ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проекты РФФИ # 12-02-00855

Бозе-эйнштейновская конденсация в мезоскопических системах: автомодельная структура критической области и неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей

В. В. Кочаровский[+*], *Вл. В. Кочаровский*[+×1)], *С. В. Тарасов*[+]

[+]*Институт прикладной физики РАН, 603950 Н. Новгород, Россия*

[*]*Department of Physics and Astronomy, Texas A&M University, College Station, TX 77843-4242, USA*

[×]*Нижегородский государственный университет им. Лобачевского, 603950 Н. Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2015 г.

Представлен краткий обзор аналитической теории бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК) идеального газа в мезоскопических системах, применимой к ловушкам произвольных формы и размера и описывающей как фазы классического газа и сформировавшегося бозе-конденсата, так и всю окрестность точки фазового перехода. Подробно обсуждаются статистика и термодинамика бозе-эйнштейновского конденсата, в том числе их автомодельная структура в критической области, переход к термодинамическому пределу, влияние граничных условий на свойства системы, неэквивалентность описания БЭК в различных статистических ансамблях. Дана полная классификация классов универсальности БЭК.

DOI: 10.7868/S0370274X16010124

1. Проблема критической области БЭК. Более века остается нерешенной проблема построения микроскопической теории фазовых переходов второго рода в критической области. Искомая теория должна позволить непрерывно проследить за эволюцией системы при переходе от неупорядоченной фазы к упорядоченной. Исключительная сложность проблемы связана с тем, что процесс фазовых переходов основан на одновременном действии целого ряда факторов, правильный учет каждого из которых в общем случае уже является почти непреодолимой преградой в теоретической физике. Указанные факторы включают многочастичность и одновременно мезоскопичность системы, микроскопическое взаимодействие между частицами и наличие дальних корреляций, критическую 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 Нетер), аномально сильные флуктуации параметров системы и т.д. 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.

Построение микроскопической теории фазовых переходов в критической области стало возможным только на основе нового метода, включающего точную редукцию гильбертова пространства со связями, неполиномиальную диаграммную технику, частичные операторные связки, точные рекуррентные уравнения для них, метод характеристической функции для совместного вероятностного распределения некоммутирующих наблюдаемых, точные уравнения для физических (вычисляемых на редуцированном гильбертовом пространстве) функций Грина и параметра порядка, отличные от стандартных уравнений Дайсона для приближенных (вычисляемых на расширенном гильбертовом пространстве без учета свя-

[1)]e-mail: kochar@appl.sci-nnov.ru

зей) функций Грина и параметра порядка. Подробное изложение этого метода, в полной мере учитывающего всю совокупность указанных выше факторов, можно найти в обзоре [1].

В настоящем обзоре мы сосредоточимся только на небольшой, но очень существенной части этой центральной для теоретической физики проблемы. А именно, мы опишем роль связей, налагаемых нарушаемой симметрией на гильбертово пространство системы, в происхождении и картине фазового перехода на примере бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) в мезоскопических системах. В этом случае нарушается глобальная калибровочная симметрия, а соответствующей ей по теореме Нетер связью является сохранение числа частиц в ловушке, т.е. условие канонического ансамбля. Принципиальным фактом является то, что само существование БЭК в системе бозе-частиц обязано этой связи (подробнее см. [1, 2]). Например, фотоны в черном ящике не испытывают БЭК при охлаждении, поскольку их число не сохраняется из-за поглощения в стенках. Кроме того, эта связь в существенной мере определяет конкретные черты, в том числе критические функции, статистики и термодинамики БЭК, даже в термодинамическом пределе. Таким образом, в теории БЭК, особенно в критической области, требуется строгий учет указанного условия связи. Так, приближение большого канонического ансамбля, в котором фактическое сохранение числа частиц в ловушке подменяется их сохранением лишь в среднем по ансамблю, может привести к ошибке порядка 100 % при вычислении критической функции теплоемкости в критической области (см. п.п. 9, 10).

Аналитическое решение задачи о БЭК в мезоскопических системах для критической области найдено недавно и только для идеального газа. Его краткий обзор и составляет содержание настоящей статьи.

Соответствующее обобщение теории БЭК в критической области на случай взаимодействующего газа найдено в [3]. Оно включает точные уравнения для параметра порядка сверхтекучести и функций Грина, обобщающие на всю критическую область известные уравнения Гросса–Питаевского и Беляева–Попова соответственно. Анализ этих уравнений и их решений выходит за рамки настоящего обзора.

Прогресс в реализации захвата, удержания и охлаждения атомов обеспечивает экспериментам по БЭК большую вариативность в выборе профиля и размерности удерживающего потенциала (ловушки), силы межчастичного взаимодействия и характера взаимодействия системы с окружающим резервуаром. Отметим, что все исследуемые в лабораториях БЭК-системы являются мезоскопическими: характерные числа удерживаемых атомов составляют 10^2-10^8 [4–7]. Разнообразие экспериментов и инструментария делает явление БЭК привлекательным для тестирования теорий фазового перехода, а также открывает большие перспективы для оптимизации и разработки систем и устройств, использующих когерентные свойства бозе-конденсатов для решения практических задач, например в сверхточной интерферометрии, квантовой информатике и т.д.

Интерпретация экспериментов и анализ практических приложений БЭК нуждаются в создании теории, применимой к описанию мезоскопических систем и учитывающей специфику, привносимую конечными размерами ловушки. В частности, необходимо учитывать неэквивалентность описаний в рамках канонического, большого канонического и микроканонического ансамблей, а также заметную зависимость свойств системы от числа атомов в ловушке, граничных условий и геометрических особенностей удерживающего потенциала. Существенно, что в реальных экспериментах критическая область между конденсированной и неконденсированной фазами оказывается достаточно широкой и доступной для детальных измерений.

Такая теория БЭК взаимодействующих частиц в мезоскопических системах пока еще не развита. Многочисленные работы по БЭК в мезоскопических системах основываются в основном на численных расчетах, например с привлечением методов Монте-Карло [8–11], либо на известных уравнениях Гросса–Питаевского и Беляева–Попова, справедливых лишь в низкотемпературной фазе развитого конденсата и не применимых в критической области.

Даже для идеального газа вплоть до недавнего времени не существовало аналитического решения, дающего непрерывное описание возникновения БЭК при переходе через критическую точку. Имелось лишь строгое численное моделирование, основанное на рекуррентных соотношениях для статистических сумм в каноническом ансамбле, фиксирующем число частиц, и микроканоническом ансамбле, фиксирующем еще и полную энергию [12–16]. 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 необоснованно и приводит к ошибкам при вычислении статистики БЭК [17–20]. Для фазы развитого БЭК явные аналитические методы описания, учитывающие фиксированность числа частиц, обсуждались в [21–26]. Главная проблема — построение аналитического решения в критической области — оставалась открытой.

Ее решение было получено в [2] и развито в [27–29]. Оно позволяет рассчитать статистику и термодинамику идеального газа в каноническом ансамбле с произвольным числом частиц, удерживающихся в ловушке произвольной формы и размеров. Эта теория применима во всей области параметров, включая всю критическую область.

В обзоре полученные ранее для БЭК идеального газа результаты рассмотрены с позиции известного теперь исчерпывающего решения, изложенного в пп. 2–4. В частности, обсуждаются вопросы, активно исследовавшиеся ранее с помощью численного моделирования или различных приближений:

– переход к термодинамическому пределу с увеличением ловушки и числа частиц в ней (п. 5),

– влияние формы удерживающего потенциала и граничных условий на статистические и термодинамические характеристики системы (пп. 6, 7),

– ренормгруппа и законы подобия (п. 8),

– неэквивалентность различных ансамблей в теории БЭК в критической области (пп. 9, 10).

2. Задача о БЭК в мезоскопической системе. Будем рассматривать равновесную систему N невзаимодействующих бозе-атомов, удерживающихся при температуре T (в энергетических единицах) в потенциале U. Уравнение Шредингера для одной частицы определяет последовательность $q = 0, 1, 2, ...$ собственных состояний ψ_q с дискретными энергиями ϵ_q, по которым распределены бозоны. Будем отсчитывать энергию от основного уровня $\epsilon_0 = 0$, заполнение которого соответствует конденсации. Основное состояние для простоты считаем невырожденным. В остальном набор энергий ϵ_q произволен, поскольку произвольны размерность и профиль потенциала U.

