

山 西 大 学

2006 届博士研究生学位论文

旋量玻色—爱因斯坦凝聚中的
理论物理问题研究

姓 名	程 茸
指导教师	梁 九 卿 教授
学科专业	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 00 六年六月

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

Theoretical Problems in Spinor Bose-Einstein Condensation

Student Name	Rong Cheng
Supervisor	Professor Jiu-Qing Liang
Major	Theoretical Physics
Field of Research	Bose-Einstein Condensation
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2003.9—2006.6

June, 2006

目 录

摘要	VII
Abstract	VIII
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 理想气体的玻色—爱因斯坦凝聚	3
1.3 稀薄气体的玻色—爱因斯坦凝聚	5
1.3.1 序参量和平均场理论	5
1.3.2 Gross-Pitaevskii 方程.....	8
1.3.3 相干性.....	9
1.3.4 超流性.....	11
1.4 旋量玻色—爱因斯坦凝聚体	12
1.4.1 磁束缚与标量玻色—爱因斯坦凝聚体	12
1.4.2 光束缚与旋量玻色—爱因斯坦凝聚体	14
1.4.3 自旋 1 的玻色—爱因斯坦凝聚体	17
1.5 光晶格中的玻色—爱因斯坦凝聚体	19
1.5.1 光晶格的实验实现	19
1.5.2 玻色—哈伯德模型	21
1.5.3 超流和 Mott—绝缘态	24
1.5.4 量子相变	25
参考文献.....	29
第二章 光晶格中自旋 1 超冷玻色气体的超流性	35
2.1 自旋 1 的玻色—哈伯德模型	35
2.2 朗道超流理论	37
2.3 波戈留波夫变换方法和能谱.....	38
2.4 超流临界速度	41
2.5 小结	44
参考文献.....	45

第三章 偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的动力学	47
3.1 磁偶极—偶极相互作用和偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体模型.....	47
3.2 宏观量子自俘获现象	49
3.3 运动方程	52
3.4 运动方程的性质	54
3.4.1 自发磁化	54
3.4.2 自旋混合动力学	56
3.5 小结	61
参考文献	62
第四章 旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中的纠缠原子态	64
4.1 两体量子纠缠的定义和度量简介	64
4.1.1 两体的纯态与混合态, 密度矩阵描述	65
4.1.2 两体纠缠分析.....	67
4.1.3 玻色—爱因斯坦凝聚体中的两体纠缠	72
4.2 单凝聚态与破裂凝聚态	73
4.3 等效两组分模型	75
4.4 纠缠动力学	78
4.5 产生纠缠原子态	80
4.6 小结	88
参考文献.....	89
第五章 两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体的能谱与纠缠度	92
5.1 有效哈密顿量	92
5.2 强隧穿耦合区域	94
5.3 弱隧穿耦合区域	99
5.4 小结	100
参考文献.....	102
结论与展望	103

附录 A	105
附录 B	108
附录 C	113
攻读博士学位期间发表文章目录	115
致谢	116

CONTENTS

Chinese Abstract	VII
Abstract	VIII
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Overview	1
1.2 Bose-Einstein condensation in ideal gases	3
1.3 Bose-Einstein condensation in dilute gases.	5
1.3.1 Order parameter and mean-field theory.	5
1.3.2 Gross-Pitaevskii equation	8
1.3.3 Phase coherence.	9
1.3.4 Superfluidity	11
1.4 Spinor Bose-Einstein condensates	12
1.4.1 Magnetic trapping and scalar Bose-Einstein condensates	12
1.4.2 Optical trapping and spinor Bose-Einstein condensates	14
1.4.3 Spin-1 Bose-Einstein condensates.	17
1.5 Bose-Einstein condensates in optical lattices	19
1.5.1 Experimental realization of optical lattices	19
1.5.2 Bose-Hubbard model	21
1.5.3 Superfluid and Mott-insulator phases	24
1.5.4 Quantum phase transition	25
References	29
Chapter 2 Superfluidity of spin-1 bosons in optical lattices	35
2.1 Spin-1 Bose-Hubbard model	35
2.2 Landau's theory of superfluids	37
2.3 Bogoliubov method and energy spectrum	38
2.4 Critical velocity of superfluid	41
2.5 Conclusion	44
References	45

Chapter 3 Dynamics of dipolar spinor condensates	47
3.1 Magnetic dipole-dipole interactions and dipolar spinor condensates	47
3.2 Macroscopic quantum self-trapping	49
3.3 Equations of motion	52
3.4 Properties of the equations of motion	54
3.4.1 Spontaneous magnetization	54
3.4.2 Spin-mixing dynamics	56
3.5 Conclusion	61
References	62
Chapter 4 Engineering entangled atom states in spinor Bose gas	64
4.1 Definition and measure of quantum entanglement of bipartite system	64
4.1.1 Pure state and mixed state, density matrix	65
4.1.2 Quantum entanglement of bipartite system	67
4.1.3 Quantum entanglement of bipartite system in Bose-Einstein condensates	72
4.2 Single and fragmented condensate ground states	73
4.3 Effective two-component model	75
4.4 Dynamics of entanglement	78
4.5 Engineering entangled atom states	80
4.6 Conclusion	88
References	89
Chapter 5 Energy spectrum and entanglement of two tunnel-coupled Bose-Einstein condensates	92
5.1 Effective Hamiltonian	92
5.2 The case of strong tunnel coupling	94
5.3 The case of weak tunnel coupling	99
5.4 Conclusion	100
References	102

Summary and outlook	103
Appendix A	105
Appendix B	108
Appendix C	113
Papers published during doctoral learning	115
Acknowledgement	116

摘 要

简并量子气体的基本性质取决于原子间相互作用的量程、强度及对称性。在旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中不仅可以通过 Feshbach 共振技术来调节原子间的短程相互作用而且可以考虑各向异性的长程相互作用带来的效应。本论文主要研究旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中自旋交换相互作用和磁偶极—偶极相互作用对凝聚体超流性、隧穿动力学及量子纠缠特性的影响，研究涉及旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的玻色—哈伯德模型，量子隧穿模型和量子相变等物理问题。

第二章从自旋 1 的玻色—哈伯德模型出发，用波戈留波夫变换方法得到了光晶格中超冷玻色原子的激发谱，研究了旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中不同的相互作用特别是自旋交换相互作用对超流性质的影响。超流临界速度与自旋组分的相关性及其可操控性，为实验探测超流相及光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的组分分离提供了可能。

第三章对偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的隧穿动力学进行了半经典研究，导出经典运动方程。自旋交换相互作用与磁偶极—偶极相互作用的影响将导致旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的等效两组分间出现自发磁化现象和著名的“宏观量子自俘获”现象。

量子纠缠是量子力学世界最基本和最具诱惑力的特质，由此我们研究了多分量玻色—爱因斯坦凝聚体——多粒子与多模系统的纠缠特性。第四章着重讨论在有梯度的磁场作用下反铁磁相互作用的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中纠缠原子态的产生和操控及纠缠的动力学问题；第五章则对最简单的量子隧穿模型——两弱耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体的本征问题及纠缠性质进行了详细的研究。

本论文研究属于凝聚态物理，理论物理和原子分子物理的交叉学科。

关键词：旋量玻色—爱因斯坦凝聚；量子相变；量子纠缠；超流性；隧穿动力学

Theoretical Problems in Spinor Bose-Einstein Condensation

Rong Cheng (Theoretical Physics)

Directed by Prof. Jiu-Qing Liang

ABSTRACT

The essential properties of degenerate quantum gases depend on the range, strength and symmetry of atomic interactions. In spinor Bose-Einstein condensates (BEC), one can not only tune the short-range contact interaction using Feshbach resonances but also investigate effects of the long-range and anisotropic interaction. In this thesis we mainly study the properties of spinor Bose-Einstein condensates, including superfluidity, tunneling dynamics and quantum entanglement. The work relates mainly to Bose-Hubbard model, quantum tunneling model, quantum phase transition in spinor Bose-Einstein condensates.

In Chapter 2, we start from spin-1 Bose-Hubbard model and derive the energy spectra in terms of Bogoliubov transformation for cold bosons in optical lattices, which indicate the dependence of superfluidity on the spin-exchange interaction. Our observation is that the critical velocities of the superfluid flow are spin-component dependent and can be controlled by adjusting the laser lights that form the optical lattice. Possible experiments to detect the superfluid phase and component separation of spinor BEC are also discussed.

In Chapter 3, we describe a semiclassical treatment of the dynamics of dipolar spinor condensates. As a result of the conservation of atom numbers and total hyperfine spin of the condensates, the classical equations of motion are derived. The interplay of spin-exchange and magnetic dipole-dipole interaction leads to the phenomena of spontaneous magnetization and the novel “macroscopic quantum self-trapping”.

Quantum entanglement is one of the most essential and fascinating features of quantum mechanics. We study the entanglement characteristics of

multi-component Bose-Einstein condensates — multipartite and multimodal systems. Chapter 4 is devoted to proposing generation and manipulation of entangled atom states in an antiferromagnetic spin-1 BEC under magnetic field with gradient and also investigating the dynamics of the entropy of entanglement. Chapter 5 pays attention to the simplest quantum tunneling model — two tunnel-coupled BEC. We study the eigen problem and entanglement characteristics with perturbation method for both weak and strong tunnel couplings, from which some new features are explored.

The research in this thesis attributes to the crossover of theoretical physics, condensed matter physics and atom physics.

Keywords: spinor Bose-Einstein condensation; quantum phase transition;
quantum entanglement; superfluidity; tunneling dynamics

第一章 绪 论

第一节 引言

玻色—爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein condensation) 是最具吸引力的量子统计现象之一[1, 2]。当粒子的德布罗意 (de Broglie) 波长大于粒子间平均距离时, 理想的量子玻色 (自旋角动量量子数为整数的粒子) 气体将发生相变, 变成一种新的物质状态, 即玻色—爱因斯坦凝聚体 (Bose-Einstein condensate, BEC)。其最显著的特征是低于某一特定温度时, 所有粒子聚集到动量空间最低能态, 并具有相同的物理特性, 这样粒子的量子特性就通过宏观的方式表现出来。

凝聚的思想提出以后, 被用来解释液氦的超流现象。但是在液氦中, 由于粒子间强的相互作用而导致玻色—爱因斯坦凝聚相变的纯量子统计特性复杂化, 于是促使人们在稀薄的、弱相互作用的玻色气体中探索 BEC 的迹象。在过去的 40 年里, 激光冷却和囚禁技术获得了长足的发展, 人们可以以较高的密度和较大的数目产生超冷原子气体。在此基础上, 1995 年 JILA 和 MIT 的实验小组相继报道了用碱金属原子 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 在静磁阱中通过蒸发冷却技术实现了 BEC[3, 4], 其间 Rice University 的研究小组也报道了超冷 ^7Li 原子进入量子简并区域的实验现象[5]。迄今为止, 全世界共有九种元素的 BEC 获得了成功, 依次是 ^{87}Rb [3], ^7Li [5], ^{23}Na [4], ^1H [6], ^4He [7], ^{41}K [8], ^{133}Cs [9], ^{174}Yb [10]和 ^{52}Cr [11]。

从此, 超冷原子领域掀起了研究的热潮, 大量的理论和实验工作涌现出来。可以说, BEC 已经成为一种特殊的低温实验室, 为研究原子物理、量子论和多体系统开辟了新视窗。从最早的转变温度、凝聚原子数的研究[12]到动力学稳定性、集体激发、振荡和衰变的研究[13-16], 再到后来相干性和超流性的研究[17-19]都取得了令人瞩目的成就。直到现在相干放大、四波混频、光速减慢、光子晶格、原子激光、分子凝聚体[20-22]等等现象和性质依然备受关注。

1997 年 MIT 的 Ketterle 小组又在光偶极阱中得到了钠原子的玻色—爱因斯坦凝聚体[23], 将在磁阱中冻结的自由度——自旋“解放”出来, 开启了研究 BEC 旋量性质的大门。随后 1998 年 Ho[24]及 Ohmi 和 Machida[25]分别独立地完成了旋量 (Spinor) 玻色—爱因斯坦凝聚体的理论研究。他们推广了 Gross-Pitaevskii 方程, 在

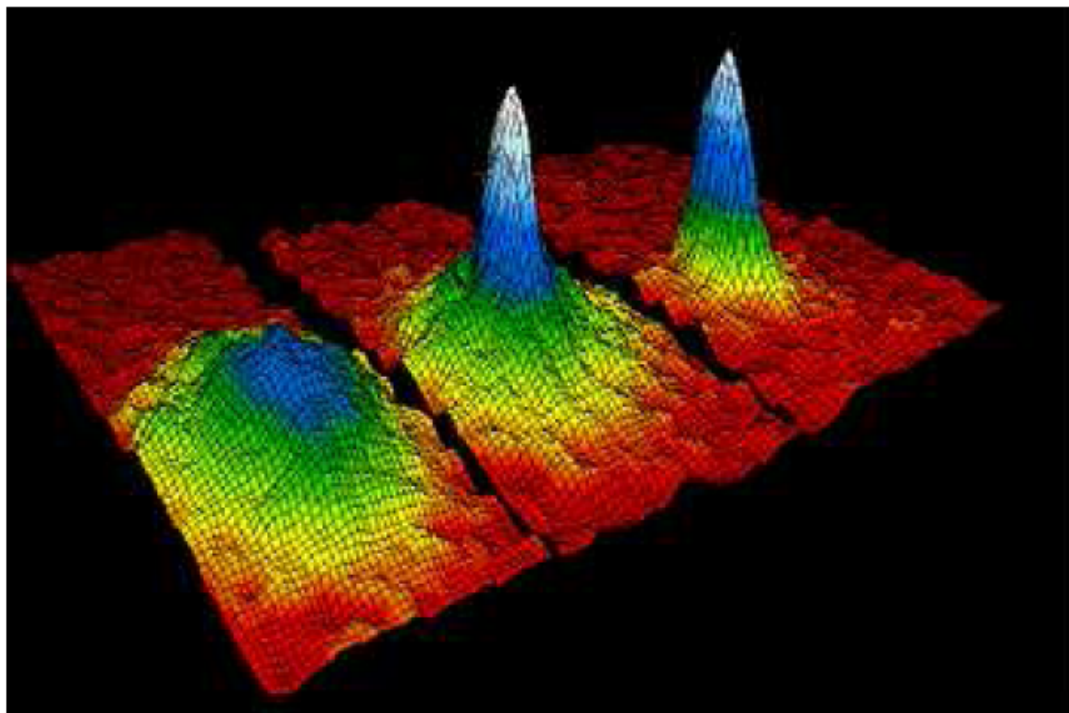


图 1.1 JILA 小组利用吸收成像法观测到的铷原子空间分布的三维像。 x, y 轴对应空间分布， z 轴对应原子数密度。第一幅表示 BEC 形成之前的情形，原子为均匀球对称分布；第二幅为 BEC 形成后的情形，中心突出部分为 BEC，边缘部分为热原子分布；第三幅为接近纯 BEC 的情况，边缘几乎没有热原子。

平均场理论的框架下研究了自旋 $F=1$ 的 BEC 丰富的基态结构和拓扑激发性质。同年, Law 等人则用量子光学中的代数方法研究了其自旋混合行为[26]。与自旋 $F=1$ 相比, 自旋 $F=2$ 的 BEC 展现出更加丰富多彩的特性[27, 28]。

相向传播的几对激光束的干涉在空间能形成明暗相间的周期性场强分布, 它通过与原子的相互作用形成了控制原子质心运动的周期性势场。这种由激光束干涉而形成的原子周期势被称作光晶格 (Optical Lattice)。光晶格技术最初起源于对原子进行的偏振梯度冷却及亚光子反弹冷却实验。近几年来, 这种技术已逐渐被应用于对超冷原子及 BEC 的操控与相变的研究。最近, 德国的研究小组首次在实验上观察到玻色—爱因斯坦凝聚体在光晶格中从超流态到 Mott—绝缘态转变的量子相变现象[29]。这一重要的实验进展不仅在理论上具有重大的研究价值, 而且为 BEC 的应用开辟了新途径。光学晶格与光阱一样能同时捕获和控制处于所有超精细自旋态的原

子，为研究 BEC 的自旋与磁特性提供了技术上的保证。此外，光晶格还具有另一重要特性——空间周期性。原子在光晶格中的运动类似于电子在固体晶格场中的运动。因此，光晶格中超冷原子的研究也为研究一些类固体物理现象提供了理想工具。Greiner 等人正是从这种相似性出发，通过对光晶格势阱深度的控制，实现了 BEC 从超流态到 Mott—绝缘态的量子相变。这一实验的理论解释涉及到玻色—哈伯德 (Bose-Hubbard) 模型[30]。光晶格还有许多实验上的应用，例如利用稀疏填充的光晶格观察光的布拉格散射[31, 32]或布洛赫振荡[33]；用光晶格囚禁原子作为量子模拟器[34]或观察量子隧穿[35]等。此外它也有许多实际的应用，光晶格 BEC 的自发磁化现象有可能应用在弱磁场探测及磁传感器等技术领域；其自旋波的激发、控制与探测的研究则可能为量子计算及量子信息处理等方面提供重要的指导。

本篇论文主要讨论旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的超流性、隧穿动力学及纠缠特性等一些物理问题。论文组织如下：第一章是对研究背景的介绍，包括玻色—爱因斯坦凝聚、旋量玻色—爱因斯坦凝聚和光晶格中玻色—爱因斯坦凝聚体的一些基本概念和基本理论以及有关的国内外研究动态。第二章用波戈留波夫变换方法研究光晶格中自旋为 1 的超冷玻色气体的超流性。第三章用半经典方法讨论偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的动力学行为。第四章和第五章着重研究多分量玻色—爱因斯坦凝聚体的纠缠特性。最后给出结论和展望。

第二节 理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚

从量子统计理论知道，玻色子服从玻色—爱因斯坦统计分布规律[36]：

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

$f(\varepsilon_i)$ 表示能量为 ε_i 的量子态 i 上的平均粒子占据数， T 是温度。 μ 是化学势，表示保持熵和体积不变的情况下，增加一个粒子到系统时所需要的能量。对理想气体，为保证各能态上的粒子数为正，化学势 μ 要比系统的最低能量还要小。若选取系统的基态能量为零 ($\varepsilon_0 = 0$)，则 μ 为负值。系统的能量和粒子数由 T 和 μ 共同决定：

$$E = \sum_i \varepsilon_i f(\varepsilon_i) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.2)$$

$$N = \sum_i f(\varepsilon_i) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (1.3)$$

若 $f(\varepsilon_i)$ 随能量变化较缓慢，可将 (1.3) 式中的求和用对能量的积分代替。注意到当 $\mu \rightarrow 0$ 时， $\varepsilon_0 = 0$ 的布居数会趋向无穷大。为避免积分中的无穷大，分离出基态的粒子数 N_0 ，则

$$N = N_0(T) + \int_0^{\infty} f(E) D(E) dE, \quad (1.4)$$

其中 $f(E)$ 是连续玻色分布， $D(E) = 2\pi V (2m)^{3/2} E^{1/2} / h^3$ 是态密度函数。 $N_0(T)$ 表示动能为零的基态的粒子数，随着温度的降低，化学势 μ 增大，最后可达到 $\mu = 0$ 。我们把上式改写成

$$N = N_0(T) + \frac{V}{\lambda_{dB}^2} g_{3/2}(z) \quad (1.5)$$

式中 $\lambda_{dB} = h / (2\pi m k_B T)^{1/2}$ 是热德布罗意波长，而

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} e^x - 1}, 0 \leq z \leq 1 \quad (1.6)$$

称为玻色函数，这里 $z \equiv e^{\mu/k_B T}$ 为气体的逸度。随着温度的降低， $\mu \rightarrow 0$ ， $z \rightarrow 1$ ，

$g_{3/2}(1) = 2.612$ 。这时，进一步降低温度，增加密度，气体中原子数的增加只能来自式 (1.5) 右边的第一项，即动能基态项。这就是玻色—爱因斯坦凝聚。因此，形成玻色—爱因斯坦凝聚的条件可写成无量纲相空间密度

$$\rho = n \lambda_{dB}^3 = \frac{N}{V} \lambda_{dB}^3 \geq 2.612. \quad (1.7)$$

根据激发态上最多可容纳的粒子数，得到形成玻色—爱因斯坦凝聚的临界温度：

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{2/3} \quad (1.8)$$

及最低密度：

$$n_c = 2.612 \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (1.9)$$

对碱金属原子气体, T_c 一般为几十到上百 nK 量级, n_c 为 $10^{11} \sim 10^{12}$ 量级。当温度低于转变温度时, 有大量原子聚集于动能基态。由式 (1.5)、式 (1.8) 及式 (1.9), 可得到此时凝聚基态的原子数与总原子数之比为

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{2.612V}{\lambda_{dB}^3 N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (1.10)$$

上述条件是在自由空间中得到的, 实际上, 玻色—爱因斯坦凝聚是在原子阱中形成的。这时, 式 (1.4) 中的态密度函数应为

$$D(E) = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_V \sqrt{E - V_{ext}(x, y, z)} d^3\vec{r}, \quad (1.11)$$

其中 $V_{ext}(x, y, z)$ 表示囚禁势。根据势阱的不同, 从式 (1.5) 到式 (1.10) 都要做一些修改。一般地, 式 (1.10) 可写为 [37]:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^\alpha, \quad (1.12)$$

其中指数 α 随势阱的不同而不同。

总之, 实现玻色—爱因斯坦凝聚的转变温度随势阱不同而改变, 阱越强, 越容易得到玻色—爱因斯坦凝聚。但不管势阱的形式如何, 只要满足式 (1.7) 的条件, 就会出现凝聚现象。这个条件说明, 形成凝聚体时, 在原子热德布罗意波长的体积范围内, 至少应有一个原子, 即原子的物质波波长大于原子间距, 整个原子体系成为一个整体, 物质波互相覆盖, 可用统一的波函数描述。这是玻色—爱因斯坦凝聚体的最主要的特征。图 1.2 形象地描绘出原子的粒子性与波动性随温度的变化。

第三节 稀薄气体的玻色—爱因斯坦凝聚

1.3.1 序参量和平均场理论

玻色—爱因斯坦凝聚现象可以在粒子间没有相互作用时发生, 它是全同玻色子体系波函数对称性的结果。在这个意义上可以称之为“纯量子力学根源的相变”。但是它的物理却决定性地依赖相互作用的性质。束缚在外势阱 V_{ext} 中的 N 个相互作用的玻色子的多体哈密顿量的二次量子化形式为 [38]

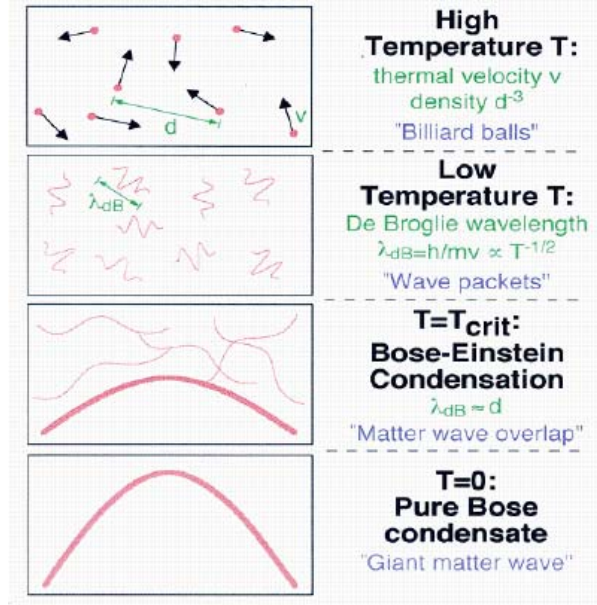


图 1.2 实现玻色—爱因斯坦凝聚的判据，引自《量子力学新进展》第三辑 74 页

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\bar{r} \hat{\Psi}^\dagger(\bar{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \right] \hat{\Psi}(\bar{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d\bar{r} d\bar{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\bar{r}') V(\bar{r} - \bar{r}') \hat{\Psi}(\bar{r}') \hat{\Psi}(\bar{r}), \end{aligned} \quad (1.13)$$

其中 $\hat{\Psi}(\bar{r})$ 和 $\hat{\Psi}^\dagger(\bar{r})$ 是玻色场湮灭和产生算符，分别表示在坐标 \bar{r} 处湮灭或产生一个粒子； $V(\bar{r} - \bar{r}')$ 表示两体相互作用势。从哈密顿量(1.13)式出发，可直接计算得到系统的基态和其热动力学性质。对于有相互作用的系统，通常用平均场理论来处理解多体薛定谔(Schrödinger)方程时遇到的问题。1947年，波戈留波夫(Bogoliubov)提出利用平均场近似来描述稀薄玻色气体的基本思想，将凝聚体的玻色场算符与非凝聚体的玻色场算符分开处理[39]。一般来说，场算符可写作 $\hat{\Psi}(\bar{r}) = \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\bar{r}) \hat{a}_{\alpha}$ ，

其中 $\Phi_{\alpha}(\bar{r})$ 是单粒子波函数， \hat{a}_{α} 是相应的玻色湮灭算符。玻色产生算符 \hat{a}_{α}^\dagger 和湮灭算符 \hat{a}_{α} 在 Fock 空间中定义为

$$\hat{a}_{\alpha}^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} + 1, \dots\rangle, \quad (1.14)$$

$$\hat{a}_{\alpha} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha}} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots\rangle, \quad (1.15)$$

其中 n_α 是粒子数算符 $\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$ 的本征值，表示单粒子 α 态上的原子数。这些算符满足对易关系

$$\left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger \right] = \delta_{\alpha,\beta}, \left[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta \right] = 0, \left[\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\beta^\dagger \right] = 0. \quad (1.16)$$

玻色—爱因斯坦凝聚发生时，一个特定的单粒子态（基态）上的原子数目 n_0 变得非常大： $n_0 \equiv N_0 \gg 1$ ；且对于热力学极限 $N \rightarrow \infty$ ，比值 N_0/N 仍然是有限的。在这种极限条件下，该态有 N_0 个粒子与有 $N_0 \pm 1 \approx N_0$ 个粒子在物理上没有分别，所以可以将算符 \hat{a}_0 和 \hat{a}_0^\dagger 作 c 数对待： $\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0}$ 。

对体积为 V 的均匀气体，玻色子凝聚在零动量的单粒子态 $\Phi_0 = 1/\sqrt{V}$ 上，场算符 $\hat{\Psi}(\vec{r})$ 可以分解为 $\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sqrt{N_0/V} + \hat{\Psi}'(\vec{r})$ 。将算符 $\hat{\Psi}'(\vec{r})$ 看作微扰，波戈留波夫发展了一套关于相互作用玻色气体元激发的“一级”理论。将波戈留波夫理论推广到非均匀和含时的情况：

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) + \hat{\Psi}'(\vec{r}, t) \quad (1.17)$$

这里的算符仍定义在海森堡（Heisenberg）表象中。 $\Phi(\vec{r}, t)$ 是复函数，是场算符的平均值： $\Phi(\vec{r}, t) \equiv \left\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right\rangle$ 。它的模表示凝聚体密度 $\rho(\vec{r}, t) = |\Phi(\vec{r}, t)|^2$ 。与均匀气体的情况类似，函数 $\Phi(\vec{r}, t)$ 也有确定的相位，它与多体系统的规范对称性的破缺有关。

函数 $\Phi(\vec{r}, t)$ 是经典场，常被称作“凝聚体波函数”，有序参量的物理含义。它表征单

粒子密度矩阵 $\rho_1(\vec{r}', \vec{r}, t) = \left\langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right\rangle$ 的非对角长程序。事实上，场算符的分解形式 (1.17) 也表明了下面的渐进行为：

$$\lim_{|\vec{r}' - \vec{r}| \rightarrow \infty} \rho_1(\vec{r}', \vec{r}, t) = \Phi^*(\vec{r}', t) \Phi(\vec{r}, t). \quad (1.18)$$

严格地讲，对有限尺寸的系统，破缺对称性和非对角长程序的概念都不适用。但凝聚体波函数仍有明确含义[38][40]：通过对角化单粒子密度矩阵，得到

$$\int \rho_1(\vec{r}', \vec{r}) \Phi_i(\vec{r}') d\vec{r}' = N_i \Phi_i(\vec{r}),$$

其中对应最大本征值 N_i 的本征函数 $\Phi_i(\vec{r})$ 即为凝聚体序参量。

1.3.2 Gross-Pitaevskii 方程

为了导出凝聚体波函数 $\Phi(\vec{r}, t)$ 的方程，首先我们写出场算符 $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ 在海森堡表象中的时间演化方程：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= \left[\hat{\Psi}, \hat{H} \right] \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (1.19)$$

在稀薄的冷原子气体中，原子间只有低能量的两体碰撞，这种相互作用可以用单参量，即 s -波散射长度来表征，而不用考虑两体碰撞产生的势的具体情况。将式(1.19)中的 $V(\vec{r}' - \vec{r})$ 用等效相互作用代替

$$V(\vec{r}' - \vec{r}) = g \delta(\vec{r}' - \vec{r}), \quad (1.20)$$

其中耦合常数 g 与 s -波散射长度 a_{sc} 的关系为

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_{sc}}{m}. \quad (1.21)$$

将等效势(1.20)代入海森堡方程(1.19)，并用经典场 $\Phi(\vec{r}, t)$ 代替场算符 $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ ，得到序参量的封闭方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + g |\Phi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Phi(\vec{r}, t). \quad (1.22)$$

这就是著名的 Gross-Pitaevskii 方程，简称 GP 方程，分别由 Gross (1961, 1963) 和 Pitaevskii (1961) 独立推导得到。

这里要阐明 GP 方程的适用条件。首先，原子数目应该很大，在这种情况下才可以使用玻色—爱因斯坦凝聚的概念；其二，为了用经典场代替场算符，必须满足稀化条件 $|a_{sc}| \ll n^{-1/3}$ 且温度要足够低。同时由于低温可以忽略掉凝聚体的量子损耗和热损耗，这样序参量可以归一化到原子总数： $\int |\Phi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = N$ 。其三，原子间的平均距离应该远远大于散射长度。

GP 方程的重要特性是其非线性性，这正是粒子间存在相互作用的体现。从 GP 方程出发可研究低温情况下，玻色—爱因斯坦凝聚体的宏观行为如相干效应等等。从凝聚体的能量泛函出发亦可得到 GP 方程，

$$E[\Phi, \Phi^*] = \int d\bar{r} \left\{ \Phi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\bar{r}) \right] \Phi + \frac{g}{2} |\Phi|^4 \right\}, \quad (1.23)$$

则由能量变分给出

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\bar{r}, t) = \frac{\delta E[\Phi, \Phi^*]}{\delta \Phi^*}. \quad (1.24)$$

将波函数写成 $\Phi(\bar{r}, t) = \Phi(\bar{r})e^{-i\mu t/\hbar}$ 的形式，可以得到凝聚体的定态方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\bar{r}) + g |\Phi(\bar{r})|^2 \right] \Phi(\bar{r}) = \mu \Phi(\bar{r}). \quad (1.25)$$

凝聚体的基态实际上对应于化学势 μ 最小的定态。当相互作用较弱时，谐振子势中凝聚体的波函数可以有效地近似作高斯函数；当相互作用较强且为排斥相互作用时，我们可以忽略动能项，这就是所谓的 Thomas-Fermi 近似；而当相互作用为吸引相互作用时，凝聚体是不稳定的，系统有崩塌的可能性[41]。

1.3.3 相干性

相位相干是与玻色—爱因斯坦凝聚的本质相关的一个重要概念。凝聚体的序参量 $\Phi(\bar{r})$ 是场算符的系综平均值，作为波函数，它是宏观的。和一般多体系统的波函数不同，它不是各个粒子坐标的 N 体波函数 $\Phi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N)$ ，而是用一个坐标描述的单体波函数，这里 \bar{r} 所延伸的范围是整个体系的尺度，所以也称为宏观波函数。将 $\Phi(\bar{r})$ 写成振幅和相位分离的形式

$$\Phi(\bar{r}) = \sqrt{\rho(\bar{r})} e^{i\theta(\bar{r})}, \quad (1.26)$$

其中振幅 $\rho(\bar{r}) = |\Phi(\bar{r})|^2$ 代表粒子数密度；相位具有任意性，如在 $\Phi(\bar{r})$ 上乘以相因子 $e^{i\alpha}$ (α 为任意实常数) 不带来任何物理差别。对于任意两点 \bar{r}_1 和 \bar{r}_2 ， $\theta(\bar{r}_1)$ 和 $\theta(\bar{r}_2)$ 都是互相关联的。不论这两点相隔多远，只要都在体系内，则两个相位的相对值 $\theta(\bar{r}_1) - \theta(\bar{r}_2)$ 就是固定的。这说明了整个体系是相位相干的。

玻色—爱因斯坦凝聚体中的原子具有相干性，如果两团 BEC 相遇，就会出现干涉条纹。关于 BEC 是否具有统一的相位以及能否出现干涉条纹等问题，曾有过许多争论，1997 年 MIT 的 W. Ketterle 领导的小组首先在实验中证实了这个结果[42]。他们在磁光阱中形成雪茄状的原子云，然后用一束远离共振的蓝失谐强激光在阱间建立一个偶极力势垒，排斥原子，造成双阱和两团原子云，再用蒸发冷却得到两个独立的 BEC 后撤去磁场，BEC 在重力场下一边下落一边自由扩张，两团原子互相重叠，如图 1.3 所示。经过 40ms 时间，用相衬色散成像法得到了如图 1.4 所示的干涉条纹。这个实验激起了理论工作者的广泛兴趣，人们用各种各样的方法来研究它。GP 方程自然是一个出发点，数值结果得到了与实验相一致的干涉图样[43-45]。另外利用反散射方法，对 GP 方程精确求解也对上述实验现象做出了非常漂亮的解释[46]。理论与实验的研究均表明凝聚体具有相位相干性。

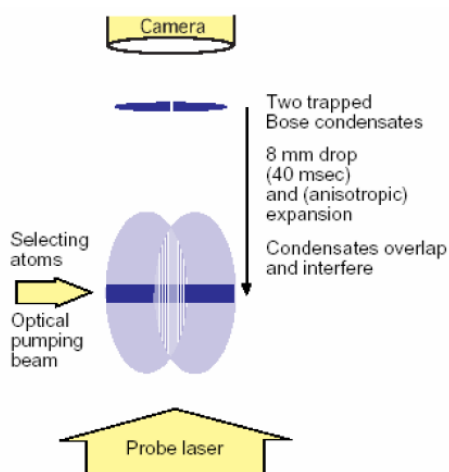


图 1.3 BEC 干涉实验的装置及其观察方法

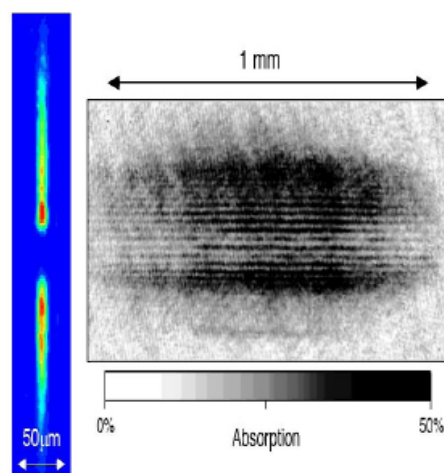


图 1.4 两团 BEC 的干涉条纹

凝聚体的相位在动力学上如何随时间演化呢？M. Lowenstein 和尤力得到了凝聚体粒子数涨落、相位扩散的表述方法并进一步阐明了整体规范对称自发破缺 Goldstone 零模的性质[47]。P.W. Anderson 曾提出过一个问题：“两个超流体从未见过面，它们有一定的相对相位吗？”J. Javanainen 和 S.M. Yoo 的研究得出结论：即使两个玻色—爱因斯坦凝聚体初始都具有确定的粒子数（即相位完全不确定）相向运动，在它们重叠时仍能显示出干涉条纹。它们的相对相位是通过动力学发展出来的。重复实验，结果仍定性地实现，而相对相位则在重复的实验中无规地从一个值

变为另一个值[48]。此外，关于两个凝聚体的相干性还有许多其它的研究结果[49, 50]。

W.D. Phillips 和邓鲁等人用相位刻印（phase imprinting）的方法来制备具有给定相位分布的凝聚体[51]。相位相干是具有深刻内涵的物理概念[40]。具有完全确定相位的 BEC 可以用相干态描述。

1.3.4 超流性

关于 BEC 的涡旋及超流性质的研究是超冷原子研究中的一个热门，是传统超流和超导性质研究在稀薄气体 BEC 中的发展，对了解宏观量子系统的特性有重要意义。仍将凝聚体的波函数写成振幅和相位分离的形式 $\Phi(\vec{r}) = \sqrt{\rho(\vec{r})}e^{i\theta(\vec{r})}$ ，根据量子力学中流密度的定义

$$\vec{j}(\vec{r}) = \rho(\vec{r})\vec{v}_s(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m}(\Phi^*\nabla\Phi - \Phi\nabla\Phi^*), \quad (1.27)$$

则凝聚体的超流速度为

$$\vec{v}_s(\vec{r}) = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta(\vec{r}). \quad (1.28)$$

它显然是无旋的，即

$$\nabla \times \vec{v}_s(\vec{r}) = 0, \quad (1.29)$$

这点反映出 BEC 的超流特性。

沿流体中的任何一条封闭曲线 c 作超流速度 $\vec{v}_s(\vec{r})$ 的线积分：

$$\oint_c \vec{v}_s \cdot d\vec{s} = \frac{\hbar}{m} \oint_c \nabla\theta \cdot d\vec{s} = \frac{\hbar}{m}(\Delta\theta)_c, \quad (1.30)$$

