УДК 538.9

ЗАВИСИМОСТЬ ФЛУКТУАЦИЙ НАСЕЛЁННОСТИ БОЗЕ-КОНДЕНСАТА В ГАЗЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ ОТ РАЗМЕРА СИСТЕМЫ: ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ

С. В. Тарасов[1*], *Вл. В. Кочаровский*[1], *В. В. Кочаровский*[1,2]

[1] Институт прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, Россия
[2] Texas A&M University, College Station, USA

Рассматривается статистика населённости бозе-конденсата в газе взаимодействующих частиц, удерживаемом при низкой температуре в трёхмерных ловушках кубической формы с различными граничными условиями. На основе численных расчётов исследуется поведение математического ожидания и дисперсии населённости конденсата при увеличении размеров системы, соответствующем переходу к термодинамическому пределу при постоянных температуре и плотности газа. Для широкого диапазона размеров ловушек, соответствующего реальным экспериментам, анализируется конкуренция тепловых и квантовых вкладов в моменты изучаемого статистического распределения, а также зависимость его характера от граничных условий. Оценивается, с какой точностью и начиная с каких размеров системы результаты, полученные в термодинамическом пределе, применимы к реальным мезоскопическим системам.

ВВЕДЕНИЕ

Описанные в самое последнее время эксперименты [1–5] демонстрируют появление технических возможностей для прецизионного контролирования и прямого измерения флуктуаций населённости бозе-эйнштейновского конденсата в ультрахолодном газе, удерживаемом в магнитооптической ловушке. Таким образом, возникает уникальная возможность экспериментального изучения и тестирования явлений критических флуктуаций и фазовых переходов в квантовой статистической физике многочастичных мезоскопических систем на принципиально более глубоком уровне [6, 7], чем на преобладавшем до последнего времени уровне изучения математического ожидания параметра порядка (в частности, средней населённости и пространственного распределения бозе-конденсата в ловушке) и определяемых им величин (таких как спектр коллективных возбуждений на фоне неоднородного конденсата или интерференция двух перекрывающихся конденсатов) [8, 9].

Описание статистики бозе-конденсата, а именно вероятностного распределения числа частиц в конденсате N_0 (населённости конденсата) и числа частиц вне конденсата N_{ex} (населённости надконденсата) [1], относится к фундаментальным задачам физики конденсированного состояния и имеет самое прямое отношение к построению микроскопической теории фазовых переходов второго рода [10]. Эта задача весьма сложна, особенно при учёте межчастичного взаимодействия в бозе-газе. В настоящее время универсальное описание статистики, применимое для системы произвольного размера и с произвольным удерживающим потенциалом, не известно даже в рамках простой теории среднего поля в приближении Боголюбова—Попова [8, 11, 12], применимом для

* serge.tar@gmail.com

[1] Обычно предполагается, что число частиц в ловушке $N = N_0 + N_{\text{ex}}$ фиксировано, т. е. рассматривается канонический статистический ансамбль. При этом случайные величины N_0 и N_{ex} являются комплиментарными друг к другу, а их вероятностные распределения – функциями, зеркально симметричными друг к другу относительно значения аргумента $N/2$.

разрежённых газов со слабым межчастичным взаимодействием при температурах значительно ниже температуры критической точки фазового перехода.

Сложность проблемы во многом обусловлена тем, что квазичастицы системы не тождественны частицам, статистика конденсированной фракции которых исследуется, и могут иметь весьма нетривиальную структуру, к тому же сильно зависящую от интенсивности межчастичного рассеяния. В отсутствие сколько-нибудь полного решения проблемы для априорного суждения о статистике конденсата берутся предсказания, полученные для модельных (например, полностью однородных) систем, причём чаще всего с использованием упрощающего предположения о переходе к термодинамическому пределу, т. е. бесконечно большой системе.

В недавней работе [13] удалось дать описание квазичастиц бозе-газа в существенно неоднородной системе, а именно для случая ловушки с плоским удерживающим потенциалом и нулевыми граничными условиями при произвольной интенсивности межчастичного взаимодействия, удовлетворяющей условиям применимости приближения Боголюбова—Попова. Для этого решались уравнение Гросса—Питаевского для макроскопической волновой функции бозе-конденсата и уравнения Боголюбова—де Жена для квазичастиц. Структура квазичастиц была найдена в таком виде, который позволяет явно, в рамках «диагональной» модели, описать статистику числа частиц в конденсате, аналитически определив характеристическую функцию распределения, а также его моменты и кумулянты.

На основе этого результата в данной работе проведён численный анализ статистических моментов вероятностного распределения числа конденсированных и надконденсатных частиц для мезоскопических систем в ловушках с плоским удерживающим потенциалом и различными граничными условиями, в частности их поведения при увеличении размеров системы и переходе к термодинамическому пределу. Представляемое исследование позволяет оценить, насколько предсказания [14, 15] об аномально большой дисперсии, сделанные в предположении термодинамического предела, справедливы для реальных экспериментов с системами конечного размера. Исследованный конкретный пример подтверждает сформулированную в модельном рассмотрении [16] гипотезу о том, что эффекты влияния граничных условий на статистику населённости бозе-конденсата, хорошо известные и последовательно описанные для случая идеального газа (см., например, [17] и цитированные в этой работе источники), сохраняются и при наличии межчастичного рассеяния.

1. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СТАТИСТИКА БОЗЕ-КОНДЕНСАТА

Настоящее рассмотрение относится к случаю низких температур $T \ll T_{\text{c}}$ (здесь T_{c} — критическая температура конденсации) и относительно слабого межчастичного взаимодействия, такого что для описания системы применимо приближение Боголюбова—Попова теории среднего поля [8, 11, 12], в рамках которой в статье [13] были определены возбуждённые состояния системы. Считается, что количественно приближение Боголюбова—Попова вполне применимо для описания бозе-систем при выполнении условия [18] $\sqrt{na^3} < 0{,}035$, где указанная комбинация концентрации газа n и длины рассеяния a традиционно используется как параметр, характеризующий межчастичное взаимодействие. Для однородной трёхмерной системы этой комбинации пропорционально квантовое истощение [6, 19] — число частиц, «вытолкнутых» из конденсата межчастичным взаимодействием при нулевой температуре системы (см. уравнение (7) ниже). Отметим, что наряду с приближением Боголюбова—Попова, являющимся приближением первого порядка теории возмущений, в литературе предлагались значительно более сложные приближения с целью продвинуть описание бозе-конденсированного состояния в сторону более высоких температур, приближающихся к критической температуре; см., в частности, работы [12, 20–23] и ссылки в них. Мы не будем обсуждать их в данной статье и ограничимся приближением Боголюбова—Попова, тем более что ни одно из них не позволяет описать критическую, самую нетривиальную область параметров вблизи критической температуры [10].

Рассмотрим ловушку, удерживающую бозе-газ внутри куба со стороной L. Граничные условия считаем периодическими по двум направлениям, в то время как по третьему направлению они могут быть выбраны как периодическими, так и нулевыми. При поиске профиля конденсата и структуры квазичастиц пространственные переменные могут быть разделены. Возникающая при выборе нулевых граничных условий неоднородная одномерная задача решена и подробно рассмотрена в работе [13]. На её основе можно утверждать, что для обоих рассматриваемых вариантов граничных условий операторы рождения и уничтожения квазичастицы представляются перепутыванием операторов рождения и уничтожения отдельных (либо взаимно сопряжённых) собственных решений $f_j(\mathbf{r})$ модифицированного уравнения Шрёдингера [2]:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\,\Delta f_j(\mathbf{r}) + \Big[U_{\rm tr}(\mathbf{r}) + g\langle N_0\rangle\phi^2(\mathbf{r}) + 2gn_{\rm ex}(\mathbf{r}) - \mu\Big] f_j(\mathbf{r}) = \epsilon_j f_j(\mathbf{r}). \tag{1}$$

Здесь M — масса атома, $g = 4\pi\hbar^2 a/M$ — так называемая константа взаимодействия, связанная с длиной межчастичного рассеяния a; $\phi(\mathbf{r})$ — волновая функция конденсата, совпадающая с решением $f_0(\mathbf{r})$; μ — химический потенциал, соответствующий условию $\epsilon_0 \equiv 0$; $\langle N_0\rangle\phi^2(\mathbf{r})$ и $n_{\rm ex}(\mathbf{r})$ — средние по ансамблю профили концентрации конденсата и надконденсата, $U_{\rm tr}$ — удерживающий потенциал, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, Δ — оператор Лапласа, $\hbar$ — постоянная Планка. Спектр квазичастиц имеет вид $E_j = \sqrt{\epsilon_j^2 + 2gnJ_{j\,j}\epsilon_j}$, где $J_{j\,j} = \int f_j^*(\mathbf{r}) f_0^2(\mathbf{r}) f_j(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}$ — интеграл перекрытия j-й квазичастицы с конденсатом, ϵ_j — собственное значение уравнения (1), индекс * обозначает комплексное сопряжение.

Статистическое распределение $\rho_{\rm ex}$ числа частиц вне конденсата $N_{\rm ex}$ и распределение ρ_0 числа частиц в конденсате N_0 для случая квазичастиц указанной структуры имеют вид

$$\rho_{\rm ex}(N_{\rm ex}) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} \exp(-iuN_{\rm ex})\Theta(u)\,\mathrm{d}u, \qquad \rho_0(N_0) = \rho_{\rm ex}(N - N_0),$$

$$\Theta = \prod_{j\ge 1} \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \zeta_j^{[+]} z\right)\left(1 - \zeta_j^{[-]} z\right)}}\,, \quad z \equiv \exp(iu) - 1,$$

$$\zeta_j^{[+]} = \frac{E_j/\epsilon_j}{\exp(E_j/T) - 1} + \frac{E_j/\epsilon_j - 1}{2}\,, \qquad \zeta_j^{[-]} = \frac{\epsilon_j/E_j}{\exp(E_j/T) - 1} + \frac{\epsilon_j/E_j - 1}{2}\,, \tag{2}$$

где индекс j перечисляет все возбуждённые уровни системы, исключая моду Голдстоуна $j = 0$, возбуждение которой не ведёт к флуктуациям населённости конденсата.