Введем безразмерный энергетический спектр:

$$\lambda_q = \frac{\epsilon_q}{\epsilon_1}, \quad \frac{\epsilon_q}{T} = \alpha\lambda_q, \quad \lambda_0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le ..., \tag{1}$$

где параметр $\alpha = \epsilon_1/T$ задает размер системы. Последовательность $\{\lambda_q\}$ характеризует геометрию системы — форму и размерность ловушки. Переходу к термодинамическому пределу соответствует предел $\alpha \to 0$. Для реальных мезоскопических систем характерны конечные, но малые значения $\alpha \ll 1$.

Решение задачи о БЭК мезоскопических систем предполагает вычисление статистического распределения числа частиц на основном и возбужденных уровнях, а также статистической суммы и всех термодинамических параметров для произвольных последовательности $\{\lambda_q\}$ и значений N и α.

3. Статистика и термодинамика БЭК идеального газа в ловушке: канонический ансамбль. Микроскопическое состояние в каноническом ансамбле полностью задается числами заполнения n_q только возбужденных состояний, $q > 0$. Число частиц в конденсате n_0 определяется из условия $n_0 + n = N$, где $n = \sum_{q>0} n_q$ – полное число частиц на возбужденных уровнях. Числа заполнения n_q нельзя считать независимыми, что и является основной технической проблемой в построении теории. Решение проблемы, найденное в [2], включает два этапа.

На первом этапе рассматривается вспомогательная задача, в которой числа заполнения n_q предполагаются независимыми и не ограниченными, что позволяет явно вычислить характеристическую функцию $\Theta^{(n)}(u)$ для полного числа надконденсатных частиц n. Распределение $\rho_n^{(\infty)}$ случайной величины n в этой вспомогательной задаче, называемое необрезанным, выражается преобразованием Фурье:

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

Распределение $\rho_n^{(\infty)}$ имеет форму холма с математическим ожиданием N_c и дисперсией σ:

$$N_c = \sum_{q\neq 0} f_q,\ \sigma^2 = \sum_{q\neq 0}\left(f_q^2 + f_q\right);\ f_q = \frac{1}{e^{\alpha\lambda_q} - 1}. \tag{3}$$

Заметим, что математически это вспомогательное решение соответствует описанию системы в рамках большого канонического ансамбля с нулевым химическим потенциалом и статистической суммой

$$Z^{(\infty)} = \prod_{q\neq 0} \frac{1}{1 - e^{-\alpha\lambda_q}}. \tag{4}$$

На втором этапе по $\rho_n^{(\infty)}$ находятся истинные статистики числа частиц вне конденсата и в конденсате:

$$\rho_n = \frac{\rho_n^{(\infty)}\theta(N-n)}{P^{(\infty)}(N)}, \quad \rho_{n_0} = \rho_n(n = N - n_0). \tag{5}$$

Они получаются обрезанием распределения ступенчатой функцией Хевисайда $\theta(N - n)$, равной 1 при $n \le N$ и 0 при $n > N$, и нормированы величиной интегрального „необрезанного“ распределения

$P^{(\infty)}(N)$ на верхней границе допустимой населенности надконденсата $n = N$. Эта же величина определяет и статистическую сумму системы N частиц:

$$Z^{(N)} = Z^{(\infty)}P^{(\infty)}(N), \quad P^{(\infty)}(N) = \sum_{n=0}^{N} \rho_n^{(\infty)}. \quad (6)$$

Затем по статистической сумме вычисляются термодинамические параметры, например свободная энергия F, средняя энергия E и теплоемкость C_V:

$$F = -T \ln Z^{(N)}, \quad E = F - T\frac{\partial F}{\partial T}, \quad C_V = \frac{\partial E}{\partial T}. \quad (7)$$

Бозе-эйнштейновский конденсат возникает, когда число загруженных в ловушку частиц N сравнивается со средним значением $N_c(T)$ (3) "необрезанного" распределения $\rho_n^{(\infty)}$ с точностью порядка дисперсии флуктуаций $\sigma(T)$. Величина $N_c(T)$ определяет критическое число частиц и зависит от температуры T. Ожидаемое число частиц вне конденсата $\langle n\rangle$ в распределении ρ_n (5) является монотонно растущей функцией N и мажорировано критическим числом частиц N_c. При $N < N_c$ имеем $\langle n\rangle \simeq N$, т.е. частицы в основном заселяют возбужденные уровни, что соответствует фазе классического газа. В противном случае, $N > N_c$, число частиц на возбужденных уровнях близко к N_c, а остальная значительная часть частиц оказывается в конденсированной фракции, что соответствует фазе развитого конденсата. Перестроение статистики происходит в критической области, где разность $N - N_c$ порядка дисперсии флуктуаций σ. Температура T_c, для которой выполняется условие $N = N_c(T_c)$, есть критическая температура БЭК.

За подробностями вычисления решения (5), (6) для мезоскопических систем в ловушках произвольной формы мы отсылаем к [2, 27–29]. Важно, что оно является математически точным, строгим решением для канонического ансамбля, верным при любых параметрах, включая всю критическую область.

4. Автомодельная структура критической области. Ключевым свойством точного решения (5), (6) является его самоподобие в центральной части критической области для систем различного размера. С его ростом, т.е. с ростом N_c и уменьшением α, все статистические и термодинамические функции, масштабированные надлежащим образом, сходятся к универсальным функциям автомодельной переменной — масштабированного числа частиц либо в надконденсате (x), либо всего в ловушке (η):

$$x = \frac{n - N_c}{\sigma}, \quad \eta = \frac{N - N_c}{\sigma}. \quad (8)$$

Указанное самоподобие проявляется в мезоскопических системах, начиная с умеренных значений $N_c \sim \sim 100$. Конкретный вид предельных функций определяется только геометрией ловушки, т.е. безразмерным спектром $\{\lambda_q\}$, но не конкретными параметрами системы, такими, как температура, объем ловушки или масса частиц, задающими параметр α в (1).

Для установления самоподобия достаточно показать автомодельность "необрезанного" распределения $\rho_n^{(\infty)}$. Сделать это удобно методом представления Меллина: $e^{-a} = \frac{1}{2\pi i}\int_{\tau - i\infty}^{\tau + i\infty} a^{-t}\Gamma(t)dt$, впервые примененного для вычисления статистики БЭК в [18] и справедливого при $\tau > 0$, $\mathrm{Re}\, a > 0$; $\Gamma(t)$ – гамма-функция. С его помощью получаем представления

$$N_c = \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t}\zeta(t)S(t),$$
$$\sigma^2 = \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t}\zeta(t-1)S(t), \quad (9)$$

$$\ln \Theta^{(x)}(u) = \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t}\zeta(t+1) \times$$
$$\times \left[S\left(t, \frac{u}{\alpha\sigma}\right) - S(t) - i\frac{u}{\alpha\sigma}S(t+1)\right], \quad (10)$$

где $\Theta^{(x)}(u) = e^{-\frac{iuN_c}{\sigma}}\, \Theta^{(n)}(u/\sigma)$ – характеристическая функция случайной величины x, сумма берется по всем вычетам подынтегральных выражений, $\zeta(t)$ – дзета-функция Римана. Здесь $S(t)$ и $S(t,u)$ обозначают простую и обобщенную функции ловушки:

$$S(t) = \sum_{q\neq 0} \frac{\Gamma(t)}{\lambda_q^t}, \quad S(t,u) = \sum_{q\neq 0} \frac{\Gamma(t)}{(\lambda_q - iu)^t}, \quad (11)$$

известные в математике как спектральные дзета-функции. Они ассоциированы с безразмерным спектром $\{\lambda_q\}$ и характеризуют геометрию ловушки. Структура этих функций, положение полюсов и величины вычетов проанализированы в [28] с использованием регулярных методов математической физики [30–32]. В излагаемой теории основную роль играет самый правый полюс функции ловушки с вычетом R. Положение этого полюса, $t = r$, совпадает с границей сходимости суммы для $S(t)$ в (11).

Полюс r определяется спектром ловушки $\{\lambda_q\}$. Так, для трехмерных ловушек со степенным спектром типа $\lambda_q = q_x^\nu + q_y^\nu + q_z^\nu$, $q_i = 0, 1, 2, \ldots$, имеем $r = 3/\nu$, т.е. для ловушки-ящика $r = 3/2$, а для трехмерной гармонической ловушки $r = 3$.

