

三维简谐势阱中玻色-爱因斯坦凝聚的边界效应*

袁都奇†

(宝鸡文理学院物理与信息技术系, 宝鸡 721016)

(2014年1月5日收到; 2014年5月17日收到修改稿)

在定义特征长度的基础上, 应用 Euler–MacLaurin 公式, 研究了理想玻色气体在三维简谐势阱中玻色-爱因斯坦凝聚的边界效应. 结果表明: 粒子的凝聚分数由于有限尺度和有限粒子数效应而减小, 修正的凝聚分数和凝聚温度由于边界效应存在一个极大值, 选择优化的最佳势阱参数, 可以有效提高凝聚分数和凝聚温度; 热容量的跃变存在边界效应和粒子数效应, 选择合理的势阱参数时, 热容量的跃变存在一个极小值. 导出了简谐势阱中有限理想玻色气体的状态方程, 揭示了压强的各向异性(或各向同性)取决于简谐势频率的各向异性(或各向同性).

关键词: 边界效应, 理想玻色气体, 玻色-爱因斯坦凝聚, 简谐势阱

PACS: 05.30.-d, 05.30.Jp, 67.85.Jk

DOI: 10.7498/aps.63.170501

1 引言

自从碱金属气体的玻色-爱因斯坦凝聚实现^[1]以来, 对于理想玻色气体在满足热力学极限条件 ($N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{常数}$) 下的玻色-爱因斯坦凝聚性质, 如凝聚分数, 凝聚温度, 基态占有数, 热容量, 态密度, 熵体积与状态方程等^[2–6], 已经进行了全面、深入研究. 然而在热力学极限条件下得到的结论, 对于有限尺度和有限粒子数系统并不成立.

近年来, 人们开展了对于有限尺度和有限粒子数系统热力学性质的研究^[7–20], 例如, 文献^[7, 8]研究了经典理想气体在密闭容器内的边界效应和 Casimirlike 尺度效应; 文献^[9, 10]研究了量子理想气体在二维密闭空间和三维管中的边界效应和连通效应; 文献^[12]在考虑有限尺度效应的情况下, 研究了相对论 π 介子气体的玻色-爱因斯坦凝聚; 文献^[18]研究了 D 维密闭容器内理想费米气体的有限尺度效应; 文献^[19, 20]研究简谐势阱中理想玻色气体有效面积和有效宽度; 文献^[3]及^[21–23]

研究了简谐势阱中玻色爱因斯坦凝聚的有限粒子数效应. 这些研究得到了不同于热力学极限条件下的一系列重要结论, 其结果能够更好的反映对有限系统的实际热力学性质, 使得有限系统的研究成为热力学统计物理一个新的热点领域.

利用简谐势阱囚禁的超冷量子气体, 不论在理论, 实验还是应用研究方面, 都具有重要意义. 文献^[24]指出, 简谐势阱中超冷量子气体的热力学极限条件可以具体为 $N \rightarrow \infty, \omega_{h0} \rightarrow 0, N\omega_{h0}^3 = \text{常数}$, 其中 $\omega_{h0} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$ 为谐振子频率的几何平均, 由于目前囚禁气体实验中的最大原子数目约为 10^7 个原子, 还不能看做在真正意义上达到宏观量级, 且简谐势的圆频率通常可达 $10^2\text{—}10^3\text{s}^{-1}$, 因此势阱中超冷量子气体的热力学极限不可能精确实现, 被囚禁的量子气体属于有限空间范围的有限粒子数系统, 由此系统将会产生许多重要的物理效应和现象, 所以对其有限尺度效应和有限粒子数效应的研究尤其具有重要的理论和应用价值. 以前大多数关于有限尺度效应的研究, 是以密闭在有限容器内的系统为研究对象. 由于囚禁于势阱中的量子气体系统没有明确的体积参量, 因而对其有限尺度

* 陕西省自然科学计划项目(批准号: 2012JM1006)和宝鸡文理学院重点科研项目(批准号: ZK11045)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: yuanduqi@163.com

效应的研究文献尚不多见, 仅有不多的文献 [3] 及 [21—23] 对其有限粒子数效应进行了研究. 此外, 简谐势阱对于气体的约束与密闭容器对于气体的约束其边界有着很大的不同, 不同的边界将会对系统的性质产生不同的影响, 而简谐势阱边界对于玻色-爱因斯坦凝聚的影响, 尚未见到文献对其进行研究.

