

山西大学  
2006 届博士学位论文

# 一维玻色多体系统的理论研究

姓 名	郝亚江
导 师	梁九卿 教授
专 业	理论物理
研究方向	玻色—爱因斯坦凝聚
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2003 年 9 月—2006 年 6 月

二〇〇六年六月

Dissertation for the Doctor' s Degree  
of Shanxi University in 2006

# Theoretical Study on 1D Many-Body Bose System

Name	Yajiang Hao
Supervisor	Prof. Jiu-Qing Liang
Major	Theoretical Physics
Field of Research	Bose-Einstein condensate
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2003.9—2006.6

June, 2006

## 摘 要

玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) 在碱金属原子气体中的实验实现激发了许多新的研究领域。从那时起, BEC 就成为研究强关联系统的各种量子多体效应的平台。本文在简要介绍一维玻色气体之后, 对几个有趣的问题进行了研究。

首先, 通过数值求解 Gross-Pitaevskii 方程, 得到了 BEC 在对称双势阱和周期势中的低能宏观波函数, 并且利用系统的基态 (偶宇称) 波函数和激发态 (奇宇称) 波函数, 计算了基态的隧穿劈裂值。计算表明, 精确数值方法和周期瞬子方法的结果是一致的。

其次, 我们结合 Lieb-Liniger 模型的精确解和局域密度近似, 得到修正的 Gross-Pitaevskii 理论, 它可以准确描述自旋-1 的玻色气体在不同相互作用区域的基态特性, 本文用数值方法计算了旋量玻色气体的基态密度分布。无论是在弱相互作用区域还是强相互作用区域, 不同组分的原子数目都与玻色气体的磁化率和磁性相关。当系统在 Tonks 区域时, 密度分布表现出明显的费米类分布特性。但是, 当自旋相互作用足够强时, 密度分布不再是费米类的。同时, 本文也对各向异性的自旋相互作用对基态密度分布的影响作了研究。铁磁性旋量玻色气体的基态分布会有相分离出现。

接下来, 本文研究  $\delta$  相互作用的  $N$  个玻色子在无限深方势阱中的基态。运用 Bethe ansatz 方法, 我们得到系统在整个物理区域 (从强吸引极限到 Tonks 极限) 的精确基态解。在 Tonks 极限, 密度分布显示出类似费米分布的行为; 在强吸引相互作用极限下, 玻色子形成  $N$  原子束缚态。密度分布在整个物理区域表现出连续的行为。另外, 两体关联函数表明随着相互作用常数的减小, 玻色原子更容易聚集在狭小的区域。

最后, 用含时规范变换理论, 得到含时薛定鄂方程的精确解, 研究了由两种超精细态原子构成的两组分 BEC 的纠缠动力学问题。对于不同的初态, 包括 SU(2) 相干态, 我们计算了在各种实验参数下系统的纠缠随

时间的演化。结果表明，非线性相互作用对纠缠的影响与BEC的参数有关，并且只在较长的演化时间内才表现出来。

**关键词：**玻色-爱因斯坦凝聚；隧穿劈裂；旋量BEC；Tonks气体；纠缠

# **Study of Several Problems on the Ultracold Bose Gases**

**Yajiang Hao**

**Directed by Prof. Jiu-Qing Liang**

## **ABSTRACT**

The experimental realization of Bose-Einstein condensates (BECs) of trapped alkali atomic clouds has stimulated active studies in many new regimes. From then on, BECs have become a popularly investigated platform for various effects of quantum many-body interaction in strongly correlated systems. After giving a brief review for the one dimensional (1D) Bose gases, this dissertation is devoted to theoretical investigation of several interesting problems.

Firstly, the low-energy-level macroscopic wave functions of the BECs trapped in a symmetric double-well and a periodic potential are obtained by solving the Gross-Pitaevskii equation numerically. The ground state tunnel splitting is evaluated in terms of the even and odd wave functions corresponding to the global ground and excited states respectively. We show that the numerical result is in good agreement with the analytic level splitting obtained by means of the periodical instanton method.

Secondly, the density distributions of a spin-1 bosonic gases in its ground state are evaluated numerically within a modified Gross-Pitaevskii theory, which is obtained by the combination of the exact solution of the corresponding integrable model with a local density approximation. The population of atoms in different components depends on the overall magnetization and the (anti-)ferromagnetism of the Bose gases in both weakly and strongly interacting regimes. When the system is in the Tonks regime, the density profiles show obvious Fermi-like distribution, however,

for strong enough spin-spin interaction, apparent deviation of the density distribution from the Fermi-like distribution. The present work also investigate the effect of the anisotropic spin-spin interaction on the ground state density distribution. It is found that for ferromagnetic spinor gas the phase separation appears.

Then, we investigate the ground state of the system of  $N$  bosons enclosed in a hard-wall trap interacting via a repulsive or attractive  $\delta$ -function potential. Based on the Bethe ansatz method, the explicit ground state is got for the full physical regime from the Tonks limit to the strong attractive limit. In the Tonks limit the density profiles display the Fermi-like behavior, while in the strong attractive limit the Bosons form a bound state of  $N$  atoms corresponding to the  $N$ -string solution. The density profiles show the continuous crossover behavior in the entire regime. Further the correlation function indicates that the Bose atoms bunch closer as the interaction constant decreases.

Finally, based on the exact solution of the time-dependent Schrödinger equation for two-species BECs consisting of two hyperfine states of the atoms coupled by a tuned adiabatic and time-varying Raman coupling, we obtain analytically the entanglement dynamics of the system with various initial states, particularly the  $SU(2)$  coherent state, for both of cases with and without the nonlinear interactions. It is shown that the effect of nonlinear interaction on the entanglement appears only in a longer time period depending on the BEC parameters.

**KEYWORDS:** Bose-Einstein condensates; tunnel splitting; spinor BEC;  
Tonks gas; entanglement

## 目 录

摘要 .....	I
<b>Abstract</b> .....	III
引言 .....	1
参考文献 .....	4
<b>第一章 一维束缚玻色气体</b> .....	7
第一节 理想玻色气体.....	8
1.1 均匀的理想气体 .....	8
1.2 简谐势中的理想气体 .....	9
第二节 含相互作用的一维玻色气体.....	10
2.1 密度泛函理论 .....	10
2.2 相互作用的均匀玻色气体 .....	11
2.3 等效的一维相互作用常数.....	14
第三节 一维玻色气体的实验实现.....	15
参考文献 .....	20
<b>第二章 玻色-爱因斯坦凝聚体的隧穿劈裂</b> .....	22
第一节 一维 Gross-Pitaevskii 方程.....	23
1.1 Gross-Pitaevskii 方程 .....	23
1.2 外势 .....	25
1.3 无量纲化.....	26
第二节 玻色-爱因斯坦凝聚体的隧穿劈裂.....	27
2.1 隧穿劈裂的周期瞬子解.....	27
2.2 隧穿劈裂的精确数值解及其应用.....	29
第三节 小节.....	36
参考文献 .....	37
<b>第三章 自旋-1 的一维玻色气体的基态</b> .....	40
第一节 旋量玻色-爱因斯坦凝聚.....	41
第二节 一维旋量玻色气体.....	44

2.1 修正的 Gross-Pitaevskii 方程.....	44
2.2 数值方法.....	47
2.3 基态密度分布.....	48
第三节 自旋-1 的玻色气体的相分离.....	52
3.1 修正的 Gross-Pitaevskii 方程.....	52
3.2 相分离.....	53
第四节 小结.....	57
参考文献 .....	58
<b>第四章 有限尺寸的玻色气体 .....</b>	<b>62</b>
第一节 物理模型 .....	63
第二节 坐标 Bethe Ansatz 方法 .....	64
第三节 单体密度矩阵和二阶关联函数.....	69
第四节 小结 .....	75
附录.....	76
参考文献 .....	78
<b>第五章 两组分 BEC 的纠缠动力学.....</b>	<b>81</b>
第一节 两组分 BEC 的 Schwinger 表示.....	82
第二节 两组分 BEC 的纠缠.....	84
第三节 纠缠动力学 .....	85
3.1 $q = 0$ 情形.....	85
3.2 含非线性相互作用的情形.....	91
3.3 自旋相干态的纠缠动力学.....	92
第四节 小结 .....	94
参考文献 .....	96
<b>总结与展望 .....</b>	<b>98</b>
<b>攻读博士期间已发表和待发表的论文 .....</b>	<b>100</b>
<b>致谢 .....</b>	<b>101</b>

# CONTENTS

<b>Chinese Abstract</b> .....	VI
<b>Abstract</b> .....	VIII
<b>Introduction</b> .....	1
<b>References</b> .....	4
<b>Chapter 1: One dimensional Bose gas.</b> .....	7
§ 1 Ideal Bose gas. ....	8
1.1 Homogeneous ideal gas. ....	8
1.2 Ideal gas in the harmonic trap .....	9
§ 2 One dimensional Bose gas with interaction .....	10
2.1 Density functional theory .....	10
2.2 Homogeneous gas with interaction. ....	11
2.3 Effective interaction constant in one dimension. ....	14
§ 3 The realization of one dimensional Bose gas. ....	15
<b>References</b> .....	20
<b>Chapter 2: Tunnel splitting of Bose-Einstein condensate in multi-well potentials</b> .....	22
§ 1 Gross-Pitaevskii equation for one dimensional Bose gas. ....	23
1.1 Gross-Pitaevskii equation. ....	23
1.2 The external potential .....	25
1.3 Dimensionless equation. ....	26
§ 2 Tunnel splitting of Bose-Einstein condensate .....	27
2.1 The solution of periodical instanton method. ....	27
2.2 Numerical solution and the application. ....	29
§ 3 Conclusion. ....	36
<b>References</b> .....	37

<b>Chapter 3: The ground state of one dimensional Spinor gases. . . . .</b>	<b>40</b>
§ 1 Spin-1 Bose-Einstein condensates . . . . .	41
§ 2 Spinor gases in one dimension. . . . .	44
2.1 Modified Gross-Pitaevskii equations. . . . .	44
2.2 Numerical method. . . . .	47
2.3 Density distribution of ground state. . . . .	48
§ 3 Phase separation of spin-1 Bose gases . . . . .	52
3.1 Modified Gross-Pitaevskii equations. . . . .	52
3.2 Phase separation. . . . .	53
§ 4 Conclusion. . . . .	57
<b>References</b> . . . . .	58
<b>Chapter 4: Ground state properties of finite ultracold Bose gases in                   hard-wall trap. . . . .</b>	<b>62</b>
§ 1 Model. . . . .	63
§ 2 Coordinate Bethe Ansatz. . . . .	64
§ 3 One body density matrix and second order correlation function. . . . .	69
§ 4 Conclusion. . . . .	75
<b>Appendix.</b> . . . . .	76
<b>References</b> . . . . .	78
<b>Chapter 5: Entanglement dynamics in two-component Bose-Einstein                   condensates. . . . .</b>	<b>81</b>
§ 1 Model. . . . .	82
§ 2 Entanglement between the two modes. . . . .	84
§ 3 Entanglement dynamics. . . . .	85
3.1 The case of $q = 0$ . . . . .	85
3.2 The case with nonlinear interaction. . . . .	91
3.3 Initial pseudo-spin coherent state. . . . .	92
§ 4 Conclusion. . . . .	94

<b>References</b> .....	96
<b>Summary and outlook</b> .....	98
<b>Papers published during doctoral learning</b> .....	100
<b>Acknowledgement</b> .....	101

## 引 言

二十世纪 20 年代, S. N. Bose 和 A. Einstein 首先预言了玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)现象[1, 2]: 在粒子数守恒的玻色系统中, 当系统温度达到临界温度以下时, 量子统计效应将导致宏观数目的原子在系统的基态发生凝聚。然而, 直到 1995 年, BEC 才首次在稀薄的碱金属原子气体中实现[3, 4, 5]。稀薄原子气体的实验研究始于上世纪 70 年代, 它的发展与以磁光阱和冷却技术为基础的原子物理学密切相关, 在 80 年代, 为了冷却和束缚中性原子, 人们又发展了基于激光技术的冷却和束缚技术。正是实验技术的进步, 使得 BEC 的实现成为可能。当原子气体的温度足够低时( $10^{-9}$  K), 原子的德布罗意波长  $\lambda_T = \hbar/\sqrt{2\pi mk_B T}$  与原子之间的距离在同一量级上(微米), 此时, 原子之间通过相互作用而达到完全相同的状态, 其性质可以由一个单原子波函数描述; 当温度为绝对零度时, 热运动现象就消失, 原子处于理想的玻色-爱因斯坦凝聚态。凝聚体中所有的原子具有完全一致的行为, 使得原来单个原子所表现的难以被观察到的现象被放大出来, 这样, 通过研究凝聚体, 我们可以观察到大量的宏观量子现象。

由于原子气体 BEC 在实验上具有很强的可操控性, 它很快就成为实验和理论物理学家们所欢迎的研究对象, 被作为研究各种量子多体现象的载体。BEC 的研究涉及原子激光、四波混频、超流、涡旋、量子相变、孤子等方面。许多研究组实现了二维和一维束缚气体[6-9], 通过调节实验参数, 原子气体可以处于不同的物理区域, 并且会表现出不同于三维系统的奇特性质。例如, 在一维玻色气体中, 使用 Feshbach 共振技术, 可以调节原子间的相互作用在整个物理区域内(从强吸引相互作用区域到 Tonks 区域)变化。在弱相互作用区域, 原子可以发生凝聚, 而强相互作用的 Tonks 气体是最简单的强关联量子系统。理论上, 玻色系统的维度效应和关联效应已经得到了广泛的研究, 并且受到越来越多的关注。另一方面, 实验上也可以实现物理上最简单的外势——一维无限深方势阱[10]等各种形状的势阱。

双势阱和周期光格子中的玻色-爱因斯坦凝聚也是众多科学家研究各种宏观量

子现象和凝聚态性质的理想模型，例如，玻色约瑟夫森结在不同区域的动力学性质，量子波导，光格子中的量子相变等[11-17]。激光驻波可以形成周期光格子，束缚在其中的 BEC 类似于一维约瑟夫森链，可以观察到振荡的原子流。M. Albiez 等人在双势阱中也实现了单个约瑟夫森结[18]，并观察到了隧穿现象和“宏观量子自陷俘”现象，这是一种由于玻色原子之间的相互作用导致的非线性现象。另外，它可以作为研究相互作用系统的隧穿性质和束缚原子干涉仪的物理模型。耦合的 BEC 之间的位相研究也是一个非常有意义的课题。

当原子气体囚禁在光阱而不是磁阱中时，原子的自旋自由度被解放，成为一个新的自由度，处于同一个超精细简并态的原子可以形成稳定的 BEC，原子的自旋不再受到磁场的限制，这样的多组分凝聚称为旋量玻色-爱因斯坦凝聚（旋量 BEC）[19]。最初的多组分 BEC 主要由不同种类的原子或者处在两个内部态的同种原子形成，现在实验上可以实现自旋-1 和自旋-2 的玻色凝聚体[20-26]。最近，Tilman Pfau 组成功地实现了  $^{52}\text{Cr}$  BEC [27]，它的电子自旋是碱金属电子自旋的 6 倍，因此，原子间的偶极相互作用非常明显，它除了具有许多单组分 BEC 所没有的静态性质和动力学性质，偶极相互作用对凝聚气体的影响使凝聚体的物理性质变得更加丰富。例如，偶极相互作用与自旋角动量和轨道角动量的耦合导致了旋量 BEC 的“爱因斯坦-德哈斯效应”和“Barnett 效应”。

1999 年，JILA 的一个小组首次在钾费米原子气体中观察到量子简并现象，2003 年底，Innsbruck 的 Grim 小组，JILA 的 Jin 小组，MIT 的 Ketterle 小组先后在两分量的费米原子气体中制备出了分子凝聚体，稍后，Jin 小组利用 Feshbach 共振技术实现了费米凝聚[28]。费米凝聚处在 BEC 和 BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 超流转变的中间区域，通过调节原子间的相互作用，可以使费米气体处在 BEC 区域，BCS 区域，或者二者的中间区域。超冷费米气体的超流行为打开了通向迷人的凝聚态物理的大门。2005 年，Ketterle 小组和 Hulet 小组又分别实现了自旋极化的费米超流体[29]，从而，吸引了越来越多的凝聚态物理学家从事这一领域的研究。

由于 BEC 有超长的相干时间，使得用 BEC 制备多粒子纠缠态成为可能，它也可以作为检验量子力学基本原理的载体。例如，两组分 BEC 的相位，粒子数涨落，宏观量子自陷俘和  $\pi$ -相位振动已经得到了广泛的研究，同时，凝聚体的量子纠缠也受到了大量的关注[30-33]。原子之间的非线性相互作用，对原始的 Berry 位相理论构

成了新的挑战，基于 BEC 的非线性 Berry 位相已经得到了深入的研究[34]。

本文第一章简要介绍一维玻色气体的基本理论以及实验实现。第二章利用周期瞬子方法和精确数值方法计算准一维玻色-爱因斯坦凝聚体的基态能级劈裂，并且计算特定实验系统的遂穿率。第三章研究自旋-1 的一维玻色气体在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度分布和相分离。第四章用精确解的方法研究有限尺寸的一维玻色气体，得到从强吸引区域到 Tonks 区域的精确基态以及密度分布和二阶关联函数。第五章以含时规范变换为基础，考虑两组分 BEC 的纠缠度随时间的演化。

## 参 考 文 献

- [1] S.N. Bose, *Z Phys.*, **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, *Sitzungsber. Klg. Preuss. Akad.*, 261 (1924); 3 (1925).
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [4] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tolett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [6] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [7] S. Burger, F. S. Cataliotti, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi and M. Inguscio, *Europhys. Lett.* **57**, 1 (2002).
- [8] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **429**, 277 (2004).
- [9] T. Kinoshita, T. Kinoshita, T. Wenger, D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [10] T. P. Meyrath, F. Schreck, J. L. Hanssen, C.-S. Chuu, and M. G. Raizen, *Phys. Rev. A* **71**, 041604 (2005).
- [11] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [12] E. A. Hinds, C. J. Vale, and M. G. Boshier, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1462 (2001).
- [13] Oliver Morsch and Markus Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.*, **78**, 179 (2006).
- [14] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Science* **282**, 1686 (1998).

- [15] F. S. Cataliotti, S. Burger, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi, A. Trombettoni, A. Smerzi, and M. Inguscio, *Science* **293**, 843 (2001).
- [16] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [17] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **429**, 277 (2004).
- [18] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M. K. Oberthaler, cond-mat/0411757.
- [19] J. O. Andersen, U. Al Khawaja, and H. T. C. Stoof, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 070407 (2002).
- [20] T.-L. Ho and S. K. Yip, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4031 (2000).
- [21] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998).
- [22] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5257 (1998).
- [23] T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1822 (1998).
- [24] W. Zhang, H. Pu, C. Search, and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 060401 (2002).
- [25] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur and W. Ketterle, *Nature* **396**, 345 (1998).
- [26] M. S. Chang, Q. Qin, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, *Nature Physics* **1**, 111 (2005).
- [27] J. Stuhler, A. Griesmaier, T. Koch, M. Fattori, T. Pfau, S. Giovanazzi, P. Pedri, and L. Santos *Phys. Rev. Lett.* **95**,150406 (2005).
- [28] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin, *Nature* **426**, 537 (2003); S. Jochim *et al.* , *Science* **302**, 2101 (2004); C. Chin *et al.* , *Science*, **305**, 1128 (2004) ; E. Kim and M. H. W. Chan, *Nature* **427**, 225 (2004).

- [29] Martin W. Zwierlein, Andre Schirotzek, Christian H. Schunck, Wolfgang Ketterle, Science **311**, 492 (2006); G. B. Partridge, W. Li, R. I. Kamar, Y.-a. Liao, R. G. Hulet, Science, **311**, 503 (2006).
- [30] G.J. Milburn, J. Corney, E.M. Wright, D.F. Walls, Phys. Rev. A **55**, 4318 (1997).
- [31] A. Sørensen, L. -M. Duan, J. I. Cirac, and P. Zoller, Nature **409**, 63 (2001).
- [32] A. P. Hines, R. H. McKenzie and G. J. Milburn, Phys. Rev. A **67**, 013609 (2003).
- [33] L. Sanz, R. M. Angelo and K. Furuya, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, 9737 (2003).
- [34] Wu, B., R. B. Diener, and Q. Niu, Phys. Rev. A **65**, 025601 (2002); Phys. Rev. A **64**, 061603(R) (2001); Wu, B., and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **89**, 088901 (2002); Wu, B., and Q. Niu, New J. Phys. **5**, 104 (2003).

## 第一章 一维束缚玻色气体

自然界是一个三维空间，生活中五彩缤纷的物理现象可以在三维坐标系中准确地描述。考虑到所研究对象的对称性，我们通常可以对系统进行简化，只是建立一个简单的二维或一维的物理模型，并不使用所有的坐标自由度。在教科书中，通常使用低维模型作为例子，这样，一方面可以清楚地描述物理现象，另一方面在技术处理上也更加简单。然而，这并不意味着所有的低维模型都和真实的自然界联系甚少，例如，稀薄的低维气体就是有趣的多体相互作用系统。相互作用在一维系统中扮演着很重要的角色，维度的减少不但使问题能够精确求解，而且也使得一维系统显示了许多不同于高维度系统的独特物理性质。

玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein Condensation, 简称为BEC) 是三维玻色子 (具有整数自旋的粒子) 系统的量子统计现象，当粒子的特征热德布罗意波长超过粒子间的平均距离时发生。1924 年玻色 [1] 和爱因斯坦 [2] 在理论上预言了玻色-爱因斯坦凝聚现象，即原子的温度足够低时，无相互作用的玻色子会在最低能量量子态上聚集，达到可观的数量。在这种状态下，所有的原子如同一个原子，具有完全相同的物理性质。此后，大量的实验现象被认为是BEC的表现形式：液氦中的超流现象，部分材料的高温超导现象，介子BEC等。1995 年，在JILA, MIT, 和RICE的实验中，人们通过用磁阱束缚稀薄碱金属气体分别观察到了玻色-爱因斯坦凝聚现象 [3-5]。从此，超冷量子气体就从理论研究发展成为一个成熟的实验领域，大量的BEC实验用不同种类的原子和外部束缚势完成。许多科学家通过在一个或者两个方向上把原子约束到只有零点振动从而制备了准二维和准一维束缚气体 [6-9]。这样的气体同真正的二维或者一维气体的区别仅限于前者的原子间相互作用是同外部束缚势有关的。当在其它方向上加上束缚势时，我们可以研究二维或者一维束缚气体。最近，几个组通过把量子气体装载到光格子中或者改变势阱的束缚强度实现了一维Tonks气体 [10-12]，对于不同的实验参数原子会发生凝聚或者处于Tonks区域。

Tonks 气体由 L. Tonks 和 M. Girardeau 预言 [13]，它是最简单的强关联量子系统。Lieb 和 Liniger 首先得到了  $\delta$ -相互作用的玻色气体的精确解，他们研究的模型是在周期边条件下 [14]，而开边条件的精确解由 M. Gaudin 给出 [15]。之后，C. N. Yang 等研究了排斥相互作用的一维玻色系统的热力学性质 [16] 以及自旋-1/2

的费米系统[17]。在实验实现 BEC 之后,许多理论开始关注低维玻色气体,M. Olsanii 计算了一维玻色气体在外势中的散射问题[18], D. S. Petrov 等则讨论了一维束缚气体在不同量子简并区域的性质[19]。M. Girardeau 运用 Bose-Fermi Mapping 技术对处于强相互作用区域的玻色气体和费米气体进行了系统的研究[20]。近期, M. Rigol 等用精确的数值方法研究了一维原子气体的各种物理性质[21]。本文将基于这些理论对一维量子气体的若干性质进行研究。

本章首先介绍理想玻色气体, 然后给出相互作用的一维玻色气体的基本理论, 最后简单介绍一维玻色气体的实验实现。

## 第一节 理想玻色气体

### 1.1 均匀的理想气体

设由  $N$  个质量为  $m$  的玻色子组成理想气体, 理想玻色气体处于热平衡状态时服从玻色-爱因斯坦统计分布。如果以  $n(\varepsilon_i)$  代表热平衡状态时处于  $\varepsilon_i$  能级的某一量子态上粒子的占据数, 则  $n(\varepsilon_i)$  可表示为:

$$n(\varepsilon_i) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.1)$$

其中  $\mu$  为粒子的化学势,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度。

系统的总粒子数为:

$$N = \sum_i n(\varepsilon_i) = \sum_i \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.2)$$

这里,  $\varepsilon_k = k^2 / 2m$ ,  $k$  是粒子的动量。若单粒子能级间隔远小于  $k_B T$ , 则 (1.1) 式中的求和可用积分代替

$$N = \Omega \int \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)/k_B T} - 1},$$

其中  $\Omega$  是气体体积 (下面将取  $k_B = 1$ )。积分可得:

$$\mu = T \ln [1 - \exp(-\rho \Lambda_T)] < 0, \quad (1.3)$$

其中  $\Lambda_T$  是热德布罗意波长,  $\rho$  是气体密度。简并参数为  $\rho \Lambda_T = (T/T_d)^{1/2}$ , 这里

$T_d = 2\pi\hbar^2 \rho^2 / m$  是量子简并温度。在经典气体极限， $\rho\Lambda_T \ll 1$ ，(1.3) 式为

$\mu = T \ln(\rho\Lambda_T)$ ；在强简并气体极限， $\rho\Lambda_T \gg 1$ ，(1.3) 式为  $\mu = -\frac{\pi T}{(\rho\Lambda_T)^2}$ 。可以看

出，化学势随着温度的降低单调减少，所以一维理想玻色气体中不会发生玻色-爱因斯坦凝聚。其与三维气体的根本差别在于能态密度  $n'(\varepsilon) \propto \varepsilon^{d/2-1}$ ，其中  $d$  是系统的维度。在三维情况下，能态密度随能量的增加而降低，因此，在足够低的温度下，不可能按照玻色-爱因斯坦统计分布占据能态的同时依然保持化学势或者密度为常数，从而，粒子可以在基态实现宏观占据，发生玻色-爱因斯坦凝聚。

### 1.2 简谐势中的理想气体

一维简谐势阱中玻色气体的态密度  $n'(\varepsilon) = \text{Constant}$ ，并且有基态占据数

$$N_0 = \frac{1}{e^{(-\mu/T)} - 1}. \quad (1.4)$$

当势阱中的粒子数目为有限个时， $N_0$  可以变得宏观大因而与  $N$  在同一数量级，也就能够发生玻色-爱因斯坦凝聚。假设一维玻色气体被束缚在简谐势阱  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  中，粒子能量为  $\varepsilon = \hbar\omega j$ ，其中  $j = 0, 1, 2, \dots$  是非负整数，系统的态密度为  $n'(\varepsilon) = 1/\hbar\omega$ 。则式 (1.2) 可写为：

$$N = N_0 + \frac{T}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{T}{\hbar\omega}\right) - \frac{T}{\hbar\omega} \psi\left(1 + \frac{T}{\hbar\omega N_0}\right), \quad (1.5)$$

其中  $\psi$  为双  $\gamma$ -函数。如果系统中的粒子数目比较大，(1.5) 式表明在临界温度  $T_c \approx \frac{N}{\ln N} \hbar\omega$  有一个向 BEC 区域过度的交叉区域。当温度低于临界温度时，(1.5) 式右边第二项远大于第三项，因此，基态占据数为：

$$N = N_0 + \frac{T}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{T}{\hbar\omega}\right). \quad (1.6)$$

当后两项在同一数量级时，是量子气体向 BEC 区域过度的交叉区域，交叉区域的宽度为：

$$\frac{\Delta T}{T_c} \sim \frac{1}{\ln N}. \quad (1.7)$$

这里我们只考虑了理想气体的 BEC，忽略了原子间的相互作用。实际上玻色原子间相互作用效应是非常重要的，正是原子间的相互作用导致一维玻色气体的许多独特性质。

## 第二节 含相互作用的一维玻色气体

在低温下，一维玻色系统会展现出完全不同于二维和三维系统的性质。一个显著的例子就是在有限温度时，均匀的一维玻色气体不会发生玻色-爱因斯坦凝聚。另一个显著而且与直觉相违背的特性是，在一维玻色气体中，随着气体密度的降低，相互作用越来越重要，并且系统的性质与高维气体相比会有明显的不同。特别是当玻色气体的密度比较低或者原子间的相互作用强度比较大的时候，系统将显示出无自旋费米气体的性质。尽管如此，理论和实验都已表明，准确描述三维玻色气体的 Gross-Pitaevskii 理论在一定参数区域内仍然能较好地描述一维玻色气体。本节将介绍在不同参数区域都可以很好地描述一维玻色气体的密度泛函理论。

### 2.1 密度泛函理论

密度泛函理论 (The Density-Functional Theory, 简称 DFT) 是在相互作用费米子系统的基础上发展起来的，它提供了一个研究非均匀玻色气体的严格方法。假定在外势  $V_{ext}(x)$  中包含有  $N$  个相互作用的玻色子，整个系统处于局域热平衡状态，并且在位置  $x$  有能量密度  $\epsilon(\rho)$ ，( $\epsilon$  是均匀系统中单个玻色原子的基态能量)。在零温，连续性方程可以写为

$$\begin{aligned} \partial \rho / \partial t + \frac{d(\rho v)}{dx} &= 0, \\ \partial v / \partial t + (1/m) \frac{d}{dx} \left( V_{ext} + \partial[\rho \epsilon(\rho)] / \partial \rho + \frac{1}{2} m v^2 \right) &= 0, \end{aligned} \quad (2.1)$$

其中  $v$  原子速度。加上量子动能项，则有

$$\partial v / \partial t + (1/m) \frac{d}{dx} \left( V_{ext} + \partial[\rho \epsilon(n)] / \partial \rho + \frac{1}{2} m v^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{d^2 \sqrt{\rho}}{dx^2} \right) = 0. \quad (2.2)$$

定义系统密度  $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ ，和原子速度

$$v(x,t) = \hbar \left( \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) / [2im\rho(x,t)].$$

从而，在绝热局域密度近似下，可得 Kohn-Sham-类 (KS-类) 含时方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V_{ext} \Psi + \frac{\partial [\rho \in (\rho)]}{\partial \rho} \Psi. \quad (2.3)$$

如果外部束缚势  $V_{ext}$  不含时，那么基态波函数可写为时间和空间分离的形式

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \exp(-i\mu t/\hbar). \quad \text{其中，} \psi(x) \text{ 为归一化波函数，它满足 } \int dx |\psi(x)|^2 = N.$$

这样，即可得到方程 (2.3) 对应的定态薛定鄂方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V_{ext} \psi + \frac{\partial [\rho \in (\rho)]}{\partial \rho} \psi = \mu \psi, \quad (2.4)$$

此时，密度  $\rho = |\psi(x)|^2$ 。在弱相互作用区域，该方程就是著名的 Gross-Pitaevskii (GP) 方程。同样，从二次量子化的哈密顿量或者能量泛函出发，也能得到相同的结果，在后面的章节，将进一步给出这些理论。

## 2.2 相互作用的均匀玻色气体

这一部分将讨论原子间有排斥相互作用的均匀一维玻色气体，事实上，也同样适用于吸引相互作用。一般来说，原子间的相互作用势是原子间距离的复杂函数，原子间距离小时，由于电子云迭加而产生强烈的排斥力；当距离大时则会产生由 Van der Waals 相互作用引起吸引力，而对于处于低温低密度的稀薄原子气体来说，三体碰撞的几率很小，原子间的散射可以看作是两体散射。在低温低密度极限下，只有在零轨道角动量态的 ( $l=0$ ) 原子散射才对整个散射振幅有贡献。在  $l=0$  态上的原子散射称为 s-波散射，其散射势可用一个等效的接触势来描述：

$$V(x_i - x_j) = g_{1d} \delta(x_i - x_j), \quad (2.5)$$

其中  $g_{1d}$  是和 s-波散射长度有关的一维相互作用常数，它的正负分别代表原子之间的相互作用是排斥或者吸引。均匀玻色气体的性质可以通过 Lieb-Liniger 模型进行研究[14]。Lieb-Liniger 模型描述了相互作用为  $\delta$ -函数势的一维玻色气体，均匀

系统的 Lieb-Liniger 模型可以用 Bethe- Ansatz 方法精确求解，并且该模型在零温和有限温度下的热力学函数已经分别由 Lieb 和 Liniger[14]以及杨振宁兄弟求得[16]。在零温，系统的能量密度为：

$$\epsilon(\rho) = \frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} e(\gamma), \quad (2.6)$$