В пределе больших систем, $\alpha \to 0$, главный вклад в выражения (9), (10) дает их самый правый полюс. При этом для критического числа частиц имеем $N_c \sim \alpha^{-r}$. (Случай $r \leq 1$, соответствующий пологим одномерным потенциалам, здесь не обсуждается.) Самый правый полюс в разложении для $\Theta^{(x)}(u)$

всегда дает вклад порядка α^0. Вкладами остальных полюсов $\sim \alpha^\gamma$, где $\gamma > 0$, можно пренебречь. Однако сам вид предельного выражения для характеристической функции, а также масштабирование, реализующееся для дисперсии в (9), существенно зависят от того, как расположен полюс r функции $S(t)$ относительно полюса $t = 2$ функции $\zeta(t-1)$.

Если $r > 2$, т.е. спектр таков, что $\sum_{q>0} \lambda_q^{-2}$ расходится, то дисперсия населенности надконденсата n растет как $\sigma^2 = \zeta(r-1)R\alpha^{-r}$ и имеет нормальный порядок величины относительно математического ожидания: $\sigma^2 \sim N_c$. Пример – трехмерная гармоническая ловушка: $r = 3$. При этом не исчезающие в пределе $\alpha \to 0$ вклады в характеристическую функцию (10) дают гауссово распределение:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \to -u^2/2, \quad \rho_x^{(\infty)} = (2\pi)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (12)$$

В противоположном случае, $r < 2$, когда $\sum_{q>0} \lambda_q^{-2}$ сходится, дисперсия населенности надконденсата n растет как $\sigma^2 = S(2)\alpha^{-2}$ и является аномально большой: $\sigma^2 \sim N_c^{2/r} \gg N_c$. Пример – ловушка-куб: $r = 3/2$. Тогда масштабированное "необрезанное" распределение $\rho_x^{(\infty)}$ дается фурье-преобразованием предельной характеристической функции:

$$\ln \Theta^{(x)}(u) \to S\left(0, \frac{u}{\sqrt{S(2)}}\right) - S(0) - \frac{iuS(1)}{\sqrt{S(2)}},$$
$$\rho_x^{(\infty)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iux} \Theta^{(x)}(u) du. \quad (13)$$

Оно не является гауссовым. Уровни энергии λ_q с ростом номера q быстро становятся высоколежащими и слабозаселенными. Поэтому статистику системы определяют лишь сравнительно низколежащие уровни, количества которых недостаточно для вступления в силу центральной предельной теоремы.

В итоге в зависимости от положения полюса r имеет место разделение ловушек на два, гауссовый и аномальный, класса универсальности (см. п. 7).

Самоподобие есть следствие нечувствительности "необрезанного" распределения $\rho_x^{(\infty)}$ к малому параметру α и его зависимости только от безразмерного спектра ловушки $\{\lambda_q\}$ через функцию ловушки $S(t)$.

Наследует указанное свойство самоподобия в пределе $\alpha \to 0$ и истинная статистика БЭК системы N частиц, определяемая точным решением (5):

$$\rho_x = \frac{\rho_x^{(\infty)} \theta(\eta - x)}{P^{(\infty)}(\eta)}, \quad P^{(\infty)}(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} \rho_x^{(\infty)} dx. \quad (14)$$

Термодинамические параметры системы в критической области также наследуют свойство самоподобия. Вычисляемые дифференцированием свободной энергии Гиббса F, они естественным образом распадаются на два вклада. Первый соответствует "необрезанной" задаче и определяется ее статистической суммой $Z^{(\infty)}$, а второй выражается через нормировку обрезания $P^{(\infty)}(\eta)$. Таким образом, на фоне некритического первого вклада легко выделить критические функции термодинамических параметров, характеризующие быстрое изменение параметров в центральной части критической области [2, 28, 33] и остающиеся гладкими для систем любого размера, в том числе и при переходе к термодинамическому пределу. Например, для таких параметров, как средняя энергия системы и теплоемкость, критические функции F_E и F_C можно определить соотношениями:

$$\frac{E}{T} = \frac{E^{(\infty)}}{T} + \frac{rN_c}{\sigma} F_E, \quad \frac{C_V}{N} = \frac{C_V^{(\infty)}}{N} + \frac{r^2 N_c^2}{N\sigma^2} F_C. \quad (15)$$

В пределе $\alpha \to 0$ эти критические функции могут быть явно вычислены в автомодельном виде:

$$F_E(\eta) \to -\frac{\partial P^{(\infty)}}{\partial \eta}, \quad F_C(\eta) \to \frac{\partial^2 P^{(\infty)}}{\partial \eta^2}. \quad (16)$$

Выражения (15) дают непрерывное асимптотическое описание термодинамических параметров в центральной части критической области для достаточно больших мезоскопических систем, если использовать в них предельные критические функции (16). Их сравнение с результатами прямого численного расчета показывает очень точное совпадение зависимостей термодинамических параметров вблизи критической точки, уже начиная с $N_c \sim 10^4$, когда система еще далека от термодинамического предела и ширина критической области весьма велика.

Таким образом, вычисление предельных автомодельных распределений и простой анализ автомодельной переменной $\eta(T)$ и масштабных факторов в выражениях для термодинамических параметров (таких, как (15)) позволяют качественно и количественно описать мезоскопическую систему в наиболее сложной центральной части критической области, избежав трудоемких и малоинформативных численных расчетов для многочисленных вариантов конкретных параметров и размеров системы.

Для совсем малых систем или слишком далеко от критической точки статистика и термодинамика БЭК (5)–(7) не сводятся к предельным автомодельным функциям. Тогда надо учесть поправки следующих порядков по малому параметру $\alpha \neq 0$, обусловленные младшими полюсами в характеристической функции (10). Такой систематический подход, использующий найденное в [2] точное решение для модели трехуровневой ловушки, служащей универсальной моделью для поправок, предложен в [28, 29].

5. Термодинамический предел и парадокс неаналитичности. В статистической физике существует парадигма – рассматривать статистику и термодинамику системы сразу и только в термодинамическом пределе. Для БЭК это означает предельный переход к бесконечным размеру ловушки и числу частиц в ней, сохраняющий неизменной характерную концентрацию частиц. Формально это упрощает расчеты: различные суммы заменяются интегралами и иногда вычисляются в конечном виде, а различные статистические ансамбли становятся эквивалентными [34–37]. Однако в критической области фазовых переходов такой подход неверен, причем не только количественно. Он упускает главный факт и объект исследования критических явлений — автомодельную структуру критической области (п. 4), огрубляя ее до примитивного разрыва термодинамических параметров или их производных. Так, он предсказывает скачок теплоемкости бозе-газа в критической точке и не может разрешить λ-структуру фазового перехода. Последний в реальных мезоскопических системах всегда является плавным, что подчеркивал еще Эренфест, критикуя Эйнштейна.

Эта проблема многократно 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 [38, 13, 14, 39] или их комбинация с аналитическими методами, известными для ловушек специальной геометрии. Так, рассматривалась ловушка-ящик, две стороны которой фиксировались очень большими, а третья варьировалась [40], или сферическая ловушка с варьируемым радиусом [41]. 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 ящика с непроницаемыми стенками наблюдается как смещение положения ее максимума по оси T/T_c, так и немонотонное изменение величины максимума [14]. Неудивительно, что обнаружить автомодельную структуру, заранее не зная о ней, такими методами не удалось.

Аналитическая теория, описанная в пп. 3 и 4, изящно решает указанную проблему термодинамического предела. А именно, для достаточно большой мезоскопической системы все статистические и термодинамические параметры в окрестности критической точки определяются автомодельными функциями от аргументов x и η (8). При увеличении размеров системы (и уменьшении α) их эволюция сводится в основном к изменению масштабов $N_c(T)$ и $\sigma(T)$, определяющих зависимость от температуры автомодельной переменной η, а также к изменению масштабных факторов, фигурирующих в выражениях для термодинамических параметров, подобных (15). Сами же критические функции от аргумента η выходят на неизменные универсальные кривые, определяемые лишь геометрией ловушки через ее спектр $\{\lambda_q\}$. Характерная ширина фазового перехода $\Delta\eta \equiv \equiv \Delta|N - N_c|/\sigma \sim 1$ 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 полностью раскрывает структуру и объясняет парадокс неаналитичности термодинамического предела.

