

山 西 大 学

2009 届博士研究生学位论文

一维相互作用量子
气体的基态和热力学性质

姓 名	尹 相 国
指导教师	张 云 波 教授
学科专业	理论物理
研究方向	冷原子物理
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2006 年 9 月—2009 年 6 月

二 00 九年六月

Dissertation for the Doctor's Degree
of Shanxi University in 2009

The Ground State and Thermodynamics of One-Dimensional Quantum Gas

Name	Xiangguo Yin
Supervisor	Professor Yunbo Zhang
Major	Theoretical Physics
Field of Research	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2006.9—2009.6

June, 2009

目 录

中文摘要	VII
ABSTRACT	VIII
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.1.1 Feshbach 共振	2
1.1.2 一维束缚的量子气体	3
1.1.3 玻色费米混合物	7
1.1.4 理论方法简介	8
1.2 我们的工作	10
1.3 本文内容	10
第二章 平均场理论	12
2.1 玻色凝聚体	12
2.1.1 密度泛函理论	12
2.1.2 玻色凝聚体的平均场理论	14
2.1.3 托马斯-费米近似	15
2.1.4 定态 Gross-Pitaevskii 方程的数值解	16
2.2 玻色费米混合物的平均场理论	19
第三章 无穷大相互作用的量子气体	25
3.1 Tonks-Girardeau 气体	25
3.2 费米 Tonks-Girardeau 气体	28
3.3 无穷大相互作用的玻色费米混和物	30
第四章 Bethe ansatz 方法与热力学 Bethe ansatz 方法	33
4.1 一维相互作用均匀玻色气体的精确解	34
4.1.1 Bethe ansatz 方法	34

4.1.2 热力学极限下的 Bethe ansatz 方程.....	40
4.1.3 开边界条件下的 Bethe Ansatz 方程.....	42
4.2 Yang-Yang 热力学方程.....	44
4.3 两分量量子气体的精确解.....	47
第五章 双阱中的少体玻色系统的基态性质.....	50
5.1 双势阱中的 Tonks-Girardeau 气体.....	50
5.1.1 理论模型和单粒子波函数.....	50
5.1.2 数值结果和分析.....	51
5.2 离散变量表象方法与精确对角化方法.....	54
5.2.1 离散变量表象方法.....	54
5.2.2 精确对角化方法.....	55
5.3 双势阱中任意相互作用强度的玻色气体.....	57
5.4 小结.....	61
第六章 玻色费米混合物的热力学性质.....	63
6.1 玻色费米混合物的精确解.....	63
6.1.1 玻色费米混合物的精确解.....	63
6.1.2 玻色费米混合物的热力学.....	65
6.2 局域密度近似和实验模拟.....	69
6.2.1 局域密度近似和数值过程.....	69
6.2.2 准一维玻色费米混合物的实验模拟.....	71
6.3 两分量玻色气体的热力学性质.....	74
6.4 小结.....	79
结论与展望.....	80
附录 A.....	81
附录 B.....	83
附录 C.....	85

参考文献.....	89
攻读博士学位期间已发表和待发表的论文.....	95
致谢.....	96

CONTENTS

Chinese Abstract	VII
Abstract	VIII
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Overview	1
1.1.1 Feshbach Resonances.....	2
1.1.2 One-Dimensional Trapped Quantum Gases.....	3
1.1.3 Bose-Fermi Mixture.....	7
1.1.4 Introduction to Theory.....	8
1.2 Our Work	10
1.3 Contents	10
Chapter 2 The Mean Field Theory	12
2.1 Bose Condensate	12
2.1.1 The Density-Functional Theory.....	12
2.1.2 The Mean Field Theory of Bose Condensate	14
2.1.3 Thomas-Fermi Approximation.....	15
2.1.4 The Numerical Solution of Gross-Pitaevskii Equation	16
2.2 The Mean Field Theory of Bose-Fermi Mixture.....	19
Chapter 3 Quantum Gases with Infinite Interaction	25
3.1 Tonks-Girardeau Gases	25
3.2 Fermionic Tonks-Girardeau Gases.....	28
3.3 Bose-Fermi Mixture with Infinite Interaction.....	30
Chapter 4 Bethe ansatz and Thermodynamics Bethe ansatz	33
4.1 Exact Solution of One-Dimensional Interacting Bose Gases.....	34
4.1.1 Bethe ansatz.....	34

4.1.2 Bethe ansatz Equation in Thermodynamics Limit.....	40
4.1.3 Bethe ansatz Equation with Open Boundary Condition.....	42
4.2 Yang-Yang Thermodynamics Equation.....	44
4.3 Exact Solution of Two-Component Quantum Gases.....	47
Chapter 5 Ground-State Properties of a Few-Boson System in a	
One-Dimensional Hard-wall Split Potential.....	50
5.1 Tonks-Girardeau Gases in Double Well.....	50
5.1.1 Model and Single Particle Wave Function	50
5.1.2 Numerical Result and Analysis.....	51
5.2 Discrete Variable Representation and Exact Diagonalization.....	54
5.2.1 Discrete Variable Representation	54
5.2.2 Exact Diagonalization.....	55
5.3 The Interacting Bosons in Double Well.....	57
5.4 Conclusion.....	61
Chapter 6 Yang-Yang Thermodynamics of Bose-Fermi Mixture.....	63
6.1 Exact Solution of Bose-Fermi Mixture.....	63
6.1.1 Exact Solution of Bose-Fermi Mixture.....	63
6.1.2 Yang-Yang Thermodynamics of Bose-Fermi Mixture.....	65
6.2 Local Density Approximation and Experimental Simulation	69
6.2.1 Local Density Approximation and Numerical Progress.....	69
6.2.2 Experimental Simulation of Quasi-1D Bose-Fermi Mixture.....	71
6.3 Thermodynamics Properties of Two-Component Bose Gases.....	74
6.4 Conclusion.....	79
Summary and outlook.....	80
Appendix A	81
Appendix B	83
Appendix C	85

References	89
Publications during doctoral study	95
Acknowledgements	96

中 文 摘 要

超冷原子实验在以下几个方面取得了突破性的进展：依据 Feshbach 共振原理实现了对粒子间相互作用强度的调控，在磁光阱中和原子芯片上实现了准一维玻色爱因斯坦凝聚，并且制备出由玻色费米混合物组成的量子气体。这些成果使得超冷原子气体成为研究一维强关联系统各种量子多体效应的理想平台。本文简要介绍了一维量子系统的基本理论模型，包括平均场理论，Tonks-Girardeau 气体，Bethe ansatz 方法，重点研究了双势阱中玻色气体的基态性质和有限温度下准一维玻色费米混合物的热力学性质。

首先，我们研究束缚在中间带有 δ 势垒的无限深方势阱中的玻色气体的基态性质。利用玻色子与费米子的对应关系构建了 Tonks-Girardeau 气体的基态波函数，研究势垒两边的关联特性以及这种特性和粒子数目宇称的关系；并且运用精确对角化方法计算在任意势垒高度和原子间相互作用强度下系统基态的密度分布，占据数分布，动量分布等。计算表明动量次峰峰值随着势垒的升高而增大，随着原子间相互作用强度的增大而减小。

其次，基于热力学 Bethe ansatz 方法研究低温下由玻色费米混合物组成的准一维量子气体在简谐势阱中的热力学性质。运用热力学 Yang-Yang 方程和局域密度近似，数值计算玻色子和费米子的空间密度分布，重点讨论了费米子数目、粒子间相互作用强度对玻色子密度分布的影响。结果表明玻色费米相分离需要非常低的温度和很强的粒子间相互作用，为相关的实验提供比较依据。

关键词：Tonks-Girardeau 气体；精确对角化方法；热力学 Bethe ansatz 方程；局域密度近似；玻色费米混合物；

The Ground State and Thermodynamics of One-Dimensional Quantum Gas

Xiangguo Yin (Theoretical Physics)

Directed by Prof. Yunbo Zhang

ABSTRACT

Recent years have witnessed great development of laser cooling and optical trapping technology, with remarkable achievements in several aspects, e.g. manipulation of the interaction strength between particles according to Feshbach resonance technique, the Bose-Einstein Condensation of quasi-one-dimensional Bose gas trapped in magnetic and optical potential and atom chip, strongly interacting Tonks-Girardeau gases, and the Bose-Fermi mixture which rarely occur in nature. These progresses make ultra-cold atoms a popularly investigated platform for various many-body effects in strongly correlated one-dimensional systems. This dissertation will introduce several theories for one-dimensional systems, including the Mean-Field theory, the Tonks-Girardeau gases, and the exact solution with Bethe ansatz. We then devote to theoretical investigation of the ground state properties of an interacting few-boson system in a splited hard-wall potential and the thermodynamics of quasi-one-dimensional Bose-Fermi mixture at finite temperature.

First of all, we carry out a detailed examination of the ground-state

properties of a few-boson system in a one-dimensional hard-wall potential with a δ split in the center. In the Tonks-Girardeau limit with infinite repulsion between particles, we use the Bose-Fermi mapping to construct the exact N -particle ground-state wave function, which allows us to study the correlation properties accurately. For the general case with finite interparticle interaction, the exact diagonalization method is exploited to study the ground-state density distribution, occupation number distribution, and momentum distribution for variable interaction strengths and barrier heights. The secondary peaks in the momentum distribution reveal the interference between particles on the two sides of the split, which is more prominent for large barrier strength and small interaction strength.

Secondly, we investigate theoretically the behavior of one-dimensional interacting Bose-Fermi mixture at finite temperature in the scheme of thermodynamic Bethe ansatz. Combining the Yang-Yang thermodynamic formalism with local density approximation in a harmonic trap, we calculate the density distribution of bosons, which is mainly influenced by the number of Fermions and interacting strength between particles. It is shown that Bose-Fermi phase separation needs even lower temperature and very large interacting strength between particles, which will provide comparative materials for relative experiments.

Key Words: TG Gas, Exact Diagonalization Method, Thermodynamic Bethe Ansatz Equation, Local Density Approximation, Bose-Fermi Mixture.

第一章 绪论

第一节 引言

众所周知，自然界的粒子按照自旋被分成了两类。由电子、质子、中子这些自旋为 $\hbar/2$ 的粒子以及其他自旋为 $\hbar/2$ 的奇数倍的粒子所组成的全同粒子体系的波函数是粒子交换反对称的，这类粒子服从费米狄喇克统计，被称为费米子；由光子(自旋为 \hbar)以及其他自旋为零或为 \hbar 的整数倍的粒子所组成的全同粒子的波函数是粒子交换对称的，这类粒子服从玻色爱因斯坦统计，因而被称为玻色子。全同费米子满足泡利不相容原理，即两个全同的费米子不能占据同一个量子态，因而费米子的基态是一个个费米子从低能级到高能级排列的费米海分布，例如单原子中的电子就是从内壳层到外壳层的费米海分布。然而玻色子不受此限制，任意两个玻色子都可以占据同一个量子态，因此所有的玻色子同时占据系统能量最低的量子态形成了系统的基态。当大量的粒子占据系统能量最低的量子态时，这些粒子整体上表现为单粒子行为，具有宏观量子效应，这就是玻色[1]和爱因斯坦[2]在 1924 年预言的玻色爱因斯坦凝聚现象(Bose-Einstein condensation,简称 BEC)。

为了实现 BEC，原子需要被冷却到非常低的温度。假设存在一个密度为 n 无相互作用的质量为 m 的玻色子组成的均匀系统，根据玻色爱因斯坦统计，可以得到出现 BEC 的转变温度为 $T_c = C \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{mk_B}$ ，其中 $C \approx 3.3$, k_B 是玻尔兹曼常数。另一个等价于转变温度的描述方法是：比较粒子的德布罗意热波长 λ_T 和粒子间的平均距离 $n^{-1/3}$ 。

粒子的德布罗意热波长定义为 $\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2}$ ，粒子可以看成具有以 λ_T 为特征长度的波包。当温度很高时， λ_T 非常小，波包也非常小，玻色子就像一种经典的粒子。当温度逐渐降低时，在空间运动的粒子的德布罗意热波长就会变长。当温度降到转变温度 T_c 时， λ_T 可以与 $n^{-1/3}$ 相比较，波包就开始在空间重叠起来，粒子不能被区分，量子效应开始显现。

1938 年 London 指出，超流态可能是 BEC 的表现，提出了二流体理论， ^4He 流

体有两种成分，即正常成份和超流成份，当温度很低的时候，正常成份就会消失， ^4He 流体全是超流成份，其中大约有 10% 发生了凝聚[3]。在上个世纪 50 年代中期，库伯等人在解释超导体的微观机制时，提出了由两个电子组成了库伯对的概念，发现超导波函数的本质正是库伯对的玻色爱因斯坦凝聚的波函数。由于上个世纪 80 年代激光冷却技术的快速发展，1995 年 6 月 5 日，美国国家标准和技术研究所 Cornell 和科罗拉多大学 Wieman 小组利用激光冷却和时间平均轨道势阱中的射频蒸发冷却技术实现了碱金属 ^{87}Rb 的玻色爱因斯坦凝聚[4]。同年 11 月美国 MIT 的 Ketterle 小组采用塞曼减速技术冷却的原子束系统实现了 ^{23}Na 的玻色爱因斯坦凝聚[5]。为了表彰这些突破性的工作，2001 年的诺贝尔物理学奖授予了他们。此后的十多年里，BEC 在理论和实验方面都得到了长足的发展，是当今世界研究的热门课题之一。其中，理论和实验的不断结合和相互促进，是 BEC 得以迅速发展的重要原因。

1.1.1 Feshbach 共振

物理学家一直关注凝聚态物理中的很多强关联的体系，例如：超导，但是玻色爱因斯坦凝聚中的原子间的相互作用一般是非常弱的。为了更全面的了解原子气体的性质，人们开始探索强相互作用的原子气体。Stoof 等人在 1996 年建议利用 Feshbach 共振原理，调节处在两个不同的超精细态上的简并费米气体 ^6Li 之间的吸引相互作用强度来实现超冷费米子的库伯对[6]。2000 年 Cornish 等人利用 Feshbach 共振原理在实验上第一次达到了玻色气体的强耦合区[7]。不幸的是，随着粒子间散射长度的增加，三体碰撞损失增多，严重影响了凝聚体的寿命。为了克服凝聚体寿命短的困难，Greiner 等人于 2002 年将 BEC 放在光晶格中，发现了超流态到 Mott-绝缘态的相变，同样可以达到强耦合区域[8]。

人们可以通过有效赝势方法描述 Feshbach 共振，从而得到原子的散射长度与磁场的关系：

$$a_s(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right) \quad (1.1)$$

其中 a_{bg} 是原子远离共振时的背景散射长度， B 为磁场场强， B_0 和 ΔB 为共振的磁场位置和宽度。从图-1.1 可以看出，通过调节磁场， ^6Li 的散射长度可以从 $-\infty$ 变到 $+\infty$ 。

同样通过磁场可以调节费米子之间的相互作用强度，以及调节玻色费米混合物中的玻色子与费米子之间的相互作用强度。

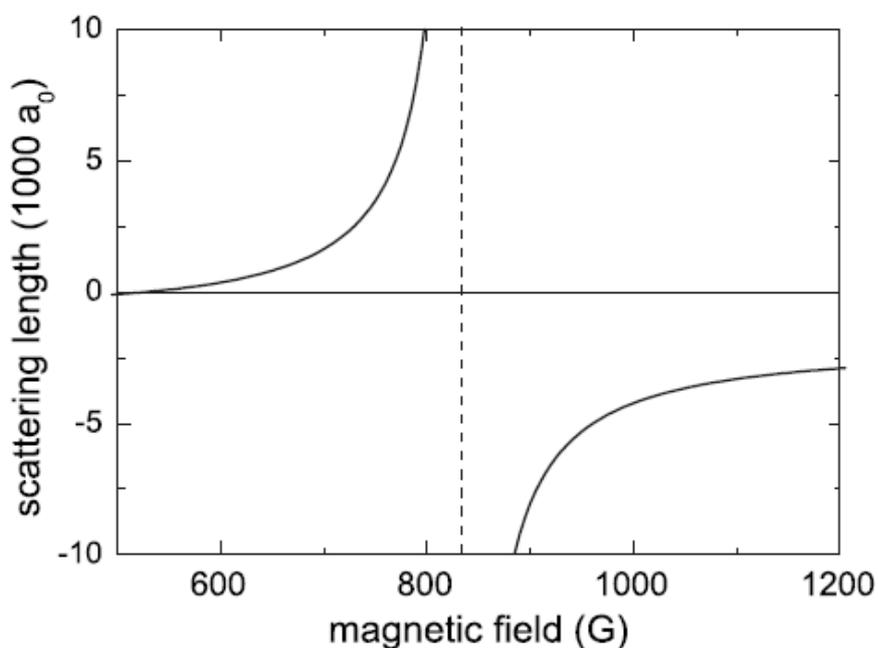


图-1.1 ${}^6\text{Li}$ 的散射长度对磁场的依赖关系[93]。 $B_0 = 834\text{G}$ ， $a_s(B)$ 由正值变为负值时的位置决定了 $B_0 + \Delta B = 534\text{G}$ 。

1.1.2 一维束缚的量子气体

相对于高维系统，一维多体系统理论上处理起来相对简单些，其物理性质不同于三维系统，一直受到物理研究者的关注。一维均匀系统的玻色气体不会发生玻色爱因斯坦凝聚，而一维束缚势中的玻色气体则可以发生凝聚，这是因为束缚势改变了系统的态密度。实验上实现的准一维 BEC，一般束缚在一个柱对称的势阱中，即在径向施加一个很强的束缚势，并且气体的温度足够低，那么其径向振动就完全束缚在简谐势的基态，径向波函数即可表示为：

$$\psi_{\perp} = \sqrt{\frac{1}{\pi d_{\perp}^2}} \exp(-r_{\perp}^2 / 2d_{\perp}^2), \quad (1.2)$$

其中 $d_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ 是径向特征长度， ω_{\perp} 是径向束缚势的束缚频率。一维系统的温度和化学势必须满足 $T, \mu \ll \hbar\omega_{\perp}$ ，确保粒子都呆在径向基态，而不会跃迁到径向激发

态。Olshanii 利用赝势近似方法得到有效的一维相互作用常数[9]:

$$U_{1D} = \frac{2a_s \hbar^2}{m d_{\perp}^2} \frac{1}{1 - C(a_s / d_{\perp})} \quad (1.3)$$

其中常数 $C = 1.463\dots$ 。若囚禁的原子为 ^{87}Rb ，径向频率通常选择一个比较大的值，如： $\omega_{\perp} = 5000 \times 2\pi$ ，那么可得 $d_{\perp} \approx 0.15 \mu\text{m}$ ，而 ^{87}Rb 原子的三维 s-波散射长度为 $a_s \approx 98.98 a_0 \approx 5.3 \text{nm}$ ，可见径向特征长度一般远大于 s-波散射长度，则有

$$U_{1D} = \frac{2a_s \hbar^2}{m d_{\perp}^2} \quad (1.4)$$

从上式可以看出，有效的一维相互作用强度不仅与三维 s-波散射长度有关，而且还依赖于径向特征长度，即径向束缚势。因此，调节 s-波散射长度或径向束缚势的频率都可以改变一维相互作用强度 U_{1D} 。实验上，通过 Feshbach Resonances 技术，扫描磁场而改变三维 s-波散射长度的大小和符号，进而调节一维相互作用强度 U_{1D} ；如果实验采用磁束缚，可以改变线圈中的电流；如果实验采用二维的光驻波束缚，可以改变激光的强度，从而达到改变径向束缚势的频率，调节 U_{1D} 的目的。

Ketterle 小组于 2001 年在实验上率先实现了雪茄形玻色-爱因斯坦凝聚[10]。他们将凝聚体束缚在径向和轴向频率分别为 $\omega_{\perp} / 2\pi = 360 \text{Hz}$ $\omega_{\parallel} / 2\pi = 3.5 \text{Hz}$ 的 Ioffe-Pritchard 型的磁阱中，使凝聚体的消退长度(healing length) $\xi = (4\pi a_s n)^{-1/2}$ 小于凝聚体的轴向半径而大于其径向半径，从而实现雪茄形 BEC，其中 a_s 为三维 s 波散射长度， n 为原子气体的平均密度。但是和系统的温度对应的能量仍大于径向的束缚能级 $k_B T > \hbar \omega_{\perp}$ ，原子气体并没有完全处于径向基态，凝聚体还不是真正的准一维系统。

除了磁阱的方法，还可以用光学方法束缚 BEC。用两束正交的光学驻波可以产生的二维的周期格子，构成了一系列紧束缚的管状势阱。如果把凝聚气体装载到这样的二维光格子中，则在每个管状势阱中都可以形成一维量子气体。一维气体中的原子在径向受到很强的束缚，只能处在径向的基态上，径向激发则完全被抑制，其

化学势和温度满足关系： $\mu, k_B T \ll \hbar \omega_{\perp}$ 。通过调节二维光格子的激光强度可以改变相邻格点的一维气体之间耦合的强弱。当激光很强时，各个一维气体之间不发生隧穿，保持相互独立。

实验上观察到的一维 TG 气体，即强相互作用的一维量子气体，它需要很强的径向束缚或特别大的原子间散射强度。2004 年 Weiss 小组在实验上观察到一维的 TG 气体[11]，同年 Bloch 小组在光晶格中实现了 TG 气体[12]。

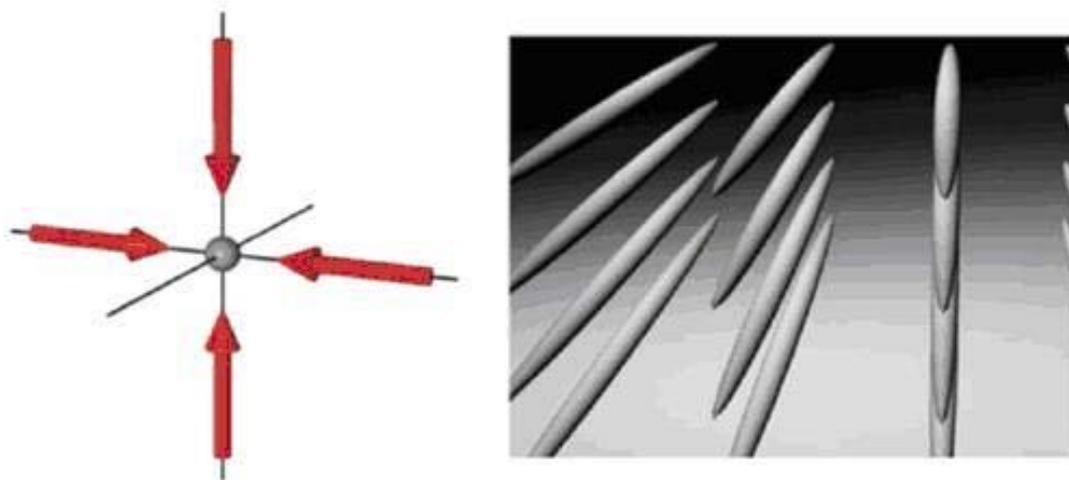


图-1.2 两个正交的驻波形成的二维光晶格势[12]。

Weiss 小组以 ^{87}Rb 为实验对象，在横向用两对相对的激光束形成了一个二维光晶格，就像一系列平行的牙签，沿着牙签方向(轴向)加一个弱束缚的光学偶极势，用这样的势阱束缚 BEC，形成一系列的准一维的 BEC。保持轴向光偶极势和粒子数不变，连续调节横向激光束，增加光势阱的深度 U_0 ，促使 BEC 在横向束缚得更紧，从而增加了原子间的相互排斥力，使原子在轴向扩张，同时系统的能量增加。随着光势阱阱深 U_0 的不断增大，原子间的一维相互作用强度变大，玻色气体接近 TG 极限，密度分布和能量趋于自旋极化的自由费米子的情况。表征从 BEC 到 TG 气体的转变的一种非常重要的无量纲参数是 $\gamma = \varepsilon_{\text{int}} / \varepsilon_{\text{kin}}$ ，其中 ε_{int} 、 ε_{kin} 分别表示用平均场理论计算的相互作用能和动能的期望值。在他们的实验中，最大的 γ 值可以达到 5。

如图-1.3 所示，实验上观测到的数据和精确解结果符合很好，当 $\gamma \gg 1$ 时，原子气体的一维温度(相当于系统的能量)，就会达到 TG 气体相应的值。实验观测到的原

子气体的空间密度分布随着 γ 值的变大而扩散开来；随着光势阱的阱深 U_0 的不断增大，原子气体的空间分布长度的方均根就会接近 TG 气体相应的值。

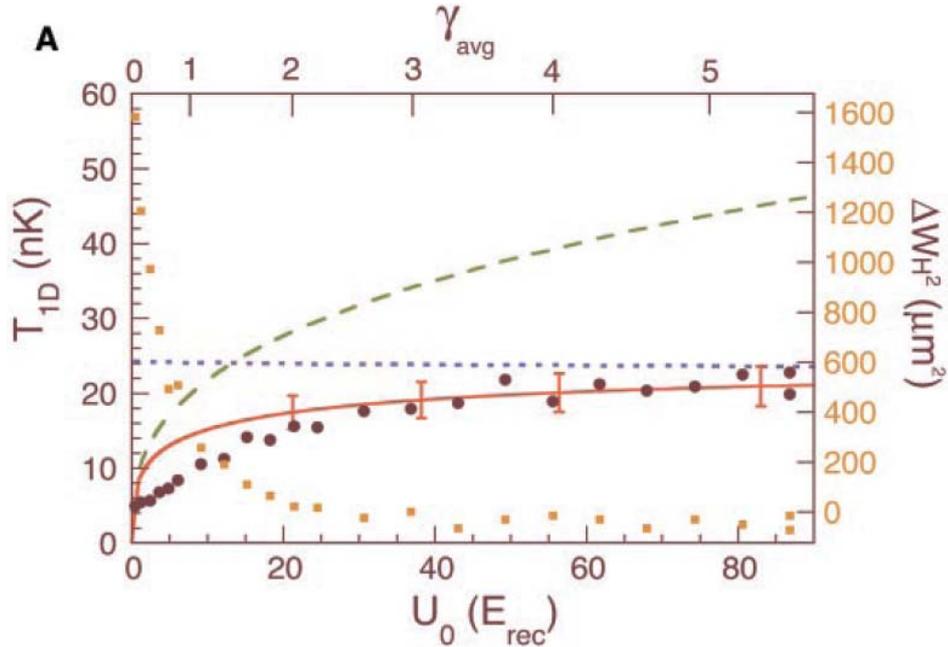


图-1.3 玻色气体的一维温度随光晶格势阱深度的变化[11]。圆点为实验数据，表示一维温度，正比于系统的能量。当 $\gamma \gg 1$ 时，TG 理论曲线(短虚线)与实验数据相符，当 $\gamma \ll 1$ 时，平均场理论曲线(长虚线)与实验数据一致。精确解理论曲线(实线)在整个区间都和实验数据吻合的比较好。

Bloch 小组利用新的方法在二维光晶格中实现了 TG 气体。他们用波长为 823nm 的两束正交的驻波叠加起来，形成二维光晶格，将 ^{87}Rb 原子束缚在其中，然后在轴向叠加上一个波长为 854nm 的光驻波，增加这个轴向激光的强度，轴向光驻波势阱的阱深变深，从而原子的有效质量增加，导致 γ 值变大，使原子气体达到 TG 区域。这个实验中 TG 区域的原子的 γ 值达到 5–200，远大于 Weiss 小组的实验值。他们研究了处在不同阱深的势阱中的原子气体的动量分布。实验结果显示，(1) 在小动量区域时，动量分布比较平坦；(2) 在大动量分布的线性区域，随着势阱深度的增加，斜率有所降低，这与玻色气体费米化的理论一致。动量的一阶衍射峰也与玻色气体费米化的理论符合得很好。

除了用磁光阱和全光阱方法实现一维量子气体外，也可以利用微刻技术在“原子芯片”上制作微磁阱，一维波导等。2001 年，Hansel 等人在原子芯片上用 $50 \mu\text{m}$ 宽

的导线产生的外势叠加形成了一个 Ioffe-Pritchard 势阱，通过调节导线中的电流，可以改变势阱的强度[13]。他们采用束缚频率为 $\nu_x = 28\text{Hz}$ ， $\nu_{y,z} = 220\text{Hz}$ 势阱实现了 ^{87}Rb 的玻色-爱因斯坦凝聚。

2008 年, Amerongen 等人在原子芯片上制备了处于 $|F = 2, m_F = 2\rangle$ 的 ^{87}Rb 的准一维量子气体，验证了 Yang-Yang 热力学公式[14]。通过改变蒸发冷却磁场的频率，他们将原子冷却到不同的温度，然后将原子束缚在轴向和径向频率分别为 $\omega_{//} / 2\pi = 8.5\text{Hz}$ ， $\omega_{\perp} / 2\pi = 3280\text{Hz}$ 的轴对称磁场中，最后采用标准的吸收成像方法，从 y 方向获得原子的二维密度分布图像。将这个二维密度分布沿 z 方向积分，就可以得到 x 轴的线密度分布。这个实验得到密度的分布与基于 Yang-Yang 热力学公式得到的结果符合得很好，第一次证实了由 Bethe ansatz 方法发展而来的 Yang-Yang 热力学公式。

一维超冷原子气体在“原子芯片”中的实验实现既对凝聚态理论的实验研究非常重要，又对表面物理，原子干涉仪，全息摄影技术，显微技术，原子微刻技术，以及量子信息处理等领域的发展有深远的意义。

1.1.3 玻色费米混合物

自然界只存在玻色子系统或费米子系统，不存在它们的混合物，由于激光制冷技术的发展，科学家在实验室里实现了由玻色气体和费米气体的混合物组成的量子气体。

量子统计决定了超冷原子气体的独特性质。在绝对零度下，玻色子形成凝聚体，而费米子由于泡利不相容原理形成费米海。一般情况下，实验物理学家利用多普勒效应，先用激光束将原子气体冷却到很低的温度，然后利用蒸发冷却将原子降到更低的温度。在蒸发冷却过程中，原子间需要频繁的碰撞以便将热量不断地通过较高动能的热原子离开束缚势阱来降低系统的温度。因为玻色子满足粒子交换对称性，玻色子之间存在 s -波碰撞相互作用，蒸发冷却可以把玻色子冷却到很低的温度，形成凝聚体。然而费米子满足粒子交换反对称性，同一内部态的费米原子间的 s -波散射长度为零，所以对于同一内部态的费米原子气体，不能进行有效的蒸发冷却。但不同内部态的两个原子间或两种不同类型的原子之间可以进行频繁的碰撞，从而能

够进行有效的蒸发冷却。Jin 等人在 1999 年将 ^{40}K 处在不同内部态 $|f = 9/2, m_f = 9/2\rangle$ 和 $|f = 9/2, m_f = 7/2\rangle$ 的等比例的两组分费米气体束缚在磁阱中进行蒸发冷却，成功将费米气体冷却到了费米温度 T_F 的 0.5 倍[15]。在随后的 2001 年，几个实验小组将玻色子 ^7Li 和费米子 ^6Li 束缚在磁阱中进行蒸发冷却，最终使费米子冷却到费米温度 T_F 的 0.21 倍[16-18]。同时，由于玻色子 ^7Li 的存在，可以说他们实现了由玻色费米混合物组成的量子气体。

