



山西大學
Shanxi University

2010 届硕士学位论文

一维势阱中的硬核玻色-费米混合物

作者姓名	吕晓龙
指导教师	张云波 教授
学科专业	凝聚态物理
研究方向	冷原子物理
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2007年9月—2010年6月

二〇一〇年六月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2010

Hard-core Bose-Fermi Mixtures in One-Dimensional Split Wells

Student Name	Xiaolong Lü
Supervisor	Professor Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Field of Research	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2007.9—2010.6

June, 2010

目 录

中文摘要	I
ABSTRACT.....	II
第一章 绪论	1
§1.1 玻色-爱因斯坦凝聚简介	1
§1.2 稀化气体中的BEC.....	2
§1.3 量子气体的一维情形	3
§1.4 本文内容	4
第二章 量子气体及其低维情形	5
§2.1 理想气体的Bose-Einstein 凝聚	5
2.1.1 态密度及玻色统计	5
2.1.2 临界温度及BEC.....	6
§2.2 非理想玻色气体BEC判据	8
§2.3 一维量子气的相位关联.....	10
第三章 TG气体及BETHE ANSATZ方法	13
§3.1 Tonks-Girardeau气体	14
§3.2 一维任意耦合强度的玻色气体	16
3.2.1 两体问题	16
3.2.2 两体问题Bethe ansatz解	19
3.2.3 多体问题Bethe ansatz解	20
第四章 一维势阱中的玻色-费米混合物.....	23
§4.1 势阱中的玻色-费米混合物.....	23
4.1.1 玻色-费米映射理论	23
4.1.2 不同束缚势下的本征解	24
§4.2 约化单粒子密度矩阵	26
§4.3 自然轨道.....	29
§4.4 玻色-费米混合物的动量分布.....	31

第五章 总结与展望	34
附录A	35
附录B	36
参考文献	38
硕士期间发表的论文	40
致 谢	41
个人简介	42
承 诺 书	43

CONTENTS

Chinese Abstract	I
Abstract	II
Chapter 1 Preface	1
§1.1 A Brief Introduction to Bose-Einstein Condensate	1
§1.2 BEC in dilute gases	2
§1.3 One-dimensional quantum gases.....	3
§1.4 The content of this paper	4
Chapter 2 Low-dimensional quantum gases	5
§2.1 Bose-Einstein condensation in ideal gases.....	5
2.1.1 Density of states and bose statistics.....	5
2.1.2 Critical temperature and BEC.....	6
§2.2 The BEC criterion of non-ideal Bose gases	8
§2.3 Phase correlation in one –dimensional quantum gas	10
Chapter 3 TG gases and Bethe ansatz method.....	13
§3.1 TG gases.....	14
§3.2 Arbitrary coupled one-dimensional Bose gas	16
3.2.1 Two-body problem.....	16
3.2.2 Bethe ansatz solutions of the two-body problem.....	19
3.2.3 Bethe ansatz solutions of many-body problem.....	20
Chapter 4 Bose-Fermi mixture in one-dimensional split traps	23
§4.1 Hard core Bose-Fermi mixture	23
4.1.1 Bose-Fermi mapping theory	23
4.1.2 Single particle Eigensolutions in different split traps.....	24
§4.2 Reduced single-particle density matrix	26
§4.3 Properties of Natural orbitals	29
§4.4 Momentum distribution of the Bose - Fermi mixture	31
Chapter 5 Summary and Outlook.....	34
Appendix A	35

CONTENTS

Appendix B.....	36
List of References	38
Publications	40
Acknowledgements.....	41
Personal Profiles	42
Letter of Commitment	43

中 文 摘 要

近年来在凝聚态物理的冷原子领域中，理论和实验都对准一维强相互作用的超冷原子体系进行了深入广泛的研究。在多体量子系统中，粒子间的强相互作用和研究系统的低维几何对称，放大了体系的量子涨落和关联。实验上通过两束相互垂直的激光束来实现一维系统和利用 Feshbach 共振技术来调节原子间的有效相互作用。

由全同粒子组成的玻色系统，当体系满足一维且粒子之间呈短程的强排斥作用时，即为 Tonks-Girardeau(TG)气体。此时，体系为了降低能量就得避免空间上的重叠，呈现出费米子的特性。体系的波函数，由于在空间坐标上玻色子之间的交换满足对称性，而费米子之间的交换满足反对称性，通过单位反对易算符联系起来，构成所谓的玻色-费米映射理论。

本文主要采用解析方法，分别对中间都含有可调节 δ 势垒的一维无限深方势阱和谐振子势阱中，玻色-费米混合物的密度分布，动量分布和自然轨道进行了讨论。利用玻色-费米映射理论，通过计算我们发现，体系的约化单粒子密度矩阵，自然轨道和动量分布与 δ 势垒的强度和粒子总数有关。在动量分布中次峰的出现显示了势垒两边有着显著的关联。

关键词： TG 气体；玻色-费米映射；约化单粒子密度矩阵；自然轨道；动量分布

ABSTRACT

In recent years in the field of condensed matter physics of cold atoms, one-dimensional strongly interacting ultra-cold atom systems have attracted extensive research interests both in theories and experiments. In the many-body quantum system, the strong interaction between particles and low-dimensional system with geometric symmetry amplify the quantum fluctuation and correlation of the system. Experimentally, one-dimensional system can be achieved by using two perpendicular laser beams and the Feshbach resonance technique is adopted to adjust the effective interaction between atoms.

In physics, a Tonks-Girardeau gas is a Bose-Einstein Condensate in which the repulsive interactions between bosonic particles confined to one dimension dominate the physics of the system. In order to lower the energy the system would have to avoid overlap in space, showing features characteristics of fermions. The system wave function, due to the exchange in coordinate space between bosons satisfying the symmetry while the exchange between fermions satisfying anti-symmetry, is linked through the unit anti-commutation operator. This is the so-called Bose-Fermi mapping.

In this paper, the density profiles and momentum distributions of the Bose-Fermi mixture, confined in one-dimensional infinite square potential well and the harmonic oscillator potential well both with a tunable intermediate δ potential barrier, are discussed. Through the Bose-Fermi mapping and numerical calculation, we find that the reduced single-particle density, momentum distribution and natural orbital of the system are related to the δ barrier strength and the total particle number. The emergence of second peaks in momentum distribution shows a remarkable correlation between particles on both side of the split.

Key words: TG gas; Bose-Fermi mapping; Reduced single-particle density; Momentum distribution; Natural orbital

第一章 绪论

自然界中存在的各种不同种类的粒子都有其各自的内禀属性，如电荷，质量，磁矩，自旋，寿命等。人们按照这些内禀属性把属于同一类的粒子称为全同粒子。实验表明，对于每一类全同粒子，它们多体波函数对于坐标交换（包括空间坐标与自旋坐标）的对称性是完全确定的，且与粒子的自旋有确定的联系。凡自旋为 \hbar 整数倍（ $s=0,1,2,\dots$ ）粒子的波函数对于两个粒子的交换总是对称的，例如光子（ $s=1$ ）， π 介子（ $s=0$ ），它们遵守 Bose 统计，称之为玻色子；凡自旋为 \hbar 半奇数倍（ $s=1/2,3/2,\dots$ ）粒子的波函数对于两粒子的交换总是反对称的，例如质子，中子，电子等，它们遵守 Fermi 统计，称之为费米子。

§ 1.1 玻色-爱因斯坦凝聚简介

对于玻色子来说，温度降低到一定程度，粒子的德布罗意波长大于粒子的平均间距时会发生相变，有宏观可测的原子数被束缚于单一的量子态，称为玻色-爱因斯坦凝聚（Bose-Einstein condensation，简称为 BEC）。对于费米子来说，由于其遵守泡利不相容原理，随温度降低形成费米压而不出现凝聚。Hulet^[1]等人测量了不同温度下 Li^7 和 Li^6 的尺寸：

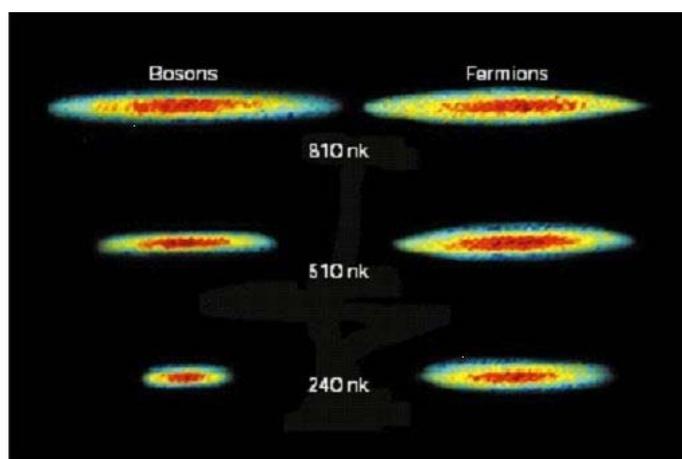


图 1.1 玻色子与费米子的实验观测。

如图 1.1 所示, 左图和右图分别是 Li^7 (玻色子) 气体和 Li^6 (费米子) 气体的空间分布随温度降低的变化。从图中可以看到, 在温度较高时 (810nk,) 玻色和费米密度分布几乎没有差别; 当温度有所降低时 (510nk), 玻色子明显比费米子的分布尺寸小, 凝聚体遵守量子统计分布, 中间颜色较亮部分是BEC, 边缘部分是热原子分布; 当系统温度降低到 240nk时, 体系接近纯的BEC, 边缘部分几乎没有热原子分布。从图中可以看出费米气体空间分布随温度降低尺寸变化不大, 没有发生玻色-爱因斯坦凝聚现象。

关于BEC的理论预言可以追溯到上世纪二十年代。在印度物理学家玻色关于光子的统计力学研究的基础上^[2], 爱因斯坦研究了大量无相互作用的玻色子, 得出在一定临界温度以下, 有宏观尺寸的玻色子将会占据能量最低的单一量子态^[3]。

§ 1.2 稀化气体中的 BEC

稀化气体不同于我们日常的气体, 液体, 固体。例如, 稀化气体发生BEC时中心原子云密度通常是 10^{13} - 10^{15} cm^{-3} , 而在室温下一个大气压的分子的密度约是 10^{19} cm^{-3} , 液体和固体的原子密度大约是 10^{22} cm^{-3} 。实验上要想观测到稀化气体的量子现象, 温度需要降到 10^{-5} K 或更低; 液氦与此相比, 由于有较高的密度, 能观测到量子现象的温度约为 1K左右。通常我们把发生宏观量子现象的稀化气体的组成原子称为冷原子。

早在 1938年, Fritz London 就指出了液氦 ^4He 的超流性可能就是BEC的表现。由于氦原子之间具有很强的相互作用, 使得即使是在绝对零度时处于零动量态的粒子数也很有限。人们开始寻求弱相互作用的玻色气体以提高凝聚的临界温度。困难的是, 大多数物质在温度降低到低温时不再是气态, 而是凝结成液态或是固态, 具有很大的粒子间相互作用。

1959年, Hecht^[4]认为自旋极化的氢原子能组成实现弱相互作用的玻色气体。自旋极化排列的两个氢原子之间的吸引相互作用很弱, 不会以分子的形式塌缩成束缚态。因此, 由氢原子组成的气体处在外磁场中会很稳定, 在任意低的温度下仍保持气态。Hecht的这个观点在 1976年由Stwalley和Nosanow^[5]两人得到了证实,

由此激发起人们利用氢原子来实现BEC的兴趣。

随着激光冷却技术的发展, JILA和MIT的研究小组于 1995 年相继报道了在磁阱中通过蒸发冷却碱金属 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 原子蒸气实现了BEC^[6,7]。

1998 年, 麻省理工学院Greytak和Kleppner领导的小组采用蒸发冷却磁阱中气体的办法, 在实验上实现了氢原子的玻色-爱因斯坦凝聚^[8]。从而实现了稀化气体的BEC。到目前为止, 能获得BEC的元素有 ^1H , ^7Li , ^{23}Na , ^{39}K , ^{41}K , ^{52}Cr , ^{85}Rb , ^{87}Rb , ^{133}Cs , ^{170}Yb , ^{174}Yb 和 ^4He (激发态氦原子)。

§ 1.3 量子气体的一维情形

一维多体系统在理论上处理起来较三维系统简单, 其量子性质也不同于三维系统。一维均匀玻色系统不会发生玻色-爱因斯坦凝聚^[9]。在多体量子理论中, 一维几何对称系统放大了粒子间相互作用的量子涨落和关联。例如Tonks-Girardeau气体中通过Feshbach共振的调节, 玻色子之间具有很强的短程排斥相互作用, 在基态时要使系统能量降到最低就得保持粒子在空间上分离, 从而表现出费米子的性质。

实验上实现的一般是准一维的系统: 量子气体被束缚在一个柱对称的势阱中, 在径向方向加很强的束缚势, 在温度足够低时, 其径向振动就被冻结在基态而不会跃迁到激发态, 而轴向相对于径向束缚则弱得多, 类似于雪茄形状。