Необходимо подчеркнуть, что собственные решения модифицированного уравнения Шрёдингера (1) и их энергии ϵ_j, определяющие статистическое распределение, вовсе не являются «голыми» модами задачи без взаимодействия, а непосредственно зависят от интенсивности межчастичного рассеяния. Роль естественного аргумента в этой зависимости играет отношение gn/ϵ^* характерной энергии взаимодействия gn к характерной кинетической энергии $\epsilon^* = \hbar^2\pi^2/(2ML^2)$ частицы в ловушке-ящике. В терминах пространственных масштабов это отношение $gn/\epsilon^* = [L/(\pi\xi)]^2$ сводится к отношению длины ловушки L к длине экранирования $\xi = (8\pi na)^{-1/2} = \hbar/\sqrt{2Mgn}$.

[2] Для однородной системы это уравнение, очевидно, сводится к обычному уравнению Шрёдингера со сдвинутым уровнем отсчёта энергии.

Последняя характеризует длину, на которой межчастичное взаимодействие выполаживает волновую функцию конденсата: при $L \gg \xi$ спадание плотности конденсата от почти постоянной величины в центральной части ловушки до нулевого значения на её границе фактически полностью происходит в приграничном слое с толщиной порядка 3ξ.

Результат (2) также даёт возможность найти моментные характеристики статистического распределения через его кумулянты $\tilde{\kappa}_m$:

$$\tilde{\kappa}_m \equiv \frac{\partial^m}{\partial z^m} \ln \Theta \bigg|_{z=0} = \frac{\Gamma(m)}{2} \sum_{j \geq 1} \left(\zeta_j^{[+]^m} + \zeta_j^{[-]^m} \right), \tag{3}$$

где $\Gamma(m)$ —гамма-функция. В дальнейшем анализе основное внимание будет уделено дисперсии, требующей вычисления второго кумулянта $\tilde{\kappa}_2$. Дело в том, что именно её связь с полным числом частиц при переходе к термодинамическому пределу — которая может соответствовать как нормальным, так и аномально больши́м флуктуациям параметра порядка — влияет на то, являются ли распределения (2) $\rho_{\rm ex}(N_{\rm ex})$ и $\rho_0(N_0)$ гауссовыми в термодинамическом пределе или сохраняют существенные отличия от такового даже для больши́х систем. Указанный тезис хорошо известен и надёжно подтверждён для случая идеального газа [17, 24]; в пользу той же закономерности и при наличии межчастичного взаимодействия свидетельствуют модельные рассмотрения [16].

Стоит отметить, что используемое нами описание квазичастиц в неоднородной задаче с нулевыми граничными условиями является не строгим решением, а «диагональной» аппроксимацией [13]. Однако сравнение с прямым численным моделированием квазичастиц в рамках системы уравнений Гросса—Питаевского и Боголюбова—де Жена показало, что точность этой аппроксимации во всём диапазоне значений соотношения L/ξ достаточно высокая: возбуждённая мода модифицированного уравнения Шрёдингера формирует не менее 97 % нормы соответствующей квазичастицы, а ошибка в определении её энергии не превышает 2,5 % даже для самых низкоэнергетических состояний [3] и быстро убывает с увеличением квантовых чисел. С позиции более последовательного исследования статистики, учитывающего явно «недиагональную» структуру квазичастиц, описание (2) можно рассматривать как нулевой порядок теории возмущений, который тем не менее оказывается весьма близким к полному решению.

2. ЭВОЛЮЦИЯ СТАТИСТИКИ НАСЕЛЁННОСТИ БОЗЕ-КОНДЕНСАТА ПРИ ПЕРЕХОДЕ К ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОМУ ПРЕДЕЛУ

Определение термодинамического предела подразумевает, что при постоянной температуре системы T и фиксированной длине рассеяния a (а значит, и фиксированной константе взаимодействия g) проводится одновременное согласованное увеличение размера ловушки L и полного числа частиц N, сохраняющее концентрацию газа n постоянной [8]. Параметр $\sqrt{na^3}$, характеризующий межчастичное взаимодействие, остаётся при таком переходе фиксированным. Однако структуру квазичастиц и их энергии напрямую определяет не он, а отношение L/ξ. Эти два параметра, описывающие роль межчастичного взаимодействия, связаны соотношением

$$L/\xi = \sqrt{8\pi}\, (na^3)^{1/6} N^{1/3} \approx \left(6\sqrt{2}\, \pi^2 \langle N_{\rm ex}^{[\rm q]} \rangle \right)^{1/3}. \tag{4}$$

Здесь $\langle N_{\rm ex}^{[\rm q]} \rangle$ — квантовое истощение конденсата, т. е. среднее число надконденсатных частиц при нулевой температуре, выражение для которого в термодинамическом пределе хорошо известно [6, 19], $\langle N_{\rm ex}^{[\rm q]} \rangle / N \simeq 8\sqrt{na^3}/(3\sqrt{\pi})$; см. также уравнения (5) и (7).

[3] Наибольшая ошибка в аппроксимации энергии реализуется для первого возбужденного состояния при $L/\xi \approx \approx 10$.

