ЖЭТФ, 2011, том 139, вып. 6, стр. 1066–1073

СТАТИСТИКА МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ АНСАМБЛЕЙ БОЗОНОВ И ФЕРМИОНОВ

В. А. Алексеев *

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 июля 2010 г.

Найдены равновесные функции распределения для ансамблей бозонов и фермионов с ограниченным числом частиц. Показано, что функции распределения чисел частиц в разных квантовых состояниях являются статистически зависимыми и только при большом числе частиц в ансамбле эта зависимость исчезает. При высокой температуре найденные распределения переходят в распределение Больцмана, а при большом числе частиц в ансамбле — в распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака.

1. ВВЕДЕНИЕ

Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака, которые позволяют вычислять средние значения числа частиц n_k, находящихся в квантовых состояниях с энергией E_k, являются фундаментом современной статистики. Они получаются суммированием распределения Гиббса в рамках предположения о том, что полное число частиц N в ансамбле очень велико (фактически $N \to \infty$), а распределения $w_k(n_k)$ числа частиц в состояниях с энергией E_k статистически независимы [1, 2]. В работах [3, 4] было показано, что в случае газа бозонов даже в пределе $N \to \infty$ предположение о статистической независимости распределений $w_k(n_k)$ приводит к неправильному распределению $w_0(n_0)$ числа частиц в основном состоянии (конденсате), и был развит метод, позволивший найти правильное распределение. Тем более предположение о статистической независимости распределений $w_k(n_k)$ приводит к неправильным результатам для ансамблей с небольшим числом частиц, например при $N = 2$. Последний случай в настоящее время привлек к себе особый интерес в связи с большими надеждами, возлагаемыми на применения запутанных состояний двух захваченных в ловушку или квантовую точку атомов в областях квантовой криптографии, квантовой телепортации и при квантовых вычислениях (см., например, работу [5]). Помимо практического интереса вопрос о равновесном распределении частиц, составляющих мезоскопический ансамбль, является концептуальной проблемой статистики.

В настоящей статье найдены точные равновесные распределения для ансамблей бозонов и фермионов с любым числом частиц.

Ясно, что для произвольного количества захваченных в ловушку частиц, взаимодействующих с термодинамически равновесным окружением, устанавливается распределение Гиббса

$$W(n_0, n_1, \dots) = S^{-1} \exp(-\varepsilon_0 n_0 - \varepsilon_1 n_1 - \dots), \quad (1)$$

где $\varepsilon_k = E_k/T$, T — температура, S — нормирующий множитель. Можно утверждать, однако, что и при полном отсутствии взаимодействия частиц рассматриваемого ансамбля с окружением для них также устанавливается распределение (1), поскольку только распределение вида (1) обращает в нуль интеграл столкновений. При этом полная энергия частиц ансамбля не является заданной сохраняющейся величиной, что, собственно, не должно вызывать удивления. С подавляющей вероятностью при захвате, например, в ловушку атом оказывается в суперпозиции стационарных состояний, а не в стационарном состоянии с определенной энергией, поскольку стационарные состояния образуют счетное множество по сравнению с континуумом их возможных суперпозиций. Другими словами, при захвате атомов энергия ансамбля не определена, и можно говорить только о средней энергии, определенной температурой T в распределении (1).

Определение нормирующего множителя S в распределении Гиббса (1) должно выполняться сумми-

*E-mail: valeks41@mail.ru

рованием по всем возможным значениям n_k с соблюдением условия

$$\sum_k n_k = N. \tag{2}$$

На этом пути обычно используется следующий, по существу модельный, подход [1, 2]. Распределения $w_k(n_k)$ считаются статистически независимыми,

$$\begin{gathered} W(n_0, n_1, \dots) = \prod_k w_k(n_k), \\ w_k(n_k) = [1 \pm \exp(\mu - \varepsilon_k)]^{\pm(-1)} \exp[(\mu - \varepsilon_k) n_k], \end{gathered} \tag{3}$$

и вводится дополнительный параметр μ — химический потенциал в единицах температуры; здесь и всюду далее знак «+» относится к случаю фермионов, а «−» — к случаю бозонов. Из (3) вычисляются средние значения

$$\overline{n}_k = \sum_{n_k} n_k w_k(n_k),$$

причем суммирование проводится по значениям $n_k = 0, 1$ в случае фермионов и $0 \leq n_k \leq \infty$ в случае бозонов. В итоге

$$\overline{n}_k = [\exp(\varepsilon_k - \mu) \pm 1]^{-1}. \tag{4}$$

После этого вместо условия (2) требуется выполнение условия

$$\sum_k \overline{n}_k = N \tag{5}$$

для средних значений, определяющего химический потенциал.