Сказанное выше верно и для канонического, и для большого канонического ансамблей (п. 9).

6. Простота конденсированной фазы. Полностью сформировавшаяся конденсированная фаза вне критической области хорошо описывается простым приближением большого канонического ансамбля для надконденсата с независимыми и неограниченными случайными населенностями n_q уровней $q > 0$, средними населенностями $\langle n_q\rangle^{(gce)} = (e^{(\epsilon_q-\mu)/T} - 1)^{-1}$ и практически нулевым химическим потенциалом μ. Это объясняется макроскопическим заселением конденсата $\langle n_0\rangle \sim N$, что лежит в основе боголюбовского приближения n_0 c-числом. Конечно, флуктуации конденсата остаются, но легко вычисляются из условия канонического ансамбля $n_0 = N - n$ по (5) как дополнительные к флуктуациям надконденсата n. По существу, таким образом решается вспомогательная задача о вычислении “необрезанного” распределения $\rho_n^{(\infty)}$ в (2). Истинное же распределение ρ_n в (5) находится в пренебрежении $\theta(N-n)$-обрезанием нефизических значений $\rho_n^{(\infty)}$ при $n > N$, которые экспоненциально малы. С этой точностью $P^{(\infty)}(N) \simeq 1$ и статистическая сумма в (6) равна “необрезанной” сумме, $Z^{(N)} \approx Z^{(\infty)}$.

Эта простая картина использовалась в большом числе работ, например в [22–26]. Она получила претенциозное название ансамбля демона Максвелла в [21], где рассматривался микроканонический ансамбль и вводился „большой микроканонический ансамбль“ для надконденсата, фиксирующий полную энергию, но не число частиц.

Формальное применение большого канонического ансамбля для вычисления флуктуаций заселения конденсата приводит к "флуктуационной катастрофе" – нефизично большой дисперсии [42, 17, 24]: $\langle (n_0 - \langle n_0 \rangle)^2 \rangle \approx N(N+1)$. Однако данный забавный артефакт подхода большого канонического ансамбля очевиден и никогда не воспринимался всерьез.

Описываемую картину обогатил начатый в [43] анализ полной функции распределения $\rho_n^{(\infty)}$, далеко выходящий за рамки стандартного вычисления первых двух моментов и дающий точное аналитическое решение для всех кумулянтов κ_m, определяемых формулой

$$\ln \Theta^{(n)}(u) = \sum_{m=1}^{\infty} \kappa_m \frac{(iu)^m}{m!}. \tag{17}$$

Их удобное представление для произвольной ловушки следует из преобразования Меллина (ср. (9)) [24]:

$$\kappa_m = \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t} S(t) \zeta(t+1-m). \tag{18}$$

Негауссовость статистики означает наличие ненулевых высших кумулянтов (κ_3, $\kappa_4, ...$) и имеет место даже в термодинамическом пределе [43, 24, 23]. Пример – подробно описанная в [2, 28] статистика БЭК в ловушке-кубе с периодическими граничными условиями, асимптотики которой найдены аналитически:

$$\rho_x^{(\infty)} \simeq \frac{\sqrt{S_2}}{8\pi^{13/2}} \left(S_1 - \sqrt{S_2}x\right)^{\frac{5}{2}} e^{\frac{(\sqrt{S_2}x - S_1)^3}{12\pi^4} + \phi_0'}, \ x < -1; \tag{19}$$

$$\rho_x^{(\infty)} \approx \sqrt{S_2}\ \wp_6\ e^{-\sqrt{S_2}x - g_1 + s_0'}, \quad x > 3,$$

$$\wp_6 = \frac{x_1^5}{5!} + \frac{x_2 x_1^3}{12} + \frac{x_3 x_1^2}{6} + \left[\frac{x_2^2}{2} + x_4\right]\frac{x_1}{4} + \frac{x_3 x_2}{6} + \frac{x_5}{5}; \tag{20}$$

$S_1 \equiv S(1) \approx -8.91, S_2 \equiv S(2) \approx 16.53, x_1 = \sqrt{S_2}x - x_0'$, $x_0' \approx 8.7$, $x_2 \approx 22.44$, $x_3 \approx -14.04$, $x_4 \approx 12.72$, $x_5 \approx -12.3$, $\phi_0' \approx 2.2$, $s_0' \approx 6.45$, $g_1 = 6$.

7. Универсальные классы статистики конденсата в ловушках с произвольной геометрией и роль граничных условий. Согласно п. 4, с увеличением мезоскопической системы статистика приобретает автомодельный вид одного из двух, гауссового или аномального, классов. Тип класса зависит от положения самого правого полюса r функции ловушки $S(t)$ (см. (11)), которая определяется исключительно геометрией ловушки через ее безразмерный спектр $\{\lambda_q\}$. Если $r > 2$, то энергии λ_q с ростом номера q растут медленно, так что эффективное число заселенных уровней, дающих важный вклад в статистику БЭК, оказывается достаточно большим для применимости центральной предельной теоремы. В этом случае статистика оказывается гауссового класса (12). В обратном случае, $r < 2$, имеем статистику аномального класса (13).

Кроме того, положение полюса r определяет относительную величину параметров $N_c(T)$ и $\sigma(T)$ автомодельной переменной x "необрезанного" распределения $\rho_n^{(\infty)}$ в (8). Отметим, что поведение математического ожидания и дисперсии истинного, "обрезанного" распределения ρ_n повторяет поведение N_c и σ в широкой окрестности точки фазового перехода и во всей низкотемпературной фазе [2].

Появление и свойства двух классов универсальности статистики БЭК можно анализировать с помощью кумулянтов (18). В термодинамическом пределе $\alpha \to 0$ они даются вкладом самого правого полюса r:

$$\begin{aligned} &\kappa_m \to \zeta(r+1-m) R \alpha^{-r} && \text{при } r > m, \\ &\kappa_m \to R\alpha^{-m} \ln \alpha^{-1} && \text{при } r = m, \\ &\kappa_m \to S(m)\alpha^{-m} && \text{при } r < m. \end{aligned} \tag{21}$$

Переход к автомодельной центрированной переменной $x = (n - N_c)/\sigma$ зануляет первый кумулянт и масштабирует остальные по закону $\kappa_m^{(x)} = \kappa_m/\sigma^m$. В пределе $\alpha \to 0$ имеем два класса универсальности:

$$\begin{aligned} &\kappa_{m>2}^{(x)} \to S(m) \big/ S^{\frac{m}{2}}(2) && \text{при } r < 2, \\ &\kappa_{m>2}^{(x)} \to 0 && \text{при } r \geq 2. \end{aligned} \tag{22}$$

Стремление старших кумулянтов к нулю соответствует гауссовому предельному распределению, а стремление к константам, задаваемым геометрией ловушки через функцию ловушки $S(t)$, определяет негауссовые предельные автомодельные распределения ловушек аномального класса.

Все ловушки с $r > 2$, например трехмерная гармоническая ловушка ($r = 3$), образуют гауссовый класс с нормальными дисперсией, $\sigma^2 \sim N_c$, и распределением $\rho_x^{(\infty)}$ независимо от конкретного профиля удерживающего потенциала. При этом автомодельное интегральное распределение всегда имеет вид $P^{(\infty)} = \frac{1}{2}\left(1 + \operatorname{erf}\frac{\eta}{\sqrt{2}}\right)$. Не зависят от профиля ловушки и определяющие термодинамические параметры системы критические функции [2], явно выражающиеся в этом случае через функцию ошибок erf. Форма ловушки влияет лишь на зависимость $\eta(T)$. Именно ловушки гауссового класса имеют в термодинамическом пределе скачок теплоемкости на графике ее зависимости от температуры в точке $T = T_c$.

Гауссово предельное "необрезанное" распределение имеют также ловушки с пограничным положением полюса $r = 2$. Однако согласно (9) для них связь дисперсии и математического ожидания включает логарифмический фактор, $\sigma^2 \sim N_c \ln N_c$, поскольку старший полюс, определяющий величину дисперсии, оказывается в этом случае двойным. При этом чем ближе полюс r к 2, тем меньшие α требуются для того, чтобы в заданной окрестности критической точки можно было пренебречь мезоскопическими поправками к автомодельному распределению.