这里 $(\Delta\theta)_c$ 表示绕封闭曲线一圈后回到起始点相位的变化。由波函数的单值性决定了相位的变化只能是 2π 的整数倍，所以

$$\oint_c \vec{v}_s \cdot d\vec{s} = \frac{2\pi\hbar}{m}\kappa, \quad (1.31)$$

其中 $\kappa = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 这也是超流的涡旋量子化条件。在量子数为 κ 的状态，凝聚体在 z 方向的角动量是 $N\kappa\hbar$ 。总之，BEC 中的“速度”体现在其序参量相位的梯度上，这种量子化可以理解为围绕涡旋一圈相位改变 2π 。因此，出现涡旋是 BEC 超流性的表现。

JILA [52] 和巴黎高师 [53] 的小组先后在实验上观察到了 BEC 中的涡旋。JILA 小组根据 J.E. Williams 和 M.J. Holland 的理论建议 [54]，采用了激光和射频场技术在双组分 ^{87}Rb ($F=1, m_F=-1$ 和 $F=2, m_F=1$) 的 BEC 中给相应的 BEC 打上相位印记，并进行旋转，从两团凝聚体的干涉观察到了涡旋。巴黎高师小组则用旋转激光束创造了一个旋转势使凝聚体转动。当激光束旋转频率增高时，涡旋数目从无到有（涡旋中心没有原子），由此可确定产生涡旋的临界旋转频率。他们还测量了涡旋的寿命，约为 $400\text{ms} \sim 1000\text{ms}$ 。

MIT [55] 小组实现了涡旋阵列。他们采用旋转激光束在钠的 BEC 中产生涡旋，图 1.5 是他们得到的多至 130 个涡旋的涡旋阵列。阵列具有规则的三角形结构，寿命可长达几秒，与涡旋数成反比。BEC 中涡旋行为的研究引起了广泛的兴趣，有大量的理论文章和新的实验结果 [56-58]，这里不做详细介绍。

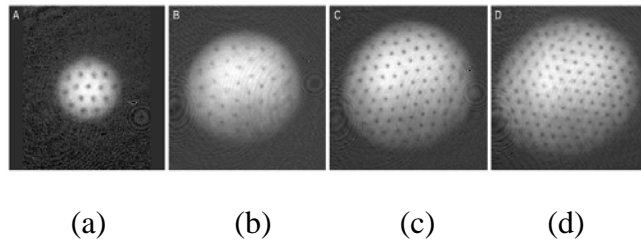


图 1.5 Na BEC 中的涡旋阵列，从(a)到(d)，所含涡旋数分别为 16,32,80,130

与超流有关的另一个突出成果是 BEC 在光学晶格中从超流态到 Mott—绝缘态的量子相变研究。这个实验由 Hänsch 小组完成 [29]。我们将在第五节与第二章中做详细介绍。

第四节 旋量玻色—爱因斯坦凝聚体

1.4.1 磁束缚与标量玻色—爱因斯坦凝聚体

实现玻色—爱因斯坦凝聚的关键就是要不断地提高原子气体的相空间密度 ρ 到 2.612。常温下一般气体的 ρ 约为 $10^{-8} \sim 10^{-6}$ ，而碱金属蒸汽因气压低，则为 10^{-13} 量级。当温度降低到微开量级，可提高 $10^{12} \sim 10^{15}$ 量级，但由于降温过程中一般原子密度也

在下降，要把 ρ 提高，达到 1 的量级是不容易的。通常的办法是用磁光阱 (MOT) 在室温下捕获冷原子，再用光学粘团使之冷却到几百至几十微开量级；然后把冷原子团装载到原子阱 (静磁阱或全光阱) 中，利用射频蒸发冷却方法把气体进一步冷至 $100nK$ 数量级，达到 BEC 转变温度。在这一过程中一般还采用绝热压缩技术来提高原子密度。最后采用共振吸收成像法来检测阱中原子数的空间分布。这是破坏性测量，后来则多用色散成像法就地检测。

若原子的基态具有磁矩，在不均匀磁场中会受到力的作用。静磁阱囚禁中性原子之原理，正是利用原子磁矩 $\bar{\mu}$ 与外加不均匀空间分布的磁场 $\bar{B}(\bar{r})$ 间的作用

$$U(\bar{r}) = -\bar{\mu} \cdot \bar{B}(\bar{r}). \quad (1.32)$$

原子磁矩与原子能级 (基态, 激发态, 超精细能级, 塞曼 (Zeeman) 能级等, 不同能级的磁矩方向也可能不同) 有关。某些塞曼能级的磁矩与外加磁场方向相反, 则该类能级的能量随磁场的增加而增加, 力趋向于磁场弱的地方。原子处于该类能级时, 一般来说宜于磁囚禁, 其势能的最低点即为磁场最低点。因此, 称为低场趋向态 (low-field seeker) 或囚禁态、束缚态。而能级随磁场升高而降低的原子 (称为强场趋向态 high-field seeker 或逃逸态、驱逐态) 则被赶出原子阱, 如图 1.6 所示 [59]。

最简单而常用的静磁阱是四极阱, 也称 “Paul” 阱 [60, 61]。它由两个相同的线圈组成, 线圈内通过的电流大小相等、方向相反。为提高囚禁力与囚禁时间又出现了许多改进的静磁阱: 时间旋转势阱 (time orbiting potential, TOP) [62]、 “Ioffe-Pritchard” 阱 [63, 64]、光学塞孔阱 [65] 和 “四叶草” 阱 [66] 等等。

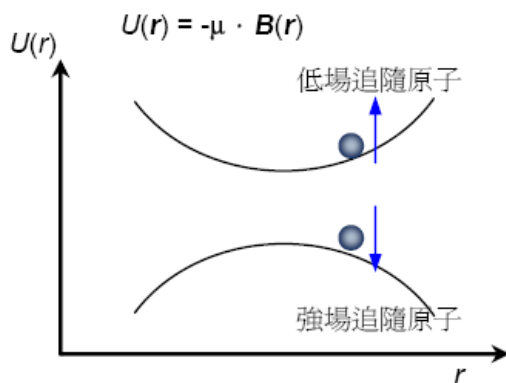


图 1.6 静磁阱原理示意图

磁阱有自动筛选低场趋向原子的特性，因此，由激光冷却产生的分布于所有塞曼能级的冷原子将不能被同时囚禁，这里原子的自旋被冻结，原子的行为与标量粒子无异，也称作标量玻色—爱因斯坦凝聚体。

下面我们对有相互作用的标量玻色—爱因斯坦凝聚体的性质作简要的概括。对处于相同的超精细自旋态上的超冷原子气体，原子间的相互作用可以等效为接触赝势：

$$V(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a_{sc}}{m} \delta(\vec{r}-\vec{r}'). \quad (1.33)$$

这种接触相互作用由 s -波散射长度 a_{sc} 来表征，它是一种短程（如著名的范德瓦尔斯（Van de Waals）势）的各向同性的相互作用。散射长度 $a_{sc} > 0$ 对应着排斥相互作用；而 $a_{sc} < 0$ 则对应吸引相互作用。实验上 a_{sc} 可通过 Feshbach 共振技术进行调节 [67-69]。 m 是原子质量。赝势近似，也称作形状无关近似，表明原子间相互作用 $V(\vec{r}-\vec{r}')$ 只与等效相互作用 $g\delta(\vec{r}-\vec{r}')$ 有关，而与实际的两体势的具体细节无关。采用赝势近似，单组分标量玻色—爱因斯坦凝聚体的哈密顿量的二次量子化形式为

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \right\}, \quad (1.34)$$

其中 $\hat{\Psi}(\vec{r})$ 和 $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$ 是场湮灭和产生算符，分别表示在坐标 \vec{r} 处湮灭或产生一个粒子； $V_{ext}(\vec{r})$ 是束缚外势（通常为谐振子势）； $g = 4\pi\hbar^2 a_{sc} / m$ 代表接触赝势的相互作用强度。

1.4.2 光束缚与旋量玻色—爱因斯坦凝聚体

我们也可以利用光场对原子的机械力作用形成纯光阱捕获和囚禁原子。这种力的本质是电场对电荷和磁场对运动电荷（电流）的作用力，即静电作用力和洛伦兹力。原子在辐射场的作用下将产生感生偶极矩 \vec{d} ，它与振幅为 $E(\vec{r}, t)$ 的辐射电磁场的相互作用能表示为 [70]：

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t). \quad (1.35)$$

若电磁场含有空间不均匀性，则原子所受的力可表示为能量梯度的负值

$$F = -\overline{\nabla V} = \overline{\vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t)}, \quad (1.36)$$

式中的横杠表示对时间的平均。

冷原子一般情况下处于基态，与电磁场的相互作用使基态能级的能量发生变化。用微扰理论可以求得这个能量变化。由于一般原子基态不带电偶极矩，一级微扰引起的能级能量变化为零，我们只要考虑二级效应，得到相互作用使基态能量的变化为[71]

$$\Delta E_g = -\sum_e \frac{|\langle e|V|g\rangle|^2}{E_e - E_g} = -\frac{1}{2}\alpha E^2, \quad (1.37)$$

其中 $\langle e|V|g\rangle$ 为跃迁矩阵元， g 和 e 分别表示基态和激发态，而

$$\alpha = 2\sum_e \frac{|\langle e|\vec{d} \cdot \vec{e}|g\rangle|^2}{E_e - E_g} \quad (1.38)$$

是原子极化率， \vec{e} 是电场方向上的单位矢量。

若电场是随时间变化的，可记为

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r})e^{-i\omega t} + \vec{E}_0^*(\vec{r})e^{i\omega t}, \quad (1.39)$$

$$\begin{aligned} \text{则 } \Delta E_g &= \sum_e \left[\frac{\langle g|\vec{d} \cdot \vec{E}_0|e\rangle \langle e|\vec{d} \cdot \vec{E}_0^*|g\rangle}{E_g - E_e + \hbar\omega} + \frac{\langle g|\vec{d} \cdot \vec{E}_0^*|e\rangle \langle e|\vec{d} \cdot \vec{E}_0|g\rangle}{E_g - E_e - \hbar\omega} \right] \\ &= \sum_e |\langle e|\vec{d} \cdot \vec{e}|g\rangle|^2 \left(\frac{1}{E_g - E_e - \hbar\omega} + \frac{1}{E_g - E_e + \hbar\omega} \right) |E_0|^2 \\ &= -\alpha(\omega) |\vec{E}_0(\vec{r})|^2 \\ &= -\frac{1}{2}\alpha(\omega) \overline{\vec{E}(\vec{r}, t)}, \end{aligned} \quad (1.40)$$

这种情况下的极化率为

$$\alpha(\omega) = \sum_e |\langle e|\vec{d} \cdot \vec{e}|g\rangle|^2 \frac{2(E_e - E_g)}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2}. \quad (1.41)$$

式 (1.41) 可看成是式 (1.38) 对随时间变化的电磁场的作用的推广。

通过微扰理论的计算，知道原子与辐射电磁场的相互作用能与原子极化率 α 成正比，而 α 与原子的磁量子数是无关系的，因此处于所有的塞曼能级的冷原子将能被同时囚禁。这里原子的自旋成为一个自由度，凝聚体的旋量性质得到体现，T.-L. Ho

将它称作旋量玻色—爱因斯坦凝聚[24]。实验上最早由 **Ketterle** 小组实现[23]。

目前只有一家实验室用全光阱得到了 BEC [72]。光阱的难处在于光与原子相互作用引起的加热和原子数损失。**Barrett** 等人采用两束交叉会聚的，远失谐的波长为 $10.6\mu\text{m}$ 的大功率(12W) CO_2 激光束形成光阱。当低速铷原子装载到 MOT 中后，逐步降低光强，关闭磁场，并把原子抽运到 $F=1$ 态，然后打开 CO_2 激光束，使原子装载到阱中。蒸发冷却则靠在 2s 时间内逐步降低光强，即减少阱深来实现。在这种光阱中， $m_F = -1, 0, 1$ 三个态的原子都可以被囚禁，三种原子总数为 3.5×10^4 。

碱金属原子的自旋 $F = I \pm S$ ， I 是原子核自旋的量子数， S 是核外价电子的自旋量子数。对于 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 原子， $I = \frac{3}{2}$ 且 $S = \pm \frac{1}{2}$ ，所以原子自旋有两个值： $F_{\text{high}} = 2$ 和 $F_{\text{low}} = 1$ 。这两个自旋态间的能级劈裂通常为 $\sim \text{GHz}$ 范围，而大多数实验中所用的势阱频率的范围从 1Hz 到几个 kHz 。所以对理想气体来说，因为角动量守恒的原因，单个原子不会从 F_{high} 态衰变到 F_{low} 态。当然，在低温情况下， F_{low} 态上的两个原子由于能量守恒的原因，也不会跃迁到 F_{high} 态。所以，在光势阱中，基态所有的原子均处于 F_{low} 态。

对自旋 $F=1$ 的碱金属原子，理论和实验[24][73]都已经表明原子间存在两种自旋关联相互作用，分别是，铁磁相互作用和反铁磁相互作用。随着实验技术的进步，可以得到自旋 $F > 1$ 的玻色子，如 ^{85}Rb 和 ^{133}Cs 等。**Ciobanu** 等人[27]最早研究了 $F=2$ 的旋量 BEC 的基态结构，证明其有三种相：极化相，铁磁相和循环相。

旋量玻色—爱因斯坦凝聚体哈密顿量的普遍的二次量子化形式为

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \\ + \Omega_{\alpha,\beta,\mu,\nu} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_\mu(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (1.42)$$

其中 $\hat{\Psi}_k(\vec{r}) (k = \alpha, \beta, \mu, \nu)$ 是场湮灭算符，指标 α, β, μ, ν 对应着凝聚体的各个组分，且重复指标表示求和。 $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ 是外束缚势的一般形式，是标量场，对每个自旋组分

有相同的形式。原子间的相互作用由系数 $\Omega_{\alpha,\beta,\mu,\nu}$ 表征，当系统在自旋空间满足旋转对称性时，相互作用的形式可大大简化。旋转对称性表明，两个超精细自旋分别为 F_1 和 F_2 的原子两体碰撞相互作用与它们的总自旋 $\vec{f} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2$ 有关，而与它们的取向无关。这样，原子相互作用的一般形式为：

$$\hat{V}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \sum_{f=0}^{2F} g_f \hat{\mathbf{P}}_f \quad (1.43)$$

这里 $g_f = \frac{4\pi\hbar^2 a_f}{m}$ ， m 是原子质量， a_f 代表总自旋 f 轨道的 s -波散射长度； $\hat{\mathbf{P}}_f$ 是总自旋 f 的投影算符。若玻色子自旋为 F ，对称性要求总自旋 $f = 0, 2, \dots, 2F$ [24]（详见附录 A）。式 (1.43) 描述的是 $(2F+1)$ 个组分的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的原子短程相互作用。

1.4.3 自旋 1 的玻色—爱因斯坦凝聚体

我们着重考虑原子自旋 $F=1$ 的情况。这时系统的基态由原子三重简并的塞曼态组成， $|F=1, m_F = +1, 0, -1\rangle$ ，原子相互作用完全由两个参数来描述，分别是 s -波散射长度 a_0 和 a_2 。式 (1.43) 可写作（详见附录 B）：

$$\hat{V}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \left(c_0 + c_2 \hat{\mathbf{F}}_1 \cdot \hat{\mathbf{F}}_2 \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (1.44)$$

其中 $\hat{\mathbf{F}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{F}}_2$ 是自旋 1 算符；参数 c_0 和 c_2 分别为

$$c_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{a_0 + 2a_2}{3}, \quad (1.45)$$

$$c_2 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{a_2 - a_0}{3}. \quad (1.46)$$

因此，描述自旋 $F=1$ 的弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体的哈密顿量为

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{2} [c_0 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \\
 & + c_2 \left(\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) F_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \right) \cdot \left(\hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) F_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}) \right)] \Bigg\}. \quad (1.47)
 \end{aligned}$$

自旋 1 矩阵的三个分量分别为

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, F_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, F_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

它们之间遵循对易关系 $[F_a, F_b] = i\epsilon_{abc} F_c$.

根据平均场理论的思想，式 (1.47) 中的场算符 $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})$ 可用序参量 $\Phi_\alpha(\vec{r})$ 来代替。将序参量写作 $\Phi_\alpha(\vec{r}) = \sqrt{\rho(\vec{r})} \zeta_\alpha(\vec{r})$ 的形式， $\rho(\vec{r})$ 表示原子密度， ζ_α 是归一化的三组分矢量 $\zeta^\dagger \cdot \zeta = 1$ ，则能量泛函为

$$E = \int d\vec{r} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \sqrt{\rho})^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \zeta)^2 \rho - [\mu - V_{\text{ext}}(\vec{r})] \rho + \frac{\rho^2}{2} [c_0 + c_2 \langle F \rangle^2] \right). \quad (1.49)$$

这里化学势 μ 决定着凝聚体的粒子数，凝聚体的平均自旋 $\langle F \rangle_\eta \equiv \zeta_a^* (F_\eta)_{ab} \zeta_b$,

($\eta = x, y, z$)。波函数 $\Phi_\alpha(\vec{r})$ 的基态结构可通过最小化自旋相关的相互作用能

$\frac{\rho^2}{2} c_2 \langle F \rangle^2$ 来决定。根据自旋非对称相互作用参数 c_2 的正负取值， $\Phi_\alpha(\vec{r})$ 的旋量部分

有两种不同的情况 [24]:

- $c_2 > 0$ (也就是 $a_2 > a_0$, 如 ^{23}Na): 反铁磁态或极化态。当 $\langle F \rangle = 0$ 时, 其能量最低。基态的旋量部分是一组简并矢量中的一个, “极化”态对应着自旋态 $m_F = 0$ 的所有旋转变换, 即

$$\zeta = e^{i\theta} U \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\alpha} \sin \beta \\ \cos \beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha} \sin \beta \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

其中 $e^{i\theta}$ 是规范变换; $U(\alpha, \beta, \tau) = e^{-iF_z \alpha} e^{-iF_y \beta} e^{-iF_x \tau}$ 表示自旋旋转变换, (α, β, τ) 是

欧拉 (Euler) 角。可见, 极化态与欧拉角 τ 无关。极化态的对称群为 $U(1) \times S^2$ 。

- $c_2 < 0$ (也就是 $a_2 < a_0$, 如 ^{87}Rb): 铁磁态。当 $\langle F \rangle = 1$ 时, 其能量最低。在这种情况下, 基态的旋量部分对应着自旋态 $m_F = 1$ 的所有旋转变换, 即

$$\zeta = e^{i\theta} U \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i(\theta-\tau)} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \sqrt{2} \cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i\alpha} \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (1.51)$$

铁磁态的对称群为 $SO(3)$ 。

极化态与铁磁态的对称性的差异导致了它们量子化涡旋的根本差异。铁磁情况下会出现无核涡旋 (Skyrmion)。

第五节 光晶格中的玻色—爱因斯坦凝聚体

光晶格是由一组相干光束产生的周期势, 原子在其中能感受到交流 Starck 效应 (光频移)。这种势能囚禁原子成为类晶体结构, 原子在光晶格中的运动类似于电子在固体晶体中的运动。光晶格势是由激光形成的, 即使格点上没有原子也不会有缺陷, 这里晶格常数是光波波长的数量级 (微米的量级), 而不是固体晶体中原子间的距离 (埃的量级)。这样虽然系统本质上没有强相互作用, 但是将原子囚禁在光晶格中减少了原子动能, 从而等效地增加了原子间的相互作用, 因此光晶格为研究强关联的原子体系提供了一个非常有价值的实验平台。

光晶格势本身可以精确地模拟, 通过选择激光的布局、偏振、强度和频率很容易调整晶格常数、对称性、势阱深度、构型以及原子间的相互作用强度等等。由自发辐射引起的动力学耗散原则上也可以通过调整激光频率和强度来控制。因此, 光晶格由于其简单可控制正在成为超冷原子实验和理论工作不可或缺的工具之一。

1.5.1 光晶格的实验实现

光晶格的诞生可追溯到由法国巴黎高师和美国标准技术研究院所进行的两个实验。前者研究了通过样品照射探测激光束的吸收和增益; 后者则测量了所捕获原子的荧光。这些实验首次给出了原子陷于一维周期性光学势阱的明确证据。两个实验

都用了正交偏振的驻波配置。理论上这个一维模拟系统是由 Dalibard 和 Cohen-Tannoudji [74, 75] 提出的，他们指出可以由正交线偏振相向传播的激光形成周期格点阵列—光学晶格—来同时冷却和囚禁原子。图 1.7 是线⊥线 (lin⊥lin) 结构光晶格示意图。设原子基态有 $F = 1/2$ ，光泵浦的主要作用是将原子从一个光学势的顶部转移到另一个光学势的底部。连续的冷却循环导致快速阻尼原子的运动。泵浦过程中吸收的能量比自发辐射的能量低，这样耗散了原子的动能，原子速度减小，不能从晶格势中逃逸。这样的结构用于偏振梯度 (Sisyphus) 冷却。

高维光晶格可以通过朝不同方向传播的驻波叠加形成。对于二维和三维 (如图 1.8) 的光晶格，已发展了几种不同的激光束配置。如 Grynberg 型 [76] 的光晶格用 $n = d + 1$ 束激光，这里 d 是空间维数而 n 是使用的激光数目。如果使用的激光束超过 $d + 1$ 束，则为 Hansch 型 [77] 光晶格。

实验上可以实现多种晶格结构的光晶格势，如简立方、体心立方和面心立方晶格 [76, 78] 等等。一般三维简立方光晶格势的形式为：

$$V_{lat}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^3 V_0 \sin^2(kr_j), \quad (1.52)$$

其中波矢 $k = 2\pi/\lambda$ ， λ 是激光的波长，则相应的晶格常数是 $d = \lambda/2$ 。 V_0 正比于原子的极化率与激光强度的乘积。

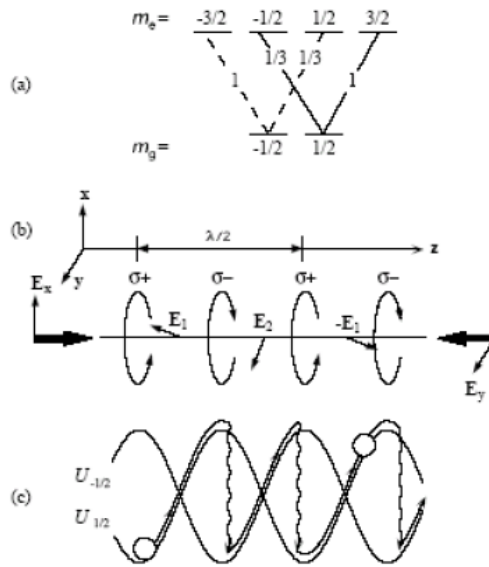


图 1.7 Sisyphus 冷却. (a) $J = -1/2$ 和 $1/2$ 两个基态能级的跃迁几率分支系数 (b) 光场偏振及基态能级光频移随空间的变化 (c) lin⊥lin 组态下的 Sisyphus 冷却

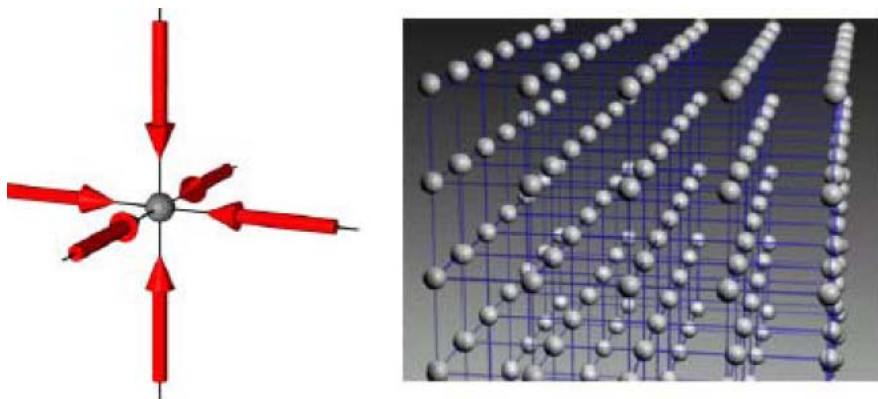


图 1.8 六束相互正交的激光产生的三维晶格，

引自 Adv. At. Mol. Opt. Phys. (2002) 42, 95-170

1.5.2 玻色—哈伯德模型

哈伯德 (Hubbard) 模型在考虑窄带中电子强关联效应的基础上成功地解释了有些过渡金属氧化物当温度升高时从绝缘体转变为金属的现象。而玻色—哈伯德 (Bose-Hubbard) 模型最初则被用来研究纳米管中惰性气体的吸收 [79] 或具有强电荷效应的超导薄膜中的库伯 (Cooper) 对 [80, 81] 等等。由于玻色原子在光晶格中的运动类似于电子在固体晶体中的运动，因此前者也可以被玻色—哈伯德模型完美地描述。1998 年 Jaksch 正是在这个模型的基础上理论预言了单分量超冷原子从超流到 Mott-绝缘态的量子相变 [30]。

相互作用的超冷玻色子在光晶格束缚势场下的哈密顿量为：

$$\hat{H} = \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_{sc} \hbar^2}{m} \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}), \quad (1.53)$$

这里 $\hat{\Psi}(\vec{r})$ 表示玻色场算符。束缚势 $V_{ext}(\vec{r})$ 包含光晶格周期势 $V_{lat}(\vec{r})$ 和一个外加的缓慢变化的束缚势 $V_T(\vec{r})$ ，如磁场，

$$V_{ext}(\vec{r}) = V_{lat}(\vec{r}) + V_T(\vec{r}),$$

如图 1.9 所示。原子间的相互作用是短程势， a_{sc} 表示 s -波散射长度。 m 是单个原子质量。

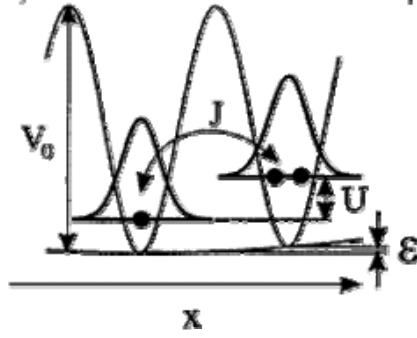


图 1.9 Bose-Hubbard 模型在光晶格中的示意图, 势阱底部的能阶由束缚势 V_T 产生

完整晶格中单原子系统的能量本征函数是布洛赫 (Bloch) 函数, 在同一能带中, 不同波矢对应不同的能量本征值。由不同波矢 (即不同能量) 的布洛赫函数组合可构成瓦涅尔 (Wannier) 函数, 它可以很好地定域在单个格点上, 不同格点的瓦涅尔函数彼此正交。为讨论光晶格周期势中格点间原子的相互作用, 我们采用瓦涅尔表象。假定系统的最低能带远低于第二个能带, 则在最低能带的瓦涅尔基中展开玻色场算符:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_i \hat{a}_i w(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (1.54)$$

其中 \hat{a}_i 是第 i 个格点上玻色子的湮灭算符, 它们满足玻色对易关系 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ 。利用

上面玻色场算符的展开式, 并且只考虑最近邻格点间的相互作用, 哈密顿量 (1.53) 可约化为玻色—哈伯德模型:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (1.55)$$

其中 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ 是第 i 个格点的原子数算符, $\langle i, j \rangle$ 表示对最近邻格点求和。模型中的第一项是跃迁 (hopping) 项, 描述了玻色子在相邻格点间的隧穿能量, 隧穿耦合的强弱由隧穿矩阵元

$$J = \int d^3 \vec{r} w^*(\vec{r} - \vec{r}_i) (-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_{lat}(\vec{r})) w(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

表征; 第二项给出了由外加缓变势引起的第 i 个格点的能量偏移,

$$\varepsilon_i = \int d^3 \vec{r} V_T(\vec{r}) |w(\vec{r} - \vec{r}_i)|^2 \approx V_T(\vec{r}_i).$$

这里可以认为对于不同的格点它是一个常量 ε ；第三项则表示单个格点上原子间的相互作用，它的强弱由相互作用矩阵元

$$U = (4\pi\hbar^2 a_{sc} / m) \int d^3\vec{r} |w(\vec{r} - \vec{r}_i)|^4$$

表示。因为与格点间距相比，这三种相互作用都是短程的，所以相互作用能可以分别用单参数 J, ε 和 U 来唯一地描述。随着光晶格势阱深度的增加，相邻格点的隧穿势垒也在增加，所以隧穿矩阵元 J 会呈指数减小，另一方面格点相互作用矩阵元 U 会随之增大一些。因此 U 与 J 的比值 U/J 可以随着光晶格势阱深度的调节在很大的范围内连续地改变。如图 1.10 所示。

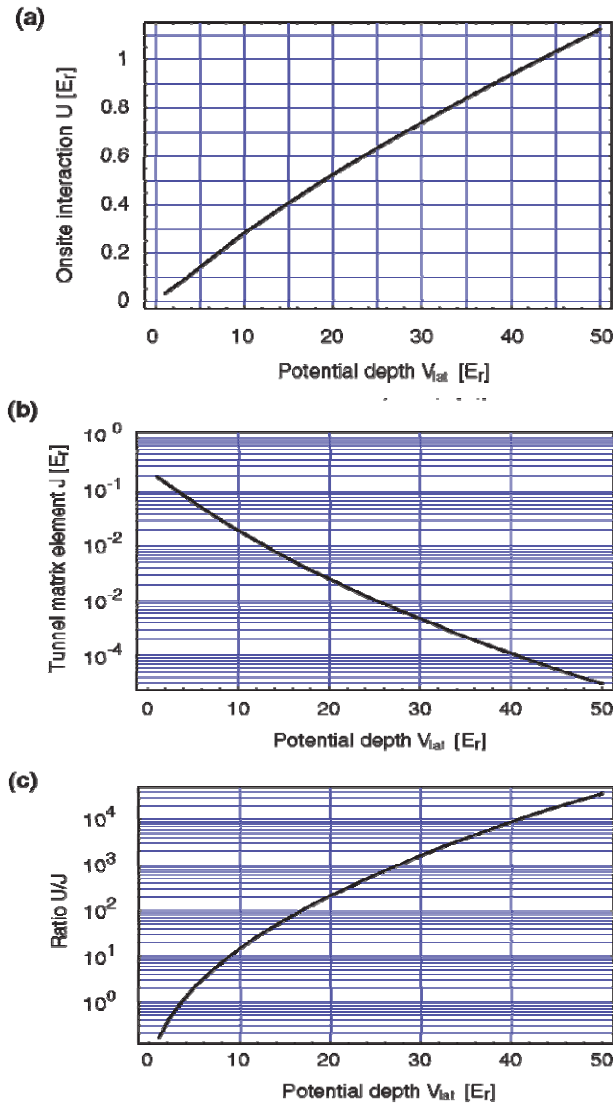


图 1.10 (a)格点相互作用矩阵元 U 、(b)隧穿矩阵元 J 及(c) U/J 随光晶格势阱深度的变化

1.5.3 超流和 Mott—绝缘态

玻色—哈伯德哈密顿量 (1.55) 式随着格点原子相互作用矩阵元 U 与隧穿矩阵元 J 的比值 U/J 大小的改变会出现两个性质不同的基态：超流态和 Mott—绝缘态。

当温度足够低形成 BEC 时，凝聚体处于超流相，可以用一个具有长程相位相干的波函数来描述。这时将它装载到远失谐的光晶格中，由于隧穿耦合，玻色原子可以从一个格点向相邻格点移动，每个格点上的原子数目都是任意的 (图 1.11(a))，系统仍处于超流状态。在这种情况下，动能在总能量中占主要地位，非局域化的波函数可使总能量最小。根据 Gutzwiller 的假设，单粒子波函数将扩展到整个晶格上，对于具有 M 个格点的光晶格周期势， N 原子系统的基态波函数在平均场理论近似下可以写作下面的形式 [29]：

$$|\Psi_{SF}\rangle|_{U \approx 0} \propto \left(\sum_{i=1}^M \hat{a}_i^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (1.56)$$

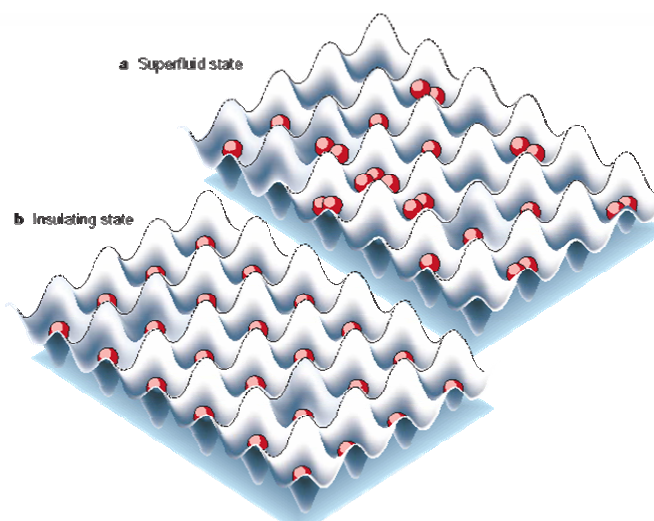


图 1.11 (a)超流态与(b) Mott—绝缘态

这时，所有的原子都占据完全相同的布洛赫 (Bloch) 扩展态。根据朗道 (Landau) 判据，超流相的特征反映在有非零的临界速度。一般说来，Hartree-Fock-Bogoliubov 平均场理论 [82] 与 Gutzwiller 假设同样适于讨论超流情形，对此我们将在第二章中做详尽地分析。与此相反，若格点上原子间相互作用能占能量的主要部分，则系统的基态由局域化的原子波函数组成，是格点局域 Fock 态的乘积，每个格点填充的原子

数目相同可以使总能量取最小（图 1.11(b)）。在此极限下，系统的波函数写作：

$$|\Psi_{MI}\rangle|_{J \rightarrow 0} \propto \prod_{i=1}^M \left(\hat{a}_i^\dagger \right)^N |0\rangle. \quad (1.57)$$

Mott—绝缘相是以整数占据数为特征的，而且量子涨落为零，因此相位相干性消失，激发谱中有能隙存在[82-86]。它不能用一个宏观波函数来描述，不能通过 **GP** 方程或者是弱相互作用下的波戈留波夫理论来讨论。而强耦合近似下的微扰展开法[82][86]则以隧穿项为微扰项，适合分析远离超流的情形。此外，**Gutzwiller** 变分理论[87-89]与双时格林函数方法[90]则可以同时兼顾这两种极限情况。

1.5.4 量子相变

相变是自然界普遍存在的一类突变现象[81]。通常将与温度有关的相变称作热力学相变，一般可以分为一级相变和连续相变。如果系统的绝对温度趋于零，所有的热运动将逐渐消失，但是由于海森堡（Heisenberg）不确定关系会有量子涨落存在，当涨落足够强时，就会促使系统从一个相向另一个相转变，即发生量子相变。一个突出的例子就是光晶格中超冷原子从超流相到 **Mott—绝缘相**的量子相变。随着激光强度的改变，相互“竞争”的两种相互作用能的比值 U/J 达到某一量子临界点，此时量子涨落将导致这种连续量子相变。对于三维的光晶格势，量子相变的临界条件

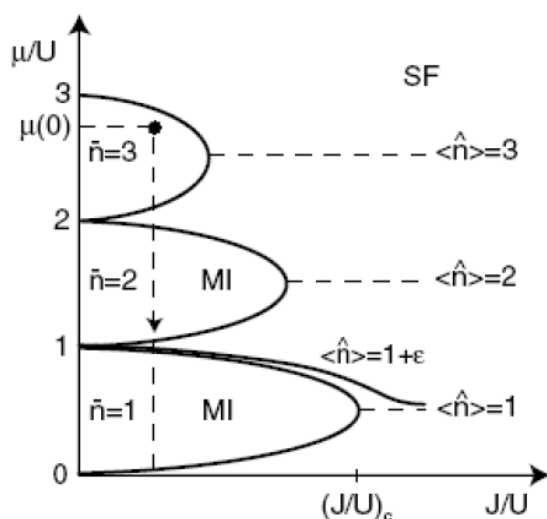


图 1.12 Bose-Hubbard 模型零温下的相图。横纵坐标分别为无量纲化的隧穿耦合与化学势。 \bar{n} 表示绝缘相中格点的平均原子数。引自 J. Opt. B (2003) 5, S9-S16。

为 $(U/J)_c = 5.8z$, 其中 z 是配位数, 这个条件适用于 Mott—绝缘相每个格点单占据的情况 [82–84] [91]。对于不同维数和不同平均占据数下的临界条件可以参看其他文献 [92–94]。零温时, 超流到 Mott—绝缘量子相变在 $\mu - J$ 平面的相图包含一系列叶型区 (如图 1.12)。叶型区内 (小 J 区) 是 Mott—绝缘相, 叶型区的外部则是超流相。根据朗道连续相变理论, 超流相具有长程相位相干性, 序参量非零; 而 Mott—绝缘相没有长程相位相干性, 序参量为零。

在 Jaksch 提出光晶格中玻色—爱因斯坦凝聚体的量子相变的理论后不久, 2002 年 Greiner 的实验完美地证实了这个预言 [29]。在他们的实验中, 形成 BEC 的 ^{87}Rb 原子被装载到六束激光 (波长为 852 nm) 形成的三维简立方晶格中, 凝聚体分布在约 15 万个晶格点上 (每个方向大约 65 个格点), 每个格点的平均原子占据数为 $1 \sim 3$ 。为了确定不同格点的原子是否具有相干性, 他们关掉了囚禁势允许原子波函数自由膨胀, 相互干涉。图 1.13 是通过吸收成像法拍摄的干涉图样。

