

К теории флуктуаций бозе-конденсата в системах конечного размера

А.И. Бугрий, В.М. Локтев

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина
E-mail: abugrij@bitp.kiev.ua;
vloktev@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 22 апреля 2009 г.

Получено асимптотическое разложение для статистической суммы идеального бозе-газа в каноническом ансамбле с произвольным числом частиц. Показано, что найденные выражения справедливы во всей области температур, включая критическую. Проведено сравнение асимптотических формул для флуктуаций бозе-конденсата с точными и установлено их количественное согласие.

Отримано асимптотичний розклад для статистичної суми ідеального бозе-газу в канонічному ансамблі з довільною кількістю частинок. Показано, що отримані вирази є вірними в усій області температур, враховуючи критичну. Проведено порівняння асимптотичних формул для флуктуацій бозе-конденсату з точними та встановлено між ними кількісне узгодження.

PACS: 05.30.Jr Бозонные системы;
75.30.Ds Спиновые волны;
75.70.-i Магнитные свойства тонких пленок, поверхностей и интерфейсов.

Ключевые слова: бозе-конденсация, флуктуация, критическая температура, кроссовер, канонические ансамбли, конечные размеры.

Введение

Статистическая механика идеального бозе-газа [1,2] является одним из самых простых и в то же время фундаментальных разделов теоретической физики. Наиболее впечатляющим результатом теории является замеченное и фактически предсказанное Эйнштейном [3] явление бозе-конденсации (БЭК) — накопления неограниченного количества невзаимодействующих (что также нетривиально) частиц в своем основном квантовом состоянии. Отметим, что БЭК оказалась первой точно решаемой моделью фазового перехода и демонстрацией возможности квантового поведения в макроскопических масштабах. К сожалению, в природе не существует веществ, которые в тепловом равновесии удовлетворяли бы условиям БЭК. Тем не менее идея о бозе-конденсате оказалась очень полезной для понимания сути таких замечательных физических явлений, как сверхтекучесть и сверхпроводимость, и плодотворной в разнообразных концептуальных построениях в физике конденсированного состояния и в квантовой теории поля.

К концу прошлого века техника эксперимента усовершенствовалась настолько, что стало возможным удерживать достаточно долго в магнитной ловушке облако поляризованных атомов водорода и щелочных металлов, чтобы охладить его до очень низких (~ 20 мК... ~ 1 К) температур [4–8]. В результате большее количество атомов ($\sim 10^3$ в случае рубидия и $\sim 10^5$ в случае натрия) собиралось в квантовом состоянии с наименьшей энергией. Хотя и понятно, что такое состояние термодинамически неравновесно, стало общепринятым рассматривать его как экспериментальное приготовление бозе-конденсата.

Если иметь в виду не строгое тепловое равновесие, а квазиравновесие, то вполне приемлемым объектом для экспериментального изучения БЭК может служить коллектив тех или иных квазичастиц, взаимодействие между которыми, как правило, также мало. Известно, что условие теплового равновесия здесь требует обращения в нуль химического потенциала ($\mu = 0$), в то время как режиму БЭК соответствует увеличение химического потенциала вплоть до значения энергии

нижайшего уровня ($\mu \rightarrow \varepsilon_0$). В случае, когда ε_0 мало, равновесный газ квазичастиц находится на пороге бозе-конденсации. Однако в квазиравновесии (например, под воздействием внешней накачки, создающей квазичастицы) можно, в принципе, управлять химическим потенциалом, увеличивая его до значений, близких к ε_0 , тем самым удовлетворяя условиям, необходимым для БЭК.

Можно привести примеры явлений из повседневной жизни, где по сути имеет место БЭК квазичастиц. Так, с точки зрения квантовой теории твердого тела, такие процессы, как звон различных сосудов, звучание камертонов и т.п., есть не что иное, как БЭК «накаченных» ударом фононов, или, другими словами, приготовление фононного бозе-конденсата, порождающего, в свою очередь, когерентное звуковое излучение. Примечательно при этом, что все это происходит, как известно, при нормальных температурах и тем самым не требует каких-либо специальных экспериментальных ухищрений. В то же время серьезные усилия прикладывались и прикладываются к исследованию БЭК таких квазичастиц, как экситоны и биэкситоны в полупроводниках [9], магноны в определенных классах квантовых магнетиков [10]. Пожалуй, наиболее впечатляющими здесь оказались недавние результаты Демокритова и соавторов [11] с микропленками железо-иттриевого граната. В экспериментах по мандельштам-бриллюэновскому рассеянию света отчетливо наблюдался резонансный пик в спектральной плотности распределения магнонов по состояниям как функции частоты в окрестности минимальной энергии соответствующего энергетического спектра при увеличении накачки до некоторого порогового значения. Образно выражаясь, в этих опытах воспроизводился аналог «магнонного камертона», причем при высоких (комнатных) температурах.

Хотя общее понимание различных свойств бозе-конденсатов частиц и квазичастиц, можно считать, достигнуто, остается ряд нерешенных вопросов, касающихся, в частности, флуктуаций тех или иных наблюдаемых величин. В первую очередь сказанное относится к системам конечного размера либо конечного числа конденсирующихся частиц, когда само понятие термодинамического предела становится проблематичным. В этой связи упомянем, что образцы, используемые в экспериментах по БЭК, имеют не только конечные, но и, как правило, малые размеры. Если же пространственные размеры системы конечны, то статистическая механика бозе-газа существенно усложняется. В частности, утрачивает смысл представление об эквивалентности канонических ансамблей. Впрочем, в режиме БЭК неэквивалентность ансамблей проявляется и в термодинамическом пределе. Некоторые эффекты конечных размеров для бозе-газа в ящике рассматривались в [12]. «Нехорошее» поведение флуктуаций скон-

денсированных частиц, описываемых в рамках большого канонического ансамбля (БКА), дало повод авторам [12] сделать достаточно радикальный вывод о том, что этот ансамбль не пригоден для описания какой бы то ни было реальной физической системы, испытывающей БЭК. Добавим, что в БКА и энтропия ведет себя «плохо» — при стремлении температуры к нулю она не обращается в нуль согласно теореме Нернста, а напротив, расходится (логарифмически), когда число частиц $N \rightarrow \infty$. Однако БКА из-за своей простоты весьма удобен при конкретных расчетах; к тому же поведение таких величин, как, например, число частиц N_0 в основном состоянии или теплоемкость, не сильно различается при вычислении с использованием разных ансамблей.

Экспериментальное изучение БЭК в ловушках оживило и теоретические исследования различных аспектов статистической механики бозе-систем [13–23]. Это было вызвано прежде всего тем, что до того основное внимание уделялось пространственно однородному газу, находящемуся в некотором объеме. В используемых же ловушках газ неоднороден, поэтому результаты, полученные ранее для однородного бозе-газа в ящике, можно было воспроизвести для ловушки, рассматривая ее как потенциальную яму с гармоническим законом пространственного удержания, т.е. фактически сведя задачу к системе N осцилляторов. Их статистическая сумма в БКА вычисляется тривиально. В каноническом (КА) и микроканоническом (МКА) ансамблях соответствующие статсуммы выражаются через контурные интегралы от статистической суммы в БКА. Поэтому для не слишком больших чисел частиц и не очень большой энергии, если речь идет о МКА, статсумма бозе-системы может быть вычислена с любой наперед заданной точностью по вычетам или путем численного интегрирования. Что касается аналитических расчетов статистической суммы в КА и МКА, то для них обычно используется метод перевала. Однако, как показано, например, в [12], он не применим в самой интересной области — окрестности БЭК, где поправки к главному вкладу не убывают с увеличением числа частиц в системе.

К настоящему времени выполнен ряд расчетов, ставивших своей целью исследование термодинамических свойств конечных бозе-систем в различных статистических ансамблях. В частности, в работе [13] установлено различие между поведением числа конденсатных частиц N_0 , а также их флуктуаций, рассчитанных для гармонической ловушки с применением БКА и КА при изменении полного числа частиц в пределах $10^2 \leq N \leq 10^6$. В работе [14], которая посвящена сравнению результатов точного расчета в МКА с приближенными, полученными методом перевала, отмечалось, что эти результаты существенно разнятся именно вблизи точки БЭК.

