小量子体系的玻色-爱因斯坦凝聚的数值模拟

谈承泰[1]

指导教师：马永利[1,2]

(1. 物理学系; 2. 表面物理国家重点实验室)

摘要

有限体的统计物理尤其是其中的相变现象是人们一直感兴趣的研究领域。教科书上传统的 Boltzmann-Gibbs (BG) 统计理论，在取了热力学极限后很好的解释了相变现象。近些年在延拓 BG 统计理论方面已有很大进步， 但是在考虑有限体时仍然有所欠缺。有很多新奇的物理现象仅在体系较小的时候出现，因为只有此时体系的 涨落足够大并且显现出这些量子特性。基于我们发展起来的超越传统 BG 理论的统计理论，我们选择著名的玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) 现象, 研究有限 Bose 体系在囚禁谐振子势阱中的 BEC. 由于作为特性函数的配分函数满足的是递推关系，数值模拟量巨大。在算力限制下提出了一些合理有效的近似方法。计算结果显示，内能及相应的热容等热力学量的温度依赖行为均显著地偏离了热力学极限下的行为，而是与实验相吻合。我们还计算了各种热力学量的维度渡越。

关键词: 有限量子体统计；配分函数递推关系；联合近似方法；玻色-爱因斯坦凝聚；维度跨越

Numerical Calculation of Bose-Einstein Condensations in Finite Systems

Chengtai Tan

Advisor: Yongli Ma

Department of Physics, and State Key Laboratory of Surface Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China

Abstract

Statistics and phase transition in finite-sized system is an interested field as the traditional Boltzmann-Gibbs (BG) statistics does not take the size into consideration but take the thermodynamic limit. There are many novel phenomenon occurring only when the system is small where the fluctuation is large and the system is quantum like. We investigate the famous Bose-Einstein condensation (BEC) in a finite-sized harmonic potential using the method we developed, which goes beyond Boltzmann statistics. We proposed several approximations in the calculation of the partition function due to the exact calculation involve recursion calculation which is formidable. We find that the behavior of specific heat and other thermodynamic quantities deviates from that of thermodynamic limit and well agrees with the experimental data. We further examine the dependence of thermodynamic quantities on the dimensions, the dimensional crossover is important in condensed matter theory.

Keywords: generalized Boltzmann-Gibbs statistics in finite system; recurrence relation on partition functions;combined approximation method; Bose-Einstein condensation; dimensional crossover.

1 引言

多体问题是物理学中的重要分支，从经典的三体问题到凝聚态理论、量子多体及量子信息，都属于这一范 畴。众所周知，粒子数庞大的体系是无法严格求解的（甚至三体问题也没有严格解）。处理这样的问题的传统

做法，即 Boltzmann-Gibbs (BG) 统计理论，以热力学极限（体系的粒子数和体积均无限大，但其数密度有限）为试金石，利用等概率原理和各态历经假说建立了统计系综的理论，建立了处理几乎所有平衡态统计问题的标准框架。但是，在实际体系中，显然体系并不是无穷大的。尤其在很多情形下，体系的大小距热力学极限很远。 比如在玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）的实验实现中，常见的粒子数为 $10^4 \sim 10^5$，这与热力学极限的假设距离很远，而实验的结果也与热力学极限下的理论有较大偏离，见图1. 寻求有限体系统计的另一个重要的出发点是相变。Lee-Yang 相变理论告诉我们，在传统的框架下，只有在热力学极限下才能发生非连续相变。而我们在实验上看到的相变均是在不满足热力学极限的情况下实现的，这就促使我们寻找超越传统BG 理论的有限体系统计理论来解释及更精确的计算相关的热力学量。在这条道路上，Hill 较早提出了广义的适用于小系统的宏观热力学 [1]. Tsallis [2] 提出的非广延熵唯象理论有着更广的应用 [3]. 近些年来，有许多关于有限体系的吉布斯统计理论，例如微正则系综理论[4]、正则系综理论[5, 6, 7]、约化配分函数理论[8, 9, 10] 等等。这些理论解释和预测了小系统中一些有趣的现象，但是依然还存在一些基本的科学问题。

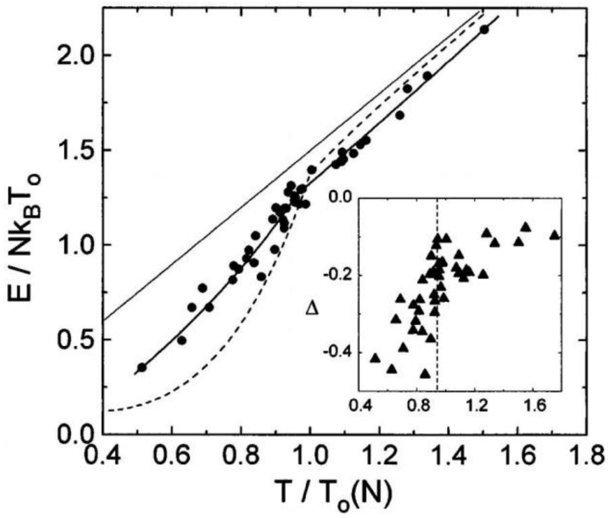

图 1: 最早实现玻色-爱因斯坦凝聚的实验得到的能量-温度图，取自 [11].

BEC 是检验有限量子统计理论的理想平台。首先，BEC 的实现均是在偏离热力学极限较远的情形下实现的，而热力学极限的统计并不能与实验很好的吻合 [11]。其次，BEC 是重要的量子相变现象，已经在多种体系中实现并有重要的物理应用。并且 BEC 的统计理论足够简单，使我们的计算不用引入多余的复杂度。最后，BEC 同很多凝聚态中现象一样，其行为依赖于维数的变化，这对于检验理论的正确性很有帮助 [12]。

传统处理 BEC 的统计理论都建立在巨正则系综上。在非热力学极限下，不同系综之间并不严格等价。我们将从正则系综出发得到推广的统计理论，并将其应用在 BEC 的计算中，这一出发点与实验上的情形更加接近。同时，我们也通过微正则系综的计算，得到推广的正则系综与微正则系综的关系，并且通过数值的计算验 证了这一点。

这篇结题报告的结构安排如下：首先，基于推广的有限体系量子统计（GBG）理论，检验正则系综中配分 函数的递推公式（RR）和微正则系综中微观状态数的RR 与正则系综中配分函数的关系。接着，我们将这套理论应用于 BEC 研究，数值计算囚禁原子在谐振子势阱中的配分函数。由于递推公式计算的复杂性，我们给出几个用于简化问题的近似方法和公式。之后，我们将用数值的方法计算一些重要的物理量，检验我们的理论并 与 BEC 实验比较。最后我们计算了这些物理量在不同维度之间跨越的行为。