本文研究有限理想玻色气体系统在三维简谐势阱中玻色-爱因斯坦凝聚的边界效应. 首先求出考虑有限尺度和有限粒子数效应时系统的巨热力学势, 给出热力学量对热力学极限的修正表达式. 其次, 研究凝聚分数、凝聚温度、热容量跃变的边界效应, 揭示边界效应对玻色-爱因斯坦凝聚的影响, 寻求上述热力学量的极值及其对应的最佳势阱参数, 为势阱参数的优化与选取提供理论依据; 同时, 求出简谐势阱中有限理想玻色气体系统的状态方程, 揭示其压强张量的基本属性. 最后给出本文的主要研究结论.

2 热力学量的修正表达式

考虑一个囚禁于三维简谐势阱中的理想玻色气体系统. 粒子的三维简谐势为

$$V_{\text{ext}}(r) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (1)$$

式中 m 是粒子的质量, $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ 是沿坐标 x, y, z 方向的简谐势频率. 单粒子的哈密顿为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{ext}}, \quad (2)$$

式中 p 为粒子的动量, $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, 粒子的能级可以表示为

$$\begin{aligned} \varepsilon(n_x, n_y, n_z) &= \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z) + \varepsilon_0, \end{aligned} \quad (3)$$

式中 \hbar 为约化普朗克常数, $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$, 为量子数, ε_0 为零点能, $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar(\omega_x + \omega_y + \omega_z)$. 根据量纲分析, 可定义势阱中坐标 i 方向的特征长度为

$$L_i = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_i}}, \quad i = x, y, z, \quad (4)$$

则粒子的能级可以表示为

$$\varepsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{n_x}{L_x^2} + \frac{n_y}{L_y^2} + \frac{n_z}{L_z^2} \right) + \varepsilon_0. \quad (5)$$

利用 (5) 式, 简谐势阱中理想玻色气体的巨热力学势可以写为

$$\begin{aligned} q &= - \sum_s \ln[1 - z \exp(-\beta\varepsilon)] \\ &= - \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} \ln \left\{ 1 - z' \exp \left[- \frac{\beta\hbar^2}{m} \left(\frac{n_x}{L_x^2} + \frac{n_y}{L_y^2} + \frac{n_z}{L_z^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

式中 $\beta = 1/kT$, k 是玻尔兹曼常数, T 是热力学温度, $z = \exp(\beta\mu)$ 是逸度, μ 为化学势, $z' = z \exp(-\beta\varepsilon_0) = \exp[\beta(\mu - \varepsilon_0)]$ 为等效逸度, 文献 [3] 的研究表明 $0 \leq z' < 1$. 如果用积分代替求和, 利用 (6) 式很容易求得热力学极限条件下 ($N \rightarrow \infty, \omega_{h0} \rightarrow 0, N\omega_{h0}^3 = \text{常数}$) 的巨热力学势, 然而文献 [18] 已经指出, 这种近似对于小尺度系统将会引起明显的误差, 对小尺度系统, 解析求解上式的最好方法是利用 Euler-MacLaurin 近似公式,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} F(n) &= \int_0^{\infty} F(n) dn + \frac{1}{2}F(0) - \frac{1}{12}F'(0) \\ &\quad + \frac{1}{720}F'''(0) + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

利用 (7) 式, 从 (6) 式可以求得一级近似下, 考虑有限尺度效应时系统的巨热力学势为

$$q = q_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega_{h0}} \right)^3 \left[g_4(z') + \frac{1}{2}g_3(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2} \right], \quad (8)$$

式中

$$\tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}}, \quad (9)$$

$$\frac{1}{\tilde{L}^2} = \frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}, \quad (10)$$

$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$ 为热波长,

$$g_n(z') = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{z'^{-1}e^x - 1} dx,$$

是玻色积分 [25].