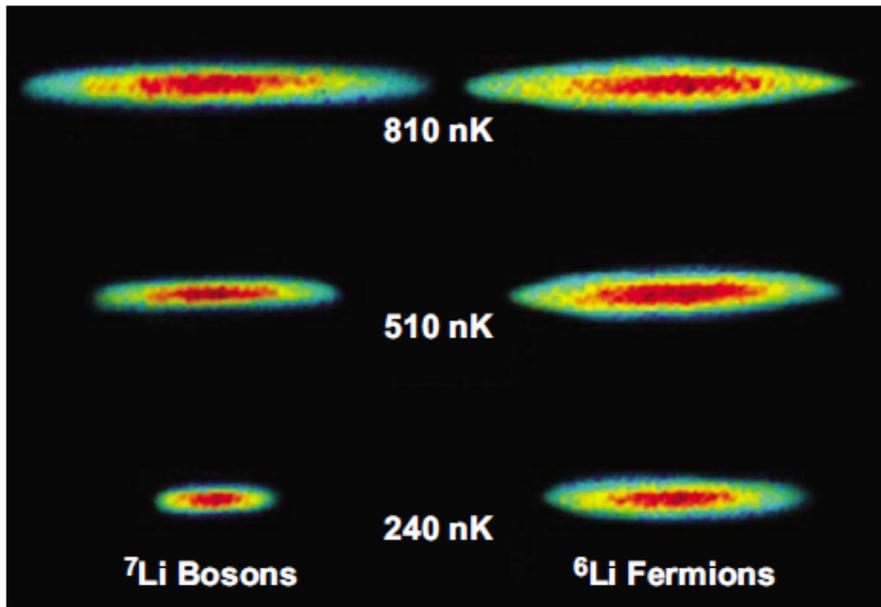


图-1.4 同时冷却的玻色子 ^7Li 和费米子 ^6Li 的密度分布[17]。费米压阻碍了费米子在空间的凝聚。

从图-1.4 可以看到，在温度比较高(810nK)的情况下，玻色子和费米子的密度几乎是相同的，可以用经典统计描述；当温度有所降低，如中间的图(510nK)，费米子分布的宽度明显大于玻色子，量子统计开始体现出来。当系统处于更低的温度(240nK)时，费米子分布的宽度远大于玻色子，验证了费米压的存在。当玻色子与费米子之间存在相互作用时，其物理图像更加丰富，是当前研究的一个热点，详细的内容可以参考综述文章[93,94]。

1.1.4 理论方法简介

玻色爱因斯坦凝聚在实验上实现后，人们对冷原子气体展开了深入的研究，包

括两团 BEC 之间的干涉[19], 长程相位相干[20], 量子涡旋[21], 费米子形成的分子凝聚体[22]等。这些现象都能用相干的宏观波函数来解释。由于玻色子之间的相互作用非常弱, 在临界温度以下的稀薄玻色气体几乎是纯的凝聚体, 宏观波函数直接和微观自由度相联系, 修正的非线性薛定谔方程, 即著名的 Gross-Pitaevskii(GP)方程[23,24]可以完整定量的描述超冷原子气体的基态和动力学行为。在 GP 方程中, 把相互作用能看作与局域粒子密度成正比的平均场, 从而稀薄气体中的多粒子行为转化为有效的单粒子行为。如果宏观波函数存在小的涨落, 那么我们可以得到 Bogoliubov 理论, 用于描述凝聚体的激发行为。综述文章[91,92]和专著[95]都有这方面详细的介绍。

人们可以通过 Feshbach 共振磁场改变原子的散射长度, 使得玻色子之间的相互作用增大。一维系统中相互作用无穷大的玻色气体称为 Tonks-Girardeau(简称 TG)气体, 是以理论模型的提出者 Tonks 和 Girardeau 而命名的[25,26]。由于 TG 气体之间无穷大的排斥相互作用, 系统不能用相干的宏观波函数描述, 但这种无穷大的排斥相互作用使它类似于无相互作用的极化费米子。Girardeau 于 1960 年提出了费米玻色映射(Fermi-Bose Mapping, 简称 FBM)理论, 利用极化费米子的波函数, 成功地得到了 TG 气体的波函数, 能量, 关联函数等, 发现其密度分布和能量与无相互作用的极化费米子完全相同, 但其动量分布与极化费米子有很大的不同[26]。最近, Girardeau 利用玻色子与费米子的对应关系, 得到了无穷大吸引相互作用的费米子的波函数和能量[41], 也探讨了存在无穷大排斥相互作用的玻色费米混合物系统[44]。

Bethe ansatz 方法可以处理任意相互作用强度的一维量子气体系统。1963 年, Lieb 和 Liniger 首次得到了 δ 相互作用的一维均匀玻色气体的精确解[27], 他们研究的模型采用周期性边界条件, 而开边界条件的精确解由 Gaudin 给出[28]。之后, 人们利用 Bethe ansatz 方法陆续得到自旋为 1/2 的费米子, 两分量玻色子, 玻色费米混合物以及其他多分量系统的精确解[49]。1969 年杨振宁兄弟研究了排斥相互作用的一维玻色系统的热力学性质, 将 Bethe ansatz 方法推广到有限温度的量子气体系统[29]。随后, 人们研究了有限温度下多分量的量子气体的热力学行为。

随着计算机技术的发展, 数值计算成为物理研究者的一个常用的工具, 帮助人们进一步进入奇妙的物理世界。很多的数值方法已经广泛应用于超冷原子气体的研究, 例如: 矩阵精确对角化方法, 量子蒙特卡罗方法, 密度矩阵重整化群方法等,

而且由这些数值方法得到的结果和实验符合得很好。

第二节 我们的工作

我们主要做了两个方面的工作，研究了双势阱中的少数玻色子气体的基态性质和有限温度下准一维玻色费米混合物在简谐势阱中的密度分布等。

为了探讨粒子的局域化性质，我们研究束缚在一个中间带有一个 δ 势垒的无限深势阱中的少数玻色子组成的系统。首先，利用 FBM 理论，得到 TG 气体在这样的势阱中的基态性质，发现单体密度矩阵和动量分布等与粒子数目的奇偶性有密切的关系。然后，利用矩阵精确对角化方法，得到任意相互作用强度下的基态的密度分布，动量分布等。结果表明动量的次峰，随着势垒的升高而增大，随着粒子间相互作用强度的增大而减小。

玻色费米混合物是当前实验研究的热点，我们利用热力学 Bethe ansatz 方程研究了有限温度下准一维玻色费米混合物在简谐势阱中的密度分布。用 Bethe ansatz 方法解决玻色费米混合物系统必须满足两个前提条件：玻色子的质量等于费米子的质量，玻色子与玻色子之间的相互作用强度等于玻色子与费米子之间的相互作用强度。实验上利用 Feshbach 共振可以调节粒子之间的相互作用达到上面的要求；然而相同质量的玻色子和费米子并不存在，但一些同位素的质量非常的接近，例如： ^7Li 和 ^6Li ， ^{87}Rb 和 ^{86}Rb ，我们的结论，例如玻色费米相分离，应该也适用于这些原子。根据 Yang-Yang 热力学的思路，我们推导出玻色子和极化费米子组成的混合物的热力学 Bethe ansatz 方程，然后基于这个方程，得到了有限温度下的准一维玻色费米混合物在简谐势阱中密度分布。混合物出现玻色费米相分离需要更低的温度和更强的相互作用。

第三节 本文内容

本文的第二章到第四章介绍与一维量子气体相关的一些基本理论，第五章和第六章分别介绍我们的两个工作。在第二章，我们介绍了描述弱相互作用量子气体的平均场理论；第三章对 TG 气体，费米 TG 气体以及其他强相互作用的混合物做了详细的回顾；第四章主要介绍了 Bethe ansatz 方法和热力学 Bethe ansatz 方法在量子气体中的应用；第五章研究了双势阱中的少数玻色子气体的基态性质；第六章基于热

力学 Bethe ansatz 方程研究了有限温度下准一维玻色费米混合物在简谐势阱中的密度分布。

第二章 平均场理论

基于平均场理论的 GP 方程，能够非常好的处理弱相互作用的玻色凝聚气体，与实验结果一致。本章第一节主要用平均场理论讨论玻色凝聚气体的基态性质；第二节基于平均场理论讨论玻色费米混合物的基态密度分布。

第一节 玻色凝聚体

一般情况下，BEC 中的原子之间的相互作用非常弱，Gross-Pitaevskii 方程非常好地描述这种弱相互作用的 BEC 实验。本节分别从密度泛函理论和平均场理论得到 GP 方程，然后对玻色气体的基态性质进行分析。

2.1.1 密度泛函理论

密度泛函理论(The density-Functional Theory, 简称 DFT)是处理多体问题的一个非常成功的理论。它是在相互作用费米子系统的基础上发展起来的，提供了一个研究非均匀玻色气体的严格方法。假定 N 个相互作用的玻色子在外势 $V_{ext}(x)$ 下，处于局域热平衡状态，并且在位置 x 有能量密度 $\varepsilon(\rho)$ 。绝对温度下的连续性方程可以写为

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

其中， v 是原子速度。若加上量子动能项，上面的第二式变为

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

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

$$v(x,t) = \hbar \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right) / [2im\rho(x,t)] \quad (2.3)$$

从而，在绝热局域密度近似下，可得 Kohn-Sham(KS)类含时方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V_{ext} \Psi + \frac{\partial[\rho \varepsilon(\rho)]}{\partial \rho} \Psi \quad (2.4)$$

如果外势 $V_{ext}(x)$ 不含时，那么基态波函数可写为时间和空间分离的形式

$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(-i\mu t/\hbar)$ 。其中 $\psi(x)$ 是已归一化的波函数，它满足 $\int dx |\psi(x)|^2 = N$ 。

由方程(2.4)可得对应的定态薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_{\text{ext}}\psi + \frac{\partial[\rho\varepsilon(\rho)]}{\partial\rho}\Psi = \mu\psi \quad (2.5)$$

此时，密度 $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ 。

我们讨论原子间有排斥相互作用的均匀一维玻色气体。在稀薄的玻色气体中，一般只发生两体相互作用，而发生三体相互作用的概率就非常小。在两体相互作用中，一般情况下只考虑 s 波相互作用，因此粒子间的相互作用可以写成 $U_{1D}\delta(r-r')$ ， r 和 r' 是粒子的坐标， U_{1D} 是和 s-波散射有关的一维相互作用常数。均匀的 δ 函数相互作用的玻色多体系统可以通过 Lieb-Liniger 模型[27]精确求解。

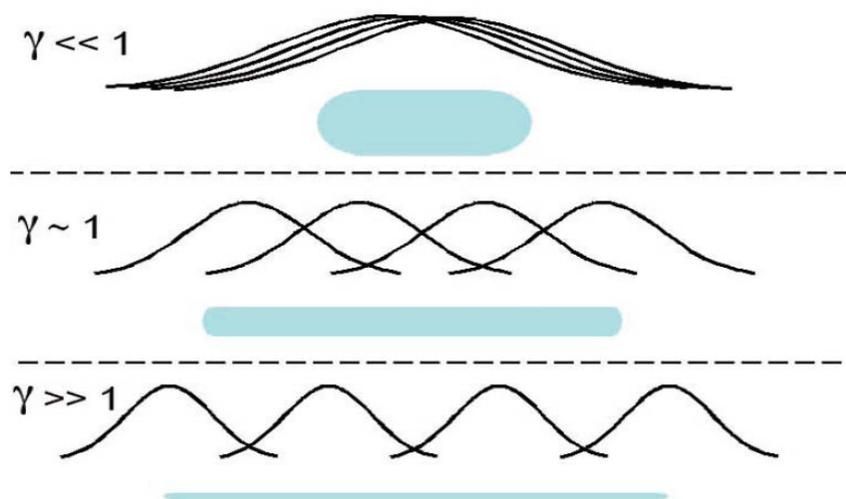


图-2.1 一维玻色原子分布示意图。对于不同的 γ 区域都有：上图表示原子的相干长度 l 和原子间距离 r ；下图表示一维原子气体的密度分布。当 $\gamma \ll 1$ ，原子空间波函数趋于相同；当 $\gamma \gg 1$ ，玻色子趋于费米化，波函数在空间分离。

一维相互作用系统可以用一个非常重要的无量纲参数 $\gamma = mU_{1D}/n_{1D}\hbar^2$ 来表征原子气体所处的不同相互作用区域，其中 n_{1D} 是一维的线密度。同时，还有两个相关的长度物理量，单粒子波函数的特征长度 l (即德布罗意热波长 λ_T) 和粒子间的平均距

离 $r=1/n_{1D}$ 。在平均场区域, $\gamma \ll 1$, 这时 $l \gg r$, 长程的特征长度(相干长度)使原子气体处于超流态。当 l 靠近 r 时, 系统就进入 TG 区, 单粒子波函数在空间开始出现分离。当 $l=r$ 时, $\gamma \gg 1$, 单粒子波函数在空间完全分离, 粒子的密度分布变的很宽, 类似费米子的密度分布, 如图-2.1 所示。

据 Lieb-Liniger 模型[27]可以计算出两个极限条件下原子气体的能量密度为:

$$\begin{cases} \varepsilon(\rho) = \frac{1}{2}U_{1D}\rho & \gamma \ll 1 \\ \varepsilon(\rho) = \frac{\pi^2\hbar^2}{6m}\rho^2 & \gamma \gg 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

从上式可以看出, 在强相互作用区域, 玻色气体的能量密度与原子间的相互作用常数无关。将上面的能量密度代入方程(2.5), 得到弱相互作用的一维玻色气体满足的非线性薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext} + U_{1D}|\Psi|^2 \right] \psi = \mu\psi \quad (2.7)$$

和强相互作用的一维玻色气体满足的非线性薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}|\Psi|^4 \right] \psi = \mu\psi \quad (2.8)$$

2.1.2 玻色凝聚体的平均场理论

从密度泛函理论得到弱相互作用下的非线性薛定谔方程, 也可以从平均场理论同样得出。玻色凝聚气体的平均场理论是描述玻色爱因斯坦凝聚的一种非常成功的理论, 与实验结果符合很好。为了研究弱相互作用的多体玻色系统, 我们采用平均场近似, 并且假设系统的波函数是 N 个单粒子波函数的乘积, 满足粒子交换对称性。所有的玻色子都占据同一个单粒子态 $\phi(r)$, 忽略邻近的两个粒子的关联, N 个粒子的波函数可设为 $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \phi(r_i)$, 其中单粒子态 $\phi(r)$ 是归一的, $\int dr |\phi(r)|^2 = 1$ 。系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \right] + U_0 \sum_{i<j} \delta(r_i - r_j), \quad (2.9)$$

其中 $V(r)$ 是系统的外势, 最后一项是相互作用能, $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s / m$, a_s 是三维 s-波

散射长度，可通过实验测量。哈密顿量在上面的态的期望值为

$$\begin{aligned} E &= \int \dots \int dr_1 \dots dr_N \Psi^*(r_1, r_2, \dots, r_N) H \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \\ &= N \int dr \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(r)|^2 + V(r) |\phi(r)|^2 + \frac{(N-1)}{2} U_0 |\phi(r)|^4 \right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

假设凝聚体的波函数 $\psi(r) = N^{1/2} \phi(r)$ ，则粒子的密度为 $n(r) = |\psi(r)|^2$ ，忽略 $1/N$ 阶项，系统的能量为

$$E = \int dr \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(r)|^2 + V(r) |\psi(r)|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\psi(r)|^4 \right] \quad (2.11)$$

同时波函数满足限制条件 $N = \int dr |\psi(r)|^2$ 。然后我们做变分， $\delta E - \mu \delta N = 0$ ，其中，化学势 μ 是拉格朗日乘子，保证粒子数守恒。这个过程等价于固定 μ 同时使 $E - \mu N$ 最小。我们让 $E - \mu N$ 对 $\psi^*(r)$ 变分等于零，得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) + U_0 |\psi(r)|^2 \psi(r) = \mu \psi(r) \quad (2.12)$$

这就是定态 GP 方程。利用 $\psi(r, t) = \psi(r) \exp(-i\mu t / \hbar)$ ，得到含时 GP 方程

$$i\hbar \partial_t \psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r) \psi(r, t) + U_0 |\psi(r, t)|^2 \psi(r, t) \quad (2.13)$$

相应的一维定态 GP 方程和含时 GP 方程分别为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) + U_{1D} |\psi(x)|^2 \psi(x) = \mu \psi(x) \quad (2.14)$$

和

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) + U_{1D} |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) \quad (2.15)$$

2.1.3 托马斯-费米近似

在相互作用强度很大的情况下，相互作用能在系统能量中占主导地位，相比之下，处于基态的系统的粒子由于受到非常强的相互排斥作用，其运动范围受到了限制，因此，动能就会远小于相互作用能。这时候，哈密顿量中的动能就可以忽略掉，被称为托马斯-费米(Thomas-Fermi)近似。一维定态 GP 方程变为

$$V(x)\psi(x) + U_{1D}|\psi(x)|^2\psi(x) = \mu\psi(x) \quad (2.16)$$

则玻色子的密度分布为

$$n(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{U_{1D}}[\mu - V(x)] \quad (2.17)$$

同时玻色子密度分布的边界满足 $V(R) = \mu$ 。在外势为简谐势的情况 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$,

我们得到凝聚体的半径为

$$R^2 = \frac{2\mu}{m\omega^2} \quad (2.18)$$

则系统的粒子数为

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} n(x)dx = \int_{-R}^R \frac{1}{U_{1D}} \left[\mu - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right] dx = \frac{4\mu}{3U_{1D}} \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega^2}} \quad (2.19)$$

将上式变换一下，得到化学势 μ 满足

$$\mu = \left(\frac{9}{32} \right)^{1/3} \left(\frac{1}{a_0} \frac{U_{1D}}{\hbar\omega} N \right)^{2/3} \hbar\omega \quad (2.20)$$

其中单粒子基态的特征半径为 $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 。边界 R 满足

$$R = \left(\frac{3}{2} \frac{1}{a_0} \frac{U_{1D}}{\hbar\omega} N \right)^{1/3} a_0 \quad (2.21)$$

化学势 μ 和边界 R 都是随着粒子个数 N 和相互作用强度 U_{1D} 的增加而增加的。

2.1.4 定态 Gross-Pitaevskii 方程的数值解

虽然定态 GP 方程是一个非线性方程，通常没有解析形式的解，但其基态和激发态可通过数值方法求解[30,31]，下面以外势为简谐势的一维定态 GP 方程为例用虚时演化方法求其数值解。这种情况下的 GP 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) + U_{1D} \psi^3(x) = \mu \psi(x) \quad (2.22)$$

其中波函数 $\psi(x)$ 是实函数并且归一到总粒子数 N ， $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx = N$ 。为了便于数值

处理，我们引入长度单位 $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ，即单粒子基态的特征半径，并用 a_0 ， $\hbar\omega$ 和 a_0^{-1}

来重新度量空间坐标，能量和粒子密度，即做变换

$$x = a_0 \xi, \quad E = \hbar \omega E_1, \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{N}{a_0}} \Psi(\xi) \quad (2.23)$$

这里波函数 $\Psi(\xi)$ 归一化到 1。这样定态 GP 方程可以写成

$$H\Psi(\xi) = \mu_1 \Psi(\xi) \quad (2.24)$$

而二阶微分算符 H 定义为 $H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \xi^2 + \frac{1}{2} U_1 \Psi^2(\xi)$, 其中 $\mu = \hbar \omega \mu_1$,

$$U_{1D} = \hbar \omega U_1 \text{。}$$

为了数值计算, 我们需要对坐标和波函数做离散化处理. 为此首先将 ξ 取在个有限的区间 $[-L/2, L/2]$, 其中 L 为此区间的长度, 并将该区间划分为 n 个均匀的小区间, 间距为 h , 用 Ψ_i 来表示波函数在坐标 $\xi_i = -L/2 + ih$ 上的值, 其中 $i = 0, 1, 2, \dots, n$. 这样, 离散化后的 GP 方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{h^2} (\Psi_{i-1} + \Psi_{i+1} - 2\Psi_i) + \frac{1}{2} \xi_i^2 \Psi_i + \frac{1}{2} U_1 \Psi_i^3 = \mu_1 \Psi_i \quad (2.25)$$

该差分方程可以等价于求一个大型对称三对角矩阵的实本征值和本征向量的问题. 其最小的两个本征值对应基态和第一激发态, 我们可以采用虚时演化方法的求解, 即

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\hat{H} \Psi \quad (2.26)$$

其中, τ 是“伪”时间. 事实上, 将含时的 GP 方程中的时间 t 用 $-i\tau$ 替换就可以得到上面的方程。

另外, 系统的能量泛函为

$$E(\psi(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi^2(x) + \frac{1}{2} U_{1D} \psi^4(x) \right] \quad (2.27)$$

其中第一个积分是凝聚体的动能 E_{kin} , 第二个积分是谐振子能 E_{ho} , 而最后一个积分是粒子间的相互作用能 E_{int} 。化学势的表达式可以从定态 GP 方程直接求得

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi^2(x) + U_{1D} \psi^4(x) \right] \quad (2.28)$$

由于粒子间的相互作用的存在, 这将导致每单位粒子能量与化学势是不相等的, 它

们满足关系

$$\mu = \frac{1}{N}(E_{kin} + E_{ho} + 2E_{int}) = \frac{E}{N} + \left(\frac{E}{N}\right)_{int} \quad (2.29)$$

若计算系统的基态波函数，我们选择单粒子基态波函数作为初始猜测波函数 Ψ^0 ；若计算系统的第一激发态的波函数，单粒子第一激发态波函数可以作为初始猜测波函数 Ψ^0 。利用上面的公式，波函数经过多次迭代，最后变的非常稳定地趋于系统的基态和第一激发态本征函数。具体的计算步骤如下：

- (1) 给出空间变量的一个步长 h 和“伪”时间步长 $\Delta\tau$ ；
- (2) 选定一个初始的猜测波函数 Ψ^0 ，并用归一化条件 $\int \Psi_i^2 = 1$ 归一化；
- (3) 利用(2.26)式重复计算得到本征函数的近似值 Ψ^{n+1} ，注意每重复一次都必须进行归一化；
- (4) 计算系统的能量本征值、动能、势能、相互作用能和化学势等。

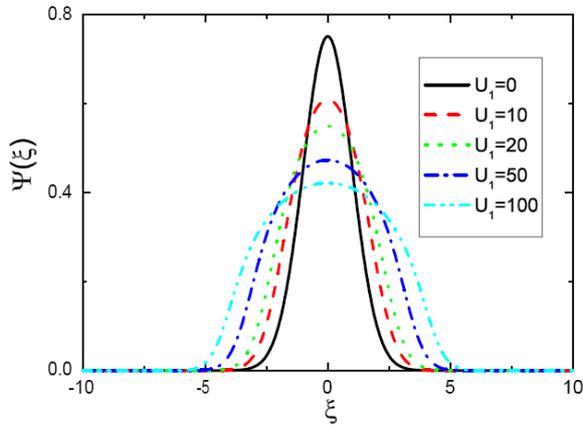


图-2.2 排斥相互作用下的基态波函

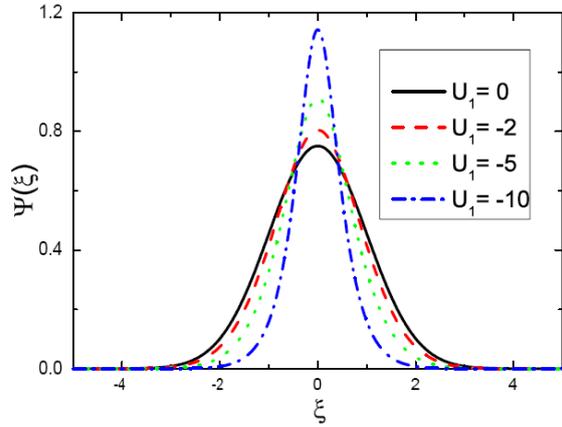


图-2.3 吸引相互作用下的基态波函

从图-2.2 中，在排斥相互作用下，随着相互作用强度的增大，粒子之间排斥加强，波函数开始变得平坦。在吸引相互作用下，随着粒子间吸引力的增强，波函数在中间位置发生聚集(见图-2.3)，但当粒子间的吸引相互作用达到一定的程度，这种聚集致使中间位置达到很高的密度而不稳定，出现塌缩现象，这时对应的 GP 方程是无解。我们得到有关各种能量的表格。当相互作用强度很大的情况下，系统的动能远小于

	μ	E/N	$(E/N)_{kin}$	$(E/N)_{ho}$	$(E/N)_{int}$
$U_1=0$	0.5000	0.5000	0.2500	0.2500	0.000
$U_1=10$	2.0115	1.3161	0.1365	0.4841	0.6955
$U_1=20$	3.1073	1.9471	0.1035	0.6834	1.1602
$U_1=50$	5.6422	3.4402	0.0687	1.1695	2.2020
$U_1=100$	8.9199	5.3914	0.0494	1.8134	3.5286
$U_1=-2$	0.0626	0.2881	0.3133	0.2004	-0.2255
$U_1=-5$	-0.8001	-0.0906	0.4868	0.1321	-0.7095
$U_1=-10$	-3.1714	-0.9804	1.1523	0.0583	-2.1910

表-2.1 每单位粒子的基态能量和化学势(能量单位为 $\hbar\omega$)

系统的势能和相互作用能, 因此, 此时的托马斯-费米近似是成立的。

采用分步傅立叶变换法解(FFT)上面的微分方程, 相对于大多数有限差分法可以使运算速度提高一到二个数量级(尤其是 Matlab 软件已经将 fft 作为一种软件包, 在编程时可以直接引用, 这使应用更加方便。)。这种方法由于采用了有限傅立叶快速变换(FFT)算法, 有较快的速度。因此, 不同外势(简谐势, 双势阱, 简谐势+光晶格势), 不同维度(一维, 二维和三维)和不同组分(单组分, 两组分和自旋-1)的 GP 方程都可以用上面的方法轻松的求解其基态和第一激发态的密度分布和相应的各项能量。当然, 同样的方法应用于含时 GP 方程的实时演化, 可以计算系统动力学行为。

第二节 玻色费米混合物的平均场理论

在平均场理论下, 玻色系统的波函数满足 GP 方程。在玻色费米混合物中, 由于玻色子受到了费米子产生的压力, GP 方程应包含与费米子的密度 $n_F(r)$ 成正比的相互作用项, 即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla^2 + V(r) + g_{BB} |\psi(r)|^2 + g_{FB} n_F(r) \right] \psi(r) = \mu_B \psi(r) \quad (2.30)$$

其中， g_{BB} 和 g_{FB} 分别表示玻色子与玻色子和费米子与玻色子之间的相互作用强度

$$\begin{aligned} g_{BB} &= \frac{4\pi\hbar^2 a_{bb}}{m_B} \\ g_{FB} &= \frac{4\pi\hbar^2 a_{fb}}{m_{BF}} \end{aligned} \quad (2.31)$$

其中 a_{bb} 和 a_{fb} 分别表示玻色子与玻色子和费米子与玻色子之间的 s 波散射长度， m_{BF} 是玻色子与费米子的约化质量， $m_{BF} = 2m_B m_F / (m_B + m_F)$ 。

费米子遵从费米狄拉克统计，粒子交换是反对称的，因而必须满足泡利不相容原理，任何两个费米子不能占据同一个量子态，所以费米子不存在与玻色子类似的 GP 方程。但是，我们可以用经典的坐标和动量描述费米子的行为。

根据量子统计力学的相空间理论，大小为 $d^3\vec{r}d^3\vec{k}$ 的相体积内的量子态数为 $d^3\vec{r}d^3\vec{k}/(2\pi)^3$ 。由于绝对零度下的无相互作用的极化费米子呈现从低能级排到高能级的费米海分布，即占据费米面以下所有的量子态，并且每个量子态上只有一个费米子，因此，在局域费米波矢量 $k_F(\vec{r})$ 以下，大小为 $d^3\vec{r}d^3\vec{k}$ 的相体积内的费米数也为 $d^3\vec{r}d^3\vec{k}/(2\pi)^3$ 。对费米波矢量积分，我们可以得到局域密度分布

$$n_F(\vec{r}) = \frac{4}{3} \pi k_F^3(\vec{r}) \frac{1}{(2\pi)^3} \quad (2.32)$$

位置 \vec{r} 处具有最大能量的费米子处于费米面，其能量为动能 $\hbar^2 k_F^2(\vec{r}) / (2m_F)$ 和势能 $V_F(\vec{r})$ 之和。如果这个能量在各个位置的值不相等的，那么能量更大的费米子很容易跑到能量更小的位置，系统就是不稳定的。因此，对于一个稳定的系统，各个位置的局域费米面上的粒子具有相同的能量，即费米子的化学势

$$\mu_F = \frac{\hbar^2 k_F^2(\vec{r})}{2m_F} + V_F(\vec{r}) \quad (2.33)$$

与位置无关。这就是费米子的托马斯-费米近似[32]，它被广泛应用于原子物理学，核物理学和天体物理学来处理有相互作用的多粒子体系，同样得到有关空间密度的闭合方程。通过上面的两式，我们得到费米密度

$$n_F(\vec{r}) = \frac{(2m_F)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3} [\mu_F - V_F(\vec{r})]^{3/2} \quad (2.34)$$

同时需要保证存在费米子的区域内 $\mu_F - V_F(\vec{r}) > 0$ 。

在玻色费米混合物中，费米子也受到了玻色子的作用。这种相互作用在平均场近似下，正比于玻色子的密度。因此公式(2.36)中的外势应加入平均场势能，所以费米子的密度修正为

$$n_F(\vec{r}) = \frac{(2m_F)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3} \max[\mu_F - V_F(\vec{r}) - g_{FB}n_B(\vec{r}), 0]^{3/2} \quad (2.35)$$

当玻色子之间的相互作用很大的时候，利用 Thomas-Fermi 近似，忽略动能项，玻色子的密度应由公式(2.32)修正为

$$n_B(\vec{r}) = \frac{1}{g_{BB}} \max[\mu_B - V_B(\vec{r}) - g_{FB}n_F(\vec{r}), 0] \quad (2.36)$$

玻色子和费米子的化学势可以根据粒子数确定，

$$\begin{aligned} N_F &= \int n_F(\vec{r}) d^3\vec{r} \\ N_B &= \int n_B(\vec{r}) d^3\vec{r} \end{aligned} \quad (2.37)$$

公式(2.37)和(2.38)可以用迭代的方法求出玻色子和费米子密度的数值解。

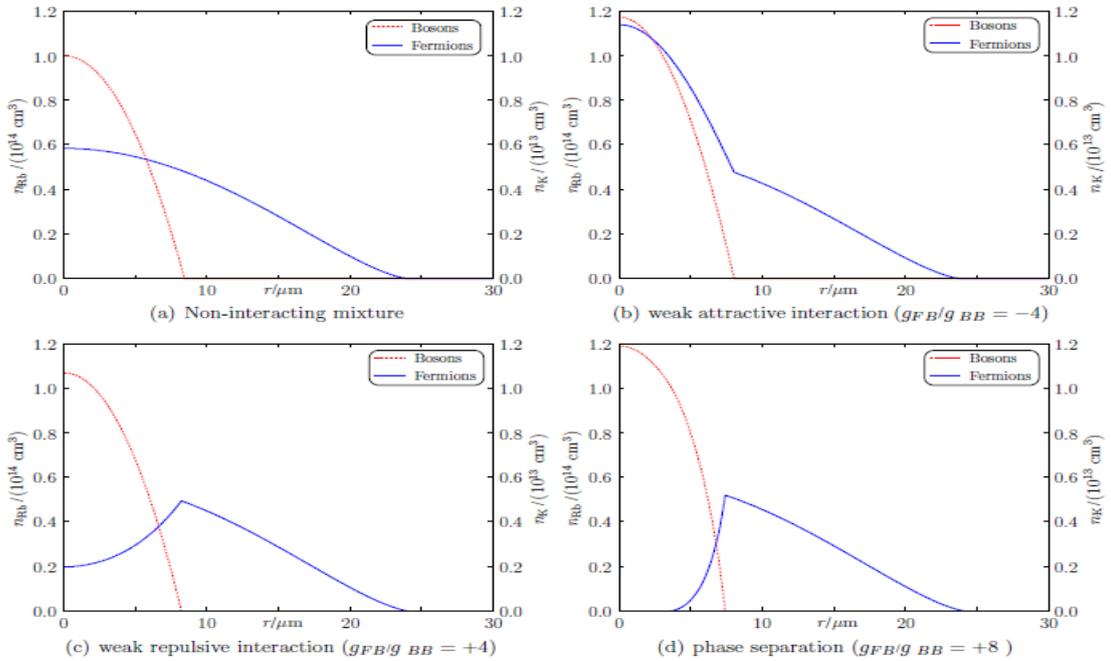


图-2.4 Thomas-Fermi 近似下的玻色费米混合物的密度分布[33]。

$$N_B = N_F = 10^5, \quad \omega_B = 2\pi \times 50 \text{Hz}, \quad a_{BB} = 98.98a_0.$$