Между тем этой процедуры можно избежать, если распределение Гиббса (1) записать в виде интеграла [3, 4]

$$W(n_0, n_1, \dots) = \frac{1}{S} \exp(-\varepsilon_0 n_0 - \varepsilon_1 n_1 - \dots) \frac{1}{2\pi i} \times \\ \times \oint z^{-N-1+n_0+n_1+\dots} dz, \tag{6}$$

который в случае фермионов необходимо дополнить условием $W(n_0, n_1, \dots) = 0$ при $n_k > 1$. Отметим, что похожий способ записи распределения (6) был использован Леонтовичем [6], однако автор ограничился исследованием только средних значений, причем для ансамблей с большим числом частиц N. Контур интегрирования в соотношении (6) имеет вид окружности с центром в точке $z = 0$. Только в случае выполнения условия (2) интеграл в (6) равен единице, а в остальных случаях он равен нулю. Таким образом, условие (2) при записи (6) выполняется автоматически, что позволяет суммировать распределение $w(n_0, n_1, \dots)$ по всем возможным значениям n_k независимо и до интегрирования. Следует отметить, что радиус окружности $|z|$ в случае фермионов произволен, а в случае бозонов должно выполняться условие $|z| < 1$, обеспечивающее сходимость всех возникающих сумм.

Ниже показано, что при небольшом числе частиц N в ансамбле для функции распределения $w(n_0, n_1, \dots)$ и для функции распределения числа частиц на уровне k,

$$w_k(n_k) = \sum_{n_i \neq n_k \dots} W(n_0, n_1, \dots),$$

из (6) получаются простые аналитические соотношения. Однако с ростом числа частиц в ансамбле трудности нарастают (например, при $N = 10$ выражение для нормирующего множителя S содержит 42 слагаемых) и соответствующие распределения могут быть исследованы только численно.

Показано, как точные распределения переходят в распределение Больцмана, причем оказывается, что в рамках этого распределения вероятность обнаружить два бозона на одном квантовом уровне, хотя и много меньше вероятности обнаружить один бозон, однако не является превышением точности. Оказывается также, что среднее произведения $\langle n_i n_k \rangle$, необходимость вычисления которого возникает, например, при вычислении вероятности одновременного поглощения двух фотонов, не равно произведению средних,

$$\langle n_i \rangle \langle n_k \rangle - \langle n_i n_k \rangle = N^{-1} \langle n_i \rangle \langle n_k \rangle,$$

т. е. только в пределе больших N распределения числа частиц на разных квантовых уровнях становятся статистически независимыми.

При $N \geq 10$ получающиеся из распределения (6) средние значения уже мало отличаются от величин, вычисленных по распределениям Бозе и Ферми. Однако в случае бозонов значительный интерес представляет еще и функция распределения числа частиц в конденсате, которая в рамках предположения о статистической независимости распределений $w_k(n_k)$ правильно не описывается. В настоящей статье для случая бозонов, захваченных в параболическую ловушку, среднее число частиц в конденсате и функция распределения $w_0(n_0)$ исследуются численно с помощью точного распределения (6). Численные результаты сравниваются с аналитическими, полученными в работах [3, 4] для случая больших N. Сравнение показывает, что уже при $N > 20$ численные результаты хорошо совпадают с аналитическими.

2. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Выполняя в (6) суммирование, получаем статистическую сумму S

$$S = \frac{1}{2\pi i}\oint z^{-N-1}\exp\left[G(z)\right]\,dz = \\ = \frac{1}{N!}\,\frac{d^N}{dz^N}\,\exp\left[G(z)\right]\Big|_{z=0}, \quad (7)$$

где

$$e^{G(z)} = \prod_k \left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)\right]^{\pm 1},$$

$$G(z) = \pm\sum_k \ln\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)\right] = \\ = \pm\sum_k\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^{p+1}\frac{(\pm z)^p}{p}\,\exp(-p\varepsilon_k).$$

Далее из (6) и (7) замечаем, что для среднего значения числа частиц в состоянии k выполняется соотношение (средние значения, получающиеся из распределения (6), обозначены скобками в отличие от средних значений, соответствующих распределению (3), которые обозначены чертой над буквой)

$$\langle n_k\rangle = \frac{1}{S}\left(-\frac{\partial S}{\partial\varepsilon_k}\right),$$

из которого находим

$$\langle n_k\rangle = \frac{1}{S(N-1)!}\left\{\frac{d^{N-1}}{dz^{N-1}}\times\right. \\ \left.\times\left(\frac{\exp(-\varepsilon_k)}{1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)}\,\exp\left[G(z)\right]\right)\right\}_{z=0}, \quad (8)$$

причем из очевидного равенства

$$\sum_k \frac{\exp(-\varepsilon_k)}{1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)}\,\exp\left[G(z)\right] = \frac{d\exp\left[G(z)\right]}{dz}$$

видим, что выполняется условие $\sum_k\langle n_k\rangle = N$.

В случае фермионов $\langle n_k\rangle = w_k(n_k = 1)$, что с учетом нормировки исчерпывает все возможности. В случае бозонов представляет интерес и функция распределения числа частиц в k-м квантовом состоянии, для которой из (6) находим

$$w_k(n_k) = \sum_{n_i, i\neq k,\ldots} W(n_0, n_1, \ldots) = \frac{1}{S}\,\frac{1}{2\pi i}\times \\ \times\oint z^{-N-1+n_k}\exp(-n_k\varepsilon_k)\left[1 - z\exp(-\varepsilon_k)\right]\times \\ \times\exp\left[G(z)\right]\,dz = \frac{\exp(-\varepsilon_k n_k)}{S(N-n_k)!}\times \\ \times\left\{\frac{d^{N-n_k}}{dz^{N-n_k}}\left\{\left[1 - z\exp(-\varepsilon_k)\right]\exp\left[G(z)\right]\right\}\right\}_{z=0}, \quad (9a) \\ n_k \le N,$$

и

$$w_k(n_k) = 0, \quad n_k > N. \quad (9b)$$

В случае фермионов, естественно, среднее значение квадрата числа частиц равно их среднему значению, $\langle n_k^2\rangle = \langle n_k\rangle$, т. е. средний квадрат флуктуаций равен $\langle\Delta n_k^2\rangle = \langle n_k\rangle(1 - \langle n_k\rangle)$, что совпадает со значением, получающимся из независимых распределений (3) (см., например, [2, выражение (113,3)]). В случае бозонов независимые распределения (3), как известно [2, выражение (113,4)], дают

$$\langle n_k^2\rangle = 2\overline{n}_k^2 + \overline{n}_k, \quad \langle\Delta n_k^2\rangle = \overline{n}_k(1 + \overline{n}_k). \quad (10)$$

Из распределения (6), однако, в этом случае получается другой результат:

$$\langle n_k^2\rangle = \langle n_k\rangle + \frac{2\exp(-2\varepsilon_k)}{S(N-2)!}\times \\ \times\left\{\frac{d^{N-2}}{dz^{N-2}}\left[\frac{\exp[G(z)]}{\left[1 - z\exp(-\varepsilon_k)\right]^2}\right]\right\}_{z=0}. \quad (11)$$

Аналогичным способом из (6) легко получаем совместное распределение

$$w_{ik}(n_i, n_k) = \frac{\exp(-\varepsilon_i n_i - \varepsilon_k n_k)}{S(N-n_i-n_k)!}\left\{\frac{d^{N-n_i-n_k}}{dz^{N-n_i-n_k}}\times\right. \\ \left.\times\left[\frac{\exp[G(z)]}{\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_i)\right]^{\pm 1}\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)\right]^{\pm 1}}\right]\right\}_{z=0}$$

и среднее произведения числа частиц в разных состояниях,

$$\langle n_i n_k\rangle = \frac{\exp(-\varepsilon_i - \varepsilon_k)}{S(N-2)!}\left\{\frac{d^{N-2}}{dz^{N-2}}\times\right. \\ \left.\times\left[\frac{\exp[G(z)]}{\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_i)\right]\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_k)\right]}\right]\right\}_{z=0}, \quad (12)$$

которые, как видно из сравнения выражений (12) и (8), вообще говоря, не равны произведению средних.

