

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM HÀ NỘI 2

PHẠM DUY THÀNH

NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA
KHÍ BOSE LOÃNG Ở NHIỆT ĐỘ CỰC THẤP

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán

Mã số: 9 44 01 03

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Người hướng dẫn khoa học: PGS.TS. NGUYỄN VĂN THỤ

HÀ NỘI, 2026

**Công trình được hoàn thành tại
Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2**

Người hướng dẫn khoa học: PGS.TS. Nguyễn Văn Thụ

Phản biện:

Phản biện:

Phản biện:

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng cấp Trường chấm luận án tiến sĩ
hợp tại: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2 vào hồi giờ ngày tháng
năm 2026.

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam
- Thư viện Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2

Mở đầu

1 Lí do chọn đề tài

Hiện tượng ngưng tụ Bose–Einstein (BEC), được Einstein dự đoán vào năm 1924, là một ví dụ điển hình về sự phá vỡ đối xứng tự phát trong lý thuyết trường lượng tử, có vai trò quan trọng trong nhiều lĩnh vực vật lý từ vi mô đến vĩ mô. Mặc dù các lý thuyết như Gross–Pitaevskii (GP) và Bogoliubov đã mô tả tốt khí Bose loãng ở nhiệt độ thấp, song chúng vẫn còn hạn chế khi xét đến tương tác và hiệu ứng nhiệt. Phương pháp tác dụng hiệu dụng bất khả quy hai hạt (CJT) cung cấp một khuôn khổ lý thuyết hệ thống hơn, cho phép khảo sát các đại lượng nhiệt động vượt ra ngoài gần đúng trường trung bình. Bên cạnh đó, các nghiên cứu về sự chuyển pha ướt và trạng thái tiền dính ướt trong hệ BEC hai thành phần vẫn còn rất ít và chưa được kiểm chứng thực nghiệm.

Từ những lý do trên, chúng tôi lựa chọn đề tài của luận án là “Nghiên cứu tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở nhiệt độ cực thấp”, trong đó chúng tôi khảo sát pha tiền dính ướt của BEC hai thành phần bằng lý thuyết GP và phân tích các đặc trưng nhiệt động của khí Bose đồng nhất ở nhiệt độ hữu hạn trong khuôn khổ lý thuyết CJT.

2 Mục đích nghiên cứu

Trong luận án này, chúng tôi đặt ra hai mục đích chính:

1. Tìm các biểu thức giải tích của một số đại lượng đặc trưng cho trạng thái tiền dính ướt (prewetting). Những kết quả này hy vọng sẽ định hướng cho việc thiết kế các thí nghiệm để quan sát được hiện tượng chuyển pha ướt trong hệ ngưng tụ Bose–Einstein nhiều thành phần.

2. Tính toán nhiệt độ chuyển pha của khí Bose loãng và sự biến đổi của các đại lượng nhiệt động ở nhiệt độ hữu hạn, lân cận nhiệt độ chuyển pha ngưng tụ. Trên cơ sở đó chúng ta có thể hiểu được ảnh hưởng của nhiệt độ lên quá trình chuyển pha ướt.

3 Đối tượng và phạm vi nghiên cứu

Đối tượng nghiên cứu của luận án là hệ khí Bose loãng, tương tác yếu, một và hai thành phần ở nhiệt độ cực thấp so với nhiệt độ phòng (cỡ vài chục đến vài trăm nano Kelvin), bao gồm cả miền nhiệt độ trên và dưới nhiệt độ chuyển pha ngưng tụ Bose–Einstein.

Phạm vi nghiên cứu gồm:

Đối với khí Bose hai thành phần: luận án khảo sát hệ trong không gian không đồng nhất ở nhiệt độ không tuyệt đối.

Đối với khí Bose loãng một thành phần: luận án xem xét hệ trong không gian đồng nhất ở nhiệt độ hữu hạn, cụ thể là ở miền lân cận nhiệt độ chuyển pha T_c và ở miền nhiệt độ cực thấp so với T_c (trong luận án gọi là nhiệt độ lân cận không).

4 Nhiệm vụ nghiên cứu

Trong luận án này, chúng tôi tập trung nghiên cứu những vấn đề sau:

1. Nghiên cứu sự dính ướt của hệ ngưng tụ Bose–Einstein hai thành phần bởi tường cứng.
2. Lý thuyết về ngưng tụ Bose–Einstein ở nhiệt độ hữu hạn bên cạnh lý thuyết Hartree–Fock–Bogoliubov đang được sử dụng rộng rãi.
3. Nghiên cứu tính chất nhiệt động của khí Bose loãng trong pha ngưng tụ ở nhiệt độ cực thấp.
4. Nhiệt độ chuyển pha ngưng tụ T_c của khí Bose loãng tương tác yếu.
5. Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở lân cận điểm chuyển pha.

5 Phương pháp nghiên cứu

Trong luận án này, chúng tôi sử dụng phương pháp nghiên cứu như sau:

1. Khi nghiên cứu về khí Bose loãng ở nhiệt độ không, chúng tôi sử dụng lý thuyết Gross–Pitaevskii. Do không có nghiệm giải tích chính xác đối với tham số trật tự của hệ, được đưa ra trong hệ phương trình Gross–Pitaevskii, là một hệ phương trình vi phân phi tuyến bậc hai, nên chúng tôi khắc phục bằng cách sử dụng thêm phương pháp gần đúng parabol kép (DPA). Ảnh hưởng bởi trường ngoài và ảnh hưởng do thăng giáng lượng tử được bỏ qua trong nghiên cứu này.
2. Khi nghiên cứu về khí Bose loãng ở nhiệt độ cực thấp, chúng tôi sử dụng phương pháp tác dụng hiệu dụng Cornwall–Jackiw–Tomboulis (CJT), trong đó tác dụng hiệu dụng là phiếm hàm của hàm trường và hàm truyền. Việc tìm chính xác tác dụng là vô cùng khó khăn, do đó tác dụng hiệu dụng được chúng tôi xác định trong gần đúng Hartree–Fock cải tiến ở mức độ gần đúng hai vòng. Ảnh hưởng của thăng giáng lượng tử và sự kích thích nhiệt được chúng tôi xem xét trong nghiên cứu này.

6 Cấu trúc của luận án

Ngoài phần mở đầu, kết luận–kiến nghị, các danh mục và tài liệu tham khảo, phần nội dung chính của luận án gồm bốn chương như sau:

Chương 1: Tổng quan về ngưng tụ Bose–Einstein.

Chương 2: Các phương pháp gần đúng.

Chương 3: Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở nhiệt độ không.

Chương 4: Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở nhiệt độ hữu hạn.

Chương 1

Tổng quan về ngưng tụ Bose–Einstein

1.1 Ngưng tụ Bose–Einstein

1.1.1 Thống kê Bose–Einstein

Theo vật lý thống kê lượng tử, số boson trung bình ở trạng thái đơn hạt $|n_i\rangle$ ứng với mức năng lượng ε_i là

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1}, \quad (1.1)$$

trong đó $\beta = (k_B T)^{-1}$ với T là nhiệt độ và k_B là hằng số Boltzmann. Vế phải của phương trình trên được gọi là *hàm phân bố Bose–Einstein*.

1.1.2 Sự ngưng tụ của khí Bose

Số hạt trung bình ở trạng thái cơ bản ($\varepsilon_0 = 0$) là

$$\langle n_0 \rangle = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}, \quad (1.2)$$

và do đó, sẽ có lượng lớn các hạt trở về trạng thái cơ bản khi thể hóa μ dần tới $\varepsilon_0 = 0$ ở phía âm.

Nhiệt độ tới hạn của khí Bose lí tưởng tự do là

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \approx 3.31 \frac{\hbar^2 \rho^{2/3}}{mk_B}, \quad (1.3)$$

trong đó $\rho = N/V$ là mật độ hạt.

Số hạt ngưng tụ N_0 của khí Bose lí tưởng đồng nhất ở nhiệt độ T ($< T_c$) là

$$N_0 = N - N_{\text{ex}} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]. \quad (1.4)$$

Theo phương pháp nhiễu loạn Bogoliubov và phương pháp giả thể Lee–Huang–Yang, tỉ lệ không ngưng tụ của khí Bose loãng ở nhiệt độ không là

$$\frac{N_{\text{ex}}}{N} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3}, \quad (1.5)$$

trong đó a_s là *độ dài tán xạ sóng s* (*s-wave scattering length*).

1.2 Các kết quả thực nghiệm về ngưng tụ Bose–Einstein

1.2.1 Các kết quả thực nghiệm về sự ngưng tụ của khí Bose

Tháng 6 năm 1995, Cornell và Wieman tại JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) lần đầu tiên quan sát được ngưng tụ Bose–Einstein khi làm lạnh khí Rubidium-87 (^{87}Rb) đến nhiệt độ 170 nK, tạo nên trạng thái ngưng tụ với khoảng 2000 nguyên tử. Sự hình thành BEC được xác nhận qua các đặc trưng rõ rệt trong phân bố vận tốc và được ghi nhận bằng kỹ thuật chụp ảnh thời gian bay (TOF imaging). Ngay sau đó, Ketterle tại Viện Công nghệ Massachusetts (MIT) (tháng 9 năm 1995) đã tạo BEC của Sodium-23 ở 200 nK. Các thí nghiệm tiên phong này tạo ra sự phát triển mạnh mẽ trong các nghiên cứu về BEC, cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm.

1.2.2 Các kết quả thực nghiệm về sự ngưng tụ của hỗn hợp khí Bose

Sau khi tạo được ngưng tụ Bose–Einstein đầu tiên, các thí nghiệm tiếp theo đã mở rộng sang hệ hỗn hợp BEC nhiều thành phần, bao gồm cả các hệ đồng vị và dị nguyên tử. Nhờ kỹ thuật làm lạnh cảm ứng và điều chỉnh tương tác bằng cộng hưởng Feshbach, các nhà nghiên cứu đã quan sát được hiện tượng chuyển pha giữa trạng thái trộn lẫn và phân tách pha. Những kết quả này giúp hiểu rõ hơn vai trò của tương tác liên loài trong cấu trúc và động lực học của hệ Bose siêu lạnh, đồng thời tạo nền tảng cho mô phỏng lượng tử và công nghệ lượng tử trong tương lai.

1.2.3 Các công nghệ tạo tường cứng

Hai phương pháp, bẫy quang học gần bề mặt và gương phản xạ ánh sáng xanh, đều chứng minh rằng có thể tạo ra các biên gần như tường cứng cho hệ BEC bằng công nghệ quang học tiên tiến. Những kỹ thuật này mở ra khả năng mô phỏng các hệ lượng tử có điều kiện biên xác định, từ đó phục vụ cho các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm trong các hệ BECs nói riêng và các hệ lượng tử nói chung.

1.3 Các lý thuyết nghiên cứu ngưng tụ Bose–Einstein

1.3.1 Lý thuyết Gross–Pitaevskii

Phương trình Gross–Pitaevskii phụ thuộc thời gian mô tả hàm sóng ngưng tụ là

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.6)$$

trong đó $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m}a_s$ là hằng số tương tác cặp, với a_s là độ dài tán xạ sóng s .

