

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной физики» Российской академии наук  
(ИПФ РАН)

На правах рукописи

Тарасов Сергей Владимирович

**Автомодельность термодинамических и статистических  
величин в критической области бозе-эйнштейновской  
конденсации идеального газа в мезоскопических  
системах**

01.04.03 — радиофизика,

01.04.07 — физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Вл.В. Кочаровский

Нижний Новгород — 2016

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. Микроскопическая теория критических явлений в бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа</b>	<b>26</b>
1.1. Постановка задачи о бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в рамках канонического ансамбля. Точное решение . . .	27
1.2. Кумулянтный анализ статистического распределения полного числа частиц вне конденсата . . . . .	33
1.3. Выводы . . . . .	39
<b>Глава 2. Статистика населенности конденсата в мезоскопической ловушке в критической области. Классы универсальности</b>	<b>41</b>
2.1. Автомодельный скейлинг статистики в окрестности критической точки. Гауссов и аномальный классы универсальности . . . . .	41
2.2. Особенности статистических распределений для систем аномального класса . . . . .	54
2.2.1 Асимптотика на правом крыле распределения . . . . .	57
2.2.2 Асимптотика на левом крыле распределения . . . . .	60
2.3. Выводы . . . . .	65
<b>Глава 3. Термодинамические характеристики газа в мезоскопической ловушке. Критические функции</b>	<b>67</b>
3.1. Параметр порядка . . . . .	68
3.2. Свободная энергия и средняя энергия . . . . .	71
3.3. Теплоемкость. Автомодельная структура $\lambda$ -особенности . . . . .	77

3.4. Выводы . . . . .	82
<b>Глава 4. Влияние граничных условий на теплоемкость газа в критической области</b>	<b>84</b>
4.1. Кубические ловушки-ящики с периодическими и нулевыми граничными условиями . . . . .	85
4.2. Ловушки с изменяемыми граничными условиями: цилиндрическая геометрия . . . . .	94
4.3. Ловушки с изменяемыми граничными условиями: декартова геометрия . . . . .	100
4.4. Выводы . . . . .	104
<b>Глава 5. Неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей</b>	<b>106</b>
5.1. Аналитическое описание мезоскопической системы во всей критической области в рамках большого канонического ансамбля . . . . .	107
5.2. Автомодельное поведение химического потенциала . . . . .	110
5.3. Сравнение канонического и большого канонического ансамблей: статистические распределения . . . . .	115
5.4. Сравнение канонического и большого канонического ансамблей: термодинамические характеристики . . . . .	120
5.5. О совпадении асимптотик термодинамических величин вне критической области для различных ансамблей . . . . .	127
5.6. Выводы . . . . .	131
<b>Заключение</b>	<b>133</b>
<b>Приложение А. О спектральных дзета-функциях</b>	<b>136</b>
<b>Список литературы</b>	<b>143</b>

# ВВЕДЕНИЕ

## Актуальность темы диссертации

Одним из центральных и до сих пор не решенных вопросов современной теоретической физики является построение микроскопической теории фазового перехода многочастичных систем из неупорядоченной в упорядоченную фазу в процессе спонтанного нарушения симметрии. Искомая теория должна позволить непрерывно проследить за эволюцией свойств системы при таком переходе через всю критическую область ее параметров. Исключительная сложность проблемы связана с тем, что процесс фазовых переходов включает одновременное действие целого ряда факторов, правильный учет каждого из которых в общем случае уже является почти непреодолимой преградой в теоретической физике. К указанным факторам относятся многочастичность и одновременно мезоскопичность системы, межчастичное взаимодействие и наличие дальних корреляций, критическая зависимость от размерности пространства и нерешенность трехмерной задачи, наличие неустойчивых мод, нелинейное насыщение неустойчивости на макроскопическом уровне, спонтанное нарушение симметрии, наличие связей (ограничений) в гильбертовом пространстве системы (в том числе, диктуемых нарушаемой симметрией в силу теоремы Нётер), аномально сильные флуктуации параметра порядка. Известные методы теории среднего поля, теории возмущений, теории колебаний и волн, квантовой теории поля и стандартной диаграммной техники, ренормализационной группы не позволили решить эту проблему.

Описание статистических и термодинамических величин критической области бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК) идеального газа является частным случаем обозначенной задачи, позволяющим выделить из этого многооб-

разия и детально изучить два отдельных фактора. Первым из них является мезоскопичность системы, ведущая к зависимости решения от размеров и формы ловушки. Вторым — условие фиксированности числа частиц в ловушке, накладывающее жесткое ограничение на описывающее систему гильбертово пространство. Заметим, что оба эти фактора пока не удалось корректно учесть при наличии прямого межчастичного взаимодействия: многочисленные работы по БЭК в мезоскопических системах основываются в основном на численных расчетах, например, с привлечением методов Монте-Карло [1–4], либо на известных уравнениях Гросса-Питаевского, Беляева-Попова и их обобщениях [5–7], справедливых лишь в низкотемпературной фазе развитого конденсата и не применимых в критической области.

Обе указанные черты безусловно присущи многочисленным современным экспериментам с бозе-газом и могут ярко (и весьма индивидуально) проявляться в физике конденсированного состояния. Действительно, вариативность лабораторного изучения атомных систем существенно выросла со времени первых лабораторных наблюдений [8, 9] атомного бозе-конденсата. Сейчас стало возможным изменять в широких пределах как число загруженных в ловушку частиц (типичные числа атомов составляют  $10^2 - 10^8$ , см. обзоры [10, 11]) и силу межчастичного взаимодействия [12, 13] (используются резонансы Фешбаха), так и профиль удерживающего потенциала [14] и, в частности, его размерность и анизотропные свойства [15–17]. Существуют установки-ловушки с квазивертикальными стенками [18] и квазиоднородным потенциалом [19]. Кроме того, бозе-конденсация наблюдается не только в газовых атомных системах, но и для квазичастиц в конденсированных средах — магнонов, экситонов, поляритонов, фотонов [20–24], свойства которых, как и параметры содержащих их ловушек, также весьма разнообразны. Эта вариативность делает бозе-конденсацию привлекательной для обнаружения новых физических эффектов и открывает перспективы для оптимизации и

разработки систем и устройств, использующих когерентные свойства бозеконденсатов для решения практических задач, например, в сверхточной интерферометрии [25], квантовой информатике [26] и др.

Однако для реализации этих возможностей необходимо построить последовательную теорию, заведомо включающую описание действия выделенных для идеального газа факторов. В частности, необходимо учитывать неэквивалентность описаний в рамках канонического, большого канонического и микроканонического ансамблей, а также зависимость свойств системы от числа атомов в ловушке, граничных условий и геометрических особенностей удерживающего потенциала. Существенно, что в реальных экспериментах критическая область параметров между конденсированной и неконденсированной фазами оказывается достаточно широкой и доступной для детальных измерений [27–29].

Условие фиксированности числа частиц при описании бозе-систем заслуживает отдельного обсуждения, так как именно этому условию обязано существование явления БЭК. Например, фотоны в черном ящике не испытывают БЭК при охлаждении, так как их число в системе не фиксировано: вместо того, чтобы накапливаться в низшей энергетической моде, они поглощаются стенками. И только создание резонатора с „белыми“, непоглощающими стенками позволило реализовать БЭК фотонов, зафиксировав число возбуждений в системе (фактически — совокупное число фотонов и возбужденных молекул красителя, заполняющих резонатор) [30, 31].

Попытка заменить условие сохранения полного числа частиц в системе более мягким условием сохранения их среднего числа, т.е. попытка заменить микроканонический или канонический ансамбль большим каноническим, мгновенно приводит к так называемой „флуктуационной катастрофе“ [10, 32]: среднеквадратичное отклонение числа частиц на основном уровне при сколь угодно низких температурах оказывается порядка ожидаемого чис-

ла частиц на этом уровне, что противоречит представлению о сформировавшейся макроскопической конденсированной фракции. Причина данного парадокса, который с самого начала рассматривался как любопытный математический артефакт модели большого канонического ансамбля, заключается в отсутствии надлежащего учета жесткой корреляции между числами надконденсатных и конденсированных частиц.

Даже для идеального газа вплоть до недавнего времени не существовало аналитического решения, дававшего непрерывное описание возникновения БЭК при переходе через критическую точку.

В приближении большого канонического ансамбля, допускающего обмен частицами с резервуаром, было известно явное описание БЭК идеального газа в ловушках с простой геометрией, однако его применение в критической области физически не обосновано [10, 32–34] и приводит к ошибкам при вычислении статистики БЭК, связанным с упомянутой „флуктуационной катастрофой“.

В определенной мере преодолеть вычислительные сложности при описании статистики бозе-системы в фазе развитого конденсата удалось с помощью приближенного метода так называемого статистического „ансамбля демона Максвелла“ (предложен в [35] и развивался для мезоскопических систем в [36–39] и др.). Этот метод предполагает при температурах  $T$  много ниже критической  $T_c$  описывать с помощью большого канонического ансамбля подсистему частиц на возбужденных (т.е. всех, кроме основного) уровнях, рассматривая сильно населенную конденсированную фракцию как резервуар частиц; статистика числа частиц в конденсате при этом определяется как раз из условия жесткого сохранения полного числа частиц в системе. Однако такое искусственное применение ограничения не позволяет подойти к критической области системы, где относительный размер конденсированной фракции не так велик и флуктуации в конденсате существенны.

Попытки построения последовательного описания мезоскопической БЭК идеального газа в рамках канонического ансамбля, естественным образом учитывающего неизменность полного числа атомов в системе, предпринимались многократно, но либо приводили к неверным ответам [40, 41], либо не давали явных выражений для характеристик системы [42], либо использовали предположения, позволяющие определить только асимптотические свойства системы вдали от критической точки [43]. Основным способом исследования бозе-системы в рамках канонического (и микроканонического) ансамбля оставались численные расчеты [4, 44–49], основанные на рекуррентных соотношениях [50, 51] для статистической суммы, дающие результаты в том числе и в критической области, но не позволяющие глубоко разобраться в процессе ее формирования. Достигнутое в работах [52–54] продвижение в учете неаналитичности, вносимой в задачу условием фиксированности числа частиц, к сожалению, не было распространено на критическую область параметров БЭК. Указанная проблема учета сильной корреляции чисел заполнения однопартичных состояний, по существу была нерешенной вплоть до работы [55] и ее развития в работах [56–58], представляющих основные результаты диссертационного исследования (обзор отдельных работ см. в [59]).

Обсудим теперь и условие мезоскопичности системы, также подробно рассматриваемое в диссертационном исследовании.

В статистической физике существует парадигма — изучать статистику и термодинамику системы сразу и только в термодинамическом пределе. Для БЭК это означает предельный переход к бесконечному размеру ловушки и числу частиц в ней, сохраняющий неизменной концентрацию частиц. Формально это упрощает расчеты: различные суммы по уровням энергии заменяются интегралами и иногда вычисляются в конечном виде, а различные статистические ансамбли становятся эквивалентными [60–63]. Однако в критической области фазовых переходов такой подход неверен, причем не только

количественно. Он упускает главный факт и объект исследования критических явлений — саму структуру физических характеристик БЭК в критической области. Эта структура оказывается огрубленной до примитивного разрыва термодинамических величин или их производных в критической точке. Так, данный подход предсказывает скачок теплоемкости в критической точке и не разрешает плавную  $\lambda$ -структуру фазового перехода. Последний в реальных мезоскопических системах всегда является плавным, что подчеркивал ещё Эренфест, критикуя Эйнштейна.

Эта проблема не раз обсуждалась, в основном, с целью уточнения тонкостей предельного перехода, зависящего, например, от последовательности устремления к бесконечности различных параметров системы. Использовались численные расчеты конечных бозе-систем [46, 48, 64, 65] или их комбинация с аналитическими методами, применимыми для ловушек специальной геометрии. Так, рассматривались ловушка-ящик, две стороны которого фиксировались очень большими, а третья варьировалась, [66] или сферическая ловушка с варьируемым радиусом [67]. В итоге констатировалось, что с увеличением системы все термодинамические параметры стремятся к термодинамически предельным значениям, испытывающим разрывы или изломы. Ход стремления зависит от геометрии системы и может быть сложным. Например, для теплоемкости газа в ящике с непроницаемыми стенками наблюдается как смещение положения её максимума по температурной оси  $T/T_c$ , так и немонотонное изменение величины максимума [48]. Не удивительно, что сделать достаточно конкретные выводы об устройстве критической области — в том числе, заранее неизвестной автомодельности ее структуры, обсуждаемой в диссертации, — такими методами не удалось.

Влияния рассмотренных выше факторов — мезоскопичности и фиксированности числа частиц — на свойства бозе-системы существенно взаимосвязаны, что особенно наглядно проявляется в задаче описания термодинами-

ческих величин. С общей точки зрения различие термодинамических предсказаний канонического и большого канонического ансамблей для систем конечных размеров совершенно не удивительно. Для БЭК оно обсуждалось, например, в [32, 54, 55, 61, 68] и демонстрировалось численно [44, 45, 69] или даже аналитически — для ловушек с известными для обоих ансамблей решениями, например, одномерной гармонической ловушки [70]. Отсюда ясно, что применение большого канонического ансамбля осложнено и в пределе больших систем, в том числе при описании характеристик, свободных от вклада фракции частиц на основном уровне и потому не ощущающих „флуктуационной катастрофы“. Что касается использования этого ансамбля для систем с конечным числом частиц, то оно обосновано лишь в частных случаях, допускающих доказательство, пусть приближенное, эквивалентности каноническому ансамблю [62, 63, 71–73]. Такие доказательства наиболее просто реализуются для макроскопических систем с нормальными термодинамическими флуктуациями и чаще всего опираются на применимость центральной предельной и других подобных строгих теорем математики [74–81]. Вместе с тем известно, что в случае наличия фазовых переходов, длинноволновых корреляций или дальнедействующих взаимодействий типа кулоновского, дипольного и гравитационного эта эквивалентность может нарушаться даже в случае термодинамического предела [32, 76, 82–84].

Отметим, что не дает исчерпывающего описания критической области и феноменологические теории ренормгруппы и масштабной инвариантности [42, 60, 85–88] — до сих пор не существует такой теории критических явлений, которая, исходя из микроскопического гамильтониана мезоскопической системы, позволяла бы регулярным и замкнутым способом вывести универсальные результаты ренормгруппового подхода, например, классы универсальности и значения критических индексов, и вычислить неуниверсальные характеристики фазового перехода — критические функции и амплиту-

ды физических величин. Именно, в теории ренормгруппы не получено явное решение для критических функций, а для их анализа [1, 2, 4, 86, 89, 90] используются численные расчеты методом Монте-Карло и аппроксимации по первым членам их ряда Тейлора с включением поправок на неопределяющие закон подобия поля.

Обозначенная проблема термодинамических и статистических свойств бозе-системы в критической области была полностью решена в работах [57, 58, 68], лежащих в основе диссертации. В них найдено исчерпывающее аналитическое описание бозе-системы с фиксированным числом частиц, применимое для ловушек произвольной геометрии во всей области параметров, включающей как классическую и конденсированную фазы, так и всю критическую область, характеризующуюся аномальными флуктуациями параметра порядка.

Основное достижение указанных работ заключается в том, что весь анализ проведен в общем виде для системы конечных размеров и лишь потом осуществлен переход к термодинамическому пределу. Такой подход позволил обнаружить важное свойство самоподобия в центральной части критической области для систем различного размера. Именно, с ростом размера и числа частиц в ловушке все статистические и термодинамические функции, масштабированные надлежащим образом, сходятся к универсальным функциям автомодельной переменной — масштабированного числа частиц либо в надконденсате, либо во всей ловушке. Конкретный вид предельных функций определяется чистой геометрией ловушки, т.е. безразмерным одночастичным энергетическим спектром, и не зависит от конкретных физических параметров и размеров системы.

Автомодельность существенно упрощает анализ БЭК, сводя влияние всего многообразия физических параметров системы к зависимости от единой переменной и позволяя качественно и количественно описать мезоскопиче-

скую систему в наиболее сложной, центральной части критической области. При этом удастся избежать трудоемких, требовательных к ресурсам, но малоинформативных численных расчетов для многочисленных вариантов конкретных параметров и размеров системы.

Свойство самоподобия проявляется в мезоскопических системах, начиная с умеренных значений полного числа частиц  $N \sim 1000$ . Для совсем малых систем или слишком далеко от критической точки статистика и термодинамика БЭК не сводятся к предельным автомодельным функциям. Тогда надо учитывать мезоскопические поправки следующего порядка по малому параметру, равному отношению разности энергий двух наинизших одночастичных состояний к температуре. Такой систематический подход, использующий найденное в [55] точное решение для модели трехуровневой ловушки, служащей универсальной моделью для поправок, предложен в [57, 58].

Автомодельность позволяет легко разрешить проблему термодинамического предела для идеального газа. При увеличении размеров системы критические функции от автомодельного аргумента выходят на неизменные универсальные кривые, определяемые лишь геометрией ловушки через спектр одночастичных состояний. Характерная ширина перехода в автомодельном масштабе не зависит от размера системы. Однако на шкале температур она выглядит сужающейся с увеличением системы, что и делает фазовый переход по температуре все более резким. Вместе с тем, автомодельное поведение всех физических величин в центре критической области остается неизменным и плавным. Этот замечательный факт раскрывает структуру и объясняет парадокс неаналитичности термодинамического предела [59]. Сказанное верно и для канонического [57, 91], и для большого канонического ансамблей [68, 92].

Сравнение представленного в диссертационной работе точного решения с упомянутым ренормгрупповым анализом законов подобия для БЭК в конечных системах обсуждается в [59]. Как и должно быть, точное решение

позволяет не только вывести результаты феноменологической теории ренорм-группы для промежуточной асимптотики на склонах критической области, но и найти сами нетривиальные (нестепенные) критические функции термодинамических и статистических параметров в центре критической области. Более того, автомодельность точного решения и знание универсальной автомодельной переменной позволяют найти зависимость физических величин сразу от всех параметров системы, а не только от одной температуры.

Другим важным достижением является проведенное в [57, 58, 93] выделение классов универсальности БЭК в различных ловушках, основанное на классификации автомодельных распределений числа несконденсированных частиц, определяющих статистику БЭК в центре критической области. Развита в диссертации теория показывает, что все мезоскопические ловушки можно разделить на два универсальных класса с сильно отличающимися статистическими свойствами бозе-газа — гауссов и аномальный классы, характеризующиеся применимостью или неприменимостью центральной предельной теоремы для расчета статистики. Для ловушек аномального класса непосредственной причиной отклонения от гауссового распределения является то, что уровни энергии с ростом номера растут настолько быстро, что статистику определяет лишь малое число заселенных, низколежащих уровней. Свойства ловушек, в том числе их деление на классы, в значительной мере определяются видом спектральной плотности состояний при энергиях меньше температуры, а именно, показателем степенной аппроксимации зависимости этой плотности состояний от энергии. Особо отметим предсказание эффекта влияния граничных условий в ловушках аномального класса на статистические и термодинамические величины. Замечательно то обстоятельство, что этот эффект не исчезает даже в термодинамическом пределе.

Представляет несомненный интерес наблюдение указанного и других обсуждающихся в диссертации эффектов, а также выяснение их зависимости от

силы межчастичного взаимодействия в современных экспериментах по БЭК в мезоскопических системах. Это реально, ибо имеется возможность управлять как геометрией ловушки — с помощью изменения профиля удерживающего частицы потенциала, так и межчастичным взаимодействием — с помощью резонансов Фешбаха.

Наконец, фундаментальный интерес для статистической физики представляет доказанная в [68] неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей для описания БЭК в критической области даже в термодинамическом пределе.

### **Цели и задачи диссертационной работы**

Непосредственной темой работы является теоретическое исследование критических явлений в идеальном газе бозе-атомов, помещенных в ловушку конечных размеров.

Основная цель работы состоит в создании микроскопической теории статистических и термодинамических свойств бозе-эйнштейновской конденсации невзаимодействующих атомов в мезоскопической ловушке для всей критической области параметров газа и произвольного удерживающего потенциала.

Для реализации сформулированной цели поставлены следующие задачи:

1. изучение автомодельных характеристик критических явлений бозе-конденсации;
2. описание статистических свойств бозе-системы на основе анализа вероятностного распределения числа несконденсированных частиц в ловушке;
3. описание термодинамических свойств бозе-системы, включая тонкую структуру  $\lambda$ -особенности теплоемкости;

4. исследование зависимости свойств бозе-системы и описывающих их автомодельных критических функций от профиля и размерности удерживающего газ потенциала;
5. сравнение и установление неэквивалентности описаний критических явлений на основе канонического ансамбля, точно фиксирующего число частиц в системе, и большого канонического ансамбля, для которого фиксируется лишь среднее число частиц в системе.

### **Методы исследования**

Микроскопическое описание равновесного газа невзаимодействующих бозонов в рамках канонического и большого канонического ансамблей строится на основе распределения Гиббса, хорошо известного в квантовой статистической механике. Исследование статистических свойств бозе-системы проводится с помощью аппарата характеристической функции и кумулянтного анализа, развитых в теории вероятностей. Влияние граничных условий и формы ловушки, удерживающей газ, на его статистику и термодинамику анализируется с использованием методов спектральных дзета-функций и преобразования Меллина, относящихся одновременно к теории чисел и математической физике.

Аналитические выводы подкреплены численными расчетами свойств мезоскопических систем невзаимодействующих бозе-атомов, проведенными с помощью рекуррентных соотношений для статистических сумм и реализованными в оригинальных программах на языке C++.

### **Научная новизна работы**

Задача построения микроскопической теории критических явлений бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в произвольной мезоскопической ловушке, включающая полное описание статистических и термодинамических свойств системы, была решена впервые. Аналитически найдены уни-

версальные автомодельные критические функции, описывающие флуктуации и термодинамические свойства газа в критической области, в том числе форму  $\lambda$ -особенности теплоемкости. Установлено, что эти функции существенно зависят от профиля удерживающего газ потенциала и граничных условий даже в термодинамическом пределе макроскопически большой системы. Явно показано, что канонический и большой канонический ансамбль дают неэквивалентные описания бозе-эйнштейновской конденсации.

### **Научная значимость результатов**

В теории конденсированного состояния точное решение задачи о фазовом переходе второго рода для всей критической области известно лишь для очень небольшого числа моделей, обычно отвечающих гамильтонианам весьма специфического вида и предоставляющих довольно ограниченные возможности варьирования параметров изучаемой системы (например, двумерная задача Изинга [94, 95] или восьмивершинная модель Бакстера [96]).

В рамках диссертационного исследования этот список был пополнен общим решением задачи о бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа, удерживаемого в мезоскопической ловушке. Полученное точное решение, исследованное методами статистической радиофизики, применимо для весьма широкого класса бозе-систем, включая удерживающие газ потенциалы произвольных размерности и профиля.

Детально изучено влияние граничных условий и геометрических свойств ловушки на статистические и термодинамические параметры удерживаемого ей бозе-газа, что может служить основой интерпретации готовящихся и уже проведенных экспериментов со слабозаимодействующими атомами и позволит оптимизировать конфигурации ловушек при планировании новых экспериментов.

Разработанные в диссертации аналитические методы делают возможным строгий учет ограничений, которые накладываются на соответствующее си-

стеме гильбертово пространство состояний частиц тем или иным условием на полное число частиц в системе. Эти методы перспективны для применения и в других задачах о фазовых переходах, где ограничения на гильбертово пространство имеют принципиальный характер. К таким задачам относится, например, описание бозе-конденсации газа с межчастичными взаимодействиями.

### **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Задача аналитического описания фазового перехода бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в произвольной мезоскопической ловушке в рамках канонического ансамбля имеет точное решение. Оно выражается через решение вспомогательной задачи о статистике населенности надконденсата в большом каноническом ансамбле с нулевым химическим потенциалом. Эта вспомогательная задача решается методом характеристической функции в спектральном представлении, полностью охватывающим критическую область параметров системы и последовательно учитывающим форму удерживающего потенциала.
2. Критические явления описываются автомодельной переменной, являющейся определенной комбинацией температуры, числа частиц, их массы и параметров ловушки. Эта переменная определяет масштаб и конечную ширину критической области, в том числе и в термодинамическом пределе, а также выявляет близкую к автомодельной статистику флуктуаций системы. Масштабированные вероятностные распределения числа частиц в конденсате и в надконденсате при увеличении размера системы быстро сходятся к автомодельным распределениям, не зависящим от значений каких-либо размерных параметров ловушки и определяемым лишь формой удерживающего потенциала через закон нарастания спектральной плотности состояний с ростом энергии.

Зависимость автомоделных функций от профиля потенциала отражает существование ловушек двух универсальных классов — гауссова и аномального — с сильно отличающимися статистическими свойствами бозе-газа.

3. В рамках канонического ансамбля зависимости термодинамических величин от параметров системы являются плавными и описывают непрерывную, без скачков, эволюцию ее свойств при прохождении через критическую область параметров. В пределе бесконечно больших систем поведение термодинамических характеристик бозе-газа сводится к автомоделным критическим функциям, конкретный вид которых определяется геометрическими свойствами удерживающего потенциала.
4. Для аномального класса ловушек, обеспечивающих наличие существенных высших (негауссовых) моментов распределения числа частиц в конденсате, термодинамические свойства системы и соответствующие автомоделные критические функции зависят от особенностей низкоэнергетического спектра одночастичных состояний и, в частности, от граничных условий. В мезоскопических ловушках с числом атомов, типичным для современных экспериментов с бозе-системами, указанный эффект можно наблюдать экспериментально, например, измеряя изменение максимума теплоемкости, его смещение и деформацию формы  $\lambda$ -особенности.
5. Большой канонический ансамбль обнаруживает в критической области фазового перехода автомоделное поведение статистических и термодинамических характеристик системы в рамках того же масштабирования, что и канонический ансамбль. Автомоделные статистические распределения, отвечающие различным ансамблям, существенно отличаются друг от друга в критической области. Это приводит к значитель-

ным различиям критических функций для термодинамических величин в центральной части критической области. Вместе с тем их асимптотики вдали от критической точки совпадают, если вклад конденсированной фракции в эти величины несущественен.

### **Достоверность полученных результатов**

Проведенные исследования основаны на хорошо зарекомендовавших себя методах статистической радиофизики, теории вероятностей и математической физики. Достоверность сделанных в диссертации выводов подтверждается их согласием с известными ранее результатами исследования частных задач о бозе-эйнштейновской конденсации, полученных аналитическими и численными методами, а также на основе экспериментальных данных. Разработанные в диссертации методы и найденные точные решения актуальных задач физики фазовых переходов прошли рецензирование и опубликованы в ведущих научных журналах.

### **Публикации и апробация результатов**

Результаты исследований по теме диссертации опубликованы в 6 статьях в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах (рекомендованных ВАК для публикации основных материалов) [57–59, 68, 91, 92]. Кроме того, результаты работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах Института прикладной физики РАН, а также на следующих конференциях (см. тезисы докладов и труды конференций [97–103]):

1. Научные школы „Нелинейные волны-2012“ (г. Нижний Новгород, 1–6 марта 2012 г.) и „Нелинейные волны-2016“ (г. Нижний Новгород, 27 февраля–4 марта 2016 г.);
2. XVII научная конференция по радиофизике (г. Нижний Новгород, 13–17 мая 2013 г.);

3. 18 Нижегородская сессия молодых ученых (г. Нижний Новгород, 28–31 мая 2013 г.);
4. V international conference „Frontiers of Nonlinear Physics“ (Nizhny Novgorod – Yelabuga, June 28 – 2 August, 2013);
5. The International conference on the Statistical Physics „SigmaPhi2014“ (Rhodes, 7–11 July 2014);
6. IV международная молодежная научная школа-конференция „Современные проблемы физики и технологий“ (г. Москва, 17-22 марта 2015 г.);
7. Всероссийская конференция „Молодые ученые России“ (г. Москва, фонд „Династия“, 12-15 апреля 2015 г.).

Результаты, представленные в главах 1-3, включены в число основных результатов научной работы Института прикладной физики РАН в 2015 г.

Результаты представленных в диссертации исследований использовались также в грантах Российского Фонда Фундаментальных Исследований (12-02-00855-а) и Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских учёных и ведущих научных школ Российской Федерации (НШ-1041.2014.2).

### **Личный вклад автора**

Автор принимал активное участие в определении направлений исследований по теме диссертации, включая постановку задач и поиск путей их решения. При выполнении диссертационной работы вклад автора был определяющим как в разработку и реализацию аналитических методов решения конкретных задач, так и в проведение численного моделирования исследованных критических явлений. Силами автора выполнена также значительная часть работы по подготовке результатов к публикации.

## **Благодарности**

Автор благодарен своим соавторам — члену-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук Вл.В. Кочаровскому и доктору физико-математических наук В.В. Кочаровскому — за совместную работу над задачами, вошедшими в данную диссертацию, а также доктору физико-математических наук, профессору Г.М. Жислину за полезные консультации по ряду вопросов спектральной теории и докторам физико-математических наук, профессорам В.В. Курину и В.Е. Семенову за конструктивное обсуждение полученных результатов.

## **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка цитированной литературы из 117 наименований (включая 13 публикаций автора) и приложения. Общий объем диссертации составляет 156 страниц, включая 14 рисунков.

## **Краткое содержание работы**

**Первая** глава посвящена анализу точного решения для идеального бозегаза в мезоскопической ловушке в рамках канонического ансамбля с учетом неаналитичности статистического распределения числа частиц в конденсате, обусловленной строгой фиксацией количества частиц в системе.

В разделе 1.1 описан последовательный метод, позволяющий на основе распределения Гиббса найти статистику числа частиц в конденсате и вне его, а также вычислить статистическую сумму для поставленной задачи, связав ее нелинейным образом с легко решаемой вспомогательной задачей о распределении полного числа частиц на возбужденных уровнях для большого канонического ансамбля с равным нулю химическим потенциалом. Роль ограничения, накладываемого условием фиксации числа частиц в каноническом ансамбле, сводится к применению неаналитической „обрезки“ и перенорми-

ровке вспомогательной статистики при возвращении к исходной задаче.

В разделе 1.2 подробно исследуется характеристическая функция флуктуирующего числа надконденсатных частиц, с помощью которой может быть решена вспомогательная задача, определяющая свойства исходной системы. С использованием методов спектральной теории для логарифма этой характеристической функции строится представление, которое позволяет в дальнейших главах эффективно анализировать критические явления и роль флуктуаций в широкой области параметров системы.

**Вторая** глава посвящена в основном особенностям статистики числа частиц вне конденсата для указанной вспомогательной задачи в той области параметров, которая ответственна за поведение исходной системы в непосредственной окрестности критической точки и позволяет выявить автомодельность критических явлений в конденсате.

В разделе 2.1 с помощью метода характеристических функций показывается, что для достаточно больших систем статистика во вспомогательной задаче оказывается близка к автомодельной: распределения числа частиц в конденсате и в надконденсате, масштабированные определенным образом, стремятся с ростом размера системы к универсальным распределениям, определяемым лишь безразмерным спектром ловушки, т. е. ее геометрическими свойствами. Обнаруживается, что в зависимости от гауссова или негауссова типа этого автомодельного распределения все ловушки делятся на два класса универсальности — гауссов (плотность состояний растет быстро с ростом энергий) или аномальный (плотность состояний растет медленно). Свойство автомодельности вспомогательного распределения критической области наследуется статистическими распределениями исходной задачи.

В разделе 2.2 особое внимание уделено ловушкам аномального класса и характеризующим их негауссовым автомодельным распределениям с аномально большими флуктуациями. Разрабатываются методы исследования таких

распределений, вычисляются их асимптотики и выясняются свойства, не требующие конкретизации ловушки.

В **третьей** главе изучается поведение термодинамических характеристик мезоскопической системы в окрестности критической точки. Эти характеристики оказываются непосредственно связанными с изученными во второй главе распределениями и тоже обладают автомодельными свойствами как функциями масштабированного числа частиц в системе.

На основе проведенного анализа вводятся и вычисляются автомодельные критические функции, которые описывают гладкое непрерывное изменение термодинамических величин при переходе через критическую область. Эта процедура проведена для параметра порядка (раздел 3.1), свободной энергии и средней энергии системы (раздел 3.2) и для удельной теплоемкости (раздел 3.3), демонстрирующей вблизи критической точки широко известную  $\lambda$ -структуру. Устанавливается, что в критической области термодинамические свойства системы, в частности, впервые раскрытый вид тонкой структуры  $\lambda$ -особенности теплоемкости, существенно зависят от того, к какому классу универсальности принадлежит ловушка.

**Четвертая** глава сфокусирована на особенностях поведения теплоемкости газа для ловушек аномального класса в критической области параметров.

На основе модельного примера ловушек в форме кубических ящиков в разделе 4.1 выявлен и объяснен эффект влияния негрубых изменений спектра (связанных с изменением граничных условий с периодических на нулевые) на изменение автомодельной критической функции, описывающей теплоемкость или другую термодинамическую величину, сильно меняющуюся при переходе через критическую область. Показано, что данный эффект, упускаемый в неразрешающих критическую область подходах типа термодинамического предела, может оказаться вполне заметным для систем с типичными размерами, реализуемыми в экспериментах.

В следующих двух разделах рассматриваются конфигурации ловушек, которые могут позволить экспериментально реализовать изменение граничных условий или возмущения спектра, достаточные для обнаружения соответствующего изменения термодинамической величины, например теплоемкости. При этом в разделе 4.2 рассматриваются цилиндрически симметричные ловушки, а в разделе 4.3 — ловушки, допускающие декартово разделение переменных при расчете собственных одночастичных состояний.

Последняя, **пятая** глава посвящена сравнению предсказаний канонического и большого канонического ансамблей в критической области параметров и доказательству их неэквивалентности.

В разделе 5.1 дано описание бозе-системы в рамках большого канонического ансамбля. Оно выполняется методами характеристической функции, аналогичными использованным в разделе 1.2 и позволяющими детально исследовать статистику системы в окрестности критической точки.

В разделе 5.2 уравнение для химического потенциала решается с использованием переменной, разрешающей критическую область для систем произвольно большого размера. В широкой области параметров системы, содержащей всю критическую область, решение этого уравнения оказывается автомодельным, однако конкретный вид автомодельной кривой зависит от геометрических свойств ловушки. В результате вновь возникает деление на два класса, совпадающих с ранее указанными гауссовым и аномальным. Статистические и термодинамические характеристики системы наследуют свойства автомодельности химического потенциала.

Раздел 5.3 содержит сравнение автомодельных статистических распределений для чисел частиц в конденсате и в надконденсате, предсказанных разными ансамблями, и демонстрирует, что большой канонический ансамбль не способен корректно и полно воссоздать статистику системы с заданным числом частиц ни в какой фазе.

В разделе 5.4 аналогичное сравнение проведено для термодинамических характеристик (и их критических функций), а именно, для средней энергии и теплоемкости. Его результаты говорят о том, что оба ансамбля приводят к одинаковому скейлингу для параметров системы, а заметных различий в предсказаниях двух ансамблей следует ожидать в центре критической области для тех термодинамических величин, которые испытывают в ней существенное изменение. Если термодинамическая характеристика определяется частицами на возбужденных уровнях (что справедливо для рассматриваемых средней энергии и теплоемкости), то вдали от критической точки сходятся друг к другу полученные в разных ансамблях асимптотики критических функций, а значит, и предсказания для самой величины.

На основе обоих построенных описаний в разделе 5.5 выясняется непосредственная причина этого совпадения асимптотик и показывается, что оно является следствием сближения величины химического потенциала и модуля стационарной точки, определяющей асимптотику статистической суммы в рамках канонического ансамбля. Физически сближение асимптотик отражает тот факт, что вне критической области для обоих ансамблей флуктуации слабо влияют на термодинамические характеристики, обусловленные атомами на возбужденных уровнях.

В **Заключении** приведены основные результаты диссертационной работы.

В **Приложении А** кратко рассмотрены основные свойства и методы исследования так называемых функций ловушек (т. е. обобщенных спектральных дзета-функций, ассоциированных с безразмерным одночастичным энергетическим спектром атома в удерживающем потенциале), которые в пределе больших систем определяют автомодельные зависимости статистических и термодинамических характеристик бозе-системы.

# ГЛАВА 1. МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКОЙ КОНДЕНСАЦИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Настоящая глава посвящена точному микроскопическому описанию статистических и термодинамических свойств равновесной мезоскопической бозе-системы, включающей ровно  $N$  удерживаемых в ловушке невзаимодействующих атомов, которое справедливо во всей ее области параметров. Именно, вычисляются вероятностные распределения числа частиц в конденсате  $n_0$  и полного числа частиц на возбужденных уровнях  $n$ , а также определяется статистическая сумма системы  $Z^{(N)}$ , несущая информацию о всех термодинамических величинах.

Основной сложностью в процессе построения такого описания, применимого в критической области, является необходимость учета корреляции между числами заполнения отдельных энергетических уровней, возникающей благодаря указанному требованию того, что для рассматриваемой системы сумма операторов числа частиц во всех одночастичных состояниях должна быть фиксирована (и равна  $N$ ). Математически данное требование отвечает наличию в равновесной матрице плотности системы неаналитичности, вносимой соответствующим символом Кронекера. При анализе свойств бозе-системы в непосредственной окрестности критической точки эта неаналитичность не может быть сглажена. Таким образом, даже несмотря на отсутствие в системе процесса парного рассеяния, для идеального газа в рамках канонического ансамбля характерно сильное эффективное взаимодействие атомов, вовлекающее сразу все существующие в ловушке одночастичные состояния.

Наличие явной неаналитичности в задаче не позволяет надеяться на построение решения хорошо развитыми методами последовательных приближений. Учет условия связи должен быть заложен в модель изначально, и именно такой метод описания представлен ниже.

Результаты главы опубликованы в работе [57, 59, 100, 101].

## 1.1. Постановка задачи о бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в рамках канонического ансамбля.

### Точное решение

Профиль удерживающего бозе-атомы потенциала  $U(r)$  определяет термодинамические параметры идеального газа, задавая стационарные состояния отдельной частицы (нумеруемые индексом  $q \geq 0$ ) и соответствующие дискретные одночастичные энергетические уровни  $\epsilon_q$ . Удобно отсчитывать их энергию от основного, самого низкоэнергетического состояния, то есть положить  $\epsilon_0 = 0$ , и характеризовать энергетический спектр последовательностью безразмерных собственных значений  $\{\lambda_q\} : \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$  (повтор элементов в последовательности соответствует вырождению энергетического уровня), такой, что:

$$\frac{\epsilon_q}{T} = \alpha \lambda_q, \quad \alpha = \text{const} \times \frac{\epsilon_1}{T}, \quad \lambda_0 \equiv 0. \quad (1.1)$$

(Температура равновесной системы  $T$  измеряется в энергетических единицах.) Для определенности можно положить  $\alpha = \frac{\epsilon_1}{T}$ , однако нормировка  $\lambda_1 = 1$  для последующего анализа совершенно не принципиальна.

