УДК 538-9

АВТОМОДЕЛЬНОСТЬ СТАТИСТИКИ В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ БОЗЕ-КОНДЕНСАЦИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА В МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ЛОВУШКАХ: КАНОНИЧЕСКИЙ И БОЛЬШОЙ КАНОНИЧЕСКИЙ АНСАМБЛИ

С. В. Тарасов[1,2]

Для идеального бозе-газа, удерживающегося в ловушке произвольной размерности и формы, исследованы особенности вероятностных распределений числа частиц на основном и на всех возбужденных уровнях в рамках канонического и большого канонического ансамблей. Показано, что в критической области параметров системы статистика автомодельна, а ее характерные масштабы (математическое ожидание, дисперсия и т.д.) не зависят от применяемого в описании ансамбля. При этом сами автомодельные распределения различаются для разных ансамблей.

Ключевые слова: бозе-эйнштейновская конденсация, мезоскопические атомные ловушки, критическая область фазового перехода, канонический и большой канонический ансамбли.

Введение. В настоящее время широко распространены экспериментальные исследования бозе-конденсации атомов в мезоскопических ловушках [1]. Число частиц в них во многих случаях можно считать фиксированным, что отвечает каноническому (или микроканоническому) ансамблю. Тем не менее, для описания часто используется большой канонический ансамбль [2, 3], подразумевающий, что система обменивается с неким резервуаром как энергией, так и частицами. Обоснованием этого подхода служит тот факт, что при определенных условиях в термодинамическом пределе результаты применения различных ансамблей совпадают [4].

[1] Институт прикладной физики РАН, 603950 Россия, Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46.
[2] Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, 603950 Россия, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23; e-mail: serge.tar@gmail.com.

Однако подобные условия не выполняются в окрестности фазового перехода, что продемонстрировано в данной работе на примере описания статистики числа частиц на основном уровне ловушки для идеального бозе-газа (N атомов, температура T) в рамках канонического и большого канонического ансамблей. В критической области параметров, где велики флуктуации параметра порядка системы, мы явно вычислим вероятностные распределения, которые для разных ансамблей заметно отличаются даже в термодинамическом пределе.

Спектр одночастичных энергетических уровней ловушки ϵ_q, где неотрицательный индекс q нумерует уровни, считаем известным. Отсчет энергии производим от основного – самого низколежащего – уровня (т.е. $\epsilon_0 = 0$), который считаем невырожденным (в остальном спектр произволен). Характеризовать систему удобно с помощью безразмерного спектра $\{\lambda_q\}$:

$$\epsilon_q = \epsilon_1 \lambda_q,\ \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3...,\ \lambda_0 = 0,\ \lambda_1 = 1, \tag{1}$$

а также безразмерных параметров α и $\tilde{\mu}$, которые соответствуют первому возбужденному уровню ϵ_1 и химическому потенциалу μ и введены следующим образом:

$$\alpha \equiv \epsilon_1 T,\quad \tilde{\mu} \equiv \mu/T,\ \text{так что}\ \epsilon_q/T = \alpha\lambda_q,\ \mu/T = \alpha\tilde{\mu}. \tag{2}$$

Переходу к термодинамическому пределу больших систем соответствует предел $\alpha \to 0$.

Описание системы в рамках канонического ансамбля. Теория идеального бозе-газа, развитая в работах [5–7], позволяет строго описать, как N атомов системы распределены между основным и возбужденными уровнями. Вероятностное распределение $\rho_n^{(ce)}$ полного числа частиц n на высоких уровнях ($q \geq 1$) выражается в виде

$$\rho_n^{(ce)} = \rho_n^{(\infty)}\theta(N-n)/P_N,\ P_N = \sum_{n=0}^{N}\rho_n^{(\infty)},\ \theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь $\rho_n^{(\infty)}$ – "необрезанное" распределение в системе с независимыми и неограниченными населенностями n_q уровней λ_q выражается явно через характеристическую функцию $\Theta_n^{(\infty)}$:

$$\rho_n^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iun}\Theta_n^{(\infty)}(u)du,\ \Theta_n^{(\infty)}(u) = \prod_{q\neq 0}\frac{e^{\alpha\lambda_q}-1}{e^{\alpha\lambda_q}-e^{iu}}. \tag{4}$$

Распределение числа атомов на основном состоянии $\rho_{n_0}^{(ce)}$ является зеркальным к вычисленному распределению $\rho_n^{(ce)}$, так как полное число частиц в системе фиксировано: $n_0 + n = N$.

