高等统计物理

王延颋

2017 年 2 月 24 日

15. 超流相变与朗道超流理论

当温度极低，粒子密度很高时，粒子的德布罗意波长与粒子间的平均距离差不多，量子效应对系统的热力学性质起决定作用，这样的多粒子流体系统都称作**量子液体**。

15.1. 液 He^4 中的超流相变

在接近绝对零度时，He^4 及其同位素 He^3 可以保持液态，这是因为氦原子的小质量导致的大零点能可以克服原子间的弱相互作用，从而使原子不被固定在晶格位置上。

He^4 的正常相 He I 和超流相 He II 之间的转变为二级相变，相变温度为$T_\lambda = 2.18$ K。而 He^3 作为费米子能够成对，从而产生超流相变，相变温度大约为 10^{-3} K。

Tisza 提出经验的**二流体模型**，假定 He II 由两部分组成：一部分是具有粘滞性和熵的正常流体，另一部分是粘滞系数为零和熵为零的超流体。整个 He II 的质量密度 ρ 和速度场 $\mathbf{v}$ 为

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_n + \rho_s \\ \rho\mathbf{v} &= \rho_n\mathbf{v}_s + \rho_s\mathbf{v}_s \end{aligned} \tag{15.1}$$

其中下标 n 代表正常流体，下标 s 代表超流体。由二流体模型可以定性解释以下实验现象：

（1） 盛有 He II 的连通器中间的小孔只让超流部分通过。在两个容器间建立压差，则超流体部分由一个容器流向另一个容器。因为超流体不具有熵，因此失去超流体的容器因为单位质量的熵增加而变热，获得超流体的容器因为熵减少而变冷，这一现象称为**机械热效应**；反之，通过加热一个容器可以在两个容器间建立压差，称为**热机械效应**。因为两容器中的化学势应相等，有

$$\mu(T,P) = \mu(T+\Delta T, P+\Delta P) \tag{15.2}$$

泰勒展开并保留一阶项，得

$$\begin{aligned} \mu(T+\Delta T, P+\Delta P) &= \mu(T,P) + \left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_P \Delta T + \left(\frac{\partial\mu}{\partial P}\right)_T \Delta P \\ &= \mu(T,P) - s\Delta T + v\Delta P \end{aligned} \tag{15.3}$$

其中 s 是熵，v 是比容。因此得

$$\Delta P = \frac{s}{v}\Delta T = \rho s \Delta T \tag{15.4}$$

这就是机械热效应和热机械效应中温度和压强的关系。

（2） 由泡在 He II 中的旋转圆盘实验可以测得正常部分的密度比和温度的关系：

$$\frac{\rho_n}{\rho}=\begin{cases}\left(\dfrac{T}{T_\lambda}\right)^{5.6} & T<T_\lambda \\ 1 & T>T_\lambda\end{cases} \tag{15.5}$$

这是因为超流部分粘滞度为零，完全不受圆盘转动影响，而正常部分被圆盘拖动，因此惯性矩应正比于$\dfrac{\rho_n}{\rho}$。

（3） He II 中存在两种独立的振动波：一种是普通的声波，此时$\mathbf{v}_n,\mathbf{v}_s$方向一致，$\rho_n,\rho_s$以相同位相作正弦振动，系统总密度$\rho$呈现振动；另一种是“熵波”，$\mathbf{v}_n,\mathbf{v}_s$方向相反，$\rho_n,\rho_s$相位相反，系统总密度$\rho$保持不变，而因为超流部分熵为零，因此熵密度呈现振动。