Ở trạng thái cơ bản, ta có thể viết hàm sóng của ngưng tụ dưới dạng

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r})e^{-i\frac{\mu t}{\hbar}}, \quad (1.7)$$

trong đó μ là thế hóa và Ψ_0 là một hàm thực thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa $\int d\mathbf{r} \Psi_0^2 = N_0 = N$. Thay (1.7) vào (1.6) ta thu được phương trình GP không phụ thuộc thời gian (TIGP),

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g \Psi_0^2(\mathbf{r}) \right) \Psi_0(\mathbf{r}) = \mu \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

1.3.2 Phương pháp tác dụng hiệu dụng Cornwall–Jackiw–Tomboulis

Ứng với sự triệt tiêu của nguồn ngoài ($J = K = 0$), trạng thái cơ bản của hệ vật lý phải thỏa mãn phương trình khe

$$\frac{\delta \Gamma[\Psi_0, G]}{\delta \Psi_0} = 0, \quad (1.9)$$

và phương trình Schwinger–Dyson (SD)

$$\frac{\delta \Gamma[\Psi_0, G]}{\delta G} = 0, \quad (1.10)$$

trong đó $\Gamma[\Psi_0, G]$ là tác dụng hiệu dụng 2PI:

$$\Gamma[\Psi_0, G] = S_0[\Psi_0] + \frac{i\hbar}{2} \text{tr} \left(\ln G^{-1} + G_0^{-1}(\Psi_0)G - \mathbb{1} \right) + \Gamma_2[\Psi_0, G]. \quad (1.11)$$

Mật độ thế năng hiệu dụng CJT ứng với tác dụng hiệu dụng (1.11) có dạng:

$$V_{\text{CJT}} = V_0(\Psi_0) - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{tr} \left[\ln G^{-1}(k) + G_0^{-1}(k)G(k) - \mathbb{1} \right] + V_2[\Psi_0, G], \quad (1.12)$$

trong đó $V_0(\Psi_0)$ là thế cổ điển.

Chương 2

Các phương pháp gần đúng

2.1 Gần đúng parabol kép

2.1.1 Gần đúng parabol kép trong nghiên cứu hệ ngưng tụ Bose–Einstein một thành phần

Ý tưởng cơ bản của gần đúng DPA này là thay thế GP bậc 4:

$$V_{\text{GP}} = -\mu|\Psi_0|^2 + \frac{g}{2}|\Psi_0|^4 \quad (2.1)$$

bằng một thế bậc 2 (gọi là thế DPA):

$$V_{\text{DPA}}(\Psi_0) = g\rho^2 \left[2 \left(1 - \frac{\sqrt{|\Psi_0|^2}}{\sqrt{\rho}} \right)^2 - \frac{1}{2} \right]. \quad (2.2)$$

Sự thay thế này khiến phương trình GP mô tả hàm sóng ngưng tụ trở thành phương trình vi phân tuyến tính, và từ đó, chúng ta có thể dễ dàng tìm được nghiệm giải tích của nó.

2.1.2 Gần đúng parabol kép trong nghiên cứu hệ ngưng tụ Bose–Einstein hai thành phần

Hệ phương trình TIGP không thứ nguyên mô tả hàm sóng ngưng tụ không thứ nguyên của hệ có dạng:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi_1}{d\tilde{z}^2} - \psi_1 + \psi_1^3 + K|\psi_2|^2\psi_1 &= 0, \\ -\xi^2\frac{d^2\psi_2}{d\tilde{z}^2} - \psi_2 + \psi_2^3 + K|\psi_1|^2\psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Xét trường hợp hai thành phần ngưng tụ cùng cân bằng ở pha khối và ở trong không gian rộng vô hạn, ta có điều kiện biên Dirichlet như sau:

$$\begin{aligned} \psi_1(-\infty) &= \psi_2(\infty) = 0, \\ \psi_2(-\infty) &= \psi_1(\infty) = 1. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Để thu được biểu thức giải tích của ψ_j với mọi giá trị của K và ξ , ta cần sử dụng phương pháp DPA, với thể GP không thứ nguyên của hệ BEC hai thành phần được thay thế bởi thể DPA không thứ nguyên:

$$\mathcal{V}_{\text{DPA}}(\psi_1, \psi_2) = 2(|\psi_j| - 1)^2 + (K - 1)|\psi_{j'}|^2 - \frac{1}{2}, \quad (2.5)$$

Kết quả thu được là sự xuất hiện của hai phương trình độc lập tuyến tính mô tả gần đúng các tham số trật tự rút gọn của hệ:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi_j}{d\tilde{z}^2} + 2(\psi_j - 1) &= 0, \\ -\xi^2 \frac{d^2\psi_{j'}}{d\tilde{z}^2} + (K - 1)\psi_{j'} &= 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Nghiệm của hai phương trình trên tương ứng là

$$\begin{aligned} \psi_j(\tilde{z}) &= 1 - \frac{\sqrt{K+1}}{\sqrt{2} + \sqrt{K+1}} \exp\left(-\sqrt{2}|\tilde{z}|\right), \\ \psi_{j'}(\tilde{z}) &= \frac{\sqrt{K-1}}{\sqrt{2} + \sqrt{K-1}} \exp\left(-\frac{\sqrt{K-1}}{\xi}|\tilde{z}|\right), \end{aligned} \quad (2.7)$$

với $(j, j') = (1, 2)$ nếu $z \geq 0$ và $(j, j') = (2, 1)$ nếu $z \leq 0$.

2.2 Gần đúng Hartree–Fock

Trong gần đúng Hartree–Fock, ta chỉ giữ lại đóng góp 2PI đơn giản nhất trong phiếm hàm Γ_2 của tác dụng hiệu dụng CJT, cụ thể là giản đồ bong bóng kép (double-bubble). Giản đồ này biểu diễn các hiệu ứng tự tương tác bậc thấp nhất (lowest-order self-interaction) một cách nhất quán (phi nhiễu loạn), đồng thời thực hiện phép tổng vô hạn một lớp các giản đồ nhiễu loạn, cụ thể là các giản đồ kiểu “hoa cúc” (daisy) và “đa hoa cúc” (superdaisy). Ngoài ra, nó mô tả các hiệu ứng trường trung bình như tương tác trực tiếp (Hartree), và trong một số hệ là cả tương tác trao đổi (Fock).

2.2.1 Mật độ Lagrangian tương tác trong gần đúng HF

Trong lý thuyết Ψ^4 , mật độ Lagrangian là

$$\mathcal{L}[\Psi, \Psi^*] = \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Psi - \mu |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4. \quad (2.8)$$

Theo hình thức luận thời gian ảo ở nhiệt độ T hữu hạn, mật độ thể năng hiệu dụng CJT có dạng:

$$V_{\text{CJT}} = -\mu \Psi_0^2 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} \left[\ln G^{-1}(k) + G_0^{-1}(k) G(k) - \mathbb{1} \right] + V_2(\Psi_0, G), \quad (2.9)$$

Trong phương trình trên, ký hiệu $\int_{\beta}$ được chúng tôi quy ước là

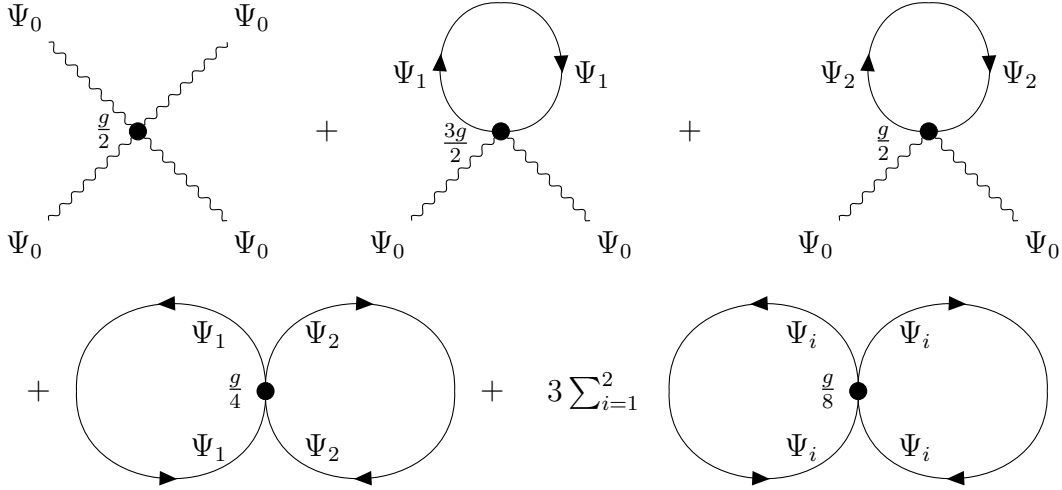
$$\int_{\beta} f(k) \equiv \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} f(\omega_n, |\mathbf{k}|). \quad (2.10)$$

với $\omega_n = 2n\pi\hbar^{-1}\beta^{-1}$ là các tần số Matsubara đối với boson.

Trong gần đúng HF, biểu thức của $V_2(\Psi_0, G)$ có dạng:

$$V_2(\Psi_0, G) = \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{g}{2}\Psi_0^2(3P_{11} + P_{22}) + \frac{g}{4}P_{11}P_{22} + \frac{3g}{8}(P_{11}^2 + P_{22}^2), \quad (2.11)$$

trong đó $P_{jj} = \int_{\beta} G_{jj}(k)$ (với $j = 1, 2$) là các loop biểu diễn các tích phân xung lượng trong không gian xung lượng.



Hình 2.1: Giản đồ Feynman 2PI ứng với phiếm hàm LW.

2.2.2 Gần đúng cây (tree approximation)

Trong gần đúng cây, mật độ thế năng hiệu dụng có dạng:

$$V_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4. \quad (2.12)$$

2.2.3 Gần đúng một vòng (one-loop)

Trong gần đúng một vòng, mật độ thế năng hiệu dụng có dạng:

$$V_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k)]. \quad (2.13)$$

2.2.4 Gần đúng hai vòng (two-loop)

Trong gần đúng hai vòng, mật độ thế năng hiệu dụng có dạng:

$$\begin{aligned} V_{\text{CJT}} = & -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k) + G_0^{-1}(k)G(k) - \mathbb{1}] \\ & + \frac{3g}{8}(P_{11}^2 + P_{22}^2) + \frac{g}{4}P_{11}P_{22}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Chương 3

Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở nhiệt độ không

3.1 Trạng thái cơ bản của hệ Bose–Einstein hai thành phần trong không gian nửa vô hạn

Chúng tôi xem xét hệ BEC hai thành phần đối xứng tịnh tiến trong mặt phẳng (x, y) và bị giới hạn bởi một tường cứng tại $z = 0$. Ngoài ra, thay vì giữ số hạt cố định, chúng tôi xem xét hệ với thế hóa cố định. Giả sử ngưng tụ 1 đang ổn định ở pha khối với thế hóa $\mu_1 = \bar{\mu}_1$ và mật độ $\rho_1 = \mu_1/g_{11}$. Trong khi đó, ngưng tụ 2 với thế hóa μ_2 và mật độ ρ_2 chưa đạt được sự ổn định pha khối. Sự cân bằng hai pha khối của hệ đạt được nếu thế hóa và mật độ của ngưng tụ 2 lần lượt là $\mu_2 = \bar{\mu}_2 = \mu_1 \sqrt{g_{22}/g_{11}}$ và $\rho_2 = \bar{\rho}_2 = \bar{\mu}_2/g_{22}$.

Hệ phương trình TIGP mô tả tham số trật tự rút gọn của hệ như sau:

$$-\frac{d^2\psi_1}{d\tilde{z}^2} - \psi_1 + \psi_1^3 + K\psi_2^2\psi_1 = 0, \quad (3.1a)$$

$$-\xi^2 \frac{d^2\psi_2}{d\tilde{z}^2} - \epsilon\psi_2 + \psi_2^3 + K\psi_1^2\psi_2 = 0, \quad (3.1b)$$

với điều kiện biên tương ứng là: $\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_2(\infty) = 0$, $\psi_1(\infty) = 1$.