其中参数  $\gamma = mg_{1d}/\rho\hbar^2$  可以标志原子气体所处的不同区域，当  $\gamma \ll 1$  时系统处于弱相互作用区域，而当  $\gamma \gg 1$  时，系统处于强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域，在不同的区域，原子气体具有完全不同的性质（如图-1.1 所示[12]）。随着  $\gamma$  的增加， $l$  变小而  $r$  变大，在强相互作用区域，玻色子的分布类似费米子，空间上完全可以区分，在弱相互作用区域， $l \gg r$ ， $l$  对应原子气体的相干长度，原子气体如同量子流体一样具有长程位相相干性。实验上，可以调整原子间相互作用强度或者原子气体的密度，从而使原子气体处于不同的区域。

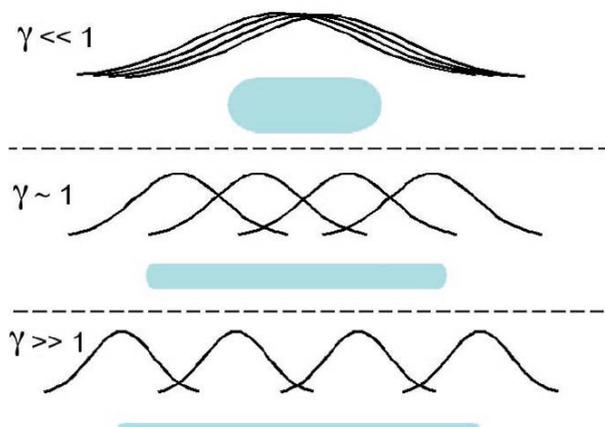


图-1.1 一维原子分布。对于不同的  $\gamma$  区域都有：上图表示原子的相干长度  $l$  和原子间距离  $r$ ；下图表示一维原子气体的密度分布。

(2.6) 式中函数  $e(\gamma)$  有如下形式：

$$e(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3(\gamma)} \int_{-1}^1 g(x|\gamma) x^2 dx. \quad (2.7)$$

$g(x|\gamma)$  和  $\lambda(\gamma)$  满足 Lieb-Liniger 方程：

$$g(x|\gamma) - \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \frac{2\lambda(\gamma)}{\lambda^2(\gamma) + (y-x)^2} g(x|\gamma) dy = \frac{1}{2\pi} \quad (2.8)$$

和

$$\lambda(\gamma) = \gamma \int_{-1}^1 g(x|\gamma) dx. \quad (2.9)$$

在弱相互作用区域 ( $\gamma \ll 1$ ), 可以求得  $e(\gamma) = \gamma - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \gamma^{3/2}$ ; 在强相互作用区域

( $\gamma \gg 1$ ), 可得  $e(\gamma) = \frac{\pi^2}{3} \left(1 - \frac{4}{\gamma}\right)$ 。从而可以得到两个极限下原子气体的能量密度为:

$$\begin{cases} \epsilon(\rho) = \frac{1}{2} g_{1d} \rho & \gamma \ll 1 \\ \epsilon(\rho) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{6m} \rho^2 & \gamma \gg 1 \end{cases}. \quad (2.9)$$

从 (2.9) 式可以看出, 在强相互作用区域, 玻色气体的能量密度与原子间的相互作用常数无关。因此, 弱相互作用的一维玻色气体满足非线性薛定鄂方程:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext} + g_{1d} |\psi|^2 \right] \psi = \mu \psi. \quad (2.10)$$

而在强相互作用区域, 满足如下非线性方程:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} |\psi|^4 \right] \psi = \mu \psi. \quad (2.11)$$

可以看到, 方程 (2.10) 就是我们常见的 Gross-Pitaevskii 方程, 它可以准确地描述弱相互作用的一维玻色气体 ( $\gamma \ll 1$ ), 其中波函数为序参量, 又称为宏观波函数。在强相互作用区域, 玻色气体等价于没有相互作用的无自旋费米子, 二者有相同的能级分布。例如, 当原子气体束缚在简谐势阱中时, 有能级分布  $E_i = (i+1/2)\hbar\omega$ , 玻色原子按照费米子的特点依次占据不同的能级。同样, 系统的密度分布也可以用简谐势中的单粒子波函数计算得到[22]:

$$\rho(x) = \frac{2}{(\pi a)^{1/2}} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{2^k k!} H_k^2(x/a) \exp(-x^2/a^2), \quad (2.12)$$

其中  $H_k$  是厄米多项式,  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$  是长度单位。对应的化学势为  $\mu_{TF} = (N+1/2)\hbar\omega$ 。

另外，如果外势是缓变的，则可以用 Thomas-Fermi 近似（忽略掉方程 (2.11) 中的动能项），这样能够容易地求得密度分布：

$$\rho_{TF} = \left\{ 2m [\mu - V_{ex}(x)] \right\}^{1/2} / \pi \hbar. \quad (2.13)$$

相应的化学势为  $\mu_{TF} = N\hbar\omega$ 。如图-1.2 所示，方程 (2.11) 的数值结果（图-1.2a 中的平滑曲线）和 Thomas-Fermi 近似结果 (2.13)（图-1.2b 中的平滑曲线）与精确结果 (2.12) 符合得很好，当粒子数目非常大的时候，二者的差别甚至可以忽略 [22]。

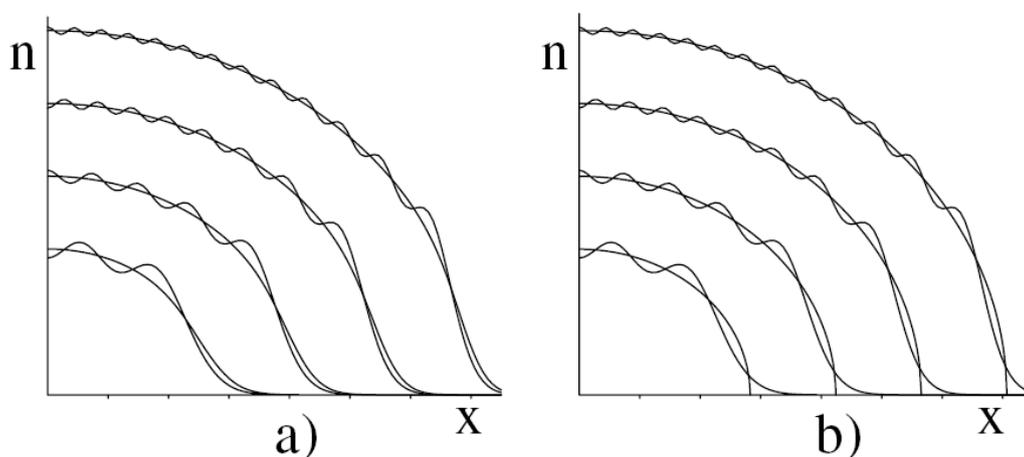


图-1.2 粒子数分别为 4, 9, 16, 25 时的密度分布。振荡曲线对应 (2.12)，平滑的曲线对应：(a) 方程 (2.11) 的数值结果；(b) 方程 (2.11) 的 Thomas-Fermi 近似结果。

上面主要讨论了均匀玻色气体，对于束缚的一维玻色气体来说，可以利用局域密度近似进行求解。在强相互作用和弱相互作用两个极限情况下，玻色系统的基态和激发态的性质都可以得到很好的结果，但是  $\gamma \sim 1$  的中间区域仍然没有解决，这就需要我们用数值的方法进行研究。

### 2.3 等效的一维相互作用常数

在弱相互作用区，原子气体的性质与宏观波函数的非线性特征有密切联系。特别是玻色-爱因斯坦凝聚体的非线性激发，在三维和二维情况下会形成涡旋态，而在一维情形，则会有扭折态出现，例如，柱对称简谐势中的扭折态就是凝聚体的激发，孤子也是非线性激发的一种，这个方向已经受到广泛的关注 [23]。如果在原子气体

的径向上施加很强的束缚势，并且气体的温度足够低，那么其径向振动就完全束缚在简谐势的基态，径向波函数即可表示为：

$$\psi_{\perp} = \sqrt{\frac{1}{\pi d_{\perp}^2}} \exp[-r_{\perp}^2 / 2d_{\perp}^2]. \quad (2.13)$$

其中， $d_{\perp} = \sqrt{\hbar / m\omega_{\perp}}$  是径向谐振长度单位， $\omega_{\perp}$  是径向束缚势的束缚频率 ( $\hbar\omega_{\perp} \gg \mu$ )。

这样，原子气体就完全成为一维系统。有效的一维相互作用常数为[18]

$$g_{1d} = \frac{2a_s \hbar^2}{m d_{\perp}^2} \frac{1}{1 - C(a_s / d_{\perp})}, \quad (2.14)$$

其中  $a_s$  是三维 s-波散射长度， $C = 1.463\dots\dots$ 。通常，径向谐振长度  $d_{\perp}$  远大于 s-波散射长度，则有

$$g_{1d} = \frac{2a_s \hbar^2}{m d_{\perp}^2}. \quad (2.15)$$

由 (2.14) 式可以看出，有效的一维相互作用强度不仅与三维 s-波散射长度有关，而且也跟径向束缚势有关。这样，一维相互作用强度既可以通过 Feshbach Resonances 调节 s-波散射长度的大小来改变，又可以通过调节径向束缚势的强弱改变。而且，即使在三维势阱中为排斥相互作用的原子，也可以通过调节实验参数使有效的一维相互作用强度从  $-\infty$  变到  $+\infty$ ，从而，可以实现束缚诱导的一维 Feshbach Resonances (CIRs)。

### 第三节 一维玻色气体的实验实现

一维多体系统很久以来一直受到物理学家的关注。在一维系统中，相互作用扮演了非常重要的角色，它有许多不同于高维系统的独特性质。从理论的观点来看，一维系统由于其模型简单因而可以用一些特定的方法精确求解，自从上世纪七十年代以来，理论工作者就发展了许多新的理论工具对其研究。对于实验科学家来说，一维系统最初只是理论物理学家的“玩具”模型。尽管在上世纪七十年代人们也用聚合材料和有机化合物制成了一维系统，但一维系统的制备直到最近二十年才在实验上有了真正的突破。其中，最著名的包括有机超导体，梯子化合物和自旋化合物。同时，纳米技术的巨大进步也导致了孤立的一维系统的完成，例如，量子镊子，约

瑟夫森结链，量子霍尔系统中的边缘态，以及纳米管。最近，由于激光技术的进步，在克服一系列难题后，美国科罗拉多大学 JILA 实验室的 Wieman 和 Cornell 小组于 1995 年 6 月在铷 ( $^{87}\text{Rb}$ ) 原子蒸气中第一次直接观测到了 BEC[3]。8 月底，美国 Rice 大学的 Hulet 小组在锂 ( $^7\text{Li}$ ) 原子蒸汽中看到 BEC [5]。同年 11 月，麻省理工学院的 Ketterle 小组在钠 ( $^{23}\text{Na}$ ) 的原子蒸气中也实现了 BEC[4]。该实验获得了 2001 年的诺贝尔物理学奖。与次同时，也有许多实验物理学家开始致力于一维玻色系统和一维费米系统的实验研究。

在 2001 年，Ketterle 组在实验上率先实现了各向异性的超冷玻色气体[24]，即雪茄形玻色-爱因斯坦凝聚。在轴对称形势阱中，发生凝聚的稀薄气体的长度标度可以由四个物理量完全描述：径向半径  $R_{\perp}$ ，轴向半宽  $R_z$ ，散射长度  $a_s$ ，以及消退长度 (healing length)  $\xi = (4\pi a_s n)^{-1/2}$ 。在通常的 BEC 实验中， $R_{\perp}$ ， $R_z$ ，和  $\xi$  都是由原子间的相互作用决定的，满足关系： $R_{\perp}, R_z \gg \xi \gg a_s$ 。在这个区域，BEC 是三维的。如果调节势阱，使得系统满足  $R_z > \xi > R_{\perp}$ ，即可得到雪茄形 BEC。这个实验可以在一个 Ioffe-Pritchard-type 磁阱中完成，通过改变径向束缚频率  $\omega_{\perp}$  和轴向束缚频率  $\omega_z$  的大小，纵横比可以达到  $10^2$  个数量级。自然地，一维凝聚中的原子数目要远低于三维玻色-爱因斯坦凝聚。同时，为了防止热激发，原子气体的化学势和温度也要满足  $\mu, k_B T \ll \hbar\omega_{\perp}$ ，这在雪茄形 BEC 实验中并没有做到。这样的量子气体虽然在几何上实现了一维凝聚，但是它的性质仍和三维 BEC 相同，依然可以用 Gross-Pitaevskii 平均场理论描述。该实验没有观察到一维 Tonks 气体，即强相互作用的一维量子气体，它需要很强的径向束缚势或特别大的原子间散射强度。

用两束正交的光学驻波可以形成二维的周期格子，构成一系列紧束缚的管状势阱。如果把凝聚气体装载到这样的二维光格子中，则在每个管状势阱中都可以形成一维量子气体[11, 12]。一维气体中的原子在径向受到很强的束缚，只有零点振动，横向激发则完全被抑制。通过调节二维光格子的强度可以改变相邻格点的一维气体之间的耦合强弱。当二维光格子很强时，一维气体之间互相独立。

在 Tilman Esslinger 的实验中[9]，使用了 $^{87}\text{Rb}$ ，首先，使 $5 \times 10^5$ 以上个原子在 $|F=2, m_F=2\rangle$ 态发生玻色-爱因斯坦凝聚。然后在 QUIC 阱(一种把四极阱和 Ioffe 阱结合在一起的磁阱)中形成雪茄形 BEC，其径向束缚频率为 24Hz，轴向束缚频率为 220Hz。光格子由两束正交的激光驻波形成，他们使用了波长 $\lambda = 852\text{nm}$ 的激光二极管，激光的斑点大小 $w_0$ 约为 $75\mu\text{m}$ 。激光对原子的束缚势正比于激光的强度，对于线性极化光场，强度可以表示为：

$$U(y, z) = U_0 [\cos^2(ky) + \cos^2(kz) + 2\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 \cos \phi \cos(ky) \cos(kz)].$$

其中 $U_0$ 为每个激光驻波的势能最大值，通常以反冲能 $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$ 为单位，这里 $k = 2\pi / \lambda$ 为光格子波矢大小， $\mathbf{e}_{1,2}$ 为水平方向和垂直方向的激光驻波的极化矢量，而 $\phi$ 是这两束驻波的位相差，实验中，位相差可以调节，也可以取 $\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 = 0$ 。雪茄形 BEC 和光格子势如图-1.3 所示。

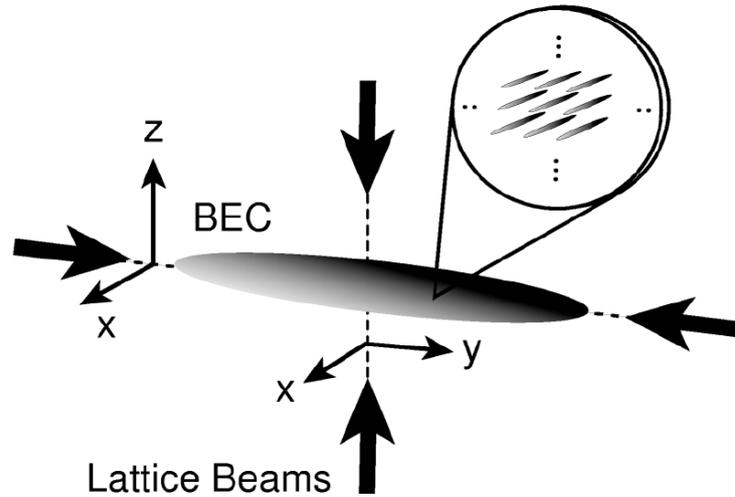


图-1.3 实验示意图。两束交叠的激光驻波分别沿水平方向（y轴）和垂直方向（z轴）组成二维的光格子势，它和磁阱中的雪茄形 BEC 一起形成了一系列一维量子气体（插图）。

为了把原子装载到光格子中，激光束的强度线性增大到实验需要达到的值。这样，原子被束缚在二维激光驻波和磁阱共同组成的势阱中，形成一系列以x为对称轴的一维量子气体。二维光格子产生的径向的束缚势为 $\omega_r \approx 2\pi\sqrt{2U_0/m}$ 。

在 2004 年, I. Bloch 组和 D. S. Weiss 组先后用二维光格子实现了一维玻色系统[11, 12], 观察到了一维 Tonks-Girardeau 气体-费米化的玻色原子气体。在 I. Bloch 组的实验中, 最关键的一点就是沿一维玻色气体的轴向加一个周期的一维光格子, 增加原子的有效质量, 从而使得  $\gamma$  得到很大提高, 在他们的实验当中,  $\gamma \sim 5-200$ 。而在 D. S. Weiss 组的实验中[12], 仅仅通过改变二维光格子的强度来调节原子间的相互作用强度, 即使得量子气体可以实现从弱相互作用的 BEC 区域到强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域, 最大  $\gamma$  值可以达到 5。在该实验中, 首先用全

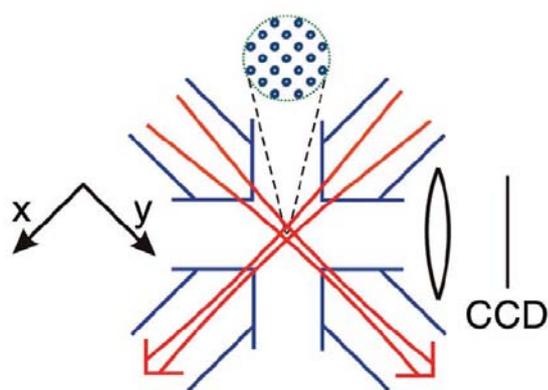


图-1.4 D. S. Weiss 实验示意图。宽箭头表示二维光格子, 它束缚原子使之形成一系列管状一维量子气体 (放大的圆形), 窄箭头表示对一维原子气体的轴向束缚。实验中使用 CCD 成像。

光阱使  $^{87}\text{Rb}$  在最低内能态发生凝聚, 光阱由水平交叉 YAG 激光器构成的偶极阱产生。原子发生凝聚之后, 在光偶极阱上叠加一个二维光格子。二维光格子由 3.2THz 的钛

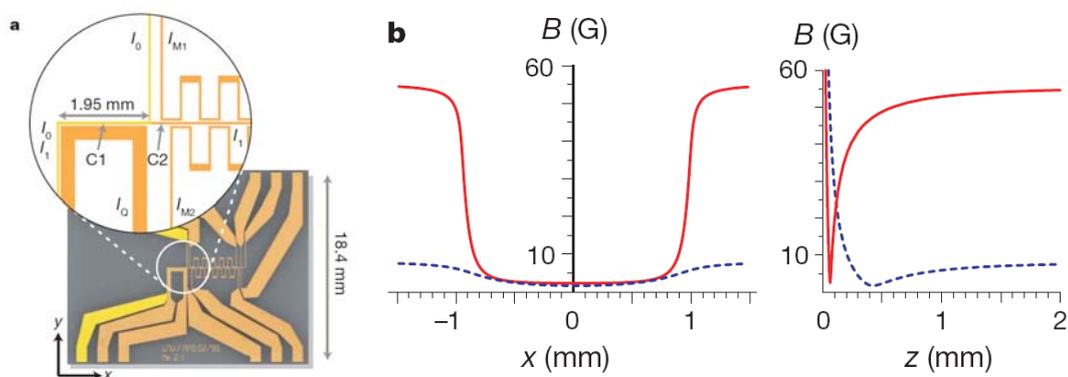


图-1.5 原子芯片及磁阱。(a) 衬底上刻蚀而成的金线。(b) 线中的电流产生的不同形状的束缚势。

宝石激光发出的两束水平正交的驻波产生（图-1.4 所示）。这两个实验观察到了显著的玻色子费米化现象，这对于实现一维费米气体以及利用一维两组分玻色气体研究强关联费米子的物理特性都有很大的帮助，例如，玻色原子可能像超导体电子那样形成库柏对，发生 BCS 转变。

除了上述在磁光阱或者全光阱中实现一维量子气体外，也可以在“原子芯片”上利用微刻技术制作微磁阱，一维波导和其他原子光学装置。图-1.5 显示了 W. Hänsel 等人在原子芯片上制作的波导[25]，它主要由  $50\mu\text{m}$  宽的导线产生的外势叠加形成一个 Ioffe-Pritchard 势阱，通过调节导线中的电流，可以改变势阱的强度，该实验中的束缚频率为  $\nu_x = 28\text{Hz}$ ， $\nu_{y,z} = 220\text{Hz}$ 。在这样的势阱中他们实现了玻色-爱因斯坦凝聚。一维超冷原子气体在“原子芯片”中的实验实现既对凝聚态理论的研究非常地重要，对于表面物理，原子干涉仪，全息摄影技术，显微技术，原子微刻技术，以及量子信息处理等领域的发展也有深远的意义。

## 参 考 文 献

- [1] S.N. Bose, *Z Phys.*, **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, *Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad.*, 261 (1924); 3 (1925).
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [4] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tolett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [6] 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, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [7] S. Burger, F. S. Cataliotti, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi and M. Inguscio, *Europhys. Lett.* **57**, 1 (2002).
- [8] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 080403 (2001).
- [9] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160405 (2001).
- [10] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250402 (2003).
- [11] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **429**, 277 (2004).
- [12] T. Kinoshita, T. Kinoshita, T. Wenger, D. S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [13] L. Tonks, *Phys. Rev.* **50**, 955 (1936); M. Girardeau, *J. Math. Phys* **1**, 516 (1960).
- [14] E.H. Lieb and W. Liniger, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963); E. H. Lieb, *ibid*, **139**, 1616 (1963).
- [15] M. Gaudin, *Phys. Rev A*, **4**, 386 (1971).
- [16] C. N. Yang and C. P. Yang, *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969).

- [17] C. N. Yang, Phys. Rev. Lett, **19**, 1312 (1967).
- [18] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998); V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett **86**, 5413 (2001).
- [19] D. S. Petrov, G.V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).
- [20] M. D. Girardeau, E. M. Wright, J. M. Triscari, Phys Rev. A **63**, 033601 (2001); M. D. Girardeau, E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. **84**, 5239 (2001).
- [21] M. Rigol, A. Muramastu, G. G. Batrouni and R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett **91**, 130403 (2003); M. Rigol, and A. Muramastu, Phys. Rev. A **69**, 053612 (2004); M. Rigol, and A. Muramastu, Phys. Rev. Lett **94**, 240403 (2005).
- [22] E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley, and X. Qi, Phys. Rev. Lett. **85**, 1146 (2000).
- [23] W. M. Liu, B. Wu, X. Zhou, D. K. Campbell, S.T. Chui, and Q. Niu, Phys. Rev. B **65**, 172416 (2002).
- [24] N. J. van Druten and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **79**, 549 (1997); 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, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [25] W. Hänsel, P. Hommelhoff, T. W. Hänsch and Reichel, Nature **413**, 498 (2001).

## 第二章 玻色-爱因斯坦凝聚体的隧穿劈裂

玻色-爱因斯坦凝聚在双势阱[1-5]和周期光格子[6-10]中的实验实现引起了众多科学家研究与凝聚体的超流性相关的各种宏观量子现象的强烈兴趣，例如，玻色约瑟夫森结[11-14]，原子干涉仪[4]，量子波导等[2]。F. Dalfovo 首先建议在由势垒连接的双势阱中观察直流和交流约瑟夫森效应，通过在两个阱中分别装载不同数目的原子，两个阱中的原子就会有不同的化学势[11]。但第一次观察到振荡原子流的实验证据是在激光驻波构成的光格子中[15]，类似于一系列耦合的一维约瑟夫森结[7]。M. Albiez 等人在双势阱中实现了单个约瑟夫森结，并观察到了隧穿现象和早已被预言的“宏观量子自陷俘”现象，这是一种由于玻色原子之间的相互作用导致的奇特的非线性现象[16]。近期，在技术上可以把一个单光阱变形后形成双势阱，这样就能使一团玻色凝聚体相干分离，处于不同的势阱中，它可以作为研究凝聚体的隧穿现象的模型，并且也为束缚原子干涉仪提供了很好的证据[4, 5]。在双势阱关闭后，凝聚体将自由扩散并发生交叠，实验上可以观察到明显的干涉条纹。双组分 BEC 之间的位相差也是许多实验和理论研究的对象。总之，相互耦合的 BEC 之间的相干性研究是一个非常有意义的课题。

实验上已经证实，BEC 在双势阱中的相干隧穿导致其宏观基态的能级劈裂和宏观量子相干[1, 4]。最近，W. Li 等在“相位”表示中用周期瞬子方法求解了弱耦合凝聚体的能级劈裂和能带结构[17]。这表明，该方法不但是计算单粒子隧穿率的强大的工具，而且对于稀薄玻色气体也是一个有效的近似方法[18]。然而，它并不能够显式地考虑 Gross-Pitaevskii 方程中描述原子间相互作用的非线性项[19]。众所周知，随着玻色凝聚中原子数目的增加，原子间的非线性相互作用效应将会越来越重要。因此，为了得到精确的结果，有必要求助于数值的方法。在本章，将通过数值求解 Gross-Pitaevskii 方程，得到对称双势阱和一维周期光格子中玻色-爱因斯坦凝聚体的基态能级劈裂的精确结果，并讨论能级劈裂与化学势和原子间相互作用强度的关系，并且将计算应用到具体的实验当中，研究原子间的非线性相互作用对能级劈裂的影响。

另外，尽管 GP 方程的数值解法已经非常成熟，这并不妨碍我们寻求有效的解析方法。周期瞬子方法是一个非微扰方法，它的优点是不仅能够对隧穿现象给予很好

的描述，而且能在量子场论的背景下充分地理解隧穿现象的物理本质。实践证明，在许多研究领域，它都是一个很好的研究工具，例如，自旋隧穿，核泡，弦理论等，重要的是它能用来考察这些系统在有限温度下的行为。计算表明，在实验的参数区域，用周期瞬子方法计算对称双势阱和周期光格子中 BEC 的隧穿劈裂是非常可靠的。本章也将比较瞬子方法计算的结果相对精确数值结果的偏离。

为了计算的方便，本文的讨论将限于弱相互作用区域的一维 BEC（准一维 BEC），其中径向的单粒子能级间隔大于原子间的相互作用能。并且为了原子能在轴向充分的运动，要求实验中轴对称形磁光阱在轴向有足够的长度[20]。

本章首先简要介绍 BEC 在外势阱中的平均场理论，其次利用周期瞬子方法和数值方法计算 BEC 在对称双势阱和周期光格子中宏观基态的能级劈裂，最后给出结论和小结。

## 第一节 一维 Gross-Pitaevskii 方程

### 1.1 Gross-Pitaevskii 方程

为了研究相互作用的非均匀玻色气体，必须借助于 Bogoliubov 理论对于场算符的一般描述，在超冷原子气体中，当发生玻色-爱因斯坦凝聚时，宏观数目的原子聚集在基态，系统的基态可以用宏观波函数  $\Psi(x,t)$  来描述，它扮演着序参量的角色。形式上，这只是经典场对算符的简单替代，但本质上这个变换有非常深刻的物理意义。这种替代类似于用量子电动力学描述经典电磁场时将过渡到经典的电场和磁场的函数，它们满足麦克斯韦方程组。需要注意的是，对于低维玻色气体，它不完全适用，但是，仍然可以用来描述弱相互作用的一维玻色气体。

凝聚玻色气体的宏观波函数  $\Psi(x,t)$  满足的含时薛定鄂方程可以用变分法得到。描述系统的能量泛函是

$$E[\Psi] = \int \left( \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\Psi}{dx} \right|^2 + V_{\text{ext}}(x,t) |\Psi|^2 + \frac{g_{1d}}{2} |\Psi|^4 \right) dx, \quad (1.1)$$

其中，积分中的第一项是凝聚动能，第二项是外势，最后一项是平均场相互作用能。由作用量满足稳定性条件

$$\delta \left[ -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi dx dt + \int E dt \right] = 0 \quad (1.2)$$

得到：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\delta E}{\delta \Psi^*(x,t)}, \quad (1.3)$$

把 (1.1) 代入 (1.3) 即可得到宏观波函数满足非线性薛定鄂方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x,t) + g_{1d} |\Psi(x,t)|^2 \right) \Psi(x,t). \quad (1.4)$$

该方程的三维形式由 Gross 和 Pitaevskii 于 1961 年分别得到，所以称为 Gross-Pitaevskii 方程 (GP 方程)，当系统处于定态时，宏观波函数随时间的演化满足：

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (1.5)$$

含时部分由化学势决定

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}. \quad (1.6)$$

上式表示，化学势是系统中每增加一个原子所需要的能量，它的值由归一化条件：

$$\int |\psi(x)|^2 dx = N \quad (1.7)$$

决定。而定态波函数满足约化的 GP 方程：

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) + g_{1d} |\psi(x)|^2 \right) \psi(x) = \mu \psi(x), \quad (1.8)$$

这里已经假定外势场不含时，在本章  $g_{1d}$  取第一章 (2.15) 式的形式 [21, 22]。从 (1.8)

式可以看出，如果已知系统的波函数，则化学势可以由哈密顿量  $H$  的期望值求得：

$$\mu = \langle \psi | H | \psi \rangle / N, \quad (1.9)$$

其中哈密顿量为：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) + g_{1d} |\psi(x)|^2. \quad (1.10)$$

接下来讨论方程 (1.4) 中的守恒量。首先，从归一化条件可以看出，系统的粒子数  $N$  是守恒的。用  $\Psi^*$  左乘方程 (1.4) 并且减去得到的表达式的复共厄，经过简单的代数运算可以得连续性方程：

$$\partial\rho/\partial t + \frac{dj}{dx} = 0, \quad (1.11)$$

其中使用了同前一章相同的气体密度的定义，并且引入了流密度：

$$j(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) = \rho \frac{\hbar}{m} \frac{dS}{dx}. \quad (1.12)$$

$S$  是波函数的位相，可以定义为：

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\rho(x,t)} e^{iS(x,t)}. \quad (1.13)$$

方程 (1.12) 表明

$$v(x,t) = \frac{\hbar}{m} \frac{dS}{dx} \quad (1.14)$$

是凝聚体的流速度，它是个无旋量，这也是超流的一个典型特征。关于波函数的位相的方程可以把 (1.13) 式代入 (1.4) 式得到，即

$$\hbar \partial S / \partial t + \frac{d}{dx} \left( V_{ext} + g_{1d} \rho + \frac{1}{2} m v^2 \right) = 0.$$

加上“量子压力”项（海森堡不确定性关系的直接结果），即有

$$\hbar \partial S / \partial t + \frac{d}{dx} \left( V_{ext} + g_{1d} \rho + \frac{1}{2} m v^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{d^2 \sqrt{\rho}}{dx^2} \right) = 0. \quad (1.15)$$

可以看到，上式同我们在第一章用密度泛函理论得到的结果是一致的。应该指出，连续性方程和关于位相的方程组成的耦合方程组严格等价于原始的 Gross-Pitaevskii 方程。

另外，在外势不含时的情况下，系统的总能量是守恒量，如果没有外场，则总动量也守恒。

## 1.2 外势

本章将研究对称双势阱和周期光格子这两种外势，阱中的原子可以在不同的势阱之间隧穿，这样，不同势阱中的原子相互耦合并导致能级劈裂。将考虑如下形式的对称双势阱：

$$V_{dw}(x) = V_0 \left( 1 - x^2 / x_0^2 \right)^2. \quad (1.16)$$

其中  $V_0$  是势垒的高度， $\pm x_0$  是双势阱的两个最小值位置。为了两个阱中的波函数只在

经典禁区 ( $\mu < V$ ) 有极小的交叠, 势垒要足够高。它的形状如图 2-1 所示。Y. Shin 等人用射频信号控制声光调制器对光阱“裁剪”, 实现了用双势阱束缚具有完全位相相干性的玻色凝聚气体[4]。图 2-2 是实验示意图。首先把发生凝聚的气体装载到单光阱中, 然后线性增加俩束射频信号的频率差驱动声光调制器, 因为形成单光阱的激光束会穿过声光调制器, 单光阱就会变成对称双势阱, 势阱中的原子也相干分裂为俩团相同数目的凝聚气体。

