



山西大學
Shanxi University

2011 届硕士学位论文

一维相互作用量子
气体 **Bethe- Ansatz** 方程

作者姓名	李花
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	2008 年 9 月至 2011 年 6 月

二〇一一年六月

山西大学

2011 届硕士学位论文

一维相互作用量子 气体 **Bethe-Ansatz** 方程

作者姓名	李 花
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	2008 年 9 月至 2011 年 6 月

二〇一一年六月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2011

The Solution of Bethe-Ansatz
Equations for One Dimensional Quantum Gas

Student Name	Hua Li
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Specialty	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2008.09-2011.06

June, 2011

目 录

中 文 摘 要	I
Abstract	II
第一章 绪论	1
1.1 一维量子气体的实验制备	1
1.2 一维量子气体原子间相互作用强度的调节	2
1.3 一维量子气体的理论研究方法	3
1.4 本文内容	4
第二章 玻色子BETHE-ANSATZ方程及其解	5
2.1 周期边界条件BETHE-ANSATZ方法及其解	5
2.1.1 周期边界条件Bethe-Ansatz方程的解	6
2.1.2 Bethe-Ansatz方程的积分形式	8
2.1.3 STG气体的性质	11
2.1.4 热力学Bethe-Ansatz方程	12
2.2 开边界条件BETHE-ANSATZ方程	16
2.2.1 TG态、STG态和BS态	17
2.2.2 单体密度矩阵和关联函数	19
第三章 两分量气体BETHE-ANSATZ方程介绍	22
3.1 两分量费米子BETHE-ANSATZ方程	22
3.2 玻色费米混合物	24
3.2.1 玻色费米混合物BA方程	25
3.2.2 玻色费米混合物TBA方程	27
3.2.3 玻色费米混合物TBA方程高阶迭代展开	30
3.3 哈伯德模型BETHE-ANSATZ方程	34
第四章 结论与展望	37
附录A: 一维气体量子场论哈密顿量和量子力学哈密顿量	38
附录B: 排斥相互作用BETHE-ANSATZ方程的解为实数的证明	41
参考文献	43
攻读学位期间取得的研究成果	47
致 谢	48

个人简况及联系方式	49
承 诺 书	50
学位论文使用授权声明	51

Contents

Chinese abstract	I
Abstract	II
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Experimental realization of one dimensional quantum gases.....	1
1.2 Manipulation of inteaction strength between particles.....	2
1.3 Theoretical methods for one dimensional quantum gases.....	3
1.4 Contents of thesis	4
Chapter 2 The Bethe-Ansatz equations of 1D interacting bosons	5
2.1 Periodical boundary condition.....	5
2.1.1 The Bethe-Ansatz equations.....	6
2.1.2 The integral Bethe-Ansatz equations.....	8
2.1.3 The property of STG gas	11
2.1.4 The thermodynamic Bethe-Ansatz equations.....	12
2.2 Open boundary condition	16
2.2.1 The TG banch, STG banch and BS banch.....	17
2.2.2 One particle density matrix and two particle correlation function.....	19
Chapter 3 The Bethe-Ansatz equations of two component quantum gases	22
3.1 Two component Fermions	22
3.2 Bose-Fermi mixture.....	24
3.2.1 The introduction of BA equations of Bose-Fermi mixture.....	25
3.2.2 The TBA equations of Bose-Fermi mixture	27
3.2.3 The iteration of TBA equations of Bose-Fermi mixture.....	30
3.3 The Hubbard model	34
Chapter 4 Summary and outlook	37
Appendix A: The Hamiltonian in quantum field theory and quantum mechanics for 1D gas	38
Appendix B: A proof of reality of the BAE solutions for 1D repulsively interacting bosons	41

References	43
Research achievements	47
Acknowledgement	48
Personal profiles	49
Letter of commitment	50
Authorization statement	51

中文摘要

在实验上, Feshbach 共振原理、磁光阱束缚以及原子芯片的应用技术日渐成熟, 实现了制备准一维玻色爱因斯坦凝聚, 并且对冷原子的研究已经从单分量气体扩展到玻色费米混合物或是两分量玻色气体混合物等领域。在多体量子系统中, 低维系统受到物理学家的关注, 体系维数降低时, 就会增强粒子间相互作用与量子涨落和关联。

Bethe-Ansatz 方法的优点在于给出了多粒子系统在任何相互作用强度下都满足的精确解方程。推广到热力学范围, 热力学 Bethe-Ansatz 方程的结果和实验结论也是一致的。因此在诸多模型中, Bethe-Ansatz 方法就成为理论研究的重要手段, 并且给出了很多有意义的结果。在理论上, 一维多体量子系统处理起来相对比较简单, 而且有可能找到其精确解析解。

本文简单介绍了开边界和周期边界条件下的 Bethe-Ansatz 方程。主要计算了在开边界条件下, 一维 δ 相互作用玻色子在排斥和吸引相互作用下的 Bethe-Ansatz 方程, 重点讨论了三个典型的量子相的能谱、单体密度矩阵分布和关联函数。在相图里有两个临界点, Tonks-Girardeau (TG) 气体和 super Tonks-Girardeau (STG) 气体在强相互作用极限 $-1/\gamma = 0$ 有相同的性质; 然而在弱相互作用极限 $\gamma = 0$ 附近, 可以从排斥相互作用的基态 (TG) 平滑地过渡到吸引相互作用的基态 (BS)。

另外, 基于一维量子气体的 Lieb-Liniger 模型, 从玻色费米混合物的热力学 Bethe-Ansatz 方程出发, 通过迭代求解的方法, 我们得到了系统在强相互作用情况下的基态能量解, 并和数值解进行了比较分析。

关键词: Bethe-Ansatz 方程; 热力学 Bethe-Ansatz 方程; Tonks-Girardeau 气体; super Tonks-Girardeau 气体; 玻色费米混合物

Abstract

The development of laser cooling and magnetic (or optical) trapping in experiments as well as the remarkable achievements in the Feshbach resonance technique leads to the observation of quasi-one-dimensional Bose-Einstein condensation of alkali atomic gases, and the researches have been expanded to Bose-Fermi mixture and two component Bose gas. Lower dimensional systems, such as one-dimensional (1D) many-body quantum system, attract more and more attention in the strongly interacting regime with anomalous, quantum fluctuations and correlations.

The advantage of Bethe-Ansatz method is that it gives the exact solution of arbitrary coupling interactions. In the thermodynamic limit, the result of thermodynamic Bethe-Ansatz equations is proven to be consistent with the experiments. Therefore, the Bethe-Ansatz method plays an important role in the theoretical research of 1D system and gives a lot of meaningful conclusions. The exact solutions of 1D solvable models are readily applicable to the research of 1D quantum gases.

In this paper, We reviewed the Bethe-Ansatz methods and thermodynamic Bethe-Ansatz equations for single component bosons and two component mixture under periodic and open boundary conditions. We investigate the Bose gas with repulsive or attractive interactions between atoms in the scheme of Bethe Ansatz equations in a hard wall trap. Three

typical quantum phases in the current research of 1D interacting cold atoms are clarified in terms of the energy spectrum, single particle density distribution and two-particle correlation function. We identify two matching points in the phase diagram, i.e. the Tonks-Girardeau gas and super Tonks-Girardeau gas show the same profiles at the strongly interacting point $-1/\gamma = 0$, and in the weakly interacting limit $\gamma = 0$, the ground states TG and bound state join to each other smoothly.

Based on the Lieb-Liniger model, we study the ground state of the 1D Bose-Fermi mixture. In the strongly interaction condition, we iterated the thermodynamic Bethe-Ansatz equations and expanded the ground state energy up to the orders of $1/\gamma^3$, which is compared with the numerical solutions.

Key words: Bethe-Ansatz equations; the thermodynamic Bethe-Ansatz equations; Tonks-Girardeau gas; super Tonks-Girardeau gas; Bose-Fermi mixture

第一章 绪论

自从 1995 年，科学家在实验上观察到了玻色爱因斯坦凝聚现象^[1-3]之后，超冷量子气体的实验研究成为热点，随着实验技术逐渐成熟，已经实现了制备不同类型的束缚势。特别是通过调节外部束缚势，在两个方向上压缩原子使其只存在零点振动，这样就制备了准一维束缚量子气体。一维超冷量子气体的物理性质和三维体系相比有很大的不同，例如，降低体系原子密度时，三维量子多体系统趋于理想玻色气体，然而对于一维系统，原子间相互作用强度却增大，因此在研究一维体系时，原子间相互作用是和外部束缚势紧密相关的，是不能忽略的重要部分。原子间相互作用非常大的时候，量子系统呈现强关联特性，称作 Tonks-Girardeau 气体^[4-6]。在近几年一维量子气体的实验研究^[7-9]中，并不局限于单一的玻色气体，而是扩展到费米子和玻色费米混合物的研究领域。

1.1 一维量子气体的实验制备

在理论物理研究领域，因为计算方法简单，能建立清晰的模型进行求解，一维多体系统倍受关注。然而实验上并不存在严格的一维量子气体，用两束正交驻波在横向形成二维的光晶格，在轴向则加一个相对较弱的光束束缚势，可以将 BEC 分割成一系列雪茄状的准一维系统。这样形成的束缚势，BEC 的横向激发完全被抑制，雪茄状的准一维气体之间互相独立，那么对于每一根“雪茄”来说，就可以近似看做是一维系统，如图 1.1 所示。

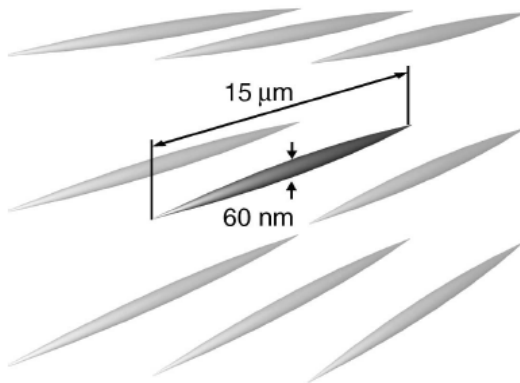


图 1.1 准一维量子气体^[10]

2001 年, Ketterle 小组首先使用磁势阱制备了雪茄状的 BEC, 但不能称作严格上的准一维体系^[11]。2004 年 Weiss 小组和 Bloch 小组利用光束缚, 在实验上观察到了一维 TG 气体^[5,6]。2009 年, Nägerl 小组结合光晶格束缚和诱导共振技术调节原子间相互作用, 观察到了一维量子气体在强吸引相互作用下具有强关联性质的低激发态, 也称作 STG 气体 (Super Tonks-Girardeau Gas)^[12]。

利用微刻技术在“原子芯片”上制作微磁阱、一维波导等实验技术也可以实现一维量子气体的制备。2001 年, Hänsel 等人在原子芯片上实现了 ^{87}Rb 的玻色爱因斯坦凝聚^[13]; 2008 年 Amerongen 等人在原子芯片上研究了自旋为 2 的 ^{87}Rb 准一维量子气体^[14]的热力学性质。

1.2 一维量子气体原子间相互作用强度的调节

有效的一维相互作用常数与三维 s 波散射长度 a_{3D} 以及横向束缚势有关:

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}} = \frac{2\hbar^2 a_{3D}}{ma_{\perp}^2} \frac{1}{1 - Ca_{3D}/a_{\perp}} \quad (1.1)$$

这个关系式是 Olshanii 利用赝势近似的方法^[15]得到的, 其中 $C = |\zeta(1/2)|/\sqrt{2} = 1.0326$

为常数, $a_{\perp} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}}}$ 是横向束缚势的特征长度; 在这里 $a_{1D} = a_{\perp}(C - a_{\perp}/a_{3D})$ 称作一

维散射长度。可以看出, 当 $a_{3D} \ll a_{\perp}$ 时,

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}} = \frac{2\hbar^2 a_{3D}}{ma_{\perp}^2} \quad (1.2)$$