Тем не менее на сегодняшний день не существует удобного аналитического представления для статистической суммы в КА и МКА, которое бы достаточно хорошо соответствовало режиму БЭК. Цель настоящей работы состоит в восполнении этого пробела. В первом разделе мы вводим необходимые обозначения и определения, а также получаем аналитическое выражение для среднего числа частиц N_0 на основном уровне при условии $N_0 \gg 1$. Во втором проводится вычисление статистической суммы в КА методом перевала с учетом первой поправки. В третьем разделе анализируется причина, из-за которой область применимости метода перевала ограничена температурами $T > T_{BEC}$; при этом путем выделения сингулярности, соответствующей основному уровню, выводится выражение, справедливое и при $T < T_{BEC}$. В четвертом разделе мы предлагаем метод асимптотического разложения статистической суммы в КА по обратным степеням числа частиц, которое работает как выше, так и ниже температуры БЭК. На основании полученного представления вычисляются флуктуации бозе-конденсата и демонстрируется количественное согласие с точным результатом вплоть до очень малых значений числа частиц в системе. В заключении обсуждаются температуры БЭК для гармонической ловушки и ящика, а также различие математического механизма формирования критической точки в БКА и КА.

1. Большой канонический ансамбль

Как известно [1,2], стационарная квантовая система, состоящая из N невзаимодействующих частиц, полностью характеризуется конфигурацией $[n] = \{n_0, n_1, n_2, \dots\}$, где $n_k = 0, 1, 2, \dots$ — количество частиц в k -м квантовом состоянии ($k = 0, 1, 2, \dots$). Согласно положениям статистической механики, среднее (по времени) значение наблюдаемой величины A в нестационарной системе совпадает со средним по ансамблю стационарных систем. Ансамбль определяется функцией распределения $\rho[n]$. Тогда

$$\bar{A} = Z^{-1} \sum_{[n]} \rho[n] A[n], \quad (1)$$

где коэффициент нормировки Z (статистическая сумма) имеет вид

$$Z = \sum_{[n]} \rho[n]. \quad (2)$$

При описании идеального бозе-газа используется, как правило, БКА с функцией распределения

$$\rho[n] = e^{\sum_k n_k (\mu - \varepsilon_k) / T}, \quad (3)$$

где T — температура, μ — химический потенциал, ε_k — одночастичная энергия k -го состояния. Здесь и далее положено, что постоянная Больцмана $k_B = 1$. Поскольку $\rho[n]$ (3) факторизована по отношению к зависимости от чисел заполнения n_k , то суммирование по конфигурациям $[n]$ выполняется тривиально. В частности, среднее число частиц в k -м состоянии

$$\bar{n}_k = Z^{-1} \sum_{[n]} \rho[n] n_k = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{n(\mu - \varepsilon_k) / T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{n(\mu - \varepsilon_k) / T}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu) / T} - 1}. \quad (4)$$

Функция в правой части (4) задает среднее число заполнения и, поскольку она входит составным элементом в выражения для большинства термодинамических величин (и не только в БКА), для нее удобно использовать специальное обозначение:

$$n_k = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu) / T} - 1} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_0) / T} (1 + n_0^{-1}) - 1}. \quad (5)$$

Статистическая сумма (2) с учетом (5) выражается через произведение

$$Z = \prod_{k=0}^{\infty} (n_k + 1). \quad (6)$$

Независимыми переменными в БКА считаются T и μ . Но, как следует из (5), таковыми можно рассматривать температуру и количество частиц n_0 в (основном) состоянии с наименьшей энергией ε_0 , что облегчает анализ различных режимов БЭК.

Запишем среднее значение полного числа частиц в виде

$$\bar{N} = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{n}_k = n_0 + N_{\text{ex}}(n_0, T), \quad (7)$$

где

$$N_{\text{ex}}(n_0, T) \equiv N_{\text{ex}} = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \quad (8)$$

— среднее число частиц в возбужденных состояниях. Если значение \bar{N} фиксировано, то все числа n_k , кроме n_0 , убывают при понижении температуры ($n_{k \neq 0} = 0$ при $T = 0$), а n_0 возрастает вплоть до $n_0 = \bar{N}$ при $T = 0$. Обозначим через \tilde{n}_k максимально возможное значение среднего числа заполнения при данной температуре, т.е. значение n_k (5) при $n_0 \rightarrow \infty$ (или, что одно и то же, $\mu = \varepsilon_0$):

$$\tilde{n}_k = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \varepsilon_0) / T} - 1}. \quad (9)$$

Тогда при $n_0 \gg 1$ для числа n_k , задаваемого (5), можно ограничиться разложением

$$n_k \simeq \tilde{n}_k - \frac{\tilde{n}_k(\tilde{n}_k + 1)}{n_0}, \quad (10)$$

чем, в свою очередь, свести уравнение (7) для n_0 к простому квадратному уравнению:

$$\bar{N} = n_0 + \tilde{N}_{\text{ex}} - \frac{\delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2}{n_0}, \quad (11)$$

в котором

$$\tilde{N}_{\text{ex}} = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{n}_k, \quad \delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{n}_k(\tilde{n}_k + 1) \quad (12)$$

— максимально возможное число частиц в возбужденных состояниях и его среднеквадратичная флуктуация. Заметим, что величины, отмеченные тильдой, являются функциями только температуры. Решение уравнения (11) относительно n_0 обозначим через

$$N_0(T) = \frac{1}{2} \left(\bar{N} - \tilde{N}_{\text{ex}} + \sqrt{(\bar{N} - \tilde{N}_{\text{ex}})^2 + 4\delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2} \right), \quad (13)$$

которое будем называть бозе-конденсатом. Название условное в том смысле, что рассматривается задача вне термодинамического предела при конечном полном числе частиц \bar{N} . Из определений (9), (12) следует, что $\tilde{N}_{\text{ex}}(T)$ и $\delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2(T)$ являются монотонно возрастающими функциями температуры. Обозначим через T_c температуру, при которой \tilde{N}_{ex} сравнивается с \bar{N} , что соответствует

$$\tilde{N}_{\text{ex}}(T_c) = \bar{N}. \quad (14)$$

Если $\delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2 \ll (\bar{N} - \tilde{N}_{\text{ex}})^2$, а это так при $T \neq T_c$ и $\bar{N} \gg 1$, то поведение решения (13) в пределе $N \rightarrow \infty$ приобретает ступенчатый характер. Для разных температурных областей — как ниже T_c , где $\bar{N} > \tilde{N}_{\text{ex}}$, так и выше T_c , где $\bar{N} < \tilde{N}_{\text{ex}}$, — асимптотики $N_0(T)$ при больших, но конечных \bar{N} , имеют простой вид:

$$N_0(T) = \begin{cases} \bar{N} - \tilde{N}_{\text{ex}}, & T < T_c \\ \delta \tilde{N}_{\text{ex}}, & T = T_c \\ \delta \tilde{N}_{\text{ex}}^2 / (\tilde{N}_{\text{ex}} - \bar{N}), & T > T_c \end{cases} \quad (15)$$

Значение T_c , при котором происходит смена режима (кроссовер) в поведении $N_0(T)$, можно рассматривать как обобщение температуры T_{BEC} на случай конечного числа частиц в системе. Напомним, что уравнение (11) является приближенным согласно условию $n_0 \gg 1$. В противоположном случае, когда $n_0 \ll 1$ (больцмановский предел), уравнение (7) дает простые зависимости:

$$N_0(T) \simeq \frac{\bar{N}}{1 + Q(T)}, \quad Q(T) = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-(\varepsilon_k - \varepsilon_0)/T}, \quad (16)$$

свидетельствующие о классическом поведении рассматриваемых бозе-систем.