文章[33]给出了 ^{87}Rb 和 ^{40}K 各向同性的简谐势阱中密度分布。从图-2.4(a)可以看出，在玻色子与费米子之间没有相互作用的情况下，由于泡利不相容原理，费米子有一个较宽的分布范围，而玻色子则集中分布在中间区域。当玻色子与费米子之间为吸引相互作用时，在重叠区域，费米子的密度升高，因为中心区域的玻色子的密度高于边缘区域，越到势阱的中心区域，费米的密度升高的幅度越大，而玻色子密度的变化不明显。当玻色子与费米子之间为排斥相互作用时，在重叠区域，费米子的密度降低，势阱中心的部分费米子被排斥到边缘。随着排斥相互作用的增大，势阱中央的费米子完全被排斥到边缘，出现了相分离现象。

如图-2.5(a)所示，当玻色子与费米子之间为非常强的吸引相互作用时，公式(2.37)和(2.38)的数值迭代过程是不收敛的，因此上面的方程没有自洽解，表明此时的混合物是不稳定的，在实验上表现为塌缩现象。为了总结不同相互作用强度下混合物的特性，图-2.5(b)给出了简谐势下的玻色费米混合物的相图。当玻色费米相互作用强度很小时，混合物处于稳定的状态。随着玻色费米间的吸引相互作用变大，混合物由稳定区域过渡到塌缩区域；随着玻色费米间的排斥相互作用变大，混合物由稳定区域过渡到相分离区域。

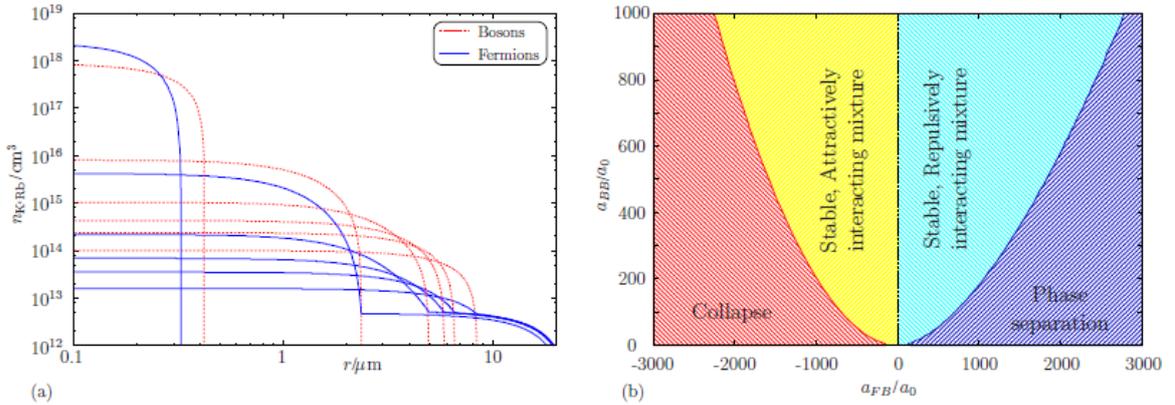


图-2.5(a)强吸引相互作用下的玻色费米混合物的不稳定性(坍缩)在平均场下表现出的迭代过程。

(b)简谐势下的玻色费米混合物的相图。 $N_B = 10^6, N_F = 5 \times 10^5$ [33]。

在一维情况下，相空间 $dxdk$ 内的量子态数为 $dxdk/2\pi$ ，那么处于绝对零度的无相互作用的极化费米子在局域费米波矢量 $k_F(x)$ 以下的相空间 $dxdk$ 内的量子态数为

$dxdk/2\pi$ 。对费米波矢 k 从 $-k_F(x)$ 积到 $k_F(x)$ ，我们得到费米子的局域密度分布函数和局域费米波矢量的关系为

$$2\pi n_F(x) = 2k_F(x) \quad (2.38)$$

它与三维的情况有所不同，按照上面的思路，我们可以得到一维混合物中的费米密度函数的方程

$$n_F(x) = \frac{(2m_F)^{1/2}}{\pi\hbar} \max[\mu_F - V_F(x) - g_{FB}^{1D} n_B(x), 0]^{1/2} \quad (2.39)$$

其中 g_{FB}^{1D} 是一维的玻色子与费米子碰撞的相互作用强度。同时玻色子满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dx^2} + V_B(x) + g_{BB}^{1D} |\psi(x)|^2 + g_{FB}^{1D} n_F(x) \right] \psi(x) = \mu_B \psi(x) \quad (2.40)$$

其中 g_{BB}^{1D} 是一维的玻色玻色相互作用强度。当玻色子之间的相互作用很强时，利用 Thomas-Fermi 近似，忽略其动能项，得到

$$n_B(x) = \frac{1}{g_{BB}^{1D}} \max[\mu_B - V_B(x) - g_{FB}^{1D} n_F(x), 0] \quad (2.41)$$

玻色子和费米子的化学势同样由粒子数确定，

$$\begin{aligned} N_F &= \int n_F(x) dx \\ N_B &= \int n_B(x) dx \end{aligned} \quad (2.42)$$

假设玻色费米混合物囚禁在简谐势中，玻色子和费米子外势分别为 $V_B(x) = \frac{1}{2} m_B \omega_B^2 x^2$ 和 $V_F(x) = \frac{1}{2} m_F \omega_F^2 x^2$ ，并且 $V_B(x) = V_F(x)$ 即 $\omega_B / \omega_F = \sqrt{m_F / m_B}$ 。为了计算的方便，我

们重新标记坐标，定义 $\tilde{x} = \sqrt{\frac{1}{2} m_B \omega_B} x$ ，其量纲为能量平方根。托马斯-费米近似下的

玻色和费米密度函数为

$$\begin{aligned} n_B(\tilde{x}) &= \frac{1}{g_{BB}^{1D}} \max[\mu_B - \tilde{x}^2 - g_{FB}^{1D} n_F(\tilde{x}), 0] \\ n_F(\tilde{x}) &= \frac{(2m_F)^{1/2}}{\pi\hbar} \max[\mu_F - \tilde{x}^2 - g_{FB}^{1D} n_B(\tilde{x}), 0]^{1/2} \end{aligned}$$

同时，粒子数等式变为

$$N_B = \sqrt{\frac{2}{m_B}} \frac{1}{\omega_B} \int n_B(\tilde{x}) d\tilde{x}$$

$$N_F = \sqrt{\frac{2}{m_F}} \frac{1}{\omega_F} \int n_F(\tilde{x}) d\tilde{x}$$

下面讨论准一维简谐势中⁸⁷Rb和⁴⁰K的密度分布。假设准一维简谐势的轴向和径向频率分别为 $\omega_B = 50 \times 2\pi \text{Hz}$ 和 $\omega_{\perp} = 3280 \times 2\pi \text{Hz}$ 。玻色玻色相互作用近似为 $g_{BB}^{1D} \cong 2\hbar\omega_{\perp}a_{BB}$ ，其中三维散射长度取作 $a_{BB} = 98.98a_0$ (a_0 为玻尔半径)。

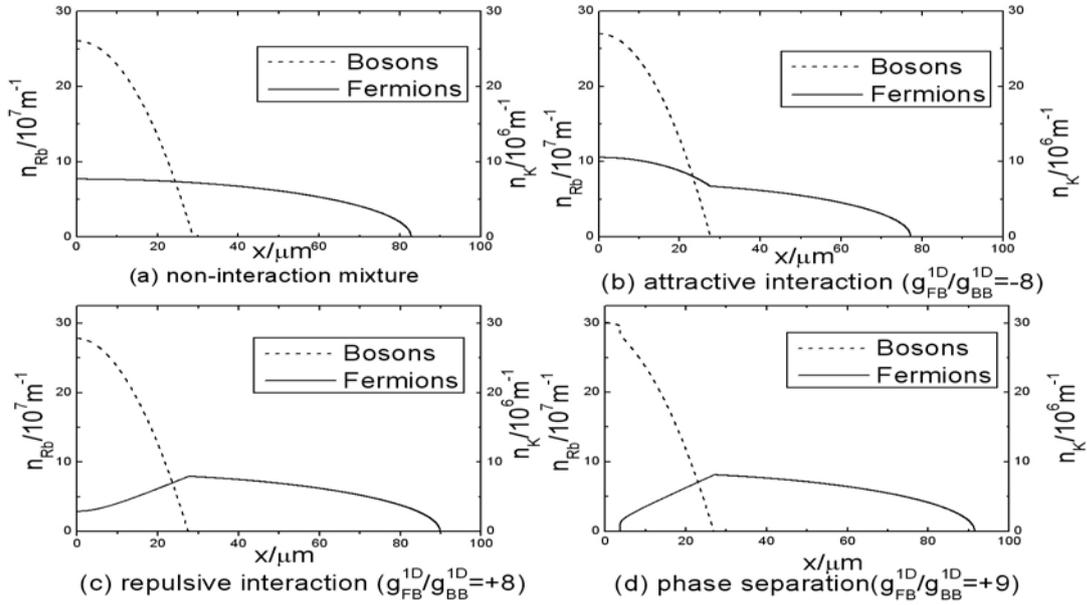


图-2.6 准一维下的玻色子和费米子的基态密度分布。 $N_B = 10^4, N_F = 10^3$ 。

从图-2.6可以看出，准一维的密度分布和三维的情况类似。在吸引相互作用下，重叠区域的费米子的密度升高，而排斥相互作用下，中间的费米子被排斥到边缘，随着相互作用的增加，混合物发生相分离。

第三章 无穷大相互作用的量子气体

前面的平均场理论只能处理相互作用比较弱的量子气体,本章讨论粒子间存在无穷大相互作用的各种系统。第一节主要介绍无穷大相互排斥作用的玻色气体的基态性质和以及一些动力学行为;第二节介绍无穷大吸引相互作用的极化费米气体的基态的占据数分布和动量分布等;第三节介绍无穷大相互排斥作用的玻色费米混合物的基态性质。

第一节 Tonks-Girardeau 气体

Tonks-Girardeau(简称TG)气体是指一维系统中相互作用无穷大的玻色气体。众所周知,玻色爱因斯坦凝聚中的多个原子的波函数是可以叠加在一起并能够相互穿透,整体上表现为单粒子行为,具有宏观量子效应。而在TG气体中,玻色子是硬核的,不可穿透的,多个硬核玻色子也不能占据同一位置,并且他们被限制在一个一维系统中,就像公路上由于塞车而出现的汽车排成长龙的现象。

假设一个一维系统由 N 个玻色子组成,玻色子之间存在接触碰撞相互作用,系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1(i \neq j)}^N U_{1D} \delta(x_i - x_j) \quad (3.1)$$

其中第一项是对所有单粒子哈密顿量 h_i 的求和,第二项是粒子间的相互作用项, U_{1D} 是相互作用强度。当 U_{1D} 等于零时,表示粒子间没有相互作用;当 U_{1D} 趋向于正无穷大时,粒子之间是不可穿透,即 TG 气体,这时波函数 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 满足

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \quad \text{当 } x_i = x_j, 1 \leq i < j \leq N, \quad (3.2)$$

这意味着 TG 气体可以看成一群受单粒子哈密顿量 h_i 控制的“自由”玻色子,同时波函数满足上面的约束条件。而这个约束条件等价于具有粒子坐标交换反对称性的自由费米子。因为遵从泡利不相容原理,任意两个费米子不能占据同一个位置。基于这种等价性, Girardeau[26]提出了费米玻色映射理论,即利用自由费米子的波函数,改变其粒子交换对称性来构造 TG 气体的波函数。TG 气体的波函数 $\psi_{TG}(x_1, \dots, x_N)$ 和无相互作用的费米子的波函数 $\psi_F(x_1, \dots, x_N)$ 有如下的对应关系

$$\psi_{TG}(x_1, \dots, x_N) = A(x_1, \dots, x_N) \psi_F(x_1, \dots, x_N) \quad (3.3)$$

其中单位反对称函数 $A(x_1, \dots, x_N)$ 定义为 $A(x_1, \dots, x_N) = \prod_{i>j} \text{sgn}(x_i - x_j)$, $\text{sgn}(x)$ 是符号函数。通过单位反对称函数, 就把粒子交换反对称的波函数变成了粒子交换对称的波函数, 从而满足玻色子的对称性要求。基态的费米子波函数可以用斯莱特行列式构造 $\psi_{F0}(x_1, \dots, x_N) = \sqrt{1/N!} \det_{n=0, j=1}^{N-1, N} [\phi_n(x_j)]$, 其中, $\phi_n(x_j)$ 是单粒子波函数。TG 气体的基态波函数可以简化成[26]: $\psi_{TG0}(x_1, \dots, x_N) = |\psi_{F0}(x_1, \dots, x_N)\rangle$ 。TG 气体可以通过这种方法精确可解, 而且两种系统的密度分布和能量完全相同。

然而, 他们的量子关联是不同的, 可以通过单体密度矩阵和动量分布表示出来。单体密度矩阵和动量分布的定义如下:

$$\rho(x, y) = N \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \dots dx_N \psi_{TG}^*(x, x_2, \dots, x_N) \psi_{TG}(y, x_2, \dots, x_N) \quad (3.4)$$

$$n(k) = N \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(x, y) \exp[-ik(x-y)] \quad (3.5)$$

其中 $n(k)$ 已经归一化。但多重积分的计算带来很大的麻烦, 为了克服这个困难, Pezer 和 Buljan 以单粒子波函数为基对单体密度矩阵作了化简[40],

$$\rho(x, y) = \sum_{i, j=1}^N \phi_i^*(x) B_{ij}(x, y) \phi_j(y) \quad (3.6)$$

系数 $B_{ij}(x, y)$ 是一个 $N \times N$ 的矩阵 $B(x, y) = (P^{-1})^T \det P$, 其中矩阵 P 的矩阵元为 $P_{ij}(x, y) = \delta_{ij} - 2 \int_x^y dx' \phi_i^*(x') \phi_j(x')$, 这儿 $x < y$ 。这就能够计算拥有更多粒子的系统。

非对角长程有序与单体密度矩阵的非对角元有关, 非对角元越大, 系统非对角长程有序越高。Girardeau 在 2001 年的文章[34]中指出, 随着粒子数 N 变大, 和对角元相比, 非对角元减少, 说明在热力学极限下, 一维简谐势中硬核玻色子的非对角长程序将会消失, 即不存在玻色爱因斯坦凝聚。

还有另一个判断系统是否非对角长程序的标准是: 在宏观系统中, 当单体密度矩阵的最大本征值也是宏观的(与 N 相比), 则存在非对角长程序。这时, 系统呈现玻色爱因斯坦凝聚状态, 最大本征值对应的本征函数(凝聚轨道), 相当于系统的序参数。尽管这个标准对微观系统不是严格成立的, 但是, 如果单体密度矩阵的最大本征值远大于 1, 我们可以认为系统呈现了一些类似于玻色爱因斯坦凝聚相干的效应。单体密度矩阵的本征方程如下:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) \varphi_j(y) dy = \lambda_j \varphi_j(x) \quad (3.7)$$

其中 λ_j 是本征值， $\varphi_j(x)$ 是本征函数。当我们做数值计算时，空间将会离散化，单体密度矩阵也会离散化，就变成了真正的矩阵，上面的本征方程就变成了离散的形式，求本征值的过程就是单体密度矩阵对角化的过程。Girardeau 得到，最大本征值与粒子数的关系为 $\lambda_0 \approx N^{0.59}$ ，系统不存在真正的玻色爱因斯坦凝聚[34]。

另外，动量分布函数也可以和本征函数联系起来 $n(k) = \sum_j \lambda_j |\mu_j(k)|^2$ ，其中 $\mu_j(k)$ 是上面本征函数的傅立叶变换： $\mu_j(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \exp(-ikx) dx$ 。而 TG 气体的动量分布中，中间呈现出一个很尖的峰，两边有很长的尾巴。在文献[35]中，作者利用费米玻色映射理论得出在简谐势场中的 TG 气体的动量 k 在较大值的分布呈 k^{-4} 衰减的规律，并用蒙特卡罗数值方法计算了两个硬核玻色子和两个无相互作用的费米子在一维简谐势中的动量分布，验证了同样的规律，如图-3.1 所示，圆圈标记 TG 气体的动量分布，方块标记费米子的动量分布。而后文献[36]指出，在任何相互作用强度下，动量 k 在较大值的分布满足 $\propto k^{-4}$ 是一个普适规律，而 TG 气体只是一个特例，并且这种规律与束缚粒子的势场无关。对于 TG 气体动量较小部分的密度分布，则具有 $1/\sqrt{k}$ 的尖峰特征[36,37]，如图-3.2 所示。

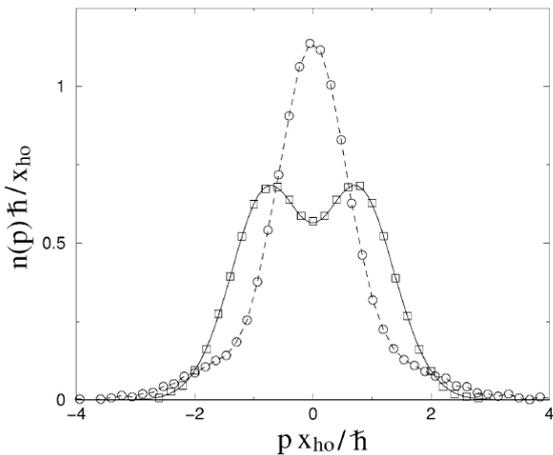


图-3.1 两个硬核玻色子和两个无相互作用的费米子在一维简谐势场中的动量分布[35]。

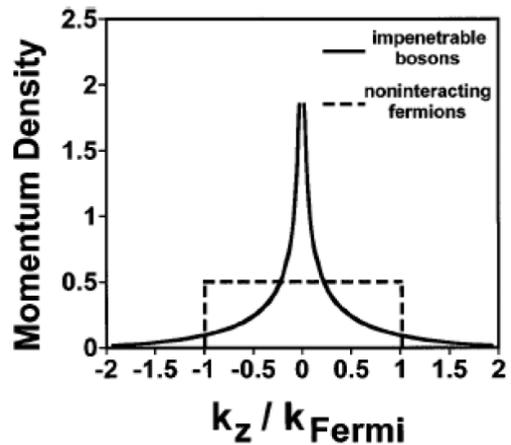


图-3.2 TG 气体和无相互作用的费米子在零温时的动量分布[36]。

最近,吴飙等人利用研究了费米玻色映射理论研究了一维周期势阱中的 TG 气体的基态性质[38]。通过对基态的分析得出,当玻色子的数目是格点数的整数倍时,系统处于 Mott 绝缘相,其能隙仍为周期势阱中单粒子的能隙;反之,系统处于金属相,而不是超流相。林海青等人也对周期性势阱中的 TG 气体做了详细的研究[39]。

Pezer 和 Buljan 将费米玻色映射理论推广到动力学过程[40]。他们将(3.3)式变为含时的形式:

$$\psi_{TG}(x_1, \dots, x_N, t) = A(x_1, \dots, x_N) \psi_F(x_1, \dots, x_N, t)$$

其中相应的费米系统的波函数为 $\psi_F(x_1, \dots, x_N, t) = \sqrt{1/N!} \det[\phi_n(x_j, t)]$, 单粒子波函数 $\phi_n(x, t)$ 满足含时薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \phi_n(x, t)$$

设单粒子初始波函数为 $\phi_n(x, t) = u_n(x) \exp(ik'x)$, 其中 $u_n(x)$ 是简谐势的本征函数, k' 粒子的初始波矢。他们研究了周期性的格子组成的圆环中已经局域化的 TG 气体的动力学行为,即计算了 TG 气体在不同时间的动量分布,从而得出结论:粒子间无穷大的相互作用抑制了布拉格反射峰。

第二节 费米 Tonks-Girardeau 气体

针对无穷大的吸引相互作用的极化费米子, M. D. Girardeau 和 E. M. Wright 提出了费米 Tonks-Girardeau 气体(简称 FTG)[41]。由于泡利不相容原理,极化的费米子之间不可能发生 s 波碰撞,但可以存在 p 波碰撞。由于 p 波碰撞的相互作用强度很弱,一般情况下,无须考虑这种碰撞。现在随着实验水平的提高,人们可以通过 Feshbach 共振技术改变这种 p 波碰撞的相互作用强度和符号,进而得到准一维的相互作用无穷大的吸引的极化费米子。假想这种情况下的基态的费米子也会发生凝聚,与没有相互作用的玻色系统的基态相对应,并改变粒子交换对称性, FTG 气体的基态波函数是

$$\psi_{FTG}(x_1, \dots, x_N) = A(x_1, \dots, x_N) \prod_{j=1}^N \phi_0(x_j) \quad (3.8)$$

因为 $|A(x_1, \dots, x_N)|^2 = 1$, FTG 气体的密度与无相互作用的玻色气体的密度完全相同。在

简谐势阱中，单体密度矩阵为

$$\rho(x, y) = N\phi_0(x)\phi_0(y) \times [F(x, y)]^{N-1} \quad (3.9)$$

其中 $F(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \text{sgn}(x-z)\text{sgn}(y-z)\phi_0^2(z)dz = 1 - |\text{erf}(x/x_{osc}) - \text{erf}(y/x_{osc})|$ ， $\text{erf}(x)$ 是误差函数，特征长度 $x_{osc} = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 。数值对角化单体密度矩阵，可以得到占据数的分

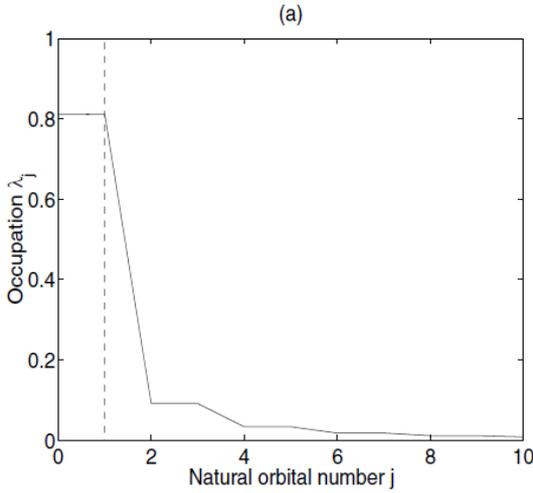


图-3.3 占据数 λ_j 的分布情况[41]。(a)N=2, (b)N=3。虚线代表自由费米子的结果。

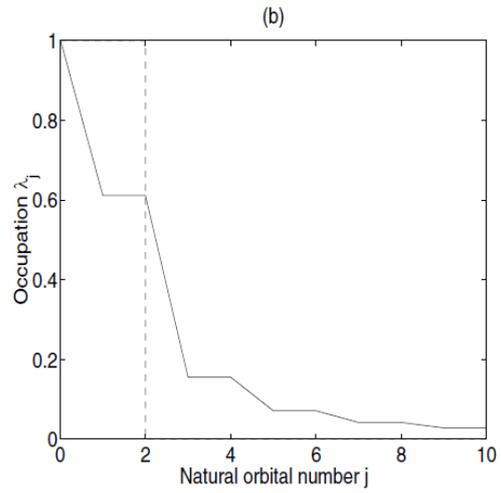


图-3.4 占据数 λ_j 的分布情况[41]。(a)N=2, (b)N=3。虚线代表自由费米子的结果。

布情况。从图-3.3 和图-3.4 可以看出，占据数分布出现了台阶分布，在费米面的下面仍然存在，说明费米子之间存在非常强的相互作用。

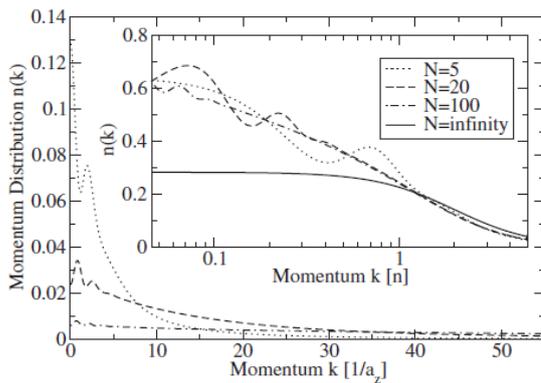


图-3.5 一维简谐势阱中的无穷大吸引相互作用的极化费米子的动量分布[42]。 $a_z = x_{osc}$ ，插图中的 $n(k)$ 已经归一化。

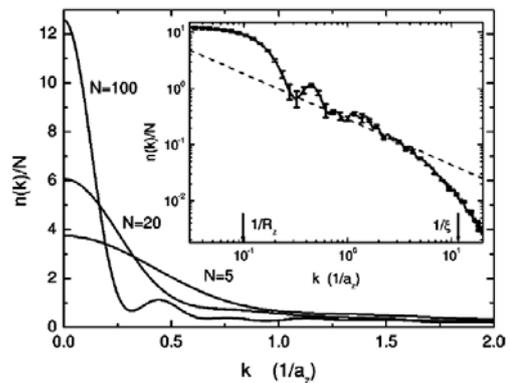


图-3.6 用量子蒙特卡罗方法得到的一维简谐势下的强相互作用的玻色气体的动量分布[43]。

布，其动量分布的宽度随着粒子数 N 的增加而增加，而强相互作用的玻色气体的动量分布的宽度却随着粒子数的增加而减少，如图-3.5 和图-3.6。对于图-3.5 中的小动量处的振动行为，文献[42]解释的原

因是简谐束缚势而不是费米子之间的强吸引相互作用。当 $x_{osc}\sqrt{\pi} \rightarrow \infty$ 和粒子数 $N \rightarrow \infty$ ，同时 $n = N/(a_{osc}\sqrt{\pi})$ 是一个常数，即热力学极限下，单体密度矩阵可近似化简为 $\rho(x, y) = N\phi_0(x)\phi_0(y)\exp(-2n|x-y|)$ ，相应的动量分布可化为洛仑兹形式： $n(k) = 2n/[\pi(4n^2 + k^2)]$ ，这和没有外势的情况相同。

第三节 无穷大相互作用的玻色费米混合物

Girardeau 和 Minguzzi 在 2007 年将 TG 气体推广到混合物[44]。下面以玻色费米混合物为例介绍这种推广。

考虑由 N_B 个玻色子和 N_F 个费米子组成的混合物，玻色子和玻色子之间存在无穷大的接触碰撞排斥作用；费米子之间没有相互作用，但满足泡利不相容原理；玻色子与费米子存在着无穷大的接触碰撞排斥作用。这里假设玻色子与费米子的质量相等 $m_B = m_F = m$ 。假设玻色子和费米子的坐标分别为 $X_B = (x_{1B}, \dots, x_{N_B B})$ 和

$X_F = (x_{1F}, \dots, x_{N_F F})$ ，并且玻色子和费米子感受到的外势也是相同的，例如：

$V_B(x_{jB}) = V(x_{jB})$ 和 $V_F(x_{iF}) = V(x_{iF})$ 。系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_B + \hat{H}_F + \hat{H}_{BB} + \hat{H}_{BF}$$

其中 $\hat{H}_B = \sum_{j=1}^{N_B} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_{jB}^2} + V(x_{jB}) \right]$ ， $\hat{H}_F = \sum_{j=1}^{N_F} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_{jF}^2} + V(x_{jF}) \right]$ ，玻色玻色碰撞相互

作用和玻色费米相互作用可以写成： $g_{BB}\delta(x_{jB} - x_{iB})$ 和 $g_{BF}\delta(x_{jB} - x_{iF})$ ，其中， $g_{BB} \rightarrow +\infty$

和 $g_{BF} \rightarrow +\infty$ ，它们可以理解为两个粒子发生碰撞，波函数便消失，即

$$\psi(X_B, X_F) = 0 \quad \text{当 } x_{jB} = x_{iB} \quad \text{或} \quad x_{jB} = x_{iF} \quad (3.10)$$

这样，粒子间的相互作用就转换成上面的限制条件了。

从上面的限制条件(3.10)和全同费米子之间的交换反对称性，说明只要粒子发生

碰撞，不论是玻色子，还是费米子，波函数就会变为零。 $N = N_B + N_F$ 个自由费米子的波函数满足上面的限制条件(3.10)，因此 N 个自由费米子的波函数为基态的母函数

$$\psi_M(X_B, X_F) = \psi_{F0}(x_1, \dots, x_N) = \sqrt{1/N!} \det_{n=0, j=1}^{N-1, N} [\phi_n(x_j)] \quad (3.11)$$

为了满足玻色子和费米子各自的宇称，引入单位反对称函数

$$A(X_B, X_F) = \prod_{1 \leq j < l \leq N_B} \text{sgn}(x_{jB} - x_{lB}) \prod_{j=1}^{N_B} \prod_{l=1}^{N_F} \text{sgn}(x_{jB} - x_{lF}) \quad (3.12)$$

则系统的波函数为

$$\psi(X_B, X_F) = A(X_B, X_F) \psi_M(X_B, X_F) \quad (3.13)$$

费米子和玻色子的单体密度矩阵分别为

$$\rho_B(x, y) = N_B \int \psi^*(x, X'_B, X_F) \psi(y, X'_B, X_F) dX'_B dX_F \quad (3.14)$$

$$\rho_F(x, y) = N_F \int \psi^*(X_B, X'_F, x) \psi(X_B, X'_F, y) dX_B dX'_F \quad (3.15)$$

其中， $X'_B = (x_{2B}, \dots, x_{N_B B})$ 和 $X'_F = (x_{1F}, \dots, x_{N_F-1, F})$ 。从上式可以看出，玻色子密度分布，费米子的密度分布都和系统的总的密度分布成比例，即

$$\begin{aligned} \rho_B(x) &= (N_B / N) \rho_{TG}(x) \\ \rho_F(x) &= (N_F / N) \rho_{TG}(x) \end{aligned} \quad (3.16)$$

这儿， $\rho_{TG}(x) = \sum_{n=0}^{N-1} |\phi_n(x)|^2$ 。通过简单的计算就可以发现，玻色子的单体密度矩阵和

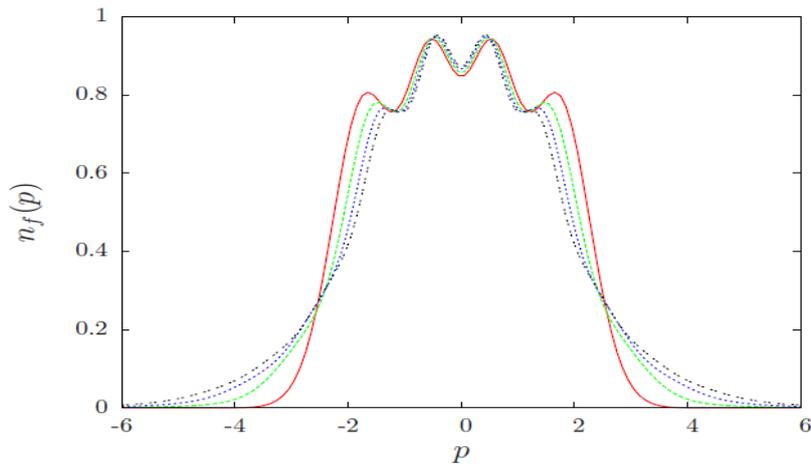


图-3.7 不同玻色子数目下的费米子的动量分布[45]。费米子数目为 $N_F = 4$ 。曲线对应的玻色子数目从最小值 $N_B = 0$ (实线) 变到最大值 $N_B = 3$ (双点线)。