对于式 (1.1) 来说有一个临界点 C , 当 $a_{3D} \lesssim a_{\perp}/C$ 时, g_{1D} 为正的极大值, 表示原子间相互作用为强排斥, 这时量子气体为 TG 气体; 当 $a_{3D} \gtrsim a_{\perp}/C$ 时, g_{1D} 为负的极大值, 表示原子间相互作用为强吸引, 这种情况下的量子气体有很强的关联性质, 也是最近一维模型研究的热点, 尤其是其低激发态, 被称作 STG 气体。

实验上, 利用 Feshbach 共振原理来调节粒子间三维 s 波散射长度 a_{3D} 。1998 年, Heinzen 小组 (^{85}Rb)^[16]和 Ketterle 小组 (^{23}Na)^[17]在实验上第一次观测到了冷原子散射的 Feshbach 共振现象。当在连续的开通道发生碰撞的两个原子的能量, 刚好与

准分子自旋反平行的闭通道的能量相等时，就会出现 Feshbach 共振。这样，原子间散射长度就可以通过外磁场进行调节，其关系为

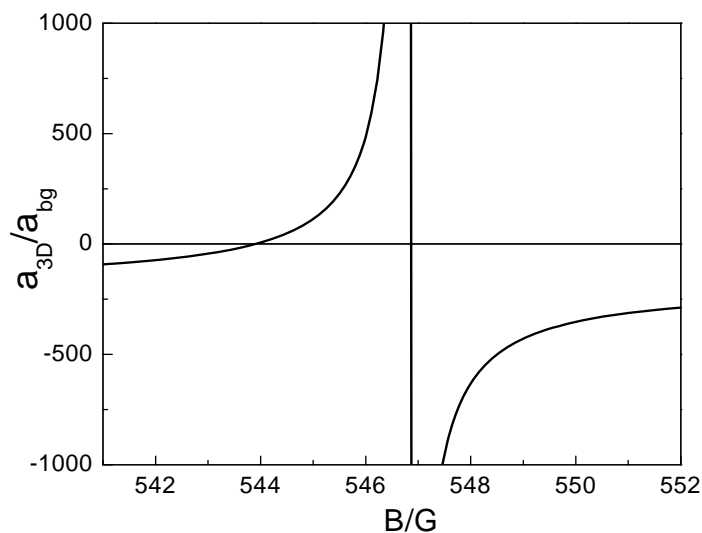


图 1.2 ^{87}Rb 的三维 s 波散射长度与磁场的关系^[18]

$$a_{3D} = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right) \quad (1.3)$$

在这里 a_{bg} 为原子间远离共振时的背景散射长度， B_0 为共振磁场中心位置， ΔB 为共振磁场的宽度。从图 1.2 中可以直观地看出，随磁场的改变，散射长度可以在区间 $[-\infty, \infty]$ 上变化。因此通过调节三维散射长度 a_{3D} 以及外势 a_{\perp} 的大小，相应的一维散射长度 a_{1D} 和有效一维相互作用常数 g_{1D} 也可以在区间 $[-\infty, \infty]$ 上变化。

1.3 一维量子气体的理论研究方法

与三维理想量子气体不同，在低温时，一维均匀无相互作用的理想气体并不会发生玻色爱因斯坦凝聚现象。在理论物理研究领域，一维相互作用量子气体的研究方法有平均场近似、量子蒙特卡罗、Luttinger 流体 (Luttinger liquid formalism)、玻色费米映射以及 Bethe-Ansatz 方程等。由于准一维束缚势强化了粒子之间的量子涨落，所以相对于三维情况来说，传统的平均场理论并不适用于一维量子气。一般来

说，用 Bethe-Ansatz 方程精确求解的方法可以给出很合理的物理解释。

由于我们比较感兴趣的是热力学统计里的一维可积模型，因此，主要采用的方法就是 Bethe-Ansatz 方程。Bethe-Ansatz 方程可以精确地求解出系统中每个粒子的准动量。并且，从热力学 Bethe-Ansatz 方程出发可以轻易地得到体系基态能量。然而只有在特殊区域里，例如 TG 气体极限下，才有解析解，在任意相互作用强度时，只能通过计算机编程进行数值求解。

1.4 本文内容

本文在第二章详细介绍了一维玻色气体在周期边界条件和开边界条件下的 Bethe-Ansatz 方程，并特别地分析了在吸引相互作用区域系统的基态及激发态性质。第三章简单介绍了两分量费米子的 Bethe-Ansatz 方程及其一些研究进展和主要结论，讨论了玻色费米混合物的 Bethe-Ansatz 方程，并从热力学 Bethe-Ansatz (TBA) 方程出发，得到了强相互作用时基态能量的解析表达式。最后在第四章总结了所有的工作。

第二章 玻色子 Bethe-Ansatz 方程及其解

坐标 Bethe-Ansatz 方法是 1931 年 Hans Bethe^[19]首先提出的，用来求解海森堡模型的能谱，主要是在局部区域对一维情况下自旋为 1/2 的粒子进行排列。1938 年，Lamek Hulthén 用 Bethe-Ansatz 方法求解反铁磁海森堡模型，并预言了自旋反平行，得到了无限长海森堡链的基态波函数，因此，Bethe-Ansatz 也被称作 Bethe-Hulthén 假设。本章详细地介绍一维玻色子的坐标 Bethe-Ansatz 方法，并讨论在排斥相互作用和吸引相互作用时方程的解。

考虑长度为 L 的一维玻色气体，粒子总数为 N ，哈密顿量的二次量子化形式为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \partial_x \hat{\Psi}^\dagger \partial_x \hat{\Psi} + \frac{g_{1D}}{2} \int dx \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \quad (2.1)$$

这里 $\hat{\Psi}^\dagger$ 和 $\hat{\Psi}$ 为场算符， m 为单个粒子的质量， g_{1D} 为相互作用耦合系数。令 $2m = \hbar = 1$ ，可以将哈密顿量写成一次量子化形式

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \quad (2.2)$$

其中 x_i 代表每个粒子的位置，所有的粒子在区间 $R: 0 \leq x_1, x_2, \dots, x_N \leq L$ 内， $c = mg_{1D} / \hbar^2$ 是粒子间相互作用强度，在文章中常用无量纲参数 $\gamma = c/n$ 来表示相互作用， $n = N/L$ 是一维气体平均粒子数密度。一次量子化的哈密顿量 (2.2) 和场论哈密顿量 (2.1) 是等价的，证明过程见附录 A。这个模型被称作 Lieb-Liniger 模型，1963 年 Lieb 和 Liniger 首次求解了不考虑自旋的玻色子系统^[20]。

2.1 周期边界条件 Bethe-Ansatz 方法及其解

Bethe-Ansatz 方法的核心思想是将一维玻色子位置进行排列，每一种排列方式称为一个局部区域，例如 Q 为 $\{1, 2, \dots, N\}$ 的一种排列方式，那么在这种方式下的局部区域为 $0 \leq x_{Q_1} \leq x_{Q_2} \leq \dots \leq x_{Q_N} \leq L$ ，在局部区域内部没有相互作用，因此满足哈密顿量 (2.2) 的波函数可以写成 N 粒子平面波的叠加形式，

$$\psi = \sum_P a(P) \exp\left(\sum_{n=1}^N ik_{P_n} x_{Q_n}\right) \quad (2.3)$$

叠加系数 $a(P)$ 则由边界条件、波函数连续性条件来确定，在这里 $\{k_j\}$ 为 N 个粒子的波矢， P 为 $\{1, 2, \dots, N\}$ 的一个排列， \sum_P 表示对所有的波矢排列方式求和。那么全区域下的波函数，就是对所有局部区域波函数求和

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_Q \theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}) \psi(x_{Q_1}, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) \quad (2.4)$$

其中 $\theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}) = \theta(x_{Q_N} - x_{Q_{N-1}}) \dots \theta(x_{Q_2} - x_{Q_1})$ ， $\theta(x-y)$ 为阶跃函数，当 $x \geq y$ 时为 1， $x < y$ 时为 0。

2.1.1 周期边界条件 Bethe-Ansatz 方程的解

取局部区域 $R_1: 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N \leq L$ ，波函数满足周期边界条件

$$\psi(0, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) = \psi(x_2, \dots, x_j, \dots, x_N, L) \quad (2.5)$$

对多体系统，在局部区域中，当相邻两个粒子 x_j, x_{j+1} 发生碰撞，占据同一个位置时， δ 相互作用条件为

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_{j+1}} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \psi(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N) \Big|_{x_{j+1}=x_j} = c \psi(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N) \Big|_{x_{j+1}=x_j} \quad (2.6)$$

在以上两个条件下，代入波函数 (2.3)，可以推导出粒子准动量 $\{k_j\}$ 满足 Bethe-Ansatz 方程

$$\exp(ik_j L) = - \prod_{i=1}^N \frac{(k_j - k_i) + ic}{(k_j - k_i) - ic} \quad (2.7)$$

这是 N 个联立的方程组，通过求解方程组 (2.7)，可以得到一组准动量解 $\{k_j\}$ ，系统总能量为 $E = \sum_i k_i^2$ ，总的准动量为 $K = \sum_i k_i$ 。这时局域波函数的系数就可以表示为

$$a(P) = (-1)^P \prod_{j < l} \frac{i(k_{P_j} - k_{P_l}) + c}{\sqrt{(k_{P_j} - k_{P_l})^2 + c^2}} \quad (2.8)$$

当粒子之间为排斥相互作用，即 $c > 0$ 时，Bethe-Ansatz 方程的解为实数（证明见附录 B），将式 (2.7) 两边取对数得

$$k_j L = 2\pi I_j - \sum_{i=1}^N 2 \arctan \left[\frac{(k_j - k_i)}{c} \right] \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2.9)$$

其中 $\{I_j\}$ 为一组整数 (N 为奇数) 或是半整数 (N 为偶数), 当 I_j 确定时, 就确定一组本征态, 因此 I_j 为决定能级的量子数。对于基态, $I_j = \frac{N+1}{2} - j$ 。特别是当 $c \rightarrow +\infty$ 时, 称为 TG 气体极限, 准动量的解为 $k_j = I_j 2\pi / L$, 在此极限附近单粒子能量的展开式为 $E / N = (N^2 - 1)\pi^2 / 3L^2 \left[1 - \frac{4N}{Lc} + \frac{12N^2}{L^2 c^2} - \dots \right]$ 。这种情况下, 对于不同的相互作用强度可以给出两粒子波函数关于相对坐标 $(x_i - x_j)$ 的分布情况, 如图 2.1 所示。

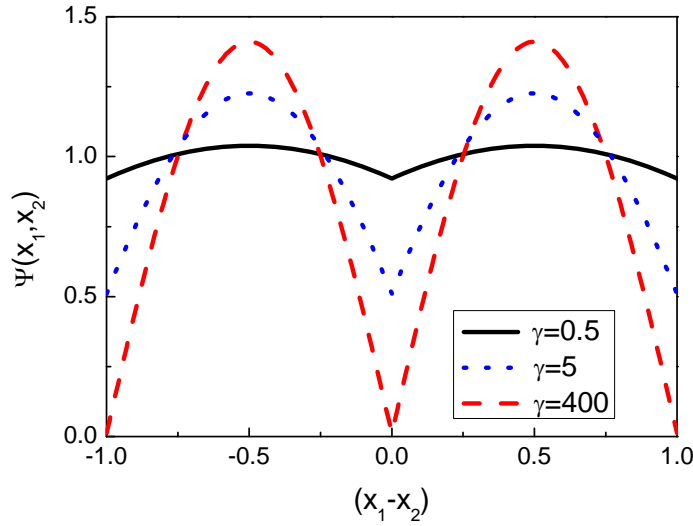


图 2.1 不同相互作用强度下的两粒子波函数, 取 $L=1$

当粒子之间为吸引相互作用, 即 $c < 0$ 时, Bethe-Ansatz 方程的基态解为复数解, 被称为 dimer 态, 当粒子总数为偶数时, 准动量为成对共轭的纯虚数; 当粒子数为奇数时, 准动量中有一个实数解, 其余解是成对共轭的纯虚数。例如两粒子时, 准动量可以写作: $k_{1,2} = \pm i\alpha$, α 为实数; 三粒子时, 准动量解的形式为: $k_{1,2} = \pm i\alpha$, $k_3 = \beta$; 四粒子时, $k_{1,2} = \pm i\alpha$, $k_{3,4} = \pm 2i\alpha$ 。因此吸引相互作用时, 基态能量随相互作用强度 $|c|$ 的增大是发散的, 粒子总数为偶数时, $E / N = -(\alpha / L)^2 (N^2 - 1) / 12$, $L \rightarrow \infty$ 的极限下, $\alpha = |c|L$ ^[21,22]。吸引相互作用的基态也叫做束缚态 (BS 态) 或塌缩态。