（4） 由环流的量子化条件，超流体在$\mathbf{v}_s$无奇点的单连通区域必须满足**朗道条件**

$$\nabla\times\mathbf{v}_s=0 \tag{15.6}$$

即超流体的速度是无旋的。但是实验发现 He II 整体依然以经典流体的方式旋转。由此推出在 He II 中存在$\mathbf{v}_s$的奇异线，其对应的涡旋线的面密度为

$$n=\frac{2\omega m}{h} \tag{15.7}$$

相对于涡旋自身的大小而言，涡旋线之间的距离是很远的，因此绝大部分体积内速度场是无旋的。

15.2. 朗道超流理论

朗道超流理论提供了在绝对零度附近二流体模型的具体结构图像。在低温弱激发条件下，可以利用二次量子化方法（元激发方法）把有相互作用粒子系统的哈密顿量变成没有相互作用的**准粒子**组成系统的哈密顿量。对于 He II，朗道认为在$T=0$ K 时处于基态，全部是超流成分；当温度略高时，系统产生弱激发，在完全超流背景下出现了准粒子，此时系统能量和动量为

$$\begin{aligned}U&=U_0+\sum_{\mathbf{p}}\varepsilon(\mathbf{p})n(\mathbf{p})\\ \mathbf{P}&=\sum_{\mathbf{p}}\mathbf{p}n(\mathbf{p})\end{aligned} \tag{15.8}$$

式中E_0为基态能，$\varepsilon(\mathbf{p})$为单个准粒子的能量，$\mathbf{p}$为准粒子动量，$n(\mathbf{p})$为准粒子数目。朗道进一步假设在 He II 中存在两种不同的玻色型准粒子：声子和旋子，能谱分别为

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_s(p) &= v_s p \\
\varepsilon_x(p) &= \varepsilon_0 + \frac{(p-p_0)^2}{2m_x}
\end{aligned}
\tag{15.9}
$$

其中 v_s 为声子速度，ε_0 和 p_0 对应能隙和能隙处的动量（杨展如第 129 页图 4.4.1）。在小动量区域只有声子激发，而在较大动量区域有旋子出现，激发谱

$$
\hbar\omega_k = \begin{cases} v_s\hbar k & k << k_0 \\ \varepsilon_0 + \dfrac{\hbar^2\left(k^2-k_0^2\right)}{2m_x} & k \approx k_0 \end{cases}
\tag{15.10}
$$

其中 $p=\hbar k, \varepsilon=\hbar\omega_k$ 。

因为 He II 中的准粒子数不是固定的，所以化学势 $\mu=0$，因而作为玻色子的准粒子在能量态 $\hbar\omega_k$ 的平均占据数为

$$
\langle n_k \rangle = \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega_k)-1}
\tag{15.11}
$$

因此内能

$$
U = U_0 + \sum_k \hbar\omega_k \langle n_k \rangle = U_0 + \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty \mathrm{d}k \frac{k^2\hbar\omega_k}{\exp(\beta\hbar\omega_k)-1}
\tag{15.12}
$$

其中 V 是体积。由此可算出声子和旋子两种元激发对比热的贡献：

$$
\begin{aligned}
\frac{C_{\mathrm{s}}}{Nk_{\mathrm{B}}} &= \frac{2\pi^2 v\left(k_{\mathrm{B}}T\right)^3}{15\hbar^3 c^3} \\
\frac{C_{\mathrm{x}}}{Nk_{\mathrm{B}}} &= \frac{2\sqrt{m_x}k_0^2\varepsilon_0^2 v\exp\left(-\dfrac{\varepsilon_0}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{(2\pi)^{3/2}\hbar\left(k_{\mathrm{B}}T\right)^{3/2}}
\end{aligned}
\tag{15.13}
$$

在适当的参数选取下，该结果与实验符合得很好。

在 $T=0\,\mathrm{K}$ 时，整个液 He II 都是超流体，其宏观运动的动量和能量分别为

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P} &= M\mathbf{v} \\
E &= \frac{1}{2}Mv^2 = \frac{P^2}{2M}
\end{aligned}
\tag{15.14}
$$

其中 M 是超流体质量。设想系统中激发了一个准粒子，则能量和动量的变动存在如下关系：

$$
\delta E = \mathbf{v}\cdot\delta\mathbf{P}
\tag{15.15}
$$

元激发的动量和能量从超流体获得：

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &= -\delta\mathbf{P} \\ \varepsilon(\mathbf{p}) &= -\delta E\end{aligned} \tag{15.16}$$

因此有

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{v}\cdot\mathbf{p} \le vp \tag{15.17}$$