2001 年, Ketterle小组实验上第一次实现了雪茄型玻色-爱因斯坦凝聚^[10]。他们将量子气体束缚在径向频率为 $\omega_{\perp}/2\pi = 360\text{Hz}$, 横向频率为 $\omega_{\parallel}/2\pi = 3.5\text{Hz}$ 的磁阱中, 使量子气体的消退长度(healing length) $\xi = (4\pi a_s n)^{-1/2}$ 大于其径向半径而小于其轴向半径, 实现了雪茄型BEC, 其中 a_s 为三维s波散射长度, n 为平均量子气密度。但量子气体的能量仍大于其径向束缚能 $k_B T > \hbar\omega_{\perp}$, 该量子系统还不是真正的准一维系统。

实验上常用光学方法来实现准一维系统。2004 年, Bloch小组和Weiss小组在实验上观测到了TG气体^[11,12]。2009 年, Nägerl小组利用光晶格束缚冷原子, 通过束缚诱导共振(confinement-induced resonance) 调节粒子间的相互作用, 实现了低

激发强关联的一维量子气体^[13]。

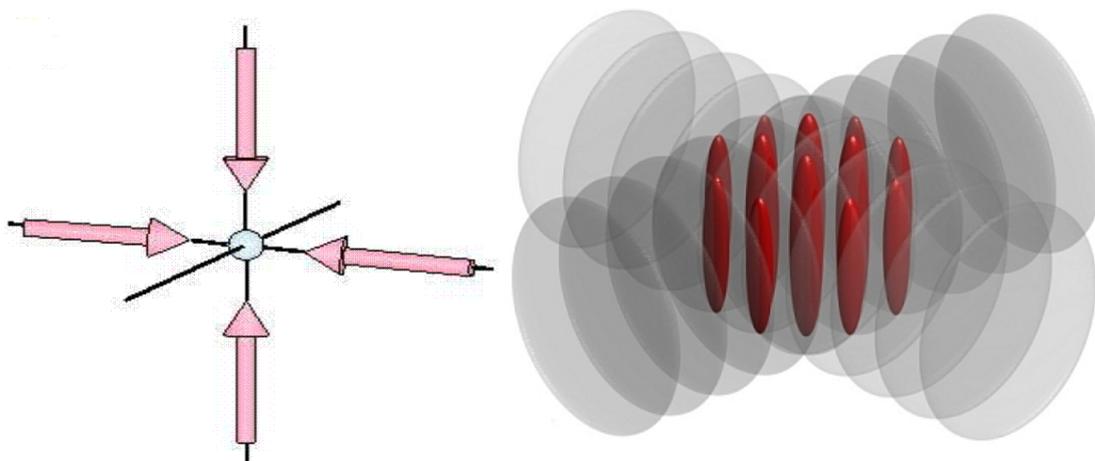


图 1.2 两束正交的驻波形成的准一维量子系统

如图 1.2 所示,用两束互相正交的激光驻波对射可以产生二维的周期光晶格,构成一系列的紧束缚管状势阱。把凝聚体装载到这些管状势阱中,可以形成一系列的一维量子气体。通过控制激光的光强可以调节相邻格点上一维量子气体之间的耦合,强激光时,不发生耦合,各自保持独立。

§ 1.4 本文内容

本文第二、三章介绍一维量子气体的一些基本理论,第四章具体介绍我们做的一些工作。在第二章中,我们介绍理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚理论,讨论量子气体的低维情形,以及低维量子系统的涨落与关联;第三章介绍 Tonks-Girardeau 气体及求解一维多体问题的 Bethe ansatz 方法。在基于前两章方法的基础上,第四章研究了一维双势阱中少体玻色-费米混合物的基态性质。第五章对我们的工作做了总结和展望。

第二章 量子气体及其低维情形

在本章中，我们首先简单介绍理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚，和存在相互作用的玻色气体发生 BEC 时的判据，最后讨论一维均匀量子玻色气体的相位关联和约化单粒子密度矩阵的关系。

§ 2.1 理想气体的 Bose-Einstein 凝聚

2.1.1 态密度及玻色统计

对于三维的理想玻色气体，单粒子量子态占据相空间的体积为 $(2\pi\hbar)^3$ 。在动量空间上，以动量大小 p 为半径的球体体积为 $4\pi p^3/3$ ，我们知道一个动量为 \mathbf{p} 粒子的能量为 $\varepsilon_p = p^2/2m$ ，能量小于 ε 的相空间上的状态总数 $G(\varepsilon)$ 为：

$$G(\varepsilon) = V \frac{4\pi}{3} \frac{(2m\varepsilon)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} = V \frac{2^{1/2}}{3\pi^2} \frac{(m\varepsilon)^{3/2}}{\hbar^3}. \quad (2.1)$$

其中， V 是系统的体积。那么那些能量在 ε 到 $\varepsilon + d\varepsilon$ 量子态数为 $g(\varepsilon)d\varepsilon$ ，而 $g(\varepsilon)$ 就是态密度：

$$g(\varepsilon) = \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{Vm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{1/2}. \quad (2.2)$$

由量子统计理论可知，玻色子遵守玻色-爱因斯坦统计分布^[14]，能量为 ε_ν 的量子态 ν 上的平均粒子数为：

$$f(\varepsilon_\nu) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_\nu - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (2.3)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数， T 是温度， μ 是化学势，表示系统在保持体积和熵不变的情况下，增加单个粒子所需要的能量。显然，任一量子态上的粒子数都不能取负值。从式(2.3)可知，这就要求对所有能级都有 $e^{(\varepsilon_\nu - \mu)/k_B T} > 1$ 。以 ε_0 表示粒子的最低能级，如果选取系统基态能级为能量的零点，即 $\varepsilon_0 = 0$ ，则 $\mu < 0$ 。系统的粒子数由温度 T 和化学势 μ 共同决定：

$$N = \sum_{\nu} f(\varepsilon_\nu) = \sum_{\nu} \frac{1}{e^{(\varepsilon_\nu - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (2.4)$$

2.1.2 临界温度及 BEC

我们知道，一般理想气体服从玻尔兹曼统计分布，粒子的平均距离远大于德布罗意波的平均热波长 λ ，即满足经典极限条件^[14]：

$$n\lambda^3 \ll 1 \quad (2.5)$$

其中， $n = \frac{N}{V}$ 为气体的粒子数密度， $\lambda = \left(\frac{1}{2\pi mkT} \right)^{1/2}$ 为德布罗意波平均热波长。

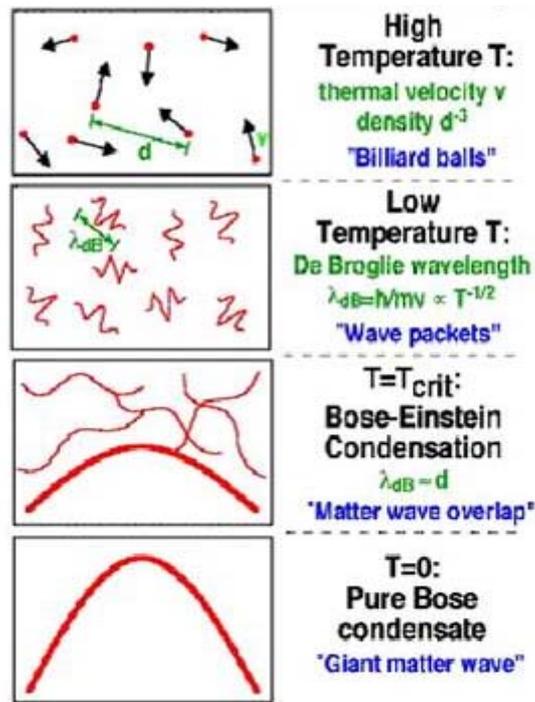


图 2.1 实现 BEC 的判据，引自《量子力学新进展》第三辑 74 页

如图 2.1 所示，随着温度的降低，粒子的平均德布罗意波（物质波）波长增大；当温度降低到某一临界温度 T_c 时，粒子的物质波波长大于粒子间距，物质波互相交叠，近似可用一个统一的波函数来描述；当温度降到绝对零度时，所有粒子处于同一状态，体系就可精确地用一个波函数来描述。

临界温度 T_c 是指量子气体在宏观上开始占据基态能级时对应的最高温度。在温度 $T > T_c$ ，且系统粒子数 N 足够大的情况下，所有的粒子都处于激发态，不考虑基态，可将式(2.4)中的求和用对能量的积分代替^[14]，则系统中处于激发态的粒子数为：

$$N_{ex} = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} - 1} g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2.6)$$

由临界温度的定义知，系统开始宏观上出现基态能级时，所有的粒子都占据激发态能级，即：

$$N = N_{ex}(T_C) = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T_C} - 1} g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2.7)$$

将(2.2)式代入，并且引入无量纲的变量 $x = \varepsilon / k_B T_C$ ，化简可得：

$$\begin{aligned} N &= C_{3/2} (k_B T_C)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2}}{z^{-1} e^x - 1} dx \\ &= C_{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(z) (k_B T_C)^{3/2}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

其中 $\Gamma(\alpha)$ 是伽玛函数， $C_{3/2} = \frac{V m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3}$ ， $g_{3/2}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}}$ ， $z = e^{\mu/kT}$ 为系统的逸度，当粒子基态能取为零点能时，系统温度降到临界温度 T_C 时，激发态粒子数目 N_{ex} 要取最大使得等于粒子总数 N 时，化学势取值为 $\mu = 0$ ，此时系统的逸度 $z = 1$ 。当 $z = 1$ 时， $g_{\alpha}(1) = \zeta(\alpha)$ 是黎曼 zeta 函数（详细过程参看附录 A）。

当系统温度 T 降到临界温度 T_C 以下，即 $T < T_C$ 时，由于宏观上有一部分粒子处于基态，处于激发态上的粒子数目小于系统总的粒子数目，同理，由式(2.8)可得：

$$N_{ex} = C_{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(z) (k_B T)^{3/2} \quad (2.9)$$

值得指出的是，处于激发态上的粒子数与总粒子数无关，而由式(2.8)和式(2.9)联立可知：

$$N_{ex} = N \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \quad (2.10)$$

那么，凝聚在基态上的粒子数目为：

$$N_0(T) = N - N_{ex}(T) \quad (2.11)$$

即为：

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \right] \quad (2.12)$$

在 T_C 以下，凝聚于基态的粒子数 N_0 与系统总粒子数 N 有相同的数量级， N_0 随温

度的变化如图 2.2 所示.

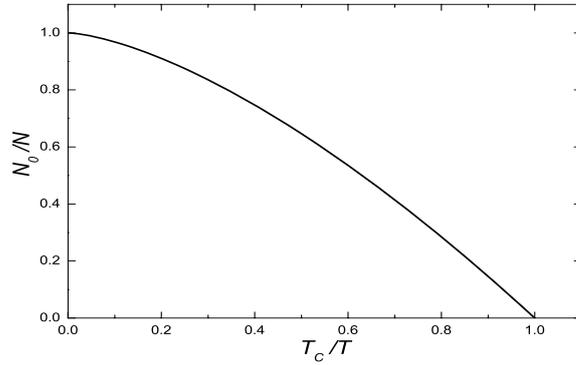


图 2.2 理想气体 BEC 随温度变化

由图可知, 对于玻色子来说, 单个量子态所能容纳的粒子数目没有限制, 在 $T < T_c$ 时有宏观量级的粒子凝聚在基态能级, 在绝对零度时粒子全部占据基态能级, 这一现象称为玻色-爱因斯坦凝聚, 简称 BEC.

§ 2.2 非理想玻色气体 BEC 判据

如 2.1 节所述, 理想玻色气体实现 BEC 的依据是宏观上有大量粒子占据单个能级. 对于有相互作用的玻色气体实现 BEC 的判据起初由 Pernoise^[15] 和 Landau^[16] 分别提出, 后来杨振宁在此基础上进行了详细的论述, 提出了约化单粒子密度矩阵判据的概念^[17].

我们知道, 对于一个量子系统, 其单个粒子的性质全部包含于这个体系的约化单粒子密度 (reduced single-particle density, 简称为 RSPD) 矩阵中, 以后简称密度矩阵, 其定义如下:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (2.13)$$

表示一个粒子从 \mathbf{r} 处迁移到 \mathbf{r}' 处的几率幅, 其中 $\hat{\psi}^\dagger$ 和 $\hat{\psi}$ 为粒子的产生和湮灭算符, $\langle \dots \rangle$ 根据不同的物理体系有着不同的含义, 对于一个处于纯态的量子系统 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$, 其指代力学量的期待值, 密度矩阵可写为:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.14)$$

当 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 时, 密度矩阵等于系统的粒子数密度 $n(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$, 且归一化为系统的粒子总数 $\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = N$.