Независимо от количества частиц n_0 в конденсате факторизованность функции распределения (3) в БКА обуславливает отсутствие каких бы то ни было корреляций между частицами бозе-газа в разных квантовых состояниях. Следствием этого является равенство

$$\overline{n_k n_l} = \bar{n}_k \cdot \bar{n}_l. \quad (17)$$

Среднее от квадрата (и более высоких степеней) числа частиц в k -м состоянии вычисляется аналогично (4):

$$\overline{n_k^2} = 2n_k^2 + n_k, \quad (18)$$

откуда среднеквадратичное отклонение (или, другими словами, среднеквадратичная флуктуация) легко вычисляется и имеет вид

$$\delta n_k^2 = \overline{n_k^2} - \bar{n}_k^2 = n_k(n_k + 1). \quad (19)$$

С учетом (17) квадрат флуктуации полного числа частиц

$$\delta N^2 = \delta n_0^2 + \delta N_{\text{ex}}^2, \quad \delta n_0^2 = n_0(n_0 + 1), \quad (20)$$

$$\delta N_{\text{ex}}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} n_k(n_k + 1).$$

При $T < T_c$ значение $n_0 \sim \bar{N}$ и квадрат флуктуации числа конденсатных частиц

$$\delta n_0^2 = n_0(n_0 + 1) \sim \bar{N}^2. \quad (21)$$

При этом относительная флуктуация $(\delta n_0^2 / \bar{N})^{1/2}$ растет с увеличением числа частиц в системе, на чем и основано распространенное утверждение о расходимости флуктуаций ниже точки БЭК (см., например, [2]).

Отметим в этой связи, что описание БЭК в рамках БКА нельзя считать вполне корректным хотя бы и потому, что при этом явно нарушается теорема Нернста. Действительно, энтропия в БКА следующим образом выражается через средние числа заполнения:

$$S = \sum_k [(n_k + 1) \ln(n_k + 1) - n_k \ln n_k]. \quad (22)$$

В области $T \ll T_c$, где $n_0 \gg 1$, а $n_{k \neq 0} \ll 1$, она становится равной энтропии бозе-конденсата:

$$S \simeq (n_0 + 1) \ln(n_0 + 1) - n_0 \ln n_0 \simeq \ln(n_0 + 1) + 1.$$

Когда $T \rightarrow 0$, величина $S \simeq \ln \bar{N}$, т.е. не только не обращается в нуль, а расходится с ростом числа \bar{N} . Как будет видно ниже, в каноническом ансамбле ни с расходимостью флуктуаций, ни с энтропией подобных проблем не возникает.

2. Канонический ансамбль

Главное различие между КА и БКА состоит в том, что полное число частиц в КА строго фиксировано:

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} n_k = n_0 + N_{\text{ex}}. \text{ Из этого прямо следует, что}$$

$$\bar{n}_0 = N - \bar{N}_{\text{ex}}, \quad (23)$$

$$(n_0 - \bar{n}_0)^2 = \overline{(N_{\text{ex}} - \bar{N}_{\text{ex}})^2}, \quad (24)$$

т.е. флуктуация бозе-конденсата не отличается от флуктуации суммарного числа частиц в возбужденных состояниях, или

$$\delta n_0 = \delta N_{\text{ex}}. \quad (25)$$

Существенно, что в КА среднее число частиц в k -м состоянии не равно среднему числу заполнения, определенному в (5), а невзаимодействующие частицы в различных квантовых состояниях (в отличие от БКА) коррелируют между собой.

Флуктуацию бозе-конденсата в КА можно оценить исходя из следующих качественных соображений. При $T > T_c$ число $\bar{n}_0 \ll N$. Поэтому, рассматривая бозе-конденсат как малую подсистему, можно предположить, что для нее справедливо описание в рамках БКА. Следовательно, при $T > T_c$ и в КА имеет место равенство (см. (19))

$$\delta n_0^2 \simeq n_0(n_0 + 1). \quad (26)$$

Когда же $T < T_c$, малой подсистемой, наоборот, становятся надконденсатные частицы и, стало быть, среднеквадратичная флуктуация их числа в КА может быть описана выражением

$$\delta N_{\text{ex}}^2 \simeq \sum_{k=1}^{\infty} n_k(n_k + 1). \quad (27)$$

Простой интерполяцией выражений (26) и (27) с учетом (25) находим, что

$$\delta n_0^2 = \delta N_{\text{ex}}^2 = \frac{n_0(n_0 + 1) \sum_{k=1}^{\infty} n_k(n_k + 1)}{\sum_{k=0}^{\infty} n_k(n_k + 1)}. \quad (28)$$

Ниже мы сравним это феноменологическое выражение с вычисленным непосредственно в КА.

Для этого определим функцию распределения в КА (ср. с (3))

$$\rho[\mathbf{n}] = e^{-\sum_k n_k \varepsilon_k / T} \delta(N - \sum_k n_k). \quad (29)$$

Свойство факторизации $\rho[\mathbf{n}]$ утрачивается из-за наличия δ -функции в правой части (29), так что по сравнению с БКА вычисление статистической суммы и средних от наблюдаемых усложняется. Факторизованность, однако, нетрудно восстановить и свести суммирование по конфигурациям $[\mathbf{n}]$ к суммированию по независимым n_k , если использовать интегральное представление δ -функции Кронекера

$$\delta(m) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx e^{ixm}. \quad (30)$$

Тогда, подставляя (30) в (29), а также меняя последовательность суммирования и интегрирования, приходим к следующему представлению для статистической суммы:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx e^{ixN} \sum_{[\mathbf{n}]} e^{-\sum_k n_k (\varepsilon_k / T + ix)} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx e^{ixN + W(-ix)}, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$W(-ix) = -\sum_k \ln(1 - e^{-\varepsilon_k / T - ix}),$$

или, обозначив x через iv ,

$$W(v) = \sum_{k=0}^{\infty} \ln(n_k + 1), \quad n_k = \frac{1}{e^{\varepsilon_k / T - v} - 1}. \quad (32)$$

Сравнение (32) с (6) показывает, что функция $W(v)$ — это логарифм статистической суммы в БКА, коль скоро положить $v = \mu / T$. Тем самым, в КА средние физических величин есть не что иное, как отношения соответствующих интегралов от тех же средних, найденных в БКА. Это, с одной стороны, устанавливает определенную связь между обоими статистическими ансамблями, а с другой — позволяет использовать исходное (см. (5)) определение для числа бозе-частиц в каждом из состояний. Но в них средние в КА могут быть выражены и через производные от статсуммы. Например, в простейшем случае невырожденного спектра ε_k имеем

$$\bar{n}_k = Z^{-1} \sum_{[\mathbf{n}]} \rho[\mathbf{n}] n_k = -Z^{-1} T \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \sum_{[\mathbf{n}]} \rho[\mathbf{n}] = -T \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_k}, \quad (33)$$

$$\delta n_k^2 = -T \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial \varepsilon_k}. \quad (34)$$

При больших N интеграл в правой части (31) вычисляется с помощью метода перевала, что приводит к следующему асимптотическому разложению:

$$Z = \frac{e^{W(v)-vN}}{\sqrt{2\pi W''(v)}} (1 + z_1 + z_2 + \dots). \quad (35)$$

Здесь через v обозначена ближайшая к началу координат в комплексной x -плоскости точка перевала ($x_s = iv$), уравнение для которой имеет вид

$$W'(v) = \sum_{k=0}^{\infty} n_k = N. \quad (36)$$

В главном асимптотическом приближении логарифм статистической суммы в КА имеет следующий простой вид:

$$\ln Z = W(v) - vN - \frac{1}{2} \ln [2\pi W''(v)]. \quad (37)$$

Вклады z_j в (35) выражаются через отношения производных функции $W(v)$ типа

$$\frac{[W^{(l)}(v)]^m [W^{(k)}(v)]^n}{[W''(v)]^{m+n+j}}. \quad (38)$$

Если функция $W(v)$ и ее производные велики, $W^{(l)}(v) \sim N$, а это так, по крайней мере, в области $T > T_c$ и $N \gg 1$, то отношения (38) и вклады z_j имеют порядок малости $O(N^{-j})$. Так, для первой поправки находим:

$$z_1 = \frac{W^{(4)}(v)}{8[W''(v)]^2} - \frac{5[W'''(v)]^2}{24[W''(v)]^3} = O(N^{-1}). \quad (39)$$

Возьмем производную от числа заполнения (32) по ε_l

$$T \frac{\partial n_k}{\partial \varepsilon_l} = n_k(n_k + 1) \left(T \frac{\partial v}{\partial \varepsilon_l} - \delta_{kl} \right). \quad (40)$$

Производная от точки перевала v по ε_l вычисляется дифференцированием уравнения (36)

$$T \frac{\partial v}{\partial \varepsilon_l} = \frac{n_l(n_l + 1)}{W''(v)}. \quad (41)$$

Теперь с помощью (33), (37), (40) и (41) находим среднее значение числа частиц в k -м состоянии

$$\bar{n}_k = n_k - \frac{n_k(n_k + 1)}{2W''(v)} \left(2n_k + 1 - \frac{W'''(v)}{W''(v)} \right). \quad (42)$$