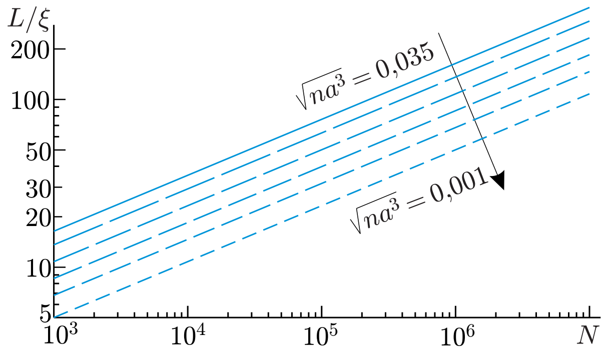

Рис. 1. Зависимость (4) отношения L/ξ длины ловушки L к длине экранирования конденсата ξ от размера системы, характеризуемого полным числом помещённых в ловушку частиц N. Прямые линии в порядке удлинения штрихов соответствуют зависимостям (4) для различных значений параметра взаимодействия $\sqrt{na^3} = 0{,}001$; $0{,}0025$; $0{,}005$; $0{,}01$; $0{,}02$ и $0{,}035$. Случай $\sqrt{na^3} = 0{,}035$ отвечает верхней границе применимости приближения Боголюбова—Попова

Для наглядности соотношение (4) проиллюстрировано на рис. 1 для систем с полным числом частиц от 10^3 (что соответствует сравнительно небольшой ловушке) до 10^7 (ловушки с плоским потенциалом с такими размерами пока не реализованы экспериментально, но видятся достижимыми в скором времени).

Отношение L/ξ при увеличении размера системы очевидным образом не сохраняется, а растёт вслед за числителем. Таким образом, переходу к термодинамическому пределу соответствует не только увеличение числа эффективно заселённых уровней, которые могут повлиять на статистику системы, но и возможная существенная перестройка волновых функций системы, что реализуется в неоднородной задаче.

На основе уравнений (2) и (3) легко записать явные мезоскопические формулы для моментов распределения, а именно для математического ожидания $\langle N_{\rm ex}\rangle$ и дисперсии σ^2, на которых основан нижеследующий численный анализ. Так, математическое ожидание $\langle N_{\rm ex}\rangle \equiv \tilde\kappa_1$ даётся суммой

$$\langle N_{\rm ex}\rangle = \langle N_{\rm ex}^{[\rm q]}\rangle + \langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle, \quad \langle N_{\rm ex}^{[\rm q]}\rangle = \frac{1}{4}\sum_{j\geq 1}\frac{(E_j-\epsilon_j)^2}{\epsilon_j E_j}\,, \quad \langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle = \frac{1}{2}\sum_{j\geq 1}\frac{\epsilon_j/E_j + E_j/\epsilon_j}{e^{E_j/T}-1}\,, \tag{5}$$

в то время как для дисперсии $\sigma^2 \equiv \tilde\kappa_2 + \tilde\kappa_1$ справедливо выражение

$$\sigma^2 = \left(\sigma^{[\rm q]}\right)^2 + \left(\sigma^{[\rm T]}\right)^2, \qquad \left(\sigma^{[\rm q]}\right)^2 = \frac{1}{8}\sum_{j\geq 1}\frac{(E_j^2-\epsilon_j^2)^2}{\epsilon_j^2 E_j^2}\,,$$

$$\left(\sigma^{[\rm T]}\right)^2 = \frac{1}{2}\sum_{j\geq 1}\left(\frac{\epsilon_j^2}{E_j^2}+\frac{E_j^2}{\epsilon_j^2}\right)\left\{\frac{1}{[\exp(E_j/T)-1]^2}+\frac{1}{\exp(E_j/T)-1}\right\}. \tag{6}$$

Для рассматриваемых моментов оказалась возможна декомпозиция на отдельные «квантовые» (индекс [q]) и «тепловые» (индекс [T]) вклады. Первые отличны от нуля только при наличии межчастичного взаимодействия, вторые значимы только при ненулевой температуре.

Вычисленное по формулам (5) и (6) поведение моментов представлено на рис. 2 и 3 для случая системы с достаточно низкой температурой ($T/T_{\rm c} \approx 0{,}1$) и умеренным параметром взаимодействия ($\sqrt{na^3} = 0{,}02$). Данный выбор параметров соответствует тому, что квантовое истощение конденсата превалирует над тепловым. Как будет видно из нижеизложенного, именно такой выбор приводит к наиболее интересной и содержательной картине перехода к термодинамическому пределу.

По отдельности квантовое и тепловое истощения легко оценить, заменяя в формулах (5) суммирование по всем возбуждённым уровням системы интегрированием:

$$\langle N_{\rm ex}^{[\rm q]}\rangle \approx \frac{\sqrt{2}}{12\pi^2}\,(L/\xi)^3 = \frac{8}{3\sqrt{\pi}}\sqrt{na^3}\,N,$$

$$\langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle \approx R(gn/T)\zeta(3/2)\ (T/\epsilon^*)^{3/2} = \frac{R(gn/T)}{R(0)}\,(T/T_{\rm c})^{3/2}N. \tag{7}$$

Величина $\zeta(3/2) \approx 2{,}61$ даётся дзета-функцией Римана, R — числовой коэффициент, имеющий монотонно убывающую зависимость от аргумента gn/T и принимающий для случая идеального газа значение $R(0) = \pi^{3/2}/8$, не зависящее от граничных условий. Вклады отдельных квазичастиц в среднее число несконденсировавшихся атомов медленно спадают с увеличением энергии возбуждённого уровня, а потому результирующие истощения $\langle N_{\rm ex}^{[\rm q]}\rangle$ и $\langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle$ эффективно формируются бóльшим числом возбуждённых уровней системы, что и позволяет применить аппроксимацию интегралами.