吸引相互作用时，类似排斥相互作用的情况，方程 (2.9) 在条件 $I_j = \frac{N+1}{2} - j$ 下也存在实数解，这个态为系统的一个激发态，当 $c \rightarrow -\infty$ 时，这时称作 STG 气体极限，对应的能量为 $E/N = (N^2 - 1)\pi^2 / 3L^2 \left[1 + \frac{4N}{L|c|} + \frac{12N^2}{L^2|c|^2} + \dots \right]$ [23]。

图 2.2 给出了两粒子时，由 Bethe-Ansatz 方程数值解得的能级分布情况。在这里量子数 (I_1, I_2) 分别取 $(-1/2, 1/2)$ ， $(-1/2, 3/2)$ ， $(-1/2, 5/2)$ 。图中特别标出了 STG 气体极限、TG 气体极限和束缚态 (BS 态) 三种特殊情况。我们把 TG 气体极限所在的那个能级即排斥相互作用时的基态称作 TG 态，在相互作用很大时对应 TG 气体极限，同理将 STG 气体极限所在的能级称为 STG 态。

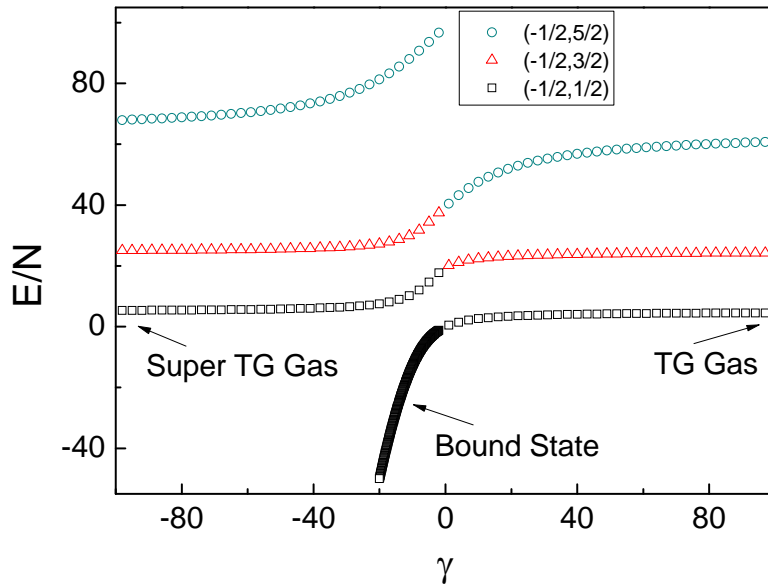


图 2.2 $N=2$ 时，系统能量关于相互作用强度 γ 的关系

2.1.2 Bethe-Ansatz 方程的积分形式

热力学极限下，即 $N \rightarrow \infty$ ， $L \rightarrow \infty$ 时，粒子数密度 $n = N/L$ 为常数，这时 Bethe-Ansatz 方程的分立波矢趋于连续分布。对于 TG 态和 STG 态，可以看到 $\{I_j\}$ 为区间 $\left(-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$ 内一系列连续的整数或半整数，并且 $\{I_j\}$ 和 $\{k_j\}$ 一一对应。因此在连

续区间 $(k, k + dk)$ 内, 定义粒子个数为 $dI = \rho(k) dkL$, 相应 k 的区间为 $(-Q, Q)$, 这样原本离散的 Bethe-Ansatz 方程可以写成连续的方程:

$$kL = 2\pi I - \int_{-Q}^Q 2 \arctan\left[\frac{(k-q)}{c}\right] \rho(q) L dq \quad (2.10)$$

方程两边对 k 求导, 可以得到

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} \rho(q) dq \quad (2.11)$$

这就是在热力学极限条件下 Bethe-Ansatz 方程的积分形式, 总粒子数守恒, 满足归一化条件,

$$n = N/L = \int_{-Q}^Q \rho(k) dk \quad (2.12)$$

能量表示成积分形式为:

$$E/L = \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk \quad (2.13)$$

为了方便计算, 做变量替换, 令 $k = Qx$, $c = Q\lambda$, 且对应的 $g(x) = \rho(k) = \rho(Qx)$ 化简为

$$g(x) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 \frac{2\lambda}{\lambda^2 + (x-x')^2} g(x') dx' \quad (2.14)$$

要求 $g(x)$ 满足归一化条件

$$\lambda = \gamma \int_{-1}^1 g(x) dx \quad (2.15)$$

这里 $\gamma = c/n = c / \int_{-Q}^Q \rho(k) dk$, 变量替换后的能量为 $E/N = \frac{\hbar^2}{2m} n^2 e(\gamma)$, 其中

$$e(\gamma) = \left(\frac{\gamma}{\lambda}\right)^3 \int_{-1}^1 g(x) x^2 dx \quad (2.16)$$

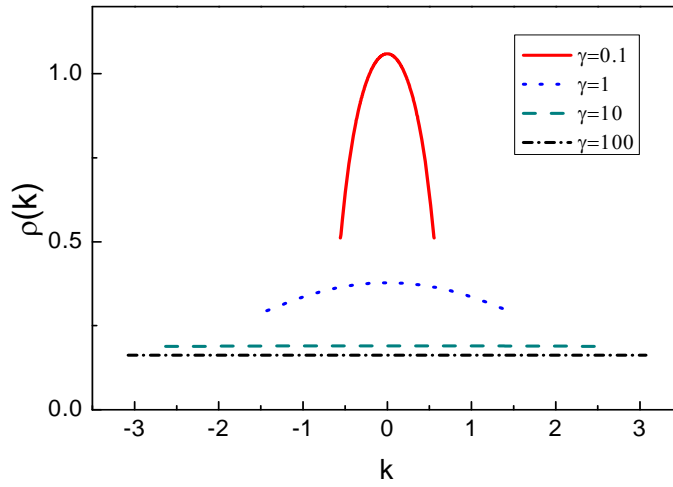


图 2.3 准动量密度分布

通过数值计算关联方程 (2.14) 和 (2.15)，可以得到热力学极限下系统的动量分布，如上图 2.3 所示。

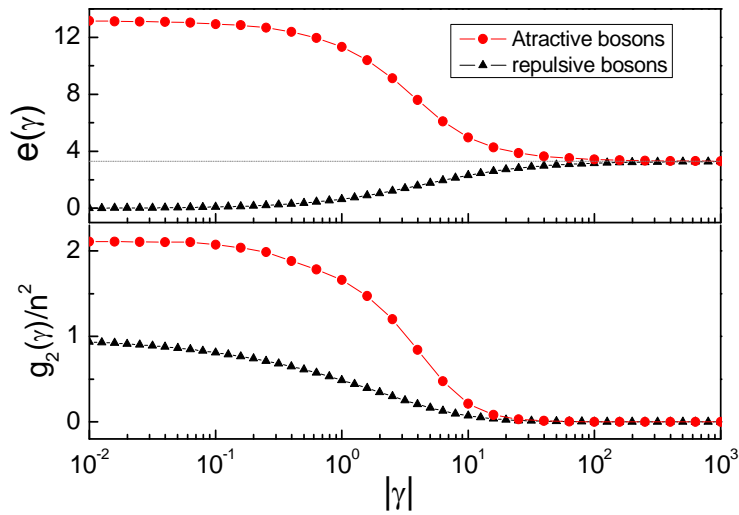


图 2.4 能量和两粒子关联函数分布

能量随相互作用强度的变化可以通过式 (2.16) 得到，在热力学极限情况下，根据关系 $g_2(\gamma) = n^2 de(\gamma)/d\gamma$ ，同时可以得到二阶关联函数 $g_2(\gamma) = \langle \Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi \rangle$ 的分布

情况。图 2.4 给出了热力学极限下，吸引相互作用和排斥相互作用的能量和关联函数分布情况，可以看出 $|\gamma|$ 很大时，TG 气体和 STG 气体的能量几乎相同，为一个常数。在 $|\gamma|$ 较小时，比起 TG 态，STG 态的局部关联要大很多，随相互作用强度 $|\gamma|$ 增大，这两种情况的关联函数都趋于零。

2.1.3 STG气体的性质

对于多体量子系统，实验上一般只能验证基态的性质，例如 TG 气体在实验和理论上都已经得到了详细地讨论。因为一般激发态都极其不稳定，会很快的衰退到基态，所以在实验上对激发态的研究是比较困难的。Astrakharchick 等在 2005 年提出，如果相互作用耦合常数 g_{1D} 为负的无穷大时，一维量子气体存在一个强关联的态，称作 Super Tonks-Girardeau 气体^[24,25]。2009 年，Näger 小组在实验上，通过调节相互作用强度，使其从正无穷突变至负无穷，来制备一维强吸引玻色气体的激发态，观察到了相对稳定存在的 STG 气体^[12]，从而证明了 STG 态是一个强关联的亚稳态。

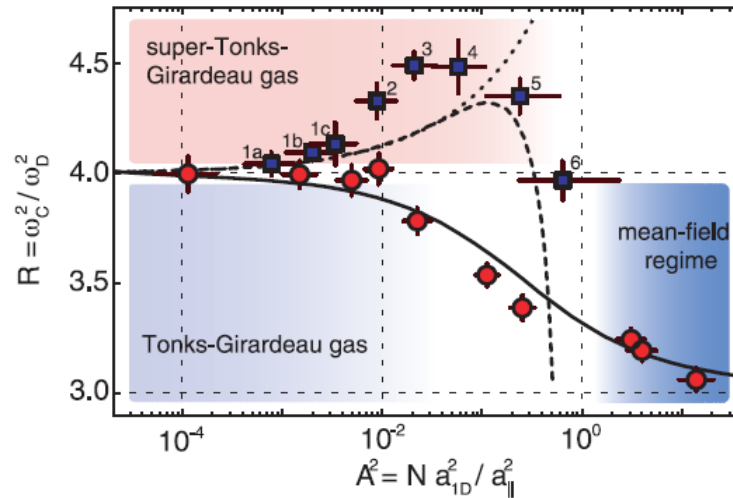


图 2.5 振荡频率与外势频率比值 $R = \omega^2 / \omega_x^2$ 关于参数 $A^2 = N a_{1D}^2 / a_{||}^2$ 的变化^[12]

和 TG 气体相比，STG 气体有很多不同的性质，其中最重要就是这两者呼吸子模型有很明显的差别。实验上，为了束缚一维量子气体，要外加一个很弱的简谐势 $V_{ext} = m\omega_x^2 x^2 / 2$ ，这里 ω_x 为外势的频率。当简谐势的频率变化时，一维量子气体会发生集体振荡，称作呼吸子模型。呼吸子模型的振荡频率定义为