Đại lượng ϵ trong vế trái của (3.1b) được định nghĩa là $\epsilon = \mu_2/\bar{\mu}_2$ và được gọi là tỉ lệ thế hóa. Sử dụng phương pháp DPA, chúng tôi thu được các tham số trật tự rút gọn như sau:

- Ở miền bên phải mặt phân cách ($\tilde{z} > 0$):

$$\psi_1(\tilde{z}) = 1 + A_1 e^{-\sqrt{2}\tilde{z}} \quad (3.2a)$$

$$\psi_2(\tilde{z}) = B_1 \exp\left(-\frac{\sqrt{K-\epsilon}}{\xi}\tilde{z}\right). \quad (3.2b)$$

- Ở miền bên trái mặt phân cách ($\tilde{z} < 0$):

$$\psi_1(\tilde{z}) = 2A_2 \sinh\left(\sqrt{\epsilon K - 1}\tilde{z}\right), \quad (3.3a)$$

$$\psi_2(\tilde{z}) = 2B_2 \sinh\left(\frac{\sqrt{2\epsilon}}{\xi}\tilde{z}\right) + \sqrt{\epsilon} \left[1 - \exp\left(-\frac{\sqrt{2\epsilon}}{\xi}\tilde{z}\right)\right]. \quad (3.3b)$$

Các hằng số tích phân A_1 , A_2 , B_1 , B_2 được xác định từ điều kiện liên tục của các tham số trật tự rút gọn và đạo hàm bậc nhất của nó tại mặt phân cách ($\tilde{z} = \ell$).

3.2 Giải đồ pha tiền dính ướt

Chúng tôi xem xét quá trình tạo nhân (nucleation), là quá trình thành phần 2 bắt đầu hình thành trong thành phần 1. Khi đó ψ_2 nhỏ so với một nên ta có hệ phương trình

$$-\frac{d^2\psi_1}{d\tilde{z}^2} - \psi_1 + \psi_1^3 = 0, \quad (3.4a)$$

$$-\xi^2 \frac{d^2\psi_2}{d\tilde{z}^2} - \epsilon\psi_2 + K\psi_1^2\psi_2 = 0, \quad (3.4b)$$

Giải hệ phương trình trên thu được

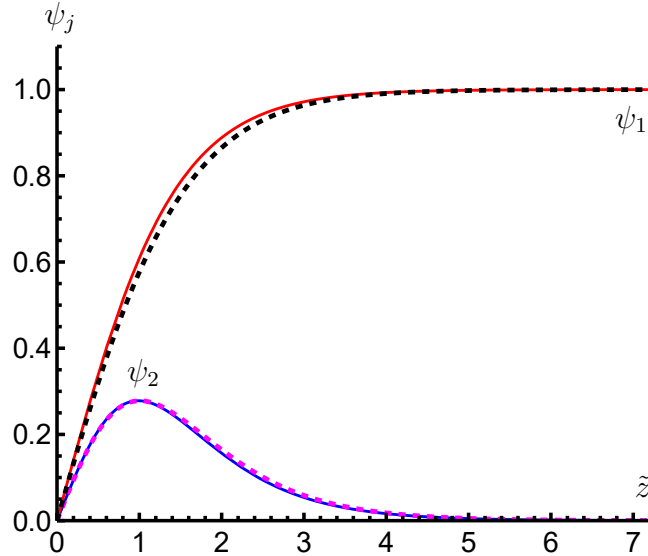
$$\epsilon_n = K - \frac{\xi^2}{2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8K}{\xi^2}} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.5)$$

$$\psi_2(\tilde{z}) = \left[\cosh \left(\frac{\tilde{z}}{\sqrt{2}} \right) \right]^{-\sqrt{2}\xi_1/\Lambda_2} \sum_{m=0}^n c_m \left[\tanh \left(\frac{\tilde{z}}{\sqrt{2}} \right) \right]^m. \quad (3.6)$$

Điều kiện biên $\psi_2(0) = a_0 = 0$ dẫn tới $a_2 = 0$. Từ đó suy ra trị riêng duy nhất ứng với $n = 1$ là

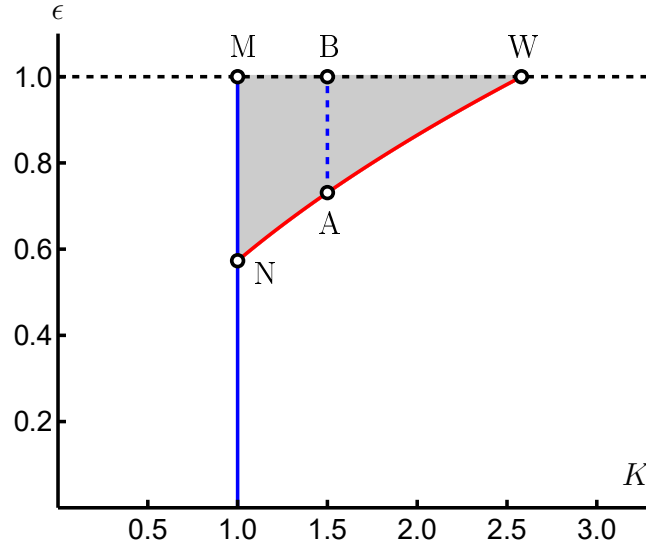
$$\epsilon = K - \frac{\xi^2}{8} \left[\sqrt{1 + \frac{8K}{\xi^2}} - 3 \right]^2. \quad (3.7)$$

Để xác thực kết quả giải tích thu được, chúng tôi vẽ đồ thị biểu diễn tham số trật tự như trong Hình 3.1. Sự trùng khớp giữa hai đồ thị góp phần xác nhận tính chính xác đối với kết quả giải tích mà chúng tôi thu được.



Hình 3.1: Đồ thị biểu diễn tham số trật tự rút gọn theo $\tilde{z}$ tại $\epsilon = 0.92$, $\xi = 1/2$ và $K = 1.3$. Đường nét liền biểu diễn kết quả giải tích, còn đường nét đứt biểu diễn kết quả tính số.

Trong Hình 3.2, miền không trộn lẫn (the immiscible region), miền này được ngăn cách với miền trộn lẫn (the miscible region) bằng đoạn thẳng MN, đặc trưng cho các trạng thái trộn lẫn (the demixing states) có $K = 1$.



Hình 3.2: Đường tạo nhân tại $\xi = 1/3$. Miền màu xám được thể hiện trong đồ thị đặc trưng cho miền không dính ướt.

Chúng tôi xem xét trường hợp được mô tả trong Hình 3.2 với giá trị xác định của $\xi = 1/3$. Miền không dính ướt của giản đồ được thể hiện trực quan bằng miền màu xám. Tại điểm ướt W, tỉ lệ thể hóa ϵ ứng với sự cân bằng hai pha. Tại đó, độ dài phụ trợ của ngưng tụ 2, $\bar{\xi}_2$, thỏa mãn điều kiện $\bar{\xi}_2 = \xi_2$ (và $\epsilon = 1$). Đường tạo nhân giao với đường cân bằng pha khối tại W, trong đó cường độ tương tác tỉ đối K tại đó được xác định là K_{wet} . Từ (3.7), chúng tôi suy ra kết quả sau:

$$K_{\text{wet}} = \epsilon + \frac{2}{9} \left(\frac{\epsilon}{\xi} - \xi \right)^2. \quad (3.8)$$

Dễ dàng thấy rằng giá trị cực đại của K_{wet} càng lớn khi ξ càng nhỏ. Với $\xi = 1/3$ thì $K_{\text{wet}} \leq 2.58$, miền giá trị này của K là phù hợp để có thể điều chỉnh được trong thực nghiệm.

Chúng tôi giả sử rằng $\xi_2 < \xi_1$. Theo đó, quá trình chuyển pha ướt không thể xảy ra khi sức căng bề mặt γ_{12} tại mặt phân cách giữa hai ngưng tụ và sức căng bề mặt γ_{Wj} của ngưng tụ j tại tường (được xác định ở phần sau) tuân theo bất đẳng thức:

$$\gamma_{W1} < \gamma_{W2} + \gamma_{12}. \quad (3.9)$$

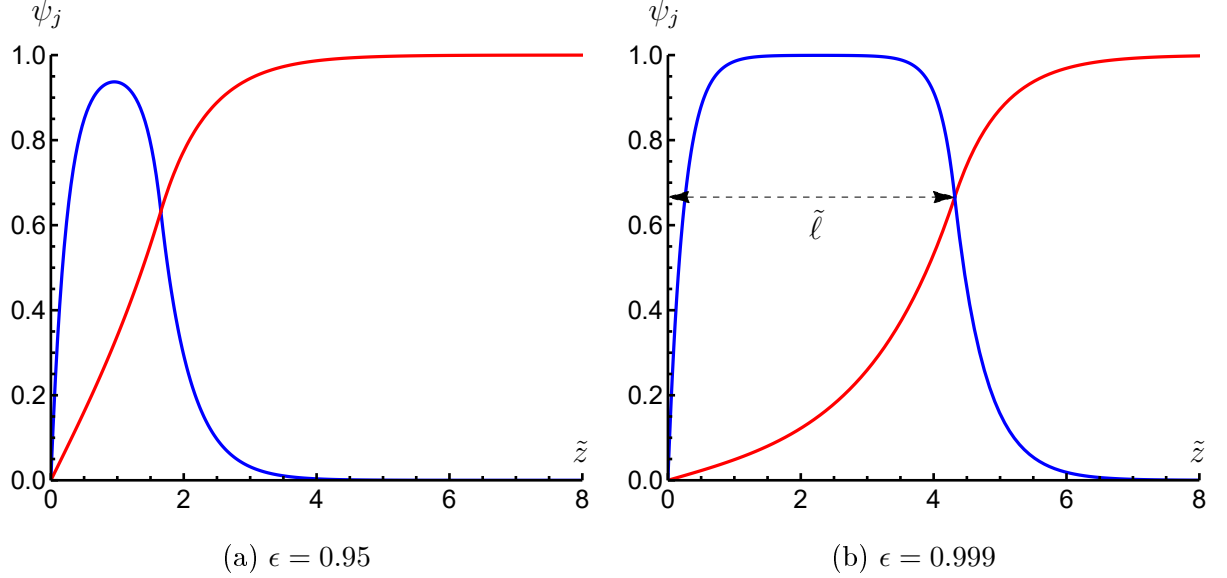
Điều kiện trên tương đương với

$$K > \epsilon + \frac{2}{9} \left(\frac{\epsilon}{\xi} - \xi \right)^2 = K_{\text{wet}}. \quad (3.10)$$

Bất đẳng thức trên thể hiện miền giá trị của cường độ tương tác tỉ đối K mà sự chuyển pha ướt không thể xảy ra. Nói cách khác, giai đoạn tiền dính ướt diễn ra ở miền $1 < K \leq K_{\text{wet}}$. Trong giản đồ pha ướt (Hình 3.2), trạng thái tiền dính ướt tương ứng với miền MNW (miền màu xám). Quá trình chuyển pha ướt xảy ra khi $1 < K \leq K_{\text{wet}}$ và $\epsilon = 1$. Dưới đoạn màu đỏ NW, sự tạo nhân không xảy ra.

3.3 Tính chất nhiệt động của trạng thái tiền dính ướt

3.3.1 Độ dày của lớp tiền dính ướt



Hình 3.3: Đồ thị biểu diễn tham số trật tự rút gọn của hai thành phần ngưng tụ theo $\tilde{z}$ tại $\xi = 1/3$ và $K = 1.5$.