Все размерные параметры системы, такие как ее температура  $T$ , масса атомов  $m$  и характерные размеры ловушки, содержатся в безразмерном параметре  $\alpha$ . „Большим“ и населенным системам отвечают значения  $\alpha \ll 1$ , при которых велико число энергетических уровней, расположенных ниже уровня

температуры и потому потенциально заселенных и влияющих на термодинамические характеристики. Постановке задачи в термодинамическом пределе соответствует предельный переход  $\alpha \rightarrow 0$ .

Для многочастичной системы, а именно для ансамбля, состоящего из  $N$  невзаимодействующих бозонов, гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{q \geq 0} \epsilon_q \hat{n}_q \equiv \sum_{q > 0} \epsilon_q \hat{n}_q, \quad (1.2)$$

где на операторы  $\hat{n}_q$  числа частиц в состоянии  $q$  наложено условие:  $\sum_{q \geq 0} \hat{n}_q = N$ . При этом для значений оператора числа частиц вне конденсата справедливо неравенство вида  $\hat{n} = \sum_{q > 0} \hat{n}_q \leq N$ .

Равновесная система подчиняется распределению Гиббса и описывается матрицей плотности  $\hat{\rho}$ :

$$\hat{\rho} = e^{-\hat{H}/T} \theta(N - \hat{n}) / Z, \quad Z = \text{Tr} \left( e^{-\hat{H}/T} \theta(N - \hat{n}) \right), \quad (1.3)$$

где  $\theta(x)$  — функция Хэвисайда ( $\theta(x \geq 0) = 1$ ,  $\theta(x < 0) = 0$ ), выражающая то условие, что в ловушке удерживается ровно  $N$  частиц.

Микросостояния данного ансамбля удобно описывать набором чисел заполнения только возбужденных уровней  $\{n_q\}$ ,  $q \geq 1$ . Число частиц на основном уровне  $q = 0$ , не включенное в набор, выражается при этом как  $n_0 = N - n$ , где  $n = \sum_{q > 0} n_q$  — число частиц на возбужденных уровнях. Каждое микросостояние системы  $\{n_q\}$  с полной энергией  $H(\{n_q\}) = \sum_{q > 0} \epsilon_q n_q$  реализуется с весом  $e^{-H/T}$ . Значит, вероятность  $\rho_n$  обнаружить вне конденсата ровно  $n$  частиц (и, соответственно,  $n_0 = N - n$  частиц в конденсате) может быть представлена в виде [55–57]:

$$\rho_n = \theta(N - n) \sum_{\{n_q\}=n} e^{-H(\{n_q\})/T} / \sum_{\{n_q\} \leq N} e^{-H(\{n_q\})/T}. \quad (1.4)$$

Здесь и далее индекс  $\{n_q\} = n$  под суммой означает суммирование по всем состояниям  $\{n_q\} : \sum_{q > 0} n_q = n$ , а индекс  $\{n_q\} \leq N$  — суммирование по

всем возможным для ловушки с  $N$  бозонами состояниям  $\{n_q\}$ , для которых  $\sum_{q>0} n_q \leq N$ .

Выражение (1.4) можно интерпретировать как „обрезку“ некоего распределения  $\rho_n^{(\infty)}$ :

$$\rho_n = \frac{\rho_n^{(\infty)} \theta(N - n)}{P(N)}, \quad P(N) \equiv \sum_{n=0}^N \rho_n^{(\infty)}, \quad (1.5)$$

где „необрезанное“ вспомогательное распределение  $\rho_n^{(\infty)}$  имеет вид:

$$\rho_n^{(\infty)} = \sum_{\{n_q\}=n} e^{-H(\{n_q\})/T} / \sum_{\{n_q\}} e^{-H(\{n_q\})/T}, \quad (1.6)$$

и индекс суммирования  $\{n_q\}$  обозначает сумму по всем наборам  $\{n_q\}$  без ограничений. По своему определению вспомогательное „необрезанное“ распределение является решением задачи о количестве надконденсатных частиц  $n$  в системе невзаимодействующих бозонов с неограниченными флуктуациями, описываемой большим каноническим ансамблем с нулевым химическим потенциалом. Так как распределение  $\rho_n^{(\infty)}$  описывает распределение независимых случайных величин  $n_q$ , оно может быть явно вычислено в виде преобразования Фурье от характеристической функции [37, 104]:

$$\rho_n^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-iun} \Theta^{(n)}(u) du, \quad \Theta^{(n)}(u) = \prod_{q>0} \frac{e^{\alpha\lambda_q} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - e^{iu}}. \quad (1.7)$$

Выражения (1.5) и (1.7) совместно с условием  $n + n_0 = N$  дают точное аналитическое решение задачи о населенности конденсата и надконденсата. Распределение  $\rho_{n_0}$  числа атомов на основном уровне  $n_0$  при этом является зеркальным к распределению  $\rho_n$ , т. е.  $\rho_{n_0}(n_0) = \rho_n(N - n_0)$ .

Легко интерпретировать связь исходной и данной вспомогательной задачи при помощи „обрезки“. Во-первых, в задаче с  $N$  бозонами в ловушке могут реализовываться только микросостояния, содержащие не более  $N$  частиц вне конденсата. Во-вторых, статистический вес состояния, возможного

в исходной задаче, в точности совпадает с весом такого же состояния в задаче с неограниченными флуктуациями. Иными словами, мы приписываем вес каждому микросостоянию вспомогательной задачи, а затем при помощи „обрезки“ оставляем в рассмотрении только те из них, которые могут реализоваться в ловушке с  $N$  частицами.

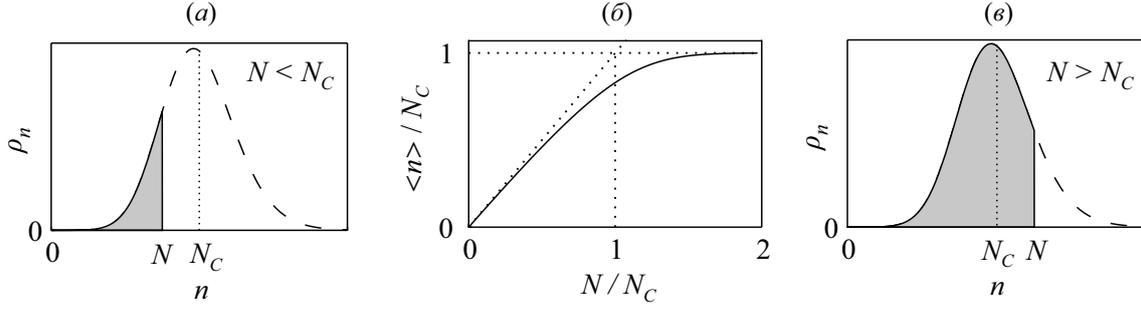


Рис. 1.1: Иллюстрация решения (1.5), использующего „обрезающую связь“. Пунктирной кривой изображено  $\rho_n^{(\infty)}$  — так называемое „необрезанное“ распределение полного числа надконденсатных частиц, характеризующееся математическим ожиданием  $N_c$  и дисперсией  $\sigma^2$ . Сплошной линией изображено распределение полного числа надконденсатных частиц  $\rho_n$  в мезоскопической ловушке, удерживающей ровно  $N$  атомов. Для наглядности распределения не нормированы. Случай (а)  $N < N_c$  отвечает неконденсированному состоянию, случай (в)  $N > N_c$  отвечает развитому бозе-конденсату. Поведение ожидаемого полного числа частиц  $\langle n \rangle$  на всех возбужденных уровнях (т. е. уровнях выше основного) показано на графике (б).

„Необрезанное“ распределение  $\rho_n^{(\infty)}$  имеет математическое ожидание  $N_c$  (также называемое критическим числом частиц) и дисперсию  $\sigma^2$ , величины которых зависят от параметров ловушки и температуры и легко вычисляются явно (например так, как описано ниже после формулы (1.13)):

$$N_c = \sum_{q>0} \frac{1}{e^{\alpha\lambda_q} - 1}, \quad \sigma^2 = \sum_{q>0} \left( \frac{1}{(e^{\alpha\lambda_q} - 1)^2} + \frac{1}{e^{\alpha\lambda_q} - 1} \right). \quad (1.8)$$

Системам, в которых ярко выражен фазовый переход бозе-конденсации,

отвечают распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  с хорошо различимым максимумом, для чего должно выполняться неравенство  $N_c \gg \sigma$ . При этом фазу бозе-системы задают совместно параметры  $N_c$ ,  $\sigma$  и полное число частиц в ловушке  $N$ .

Действительно, рассмотрим такую систему, где одночастичный энергетический спектр и температура фиксированы (т. е. фиксировано „необрезанное“ распределение вероятностей), а полное число бозонов в ловушке  $N$  является варьируемым параметром (рис. 1.1). В случае, если  $N \ll N_c$ , увеличение числа частиц в ловушке ведет к заметному увеличению числа частиц вне конденсата, иными словами, „добавленная“ частица занимает возбужденный энергетический уровень. Такое поведение системы является классическим и соответствует температурам значительно выше критической,  $T \gg T_c$ . Если же выполнено неравенство  $N \gg N_c$ , то дальнейшее увеличение числа частиц не приведет в осязательном увеличении ожидаемого числа надконденсатных бозонов, поскольку основной вклад в величину математического ожидания дает „горб“ распределения. Другими словами, каждая следующая „добавленная“ частица увеличивает населенность самого нижнего уровня, и число бозонов на нем оказывается много большим, чем число частиц вне конденсата. Такая ситуация соответствует развитому конденсату Бозе-Эйнштейна в системе при температуре ниже критической,  $T \ll T_c$ . Критической области  $T \sim T_c$ , в которой и происходит перестройка системы из одной фазы в другую, соответствуют числа бозонов в ловушке  $N \sim N_c$ . Критическая температура мезоскопической системы  $T_c$  определяется равенством  $N = N_c(T_c)$ . (Для вычисления критической температуры в термодинамическом пределе  $N_c(T)$  аппроксимируют интегралом по  $q$ .)

Естественно, такая трактовка бозе-конденсации аналогична привычной интерпретации с неизменным числом частиц  $N$  и варьируемой температурой  $T$  — в последнем случае неизменно положение „обрезки“, осуществляемой ступенчатой функцией  $\theta(N - n)$ , но с уменьшением температуры  $T$  движется

в сторону меньших  $N_c$  горб „необрезанного“ распределения.

Рассматриваемый механизм „обрезающей связи“ позволяет определить статистическую сумму

$$Z^{(N)} = \sum_{\{n_q\} \leq N} e^{-H(\{n_q\})/T}, \quad (1.9)$$

с помощью которой могут быть вычислены любые термодинамические параметры. В частности, для энергии Гиббса  $F$ , средней энергии  $E$ , энтропии  $S$  и теплоемкости  $C_V$  имеем:

$$F = -T \ln Z, \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial(1/T)} = F + TS, \quad C_V = \frac{\partial E}{\partial T}. \quad (1.10)$$

Действительно, статистическая сумма после простых вычислений преобразуется к виду

$$Z^{(N)} \equiv Z^{(\infty)} \frac{Z^{(N)}}{Z^{(\infty)}} = Z^{(\infty)} \frac{\sum_{\{n_q\} \leq N} e^{-H(\{n_q\})/T}}{\sum_{\{n_q\}} e^{-H(\{n_q\})/T}} = Z^{(\infty)} P(N), \quad (1.11)$$

содержащему два множителя. Первый из них,  $Z^{(\infty)}$ , соответствует задаче с неограниченным количеством бозонов (большой канонический ансамбль):

$$Z^{(\infty)} \equiv \sum_{\{n_q\}} e^{-H(\{n_q\})/T} = \prod_{q>0} \frac{1}{1 - e^{-\alpha \lambda_q}}. \quad (1.12)$$

Второй множитель, специфичный именно для мезоскопической системы, представляет интегральная функция распределения количества надконденсатных частиц в „необрезанной“ задаче, уже встречавшаяся в выражении (1.5):  $P(N) = \sum_{n=0}^N \rho_n^{(\infty)}$ . Таким образом, поведение термодинамических характеристик мезоскопической системы связано с функцией распределения числа атомов системы вне нулевого уровня во вспомогательной задаче.

Полученное точное решение для статистики и термодинамики можно рассматривать также как строгое обоснование приближения эвристической модели ансамбля „демона Максвелла“ [35, 37] для фазы развитого конденсата при  $T \ll T_c$ , позволяющее указать область применимости этого приближения. В его рамках „обрезка“ происходит далеко на спадающем правом крыле

распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  и не существенна, т. е. статистика описывается распределением  $\rho_n^{(\infty)}$ , а термодинамика — статистической суммой  $Z^{(\infty)}$ .

## 1.2. Кумулянтный анализ статистического распределения полного числа частиц вне конденсата

Эффективным способом исследования „необрезанного“ распределения  $\rho_n^{(\infty)}$ , во многом определяющего статистические и термодинамические свойства мезоскопической системы, является широко применяемый в статистической радиофизике анализ кумулянтов [105, 106], то есть коэффициентов  $\kappa_m^{(n)(\infty)}$  в разложении логарифма характеристической функции  $\ln \Theta^{(n)}(u)$  по степеням  $iu$  при малых абсолютных значениях аргумента:

$$\kappa_m^{(n)(\infty)} = \left. \frac{\partial \ln \Theta^{(n)}(u)}{\partial (iu)^m} \right|_{u=0}. \quad (1.13)$$

Кумулянты, определяемые характеристической функцией  $\Theta^{(n)}(u)$ , тесно связаны с моментными характеристиками распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  [107]. В частности, для математического ожидания  $N_c$  и дисперсии  $\sigma^2$  такая связь принимает вид  $N_c = \kappa_1^{(n)(\infty)}$  и  $\sigma^2 = \kappa_2^{(n)(\infty)}$  (что и является одним из способов получения выражений (1.8)).

При описании систем с большим числом атомов  $N \gg 1$ , вызывающих наибольший интерес и характеризующихся в области фазового перехода малыми  $\alpha$ , было бы удобно иметь для кумулянтов выражение в виде ряда по этому малому параметру. Подобное разложение можно получить, преобразовав логарифм известной характеристической функции (1.7)  $\Theta^{(n)}(u)$  с помощью интегрального представления экспоненты, порождаемого преобразованием Меллина:

$$e^{-a} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\tau-i\infty}^{\tau+i\infty} a^{-t} \Gamma(t) dt, \quad a > 0. \quad (1.14)$$

Здесь  $\Gamma(t)$  является гамма-функцией, а постоянная  $\tau > 0$  определяет путь интегрирования, оставляющий слева все полюса подынтегрального выражения.

Раскладывая в ряд Тейлора  $\ln \Theta^{(n)}(u)$  при  $u \simeq 0$ ,

$$\begin{aligned} \ln \Theta^{(n)}(u) &= \sum_{q>0} (\ln(1 - e^{-\alpha\lambda_q}) - \ln(1 - e^{-\alpha\lambda_q + iu})) \\ &= \sum_{q>0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\alpha\lambda_q m + ium} - e^{-\alpha\lambda_q m}}{m}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

и применяя представление (1.14), получаем

$$\ln \Theta^{(n)}(u) = \sum_{q>0} \sum_{m=1}^{\infty} \int_{\tau-i\infty}^{\tau+i\infty} \frac{(\alpha\lambda_q - iu)^{-t} - (\alpha\lambda_q)^{-t}}{2\pi i m^{t+1}} \Gamma(t) dt, \quad (1.16)$$

где можно достигнуть абсолютной сходимости обеих сумм и интеграла, выбрав значение  $\tau$  левее всех полюсов подынтегрального выражения. Последнее позволяет изменить порядок выполнения операций и получить следующее интегральное представление:

$$\ln \Theta^{(n)}(u) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\tau-i\infty}^{\tau+i\infty} \alpha^{-t} \zeta(t+1) \Gamma(t) \left( \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - \frac{i u}{\alpha})^t} - \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^t} \right) dt; \quad (1.17)$$

обозначение  $\zeta(t)$  введено для дзета-функцию Римана,  $\zeta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^t}$ . Обратим внимание, что до настоящего момента условие  $\alpha \ll 1$  ни на каком этапе задействовано не было.

Дополнив контур интегрирования до замкнутого дугой большого радиуса в левой полуплоскости  $\text{Im } t < \tau$ , можно вычислить интеграл по всей замкнутой кривой как сумму всех оказавшихся внутри нее вычетов. При этом если величина  $\alpha$  мала, то пренебрежимо малым является и интеграл по замыкающей дуге, и значение всего контурного интеграла совпадает со значением интеграла по прямой  $\text{Re } t = \tau$  в (1.17). Отметим, что малость  $\alpha$  здесь предполагает не переход к пределу  $\alpha \rightarrow 0$ , а то, что  $\alpha$  должно быть меньше некой

константы, определенной последовательностью  $\{\lambda_q\}$  и имеющей вполне конечную величину.

Таким образом, при малых  $\alpha$  оказывается справедливым представление логарифма характеристической функции в виде

$$\ln \Theta^{(n)}(u) = \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t+1) \left( S\left(t, \frac{u}{\alpha}\right) - S(t) \right), \quad (1.18)$$

где появляются так называемые простая и обобщенная функции ловушки  $S(t)$  и  $S(t, u)$ :

$$S(t) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^t}, \quad S(t, u) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - iu)^t}, \quad (1.19)$$

несущие информацию о безразмерном энергетическом спектре системы  $\{\lambda_q\}$  (здесь  $\Gamma(t)$  является гамма-функцией). Суммирование в (1.18) ведется по всем полюсам выражения, которые порождаются дзета-функцией Римана (при  $t \rightarrow 1$  справедливо  $\zeta(t) = \frac{1}{t-1} + \gamma + \dots$ , где  $\gamma \simeq 0.577$  — константа Эйлера) и функциями ловушки  $S(t)$  и  $S(t, u)$ . Для описания поведения последних — в том числе конструирования аналитического продолжения, поиска полюсов, вычетов, рядов Тейлора и Лорана, вычисления значений в конкретных точках — существуют регулярные методы, в достаточной мере изложенные в Приложении А. Здесь же упомянем только то обстоятельство, что самый правый полюс  $t = r$  функции  $S(t)$ , играющий важную роль во всем последующем анализе, совпадает с границей расходимости ряда в (1.19) и потому связан с асимптотическим законом роста энергий. Так, для частного случая спектра со степенной асимптотикой  $\lambda \sim q_1^{\nu_1} + \dots + q_d^{\nu_d}$  справедливо соотношение  $r = \frac{1}{\nu_1} + \dots + \frac{1}{\nu_d}$ .

Значение  $r$  в общем случае отличается на единицу от показателя степенной аппроксимации зависимости плотности состояний от энергии:  $g(E) \sim E^{r-1}$  при  $E < T$ .

Следует отметить, что интегральное представление, подобное (1.17), было

получено близким к описанному способом в [37] для производящей функции распределения  $\rho_n^{(\infty)}$ , с точностью до нормировки совпадающей с  $\Theta^{(n)}(u)$ , взятой от чисто мнимого аргумента  $u$ . Однако между этими представлениями имеется важное отличие: в [37] содержащие  $iu$  члены группировались в отдельный множитель, выраженный в виде полилогарифма и потому имеющий особую точку при  $u = 0$ . Рассматриваемое же здесь представление (1.17) относит  $u$  к обобщенной функции ловушки  $S(t, u)$ , что делает каждое слагаемое в сумме по полюсам (1.18) регулярным для любого значения аргумента, в том числе для  $u = 0$ . Это обстоятельство является чрезвычайно важным, так как именно оно позволяет успешно описывать распределение  $\rho_n^{(\infty)}$  в непосредственной окрестности критической точки, о чем пойдет речь в следующих разделах.

Представление для кумулянтов [57]

$$\kappa_m^{(n)(\infty)} = \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t+1-m) S(t), \quad (1.20)$$

найденное также в [37], моментально следует из (1.18) с учетом простого свойства обобщенной функции ловушки  $\frac{\partial S(t, u)}{\partial(iu)} = S(t+1, u)$ . Для значений  $\alpha \ll 1$  это представление дает желаемые разложения кумулянтов в степенные ряды (в общем случае — бесконечные) малого параметра  $\alpha$ . Самый большой по порядку  $\alpha$  член ряда соответствует самому правому полюсу разложения.

На практике для описания распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в ловушках, удерживающих большое число атомов, достаточно учесть в рядах для кумулянтов только полюса в неотрицательных точках  $t_j \geq 0$ . Получающиеся выражения оказываются достаточно компактными. Так, для трехмерной изотропной

гармонической ловушки с частотой  $\omega$  можно записать, положив  $\alpha = \frac{\hbar\omega}{T}$ :

$$\begin{aligned}
N_c = \kappa_1^{(n)(\infty)} &\simeq \frac{\zeta(3)}{\alpha^3} + \frac{\pi^2}{4\alpha^2} + \left[ \gamma - \ln \alpha - \frac{19}{24} \right] \frac{1}{\alpha} + \frac{5}{16}, \\
\sigma^2 = \kappa_2^{(n)(\infty)} &\simeq \frac{\pi^2}{6\alpha^3} + \left[ \frac{3}{2}\gamma - \frac{3}{2}\ln \alpha + \frac{5}{4} + \frac{\pi^2}{6} \right] \frac{1}{\alpha^2} - \frac{1}{2\alpha} + \frac{5}{96}, \\
\kappa_3^{(n)(\infty)} &\simeq \left[ 2\zeta(3) - \ln \alpha + \frac{\pi^2}{2} + \gamma + \frac{3}{2} \right] \frac{1}{\alpha^3} - \frac{3}{4\alpha^2} - \frac{1}{12\alpha}, \\
\kappa_{m \geq 4}^{(n)(\infty)} &\simeq \frac{S(m)}{\alpha^m} + \frac{\zeta(4-m)}{\alpha^3} + \frac{3\zeta(3-m)}{2\alpha^2} + \frac{\zeta(2-m)}{\alpha};
\end{aligned} \tag{1.21}$$

для трехмерной изотропной ловушки-ящика со стороной  $L$  и периодическими граничными условиями ( $\alpha = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ ) имеем:

$$\begin{aligned}
N_c = \kappa_1^{(n)(\infty)} &= \frac{\pi^{3/2}}{8} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \alpha^{-3/2} + S(1)\alpha^{-1} + \frac{1}{2}, \\
\sigma^2 = \kappa_2^{(n)(\infty)} &= S(2)\alpha^{-2} + \frac{\pi^{3/2}}{8} \zeta(1/2)\alpha^{-3/2} + \frac{1}{12} \\
\kappa_{m \geq 3}^{(n)(\infty)} &\simeq S(m)\alpha^{-m} + \frac{\pi^{3/2}}{8} \zeta\left(\frac{5}{2} - m\right) \alpha^{-3/2} - \zeta(1-m).
\end{aligned} \tag{1.22}$$

Эти выражения хорошо работают начиная уже со сравнительно небольших размеров системы, когда критическое число частиц имеет порядок  $N_c \sim 10^2$ .

Итак, с помощью представления (1.20) кумулянты можно вычислять сравнительно простым образом, получая и используя аналогичные (1.21, 1.22) формулы. Принимая во внимание тот факт, что первые  $m$  моментов выражаются только через  $m$  первых кумулянт, можно предложить регулярный метод построения аппроксимации настоящего мезоскопического „необрезанного“ распределения  $\rho_n^{(\infty)}$ , копирующей основные его интегральные характеристики. Для этого рассмотрим модельную систему с всего лишь тремя различными вырожденными энергетическими уровнями [55], для которой распределение числа частиц вне конденсата находится явно в терминах гипергео-

метрической функции  $M(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)\Gamma(a)} \int_0^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt$  [107, 108]:

$$\begin{aligned} \rho_n^{(\infty)(3-lv)} = & \frac{\left(\alpha\Lambda_1^{(3-lv)}\right)^{g_1^{(3-lv)}} \left(\alpha\Lambda_2^{(3-lv)}\right)^{g_2^{(3-lv)}} (n + \delta N + g_1^{(3-lv)} + g_2^{(3-lv)} - 2) g_1^{(3-lv) + g_2^{(3-lv)} - 1}}{\Gamma(g_1^{(3-lv)} + g_2^{(3-lv)}) \exp\left(\alpha\Lambda_2^{(3-lv)}(n + \delta N + g_1^{(3-lv)} + g_1^{(3-lv)} - 2)\right)} \\ & \times M\left(g_1^{(3-lv)}, g_1^{(3-lv)} + g_2^{(3-lv)}, n + \delta N + g_1^{(3-lv)} + g_2^{(3-lv)} - 2\right) \end{aligned} \quad (1.23)$$

(параметр  $\delta N$  введен в модель дополнительно и позволяет сдвигать распределение как целое). Здесь безразмерные энергии возбужденных уровней обозначены как  $\Lambda_1^{(3-lv)}$  и  $\Lambda_2^{(3-lv)}$  с кратностями вырождения  $g_1^{(3-lv)}$  и  $g_2^{(3-lv)}$ . Кумулянты этого „необрезанного“ распределения вычисляются в явном виде:

$$\begin{aligned} \kappa_1^{(3-lv)} &= \frac{g_1^{(3-lv)}}{\alpha\Lambda_1^{(3-lv)}} + \frac{g_2^{(3-lv)}}{\alpha\Lambda_2^{(3-lv)}} - \delta N - g_1^{(3-lv)} - g_2^{(3-lv)} + 2; \\ \kappa_{m \geq 2}^{(3-lv)} &= \Gamma(m) \left( \frac{g_1^{(3-lv)}}{(\alpha\Lambda_1^{(3-lv)})^m} + \frac{g_2^{(3-lv)}}{(\alpha\Lambda_2^{(3-lv)})^m} \right). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Выбором значений  $\delta N$ ,  $\Lambda_1^{(3-lv)}$ ,  $g_1^{(3-lv)}$  и  $\Lambda_2^{(3-lv)}$ ,  $g_2^{(3-lv)}$  можно попытаться добиться того, что модельное распределение точно опишет пять первых кумулянтов (а значит, пять первых моментов) распределения  $\rho_n^{(\infty)}$ .

Поиск желаемых параметров модельной ловушки при известных величинах кумулянтов  $\kappa_1^{(n)(\infty)} - \kappa_5^{(n)(\infty)}$  в аппроксимируемой системе удастся свести к решению квадратного уравнения, существующему по меньшей мере в пределе малых  $\alpha$  [58]:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\kappa_3^{(n)(\infty)} \alpha\Lambda_{1,2}^{(3-lv)}}{\Gamma(3)} - \frac{\kappa_2^{(n)(\infty)}}{\Gamma(2)} \right] \left[ \frac{\kappa_5^{(n)(\infty)} \alpha\Lambda_{1,2}^{(3-lv)}}{\Gamma(5)} - \frac{\kappa_4^{(n)(\infty)}}{\Gamma(4)} \right] &= \left[ \frac{\kappa_4^{(n)(\infty)} \alpha\Lambda_{1,2}^{(3-lv)}}{\Gamma(4)} - \frac{\kappa_3^{(n)(\infty)}}{\Gamma(3)} \right]^2, \\ g_{1,2}^{(3-lv)} &= (\alpha\Lambda_{2,1}^{(3-lv)})^{-2} \left( \frac{\kappa_3^{(n)(\infty)}}{\Gamma(3)} - \frac{\kappa_2^{(n)(\infty)}}{\Gamma(2)(\alpha\Lambda_{1,2})} \right) \left( \frac{1}{\alpha\Lambda_{2,1}^{(3-lv)}} - \frac{1}{\alpha\Lambda_{1,2}^{(3-lv)}} \right)^{-1}, \\ \delta N &= \frac{g_1^{(3-lv)}}{\alpha\Lambda_1^{(3-lv)}} + \frac{g_2^{(3-lv)}}{\alpha\Lambda_2^{(3-lv)}} - N_c - g_1^{(3-lv)} - g_2^{(3-lv)} + 2. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Полученное модельное распределение трехуровневой ловушки (1.23), параметры которого находятся согласно (1.25), оказывается хорошей аппроксимацией распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в окрестности его максимума, допускающей неточности только в кумулянтах 6-го порядка и выше.

### 1.3. Выводы

Таким образом, для заключенного в мезоскопическую ловушку произвольной формы и размеров идеального газа, рассматриваемого в рамках канонического ансамбля, существует исчерпывающее аналитическое решение задачи о бозе-эйнштейновской конденсации, которое естественным образом учитывает фиксированность полного числа частиц в системе и связанный с этим условием неаналитичный множитель в равновесной матрице плотности.

Точная статистика флуктуаций числа частиц в конденсате и статистическая сумма системы выражаются через решение вспомогательной задачи о статистике населённости надконденсата в той же ловушке, но с независимыми и неограниченными числами заполнения уровней. Вспомогательная задача, описываемая большим каноническим ансамблем с нулевым химическим потенциалом, решается аналитически методом характеристической функции. Затем совершается переход обратно к исходной системе, реализующийся с помощью так называемого механизма „обрезающей связи“, который вносит явную неаналитичность в характеризующие канонический ансамбль статистические распределения. При этом получается, что фазовое состояние системы определяется полным числом частиц в ловушке и величинами математического ожидания и дисперсии статистики надконденсата во вспомогательной задаче, зависящими от формы и размеров ловушки, температуры и прочих физических параметров.

Свойства мезоскопической системы в критической области параметров во многом определяются поведением вспомогательного распределения в окрест-

ности его максимума. Для детального описания этого поведения было получено оригинальное представление (1.18) логарифма характеристической функции полного числа частиц вне основного уровня в виде суммы по полюсам комбинации спектральных дзета-функций, ассоциированных с безразмерным спектром ловушки; при этом каждое его слагаемое является аналитичным во всей области параметров, включая малые аргументы. Данная техника, развитая для анализа характеристической функции, позволяет успешно описывать непосредственную окрестность критической точки бозе-газа, разделяя влияния геометрической формы ловушки и размера ловушки на свойства системы.

## ГЛАВА 2. СТАТИСТИКА НАСЕЛЕННОСТИ КОНДЕНСАТА В МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ. КЛАССЫ УНИВЕРСАЛЬНОСТИ

В данной главе для бозе-системы, включающей достаточно большое число атомов в ловушке произвольной формы, в критической области параметров изучаются статистические распределения числа частиц в основном состоянии и полного числа частиц на возбужденных уровнях. В результате исследования, проводимого с использованием методов и представлений статистической радиофизики [105, 106], а именно аппарата характеристической функции и кумулянтного анализа, удается показать, что статистика системы имеет автомодельный характер, определяемый исключительно геометрическими особенностями ловушки. Установлены также свойства двух возможных классов универсальности подобных бозе-систем, характеризующихся гауссовыми и существенно негауссовыми флуктуациями.

Результаты главы опубликованы в работах [57–59, 98–101].

### 2.1. Автомодельный скейлинг статистики в окрестности критической точки. Гауссов и аномальный классы универсальности

Поведение статистических и термодинамических характеристик системы, описываемых для канонического ансамбля с использованием выражений (1.5) и (1.11), в значительной мере определяется решением вспомогательной задачи

о статистике полного числа надконденсатных частиц  $\rho_n^{(\infty)}$  в рамках большого канонического ансамбля с нулевым химическим потенциалом при помощи так называемого метода „обрезающей связи“. Сказанное означает, что задача описания системы в критической области параметров по существу сводится к анализу вспомогательного необрезанного распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в окрестности его максимума, где  $|n - N_c| \lesssim \sigma$ . При этом вместо случайных величин  $n$ ,  $n_0$  и полного числа частиц в системе  $N$  удобно ввести масштабированные аргументы:

$$x = \frac{n - N_c}{\sigma}, \quad x_0 = \frac{n_0}{\sigma}, \quad \eta = \frac{N - N_c}{\sigma}, \quad (2.1)$$

определенные через характерные параметры системы — критическое число частиц  $N_c$  и стандартное отклонение  $\sigma$ . Новая случайная величина  $x$ , соответствующая полному числу частиц вне основного уровня, имеет нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию. Переменная  $\eta$ , являющаяся масштабированным полным числом частиц в системе, определяет фазу бозе-газа: согласно механизму „обрезающей связи“, (1.5), положительные значения  $\eta > 0$  соответствует развивающейся конденсированной фазе, а отрицательные значения  $\eta < 0$  — развивающейся классической. При этом случаи развитых фаз, т. е. состояния системы вдали от критической точки, описываются значениями аргумента  $|\eta| \gtrsim \frac{N_c}{\sigma}$ . Случайная величина  $x_0$ , соответствующая числу атомов на основном уровне (т.е. в бозе-конденсате), жестко связана со случайной величиной  $x$  соотношением  $x + x_0 = \eta$ , в которое превратилось условие  $n_0 + n = N$ .

Распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  и  $\rho_x$ , описывающие „необрезанную“ вспомогательную задачу и случай канонического ансамбля в терминах масштабированных переменных (2.1), по-прежнему оказываются связанными применением „обрезки“ и последующим восстановлением нормировки:

$$\rho_x = \frac{\rho_x^{(\infty)} \theta(\eta - x)}{P(\eta)}, \quad \rho_{x_0} = \rho_x(\eta - x_0), \quad P(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} \rho_x^{(\infty)} dx. \quad (2.2)$$

Ступенчатая функция  $\theta(\eta - x)$  соответствует условию фиксированности полного числа частиц в рассматриваемой задаче, принимающему вид  $x \leq \eta$ . При вычислении интегрального распределения  $P$  здесь были сделаны два приближения, вполне обоснованных для наиболее интересного случая достаточно крупных систем с  $N_c \gg 1$  и  $N \gg 1$ . Во-первых, сумма по реализациям  $x = \frac{n-N_c}{\sigma}$  с целыми  $n$  была аппроксимирована интегралом, так как  $\sigma \gg 1$  и расстояние между соседними отсчетами  $x$ , равное  $\frac{1}{\sigma}$ , оказывается много меньше единицы — характерного масштаба распределения  $\rho_x^{(\infty)}$ . Во-вторых, нижний предел указанного интеграла заменен бесконечным, так как функция  $\rho_x^{(\infty)}$  быстро спадает при увеличении абсолютной величины аргумента (предполагается, что „горб“  $\rho_x^{(\infty)}$  хорошо выражен, т.е.  $N_c \gg \sigma$ ) и хвосты этого распределения при  $|x| \sim \frac{N_c}{\sigma}$  дают пренебрежимо малый вклад в  $P(\eta)$ .

Использованное масштабирование (2.1) обнаруживает важное свойство автомодельности в окрестности критической точки [55, 57]: с увеличением размера системы распределение  $\rho_x^{(\infty)}$  масштабированной случайной величины  $x$  быстро сходится к неким универсальным функциям, которые определяются лишь безразмерным одночастичным энергетическим спектром  $\{\lambda_q\}$  (т. е. геометрическими свойствами ловушки) и не зависят от каких-либо размерных параметров системы. Иллюстрирует эту сходимость для частного примера ловушки рис. 2.1. Автомодельность наследуется как статистическими распределениями  $P(\eta)$ ,  $\rho_x$  и  $\rho_{x_0}$  (что моментально следует из (2.2)), так и термодинамическими характеристиками системы (чему посвящена глава 3).

Аналитически обосновать указанное свойство можно с помощью анализа кумулянтов  $\kappa_m^{(n)(\infty)}$ , наглядно характеризующих статистику  $\rho_n^{(\infty)}$  в широкой окрестности максимума и описывающихся представлением (1.20). Имея в виду то, что наибольший интерес вызывают системы с большим числом удерживаемых атомов  $N \gg 1$ , рассмотрим поведение этих кумулянтов в пределе  $\alpha \ll 1$ , сохраняя в представлении (1.20) только самое крупное слагаемое.

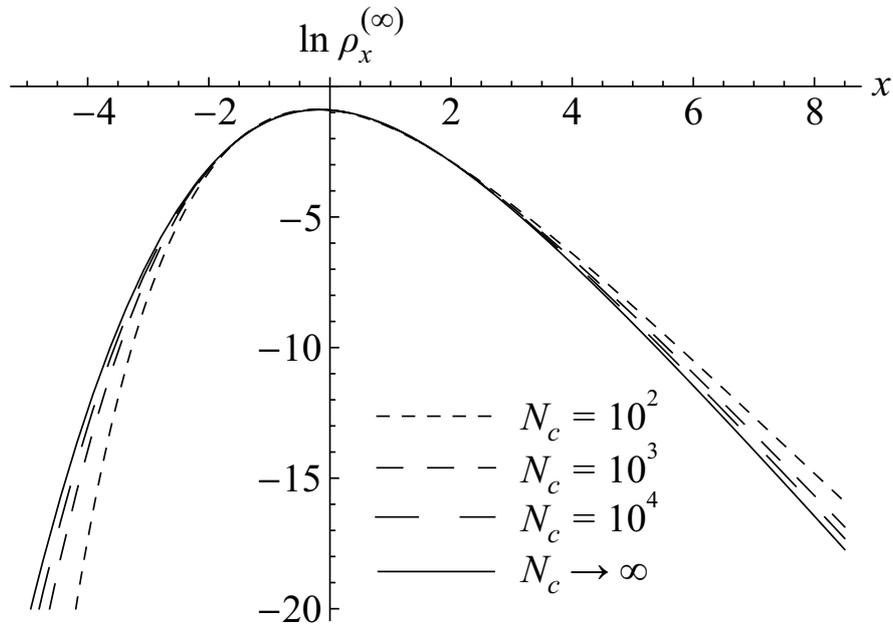


Рис. 2.1: „Необрезанное“ распределение  $\rho_x^{(\infty)}$  случайной величины  $x$  — масштабированного полного числа частиц вне конденсата (2.1) — для трехмерной изотропной ловушки-ящика с периодическими граничными условиями. Пунктирные кривые, соответствующие разным размерам системы ( $N_c = 10^2$  для коротких,  $N_c = 10^3$  для средних и  $N_c = 10^4$  для длинных интервалов) стремятся с увеличением  $N_c$  к предельному распределению (сплошная линия), вычисленному согласно формулам (2.8) и (2.14). Мезоскопические распределения получены в результате численного счета, опирающегося на рекуррентные соотношения для статистической суммы [50, 51].

Вводя обозначения  $r$  и  $R$  для положения и вычета самого правого полюса функции ловушки  $S(t) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^t}$ , получим:

$$\kappa_m^{(n)(\infty)} = \begin{cases} \zeta(r+1-m)R\alpha^{-r}, & r > m; \\ R\alpha^{-r} \ln \alpha^{-1}, & r = m; \\ S(m)\alpha^{-m}, & r < m. \end{cases} \quad (2.3)$$

Порядок величины кумулянта, таким образом, зависит от его номера  $m$  и особенностей удерживающего потенциала, определяющих величину  $r$ . (В негрубом случае  $r \simeq m$  вклады двух самых правых полюсов сопоставимы, и учитывать необходимо каждый из них.)