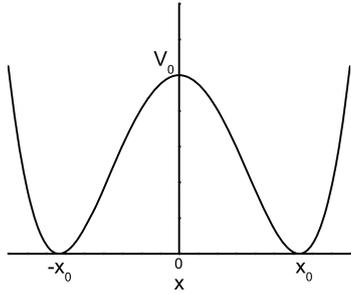


图 2-1 对称双势阱示意图。  $V_0$  是势垒的高度,  $\pm x_0$  是双势阱的阱底。

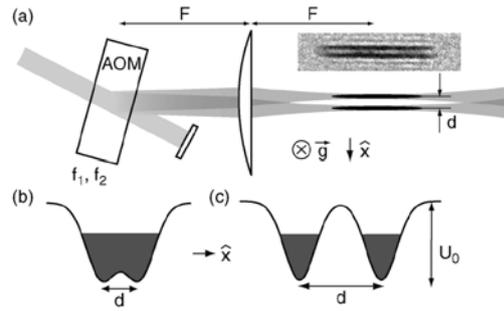


图 2-2 (a) 对称双势阱的光学装置示意图。(b) 初始单阱。(c) 形成的双阱。

而这里考虑的周期光格子有如下类似于量子场论中广泛使用的周期场模型 sine-Gordon 势的形式[23]:

$$V_{ol} = V_0 \cos^2(k_0 x). \quad (1.17)$$

一维周期光格子可以由激光驻波形成,  $k_0$  是激光的波矢,  $V_0$  是势垒的高度。首先在磁阱或者光阱中产生雪茄形 BEC, 然后再在一维 BEC 的轴向叠加上光格子即可产生 (1.17) 式表示的周期势。原子在周期势中的量子隧穿会导致能带的形成。原子在以上两种外势中的量子隧穿问题已经用路径积分的方法得到了精确结果[23], 其中包括基态和激发态, 但是忽略了非线性相互作用, 原子间的相互作用被包括在有限的化学势中, 隧穿在有限化学势上发生。

### 1.3 无量纲化

为了简化方程, 要对方程进行无量纲处理。定义能量单位  $\hbar\omega_0$  和长度单位  $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ , 其中  $\omega_0 = \sqrt{V''(x_b)}/m$  是势阱底的小振动频率,  $x_b$  为阱底的位置, 对于

对称双势阱  $x_b = \pm x_0$ ，对于周期光格子  $x_b = \frac{1}{k_0}(2m+1)\pi$  ( $m = 0, 1, 2, \dots$ )。而无量纲波

函数以  $\sqrt{1/a_0}$  为单位，也归一化为  $N$ 。这样，GP 方程取无量纲的形式：

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) + g_{1d} |\psi(x)|^2 \right] \psi(x) = \mu \psi(x). \quad (1.18)$$

其中，势垒高度  $V_0$  和化学势  $\mu$  单位为  $\hbar\omega_0$ ，而非线性相互作用常数为  $g_{1d} = 2a_s a_0 / d_{\perp}^2$ 。

另外，为了使问题得到简化，控制外势的参数  $x_0 = \sqrt{8V_0}$  和  $k_0 = 1/2\sqrt{V_0}$ ，这样只要一个可调参数势垒高度  $V_0$  就可以决定外势形状，隧穿劈裂只对它有依靠。通常，光格子的势垒高度以原子的反冲能量  $E_r = \hbar^2 k_0^2 / 2m$  为能量单位，但是也很容易转换为这里的能量单位。

## 第二节 玻色-爱因斯坦凝聚体的隧穿劈裂

在这一节我们考虑玻色-爱因斯坦凝聚体在对称双势阱和周期光格子中的基态的隧穿劈裂，我们将给出周期瞬子方法及精确的数值结果，并比较周期瞬子结果相对精确数值解的偏离。

### 2.1 隧穿劈裂的周期瞬子解

束缚在相邻势阱中的原子由于量子隧穿会导致基态的能级劈裂  $\Delta\mu$ ，对应两个宏观波函数  $\psi_e$  和  $\psi_o$ ，它们有不同的宇称，前者为偶宇称而后者为奇宇称，分别对应能级劈裂后的下能级和上能级，可以用势阱中的局域波函数表示为：

$$\begin{aligned} \psi_e &= (\psi_+ + \psi_-) / 2, \\ \psi_o &= (\psi_+ - \psi_-) / 2, \end{aligned} \quad (2.1)$$

而对应的化学势为  $\mu \pm \Delta\mu/2$ ， $\psi_{\pm}$  表示不同势阱中的波函数。当原子间相互作用常数为零时，问题约化为线性薛定鄂方程的解，哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x). \quad (2.2)$$

当原子间有相互作用时，即使在零温时系统也会有有限的化学势，隧穿会在一个更高的能级发生而不是单粒子系统的基态。隧穿劈裂可以用周期瞬子方法[19, 23, 24]计算出来，通式表示为：

$$\Delta\mu = \frac{\omega(\mu)}{\pi} \exp[-S(\mu)], \quad (2.3)$$

其中  $S(\mu)$  为虚时作用量，它由原子在经典禁区 ( $\mu < V(x)$ ) 的位形决定，即从拐点  $-b$  到  $b$ ：

$$S(\mu) = \int_{-b}^b \sqrt{2(V(x) - \mu)} dx. \quad (2.4)$$

前因子中的  $\omega(\mu)$  是原子在经典允许区 ( $\mu > V(x)$ ) 的周期振动频率，由原子在经典允许区的位形决定，即从拐点  $b$  到拐点  $a$ ：

$$\omega(\mu) = \frac{\pi}{\int_b^a \frac{dx}{\sqrt{2(\mu - V(x))}}}. \quad (2.5)$$

隧穿率的前因子可以由路径积分方法[25]计算得到，在计算跃迁幅时，要用到 WKB 波函数[11]，所以要求势垒足够高。

当外势为对称双势阱时，能级劈裂为

$$\Delta\mu = \frac{\sqrt{1+u}}{2\kappa(k')} \exp(-W). \quad (2.6)$$

其中

$$W = \frac{16V_0}{3} (1+u)^{1/2} (\mathcal{E}(k) - u\mathbf{K}(k)).$$

这里  $\mathbf{K}(k)$  和  $\mathcal{E}(k)$  分别为第一类和第二类完全椭圆积分，其中的参数定义为

$$u = \sqrt{\mu/V_0},$$

$$k^2 = (1-u)/(1+u)$$

和

$$k'^2 = 1 - k^2.$$

当不包含非线性相互作用时，无量纲的化学势为  $1/2$ ，而 (2.6) 式为：

$$\Delta\mu = \sqrt{\frac{2}{\pi}} 8V_0^{1/2} \exp\left(-\frac{16V_0}{3}\right). \quad (2.7)$$

该式同真空瞬子方法的结果一致，周期瞬子方法的优点就是不仅可以考虑基态的量子隧穿，而且可以考虑激发态的量子隧穿问题，在这里它体现为可以把原子间的相互作用能隐式地包括到化学势当中。

当外势为周期光格子时，原子在势阱之间的隧穿会导致能级分裂为多个子能级，子能级的数目等于周期势的势阱数目。Bloch 定理告诉我们，在紧束缚近似下，周期势中的系统能带结构为：

$$E(\theta) = \mu + \frac{\Delta\mu}{2} \cos(\theta a), \quad (2.8)$$

其中  $\Delta\mu$  为能量为  $\mu$  的量子态的能带宽度， $a = \lambda/2$  是周期势的晶格常数，Bloch 波矢  $\theta$  在周期势的第一布里渊区  $[-\pi/a, \pi/a]$ 。  $\psi_e$  和  $\psi_o$  分别对应能带的带底和带顶的宏观波函数，能带宽度为

$$\Delta\mu = \frac{1}{2\sqrt{2}\mathcal{K}(k)} \exp(-W), \quad (2.9)$$

其中

$$W = 4\sqrt{2}V_0 (\mathcal{E}(k) - u\mathcal{K}(k)). \quad (2.10)$$

并且有参数  $k^2 = 1 - \mu/V_0$ 。

## 2.2 隧穿劈裂的精确数值解及其应用

### 2.2.1 数值方法

在研究能谱和束缚在外势中的 BEC 的动力学方面有各种各样的数值方法。本文将要求解玻色凝聚气体的基态在隧穿劈裂以后的奇态波函数  $\psi_o$  和偶态波函数  $\psi_e$ ，然后计算对应的能量期望值  $\mu_o$  和  $\mu_e$  并由  $\Delta\mu = \mu_o - \mu_e$  得到能级劈裂值。这里将采用 Gauss-Seidel 方法求解方程 (1.18)。从以下扩散常数为  $\frac{1}{2}$  的扩散方程出发：

$$\partial_t \psi = -H \psi =: \frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{1}{2} \rho, \quad (2.11)$$

其中  $\rho = 2(V_{ext}(x) + g_{1d}|\psi(x)|^2)$  表示扩散方程的源项。当  $t \rightarrow \infty$  时，波函数趋于稳定解，它关于时间的微分为零。事实上，方程 (2.11) 可由非线性方程 (1.18) 做虚时变换得到。初始给定一个任意的试探波函数，让它在虚时空间中演化，即可得到基态。假定有一个含时波函数  $\psi(x, \tau)$ ， $\tau$  是虚时变量，随着时间的演化，收敛到精确的基态解  $\psi(x, \infty) \equiv \psi(x)$ 。波函数随时间的演化满足方程：

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(x, \tau) = -\frac{\bar{\delta} E}{\bar{\delta} \psi^*}, \quad (2.12)$$

这里  $\bar{\delta}$  表示泛函微分要保证波函数的归一化，该方程在波函数空间定义了一个轨迹，虚时间只是标记不同的位形，在每一个时间步波函数沿梯度  $-\bar{\delta} E / \bar{\delta} \psi$  方向移动。这里的泛函微分由下述微分再加上归一化条件得到

$$\frac{\delta E}{\delta \psi^*} = H\psi(x, \tau).$$

通过自洽计算，最终得到能量最小值，即  $\partial \psi / \partial \tau = 0$  或者  $H\psi = \mu\psi$ ，这与方程 (2.11) 一致。可以选一个任意的时间步，并按如下方程演化：

$$\psi(x, \tau + \Delta\tau) \approx \psi(x, \tau) - \Delta\tau H\psi(x, \tau). \quad (2.13)$$

收敛速度和步长  $\Delta\tau$  的选择有关。本文将使用 Crank-Nicholson 算法对方程 (2.11) 进行离散化，选择  $h$  作为空间步长， $\Delta$  作为时间步长，则有：

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta} = \frac{1}{2h^2} \left[ (\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n) \right] - \frac{1}{2} \left[ V_i(x_i) + g_{1d} |\psi_i^n|^2 \right] (\psi_i^{n+1} + \psi_i^n). \quad (2.14)$$

其中  $\psi_i^n = \psi(x_i, t_n)$  表示在  $x_i = ih$  和  $t_n = n\Delta$  点的精确解。这种离散化方式是稳定的，幺正的，而且在时间域和空间域上都可以达到二阶精度 [27, 29]。在一个  $s$  个格点的格子上，如果满足齐次边条件，方程 (2.14) 表示三对角方程组，它可以用 LU 分解法求解，其中也要用到向前回代以及向后回代算法；如果满足周期边条件，方程 (2.14) 表示周期三对角方程组 ( $i = 2, 3, \dots, s-1$ )，它可以用 Sherman-Morrison 公式求解 [27]。对于对称双势阱，选择空间步长  $h = 0.01$ ，时间步长  $\Delta = 0.001$ ，空间格点数

$s = 2400$ 。对于周期光格子，时间步长为  $\Delta = 0.02$ ，格点数为  $s = 2500$ 。这些参数的选择要满足 Crank-Nicholson 算法的稳定性标准。

选择 (2.1) 式中的波函数为初始试探波函数 ( $t=0$ )， $\psi_{\pm}$  为没有相互作用时的左阱和右阱中的简并本征态。在我们的程序当中，初始为偶宇称的试探波函数最终将演化为偶宇称的本征态，对应双阱势基态的下能级以及周期光格子势的基态的能带带底；初始为奇宇称态的试探波函数将演化为奇宇称的本征态，对应双阱势基态的上能级以及周期光格子势的基态能带带顶。在演化的每一步考虑波函数的边条件和归一化条件。为了测试程序的有效性，我们计算了外势为球谐势的 GP 方程，得到和文献一致的数值结果 [30]。

### 2.2.2 精确数值解及其应用

作为实例，我们首先考虑文献 [12] 中的物理模型，由束缚在双势阱中的  $^{87}\text{Rb}$  原子形成的弱耦合的 BEC，势阱的束缚频率为  $\omega_0 = 100 \text{ Hz}$ ，对应的谐振长度为  $a_0 = 2.70 \times 10^{-4} \text{ cm}$ 。 $^{87}\text{Rb}$  原子的 s-波散射长度处于区域  $85a_{\text{Bohr}} < a_{sc} < 140a_{\text{Bohr}}$ ，其中  $a_{\text{Bohr}}$  为玻尔半径 [31]，这里取  $a_{sc} = 100a_{\text{Bohr}}$ 。本章只考虑弱相互作用区域 [32] 的非线

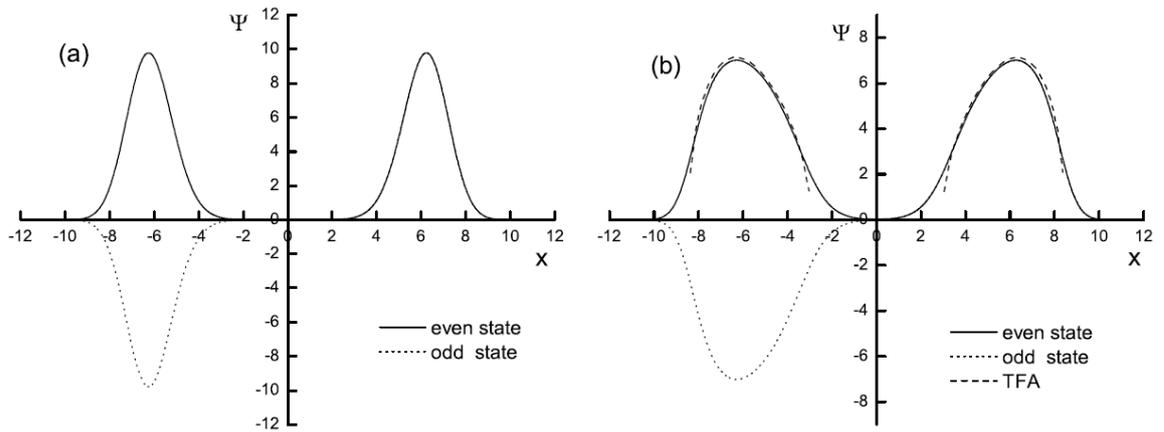


图 2-3 对称双势阱中的凝聚波函数， $V_0 = 5$ 。(a) 对称 (实线) 和反对称 (虚线) 的基态波函数， $g_{1d} = 0$ 。(b) 基态波函数和 Thomas-Fermi 解 (划线)， $g_{1d} = 0.06$ 。

性相互作用对能级劈裂的影响，所以取横向束缚频率  $\omega_{\perp} = 2\pi \times 250$  Hz，相应的径向长度单位是  $d_{\perp} = 6.81 \times 10^{-4}$  cm，原子间的相互作用常数是  $g_{1d} = 0.06$ （单位： $\hbar\omega_0$ ）。本章选择能量单位  $\hbar\omega_0$ ，长度单位  $a_0$ ，所有的可调参数只有  $V_0$  [33]。

作为比较，首先处理没有相互作用的情况。当  $V_0 = 5$ ，周期瞬子方法得到的解析结果，即 (2.3) 式，值为  $\Delta\mu = 3.74 \times 10^{-11}$ ，而数值结果为  $\Delta\mu = 3.60 \times 10^{-11}$ ，这再次证明了我们的数值程序，波函数如图 2-3a 所示，实线对应偶态波函数，虚线对应奇态波函数。本文主要研究凝聚体的基态，所以，对我们的计算来说，选择  $s = 2400$  个格点足够了。对于包括原子间相互作用  $g_{1d} |\psi(x)|^2$  的情况，假定有 344 个原子在势垒高度  $V_0 = 5$  的双势阱中凝聚，在图 2-3b 中，我们画了 BEC 的奇态波函数和偶态波函数。同时，图中给出了 Thomas-Fermi 近似下的波函数（划线）：

$$\psi_{TF} = \left[ (\mu - V(x)) / g_{1d} \right]^{1/2}. \quad (2.15)$$

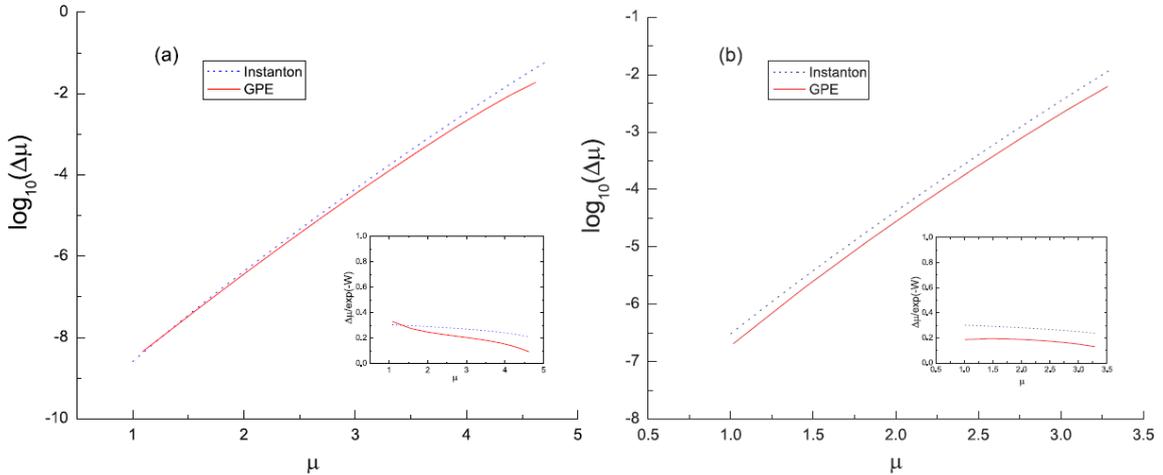


图 2-4 对称双势阱中的 BEC 基态能级劈裂与化学势的关系，GP 方程的数值解用实线表示，周期瞬子解用虚线表示。(a)  $V_0 = 5$ 。(b)  $V_0 = 4$ 。插图：能级劈裂与解析结果指数因子的比值，实线：GP 方程的数值解  $\Delta\mu_{\text{GPE}} / \exp(-W)$ ；虚线：周期瞬子解  $\Delta\mu_{\text{Instanton}} / \exp(-W)$ 。

它只有在  $V(x) < \mu$  的区域波函数不为零。

接下来对对称双势阱中 BEC 能级劈裂的周期瞬子结果和精确数值结果进行比较。图 2-4 为两种方法对不同势垒高度  $V_0 = 5$  (图 2-4a) 和  $V_0 = 4$  (图 2-4b) 的能级劈裂值, 因为能级劈裂通常都比较小, 所以, 图中给出了能级劈裂值以 10 为底的对数。在后边的图 2-5 和图 2-7 中也给出了能级劈裂以 10 为底的对数值。图中显示, 由数值方法和周期瞬子方法得到的能级劈裂都随化学势的增加而变大。为了显示出两种结果的差别, 在插图中给出了能级劈裂值与解析结果的指数因子的比值, 对于周期瞬子方法, 它对应能级劈裂值的前因子。这里可以看出, 周期瞬子结果的前因子随化学势的增加而增加, 这也是周期瞬子方法不同于其他解析方法的优点, 其他方法计算得到的前因子通常只是常数。计算表明, 两种方法的结果总是有相同的数量级并且彼此非常接近, 即使在包含非线性相互作用的情况下, 周期瞬子方法也可以得

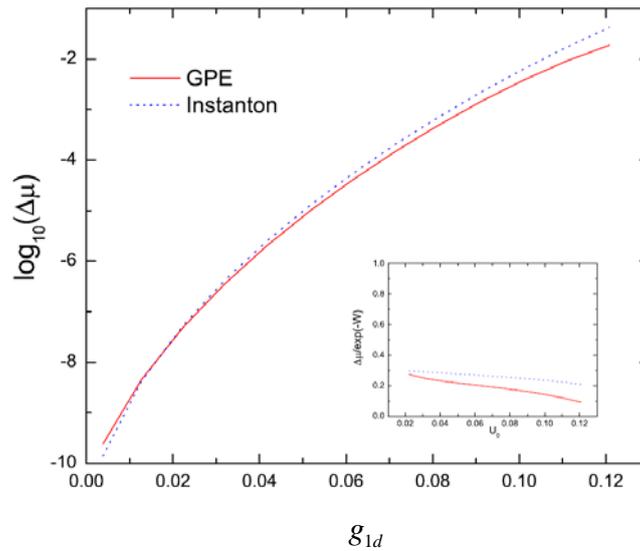


图 2-5 对称双势阱中 BEC 的能级劈裂与相互作用常数  $g_{1d}$  的关系, GP 方程的数值解用实线表示, 周期瞬子解用虚线表示,  $V_0 = 5$ 。插图: 能级劈裂与解析结果的指数因子的比值, 实线: GP 方程的数值解  $\Delta\mu_{\text{GPE}} / \exp(-W)$ ; 虚线: 周期瞬子解  $\Delta\mu_{\text{Instanton}} / \exp(-W)$ 。

到足够精确的能级劈裂值。同时, 可以看出, 在整个化学势区域, 周期瞬子结果总是略大于精确结果。能级劈裂随相互作用常数  $g_{1d}$  的变化也显示出同样的特点(图 2-5

及其插图)。值得强调的是,如图 2-4 和图 2-5 所示,周期瞬子方法计算得到的结果中,前因子是随化学势的改变而变化的。BEC 在不同势阱之间的隧穿率同原子数目和原子间的相互作用有关,对于不同数目和种类的 BEC,以及不同的束缚势,处于不同势阱中的凝聚体有不同的耦合强度。

对于光格子中的 BEC,我们仍选择和对称双势阱相同的参数,同一势阱中原子的相互作用常数为  $g_{1d} = 0.06$ ,每个阱中有 150 个  $^{87}\text{Rb}$  原子。势垒高度为  $V_0 = 5$  的偶态波函数(实线)和奇态波函数(虚线)如图 2-6 所示,可以看到,偶态波函数是对称的,而奇态波函数具有最大反对称性,即:每个势阱中的波函数都关于它相邻阱中的波函数反对称。用和对称双势阱同样的方法,图 2-7 给出了不同势垒高度下,能级劈裂与化学势的关系,同样,周期瞬子方法和精确数值解在相同的数量级。

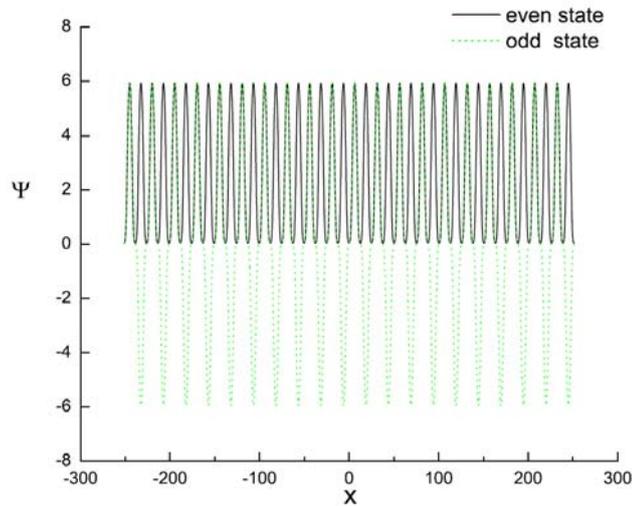


图 2-6 光格子中的 BEC 的对称波函数(实线)和反对称波函数(虚线),  $V_0 = 5$ 。

比较图 2-4 和图 2-7,可以看出,当考虑原子之间的相互作用时,对于双势阱中的 BEC,周期瞬子结果略大于精确结果;而对于周期光格子中的 BEC,则正好相反,周期瞬子结果略小与精确结果。这种差别与束缚势的结构有关,例如,光格子中的原子可以向相邻的两个方向的势垒隧穿,而双势阱中的原子的隧穿路径则只能是从一个势阱向另一个势阱。因此,BEC 在光格子中的隧穿劈裂不同于对称双势阱。尽管如此,用周期瞬子方法计算由于隧穿引起的 BEC 的基态能级劈裂值仍然是一个很好的选择。

## 2.2.3 应用

最后，把上述方法应用到一个实际的例子。最近，M. Albiez 等人用束缚在双势阱中的弱耦合 BEC 实现了单个玻色约瑟夫森结[16]。在此之前的实验中，双势阱中的玻色凝聚体的隧穿动力学的时间标度为几千秒。相比之下，他们的实验装置使得非线性隧穿时间在 50ms 的数量级，这使得首次直接观察到单个玻色约瑟夫森结的非线性隧穿动力学成为可能。这里，要强调的是，在三维系统和一维系统中隧穿有很

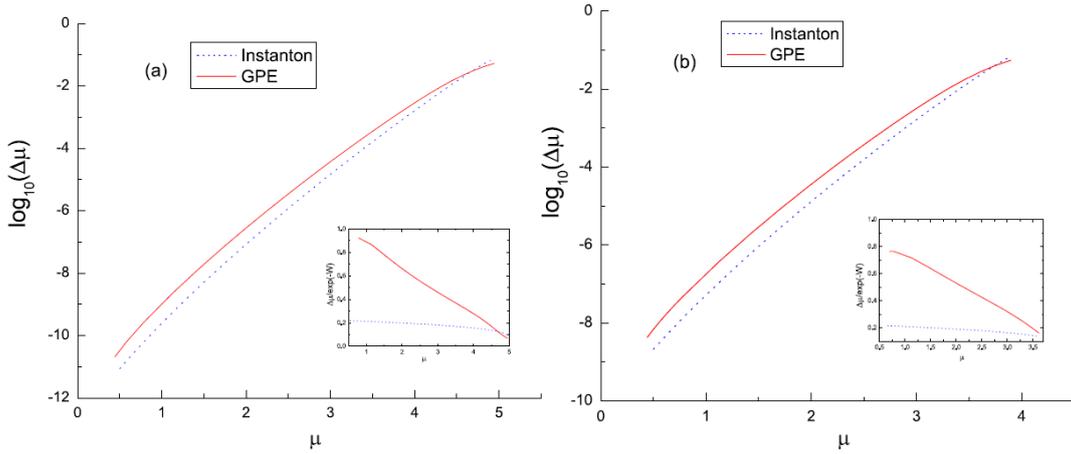


图 2-7 光格子中的 BEC 基态能级劈裂与化学势的关系，GP 方程的数值解用实线表示，周期瞬子解用虚线表示。(a)  $V_0 = 5$ . (b)  $V_0 = 4$ . 插图：能级劈裂与解析结果的指数因子的比值，实线：GP 方程的数值解  $\Delta\mu_{\text{GPE}} / \exp(-W)$ ；虚线：周期瞬子解  $\Delta\mu_{\text{Instanton}} / \exp(-W)$ 。

大的差别。在不同势阱中的凝聚体之间的“隧穿矩阵元”  $K$  [12]，是一个非常重要的参数，它和能级劈裂存在如下关系：

$$K = \Delta\mu/2. \quad (2.16)$$

对于不同的参数  $\Lambda = Ng_{1d}/2K$ ，都可以对文献[16]中的方程进行数值积分得到振荡周期  $T$ 。在三维情况下， $K$  的数量级通常是 0.1nK 或者 25Hz，因此，参数  $\Lambda$  的值比较小， $\Lambda \sim 10$ 。而在一维情况下，由于在轴向以外的另外两个方向的强烈束缚极大地抑制了原子在不同势阱之间的隧穿，从而导致凝聚体间的耦合更弱。计算表明，参数  $K$  的特征值为  $10^{-3} \sim 1\text{Hz}$ ，而  $\Lambda$  有较大的值  $10^3 \sim 10^6$ 。这样，原子更容易占据在

一个势阱中，导致观察到约瑟夫森振荡变得困难，当  $\Lambda \sim 10^3$  时，初始的布居数差应该小于 0.06。简单的计算表明，对于一个  $N = 600$ ， $g_{1d} = 0.06$  和  $V_0 = 5$  的系统，约瑟夫森振荡的周期为 2ms，这远小于三维的实验测得的振荡周期。

另外，根据计算，系统的能级劈裂值要远远的低于化学势，并且随着化学势的增加指数增加。而由于量子隧穿效应的存在，势垒两侧 BEC 具有宏观位相相干性，这使得不同的凝聚体在叠加时会产生可直接观测的干涉条纹。

### 第三节 小结

在这一章，我们首先介绍了一维 Gross-Pitaevskii 方程，接着运用周期瞬子方法和精确的数值方法讨论了弱耦合的 BEC 在对称双势阱和周期光格子中的基态能级劈裂，并对两种方法得到的结果进行了比较。计算表明，周期瞬子方法是计算 BEC 的隧穿劈裂的一个非常好的工具。其根本原因在于，势垒区的非线性相互作用对量子隧穿的效应非常小，甚至可以忽略，它的总体效应是贡献一个有限的化学势。最后，作为实例，计算了一维单个玻色约瑟夫森结的振荡周期。

## 参 考 文 献

- [1] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [2] E. A. Hinds, C. J. Vale, and M. G. Boshier, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1462 (2001).
- [3] T. G. Tiecke, M. Kemmann, Ch. Buggle, I. Shvarchuck, W. von Klitzing and J. T. M. Walraven, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **5**, S119 (2003).
- [4] Y. Shin, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard, and A. E. Leanhardt, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 050405 (2004).
- [5] Y. Shin, M. Saba, A. Schirotzek, T. A. Pasquini, A. E. Leanhardt, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 150401 (2004).
- [6] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Science* **282**, 1686 (1998).
- [7] F. S. Cataliotti, S. Burger, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi, A. Trombettoni, A. Smerzi, and M. Inguscio, *Science* **293**, 843 (2001).
- [8] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [9] M. Kramer, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 180404 (2002).
- [10] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **429**, 277 (2004).
- [11] F. Dalfovo, L. Pitaevskii and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54**, 4213 (1996).
- [12] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S. R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4950 (1997).
- [13] S. Giovanazzi, A. Smerzi, and S. Fantoni, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4521 (2000).
- [14] L. Salasnich, A. Parola, L. Reatto, *Phys. Rev. A* **60**, 4171 (1999).

- [15] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [16] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M. K. Oberthaler, *cond-mat/0411757*.
- [17] W.-D. Li, Y.-B. Zhang, J.-Q. Liang, *Phys. Rev. A* **67**, 065601 (2003).
- [18] W.-M. Liu, W.-B. Fan, W.-M. Zheng, J.-Q. Liang, and S. T. Chui, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 170408 (2002).
- [19] Y. Zhang and H. J. W. Müller-Kirsten, *Phys. Rev. A* **64**, 023608 (2001).
- [20] A. Gorlitz et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [21] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3745 (2000).
- [22] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [23] J.-Q. Liang and H. J. W. Müller-Kirsten, *Phys. Rev. D* **46**, 4685 (1992); *ibid*, *D* **51**, 718 (1995).
- [24] 张云波, 博士论文: 周期瞬子方法及其在磁性宏观量子隧穿中的应用, 中国科学院物理研究所 (1998)。
- [25] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integratio* (Wiley-Interscience, New York, 1981) .
- [26] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, London, 2001); L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Oxford University Press, New York, 2003); A. Minguzzi, S. Succi, F. Toschi, M. P. Tosi, and P. Vignolo, *Phys. Rep.* **395**, 223 (2004).
- [27] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd edition (Cambridge University Press, London, 1992).

- [28] P. A. Ruprecht, M. J. Holland and K. Burnett, *Phys. Rev. A* **51**, 4704 (1995).
- [29] S. K. Adhikari, *Phys. Rev. E* **62**, 2937(2000).
- [30] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 463 (1999); F. Dalfovo and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **53**, 2477 (1996).
- [31] J.R. Gardner, R.A. Cline, J.D. Miller, D.J. Heinzen, H.M.J.M.Boesten, and B.J. Verhaar, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3764 (1995).
- [32] L. Salasnich, A. Parola, L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002).
- [33] Y. Hao, J.-Q. Liang, and Y. Zhang, *Eur. Phys. J. D* **36**, 33 (2005).

