

Интеграл по траекториям в многочастичной квантовой механике

Побойко Игорь

26 апреля 2017

Когерентные состояния

В многочастичной квантовой механике, в отличие от, например, рассматриваемой ранее теории Клейна-Гордона, отправной точкой является не Лагранжев формализм и функционал действия, а представление вторичного квантования и операторы рождения и уничтожения частиц. Для неё, тем не менее, тоже можно построить представление функционального интеграла, слегка модифицировав обсуждаемую ранее схему. Как и ранее, мы будем дискретизовать время, представляя оператор эволюции $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t)$ в виде произведения N операторов $\hat{U}(\epsilon = \frac{t}{N})$, между которыми мы будем вставлять единичные операторы в виде разложения по некоторому набору. В отличие от координатного и импульсного базиса, для многочастичной квантовой механики оказываются удобными «когерентные состояния» — собственные состояния оператора уничтожения $\hat{a}$ (через которые записывается гамильтониан). Давайте напомним, что они из себя представляют.

Бозонные когерентные состояния

Пусть есть собственная функция оператора уничтожения $\hat{a}$ с собственным числом $\phi \in \mathbb{C}$:

$$\hat{a}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle, \quad \langle\phi|\hat{a}^\dagger = \langle\phi|\bar{\phi} \quad (1)$$

Состояние $|\phi\rangle$ в таком случае может быть построено явно:

$$|\phi\rangle = e^{\phi\hat{a}^\dagger}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \quad (2)$$

Когерентные состояния не образуют ортонормированную систему; можно вычислить перекрытие двух когерентных состояний:

$$\langle\theta|\phi\rangle = \exp(\bar{\theta}\phi) \quad (3)$$

Кроме того, они образуют переполненный набор; это означает, что разложение единицы имеет следующий вид:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int \underbrace{\frac{d(\text{Re}\phi)d(\text{Im}\phi)}{\pi}}_{\equiv d\bar{\phi}d\phi} e^{-|\phi|^2} |\phi\rangle \langle\phi| \quad (4)$$

Все полученные свойства тривиально обобщаются и на произвольное количество бозонных состояний (как, собственно, и бывает в многочастичной квантовой механике), описываемых каким-то набором операторов $\hat{a}_n$ с коммутационными соотношениями $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$.

Фермионные когерентные состояния

Фермионы устроены чуть сложнее — ведь если $|\eta\rangle$ является собственным для оператора уничтожения $\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle$, то в силу принципа Паули $\hat{a}^2 = 0$, что неизбежно влечёт $\eta^2 = 0$. Кроме того, фермиевские операторы антикоммутируют. Всё это приводит нас к мысли о том, что для построения фермионных когерентных состояний нужна специальная алгебра — алгебра *грассмановых чисел*.

Лирическое отступление. Грассмановы числа

Грассманову алгебру мы введём формальным образом как алгебру антикоммутирующих чисел. Пусть имеется набор грассмановых чисел $\{\eta_i\}_{i=1}^N$.

1. Основным свойством их мы положим антикоммутативность по отношению к произведению:

$$\eta_i\eta_j = -\eta_j\eta_i \quad (5)$$

Ассоциативность $\eta_1(\eta_2\eta_3) = (\eta_1\eta_2)\eta_3$ и дистрибутивность $\eta_1(\eta_2 + \eta_3) = \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3$ по-прежнему выполняются.

2. Непосредственно из определения следует то, что квадрат произвольного грассманового числа равен нулю $\eta^2 = 0$. Кроме того, *пары* грассмановых чисел (или любое их чётное количество) ведут себя как обычные числа — коммутируют со всеми; например, $\eta_1(\eta_2\eta_3) \equiv (\eta_2\eta_3)\eta_1$.