В частности, из (2.3) следует, что совпадающее с первым кумулянтом критическое число  $N_c$  для абсолютного большинства ловушек в пределе больших систем имеет вид:

$$N_c = \zeta(r)R\alpha^{-r}. \quad (2.4)$$

(Из анализа здесь и далее исключены одномерные ловушки с быстрорастущими собственными энергиями, в которых может достигаться неравенство  $r < 1$ , соответствующее оценке  $N_c \sim \sigma \sim \alpha^{-1}$ ; в подобных ловушках фазовый переход бозе-эйнштейновской конденсации ярко не проявляется. В то же время, для всех двумерных и трехмерных ловушек заведомо выполнено неравенство  $r \geq 1$ .) Для дисперсии распределения реализуется один из следующих сценариев:

$$\sigma^2 = \begin{cases} \zeta(r-1)R\alpha^{-r}, & r > 2; \\ R\alpha^{-2} \ln \alpha^{-1}, & r = 2; \\ S(2)\alpha^{-2}, & r < 2. \end{cases} \quad (2.5)$$

При описываемом формулой (2.1) переходе от случайной величины  $n$  к переменной  $x$  кумулянты распределений испытывают следующее масштаби-

рование:

$$\kappa_1^{(x)(\infty)} = 0, \quad \kappa_2^{(x)(\infty)} = 1, \quad \kappa_{m \geq 3}^{(x)(\infty)} = \frac{\kappa_{m \geq 3}^{(n)(\infty)}}{\sigma^m}. \quad (2.6)$$

Для старших кумулянтов с номерами  $m \geq 3$  результат этого преобразования нетривиален и зависит от того, какое из выражений в (2.5) определяет величину дисперсии.

Если  $r > 2$ , то есть собственные значения  $\lambda_q$  растут медленно настолько, что сумма  $\sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^2}$  расходится, то все масштабированные старшие кумулянты стремятся к нулю в пределе  $\alpha \rightarrow 0$ . Если же  $r < 2$ , то есть характер роста собственных значений  $\lambda_q$  обеспечивает сходимость суммы  $\sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^2}$ , то масштабированные кумулянты стремятся при  $\alpha \rightarrow 0$  к ненулевым константам [55, 57]:

$$\kappa_m^{(x)(\infty)} \rightarrow \begin{cases} 0, & r > 2; \\ S(m)/S^{m/2}(2), & r < 2. \end{cases} \quad (2.7)$$

Соответствующее предельное распределение выражается фурье-преобразованием

$$\rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iux} \Theta^{(x)}(u) du \quad (2.8)$$

от характеристической функции  $\Theta^{(x)}(u)$ , восстанавливаемой по предельным кумулянтам (2.7):

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\kappa_m^{(x)(\infty)}}{m!} (iu)^m. \quad (2.9)$$

Независимо от того, где расположен самый правый полюс  $r$  функции ловушки  $S(t)$ , предельные значения кумулянтов не зависят ни от каких размерных параметров системы, что и обосновывает автомодельный характер статистики системы в критической области. Предельные распределения, определенные преобразованием Фурье (2.8) от характеристической функции (2.9) с кумулянтами (2.7), являются по факту математическими специальными функциями, которые определены лишь геометрическими свойствами системы

через спектральную дзета-функцию  $S(t)$ , ассоциированную с безразмерным одночастичным энергетическим спектром  $\{\lambda_q\}$ .

Отметим, что при переходе к масштабированной переменной  $x$  естественным образом возникло разделение ловушек на два класса в зависимости от того, какой сценарий реализовывался в выражениях (2.5) и (2.7) для стандартного отклонения  $\sigma$  и предельных значений кумулянтов  $\kappa^{(x)(\infty)}$ .

Ловушки с  $r > 2$  образуют так называемый гауссов класс. Для него среднеквадратичное отклонение  $\sigma$  связано с критическим числом частиц  $N_c$  стандартным соотношением  $\sigma \sim \sqrt{N_c}$ , масштабированные старшие кумулянты исчезают в термодинамическом пределе и универсальное автомодельное статистическое распределение является гауссовым (или нормальным).

Ловушки с  $r < 2$  формируют так называемый аномальный класс. Для него среднеквадратичное отклонение  $\sigma$  имеет много большую величину  $\sigma \sim N_c^{1/r}$ , масштабированные старшие кумулянты в термодинамическом пределе являются положительными константами и универсальное автомодельное статистическое распределение имеет негауссову форму.

Пограничный случай ловушек с  $r \simeq 2$ , для которого среднеквадратичное отклонение оценивается как  $\sigma \sim \sqrt{N_c \ln N_c}$ , характеризуется в пределе больших систем гауссовой „необрезанной“ статистикой, как и в случае  $r > 2$ . Однако, масштабированные старшие кумулянты в этом случае спадают с увеличением размера системы очень медленно (логарифмическим образом, тогда как в гауссовом классе это спадание степенное). Соответственно, предельное распределение достигается только при очень больших размерах системы.

Доказательство автомодельности и описание разделения ловушек на классы можно провести и в терминах самой характеристической функции, а не порожденных ею кумулянтов (при этом, однако, все равно будут использоваться выражения (2.5) для величины среднеквадратичного отклонения  $\sigma$ ). Действительно, линейная связь случайных величин  $x$  и  $n$  порождает для ха-

рактических функций  $\Theta^{(x)}(u)$  и  $\Theta^{(n)}(u)$  простое соотношение:

$$\Theta^{(x)}(u) = \exp\left(-\frac{i u N_c}{\sigma}\right) \Theta^{(n)}\left(\frac{u}{\sigma}\right), \quad \ln \Theta^{(x)}(u) = -\frac{i u N_c}{\sigma} + \ln \Theta^{(n)}\left(\frac{u}{\sigma}\right). \quad (2.10)$$

Используя спектральные представления (1.18) и (1.20) для характеристической функции  $\Theta^{(n)}(u)$  и критического числа частиц  $N_c$ , осуществим масштабирование (2.10) и получим представление для характеристической функции масштабированной случайной величины  $x$  в виде суммы вычетов:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t+1) \left( S\left(t, \frac{u}{\alpha\sigma}\right) - S(t) - \frac{i u}{\alpha\sigma} S(t+1) \right). \quad (2.11)$$

Дзета-функция Римана обеспечивает наличие полюса в точке  $t = 0$ . Комбинация функций ловушки остается регулярной вплоть до значения  $t = r - 2$  (см. Приложение А), где находится ее самый правый полюс с вычетом  $-\frac{R}{2} \left(\frac{u}{\alpha\sigma}\right)^2$ .

С увеличением размеров системы и соответствующим уменьшением  $\alpha$  растет роль правых полюсов разложения. Подразумевая переход к термодинамическому пределу  $\alpha \rightarrow 0$ , представление (2.11) можно переписать в виде [91]

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \simeq \left( S\left(0, \frac{u}{\alpha\sigma}\right) - S(0) - i \frac{u}{\alpha\sigma} S(1) \right) - \frac{R}{2} \left(\frac{u}{\alpha\sigma}\right)^2 \zeta(r-1) \alpha^{-r+2}, \quad (2.12)$$

где сохранены только два описанных выше полюса; легко показать, что вклады всех остальных заведомо исчезнут в пределе больших систем, так как их величины пропорциональны положительным степеням  $\alpha$ . Решение вопроса о том, какое из оставшихся двух слагаемых играет определяющую роль, зависит от реализующегося при  $\alpha \rightarrow 0$  масштабирования (2.5) для среднеквадратичного отклонения  $\sigma$ .

Для ловушек гауссова класса, где  $r > 2$  и дисперсия выражается как  $\sigma^2 = R\zeta(r-1)\alpha^{-r}$ , случаю  $\alpha \ll 1$  отвечают очень малые значения аргумента  $\frac{u}{\alpha\sigma}$  при конечных  $u$ , так что предельная характеристическая функция (2.12) принимает вид

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = -\frac{u^2}{2}, \quad (2.13)$$

соответствующий гауссовому распределению масштабированного полного числа надконденсатных частиц  $x$  с нулевыми старшими кумулянтами.

Для ловушек аномального класса, где  $r < 2$  и формула (2.5) определяет соотношение  $\sigma^2 = S(2)\alpha^{-2}$ , слагаемое с дзета-функцией пропорционально  $\alpha^{2-r}$  и исчезает при  $\alpha \ll 1$ . Предельная характеристическая функция (2.12) в этом случае определяется через функции ловушки (1.19)  $S(t)$  и  $S(t, u)$  [57, 91]:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = S\left(0, \frac{u}{\sqrt{S(2)}}\right) - S(0) - i\frac{u}{\sqrt{S(2)}}S(1), \quad (2.14)$$

что соответствует аномальному классу ловушек с негауссовым распределением масштабированного полного числа надконденсатных частиц  $x$ . Легко убедиться, что его старшие кумулянты совпадают с ненулевыми константами в (2.7).

Заметим, что проведенное исследование конкуренции полюсов представляет собой наглядную иллюстрацию успешной или безуспешной попытки применения центральной предельной теоремы. Действительно, негауссовы распределения появляются тогда, когда спектральная плотность состояний растет недостаточно быстро (медленнее, чем линейно по энергии) и статистику определяет лишь небольшое число низколежащих одночастичных уровней системы. Этот случай реализуется, если энергетические уровни  $\lambda_q$  быстро растут с номером  $q$  и скоро становятся слабозаселенными. Если же вклад в статистику дают много уровней (вплоть до энергий порядка температуры), то работает центральная предельная теорема и ловушка попадает в гауссов класс.

Область автомодельности, в которой статистика близка к найденным предельным распределения, содержит при  $\alpha \ll 1$  центральную часть критической области,  $|x| \leq 5$ , и простирается дальше, вплоть до больших абсолютных значений  $|x| \leq \xi \left(\frac{N_c}{\sigma}\right)^\delta$ , где показатель  $\delta > 0$  зависит от типа ловушки, а  $\xi \sim 0.1$  является малым множителем. Для ловушек с  $r = 3/2$  (например,

трехмерных ящиков) выполняется равенство  $\delta = 1$  и ширина области автомодельности оценивается как  $|x| \ll \frac{N_c}{\sigma}$ , т.е. является неограниченно большой при  $\alpha \rightarrow 0$ . Ловушки гауссова класса характеризуются меньшими значениями  $\delta$ , однако и для них ширина области автомодельности в терминах аргумента  $x$  возрастет неограниченно в термодинамическом пределе  $\alpha \rightarrow 0$ .

Таким образом, описание статистики системы в области автомодельности, содержащей всю критическую область, строится в три этапа. На первом из них находятся параметры „необрезанного“ распределения (1.8)  $N_c$  и  $\sigma$ , определяющие автомодельные переменные  $x$  и  $\eta$ . На втором этапе по безразмерному одночастичному энергетическому спектру ловушки  $\{\lambda_q\}$  строится универсальное автомодельное распределение  $\rho_x^{(\infty)}$ , определяющее искомую статистику. На заключительном этапе применяется механизм „обрезающей связи“ (2.2) (или (1.5), если предполагается переход обратно к переменным  $n$  и  $n_0$ ).

В случае ловушек гауссова класса с  $r > 2$  второй этап тривиален — независимо от особенностей системы, предельная автомодельная статистика сводится к нормальному распределению:

$$\rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad P(\eta) = \frac{1}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \frac{\eta}{\sqrt{2}} \right), \quad \operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy. \quad (2.15)$$

В случае аномального класса  $r < 2$  предельное „необрезанное“ распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  зависит от безразмерного спектра ловушки. В том числе, как продемонстрировано на рисунке 2.2, оно может быть чувствительно к неглубоким возмущениям спектра. Описание свойств таких „аномальных“ распределений требует специального исследования, которое проведено в следующем разделе.

Отметим, что упомянутые во Введении работы [52–54] (посвященные бозе-системам как в холодной, так и в горячей фазе, но не подробному анализу критической области) содержат утверждения, которые можно считать пред-

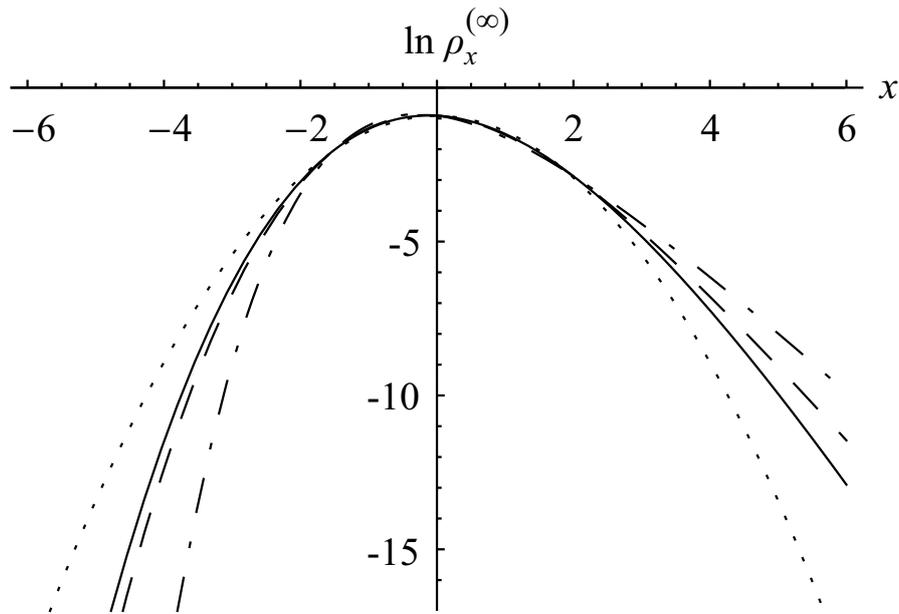


Рис. 2.2: Предельное „необрезанное“ распределение  $\rho_x^{(\infty)}$  масштабированного полного числа надконденсатных частиц (2.1)  $x$ , для ловушек гауссова класса  $r > 2$  (изображена точками) и трех ловушек негауссова класса: трехмерного изотропного ящика с периодическими граничными условиями ( $r = 3/2$ , сплошная кривая) и нулевыми граничными условиями ( $r = 3/2$ , пунктирная кривая), а также одномерной гармонической ловушки ( $r = 1$ , штрихпунктирная кривая).

вестниками обнаружения деления ловушек на классы универсальности. Так, в [52] предполагалось, что для любой ловушки в термодинамическом пределе характеристическая функция определяется лишь математическим ожиданием и дисперсией, а старшие кумулянты могут быть отброшены. В итоге, любой ловушке сопоставлялось „обрезанное“ нормальное распределение, как для описанного выше гауссового класса, при этом аномальный класс ловушек с негауссовыми распределениями оставался нераскрытым. Однако в работе [53], описывающей „свободный“ газ (на самом деле — газ в кубической ловушке-ящике с периодическими граничными условиями), старшие кумулянты, исчезающие в термодинамическом пределе, были учтены и приводили к негауссовой статистике.

Потребность в указанном специальном исследовании мотивировалась в [52] тем, что второй член разложения логарифма характеристической функции имел не предполагавшийся в этой работе вид  $(iu)^2$ , а получался в форме  $(iu)^{3/2}$ , и эта особенность связывалась с непрерывностью спектра свободного газа в термодинамическом пределе. Как понятно теперь, негауссовость распределения на самом деле связана с тем, что рассматриваемая в [53] ловушка относится к аномальному классу, для которого центральная предельная теорема неприменима. Характеристическая функция  $\Theta^{(n)}(u)$ , восстанавливаемая по формулам (2.12) и (2.10), не имеет неаналитичностей и расходимостей в точке  $u = 0$ , а упомянутый член  $(iu)^{3/2}$  определяет промежуточную асимптотику между двумя малыми масштабами  $|u| \sim 1/\sigma$  и  $|u| \sim 1/\sqrt{N_c}$  для ловушек с  $r = 3/2$  (подробнее этот факт обсуждается в следующем разделе 2.2). Так как оба масштаба в ловушке-ящике удовлетворяют неравенству  $|u| \ll 1$ , поведение характеристической функции в нуле легко принимается за неаналитическое без использования масштабирования (2.1).

Аналогичные классы статистики БЭК идеального газа в ловушке произвольной формы были независимо найдены совершенно другим методом в ра-

боте [93], ограничивающейся изучением распределений для случая развитого конденсата и не предполагающей перехода к другим фазам системы. В качестве ключевых характеристик ловушки в этой работе вводились константы  $L$  и  $a$ , такие что

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \#\{q : \lambda_q \leq \Lambda\} \Lambda^{-a} = L, \quad (2.16)$$

где символ  $\#$  означает число элементов множества. Изучалась система с фиксированным спектром  $\{\lambda_q\}$  в пределе  $N \rightarrow \infty$ , т. е. в терминах метода „обрезающей связи“ искалось „необрезанное“ распределение  $\rho_n^{(\infty)}$ . Было найдено соотношение между его дисперсией и математическим ожиданием:

$$\begin{aligned} a = 1 : \sigma &\sim N_c / \log N_c; & 1 < a < 2 : \sigma &\sim N_c^{1/a}; \\ a = 2 : \sigma &\sim \sqrt{N_c \log N_c}; & a > 2 : \sigma &\sim \sqrt{N_c}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

При этом центрированные и нормированные на дисперсию предельные распределения числа частиц в конденсате, то есть фактически  $\rho_x^{(\infty)}$ , оказываются гауссовыми в случае  $a \geq 2$  и негауссовыми в случае  $a < 2$ . Для негауссовых распределений были получены представления в виде суммы бесконечного числа экспоненциально распределенных величин. Однако поиск конечных выражений и явных асимптотик распределения на основе указанного представления остается нетривиальной задачей, для которой явные решения получены лишь в частных случаях (таких, как одномерная ловушка с дважды экспоненциальной асимптотикой при  $-x \gg 1$ ). Найденные в [93] типы статистики БЭК в точности эквивалентны описанным выше гауссовому и аномальному классам, так как характеризующий ловушку параметр  $a$ , введенный в [93], в точности совпадает с положением самого правого полюса  $r$  функции ловушки  $S(t)$ .

## 2.2. Особенности статистических распределений для систем аномального класса

Конкретная форма универсального распределения  $\rho_x^{(\infty)}$ , определяющая статистику системы с помощью механизма „обрезающей связи“ (2.2), для любых ловушек аномального класса задана преобразованием Фурье (2.8) от явно вычисляемой характеристической функции (2.14)  $\Theta^{(x)}(u)$ . Это распределение неизменно оказывается несимметричным: спадание на левом крыле  $x < 0$  происходит более резко, чем на правом, что соответствует положительному предельному значению третьего кумулянта  $\kappa_3^{(x)(\infty)}$ .

Численные построения распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  можно реализовать непосредственно с помощью формулы (2.14). Провести по ней вычисления позволяют методы, опирающиеся на преобразование Меллина и описанные в Приложении А (см. (A.13)) [91]:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = \int_0^\infty \beta^{-1} \Xi(\beta) \left( e^{\frac{i u \beta}{\sqrt{S(2)}}} - 1 - \frac{i u \beta}{\sqrt{S(2)}} \right) d\beta, \quad \Xi(\beta) = \sum_{q>0} e^{-\beta \lambda_q}. \quad (2.18)$$

При этом нетривиальным может оказаться корректный учет вклада в интеграл от окрестности нижнего предела, что связано с расходимостью функции  $\Xi(\beta)$  при  $\beta \rightarrow 0$ . Одной из возможностей разрешения этой трудности является поиск решения задачи о разложении одночастичной статистической суммы  $\Xi$  в степенной ряд при малых  $\beta$ , синонимичной задаче о поиске всех полюсов и вычетов функции  $S(t)$  (см. Приложение А).

Если же при расчете статистики необходимо избежать поиска разложения функции  $\Xi$ , то более предпочтительным способом является восстановление характеристической функции по рассчитываемым напрямую кумулянтам:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{S(m)}{m!} \left( \frac{i u}{\sqrt{S(2)}} \right)^m = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{1}{m} \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^m} \left( \frac{i u}{\sqrt{S(2)}} \right)^m. \quad (2.19)$$

Само выражение (2.19) сходится только при аргументах  $|u| < \sqrt{S(2)} \lambda_1$ , чего недостаточно для аппроксимации фурье-интеграла (2.8), однако область сходимости расширить не очень сложно.

Удобно при этом описывать спектр не последовательностью  $\{\lambda_q\}$ , которая содержит повторяющиеся элементы в случае уровней с совпадающими энергиями, а последовательностью  $\{\Lambda_k, g_k\}$ , где явно указана кратность вырождения  $g_k$  энергетических уровней  $\Lambda_k$ , значения которых не повторяются и строго возрастают. В данных обозначениях имеем:

$$S(m) = \Gamma(m) \sum_{k>0} \frac{g_k}{\Lambda_k^m}, \quad \ln \Theta^{(x)}(u) = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{1}{m} \sum_{k>0} g_k \left( \frac{i u}{\Lambda_k \sqrt{S(2)}} \right)^m. \quad (2.20)$$

Ряд по  $m$  для характеристической функции является рядом Тейлора для логарифма с отсутствующим первым членом. Выделяя логарифмические вклады от первых  $K$  уровней  $\Lambda_{k \leq K}$ , перепишем выражение (2.20) в форме:

$$\begin{aligned} \ln \Theta^{(x)}(u) &= - \sum_{k=1}^K g_k \ln \left( 1 - \frac{i u}{\sqrt{S(2)} \Lambda_k} \right) - \frac{i u}{\sqrt{S(2)}} \sum_{k=1}^K \frac{g_k}{\Lambda_k} + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\tilde{S}(m)}{m!} \frac{(i u)^m}{S^{\frac{m}{2}}(2)}, \\ \tilde{S}(m) &= \Gamma(m) \sum_{k>K} \frac{g_k}{\Lambda_k^m} \equiv \Gamma(m) \sum_{\lambda_q > \Lambda_K} \frac{1}{\lambda_q^m}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Область сходимости, описываемая здесь как  $|u| < \sqrt{S(2)} \Lambda_K$ , может быть произвольно увеличена выбором значения  $K$ . При использовании (2.21) в численных расчетах бесконечный предел в сумме по  $m$  должен быть заменен на некое конечно число  $M$ . Это соответствует тому, что первые  $M$  кумулянтов моделируются точно, а для следующих отбрасывается вклад уровней, лежащих выше  $\Lambda_K$ . Для описания центральной части области автомодельности (например,  $-5 < x < 10$  для кубических ловушек-ящиков) вполне достаточным оказывается следующий выбор параметров  $K : \frac{\Lambda_K}{\lambda_1} \sim 10$  и  $M \sim 15$ .

Отметим также, что в центральной части области автомодельности можно построить аналитическую аппроксимацию предельного распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  с

помощью трехуровневой модели (1.23), примененной ранее к описанию статистики мезоскопических систем. Выбор параметров ловушки определяется из тех же соображений, что и ранее. Отличия заключаются лишь в том, что теперь первые пять кумулянтов  $\kappa_m^{(x)(3-lvl)}$  модельной системы должны совпадать с предельными (а не мезоскопическими) значениями кумулянтов случайной величины  $x$ , равными  $\frac{S(m)}{S^{m/2}(2)}$ . При этом из свойств выпуклости  $S(t)$  следует, что добиться совпадения первых пяти кумулянтов подбором параметров модели — высоты возбужденных уровней и кратностей их вырождения — возможно всегда и ровно одним способом. Трехуровневая аппроксимация универсального распределения, как и ранее (1.23) вовлекающая гипергеометрическую функцию  $M$ , имеет следующий вид [58]:

$$\begin{aligned} \rho_x^{(\infty)} &\simeq \frac{e_1^{g_1} e_2^{g_2} X^{g_1+g_2-1}}{\Gamma(g_1+g_2) e^{e_2 X}} M[g_1, g_1+g_2, (e_2-e_1)X], \quad X = x + \frac{g_1}{e_1} + \frac{g_2}{e_2}, \\ e_{1,2} &= \frac{a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0 a_2}}{2a_0}, \quad g_{1,2} = \frac{e_{2,1}^3 (e_{1,2} k_3 - k_2)}{e_{1,2} - e_{2,1}}, \\ a_0 &= k_3 k_5 - k_4^2, \quad a_1 = k_2 k_5 - k_3 k_4, \quad a_2 = k_2 k_4 - k_3^2, \\ k_m &= \frac{S(m)}{(m-1)! S^{m/2}(2)}. \end{aligned} \tag{2.22}$$

Он вполне удовлетворительно работает в области  $-4 < x < 8$  для трехмерных ловушек-ящичков и позволяет увидеть несовпадение распределения с гауссовым законом.

Отличия от нормального распределения становятся все более наглядными по мере удаления от центра критической области  $x = 0$ . Характеризовать поведение распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  на левом и правом спадающих крыльях,  $-x \gg 1$  и  $x \gg 1$  соответственно, удобно с помощью асимптотик, методы вывода и анализ которых приведены в следующих подразделах.

### 2.2.1 Асимптотика на правом крыле распределения

Изучим поведение „необрезанного“ распределения для больших аргументов  $n > N_c$ . Если число частиц вне конденсата значительно превышает матожидание по всем возможным реализациям, то наиболее вероятно, что реализуются высокие числа заполнения на низких возбужденных уровнях. Основной вклад естественно ожидать от уровня  $\lambda_1$ .

Последующие расчеты подтверждают, что данное предположение справедливо: асимптотика распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  на правом крыле действительно определяется первым возбужденным уровнем, учет остальных приводит лишь к сдвигу аргумента и небольшой коррекции значений функции.

Начать поиск асимптотики для  $n > N_c$  удобно, совершив замену  $z = e^{iu}$  в преобразовании Фурье (1.7), определяющем функцию распределения количества надконденсатных частиц  $\rho_n^{(\infty)}$ :

$$\rho_n^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=1} \frac{1}{z^{n+1}} \prod_{q>0} \frac{e^{\alpha\lambda_q} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - z} dz. \quad (2.23)$$

Подынтегральное выражение внутри контура интегрирования  $|z| = 1$  имеет единственный полюс в точке  $z_0 = 0$ , а вне него — набор полюсов, ассоциированных с одночастичными уровнями  $\lambda_q$ ,  $q = 1, 2, \dots$  и расположенных в точках  $z_q = e^{\alpha\lambda_q}$ . Так как функция под интегралом существенно особых точек не имеет, интеграл может быть выражен через сумму вычетов во всех полюсах вне контура интегрирования. Предполагая, что наибольший вклад вносит вычет от самого близкого к основному уровню  $\lambda_1$ , запишем:

$$\rho_n^{(\infty)} = \text{Res}_{z=0} \frac{1}{z^{n+1}} \prod_{q>0} \frac{e^{\alpha\lambda_q} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - z} \simeq -\text{Res}_{z=z_1} \frac{1}{z^{n+1}} \prod_{q>0} \frac{e^{\alpha\lambda_q} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - z}. \quad (2.24)$$

Чтобы найти этот вычет и сравнить его величину с вкладами от других полюсов  $z_{q>1}$ , совершим линейную замену переменных  $\xi = \frac{e^{\alpha\lambda_1} - z}{e^{\alpha\lambda_1} - 1}$ , которая

переносит интересующий нас полюс в точку  $\xi = 0$ :

$$\rho_n^{(\infty)} \simeq \frac{e^{\alpha\lambda_1} - 1}{e^{x' - \tilde{x}'_0}} \operatorname{Res}_{\xi=0} \left( \xi^{-g_1} \exp \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\tilde{x}_l \xi^l}{l} \right). \quad (2.25)$$

Здесь  $g_1$  соответствует кратности вырождения энергетического уровня  $\lambda_1$ ,

$$\begin{aligned} x' &= \alpha\lambda_1(n - N_c), & \tilde{x}'_0 &= (e^{\alpha\lambda_1} - 1 - \alpha\lambda_1)N_c - g_1 - \alpha\lambda_1 + s'_0, \\ s'_0 &= - \sum_{\lambda > \lambda_1} \left( \frac{e^{\alpha\lambda_1} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - 1} + \ln \frac{e^{\alpha\lambda_q} - e^{\alpha\lambda_1}}{e^{\alpha\lambda_q} - 1} \right), & (2.26) \\ \tilde{x}_m &= (n + 1)(1 - e^{-\alpha\lambda_1})^m + (-1)^m \sum_{\lambda > \lambda_1} \left( \frac{e^{\alpha\lambda_1} - 1}{e^{\alpha\lambda_q} - e^{\alpha\lambda_1}} \right)^m. \end{aligned}$$

Искомый вычет, совпадающий с коэффициентом перед  $\xi^{-1}$  в ряде Лорана для функции из (2.25), может быть найден с использованием мультиномиального разложения [107]:

$$\exp \left( \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\tilde{x}_l \xi^l}{l} \right) = \sum_{p=0}^{\infty} \xi^p \sum_{m=0}^p \sum^{(m,p)} \frac{\left(\frac{\tilde{x}_1}{1}\right)^{a_1} \dots \left(\frac{\tilde{x}_p}{p}\right)^{a_p}}{a_1! \dots a_p!}, \quad (2.27)$$

где суммирование  $\sum^{(m,p)}$  ведется по всем неотрицательным целым индексам  $a_1, a_2, \dots, a_p$ , для которых выполнены два условия:  $a_1 + a_2 + \dots + a_p = m$  и  $a_1 + 2a_2 + \dots + pa_p = p$ . Таким образом, асимптотика „необрезанного“ распределения в области развитого конденсата приобретает вид:

$$\rho_n^{(\infty)} \simeq (e^{\alpha\lambda_1} - 1)e^{\tilde{x}'_0 - x'} \wp_{g_1}(\{\tilde{x}_m\}), \quad (2.28)$$

т. е. является произведением полинома степени  $p = g_1 - 1$ ,

$$\wp_{g_1}(\{\tilde{x}_m\}) = \sum_{m=0}^p \sum^{(m,p)} \frac{\left(\frac{\tilde{x}_1}{1}\right)^{a_1} \dots \left(\frac{\tilde{x}_p}{p}\right)^{a_p}}{a_1! \dots a_p!}, \quad (2.29)$$

и экспоненты  $e^{-x'} \equiv e^{-\alpha\lambda_1(n - N_c)}$ , спадающей с ростом случайной величины — числа надконденсатных частиц  $n$ .

Совершенно аналогичный анализ для произвольного полюса  $z_q$  показывает, что соответствующий ему вклад спадает как  $e^{-\alpha\lambda_q(n - N_c)}$ . Этот факт и

является обоснованием сделанного ранее предположения (2.24) о том, что при вычислении статистики в области параметров  $n > N_c$  можно пренебречь всеми полюсами, кроме порожденного уровнем  $\lambda_1$ . Однако надо иметь в виду, что применимость асимптотики определяется выполнением неравенства  $\alpha \Delta\lambda (n - N_c) \gg 1$ , где  $\Delta\lambda$  — расстояние между первыми двумя возбужденными несовпадающими уровнями. Это означает, что если в системе сразу над основным уровнем располагается группа близких возбужденных состояний, то при получении асимптотики нужно учесть вклад каждого из них. Другая возможность — заменить всю группу близких возбужденных уровней одним эффективным, повысив кратность его вырождения.

Конкретный вид полинома  $\wp_{g_1}$  легко вычисляется для конкретных значений (обычно небольших) кратности вырождения  $g_1$  уровня  $\lambda_1$ :

$$\wp_1 = 1; \quad \wp_2 = \tilde{x}_1; \quad \wp_3 = \frac{\tilde{x}_2 + \tilde{x}_1^2}{2}; \quad \dots \quad (2.30)$$

Из полученной для мезоскопической задачи асимптотики „необрезанного“ распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  числа надконденсатных частиц  $n$  легко вычленив асимптотику масштабированного предельного автомодельного распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  в области универсальности при значениях аргумента  $x \gg 1$ . Для этого достаточно переписать (2.28) для переменной  $x = \frac{n - N_c}{\sigma}$ , разложить получившиеся выражения по малому параметру  $\alpha$  и сохранить только те вклады, которые не исчезают в пределе  $\alpha \rightarrow 0$  (при этом совершается предельный переход  $\tilde{x}_m \rightarrow x_m$ ). Указанный способ дает следующий результат:

$$\rho_x \simeq \lambda_1 \sqrt{s_2} \wp_{g_1}(\{x_m\}) e^{-\lambda_1 \sqrt{s_2} x - g_1 + s'_0},$$

$$\wp_{g_1}(\{x_m\}) = \sum_{m=0}^p \sum \frac{\binom{m,p} (x_1)^{a_1} \dots (x_p)^{a_p}}{a_1! \dots a_p!}, \quad p = g_1 - 1, \quad (2.31)$$

где из всех  $x_i$ , входящих в полином  $\wp_{g_1}$ , зависимость от аргумента  $x = \frac{n - N_c}{\sigma}$

сохранилась при  $\alpha \ll 1$  только в  $x_1$ :

$$\begin{aligned} x'_0 &= s'_0 - g_1, & s'_0 &= \sum_{\lambda > \lambda_1} \left( \ln \frac{\lambda_q}{\lambda_q - \lambda_1} - \frac{\lambda_1}{\lambda_q} \right), \\ x_1 &= \lambda_1 \sqrt{S(2)} x + g_1 - \sum_{\lambda > \lambda_1} \frac{\lambda_1^2}{(\lambda_q - \lambda_1)^2}, & x_{m \geq 2} &= (-1)^m \sum_{\lambda > \lambda_1} \frac{\lambda_1^m}{(\lambda_q - \lambda_1)^m}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Для применимости асимптотики необходимо выполнение неравенства  $x > \left( \Delta \lambda \sqrt{S(2)} \right)^{-1}$ , которое следует из тех же рассуждений, что и раньше.

В частных случаях трехмерных ловушек-ящиков с периодическими либо нулевыми граничными условиями асимптотики, построенные указанным методом в разделе 4 (см. соответствующие формулы (4.4) и (4.5)), хорошо приближают распределение уже при  $x \simeq 3$ . По мере приближения самого правого полюса  $r$  функции ловушки  $S(t)$  к границе аномального класса  $r = 2$  выход на асимптотику происходит при все больших аргументах  $x > 0$ .

Для интегрального распределения найденная асимптотика позволяет показать, что выход значения функции  $P(N)$  (и ее масштабированного аналога  $P(\eta)$ ) на единицу при  $n > N_c$  происходит экспоненциально.

### 2.2.2 Асимптотика на левом крыле распределения

Ситуация, в которой обнаруженное полное число частиц на возбужденных уровнях  $n$  оказывается значительно меньше ожидаемого значения  $N_c$ , вряд ли может быть связана с флуктуацией числа частиц на каком-то выделенном уровне — отдельные числа заполнений невелики. Скорее, такую ситуацию следует приписать недобору частиц на большой группе уровней. Соответственно, асимптотика должна связываться с особенностями характеристической функции, учитывающей интегральный вклад от всех состояний системы.

Данное рассуждение математически обязано тому обстоятельству, что при

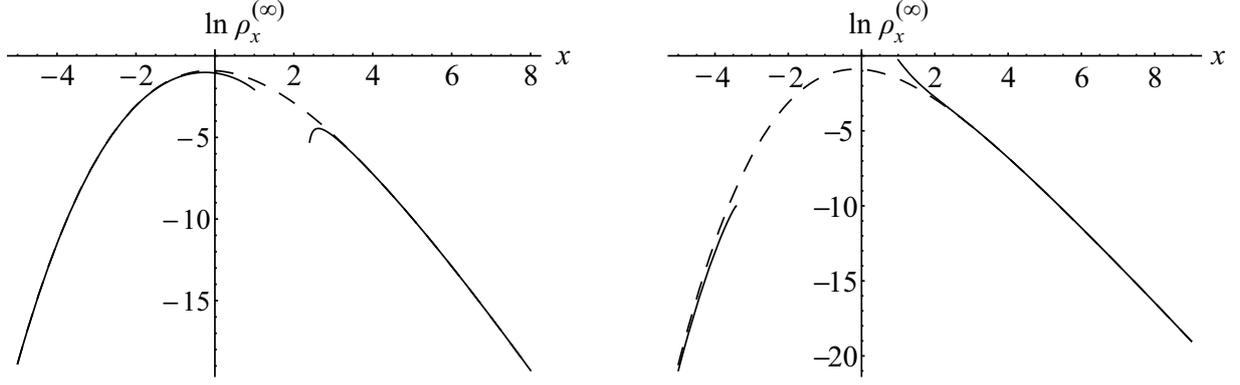


Рис. 2.3: Предельное „необрезанное“ распределение  $\rho_x^{(\infty)}$  (пунктиром) и его асимптотики на левом и правом крыле (сплошные кривые) для двух ловушек аномального класса: трехмерного изотропного ящика с периодическими (слева) и нулевыми (справа) граничными условиями. Асимптотики получены согласно (2.31), (2.34) и (2.35).

$n < N_c$  подынтегральное выражение в преобразовании Фурье (1.7) для  $\rho_n^{(\infty)}$  имеет стационарную точку. Это значит, что приблизительно вычислить интеграл можно методом перевала:

$$\rho_n^{(\infty)} \simeq \frac{\exp(-iun + \ln \Theta^{(n)}(u))}{\sqrt{-2\pi \frac{\partial^2}{\partial u^2} \ln \Theta^{(n)}(u)}} \Bigg|_{u=u_{st}}, \quad \text{где} \quad \frac{\partial}{\partial u} \ln \Theta^{(n)}(u) \Bigg|_{u=u_{st}} = in. \quad (2.33)$$

Уравнение для стационарной точки характеризуется чисто мнимым корнем.

Совершая переход к предельному автомодельному „необрезанному“ распределению  $\rho_x^{(\infty)}$ , получаем асимптотику при  $-x \gg 1$  в виде

$$\rho_x^{(\infty)} \simeq \frac{\exp(-iux + \ln \Theta^{(x)}(u))}{\sqrt{-2\pi \frac{\partial^2}{\partial u^2} \ln \Theta^{(x)}(u)}} \Bigg|_{u=u_{st}}, \quad \text{где} \quad \frac{\partial}{\partial u} \ln \Theta^{(x)}(u) \Bigg|_{u=u_{st}} = ix. \quad (2.34)$$

Стационарная точка  $u_{st}$  здесь также оказывается чисто мнимой, при этом модуль  $|u_{st}|$  неограниченно растет с ростом абсолютной величины  $x$ . Послед-

нее означает, что вычисления конкретного вида асимптотики (2.34) можно провести с использованием асимптотик характеристической функции  $\Theta^{(x)}(u)$  при больших аргументах.