### 第三章 一维旋量玻色气体的密度分布

玻色-爱因斯坦凝聚的实验实现[1]激起了许多新领域的研究。前一章所讨论的原子气体发生玻色-爱因斯坦凝聚时，所有原子占据同一个内部态，例如，钠原子的超精细态  $|F=1, m_F=-1\rangle$ 。BEC 相变导致一个非零的标量序参量—宏观波函数  $\psi(\vec{r}) = \langle \hat{\Psi}(\vec{r}) \rangle$ 。这样，单组分气体凝聚可以被看作一个简单且容易处理的模型，而不必考虑它的自旋。但是，碱金属的自旋并不为零，它的众多超精细态都是稳定的电子基态。磁阱中的原子气体，只有当原子处于弱场扫描态时，超精细态才可用。在通常情况下，原子气体中同时存在一个以上的弱场扫描态时，凝聚体会不稳定，但是，一些特定的态也可以形成稳定的多组分凝聚。相比之下，光阱中的 BEC 和原子的超精细结构无关。原子的自旋不再受到磁场束缚的限制，成为一个新的自由度，所有处于同一个超精细简并态的原子可以形成稳定的 BEC。这样的多组分凝聚可以用超精细自旋空间的矢量序参量描述，称为旋量玻色-爱因斯坦凝聚（旋量 BEC）。

由于自旋自由度的解放，旋量 BEC 有许多单组分 BEC 所没有的静态性质和动力学性质，表现出许多新奇的物理现象[2-9]，例如，自旋结构，自旋波，原子自旋之间的耦合，超流体之间的耦合，自旋畴的形成，原子在不同自旋畴之间的隧穿，以及外磁场对它们的影响，旋量气体的磁性也得到了广泛的研究。旋量 BEC 不同于其它的多组分 BEC，矢量序参量具有转动对称性，而且，原子可以在不同超精细态间跃迁。例如，对于总自旋  $F=1$  的旋量 BEC，由于原子之间的散射，可以有如下物理过程：

$$|m_F=0\rangle + |m_F=0\rangle \leftrightarrow |m_F=+1\rangle + |m_F=-1\rangle,$$

一个处于  $m_F=-1$  态的原子可以同另一个  $m_F=1$  的原子散射，产生两个  $m_F=0$  的原子，相反的过程也可以发生。

最初，旋量 BEC 主要用总自旋  $|F=1\rangle$  或者  $|F=2\rangle$  的  $^{87}\text{Rb}$  原子和  $^{23}\text{Na}$  原子实现。最近，斯图加特的 Tilman Pfau 组成功地实现了  $^{52}\text{Cr}$  BEC，它的核自旋  $I=0$ ，电子自旋  $J=3$ ，总自旋  $|F=3\rangle$ 。由于  $^{52}\text{Cr}$  的电子自旋是碱金属电子自旋的 6 倍，因此，它的偶极相互作用是碱金属的 36 倍。这样，原子间的偶极相互作用就会非常明显，自

旋相互作用和偶极相互作用对凝聚气体的交互影响使得凝聚体表现出更加丰富的结构和性质。计算表明， $^{52}\text{Cr}$  BEC 是一种量子自旋有序，而且，偶极相互作用与自旋角动量和轨道角动量的耦合会导致“爱因斯坦-德哈斯效应”和“Barnett 效应”。偶极旋量 BEC 的实验实现，无疑又为多组分玻色-爱因斯坦凝聚的研究注入了新的活力。

W. Zhang 和 L. You 在平均场理论下研究了准一维的雪茄形 BEC，通过求解有效的 nonpolynomial 薛定鄂方程，得到了它的基态和动力学性质[10]。众所周知，当系统处于强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域时，平均场理论不再适用[11-20]。本章主要介绍自旋-1 的一维玻色气体[21-24]，包括弱相互作用区域和强相互作用区域[25, 26]。并且给出各向异性的自旋自旋相互作用对旋量玻色气体的基态分布的影响。首先简要介绍自旋-1 的旋量 BEC，其次介绍一维旋量玻色气体，并用数值方法得到在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度分布。

## 第一节 旋量玻色-爱因斯坦凝聚

因为实验上的重要性和简单性，我们这里考虑  $|F=1\rangle$  的旋量玻色气体，但是所有的理论都可以扩展到更高的自旋。作为多组分 BEC 的一个特例， $|F=1\rangle$  的旋量玻色凝聚体可以用三分量的序参量描述：

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_0(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

下标  $i = +, 0, -$  表示原子分别处于超精细态  $|F=1, m_F = +1, 0, -1\rangle$ 。多组分气体的二次量子化形式为：

$$H = \int d^3\mathbf{r} \Psi_i^+(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \Psi_i(\mathbf{r}) + \frac{g_{ij,kl}}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \Psi_i^+(\mathbf{r}_1) \Psi_j^+(\mathbf{r}_2) \Psi_k(\mathbf{r}_2) \Psi_l(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

其中要对重复指标求和，下标  $i, j, k, l$  表示不同的超精细态， $\Psi_i(\mathbf{r})$  ( $\Psi_i^+(\mathbf{r})$ ) 是场算符，表示在空间  $\mathbf{r}$  处湮灭（产生）一个  $i$  超精细态的原子。原子间的相互作用为接触

相互作用，系数  $g_{ij,kl}$  描述各种弹性和非弹性碰撞（不同态间的跃迁），这里不考虑偶极相互作用，它是长程相互作用。考虑到原子碰撞的交换对称性，时间反演对称性以及旋量 BEC 的转动对称性，原子间的相互作用情形可以极大地简化。自旋  $F_1$  和  $F_2$  的原子间的俩体相互作用只与总自旋  $f = F_1 + F_2$  有关。当只考虑 s-波散射时，原子间的相互作用为

$$U_{\text{int}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sum_f a_f P_f, \quad (1.2)$$

其中  $a_f$  是总自旋为  $f$  的原子间的散射长度，投影算符  $P_f$  把一对原子的波函数投影到总角动量为  $f$  的态。对于自旋为  $F$  的玻色子，总自旋可以取  $f = 0, 2, \dots, 2F$ 。因此，自旋  $F$  的旋量 BEC 可以有  $M = 2F + 1$  个不同的组分，描述原子间相互作用的参数  $g_{ij,kl}$  仅与  $F + 1 = (M + 1)/2$  个散射长度有关。对于自旋  $|F = 1\rangle$  的两个原子，有效相互作用有如下形式：

$$U_{\text{int}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) (U_0 P_0 + U_2 P_2). \quad (1.3)$$

其中  $U_{0,2} = 4\pi\hbar^2 a_{0,2}/m$ 。上式可以非常方便地用两个原子的角动量算符  $\mathbf{F}_1$  和  $\mathbf{F}_2$  表示出来。把算符  $\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2$  投影到总自旋空间，则有

$$\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 = \sum_{f=0,2} \frac{1}{2} [f(f+1) - F_1(F_1+1) - F_2(F_2+1)] P_f. \quad (1.4)$$

当总自旋  $f = 2$  时，标积  $\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2$  的本征值是 1，而当  $f = 0$  时，本征值是 -2。另外，有等式  $P_1 + P_2 = 1$ 。这样可以求得，投影到  $f = 2$  态的算符是  $P_2 = (2 + \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2)/3$ ，投影到  $f = 0$  态的算符是  $P_0 = (1 - \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2)/3$ ，(1.3) 式即可表示为：

$$U_{\text{int}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) (c_0 + c_2 \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2), \quad (1.5)$$

其中有  $c_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{2a_2 + a_0}{3}$  和  $c_2 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{a_2 - a_0}{3}$ 。这样，原子间的相互作用可以分为与

自旋无关的相互作用项（ $c_0$  项）和与自旋有关的相互作用项（ $c_2$  项），当  $c_2 < 0$  时，

与自旋有关的相互作用是铁磁的，当  $c_2 > 0$ ，与自旋有关的相互作用是反铁磁的。对于更高自旋  $F$  的原子气体，相互作用有类似的形式，只是要包括  $\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2$  的高阶项。

$|F=1\rangle$  的弱相互作用 BEC 的二次量子化的哈密顿量为：

$$H = \int d^3\mathbf{r} \left[ \Psi_i^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \Psi_i + \frac{c_0}{2} \Psi_i^\dagger \Psi_j^\dagger \Psi_i \Psi_j + \frac{c_2}{2} \Psi_k^\dagger \Psi_i^\dagger (F_\eta)_{ij} (F_\eta)_{kl} \Psi_j \Psi_l \right]. \quad (1.6)$$

这里，要对所有的重复指标求和，并且已经假定外势  $V_{ext}(\mathbf{r})$  与原子所处的超精细态无关。在  $F_z$  表象中，自旋为 1 的角动量矩阵为

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad F_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad F_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

在海森堡绘景中，场算符的运动方程表示为：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_+(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \sum_i \Psi_i^\dagger \Psi_i \right] \Psi_+ \\ &\quad + c_2 (\Psi_+^\dagger \Psi_+ + \Psi_0^\dagger \Psi_0 - \Psi_-^\dagger \Psi_-) \Psi_+ + c_2 \Psi_-^\dagger \Psi_0 \Psi_0, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \sum_i \Psi_i^\dagger \Psi_i \right] \Psi_0 \\ &\quad + c_2 (\Psi_+^\dagger \Psi_+ + \Psi_-^\dagger \Psi_-) \Psi_0 + 2c_2 \Psi_0^\dagger \Psi_+ \Psi_-, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_-(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \sum_i \Psi_i^\dagger \Psi_i \right] \Psi_- \\ &\quad + c_2 (\Psi_-^\dagger \Psi_- + \Psi_0^\dagger \Psi_0 - \Psi_+^\dagger \Psi_+) \Psi_- + c_2 \Psi_-^\dagger \Psi_0 \Psi_0. \end{aligned}$$

在平均场理论中，可以得到类似的耦合 GP 方程组

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \rho + c_2 (\rho_+ + \rho_0 - \rho_-) \right] \psi_+ + c_2 \psi_0^2 \psi_-^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \rho + c_2 (\rho_+ + \rho_-) \right] \psi_0 + 2c_2 \psi_+ \psi_- \psi_0^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(\mathbf{r}, t) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + c_0 \rho + c_2 (\rho_- + \rho_0 - \rho_+) \right] \psi_- + c_2 \psi_0^2 \psi_+^*, \end{aligned}$$

其中  $\rho_i = |\psi_i|^2$  是凝聚体的  $i$  分量的密度， $\rho = \sum_i \rho_i$  是原子气体的总密度。

## 第二节 自旋-1 的一维玻色气体

在这一节我们考虑自旋为 1 的一维玻色气体的基态密度分布。首先，运用可积模型的精确解和局域密度近似，得到修正的 Gross-Pitaevskii 方程组。然后，通过数值求解修正的 Gross-Pitaevskii 耦合方程组，求得旋量玻色气体在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度分布。

### 2.1 修正的 Gross-Pitaevskii 方程

对冷原子在径向加上很强的束缚势  $\hbar\omega_{\perp}$  ( $\hbar\omega_{\perp} \gg \mu$ )，原子的径向运动会被完全“冻结” [27]，系统的动力学可以用一维的哈密顿量描述。有效相互作用强度为 [11, 28, 29]：

$$g_{1d}^{0,2} = \frac{2a_{0,2}\hbar^2}{md_{\perp}^2} \frac{1}{1-C(a_{0,2}/d_{\perp})}, \quad (2.1)$$

其中， $d_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ ， $C=1.463\dots$ 。因为两原子的碰撞过程与自旋无关，所以，总自旋分别为 0 和 2 的一维有效相互作用常数与不考虑自旋时有相同的形式。与三维情形相同，任意两个自旋为  $|F=1\rangle$  的原子，其相互作用为

$$U_{ij} = \delta(x_i - x_j)(c_0 + c_2 \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{F}_j), \quad (2.2)$$

但是，在一维系统中有， $c_0$  和  $c_2$  是与有效的一维相互作用强度有关的常数：

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{g_{1d}^0 + 2g_{1d}^2}{3}, \\ c_2 &= \frac{g_{1d}^2 - g_{1d}^0}{3}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

同样，当  $c_2 < 0$  时，系统是铁磁的，当  $c_2 > 0$ ，系统是反铁磁的， $F_x, F_y, F_z$  为在  $F_z$  表象中，自旋为 1 的角动量矩阵。束缚在外势  $V_{ext}(x)$ （假定与超精细态无关）中的自旋为 1 的旋量玻色气体可以用二次量子化的哈密顿量描述：

$$\begin{aligned} H &= \int dx \left[ \Psi_i^{\dagger} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(x) \right) \Psi_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{c_0}{2} : (\Psi_i^{\dagger} \Psi_i)^2 : + \frac{c_2}{2} \Psi_k^{\dagger} \Psi_i^{\dagger} (F_{\eta})_{ij} (F_{\eta})_{kl} \Psi_j \Psi_l \right]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

$\Psi_i$  ( $\Psi_i^+$ ) 是场算符, 表示在位置  $x$  处湮灭 (产生) 一个  $i$  超精细态的原子,  $i = +, 0, -$  分别表示超精细态  $|F=1, m_F = +1, 0, -1\rangle$ 。同样, 这里要对重复指标求和。: 表示正则序。在平均场近似下, 旋量玻色气体的性质由如下自旋相关的能量泛函描述:

$$E[\psi] = \int dx \left[ \psi_i^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) \right) \psi_i + \rho \epsilon(\rho) + \frac{c_2}{2} \psi_k^* \psi_i^* (F_\eta)_{ij} (F_\eta)_{kl} \psi_j \psi_l \right], \quad (2.5)$$

其中有  $\rho = \sum_i \rho_i = \sum_i |\psi_i|^2$  和  $\epsilon(\rho) = \frac{1}{2} c_0 \rho$ 。对于单组分玻色气体, 这样的平均场近似可以正确地描述弱相互作用区域的玻色气体的密度分布, 但是, 在强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域, 平均场理论失效[30]。通过  $\delta$ -函数势相互作用的一维玻色气体, 可以用 Lieb-Liniger 解得到在强相互作用区域和弱相互作用区域的基态密度分布, 因此, 可以用 Lieb-Liniger 解对平均场理论修正, 得到修正的 Gross-Pitaevskii 方程, 即可正确地描述不同区域的一维玻色气体[12, 15, 17, 31]。修正的 Gross-Pitaevskii 理论以局域密度近似和均匀系统的精确解为基础, 在局域密度近似下, 非均匀系统的化学势满足局域平衡条件:

$$\mu = \mu_{\text{hom}}[\rho(x)] + V_{ext}(x),$$

其中  $\mu_{\text{hom}}[\rho]$  是均匀系统中的化学势。单组分玻色气体中, 可以由 Lieb-Liniger 模型求得  $\mu_{\text{hom}}[\rho]$ 。在目前的问题中, 哈密顿量 (2.4) 式中的  $c_2$  项通常远小于  $c_0$  项, 自旋有关的相互作用通常很小, 在  $V_{ext}(x) = 0$  和  $c_2 = 0$  的情况下, (2.4) 式描述的模型是可积的。可以从三组分玻色气体的精确可解问题得到能量密度  $\epsilon(\rho)$ , 它和 Lieb-Liniger 模型[32, 33, 34] 有相同的形式。同时, 用 Lieb-Liniger 问题的能量密度代替 (2.5) 式中的  $\epsilon(\rho)$ , 在弱相互作用极限 ( $\gamma \ll 1$ ) 和强相互作用极限 ( $\gamma \gg 1$ ) 下, 它表示为[32, 35]:

$$\begin{cases} \epsilon(\rho) = \frac{1}{2} c_0 \rho & \gamma \ll 1 \\ \epsilon(\rho) = \pi^2 \hbar^2 \rho^2 / 6m & \gamma \gg 1 \end{cases}. \quad (2.6)$$

旋量玻色气体模型与 Lieb-Liniger 模型的能量密度有相似的形式，这里的密度  $\rho = \rho_+ + \rho_0 + \rho_-$  是三个分量的总密度。值得注意的是，(2.5) 式中的动能项是由于外势导致的气体非均匀分布所增加的动能[17, 36]， $\epsilon(\rho)$  是均匀系统中的能量密度，而  $c_2$  项对应自旋自旋相互作用能。

在弱相互作用区域，每个原子的相互作用能和它的特征动能相比都比较小，甚至可以忽略，因此原子的相互作用能不会对原子的波函数有强烈的影响。在强相互作用区域，平均的原子相互作用能非常大，玻色原子的分布类似于无自旋费米子。在这两种情形下，自旋有关的相互作用都可以表示为：

$$\begin{aligned} & \psi_k^* \psi_i^* (F_\eta)_{ij} (F_\eta)_{kl} \psi_j \psi_l \\ & = \rho_+^2 + \rho_-^2 + 2\rho_0\rho_- + 2\rho_0\rho_+ - 2\rho_+\rho_- + 2\psi_0^{*2}\psi_+\psi_- + 2\psi_0^2\psi_-\psi_+^* \end{aligned} \quad (2.7)$$

可以看出，在两个散射过程中原子的自旋态发生了改变， $|m_F = +1\rangle$  的原子和  $|m_F = -1\rangle$  的原子发生散射产生两个  $|m_F = 0\rangle$  的原子，或者相反的过程。在这两个过程中，系统有两个守恒量[10, 37]，即原子总数  $N$  和总的磁化率  $M$ ，分别定义如下：

$$\begin{aligned} N & = \int dx (|\psi_+|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_-|^2), \\ M & = \int dx (|\psi_+|^2 - |\psi_-|^2). \end{aligned} \quad (2.8)$$

在二次量子化表示中，可以证明这两个量与哈密顿量 (2.4) 式对易，这里同时定义平均磁化率  $m = M / N$ 。为了在  $N$  和  $M$  守恒这两个约束条件下求得能量泛函  $E[\psi]$  的最小值，引入拉格朗日乘子  $B$  以保证总磁化率守恒，引入拉格朗日乘子  $\mu$  以保证总原子数守恒， $B$  可以看作有效磁场。这样，可以得到自由能泛函：

$$F = E - \mu N - BM.$$

通过求解自由能泛函的最小值问题，可以得到系统的基态。系统可由耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组描述，也即  $\psi_i$  的动力学方程为：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(x,t) & = [H - B + c_2(\rho_+ + \rho_0 - \rho_-)]\psi_+ + c_2\psi_0^2\psi_-^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(x,t) & = [H + c_2(\rho_+ + \rho_-)]\psi_0 + 2c_2\psi_+\psi_-\psi_0^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(x,t) & = [H + B + c_2(\rho_- + \rho_0 - \rho_+)]\psi_- + c_2\psi_0^2\psi_+^* \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{ext}}(x) + \tilde{F}(\rho). \quad (2.10)$$

而  $\tilde{F}(\rho)$  在不同的相互作用区域有不同的形式:

$$\tilde{F}(\rho) = \frac{\partial}{\partial \rho}(\rho) \epsilon(\rho) = \begin{cases} c_0 \rho & \gamma \ll 1 \\ \pi^2 \hbar^2 \rho^2 / 2m & \gamma \gg 1 \end{cases}.$$

通过数值求解上面的方程, 可以得到一维旋量玻色气体在外势中的基态密度分布, 包括弱相互作用区域和强相互作用区域, 本章将考虑在一维简谐势中的旋量玻色气体, 即  $V_{\text{ext}}(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ 。

## 2.2 数值方法

为了简化方程, 选择新的记法, 所有的能量和距离都以简谐势的特征能量和特征长度为单位。本章将引入标准长度单位:

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.11)$$

并定义空间坐标, 波函数和时间为

$$\begin{aligned} x &= \tilde{x}a, \\ \psi_i &= \sqrt{N/a} \varphi_i, \\ \tilde{\rho}_i &= |\varphi_i|^2, \\ \tilde{\rho} &= \sum_i \tilde{\rho}_i, \\ t &= \tau/\omega. \end{aligned}$$

波函数满足归一化条件:

$$\int d\tilde{x} \sum_i |\varphi_i|^2 = 1.$$

做了以上改变之后, 耦合 Gross-Pitaevskii 方程组表示为:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_+ &= [\tilde{H} - \tilde{B} + g_2(\tilde{\rho}_+ + \tilde{\rho}_0 - \tilde{\rho}_-)] \varphi_+ + g_2 \varphi_0^2 \varphi_+^*, \\ i \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_0 &= [\tilde{H} + g_2(\tilde{\rho}_+ + \tilde{\rho}_-)] \varphi_0 + 2g_2 \varphi_+ \varphi_- \varphi_0^*, \\ i \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_- &= [\tilde{H} + \tilde{B} + g_2(\tilde{\rho}_- + \tilde{\rho}_0 - \tilde{\rho}_+)] \varphi_- + g_2 \varphi_0^2 \varphi_-^*, \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中  $\tilde{B} = NB/a\hbar\omega$ ， $\tilde{H} = -(1/2)d^2/d\tilde{x}^2 + \tilde{x}^2/2 + \tilde{F}(\tilde{\rho})$ ，并且有：

$$\tilde{F}(\tilde{\rho}) = \begin{cases} g_0\tilde{\rho} & \gamma \ll 1 \\ \tilde{g}_0\tilde{\rho}^2 & \gamma \gg 1 \end{cases}$$

相互作用常数表示为

$$\begin{aligned} g_0 &= Nc_0/a\hbar\omega, \\ \tilde{g}_0 &= N^2\pi^2/2, \\ g_2 &= Nc_2/a\hbar\omega. \end{aligned}$$

给定一个初态，让它在虚时空间里按耦合方程组 (2.12) 演化，即可得到旋量 BEC 的基态波函数。在每一个时间步，对波函数归一化，保证粒子数守恒，同时调整拉格朗日乘子  $B$ ，以保证总的磁化率守恒。在我们的数值程序中，用 Crank-Nicholson 方法对方程组 (2.12) 做离散化处理 [38]。初始试探波函数选择 Gaussian 波函数： $\exp[-x^2/2q - ikx]$ ， $q$  和  $k$  是可调参数，它们的选择只和计算的收敛速度有关而不会影响最终的结果 [37]。

### 2.3 基态密度分布

在这一部分根据实验中的原子参数，计算旋量玻色气体在不同区域的基态分布。首先考虑自旋为 1 的  $^{87}\text{Rb}$  原子（铁磁性）在一维简谐振势中形成的旋量玻色气体，它的散射长度为  $a_0 = 102a_B$  和  $a_2 = 100a_B$ （ $a_B$  是玻尔半径）[39]。通过适当地调节参数，系统可以处于弱相互作用区域（Thomas-Fermi 区域）或者强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域。选择一个特定的系统，束缚势的参数为  $\omega_x = 0.5\text{kHz}$ ， $\omega_\perp = 50\text{kHz}$ ，原子总数为  $N = 2000$ ，计算可得到  $\gamma \sim 0.008$ ，即系统处于弱相互作用区域。图-3.1a 和图-3.1b 给出了  $m = 0$  和  $m = 0.2$  的密度分布，图中密度单位为  $N/a$ 。如图所示，当磁化率  $m = 0$  时， $|m_F = +1\rangle$  组分的原子分布和  $|m_F = -1\rangle$  的原子分布精确地叠加在一起。如果调节外势的参数为  $\omega_x = 10\text{Hz}$ ， $\omega_\perp = 500\text{kHz}$ ，原子总数为  $N = 50$ ，计算可得到  $\gamma \sim 15$ ，即系统处于强相互作用的 Tonks 区域。图-3.1c 和图-3.1d 给出了  $m = 0$  和  $m = 0.2$  的密度分布。在强相互作用区域，由于原子之间的强排

斥作用，密度分布类似于费米-狄拉克统计分布，原子在相对较大的范围内均匀分布，并且在边界上很快地下降为 0。这表明，玻色原子的密度分布在强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域类似于费米分布。

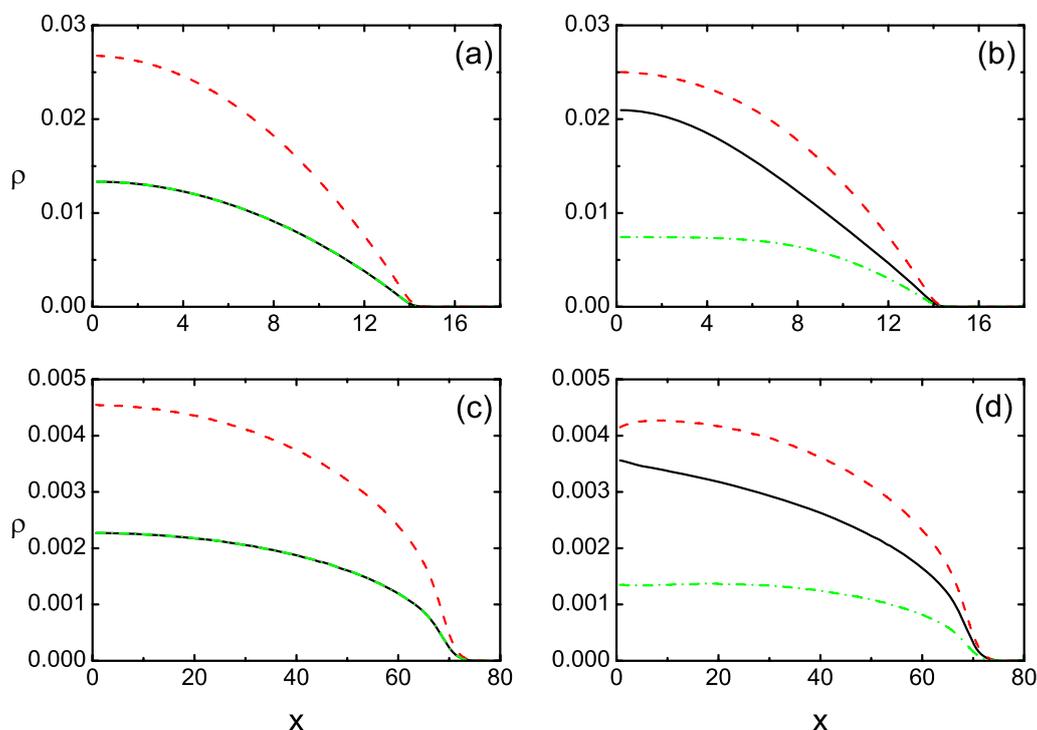


图-3.1 自旋-1 的  $^{87}\text{Rb}$  原子气体不同组分的基态密度分布，其中实线为 + 组分，划线为 0 组分，点划线为 - 组分。(a)  $m = 0$ ，Thomas-Fermi 区域；(b)  $m = 0.2$ ，Thomas-Fermi 区域；(c)  $m = 0$ ，Tonks 区域；(d)  $m = 0.2$ ，Tonks 区域。本图中长度单位是  $1.2\mu\text{m}$ 。

对于反铁磁的旋量玻色气体，我们考虑自旋-1 的  $^{23}\text{Na}$  原子，它的散射长度为  $a_0 = 50a_B$  和  $a_2 = 55.1a_B$  [40]。在弱相互作用区域，选择束缚频率为  $\omega_x = 50\text{Hz}$ ， $\omega_\perp = 10\text{kHz}$ ，原子总数为  $N = 1000$ ，计算可得到  $\gamma \sim 0.001$ 。 $m = 0$  和  $m = 0.2$  的密度分布如图-3.2a 和图-3.2b 所示。如果调节外势的参数为  $\omega_x = 10\text{Hz}$ ， $\omega_\perp = 2000\text{kHz}$ ，原子总数为  $N = 50$ ，计算可得到  $\gamma \sim 15$ ，即系统处于强相互作用的 Tonks 区域。图

-3.2c 和图-3.2d 给出了  $m = 0$  和  $m = 0.2$  的密度分布，单位是  $N/a$ 。与铁磁性的旋量玻色气体相同，在 Tonks 区域， $^{23}\text{Na}$  原子气体的密度分布也显示了类似的费米分布。

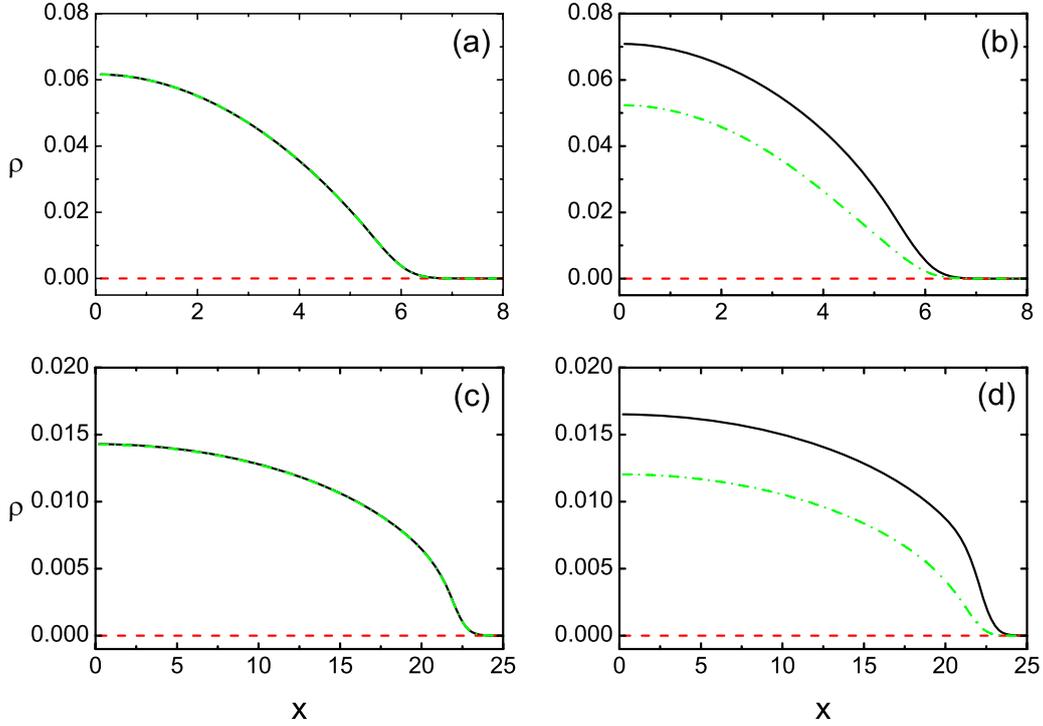


图-3.2 自旋-1 的  $^{23}\text{Na}$  原子气体不同组分的基态密度分布，其中实线为 + 组分，划线为 0 组分，点划线为 - 组分。(a)  $m = 0$ ，Thomas-Fermi 区域；(b)  $m = 0.2$ ，Thomas-Fermi 区域；(c)  $m = 0$ ，Tonks 区域；(d)  $m = 0.2$ ，Tonks 区域。本图中长度单位是  $7.4\mu\text{m}$ 。

不同的是，反铁磁性的玻色气体中，在零磁场， $|m_F = 0\rangle$  组分的原子数目总是为零，这与平均场理论一致。一个直接的解释是反铁磁相互作用更容易使得原子的自旋反平行排列，因此， $|m_F = 0\rangle$  组分的原子相互散射产生  $|m_F = +1\rangle$  和  $|m_F = -1\rangle$  的原子，降低了系统的自旋相互作用能。三维球谐势中的计算也表明，反铁磁相互作用的旋量 BEC 的基态是由  $|m_F = +1\rangle$  和  $|m_F = -1\rangle$  两个组分构成的凝聚体[41]。

当玻色气体处在强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域时，两体相互作用

$\tilde{g}_0 = N^2\pi^2/2$  是常数，它与原子的 s-波散射长度无关。如果用 Feshbach 共振技术调节原子间相互作用，那么相互作用常数  $g_2$  可以增加至与  $\tilde{g}_0$  相同的数量级。这样，我们就可以更清楚地研究自旋自旋相互作用的效应。例如，考虑由  $N = 15$  个  $^{23}\text{Na}$  构成的

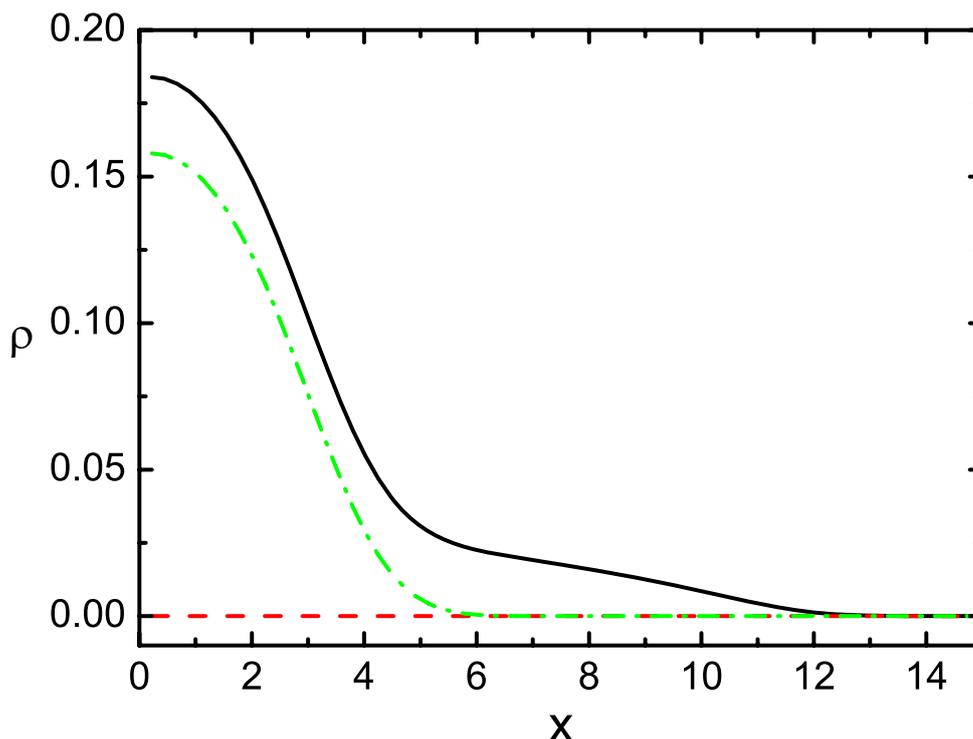


图-3.3 自旋-1 的  $^{23}\text{Na}$  原子气体不同组分的基态密度分布，其中实线为 + 组分，划线为 0 组分，点划线为 - 组分。本图中长度单位是  $7.4\mu\text{m}$ 。