$\omega = -2\langle x^2 \rangle / (d\langle x^2 \rangle / d\omega_x^2)$, 其中 $\langle x^2 \rangle = \int n(x)x^2 dx / N$, N 是总粒子数, $n(x)$ 为粒子密度分布。利用局域密度近似计算, 局部化学势满足条件

$$\mu[n(x)] = \mu_0 - V_{ext}(x)$$

这里 μ_0 为没有外势时的化学势, 因为总粒子数守恒, 归一化条件为 $N = \int n(x)dx$ 。图 2.5 给出了 TG 态和 STG 态呼吸子模型的振荡频率随参数 $A^2 = Na_{1D}^2/a_{\parallel}^2$ 的变化趋势, a_{\parallel} 为外势的特征长度。图中点图为实验数据, 线图为局域密度近似的理论计算结果^[24], 实线为 TG 态, 虚线为 STG 态。对 STG 态来说其震荡频率先增大后减小, 有一个峰值, 在实验中可以通过测量振荡频率, 来判断一维量子气体是否处于 STG 态。

2.1.4 热力学 Bethe-Ansatz 方程

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]。基于在 2.1.1 节中提到的 Bethe-Ansatz 方程, 这一节介绍有限温度下的玻色子热力学方程^[26]。从前面讨论已经知道, Bethe-Ansatz 方程的对数形式为 (2.9) 式

$$k_j L = 2\pi I_j - \sum_{i=1}^N 2 \arctan\left[\frac{(k_j - k_i)}{c}\right] \quad j = 1, 2, \dots, N$$

在粒子总数 N 很大的时候, 基态量子数 $\{I_j\}$ 是一系列连续分布在区间 $\left(-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$ 上的点 (整数或半整数), 并且 $\{k_j\}$ 分布在对应的区间 $(-Q, Q)$ 上。那么在有限温度下, 粒子处于激发态上, 即基态上的一些波矢的位置上留下空穴, 波矢跃迁到能量较高的位置上。这时量子数不再均匀的分布在区间 $\left(-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right)$ 上, 一些量子数会取到比较高的值, 从而跳出该区间, 在区间中形成一个“空穴”, 相应的在区间外存在一个“粒子”, 形成配对。定义“空穴”的量子数为 J , “粒子”的量子数称为 I , 那么整个波矢空间为

$$H(k) = \begin{cases} I, & \text{粒子} \\ J, & \text{空穴} \end{cases} \quad (2.17)$$

方程 (2.9) 变为

$$2\pi H(k) = kL + \sum_{k_i} 2 \arctan\left[\frac{(k-k_i)}{c}\right] \quad (2.18)$$

对于粒子总数很大的热力学系统，可以定义“空穴”和“粒子”的态密度为 $\rho_h(k)$ 和 $\rho(k)$ ，在区间 $(k, k+dk)$ 内粒子数为 $dI = \rho(k)Ldk$ ，空穴数为 $dJ = \rho_h(k)Ldk$ ，所以有

$$dH(k) = dI + dJ = \rho(k)Ldk + \rho_h(k)Ldk \quad (2.19)$$

热力学极限下， k_i 替换为 q ，离散式子可以写成微积分形式

$$2\pi H(k) = kL + \int_{-Q}^Q 2 \arctan\left[\frac{(k-q)}{c}\right] \rho(q)Ldq \quad (2.20)$$

方程两边对 k 求导得到

$$2\pi(\rho(k) + \rho_h(k)) = 1 + \int_{-Q}^Q \frac{2c}{(k-q)^2 + c^2} \rho(q)dq \quad (2.21)$$

粒子总数和能量为

$$N/L = \int_{-Q}^Q \rho(k)dk \quad (2.22)$$

$$E/L = \int_{-Q}^Q \rho(k)k^2 dk \quad (2.23)$$

在区间 $(k, k+dk)$ 内，粒子数是 $\rho(k)Ldk$ ，空穴数是 $\rho_h(k)Ldk$ ，按统计学定义，所有可能的状态数 dW 为

$$dW = \frac{[(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk]!}{[\rho(k)Ldk]![\rho_h(k)Ldk]!} \quad (2.23)$$

对此式取对数得到微熵

$$\begin{aligned} dS = \ln dW &= \ln \frac{[(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk]!}{[\rho(k)Ldk]![\rho_h(k)Ldk]!} \\ &= [\rho(k)Ldk + \rho_h(k)Ldk] \ln [\rho(k)Ldk + \rho_h(k)Ldk] \\ &\quad - [\rho(k)Ldk] \ln [\rho(k)Ldk] - [\rho_h(k)Ldk] \ln [\rho_h(k)Ldk] \end{aligned}$$

系统的熵为

$$\begin{aligned}
 S/L &= \int_{-q}^q dS \\
 &= \int_{-q}^q dk \{ [\rho(k) + \rho_h(k)] \ln [\rho(k) + \rho_h(k)] - [\rho(k)] \ln [\rho(k)] - [\rho_h(k)] \ln [\rho_h(k)] \}
 \end{aligned}$$

吉布斯自由能定义为 $G = E - ST - \mu N$ ， T 表示温度， μ 是化学势。在热力学平衡时，自由能最小，要求吉布斯自由能变分为零

$$\delta G / \delta \rho(k) = (\delta E - \delta S \cdot T - \mu \cdot \delta N) / \delta \rho(k) = 0 \quad (2.24)$$

将对应的式子代入上式，可以导出

$$T \ln \frac{\rho_h(k)}{\rho(k)} = k^2 - \mu - \frac{T}{\pi} \int_{-q}^q \frac{c}{c^2 + (k-q)^2} \ln \left(\frac{\rho_h(q) + \rho(q)}{\rho_h(q)} \right) dq \quad (2.25)$$

定义 $\rho_h(k)/\rho(k) = \exp(\varepsilon(k)/T)$ ，式 (2.25) 变为

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu - \frac{T}{\pi} \int_{-q}^q \frac{c}{c^2 + (k-q)^2} \ln(1 + \exp(-\varepsilon(q)/T)) dq \quad (2.26)$$

并且 $\rho(k)$ 满足条件式 (2.21)，也就是

$$2\pi\rho(k)(1 + \exp(\varepsilon(k)/T)) = 1 + \int_{-q}^q \frac{2c}{(k-q)^2 + c^2} \rho(q) dq \quad (2.27)$$

(2.26) 和 (2.27) 就是热力学 BA 方程 (TBA 方程)，也称为 Yang-Yang 热力学公式^[26]。通过迭代计算可以得到 $\varepsilon(k)$ 和 $\rho(k)$ ，这样就可以计算整个体系的热力学性质。

系统压强和自由能为

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-q}^q \ln(1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)) dk \quad (2.28)$$

$$E = -PL + N\mu \quad (2.29)$$

利用 TBA 方程和压强的表达式，我们可以迭代导出相互作用无穷大附近基态能量的解析表达式。对于基态，温度 $T \rightarrow 0$ ，那么当 $\varepsilon(k) > 0$ 时， $\exp(-\varepsilon(k)/T) \rightarrow 0$ ，对积分没有贡献，因此只考虑 $\varepsilon(k) < 0$ 的情况，这时 $1 + \exp(-\varepsilon(k)/T) \approx \exp(-\varepsilon(k)/T)$ ，因此可以化简为

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu + \frac{c}{\pi} \int_{-q}^q \frac{\varepsilon(q)}{c^2 + (k-q)^2} dq \quad (2.30)$$

$$P = -\frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \varepsilon(k) dk \quad (2.31)$$

在 $c \rightarrow \infty$ 的条件下, 保留 $1/c^3$ 项, 可以将上述两式积分展开得到

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu - \frac{2P}{c} \left(1 - \left(\frac{k}{c} \right)^2 \right) + \frac{4}{15\pi c^3} \mu^{5/2} \quad (2.32)$$

$$P = -\frac{Q^3}{3\pi} + \frac{\mu}{\pi} Q + \frac{2P}{\pi c} Q - \frac{2P}{3\pi c^3} Q^3 - \frac{4}{15\pi^2 c^3} \mu^{5/2} Q \quad (2.33)$$

这里 $\pm Q$ 是费米海的截断点, 因此满足 $\varepsilon(Q) = \varepsilon(-Q) = 0$, 即

$$\varepsilon(Q) = Q^2 - \mu - \frac{2}{c} \left(1 - \left(\frac{Q}{c} \right)^2 \right) \left(-\frac{Q^3}{3\pi} + \frac{\mu}{\pi} Q \right) - \frac{1}{\pi c^3} \left(\frac{2}{5} Q^5 - \frac{2\mu Q^3}{3} \right) = 0 \quad (2.34)$$

从这个方程反解出 Q 的表达式并带入 $\varepsilon(k)$ 和 P 中, 就可以消去 Q 得到

$$P = \frac{2\mu^{3/2}}{3\pi} + \frac{2P\mu^{1/2}}{c\pi} + \frac{P^2}{3\pi c^2} \mu^{-1/2} - \frac{1}{c^3} \left(\frac{8}{81\pi^4} + \frac{32}{45\pi^2} \right) \mu^3 \quad (2.35)$$

根据热力学关系 $n = \frac{\partial P}{\partial \mu}$, 得到粒子数密度

$$n = \frac{\mu^{1/2}}{\pi} + \frac{1}{c} \left(\frac{8}{3\pi^2} \mu \right) + \frac{1}{c^2} \left(\frac{70}{9\pi^3} \mu^{3/2} \right) + \frac{1}{c^3} \left(\frac{640}{27\pi^4} - \frac{32}{15\pi^2} \right) \mu^2 \quad (2.36)$$

由此式可以得到化学式的表达式

$$\mu^{1/2} = n\pi - \frac{1}{c} \frac{8\pi}{3} n^2 + \frac{1}{c^2} \frac{58\pi}{9} n^3 + \frac{1}{c^3} \left(\frac{32\pi^3}{15} - \frac{400}{27} \pi \right) n^4 \quad (2.37)$$

代入压强表达式导出

$$\begin{aligned} P &= \frac{2\pi^2 n^3}{3} \left[1 + \frac{n}{c} (-6) + \frac{n^2}{c^2} 24 + \frac{n^3}{c^3} \left(-80 + \frac{16}{3} \pi^2 \right) \right] \\ &= \frac{2\pi^2 n^3}{3} \left[1 + \frac{1}{\gamma} (-6) + \frac{1}{\gamma^2} 24 + \frac{1}{\gamma^3} \left(-80 + \frac{16}{3} \pi^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

体系能量为

$$\begin{aligned} E/L &= n\mu - P \\ &= \frac{1}{3} \pi^2 n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} - \frac{32}{\gamma^3} \left(1 - \frac{\pi^2}{15} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

这就是在相互作用极大时, 一维玻色子能量的精确表达式, 这个结果是从热力学 BA

方程导出的。

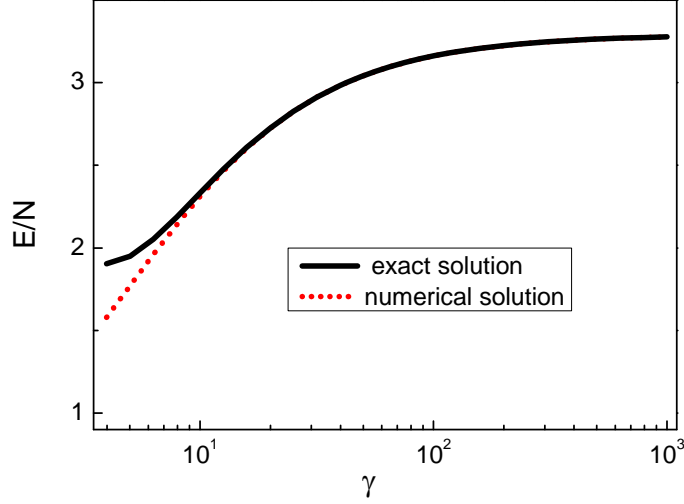


图 2.6 精确解和数值解的比较

图 2.6 给出了能量精确表达式 (2.39) 和 BA 方程的积分形式数值解的比较, 其中实线是精确表达式的结果, 点线是数值解, 可以看出在相互作用极大时两者结果趋于一致。