动量分布与纯的 TG 气体的相应的分布完全相同，而费米子却有所不同。从图-3.7 可以看出，随着玻色子数目的增加，费米的动量振荡会减弱[45]。另外，费米子在大动量区域也出现了 k^{-4} 衰减的规律[45]。

第四章 Bethe ansatz 方法与热力学 Bethe ansatz 方法

我们从量子力学课本得知，很多束缚在势阱中的单粒子系统是精确可解的，少数的两体系统也是可精确求解的，例如：简谐势中两个玻色子组成的系统，但多体系统能够精确求解的并不多，然而 Bethe ansatz 方法却是个特例，它能够对很多多体量子系统进行精确求解。

1931 年物理学家 Bethe 首次提出了 Bethe ansatz 方法，成功地解决了一维铁磁 Heisenberg 模型的基态能量问题[46]。1938 年 Hulthen 将这种方法推广到一维反铁磁 Heisenberg 模型[47]。1963 年 Lieb 和 Liniger 用 Bethe ansatz 方法给出了一维 δ 相互作用的均匀无自旋的玻色子系统的精确解[27]。随后，这种方法被推广到费米子[48,49]，多分量的玻色子[50]以及玻色费米混合物[51]等系统。与此同时，杨振宁兄弟于 1969 年用 Bethe ansatz 方法解决了有限温度下的一维 δ 相互作用的均匀玻色气体的热力学问题[29]。1968 年 Lieb 和 Wu 解决了一维 Hubbard 模型[52]。Bethe ansatz 方法还被用来处理一些二维模型，例如，1967 年 Lieb 借助转换矩阵(transfer matrix)成功解决了冰模型(即六顶点模型)[53]。

上面的这些方法一般被称为坐标 Bethe ansatz 方法，其基本思想是：波函数是分区域的波函数，在区域内部没有相互作用，波函数可写成平面波的叠加形式，其中叠加系数是待定的；根据不同区域的波函数满足连续性条件和薛定谔方程，可以由散射矩阵确定叠加系数之间的关系；同时这些散射矩阵还满足一些自洽性条件，这些自洽性条件现今通称为 Yang-Baxter 方程。

另外，Faddeev 和 Takhtajan 于 1978 年提出的量子反散射方法(代数 Bethe ansatz 方法)是处理低维量子可积系统的一种普适而有效的方法[54]。此方法已被成功的应用于许多物理模型，如：XXX 模型、XYZ 模型、t-J 模型等，使得可积系统的研究具有了丰富的内容。

玻色爱因斯坦凝聚在实验上实现以后，由于 Bethe ansatz 方法得到的结果能够和实验数据相比较，Bethe ansatz 方法又一次成为当前研究的热点。最近，玻色气体的关联函数[55-58]和动力学行为[59]，开边界下的量子气体[60-65]，布局数不对称分布的费米子[66,67]，多分量量子气体的磁性质[68,69]，玻色费米混合物[70-72]，任意子[73]等得到人们详细的研究。

本章主要介绍一维 δ 相互作用的均匀玻色子系统的基态性质和有限温度下的热力学性质以及多分量的情况。

第一节 一维相互作用的均匀玻色气体的精确解

存在粒子碰撞相互作用的一维系统由 N 个玻色子组成，长度为 L ，令 $\hbar = 2m = 1$ ，其哈密顿量为

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \quad (4.1)$$

其中第一项是粒子的动能， x_i 是第 i 个粒子的坐标；第二项是粒子间的相互作用能，表示两个粒子只有发生接触才会有相互作用， c 表示粒子间的相互作用强度。当 c 为正值时，粒子间相互排斥；当 c 为负值时，粒子间相互吸引。我们将首先详细讨论这个系统在周期性边界下的基态性质[27]，然后简单介绍开边界情况下的一些独特的性质[28,62]。

4.1.1 Bethe ansatz 方法

系统的本征方程为

$$\left(-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \right) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (4.2)$$

其中 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 是本征函数， E 是本征能量。当两个粒子发生碰撞的时候，波函数是连续的，但上式中的 δ 相互作用可以导致波函数导数不连续的接触边界条件。

为此，我们首先将本征方程变换到相对坐标系，令 $X = (x_m + x_n)/2$ 和 $Y = x_m - x_n$ ，

本征方程(4.2)则变为

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \dots - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \dots - \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + 2c \sum_{i<j}' \delta(x_i - x_j) + 2c \delta(Y) - E \right) \psi(\dots X \dots Y \dots) = 0$$

其中 \sum' 表示对 δ 函数所有的求和项中不包括 $x_m - x_n$ 。此方程在区间 $(-\varepsilon, \varepsilon)$ 内对 Y 积分，其中 ε 是一无限小的正数，

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \dots - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \dots - \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + 2c \sum_{i<j}' \delta(x_i - x_j) - E \right) \psi(\dots X \dots Y \dots) dY = 0$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} 2c\delta(Y)\psi(\cdots X \cdots Y \cdots)dY = 2c\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n} \\
 & \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} -2\frac{\partial^2}{\partial Y^2}\psi(\cdots X \cdots Y \cdots)dY = -2\frac{\partial}{\partial Y}\psi(\cdots X \cdots Y \cdots)|_{Y=+\varepsilon} + 2\frac{\partial}{\partial Y}\psi(\cdots X \cdots Y \cdots)|_{Y=-\varepsilon} \\
 & = -\left(\frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n+\varepsilon} + \left(\frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n-\varepsilon}
 \end{aligned}$$

我们可以得到接触边界条件

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n+\varepsilon} - \left(\frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n-\varepsilon} \\
 & = 2c\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n}
 \end{aligned} \quad (4.3)$$

又因为玻色子的波函数满足粒子交换对称性 $\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots) = \psi(\cdots x_n \cdots x_m \cdots)$ ，则上式中的第二项满足

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x_m} - \frac{\partial}{\partial x_n}\right)\psi(\cdots x_m \cdots x_n \cdots)|_{x_m=x_n-\varepsilon} = \left(\frac{\partial}{\partial x_n} - \frac{\partial}{\partial x_m}\right)\psi(\cdots x_n \cdots x_m \cdots)|_{x_m=x_n+\varepsilon}$$

所以(4.3)式中的前两项是等价的。当 $\varepsilon = 0$ 时，这两项相等。

定义区域 $R_1 : 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \cdots \leq x_N$ 。由于玻色子的波函数满足粒子交换对称性，不在 R_1 区域的波函数可以通过交换 R_1 区域的波函数中的粒子坐标而得到，而且波函数的值保持不变，所以说，在 R_1 区域的波函数的特性等价于整个区域的波函数的特性。下面的讨论仅限于 R_1 区域，即原来整个空间的波函数 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 现在只限于 R_1 区域。根据上面的讨论，利用粒子交换对称性，由(4.3)式可以得到 R_1 区域内的波函数满足的接触边界条件

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_{j+1}} - \frac{\partial}{\partial x_j}\right)\psi(\cdots x_j, x_{j+1} \cdots)|_{x_{j+1}=x_j} = c\psi(\cdots x_j, x_{j+1} \cdots)|_{x_{j+1}=x_j} \quad (4.4)$$

粒子间的碰撞为弹性碰撞，系统不损失能量；而当在 R_1 区域内的粒子不发生碰撞时，此区域内的本征方程变为

$$\left(-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (4.5)$$

令系统的波函数满足周期性边界条件

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(L, x_2, \dots, x_N) \quad (4.6)$$

但是右边的一项不在 R_1 区域内。根据波函数满足粒子交换对称性，我们可以定义

$\psi(L, x_2, \dots, x_N) \equiv \psi(x_2, \dots, x_N, L)$ ，所以

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(x_2, \dots, x_N, L) \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, x_2, \dots, x_N) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_2, \dots, x_N, x) \Big|_{x=L} \quad (4.8)$$

其实这两个等式是等价的，系统的波函数只需同时满足(4.4)、(4.5)、(4.7)三个等式。下面根据这些等式对波函数做出假设，让其满足这三个等式，从而得到波函数中的一些假定的参数。当粒子没有发生碰撞时，又因为没有外势，根据本征方程(4.5)式，每个粒子都可以看成自由粒子，可以用平面波来描述，例如： $\exp(ikx)$ ，其中 k 和 x 分别是粒子的波矢和坐标。系统有 N 个粒子 (x_1, x_2, \dots, x_N) ，相应地有 N 个波矢 (k_1, k_2, \dots, k_N) 。由于 N 个粒子是全同的，每个粒子的波矢可以是 N 个波矢中的任何一个。由于在 R_1 区域粒子的坐标的顺序是固定的，所以波函数应考虑波矢的所有排列方式。不同的排列方式是通过粒子的碰撞来实现的，碰撞产生的后果是平面波在粒子碰撞前后会产生一个相位差，也就是说，每种排列对应着不同的相因子(或系数)。为此，Lieb 和 Liniger [27]对波函数做了如下的假设

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P a(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j\right) \quad (4.9)$$

其中求和号表示对所有波矢 $\{k_j\}$ $N!$ 种排列的求和， $a(P)$ 表示和排列 P 有关的系数。

在 R_1 区域之外的波函数可以通过玻色系统的粒子交换对称性来得到。根据等式(4.5)，

我们可以得到系统的能量 $E = \sum_{j=1}^N k_j^2$ 。

这部分只讨论相互作用强度 c 为正数， k_j 的解为实数的情况。为了详尽的阐述波矢 k_j 的求解过程，我们首先讨论 $N=2$ 的情况，系统的波函数被假设为

$$\psi(x_1, x_2) = a(12) \exp(ik_1 x_1 + ik_2 x_2) + a(21) \exp(ik_2 x_1 + ik_1 x_2) \quad (4.10)$$

将此波函数代入接触边界条件 $\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right)\psi(x_1, x_2)|_{x_2=x_1} = c\psi(x_1, x_2)|_{x_2=x_1}$ ，可以得到系数

$a(12)$ 和 $a(21)$ 的关系

$$a(21) = -a(12) \frac{c - i(k_2 - k_1)}{c + i(k_2 - k_1)} = -a(12) \exp(i\theta(k_2 - k_1)) \quad (4.11)$$

其中 $\theta(x) = -2\arctan(x/c)$ ，是一个反对称的函数 $\theta(-x) = \theta(x)$ ；再将此波函数代入周期性边界条件 $\psi(0, x_2) = \psi(x_2, L)$ ，可以得到 $a(12) - a(21)\exp(ik_1L) = 0$ 和 $a(21) - a(12)\exp(ik_2L) = 0$ 两个关系式；最后联合上面的关系，可以得到

$$\begin{aligned} \exp(ik_1L) &= -\exp(i\theta(k_2 - k_1)) \\ \exp(ik_2L) &= -\exp(i\theta(k_1 - k_2)) \end{aligned} \quad (4.12)$$

这就是所谓的 Bethe ansatz 方程

对于 $N = 3$ 的情况，系统的波函数被假设为

$$\begin{aligned} &\psi(x_1, x_2, x_3) \\ &= a(123)\exp(ik_1x_1 + ik_2x_2 + ik_3x_3) + a(132)\exp(ik_1x_1 + ik_3x_2 + ik_2x_3) \\ &\quad + a(213)\exp(ik_2x_1 + ik_1x_2 + ik_3x_3) + a(231)\exp(ik_2x_1 + ik_3x_2 + ik_1x_3) \\ &\quad + a(312)\exp(ik_3x_1 + ik_1x_2 + ik_2x_3) + a(321)\exp(ik_3x_1 + ik_2x_2 + ik_1x_3) \end{aligned} \quad (4.13)$$

此时的三个波矢 k_1, k_2, k_3 总有 6 种排列方式，对应着 6 个系数 $a(P)$ 。将波函数代入 x_1

与 x_2 粒子发生碰撞时的接触边界条件 $\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right)\psi(x_1, x_2, x_3)|_{x_2=x_1} = c\psi(x_1, x_2, x_3)|_{x_2=x_1}$ ，可以

得到相邻的两种排列系数的关系

$$\begin{aligned} a(213) &= -a(123)\exp(i\theta(k_2 - k_1)) \\ a(312) &= -a(132)\exp(i\theta(k_3 - k_1)) \\ a(321) &= -a(231)\exp(i\theta(k_3 - k_2)) \end{aligned}$$

同理，将波函数代入 x_2 与 x_3 粒子发生碰撞时的接触边界条件

$\left(\frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{\partial}{\partial x_2}\right)\psi(x_1, x_2, x_3)|_{x_3=x_2} = c\psi(x_1, x_2, x_3)|_{x_3=x_2}$ ，可以得到相邻的两种排列系数的关系

$$\begin{aligned} a(132) &= -a(123)\exp(i\theta(k_3 - k_2)) \\ a(231) &= -a(213)\exp(i\theta(k_3 - k_1)) \end{aligned}$$

$$a(321) = -a(312)\exp(i\theta(k_2 - k_1))$$

虽然由接触边界条件只得到相邻的两种排列系数的关系，但任何两种排列系数的关系都可经过多次的轮换(相邻的两种排列的置换)而联系起来。例如： $a(321)$ 与 $a(123)$ 的关系可以通过两种轮换途径实现，

$$\begin{aligned} a(321) &\Rightarrow a(312) \Rightarrow a(132) \Rightarrow a(123) \\ a(321) &\Rightarrow a(231) \Rightarrow a(213) \Rightarrow a(123) \end{aligned}$$

但是这两种轮换途径是等价的，它们可以得到同样的关系，

$$a(321) = -a(123)\exp(i\theta(k_2 - k_1) + i\theta(k_3 - k_1) + i\theta(k_3 - k_2))$$

再将波函数代入周期性边界条件 $\psi(0, x_2, x_3) = \psi(x_2, x_3, L)$ ，可以得到

$$\begin{aligned} a(123) &= a(231)\exp(ik_1L) \\ a(213) &= a(132)\exp(ik_2L) \\ a(312) &= a(123)\exp(ik_3L) \end{aligned}$$

联合上面的三个等式和任意两个排列系数的关系，可以得到三个粒子的 Bethe ansatz 方程

$$\exp(-ik_1L) = (-1)^2 \exp(i\theta(k_2 - k_1) + i\theta(k_3 - k_1)) \quad (4.14)$$

$$\exp(-ik_2L) = (-1)^2 \exp(i\theta(k_1 - k_2) + i\theta(k_3 - k_2)) \quad (4.15)$$

$$\exp(-ik_3L) = (-1)^2 \exp(i\theta(k_1 - k_3) + i\theta(k_2 - k_3)) \quad (4.16)$$

对于任意的粒子数 N 的情况，波函数采用(4.9)的形式。设 P 表示一种排列顺序 $\{k_i, k_j, k_{\alpha_1}, \dots, k_{\alpha_N}\}$ ，将其中 k_i 和 k_j 的顺序交换一下，得到另一种排列顺序 Q ： $\{k_j, k_i, k_{\alpha_1}, \dots, k_{\alpha_N}\}$ 。将波函数(4.9)代入接触边界条件(4.4)，可以得到

$$\begin{aligned} &\left[a(P)(ik_j - ik_i)\exp\left(ik_ix_1 + ik_jx_2 + i\sum_{l=3}^N k_{\alpha_l}x_l\right) + a(Q)(ik_i - ik_j)\exp\left(ik_jx_1 + ik_ix_2 + i\sum_{l=3}^N k_{\alpha_l}x_l\right) \right] \Big|_{x_1=x_2} \\ &= \left[a(P)c\exp\left(ik_ix_1 + ik_jx_2 + i\sum_{l=3}^N k_{\alpha_l}x_l\right) + a(Q)c\exp\left(ik_jx_1 + ik_ix_2 + i\sum_{l=3}^N k_{\alpha_l}x_l\right) \right] \Big|_{x_1=x_2} \end{aligned}$$

即

$$a(P)(ik_j - ik_i) + a(Q)(ik_i - ik_j) = a(P)c + a(Q)c$$

于是相邻的两个排列顺序 P 和 Q 的系数的关系为

$$a(Q) = -a(P) \frac{c - i(k_j - k_i)}{c + i(k_j - k_i)} = -a(P) \exp(i\theta(k_j - k_i))$$

利用上式，我们做多次这样的轮换可以得到任何两种排列顺序的系数之间的关系。

例如：

$$a(I_1, I_2, \dots, I_{N-1}, j) = a(j, I_1, I_2, \dots, I_{N-1}) (-1)^{N-1} \exp\left(i \sum_{s=1}^N \theta(k_s - k_j)\right)$$

这里定义 $\theta(0) \equiv 0$ ， I_1, I_2, \dots, I_{N-1} 表示除了 j 的 $1, 2, \dots, N$ 中的 $N-1$ 个数的任何一种排列顺序。再将波函数(4.9)代入周期性边界条件(4.7)式，可以得到

$$a(j, I_1, I_2, \dots, I_{N-1}) = a(I_1, I_2, \dots, I_{N-1}, j) \exp(ik_j L)$$

联合上面的两个等式，可以得到 N 个粒子的 Bethe ansatz 方程[27]

$$\exp(-ik_j L) = (-1)^{N-1} \exp\left(i \sum_{s=1}^N \theta(k_s - k_j)\right), \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (4.17)$$

适用于粒子间的排斥相互作用和吸引相互作用情况的 Bethe ansatz 方程形式为

$$\exp(ik_j L) = \prod_{s \neq j}^N \frac{k_j - k_s + ic}{k_j - k_s - ic} \quad (4.18)$$

这是因为，当粒子间相互作用强度为负数时， k_j 可以为复数；而当相互作用强度为正数时， k_j 只能为实数，此时的(4.18)可以化简为(4.17)式。

对(4.17)式取对数可以得到

$$k_j L = 2\pi I_j + \sum_{s=1}^N \theta(k_j - k_s), \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (4.19)$$

其中，当 N 是奇数的时候，量子数 I_j 取整数；当 N 是偶数的时候， $I_j + 1/2$ 取整数。

对于不同的 j ， I_j 取不同的值，相应的波矢 k_j 也是不同的。对每个 j 来说， I_j 和 k_j 是一一对应的。对于系统的基态， I_j 取值为 $\{-(N-1)/2, -(N-3)/2, \dots, (N-3)/2, (N-1)/2\}$ 。借助 mathematic 软件，我们可以得到超越方程(4.19)的数值解。图-4.1 描述了 5 个粒子的基态波矢分布，当 c 接近零时，

所有的波矢也接近于零；随着相互作用强度 c 的增大，波矢的绝对值也在增大；当 c 非常大时，波矢趋向于单粒子能级上的波矢值 $2\pi(3-j)/L$ ，与无相互作用的极化费米子的波矢分布相同，一定程度上验证了 Girardeau 的费米玻色映射理论的正确性。

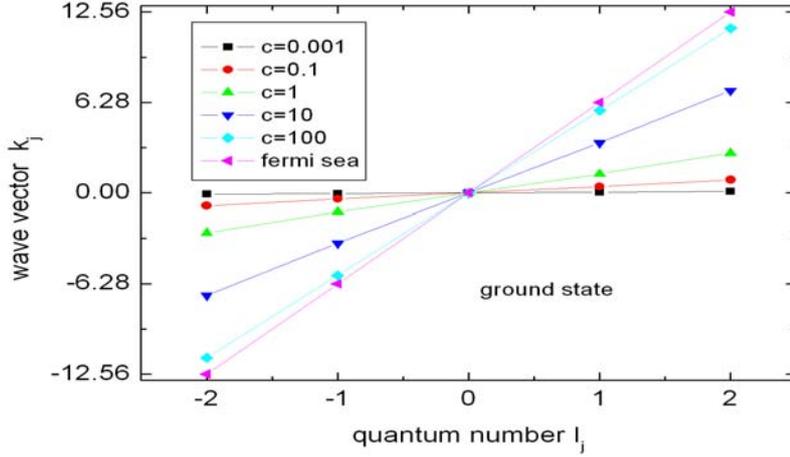


图-4.1 $N = 5$ 时的波矢 k_j 的分布。 $L=1$ 。

4.1.2 热力学极限下的 Bethe ansatz 方程

现在讨论热力学极限下的系统基态情况[27]。在热力学极限下，即 $N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$ 并保持粒子数密度 $n \equiv N/L$ 为一个常数，原来分离的波矢 k 连续分布。定义在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 的个数为 $\rho(k)Ldk$ 。因为基态的量子数 I 是关于零点对称的一系列连续的整数(半整数)，而且 I 和 k 是一一对应的，所以在 $(I, I + dI)$ 区间内量子数的个数应该等于区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 的个数，即 $dI = \rho(k)Ldk$ 。则方程(4.19)式变为

$$kL = 2\pi I + \int_{-k_0}^{k_0} \theta(k-q)\rho(q)Ldk \quad (4.20)$$

其中 $\pm k_0$ 是波矢分布的边界。上式对 k 求导数可以得到[27]

$$2\pi\rho(k) = 1 + \int_{-k_0}^{k_0} \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} \rho(q)dq \quad (4.21)$$

这就是 Bethe ansatz 方程的积分形式。另外，粒子数密度和能量密度分别为

$$n = \int_{-k_0}^{k_0} \rho(k) dk \quad (4.22)$$

$$E_0 / L = \int_{-k_0}^{k_0} k^2 \rho(k) dk \quad (4.23)$$

为了计算的方便, 对变量做无量纲处理:

$$k \equiv k_0 x; c \equiv k_0 \lambda; \rho(k_0 x) = g(x) \quad (4.24)$$

则(4.21)式、(4.22)式和(4.23)式变为

$$1 + 2\lambda \int_{-1}^1 \frac{g(x) dx}{\lambda^2 + (x-y)^2} = 2\pi g(y) \quad (4.25)$$

$$\gamma \int_{-1}^1 g(x) dx = \lambda \quad (4.26)$$

$$E_0 / L = \left(\frac{n\gamma}{\lambda} \right)^3 \int_{-1}^1 g(x) x^2 dx \quad (4.27)$$

其中无量纲参数 $\gamma = c/n$ 。根据能量的量纲, 基态能量可以写为 $E_0 = Nn^2 e(\gamma)$, 其中 $e(\gamma)$ 是无量纲函数。当粒子之间没有相互作用时, $e(0) = 0$; 当粒子间的相互作用无穷大, 即粒子为 TG 气体时, $e(\infty) = \pi^2/3$ 。能量的表达式(4.27)则变为

$$e(\gamma) = \left(\frac{\gamma}{\lambda} \right)^3 \int_{-1}^1 g(x) x^2 dx \quad (4.28)$$

由于积分方程(4.25)没有解析形式的通解, 但是可以通过数值方法(例如: 线性代数法, 迭代法等)得到这个积分方程的解。

从图-4.1 可以看出, 当 γ 很小的时候, 动量分布在一个很小的范围内, 而且中间位置出现了一个尖峰。随着 γ 变大, 动量分布的范围变广, 中间峰的高度降低。当 γ 非常大时, 动量分布均匀, 就像处于基态的费米子系统的费米海分布那样, 每个粒子只占据一个单粒子能级。

方程(4.25)在两种极限情况下有相应的解析形式的解,

$$g(x, \lambda) = \frac{1}{2\pi} (1-x^2)^{1/2}, \quad \gamma \rightarrow 0 \quad (4.29)$$

$$g(x, \lambda) = \lambda(2\pi\lambda - 1), \quad \gamma \rightarrow \infty \quad (4.29)$$

根据(4.28)式, 与基态能量相关的 $e(\gamma)$ 的表达式变为

$$\begin{aligned}
 e(\gamma) &= \gamma, \quad \gamma \rightarrow 0 \\
 e(\gamma) &= \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\gamma}{\gamma+2} \right)^2, \quad \gamma \rightarrow \infty
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

我们在第二章提到密度泛函理论中的能量密度就是由此而来。系统的化学势，单个粒子的势能和动能也能得到相应的解析表达式。

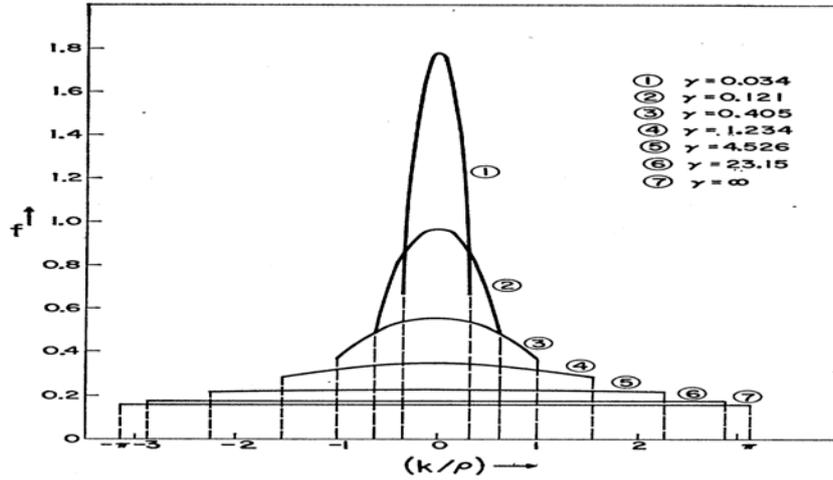


图-4.2 不同 γ 时的波矢分布[27]。

4.1.3 开边界条件下的 Bethe ansatz 方程

前面的介绍的 Bethe ansatz 方法采用的是周期性边界条件，如果采用开边界条件，系统的性质会有所不同，例如：少体系统的空间密度分布等。开边界条件是指波函数在边界处的值为零，对单粒子而言，它被称为驻波边界条件，即将粒子束缚在一个无限深势阱中。

处于一个无限深的势阱中 N 个 δ 碰撞相互作用的玻色子系统的本征方程与(4.2)式相同，但假设的波函数与前面的(4.9)式有所不同

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{P, r_1, \dots, r_N} a(P, r_p) \exp\left(i \sum_{j=1}^N r_{p_j} k_{p_j} x_j\right)$$

其中 $r_{p_j} = \pm 1$ 表示原子向右或者向左运动，系数 $a(P, r_p)$ 不仅与波矢的排列顺序有关，还和原子的运动方向 r_{p_j} 有关，求和符号是对所有的波矢排列和所有的 r_{p_j} 的求和。令波函数满足开边界条件

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(L, x_2, \dots, x_N) = 0$$

并采用和前面相同的思路，可以得到开边界条件下的 Bethe ansatz 方程[62]:

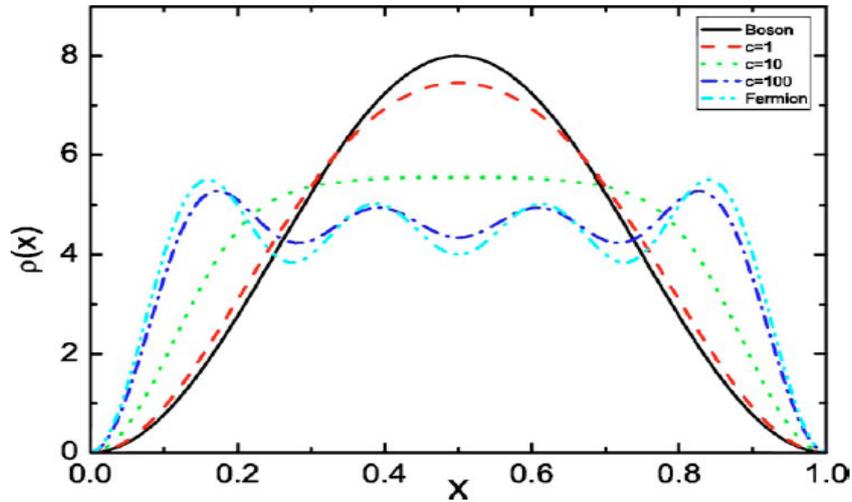


图-4.3 排斥相互作用粒子的基态密度分布[62]。 $N = 4$ 。

$$\exp(i2k_j L) = \prod_{s \neq j}^N \frac{k_j - k_s + ic}{k_j - k_s - ic} \frac{k_j + k_s + ic}{k_j + k_s - ic} \quad (4.31)$$

上式与周期性边界条件下的 Bethe ansatz 方程(4.18)相比，方程的左边指数上多了一个 2，同时右边的连乘符号里多了一项。对上式取对数，得到

$$k_j L = I_j \pi - \sum_{s=1(\neq j)}^N \left(\arctan\left(\frac{k_j + k_s}{c}\right) + \arctan\left(\frac{k_j - k_s}{c}\right) \right) \quad (4.32)$$

其中基态的量子数 $I_j = j (1 \leq j \leq N)$ 。数值计算超越方程(4.32)的解，可以得到波矢 k_j 和系统的波函数，从而得到基态的空间密度分布。

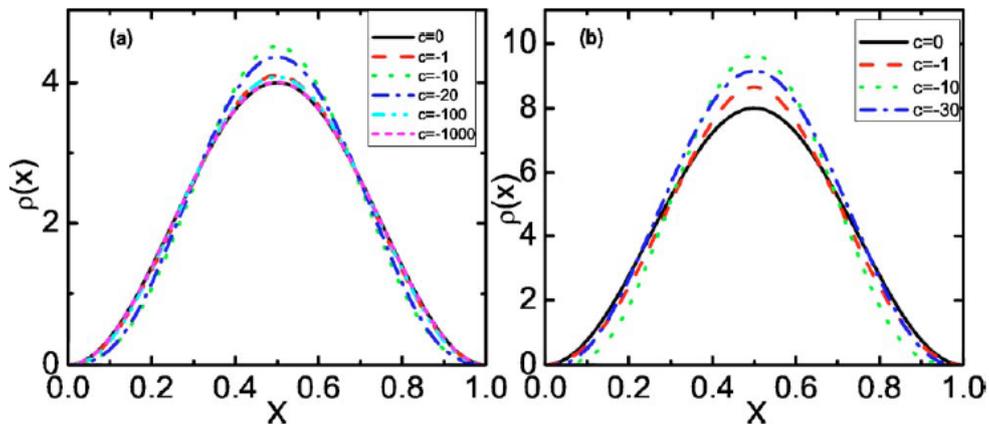


图-4.4 吸引相互作用的玻色子的基态密度分布[62]。(a) $N = 2$, (b) $N = 4$ 。

郝亚江对这个系统的基态性质进行了详细的讨论[62,96]。图-4.3 给出了排斥相互作用粒子的基态密度分布。当 c 很小的时候，密度分布接近于无相互作用的玻色气体的情况；当 c 非常大的时候，密度分布接近于无相互作用的极化费米子的情况。当粒子间为吸引相互作用时，随着吸引相互作用强度 c 的绝对值增大，基态密度的中间峰先升高后降低，如图-4.4 所示。在 $c \rightarrow -\infty$ 的极限下的密度分布和无相互作用时的密度分布相同，这可以解释为处在基态的质量为 Nm 的复合粒子。

第二节 YangYang 热力学方程

基于上节中的 Bethe ansatz 方程，本节将介绍有限温度下的 δ 相互作用的玻色气体的热力学行为[29]。我们把(4.19)式变成下面的形式

$$2\pi I_j = k_j L - \sum_{s=1}^N \theta(k_j - k_s), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