Остановимся на случае очень низких температур $T \to 0$, когда $\varepsilon_0 = 0$, $\varepsilon_{i>0} \to \infty$. В случае бозонов из уравнения (7) получаем

$$\exp\left[G(z)\right] = 1/(1 - z), \quad S = 1,$$

$$W(n_0, n_1, \ldots) = \delta_{n_0,N}\delta_{n_1,0}\ldots,$$

а средние значения, естественно, равны

$$\langle n_0\rangle = N, \quad \langle n_0^2\rangle = N^2, \quad \langle n_{k\neq 0}\rangle = 0.$$

В итоге, как и должно быть в этом случае, $\langle \Delta n_0^2 \rangle = 0$, тогда как выражение (10), соответствующее независимым распределениям (3), приводит к заведомо неправильному результату $\langle \Delta n_0^2 \rangle = N(N+1)$.

В случае фермионов аналогичная процедура приводит к неопределенности 0/0, и удобнее поступить следующим образом. Из выражения для статистической суммы S, записанного в виде

$$S = \frac{1}{2\pi i} \oint z^{-N-1} \prod_k [1 + z\exp(-\varepsilon_k)]\, dz,$$

видно, что она равна коэффициенту при z^N разложения произведения по степеням z. Этот коэффициент, как нетрудно понять, равен сумме

$$S = \sum_{i \neq k} \exp(-\varepsilon_i - \varepsilon_k - \ldots),$$

в которой среди индексов $i, k, \ldots$ нет совпадающих, а число индексов равно N. Если пронумеровать уровни в порядке возрастания энергии, наибольшим из членов этой суммы в пределе $T \to 0$ является $\exp(-\varepsilon_0 - \varepsilon_1 - \ldots - \varepsilon_N)$, а все остальные члены по сравнению с ним экспоненциально малы. В итоге $S = \exp(-\varepsilon_0 - \varepsilon_1 - \ldots - \varepsilon_N)$, откуда находим

$$\langle n_k \rangle = \begin{cases} 1, & k \leq N, \\ 0, & k > N, \end{cases}$$

если уровень с энергией ε_N не вырожден, и

$$\langle n_k \rangle = \begin{cases} 1, & k \leq N - M, \\ M/g_N, & N - M < k \leq N, \\ 0, & k > N, \end{cases}$$

где g_N — кратность вырождения уровня ε_N, $M \leq g_N$ — число находящихся на этом уровне частиц.

Таким образом, в случае фермионов распределения (6) и (3) приводят к одинаковым значениям для среднего квадрата флуктуаций и описывают одинаковое поведение распределения при $T \to 0$. Отсюда следует, что качественных расхождений между распределениями (6) и (3) в этом случае ожидать не следует. Однако в случае независимых распределений (3) среднее произведения $\langle n_i n_k \rangle$ равно произведению средних, тогда как в случае распределения (6) отличное от нуля значение $\langle n_i n_k \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_k \rangle$ указывает на наличие корреляций, так что численные расхождения между результатами (6) и (3) и в случае фермионов, особенно при небольших N, могут быть значительными.

3. СТАТИСТИКА БОЛЬЦМАНА

Покажем, как статистика, отраженная выражениями (6)–(9) и (11), (12) переходит в статистику Больцмана. При высокой температуре сумма $A = \sum_k \exp(-\varepsilon_k)$ велика, и с ростом температуры при любых значениях N достигается условие $A \gg N$. В этом случае при вычислении производных можно положить

$$\left[\frac{d^{N-m}}{dz^{N-m}}\left(f(z)e^{G(z)}\right)\right]_{z=0} = \\ = f(0)\left[\frac{d^{N-m}}{dz^{N-m}}\left(e^{G(z)}\right)\right]_{z=0} = f(0)A^{N-m},$$