自旋为 1 的一维玻色气体，磁化率为  $m = 0.2$ ，简谐势的束缚频率为  $\omega_x = 10\text{Hz}$ ， $\omega_\perp = 2000\text{kHz}$ ，如果 s-波散射长度  $a_2$  用 Feshbach 共振技术调节到  $104.8a_B$ ，那么相应的相互作用常数是  $g_2 = 500$  和  $\tilde{g}_0 = 1110.33$ 。基态的密度分布如图-3.3 所示（单位： $N/a$ ），这时它不再是费米类分布，大多数原子被束缚在简谐势阱中心附近比较狭窄的区域内。 $|m_F = 0\rangle$  组分的原子数仍然是零。一个可能的解释是，由于很强的自旋相互作用，不同自旋的原子会形成单态，相比之下，单态之间的有效相互作用非常弱，

所以，Tonks 气体的分布受到了破坏 [42]。

最后要讨论的是，上述结果在什么条件下有意义。在前面的  $^{23}\text{Na}$  例子中，自旋相互作用能（ $c_2$  项）是非常弱的，它通常比接触相互作用能（ $c_0$  项）小两个数量级，即使在  $a_2 = 104.8a_B$  的情形也有  $c_0/c_2 = 4.14$ 。因此，上面的结果是有效的。然而，在  $g_2$  大于  $\tilde{g}_0$  的区域，这里介绍的方法不再适用。

### 第三节 自旋-1 的玻色气体的相分离

多组分 BEC 中畴的形成或称为相分离在过去几年当中得到了广泛的研究 [44-46]。如果不同组分之间存在很强的相互作用，凝聚混合物显示出奇特的相分离现象。在旋量 BEC 中，自旋相互作用远小于接触相互作用，因此，前者对系统的总密度分布没有任何效应。当自旋相互作用为各向同性时，尽管旋量 BEC 的每个组分都有不同的密度分布，但是没有相分离现象 [10, 42]。在本节我们考虑各向异性的自旋相互作用对一维旋量玻色气体的基态的影响。通过数值求解修正的 Gross-Pitaevskii 耦合方程组，求得旋量玻色气体在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度。

#### 3.1 修正的 Gross-Pitaevskii 方程

当自旋相互作用为各向异性时，二次量子化的哈密顿量为

$$H = H_0 + H_{\text{int}} + H_{\text{spin}}, \quad (3.1)$$

其中有

$$H_0 = \int dx \Psi_i^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(x) \right) \Psi_i,$$

$$H_{\text{int}} = \frac{c_0}{2} \int dx : (\Psi_i^\dagger \Psi_i)^2 :,$$

和各向异性的自旋相互作用

$$H_{\text{spin}} = \frac{c_2}{2} \int dx \Psi_k^\dagger \Psi_i^\dagger \left[ (F_z)_{ij} (F_z)_{kl} + \Delta \left( (F_x)_{ij} (F_x)_{kl} + (F_y)_{ij} (F_y)_{kl} \right) \right] \Psi_j \Psi_l. \quad (3.2)$$

这里，引进了唯象参数  $\Delta$  描述各向异性的自旋相互作用，它源于各向异性的偶极相

互作用, 只有在  $0 \leq \Delta \leq 1$  这个区域, 才有相分离现象出现。当  $\Delta = 1$  时, 为各向同性的自旋相互作用。相应的能量泛函为:

$$E[\psi] = \int dx \left[ \psi_i^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) \right) \psi_i + \rho \in(\rho) + \frac{c_2}{2} \psi_k^* \psi_i^* \left[ (F_z)_{ij} (F_z)_{kl} + \Delta \left( (F_x)_{ij} (F_x)_{kl} + (F_y)_{ij} (F_y)_{kl} \right) \right] \psi_j \psi_l \right], \quad (3.3)$$

其中有  $\rho = \sum_i \rho_i = \sum_i |\psi_i|^2$ , 能量密度为:

$$\begin{cases} \in(\rho) = \frac{1}{2} c_0 \rho & \gamma \ll 1 \\ \in(\rho) = \pi^2 \hbar^2 \rho^2 / 6m & \gamma \gg 1 \end{cases}$$

自旋相互作用部分可以进一步表示为:

$$\Delta (2\rho_0\rho_- + 2\rho_0\rho_+ + 2\psi_0^* \psi_+ \psi_- + 2\psi_0^2 \psi_-^* \psi_+^*) + \rho_+^2 + \rho_-^2 - 2\rho_+ \rho_- \quad (3.4)$$

与自旋相互作用为各向同性相同, 系统有两个守恒量, 即原子总数  $N$  和总的磁化率  $M$ , 分别定义为 (2.8) 式。为了在  $N$  和  $M$  守恒这两个约束条件下求得能量泛函  $E[\psi]$  的最小值, 引入拉格郎日乘子  $B$  以保证总磁化率守恒, 引入拉格郎日乘子  $\mu$  以保证总原子数守恒。得到自由能泛函:

$$F = E - \mu N - BM$$

通过求解自由能泛函的最小值问题, 求得系统的基态。系统可由新的耦合方程组描述:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(x,t) &= [H - B + c_2(\rho_+ + \Delta\rho_0 - \rho_-)] \psi_+ + c_2 \Delta \psi_0^2 \psi_-^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(x,t) &= [H + c_2(\rho_+ + \rho_-)] \psi_0 + 2c_2 \Delta \psi_+ \psi_- \psi_0^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_-(x,t) &= [H + B + c_2(\rho_- + \Delta\rho_0 - \rho_+)] \psi_- + c_2 \Delta \psi_0^2 \psi_+^*. \end{aligned} \quad (3.5)$$

其中  $H$  的表达式为 (2.10) 式。下面将用上一节介绍的方法求解一维旋量玻色气体在外势  $V_{ext}(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$  中的基态。

### 3.2 相分离

为了研究各向异性参数的效应, 计算一维旋量玻色气体在弱相互作用区域和强

相互作用区域的基态密度。首先，考虑各向异性参数对 $^{87}\text{Rb}$ 原子气体（铁磁性）的

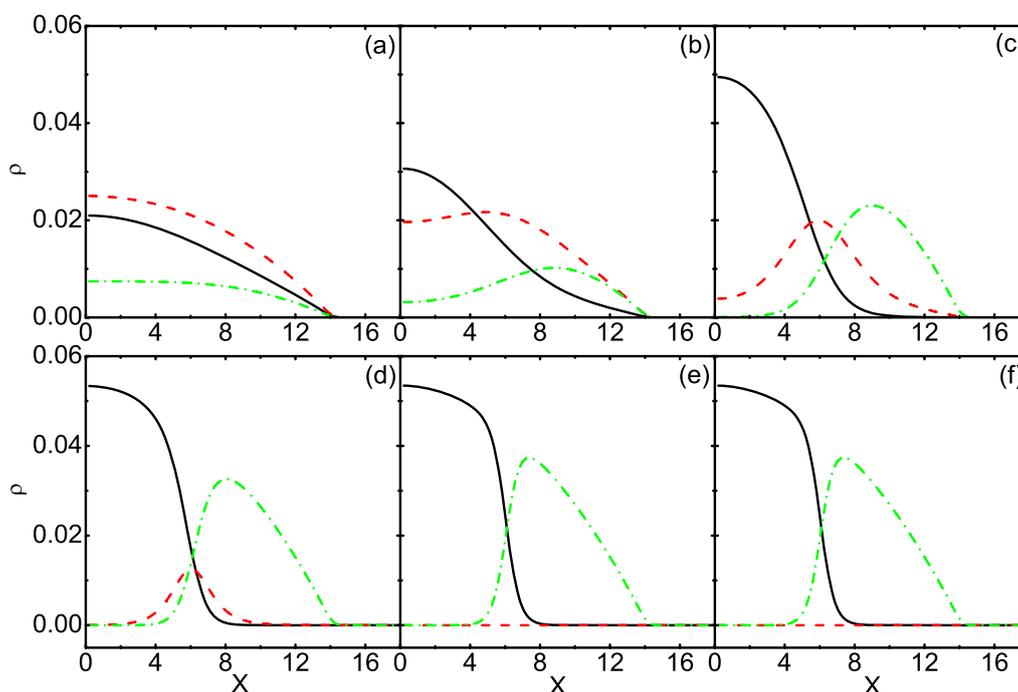


图-3.4 自旋-1 的 $^{87}\text{Rb}$ 原子气体在弱相互作用区域的基态密度，其中实线为+组分，划线为0组分，点划线为-组分，磁化率为 $m = 0.2$ 。

(a)  $\Delta = 1.0$ ; (b)  $\Delta = 0.9$ ; (c)  $\Delta = 0.8$ ; (d)  $\Delta = 0.5$ ; (e)  $\Delta = 0.2$ ;

(f)  $\Delta = 0.0$ 。本图中长度单位是 $a = 1.2\mu\text{m}$ 。

基态的影响。通过调节参数，系统可以处在不同的相互作用区域。这里选择与上节相同的实验系统，弱相互作用的玻色气体的基态分布如图-3.4 所示，图-3.4a-f 分别对应不同的唯象参数 $\Delta$ ，图中密度单位是 $N/a$ ，磁化率为 $m = 0.2$ 。当自旋相互作用为各向同性时， $\Delta = 1.0$ ，旋量气体的三个组分互相重叠在一起，它们有相似分布。对于弱的各向异性相互作用，例如 $\Delta = 0.9$ ，分布已经发生了明显变化，基态位形在部分区域的磁化率为正，而在部分区域的磁化率为负。当各向异性增大时， $|m_F = 0\rangle$ 组分的原子（划线）将湮灭掉。随着各向异性参数的增大，不同组分的原子发生分离，只在彼此的边界上发生交叠。不同组分的原子总是互相排斥。从图-3.4e 可以看出，当 $\Delta = 0.2$ 时， $|m_F = 0\rangle$ 组分的原子完全消失， $|m_F = +1\rangle$ 组分的原子（实

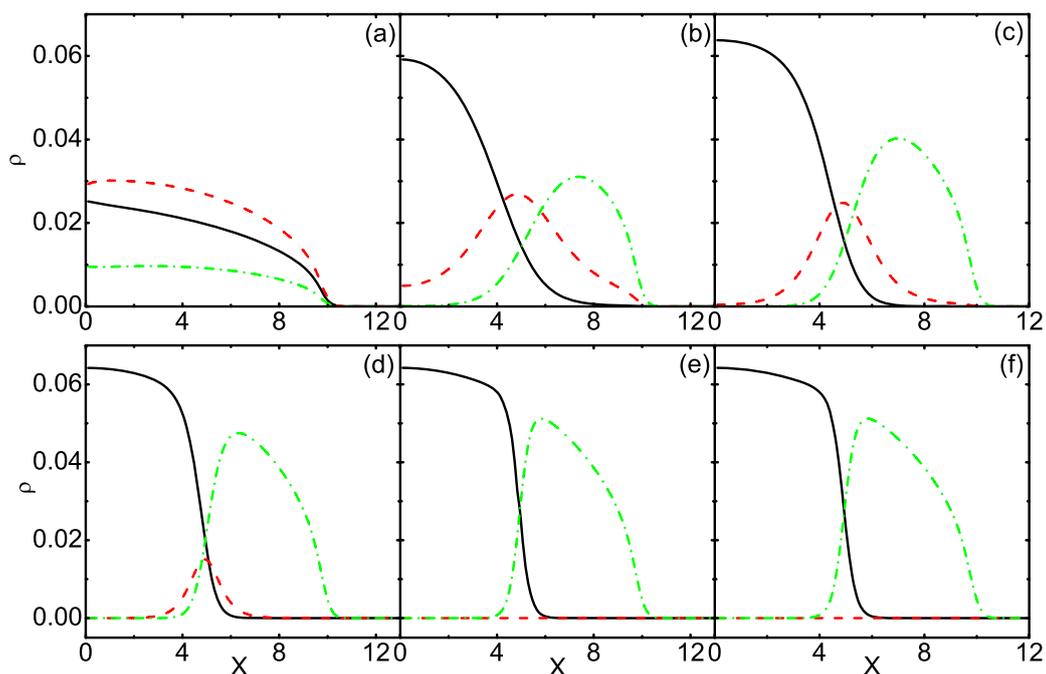


图-3.5 自旋-1 的 $^{87}\text{Rb}$  原子气体在强相互作用区域的基态密度，其中实线为+组分，划线为 0 组分，点划线为-组分，磁化率为  $m = 0.2$ 。

(a)  $\Delta = 1.0$ ; (b)  $\Delta = 0.9$ ; (c)  $\Delta = 0.8$ ; (d)  $\Delta = 0.5$ ; (e)  $\Delta = 0.2$ ;  
(f)  $\Delta = 0.0$ 。本图中长度单位是  $a = 8.5\mu\text{m}$ 。

线) 和  $|m_F = -1\rangle$  组分的原子 (点划线) 的密度分布显示出相分离现象。 $^{87}\text{Rb}$  原子气体在强相互作用区域的密度分布如图-3.5 所示, 这里同样选择了上一节的实验系统, 磁化率为  $m = 0.2$ 。在这个区域的密度分布与图-3.4 相似。比较图-3.4a 和图-3.5a 可以得到, 在强相互作用的 Tonks-Girardeau 区域, 原子气体的密度分布类似于费米分布。由图-3.5b 可以看出, 在强相互作用情况下, 即使非常弱的各向异性, 明显的相分离形式也会出现。图-3.6 显示了当  $\Delta = 0.2$  时, 不同磁化率所对应的基态密度分布。它表明, 磁化率只影响  $|m_F = +1\rangle$  组分和  $|m_F = -1\rangle$  组分的原子数比。总之, 尽管自旋相互作用项非常小, 它的性质极大地影响了旋量玻色气体的各个分量的密度分布, 同弱相互作用玻色气体相比, 相分离现象在强相互作用区域更容易显示出来。强相互作用的一维旋量气体也许为我们提供了一个研究冷原子磁性的很好的平台。

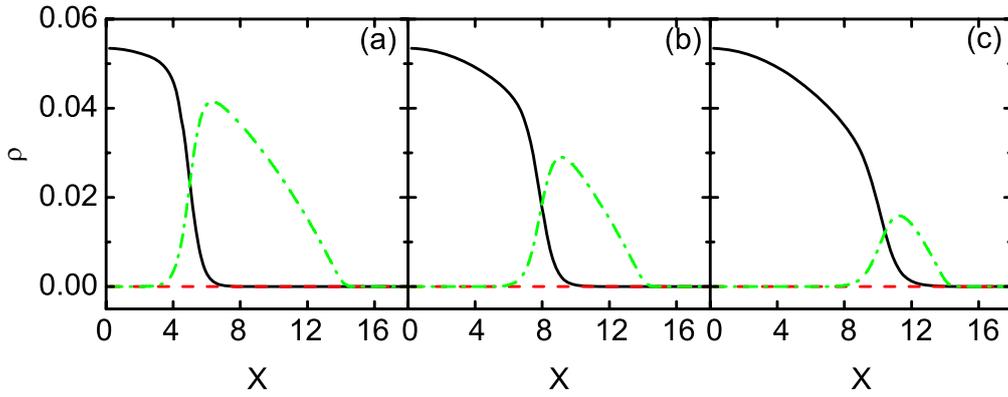


图-3.6 自旋-1 的<sup>87</sup>Rb 原子气体在弱相互作用区域的基态密度，其中实线为+组分，划线为 0 组分，点划线为-组分，图中各各向异性参数为  $\Delta = 0.2$ 。(a)  $m = 0.0$ ；(b)  $m = 0.5$  (c)  $m = 0.8$ 。图中长度单位是  $a = 1.2\mu\text{m}$ 。

下面进一步研究各向异性的自旋相互作用对反铁磁系统的影响，选择弱相互作用的<sup>23</sup>Na 原子气体。这里仍然选择上一节使用的实验参数。图-3.7 显示了对各向异性 and 各向同性的自旋相互作用的密度分布，磁化率为  $m = 0.2$ 。可以看出，即使对于很

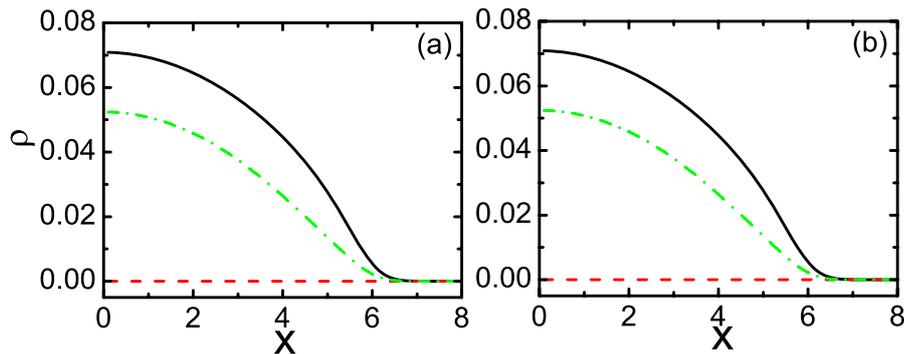


图-3.7 自旋-1 的<sup>23</sup>Na 原子气体在强相互作用区域的基态密度，其中实线为+组分，划线为 0 组分，点划线为-组分，磁化率为  $m = 0.2$ 。

(a)  $\Delta = 0.5$ ；(b)  $\Delta = 1.0$ 。本图中长度单位是  $a = 8.5\mu\text{m}$ 。

强的各向异性，也没有相分离显示，两种情形下有相同的密度分布。以上结果表明，虽然自旋相互作用非常弱，但是各个组分的密度分布与它是否各向异性以及磁性有很大的关系，而系统的总密度分布与自旋相互作用无关。

接下来要讨论的是在旋量玻色气体中如何在实验上实现各向异性的自旋相互作用。众所周知，偶极相互作用是各向异性的，它通常比自旋相互作用小许多。 $^{87}\text{Rb}$  原子气体中，二者的比值是 $10^{-1}$ ， $^{23}\text{Na}$  原子气体中二者的比值是 $10^{-3}$  [48]。理论上，可以用 Feshbach 共振技术调节 s-波散射长度，使得偶极相互作用变得更加明显。虽然各向异性的自旋相互作用还没有在实验上实现，但是偶极相互作用已经被证实 [49]，实现了偶极旋量 BEC。随着实验技术的飞速发展，实现各向异性的旋量气体也指日可待。我们的工作有助于理解旋量凝聚的性质和自旋畴的形成机制。

#### 第四节 小结

本章讨论了一维旋量玻色气体在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度分布。结果表明，虽然自旋相互作用非常的弱，但是它对气体的性质有很大的影响。各个组分的原子数目与磁化率以及气体的铁磁性（反铁磁性）有关。当系统处于强相互作用区域时，密度分布为类费米分布，但是当自旋相互作用足够强时，类费米分布即被破坏。对于铁磁性的旋量玻色气体，如果自旋相互作用为各向异性，它的密度分布会受到极大的影响，即使这种各向异性非常弱，也与各向同性的玻色气体有明显的区别。当各向异性较强时， $|m_F = 0\rangle$  组分的原子消失，密度分布呈现相分离的形式。在弱相互作用区域和强相互作用区域，都有这样的现象，但是后者在较弱的各向异性也会出现明显的相分离。对于反铁磁的旋量气体，密度分布不会受到各向异性参数的影响。

## 参 考 文 献

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995); K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995); C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, R. G. Hulet, *ibid.* **75**, 1687 (1995).
- [2] J. O. Andersen, U. Al Khawaja, and H. T. C. Stoof, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 070407 (2002).
- [3] T.-L. Ho and S. K. Yip, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4031 (2000).
- [4] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 742 (1998).
- [5] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5257 (1998).
- [6] T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1822 (1998).
- [7] W. Zhang, H. Pu, C. Search, and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 060401 (2002).
- [8] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur and W. Ketterle, *Nature* **396**, 345 (1998).
- [9] M. S. Chang, Q. Qin, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, *Nature Physics* **1**, 111 (2005).
- [10] W. Zhang and L. You, *Phys. Rev. A.* **71**, 025603 (2005).
- [11] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [12] V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5413 (2001).
- [13] D. L. Luxat and A. Griffin, *Phys. Rev. A.* **67**, 043603 (2003).
- [14] P. Pedri, L. Santos, P. öhberg, and S. Stringari, *Phys. Rev. A.* **68**, 043601 (2003).
- [15] S. Chen and R. Egger, *Phys. Rev. A.* **68**, 063605 (2003).
- [16] K. K. Das, M. D. Girardeau, and E. M. Wright, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 170404 (2002);

- K. K. Das, G. J. Lapeyre, and E. M. Wright, Phys. Rev. A. **65**, 063603 (2002).
- [17] P. öhberg and L. Santos, Phys. Rev. Lett. **89**, 240402 (2002).
- [18] M. D. Girardeau and E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. **84**, 5239 (2000); T.-L. Ho and M. Ma, J. Low Temp Phys. **115**, 61 (1999); H. Monien, M. Linn, and N. Elstner, Phys. Rev. A. **58**, R3395 (1998).
- [19] A. Recati, P. O. Fedichev, W. Zwerger, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **90**, 020401 (2003).
- [20] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and B. E. Granger, Phys. Rev. Lett. **92**, 030402 (2004).
- [21] A. Görlitz J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [22] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, and T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003); T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl, and T. Esslinger, *ibid.* **92**, 130403 (2004).
- [23] S. Richard, F. Gerbier, J. H. Thywissen, M. Hugbart, P. Bouyer, and A. Aspect, Phys. Rev. Lett. **91**, 010405 (2003).
- [24] Y.-J. Wang, D. Z. Anderson, V. M. Bright, E. A. Cornell, Q. Diot, T. Kishimoto, M. Prentiss, R. A. Saravanan, S. R. Segal, and S. Wu, Phys. Rev. Lett. **94**, 090405 (2005).
- [25] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature **429**, 277 (2004).
- [26] T. Kinoshita, T. Wenger and D. S. Weiss, Science **305**, 1125 (2004).
- [27] N. J. van Druten and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **79**, 549 (1997).
- [28] T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **91**, 163201 (2003); M.

- D. Girardeau and M. Olshanii, *Phys. Rev. A.* **70**, 023608 (2002).
- [29] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 050404 (2001); D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *ibid.* **85**, 3745 (2000).
- [30] M. D. Girardeau, *J. Math. Phys. (N.Y.)* **1**, 516 (1960); L. Tonks, *Phys. Rev.* **50**, 955 (1936); V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov and A. G. Izergin, *Quantum inverse scattering method and correlation functions* (Cambridge university press,1993).
- [31] E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley, and X. Qi, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1146 (2000).
- [32] E. H. Lieb and W. Liniger, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963); E. H. Lieb, *ibid.* **130**, 1616 (1963).
- [33] B. Sutherland, *Beautiful models* (World Scientific, 2004).
- [34] Y. E. Kim and A. L. Zubarev, *Phys. Rev. A.* **67**, 015602 (2003).
- [35] A. Minguzzi, S. Succi, F. Toschi, M.P. Tosi, P. Vignolo, *Phys. Rep.* **395**, 223 (2004).
- [36] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 150401 (2003).
- [37] S. Yi, Ö. E. Müstecaplıoğlu, C. P. Sun, and L. You, *Phys. Rev. A.* **66**, 011601 (2002).
- [38] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, 2nd edition* (Cambridge University Press, London, 1992).
- [39] E. G. M. van Kempen, S. J. J. M. F. Kokkelmans, D. J. Heinzen, and B. J. Verhaar, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 093201, (2002).
- [40] A. Crubellier, O. Dulieu<sup>1</sup>, F. Masnou-Seeuws, M. Elbs, H. Knöckel, and E. Tiemann, *Eur. Phys. J. D* **6**, 211 (1999).

- [41] W. Zhang, S. Yi and L. You, Phys. Rev. A **70**, 043611 (2004).
- [42] Yajiang Hao, Yunbo Zhang, J. Q. Liang and Shu Chen, Phys. Rev. A (2006).
- [43] Yajiang Hao, Yunbo Zhang, J. Q. Liang and Shu Chen, cond-mat/0511581.
- [44] H. Pu, W. Zhang, and P. Meystre, Phys. Rev. Lett. **87**, 140405 (2001).
- [45] Q. Gu and R. A. Klemm, Phys. Rev. A. **68**, 031604 (2003).
- [46] T-L. Ho and V. B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. **77**, 3276 (1996); H. Pu and N. P. Bigelow, *ibid.* **80**, 1130 (1998); E. Timmermans, *ibid.* **81**, 5718 (1998); P. Ao and S. T. Chui, Phys. Rev. A **58**, 4836 (1999).
- [47] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, Phys. Rev. Lett. **91**, 150401 (2003).
- [48] S. Yi, L. You and H. Pu, Phys. Rev. Lett. **93**, 040403 (2004).
- [49] J. Stuhler, A. Griesmaier, T. Koch, M. Fattori, T. Pfau, S. Giovanazzi, P. Pedri, and L. Santos Phys. Rev. Lett. **95**, 150406 (2005).

## 第四章 有限尺寸的玻色气体

一维冷原子系统在实验上的重大进展，受到了众多物理学工作者的关注[1-5]。当在两个方向上把粒子的运动限制到零点振动时，径向自由度被冻结，超冷原子气体为真正的一维量子气体[6]，量子气体可以用沿轴向的一维等效模型描述[7]。实验上，一维玻色气体可以用各向异性的磁阱或者二维光格子势来实现。另外，用广泛使用的 Feshbach 共振技术，通过控制磁场的强弱可以调节原子间的散射长度在从弱相互作用到强相互作用，从吸引相互作用到排斥相互作用的整个区域变化。2004 年，几个研究组观察到了一维强相互作用的 Tonks-Girardeau 气体[3-5]，这是一个最简单的强关联系统，原子间的相互作用使得系统有许多奇妙而独特的性质，在 Tonks 区域，平均场理论不能得到合理的结果[8]。理论上，玻色系统的维度效应和关联效应已经得到了广泛的研究[7, 9-18]，并且受到越来越多的关注。

众所周知，一些一维的相互作用系统可以精确求解，但是不能被直接应用到束缚在外部简谐势的系统中[19-23]，而 Gross-Pitaevskii 理论被广泛应用于弱相互作用的 BEC 系统。排斥相互作用和吸引相互作用的一维 Gross-Pitaevskii 方程在齐次边条件下可以用解析的方法求解[24]。尽管它成功地解释了实验上观察到的许多现象，但是 Gross-Pitaevskii 方程是基于平均场近似的，不能用来描述强关联系统。一些工作已经显示了 Gross-Pitaevskii 理论的局限性，例如，强相互作用区域的一维束缚气体的密度分布，干涉效应，吸引相互作用时 Gross-Pitaevskii 方程的稳定性[16, 17, 25]。在束缚的系统中，吸引相互作用可以补偿凝聚动能并且产生稳定的孤子解。另一方面，在建立方阱势[26]和光学箱子势[27]上的实验进展，也使得我们有希望在实验上研究教科书中作为实例讲解的简单物理模型——一维无限深势阱中的粒子的性质。到目前为止，我们还不清楚，Gross-Pitaevskii 方程的解是否能够很好的描述无限深方势阱中的玻色气体，特别是在吸引相互作用和在强排斥相互作用的条件下。非常幸运的是，无限深方阱势对应的相互作用模型是可积的，Gaudin 已经用 Bethe ansatz 方法得到了排斥相互作用模型的精确解[28]。现在，无限深势阱中的精确可解模型正在受到越来越多的关注[29-31]。尽管可积的相互作用玻色模型（Lieb-Liniger 模型）已经有很长的研究历史，吸引相互作用情形却没有受到太多的关注[23, 32, 33]，而且已有的大多数研究都集中在周期边条件系统的基态能

量上。

本章将要讨论一维玻色气体在无限深方势阱中的基态密度分布。在周期边条件下，系统的密度分布为常数，它和相互作用的大小无关，而束缚玻色系统则不同，它的密度分布会受到相互作用强度的影响。这里要研究的是单体密度矩阵与原子间相互作用的关系以及有限尺寸效应（包括吸引相互作用和排斥相互作用）。另外，也将计算系统的二阶关联函数。我们将通过数值求解 Bethe ansatz 方程，得到基态波函数。

## 第一节 物理模型

在第一章提到一维玻色气体的实验实现，主要方法是用各向异性的势阱或者二维光格子束缚囚禁玻色气体，使它在两个方向上受到强烈的束缚而在另一个方向上可以自由的运动，这样形成一维的束缚气体。另外，也可以用微电子芯片实现低维玻色气体的凝聚。但是，用二维光格子形成的一维束缚气体在不同的一维气体之间存在耦合，这些方法得到的一维气体都在空间中非均匀分布，其对应的物理模型不能用解析的办法精确求解，更重要的是没有准确的模型可以描述整个相互作用区域，而只能描述某些特定的区域，比如弱排斥相互作用区域和强排斥相互作用区域，中间区域和吸引相互作用区域则在求解过程中遇到了很大的困难。因此，在实验上实现简单的物理模型就非常的必要，这有助于我们更清楚准确地理解一些基本的物理问题。

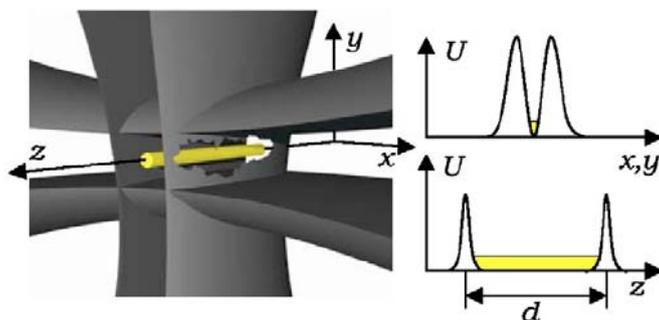


图-4.1 左图：交叉的 $TEM_{01}$ 光。右图：势阱形状，即势能（ $U$ ）在  $x, y$  方向的形状。端帽光束沿  $z$  方向，端帽间距离为  $d = 80\mu\text{m}$ 。

2005 年, M. G. Raizen 等人在光学箱子势中实现了玻色-爱因斯坦凝聚[27], 从而得到了最简单的多体模型-“一维无限深势阱中的多粒子系统”。他们的势阱由一对交叉的  $\text{TEM}_{01}$  光束构成, 并用高斯光束作为端帽, 示意图如图-4.1 所示。这里简单介绍一下他们的实验步骤: (1) 在磁光阱中产生饼状 BEC; (2) 把 BEC 装载到水平方向的  $\text{TEM}_{01}$  光阱; (3) 在另一个方向用红色光压缩 BEC, 形成雪茄状 BEC; (4) 把雪茄形 BEC 装载到垂直方向的  $\text{TEM}_{01}$  光阱中并用高斯光束作为端帽在两端形成无限高势垒; (5) 撤去红色光并加上补偿光; (6) 调节  $\text{TEM}_{01}$  光达到最大功率。补偿光的作用是使原子在阱中均匀分布, 可以实现的阱中的原子数目为  $5 \times 10^2$ 。该实验的优点是在单个势阱中实现 BEC, 并且使得原子在阱中均匀分布。

上述光学箱子中的原子气体可以用长度为  $L$  的无限深方势阱中的  $N$  个相互作用为  $\delta$  函数势的粒子的模型描述, 薛定鄂方程为 (取自然单位):

$$\left[ -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) \right] \Psi = E\Psi, \quad (1.1)$$

其中  $2c$  是原子间的相互作用强度, 它与原子的  $s$ -波散射长度有关[7, 10], 可以用 Feshbach 共振技术或者束缚诱导共振技术调节, 在  $-\infty$  到  $+\infty$  的区域上变化。当原子间相互作用为排斥时,  $c > 0$ , 当原子间相互作用为吸引时,  $c < 0$ 。这里定义一个表征一维量子气体处于不同的物理区域的重要参数  $\gamma = c\rho^{-1}$ , 其中  $\rho = N/L$ 。本章将讨论整个物理区域  $-\infty < c < +\infty$ 。所有的粒子在区间  $R$  内, 即:

$$R: 0 \leq x_1, x_2, \dots, x_N \leq L. \quad (1.2)$$

并且波函数满足齐次边条件。玻色子系统的多体波函数满足交换对称性。

## 第二节 坐标 Bethe Ansatz 方法

首先考虑  $N = 2$  的情况, 然后推广到任意粒子数  $N$  的情况。对于两个粒子的体系, 方程 (1.1) 的波函数可写成

$$\Psi(x_1, x_2) = \varphi_{12}(x_1, x_2)\theta(x_2 - x_1) + \varphi_{21}(x_1, x_2)\theta(x_1 - x_2), \quad (2.1)$$

