

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

О функции распределения числа частиц в бозе-эйнштейновском конденсате идеального газа

Е.Д. Трифонов, С.Н. Загуляев

Рассматриваются рекуррентные методы вычисления статсуммы для канонического ансамбля идеального бозе-газа, позволяющие находить функцию распределения числа частиц в бозе-эйнштейновском конденсате для ансамбля, состоящего из конечного числа частиц, когда приближение термодинамического предела оказывается неоправданным. Наряду с ранее известным рекуррентным методом (по числу частиц) предлагается итерационная процедура по числу состояний. Эффективность обоих методов демонстрируется на примере идеального газа, заключённого в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку.

PACS numbers: 05.30.Jp, 67.85.-d

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201001e.0089

Содержание

1. Введение (89).
 2. Термодинамический предел для большого канонического ансамбля (90).
2.1. БЭК в трёхмерной гармонической ловушке. 2.2. Бозе-газ при температурах выше критической. 2.3. Учёт дискретности энергетических уровней.
 3. Рекуррентные методы вычисления статсуммы для канонического ансамбля бозе-газа (92).
3.1. Итерационная процедура по числу частиц. 3.2. Итерационная процедура по числу состояний.
 4. Результаты применения рекуррентных методов для БЭК в трёхмерной гармонической ловушке (93).
 5. Заключение (95).
- Список литературы (96).

1. Введение

Образование бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) идеального газа при понижении температуры (или повышении плотности) было, как известно, предсказано во второй статье А. Эйнштейна, посвящённой квантовой теории одноатомного идеального газа [1]. Это заключе-

ние было сделано на основании вычисления среднего числа частиц, имеющих непрерывное распределение по энергии. При температуре ниже определённого критического значения (зависящего от концентрации), оно оказалось меньше заданного числа частиц, и поэтому Эйнштейн высказал утверждение: "...некоторое число молекул переходит в первое квантовое состояние с нулевой кинетической энергией" [1]. Фактически это было скорее гениальной догадкой, чем результатом последовательного доказательства.

Эйнштейн использовал непрерывное распределение атомов по энергии, в котором состояние с нулевым значением энергии не было выделено из сплошного спектра. Более строгое рассмотрение этой задачи для модели большого канонического ансамбля было осуществлено с помощью метода Дарвина – Фаулера [2–4]. Новый интерес к исследованию свойств конденсата появился сравнительно недавно, уже после того, как он был получен экспериментально в разреженном газе, удерживаемом в магнитных ловушках [5, 6]. Число захваченных атомов в этих случаях было порядка $10^3 - 10^6$, что меньше величины, требуемой для того, чтобы задачу можно было бы рассматривать в приближении термодинамического предела с использованием плотности энергетических состояний. Термодинамические функции таких систем не оказываются сингулярными по температуре, и критическая температура уже не является строго определённой величиной. Можно говорить лишь об интервале температур, в котором происходит фазовый переход.

Существенное уточнение модели БЭК со сравнительно небольшим числом атомов было достигнуто с учётом дискретности энергетического спектра квантовых состояний. Помимо обобщения метода Дарвина – Фаулера, относящегося к большому каноническому ансамблю [7–11], продуктивно использовался метод кинетического уравнения как для микроканонического, так и для ка-

Е.Д. Трифонов. Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Мойка 48, 191186 Санкт-Петербург, Российская Федерация
E-mail: thphys@ Herzen.spb.ru,
С.Н. Загуляев. НИИ физики им. В.А. Фока, С.-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская 1, 198504 Старый Петергоф, Санкт-Петербург, Российская Федерация
E-mail: snz@pcqnt1.phys.spbu.ru

Статья поступила 29 мая 2009 г.,
после доработки 9 июля 2009 г.

нонического ансамблей [12–17], а также метод квазичастиц для канонического ансамбля, позволивший получить приближённые аналитические выражения всех моментов функции распределения числа частиц в конденсате как для идеального газа, так и для газа со слабым межчастичным взаимодействием [18, 19]. Обстоятельный анализ различных методов исследования статистических свойств бозе-эйнштейновского конденсата содержится в монографии [20] и обзоре [21].

В данной статье, носящей методический характер, мы более детально останавливаемся лишь на рекуррентных способах вычисления статсуммы для канонического ансамбля идеального бозе-газа, результаты применения которых часто используются как эталонные для более сложных моделей. Наряду с методом Ландсберга [22, 23], в котором итерационная процедура выполняется по числу частиц, мы предлагаем метод итераций по числу состояний. Одновременно предлагается модернизация метода Ландсберга, облегчающая его применение для ансамблей, состоящих из большого числа частиц, и в более широком диапазоне температур, чем это делалось прежде. Мы демонстрируем эффективность рекуррентных методов на примере бозе-газа в трёхмерной изотропной ловушке и проводим сравнение наших результатов с таковыми, полученными при традиционном полуклассическом подходе для большого канонического ансамбля. Приведённые ниже результаты прецизионных расчётов дают возможность количественно оценить изменение статистических характеристик БЭК в зависимости от числа частиц в ансамбле. В частности, обращается внимание на радикальное изменение дисперсии числа частиц в БЭК по сравнению с полуклассическим результатом при температурах, близких к критической.

2. Термодинамический предел для большого канонического ансамбля

Обычный метод исследования статистических свойств бозе-эйнштейновского конденсата для большого канонического ансамбля основан на теории Дарвина–Фаулера. При этом используется полуклассическое приближение в термодинамическом пределе, под которым понимается возможность пренебрежения дискретной энергетической структурой рассматриваемой системы и введения функции распределения энергетической плотности.