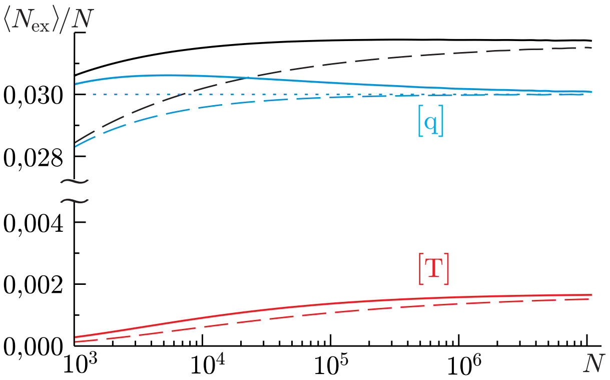

Рис. 2. Математическое ожидание относительного числа частиц вне конденсата $\langle N_{\rm ex}\rangle/N$ как функция размера системы, характеризуемого полным числом частиц N в ловушке-ящике, при неизменных концентрации газа n, температуре $T \approx \approx 0{,}1T_{\rm c}$ и параметре межчастичного взаимодействия $\sqrt{na^3} \approx 0{,}02$. Случай нулевых граничных условий вдоль одного направления и периодических граничных условий по двум другим направлениям показан сплошными кривыми; случай периодических граничных условий по всем направлениям — штриховыми кривыми. Чёрные кривые соответствуют полной населённости надконденсата, синие — квантовому вкладу (также обозначены индексом [q]), красные — тепловому вкладу (индекс [T]). Синим пунктиром дана известная асимптотика $\langle N_{\rm ex}^{[\rm q]}\rangle/N \approx 8\sqrt{na^3}/(3\sqrt{\pi})$ для квантового истощения в термодинамическом пределе [19]

Действительно, тепловое истощение эффективно формируется квазичастицами с энергиями E_j вплоть до таких, которые сопоставимы с температурой T; полное число тепловых надконденсатных частиц $\langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle$ при этом определяется резким падением населённостей из-за больцмановской экспоненты, обусловливающей сходимость суммы по состояниям для $\langle N_{\rm ex}^{[\rm T]}\rangle$ и соответствующего интеграла. Квантовое же истощение наиболее существенно накапливается из-за вкладов квазичастиц, отвечающих энергиям модифицированного уравнения Шрёдингера (1) порядка $\epsilon_j \sim (5{\div}10)gn$ и более низким. Указанный характер накопления вкладов квазичастиц предполагает, что отдельный возбуждённый уровень заметно не влияет на общий результат. Соответственно, влияние граничных условий на среднее число надконденсатных частиц ослабляется при увеличении размеров системы, что видно из рис. 2 и является ожидаемым свойством экстенсивных величин (т. е. величин, связанных с объёмом системы) при переходе к термодинамическому пределу.

Для квантовой составляющей дисперсии флуктуаций населённости ситуация качественно похожа на описанную выше. Вклад слагаемых, соответствующих отдельным квазичастицам, медленно спадает с ростом энергий последних, потому суммарный квантовый вклад в дисперсию по-прежнему может быть аппроксимирован интегралом по пространству квантовых чисел:

$$\left(\sigma^{[\rm q]}\right)^2 \simeq \frac{\sqrt{2}}{16\pi}\,(L/\xi)^3 = 2\sqrt{\pi n a^3}\ N. \tag{8}$$

Таким образом, квантовая составляющая дисперсии флуктуаций также является экстенсивной характеристикой, растущей пропорционально объёму системы и не испытывающей в пределе бóльших систем зависимости от граничных эффектов.

Однако для тепловой составляющей дисперсии флуктуаций населённости $\left(\sigma^{[\rm T]}\right)^2$ реализуется принципиально другая ситуация. Соответствующие вклады отдельных квазичастиц резко зависят от их энергий, быстро возрастая в низкоэнергетическом пределе и быстро убывая в высокоэнергетическом пределе. При этом вся тепловая часть дисперсии формируется лишь относительно небольшим числом самых низкоэнергетичных и потому наиболее заселённых состояний с энергиями в интервале, лежащем значительно ниже уровня температуры и напрямую не скоррелированным с её значением (формальный же интеграл, сопоставляемый тепловому вкладу в дисперсию, при этом оказывается расходящимся на нижнем пределе). Таким образом, тепловая составляющая дисперсии обусловлена лишь малой частью пространства квантовых чисел (квазиимпульсов) и вовсе не является экстенсивной величиной, связанной с полным объёмом этого пространства, — переход к термодинамическому пределу наиболее значительно увеличивает число заселённых уровней с энергиями, сопоставимыми с температурой, а их вклады как раз являются второстепенными. Из-за этого величина $\left(\sigma^{[\mathrm{T}]}\right)^2$ может зависеть от наложенных граничных условий, которые заметно влияют на квазичастицы с самыми малыми энергиями. В противоположность тому, как формируется тепловое истощение, экспоненциальное падение населённостей не успевает проявиться в дисперсии для формирующих её низколежащих возбуждённых уровней, что в старшем порядке величины позволяет записать тепловую составляющую дисперсии в следующей форме:

$$\left(\sigma^{[\mathrm{T}]}\right)^2 \approx S_2 \left(\frac{T}{\epsilon^*}\right)^2, \qquad S_2 = \frac{1}{2}\sum_{j\geq 1}\left[\left(\frac{\epsilon^*}{\epsilon_j}\right)^2 + \left(\frac{\epsilon^*}{\epsilon_j + 2g\langle n\rangle J_{jj}}\right)^2\right]. \tag{9}$$