2 有限体系量子统计理论

这一节我们给出有限体系下非广延统计的理论框架和重要公式。

2.1 一般形式理论

众所周知，在热力学极限下，密度矩阵由下式给出

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}. \tag{1}$$

不取热力学极限，引入待定参数 σ, 则密度矩阵可以推广为

$$\hat{\rho}_\sigma = \frac{1}{Z} (1 - \sigma \beta \hat{H})_+^{1/\sigma}, \tag{2}$$

其中下标 + 代表括号里的数只能取正值，即粒子分布有能级上限。σ 依赖于体系大小，类似于温度倒数 $\beta = 1/k_B T$，化学势 μ，在微正则系综中都可以由熵极大原理计算，或者在正则系综中由自由能极小原理计算。在正则系综中，σ 反比于热库的体积，可以写成

$$\sigma = \frac{1}{d(N_b - 1)/2 - 1}. \tag{3}$$

这里 $N_b = \Lambda N_s$ 是热库的粒子数，d 为单粒子的自由度，对于自由粒子 d 就是空间维度 D，对于谐振子则为 $2D$. 在 (2) 式中，我们引入了有限体系的配分函数

$$Z = \mathrm{Tr}\hat{\rho}_\sigma. \tag{4}$$

系统的所有信息都由体系的密度矩阵给定，任一热力学量算符 $\hat{Q}$ 的热平均值 Q 都可以如下计算

$$Q = \mathrm{Tr}\hat{Q}\hat{\rho}. \tag{5}$$

我们熟知，在 BG 理论中尤其是在热力学极限下所有的物理量都可以通过配分函数计算。在 GBG 理论中，为了计算所有的物理量，更方便的做法是引入 ν 阶配分函数

$$Z^{(\nu)} = \mathrm{Tr}\hat{\rho}_\sigma^{1+\nu\sigma} = \mathrm{Tr}(1 - \sigma\beta\hat{H})_+^{\nu+1/\sigma}, \tag{6}$$

所有的物理量都可以通过这些配分函数计算。例如，能量的 ν 阶矩可以写成

$$E^\nu = \mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{H}^\nu = \frac{(-1)^\nu \Gamma(2+\nu\sigma-\nu)}{\Gamma(2+\nu\sigma)Z} \frac{\partial^\nu}{\partial\beta^\nu} Z^{(\nu)}. \tag{7}$$

于是热容可以写成

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\beta^2}{Z}\left(\frac{\partial_\beta^2 Z^{(1)}}{1+\sigma} + E\partial_\beta Z\right). \tag{8}$$

2.2 配分函数的递推公式

统计理论的瓶颈在于如何计算配分函数。虽然有些简单模型是可以严格计算的，但大部分体系，例如有相互作用和/或能谱复杂的体系，要么无法严格求解、要么计算量大于计算能力。对于推广的密度矩阵 (2)，哪怕是最简单的模型也难以解析求解。我们知道，单粒子的配分函数是容易计算的，所以促使人们找到配分函数的

递推关系来计算配分函数。对于有限体系，密度矩阵取 BG 统计因子 (1), 设 N 个粒子处于温度倒数 β 时的正则系综配分函数为 $Z_N(\beta)$，则从传统 BG 理论可得 $Z_N(\beta)$ 有如下的递推公式

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \eta^{(n+1)} Z_1(n\beta) Z_{N-n}(\beta), \tag{9}$$

其中 η 依赖于粒子满足的统计，对于玻色子取 1，对于费米子取 −1. 同时还有递推公式的边界条件

$$Z_0(\beta) = 0. \tag{10}$$

在我们的GBG 理论中，一般情况下，没有与递推公式 (9) 直接的对应。但是对于某些特殊简单的能谱，可以加以推广而得到。例如，对于我们关心的谐振子势阱中的原子，正则系综的 ν 阶配分函数有如下的递推公式

$$Z_N^{(\nu)}(\beta) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \eta^{n+1} \sum_{\{l_i\}} (1-nl_i\sigma\beta\hbar\omega)_+^{\nu+1/\sigma-1} Z_{N-n}^{(\nu)}(\beta/(1-nl_i\sigma\beta\hbar\omega)), \tag{11}$$

其中 $\{l_i\}$ 为不同维度谐振子能谱的量子数，求和上限到括号内为正值的最大取值。递推公式的边界条件, 类似地有

$$Z_0^{(\nu)}(\beta) = 0. \tag{12}$$

另一方面，设 N 个粒子具有能量 E 时在微正则系综中的微观状态数为 $\Omega(N, E)$，则其有递推公式

$$\Omega(N,E) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{s} \eta^{n}\, \Omega(N-n, E-n\varepsilon_s), \tag{13}$$

其中 s 为对所有可能的能级求和, 单粒子能谱为 ε_s. 边界条件显而易见为 $\Omega(N \geq 1, E = E_0) = 1$, $\Omega(N = 0, E > 0)=0$，以及体系基态能为 E_0. 这一公式与统计理论取何种的密度矩阵无关，显然在GBG 理论中同样成立。将它与 (2) 相乘得到有限体系正则系综的配分函数为

$$Z_N(\beta) = \sum_{E=E_0}^{[1/\beta\sigma]} \Omega(N,E)(1-\sigma\beta E)_+^{1/\sigma}, \tag{14}$$

其中求和到不超过 $1/\beta\sigma$ 的最高能级。我们之后的计算就将建立于联合以上两个递推公式之上。

3 玻色-爱因斯坦凝聚理论与数值计算方法

3.1 囚禁在谐振子势阱中的BEC 及其传统统计理论

稀薄气体中的 BEC 现象的描述，可以近似为理想玻色气体被束缚在 d 维谐振子型势能的磁阱中，其势能可以写成

$$V_{ext}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^{d} \omega_i^2 r_i^2. \tag{15}$$

对于这个没有相互作用的模型，多体哈密顿量可以简化为单体哈密顿量，其单粒子能谱为 $\varepsilon_{\boldsymbol{n}} = \varepsilon_{\boldsymbol{n}_i} + \varepsilon_0$，其中

$$\varepsilon_{\boldsymbol{n}_i} = \hbar\sum_{i=1}^{d} n_i\omega_i,\quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\sum_{i=1}^{d}\omega_i, \tag{16}$$

在巨正则系综中，无量纲的巨势为

$$\Psi(\beta,\tilde{\omega},z)=-\sum_{n_i=0}^{\infty}\ln(1-ze^{-\beta\varepsilon_{n_i}}) \tag{17}$$