Асимптотики логарифма характеристической функции  $\ln \Theta^{(x)}(u)$ , для которого известно явное выражение (2.14), можно получить с помощью методов, описанных в Приложении А. В частности формула (A.10) связывает поведение фигурирующей в (2.14) обобщенной функции ловушки  $S(t, u)$  при больших аргументах  $u$  с простой функцией ловушки  $S(t)$ , а именно, с положениями ее полюсов  $t_j$  и соответствующими вычетами  $R_{t_j}$ :

$$S(t, u) \simeq \sum_{j=1}^{\infty} R_{t_j} \Gamma(t - t_j) (-iu)^{t_j - t}, \quad \text{при } |u| \gg 1, \text{ Im } u > 0.$$

Применение данной формулы может осложнить тот факт, что ее коэффициенты содержат гамма-функции и потенциально сами могут иметь особенность. В вовлекающем  $S(0, u)$  выражении (2.14) для  $\Theta^{(x)}(u)$  такое происходит, если функция ловушки имеет полюс в точках  $t = 0$  или  $1$  (полюса в точке  $t = 2$  и выше для аномального класса быть не может). Структура (2.14) естественным образом обеспечивает регуляризацию этих особенностей, однако вклады в асимптотику  $\ln \Theta^{(x)}(u)$  от полюсов  $t = 0$  или  $1$  имеют вид, несколько отличный от остальных. Именно, при  $|u| \gg 1$  имеем:

$$\begin{aligned} \ln \Theta^{(x)}(u) &\simeq \sum_{j, t_j \neq 0, 1} R_{t_j} \Gamma(-t_j) \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right)^{t_j} - \frac{iu R_1}{\sqrt{S(2)}} \ln \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right) \\ &\quad - \frac{iu (S^{(0)}(1) - R_1 + \gamma R_1)}{\sqrt{S(2)}} - R_0 \ln \left( -\frac{iu}{\sqrt{S(2)}} \right) - R_0 \gamma - S^{(0)}(0); \\ \frac{\partial \ln \Theta^{(x)}(u)}{\partial u} &\simeq \frac{i}{\sqrt{S(2)}} \left( \sum_{j, t_j \neq 1} R_{t_j} \Gamma(1 - t_j) \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right)^{t_j - 1} \right. \\ &\quad \left. - R_1 \ln \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right) - S^{(0)}(1) - \gamma R_1 \right); \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial^2 \ln \Theta^{(x)}(u)}{\partial u^2} \simeq -\frac{1}{S(2)} \sum_j R_{t_j} \Gamma(2 - t_j) \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right)^{t_j-2}.$$

Присутствие особых полюсов  $t = 0$  или  $t = 1$  приводит к появлению логарифмических членов по  $u$  и константы Эйлера  $\gamma \simeq 0.577$ , а также коэффициентов  $S^{(0)}$  ряда Лорана для функции ловушки:

$$S(t_j + \Delta) = \frac{R_{t_j}}{\Delta} + \sum_{m=0}^{\infty} S^{(m)}(t_j) \Delta^m. \quad (2.36)$$

Значения коэффициентов  $S^{(m)}(t_j)$  вычисляются согласно разложению (A.8), приведенному в Приложении А. Заметим, что если функция регулярна в  $t$ , то соответствующий вычет  $R_t$  равен нулю, ряд Лорана совпадает с рядом Тейлора и  $S^{(0)}(t) \equiv S(t)$ .

Искомую асимптотику  $\rho_x^{(\infty)}$  при  $-x \gg 1$  описывают совместно выражения (2.34) и (2.35). В окончательном ответе достаточно удержать в показателе неубывающие слагаемые в показателе, а для предэкспоненциального множителя можно ограничиться старшим членом. Асимптотика интегрального распределения вероятностей при  $-\eta \gg 1$  вычисляется аналогично, с точностью до замены  $\ln \Theta^{(x)}(u)$  на функцию  $\ln \frac{\Theta^{(x)}(u)}{-iu}$ .

Несмотря на то, что предъявленное решение в общем виде выглядит весьма громоздко, в частных случаях асимптотика может приобрести вполне компактный вид. В качестве примера здесь можно рассмотреть описание трехмерных кубических ящиков с периодическими либо нулевыми граничными условиями, представленное в разделе 4.1. Общие асимптотики  $\rho_x^{(\infty)}$  при  $-x \gg 1$ , определенные по описанной схеме и приведенные к виду (4.8) и (4.12), построены на рисунке 2.3.

В настоящей же главе ограничимся тем, что используем разработанный подход для определения характера зависимости  $\rho_x^{(\infty)}$  на левом крыле распределения для произвольной двумерной или трехмерной ловушки аномального класса, функция ловушки которой имеет самый правый полюс в точке  $t = r$ ,

$1 < r \leq 2$ , а соответствующий вычет равен  $R$ . Для данной оценки достаточно проследить за показателем экспоненты в (2.34), сохраняя в асимптотиках (2.35) только старшие члены:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \sim R\Gamma(-r) \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right)^r, \quad \frac{\partial \ln \Theta^{(x)}(u)}{\partial(iu)} \sim \frac{iR\Gamma(1-r)}{\sqrt{S(2)}} \left( \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} \right)^{r-1}. \quad (2.37)$$

Уравнение для стационарной точки определяет соотношение

$$-\frac{i u_{st}}{\sqrt{S(2)}} \sim \left| \frac{\sqrt{S(2)} x}{R\Gamma(1-r)} \right|^{\frac{1}{r-1}}, \quad (2.38)$$

и характерная зависимость  $\rho_x^{(\infty)}$  при  $-x \gg 1$  имеет следующий вид:

$$\rho_x^{(\infty)} \sim \exp \left( -a \left| \sqrt{S(2)} x \right|^{\frac{r}{r-1}} \right), \quad a = \frac{r-1}{r} (R\Gamma(1-r))^{-\frac{1}{r-1}}. \quad (2.39)$$

Отличие левого крыла распределения от гауссова закона тем больше, чем левее расположен самый правый полюс функции ловушки  $r$ , т. е. чем быстрее нарастают одночастичные энергии  $\{\lambda_q\}$  и чем медленнее нарастает соответствующая им спектральная плотность состояний  $g(E) \sim E^{r-1}$ . Для трехмерных ловушек минимально возможным является значение  $r = \frac{3}{2}$ , что отвечает закону спадания  $\rho_x^{(\infty)} \sim e^{-\text{const } x^3}$ . (Отметим, что спадание распределения по закону  $e^{-\text{const } x^3}$  для ящика с периодическими граничными условиями было ранее обнаружено в работе [53] и как раз этой оценке удовлетворяют уже упомянутые асимптотики для ловушек-ящиков (4.8) и (4.12), представленные на рисунке 2.3). Для двумерных ловушек возможно и более быстрое спадание, вплоть до определяемого двойным экспоненциальным законом  $\rho_x^{(\infty)} \sim e^{-e^{-x}}$ , реализующимся в случае  $r = 1$  (при этом из общих формул (2.35) следуют слегка другие оценки, чем приведенные выше для случая  $r > 1$ ).

С увеличением значения  $r$  спадание  $\rho_x^{(\infty)}$  при  $x < 0$  становится все более пологим и переходит в гауссову форму при значении  $r = 2$ , разделяющем ловушки гауссова и аномального классов.

### 2.3. Выводы

На основе проведенных исследований обнаружено, что „необрезанное“ распределение числа надконденсатных частиц  $\rho_n^{(\infty)}$  при переходе к аргументу  $x = \frac{n-N_c}{\sigma}$  превращается в масштабированное  $\rho_x^{(\infty)}$  и демонстрирует поведение, близкое к автомодельному, а именно, с увеличением размера мезоскопической системы быстро сходится к предельному автомодельному распределению. Вид этого предельного распределения, вычисляемый с помощью преобразования Фурье, не зависит ни от каких размерных параметров системы и определяется лишь геометрическими свойствами профиля удерживающего потенциала через безразмерный одночастичный энергетический спектр.

В зависимости от свойств реализующегося предельного автомодельного распределения все ловушки делятся на два — гауссов и аномальный — класса, что связано с выполнением или невыполнением условий применимости центральной предельной теоремы для исследуемой статистики. К гауссову классу относятся ловушки, собственные энергии в которых нарастают достаточно медленно (так что сумма  $\sum_{q>0} \lambda_q^{-2}$  расходится). Для них предельное распределение является нормальным независимо от конкретных свойств удерживающего потенциала. Аномальный класс формируют ловушки, собственные энергии которых растут достаточно быстро (так что сумма  $\sum_{q>0} \lambda_q^{-2}$  сходится). Для них предельное распределение характеризуется ненулевыми старшими кумулянтами и его конкретный вид, отличающийся от гауссовой кривой, зависит от конфигурации ловушки и от особенностей расположения небольшого числа низколежащих уровней.

Принадлежность ловушки к тому или иному классу связывается с положением самого правого полюса  $r$  функции ловушки  $S(t)$ , ассоциированной с одночастичным спектром  $\{\lambda_q\}$ : гауссовой предельной статистике отвечают значения  $r > 2$ , при значениях  $r < 2$  статистика гауссовой не является.

Для ловушек аномального класса разработаны регулярные методы, поз-

воляющие получить асимптотические описания предельной автомодельной кривой при больших абсолютных значениях аргумента,  $x \gg 1$  и  $-x \gg 1$ .

### ГЛАВА 3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГАЗА В МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ. КРИТИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

Широко распространены методы описания термодинамики системы, строящиеся сразу в термодинамическом пределе. Характерным масштабом задачи при этом признается критическая температура  $T_c$ , а искомые термодинамические величины пытаются определить непосредственно в зависимости от аргумента  $T/T_c$ . Такой подход, очевидно, не позволяет рассмотреть эволюцию системы при переходе из одной фазы в другую фазу непрерывно — вся критическая область, в которой эта эволюция происходит, оказывается в данном масштабе сжата в исчезающе малую окрестность точки  $T/T_c = 1$ , а любые малые, но конечные отклонения от этой точки соответствуют переходам на неучитываемые флуктуации асимптотики развитых фаз. Вследствие невозможности изучить критическую область указанный подход характеризует термодинамические величины неаналитичными функциями, имеющими разрывы или скачки производных в точке  $T = T_c$ , тогда как на самом деле для любой большой, но конечной системы эти параметры должны описываться плавными зависимостями.

В данной главе рассматривается поведение термодинамических величин в критической области параметров, представляющей наибольший интерес при анализе фазовых переходов в физике конденсированных состояний. Критическую область удастся разрешить для произвольно больших систем введением автомодельного аргумента  $\eta = \frac{N - N_c}{\sigma}$ , определяемого критическим числом частиц  $N_c$  и стандартным отклонением  $\sigma$  (см. формулу (1.8)). Для различных

характеризующих мезоскопическую систему величин — параметра порядка, связанного с моментными характеристиками статистики, а также свободной энергии, средней энергии и теплоемкости, выражающихся из статистической суммы напрямую либо кратным дифференцированием, — получены автономные критические функции, описывающие их эволюцию в окрестности критической точки и остающиеся плавными для систем любого размера.

Результаты главы опубликованы в работах [57, 58, 98–101].

### 3.1. Параметр порядка

Теория Ландау фазовых переходов второго рода [60] характеризует состояние системы с помощью так называемого параметра порядка, имеющего пренебрежимо малую абсолютную величину в неупорядоченной фазе и нарастающего при переходе в упорядоченное состояния. Для бозе-систем в качестве параметра порядка традиционно используется населенность конденсированной фракции, которая становится макроскопической при температурах ниже критической.

Рассмотрение бозе-газа сразу в термодинамическом пределе предсказывает ожидаемое число частиц в конденсате как функцию температуры вида

$$\langle n_0 \rangle = \max(N - N_c(T), 0), \quad (3.1)$$

что отвечает неаналитичному поведению параметра порядка с разрывом производной в точке  $T = T_c$ , где  $N = N_c$ .

Для мезоскопических систем использование механизма „обрезающей связи“ (1.5) дает точные статистические распределения полного числа частиц в конденсате  $n_0$  и в надконденсате  $n$ . В результате становится возможным аналитически найти число частиц в конденсированной фракции:

$$\langle n_0 \rangle = N - \langle n \rangle, \quad \langle n \rangle = \sum_{n=0}^N \frac{n \rho_n^{(\infty)}}{P(N)}, \quad P(N) = \sum_{n=0}^N \rho_n^{(\infty)}, \quad (3.2)$$

а следовательно, указать плавную температурную зависимость параметра порядка в окрестности критической точки. Одновременно находится и уровень его флуктуаций:

$$\langle (n_0 - \langle n_0 \rangle)^2 \rangle = \sum_{n=0}^N (n - \langle n \rangle)^2 \frac{\rho_n^{(\infty)}}{P(N)}. \quad (3.3)$$

Как показано в разделе 2.1, с увеличением размера системы (и с соответствующим уменьшением величины  $\alpha \sim \frac{\epsilon_1}{T}$ ) статистические распределения при переходе к масштабированным переменным (2.1)  $x = \frac{n-N_c}{\sigma}$ ,  $x_0 = \frac{n_0}{\sigma}$  и  $\eta = \frac{N-N_c}{\sigma}$  стремятся в критической области к универсальным кривым, чей вид задается безразмерным спектром ловушки  $\{\lambda_q\}$ . С учетом этого свойства автомодельности поведение параметра порядка — в качестве которого удобно использовать не само число частиц на основном уровне, а его масштабированный аналог (2.1)  $x_0 \equiv \frac{n_0}{\sigma}$  — также описывается в окрестности критической точки функцией единственного аргумента — масштабированного полного числа частиц в системе  $\eta$ :

$$\begin{aligned} \langle x_0 \rangle &= \eta - \langle x \rangle, & \langle x \rangle &= \frac{1}{P(\eta)} \int_{-\infty}^{\eta} x \rho_x^{(\infty)} dx, \\ (\delta x_0)^2 &\equiv \langle (x_0 - \langle x_0 \rangle)^2 \rangle &= \frac{1}{P(\eta)} \int_{-\infty}^{\eta} (x - \langle x \rangle)^2 \rho_x^{(\infty)} dx. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Здесь универсальные распределения  $P(\eta)$  и  $\rho_x^{(\infty)}$  определены согласно формулам (2.8), (2.13), (2.14) и соотношению (2.2), отвечающему механизму „обрезающей связи“ для масштабированных распределений. Заметим, что совершенно аналогичное сведение к автомодельным функциям от переменной  $\eta$  в пределе больших систем  $\alpha \rightarrow 0$  легко выполнить для всех зависимостей моментных и кумулянтных характеристик системы от определяющих ее фазовое состояние параметров.

Конкретный вид универсальной структуры параметра порядка в критической области для случая трехмерной изотропной ловушки-ящика с непроницаемыми стенками приведен на рисунке 3.1, который содержит также ин-

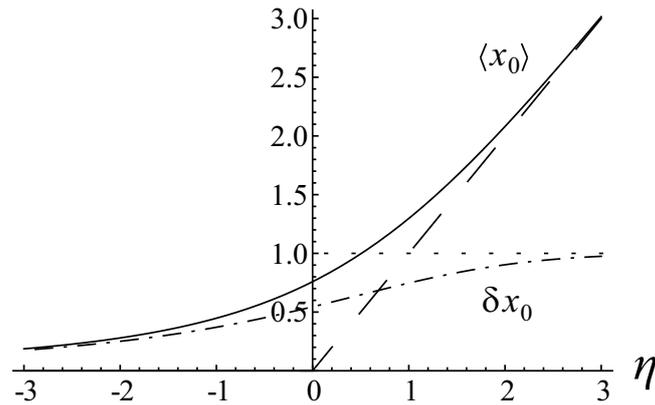


Рис. 3.1: Автомодельное поведение параметра порядка  $\langle x_0 \rangle = \frac{\langle n_0 \rangle}{\sigma}$ , определяемого посредством ожидаемого числа частиц в конденсате (сплошная линия), и уровня его флуктуаций  $\delta x_0$  (штрих-пунктирная линия) в окрестности критической точки для кубической ловушки с нулевыми граничными условиями. Пунктирная линия соответствует асимптотике вдали от критической точки, предсказываемой теорией Ландау (3.1). Точками отмечен верхний предел среднеквадратичного отклонения числа конденсированных частиц. В центральной части критической области флуктуации параметра порядка сопоставимы с самим его значением.

формацию об уровне флуктуаций параметра порядка. Хорошо видно, что в центральной части критической области относительная величина этих флуктуаций велика и, соответственно, описание Ландау оказывается в ней неприменимым.

Отметим, что хотя предельные функции, описывающие поведение параметра порядка, и зависят от геометрических свойств ловушки через соответствующий ей одночастичный энергетический спектр  $\{\lambda_q\}$ , эта зависимость малосущественна и не представляет особого интереса. Независимо от конкретного вида ловушки (в том числе и отношения ее к гауссову или аномальному классу), эти предельные функции сравнительно быстро приближаются к предсказываемым теорией Ландау (3.1) асимптотикам по мере удаления от

критической точки:

$$\eta \gg 1 : \langle x_0 \rangle \rightarrow \eta; \quad -\eta \gg 1 : \langle x_0 \rangle \rightarrow 0. \quad (3.5)$$

Для ловушек гауссова класса с  $r < 2$  данные предельные кривые могут быть вычислены в простом виде:

$$\begin{aligned} \langle x_0 \rangle &= \eta + \frac{\sqrt{2} \exp(-\eta^2/2)}{\sqrt{\pi} (1 + \operatorname{erf}(\eta/\sqrt{2}))}, \\ (\delta x_0)^2 &= 1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\eta \exp(-\eta^2/2)}{1 + \operatorname{erf}(\eta/\sqrt{2})} - \frac{2 \exp(-\eta^2)}{\pi (1 + \operatorname{erf}(\eta/\sqrt{2}))^2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

### 3.2. Свободная энергия и средняя энергия

Описание термодинамики начнем со свободной энергии  $F = -T \ln Z^{(N)}$ , дифференцирование которой позволяет выразить все основные термодинамические характеристики равновесной системы в каноническом ансамбле.

Статистическая сумма  $Z^{(N)}$  мезоскопической системы вычисляется в виде произведения (1.11) статистической суммы необрезанной вспомогательной задачи  $Z^{(\infty)}$  и „необрезанного“ интегрального распределения  $P(N)$ , взятого от полного числа частиц в изучаемой мезоскопической системе. Свободная энергия, таким образом, распадается на два слагаемых:

$$F = F^{(\infty)} - T \ln P(N), \quad F^{(\infty)} = -T \ln Z^{(\infty)} = T \sum_{q>0} \ln(1 - e^{-\alpha \lambda_q}) \quad (3.7)$$

Рассмотрим отдельно каждое из них.

Первое слагаемое  $F^{(\infty)}$ , порожденное  $Z^{(\infty)}$ , не содержит информации о фазовом состоянии системы — согласно точному методу „обрезающей связи“ (1.5) оно соответствует случаю неограниченного числа частиц  $N$ , то есть описывает фазу развитого конденсата при  $T \ll T_c$ . Для достаточно больших систем, характеризующихся  $\alpha \ll 1$ , это „необрезанное“ слагаемое  $F^{(\infty)}$  может

быть вычислено в виде суммы степенных по  $\alpha$  слагаемых, подобной представлению (1.20). Действуя, как в (1.15) - (1.18), т. е. применяя последовательно к  $F^{(\infty)}$  разложение в ряд Тейлора

$$F^{(\infty)} = -T \sum_{q>0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\alpha \lambda_q m}}{m}, \quad (3.8)$$

затем преобразование Меллина,

$$F^{(\infty)} = -T \sum_{q>0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\tau-i\infty}^{\tau+i\infty} \alpha^{-t} m^{-t-1} \Gamma(t) \lambda_q^{-t} dt, \quad (3.9)$$

а затем перегруппировывая члены и вычисляя интеграл как сумму всех вычетов функции, получим

$$F^{(\infty)} = -T \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \zeta(t+1) S(t) \alpha^{-t} \quad (3.10)$$

Ограничиваясь в близкой к термодинамическому пределу ситуации самым большим вкладом в (3.10), который дается самым правым полюсом  $t = r$  функции ловушки  $S(t)$  с вычетом  $R$ , можно оценить порядок величины  $F^{(\infty)}$ :

$$\frac{F^{(\infty)}}{T} \approx -\frac{\zeta(1+r)}{\zeta(r)} N_c. \quad (3.11)$$

„Необрезанная“ свободная энергия испытывает существенное относительное изменение величины при изменениях параметра  $\alpha$ , сравнимых с его критическим значение  $\alpha_c : N_c(\alpha_c) = N$ . Таким образом, во всей критической области, где из  $T \simeq T_c$  следует  $\alpha \simeq \alpha_c$ , величина  $F^{(\infty)}$  ведет себя как весьма медленная, плавная функция.

Второе слагаемое, определяемое интегральным распределением  $P(N)$ , характеризует непосредственно фазовый переход в мезоскопической системе. При  $T \ll T_c$ , где это распределение экспоненциально (см. раздел 2.2.2), оно выходит на асимптотику  $\ln P(N) \rightarrow 0$ , так что роль данного мезоскопического слагаемого полностью исчезает, и термодинамические характеристики системы асимптотически описываются „необрезанной“ задачей через  $Z^{(\infty)}$

(что соответствует так называемому приближению „ансамбля демона Максвелла“ [35, 37]). В критической области  $T \simeq T_c$  величина  $\ln P(N)$  оказывается порядка  $\alpha^0$ . Действительно, указанные распределения здесь являются автомодельными и сводятся к математическим специальным функциям, не включающим никаких размерных параметров системы.

Таким образом, мезоскопическое слагаемое  $\ln P$  не имеет большого масштабного множителя, подобно  $F^{(\infty)}$ . Однако, оно является намного более быстрым и испытывает очень значительные относительные изменения величины в окрестности критической точки, т. е. при изменениях величины  $N - N_c(\alpha)$  порядка  $\sigma(\alpha)$ .

Для того чтобы выделить описывающее фазовый переход нетривиальное быстрое мезоскопическое слагаемое  $\ln P$  на фоне медленного, но много большего по величине „необрезанного“ слагаемого  $F^{(\infty)}$ , удобно ввести для свободной энергии критическую функцию  $\Delta F$ :

$$\Delta F \equiv \frac{F}{T} - \frac{F^{(\infty)}}{T}. \quad (3.12)$$

С увеличением размеров системы интегральное распределение  $P$  быстро сходится к автомодельной функции масштабированного полного числа частиц в системе  $\eta = \frac{N-N_c}{\sigma}$ . Это значит, что в пределе  $\alpha \rightarrow 0$  введенная критическая функция  $\Delta F$  сходится к гладкой автомодельной зависимости  $F_F$ , определенной предельным автомодельным распределением  $P(\eta)$ :

$$\Delta F \rightarrow F_F = -\ln P(\eta), \quad (3.13)$$

Для всех ловушек аномального класса с  $r > 2$  легко предъявить явное описание предельной критической функции  $F_F$ :

$$F_F = \ln 2 - \ln \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \eta / \sqrt{2} \right) \right), \quad (3.14)$$

$$F_F(\eta \gg 1) \approx 0, \quad F_F(-\eta \gg 1) \approx \frac{\eta^2}{2} + \ln(-\eta) + \ln(2).$$

В аномальном классе с  $r < 2$  поведение  $F_F$  не одинаково для разных ловушек, а зависит от конкретного вида безразмерного одночастичного энергетического спектра  $\{\lambda_q\}$ . Асимптотика  $F_F \rightarrow 0$  при  $\eta \gg 1$  по-прежнему тривиальна. Поведение критической функции при  $-\eta \gg 1$  зависит от самого правого полюса функции ловушки  $S(t)$  и имеет степенной характер  $F_F \sim |\eta|^{r/(r-1)}$ .

Для термодинамических величин, вычисляемых дифференцированием свободной энергии, естественным образом наследуется распад на два слагаемых — „необрезанное“, порожденное свободной энергией  $F^{(\infty)}$ , и мезоскопическое, порожденное величиной  $\ln P$ . Аналогично случаю свободной энергии, это позволяет вводить гладкие критические функции, характеризующие непрерывное поведение термодинамической величины в критической области, где происходит перестройка системы из одной фазы в другую. При этом, так как мезоскопическое слагаемое является существенно более „быстрым“, с каждым дифференцированием свободной энергии величина его вклада будет расти.

Конкретизируем эти тезисы на примере средней энергии системы  $E = F - T \frac{\partial F}{\partial T}$ :

$$E = E^{(\infty)} + T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln P(N), \quad E^{(\infty)} = \alpha T \sum_{q>0} \frac{\lambda_q}{e^{\alpha \lambda_q} - 1}. \quad (3.15)$$

При  $\alpha \ll 1$  для „необрезанного“ слагаемого  $E^{(\infty)}$  из (3.10) получается представление

$$\frac{E^{(\infty)}}{T} = \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} t \zeta(t+1) S(t) \alpha^{-t} = \sum_{j \neq 0} \operatorname{Res}_{t=t_j} t \zeta(t+1) S(t) \alpha^{-t} + R(0). \quad (3.16)$$

Все полюса в нем порождены только функцией ловушки  $S(t)$ , так как комбинация  $t \zeta(t+1)$  не имеет особых точек. Учет главного члена порождает оценку  $\frac{E^{(\infty)}}{T} \approx \frac{r \zeta(1+r)}{\zeta(r)} N_c$ , т.е.  $E^{(\infty)}$  вновь содержит большой масштабный фактор  $N_c$ .

Мезоскопическое слагаемое (3.15) в пределе больших систем можно преобразовать с учетом того обстоятельства, что распределение  $P$  оказывается близко к своей предельной автомодельной форме. Это позволяет связать

дифференцирование по температуре  $T$  с дифференцированием по автомодельному аргументу  $\eta$ :

$$T \frac{\partial \eta}{\partial T} = -\frac{1}{\sigma} \left( T \frac{\partial N_c}{\partial T} + \eta T \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \rightarrow -r \frac{N_c}{\sigma}. \quad (3.17)$$

(Последний переход учитывает, что в окрестности критической точки выполняется условие  $|\eta| \ll \frac{N_c}{\sigma}$ ).

Из (3.15) и (3.17) следует, что вычитание „необрезанного“ слагаемого и последующее масштабирование позволяет ввести для средней энергии гладкую критическую функцию, характеризующую ее поведение в непосредственной окрестности критической точки и имеющую характерную величину порядка  $\alpha^0$ :

$$\Delta E \equiv \frac{\sigma}{r N_c} \left( \frac{E}{T} - \frac{E^{(\infty)}}{T} \right) \rightarrow F_E = -\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P(\eta). \quad (3.18)$$

В термодинамическом пределе эта функция  $\Delta E$  также сходится к универсальной зависимости  $F_E$ , связанной с предельным автомодельным распределением  $P(\eta)$ . Для гауссова класса этот предел, как и ранее, одинаков для всех ловушек и явно известен вместе со своими асимптотиками:

$$F_E = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\exp\left(-\frac{\eta^2}{2}\right)}{1 + \operatorname{erf} \frac{\eta}{\sqrt{2}}}, \quad F_E(\eta \gg 1) \approx 0, \quad F_E(-\eta \gg 1) \approx -|\eta| - \frac{1}{|\eta|}. \quad (3.19)$$

Формы кривых  $F_E$  для ловушек аномального класса зависят от спектра, и ее нетривиальная асимптотика имеет вид  $F_E(-\eta \gg 1) \sim -|\eta|^{1/(r-1)}$ .

Для критической области мезоскопической системы конечного, но достаточно большого размера можно использовать приближенное равенство  $\Delta E \simeq F_E$  и записать:

$$E \simeq E^{(\infty)} + T \frac{r N_c}{\sigma} F_E(\eta(T)), \quad (3.20)$$

что весьма удобно для применения в конкретных задачах. Вычисление средней энергии здесь сводится к вычислению слагаемого  $E^{(\infty)}$  и определяющих автомодельный аргумент  $\eta$  параметров  $N_c$  и  $\sigma$ , для каждого из которых есть

простые аналитические аппроксимации (3.16) и (1.20), а также к определению предельного автомодельного распределению  $P(\eta)$ , которое для ловушки фиксированной формы достаточно провести один раз (или сразу использовать результаты (3.19), если ловушка относится к гауссовому классу).

Для не слишком большой мезоскопической системы, распределения в которой еще заметно отличаются от своих предельных форм, формулу (3.20) можно улучшить, используя вместо универсальной критической функции выражение  $-\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P^{(meso)}(\eta)$ , где  $P^{(meso)}(\eta)$  является какой-либо аппроксимацией интегрального распределения при  $\alpha = \alpha_c$ . Например, это может быть распределение, полученное в приближении трехуровневой модели (1.23) по мезоскопическим значениям кумулянтов (1.20) и переписанное посредством автомодельной переменной  $\eta$ . Применимость такого подхода обосновывает тот факт, что мезоскопическое „необрезанное“ распределение остается практически неизменным (но не обязательно близким к предельному) во всем интервале значений  $\alpha$ , соответствующих критической области, т. е. технически ситуации аналогичны. Таким образом, дифференцирование по температуре все равно успешно сводится к дифференцированию по переменной  $\eta$ .

Заметим, что дифференцирование по температуре привело к тому, что относительный вклад мезоскопического слагаемого вырос, получив масштабный множитель  $\frac{N_c}{\sigma} \gg 1$  (который, тем не менее, все равно в  $\sigma$  раз меньше масштабного фактора для „необрезанного“ слагаемого). Последующие дифференцирования продолжают усиливать роль мезоскопического слагаемого и могут сравнивать величины двух вкладов, как показано в следующем разделе на примере теплоемкости системы.

Обратим внимание, что подробно разбираемые примеры термодинамических характеристик — средней энергии и теплоемкости — сводятся к дифференцированию свободной энергии по температуре. При ее вариации энергия основного состояния системы  $\epsilon_0 = 0$  остается постоянной, и вклад конден-

сированной фракции частиц в соответствующий параметр просто отсутствует. Однако в случае, если термодинамическая величина определена какой-то другой частной производной (например, давление дается производной свободной энергии по объему системы), дифференцирование предполагает изменение уровня  $\epsilon_0$ . Вклад конденсированной фракции в такую характеристику может быть значительным и должен учитываться отдельно. За исключением этой особенности анализ таких термодинамических величин и введение соответствующих критических функций проводится близко к указанной схеме.

### 3.3. Теплоемкость. Автомоделная структура $\lambda$ -особенности

Теплоемкость бозе-системы является одной из наиболее интересных термодинамических характеристик для анализа благодаря своему нетривиальному поведению в окрестности критической точки, где либо она сама, либо ее производные (в зависимости от типа ловушки) очень быстро и существенно изменяют свое значение. При рассмотрении системы сразу в термодинамическом пределе этот эффект известен как  $\lambda$ -особенность теплоемкости и характеризуется функциями, неаналитичными в точке  $T = T_c$  (см., например, [60, 109]).

Развитый в предыдущем разделе подход к описанию мезоскопических бозе-систем в рамках канонического ансамбля позволяет представить теплоемкость, выражаемую производной средней энергии системы (3.15) по температуре при постоянных характерных размерах ловушки, в виде суммы двух слагаемых — „необрезанного“ и мезоскопического:

$$C_V = C_V^{(\infty)} + \frac{\partial}{\partial T} T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln P(N), \quad C_V^{(\infty)} = \sum_{q>0} \frac{\alpha^2 \lambda_q^2 e^{\alpha \lambda_q}}{(e^{\alpha \lambda_q} - 1)^2}. \quad (3.21)$$

Первое слагаемое  $C_V^{(\infty)}$  определяет монотонную зависимость теплоемкости, соответствующую фазе развитого конденсата. При  $\alpha \ll 1$  для него прямым

дифференцированием (3.16) получается разложение по вычетам функции лопушки (при этом вносим оценку  $C_V^{(\infty)} \sim N_c$ ):

$$C_V^{(\infty)} = \sum_{\substack{j \neq 0 \\ t=t_j}} \text{Res } t(t+1)\zeta(t+1)S(t)\alpha^{-t} + R(0). \quad (3.22)$$

Второе же слагаемое, связанное с интегральным распределением  $P(N)$ , ответственно за формирование  $\lambda$ -особенности.

Если в качестве  $P(N)$  используется точно вычисленное интегральное распределение во вспомогательной „необрезанной“ задаче, то данное выражение является тождеством, справедливым для системы всюду, включая окрестность критической точки. Проблема поиска теплоемкости в мезоскопической задаче, таким образом, сводится к поиску подходящей аппроксимации второго, „мезоскопического“ слагаемого. В качестве таковой можно использовать распределение, определяемое трехуровневой моделью (1.23) по мезоскопическим значениям кумулянтов (1.20), что позволяет получать хорошие численные предсказания уже для малых систем с характерными размерами  $N_c > 10^2$  [58].

Большой интерес, однако, представляет описание более крупных систем, для которых  $\lambda$ -особенность ярко выражена. Имея ввиду такие системы с  $\alpha \ll 1$  и учитывая, что статистические распределения для них достаточно близки к автомодельным, возможно согласно (3.17) свести дифференцирование по температуре  $T$  к дифференцированию по автомодельной переменной  $\eta = \frac{N-N_c}{\sigma}$  и преобразовать формулу (3.21) к виду:

$$C_V \simeq C_V^{(\infty)} + \left( \frac{rN_c}{\sigma} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \ln P(\eta). \quad (3.23)$$

При этом видно, что относительный вклад мезоскопического слагаемого возрос относительно рассмотренного ранее случая средней энергии и характеризуется масштабным множителем  $\frac{N_c^2}{\sigma^2}$ . Теперь „необрезанное“ слагаемое  $C_V^{(\infty)}$ , которое меняется значительно медленнее мезоскопического, вовсе не обяза-

тельно является преобладающим по величине: конкуренция слагаемых имеет разный исход для ловушек разных классов и приводит к качественно разным картинам  $\lambda$ -особенности теплоемкости, которую можно наглядно представить с помощью следующей критической функции  $\Delta C_V$ :

$$\Delta C_V \equiv \frac{\sigma^2}{r^2 N_c^2} \left( C_V - C_V^{(\infty)} \right) \rightarrow \Delta C_V^{(lim)} \equiv \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \ln P(\eta) \quad (3.24)$$

Так, в случае ловушек гауссова класса, для которых  $r > 2$  и реализуется стандартное соотношение между математическим ожиданием и дисперсией „необрезанной“ статистики  $\sigma \sim N_c^{1/r}$ , оба слагаемых в (3.23) имеют одинаковый порядок. При этом критическая функция с увеличением размера системы принимает вид:

$$\Delta C_V^{(lim)} = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\eta \exp(-\eta^2/2)}{1 + \operatorname{erf}(\eta/\sqrt{2})} - \frac{2}{\pi} \frac{\exp(-\eta^2)}{(1 + \operatorname{erf}(\eta/\sqrt{2}))^2} \quad (3.25)$$

и в окрестности точки  $\eta = 0$  изображает плавную, но быструю ступеньку с высотой перепада 1 (см. рисунок 3.2). Это поведение характеризует плавное, но быстрое изменение удельной теплоемкости  $\frac{C_V}{N}$  в окрестности критической точки на величину  $\frac{r^2 N_c}{\sigma^2}$ , которое для больших систем можно характеризовать как скачок. Величина этого скачка в термодинамическом пределе совпадает с известными предсказаниями большого канонического ансамбля для гармонической ловушки ([60], скачок  $\frac{9\zeta(3)}{\zeta(2)}$ ) и общего случая трехмерной ловушки, обеспечивающей степенной спектр с показателем  $\nu$  (см. [109], скачок  $\frac{9}{\nu^2} \frac{\zeta(3/\nu)}{\zeta(3/\nu-1)}$ ).

При переходе в аномальный класс, по мере уменьшения величины  $r$  и удаления ее от пограничного значения  $r = 2$ , критическая функция описывает все более плавный переход. Действительно, так как мезоскопическое слагаемое по порядку величины уменьшается относительно „необрезанного“, резкого изменения удельной теплоемкости при переходе через критическую область произойти не может. Вместо этого, в малой окрестности критической точки быстро меняются производные теплоемкости по температуре, как

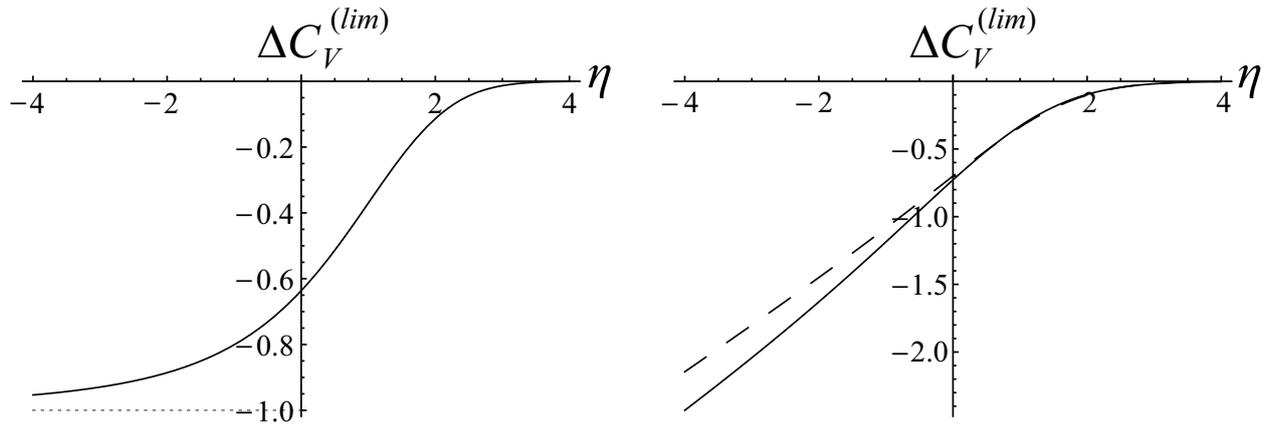


Рис. 3.2: Предельные универсальные кривые для критической функции  $\Delta C_V^{(lim)}$ , определенной формулой (3.24) и описывающей автомоделльную структуру  $\lambda$ -особенности теплоемкости, для всех ловушек гауссова класса (график слева) и двух примеров ловушек аномального класса — трехмерных ящиков с периодическими либо нулевыми граничными условиями (график справа, пунктирная и сплошная линия соответственно).

легко понять из рисунка 3.2. Для всех ловушек аномального класса свести поведение удельной теплоемкости к одной кривой невозможно, так как критическая функция зависит от особенностей спектра. Последняя зависимость может приводить к существенным отличиям критических функций даже тогда, когда фиксированы определяющие главный член асимптотики самый правый полюс  $t = r$  и вычет  $R$  в нем. Описанию этого эффекта, который теряется при построении описания сразу в термодинамическом пределе, посвящена глава 4.