В частности, для среднего числа частиц в основном состоянии (33) получим

$$\bar{n}_0 = n_0 - \frac{n_0(n_0 + 1)}{2W''(v)^2} [(2n_0 + 1)W''(v) - W'''(v)], \quad (43)$$

где через $V(v)$ обозначена сумма только по возбужденным состояниям

$$V(v) = W(v) - \ln(n_0 + 1) = \sum_{k=1}^{\infty} \ln(n_k + 1). \quad (44)$$

Продифференцировав, наконец, \bar{n}_0 по ε_0 (см. (34)), приходим к выражению для среднеквадратичной флуктуации бозе-конденсата

$$\delta n_0^2 = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3, \quad (45)$$

определяющейся вкладом:

$$\delta_1 = \frac{n_0(n_0 + 1)W''(v)}{W''(v)}, \quad (46)$$

$$\delta_2 = \frac{\delta_1}{2W''(v)^2} \left\{ (2n_0 + 1)W'''(v) - (6n_0^2 + 6n_0 + 1)W''(v) + \frac{2n_0(n_0 + 1)(2n_0 + 1)}{W''(v)} [(2n_0 + 1)W''(v) - W''(v)] \right\}, \quad (47)$$

$$\delta_3 = \frac{n_0^2(n_0 + 1)^2}{2W''(v)^3} \left\{ (2n_0 + 1)W'''(v) - V^{(4)}(v) - \frac{2W'''(v)}{W''(v)} [(2n_0 + 1)W''(v) - W''(v)] \right\}. \quad (48)$$

В области температур $T > T_c$ конденсат разреженный, $n_0 \ll N$, и, соответственно,

$$\delta_1 \simeq n_0(n_0 + 1), \quad \delta_2 \sim \frac{\delta_1}{N}, \quad \delta_3 \sim \frac{\delta_1^2}{N^2}. \quad (49)$$

Отметим, что феноменологическая формула для флуктуации (28) бозе-конденсата совпадает с главным асимптотическим вкладом δ_1 (46).

Точное выражение для статистической суммы дается однократным интегралом (31), который для не слишком больших N нетрудно найти численно. Интересно при этом сравнить точное выражение для флуктуаций с его асимптотикой, определяемой формулами (45)–(48). Такое сравнение, однако, невозможно сделать в общем виде, поскольку количественные расчеты требуют задания явного вида функции $W(v)$, который, в свою очередь, опирается на конкретный спектр энергий ε_k . Найдем его для случая атомов щелочных металлов в магнитных ловушках.

Как известно, опыты по охлаждению большого количества таких атомов ($N \simeq 10^3 - 10^4$) трактуются как экспериментальное осуществление БЭК. Удержание частиц в ловушках обеспечивается потенциалом $v(\mathbf{r})$, точная зависимость которого от расстояния \mathbf{r} , вообще говоря, неизвестна, однако для теоретического рассмотрения обычно ограничиваются квадратичным

(гармоническим) приближением. В итоге задача о БЭК сводится, как упоминалось, к расчету статсуммы системы линейных осцилляторов. Спектр ε_l и спектральная плотность g_l (коэффициент вырождения) трехмерного изотропного осциллятора имеют простой вид:

$$\varepsilon_l = \hbar\omega \left(l + \frac{3}{2} \right), \quad g_l = \frac{1}{2}(l+1)(l+2), \quad l=0,1,2, \dots, \quad (50)$$

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2\omega^2} - \frac{1}{4} \right), \quad \varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

Обратим внимание, что в (50) индексом l перечисляются уровни энергии, а не квантовые состояния, для нумерации которых ранее использовался индекс k . При высоких температурах ($T \gg \varepsilon_0$) ряды, которыми заданы функция $W(\nu)$ и ее производные, сходятся медленно. В Приложении показано, как улучшить их сходимость и получить выражения, удобные для численных расчетов.

Уравнение на точку кроссовера в КА отличается от (14) в БКА всего лишь заменой \bar{N} на N , т.е.

$$\tilde{N}_{\text{ex}}(T_c) = N. \quad (51)$$

Из определений (12) и (36) следует, что $\tilde{N}_{\text{ex}} = W'(\varepsilon_0/T) - \tilde{n}_0$. Тогда, используя для $W'(\nu)$ асимптотическое разложение ((П.21) в Приложении) при больших температурах $\tau = T/\hbar\omega \gg 1$, запишем для \tilde{N}_{ex} разложение

$$\tilde{N}_{\text{ex}} = \tau^3 \zeta(3) + \frac{3}{2} \tau^2 \zeta(2) + \tau \ln \tau + O(\tau), \quad (52)$$

где $\zeta(j)$ — ζ -функция Римана. Из него можно найти решение уравнения (51), определяющее точку кроссовера τ_c в виде разложения по обратным степеням N . В главном приближении обозначим это решение через

$$\tau_{\text{BEC}} \equiv \frac{T_{\text{BEC}}}{\hbar\omega} = \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3}. \quad (53)$$

Теперь, зная (53) из (51) и (52), находим для τ_c

$$\frac{\tau_c}{\tau_{\text{BEC}}} = \frac{T_c}{T_{\text{BEC}}} = 1 - \frac{1}{\zeta(3)\tau_{\text{BEC}}} \left[\frac{\zeta(2)}{2} + \frac{\ln \tau_{\text{BEC}}}{3\tau_{\text{BEC}}} \right] + O(\tau_{\text{BEC}}^{-2}). \quad (54)$$

Из выражений (53) и (54) видно, что температура кроссовера T_c ниже температуры конденсации T_{BEC} для бозе-газа в ловушке. Заметим, что для такого газа в ящике ситуация противоположная: $T_c > T_{\text{BEC}}$.

Полученные выражения (53) и (54), а также известные численные значения входящей в них ζ -функции позволяют без труда убедиться, что даже при числе частиц порядка 10^3 температура конденсации T_c всего

лишь в 6 раз превышает величину энергии ε_0 основного состояния. Это прямо указывает на микроскопичность (в крайнем случае, мезоскопичность), а не макроскопичность наблюдаемого в упомянутых опытах явления конденсации. В связи с этим можно высказать сомнение в адекватности однозначного рассмотрения конденсации нескольких тысяч частиц как БЭК, главной особенностью которой служит, строго говоря, возникновение и проявление квантовых свойств у макроскопических явлений или объектов.

Не отрицая, разумеется, наличия самого явления бозе-конденсации, происходящего в магнитных ловушках, хотелось бы все же заметить, что изложенные в этом разделе результаты свидетельствуют, на наш взгляд, скорее, в пользу нанофизического характера конденсации атомов щелочных металлов, наблюдаемой в экспериментах.

На рис. 1 приведены графики флуктуаций бозе-конденсата при их точном расчете

$$\delta n_0^2 = T^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \varepsilon_0^2}$$

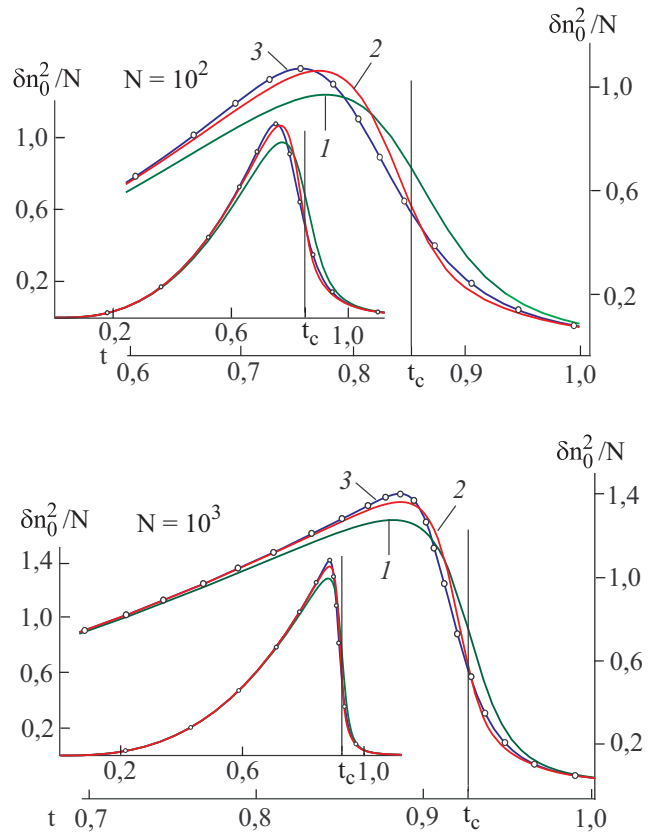


Рис. 1. Зависимость от температуры $t = T/T_{\text{BEC}}$ относительной флуктуации бозе-конденсата $\delta n_0^2/N$. Кружками обозначены результаты численного расчета интеграла (31). Кривая 1 — главный вклад в асимптотическое разложение (45), кривая 2 — учет следующей поправки к (45), кривая 3 — асимптотическое разложение (68), (71).