从上一节可知，在粒子数 N 很大的情况下基态的量子数 I 是一系列连续的格点(整数或半整数)，均匀分布在区间 $[-N/2, N/2]$ ，而波矢 k 不均匀地分布在区间 $[-k_0, k_0]$ 。在有限温度的情况下，基态上的一些波矢从原来的地方跃迁到能量较高的位置上，在原处留下一个空穴。此时的系统处于激发态，量子数 I 不在均匀分布在区间 $[-N/2, N/2]$ ，此区间内有的格点不再被占据，与波矢的空穴相对应，有的量子数 I 跳出了该区间，占据区间外的格点。因此整个格点空间被分成了两种格点：占据的格点和不被占据的格点，占据的格点称为量子数 I/L ，与此相似，没有被占据的格点被定义为 J 。赋予 I_j 一组特定的量子数，根据上式可以唯一地确定一组波矢 k_j 。定义

$$2\pi H(p) \equiv pL - \sum_{j=1}^N \theta(p - k_j)$$

是 p 的单调函数，其中 $H(p)$ 为整个格点空间，例如：整数空间或半整数空间，求和符号中的 k_j 是(4.19)式的解。当 $p = \pm\infty$ 时， $H(p)/L$ 也等于 $\pm\infty$ 。当 $H(p)$ 等于量子数

I 时, p 就是波矢 k ; 当 $H(p)$ 等于没有被占据的格点 J 时, p 就是空穴。因此 $H(p)$ 涵盖了整个格点空间, 包含量子数 I 和没有被占据的格点 J 。

热力学极限下原来分离的波矢 k 和空穴都连续分布。定义在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 的个数为 $\rho(k)Ldk$, 空穴的个数为 $\rho_h(k)Ldk$ 。因为量子数 I/L 和波矢 k 一一对应, 没有被占据的格点 J/L 和空穴是一一对应, 而 $H(k)$ 涵盖了整个格点空间, 包含量子数 I 和没有被占据的格点 J , 所以在 $(H(k), H(k) + dH(k))$ 区间内格点的个数应该等于区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 和空穴两者个数的和, 即 $dH(k) = (\rho(k) + \rho_h(k))Ldk$; 在热力学极限下, 上式的求和变成积分, 同时将 p 替换为 k , k_j 替换为 q ,

$$2\pi H(k) \equiv kL - \int_{-\infty}^{\infty} \theta(k - q) \rho(q) Ldq$$

上式对 k 求导可得 $\rho(k)$ 满足的约束条件

$$2\pi(\rho(k) + \rho_h(k)) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2c}{c^2 + (k - q)^2} \rho(q) dq \quad (4.33)$$

单位长度内的粒子数和能量分别为

$$\begin{aligned} N/L &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk \\ E/L &= \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \rho(k) dk \end{aligned} \quad (4.34)$$

现在讨论系统的熵。在 $\rho(k)$ 和 $\rho_h(k)$ 给定的情况下, 在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢和空穴的总个数是 $(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk$, 其中, 波矢的个数是 $\rho(k)Ldk$, 空穴的个数是 $\rho_h(k)Ldk$, 所以在区间 $(k, k + dk)$ 内所有可能的状态的数目是

$$\frac{[(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk]!}{[\rho(k)Ldk]! [\rho_h(k)Ldk]!} \quad (4.35)$$

将上式取对数, 然后对整个空间积分得(玻耳兹曼常数 $k_B = 1$)

$$S/L = \int_{-\infty}^{\infty} \{[(\rho(k) + \rho_h(k))] \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k)\} dk \quad (4.36)$$

最终可以得到自由能 $F = E - TS - \mu N$, 其中 T 是系统的温度, μ 是拉格郎日乘子,

可以证明是化学势。

在 T 和 μ 确定的情况下，只有自由能达到极小值，系统才达到热力学平衡态。

在 $\rho(k)$ 满足约束条件(4.33)的情况下，自由能的变分应该等于零，即

$$\frac{\delta F}{\delta \rho(k)} = 0 \quad (4.37)$$

可以得到

$$-\mu + k^2 + T \ln \frac{\rho(k)}{\rho_h(k)} - \frac{T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{c}{c^2 + (k-q)^2} \ln \left(1 + \frac{\rho(q)}{\rho_h(q)} \right) dq = 0 \quad (4.38)$$

令 $\rho_h(k)/\rho(k) = \exp[\xi(k)/T]$ ，上式变为[29]

$$\xi(k) = -\mu + k^2 - \frac{T}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{c}{c^2 + (k-q)^2} \ln(1 + \exp(-\xi(q)/T)) dq \quad (4.39)$$

则约束条件(4.33)可以变为

$$2\pi\rho(k)(1 + \exp(\xi(k)/T)) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} \rho(q) dq \quad (4.40)$$

(4.39)式和(4.39)式一般被称为热力学 Bethe ansatz 方程，也被称为 Yang-Yang 热力学公式，通过迭代方法可以获得 $\xi(k)$ 和 $\rho(k)$ 数值解。系统的压强和自由能分别为

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\xi(k)}{T} \right) \right) dk \quad (4.41)$$

$$F = -PL + N\mu \quad (4.42)$$

系统的熵和比热可以通过自由能得到

$$S = - \left[\frac{\partial F}{\partial T} \right]_{L,N}, \quad C_v = T \left[\frac{\partial S}{\partial T} \right]_{L,N} \quad (4.43)$$

下面讨论一些特殊的情况。当 $c \rightarrow \infty$ 时，积分方程(4.39)和(4.40)中的积分项为零，因此

$$\begin{aligned} \xi(k) &= -\mu + k^2 \\ 2\pi\rho(k) &= [z^{-1} \exp(k^2/T) + 1]^{-1} \\ 2\pi\rho_h(k) &= [z \exp(-k^2/T) + 1]^{-1} \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$P = T(2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + z \exp(-k^2/T)) dk$$

其中逸度 $z = \exp(\mu/T)$ 。这和自由费米子的分布函数和压强完全相同。当 $c = 0$ 时，

$c(c^2 + x^2) \rightarrow \pi\delta(x)$ ，因此

$$\begin{aligned} \exp[-\xi(k)/T] &= [z^{-1} \exp(k^2/T) - 1]^{-1} \\ 2\pi\rho(k) &= [z^{-1} \exp(k^2/T) - 1]^{-1} \\ 2\pi\rho_h(k) &= 1 \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$P = -T(2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 - z \exp(-k^2/T)) dk$$

它们和自由玻色子的分布函数和压强完全相同。当 $T = 0$ 时，积分方程(4.40)就变成了基态的积分方程(4.21)。

第三节 两分量量子气体的精确解

δ 碰撞相互作用的自旋 1/2 的费米子或两分量玻色子也可以用 Bethe ansatz 方法求解。Gaudin 和 Yang 对这样的系统进行了详细的研究[49]，本节主要介绍一下 Yang 对这方面做的工作[49]，然后对两分量量子气体进行概述。下一章将要介绍的玻色费米混合物的 Bethe ansatz 方程就是由这种方法得到的。系统的哈密顿量仍为 (4.1) 式，设系统的波函数是

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P a(Q, P) \exp(ik_{P1}x_{Q1} + ik_{P2}x_{Q2} + \dots + ik_{PN}x_{QN}) \quad (4.46)$$

其中， $x_{Q1} < x_{Q2} < \dots < x_{QN}$ 。 $a(Q, P)$ 是一个 $N! \times N!$ 的矩阵。Q 表示粒子坐标顺序的某种排列，是矩阵的行；P 表示粒子动量顺序的某种排列，是矩阵的列。不考虑粒子之间的交换对称性，利用粒子间的碰撞导致的接触边界条件和波函数连续性条件，可以得到各个系数 $a(Q, P)$ 之间的关系

$$a(Q, P) = (u_{P(l+1)Pl} - 1)a(Q, P(l, l+1)) + u_{P(l+1)Pl} a(Q(l, l+1), P(l, l+1)). \quad (4.47)$$

其中， $u_{mn} = \frac{k_m - k_n}{k_m - k_n + ic}$ ， $(l, l+1)$ 表示 l 和 $l+1$ 位置的交换。 $P(l, l+1)$ 表示的置换如下：

下：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & l & l+1 & \dots & N \\ P1 & P2 & \dots & P(l+1) & Pl & \dots & PN \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

同样， $Q(l, l+1)$ 表示的置换是

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & l & l+1 & \dots & N \\ Q1 & Q2 & \dots & Q(l+1) & Ql & \dots & QN \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

把矩阵 $a(Q, P)$ 的某一系列向量标记为 $\xi(P)$ 。则 $\xi(P)$ 满足

$$\xi(\dots nm \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} \xi(\dots mn \dots) \quad (4.50)$$

其中， $Y_{mn}^{ab} = (u_{mn} - 1)I + u_{mn} P_{ab}$ ， P_{ab} 表示对粒子坐标排列中的第 a 处和第 b 处的置换，

并不是 x_a 和 x_b 的置换。由上式可以得到 Y_{mn}^{ab} 的两个关系式。因为

$$\xi(\dots nm \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} \xi(\dots mn \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} Y_{nm}^{l+1, l} \xi(\dots nm \dots), \text{ 所以}$$

$$Y_{mn}^{a, b} Y_{nm}^{b, a} = 1 \quad (4.51)$$

由于从 $\xi(\dots nmj \dots)$ 到 $\xi(\dots jmn \dots)$ 有两条路径可以实现

$$\begin{aligned} \xi(\dots nmj \dots) &\rightarrow \xi(\dots mnj \dots) \rightarrow \xi(\dots mjn \dots) \rightarrow \xi(\dots jmn \dots), \\ \xi(\dots nmj \dots) &\rightarrow \xi(\dots njm \dots) \rightarrow \xi(\dots jnm \dots) \rightarrow \xi(\dots jmn \dots). \end{aligned} \quad (4.52)$$

而且这两条路径是等价的，因而得到[49]

$$Y_{mn}^{ab} Y_{jn}^{bc} Y_{jm}^{ab} = Y_{jm}^{bc} Y_{jn}^{ab} Y_{mn}^{bc} \quad (4.53)$$

人们一般把上式称为 Yang-Baxter 方程。将波函数代入周期性边界条件

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(L, x_2, \dots, x_N), \text{ 可得}$$

$$\begin{aligned} \xi(12\dots N) &= P_{N-1, N} \dots P_{23} P_{12} \xi(2\dots N1) \exp(ik_1 L) \\ \xi(213\dots N) &= P_{N-1, N} \dots P_{23} P_{12} \xi(13\dots N2) \exp(ik_2 L) \end{aligned} \quad (4.54)$$

...

由上式结合(4.50)式，可以得到本征方程：

$$\exp(ik_j L) \xi(12\dots N) = X_{j+1, j} X_{j+2, j} \dots X_{N, j} X_{1j} X_{2j} \dots X_{j-1, j} \xi(123\dots N) \quad (4.55)$$

其中 $X_{ij} = P_{ij} Y_{ij}^{ij} = P_{ij} [(u_{ij} - 1)I + u_{ij} P_{ij}] = (u_{ij} - 1)P_{ij} + u_{ij} I$ ， I 为单位算符。

如果考虑单分量的玻色气体，满足粒子交换对称性，上式便变成了第一节中的 Bethe ansatz 方程；如果考虑单分量的费米气体，满足粒子交换反对称性，上式便变成了 $\exp(ik_j L) = 1$ ，粒子间就不存在相互作用。如果考虑自旋 1/2 的费米子，其中，

$N - M$ 个粒子自旋朝上， M 个粒子自旋朝下，并且波函数满足粒子交换反对称性，上式可以得到化简，并进行一系列的计算，最后得到 Bethe ansatz 方程[49]

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j + ic/2}{k_i - \Lambda_j - ic/2}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.56)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic/2}{\Lambda_i - k_j + ic/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (4.57)$$

其中 Λ 是和波矢 k 相同类型的变量。

如果考虑两分量的玻色子，其中， $N - M$ 个粒子自旋朝上， M 个粒子自旋朝下，并且波函数满足粒子交换对称性，本征方程(4.55)式可以得到化简，进行一系列的计算，最后得到 Bethe ansatz 方程[50]

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j - ic/2}{k_i - \Lambda_j + ic/2} \prod_{j=1(j \neq i)}^N \frac{k_i - k_j + ic}{k_i - k_j - ic}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.58)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic/2}{\Lambda_i - k_j + ic/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (4.59)$$

1970 年, Lai 和 Yang 用 Bethe ansatz 方法得到由无自旋的玻色子和自旋 1/2 的费米组成的混合物的 Bethe ansatz 方程[51]

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j + ic/2}{k_i - \Lambda_j - ic/2}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.60)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic/2}{\Lambda_i - k_j + ic/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic} \prod_{l=1}^{M_b} \frac{\Lambda_i - A_l + ic/2}{\Lambda_i - A_l - ic/2}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (4.61)$$

$$\prod_{j=1}^M \frac{A_l - \Lambda_j - ic/2}{A_l - \Lambda_j + ic/2} = 1, \quad l = 1, 2, \dots, M_b \quad (4.62)$$

其中 M_b 为玻色子的数目， M 为玻色子的数目和自旋朝下的费米子的数目之和， N 为所有粒子的数目， Λ_j, A_l 是和 k_i 相同类型的变量。Lai 在 1971 年得到有限温度下的费米子和玻色费米混合物的热力学 Bethe ansatz 方程[74]。文献[61]对多分量量子气体的基态性质进行了详细的介绍，而参考书[102]对热力学 Bethe ansatz 方法进行了详细的讲解，其中包括多分量量子气体。

第五章 双阱中的少体玻色系统的基态性质

双势阱中的量子气体在实验和理论上都是当前研究的热点。不同于单个简谐势，由于中间势垒的存在，势垒两边的粒子可以发生隧穿。人们在双阱中发现了约瑟夫森振荡和自束缚现象。现在不对称势阱成为人们研究的一个热点。

Murphy 等人研究了中间带有 δ 势垒的一维简谐势阱中两个玻色子系统的基态和低能激发态性质[75]。我们对中间带有 δ 势垒的无限深势阱中的玻色气体的基态性质进行了详细的研究。第一节介绍了 TG 气体的基态的性质；第二节介绍了处理多体问题的两种数值方法，分离表象法和精确对角化方法。第三节介绍了任意相互强度下的系统的基态性质。

第一节 双势阱中的 TG 气体

5.1.1 理论模型和单粒子波函数

我们考虑束缚在一个一维的无限深势阱中 N 个质量为 m 的玻色子的系统。为了研究粒子的局域性，我们在势阱的中部加入一个大小可调的 δ 势垒。系统的哈密顿量

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \frac{1}{2} g \sum_{i,j=1(i \neq j)}^N \delta(x_i - x_j) \quad (5.1)$$

与第三章的(3.1)式类似，这里 g 表示粒子间的相互作用强度。令 $\hbar = m = 1$ ，其中单体哈密顿量 h_i 如下

$$h_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_i) + \kappa \delta(x_i)$$

这里 $V(x)$ 是一个无限深势阱，即在 $(-a, a)$ 区域等于零，在其他区域是无穷大。单体哈密顿量中的最后一项表示在 origin 处的 δ 势垒，我们用一个正的参数 κ 表征势垒的高度。另一个描述系统的重要参数是一维相互作用强度 g ，它由纵向强束缚势修正过的 s-波散射长度决定。这个单体哈密顿量是精确可解的。这个解在教科书[76]上可以找到，我们为了以后的计算回顾一下这些结果。

单体哈密顿量的本征方程是

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + \kappa \delta(x) \right] \phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \quad (5.2)$$

本征函数 $\phi_n(x)$ 可以是对称的，也可以是反对称的。解析的对称波函数为

$$\phi_n(x) = \begin{cases} C \left(\cos(px) - \frac{\kappa}{p} \sin(px) \right), & -a \leq x \leq 0, \\ C \left(\cos(px) + \frac{\kappa}{p} \sin(px) \right), & 0 \leq x \leq a. \end{cases} \quad (5.3)$$

其中 C 是归一化系数， p 是粒子的波矢，由公式 $p/\kappa + \tan(pa) = 0$ 决定。相应的能量为 $E = p^2/2$ 。相比之下，反对称的本征函数在原点的值为零，不受势垒的影响。它们和没有势垒的情况下的反对称波函数是相同的，

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{(n+1)\pi x}{2a}\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (5.4)$$

相应的本征能量为 $E_n = [(n+1)\pi/2a]^2/2$ 。当 $\kappa \rightarrow 0$ ，以 $\pi^2/2a^2$ 为单位，对称态的能量 $E_n = (1/2)^2, (3/2)^2, (5/2)^2, \dots$ ，反对称态的能量 $E_n = 1, 2^2, 3^2, \dots$ 。在另一极限下，即当 $\kappa \rightarrow \infty$ ，两种对称类型的态的能级都收敛于 $E_n = 1, 2^2, 3^2, \dots$ ，每一个对称态和上一个反对称态发生简并。

5.1.2 数值结果和分析

我们利用第三章介绍的费米玻色映射理论，详细的分析了 TG 气体在这样的势阱中的物理性质。

图-5.1 和图-5.2 分布给出了五个粒子和六个粒子在不同的势垒高度下的单体密度矩阵。对角项 $\rho(x, x)$ 表示粒子密度分布，并且归一到粒子数 N 。当中间势垒很小的情况下，势垒几乎不影响粒子的密度分布，由于粒子之间很强的排斥作用，促使每个粒子占据不同的位置，产生 N 个密度最大值，因而图-5.1(a)和图-5.2(b)的对角线上出现了 N 个峰。同时，非对角元素非零，反应了粒子之间的关联。物理上，这种自身关联 $\rho(x, y)$ 可以看成一种几率，即在 x 的位置探测到粒子后，紧跟着在 y 处探测到粒子的几率。增加势垒高度，象限分离现象就会呈现，如图-5.1(b)-(d)和图-5.2(b)-(d)，这与文献[75]一致。

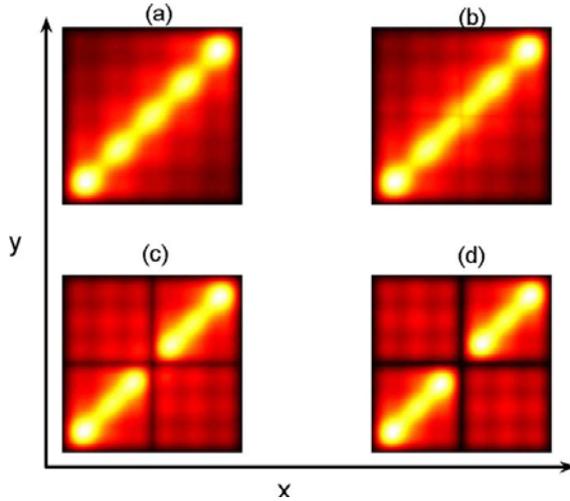


图-5.1 由 5 个玻色子构成的 TG 气体的单体密度矩阵。势垒高度为 $\kappa=(a)0.2, (b)2, (c)20,$ 和 $(d)200$ 。图的边界范围是 $-a < x, y < a$ 。

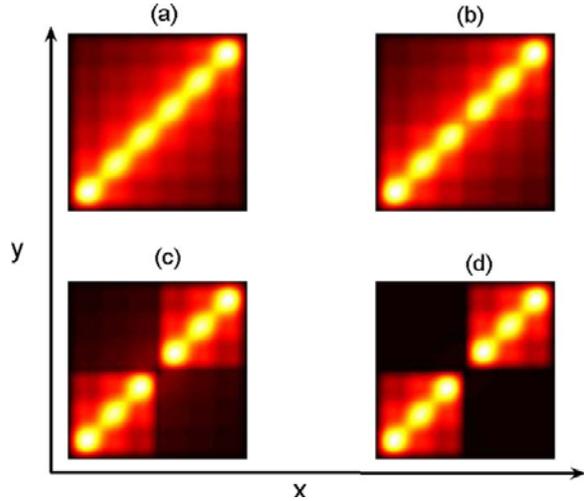


图-5.2 由 6 个玻色子构成的 TG 气体的单体密度矩阵。势垒高度为 $\kappa=(a)0.2, (b)2, (c)20,$ 和 $(d)200$ 。图的边界范围是 $-a < x, y < a$ 。

我们还观察到，系统中还存在和粒子数的奇偶性有关的有趣的宇称效应。当粒子数为奇数的时候，随着势垒的升高，中间的峰会一分为二，峰的总数有 N 个变成 $N+1$ 个。而当粒子数是偶数时，峰的总数一直是 N 个，保持不变。当中间势垒非常高时，例如： $\kappa=200$ ，粒子数为偶数的非对角象限的元素消失而粒子数为奇数的非对角象限的元素仍然存在。这说明，奇数粒子的情况下，即使在很高的势垒下，势垒两边的关联仍然存在。

我们可以用类似能带的理论解释上面的现象。中间的势垒把无限深的势阱劈成了一个对称的双势阱。类似两格点哈伯德模型扩展成多格点自然产生能带结构，我们可以认为一个周期性分布着 $\delta(x)$ 函数势垒的无限深势阱，即 Kronig-Penney 势，也存在着同样的能带结构。然而，在我们的系统中，每个能带只有两个能级组成。粒子间无穷大的排斥相互作用禁止两个粒子占据同一个能级，即每个能级上最多被一个粒子占据，因而每个能带上最多有两个粒子。类似费米海分布，系统的基态中的粒子是一个一个从最低的能级排到高的能级。当粒子数是偶数时，所有被占据的能带是被占满的，系统处于绝缘态，而当粒子数是奇数时，最高的占据能带只有一个粒子，是半满的，类似于金属导体中的导带。占据最高能带的粒子可以自由运动，这就是由粒子的奇偶性导致单体密度矩阵的非对角项不同的原因。

上面的结果也可以用更简单的方式解释。当粒子数是偶数时，每个阱中可以容

纳 $N/2$ 个粒子，这样两个阱中的粒子数目一样，在势垒两边保持了平衡。当粒子数是奇数时，我们先假设往每个阱中放入 $(N-1)/2$ 个粒子，然后就遇到了一个困难，怎么放最后一个粒子呢？在两个阱中发现最后一个粒子的几率应该是相同的，就是说，最后一个粒子保持了势垒两边的阱之间的联系，因而导致单体密度矩阵的非对角项不是零。然而，当势阱的这样完美的对称性被破坏后，结论就会发生变化。在势垒很高的情况下，将 δ 势垒从原点移动很小的位移时，奇数粒子的单体密度矩阵的非对角象限的元素就会消失，例如： $\kappa = 200, N = 5$ ，势垒移动 $0.02a$ 就完全破坏了势垒两边的量子关联。势垒的小移动对偶数粒子的情况没有明显的影响。

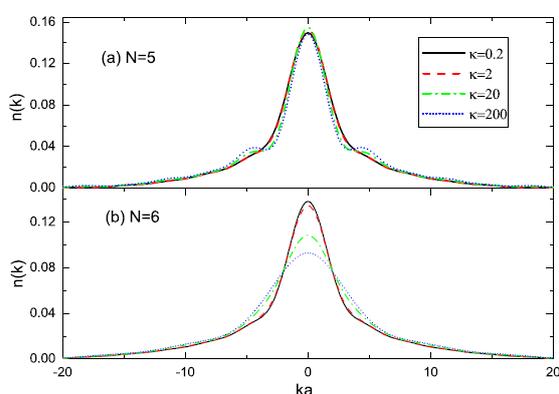


图-5.3 TG 气体的动量分布。(a) $N = 5$, (b) $N = 6$ 。

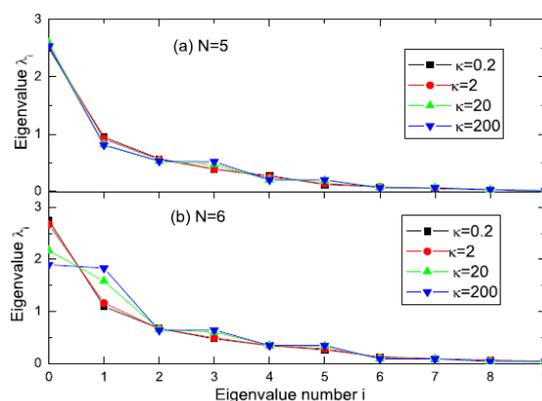


图-5.4 TG 气体的占据数分布。(a) $N = 5$, (b) $N = 6$ 。

图-5.3 给出了不同势垒高度 ($\kappa = 0.2, 2, 20, 200$) 下的 TG 气体的动量分布。当粒子数是奇数时，随着势垒高度的增加，中间的最高峰先升高，升到最高的地方，然后开始下降。次峰随着势垒高度的增加逐渐出现并且很显著，与文献[4]相一致。粒子被势垒分到两个势阱中，但它们之间并不是孤立的而是相干的。这种相干导致了次峰的出现。当粒子数为偶数时，随着势垒高度的增加，动量分布变得越来越宽，中间峰的高度是单调降低的。这是因为， $N/2$ 个粒子被局域在单势阱中，保持势垒两边的平衡，和上面的结果一致。

我们还研究了不同粒子数下的单体密度矩阵的本征值的分布情况，见图-5.4。单体密度矩阵的本征函数，可以理解为粒子的自然轨道，其本征值可以理解为在自然轨道上的占据数。当粒子数为奇数时，随着势垒的升高，第一和第二轨道占据数几乎保持不变，但第三和第四轨道占据数会逐渐等于同一个值，形成一个台阶结构，表明形成了一个粒子对。接下来的两个占据数也会形成粒子对，依次类推。当粒子

数是偶数时，情况就发生了变化，第一和第二轨道占据数也会发生配对，接下来也是如此，这是因为所有被占据的能带都是有二个粒子的满带，在费米 TG 气体中，也发现了类似的现象[41]。

第二节 离散变量表象方法与精确对角化方法

处理任意相互作用的多体系统的方法很多，解析的方法如：Bethe ansatz,数值的方法也很多，例如：数值精确对角化[77]，离散变量表象方法(Discrete Variable Representation)[75,78]，量子蒙特卡罗方法[79]，多重结构方法(Multiconfigurational method)[80]等。这一节我们介绍处理两粒子体系的离散变量表象方法和能够数值处理少体系统的精确对角化方法。

5.2.1 离散变量表象方法

下面我们介绍离散变量表象方法处理两个粒子的系统。将坐标空间离散化，假设空间的区域为 (a,b) ，从该区域中取出 N 个格点 q_i ， $i=1,2,\dots,N$ 。两体波函数可以写成直积的形式：

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^N \psi_{ij} f_i(x_1) f_j(x_2) \quad (5.5)$$

其中 ψ_{ij} 是一系列待定的系数，表示两体波函数在空间格点 $(x_1 = q_i, x_2 = q_j)$ 上的取值，这儿， $i, j = 1, 2, \dots, N$ 。 $f_i(q)$ 是已知的 N 个拉格朗日函数，是各个格点 q_1, q_2, \dots, q_N 的局域函数，必须满足下面的两个条件：

$$f_i(q_j) = \delta_{ij} \quad \forall i, j \quad (5.6)$$

和

$$\int_a^b f_i^*(q) f_j(q) dq = \lambda \delta_{ij} \quad (5.7)$$

在笛卡尔坐标空间中，一般取 $\lambda = 1$ ，拉格朗日函数 $f_i(q)$ 为

$$f_i(q) = \frac{1}{N} \frac{\sin[\pi(q-i)]}{\sin[\pi(q-i)/N]} \quad (5.8)$$

将波函数的直积形式(5.5)式代入能量本征方程，(h 是单粒子哈密顿量)

$$[h(x_1) + h(x_2) + g\delta(x_1 - x_2)]\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2), \quad (5.9)$$

可以得到

$$[h(x_1) + h(x_2) + g\delta(x_1 - x_2)] \sum_{i=1}^N \psi_{ij} f_i(x_1) f_j(x_2) = E \sum_{i=1}^N \psi_{ij} f_i(x_1) f_j(x_2). \quad (5.10)$$

在上面方程的两边乘以 $f_m(x_1) f_n(x_2)$ ，并对 x_1, x_2 在整个空间积分，得到

$$\sum_{i,j=1}^N H_{mn,ij} \psi_{ij} = E \psi_{mn} \quad (5.11)$$

然后，用标准的线性代数方法解上面的本征方程，便可以得出所有的本征值和本征矢量。最小的那个本征值和本征矢量对应系统的基态能量和波函数。系统的其他性质就可以通过波函数计算出来。

5.2.2 精确对角化方法

精确对角化方法在物理领域是一种常用的数值方法，主要思想是，将系统的哈密顿量在一个完备的空间上展开，写成矩阵的形式，然后将这个矩阵对角化，就可以得到本征值和本征矢量，最小的本征值就是基态的能量，最小的本征矢量就是基态波函数。

利用精确对角化方法可以处理任意相互作用强度的玻色气体，首先对方程(5.1)进行二次量子化处理[90]，

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^+(x) \hat{h} \hat{\psi}(x) dx + \frac{g}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \delta(x-x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx' \quad (5.12)$$

这儿， $\hat{\psi}^+(x)$ ($\hat{\psi}(x)$) 表示在坐标 x 位置产生(湮灭)一个粒子的场算符。令场算符展开为

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_i \hat{a}_i \phi_i(x) \\ \hat{\psi}^+(x) &= \sum_i \hat{a}_i^+ \phi_i^*(x) \end{aligned} \quad (5.13)$$

其中， $\phi_i(x)$ 和前面的含义相同，是单体哈密顿量的本征方程 $\hat{h}\phi_i(x) = E_i\phi_i(x)$ 的本征函数，是正交归一的，其中 E_i 是单粒子的能量本征值。 \hat{a}_i^+ (\hat{a}_i) 表示在单粒子能量本征态 $\phi_i(x)$ 上粒子产生(湮灭)算符，满足下面的对易式

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^+] &= \delta_{ij} \\ [a_i, a_j] &= [a_i^+, a_j^+] = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

哈密顿量(5.12)式变为

$$H = \sum_i E_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + \frac{g}{2} \sum_{ijkl} I_{ijkl} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_l, \quad (5.14)$$

其中相互作用积分参数 I_{ijkl} 为 $I_{ijkl} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^*(x) \phi_j^*(x) \phi_k(x) \phi_l(x) dx$ 。我们将上面的哈密顿量在没有相互作用的玻色气体组成的多体系统的能量最低的一系列空间上展开成矩阵形式，然后将这个矩阵对角化，从而获得有相互作用的情况下的本征函数和本征能量。为了简单起见，下面我们以两个粒子为例，且只考虑两个单粒子能级，来说明对角化的过程。

如果 $|m, n\rangle$ 表示有 m 粒子占据单粒子基态 $\phi_0(x)$ 和 n 个粒子占据第一激发态 $\phi_1(x)$ ，那么无相互作用的玻色系统的本征态有三个：

$$\varphi_1 = |2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a_0^+ a_0^+ |vac\rangle, \quad \varphi_2 = |1, 1\rangle = a_0^+ a_1^+ |vac\rangle, \quad \varphi_3 = |0, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a_1^+ a_1^+ |vac\rangle \quad (5.15)$$

其中 $|vac\rangle$ 是真空态， $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 是正交归一的。

我们计算哈密顿量在本征态上的矩阵元

$$\langle \varphi_m | H | \varphi_n \rangle = \sum_i E_i \langle \varphi_m | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | \varphi_n \rangle + \frac{g}{2} \sum_{ijkl} I_{ijkl} \langle \varphi_m | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_l | \varphi_n \rangle \quad (5.16)$$

得到一个 3×3 的矩阵，然后将这个矩阵对角化，得出一系列的本征值和相应的本征矢量。最小的那个本征值就是系统的基态能量 E_G ，相应的本征矢量是和基态的波函数相对应的。例如：本征矢量为 (A_1, A_2, A_3) ，那么基态的波函数是 $G = A_1 \varphi_1 + A_2 \varphi_2 + A_3 \varphi_3$ 。那么系统基态的一些物理观测量就可以由基态波函数计算得到。

系统的基态密度分布函数为

$$\rho(x) = \langle G | \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) | G \rangle = \sum_{ij} \phi_i^*(x) \phi_j(x) \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j | G \rangle \quad (5.17)$$