Фигурирующий в формуле числовой коэффициент S_2 непосредственно зависит от спектра модифицированного уравнения Шрёдингера (1) и интегралов перекрытия $J_{j\,j}$ его решений с конденсатом; энергии же квазичастиц E_j присутствуют опосредованно.

Принципиальной особенностью здесь является то, что в соответствии с формулой (9) тепловая составляющая дисперсии имеет аномально большой порядок величины [14, 15]: $\left(\sigma^{[\mathrm{T}]}\right)^2 \propto N^{4/3} \gg N$. Квантовая составляющая при этом линейно пропорциональна полному числу частиц в ловушке, $\left(\sigma^{[\mathrm{q}]}\right)^2 \propto N$, т. е. её рост при увеличении размера системы более медленный. Это означает, что, даже если для каких-то размеров системы дисперсия определялась преимущественно квантовыми эффектами, с приближением к термодинамическому пределу неизбежно произойдёт переход к режиму тепловой дисперсии. Указанная картина в полной мере демонстрируется на рис. 3*а* и *б*, где использованы нормировки σ^2/N и $\sigma^2/N^{4/3}$, естественные для квантовой и тепловой составляющей дисперсии соответственно.

Из рис. 3 видно, что разница квантовых составляющих дисперсии для ловушек с разными граничными условиями нивелируется с увеличением размера системы. В то же время, влияние граничных условий на тепловую составляющую дисперсии является существенным и не уменьшается с приближением к термодинамическому пределу [4]. Интересно заметить, что для рассматриваемой системы с межчастичным рассеянием разница дисперсий при различных граничных условиях оказалась намного заметнее таковой, рассчитанной для идеального газа и составляющей около 5 % (см., например, [17]).

Полученные из численного расчёта кривые при этом хорошо согласуются с аналитическими формулами (9), описывающими величину в главном порядке, что позволяет объяснить эффект

[4] Это обстоятельство вполне естественно, т. к. в рассматриваемых ловушках тепловую составляющую дисперсии вполне можно считать величиной, непосредственно связанной с приграничными областями системы, а не с её объёмной частью. Действительно, переход к термодинамическому пределу подразумевает выполнение неравенства $L/\xi \gg 1$, в условиях которого низкоэнергетические квазичастицы при смене граничных условий изменяют волновую функцию только в узких приграничных слоях, в то время как в центральной части ловушки для обоих типов рассматриваемых граничных условий эти волновые функции близки к плоским волнам [13]. Определяющая роль низколежащих возбуждённых состояний в формировании тепловой дисперсии фактически и позволяет связать данную величину с приграничным объёмом системы.

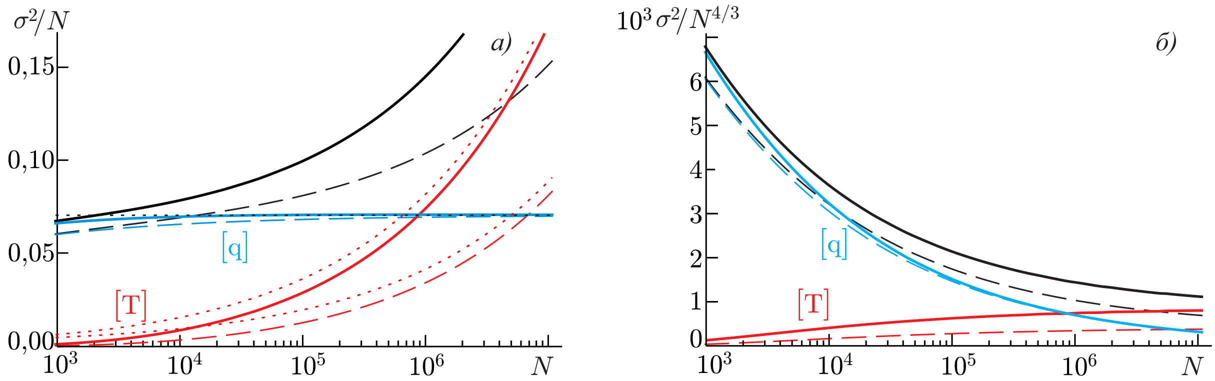

Рис. 3. Зависимость дисперсии числа частиц в конденсате σ^2 от размера системы, характеризуемого полным числом частиц N в ловушке-ящике, при неизменных концентрации газа n, температуре $T \approx 0{,}1T_\mathrm{c}$ и параметре межчастичного взаимодействия $\sqrt{na^3} \approx 0{,}2$. Случай нулевых граничных условий вдоль одного направления и периодических граничных условий по двум другим направлениям показан сплошными кривыми; случай периодических граничных условий по всем направлениям – штриховыми кривыми. Чёрные кривые соответствуют полной величине дисперсии, синие — квантовому вкладу (также обозначены индексом [q]), красные — тепловому вкладу (индекс [T]). Пунктирами показаны асимптотики (9) для тепловых вкладов. Нормировки на N и $N^{4/3}$ на панелях *а* и *б* являются естественными для квантового и теплового вкладов соответственно