Аномальный класс ловушек (пример – ящики, $r = 3/2$), для которых $r < 2$ и дисперсия аномально велика, $\sigma^2 \sim N_c^{2/r}$, демонстрирует более сложные свойства. Конкретная форма автомодельного распределения (13) явно зависит от спектра ловушки $\{\lambda_q\}$. Техника анализа таких распределений и их асимптотик описана в [2, 28]. Асимптотика при $x \gg 1$ в фазе развитого конденсата для ловушек аномального класса дается линейной экспонентой, умноженной на полином (ср. (20)). При уменьшении r она становится применима при все больших x. Асимптотика при $-x \gg 1$ дается методом стационарной фазы. Ее вид сильно зависит от нескольких старших полюсов функции ловушки $S(t)$. Самый правый полюс r при $r > 1$ отвечает асимптотике вида $\sim \exp\left(-|x|^{r/(r-1)}\right)$. При $r = 1$, например для одномерной гармонической ловушки, спадание идет по более сильному, дважды экспоненциальному закону $\sim \exp\left(-e^{|x|}\right)$.

Аналогичные классы статистики БЭК идеального газа в ловушке произвольной формы были независимо найдены совершенно другим методом в [44]. В качестве ключевых характеристик ловушки вводились константы L и a, такие, что

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \#\{q : \lambda_q \le \Lambda\}\Lambda^{-a} = L, \tag{23}$$

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

$$\begin{aligned} &a = 1\colon \sigma \sim N_c/\log N_c; \quad 1 < a < 2\colon \sigma \sim N_c^{1/a};\\ &a = 2\colon \sigma \sim \sqrt{N_c \log N_c}; \quad a > 2\colon \sigma \sim \sqrt{N_c}. \end{aligned} \tag{24}$$

При этом центрированные и нормированные на дисперсию предельные распределения числа частиц в конденсате, т.е., фактически, $\rho_x^{(\infty)}$, оказываются гауссовыми в случае $a \ge 2$ и негауссовыми в случае $a < 2$. Для негауссовых распределений были получены представления в виде суммы бесконечного числа экспоненциально распределенных величин. Отметим, что поиск конечных выражений и явных асимптотик распределения на основе указанного представления остается нетривиальной задачей. Однако упомянутая выше дважды экспоненциальная асимптотика при $-x \gg 1$ для одномерной гармонической ловушки также была получена. Найденные в [44] типы статистики БЭК эквивалентны описанным выше гауссову и аномальному классам, так как характеризующий ловушку параметр a в точности совпадает с положением самого правого полюса r функции ловушки $S(t)$.

Близко к указанным выводам подводили также работы [45–47]. В них вероятность обнаружения n_0 частиц в конденсате записывалась в виде суммы по населенностям возбужденных уровней, а условие канонического ансамбля удовлетворялось введением символа Кронекера в форме контурного интеграла:

$$\rho_{n_0} \sim \sum_{n_1,n_2,\ldots=0}^{\infty} e^{-\sum_{q=0}^{\infty}\alpha\lambda_q n_q} \oint \frac{z^{-N-1+\sum_{q=0}^{\infty} n_q}}{2\pi i}dz, \tag{25}$$

который затем преобразовывался в интеграл типа Фурье. (Это представление сводится к (5) и (2).) Интеграл вычислялся приближенно методом стационарной фазы. Полученные распределения ρ_{n_0} в целом хорошо описывали фазовый переход: они монотонно спадали при $T > T_c$ и имели горб при $T < T_c$, что ранее наблюдалось и в численных расчетах [12, 48].

Вместе с тем в [45] 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 гауссова класса, а аномальный класс ловушек с негауссовыми распределениями оставался нераскрытым. Отметим, что даже для ловушек гауссова класса вдали от критической точки распределение не является нормальным из-за мезоскопических поправок $\alpha \ne 0$.

В то же время для ловушки-ящика с периодическими граничными условиями старшие кумулянты были учтены в [46]. Потребность в таком специальном рассмотрении мотивировалась в [45] тем, что второй член разложения логарифма характеристической функции имел не предполагавшийся в этой работе вид $(iu)^2$, а $(iu)^{3/2}$. Эта особенность связывалась с непрерывностью спектра свободного газа в термодинамическом пределе. Результат [46] вновь говорил о переходе ρ_{n_0} от монотонного спадания при $T > T_c$ к кривой, имеющей горб, при $T < T_c$. Это перестроение происходило в узком интервале температур $|T/T_c - 1| \sim N^{-1/3}$, что соответствует критической области $|N - N_c| \sim \sigma$. Отмечалась негауссовость распределения. Была верно найдена кубическая зависимость в показателе экспоненты асимптотики (19), но не предэкспоненциальный фактор.

Заметим, что непосредственной причиной отклонения от гауссова распределения является неприменимость центральной предельной теоремы из-за того, что уровни энергии λ_q с ростом номера q быстро становятся высоколежащими и слабозаселенными и потому статистику определяет лишь малое число низколежащих уровней. Характеристическая функция $\Theta^{(n)}(u)$ не имеет неаналитичностей и расходимостей в точке $u = 0$, а упомянутый член $(iu)^{3/2}$ определяет ее промежуточную асимптотику между двумя малыми масштабами, $|u| \sim 1/\sigma$ и $|u| \sim 1/\sqrt{N_c}$, вклад каждого из которых необходимо учитывать [28]. Для свободного газа оба масштаба удовлетворяют неравенству $|u| \ll 1$. Поэтому без использования масштабирования (8) поведение характеристической функции в нуле легко принимается за неаналитическое.

Для ловушек аномального класса автомодельные статистика и термодинамика в критической области зависят не только от таких грубых характеристик ловушки, как определяемый положением самого правого полюса r характер роста уровней энергии. Автомодельное "необрезанное" распределение $\rho_x^{(\infty)}$ может значительно перестраиваться и при небольших коррекциях спектра, например вызванных изменением граничных условий волновой функции атомов в ловушках-ящиках с периодических на нулевые [28]. Так как структура критической области автомодельна, отмеченное влияние граничных условий не исчезает с увеличением размеров системы и сохраняется даже в термодинамическом пределе. Указанное свойство, достаточно редкое в задачах статистической физики, представляет несомненный интерес для экспериментального обнаружения и практического применения в устройствах на базе БЭК в ловушках аномального класса с контролируемыми параметрами.

8. Феноменологическая теория ренормгруппы и законы подобия для БЭК в конечных системах. Феноменологической теории ренормгруппы и масштабной инвариантности критических явлений исполнилось уже полвека [34, 49–53]. Однако до сих пор не существует микроскопической теории критических явлений, которая, исходя из микроскопического гамильтониана мезоскопической системы, позволяла бы регулярным способом вывести универсальные результаты ренормгруппового подхода, например классы универсальности и значения критических индексов, и вычислить неуниверсальные характеристики фазового перехода — критические функции и амплитуды физических величин.

Сравним описанное выше точное микроскопическое решение мезоскопической задачи о БЭК идеального газа в ловушке с ренормгрупповым анализом законов подобия для БЭК в конечных системах. Например, известно [54, 49, 50, 55, 56], что для трехмерной ловушки-ящика этот фазовый переход принадлежит к классу универсальности гауссовой модели комплексного поля, или сферической модели, и потому критические индексы корреляционной длины ν и фракции конденсата v равны единице, $\nu = v = 1$, а критический индекс удельной теплоемкости $\alpha = -1$. Отметим, что для взаимодействующего газа фазовый переход БЭК принадлежит к классу универсальности трехмерной модели XY, или O(2) [50, 52, 57, 58, 11], для которой критические индексы другие: $\nu \approx 0.6717, \alpha \approx -0.015$. Существуют универсальные соотношения между критическими индексами, в том числе $\alpha = 2 - d\nu$ и $v = (d-2)\nu$, где d – размерность пространства.

Метод скейлинга конечных систем в теории ренормгруппы использует представление физических величин в виде степенных функций относительной отстройки $\tau = (T - T_c)/T_c$ температуры от критической точки и размера системы L. Пусть физическая величина $y(\tau, L)$ нормирована так, что ее термодинамический предел при $L \to \infty$ в критической точке $T = T_c$, или $N = N_c$, имеет конечное значение $y(0,\infty) = y^{(c)}$. Тогда ее ренормгрупповой анзац есть

$$y(\tau, L, N) = y^{(c)} + |\tau|^{\zeta_y}\, g_y\left[\frac{L}{\xi(\tau)}\right], \quad \xi(\tau) = \xi_0|\tau|^{-\nu}, \tag{26}$$

где ζ_y – критический индекс величины y, g_y – ее критическая функция, $\xi(\tau) = \xi(\tau,\infty)$ – величина корреляционной длины $\xi(\tau, L) = |\tau|^{-\nu} f_\xi[\frac{L}{\xi(\tau)}]$ при $L \to \infty$.