2.2 开边界条件 Bethe-Ansatz 方程

这一节主要介绍一维均匀玻色子在开边界条件下, 即无限深方势阱中的 Bethe-Ansatz 方程, 与周期边界条件的情况相比, 无限深方势阱条件下, 波函数满足边界条件

$$\psi(0, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) = \psi(x_2, \dots, x_j, \dots, x_N, L) = 0 \quad (2.40)$$

局部区域 $R_1: 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N \leq L$ 里, 假设波函数具有形式

$$\psi = \sum_{P, r_1, \dots, r_N} a(P) \exp\left(\sum_{n=1}^N i r_n k_{P_n} x_{Q_n}\right)$$

其中 $r_n = \pm 1$ 代表粒子向右或是向左运动, 将波函数代入本征方程, 可以得到关系^[28]:

$$\exp(ik_j L) = \prod_{l=1(l \neq j)}^N \frac{i(k_l - k_j) + c}{i(k_l - k_j) - c} \frac{i(k_l + k_j) - c}{i(k_l + k_j) + c} \quad (2.41)$$

2.2.1 TG态、STG态和BS态

类似于周期边界条件，对于开边界条件，相互作用 c 在区间 $[-\infty, +\infty]$ 上变化时，求解 BA 方程 (2.41)，也可以找出相应的基态和激发态。

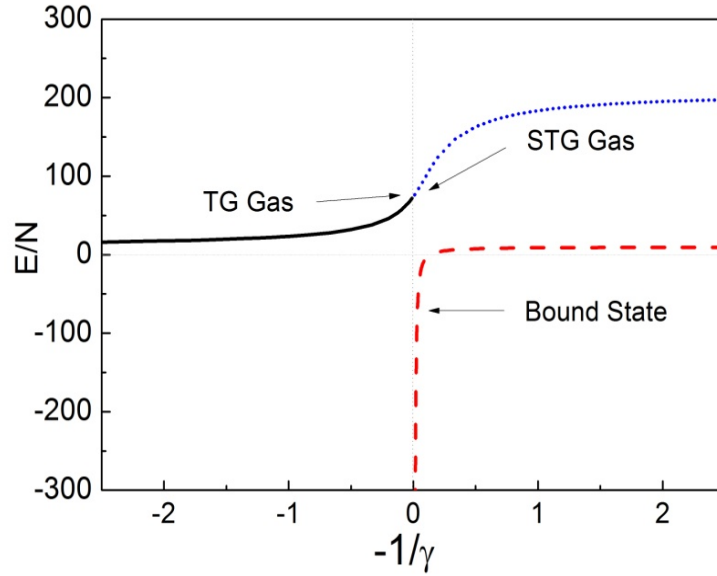


图 2.7 开边界条件， $N = 4$ 的 STG、TG、和 BS 态能谱随相互作用参数 γ 分布

在图 2.7 中画出了四个玻色子时系统的能谱分布，这里，横坐标为 $-1/\gamma$ ，可以看出，这三个态的能量有两个临界点，在强相互作用极限 $|\gamma| \rightarrow \infty$ ，即 $-1/\gamma \rightarrow 0$ 时，吸引相互作用激发态（STG 态）对应 STG 气体极限，排斥相互作用基态（BS 态）对应 TG 气体极限，这两者能量趋于同一个常数为 $E/N = \pi^2(N+1)(2N+1)/6L^2$ ，图中实线和虚线在 $-1/\gamma \rightarrow 0$ 相等；另一方面，在弱相互作用区域 $|\gamma| \rightarrow 0$ ，即 $-1/\gamma \rightarrow \pm\infty$ 时，无论是在排斥相互作用还是在吸引相互作用，系统基态能量趋于同一个值，即图 2.7 中，实线和折线在 $-1/\gamma \rightarrow \pm\infty$ 处相等，为 $E/N = \pi^2/L^2$ 。

和周期边界条件相比，开边界条件在 STG 态和 TG 态情况下的准动量解并不是对称分布的，并且随着相互作用强度的增大，STG 态和 TG 态的准动量接近于同一

组值。开边界条件 BS 态的解是实部相等虚部互为共轭的复数解，例如四粒子时，为 $k_{1,2} = \alpha_1 \pm i\beta_1$ ， $k_{3,4} = \alpha_2 \pm i\beta_2$ ，在相互作用无穷大时， $\alpha_1 \approx \alpha_2 = \pi/N$ 。图 2.8 给出了 $\gamma = 50$ 的准动量解，其中横轴表示准动量实部，纵轴表示虚部。

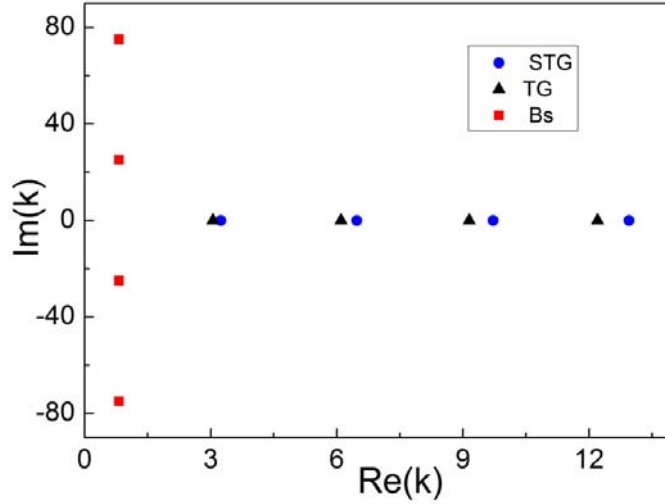


图 2.8 开边界条件下， $N=4$ 时，相互作用取 $\gamma=50$ 的准动量

在第一章中提到，通过 Feshbach 共振原理和对束缚势的调节，在临界点附近，可以调节相互作用强度 γ ，使其从 $+\infty$ 突变至 $-\infty$ ，从图 2.6 可以看到，这时能量可以从 TG 态平滑地过渡到 STG 态，说明通过调节外势和粒子间相互作用，可以使一维量子气体从 TG 气体演变至 STG 气体。然而从 TG 到 STG 的动力学演化实际过程是比较复杂的，我们计算了 TG 态到 STG 态和 BS 态的跃迁几率随相互作用强度的变化。从 TG 态到 STG 态跃迁几率幅为 $t = \langle \psi_{\text{STG}}(X) | \psi_{\text{TG}}(X) \rangle$ ，相应的从 TG 态到 BS 态的跃迁几率幅是 $t = \langle \psi_{\text{BS}}(X) | \psi_{\text{TG}}(X) \rangle$ 。图 2.9 中给出了初态排斥相互作用分别为 $\gamma = 200, 1$ 时，到吸引相互作用激发态（STG 态）和基态（BS 态）的跃迁几率，可以看出，在相互作用很大时，从 TG 态到 STG 态的跃迁几率接近 1，而弱相互作用时，TG 态到 STG 态的跃迁几率非常小，在这种情况下，系统有很大的几率最后处于 BS 态上。

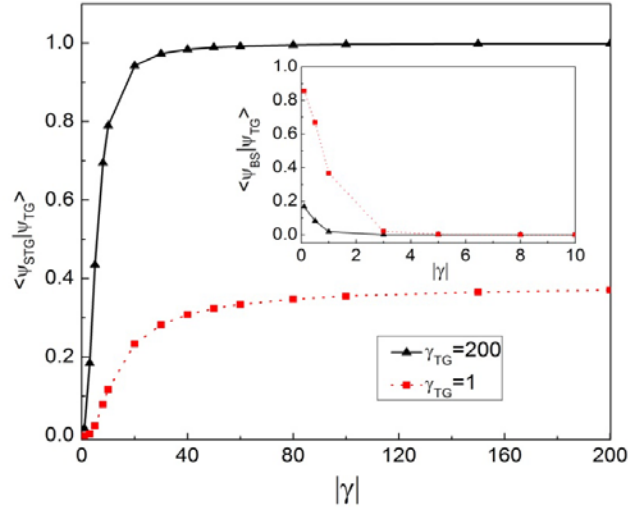


图 2.9 从 TG 态到 STG 态和 BS 态的跃迁几率

2.2.2 单体密度矩阵和关联函数

对于一维玻色气体，玻色子在 x 处的几率可以用单体密度矩阵来衡量，

$$\rho(x) = N \int |\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_2 \cdots dx_N \quad (2.42)$$

对应吸引相互作用激发态（STG 态）、排斥相互作用的基态（TG 态）、和吸引相互作用的基态（BS 态）三种不同的情况，图 2.10 给出了不同相互作用强度下的单体密度矩阵分布情况。这里灰度值表示 $\rho(x)$ 的大小，颜色越浅，表示玻色子的占据几率越大。从最左边的一组图看出，相互作用强度 $|\gamma|$ 的值较小时，即最上面一条灰度图所示，系统的激发态为七个峰，这组图最下面的一条图表示相互作用极大的情况，接近 STG 气体极限， $\rho(x)$ 为四个峰，说明随着吸引相互作用强度变大系统的费米化程度减小。中间的一组图为排斥相互作用基态时的单体密度矩阵分布，从弱相互作用时的一个峰变为 TG 气体极限下的四个峰，表明随排斥相互作用强度变大系统的费米化程度增大，而 BS 态的密度分布随相互作用强度变化不大，在势阱中心位置粒子占据几率一直保持最大。在 $|\gamma| \rightarrow \infty$ 时，STG 气体（左下）和 TG 气体（中下）的密度分布几乎一样。在弱相互作用 $|\gamma| \rightarrow 0$ 时，排斥相互作用（中上）基态和吸引相互作用（右上）基态密度分布基本相同。这也从另一个角度说明， γ 从 $+\infty$ 突变至 $-\infty$ 时，处于 STG 态的几率比较大，但当 γ 从 $+0$ 变到 -0 时，处于束缚态的几率较大。

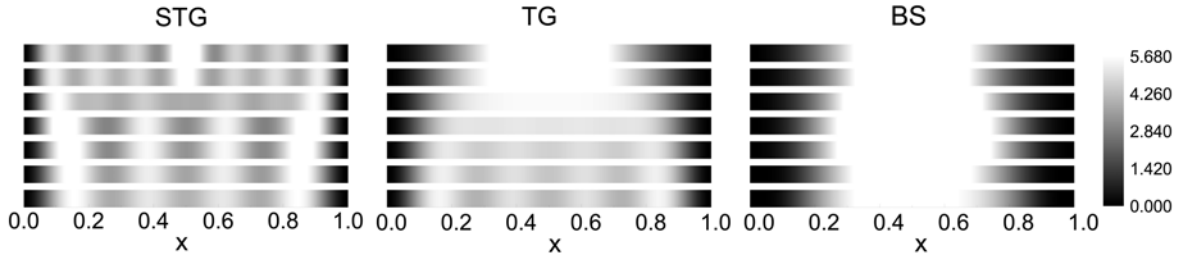


图 2.10 $N=4$ 时, 不同相互作用强度下的单体密度矩阵分布, 从左边开始依次是 STG、TG、和 BS 态的单体密度矩阵灰度图, 颜色越深表示粒子占据几率越小, 从上到下相互作用参数 STG 态依次取 $\gamma = -0.1, -1, -2.5, -5, -12.5, -25, -100$, TG 态依次取 $\gamma = 0.1, 1, 2.5, 5, 12.5, 25, 100$, BS 态依次取 $\gamma = -0.1, -0.5, -1, -2, -3, -4, -5$ 。

对于一维精确解模型, 另一个很重要的物理量是二阶关联函数, 可以从波函数出发计算:

$$g_2(x) = N(N-1) \int |\Psi(x, x, x_3, \dots, x_N)|^2 dx_3 \dots dx_N \quad (2.43)$$

$g_2(x)$ 表示在同一个位置 x 处同时测量到两个粒子的几率。图 2.11 中给出了不同情况下的二阶关联函数在势阱中心位置 $L/2$ 的计算结果, 这里先通过数值计算求得 BA 方程的解, 然后代入波函数后由定义式 (2.43) 积分, 就可以得到关联函数在不同相互作用强度时的分布情况。