Độ dày của lớp tiền dính ướt được xác định từ điều kiện

$$\psi_1(\tilde{\ell}) = \psi_2(\tilde{\ell}) \quad (3.11)$$

có biểu thức giải tích như sau:

$$\tilde{\ell} \approx \frac{1}{2\sqrt{\epsilon K - 1}} \ln \left(\frac{\sqrt{K - \epsilon} + \sqrt{2\epsilon}(1 - \sqrt{\epsilon}) + \epsilon\sqrt{\epsilon K - 1}}{\sqrt{K - \epsilon} + \sqrt{2\epsilon}(1 - \sqrt{\epsilon}) - \epsilon\sqrt{\epsilon K - 1}} \right). \quad (3.12)$$

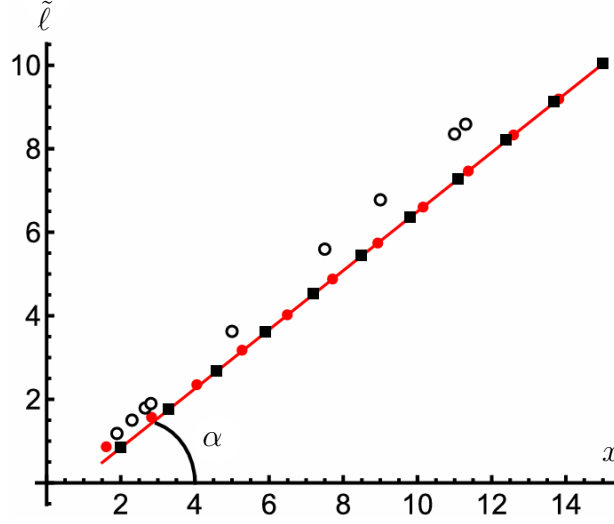
Nhìn vào Hình 3.3 ta thấy, độ dày của lớp tiền dính ướt sẽ tăng khi tỉ lệ thể hóa tăng.

Từ phương trình (3.12) ta thấy: độ dày của lớp tiền dính ướt phụ thuộc vào cả cường độ tương tác tỉ đối và tỉ lệ thể hóa, nhưng lại không phụ thuộc vào độ dài đặc trưng tỉ đối. Đáng chú ý, mẫu số trong hàm logarit của (3.12) sẽ dần tới không khi tỉ lệ thể hóa dần tới một, điều này chỉ ra rằng, độ dày của lớp tiền dính ướt sẽ đạt đến mức vĩ mô và sự chuyển pha ướt sẽ xảy ra khi tỉ lệ thể hóa bằng một. Kết quả này củng cố cho quan điểm: sự chuyển pha ướt của BECs hấp phụ trên một tường cứng là sự chuyển pha bậc một.

Chúng tôi phân tích (3.12) trong thang logarit bằng cách đặt $x = -\ln(1 - \epsilon)$, từ đó thu được

$$\tilde{\ell} \approx \frac{1}{2\sqrt{K - 1}} \left[x - \ln \left(\frac{3K + \sqrt{2(K - 1)} - 1}{4(K - 1)} \right) \right]. \quad (3.13)$$

Rõ ràng, độ dày của lớp tiền dính ướt thay đổi tuyến tính theo x , điều này được xác nhận thông qua đồ thị dưới đây.



Hình 3.4: Đồ thị biểu diễn độ dày không thứ nguyên của lớp tiền dính ướt $\tilde{\ell}$ theo x tại $K = 1.5$. Đường nét liền được vẽ theo kết quả tính số của phương trình (3.11). Các ký hiệu tròn đỏ và các ký hiệu vuông lần lượt là các kết quả thu được từ (3.12) và (3.13). Các ký hiệu tròn rỗng ứng với các kết quả tính số trong lý thuyết GP.

Như vậy, cả kết quả tính số theo lý thuyết GP và DPA đều cho thấy độ dày của lớp tiền dính ướt có thể được biểu diễn như một hàm tuyến tính của x với hệ số góc $a = \tan \alpha$, trong đó α là góc hợp bởi đồ thị $\ell(x)$ và trục x (như trong Hình 3.4). Trong DPA, hệ số góc thu được từ (3.13) là

$$a_{\text{DPA}} = \frac{1}{2\sqrt{K-1}}. \quad (3.14)$$

Hệ thức trên cho thấy, góc α giảm khi cường độ tương tác tỉ đối tăng lên. Trong Bảng 3.1, chúng tôi đưa ra các giá trị của a_{DPA} , a_{GP} và sai số tỉ đối tương ứng

$$\delta = \frac{|a_{\text{GP}} - a_{\text{DPA}}|}{a_{\text{GP}}}. \quad (3.15)$$

Điều quan trọng mà ta có thể thấy là sai số tỉ đối của DPA so với lý thuyết GP nhỏ hơn 10%.

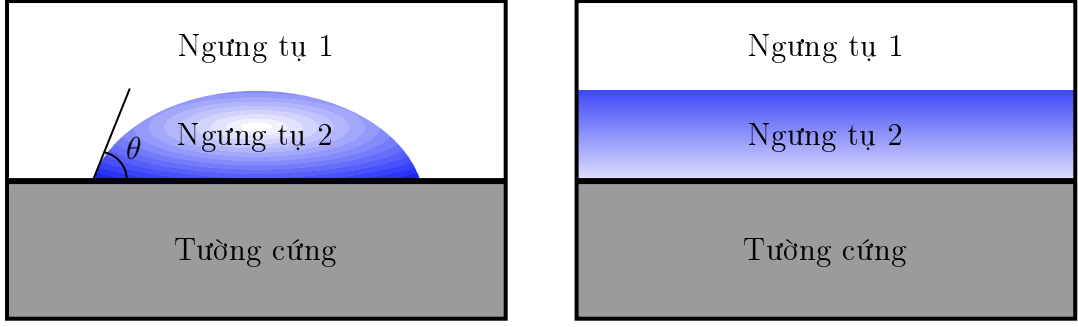
K	a_{DPA}	a_{GP}	δ (%)
1.1	0	0	0
1.3	0.913	0.916	0.36
1.5	0.707	0.756	6.53

Bảng 3.1: Hệ số góc a trong lý thuyết GP, DPA và sai số tỉ đối tương ứng.

3.3.2 Góc tiếp xúc

Theo định luật Young, góc tiếp xúc θ thỏa mãn điều kiện cân bằng cơ học của một đường tiếp xúc ba pha (three-phase contact line),

$$\gamma_{\text{W1}} = \gamma_{\text{W2}} + \gamma_{12} \cos \theta. \quad (3.16)$$



Hình 3.5: Hỗn hợp ngưng tụ Bose–Einstein hai thành phần bị hấp phụ trên một tường cứng ở pha tiền dính ướt, $0 < \theta < \pi/2$, (hình bên trái) và ở pha ướt (hình bên phải).

Sức căng bề mặt tại mặt phân cách giữa hai ngưng tụ là thể lớn dư thừa trên một đơn vị diện tích bề mặt. Về mặt toán học, nó có thể được xác định từ các tham số trật tự thông qua hệ thức sau:

$$\gamma_{12} = 4P\xi_1 \int_0^\infty d\tilde{z} \left[\left(\frac{d\psi_1}{d\tilde{z}} \right)^2 + \xi^2 \left(\frac{d\psi_2}{d\tilde{z}} \right)^2 \right]. \quad (3.17)$$

Thay (3.2) và (3.3) vào (3.17) ta được

$$\gamma_{12} = P \left(M\xi_1 + N\bar{\xi}_2 \right), \quad (3.18)$$

trong đó M và N là các hằng số phụ thuộc vào ϵ , K và ξ .

Trong gần đúng DPA, sức căng bề mặt của ngưng tụ j với tường là

$$\gamma_{Wj,\text{pure}} = 2\sqrt{2}P_j\xi_j. \quad (3.19)$$

Trong hệ ngưng tụ mà chúng tôi đang khảo sát, ngưng tụ 1 ở bên phải mặt phân cách, còn ngưng tụ 2 bị hấp phụ bởi một tường cứng. Do đó, sức căng của ngưng tụ 1 tại tường được định nghĩa là độ chênh lệch trên một đơn vị diện tích giữa tổng thể lớn của hệ và thể lớn của nửa không gian lấp đầy pha tinh khiết 1 ở pha khối, từ hệ phương trình GP (3.1) ta có:

$$\gamma_{W1} = \gamma_{W1,\text{pure}} + \gamma_{W2,\text{pure}} - 2P_1\xi_1 \int_0^\infty K\psi_1^2\psi_2^2 d\tilde{z}. \quad (3.20)$$

Ở gần đường cân bằng pha khối (đường $\epsilon = 1$ trong Hình 3.2), sức căng tại mặt phân cách giữa hai ngưng tụ có thể rút gọn thành

$$\gamma_{12} = 2\sqrt{2}P \left(\xi_1 \frac{\sqrt{\epsilon K - 1}}{\sqrt{2} + \sqrt{\epsilon K - 1}} + \bar{\xi}_2 \frac{\epsilon^{3/2} [K - \epsilon + \sqrt{2\epsilon(K - \epsilon)}]}{(\sqrt{2\epsilon} + \sqrt{K - \epsilon})^2} \right). \quad (3.21)$$

Trong gần đúng bậc 1 của $(1 - \epsilon)$, hệ thức (3.21) có thể viết gần đúng dưới dạng

$$\gamma_{12} \approx 2\sqrt{2}P (\xi_1 + \bar{\xi}_2) \frac{\sqrt{K - 1}}{\sqrt{2} + \sqrt{K - 1}} + F(K, \xi)(1 - \epsilon), \quad (3.22)$$

trong đó $F(K, \xi)$ là một hàm của K và ξ .

Tại pha ướt ($\theta = 0$), số hạng cuối cùng trong vế phải của (3.20) sẽ bằng không. Kết hợp (3.16), (3.19), (3.20) và (3.21), chúng tôi xác định được ranh giới pha ướt (wetting phase boundary) trong mặt phẳng $(\xi, 1/K)$ có phương trình

$$\sqrt{K-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\xi} - 1 \right). \quad (3.23)$$

Hơn nữa, chúng tôi xác định được góc tiếp xúc θ thỏa mãn

$$\cos \theta = \frac{\gamma_{W1} - \gamma_{W2, \text{pure}}}{\gamma_{12}}. \quad (3.24)$$

Ở gần đường cân bằng pha khối, cosine của góc tiếp xúc có thể rút gọn thành

$$\cos \theta \approx \left(\frac{1-\xi}{1+\xi} \right) \frac{\sqrt{2} + \sqrt{K-1}}{\sqrt{K-1}}. \quad (3.25)$$

Từ (3.25) ta thấy, trong trường hợp hệ phân tách yếu

$$\cos \theta \approx \left(\frac{1-\xi}{1+\xi} \right) \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{K-1}}. \quad (3.26)$$

Ngược lại, trong trường hợp hệ phân tách mạnh, góc tiếp xúc sẽ không phụ thuộc vào cường độ tương tác tỉ đối K ,

$$\cos \theta \approx \frac{1-\xi}{1+\xi}. \quad (3.27)$$

Phương trình (3.27) một lần nữa xác nhận rằng, khi cường độ tương tác tỉ đối đủ lớn, góc tiếp xúc chỉ phụ thuộc vào độ dài đặc trưng tỉ đối. Hơn nữa, (3.27) cũng cho thấy, góc tiếp xúc luôn khác không khi cường độ tương tác tỉ đối đủ lớn. Điều này cho biết, quá trình chuyển pha ướt không xảy ra đối với hệ phân tách rất mạnh.