3. Помимо перемножения, их числа можно складывать и домножать на обычные $\mathbb{C}$ -числа. Число самого общего вида тем самым можно представить как произвольную линейную комбинацию следующих 2^N объектов (то есть мы имеем дело с линейным пространством со следующими «базисными векторами»):

$$\{1, \quad \eta_1, \dots, \eta_N, \quad \eta_1\eta_2, \eta_1\eta_3, \dots, \eta_{N-1}\eta_N, \quad \dots, \quad \eta_1 \dots \eta_N\} \quad (6)$$

4. Мы можем определить действие произвольной аналитической функции на грассманово число η через разложение в ряд Тейлора:

$$\forall c \in \mathbb{C} \mapsto f(c + \eta) = f(c) + f'(c) \cdot \eta \quad (7)$$

(все следующие члены зануляются).

5. Исходя из предыдущего свойства, мы можем формально ввести операцию *дифференцирования* по грассмановому числу через определение:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = \delta_{ij} \quad (8)$$

Кроме дифференцирования, по грассмановым числам можно также и *интегрировать*, причём эти две операции тождественно совпадают:

$$\int d\eta_i \eta_j = \delta_{ij} \quad (9)$$

(стоит обратить внимание, что в таком случае для кратных интегралов «дифференциалы» $d\eta$ тоже антикоммутируют: $\int d\eta_1 d\eta_2 \eta_1 \eta_2 = -\int d\eta_1 \underbrace{\int d\eta_2 \eta_2}_{=1} \eta_1 = -\int d\eta_1 \eta_1 = -1$, что эквивалентно $\int d\eta_1 d\eta_2 \eta_1 \eta_2 = -\int d\eta_2 \underbrace{d\eta_1 \eta_1}_{=1} \eta_2 = -\int d\eta_2 \eta_2 = -1$). В частности, $\frac{\partial}{\partial \eta_i} 1 = \int d\eta_i \cdot 1 = 0$).

6. Можно ввести операцию *комплексного сопряжения* для грассмановых чисел $\bar{\eta}_i$ — её мы просто определим как дающую независимое грассманово число, так что $\bar{\bar{\eta}}_i = \eta_i$. В таком смысле, грассмановых чисел попросту удваивается $\{\eta_1, \dots, \eta_N, \bar{\eta}_1, \dots, \bar{\eta}_N\}$.

7. Наконец, можно вычислить гауссов грассманов интеграл:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) e^{-\sum_{ij} \bar{\eta}_i L_{ij} \eta_j} = \det L \quad (10)$$

Можно просто это проверить для диагональной матрицы:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \exp(-\sum_i \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \prod_i \exp(-\lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\eta_i d\bar{\eta}_i \cdot (1 - \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i)) = \prod_i \lambda_i \quad (11)$$

Тут мы в первом равенстве воспользовались тем, что пары грассмановых чисел ведут себя как обычные числа, а во втором — взятием экспоненты от грассманового числа¹.

Продолжение

Итак, продолжим наше построение когерентных состояний, вооружившись грассмановой алгеброй. Мы выяснили, что собственное число фермионного оператора уничтожения обязано быть грассмановым; с учётом нашего определения для комплексного сопряжения, имеем:

$$\hat{a} |\eta\rangle = \eta |\eta\rangle, \quad \langle \eta | \hat{a}^\dagger = \langle \eta | \bar{\eta}$$

Для такого состояния тоже работает выражение через экспоненту:

$$|\eta\rangle = e^{\eta \hat{a}^\dagger} |0\rangle = (1 + \eta \hat{a}^\dagger) |0\rangle = |0\rangle + \eta |1\rangle \quad (12)$$

С учётом нашего определения комплексного сопряжения, мы также имеем $\langle \eta | = \langle 0 | + \langle 1 | \bar{\eta}$ и $\langle \eta | \hat{a}^\dagger = \langle \eta | \bar{\eta}$. Перекрывание когерентных состояний равно:

$$\langle \eta_i | \eta_j \rangle = (\langle 0 | + \langle 1 | \bar{\eta}_i) (|0\rangle + \eta_j |1\rangle) = 1 + \bar{\eta}_i \eta_j = \exp(\bar{\eta}_i \eta_j) \quad (13)$$

¹Сравните с обычными числами, для которых гауссов интеграл имеет вид $\int \prod_i (d\bar{z}_i dz_i) \exp(-\sum_{ij} \bar{z}_i L_{ij} z_j) = (\det L)^{-1}$ (если мы определили $d\bar{z}_i dz_i \equiv \frac{1}{\pi} d(\text{Re} z_i) d(\text{Im} z_i)$). На этом основана идея суперсимметрии — если взять одинаковое число грассмановых и обычных чисел, то, скажем, гауссов интеграл будет вообще равен единице.