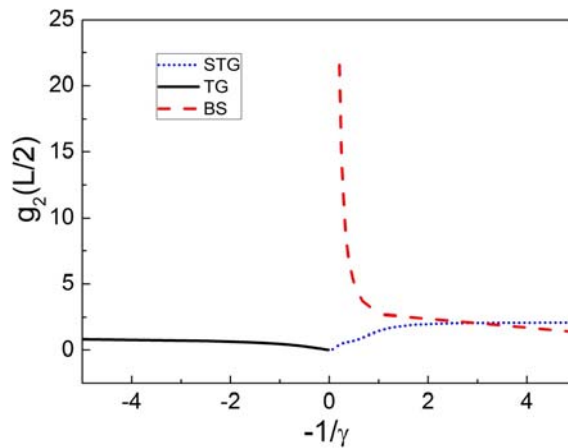


图2.11 $N=4$ 的关联函数随相互作用强度参数 γ 的分布

如图所示，弱相互作用时，STG 态的关联函数要比 TG 态较大，在 $|\gamma| \rightarrow 0$ 时，TG 态的关联函数值约为 1，STG 态的关联函数趋于 2，在强相互作用 $|\gamma| \rightarrow \infty$ 时，STG 态和 TG 态粒子间的关联函数都减小到零，说明这时系统的费米化程度很强，虽然边界条件和计算方法不同，但这个计算结果和前面 2.1.2 节中提到的，周期边界条件热力学极限下的结果是一致的。作为对比，图中同时给出了 BS 态的关联函数，可以看出束缚态是一个强关联的系统，并且随相互作用强度增大，关联越大，说明在束缚态时两个粒子同时处于势阱中间位置的几率是非常大的，因此束缚态也被称作塌缩态。

第三章 两分量气体Bethe-Ansatz方程介绍

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，在这方面，Gaudin 和 Yang 在 1967 年就给出了精确解模型的 BA 方程^[29,30,31]，本章简单介绍一下这方面的主要结果。为了求解自旋为 1/2 的一维费米子的多体系统，必须引入代数 Bethe-Ansatz 方法^[32]。代数 Bethe-Ansatz 方法的基本思想是，在自旋空间构造一个赝真空态（所有粒子自旋朝下），用产生算符和湮灭算符作用赝真空态，表示生成一个自旋向上的粒子并消灭一个自旋向下的粒子，这样就可以求得哈密顿量的本征函数。

3.1 两分量费米子Bethe-Ansatz方程

自旋为 1/2 的一维费米气体系统的哈密顿量为^[30,31]

$$H = -\int dx \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \frac{\hbar^2}{2m_F} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{\sigma}(x) + g_F \int dx \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \Psi_{\downarrow}(x) \Psi_{\uparrow}(x) \quad (3.1)$$

这个模型也被称作 Gaudin-Yang 模型， Ψ_{σ}^{\dagger} 和 Ψ_{σ} 为费米子场算符， $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 表示自旋向上或是向下， g_F 为费米子间相互作用强度。一次量子化后，哈密顿量 (3.1) 也可以化简为 Lieb-Liniger 模型

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_F} \frac{\partial}{\partial x_i^2} + g_F \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \quad (3.2)$$

N 为费米子总数。在局部区间 $x_{Q1} < x_{Q2} < \dots < x_{QN}$ 内，假设系统的波函数为

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P a(Q, P) \exp(ik_{P1}x_{Q1} + ik_{P2}x_{Q2} + \dots + ik_{PN}x_{QN}) \quad (3.3)$$

总波函数同样可以通过对局域波函数的粒子置换得到。这里 $a(Q, P)$ 是一个 $N! \times N!$ 的矩阵， Q 表示粒子坐标顺序的排列，是矩阵的行； P 表示粒子准动量顺序排列，是矩阵的列。利用粒子间的碰撞导致的 δ 函数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

$$a(Q, P) = (u_{P(l+1)Pl} - 1)a(Q, P(l, l+1)) + u_{P(l+1)Pl}a(Q(l, l+1), P(l, l+1)) \quad (3.4)$$

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。 $P(l, l+1)$ 表示的置换如下所示:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & l & l+1 & \dots & N \\ P1 & P2 & \dots & P(l+1) & Pl & \dots & PN \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

对应的 $Q(l, l+1)$ 表示的置换为

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & l & l+1 & \dots & N \\ Q1 & Q2 & \dots & Q(l+1) & Ql & \dots & QN \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

如果把矩阵 $a(Q, P)$ 的某一列向量标记为 $\xi(P)$, 则 $\xi(P)$ 满足关系

$$\xi(\dots nm \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} \xi(\dots mn \dots) \quad (3.7)$$

其中, $Y_{mn}^{ab} = (u_{mn} - 1)I + u_{mn} P_{ab}$, 叫做杨算符, 在这里 P_{ab} 表示对粒子坐标排列中的第 a 处和第 b 处进行置换。根据 (3.6) 式, 可以得到 Y_{mn}^{ab} 满足两个关系式。由于

$\xi(\dots nm \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} \xi(\dots mn \dots) = Y_{mn}^{l, l+1} Y_{mn}^{l+1, l} \xi(\dots nm \dots)$, 因此得到第一个关系式为

$$Y_{mn}^{a, b} Y_{mn}^{b, a} = 1 \quad (3.8)$$

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

$$\begin{aligned} \xi(\dots nmj \dots) &\rightarrow \xi(\dots mnj \dots) \rightarrow \xi(\dots mjn \dots) \rightarrow \xi(\dots jmn \dots), \\ \xi(\dots nmj \dots) &\rightarrow \xi(\dots njm \dots) \rightarrow \xi(\dots jnm \dots) \rightarrow \xi(\dots jmn \dots). \end{aligned} \quad (3.9)$$

并且这两条路径是等价的, 因而得到第二个关系

$$Y_{mn}^{ab} Y_{jn}^{bc} Y_{jm}^{ab} = Y_{jm}^{bc} Y_{jn}^{ab} Y_{mn}^{bc} \quad (3.10)$$

这就是著名的 Yang-Baxter 方程。

将波函数 (3.3) 代入周期性边界条件 $\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(L, x_2, \dots, x_N)$, 得到

$$\begin{aligned} \xi(12 \dots N) &= P_{N-1, N} \dots P_{23} P_{12} \xi(2 \dots N1) \exp(ik_1 L) \\ \xi(213 \dots N) &= P_{N-1, N} \dots P_{23} P_{12} \xi(13 \dots N2) \exp(ik_2 L) \end{aligned} \quad (3.11)$$

...

结合关系式 (3.8), 可以得到本征方程:

$$\exp(ik_j L)\xi(12\dots N) = X_{j+1,j} X_{j+2,j} \dots X_{N,j} X_{1,j} X_{2,j} \dots X_{j-1,j} \xi(123\dots N) \quad (3.12)$$

这里 $X_{ij} = P_{ij} Y_{ij}^j = P_{ij} [(u_{ij} - 1)I + u_{ij} P_{ij}] = (u_{ij} - 1)P_{ij} + u_{ij} I$, I 为单位算符, 那么只要找出满足本征方程 (3.12) 的准动量 k_j 的解, 就能得到波函数的具体形式。

如果只考虑单分量无自旋的玻色气体, 波函数满足粒子交换对称性, (3.12) 就变成了第二章第一节中的满足周期边界条件的 BA 方程, 即式 (2.7); 如果考虑单分量的费米气体, 体系波函数满足粒子交换反对称性, 那么 (3.12) 就变成了 $\exp(ik_j L) = 1$, 表示粒子间不存在相互作用。若考虑自旋 1/2 的费米子, 其中, M 个粒子自旋向下, $N - M$ 个粒子自旋朝上, 并且波函数满足粒子交换反对称性, (3.12) 可以化简计算得到两分量费米子的 Bethe-Ansatz 方程^[32]

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j + ic_F/2}{k_i - \Lambda_j - ic_F/2}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.13)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic_F/2}{\Lambda_i - k_j + ic_F/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic_F}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic_F}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (3.14)$$

其中 Λ 是和波矢 k 相同类型的变量, 也叫作谱参数, 这里 $c_F = m_F g_F / \hbar^2$ 。在最近的文
章里对强吸引相互作用的两分量费米子的情况进行了深入的分析 and 讨论^[33-35]。

3.2 玻色费米混合物

本节介绍玻色费米混合物的 Bethe-Ansatz 方程, 并推导出混合物的热力学 Bethe-Ansatz 方程。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

$$H = \int_0^L dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_b} \partial_x \Psi_b^\dagger \partial_x \Psi_b + \frac{\hbar^2}{2m_f} \partial_x \Psi_f^\dagger \partial_x \Psi_f + \frac{1}{2} g_{bb} \Psi_b^\dagger \Psi_b^\dagger \Psi_b \Psi_b + g_{bf} \Psi_b^\dagger \Psi_f^\dagger \Psi_f \Psi_b \right\} \quad (3.15)$$

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 分别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(3.15)中前两项是动能项, 后两项是相互作用项。由于泡利不相容原理, 费米子之间不会发生碰撞, 因此不存在费米子间的相互作用项。这个模

型只有满足以下两个条件才是精确可解的，第一个条件是玻色子和费米子的质量相等，第二个条件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

$$\begin{aligned} m_b &= m_f = m, \\ g_{bb} &= g_{bf} = g \end{aligned} \quad (3.16)$$

令 $2m = \hbar = 1$ ，哈密顿量写成一次量子化形式，

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) \quad (3.17)$$

其中 $c = mg/\hbar^2$ 。

3.2.1 玻色费米混合物BA方程

1970年，Lai 和 Yang^[36]得到由无自旋的玻色子和自旋 1/2 的费米子组成的混合物的 Bethe-Ansatz 方程

$$\exp(ik_i L) = \prod_{j=1}^M \frac{k_i - \Lambda_j + ic/2}{k_i - \Lambda_j - ic/2}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.18)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_i - k_j - ic/2}{\Lambda_i - k_j + ic/2} = \prod_{j=1(j \neq i)}^M \frac{\Lambda_i - \Lambda_j - ic}{\Lambda_i - \Lambda_j + ic} \prod_{l=1}^{M_b} \frac{\Lambda_i - A_l + ic/2}{\Lambda_i - A_l - ic/2}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (3.19)$$

$$\prod_{j=1}^M \frac{A_l - \Lambda_j - ic/2}{A_l - \Lambda_j + ic/2} = 1, \quad l = 1, 2, \dots, M_b \quad (3.20)$$

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 和 A_l 为谱参数。

当只存在单分量费米子时，例如令所有费米子自旋朝上，则以上三个互相耦合的方程组变为两个方程组， M_b 和 M 等价，这样就得到了不计自旋时，一维玻色和费米混合气体的 Bethe-Ansatz 方程^[37]

$$\begin{aligned} \exp(ik_j L) &= \prod_{\beta=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\beta + ic/2}{k_j - \Lambda_\beta - ic/2}, & j = 1, \dots, N \\ 1 &= \prod_{i=1}^N \frac{k_i - \Lambda_\alpha + ic/2}{k_i - \Lambda_\alpha - ic/2}, & \alpha = 1, \dots, M \end{aligned} \quad (3.21)$$

其中波矢 k_1, \dots, k_N 是准动量，谱参数 $\Lambda_1, \dots, \Lambda_M$ 是和波矢相同类型的量。可以证明

(3.21)式在排斥相互作用时的解为实数，因此我们同样可以将混合物的 BA 方程推广到热力学 BA 方程。

类似玻色子的情况，对上面方程两边取对数，得到

$$\begin{aligned} k_j L &= 2\pi I_j - \sum_{\beta=1}^M 2 \arctan\left(\frac{(2k_j - 2\Lambda_\beta)}{c}\right) \\ 2\pi J_\alpha &= -\sum_{i=1}^N 2 \arctan\left(\frac{(2k_i - 2\Lambda_\alpha)}{c}\right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