Выделим отдельно случай ловушки аномального класса с  $r = \frac{3}{2}$ , важный тем, что к нему относится наиболее часто используемая в задачах статистической физики и термодинамики трехмерная кубическая ловушка-ящик (ее традиционно используют для описания системы свободных частиц). Реализующееся при  $r = \frac{3}{2}$  соотношение  $\sigma \sim N_c^{3/2}$  позволяет определить несколько

другую, более наглядную критическую функцию для удельной теплоемкости

$$\delta C_V \equiv \frac{\sigma^2}{t_1^2 N_c} \left( \frac{C_V(T)}{N} - \frac{C_V(T_c)}{N_c} \right). \quad (3.26)$$

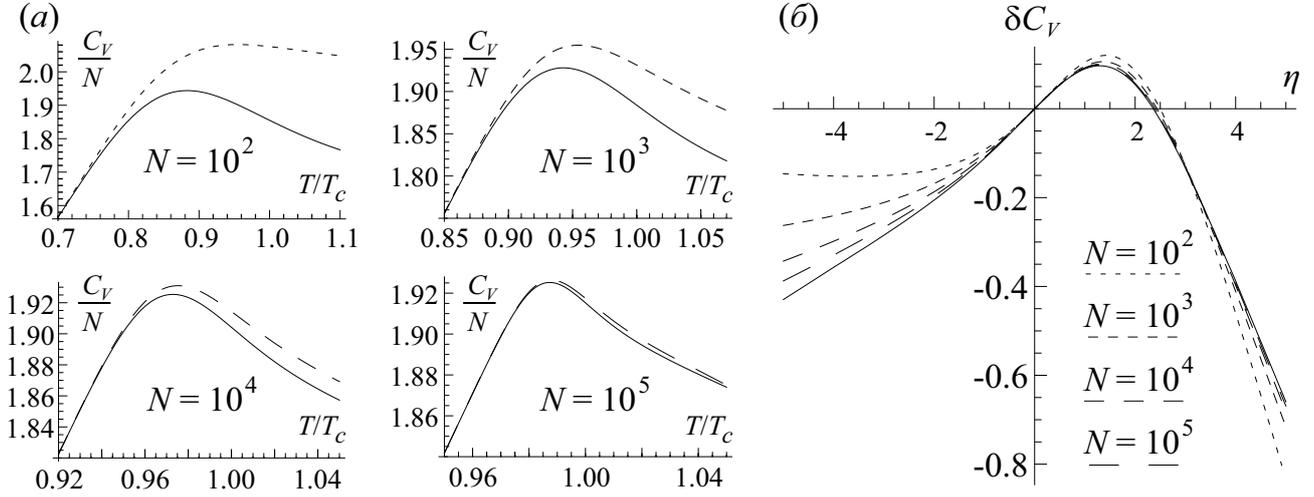


Рис. 3.3: (а) Сходимость  $\lambda$ -особенности теплоемкости, восстановленной по формуле (3.26) и предельной автомодельной функции (3.27)  $F_c$ , к точному численному результату с увеличением числа атомов, удерживаемых трехмерной изотропной ловушкой-ящиком с периодическими граничными условиями. (б) Сходимость соответствующей функции (3.26)  $\delta C_V$ , описывающей  $\lambda$ -особенность теплоемкости, к термодинамическому пределу (3.27)  $F_c$  (сплошная кривая).

Данная функция является нормированным отличием удельной теплоемкости от ее значения в критической точке  $\eta = 0$  (т.е. при  $T = T_c$ ). В критической области для больших систем она быстро сходится к предельной функции

$$F_c = \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \ln P(\eta) - \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \ln P(0) - \frac{5\zeta(5/2)S^{3/2}(2)}{3\zeta^3(3/2)R_{3/2}} \eta, \quad (3.27)$$

имеющей вид горки с двумя близкими к линейным крыльями. Процесс сходимости, а также восстановление теплоемкости мезоскопической системы по формуле (3.26) при использовании в ней предельного выражения  $\delta C_V = F_c(\eta)$  наглядно продемонстрированы на рисунке 3.3.

### 3.4. Выводы

Применение механизма „обрезающей связи“ позволяет получить явные аналитические выражения для термодинамических характеристик мезоскопической бозе-системы, справедливые во все области ее параметров и описывающие непрерывную их непрерывную эволюция в процессе фазового перехода. Поскольку статистическая сумма системы факторизована на два множителя — статистическую сумму во вспомогательной задаче и интегральное распределение числа частиц в надконденсате во вспомогательной задаче, отвечающее применению „обрезающей связи“, — термодинамические величины представляются как характерные комбинации двух разномасштабных вкладов.

Вклад, порожденный статистической суммой „необрезанной“ задачи, характеризует фазу развитого конденсата и описывает медленные плавные зависимости термодинамических характеристик от параметров системы. Вклад интегрального распределения ответственен за фазовый переход в системе и определяет быстрые изменения термодинамических характеристик вблизи критической точки.

Знание характерных масштабов и величин каждого из факторов позволило ввести для термодинамических характеристик, связанных с моментами распределения (как параметр порядка), а также напрямую выражающихся через статистическую сумму (как свободная энергия) либо требующими однократного или двукратного дифференцирования (как средняя энергия или теплоемкость соответственно), гладкие аналитичные критические функции, дающие непрерывное описание во всей критической области от всех параметров системы в виде зависимости от единственной автомодельной переменной — масштабированного полного числа частиц в системе. Эти предельные автомодельные функции найдены для случая произвольного удерживающего потенциала и позволяют с хорошей степенью точности описать термодина-

мические параметры мезоскопической бозе-системы уже при  $N \geq 1000$ .

В частности, указанным методом впервые была аналитически выявлена тонкая структура  $\lambda$ -особенности теплоемкости вблизи критической точки. При этом оказалось, что иерархия абсолютных величин вкладов интегрального распределения и „необрезанной“ задачи зависит от свойств удерживающего потенциала. Результаты их конкуренции различны для ловушек аномального и гауссова классов, что приводит к качественно разным картинам  $\lambda$ -особенности теплоемкости.

## ГЛАВА 4. ВЛИЯНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ ГАЗА В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ

Проводимые на сегодняшний день эксперименты с мезоскопическими ловушками (т.е. ловушками конечных размеров), удерживающими конечное число бозе-атомов, характеризуются большим разнообразием, в том числе и в выборе профиля и размерности удерживающего потенциала. Наряду с привычными трехмерными гармоническими ловушками становятся доступны двумерные и квазидвумерные ловушки [15–17], ловушки с квазивертикальными стенками [18] и квазиоднородным потенциалом [19], появляются подходы, позволяющие динамически создать произвольный квазипостоянный потенциал [14]. Профиль удерживающего потенциала при этом оказывает существенное влияние на термодинамические характеристики системы.

Описание системы, проведенное изначально в термодинамическом пределе, позволяет дать только грубую оценку влияния формы ловушки на свойства удерживаемого газа, а именно, учесть влияние положения самого правого полюса  $r$  функции ловушки  $S(t)$  и величины вычета  $R$  в нем. Однако в ловушках аномального класса, как следует из последовательного анализа термодинамики системы, проведенного для критической области в главе 3, для термодинамических величин, заметно меняющихся при перестроении системы из одной фазы в другую фазу, соответствующие критические функции могут существенно зависеть и от более тонких особенностей спектра, связанных, например, с расположенными левее  $r$  полюсами или подобных возникающим при смене граничных условий. В данной главе на примере удельной теплоемкости будут анализироваться именно такие эффекты, упускаемые из

виду в не разрешающих критическую область теориях.

Глава начинается со сравнения ловушек-ящиков одинаковых размеров с нулевыми либо периодическими граничными условиями, наложенными на волновую функцию. С точки зрения введенных выше функций ловушки (1.19) этот модельный пример хорошо иллюстрирует роль следующего за самым правым полюса в формировании критических автомодельных функций. Затем исследованы несколько конфигураций ловушек, для которых смену граничных условий можно реализовать в эксперименте и обнаружить связанное с этим изменение теплоемкости.

Основные результаты главы опубликованы в работах [58, 91, 97, 99].

#### **4.1. Кубические ловушки-ящики с периодическими и нулевыми граничными условиями**

Основным примером, на котором будет обсуждаться влияние граничных условий на термодинамику системы в критической области, послужит ансамбль невзаимодействующих бозе-атомов, помещенных в трехмерную кубическую ловушку-ящик с ребром длины  $L$ . Такая ловушка, накладывающая на волновую функцию частицы периодические граничные условия, является широко распространенной моделью, используемой в задачах статистической физики и термодинамики, в том числе и при исследовании бозе-конденсации. Однако, определяемые ей волновые функции бозе-атомов нелокализованы, и с точки зрения мезоскопической задачи при описании удерживаемых частиц естественнее рассматривать ящик с „нулевыми“ граничными условиями.

Известный анализ системы в термодинамическом пределе, не стремящийся разрешить критическую область, опускает вопрос о граничных условиях, поскольку неявно предполагает, что в пределе больших систем связанные с границами эффекты исчезают [40, 60, 62]. Как детально показано ниже,

в критической области это допущение не справедливо, так как изменение граничных условий возмущает спектр низкоэнергетичных состояний и через него изменяет автомодельную структуру параметров в окрестности фазового перехода.

Спектры рассматриваемых кубических ловушек (индексы  $(p)$  и  $(z)$  здесь и далее обозначают соответственно периодические и нулевые граничные условия) выглядят следующий образом ( $m$  – масса бозе-атома):

$$\alpha = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2T}; \quad \begin{aligned} \epsilon^{(p)}/T &= \alpha \lambda^{(p)}, & \lambda^{(p)} &= 4 \times (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2), & q_i &= 0, \pm 1, \pm 2 \dots \\ \epsilon^{(z)}/T &= \alpha \lambda^{(z)}, & \lambda^{(z)} &= (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 - 3), & q_i &= +1, +2 \dots \end{aligned} \quad (4.1)$$

Для наглядности обе ловушки описаны одним и тем же параметром  $\alpha$ . Грубое сравнении спектров показывает, что при нулевых граничных условиях энергетические уровни расположены примерно в 4 раза ниже, но в случае периодических граничных условий число состояний больше примерно в 8 раз.

Более тонкий анализ заключается в сравнении структур связанных с данными спектрами функций ловушек (1.19)  $S(t) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^t}$ , которые определяются асимптотикой одночастичной статсуммы  $\Xi = \sum_{q>0} e^{-\beta \lambda_q}$  при  $\beta \rightarrow 0$ . Эти асимптотики задаются формулами (A.16), (A.17) и (A.18) из Приложения А, что позволяет записать для  $S(t)$  положения  $t_j$  и вычеты  $R_{t_j}$  ее полюсов. В случае периодических граничных условий указанная структура чрезвычайно проста — функция ловушки имеет только два полюса:

$$t_1 = \frac{3}{2}, \quad R_{3/2} = \frac{\pi^{3/2}}{8}; \quad t_2 = 0, \quad R_0 = -1; \quad (4.2)$$

первый из них отвечает спектру свободной частицы в трехмерном пространстве, а второй — исключению основного состояния  $\lambda_0 \equiv 0$  из суммирования.

Для непроницаемых границ структура полюсов  $S(t)$  оказывается более

сложной:

$$\begin{aligned}
 t_1 = \frac{3}{2}, \quad R_{3/2} = \frac{\pi^{3/2}}{8}; \quad t_2 = 1, \quad R_1 = -\frac{3\pi}{8}; \quad t_3 = \frac{1}{2}, \quad R_{1/2} = \frac{3\sqrt{\pi}(1+\pi)}{8}; \\
 t_4 = 0, \quad R_0 = -\frac{9(1+\pi)}{8}; \quad t_5 = -\frac{1}{2}, \quad R_{-1/2} = \frac{9\sqrt{\pi}(2+\pi)}{16}; \quad \dots
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

Те или иные накладываемые граничные условия не меняют квадратичного характера нарастания собственных значений, потому в обоих случаях ловушка относится к аномальному классу и характеризуется самым правым полюсом  $t_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ . Вычет  $R_{3/2} = \frac{\pi^{3/2}}{8}$  в этом полюсе  $t_1$  также одинаков для разных граничных условий, что легко понять на основе приведенных выше суждений о соотношениях высоты уровней и числах состояний.

Однако следующий полюс оказывается разным для рассматриваемых случаев: при периодических граничных условиях он расположен в точке  $t_2 = 0$  и имеет вычет  $-1$ , в то время как для нулевых граничных условий таковым является  $t_2 = 1$  с вычетом  $-3\pi/8$ . Причина различия объясняется, например, в [37]: наложение нулевых граничных условий не просто уменьшает число состояний в 8 раз, но и отбрасывает кроме этого целые „плоскости“ состояний с  $q_i = 0$ . Недостаток этих плоскостей и соответствует полюсу в точке  $t_2 = 1$  с отрицательным вычетом указанной величины (см. Приложение А).

Несовпадение (в том числе и по структуре полюсов) функций ловушек  $S(t)$  приводит к различиям в статистике и термодинамике сравниваемых систем в критической области параметров. Так, асимптотики предельных „необрезанных“ распределений  $\rho_x^{(\infty)}$  при  $x \gg 1$ , получаемые общим методом (2.31),

для ящика с периодическими граничными условиями принимают форму

$$\begin{aligned}\rho_x^{(\infty)} &\approx \lambda_1 \sqrt{S(2)} \wp_6(x) e^{-\lambda_1 \sqrt{s_2} x - g_1 + s'_0}, \\ \lambda_1 &= 4, \quad g_1 = 6, \quad S(2) \simeq 1.04, \quad s'_0 \approx 6.44, \\ \wp_6(x) &= \frac{x_1^5}{5!} + \frac{x_2 x_1^3}{12} + \frac{x_3 x_1^2}{6} + \left[ \frac{x_2^2}{2} + x_4 \right] \frac{x_1}{4} + \frac{x_3 x_2}{6} + \frac{x_5}{5}, \quad (4.4) \\ x_1 &= \lambda_1 \sqrt{S(2)} x - x'_0, \quad x'_0 \approx 8.7, \quad x_2 \approx 22.24, \\ x_3 &\approx -14.06, \quad x_4 \approx 12.73, \quad x_5 \approx -12.3,\end{aligned}$$

а для ящика с нулевыми граничными условиями — форму

$$\begin{aligned}\rho_x^{(\infty)} &\approx \lambda_1 \sqrt{S(2)} \wp_3(x) e^{-\lambda_1 \sqrt{s_2} x - g_1 + s'_0}, \\ \lambda_1 &= 3, \quad g_1 = 3, \quad S(2) \approx 0.89, \quad s'_0 \approx 2.96, \quad (4.5) \\ \wp_3 &= \frac{x_1^2 + x_2}{2}, \quad x_1 = \lambda_1 \sqrt{S(2)} x - x'_0, \quad x'_0 \approx 3.54, \quad x_2 \approx 9.08.\end{aligned}$$

Определяемое данными асимптотиками различие спадающих правых крыльев распределений ( $x \gg 1$ ) хорошо заметно на рисунке 2.2. Это различие, однако, не наследуется термодинамическими величинами, так как согласно (1.11) их определяет интегральное распределение  $P(\eta)$ , экспоненциально выходящее на значение 1 при  $\eta \gg 1$  для любых ловушек.

На левом крыле распределения ситуация обстоит иначе — там значение функции  $P(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} \rho_x^{(\infty)} dx$  мало и статистическая сумма  $Z^{(N)}$  чувствительна к асимптотическому закону спадающего дифференциального и интегрального распределения. Общий вид асимптотики предельного распределения  $\rho_x^{(\infty)}$ , получаемой с помощью метода стационарной фазы в интеграле  $\rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iux} \Theta^{(x)}(u) du$ , представлен выражениями (2.34) и (2.35).

В случае трехмерной ловушки-ящика с периодическими граничными условиями со спектром (4.1) логарифм характеристической функции  $\Theta^{(x)}(u)$  имеет простую асимптотику:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \approx \frac{\pi^2 a^{3/2}}{6} + \ln a + aS(1) + \varphi_0, \quad a \equiv \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}}, \quad (4.6)$$

где  $S(2) \approx 1.03$ ,  $S(1) \approx -2.3$ ,  $\varphi_0 = \gamma - S_0^{(0)} \approx 0.84$ . Таким образом, уравнение на стационарную точку в интеграле для „необрезанного“ распределения принимает следующий вид:

$$\frac{\pi^2}{4} \sqrt{a_{st}} + \frac{1}{a_{st}} = -S(1) - \sqrt{S(2)}x. \quad (4.7)$$

Хорошим приближением его корня является  $a_{st} \approx \frac{16}{\pi^4} \left( \sqrt{S(2)}x + S(1) \right)^2$ .

Применение метода стационарной фазы к интегралу для распределения  $\rho_x^{(\infty)}$  дает искомые асимптотики:

$$\rho_x^{(\infty)} \approx \sqrt{S(2)} \frac{64 \left( -\sqrt{S(2)} x - S(1) \right)^{5/2}}{\pi^{13/2}} \exp \left[ \frac{16 \left( \sqrt{S(2)} x + S(1) \right)^3}{3\pi^4} + \varphi_0 \right],$$

$$P(\eta) \approx \frac{4 \left( -\sqrt{S(2)} \eta - S(1) \right)^{1/2}}{\pi^{5/2}} \exp \left[ \frac{16 \left( \sqrt{S(2)} \eta + S(1) \right)^3}{3\pi^4} + \varphi_0 \right], \quad (4.8)$$

хорошо действующие при  $x < -2$  (см. рисунок 2.3).

В случае трехмерной ловушки-ящика с непроницаемыми стенками характеристическая функция  $\Theta^{(x)}(u)$  приобретает логарифмические члены, связанные с полюсом  $S(t)$  в точке  $t = 1$ :

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \approx \frac{\pi^2 a^{3/2}}{6} + \frac{3\pi a(1 - \ln a)}{8} - \frac{3\pi a^{1/2}}{4} + \ln(a + 3) + \frac{\ln a}{8} - (a + 3)x_0 + \varphi_0, \quad (4.9)$$

где  $a \equiv \frac{-iu}{\sqrt{S(2)}} - 3$ ,  $\varphi \approx 0.47$ ,  $x_0 \approx -0.77$  (при этом здесь наиболее удобно использовать не непосредственно разложение (A.11), а его аналог, в котором разложение ведется по сдвинутому аргументу). Данная асимптотика содержит все неубывающие члены.

Для получения удовлетворительной асимптотики в уравнении на стационарную точку в (2.34) достаточно оставить лишь два самых крупных члена

для производной характеристической функции:

$$\frac{\pi^2}{4} a_{st}^{1/2} - \frac{3\pi}{4} \ln a_{st}^{1/2} + \dots = x_0 - \sqrt{S(2)} x. \quad (4.10)$$

Такое уравнение имеет решение в виде нижней ветви функции Ламберта  $W_{-1}$ , обратной к  $xe^x$  [107]:

$$a_{st}^{1/2}(x) = -\frac{3}{\pi} W_{-1} \left( -\frac{\pi}{3} e^{\frac{4}{3\pi}(\sqrt{S(2)}x - x_0)} \right) \sim \frac{-4\sqrt{S(2)}x}{\pi^2} + \frac{3}{\pi} \ln \left( -\frac{4\sqrt{S(2)}x}{\pi^2} \right). \quad (4.11)$$

Так как  $x < 0$ , абсолютная величина аргумента при таком сдвиге возрастает, и спадание функции распределения идет более резко:

$$\begin{aligned} \rho_x^{(\infty)} &\approx \frac{2\sqrt{S(2)}}{\pi^{3/2}} a_{st}^{5/2}(x) e^{g(a_{st}(x))}, & P(\eta) &\approx \frac{2}{\pi^{3/2}} a_{st}^{1/2}(\eta) e^{g(a_{st}(\eta))}, \\ g(a) &= -\frac{\pi^2}{12} a^{3/2} + \frac{3\pi}{8} a - \frac{3\pi(1+\pi)}{4} a^{1/2} + \frac{1+9\pi}{8} \ln a + \ln(a+3) + \varphi_0. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Как видно из рисунка 2.3, асимптотика хорошо работает, начиная с  $x < -4$ . Из сопоставления асимптотик (4.8), (4.12) и выражений для стационарных точек (4.7) и (4.11) можно заключить, что случай нулевых граничных условий отличается от случая периодических сдвигом аргумента  $x \rightarrow x - \frac{3\pi}{4\sqrt{S(2)}} \ln \left( -\frac{4\sqrt{S(2)}x}{\pi^2} \right)$ .

Отличие случаев разных граничных условий в виде логарифмического сдвига аргумента в универсальной асимптотике  $P(\eta)$  при  $-\eta \gg 1$  наследуется и статистической суммой  $Z^{(N)}(\eta)$ , и ее производными. Относительно удельной теплоемкости системы (3.21) можно заключить, что описывающие ее поведение в окрестности точки конденсации автомодельные критические функции  $F_c$ , определенные в (3.27), заметно различаются для сравниваемых ловушек. Случай нулевых граничных условий характеризуется более крутым крылом при  $\eta < 0$  и более правым положением максимума теплоемкости:  $\eta \simeq 1.55$  против  $\eta \simeq 1.3$ .

Теплоемкости для мезоскопических ловушек-ящиков с  $10^4$  атомами, полученные строгим численным моделированием, представлены на рисунке 4.1a,

где по оси отложена одинаково нормированная температура  $T/T_c^{(lim)}$ , причем  $T_c^{(lim)} = \frac{2\pi\hbar^2}{mL^2} \left( \frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}$  — критическая температура в термодинамическом пределе, одна и та же для рассматриваемых ловушек. Эти теплоемкости наследуют поведение автомоделльных кривых: нарастание и спадание теплоемкости в критической области происходит более круто для случая нулевых граничных условий. Пиковые значения теплоемкостей при этом отличаются на величину порядка 10%.

Усиливает различие теплоемкостей в выбранных осях тот факт, что переход к автомоделльному масштабу  $\eta(T)$  выражается по-разному для периодических и нулевых граничных условий, так как разные выражения получаются для величин (1.8)  $N_c$  и  $\sigma$  (если опираться на формулу (1.20), то различие в этих величинах связывается с различными вторыми полюсами  $t_2$ ). Из-за этого точки  $\eta = 0$ , являющиеся центром области автомоделльности (именно в них по определению достигается критическая температура  $T_c^{(meso)}$  для конкретной мезоскопической системы), оказываются для рассматриваемых ловушек раздвинуты по оси абсолютных или одинаково нормированных температур (см. рис. 4.1б). Как результат, в таких осях максимумы удельной теплоемкости (положения которых и так не совпадают для разных наложенных граничных условий из-за отличий соответствующих критических функций (3.26)  $\delta C_V$  и их предельных форм (3.27)  $F_c$ ) дополнительно отдаляются друг от друга. Если же температуру нормировать на критическую температуру мезоскопической системы  $T_c^{(meso)}$ , свою для каждой ловушки, данный дополнительный сдвиг не возникнет, что хорошо видно на рисунке 4.1б.

Заметим также, что дополнительный полюс  $t_3 = 1/2$  в случае нулевых граничных условий, связанный с запретом состояний с двумя нулевыми квантовыми числами, серьезных изменений в рассматриваемую ситуацию не привносит. Значительное изменение термодинамических величин может быть вызвано лишь изменением (в том числе, добавлением или исчезновением) до-

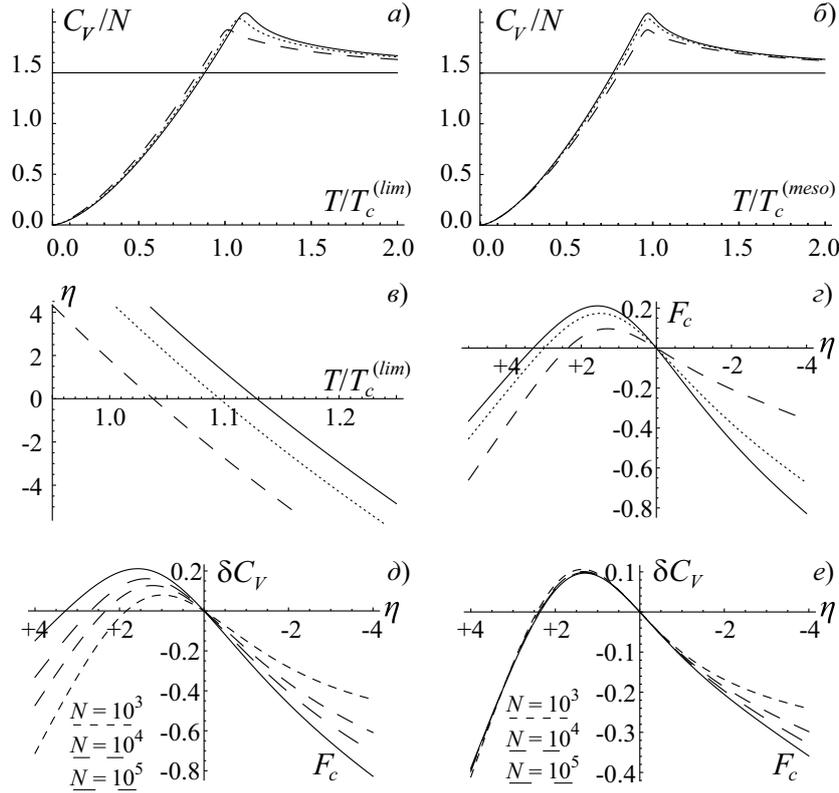


Рис. 4.1: Для мезоскопических ловушек – кубических ящиков с различными граничными условиями и числом удерживаемых атомов  $10^4$ , изображены: (а) зависимость удельной теплоемкости от  $T/T_c^{(lim)}$  — температуры, нормированной на общую для всех ловушек критическую температуру в термодинамическом пределе; (б) зависимость удельной теплоемкости от  $T/T_c^{(meso)}$  — температуры, нормированной на индивидуальную мезоскопическую критическую температуру каждой ловушки; (в) зависимость автомодельного аргумента (2.1)  $\eta$  от  $T/T_c^{(lim)}$ ; (г) автомодельные критические функции  $F_c$ , описывающие поведение теплоемкости в окрестности критической точки  $T_c^{(meso)}$ . Сплошные кривые соответствуют нулевым граничным условиям для волновой функции на гранях ловушки, пунктир — периодическим, кривые точками — комбинации граничных условий (по двум направлениям нулевые, по третьему — периодические). На (д) и (е) показано, как критическая функция теплоемкости (3.26)  $\delta C_V$  в мезоскопической ловушке, полученная строгим численным моделированием, стремится к своей автомодельной форме (3.27)  $F_c$  с увеличением размера системы (числа атомов  $N$ ) для нулевых и периодических граничных условий соответственно.

статочной большой группы состояний, чей совокупный вклад в статистику и термодинамику системы достаточно велик. Группа состояний с двумя нулевыми квантовыми числами этому свойству не удовлетворяет. Ее вклад при вычислении асимптотики (4.12) учитывается в рамках теории возмущений, в отличие от вклада целой „плоскости“ состояний, рождающей полюс в точке  $t = 1$ .

Изученная в данном разделе модельная ситуация может быть с хорошей точностью воспроизведена в эксперименте. Для этого требуется подобрать такие конфигурации ловушек, которые позволят лабораторно реализовать изменения спектра, подобные происходящим при смене граничных условий в ловушках-ящиках, и наблюдать связанные с этими возмущениями перемены в термодинамических характеристиках (в данном исследовании — это смещение и изменение максимума теплоемкости).

Из уже проведенного анализа следует, что наибольший интерес представляют ловушки аномального класса, в которых для самого правого полюса  $t_1$  функции (1.19)  $S(t)$  выполняется неравенство  $t_1 < 2$ . Самый распространенный тип ловушек — трехмерные квазигармонические — характеризуется полюсом  $t_1 = \frac{1}{1} + \frac{1}{1} + \frac{1}{1} = 3$  и в аномальный класс не попадают. Достичь условия  $t_1 < 2$  возможно выбором более быстрорастущего потенциала, для которого выше показатель степени в асимптотическом законе роста одночастичных энергий  $\lambda_q$ . Вторым способом является понижение эффективной размерности ловушки; например, в ловушках с сильной анизотропией для определенной области параметров частицам могут быть хорошо доступны только уровни, для которых какое-то выделенное квантовое число минимально.

Оба этих способа успешно осуществимы на практике. Квазидвумерные ловушки описаны в [16] и [17]. Кроме того, показана реализуемость близкого к однородному потенциала, отвечающего быстрорастущему энергетиче-

ческому спектру  $\{\lambda_q\}$  [19]. Отдельного упоминания заслуживает возможность создания квазивертикальной стенки, подобной описанной в работе [18], посвященной удержанию бозе-частиц. В ней такая стенка формировалась сильно негауссовыми лазерными пучками, такими что излучение имело „ножевую“ диаграмму направленности и образовывало отталкивающую атомы плоскость. Создание подобной стенки может быть использовано для изменения граничных условий в том или ином эксперименте.

## 4.2. Ловушки с изменяемыми граничными условиями: цилиндрическая геометрия

Наиболее прямой реализацией эксперимента по смене граничных условий, казалось бы, является создание ловушки с кольцевой геометрией [110, 111], которая естественным образом накладывает периодические граничные условия по азимуту. Рассечение ловушки такого типа по одному из радиусов при помощи упомянутой лазерной плоскости, сформированной достаточно интенсивным излучением для того, чтобы позволить пренебречь туннелированием, превращает азимутальные граничные условия в нулевые.

Рассмотрим возникающие здесь трудности в простейшем случае цилиндрически симметричного удерживающего потенциала, имеющего вид

$$U(r, \varphi, y) = \begin{cases} 0 & \text{в кольце } 0 < \varphi < 2\pi, r_{in} < r < r_{out}, 0 < y < H; \\ +\infty & \text{вне указанного кольца.} \end{cases} \quad (4.13)$$

Здесь  $r$  и  $\varphi$  — радиальная и азимутальная координата,  $y$  — координата вдоль оси цилиндра.

При аналитическом решении задачи о спектре частицы в таком потенциале переменные разделяются. Энергия одночастичного состояния задается

азимутальным и радиальным квантовыми числами  $q_\varphi$  и  $q_r$ , а также продольным квантовым числом  $q_y$ , отвечающим импульсу по оси  $y$ . Одночастичные энергетические уровни  $\lambda_q$  растут квадратично по каждому из трех квантовых чисел, поэтому самым правым полюсом функции ловушки  $S(t)$  здесь вновь является  $t_1 = \frac{3}{2}$ . По аналогии с ловушками-ящиками, замена периодических граничных условий нулевыми (например, с помощью рассеяния кольца лазерной плоскостью) приводит к тому, что исчезают все состояния, отвечающие нулевому азимутальному собственному числу  $q_\varphi$ .

Однако такая конфигурация ловушки является плохим вариантом для демонстрации эффектов, связанных со сменой граничных условий, поскольку спектр в подобной ловушке существенно анизотропен. Так, в предельном случае  $r_{out} \gg r_{in}$  задача о собственных функциях и энергиях может быть решена в терминах хорошо изученных функций Бесселя [112], при этом спектр  $\{\lambda_q\}$  выражается через нули этих функций. Из асимптотик распределения нулей функций Бесселя различных порядков [113] следует, что рост энергий  $\lambda_q$  при увеличении  $q_r$  будет быстрее роста по  $q_\varphi$  примерно в 10 раз для периодических граничных условий по азимуту и примерно в 40 раз для нулевых. Можно убедиться, что с уменьшением соотношения  $r_{out}/r_{in}$  эти характеризующие анизотропию числа будут неограниченно возрастать.

Отмеченная анизотропия не позволяет значительно изменить наблюдаемые термодинамические параметры: состояния с  $q_\varphi = 0$ , которые отбрасываются при реализации нулевых граничных условиях, имеют слишком быстро нарастающие энергии, и потому в целом заселены слабо, то есть не оказывают сильного влияния на теплоемкость системы (3.21)  $C_V$  ни через статистику числа частиц вне конденсата  $P(N)$ , ни через медленное слагаемое  $C_V^{(\infty)}$ . Варьирование высоты  $H$ , определяющей закон роста энергий от продольного квантового числа, также не позволяет значительно улучшить ситуацию.

Преодолеть недостаток, связанный с анизотропией, возможно в ловушках

с кольцевой геометрией, имеющих пониженную размерность. Создать такую ловушку можно, например, подобрав параметры системы, при которых эффективно заселены могут быть только состояния с минимальным значением какого-то из квантовых чисел.

Рассмотрим цилиндрически симметричный удерживающий потенциал:

$$U(r, \varphi, y) = \begin{cases} \frac{U_0}{H^2} y^2 & \text{в кольце } 0 < \varphi < 2\pi, \quad r_{in} < r < r_{out}; \\ +\infty & \text{вне указанного кольца,} \end{cases} \quad (4.14)$$

который, в отличие от рассмотренного ранее потенциала (4.13), вдоль оси цилиндрической системы координат является гармоническим, а не однородным. Выберем близкие радиусы  $r_{out} \simeq r_{in}$ , что соответствует очень сильной анизотропии в законе роста энергий  $\lambda_q$  при возрастании квантовых чисел  $q_r$  и  $q_\varphi$ . В такой системе энергетические спектры  $\{\epsilon^{(p)}\}$  и  $\{\epsilon^{(z)}\}$  (для случая периодических и нулевых граничных условий по азимуту соответственно) можно приблизительно найти в виде:

$$\begin{aligned} \epsilon^{(p)} &= 4E_\varphi q_\varphi^2 + E_r(q_r^2 - 1) + \hbar\omega q_y, \\ \text{где } q_\varphi &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \quad q_r = 1, 2, \dots; \quad q_y = 0, 1, 2, \dots; \\ \epsilon^{(z)} &= E_\varphi(q_\varphi^2 - 1) + E_r(q_r^2 - 1) + \hbar\omega q_y, \\ \text{где } q_\varphi &= +1, +2, \dots; \quad q_r = 1, 2, \dots; \quad q_y = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4.15)$$

Рост энергий с увеличением квантовых чисел описывают параметры  $E_\varphi = \frac{\hbar^2}{8mr_{in}^2}$ ,  $E_r = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(r_{out}-r_{in})^2}$  и  $\hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{2U_0}{mH^2}}$  (последний характеризует шаг эквидистантных энергетических уровней гармонического осциллятора, возникшего вдоль оси  $y$  и имеющего частоту  $\omega$ ).

Подбором размерных параметров легко добиться ситуации, в которой одновременно выполняются неравенства  $E_\varphi \ll T$ ,  $\hbar\omega \ll T$ , но при это оказывается  $E_r \gtrsim T$ . В этом случае энергии  $\epsilon_q$  демонстрируют очень быстрый рост при увеличении „радиального“ квантового числа  $q_r$ , и уже для первого его

неминимального значения уровни заселены слабо.

С точки зрения одночастичного энергетического спектра такая ловушка становится двумерной, имеющей только одно „радиальное“ квантовое состояние с минимально возможным  $q_r = 1$ . Так как одночастичные энергии растут квадратично по азимутальному квантовому числу  $q_\varphi$  и линейно по  $q_y$ , старшим полюсом функции  $S(t)$  для данного удерживающего потенциала вновь оказывается  $t_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{1} = \frac{3}{2}$ , то есть качественно картина критической области получается той же, что для ловушек-ящичков.

Для безразмерного спектра  $\{\lambda_q\}$  этой эффективно двумерной ловушки имеем (верхние индексы  $(p)$  и  $(z)$  соответствуют периодическим или нулевым граничным условиям по азимутальной координате):

$$\begin{aligned}\lambda^{(p)} &= 4q_\varphi^2 + Aq_y, & q_\varphi &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, & q_y &= 0, 1, 2, \dots; \\ \lambda^{(z)} &= q_\varphi^2 - 1 + Aq_y, & q_\varphi &= +1, +2, \dots, & q_y &= 0, 1, 2, \dots.\end{aligned}\quad (4.16)$$

Как и ранее, при обезразмеривании  $\epsilon_q/T = \alpha\lambda_q$  мы для большей наглядности используем для обоих случаев граничных условий один и тот же параметр  $\alpha = \frac{E_\varphi}{T} = \frac{\hbar^2}{8mr_{in}^2T}$ . Постоянная  $A = \hbar\omega/E_\varphi$  содержит информацию о соотношении характерных размеров ловушки  $r_{in} \simeq r_{out}$  и  $H$ . На ее подбор не наложено никаких фундаментальных ограничений, подобных тем, которые не позволяли изотропизовать спектр в предыдущем примере (4.13).

Для функций ловушки  $S(t)$ , ассоциированных с данными спектрами, легко определить положения полюсов  $t_j$  и величины соответствующих вычетов  $R_{t_j}$ , вычислив разложение одночастичной статсуммы  $\Xi(\beta)$  при малых аргументах с помощью формул (A.15), (A.16), (A.16) и (A.18) из Приложения А. В случае периодических граничных условий по азимуту получается

$$t_1 = \frac{3}{2}, R_{3/2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2A}; \quad t_2 = \frac{1}{2}, R_{1/2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}; \quad \dots; \quad (4.17)$$

в случае нулевых азимутальных условий имеем

$$t_1 = \frac{3}{2}, R_{3/2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2A}; \quad t_2 = 1, R_1 = -\frac{1}{2A}; \quad t_3 = \frac{1}{2}, R_{1/2} = \frac{\sqrt{\pi}(2+A)}{4A}; \dots \quad (4.18)$$

Как и для модельного примера ловушек-ящичков, в случае нулевых граничных условий возникает полюс в точке  $t = 1$ , который добавляет в асимптотику характеристической функции член  $u^{-1} \ln u^{-1}$  с отрицательным вычетом, что делает автомодельную структуру теплоемкости более резкой.

Сравнение теплоемкостей для мезоскопических систем и их критических функций при разных наложенных азимутальных граничных условиях дано на рис. 4.2. Качественно ситуация очень похожа на рассмотренную для ловушек-ящичков в разделе 4.1, несмотря на то что удерживающие профили выглядят совершенно по-разному. Отметим, что максимумы критических функций  $F_c$  для кольцевой ловушки оказываются значительно ближе к критической точке, чем это было для ловушек-ящичков: теперь они достигаются при  $\eta \simeq 0$  для периодических азимутальных граничных условий и  $\eta \simeq 0.3$  для нулевых (см. рис. 4.2*г*).

Графики, построенные численно на рис. 4.2*а-в* для мезоскопической кольцевой ловушки с  $E_\varphi \simeq \hbar\omega$ , удерживающей  $10^4$  атомов, показывают, что при смене азимутальных граничных условий максимальные значения удельной теплоемкости изменяется на величину порядка 3 – 4%, что вполне может быть измерено в эксперименте. Отметим, что эта величина отклика теплоемкости на изменение граничных условий похожа на ту, которая реализуется для ловушек-ящичков из раздела 4.1, если изменить граничные условия с периодических на нулевые только на одной паре противоположенных граней (этот случай изображен кривыми из точек на рис. 4.1*а-г*).