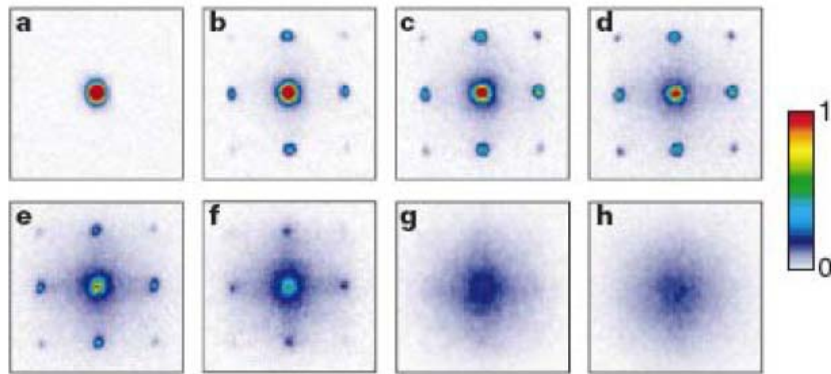


图 1.13 不同势阱深度下的干涉图样。(a) $0E_R$; (b) $3E_R$; (c) $7E_R$; (d) $10E_R$; (e) $13E_R$; (f) $14E_R$; (g) $16E_R$; (h) $22E_R$ 。

在超流区, 原子在整个晶格是非定域的, 因此有清晰的干涉图样。干涉图中尖锐的干涉最大直接反映了系统相位相干的程度。随着光晶格势深的增加, 干涉图样发生了显著地变化。势阱深度大约为 $13E_R$ 时, 干涉图样变得模糊, 直到 $22E_R$ 时干涉图样完全不可见 (这里 $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ 表示从激光束中吸收一个光子得到的能量, 称作反

冲能量 Recoil Energy, 作为能量的基本单位)。这正是系统从超流相到 Mott—绝缘相转变的标志。这时如果降低势阱深度, 系统返回到超流相, 干涉图样又很快清晰可辨了[29]。

Stoferle 小组则在实验上研究了一维[95]和三维[96]光晶格中囚禁的玻色—爱因斯坦凝聚体在不同区域的激发谱。一维情况下在超流相, 观察到宽的不同于波戈留波夫谱的连续激发, 这个连续激发谱可以认为是强相互作用的影响。在绝缘态观测到的则是离散谱。如图 1.14。

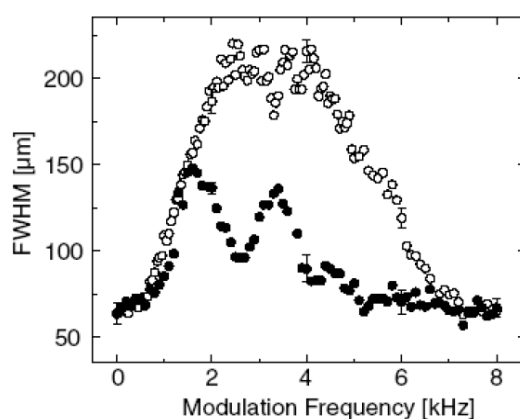


图 1.14 一维光晶格中超流（空心点）和 Mott—绝缘相（实心点）的激发谱。

U/J 分别对应 2.3 和 14 的情况。

前面讨论的都是不考虑自旋时光晶格中单分量超冷玻色原子的量子相变。Tsuchiya 等人研究了自旋为 1 的反铁磁相互作用的玻色原子在光晶格中从超流到 Mott—绝缘的量子相变[97], 他们利用平均场近似得到零温相图, 发现格点平均占据数是偶数的 Mott—绝缘相是自旋单态, 非常稳定; 而平均占据数为奇数的 Mott—绝缘相有一个原子不能形成单态, 因此格点自旋为 1。Svidzinsky 等人则进一步考虑了外部磁场对量子相变的影响[98]。自旋为 2 的超冷玻色原子在光晶格中的能谱和量子相变也已经由 Jin 和 Hou[99]研究过。另外, Pu 和 Zhang[100]研究了磁偶极相互作用引起的光晶格中玻色—爱因斯坦凝聚体的反铁磁相变和自发磁化等现象。总之, 光晶格中量子相变的研究已经从单分量超冷玻色原子延伸到双分量超冷玻色原子、旋量玻色—爱因斯坦凝聚体以及超冷玻色—费米混合物等等复杂的领域。当然, 对于光晶格和量子相变的实际应用仍在不断的探索中。

稀薄气体中玻色—爱因斯坦凝聚的实现被认为是 20 世纪末实验物理学最重大的成就之一。可以预期，超冷原子、玻色—爱因斯坦凝聚体和高度相干的原子激光束的发展与激光的问世一样将对科技和人类的生产和生活带来不可估量的深远影响。1997 年和 2001 年两次授予在这方面做出了杰出贡献的科学家以诺贝尔物理奖是当之无愧的。在这个全新而又充满活力的研究领域还有许多奥秘和惊奇等待我们去发现！

参考文献

- [1] S.N. Bose, *Z.Physil* (1924) 26, 178.
- [2] A. Einstein, *Sitzungsber, Kgl. Preuss, Akad.Wiss* (1924) 261, (1925) 3.
- [3] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Science* (1995) 269, 198.
- [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.* (1995) 75, 3969.
- [5] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 75, 1687.
- [6] D.G. Fried, T.C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S.C. Moss, D. Kleppner, and T.J. Greytak, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 3811.
- [7] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C.I. Westbrook, and A. Aspect, *Science* (2001) 292, 461.
- [8] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R.J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio, *Science* (2001) 294, 1320.
- [9] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.-C. Nagerl, and R. Grimm, *Science* (2001) 299, 232.
- [10] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki, and Y. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* (2003) 91, 040404.
- [11] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler and, T. Pau, *Phys. Rev. Lett.* (2005) 94, 160401.
- [12] V. Bagnato, D.E. Pritchard, and D. Kleppner, *Phys. Rev. A* (1987) 35, 4354.
- [13] D.S. Jin, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 420.
- [14] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N.J. van Druten, D.M. Kurn, D.S. Durfee, C.G. Townsend, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 988.
- [15] M. Edwards, P.A. Ruprecht, K. Burnett, R.J. Dodd, and C.W. Clark, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 1671.
- [16] S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 2360.

- [17] O.M. Maragó, S.A. Hopkins, J. Arlt, E. Hodby, G. Heckenblaikner, and C.J. Foot, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 84, 2056.
- [18] R. Onofrio, C. Raman, J.M. Vogels, J.R. Abo-Shaeer, A.P. Chikkatur, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 85, 2228.
- [19] G. Heckenblaikner, E. Hodby, S.A. Hopkins, O.M. Maragó, and C.J. Foot, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 88, 070406.
- [20] S. Inouye, A.P. Chikkatur, D.M. Stamper-Kurn, J. Stenger, D.E. Pritchard, and W. Ketterle, *Science* (1999) 285, 571.
- [21] M. Kozuma, Y. Suzuki, Y. Torii, T. Sugiura, T. Kuga, E.W. Hagley, and L. Deng, *Science* (1999) 286, 2309.
- [22] L. Deng, E.W. Hagley, J. Wen, M. Trippenbach, Y.B. Band, P.S. Julienne, J.E. Simsarian, K. Helmerson, S.L. Rolston, and M.D. Phillips, *Nature* (1999) 398, 218.
- [23] D.M. Stamper-Kurn, M.R. Andrews, A.P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 80, 2027.
- [24] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 742.
- [25] T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* (1998) 67, 1822.
- [26] C.K. Law, H. Pu, and N.P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 5257.
- [27] C.V. Ciobanu, S.K. Yip, and T.-L. Ho, *Phys. Rev. A* (2000) 61, 033607.
- [28] M. Koashi and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 84, 1066.
- [29] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hansch, and I. Bloch, *Nature (London)* (2002) 415, 39.
- [30] D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 3108.
- [31] G. Birkl, M. Gatzke, I.H. Deutsch, S.L. Rolston, and W.D. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 75, 2823.
- [32] M. Weidemüller, A. Hemmerich, A.G. Orłitz, T. Esslinger, and T.W. Hansch, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 75, 4583.
- [33] M. Ben Dahan, E. Peik, Y. Castin, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 76, 4508.
- [34] A.S. Rensen and K. Müller, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 76, 4508.

- [35] W.K. Hensinger, H. Haner, A. Browaeys, N.R. Heckenberg, K. Helmerson, C. McKenzie, G.J. Milburn, W.D. Phillips, S.L. Rolston, H. Rubinsztein-Dunlop, and B. Upcroft, *Nature* (2001) 412, 52.
- [36] 汪志成, 《热力学与统计物理》, 高等教育出版社 1993。
- [37] C.J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (1997).
- [38] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* (1999) 71, 463.
- [39] N. Bogliubov, *J. Phys. (Moscow)* (1947) 11, 23.
- [40] 张礼、葛墨林, 《量子力学前沿问题》, 清华大学出版社 1999。
- [41] H.T.C. Stoof, *Phys. Rev. A* (1994) 49, 3824.
- [42] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.-J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* (1997) 275, 31.
- [43] P.W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* (1966) 38, 298.
- [44] W. Hoston and L. You, *Phys. Rev. A* (1996) 53, 4254.
- [45] M. Naraschewski, H. Walls, A. Schenzle, J.I. Cirac, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* (1996) 54, 2185.
- [46] W.M. Liu, B. Wu, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 84, 2294.
- [47] M. Lewenstein and L. You, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 3489.
- [48] J. Javanainen and S.M. Yoo, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 76, 161.
- [49] Y. Castin and J. Dalibard, *Phys. Rev. A* (1997) 55, 4330.
- [50] J.I. Cirac, C.W. Gardiner, M. Naraschewski, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* (1996) 54, R3714.
- [51] J. Denschlag, J.E. Simsarian, D.L. Feder, C.W. Clark, L.A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E.W. Hagley, K. Helmerson, W.P. Reinhardt, S.L. Rolston, B.I. Schneider, and W.D. Phillips, *Science* (2000) 297, 97.
- [52] M.R. Mathews, B.P. Anderson, P.C. Haljan, D.S. Hall, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1999) 83, 2498.
- [53] K.W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 84, 806.

- [54] J.E. Williams and M.J. Holland, *Nature* (1999) 401, 568.
- [55] J.R. Abo-Shaeer, C. Raman, J.M. Vogels, and W. Ketterle, *Science* (2001) 292, 476.
- [56] K.W. Madison, F. Chevy, V. Bretin, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* (2001) 86, 4443.
- [57] J.R. Abo-Shaeer, C. Raman, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 88, 070409.
- [58] P. Rosenbusch, D.S. Petrov, S. Sinha, F. Chevy, V. Bretin, Y. Castin, G. Shlyapnikov, and J. Dalibard, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 88, 250403.
- [59] 韩殿君, *物理双月刊* (2005) 27, 384.
- [60] A. Migdall, J. Prodan, W. Phillips, T. Bergeman, and H. Metcalf, *Phys. Rev. Lett.* (1985) 54, 2596.
- [61] T. Bergeman, G. Erez, and H. Metcalf, *Phys. Rev. A* (1987) 35, 1535.
- [62] W. Petrich, M.H. Anderson, J.R. Ensher, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 74, 3352.
- [63] T. Esslinger, I. Bloch, and T.W. Hansch, *Phys. Rev. A* (1998) 54, R2664.
- [64] J. Reichel, W. Hansel, and T.W. Hansch, *Phys. Rev. Lett.* (1999) 83, 3398.
- [65] 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.* (1995) 75, 3969.
- [66] M.O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. Vandruten, D.M. Kurn, D.S. Durfee, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1996) 77, 416.
- [67] H. Feshbach, *Ann. Phys.* (1962) 19, 287.
- [68] J. Stenger, S. Inouye, M.R. Andrews, H.-J. Miesner, D.M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1999) 82, 2422.
- [69] S.L. Cornish, N.R. Claussen, J.L. Roberts, E.A. Cornell, and C.E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 85, 1795.
- [70] 王义遒, 《量子力学新进展》, (第三辑) 清华大学出版社 2003。
- [71] 曾谨言, 《量子力学》, (卷 I) 科学出版社 1990。
- [72] M.D. Barrett, J.A. Sauer, and M.S. Chapman, *Phys. Rev. Lett.* (2001) 87, 010404.
- [73] C. Chin, e-print cond-mat/0409489.
- [74] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, *J. opt. Soc. Am.* (1989) 2023.
- [75] C. Cohen-Tannoudji and W.D. Phillips, *Phys. Today* (1990) 33.

- [76] K.I. Petsas, A.B. Coates, and G. Grynberg, *Phys. Rev. A* (1994) 50, 5173.
- [77] A. Hemmerich and T.W. Hansch, *Phys. Rev. Lett.* (1993) 70, 410.
- [78] L. Guidoni, C. Triche, P. Verkerk, and G. Grynberg, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 79, 3363.
- [79] Min-Chul Cha, M.P.A. Fischer, S.M. Girvin, M. Wallin, and A.P. Young, *Phys. Rev. B* (1991) 44, 6883.
- [80] M.P.A. Fischer, G. Grinstein, S.M. Girvin, *Phys. Rev. Lett.* 64, 587 (1990); M.P.A. Fischer, *Phys. Rev. Lett.* (1990) 65, 923.
- [81] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press (2001).
- [82] D. van Oosten, P. van der Straten, and H.T.C. Stoof, *Phys. Rev. A* (2001) 63, 053601.
- [83] K. Sheshadri, H.R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T.V. Ramakrishnan, *Europhys. Lett.* (1993) 22, 257.
- [84] I.K. Freericks and H. Monien, *Europhys. Lett.* (1995) 26, 545.
- [85] N. Elstner and H. Monien, *Phys. Rev. B* (1999) 59, 12184.
- [86] K. Sengupta and N. Dupuis, *Phys. Rev. A* (2005) 71, 033629.
- [87] R. Roth and K. Burnett, *Phys. Rev. A* (2003) 67, 031602.
- [88] C. Schroll, F. Marquardt, and C. Bruder, *Phys. Rev. A* (2004) 70, 053609.
- [89] T. Kimura, S. Tsuchiya, and S. Kurihara, *Phys. Rev. Lett.* (2005) 94, 110403.
- [90] J.-J. Liang, J.-Q. Liang, and W.-M. Liu, *Phys. Rev. A* (2003) 68, 043605.
- [91] M.P.A. Fisher, P.B. Weichman, G. Grinstein, and D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* (1989) 40, 546.
- [92] T.D. Kühner and H. Monien, *Phys. Rev. B* (1998) 58, 14741.
- [93] N. Elstner and H. Monien, *Phys. Rev. B* (1999) 59, 12184.
- [94] S. Rapsch, U. Schollwöck, and W. Zwerger, *Europhys. Lett.* (1999) 46, 559.
- [95] T. Stoferle, H. Moritz, C. Schori, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* (2004) 92, 130403.
- [96] C. Schori, T. Stoferle, H. Moritz, M. Kohl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* (2004) 93, 240402.
- [97] S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kinmura, *Phys. Rev. A* (2004) 70, 043628.
- [98] A. A. Svidzinsky and S.T. Chui, *Phys. Rev. A* (2003) 68, 043612.

- [99] J.-M. Hou and M.-L. Ge, *Phys. Rev. A* (2003) 67, 063607; S. Jin, J.-M. Hou, B.-H. Xie, L.-J. Tian, and M.-L. Ge, *Phys. Rev. A* (2004) 70, 023605.
- [100] H. Pu, W. Zhang, and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* (2001) 87, 140405.

第二章 光晶格中自旋 1 超冷玻色气体的超流性

相互作用的量子流体展现了丰富多彩的物理特性，例如液氦的超流性和金属的超导性（也可以看成是电子“液体”的一种超流性）等。随着在碱金属原子蒸汽中玻色—爱因斯坦凝聚现象的实现，这种弱相互作用的多粒子系统就成为一个更加理想的研究超流性和宏观量子效应的模型。超流体有许多“超越”的性质：无粘滞性、无旋性、支持持续流和量子化涡旋等等。在这章中我们将对光晶格周期势中旋量 BEC 的超流性质及其可能的应用进行详细地研究。

第一节 自旋 1 的玻色—哈伯德模型

核自旋 $I = 3/2$ 的碱金属原子，如 ^{23}Na ， ^{39}K 和 ^{87}Rb 在低温下的行为类似于自旋 $F = 1$ 的玻色子。当用全光学手段使它们形成玻色—爱因斯坦凝聚体并装载到光晶格中，我们得到了相互作用的三分量模型，可以用下面二次量子化的哈密顿量描述 [1-8]：

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{lat}(\vec{r}) + V_T(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}) \\ & + \frac{c_0}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}) \\ & + \frac{c_2}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}) F_{\alpha\alpha'} \cdot F_{\beta\beta'} \hat{\Psi}_{\beta'}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (2.1)$$

其中 m 是单原子质量； $\hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r})$ 是处于超精细自旋态 $|F = 1, m_F = \alpha\rangle$ 的原子的场湮灭算符，指标 $\alpha, \beta, \alpha', \beta'$ 代表三个自旋组分 ($\alpha, \beta, \alpha', \beta' = -1, 0, 1$)。激光形成的光晶格势 $V_{lat}(\vec{r}) = V_0 (\sin^2 kr_1 + \sin^2 kr_2 + \sin^2 kr_3)$ 对每个自旋组分都有相同的形式，波矢 $k = 2\pi/\lambda$ ， λ 是激光的波长，则晶格常数 $d = \lambda/2$ 。 V_0 是可调节的势阱深度。 $V_T(\vec{r})$ 仍表示外加的缓慢变化的束缚势。 3×3 的自旋矩阵 F 表示三维自旋角动量算符， $F_{\alpha\beta}^x = (\delta_{\alpha, \beta-1} + \delta_{\alpha, \beta+1})/\sqrt{2}$ ， $F_{\alpha\beta}^y = i(\delta_{\alpha, \beta-1} - \delta_{\alpha, \beta+1})/\sqrt{2}$ 和 $F_{\alpha\beta}^z = \alpha\delta_{\alpha\beta}$ ，如 (1.48) 式。原子的两体碰撞相互作用特征分别由两个参数 $c_0 = 4\pi\hbar^2(2a_2 + a_0)/3m$ 及

$c_2 = 4\pi\hbar^2(a_2 - a_0)/3m$ 确定，这里 a_0 与 a_2 分别对应于两个原子碰撞后总角动量 $f = 0$ 与 $f = 2$ 通道的 s -波散射长度。对 ^{23}Na ，有 $a_2 > a_0$ ，则 $c_2 > 0$ ，原子间是反铁磁相互作用；而对 ^{87}Rb ，情况正好相反，有 $a_2 < a_0$ ，则 $c_2 < 0$ ，原子间是铁磁相互作用。在最低能带的瓦涅尔基中展开玻色场算符 $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})$ ：

$$\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) = \sum_i \hat{a}_{\alpha i} w(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.2)$$

其中 $w(\vec{r} - \vec{r}_i)$ 是第 i 个格点的瓦涅尔函数， $\hat{a}_{\alpha i}$ 表示第 i 个格点上 α -自旋组分的玻色湮灭算符。式 (2.2) 也表明不同自旋组分的原子可以用同样的空间波函数描述，这种情形适用于自旋对称相互作用远远大于自旋非对称相互作用，即 $|c_0| \gg |c_2|$ 的情况 [9]。利用式 (2.2)，并且只考虑最近邻格点间的相互作用，哈密顿量 (2.1) 约化得到自旋 1 的玻色—哈伯德模型 [7, 8]：

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha i}^\dagger \hat{a}_{\alpha j} + \sum_i \sum_{\alpha} \varepsilon_i \hat{a}_{\alpha i}^\dagger \hat{a}_{\alpha i} \\ & + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \sum_{\alpha, \beta} \hat{a}_{\alpha i}^\dagger \hat{a}_{\beta i}^\dagger \hat{a}_{\beta i} \hat{a}_{\alpha i} + \frac{1}{2} U_2 \sum_i \sum_{\alpha, \beta, \alpha', \beta'} \hat{a}_{\alpha i}^\dagger \hat{a}_{\beta i}^\dagger F_{\alpha\alpha'} F_{\beta\beta'} \hat{a}_{\beta' i} \hat{a}_{\alpha' i}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

模型中的第一项是自旋对称隧穿项，隧穿耦合的强弱由隧穿矩阵元

$$J = \int d^3\vec{r} w^*(\vec{r} - \vec{r}_i) (-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_{lat}(\vec{r})) w(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

表征；第二项给出了由外加缓变势引起的第 i 个格点的能量偏移，其中参数

$$\varepsilon_i = \int d^3\vec{r} V_T(\vec{r}) |w(\vec{r} - \vec{r}_i)|^2 \approx V_T(\vec{r}_i).$$

这里可以认为对于不同的格点它是一个常量 ε ；第三项和第四项则分别表示同一格点上原子间的两种碰撞相互作用—自旋对称碰撞与自旋非对称（交换）碰撞，它们的强弱分别由相互作用矩阵元

$$U_{0(2)} = c_{0(2)} \int d^3\vec{r} |w(\vec{r} - \vec{r}_i)|^4$$

表征，这是两种短程相互作用，分别由单参数 U_0 和 U_2 来唯一地决定，并且随着光晶格势阱深度的调节可以在很大的范围内连续地改变 [4]。

第二节 朗道超流理论

超流与玻色—爱因斯坦凝聚密切相关。液氦 (^4He) 在温度 2.17K 以下时, 能沿极细的毛细管 (管径 $\sim 0.1\mu\text{m}$) 流动而几乎不呈现任何粘滞性。这一现象首先由卡皮查 (Kapitza) 于 1937 年观察到[10], 称之为超流性, 也称作 λ -相变。随后 1938 年, F. London 指出: 超流可能具有氦原子的玻色—爱因斯坦凝聚特性[11]。同年 L. Tisza 提出二流体模型, 认为液氦 II 相 (超流相) 由正常流体和超流体两部分组成[12]; 朗道在 1941 年独立发展了二流体模型的定量描述, 指出元激发谱满足一定条件, 则流体可以无耗散地流动[13]。经过后人的不断发展, 目前普遍接受的观点是上述两种观点的综合, 即超流的性质由玻色—爱因斯坦凝聚体携带[14]。这里我们简述朗道超流理论, 作为进一步讨论问题的依据。

朗道根据相当一般的考虑, 导出了超流的临界速度[15]。首先考虑 $T=0\text{K}$ 的情形, 这时超流相全部为超流成分, 没有元激发。假定质量为 M 的超流体以宏观速度 \bar{v} 运动, 其动量和能量为

$$\bar{P} = M\bar{v}, E = \frac{1}{2}M\bar{v}^2 = \frac{P^2}{2M}. \quad (2.4)$$

由此, 能量和动量的任何变化必须满足关系

$$\delta E = \bar{v} \cdot \delta \bar{P}. \quad (2.5)$$

设想这一变化是由于超流体中产生了一个元激发引起的, 元激发的动量为 \bar{p} , 能量为 $\varepsilon(p)$ 。根据动量守恒和能量守恒, 元激发的动量和能量一定是靠消耗超流体宏观流动的动量和能量而来, 即有

$$\bar{p} = -\delta \bar{P}, \varepsilon(p) = -\delta E, \quad (2.6)$$

于是式 (2.5) 可改写为

$$\varepsilon(p) = \bar{v} \cdot \bar{p} \leq v p, \quad (2.7)$$

或

$$v \geq \frac{\varepsilon(p)}{p}. \quad (2.8)$$

上式表明，要产生元激发，超流体的宏观速度必须大于 $\varepsilon(p)/p$ 值；反之，如果 $v < \varepsilon(p)/p$ ，则由于流动而产生元激发是不可能的，流体将继续保持超流。由此，朗道得出下列超流判据

$$v < \left(\frac{\varepsilon(p)}{p} \right)_{\min} \equiv v_c, \quad (2.9)$$

其中 v_c 称为超流的临界速度。若 $T \neq 0K$ ，上面的分析仍然有效，不过这时超流体中原来存在元激发，上式代表液体中不再由于流动而产生新的元激发的条件。根据朗道判据，自由粒子的能谱 $\varepsilon(p) = p^2/2m$ 显然不可能有超流，因为其临界速度 $v_c = (\varepsilon/p)_{\min} = 0$ 。总之，在超流中存在一个非零的临界速度 v_c ，当流体速度超过它时，在流体中能够产生导致能量转移的激发，因而产生粘滞性，即超流状态被破坏。对于弱相互作用的碱金属原子气体 BEC，已有实验证实其低能元激发谱是声子谱 [16]，这说明它与液氦超流相类似，也存在一个破坏超流性的临界速度。

第三节 波戈留波夫变换方法和能谱

朗道超流理论是一种唯象理论，要建立一套完整的研究方法，必须从系统的哈密顿量出发，从微观上根据第一原理来确定元激发能谱。从第一章的论述中知道，通过控制光晶格势阱的深度，可以实现 BEC 从超流态到 Mott—绝缘态的量子相变，因此我们设定相应的参数范围使自旋 1 的旋量 BEC 在光晶格中处于其超流基态。下面应用波戈留波夫变换方法来对角化哈密顿量 (2.3)，得到系统的元激发能谱，进而研究超流相的性质。为此，首先用波矢空间算符 $\hat{a}_{k,\alpha}$ 代替格点空间算符 \hat{a}_{ai} ：

$$\begin{cases} \hat{a}_{ai} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k \hat{a}_{k,\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}, \\ \hat{a}_{ai}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k \hat{a}_{k,\alpha}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}, \end{cases} \quad (2.10)$$

其中 N_s 表示格点数目； \vec{r}_i 是第 i 个格点的坐标；波矢 \vec{k} 在第一布里渊区内取值。将式 (2.10) 代入哈密顿量 (2.3)，在紧束缚近似下，若考虑光晶格为简立方晶格，则可以得到

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \sum_{\alpha} \sum_k \varepsilon(k) \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha} + \hat{H}_{\text{int}} \\
 \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{U_0}{2N_s} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,p,k',p'} \delta_{k+p,k'+p} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{p,\beta}^{\dagger} \hat{a}_{p',\beta} \hat{a}_{k',\alpha} \\
 &+ \frac{U_2}{2N_s} \sum_{\alpha,\beta,\alpha',\beta'} \sum_{k,p,k',p'} \delta_{k+p,k'+p} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{p,\beta}^{\dagger} F_{\alpha\alpha'} F_{\beta\beta'} \hat{a}_{p',\beta'} \hat{a}_{k',\alpha'},
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

其中 $\varepsilon(k) = \varepsilon - Jz \cos(kd)$ ， z 代表每个格点的最近邻原子数。由于凝聚在零动量态上的原子数目远远大于一，即

$$\sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha 0}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha 0} = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha 0}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha 0} + 1 \approx \sum_{\alpha} N_{\alpha 0} = M_0 \gg 1, \tag{2.12}$$

其中 $N_{\alpha 0}$ 表示凝聚在零动量态上 α -自旋组分的原子数目； M_0 则表示凝聚的原子总数。因此算符 $\hat{a}_{\alpha 0}^{\dagger}$ 和 $\hat{a}_{\alpha 0}$ 可以用 c 数 $\sqrt{N_{\alpha 0}}$ 来代替。又

$$N_{\alpha 0} = N_{\alpha} - \sum_{k \neq 0} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha}, \tag{2.13}$$

这里 N_{α} 表示 α -自旋组分的原子总数。对相互作用哈密顿量，当 $k \neq 0$ 时，算符 $\hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger}$ ， $\hat{a}_{k,\alpha}$ 是相应的零动量算符的微小偏移，所以，四个玻色子算符的乘积可近似作二次型，举两个典型例子来说明：

$$\hat{a}_{0,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{0,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{0,\alpha} \hat{a}_{0,\alpha} = N_{\alpha 0}^2 \approx N_{\alpha}^2 - 2N_{\alpha} \sum_{k \neq 0} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha}, \tag{2.14}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha,\beta,k \neq 0} \hat{a}_{0,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\beta}^{\dagger} \hat{a}_{k,\beta} \hat{a}_{0,\alpha} &= \sum_{\alpha,\beta,k \neq 0} \hat{a}_{k,\beta}^{\dagger} \hat{a}_{k,\beta} N_{\alpha 0} = \left[\sum_{\alpha} \left(N_{\alpha} - \sum_{k \neq 0} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha} \right) \right] \sum_{\beta,k \neq 0} \hat{a}_{k,\beta}^{\dagger} \hat{a}_{k,\beta} \\
 &\approx N \sum_{\alpha,k \neq 0} \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha},
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

其中 $N = \sum_{\alpha} N_{\alpha}$ 表示原子总数。通过如式 (2.14) 和式 (2.15) 的近似，总哈密顿量

(2.11) 可写作

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \frac{U_0}{2N_s} N^2 + N(\varepsilon - zJ) + \frac{U_2}{2N_s} \left[(N_1 - N_{-1})^2 + 2N_0 (\sqrt{N_1} + \sqrt{N_{-1}})^2 \right] \\
 & + \sum_{k \neq 0} \left\{ \sum_{\alpha} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\alpha} + \frac{U_0}{2N_s} \sum_{\alpha, \beta} \sqrt{N_{\alpha 0}} \sqrt{N_{\beta 0}} (\hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{-k,\beta}^{\dagger} + \hat{a}_{k,\alpha} \hat{a}_{-k,\beta} + 2\hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{k,\beta}) \right. \\
 & + \frac{U_2}{2N_s} \left[2N_0 (\hat{a}_{k,1}^{\dagger} \hat{a}_{-k,-1}^{\dagger} + \hat{a}_{-k,1} \hat{a}_{k,-1}) + \sum_{\gamma=\pm 1} N_{\gamma} (\hat{a}_{k,\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{-k,\gamma}^{\dagger} + \hat{a}_{k,\gamma} \hat{a}_{-k,\gamma} + 2\hat{a}_{k,\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{k,\gamma}) \right. \\
 & + 2 \sum_{\gamma=\pm 1} \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} (\hat{a}_{k,\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{-k,0}^{\dagger} + \hat{a}_{-k,\gamma} \hat{a}_{k,0} + \hat{a}_{k,\gamma} \hat{a}_{k,0} + \hat{a}_{k,0} \hat{a}_{k,\gamma} + 2\hat{a}_{k,0}^{\dagger} \hat{a}_{k,-\gamma} + 2\hat{a}_{k,-\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{k,0}) \\
 & + 2\sqrt{N_{10}} \sqrt{N_{-10}} (\hat{a}_{k,0}^{\dagger} \hat{a}_{-k,0}^{\dagger} - \hat{a}_{k,1} \hat{a}_{-k,-1} + \hat{a}_{k,0} \hat{a}_{-k,0} - \hat{a}_{k,-1} \hat{a}_{-k,1} - \hat{a}_{k,1} \hat{a}_{k,-1} - \hat{a}_{k,-1} \hat{a}_{k,1}) \\
 & \left. \left. - 2\hat{a}_{k,0}^{\dagger} \hat{a}_{k,0} \right) \right\}. \tag{2.16}
 \end{aligned}$$

对任何结构的光晶格来说， U_2/U_0 与 c_2/c_0 总是成正比的，所以 U_2/U_0 很小，也就是说，相互作用中的自旋非对称部分比自旋对称部分要小得多。

哈密顿量 (2.16) 是算符 $\hat{a}_{k,\alpha}$ 和 $\hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger}$ 的二次式，可通过下面的线性变换来对角化：

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_{k,\alpha} &= u_{k,\alpha} \hat{b}_{k,\alpha} - v_{k,\alpha} \hat{b}_{-k,\alpha}^{\dagger}, \\
 \hat{a}_{k,\alpha}^{\dagger} &= u_{k,\alpha} \hat{b}_{k,\alpha}^{\dagger} - v_{k,\alpha} \hat{b}_{-k,\alpha}, \tag{2.17}
 \end{aligned}$$

这就是著名的波戈留波夫变换。这个变换引入了一套新的算符， $\hat{b}_{k,\alpha}$ 和 $\hat{b}_{k,\alpha}^{\dagger}$ ，若使这套算符同样满足玻色对易关系 $[\hat{b}_{k,\alpha}, \hat{b}_{k',\beta}^{\dagger}] = \delta_{k,k'} \delta_{\alpha,\beta}$ ，我们可得到参数 $u_{k,\alpha}$ 和 $v_{k,\alpha}$ 满足的关系式

$$u_{k,\alpha}^2 - v_{k,\alpha}^2 = 1. \tag{2.18}$$

辅助参数 $u_{k,\alpha}$ 和 $v_{k,\alpha}$ 的引入是为了使哈密顿量中形如 $\hat{b}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{-k,\alpha}^{\dagger}$ 和 $\hat{b}_{k,\alpha} \hat{b}_{-k,\alpha}$ 的非对角项的系数为零（详细过程请参看附录 C）。利用波戈留波夫变换 (2.17)，我们最终得到了对角化的哈密顿量：

$$\hat{H} = E_c + \sum_{k \neq 0} E_{k,\alpha} \hat{b}_{k,\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{k,\alpha} \tag{2.19}$$

其中

$$E_c = \frac{1}{2}U_0 N n^2 + N(\varepsilon - zJ) + \frac{U_2}{2N_s} \left[(N_1 - N_{-1})^2 + 2N_0 (\sqrt{N_1} + \sqrt{N_{-1}})^2 \right];$$

准粒子能谱 $E_{k,\alpha,\alpha}$ ($\alpha = 0, \pm 1$) 为

$$E_{k,\gamma,\gamma} = \sqrt{\varepsilon_k (\bar{\varepsilon}_k + 2U_0 n_\gamma + 2U_2 n_\gamma)}, \quad (2.20)$$

$$E_{k,0,0} = \sqrt{\varepsilon_k (\bar{\varepsilon}_k + 2U_0 n_0 + 4U_2 \sqrt{n_{-1}} \sqrt{n_1})}, \quad (2.21)$$

这里 $\gamma = \pm 1$, $\bar{\varepsilon}_k$ ($k \neq 0$) = $zJ [1 - \cos(kd)]$ 。符号 $n_\alpha = N_\alpha / N_s$ 表示每个格点上 α -自旋组分的平均原子数。在文献[4]的实验中每个格点上的平均原子数目为1-3个。

第四节 超流临界速度

能谱 (2.20) 和 (2.21) 的形式在超流体中是很典型的。为此, 来看当 $k \rightarrow 0$ 的极限情况下能谱 $E_{k,\alpha,\alpha}$ 的色散关系

$$E_{k,\gamma,\gamma} \sim [zJd^2 (U_0 + U_2) n_\gamma]^{1/2} k, \quad (2.22)$$

$$E_{k,0,0} \sim [zJd^2 (U_0 n_0 + 2U_2 \sqrt{n_{-1}} \sqrt{n_1})]^{1/2} k. \quad (2.23)$$

激发谱 $E_{k,\alpha,\alpha}$ 与波矢 k 的线性关系正是超流的特性, 从色散关系也可得到超流的临界速度

$$v_{s,\gamma} = \left(\frac{\partial E_{k,\gamma,\gamma}}{\partial k} \right)_{k \rightarrow 0} = \frac{1}{\hbar} [zJd^2 (U_0 + U_2) n_\gamma]^{1/2}, \quad (2.24)$$

$$v_{s,0} = \left(\frac{\partial E_{k,0,0}}{\partial k} \right)_{k \rightarrow 0} = \frac{1}{\hbar} [zJd^2 (U_0 n_0 + 2U_2 \sqrt{n_{-1}} \sqrt{n_1})]^{1/2}, \quad (2.25)$$

其中 $\frac{1}{\hbar}$ 是量纲修正。当 $U_2 = 0$ 时, 上式可简化为不考虑自旋的情况下超流临界速度的表达式, 如文献[6]。临界速度不为零是超流相的朗道判据。从式(2.24)和式(2.25)可以看出, 超流临界速度的值由 J 和 $U_{0(2)}$ 决定, 而这三个参数本质上又是由光晶格势来决定的。这样 J 和 $U_{0(2)}$ 的值可通过调节激光参数来控制。由于自旋非对称相互作用参数 U_2 比自旋对称相互作用参数 U_0 小一到两个数量级, 这样就可以保证, 对于反铁磁相互作用 ($U_2 > 0$) 和铁磁相互作用 ($U_2 < 0$), 都有临界速度 $v_{s,\alpha}$ ($\alpha = 0, \pm 1$) 不为

零成立。

美国 W. Ketterle 的研究小组首先在实验上给出了单分量钠原子 BEC 中存在临界速度的证据及临界速度的数量级 [17, 18]。他们用蓝失谐的激光束搅动 BEC，发现只有当搅动速度超过某一临界值时才会有耗散产生。耗散速率的测量有两种办法：一是通过测量加热造成的凝聚体的贫化来看（图 2.1）；二是通过测量移动的激光束前后两个方向上凝聚体的密度分布的不对称性来看，这种不对称性反映在两个方向上压力的不同（图 2.2）。对实验数据的物理机制解释为：蓝失谐的激光束相当于宏观的物体，如果它的运动速度超过临界值，就会使得在它的运动方向上局部的流体速度超过声速，产生涡旋对激发，造成耗散。

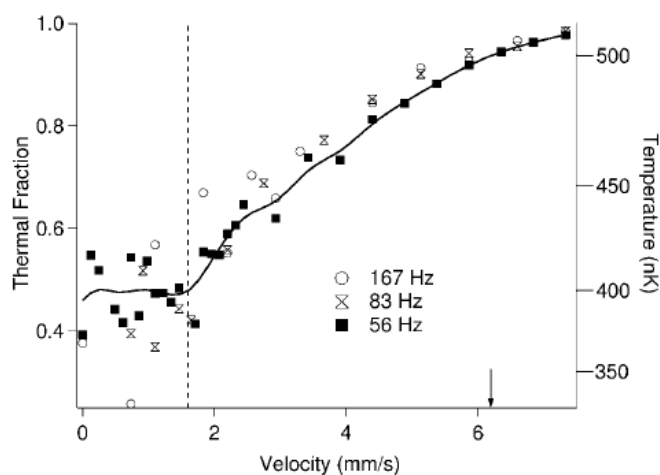


图 2.1 临界速度存在的证据。虚线将低耗散区与高耗散区分隔开来，

右面的纵轴表明系统的温度 $T = (1 - N_0/N)^{1/3} T_c$ 。

意大利 M.P. Tosi 小组讨论的则是铷原子 BEC 在一维光晶格中的运动 [19]。这里的光晶格势阱较浅，BEC 的运动可以直观地看成是流体在粗糙的表面流动。他们的实验给出了两个临界值，即当 BEC 的运动速度超过下临界值 $v_{c,\min}$ 时开始有耗散产生，但体系中还有凝聚的部分存在，而当 BEC 的运动速度超过上临界速度值 $v_{c,\max}$ 时，其超流性就完全没有了，凝聚部分的比例为零（图 2.3）。他们的数值结果同时显示出起作用的耗散机制是轴向声子激发，激发它的临界速度与凝聚体的密度分布有关。

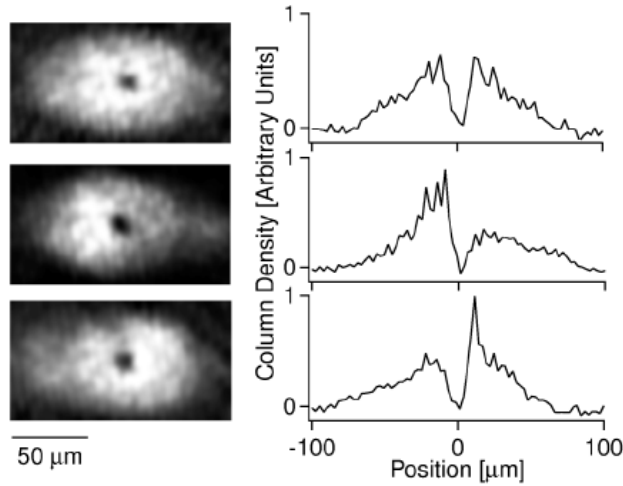


图 2.2 移动激光束使凝聚体产生的压力差。激光束的运动状态分别为：静止（上），向左移动（中），向右移动（下）。激光束的移动速度为 3.0 mm/s.