这里有两组量子数 I_j 和 J_α ，分别根据 M 和 N 的奇偶性取整数或半整数。系统处于基态时，量子数取值满足条件

$$\begin{aligned} I_j &= \left\{ -(N-1)/2, -(N-3)/2, \dots, (N-1)/2 \right\} \\ J_\alpha &= \left\{ -(M-1)/2, -(M-3)/2, \dots, (M-1)/2 \right\} \end{aligned} \quad (3.23)$$

热力学极限下，即 $N \rightarrow \infty$ ， $M \rightarrow \infty$ ， $L \rightarrow \infty$ ，且 N/L 和 M/L 为常数，定义在区间 $(k, k+dk)$ 内波矢 k 的个数是 $dI = \rho(k)Ldk$ ，在区间 $(\Lambda, \Lambda+d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 的个数是 $dJ = \sigma(\Lambda)Ld\Lambda$ ，并且 k 的取值范围为 $[-B, B]$ ， Λ 的取值范围为 $[-A, A]$ 。那么方程 (3.22) 变为连续方程，得到玻色费米混合物的 BA 方程的积分形式

$$\begin{aligned} \rho(k) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-A}^A \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \sigma(\Lambda) d\Lambda, \\ \sigma(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \rho(k) dk. \end{aligned} \quad (3.24)$$

玻色子数目和总粒子数守恒，因此 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 分别满足归一化条件

$$n = N/L = \int_{-B}^B \rho(k) dk \quad (3.25)$$

$$m = M/L = \int_{-A}^A \sigma(\Lambda) d\Lambda \quad (3.26)$$

体系能量为

$$E/L = \int_{-B}^B k^2 \rho(k) dk \quad (3.27)$$

类比单分量玻色子情况，能量可以写作 $E/N = \frac{\hbar^2}{2m} n^2 e(\gamma, \alpha)$ ，在这里， α 为玻色子与总粒子数的比值， $\gamma = c/n$ 。在图 3.1 中给出了不同 α 和 γ 时的能量分布 $e(\gamma, \alpha)$ 。可以看到，当 $\alpha = 1$ ，即粒子全为玻色子，能量分布为 Lieb-Liniger 模型的情况；当 $\alpha = 0$ ，

即粒子全为费米子时，能量分布为理想费米子的情況。

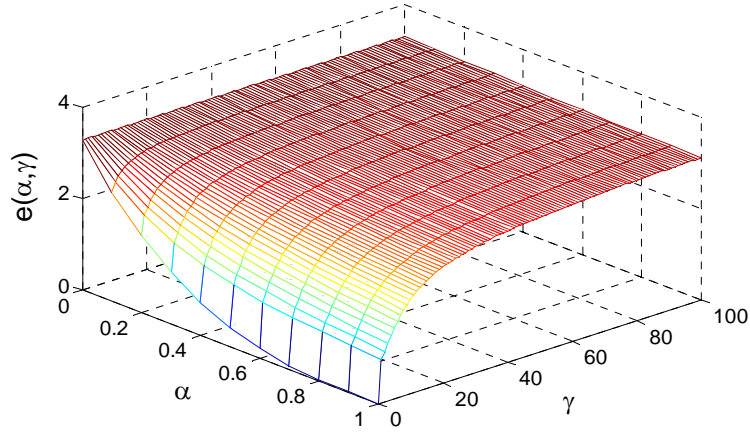


图 3.1 不同 α 和 γ 时的能量 $e(\gamma, \alpha)$ ^[37]。

3.2.2 玻色费米混合物TBA方程

如(3.23)式所示，一维玻色费米混合气体基态的量子数 I_j 和 J_α 是一系列连续分布的格点（整数或半整数），均匀分布在区间 $[-(N-1)/2, (N-1)/2]$ 和 $[-(M-1)/2, (M-1)/2]$ 上，对应的波矢 k 和谱参数 Λ 分别分布在区间 $[-B, B]$ 和 $[-A, A]$ 上。在有限温度下，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，超出了区间 $[-B, B]$ 或 $[-A, A]$ 的范围，在原来的格点处留下“空穴”，并在新的位置形成“粒子”。这时系统处于激发态，量子数 I 和 J 不只局限于区间 $[-(N-1)/2, (N-1)/2]$ 和 $[-(M-1)/2, (M-1)/2]$ ，而是有可能也占据区间外的格点。定义整个空间为 $I'(k)$ 和 $J'(\Lambda)$ ，满足方程

$$\begin{aligned} 2\pi I'(k) &= kL + \sum_{\beta=1}^M 2 \arctan\left(\frac{2k - 2\Lambda_\beta}{c}\right) \\ 2\pi J'(\Lambda) &= -\sum_{i=1}^N 2 \arctan\left(\frac{2k_i - 2\Lambda}{c}\right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

$I'(k)$ 为一个均匀连续分布的格点空间（整数空间或半整数空间），由占据的格点和

不被占据的格点组成。同样的，谱参数 Λ 对应的格点空间为 $J'(\Lambda)$ 也成为均匀连续分布的格点空间。和玻色子情况相似，在热力学极限下，定义在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 的个数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，所以在区间 $(k, k + dk)$ 内波矢 k 和空穴两者个数的和为

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

同理，定义在区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 的个数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，不被占据的格点和谱参数 Λ 的空穴一一对应，所以区间 $(\Lambda, \Lambda + d\Lambda)$ 内谱参数 Λ 和其空穴两者个数的和为

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

这样(3.28)式中的求和变为积分

$$\begin{aligned} 2\pi I'(k) &= kL + \int_{-A}^A 2 \arctan((2k - 2\Lambda)/c) \sigma(\Lambda) d\Lambda \\ 2\pi J'(\Lambda) &= - \int_{-B}^B 2 \arctan((2k - 2\Lambda)/c) \rho(k) dk \end{aligned} \quad (3.29)$$

这里 $\pm A$ 和 $\pm B$ 分别 Λ 和 k 的截断点，上两式分别对 k 和 Λ 求导数，得到 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 满足约束条件

$$\begin{aligned} \rho(k) + \rho_h(k) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-A}^A \frac{4c}{c^2 + 4(k - \Lambda)^2} \sigma(\Lambda) d\Lambda, \\ \sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{4c}{c^2 + 4(k - \Lambda)^2} \rho(k) dk. \end{aligned} \quad (3.30)$$

粒子数密度和能量密度的表达式为

$$n = N/L = \int_{-B}^B \rho(k) dk \quad (3.31)$$

$$m = M/L = \int_{-A}^A \sigma(\Lambda) d\Lambda \quad (3.32)$$

$$E/L = \int_{-B}^B k^2 \rho(k) dk \quad (3.33)$$

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

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

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

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

系统的微熵为

$$\begin{aligned} dS &= \ln(dW_k dW_\Lambda) \\ &= \ln dW_k + \ln dW_\Lambda \\ &= \ln \frac{[(\rho(k) + \rho_h(k))Ldk]!}{[\rho(k)Ldk]![\rho_h(k)Ldk]!} + \ln \frac{[(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda))Ld\Lambda]!}{[\sigma(\Lambda)Ld\Lambda]![\sigma_h(\Lambda)Ld\Lambda]!} \\ &= [(\rho(k) + \rho_h(k))] \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k) \\ &\quad + [(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda))] \ln(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) - \sigma(\Lambda) \ln \sigma(\Lambda) - \sigma_h(\Lambda) \ln \sigma_h(\Lambda) \end{aligned}$$

积分得到系统的熵

$$\begin{aligned} \frac{S}{L} &= \int_{-B}^B \left\{ [(\rho(k) + \rho_h(k))] \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k) \right\} dk \\ &\quad + \int_{-A}^A \left\{ [(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda))] \ln(\sigma(\Lambda) + \sigma_h(\Lambda)) - \sigma(\Lambda) \ln \sigma(\Lambda) - \sigma_h(\Lambda) \ln \sigma_h(\Lambda) \right\} d\Lambda \end{aligned} \quad (3.34)$$

吉布斯自由能 $G = E - TS - \mu_F(N - M) - \mu_B M$ ，其中 T 是系统的温度， μ_F 和 μ_B 是拉格朗日乘子，其物理意义分别是费米子和玻色子的化学势。为了达到热力学平衡，在满足约束条件(3.30)的情况下，吉布斯自由能取极小值，即对 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 的变分等于零

$$\frac{\delta F}{\delta \rho(k)} = 0, \quad \frac{\delta F}{\delta \sigma(\Lambda)} = 0 \quad (3.35)$$

这样可以得到积分方程

$$\begin{aligned}
 k^2 - \mu_F - T \ln(\rho_h(k)/\rho(k)) - \frac{T}{2\pi} \int_{-A}^A \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \ln(1 + \sigma(\Lambda)/\sigma_h(\Lambda)) d\Lambda &= 0 \\
 \mu_F - \mu_B - T \ln(\sigma_h(\Lambda)/\sigma(\Lambda)) - \frac{T}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \ln(1 + \rho(k)/\rho_h(k)) dk &= 0
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

定义

$$\exp(\varepsilon(k)/T) = \rho_h(k)/\rho(k), \quad \exp(\varphi(\Lambda)/T) = \sigma_h(\Lambda)/\sigma(\Lambda) \tag{3.37}$$

混合物热力学 Bethe-Ansatz (TBA) 方程为^[38]

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(k) &= -\mu_F + k^2 - \frac{T}{2\pi} \int_{-A}^A \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) d\Lambda \\
 \varphi(\Lambda) &= \mu_F - \mu_B - \frac{T}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \ln(1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)) dk
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

根据(3.37)式, 约束条件(3.30)式变为

$$\begin{aligned}
 \rho(k)(1 + \exp(\varepsilon(k)/T)) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \int_{-A}^A \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \sigma(\Lambda) d\Lambda, \\
 \sigma(\Lambda)(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \rho(k) dk.
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

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。当温度 T 、相互作用强度 c 、化学势 μ_F 和 μ_B 被确定时, 就可以得到系统所有的热力学性质, 例如, 压强、自由能和熵分别为

$$P = \frac{T}{2\pi} \int_{-B}^B \ln(1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)) dk \tag{3.40}$$

$$E = -PL + M\mu_B + (N - M)\mu_F \tag{3.41}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{S}{L} &= \int_{-B}^B \rho(k) \left[(1 + \exp(\varepsilon(k)/T)) \ln(1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)) + \varepsilon(k)/T \right] dk \\
 &+ \int_{-A}^A \sigma(\Lambda) \left[(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) \ln(1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)) + \varphi(\Lambda)/T \right] d\Lambda
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

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

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

3.2.3 玻色费米混合物TBA方程高阶迭代展开

在 Yin^[38]文章中利用数值迭代的方法和局域密度近似讨论了有限温度下的一维

玻色费米混合气体的性质。这一小节我们试图通过第 2.1.5 小节中相同的迭代方法，得到强相互作用时玻色费米混合气体的 TBA 方程的高阶精确表达式。这里在温度 $T \rightarrow 0$ 时，方程组 (3.38) 和压强 (3.40) 可以化简为以下三个式子

$$\varepsilon(k) = -\mu_F + k^2 + \frac{1}{2\pi} \int_{-A}^A d\Lambda \frac{4c\varphi(\Lambda)}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \quad (3.43a)$$

$$\varphi(\Lambda) = \mu_F - \mu_B + \frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B dq \frac{4c\varepsilon(q)}{c^2 + 4(q-\Lambda)^2} \quad (3.43b)$$

$$P = -\frac{1}{2\pi} \int_{-B}^B dk \varepsilon(k) \quad (3.43c)$$

首先，在相互作用强度 c 趋于无穷大时，为了得到 $\varepsilon(k)$ 关于相互作用强度 $1/c$ 的精确表达式，把式子 (3.43b) 代入 (3.43a) 积分，保留至 $1/c^3$ 项，可以得到