Характеристики распределения $\rho_n^{(\infty)}$ – матожидание N_c (известное как критическое число частиц [1]) и дисперсия σ^2 совместно с полным числом частиц N определяют фазовое состояние (рис. 1). При $N < N_c$ большинство частиц размещено на высоких уровнях, что соответствует "горячей", классической фазе. При $N > N_c$ число надконденсатных частиц насыщается и преобладает фракция на уровне ϵ_0, т.е. бозе-конденсат. Перестроение фаз происходит в критической области, где отличие N и N_c порядка среднеквадратичного отклонения σ.

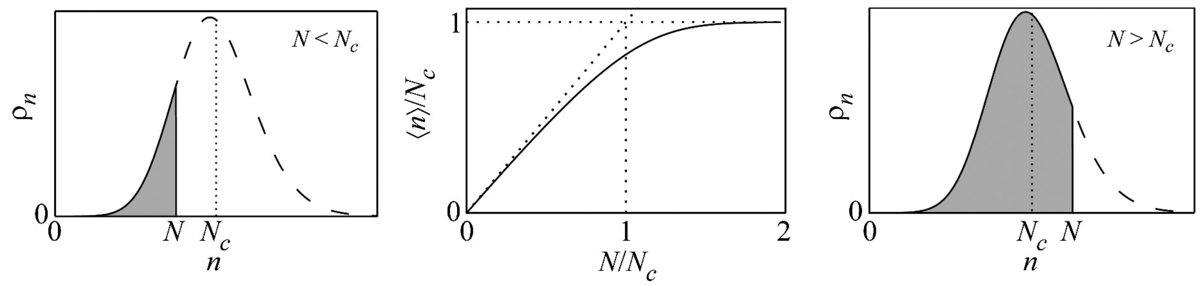

Рис. 1: *Иллюстрация решения (3) для распределения числа частиц вне конденсата: штриховая линия – "необрезанное" распределение $\rho_n^{(\infty)}$, сплошная линия – актуальное распределение $\rho_n^{(ce)}$. Случай $N < N_c$ отвечает классическому газу, $N > N_c$ – наличию конденсата.*

Переход к естественным переменным $x = (n - N_c)/\sigma$ (масштабированное число частиц вне конденсата) и $\eta = (N - N_c)/\sigma$ (масштабированное полное число частиц) обнаруживает автомодельность статистики в критической области [5, 6]. С увеличением числа энергетических уровней ловушки, расположенных ниже уровня температуры (что соответствует увеличению N_c), масштабированные распределения $\rho_n^{(ce)}$ и $\rho_{n0}^{(ce)}$ быстро сходятся к функциям введённых аргументов x и η, зависящих от безразмерного спектра $\{\lambda_q\}$ (т.е. от формы ловушки), но не от конкретных значений температуры и размера системы.

Эту автомодельность можно обосновать, анализируя кумулянты "необрезанного" распределения (3) $\rho_n^{(\infty)}$, т.е. коэффициенты $\kappa_m^{(n)(\infty)}$ разложения $\ln\, \Theta_n^{(\infty)}(u) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\kappa_m^{(n)(\infty)}}{m!}(iu)^m$ при $u \to 0$, где $N_c = \kappa_1^{(n)(\infty)}, \sigma^2 = \kappa_2^{(n)(\infty)}$. Преобразование Меллина, примененное к формуле (4) для $\Theta_n^{(\infty)}$, позволяет представить кумулянт суммой вычетов [5, 6]:

$$\kappa_m^{(n)(\infty)} = \sum_j \mathrm{Res}_{t=t_j}[\alpha^{-t}\zeta(t+1-m)S(t)],\ S(t) = \Gamma(t)\sum_{q\neq 0}\lambda_q^{-t}. \quad (5)$$