где функция $V(v)$ определена в (44). Вклад интеграла по контуру C имеет следующий вид:

$$Z_1 = \frac{1}{2\pi} \int_C dx e^{U(-ix)} \simeq \frac{e^{U(v_1)}}{\sqrt{2\pi U''(v_1)}}. \quad (57)$$

Заметим, что вследствие периодичности функции $W(v)$, т.е.

$$W(v + 2\pi i) = W(v),$$

вклады участков контура интегрирования вдоль лучей $[-\pi, -\pi + i\infty)$ и $(\pi, \pi + i\infty)$, будучи равными и противоположными по знаку, взаимно сокращаются. Кроме того, из выражений (56) и (57) нетрудно увидеть, что при $T < T_c$ и $N \gg 1$ отношение интегралов Z_1 / Z_0 экспоненциально мало, вследствие чего статистическая сумма в режиме бозе-конденсации дается исключительно простым выражением (56). Из него, в частности, следует, что энтропия

$$S = \frac{\partial \ln(T \ln Z_0)}{\partial T} = \sum_{k=1}^{\infty} [\ln(\tilde{n}_k + 1) + \tilde{n}_k(\varepsilon_k - \varepsilon_0) / T],$$

как и должно быть, обращается в нуль при $T \rightarrow 0$.

4. Модифицированное асимптотическое разложение статистической суммы

Наиболее интересная и в то же время наиболее трудная для расчета область — это критическая окрестность T_c . Здесь вклады Z_0 и Z_1 сравниваются, а флуктуации максималны. Для получения корректного асимптотического разложения интеграла (31) по обратным степеням числа частиц N предлагаем следующий прием, состоящий из нескольких этапов.

1. На начальном этапе выделим явно первый сингулярный член в подынтегральном выражении (31)

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx e^{U(-ix)}}{2 \operatorname{sh}\left(\frac{\varepsilon_0}{2T} + \frac{ix}{2}\right)}, \quad (58)$$

причем в отличие от (55) функция $U(-ix)$ здесь имеет другой вид:

$$U(-ix) = \frac{\varepsilon_0}{2T} + ix \left(N + \frac{1}{2} \right) + V(-ix). \quad (59)$$

Точка перевала $x_s = iv$ для функции (59) удовлетворяет уравнению (ср. с (36))

$$V'(v) = N + \frac{1}{2}. \quad (60)$$

2. На втором этапе осуществим замену переменной интегрирования $x \rightarrow u$:

$$u^2 = U(v) - U(-ix) = V(v) - V(-ix) - (v + ix) \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (61)$$

$$2u du = iU'(-ix) = i \left[V'(-ix) - N - \frac{1}{2} \right]. \quad (62)$$

3. Наконец, деформируем контур интегрирования в x -плоскости так, чтобы он проходил через точку перевала по линии наискорейшего спуска, которая определяется уравнением

$$\operatorname{Im}[U(-ix)] = 0.$$

В результате, все вместе позволяет преобразовать интеграл (58) к виду, в котором

$$Z = Z_0 + Z_1, \quad (63)$$

$$Z_0 = \frac{e^{U(v)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du e^{-u^2}}{v + iu}, \quad (64)$$

$$Z_1 = \frac{e^{U(v)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} f(u), \quad (65)$$

а через iv обозначено значение переменной u , определенной в (61), соответствующее точке $x = i\varepsilon_0 / T$:

$$v^2 = U\left(\frac{\varepsilon_0}{T}\right) - U(v) = V\left(\frac{\varepsilon_0}{T}\right) - V(v) - \left(\frac{\varepsilon_0}{T} - v\right) \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (66)$$

Функция $f(u)$ в подынтегральном выражении (65) аналитична в окрестности точки $u = iv$:

$$f(u) = \frac{u}{iU'[-x(u)] \operatorname{sh}[\varepsilon_0 / 2T + ix(u) / 2]} - \frac{1}{v + iu}, \quad (67)$$

где зависимость $x(u)$ в (67) определяется уравнением (61). Интеграл (64) выражается через функцию ошибок

$$\begin{aligned} Z_0 &= \frac{1}{2} \exp[U(v) + v^2] \operatorname{Erfc}(v) = \\ &= \frac{1}{2} \exp[V(\varepsilon_0/T) - N\varepsilon_0/T] \operatorname{Erfc}(v), \end{aligned} \quad (68)$$

для которой, как известно [24], справедливы равенства

$$\begin{aligned} \operatorname{Erfc}(v) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_v^{\infty} dx e^{-x^2}, \quad \operatorname{Erfc}(0) = 1, \\ \operatorname{Erfc}(-\infty) &= 2, \quad \operatorname{Erfc}(-v) = 2 - \operatorname{Erfc}(v), \end{aligned} \quad (69)$$

а при $v \gg 1$ — асимптотическое разложение

$$\text{Erfc}(v) = \frac{e^{-v^2}}{v\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2v^2} + \frac{3}{4v^4} + O(v^{-6}) \right). \quad (70)$$

Приближенное значение интеграла (65) находим, разлагая в ряд Тейлора функцию (67) в точке $u = 0$:

$$Z_1 = \frac{e^{U(v)}}{2\sqrt{\pi}} [f(0) + \frac{1}{4} f''(0) + \dots]. \quad (71)$$

Из (62) следует, что $dx/du = -2iu/U'(ix)$. В итоге, для функции $f(u)$ и ее второй производной в точке $u = 0$ находим

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{\sqrt{2V''(v)} \text{sh}\left(\frac{\varepsilon_0 - v}{2T} - \frac{v}{2}\right)} - \frac{1}{v}, \\ f''(0) &= \frac{2}{v^3} - \frac{2}{[2V''(v)]^{3/2} \text{sh}\left(\frac{\varepsilon_0 - v}{2T} - \frac{v}{2}\right)} \times \\ &\times \left[\text{sh}^{-2}\left(\frac{\varepsilon_0 - v}{2T} - \frac{v}{2}\right) - \frac{V'''(v)}{V''(v)} \coth\left(\frac{\varepsilon_0 - v}{2T} - \frac{v}{2}\right) + \right. \\ &\left. + \frac{5}{6} \left(\frac{V'''(v)}{V''(v)} \right)^2 - \frac{V^{(4)}(v)}{2V''(v)} + \frac{1}{2} \right]. \end{aligned} \quad (72)$$

В пределе $T \rightarrow T_c$ имеем $v \rightarrow \varepsilon_0/T$, $v \rightarrow 0$. Тогда, раскрывая неопределенность ($\infty - \infty$) в точке $v = 0$, из (72) для окрестности кроссовера получаем

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{V'''(v)}{3\sqrt{2}[V''(v)]^{3/2}}, \\ f''(0) &= \frac{V'''(v)}{3\sqrt{2}[V''(v)]^{3/2}} \times \\ &\times \left[1 - \frac{35}{9} \left(\frac{V'''(v)}{V''(v)} \right)^2 + \frac{5V'''(v)}{V''(v)} - \frac{6V^{(5)}(v)}{5V'''(v)} \right]. \end{aligned} \quad (73)$$

Вклады $f(0)$, $f''(0)$, а также их отношение $f''(0)/f(0)$ убывают с ростом N . Степень убывания отношения $f''(0)/f(0)$ зависит от асимптотического поведения производных $V^{(p)}(v)$, которое, в свою очередь, определяется конкретным видом спектра ε_l или спектральной плотности g_l как функций l . Для рассмотренного в Приложении квадратичного потенциала удержания производные $V^{(p)} \sim N$ при $p < 3$, $V^{(3)} \sim N \ln N$ и $V^{(p)} \sim N^{p/3}$ при $p > 3$. Из этого следует, что представления (68) и (71) для вкладов в статистическую сумму являются действительно асимптотическими разложе-

ниями по обратным степеням N для всех температур, включая их критическую область $T \sim T_c$.