应用 (8) 式可以求得, 考虑有限尺度效应时系统粒子数的统计表达式为

$$N = z' \left(\frac{\partial q}{\partial z'} \right)_{\beta, L_i}$$

$$= \begin{cases} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_{h0}} \right)^3 \left[g_3(z') + \frac{1}{2} g_2(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2} \right], & T > T_c, \\ N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega_{h0}} \right)^3 \left[\zeta(3) + \frac{1}{2} \zeta(2) \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2} \right], & T \leq T_c, \end{cases} \quad (11)$$

$$= \begin{cases} NkT \frac{3g_4(z') + g_3(z') \tilde{\lambda}^2 / \tilde{L}^2}{g_3(z') + g_2(z') \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}, & T > T_c, \\ (N - N_0)kT \frac{3\zeta(4) + \zeta(3) \tilde{\lambda}^2 / \tilde{L}^2}{\zeta(3) + \zeta(2) \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}, & T \leq T_c. \end{cases} \quad (15)$$

式中 $\zeta(n)$ 是 Riemann zeta 函数, N_0 是基态的占有数. 式中含有 $\tilde{\lambda}^2 / \tilde{L}^2$ 的项为有限尺度效应引起的修正项, 若系统满足 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 时, (11) 式将过渡到满足热力学极限条件 ($N \rightarrow \infty, \omega_{h0} \rightarrow 0, N\omega_{h0}^3 = \text{常数}$) 时所得的结果^[24]. 应用 (11) 式以及 (4), (9), (10) 式, 可以将考虑有限尺度效应时理想玻色气体在三维简谐势阱中玻色-爱因斯坦凝聚的粒子数分数表示为^[24]

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^3 - a \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_0} \right)^2, \quad (12)$$

式中

$$a = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \frac{\omega_i}{\omega_{h0}} \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3},$$

$$T_0 = \frac{\hbar\omega_{h0}}{k} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}.$$

对大粒子数系统, $a \rightarrow 0$, 由 (12) 式可知, 此时的 T_0 就是凝聚温度. 为了研究凝聚的粒子数分数以及凝聚温度的边界效应, 我们引入势阱参数 b 和 d , 令 $\omega_y = b\omega_x, \omega_z = d\omega_y$, 则

$$a = \frac{1}{2} \frac{1+b+d}{(bd)^{1/3}} \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3}, \quad (13)$$

对于球对称势阱,

$$a = \frac{3}{2} \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3}.$$

在凝聚开始的时刻, 可取 $N_0 \approx 0$ 和 $z' \approx 1$, 应用 (11) 式以及参数 a 的表达式, 可以将修正的凝聚温度表示为

$$T_c = \frac{\hbar\omega_x}{k} \left(\frac{N}{\zeta(3)} bd \right)^{1/3} \times \left[1 - \frac{1}{6} \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)^{2/3}} \frac{1+b+d}{(Nbd)^{1/3}} \right]. \quad (14)$$

利用 (8) 式和 (11) 式, 可以求得系统内能的修正表达式为

$$E = - \left(\frac{\partial q}{\partial \beta} \right)_{z, L_i}$$

对于有限尺度系统, 压强不再是一个只依赖于密度和温度的强度变量, 而是一个张量^[7,18]. 如果三维简谐势阱中第 i 个坐标与气体中的第 i 个坐标的方向相一致, 则压强张量可以对角化, 且 p_{ii} 表示与坐标 i 垂直面元上的压强. 利用 (8) 式, 压强张量可以表示为

$$p_{ii} = \frac{1}{\beta} \frac{L_i}{V} \left(\frac{\partial q}{\partial L_i} \right)_{z, \beta, L_{j \neq i}}$$

$$= \begin{cases} \frac{NkT}{V} \frac{g_4(z') + g_3(z')(1 - \tilde{L}^2/L_i^2) \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}{g_3(z') + g_2(z') \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}, & T > T_c, \\ \frac{(N - N_0)kT}{V} \frac{\zeta(4) + \zeta(3)(1 - \tilde{L}^2/L_i^2) \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}{\zeta(3) + \zeta(2) \tilde{\lambda}^2 / 2\tilde{L}^2}, & T \leq T_c. \end{cases} \quad (16)$$