Здесь $\zeta(t)$ – дзета-функция Римана – имеет полюс в $t = 1$ с вычетом 1, а $S(t)$ – так называемая функция ловушки – имеет самый правый полюс в $t = r$ с вычетом R (эта точка – граница области сходимости для определяющего $S(t)$ ряда). Суммирование в (5) ведется по всем полюсам, и каждое слагаемое имеет свой порядок величины по α. В интересующем нас пределе больших систем $\alpha \ll 1$ основной вклад в кумулянт дает самый правый полюс:

$$m < r : \kappa_m^{(n)(\infty)} \to \alpha^{-r}\zeta(r + 1 - m)R, \; m > r : \kappa_m^{(n)(\infty)} \to S(m)\alpha^{-m}. \tag{6}$$

Кумулянты $\kappa_m^{(x)(\infty)}$, определяющие характеристическую функцию $\Theta_x^{(\infty)}$ для масштабированного аргумента $x = (n - N_c)/\sigma$, легко вычисляются: $\kappa_1^{(x)(\infty)} = 0$, $\kappa_2^{(x)(\infty)} = 1$, $\kappa_{m\geq 2}^{(x)(\infty)} = \kappa_{m\geq 2}^{(n)(\infty)}/\sigma^m$. В зависимости от положения полюса r значение $\sigma^2 = \kappa_2^{(n)(\infty)}$ дается одним из двух выражений (6), что соответствует делению всех ловушек на два класса. Легко убедиться, что для каждого класса кумулянты – а значит, и характеристическая функция $\Theta_x^{(\infty)}$, и распределение $\rho_x^{(\infty)}$ – не зависят от характеризующего размер системы параметра α, если $\alpha \ll 1$.

Ловушки, закон роста собственных значений в которых таков, что $r > 2$ (то есть ряд $\sum\limits_{q\neq 0} \lambda_q^{-2}$ расходится), образуют так называемый гауссов класс:

$$\kappa_{m\geq 2}^{(x)(\infty)} \to 0, \; \ln\Theta_x^{(\infty)} = -\frac{u^2}{2}, \; \rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}. \tag{7}$$

Ловушки, для которых старший полюс $S(t)$ лежит в точке $r < 2$ (то есть ряд $\sum\limits_{q\neq 0} \lambda_q^{-2}$ сходится), образуют аномальный класс. Для таких ловушек старшие кумулянты не нулевые:

$$\kappa_{m\geq 2}^{(x)(\infty)} \to S(m)/S^{m/2}(2), \; \ln\Theta_x^{(\infty)} = \sum_{m=2}^{\infty}\frac{\kappa_{m\geq 2}^{(x)(\infty)}(iu)^m}{m!}, \; \rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-iux}\Theta_x^{(\infty)}(u)du, \tag{8}$$

а распределение $\rho_x^{(\infty)}$, которое может сильно отличаться от гауссова [6], определено $\{\lambda_q\}$.

Описание системы в рамках большого канонического ансамбля. Большой канонический ансамбль рассматривает все числа заполнения n_q уровней λ_q как независимые случайные величины со следующими ожидаемыми значениями [2]:

$$\langle n_q\rangle^{(gce)} = (e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1)^{-1}, \; \sum_q (e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1)^{-1} = N; \tag{9}$$

при этом величина параметра $\tilde{\mu} < 0$ находится из условия приравнивания ожидаемого числа частиц в ловушке $\langle N \rangle$ заданному числу частиц N в описываемой мезоскопической системе.

Независимость n_q позволяет легко найти вероятностное распределение полного числа частиц на возбужденных уровнях $n = \sum_{q \neq 0} n_q$, вычислив характеристическую функцию $\Theta_n^{(gce)}$:

$$\rho_n^{(gce)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iun} \Theta_n^{(gce)}(u) du, \ \Theta_n^{(gce)}(u) = \prod_{q \neq 0} \frac{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - e^{iu}}. \tag{10}$$

Число частиц n_0 на основном уровне, в рамках большого канонического ансамбля независимое от остальных n_q, имеет экспоненциальное распределение $\rho_{n_0}^{(gce)} = e^{\alpha\tilde{\mu}n_0}(1 - e^{\alpha\tilde{\mu}})$.