Chương 4

Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng ở nhiệt độ hữu hạn

4.1 Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng trong gần đúng một vòng

Chúng tôi bắt đầu từ mật độ Lagrangian của khí Bose loãng đồng nhất

$$\mathcal{L} = \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Psi - \mu |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4. \quad (4.1)$$

Trong gần đúng cây, trị trung bình $\Psi_0 = \sqrt{\mu/g}$ ứng với pha phá vỡ đối xứng tự phát. Hàm truyền ở mức độ gần đúng này là

$$G_0(k) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_n^2 + E_0^2(k)} \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + g\Psi_0^2 & \hbar\omega_n \\ -\hbar\omega_n & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + 3g\Psi_0^2 \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

trong đó $\omega_n = 2\pi n\hbar^{-1}\beta^{-1}$ ($n \in \mathbb{Z}$) là tần số Matsubara của boson ở nhiệt độ T . Hệ thức tán sắc được xác định thông qua các thành phần trên đường chéo chính của hàm truyền

$$E_0(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2g\Psi_0^2 \right)}. \quad (4.3)$$

Hệ thức tán sắc trên cho thấy, phổ năng lượng của các kích thích không có khe năng lượng, tức là khi $k = 0$ thì $E_0 = 0$, điều này tương ứng với sự phá vỡ đối xứng $U(1)$ tự phát và phù hợp với định lý Goldstone.

4.1.1 Độ suy giảm ngưng tụ và nhiệt độ tối hạn

Trong gần đúng một vòng, mật độ thế năng hiệu dụng CJT ứng với mật độ Lagrangian (4.1) có dạng:

$$V_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k)], \quad (4.4)$$

với hàm truyền $G(k)$ trong gần đúng một vòng là

$$G(k) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_n^2 + E(k)^2} \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + g\Psi_0^2 & \hbar\omega_n \\ -\hbar\omega_n & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + 3g\Psi_0^2 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Hệ thức tán sắc tương ứng là

$$E(k) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + g\Psi_0^2\right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + 3g\Psi_0^2\right)} = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\mu\right)}. \quad (4.6)$$

Trong giới hạn bước sóng dài, dễ thấy phổ năng lượng tỉ lệ tuyến tính với vector sóng,

$$E(k) \approx \hbar k \sqrt{\frac{\mu}{m}}, \quad (4.7)$$

phù hợp với phổ của Nambu–Goldstone boson do sự phá vỡ $U(1) \times U(1)$.

Để xác định số hạng cuối cùng trong vế phải của (4.4), chúng tôi áp dụng phương pháp tổng tần số Matsubara

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \ln [\hbar^2 \omega_n^2 + E(k)^2] = E(k) + \frac{2}{\beta} \ln (1 - e^{-\beta E(k)}), \quad (4.8)$$

từ đó thu được

$$V_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[E(k) + \frac{2}{\beta} \ln (1 - e^{-\beta E(k)}) \right]. \quad (4.9)$$

Bằng cách cực tiểu hóa mật độ thế năng hiệu dụng CJT (4.9) theo Ψ_0 , chúng tôi thu được phương trình khe trong gần đúng một vòng

$$-\mu + g\rho_0 + \frac{g}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[2 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + 2g\Psi_0^2 \right) - g\Psi_0^2 \right] \frac{1}{E(k)} \left(1 + \frac{2}{e^{\beta E(k)} - 1} \right) = 0. \quad (4.10)$$

Thay $\mu = g\rho$ vào (4.10) ta thu được mật độ ngưng tụ

$$\rho_0 = \frac{\mu}{g} - \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} + \mu \right) \frac{1}{E(k)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \right). \quad (4.11)$$

Áp suất của hệ là

$$P = -V_{\text{CJT}}|_{\min} = \frac{\mu^2}{2g} - \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[E(k) + \frac{2}{\beta} \ln (1 - e^{-\beta E(k)}) \right]. \quad (4.12)$$

Mật độ hạt toàn phần được định nghĩa là đạo hàm riêng của áp suất theo thế hóa

$$\rho = \frac{\partial P}{\partial \mu}. \quad (4.13)$$

Thay (4.12) vào (4.13) ta thu được mật độ toàn phần

$$\rho = \frac{\mu}{g} - \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{1}{E(k)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \right). \quad (4.14)$$

Từ (4.11) và (4.14), dễ thấy độ suy giảm ngưng tụ trong gần đúng một vòng (hay còn gọi là gần đúng Popov) được xác định bởi

$$\frac{\rho_{\text{ex}}}{\rho} \equiv \frac{\rho - \rho_0}{\rho} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m\rho} + g \right) \frac{1}{E(k)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \right). \quad (4.15)$$

Khi điều kiện tự hợp được đảm bảo, độ suy giảm ngưng tụ tương ứng giữ nguyên dạng như (4.14) với mật độ ngưng tụ ρ_0 được thay thế bằng mật độ toàn phần ρ . Cụ thể, trong vế phải của (4.14), ta có thể lấy

$$E(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2g\rho \right)}. \quad (4.16)$$

Đặt $\kappa^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ và thay (4.16) vào (4.15) ta thu được

$$\frac{\rho_{\text{ex}}}{\rho} = \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3 \rho} \int \frac{d^3\vec{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{\kappa^2 + g\rho}{\sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2g\rho)}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2g\rho)}} - 1} \right) \quad (4.17)$$

Vế phải của (4.17) bị phân kỳ tử ngoại. Theo phương pháp chỉnh thứ nguyên ta có

$$I_{m,n}(\mathcal{M}) = \int \frac{d^d\vec{\kappa}}{(2\pi)^d} \frac{\kappa^{2m-n}}{(\kappa^2 + \mathcal{M}^2)^{n/2}} = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \Lambda^{2\epsilon} \mathcal{M}^{d+2(m-n)} \frac{\Gamma(\frac{d-n}{2} + m) \Gamma(n - m - \frac{d}{2})}{2\Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (4.18)$$

với $\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1} e^{-x} dx$ là hàm Gamma, $\Omega_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ là diện tích mặt cầu bán kính một đơn vị trong không gian d chiều và Λ là hệ số tái chuẩn hóa để đảm bảo tích phân này có thứ nguyên chính xác. Áp dụng với $d = 3$, kết hợp với điều kiện $g\rho \ll k_B T$ (hay $\beta g\rho \ll 1$), chúng tôi thu được

$$\frac{\rho_{\text{ex}}}{\rho} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} + \frac{\zeta(3/2)}{\rho \lambda_B^3} + \frac{2\zeta(1/2)a_s}{\lambda_B}, \quad (4.19)$$

trong đó λ_B là bước sóng de Broglie của chuyển động nhiệt,

$$\lambda_B = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (4.20)$$

Để xác định nhiệt độ tới hạn, chúng tôi sử dụng điều kiện mật độ ngưng tụ bằng không ($\rho_0 = 0$ và $\rho_{\text{ex}} = \rho$) tại điểm chuyển pha ngưng tụ. Từ phương trình (4.19), chúng tôi thu được biểu thức của nhiệt độ tới hạn ở gần đúng bậc thấp của a_s như sau:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{4\zeta(1/2)}{3\zeta(3/2)^{1/3}} \rho^{1/3} a_s \right). \quad (4.21)$$

Như vậy, độ lệch tỉ đối của nhiệt độ tới hạn tỉ lệ tuyến tính với độ dài tán xạ sóng s theo hệ thức

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} = c\rho^{1/3}a_s, \quad (4.22)$$

trong đó $c = -\frac{4\zeta(1/2)}{3\zeta(3/2)^{1/3}} \approx 1.413$. Kết quả (4.22) của chúng tôi tương đối phù hợp với kết quả thu được từ mô phỏng Monte Carlo ($c = 1.29 \pm 0.05$) và mô phỏng mạng (lattice simulation) ($c = 1.32 \pm 0.02$). Ngoài ra, nó cũng rất gần kết quả lý thuyết thu được từ phương pháp khai triển δ tuyến tính phi nhiễu loạn (the non-perturbative linear δ -expansion method) trong khuôn khổ lý thuyết nhiễu loạn tối ưu (optimized perturbation theory) ($c = 1.48$). Phương pháp biến phân và giải tích tiệm cận (asymptotic analysis) trên cơ sở lý thuyết Bogoliubov cũng tương đối phù hợp với kết quả của chúng tôi ($c = 1.49$), tuy nhiên phương pháp này lại dẫn tới kết luận mà chúng tôi cho là chưa chính xác: chuyển pha ngưng tụ Bose–Einstein là chuyển pha loại một.

4.1.2 Năng lượng điểm không và các tính chất nhiệt động trong pha ngưng tụ

Từ phương trình (4.14), ta có thể hóa

$$\mu = g\rho + g \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{1}{E(k)} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta E(k)} - 1} \right). \quad (4.23)$$

Thay (4.16) vào (4.23) rồi khử phân kỳ bằng cách áp dụng (4.18), trong gần đúng bậc thấp nhất của tham số khí ρa_s^3 , chúng tôi thu được

$$\mu = g\rho \left(1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} \right) + \frac{4\pi\hbar^2\zeta(3/2)a_s}{m\lambda_B^3}. \quad (4.24)$$

Bây giờ chúng tôi sẽ xem xét áp suất thỏa mãn điều kiện tự hợp, từ (4.12) ta có

$$\begin{aligned} P &= \frac{\mu^2}{2g} - \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2\mu)} - \frac{1}{\beta} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \left(1 - e^{-\beta\sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2\mu)}} \right) \\ &= \frac{\mu^2}{2g} + P_g^{(0)} + P_g^{(T)}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Số hạng thứ hai trong vế phải của (4.25) đặc trưng cho năng lượng điểm không (chân không) sinh ra do các thăng giáng lượng tử ở trạng thái cơ bản:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0 &= -P_g^{(0)} = \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2\mu)} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\hbar^3} \int \frac{d^3\vec{\kappa}}{(2\pi)^3} \sqrt{\kappa^2(\kappa^2 + 2\mu)} \\ &= \frac{8m^{3/2}}{15\pi^2\hbar^3} \mu^{5/2}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Với điều kiện khí loãng và lân cận điểm chuyển pha ngưng tụ được áp dụng, số hạng cuối cùng trong vế phải của (4.25) được lấy gần đúng bằng

$$P_g^{(T)} = \frac{2\pi\hbar^2}{m\lambda_B^5} \left(\zeta(5/2) - \zeta(3/2) \frac{\mu}{k_B T} \right). \quad (4.27)$$

Thay (4.26) và (4.27) vào (4.25), chúng tôi thu được áp suất thỏa mãn điều kiện tự hợp, trong gần đúng bậc thấp nhất của tham số khí như sau:

$$P = \frac{g\rho^2}{2} \left(1 + \frac{64}{5\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} \right) + \frac{2\pi\hbar^2\zeta(3/2)^2 a_s}{m\lambda_B^6} + \frac{2\pi\hbar^2\zeta(5/2)}{m\lambda_B^5}. \quad (4.28)$$

Sau đây, chúng ta sẽ xem xét ý nghĩa vật lý của các số hạng trong vế phải của (4.28). Số hạng đầu tiên bao gồm hai thành phần: dễ thấy thành phần $g\rho^2/2$ đặc trưng cho áp suất khối; trong khi thành phần còn lại xuất hiện do sự thăng giáng lượng tử ở nhiệt độ không (thăng giáng chân không). Hai số hạng tiếp theo mô tả đóng góp của tương tác giữa nguyên tử và thăng giáng nhiệt vào áp suất, trong đó số hạng cuối cùng đặc trưng cho sự thăng giáng nhiệt thuần túy, bởi số hạng này vẫn xuất hiện trong vế phải của (4.28) ngay cả đối với khí Bose lí tưởng. Nó cho thấy, áp suất của khí Bose lí tưởng trong pha ngưng tụ tỉ lệ với $T^{5/2}$.