где $f(z)$ — гладкая при $z \to 0$ функция, как это имеет место в выражениях (7)–(12). В итоге $S = A^N/N!$, и для средних значений из (8) получаем известный в статистике Больцмана результат $\langle n_k \rangle = \exp(\mu - \varepsilon_k)$, где $e^\mu = N/A$, т. е. μ — большая отрицательная величина. В случае бозонов для функции распределения числа частиц в k-м состоянии находим

$$\begin{gathered} w_k(n_k) = \frac{N!}{(N - n_k)!} \frac{\exp(-\varepsilon_k n_k)}{A^{n_k}}, \quad n_k \leq N, \\ w_k(n_k) = 0, \quad n_k > N. \end{gathered} \tag{13}$$

В случае $n_k \ll N$, что может выполняться при больших N, выражения (13) переходят в статистику Больцмана $w_k(n_k) = \exp[(\mu - \varepsilon_k)n_k]$. Однако при небольших N получается другой результат. Например, при $N = 2$ для случая бозонов находим

$$w_k(n_k = 0) = 1, \quad w_k(n_k = 1) = \exp(\mu - \varepsilon_k),$$

$$w_k(n_k = 2) = \frac{1}{2}\exp[2(\mu - \varepsilon_k)],$$

причем отметим, что сохранение вероятности $w_i(n_i = 2)$ не является превышением точности.

Среднее произведения $\langle n_i n_k \rangle$ при $i \neq k$ (этой величине пропорциональна, например, вероятность одновременного поглощения двух фотонов) в соответствии с (12) равно

$$\langle n_i n_k \rangle = \exp(-\varepsilon_i - \varepsilon_k)\frac{N(N-1)}{A^2}, \quad i \neq k. \tag{14}$$

В итоге

$$\langle n_i \rangle \langle n_k \rangle - \langle n_i n_k \rangle = \frac{1}{N}\langle n_i \rangle \langle n_k \rangle, \quad i \neq k, \tag{15}$$

т. е. только в пределе $N \to \infty$ среднее произведения равно произведению средних.

Сохранение в выражении (11) второго слагаемого при вычислении среднего значения квадрата числа частиц в k-м состоянии в статистике Больцмана является превышением точности. В результате получаем $\langle n_k^2\rangle = \langle n_k\rangle$.

4. АНСАМБЛИ ИЗ ДВУХ ЧАСТИЦ

В этом случае из уравнения (7) получаем

$$S = \frac{1}{2}\left[A_1^2 \pm (-A_2)\right], \quad A_p = \sum_{k=0}^{\infty} \exp(-p\varepsilon_k). \qquad (16)$$

После этого распределение (1) необходимо еще дополнить двумя условиями, первое из которых

$$w(n_0, n_1, \ldots) = 0 \quad \text{при} \quad n_0 + n_1 + \ldots \neq 2 \qquad (17)$$

должно быть выполнено как для бозонов, так и для фермионов, а второе

$$w(n_0, n_1, \ldots) = 0 \quad \text{при} \quad n_k > 1 \qquad (18)$$

— только в случае фермионов.

Эти условия значительно затрудняют поиск средних значений и функции распределения числа частиц в k-м состоянии, $w_k(n_k)$, непосредственно из (1), однако, используя (8) и (9), легко получаем

$$\langle n_k\rangle = \frac{\exp(-\varepsilon_k)}{S}\left[A_1 \pm [-\exp(-\varepsilon_k)]\right\}. \qquad (19)$$

В случае фермионов это среднее значение совпадает, как уже отмечалось, с $w_k(n_k = 1)$, а в случае бозонов из (9) находим

$$w_k(n_k = 0) = \frac{1}{2S}\left[A_1^2 + A_2 - 2A_1\exp(-\varepsilon_k)\right],$$

$$w_k(n_k = 1) = \frac{\exp(-\varepsilon_k)}{S}\left[A_1 - \exp(-\varepsilon_k)\right],$$

$$w_k(n_k = 2) = \frac{\exp(-2\varepsilon_k)}{S}.$$

Вычислим энергию двух частиц, захваченных в магнитную параболическую ловушку [7], потенциал которой для упрощения формул будем считать сферически симметричным:

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2).$$

В этом случае $E_k = \hbar\omega(v_x + v_y + v_z)$, где $0 \le v_{x,y,z} < < \infty$ — колебательные квантовые числа, и мы получаем

$$E = 6\hbar\omega\frac{a(1-a)^{-7} \pm (-a^2)(1-a^2)^{-4}}{(1-a)^{-6} \pm (a^2-1)^{-3}}, \quad a = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right). \qquad (20)$$