Как видно на рис. 2 и 4, даже при относительно малых (вплоть до $N \sim 100$) количествах частиц расхождение между точным и приближенным, соответствующим представлению (63), (68), (71), (72) для статистической суммы, выражениями для флуктуаций бозе-конденсата на графике неразлично. Можно показать, что при температуре ниже T_c данное представление совпадает с асимптотикой (56), а при $T > T_c$ переходит в (35). Критическая область определяется условием

$$|\text{Erfc}(v) - 1| \leq \epsilon, \quad \epsilon \ll 1. \quad (74)$$

Положив, например, $\epsilon = 10^{-1}$, из (74) находим граничное значение $v_c = 1,16$ и, используя для $V(v)$ асимптотическое приближение (см. (П.21) в Приложении), для критической области температур $|T - T_c| \leq \Delta T$ получаем

$$\frac{\Delta T}{T_{BEC}} = \frac{\Delta \tau}{\Delta \tau_{BEC}} = v_c \left(\frac{2}{\zeta(2)} \right)^{1/2} \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \simeq \frac{1}{N^{1/3}}. \quad (75)$$

Из (75) видно, что эта область с увеличением количества частиц в системе сужается весьма медленно. Иными словами, термодинамический предел достигается при очень большом — $N \geq 10^6$ — их количестве. На рис. 5 изображена эволюция величины относи-

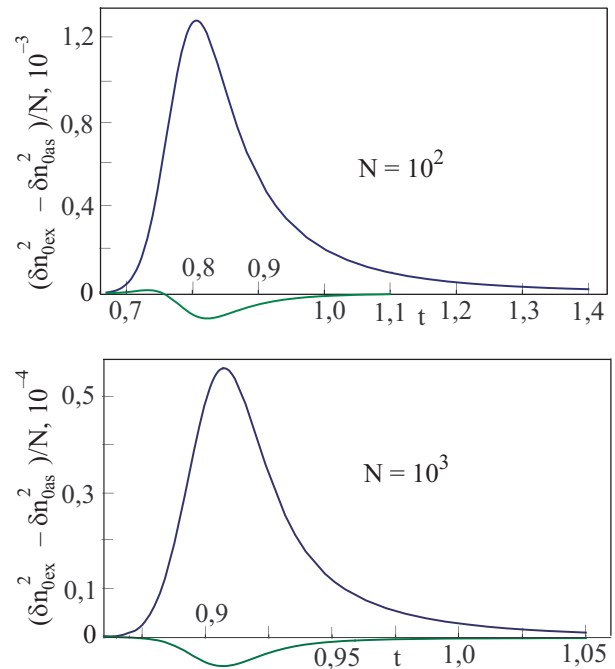


Рис. 4. Разность между приближенными выражениями для флуктуаций и точными значениями $(\delta n_{0ex}^2 - \delta n_{0as}^2)/N$. Кривая 1 соответствует (см. (72)) главному асимптотическому вкладу $f(0)$, кривая 2 — учету асимптотической поправки $f''(0)$.

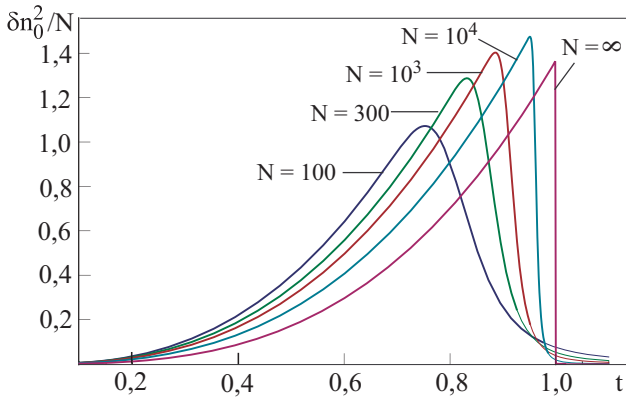


Рис. 5. Зависимость относительной флуктуации $\delta n_0^2/N$ от температуры $t = T/T_{BEC}$ при различных значениях числа частиц в системе.

тельной флуктуации плотности бозе-конденсата по мере изменения полного числа частиц в системе. Приведенные зависимости убедительно демонстрируют, что даже для системы с $N \approx 10^4$ температурное поведение этих флуктуаций все еще заметно отличается от предела $N \rightarrow \infty$, в котором

$$\frac{\delta n_0^2}{N} = \frac{V''(\varepsilon_0/T)}{N} \theta(T_{BEC} - T) = \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_{BEC}} \right)^3 \theta(T_{BEC} - T). \quad (76)$$

5. Заключение

Как хорошо известно и упоминалось выше, в стандартной теоретической задаче о БЭК ловушкой служит трехмерный ящик с фиксированным, что важно, объемом. Для него температура (в квантовой шкале $\tau = T/\hbar\omega_{\text{box}}$) образования бозе-конденсата имеет вид

$$\tau_{BEC}^{\text{box}} = \left(\frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}, \quad (77)$$

а в рассмотренной выше задаче с ловушкой, где потенциал удержания квадратичен и объем не задан,

$$\tau_{BEC}^{\text{trap}} = \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}. \quad (78)$$

Как видно из (77) и (78), зависимости температуры БЭК от числа частиц в системе для этих двух случаев существенно различаются. Для ящика характерная энергия выражается через объем системы V и массу M частицы следующим образом:

$$\hbar\omega_{\text{box}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2V^{2/3}M}. \quad (79)$$

В магнитной же ловушке объем не фиксирован и, более того, меняется с изменением температуры. Определим эффективный размер системы в ловушке с квадратичным потенциалом удержания как амплитуду колебаний осциллятора с энергией, равной температуре T . Тогда

$$V^{\text{eff}} \simeq \frac{4\pi}{3} \left(\frac{T}{M\omega^2} \right)^{3/2}. \quad (80)$$

Теперь, выразив число частиц через их плотность ρ ($N = \rho V$) и подставив (79) в (77) и (80) в (78), для T_{BEC} находим

$$T_{BEC}^{\text{box}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2M} \left(\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}, \quad T_{BEC}^{\text{trap}} = \frac{\hbar^2}{M} \left(\frac{4\pi\rho}{3\zeta(3)} \right)^{2/3}. \quad (81)$$

Из (81) следует, что на языке плотности числа частиц температуры БЭК в ящике и ловушке близки не только качественно, но и количественно:

$$\frac{T_{BEC}^{\text{box}}}{T_{BEC}^{\text{trap}}} = \frac{1}{2} \left[\frac{3\pi^2 \zeta(3)}{4\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \simeq 1,13. \quad (82)$$

В целом, следует еще раз подчеркнуть, что эйнштейновская бозе-конденсация по праву считается одним из фундаментальных открытий теоретической физики. Наиболее яркой его чертой является не просто накопление макроскопического количества частиц в основном состоянии при охлаждении идеального бозе-газа, а то, что этот процесс представляет собой фазовое превращение в системе *невозмущающихся* между собой частиц. Скорее всего, и термин «бозе-конденсация» появился благодаря аналогии (строго говоря, не вполне корректной) с конденсацией пара в жидкость, обсуждавшейся Эйнштейном в его пионерской работе [3].

Хотя фазовые превращения в природе весьма разнообразны, они в то же время демонстрируют удивительную универсальность: изменение термодинамических свойств системы происходит скачкообразно при пересечении температурой (или каким-либо иным контролируемым параметром) своего критического значения. С формальной теоретико-физической точки зрения главный вопрос заключается в том, каким образом в исходно аналитических по температуре функциях формируется в термодинамическом пределе сингулярность в критической точке T_c :

$$f(T, N) \underset{N \rightarrow \infty}{=} f_1(T)\theta(T_c - T) + f_2(T)\theta(T - T_c). \quad (83)$$

БЭК, как точно решаемая модель, дает на него простой ответ. Так, в БКА роль «размазанной» θ -функции, согласно (13), играет величина

$$\theta_{GCA}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + \alpha_{GCA}/N}} + 1 \right), \quad \alpha_{GCA} = \frac{4\zeta(2)}{\zeta(3)}, \quad (84)$$

а в КА, как это следует из (68), таковой является

$$\theta_{CA}(x) = \frac{1}{2} \operatorname{Erfc}(-\alpha_{CA} \sqrt{N}x), \quad \alpha_{CA} = \sqrt{\frac{\zeta(3)}{2\zeta(2)}}. \quad (85)$$

Для обоих представлений (84) и (85) при $N \rightarrow \infty$ пределом служит обычная θ -функция, однако при конечной величине N они ведут себя по-разному. На рис. 6 видно, что θ_{CA} ближе к ступеньке, чем θ_{GCA} . Таким образом, можно утверждать, что в КА термодинамический предел наступает несколько быстрее, чем в БКА.