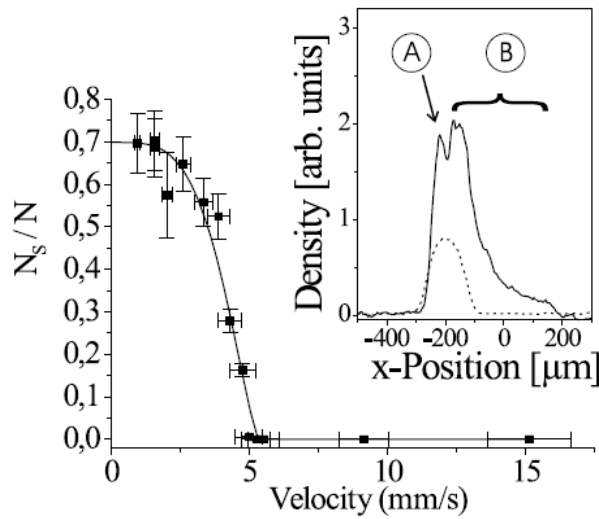


图 2.3 凝聚原子分数。插图为体系的密度分布，A 为超流部分。

$v_{c,\min}$ 对应于在密度低的地方开始有声子激发，而 $v_{c,\max}$ 对应于在凝聚体中心密度最大处也有声子激发。

下面我们根据式 (2.24) 和式 (2.25) 来估算超流临界速度的值。采用文献[20]中的典型实验数据，实验使用的三束垂直激光波长为 $\lambda = 985\text{nm}$ ； ^{23}Na 原子的 s -散射长度分别为 $a_0 = (46 \pm 5)a_B$ 和 $a_2 = (52 \pm 5)a_B$ ，其中 a_B 是玻尔半径，则相应的

$U_2/U_0 = 0.04$ 。波戈留波夫变换方法的适用条件是 $U_{0(2)} \ll J$ ($U_{0(2)}/J \ll 0.1$)，当光晶格势的势垒高度在 $0 \sim 3E_R$ 范围内变化时，这个条件得到满足，其中 E_R 是反冲能量。根据实验数据及上述分析，最终可估算得到超流临界速度的量级为 mm/s，这与文献 [17-20] 中实验值的数量级范围是一致的。

式 (2.24) 和式 (2.25) 还表明，超流的临界速度 $v_{s,\alpha}$ 是原子数密度的函数，对三个自旋组分来说是不同的。因此，在实验上超流的临界速度可通过对原子布居数的探测而得到。而且，超流临界速度与自旋组分的依赖关系意味着在光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体会有组分分离的现象出现。实验上组分分离现象在双组分玻色—爱因斯坦凝聚体中已得到观测 [21]，那么对于旋量玻色—爱因斯坦凝聚体，若可以控制混合体的时间演化，最终就可观测到三组分的相对运动。特别地，假设自旋极化原子组成的凝聚体，初始 $t=0$ 时刻，所有原子均处于 $\alpha=0$ 的超精细自旋态，有 $|\psi(0)\rangle = |0, N, 0\rangle$ 。一对处于 $\alpha=0$ 自旋态的原子可以被分别激发到 $\alpha=\pm 1$ 的自旋态。这样经过一段时间 t_c ， $\alpha=0$ 组分的原子数目变得稳定，为 $N_0(t_c) = N/2$ [9]； $\alpha=\pm 1$ 组分的原子数目相等，都为 $N_0(t_c)$ 的一半，即

$$N_{-1}(t_c) = N_1(t_c) = N_0(t_c)/2 \approx N/4.$$

这时， $\alpha=\pm 1$ 组分的超流临界速度 ($v_{s,-1}$) 与 ($v_{s,1}$) 相同，与 $\alpha=0$ 组分的超流临界速度 ($v_{s,0}$) 不同。在这种情况下，三者间存在简单的数学关系 $v_{s,-1} = v_{s,1} = v_{s,0}/\sqrt{2}$ ，因此， $\alpha=0$ 组分的原子就可以从混合凝聚体中分离出来。

第五节 小结

在这一章中，我们利用波戈留波夫变换方法推导出在光晶格中自旋 1 的超冷玻色气体的元激发能谱，从朗道超流判据的观点来看，这样的能谱结构对超流来说是很典型的。进而，从超流能谱出发研究了超流相的性质，得到超流临界速度的表达式，结果表明超流的临界速度是与自旋组分相关的，可通过调节形成光晶格的激光来操控，并且临界速度的理论值与实验观测值数量级是一致的。最后我们讨论了实验探测超流相及光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体组分分离的可能性。

参考文献

- [1] T.-L. Ho, Phys. Rev. Lett. (1998) 81, 742.
- [2] T. Ohmi and K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. (1998) 67, 1822.
- [3] D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. (1998) 81, 3108.
- [4] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hansch, and I. Bloch, Nature (London) (2002) 415, 39.
- [5] D. van Oosten, P. van der Straten, and H.T.C. Stoof, Phys. Rev. A (2001) 63, 053601.
- [6] J.-J. Liang, J.-Q. Liang, and W.-M. Liu, Phys. Rev. A (2003) 68, 043605.
- [7] S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kinmura, Phys. Rev. A (2004) 70, 043628.
- [8] A. A. Svidzinsky and S.T. Chui, Phys. Rev. A (2003) 68, 043612.
- [9] C.K. Law, H. Pu, and N.P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. (1998) 81, 5257.
- [10] R.Ya. Kapitza, Nature (1937) 141, 74.
- [11] F. London, Phys. Rev. (1938) 54, 947.
- [12] L. Tisza, Nature (1938) 171, 913; J. Phys. et Radium, (8) 1, (1940) 164, 350.
- [13] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics (Part 2)* New York: Pergamon Press, 85~93, 1980.
- [14] A.J. Leggett, Phys. Rev. Mod. (1999) 71, 318.
- [15] 《量子统计物理学》
- [16] D.M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A.P. Chikkatur, S. Inouye, J. Stenger, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (1998) 81, 2194.
- [17] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D.S. Durfee, C.E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (1999) 83, 2502.
- [18] R. Onofrio, C. Raman, J.M. Vogels, J.R. Abo-Shaer, A.P. Chikkatur, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (2000) 85, 2228.
- [19] S. Burger, F.S. Cataliotti, C. Fort, F. Minardi, M. Inguscio, M.L. Chiofalo and M.P. Tosi, Phys. Rev. Lett. (2001) 86, 4447.
- [20] A. Imambekov, M. Lukin, and E. Demler, Phys. Rev. A (2003) 68, 063602.

- [21] D.S. Hall, M.R. Matthews, J.R. Ensher, C. E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 1539.

第三章 偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的动力学

第一节 磁偶极—偶极相互作用和偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体模型

磁偶极—偶极相互作用来源于原子的磁偶极矩[1, 2], 而原子的磁偶极矩 $\bar{\mu}_F$ 与原子的总角动量 \bar{F} 有关, $\bar{\mu}_F = -g_F \mu_B \bar{F}$, 其中 g_F 是朗德(Landé) g 因子; μ_B 是玻尔(Bohr) 磁子; \bar{F} 代表角动量算符。所以如果考虑原子自旋(不考虑原子的轨道角动量, \bar{F} 则表示自旋角动量算符), 很自然就应该考虑磁偶极—偶极相互作用对体系的影响。一般局域在 \bar{r} 和 \bar{r}' 处的磁矩分别为 $\bar{\mu}$ 和 $\bar{\mu}'$ 的两原子间的磁偶极—偶极相互作用的形式为:

$$V(\bar{r} - \bar{r}') = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\bar{\mu}_1(\bar{r}) \cdot \bar{\mu}_2(\bar{r}') - 3\bar{\mu}_1(\bar{r}) \cdot \bar{u} \bar{\mu}_2(\bar{r}') \cdot \bar{u}}{|\bar{r} - \bar{r}'|^3}, \quad (3.1)$$

其中单位矢量 $\bar{u} = (\bar{r} - \bar{r}')/|\bar{r} - \bar{r}'|$, μ_0 是真空磁导率。从表达式(3.1)式也可以看出磁偶极—偶极相互作用具有长程性和矢量性, 这种各向异性的相互作用与用 s -波散射长度表征的短程接触相互作用在本质上有很大不同, 因此它将极大地丰富旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的性质。考虑了磁偶极—偶极相互作用的旋量 BEC 称作偶极旋量 BEC [3]。近来的理论研究表明磁偶极—偶极相互作用极大地改变了单势阱中标量玻色—爱因斯坦凝聚体的激发谱[4-7], 影响了其稳定性[1-2][8-9], 并使其产生了各种新的量子相[3][10]。另一类研究则关注磁偶极—偶极相互作用对光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的自旋和磁特性的影响[11-13], 这些文献主要考虑的是不同晶格之间的原子与原子的磁偶极—偶极相互作用和光诱导的偶极—偶极相互作用引起的晶格与晶格之间的关联耦合效应。

对于大多数实现了玻色—爱因斯坦凝聚的碱金属元素来说, 其原子磁矩约为 $1\mu_B$ (玻尔磁子), 相应的磁偶极—偶极相互作用与短程接触相互作用相比, 几乎可以忽略。而最近德国 Stuttgart 的研究小组报道了过渡金属元素 ^{52}Cr 的 BEC 的实验实现[14], 为这种长程相互作用的研究开辟了广阔的前景。铬原子 ^{52}Cr 有 6 个价电子

($[Cr]3d^5 4s^1$)，没有核自旋，因此它的总自旋为 3，并且磁矩约为 $6\mu_B$ 。由于磁偶极—偶极相互作用与原子磁矩的平方成正比，所以铬的 BEC 中磁偶极—偶极相互作用就是碱金属 BEC 中的 36 倍。因此，在偶极旋量 BEC 中人们不仅可以利用 Feshbach 共振技术调节短程接触相互作用[15]，而且可以通过旋转原子偶极子的办法来改变其中的磁偶极—偶极相互作用[16]，甚至可以将前者调节至零，突出后者对凝聚体的影响，这在实验中也已有报道[17]。

考虑 N 个自旋 $F=1$ 的玻色子组成的偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体模型[3]，哈密顿量 \hat{H}_{tot} 包含两部分，第一部分是旋量 BEC 的哈密顿量 \hat{H}_{sp} ，第二部分表示磁偶极—偶极相互作用哈密顿量 \hat{H}_{dd} ，二次量子化形式分别为：

$$\hat{H}_{tot} = \hat{H}_{sp} + \hat{H}_{dd}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{sp} = & \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext}(\bar{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) + \frac{c_0}{2} \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) \\ & + \frac{c_2}{2} \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}) \bar{F}_{\alpha\alpha'} \cdot \bar{F}_{\beta\beta'} \hat{\Psi}_{\beta'}(\bar{r}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\bar{r}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{dd} = & \frac{c_d}{2} \int d\bar{r} \int d\bar{r}' \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|^3} \left[\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}') \bar{F}_{\alpha\alpha'} \cdot \bar{F}_{\beta\beta'} \hat{\Psi}_{\beta'}(\bar{r}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\bar{r}') \right. \\ & \left. - 3 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}') (\bar{F}_{\alpha\alpha'} \cdot \bar{u}) (\bar{F}_{\beta\beta'} \cdot \bar{u}) \hat{\Psi}_{\beta'}(\bar{r}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\bar{r}') \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

其中 $\hat{\Psi}_\alpha(\bar{r})$ ($\alpha=0, \pm 1$) 代表处在超精细自旋态 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$ 的原子的场湮灭算符。单原子的超精细自旋算符 \bar{F} 可用自旋 1 矩阵表示， m 是原子质量。式 (3.2) 和式 (3.3) 中重复指标求和。外束缚势 $V_{ext}(\bar{r})$ 是远离共振的光偶极阱，对三个自旋组分都是相同的。两系数 $c_0 = 4\pi\hbar^2(a_0 + 2a_2)/3m$ 和 $c_2 = 4\pi\hbar^2(a_2 - a_0)/3m$ 分别代表密度—密度碰撞相互作用和自旋—自旋碰撞相互作用， a_f ($f=0, 2$) 是两个自旋 1 的原子碰撞形成的总自旋为 f 的对称轨道的 s -波散射长度。磁偶极—偶极相互作用参数 $c_d = \mu_0 \mu_B^2 g_F^2 / 4\pi$ ，其中 g_F 是朗德 g 因子， μ_B 是玻尔磁子。 $\bar{u} = (\bar{r} - \bar{r}') / |\bar{r} - \bar{r}'|$ 是单位矢量。对于已经在实验上获得的旋量 BEC (^{23}Na 和 ^{87}Rb)，总有 $|c_2| \ll c_0$ 。

若将量子化轴 z 选作凝聚体的对称轴（绝大多数实验情况都如此），那么 \hat{H}_{dd} 可以如文献[3]进行简化。采用单模近似，即 $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \approx \phi(\vec{r})\hat{a}_\alpha$ ，其中 $\phi(\vec{r})$ 表示与自旋无关的凝聚体空间波函数， \hat{a}_α 是磁量子数 $m_F = \alpha$ 的自旋组分的湮灭算符，则总哈密顿量 \hat{H}_{tot} 化简作（略去不重要的常数项）：

$$\begin{aligned} \hat{H}_{tot} = \hat{H}_{sp} + \hat{H}_{dd} = & \varepsilon \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} + U_0 \sum_{\alpha, \beta} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \hat{a}_{\alpha} \\ & + U_2 \left(\hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_{-1}^{\dagger} \hat{a}_{-1}^{\dagger} \hat{a}_{-1} \hat{a}_{-1} - 2 \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_{-1}^{\dagger} \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} + 2 \hat{a}_1^{\dagger} \hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_1 \hat{a}_0 \right. \\ & \left. + 2 \hat{a}_{-1}^{\dagger} \hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_{-1} \hat{a}_0 + 2 \hat{a}_0 \hat{a}_0 \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} + 2 \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} \hat{a}_0 \hat{a}_0 \right) + U_d \left(2 \hat{a}_1 \hat{a}_1 \hat{a}_1 \hat{a}_1 \right. \\ & \left. + 2 \hat{a}_{-1} \hat{a}_{-1} \hat{a}_{-1} \hat{a}_{-1} - 4 \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} - 2 \hat{a}_1 \hat{a}_0 \hat{a}_1 \hat{a}_0 - 2 \hat{a}_{-1} \hat{a}_0 \hat{a}_{-1} \hat{a}_0 \right. \\ & \left. - 2 \hat{a}_0 \hat{a}_0 \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} - 2 \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_{-1} \hat{a}_{-1} - 2 \hat{a}_0 \hat{a}_0 \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

其中 $\varepsilon = \int d\vec{r} \phi^*(\vec{r}) [-\nabla^2 / 2m + V_{ext}(\vec{r})] \phi(\vec{r})$ ，对三个自旋组分取相同的值；

$U_{0,2} = (c_{0,2}/2) \int |\phi(\vec{r})|^4 d\vec{r}$ 表示短程碰撞相互作用；

$U_d = (c_d/4) \iint d\vec{r} d\vec{r}' |\phi(\vec{r})|^2 |\phi(\vec{r}')|^2 (1 - 3\cos^2 \theta_e) / |\vec{r} - \vec{r}'|^3$ 则表示磁偶极—偶极相互作用， θ_e 是矢量 $(\vec{r} - \vec{r}')$ 的极角。

这里要强调的是 \hat{H}_{sp} 具有自旋旋转不变性，也就是说，在自旋空间它具有 $SO(3)$ 对称性[18]。磁偶极—偶极相互作用的存在破坏了这种对称性，成为 $SO(2)$ 对称性。这意味着， \hat{H}_{tot} 在自旋空间只具有轴对称性，对称轴正是量子化轴 z 。所以从对称性的角度来说，磁偶极—偶极相互作用对系统动力学的影响与外磁场的影响是相同的。

第二节 宏观量子自俘获现象

玻色—爱因斯坦凝聚体作为可以用宏观相位相干波函数描述的体系，其中必然存在宏观量子现象[19]。用一束远失谐的激光使一个磁谐振子势从中一分为二，形成磁双势阱，这样囚禁其中的凝聚体分成两部分，适当调整两阱中间的势垒高度就

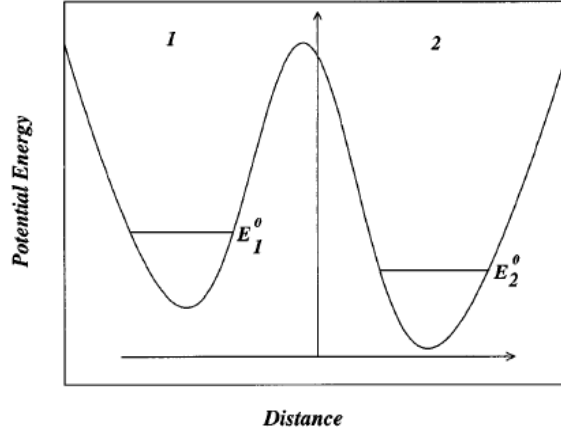


图 3.1 双势阱中两隧穿耦合的 BEC 模型, $N_{1,2}$ 和 $E_{1,2}^0$ 分别代表两势阱中的粒子数和零点能。

形成了两弱连接的 BEC 系统，如图 3.1。这个模型与超导约瑟夫森（Josephson）结非常类似，都是由两个中间被隔开的超流体构成的系统，所以也称为玻色约瑟夫森结（简称 BJJ）。双势阱模型是一个非常基本的简单物理模型，是研究量子隧穿和量子相干现象的典型结构。早在 1997 年 A. Smerzi 等人就对双势阱模型中的相干原子隧穿进行了研究，在理论上预言了一种非常著名的非线性现象——宏观量子自俘获（self-trapping）现象[20, 21]；直到最近这一现象在双势阱[22]和光晶格[23]中有了实验观测。自俘获现象是指在隧穿过程中由于原子间的非线性相互作用，使对称双势阱中演化的 BEC 呈现高度的不对称分布，两势阱间的原子布居数差保持其初始值，绝大多数原子好像被其中的一个阱俘获。将体系的波函数看成是分别描述两个势阱中凝聚体的波函数的叠加，并且认为每个阱中波函数随时间的演化和随位置的变化是可分离的变量，即

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_1(t)\Phi_1(\vec{r}) + \Psi_2(t)\Phi_2(\vec{r}),$$

则双势阱模型可以用两模 GP 方程来描述：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= (E_1^0 + U_1 N_1) \Psi_1 - K \Psi_2, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= (E_2^0 + U_2 N_2) \Psi_2 - K \Psi_1, \end{aligned} \quad (3.5)$$

其中 K 是隧穿耦合矩阵元[20]，波函数的时间演化部分可以写成振幅与相位分离的形式 $\Psi_{1,2}(t) = \sqrt{N_{1,2}(t)} e^{i\theta_{1,2}(t)}$ ， $N_{1,2}$ 和 $\theta_{1,2}$ 分别表示势阱 1 和 2 的粒子数与相位。引入

一对共轭变量，布居数差分数 $z \equiv \frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2}$ 与相对相位 $\phi \equiv \theta_2 - \theta_1$ ，得到运动方程

$$\begin{aligned} \dot{z} &= -\sqrt{1-z^2} \sin \phi, \\ \dot{\phi} &= \Lambda z + \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi + \Delta E, \end{aligned} \quad (3.6)$$

和经典哈密顿量

$$H = \frac{\Lambda}{2} z^2 - \sqrt{1-z^2} \cos \phi + \Delta E z, \quad (3.7)$$

其中

$$\begin{aligned} \Delta E &= (E_1^0 - E_2^0)/2K + (U_1 - U_2)(N_1 + N_2)/4K, \\ \Lambda &= (U_1 + U_2)(N_1 + N_2)/4K. \end{aligned}$$

当双势阱对称时， $E_1^0 = E_2^0$ ($\Delta E = 0$), $U_1 = U_2 = U$, 则 $\Lambda = U(N_1 + N_2)/2K$ 。在经典力学中，式 (3.6) 和式 (3.7) 对应摆角为 ϕ ，摆长正比于 $\sqrt{1-z^2}$ 的非刚性摆。文献[20]中的图 2 给出了布居数差分数 $z(t)$ 在不同的非线性相互作用参数 Λ 下的时间演化行为（如图 3.2）。随着 Λ 的增加，可以看到从正弦约瑟夫森振荡到非谐振振荡的过程，特别是当 Λ 超过某一临界值时，布居数差振荡的时间平均不为零， $\langle z(t) \rangle \neq 0$ ，即发生自俘获现象(d)。保持非线性相互作用参数 Λ 不变，改变布居数差的初始值，同样也可以得到自俘获现象，实验[22]中正是采用了这种方案（如图 3.3）。

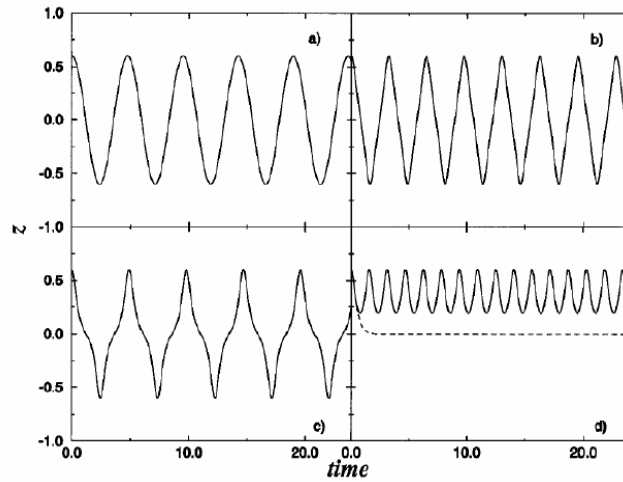


图 3.2 布居数差分数 $z(t)$ 的时间演化，初始条件为 $z(0) = 0.6, \phi(0) = 0$,

$\Lambda = 1$ (a), $\Lambda = 8$ (b), $\Lambda = 9.99$ (c), $\Lambda = 10$ (虚线, d), $\Lambda = 11$ (实线, d)。

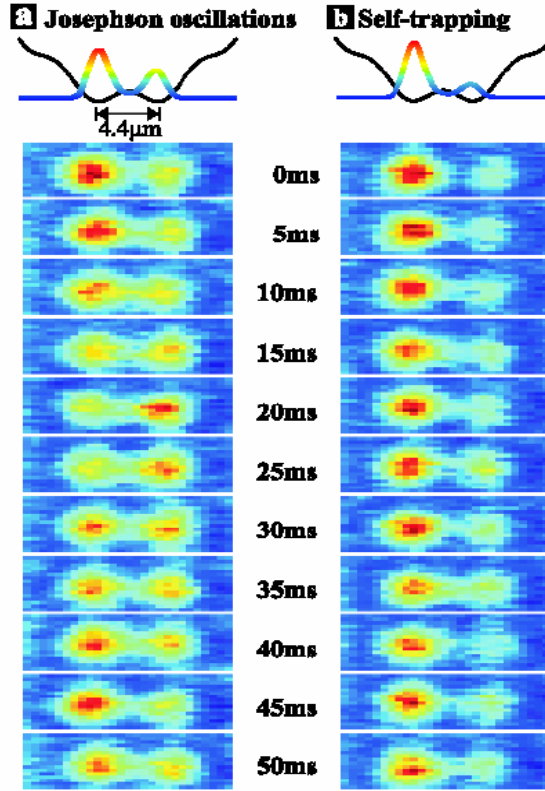


图 3.3 对称双势阱中两弱连接 BEC 的动力学行为。(a) 初始布居数差低于临界值时的约瑟夫森振荡；(b) 初始布居数差超过临界值时的宏观量子自俘获现象。

即使在排斥相互作用下原子也会呈现不对称分布，因此这种反直觉的现象引起了人们极大的兴趣。

第三节 运动方程

在平均场理论中，凝聚体通常用相干态来描述

$$|\bar{z}\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha}|z_{\alpha}|^2\right)\exp\left(\sum_{\alpha}z_{\alpha}\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}\right)|0\rangle, \quad (3.8)$$

其中 $|0\rangle$ 是真空态。复数 z_{α} 代表处于超精细能级 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$ 的原子的宏观波函数

$$z_{\alpha} = \sqrt{N_{\alpha}}e^{-i\theta_{\alpha}}, \quad (3.9)$$

其中 N_{α} 表示 α -自旋组分的布居数， θ_{α} 表示相位。由系统的含时变分原理

$$\delta S = \delta \int i\hbar \langle \dot{\bar{z}} | \dot{\bar{z}} \rangle - \langle \bar{z} | H | \bar{z} \rangle dt = 0 \quad (3.10)$$

我们可以得到复数空间的哈密顿运动方程

$$i\hbar \dot{z}_\alpha = \frac{\partial H_0}{\partial z_\alpha^*}, i\hbar \dot{z}_\alpha^* = \frac{\partial H_0}{\partial z_\alpha}, \quad (3.11)$$

这里

$$H_0(N_\alpha, \theta_\alpha) = (\varepsilon + U_d)N - 3U_d N_0 + U_0 N^2 + (U_2 + 2U_d)(N_1 - N_{-1})^2 + 2(U_2 - U_d)N_0 \left[N_1 + N_{-1} + 2\sqrt{N_1 N_{-1}} \cos(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1}) \right]. \quad (3.12)$$

注意到哈密顿量 (3.4) 的动力学问题中有两个守恒量：总原子数 $N = \sum_\alpha N_\alpha$ 守恒；

量子化轴方向凝聚体的总超精细自旋 $S = (N_1 - N_{-1})\hbar$ 守恒。引入正则变量：

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{(\theta_1 + \theta_0 + \theta_{-1})}{3} & \Omega_1 &= N_1 + N_0 + N_{-1} \\ \varphi_2 &= \theta_0 - \frac{(\theta_1 + \theta_{-1})}{2} & \text{和} & \Omega_2 = \frac{2}{3}N_0 - \frac{1}{3}(N_1 + N_{-1}) \\ \varphi_3 &= \theta_1 - \theta_{-1} & \Omega_3 &= \frac{N_1 - N_{-1}}{2}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

哈密顿量 (3.12) 改写作

$$H_0(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \varphi_2) = \varepsilon \Omega_1 + U_0 \Omega_1^2 - 3U_d \Omega_2 + 4(U_2 + 2U_d)\Omega_3^2 + 2(U_2 - U_d) \times \left[\left(\frac{1}{3}\Omega_1 + \Omega_2 \right) \left(\frac{2}{3}\Omega_1 - \Omega_2 \right) + \sqrt{\left(\frac{2}{3}\Omega_1 - \Omega_2 \right)^2 - 4\Omega_3^2} \left(\frac{1}{3}\Omega_1 + \Omega_2 \right) \cos 2\varphi_2 \right], \quad (3.14)$$

其中 φ_1 和 φ_3 成为循环坐标，并由此得到两个重要的结果。第一，总原子数 $N = \Omega_1$ 的平均值及凝聚体的总超精细自旋 $S = 2\hbar\Omega_3$ 的平均值是两个运动常数。第二，哈密顿量 (3.14) 的动力学问题可以由 $\{\varphi_2, \Omega_2\}$ 这对变量来决定，哈密顿方程为：

$$\dot{\varphi}_2 = \frac{\partial H_0}{\partial \Omega_2}, \dot{\Omega}_2 = \frac{\partial H_0}{\partial \varphi_2}.$$

定义 $\xi_i = \Omega_i / N (i=1,2,3)$ 和 $\eta = \sqrt{\left(\frac{2}{3} - \xi_2 \right)^2 - 4\xi_3^2}$ ，可以得到哈密顿方程

$$\begin{cases} \hbar \dot{\xi}_2 = 4N(U_2 - U_d)\eta \left(\frac{1}{3} + \xi_2 \right) \sin 2\varphi_2 \\ -\hbar \dot{\varphi}_2 = 3U_d + 2N(U_2 - U_d) \left(2\xi_2 - \frac{1}{3} \right) + 2N(U_2 - U_d) \frac{\left(\frac{2}{3} - \xi_2 \right) \left(2\xi_2 - \frac{1}{3} \right) + 4\xi_3^2}{\eta} \cos 2\varphi_2 \end{cases} \quad (3.15)$$

上式表明系统的动力学由 ξ_2 和 ξ_3 共同决定。

变量 ξ_2 和 φ_2 可以看作经典哈密顿量

$$H = -\frac{(U_2 - U_d)N}{2} \left(2\xi_2 - \frac{1}{3} \right)^2 + 2(U_2 - U_d)N\eta \left(\frac{1}{3} + \xi_2 \right) \cos 2\varphi_2 - 3U_d\xi_2 \quad (3.16)$$

的共轭变量。与经典力学相比，哈密顿量 H 可以认为描述的是一个非刚性摆。 $\alpha = 0$ 和 $\alpha = \pm 1$ 自旋组分构成的玻色约瑟夫森结隧穿流为

$$I_{BJJ} = \frac{\dot{\xi}_2 N}{2} = I_0 \eta \left(\frac{1}{3} + \xi_2 \right) \sin 2\varphi_2, \quad (3.17)$$

其中 $I_0 = 2N^2(U_2 - U_d)$ 。上式与双势阱中两弱连接 BEC 的 BJJ 隧穿流[20]相比要复杂得多，这正是系统非线性性的体现。

第四节 运动方程的性质

3.4.1 自发磁化

首先研究系统的平衡结构。令经典运动方程 (3.15) 中的时间导数项为零，得到静态经典运动方程为

$$0 = \eta \left(\frac{1}{3} + \xi_2 \right) \sin 2\varphi_2, \quad (3.18)$$

$$0 = \Lambda \pm \left[2\xi_2 - \frac{1}{3} + \frac{\left(\frac{2}{3} - \xi_2 \right) \left(2\xi_2 - \frac{1}{3} \right) + 4\xi_3^2}{\eta} \cos 2\varphi_2 \right]. \quad (3.19)$$

这里我们定义一个无量纲参数 $\Lambda = \frac{3U_d}{2|U_2 - U_d|N}$ ，用来表征磁偶极—偶极相互作用的

相对作用强度。在式 (3.19) 中“+”号对应 $(U_2 - U_d) > 0$ 的情况,“-”号则对应情况 $(U_2 - U_d) < 0$ (下面我们以前种情况为例作详细说明)。从 η 的定义我们可以知道运动常数 ξ_3 的取值范围是 $-\frac{1}{2} < \xi_3 < \frac{1}{2}$, 而动力学变量 ξ_2 则可以在 $-\frac{1}{3} < \xi_2 < \frac{2}{3} - 2|\xi_3|$ 的范围内取值。为了更清楚地表明平衡方程 (3.18-3.19) 的解与相对相位 φ_2 的依赖关系, 在下面的讨论中我们分三种情况进行考虑。

(1) $\cos 2\varphi_2 = 1$ (即 $2\varphi_2 = 2k\pi$) 时的平衡结构。 ξ_2 的平衡值由式 (3.19) 令 $\cos 2\varphi_2 = 1$ 得到, 在区间 $-\infty < \Lambda < 1 + \sqrt{1 - (2\xi_3)^2}$ 中 ξ_2 只有唯一解。当 $\Lambda \rightarrow -\infty$ 时, ξ_2 的平衡值趋近于它的上边界值 $\frac{2}{3} - 2|\xi_3|$ 。这时, 占据三个超精细自旋态的原子分数 $n_\alpha = N_\alpha / N (\alpha = 0, \pm 1)$ 分别为 $n_1 = |\xi_3| + \xi_3, n_0 = 1 - 2|\xi_3|, n_{-1} = |\xi_3| - \xi_3$ 。另一方面, 当 $\Lambda = 1 + \sqrt{1 - (2\xi_3)^2}$ 时, ξ_2 的平衡值趋近于它的下边界值 $-\frac{1}{3}$, 这时的三个超精细自旋态的原子占据分数为 $n_1 = \frac{1}{2}(1 + 2\xi_3), n_0 = 0, n_{-1} = \frac{1}{2}(1 - 2\xi_3)$ 。除此之外, 当 $\xi_3 = 0$ 时, 在区间 $-2 < \Lambda < 2$ 中 ξ_2 的平衡值为 $\xi_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3} - \Lambda\right)$, 三个超精细自旋态的原子占据分数分别为 $n_0 = \frac{1}{2}(1 - \Lambda), n_1 = n_{-1} = \frac{1}{4}(1 + \Lambda)$ 。

(2) $\cos 2\varphi_2 = -1$ (即 $2\varphi_2 = (2k+1)\pi$) 时的平衡结构。现在 ξ_2 的平衡值由式 (3.19) 令 $\cos 2\varphi_2 = -1$ 得到。同样地, 在区间 $\Lambda > 1 - \sqrt{1 - (2\xi_3)^2}$ 中它有唯一解。当 $\Lambda = 1 - \sqrt{1 - (2\xi_3)^2}$ 时, ξ_2 的平衡值趋近于它的下边界值 $-\frac{1}{3}$ 。特别当 $\xi_3 = 0$, 只有磁偶极—偶极相互作用 U_d 为零时, ξ_2 才有平衡解。

(3) $\cos 2\varphi_2 = 0$ (即平衡结构不依赖于相对相位 φ_2) 时的平衡结构。在这种情况下, ξ_2 有两个与 Λ 无关的平衡解。一个解是它的下边界值 $-\frac{1}{3}$, 原子占据分数为 $n_1 = n_{-1} = \frac{1}{2}, n_0 = 0$ 。另一个解是其上边界值 $\frac{2}{3} - 2|\xi_3|$, 这时的原子占据分数为 $n_1 = n_{-1} = |\xi_3| + \xi_3, n_0 = 1 - 2|\xi_3|$ 。有趣的是, 当 $\xi_3 = 0$ 时原子占据分数就成为 $n_1 = n_{-1} = 0$

和 $n_0 = 1$ ，这对应着凝聚体的“极化”态。

平均场理论表明当不存在磁偶极—偶极相互作用时， ^{23}Na 原子的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的基态是极化的，原子间的相互作用是反铁磁的[18]。又粒子的内部磁矩会作用形成玻色—爱因斯坦铁磁体（BEF）[24]。带自旋的玻色子具有磁矩 μ ，磁化强度 M 可以用 $M = \mu|\Psi_1|^2$ 来表示。自发磁化是指即使外磁场 B 为零，磁化强度 M 仍不为零，也就是说，旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的基态总是铁磁的。我们的计算恰好预示着这点。具体来说上面的分析表明，除了在第三点中指明的情况外，对于绝大多数确定的 Λ 及三组分相对相位 φ_2 值，当外磁场 $B = 0$ 及原子间相互作用是反铁磁（ $U_2 > 0$ ）时，磁化强度仍不为零。这也就是说，当磁偶极—偶极相互作用引入时，旋量玻色—爱因斯坦凝聚体可以发生自发磁化。正如在文献[24]中提到的，可以从实验上来证明自发磁化现象。考虑到磁偶极—偶极相互作用系数 c_d 的符号和大小与凝聚体的几何形状是有关的[1][14][16][25]，因此我们可以通过调整凝聚体势阱的纵横比，从而方便地控制其基态的磁性质。