对于均匀分布的理想玻色气体, 那些占据量子态 \mathbf{p} , 布居数为 $N_{\mathbf{p}}$ 粒子的本征态是平面波 $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} / V^{1/2}$, 其密度矩阵为:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} N_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}. \quad (2.15)$$

若粒子的迁移间距 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ 很大, 且系统的粒子大多处于基态时, 那些动量不为零 ($\mathbf{p} \neq 0$) 的粒子由于不同组分之间的干涉, 对求和的贡献可以忽略, 上式只保留零动量量子态:

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{N_0}{V}. \quad (2.16)$$

因此玻色-爱因斯坦凝聚的判据是: 在 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ 时, 密度矩阵 $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 趋于非零值。对于存在相互作用的玻色系统, 没有零动量态粒子数算符的本征态, 但式(2.16)仍可以写为:

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\langle N_0 \rangle}{V}. \quad (2.17)$$

其中 $\langle N_0 \rangle$ 指代零动量态粒子布居数的期待值, 仍可用上述判据。

对于束缚在有限尺寸势阱中的玻色气体, 用间距很大时的单粒子密度矩阵来判断是否发生 BEC 的判据不再成立。习惯上采用密度矩阵对应本征函数 $\chi_j(\mathbf{r})$ 的本征值来判断:

$$\int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \chi_j(\mathbf{r}') = \lambda_j \chi_j(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

因为密度矩阵是厄米矩阵且为正的有限值, 它的本征值 λ_j 应该是一个正的实数值。假定本征函数满足归一化条件 $\int d\mathbf{r} |\chi_j(\mathbf{r})|^2 = 1$, 则有:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_j \lambda_j \chi_j^*(\mathbf{r}') \chi_j(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

对于束缚在势阱中的无相互作用的玻色气体来说, χ_j 是单粒子态波函数, 其本征值是相应的布居数。在绝对零度时, 最低能级单粒子态的本征值是 N , 其余的都为零。对于粒子间有相互作用的系统来说, 可做如下推广: 实现 BEC 时, 在 $N \rightarrow \infty$

的情况下, 某个单粒子态的本征值 λ_j 的数量级是 N , 其余量子态本征值均为有限的正值^[18]。

§ 2.3 一维量子气的相位关联

对于在某一低温 T , 且热平衡状态下的量子玻色气体, 处在波矢为 \mathbf{q} 模式下的平均粒子数为普朗克函数 $(e^{\varepsilon_q/kT} - 1)^{-1}$ 。当 $kT \gg \varepsilon_q$ 时, 该模式下的总能量为 kT , 平均动能^[9]为 $kT/2$, 而平均动能又可写为 $mn \langle \mathbf{v}_q \cdot \mathbf{v}_q^* \rangle V/2$; 为了将量子气体的速度与波函数的相位 ϕ 联系起来, 把 $\phi(\mathbf{r})$ 对 ϕ_q 展开有 $\phi(\mathbf{r}) = \sum_q \phi_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ 。不妨设均匀体系波函数写为 $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow f e^{i\phi(\mathbf{r})}$, 其中 f 是振幅。依据波函数几率流守恒^[19] $\mathbf{v} = \mathbf{j}/n = \hbar(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) / (2mi|\psi|^2)$, 有 $\mathbf{v} = \hbar/m \nabla \phi(\mathbf{r})$, 可得 q 模式下 $\mathbf{v}_q = i(\hbar \mathbf{q}/m) \phi_q$, 因此有:

$$\begin{aligned} \langle |\phi_q|^2 \rangle &= \frac{m^2}{\hbar^2 q^2} \langle \mathbf{v}_q \cdot \mathbf{v}_q^* \rangle = \frac{m^2}{\hbar^2 q^2} \frac{kT}{mN} \\ &= \frac{mkT}{N\hbar^2} \frac{1}{q^2}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

现在我们来考察单体密度矩阵和波函数相位的关系, 将粒子的产生和湮灭算符用 c 数来代替 $\hat{\psi}(\mathbf{r}) \rightarrow |\psi(\mathbf{r})| e^{i\phi(\mathbf{r})}$, 所以有:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') &= \left\langle |\psi(\mathbf{r}')| |\psi(\mathbf{r}'')| e^{i[\phi(\mathbf{r}') - \phi(\mathbf{r}'')]} \right\rangle \\ &\approx |\psi|^2 \left\langle e^{i[\phi(\mathbf{r}') - \phi(\mathbf{r}'')]} \right\rangle \\ &= |\psi|^2 \left\langle \exp \left[i \sum_q \phi_q (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}''}) \right] \right\rangle \\ &= |\psi|^2 \prod_q \left\langle \exp \left[i \phi_q (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}''}) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

我们考虑的是均匀系统, 在第二步忽略了粒子密度的涨落, 在第四步化简中考虑到不同模式下的波函数是不相关联的, $\langle \dots \rangle$ 项可作如下化简:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \exp \left[i \phi_q \left(e^{i q r'} - e^{i q r''} \right) \right] \right\rangle \\
&= 1 - \frac{1}{2} \left\langle \left| \phi_q \left(e^{i q r'} - e^{i q r''} \right) \right|^2 \right\rangle \\
&= 1 - \left\langle |\phi_q|^2 \right\rangle (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \\
&\approx \exp \left[- \left\langle |\phi_q|^2 \right\rangle (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right]
\end{aligned} \tag{2.22}$$

其中 $\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}''$ ，因此有：

$$\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \approx |\psi|^2 \exp \left(- \left\langle [\Delta \phi(\mathbf{r})]^2 \right\rangle / 2 \right) \tag{2.23}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle [\Delta \phi(\mathbf{r})]^2 \right\rangle &= \left\langle [\phi(\mathbf{r}') - \phi(\mathbf{r}'')]^2 \right\rangle \\
&= 2 \sum_q \left\langle |\phi_q|^2 \right\rangle (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{2.24}$$

在一维情况下有：

$$\begin{aligned}
\left\langle [\Delta \phi(x)]^2 \right\rangle &= \frac{mkTL}{\pi N \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{1 - \cos qx}{q^2} \\
&= \frac{mkT}{n \hbar^2} |x|
\end{aligned} \tag{2.25}$$

其中 $n = N/L$ 为单位长度的粒子数目，由上式可见，系统温度较高时相位涨落较为显著，此时的密度矩阵可写成：

$$\rho(x) \approx n e^{-|x|/2L_\phi} \tag{2.26}$$

L_ϕ 是一维粒子在温度 T 时的特征波长， $L_\phi = \frac{N \hbar^2}{mkTL} = \frac{L}{N} \frac{T_{1D}}{T}$ ， $T_{1D} = \frac{n^2 \hbar^2}{mk}$ 。

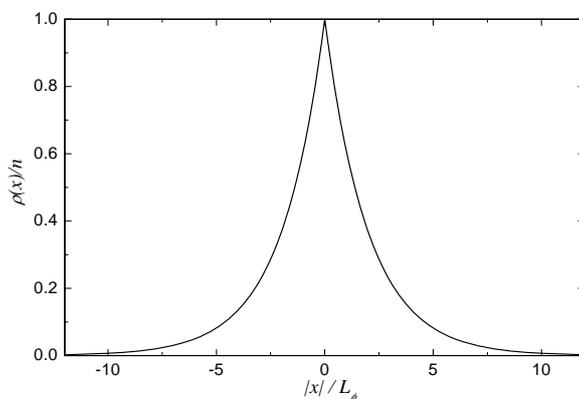


图 2.3 密度矩阵与相涨落的关系

由此可以看出，对于有限尺寸的一维系统来说，若系统长度 L 远小于其特征波长 L_ϕ ，量子气体的相位总是相关联的，在此条件下有温度 T 满足 $T \ll \frac{T_{1D}}{N}$ 。

第三章 TG 气体及 Bethe ansatz 方法

低维量子系统由于其解的精确可解性在物理学中占有重要地位。若给定一个一维均匀玻色系统，其粒子间相互作用为 S 波散射的排斥相互作用，即接触碰撞相互作用，该体系的哈密顿量为：

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i,j(i<j)}^N U_{1D} \delta(x_i - x_j). \quad (3.1)$$

其中，第一项为 N 个单粒子动能项的简单求和，第二项为相邻粒子间相互作用能的求和， U_{1D} 为两粒子间相互作用的一维耦合强度^[20]：

$$U_{1D} = c \frac{\hbar^2}{m} \quad (3.2)$$

上式中 c 是一个参数，量纲为长度的倒数，引进 γ 使得满足：

$$\gamma = \frac{c}{n_{1D}}. \quad (3.3)$$

γ 为无量纲化的两体相互作用耦合强度， n_{1D} 为一维系统的粒子数密度。不同于三维的是，一维的耦合强度随粒子数密度的增大而递减。

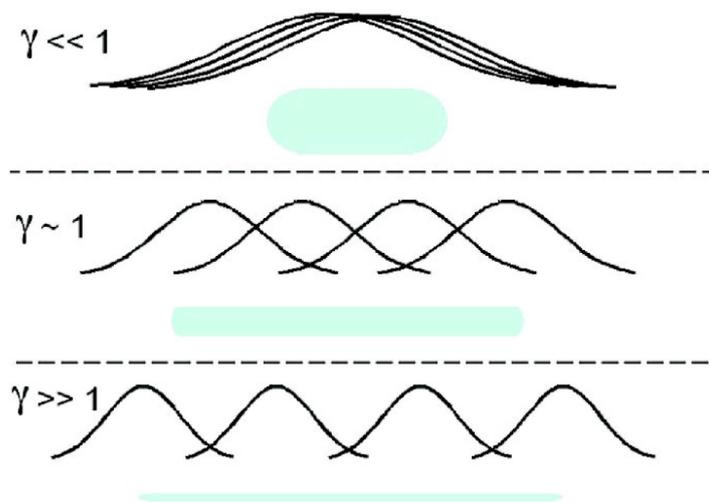


图 3.1 一维玻色子密度分布随 γ 变化示意图

如图 3.1 所示，随着 γ 的改变，玻色子波函数之间的相干性发生变化，对应密度分布也随之变化；当 $\gamma \ll 1$ 时，玻色子空间波函数趋于相同，一维系统粒子数密

度最大；当 $\gamma \gg 1$ 时，玻色子波函数在空间上呈离散分布，趋于费米化，粒子数密度最小。

在本章中，我们首先介绍用玻色-费米映射理论，得出一维耦合强度 $\gamma \rightarrow \infty$ 时的玻色气体基态波函数及一些基态性质，接着介绍利用 **Bethe ansatz** 方法求解出两粒子系统的任意耦合强度的波函数，并推广到多粒子系统。

§ 3.1 Tonks-Girardeau 气体

Tonks Girardeau(TG)气体，是指一维无穷大短程排斥耦合强度的玻色气体^[21]。一维粒子间耦合强度可通过Feshbach共振技术调节到S波散射强度^[20]，即接触碰撞相互作用，此时的玻色子称为硬核玻色子(hard-core bosons)。

在式(3.3)中，当 $\gamma \rightarrow \infty$ 时，两粒子的交叠波函数必须为零，否则能量将趋于无穷大，即：

$$\psi|_{x_j=x_k} = 0. \quad (3.4)$$

在此条件下， N 个自由费米子的定态薛定谔方程解的形式可写为斯莱特行列式(Slater determinant)：

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \propto \det \left[e^{ik_j x_i} \right] \equiv \begin{vmatrix} e^{ik_1 x_1} & e^{ik_1 x_2} & \dots & e^{ik_1 x_N} \\ e^{ik_2 x_1} & e^{ik_2 x_2} & \dots & e^{ik_2 x_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ e^{ik_N x_1} & e^{ik_N x_2} & \dots & e^{ik_N x_N} \end{vmatrix}. \quad (3.5)$$

这个波函数关于两个粒子坐标之间的交换满足反对称性，描述的是费米子的波函数，而对于玻色子来说两粒子波函数满足坐标交换对称性，因此有：

$$\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) \propto \det \left[e^{ik_j x_i} \right] \prod_{1 \leq s < t \leq N} \text{sgn}(x_t - x_s). \quad (3.6)$$

连乘号一项是单位反对易函数，其中 $\text{sgn}(x)$ 是符号函数。当 $x > 0$ 时， $\text{sgn}(x) = 1$ ；当 $x < 0$ 时， $\text{sgn}(x) = -1$ 。此即 TG 气体的玻色-费米映射理论。式(3.6)的波函数是式(3.1)哈密顿量的本征函数，本征值为：

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N k_j^2. \quad (3.7)$$

下面我们来求波矢 $k_j (j=1, 2, \dots, N)$ 的值, 在不考虑边界效应的情况下, 采用周期性边界条件:

$$\psi(x_1, \dots, x_j=0, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_j=L, \dots, x_N) \quad (3.8)$$

L 是一维系统的长度。对于全同玻色子来说, 波函数对任意两个粒子坐标交换满足对称性, 意味着对所有粒子 $j=1, 2, \dots, N$ 都满足这个约束条件, 这里为了描述的方便, 用 j 来标记一维原子链上第 j 个粒子的坐标 x_j . 任选其中的一个粒子 j , 将其从坐标 x_j 移到坐标 x_j+L 处, 其波函数的变化包括两部分: 反对易函数部分和指数部分, 由式(3.8)可得:

$$e^{ik_j L} = (-1)^{N-1} = e^{-i\pi(N-1)}. \quad (3.9)$$

即波矢有如下形式:

$$k_j = \frac{2\pi}{L} \left(n_j - \frac{N-1}{2} \right). \quad (3.10)$$

其中 n_j 为任意的整数, 选择上面的形式是为了使波矢描述系统基态更简洁。

考虑两个粒子的情形, 波矢 k 的取值为 $k_1 = -k_2 = \pi/L$. 这时归一化的基态波函数是:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L} \sin\left(\frac{\pi|x_1 - x_2|}{L}\right). \quad (3.11)$$