而基态动量分布函数为

$$n(k) = \langle G | \hat{\Pi}^+(k) \hat{\Pi}(k) | G \rangle / N = \sum_{ij} \Phi_i^*(k) \Phi_j(k) \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j | G \rangle / N \quad (5.18)$$

并且归一，其中 $\hat{\Pi}(k)$ 表示湮灭一个动量为 k 的玻色子的场算符，可以写成

$$\hat{\Pi}(k) = \sum_i \hat{a}_i \Phi_i(k), \quad \Phi_i(k) \text{ 是单粒子本征函数 } \phi_i(x) \text{ 的傅立叶变换}$$

$$\Phi_i(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i(x) \exp(-ikx) dx \quad (5.19)$$

另外，占据数分布，即在不相互作用的玻色气体能级上的分布情况为

$$\langle n_i \rangle = \langle G | a_i^+ a_i | G \rangle \quad (5.20)$$

和刻画两个粒子关联的对关联函数为

$$\begin{aligned} g^{(2)}(x, x') &= \langle G | \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) | G \rangle \\ &= \sum_{ijkl} \phi_i^*(x) \phi_j^*(x') \phi_k(x') \phi_l(x) \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_l | G \rangle \end{aligned} \quad (5.21)$$

系统的相互作用能可以通过对关联函数求出，

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \langle G | \frac{g}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \delta(x-x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx' | G \rangle \\ &= \frac{g}{2} \sum_{ijkl} I_{ijkl} \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_l | G \rangle \\ &= \frac{g}{2} \int_{-\infty}^{\infty} g^{(2)}(x, x) dx \end{aligned} \quad (5.22)$$

假设单粒子哈密顿量为 $\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ ，则动能和势能分别为

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= \langle G | \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \hat{\psi}(x) dx | G \rangle \\ &= \sum_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \phi_j(x) dx \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j | G \rangle \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$E_{\text{pot}} = \langle G | \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^+(x) V(x) \hat{\psi}(x) dx | G \rangle = \sum_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^*(x) V(x) \phi_j(x) dx \langle G | \hat{a}_i^+ \hat{a}_j | G \rangle \quad (5.24)$$

当然，基态的能量应为上面三项的和 $E_G = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} + E_{\text{int}}$ 。

第三节 双势阱中的任意相互作用强度的玻色气体

第一节研究了相互作用无穷大的 TG 气体的情况，这节利用精确对角化方法研究双势阱中任意相互作用强度的玻色气体的基态性质。

如果我们考虑 N 个粒子， M 个单粒子能级，无相互作用的玻色系统有 C_{N+M-1}^N 个本征态。令 $N=5$ ， $M=27$ ，无相互作用的玻色系统的本征态个数是 $C_{31}^5 \approx 1.7 \times 10^5$ ，将哈密顿量作用在这个空间上得到非常大的稀疏矩阵。如果用普通的方法将这个矩阵对角化，计算机将会占用大量的内存存储这个矩阵，现在的内存不能达到这样的要求，

并且存储和读取大量的数据也很费时间。我们只需要算出系统的基态，即得到最小的那个本征值和本征矢量。为了解决上面的困难，对于这种大型的稀疏矩阵，我们

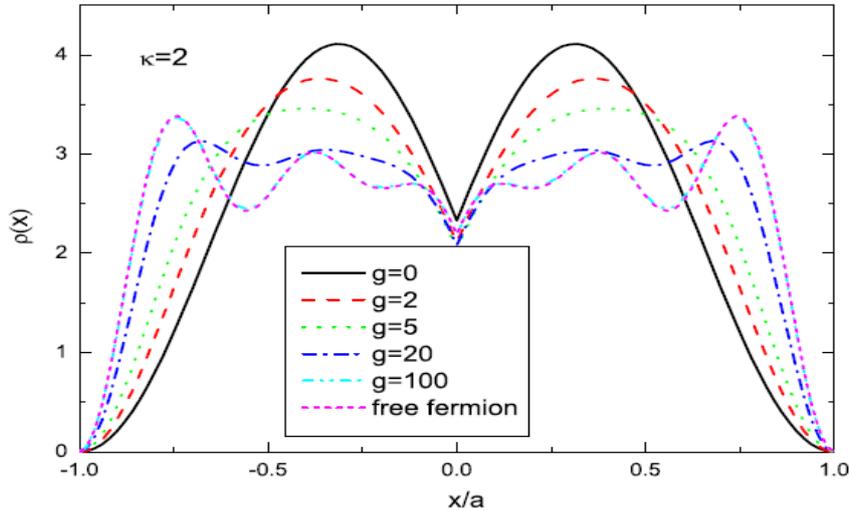


图-5.5 不同相互作用强度($g=0,2,5,20,100$)下粒子密度分布。粒子数 $N=5$ ，势垒高度 $\kappa=2$ 。随着 g 变大，密度分布变的平坦和宽广，最后和 5 个自由费米子的密度分布完全相同。

可以用 Lanczos 方法得到最小的那个本征值和本征矢量，计算过程只需要存储几个行(列)矢量就可以了，不需要存储整个矩阵。Lanczos 方法的详细介绍见附录 A。文章 [75] 已经计算了双势阱中两个粒子的情况，我们考虑 $N=5$ ，即奇数个粒子的情况。

不失一般性，我们讨论势垒高度 $\kappa=2$ 的情况。图-5.5 给出了不同相互作用强度下的密度分布。由于势阱中间存在势垒，中间位置的密度低于附近的密度。无相互作用的玻色气体在势垒两边各有一个密度峰。随着相互作用强度的增大，密度开始扩展，变得平坦，同时密度峰的高度降低。当相互作用强度达到一定的值，新的密度峰就会出现，最终密度就和自由费米子的密度分布完全相同。

图-5.6 给出了不同相互作用强度下的玻色子的动量分布。我们发现，随着相互作用强度的增加，次峰会逐渐消失，中间峰将变低变宽。这就证明了粒子间的相互作用阻碍了粒子在两个阱中的相干性。我们利用前面提到的费米玻色映射理论计算了 TG 极限 $g \rightarrow \infty$ 的动量分布，和 $g=100$ 的情况几乎完全相同。在 TG 极限下，由于粒子间无穷大的相互作用，一些可能会占据更高的能级，于是在动量分布的两端出现了长的尾巴，这和 TG 气体一般的性质是一致的。而自由费米气体的动量分布与此完全不同，是一个非常平坦的分布，不存在长的尾巴。

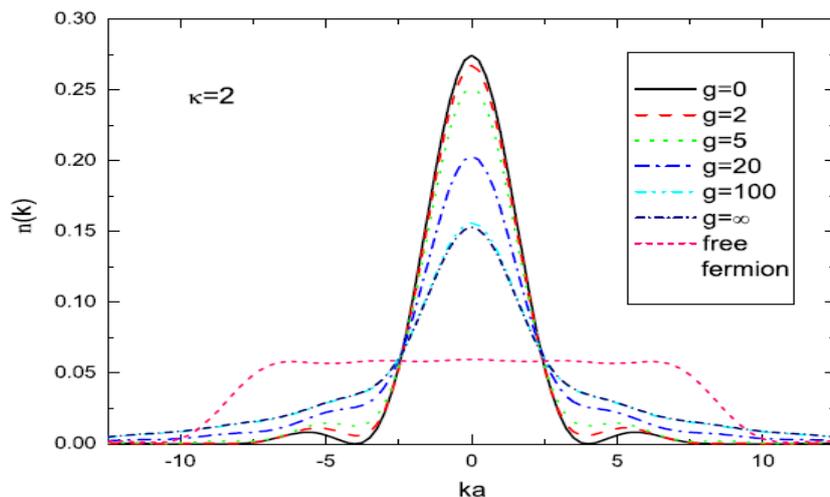


图-5.6 不同相互作用强度下的 5 个玻色的动量分布。由于粒子间的相互作用阻碍了粒子在两个阱中的相干性，导致次峰的消失。

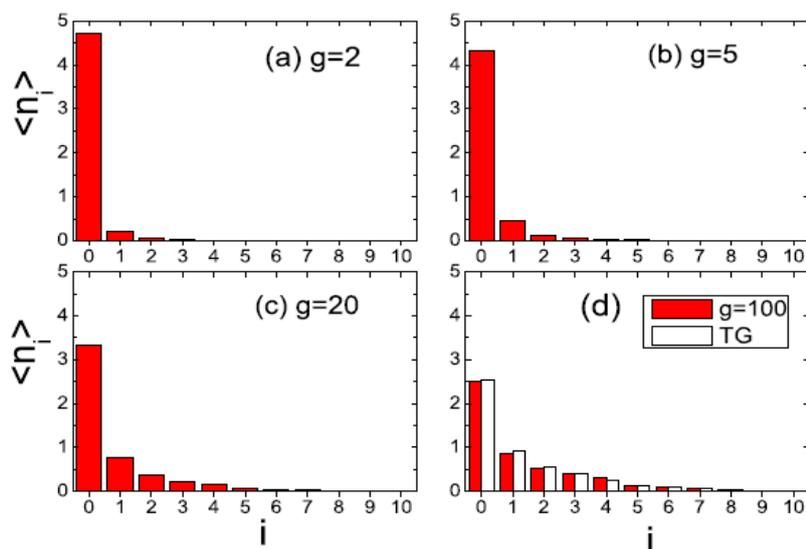


图-5.7 不同的相互作用强度下的占据数分布。在(d)中的每个态的左边代表 $g=100$ ，右边代表 TG 气体的占据数分布。随着 g 变大，部分粒子会离开基态，占据能量更高的激发态。但较低能量的态上的占据数永远大于较高能量的态上的占据数。

我们还给出了单粒子态占据数分布，与 TG 气体的自然轨道占据数不是同一个概念。这儿占据的态是指势阱中单粒子的能量本征函数 ϕ_i ，而 TG 气体的自然轨道是指单体密度矩阵的本征函数。两者十分类似，但并不完全相同。如图-5.7 所示，随着相互作用强度 g 的增加，玻色子不仅占据基态，还占据相当一部分能量低的激发态。但较低能量的态上的占据数永远大于较高能量的态上的占据数，这与简谐势中的占

据数分布情况不同。在简谐势中，单粒子基态的占据数是最大的，但第二激发态上的占据数高于第一激发态上的占据数，即粒子更愿意占据对称的态，在我们的势阱并没有观察到类似的现象。在图-5.7(d)中，我们还比较了相互作用强度 $g=100$ 的情况下的在单粒子的能量本征函数上的占据数和 TG 气体在单体密度矩阵的自然轨道上的占据数分布，发现在相应的态上他们趋向于同一个值。另外，我们还对这两者的能量做了比较。 $g=100$ 的系统基态能量 $E_G = 71.95$ 非常接近但小于 TG 气体的能量 $E_{TG} = 73.01$ ，说明随着相互作用强度的增大，系统的能量就会趋向 TG 气体，和文章 [77] 的结果一致。利用其他的方法 [80] 也可以得到同样的收敛性。

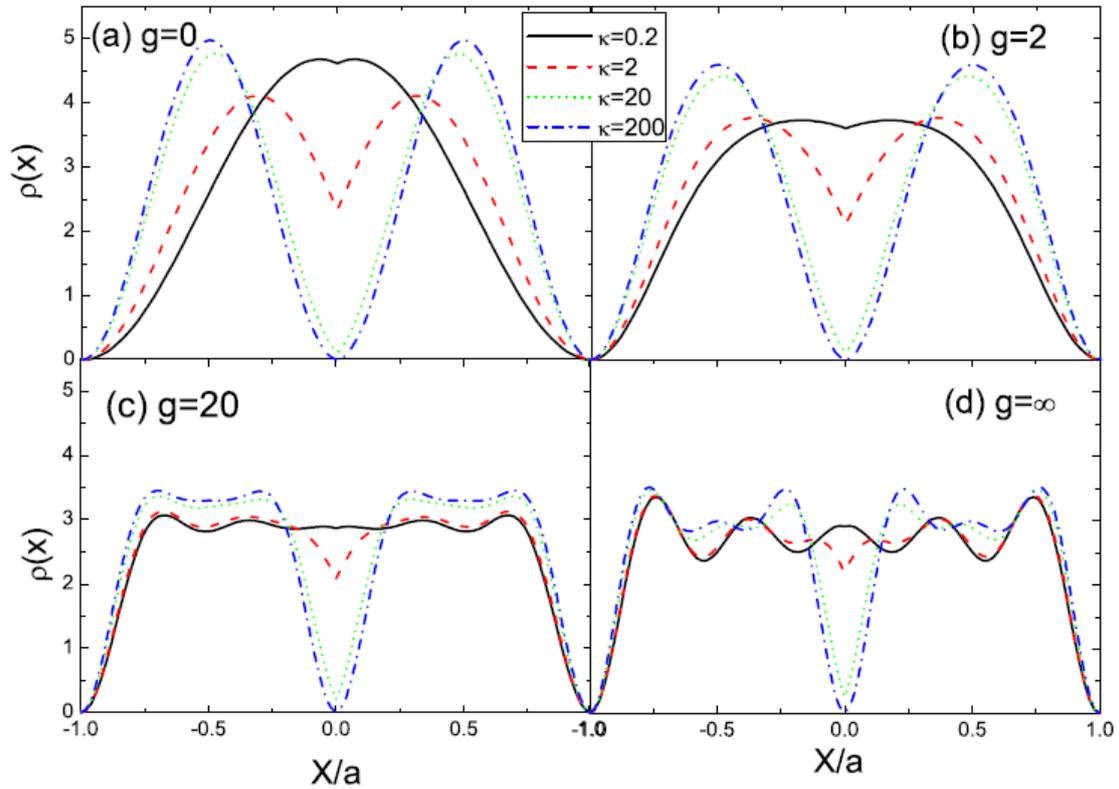


图-5.8 不同相互作用强度 g 和不同势垒高度 κ 下的粒子密度分布。随着中间势垒的升高，粒子被分成两部分。

我们还可以调节势垒的高度改变系统的特性。图-5.8 给出了相互作用强度取 $g=0, 2, 20, \infty$ 和势垒高度取 $\kappa=0.2, 2, 20, 200$ 时的 5 个玻色子的密度分布。对于任意相互作用强度，当增加中间势垒的高度时，中间势垒位置的密度就会降低，同时在其他区域的密度会增加，也就是说，势垒将粒子分在了两个区域。我们还研究了不

同势垒高度下的动量分布，如图-5.9。图-5.9(a)给出了没有相互作用的玻色子的动量分布，它是动量空间的单粒子能量本征函数的模方，其解析形式为

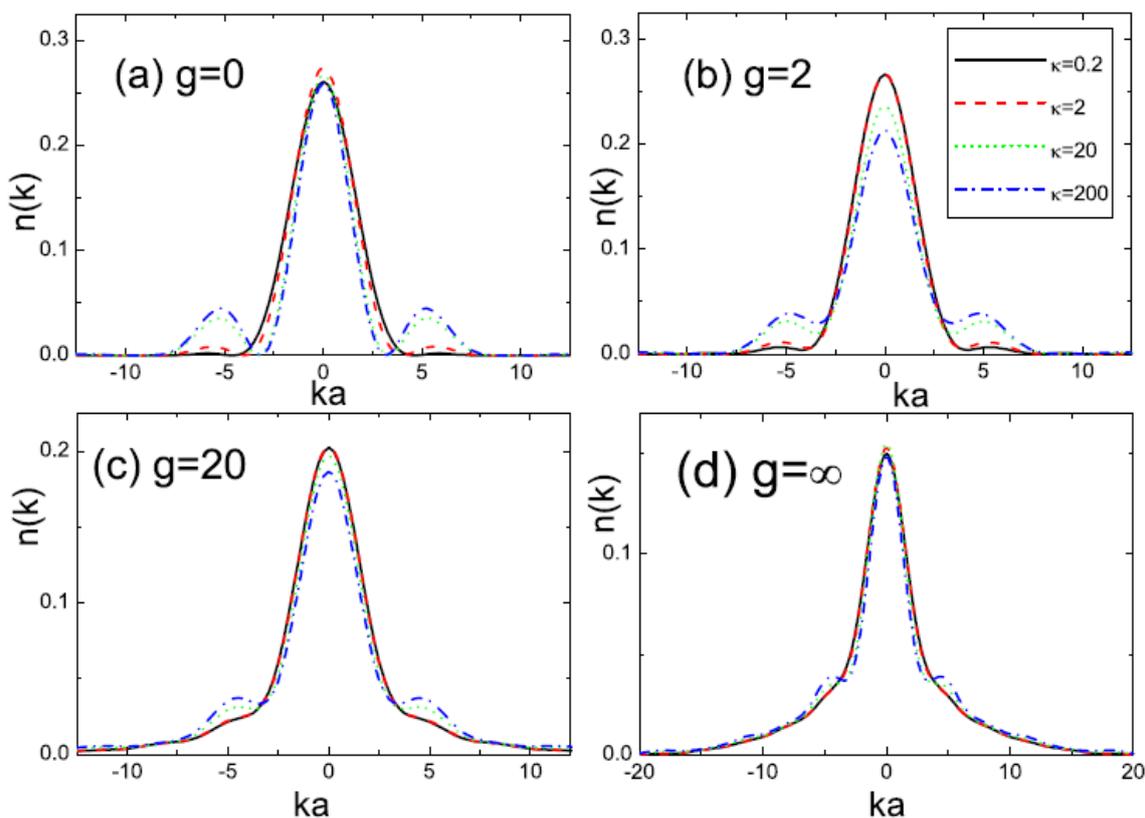


图-5.9 不同相互作用强度 g 和不同势垒高度 κ 下的动量分布。次峰随着势垒的升高而出现，随着相互作用强度的增大而消失。

$$n(p) = C \left(\frac{\sin(k+p)}{k+p} + \frac{\sin(k-p)}{k-p} + \frac{\kappa}{k} \frac{1 - \cos(k+p)}{k+p} + \frac{\kappa}{k} \frac{1 - \cos(k-p)}{k-p} \right)^2 \quad (5.25)$$

其中 C 是归一化系数。增加势垒的高度，次峰越来越明显。这是因为粒子被分在两个区域，但他们是相干的，产生了窄的动量峰。对于非零的相互作用强度，图-5.9(b)-(d) 显示，主峰和次峰都有相同的趋势。类比于光晶格中的玻色哈伯德模型中的超流绝缘相变，由于粒子之间非常强的排斥作用导致粒子的局域化，从而引起次峰的消失。

第四节 小结

我们对中间带有 δ 势垒的无限深势阱中的玻色气体的基态性质进行了详细的研

究。基于玻色与费米子的对应关系，我们构建了 Tonks-Girardeau 气体的基态波函数，计算了 5 个粒子和 6 个粒子的单体密度矩阵，动量分布，占据数分布等，发现了在势垒很高的情况下，标记粒子关联的单体密度矩阵的非对角元对偶数个的粒子为零，而对奇数个的粒子为有限值；其次，用精确对角化方法计算了在任意势垒高度和原子间相互作用强度下系统基态的密度分布，占据数分布，动量分布等。由于势垒两边的粒子的干涉而产生的动量次峰随着势垒的升高而增大，随着原子间相互作用强度的增大而减小。

第六章 玻色费米混合物的热力学性质

Amerongen 等人在 2008 年将 ^{87}Rb 束缚在准一维的简谐势阱中，其空间密度分布与热力学 Bethe ansatz 方程得到的结果相一致，从而验证热力学 Bethe ansatz 方法是正确的[14]。我们重新推导出玻色费米混合物的热力学 Bethe ansatz 方程，并利用这个方程和局域密度近似方法得到了准一维简谐势中玻色子和费米子的空间密度分布，为相关的实验提供比较的对象。

本章第一节将介绍玻色费米混合物的 Bethe ansatz 方程，并推导出其热力学 Bethe ansatz 方程；第二节描述了实验模拟的结果；第三节介绍有关两分量玻色气体热力学性质的一些结果。

第一节 玻色费米混合物的精确解

6.1.1 玻色费米混合物的精确解

考虑一个由玻色子和费米子组成的均匀一维系统，系统的哈密顿量是

$$H = \int_0^L dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_b} \partial_x \Psi_b^+ \partial_x \Psi_b + \frac{\hbar^2}{2m_f} \partial_x \Psi_f^+ \partial_x \Psi_f + \frac{1}{2} g_{bb} \Psi_b^+ \Psi_b^+ \Psi_b \Psi_b + g_{bf} \Psi_b^+ \Psi_f^+ \Psi_f \Psi_b \right\} \quad (6.1)$$

其中 Ψ_b ， Ψ_f 分别是玻色子和费米子的场算符， m_b 和 m_f 是玻色子和费米子的质量， g_{bb} 是玻色子和玻色子之间的相互作用强度， g_{bf} 是玻色子和费米子之间的相互作用强度。哈密顿量(6.1)中前两项是动能项，后两项是相互作用项。因为泡利不相容原理，费米子之间不可能发生碰撞，没有费米子间的相互作用项。这个模型只有满足两个条件才是精确可解的，第一个是玻色子和费米子的质量相等，第二个是玻色子和玻色子之间的相互作用强度等于玻色子和费米子之间的相互作用强度，即

$$\begin{aligned} m_b &= m_f = m \\ g_{bb} &= g_{bf} = g \end{aligned} \quad (6.2)$$

按照以前的惯例，我们规定 $2m = \hbar = 1$ ，将前面的哈密顿量写成一次量子化形式，

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) \quad (6.3)$$

这里 $c = mg / \hbar^2$ 。 N 个粒子中有 M 个玻色子， $N - M$ 个费米子。系统的波函数满足玻色子和费米子各自的粒子交换对称性，即交换任意两个玻色子的坐标 $\{x_1, x_2, \dots, x_M\}$ ，波函数保持不变；交换任意两个费米子的坐标 $\{x_{M+1}, x_{M+2}, \dots, x_N\}$ ，波函数出现一个负号。

利用周期性边界条件，Imambekov 和 Demler[72]得到了下面的 Bethe ansatz 方程

$$\begin{aligned} \exp(ik_j L) &= \prod_{\beta=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\beta + ic/2}{k_j - \Lambda_\beta - ic/2}, & j = 1, \dots, N \\ 1 &= \prod_{i=1}^N \frac{k_i - \Lambda_\alpha + ic/2}{k_i - \Lambda_\alpha - ic/2}, & \alpha = 1, \dots, M \end{aligned} \quad (6.4)$$

其中波矢 k_1, \dots, k_N 是一系列不相等的实数，谱参数 $\Lambda_1, \dots, \Lambda_M$ 是和波矢相同类型的量。可以证明上面的方程的所有解都是实数[72]，这将为后面的热力学推导带来很大的方便。

对上面的方程取对数，可以得到

$$\begin{aligned} k_j L &= 2\pi I_j + \sum_{\beta=1}^M \theta(2k_j - 2\Lambda_\beta) \\ 2\pi J_\alpha &= \sum_{i=1}^N \theta(2k_i - 2\Lambda_\alpha) \end{aligned} \quad (6.5)$$

其中 $\theta(x) = -2 \arctan(x/c)$ ， I_j 和 J_α 是两组量子数，根据 M 和 N 的奇偶性取整数或半整数。当系统处于基态时，它们的取值满足

$$\begin{aligned} I_j &= \{-(N-1)/2, -(N-3)/2, \dots, (N-1)/2\} \\ J_\alpha &= \{-(M-1)/2, -(M-3)/2, \dots, (M-1)/2\} \end{aligned} \quad (6.6)$$

在热力学极限下，即 $N \rightarrow \infty, M \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$ ，而 N/L 和 M/L 为有限的常数，定义在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 的个数是 $\rho(k)Ldk$ ，在区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 的个数是 $\sigma(\Lambda)Ld\Lambda$ 。当系统处于基态，方程(6.5)则变为

$$\begin{aligned} \rho(k) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B K(k, \Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ \sigma(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q K(\Lambda, k) \rho(k) dk \end{aligned} \quad (6.7)$$

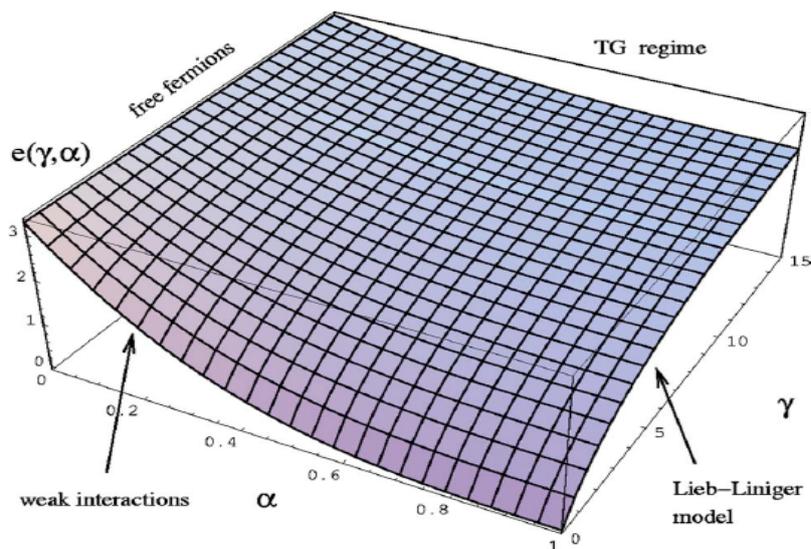


图-6.1 不同 α 和 γ 时的能量 $e(\gamma, \alpha)$ [72]。 α 为玻色子与总粒子数的比值， $\gamma = c/n$ 。

其中 $K(x, y) = \frac{4c}{c^2 + 4(x-y)^2}$ ， Q 和 B 分别是波矢 k 和谱参数 Λ 的边界。归一化条件和

能量分别是

$$n \equiv N/L = \int_{-Q}^Q \rho(k) dk \quad (6.8)$$

$$M/L = \int_{-B}^B \sigma(\Lambda) d\Lambda \quad (6.9)$$

$$E/L = \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk \quad (6.10)$$

若标记能量为 $E = e(\gamma, \alpha)N^3/L^2$ ， 文章 [72] 给出了不同 α 和 γ 时的能量分布 $e(\gamma, \alpha)$ ， 如图-6.1 所示。其中， α 为玻色子与总粒子数的比值， $\gamma = c/n$ 。当 $\alpha = 1$ ， 即粒子全为玻色子时， 能量分布变为 Lieb-Liniger 模型的情况； 当 $\alpha = 0$ ， 即粒子全为费米子时， 能量分布变为理想费米子的情况；

6.1.2 玻色费米混合物的热力学

如(6.6)式所示， 基态的量子数 I_j 和 J_α 是一系列连续分布的格点(整数或半整数)， 分别均匀分布在区间 $[-(N-1)/2, (N-1)/2]$ 和 $[-(M-1)/2, (M-1)/2]$ ， 而波矢 k 和谱参数 Λ 分别不均匀地分布在区间 $[-Q, Q]$ 和 $[-B, B]$ 。有限温度下， 某些波矢 k 或谱参数 Λ 就会从原来的位置跃迁到能量较高的位置， 超出了 $[-Q, Q]$ 或 $[-B, B]$ 的范围， 在

原来的地方留下空穴。此时的系统处于激发态，量子数 I 不在均匀分布在区间 $[-(N-1)/2, (N-1)/2]$ ，此区间内有的格点不再被占据，与波矢的空穴相对应，有的量子数 I 跳出了该区间，占据区间外的格点。同样，量子数 J 的分布情况与 I 类似。根据(6.5)式，定义

$$\begin{aligned} 2\pi I'(p) &= pL - \sum_{\beta=1}^M \theta(2p - 2\Lambda_{\beta}) \\ 2\pi J'(\Gamma) &= \sum_{i=1}^N \theta(2k_i - 2\Gamma) \end{aligned} \quad (6.11)$$

其中 k_i 和 Λ_{β} 满足(6.5)式，为了描述波矢 k 和其空穴的格点 $I'(p)$ 构成了一个均匀连续分布的格点空间(整数空间或半整数空间)，它被分成了两种格点：占据的格点 I 和不被占据的格点。当 $I'(p) = I$ 时， p 就是波矢 k ；当 $I'(p)$ 处在不被占据的格点上时， p 就是空穴。同样为了描述谱参数 Λ 和其空穴的格点 $J'(\Gamma)$ 也构成一个均匀连续分布的格点空间，它被分成了两种格点：占据的格点 J 和不被占据的格点。当 $J'(\Gamma) = J$ 时， Γ 就是谱参数 Λ ；当 $J'(\Gamma)$ 处在不被占据的格点上时， Γ 就是空穴。

类比上一节，在热力学极限下处于激发态的系统，定义在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 和空穴的个数分别为 $\rho(k)Ldk$ 和 $\rho_h(k)Ldk$ ；由于占据的格点 I 和波矢 k 一一对应，不被占据的格点和空穴一一对应，所以在 $(I'(k), I'(k) + dv(k))$ 区间内格点的个数应该等于区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 和空穴两者个数的和

$$dI'(k) = (\rho(k) + \rho_h(k))Ldk$$

同理，定义在区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 和其空穴的个数分别为 $\sigma(\Lambda)Ld\Lambda$ 和 $\sigma_h(\Lambda)Ld\Lambda$ 。由于占据的格点 J 和谱参数 Λ 一一对应，不被占据的格点和其空穴一一对应，所以在 $(J'(\Lambda), J'(\Lambda) + dJ'(\Lambda))$ 区间内格点的个数应该等于区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 和其空穴两者个数的和

$$dJ'(\Lambda) = (\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda))Ld\Lambda$$

在热力学极限下, 将(6.11)式中的求和变为积分, 并把 p 替换为 k , Γ 替换为 Λ 。(6.11) 式变为

$$\begin{aligned} 2\pi I'(k) &= pL - \int_{-\infty}^{\infty} \theta(2k - 2\Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ 2\pi J'(\Lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \theta(2k - 2\Lambda) \rho(k) dk \end{aligned} \quad (6.12)$$

上两式分别对 k 和 Λ 求导数, 可以得到 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 满足的约束条件

$$\begin{aligned} \rho(k) + \rho_h(k) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ \sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \rho(k) dk \end{aligned} \quad (6.13)$$

粒子数密度和能量密度的表达式为

$$\begin{aligned} n \equiv N/L &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk \\ M/L &= \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ E/L &= \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \rho(k) dk \end{aligned}$$

现在根据 Yang-Yang 的思路[29]讨论系统的熵。在 $\rho(k)$ 和 $\rho_h(k)$ 给定的情况下, 在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢和空穴的总个数是 $(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk$, 其中, 波矢的个数是 $\rho(k)Ldk$, 空穴的个数是 $\rho_h(k)Ldk$, 所以在区间 $(k, k + dk)$ 内所有可能的状态的数目是

$$\frac{[(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk]!}{[\rho(k)Ldk]! [\rho_h(k)Ldk]!}$$

将上式取对数, 然后对整个空间积分得(玻耳兹曼常数 $k_B = 1$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{[(\rho(k) + \rho_h(k))] \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k)\} dk ;$$

按照同样的思路, 在 $\sigma(\Lambda)$ 和 $\sigma_h(\Lambda)$ 给定的情况下, 在区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内所有可能的状态的数目是

$$\frac{[(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda))Ld\Lambda]!}{[\sigma(\Lambda)Ld\Lambda]! [\sigma_h(\Lambda)Ld\Lambda]!}$$

将上式取对数，然后对整个空间积分得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{[(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) \ln(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) - \sigma(\Lambda) \ln \sigma(\Lambda) - \sigma_h(\Lambda) \ln \sigma_h(\Lambda)]\} d\Lambda$$

将上面的两部分相加，便得到系统的熵

$$\begin{aligned} S/L = & \int_{-\infty}^{\infty} \{[(\rho(k) + \rho_h(k)) \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k)]\} dk \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \{[(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) \ln(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) - \sigma(\Lambda) \ln \sigma(\Lambda) - \sigma_h(\Lambda) \ln \sigma_h(\Lambda)]\} d\Lambda \end{aligned} \quad (6.14)$$