上式就是考虑有限尺度效应时, 三维简谐势阱中理想玻色气体的状态方程. 式中的 V 是系统的等效体积,

$$V = \frac{L_x L_y L_z}{2}. \quad (17)$$

(16) 式反映了小尺度非对称势阱中压强的各向异性特征. 当系统满足 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 时, 压强不再具有各向异性的特征, 此时状态方程 (16) 式可以表示为

$$p = \begin{cases} \frac{NkT}{V} \frac{g_4(z')}{g_3(z')}, & T > T_c, \\ \frac{(N - N_0)kT}{V} \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}, & T \leq T_c. \end{cases} \quad (18)$$

(18) 式与文献 [6] 的结果相一致, 是热力学极限条件下三维简谐势阱中理想玻色气体的状态方程.

利用 (15) 和 (16) 式, 可以求得三维简谐势阱中理想玻色气体的内能和压强张量之间满足的关系为

$$E = V \sum_{i=x,y,z} p_{ii} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega_{h0}} \right)^{3/2} \sum_{i=x,y,z} p_{ii}. \quad (19)$$

应用 (15) 式, 求得系统热容量的表达式为

$$\frac{C_{L_i}}{Nk} = \frac{1}{Nk} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{z', L_i} + \left(\frac{\partial E}{\partial z'} \right)_{T, L_i} \left(\frac{\partial z'}{\partial T} \right)_{L_i} \right]$$

$$= \begin{cases} \frac{12g_4(z') + 3g_3(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2} - \frac{(3g_3(z') + g_2(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2})^2}{g_2(z') + g_1(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{2\tilde{L}^2}}}{g_3(z') + g_2(z') \frac{\tilde{\lambda}^2}{2\tilde{L}^2}}, & T > T_c, \\ \frac{12\zeta(4) + 3\zeta(3) \frac{\tilde{\lambda}^2}{\tilde{L}^2}}{\zeta(3) + \zeta(2) \frac{\tilde{\lambda}^2}{2\tilde{L}^2}} \left[\left(\frac{T}{T_0} \right)^3 + a \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 \right], & T \leq T_c. \end{cases} \quad (20)$$

(11)、(12)、(14)、(15)、(16) 以及 (20) 式是考虑有限尺度效应和有限粒子数效应时, 三维简谐势阱中理想玻色气体系统热力学量对热力学极限情况的修正表达式, 是本文的主要结果之一. 当满足大尺度条件 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 以及大粒子数条件 ($a \rightarrow 0$) 时, 上述结果均与热力学极限条件下的结论相一致.

3 热力学量的边界效应

本节根据粒子数的凝聚分数, 临界温度, 压强张量以及热容量的修正表达式, 进一步研究系统热力学量的边界效应.

3.1 凝聚分数的粒子数效应及边界效应

将 (12) 式与热力学极限下的凝聚分数 [24,26] 比较可知, 由于有限粒子数效应和有限尺度效应, 粒子的凝聚分数减小. 结合 (12) 和 (13) 式可知, 对有限粒子数系统, 势阱条件不变, 粒子数减少时, 参数 a 增大, 其凝聚分数将减小, 这与实验 [27] 和文献 [3,28] 结论相一致. 图 1 表示了凝聚分数的有限粒子数效应. 由 (12) 和 (13) 式可知, 凝聚分数依赖于势阱的谐振势频率参数, 而势阱的边界形状依赖于