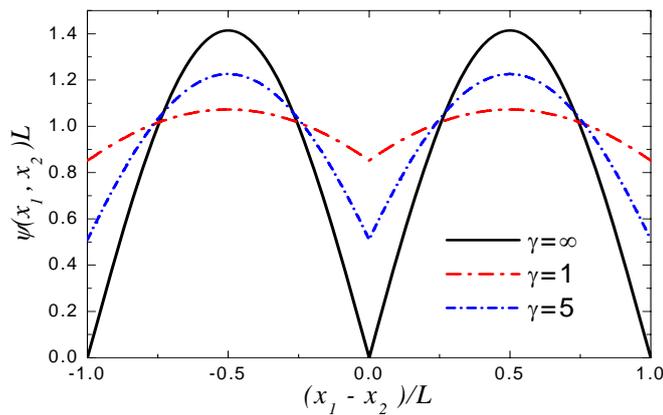


图 3.2 不同 γ 下两玻色子波函数随相对坐标的变化

对于粒子数为 N 的一维的硬核玻色系统, 系统基态波矢的取值应使得能量表达式(3.7)最小, k 的取值应为:

$$k_j = \frac{2\pi}{L} \left(j - \frac{N+1}{2} \right), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.12)$$

这时归一化的基态波函数是（详细过程参看附录 B）：

$$\psi_{TG} = \frac{2^{N(N-1)/2}}{\sqrt{N!L^N}} \prod_{i < j} \left| \sin \left[\pi (x_i - x_j) / L \right] \right|. \quad (3.13)$$

在热力学极限情况下，即： $N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$ 而 N/L 的比值为一个常数，系统基态单粒子平均能量为：

$$\frac{E}{N} = \frac{\pi^2}{6} \frac{\hbar^2 n_{1D}^2}{m}. \quad (3.14)$$

§ 3.2 一维任意耦合强度的玻色气体

在本节中我们将上节计算 TG 气体波函数的方法，推广到任意耦合玻色子的计算。为了描述简单，首先考虑两个任意耦合强度的玻色子，然后再用 Bethe ansatz 方法推广到 N 个玻色子。

3.2.1 两体问题

考虑两个全同的玻色子，质量都是 m ，粒子间为 δ 势相互作用。因为粒子间的相互作用只与粒子的相对坐标有关，我们采用相对坐标系。当中心质量对应的动量为零时，中心质量的基态能量也为零。粒子间的相互作用只依赖于粒子间的相对坐标 $x = x_1 - x_2$ ，且玻色子的波函数是关于 x 的偶函数，因此波函数有如下的形式：

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin k|x|. \quad (3.15)$$

根据周期性边界条件式(3.8)有 $\psi(0) = \psi(L)$ ，代入得：

$$A = A \cos kL + B \sin kL \quad (3.16)$$

即：

$$\frac{B}{A} = \tan(kL/2) \quad (3.17)$$

现在我们用质心坐标 $X = (x_1 + x_2)/2$ 和相对坐标 $x = x_1 - x_2$ 来表示动能算符：

$$\frac{\partial}{\partial x_1^2} + \frac{\partial}{\partial x_2^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial X^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x^2}. \quad (3.18)$$

则对于波函数 $\psi(x)$ 的薛定谔方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_{1D}\delta(x)\psi = E\psi. \quad (3.19)$$

因上式中有 δ 势垒类型的粒子间相互作用项, 导致波函数导数的不连续性, 由跃变条件有^[19]:

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0^+} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0^-} = c\psi(0). \quad (3.20)$$

其中 $c = mU_{1D}/\hbar^2$, 因为波函数关于坐标是对称的, 其导数则是反对称的, 等式左边两项相等, 则:

$$2 \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0^+} = c\psi(0). \quad (3.21)$$

即:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi \Big|_{0^+} = c\psi(0). \quad (3.22)$$

代入波函数可得:

$$\frac{B}{A} = \frac{c}{2k}. \quad (3.23)$$

由式(3.17)和式(3.23)可得出波矢 k 所满足的方程:

$$c = 2k \tan(kL/2). \quad (3.24)$$

将上式用无量纲化的数 γ 来表示, 对于两体问题, 粒子数密度 $n_{1D} = N/L$, 根据式(3.3)有 $\gamma = cL/2$, 则:

$$\gamma = \alpha \tan(\alpha/2). \quad (3.25)$$

上式是一个超越方程, 其中 $\alpha = kL$. 因为两个质量均为 m 的全同玻色子的约化质量为 $m/2$, 此系统的能量可写为:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{m} = \frac{\hbar^2}{mL^2} \alpha^2. \quad (3.26)$$

由式(3.15)和式(3.23)可知, 两粒子波函数可写为:

$$\begin{aligned}
 \psi(x_1, x_2) &= \Re \left(\frac{2k}{\sqrt{(2k)^2 + c^2}} \cos kx + \frac{c}{\sqrt{(2k)^2 + c^2}} \sin k|x| \right) \\
 &= \Re (\cos \beta \cos kx + \sin \beta \sin k|x|) \\
 &= \Re \cos(k|x| - \beta).
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

其中 $\cos \beta = \cos \alpha / 2$, 且由波函数的归一化条件 $\int_0^L |\psi(x_1, x_2)|^2 dx = 1$, 可得归一化常

数 $\Re = \frac{1}{L^{1/2}} \left(\frac{2\alpha}{\alpha + \sin \alpha} \right)^{1/2}$, 综上所述, 归一化的两个粒子的波函数可写为如下形式:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{L^{1/2}} \left(\frac{2\alpha}{\alpha + \sin \alpha} \right)^{1/2} \cos \left[\alpha \left(\frac{|x_1 - x_2|}{L} - \frac{1}{2} \right) \right]. \tag{3.28}$$

此波函数的形状如图(3.2)所示, 随着 γ 的增大, 波包愈加分离, 当 $\gamma \rightarrow \infty$ 的极限情况时, 如式(3.11)所示的那样, 就成了 TG 气体的波函数。

为了将两个粒子的情况和热力学情况作对比, 不妨把能量写为如下形式:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} N n_D^2 e(\gamma). \tag{3.29}$$

由上式和式(3.26)对比得: $e(\gamma) = \alpha^2(\gamma)/4$. 当 $\gamma \ll 1$ 时, $\alpha^2 \approx 2\gamma$, $e(\gamma) \approx \gamma/2$. 当 $\gamma \rightarrow \infty$ 时, $\alpha \approx \pi(1 - 2/\gamma)$, $e(\gamma) \approx \pi^2/4 - \pi^2/\gamma$. 如下图所示:

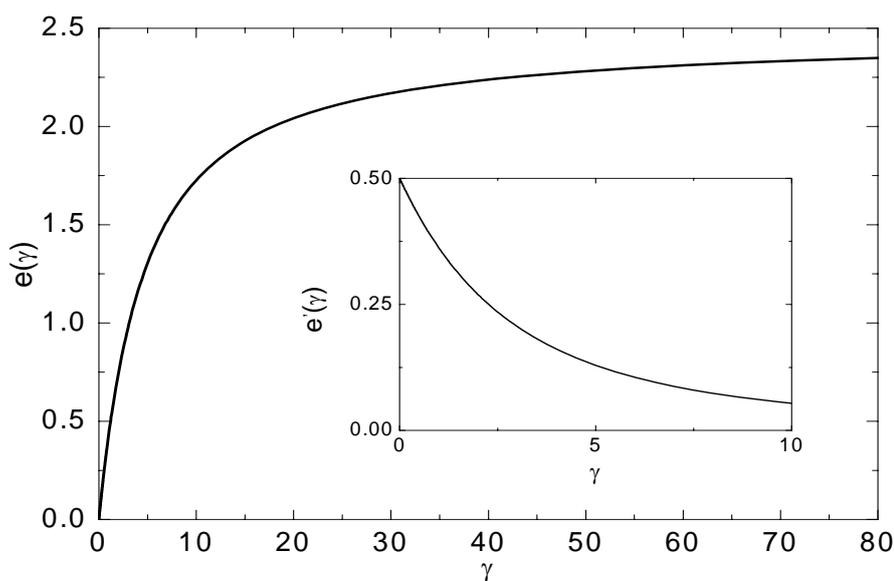


图 3.3 函数 $e(\gamma)$ 及其导数随 γ 的变化.

3.2.2 两体问题 Bethe ansatz 解

利用 Bethe ansatz 方法可求解一维任意耦合的多体问题，为了便于推广到多粒子 ($N \geq 2$) 波函数的求解，我们先用该方法求解上一小节的两体问题 ($N = 2$)。

同上节，我们考虑全同的两个玻色子，不妨设波函数为 $\psi(x_1, x_2)$ ，两粒子的坐标标记为如下区域：

$$0 \leq x_1 \leq x_2 \leq L. \quad (3.30)$$

那么在区域 $x_1 > x_2$ 上的波函数为 $\psi(x_2, x_1)$ ，由全同玻色子的坐标交换对称性知 $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ ，又两体相互作用项有接触碰撞势的形式，那么除了两粒子碰撞外，体系的波函数有满足自由粒子薛定谔方程的形式：

$$\psi = Ae^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + Be^{ik_2 x_1} e^{ik_1 x_2}, (x_1 \leq x_2). \quad (3.31)$$

其中 k_1 和 k_2 分别是两粒子的波矢，该系统总的动量为 $\hbar(k_1 + k_2)$ ，能量为 $\hbar^2(k_1^2 + k_2^2)/2m$ ，利用式(3.22)的关系可推得：

$$i(k_2 - k_1)(A - B) = c(A + B). \quad (3.32)$$

即：

$$\frac{B}{A} = \frac{k_2 - k_1 + ic}{k_2 - k_1 - ic}. \quad (3.33)$$

当 $k_2 - k_1$ 为实数时， $|A| = |B|$ 。当 $c \rightarrow \infty$ 时， $B \rightarrow -A$ ，有 $\psi(x_1, x_1) = 0$ ，与前面讨论的 TG 气体一致。此时在区间式(3.30)上的波函数可写为：

$$\psi(x_1, x_2) \propto (k_2 - k_1 - ic)e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + (k_2 - k_1 + ic)e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}. \quad (3.34)$$

考虑到波函数对于坐标交换的对称性，在区间 $0 \leq x_1 \leq L$ 和 $0 \leq x_2 \leq L$ 上的波函数可写为：

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) \propto & [k_2 - k_1 - ic \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} \\ & - [k_1 - k_2 - ic \operatorname{sgn}(x_2 - x_1)] e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

利用该波函数的周期性边界条件 $\psi(x_1, 0) = \psi(x_1, L)$ ，有：

$$e^{ik_1L} = e^{-ik_2L} = \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic}. \quad (3.36)$$

由此易得系统总的动量为：

$$P = \hbar(k_1 + k_2) = \mu \frac{2\pi\hbar}{L}. \quad (3.37)$$

其中 μ 是一个整数。对于系统基态来说，总动量为零，对应的波矢为 $k_1 = -k_2 = k$ ，据式(3.36)可求出 k 的值。

3.2.3 多体问题 Bethe ansatz 解

著名的 N 个玻色子的Bethe ansatz解由Lieb和Linger两人在 1963 年给出^[22]，考虑到波函数坐标交换对称性，将式(3.34)推广为：

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = R \sum_p (-1)^{[p]} \exp\left(i \sum_{n=1}^N k_{p_n} x_n\right) \prod_{j>l} [k_{p_j} - k_{p_l} - ic \operatorname{sgn}(x_j - x_l)]. \quad (3.38)$$

其 R 是归一化因子，求和式中 $[p]$ 指代波矢 k_1, k_2, \dots, k_N 的置换，奇数次相邻置换 $[p]$ 为奇数，偶数次相邻置换 $[p]$ 为偶数。该波函数满足 N 体薛定谔方程，系统总能量为：

$$E = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m}. \quad (3.39)$$

总动量为：

$$P = \sum_{j=1}^N \hbar k_j. \quad (3.40)$$

类似于两个粒子的情况，由周期性边界条件，式(3.36)可推广得如下关系式^[23]：

$$\exp(ik_jL) = \prod_{l(l \neq j)} \frac{k_j - k_l + ic}{k_j - k_l - ic}, \quad j=1, 2, \dots, N. \quad (3.41)$$

当 $c \rightarrow \infty$ ， $N=2$ 时的极限情况，上式就变成(3.9)式。对其求对数可得：

$$k_jL + \sum_{l=1}^N \theta(k_j - k_l) = 2\pi \left(n_j - \frac{N+1}{2} \right). \quad (3.42)$$

其中：

$$\theta(k) = i \ln \left(\frac{ic+k}{ic-k} \right) = 2 \arctan(k/c). \quad (3.43)$$

$\theta(k)$ 是关于 k 的一个连续函数, 当 $k \rightarrow \pm\infty$ 时, $\theta(k) = \pm\pi$. 当 $c \rightarrow \infty$ 时, 上式退化为(3.12)式. 上面关于波矢 $k_j (j=1, 2, \dots, N)$ 的 N 个耦合方程即是 Bethe ansatz 方程。

下面我们给出该系统的基态解, 基态的波矢对应于动量占据最低能态, 呈费米海分布, 类似于(3.12)式可写为:

$$k_j L + \sum_{l=1}^N \theta(k_j - k_l) = 2\pi \left(j - \frac{N+1}{2} \right), \quad j=1, 2, \dots, N. \quad (3.44)$$

考虑到热力学极限情况下, 波矢 k_j 和 k_{j+1} 在量级上的差别约为 $1/L$, 将 θ 函数作一阶泰勒展开得:

$$(k_{j+1} - k_j)L + (k_{j+1} - k_j) \sum_{m=1}^N \theta'(k_j - k_m) = 2\pi. \quad (3.45)$$

其中,

$$\theta'(k) = \frac{d\theta}{dk} = \frac{2c}{c^2 + k^2}. \quad (3.46)$$

为了方便计算, 引进一个关于 k 的函数 $f(k)$ 来表示 k 空间上的态密度, $Lf(k)dk$ 表示在 k 处无穷小间隔 dk 内的量子态数目. 即有 $k_{j+1} - k_j = 1/Lf(k_j)$. 由此上式可写为:

$$1 + 2c \int_{-K}^K \frac{f(k') dk'}{c^2 + (k - k')^2} = 2\pi f(k). \quad (3.47)$$

在此 K 指代波矢的上限, 其值可由总粒子数限制条件求出:

$$N = L \int_{-K}^K f(k) dk. \quad (3.48)$$

系统总能量为对所有单粒子态 $\hbar^2 k^2 / 2m$ 关于 k 的积分:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} L \int_{-K}^K k^2 f(k) dk. \quad (3.49)$$

做变量代换 $k = Ky$, 并定义 $g(y) \equiv f(Ky)$, $\lambda \equiv c/K$, 通过式(3.47)–(3.49)的联立和式(3.29)可得:

$$g(y) = \frac{1}{2\pi} + \frac{\lambda}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{g(t) dt}{\lambda^2 + (y-t)^2}. \quad (3.50)$$

$$\lambda = \gamma \int_{-1}^1 g(t) dy. \quad (3.51)$$

$$e(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3} \int_{-1}^1 t^2 g(t) dt. \quad (3.52)$$

给定 γ 和 g 的初始值, 解该耦合方程组可得 $e(\gamma)$ 的值, 从而得出基态下能量的表达式(3.29).

