n и энергией

$$E_n^S = \frac{K_n^2}{2m_n^S} - c^2\frac{m_n^S\left(m_n^S - 1\right)\left(m_l^S + 1\right)}{24}. \qquad (16)$$

Таких комплексов может быть сколько угодно много, но меньше, чем $N/2$ (N четное) или $(N-1)/2$ (N нечетное). Возможен случай, когда все частицы образуют один такой связанный комплекс. Тогда его энергия будет равна

$$E^S = \frac{K^2}{2N} - c^2\frac{N(N^2-1)}{24}. \tag{17}$$

3. В системе могут быть импульсы, соответствующие связанному состоянию частиц с поверхностью. Их можно разбить на три класса: 1) связанное состояние одной частицы с поверхностью (R-тип), ему соответствует $k^R = -i\gamma$; 2) рассмотренные ранее импульсы D- и B-типа. Необходимым условием существования таких импульсов является наличие в системе импульса R-типа. Импульсы D- и B-типа соответствуют появлению в системе связанных с поверхностью комплексов частиц.

Итак, возможны импульсы пяти типов: V, S, R, D, B. При помощи этих обозначений можно классифицировать все возможные состояния системы. Произвольное состояние системы можно обозначить как

$$NVm^VSm_1^SSm_2^S\dots Sm_l^SRBm^BDm^D.$$

Здесь N обозначает общее количество частиц, Vm^V — наличие среди импульсов m^V импульсов V-типа. Агрегат $Sm_1^SSm_2^S\dots Sm_l^S$ соответствует наличию l объемных связанных комплексов по m_i^S частиц в комплексе с номером i. Связанный с поверхностью комплекс частиц обозначается как RBm^BDm^D, где m^B частиц связано с поверхностью связью B-типа, а m^D — связью D-типа.

Произвольное состояние системы, таким образом, может включать в себя 1) связанный с поверхностью комплекс частиц, 2) несколько объемных связанных комплексов, 3) группу частиц, свободно движущихся в объеме.

Рассмотренные нами поверхностные связанные состояния из предыдущего раздела будут обозначаться как $(m^B+m^D+1)RBm^BDm^D$. Объемное связанное состояние, включающее в себя все частицы системы, будет обозначаться как NSN, а состояние, в котором все квазиимпульсы вещественны, — NVN.

Энергия нашего произвольного состояния равна

$$E = -\frac{\gamma^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{l}\left[\sum_{j=1}^{m_n^S} - \left(m_j^S + 1 - 2j\right)^2 + \frac{K_n^2}{m_i^S}\right] -$$

$$-\sum_{t=1}^{m^B}(\gamma+ct)^2/2 - \sum_{t=1}^{m^D}(\gamma-ct)^2/2 + \sum_{i=1}^{m^V}\frac{p_i^2}{2}. \tag{18}$$

Первое слагаемое определяется импульсом R-типа. Второе слагаемое — вклад от объемных связанных комплексов, третье и четвертое — вклад от импульсов B- и D-типов, пятое — вклад от импульсов V-типа, это слагаемое больше нуля. Больше нуля и все K_n^2; K_n и p при нашем предельном переходе — произвольные вещественные числа, поэтому

(18) задает зону сплошного спектра, ограниченную по энергии снизу выражением

$$E = -\frac{\gamma^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{l}\sum_{j=1}^{m_n^S}\left[-\left(m_j^S + 1 - 2j\right)^2\right] - \sum_{t=1}^{m^B}(\gamma + ct)^2/2 - \sum_{t=1}^{m^D}(\gamma - ct)^2/2. \quad (19)$$

Если есть состояние типа $(m^B + m^D + 1)RBm^B Dm^D$, то оно имеет дискретную энергию, задаваемую выражением (10).

Требование нормируемости $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S RBm^B Dm^D$ приводит к ограничению (11) на γ. В связи с этим встает вопрос о поведении энергии этого состояния при критических значениях γ. Мы рассмотрим его на примере $(m^B + m^D + 1)RBm^B Dm^D$, а затем обобщим на все состояния.

Из сравнения выражений для энергии (10) и (19) видно, что при $\gamma = (m^D - m^B)c/2$ состояние $(m^B + m^D + 1)RBm^B Dm^D$ отщепляется от $(m^B + m^D + 1)S(m^B + m^D + 1)$, а при $\gamma = (m^D + 1)c/2$ и $m^D > 0$ присоединяется к $(m^B + m^D + 1)Sm^D RBm^B$. Состояния $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S$ не налагают ограничения на γ, их спектр такой же, как и в периодическом случае. Поэтому для $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S RBm^B Dm^D$ будет, что при $\gamma = (m^D - m^B)c/2$ состояние $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S RBm^B Dm^D$ отщепляется от $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S S(m^D + m^B + 1)$, а при $\gamma = (m^D + 1)c/2$ и $m^D > 0$ присоединяется к $NVm^V Sm_1^S Sm_2^S \ldots Sm_l^S Sm^D RBm^B$.

Интересно, что с ростом N поверхностные N-частичные состояния могут образовываться во все более слабом поверхностном потенциале. Это связано с тем, что масса объемного N-частичного комплекса с ростом N возрастает и суммарный поверхностный потенциал, действующий на объемное связанное состояние, также возрастает (так как поверхностный потенциал действует на каждую частицу, связанную в объемном комплексе).

Вследствие специфики взаимодействия между частицами и взаимодействия частиц с поверхностью столкновения объемных связанных состояний с поверхностью и с поверхностными связанными состояниями не приводят ни к распадам связанных комплексов, ни к обменам частицами между комплексами. Связь D-типа возникает в более сильном поверхностном потенциале, чем связь B-типа.

Итак, отметим некоторые интересные задачи, связанные с затронутым кругом проблем.

1. Решение N-частичной модели Хаббарда на конечной цепочке и изучение возникающих поверхностных связанных состояний. Интересно было бы воспользоваться квантовым методом обратной задачи рассеяния.

2. Изучение классического нелинейного уравнения Шредингера на полуоси. Среди решений должны появляться локализованные у поверхности солитоны. Эта задача имеет прямые физические приложения, например в физике длинных молекул.

Автор благодарит В.Л.Булатова за многочисленные обсуждения.

Список литературы

[1] Kulish P.P., Sklyanin E.K. // Lect. Notes in Phys. 1982. V. 151. P. 61–119.
[2] Gaudin M. // Phys. Rev. A. 1971. V. 4. N 1. P.386–393.
[3] Гочев И.Г. // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 26. № 3. С.136–138.
[4] Shulz H.J. // J. Phys. C. 1985. V. 18. N 3. P. 586–601.
[5] Woynarovich F. // Phys. Lett. A. 1985. V. 108. N 8. P. 401–406.
[6] Sklyanin E.K. // J. Phys. A. 1988. V. 21. N 10. P. 2375–2389.
[7] Булатов В.Л. // ТМФ. 1988. Т. 75. № 1. С. 148–156.

Петербургский институт
ядерной физики им.Б.П.Константинова РАН

Поступило в Редакцию
6 сентября 1993 г.