как качественно, так и количественно. Дело в том, что для случая полностью однородной системы (периодические граничные условия) с ростом взаимодействия коэффициент S_2 убывает в соответствии с его определением в (9): собственные решения и энергии ϵ_j соответствующего модифицированного уравнения Шрёдингера (1) остаются постоянными, в то время как знаменатели второго слагаемого растут из-за увеличения величин $2gnJ_{j\,j}$. Такое падение коэффициента S_2 по отношению к его величине для идеального газа является почти двукратным [15] при условии $L/\xi \gg 1$, выполненном для режима тепловой дисперсии (см. рис. 1).

Для ловушки с нулевыми граничными условиями вдоль одного из направлений с усилением взаимодействия второе слагаемое в определяющей коэффициент S_2 сумме по состояниям также падает с ростом взаимодействия. Однако, как показано в статье [13], рост взаимодействия приводит к перестройке волновых функций системы, сопровождающейся существенным понижением энергий ϵ_j модифицированного уравнения Шрёдингера (1) [5]. Это соответствует увеличению первого слагаемого в формуле (9) для коэффициента S_2. Данный эффект становится основным при $L/\xi \gtrsim 10$ и приводит к тому, что в пределе $L/\xi \to \infty$ значение S_2 становится даже больше, чем в пределе $L/\xi \to 0$. Таким образом, тепловая дисперсия числа частиц в конденсате для неоднородной ловушки при наличии межчастичного взаимодействия в условиях сильного экранирования $L/\xi \gg 1$ более чем в 2 раза превышает дисперсию для однородной системы, хотя в идеальном газе при том же отличии в граничных условиях дисперсии были весьма близки.

Анализ поведения дисперсии в целом может быть перенесён на случай старших кумулянтов $\tilde{\kappa}_m$ и центральных моментов μ_m порядков $m > 2$ с той лишь разницей, что кроме чисто теплового и чисто квантового вкладов для них могут возникать также и смешанные слагаемые (обращающиеся в нуль независимо как при отсутствии межчастичного взаимодействия, так и при нулевой температуре).

Другой важной особенностью, которую демонстрируют мезоскопические расчёты, является

[5] Например, самая низкая собственная энергия ϵ, соответствующая волновой функции с одним нулём вдоль неоднородного направления и однородной по поперечным координатам, уменьшается втрое при переходе от идеального газа к пределу $L/\xi \to \infty$.

значительная ширина переходной области между областями квантово обусловленной дисперсии и тепловой дисперсии. В приведённом примере параметры системы таковы, что вклады разной природы сравниваются при размере системы, соответствующем весьма большому полному числу частиц, $N = (1{\div}5) \cdot 10^6$. Перестройка зависимости дисперсии от размера системы при этом становится заметной уже начиная с $N \approx 5{\cdot}10^4$. Плавный, широкий переход между режимами в целом ожидаем, т. к. соответствующие тепловым и квантовым вкладам в дисперсию масштабные факторы $N^{4/3}$ и N отличаются не слишком кардинально. Таким образом, для типичной мезоскопической бозе-системы, реализуемой в эксперименте, интерпретация экспериментальных данных или же предсказания о статистике числа частиц в конденсате зачастую могут потребовать учёта обеих составляющих.

Наконец, отметим, что в эксперименте сравнительно легко реализовать режим статистики с преобладающим тепловым вкладом в дисперсию и старшие кумулянты. Для этого достаточно обеспечить, чтобы тепловое истощение конденсата было заметно больше, чем квантовое, и предпочтительно работать с системой большого размера. Реализация же противоположного режима квантово-обусловленной статистики видится более сложной задачей, т. к. при значительном полном числе частиц в ловушке требование на малость температур окажется весьма строгим.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты мезоскопических расчётов для статистических характеристик бозе-газа взаимодействующих частиц, удерживаемого при низких температурах в кубических ловушках с различными граничными условиями. Эти расчёты иллюстрируют поведение моментов вероятностного распределения числа частиц в конденсате и вне его при увеличении размера ловушки и числа частиц в ней, отвечающем переходу к термодинамическому пределу.

Показано, что в процессе этого перехода для рассматриваемых ловушек с плоским удерживающим потенциалом тепловой вклад в дисперсию растёт быстрее, чем квантовый, и неизменно окажется превалирующим, начиная с некоторых размеров системы. Таким образом, формально в термодинамическом пределе для ловушек-ящиков дисперсия числа частиц в конденсате всегда оказывается тепловой, а потому аномально большой относительно среднего значения и существенно зависящей от граничных условий даже для произвольно большой системы. Утверждение о тепловом характере дисперсии флуктуаций населённости бозе-конденсата и её зависимости от граничных условий в термодинамическом пределе легко обобщить и на остальные старшие моменты и кумулянты.