在热力学极限情况下 ($N \rightarrow \infty$), $e(\gamma)$ 等于基态下单粒子平均能量 E/N 除以 $\hbar^2 n_{1D}^2 / 2m$ 的值, 通过数值计算可得出 $e(\gamma)$ 随 γ 值变化的曲线, 类似于图 3.3 两个粒子的特殊情况, $e(\gamma)$ 及其导数 $e'(\gamma) = de/d\gamma$ 随 γ 的变化如图 3.4 所示:

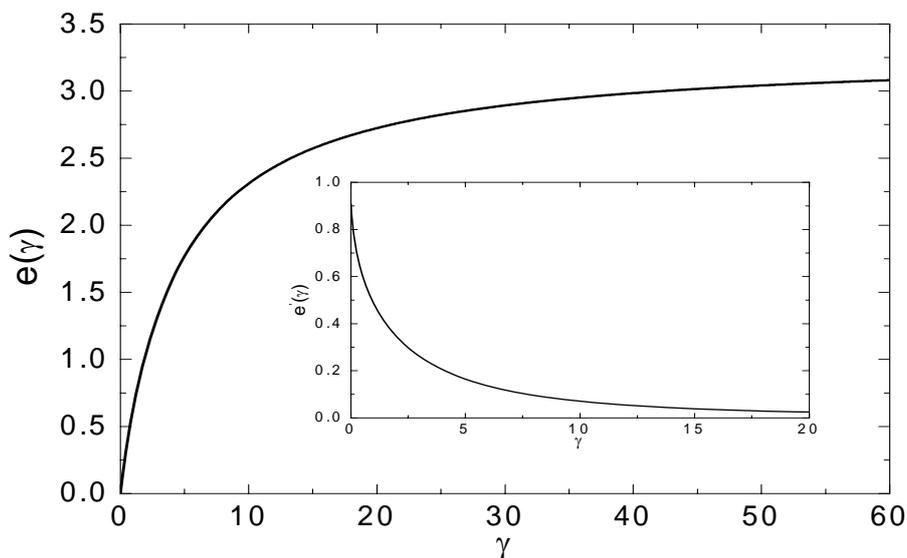


图 3.4 热力学极限情况下 ($N \rightarrow \infty$), 函数 $e(\gamma)$ 及其导数随 γ 的变化.

现在考虑 Tonks-Girardeau 极限, 即 $\gamma \rightarrow \infty$ 时, $g = 1/2\pi$, $\lambda = \gamma/\pi$, 可得 $e(\gamma) = \pi^2/3$. 将其带入到式(3.28)中, 得到对应基态下单粒子的平均能量, 如式(3.14)所示。

第四章 一维势阱中的玻色-费米混合物

前面讨论了一维任意耦合的玻色气体，在这一章我们考虑体系处于基态，且粒子间的相互作用为 TG 类型的简单情形，不同的是将玻色子推广为严格限制条件下的玻色-费米混合物，讨论它们在不同的束缚势中的基态解。利用扩展的玻色-费米映射理论，我们计算混合气体中费米子的约化单粒子密度矩阵、自然轨道和动量分布，并分别给予讨论。

§ 4.1 势阱中的玻色-费米混合物

考虑一维势阱中束缚粒子数为 $N = N_B + N_F$ 的玻色-费米混合物， N_B 为玻色子的数目， N_F 为费米子的数目。在低线性粒子数密度条件下，该系统的哈密顿量可写为：

$$H = \int dx \left\{ \psi_b^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m_b} \partial_x^2 + V_b(x) \right) \psi_b + \psi_f^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m_f} \partial_x^2 + V_f(x) \right) \psi_f + \frac{1}{2} g_{bb} \psi_b^\dagger \psi_b^\dagger \psi_b \psi_b + g_{bf} \psi_b^\dagger \psi_f^\dagger \psi_f \psi_b \right\}. \quad (4.1)$$

其中， ψ_b, ψ_f 分别是玻色子和费米子的场算符，且假定玻色子和费米子质量相等 $m_b = m_f = m$ ，这可以利用碱金属元素的同位素来近似实现，比如 $^{40}\text{K} - ^{39(41)}\text{K}$ [24] 或 $^{86(84)}\text{Rb} - ^{87(85)}\text{Rb}$ [25]，玻色子之间的接触势为 g_{bb} ，玻色子和费米子之间的接触势为 g_{bf} ，费米子之间由于泡利不相容原理没有相互作用 ($g_{ff} = 0$)，同时假定外势对它们的作用也相等 $V_b(x) = V_f(x) = V(x)$ 。

4.1.1 玻色-费米映射理论

最初的玻色-费米映射理论由 Girardeau 在 1960 年提出 [21]，它将强相互作用的玻色子和无相互作用的费米子联系起来，近来发现该理论可应用于极化的费米子 [26] 和玻色-费米混合物 [27]。为了便于描述，我们将这个 N 粒子系统的空间坐标用

$X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ 来统一地进行标记, 当 $i \in \{1, \dots, N_B\}$ 时, x_i 指代玻色子的空间坐标; 当 $i \in \{N_B + 1, \dots, N_B + N_F = N\}$ 时, x_i 指代费米子的空间坐标。在硬核接触碰撞条件下, 相互作用项 $g_{bb}, g_{bf} \rightarrow \infty$, 可将哈密顿量中粒子相互作用部分忽略掉, 此时系统多体波函数的约束条件为, 在 $x_i = x_j (i \neq j)$ 时有:

$$\Phi(X) = 0. \quad (4.2)$$

此时, 一次量子化条件下玻色-费米混合物的哈密顿量是单体哈密顿量算符的简单求和 $\sum_{i=1}^N h_i$, 其中:

$$h_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{x_i}^2 + V(x_i). \quad (4.3)$$

利用玻色-费米映射理论^[27], 满足上面约束条件的系统总的波函数可写为:

$$\Phi(X) = A(X) \Phi_D(X). \quad (4.4)$$

其中 $\Phi_D(X)$ 是由互相正交的、 N 个粒子的单体波函数 $u_1(x), u_2(x), \dots, u_N(x)$ 构成的 N 阶斯莱特行列式:

$$\Phi_D(X) = \sum_P \varepsilon(P) u_1(Px_1) u_2(Px_2) \cdots u_N(Px_N). \quad (4.5)$$

上式有 $N!$ 个不同置换项的求和, 其中 $\varepsilon(P) = +1(-1)$ 对应于偶数 (奇数) 次置换, 体系坐标交换对称性通过映射函数 $A(X)$ 来改变:

$$A(X) = \prod_{1 \leq j < l \leq N_B} \text{sgn}(x_j - x_l) \prod_{j=1}^{N_B} \prod_{l=N_B+1}^N \text{sgn}(x_j - x_l). \quad (4.6)$$

这样, 系统总的波函数为: 玻色子之间的坐标交换满足对称性, 费米子之间的坐标为交换反对称性。当 $x > 0$ 时, 符号函数 $\text{sgn}(x) = 1$; 当 $x < 0$ 时, $\text{sgn}(x) = -1$.

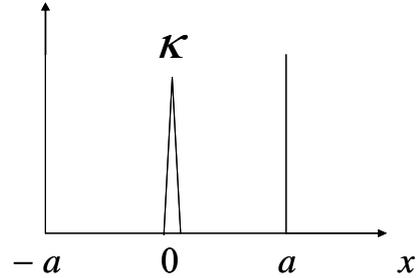
4.1.2 不同束缚势下的本征解

设在束缚势阱 $V(x)$ 中, 体系中单粒子哈密顿量的本征函数为 $u_n(x)$, 对应的本征值为 ε_n , 其本征方程为:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)u_n(x) = \varepsilon_n u_n(x). \quad (4.7)$$

其中 $n=1,2,\dots,N$. 我们计算了不同束缚外势下 $V(x)$ 的本征值问题:

(A) 无限深方势阱中间含有 δ 势垒: 如右面示意图所示, 方势阱区域为 $(-a, a)$, 坐标原点处有可调节势垒高度的 δ 势, 在区域 $(-a, a)$ 外是无限高的势垒, 即:



$$V(x) = \begin{cases} \kappa\delta(x), & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (4.8)$$

在此外势下, 本征方程(4.7)的解在量子力学书里能找到^[28], 这里作简要回顾, 该方程的本征态有确定的宇称: 偶宇称和奇宇称。其偶宇称解为: 当 $|x| < a$ 时,

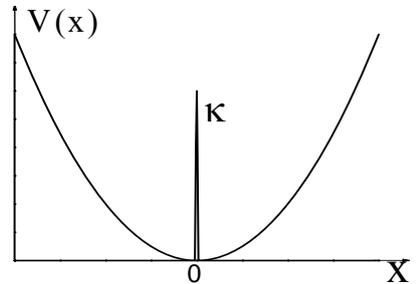
$$u_n(x) = C \left(\cos(kx) + \frac{m\kappa}{\hbar^2 k} \sin(k|x|) \right), \quad (n=1,3,5,\dots). \quad (4.9)$$

当 $|x| > a$ 时, $u_n(x) = 0$. 其中 C 是归一化常数, k 是波矢, 由阶跃条件 $\tan(ka) = -\hbar^2 k / m\kappa$ 决定, 本征能量为 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$; 其奇宇称解由于坐标原点的值为零, 不受势垒影响, 与没有势垒的解相同, 波函数可写为:

$$u_n(x) = C \sin(kx), \quad (n=2,4,6,\dots). \quad (4.10)$$

波矢 $k = n\pi / 2a$, 对应的本征能量 $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m(2a)^2$. 在以后的计算中, 我们将坐标值以方势阱的一半, 即 a 为单位, 动量以 $p = \hbar / 2a$ 为单位, 能量以 $\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ 为单位。

(B) 谐振子势阱中间含有 δ 势垒: 如右面示意图所示, 简谐势阱的频率为 ω , 同样, 在坐标原点处存在一个 δ 函数类型的势垒, δ 势垒的高度, 即 κ 的值从 $\kappa \in (0, \infty)$ 可变, 此外势可写为如下形式:



$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \kappa \delta(x). \quad (4.11)$$

奇宇称解同上面类似，与没有势垒谐振子势的解相同，可写为：

$$u_n(x) = N_n H_n(Q) e^{-Q^2/2}, \quad n=1,3,5,\dots \quad (4.12)$$

上式中 $N_n = (\sqrt{\pi} 2^n n! x_{osc})^{-1/2}$ ，且 $Q = x/x_{osc}$ ，谐振子的特征长度为 $x_{osc} = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ， $H_n(Q)$ 是厄米多项式，相应的能量本征值为 $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ ；其偶宇称解由于受中间 δ 势垒的影响，不同于奇宇称解，可写为^[29,30]：

$$u_n(x) = N_n e^{-Q^2/2} U(-\nu_n, 1/2, Q^2), \quad n=0,2,4,\dots \quad (4.13)$$

其中， $U(a,b,z)$ 是库默合流超几何函数(Kummer's confluent hypergeometric function)^[31]。能量本征值为 $E_n = (2\nu_n + 1/2)\hbar\omega$ ， ν_n 是类似与谐振子量子数 n 的一个非整数，其值由式 (4.14) 超越代数方程来确定：

$$2\Gamma(-\nu_n + 1/2) + \kappa\Gamma(-\nu_n) = 0. \quad (4.14)$$

同样，在以后的变量中，长度以谐振子的特征长度 x_{osc} 为单位，动量以 $p_{osc} = \hbar/x_{osc} = \sqrt{m\hbar\omega}$ 为单位，能量以 $\hbar\omega$ 为单位。