其中 $\tilde{\omega}\propto V^{-1/d}$ 为角频率的几何平均。上式中我们定义了有效逸度 $z=e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)}$，其中化学势减除了零点能的贡献。将上式的对数展开，可以得到

$$\Psi=\sum_{j=1}^{\infty}\frac{z^j}{j}\sum_{n_i=0}^{\infty}e^{-j\beta\varepsilon_{n_i}}. \tag{18}$$

为了得到巨势进而热力学量的解析表达式，我们利用如下的近似公式 [13]

$$\sum_{n_i=0}^{\infty}e^{-n_i y_{ij}}\simeq 1+\frac{e^{-y_{ij}c(y_{ij})}}{y_{ij}}, \tag{19}$$

其中 $y_{ij}=j\beta\hbar\omega_i$，而 $c(y_{ij})$ 可以通过泰勒展开得到 $c(y_{ij})=1/2+O(y_{ij})$. 由于 $\beta\hbar\omega_i$ 在热力学极限下（在实验上的数值同样地）足够小，仅仅取其 0 级近似 $c(y_{ij})=1/2$. 在这个近似下 (18) 式变为

$$\Psi=\sum_{j=1}^{\infty}\frac{z^j}{j}\prod_{i=1}^{d}\left(1+\frac{e^{-j\beta\hbar\omega_i/2}}{j\beta\hbar\omega_i}\right). \tag{20}$$

考虑一个实验上轴对称的势阱 $\omega_1=\omega_2=\omega_\perp$ 及 $\omega_3=\omega_z=\lambda\omega_\perp$，巨势可以化简为

$$\begin{aligned}\Psi=&\,g_1(z)+\frac{1}{x_\perp^2 x_z}g_4(ze^{-x_\perp-x_z/2})+\frac{2}{x_\perp x_z}g_3(ze^{-x_\perp/2-x_z/2})\\&+\frac{1}{2x_\perp^2}g_3(ze^{-x_\perp})+\frac{2}{x_\perp}g_2(ze^{-x_\perp/2})+\frac{1}{x_z}g_2(ze^{-x_z/2}),\end{aligned} \tag{21}$$

其中我们定义了无量纲变量 $x_{\perp,z}=\beta\hbar\omega_{\perp,z}$. 可以看出这个表达式中每个 $g_{d+1}(z)$ 的项对应于 d 维的能谱，而 $g_1(z)$ 项对应基态的贡献。由此巨势就可计算所有热力学量了，维度渡越特性见第4节。

3.2 有限体微观状态数的计算

严格的计算GBG 理论的配分函数只能通过递推公式(11) 和 (13) 的计算。然而由于有限的算力下不能严格的计算到实验用粒子数的数量级，故需要提出有效的近似计算方法。由于从微正则系综出发比正则系综出发计算递推公式的复杂度要低许多，我们提出的近似方法将集中在如何计算微观状态数上。由于这一节的内容是这篇报告的主要成果之一，故每个近似方法都将给出详细的证明。

3.2.1 一维微观状态数严格递推式的简化

微观状态数的计算归根结底是一个排列组合问题。对于某一统计问题，在微正则系综中，微观状态数对应于将 N 个粒子放入不同能级的不同放法的数目。对于满足 Maxwell 统计的粒子，粒子可分辨，故交换两个粒子可以给出两种微观状态。而对于满足 Bose 统计的粒子，粒子全同、不可分辨，微观状态由每个能级上的粒子数给定。对于满足 Fermi 统计的粒子，粒子不可分辨且需满足 Pauli 不相容原理，即每个能级上最多有一个粒子。由于我们考虑的是 Bose 统计，粒子不可分辨，故传统的做法均为如上所述：考虑 N 个粒子放入不同能级的方法。如此做法容易给出依赖于每个能级粒子数的微观状态数，进而得到玻色分布，然而并不利于给出总微观状态数。从同样思路出发得到的递推公式 (13), 也涉及了多重求和，为实际计算带来了麻烦。

考虑到一维谐振子系统的能级间隔是相等的，很容易换一种思路考虑微观状态数的计算。考虑将 E 份能

量（这里 E 为以 $\hbar\omega$ 为单位的整数）分给 N 个粒子，按照这个思路可以立即给出如下的递推关系

$$\Omega(N,E)=\Omega(N,E-N)+\Omega(N-1,E), \tag{22}$$
$$\Omega(N,E)=\Omega(E,E), \quad for \quad N>E. \tag{23}$$

这个思路的过程如下：首先对于第二式，由于 $N>E$，总有至少 $N-E$ 个粒子处于基态。由于粒子的不可分辨性，哪些粒子处于基态并不重要，故可以只考虑 E 个粒子来分担 E 份能量的情况。对于第一式，容易将情况分为两类，即每个粒子都不处于基态的情况和至少有一个粒子处于基态的情况。对于第一种情况，可以减除掉　每个粒子激发到第一激发态的能量，故有 $\Omega(N,E-N)$。对于第二种情况，可以除去一个处于基态的粒子，即得到 $\Omega(N-1,E)$.

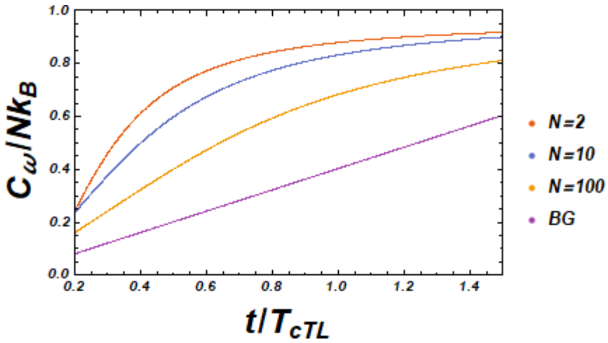

图 2: 不同的粒子数情况下，单粒子约化热容随着约化温度的变化曲线图。随着粒子数增大，热容曲线单调下降，最终趋向于热力学极限的结果，且均没有相变的特征。

从这一套递推公式来看，得到每一个参数对应的微观状态数只需要一次求和。所以这个递推公式相比于通常的递推公式 (13) 而言计算量大大减少，因而足以让我们将微观状态数计算到需要的体系大小。如图2所示，　对于不同的粒子数，我们计算了一维情形下体系的热容与温度的关系。从图中可以看到: (1) 对于小的 N, 由于量子扰动大，单粒子约化热容反到大；(2) 在某一温度处热容的行为并没有峰值或跳变，这与一维谐振子势阱情形下热力学极限下没有BEC 的预期一致；(3) 并且进一步说明了，有限体系除了基态粒子数的占比数有类似 BEC 的行为 [14]，其他物理量并没有不连续的相变行为。