Вероятность обнаружения n частиц в одном квантовом состоянии с энергией E при температуре T определяется как

$$P_n = \left[1 - \exp \left(-\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \right] \exp \left[-\frac{(E - \mu)n}{k_B T} \right], \quad (1)$$

где k_B — постоянная Больцмана, μ — химический потенциал, определяемый из условия равенства полного среднего числа частиц в газе заданному значению N . Из (1) следует, что среднее число частиц в рассматриваемом состоянии равно

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] - 1}. \quad (2)$$

Среднее число частиц в интервале энергии E , $E + dE$ будет равно

$$d\bar{n} = \frac{F(E) dE}{\exp[(E - \mu)/k_B T] - 1}, \quad (3)$$

где $F(E)$ — энергетическая плотность состояний. Химический потенциал определяется из интегрального соотношения

$$N = \int_0^\infty \frac{F(E) dE}{\exp[(E - \mu)/k_B T] - 1}. \quad (4)$$

2.1. БЭК в трёхмерной гармонической ловушке

Для изотропной трёхмерной гармонической ловушки с собственной частотой ω имеем $F(E) = (1/2) E^2/(\hbar\omega)^3$. Поэтому, выражая энергию в единицах $\hbar\omega$, и соответственно температуру в единицах $\hbar\omega/k_B$, получаем

$$d\bar{n} = \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp[(E - \mu)/T] - 1}. \quad (5)$$

Уравнение для определения критической температуры T_c , вытекающее из условия $\mu = 0$, имеет вид:

$$N = \int_0^\infty \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp(E/T_c) - 1} = \frac{T_c^3}{2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\exp(x) - 1} = T_c^3 \zeta(3), \quad (6)$$

где $\zeta(3) \approx 1,202$ — значение ζ -функции Римана в точке 3. Отсюда следует, что

$$T_c = \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}. \quad (7)$$

При $T \leq T_c$ формула, аналогичная (6), определяет среднее число частиц с положительной энергией, т.е. находящихся вне конденсата:

$$N_p = \int_0^\infty \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp(E/T) - 1} = T^3 \zeta(3). \quad (8)$$

Если через N_0 обозначить среднее число частиц в БЭК, то с помощью (6) и (8) получаем

$$\frac{N_0}{N} = \frac{N - N_p}{N} = 1 - \frac{T^3}{T_c^3}. \quad (9)$$

Как известно, дисперсия числа бозе-частиц в одном состоянии с энергией E равна $D(E) = \bar{n}(\bar{n} + 1)$.

Если для оценки считать, что дисперсия числа частиц в БЭК D_0 равна дисперсии числа частиц вне конденсата, как это должно выполняться для канонического ансамбля, то она может быть представлена в виде

$$D_0 = \int_0^\infty \frac{1}{\exp(E/T) - 1} \left(\frac{1}{\exp(E/T) - 1} + 1 \right) \frac{1}{2} E^2 dE = \frac{T^3}{2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{\exp(x) - 1} + 1 \right) \frac{x^2 dx}{\exp(x) - 1} \approx 1,645 T^3. \quad (10)$$

С помощью (9) получаем

$$D_0 = 1,369 N \frac{T^3}{T_c^3} = 1,369 (N - N_0). \quad (11)$$

Отсюда следует, что дисперсия числа неконденсированных частиц близка к среднему значению числа неконденсированных частиц и, следовательно, соответ-

вующее распределение вероятности числа частиц должно быть близко к распределению Пуассона

$$P_{N-n} = \exp[-(N - N_0)] \frac{(N - N_0)^{N-n}}{(N - n)!} \quad (12)$$

или, более точно, к распределению Гаусса

$$G_{N-n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi D_0}} \exp\left[-\frac{(n - N_0)^2}{2D_0}\right]. \quad (13)$$

Здесь n — число частиц в конденсате. Одновременно эти распределения определяют вероятность того, что в БЭК будет находиться n частиц.

С помощью формул (7) и (8) можно оценить граничное значение энергии, которое обеспечит необходимую точность определения среднего значения и дисперсии числа частиц в БЭК. Заменяя бесконечный верхний предел интегрирования конечной величиной $E_{\max}$, получим

$$N_p = \int_0^{E_{\max}} \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp(E/T) - 1} = \frac{T^3}{2} \int_0^{E_{\max}/T} \frac{x^2 dx}{\exp(x) - 1}. \quad (14)$$

Учитывая (8) можно сказать, что возникающая при замене верхнего предела относительная погрешность величины N_p будет определяться значением интеграла

$$\delta = \frac{1}{2\zeta(3)} \int_{E_{\max}/T}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\exp(x) - 1}. \quad (15)$$

Полагая, например, $E_{\max}/T = 10$, получим $\delta \approx 3 \times 10^{-3}$. Приблизительно такая же погрешность в этом случае получается и для дисперсии.