由上面的单粒子本征态，我们可以构建一个描述无相互作用费米子的斯莱特行列式 $\Phi_D(X)$ ，通过玻色费米映射我们可以给出多体玻色子的波函数 $\Phi(X)$ 。

§ 4.2 约化单粒子密度矩阵

一维量子气体的量子关联，在第二章曾有过叙述，可通过约化单粒子密度矩阵(RSPD)来体现，此处，玻色子和费米子的约化单粒子密度矩阵(RSPD)分别写为：

$$\begin{aligned} \rho_B(x,y) &= N_B \int dX' \Phi^*(x, X') \Phi(y, X'), \\ \rho_F(x,y) &= N_F \int dX'' \Phi^*(X'', x) \Phi(X'', y). \end{aligned} \quad (4.15)$$

其中 $X' = (x_2, \dots, x_N)$ ， $X'' = (x_1, \dots, x_{N-1})$ ，以上两式分别归一化到 N_B 和 N_F 。虽然外势不尽相同，有人算过纯玻色子^[32]和玻色-费米混合物^[33]的约化单粒子密度矩阵，这里作为对比，我们给出纯费米子的约化单粒子密度矩阵：

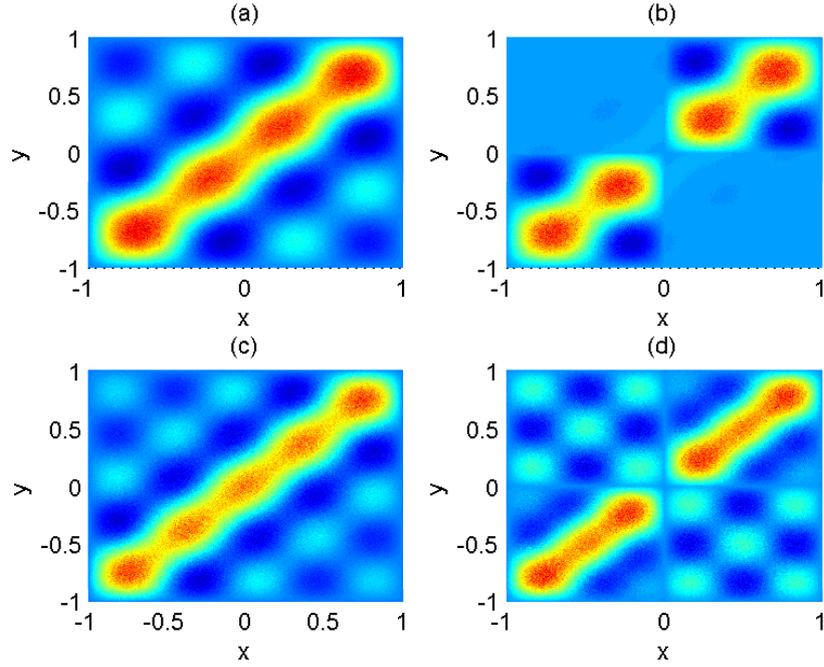


图 4.1 无限深方势阱中费米子的约化单粒子密度矩阵. δ 势垒分别为:
 (a) $\kappa = 0.1$ ($N = N_F = 4$), (b) $\kappa = 100$ ($N = N_F = 4$),
 (c) $\kappa = 0.1$ ($N = N_F = 5$), (d) $\kappa = 100$ ($N = N_F = 5$). 坐标值为 $-a < x, y < a, a = 1$.

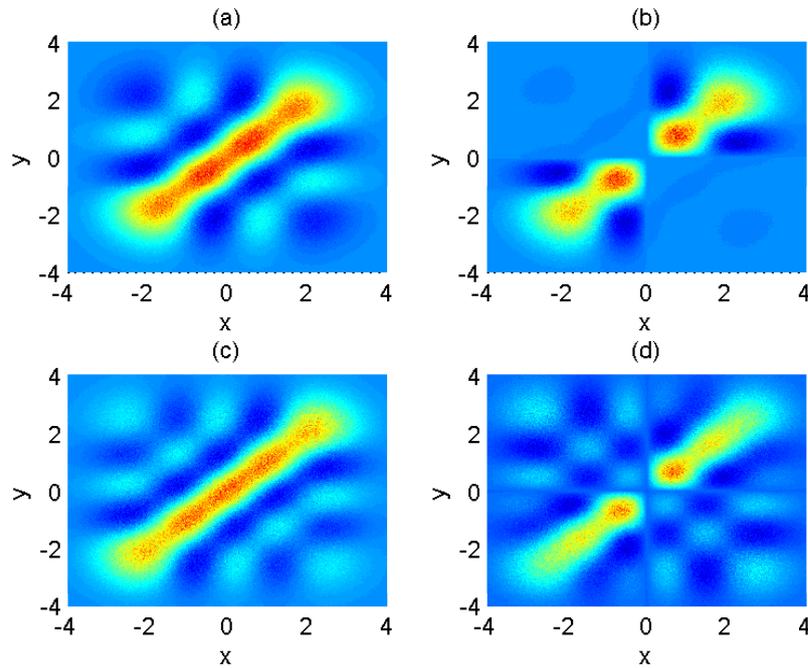


图 4.2 谐振子势阱中费米子的约化单粒子密度矩阵. δ 势垒分别为:
 (a) $\kappa = 0.1$ ($N = N_F = 4$), (b) $\kappa = 100$ ($N = N_F = 4$),
 (c) $\kappa = 0.1$ ($N = N_F = 5$), (d) $\kappa = 100$ ($N = N_F = 5$). 坐标值为 $-a < x, y < a, a = 4$.

如图 4.1 和图 4.2 所示, 在不同外势下 (无限深方势阱, 简谐势阱) 偶数个粒子 ($N=4$) 在 δ 势垒很小时有关联, 很大时则没有关联; 奇数个粒子 ($N=5$) 则不同, 在 δ 势垒很大时仍有关联。这个现象可类似地用能带论来解释^[23], 坐标中间的 δ 势垒把势阱分割成对称的双势阱, 类似地可扩展成多格点周期势, 形成能带结构, 每个能带只有一个能级, 当 N 为奇时, 最高能级只有一个粒子, 占据半满, 类似于导带粒子可自由运动, 导致了约化密度矩阵的关联。

在 TG 极限情况下, 对角元素退化成为单粒子密度分布 $\rho_B(x,x) = \rho_B(x)$ 和 $\rho_F(x,x) = \rho_F(x)$, 此时由于映射函数的平方等于 1, 二者的密度分布完全相同, 它们都与由 N 个玻色子组成 TG 气体的密度 $\rho_{TG}(x)$ 成比例, 即:

$$\rho_B(x)/N_B = \rho_F(x)/N_F = \rho_{TG}(x)/N. \quad (4.16)$$

我们分别给出了坐标中间都带有 δ 势垒的方势阱(A)和谐振子势阱(B)的密度分布如下图 4.3 所示:

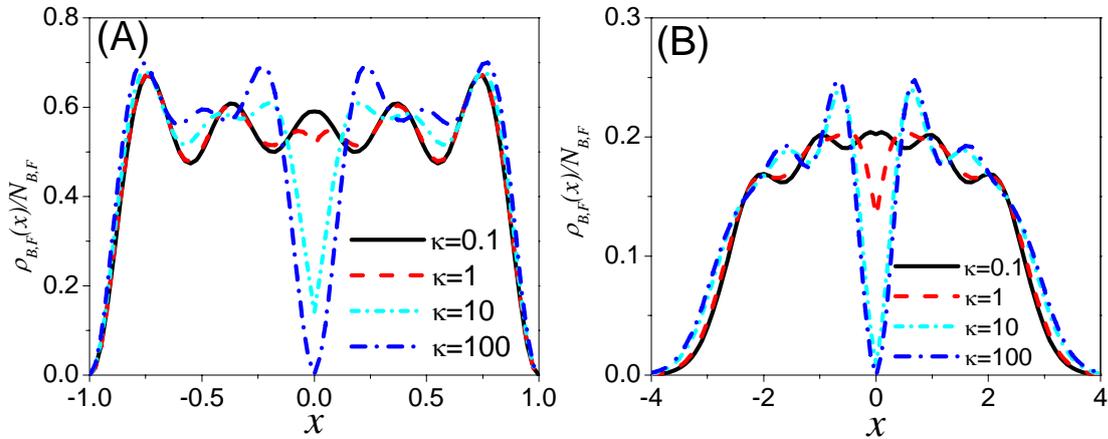


图 4.3 不同 δ 势垒下总的粒子数密度分布图 ($N = N_B + N_F = 5$)

上图中我们分别给出了不同势垒高度 ($\kappa = 0.1, 1, 10, 100$), 混合物总粒子数都为 $N=5$, 玻色子 (费米子) 约化密度矩阵上对角元素的分布, 两幅图的密度都归一化为 $\int \rho_{B,F}(x)/N_{B,F} dx = 1$. 当势垒 κ 小到可以忽略时, 其峰值个数等于总粒子数, 此时, 密度分布在大粒子数 N 的极限情况下, 对于方势阱来说, 呈现趋于平坦的梯形分布; 对于谐振子势阱来说, 是一个半径为 $R = \sqrt{2N}$ 的半圆; 当渐渐地

增大势垒，切割了中间部分，密度分布以势垒为中心呈现对称的两部分，峰值个数也不再等于粒子数目，体系出现了内在关联的特征，这一点在 4.4 所示的动量分布中更为明显。位于坐标中间的 δ 势垒对谐振子势阱中密度的抑制似乎更加有效，这点可以这样来理解：在我们采取的能量单位中，方势阱以 $\pi^2\hbar^2/2ma^2$ 为单位，谐势阱以 $\hbar\omega$ 为单位，据 $a = x_{osc} = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ ，即 $\hbar\omega = \hbar^2/ma^2$ ，知方势阱能量的单位比谐振子能量单位大 $\pi^2/2$ 。

§ 4.3 自然轨道

如前所述，判断一个宏观系统是否出现BEC的依据是，看它的约化单粒子密度矩阵 $\rho(x,y)$ 在 $|x-y| \rightarrow \infty$ 时的行为。虽然这个标准不适合介观系统，尤其是一维系统不可能出现BEC，但是当 ρ 的最大本征值远大于其他本征值时，可认为体系出现类似BEC的关联效应^[34]。因此，我们给出 ρ 对应于本征函数（自然轨道） $\phi_j(x)$ 的本征值 λ_j ，相应的本征方程为：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_F(x,y)\phi_j(y)dy = \lambda_j\phi_j(x). \quad (4.17)$$

其中 λ_j 代表轨道 $\phi_j(x)$ 的占据数，且有 $\sum_j \lambda_j = N$ 。

数值结果如图 4.4 所示，不同势阱中，相同粒子比例的自然轨道基本相同，纯费米子体系的轨道占据数都相同。当 $\kappa = 0.1$ 时，随着混合物中玻色子成分的增多，第一轨道占据数的比重逐渐增加；当 $\kappa = 100$ 时，玻色-费米混合物总粒子数为偶 ($N = 4$) 的轨道占据数成对出现，它们形成简并的自然轨道，这是因为强 δ 势垒下，势阱被分割成对称的双势阱，有着相同的简并能级所致。