3.4.2 自旋混合动力学

偶极旋量 BEC 的一个重要特性就是原子间除了存在通常的两体硬核排斥相互作用以外，还存在自旋交换相互作用以及磁偶极—偶极相互作用。后两种相互作用可以引起凝聚体的自旋混合，也就是说，在没有外场的情况下原子仍可以在内部非线性相互作用的影响下从一个自旋态转移到另一个自旋态。为了深刻地了解系统的这种复杂的动力学行为，可以使用作用量—角变量方法[26]。在下面的讨论中，我们将采用数值分析方法，分别给出 $\alpha = 0$ 和 $\alpha = \pm 1$ 自旋组分间布居数差及相对相位的时间演化。考虑两种情况：(1) $\xi_3 \neq 0$ ，即凝聚体总超精细自旋不为零；(2) $\xi_3 = 0$ ，即凝聚体总超精细自旋为零。图 3.4 和图 3.5 中的时间比例单位为 $2|U_2 - U_d|N/\hbar$ 。

图 3.4 表示的是式 (3.15) 中布居数差及相对相位的解，其初始条件为

$$\xi_2(0) = 0.12, \xi_3(0) = 0.25, \varphi_2(0) = \frac{\pi}{2}, \text{ 相对相互作用参数 } \Lambda = \frac{3U_d}{2|U_2 - U_d|N} \text{ 分别为(a)}$$

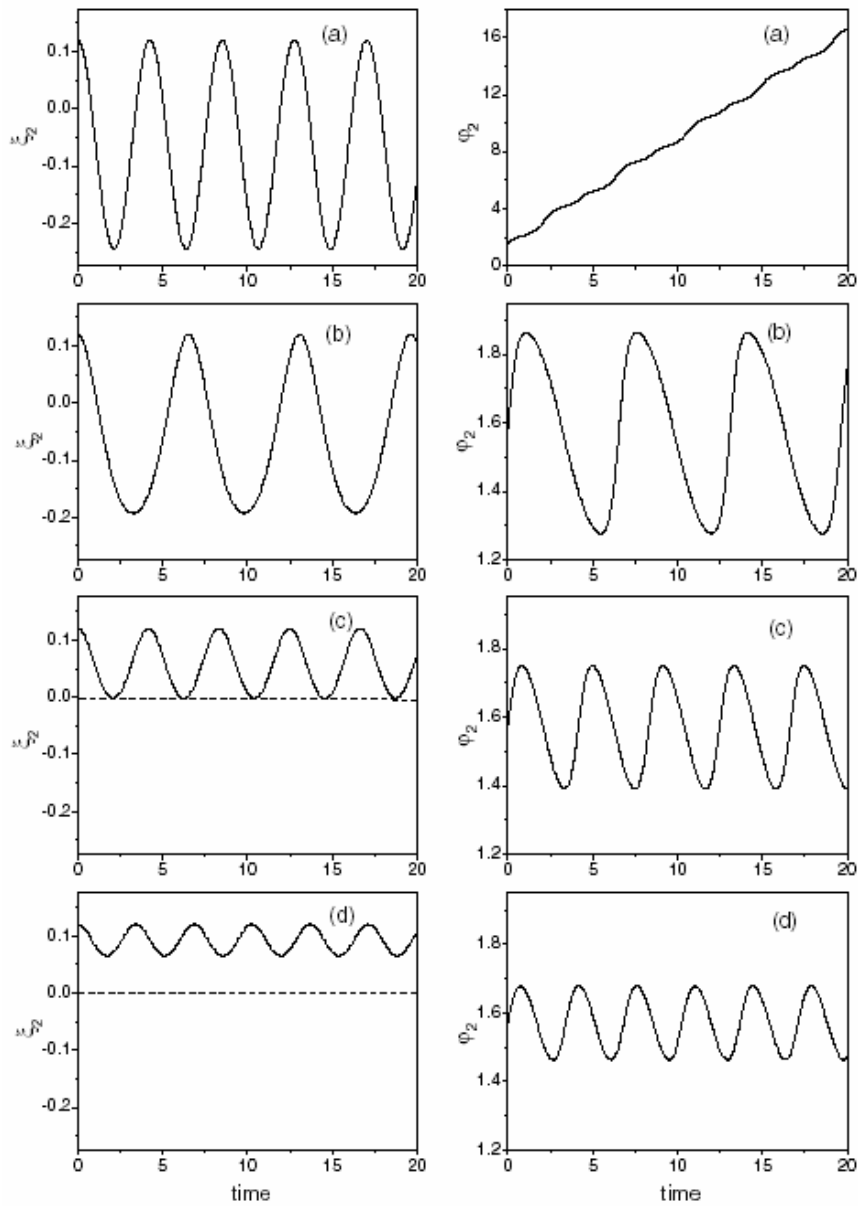


图 3.4 自旋混合动力学：布居数差 ξ_2 和相对相位 φ_2 与时间的关系曲线，初始条件 $\xi_2(0) = 0.12, \xi_3(0) = 0.25, \varphi_2(0) = \frac{\pi}{2}$ 及 $\Lambda = 0.00$ (a), 0.40 (b), 0.60 (c), 0.75 (d)。时间比例单位为 $2|U_2 - U_d|N/\hbar$ 。

0.00, (b) 0.40, (c) 0.60, (d) 0.75。左列表示 0 和 ± 1 组间布居数差 $\xi_2(t)$ 的时间演化。从图 3.4 (a) 和 3.4 (b) 中可以看到随着参数 Λ 的增加，布居数差的时间演化呈现约瑟夫森正弦振荡的结果。图 3.4 (c) 中的 $\Lambda_c = 0.60$ 是一个临界转变点。随着 Λ 的进一步增

加, 到图 3.4 (d) 中的 $\Lambda = 0.75$, 每一个等效组分的布居数都将围绕一个非零的时间平均值振荡, 这时净布居数差为 $\langle \xi_2(t) \rangle > 0$ 。这与第二节中介绍的宏观量子自俘获现象非常符合。同样地, 右列表示 0 和 ± 1 组分间相对相位 $\varphi_2(t)$ 的时间演化, 它表明随着参数 Λ 的增加, $\varphi_2(t)$ 从时间的单调增加函数变化为时间的周期振荡函数。与非刚性摆相比, 这对应着我们系统的运动从“连续-相模”(图 3.4 (a)) 转变为“ π -相模”(图 3.4 (b)-3.4 (d)) 或者说从旋转运动到摆动运动。这里, “连续-相模”与“ π -相模”的定义与双势阱中两弱连接 BEC 中的定义相同[20]。

运动的临界行为与临界参数 $\Lambda_c = \Lambda_c \left[\xi_2(0), \xi_3(0), \varphi_2(0) = \frac{\pi}{2} \right]$ 是相关的。临界参数可以从式 (3.16) 中能量守恒及隧穿能边界值得到。实际上, 如果

$$\Lambda > \Lambda_c = \frac{1}{3} - \xi_2(0) + \frac{2\sqrt{1-9\xi_3^2(0)}}{9\xi_2(0)} - \frac{[1+3\xi_2(0)]\sqrt{[2-3\xi_2(0)]^2-36\xi_3^2(0)}}{9\xi_2(0)} \quad (3.20)$$

则 $\langle \xi_2(t) \rangle$ 总是大于零的。当 $\varphi_2(0) = 0$ 时, 临界参数为

$$\Lambda_c = \frac{1}{3} - \xi_2(0) - \frac{2\sqrt{1-9\xi_3^2(0)}}{9\xi_2(0)} + \frac{[1+3\xi_2(0)]\sqrt{[2-3\xi_2(0)]^2-36\xi_3^2(0)}}{9\xi_2(0)}. \quad (3.21)$$

当 $\Lambda < \Lambda_c$ 标志着系统进入宏观量子自俘获区域。例如我们取 $\xi_2(0) = 0.12, \xi_3(0) = 0.25$, 临界参数计算得到 $\Lambda_c = -0.18$ 。这时取 $\Lambda_c = -0.20$, 宏观量子自俘获现象确实存在。

图 3.5 则表示出了在初始条件为 $\xi_2(0) = 0.12, \xi_3(0) = 0, \varphi_2(0) = 0$ 时式 (3.15) 的解, 其中相对相互作用参数 $\Lambda = \frac{3U_d}{2|U_2 - U_d|N}$ 分别为 (a) 0.75, (b) 0.60, (c) 0.43, (d) 0.00。左列仍表示 0 和 ± 1 组分间布居数差 $\xi_2(t)$ 的时间演化, 它表明随着参数 Λ 的减少, $\xi_2(t)$ 总是时间的周期函数。当 $\Lambda = \Lambda_c = 0.43$ 时, 布居数差保持在其初始值, 这是宏观量子自俘获现象的另一标志。右列同样表示 0 和 ± 1 组分间相对相位 $\varphi_2(t)$ 的时间演化, 它表明了随着参数 Λ 的减少, $\varphi_2(t)$ 是时间的周期函数, 其平均值为

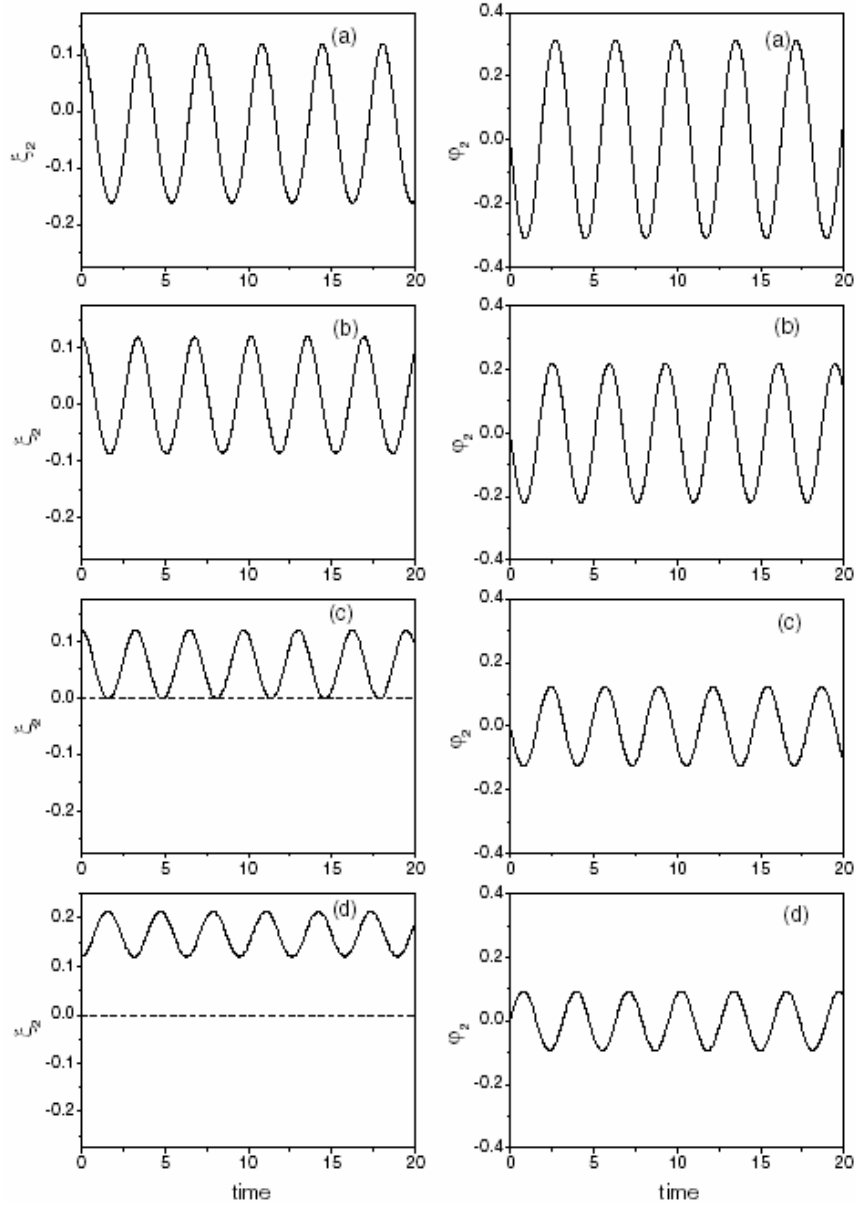


图 3.5 自旋混合动力学：布居数差 ξ_2 和相对相位 φ_2 与时间的关系曲线，初始条件 $\xi_2(0) = 0.12, \xi_3(0) = 0, \varphi_2(0) = 0$ 及 $\Lambda = 0.75$ (a), 0.60 (b), 0.43 (c), 0.00 (d)。时间比例单位为 $2|U_2 - U_d|N/\hbar$ 。

$\langle \varphi_2(t) \rangle = 0$ 。系统动力学对应着“零—相模”。进一步说，

$$\Lambda < \Lambda_c = \frac{2}{3} - 2\xi_2(0) \quad (3.22)$$

时，体系进入宏观量子自俘获区域。而若 $\varphi_2(0) = \pi$ 时，永远没有宏观量子自俘获现象的存在。

因此，自旋混合动力学不仅与相对相互作用参数 Λ 有关，而且与三组分的初始布居数及相位都是有关的。初始布居数及相位可通过拉曼脉冲来调节[27]。在实际的实验中，通常有两种不同的方法来得到宏观量子自俘获现象。一种，如图 3.4 和图 3.5， $\xi_2(0)$ 和 $\varphi_2(0)$ 保持不变同时改变相对相互作用参数 Λ （通过改变凝聚体的几何形状）。另一种，在保持势阱形状不变的情况下（即 Λ 保持不变），调整布居数差 $\xi_2(0)$ 和相对相位 $\varphi_2(0)$ 的初始值[23]。

为了进一步表明系统的时间演化特性，我们将式 (3.15) 的动力学行为在图 3.6 中进行概括。图 3.6 表示的是 $\xi_2(t) - \varphi_2(t)$ 的等能相图。两个动力学区域——非线性约瑟夫森隧穿区域和宏观量子自俘获区域——的差别在图 3.6 中有明显表示。在约瑟夫森振荡区，动力学的变化形成了相空间的闭合轨道；在宏观量子自俘获区则是无相边界的开放轨道。

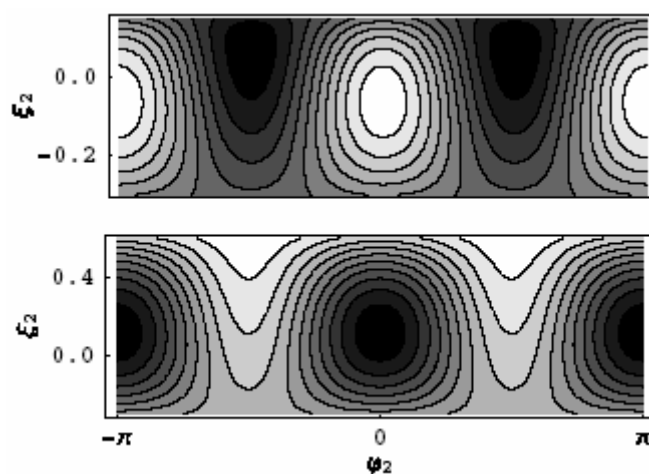


图 3.6 布居数差 ξ_2 和相对相位 φ_2 的相空间等能图。上图参数： $\xi_3(0) = 0.25$ ， $\Lambda = 0.6(c_2 > 0)$ 。下图参数： $\xi_3(0) = 0, \Lambda = -0.2(c_2 < 0)$ 。暗色部分代表低能量。

通过 Feshbach 共振技术可将超冷原子间的碰撞相互作用调节接近于零[28]，这样可使磁偶极—偶极相互作用更主要甚至成为占主导地位的相互作用。基于 ^{23}Na 原子的 s -波散射长度的实验数据： $a_0 = (50.0 \pm 1.6)a_B$ 和 $a_2 = (55.0 \pm 1.7)a_B$ ，系数 c_d 与 $|c_2|$

的比是 0.007, 这里 a_B 是玻尔半径。而对 ^{87}Rb 原子, $a_0 = 101.8a_B$ 和 $a_2 = 100.4a_B$, 系数 c_d 与 $|c_2|$ 的比则为 0.1 [3]。通过对变分函数的简单估算 [29], 知道对于束缚在光偶极阱中的钠原子的玻色—爱因斯坦凝聚体, 若原子数目为 $N = 5 \times 10^6$, 原子密度为 10^{-8}cm^{-3} , 则 $U_2 N \approx 6nK$ 。另一方面, 正如文献 [1] [3] [14] [16] [25] 所述, 磁偶极—偶极相互作用 U_d 的符号和大小随势阱的几何形状是有很大改变的, 且 U_d/U_2 在范围 $(-1, 2)$ 内是凝聚体纵横比 κ 的单增函数 [3]。这表明将磁偶极—偶极相互作用调节接近于自旋交换相互作用, 也就是, $U_d/U_2 \approx 1$ 是可能的。这样地话, 相对相互作用参数 Λ 就可在一个很大的范围内取值, 那么在现有的实验技术条件下旋量 BEC 中宏观量子自俘获现象就可观测得了。所以, 归结上面所提到的种种原因, 相信在这种同时具有可调节长程和短程相互作用的偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中, 通过调节两种相互作用的相对强度及初始条件, 就可观测到著名的宏观量子自俘获现象。这样一来就可避免实验上实现磁双势阱的困难了。

第五节 小结

在这一章, 我们对自旋 1 的偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体进行了半经典描述。利用原子数守恒与凝聚体总超精细自旋守恒的条件, 导出了经典运动方程, 并且用与研究双势阱玻色约瑟夫森结隧穿同样的方法对运动方程进行讨论。结果证明自发磁化现象和自旋混合动力学取决于自旋交换相互作用 U_2 和磁偶极—偶极相互作用

U_d 的比率 $\Lambda = \frac{3U_d}{2|U_2 - U_d|N}$ 。同样, 三组分间的初始布居数差和相对相位, 以及凝聚

体的总超精细自旋对半经典动力学都有重要影响。最后, 我们阐明了利用偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体来实现和控制宏观量子自俘获现象和约瑟夫森振荡现象的实验可能性。

参考文献

- [1] S. Yi and L. You, *Phys. Rev. A* (2000) 61, 041604; S. Yi and L. You, *ibid.* (2001) 63, 053607.
- [2] K. Góral, K. Rzaewski, and T. Pfau, *Phys. Rev. A* (2000) 61, 051601(R).
- [3] S. Yi, L. You, and H. Pu, *Phys. Rev. Lett.* (2004) 93, 040403.
- [4] S. Yi and L. You, *Phys. Rev. A* (2002) 66, 013607.
- [5] K. Góral and L. Santos, *Phys. Rev. A* (2002) 66, 023613.
- [6] D.H.J. Odell, S. Giovanazzi, and G. Kurizki, *Phys. Rev. Lett.* (2003) 90, 110402.
- [7] L. Santos, G.V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* (2003) 90, 250403.
- [8] J.-P. Martikainen, M. Mackie, and K.-A. Suominen, *Phys. Rev. A* (2001) 64, 037601.
- [9] S. Giovanazzi, D.H.J. Odell, and G. Kurizki, *Phys. Rev. A* (2001) 63, 031603(R).
- [10] K. Góral, L. Santos, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 88, 170406.
- [11] H. Pu, W.-P. Zhang, and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* (2001) 87, 140405.
- [12] W.-P. Zhang, H. Pu, C.P. Search, and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 88, 060401.
- [13] K. Cross, C.P. Search, H. Pu, W.-P. Zhang, and P. Meystre, *Phys. Rev. A* (2002) 66, 033603.
- [14] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* (2005) 94, 160401.
- [15] J. Werner, A. Griesmaier, S. Hensler, A. Simoni, E. Tiesinga, J. Stuhler, and T. Pfau, Preprint cond-mat/0412049.
- [16] S. Giovanazzi, A. Görlitz, and T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* (2002) 89, 130401.
- [17] M. Baranov, L. Dobrek, K. Gral. L. Santos, and M. Lewenstein, *Physica Scripta* (2002) T102, 74, and references therein.
- [18] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 742; T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* (1998) 67, 1822.
- [19] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* (1999) 71, 463.
- [20] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S.R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 79, 4950.
- [21] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni, and S.R. Shenoy, *Phys. Rev. A* (1998) 59, 620.
- [22] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M.K. Oberthaler,

- Preprint cond-mat/0411757.
- [23] Th. Anker, M. Albiez, R. Gati, S. Hunsmann, B. Eiermann, A. Trombettoni, and M.K. Oberthaler, Phys. Rev. Lett. (2005) 94, 020403.
- [24] Q. Gu, Phys. Rev. A (2003) 68, 025601.
- [25] C. Eberlein, S. Giovanazzi, and D.H.J. Odell, Preprint cond-mat/0311100.
- [26] J. Garnier and F.Kh. Abdullaev, Preprint cond-mat/0409479.
- [27] H. Pu, C.K. Law, and N.P. Bigelow, Physica B (2000) 280, 27.
- [28] E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein, and A. Kerman, Phys. Rep. (1999) 315, 199.
- [29] G. Baym and C.J. Pethick, Phys. Rev. Lett. (1996) 76, 6.

第四章 旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中的纠缠原子态

量子纠缠是发生在多个微观粒子之间的一种物理现象，是指无论粒子间距离相隔多远，一个粒子的态都是与其它粒子的态相关联的，一个粒子的变化会影响到另一个粒子的行为，对一个粒子的测量也会影响到其它粒子的态。量子纠缠的非定域、非经典特性代表了量子力学中最为深刻的含义。近年来在宏观量子系统中产生量子纠缠取得了很大的进展，研究表明多粒子纠缠可以在弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体中产生和操控[1, 2]，事实上，这也已经成为当前 BEC 研究的热点之一。实验研究量子纠缠的关键在于使系统尽量处于纯态，并且能够有效地控制粒子间的相互作用，这些条件在 BEC 中都可以得到满足，因此 BEC 可以作为研究量子纠缠的理想实验平台。在这章中我们将在介绍量子纠缠基本知识的基础上，着重介绍旋量 BEC 中纠缠原子态的产生和操控及纠缠的动力学问题。

第一节 两体量子纠缠的定义和度量简介

1935 年, Einstein, Podolsky 和 Rosen 提出了著名的 EPR 佯谬[3]。针对这一令人惊异的现象薛定谔指出, 描述 EPR 粒子对的态是一种纠缠态(entangled state), 其中存在纠缠现象(entanglement)。EPR 佯谬和纠缠现象涉及量子力学的实在性、定域性、隐变量理论以及测量在量子力学中所起的作用等等一系列根本问题[4]。早期对于纠缠态的研究仅限在哲学思辨的层面上, 直到 1964 年 Bell 定理提出以后, 才使得量子理论与局域性隐变量理论的预言的差别可以通过实验来验证。20 世纪 80 年代初, Feynman 提出量子力学和计算机结合的量子计算机的理论模型[5], 此后有关量子计算和量子通讯的理论和实验的研究迅速发展起来[6-9], 而纠缠态在其中起着不可或缺的重要作用[10, 11]。纠缠态存在于多粒子系统中, 它描述了子系统间的不可分离的特性。一个典型的例子是由两个自旋 $1/2$ 粒子组成的系统, 其自旋单态和自旋三重态均不能简单地表示为两个粒子各自量子态的直积, 从而显示出非经典的量子关联。纠缠现象不但存在于纯态中, 而且存在于混合态中。在量子计算和量子通讯中, 后一情形更具有实际意义。对纠缠程度的定量描述用纠缠度来定义[12]。下文中我们将介绍一些有关纠缠态和纠缠度的基本概念、基本理论和研究进展。

4.1.1 两体的纯态与混合态，密度矩阵描述

量子纠缠是对两个或多个量子体系而言的。为简明起见，这里只简略叙述两体的情况，但下面有些叙述是可以推广到多体系统的。

1. 纯态：能用单一波函数描述的态，或在态空间 $H_A \otimes H_B$ 中任一套基矢下的任一相干叠加态。就一般系统而言，任一纯态为

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle, \quad (4.1)$$

其中 $\{|\psi_n\rangle\}$ 是正交归一基矢。就两体系统 A 和 B 而言，它可以表示为：

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{mn} C_{mn} |\phi_m\rangle_A \otimes |\varphi_n\rangle_B = \sum_{mn} C_{mn} |\phi_m\rangle_A |\varphi_n\rangle_B, \quad (4.2)$$

这里 $\{|\phi_m\rangle_A \otimes |\varphi_n\rangle_B\}$ 是正交归一基矢。两体纯态可分为两类，一类是可分离态，即 $|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$ ， A 和 B 均处于确定的量子态，即非纠缠态。另一类为不可分离态即纠缠态， $|\psi\rangle_{AB}$ 不能表示为直积形式 $|\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$ 的量子态， A 和 B 均不处于确定的量子态。例如，

$$|\psi\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B \}. \quad (4.3)$$

应当指出，量子纠缠必然体现为粒子态之间的关联，但关联不等于纠缠。例如，态 $|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B$ ，它表明在 A 和 B 的自旋取向之间有关联，但未纠缠， A 和 B 均处于自旋确定态。

2、混合态：系统若干个纯态（不一定是正交归一的！） $|\psi^i\rangle_{AB}$ 的非相干混合，这些 $|\psi^i\rangle_{AB}$ 之间不存在固定的位相关联，因而也就不存在彼此相干叠加并发生干涉的问题。系统处于混合态时，其状态不能简单地用一个态矢来表示，而只能用密度矩阵 ρ 来描述：

$$\rho_{AB} = \sum_i \alpha_i |\psi^i\rangle_{AB} \langle \psi^i| \quad (4.4)$$

其中

$$|\psi^i\rangle_{AB} = \sum_{mn} C_{mn}^i |\phi_m\rangle_A \otimes |\varphi_n\rangle_B, \quad (4.5)$$

α_i 表示系统处于态 $|\psi^i\rangle$ 的几率，且 $\sum_i \alpha_i = 1, 0 < \alpha_i < 1$ 。

$$\text{Tr}(\rho_{AB}) = 1, \text{Tr}(\rho_{AB}^2) < 1. \quad (4.6)$$

注意，纯态是混合态的特殊情况，这时 ρ_{AB} 求和式中只有一项，于是 $\text{Tr}(\rho_{AB}^2) = 1$ 。

混合态情况下， $A+B$ 系统的态可分类为：

(1) 未关联态： $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$

(2) 可分离态： $\rho_{AB} = \sum_i \beta_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i, 0 < \beta_i < 1$

(3) 不可分离态，即混合态纠缠态：不能写成可分离态形式的态。例如（设 A 和 B 均为双能级系统）：

$$\rho_{AB} = \alpha |\psi^+\rangle_{AB} \langle \psi^+| + (1-\alpha) |\varphi^+\rangle_{AB} \langle \varphi^+| \quad (0 < \alpha < 1)$$

可分离的标准：当 A 和 B 均为双能级系统时，一个给定的 ρ_{AB} 为可分离的必要条件是：关于 A 和 B 的转置算符 T_A 和 T_B 均是正定的。以可分离态为例，这种操作为：

$$\begin{cases} T_A(\rho_{AB}) = \sum_i \beta_i (\rho_A^i)^{T_A} \otimes \rho_B^i, \\ T_B(\rho_{AB}) = \sum_i \beta_i \rho_A^i \otimes (\rho_B^i)^{T_B}. \end{cases} \quad (4.7)$$

需要注意，可分离 ρ_{AB} 在 T_A 或 T_B 的作用下，仍为一个可分离态的密度算符，所有本征值仍然是非负的；不可分离的 ρ_{AB} 在 T_A 或 T_B 的作用下会出现负本征值，已不是密度矩阵。

在一般情况下，判断一个态是否为可分离态（或有无量子纠缠），这是一个极其重要的问题。从目前文献来看，已有大量的工作，提出不少各种类型的判据，文献 [13] 给出了一个既充要又可操作的判断纠缠态的判据。两体系统中单独对 A 或 B 的约化密度矩阵的一般表达式为：

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}^{(B)}(\rho_{AB}) = \sum_{j=1}^M \langle j | \rho_{AB} | j \rangle_B, \left(\sum_{j=1}^M |j\rangle_{BB} \langle j| = I_B \right), \\ \rho_B &= \text{Tr}^{(A)}(\rho_{AB}) = \sum_{i=1}^M \langle i | \rho_{AB} | i \rangle_A, \left(\sum_{i=1}^M |i\rangle_{AA} \langle i| = I_A \right). \end{aligned} \quad (4.8)$$

3. Schmidt 分解:可以证明,两体系统的任一纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 可以表示为如下标准的表达式,称为 Schmidt 分解式[4]:

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A |i'\rangle_B, \quad (4.9)$$

其中 $\sum_i p_i = 1$, $\sqrt{p_i}$ 可以取正值或负值; $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i'\rangle_B\}$ 分别是 H_A 和 H_B 中的某两组特殊的(即和 $|\psi\rangle_{AB}$ 有关的)正交基,

$${}_A \langle i | j \rangle_A = \delta_{ij} \text{ 和 } {}_B \langle i' | j' \rangle_B = \delta_{ij}.$$

所采用的基一般会依赖于 $|\psi\rangle_{AB}$,也就是说,一般而言不能用这两组正交归一基 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i'\rangle_B\}$ 同时又去对另一纯态 $|\psi'\rangle_{AB}$ 作 Schmidt 分解。

这时约化密度矩阵为:

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}^{(B)} (|\psi\rangle_{AB} {}_{AB} \langle \psi|) = \sum_i p_i |i\rangle_A {}_A \langle i|, \\ \rho_B &= \text{Tr}^{(A)} (|\psi\rangle_{AB} {}_{AB} \langle \psi|) = \sum_i p_i |i'\rangle_B {}_B \langle i'|. \end{aligned} \quad (4.10)$$

可以看到, ρ_A 与 ρ_B 的非零本征值相同(这里并不要求 H_A 和 H_B 的维数相同, ρ_A 与 ρ_B 的零本征值的个数可能不同)。于是只要将 ρ_A 与 ρ_B 对角化,就可以找到这两组基 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i'\rangle_B\}$ 以及本征值 p_i ,从而给出 Schmidt 分解的表达式。其步骤是:对任给的态 $|\psi\rangle_{AB}$,算出它的并矢(注意还须取复数共轭),对 A 或 B 分别作部分求迹运算,相应得到 ρ_A 或 ρ_B ,将它们分别在 H_A 和 H_B 中对角化,得到两组正交归一基 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i'\rangle_B\}$ 及一组本征值 $\{p_i\}$,按这里的表达式即可写出 $|\psi\rangle_{AB}$ 的 Schmidt 分解式。由 Schmidt 分解可知,可以为 $A+B$ 系统的任一纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 指定一个正整数——Schmidt 数,它是 ρ_A (或 ρ_B)中非零 p_i 的个数,也就是 Schmidt 分解式中的项数。若一个纯态的 Schmidt 数 ≥ 2 ,它必定为纠缠态。

4.1.2 两体量子纠缠分析

量子纠缠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。事实上,它是两体及多体量子力学中最

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。目前对于两体量子系统纯态这一最简单的情况，问题的研究非常完全了。

1. 两体量子纠缠及纠缠态定义

就纯态而言，纠缠态是两体量子系统 A 和 B 的那些纯态，它们不能被简单地写成两个子系统态的直积形式 $|\phi\rangle_A |\varphi\rangle_B$ 。应当指出，由子系统 A 和 B 组成的量子系统的绝大部分纯态都是纠缠的，准确地说，纠缠态在 $H = H_A \otimes H_B$ 态空间中是稠密的。对于 A 和 B 都是两能级系统的情况，可以证明，如下四个纠缠态将组成一个完备基：

$$|\psi_i\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A, |1\rangle_A) \sigma_i \begin{pmatrix} |0\rangle_B \\ |1\rangle_B \end{pmatrix}, (i=0,1,2,3), \quad (4.11)$$

其中， $\sigma_i (i=1,2,3)$ 为三个泡利 (Pauli) 矩阵， $\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 是二维单位矩阵。这四个态常被记成

$$\begin{cases} |\psi^\pm\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |1\rangle_B \pm |1\rangle_A |0\rangle_B), \\ |\phi^\pm\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |0\rangle_B \pm |1\rangle_A |1\rangle_B), \end{cases} \quad (4.12)$$

并称之为 Bell 基。这里， A 和 B 的关联是纯态之间的关联，不同于可分离态下 A 和 B 的关联，那是混合态之间的关联。子体系之间有量子纠缠的最重要的特征是（由测量造成的塌缩可以知道）子系统 A 和 B 的状态均依赖于对方而都处于一种不确定的状态。这样一来，对一个进行测量必将使另一个产生关联的塌缩。注意，在纠缠态中，粒子 A 和 B 的空间波包可以彼此相距遥远而并不重叠！这时它们的自旋波函数仍会产生关联的塌缩：当 A 系统因测量而发生塌缩时， B 系统必将发生相关联的塌缩。例如：对态 $|\phi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B)$ 中的 A 作测量，若 A 的状态塌缩到 $|0\rangle_A \Rightarrow B$ 必为 $|0\rangle_B$ ；若 A 的状态塌缩到 $|1\rangle_A \Rightarrow B$ 必为 $|1\rangle_B$ 。 B 的这种关联塌缩是 $A+B$ 系统测量塌缩的一部分，因而它也是瞬时的、非局域的、不可逆的、斩断相干性的。可以说，纠缠态的关联是一种纯量子的非定域的关联，是一种超空间的关联！这是量子态塌缩的非定域性质和量子纠缠相结合表现出的奇妙性质。

量子纠缠态之所以引起人们的兴趣，在于它的极端重要性：第一，在测量塌缩中它们表现出一种非定域的关联——一种没有经典对应的、超空间的关联。这不仅具有深远的科学意义，而且在量子通讯和量子计算中具有潜在的巨大技术价值；第二，量子系统与环境发生的难以避免的量子纠缠正是量子退相干——量子信息衰减的主要方式。可以说，这是量子信息论和量子计算机发展途中的主要障碍。

2. 最大纠缠态与 GHZ (Greenberge-Horne-Zeilinger) 态

由上面的四个 Bell 基 (4.12) 出发，对 A 或 B 分别独立地施以任何么正变换所得到的纠缠态都称为最大纠缠态 $|\Phi\rangle_{AB}$ ，即

$$|\Phi\rangle_{AB} = U_A \otimes U_B (|\psi^\pm\rangle, |\phi^\pm\rangle). \quad (4.13)$$

这时，如果对子系统 B (或 A) 部分求迹，所找到的密度算符 ρ_A (或 ρ_B) 将为

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B (|\psi^\pm\rangle_{AB} \langle\psi^\pm|) = \frac{1}{2} I_A, \\ \rho_A &= \text{Tr}_B (|\phi^\pm\rangle_{AB} \langle\phi^\pm|) = \frac{1}{2} I_A. \end{aligned} \quad (4.14)$$

这意味着，使用两个双态系统原本能够贮存两位的信息，但在 $|\phi^\pm\rangle(|\psi^\pm\rangle)$ 态中，这些信息却全部被隐藏在 A 和 B 之间的关联上。 A 或 B 都未能单独荷载任何信息，因而不能单独对 A (或 B) 的局域测量来获取它们。尽管如此，人们可以局部地对 A (或 B) 施行么正变换来改变这些最大纠缠态。例如，采用 σ_3^A 可使 $|\phi^+\rangle \leftrightarrow |\phi^-\rangle$ ， $|\psi^+\rangle \leftrightarrow |\psi^-\rangle$ ；而 σ_1^A 可使 $|\phi^+\rangle \leftrightarrow |\psi^+\rangle$ ， $|\phi^-\rangle \leftrightarrow |\psi^-\rangle$ ，等等。

N 个 (A, B, \dots, F) S 能级粒子的 GHZ 态为：

$$|\psi\rangle_N = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |0\rangle_B \cdots |0\rangle_F + |1\rangle_A |1\rangle_B \cdots |1\rangle_F + \cdots + |S-1\rangle_A |S-1\rangle_B \cdots |S-1\rangle_F), \quad (4.15)$$

这当然是高度纠缠态。在对量子纠缠的研究中，最常用到的，也是最简单的 GHZ 态是三个两能级粒子的 GHZ 态：

$$|\text{GHZ}\rangle_{ABC} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |0\rangle_B |0\rangle_C + |1\rangle_A |1\rangle_B |1\rangle_C). \quad (4.16)$$

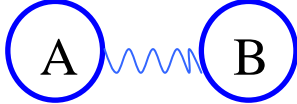
我们可以用下面的图示来简单总结上面的结论：(对于两体情况)

直积态（分离）： $|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$ 如： $|\psi\rangle_{AB} = |0\rangle_A |0\rangle_B$

图示：

纠缠态（不可分离）： $|\psi\rangle_{AB} \neq |\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$ 如： $|EPR\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |1\rangle_B - |1\rangle_A |0\rangle_B)$ 和

$$|GHZ\rangle_{ABC} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A |0\rangle_B |0\rangle_C + |1\rangle_A |1\rangle_B |1\rangle_C)$$

图示：

3. 量子纠缠与量子纠缠态定义之二

对于两体量子系统的任一纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ ，可以为它指出一个正整数——Schmidt 数，它是 ρ_A （或 ρ_B ）中非零本征值的个数，也是 $|\psi\rangle_{AB}$ Schmidt 分解中的项数。由此，可以给出纠缠态的另一定义：“如果一个两体量子系统的纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 的 Schmidt 数大于 1，它便是纠缠的，否则便是可分离的（或者是未纠缠的）。”于是，一个可分离的两体系统纯态便是 H_A 和 H_B 中纯态的直积：

$$|\psi\rangle_{AB, \text{可分离}} = |\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B,$$