При высокой температуре ($\hbar\omega/T \ll 1$) параметр $a \approx \approx 1$, $1 - a \approx \hbar\omega/T$, и из (20) находим

$$E = 6T, \quad C = dE/dT = 6,$$

т. е. теплоемкость в этом случае равна теплоемкости двух независимых осцилляторов. В противоположном предельном случае низких температур ($\hbar\omega/T \gg 1$) для фермионов и бозонов из (20) находим разные энергии, соответственно

$$E = \hbar\omega + 3\hbar\omega\exp(-\hbar\omega/T)$$

и

$$E = 3\hbar\omega\exp(-\hbar\omega/T).$$

Эти разные энергии соответствуют одинаковой теплоемкости

$$C = 3\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right),$$

которая в этом случае оказывается в два раза меньшей теплоемкости двух независимых осцилляторов.

Отметим, что этот результат для бозонов является частным случаем общего факта. В этом случае при $T \to 0$ из (7) следует, что $\exp[G(x)] = = 1 - z$, $S = 1$, откуда немедленно получаем $E = = g_1E_1\exp(-E_1/T)$, где E_1 — энергия первого возбужденного уровня, g_1 — его статистический вес. В отличие от этого, при $T \to 0$ энергия трех захваченных в параболическую ловушку фермионов равна

$$E = 2\hbar\omega + \frac{19}{3}\hbar\omega\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right),$$

т. е. теплоемкость такой системы

$$C = \frac{19}{3}\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right)$$

при $T \to 0$ оказывается больше теплоемкости двух, но меньше теплоемкости трех независимых частиц. При $T \to \infty$ применима статистика Больцмана, и для теплоемкости бозонов и фермионов получается классический результат $C = 3N$.

5. АНСАМБЛИ С БОЛЬШИМ ЧИСЛОМ ЧАСТИЦ

Для исследования этого случая в выражении для функции распределения числа частиц на уровне k $w_k(n_k)$, которая получается суммированием в выражении (9),

$$w_k(n_k) = \frac{1}{S}\exp(-\varepsilon_k n_k)\frac{1}{2\pi i}\oint z^{-N-1+n_k} \times \\ \times \exp\left[G_k(z)\right]\,dz, \tag{21}$$

$$G_k(z) = \pm\sum_{i\neq k}\ln\left[1 \pm z\exp(-\varepsilon_i)\right],$$

удобно выполнить замену $z = \exp(\mu + ix)$, после чего получаем

$$w_k(n_k) = \frac{1}{S}\exp\left[(\mu-\varepsilon_k)n_k\right] \times \\ \times \int\limits_{-\pi}^{\pi}\exp\left[ix(-N+n_k)+G_k(x)\right]\,dx, \tag{22}$$

причем при переходе от (21) к (22) мы опустили множители, которые не зависят от n_k и потому «поглощаются» нормировкой. Напомним, что в случае бозонов для сходимости сумм необходимо выполнение условия $|z| < 1$, т. е. $\mu < 0$, тогда как в случае фермионов величина $|z|$ произвольна. Дальнейшие действия аналогичны выполненным в работах [3, 4], в которых исследовалась функция распределения числа бозонов в конденсате.

Разложим функцию $G_k(x)$ в окрестности точки $x = 0$ с точностью до членов порядка x^2:

$$G_k(x) = G_k(0) + iA_k x - D_k x^2.$$

Здесь

$$G_k(0) = \pm\sum_{i\neq k}\ln\left[1 \pm \exp(\mu-\varepsilon_i)\right],$$

$$A_k = \sum_{i\neq k}\left[\exp(\varepsilon_i-\mu)\pm 1\right]^{-1},$$

$$D_k = \frac{1}{2}\sum_{i\neq k}\left\{\left[\exp(\varepsilon_i-\mu)\pm 1\right]^{-1} \pm \right. \\ \left. \pm\,(-1)\left[\exp(\varepsilon_i-\mu)\pm 1\right]^{-2}\right\}.$$

Выберем теперь параметр μ, потребовав выполнения условия

$$A_k = \sum_{i\neq k}\left[\exp(\varepsilon_i-\mu)\pm 1\right]^{-1} = N - \overline{n}_k. \tag{23}$$