2.2. Бозе-газ при температурах выше критической

При температурах выше критической, химический потенциал отличен от нуля и находится, как было сказано выше, из условия (4). Если ввести новую функцию $\eta(T) = -\mu/k_B T$, то вместо (4) получим

$$N = \int \frac{F(E) dE}{\exp(E/k_B T + \eta) - 1}. \quad (16)$$

В частности, для случая изотропной гармонической ловушки будем иметь

$$N = \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp(E/T + \eta) - 1}. \quad (17)$$

Соотношение (17) позволяет выразить температуру как функцию от η :

$$T(\eta) = (2N)^{1/3} \left[\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{\exp(x + \eta) - 1} \right]^{-1/3}. \quad (18)$$

Переписанная в новых обозначениях формула (5),

$$d\bar{n} = \frac{1}{2} \frac{E^2 dE}{\exp[E/T(\eta) + \eta] - 1}, \quad (19)$$

определяет функцию распределения частиц по энергии при температуре $T(\eta)$. Параметр η изменяется от нуля, соответствующего критической температуре, до беско-

нечности. До "выхода" на классическое распределение практически достаточно ограничиться интервалом для η $[0 \dots 3]$.

Опишем температурный ход теплоёмкости для бозе-газа, заключённого в гармоническую ловушку. Средняя энергия газа представляется как

$$U = \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \frac{E^3 dE}{\exp(E/T + \eta) - 1} = \frac{1}{2} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp(x + \eta) - 1}. \quad (20)$$

Соответственно теплоёмкость при температуре $T(\eta) \geq T_c$ может быть вычислена по формуле

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{2T(\eta)^3}{N} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp(x + \eta) - 1} - \frac{T(\eta)^4}{2N} \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{-1} \int_0^{\infty} \frac{x^3 \exp(x + \eta) dx}{[\exp(x + \eta) - 1]^2}. \quad (21)$$

При температурах ниже критической выражение для теплоёмкости соответствует $\eta = 0$ и имеет более простой вид

$$C = \frac{dU}{dT} = 2T^3 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1}, \quad (T \leq T_c). \quad (22)$$

В обоих случаях, (21) и (22), теплоёмкость выражена в единицах Nk_B .

2.3. Учёт дискретности энергетических уровней

В связи с тем, что экспериментально удалось получить бозе-эйнштейновский конденсат идеального газа при сверхнизких температурах ($T < 10^{-6}$ К), в ряде работ было предложено уточнение теории, сводящееся к учёту дискретности энергетических уровней и замене интегрирования по энергии суммированием по этим дискретным уровням [5, 6, 8, 9, 13, 14]. Определение химического потенциала осуществляется теперь из условия

$$N = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{g_m}{\exp[-(E_m - \mu)/k_B T] - 1}, \quad (23)$$

заменяющее уравнение (4). Здесь g_m — кратность вырождения m -го уровня.

В частности, такое уточнение удалось провести для изотропной гармонической ловушки. В этом случае

$$E_m = \hbar\omega \left(m + \frac{3}{2} \right), \quad (24)$$

$$g_m = \frac{1}{2} (m + 1)(m + 2). \quad (25)$$

Вероятность того, что в одном состоянии на m -м уровне будет находиться n частиц, определяется как

$$P_n^{(m)} = \frac{\exp[-(E_m - \mu)n/k_B T]}{\sum_{n'=0}^N \exp[-(E_m - \mu)n'/k_B T]}. \quad (26)$$

Считая N достаточно большой величиной и учитывая, что $\mu - E_m < 0$, можно записать

$$P_n^{(m)} = \exp\left[\frac{(\mu - E_m)n}{T}\right] \left[1 - \exp\left(\frac{\mu - E_m}{T}\right)\right], \quad (27)$$

в частности, для основного состояния

$$P_n^{(0)} = \exp \left[\frac{(\mu - E_0)n}{T} \right] \left[1 - \exp \left(\frac{\mu - E_0}{T} \right) \right]. \quad (28)$$

Видно, что распределение числа частиц в основном состоянии описывается для большого канонического ансамбля экспоненциальным законом. Мы покажем далее, что этот результат существенно отличается от соответствующего распределения для канонического ансамбля.

3. Рекуррентные методы вычисления статсуммы для канонического ансамбля бозе-газа

Теперь мы обратимся к точной формулировке задачи о каноническом ансамбле идеального бозе-газа, состоящего из N частиц. Каждая частица газа может находиться в одном из одночастичных стационарных состояний, имеющих дискретные собственные значения энергии E_i . Для идеального бозе-газа полная энергия $E_{\{n_i\}}$ есть сумма одночастичных энергий

$$E_{\{n_i\}} = \sum_i n_i E_i, \quad (29)$$

где n_i — числа заполнения одночастичных состояний. Вероятность того, что N -частичная система находится в состоянии, определяемом совокупностью значений чисел заполнения $\{n_i\}$ определяется как

$$P_{\{n_i\}} = \frac{1}{Z_N} \exp \left(- \frac{E_{\{n_i\}}}{k_B T} \right). \quad (30)$$

Здесь Z_N — статсумма N -частичной системы:

$$Z_N = \sum_{\{n_i\}} \exp \left(- \frac{E_{\{n_i\}}}{k_B T} \right), \quad (31)$$

где суммирование проводится по всем совокупностям чисел заполнения, которые удовлетворяют условию

$$\sum_i n_i = N. \quad (32)$$

Если нас интересует только k -е одночастичное состояние, то вероятность обнаружить в нём n_k частиц представляется как

$$P_{n_k}^{(k)} = \frac{Z_{N-n_k}^{(k)}}{Z_N} \exp \left(- \frac{n_k E_k}{k_B T} \right), \quad (33)$$

где $Z_{N-n_k}^{(k)}$ — статсумма для $N - n_k$ частиц, из которой исключено k -е одночастичное состояние.