因此，它的约化密度矩阵 $\rho_A = |\phi\rangle_{AA} \langle\phi|$ 和 $\rho_B = |\varphi\rangle_{BB} \langle\varphi|$ 都是纯的。任何不能表示为这种直积形式的态都是纠缠的，相应的 ρ_A 和 ρ_B 是混合的。如果用不严格的话说就是：假如 $|\psi\rangle_{AB}$ 是可分离的，则子系统A和B是未关联的（“不严格”是指：可以举出一个反例，即直积态 $|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B$ ，显然是可分离的，但此时两个自旋彼此完全关联——它们都指向同一方向）。注意，处于纠缠态中的子系统A和B的关联，其特征不同于处于可分离态时的关联。区别在于，纠缠不能被局部地制造出来，只有让A和B彼此相互作用才能使它们纠缠起来。Alice 和 Bob 可以通过对方向的约定来制造出 $|\uparrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B$ 态，但要将这个态转变为（比如 Bell 基中任一个）纠缠态，则必须对这个态施加一个整体的么正变换才能办得到。由 Alice 和 Bob 分别做的任何局部么正变换 $U_A \otimes U_B$ 和任何局部测量都不能够增加两体系统这些双 qubit 态的 Schmidt 数。为了

纠缠两个 qubit (例如, 使其成为 Bell 基中的某一个), 就必须使它们发生直接或间接的相互作用。

注意, 上面的 $|\psi\rangle_{AB, \text{可分离}}$ 为 H_A 和 H_B 中纯态的直积, 这一论述还可以推广到为 H_A 和 H_B 中混态的直积。也就是说, 两体系统的混合态也可以区分为可分离混态与不可分离的混态 (混态纠缠态)。另外, 局部操作不能制造纠缠, 不等于说局部操作不会修改纠缠的形式。

4. 量子纠缠度的定义

从量子信息论的观点来看, 量子纠缠总是强调不同粒子的量子态之间的纠缠, 而不是指单个粒子不同自由度的波函数之间的耦合。同时, 量子纠缠又必表现为粒子态之间的关联, 但粒子态间的关联并不一定等于它们之间存在着纠缠。为了定量的描述纠缠现象, 需要引入纠缠度的概念。所谓纠缠度是指所研究的纠缠态所携带纠缠的量的多少。对纠缠度的描述, 实质上是对不同纠缠态之间建立定量的可比关系。显然, 求混合态的纠缠度要比求纯态的纠缠度困难得多。

一个两体纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 的量子纠缠度 E_ψ 用其中任一子系统的约化密度矩阵的 Von Neumann 熵 S 来定义 (也称作部分熵纠缠度):

$$E_\psi = S(\rho_A) = S(\rho_B), \quad (4.17)$$

其中 $\rho_A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle_{AB} \langle\psi|)$, $\rho_B = \text{Tr}_A(|\psi\rangle_{AB} \langle\psi|)$ 。而 $S(\rho)$ 的定义为:

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = -\text{Tr}(\rho_B \log \rho_B), \quad (4.18)$$

此处求迹内的对数以 2 为底。容易验证, 对任意直积态 $|\psi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$, 纠缠度 $E_\psi = 0$; 对有最大纠缠度的基, 如 $|\psi^+\rangle_{AB}$, 由于其 $\rho_A = \rho_B = \frac{1}{2}I$, 因此 $E_{\psi^+} = 1$; 其他形式的纯态的纠缠度介于 0 和 1 之间。部分熵纠缠表征了系统局域的混乱程度, 它说明: 量子态的纠缠越厉害, 从局部上看“局部态”的“不确定程度”就越大。

一般情况的纠缠度计算并不十分简明。到目前为止, 对两体纯态纠缠性质和程度描述的理论一致认为是相当完善和漂亮的, 但对于多体纯态和混合态的纠缠及纠缠度的描述仍在研讨之中。

4.1.3 玻色—爱因斯坦凝聚体中的两体纠缠

随着量子信息科学的深入，关于量子通讯与量子计算家族中的新成员——玻色—爱因斯坦凝聚系统的纠缠性质的研究也飞速地发展起来[1-2][14-17]。超冷原子之特点，是其动能极小，约为室温原子的 10^{-6} 倍或者更小，所以可以近似认为，系统处于其基态，是一个纯态。对于这种系统来说，其粒子与粒子之间的关联应该与量子纠缠有很大的关系，研究已经表明多粒子纠缠可以在弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体中产生和操控[1, 2]。不过我们现在研究的量子纠缠的度量大都集中在两体纯态的纠缠上面，对于多粒子纯态，纠缠度的定义还有待最后的定论。另一方面，由于玻色—爱因斯坦凝聚体是一种长程相干的物质，整个的凝聚体可以用一个单粒子波函数来描述，处于这种状态的物质中，所有的粒子具有相同的物理特征，是不可分辨的。因此，我们可以将双组分 BEC（双势阱中弱连接的 BEC [如图 3.1] 或者单势阱中通过辐射场耦合的分别处于超精细能级 $|F=1, m_F=-1\rangle$ 和 $|F=2, m_F=1\rangle$ 的原子构成的 BEC[18, 19]）看作是双模的两体系统，这样的两个模成为可以分辨但又相互关联的两个子系统，利用两体纯态的纠缠度的定义，我们可以定量地描述其纠缠特性[20]。

在双模 BEC 系统中，每个模的量子态都可以用其原子占据数来表征。假设系统的总粒子数为 N ，且是守恒的，则系统的任意态 $|\psi\rangle$ 在 Fock 基中可写作：

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle |N-n\rangle, \quad (4.19)$$

其中 c_n 是复系数，模 A 中有 n 个玻色子意味着在模 B 中有 $N-n$ 个玻色子。根据前面的知识，两体系统纯态的纠缠熵定义为：

$$E(\rho_A) = -\text{Tr}[\rho_A \log(\rho_A)] \quad (4.20)$$

$$= -\sum_k \lambda_k \log(\lambda_k), \quad (4.21)$$

这里 $\{\lambda_k\}$ 是约化密度矩阵 ρ_A 的一套本征值。两体系统的纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 的 Schmidt 分解式为：

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \lambda_i |i\rangle_A |i\rangle_B, \quad (4.22)$$

其中 Schmidt 系数 λ_i 是非负的实数，且 $\sum_i \lambda_i^2 = 1$ ； $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i\rangle_B\}$ 分别是子系统 A 和子系统 B 中的两组正交基。约化密度矩阵分别为：

$$\begin{aligned}\rho_A &= \sum_i \lambda_i^2 |i\rangle_{AA} \langle i|, \\ \rho_B &= \sum_i \lambda_i^2 |i\rangle_{BB} \langle i|,\end{aligned}$$

并且 ρ_A 和 ρ_B 具有相同的本征值。在 Fock 基中密度矩阵

$$\rho = |\psi\rangle_{AB} \langle \psi| = \sum_{m,n=0}^N c_m c_n^* |m\rangle |N-m\rangle \langle n| \langle N-n|, \quad (4.23)$$

则约化密度算符

$$\begin{aligned}\rho_A = \text{Tr}_B(\rho) &= \sum_{m,n,k=0}^N c_m c_n^* |m\rangle \langle n| \langle k| N-m \rangle \langle N-n| k \rangle \\ &= \sum_{n=0}^N |c_n|^2 |n\rangle \langle n|.\end{aligned} \quad (4.24)$$

由此可见，在 Fock 基中约化密度算符是对角化的，本征值 $\lambda_i = |c_n|^2$ 。这样双组分 BEC 两模间的纠缠熵写作：

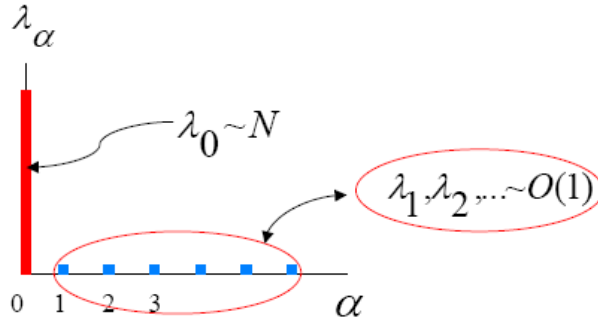
$$E(\rho_A) = -\sum_{n=0}^N |c_n|^2 \log |c_n|^2. \quad (4.25)$$

最大纠缠度为：

$$E_{\max} = -\sum_{n=0}^N \frac{1}{N+1} \log \left(\frac{1}{N+1} \right) = -\log \left(\frac{1}{N+1} \right) = \log(N+1). \quad (4.26)$$

第二节 单凝聚态与破裂凝聚态

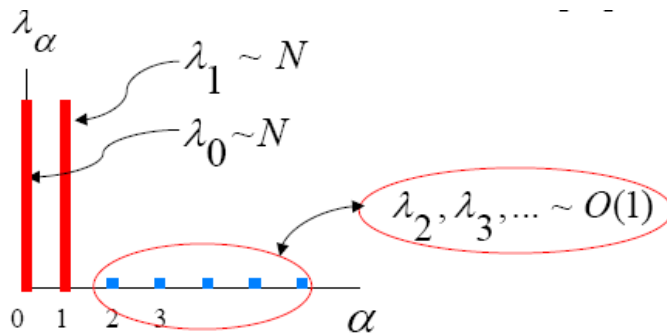
1956 年，Penrose 和 Onsager[21] 将玻色—爱因斯坦凝聚的概念成功地推广到相互作用的玻色系统中。他们指出，若 N 个玻色子组成的系统的单粒子密度矩阵有单一的宏观本征值（与 N 同量级），则可以认为其发生了玻色—爱因斯坦凝聚，相应的本征函数为粒子宏观占据的量子态。单凝聚基态通常用相干态来表示，因此也把“单凝聚态”称作“相干凝聚态”。我们用下面的示意图 4.1 来表示这一结论：



$$\begin{aligned} \langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}') \rangle &= \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}) \varphi_{\alpha}(\vec{r}') & \lambda_{\alpha} &: \text{eigenvalues} \\ &= \lambda_0 \varphi_0^*(\vec{r}) \varphi_0(\vec{r}') + O(1) & \varphi_{\alpha}(\vec{r}) &: \text{eigenfunctions} \end{aligned}$$

图 4.1 单凝聚态的特征（引自 Prof. T.-L. Ho 的报告资料）

但如果系统的单粒子密度矩阵有多于一个的宏观本征值（如示意图 4.2），情况会怎样呢？1982 年，Nozieres 和 Saint James 的研究[22]指出这种“破裂”凝聚的情况在具有排斥相互作用的标量玻色—爱因斯坦凝聚体中是不会发生的。迄今为止，单凝聚态的理论实验与磁束缚的碱金属原子的 BEC 的实验结果符合得还是很好的。后来光束束缚技术的发展，导致实验上获得了具有自旋自由度的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体[23, 24]，为“破裂凝聚态”性质的研究开辟了道路。



$$\begin{aligned} \langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}') \rangle &= \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}) \varphi_{\alpha}(\vec{r}') \\ &= \lambda_0 \varphi_0^*(\vec{r}) \varphi_0(\vec{r}') + \lambda_1 \varphi_1^*(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}') + \dots \end{aligned}$$

图 4.2 破裂凝聚态的特征（引自 Prof. T.-L. Ho 的报告资料）

第三节 等效两组分模型

考虑自旋 $F=1$ 的反铁磁相互作用 (^{23}Na) 的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体, 其哈密顿量的二次量子化形式为:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext}(\bar{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) \\ & + \frac{c_0}{2} \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) \\ & + \frac{c_2}{2} \int d\bar{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}) \bar{F}_{\alpha\alpha'} \cdot \bar{F}_{\beta\beta'} \hat{\Psi}_{\beta'}(\bar{r}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\bar{r}), \end{aligned} \quad (4.27)$$

这里 $\hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) (\alpha=0, \pm 1)$ 代表处于超精细自旋态 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$ 的原子的场湮灭算符, 且 $c_2 > 0$ 。文献[25]引入满足 $SU(2)$ 对称性的赝角动量算符:

$$\hat{S}_+ = \sqrt{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{-1} \right), \hat{S}_- = \sqrt{2} \left(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_0 \right), \hat{S}_z = \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_{-1} \right), \quad (4.28)$$

得到哈密顿量

$$\hat{H} \propto c_2 \hat{S}^2. \quad (4.29)$$

可见系统的基态为自旋单态 (spin singlet), 记为

$$|S=0\rangle = \Theta^{N/2} |0\rangle, \quad (4.30)$$

其中 $\Theta = 2a_1^\dagger a_{-1}^\dagger - a_0^{\dagger 2}$ 。由此得到

$$\langle a_\alpha^\dagger a_\beta \rangle = \frac{N}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

所以系统单粒子密度矩阵有三个相同本征值 $N_0 = N_1 = N_{-1} = N/3$, 且 $\Delta N_1^2 \sim N^2$, 显然, 自旋单态是破裂凝聚基态, 粒子数涨落很大。这与 T.-L. Ho 在文献[26]中阐述的单旋量凝聚图像 (这是平均场近似的结果, 与实验[24]符合很好) 是有很大的不同的。单旋量凝聚态可以用旋量相干态来描述, $|\zeta\rangle = \frac{a_0^{\dagger N} |0\rangle}{\sqrt{N!}}$, 且 $\Delta N_1^2 \sim N$ 。

如果整个系统处于均匀磁场中, 那么其基态情况又会怎样呢? 均匀磁场与系统的相互作用可以表示为:

$$\hat{H}_B = -\gamma \bar{\mathbf{B}}_0 \cdot \bar{\mathbf{S}}, \quad (4.32)$$

这里 γ 是原子的回磁比， $\bar{\mathbf{B}}_0 = B_0 \bar{\mathbf{z}}$ ， $\bar{\mathbf{S}} = \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{\mathbf{r}}) \bar{\mathbf{F}}_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\bar{\mathbf{r}})$ 。采用单模近似，即 $\hat{\Psi}_\alpha(\bar{\mathbf{r}}) \approx \phi(\bar{\mathbf{r}}) \hat{a}_\alpha$ ，其中 $\phi(\bar{\mathbf{r}})$ 表示与自旋无关的凝聚体空间波函数， \hat{a}_α 是磁量子数 $m_F = \alpha$ 的自旋组分的湮灭算符，则总哈密顿量 $\hat{H}_{tot} = \hat{H}_0 + \hat{H}_B$ 化简作：

$$\hat{H}_{tot} = \frac{U_0}{2} \hat{N}(\hat{N}-1) + \frac{U_2}{2} \left(\hat{S}^2 - 2\hat{N} \right) - \gamma \bar{\mathbf{B}}_0 \cdot \bar{\mathbf{S}}, \quad (4.33)$$

其中 $\hat{N} = \sum_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$ 表示总粒子数算符， $U_i = c_i \int |\phi(\bar{\mathbf{r}})|^4 d^3\bar{\mathbf{r}}$ ($i=0,2$)。由此可见，在均匀磁场中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的基态为 $|G\rangle = |S^{total} = S; S_z = S\rangle$ ，当 S 取整数时系统能量最低 $\langle \hat{H}_{tot} \rangle_G = \frac{U_2}{2} S(S+1) - \gamma B_0 S + Const$ 。同样可以证明[27]：

$$|S, S\rangle = \frac{1}{\sqrt{f(Q; S)}} a_1^{\dagger S} \Theta^{\dagger Q} |vac\rangle, \quad (4.34)$$

其中 $Q = (N-S)/2$ ，归一化常数

$$f(Q; S) = S! Q! 2^Q \frac{(2Q+2S+1)!!}{(2S+1)!!}. \quad (4.35)$$

基态 $|G\rangle = |S; S\rangle$ 的单粒子密度矩阵是对角化的 $\hat{\rho}_{\alpha\beta} = \langle a_\alpha^\dagger a_\beta \rangle_G = N_\alpha \delta_{\alpha\beta}$ ，且

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{N(S+1) + S(S+2)}{2S+3}, \\ N_{-1} &= \frac{(N-S)(S+1)}{2S+3}, N_0 = \frac{N-S}{2S+3}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

粒子数涨落

$$\begin{aligned} \left(\Delta \hat{N}_1 \right)^2 &= \left(\frac{N}{2S+3} \right)^2 \left(\frac{S+1}{2S+5} \right) \\ &+ \left(\frac{3N}{(2S+3)^2} \right) \left(\frac{S+1}{2S+5} \right) + \left(\frac{S^2-3S}{(2S+3)^2} \right) \left(\frac{S+1}{2S+5} \right), \end{aligned} \quad (4.37)$$

且 $(\Delta \hat{N}_1)^2 = (\Delta \hat{N}_{-1})^2 = (\Delta \hat{N}_0)^2 / 4$ 。式 (4.36) 和式 (4.37) 共同表明基态 $|G\rangle = |S; S\rangle$ 的行为依赖于系统的磁化强度 S/N 。当 $S=0$ 时, 系统有三个相同的宏观本征值, 与文献 [25] 结论一致, $N_0 = N_1 = N_{-1} = N/3$, 粒子数涨落 $\Delta \hat{N}_\alpha \sim N$; 随着 S 的增加, 直到达到一个宏观值, $N_{\pm 1} \rightarrow (N \pm S)/2$, 而 N_0 与 $\Delta \hat{N}_\alpha \rightarrow 1$ 。既然对于所有的磁化强度, 系统都有多于一个的宏观本征值, 那么它的基态 $|G\rangle = |S; S\rangle$ 就是破裂凝聚态 [22]。在热力学极限下, 把 $S/N=0$ 时的破裂基态称作超破裂凝聚态 (superfragmented), $S/N \neq 0$ 则对应相干破裂凝聚态 (coherent fragmented) [27]。当系统粒子数涨落 $\Delta \hat{N}_\alpha$ 极小, 系统处于相干破裂凝聚时, 其基态 $|G\rangle = |S; S\rangle$ 可以用 Fock 态来近似描述,

$$|S; S\rangle \rightarrow |N_1, N_{-1}, 0\rangle \equiv \frac{a_1^{\dagger N_1} a_{-1}^{\dagger N_{-1}}}{\sqrt{N_1! N_{-1}!}} |vac\rangle, \quad (4.38)$$

其中 $N_{\pm 1} = (N \pm S)/2$, $|N_1, N_{-1}, 0\rangle$ 表示分别有 N_α 个玻色子处于自旋态 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$, ($\alpha=1, -1, 0$)。这时, 在 Fock 空间, 哈密顿量 (4.33) 可以写作:

$$\hat{H}_{tot} = \frac{U_2}{2} (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1})^2 - \gamma B_0 (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1}). \quad (4.39)$$

旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中基态“破裂”的根源为自旋守恒, 这也意味着密度矩阵是对角的 (这正是破裂凝聚态的特征, 式 (4.36)), 因为算符 $\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta$ ($\alpha \neq \beta$) 会改变系统的总自旋 \hat{S}_z 。所以为了使系统从破裂凝聚态转变为单凝聚态, 就要实现从 1 到 -1 的自旋反转过程, 很自然会考虑磁场梯度产生的影响, 因为在 MIT 实验 [24] 中磁场梯度确实是存在的。假定不均匀磁场为 $B(\vec{r}) = B_0 \vec{z} + G(x\vec{x} - z\vec{z})$, 通过一个么正变换 $\hat{U} = \prod_{i=1}^N e^{-i\theta(\vec{r}_i) \cdot \vec{S}_i}$, 其中 $\theta = \vec{z} \times B(\vec{r}) = Gx\vec{y}$, 则系统的哈密顿量 (4.39) 变为,

$$\hat{H}'_{tot} = -\frac{\chi}{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{-1} + \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_1 \right) + \frac{U_2}{2} (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1})^2 - \gamma B_0 (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1}), \quad (4.40)$$

其中 $\chi = \hbar^2 G^2 / 2m$, 并且可以进一步证明, 这时系统的基态转变为单凝聚态, 可以用相干态来描述 [27]。旋量玻色—爱因斯坦凝聚体在空间不均匀磁场作用下的等效

哈密顿量 (4.40) 与双势阱中单分量 BEC 的模型是等效的, 这里超精细自旋态 $|F=1, m_F=1\rangle$ 和 $|F=1, m_F=-1\rangle$ 分别代表两个阱。对应双势阱模型, 参数 $\chi/2$, $U_2/2$ 和 γB_0 分别具有隧穿幅度、原子相互作用和势阱间化学势差的物理意义。下面我们将从旋量 BEC 中这个等效双组分哈密顿量出发, 研究 (± 1) 自旋组分间的纠缠性质。

文献[27]还表明, Fock 态与相干态在每个自旋组分都具有相同的原子占据数, 因此在实验[24]中仅仅通过各自旋组分密度的测量是不能区分这两种基态的。然而 Fock 态没有相位相干性, 同时在不均匀磁场作用下的相干态却允许不同自旋组分发生约瑟夫森隧穿, 从这点可以看出二者的本质区别。

第四节 纠缠动力学

为研究处于自旋态 $|F=1, m_F=1\rangle$ 和自旋态 $|F=1, m_F=-1\rangle$ 的原子的纠缠动力学, 将哈密顿量 (4.40) 在角动量表象中重新表达。首先, 引入满足 Schwinger 关系的角动量算符:

$$\begin{aligned} \hat{J}_x &= \frac{1}{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{-1} + \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_1 \right), \\ \hat{J}_y &= \frac{1}{2i} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{-1} - \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_1 \right), \\ \hat{J}_z &= \frac{1}{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_{-1} \right), \end{aligned} \quad (4.41)$$

这些算符同时满足 $SU(2)$ 对易关系。Casimir 不变量为

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

其中 $\hat{N} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_{-1}$ 是总粒子数算符, 是一个守恒量。这样哈密顿量 (4.40) 可写作角动量模型

$$\hat{H} = \omega \hat{J}_z + \lambda \hat{J}_z^2 - \frac{\chi}{2} \left(\hat{J}_+ + \hat{J}_- \right), \quad (4.42)$$

其中 $\omega = -2\gamma B_0$, $\lambda = 2U_2$, $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$, 总角动量 $j = N/2$ 。

单凝聚态的时间演化可用含时薛定谔方程来描述($\hbar=1$)

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad (4.43)$$

其形式解为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-j}^j C_m(t)|j, m\rangle, \quad (4.44)$$

其中 $|j, m\rangle$ 是算符 \hat{J}_z 的本征态, $-j \leq m \leq j$ 。将(4.44)代入含时薛定谔方程(4.43)中, 可得到 $(2j+1)$ 个线性微分方程:

$$i\frac{d}{dt}C_m(t) = (\omega m + \lambda m^2)C_m(t) - \frac{\chi}{2} \left[\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}C_{m-1}(t) + \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}C_{m+1}(t) \right]. \quad (4.45)$$

可见, 角动量表象中态的展开系数与时间的依赖关系可通过对(4.45)式的数值求解得到。将等效哈密顿量(4.40)看作两模系统, 每个模分别对应的一个自旋态。如第一节所述, 两模系统纯态的纠缠度的标准量度为任一子系统的约化密度算符的冯·诺依曼(Von Neumann)熵。两模间纠缠度的动力学 $E(t)$ 可从角动量基中的展开系数计算得到:

$$E(t) = - \sum_{m=-j}^j |C_m(t)|^2 \ln |C_m(t)|^2. \quad (4.46)$$

最大纠缠度为

$$E_{\max} = \log(2j+1) = \log N. \quad (4.47)$$

下面我们将分别讨论磁场强度、磁场梯度及不同的初态对纠缠动力学的影响。首先, 考虑初态 $|\psi(0)\rangle = |j, m=0\rangle$, 这表示 $|\alpha=1\rangle$ 和 $|\alpha=-1\rangle$ 组分有相等的原子数目。根据 ^{23}Na 原子 s -波散射长度的实验数据[28], $a_0 = (50.0 \pm 1.6)a_B$, $a_2 = (55.0 \pm 1.7)a_B$, 反铁磁相互作用 U_2 约为 $2.5 nK$ 。又根据文献[24]估算可知, 磁场的影响将是 U_2 的十到一百倍。因此我们选取适当的参数范围, 并在此范围内, 一方面固定磁场强度 B_0 , 改变磁场梯度 G ; 另一方面保持 G 不变而调整 B_0 , 来看磁场的这两个参数对纠缠动

力学的影响。图 4.3 表示纠缠度在参数 χ （它是磁场梯度 G 的函数）分别为(a) 0.02, (b) 0.2, (c) 1.0 时的时间演化行为，其中参数 ω （它与磁场强度 B_0 成正比）的值是固定的。能量单位是 $250 nK$ 。从中我们可以看出纠缠熵随着 χ 的增加是增大的。特别地，当 $\chi = 0$ ，即磁场均匀，没有梯度时，纠缠度为零，这时系统的基态可以很好地用 Fock 态来描述，而随着磁场梯度地增加，系统的基态逐渐地转变为相干态，后者是存在相位相干性的[27]。相反地，随着磁场强度的增加，纠缠度是减小的，这点可以从图 4.4 中看到。图 4.4 表示的是纠缠度在参数 ω 分别为(a) 0.5, (b) 1.0, (c) 1.5 时的时间演化，这里参数 χ 是固定的。

图 4.5 的主要目的是研究系统初态对纠缠动力学的影响。我们选取另外两种具有代表性的初态 $|j, m = -N/2\rangle$ 和 $SU(2)$ 相干态与初态 $|j, m = 0\rangle$ 进行比较。 $SU(2)$ 相干态是角动量算符的本征态， $\hat{J} \cdot \hat{n} |n\rangle = j |n\rangle$ ，对应的本征值 $j = N/2$ ，其中 $\hat{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 表示 (θ, φ) 方向的单位矢量，

$$|n\rangle = \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{j+m} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{j-m} e^{i(j-m)\varphi} |j, m\rangle. \quad (4.48)$$

根据文献[29], 取 $\varphi = 0$ ， $\cos \theta = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + \chi^2}}$ 。显然，初态为 $|j, m = 0\rangle$ 时纠缠度最大。

从上面的分析知道，适当地选取系统的初始状态，增加磁场梯度并减小磁场强度，自旋(± 1) 组分间的纠缠度就可达到其最大值。

第五节 产生纠缠原子态

量子纠缠现象在量子理论与信息科学中扮演着非常重要的角色，产生与操控量子纠缠态成为当今科学研究的兴趣所在。近年来在许多宏观量子系统，如腔 QED[30]、离子阱[31]、量子点[32]及约瑟夫森结[33]等中产生量子纠缠都取得了长足的进展。当然 BEC 也是非常理想的实现多粒子纠缠与非经典原子态的量子系统，在理论上提出了许多的实验方案，还有待实验进一步的验证。

这些方案从本质上来说可以分为两类：第一种办法就是控制量子系统的动力学，

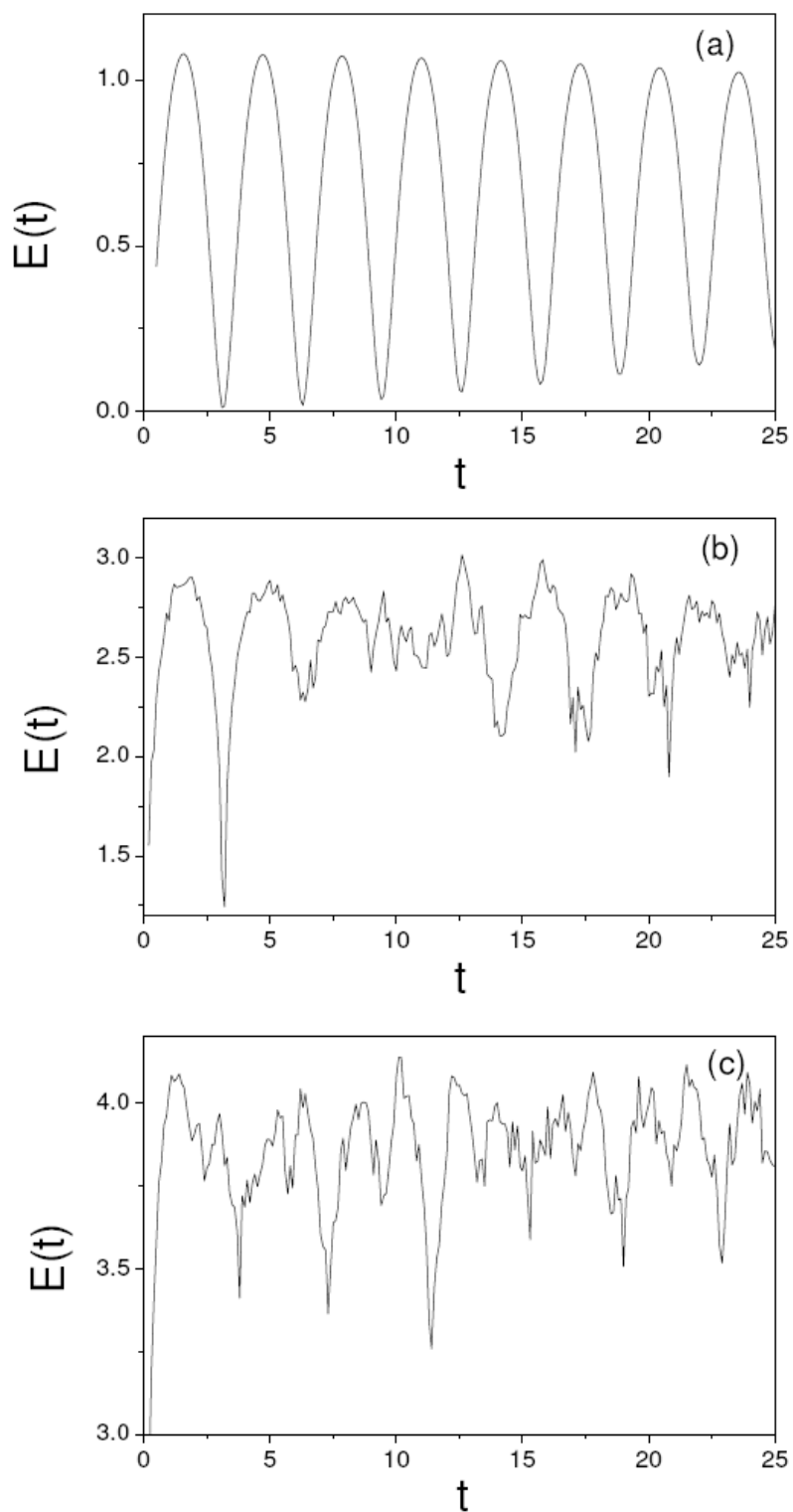


图 4.3 纠缠熵在初态 $|\psi(0)\rangle = |j, m=0\rangle$ 下的时间演化，参数 $\omega = -2.0, \lambda = 0.02$ ，

$\chi = 0.02$ (a), $\chi = 0.2$ (b), $\chi = 1.0$ (c)。能量单位是 $250 nK$ 。总原子数为 $N = 100$ 。

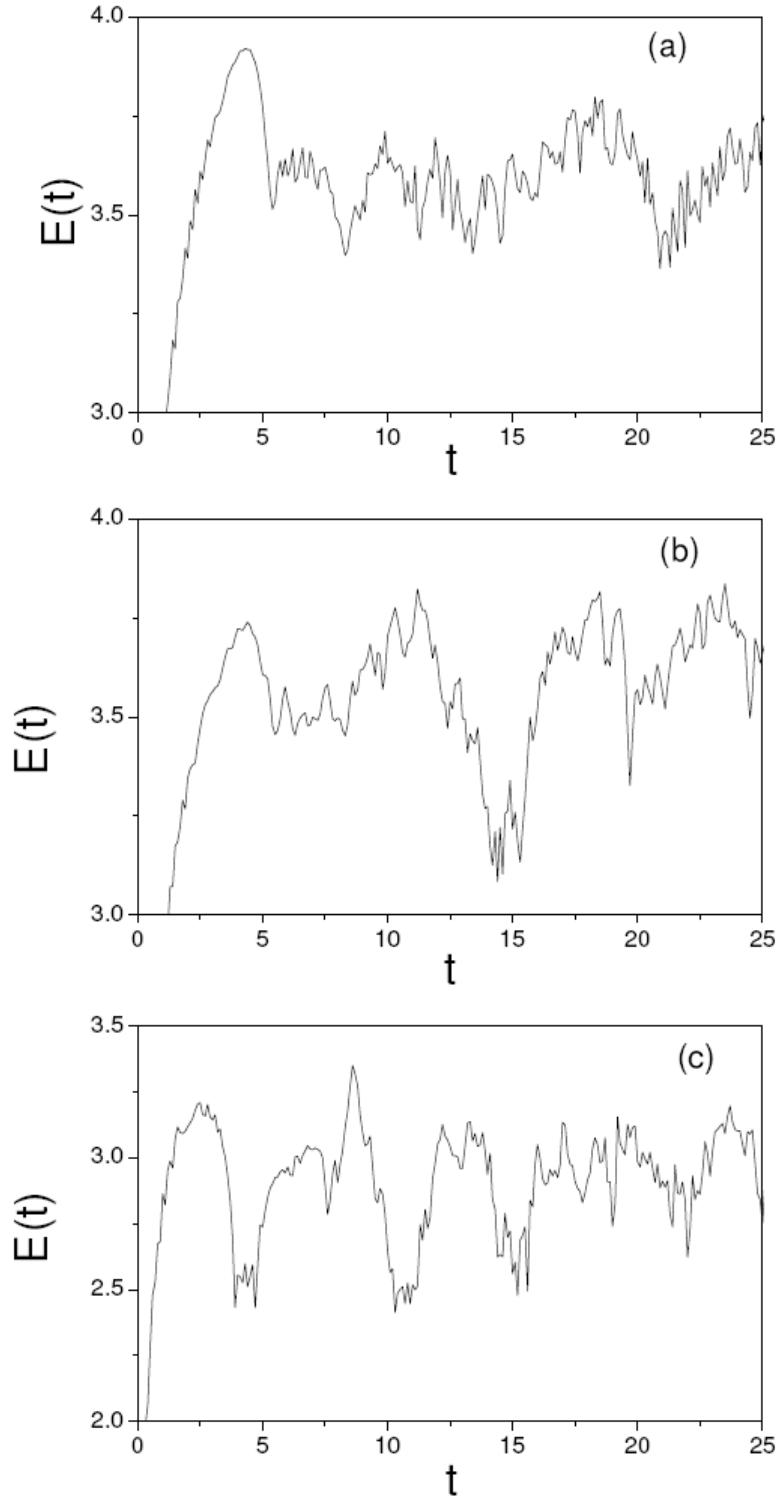


图 4.4 纠缠熵在初态 $|\psi(0)\rangle = |j, m=0\rangle$ 下的时间演化，参数 $\lambda = 0.02, \chi = 0.2$ ， $\omega = 0.5$ (a), $\omega = 1.0$ (b), $\omega = 1.5$ (c)。能量单位是 $250 nK$ 。总原子数为 $N = 100$ 。

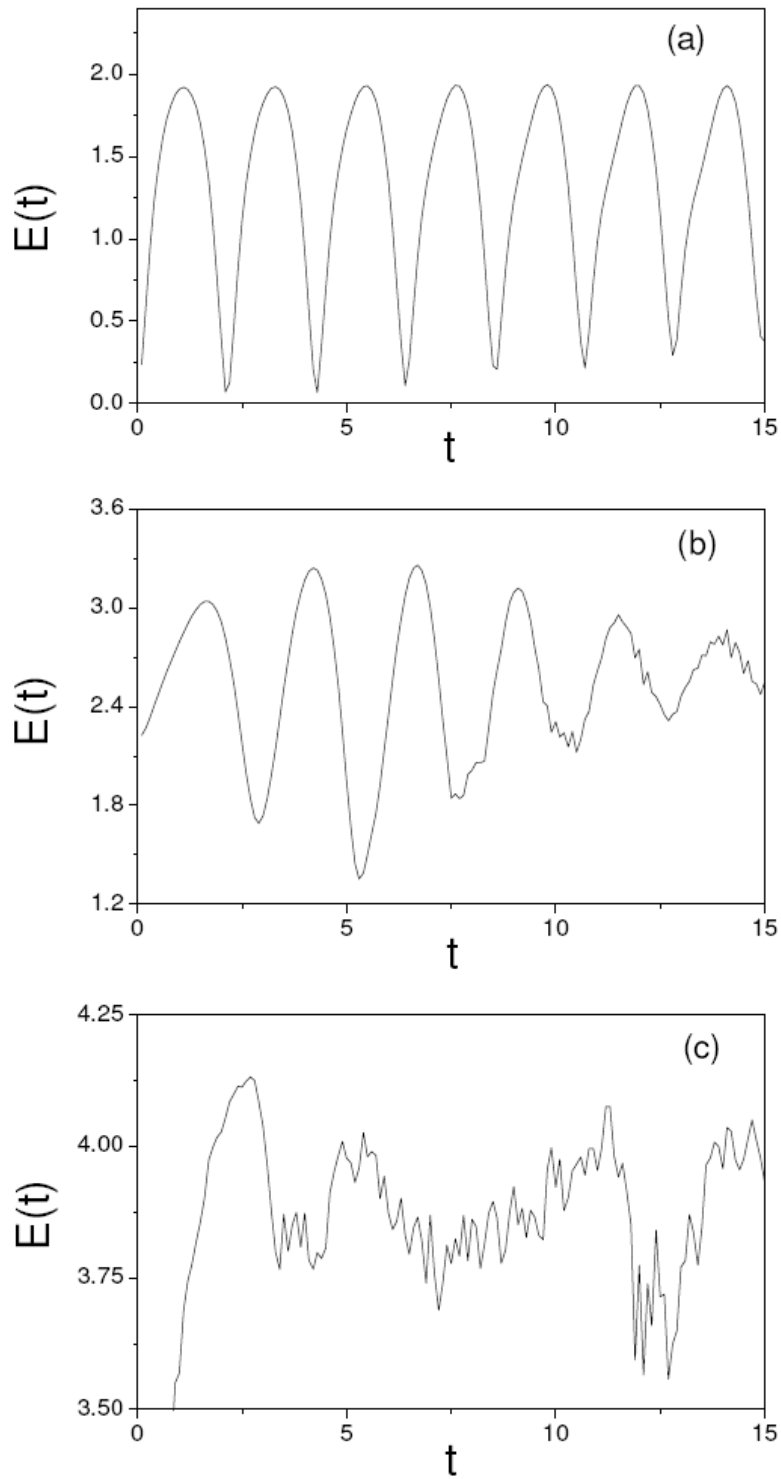


图 4.5 纠缠熵在不同初态下的时间演化, $|\psi(0)\rangle = |j, m = -N/2\rangle$ (a), $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$ (b), $|\psi(0)\rangle = |j, m = 0\rangle$ (c), 参数 $\omega = -1.0, \lambda = 0.02, \chi = 0.5$ 。能量单位是 $250 nK$ 。总原子数为 $N = 100$ 。