其中  $\theta(x)$  是阶跃函数。对于玻色子，要求波函数满足交换对称性，即

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi(x_2, x_1). \quad (2.2)$$

将 (2.1) 式代入 (2.2) 式，得到

$$\varphi_{12}(x_1, x_2) = \varphi_{21}(x_2, x_1). \quad (2.3)$$

因此，原始的  $\Psi(x_1, x_2)$  在区间  $R$  上的问题就可以简化为  $\varphi(x_1, x_2)$  在区间

$R_1: 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq L$  上的问题。原始方程简化为：

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\varphi(x_1, x_2) = E\varphi(x_1, x_2) \quad x_1 < x_2. \quad (2.4)$$

而无限深势阱中的波函数  $\psi(x_1, x_2)$  满足齐次边条件：

$$\begin{aligned} \varphi(x_1 = 0, x_2) &= 0, \\ \varphi(x_1, x_2 = L) &= 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

设波函数为 Bethe 波函数

$$\begin{aligned} \varphi(x_1, x_2) = \sum_{r_1, r_2} [ & A_{12}(r_1, r_2) \exp(ir_1 k_1 x_1 + ir_2 k_2 x_2) \\ & + A_{21}(r_2, r_1) \exp(ir_2 k_2 x_1 + ir_1 k_1 x_2) ], \end{aligned} \quad (2.6)$$

其中  $r_{1,2} = \pm 1$ ，分别表示粒子向右运动或者向左运动。代入本征方程 (2.4) 可得到能量本征值：

$$E = k_1^2 + k_2^2. \quad (2.7)$$

由第一个边条件得：

$$\sum_{r_1, r_2} [A_{12}(r_1, r_2) \exp(ir_2 k_2 x_2) + A_{21}(r_2, r_1) \exp(ir_1 k_1 x_2)] = 0. \quad (2.8)$$

这样，可以得到关系：

$$\begin{aligned} A_{12}(-, r_2) &= S_L(k_1) A_{12}(+, r_2), \\ A_{21}(-, r_1) &= S_L(k_2) A_{21}(+, r_1), \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中

$$S_L(k_i) = -1. \quad (2.10)$$

对于在右边界处的粒子 ( $x_2 = L$ )，利用和左边条件同样的方法可以得到关系：

$$\sum_{r_1, r_2} [A_{12}(r_1, r_2) \exp(ir_1 k_1 x_1 + ir_2 k_2 L) + A_{21}(r_2, r_1) \exp(ir_2 k_2 x_1 + ir_1 k_1 L)] = 0,$$

因此有

$$\begin{aligned} A_{12}(r_1, -) &= S_R(k_2) A_{12}(r_1, +), \\ A_{21}(r_2, -) &= S_R(k_1) A_{21}(r_2, +), \end{aligned} \quad (2.11)$$

其中

$$S_L(k_i) = -e^{i2k_i L}. \quad (2.12)$$

下面考虑  $x_1 = x_2$  时由  $\delta$  函数引起的波函数跃变，它可以等价于波函数  $\varphi(x_1, x_2)$  的一阶微商满足条件：

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \varphi(x_1, x_2) \Big|_{x_2=x_1^+} = c \varphi(x_1, x_2) \Big|_{x_2=x_1}. \quad (2.13)$$

将波函数 (2.6) 式代入上式，得

$$\sum_{r_1, r_2} [(ir_2 k_2 - ir_1 k_1 - c) A_{12}(r_1, r_2) + (ir_1 k_1 - ir_2 k_2 - c) A_{21}(r_2, r_1)] \exp(ir_1 k_1 + ir_2 k_2) x_1 = 0,$$

从而有

$$A_{21}(r_2, r_1) = \frac{r_2 k_2 - r_1 k_1 + ic}{r_2 k_2 - r_1 k_1 - ic} A_{12}(r_1, r_2). \quad (2.14)$$

为了方便，定义

$$A_{21}(r_2, r_1) = S(r_1 k_1, r_2 k_2) A_{12}(r_1, r_2), \quad (2.15)$$

其中

$$S(r_1 k_1, r_2 k_2) = \frac{r_2 k_2 - r_1 k_1 + ic}{r_2 k_2 - r_1 k_1 - ic}.$$

由 (2.9) 式，(2.11) 式，和 (2.15) 式可得

$$S_L^{-1}(k_1) S(k_2, -k_1) S_R^{-1}(-k_1) S(k_1, k_2) = 1.$$

这一关系可以被表示为：

$$e^{i2k_1 L} = \frac{ik_2 - ik_1 + c}{ik_2 - ik_1 - c} \frac{ik_2 + ik_1 - c}{ik_2 + ik_1 + c}. \quad (2.16)$$

这就是 Bethe Ansatz 方程，类似地有

$$e^{i2k_2L} = \frac{ik_1 - ik_2 + c}{ik_1 - ik_2 - c} \frac{ik_1 + ik_2 - c}{ik_1 + ik_2 + c}. \quad (2.17)$$

对于  $N$  粒子系统，一般地假设多体波函数为：

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P \varphi(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N}) \theta(x_{p_1} < x_{p_2} < \dots < x_{p_N}),$$

其中  $\theta(x_{p_1} < x_{p_2} < \dots < x_{p_N}) = \theta(x_{p_N} - x_{p_{N-1}}) \cdots \theta(x_{p_2} - x_{p_1})$ ， $p_1, p_2, \dots, p_N$  是  $1, \dots, N$  的排列， $\sum_P$  对所有的排列求和。根据波函数的对称性条件， $\varphi(x_{p_1}, x_{p_2}, \dots, x_{p_N})$  可以通过对  $\varphi(x_1, \dots, x_N)$  置换得到。原始问题等价于在区间  $R_1: 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N \leq L$  内求解方程：

$$\left[ -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta(x_i - x_j) \right] \varphi(x_1, \dots, x_N) = E \varphi(x_1, \dots, x_N). \quad (2.18)$$

波函数  $\varphi(x_1, \dots, x_N)$  为 Bethe 波函数：

$$\varphi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{P, r_1, \dots, r_N} \left[ A_P \exp\left(i \sum_j r_j k_{p_j} x_j\right) \right], \quad (2.19)$$

其中  $r_j = \pm 1$  表示原子向右或者向左运动。把 (2.19) 式代入方程 (2.18) 并考虑边界条件

$$\varphi(0, x_2, \dots, x_N) = \varphi(x_1, \dots, x_N = L) = 0,$$

可以得到 Bethe Ansatz 方程：

$$\exp(i2k_jL) = \prod_{l=1(\neq j)}^N \frac{ik_l - ik_j + c}{ik_l - ik_j - c} \frac{ik_l + ik_j - c}{ik_l + ik_j + c}.$$

能量本征值为  $E = \sum_{j=1}^N k_j^2$ ，总动量为  $k = \sum_{j=1}^N k_j$ 。对 Bethe Ansatz 方程取对数，可得：

$$k_j L = n_j \pi + \sum_{l=1(\neq j)}^N \left( \arctan \frac{c}{k_j + k_l} + \arctan \frac{c}{k_j - k_l} \right). \quad (2.20)$$

这里， $\{n_j\}$  是一组整数，它决定一组本征态，对于基态有  $n_j = 1 (1 \leq j \leq N)$ 。另外，方程 (2.21) 也可表示为：

$$k_j L = n'_j \pi - \sum_{l=1(\neq j)}^N \left( \arctan \frac{k_j + k_l}{c} + \arctan \frac{k_j - k_l}{c} \right). \quad (2.21)$$

这两个方程是自洽的，只是  $\{n'_j\}$  和  $\{n_j\}$  的选择不同。对于后一种表达式，对应基态有  $n'_j = j (1 \leq j \leq N)$ 。这样，通过求解超越方程组 (2.20)，可以得到  $\{k_j\}$  和波函数。因为 (2.21) 式可以方便地推广到热力学极限，所以文献中通常使用该式 [21, 22]。当  $c > 0$  时，解集  $k_j$  是唯一的实数，在  $k$  空间的态密度  $\rho(k)$  可以定义为 [20]：

$$L \rho \left( \frac{k_j + k_{j+1}}{2} \right) = \frac{1}{k_{j+1} - k_j}. \quad (2.22)$$

这样的定义在  $c < 0$  时没有意义。在后边，通过  $N = 3$  的例子可以看出，在吸引相互作用时，方程的解不是唯一的，可以通过比较各组解的能量本征值确定基态。

通过简单的代数运算，波函数有如下形式：

$$\begin{aligned} \varphi(x_1, \dots, x_N) = & \sum_P A_P \in_P \exp \left[ i \sum_{l < j}^{N-1} \omega_{p_l p_j} \right] \exp(i k_{p_N} L) \sin(k_{p_1} x_1) \\ & \times \sin \left( k_{p_j} x_j - \sum_{l < j} \omega_{p_l p_j} \right) \sin(k_{p_N} (L - x_N)), \end{aligned} \quad (2.23)$$

其中有

$$\omega_{ab} = \arctan \frac{c}{k_b - k_a} + \arctan \frac{c}{k_b + k_a},$$

和

$$A_{p_1 p_2 \dots p_N} = \prod_{j < l}^N (i k_{p_l} - i k_{p_j} + c) (i k_{p_l} + i k_{p_j} + c).$$

当  $P$  为  $1, \dots, N$  的偶置换时， $\in_P$  为  $+1$ ，当  $P$  为  $1, \dots, N$  的奇置换时， $\in_P$  为  $-1$ 。利用基态波函数  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ ，可以计算单体密度矩阵，它定义为：

$$\rho(x) = \frac{N \int_0^L dx_2 \dots dx_N \Psi^*(x, x_2, \dots, x_N) \Psi(x, x_2, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2}. \quad (2.24)$$

从这里可以看出，要计算出  $\rho(x)$ ，需要计算  $2(N!)^2$  个多重积分，随着粒子数的增加，

运算量增大很快，本文最多计算  $N=4$  个原子，这需要计算 576 个三重积分和 576 个四重积分，我们用数值方法完成。尽管运算量很大，但是相对于原始未被简化的波函数 (2.19) 式来说，已经有了很大的进步，如果用原始的 Bethe 波函数计算，则需要计算  $2(2^N N!)^2$  个多重积分。

### 第三节 单体密度矩阵和关联函数

本节将通过数值求解 Bethe Ansatz 方程 (2.20)，得到吸引相互作用和排斥相互作用的基态解，并计算单体密度矩阵。

在后面的计算中，不失一般性，都令  $L=1$ 。首先考虑排斥相互作用的情形。当  $c>0$  时，Bethe Ansatz 方程的解  $\{k_j\}$  为实数，用 Newton-Raphson 算法可以很容易地求解。图-4.1 给出了不同相互作用常数时基态在准动量  $k$  空间的密度分布 (2.22)

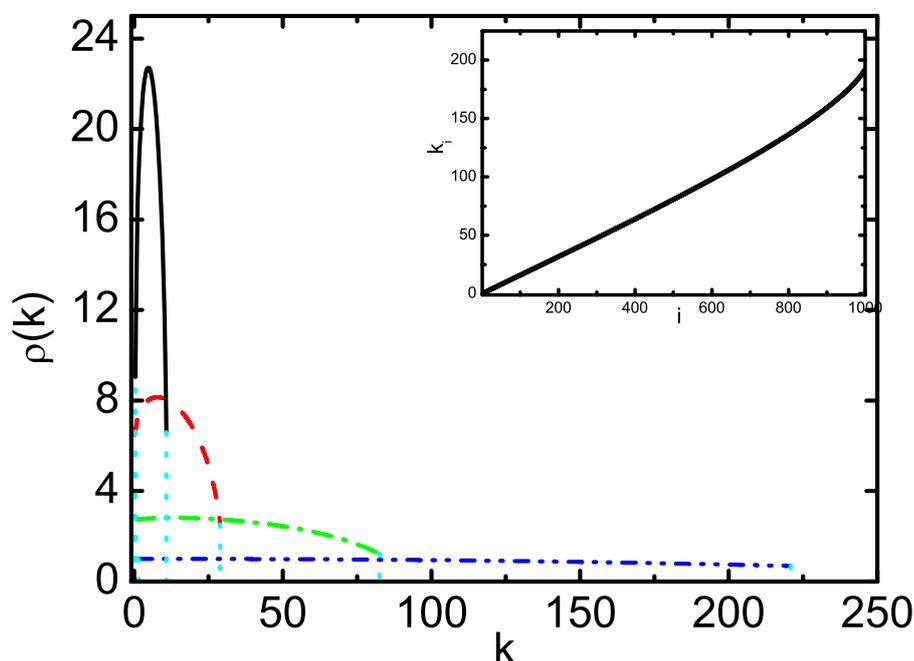


图-4.1 在准动量  $k$  空间的态密度， $N=200$ ， $c=0.1$  (实线)， $c=1$  (划线)， $c=10$  (点划线)， $c=100$  (点点划线)。插图：Bethe Ansatz 方程的数值解， $N=1000$ ， $c=10$ 。

式，可以看出，在齐次边条件下的密度分布和周期边条件下的密度分布有明显的不同，在这里，由于无限深势阱的束缚，当 $k$ 接近零点时，密度被强烈地压制。插图中给出了 $N=1000$ 和 $c=10$ 时方程(2.20)的数值解。Bethe Ansatz 方程唯一地决定了准动量 $k_j$ 的值和基态波函数，以及单体密度矩阵。对于不同的相互作用常数 $c$ ，在图-4.2 中给出了粒子数为 $N=4$ 的基态单体密度矩阵。当原子间没有相互作用时( $c=0$ )，所有原子有相同的准动量， $k_j = \pi (1 \leq j \leq N)$ ，即系统为凝聚在基态的理想玻色气体，单体密度矩阵是 $N$ 个独立的位于基态的玻色子密度分布的和。随着相互作用变强，系统密度的半宽增大，当 $c=10$ 时，密度分布已经表现出类似费米分布的特征，随着相互作用的进一步增强，玻色子的分布和 $N$ 个没有相互作用的无自旋费米子分布相同，这里当 $c \sim 10$ 时，准动量为 $k_j = j\pi (1 \leq j \leq N)$ 。

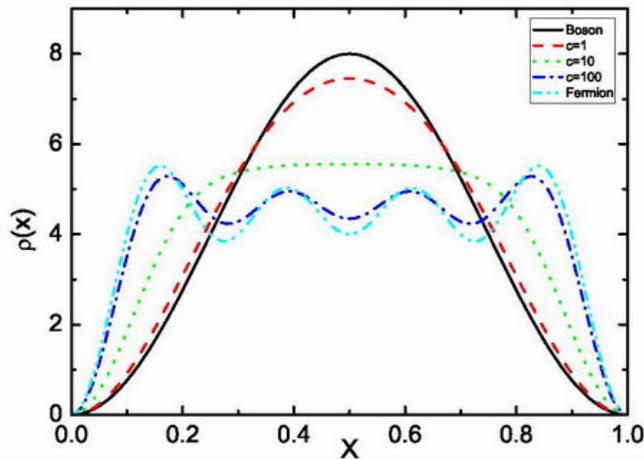


图-4.2 不同相互作用常数时基态的单体密度矩阵  $\rho(x)$ ， $N=4$ 。

当原子间相互作用为吸引时( $c < 0$ )，Bethe Ansatz 方程的解为复数。在文献[22, 32, 33]中已经研究了周期边条件情形，但是对于束缚系统，由于零点能的存在，基态解的准动量不再是纯虚数。对于两粒子系统，Bethe Ansatz 方程的解为两弦解：

$$\begin{aligned} k_1 &= \alpha + i\Lambda, \\ k_2 &= \alpha - i\Lambda, \end{aligned}$$

其中 $\alpha$ 和 $\Lambda$ 是实数， $2\alpha$ 是系统的总动量。这时，Bethe Ansatz 方程表示为：

$$\begin{aligned}\alpha L &= \frac{n_1 + n_2}{2} \pi + \arctan \frac{c}{2\alpha}, \\ \Lambda L &= \frac{1}{2} \ln \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c},\end{aligned}\tag{3.1}$$

其中基态时有  $n_1 = n_2 = 1$ ，相应地，系统的基态能量为  $E = 2\alpha^2 - 2\Lambda^2$ 。由于动量  $k = 2\alpha$ ，能量可以表示为  $E = k^2/2 - 2\Lambda^2$ ，因此，对应两弦解的态可以看作束缚能为  $-2\Lambda^2$  质量为两倍原子质量的束缚态。出于方便，我们称两弦解对应的束缚态为 Dimer 态。接下来讨论无限深方势阱中的三体问题，假设有如下形式的解：

$$\begin{aligned}k_1 &= \alpha - i\Lambda, \\ k_2 &= \alpha + i\Lambda, \\ k_3 &= \beta,\end{aligned}$$

这样，Bethe Ansatz 方程表示为：

$$\begin{aligned}(2\alpha + \beta)L &= (2n + n')\pi + 2\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{\alpha + \beta} - \arctan \frac{\Lambda - c}{\alpha + \beta} + \arctan \frac{c}{2\alpha}\right), \\ (2\alpha - \beta)L &= (2n - n')\pi + 2\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{\alpha - \beta} - \arctan \frac{\Lambda - c}{\alpha - \beta} + \arctan \frac{c}{2\alpha}\right), \\ \exp(2\Lambda L) &= \frac{\left[(\alpha + \beta)^2 + (\Lambda - c)^2\right]^{1/2} \left[(\alpha - \beta)^2 + (\Lambda - c)^2\right]^{1/2}}{\left[(\alpha + \beta)^2 + (\Lambda + c)^2\right]^{1/2} \left[(\alpha - \beta)^2 + (\Lambda + c)^2\right]^{1/2}} \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c}.\end{aligned}$$

上面第一个式子中  $2\alpha + \beta$  是系统的总动量，在周期边条件下，它是守恒量，但是在开边界情形，它不守恒。这里  $n = n' = 1$  对应系统的基态，在无相互作用极限  $c = 0$ ，总动量  $2\alpha + \beta = 3\pi/L$ ，三个粒子有相同的准动量，他们同时占据最低能级态。当  $c \rightarrow -\infty$  时，结果不太明显。我们有  $2\alpha + \beta = \pi/L$ ，其中  $\Lambda = -c + \delta$ ， $\delta$  是极小的正数。通过数值求解 Bethe Ansatz 方程，可以得到  $\alpha, \beta$  和  $\Lambda$  的值。对于周期边条件，三个吸引相互作用的玻色子有三弦解（对应  $\alpha = \beta$ ），即三粒子束缚态。图-4.3 给出了  $L=1$ ， $c=-1$  的三弦解（菱形）。在我们研究的开边界条件情形，对于有限的吸引相互作用，可以证明没有三弦解存在（见附录），这就意味着对于开边界，或者有束缚势的系统，不可能有三粒子束缚态，只有一个两粒子束缚态和一个独立的粒子，但

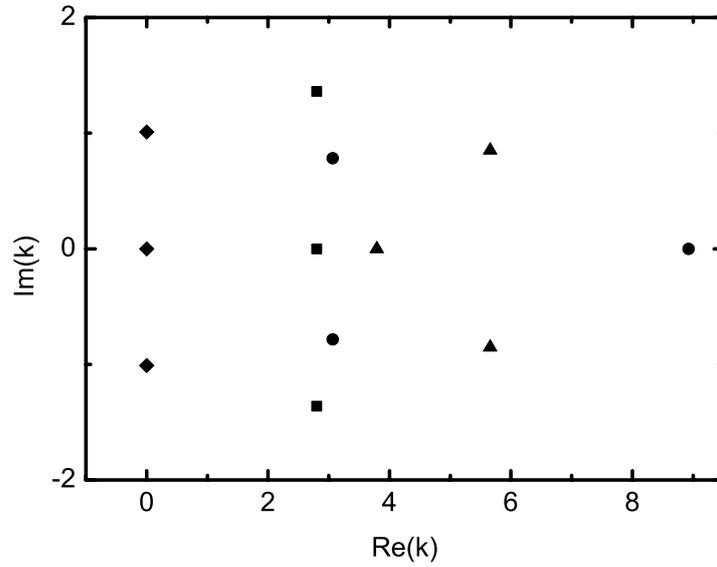


图-4.3 吸引相互作用的三个玻色子的三组解（方块，三角，圆圈）， $c = -1$ 。菱形是周期边条件下三个玻色子的三弦解， $L = 1$ ， $c = -1$ 。

是数值计算表明，在  $c = -1$  时，可以找到三组不同的解，如图-4.3 所示，方块，三角和圆圈表示开边界条件下有限吸引相互作用的玻色子的三组解。这里可以看出，与周期边条件相比，开边界使得系统有了更丰富的物理性质，但是同时也增加了精确求解的难度。值得注意的是，图-4.3 中方块表示的解中虽然  $\alpha \approx \beta$ ，但它并不是一个三粒子束缚态。通过比较三组解的能量  $E$ ，看出类似于三粒子束缚态的解（方块）有最低的能量本征值，因此，它是系统的基态。

当系统中有四个原子时，通解可以假设为如下形式：

$$\begin{aligned} k_1 &= \alpha - i\Lambda_1, \\ k_2 &= \alpha + i\Lambda_1, \\ k_3 &= \beta - i\Lambda_2, \\ k_4 &= \beta + i\Lambda_2. \end{aligned}$$

通过数值求解 Bethe Ansatz 方程，结果表明基态为四弦解。通常，对于粒子数  $N > 4$  的系统，在弱相互作用区域，当系统中的粒子数  $N$  为偶数时，解  $N/2$  个 Dimer 构成的散射态组成，当  $N$  为奇数时，解由  $(N-1)/2$  个 Dimer 和一个独立的粒子构成的散

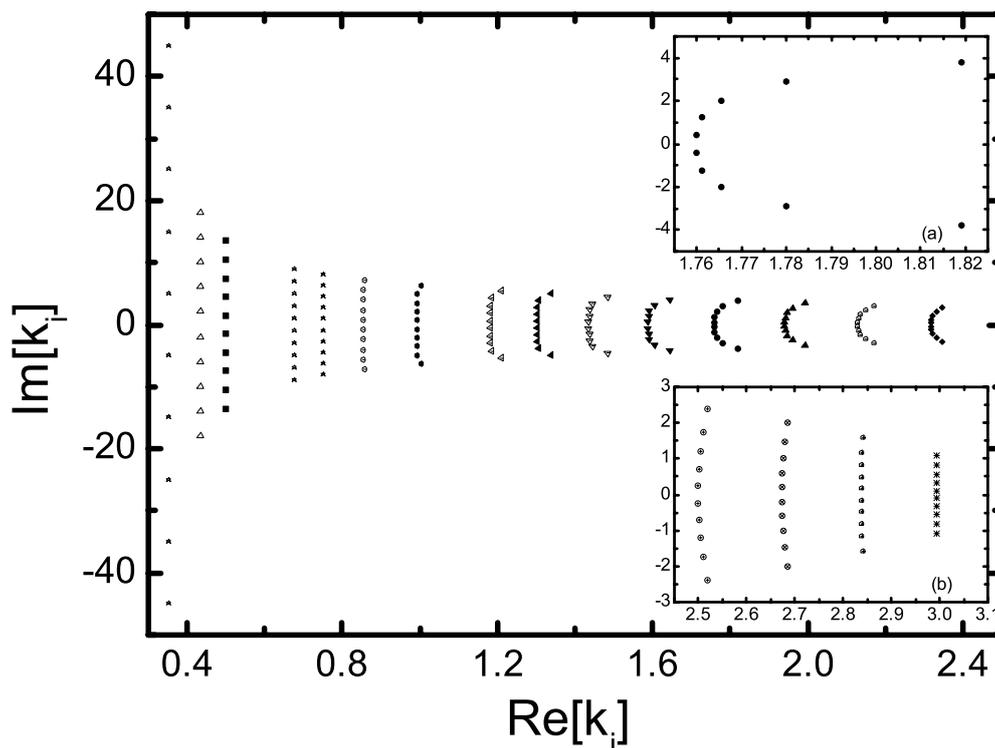


图-4.4 不同吸引相互作用常数  $c$  的 Bethe Ansatz 解,  $N=10$ 。  $c$  的值分别为  $-10, -4.0, -3.0, 2.0, -1.8, -1.6, -1.4, -1.2, -1.1, -1.0, -0.9, -0.8, -0.7, -0.6, -0.5$  (从左到右)。插图: (a)  $c=-0.8$ ; (b)  $c$  的值分别为  $-0.4, -0.3, -0.2, -0.1$  (从左到右)。

射态组成。  $N/2$  个 Dimer 态由  $N/2$  个两弦解形成。随着吸引相互作用的增强, 在中间区域, 基态由  $(N-M)$ -弦解和  $M/2$  个两弦解构成 ( $2 \leq M \leq N$ ), 而在强相互作用区域基态为  $N$ -弦解。图-4.4 是不同吸引相互作用常数  $c$  对应的 Bethe Ansatz 方程的解, 图中的粒子数为  $N=10$ 。结果表明, 当吸引相互作用比较弱时 ( $-1.42 < c < 0$ ), 系统的基态由 5 个 Dimer 构成, 而在强吸引极限 ( $c \leq -3.02$ ), 基态是一个 10-弦解。而在中间区域 ( $-3.02 \leq c < -1.42$ ), 当  $-1.72 \leq c < -1.42$  时, 基态解为一个 4-弦解加三个 2-弦解; 当  $-1.88 \leq c < -1.72$  时, 为一个 6-弦解加两个 2-弦解; 当  $-3.02 \leq c < -1.88$  时, 为一个 8-弦解加一个 2-弦解。

对于周期边条件系统,  $N$ -弦假设可以表示为:

$$k_j = \alpha + i(N+1-2j)(c/2), \quad j=1, \dots, N.$$

在  $c < 0$  时,  $N$ -弦假设通常是  $L \rightarrow \infty$  极限下 Bethe Ansatz 方程的解。对于有限长度

的无限深势阱，假定  $N$ -弦解有如下形式：

$$k_j = \alpha + i(N+1-2j)(c/2 + \delta_j), \quad j=1, \dots, N, \quad (3.2)$$

其中  $\delta_j$  是一组极小的正数，并且在  $c \rightarrow -\infty$  时  $\delta_j \rightarrow 0$ 。在强吸引相互作用极限下方程

(2.20) 的数值结果与表达式 (3.2) 非常一致。例如，对于十个原子的系统，当  $c = -3.02$  时，解的值表示为  $k_j = 0.498075 - i(11-2j)(5 + \delta_j)$ ，其中  $|\delta_j| < 10^{-9}$ ；当

$c = -10$  时， $k_j = 0.354213 - i(11-2j)(5 + \delta_j)$ ，其中  $|\delta_j| < 10^{-13}$ 。在强吸引极限，我们

可以解析决定  $\alpha$  值。由表达式 (3.2) 和 Bethe Ansatz 方程，总动量满足：

$$\exp(i2kL) = \prod_{1 \leq j < N} \left[ \frac{2\alpha + i(jc)}{2\alpha - i(jc)} \right]^2,$$

其中  $k = N\alpha$  并且我们取了  $\delta_j = 0$ 。对上式取对数可得：

$$kL = n\pi + \sum_{1 \leq j < N} 2 \arctan \frac{jc}{2\alpha}, \quad (3.3)$$

其中对于基态  $n = N$ 。可以清楚地看出，当  $c \rightarrow -\infty$  时，系统的总动量为  $\pi$ ，因此  $\alpha = \pi/N$ 。

粒子数  $N = 2$  和  $N = 4$  的基态单体密度矩阵如图-4.5 所示。随着吸引相互作用增大，系统的中心密度先逐渐变大然后变小。在  $c \rightarrow -\infty$  的极限（当  $N = 2$  时， $c \sim -1000$ ），密度分布和无相互作用时（ $c = 0$ ）的密度分布相同。这可以解释为处

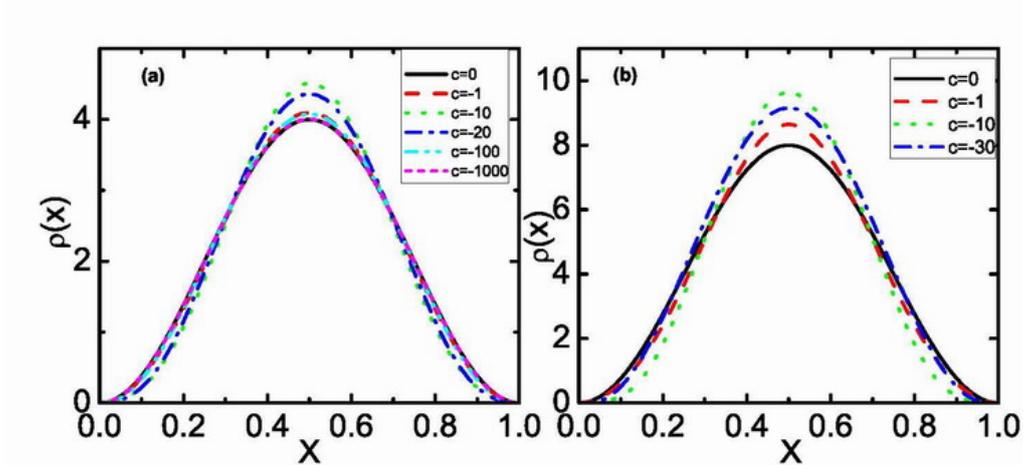


图-4.5 不同吸引相互作用下基态的单体密度矩阵  $\rho(x)$ 。(a)  $N = 2$ ,

(b)  $N = 4$ 。

在基态的质量为  $Nm$  的复合粒子, 它的基态密度分布的形式为  $\sin^2 x$ 。当 Bethe Ansatz 方程取形如 (3.2) 式的解时, 基态能量表示为  $E = k^2/N - N(N^2 - 1)c^2/12$ , 因此对应  $N$ -弦解的态可以看作  $N$  原子的束缚态, 其束缚能  $\propto -c^2$ , 质量为  $Nm$ 。研究二阶关联函数也是很有意义的:

$$g_2(x, c) = \frac{N(N-1) \int_0^L dx_2 \cdots dx_N |\Psi(x, x_2, \cdots, x_N)|^2}{\int_0^L dx_1 \cdots dx_N |\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N)|^2}.$$

在图-4.6 中, 我们给出了二阶关联函数随相互作用常数的变化。吸引相互作用的玻色气体更容易聚集在一起, 并且相互作用越强, 原子聚集的范围越小。而对于排斥相互作用, 原子相互避开, 并且不再聚集在一个狭窄的区域, 在 Tonks 区域关联函数为零, 这类似于周期边条件情形。

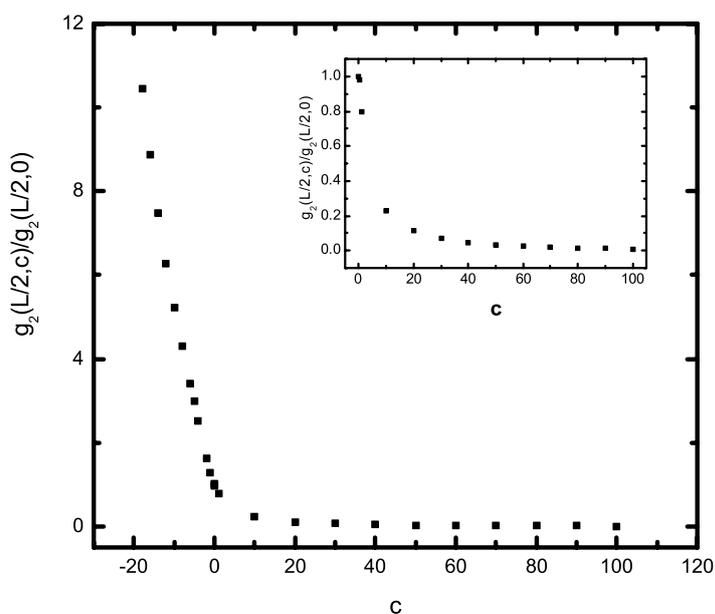


图-4.6 二阶关联函数对  $c$  的依赖,  $N = 4$ 。插图: 排斥相互作用时的二阶关联函数。

#### 第四节 小结

本章通过数值求解 Bethe Ansatz 方程, 讨论了在有限长度  $L$  的一维无限深势阱中, 玻色气体在整个物理区域  $-\infty < c < +\infty$  上的基态波函数 [35], 并且计算了单体密度