3.2.2 各向异性谐振子势阱中微观状态数的近似计算

由于态密度对维数的依赖特性，BEC 现象一般在更高的维度更易发生。因此，一般的计算高维微观状态数就是更重要的问题。但是，对于更高维的情况，并不能像上一节那样找到问题的数学对应，从而得到一个简单　的递推公式。事实上，要想严格的计算微观状态数，只能依靠前述的递推公式 (13). 但是在特定的条件下，我们可以找到微观状态数的渐进表达式。下面我们将证明，当 $E \gg N^2$ 时（这里 E 依然是整数，具体的定义在后面给出），微观状态数的领头阶贡献由下式给出

$$\Omega = \frac{1}{N!}\sum_{\{E_{xi}\}}\prod_{i}^{d}\binom{E_{xi}+N-1}{N-1}, \tag{24}$$

其中一系列 E_{xi} 均为整数，定义在后面给出。尽管这个表达式只是微观状态数领头阶贡献，且收敛的速度并不快，但我们会发现这是一个很好的近似。我们要计算的是正则系综配分函数，即 (14), 是微观状态数与分布函数的卷积。我们知道，微观状态数是随 E 单调指数增加的函数，而分布函数是随 E 单调指数减小的函数。容易证明，求和中最重要的贡献来自于 $E \sim N^2$ 处的项；当 $E \gg N^2$ 时，分布函数被压的很低，因此微观状态数的计算即使相差较大，对最后的贡献依然是微乎其微的。所以使用上式的近似是非常安全的。

下面我们证明上式成立。在证明任意维成立的情况前，我们先讨论一维的特殊情况，这是因为其中已经包含了最重要的近似思路，很容易推广到任意维。我们首先考虑 N 个满足Maxwell 统计的粒子，要给这些粒子分配 E 份能量（当然这只是一种假想情况），问有多种分法。这个问题的答案显而易见，微观状态数是

$$\Omega_s = \binom{E+N-1}{N-1}. \tag{25}$$

下面对这些微观状态进行分类，分类的依据是计算有多少个粒子被激发。比如，只有一个粒子被激发的选取方式有 N 种, 两个粒子被激发有 $\binom{N}{2}E$, 一般地，有 n 个粒子被激发的选取方式有 E 的 $n-1$ 次多项式种。由此可见，对于 $E \gg N^2$ 的情形，主要的情形是 N 个粒子均被激发。因此我们可以只考虑这一种情况。在此之上，我们再考虑每个粒子处于的能级是否相同。比如，所有粒子处于相同能级的状态为 1 种 [即 $O(1)$]. 有 $N-1$ 个粒子处于相同能级的状态为 NE 种。类似的有 n 个粒子处于不同能级的状态为 E 的 $n-1$ 次多项式，即领头阶的贡献为所有粒子都被激发且能量各不相同。注意到以上的讨论我们反复的利用了 $E \gg N^2$ 的条件才有这样的结论。

下面我们考虑这 N 个粒子为玻色子的情形。玻色子与可分辨粒子的区别在于，既是两个粒子交换，玻色子也只给出一种微观状态，而可分辨粒子给出两种微观状态。对于 N 个粒子，以上不同分类的情形给出的玻色子与可分辨粒子之间相差的微观状态数不一样，这给我们建立两者之间的关系带来困难。例如，如果只有一个粒子被激发，对于可分辨粒子的微观状态数为 N，而对玻色子只对应一种状态，两者之间相差 N 倍。在两个粒子激发的情形下，可分辨粒子给出 $\binom{N}{2}E$，但是玻色子只给出 E 种状态，相差$\sim N^2$ 倍。总而言之，严格的倍数关系依赖于有几个粒子被激发以及这些粒子的能量是否相同。结果发现，领头的贡献仅来自于全部被激发且能量各不相同的情况。很容易证明，玻色子的微观状态数与可分辨粒子微观状态数的关系为

$$\Omega = \frac{1}{N!}\Omega_s. \tag{26}$$

于是我们就得到一维谐振子势阱中微观状态数的近似表达式

$$\Omega = \frac{1}{N!}\binom{E+N-1}{N-1}. \tag{27}$$

这个结果可以很容易的推广到任意维。对于任意维的各向异性谐振子势阱，设其每个方向的角频率为 $\omega_{x1}, \omega_{x2}, \ldots, \omega_{xd}$，为了将问题转化为排列组合问题，假设这些角频率之比可以化简为正整数之比（在一定的精度上总可以这样做），即

$$\omega_{x1} : \omega_{x2} : \ldots : \omega_{xd} = a_1 : a_2 : \ldots : a_d, \tag{28}$$

并假设这些角频率的最大公约数为 ω_0. 于是，谐振子的能谱可以写成

$$E\hbar\omega_0 = \sum_{i=1}^{d} E_{xi}\hbar\omega_{xi}. \tag{29}$$

这里把总能量写成了 $E\hbar\omega_0$，使得 E 和 E_{xi} 均为整数，满足

$$E = \sum_{i=1}^{d} E_{xi}a_i. \tag{30}$$

有了这些记号，(27) 可以推广到 d 维, 即

$$\Omega = \frac{1}{N!}\sum_{\{E_{xi}\}}\prod_{i}^{d}\binom{E_{xi}+N-1}{N-1}, \tag{31}$$

这里的求和需对所有满足 (30) 的能量组合求和。

对于有一些维度上有简并的情况，这个公式可以简化。例如对于我们关心的 3 维中 x,y 方向上简并的情况，其可以简化为

$$\Omega = \frac{1}{N!}\sum_{\{E_\perp,E_z\}}\binom{E_z+N-1}{N-1}\binom{E_\perp+2N-1}{2N-1}. \tag{32}$$

图3分别显示了一维 (左图) 和柱对称三维 (右图) 势阱下的微观状态数随能量的变化曲线, 能量较小时有多条曲线体现了显著的量子特性。可以看到近似计算的结果与严格的结果在 $E \gg N^2$ 的区间符合的很好，验证了我们的公式。这个近似可以看做是准经典近似，在此近似下，玻色子可以近似的看做满足Maxwell 分布，不过微观状态数要除以 $N!$. 这与传统教科书上的全同粒子在非简并条件 $e^{\alpha} \gg 1$ 下与可分辨粒子的对应是类似的。