3.1. Итерационная процедура по числу частиц

Уже достаточно давно Ландсбергом был предложен рекуррентный метод вычисления статсуммы для канонического ансамбля, в котором используются итерации по числу частиц [22]. Вычисление статсуммы предлагается проводить с помощью простого алгоритма

$$Z_n = \frac{1}{n} \sum_{p=1}^n S_p Z_{n-p}, \quad Z_0 = 1, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (34)$$

где

$$S_p = \sum_j \exp \left(- \frac{p E_j}{k_B T} \right). \quad (35)$$

Обратим внимание на то, что суммирование в (35) проводится по всем одночастичным состояниям, и поэтому преимущество такого метода проявляется в тех случаях, когда это суммирование можно осуществить аналитически. Например, в случае трёхмерной изотропной гармонической ловушки

$$\begin{aligned} S_p &= \sum_{m_1=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\infty} \sum_{m_3=0}^{\infty} \exp \left(- p \frac{m_1 + m_2 + m_3}{T} \right) = \\ &= \frac{1}{[1 - \exp(-p/T)]^3}. \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь мы опустили "нулевую" энергию осциллятора и температуру выразили в единицах $\hbar\omega/k_B$.

Для нахождения распределения числа частиц в БЭК целесообразно временно исключить из рассмотрения основное состояние. Новую статсумму для n частиц обозначим как $\tilde{Z}_n$. Тогда

$$P_n^{(0)} = \frac{\tilde{Z}_{N-n}}{\sum_{p=0}^N \tilde{Z}_{N-p}} = \frac{\tilde{Z}_{N-n}}{Z_N}. \quad (37)$$

Исключение основного состояния осуществляется вычитанием из S_k первого слагаемого. Поэтому $\tilde{S}_k = S_k - 1$. Тогда рекуррентное соотношение для $\tilde{Z}_n$ можно записать как

$$\tilde{Z}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \tilde{S}_k \tilde{Z}_{n-k}, \quad \tilde{Z}_0 = 1. \quad (38)$$

Заметим, что $\tilde{Z}_{N-n} = Z_{N-n} - Z_{N-n-1}$. Поэтому $P_n^{(0)}$ можно также представить в виде

$$P_n^{(0)} = \frac{Z_{N-n} - Z_{N-n-1}}{Z_N}, \quad (39)$$

как это сделано в работе [13].

Метод Ландсберга применялся для вычисления статсуммы бозе-газа для систем, состоящих из сравнительно небольшого числа частиц ($N \leq 1000$), и для достаточно низких температур ($T \leq T_c$) [8, 9, 13]. Это связано с тем, что при увеличении числа частиц и повышении температуры проявляется быстрая потеря точности и превышение "самого большого машинного вещественного числа". Чтобы избежать этих вычислительных трудностей, мы предлагаем модернизацию его применения, проводя нормировку статсумм на каждом итерационном шаге:

$$\begin{aligned} Z_0^{\{0\}} &= 1, \\ Z_n^{\{n-1\}} &= \sum_{p=0}^{n-1} \frac{S_{n-p} Z_p^{\{n-1\}}}{n}, \quad n = 1, \dots, N, \\ Z_k^{\{n\}} &= \frac{Z_k^{\{n-1\}}}{\sum_{p=0}^n Z_p^{\{n-1\}}}, \quad k = 0, \dots, n. \end{aligned} \quad (40)$$

Интересующая нас вероятность того, что в БЭК окажется n частиц, может быть представлена в виде

$$P_n^{(0)} = Z_{N-n}^{\{N\}}. \quad (41)$$

Статсумма бозе-газа представляется в виде

$$Z_N = Z_N^{\{N\}} \prod_{n=1}^N \sum_{p=0}^n Z_p^{\{n-1\}}.$$

3.2. Итерационная процедура по числу состояний

При низких температурах эффективно заселёнными окажутся состояния с низкими значениями энергии. Поэтому можно ожидать, что достаточно точную информацию о распределении числа частиц в этом случае можно будет получить, если ограничиться конечным числом состояний. Точность такого приближения можно оценить с помощью соотношения (15).

Обозначим статсумму при учёте первых $m+1$ состояний для системы n частиц через $Z_{m,n}$. Тогда мы получаем очевидное рекуррентное соотношение

$$Z_{m,n} = \sum_{p=0}^n \exp\left(-\frac{E_{mp}}{k_B T}\right) Z_{m-1,n-p}, \quad m \geq 1. \quad (42)$$

При этом

$$Z_{0,n} = \exp\left(-\frac{E_0 n}{k_B T}\right). \quad (43)$$

Энергию основного состояния E_0 можно положить равной нулю. Тогда $Z_{0,n} = 1$.

Для того чтобы выразить вероятность $P_n^{(k)}$ того, что в k -м состоянии окажется n частиц, надо это состояние сначала исключить из рассмотрения и вычислить с помощью рекуррентного соотношения (42) соответствующие статсуммы $Z_{M,p}^{(k)}$, $p = 0, \dots, N$. Здесь M — максимальное число учтённых состояний. Тогда

$$P_{M,n}^{(k)} = \frac{Z_{M,N-n}^{(k)} \exp(-E_k n / k_B T)}{\sum_{p=0}^N Z_{M,N-p}^{(k)} \exp(-E_k p / k_B T)}. \quad (44)$$

Возвратимся опять к бозе-газу, заключённому в изотропную гармоническую ловушку, и ограничимся исследованием статистики основного $k=0$ состояния. Для упрощения обозначений не будем указывать верхний индекс (0) статсуммы. Формулу (42) можно несколько модернизировать, перейдя от суммирования по состояниям к суммированию по уровням энергии. Индексом m теперь будем нумеровать не состояния, а уровни энергии. С учётом вырождения уровней энергии получим

$$Z_{m,n} = \sum_{p=0}^n C_{p+g_m-1}^{g_m-1} \exp\left(-\frac{mp}{T}\right) Z_{m-1,n-p}, \quad (45)$$

$$Z_{0,p} = \delta_{0,p},$$

где $C_{p+g_m-1}^{g_m-1}$ — биномиальный коэффициент, равный числу разбиений p частиц по g_m состояниям m -го уровня. Здесь температура, как и выше, выражена в единицах $\hbar\omega/k_B$ и опущено "нулевое" значение энергии осциллятора, которое сокращается в окончательном результате.