Кроме того, также работает и разложение единицы:

$$\mathbb{I} = \int d\bar{\eta}d\eta e^{-\bar{\eta}\eta} |\eta\rangle \langle \eta| = \int d\bar{\eta}d\eta (1 - \bar{\eta}\eta)(|0\rangle + \eta|1\rangle)(\langle 0| + \bar{\eta}\langle 1|) = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| \quad (14)$$

Таким образом, фермионные когерентные состояния устроены абсолютно точно так же, как и бозонные — за исключением того, что они даются грассмановыми числами (различие имеется разве что в множителе π в определении $d\bar{\phi}d\phi$).

Интеграл по траекториям

С учётом всего вышесказанного, давайте вернёмся к многочастичной квантовой механике. Рассмотрим для простоты гамильтониан квантового осциллятора $\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}$ (рассмотрение мы будем вести для бозонов и фермионов одновременно — ведь когерентные состояния устроены одинаково!), а затем проведём тривиальное обобщение на произвольный многочастичный гамильтониан. Как обычно, мы стартуем с пропагатора, который определим как амплитуду перехода между двумя когерентными состояниями:

$$G_R(\phi, \phi', T > 0) = \langle \phi | e^{-i\hat{H}T} | \phi' \rangle \quad (15)$$

Будем действовать стандартным образом, вставляя разложение единиц по когерентным состояниям:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} (d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp(-\bar{\phi}_k \phi_k)) \langle \phi_N \equiv \phi | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_{N-1} \rangle \dots \langle \phi_2 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_0 \equiv \phi' \rangle \quad (16)$$

Если гамильтониан $\hat{H} = H(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ нормально упорядочен (и только тогда!), матричные элементы считаются прямолинейно:

$$\langle \phi_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_k \rangle \approx \langle \phi_{k+1} | (1 - iH(\hat{a}^\dagger, \hat{a})\epsilon) | \phi_k \rangle = \langle \phi_{k+1} | \phi_k \rangle \cdot (1 - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \approx \exp(\bar{\phi}_{k+1}\phi_k - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \quad (17)$$

И, наконец, для пропагатора мы получаем следующее выражение:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \bar{\phi}_k \phi_k + \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \phi_{k-1} - i\epsilon \sum_{k=1}^N H(\bar{\phi}_k, \phi_{k-1}) \right) \quad (18)$$

Для данного выражение непосредственно строится и непрерывный предел. Интегрирование происходит по всем комплексным (для бозонов) или грассмановым (для фермионов)² функциям $\phi(t)$ с закреплёнными концами $\phi(t=0) = \phi'$ и $\phi(t=T) = \phi$; а действие имеет следующий вид:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int_{\phi(0)=\phi'}^{\phi(T)=\phi} \mathcal{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] \cdot e^{iS[\bar{\phi}(t), \phi(t)]}, \quad S = \int dt (i\bar{\phi}\partial_t\phi - H(\bar{\phi}(t), \phi(t))) \quad (19)$$

Наконец, используя рассуждения предыдущей лекции, мы можем от пропагатора перейти сразу к многочастичной квантовой механике (вместо одного состояния) и квантовой теории поля, а также к вычислению средних по основному состоянию. Скажем, для частиц с парным взаимодействием с потенциалом $U(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ многочастичный гамильтониан имел вид:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x} \frac{1}{2m} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad (20)$$