所以超流体要产生元激发，速度必须大于等于临界速度

$$v \ge \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{p} \equiv v_{\mathrm{c}} \tag{15.18}$$

要激发出声子，需要

$$v \ge \frac{v_{\mathrm{s}} p}{p} = v_{\mathrm{s}} \tag{15.19}$$

而对于理想气体，

$$v_{\mathrm{c}} = \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{p}\right)_{\min} = \left(\frac{p^2/2m}{p}\right)_{\min} = 0 \tag{15.20}$$

说明理想气体不可能处于完全的超流状态。

15.3. 声子型激发的微观机制

以下由近理想玻色气体模型推导出超流体的声子型激发的微观机制，但是不能得到需要考虑高密度玻色气体模型的旋子型激发。

量子近理想气体条件为$a << v^{1/3}$，其中a是散射长度，v是比容，并且温度很低，因而平均热波长（德布罗意波长）$\lambda = \sqrt{\dfrac{2\pi\hbar^2\beta}{m}}$很长，量子效应明显。此时自旋为零的$N$个玻色粒子组成的系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\ne j}\hat{u}\left(\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|\right) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \tag{15.21}$$

采用二次量子化的动量表象，有

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{p}\frac{p^2}{2m}\hat{a}_p^{+}\hat{a}_p \\ \hat{H}_1 &= \frac{1}{2}\sum_{\substack{p_1',p_2' \\ p_1,p_2}}\left\langle \mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\right|\hat{u}\left|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2\right\rangle \hat{a}_{p_1'}^{+}\hat{a}_{p_2'}^{+}\hat{a}_{p_2}\hat{a}_{p_1}\end{aligned} \tag{15.22}$$

式中$\hat{a}_p^+$是动量为$\mathbf{p}$的粒子的产生算符，$\hat{a}_p$是相应的湮没算符，满足如下对易关系：

$$\begin{aligned}&\left[\hat{a}_p,\hat{a}_{p'}^+\right]=\delta_{p,p'}\\&\left[\hat{a}_p,\hat{a}_{p'}\right]=\left[\hat{a}_p^+,\hat{a}_{p'}^+\right]=0\end{aligned}\tag{15.23}$$

由动量守恒有

$$\mathbf{p}_1'+\mathbf{p}_2'=\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2\tag{15.24}$$

而散射矩阵元

$$\begin{aligned}\left\langle\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\left|\hat{u}\right|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2\right\rangle&=\iint\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\varphi_{p_1'}^*\left(\mathbf{r}_1\right)\varphi_{p_2'}^*\left(\mathbf{r}_2\right)\hat{u}\left(\left|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\right|\right)\varphi_{p_2}\left(\mathbf{r}_2\right)\varphi_{p_1}\left(\mathbf{r}_1\right)\\&=\frac{1}{V}\int d^3r\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right)u\left(\mathbf{r}\right)\end{aligned}\tag{15.25}$$

其中$\mathbf{p}=\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_1'=\mathbf{p}_2'-\mathbf{p}_2$，$\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$，$\varphi_p\left(\mathbf{r}\right)=\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right)$。应用玻恩近似，仅考虑小动量转移的低能散射情况，有$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right)\approx1$，则

$$\left\langle\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2'\left|\hat{u}\right|\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2\right\rangle\approx\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3ru\left(\mathbf{r}\right)\equiv\frac{u_0}{V}\tag{15.26}$$

所以哈密顿量近似写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1=\sum_p\frac{p^2}{2m}\hat{a}_p^+\hat{a}_p+\frac{u_0}{2V}\sum_{\substack{p_1',p_2'\\p_1,p_2}}\hat{a}_{p_1'}^+\hat{a}_{p_2'}^+\hat{a}_{p_2}\hat{a}_{p_1}\tag{15.27}$$

散射长度

$$a=\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int d^3r\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right)u\left(\mathbf{r}\right)\approx\frac{m}{4\pi\hbar^2}\int d^3ru\left(\mathbf{r}\right)=\frac{mu_0}{4\pi\hbar^2}\tag{15.28}$$