Условие (23) совпадает с (5), и параметр μ обретает смысл химического потенциала. Таким образом,

$$A_k = \sum_{i\neq k}\overline{n}_i, \quad D_k = \frac{1}{2}\sum_{i\neq k}\left[\overline{n}_i \pm (-1)\overline{n}_i^2\right], \tag{24}$$

и функция распределения числа частиц в состоянии k принимает вид

$$w_k(n_k) = \frac{1}{S}\exp\left[(\mu-\varepsilon_k)n_k\right] \times \\ \times \int\limits_{-\pi}^{\pi}\exp\left[ix(n_k-\overline{n}_k) - D_k x^2\right]\,dx. \tag{25}$$

При написании выражения (25) отброшены не зависящие от n_k и потому поглощающиеся нормировкой сомножители.

Для ансамбля бозонов функция распределения (25) была исследована в работах [3, 4]. В случае основного состояния $w_0(n_0)$ (распределение числа частиц в конденсате) при $T \to 0$ величина $D_0 \to 0$ и использованное здесь разложение функции $G(z)$ становится неприменимым. В этом случае, как уже отмечалось, $G(z) = (1-z)^{-1}$, откуда немедленно следует, что $w_0(n_0) = \delta_{n_0 N}$ при $T = 0$. Область температур, близких к нулю, затруднена для исследования, однако уже при температуре, еще много меньшей критической, когда число частиц в конденсате еще очень велико, величина D_0 становится большой и распределение (25) для $w_0(n_0)$ принимает вид резонанса [3]:

$$w_0(n_0) = \frac{1}{S}\exp\left[\mu n_0 - \frac{(n_0-\overline{n}_0)^2}{4D_0}\right],$$

$$D_0 = \frac{1}{2}\gamma\left(\frac{T}{T_0}\right)^3 N, \tag{26}$$

$$\mu = -\ln\left(1+\frac{1}{\overline{n}_0}\right), \quad \gamma = \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \approx 1.37$$

($\zeta(s)$ — дзета-функция Римана), имеющего гауссову форму, центр которого с ростом температуры сдвигается в сторону уменьшающихся значений n_0, а ширина возрастает. В узкой окрестности критической температуры (при $N \to \infty$ скачком) происходит перестройка этой зависимости, и распределение $w_0(n_0)$ принимает вид (3). Что же касается возбужденных состояний, в этом случае величина $D_{k\neq 0}$ всегда порядка N, интеграл в (25) практически не зависит от n_k, т. е. распределение $w_{k\neq 0}(n_k)$ при всех температурах имеет вид (3).

В случае фермионов при температуре, много меньшей температуры вырождения, $T \ll E_N$, где E_N — граничная энергия, имеем $\overline{n}_k = 1$ при $k < N$ и $\overline{n}_k = 0$ при $k > N$. В итоге $D_k = 0$. Можно проверить, что и все последующие члены разложения функции $G(x)$ в этом случае обращаются в нуль. Поэтому после выполнения интегрирования в (25) и последующей нормировки распределение $w_k(n_k)$ принимает вид (3). В области температур $0 < T < E_N$ распределение (25) может несколько отличаться от (3). Однако при $T \geq E_N$ величина D_k уже становится большой и интеграл в (25) перестает играть

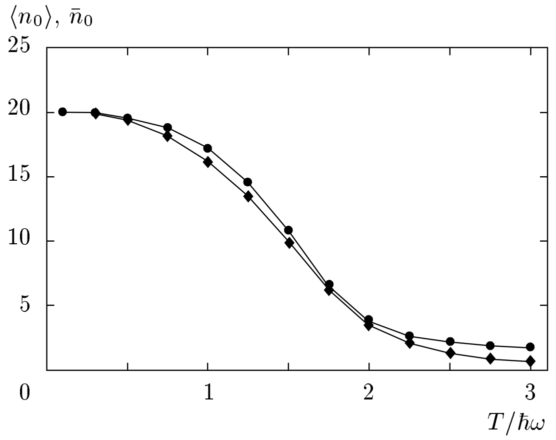

Рис. 1. Зависимости от температуры среднего числа бозонов в конденсате, вычисленные по точной формуле (8) — кружки, и по асимптотической (при больших N) аналитической формуле (27) — квадраты. Число бозонов в ансамбле $N = 20$