使初始分离的态相干演化至纠缠态[1-2][14-17]，其中在旋量 BEC 中产生自旋 $\alpha = \pm 1$ 组分间的原子纠缠态也已有许多提议[34-37]。例如，文献[34]中初始时刻极化的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体完全布居于自旋 $\alpha = 0$ 组分，通过远共振激光的作用使自旋态 $|F=1, m_F=0\rangle$ 的能级高于自旋态 $|F=1, m_F=\pm 1\rangle$ 的能级，利用自旋交换相互作用最终产生了自旋 $\alpha = \pm 1$ 组分间的原子纠缠态。Duan 等人[35]则证实从自旋 1 玻色—爱因斯坦凝聚体适当制备的初态出发，经过自由动力学演化可以产生并检测压缩型纠缠及连续变量型纠缠。同时，基于光晶格中 BEC 量子相变的实验进展，L. You 提议从处于 Mott—绝缘态的凝聚体出发，利用激光脉冲产生的原子 Raman 跃迁，获得最大纠缠的原子对及原子簇群[36]。

第二种方案就是将量子系统的基态转化为纠缠原子态[38-40]。文献[40]中利用简单的相位操控——相位刻印[41]的方法从双势阱 BEC 的相干基态中产生出纠缠原子态。在这一节，我们将相位刻印的方法引入旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的等效双组分模型 (4.40) 中，通过对 Husimi 相空间的直观分析，阐明在自旋 $\alpha = \pm 1$ 组分间产生原子纠缠态的可能性。最终期望实现的原子纠缠态的形式为：

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|N_1, N - N_1\rangle + |N - N_1, N_1\rangle), \quad (4.49)$$

其中 $|N_1, N_{-1}\rangle$ 表示有 N_1 个原子处于自旋态 $|F=1, m_F=1\rangle$ ，同时 N_{-1} 个原子处于自旋态 $|F=1, m_F=-1\rangle$ 的 Fock 态（数态），总粒子数 $N = N_1 + N_{-1}$ 。

等效双组分模型 (4.40) 的基态是相干凝聚态，可以表示为所有 Fock 态的叠加：

$$|\Psi\rangle = \sum_{N_1=0}^N C_{N_1}^{(l)} |N_1, N - N_1\rangle, \quad (4.50)$$

其中

$$|N_1, N - N_1\rangle = \frac{a_1^{\dagger N_1} a_{-1}^{\dagger(N-N_1)}}{\sqrt{N_1!(N-N_1)!}} |vac\rangle. \quad (4.51)$$

通过对角化一个 $(N+1) \times (N+1)$ 的三对角矩阵，我们很容易得到哈密顿量 (4.40) 在 Fock 基中的本征值和本征矢量。图 4.6 分别描绘了基态本征态与激发态本征态的 Fock 基展开系数，其中系统参数为 $\omega = -2.0$, $\lambda = 0.2$ 及 $\chi = 0.5$ ，总粒子数为 $N = 100$ 。由此

可见，能量较低的态，图 4.6 (a)和(b)，类似于谐振子振荡的波函数，而能量较高的态，图 4.6 (c)和(d)，则接近于原子的宏观量子叠加态。

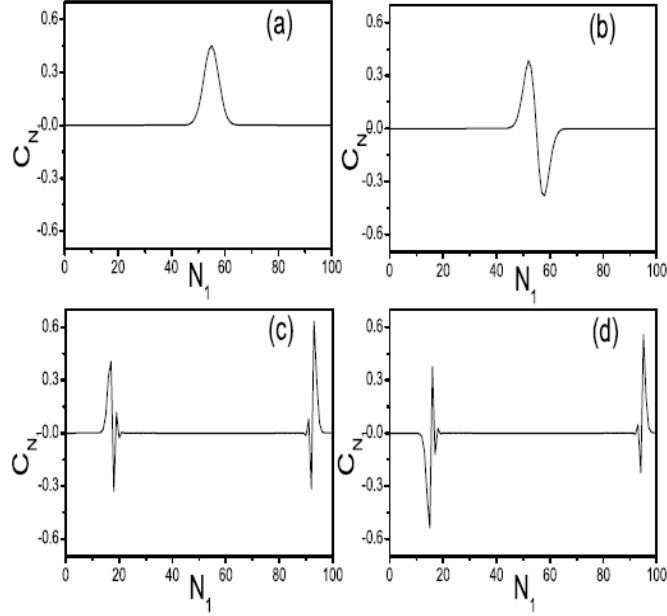


图 4.6 本征态的 Fock 基展开系数，(a)基态，(b)第一激发态，(c)第 77 个本征态 (d)第 81 个本征态，总粒子数为 100。

Husimi 分布函数[42, 43]是一种相空间的几率分布函数，它能够把系统的量子信息通过经典语言表达出来，因此我们将利用这种分布函数建立系统本征态的量子——经典的联系。在相干态表象中，Husimi 分布函数可以写作：

$$P_l(n, \theta) = \left| \langle \theta + in | \Psi_l \rangle \right|^2, \quad (4.52)$$

其中

$$\langle \theta + in | \Psi_l \rangle = \frac{1}{(\pi\kappa)^{1/4}} \sum_{n'=-N/2}^{N/2} C_n^l \exp \left[i\theta n' - \frac{(n'-n)}{2\kappa} \right], \quad (4.53)$$

且 $n' = (N_1 - N_{-1})/2$ ， C_n^l 是第 l 个本征态对应的那组 Fock 基展开系数。

$\kappa = \sigma \sqrt{U_2 \chi N^2}$ ， σ 表示基态的展宽与二项式分布态的比率[40]。采用与图 4.6 中相同的参数，我们在图 4.7 中画出了系统各本征态相应的 Husimi 分布，分别为 (a)基态，(b)第 10 个本征态，(c)第 20 个本征态，(d)第 77 个本征态。在经典力学中，形如(4.40)式的哈密顿量可以认为描述的是非刚性摆动[44]。图 4.7 表示的相空间的 Husimi 投

影证实了系统具有物理摆的运动特性。低激发态，图 4.7 (a)和(b)，对应非刚性摆的谐振子振动，而高激发态，图 4.7 (c)和(d)，则对应摆在两个相反方向的旋转运动的叠加，是一种宏观量子叠加态，也正是我们想要的原子纠缠态。

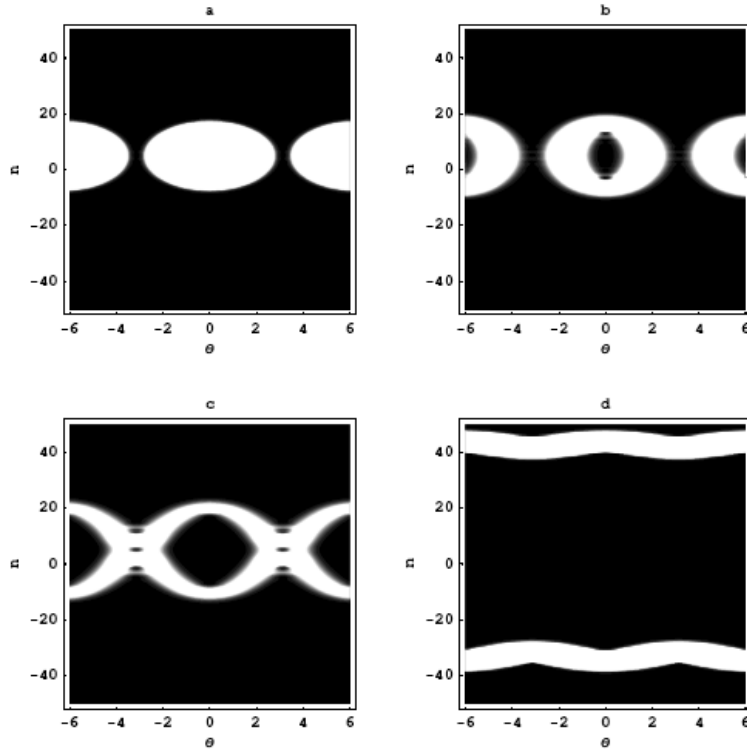


图 4.7 不同能量本征态的 Husimi 几率分布，(a)基态，(b)第 10 个本征态，(c)第 20 个本征态，(d)第 77 个本征态。

实际上我们并不能够获得高激发态，但是可以利用相位操控的办法从基态产生原子纠缠态。对自旋 1 的 BEC 来说，通过一个短而强的均匀磁场脉冲可以使不同的超精细自旋态之间获得相位差[27]，对 $|F=1, m_F=1\rangle$ 自旋态引入 π 相位，那么相空间中基态的中心位置 $(0,0)$ 将移至不稳定的平衡点 $(0,\pi)$ 。从数学上来讲，这样的过程对应着将基态本征态的每一个 Fock 基展开系数都乘以 $e^{-iN_1\pi}$ [40]。之后随着磁场梯度的连续变化，正如我们所期望的那样，被移置的基态波包将发生分叉，直到最终产生纠缠的原子态。图 4.8 表示基态本征态时间演化的 Husimi 相图，表明了纠缠原子态的产生过程。总粒子数仍为 100。图 4.8 (a)基态，(b)刻印 π -相位后的基态，(c) \rightarrow (e)

基态的时间演化, (f)原子纠缠态产生。这里采用的系统参数是 $\omega = -2.0, \lambda = 0.2$, 磁场梯度参数随时间的变化规律为 $\chi = 3\exp(-1-3t)$ 。还要指出的是, 不同的磁场参数和磁场梯度的时间变化规律将导致纠缠态尖度 (sharpness) 与极值 (extremity) 的不同。另外, 为尽可能避免退相干的发生, 最好使纠缠态的极值小一些[40]。

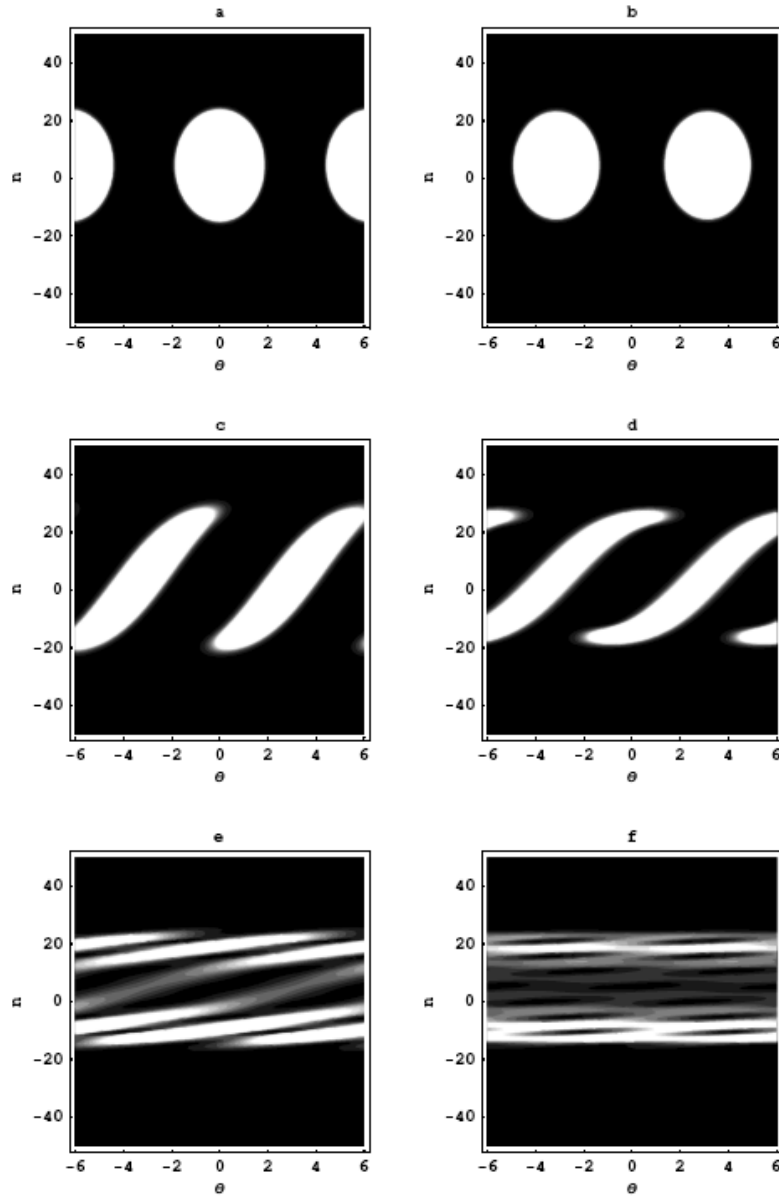


图 4.8 原子纠缠态的产生过程——基态本征态时间演化的 Husimi 相图, (a) $t = 0$ 时刻的基态, (b)刻印 π -相位后的基态, (c) $t = 0.4$ 时刻基态波包分叉, (d) $t = 0.6$ 时刻基态波包沿分界线运动, (e) $t = 1.9$ 时刻分叉波包变得局域 (f) $t = 2.6$ 时刻原子纠缠态产生。

第六节 小结

在这一章，我们首先介绍了量子纠缠的基本概念，特别是两体纯态量子纠缠的性质及量子纠缠度的计算方法，在此基础上研究了自旋为 1 的反铁磁相互作用的旋量玻色—爱因斯坦凝聚体在有梯度的磁场作用下的纠缠特性。结果表明(± 1)自旋组分间纠缠熵的动力学受到系统初态和磁场参数的影响。进而我们论证了利用相位刻印方法在旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中产生原子纠缠态的可能性。由于磁场有很好的操控性，因此我们期望在现有的实验技术条件下能够获得这种宏观纠缠态。

参考文献

- [1] A. Sørensen, L.-M. Duan, J.I. Cirac, and P. Zoller, *Nature* (2001) 409, 63.
- [2] L.-M. Duan, A. Sørensen, J.I. Cirac, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 85, 3991.
- [3] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Phys. Rev.* (1935) 47, 777.
- [4] 张永德、吴盛俊、侯广、黄民信,《量子信息论》, 华中师范大学出版社 2002。
- [5] R. Feynman, In. *J. Theo. Phys.* (1982) 21, 467.
- [6] D. Deutsch, *Proc. Roy. Soc. Lond. A.* (1985) 400, 97.
- [7] D. Deutsch and R. Jozsa, *Proc. Roy. Soc. Lond. A.* (1992) 439, 55.
- [8] S. Lloyd, *Science* (1993) 261, 1569.
- [9] A. Ekert, and R. Jozsa, *Rev. Mod. Phys.* (1996) 68, 733.
- [10] C. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, and W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* (1993) 70, 1895.
- [11] C.H. Bennett and S.J. Wiesner, *Phys. Rev. Lett.* (1992) 69, 2881.
- [12] C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo, J. Smolin, W.K. Wootters, *Phys. Rev. A* (1996) 54, 3824.
- [13] S.J. Wu, X.M. Chen, and Y.D. Zhang, *Phys. Lett. A* (2000) 275, 244.
- [14] K. Molmer and A. Sørensen, *Phys. Rev. Lett.* (1999) 82, 1835.
- [15] K. Helmerson and L. You, *Phys. Rev. Lett.* (2001) 87, 170402.
- [16] D. Gordon and C.M. Savage, *Phys. Rev. A* (1999) 59, 4623.
- [17] A. Micheli, D. Jaksch, J.I. Cirac, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* (2003) 67, 013607.
- [18] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* (1997) 275, 637.
- [19] D.S. Hall, M.R. Matthews, J.R. Ensher, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 1539.
- [20] A.P. Hines, R.H. McKenzie, and G.J. Milburn, *Phys. Rev. A* (1999) 67, 013609.
- [21] O. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.* (1956) 104, 576.
- [22] P. Nozieres and D. Saint James, *J. Phys. (Paris)* (1982) 43, 1133; P. Nozieres, in *Bose-Einstein Condensation*, edited by A. Griffin, D.W. Snoke, and S. Stringari

- (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1996).
- [23] D.M. Stamper-Kurn, M.R. Andrews, A.P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 80, 2027.
- [24] J. Stenger, S. Inouye, D.M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A.P. Chikkatur, and W. Ketterle, *Science* (1998) 396, 345.
- [25] C.K. Law, H. Pu, and N.P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 5257.
- [26] T.-L. Ho, *Phys. Rev. Lett.* (1998) 81, 742; T. Ohmi and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* (1998) 67, 1822.
- [27] T.-L. Ho and S.K. Yip, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 84, 4031.
- [28] A. Crubellier, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, M. Elbs, H. Knockel, and E. Tiemann, *Eur. Phys. J. D* (1999) 6, 211.
- [29] Z.-D. Chen, J.-Q. Liang, S.-Q. Shen, and W.-F. Xie, *Phys. Rev. A* (2004) 69, 023611.
- [30] Q.A. Turchette, C.J. Hood, W. Lange, H. Mabuchi, and H.J. Kimble, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 75, 4710.
- [31] C. Monroe, D.M. Meekhof, B.E. King, W.M. Itano, and D.J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* (1995) 75, 4714.
- [32] D. Loss and D.P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* (1998) 57, 120.
- [33] Y. Makhlin and G. Schon, *Nature (London)* (1998) 398, 305; H. Li, S.Q. Shen, J.-Q. Liang, W.-M. Liu, *Phys. Rev. B* (2005) 72, 014546.
- [34] H. Pu and P. Meystre, *Phys. Rev. Lett.* (2000) 85, 3987.
- [35] L.-M. Duan, J.I. Cirac, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* (2002) 65, 033619.
- [36] L. You, *Phys. Rev. Lett.* (2003) 90, 030402.
- [37] X.B. Zou, K. Pahlke, and W. Mathis, *Phys. Rev. A* (2002) 69, 053608.
- [38] J.I. Cirac, M. Lewenstein, K. Molmer, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* (1997) 57, 1208.
- [39] C.P. Search, A.G. Rojo, and P.R. Berman, *Phys. Rev. A* (2001) 64, 013615.
- [40] K.W. Mahmud, H. Perry, and W.P. Reinhardt, *Rev. A* (2003) 71, 023615; *ibid.*, *J. Phys. B* (2003) 36, L265.
- [41] J. Denschlag, J.E. Simsarian, D.L. Feder, C.W. Clark, L.A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E.W. Hagley, K. Helmerson, W.P. Reinhardt, S.L. Rolston, B.I. Schneider, and

- W.D. Phillips, *Science* (2000) 297, 97.
- [42] K. Husimi, *Proc. Physico-Math. Soc. Japan* (1940) 22, 264.
- [43] H. Lee, *Phys. Rep.* (1995) 259, 147.
- [44] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S.R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 79, 4950.

第五章 两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体的能谱与纠缠度

量子力学是支配物质世界运动和变化规律的基本法则，而描述宏观现象的经典力学一般地说只是量子力学在宏观尺度下的近似。通常宏观系统的量子效应并不显著，但在特定的系统中，量子现象也可以在宏观尺度下表现出来，称为宏观量子效应。例如，超导体中的约瑟夫森(Josephson)隧穿，液氦中的超流动性，纳米磁体磁化矢量的隧穿以及玻色—爱因斯坦凝聚等都是众所周知的宏观量子效应的例子。量子态的相位及相干是量子力学的核心概念，也是量子信息科学的基础。20世纪80年代，2003年的诺贝尔物理奖得主 Leggett 等指出，宏观可区分态的相干叠加可以通过量子隧穿实现[1]，也就是说，量子系统能够展现宏观效应，量子隧穿起着极其重要的作用。

简单地说，量子隧穿是指微观粒子具有波动性而以一定的概率通过经典禁区（例如势垒）的过程，它是一种没有经典对应的量子现象！实现玻色—爱因斯坦凝聚的过程，要求原子气体的温度极低，密度极高。随着温度的降低，原子的无规则热运动越来越弱，原子的德布罗意波长越来越长，当相邻原子的德布罗意波叠加在一起时，则实现了 BEC。与此同时，由于超冷原子的波动性表现得越来越强，原子的量子隧穿能力也越来越强，实验上已经证实了丰富多彩的隧穿现象，如原子约瑟夫森效应[2]、物质波相干[3]、四波混频[4]等等。当然其中能够展现量子隧穿现象的最简单也是最基本的系统就是双组分 BEC 了[2-3][5-6]，这种隧穿耦合的 BEC 模型受到了广泛的关注，发展了许多的研究方法，如：Gross-Pitaevskii 近似[7]，平均场理论[8, 9]，Bethe ansatz 方法[10, 11]，数值对角化[12]等。在这章中，我们将采用微扰法来分别研究在强隧穿耦合与弱隧穿耦合的情况下系统的本征问题及纠缠性质。

第一节 有效哈密顿量

两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体模型可用双组分哈密顿量来描述，其二次量子化形式为（取自然单位 $\hbar = 1$ ），

$$\hat{H} = \sum_{l=1,2} \hat{H}_l + \hat{H}_i + \hat{H}_t, \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_l &= \omega_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l + \frac{\eta_l}{2} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l, \\ \hat{H}_i &= \chi \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2, \\ \hat{H}_t &= G \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right),\end{aligned}$$

其中 \hat{a}_1 和 \hat{a}_2 分别表示两个组分的单粒子湮灭算符，它们均满足玻色子对易关系 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ 。参数 η_l, χ 和 G 则分别表示各组分的非线性原子相互作用强度，两组分间的原子相互作用强度及两组分间的隧穿耦合强度。引入满足 Schwinger 关系的赝角动量算符，则模型的哈密顿量化简作

$$\hat{H} = \omega \hat{J}_z + q \hat{J}_z^2 + G \left(\hat{J}_+ + \hat{J}_- \right), \quad (5.2)$$

其中赝角动量算符为

$$\begin{aligned}\hat{J}_x &= \frac{1}{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right), \\ \hat{J}_y &= \frac{1}{2i} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \right), \\ \hat{J}_z &= \frac{1}{2} \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \right),\end{aligned} \quad (5.3)$$

且 $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y$ 。Casimir 不变量

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

其中 $\hat{N} = \hat{N}_1 + \hat{N}_2 = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2$ 是总粒子数算符，总粒子数 $N = 2j$ 是守恒量， j 是角动量量子数。对不同的物理系统，哈密顿量 (5.1) 中各耦合参数的物理意义在文献 [7] 中可以找到。总之，

$$\omega = \omega_1 - \omega_2 + (N-1)(\eta_1 - \eta_2)/2$$

表示两组分的化学势差。下面我们主要讨论 $\omega = 0$ 的情况（对应对称双势阱 $\omega_1 = \omega_2$ 的情形）。参数

$$q = (\eta_1 - \eta_2) / 2 - \chi$$

表示玻色子间的散射相互作用。参数 G 仍代表隧穿耦合强度。这里要指出的是，双组分 BEC 模型的不同耦合区域可由两相互作用参数的比值 q/G 来表征。通常会考虑下面三个区域[7]：Rabi 区 $\rightarrow q/G \ll 1/N$ ；Josephson 区 $\rightarrow 1/N \ll q/G \ll N$ ；Fock 区 $\rightarrow q/G \gg N$ 。Rabi 区与 Josephson 区的交叉区域处在强隧穿耦合区域；而弱隧穿耦合区域对应着 Josephson 区与 Fock 区的交叉区域。哈密顿量 (5.1) 的动力学可与非刚性摆的运动类比[2]。

第二节 强隧穿耦合区域

5.2.1 能隙

对强隧穿耦合区域进行分析。首先用二级微扰论确定系统的能谱，为此，将哈密顿量改写作，

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}^{(0)} + \hat{W}, \\ \hat{H}^{(0)} &= G \left(\hat{J}^+ + \hat{J}^- \right), \hat{W} = q \hat{J}_z^2. \end{aligned} \quad (5.4)$$

哈密顿量 (5.4) 的非微扰部分 $\hat{H}^{(0)}$ 可通过由 $SU(2)$ 相干态的生成元构造的么正变换来精确求解，最终得到非微扰的能量和波函数的解析表达式。通常由么正算符构成的规范变换定义为[13]，

$$\hat{U} = \exp\left[\frac{\lambda}{2} \left(\hat{J}_- - \hat{J}_+ \right)\right], \quad (5.5)$$

其中当 $\omega=0$ 时辅助参数 $\lambda = -\frac{\pi}{2}$ 。假定态 $|\psi\rangle^{(0)}$ 为定态薛定谔方程的解：

$$\hat{H}^{(0)} |\psi\rangle^{(0)} = E^{(0)} |\psi\rangle^{(0)}.$$

在规范变换下，定态薛定谔方程的形式是不变的，即

$$\hat{H}^{(0)} |\psi'\rangle^{(0)} = E^{(0)} |\psi'\rangle^{(0)}$$

其中 $\hat{H}^{(0)}$ 和 $|\psi'\rangle^{(0)}$ 分别表示规范变换后的非微扰哈密顿量和波函数

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger, |\psi\rangle^{(0)} = \hat{U} |\psi\rangle^{(0)}.$$

经过规范变换后，非微扰哈密顿量在 \hat{J}_z 表象中是对角的，

$$\hat{H}^{(0)} = -2G \hat{J}_z.$$

这样，很容易得到规范变换前定态薛定谔方程的精确解

$$|\psi\rangle^{(0)} = \hat{U}^\dagger |\psi'\rangle^{(0)} = \hat{U}^\dagger |j, m\rangle,$$

以及磁量子数为 m 的态的零级能量

$$E_m^{(0)} = -2Gm.$$

所以，基态的零级能量和零级波函数分别为

$$\begin{aligned} E_g^{(0)} &= -2Gj = -GN; \\ |\psi\rangle_g^{(0)} &= \hat{U}^\dagger |\psi'\rangle_g^{(0)} = \hat{U}^\dagger |j, j\rangle = |n_x\rangle, \end{aligned} \quad (5.6)$$

这里 $|n_x\rangle$ 是 $SU(2)$ 相干态，它是算符 $\hat{J} \cdot \hat{n}_x$ 的本征态 $\hat{J} \cdot \hat{n}_x |n_x\rangle = |n_x\rangle$ ， \hat{n}_x 是 x -轴方向的单位矢量。基态能量的一级和二级修正为

$$\begin{aligned} E_g^{(1)} &= {}_g^{(0)} \langle \psi | W | \psi \rangle_g^{(0)} = q {}_g^{(0)} \langle \psi' | \hat{U} \hat{J}_z^2 \hat{U}^\dagger | \psi' \rangle_g^{(0)}, \\ E_g^{(2)} &= \sum_{m \neq g} \frac{|W_{gm}|^2}{E_g^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq g} \frac{q^2 \left| {}_g^{(0)} \langle \psi' | \hat{U} \hat{J}_z^2 \hat{U}^\dagger | \psi' \rangle_m^{(0)} \right|^2}{E_g^{(0)} - E_m^{(0)}}, \end{aligned}$$

其中 $|\psi\rangle_m^{(0)}$ 表示磁量子数为 m 的零级波函数。最终我们得到包含一级和二级修正的基态能量为

$$E_g(q, G) = -GN + \frac{q}{4}N + \frac{q^2}{32G}(N - N^2). \quad (5.7)$$

同样的方法，磁量子数为 $(j-1)$ 的第一激发态修正后的能量为

$$E_e(q, G) = -GN + 2G + \frac{q}{4}(3N - 2) + \frac{3q^2}{32G}(3N - N^2 - 2). \quad (5.8)$$

这样，第一激发态和基态间的能隙

$$\Delta = E_e(q, G) - E_g(q, G) = 2G + \frac{q}{2}(N - 1) + \frac{3q^2}{16G}(N - 1), \quad (5.9)$$

这个结果与用 Bethe ansatz 方法得到的结果[11]是一致的。

5.2.2 基态纠缠度与关联算符的期待值

基态波函数的一级修正为

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle_g &= |n_x\rangle + |\psi\rangle_g^{(1)} \\
 &= \sum_{m=-j}^j \left(C_{2j}^{j+m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^j} |j, m\rangle + \frac{q}{4} \left[-\frac{\pi^2 \sqrt{6j(j-1)(2j-1)(2j-3)}}{32G} |j, j-4\rangle \right. \\
 &\quad + \frac{\pi \sqrt{6j(j-1)(2j-1)}}{8G} |j, j-3\rangle - \frac{\sqrt{j(2j-1)}}{2G} |j, j-2\rangle \\
 &\quad \left. + \frac{\pi(2j-1)\sqrt{2j}}{8G} |j, j-1\rangle - \frac{\pi^2 j(2j-1)}{32G} |j, j\rangle \right], \tag{5.10}
 \end{aligned}$$

其中 C_{2j}^{j+m} 是二项式系数。对于由式 (5.2) 描述的两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体模型，态 $|\psi\rangle$ 通常可在 Fock 基矢中展开

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle_1 |N-n\rangle_2,$$

这里 c_n 是复系数，表示组分“1”有 n 个玻色子，同时有 $(N-n)$ 个玻色子在组分“2”。角动量表象的基底与 Fock 态表象基底间有一个明显的关系式

$$|j, m\rangle \equiv |N+2m\rangle_1 |N-2m\rangle_2,$$

因此，

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n \left| j, n - \frac{N}{2} \right\rangle.$$

这样，两组分间的纠缠度由

$$E(\rho) = -\sum_{n=0}^N |c_n|^2 \ln |c_n|^2 = -\sum_{m=-j}^j |c_m|^2 \ln |c_m|^2 \tag{5.11}$$

计算得到，这个公式在文献[9]中已有证明。因此，基态纠缠度为

$$E(\rho) = -\sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N-5}{2}} \left| \left(C_N^{\frac{N}{2}+m} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N \ln \left| \left(C_N^{\frac{N}{2}+m} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N \right|^2 \right|^2$$

$$\begin{aligned}
& - \left| \left(C_N^{N-4} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\pi^2 \sqrt{3N(N-1)(N-2)(N-3)}}{128\sqrt{2}G} \right|^2 \\
& \times \ln \left| \left(C_N^{N-4} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\pi^2 \sqrt{3N(N-1)(N-2)(N-3)}}{128\sqrt{2}G} \right|^2 \\
& - \left| \left(C_N^{N-3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N + \frac{q\pi \sqrt{3N(N-1)(N-2)}}{32\sqrt{2}G} \right|^2 \\
& \times \ln \left| \left(C_N^{N-3} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N + \frac{q\pi \sqrt{3N(N-1)(N-2)}}{32\sqrt{2}G} \right|^2 \\
& - \left| \left(C_N^{N-2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\sqrt{N(N-1)}}{8\sqrt{2}G} \right|^2 \times \ln \left| \left(C_N^{N-2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\sqrt{N(N-1)}}{8\sqrt{2}G} \right|^2 \quad (5.12) \\
& - \left| \left(C_N^{N-1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N + \frac{q\pi(N-1)\sqrt{N}}{32G} \right|^2 \times \ln \left| \left(C_N^{N-1} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N + \frac{q\pi(N-1)\sqrt{N}}{32G} \right|^2 \\
& - \left| \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\pi^2 N(N-1)}{256G} \right|^2 \times \ln \left| \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \right)^N - \frac{q\pi^2 N(N-1)}{256G} \right|.
\end{aligned}$$

图 5.1 表示的是式 (5.12) 计算得到的纠缠度与两相互作用参数比值 q/G 的关系。当 $q=0$ 时, 基态可以认为是玻色—哈伯德模型的超流相的两格点近似。即使 q 值很小, 但由于强隧穿耦合作用, 粒子布居数的波动仍很大, 这正引起了两组分间的相位相干, 体现在高纠缠度上。随着比值 q/G 的连续增加, 纠缠度逐渐接近一个最大值, 但这个值仍远小于系统的最大纠缠度 $\ln(N+1)$ 。然后随着 q/G 的进一步增加, 纠缠度又渐渐地减小。

关联函数 \hat{J}_z 的期待值表征耦合的两组分凝聚体间的布居数差。相对相位与布居数差 $\Delta N = N_1 - N_2$ 是一对共轭变量, 这对于理解两体系统的动力学与量子隧穿效应是非常重要的。对于在强隧穿情况的基态, 有

$$\Delta N = 2 \langle \psi | \hat{J}_z | \psi \rangle_g$$

$$\begin{aligned}
 &= -\left(C_N^{N-4}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^N \times \frac{q\pi^2\sqrt{3N(N-1)(N-2)(N-3)}}{32\sqrt{2}G} \\
 &+ \left(C_N^{N-3}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^N \times \frac{q\pi\sqrt{3N(N-1)(N-2)}}{8\sqrt{2}G} \\
 &- \left(C_N^{N-2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^N \times \frac{q\sqrt{N(N-1)}}{2\sqrt{2}G} \\
 &+ \left(C_N^{N-1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^N \times \frac{q\pi(N-1)\sqrt{N}}{8G} - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^N \times \frac{q\pi^2N(N-1)}{64G},
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

由于只考虑了波函数的一级修正，所以上式我们只保留到 q 的一次项 $O(q)$ 。图 5.2 描绘了式 (5.13) 计算得到的布居数差与两相互作用参数比值 q/G 的关系，表明耦合的两模间的布居数差随着 q/G 的增加而增加。

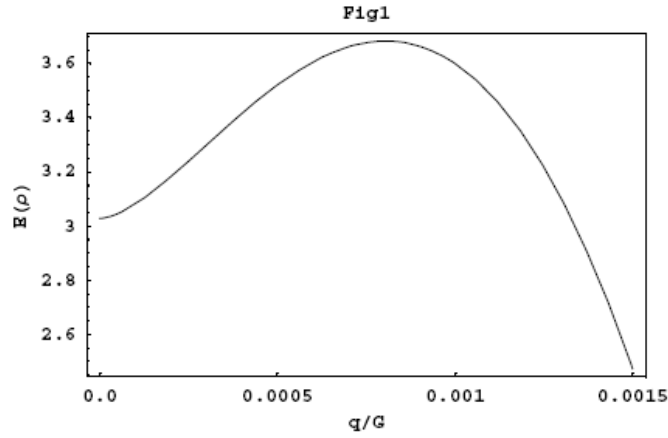


图 5.1 纠缠度 $E(\rho)$ 与两相互作用参数比值 q/G 的关系曲线，粒子数 $N=100$ 。

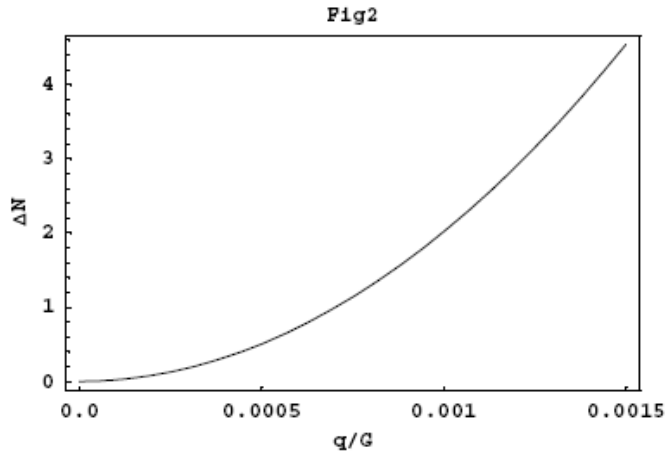


图 5.2 布居数差 $\Delta(N)$ 与两相互作用参数比值 q/G 的关系曲线，粒子数 $N=100$ 。

第三节 弱隧穿耦合区域

5.3.1 能隙

在弱隧穿耦合区域，把哈密顿量 (5.2) 中的隧穿部分看作微扰。同样地，我们采用简并微扰论计算得到能谱的修正公式 (假定总粒子数 N 是偶数)：

$$E_g(q, G) = -\frac{G^2(N^2 + 2N)}{2q},$$

$$E_e(q, G) = q + \frac{2G^2(j^2 + j + 1)}{3q} = q + \frac{G^2(N^2 + 2N + 4)}{6q},$$

所以，基态与第一激发态间的能隙为

$$\Delta = E_e(q, G) - E_g(q, G) = q + \frac{2G^2(N+1)^2}{3q}, \quad (5.14)$$

这个结果与用 Bethe ansatz 方法得到的弱耦合区域的结果 [11] 仍是一致的。

§ 5.3.2 基态纠缠度与关联算符的期待值

基态波函数的一级修正为

$$|\psi\rangle_g = |j, 0\rangle - \frac{G\sqrt{j(j+1)}}{q} (\langle j, -1| + |j, 1\rangle).$$

这样，在弱隧穿区域，基态纠缠度和两组分间的布居数差分别为

$$E(\rho) = -\sum_{m=-j}^j |c_m|^2 \ln |c_m|^2 = -\frac{1}{2} \left(\frac{G}{q}\right)^2 \times N(N+2) \times \ln \left[\frac{1}{4} \left(\frac{G}{q}\right)^2 \times N(N+2) \right], \quad (5.15)$$

$$\Delta N = 2 \langle \psi | \hat{J}_z | \psi \rangle_g = 0. \quad (5.16)$$

5.3.3 宇称效应

现在对 N 为奇数的情况进行同样的分析。基态与激发态间的能隙为

$$\Delta = 2q - \frac{G}{2}(N+1) + \frac{3G^2(N+1)^2}{16q}. \quad (5.17)$$

基态纠缠度和两组分布居数差分别是

$$E(\rho) = -\left\{ \ln \frac{1}{2} + \frac{1}{16} \left(\frac{G}{q}\right)^2 \times (N-1)(N+3) \times \ln \left[\frac{1}{32} \left(\frac{G}{q}\right)^2 \times (N-1)(N+3) \right] \right\}, \quad (5.18)$$

$$\Delta N = 2 \langle \psi | \hat{J}_z | \psi \rangle_g = 0. \quad (5.19)$$

图 5.3 详细地描绘了在两种不同的情况，即总粒子数分别为偶数 $N = 100$ （实线）和奇数 $N = 101$ （虚线），纠缠度与两相互作用参数比值 G/q 的关系。 G 是隧穿耦合作用的参数，所以它的值越大就表明系统两组分间的耦合越强。当 $G = 0$ 时，粒子总数为偶数的情况下，这个两体系统的纠缠度为零。但当粒子总数为奇数时，即使 $G = 0$ ，系统的纠缠度也是非零的。这表明在弱隧穿区域有宇称效应存在，类似于磁性宏观量子隧道效应中自旋隧穿和演化的宇称效应[14]。

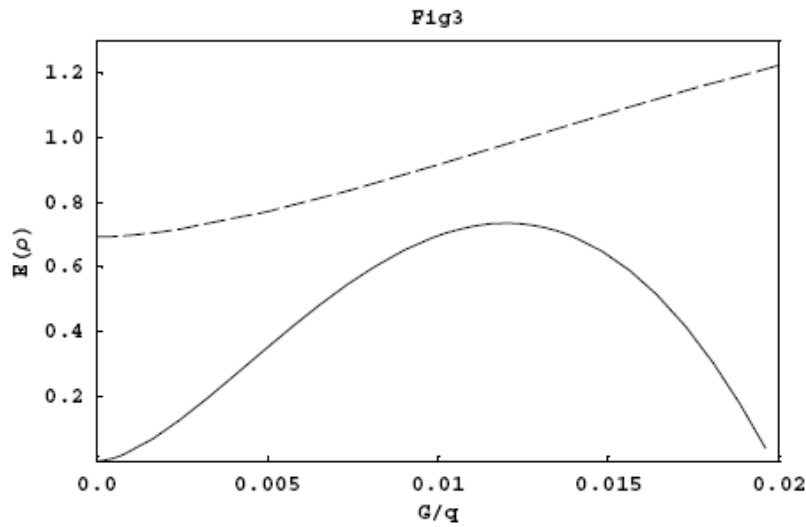


图 5.3 纠缠度 $E(\rho)$ 与两相互作用参数比值 G/q 的关系曲线（实线是粒子数 $N = 100$ 的情况；虚线是 $N = 101$ 的情况）。

将图 5.3 与图 5.1 作比较，可以看出弱隧穿耦合区域的纠缠度远小于强隧穿耦合区域的纠缠度。也就是说，Rabi 区与 Josephson 区的交叉区域的基态有强的相干性。而在相对区域，即 Josephson 区与 Fock 区的交叉区域，系统相干性则较弱。

第四节 小结

在这一章，我们对两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体的能谱进行了研究，采用微扰法，分别得到了在强隧穿和弱隧穿区域两组分间布居数差和基态纠缠度的解析表达式。我们的分析方法和结果为 Rabi 区、Josephson 区及 Fock 区的交叉区域的

相干性质的研究提供了依据。在弱耦合区域，量子隧穿体现出宇称效应，这个现象潜在的物理应用值得进一步探究。

参考文献

- [1] A.J. Leggett, Chakravarty, A.T. Dorsey et al. *Rev. Mod. Phys.* (1987) 59, 1.
- [2] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S.R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 79, 4950.
- [3] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* (1997) 275, 637.
- [4] S. Inouye, A.P. Chikkatur, D.M. Stamper-Kurn, J. Stenger, D.E. Pritchard, and W. Ketterle, *Science* (1999) 285, 571.
- [5] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, and M.K. Oberthaler, Preprint cond-mat/0411757.
- [6] D.S. Hall, M.R. Matthews, J.R. Ensher, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1997) 81, 1539.
- [7] A.J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* (2001) 73, 307.
- [8] G.J. Milburn, J. Corney, E.M. Wright, and D.F. Walls, *Phys. Rev. A* (1997) 55, 4318.
- [9] A.P. Hines, R.H. McKenzie, and G.J. Milburn, *Phys. Rev. A* (2003) 67, 013609.
- [10] J. Links and H.Q. Zhou, *Lett. Math. Phys.* (2002) 60, 275.
- [11] H.Q. Zhou, J. Links, R.H. McKenzie, and X.W. Guan, *J. Phys. A: Math. Gen.* (2002) 36, L113.
- [12] A.P. Tonel, J. Link, and A. Foerster, Preprint quant-ph/0408161.
- [13] Y.Z. Lai, J.-Q. Liang, H.J.W. Müller-Kirsten, and J.G. Zhou, *Phys. Rev. A* (1996) 53, 3691.
- [14] 李伯臧, 吴建华, 钟文定, 蒲富恪, *中国科学 (A 辑)* (1998) 28, 145.