и, скажем, Фейнмановский пропагатор запишется следующим образом:

$$\langle \Omega | \mathcal{T} \{ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t') \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \cdot \psi(\mathbf{x}, t) \bar{\psi}(\mathbf{y}, t') \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])}{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])} \quad (21)$$

$$L = \int d\mathbf{x} \left(i\bar{\psi}\partial_t\psi - \frac{|\nabla\psi|^2}{2m} \right) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi(\mathbf{y}, t)|^2 U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (22)$$

Прелесть в том, что в правой части поля $\psi(\mathbf{x}, t)$ — это уже обычные (для фермионов — грассмановы) числа, которые устроены куда проще операторов. Из этого представления также тривиально показывается, что Фейнмановский пропагатор является функцией Грина оператора $i\partial_t - \hat{H}$ — то, что мы получали ранее непосредственным вычислением. Кроме того, тот факт, что поля ψ для фермионов грассмановы полностью согласуется с возникновением знака «минус» в определении $\mathcal{T}$ -упорядочения фермионных операторов.

²Конечно, грассманова алгебра хорошо определена для счётного количества грассмановых переменных, и такой объект как грассманова функция порой может смущать (например, $\phi^2(t) = 0$, но $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi(t + \epsilon)\phi(t) = ?$). Чтобы понять, какой смысл вкладывается в то или иное выражение, стоит возвращаться к дискретному представлению, где всё хорошо определено.

Большой канонический ансамбль

Будучи построенным так, функциональный интеграл даёт среднее по состоянию с минимальной энергией полного гамильтониана $\hat{H}$. Даже для взаимодействующих частиц, скажем, с отталкиванием, это основное состояние устроено тривиально как $|\Omega\rangle = |0\rangle$ (и $\hat{H}|0\rangle = 0$) — но это совершенно не то, что нам интересно! Как правило, мы интересуемся *условным минимумом* — а именно, нас интересует основное состояние с фиксированным числом частиц — с дополнительным условием $\langle\Omega|\hat{N}|\Omega\rangle = N$. К счастью, полученная схема достаточно просто модифицируется и для этой задачи — с использованием множителей Лагранжа:

$$\min_{\forall\psi: \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle=N} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \Leftrightarrow \min_{\forall\psi} \langle\psi|\hat{H} - \mu\hat{N}|\psi\rangle \text{ and } \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = N \quad (23)$$

Задача на условный минимум $E(\psi) = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ при дополнительном условии $N(\psi) = \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = N$ тем самым эквивалентна нахождению *безусловного* минимума модифицированного функционала $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$, где множитель Лагранжа μ должен быть найден из условия $\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = N$. Последний же уже можно найти с помощью аппарата функционального интегрирования.

В статистической физике величина μ носит название *химического потенциала*, а ансамбль систем с фиксированным химическим потенциалом носит название *большого канонического ансамбля*. Он противопоставляется *каноническому ансамблю* — ансамблю систем с фиксированным числом частиц; и в термодинамическом пределе они эквивалентны. Поэтому сухой остаток такой: если число частиц сохраняется, то для использования аппарата функционального интегрирования необходимо гамильтониан заменить на «большой канонический гамильтониан» $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$.

Слабонеидеальный Бозе-газ

Постановка задачи

В качестве демонстрации методов функционального интегрирования, мы рассмотрим Бозе-газ с фиксированным числом частиц и точечным взаимодействием $U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ между частицами, описываемый следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}' = \int d\mathbf{x} \left(\frac{\nabla\hat{\Psi}^\dagger\nabla\hat{\Psi}}{2m} - \mu\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi} + \frac{g}{2}\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi} \right) \quad (24)$$

«Статсумма» функционального интеграла имеет следующий вид:

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] \exp \left(i \int dt d\mathbf{x} \left[i\bar{\Psi}\partial_t\Psi - \frac{|\nabla\Psi|^2}{2m} + \mu|\Psi|^2 - \frac{g}{2}|\Psi|^4 \right] \right) \quad (25)$$