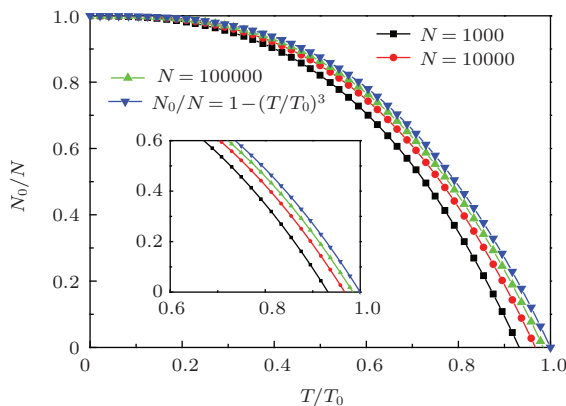


图 1 简谐势的圆频率为 $\omega_x = \omega_y = \omega_z = 10^3 \text{ s}^{-1}$ 时, 满足热力学极限及 $N = 10^3$, $N = 10^4$, $N = 10^5$ 时凝聚分数 N_0/N 与约化温度 T/T_0 曲线 (凝聚分数随粒子数减少而减小)

其谐振势的频率 [29,30], 所以凝聚分数随势阱参数的变化, 就是凝聚分数的边界效应. 当粒子数 N 和势阱参数 b 给定时, 由 (13) 式求得, $d = (b + 1)/2$ 时, 参数 a 存在一个极小值, 这时凝聚分数随约化温度的变化取极大值. 图 2 表示了凝聚分数的边界效应.

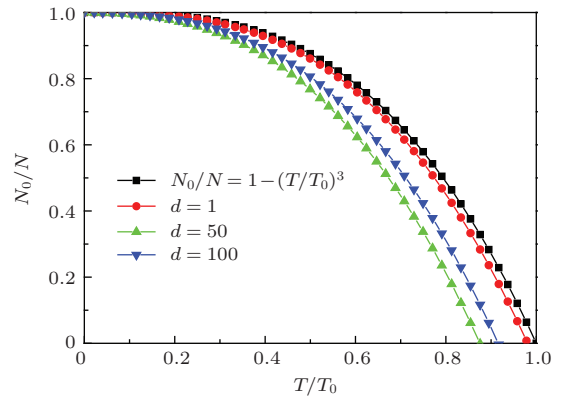


图 2 势阱参数 $b = 1$, $d = 1, d = 50, d = 100$ 时, 凝聚分数的边界效应 ($N_0/N = 1 - (T/T_0)^3$ 是热力学极限, 若 $b = 1$, 则 $d = 1$ 时, 参数 a 存在极小值, 凝聚分数随约化温度变化有极大值)

3.2 凝聚温度的边界效应

由 (14) 式可知, 凝聚温度依赖于势阱参数 b 和 d , 所以, 凝聚温度存在边界效应. 在给定粒子数 N , 简谐势频率 ω_x 及势阱参数 b 的条件下, 当势阱参数 $d = \left(\frac{2}{\zeta(2)} \right)^{3/2} \zeta(3)(Nb)^{1/2}$ 时, 凝聚温度存在极大值. 图 3 和图 4 反映了不同条件下凝聚温度的边界效应. 可以看出, 适当选择势阱参数可以有效提高凝聚温度.

3.3 压强张量的边界效应

结合 (16) 式以及 (4) 式可知, 若特征长度 $L_i \neq L_j$ 时, 即 $\omega_i \neq \omega_j$ 则 $p_{ii} \neq p_{jj}$, 若 $L_i = L_j$, 即 $\omega_i = \omega_j$, 则 $p_{ii} = p_{jj} = p$. 这清楚的表明, 简谐

势阱中量子气体压强的各向异性(或各向同性)取决于简谐势频率的各向异性(或各向同性).