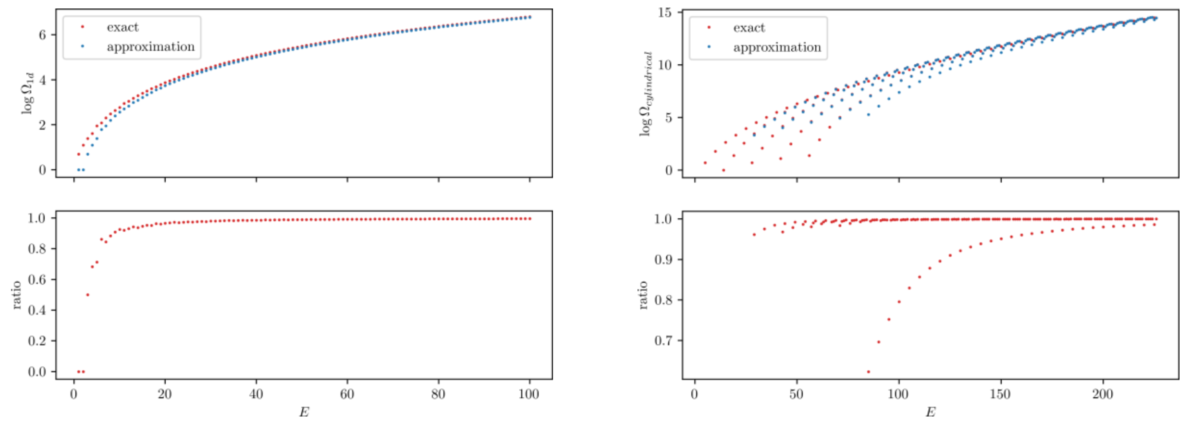

图 3: 不同维度下，微观状态数随着能量的变化曲线图。取 $N = 3$，左图为一维情形，左上图中红线和蓝线分别为严格结果和近似结果; 左下图为两者的比值。右图为三维轴对称情形的类似结果，取各向异性参数$\lambda = 14/5$. 右上图有五条计算曲线的说明：取横纵比为 5/14，不同整数的最小公倍数可能不同，比如E=5,10,15 ,... 是一条曲线，E=14,28,... 是另一条曲线。最终归于渐进的一条曲线了。

3.2.3 正则配分函数的联合近似及计算结果

上述的对微观状态数的近似在适用区间成立的很好。但其弊端是，在计算递推关系时，总要计算到最后体系的粒子数 N，因为对于任意的 N 总有一段范围不满足所提近似的条件。因此虽然极大的简化了计算，但是仍然有一定的缺陷。解决这一问题的办法就是这一节提出的联合近似。

我们提出的有限系统量子统计理论，在体系趋于无穷大时回到传统的量子统计理论。实际上，长久的经验告诉我们，并不需要体系实际达到真的无穷大，才能适用热力学极限的近似。为了既考虑有限尺寸效应，又恰当的利用 BG 理论简化计算，我们在计算递推公式时，先利用有限量子统计的递推公式，从 $n=1$ 计算到某一个特征大小 $n=n_0$，再利用 BG 理论的递推公式 (9) 从 n_0 计算到最后的体系大小 N. 这样的计算的合理性可以从递推公式 (11) 本身看出: 当 n_0 足够大的时候，由于 $dN_b \gg n_0$，$\sigma \to 0$，所以递推关系 (11) 退回到递推关系 (9). 最后的误差可以由调节 n_0 的大小来调控，且可以很容易的由比较 $Z_1(n\beta)$ 和 $\sum_{\{l_i=0\}}(1-nl_i\sigma\beta\hbar\omega)_i$ 的相对大小来估计误差的大小。

综合以上的方法，我们得到一个可以有效、误差可控的配分函数的联合近似计算方法：先从 $N = 1$ 开始、再逐步一增加 N 来计算微正则系综的微观状态数，其中当 $E \gg N^2$ 时可以利用近似的表达式。对于比较大的 N，当计算到 n_0 后，利用 (14) 计算正则配分函数，再利用 BG 理论的递推公式 (9) 计算到 N 的配分函数。如此联合循环计算出正则系综的配分函数，以便计算各种热力学量。

图4显示了我们计算的三维轴对称势阱下玻色气体的内能曲线。蓝线为有限体统计理论结果，参数取为$N = 10^2$, $N_b = \Lambda N_s = 10^4$. 点线为实验数据，粒子数约为 $10^4 \sim 10^5$. 从图中可以看到，我们的结果与实验的结果更加的符合，体现了有限体尺寸效应的修正。图5显示了我们计算的三维轴对称势阱下玻色气体的热容曲线。 我们的结果良好的解释了有限体系下相变温度相比于热力学极限略小的现象，但与内能的曲线很贴近。更好的解释实验结果还需要考虑相互作用对能谱的修正，这超出了这篇报告的内容。

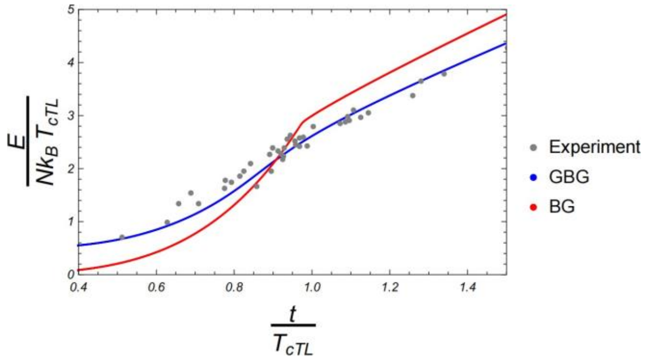

图 4: 不同模型/实验下，单粒子约化内能随着约化温度的变化曲线图。红线为热力学极限结果，蓝线为我们的有限体统计理论结果，实验数据取自 [11].

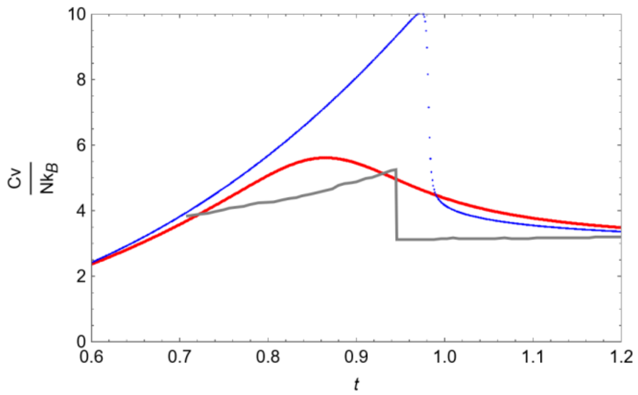

图 5: 不同模型/实验下，单粒子约化热容随着约化温度的变化曲线图。红线为我们的有限体统计理论结果，灰线为实验曲线，数据取自 [11], 蓝线为热力学极限结果.