Конденсат

Рассмотрение системы мы проведём с помощью метода перевала. Обычно, когда мы имели дело с «хорошими» теориями поля типа «фи-в-четвёртой», седловое решение было тривиально — $\phi = 0$. В данном же случае, варьируя действие по $\bar{\Psi}$, мы получаем, что седловая конфигурация удовлетворяет так называемому уравнению Гросса-Питаевского (нелинейному уравнению Шрёдингера с отталкиванием):

$$i\partial_t\psi + \frac{\Delta\psi}{2m} + \mu\psi - g|\psi|^2\psi = 0 \quad (26)$$

Седловое решение мы будем называть «конденсатной волновой функцией»; пусть вас это не смущает, к обычным бозонным волновым функциям это не имеет отношения. В однородном (без внешнего потенциала) и стационарном (без возмущающих сил) случае ψ само не зависит ни от пространственных координат, ни от временных, и нам достаточно минимизировать лишь «потенциал» $U(|\psi|^2) = -\mu|\psi|^2 + \frac{g}{2}|\psi|^4$. При $\mu, g > 0$ такой потенциал носит название «мексиканской шляпы», и он имеет целый вырожденный континуум минимумов, параметризуемых $U(1)$ -фазой ϕ :

$$|\psi_0|^2 = \frac{\mu}{g} \Rightarrow \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu}{g}} e^{i\phi}, \quad U_0 = -\frac{\mu^2}{2g} \quad (27)$$

Наличие такого макроскопического вырождения — прямое следствие наличия $U(1)$ симметрии исходного действия — симметрии по отношению к фазовым вращениям $\psi \mapsto \psi e^{i\phi}$. Последняя, в свою очередь, по теореме Нётер связано с сохранением числа частиц $|\psi|^2$. Можно было бы предположить, что система «растечётся» по минимуму неким симметричным образом, и будет даваться линейной комбинацией минимумов с различными фазами; *истинное* основное состояние устроено именно так. Однако в действительности же оказывается, что такое «растекание» происходит за экспоненциально большое (по размеру системы) время, то есть в термодинамическом пределе — никогда; и в результате, опять же в термодинамическом пределе мы имеем дело с континуумом основных состояний, среди которых система выбирает

какое-то одно конкретное. В таких случаях говорят о *спонтанном нарушении симметрии* (в данном случае речь идёт об $U(1)$ -симметрии), что практически всегда связано с фазовыми переходами второго рода³.

Основное состояние

Мы приходим к выводу, что в рамках седлового приближения, в системе образуется *Бозе-конденсат* $\psi_0(\mathbf{x}, t)$, удовлетворяющий уравнению Гросса-Питаевского. Это значит, что в рамках всё того же седлового приближения имеется ненулевое *аномальное среднее* $\langle \Omega | \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) | \Omega \rangle = \psi_0(\mathbf{x}, t)$ — объект, который в «нормальных» теориях попросту не может существовать в силу закона сохранения числа частиц, но который возникает в рамках такого седлового рассмотрения. Появление аномального среднего является одним из признаков Бозе-конденсации⁴; последняя происходит тогда, когда *макроскопически большое* (пропорциональное объёму системы) число частиц скапливается в одном квантомеханическом состоянии⁵. При конечных температурах она происходит тогда, когда химический потенциал μ (зависящий, вообще говоря, от температуры) оказывается положительным $\mu \geq 0$.

В рамках того же седлового приближения, полное число частиц в системе равно $N = \langle \Omega | \hat{N} | \Omega \rangle \simeq \int d\mathbf{x} |\psi_0(\mathbf{x})|^2 = \frac{\mu}{g} V$ — откуда можно найти связь химического потенциала и числа частиц при нуле температур, $\mu = gn$. Хорошим анзацем для основного состояния, обладающим необходимым свойством наличия аномальных средних, является *когерентное состояние* — состояние, собственное для оператора уничтожения⁶:

$$|\Omega\rangle \simeq |\psi_0\rangle = \exp\left(\int d\mathbf{x} \psi_0(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\right) |0\rangle, \quad \hat{\Psi}(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle = \psi_0(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle \quad (28)$$