В критической области $N - N_c \sim \sigma$ статистику системы легко проанализировать при помощи преобразования Меллина, что аналогично исследованию $\rho_n^{(\infty)}$ с точностью до замены

$$\{\lambda_q\} \Rightarrow \{\lambda_q - \tilde{\mu}\}, \ S(t) \Rightarrow S_\mu(t) = \Gamma(t) \sum_{q \neq 0} (\lambda_q - \tilde{\mu})^{-t}; \tag{11}$$

кумулянты распределения n имеют вид $\kappa_m^{(n)(gce)} = \sum_i \mathrm{Res}_{t=t_i}[\alpha^{-t}\zeta(t+1-m)S_\mu(t)]$. Можно явно показать, что в критической области для любых ловушек $\tilde{\mu}$ по порядку величины не превышает α^0: $\tilde{\mu} \leq \alpha^0$. Это значит, что производимый сдвиг спектра не меняет качественно структуру функции ловушки, например, положение самого правого полюса r одинаково для функций $S(t)$ и $S_\mu(t)$ [8], и вычет именно в нем вносит основной вклад в кумулянты $\kappa_m^{(n)(gce)}$ с номерами $r > m$.

Переход к аргументу $x = (n - N_c)/\sigma$ вновь выявляет автомодельность статистики:

$$\ln \Theta_x^{(gce)} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\kappa_{m\geq 2}^{(x)(gce)} (iu)^m}{m!}, \ \rho_x^{(gce)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iux} \Theta_x^{(gce)}(u) du, \ \rho_{x_0}^{(gce)} \sim -F_\mu e^{F_\mu x_0}, \tag{12}$$

хотя теперь первые кумулянты и нетривиальны: $\kappa_{m\geq 2}^{(x)(gce)} = \eta - F_\mu^{-1}(\eta)$, где функция $F_\mu(\eta) \equiv \sigma\alpha\tilde{\mu}$ определяет автомодельную зависимость $\tilde{\mu}$ от η и может быть найдена явно; $\kappa_{m\geq 2}^{(x)(gce)} = S_\mu(m)/S^{m/2}(2) \neq 1$ при $r > 2$. Разделение ловушек на классы, связанное с поведением старших кумулянтов $m \geq 3$, сохраняется и не зависит от выбора ансамбля.

Сравнение описаний в различных ансамблях. Итак, вероятностные распределения числа частиц на основном уровне и полного числа частиц на возбужденных уровнях явно вычислены для критической области в терминах автомодельных распределений ρ_x

и ρ_{x_0} масштабированных аргументов $x = \frac{n-N_c}{\sigma}$ и $x_0 = \frac{n_0}{\sigma}$ соответственно. Результаты для канонического и большого канонического ансамблей, справедливые даже при переходе к термодинамическому пределу $\alpha \ll 1$, сопоставлены на рис. 2 для ловушек гауссова класса. Для ловушек аномального класса ситуация аналогична.