矩阵和二阶关联函数。在强排斥相互作用极限  $c \rightarrow \infty$ ，玻色子表现出和无相互作用的无自旋费米子相同的性质，而在强吸引相互作用极限  $c \rightarrow -\infty$ ，玻色气体如同一个位于基态的质量为  $Nm$  的复合玻色子。在有限吸引相互作用时，系统的基态由  $N/2$  个两体束缚态（ $N$  为偶数）或者  $(N-1)/2$  个两粒子束缚态加一个独立的粒子态（ $N$  为奇数）构成。二阶关联函数表明相互作用常数越小，原子聚集在越小的区域内。这里的结果包括了平均场理论以外的整个参数区域，并且从 Tonks 极限到强吸引相互作用极限显示出了连续的行为。精确解有望为束缚势中吸引相互作用 BEC 的波函数提供一个清晰的图象并使我们能够更好的理解 BEC 的塌缩行为。

## 附 录

本附录将详细研究三粒子问题。我们首先假定三原子系统的解为 3-弦解：

$k_1 = \alpha - i\Lambda, k_2 = \alpha + i\Lambda, k_3 = \alpha$ . Bethe Ansatz 方程可以表示为  $\alpha$  和  $\Lambda$  的方程：

$$\exp[(i2\alpha + 2\Lambda)L] = \frac{i2\alpha + \Lambda - c}{i2\alpha + \Lambda + c} \frac{i2\alpha - c}{i2\alpha + c} \frac{\Lambda - c}{\Lambda + c} \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c}, \quad (\text{A.1})$$

$$\exp[(i2\alpha + 2\Lambda)L] = \frac{i2\alpha - c}{i2\alpha + c} \frac{i2\alpha - \Lambda - c}{i2\alpha - \Lambda + c} \frac{\Lambda + c}{\Lambda - c} \frac{2\Lambda + c}{2\Lambda - c}, \quad (\text{A.2})$$

$$\exp(i2\alpha L) = \frac{i2\alpha + \Lambda - c}{i2\alpha + \Lambda + c} \frac{i2\alpha - \Lambda - c}{i2\alpha - \Lambda - c}, \quad (\text{A.3})$$

其中在第三个方程中我们使用了  $\frac{\Lambda - c}{\Lambda + c} \frac{\Lambda + c}{\Lambda - c} = 1$ 。把 (A.3) 代入 (A.1) 和 (A.2) 可得：

$$\begin{aligned} \exp[2\Lambda L] \frac{i2\alpha - \Lambda - c}{i2\alpha - \Lambda + c} &= \frac{i2\alpha - c}{i2\alpha + c} \frac{\Lambda - c}{\Lambda + c} \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c}, \\ \exp[-2\Lambda L] \frac{i2\alpha + \Lambda - c}{i2\alpha + \Lambda + c} &= \frac{i2\alpha - c}{i2\alpha + c} \frac{\Lambda + c}{\Lambda - c} \frac{2\Lambda + c}{2\Lambda - c}. \end{aligned}$$

上述方程可以重新表示为

$$\begin{aligned} &\exp[2\Lambda L] \sqrt{\frac{4\alpha^2 + (\Lambda + c)^2}{4\alpha^2 + (\Lambda - c)^2}} \exp\left[i\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{2\alpha} - \arctan \frac{\Lambda - c}{2\alpha}\right)\right] \\ &= \exp\left[2i\left(\arctan \frac{c}{2\alpha}\right)\right] \frac{\Lambda - c}{\Lambda + c} \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp[-2\Lambda L] \sqrt{\frac{4\alpha^2 + (\Lambda - c)^2}{4\alpha^2 + (\Lambda + c)^2}} \exp\left[i\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{2\alpha} - \arctan \frac{\Lambda - c}{2\alpha}\right)\right] \\ &= \exp\left[2i\left(\arctan \frac{c}{2\alpha}\right)\right] \frac{\Lambda + c}{\Lambda - c} \frac{2\Lambda + c}{2\Lambda - c}. \end{aligned}$$

比较这两个等式左右两边的模或虚部，对应方程 (A.1)，(A.2) 和 (A.3) 我们可以得到三个新的方程：

$$\exp[2\Lambda L] = \sqrt{\frac{4\alpha^2 + (\Lambda - c)^2}{4\alpha^2 + (\Lambda + c)^2}} \frac{\Lambda - c}{\Lambda + c} \frac{2\Lambda - c}{2\Lambda + c}, \quad (\text{A.4})$$

$$\exp\left[2i\left(\arctan \frac{c}{2\alpha}\right)\right] = \exp\left[i\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{2\alpha} - \arctan \frac{\Lambda - c}{2\alpha}\right)\right], \quad (\text{A.5})$$

$$\exp[2i\alpha] = \exp\left[i\left(\arctan \frac{\Lambda + c}{2\alpha} - \arctan \frac{\Lambda - c}{2\alpha}\right)\right]. \quad (\text{A.6})$$

可以看出，这里有两个未知参数  $\alpha$  和  $\Lambda$ ，但是需要满足三个方程，对于任意的常数  $c$  上述方程组无解。这意味着假设的三弦解不是 Bethe Ansatz 方程的解。另外，数值计算也表明，该方程组无解。

## 参 考 文 献

- [1] A. Görlitz, et.al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [2] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, and T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003);  
T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl, and T. Esslinger, *ibid.* **92**, 130403 (2004).
- [3] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature **429**, 277 (2004).
- [4] T. Kinoshita, T. Wenger and D. S. Weiss, Science **305**, 1125 (2004).
- [5] B. L. Tolra, K. M. O'Hara, J. H. Huckans, W. D. Phillips, S. L. Rolston, and J. V. Porto, Phys. Rev. Lett. **92**, 190401 (2004).
- [6] N. J. van Druten and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **79**, 549 (1997).
- [7] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [8] M. D. Girardeau, J. Math. Phys. (N.Y.) **1**, 516 (1960); L. Tonks, Phys. Rev. **50**, 955 (1936).
- [9] K. K. Das, G. J. Lapeyre, and E. M. Wright, Phys. Rev. A. **65**, 063603 (2002).
- [10] T. Bergeman, M. G. Moore, and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **91**, 163201 (2003).
- [11] P. Öhberg and L. Santos, Phys. Rev. Lett. **89**, 240402 (2002).
- [12] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).
- [13] V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **86**, 5413 (2001).
- [14] D. L. Luxat and A. Griffin, Phys. Rev. A. **67**, 043603 (2003).
- [15] P. Pedri, L. Santos, P. Öhberg, and S. Stringari, Phys. Rev. A. **68**, 043601 (2003).
- [16] E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley, and X. Qi, Phys. Rev. Lett. **85**, 1146

- (2000).
- [17] S. Chen and R. Egger, *Phys. Rev. A* **68**, 063605 (2003).
- [18] M. D. Girardeau and E. M. Wright, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5239 (2000); T.-L. Ho and M. Ma, *J. Low Temp Phys.* **115**, 61 (1999).
- [19] E. H. Lieb and W. Liniger, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963); E. H. Lieb, *ibid.* **130**, 1616 (1963).
- [20] C. N. Yang and C. P. Yang, *J. Math. Phys.* **10**, 1115 (1969).
- [21] V. E. Korepin, A. G. Izergin and N. M. Bogoliubov, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. (Cambridge University Press, Cambridge 1993).
- [22] M. Takahashi, *Thermodynamic of One-Dimensional Solvable Models*. (Cambridge University Press, Cambridge 1999).
- [23] J. B. McGuire, *J. Math. Phys.* **5**, 622 (1964).
- [24] L. D. Carr, C. W. Clark, and W. P. Reinhardt, *Phys. Rev. A* **62**, 063610 (2000); *ibid.*, **62**, 063611 (2000).
- [25] P. A. Ruprecht, M. J. Holland, K. Burnett, and M. Edwards, *Phys. Rev. A* **51**, 4704 (1995).
- [26] W. Hänsel et al., *Nature* **413**, 498 (2001).
- [27] T. P. Meyrath, F. Schreck, J. L. Hanssen, C.-S. Chuu, and M. G. Raizen, *Phys. Rev. A* **71**, 041604 (2005).
- [28] M. Gaudin, *Phys Rev. A* **4**, 386 (1971).
- [29] M.T. Batchelor, X.W. Guan, N. Oelkers, and C. Lee, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 7787 (2005).
- [30] S. Gu, Y. Li and Z. Ying, *J. Phys. A* **34**, 8995 (2001).
- [31] A. del Campo and J. G. Muga, cond-mat/0511747.

- [32] J. G. Muga and R. F. Snider, *Phys. Rev. A* **57**, 3317 (1998).
- [33] K. Sakmann, A. I. Streltsov, O. E. Alon, and L. S. Cederbaum, *Phys. Rev. A* **72**, 033613 (2005).
- [34] D. M. Gangardt and G.V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett* **90**, 010401 (2003).
- [35] Yajiang Hao, Yunbo Zhang, J. Q. Liang and Shu Chen, cond-mat/0602483.

## 第五章 两组分 BEC 的纠缠动力学

近来, 许多研究工作通过实验的方法检验和探讨量子力学的基本概念和基本图景并且给出了相应的理论分析, 比如 Bell 不等式的检验、薛定鄂猫态在介观尺度上的实现等, 玻色-爱因斯坦凝聚[1]也是其中的一个典型代表, BEC 在观察量子现象方面有很多优点, 特别是它表现出的相干碰撞相互作用使得制作真正的多粒子纠缠态成为可能, 因此成为了检验量子力学基本原理的广受欢迎的载体[2-9]。两组分 BEC 在  $^{87}\text{Rb}$  内的实验实现激发了人们对凝聚体的相位和粒子数涨落的研究兴趣, 宏观量子自陷俘和  $\pi$ -相位振动已经得到了广泛的研究, 同时, 许多工作也集中在用凝聚体实现量子计算方面。作为量子计算基础的量子纠缠已经并正在吸引更多人的注意。应该指出, 它并不是一个完全依赖于态的表达方式的纯形式的东西: 在某种表达方式下存在, 而在另一种表达方式下不存在[10]。事实上, 它是两体及多体量子力学中重要的概念, 是一种物理的存在, 它与态叠加原理以及量子态和测量的非定域性密切相关。它是量子力学中看似简单、但实际却十分深刻、目前尚未很好了解的问题。由于 BEC 有超长的相干时间[4], 研究两组分 BEC 的纠缠特性以及用它来实现多体纠缠对量子信息和量子计算是非常有意义的。

两组分玻色-爱因斯坦凝聚可以由两种不同的原子组成, 也可以由同一种原子的两个不同的内部态组成。在两组分 BEC 中, 有丰富的基态性质和动力学行为, 例如相分离, 宏观量子自陷俘和约瑟夫森振荡等。在本章, 将要讨论在单阱中由束缚原子气体的两个内部态形成的双组分 BEC 的纠缠动力学, 原子的两个内部态用拉曼光或者微波场耦合。为了计算的方便, 系统用角动量算符的 Schwinger 表示的大自旋(介观自旋算符)来描述, 这个方法已经在文献[12, 14]中用来描述两模玻色系统。利用该模型的精确解, 两模 BEC 系统的纠缠度随时间的演化可以用解析的方法精确求解。对于不同的实验参数, 例如, 原子的散射长度, 约瑟夫森耦合强度, 含时系统的初态等, 都可以用精确解计算得到纠缠度随时间的演化。这里也特别计算了初态为  $\text{SU}(2)$  相干态(自旋相干态)的两组分 BEC 的纠缠动力学[15]。另外, 因为两个组分之间的耦合强度随时间周期变化, 介观自旋模型可以很自然地得到 Berry 位相。把两组分 BEC 作为研究 Berry 位相这一量子力学基本问题的载体, 有很大的现实意义, 而且, 由于原子间的非线性相互作用的出现, 对原始的 Berry 位相理论

构成了新的挑战，基于 BEC 的非线性 Berry 位相已经得到了广泛的研究。

本章首先介绍两组分 BEC 的物理模型并用赝自旋算符表述，然后在赝角动量算符表示中给出两组分 BEC 的纠缠度表达式，最后针对不同的参数和初态研究系统的纠缠动力学。

## 第一节 两组分 BEC 的 Schwinger 表示

当许多个相互作用的玻色子占据在同一个二维的单粒子希尔伯特 (Hilbert) 空间时，这样的效应称为约瑟夫森效应。如果两个单粒子态或者两个模在空间上分开时，为外部约瑟夫森效应[3]。我们将要考虑的是位于同一个势阱中的一对隧穿耦合的玻色-爱因斯坦凝聚体，它由原子的两个超精细态  $|A\rangle$  和  $|B\rangle$  组成，这被成为内部约瑟夫森效应。在单模近似下，凝聚系统可以用二次量子化的哈密顿量描述[3] (本章选择自然单位  $\hbar = 1$ )：

$$\hat{H} = \sum_{l=a,b} \hat{H}_l + \hat{H}_{\text{int}} + \hat{H}_f, \quad (1.1)$$

其中

$$\hat{H}_a = \omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\eta_a}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}, \quad (1.2)$$

$$\hat{H}_b = \omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{\eta_b}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{b}, \quad (1.3)$$

并且有：

$$\omega_l = \int d^3r \phi_l^*(r) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_l(r) \right] \phi_l(r), \quad l = a, b.$$

两个组分的原子之间的相互作用能是：

$$\hat{H}_{\text{int}} = \chi \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{b}^\dagger \hat{b}, \quad (1.4)$$

而原子在两组分间的跃迁项是：

$$\hat{H}_f = G \left( \hat{a}^\dagger \hat{b} e^{i\varphi(t)} + \hat{b}^\dagger \hat{a} e^{-i\varphi(t)} \right). \quad (1.5)$$

$a, b$  表示不同的组分， $\eta_a$  和  $\eta_b$  分别是同一组分内原子的相互作用常数， $\chi$  是不同组分原子间的相互作用常数。原子在不同组分间的跃迁在旋波近似下用约瑟夫森耦合常数  $G$  和位相  $\varphi(t) = \Delta t$  表示， $\Delta$  是在超精细态  $|A\rangle$  和  $|B\rangle$  之间的跃迁频率和激光频率的

失谐。特别要注意的是， $\hat{H}_f$  描述的约瑟夫森耦合以相干的方式改变原子所处的内部态。引入 Schwinger 表示的赝角动量 (SU(2)) 算符可以极大地简化系统的动力学研究，它表示为：

$$\begin{aligned}\hat{J}_x &= \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{b} + \hat{b}^+\hat{a}), \\ \hat{J}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{a}^+\hat{b} - \hat{b}^+\hat{a}), \\ \hat{J}_z &= \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b}),\end{aligned}$$

并且有 Casimir 不变量：

$$\hat{J}^2 = \frac{\hat{N}}{2} \left( \frac{\hat{N}}{2} + 1 \right),$$

其中总粒子数算符  $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a} + \hat{b}^+\hat{b}$  是守恒量。在 Schwinger 表示中，系统的哈密顿量为：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + G(\hat{J}_+ e^{i\varphi(t)} + \hat{J}_- e^{-i\varphi(t)}), \quad (1.6)$$

其中有

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \omega_0 \hat{J}_z + q \hat{J}_z^2, \\ \hat{J}_\pm &= \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y.\end{aligned}$$

这里的参数为：

$$\omega_0 = \omega_a - \omega_b + (N-1)(\eta_a - \eta_b)/2$$

和

$$q = (\eta_a + \eta_b)/2 - \chi.$$

赝角动量算符  $\hat{J}_+$ ， $\hat{J}_-$  和  $\hat{J}_z$  满足普通的角动量对易关系：

$$\begin{aligned}[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= \pm \hat{J}_\pm, \\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hat{J}_z.\end{aligned}$$

算符  $\hat{J}^2$  和  $\hat{J}_z$  对它们的共同本征态  $|j, m\rangle$  作用，分别有本征值  $j$  和  $m$ ，这两个本征值与两组分 BEC 中的总原子数和两组分  $a$  和  $b$  之间的粒子数差有关，它们分别为  $j = N/2$  和  $m = \{-N/2, -N/2+1, \dots, N/2\}$ 。因为系统的总粒子数固定，所以  $|j, m\rangle$  可以构成一组完备基，任意量子态  $|\psi(t)\rangle$  可以用这组完备基展开，表示为：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-j}^j C_m(t) |j, m\rangle, \quad (1.7)$$

其中  $C_m(t)$  为复杂的系数。态  $|j, m\rangle$  可以从真空态用玻色子产生算符得到，即：

$$|j, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} (\hat{a}^+)^{j+m} (\hat{b}^+)^{j-m} |0\rangle. \quad (1.8)$$

这里简单地给出 SU(2) 相干态的定义，文献[14]的定义为：

$$|\mathbf{n}\rangle = \hat{\Omega}(\xi) |j, -j\rangle,$$

其中

$$\hat{\Omega}(\xi) = \exp(\xi \hat{J}_+ - \xi^* \hat{J}_-). \quad (1.9)$$

这样的相干态定义称为南极规范，与之对应的是从另一个极态  $|j, j\rangle$  生成的相干态，被称为北极规范。相干态可以用角动量算符的本征态  $|j, m\rangle$  展开

$$|\mathbf{n}\rangle = \sum |j, m\rangle \left[ \frac{2j}{j+m} \right]^{1/2} \left( \cos \frac{\theta}{2} \right)^{j-m} \left[ \exp(-i\phi) \sin \frac{\theta}{2} \right]^{j+m}, \quad (1.10)$$

其中  $\xi = \frac{\theta}{2} e^{-i\phi}$ 。

## 第二节 两组分 BEC 的纠缠

单个玻色子在物理上很难得到，我们的物理模型中两个子系统也是不可区分的，无法测量某一个粒子在两组分 BEC 中的哪一个组分，但是，每一个组分中的原子数是物理上的可观察量，可以把两个组分作为 BEC 的两个子系统。在这一节我们考虑两组分 BEC 在角动量算符表示中的纠缠度。从量子信息和量子通讯的观点来看，两个组分  $a$  和  $b$  中的原子是纠缠的，实现它们的纠缠是可行的并且非常有实用价值。根据文献[16, 17]，这样的系统的纯态纠缠可以用纠缠熵作为标准量度，它用其中任意一个子系统的约化密度矩阵的 von Neumann 熵来定义：

$$E(\hat{\rho}) = S(\hat{\rho}_a) = S(\hat{\rho}_b).$$

一个子系统的约化密度算符由另一个子系统的偏迹得到，例如子系统  $a$  的约化密度算符定义为

$$\hat{\rho}_a = \text{Tr}_b(\hat{\rho}), \quad (2.1)$$

其中  $\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$  是整个系统的密度算符， $Tr_b$  是对子系统  $b$  求偏迹。这样，纠缠熵就定义为：

$$E(\rho) = -Tr(\hat{\rho}_a \ln \hat{\rho}_a) = -\sum_k \lambda_k \ln(\lambda_k), \quad (2.2)$$

这里  $\{\lambda_k\}$  是约化密度算符  $\hat{\rho}_a$  的一组本征值。

非常有趣的是，赝角动量算符的本征态可以表示为：

$$|j, m\rangle = |N/2 + m\rangle_a |N/2 - m\rangle_b, \quad (2.3)$$

其中  $|N/2 + m\rangle_a$  和  $|N/2 - m\rangle_b$  分别为组分  $a$  和组分  $b$  的粒子数算符的本征值。所以，在  $\{|j, m\rangle\}$  子空间，描述一个系统的任意态的密度算符是：

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{m, n=-j}^j C_m C_n^* |j+m\rangle_a |j-m\rangle_{ab} \langle j+n|_b \langle j-n|.$$

取组分  $b$  的偏迹得到组分  $a$  的约化密度算符：

$$\hat{\rho}_a = Tr_b(\rho) = \sum_{m=-j}^j |C_m|^2 |j+m\rangle_a \langle j+m|.$$

可以看到，这里的约化密度矩阵是对角的，它的本征值是  $\lambda_i = |C_i|^2$ 。因此，BEC 的两个组分之间的纠缠熵为：

$$E(\rho) = -\sum_{m=-j}^j |C_m|^2 \ln(|C_m|^2), \quad (2.4)$$

也就是说，两组分之间的纠缠能够通过量子态在角动量空间内的系数  $C_m$  计算得到。

可以清楚地看出，系统的最大纠缠度是  $E_{\max}(\rho) = \ln(2j+1)$ 。

### 第三节 纠缠动力学

在目前的实验中，同一种原子的不同内部态的散射长度差别非常小，所以能够满足条件  $\eta_a \approx \eta_b \approx \chi$ 。这样，参数  $q$  通常非常小，出于简单的原因，首先考虑  $q=0$  的情况，该问题可以通过含时规范变换精确求解。

#### 3.1 $q=0$ 情形

定义一个么正的规范变换[18]：

$$R(t) = \exp\left(\lambda/2\left(\hat{J}_- e^{i\varphi(t)} - \hat{J}_+ e^{-i\varphi(t)}\right)\right), \quad (3.1)$$

该算符和 SU(2) 相干态的生成元 (1.9) 式有相同的形式，其中  $\lambda$  是辅助参数。含时薛定鄂方程在规范变换下是协变的，即：

$$i \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = \hat{H}' |\psi'(t)\rangle,$$

其中有

$$\hat{H}' = \hat{R} \hat{H} \hat{R}^+ - i \hat{R} \frac{\partial}{\partial t} \hat{R}^+$$

和

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{R} |\psi(t)\rangle.$$

这里假定量子态  $|\psi(t)\rangle$  为原始薛定鄂方程的解：

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

通过简单的运算，可以得到哈密顿量算符

$$\hat{H}' = \alpha \hat{J}_z,$$

其中

$$\alpha = \sqrt{(\omega_0 + \Delta)^2 + 4G^2},$$

而辅助参数  $\lambda$  的选择由方程

$$\sin \lambda = -\frac{2G}{\omega_0 + \Delta} \cos \lambda$$

和

$$\cos \lambda = \frac{\omega_0 + \Delta}{\alpha}$$

确定。这样，原始薛定鄂方程的通解可以表示为：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-j}^j c_m e^{i\varepsilon_m(t)} |j, m(t)\rangle, \quad (3.2)$$

其中  $|j, m(t)\rangle = \hat{R}(t) |j, m\rangle$ ， $|j, m\rangle$  是角动量算符的本征态，而  $\varepsilon_m(t)$  为系统的总位相，它的形式可以精确地求得，即：

$$\varepsilon_m(t) = \int_0^t dt' \left\langle j, m \left| i\hat{R}^+(t') \frac{\partial}{\partial t'} \hat{R}(t') - \hat{R}^+(t') \hat{H}(t') \hat{R}(t') \right| j, m \right\rangle.$$

按照 Berry 的定义，上式中的第二项为动力学项，而第一项为几何位相，即 Berry 位相，在一个周期内，即  $\varphi(T) - \varphi(0) = 2\pi$ ，它的改变值为：

$$\gamma_m(T) = m(\cos \lambda - 1) \oint d\varphi = m \left( \frac{\omega_0 + \Delta}{\alpha} - 1 \right) 2\pi.$$

Berry 位相与函数  $\varphi(t)$  的明显形式无关，它只是极角为  $\lambda$  的立体角的  $m$  倍，这与文献 [14] 的结果一致。当初态为  $|\psi(0)\rangle = |j, m_0\rangle$  时，系统的通解表示为

$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}^+ e^{-i\hat{H}t} \hat{R}(0) |j, m_0\rangle = \sum_{m'=-j}^j C_{m'}(t) |j, m'\rangle,$$

系数为

$$C_{m'}(t) = \sum_{m''=-j}^j e^{-i\alpha m'' t} c_{m'}(t) c_{m''}(t), \quad (3.3)$$

而上式的系数又可表示为如下的复杂形式：

$$\begin{aligned} c_{m'} &= \sum_{m=m_0}^j (-1)^{m-m_0} \frac{(1+\tau^2)^{-m} \tau^{(2m-m_0-m')}}{(m-m_0)!(m-m')!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \frac{\sqrt{(j-m_0)!(j-m')!}}{\sqrt{(j+m_0)!(j+m')!}} & m' \leq m_0, \\ c_{m'} &= \sum_{m=m'}^j (-1)^{m-m_0} \frac{(1+\tau^2)^{-m} \tau^{(2m-m_0-m')}}{(m-m_0)!(m-m')!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \frac{\sqrt{(j-m_0)!(j-m')!}}{\sqrt{(j+m_0)!(j+m')!}} & m' > m_0, \end{aligned} \quad (3.4)$$

以及

$$\begin{aligned} c_{m''} &= \sum_{m=m'}^j (-1)^{m-m''} e^{i(m'-m'')\varphi(t)} \frac{(1+\tau^2)^{-m} \tau^{(2m-m'-m'')}}{(m-m')!(m-m'')!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \frac{\sqrt{(j-m')!(j-m'')!}}{\sqrt{(j+m')!(j+m'')!}} & m'' \leq m', \\ c_{m''} &= \sum_{m=m''}^j (-1)^{m-m''} e^{i(m'-m'')\varphi(t)} \frac{(1+\tau^2)^{-m} \tau^{(2m-m'-m'')}}{(m-m')!(m-m'')!} \frac{(j+m)!}{(j-m)!} \frac{\sqrt{(j-m')!(j-m'')!}}{\sqrt{(j+m')!(j+m'')!}} & m'' > m', \end{aligned} \quad (3.5)$$

这里，

$$\tau = \sqrt{\frac{1 - \omega_0/\alpha}{1 + \omega_0/\alpha}}.$$

在得到系数 (3.3) 式之后，即可以用纠缠度的定义 (2.4) 式计算两组分 BEC 的纠缠度随时间的演化。从 (3.3) 式至 (3.5) 式可以看出，系数  $C_{m'}(t)$  的形式非常

复杂，我们很难从中获得物理信息，为了更清晰地显示其中的物理含义，我们通过 (2.3) 式变回到 Fock 态空间。图-5.1 为纠缠度随时间的演化，总的原子数为  $N=10$ ，参数  $\omega_0 + \Delta = 0$ ，(a) 图和 (b) 图中的初态是  $|5\rangle_a |5\rangle_b$  和  $|10\rangle_a |0\rangle_b$ ，即原子数在两个

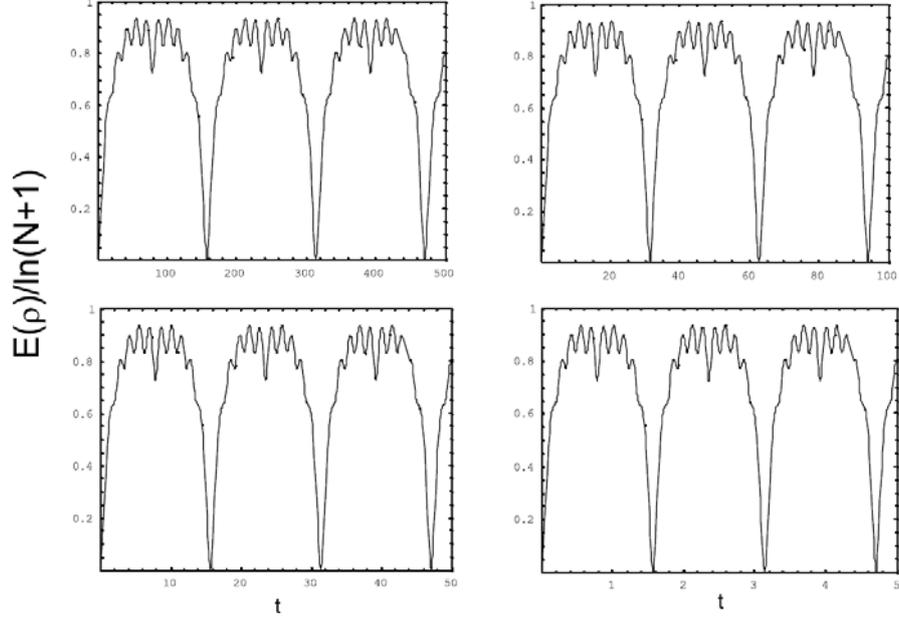


图-5.1a 纠缠度随时间的演化， $\omega_0 + \Delta = q = 0$ ， $N=10$ ， $G=0.01, 0.05, 0.1, 1$ 。 $\psi(0) = |N/2\rangle_a |N/2\rangle_b$ 。

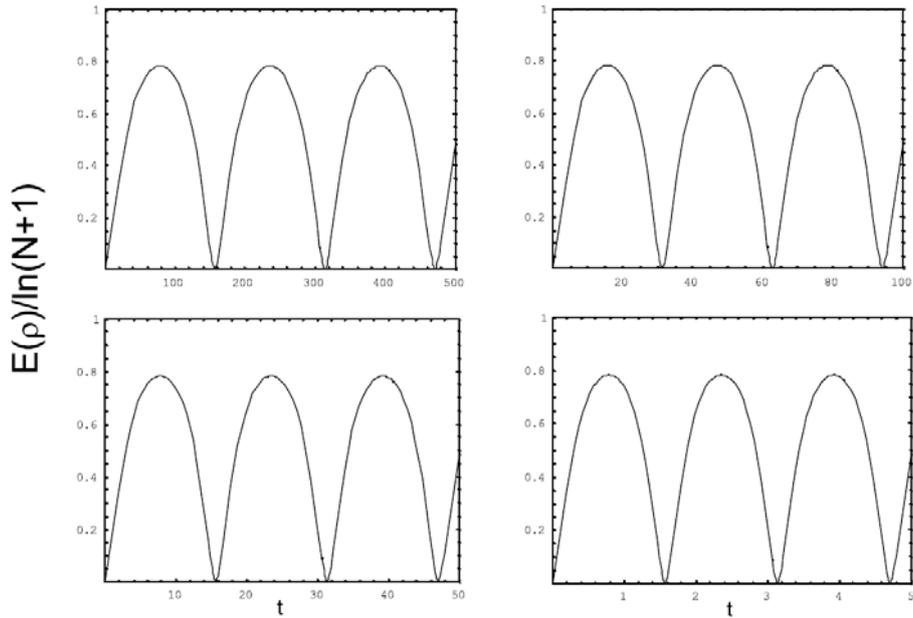


图-5.1b 纠缠度随时间的演化， $\omega_0 + \Delta = q = 0$ ， $N=10$ ， $G=0.01, 0.05, 0.1, 1$ 。 $\psi(0) = |N\rangle_a |0\rangle_b$ 。

组分之间平均分布的态和最大原子数差的态，它们分别对应角动量态  $|5,0\rangle$  和  $|5,5\rangle$ 。

这两种情形下, Berry 位相是  $\gamma_m(T) = -2\pi m$ 。由于两组分之间有 Raman 耦合, 所以纠缠熵随时间周期振荡。而且, 可以明显地看到纠缠度的振荡周期为  $\frac{\pi}{2G}$ , 随着两组

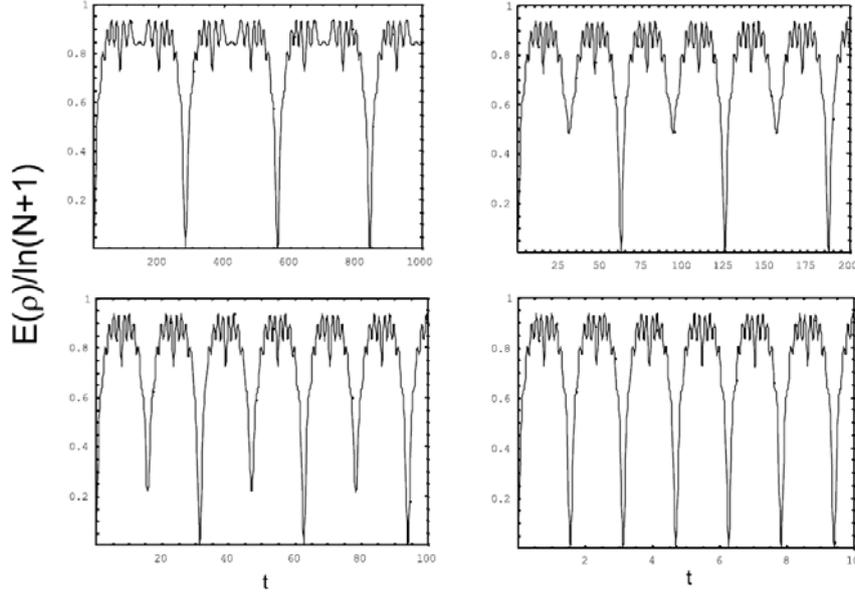


图-5.2a 纠缠度随时间的演化,  $\omega_0 + \Delta = 0.01$ ,  $q = 0$ ,  $N = 10$ ,  $G = 0.01$ ,  $0.05$ ,  $0.1$ ,  $1$ 。  $\psi(0) = |N/2\rangle_a |N/2\rangle_b$ 。