Поучительным оказывается вычисления перекрытия двух состояний с различными фазами конденсата:

$$\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle = \exp\left(e^{-i\phi} \int d\mathbf{x} |\psi_0(\mathbf{x})|^2\right) \Rightarrow P = \frac{|\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle|^2}{\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 e^{i\phi} \rangle \cdot \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \exp(-2N(1 - \cos \phi)) \quad (29)$$

Это вычисление и демонстрирует, что такие когерентные состояния в термодинамическом пределе становятся ортогональными друг другу, а время перехода между состояниями с различными фазами для конечных систем экспоненциально велико.

Звук

Для систем со спонтанным нарушением симметрии имеется утверждение, которое носит название *теоремы Голдстоуна*: каждому генератору нарушенной симметрии соответствует некоторая мягкая (то есть безщелевая $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$) мода. В Бозе-газе роль это звуковая мода с линейным законом дисперсии $\omega(k) = ck$, и в её наличии можно убедиться из простых термодинамических соображений. При нуле температур, *термодинамический потенциал* системы $\Omega = F - \mu N = E - TS - \mu N = -\frac{\mu^2}{2g} V$; с другой же стороны из термодинамики известно, что $\Omega = -PV$, поэтому давление такой системы равно $P = \frac{\mu^2}{2g} = \frac{gn^2}{2}$. Скорость же звука опять-же можно найти из известного термодинамического соотношения:

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} = \frac{gn}{m} = \frac{\mu}{m} \quad (30)$$

Поучительно продемонстрировать явно наличие такой моды с использованием формализма функционального интегрирования. Для этого предлагается сделать нелинейную(!) замену переменных в функциональном интеграле следующего вида:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{-i\varphi(\mathbf{x}, t)}, \quad (31)$$

и вместо интегрирования по $\mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi]$ проводит интегрирование по всем положительным функциям $\rho(\mathbf{x}, t) > 0$ и по всем функциям $\varphi(\mathbf{x}, t) \in U(1)$ (фазы φ и $\varphi + 2\pi$ тождественны!). В общем случае замена переменных в функциональном интеграле может привести к возникновению ненулевого *якобиана перехода*. Однако данная конкретная замена имеет единичный якобиан, в чём можно убедиться, вернувшись с дискретному представлению в пространстве-времени:

$$d\bar{\Psi} d\Psi = d(\text{Re}\Psi) d(\text{Im}\Psi) = |\Psi| d(|\Psi|) d(\arg\Psi) = \sqrt{\rho} \frac{d\rho}{2\sqrt{\rho}} d\varphi = \frac{1}{2} d\rho d\varphi \Rightarrow \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] \equiv \mathcal{D}[\rho, \varphi] \quad (32)$$

³Другим простым примером спонтанного нарушения симметрии является ферромагнетизм — хотя исходно в обычных ферромагнетиках нет никакой выделенной оси и в этом смысле оно изотропно (обладает $O(3)$ вращательной симметрией), но при низких температурах оно приобретает конечную намагниченность, направленную в каком-то выделенном направлении — симметрия спонтанно нарушается

⁴С точки зрения теории фазовых переходов Ландау, аномальное среднее является *параметром порядка* соответствующего фазового перехода

⁵Даже если число частиц строго фиксировано и никакого аномального среднего нет, наличие или отсутствие конденсата можно выяснить по возникновению *дальнего порядка* — асимптотики корреляционной функции $\langle \Omega | \psi(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{y}) | \Omega \rangle \rightarrow \psi_0(\mathbf{x}) \psi_0^*(\mathbf{y})$ при $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$.

⁶Мы с этими состояниями уже сталкивались выше, когда строили представление функционального интеграла для многочастичной квантовой механики. Именно в контексте конденсации Бозе-Эйнштейна становится понятно, о какой именно когерентности речь — оно так называется как раз потому, что представляет собой хороший анзац для основного состояния конденсата.