对于近理想玻色气体绝大部分粒子占据零动量态，即

$$\hat{N}_0=\hat{a}_0^+\hat{a}_0\sim O\left(N\right)\tag{15.29}$$

由$\left[\hat{a}_0,\hat{a}_0^+\right]=1<<N_0$，近似认为

$$\hat{a}_0\hat{a}_0^+=\hat{a}_0^+\hat{a}_0\tag{15.30}$$

且有

$$a_0=a_0^+\approx\sqrt{N_0}\tag{15.31}$$

而激发态的粒子数很小，所以$\hat{H}_1$中的零级项

$$\begin{aligned}a_0^+a_0^+a_0a_0 &\approx N_0^2=\left(N-\sum_{p\neq 0}a_p^+a_p\right)^2\\ &=N^2-2N\sum_{p\neq 0}a_p^+a_p+\left(\sum_{p\neq 0}a_p^+a_p\right)^2\\ &=N^2-2N\sum_{p\neq 0}a_p^+a_p\end{aligned} \tag{15.32}$$

而$\hat{H}_1$中的其它项在精确至二级小量（有动量为零的粒子参与散射）的情况下，考虑到动量守恒，等于

$$\begin{aligned}&\sum_{p\neq 0}\left(\hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_p\hat{a}_{-p}+\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^+\hat{a}_0\hat{a}_0+\hat{a}_0^+\hat{a}_p^+\hat{a}_0\hat{a}_p+\hat{a}_0^+\hat{a}_p^+\hat{a}_p\hat{a}_0+\hat{a}_p^+\hat{a}_0^+\hat{a}_0\hat{a}_p+\hat{a}_p^+\hat{a}_0^+\hat{a}_p\hat{a}_0\right)\\ &\approx N_0\sum_{p\neq 0}\left(\hat{a}_p\hat{a}_{-p}+\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^++4\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right)=\left(N-\sum_{p\neq 0}\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right)\sum_{p\neq 0}\left(\hat{a}_p\hat{a}_{-p}+\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^++4\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right)\\ &\approx N\sum_{p\neq 0}\left(\hat{a}_p\hat{a}_{-p}+\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^++4\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right)\end{aligned} \tag{15.33}$$

因此哈密顿量(15.27)可近似表示为

$$\hat{H}=\sum_p\frac{p^2}{2m}\hat{a}_p^+\hat{a}_p+\frac{N^2u_0}{2V}+\frac{Nu_0}{2V}\sum_{p\neq 0}\left(\hat{a}_p\hat{a}_{-p}+\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^++2\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right) \tag{15.34}$$

其中$\hat{a}_p\hat{a}_{-p}$和$\hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^+$项是非对角的。

以下引入**博戈留波夫变换**对以上哈密顿量进行对角化。定义满足玻色对易关系(15.23)的玻色算符

$$\begin{cases}\hat{b}_p^+=u_p\hat{a}_p^+-v_p\hat{a}_{-p}\\ \hat{b}_p=u_p\hat{a}_p-v_p\hat{a}_{-p}^+\end{cases} \tag{15.35}$$

其中u_p,v_p是待定实数且满足$u_p^2-v_p^2=1$。其逆变换为

$$\begin{cases}\hat{a}_p^+=u_p\hat{b}_p^++v_p\hat{b}_{-p}\\ \hat{a}_p=u_p\hat{b}_p+v_p\hat{b}_{-p}^+\end{cases} \tag{15.36}$$

从而哈密顿量(15.34)表示为

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = \frac{N^2 u_0}{2V} &+ \sum_{p\neq 0}\left(\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{Nu_0}{V}\right)v_p^2 + \frac{Nu_0}{V}u_p v_p\right) \\
&+ \sum_{p\neq 0}\left(\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{Nu_0}{V}\right)\left(u_p^2+v_p^2\right)+\frac{2Nu_0}{V}u_p v_p\right)\hat{b}_p^{+}\hat{b}_p \\
&+ \sum_{p\neq 0}\left(\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{Nu_0}{V}\right)u_p v_p + \frac{Nu_0}{2V}\left(u_p^2+v_p^2\right)\right)\left(\hat{b}_p^{+}\hat{b}_{-p}^{+}+\hat{b}_p\hat{b}_{-p}\right)
\end{aligned}
\tag{15.37}
$$