Если в качестве функции $f(T, N)$ в (83) выбрать удельную свободную энергию

$$f(T, N) = -\frac{T}{N} \ln Z,$$

то в обоих ансамблях как $f_1(T)$, так и $f_2(T)$ одинаковы, откуда следует вывод об эквивалентности ансамблей:

$$f_1(T) = -\frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \frac{T^4}{T_{BEC}^3}, \quad f_2(T) = -\frac{\operatorname{Li}_4(e^{\mu/T})}{\zeta(3)} \frac{T^4}{T_{BEC}^3}. \quad (86)$$

Химический потенциал μ в (86) как функция температуры и плотности числа частиц дается решением уравнения

$$T^3 \operatorname{Li}_3(e^{\mu/T}) = \zeta(3) T_{BEC}^3,$$

где $\operatorname{Li}_k(z)$ — полилогарифмы (см. (П.12), Приложение). Однако удельные флуктуации бозе-конденсата в разных ансамблях оказываются разными:

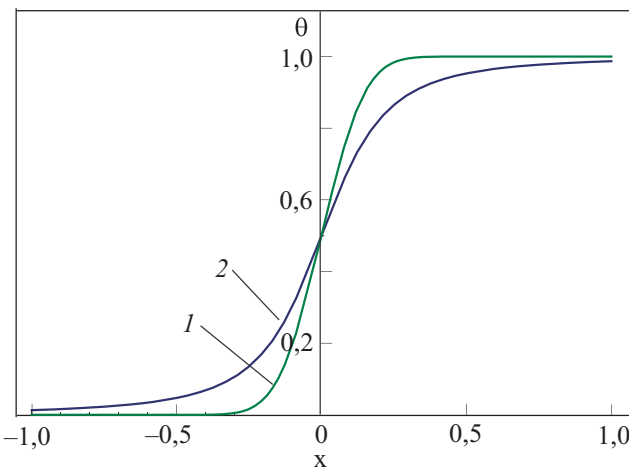


Рис. 6. Поведение сглаженных θ -функций при $N = 10^2$. Кривая 1 — $\theta_{CA}(x)$, кривая 2 — $\theta_{GCA}(x)$.

в БКА

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\delta n_0^2}{N} = \begin{cases} \infty & \text{при } T < T_c, \\ 0 & \text{при } T > T_c, \end{cases}$$

а в КА

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\delta n_0^2}{N} = \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \frac{T^3}{T_{BEC}^3} \theta(T_c - T).$$

Само по себе накопление частиц на нижайшем уровне — прямое и достаточно тривиальное следствие бозе-статистики, очевидное из вида формул для средних чисел заполнения (5). Но когда речь идет о фазовом переходе, нужно затронуть и вопрос о термодинамическом пределе: например, достаточно ли количества частиц $N = 10^3$ для того, чтобы приблизиться к нему? Уточним, кстати, что под термодинамическим пределом принято подразумевать стремление объема системы к бесконечности при постоянстве различных плотностей (например, плотности числа частиц ρ) и фиксированной температуре. Но и объем, и плотность, и температура — величины размерные: 1 метр почти «бесконечен», если его измерять в ангстремах. С точки зрения теоретической физики, всякий предел следует формулировать на языке безразмерных величин, а их в задаче о бозе-конденсации идеального газа всего две: полное число частиц в системе N и температура в квантовой шкале $\tau = T / \hbar\omega$. Поэтому термодинамический предел — это прежде всего $N \rightarrow \infty$, а в качестве плотностей нужно рассматривать отношение соответствующих экстенсивных величин к полному числу частиц. Асимптотические поправки к пределу $N \rightarrow \infty$ в рассмотренной задаче имеют порядок $N^{-1/3}$, так что, казалось бы, термодинамический предел достигается с 10% точностью, если $N = 10^3$. Но с другой стороны, температура БЭК при таком количестве частиц сопоставима с энергией основного состояния ϵ_0 (напомним, что в данной задаче $T_c \simeq 6\epsilon_0$ при $N = 10^3$), что никак не позволяет говорить о макроскопическом масштабе физических величин.

В связи с этим заметим, что при удержании атомов щелочных металлов в магнитных ловушках процедура приготовления когерентного состояния из N частиц сопровождается словом «охлаждение», видимо, чтобы отразить ее термодинамическую природу. Между тем, ни объем, ни температуру, ни, тем более, спектральную плотность числа частиц нельзя с необходимой точностью контролировать из-за недостатка технических возможностей да и по принципиальным причинам: что такое температура в квантовых масштабах $T \sim \epsilon_0$? Поэтому в свете изложенных результатов представляется вполне обоснованным вывод, согласно которому утверждение о наблюдении истинной БЭК в этих, несомненно, выдающихся экспериментах следовало бы воспринимать с известной степенью осторожности.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов SCOPES SNSF, француско-украинских программ «Дніпро» — проект M17-2009, PICS CNRS и НАН Украины 2009–2011, программы НАН Украины «Наноструктурные системы, наноматериалы, нанотехнологии» — 10/7-Н, а также целевой программы Отделения физики и астрономии НАН Украины.

Приложение

Функция $W(v)$ (32) и ее производные $W^{(p)}(v)$ определяются рядами вида $\sum_{l=0}^{\infty} h(l)$. Отделив первые m слагаемых, обозначим остаток ряда через

$$K = \sum_{l=m+1}^{\infty} h(l) \tag{П.1}$$

и применим для него преобразование Абеля–Плана. Тогда ряд (П.1) преобразуется к сумме двух интегралов

$$K = I + J, \tag{П.2}$$

в которой

$$I = \int_{m+\frac{1}{2}}^{\infty} dl h(l), \tag{П.3}$$

$$J = -2 \int_0^{\infty} \frac{dx \operatorname{Im} [h(m + \frac{1}{2} - ix)]}{e^{2\pi x} + 1}. \tag{П.4}$$

Чтобы ряд (П.1) сходиллся, функция $h(l)$ должна убывать с ростом l не медленнее, чем l^{-1} . Для степенной функции $h(l) \sim l^{-\alpha}$ ее производные $h^{(p)}(l)$ ведут себя при больших l как $l^{-\alpha-p}$. В этом случае интеграл J можно вычислить с помощью асимптотического разложения по обратным степеням m . Разложим в ряд Тейлора функцию $h(m + 1/2 - ix)$ в точке $x = 0$ в подынтегральном выражении (П.4). Для суммы любого конечного числа n членов этого разложения можно поменять порядок суммирования и интегрирования, что в результате дает

$$J \simeq \sum_{l=0}^n (-1)^l c_l h^{(2l+1)}(m + \frac{1}{2}), \tag{П.5}$$

где

$$c_l = \frac{1}{(2l+1)!} \int_0^{\infty} \frac{dx x^{2l+1}}{e^{2x} + 1} = \frac{(1 - 2^{-2l-1}) \zeta[2l+2]}{(2\pi)^{2(l+1)}}. \tag{П.6}$$

Заметим, что оптимальное число членов в асимптотическом разложении (П.5) определяется видом коэффициентов c_l . Поэтому вычисление интеграла J можно выполнить с помощью (П.5) с любой наперед заданной точностью, увеличивая m .