4 BEC 的维度渡越

维度是凝聚态物理中的重要参数。由于系统的态密度高度依赖于相空间的自由度，很多重要的现象都取 决于维度。BEC 就是其中很重要的例子之一，BEC 在不同维度下都被在理论上 [7, 14, 15, 16, 17] 和实验上 [11, 18, 19, 20, 21] 很细致的研究过。介于不同维度之间的状态也被理论上考虑过 [13, 22]，并且实验上几乎没有球对称的势阱。常见的例子是轴对称的，其中各向异性参数$\lambda = \omega_z/\omega_\perp$ 一般取在 $1/10 \sim 10$, 例如在[11] 中$\lambda = 8$, 在 [20] 中取 $\lambda = 0.189$. 因此，计算BEC 中的各物理量随维度渡越的连续变化行为具有重要的物理意义，同时也可以检验我们理论的正确性。

由第3.1节得到的巨势，我们本节计算一些热力学量，尤其是探索维度渡越特性。注意到逸度由粒子数守恒条件确定，总粒子数可以通过巨势计算 $N=z\partial\Psi/\partial z$. 当 $z=1, N_0/N=0$ 时，给出 BEC 相变温度 T_c

$$N=\frac{1}{(x_\perp^c)^2 x_z^c}g_3(e^{-x_\perp^c-x_z^c/2})+\frac{2}{x_\perp^c x_z^c}g_2(e^{-x_\perp^c/2-x_z^c/2})+\frac{1}{(x_\perp^c)^2}g_2(e^{-x_\perp^c})+\frac{2}{x_\perp^c}g_1(e^{-x_\perp^c/2})+\frac{1}{x_z^c}g_1(e^{-x_z^c/2}). \tag{33}$$

通过取不同的极限过程，上式很容易得到不同维度下相变温度的表达式。球对称势对应于 3 维的结果：$T_c^{TL}=\hbar\tilde{\omega}[N/\zeta(3)]^{1/3}/k_B$, $\lambda\gg 1$ 对应 2 维的结果 $T_c^{TL}(\lambda\to\infty)=\hbar\omega_\perp(N/\zeta(2))^{1/2}/k_B$ 而在相反的极限下给出 1 维的结果 $T_c^{1D}(\lambda\to 0)=\hbar\omega_z N/k_B\mathrm{ProductLog}(2N)$. 注意到一维的相变是一个赝相变，因为 T_c^{1D} 在热力学极限下趋于 0.
图6给出了相变温度随着势阱形状连续变化的曲线。结果表明，随着凝聚体向低维的渡越，相变温度呈现平滑的下降。

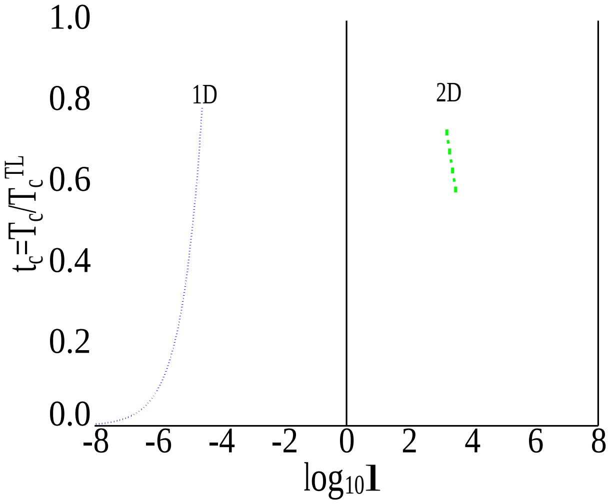

图 6: 相变温度的维度跨越：以三维球对称势阱中相变温度为单位的相变温度随着势阱形状 (用因子 λ 刻画) 连续变化的曲线图（红色实线），绿线和蓝线分别是二维和一维的渐进行为。粒子数取 10^5.

热容与熵的温度依赖和维度渡越曲很容易计算，它们的跨越行为在图7和图8中显示。我们可以看到，从三维到二维渡越时，热容在相变温度处一直有一个峰。这个峰的高度随维度降低而减少，但是的确始终存在。这体现了在二维和三维中都存在BEC，且这一现象在维度的渡越过程始终存在。与之相反，在从三维到一维的渡越中，热容的峰从有到无，呈现了平滑的过渡，相变现象从有到无。热容的高温极限也符合预期，在不同维度下单粒子约化热容数值分别趋于预期的 3,2,1.

熵的渡越行为也很有特点。从三维到二维的渡越中熵始终是 t,λ 的单调递增函数，随 λ 的递增体现了低维涨落更大，使体系混乱度更大的特点。而从三维到一维的渡越更具特点，其随λ 的变化先减后增，这体现了低维下涨落效应与自由度减少两种效应对熵变化的竞争。

粒子数涨落是 BEC 中一个重要的物理量，我们还考虑了粒子数涨落的维度和温度依赖的行为。在正常相中，我们知道热力学极限下相对涨落趋于 0. 在相变温度以下，由于基态占据数与总粒子数可以比拟，涨落成为一个宏观量。涨落在不同系综中的结果并不一致。因为巨正则系综系统本身联系着一个可以交换粒子的热源而正则系综中系统的粒子数守恒，故而不能在正则系综下计算涨落。有文献指出[23]，在巨正则系综中计算涨落的结果由于数学上的问题会给出一个非物理的结果。为了得到与实验可以比较的结果，需要用“Maxwell’s demon”系综 [24]. 利用这个系统，我们可以计算粒子数的相对涨落。其维度和温度依赖的行为如图9所示。可以看到，在从三维到二维或一维的渡越中，粒子数涨落都增长的相当多，这是一个符合物理直觉的结果。但其重要性在于，尽管一维没有 BEC，但是粒子数涨落的行为却非常的类似于 BEC，这可以被看成是一个赝相变。我