Наконец, так же как и в модельном примере, при сравнении случаев различных граничных условий обнаруживается заметная разница положений максимумов удельной теплоемкости (на несколько процентов). При этом в

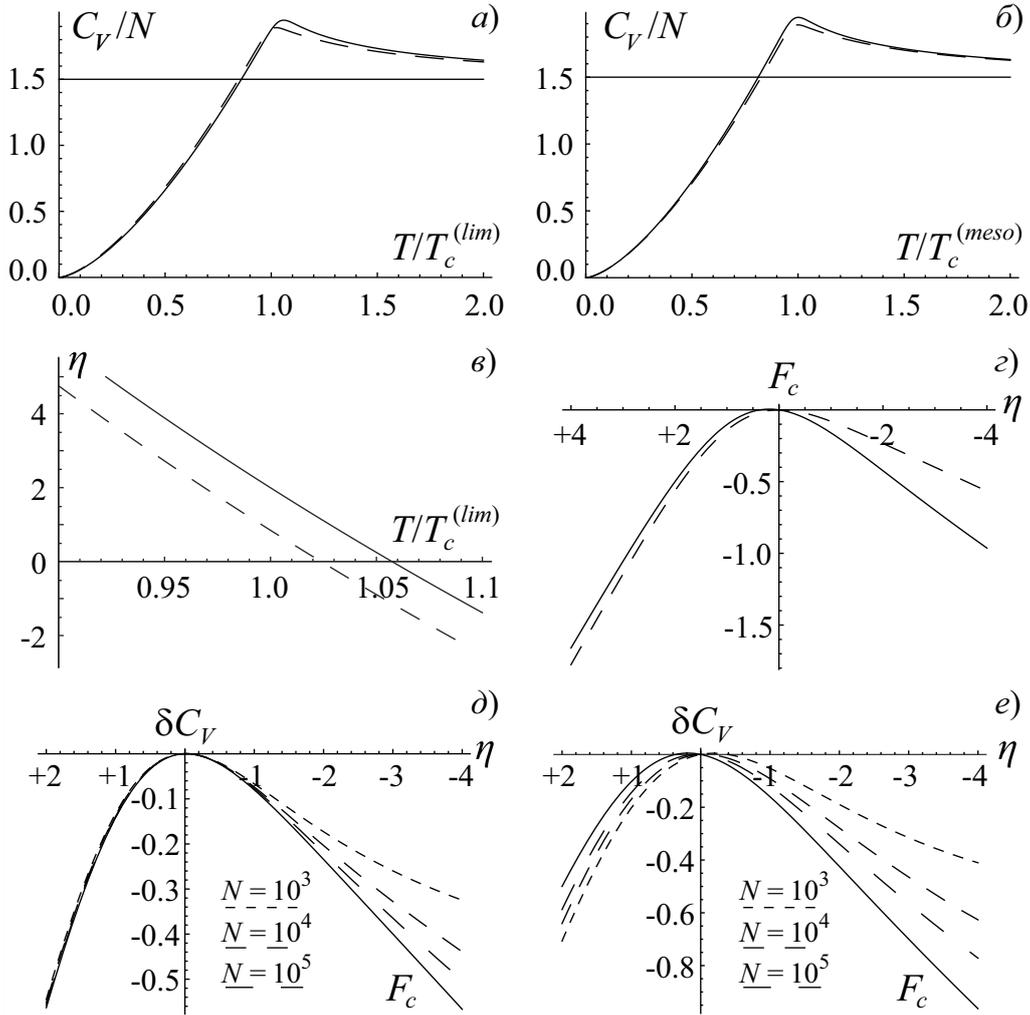


Рис. 4.2: Для мезоскопических квазидвумерных кольцевых ловушек с периодическими или нулевыми азимутальными граничными условиями, описываемых потенциалом (4.16) и удерживающих  $10^4$  атомов, под буквами (а)-(г) изображены те же зависимости, что и на рисунке 4.1. Периодическим граничным условиям соответствуют пунктирные кривые, нулевым – сплошные кривые. На (д) и (е) показано, как структура теплоемкости в мезоскопической ловушке стремится (см. (3.27)) к автомодельной форме с увеличением размера системы (числа атомов  $N$ ) для периодических и нулевых азимутальных граничных условий соответственно.

качестве аргумента по горизонтальной оси следует выбирать температуру, нормированную для обоих рассматриваемых случаев одинаково — например, на выражение для критической температуры в термодинамическом пределе  $T_c^{(lim)} = \frac{\hbar^2 A^{2/3}}{2^{7/3} \pi^{1/3} m r_{in}^2} \left( \frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}$ , как это сделано на рис. 4.2а. Связано это, опять же, с продемонстрированным на рис. 4.2в влиянием граничных условий на зависимость автомодельного аргумента  $\eta$  от температуры  $T$ .

### 4.3. Ловушки с изменяемыми граничными условиями: декартова геометрия

Реализовать запрет состояний с одним выделенным квантовым числом можно не только с помощью замены граничных условий в кольцевой геометрии. Возможно вместо этого создать трехмерную ловушку-параллелепипед с достаточно крутыми стенками по всем трем направлениям и „разрезать“ ее дополнительно лазерной плоскостью, параллельной какой-либо паре стенок. Высоту потенциального барьера стенки, определяемую интенсивностью лазера, предполагаем допускающей эффективное туннелирование и регулируемой. Простейший модельный потенциал, описывающий такую систему, имеет вид:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} \frac{\hbar B}{m L_x} \delta \left( x - \frac{L_x}{2} \right) & \text{при } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z; \\ +\infty & \text{вне параллелепипеда.} \end{cases} \quad (4.19)$$

Здесь  $B$  — параметр, определяемый интенсивностью лазерного поля, образующего рассекающую плоскость,  $\delta$  — дельта-функция,  $L_x, L_y, L_z$  — длины ребер параллелепипеда.

Спектр такой ловушки растет квадратично по всем квантовым числам, т. е. вновь обуславливает самый правый полюс функции ловушки в точке

$t_1 = \frac{3}{2}$ . Энергетические уровни находятся методом разделения переменных:

$$\lambda = \lambda^{(1d)}(q_x) - \lambda_{min}^{(1d)} + \left(\frac{L_x}{L_y}\right)^2 (q_y^2 - 1) + \left(\frac{L_x}{L_z}\right)^2 (q_z^2 - 1), \quad \alpha = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2 T}, \quad (4.20)$$

квантовые числа  $q_y$  и  $q_z$  принимают значения  $+1, +2, \dots$ . Вклад в энергетический уровень от квантового числа  $q_x$ , выражаемый как  $\lambda^{(1d)}(q_x) - \lambda_{min}^{(1d)}$ , проанализируем отдельно (введение слагаемого  $\lambda_{min}^{(1d)}$  упрощает возникающие при этом формулы, позволяя не выполнять условие  $\lambda^{(1d)} = 0$  для минимального  $q_x$ , но сохранить нормировку  $\lambda_0 = 0$ ).

Итак, для четных квантовых чисел  $q_x = +2, +4, \dots$  волновая функция не чувствует дельта-функции в потенциале, потому для них выполняется  $\lambda^{(1d)} = q_x^2$ . Для нечетных аргументов величина  $\lambda^{(1d)}(q_x)$  определяется как корень уравнения  $\text{tg} \frac{\pi \lambda^{(1d)}}{2} = \frac{1}{B} \frac{\pi \lambda^{(1d)}}{2}$  [114], лежащий в интервале  $(q_x - 1, q_x)$ . Заметим, что если параметр  $B$  превысит 1, то согласно этому уравнению с тангенсом собственное значение  $\lambda^{(1d)}$  в интервале  $(0, 1)$  пропадет (т.е. становится запрещенным квантовое число  $q_x = 1$ ), а остальные уровни просто несколько сдвинутся. Это значит, что изменяя величину  $B$  вокруг порогового значения  $B = 1$ , мы можем включать в или исключать из системы большую группу состояний (так как при этом изменяется и основное состояние, имеем  $\lambda_{min}^{(1d)} = 4$  при  $B > 1$  и  $\lambda_{min}^{(1d)} = \lambda^{(1d)}(1)$  в случае  $B < 1$ ). Ситуация аналогична модельному случаю ловушки-ящика, где изменение граничных условий исключает все состояния с конкретным значением  $q_i = 0$ .

Сравнение теплоемкостей и их критических функций для таких мезоскопических систем с одинаковыми сторонами ловушки  $L_x = L_y = L_z$  при значениях параметра  $B = 0.9$  и  $B = 1.1$  представлено на рис. 4.1. Для системы, удерживающей  $10^4$  атомов, отличие величин максимумов теплоемкостей вновь составляет доступные для измерения  $3 - 4\%$ . Системе со значением  $B > 1$ , в которой не реализуется большая группа состояний с  $\lambda^{(1d)}$  в интервале  $(0, 1)$ , отвечает критическая функция с более крутыми крыльями.

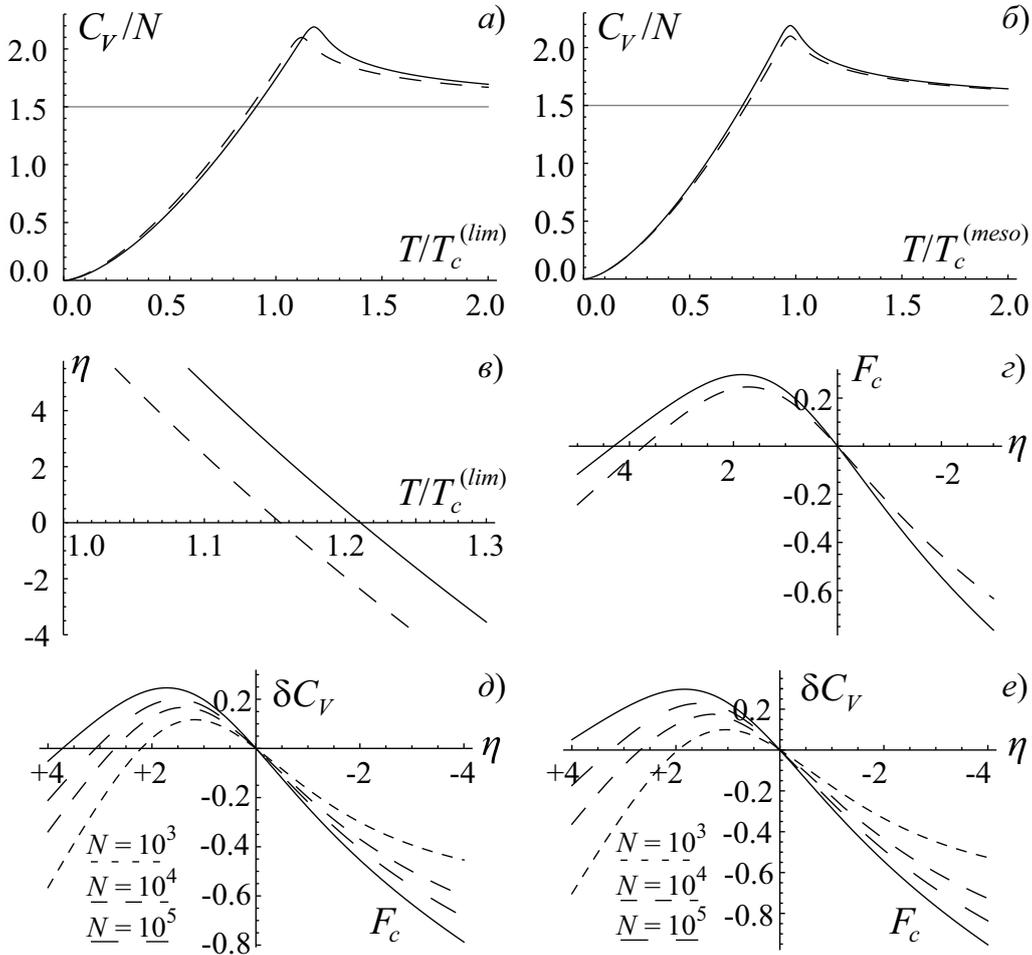


Рис. 4.3: Для мезоскопических систем из  $10^4$  атомов, удерживаемых потенциалом (4.19), т.е. ловушкой-ящиком, рассеянным „лазерной“ плоскостью нормированной интенсивности  $B$ , под буквами (а)-(г) изображены те же зависимости, что и на рисунке 4.1. Пунктирные кривые соответствуют нормированной интенсивности  $B = 0.9$ , а сплошные линии – интенсивности  $B = 1.1$ , при которой достаточно большая часть энергетических состояний в системе пропадает. На (д) и (е) показано, как структура теплоемкости в мезоскопической ловушке стремится (см. (3.27)) к автомодельной форме с увеличением размера системы для значений  $B = 0.9$  и  $B = 1.1$  соответственно.

Актуальным остается и тот факт, что максимумы теплоемкостей достигаются при разных абсолютных температурах. При этом величина сдвига согласуется с предсказанием, которое можно получить из зависимостей  $\eta(T)$  и  $F_c(\eta)$ , изображенных на рис. 4.1в и г-е соответственно.

Отметим также на данном примере, что для изменения термодинамических характеристик вовсе не обязательно, чтобы новый полюс возникал или пропадал при изменении граничных условий, как это оказывалось для модельных ловушек-ящиков или двумерных цилиндрических ловушек. В данном случае полюс функции в точке  $t_2 = 1$  присутствует и при  $B = 0.9$ , и при  $B = 1.1$  (его наличие выдает характер стремления теплоемкости к универсальной кривой, общий для графика на рисунке 4.1д и графиков на рисунке 4.3д-е), а для проявления исследуемого эффекта достаточно заметного изменения величины соответствующего вычета  $R_{t_2}$ . Аналогичную ситуацию в терминах модельных ловушек-ящиков из раздела 4.1 мы бы получили, если бы при уже наложенных нулевых граничных условиях, не допускающих  $q_x = 0$ ,  $q_y = 0$  и  $q_z = 0$ , могли дополнительно исключать все состояния с  $q_x = 1$ .

На основе примера с рассеченной трехмерной ловушкой-ящиком можно легко предложить конфигурацию ловушки, для которой относительное изменение теплоемкости, связанное с изменением граничных условий, будет примерно втрое сильнее и достигнет 10 – 12% для числа атомов  $N = 10^4$ . Для этого исходную ловушку-ящик нужно рассечь лазерным излучением с „ножевой“ диаграммой направленности не по одному, а по всем трем ортогональным направлениям, моделируя тем самым потенциал вида:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} +\infty & \text{вне области } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z; \\ \frac{\hbar B_x}{mL_x} \delta\left(x - \frac{L_x}{2}\right) + \frac{\hbar B_y}{mL_y} \delta\left(x - \frac{L_y}{2}\right) + \frac{\hbar B_z}{mL_z} \delta\left(x - \frac{L_z}{2}\right) & \text{внутри.} \end{cases} \quad (4.21)$$

Действительно, иллюстрируемый рисунком 4.1 случай ящика с одной лазер-

ной аналогичен модельной задаче из раздела 4.1, для которой граничные условия меняются только на одной паре параллельных граней. В то же время превышение единицы всеми  $B_i$  ( $i = x, y, z$ ) в потенциале (4.21) в терминах модельной задачи соответствует замене граничных условий на всех гранях.

Кроме того, укажем, что вместо создания ловушки с квазивертикальными стенками по всем трем направлениям, описываемой потенциалом (4.19), можно рассматривать двумерную конфигурацию, где быстрорастущий спектр одночастичных энергий требуется создать только вдоль одного направления  $x$ . Удержание по поперечному направлению  $y$  при этом осуществляется гармоническим потенциалом, наиболее распространенным в экспериментах и простым в создании:

$$U(x, y) = \begin{cases} \frac{\hbar B}{mL} \delta(x - \frac{L}{2}) + \frac{U_0}{H^2} y^2 & \text{в области } 0 < x < L; \\ +\infty & \text{вне указанной области.} \end{cases} \quad (4.22)$$

Иными словами, данный вариант эквивалентен тому, что два направления  $y$  и  $z$ , каждое из которых обеспечивает квадратичный рост спектра  $\{\lambda_q\}$ , эффективно заменяются одним направлением  $y$ , обеспечивающим линейный рост собственных значений. Совершенно аналогичным образом выглядит переход от ловушки-кольца (4.13) к ловушке-кольцу (4.14). Изменение пика теплоемкости в такой ловушке также будет достигать величины 3 – 4%.

#### 4.4. Выводы

На примере теплоемкости идеального газа было показано, каким образом возникает и проявляется зависимость термодинамических параметров системы в критической области от негрубых возмущений спектра, не меняющих положение и вычет старшего полюса функции ловушки. Анализ проведен с использованием автомодельных свойств критической области бозе-системы.

Указанная зависимость не может быть обнаружена при исследовании системы сразу в термодинамическом пределе в приближении непрерывного энергетического спектра.

Продемонстрировано, что в критической области бозе-системы для термодинамических величин, значительно изменяющихся вблизи фазового перехода, влияние негрубых возмущений спектра (например, изменения граничных условий) может оказаться существенным. Для того чтобы этот эффект граничных условий проявился, возмущение спектра должно затрагивать (сдвигать, разрешать или запрещать) большое число уровней, которые потенциально достигаемы для частиц при рассматриваемой температуре и потому вносят заметный вклад в термодинамические характеристики системы. Добиться изменения относительно большой фракции уровней проще в ловушках так называемого аномального класса, где энергии одночастичных состояний быстро нарастают с ростом номера, так что число уровней, определяющих статистические и термодинамические характеристики всей системы, является небольшим само по себе.

Рассмотрены несколько конфигураций ловушек, которые позволяют экспериментально реализовать подобные возмущения спектра, а именно, ловушки-кольца, в которых возможно переключение азимутальных граничных условий с периодических на нулевые, и рассекаемые „лазерным ножом“ ловушки-ящички, в которых возможно исключить целый пласт состояний, управляя интенсивностью света в „лазерной“ секущей плоскости. На основе численных расчетов для систем с числом атомов порядка  $10^3 - 10^5$  предсказан эффект изменения величины максимума теплоемкости и положения этого максимума на несколько процентов при изменении граничных условий ловушки.

## ГЛАВА 5. НЕЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ КАНОНИЧЕСКОГО И БОЛЬШОГО КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЕЙ

В данной главе статистика и термодинамика идеального бозе-газа, удерживаемого в ловушке с произвольным потенциалом, рассмотрена в приближении большого канонического ансамбля. Дано полное описание мезоскопической системы, применимое во всей области ее параметров, включая непосредственную окрестность критической точки фазового перехода. Продемонстрировано, что и в большом каноническом ансамбле для критической области имеется автомодельность статистических и термодинамических величин, подобная обнаруженной в рамках канонического ансамбля. Соответствующие гладкие самоподобные функции получены в первую очередь для химического потенциала, а затем для распределений числа частиц в конденсате и вне него, для полной энергии системы и для ее теплоемкости. Проводится сравнение полученных в рамках разных ансамблей несовпадающих критических функций, описывающих статистические и термодинамические характеристики системы. Вместе с тем обосновывается совпадение их асимптотик и эквивалентность ансамблей при вычислении обусловленных надконденсатными частицами термодинамических величин вдали от критической точки.

Результаты опубликованы в работах [68, 92, 102, 103].

## 5.1. Аналитическое описание мезоскопической системы во всей критической области в рамках большого канонического ансамбля

Широко используемое приближение большого канонического ансамбля подразумевает, что в системе могут возникать и пропадать частицы (например, в результате обмена с окружающей ее средой). Данный процесс характеризуется химическим потенциалом системы  $\mu < 0$ , имеющим размерность энергии. Аналогично тому, как в предыдущих главах одночастичные энергии описывались безразмерным спектром  $\{\lambda_q\}$ , в настоящей главе для химического потенциала  $\mu$  удобно ввести его безразмерный аналог  $\tilde{\mu} < 0$ , так что

$$\frac{\epsilon_q}{T} = \alpha \lambda_q, \quad \frac{\mu}{T} = \alpha \tilde{\mu}, \quad \alpha = \text{const} \times \frac{\epsilon_1}{T}. \quad (5.1)$$

Переходу к термодинамическому пределу, как и всюду ранее, отвечает  $\alpha \rightarrow 0$ .

Для наглядности при всем последующем обсуждении статистических и термодинамических характеристик системы будут использоваться индексы (бка) и (ка), явно указывающие на большой канонический ансамбль и канонический ансамбль соответственно.

Поскольку в рамках большого канонического ансамбля полное число частиц не фиксировано, числа заполнения  $n_q$  одночастичных состояний  $q$  с энергиями  $\epsilon_q$  можно рассматривать как независимые случайные величины со средними значениями [60]

$$\langle n_q \rangle^{(\text{бка})} = \frac{1}{e^{(\epsilon_q - \mu)/T} - 1} \equiv \frac{1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1}. \quad (5.2)$$

Значение химического потенциала  $\mu < 0$  (или его безразмерной версии  $\tilde{\mu}$ ) подбирается таким образом, чтобы ожидаемое полное число частиц в системе, флуктуирующее в рассматриваемом приближении, совпадало с заданным

числом  $N$  загруженных в ловушку атомов:

$$\sum_{q \geq 0} \frac{1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1} = N. \quad (5.3)$$

Сумма берется по всем одночастичным состояниям, включая и основное состояние со средним числом заполнения  $\langle n_0 \rangle^{(\text{бка})} = (e^{-\alpha \tilde{\mu}} - 1)^{-1}$ .

Число частиц в основном состоянии  $q = 0$  описывается экспоненциальным распределением:

$$\rho_{n_0}^{(\text{бка})} = e^{\alpha \tilde{\mu} n_0} (1 - e^{\alpha \tilde{\mu}}). \quad (5.4)$$

Распределение полного числа частиц вне конденсата, т. е. суммы  $n = \sum_{q > 0} n_q$  независимых случайных величин  $n_q$ , записывается в виде преобразования Фурье от явно вычисляемой характеристической функции  $\Theta^{(n)(\text{бка})}(u)$ :

$$\rho_n^{(\text{бка})} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-iun} \Theta^{(n)(\text{бка})}(u) du, \quad \Theta^{(n)(\text{бка})} = \prod_{q > 0} \frac{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - e^{iu}}, \quad (5.5)$$

и имеет следующие математическое ожидание  $\langle n \rangle^{(\text{бка})}$  и дисперсию  $\sigma^{(\text{бка})2}$ :

$$\begin{aligned} \langle n \rangle^{(\text{бка})} &= \sum_{q > 0} \frac{1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1}, \\ \left( \sigma^{(\text{бка})} \right)^2 &= \sum_{q > 0} \left( \frac{1}{(e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1)^2} + \frac{1}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1} \right). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Термодинамические величины системы определены статистической суммой

$$Z^{(\text{бка})} = \prod_{q > 0} \frac{1}{1 - e^{-\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})}}. \quad (5.7)$$

Для достаточно больших систем, характеризующихся  $\alpha \ll 1$ , особенности распределения числа частиц вне конденсата  $\langle n \rangle^{(\text{бка})}$  можно изучить с помощью широко используемого в задачах статистической радиофизики кумулянтного анализа, подобно тому, как это было сделано для „необрезанного“ распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в каноническом ансамбле. При этом для кумулянтов полного числа частиц вне конденсата  $n$  получаются следующие представления,

аналогичные (1.18) и (1.20):

$$\begin{aligned} \ln \Theta^{(n)(\text{бка})}(u) &= \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t+1) \left( S\left(t, \frac{u}{\alpha} - i\tilde{\mu}\right) - S(t, -i\tilde{\mu}) \right) \\ \kappa_m^{(n)(\text{бка})} &= \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t+1-m) S(t, -i\tilde{\mu}), \\ S(t, -i\tilde{\mu}) &\equiv \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - \tilde{\mu})^t}, \quad S(t, u - i\tilde{\mu}) \equiv \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - \tilde{\mu} - iu)^t}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Здесь, по-прежнему,  $\zeta(t)$  является дзета-функцией Римана, а  $\Gamma(t)$  — гамма-функцией. Отличие от выражений (1.18) и (1.20), полученных для характеристической функции  $\Theta^{(n)}(u)$  и кумулянтов  $\kappa_m^{(n)(\infty)}$  в „необрезанной“ задаче, связано только с функцией ловушки  $S$ , которая в данном случае ассоциирована с последовательностью  $\{\lambda_q - \tilde{\mu}\}$ , то есть сдвинутым на величину безразмерного химического потенциала спектром ловушки.

На основе использованной кумулянтной техники для канонического ансамбля удалось показать, что переход к масштабированным аргументам  $x = \frac{n-N_c}{\sigma}$  и  $\eta = \frac{N-N_c}{\sigma}$  (которые определены через математическое ожидание и дисперсию „необрезанного“ распределения) обнаруживает автомодельный характер поведения статистических и термодинамических величин системы в критической области. Имея в виду аналогию между распределениями  $\rho_n^{(\infty)}$  и  $\rho_n^{(\text{бка})}$ , подобного свойства системы можно ожидать и в приближении большого канонического ансамбля. Однако для этого необходимо изучить поведение химического потенциала в критической области и убедиться, что характерные для этой области параметров величины  $\tilde{\mu}$  не изменят полюса, вносящего наибольший вклад в величины кумулянтов  $\kappa_m^{(n)(\text{бка})}$  по сравнению с  $\kappa_m^{(n)(\infty)}$ .

## 5.2. Автомоделное поведение химического потенциала

Для того чтобы проанализировать поведение химического потенциала в критической области, обратимся к определяющему  $\tilde{\mu}$  уравнению (5.3) и перепишем его в терминах автомоделной переменной  $\eta = \frac{N-N_c}{\sigma}$ , соответствующей масштабированному полному числу частиц в системе:

$$\langle n_0 \rangle^{(\text{бка})} + \langle n \rangle^{(\text{бка})} = N_c + \sigma\eta. \quad (5.9)$$

Имея в виду случай малых  $\alpha$ , воспользуемся представлениями (5.8) и (1.20) для  $\langle n \rangle^{(\text{бка})} \equiv \kappa_1^{(n)(\text{бка})}$  и  $N_c \equiv \kappa_1^{(n)(\infty)}$ , чтобы получить их разность:

$$\langle n \rangle^{(\text{бка})} - N_c = \sum_j \text{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t) (S(t, -i\tilde{\mu}) - S(t)). \quad (5.10)$$

Таким образом, исходное уравнение (5.9) для химического потенциала принимает вид:

$$\frac{1}{e^{-\alpha\tilde{\mu}} - 1} + \sum_j \text{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} \zeta(t) (S(t, -i\tilde{\mu}) - S(t)) = \sigma\eta. \quad (5.11)$$

В термодинамическом пределе  $\alpha \rightarrow 0$  ограничимся анализом самых старших по  $\alpha$  членов, присутствующих в уравнении, то есть для вклада основного состояния запишем  $(e^{-\alpha\tilde{\mu}} - 1)^{-1} \approx -1/(\alpha\tilde{\mu})$ , а из всей суммы по вычетам удержим только самый правый полюс. Таковым, в зависимости от свойств последовательности  $\{\lambda_q\}$ , может оказаться полюс дзета-функции  $\zeta(t)$  в точке  $t = 1$  или же полюс функции  $S(t, -i\tilde{\mu}) - S(t)$ , лежащий в точке  $t = r - 1$  и имеющий вычет  $R\tilde{\mu}$  (как следует из Приложения А, для функций  $S(t, -i\tilde{\mu})$  и  $S(t)$  положение самого правого полюса  $t = r$  и соответствующий вычет  $R$  совпадают, т. е. разность функций в  $t = r$  регулярна). Эта конкуренция полюсов обуславливает в приближении большого канонического ансамбля разделение ловушек на два класса, которое совпадает с описанным в разделе 2.1 разделением на гауссов и аномальный классы. Первый из упомянутых полюсов

$t = 1$  оказывается старшим для ловушек аномального класса ( $r < 2$ ), в то время как второй полюс,  $t = r$ , является самым правым для ловушек гауссова класса ( $r > 2$ ).

В соответствии с вышесказанным, для ловушек гауссова класса уравнение (5.11) в термодинамическом пределе принимает вид

$$-\frac{1}{\alpha\tilde{\mu}} + \alpha^{1-r}\zeta(r-1)R\tilde{\mu} = \sigma\eta, \quad (5.12)$$

или, с учетом справедливого при  $r > 2$  выражения  $\sigma^2 = \alpha^{-r}\zeta(r-1)R$ :

$$-\frac{1}{\sigma\alpha\tilde{\mu}} + \sigma\alpha\tilde{\mu} = \eta. \quad (5.13)$$

Таким образом, комбинация  $\alpha\sigma\tilde{\mu} \equiv \sigma\mu/T$  для всех ловушек гауссова класса стремится с ростом размера системы к одной и той же критической функции, вычисляемой явно:

$$\frac{\sigma\mu}{T} \rightarrow F_\mu(\eta) = \frac{\eta - \sqrt{\eta^2 + 4}}{2}. \quad (5.14)$$

Форма ловушки при этом определяет только параметры  $N_c$  и  $\sigma$ , задающие автомодельный аргумент  $\eta$ . Сам безразмерный химический потенциал  $\tilde{\mu}$  в критической области имеет порядок величины  $\alpha^{\frac{r-2}{2}}$ , не превышающий  $\alpha^0$ . Асимптотики найденной универсальной функции вдали от критической точки, т.е. при  $|\eta| \gg 1$ , имеют следующий вид:

$$F_\mu(\eta \rightarrow +\infty) \simeq -\frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^3} - \frac{2}{\eta^5} + \dots, \quad F_\mu(\eta \rightarrow -\infty) \simeq \eta + \frac{1}{\eta} - \frac{1}{\eta^3} + \dots \quad (5.15)$$

Для ловушек аномального класса уравнение (5.11) в термодинамическом пределе принимает вид:

$$-\frac{1}{\alpha\tilde{\mu}} + \frac{1}{\alpha}(S(1, -i\tilde{\mu}) - S(1)) = \sigma\eta, \quad (5.16)$$

где разность функций ловушек (как уже отмечалось, она хорошо определена в точке  $t = 1$ ) вычисляется с помощью интегрального преобразования

Меллина и оказывается регулярной функцией  $\tilde{\mu}$  (см. (A.12) из Приложения А):

$$S(1, -i\tilde{\mu}) - S(1) = \int_0^\infty \beta^{-1} \Xi(\beta) (e^{\beta\tilde{\mu}} - 1) d\beta. \quad (5.17)$$

Принимая во внимание выражение  $\sigma = \sqrt{S(2)}\alpha^{-1}$ , справедливое для дисперсии распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в случае ловушек аномального класса, получаем уравнение, выражающее масштабированное полное число частиц в ловушке  $\eta$  через универсальную функцию величины  $F_\mu = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\sigma\mu}{T}$ , характеризующую химический потенциал

$$-\frac{1}{F_\mu} + \frac{1}{\sqrt{S(2)}} \left[ S \left( 1, -i \frac{F_\mu}{\sqrt{S(2)}} \right) - S(1) \right] = \eta. \quad (5.18)$$

Функция, обратная к приведенной выше и определяемая только безразмерным одночастичным энергетическим спектром  $\{\lambda_q\}$ , является универсальной критической функцией  $F_\mu(\eta)$ , описывающей плавное изменение химического потенциала в окрестности критической точки. С ростом размеров ловушки к ней быстро сходится комбинация параметров мезоскопической ловушки  $\alpha\sigma\mu$ , в точности та же, которая возникала для ловушек гауссова класса. При этом сам безразмерный химический потенциал  $\tilde{\mu}$  в критической области по порядку величины соответствует  $\alpha^0$ .

В области развитого конденсата  $\eta \gg 1$ , когда наибольший вклад в левую часть (5.18) вносит член  $-\frac{1}{F_\mu}$ , асимптотика  $F_\mu$  потенциала описывается уравнением

$$-\frac{1}{F_\mu} + F_\mu + \frac{S(3)}{S^{3/2}(2)} F_\mu^2 + \dots + \frac{S(n+1)}{n! S^{\frac{n+1}{2}}(2)} F_\mu^n + \dots = \eta; \quad F_\mu \rightarrow -\frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^3} + \dots \quad (5.19)$$

Первые два члена асимптотики (и только они) оказываются одинаковыми для ловушек как гауссова, так и аномального класса.

В области  $-\eta \gg 1$ , соответствующей переходу к классической фазе, нетривиальная асимптотика может быть получена с использованием следующего

разложения обобщенной функции ловушки (см. (A.11) в Приложении A):

$$S(t, -i\zeta) = \sum_{j=1}^{\infty} R_{t_j} \Gamma(t - t_j) (-\zeta)^{t_j - t} \quad \text{при} \quad -\zeta \gg 1, \quad (5.20)$$

где  $t_i$  и  $R_{t_i}$  являются полюсами и вычетами простой функции ловушки  $S(t)$ . Конкретное выражение для асимптотики критической функции  $F_\mu$  при  $-\eta \gg 1$ , конечно, зависит от безразмерного спектра удерживающего потенциала. В частности, для трехмерной кубической ловушки-ящика с периодическими граничными условиями получаем

$$F_\mu \simeq -\frac{S^{3/2}(2)}{4\pi^4} (\eta + S(1))^2, \quad S(1) \simeq -2.3, \quad (5.21)$$

а для ловушки-ящика с нулевыми граничными условиями получаем

$$F_\mu \simeq -\sqrt{S(2)} \left[ \frac{1 + \pi}{\pi} + \frac{9}{\pi^2} W_{-1}^2 \left[ \frac{-\pi}{3} e^{\frac{4}{3\pi} (\sqrt{S(2)} \eta - x_0)} \right] \right], \quad x_0 \simeq -0.77. \quad (5.22)$$

Здесь  $W_{-1}$  является нижней ветвью функции Ламберта, обратной к  $x e^x$ .

Обратим внимание на тот факт, что полученные асимптотики переключаются с выражениями для стационарных точек (4.7) и (4.11), возникающих при вычислении асимптотик  $\eta \gg 1$  статистических распределений в рамках канонического ансамбля в разделе 4.1 по описанному в разделе 2.2.2 методу. Это не простое совпадение, а частное проявление общего соотношения, доказанного в разделе 5.5 и (как будет продемонстрировано) ответственного за близость полученных для разных ансамблей асимптотик термодинамических характеристик системы при  $T > T_c$  вдали от критической точки.

Итак, независимо от принадлежности ловушки к тому или иному классу, введенная одним и тем же способом комбинация параметров  $\sigma\mu/T$  демонстрирует в критической области мезоскопической системы близкое к автомодельному поведению. С увеличением размера системы эта комбинация быстро сходится к универсальной критической функции  $F_\mu$  аргумента  $\eta$  (масштабированного полного числа частиц в ловушке), которая с математической

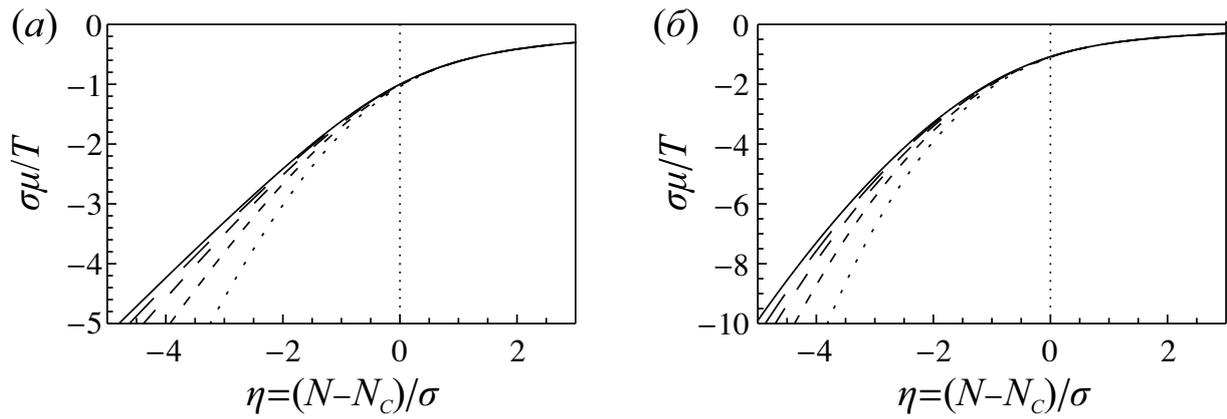


Рис. 5.1: Зависимость масштабированного химического потенциала  $\sigma\mu/T$  от масштабированного полного числа частиц в ловушке  $\eta = (N - N_c)/\sigma$  для мезоскопических систем бозе-газа в трехмерных и изотропных гармонической ловушке ( $r = 3$ , гауссов класс, (а)) и ловушке-ящике с непроницаемыми стенками ( $r = 3/2$ , аномальный класс, (б)). Кривые приведены для задающих размер системы критических чисел частиц  $N_c$  равных  $10^2 - 10^5$  (пунктирные линии с удлиняющимися штрихами); сплошная кривая описывает предельную критическую функцию  $F_\mu$ , определенную уравнениями (5.14) и (5.18).

точки зрения является специальной функцией, определенной последовательностью  $\{\lambda_q\}$  и не зависящей от каких-либо размерных параметров системы. Рисунок 5.1 демонстрирует обнаруженное свойство автомодельности на двух конкретных примерах ловушек, относящихся к разным классам.

### 5.3. Сравнение канонического и большого канонического ансамблей: статистические распределения

Теперь проанализируем для приближения большого канонического ансамбля статистические распределения числа частиц на основном уровне  $n_0$  и полного числа частиц на всех возбужденных уровнях  $n$  соответственно. Для того чтобы обнаружить их автомодельное поведение, совершим переход от  $\rho_n^{(\text{бка})}$ , заданного (5.5), к распределению  $\rho_x^{(\text{бка})}$  масштабированного числа надконденсатных частиц  $x = (n - N_c)/\sigma$ . Для достаточно больших систем, таких что  $\alpha \ll 1$ , масштабированные кумулянты случайной величины  $x$ ,

$$\kappa_1^{(x)(\text{бка})} = \frac{\langle n \rangle^{(\text{бка})} - N_c}{\sigma}, \quad \kappa_{m \geq 2}^{(x)(\text{бка})} = \frac{\kappa_m^{(n)(\text{бка})}}{\sigma^m}, \quad (5.23)$$

могут быть вычислены с учетом того обстоятельства, что основной вклад представления (5.8) для исходных кумулянтов  $\kappa_m^{(n)(\text{бка})}$  вносит самый правый полюс либо два наиболее правых полюса, расположенных рядом. Отметим, что это утверждение не является заранее очевидным в случае ненулевого химпотенциала  $\mu \neq 0$ , но подтверждается проведенными в предшествующем разделе оценками величины  $\mu$  в критической области.

Распределение  $\rho_x^{(\text{бка})}$  для полного числа частиц в рамках большого канонического ансамбля вне конденсата выражается преобразованием Фурье:

$$\rho_x^{(\text{бка})} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iux} \Theta^{(x)(\text{бка})}(u) du, \quad \ln \Theta^{(x)(\text{бка})}(u) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\kappa_m^{(x)(\text{бка})}}{m!} (iu)^m. \quad (5.24)$$

Так как распределение  $\rho_x^{(\text{бка})}$  центрируется не на собственное математическое ожидание, а на математическое ожидание „необрезанного“ распределения, его ожидаемое значение (совпадающее с первым кумулянтном), в отличии от  $\rho_x^{(\infty)}$ , не равно нулю ни для мезоскопической системы, ни в термодинамическом пределе. А именно, из формул (5.23) следует:

$$\kappa_1^{(x)(\text{бка})} = \eta - \frac{\langle n_0 \rangle^{(\text{бка})}}{\sigma} \leq 0, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \kappa_1^{(x)(\text{бка})} = \eta + \frac{1}{F_\mu(\eta)} \leq 0. \quad (5.25)$$

Скейлинг всех остальных кумулянтов ( $m > 2$ ) зависит от того, где расположен самый правый полюс функции ловушки, определяющий основной вклад в их значения:

$$\begin{aligned} \kappa_m^{(n)(\text{бка})} &\rightarrow \zeta(r+1-m)R \alpha^{-r} \quad \text{для } m < r, \\ \kappa_m^{(n)(\text{бка})} &\rightarrow R \alpha^{-r} \ln \alpha^{-1} \quad \text{для } m = r, \\ \kappa_m^{(n)(\text{бка})} &\rightarrow S(m, -i\tilde{\mu}) \alpha^{-m} \quad \text{для } m > r, \end{aligned} \quad (5.26)$$

Для ловушек гауссова класса ( $r > 2$ ) дисперсия „необрезанного“ распределения имеет порядок величины  $\sigma \sim \alpha^{-r/2}$  и связана с математическим ожиданием стандартным образом,  $\sigma \sim \sqrt{N_c}$ . Тогда из выражений (5.23) и (5.26) следует, что все старшие кумулянты ( $m > 2$ ) стремятся к нулю при  $\alpha \rightarrow 0$ , как это происходило с кумулянтами „необрезанного“ распределения. Это означает, что оба распределения,  $\rho_x^{(\text{бка})}$  и  $\rho_x^{(\infty)}$ , в термодинамическом пределе являются гауссовыми. Более того, оба они характеризуются одинаковыми дисперсиями, так как для функций ловушек  $S(t)$  и  $S(t, -i\tilde{\mu})$  положение самого правого полюса и соответствующий вычет одинаковы.