Применим данный прием к вычислению логарифма статистической суммы (2). Здесь функция $h(l)$ имеет вид

$$h(l) = g(l) \ln(n_l + 1), \tag{П.7}$$

$$g(l) = \frac{1}{2}(l+1)(l+2), \quad n_l = \frac{1}{e^{(l-\sigma)/\tau} - 1},$$

$$\tau = \frac{T}{\hbar\omega}, \quad \sigma = \nu\tau - \frac{3}{2}. \tag{П.8}$$

Тогда

$$W(v) = \sum_{l=0}^m g(l) \ln(n_l + 1) + I + J. \tag{П.9}$$

Интеграл I в (П.9) выражается через полилогарифмы (функции Лерха)

$$I = \tau^3 \operatorname{Li}_4(z) + a\tau^2 \operatorname{Li}_3(z) + b\tau \operatorname{Li}_2(z), \tag{П.10}$$

где

$$a = g' \left(m + \frac{1}{2} \right) = m + 2, \quad b = g \left(m + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \left(m + \frac{3}{2} \right) \left(m + \frac{5}{2} \right),$$

$$z = e^{-\left(m + \frac{1}{2} - \sigma\right)/\tau}, \tag{П.11}$$

$$\operatorname{Li}_k(z) = \frac{1}{\Gamma(k)} \int_0^{\infty} \frac{dx x^{k-1}}{e^x/z + 1} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^k},$$

$$\operatorname{Li}_{k-1}(z) = z \frac{d\operatorname{Li}_k(z)}{dz}. \tag{П.12}$$

Вклад J в (П.9) имеет следующий вид:

$$J = \sum_{l=0}^n (-1)^l c_l f_l, \tag{П.13}$$

где

$$f_0 = a \ln(r + 1) - b\tau^{-1}r, \tag{П.14}$$

при $l > 0$

$$f_l = -l(2l+1)\tau^{-2l+1}r_{2l-1} + a(2l+1)\tau^{-2l}r_{2l} - b\tau^{-2l-1}r_{2l+1}, \tag{П.15}$$

$$r_0 = r = n_{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{e^{(m+\frac{1}{2}-\sigma)/\tau} - 1},$$

$$r_l = \tau^l \frac{\partial^l r}{\partial \sigma^l} = r(r+1) \frac{\partial r_{l-1}}{\partial r}.$$

Для расчета асимптотического разложения $W(\nu)$ при больших τ в сумме в правой части (П.9) достаточно удержать только одно слагаемое ($m=0$ в (П.1)). Тогда, воспользовавшись известным асимптотическим разложением полилогарифма при $x \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \text{Li}_4(e^{-x}) &= \zeta(4) - \zeta(3)x + \zeta(2) \frac{x^2}{2} + \\ &+ \left(\ln x - \frac{11}{6} \right) \frac{x^3}{6} + O(x^4), \end{aligned} \quad (\text{П.16})$$

где $\zeta(j)$ — ζ -функция Римана

$$\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \zeta(3) \simeq 1,202, \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6},$$

с точностью до неубывающих с ростом τ членов находим, что

$$\begin{aligned} I &= \frac{\pi^4}{90} \tau^3 + g'(\sigma) \zeta(3) \tau^2 + g(\sigma) \frac{\pi^2}{6} \tau + \\ &+ \frac{1/2 - \sigma}{6} \left\{ \left[g(\sigma+1) + \frac{5}{2} \right] \ln \left[\frac{1/2 - \sigma}{\tau} \right] - \right. \\ &\left. - \frac{1}{6} \left[11(\sigma+2)^2 - \sigma - \frac{3}{4} \right] \right\} + O(\tau^{-1}). \end{aligned} \quad (\text{П.17})$$

При этом вклад (П.4) приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} J &= 2 \int_0^\infty \frac{dx}{e^{2\pi x} + 1} \text{Im} \left[g\left(\frac{1}{2} - ix\right) \ln \left(1 - e^{-\left(\frac{1}{2} - \sigma - ix\right)/\tau} \right) \right] \simeq \\ &\simeq \frac{\ln \tau}{12} + 2 \int_0^\infty \frac{dx}{e^{2\pi x} + 1} \text{Im} \left[g\left(\frac{1}{2} - ix\right) \right] \ln \left(\frac{1}{2} - \sigma - ix \right) + O(\tau^{-1}). \end{aligned} \quad (\text{П.18})$$

Асимптотические разложения для производных $W^{(p)}(\nu)$ получаются дифференцированием выражений (П.10) и (П.18) по σ :

$$W^{(p)}(\nu) = \frac{\tau^p \partial^p}{\partial \sigma^p} [\ln(n_0 + 1) + I + J].$$

Заметим, что, начиная с третьей производной, выражение (П.10) для I представляется в виде элементарных функций, поскольку

$$\text{Li}_1(e^{-x}) = -\ln(1 - e^{-x}). \quad (\text{П.19})$$

Производная $\partial J / \partial \sigma$ выражается через специальную функцию $\psi(z) = \Gamma'(z) / \Gamma(z)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial \sigma} &= -2 \int_0^\infty \frac{dv}{e^{2\pi v} + 1} \text{Im} \left[\frac{g\left(\frac{1}{2} - ix\right)}{\frac{1}{2} - \sigma - ix} \right] = \\ &= \frac{1}{48} - g(\sigma) \left[\psi(1 - \sigma) - \ln \left(\frac{1}{2} - \sigma \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.20})$$

В частности, для производной $W'(\nu) = \sum_{l=0}^\infty g(l) n_l$ с учетом (П.20) приходим к выражению

$$\begin{aligned} W'(\nu) &= n_0 + \zeta(3) \tau^3 + g'(\sigma) \frac{\pi^2}{6} \tau^2 + \\ &+ \tau g(\sigma) [\ln \tau - \psi(1 - \sigma)] + \frac{\tau}{4} \left(3\sigma^2 + 5\sigma - \frac{19}{6} \right) + \\ &+ \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} - \sigma \right) \left[g(\sigma+1) + \frac{5}{4} \right] - \frac{1}{24} + O(\tau^{-1}). \end{aligned} \quad (\text{П.21})$$

1. Керзон Хуанг, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1966).
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
3. А. Einstein, *Preuss. Akad. Wiss. Math. Kl. Bericht* **1**, 2 (1925).
4. W. Petrich, M.H. Anderson, J.R. Ensher, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3352 (1995).
5. M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wiemann, and E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
6. C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
7. K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
8. D.J. Fried, T.C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S.C. Moss, D. Kleppner, and T.J. Greytak, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3811 (1998).
9. J.P. Einstein and A.H. McDonald, *Nature* **432**, 691 (2004).
10. T. Giamarchi, C. Ruegg, and O. Tchernyshov, *Nature Phys.* **4**, 198 (2008).
11. S.O. Demokritov, V.E. Demidov, O. Dzyapko, G.A. Melkov, A.A. Serga, B. Hillebrands, and A.N. Slavin, *Nature* **443**, 430 (2006).
12. R.M. Ziff, G.E. Uhlenbeck, and M. Kac, *Phys. Rep.* **C32**, 171 (1977).
13. H.D. Politzer, *Phys. Rev.* **A54**, 5048 (1996).
14. W. Ketterle and N.J. van Druten, *Phys. Rev.* **A54**, 656 (1996).
15. M. Gajda and K. Rzazewski, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2686 (1997).
16. H. Haugerund, T. Haugset, and F. Ravndal, *Phys. Lett.* **A225**, 18 (1997).
17. Л.П. Питаевский, *УФН* **168**, 641 (1998).
18. А.А. Звягин, *ФНТ* **33**, 1248 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 948 (2007)].

19. R. Hoppeler, J. Viana Gomes, and D. Boiron, *Eur. Phys. J.* **D41**, 157 (2007).
20. А.И. Бугрий, В.М. Локтев, *ФНТ* **33**, 51 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 37 (2007)].
21. А.И. Бугрий, В.М. Локтев, *ФНТ* **34**, 1259 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 992 (2008)].
22. K. Glaum, H. Kleinert, and A. Pelster, *Phys. Rev.* **A76**, 063604 (2007).
23. S.M. Rezende, *Phys. Rev.* **B79**, 060410 (2009).
24. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).

On the theory of Bose-condensate fluctuations in finite size systems

A.I. Bugrij and V.M. Loktev

An asymptotic expansion for the grand partition function of ideal Bose gas in the canonical ensemble with an arbitrary number of particles is obtained. It is shown that the expressions found are valid in the whole temperature region, the critical temperature included. A comparison between the asymptotic formulas for Bose-condensate fluctuations and the exact ones is carried out and their quantitative agreement is established.

PACS: 05.30.Jp Boson systems;
75.30.Ds Spin waves;
75.70.-i Magnetic properties of thin films, surfaces, and interfaces.

Keywords: Bose-condensation, fluctuation, critical temperature, crossover, canonical ensembles, finite sizes.