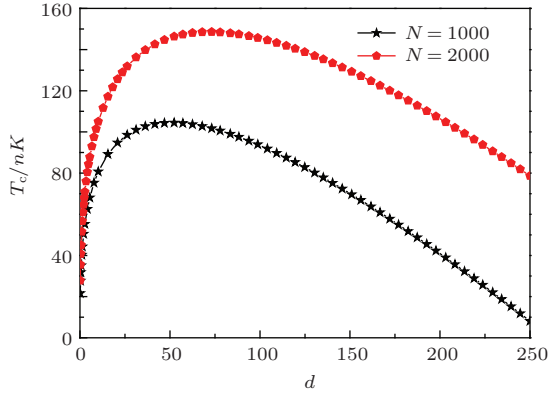


图3 $\omega_x = 600\text{s}^{-1}$, 势阱参数 $b = 1$, 粒子数分别为 $N_1 = 2 \times 10^3, N_2 = 10^3$ 时, 凝聚温度的边界效应

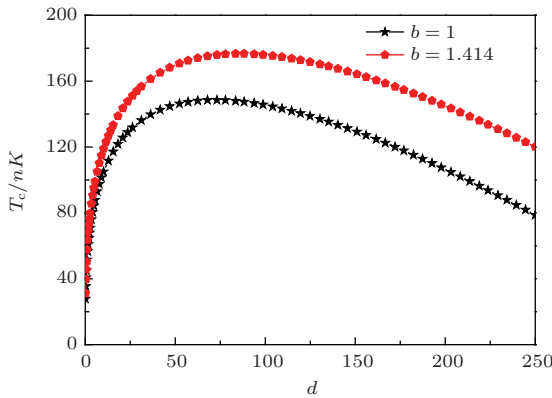


图4 粒子数 $N = 2 \times 10^3, \omega_x = 600\text{s}^{-1}$, 势阱参数分别为 $b = 1$ 以及 $b = \sqrt{2}$ 时, 凝聚温度的边界效应

3.4 热容量跃变的边界效应

按照(20)式及(13)式, 对于满足大尺度条件 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 以及大粒子数条件 ($a \rightarrow 0$) 的系统, 在临界点处的热容量是不连续的. 热容量的跃变与文献[3]的结论相一致,

$$\frac{\Delta C_{L_i}}{Nk} = 9 \frac{\zeta(3)}{\zeta(2)}. \quad (21)$$

可见, 大尺度和大粒子数系统的热容量跃变既不依赖系统的边界和形状, 也与系统的粒子数无关. 对于满足大尺度条件 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 的有限粒子数系统, 在临界点处若取 $T/T_0 \approx 1$, 由(20)式可以求得, 其热容量跃变为

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C_{L_i}}{Nk} &= 9 \frac{\zeta(3)}{\zeta(2)} + 6 \frac{\zeta(2)\zeta(4)}{[\zeta(3)]^2} \left[\frac{\zeta(3)}{N} \right]^{1/3} \\ &\times \frac{1+b+d}{(bd)^{1/3}}. \end{aligned} \quad (22)$$

显然, 此时的热容量跃变与系统的边界和形状有关, 也与系统的粒子数有关. 给定势阱参数 b 和粒子数 N , 当 $d = (b+1)/2$ 时, 热容量的跃变存在一个极小值. 而给定势阱参数时, 随着 N 值增加, $\Delta C_{L_i}/Nk$ 单调减小. 对于小尺度和有限粒子数系统, 在临界点处若取 $T/T_0 \approx 1$, 由于临界点处 $z \approx 1, g_1(z') = \zeta(1) \rightarrow \infty$, 由(20)式可以求得系统热容量的跃变为

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta C_{L_i}}{Nk} \\ &= a \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \frac{12\zeta(4) + 3\zeta(3)\tilde{\lambda}^2/\tilde{L}^2}{\zeta(3) + \zeta(2)\tilde{\lambda}^2/2\tilde{L}^2} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1+b+d}{(bd)^{1/3}} \left[\frac{\zeta(3)}{N} \right]^{1/3} \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \\ &\times \frac{12\zeta(4) + 3\zeta(3) \frac{(1+b+d)}{(bd)^{1/3}} \left[\frac{\zeta(3)}{N} \right]^{1/3}}{\zeta(3) + \frac{1}{2}\zeta(2) \frac{(1+b+d)}{(bd)^{1/3}} \left[\frac{\zeta(3)}{N} \right]^{1/3}}. \end{aligned} \quad (23)$$