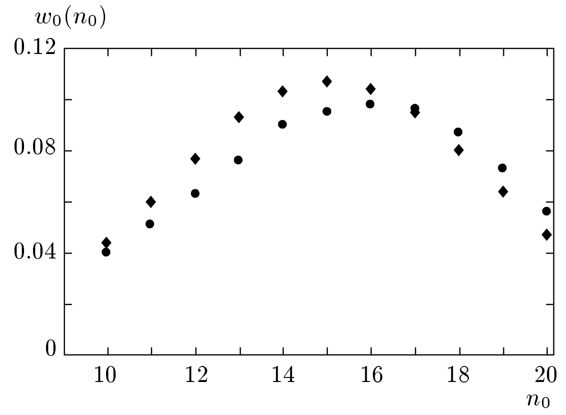

Рис. 2. Функция распределения числа частиц в конденсате. Значения $w_0(n_0)$ вычислены по точной формуле (9) — кружки, и по асимптотической формуле (26) — квадраты; $N = 27$, $T/T_0 = 0.75$

какую-либо роль. В итоге выражение (25) опять совпадает с (3).

На рис. 1 численные результаты для значений $\langle n_0\rangle$, найденные для захваченного в параболическую ловушку ансамбля бозонов по точной формуле (8), сравниваются с результатами, полученными по приближенной аналитической формуле, получающейся из распределения (3) при большом числе захваченных в ловушку частиц,

$$\overline{n}_0 = \frac{N}{2}\left[1-t^3+\sqrt{(1-t^3)^2+\frac{4\gamma t^3}{N}}\right], \quad t = \frac{T}{T_c}, \quad (27)$$

T_c — критическая температура,

$$T_c = \hbar\omega\left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3}\left(1-\frac{0.73}{N^{1/3}}\right),$$

в которую внесена поправка на конечное число частиц [8]. Выражение (27) получено в работе [3] и правильно описывает плавное убывание числа частиц в конденсате до нуля в области критической температуры, вызванное конечностью числа частиц. При больших N оно применимо во всей области температур ниже критической температуры и в узкой окрестности выше критической температуры, когда $t-1 \ll 1$. Из рис. 1 видно, что уже при $N = 20$ численные значения $\langle n_0\rangle$, найденные по формуле (8), очень близки к значениям $\overline{n}_0$, найденным по формуле (27), т. е. из распределения (3).

На рис. 2 показаны численные значения функции распределения числа частиц в конденсате, $w_0(n_0)$, найденные по точным формулам (9), и значения, вычисленные по аналитической формуле (26), применимой при достаточно большом числе N захваченных частиц.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развит подход, позволяющий вычислить равновесные функции распределения бозонов и фермионов в ансамблях с ограниченным (конечным) числом частиц. Эти распределения не имеют вид произведения распределений чисел частиц в разных квантовых состояниях, т. е. обнаруживается статистическая зависимость распределений чисел частиц по разным квантовым уровням. В случае большого числа частиц в ансамбле найденные распределения приводят к средним значениям для чисел частиц на квантовых уровнях, совпадающим с результатами распределений Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака. При высокой температуре найденные распределения переходят в распределение Больцмана, причем оказывается, что при конечном числе частиц и в этом случае сохраняется статистическая зависимость функций распределения чисел частиц в разных квантовых состояниях и только при $N\to\infty$ эта зависимость исчезает. Для случая бозонов, захваченных в параболическую ловушку, выполнено сравнение функции распределения числа частиц в конденсате и среднего числа частиц в конденсате, полученных по точным формулам (8) и (9) и найденным соответственно по аналитическим выражениям (26) и (27), применимым при большом числе частиц в ансамбле.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Einstein, Berl. Ber. **22**, 261 (1924); **23**, 3 (1925).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1995), пп. 37, 53, 54, 113.
3. В. А. Алексеев, ЖЭТФ **119**, 700 (2001).
4. В. А. Алексеев, КЭ **31**, 16 (2001); **31**, 427 (2001).
5. А. М. Башаров, А. А. Башкеев, Э. А. Маныкин, ЖЭТФ **100**, 475 (2005).
6. М. А. Леонтович, *Введение в термодинамику. Статистическая физика*, Наука, Москва (1983).
7. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
8. S. Grossman and M. Holthaus, Phys. Lett. A **208**, 188 (1995).