Для ловушек аномального класса дисперсия аномально велика и имеет порядок величины  $\sigma \sim \alpha^{-1}$ . Тогда, в соответствии с (5.23) и (5.26), все старшие кумулянты распределения  $\rho_x^{(\text{бка})}$  стремятся к ненулевым константам:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \kappa_m^{(x)(\text{бка})} = S(m, -i\tilde{\mu})/S(2)^{m/2}, \quad m \geq 2, \quad (5.27)$$

которые зависят как от одночастичного энергетического спектра ловушки  $\{\lambda_q\}$ , так и от автомодельного аргумента  $\eta$  через химический потенциал  $\tilde{\mu}$  (имеющий в критической области порядок величины  $\alpha^0$ ). Они определяют негауссов характер распределения  $\rho_x^{(\text{бка})}$ . Величина дисперсии, выражающаяся как  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \sigma^{(x)(\text{бка})} = \sqrt{S(2, -i\tilde{\mu})/S(2)}$ , оказывается меньше единицы.

Заметим, что анализ распределений полного числа надконденсатных частиц и обнаружение классов универсальности можно было провести и другим способом, используя представление Меллина (5.8) непосредственно для характеристической функции  $\Theta^{(n)(\text{бка})}$  и переходя к случайной величине  $x$ . Этот подход полностью аналогичен продемонстрированному в разделе 2.1 и стартующему с формулы (2.11) для характеристической функции  $\Theta^{(n)(\infty)}$ .

Статистику количества частиц на основном состоянии удобно анализировать, используя масштабированное число конденсированных частиц  $x_0 = n_0/\sigma$ . Показательное распределение  $\rho_{n_0}^{(\text{бка})}$  принимает для произвольной ловушки вид

$$\rho_{x_0}^{(\text{бка})} = |F_\mu(\eta)| \exp(-|F_\mu(\eta)| x_0). \quad (5.28)$$

В противоположность свойству канонического ансамбля, для которого есть корреляция  $\rho_{x_0}^{(\text{ка})} = \rho_x^{(\text{ка})}(\eta - x_0)$ , распределение  $\rho_{x_0}^{(\text{бка})}$  не связано напрямую с распределением числа надконденсатных частиц  $\rho_x^{(\text{бка})}$ , так что условие сохранения полного числа частиц в системе  $n_0 + n = N$ , принимающее в масштабированных переменных вид  $x_0 + x = \eta$ , оказывается выполненным только для усредненных величин.

Итак, применение большого канонического ансамбля обнаруживает тот же скейлинг для распределений числа частиц в конденсате  $n_0$  и полного числа частиц вне конденсата  $n$  в термодинамическом пределе и то же разделение всех ловушек на гауссов и аномальный класс, которые были обнаружены в рамках канонического ансамбля. Однако, использование большого канонического ансамбля для нахождения формы этих распределений при заданном

числе частиц  $N$  приводит к существенным ошибкам, относительная величина которых оказывается порядка единицы. Кривые распределений для большого канонического ансамбля, зависящие от  $\eta$  не только напрямую, но и через химический потенциал  $\tilde{\mu}(\eta)$ , значительно отличаются от предсказаний канонического ансамбля во всей критической области, а совпадают лишь отдельные асимптотики вдали от критической точки.

Этот результат наглядно продемонстрирован на рис. 5.2, где в рамках канонического и большого канонического ансамблей в одних и тех же осях масштабированные автомодельные распределения числа надконденсатных частиц и числа частиц в конденсате построены для трехмерной ловушки-ящика. Для большого канонического ансамбля распределения остаются плавными и непрерывными для всех значений аргументов, в то время как для канонического ансамбля явно видна неаналитичность в точке  $x = \eta$ , отвечающая точному условию сохранения полного числа частиц в системе. Распределение количества надконденсатных частиц  $\rho_x^{(\text{бка})}$  приближается к распределению  $\rho_x^{(\text{ка})}$  только в фазе развитого конденсата  $\eta \gg 1$ . При этом, с одной стороны, управляющий распределением  $\rho_x^{(\text{бка})}$  химический потенциал  $\tilde{\mu}$  стремится к нулю, а с другой стороны, в распределении  $\rho_x^{(\text{ка})}$  уменьшается роль „обрезки“, выражаемой ступенчатой функцией  $\theta(\eta - x)$ . Таким образом, оба распределения при  $\eta \gg 1$  стремятся к „необрезанному“ распределению  $\rho_x^{(\infty)}$  и потому оказываются близки между собой.

Различие предсказаний канонического ансамбля и большого канонического ансамбля оказываются еще более наглядными для статистики числа частиц на основном уровне ловушки. Причиной расхождения является тот факт, что приближение большого канонического ансамбля не обеспечивает в полной мере выполнение условия  $n_0 + n = N$ , отвечающего сохранению полного числа частиц в системе, и в результате жесткая корреляция распределений  $n_0$  и  $n$  оказывается утерянной. Большой канонический ансамбль предпола-

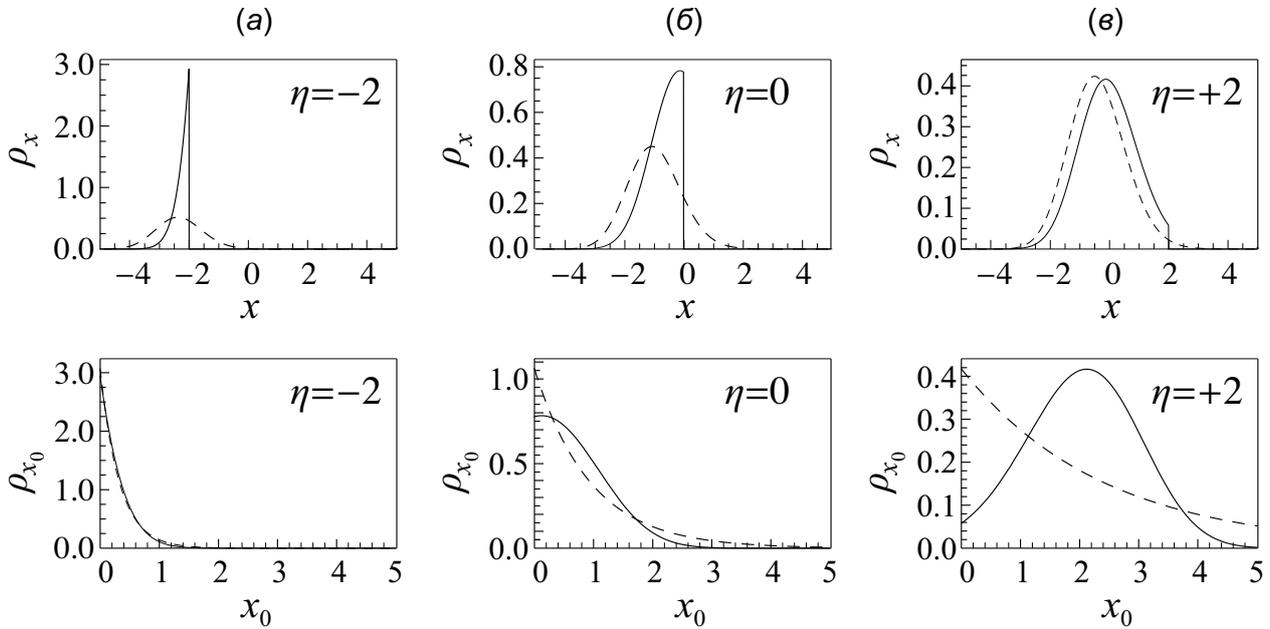


Рис. 5.2: Автомоделные распределения (5.24) и (5.28) масштабированного полного числа частиц вне конденсата  $x = (n - N_c)/\sigma$  (на верхних графиках) и масштабированного числа частиц в конденсате  $x_0 = n_0/\sigma$  (на нижних графиках) при различных значениях параметра  $\eta = (N - N_c)/\sigma$ , определяющего фазу системы: (а)  $\eta = -2$ , классическая фаза; (б)  $\eta = 0$ , критическая точка; (в)  $\eta = 2$ , конденсированная фаза. Предсказания большого канонического ансамбля даны пунктиром, канонического ансамбля — сплошной кривой. Их отличия хорошо заметны во всей критической области. Универсальные распределения построены для трехмерной изотропной ловушки-ящика с непроницаемыми стенками.

гает для числа частиц в конденсате монотонно спадающее экспоненциальное распределение, независимо от того, какой фазе отвечают параметры системы. В конденсированной фазе этот результат заведомо ошибочен — предсказанное среднеквадратичное отклонение числа частиц в конденсате оказывается порядка ожидаемого значения, а наиболее вероятное состояние имеет незанятый основной уровень. В то же время каноническое распределение имеет в холодной фазе выраженный максимум при конечной населенности конденсата и много меньшую дисперсию. Это различие обсуждалось и ранее [44, 69] на примере численных расчетов для конкретных мезоскопических ловушек. Теперь же данную особенность, описанную аналитически для ловушки произвольной геометрии, с учетом автомодельности распределений удастся распространить на системы любого размера, в том числе и на термодинамический предел.

#### **5.4. Сравнение канонического и большого канонического ансамблей: термодинамические характеристики**

Используем обнаруженную автомодельность поведения химического потенциала  $\tilde{\mu}$  и соответствующие вычисленные критические функции  $F_\mu$  для того, чтобы описать универсальное самоподобное поведение термодинамических характеристик идеального бозе-газа в непосредственной окрестности критической точки в рамках большого канонического ансамбля. Именно, рассмотрим подробно такие характеристики, как средняя энергия системы и ее теплоемкость; прочие термодинамические величины могут быть проанализированы с помощью аналогичной техники.

Наглядно представить поведение термодинамических характеристик в критической области можно, используя для них те же критические функции, что

и для случая канонического ансамбля:

$$\Delta E = \frac{\sigma}{rN_c} \frac{E - E^{(\infty)}}{T}, \quad \Delta C_V = \frac{\sigma^2}{r^2 N_c^2} \left( C_V - C_V^{(\infty)} \right). \quad (5.29)$$

Эти функции определены через среднюю энергию  $E^{(\infty)}$  и теплоемкость  $C_V^{(\infty)}$  во вспомогательной „необрезанной“ задаче (см. раздел 3, формулы (3.15) и (3.21)), которые являются плавными и монотонными и не несут в себе информации о явлении фазового перехода.

Среднюю энергию системы в приближении большого канонического ансамбля можно вычислить дифференцированием статистической суммы (5.7)  $Z^{(\text{бка})}$  и представить в следующем виде:

$$E^{(\text{бка})} = \alpha T \sum_{q>0} \frac{\lambda_q}{e^{\alpha(\lambda_q - \tilde{\mu})} - 1}, \quad (5.30)$$

отличающимся от „необрезанного“ слагаемого  $E^{(\infty)}$  в выражении (3.15) только наличием ненулевого химического потенциала  $\tilde{\mu}$  в показателе экспоненты:

$$E^{(\infty)} = \alpha T \sum_{q>0} \frac{\lambda_q}{e^{\alpha\lambda_q} - 1}.$$

При  $\alpha \ll 1$  „необрезанная“ энергия  $E^{(\infty)}$  представима в виде суммы по вычетам (3.16). Используя интегральное преобразование Меллина для получения аналогичного представление средней энергии большого канонического ансамбля  $E^{(\text{бка})}$ , можно получить для разности  $E^{(\text{бка})} - E^{(\infty)}$  следующее выражение:

$$\frac{E^{(\text{бка})} - E^{(\infty)}}{\epsilon_1} = \sum_j \operatorname{Res}_{t=t_j} \zeta(t) \frac{(t-1)(S(t-1, -i\tilde{\mu}) - S(t-1, 0)) + \tilde{\mu}S(t, -i\tilde{\mu})}{\alpha^t}, \quad (5.31)$$

где наибольший вклад дает вычет самого правого полюса. В настоящем случае оказывается, что и функция  $\tilde{\mu}S(t, -i\tilde{\mu})$  и разность  $(t-1)(S(t-1, -i\tilde{\mu}) -$

$S(t - 1, 0)$ ) имеют полюс в одной и той же точке  $t = r$ , причем соответствующие вычеты равны  $\tilde{\mu}R$  и  $(r - 1)\tilde{\mu}R$ . Этот полюс является самым правым в выражении (5.31) для ловушек, характеризующихся величиной  $r > 1$ , в том числе для любых трехмерных ( $r \geq 3/2$ ) и двумерных ( $r > 1$ ) ловушек, в которых возможно явление бозе-эйнштейновской конденсации. (Рассмотрение значительно менее интересного случая одномерных ловушек с пологим удерживающим потенциалом, для которых  $r \leq 1$  и старший полюс в (5.31) принадлежит дзета-функции, опускаем.) Таким образом, для ловушек обоих — гауссова и аномального — классов универсальности выражение (5.31) в термодинамическом пределе приобретает вид:

$$E^{(\text{бка})} - E^{(\infty)} \rightarrow \epsilon_1 \alpha^{-r} \zeta(r) r R \tilde{\mu} \quad \text{при } \alpha \rightarrow 0. \quad (5.32)$$

С учетом того обстоятельства, что для критического числа частиц  $N_c$  произвольной ловушки с  $r > 1$  в термодинамическом пределе выполняется свойство  $N_c \rightarrow \alpha^{-r} \zeta(r) R$ , критическая функция (5.29)  $F_E(\eta)$  для средней энергии системы совпадает с критической функцией химического потенциала  $F_\mu(\eta)$ , найденной в разделе 5.2.

Этот результат позволяет моментально определить и предельную кривую, описывающую в критической области поведение теплоемкости в приближении большого канонического ансамбля:

$$C_V^{(\text{бка})} - C_V^{(\infty)} = \frac{\partial}{\partial T} \left( E^{(\text{бка})} - E^{(\infty)} \right) \rightarrow \frac{\partial}{\partial T} \left( T \frac{N_c}{\sigma} r F_\mu(\eta) \right). \quad (5.33)$$

Здесь дифференцирование по температуре может быть заменено дифференцированием по автомодельному аргументу,  $T \frac{\partial}{\partial T} = -r \frac{N_c}{\sigma} \frac{\partial}{\partial \eta}$ . Тогда для критической функции теплоемкости (5.29) получаем  $\Delta C_V^{(\text{бка})} \rightarrow -\partial F_\mu / \partial \eta$  при  $\alpha \rightarrow 0$ .

Теперь легко привести выражения для термодинамических величин си-

стемы, в частности, средней энергии и теплоемкости, при  $\alpha \ll 1$ :

$$\frac{E}{T} \simeq \frac{E^{(\infty)}}{T} + r \frac{N_c}{\sigma} F_E, \quad \frac{C_V}{N} \simeq \frac{C_V^{(\infty)}}{N} + \frac{r^2 N_c^2}{N \sigma^2} \Delta C_V^{(lim)}. \quad (5.34)$$

которые вовлекают предельные автомодельные функции  $F_E$  и  $\Delta C_V^{(lim)}$ , вычисленные аналитически как в рамках канонического ансамбля, так и в приближении большого канонического ансамбля:

$$\begin{aligned} F_E^{(бка)}(\eta) &= F_\mu(\eta), & \Delta C_V^{(lim)(бка)}(\eta) &= -\frac{\partial}{\partial \eta} F_\mu(\eta), \\ F_E^{(ка)}(\eta) &= -\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P(\eta), & \Delta C_V^{(lim)(ка)}(\eta) &= \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \ln P(\eta). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Анализ показывает, что большой канонический ансамбль в критической области корректно описывает только те термодинамические характеристики, которые не чувствительны к фазовому переходу бозе-конденсации и не испытывают сильного изменения в небольшой окрестности критической точки. Примером такой характеристики является средняя энергия системы, изображенная на верхних графиках рисунка 5.3 для трехмерной изотропной гармонической ловушки и трехмерной изотропной ловушки-ящика. На этих графиках соответствующие кривые практически неразличимы. Однако данное на нижних графиках сравнение критических функций (5.35), которые характеризуют критическую область наиболее подробно, показывает, что предсказания различных ансамблей все же отличаются даже для таких нечувствительных к фазовому переходу характеристик.

В то же время для термодинамических характеристик, величина которых заметно меняется в критической области, приближение большого канонического ансамбля приводит к более заметным ошибкам, что проиллюстрировано на рисунке 5.4. Не только критические функции, но и сами термодинамические величины демонстрируют отклонения от предсказаний канонического ансамбля на величину, которая может быть порядка единицы. Важной особенностью является то, что относительная ошибка может не убывать с уве-

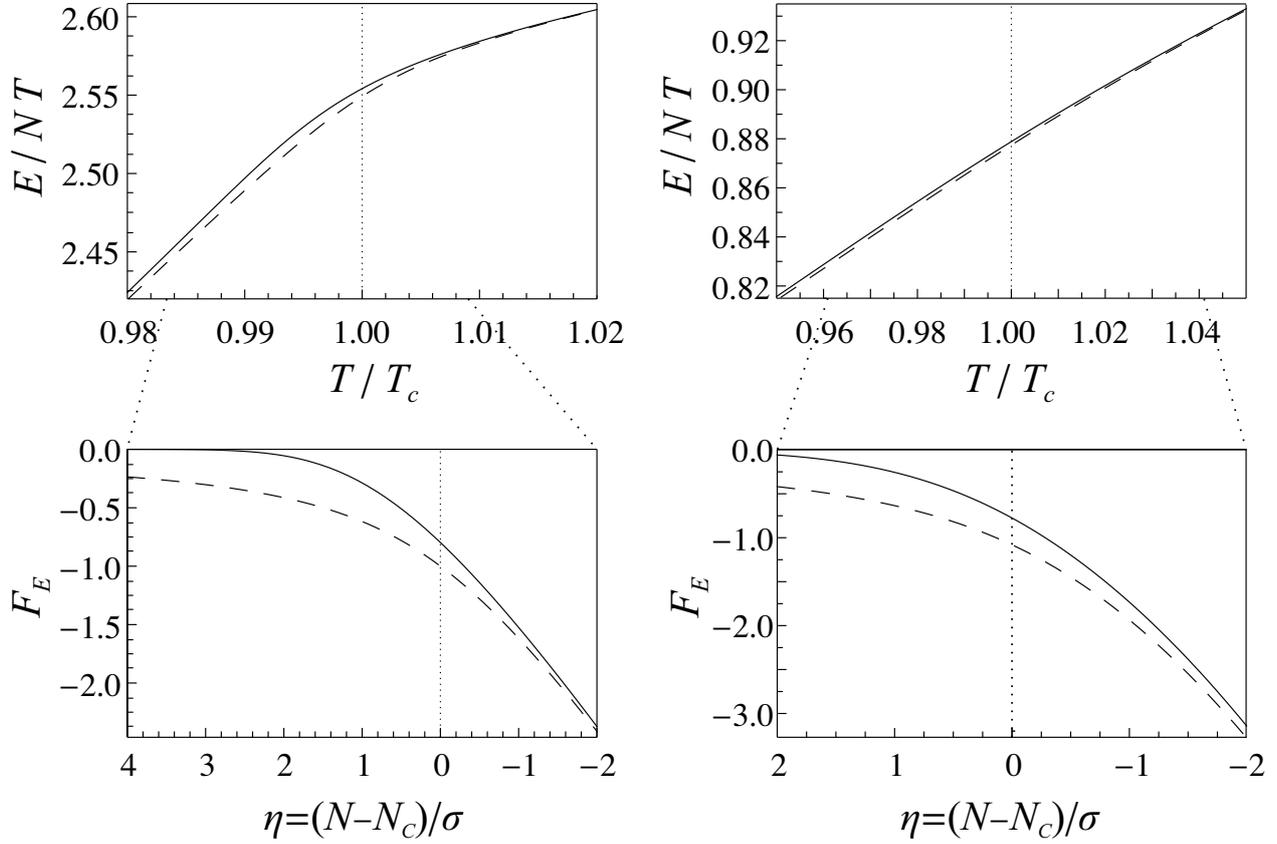


Рис. 5.3: Средний энергии мезоскопической системы из  $10^4$  невзаимодействующих атомов (на верхних графиках) и соответствующие предельные критические функции  $F_E$  (на нижних графиках), предсказанные каноническим (сплошные кривые) и большим каноническим (пунктирные линии) ансамблями для двух ловушек: изотропной трехмерной гармонической (слева) и трехмерного ящика с непроницаемыми стенками (справа). Отличие предсказаний разных ансамблей, почти не видимое на верхних графиках, хорошо разрешается критическими функциями на нижних графиках.

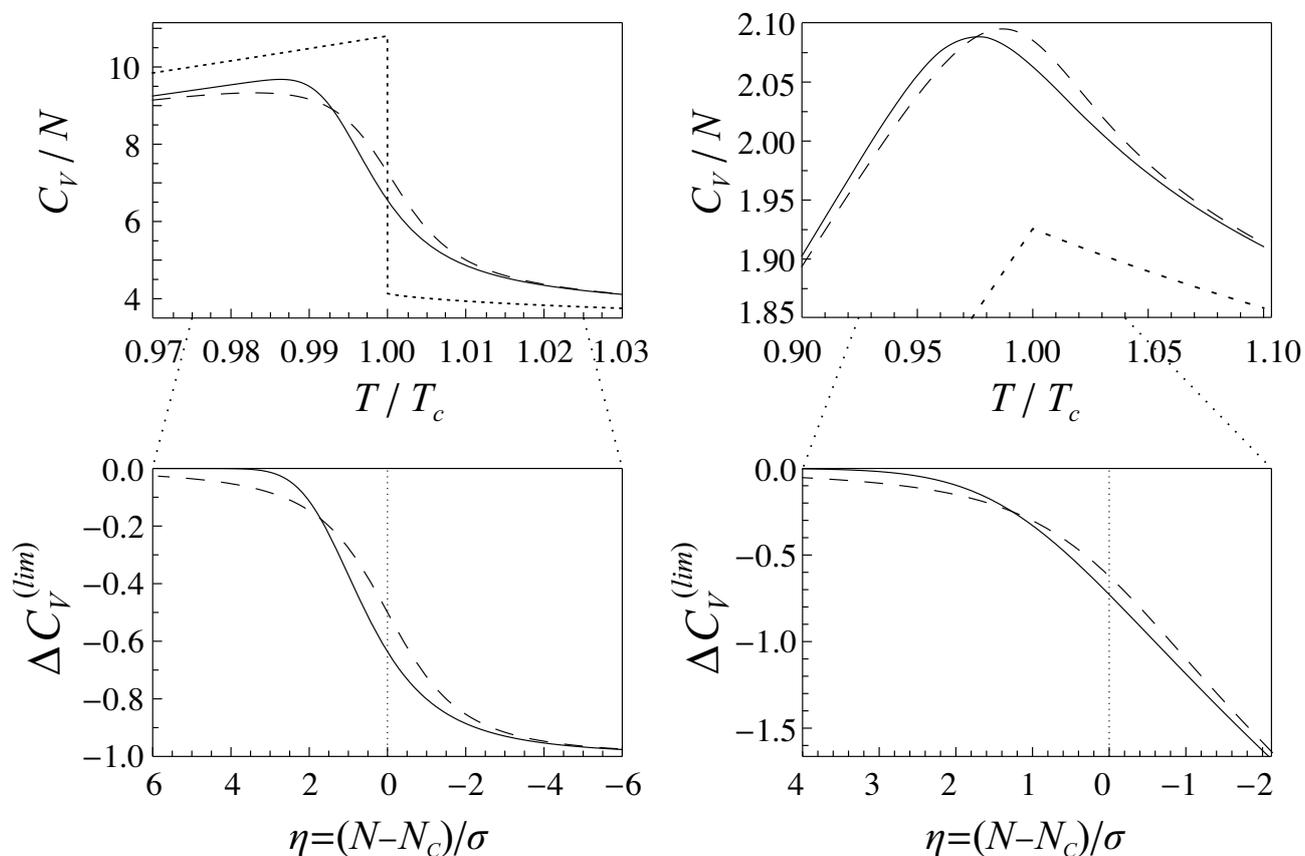


Рис. 5.4: Удельные теплоемкости мезоскопической системы из  $10^4$  невзаимодействующих атомов (на верхних графиках) и соответствующие предельные критические функции  $\Delta C_V^{(lim)}$  (на нижних графиках), предсказанные каноническим (сплошные кривые) и большим каноническим (пунктирные линии) ансамблями для двух ловушек: изотропной трехмерной гармонической (слева) и трехмерного ящика с непроницаемыми стенками (справа). Во всей критической области хорошо видны отличия в предсказаниях ансамблей. Точками показана предельная кривая, грубо описывающая  $\lambda$ -структуру теплоемкости в большом каноническом ансамбле в приближении непрерывного спектра одночастичных энергий.

личением размера системы и проявляться (с учетом автомодельности критической области) даже в термодинамическом пределе. В добавок отметим, что аппроксимация дискретного энергетического спектра непрерывным спектром и соответствующей плотностью состояний  $g(E)$ , часто используемая в термодинамическом пределе для большого канонического ансамбля, вообще не способна разрешить критическую область и описывает термодинамические характеристики как функции, имеющие разрывы или разрывы производных в критической точке (соответствующие зависимости даны точками на рис. 5.4).

Итак, для определенных надконденсатными частицами термодинамических характеристик, как почти постоянных, так и меняющихся быстро в окрестности критической точки, приближение большого канонического ансамбля корректно воспроизводит их скейлинг и асимптотики вдали от точки фазового перехода. Это утверждение верно для ловушек обоих — гауссова и аномального — классов. Для асимптотик  $\eta \gg 1$ , описывающих классическую, неупорядоченную фазу системы при  $T > T_c$ , этот результат следует из аппроксимации статсуммы системы с помощью метода стационарной фазы и соотношения (5.44),  $-\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P_\eta^{(\infty)} \simeq F_\mu(\eta)$ , полученного в следующем разделе. В конденсированной фазе, где  $T < T_c$ , все критические функции при  $\eta \rightarrow 0$  стремятся к нулю, однако определяющие их асимптотические законы отличаются для разных ансамблей. Так, в приближении большого канонического ансамбля порядок спадания критических функций является степенным и определяется асимптотикой  $F_\mu \simeq -1/\eta$ , в то время как для канонического ансамбля их спадание происходит экспоненциально. Этот факт делает различие предсказаний рассматриваемых ансамблей заметным даже достаточно далеко от критической точки: соответствующие каноническому ансамблю кривые повторяют „необрезанные“ зависимости вплоть до  $\eta \simeq -1$ , в то время как кривые для большого канонического ансамбля начинают „чувствовать“

ставший ненулевым химический потенциал.

Также обратим внимание на тот факт, что ни в среднюю энергию  $E$ , ни в теплоемкость  $C_V$  не вносит вклада основной уровень с потенциально макроскопической фракцией частиц, статистика которой неудовлетворительно описывается большим каноническим ансамблем. При рассмотрении термодинамических величин, в формировании которых участвует конденсированная фракция — например, давления или теплоемкости при постоянном давлении  $C_P$  — различия предсказаний большого канонического и канонического ансамбля могут оказаться больше, чем в рассмотренном примере.

В целом, картина фазового перехода оказывается более резкой в рамках канонического ансамбля. Для реальных мезоскопических систем, создаваемых в современных экспериментах и содержащих  $10^3 - 10^7$  атомов, ошибки приближения большого канонического ансамбля оказываются несколько больше приведенных на основе структуры критической области, характеризующей термодинамический предел, поскольку их будут увеличивать мезоскопические поправки к описанию системы.

## 5.5. О совпадении асимптотик термодинамических величин вне критической области для различных ансамблей

Несмотря на существующие отличия предсказаний большого канонического и канонического ансамблей для центральной части критической области, эти ансамбли определяют похожие асимптотики при удалении от критической точки для тех термодинамических величин, которые обусловлены атомами на возбужденных уровнях системы. Для фазы развитого конденсата при  $T < T_c$  данный факт является тривиальным для любой рассматриваемой мезоскопической бозе-системы в используемой картине описания (раз-

дел 1.1): он выражает стремление обоих сравниваемых решений к „необрезанному“ вспомогательному решению, характеризующемуся статистической суммой  $Z^{(\infty)}$ . Для фазы классического газа такой очевидной трактовки нет, потому вопрос требует отдельного изучения, которое и будет проведено в данном разделе.

Исследование поставленного вопроса начнем с анализа описания системы в рамках канонического ансамбля в области  $T > T_c$ ,  $\eta < 0$ . В разделе 1.1 показано, что статсумма системы  $Z^{(N)} = Z^{(\infty)}P(N)$  выражается через интегральное распределение числа надконденсатных частиц во вспомогательной „необрезанной“ задаче. Как следует из (1.7), это интегральное распределение дается преобразованием Фурье:

$$P(N) \equiv \sum_{n=0}^N \rho_n^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1 - e^{-iu(N+1)}}{1 - e^{-iu}} \Theta^{(n)}(u) du. \quad (5.36)$$

Возникающий здесь интеграл имеет стационарную точку в области параметров, соответствующей классическому газу. Этот факт позволяет при  $T > T_c$  записать следующую асимптотику интегрального распределения  $P(N)$ :

$$P(N) \simeq \frac{\exp [\ln \Theta^{(n)}(u) + \ln(1 - e^{-iu(N+1)}) - \ln(1 - e^{-iu})]}{\sqrt{-2\pi \frac{\partial^2}{\partial u^2} \ln \Theta^{(n)}(u)}} \Bigg|_{u=u_{st}}. \quad (5.37)$$

Она подобна полученной для дифференциального распределения  $\rho_n^{(\infty)}$  в разделе 2.2.2 (см. формулу (2.33)). Стационарная точка задается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial(iu)} \ln \Theta^{(n)}(u, \alpha) - \frac{1}{e^{iu} - 1} = \frac{N + 1}{1 - e^{iu(N+1)}}. \quad (5.38)$$

Вдали от критической области, где  $-\eta \equiv \frac{N_c - N}{\sigma} \gg 1$ , оно имеет чисто мнимое решение  $u_{st} = i \operatorname{Im} u_{st}$  с очень большой абсолютной величиной  $|u_{st}| \sim N_c/\sigma$ . Это позволяет пренебречь в выражении (5.38) малой величиной  $e^{iu_{st}(N+1)}$  и переписать его в виде

$$\frac{1}{e^{-iu_{st}} - 1} + \frac{\partial}{\partial(iu)} \ln \Theta^{(n)}(u, \alpha) \Bigg|_{u=u_{st}} = N. \quad (5.39)$$

Теперь обратимся к уравнению для химического потенциала (5.3), определяющего статистическую сумму  $Z^{(\text{бкка})}$  большого канонического ансамбля. Выделением из общей суммы средних чисел заполнения  $n_q$  вклада основного состояния и использованием того факта, что ожидаемое число надконденсатных частиц выражается как первый кумулянт характеристической функции (5.5)  $\Theta^{(n)(\text{бкка})}$ , это уравнение может быть преобразовано к форме

$$\frac{1}{e^{-\alpha\tilde{\mu}} - 1} + \frac{\partial}{\partial(iu)} \ln \Theta^{(n)(\text{бкка})}(u, \alpha, \tilde{\mu}) \Big|_{u=0} = N. \quad (5.40)$$

С учетом явных выражений (1.7) и (5.5) для характеристических функций  $\Theta^{(n)}(u)$  и  $\Theta^{(n)(\text{бкка})}(u)$ , уравнения (5.40) и (5.39) для  $u_{st}$  и  $\tilde{\mu}$  совпадают с точностью до множителя перед неизвестным. Однако следует заметить, что уравнение для химического потенциала, используемое в приближении большого канонического ансамбля, справедливо во всей области параметров системы и является точным. В то же время уравнение для стационарной точки имеет смысл только при  $T > T_c$ , когда для интеграла (5.36) такая точка перевала существует, но даже тогда оно является приближительным.

В области параметров, соответствующей классическому газу, корни рассматриваемых уравнений оказываются связаны соотношением

$$iu_{st}(\alpha, N) = \alpha\tilde{\mu}(\alpha, N). \quad (5.41)$$

Заметим, что термодинамические характеристик выражаются разнообразными комбинациями величин  $e^{(\epsilon_q - \mu)/T}$  (для большого канонического ансамбля), и  $e^{(\epsilon_q/T - iu_{st})}$  (для канонического ансамбля, асимптотически). Таким образом, если рассматриваемый параметр определен атомами на возбужденных уровнях (т.е. слагаемое с  $\epsilon_0$  отсутствует или мало), то из соотношения (5.41) и следует сближение асимптотик в той области параметров, где интеграл (5.36) для статистического распределения может быть вычислен методом перевала.

Физически сближение асимптотик отражает тот факт, что вне критической области для обоих ансамблей флуктуации слабо влияют на термодина-

мические характеристики, обусловленные атомами на возбужденных уровнях.

Поясним последнее утверждение на конкретном примере средней энергии системы  $E$ . В рамках канонического ансамбля, определяющего статистическую сумму  $Z^{(N)} = Z^{(\infty)}P(N)$ , для  $E^{(\text{ка})}$  несложно получить следующее выражение в допускаящей аппроксимацию (5.37) области параметров:

$$E^{(\text{ка})} \simeq \epsilon_1 \sum_{q>0} \frac{\lambda_q}{e^{\alpha\lambda_q - iu_{st}} - 1}. \quad (5.42)$$

Определяемое ей значение энергии с учетом соотношения (5.41) между положением стационарной точки и величиной химического потенциала в точности совпадает со средней энергией системы (5.30)  $E^{(\text{бка})}$  в приближении большого канонического ансамбля. Аналогичные рассуждения легко проводятся и для других термодинамических характеристик.

Данный анализ актуален и внутри области автомодельности вокруг критической точки. В термодинамическом пределе  $\alpha \rightarrow 0$  при переходе к масштабированным переменным  $x$ ,  $\eta$  и описывающей их характеристической функции  $\Theta^{(x)}(u)$  ключевое соотношение (5.41) принимает вид

$$iu_{st} = F_\mu(\eta). \quad (5.43)$$

В условиях применимости метода стационарной фазы при вычислении автомодельного распределения  $P(\eta)$  справедливо соотношение  $\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P_\eta = -iu_{st}(\eta)$ . Это значит, что асимптотика автомодельного интегрального распределения задачи о каноническом ансамбле оказывается напрямую связана с химическим потенциалом задачи о большом каноническом ансамбле:

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} \ln P_\eta^{(\infty)} \simeq F_\mu(\eta), \quad (5.44)$$

что было анонсировано в разделе 5.4. Из последнего утверждения моментально делается вывод о совпадении асимптотик всех рассмотренных нами критических функций при  $-\eta \gg 1$ .

## 5.6. Выводы

В настоящей главе для идеального бозе-газа, удерживаемого в произвольной мезоскопической ловушке, дано точное описание статистических и термодинамических свойств в рамках большого канонического ансамбля, которое позволило последовательно изучить переход из высокотемпературной в конденсированную фазу. Основное внимание уделено критической области параметров, для анализа которой использован аппарат характеристических функций и методы спектральных дзета-функций.

Продемонстрировано, что статистические и термодинамические характеристики в критической области бозе-системы в приближении большого канонического ансамбля являются автомодельными: их зависимости от параметров системы, отмасштабированные определенным образом, близки к универсальным плавным предельным самоподобным функциям, зависящим от единой автомодельной переменной и задаваемым лишь геометрической формой удерживающего потенциала, и стремятся к ним при увеличении размеров системы и числа частиц в ней. При этом масштабирование переменных, обнаруживающее автомодельную структуру, совпадает с таковым для случая канонического ансамбля.

Автомодельные универсальные кривые, описывающие статистические распределения и термодинамические величины, найдены аналитически для удерживающего потенциала произвольного профиля и размерности. Показано, что существуют два класса ловушек с разными свойствами статистических распределений частиц на основном и возбужденных уровнях — гауссов и аномальный. При этом как характерные свойства классов, так и реализующееся разделение ловушек по этим двум классам одинаковы для канонического и большого канонического ансамблей.

В то же время сами автомодельные статистические распределения и критические функции, характеризующие поведение термодинамических величин

в окрестности точки перехода, для различных ансамблей существенно отличаются друг от друга. Для рассмотренных в диссертации термодинамических величин совпадают лишь асимптотики вдали от критической точки. С учетом автомодельности критических явлений выявленные отличия в предсказаниях ансамблей для статистических и термодинамических характеристик остаются актуальными и не исчезают даже в термодинамическом пределе.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем кратко основные результаты диссертации:

1. В рамках канонического ансамбля дано аналитическое описание критических явлений бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в произвольной мезоскопической ловушке. Оно опирается на нахождение статистики населенности надконденсата в аналогичной задаче для большого канонического ансамбля с нулевым химическим потенциалом, решение которой получено на основе развитой техники спектрального представления характеристической функции этой статистики, порождаемого преобразованием Меллина.
2. С использованием автомодельной переменной, являющейся определенной комбинацией температуры, числа частиц, их массы и параметров ловушки, установлен масштаб критической области и показано, что масштабированные распределения числа частиц в конденсате и в надконденсате при увеличении размера системы быстро сходятся к определенным автомодельным распределениям этой переменной. Их вид обусловлен профилем удерживающего потенциала через закон нарастания одностичных собственных энергий и не зависит от значений каких-либо размерных параметров ловушки. Проведено и обосновано разделение всех ловушек на два класса универсальности с сильно отличающимися статистическими свойствами бозе-газа — гауссов и аномальный классы, характеризующиеся применимостью или неприменимостью центральной предельной теоремы для расчета статистики.