Вероятность того, что при температуре T в основном состоянии будет находиться n частиц, может быть представлена в виде

$$P_{M,n}(T) = \frac{Z_{M,N-n}}{\sum_{p=0}^N Z_{M,N-p}}, \quad (46)$$

где M — максимальный номер учтённого уровня.

Соответственно, среднее число частиц в основном состоянии $\bar{n}$ и дисперсия этой величины находятся по формулам

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^N n P_n, \quad D = \sum_{n=0}^N n^2 P_n - \bar{n}^2. \quad (47)$$

При проведении итераций целесообразно использовать рекуррентную формулу для вероятностей $P_{m,p}$, которая следует из уравнения (44, 45):

$$P_{m,n} = \frac{\sum_{p=0}^n C_{p+g_m-1}^{g_m-1} \exp(-mp/T) P_{m-1,p}}{\sum_{n'=0}^N \sum_{p=0}^{n'} C_{p+g_m-1}^{g_m-1} \exp(-mp/T) P_{m-1,p}}, \quad (48)$$

где $m = 1, \dots, M$; $n = 0, \dots, N$; $P_{0,n} = \delta_{0,n}$.

Если ввести обозначение

$$W_{m,n} = \sum_{p=0}^n C_{p+g_m-1}^{g_m-1} \exp\left(-\frac{mp}{T}\right) P_{m-1,p}, \quad (49)$$

то окончательно получаем

$$P_{M,n} = \frac{W_{M,n}}{\sum_{n'=0}^N W_{M,n'}}, \quad (50)$$

$$Z_{M,N} = W_{M,N} \prod_{m=1}^{M-1} \sum_{n=0}^N W_{m,n}. \quad (51)$$

4. Результаты применения рекуррентных методов для БЭК в трёхмерной гармонической ловушке

Здесь мы иллюстрируем применение изложенных выше рекуррентных методов к каноническому ансамблю бозе-газа, заключённого в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку. Найденные обоими методами результаты, неразличимые по точности, мы сравниваем с аналогичными результатами термодинамического предела (см. раздел 2) для большого канонического ансамбля. Вычисления проводились для ансамблей с числом частиц в диапазоне $10^2 - 10^5$.

На рисунке 1 показана эволюция функции распределения числа частиц в БЭК при изменении температуры для ансамбля 1000 атомов и при учёте 100 первых уровней энергии. Напоминаем, что температура выражена в единицах $\hbar\omega/k_B$, где ω — собственная частота гармонической ловушки. По стандартной теории критическая температура T_c для такого ансамбля, согласно (7), равна приблизительно 9,4. Из рисунка 1 видно, что при температурах, близких к критической, распределение экспоненциально убывает с ростом n и центрируется около нуля. При понижении температуры распределение расширяется и приобретает колоколообразную форму, смещаясь в сторону большего числа частиц. При дальнейшем понижении происходит сужение распределения и в пределе низких температур превращается в пик

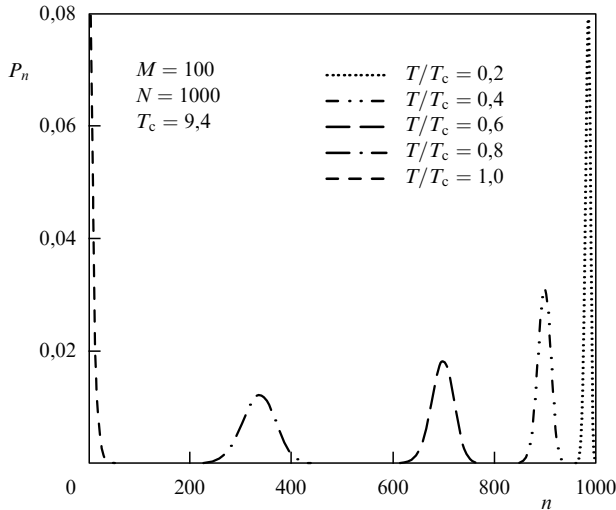


Рис. 1. Температурная эволюция функции распределения числа частиц в БЭК для ансамбля 1000 бозе-частиц заключённого в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку.

сосредоточенный на максимальном значении числа частиц.

На рисунке 2 приведена температурная зависимость среднего значения числа частиц в БЭК для этого же ансамбля, полученная двумя методами: стандартным (по формуле (9)) и рекуррентным. Отличие более заметно при температурах, близких к критической. Отличие такого рода было ранее получено для дискретной модели в работе [2–4].

Более выразительно отличие стандартной теории от рекуррентного метода проявляется при определении дисперсии числа частиц также в окрестности критической температуры, что показано на рис. 3. По стандартной теории при $T \approx T_c$ дисперсия максимальна, в то время как на самом деле она достигает минимума.