Mật độ năng lượng được xác định từ áp suất thông qua mối liên hệ giữa hai đại lượng này trong nhiệt động lực học

$$\mathcal{E} = - \left[\frac{\partial(\beta P)}{\partial\beta} \right]_{\beta\mu}, \quad (4.29)$$

chúng tôi thu được

$$\mathcal{E} = \frac{g\rho^2}{2} \left(1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} \right) - \frac{2\pi\hbar^2\zeta(3/2)\rho a_s}{m\lambda_B^3} + \frac{4\pi\hbar^2\zeta(3/2)^2 a_s}{m\lambda_B^6} + \frac{3\pi\hbar^2\zeta(5/2)}{m\lambda_B^5}. \quad (4.30)$$

Ở nhiệt độ hữu hạn, các đóng góp của thăng giáng nhiệt vào mật độ năng lượng được thể hiện ở ba số hạng cuối cùng.

4.1.3 Các tính chất nhiệt động trong pha thông thường

Trong pha thông thường, hệ thức tán sắc có dạng:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \bar{\mu}, \quad (4.31)$$

trong đó $\bar{\mu} = \mu - 2g\rho$ được định nghĩa là thế hóa hiệu dụng và nó bằng thế hóa của khí Bose lí tưởng trong pha thông thường. Hàm truyền tương ứng khi đó là

$$G(k) = \frac{1}{\hbar^2\omega_n^2 + E(k)^2} \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \bar{\mu} & \hbar\omega_n \\ -\hbar\omega_n & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \bar{\mu} \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

Sự phân kỳ tử ngoại trong năng lượng điểm không có thể được khử bằng cách đưa thêm một số hạng bù trừ mà không làm thay đổi áp suất. Áp suất tự hợp được xác định bởi

$$P = g\rho^2 + \frac{2\pi\hbar^2}{m\lambda_B^5} \text{Li}_{5/2}[e^{\beta(\mu-2g\rho)}]. \quad (4.33)$$

Bằng cách thay (4.33) vào (4.13), chúng tôi thu được mật độ toàn phần của hệ

$$\rho = \frac{\text{Li}_{5/2}[e^{\beta(\mu-2g\rho)}]}{\lambda_B^3}. \quad (4.34)$$

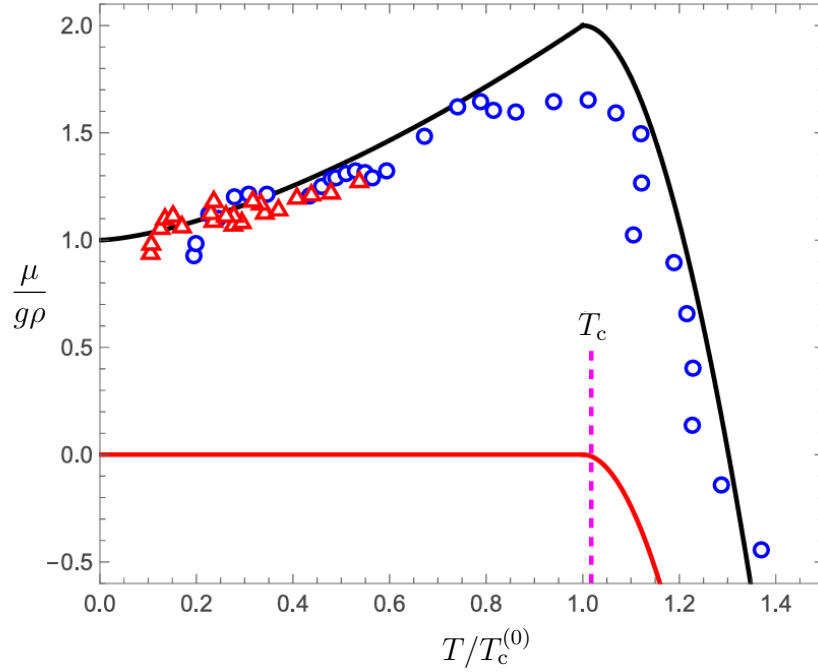
Tiếp tục lấy nghịch đảo hai vế của (4.34), chúng tôi suy ra thể hóa ở ngoài pha ngưng tụ

$$\mu = 2g\rho + k_B T \ln \left[\text{Li}_{3/2}^{-1}(\rho \lambda_B^3) \right]. \quad (4.35)$$

Kết hợp (4.24) và (4.35), ta có sự phụ thuộc của thể hóa μ theo nhiệt độ T ở gần điểm chuyển pha ngưng tụ như sau:

$$\mu = \begin{cases} g\rho \left(1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} \right) + \frac{4\pi \hbar^2 \zeta(3/2) a_s}{m \lambda_B^3}, & T \leq T_c; \\ 2g\rho + k_B T \ln \left[\text{Li}_{3/2}^{-1}(\rho \lambda_B^3) \right], & T \geq T_c. \end{cases} \quad (4.36)$$

Sự phụ thuộc của thể hóa theo nhiệt độ như trong (4.36) được chúng tôi biểu diễn bằng đường màu đen trong Hình 4.1. Có thể thấy, thể hóa thay đổi liên tục khi qua điểm chuyển pha ngưng tụ. Ban đầu, trong pha ngưng tụ, thể hóa tăng theo nhiệt độ từ giá trị $g\rho$ đến giá trị cực đại là $2g\rho$ tại điểm tới hạn, sau đó nó giảm khi nhiệt độ tiếp tục tăng. Trong Hình 4.1, đường màu đỏ biểu diễn sự thay đổi thể hóa theo nhiệt độ của khí Bose lí tưởng, các ký hiệu tròn và tam giác đánh dấu các dữ liệu thực nghiệm của Mordini và cộng sự (2020).



Hình 4.1: Đồ thị biểu diễn thể hóa của khí ^{23}Na theo nhiệt độ.

Kết quả thực nghiệm đã cho thấy sự phù hợp tốt với kết quả lý thuyết của chúng tôi. Một điều quan trọng nữa cũng có thể được quan sát từ Hình 4.1, đó là sự xác nhận về mặt thực nghiệm đối với sự thay đổi không đơn điệu của thể hóa trong vùng lân cận điểm chuyển pha.

Tương tự cách mà chúng tôi đã xác định thể hóa ở ngoài pha ngưng tụ, mật độ năng lượng ở nhiệt độ $T > T_c$ mà chúng tôi tìm được có dạng:

$$\mathcal{E} = g\rho^2 - \frac{2\pi \hbar^2}{m \lambda_B^5} \text{Li}_{5/2}[e^{\beta(\mu - 2g\rho)}]. \quad (4.37)$$

4.2 Tính chất nhiệt động của khí Bose loãng trong gần đúng hai vòng

4.2.1 Phương trình trạng thái trong pha ngưng tụ

Chúng tôi bắt đầu với mật độ thế năng hiệu dụng CJT trong gần đúng Hartree-Fock

$$V_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k) + G_0^{-1}(k)G(k) - \mathbb{1}] + \frac{3g}{8}(P_{11}^2 + P_{22}^2) + \frac{g}{4}P_{11}P_{22}. \quad (4.38)$$

Từ mật độ thế năng hiệu dụng (4.38), chúng tôi suy ra:

- Phương trình khe:

$$-\mu + g\Psi_0^2 + \Pi_1 = 0. \quad (4.39)$$

- Phương trình SD:

$$G^{-1}(k) = G_0^{-1}(k) + \Pi, \quad (4.40)$$

trong đó $\Pi = \begin{pmatrix} \Pi_1 & 0 \\ 0 & \Pi_2 \end{pmatrix}$ là ma trận năng lượng riêng, với $\Pi_1 = \frac{3g}{2}P_{11} + \frac{g}{2}P_{22}$ và $\Pi_2 = \frac{g}{2}P_{11} + \frac{3g}{2}P_{22}$.

Hàm truyền trong gần đúng HF có dạng:

$$G(k) = \frac{1}{\hbar^2\omega_n^2 + E_{(\text{HF})}^2(k)} \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu + g\Psi_0^2 + \Pi_2 & -\hbar\omega_n \\ \hbar\omega_n & \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu + 3g\Psi_0^2 + \Pi_1 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Hàm truyền trên dẫn tới hệ thức tán sắc trong gần đúng HF tương ứng là

$$E_{(\text{HF})}(k) = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu + 3g\Psi_0^2 + \Pi_1\right) \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu + g\Psi_0^2 + \Pi_2\right)}. \quad (4.42)$$

Hệ thức tán sắc (4.42) cho thấy sự xuất hiện của khe năng lượng, có nghĩa là định lý Goldstone bị vi phạm trong gần đúng HF.

Để khắc phục điều này, chúng tôi sử dụng phương pháp gần đúng IHF. Trong gần đúng này, mật độ thế năng hiệu dụng được bổ sung một số hạng hiệu chỉnh sao cho các phương trình chuyển động có dạng không thay đổi, và điều này dẫn tới

$$\tilde{V}_{\text{CJT}} = -\mu\Psi_0^2 + \frac{g}{2}\Psi_0^4 + \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G_{(\text{IHF})}^{-1}(k) + G_0^{-1}(k)G_{(\text{IHF})}(k) - \mathbb{1}] + \frac{g}{8}(P_{11}^2 + P_{22}^2) + \frac{3g}{4}P_{11}P_{22}. \quad (4.43)$$

Từ mật độ thế năng hiệu dụng CJT (4.43), chúng tôi suy ra:

- Phương trình khe:

$$-\mu + g\Psi_0^2 + \Sigma_2 = 0, \quad (4.44)$$

- Phương trình SD:

$$G_{(\text{IHF})}^{-1} = G_0^{-1} + \Sigma, \quad (4.45)$$

trong đó $\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & \Sigma_2 \end{pmatrix}$ là ma trận năng lượng riêng trong gần đúng IHF, với $\Sigma_1 = \frac{g}{2}P_{11} + \frac{3g}{2}P_{22}$ và $\Sigma_2 = \frac{3g}{2}P_{11} + \frac{g}{2}P_{22}$.

Hàm truyền trong gần đúng IHF có dạng:

$$G_{\text{(IHF)}}(k) = \frac{1}{\hbar^2\omega_n^2 + E(k)^2} \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & \hbar\omega_n \\ -\hbar\omega_n & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + M \end{pmatrix}, \quad (4.46)$$

trong đó M là khối lượng hiệu dụng:

$$M = -\mu + 3g\Psi_0^2 + \Sigma_1. \quad (4.47)$$

Có thể thấy, phổ kích thích ứng với hàm truyền (4.46) là

$$E(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + M \right)} \rightarrow \hbar k \sqrt{\frac{M}{2m}} \text{ khi } k \rightarrow 0. \quad (4.48)$$

Như vậy, vấn đề về sự xuất hiện khe năng lượng trong phổ kích thích đã được giải quyết trong gần đúng IHF.