最后我们可以得到吉布斯自由能 $F = E - TS - \mu_F(N - M) - \mu_B M$ ，其中 T 是系统的温度， μ_F 和 μ_B 是两个拉格朗日乘子。为了达到热力学平衡，在满足约束条件(6.13)下，吉布斯自由能取极小值，即对 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 的变分等于零。其中也保证了玻色子和费米子的数目保持不变。另外，我们严格证明了 μ_F 和 μ_B 是费米子和玻色子的化学势，详见附录 B。

下面我们做变分计算，在 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 满足约束条件(6.13)式的前提下，令吉布斯自由能对 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 的变分等于零，即 $\frac{\delta F}{\delta \rho(k)} = 0$ 和 $\frac{\delta F}{\delta \sigma(\Lambda)} = 0$ ，可以得到积分方程

$$\begin{aligned} k^2 - \mu_F - T \ln(\rho_h(k)/\rho(k)) - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \ln(1 + \sigma(\Lambda)/\sigma_h(\Lambda)) d\Lambda &= 0 \\ \mu_F - \mu_B - T \ln(\sigma_h(\Lambda)/\sigma(\Lambda)) - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \ln(1 + \rho(k)/\rho_h(k)) dk &= 0 \end{aligned} \quad (6.18)$$

定义

$$\begin{aligned} \exp(\xi(k)/T) &= \rho_h(k)/\rho(k) \\ \exp(\varphi(\Lambda)/T) &= \sigma_h(\Lambda)/\sigma(\Lambda) \end{aligned} \quad (6.19)$$

我们得到了热力学 Bethe ansatz(TBA)方程

$$\begin{aligned} \xi(k) &= -\mu_F + k^2 - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) d\Lambda \\ \varphi(\Lambda) &= \mu_F - \mu_B - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \end{aligned} \quad (6.20)$$

利用(6.19)式，则约束条件(6.13)式变为

$$\begin{aligned}\rho(k)(1 + \exp(\xi(k)/T)) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ \sigma(\Lambda)(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \rho(k) dk\end{aligned}\quad (6.21)$$

密度函数 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 可以利用迭代的方法联合求解上面方程而获得数值解，详细过程见附录 C。当 T 、 c 、 μ_F 和 μ_B 被确定时，系统所有的热力学性质都可以得到，例如，压强、自由能和熵

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \quad (6.22)$$

$$F = -PL + M\mu_B + (N - M)\mu_F \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned}S/L &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) [(1 + \exp(\xi(k)/T)) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) + \xi(k)/T] dk \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) [(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) + \varphi(\Lambda)/T] d\Lambda\end{aligned}\quad (6.24)$$

当然系统的熵还可以通过热力学的一般公式 $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{L,N,M}$ 求得，同样得到系统的比

$$\text{热 } C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{L,N,M}。$$

第二节 局域密度近似和实验模拟

6.2.1 局域密度近似和数值过程

上面介绍的是均匀系统的热力学性质，下面我们讨论有外势的情况下空间密度的分布情况。当外势随空间变化非常平缓时，我们可以利用局域密度近似处理该系统。

众所周知，在同等条件下，如果系统的粒子数越多，那么系统的化学势越高，即化学势与粒子数成正比。在简谐势阱中的粒子分布区域内，粒子的密度大约和势的大小成反比。这儿，我们引进局域化学势，它和空间的位置有关，从上面的分析可见，局域化学势和势的大小成反比。局域密度近似可以表示为

$$\mu(x) = \mu - V(x) \quad (6.25)$$

其中 $\mu(x)$ 是局域化学势， μ 是势阱中间最低点的化学势 $\mu(0)$ ， $V(x)$ 是外势。同样，

玻色费米混合物中，我们可以对玻色子和费米子分别使用局域密度近似。

我们考虑一个真实的实验系统，原子的质量采用 ^{87}Rb 的质量，玻色费米混合物被囚禁在一个雪茄形状柱对称的简谐势阱中，轴向和径向的简谐频率分别为 $\omega_{\parallel}/2\pi = 8.5\text{Hz}$ 和 $\omega_{\perp}/2\pi = 3280\text{Hz}$ ，与实验参数[14]相同。根据公式 $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ，轴向和径向的特征长度分别是 $a_{\parallel} = 3.70\mu\text{m}$ 和 $a_{\perp} = 0.19\mu\text{m}$ ，我们发现轴向的特征长度大约是径向的20倍，我们可以认为在低温下这样的系统就是一个准一维系统。它满足径向频率远远大于轴向频率的要求($\omega_{\perp} \gg \omega_{\parallel}$)。

判断是不是准一维系统还要满足另一个要求：化学势满足 $\mu \ll \hbar\omega_{\perp}$ ，确保所有的粒子都呆在径向基态，而没有跃迁到激发态。化学势受温度、粒子间相互作用强度等因素的影响。这里我们采用的温度和径向能隙($\hbar\omega_{\perp}/k_B \approx 157\text{nK}$)在同一个数量级上，所以处在径向激发态上的原子不可忽略。我们需要在径向上对所有分立能级上的粒子分布求和，而轴向能隙($\hbar\omega_{\parallel}/k_B \approx 0.4\text{nK}$)如此小以致于我们可以通过局域密度近似获得在轴向连续变化的化学势 $\mu(x) = \mu - \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2 x^2$ 。

我们首先讨论径向基态上的原子在轴向的密度分布。当外势满足局域密度近似的条件时，通常用于处理均匀系统的TBA方程可以处理这种情况。束缚在空间上缓慢变化的外势中的玻色子和费米子的化学势分别满足

$$\mu_B(x) = \mu_B - \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2 x^2, \quad \mu_F(x) = \mu_F - \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2 x^2 \quad (6.26)$$

其中 μ_B 和 μ_F 是径向基态上的玻色子和费米子在简谐势中间位置的化学势。把上式中的 $\mu_B(x)$ 和 $\mu_F(x)$ 替换方程(6.20)中 μ_B 和 μ_F ，然后用数值迭代法求解方程(6.20)和(6.21)，我们可以得到密度分布函数 $\rho(x, k)$ 和 $\sigma(x, \Lambda)$ ，这些密度分布函数分别对 k 和 Λ 积分，我们可以得到径向基态的玻色子和费米子的轴向密度分布函数

$$n_B^{TBA} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(x, \Lambda) d\Lambda \quad (6.27)$$

$$n_F^{TBA} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, k) dk - \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(x, \Lambda) d\Lambda \quad (6.28)$$

在特定的温度和相互作用强度下，我们可以调整 μ_B 和 μ_F 的值而得到指定基态上的玻

色子和费米子的数目。

现在讨论径向激发态上的粒子在轴向的密度分布。这里径向基态上玻色子的化学势 $\mu_B < \hbar\omega_\perp$ ，而其径向第一激发态的化学势为 $\mu_B - \hbar\omega_\perp < 0$ ，我们可以认为粒子间的相互作用强度只影响径向基态的密度分布而径向激发态的分布可以用理想玻色气体描述。由于泡利不相容原理，任意费米子不可能重叠在一起，和玻色子相比，费米子更容易产生很大的化学势。这儿，我们假设费米子的化学势可以大于径向能隙，同时径向激发态上的费米子用理想的费米气体分布处理。径向激发态的兼并度是 $j+1$ ($j \geq 1$)，例如：第一激发态的兼并度是 2。我们同样利用局域密度近似处理径向激发态理想玻色子和理想费米子的局域化学势

$$\mu_B^j(x) = \mu_B(x) - j\hbar\omega_\perp, \quad \mu_F^j(x) = \mu_F(x) - j\hbar\omega \quad (6.29)$$

径向激发态上的密度分布函数是

$$n_B^j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu_B^j(x)\right)/k_B T\right] - 1} dk \quad (6.30)$$

$$n_F^j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\exp\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \mu_F^j(x)\right)/k_B T\right] + 1} dk \quad (6.31)$$

最后我们对径向基态和所有的激发态求和可以得到总的轴向线性密度

$$n_B(x) = n_B^{TBA}(x) + \sum_{j=1}^{\infty} (j+1)n_B^j(x) \quad (6.32)$$

$$n_F(x) = n_F^{TBA}(x) + \sum_{j=1}^{\infty} (j+1)n_F^j(x) \quad (6.33)$$

6.2.2 准一维玻色费米混合物的实验模拟

对于实验上可以实现的准一维系统，我们令玻色子和费米子的质量都等于 ^{87}Rb 的质量，三维的散射长度是 ^{87}Rb 的背景散射长度 $100a_b$ ，(a_b 是玻耳半径)。一维的玻色费米混合物最近在实验上得以实现，备受人们的关注[14,33]。实验学家更喜欢研究异核玻色费米混合物，例如： $^{87}\text{Rb} - ^{40}\text{K}$ ，因为他们之间的相互作用可以通过磁场来调节。还有一些玻色费米混合物中，玻色子和费米子的质量相差很小，例如： $^6\text{Li} - ^7\text{Li}$ 和 $^{86}\text{Rb} - ^{87}\text{Rb}$ 。这里考虑的质量相等的精确可解的模型可以看成对上述系

统的近似处理，也可以和其他的方法做比较。

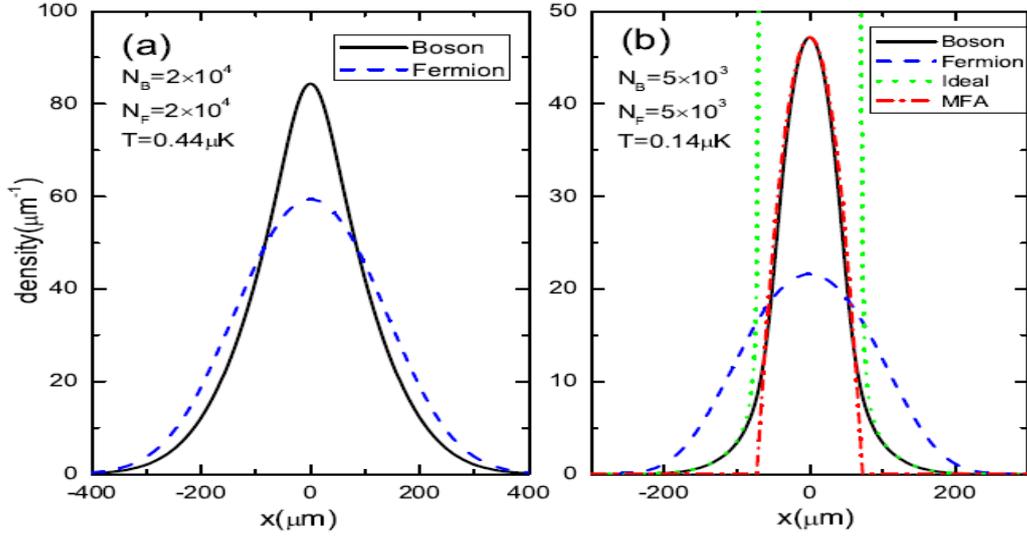


图-6.2 不同温度下的玻色子和费米子各自的密度分布。(a) $T=0.44 \mu\text{K}$ (b) $T=0.14 \mu\text{K}$ 。相互作用强度为 $c_0 = 0.30 \mu\text{m}$ 。绿色点线为理想玻色气体的密度分布，红色点杠线为在原点和精确解相同高度的准凝聚玻色分布。

我们首先考虑相互作用比较弱的情况。当三维的 s-波散射长度 a 远小于径向特征长度 a_{\perp} ，有效的一维的耦合强度可以通过描述 $c = 2m\omega_{\perp}a/\hbar$ 。我们用 c_0 标记 ^{87}Rb 的自然散射长度下的一维的耦合强度 $c_0 \approx 0.30 \mu\text{m}^{-1}$ 。图-6.2(a)和(b)给出了不同温度下玻色子和费米子的密度分布。这个图像在实验上可以通过吸收成像的方法获得。在高温($T=0.44 \mu\text{K}$)下，激发态上的粒子占很大的比例，对总的密度贡献很大，而基态上的粒子数比较少，因此来自 Yang-Yang 热力学的结果对总的密度影响不大。在低温($T=0.14 \mu\text{K}$)下，玻色子的分布会出现一个窄的尖峰，Yang-Yang 热力学的结果很明显，同时理想气体和准凝聚的理论是不成立的。

混合物中的相互作用强度可以通过所谓的束缚诱导共振来调节，也可以通过玻色费米 Feshbach 共振调节。图-6.3 给出了随着相互作用的变化，玻色子的密度变化情况。我们固定玻色子和费米子的化学势，随着相互作用强度的增加，玻色子的数目急剧的减少，而费米子没有发生明显变化。可以这样解释该现象：与玻色费米之间的相互作用相比，泡利不相容原理占据着主导地位。

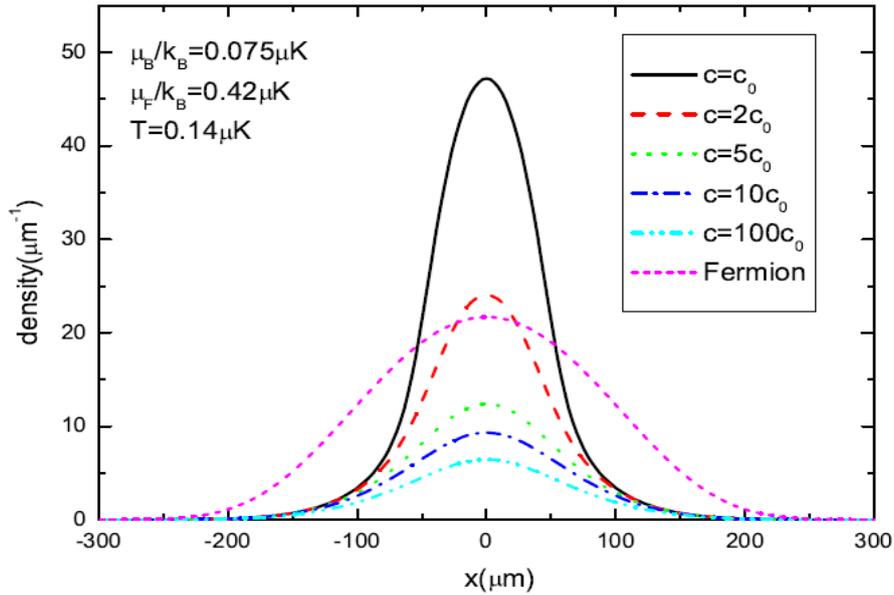


图-6.3 不同的相互作用强度下的玻色子和费米子各自的密度分布。 $c_0 = 0.30 \mu\text{m}$ 。

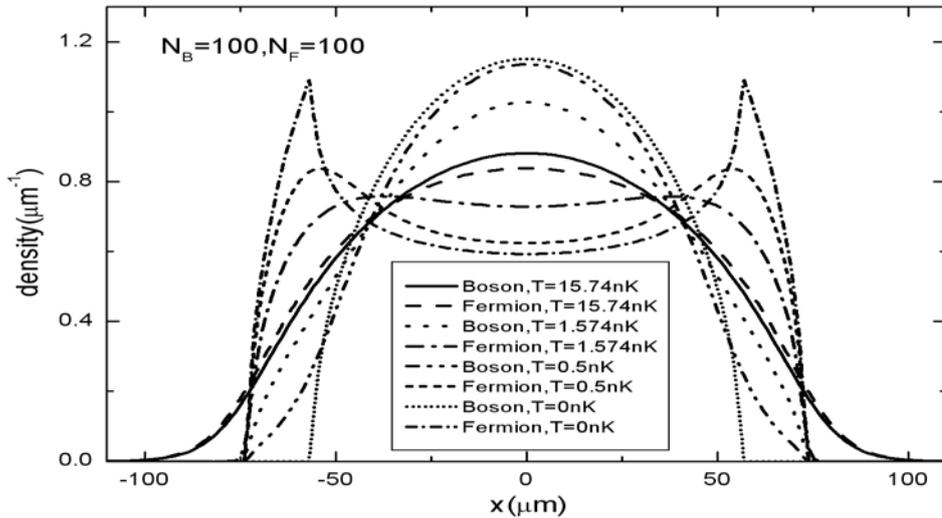


图-6.4 强相互作用下不同的温度的玻色子和费米子各自的密度分布。低温下出现相分离。绝对零度下的密度分布由基态的 Bethe ansatz 方程得到。

Imambekov and Demler[72]预言了在低温和强相互作用下的玻色费米相分离：随着相互作用的变化，玻色和费米的相对密度发生变化，中间的费米子受到很大的排斥而向两边移动，中间的费米密度峰变为谷底，两边的费米密度有所增加。他们首先得到强相互作用下的磁振子能谱，然后利用局域密度近似和能谱获得密度分布。

然而在图-6.3 中，即使在强相互作用下，我们也没有观察到相分离。很明显，温度湮灭了量子多体效应。为了观察到相分离，我们需要继续冷却原子到更低的温度。图-6.4 给出了强相互作用($c = 100\mu\text{m}^{-1}$)下不同温度玻色子和费米子的密度变化，同样发现了相分离。在 $n\text{K}$ 量级上出现了非常明显的相分离，但是在实验上很难被实现。绝对温度下的相分离是通过基态的 Bethe ansatz 方程得到的。

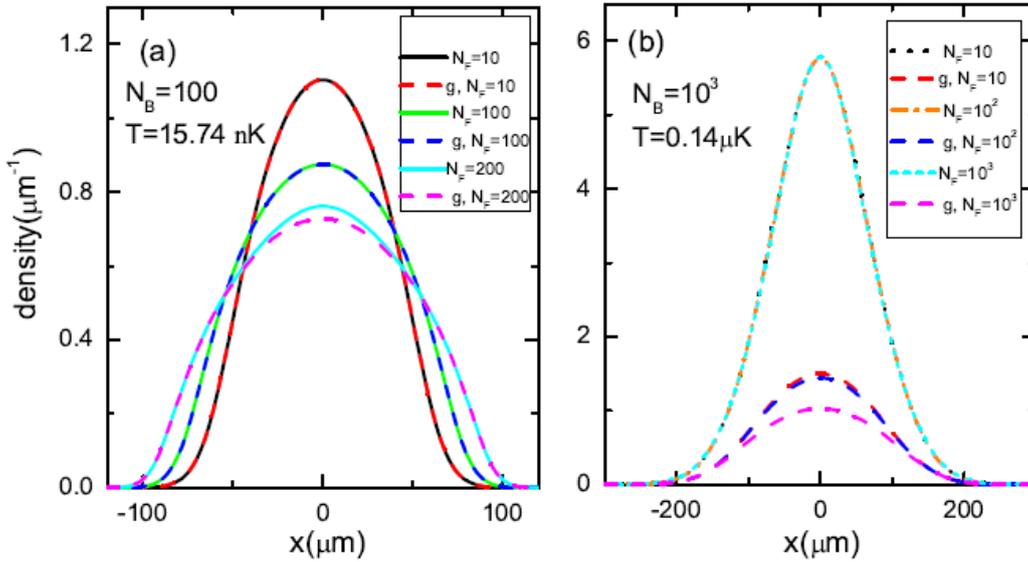


图-6.5 玻色子的总数目保持不变，玻色子的密度分布对费米子数目的依赖。粒子之间是强相互作用强度 $c = 100\mu\text{m}$ 。(a) $T=15.74\text{ nK}$ (b) $T=0.14\mu\text{K}$

最后，我们还研究了费米子对玻色子密度分布的影响。在弱相互作用的情况下，费米子对玻色子的分布影响不明显。同样在高温下，这种影响也不明显。只有低温强相互作用下，随着费米子数量的增加，玻色子的密度分布趋于平坦，如图-6.5。

第三节 两分量玻色气体的热力学

前面两节讨论了玻色费米混合物的性质，本节首先介绍顾世健有关两分量玻色气体的热力学 Bethe ansatz 方法[82, 101]，然后我们根据其热力学 Bethe ansatz 方程对其热力学性质做了一些数值计算。两分量玻色气体一般指处于两个不同超精细内部态上的玻色子，例如：实验[81]中的 ^{87}Rb 的两个内部态为 $|F=1, m=-1\rangle$ 和 $|F=2, m=1\rangle$ ，其中 F 为电子和原子核总的角动量， m 为其某一方向上的分量。实

验上早已实现了两分量的玻色气体[81,97],同时理论上也对其很多性质做了详细的研究,例如:基态能量[98],激发特性和相分离[99],自旋波[100]等。其中两分量玻色气体的 Bethe ansatz 方法也得到人们的详细研究[82]。

存在接触碰撞相互作用的两分量玻色系统的哈密顿量是:

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) - 2\Omega \sum_{i=1}^N S_i^z \\ &= -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) - \Omega(N - 2M) \end{aligned} \quad (6.34)$$

其中第一项表示动能,第二项表示相互作用项,第三项表示能够区分自旋- \uparrow 和自旋- \downarrow 的类似塞曼能的项, N 是总的粒子个数, M 是自旋- \downarrow 的粒子的数目, c 和 Ω 分别表示粒子间的相互作用强度和拉比磁场的耦合强度。利用 Bethe ansatz 方法,波函数满足周期性边界条件和粒子交换对称性而得到第四章的最后部分提到的 Bethe ansatz 方程[50,101]

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j - ic/2}{k_i - \Lambda_j + ic/2} \prod_{j=1(j \neq i)}^N \frac{k_i - k_j + ic}{k_i - k_j - ic}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (6.35)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic/2}{\Lambda_i - k_j + ic/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (6.36)$$

我们只讨论 $c > 0$ 情况,当系统处于基态的时候,所有的 k_i, Λ_j 的解都是实数;当系统不处于基态,即温度不为零时,所有的 k_i 都是实数,但 Λ_j 不一定是实数,有可能是复数,与其他的 Λ_l 形成“束缚态”,形成了一根弦。长度为 n 的弦假设为

$$\Lambda_a^{nj} = \lambda_a^n + (n+1-2j)iu + O(\exp(-\delta N)), \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (6.37)$$

其中, $u = c/2$, 右边第一项 λ_a^n 表示弦的实部,最后一项为一小量,一般都忽略掉。

利用弦假设,并对上面的 Bethe ansatz 方程取对数得到分离的 Bethe ansatz 方程

$$\begin{aligned} 2\pi l_j &= k_j L + 2 \sum_l \Theta_2(k_j - k_l) - \sum_{an} \Theta_n(k_j - \lambda_a^n), \quad j = 1, 2, \dots, N \\ 2\pi J_a^n &= 2 \sum_l \Theta_n(\lambda_a^n - k_l) - 2 \sum_{bl, t \neq 0} A_{nl} \Theta_t(\lambda_a^n - \lambda_b^l), \quad \forall a, n \end{aligned} \quad (6.38)$$

其中 $\Theta_n(x) = \arctan(x/nu)$,

$$A_{nl} = \begin{cases} 1, & \text{若 } t = n+l, |n-l| \\ 2, & \text{若 } t = n+l-2, n+l-4, \dots, |n-l|+4, |n-l|+2 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

I_j 和 J_a^n 分别表示核的准波矢 k_j 和自旋的谱参数 λ_a^n 的量子数，只能是整数或半整数。为了保证波函数的线性独立， $\{I\}$ 中任何两个量子数都不能相等，同样， $\{J^n\}$ 中的任何两个量子数也不能相等。在有限温度下，任意的一个整数或半整数(量子数)有可能在 $\{I\}$ 或 $\{J^n\}$ 中，也有可能不在 $\{I\}$ 或 $\{J^n\}$ 中。我们把前者叫做根，后者叫做空穴。在热力学极限下， k_j 的分布变为密度分布，因此有必要引入根的密度分布函数和空穴的密度分布函数。定义 $\rho(k)$ 和 $\rho_h(k)$ 分别为动量密度分布函数和相应的空穴密度分布函数，同样定义 $\sigma^n(\lambda)$ 和 $\sigma_h^n(\lambda)$ 为自旋的谱参数 λ_a^n 的根的密度分布和相应的空穴密度分布。因此它们可以写成

$$\begin{aligned} \rho(k) + \rho_h(k) &= (1/L)dI(k)/dk \\ \sigma^n(\lambda) + \sigma_h^n(\lambda) &= (1/L)dJ(\lambda)/d\lambda \end{aligned} \quad (6.39)$$

根据 Yang-Yang 热力学方程的推导方法，两分量玻色气体的热力学方程如下[82]:

$$\begin{aligned} \xi(k) &= k^2 - \Omega - \mu - T \int_{-\infty}^{\infty} K_2(k, k') \ln(1 + \exp(-\xi(k')/T)) dk' \\ &\quad - T \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} K_n(k, \lambda) \ln(1 + \exp(-\zeta_n(\lambda)/T)) d\lambda \end{aligned} \quad (6.40)$$

$$\begin{aligned} \zeta_n(\lambda) &= 2n\Omega + T \int_{-\infty}^{\infty} K_n(\lambda, k) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \\ &\quad + T \sum_{m, t \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} A_{nmt} K_t(\lambda, \lambda') \ln(1 + \exp(-\zeta_m(\lambda')/T)) d\lambda', \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.41)$$

其中 $K_n(x) = nc/2\pi(n^2c^2/4 + x^2)$, $\xi(k) = T \ln(\rho_h(k)/\rho(k))$,

$\zeta_n(\lambda) = T \ln(\sigma_h^n(\lambda)/\sigma^n(\lambda))$, 同时, $\rho(k)$ 和 $\sigma^n(\lambda)$ 满足

$$\rho(k) = \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \left[\frac{1}{2\pi} + \int_{-\infty}^{\infty} K_2(k, k') \rho(k') dk' - \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} K_n(k, \lambda) \sigma^n(\lambda) d\lambda \right] \quad (6.42)$$

$$\sigma^n(\lambda) = \frac{1}{1 + \exp(\zeta_n(\lambda)/T)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} K_n(\lambda, k) \rho(k) dk + \sum_{m, t \neq 0} \int_{-\infty}^{\infty} A_{nmt} K_t(\lambda, \lambda') \sigma^m(\lambda') d\lambda' \right], \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.43)$$

通过傅立叶变换, (6.41)和(6.43)可以化简为另一种形式[82]

$$\begin{aligned}\zeta_1(\lambda) &= \frac{T}{2c} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\cosh(\pi(\lambda-k)/c)} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \\ &+ \frac{T}{2c} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\cosh(\pi(\lambda-\lambda')/c)} \ln(1 + \exp(\zeta_2(\lambda')/T)) d\lambda' \\ \zeta_n(\lambda) &= \frac{T}{2c} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln[(1 + \exp(\zeta_{n+1}(\lambda')/T))(1 + \exp(\zeta_{n-1}(\lambda')/T))]}{\cosh(\pi(\lambda-\lambda')/c)} d\lambda', n=1,2,\dots\end{aligned}\quad (6.44)$$

和

$$\begin{aligned}\sigma^1(\lambda) &= \frac{1}{2c(1 + \exp(\zeta_1(\lambda)/T))} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(k)}{\cosh(\pi(\lambda-k)/c)} dk + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_h^2(\lambda')}{\cosh(\pi(\lambda-\lambda')/c)} d\lambda' \right] \\ \sigma^n(\lambda) &= \frac{1}{2c(1 + \exp(\zeta_n(\lambda)/T))} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\cosh(\pi(\lambda-\lambda')/c)} (\sigma_h^{n-1}(\lambda') + \sigma_h^{n+1}(\lambda')) d\lambda', n=1,2,\dots\end{aligned}\quad (6.45)$$

同时 $\zeta_n(\lambda)$ 满足一个极限条件

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [\zeta_n(\lambda)/n] = 2\Omega \quad (6.46)$$

系统的粒子数、自旋- \downarrow 的粒子的数目、能量、压强、自由能分别为

$$N/L = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk \quad (6.47)$$

$$M/L = \sum_n n \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^n(\lambda) d\lambda \quad (6.48)$$

$$E/L = \int_{-\infty}^{\infty} k^2 \rho(k) dk - \Omega(N - 2M)/L = \int_{-\infty}^{\infty} (k^2 - \Omega) \rho(k) dk + \sum_n 2n\Omega \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^n(\lambda) d\lambda \quad (6.49)$$

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk, \quad (6.50)$$

$$F = -PL + N\mu \quad (6.51)$$

在高温情况($T \rightarrow \infty$)下, $\zeta_n(\lambda)$ 与 λ 无关, 可得

$$\zeta_n(\lambda) = T \ln \left[\left(\frac{\sinh((n+1)\Omega/T)}{\sinh(\Omega/T)} \right)^2 - 1 \right] \quad (6.52)$$

一般情况下, 积分方程组(6.42)和(6.44)没有解析解, 但我们可以通过迭代的方法求出这两个积分方程组的数值解。由于积分方程组(6.44)中有无限个积分方程, 而数值求解只能计算有限的方程, 因此, 我们需要对方程进行截断处理, 将方程的个数变为有限, 即将 $\zeta_n(\lambda)$ 中的 n 取到最大值 n_0 , 而不在考虑 n_0 以后的 $\zeta_n(\lambda)$ 对方程的影响。从方程的数值分析的结果来看, 当 n 很大时, 第 n 个弦上的粒子数几乎为零, 说

明这种截断处理是可行的。

我们简单的介绍解积分方程组(6.42)和(6.44)的数值迭代过程。首先, 选定 T 、 c 、 μ 、 Ω 的值, 并且 $\xi(k)$ 被赋予初始值 $\xi(k) = k^2 - \Omega - \mu$, 且 $\zeta_n(\lambda)$ 的初始值满足(6.52)式; 其次, 将这些初始值代入方程组(6.42)和(6.44)的右边, 在方程组的左边得到新的函数 $\xi(k)$ 和 $\zeta_n(\lambda)$, 从而不断的更新这些函数; 最后, 当相邻计算的函数的差别非常小时, 这些收敛的函数可以认为是积分方程组(6.42)和(6.44)的解。将这些解代入积分方程组(6.43)和(6.45), 我们利用同样的迭代方法解这些方程组, 便可得密度分布函数 $\rho(k)$ 和 $\sigma^n(\lambda)$, 从而利用公式(6.47)- (6.51)计算有关的物理量。另外, 我们可以调节化学势 μ 的大小, 得到指定的 N/L 。

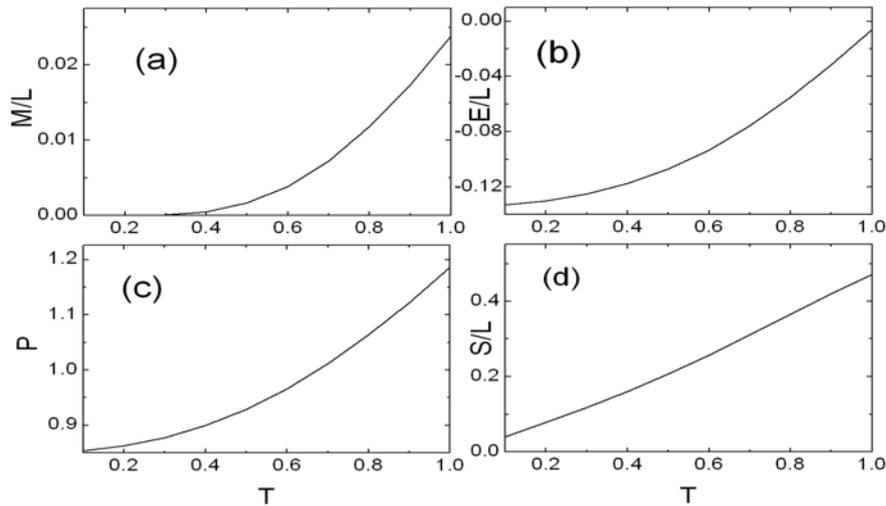


图-6.6 单位长度内自旋- \downarrow 的粒子数(a)、能量(b)、熵(d)和压强(c)随着温度的改变而改变。

$N/L = 1, c = 0.5, \Omega = 0.5$ 。

在粒子数密度、相互作用强度、磁场的耦合强度不变的提前下, 图-6.6描述了各种物理量与温度变化的关系。温度接近于零的时候, 自旋- \downarrow 的粒子数也趋向于零, 所有的粒子自旋都为 \uparrow , 系统处在铁磁态上; 随着温度的升高, 自旋- \downarrow 的粒子数会增加; 能量, 压强和熵都是随着温度的升高而增加, 和单分量的情况相同。