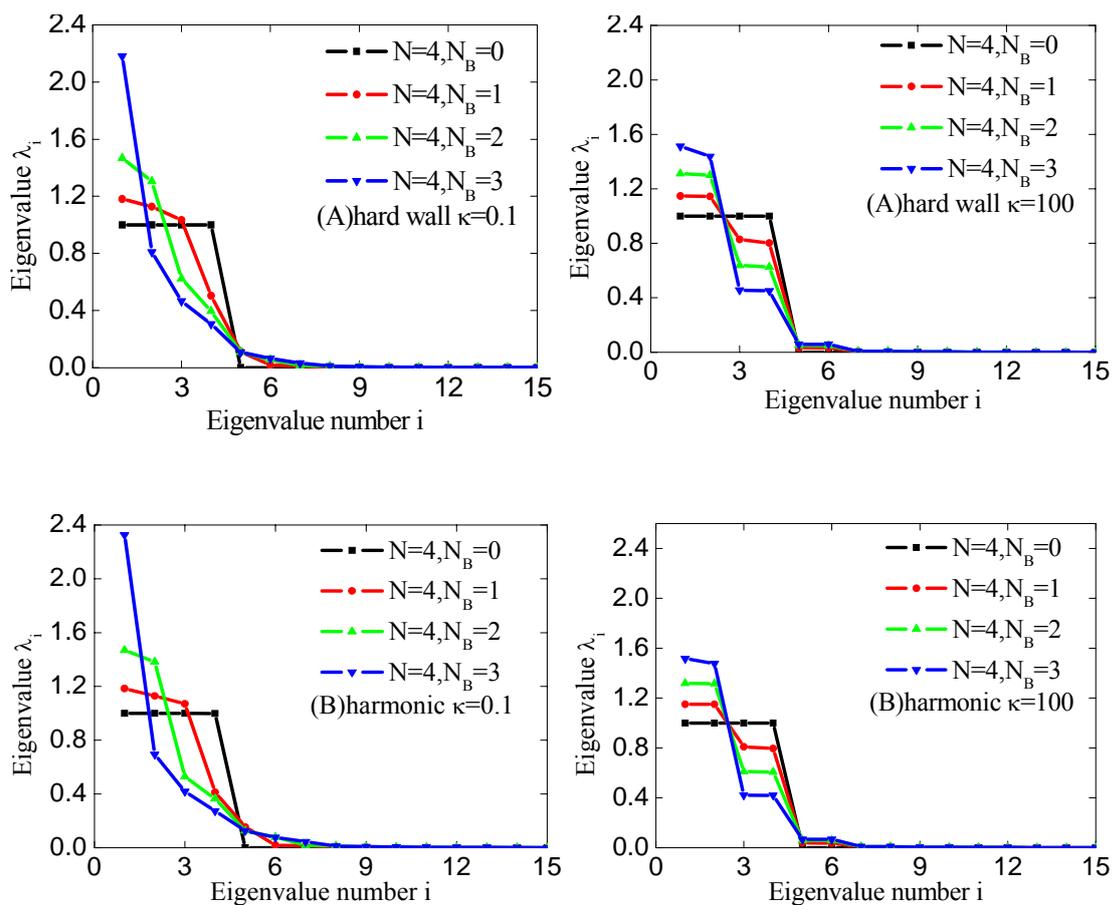


图 4.4 总粒子数为偶，费米子约化单粒子密度矩阵的自然轨道

对于在不同的外势下，粒子数为奇 ($N=5$)，且势垒很高时 ($\kappa=100$)，玻色-费米混合体系中费米子的自然轨道与总粒子数为偶 ($N=4$) 且势垒可忽略 ($\kappa=0.1$) 的情况类似，几乎不出现简并对的形式，轨道占据数一个接一个地降低，而纯费米子体系中费米子的轨道占据数仍然相同，如图 4.5 所示：

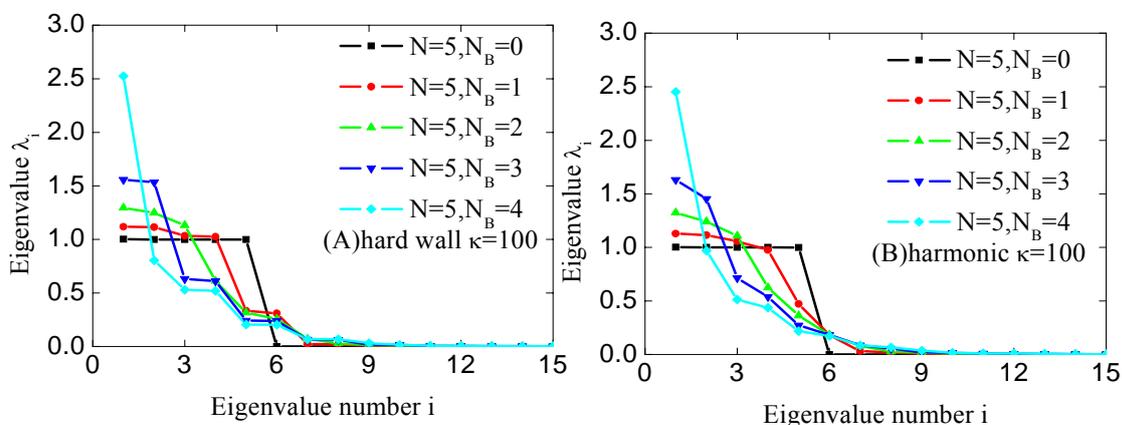


图 4.5 总粒子数为奇，费米子约化单粒子密度矩阵的自然轨道

§ 4.4 玻色-费米混合物的动量分布

在 TG 极限情况下, 玻色-费米映射理论给出的玻色子和费米子的密度分布完全相同。然而, 它们的动量分布却有着显著的差别, 动量分布由约化单粒子密度矩阵的傅里叶变换给出:

$$n_{B,F}(p) = \frac{1}{2\pi} \iint \rho_{B,F}(x, y) e^{-ip(x-y)} dx dy. \quad (4.18)$$

上式归一化到 N , 有文献已经指出^[29, 32, 33], 玻色子部分 $n_B(p)$ 和 TG 气体相同, 这同样是由于玻色子之间和玻色子、费米子之间的置换对称性被映射函数改变所致。我们主要针对费米子的动量分布 $n_F(p)$, 关于费米子部分的计算比较复杂, 其密度矩阵没有一个解析的表达式^[35], 我们借助数值方法来进行求解。为了计算方便, 我们用动量分布的另外一个表达式:

$$n_F(p) = N \int dX'' \left| \tilde{\Phi}(X'', p) \right|^2. \quad (4.19)$$

其中 $\tilde{\Phi}(X'', p)$ 是关于 $\tilde{\Phi}(X'', x_N)$ 的傅里叶变换, x_N 是最后一个费米子坐标变量:

$$\tilde{\Phi}(X'', p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_N \Phi(X'', x_N) e^{-ipx_N}. \quad (4.20)$$

最近的一篇文章中, Lelas 等人研究了在带有高斯型势垒谐振子式中, 玻色-费米混合物的约化单粒子密度矩阵, 动量分布, 自然轨道的占据数^[33]。然而他们只给出势垒很强的极限情况, 我们涉及了不同势垒强度、不同外势下(无限深方势阱, 谐振子势阱)费米子动量分布的对比。

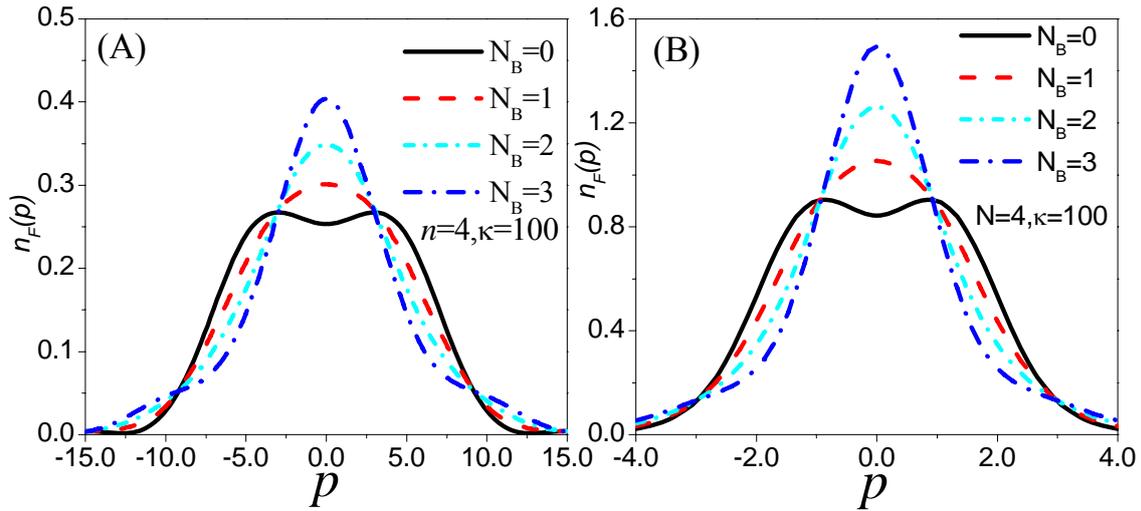


图 4.6 强势垒 $\kappa = 100$ 、总粒子数为偶的费米子动量分布

如图 4.6 所示，在两势阱中势垒强度都为 $\kappa = 100$ 的情况下，保持总粒子数 $N = 4$ 不变，玻色子的数目从 $N_B = 0$ 增加到 3，费米子的动量分布（A 图中动量以 $\hbar/2a$ 为单位，B 图中动量以 $\sqrt{m\hbar\omega}$ 为单位），混合物中 $N_B = N$ 或 $N - 1$ 情况相同，这是由于单个粒子不能体现出该种粒子的统计性质。从图中可以看出，带有 δ 势垒的方势阱和谐振子势阱中，费米子的动量都呈现为振铃形分布，而它们的特征动量值却有明显的不同，当逐渐减少总粒子数的玻色子数目时，这个现象更为明显。需要指出的是：除了稍微使动量分布变宽、降低其峰值之外，两势阱中间的 δ 势垒，对势阱中数目为偶的粒子的动量分布影响不大。当总粒子数目为奇时，情况却很不相同。

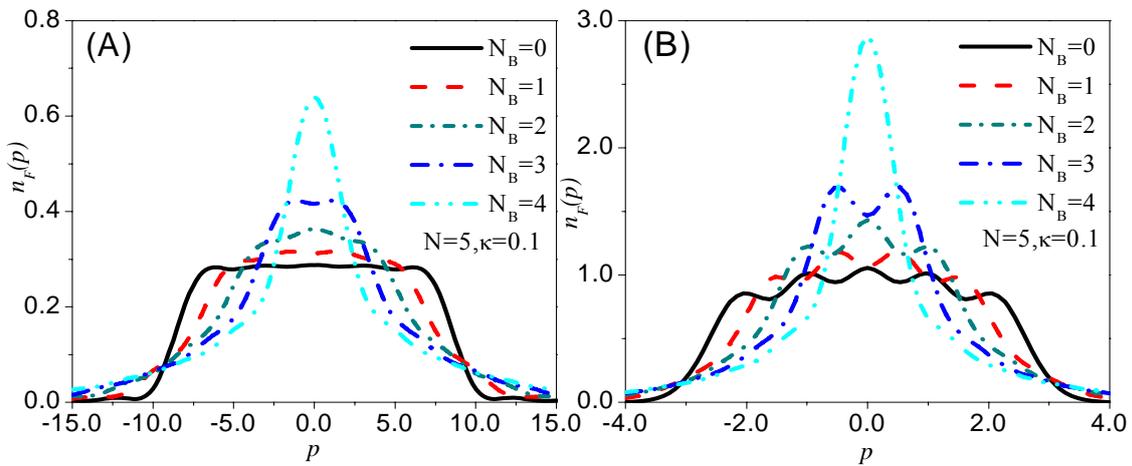


图 4.7 势垒 $\kappa = 0.1$ 、总粒子数为奇的费米子动量分布

如图 4.7 所示，在弱势垒作用 ($\kappa = 0.1$) 下，玻色-费米混合物中总粒子数为奇 ($N = 5$) 时的费米子的动量分布。随着玻色子的数目从 0 增加到 4 (或者 5)，费米子的动量分布愈加受到抑制，当混合物中全是玻色子时，呈现出典型的 Tonks-Girardeau 类型的动量分布。在强势垒作用下，奇数个粒子的动量分布有所变化，如图 4.8 所示：

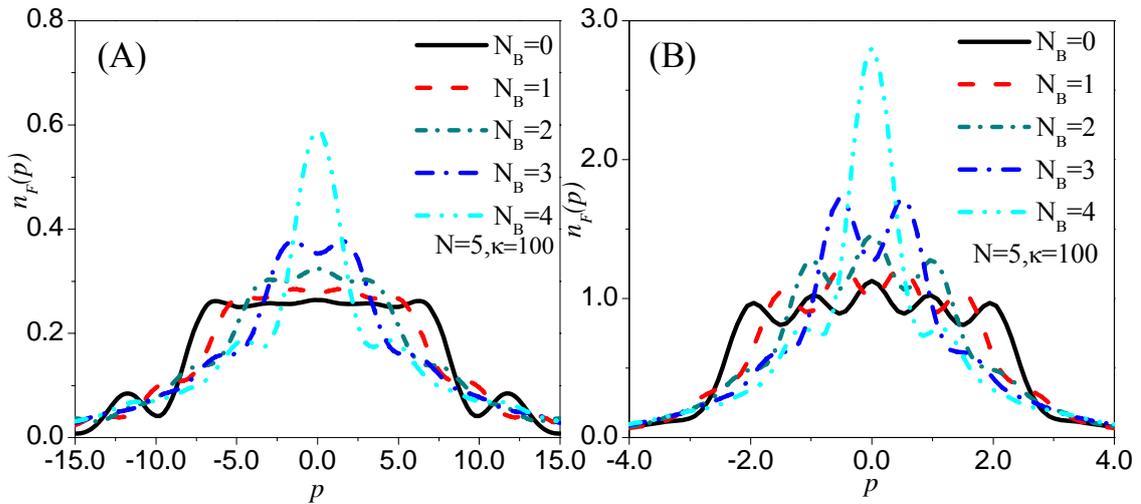


图 4.8 强势垒 $\kappa = 100$ 、总粒子数为奇的费米子动量分布。

从图 4.8 可以看出，与弱势垒不同的是，强势垒下费米子的动量分布出现了次峰，这是由于在两个几乎分立的势阱中粒子之间的相互干涉造成的。对于总粒子数为奇，玻色子和费米子数目之间的不同组合，都有次峰的出现，但随着混合物的成份中玻色子比重的增大，次峰向着趋于零动量的方向移动。我们仍注意到，无限深方势阱和谐振子势阱中费米子特征动量不同，但是当混合物改变成为纯费米子时，在大粒子数 N 极限情况下，(对于方势阱来说 $k \sim \pi N/2$ ，对于谐振子势阱来说 $k \sim \sqrt{2N}$)，则呈现出阶梯函数类型的动量分布。