Рассмотрим, например, фракцию конденсата $\bar{n}_0/N$ и удельную теплоемкость $c_V = C_V/N$. Точное микроскопическое решение для них в центре критической области есть описанные в предыдущих пунктах функции автомодельной переменной η (см. (8)), которая в линейном приближении пропорциональна ренормгрупповой переменной $L/\xi(\tau)$. Так, для ловушки-ящика

$$\eta \approx -\frac{3N_c}{2\sigma}\tau = -\frac{3\pi[\zeta(3/2)]^{2/3}}{2\sqrt{S_2}} N_c^{1/3}\tau \propto \tau L, \tag{27}$$

где $\tau \equiv T/T_c - 1 = (N_c/N)^{2/3} - 1$, $N_c \propto L^3$, $\sigma \propto L^2$. В общем случае $\sigma \propto L^{\Delta_\sigma}$, где масштабная размерность Δ_σ дисперсии σ зависит от геометрии ловушки. Например, $\Delta_\sigma = 2$ для ящика и $\Delta_\sigma = 3/2$ для гармонической ловушки. Из сказанного ясно, что точное решение для критической функции физической величины y, записанное в виде

$$y(T,L,N) = y^{(c)} + \sigma^{-\zeta_y/(\nu\Delta_\sigma)} f_y(\eta), \qquad (28)$$

дает ренормгрупповой анзац (26) в окрестности критической точки для достаточно больших систем с $\nu = 1$. Надо лишь идентифицировать автомодельную функцию $f_y(\eta)$ в (28) с произведением $g_y[L/\xi(\tau)]$ на фактор $\propto (\tau L^{1/\nu})^{\zeta_y}$ в (26). Более того, критический индекс корреляционной длины ν вычисляется просто по виду автомодельной переменной η в (8) без какой-либо информации о критических функциях. Наконец, негауссова масштабная размерность Δ_σ аномальной дисперсии флуктуаций $\sigma \propto L^{\Delta_\sigma}$, обсуждавшаяся в п. 7, сродни явлению аномальной масштабной размерности физических величин.

В частности, для фракции конденсата $y = \bar{n}_0/N$ и удельной теплоемкости $y = C_V/N \equiv c_V$ переход от точного автомодельного решения к ренормгрупповому приближению путем линеаризации автомодельной переменной η по малому отклонению температуры от критической точки можно записать в виде соответствующих пар уравнений (28) $\Rightarrow$ (26):

$$\frac{\bar{n}_0(T,L,N)}{N} = \frac{f_{n_0}(\eta)}{\sigma^{v/(\nu\Delta_\sigma)}} \;\Rightarrow\; \frac{\bar{n}_0(\tau,L,N)}{N} = |\tau|^v g_{n_0}\left[\frac{L}{\xi}\right], \qquad (29)$$

$$c_V = \frac{C_{Vc}}{N_c} + \frac{f_{CV}(\eta)}{\sigma^{-\alpha/(\nu\Delta_\sigma)}} \Rightarrow c_V = \frac{C_{Vc}}{N_c} + \frac{g_{CV}\left[\frac{L}{\xi}\right]}{|\tau|^\alpha}. \qquad (30)$$

Итак, как и должно быть, точное микроскопическое решение позволяет не только вывести результаты феноменологической теории ренормгруппы для промежуточной асимптотики на склонах критической области, но и найти сами нетривиальные (не степенные) критические функции термодинамических и статистических параметров в центре критической области. Более того, автомодельность точного решения и знание универсальной автомодельной переменной η позволяют найти зависимость физических величин сразу от всех параметров системы, а не только от одной температуры. В теории ренормгруппы не получено явного решения для критических функций, а для их анализа [50, 57, 58, 8, 9, 11] используются численные расчеты методом Монте-Карло и аппроксимации по первым членам их ряда Тейлора с включением поправок на не определяющие закон подобия поля. О некоторых открытых вопросах, связанных с обсуждавшимся здесь сравнением точной и ренормгрупповой теорий БЭК, будет говориться в п. 11.

9. Статистика и термодинамика БЭК в критической области для произвольных ловушек: большой канонический ансамбль. Анализ критической области БЭК идеального газа для произвольных ловушек в большом каноническом ансамбле дан в [33]. Начнем с уравнения $\langle n_0\rangle + \langle n\rangle = N$, определяющего химический потенциал μ, и запишем его аналогично уравнениям (9)–(10):

$$\frac{1}{e^{-\frac{\mu}{T}}-1} + \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t}\zeta(t)\left[S\left(t, \frac{-i\mu}{\epsilon_1}\right) - S(t)\right] = \sigma\eta. \qquad (31)$$

В термодинамическом пределе $\alpha \to 0$ нормированный химический потенциал $F_\mu = \sigma\mu/T$ оказывается функцией только автомодельного аргумента η. Ее конкретный вид определяется положением самого правого полюса r функции ловушки $S(t)$ в (11).

Для ловушек гауссова класса ($r > 2$) основной вклад в (31) вносит полюс дзета-функции, что дает

$$F_\mu(\eta) = \left(\eta - \sqrt{\eta^2+4}\right)/2. \qquad (32)$$

Для ловушек аномального класса ($r < 2$) доминирует полюс комбинации функций ловушки, что дает явное решение для обратной к $F_\mu(\eta)$ функции:

$$-\frac{1}{F_\mu} + \frac{1}{\sqrt{S(2)}}\left[S\left(1, -i\frac{F_\mu}{\sqrt{S(2)}}\right) - S(1)\right] = \eta. \qquad (33)$$

Кумулянтный анализ статистики надконденсата приводит к результату, аналогичному (21), но с заменой $\{\lambda_q\}$ на сдвинутый спектр $\{\lambda_q - \mu/\epsilon_1\}$:

$$\kappa_m^{(gce)} = \sum_j \operatorname*{Res}_{t=t_j} \alpha^{-t}\zeta(t+1-m) S\left(t, -\frac{i\mu}{\epsilon_1}\right). \qquad (34)$$

Отсюда опять получаем, что в термодинамическом пределе $\alpha \to 0$ для случайной величины $x = (n - N_c)/\sigma$ все кумулянты старше второго при $r \geq 2$ стремятся к нулю (гауссовый класс), а при $r < 2$ — к ненулевым константам (аномальный класс), которые не зависят от α ни явно, ни через химический потенциал, поскольку μ/ϵ_1 при $r < 2$ зависит лишь от η.

Критическая термодинамика характеризуется теми же критическими функциями, что были введены для канонического ансамбля в (16). Они выражаются через найденный выше химический потенциал:

$$F_E^{(gce)}(\eta) = F_\mu(\eta), \quad F_C^{(gce)}(\eta) = -\partial F_\mu/\partial\eta. \qquad (35)$$

Итак, в большом каноническом ансамбле структура статистики и термодинамики в центре критической области также является автомодельной с тем же делением на два, гауссовый и аномальный, класса универсальности, что и в каноническом ансамбле.

10. Неэквивалентность большого канонического, канонического и микроканонического ансамблей в критической области. Приближение большого канонического ансамбля стало парадигмой в статистической физике после доказательства его эквивалентности каноническому ансамблю для макроскопических систем с нормальными термодинамическими флуктуациями [59, 60, 36, 61, 37]. В изложении Ландау [34] на этом основана вся статистическая физика. Доказательства и условия этой эквивалентности основаны на применимости центральной предельной и подобных строгих теорем математики [62–70].