在粒子数密度、相互作用强度、温度不变的提前下, 图-6.7描述了各种热力学量

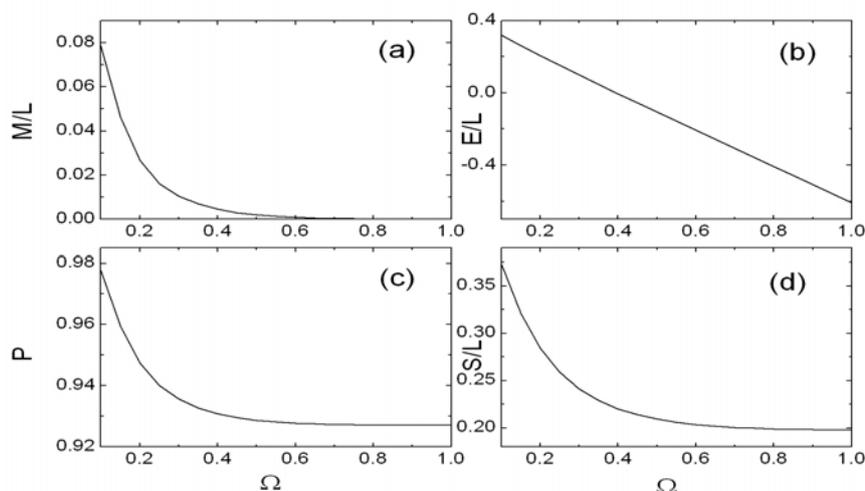


图-6.7 单位长度内自旋- \downarrow 的粒子数(a)、能量(b)、熵(d)和压强(c)随着磁场耦合强度的改变而改变。

$$N/L = 1, c = 0.5, T = 0.5。$$

与磁场耦合强度变化的关系。随着磁场耦合强度的增加，自旋- \downarrow 的粒子数逐渐减少，最终趋向于零，所有的粒子自旋都为 \uparrow ，系统处在铁磁态上；能量，压强和熵都是随着磁场耦合强度的增加而减少。

第四节 小结

我们研究了简谐势中准一维的质量和粒子间相互作用强度都相等的玻色费米混合物在低温下的热力学行为。联合热力学 Bethe ansatz 方程和局域密度近似，我们在轴向和径向采用不同的策略，数值计算了玻色子和费米子的空间密度分布，重点研究了费米子的数目和粒子间相互作用强度对玻色子的密度分布的影响，以及出现玻色费米相分离的条件，为相关的实验提供比较的对象。另外，我们介绍了两分量玻色气体的热力学性质。

结论与展望

无论在实验方面还是在理论方面，玻色爱因斯坦凝聚都是当前研究的热点，并涉及到多个基础学科，例如：原子分子物理，凝聚态物理，光学等。我们在一维量子气体领域主要做了两个方面的工作，研究了双阱中的玻色气体的基态性质和玻色费米混合物的热力学行为。

我们对中间带有 δ 势垒的无限深势阱中的玻色气体的基态性质进行了详细的研究。基于玻色与费米子的对应关系，我们构建了 Tonks-Girardeau 气体的基态波函数，发现了在势垒很高的情况下，标记粒子关联的单体密度矩阵的非对角元对偶数个的粒子为零，而对奇数个的粒子为有限值；其次，用精确对角化方法计算了在任意势垒高度和原子间相互作用强度下系统基态的密度分布，占据数分布，动量分布等。由于势垒两边的粒子的干涉而产生的动量次峰随着势垒的升高而增大，随着原子间相互作用强度的增大而减小。

我们研究了简谐势中准一维的质量和粒子间相互作用强度都相等的玻色费米混合物在低温下的热力学行为。联合热力学 Bethe ansatz 方程和局域密度近似，我们在轴向和径向采用不同的策略，数值计算了玻色子和费米子的空间密度分布，重点研究了费米子的数目和粒子间相互作用强度对玻色子的密度分布的影响，以及出现玻色费米相分离的条件，为相关的实验提供比较的对象。

目前玻色子的热力学 Bethe ansatz 方程已经被实验证实，我们相信，两分量玻色气体和玻色费米混合物的热力学 Bethe ansatz 方程在不久的将来也会得到实验的验证。在一维量子气体的基态和热力学性质方面，理论和实验可望互相推动，理论物理学家很多玩具模型可以在冷原子物理的实验中得到验证。

附录 A: Lanczos 方法

Lanczos 方法是 Cornelius Lanczos[83]在 1950 年发现的用于求解大型稀疏矩阵的本征值和本征矢量的一种迭代方法，是幂方法的延伸。它主要的思想是将大型稀疏矩阵转换成对称三对角矩阵同时不改变矩阵的稀疏性，不需要大量的存储空间。假设 A 是一个 $m \times m$ 的大型稀疏矩阵，通过一个正交矩阵 V_m ，可使 A 变为一个对称三对角矩阵

$$T_m = V_m^* A V_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

正交矩阵 $V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ ，其中 v_j 是一列矢量。

Paige[84]和其他的合作者阐明将矩阵 A 转换为对称三对角矩阵的方法在数值运算中的稳定算法。将任意的一个模为 1 的列矢量赋给 v_1 ，同时定义 v_0 是一个元素全为零的列矢量和 $\beta_1 = 0$ ，通过下面的迭代过程，可以计算出所有的 α_j ， β_j 和 v_j 。迭代过程为

$$\begin{aligned} w_j &= A v_j - \beta_j v_{j-1} \\ \alpha_j &= (w_j, v_j) \\ w_j &= w_j - \alpha_j v_j \\ \beta_{j+1} &= \|w_j\| \\ v_{j+1} &= w_j / \beta_{j+1} \\ j &= 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

其中， (x, y) 表示矢量 x 与矢量 y 的点积。 $\|x\|$ 表示矢量 x 的模。

我们可以利用 Lanczos 迭代来求实对称矩阵 A 的某些特征值和对应的特征向量，求解过程归纳为如下四步：

第一步，利用 Lanczos 迭代(A.2)产生一系列对称三对角矩阵 T_j ， $j = 1, 2, \dots, m$ ；

第二步，对某一 $k \leq m$ ，计算 T_k 的部分特征值或全部特征值 $\lambda_i^{(k)}$ ；

第三步，选择这些特征值中的某些 $\lambda_i^{(k)}$ 作为 A 的近似特征值 $\lambda_i^{(k)}$ 。

第四步， T_k 的特征值 $\lambda_i^{(k)}$ 对应着特征向量 $u_i^{(k)}$ ，那么 A 的近似特征值 $\lambda_i^{(k)}$ 对应的特征向量为 $y_i = V_k u_i^{(k)}$ 。

稳定性对数值计算是至关重要的。理论上 v_1, v_2, \dots, v_m 构成一组正交的基，得到的本征值和本征矢量是原来的矩阵 A 的非常好的近似。然而，在实际的计算过程中，计算机带来的舍入误差是不可避免的，有时正交性很快消失，对称三对角矩阵的本征值就不能作为原始矩阵 A 的近似本征值，这样 Lanczos 方法是不稳定的。我们必须找到这些伪本征值，将其剔除。我们从三个方面防止 Lanczos 方法的不稳定性：

1. 阻止正交性的损失；
2. 基矢产生后，恢复其正交性；
3. 识别好的和伪的本征值，去掉伪的本征值。

人们对 Lanczos 方法做了很多改进，例如矢量 v_j 被替换为又高又窄的小矩阵，这样的 Lanczos 方法被称为块 Lanczos 方法，计算过程中需要较大的存储空间，但能大大提高计算速度。

还有一种改进为重新启动的 Lanczos 方法，即，在计算对称三对角矩阵的过程中，经过一定次数的迭代，产生一个比较小的对称三对角矩阵，计算其本征值，然后重新迭代计算新的大一点对称三对角矩阵，求其本征值，与上一次的比较，作误差分析。如果误差太大，那么再计算再大一点的对称三对角矩阵，直到两次计算的本征值误差非常小的时候，对称三对角矩阵的本征值就可以作为原来矩阵 A 的近似本征值，接着计算相应的本征向量。而重新启动的方式有很多种，例如：隐式重新启动 Lanczos 方法，重新启动 Lanczos 双对角化方法，Thick-Restart Lanczos 方法，并且它们都做成了软件包。

现在 Lanczos 方法是解决大型稀疏矩阵对角化问题的一种常用方法，可以处理很多物理问题，教科书[85,86]和参考文献[87-89]中有非常详细的总结与应用。

附录 B: 利用迭代方法数值求玻色子和费米子的粒子数

首先我们需要计算 TBA 方程(6.20), 其中, T , c , μ_F 和 μ_B 是已知的参数, $\xi(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 是我们要求解的分布函数。这是一对非线性方程组, 没有解析的解, 但我们可以通过数值的方法计算出其结果。这儿, 我们利用了迭代的方法计算 $\xi(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 。计算过程可以分为以下几步。

- (1) 将 T , c , μ_F 和 μ_B 赋值, 将变量 k 和 Λ 离散化。
- (2) 给出迭代的初始函数 $\xi_0(k) = -\mu_F + k^2$, $\varphi_0(\Lambda) = \mu_F - \mu_B$ 。
- (3) 将初始函数 $\xi_0(k), \varphi_0(\Lambda)$ 代入非线性方程组(6.20)的右边

$$\begin{aligned}\xi_1(k) &= -\mu_F + k^2 - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \ln(1 + \exp(-\varphi_0(\Lambda)/T)) d\Lambda \\ \varphi_1(\Lambda) &= \mu_F - \mu_B - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \ln(1 + \exp(-\xi_0(k)/T)) dk\end{aligned}\tag{B.1}$$

得到新的 $\xi_1(k), \varphi_1(\Lambda)$ 。在数值计算中, 积分需要变为分离的值的求和, 一般采用 Simpson 公式做数值积分。

- (4) 比较 $\xi_1(k), \varphi_1(\Lambda)$ 和 $\xi_0(k), \varphi_0(\Lambda)$, 计算它们的均方差, 并将 $\xi_1(k), \varphi_1(\Lambda)$ 的值赋给 $\xi_0(k), \varphi_0(\Lambda)$ 。
- (5) 若均方差大于指定的一个非常小的量, 例如: 10^{-16} , 重复(3)(4)两步, 若均方差小于指定的那个小量, 就可以跳出这个迭代过程。这时得到的 $\xi_1(k), \varphi_1(\Lambda)$ 就是我们想要的动量密度分布和谱参数 Λ 的密度分布 $\xi(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 。

接下来我们需要计算线性方程组(6.21)。计算线性方程可以用线性代数的方法求解, 也可以用迭代的方法计算。线性代数的方法, 将变量离散化, 积分变为求和, 方程便写成矩阵的形式, 然后将矩阵对角化, 就可以得到想要的函数。我们仍采用迭代的方法计算。上面的方程可以写成

$$\begin{aligned}\rho(k) &= R(k) \times \left(1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda \right) \\ \sigma(\Lambda) &= Q(\Lambda) \times \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \rho(k) dk\end{aligned}\tag{B.2}$$

其中 $R(k) = \frac{1}{(1 + \exp(\xi(k)/T))} \frac{1}{2\pi}$, $Q(\Lambda) = \frac{1}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))} \frac{1}{2\pi}$ 。通过前面的 TBA 方程得到了 $\xi(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ ，可以进一步得到 $R(k), Q(\Lambda)$ 的值。给出 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 的初始分布 $\rho_0(k) = R(k), \sigma_0(\Lambda) = 0$ ，利用上面介绍的详细的迭代过程，同样可以计算出符合上面方程的 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 。

最终，我们可以得到 $N/L = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk$ 和 $M/L = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) d\Lambda$ ，则单位长度内玻色子和费米子的个数分别为 M/L ， $N/L - M/L$ 。

当相互作用强度 c 非常小时，被积函数只分布在一个非常小的区域。为了保证积分的正确性，最好对被积函数作插值处理，化为更多的份数，使数值求和的值更接近真实值。

另外，我们可以改变 μ_F 和 μ_B 的大小，得到指定的玻色子和费米子的数目。

附录 C: 证明 μ_F 和 μ_B 是玻色子和费米子的化学势。

定义 $D = N/L$ 和 $H = M/L$ ，在 TBA 方程(6.20)的第一式两边分别乘以 $\rho(k)D^{-1}$ ，并对 k 在整个空间积分，得到

$$\mu_F = D^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (k^2 - \xi(k)) \rho(k) dk - \frac{T}{2\pi D} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) \rho(k) d\Lambda dk \quad (C.1)$$

利用等式(6.13)的第一式，上式变为

$$\frac{\mu_F N}{L} = \int_{-\infty}^{\infty} (k^2 - \xi(k)) \rho(k) dk - T \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) d\Lambda \quad (C.2)$$

在 TBA 方程(6.20)的第二式两边乘以 $\sigma(\Lambda)H^{-1}$ ，并对 Λ 在整个空间积分得

$$-(\mu_F - \mu_B) = -H^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) \varphi(\Lambda) d\Lambda - \frac{T}{2\pi H} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) K(\Lambda, k) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) d\Lambda dk \quad (C.3)$$

又因为等式(6.13)中的第二式，上式变为

$$\begin{aligned} -(\mu_F - \mu_B)H &= -\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) \varphi(\Lambda) d\Lambda - T \int_{-\infty}^{\infty} (\rho(k) + \rho_h(k)) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \\ &+ \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \end{aligned} \quad (C.4)$$

系统单位长度的自由能为

$$\begin{aligned} F/L &= E/L - TS/L \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (k^2 - \xi(k)) \rho(k) dk - T \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) d\Lambda \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) \varphi(\Lambda) d\Lambda - T \int_{-\infty}^{\infty} (\rho(k) + \rho_h(k)) \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \end{aligned} \quad (C.5)$$

利用上面的公式

$$F/L = \mu_F \times \frac{(N-M)}{L} + \mu_B \times \frac{M}{L} - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \quad (C.6)$$

根据普遍适用的热力学公式

$$F = -PL + \mu_F(N-M) + \mu_B M \quad (C.7)$$

如果我们能够证明压强 $P = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk$ ，那么 μ_F 和 μ_B 分别是费米子和玻色子的化学势。

现在证明关于压强的这个表达式。

$$\begin{aligned}
 P = -\left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_T &= -(N-M)\frac{\partial \mu_F}{\partial L} - M\frac{\partial \mu_B}{\partial L} + \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \\
 &- \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial \mu_F} dk \frac{\partial \mu_F}{\partial L} - \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial \mu_B} dk \frac{\partial \mu_B}{\partial L}
 \end{aligned} \quad (C.8)$$

定义 $A = \mu_F, B = \mu_B - \mu_F$, 由 TBA 方程分别对 A, B 求导数, 可得

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \xi(k)}{\partial A} &= -1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial A} d\Lambda \\
 \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial A} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \frac{1}{1 + \exp(-\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial A} dk
 \end{aligned} \quad (C.9)$$

和

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial B} d\Lambda \\
 \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial B} &= -1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \frac{1}{1 + \exp(-\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} dk
 \end{aligned} \quad (C.10)$$

上面的两式分别合并得

$$\frac{\partial \xi(k)}{\partial A} = -1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k') \frac{1}{1 + \exp(-\xi(k')/T)} \frac{\partial \xi(k')}{\partial A} dk' d\Lambda \quad (C.11)$$

$$\frac{\partial \xi(k)}{\partial B} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \left(-1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k') \frac{1}{1 + \exp(-\xi(k')/T)} \frac{\partial \xi(k')}{\partial B} dk' \right) d\Lambda \quad (C.12)$$

同时由线性方程组可得

$$\begin{aligned}
 2\pi\rho(k)(1 + \exp(\xi(k)/T)) &= 1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda)\sigma(\Lambda)d\Lambda \\
 &= 1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k')\rho(k')dk' d\Lambda
 \end{aligned} \quad (C.13)$$

$$\begin{aligned}
 2\pi\sigma(\Lambda)(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) &= \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k)\rho(k)dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \left(1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda')\sigma(\Lambda')d\Lambda' \right) dk
 \end{aligned} \quad (C.14)$$

比较(C.11)和(C.13), 我们得到

$$-\frac{\partial \xi(k)}{\partial A} = 2\pi\rho(k)(1 + \exp(\xi(k)/T)) \quad (C.15)$$

进而得

$$-\frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial A} dk = L \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk = N \quad (\text{C.16})$$

对公式(C.12)两边分别乘以 $-\frac{1}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)}$ ，并对 k 在全空间积分得

$$\begin{aligned} -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} dk &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(k, \Lambda)}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} d\Lambda dk \\ -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(k, \Lambda)}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{K(\Lambda, k')}{1 + \exp(-\xi(k')/T)} \frac{\partial \xi(k')}{\partial B} dk' d\Lambda dk & \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

对等式(C.14)两边分别乘以 $\frac{1}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)}$ ，并对 Λ 在空间积分得

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) d\Lambda &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\Lambda, k) \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} dk d\Lambda \\ + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{K(\Lambda, k)}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \int_{-\infty}^{\infty} K(k, \Lambda') \sigma(\Lambda') d\Lambda' dk d\Lambda & \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

比较上面两式得

$$-\frac{1}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} = \sigma(k) \quad (\text{C.19})$$

因此得到

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{L}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\Lambda) L d\Lambda = M \quad (\text{C.20})$$

又因为 $\mu_B = A + B, \mu_F = A$ ，所以

$$\frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial \mu_F} dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \left(\frac{\partial \xi(k)}{\partial A} - \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} \right) dk = -N + M \quad (\text{C.21})$$

$$\frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial \mu_B} dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp(\xi(k)/T)} \frac{\partial \xi(k)}{\partial B} dk = -M \quad (\text{C.22})$$

将上面两式代入压强的公式(C.8)，就可以证明

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + \exp(-\xi(k)/T)) dk \quad (\text{C.23})$$

那么 μ_F 和 μ_B 分别是费米子和玻色子的化学势。

参考文献

- [1] S. N. Bose, *Z Phys.* (1924) **26**,178.
- [2] A. Einstein, *Sitzungsber, Kgl. Preuss, Akad.Wiss* (1924) **261**, 3.
- [3] F. London, *Nature* (1938) **141**, 643; *Phys. Rev.* (1938) **54**, 947.
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* (1995) **269**,198.
- [5] 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.
- [6] H. T. C. Stoof, M. Houbiers, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* (1996) **76**, 10.
- [7] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* (2000) **85**, 1795.
- [8] M. Greiner, M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* (2002) **415**, 39.
- [9] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **81**, 938; V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* (2001) **86**, 5413.
- [10] N. J. van Druten and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1997) **79**, 549; A. Gorlitz J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkature, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (2001) **87**, 130402.
- [11] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* (2004) **305**, 1125.
- [12] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature(London)* (2004) **429**, 277.
- [13] W. Hänsel, P. Hommelhoff, T. W. Hänsch and Reichel, *Nature(London)* (2001) **413**, 498.
- [14] A. H. van Amerongen, J. J. P. van Es, P. Wicke, K. V. Kheruntsyan, and N. J. van Druten, *Phys. Rev. Lett.* (2008) **100**, 090402.
- [15] B. DeMarco and D. S. Jin, *Science* (1999) **285**, 1703.
- [16] F. Schreck, G. Ferrari, K. L. Corwin, J. Cubizolles, L. Khaykovich, M.-O. Mewes, and C. Salomon, *Phys. Rev. A* (2001) **64**, 011402.

- [17] A. G. Truscott, A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, R. G. Hulet, *Science* (2001) **291**, 2570.
- [18] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* (2001) **87**, 080403.
- [19] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Science* (1997) **275**, 637.
- [20] I. Bloch, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Nature* (2000) **403**, 166.
- [21] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* (1999) **83**, 2498.
- [22] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin, *Nature* (2003) **426**, 537.
- [23] E. P. Gross, *Nuovo Cimento, Suppl.* (1961) **20**, 454.
- [24] L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* (1961) **13**, 451.
- [25] L. Tonks, *Phys. Rev.* (1936) **50**, 955.
- [26] M. Girardeau, *J. Math. Phys.* (1960) **1**, 516.
- [27] E. H. Lieb and W. Liniger, *Phys. Rev.* (1963) **130**, 1605; E. H. Lieb, *ibid* (1963) **139**, 1616.
- [28] M. Gaudin, *Phys. Rev. A* (1971) **4**, 386.
- [29] C. N. Yang and C. P. Yang, *J. Math. Phys.* (1969) **10**, 1115.
- [30] M. L. Chiofalo, S. Succi, and M. P. Tosi, *Phys. Rev. E* (2000) **62**, 7438.
- [31] A. Aftalion and Q. Du, *Phys. Rev. A* (2001) **64**, 063603.
- [32] K. Mølmer, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **80**, 1804.
- [33] C. Ospelkaus and S. Ospelkaus, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* (2008) **41**, 203001.
- [34] M. D. Girardeau, E. M. Wright, and J. M. Triscari, *Phys. Rev. A* (2001) **63**, 033601.
- [35] A. Minguzzi, P. Vignolo, and M. P. Tosi, *Phys. Lett. A* (2002) **294**, 222.
- [36] M. Olshanii and V. Dunjko, *Phys. Rev. Lett.* (2003) **91**, 090401.
- [37] H. G. Vaidyah and C. A. Tracy, *Phys. Rev. Lett.* (1978) **42**, 3.
- [38] Y. Lin and B. Wu, *Phys. Rev. A* (2007) **75**, 023613.
- [39] B. -B. Wei, S. J. Gu and H. -Q. Lin, arXiv: 0812.1277.
- [40] R. Pezer and H. Buljan, *Phys. Rev. Lett.* (2007) **98**, 240403.

- [41] M. D. Girardeau and E. M. Wright, Phys. Rev. Lett. (2005) **95**, 010406.
- [42] S. A. Bender, K. D. Erker, and B. E. Grange, Phys. Rev. Lett. (2005) **95**, 230404.
- [43] G. E. Astrakharchik and S. Giorgini, Phys. Rev. A (2003) **68**, 031602.
- [44] M. D. Girardeau and A. Minguzzi, Phys. Rev. Lett. (2007) **99**, 230402.
- [45] B. Fang, P. Vignolo, C. Miniatura, and A. Minguzzi, Phys. Rev. A (2009) **79**, 023623.
- [46] H. A. Bethe, Z. Phys. (1931) **71**, 205.
- [47] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. A (1938) **26**, 1.
- [48] J. B. McGuire, J. Math. Phys. (1964) **5**, 622.
- [49] M. Flicker, E. H. Lieb, Phys. Rev. (1967) **161**, 179; M. Gaudin, Phys. Lett. A (1967) **24**, 55; C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. (1967) **19**, 1312.
- [50] B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. (1968) **20**, 98.
- [51] C. K. Lai and C. N. Yang, Phys. Rev. A (1971) **3**, 393.
- [52] E. H. Lieb, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. (1968) **20**, 1445.
- [53] E. H. Lieb, Phys. Rev. (1967) **162**, 162.
- [54] L. A. Takhtadzhian, L. D. Faddeev, Russ. Math. Surveys (1979) **34**, 11.
- [55] D. M. Gangardt and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. (2003) **90**, 010401; K. V. Kheruntsyan, D. M. Gangardt P. D. Drummond and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. Lett. (2003) **91**, 040403.
- [56] P. Calabrese and J. S. Caux, Phys. Rev. Lett. (2007) **98**, 150403.
- [57] A. G. Sykes, D. M. Davis, K. Viering, M. G. Raizen, and K. V. Kheruntsyan, Phys. Rev. Lett. (2008) **100**, 160406.
- [58] A. Iamambekov and L. Glazman, Phys. Rev. Lett. (2008) **100**, 206805.
- [59] H. Buljan, R. Pezer, and T. Gasenzer, Phys. Rev. Lett. (2008) **100**, 080406.
- [60] M. T. Batchelor, X.-W. Guan, N. Oelkers, and C. Lee, J. Phys. A: Math. Gen. (2005) **38**, 7787-7806.
- [61] N. Oelkers, M. T. Batchelor, M. Bortz, and X.-W. Guan, J. Phys. A: Math. Gen. (2006) **39**, 1073-1098.
- [62] Y. Hao, Y. Zhang, J. Q. Liang, and S. Chen, Phys. Rev. A (2006) **73**, 063617.

- [63] Y. Hao, Y. Zhang, and S. Chen, Phys. Rev. A (2007) **76**, 063601.
- [64] Y. Hao, Y. Zhang, and S. Chen, Phys. Rev. A (2008) **78**, 023631.
- [65] Y. Hao, Y. Zhang, X. -W. Guan, and S. Chen, Phys. Rev. A (2009) **79**, 033607.
- [66] X. -J. Liu, H. Hu, P. D. Drummond, Phys. Rev. A (2007) **76**, 043605.
- [67] X.W. Guan, M.T. Batchelor, C. Leeand, and M. Bortz, Phys. Rev. B (2007) **76**, 085120.
- [68] X.-W. Guan, M.T. Batchelor, and M. Takahashi, Phys. Rev. A (2007) **76**, 043617.
- [69] X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and J.-Y. Lee, Phys. Rev. A (2008) **78**, 023621.
- [70] M. T. Batchelor, M. Bortz, X.W. Guan, and N. Oelkers, Phys. Rev. A (2005) **72**, 061603.
- [71] Z.X. Hu, Q. L. Zhang, and You-Quan Li, J. Phys. A: Math. Gen. (2006) **39**, 351.
- [72] A. Imambekov and E. Demler, Phys. Rev. A (2006) **73**, 021602(R); A. Imambekov and E. Demler, Ann. Phys. (2006) **321**, 2390.
- [73] M.T. Batchelor, X.-W. Guan, and N. Oelkers, Phys. Rev. Lett. (2006) **96**, 210402; M.T. Batchelor, X.-W. Guan, J.-S. He, J. Stat. Mech. (2007) P03007; M. T. Batchelor, X. -W. Guan, Phys. Rev. B (2006) **74**, 195121; M. T. Batchelor, X.-W. Guan, A. Kundu, J. Phys. A: Math. Theor. (2008) **41**, 352002.
- [74] C. K. Lai, Phys. Rev. Lett. (1971) **26**, 1472; C. K. Lai, Phys. Rev. A (1973) **8**, 2567.
- [75] D. S. Murphy, J. F. McCann, J. Goold, and T. Busch, Phys. Rev. A (2007) **76**, 053616; D. S. Murphy and J. F. McCann, Phys. Rev. A (2008) **77**, 063413.
- [76] 钱伯初, 曾谨言, 量子力学习题精选与解析(第二版), 上册, 科学出版社, 1999.
- [77] F. Deuretzbacher, K. Bongs, K. sengstock, and D. Pfannkuche, Phys. Rev. A (2007) **75**, 013614.
- [78] D. Baye and P. H. Heenen, J. Phys. A: Math. Gen. (1986) **19**, 2041-2059.
- [79] C. Zhang, K. Nho, and D.P. Landau, Phys. Rev. A (2008) **77**, 025601.
- [80] S. Zöllner, H.-D. Meyer, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A (2006) **74**, 053612; S. Zöllner, ibid (2007) **75**, 043608.
- [81] J. E. Williams, M. J. Holland, Nature (1999) **401**, 568; J. E. Williams, M. J. Holland, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. (1999) **83**, 3358.

- [82] S. Gu, Y. Li, Z. Ying, and X. Zhao, *Int. J. Mod. Phys. B* (2002) **16**, 2137.
- [83] C. Lanczos, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* (1950) **45**, 255.
- [84] C. C. Paige, *The computation of eigenvalues and eigenvectors of very large sparse matrices*, Ph. D. thesis, London University, London, England(1971).
- [85] 徐树方, 矩阵计算的理论与方法, 北京大学出版社, 1995。
- [86] G. H. 格罗布, C. F. 万罗安 著, 廉庆荣 等译, 矩阵计算, 大连理工大学出版社, 1988。
- [87] T. Sebe and J. Nachamkin, *Ann. Phys.* (1969) **51**, 100.
- [88] H. Q. Lin, *Phys. Rev. B* (1990) **42**, 6561.
- [89] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* (1994) **66**, 763.
- [90] 曾谨言, 量子力学, 卷II, 第三版, 科学出版社, 2000。
- [91] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* (1999) **71**, 463.
- [92] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* (2001) **73**, 301.
- [93] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* (2008) **80**, 885.
- [94] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* (2008) **80**, 1215.
- [95] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, second edition, Cambridge University Press, 2008.
- [96] 郝亚江, 博士论文: 一维玻色多体系统的理论研究, 山西大学(1998)。
- [97] M. R. Matthews, D. S. Hall, D. S. Jin, J. R. Ensher, C. E. Wieman, E. A. Cornell, F. Dalfovo, C. Minniti, and S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **81**, 243.
- [98] E. H. Lieb and J. P. Solovej, *The Stability of Matter: From Atoms to Stars*, Fourth Edition, Part VIII, Springer Berlin Heidelberg Press(2005).
- [99] A. S. Alexandrov and V. V. Kabanov, *J. Phys.: Condens. Matter* (2002) **14**, L327-L332.
- [100] J. N. Fuchs, D. M. Gangardt, T. Keilmann, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* (2005) **95**, 150402.
- [101] Y.-Q. Li, S.-J. Gu, Z.-J. Ying and U. Eckern, *Europhys. Lett.* (2003) **61**, 368.
- [102] M. Takahashi, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, Cambridge

University Press(1999).

攻读博士学位期间已发表和待发表的论文

- [1] **Xiangguo Yin**, Yajiang Hao, Shu Chen, and Yunbo Zhang, Ground-state properties of a few-boson system in a one-dimensional hard-wall split potential, *Phys. Rev. A* **78**, 013604 (2008). (SCI)
- [2] **Xiangguo Yin**, Shu Chen, and Yunbo Zhang, Yang-Yang thermodynamics of a Bose-Fermi mixture, *Phys. Rev. A* **79**, 053604 (2009). (SCI)
- [3] **Xiangguo Yin** and Yunbo Zhang, Thermodynamics Bethe ansatz of two-component Bose gases (in preparation).

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，首先要向我的导师张云波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张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。衷心感谢张老师对我的悉心关怀和谆谆教诲！谢谢您的信任和鼓励！

感谢中国科学院物理研究所陈澍老师，北京科技大学的郝亚江师兄和美国佐治亚理工大学尤力教授对我的无私帮助和勉励。他们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们的一份心血！

感谢梁九卿教授，聂一行教授，李卫东教授、李录教授、李志坚教授、张素英教授等老师的关心和帮助，让我受益匪浅。

感谢吕竟伟、刘吉利、杨国全、眭小红、郭利平、杜磊、叶成芝、薛锐、费宏明、陈刚、冯志芳、陈俊生、程茸、贾欣燕、李军奇、张永平、王瑞、张存喜、王建明、张杰、王红梅、常博、李江丹、薛海斌、张兴、韩伟、贾纪峰、张彦伟、梁成功、蔚晓红、吕晓龙、李花、梁晋菊、毛丽君、郭宏丽、陈星、韩艳良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 28 年来的关怀、理解和无尽的爱。

尹相国

2009年5月于山西大学理论物理研究所

承 诺 书

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是在导师指导下独立完成的，学位论文的知识产权属于山西大学。如果今后以其他单位名义发表与在读期间学位论文相关的内容，将承担法律责任。除文中已经注明引用的文献资料外，本学位论文不包括任何其他个人或集体已经发表或撰写过的成果。

学位论文作者(签章)：

2009 年 5 月 28 日