3. Продемонстрирован плавный, непрерывный (без скачков) характер перехода через критическую область для всех термодинамических величин, как связанных с моментами распределения (параметр порядка), так и выражающихся через статистическую сумму — напрямую (свободная энергия) либо посредством однократного или двукратного дифференцирования (средняя энергия и теплоемкость). В пределе большой системы бозе-атомов поведение ее термодинамических величин сведено к найденным критическим функциям единого аргумента — указанной автомодельной переменной. Соответствующие детальные аналитические и численные расчёты выполнены для ряда ловушек гауссова и аномального класса.
4. На примере формы  $\lambda$ -особенности теплоемкости газа невзаимодействующих атомов, удерживающегося в мезоскопической ловушке, выявлено значительное влияние граничных условий на термодинамические свойства бозе-системы. Оно рассчитано для ловушек определенных конфигураций аномального класса, где флуктуации конденсата и вид автомодельных критических функций в существенной мере зависят от низкоэнергетического спектра одночастичных состояний, а следовательно, от граничных условий. Предложены анизотропные ловушки цилиндрической и декартовой геометрии, в том числе квазидвумерные, в которых указанный эффект может быть обнаружен экспериментально при использовании сравнительно небольшого числа атомов ( $10^3 - 10^5$ ), типичного для современных экспериментов с бозе-системами.
5. В рамках большого канонического ансамбля найдены статистические и термодинамические свойства идеального бозе-газа, удерживаемого в произвольной ловушке, и проведено их сравнение с соответствующими свойствами для канонического ансамбля. Доказано, что для различ-

ных ансамблей эти свойства имеют одинаковый автомодельный характер, однако существенно отличаются друг от друга в центральной части критической области, где велика роль флуктуаций. Установлены наличие и границы неэквивалентности описания бозе-конденсации в рамках канонического и большого канонического ансамблей.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### (обязательное)

#### О спектральных дзета-функциях

Приложение посвящено краткому описанию основных свойств и методов анализа простой и обобщенной функций ловушки  $S(t)$  и  $S(t, u)$ ,

$$S(t) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{\lambda_q^t}, \quad S(t, u) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - iu)^t}, \quad (\text{A.1})$$

ассоциированных с неубывающей последовательностью одночастичных энергетических уровней  $\{\lambda_q\}$  (данные определения содержательны для тех значений аргументов, при которых указанные ряды являются сходящимися).

Именно, в задачах описания идеального бозе-газа, которым посвящена диссертация, данные функции появляются при применении интегрального преобразования Меллина, и для них необходимо уметь:

- определять структуру расположенных при  $t \geq 0$  полюсов и вычеты в них;
- описывать их поведение в окрестности полюсов (что требуется при вычислении двойных полюсов выражений, включающих функцию ловушки);
- строить аналитическое продолжение и получать (хотя бы численно) значения функции ловушки в целых неотрицательных точках регулярности (в том числе там, где ряды (A.1) расходятся);
- получать асимптотики обобщенной функции ловушки при больших  $|u|$ .

В настоящем приложении приводятся решения этих задач и рассматриваются частные примеры функций ловушек, отвечающих спектрам удерживающих потенциалов, которые анализируются в основных главах диссертации.

Функции, подобные  $S(t)$ , известны в математике как обобщенные (спектральные) дзета-функции. Для их исследования разработаны регулярные методы, перекликающиеся с методами исследования обычной дзета-функции Римана  $\zeta(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^t}$ . Один из наиболее эффективных и общих подходов к анализу спектральных дзета-функций, на котором мы и остановимся, изложен в [115–117] и основан на интегральном преобразовании Меллина. Оно определяет для произвольного параметра  $a > 0$  равенство

$$\Gamma(t)a^{-t} = \int_0^{\infty} \beta^{t-1} e^{-\beta a} d\beta, \quad (\text{A.2})$$

которое порождает представление (называемое "heat kernel representation [115])

$$S(t) = \int_0^{\infty} \beta^{t-1} \Xi(\beta) d\beta, \quad \Xi(\beta) = \sum_{q>0} e^{-\beta \lambda_q}, \quad (\text{A.3})$$

являющееся ключевым для всего дальнейшего анализа.

Здесь функция  $\Xi(\beta)$  по своему смыслу является одночастичной статистической суммой по уровням системы при температуре, обратно пропорциональной величине аргумента  $\beta$ . Будем считать, что при малых величинах  $\beta \ll 1$  для  $\Xi(\beta)$  известно степенное разложение:

$$\Xi(\beta) \rightarrow R_{t_1} \beta^{-t_1} + R_{t_2} \beta^{-t_2} + R_{t_3} \beta^{-t_3} + \dots, \quad \text{где } t_1 > t_2 > t_3 > \dots \quad (\text{A.4})$$

Как правило, поиск этой асимптотики для известной последовательности  $\{\lambda_q\}$  не представляет особой сложности. Сходимость интеграла в представлении (A.3) для  $S(t)$ , не гарантированная на нижнем пределе, а также сходимость исходной определяющей  $S(t)$  суммы (A.1) обеспечиваются условием  $t > t_1$ . Для этой области поведение функции вблизи произвольной фиксированной точки описывается рядом Тейлора:

$$S(t + \Delta) = \sum_{m=0}^{\infty} \left( \int_0^{\infty} \beta^{t-1} \frac{\ln^m \beta}{m!} \Xi(\beta) d\beta \right) \Delta^m. \quad (\text{A.5})$$

Аналитическое продолжение в произвольную область  $t > t_{J+1}$  строится последовательным интегрированием по частям (для простоты записи введено

обозначение  $t_0 \equiv 1$ ):

$$S(t) = \prod_{k=1}^J \frac{1}{t_k - t} \times \int_0^\infty \beta^{t-1} \left( \beta^{1-t_J} \hat{D}_J \dots \hat{D}_2 \hat{D}_1 \Xi(\beta) \right) d\beta, \quad (\text{A.6})$$

$$\text{где } \hat{D}_k f(\beta) \equiv \frac{d}{d\beta} \left( \beta^{t_k - t_{k-1} + 1} f(\beta) \right).$$

Идея построения заключается в том, что при интегрировании по частям подстановка зануляется, а новое ядро преобразования Меллина имеет при малых  $\beta$  асимптотику

$$\beta^{1-t_J} \hat{D}_J \dots \hat{D}_2 \hat{D}_1 \Xi(\beta) \simeq \sum_{m=J+1}^{\infty} \left[ R_{t_m} \prod_{k=1}^J (t_k - t_m) \right] \beta^{-t_m}, \quad (\text{A.7})$$

где первым ненулевым членом является  $\beta^{-t_{J+1}}$  вместо  $\beta^{-t_1}$ , что и обеспечивающую сходимость интеграла (A.6) в более широкой области  $t$ .

Данный метод обнаруживает все особые точки функции  $S(t)$  — как следует из (A.6), ими являются полюса, расположенные в точках  $t = t_j$ , при этом соответствующие вычеты равны  $R_{t_j}$ . Поведение функции ловушки в окрестности выбранного полюса  $t = t_j$  легко найти, рассмотрев аналитическое продолжение (A.6), где  $J \geq j$ , и используя разложения Тейлора для подынтегральной функции и множителя перед интегралом:

$$S(t_j + \Delta) = -\frac{1}{\Delta} \times \left( \prod_{k=1, k \neq j}^J \frac{1}{t_k - t_j} \right) \times \left( \prod_{k=1, k \neq j}^J \sum_{m=0}^{\infty} \left( \frac{\Delta}{t_k - t_j} \right)^m \right) \quad (\text{A.8})$$

$$\times \sum_{m=0}^{\infty} \left( \int_0^\infty \frac{\ln^m \beta}{m!} \beta^{t_j - t_J} \hat{D}_J \dots \hat{D}_1 \Xi(\beta) d\beta \right) \Delta^m.$$

Для вычислительных задач заведомо достаточен выбор аналитического продолжения в минимальную содержащую этот полюс область, что соответствует выбору  $J = j$  в (A.6). При этом произведения  $\prod_{k=1, k \neq j}^J$  в формуле выше запишутся как  $\prod_{k=1}^{j-1}$ , а степенной член  $\beta^{t_j - t_J} \equiv 1$  под интегралом тривиален.

Общий вид коэффициентов ряда Лорана, к которому приводит полученное разложение (A.8), оказывается весьма громоздким; однако, задача вычисления конкретного коэффициента является тривиальной. Частным случаем,

в котором запись ряда Лорана оказывается вполне компактной и наглядной, является разложение  $S(t)$  в окрестности старшего полюса  $t_1$ :

$$S(t_1 + \Delta) = -\frac{1}{\Delta} \times \sum_{m=0}^{\infty} \left( \int_0^{\infty} \frac{\ln^m \beta}{m!} \hat{D}_1 \Xi(\beta) d\beta \right) \Delta^m. \quad (\text{A.9})$$

Анализ обобщенной функции ловушки  $S(t, u) = \Gamma(t) \sum_{q>0} \frac{1}{(\lambda_q - iu)^t}$ , порожденной последовательностью со сдвигом  $\{\lambda_q - iu\}$  и имеющей смысл при аргументах  $u$ , таких что  $\text{Im } u > -\lambda_1$ , аналогичен описанному выше с точностью до замены ядра интегрального преобразования  $\Xi(\beta)$  на функцию  $\Xi(\beta)e^{iu\beta}$ :

$$S(t) = \int_0^{\infty} (\beta^{t-1} \Xi(\beta) e^{iu\beta}) d\beta, \quad \Xi \rightarrow \left( \sum_{j=1}^{\infty} R_{t_j} \beta^{-t_j} \right) \left( \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (iu\beta)^m \right). \quad (\text{A.10})$$

Очевидным образом, каждый полюс  $t = t_j$  простой функции  $S(t)$  порождает для обобщенной функции  $S(t, u)$  целую серию полюсов  $t = t_j - m$ , где  $m = 0, 1, 2, \dots$ , с вычетами  $R_{t_j}(iu)^m/m!$ . Отметим важную особенность — самый правый полюс  $t_1$  и отвечающий ему вычет  $R_{t_1}$  для функций  $S(t)$  и  $S(t, u)$  совпадают.

При больших значениях  $|u| \gg 1$ ,  $\text{Im } u > 0$ , легко вычислить асимптотику  $S(t, u)$ . В этих условиях подынтегральное выражение в преобразовании Меллина (A.10) быстро спадает либо осциллирует, и наибольший вклад в интеграл дает область  $\beta \ll 1$ , где актуально разложение (A.4) для  $\Xi$ :

$$S(t, u) \simeq \sum_{j=1}^{\infty} R_{t_j} \Gamma(t - t_j) (-iu)^{t_j - t}. \quad (\text{A.11})$$

На основе (A.3) и (A.10) легко анализируются комбинации, образованные разностью функций ловушек. К примеру, для разности простой и обобщенной функций из представления

$$S(t, u) - S(t) = \int_0^{\infty} \beta^{t-1} \Xi(\beta) (e^{iu\beta} - 1) d\beta \quad (\text{A.12})$$

становится очевидным, что полюс  $t_1$  исчезает при вычитании, а самым правым становится полюс  $t = t_1 - 1$  с вычетом  $iuR_{t_1}$ .

Более важный, но не более сложный пример — регулярность логарифма универсальной характеристической функции (2.14) для ловушек аномального класса. Для определяющей ее комбинации

$$S(t, \tilde{u}) - S(t) - i\tilde{u}S(t+1) = \int_0^\infty \beta^{t-1} \Xi(\beta) (e^{i\tilde{u}\beta} - 1 - i\tilde{u}\beta) d\beta \quad (\text{A.13})$$

из интегрального представления видно, что самый правый полюс расположен в точке  $t = r - 2$ , что лежит левее нуля для ловушек аномального класса. Соответствующий вычет равен  $-\frac{R_{t_1}\tilde{u}^2}{2}$ .

Ниже рассмотрены примеры нескольких конкретных удерживающих потенциалов, анализируемых в диссертации. Для них получены разложения  $\Xi$  при малых аргументах  $\beta$ , содержащие полную информацию о положении полюсов  $t_j$  и вычетах  $R_j$ . Для нумерации основных состояний при этом удобнее пользоваться не общим индексом  $q$ , а набором квантовых чисел  $\{q_1 \dots q_d\}$ , где  $d$  — размерность ловушки.

Весьма общим и показательным случаем является модельный спектр  $\lambda_q = Xq^\nu$ , где  $q = 0, 1, 2, \dots$ , а  $X$  — постоянный множитель. Функция ловушки  $S(t)$ , определяемая таким спектром, выражается явно через обычную дзета-функцию Римана как  $S(t) = \Gamma(t)X^{-t}\zeta(\nu t)$ . Зная структуру дзета-функции —  $\zeta(t)$  имеет единственный полюс в  $t = 1$  с вычетом 1 — и структуру гамма-функции — она имеет полюса в  $t = -m, m = 0, 1, 2, \dots$  с соответствующими вычетами  $\frac{(-1)^m}{m!}$ , — не составляет труда найти все полюсы и вычеты  $S(t)$ , восстановив этим согласно (A.4) асимптотику статистической суммы  $\Xi(t)$  при  $\beta \ll 1$ :

$$\Xi \rightarrow \frac{\Gamma(1 + \nu^{-1})}{X^{1/\nu}} \beta^{-\frac{1}{\nu}} - \frac{1}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \zeta(-m\nu) X^m \beta^m. \quad (\text{A.14})$$

Обратим внимание на то обстоятельство, что при  $\nu = 2$  в этом разложении остаются только два члена,  $\Xi \simeq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{X}} \beta^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}$ , так как  $\zeta(0) = -\frac{1}{2}$ , а в отрицательных четных точках дзета-функция имеет нули.

Частным примером оказывается одномерная гармоническая ловушка со

спектром  $\lambda_q = Xq$ ,  $q = 0, 1, 2, \dots$ , для которого, помимо прочего, одночастичную статсумму  $\Xi$  удастся свернуть из ряда в конечное выражение как геометрическую прогрессию:

$$\Xi = \frac{1}{e^{X\beta} - 1}. \quad (\text{A.15})$$

Другим достойным внимания частным примером является случай одномерной ловушки-ящика. В случае наложенных периодических граничных условий, задающий спектр  $\lambda_q = Xq^2$ ,  $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , такая ловушка часто интерпретируется как одномерное свободное пространство. Соответствующую последовательность  $\{\lambda_q\}$  можно рассматривать как объединение двух последовательностей, отвечающих степенному спектру с показателем  $\nu = 2$ , причем в этом объединении член с  $\lambda = 0$  оставляется лишь в одном экземпляре. Тогда с учетом (A.14) для соответствующей статсуммы  $\Xi$  получаем:

$$\Xi \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{X}} \beta^{-\frac{1}{2}} - 1. \quad (\text{A.16})$$

(Отметим, что к данному результату можно придти и другими путями, например, выражая  $\Xi$  как эллиптическую функцию Якоби или используя при получении асимптотики формулу суммирования Пуассона для исходного определения  $\Xi$ .) Полюс  $S(t)$  в точке  $\frac{1}{2}$  с вычетом  $\sqrt{\frac{\pi}{X}}$  отвечает однородному свободному пространству, полюс в  $t = 0$  с вычетом  $-1$  отвечает исключению из суммы (A.1) для функции ловушки одного состояния  $\lambda_0 = 0$ , являющегося основным.

При наложении на одномерную ловушку-ящик нулевых граничных условий спектр имеет вид  $\lambda_q = q^2 - 1$ , отличающийся от степенного с  $\nu = 2$  явным наличием сдвига. Разложение соответствующей статсуммы  $\Xi$  при малых  $\beta$  легко получить на основании результата (A.14), учитывая разложение (A.10) и то обстоятельство, что данная простая функция ловушки  $S(t)$  совпадает с

обобщенной функцией ловушки  $S(t, -i)$  для степенного спектра:

$$\Xi \rightarrow \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{X}} \beta^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right) e^{X\beta}. \quad (\text{A.17})$$

Полюса в точках  $t_1 = \frac{1}{2}$  и  $t_2 = 0$  сохраняются, и каждый из них порождает целую серию полюсов с единичным шагом (именно, серии  $-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, \dots$  и  $-1, -2, \dots$  соответственно).

Подобные одномерные примеры образуют хорошую основу для анализа случая многомерных ловушек ( $d > 1$ ), допускающих запись собственных значений в виде суммы „одномерных“:  $\lambda = \lambda_{q_1}^{(1)} + \dots + \lambda_{q_d}^{(d)}$ . Одночастичная статистическая сумма  $\Xi$  таких ловушек естественным образом факторизуется:

$$\Xi(\beta) = \left( 1 + \Xi^{(1)}(\beta) \right) \times \dots \times \left( 1 + \Xi^{(d)}(\beta) \right) - 1, \quad (\text{A.18})$$

где  $\Xi^{(i)}(\beta)$  — одночастичные статистические суммы по одномерным спектрам  $\{\lambda_{q_i}^{(i)}\}$ . Прибавление и вычитание единиц здесь соответствует тому, что суммирование (A.1) для  $S(t)$ , проводящееся по нескольким квантовым числам, включает состояния с одним или двумя минимальными значениями  $q_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ); исключено из суммирования лишь состояние  $\lambda = 0$ , отвечающее всем минимальным квантовым числам одновременно.

Стоит отметить чрезвычайно простую структуру полюсов функции  $S(t)$ , отвечающей  $d$ -мерной изотропной и однородной ловушке ящику с периодическими граничными условиями (нередко именуемой  $d$ -мерным свободным пространством), для которой  $\lambda_1 = 1$ . Из (A.16) и (A.18) мгновенно следует, что такой ловушке соответствует функция  $S(t)$  с ровно двумя полюсами, а именно,  $t = \frac{d}{2}$  с вычетом  $(\pi/X)^{d/2}$  и  $t = 0$  с вычетом  $-1$ . Последний отвечает изъятию из суммы для  $S(t)$  основного состояния  $\lambda = 0$ .

Совокупно приведенные результаты и методы изучения функций ловушек  $S(t)$  и  $S(t, u)$  служат хорошей основой для решения вопросов и задач, возникающих как при численных расчетах, так и при аналитическом исследовании статистики идеального бозе-газа.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] P. Grüter, D. Ceperley, F. Laloë. *Critical temperature of Bose-Einstein condensation of hard-sphere gases* // Physical Review Letters, **79**, 19, pp. 3549–3552 (1997).
- [2] M. Holzmann, W. Krauth. *Transition temperature of the homogeneous, weakly interacting Bose gas* // Physical Review Letters, **83**, 14, pp. 2687–2690 (1999).
- [3] E. Burovski, J. Machta, N. Prokof'ev, B. Svistunov. *High-precision measurement of the thermal exponent for the three-dimensional  $X Y$  universality class* // Physical Review B, **74**, 13, pp. 132502 (2006).
- [4] J. Wang, Y. Ma. *Thermodynamics and finite-size scaling of homogeneous weakly interacting Bose gases within an exact canonical statistics* // Physical Review A, **79**, 3, pp. 033604 (2009).
- [5] Л. П. Питаевский. *Конденсация Бозе–Эйнштейна в магнитных ловушках. Введение в теорию* // Успехи физических наук, **168**, 6, стр. 641–653 (1998).
- [6] H. Shi, A. Griffin. *Finite-temperature excitations in a dilute Bose-condensed gas* // Physics Reports, **304**, 1, pp. 1–87 (1998).
- [7] J. O. Andersen. *Theory of the weakly interacting Bose gas* // Reviews of Modern Physics, **76**, 2, pp. 599–639 (2004).

- [8] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle. *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms* // Physical Review Letters, **75**, 22, pp. 3969–3973 (1995).
- [9] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell. *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor* // Science, **269**, 5221, pp. 198–201 (1995).
- [10] L. P. Pitaevskii, S. Stringari. *Bose-einstein condensation*: Oxford University Press (2003).
- [11] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger. *Many-body physics with ultracold gases* // Reviews of Modern Physics, **80**, 3, pp. 885–964 (2008).
- [12] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, W. Ketterle. *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate* // Nature, **392**, 6672, pp. 151–154 (1998).
- [13] N. Nygaard, B. I. Schneider, P. S. Julienne. *Two-channel R-matrix analysis of magnetic-field-induced Feshbach resonances* // Physical Review A, **73**, 4, pp. 042705 (2006).
- [14] K. Henderson, C. Ryu, C. MacCormick, M. G. Boshier. *Experimental demonstration of painting arbitrary and dynamic potentials for Bose-Einstein condensates* // New Journal of Physics, **11**, 4, pp. 043030 (2009).
- [15] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, W. Ketterle. *Realization of Bose-Einstein condensates in lower dimensions* // Physical Review Letters, **87**, 13, pp. 130402 (2001).
- [16] D. Rychtarik, B. Engeser, H.-C. Nägerl, R. Grimm. *Two-dimensional Bose-*

- Einstein condensate in an optical surface trap* // Physical Review Letters, **92**, 17, pp. 173003 (2004).
- [17] N. L. Smith, W. H. Heathcote, G. Hechenblaikner, E. Nugent, C. J. Foot. *Quasi-2D confinement of a BEC in a combined optical and magnetic potential* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **38**, 3, pp. 223–235 (2005).
- [18] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, Z. Hadzibabic. *Bose-Einstein condensation of atoms in a uniform potential* // Physical Review Letters, **110**, 20, pp. 200406 (2013).
- [19] T. P. Meyrath, F. Schreck, J. L. Hanssen, C.-S. Chuu, M. G. Raizen. *Bose-Einstein condensate in a box* // Physical Review A, **71**, 4, pp. 041604 (2005).
- [20] T. Radu, H. Wilhelm, V. Yushankhai, D. Kovrizhin, R. Coldea, Z. Tylczynski, T. Lühmann, F. Steglich. *Bose-Einstein condensation of magnons in Cs<sub>2</sub>CuCl<sub>4</sub>* // Physical Review Letters, **95**, 12, pp. 127202 (2005).
- [21] Ю. Е. Лозовик. *Сильные корреляции и новые фазы в системе экситонов и поляритонов, поляритонный лазер* // Успехи физических наук, **179**, 3, стр. 309–313 (2009).
- [22] L. V. Butov, C. W. Lai, A. L. Ivanov, A. C. Gossard, D. S. Chemla. *Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps* // Nature, **417**, 6884, pp. 47–52 (2002).
- [23] H. Deng, H. Haug, Y. Yamamoto. *Exciton-polariton Bose-Einstein condensation* // Reviews of Modern Physics, **82**, 2, pp. 1489–1537 (2010).
- [24] J. J. Baumberg, A. V. Kavokin, S. Christopoulos, A. J. D. Grundy, R. Butté, G. Christmann, D. D. Solnyshkov, G. Malpuech, G. Baldassarri Höger von

- Högersthal, E. Feltin, J.-F. Carlin, N. Grandjean. *Spontaneous polarization buildup in a room-temperature polariton laser* // Physical Review Letters, **101**, 13, pp. 136409 (2008).
- [25] M. Fattori, C. D’Errico, G. Roati, M. Zaccanti, M. Jona-Lasinio, M. Modugno, M. Inguscio, G. Modugno. *Atom interferometry with a weakly interacting Bose-Einstein condensate* // Physical Review Letters, **100**, 8, pp. 080405 (2008).
- [26] A. N. Pyrkov, T. Byrnes. *Entanglement generation in quantum networks of Bose-Einstein condensates* // New Journal of Physics, **15**, 9, pp. 093019 (2013).
- [27] T. Donner, S. Ritter, T. Bourdel, A. Öttl, M. Köhl, T. Esslinger. *Critical behavior of a trapped interacting Bose gas* // Science, **315**, 5818, pp. 1556–1558 (2007).
- [28] A. Perrin, R. Bücker, S. Manz, T. Betz, C. Koller, T. Plisson, T. Schumm, J. Schmiedmayer. *Hanbury Brown and Twiss correlations across the Bose-Einstein condensation threshold* // Nature Physics, **8**, 3, pp. 195–198 (2012).
- [29] A. L. Gaunt, R. J. Fletcher, R. P. Smith, Z. Hadzibabic. *A superheated Bose-condensed gas* // Nature Physics, **9**, 5, pp. 271–274 (2013).
- [30] J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger, M. Weitz. *Bose-Einstein condensation of photons in an optical microcavity* // Nature, **468**, 7323, pp. 545–548 (2010).
- [31] D. N. Sob’yanin. *Bose-Einstein condensation of light: General theory* // Physical Review E, **88**, 2, pp. 022132 (2013).
- [32] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, M. Kac. *The ideal Bose-Einstein gas, revisited* // Physics Reports, **32**, 4, pp. 169–248 (1977).

- [33] M. Holthaus, E. Kalinowski, K. Kirsten. *Condensate fluctuations in trapped Bose gases: Canonical vs. microcanonical ensemble* // Annals of Physics, **270**, 1, pp. 198–230 (1998).
- [34] V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky, M. Holthaus, C. H. R. Ooi, A. Svidzinsky, W. Ketterle, M. O. Scully. *Fluctuations in ideal and interacting bose–einstein condensates: from the laser phase transition analogy to squeezed states and Bogoliubov quasiparticles* // Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics, **53**, pp. 291–411 (2006).
- [35] P. Navez, D. Bitouk, M. Gajda, Z. Idziaszek, K. Rzazewski. *Fourth statistical ensemble for the Bose-Einstein condensate* // Physical Review Letters, **79**, 10, pp. 1789–1792 (1997).
- [36] S. Grossmann, M. Holthaus. *Maxwell’s Demon at work: Two types of Bose condensate fluctuations in power-law traps* // Optics Express, **1**, 10, pp. 262–271 (1997).
- [37] M. Holthaus, K. T. Kapale, V. V. Kocharovsky, M. O. Scully. *Master equation vs. partition function: canonical statistics of ideal Bose–Einstein condensates* // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **300**, 3, pp. 433–467 (2001).
- [38] D. Boers, M. Holthaus. *Canonical statistics of occupation numbers for ideal and weakly interacting Bose-Einstein condensates* // Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions, pp. 332–368, Springer (2002).
- [39] C. Weiss, M. Holthaus. *Asymptotics of the number partitioning distribution* // EPL (Europhysics Letters), **59**, 4, pp. 486 (2002).

- [40] R. P. Feynman. *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*: Benjamin, New-York (1972).
- [41] D. ter Haar. *Lectures on Selected Topics in Statistical Mechanics*: Pergamon, Oxford (1977).
- [42] H. Kleinert. *Gauge fields in condensed matter*: World Scientific Singapore (1989).
- [43] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics, International Series in Natural Philosophy*: Pergamon Press, Oxford, UK (1986).
- [44] C. Weiss, M. Wilkens. *Particle number counting statistics in ideal Bose gases* // *Optics Express*, **1**, 10, pp. 272–283 (1997).
- [45] N. L. Balazs, T. Bergeman. *Statistical mechanics of ideal Bose atoms in a harmonic trap* // *Physical Review A*, **58**, 3, pp. 2359–2372 (1998).
- [46] P. Borrmann, J. Harting, O. Mülken, E. R. Hilf. *Calculation of thermodynamic properties of finite Bose-Einstein systems* // *Physical Review A*, **60**, 2, pp. 1519–1522 (1999).
- [47] W. J. Mullin, J. P. Fernandez. *Bose–Einstein condensation, fluctuations, and recurrence relations in statistical mechanics* // *American Journal of Physics*, **71**, 7, pp. 661–669 (2003).
- [48] K. Glaum, H. Kleinert, A. Pelster. *Condensation of ideal Bose gas confined in a box within a canonical ensemble* // *Physical Review A*, **76**, 6, pp. 063604 (2007).
- [49] J. Wang, Y. Ma, J. He. *Thermodynamics of finite Bose Systems: an exact canonical-ensemble treatment with different traps* // *Journal of Low Temperature Physics*, **162**, 1, pp. 23–33 (2011).

- [50] P. T. Landsberg. *Thermodynamics with quantum statistical illustrations*: New York, London (1961).
- [51] Е. Д. Трифонов, С. Н. Загуляев. *О функции распределения числа частиц в бозе-эйнштейновском конденсате идеального газа* // Успехи физических наук, **180**, 1, стр. 89—96 (2010).
- [52] В. А. Алексеев. *Функции распределения числа частиц в конденсате захваченного в ловушку идеального бозе-газа* // Журнал экспериментальной и теоретической физики, **119**, 4, стр. 700–709 (2001).
- [53] В. А. Алексеев. *Статистика идеального однородного бозе-газа с фиксированным числом частиц* // Квантовая электроника, **31**, 5, стр. 427–431 (2001).
- [54] В. А. Алексеев. *Статистика мезоскопических ансамблей бозонов и фермионов* // Журнал экспериментальной и теоретической физики, **139**, 6, стр. 1069–1073 (2011).
- [55] V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky. *Analytical theory of mesoscopic Bose-Einstein condensation in an ideal gas* // Physical Review A, **81**, 3, pp. 033615 (2010).
- [56] V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky. *Self-similar analytical solution of the critical fluctuations problem for the Bose-Einstein condensation in an ideal gas* // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **43**, 22, pp. 225001 (2010).
- [57] S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, V. V. Kocharovsky. *Universal scaling in the statistics and thermodynamics of a Bose-Einstein condensation of an ideal gas in an arbitrary trap* // Physical Review A, **90**, 3, pp. 033605 (2014).

- [58] S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, V. V. Kocharovsky. *Universal fine structure of the specific heat at the critical  $\lambda$ -point for an ideal Bose gas in an arbitrary trap* // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **47**, 41, pp. 415003 (2014).
- [59] Вл. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский, С. В. Тарасов. *Бозе-эйнштейновская конденсация в мезоскопических системах: автомодельная структура критической области и неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей* // Письма в ЖЭТФ, **103**, 1, стр. 67–80 (2016).
- [60] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. *Статистическая физика, часть 1*: М.: Наука, Физматлит (1995).
- [61] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari. *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases* // Reviews of Modern Physics, **71**, 3, pp. 463–512 (1999).
- [62] P. T. Landsberg. *Thermodynamics and statistical mechanics*: Courier Corporation (2014).
- [63] E. Schrödinger. *Statistical thermodynamics*: Courier Corporation (1989).
- [64] M. Van den Berg, J. T. Lewis, J. V. Pulé. *A general theory of Bose-Einstein condensation* // Helvetica Physica Acta, **59**, 8, pp. 1271–1288 (1986).
- [65] G. Su, J. Chen. *Bose-Einstein condensation of a finite-size Bose system* // European Journal of Physics, **31**, 1, pp. 143–150 (2009).
- [66] D. J. Toms. *Statistical mechanics of an ideal Bose gas in a confined geometry* // Journal of Physics A: Mathematical and General, **39**, 4, pp. 713 (2006).

- [67] J. M. B. Noronha, D. J. Toms. *Bose–Einstein condensation in the three-sphere and in the infinite slab: Analytical results* // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **392**, 18, pp. 3984–3996 (2013).
- [68] S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, V. V. Kocharovsky. *Grand Canonical Versus Canonical Ensemble: Universal Structure of Statistics and Thermodynamics in a Critical Region of Bose–Einstein Condensation of an Ideal Gas in Arbitrary Trap* // Journal of Statistical Physics, **47**, 41, pp. 942–964 (2015).
- [69] M. Wilkens, C. Weiss. *Particle number fluctuations in an ideal Bose gas* // Journal of Modern Optics, **44**, 10, pp. 1801–1814 (1997).
- [70] C. Herzog, M. Olshanii. *Trapped Bose gas: The canonical versus grand canonical statistics* // Physical Review A, **55**, 4, pp. 3254 (1997).
- [71] E. A. Guggenheim, R. H. Fowler. *Statistical thermodynamics*: Cambridge University Press (1949).
- [72] T. L. Hill. *Statistical mechanics: principles and selected applications*: Courier Corporation (2013).
- [73] F. Reif. *Fundamentals of statistical and thermal physics*: Waveland Press (2009).
- [74] А. Я. Хинчин. *Математические основания статистической механики*: Ижевск: НИЦ «РХД», ИКИ (2003).
- [75] D. Ruelle. *Statistical Mechanics: Rigorous Results*: World Scientific (1969).
- [76] Д. Н. Зубарев. *Неравновесная статистическая термодинамика*: М.: Наука (1971).

- [77] R. L. Dobrushin, B. Tirozzi. *The central limit theorem and the problem of equivalence of ensembles* // Communications in Mathematical Physics, **54**, 2, pp. 173–192 (1977).
- [78] M. Aizenman, S. Goldstein, J. L. Lebowitz. *Conditional equilibrium and the equivalence of microcanonical and grandcanonical ensembles in the thermodynamic limit* // Communications in Mathematical Physics, **62**, 3, pp. 279–302 (1978).
- [79] A. Martin-Löf. *Statistical mechanics and the foundations of thermodynamics*: Springer (1979).
- [80] J. T. Lewis, C.-E. Pfister, W. G. Sullivan. *The equivalence of ensembles for lattice systems: some examples and a counterexample* // Journal of Statistical Physics, **77**, 1-2, pp. 397–419 (1994).
- [81] H. Touchette. *Ensemble equivalence for general many-body systems* // EPL (Europhysics Letters), **96**, 5, pp. 50010 (2011).
- [82] В. А. Загребнов, Вл. В. Папоян. *О проблеме эквивалентности ансамблей для бозе-систем (неидеальный бозе-газ)* // Теоретическая и математическая физика, **69**, 3, стр. 420–438 (1986).
- [83] A. Campa, T. Dauxois, S. Ruffo. *Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions* // Physics Reports, **480**, 3, pp. 57–159 (2009).
- [84] M. Kastner. *Nonequivalence of ensembles in the Curie–Weiss anisotropic quantum Heisenberg model* // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, **2010**, 7, pp. P07006 (2010).
- [85] M. E. Fisher. *The renormalization group in the theory of critical behavior* // Reviews of Modern Physics, **46**, 4, pp. 597 (1974).

- [86] P. B. Weichman, M. Rasolt, M. E. Fisher, M. J. Stephen. *Criticality and superfluidity in a dilute Bose fluid* // Physical Review B, **33**, 7, pp. 4632–4663 (1986).
- [87] А. З. Паташинский, В. Л. Покровский. *Флуктуационная теория фазовых переходов*: М.: Наука (1982).
- [88] F. M. Gasparini, M. O. Kimball, K. P. Mooney, M. Diaz-Avila. *Finite-size scaling of He4 at the superfluid transition* // Reviews of Modern Physics, **80**, 3, pp. 1009 (2008).
- [89] E. L. Pollock, K. J. Runge. *Finite-size-scaling analysis of a simulation of the He4 superfluid transition* // Physical Review B, **46**, 6, pp. 3535 (1992).
- [90] N. Schultka, E. Manousakis. *Specific heat of superfluids near the transition temperature* // Physical Review B, **52**, 10, pp. 7528–7536 (1995).
- [91] С. В. Тарасов. *Асимптотические методы в теории бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в произвольной мезоскопической ловушке* // Нелинейный мир, 6, стр. 34–46 (2015).
- [92] С. В. Тарасов. *Автомодельность статистики в критической области бозе-конденсации идеального газа в мезоскопических ловушках: канонический и большой канонический ансамбли* // Краткие сообщения по физике, **43**, 4, стр. 45–51 (2016).
- [93] S. Chatterjee, P. Diaconis. *Fluctuations of the Bose–Einstein condensate* // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, **47**, 8, pp. 085201 (2014).
- [94] L. Onsager. *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition* // Physical Review, **65**, 3-4, pp. 117 (1944).

- [95] A. B. Zamolodchikov. *Integrals of motion and S-matrix of the (scaled)  $T = Tc$  Ising model with magnetic field* // International Journal of Modern Physics A, **4**, 16, pp. 4235–4248 (1989).
- [96] Р. Бэкстер, Е. П. Вольский, Л. И. Дайхин. *Точно решаемые модели в статистической механике: Пер. с англ.* М.: Мир (1985).
- [97] С. В. Тарасов, Вл. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский. *Точное решение задачи о бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в мезоскопической ловушке с жесткими стенками* // XVI научная школа "Нелинейные волны–2012": тезисы докладов, стр. 135–136, Нижний Новгород (2012).
- [98] С. В. Тарасов, Вл. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский. *Универсальная структура критической области бозе-эйнштейновской конденсации идеального газа в мезоскопических системах* // Труды XVIII Нижегородской сессии молодых ученых: естественные, математические науки, стр. 74–77, Нижний Новгород (2013).
- [99] С. В. Тарасов, Вл. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский. *Влияние граничных условий на процесс бозе-эйнштейновской конденсации в атомных системах* // Труды XVII научной конференции по радиофизике, стр. 151–153, Нижний Новгород (2013).
- [100] S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, V. V. Kocharovsky. *Universality of the  $\lambda$ -point structure for the Bose-Einstein condensation of an ideal gas in different traps* // V International conference "Frontiers of Nonlinear Physics-2013": proceedings, pp. 276–277, Nizhny Novgoro (2013).
- [101] S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, V. V. Kocharovsky. *Universal scaling in the statistics and thermodynamics of the Bose-Einstein condensation of an*

*ideal gas in different mesoscopic traps* // International conference on the Statistical Physics SigmaPhi2014: abstracts, pp. 160, Rhodes (2014).

- [102] С. В. Тарасов, В. В. Кочаровский, Вл. В. Кочаровский. *Универсальная аналитическая теория термодинамических свойств идеального бозе-газа в мезоскопических ловушках для всей критической области параметров системы* // IV Международная молодежная научная школа-конференция "Современные проблемы физики и технологий": тезисы докладов, ч. 1, стр. 79–80, Москва (2015).
- [103] С. В. Тарасов, Вл. В. Кочаровский, В. В. Кочаровский. *Неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей на примере статистики и термодинамики бозе-эйнштейновского конденсата в критической области параметров* // XVII научная школа "Нелинейные волны–2016": тезисы докладов, стр. 143, Нижний Новгород (2016).
- [104] V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky, M. O. Scully. *Condensation of  $N$  bosons. III. Analytical results for all higher moments of condensate fluctuations in interacting and ideal dilute Bose gases via the canonical ensemble quasiparticle formulation* // Physical Review A, **61**, 5, pp. 053606 (2000).
- [105] А. Н. Малахов. *Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований*: М.: Советское радио (1978).
- [106] С. М. Рытов. *Введение в статистическую радиофизику*: М.: Наука (1976).
- [107] М. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами*: М.: Наука (1979).

- [108] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. *Высшие трансцендентные функции*: М.: Наука (1974).
- [109] S. R. De Groot, G. J. Hooyman, C. A. Ten Seldam. *On the Bose-Einstein condensation* // Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, pp. 266–286 (1950).
- [110] S. Gupta, K. W. Murch, K. L. Moore, T. P. Purdy, D. M. Stamper-Kurn. *Bose-Einstein condensation in a circular waveguide* // Physical Review Letters, **95**, 14, pp. 143201 (2005).
- [111] S. Franke-Arnold, J. Leach, M. J. Padgett, V. E. Lembessis, D. Ellinas, A. J. Wright, J. M. Girkin, P. Ohberg, A. S. Arnold. *Optical ferris wheel for ultracold atoms* // Optics Express, **15**, 14, pp. 8619–8625 (2007).
- [112] А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. *Уравнения математической физики*: М.: МГУ (1999).
- [113] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. *Высшие трансцендентные функции*: М.: Наука (1974).
- [114] А. Мессиа. *Квантовая механика*: М.: Наука (1978).
- [115] A. Voros. *Spectral functions, special functions and the Selberg zeta function* // Communications in Mathematical Physics, **110**, 3, pp. 439–465 (1987).
- [116] A. Voros. *Spectral zeta functions* // Advanced Studies in Pure Mathematics, **21**, pp. 327–358 (1992).
- [117] K. Kirsten. *Inhomogeneous multidimensional Epstein zeta functions* // Journal of Mathematical Physics, **32**, 11, pp. 3008–3014 (1991).