结论与展望

本文主要研究旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的超流性、隧穿动力学及量子纠缠特性等一些物理问题，研究涉及超冷原子气体中的多分量凝聚态物理模型。超冷原子的凝聚态物理区别于固体物理学有以下几个特点：首先系统组成元素不再是电子，而是电中性的玻色或费米原子。其次基本相互作用不再是库仑型，而是短程和长程势型。再次囚禁在磁或光阱中的稀薄原子气体提供了前所未有的可控自由度，如密度，相互作用等，很多现象可以在理想干净的系统实验中观察。具体来说，我们主要研究了玻色—哈伯德模型，量子隧穿模型以及量子相变和量子纠缠在旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中展现的新现象。一些普遍的、众所周知的背景知识也在文中作了详细介绍。特别地，我们回顾了玻色—爱因斯坦凝聚、旋量玻色—爱因斯坦凝聚以及光晶格中玻色—爱因斯坦凝聚的理论和实验进展。

本文的主要研究结果总结如下：首先，我们研究了光晶格中自旋 1 的玻色—爱因斯坦凝聚体，利用波戈留波夫变换方法得到其元激发能谱，进而从超流能谱出发得到超流临界速度的表达式，并根据朗道超流判据研究了超流相的性质。结果表明超流的临界速度与自旋组分相关，具有实验可操控性，并且临界速度的理论值与实验观测值的数量级是一致的，由此预言了在这种三分量的玻色—爱因斯坦凝聚体中的组分分离现象。

其次，我们对偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的半经典动力学的研究表明，由于原子自旋交换相互作用和磁偶极—偶极相互作用分别可以通过 Feshbach 共振技术和调节囚禁势的几何形状来改变，因此它们决定着系统动力学的性质，并且二者的共同作用导致旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的等效两组分间出现自发磁化现象和宏观量子自俘获现象。此外，三组分的初始布居数和相对相位，以及凝聚体的总超精细自旋对半经典动力学都有重要影响。这些结果为利用偶极旋量玻色—爱因斯坦凝聚体来实现和控制约瑟夫森振荡和宏观量子自俘获现象提供了依据。

玻色—爱因斯坦凝聚体作为一种宏观量子系统，由于具有制作量子器件的潜在性质，因此对其纠缠特性的研究受到相当的关注。自旋为 1 的反铁磁相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体在空间不均匀磁场的作用下能够有效地等价作双组分模型，两模间纠缠度的动力学受到系统初态和磁场参数的影响，利用相位刻印的方法我们论

证了在这种旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中产生原子纠缠态的可能性。

量子隧穿在宏观量子效应中起着非常重要的作用，能够展现量子隧穿现象的最简单也是最基本的模型就是两隧穿耦合的玻色—爱因斯坦凝聚体，我们运用微扰法和含时规范变换得到其能谱，分析了在强、弱两种隧穿区域中隧穿耦合对各能级及基态纠缠度的影响，这些结果为 Rabi 区、Josephson 区及 Fock 区的交叉区域的相干性质的研究提供了依据。在弱耦合区域，量子隧穿体现出宇称效应，这种现象潜在的物理应用值得进一步探究。

通过改变光晶格常数从而控制 BEC 原子的相互作用可以得到超流相到 Mott—绝缘相之间的量子相变，我们期望对光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的量子相变完成分类，得到量子相变分类的普遍判据。另一方面，量子纠缠作为粒子间的某种关联，可以标记量子相变或强关联体系中的其它物理性质。但对于强关联系统来说，不仅有两体关联，还有三体关联，甚至整个体系全部都有关联。因此要研究光晶格中 BEC 的量子纠缠与量子相变的联系，现有的理论是不完备的。未来我们希望对光晶格中旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的量子纠缠做出适当定义，以期得到量子相变与量子纠缠的关系。另外，关于玻色—费米混合凝聚体和自旋 3 的玻色—爱因斯坦凝聚体性质的研究都在我们进一步的考虑之中。

利用超冷玻色原子气体来模拟凝聚态物理中的著名模型是本文的特色。在旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中，由于原子自旋引起的相互作用的多样性及实验可操控性对凝聚体性质的影响和其广阔的应用前景有待进一步地深入下去。

附录 A 自旋波函数的对称性分析

全同粒子系波函数的交换对称性与粒子的自旋有确定的联系。对玻色子来说，波函数对两个粒子交换总是对称的。旋量玻色—爱因斯坦凝聚体的波函数可分离为空间坐标部分与自旋变量部分的直积

$$\Psi_\alpha(\vec{r}) \equiv \phi(\vec{r}) \zeta_\alpha(\vec{r}), \quad (\text{A1})$$

并且具有交换对称性。在稀薄的冷原子气体中，原子间只有低能量的两体碰撞，这种相互作用可以用单参量—— s -波散射长度来表征，因此空间坐标波函数是交换对称的，这就要求自旋波函数也满足交换对称性，即自旋 $F_1 = F_2 = F$ 的两个玻色子，交换对称性决定它们的总自旋 $\vec{f} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2 = \vec{F} + \vec{F}$ 的取值只能为 $f = 0, 2, \dots, 2F$ 。下面以 $F_1 = F_2 = 1$ 为例，分析自旋波函数的对称性。我们知道，这时单粒子自旋分量 F_{iz} ($i=1,2$) 的本征值为 $1, 0, -1$ ，相应的本征函数标记为 α, β, γ ，也就是说，

$$F_{iz}\alpha(i) = \alpha(i), F_{iz}\beta(i) = 0, F_{iz}\gamma(i) = -\gamma(i). \quad (\text{A2})$$

令

$$F_{i+} = F_{ix} + iF_{iy}; F_{i-} = F_{ix} - iF_{iy},$$

根据角动量普遍理论，

$$J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (\text{A3})$$

有

$$\begin{aligned} F_{i+}\alpha(i) &= 0, F_{i+}\beta(i) = \sqrt{2}\alpha(i), F_{i+}\gamma(i) = \sqrt{2}\beta(i), \\ F_{i-}\alpha(i) &= \sqrt{2}\beta(i), F_{i-}\beta(i) = \sqrt{2}\gamma(i), F_{i-}\gamma(i) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

总自旋平方可以表示成

$$\begin{aligned} \vec{f}^2 &= (\vec{F}_1 + \vec{F}_2)^2 = \vec{F}_1^2 + \vec{F}_2^2 + 2\vec{F}_1 \cdot \vec{F}_2 \\ &= \vec{F}_1^2 + \vec{F}_2^2 + 2F_{1z}F_{2z} + F_{1+}F_{2-} + F_{1-}F_{2+}, \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

其中 $\vec{F}_1^2 = \vec{F}_2^2 = 2$ 。根据角动量耦合的普遍理论， \vec{f}^2 和 f_z 的本征值为

$$\vec{f}^2 \chi_{fM} = f(f+1) \chi_{fM}, \quad f = 0, 1, 2 \quad (\text{A6})$$

$$f_z \chi_{fM} = M \chi_{fM}, \quad M = f, f-1, \dots, (-f) \quad (\text{A7})$$

χ_{fM} 为与量子数 f, M 相应的 (\bar{f}^2, f_z) 的共同本征态。

1. $f = 2$. M 的最大值为 2, 最小值为 -2, 相应的本征函数显然是

$$\chi_{22} = \alpha(1)\alpha(2), \chi_{2,-2} = \gamma(1)\gamma(2), \quad (\text{A8})$$

以量子数 M 的升降算符

$$f_+ = F_{1+} + F_{2+}; f_- = F_{1-} + F_{2-},$$

作用于式 (A8), 得到 χ_{21} 和 $\chi_{2,-1}$, 再作用之, 即得 χ_{20} 。利用式 (A3), 应有

$$f_- \chi_{22} = 2\chi_{21}, f_- \chi_{21} = \sqrt{6}\chi_{20}, f_+ \chi_{2,-2} = 2\chi_{2,-1}.$$

利用式 (A4), 不难将 χ_{2M} 逐个求出,

$$\begin{aligned} \chi_{22} &= \alpha(1)\alpha(2) \\ \chi_{21} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \\ \chi_{20} &= \frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\gamma(2) + 2\beta(1)\beta(2) + \gamma(1)\alpha(2)] \\ \chi_{2,-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2) + \gamma(1)\beta(2)] \\ \chi_{2,-2} &= \gamma(1)\gamma(2) \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

显然, 它们都是满足交换对称性的。

2. $f = 1$. M 的最大值为 1, 显然只能由 $\alpha(1)\beta(2)$ 和 $\beta(1)\alpha(2)$ 组成, χ_{11} 应和 χ_{21} 正交, 因此 χ_{11} 必然是

$$\chi_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] \quad (\text{A10})$$

再以 f_- 逐次作用之, 即可求出

$$\begin{aligned} \chi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\gamma(2) - \gamma(1)\alpha(2)] \\ \chi_{1,-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2) - \gamma(1)\beta(2)] \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

容易看出，它们都是交换反对称的，不满足旋量 BEC 系统对自旋波函数的要求。

3. $f = 0$. M 只能是 0，容易写出

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\alpha(1)\gamma(2) - \beta(1)\beta(2) + \gamma(1)\alpha(2)] \quad (\text{A12})$$

它显然是交换对称的。

从自旋 1 的情况可以得出结论，总自旋量子数 f 是偶数时，自旋波函数满足交换对称性； f 是奇数时，自旋波函数则是交换反对称的，因此在旋量 BEC 中，波函数的交换对称性决定了原子短程相互作用的表达式 (1.43) 的投影算符的求和中只能有总自旋量子数为偶数的项出现。

附录 B 旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中的短程相互作用

1998 年 T.-L. Ho 给出旋量玻色—爱因斯坦凝聚体中短程相互作用的一般形式

$$\sum_{\alpha\beta\mu\nu} \Omega_{\alpha,\beta,\mu,\nu} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_\mu(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}_1), \quad (\text{B1})$$

其中自旋分别为 F_1 与 F_2 的原子间两体碰撞相互作用与它们的总自旋 $\vec{f} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2$ 有关，系数

$$\Omega_{\alpha\beta\mu\nu} = \hat{V}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \sum_{F=0}^{2F} g_f \hat{\mathbf{P}}_f \quad (\text{B2})$$

这里 $g_f = \frac{4\pi\hbar^2 a_f}{m}$ ， m 是原子质量， a_f 代表总自旋 f 轨道的 s -波散射长度； $\hat{\mathbf{P}}_f$ 是总自旋 f 的投影算符。对玻色子自旋 F ，对称性要求总自旋 $f = 0, 2, \dots, 2F$ ；相反对于费米子，对称性要求总自旋 $f = 1, 3, \dots, 2F$ （对称性分析详见附录 A）。

一方面，投影算符 $\hat{\mathbf{P}}_f$ 与玻色子自旋算符 $\hat{\mathbf{F}}$ 的关系为

$$\left(\hat{\mathbf{F}}_1 \cdot \hat{\mathbf{F}}_2 \right)^n = \sum_{f=0}^{2F} \lambda_f^n \hat{\mathbf{P}}_f, \quad (\text{B3})$$

其中 $\lambda_f \equiv \frac{1}{2} [f(f+1) - 2F(F+1)]$ ，这样

$$\hat{V} = \sum_{n=0}^F c_{2n} \left(\hat{\mathbf{F}}_1 \cdot \hat{\mathbf{F}}_2 \right)^n, \quad (\text{B4})$$

而 c_{2n} 是各 $g_f = \frac{4\pi\hbar^2 a_f}{m}$ 的线性组合。另一方面，投影算符 $\hat{\mathbf{P}}_f$ 的二次量子化形式为

$$\hat{\mathbf{P}}_f = \sum_{\alpha=-f}^f \hat{\mathbf{O}}_{f\alpha}^\dagger \hat{\mathbf{O}}_{f\alpha}, \quad (\text{B5})$$

其中 $\hat{\mathbf{O}}_{f\alpha} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \langle f\alpha | F_1, \alpha_1; F_2, \alpha_2 \rangle \hat{\Psi}_{\alpha_1}^\dagger \hat{\Psi}_{\alpha_2}$ ， $\langle f\alpha | F_1, \alpha_1; F_2, \alpha_2 \rangle$ 是 Clebsch-Gordon 系数，

表示自旋态分别为 $|F_1, \alpha_1\rangle$ 与 $|F_2, \alpha_2\rangle$ 的粒子耦合形成总自旋态 $|f, \alpha\rangle$ 的几率。因此，

$$\hat{V} = \sum_{f=0}^{2F} g_f \sum_{\alpha=-f}^f \hat{O}_{f\alpha}^\dagger \hat{O}_{f\alpha}. \quad (\text{B6})$$

另外，投影算符 \hat{P}_f 还有关系式 $\sum_{f=0}^{2F} \hat{P}_f = 1$ 成立。

下面我们将分别介绍自旋 $F=1, 2, 3$ 的情况。

1. 自旋 $F_1 = F_2 = 1, f = 0, 2$

$$\sum_{f=0}^{2F=2} \hat{P}_f = 1 \Rightarrow \hat{P}_0 + \hat{P}_2 = 1. \quad (\text{B7})$$

$$\lambda_f \equiv \frac{1}{2} [f(f+1) - 2F(F+1)] = \frac{1}{2} [f(f+1) - 4] \Rightarrow \lambda_0 = -2, \lambda_2 = 1, \quad (\text{B8})$$

$$\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 = \sum_{f=0}^{2F=2} \lambda_f \hat{P}_f = \lambda_0 \hat{P}_0 + \lambda_2 \hat{P}_2 = \hat{P}_2 - 2\hat{P}_0. \quad (\text{B9})$$

根据式 (B7) 和式 (B9)，将 \hat{P}_0 与 \hat{P}_2 表示为 $\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2$ 的函数，

$$\hat{P}_0 = \frac{1 - \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{3}, \hat{P}_2 = \frac{2 + \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{3}. \quad (\text{B10})$$

那么，

$$\begin{aligned} \hat{V} &= c_0 + c_2 \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 = g_0 \hat{P}_0 + g_2 \hat{P}_2 \\ &= g_0 \frac{1 - \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{3} + g_2 \frac{2 + \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{3} \\ &= \frac{(g_0 + 2g_2)}{3} + \frac{(g_2 - g_0)}{3} \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2, \end{aligned} \quad (\text{B11})$$

即 $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3, c_2 = (g_2 - g_0)/3$ 。因此描述自旋 $F=1$ 的弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\vec{r} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} [c_0 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \\ &\quad \left. + c_2 \left(\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) F_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \right) \cdot \left(\hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) F_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

2. 自旋 $F_1 = F_2 = 2, f = 0, 2, 4$

$$\sum_{f=0}^{2F=4} \hat{P}_f = 1 \Rightarrow \hat{P}_0 + \hat{P}_2 + \hat{P}_4 = 1. \quad (\text{B13})$$

$$\lambda_f \equiv \frac{1}{2}[f(f+1) - 2F(F+1)] = \frac{1}{2}[f(f+1) - 12] \Rightarrow \lambda_0 = -6, \lambda_2 = -3, \lambda_4 = 4, \quad (\text{B14})$$

$$\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 = \sum_{f=0}^{2F=4} \lambda_f \hat{P}_f = \lambda_0 \hat{P}_0 + \lambda_2 \hat{P}_2 + \lambda_4 \hat{P}_4 = 4\hat{P}_4 - 3\hat{P}_2 - 6\hat{P}_0. \quad (\text{B15})$$

根据式 (B13) 和式 (B15), 将 \hat{P}_4 与 \hat{P}_2 表示为 \hat{P}_0 与 $\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2$ 的函数,

$$\begin{aligned} 7\hat{P}_2 &= 4 - 10\hat{P}_0 - \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2, \\ 7\hat{P}_4 &= 3 + 3\hat{P}_0 + \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2. \end{aligned} \quad (\text{B16})$$

那么,

$$\begin{aligned} \hat{V} &= c_0 + c_2 \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 + \delta = g_0 \hat{P}_0 + g_2 \hat{P}_2 + g_4 \hat{P}_4 \\ &= g_0 \hat{P}_0 + g_2 \frac{4 - 10\hat{P}_0 - \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{7} + g_4 \frac{3 + 3\hat{P}_0 + \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2}{7} \\ &= \frac{(4g_2 + 3g_4)}{7} + \frac{(g_4 - g_2)}{7} \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 + \frac{(3g_4 - 10g_2 + 7g_0)}{7} \hat{P}_0, \end{aligned} \quad (\text{B17})$$

即 $c_0 = (4g_2 + 3g_4)/7, c_2 = (g_4 - g_2)/7, \delta = (3g_4 - 10g_2 + 7g_0)/7$, 其中投影算符

$$\hat{P}_0 = \hat{O}_{0\alpha}^\dagger \hat{O}_{0\alpha} = \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\mu^\dagger(\bar{r}) \langle 2\alpha; 2\mu | 00 \rangle \langle 00 | 2\beta; 2\nu \rangle \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \hat{\Psi}_\nu(\bar{r}).$$

因此描述自旋 $F = 2$ 的弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体的哈密顿量

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\bar{r} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\bar{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} [c_0 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\bar{r}) + c_2 \left(\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) F_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \right) \cdot \left(\hat{\Psi}_\mu^\dagger(\bar{r}) F_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\nu(\bar{r}) \right)] \\ &\quad \left. + \delta \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\bar{r}) \hat{\Psi}_\mu^\dagger(\bar{r}) \langle 2\alpha; 2\mu | 00 \rangle \langle 00 | 2\beta; 2\nu \rangle \hat{\Psi}_\beta(\bar{r}) \hat{\Psi}_\nu(\bar{r}) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B18})$$

3. 自旋 $F_1 = F_2 = 3, f = 0, 2, 4, 6$

$$\sum_{f=0}^{2F=6} \hat{P}_f = 1 \Rightarrow \hat{P}_0 + \hat{P}_2 + \hat{P}_4 + \hat{P}_6 = 1. \quad (\text{B19})$$

$$\begin{aligned}
 \lambda_f &\equiv \frac{1}{2}[f(f+1) - 2F(F+1)] = \frac{1}{2}[f(f+1) - 24] \\
 \Rightarrow \lambda_0 &= -12, \lambda_2 = -9, \lambda_4 = -2, \lambda_6 = 9, \\
 \Rightarrow \lambda_0^2 &= 144, \lambda_2^2 = 81, \lambda_4^2 = 4, \lambda_6^2 = 81.
 \end{aligned} \tag{B20}$$

$$\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 = \sum_{f=0}^{2F=6} \lambda_f \hat{P}_f = \lambda_0 \hat{P}_0 + \lambda_2 \hat{P}_2 + \lambda_4 \hat{P}_4 + \lambda_6 \hat{P}_6 = 9\hat{P}_6 - 2\hat{P}_4 - 9\hat{P}_2 - 12\hat{P}_0. \tag{B21}$$

$$\left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 = \sum_{f=0}^{2F=6} \lambda_f^2 \hat{P}_f = 144\hat{P}_0 + 81\hat{P}_2 + 4\hat{P}_4 + 81\hat{P}_6. \tag{B22}$$

根据式 (B19)、(B21) 和式 (B22), 将 \hat{P}_2 , \hat{P}_4 与 \hat{P}_6 表示为 \hat{P}_0 , $\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2$ 与 $\left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2$ 的函数,

$$\begin{aligned}
 126\hat{P}_2 &= \left[18 + 210\hat{P}_0 + 7\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 - \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 \right], \\
 77\hat{P}_4 &= \left[81 + 63\hat{P}_0 - \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 \right], \\
 198\hat{P}_6 &= \left[18 - 30\hat{P}_0 + 11\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 + \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 \right].
 \end{aligned} \tag{B23}$$

那么,

$$\begin{aligned}
 \hat{V} &= c_0 + c_2 \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 + c_4 \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 + \delta = g_0 \hat{P}_0 + g_2 \hat{P}_2 + g_4 \hat{P}_4 + g_6 \hat{P}_6 \\
 &= g_0 \hat{P}_0 - g_2 \frac{18 + 210\hat{P}_0 + \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 - \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2}{126} + g_4 \frac{81 + 63\hat{P}_0 - \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2}{77} \\
 &\quad + g_6 \frac{18 - 30\hat{P}_0 + 11\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 + \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2}{198} \\
 &= \left(-\frac{1}{7}g_2 + \frac{81}{77}g_4 + \frac{1}{11}g_6 \right) + \frac{(g_6 - g_2)}{18} \hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \\
 &\quad + \left(\frac{1}{126}g_2 - \frac{1}{77}g_4 + \frac{1}{198}g_6 \right) \left(\hat{F}_1 \cdot \hat{F}_2 \right)^2 + \left(g_0 - \frac{5}{3}g_2 + \frac{9}{11}g_4 - \frac{5}{33}g_6 \right) \hat{P}_0,
 \end{aligned} \tag{B24}$$

即 $c_0 = \left(-\frac{1}{7}g_2 + \frac{81}{77}g_4 + \frac{1}{11}g_6\right)$, $c_2 = (g_6 - g_2)/18$, $c_4 = \left(\frac{1}{126}g_2 - \frac{1}{77}g_4 + \frac{1}{198}g_6\right)$, 且

$\delta = \left(g_0 - \frac{5}{3}g_2 + \frac{9}{11}g_4 - \frac{5}{33}g_6\right)$, 其中投影算符

$$\hat{P}_0 = \hat{O}_{0\alpha}^\dagger \hat{O}_{0\alpha} = \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) \langle 3\alpha; 3\mu | 00 \rangle \langle 00 | 3\beta; 3\nu \rangle \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}).$$

因此描述自旋 $F = 3$ 的弱相互作用的玻色—爱因斯坦凝聚体的哈密顿量

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d\vec{r} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \right. \\ + \frac{1}{2} \left[c_0 \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) + c_2 \left(\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) F_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \right) \cdot \left(\hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) F_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}) \right) \right] \\ + c_4 \sum_{ij} \left[\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) (F^i F^j)_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \right] \cdot \left[\hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) (F^i F^j)_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}) \right] \\ \left. + \delta \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_\mu^\dagger(\vec{r}) \langle 3\alpha; 3\mu | 00 \rangle \langle 00 | 3\beta; 3\nu \rangle \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}) \right\}. \end{aligned}$$

(B25)

附录 C

式 (2.17) 的逆变换为

$$\begin{cases} \hat{b}_{k,\alpha} = u_{k,\alpha} \hat{a}_{k,\alpha} + v_{k,\alpha} \hat{a}_{-k,\alpha}^\dagger, \\ \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger = u_{k,\alpha} \hat{a}_{k,\alpha}^\dagger + v_{k,\alpha} \hat{a}_{-k,\alpha}. \end{cases} \quad (C1)$$

哈密顿量 (2.16) 可用准玻色子算符 $\hat{b}_{k,\alpha}$ 和 $\hat{b}_{k,\alpha}^\dagger$ 表示作

$$\hat{H} = E_c + \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (C2)$$

其中

$$E_c = \frac{U_0}{2N_s} N^2 + N(\varepsilon - zJ) + \frac{U_2}{2N_s} \left[(N_1 - N_{-1})^2 + 2N_0 (\sqrt{N_1} + \sqrt{N_{-1}})^2 \right] \quad (C3)$$

是常数。 \hat{H}_1 和 \hat{H}_2 分别代表对角和非对角部分，

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = & \sum_{k \neq 0} \left(\left[\left(-\varepsilon_k + \frac{U_0}{N_s} N_0 - \frac{2U_2}{N_s} \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} \right) (u_{k,\alpha}^2 + v_{k,\alpha}^2) \right. \right. \\ & - \left. \left(\frac{2U_0}{N_s} N_0 + \frac{4U_2}{N_s} \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} \right) u_{k,0} v_{k,0} \right] \hat{b}_{k,0}^\dagger \hat{b}_{k,0} + \sum_{\gamma} \left[\left(-\varepsilon_k + \frac{U_0}{N_s} N_\gamma + \frac{U_2}{N_s} N_\gamma \right) (u_{k,\gamma}^2 + v_{k,\gamma}^2) \right. \\ & - \left. \left(\frac{2U_0}{N_s} + \frac{2U_2}{N_s} \right) N_\gamma u_{k,\gamma} v_{k,\gamma} \right] \hat{b}_{k,\gamma}^\dagger \hat{b}_{k,\gamma} + \sum_{\gamma} \left\{ \left[\left(-\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{-\gamma 0}} \sqrt{N_{\gamma 0}} - \frac{U_2}{N_s} N_0 \right] (u_{k,\gamma} v_{k,-\gamma} + u_{k,-\gamma} v_{k,\gamma}) \right. \\ & + \left. \left(\frac{U_0}{N_s} - \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{-\gamma 0}} \sqrt{N_{\gamma 0}} (u_{k,\gamma} u_{k,-\gamma} + v_{k,-\gamma} v_{k,\gamma}) \right\} \hat{b}_{k,\gamma}^\dagger \hat{b}_{k,-\gamma} + \sum_{\gamma} \left\{ \left[\left(\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} \right. \right. \\ & + \left. \left. \frac{2U_2}{N_s} \sqrt{N_{-\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} \right] (u_{k,\gamma} u_{k,0} + v_{k,0} v_{k,\gamma}) \right. \\ & \left. - \left(\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} (u_{k,\gamma} v_{k,0} + u_{k,0} v_{k,\gamma}) \right\} \left(\hat{b}_{k,\gamma}^\dagger \hat{b}_{k,0} + \hat{b}_{k,0}^\dagger \hat{b}_{k,\gamma} \right) \Big) + const; \end{aligned} \quad (C4)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_2 = & \sum_{k \neq 0} \left[\left(\frac{U_0}{2N_s} N_0 + \frac{U_2}{N_s} \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} \right) (u_{k,0}^2 + v_{k,0}^2) \right. \\
 & - \left(\frac{-\varepsilon_k}{N_s} + \frac{U_0}{N_s} N_0 + \frac{2U_2}{N_s} \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} \right) u_{k,0} v_{k,0} \left. \right] \left(\hat{b}_{k,0}^\dagger \hat{b}_{-k,0}^\dagger + \hat{b}_{k,0} \hat{b}_{-k,0} \right) \\
 & + \left[\left(\frac{U_0}{2N_s} - \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} + \frac{U_2}{N_s} N_0 \right] (u_{k,1} u_{k,-1} + v_{k,1} v_{k,-1}) \\
 & - \left(\frac{U_0}{N_s} - \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} u_{k,1} v_{k,-1} \left. \right] \left(\hat{b}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{-k,-1}^\dagger + \hat{b}_{k,1} \hat{b}_{-k,-1} \right) \\
 & + \left[\frac{U_0}{2N_s} \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} (u_{k,-1} u_{k,1} + v_{k,-1} v_{k,1}) \right. \\
 & - \left. \left(\frac{U_0}{N_s} - \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{-10}} \sqrt{N_{10}} u_{k,-1} v_{k,1} \right] \left(\hat{b}_{k,-1}^\dagger \hat{b}_{-k,1}^\dagger + \hat{b}_{k,-1} \hat{b}_{-k,1} \right) \\
 & + \sum_\gamma \left\{ \left(\frac{U_0}{2N_s} + \frac{U_2}{2N_s} \right) N_\gamma (u_{k,\gamma}^2 + v_{k,\gamma}^2) - \left[-\varepsilon_k + \left(\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) N_\gamma \right] \right\} \left(\hat{b}_{k,\gamma}^\dagger \hat{b}_{-k,\gamma}^\dagger + \hat{b}_{k,\gamma} \hat{b}_{-k,\gamma} \right) \\
 & + \sum_\gamma \left\{ \left(\frac{U_0}{2N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} (u_{k,\gamma} u_{k,0} + v_{k,\gamma} v_{k,0}) \right. \\
 & - \left. \left[\left(\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} + \frac{2U_2}{N_s} \sqrt{N_{-\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} \right] u_{k,\gamma} v_{k,0} \right\} \left(\hat{b}_{k,\gamma}^\dagger \hat{b}_{-k,0}^\dagger + \hat{b}_{k,\gamma} \hat{b}_{-k,0} \right) \\
 & + \sum_\gamma \left\{ \frac{U_0}{2N_s} \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} (u_{k,0} u_{k,\gamma} + v_{k,0} v_{k,\gamma}) \right. \\
 & - \left. \left[\left(\frac{U_0}{N_s} + \frac{U_2}{N_s} \right) \sqrt{N_{\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} + \frac{2U_2}{N_s} \sqrt{N_{-\gamma 0}} \sqrt{N_{00}} \right] u_{k,0} v_{k,\gamma} \right\} \left(\hat{b}_{k,0}^\dagger \hat{b}_{-k,\gamma}^\dagger + \hat{b}_{k,0} \hat{b}_{-k,\gamma} \right). \tag{C5}
 \end{aligned}$$

为了消去非对角部分 \hat{H}_2 ，令所有 $\hat{b}_{k,\alpha}^\dagger \hat{b}_{-k,\alpha}^\dagger$ 和 $\hat{b}_{k,\alpha} \hat{b}_{-k,\alpha}$ 的项的系数为零。考虑到关系式 (2.18)，为计算方便再引入一套新参数

$$\begin{aligned}
 u_{k,\alpha} &= \cosh \phi_{k,\alpha} \\
 v_{k,\alpha} &= \sinh \phi_{k,\alpha}
 \end{aligned} \tag{C6}$$

由关系式 (2.18) 和 (C6) 可得到有用的关系式

$$\begin{aligned}
 \tanh(2\phi_{k,\alpha}) &= \frac{2u_{k,\alpha} v_{k,\alpha}}{u_{k,\alpha}^2 + v_{k,\alpha}^2}, \\
 \cosh(2\phi_{k,\alpha}) &= u_{k,\alpha}^2 + v_{k,\alpha}^2 = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2(2\phi_{k,\alpha})}}.
 \end{aligned} \tag{C7}$$

据此，哈密顿量 (2.16) 最终可化简为对角化形式 (2.19)。

攻读博士期间已发表论文和待发表论文

- [1] **Rong Cheng** and J.-Q. Liang, Superfluidity of spin-1 bosons in optical lattices, Phys. Rev. A (2005) **71**, 053607. (SCI)
- [2] **Rong Cheng**, J.-Q. Liang and Yunbo Zhang, Dynamics of dipolar spinor condensates, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. (2005) 38, 2569-2578. (SCI)
- [3] **Rong Cheng** and J.-Q. Liang, Energy spectrum and entanglement of two tunnel-coupled Bose-Einstein condensates, Chinese Physics (in press) (2006) 9. (SCI)
- [4] **Rong Cheng**, J.-Q. Liang and W.-M. Liu, Engineering entangled atom states in spinor Bose gas, submitted to Eur. Phys. J. D (in revised). (SCI)

致 谢

五年的求学生涯，即将告一段落，我顺利完成了硕士和博士阶段的学习与工作。学习期间，理论所浓厚的科研氛围和良好的工作环境，导师们兢兢业业、献身科学的精神在我心中刻下了永久的印记。五年的寒窗生涯充满了探索的艰辛与惆怅，也包含着成功的喜悦与忐忑。所有这些，都将成为我人生最宝贵的财富。

值此论文完成之际，首先要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！在导师的指导和辛勤培养下，我的科研思维和独立研究能力以及论文写作等方面都得到了长足的进步。五年来，无论从课题的选择、设计到研究的每个环节甚至是论文的修改无不倾注着梁老师大量的心血和智慧。导师广博的学识、高尚的师德、严谨的治学态度、崇高的敬业精神、平易近人的作风，都是我人生的楷模。衷心感谢梁老师对我的悉心关怀和谆谆教诲！谢谢您的信任和鼓励！

感谢硕士导师张云波教授对我的无私帮助和勉励。五年来，张老师给予了许多具体的指导，进行过许多有益的讨论，启迪思路，开阔视野，令人如沐春风。我能够顺利完成学业也凝结着他的一份心血！

感谢李德明教授、刘文森教授、丁秀香教授以及周富国书记、郜江瑞院长、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工作、学习和生活方面给予的关怀。

感谢刘伍明研究员、李卫东教授、李录教授、许长谭教授、殷雯副教授、梁建军副教授、李志坚副教授等老师的关心和帮助，让我受益匪浅。

感谢与我同学九年的学友郝亚江一直以来对我的鼓励与肯定；感谢杜微、徐卫平、于慧、赵华、谷娟、高迎芳、贾欣燕、郭利平、李再东、郑公平、王瑞、王建明、贺明明、张永平、张存喜、陈刚等学友的无私帮助和友好合作，是大家的共同努力，创造了理论所良好的学习环境。

感谢我挚爱的亲人们，谢谢你们 26 年来的关怀、理解和无尽的爱。

感谢我生活了九年的母校，我永远的精神家园！

程 茸

2006 年 5 月于山西大学理论物理研究所