Для представления эволюции распределения числа частиц при разных температурах на одном рисунке мы выбрали ансамбль из небольшого числа частиц. Для

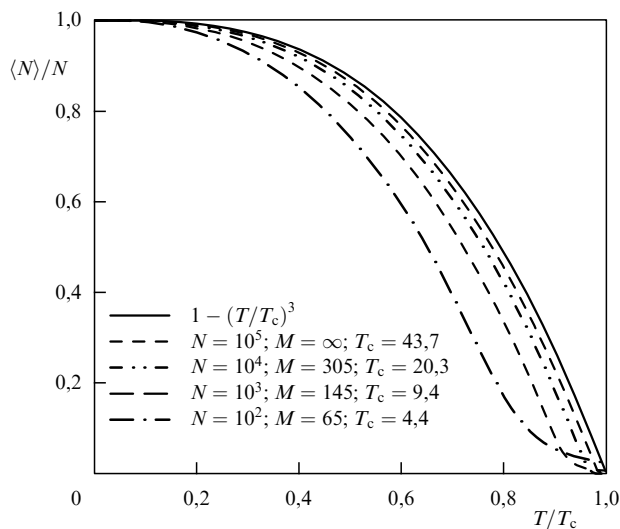


Рис. 2. Температурная зависимость среднего значения числа частиц в БЭК для ансамблей из 100, 1000, 10000 и 100000 частиц, заключённых в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку.

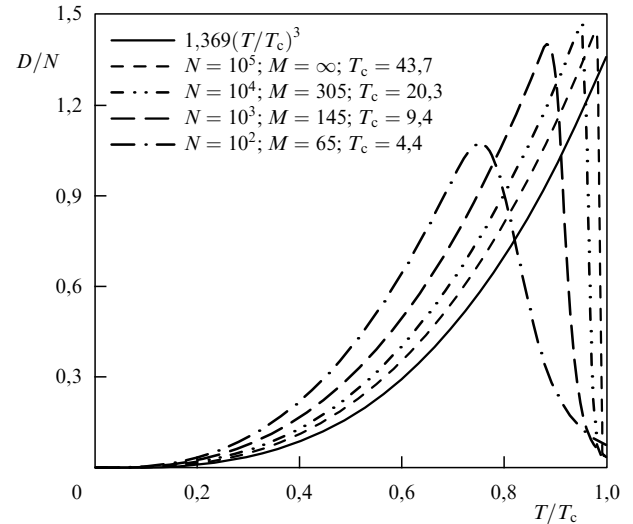


Рис. 3. Температурная зависимость дисперсии числа частиц в БЭК для ансамблей из 100, 1000, 10000 и 100000 частиц, заключённых в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку.

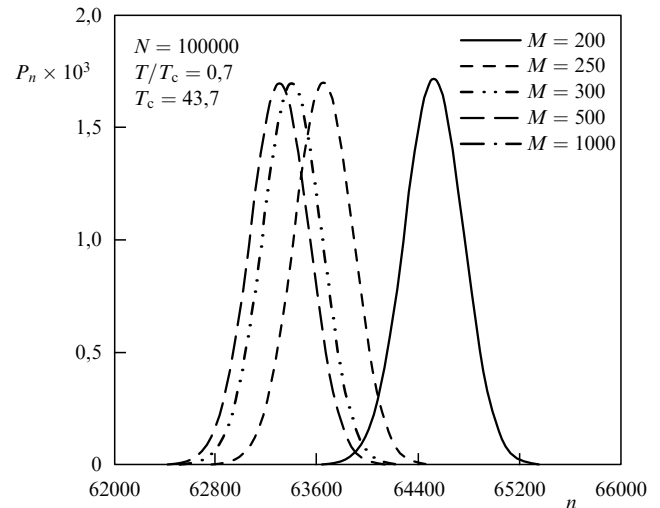


Рис. 4. Функции распределения числа частиц в БЭК для ансамбля 100000 частиц при учёте различного числа состояний.

большого числа частиц эти распределения выглядели бы очень узкими пиками. Отдельно на рис. 4 мы приводим распределение числа частиц в БЭК для ансамбля 10^5 бозонов при одном значении температуры $T = 30$. Для такого числа бозонов $T_c \approx 43.7$. Одновременно на этом рисунке мы демонстрируем точность рекуррентного метода, которая зависит от числа учитываемых состояний или числа уровней энергии. Для этого случая проведено вычисление распределения числа частиц в БЭК при учёте 200, 250, 300, 500 и 1000 уровней. Последние две кривые полностью сливаются, так что учёт 500 уровней обеспечивает достаточную точность. По приведённой нами выше оценке (14) $m_{\max} \approx 350$.

На рисунке 5 проводится сопоставление функции распределения числа частиц в БЭК с распределениями Пуассона (12) и Гаусса (13), полученными на основании полуклассической теории. Как можно ожидать на основании полученной температурной зависимости среднего значения числа частиц (рис. 2) и дисперсии (рис. 3), отличия между распределениями наиболее заметны при