Вместе с тем известно [17, 64, 71–73], что указанная эквивалентность нарушается при наличии фазовых переходов, длинноволновых корреляций или дальнодействующих взаимодействий типа кулоновского, дипольного и гравитационного. Несмотря на это, большой канонический ансамбль широко применяется для описания термодинамики фазового перехода при БЭК, в том числе в случае идеального газа [40, 74, 39, 41]. Кстати, формально "флуктуационная катастрофа" нефизично большой дисперсии флуктуаций БЭК (см. п. 6) тут не мешает, поскольку частицы на основном уровне с нулевой энергией не вносят никакого вклада в термодинамические параметры, такие, как средняя энергия или теплоемкость. (Последнее утверждение не относится к ряду параметров, например к давлению газа.) Конечно, о различии предсказаний канонического и большого канонического ансамблей для конечных мезоскопических систем хорошо известно со времен критики Эйнштейна Эренфестом. Для БЭК оно обсуждалось, например, в [17, 35, 2, 47, 33], демонстрировалось численно [12, 48, 75] и даже аналитически — для ловушек с известными для обоих ансамблей решениями (одномерная гармоническая ловушка [76]).

Однако в большинстве работ рассматривают термодинамический предел и потому подразумевают эквивалентность ансамблей для описания статистики и термодинамики, в том числе для критической области фазового перехода БЭК. Мы показали [33], что последнее неверно. Для этого мы сравнили явные аналитические решения для канонического (пп. 3–7) и большого канонического (п. 9) ансамблей в центральной части критической области.

Легко убедиться в том, что предельные выражения (16) и (35) для термодинамических функций в разных ансамблях не совпадают. Это означает, что в критической области ансамбли не эквивалентны даже при переходе к термодинамическому пределу. Отличия в предсказаниях разных ансамблей для быстроменяющихся в окрестности критической точки величин могут быть того же порядка по α, что и сами величины. Примером является теплоемкость газа атомов в трехмерной гармонической ловушке [33].

В целом критические функции для канонического ансамбля описывают более резкую картину фазового перехода. Для термодинамических параметров, таких, как теплоемкость и энергия, при образовании БЭК "обрезающая связь" в (5) начинает быть существенной только при $\eta \simeq -1$ и быстро изменяет соответствующую критическую функцию канонического ансамбля. В большом каноническом ансамбле критическая функция начинает заметно меняться намного раньше (при $\eta \simeq -5$) за счет нарастания абсолютной величины химического потенциала — предвестника фазового перехода. Соответствующие асимптотики при $-\eta \gg 1$ оказываются существенно различными: экспоненциальное спадание для канонического ансамбля и степенное спадание для большого канонического ансамбля. Таким образом, обычное утверждение об эквивалентности ансамблей относится только к термодинамическим функциям и верно только вне критической области фазового перехода.

Обобщение указанного анализа на микроканонический ансамбль, в котором система изолирована и по числу частиц, и по энергии, пока не получено даже для идеального газа. В отдельных работах, таких, как [25], удалось получить лишь асимптотические результаты для гармонических ловушек. При этом применяются методы теории чисел, что эффективно только для случая спектра $\lambda_q = q$, $q = 0, 1, 2, ...$, и не допускает прямого обобщения на ловушки произвольной геометрии. Известные фрагментарные результаты [12, 23, 77] подкрепляют ожидания того, что и в микроканоническом ансамбле для статистики и термодинамики БЭК в центре критической области существуют обсуждавшиеся выше автомодельность и разделение на гауссовый и аномальный классы.

Таким образом, в классических работах по проблеме эквивалентности статистических ансамблей в термодинамическом пределе был упущен сам универсальный объект исследования фазовых переходов — автомодельная структура критической области и ее различия в разных ансамблях. Вся критическая область была недальновидно заменена одной критической точкой $T = T_c$, в которой термодинамические функции терпят разрыв или излом.

11. Некоторые итоги и задачи теории БЭК в критической области. Представленный обзор работ по БЭК идеального газа в мезоскопических системах показывает, что для канонического и большого канонического ансамблей найдено исчерпывающее аналитическое решение, 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.

Главным обнаруженным фактом является автомодельность решения для статистических и термодинамических величин в критической области. Это существенно упрощает анализ БЭК, сводя влияние всего многообразия физических параметров системы к зависимости от единой автомодельной переменной. При этом вид критических функций статистических и термодинамических величин как функций указанной автомодельной переменной определяется и зависит от чистой геометрии ловушки, но не от конкретных физических параметров и размеров системы.

Другим важным достижением является найденная в [28, 29, 44] полная классификация классов универсальности БЭК в различных ловушках, основанная на классификации автомодельных функций, определяющих статистику БЭК в центре критической области. Особо отметим предсказание эффекта влияния граничных условий в ловушках аномального класса на статистические и термодинамические величины. Замечательно то, что данный эффект не исчезает даже в термодинамическом пределе.

Представляет несомненный интерес наблюдение указанного и других обсуждавшихся в обзоре эффектов, а также их зависимости от силы межчастичного взаимодействия в современных экспериментах по БЭК в мезоскопических системах. Это реально, поскольку возможно 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 [33] неэквивалентность канонического и большого канонического ансамблей для описания БЭК в критической области даже в термодинамическом пределе.

Следующим, относительно простым шагом является построение аналогичной теории БЭК идеального газа в мезоскопических системах в микроканоническом ансамбле, который наиболее адекватен для экспериментов с энергетически изолированными ловушками. Однако для корректного применения микроканонического ансамбля к мезоскопическим системам требуется допустить определенные флуктуации полной энергии, соответствующие конкретным экспериментальным ситуациям.

Теория БЭК, рассматривавшаяся выше в рамках модели идеального газа, значительно усложняется при наличии межчастичного взаимодействия. В качестве первого приближения обычно используется теория среднего поля в приближении Боголюбова. В этом случае удается решить задачу путем перехода к невзаимодействующим каноническим квазичастицам, точно удовлетворяющим наложенной на гильбертово пространство связи, т.е. условию сохранения числа частиц. Такая теория построена в [43, 78, 79]. Она является прямым обобщением изложенной выше теории БЭК идеального газа в каноническом ансамбле. Однако эта теория неприменима в критической области, где приближение Боголюбова не верно.

Исчерпывающее описание критической области фазового перехода в мезоскопических системах с межчастичным взаимодействием известно только для точно решаемых моделей. Такая математическая решаемость связана с сильным вырождением конфигурации, параметров, гамильтониана и размерности модельных систем, что делает их свойства крайне далекими от свойств фазовых переходов в реальных трехмерных системах. Наиболее известно точное решение модели Изинга о магнитном фазовом переходе в двумерной решетке спинов [80, 81].

Принципиальная, определяющая роль связей, налагаемых природой и конфигурацией многочастичной системы на ее гильбертово пространство, в происхождении и картине фазовых переходов в критической области сохраняется и для систем взаимодействующих частиц. Полнота и строгость аналитической теории порожденной такой связью бозе-конденсации в модели идеального газа, описанной в обзоре, является образцом и, по-видимому, недостижимым идеалом для будущих теорий критических явлений в системах с взаимодействием. Более того, эта аналитическая теория должна стать составной частью и ядром любой будущей теории критических явлений в БЭК взаимодействующих частиц, в частности предложенной в [1, 3].

Феноменологическая теория ренормгруппы не дает полного решения проблемы критической области БЭК в мезоскопических системах даже для БЭК идеального газа (см. п. 8). Ее сравнение с микроскопической теорией наводит на ряд интересных вопросов. Так, хотя автомодельная переменная η в (8) имеет универсальное определение независимо от величины межчастичного взаимодействия, вопрос о том, остается ли она универсальной автомодельной переменной для решения в критической области и при наличии взаимодействия, является открытым. Другой вопрос: как далеко от критической области происходит переход промежуточной универсальной асимптотики, даваемой теорией ренормгруппы, в итоговую асимптотику теории среднего поля Ландау? Еще один вопрос: как происходит переход БЭК из класса универсальности гауссовой модели комплексного поля, или сферической модели, в класс универсальности трехмерной модели XY, или O(2), при выключении взаимодействия? Его можно изучать экспериментально с помощью резонансов Фешбаха.

Микроскопическая теория фазовых переходов в критической области, предложенная в [1, 3], по существу, дополняет метод функций Грина квантово-полевой теории многочастичных систем до точного регулярного метода решения задач о фазовых переходах в критической области. Таким методом можно непрерывно проследить за преобразованием неупорядоченной фазы в упорядоченную при переходе через критическую точку для трехмерных систем. Эта проблема остается одной из центральных нерешенных проблем теоретической физики. Метод ее решения для трехмерной задачи Изинга предложен в [82].