(как обычно, константа $1/2$ нас совершенно не интересует — она войдёт в нормировку). Непосредственной подстановкой мы получаем следующий Лагранжиан:

$$S[\varphi, \rho] = \int dt d\mathbf{x} \left[\frac{i}{2} \overset{0}{\partial_t \rho} + \rho \partial_t \varphi - \frac{1}{2m} \left(\frac{(\nabla \rho)^2}{4\rho} + \rho (\nabla \varphi)^2 \right) + \mu \rho - \frac{g}{2} \rho^2 \right] \quad (33)$$

(первый член является полной производной и нас не интересует). Из такого представления видно, что фаза и плотность являются канонически сопряжёнными координатой и импульсом: $\rho = \frac{\partial L}{\partial(\partial_t \varphi)}$; поэтому можно было бы продолжить рассмотрение, используя операторный формализм с следующим гамильтонианом, описывающим уже *коллективные возбуждения*:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{(\nabla \rho)^2}{4\rho} + \rho (\nabla \varphi)^2 \right) - \mu \rho + \frac{g}{2} \rho^2, \quad [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\rho}(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (34)$$

Мы же пройдём чуть дальше и разложимся вблизи седла $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ до квадратичного порядка по $\delta\rho$ и производным фазы φ :

$$S[\varphi, \delta\rho] = \int dt d\mathbf{x} \left[\delta\rho \cdot \partial_t \varphi - \frac{1}{8m\rho_0} (\nabla \delta\rho)^2 - \frac{g}{2} \delta\rho^2 - \frac{\rho_0}{2m} (\nabla \varphi)^2 \right] \quad (35)$$

Теперь мы можем взять Гауссов функциональный интеграл по флуктуациям плотности, чтобы получить эффективное действие, описывающее флуктуации фазы. Интеграл устроен как гауссов источником $\partial_t \varphi$, и, как мы помним из предыдущего семинара, ответ выражается через функцию Грина соответствующей квадратичной части:

$$\int \mathcal{D}\delta\rho \cdot \exp \left(i \int dt d\mathbf{x} \left(-\frac{1}{2} \left[\frac{1}{4m\rho_0} (\nabla \delta\rho)^2 + g \cdot \delta\rho^2 \right] + \delta\rho \partial_t \varphi \right) \right) = \exp \left(\frac{i}{2} \int dt d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \cdot \partial_t \varphi(\mathbf{x}_1, t) G(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \partial_t \varphi(\mathbf{x}_2) \right) \quad (36)$$

В длинноволновом пределе можно записать $G^{-1}(\mathbf{k}) = g + \frac{k^2}{4m\rho_0} \approx g \Rightarrow G(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{g} \delta(\mathbf{x})$; поэтому после Гауссового интегрирования по плотности мы приходим к следующему действию для флуктуаций фазы:

$$S[\varphi] = \frac{1}{2} \int dt d\mathbf{x} \left[\frac{1}{g} (\partial_t \varphi)^2 - \frac{\rho_0}{m} (\nabla \varphi)^2 \right] \quad (37)$$

Если отвлечься от того, что фаза определена с точностью до⁷ 2π (что соответствует тому, что флуктуации фазы мы предполагаем маленькими), то мы получили нашу любимую безмассовую теорию Клейна-Гордона. Тот факт, что она зависит только от производных фазы и не зависит от самой фазы явно, конечно же, связан с той самой $U(1)$ симметрией. «Скорость света» же в этой теории равна скорости звука $c^2 = \frac{\rho_0 g}{m} = \frac{\mu}{m}$ — что совпадает с полученным ранее из термодинамических соображений. Полученная бесщелевая мода тем самым связана с длинноволновыми флуктуациями фазы конденсата.

⁷На самом деле, это имеет далеко идущие последствия. В такой системе имеются точечные топологические возбуждения, при обходе вокруг которых фаза меняется на 2π — вихревые нити, с которыми связана очень интересная физика, но которая всё-же выходит за рамки нашего курса.