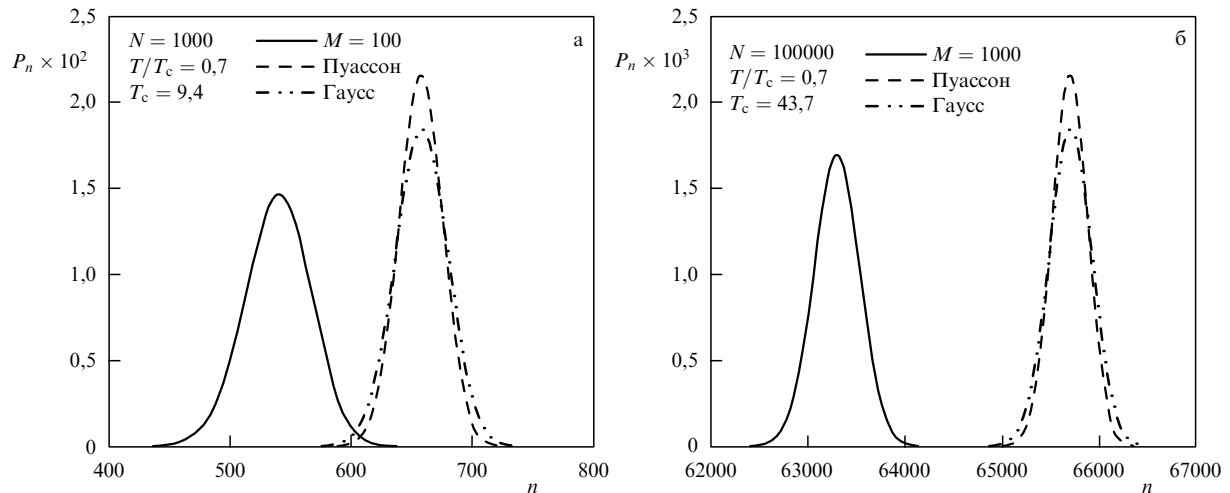


Рис. 5. Сравнение функций распределения числа частиц в БЭК для канонического ансамбля 1000 (а) и 100000 (б) частиц с распределениями Пуассона и Гаусса, полученными для большого канонического ансамбля в термодинамическом пределе.

температурах, близких к критической. Полуклассические распределения сужены и сдвинуты в сторону большего числа частиц.

Отметим, что применение рекуррентных методов не ограничено областью температур ниже критической. Вычисление статсуммы бозе-газа позволяет находить температурную зависимость термодинамических характеристик системы и в более широком диапазоне температур. В частности, для теплоёмкости бозе-газа (в единицах $k_B N$) по найденному значению статсуммы с помощью стандартной процедуры имеем

$$C = \frac{1}{N} \frac{d}{dT} \left[T^2 \frac{d \ln(Z)}{dT} \right]. \quad (52)$$

На рисунке 6 показана температурная зависимость теплоёмкости канонического ансамбля для гармоничес-

кой ловушки. Видно, что при температурах выше критической теплоёмкость близка к полуклассическому значению, а при температурах $T \geq 1,5T_c$ выходит на классический предел $3Nk_B$. Наши расчёты подтверждают ранее полученные результаты [7–17], свидетельствующие о том, что для ансамблей, состоящих из конечного числа частиц, теплоёмкость не испытывает скачок в районе полуклассической критической температуры. С уменьшением числа частиц в ансамбле температурный ход теплоёмкости становится более плавным. Теплоёмкость бозе-газа в ловушке-ящике рассмотрена в работе [24].

5. Заключение

В данной статье мы хотели показать, как с помощью двух рекуррентных методов вычисления статсуммы для канонического ансамбля бозе-частиц может быть исследована статистика БЭК идеального газа. Выполненные нами вычисления с помощью обоих методов приводят практически к одинаковым результатам. Как отмечалось выше, рекуррентный метод Ландсберга (по числу частиц) обладает вычислительным преимуществом в тех случаях, когда известно аналитическое выражение для одночастичной статсуммы — это относится и к рассмотренному нами примеру трёхмерной гармонической ловушки. Второй метод, вывод которого приводится в нашей статье (по числу учитываемых состояний), целесообразно использовать, когда требуется выяснить влияние особенностей одночастичного энергетического спектра на термодинамические свойства системы.

Применение рекуррентных методов позволяет уточнить статистические характеристики БЭК, полученные ранее в так называемом термодинамическом полуклассическом пределе. В рассмотренной модели бозе-газа явно учитывается дискретная структура энергетических уровней и конечность числа частиц. При применении рекуррентных методов не требуется нахождение химического потенциала. Кроме того, рекуррентный метод позволяет получить исчерпывающую информацию о статистических свойствах БЭК мезоскопических атомных систем — не только среднее значение и дисперсию, но и саму функцию распределения числа конденсирован-

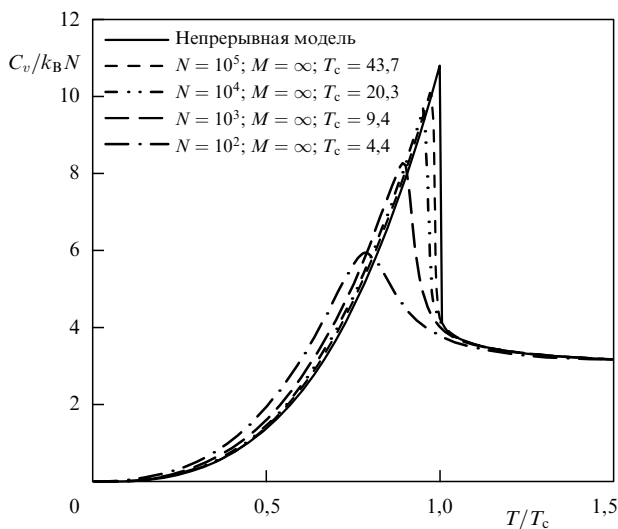


Рис. 6. Температурная зависимость теплоёмкости для бозе-газа, заключённого в трёхмерную изотропную гармоническую ловушку, для ансамблей из 100, 1000, 10000 и 100000 частиц. Сплошной кривой изображён график теплоёмкости для большого канонического ансамбля, полученный в термодинамическом пределе.