此时, 热容量的跃变与势阱的边界和形状有关, 也与系统的粒子数有关. 当给定势阱参数 b (或 d) 和粒子数 N 时, 数值计算表明, 热容量的跃变随势阱参数 d (或 b) 的变化存在一个极小值. 图5反映了热容量跃变的边界效应及其随势阱参数变化的极小值.

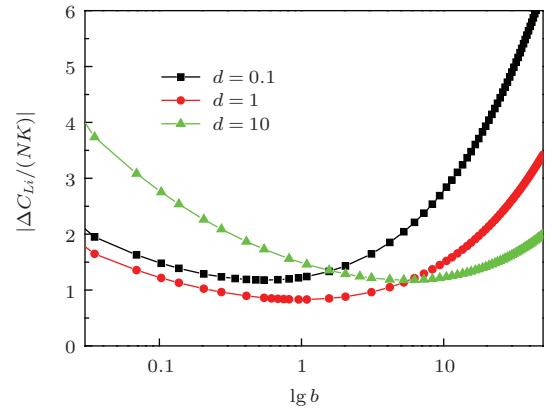


图5 取 $N = 2 \times 10^4, d = 0.1, d = 1$ 以及 $d = 10$ 时, 热容量跃变的边界效应

不同的势阱参数 b 对应不同的势阱边界, 热容量跃变也不相同.

4 结 论

在定义特征长度的基础上, 借助Euler-MacLaurin公式, 求得了理想玻色气体在三维

简谐势阱中发生玻色-爱因斯坦凝聚时热力学量的修正表达式, 研究了热力学量的边界效应, 得到了以下主要结论: 1) 在有限粒子数的情况下, 修正的粒子数凝聚分数随着粒子数的减少而减小. 凝聚分数存在边界效应, 给定粒子数 N 和势阱参数 b 时, 凝聚分数随势阱参数 d 的变化存在一个极大值. 选择适当的势阱参数, 可以有效提高粒子数的凝聚分数. 2) 凝聚温度的修正表达式依赖于势阱参数 b 和 d . 在给定粒子数 N , 简谐势频率 ω_x 以及势阱参数 b 的条件下, 当势阱参数 $d = \left(\frac{2}{\zeta(2)}\right)^{3/2} \zeta(3)(Nb)^{1/2}$ 时, 凝聚温度存在极大值. 选取优化的势阱参数, 可以有效提高凝聚温度. 3) 求出了简谐势阱中理想玻色气体在有限尺度效应下的状态方程, 揭示了压强的各向异性(或各向同性)取决于简谐势频率的各向异性(或各向同性). 4) 满足 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 及 $a \rightarrow 0$ 的大尺度大粒子数系统, 热容量的跃变既与边界无关, 也与粒子数无关, 而满足 $\tilde{L}^2 \gg \tilde{\lambda}^2$ 的大尺度和有限粒子数系统、小尺度有限粒子数系统, 热容量跃变存在边界效应也存在粒子数效应, 选取合适的势阱参数可以使得热容量的跃变取极小值.