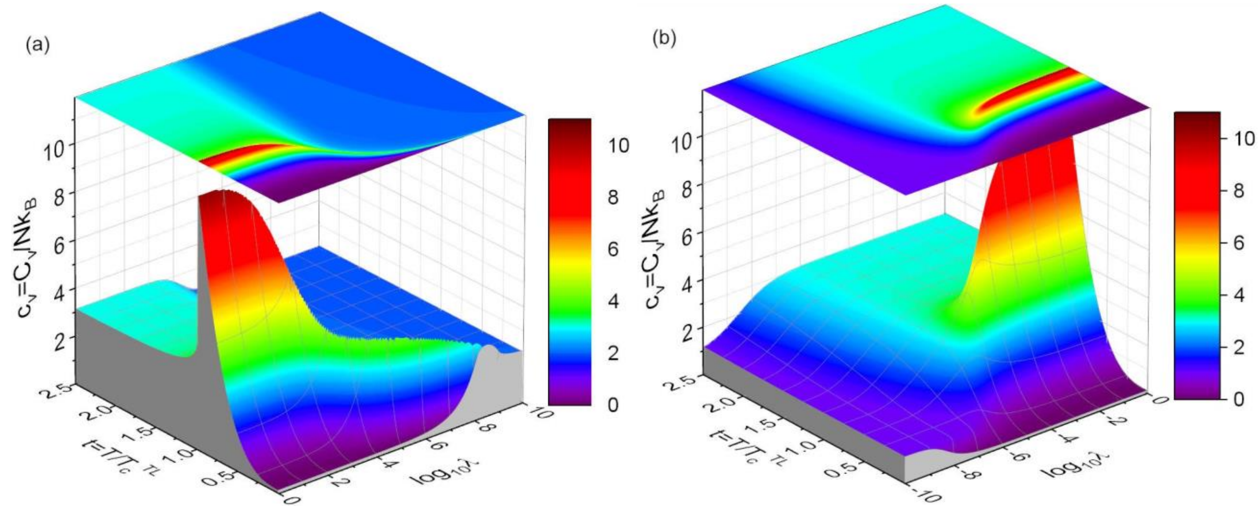

图 7: 单粒子约化热容从三 (3D) 维到低维的转变，x 轴为约化温度，y 轴为各向异性参数，粒子数取 $N = 5 \times 10^5$. 左图为 3D 到 2D，右图为 3D 到 1D.

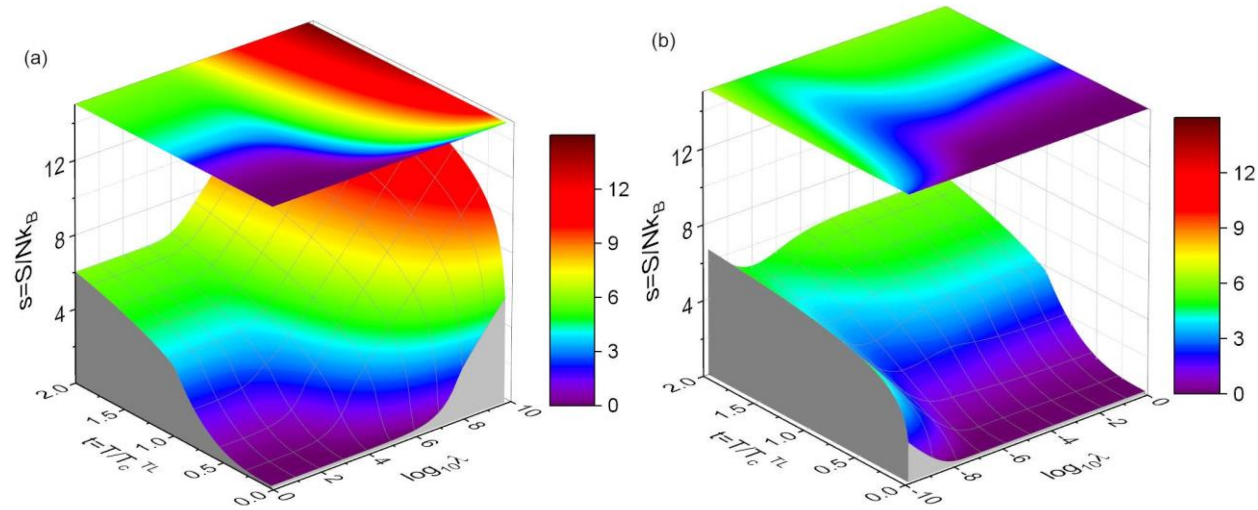

图 8: 单粒子约化熵从三维到低维的转变，参数设置与图7相同。

们还将计算结果与实验数据 [20] 相比较，我们的结果很好的解释了相变温度比热力学极限偏小以及涨落比热力学极限结果偏大的现象。而想要更加好的解释实验结果还需要引入相互作用，这需要我们超越 Thomas-Fermi 近似，同时对基态求解 Gross-Pitaevskii 方程并对激发态求解 Bogliubov-de Gennes 方程，我们将在未来的工作中研究这一问题。

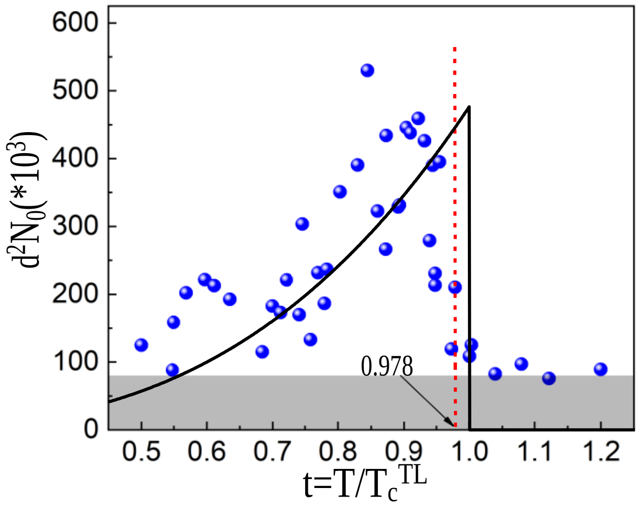

图 9: 理论计算的基态涨落 $\delta^2 N_0$ 与实验数据的比较。取粒子数为 5×10^5，$\lambda=0.189$. 红色虚线为理论计算结果，黑色线为热力学极限下 3D 计算的结果。蓝点为实验结果 [20]，灰色带为实验的本底误差。几何效应和有限尺寸效应给出更低的相变温度 ($t_c=0.978$) 以及更大的涨落。

5 总结

有限体系的量子统计以及在非热力学极限下是否有相变是一个基本的物理问题，我们基于第一性原理给出了推广的密度矩阵，并给出了具体的计算方法。这样的方法是普适的，但是由于没有热力学极限条件下可以利用的近似，严格的计算是几乎不可能的。为此我们在特定的问题（任意维各向异性谐振子势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚）中，提出了联合近似方法，给出了简化的计算途径，并付诸实施。计算结果与实验比较基本符合。进一步我们还考虑了 BEC 在不同维度之间渡越的行为，计算了各种物理量对于维度的依赖，发现了一些有趣的现象。

本工作有力的说明了我们理论的正确性以及有限尺寸效应可以很好的解释热力学量的传统理论与实验之间的偏差。由于我们的理论超越了Boltzmann-Gibbs 统计范式，因而在理论上有可能超越Lee-Yang 相变理论的限制，在有限体系中实现非连续相变，这是我们工作的重要目标。

参考文献

[1] Terrell L Hill. Thermodynamics of small systems. *The Journal of Chemical Physics*, 36(12):3182–3197, 1962.