При этом численный анализ наглядно показывает, что переход между режимом квантово-обусловленной дисперсии и режимом тепловой дисперсии с приближением к термодинамическому пределу отнюдь не происходит резко. Напротив, переходная область настолько широка, что для достижимых в эксперименте температур и интенсивностей межчастичного взаимодействия, обеспечивающих применимость теории Боголюбова—Попова, она вполне может покрывать заметную или даже бóльшую часть диапазона доступных на практике размеров ловушек. Этот факт говорит об актуальности дальнейшего развития предложенного мезоскопического описания статистики флуктуаций в газах с бозе-конденсатом, которое позволяет находить аналитически (в главных порядках величины) и численно одновременно и квантовый, и тепловой вклады во флуктуации параметра порядка.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 18–72–00225).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kristensen M., Christensen M., Gajdacz M., et al. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122, No. 16. Art. no. 163601. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.163601
2. Mehboudi M., Lampo A., Charalambous C., et al. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122, No. 3. Art. no. 030403. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.030403
3. Lopes R., Eigen C., Navon N., et al. // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 119, No. 19. Art. no. 190404. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.190404
4. Chomaz L., Corman L., Bienaimé T., et al. // Nat. Commun. 2015. V. 6, No. 1. Art. no. 6162. https://doi.org/10.1038/ncomms7162
5. Perrin A., Bücker R., Manz S., et al. // Nat. Phys. 2012. V. 8, No. 3. P. 195–198. https://doi.org/10.1038/nphys2212
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Часть 2. М. : Физматлит, 2004. 496 с.
7. Zwerger W. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92, No. 2. Art. no. 027203. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.027203
8. Pitaevskii L., Stringari S. Bose—Einstein condensation and superfluidity. V. 164. Oxford : Oxford University Press, 2016. 512 p.
9. Pethick C. J., Smith H. Bose—Einstein condensation in dilute gases. Cambridge : Cambridge University Press, 2002. 402 p.
10. Kocharovsky V. V., Kocharovsky Vl. V. // Physica Scripta. 2015. V. 90, No. 10. Art. no. 108002. https://doi.org/10.1088/0031-8949/90/10/108002
11. Bogoliubov N. // J. Phys. 1947. V. 11, No. 1. P. 23–32.
12. Shi H., Griffin A. // Phys. Rep. 1998. V. 304, No. 1-2. P. 1–87. https://doi.org/10.1016/S0370-1573(98)00015-5
13. Тарасов С. В., Кочаровский Вл. В., Кочаровский В. В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2019. Т. 62, № 4. С. 327–347.
14. Giorgini S., Pitaevskii L., Stringari S. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80, No. 23. P. 5 040–5 043. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.5040
15. Kocharovsky V. V., Kocharovsky Vl. V., Scully M. O. // Phys. Rev. A. 2000. V. 61, No. 5. Art. no. 053606. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.61.053606
16. Tarasov S. V., Kocharovsky Vl. V., Kocharovsky V. V. // Entropy. 2018. V. 20, No. 3. Art. no. 153. https://doi.org/10.3390/e20030153
17. Tarasov S. V., Kocharovsky Vl. V., Kocharovsky V. V. // Phys. Rev. A. 2014. V. 90, No. 3. Art. no. 033605. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.033605
18. Giorgini S., Boronat J., Casulleras J. // Phys. Rev. A. 1999. V. 60, No. 6. P. 5 129–5 132. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.60.5129
19. Lee T. D., Huang K., Yang C. N. // Phys. Rev. 1957. V. 106, No. 6. P. 1 135–1 145. https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.1135
20. Fedichev P., Shlyapnikov G. // Phys. Rev. A. 1998. V. 58, No. 4. P. 3 146–3 158. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.58.3146
21. Andersen J. O. // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76, No. 2. P. 599–638. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.599
22. Proukakis N. P., Jackson B. // J. Phys. B. At. Mol. Opt. 2008. V. 41, No. 20. Art. no. 203002. https://doi.org/10.1088/0953-4075/41/20/203002
23. Bhattacharyya S., Chakrabarti B. // Phys. Rev. A. 2016. V. 93, No. 2. Art. no. 023636. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.023636
24. Chatterjee S., Diaconis P. // J. Phys. A. Math. Theor. 2014. V. 47, No. 8. Art. no. 085201.

https://doi.org/10.1088/1751-8113/47/8/085201

Поступила в редакцию 24 марта 2020 г.; принята в печать ??? 2020 г.

DEPENDENCE OF THE BOSE-CONDENSATE POPULATION FLUCTUATIONS IN A GAS OF INTERACTING PARTICLES ON THE SYSTEM SIZE: NUMERICAL EVALUATION

S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, and V. V. Kocharovsky

We consider the Bose-condensate population statistics for a gas of interacting particles confined into a three-dimensional cubic trap with different boundary conditions at a low temperature. Behavior of the mathematical expectation and dispersion of the condensate population with the system size increase corresponding to the transition to a thermodynamic limit at constant temperature and density of the gas is examined on the basis of numerical calculations. A competition between the thermal and quantum contributions to the moments of the statistical distribution, as well as the dependence of the statistics character on the boundary conditions, are analyzed for a wide range of trap sizes related to the actual experiments. It is found with what accuracy and starting with which system sizes the thermodynamic-limit results could be applied to the actual mesoscopic systems.