其中最后一项是非对角的。为使其对角化，求解

$$
\begin{cases}
\left(\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{Nu_0}{V}\right)u_p v_p + \dfrac{Nu_0}{2V}\left(u_p^2+v_p^2\right)=0 \\
u_p^2 - v_p^2 = 1
\end{cases}
\tag{15.38}
$$

得到

$$
\begin{aligned}
u_p &= \frac{1}{\sqrt{1-L_p^2}} \\
v_p &= \frac{L_p}{\sqrt{1-L_p^2}}
\end{aligned}
\tag{15.39}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
L_p &= \frac{1}{mu^2}\left(\varepsilon(\mathbf{p}) - \frac{p^2}{2m} - mu^2\right) \\
u &= \left(\frac{4\pi\hbar^2 aN}{m^2 V}\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{u_0 N}{mV}} \\
\varepsilon(\mathbf{p}) &= \left(\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2 + u^2 p^2\right)^{1/2}
\end{aligned}
\tag{15.40}
$$

哈密顿量(15.37)最终表示为

$$
\hat{H} = E_0 + \sum_{p\neq 0}\varepsilon(\mathbf{p})\hat{n}_p \tag{15.41}
$$

其中准粒子的总能量为

$$
E_0 = \frac{1}{2}Nmu^2 + \frac{1}{2}\sum_{p\neq 0}\left(\varepsilon(\mathbf{p}) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 + \frac{m^3u^4}{p^2}\right) \tag{15.42}
$$

准粒子的粒子数算符为

$$
\hat{n}_p = \hat{b}_p^{+}\hat{b}_p \tag{15.43}
$$

把式(15.42)中的求和换成积分$\sum_p \to \frac{V}{h^3}\int \mathrm{d}^3 p$，得到

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2 aN^2}{mV}\left(1+\frac{128}{15}\sqrt{\frac{a^3N}{\pi V}}\right) \tag{15.44}$$

在$T=0$ K时自由能$F=E_0-TS=E_0$，因此有压强

$$P_0 = \left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_N = \frac{2\pi\hbar^2 aN}{mV^2}\left(1+\frac{64}{5\sqrt{\pi}}\left(\frac{N}{V}a^3\right)^{1/2}\right) \tag{15.45}$$

由此求得普通声速

$$\begin{aligned} v_s &= \sqrt{\frac{\partial P_0}{\partial \rho}} = \sqrt{\frac{\partial P_0}{\partial\left(m\frac{N}{V}\right)}} \\ &= \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 aN}{m^2V}\left(1+\frac{16}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{N}{V}a^3\right)^{1/2}\right)} \\ &\approx \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 aN}{m^2V}} = u \end{aligned} \tag{15.46}$$

只有当$a>0$，即玻色粒子间存在排斥作用，才能保证声速为实数。所以**在具有排斥相互作用的近理想玻色气体中可以产生超流性。**

对于准粒子的能谱，当$p>>mu$时，

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2\left(1+\frac{4m^2u^2}{p^2}\right)} \approx \frac{p^2}{2m} \tag{15.47}$$

是自由粒子的能谱；而当$p<<mu$时，

$$\varepsilon(\mathbf{p}) \approx up = v_s p \tag{15.48}$$

是声子能谱，可见**声子是在低动能激发时产生的准粒子**。

再计算实际气体粒子按动量的分布。实际粒子和准粒子的平均粒子数为

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{N}_p \right\rangle &= \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\hat{N}_p\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\hat{a}_p^+\hat{a}_p\right) \\ \left\langle \hat{n}_p \right\rangle &= \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\hat{n}_p\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\hat{b}_p^+\hat{b}_p\right) \end{aligned} \tag{15.49}$$

由式(15.36)可得

$$\left\langle \hat{N}_p \right\rangle = v_p^2 + \left(u_p^2 + v_p^2\right)\left\langle \hat{n}_p \right\rangle \tag{15.50}$$