Thế hóa μ được định nghĩa là đạo hàm bậc nhất của áp suất P theo mật độ toàn phần ρ :

$$\mu = \frac{\partial P}{\partial \rho} = -\frac{\partial V_{\text{CJT}}|_{\min}}{\partial \rho}, \quad (4.49)$$

thay

$$\begin{aligned} P = -\tilde{V}_{\text{CJT}}|_{\min} &= \mu\Psi_0^2 - \frac{g}{2}\Psi_0^4 - \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} \left[\ln G_{\text{(IHF)}}^{-1}(k) \right] - \frac{1}{2} (3g\Psi_0^2 - \mu - M^2) P_{11} \\ &\quad - \frac{1}{2} (g\Psi_0^2 - \mu) P_{22} - \frac{g}{8} (P_{11}^2 + P_{22}^2) - \frac{3g}{4} P_{11} P_{22} \end{aligned} \quad (4.50)$$

ta được thế hóa trong gần đúng hai vòng:

$$\mu = g\rho + gP_{11}. \quad (4.51)$$

Kết hợp (4.51), (4.44) và (4.47), chúng tôi thu được phương trình khe và phương trình SD cho khối lượng hiệu dụng:

$$0 = -1 + \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{1}{2\rho} (P_{11} + P_{22}), \quad (4.52a)$$

$$\mathcal{M} = -1 + \frac{3\rho_0}{\rho} - \frac{1}{2\rho} (P_{11} - 3P_{22}), \quad (4.52b)$$

trong đó $\mathcal{M} = M/(g\rho)$ là khối lượng hiệu dụng không thứ nguyên.

4.2.2 Độ suy giảm ngưng tụ ở nhiệt độ lân cận không

Để xác định các tích phân xung lượng P_{11} và P_{22} , ta cần áp dụng công thức lấy tổng Matsubara

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar^2 \omega_n^2 + E(k)^2} = \frac{\beta}{2E(k)} \left(1 + \frac{2}{e^{\beta E(k)} - 1} \right). \quad (4.53)$$

Ở nhiệt độ lân cận không, các tích phân xung lượng có biểu thức giải tích như sau:

$$P_{11} = \frac{(2m)^{3/2} M^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3} + \frac{(2m)^{3/2} \pi^2}{30 \hbar^3 M^{5/2}} (k_B T)^4, \quad (4.54a)$$

$$P_{22} = -\frac{(2m)^{3/2} M^{3/2}}{12\pi^2 \hbar^3} + \frac{(2m)^{3/2}}{12 \hbar^3 M^{1/2}} (k_B T)^2. \quad (4.54b)$$

Thay các tích phân xung lượng trong (4.54) vào phương trình khe (4.52a) và phương trình SD (4.52b), chúng tôi thu được hệ phương trình mô tả mối liên hệ giữa tỉ lệ ngưng tụ ρ_0/ρ và khối lượng hiệu dụng không thứ nguyên $\mathcal{M}$ ở nhiệt độ $T \gtrsim 0$ như sau:

$$0 = -1 + \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \mathcal{M}^{3/2} \sqrt{\rho a_s^3} + \frac{(mk_B T)^2}{12\sqrt{2}\pi \hbar^4 \rho^{3/2} a_s^{1/2} \mathcal{M}^{1/2}} + \frac{(mk_B T)^4}{480\sqrt{2}\pi \hbar^8 \rho^{7/2} a_s^{5/2} \mathcal{M}^{5/2}}, \quad (4.55a)$$

$$\mathcal{M} = -1 + \frac{3\rho_0}{\rho} - \frac{10\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \mathcal{M}^{3/2} \sqrt{\rho a_s^3} + \frac{(mk_B T)^2}{4\sqrt{2}\pi \hbar^4 \rho^{3/2} a_s^{1/2} \mathcal{M}^{1/2}} - \frac{(mk_B T)^4}{480\sqrt{2}\pi \hbar^8 \rho^{7/2} a_s^{5/2} \mathcal{M}^{5/2}}. \quad (4.55b)$$

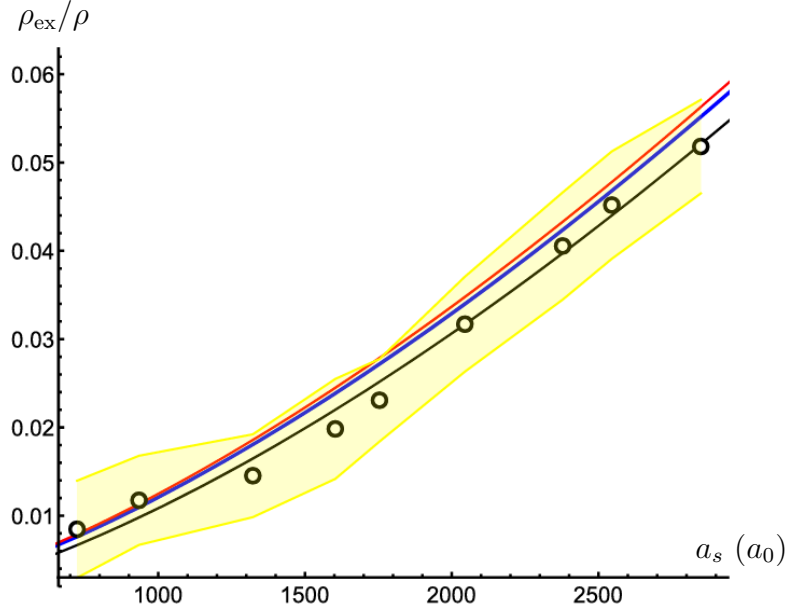
Giải hệ phương trình trên chúng tôi thu được biểu thức gần đúng cho độ suy giảm ngưng tụ của khí Bose loãng ở lân cận nhiệt độ không:

$$\frac{\rho_{\text{ex}}}{\rho} = 1 - \frac{\rho_0}{\rho} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} + \frac{2(mk_B T)^2}{9\pi \hbar^4 \rho} a_s + \frac{(mk_B T)^4}{9\pi^{3/2} \hbar^8 \rho^{5/2}} a_s^{1/2}. \quad (4.56)$$

Có thể thấy, vế phải của (4.56) bao gồm hai thành phần: (i) thành phần đặc trưng cho ảnh hưởng của sự thăng giáng lượng tử thuần túy, được thể hiện bởi số hạng đầu tiên; và (ii) thành phần đặc trưng cho ảnh hưởng của nhiệt độ lân cận không, được thể hiện bởi hai số hạng cuối.

Kết quả mà chúng tôi thu được khác với kết quả thu được từ khí Bose đồng nhất lý tưởng, trong đó độ suy giảm ngưng tụ tỉ lệ với $T^{3/2}$. Sự sai khác này là do phần phổ phonon chỉ phối phần lớn các tính chất nhiệt động. Điều này ngụ ý rằng, việc đưa vào dù chỉ một tương tác nhỏ giữa các hạt cũng có thể thay đổi đáng kể các tính chất của khí Bose ở nhiệt độ thấp.

Trong Hình 4.2, đường cong màu đen biểu diễn kết quả theo lý thuyết Bogoliubov, đường cong màu xanh lam biểu diễn kết quả (4.56) của chúng tôi tại nhiệt độ $T = 3.5 \text{ nK}$; còn các vòng tròn rỗng là dữ liệu thực nghiệm của Lopes và cộng sự, với đường bao sai số được biểu diễn bằng đường cong màu vàng đậm. Có thể tích, kết quả lý thuyết của chúng tôi tương đối phù hợp với thực nghiệm.



Hình 4.2: Đồ thị biểu diễn độ suy giảm ngưng tụ của khí Bose loãng theo độ dài tán xạ a_s tại nhiệt độ $T = 3.5 \text{ nK}$.

4.2.3 Độ suy giảm ngưng tụ ở lân cận nhiệt độ tới hạn

Ở lân cận nhiệt độ tới hạn, các tích phân xung lượng có biểu thức giải tích như sau:

$$P_{11} = \frac{(2m)^{3/2} M^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3} + \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left(\zeta(3/2) - \frac{1}{2} \zeta(1/2) \frac{M}{k_B T} \right), \quad (4.57a)$$

$$P_{22} = -\frac{(2m)^{3/2} M^{3/2}}{12\pi^2 \hbar^3} + \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left(\zeta(3/2) + \frac{3}{2} \zeta(1/2) \frac{M}{k_B T} \right). \quad (4.57b)$$

Thay các tích phân xung lượng trong (4.57) vào phương trình khe (4.52a) và phương trình SD (4.52b), chúng tôi thu được hệ phương trình mô tả mối liên hệ giữa tỉ lệ ngưng tụ ρ_0/ρ và khối lượng hiệu dụng không thứ nguyên $\mathcal{M}$ ở nhiệt độ $T \lesssim T_c$ như sau:

$$0 = -1 + \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{2\sqrt{2\rho a_s^3}}{3\pi} \mathcal{M}^{3/2} + t^{3/2} \left(1 + \frac{\zeta(1/2)\rho^{1/3}a_s}{\zeta(3/2)^{1/3}} \frac{\mathcal{M}}{t} \right), \quad (4.58a)$$

$$\mathcal{M} = -1 + \frac{3\rho_0}{\rho} - \frac{10\sqrt{2\rho a_s^3}}{3\pi} \mathcal{M}^{3/2} + t^{3/2} \left(1 + \frac{5\zeta(1/2)\rho^{1/3}a_s}{\zeta(3/2)^{1/3}} \frac{\mathcal{M}}{t} \right), \quad (4.58b)$$

trong đó $t = T/T_c^{(0)}$ là tỉ số giữa nhiệt độ và nhiệt độ tới hạn $T_c^{(0)}$ của khí Bose lí tưởng. Giải hệ phương trình trên, chúng tôi thu được kết quả gần đúng

$$\sqrt{\mathcal{M}} \approx \sqrt{2} - \frac{16\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} - \frac{t^{3/2}}{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{2}\zeta(1/2)\rho^{1/3}a_s}{\zeta(3/2)^{1/3}} \sqrt{t}, \quad (4.59a)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} \approx 1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} - \left(1 - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho a_s^3} \right) t^{3/2} - \frac{2\zeta(1/2)\rho^{1/3}a_s}{\zeta(3/2)^{1/3}} \sqrt{t}. \quad (4.59b)$$

Như vậy, độ suy giảm ngưng tụ của khí Bose loãng ở nhiệt độ T lân cận nhiệt độ tới hạn

là

$$\frac{\rho_{\text{ex}}}{\rho} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}}\sqrt{\rho a_s^3} + \left(1 - \frac{4}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\rho a_s^3}\right) \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^{3/2} + \frac{2\zeta(1/2)\rho^{1/3}a_s}{\zeta(3/2)^{1/3}}\sqrt{\frac{T}{T_c^{(0)}}}. \quad (4.60)$$

Tại điểm chuyển pha tới hạn ($T = T_c$), tỉ lệ ngưng tụ bằng không, điều kiện này giúp chúng tôi xác định được nhiệt độ tới hạn trong gần đúng hai vòng

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\rho}{\zeta(3/2)}\right)^{2/3} \left(1 - \frac{4\zeta(1/2)}{3\zeta(3/2)^{1/3}}\rho^{1/3}a_s + \frac{8}{9\sqrt{\pi}}\sqrt{\rho a_s^3}\right). \quad (4.61)$$

4.2.4 Các hàm nhiệt động

Do có sự khác nhau giữa các hàm nhiệt động của khí Bose ở trong và ngoài pha ngưng tụ, nên chúng tôi sẽ khảo sát hai miền khác nhau của nhiệt độ, được ngăn cách bởi nhiệt độ tới hạn.