Работа поддержана грантом Президента РФ для поддержки ведущих научных школ РФ (проект НШ # 1041.2014-2), программой фундаментальных исследований отделения физических наук РАН IV.2.6 и фондом некоммерческих программ “Династия”.

---

1. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Scripta **90**, 108002 (2015).
2. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Rev. A **81**, 033615 (2010).
3. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Lett. A **379**, 466 (2015).
4. T. Meyrath, F. Schreck, J. Hanssen, C. Chuu, M. Raizen, Phys. Rev. A **71**, 041604 (2005).
5. K. Nho and D. Blume, Phys. Rev. Lett. **95**, 193601 (2005).
6. R. L. Campbell, R. P. Smith, N. Tammuz, S. Beattie, S. Moulder, and Z. Hadzibabic, Phys. Rev. A **82**, 063611 (2010).
7. T. Berrada, S. van Frank, R. Bücker, T. Schumm, J. Schaff, and J. Schmiedmayer, Nat. Commun. **4**, 2077 (2013).
8. P. Grüter, D. Ceperley, and F. Laloë, Phys. Rev. Lett. **19**, 3549 (1997).
9. M. Holzmann and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999).
10. E. Burovski, J. Machta, N. Prokof’ev, and B. Svistunov, Phys. Rev. B **76**, 132502 (2006).
11. J.-H. Wang and Y.-L. Ma, Phys. Rev. A **79**, 033604 (2009).
12. C. Weiss and M. Wilkens, Opt. Express **1**, 272 (1997).
13. P. Borrmann, J. Harting, O. Mülken, and E. R. Hilf, Phys. Rev. A **60**, 1519 (1999).
14. K. Glaum, H. Kleinert, and A. Pelster, Phys. Rev. A **76**, 063604 (2007).
15. J.-H. Wang, J.-H. He, and Y.-L. Ma, Phys. Rev. E **83**, 051132 (2011).
16. W. Mullin and J. Fernandez, Am. J. Phys. **71**, 661 (2003).
17. R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, and M. Kac, Phys. Rep. **32**, 169 (1977).
18. M. Holthaus, E. Kalinowski, and K. Kirsten, Ann. Phys. **270**, 198 (1998).
19. L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein condensation*, Oxford, Clarendon Press (2003).
20. V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky, M. Holthaus, C. Raymond Ooi, A. Svidzinsky, W. Ketterle, and M. O. Scully, Adv. Atom. Mol. Opt. Phys. **53**, 291 (2006).
21. P. Navez, D. Bitouk, and M. Gajda, Phys. Rev. Lett. **79**, 1789 (1997).
22. S. Grossmann and M. Holthaus, Opt. Express **1**, 262 (1997).
23. C. Weiss and M. Holthaus, Europhys. Lett. **59**, 486 (2002).
24. M. Holthaus, K. T. Kapale, V. V. Kocharovsky, and M. O. Scully, Physica A: Stat. Mech. Appl. **300**, 433 (2001).
25. S. Grossmann and M. Holthaus, Phys. Rev. Lett. **79**, 3557 (1997).
26. D. Boers and M. Holthaus, *Canonical statistics of occupation numbers for ideal and weakly interacting Bose-Einstein condensates, in Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, Springer (2002), p. 232.
27. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 225001 (2010).
28. S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, and V. V. Kocharovsky, Phys. Rev. A **90**, 033605 (2014).
29. S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, and V. V. Kocharovsky, J. Phys. A: Math. Theor. **47**, 415003 (2014).
30. A. Voros, Comm. Math. Phys. **110**, 439 (1987).
31. A. Voros, Advanced Studies in Pure Mathematics **21**, 358 (1992).
32. K. Kirsten, J. Math. Phys. **32**, 3008 (1991).
33. S. V. Tarasov, Vl. V. Kocharovsky, and V. V. Kocharovsky, J. Stat. Phys. **161**, 942 (2015).
34. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Физматлит, М. (2005), ч. 1.
35. F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
36. P. T. Landsberg, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Dover Publications, N.Y. (2014).

37. E. Schrödinger, *Statistical Thermodynamics*, Dover Publications, N.Y. (1989).
38. M. Van den Berg, J. Lewis, and J. Pulé, Helvetica Physica Acta **59**, 1271 (1986).
39. G. Su and J. Chen, European J. Phys. **31**, 143 (2010).
40. D. J. Toms, J. Phys. A: Math. General **39**, 713 (2006).
41. J. Noronha and D. J. Toms, Physica A: Stat. Mech. Appl. **392**, 3984 (2013).
42. I. Fujiwara, D. Ter Haar, and H. Wergeland, J. Stat. Phys. **4**, 329 (1970).
43. V. V. Kocharovsky, Vl. V. Kocharovsky, and M. O. Scully, Phys. Rev. A **61**, 053606 (2000).
44. S. Chatterjee and P. Diaconis, J. Phys. A: Math. Theor. **47**, 085201 (2014).
45. В. А. Алексеев, ЖЭТФ **119**, 700 (2001).
46. В. А. Алексеев, Квантовая электроника **31**, 427 (2001).
47. В. А. Алексеев, ЖЭТФ **139**, 1066 (2011).
48. M. Wilkens and C. Weiss, J. Mod. Opt. **44**, 1801 (1997).
49. M. E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
50. P. B. Weichman, M. Rasolt, M. E. Fisher, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B **33**, 4632 (1986).
51. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, М. (1992).
52. H. Kleinert, *Gauge Fields in Condensed Matter*, World Scientific, Singapore (1989).
53. F. M. Gasparini, M. O. Kimball, K. P. Mooney, and M. Diaz-Avila, Rev. Mod. Phys. **80**, 1009 (2008).
54. R. K. Pathria, *Statistical mechanics*, Butterworth-Heinemann, Oxford (1996).
55. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
56. M. E. Fisher, M. N. Barber, and D. Jasnow, Phys. Rev. A **8**, 1111 (1973).
57. E. Pollock and K. J. Runge, Phys. Rev. B **46**, 3535 (1992).
58. N. Schultka and E. Manousakis, Phys. Rev. B **52**, 7528 (1995).
59. R. H. Fowler and E. A. Guggenheim, *Statistical thermodynamics*, University Press, England, Cambridge (1949).
60. T. L. Hill, *Statistical Mechanics: Principles and Selected Applications*, McGraw-Hill, N.Y. (1956).
61. F. Reif, *Fundamentals of Thermal Physics*, McGraw-Hill, N.Y. (1965).
62. А. Я. Хинчин, *Математические основания статистической механики*, НИЦ РХД, ИКИ, Ижевск (2003).
63. D. Ruelle, *Staistical mechanics: Rigorous results*, World Scientific, London (1969).
64. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М. (1971).
65. R. Dobrushin and B. Tirozzi, Comm. Math. Phys. **54**, 173 (1977).
66. M. Aizenman, S. Goldstein, and J. L. Lebowitz, Comm. Math. Phys. **62**, 279 (1978).
67. A. Martin-Löf, *Statistical Mechanics and the Foundations of Thermodynamics*, Springer, Berlin (1979).
68. J. T. Lewis, C. E. Pfister, and W. G. Sullivan, J. Stat. Phys. **77**, 397 (1994).
69. R. S. Ellis, K. Haven, and B. Turkington, J. Stat. Phys. **101**, 999 (2000).
70. H. Touchette, Europhys. Lett. **96**, 50010 (2011).
71. В. А. Загребнов, В. В. Папоян, Теоретическая и математическая физика **69**, 420 (1986).
72. A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, Phys. Rep. **480**, 57 (2009).
73. M. Kastner, J. Stat. Mech.: Theory and Experiment **2010**, 07006 (2010).
74. B. Klünder and A. Pelster, Eur. Phys. J. B **68**, 457 (2009).
75. N. Balazs and T. Bergeman, Phys. Rev. A **58**, 2359 (1998).
76. C. Herzog and M. Olshanii, Phys. Rev. A **55**, 3254 (1997).
77. C. Weiss, M. Block, M. Holthaus, and G. Schmieder, J. Phys. A: Math. General **36**, 1827 (2003).
78. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Laser Phys. **17**, 700 (2007).
79. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, J. Mod. Opt. **54**, 2491 (2007).
80. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
81. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир М. (1985) [R. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Academic press, London (1982)]
82. V. V. Kocharovsky and Vl. V. Kocharovsky, Phys. Lett. A **379**, 2520 (2015).