而由玻色—爱因斯坦分布且声子的化学势 $\mu = 0$，有

$$\left\langle \hat{n}_p \right\rangle = \frac{1}{\exp\left(\beta\varepsilon\left(\mathbf{p}\right)\right) - 1} \tag{15.51}$$

因此粒子数

$$\begin{cases} \left\langle \hat{N}_{p\neq 0} \right\rangle = \dfrac{1}{1 - L_p^2}\left(\left\langle \hat{n}_p \right\rangle + L_p^2\left(\left\langle \hat{n}_p \right\rangle + 1\right)\right) \\ \left\langle \hat{N}_{p=0} \right\rangle = N - \sum\limits_{p\neq 0}\left\langle \hat{N}_p \right\rangle = N - \dfrac{V}{h^3}\int \left\langle \hat{N}_{p\neq 0} \right\rangle \mathrm{d}^3 p \end{cases} \tag{15.52}$$

在绝对零度（$T = 0$ K）时，不存在准粒子，$\left\langle \hat{n}_p \right\rangle = 0$，由式(15.50)得动量不为零的平均粒子数

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{N}_{p\neq 0} \right\rangle_{T=0} &= v_p^2 = \frac{L_p^2}{1 - L_p^2} \\ &= \frac{m^2 u^4}{2\varepsilon\left(\mathbf{p}\right)\left(\varepsilon\left(\mathbf{p}\right) + \dfrac{p^2}{2m} + mu^2\right)} \\ &= \frac{1 + x^2}{2x\sqrt{x^2 + 2}} - \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{15.53}$$

其中

$$x \equiv p\left(\frac{V}{8\pi a\hbar^2 N}\right)^{1/2} \tag{15.54}$$

而动量为零的平均粒子数

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{N}_{p=0} \right\rangle_{T=0} &= N - \sum_{p\neq 0}\left\langle \hat{N}_{p=0} \right\rangle_{T=0} \\ &= N - \frac{V}{h^3}\int \frac{m^2 u^4}{2\varepsilon\left(\mathbf{p}\right)\left(\varepsilon\left(\mathbf{p}\right) + \dfrac{p^2}{2m} + mu^2\right)} \mathrm{d}\mathbf{p} \\ &= N\left(1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}}\left(na^3\right)^{1/2}\right) \end{aligned} \tag{15.55}$$

因此**即使在绝对零度，一部分粒子仍处在动量不为零的单粒子态**。这是因为粒子间的相互作用使得动量为零的粒子由于散射而改变动量。

15.4. 理论与实验结合的元激发谱推导

以上近理想玻色气体模型用微扰近似只能得到声子谱，得不到旋子谱。这节介绍液体理论与实验相结合的方法得到这两种元激发谱。

令$\hbar=1$，因此动量$\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}=\mathbf{k}$。二次量子化表象中，系统的激发能对应的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\int \mathrm{d}^3\mathbf{x}\left|\nabla\psi(\mathbf{x})\right|^2+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3\mathbf{x}\mathrm{d}^3\mathbf{y}\,\psi^+(\mathbf{x})\psi^+(\mathbf{y})V(\mathbf{x}-\mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})-E_0$$

(15.56)

其中$\psi(\mathbf{x})$是场算符，E_0是N个粒子系统的基态能。令$|\alpha\rangle$是$\hat{H}$的本征态，$|0\rangle$是最低本征态，则

$$\begin{aligned}\hat{H}|0\rangle&=0|0\rangle\\ \hat{H}|\alpha\rangle&=\omega_\alpha|\alpha\rangle\end{aligned}\tag{15.57}$$

粒子密度算符为

$$\rho(\mathbf{x})=\psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\tag{15.58}$$

其傅里叶变换为

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3\mathbf{x}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{p}}\tag{15.59}$$

有性质

$$\hat{\rho}_{-\mathbf{k}}=\hat{\rho}^*_{\mathbf{k}}\tag{15.60}$$

以下证明$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle$（基态中动量为$\mathbf{k}$的粒子数）是$\hat{H}$的本征态，对应的能量为$v_s k$。