Thay (4.50) vào (4.13), chúng tôi biểu diễn được mật độ khí trong gần đúng IHF, theo tham số trật tự và các tích phân xung lượng,

$$\rho = \Psi_0^2 + \frac{g}{2}(P_{11} + P_{22}). \quad (4.62)$$

Thay (4.62) vào (4.50) ta được

$$P = \frac{g\rho^2}{2} + g\rho P_{11} + \frac{g}{2}P_{11}^2 - \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} \left[\ln G_{(\text{IHF})}^{-1}(k) \right] \quad (4.63)$$

$$= \frac{g\rho^2}{2} \left(1 + \frac{64}{5\sqrt{\pi}}\sqrt{\rho a_s^3}\right) + \frac{4\pi\hbar^2\zeta(3/2)\rho a_s}{m\lambda_B^3} + \frac{2\pi\hbar^2\zeta(3/2)^2 a_s}{m\lambda_B^6} + \frac{2\pi\hbar^2\zeta(5/2)}{m\lambda_B^5}. \quad (4.64)$$

Có thể thấy, số hạng đầu tiên trong vế phải của (4.64) chính là áp suất khối $P_0 = g\rho^2/2$, các số hạng còn lại đặc trưng cho sự ảnh hưởng của tương tác và nhiệt độ vào áp suất, trong đó số hạng thứ hai là đóng góp của nhiệt độ thuần túy.

Bằng cách thay (4.63) vào (4.29) chúng tôi thu được mật độ năng lượng

$$\mathcal{E} = \frac{g\rho^2}{2} \left(1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}}\sqrt{\rho a_s^3}\right) + \frac{4\pi\hbar^2\zeta(3/2)\rho a_s}{m\lambda_B^3} + \frac{2\pi\hbar^2\zeta(3/2)^2 a_s}{m\lambda_B^6} + \frac{3\pi\hbar^2\zeta(5/2)}{m\lambda_B^5}. \quad (4.65)$$

Ở pha thông thường, nhiệt độ $T > T_c$, tỉ lệ ngưng tụ của hệ khí đó bằng không. Trong pha này, hệ thức tán sắc (4.48) được điều chỉnh thành

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \bar{\mu}, \quad (4.66)$$

trong đó $\bar{\mu} = \mu - \Sigma_1$ là thế hóa hiệu dụng.

Các số hạng không phụ thuộc nhiệt độ trong các tích phân xung lượng bị phân kỳ. Vấn đề này được giải quyết bằng cách đưa thêm vào các số hạng bù trừ sao cho chúng không đóng góp gì vào các kết quả. Các số hạng phụ thuộc nhiệt độ trong các tích phân xung lượng có dạng tích phân Bose,

$$P_{11} = P_{22} = \frac{4}{\sqrt{\pi}\lambda_B^3} \text{Li}_{3/2}(\bar{z}), \quad (4.67)$$

trong đó $\bar{z} = e^{\beta\bar{\mu}}$ là fugacity của khí Bose. Do sự biến mất của ngưng tụ nên các số hạng cổ điển và điểm không trong sẽ không đóng góp vào kết quả, từ đó ta có

$$\frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k)] = -\frac{2\pi\hbar^2}{m\lambda_B^5} \text{Li}_{5/2}(\bar{z}). \quad (4.68)$$

Để dàng suy ra áp suất trong pha thông thường là

$$P = gP_{11}^2 - \frac{1}{2} \int_{\beta} \text{tr} [\ln G^{-1}(k)]. \quad (4.69)$$

Ở gần điểm chuyển pha ngưng tụ, ta có thể lấy gần đúng $\bar{\mu} = \mu$ trong năng lượng riêng. Khi đó các phương trình (4.67) và (4.68) cho phép ta viết lại áp suất (4.69) dưới dạng

$$P = \frac{2\pi\hbar^2}{m\lambda_B^5} \text{Li}_{5/2}(\bar{z}) + \frac{64\pi\hbar^2 a_s}{m\lambda_B^6} \text{Li}_{3/2}^2(\bar{z}). \quad (4.70)$$

Từ (4.70) suy ra mật độ hạt

$$\rho = \frac{64a_s}{\pi\lambda_B^4} \text{Li}_{1/2}(\bar{z}) \text{Li}_{3/2}(\bar{z}) + \frac{1}{\lambda_B^3} \text{Li}_{3/2}(\bar{z}). \quad (4.71)$$

Giải phương trình trên, chúng tôi thu được biểu thức của hàm đa thức logarit

$$\text{Li}_{3/2}(\bar{z}) = \rho\lambda_B^3 \left[1 + \Lambda \left(-1 - \frac{\pi \ln \bar{z}}{64\rho a_s \lambda_B^2} \right) \right], \quad (4.72)$$

trong đó $\Lambda(x)$ là hàm Lambert. Đối với khí Bose loãng ở nhiệt độ hữu hạn, các kích thích đơn hạt chiếm ưu thế, điều này tương đương với điều kiện bước sóng de Broglie của chuyển động nhiệt rất nhỏ so với độ dài đặc trưng, $\rho a_s \lambda_B^2 \ll 1$. Vì vậy, ở mức độ gần đúng thấp nhất, thể hóa hiệu dụng có thể được suy ra từ (4.72) như sau

$$\bar{\mu} = k_B T \ln \left[\text{Li}_{3/2}^{-1}(\rho\lambda_B^3) \right]. \quad (4.73)$$

Phương trình trên tương đương với

$$\text{Li}_{3/2}(\bar{z}) = \rho\lambda_B^3. \quad (4.74)$$

Sử dụng công thức đạo hàm của hàm đa thức logarit đối với (4.74):

$$\frac{d \text{Li}_n(\bar{z})}{d\bar{z}} = \frac{1}{\bar{z}} \text{Li}_{n-1}(\bar{z}), \quad (4.75)$$

ta có thể suy ra

$$\text{Li}_{5/2}(\bar{z}) = \frac{\lambda_B^3 P}{k_B T}, \quad (4.76)$$

trong đó $P = \rho(\bar{\mu} + C)$ với C là hằng số đảm bảo tính liên tục của áp suất P tại điểm chuyển pha. Các phương trình (4.74) và (4.76) hoàn toàn trùng khớp với các phương trình trạng thái của khí Bose lý tưởng, trong đó thể hóa hiệu dụng của khí Bose loãng tương tác yếu đóng vai trò như thể hóa ứng với khí Bose lý tưởng.

Kết luận và kiến nghị

1 Các kết quả đạt được

Trong luận án này chúng tôi thu được nhiều kết quả quan trọng, góp phần bổ sung những hiểu biết về tính chất của hệ BEC một thành phần cũng như hai thành phần. Những kết quả chính có thể tóm lược như sau:

1. Đối với khí Bose loãng hai thành phần: các tính chất của pha tiền dính ướt được nghiên cứu đầy đủ bằng cách sử dụng DPA trong lý thuyết GP. Nghiên cứu của chúng tôi chỉ ra rằng trong pha tiền dính ướt, bề dày của lớp dính ướt tăng một cách tuyến tính theo thang logarithm của tỉ số thể hóa khi tiếp cận dần từ pha tiền dính ướt đến pha dính ướt hoàn toàn. Trong quá trình này góc tiếp xúc (góc bờ) giảm dần từ giá trị hữu hạn (dính ướt một phần) về giá trị 0 (dính ướt hoàn toàn). Những vấn đề này cung cấp những thông tin hữu ích cho việc thiết kế thực nghiệm để quan sát chuyển pha ướt trong BEC.

2. Đối với khí Bose loãng một thành phần:

- Nghiên cứu của chúng tôi chỉ ra rằng phương pháp tác dụng hiệu dụng CJT mô tả rất tốt các tính chất nhiệt động của khí Bose loãng không chỉ ở nhiệt độ không mà cả ở nhiệt độ hữu hạn. Độ dịch chuyển tương đối của nhiệt độ tới hạn dưới ảnh hưởng của tương tác giữa các phân tử khí mà chúng tôi thu được phù hợp tốt với kết quả tương ứng thu được thông qua tính số theo phương pháp Monte Carlo. Kết quả mà chúng tôi thu được trong gần đúng một vòng và gần đúng hai vòng khá phù hợp nhau.

- Sử dụng phương pháp tác dụng hiệu dụng CJT trong gần đúng Hartree-Fock cải tiến cho kết quả rất tốt về tính chất nhiệt động của khí Bose loãng. Đặc biệt là mô tả sự biến đổi liên tục, không đơn điệu của thể hóa ở lân cận nhiệt độ chuyển pha. Điều này khắc phục được hạn chế của lý thuyết Hartree-Fock khi nó cho thấy thể hóa có bước nhảy phi vật lý tại nhiệt độ chuyển pha.

2 Kiến nghị một số vấn đề nghiên cứu tiếp theo

Các kết quả nghiên cứu về hiện tượng chuyển pha ướt trong luận án nằm trong khuôn khổ lý thuyết trường trung bình GP, có nghĩa là, chúng tôi đã không xem xét đến sự suy giảm ngưng tụ do thăng giáng lượng tử và kích thích nhiệt. Điều này có thể dẫn tới sự sai khác lớn so với thực nghiệm khi hệ chưa đủ lạnh, cụ thể là có nhiệt độ đủ thấp so với nhiệt độ tới hạn. Ngoài ra, điều kiện biên tường cứng chỉ là một mô hình lý tưởng, và trong thực nghiệm hiện nay có thể chưa thể chế tạo được những tường có độ cứng lý tưởng như vậy. Tiếp tục phát triển các kết quả thu được trong luận án này, chúng tôi dự kiến một số vấn đề nghiên cứu tiếp theo như sau:

- Tại nhiệt độ không: chúng tôi nghiên cứu các giải pháp thay thế tường cứng để định hướng quan sát được hiện tượng dính ướt của BEC trong thực nghiệm.

- Tại nhiệt độ hữu hạn: đánh giá ảnh hưởng của nhiệt độ lên năng lượng bề mặt, qua đó xem xét ảnh hưởng của nó đến chuyển pha ướt của hệ BEC.

Danh mục công trình đã công bố kết quả nghiên cứu của luận án

1. N. V. Thu and P. D. Thanh. Phenomenological analogy between Gross–Pitaevskii theory for Bose–Einstein condensate and Newton equation for classical mechanics. *VNU Journal of Science: Mathematics–Physics*, 40(2):100–105, 2024.
2. N. V. Thu and P. D. Thanh. Effect of nonzero temperature to non-condensed fraction of a homogeneous dilute weakly interacting Bose gas. *Physics Letters A*, 523:129787, 2024.
3. P. D. Thanh and N. V. Thu. Static properties of prewetting phase in binary mixtures of Bose–Einstein condensates. *International Journal of Theoretical Physics*, 63(12):315, 2024.
4. P. D. Thanh, T. K. Vi and N. V. Thu. Phenomenological analogy between Gross–Pitaevskii theory for Bose–Einstein condensate mixtures in infinite space and classical mechanics. *HNUE Journal of Science: Natural Science*, 70(1): 25–35, 2025.
5. N. V. Thu, P. D. Thanh and L. T. Thuy. Transition temperature and thermodynamic properties of homogeneous weakly interacting Bose gas in self-consistent Popov approximation. *Physica B: Condensed Matter*, 713:417356, 2025.
6. P. D. Thanh and D. T. Hai. The interface position of a Bose–Einstein condensate mixture restricted by a hard wall in double-parabola approximation. *Dalat University Journal of Science: Natural Sciences and Technology*, 15(3S):33–43, 2025.
7. P. D. Thanh and N. V. Thu. The thermodynamic contact angle in the prewetting phase of a binary Bose–Einstein condensate mixture. *HNUE Journal of Science: Natural Science*, 70(3): 35–46, 2025.
8. N. V. Thu and P. D. Thanh. Thermodynamic properties of repulsive interacting Bose gas at sufficiently temperature. *International Journal of Modern Physics B*, 2026.