[2] Constantino Tsallis. Introduction to nonextensive statistical mechanics: approaching a complex world. *Springer* 1(1):2–1, 2009.

[3] Michele Campisi, Fei Zhan, and Peter Hänggi. On the origin of power laws in equilibrium. *EPL (Europhysics Letters)*, 99(6):60004, 2012.

[4] Dieter HE Gross. *Microcanonical thermodynamics: phase transitions in" small" systems*. World Scientific, 2001.

[5] Martin Wilkens and Christoph Weiss. Particle number fluctuations in an ideal bose gas. *Journal of Modern*

Optics, 44(10):1801–1814, 1997.

[6] Patrick Navez, Dmitri Bitouk, Mariusz Gajda, Zbigniew Idziaszek, and Kazimierz Rzażewski. Fourth statistical ensemble for the bose-einstein condensate. *Physical review letters*, 79(10):1789, 1997.

[7] Konstantin Glaum, Hagen Kleinert, and Axel Pelster. Condensation of ideal bose gas confined in a box within a canonical ensemble. *Phys. Rev. A*, 76:063604, Dec 2007.

[8] Jian-hui Wang and Yong-li Ma. Thermodynamics and finite-size scaling of homogeneous weakly interacting bose gases within an exact canonical statistics. *Physical Review A*, 79(3):033604, 2009.

[9] Zbigniew Idziaszek, M Gajda, K Rzążewski, et al. Fluctuations of a weakly interacting bose-einstein condensate. *EPL (Europhysics Letters)*, 86(1):10002, 2009.

[10] Richard Phillips Feynman and FL Vernon Jr. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of physics*, 281(1-2):547–607, 2000.

[11] J. R. Ensher, D. S. Jin, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Bose-einstein condensation in a dilute gas: Measurement of energy and ground-state occupation. *Phys. Rev. Lett.*, 77:4984–4987, Dec 1996.

[12] Chengtai Tan, Qi Wang, Xuerui Du, and Yongli Ma. Dimensional crossover of bose – einstein condensation of atomic gases in anisotropic harmonic traps. *Annals of Physics*, 440:168843, 2022.

[13] N. J. van Druten and Wolfgang Ketterle. Two-step condensation of the ideal bose gas in highly anisotropic traps. *Phys. Rev. Lett.*, 79:549–552, Jul 1997.

[14] Wolfgang Ketterle and N. J. van Druten. Bose-einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. *Phys. Rev. A*, 54:656–660, Jul 1996.

[15] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii, and Sandro Stringari. Theory of bose-einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, 71:463–512, Apr 1999.

[16] Christopher J Pethick and Henrik Smith. *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2008.

[17] Klaus Kirsten and David J. Toms. Bose-einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator confining potential trap. *Phys. Rev. A*, 54:4188–4203, Nov 1996.

[18] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle. Realization of bose-einstein condensates in lower dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 87:130402, Sep 2001.

[19] R. F. Shiozaki, G. D. Telles, P. Castilho, F. J. Poveda-Cuevas, S. R. Muniz, G. Roati, V. Romero-Rochin, and V. S. Bagnato. Measuring the heat capacity in a bose-einstein condensation using global variables. *Phys. Rev. A*, 90:043640, Oct 2014.

[20] M. A. Kristensen, M. B. Christensen, M. Gajdacz, M. Iglicki, K. Pawłowski, C. Klempt, J. F. Sherson, K. Rzążewski, A. J. Hilliard, and J. J. Arlt. Observation of atom number fluctuations in a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 122:163601, Apr 2019.

[21] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon. Quasipure bose-einstein condensate immersed in a fermi sea. *Phys. Rev. Lett.*, 87:080403, Aug 2001.

[22] Tor Haugset, H˚arek Haugerud, and Jens O. Andersen. Bose-einstein condensation in anisotropic harmonic traps. *Phys. Rev. A*, 55:2922–2929, Apr 1997.

[23] Robert M Ziff, George E Uhlenbeck, and Mark Kac. The ideal bose-einstein gas, revisited. *Physics Reports*, 32(4):169–248, 1977.

[24] Patrick Navez, Dmitri Bitouk, Mariusz Gajda, Zbigniew Idziaszek, and Kazimierz Rzążewski. Fourth statistical ensemble for the bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 79:1789–1792, Sep 1997.

[25] WJ Mullin. Bose-einstein condensation in a harmonic potential. *Journal of Low Temperature Physics*, 106(5):615–641, 1997.

[26] Christoph Weiss and Martin Wilkens. Particle number counting statistics in ideal bose gases. *Opt. Express*, 1(10):272–283, Nov 1997.

[27] Haydar Uncu, Devrim Tarhan, Ersan Demiralp, and Özgür E. Müstecaplıoğlu. Bose-einstein condensate in a harmonic trap decorated with dirac δ functions. *Phys. Rev. A*, 76:013618, Jul 2007.

[28] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov. Bose-einstein condensation in quasi-2d trapped gases. *Phys. Rev. Lett.*, 84:2551–2555, Mar 2000.

[29] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven. Regimes of quantum degeneracy in trapped 1d gases. *Phys. Rev. Lett.*, 85:3745–3749, Oct 2000.

[30] K. K. Witkowski and T. K. Kopeć. Dimensional Crossover in the Bose-Einstein Condensation Confined to Anisotropic Three-Dimensional Lattices. *Journal of Low Temperature Physics*, 201(3-4):340–372, July 2020.

[31] Patrick Navez, Dmitri Bitouk, Mariusz Gajda, Zbigniew Idziaszek, and Kazimierz Rzażewski. Fourth statistical ensemble for the bose-einstein condensate. *Physical review letters*, 79(10):1789, 1997.

[32] Yong-li Ma and Siu-Tat Chui. Bose-einstein condensation temperature of a trapped interacting bose-fermi gas mixture. *Phys. Rev. A*, 66:053611, Nov 2002.

[33] Yong-li Ma and Siu-Tat Chui. Analytical expressions for the hydrodynamic excitation spectrum of bose-einstein condensates in axially anisotropic traps. *Phys. Rev. A*, 65:053610, May 2002.

[34] Bambi Hu, Guoxiang Huang, and Yong-li Ma. Analytical solutions of the bogoliubov–de gennes equations for excitations of a trapped bose-einstein-condensed gas. *Phys. Rev. A*, 69:063608, Jun 2004.