ных частиц. Еще одной областью применения рекуррентных методов может быть исследование статистики одномерных и двумерных мезосистем, для которых термодинамический предел выносит отрицательный вердикт относительно возможности образования БЭК. Мы показали, что целесообразность применения рекуррентного подхода ограничена значением числа частиц порядка 10^5 , что как раз актуально для осуществлённых к настоящему времени экспериментов по реализации БЭК разреженных газов [5, 6]. Для ансамблей с большим числом частиц отклонение статистических характеристик, найденных полуклассическим методом, от "точных" значений составляет незначительные доли процента.

Авторы выражают благодарность Вл.В. Кочаровскому, Вит.В. Кочаровскому, И.В. Абаренкову, А.С. Трошину за интерес к работе и конструктивные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 08-02-00502 и № 09-03-00733).

Список литературы

1. Einstein A *Sitzungsber. Preuß. Akad. Wiss. Phys.-Math. Kl.* 3–14 (1925) [Эйнштейн А *Собрание научных трудов* Т. III (М.: Наука, 1966) с. 489–592]
2. Fowler R H *Statistical Mechanics, the Theory of the Properties of Matter in Equilibrium* (Cambridge: The Univ. Press, 1936)
3. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Наука, 1995) [Landau L D, Lifshitz E M *Statistical Physics* Pt. 1 (Oxford: Pergamon Press, 1980)]
4. Леонтович М А *Введение в термодинамику. Статистическая физика* (М.: Наука, 1983)
5. Ketterle W *Rev. Mod. Phys.* **74** 1131 (2002) [Перевод на русск. яз.: Кеттерле В *УФН* **173** 1339 (2003)]
6. Cornell E A, Wieman C E *Rev. Mod. Phys.* **74** 875 (2002) [Перевод на русск. яз.: Корнелл Э А, Виман К Э *УФН* **173** 1320 (2003)]
7. Ketterle W, van Druten N J *Phys. Rev. A* **54** 656 (1996)
8. Kristen K, Toms D J *Phys. Rev. A* **54** 4188 (1996)
9. Kagan Yu, Svistunov B V *Phys. Rev. Lett.* **79** 3331 (1997)
10. Haugerud H, Haugset T, Pavndal F *Phys. Lett. A* **225** 18 (1997)
11. Pathria R K *Phys. Rev. A* **58** 1490 (1998)
12. Davis M J, Morgan S A, Burnett K *Phys. Rev. Lett.* **87** 160402 (2001)
13. Yan Z *Eur. J. Phys.* **22** 233 (2001)
14. Xiong H, Liu S, Huang G, Xu Z *Phys. Rev. A* **65** 033609 (2002)
15. Davis M J, Morgan S A *Phys. Rev. A* **68** 053615 (2003)
16. Sinatra A, Lobo C, Castin Y *Phys. Rev. Lett.* **87** 210404 (2001); *J. Phys. B* **35** 3599 (2002)
17. Goral K, Gajda M, Rzazewski K *Opt. Express* **8** (2) 92 (2001); Brewczyk M, Gajda M, Rzażewski K *J. Phys. B* **40** R1 (2007)
18. Kocharovsky V V, Kocharovsky VI V, Scully M O *Phys. Rev. Lett.* **84** 2306 (2000); *Phys. Rev. A* **61** 053606 (2000)
19. Kocharovsky V V, Scully M O, Zhu S-Y, Zubairy M S *Phys. Rev. A* **61** 023609 (2000)
20. Pitaevskii L, Stringari S *Bose-Einstein Condensation* (Oxford: Clarendon Press, 2003)
21. Kocharovsky Vit V et al. *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **53** 291 (2006); cond-mat/0605507
22. Landsberg P T *Thermodynamics with Quantum Statistical Illustrations* (New-York: Interscience Publ., 1961)
23. Borrmann P, Franke G *J. Chem. Phys.* **98** 2484 (1993)
24. Glaum K, Kleinert H, Pelster A *Phys. Rev. A* **76** 063604 (2007)

On the Bose–Einstein condensate partition function for an ideal gas

E.D. Trifonov

Herzen State Pedagogical University of Russia,
 Moika nab. 48, 191186 Saint-Petersburg, Russian Federation
 E-mail: thphys@herzen.spb.ru

S.N. Zagoulaev

Department of Theoretical Physics, V.A. Fock Institute of Physics,
 St. Petersburg State University
 ul. Ul'yanovskaya 1, 198504 Staryi Peterhof, St. Petersburg, Russian Federation
 E-mail: snz@pcqnt1.phys.spbu.ru

Recursive approaches determining the canonical ideal Bose gas partition function are reviewed that enable the Bose–Einstein condensate occupation probability to be calculated for a finite number of particles ensemble where, the thermodynamic limit approximation fails. In addition to the earlier known method recursive in the number of particles, an iteration procedure on the number of quantum states is proposed. The efficiency of both methods is demonstrated for an ideal Bose gas in a three-dimensional isotropic harmonic trap.

PACS numbers: 05.30.Jp, **67.85.–d**

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201001e.0089

Bibliography — 24 references

Received 29 May 2009, revised 9 July 2009

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **180** (1) 89–96 (2010)

Physics–Uspekhi **53** (1) (2010)