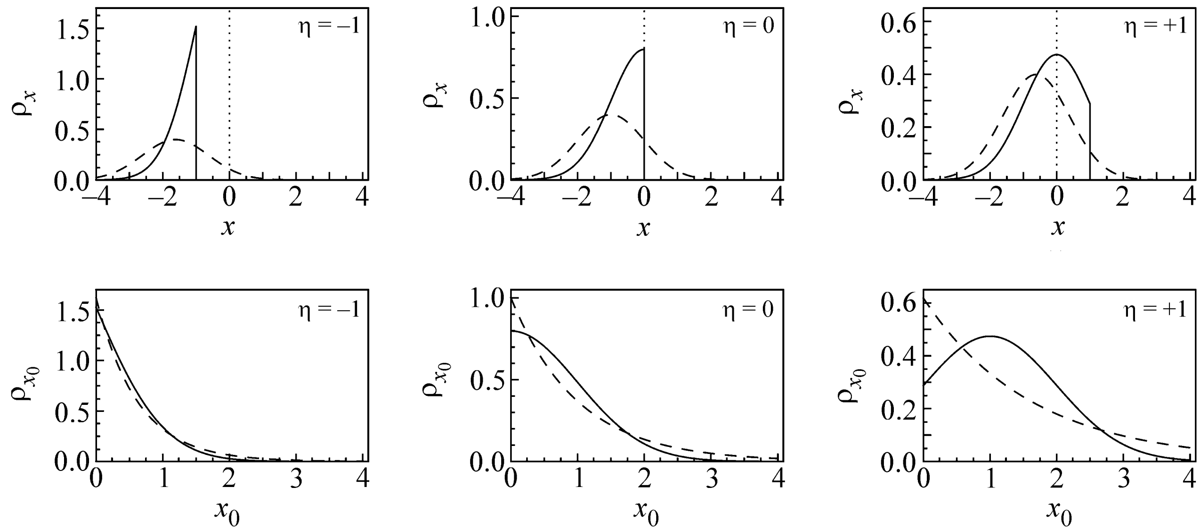

Рис. 2: *Автомодельное распределение масштабированного числа частиц в конденсате $x_0 = n_0/\sigma$ и полного числа частиц вне конденсата $x = (n - N_c)/\sigma$ для произвольной ловушки гауссова класса. Фазовое состояние характеризует параметр $\eta = (n - N_c)/\sigma$. Пунктир – большой канонический ансамбль. Сплошная линия – канонический ансамбль.*

Статистика числа атомов вне конденсата для канонического ансамбля $\rho_x^{(ce)}$ характеризуется явной неаналитичностью, которую вводит обрезающая связь (3). Отличие от плавного большого канонического распределения $\rho_x^{(gce)}$ уменьшается лишь в глубоко конденсированной фазе $\eta \gg 1$, где населенный основной уровень ϵ_0 играет роль резервуара частиц.

Распределения числа частиц в конденсате $\rho_{x_0}^{(ce)}$ и $\rho_{x_0}^{(gce)}$ также качественно отличны. Большой канонический ансамбль предсказывает экспоненциальное распределение n_0 независимо от фазового состояния. В конденсированной области $\eta \gg 1$, это дает заведомо ошибочный результат – среднеквадратичное отклонение числа частиц в конденсате оказывается порядка ожидаемого значения, а наиболее вероятно состояние с незанятым основным уровнем. При этом каноническое распределение $\rho_{x_0}^{(ce)}$, являющееся отражением $\rho_x^{(ce)}$, имеет выраженный максимум при конечной населенности конденсата и много меньшую дисперсию.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований Отделения физических наук РАН ОФН-III.7, гранта Президента РФ для поддержки ведущий научных школ РФ НШ-1041.2014.2, Правительства Российской Федерации (соглашение №14.B25.31.0008) и Фонда некоммерческих программ “Династия”.

Л И Т Е Р А Т У Р А

[1] L. Pitaevskii and S. Stringary, *Bose-Einstein Condensation* (Clarendone, Oxford, 2003).

[2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, часть 1 (М., Наука, 1995).

[3] J. M. B. Noronha and D. J. Toms, Physica A **392**(18), 3984 (2013).

[4] Т. Хилл, *Статистическая механика, принципы и избранные приложения* (М., Иностранная литература, 1960). [T. Hill, Statistical mechanics: principles and selected applications (McGraw-Hill, New York,1956)].

[5] V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Rev. A **81**(3), 033615 (2010).

[6] S. V. Tarasov, V. V. Kocharovsky, and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Rev. A **90**(3), 033605 (2014).

[7] S. V. Tarasov, V. V. Kocharovsky, and Vl. V. Kocharovsky, J. Phys. A **47**(41), 415003 (2014).

[8] A. Voros, Adv. Stud. Pure Math., No. 21, 327 (1992).

По материалам IV Международной молодежной научной школы-конференции “Современные проблемы физики и технологий”.

Поступила в редакцию 12 мая 2015 г.