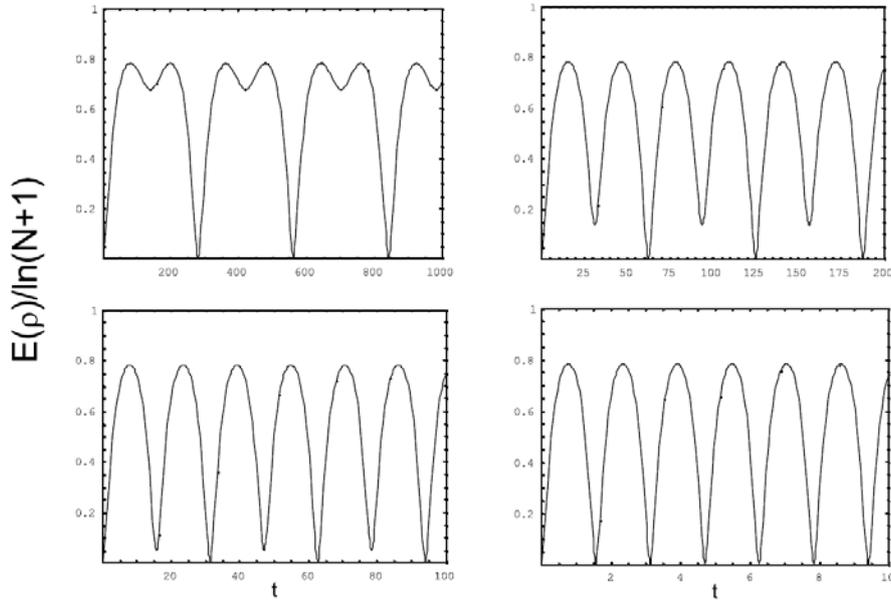


图-5.2b 纠缠度随时间的演化,  $\omega_0 + \Delta = 0.01$ ,  $q = 0$ ,  $N = 10$ ,  $G = 0.01$ ,  $0.05$ ,  $0.1$ ,  $1$ 。  $\psi(0) = |N\rangle_a |0\rangle_b$ 。

分之间耦合驱动强度增大而减小。对于不同的初态, 纠缠度的演化特征也不同, 当初态的粒子数在两个组分上相同时, 在最大纠缠度附近会有小的振荡。

$\omega_0 + \Delta = 0.01$  的情形如图-5.2 所示。在这种情况下，与图-5.1 中的现象相比，有两个新的现象：(i) 纠缠度演化的振荡周期，该图中周期为  $\frac{\pi}{G}$ ，是原来的两倍，并且

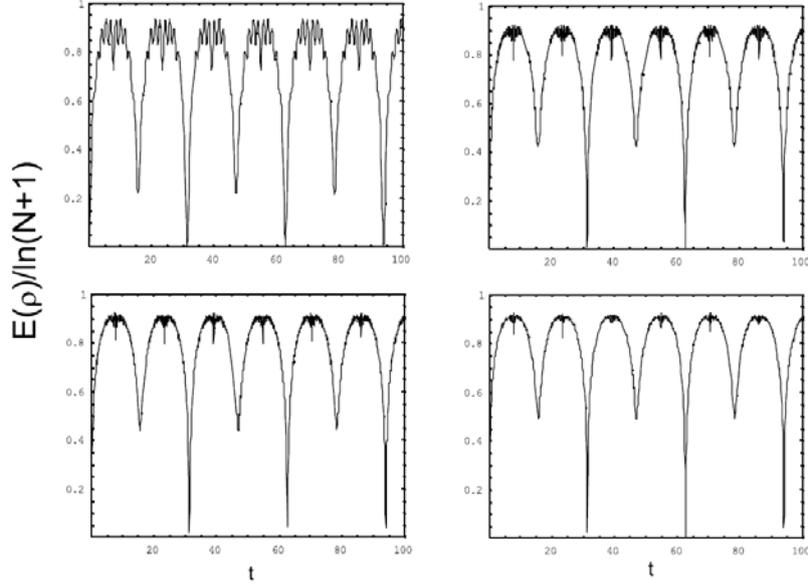


图-5.3a 纠缠度随时间的演化， $\omega_0 + \Delta = 0.01$ ， $q = 0$ ， $\psi(0) = |N/2\rangle_a |N/2\rangle_b$ ， $N = 10, 30, 50, 100$ 。  $G = 0.1$ 。

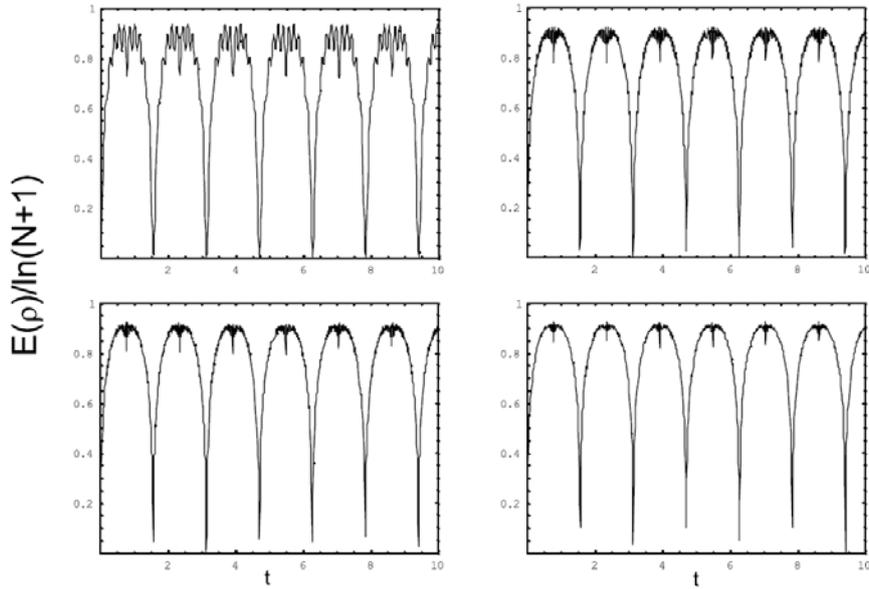


图-5.3b 纠缠度随时间的演化， $\omega_0 + \Delta = 0.01$ ， $q = 0$ ， $\psi(0) = |N/2\rangle_a |N/2\rangle_b$ ， $N = 10, 30, 50, 100$ 。  $G = 1$ 。

在半周期的时候，出现一个波谷；(ii) 随着耦合强度  $G$  的增加，半周期处的波谷变得越来越深，并且谷底的纠缠度值最终趋于零。对于不同原子总数，纠缠度随时间

的演化见图-5.3。随着原子数的增加，纠缠度变大，半周期的波谷变浅。

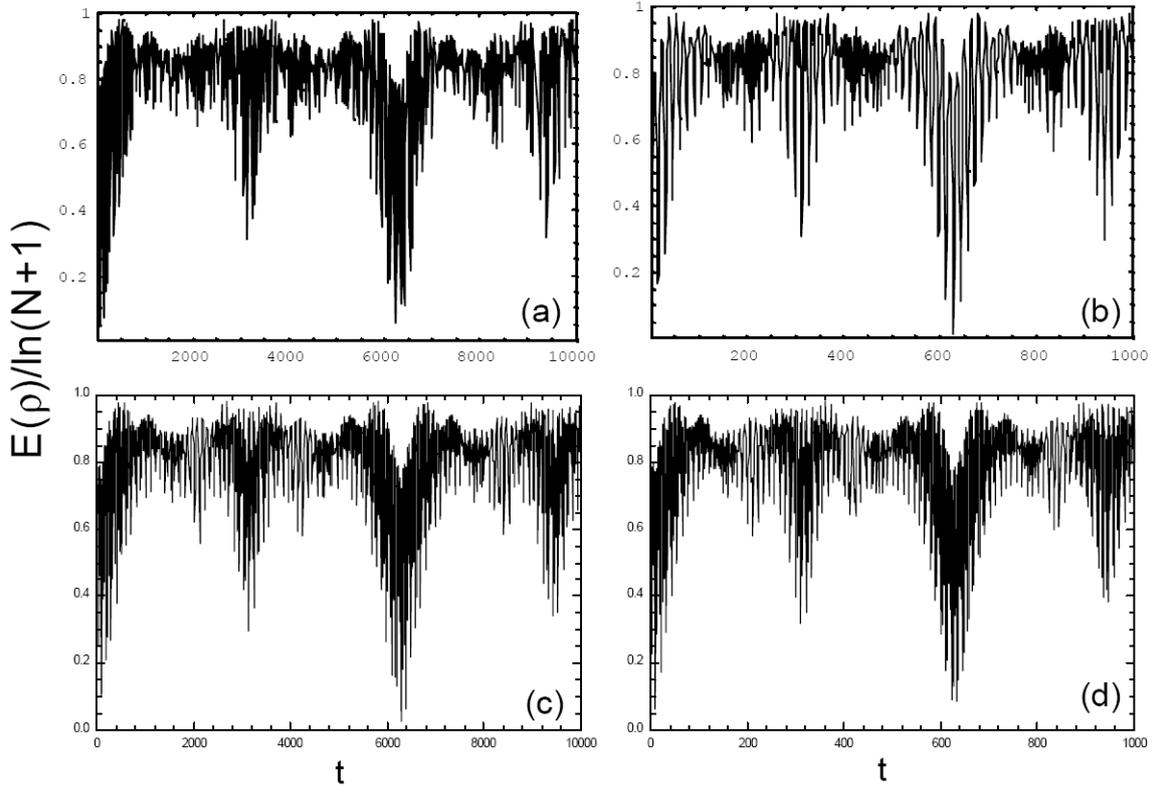


图-5.4 含非线性相互作用时纠缠度随时间的演化， $\psi(0) = |N\rangle_a |0\rangle_b$ ， $N=10$ 。

(a)  $G=0.1$  和  $q=0.001$ ；(b)  $G=0.1$  和  $q=0.01$ ；(c)  $G=1$  和  $q=0.001$ ；

(d)  $G=1$  和  $q=0.01$ 。

### 3.2 含非线性相互作用的情形

由同种原子的不同超精细态构成的两组分 BEC 种， $q$  通常都很小，可以很好地满足条件  $q \ll G$ 。并且，对于单阱中的 BEC，条件  $\omega_0 + \Delta = 0$  也是非常合理的，通过(3.1)式中的么正变换和下面的关系

$$\begin{aligned} \hat{R} \hat{J}_z^2 \hat{R}^\dagger &= \hat{J}_z^2 \cos^2 \lambda + \frac{1}{4} \left( \hat{J}_+^2 e^{i2\varphi(t)} + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_-^2 e^{-i2\varphi(t)} \right) \sin^2 \lambda \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[ \left( \hat{J}_z \hat{J}_+ + \hat{J}_+ \hat{J}_z \right) e^{i\varphi(t)} + \left( \hat{J}_z \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_z \right) e^{-i\varphi(t)} \right] \cos \lambda \sin \lambda, \end{aligned}$$

我们可以得到

$$\hat{H}' = -2G\hat{J}_z - \frac{1}{2}q\hat{J}_z^2,$$

其中关于  $\hat{J}_+^2 e^{i2\varphi(t)}$  和  $\hat{J}_-^2 e^{-i2\varphi(t)}$  的项在条件  $q \ll G$  下，作为合理的近似已经被忽略掉了。

很容易计算得到原始薛定鄂方程的精确解：

$$|\psi(t)\rangle = \hat{R}^+ e^{-i\hat{H}t} \hat{R}(0) |j, m_0\rangle = \sum_{m''=-j}^j C_{m''}(t) |j, m''\rangle,$$

其中

$$C_{m''}(t) = \sum_{m'=-j}^j e^{-i\left(2Gm' + \frac{1}{2}qm'^2\right)t} c_{m'}(t) c_{m''}(t), \quad (3.6)$$

这里的  $c_m(t)$  和  $c_{m''}(t)$  的表达式与 (3.4) 式和 (3.5) 式相同。得到态以后，系统的纠缠动力学便可以用 (2.4) 式计算得到。基于和上面相同的原因，我们返回 Fock 态空间。在图-5.4 中，我们画了粒子数  $N=10$  和初态为  $\psi(0) = |N\rangle_a |0\rangle_b$  时的纠缠动力学。非常有趣的是，可以观察到纠缠度迅速地增加到最大，并且系统在大多数时间内都处于最大纠缠的状态。然而，纠缠的演化曲线不平滑，以  $\pi/q$  的时间周期突然变小。对于不同的耦合强度  $G$  和粒子数  $N$  都有相同的行为，如图-5.5 所示。随着系统中原子数的增加，这种周期性变小的情形会越来越不明显。

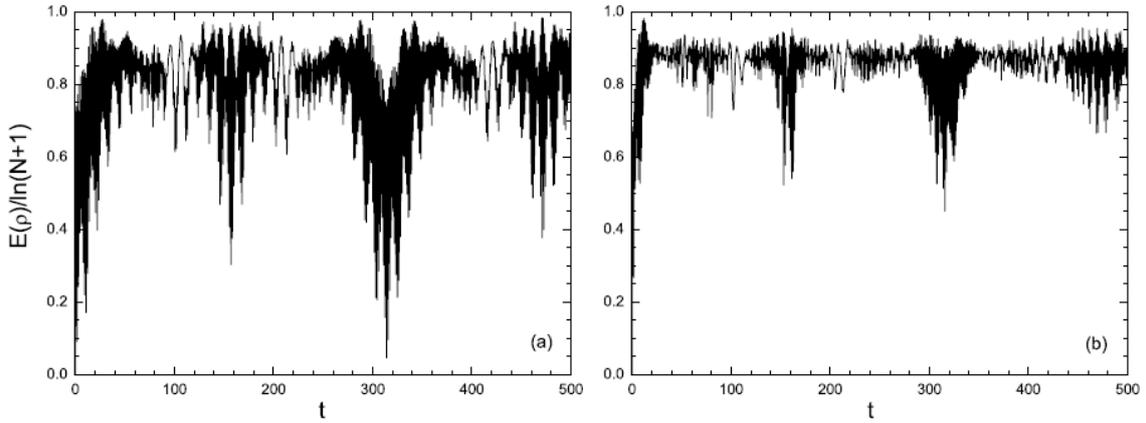


图-5.5 对于不同的粒子数，纠缠度随时间的演化， $\psi(0) = |N\rangle_a |0\rangle_b$ ， $G=1$ ， $q=0.02$ 。(a)  $N=10$ ；(b)  $N=50$ 。

### 3.3 自旋相干态的纠缠动力学

用辐射场耦合的两个超精细态实现两组分的 BEC，初态可以制成 SU(2) 相干态，它描述两个组分之间有确定的位相差的态。当初态为一般的 SU(2) 相干态  $\psi(0) = |\mathbf{n}\rangle$  时，在时刻  $t$  系统所处的态为 (SU(2) 相干态的定义见 (1.10) 式)：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m''=-j}^j |j, m''\rangle C_{m''}(t) \left[ \frac{2j}{j+m''} \right]^{1/2} \left( \cos \frac{\theta}{2} \right)^{j-m''} \left[ \exp(-i\phi) \sin \frac{\theta}{2} \right]^{j+m''},$$

当  $q=0$  时, 系数  $C_{m''}(t)$  由 (3.3) 式确定, 当  $q \neq 0$  时, 系数  $C_{m''}(t)$  由 (3.6) 式确定。对于不同的耦合驱动  $G$  和极角  $\theta$  (为了问题的简化, 我们设  $\varphi(t)=\phi=0$ ),  $q=0$  时的纠缠动力学如图-5.6 所示。除了不同的振幅之外, 所有的参数都显示了同样的纠缠演化。事实上, 可以很容易地证明, 当初态为最大布居数差态  $|N\rangle_a |0\rangle_b$  时,  $\psi(t)$  将是 SU(2) 相干态。与  $\omega_0 + \Delta = 0$  时的演化周期相比,  $\omega_0 + \Delta = 0.01$  的演化周期是前者的两倍。随着耦合强度的增加, 在半周期处会出现波谷, 并且变得越来越深, 最终谷底趋于零。 $q \neq 0$  时纠缠度的演化图像如图-5.7 所示。与图-5.6 相比, 最重要的非线性效应就是纠缠度会很快地接近最大值, 而且会以周期  $\pi/q$  突然地变小。纠缠度和粒子

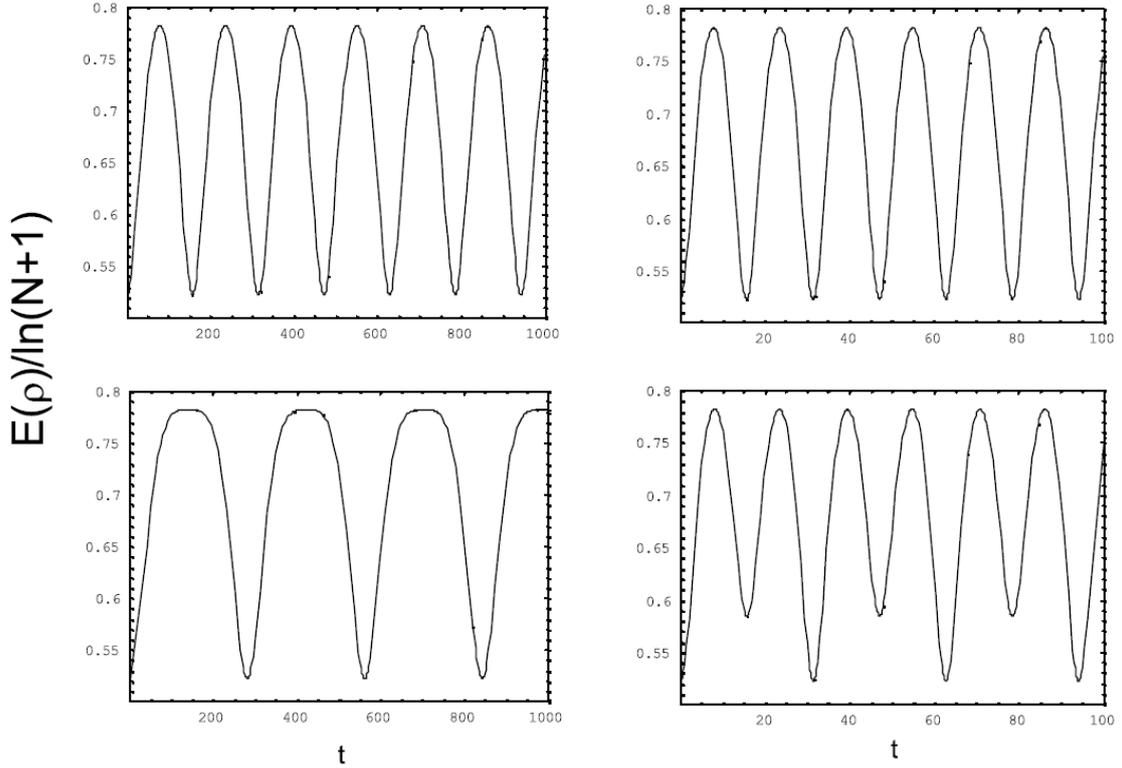


图-5.6 初态为 SU(2) 相干态的纠缠度随时间的演化,  $\varphi(t)=\phi=0$ ,  $\theta=4\pi/5$ 。

上图:  $G=0.01$  (左),  $G=0.1$  (右),  $q=0$ ,  $\omega_0 + \Delta = 0$ ,  $N=10$ 。下图:  $G=0.01$  (左),  $G=0.1$  (右),  $q=0$ ,  $\omega_0 + \Delta = 0.01$ 。

数的关系可以通过比较图-5.7c 和图-5.7d 看出。当系统中的原子数比较多时, 纠缠度向下减小的情形会变得不太明显。

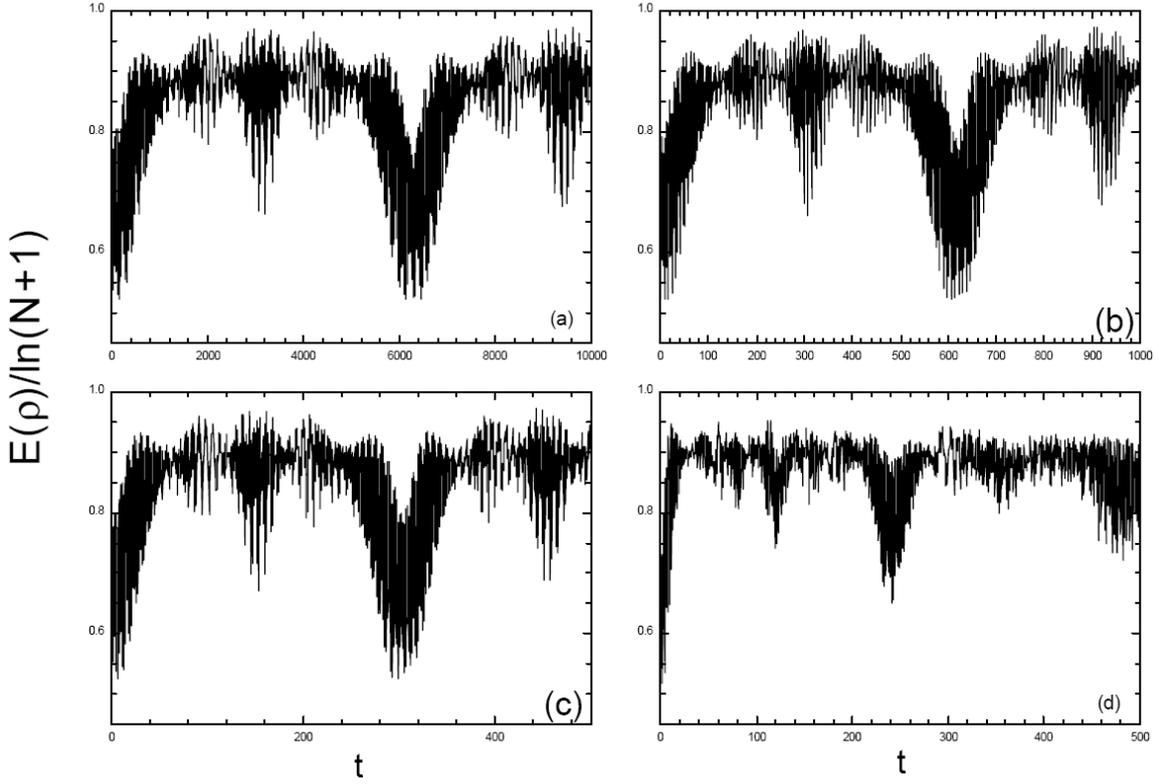


图-5.7 含非线性相互作用，初态为  $SU(2)$  相干态时，纠缠度随时间的演化， $\varphi(t) = \phi = 0$ ， $\theta = 4\pi/5$ ， $G=1$ 。(a)  $q = 0.001$ ， $N = 10$ ；(b)  $q = 0.01$ ， $N = 10$ ；(c)  $q = 0.02$ ， $N = 10$ ；(d)  $q = 0.02$ ， $N = 50$ 。

#### 第四节 小结

本章讨论了  $N$  个原子的两组分 BEC 的纠缠动力学，系统由 Raman 激光耦合的两个超精细态组成。首先得到含时薛定鄂方程在 Schwinger 表示下的精确解，然后对于不同的参数和初态，计算纠缠度随时间的演化，特别地，我们研究了初态为  $SU(2)$  相干态的纠缠动力学。主要结论是：(i) 当  $q = 0$  时，纠缠度周期振荡，周期与耦合驱动强度  $G$  有关；(ii) 当  $q \neq 0$  时，在较短的时间内 ( $\pi/G$  数量级)，纠缠演化的行为与  $q = 0$  时相似，但是对于较长的时间 ( $\pi/q$  数量级)，由明显不同的现象出现；(iii) 在两种情况下，纠缠度都随系统中的原子数增加而增强。含时规范变换((3.1) 式)，是一个非常有效的解决含时系统动力学问题的方法，它可以解决包括非线性项在内的动力学问题，用解析的方法所得到的结果和文献[19]中用数值方法的结果完全一致，另外，我们也用精确对角化的方法进行了计算，证明在我们所选取的参数

区域内，含时规范变换非常有效。

## 参 考 文 献

- [1] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995); K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995); C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, R.G. Hulet, *ibid.* **75**, 1687 (1995).
- [2] A.S. Parkins, D.F. Walls, *Phys. Rep.* **303**, 1 (1998); F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [3] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001).
- [4] D.S. Hall, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1543 (1998); M.R. Matthews, B.P. Anderson, P.C. Haljan, D.S. Hall, M.J. Holland, J.E. Williams, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *ibid.* **83**, 3358 (1999). D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2027 (1998).
- [5] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.-J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [6] Y. Shin, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard, and A. E. Leanhardt, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 050405 (2004).
- [7] G.J. Milburn, J. Corney, E.M. Wright, D.F. Walls, *Phys. Rev. A* **55**, 4318 (1997).
- [8] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, S.R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4950 (1997).
- [9] Z.-D. Chen, J.-Q. Liang, S.-Q. Shen, and W.-F. Xie, *Phys. Rev. A* **69**, 023611 (2004).
- [10] 张永德, 吴盛俊, 侯广, 黄民信, 量子信息论-物理原理和某些进展, 华中师范大学出版社, 2002。
- [11] A. Sørensen, L. -M. Duan, J. I. Cirac, and P. Zoller, *Nature* **409**, 63 (2001).
- [12] A. P. Hines, R. H. McKenzie and G. J. Milburn, *Phys. Rev. A* **67**, 013609 (2003).
- [13] L. Sanz, R. M. Angelo and K. Furuya, *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 9737 (2003).
- [14] I. Fuentes-Guridi, J. Pachos, S. Bose, V. Vedral, and S. Choi, *Phys. Rev. A* **66**, 022102 (2002).
- [15] W. M. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 867 (1990).
- [16] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu and B. Schumacher, *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).

- [17] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [18] Y.-Z. Lai, J.-Q. Liang, H.J.W. Müller-Kirsten, and J.-G. Zhou, *Phys. Rev. A* **53**, 3691 (1996).
- [19] W. Yin, J. -Q. Liang, Q.-W Yan, G.-F. Zhang, *Phys. Rev. A* **70**, 034304 (2004).
- [20] Yajiang Hao, J.-Q. Liang, *Chinese Physics*, **15**, 1 (2006).

## 结论与展望

本文结合解析和数值的方法对一维 BEC 的若干问题和双两组分 BEC 的纠缠动力学进行了理论上的研究，其结论如下：

通过对对称双阱势和周期光格子势中的弱耦合 BEC 的基态隧穿劈裂的数值分析，证明周期瞬子方法是一个值得信赖的理论工具，它可以用来研究包含非线性相互作用的 BEC 的隧穿问题。这是因为原子在隧穿通过势垒时，非线性相互作用非常小，它只是增加了一个有限的化学势。我们的数值方法可以在适当的改进之后用来研究多阱 BEC 的动力学行为。

旋量 BEC 有丰富的基态结构和动力学性质。我们计算了自旋-1 的一维玻色气体在弱相互作用区域和强相互作用区域的基态密度分布。不同组分中的原子数与玻色气体的磁化率和磁性有关。当系统在 Tonks 区域时，密度分布表现出明显的费米类分布特性。但是，当自旋相互作用足够强时，密度分布不再是费米类的。同时，本文也对旋量玻色气体的相分离进行了研究。

第四章研究了一维无限深方势阱中  $N$  个相互作用的玻色子的基态，得到了系统的单体密度矩阵和两体关联函数。在 Tonks 极限，玻色气体的密度分布类似于无自旋费米子，而在强吸引相互作用极限，玻色气体好比一个质量为  $Nm$  的复合粒子。在弱相互作用下，系统的基态由两粒子束缚态或者两粒子束缚态加单原子态构成。我们的精确结果超越了平均场理论，可以覆盖所有参数区域，有望为吸引相互作用的 BEC 的波函数提供一个清晰的图像。

第五章研究了两组分 BEC 的纠缠动力学，对于不同的参数和初态，BEC 表现出不同的纠缠特性。主要结论为：(i) 当非线性相互作用项为零时，纠缠度周期

振荡，振荡周期与两组分的耦合强度有关；(ii) 当包含非线性相互作用时，在短时间内，纠缠度为周期振荡，但是在较长的时间内，会有明显不同的行为；(iii) 随着原子数的增加，纠缠度增大。

尽管 BEC 的实验实现已经超过了十个年头，但是丝毫没有要冷却下来的迹象。近期，人们把目光聚集在超冷费米气体的超流行为上，费米超流体为研究量子现象和超导理论提供了一个崭新的途径。对于超冷费米气体，通过在 Feshbach 共振磁场附近调节均匀磁场的大小，人们可以分别研究分子 BEC、原子库柏对的凝聚体以及强相互作用费米气体这三种物态的基本性质。许多在固体材料中无法实现的量子态也可以用超冷原子气体实现，例如，2005 年底 W. Ketterle 组和 Hulet 组分别在自旋极化的两组分费米气体中实现了在普通超导材料中很难实现的 FFLO (Fulde-Ferell-Larkin-Ovchinnikov) 态。因此，我们今后的研究将主要集中于超冷原子气体的凝聚态模型，同时，高自旋的玻色气体也将是我们的研究对象。

## 攻读博士期间已发表论文和待发表的论文

- [1] **Yajiang Hao**, Jiuqing Liang, Yubo Zhang, Numerical simulation on tunnel splitting of Bose-Einstein condensate in multi-well potentials, *Eur. Phys. J. D* **36**, 33 (2005). (SCI)
- [2] **Yajiang Hao**, Jiuqing Liang, Entanglement dynamics in two-component Bose-Einstein condensates, *Chinese Physics*, **15**, 1161 (2006). (SCI)
- [3] **Yajiang Hao**, Yunbo Zhang, Jiuqing Liang, and Shu Chen, Density distributions for one-dimensional spinor gases, *Phys. Rev. A* **73**, 053605 (2006). (SCI)
- [4] **Yajiang Hao**, Yunbo Zhang, Jiuqing Liang, and Shu Chen, Ground state properties of finite ultracold Bose gas in a hard-wall trap, *Phys. Rev. A* (2006), accepted. (SCI)
- [5] **Yajiang Hao**, Yunbo Zhang, Jiuqing Liang, and Shu Chen, Phase separation in the trapped spinor gases with anisotropic spin-spin interaction, cond-mat/0511581.

## 致 谢

在本论文交付之际，谨向我的导师梁九卿教授致以最崇高的敬意和最衷心的感谢！感谢梁老师在学习和生活上给予我的关心和帮助，我所取得的每一点进步都凝结着梁老师的心血和汗水。梁老师渊博的知识、严谨的治学态度、对学科前沿敏锐的洞察力和孜孜不倦的探索精神给我树立一个科学和教育工作者应有的水平和标尺，也是我今后努力的方向和目标；生活中，梁老师博大的胸怀和身体力行的作风更是给我极大的感动和力量，他永远都是我学习的榜样。我深信，跟随梁老师学习的经历必使我终身受益。

感谢我的硕士导师张云波教授对我的关心和的指导。从最初带领我走进冷原子这一研究领域到后来为我指出最新的研究方向，以及我所研究的每一个问题，张老师都和我进行了广泛而深入的讨论，启迪了我的思路，也开阔了我的视野。我能够顺利完成学业也是他辛勤劳动的结果！

感谢中科院物理研究所陈澍研究员的悉心指导，他精深的理论造诣和对物理问题的深刻理解使我受益匪浅，他也教给了我研究问题的方法。

感谢李德明教授、刘文森教授、丁秀香教授以及郜江瑞院长、周富国书记、裴建文副院长、聂一行副院长等物电学院的老前辈和领导对我学习和生活方面给予的关怀。感谢李卫东教授、李录教授、许长谭教授、梁军军副教授、殷雯副教授、李志坚副教授、赵华副教授等老师的关心和帮助。

感谢与我同窗九年的学友程茸一直以来对我的鼓励与肯定；感谢张国锋、郑公平、李再东、谷娟、高迎芳、王瑞、王建明、贺明明、于慧、张永平、张存喜、郭利平、贾欣燕、杨利民、陈刚等学友的无私帮助和交流，是大家的共同努力，为理论所创造了一个宽松友好的学习氛围。同时，也向中科院物理研究所的梁兆新、刘小兵、梁拥成、王广涛、张海军、王利、刘立宝、张鹏、远晓辉、方磊等朋友表示感谢！谢谢你们的帮助，从你们那里我也学到了许多东西。

感谢我的家人和朋友们，谢谢你们始终如一的关心、帮助和支持。

感谢在山西大学本科和研究生阶段所有教育过我的老师，以及和我一起生活学习过的同学们，在这里我度过了一段美好的时光！谢谢大家！

郝亚江