参考文献

- [1] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [2] Bagnato V, Pritchard D E, Kleppner D 1987 *Phys. Rev. A* **35** 4354
- [3] Grossmann S, Holthaus M 1995 *Phys. Lett. A* **208** 188
- [4] Ensher J R, Jin D S, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 4984
- [5] Haugerud H, Haugset T, Ravndal F 1997 *Phys. Lett. A* **225** 18
- [6] Yan Z 2000 *Phys. Rev. A* **61** 063607
- [7] Sisman A, Muller I 2004 *Phys. Lett. A* **320** 360
- [8] Sisman A 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 11353
- [9] Pang H, Dai W S, Xie M 2006 *J. Phys. A: Math. Gen.* **39** 2563
- [10] Dai W S, Xie M 2003 *Phys. Lett. A* **311** 340
- [11] Dai W S, Xie M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 016103
- [12] Begun V V, Gorenstein M I 2008 *Phys. Rev. C* **77** 064903
- [13] Nash C, O'Connor D 1999 *Ann. Phys.* **273** 72
- [14] Leboeuf P, Monastra A G 2002 *Ann. Phys.* **297** 127
- [15] Chamati H 2008 *J. Phys. A: Math. Theor.* **41** 375002
- [16] Sun J R, Wei Y N, Pu F C 1995 *Acta Phys. Sin.* **4** 542
- [17] Wu S Q, Wang S J, Sun W L, Yu W L 2004 *Chin. Phys.* **13** 510
- [18] Su D G, Ou C J, Wang A Q P, Chen J C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5189
- [19] Hassan A S 2010 *Phys. Lett. A* **374** 2106
- [20] Hassan A S, El-Badry A M, Mohammedein A M, Ebeid M R 2012 *Phys. Lett. A* **376** 1781
- [21] Cui H T, Wang L C, Yi X X 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 991 (in Chinese) [崔海涛, 王成林, 衣学喜 2004 物理学报 **53** 991]
- [22] Ketterle W, Druten N J V 1996 *Phys. Rev. A* **54** 656
- [23] Pathria R K 1998 *Phys. Rev. A* **58** 1490
- [24] Franco D, Stefano G, Lev P P, Sandro S 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 463
- [25] Pathria R K 1972 *Statistical Mechanics* (Oxford: Pergamon) p177
- [26] Yan Z J, Li M Z, Chen L X, Chen C H, Chen J C 1999 *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** 4069
- [27] Gerbier F, Thywissen J H, Richard S, Hugbart M, Bouyer P, Aspect A 2004 *Phys. Rev. A* **70** 013607
- [28] Hassan A S, El-Badry A M 2009 *Physica B* **404** 1947
- [29] Yuan D Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5271 (in Chinese) [袁都奇 2010 物理学报 **59** 5271]
- [30] Yuan D Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 060509 (in Chinese) [袁都奇 2011 物理学报 **60** 060509]

Boundary effects of Bose-Einstein condensation in a three-dimensional harmonic trap^{*}

Yuan Du-Qi[†]

(Department of Physics and Information Technology, Baoji University of Science and Arts, Baoji 721016, China)

(Received 5 January 2014; revised manuscript received 17 May 2014)

Abstract

By defining the characteristic length, the boundary effects of Bose-Einstein condensation in a three-dimensional harmonic trap are investigated using the Euler–MacLaurin formula. Results show that the condensed fraction of particles reduces due to the finite-size effects and the effects of finite particle number; the corrections of the condensation fraction and the condensation temperature have, respectively, a maximum value due to the boundary effect, hence it is very effective to optimize the parameters of the harmonic traps for improving the condensation fraction and the condensation temperature. In the jump of heat capacity exist the boundary effects and the effects of finite particle number, and the jump of heat capacity has a minimum because the parameters of harmonic traps are selected to be reasonable. The equation of state is derived for a finite ideal Bose gas system in a three-dimensional harmonic trap; the anisotropy (or isotropy) of the pressure is determined by the anisotropy (or isotropy) of the frequency of the harmonic potential.

Keywords: boundary effects, ideal Bose gas, Bose-Einstein condensation, harmonic potential

PACS: 05.30.-d, 05.30.Jp, 67.85.Jk

DOI: [10.7498/aps.63.170501](https://doi.org/10.7498/aps.63.170501)

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of the Shaanxi Province, China (Grant No. 2012JM1006), and the key project of Baoji University of Sciences and Arts of China (Grant No. ZK11045).

[†] Corresponding author. E-mail: yuanduqi@163.com