考虑函数

$$S(\mathbf{k},\omega)=\frac{V}{N}\langle 0|\hat{\rho}^+_{\mathbf{k}}\delta(H-\omega)\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle=\frac{V}{N}\sum_\alpha\delta(\omega_\alpha-\omega)\left|\langle\alpha|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle\right|^2\tag{15.61}$$

假定$|0\rangle$是旋转不变的（各向同性），则上式只与$\mathbf{k}$的大小有关，与方向无关。因为$\hat{H}$的本征值都是正的，所以对$\omega<0$，有$S(\mathbf{k},\omega)=0$。其对ω的积分为实验可测的**液体结构因子**

$$
\begin{aligned}
S_k &= \int_0^\infty \mathrm{d}\omega S(\mathbf{k},\omega) = \frac{V}{N}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega \sum_\alpha \delta(\omega_\alpha-\omega)\left|\langle\alpha|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle\right|^2 \\
&= \frac{V}{N}\sum_\alpha \left|\langle\alpha|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle\right|^2 = \frac{V}{N}\sum_\alpha \langle 0|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^+|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle \\
&= \frac{V}{N}\langle 0|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^+\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle
\end{aligned}
\tag{15.62}
$$

可以证明以下几点性质（杨展如第 141—142 页）：

（1） 矩阵元仅当$|\alpha\rangle$具有动量$\mathbf{k}$时才不为 0；

（2） $$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\omega S(\mathbf{k},\omega) = \frac{V}{N}\langle 0|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^+\hat{H}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle = \frac{k^2}{2m} \tag{15.63}$$

（3） $$\lim_{k\to 0}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\frac{1}{\omega}S(\mathbf{k},\omega) = \lim_{k\to 0}\frac{V}{N}\langle 0|\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^+\hat{H}^{-1}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle = \frac{1}{2mv_s^2} \tag{15.64}$$

其中v_s是绝对零度时的声速。

令

$$
\begin{aligned}
&\nu = \omega / v_s k \\
&R(\mathbf{k},\nu) = 2mv_s^2 S(\mathbf{k}, v_s k\nu)
\end{aligned}
\tag{15.65}
$$

则式(15.62)、(15.63)、(15.64)变为

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \mathrm{d}\nu R(\mathbf{k},\nu) = \frac{2mv_s}{k}S_k \\
&\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\nu R(\mathbf{k},\nu) = 1 \\
&\lim_{k\to 0}\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\frac{1}{\nu}R(\mathbf{k},\nu) = 1
\end{aligned}
\tag{15.66}
$$

由以上三式可得

$$\lim_{k\to 0}\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\frac{(\nu-1)^2}{\nu}R(\mathbf{k},\nu) = 2\left(1-\frac{2mv_s}{k}S_k\right) \tag{15.67}$$

因为按定义，$R(\mathbf{k},\nu)$和S_k均为正定的，所以

$$\frac{2mv_s}{k}S_k \le 1 \tag{15.68}$$

而实验测得的结构因子在$k\to 0$时，有

$$S_k \approx \frac{k}{2mv_s} \tag{15.69}$$

所以

$$\lim_{\mathbf{k}\to 0} R(\mathbf{k},\nu) = \delta(\nu - 1) \tag{15.70}$$

由定义(15.65)和(15.62)可知，为了使上式成立，$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}|0\rangle$ 必须是 $\hat{H}$ 的本征态，对应的激发能为

$$\omega_k = \frac{\langle 0|\hat{\rho}_k^{+}\hat{H}\hat{\rho}_k|0\rangle}{\langle 0|\hat{\rho}_k^{+}\hat{\rho}_k|0\rangle} = \frac{\langle 0|\hat{\rho}_k^{+}\omega_k\hat{\rho}_k|0\rangle}{\langle 0|\hat{\rho}_k^{+}\hat{\rho}_k|0\rangle} = \frac{k^2}{2mS_k} \tag{15.71}$$

由式(15.69)，得到

$$\lim_{k\to 0}\omega_k = v_s k \tag{15.72}$$

与低激发态的声子谱一致。

将完整的 S_k 的实验数据代入式(15.71)可以得到包含旋子谱在内的全激发谱。