第五章 总结与展望

本文主要基于坐标中间都带有可调 δ 势垒的无限深方势阱和谐振子势阱两个模型的基础上, 应用玻色-费米映射理论, 详细研究了粒子之间的相互作用为 Tonks-Girardeau 类型的玻色-费米混合物的基态性质, 并对两个模型下的密度分布、动量分布、自然轨道分别作了对比, 我们发现:

1) 混合物中费米子的约化单粒子密度分布不仅取决于外势的形状, 还与体系总的粒子数 N 有关, 当 N 为奇数时, 出现了明显的关联现象, 而 N 为偶数时, 则关联现象不明显。中间带有 δ 势垒的谐振子势阱, 对费米子单体约化密度的改变要大于方势阱的情形。

2) 势阱中间强 δ 势垒的出现, 极大地加强了势垒两边的关联, 费米子动量分布中次峰的出现, 除了与总粒子数 N 有关外, 还与混合物中玻色子和费米子的比例有关, 当玻色子的比例增大时, 次峰向中间移动, 当体系为纯玻色子时, 呈现出典型的 Tonks-Girardeau 类型的动量分布。

3) 不同势阱中, 总粒子数目为偶的系统, 在中间 δ 势垒高时, 费米子约化单粒子密度矩阵的自然轨道出现配对, 其它情况几乎不出现配对。当体系为纯费米子系统时, 费米子约化单密度矩阵的自然轨道占据数都相同。

近年来, 理论和实验上都对强相互作用下的准一维超冷原子有着浓厚的兴趣, 自旋二分量的一维强相互作用费米气体的研究, 使得在实验上可以用带有不同自旋的粒子来实现新奇的相^[36, 37]; 低激发态强吸引相互用的超TG气体(super Tonks-Girardeau gas)也已在实验上实现^[13]。人类探索微观世界的步伐从未停下, 理论和实验相互依赖, 相互促进, 在这个过程中形成的技术革新, 不断地被应用于人们的生产和生活, 极大地丰富着人们的物质世界和精神世界。

附录 A

式(2.6)化简过程如下:

$$\begin{aligned}
N &= N_{ex}(T_C) \\
&= \int_0^\infty \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T_C} - 1} g(\varepsilon) d\varepsilon \\
&= \int_0^\infty \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T_C} - 1} \frac{Vm^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \\
&= \frac{Vm^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1} e^{\varepsilon/k_B T_C} - 1} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \\
&= C_{3/2} (k_B T_C)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1} e^x - 1} dx .
\end{aligned} \tag{A.1}$$

其中, $C_{3/2} = \frac{Vm^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3}$, 在给定系统体积和量子气体单粒子质量后是一个常数;

$z = e^{\mu/kT}$, 是系统的逸度。式中的积分项可做如下化简:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dx \frac{x^{\gamma-1}}{z^{-1} e^x - 1} \\
&= \int_0^\infty dx x^{\gamma-1} z e^{-x} \frac{1}{1 - z e^{-x}} \\
&= \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty dx x^{\gamma-1} z e^{-x} z^n e^{-nx} \\
&= \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty dx x^{\gamma-1} z^n e^{-nx} \\
&= \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty \frac{dy}{n} \left(\frac{y}{n}\right)^{\gamma-1} z^n e^{-y} \\
&= \int_0^\infty dy y^{\gamma-1} e^{-y} \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^\gamma} \\
&= \Gamma(\gamma) g_\gamma(z)
\end{aligned} \tag{A.2}$$

第三步令 $y = nx$, 其中 $\Gamma(\gamma) = \int_0^\infty dy y^{\gamma-1} e^{-y}$ 是伽马函数, $g_\gamma(z) = \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^\gamma}$, 当 $z=1$ 时,

$g_\gamma(1) = \zeta(\gamma) = \sum_{n=1}^\infty n^{-\gamma}$ 是黎曼 zeta 函数。由以上两式可得($\gamma=3/2$):

$$\begin{aligned}
N &= N_{ex}(T_C) \\
&= C_{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(z) (k_B T_C)^{3/2} .
\end{aligned} \tag{A.3}$$

附录 B

式(3.13)推导过程，将式(3.12)代入式(3.8)可得：

$$\begin{aligned}
\psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N) &= C \det \left[e^{ik_j x_l} \right] \\
&= C \begin{vmatrix} e^{i\frac{2\pi}{L}\left(1-\frac{N+1}{2}\right)x_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(1-\frac{N+1}{2}\right)x_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(1-\frac{N+1}{2}\right)x_N} \\ e^{i\frac{2\pi}{L}\left(2-\frac{N+1}{2}\right)x_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(2-\frac{N+1}{2}\right)x_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(2-\frac{N+1}{2}\right)x_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ e^{i\frac{2\pi}{L}\left(N-\frac{N+1}{2}\right)x_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(N-\frac{N+1}{2}\right)x_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}\left(N-\frac{N+1}{2}\right)x_N} \end{vmatrix} \\
&= C e^{-i\frac{2\pi}{L}\frac{N+1}{2}\sum_j x_j} \begin{vmatrix} e^{i\frac{2\pi}{L}x_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}x_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}x_N} \\ e^{i\frac{2\pi}{L}2x_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}2x_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}2x_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ e^{i\frac{2\pi}{L}Nx_1} & e^{i\frac{2\pi}{L}Nx_2} & \dots & e^{i\frac{2\pi}{L}Nx_N} \end{vmatrix} \\
&= C e^{-i\frac{2\pi}{L}\frac{N+1}{2}\sum_j x_j} \begin{vmatrix} z_1 & z_2 & \dots & z_N \\ z_1^2 & z_2^2 & \dots & z_N^2 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ z_1^N & z_2^N & \dots & z_N^N \end{vmatrix} \\
&= C e^{-i\frac{2\pi}{L}\frac{N+1}{2}\sum_j x_j} \prod_j z_j \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ z_1^1 & z_2^1 & \dots & z_N^1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ z_1^{N-1} & z_2^{N-1} & \dots & z_N^{N-1} \end{vmatrix} \tag{B.1} \\
&= C e^{-i\frac{2\pi}{L}\frac{N+1}{2}\sum_j x_j} \prod_j z_j \prod_{j>l} (z_j - z_l).
\end{aligned}$$

其中 $z_j = e^{i2\pi x_j/L}$ ， C 是归一化常数，最后一步利用了范德门行列式(vandermonde determinant)的基本性质，根据玻色-费米映射理论有：

$$\begin{aligned}
\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= |\psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N)| \\
&= C \prod_{j>l} |z_j - z_l| \\
&= C \prod_{j>l} |e^{i2\pi x_j/L} - e^{i2\pi x_l/L}| \\
&= C 2^{N(N-1)/2} \prod_{j>l} |\sin \pi(x_j - x_l)/L|.
\end{aligned} \tag{B.2}$$

归一化常数 C 利用 $\int_0^L \cdots \int_0^L dx_1 \cdots dx_N |\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 = 1$ 可求得为:

$$C = (N! L^N)^{-1/2} \tag{B.3}$$

综上, TG 气体的波函数为:

$$\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{2^{N(N-1)/2}}{\sqrt{N! L^N}} \prod_{j>l} |\sin \pi(x_j - x_l)/L|. \tag{B.4}$$

参考文献

- [1] R. G. Hulet, *Science*. **291**, 2570 (2001).
- [2] S. N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924).
- [3] A. Einstein, Sitzungsber k, Preuss, et al. *Phys Math Kl*, 22:261 (1924).
- [4] C. E. Hecht, *Physica* **25**, 1159 (1959).
- [5] W. C. Stwalley and L. H. Nosanow, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 910 (1976).
- [6] M. H. Anderson, J.R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science*. **269**, 198 (1995).
- [7] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [8] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. kleppner, and T. J. Greytak, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3811 (1998).
- [9] C. J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation In Dilute Gases* (2008), 2rd edition. Cambridge University Press.
- [10] A. Gorlitz J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [11] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* (London). **429**, 277 (2004).
- [12] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science*. **305**, 1125 (2004).
- [13] E. Haller, M. Gustavasson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H.-C. Nägerl, *Science*. **325**, 1224 (2009).
- [14] 汪志诚, 《热力学·统计物理》, 高等教育出版社 (1993). P:244, 256.
- [15] O. Penrose, *Phil. Mag.* **42**, 1373 (1951).
- [16] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. (Oxford, Pergamon, 1958). §133.
- [17] C. N. Yang. *Rev. Mod. Phys.*, **34**, 4 (1962).
- [18] O. Penrose, L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956).
- [19] 曾谨言, 量子力学, 卷 II, 第三版, 科学出版社, 2000, P: 45.
- [20] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and B. E. Granger, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 030402 (2004).
- [21] M. Girardeau, *J. Math. Phys.* **1**, 516 (1960).

- [22] E. H. Lieb, *Phys. Rev.* **130**, 2518 (1963).
- [23] 尹相国, 博士论文: 一维相互作用量子气体的基态和热力学性质, 山西大学(2009).
- [24] R. Côté, A. Dalgarno, H. Wang and W. C. Stwalley, *Phys. Rev. A.* **57**, R4118 (1998).
- [25] J. P. Burke, J. L. Bohn, *Phys. Rev. A.* **59**, 1303 (1999).
- [26] M. D. Girardeau and E. M. Wright, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010406 (2005).
- [27] M. D. Girardeau and A. Minguzzi, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 230402 (2007).
- [28] 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.
- [29] J. Goold and Th. Busch, *Phys. Rev. A.* **77**, 063601 (2008).
- [30] Th. Busch, B. G. Englert, K. Rzazewski, and M. Wilkens, *Found. Phys.* **28**, 549 (1998).
- [31] M. Abramowitz and I. A. Stegun, eds, *Handbook of Mathematica Functions* (Dover, New York, 1972).
- [32] X. Yin, S. Chen, and Y. Zhang, *Phys. Rev. A.* **79**, 053604 (2009).
- [33] K. Lelas, D. Jukić and H. Buljan, *Phys. Rev. A.* **80**, 053617 (2009).
- [34] M. D. Girardeau, E. M. Wright, and J. M. Triscari, *Phys. Rev. A.* **63**, 033601 (2001).
- [35] B. Fang, P. Vignolo, C. Miniatura and A. Minguzzi, *Phys. Rev. A.* **79**, 023623 (2009).
- [36] H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, M. Köhl, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 210401 (2005).
- [37] Y. Liao, A. S. C. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. B. Partridge, R. G. Hulet, S. K. Baur, and E. J. Mueller, arxiv: 0912.0092.

硕士期间发表的论文

1. **Xiaolong Lü**, Xiangguo Yin, and Yunbo Zhang, “Hard-core Bose-Fermi mixture in one-dimensional split traps”. **Phys. Rev. A.** 81, 043607(SCI 收录), 2010.

致 谢

光阴似箭，三年的硕士生涯即将结束，在经历了找工作的喧嚣与坎坷，考博的焦急与等待之后，我深深体会到了论文写作期间的那份宁静与思考。回首三年来在的理论所求学历程，自己付出了不懈的心血和汗水，充满了探索的艰辛和惆怅，也体会到了成功的喜悦与忐忑，对那些引导我、帮助我、激励我的人，心中由衷地充满了感激之情。所有这些，都将成为我人生旅途的宝贵财富。

值此论文完成之际，首先要向我的导师张云波教授表示最衷心的感谢！张老师渊博的学识、严谨的治学态度和准确地把握学科前沿问题的洞察力使我受益终身。三年来，无论从课题的选择，还是研究的各个环节，甚至到论文的修改无不倾注着张老师大量的心血。他崇高的人格，坦荡的胸怀，使我终生难忘。在此，衷心感谢张老师对我的谆谆教诲和悉心关怀！

感谢曾经给我上过课的梁九卿教授、李卫东教授、张素英教授、李志坚教授、李禄教授、闫维贤教授、姜晓庶副教授。他们对学科问题理解的深刻、思维的活跃以及敬业精神的崇高无不深深地感染和激励着我，使我受益匪浅。

感谢郜江瑞院长、裴建文书记、刘福虎副院长、聂一行副院长等物理电子工程学院的领导给我们提供了优良的学习环境及班主任刘波老师在学习、工作上的关心和帮助。

感谢一直关心与支持我的同学和朋友们！感谢学长尹相国、郭利萍、杜磊、王红梅、张杰、梁成功、张彦伟的关怀和照顾，感谢蔚小红、贾志刚、贾纪峰、崔建功、闫映策、郝小雷等同学的关心和帮助，也是你们在学习之余带来了欢乐和笑声！

感谢我挚爱的家人在生活和精神上对我极大的照顾，谢谢你们始终如一的关怀、理解和无尽的爱！

吕晓龙

2010年5月于山西大学理论物理研究所

个人简历

姓名：吕晓龙

性别：男

个人简历：

2007.9- 现在；山西大学物理电子工程学院凝聚态物理专业 硕士

电子邮箱：cyxlcyx@163.com.

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）：

2010年 月 日

学位论文使用授权声明

本人完全了解山西大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关机关或机构送交论文的复印件和电子文档，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印、缩印或扫描等手段保存、汇编学位论文。同意山西大学可以用不同方式在不同媒体上发表、传播论文的全部或部分内容。

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：

导师签名：

20 年 月 日