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= -\mu_F + k^2 + \frac{1}{2\pi} \int_{-A}^A d\Lambda \frac{4c(\mu_F - \mu_B)}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \\ &\quad + \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-A}^A d\Lambda \int_{-B}^B dq \frac{4c}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \frac{4c\varepsilon(q)}{c^2 + 4(q-\Lambda)^2} \\ &= -\mu_F + k^2 + \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} + \int_{-B}^B dq \frac{c\varepsilon(q)}{c^2 + k^2} \left[2 \arctan \frac{2A}{c} + \frac{4Ac}{c^2 + 4A^2} \right] \\ &\quad - \int_{-B}^B dq \frac{c\varepsilon(q)q^2}{(c^2 + k^2)^2} \left[2 \arctan \frac{2A}{c} + \frac{4Ac}{c^2 + 4A^2} \right] \end{aligned}$$

将上式右边按 $1/c$ 作级数展开并积分，这里右边的积分可以用 (3.43c) 式替换成 P ，为了计算方便令

$$\zeta = 2 \arctan \frac{2A}{c} + \frac{4Ac}{c^2 + 4A^2} \quad (3.44)$$

那么 $\varepsilon(k)$ 的解析式化简为

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= -\mu_F + k^2 + \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} - \frac{2Pc}{\pi(c^2 + k^2)} \zeta \\ &\quad - \frac{\frac{2}{3}B^3 \left(-\mu_F + \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} \right) + \frac{2}{5}B^5}{\pi^2 c^3} \zeta \end{aligned} \quad (3.45)$$

$\varepsilon(k)$ 在截断点处为零，即 $\varepsilon(B) = \varepsilon(-B) = 0$ ，

$$0 = B^2 - \mu_F + \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} - \frac{2Pc}{\pi(c^2 + k^2)} \zeta$$

$$\frac{\frac{2}{3}B^3 \left(-\mu_F + \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} \right) + \frac{2}{5}B^5}{\pi^2 c^3} \zeta$$

从这个方程可以反解出截断点 B ，重新定义变量

$$\Omega = \mu_F - \frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} \quad (3.46)$$

得到关系

$$B^2 = \Omega \left(1 + \frac{1}{c} \frac{2P}{\pi \Omega} \zeta - \frac{1}{c^3} \left(\frac{2P}{\pi} + \frac{4\Omega^{3/2}}{15\pi^2} \right) \zeta \right) \quad (3.47)$$

将 $\varepsilon(k)$ 的表达式 (3.45) 代入(3.43c)积分，就得出压强在强相互作用下的解为

$$P = \left(\frac{2}{3\pi} + \frac{1}{c^3} \frac{4P}{3\pi^2} \zeta \right) B^3$$

$$= \frac{2}{3\pi} \Omega^{3/2} + \frac{1}{c} \frac{2\Omega^{1/2} P \zeta}{\pi^2} + \frac{1}{c^2} \frac{\Omega^{-1/2} P^2}{\pi^3} \zeta^2 - \frac{1}{c^3} \Omega^3 \left(\frac{32}{45\pi^3} \zeta + \frac{8}{81\pi^7} \zeta^3 \right)$$

在推导过程中，需要注意的是，我们保留至 $1/c^3$ 项，这个式子两边都有变量 P ，重新整理合并为

$$P = \frac{2}{3\pi} \Omega^{3/2} + \frac{1}{c} \frac{4\Omega^2 \zeta}{3\pi^2} + \frac{1}{c^2} \frac{28\Omega^{5/2} P^2 \zeta^2}{9\pi^5} + \frac{1}{c^3} \Omega^3 \left(\frac{640}{81\pi^7} \zeta^3 - \frac{32}{45\pi^3} \zeta \right) \quad (3.48)$$

玻色子的数目和总粒子数目是由压强和化学势决定的，热力学性质满足关系

$$m = \frac{M}{L} = \frac{\partial P}{\partial \mu_B} \quad n = \frac{N}{L} = \frac{\partial P}{\partial \mu_F} + \frac{\partial P}{\partial \mu_B}$$

结合定义式(3.46)可以证明 $\frac{2}{\pi}(\mu_F - \mu_B) \arctan \frac{2A}{c} = \frac{m}{n}$ ，并且由三角函数关系得出

$$\frac{4Ac}{c^2 + 4A^2} = \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right), \text{ 因此定义式(3.44)变为}$$

$$\zeta = \pi \frac{m}{n} + \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right) \quad (3.49)$$

这样就导出

$$\begin{aligned}
 n &= \frac{\partial P}{\partial \mu_F} + \frac{\partial P}{\partial \mu_B} = \frac{\partial P}{\partial \Omega} \\
 &= \Omega^{1/2} \left(\frac{1}{\pi} + \frac{1}{c} \frac{8\Omega^{1/2}\zeta}{3\pi^3} + \frac{1}{c^2} \frac{70\Omega\zeta^2}{9\pi^5} + \frac{1}{c^3} \Omega^{3/2} \left(\frac{640\zeta^3}{27\pi^7} - \frac{32\zeta}{15\pi^3} \right) \right)
 \end{aligned}$$

比较上式左右两边对应的项，整理得到

$$\Omega^{1/2} = n\pi - \frac{1}{c} \frac{8\zeta}{3\pi^3} (n\pi)^2 + \frac{1}{c^2} \frac{58\zeta^2}{9\pi^4} (n\pi)^3 - \frac{1}{c^3} \left(\frac{52\zeta^3}{27\pi^6} - \frac{32\zeta}{15\pi^2} \right) (n\pi)^4$$

把此式代入式 (3.48) 中消去变量 Ω ，最后导出压强的精确表达式

$$P = \frac{2}{3\pi} (n\pi)^3 - \frac{1}{c} \frac{4\zeta}{\pi^3} (n\pi)^4 + \frac{1}{c^2} \frac{\Omega^{-1/2} P^2}{\pi^3} \zeta^2 - \frac{1}{c^3} \Omega^3 \left(\frac{32}{45\pi^3} \zeta + \frac{8}{81\pi^7} \zeta^3 \right) \quad (3.50)$$

根据自由能的定义(3.41)，系统单位长度自由能为

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{L} &= -P + m\mu_B + (n-m)\mu_F \\
 &= \frac{1}{3\pi} (n\pi)^3 - \frac{1}{c} \frac{4\zeta}{3\pi^3} (n\pi)^4 + \frac{1}{c^2} \frac{4\zeta^2}{\pi^5} (n\pi)^5 - \frac{1}{c^3} \left(\frac{32\zeta^3}{3\pi^7} - \frac{32\zeta}{45\pi^3} \right) (n\pi)^6 \\
 &= \frac{1}{3\pi} (n\pi)^3 - \frac{1}{c} \frac{4}{3\pi^3} (n\pi)^4 \left(\pi \frac{m}{n} + \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right) \right) + \frac{1}{c^2} \frac{4}{\pi^5} (n\pi)^5 \left(\pi \frac{m}{n} + \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right) \right)^2 \\
 &\quad - \frac{1}{c^3} (n\pi)^6 \left(\frac{32}{3\pi^7} \left(\pi \frac{m}{n} + \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right) \right)^3 - \frac{32}{45\pi^3} \left(\pi \frac{m}{n} + \sin \left(\pi \frac{m}{n} \right) \right) \right)
 \end{aligned}$$

物理上，用无量纲参数 $\gamma = c/n$ 标志相互作用强度。在上式中 $\alpha = m/n$ 表示体系玻色子占总粒子数的比例，由此可以看出，单粒子能量在相互作用强度无穷大附近高阶展开只和粒子数密度 n 和玻色子数目占据比例 α 有关系，

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{3} \pi^2 n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} \left(\alpha + \frac{\sin \pi \alpha}{\pi} \right) + \frac{12}{\gamma^2} \left(\alpha + \frac{\sin \pi \alpha}{\pi} \right)^2 - \frac{32}{\gamma^3} \left(\left(\alpha + \frac{\sin \pi \alpha}{\pi} \right)^3 - \frac{\pi^2}{15} \left(\alpha + \frac{\sin \pi \alpha}{\pi} \right) \right) \right]$$

热力学极限下， $N \rightarrow \infty$ ， $L \rightarrow \infty$ ， $n = N/L$ 为一个常数。当 $m = n$ 时， $\alpha + \frac{\sin \pi \alpha}{\pi} = 1$ ，表示体系全部为玻色子，这时上述结果和单分量玻色子结果 (2.39) 趋于一致：

$$\frac{E}{L} = \frac{1}{3} \pi^2 n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} - \frac{32}{\gamma^3} \left(1 - \frac{\pi^2}{15} \right) \right]$$

图 3.2 中给出了能量和粒子数比 α 的关系，其中实线是图 3.1 中的数值解，虚线是通过迭代求得的解析解，可以看到在相互作用强度极大时，解析解和数值解的结

果基本一致，尤其当体系中玻色子数目较少时，解析解和数值解完全重合。

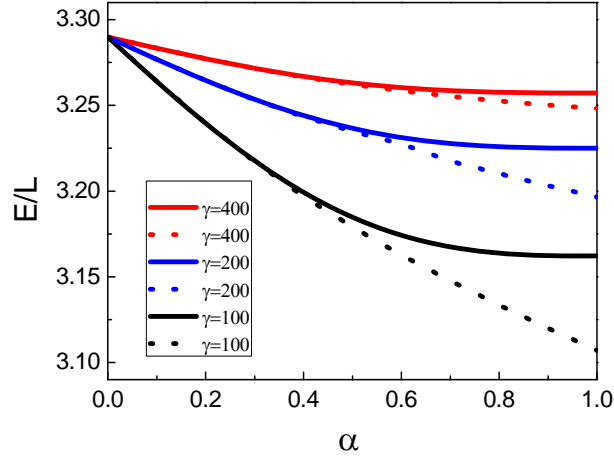


图 3.2 在强相互作用条件下能量和粒子数比 α 的关系

3.3 哈伯德模型Bethe-Ansatz方程

自旋 1/2 的费米子在一维光晶格中的系统可以用哈伯德模型来描述。因为哈伯德模型可以用来计算强关联的电子系统，所以在凝聚态物理的理论研究领域中有很重要的意义。E. H. Lieb 和 F. Y. Wu 在 1968 年给出了哈伯德模型的 Bethe-Ansatz 方程^[39]。

考虑自旋 1/2 的粒子在一维光晶格中，可以用场算符 $\Psi_{j,\sigma}$ 来描述，这里 j 为光晶格的格点位置，可以取 $j=1,2,\dots,N$ ， N 是光晶格格点总数， $\sigma=\uparrow,\downarrow$ 表示自旋， $\Psi_{j,\sigma}$ 满足对易关系

$$\{\Psi_{j,\sigma}^\dagger, \Psi_{j,\sigma'}^\dagger\} = \{\Psi_{j,\sigma}, \Psi_{j,\sigma'}\} = 0, \quad \{\Psi_{i,\sigma}, \Psi_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \Psi_{i,\sigma} |0\rangle = \langle 0 | \Psi_{i,\sigma}^\dagger = 0 \quad (3.51)$$

这里 $|0\rangle$ 为 Fock 真空态，一维哈伯德模型的哈密顿量为

$$H = -\sum_{j=1}^N \sum_{\sigma} (\Psi_{j+1,\sigma}^\dagger \Psi_{j,\sigma} + \Psi_{j,\sigma}^\dagger \Psi_{j+1,\sigma}) + U \sum_{j=1}^N (n_{j\uparrow} (n_{j\downarrow} - 1)) \quad (3.52)$$

其中 $n_{j,\sigma} = \Psi_{j,\sigma}^\dagger \Psi_{j,\sigma}$ 为 j 格点处的粒子数。定义系统里自旋朝上的粒子总数为 N_\uparrow ，相应的自旋朝下的粒子数为 $N_\downarrow = N_s$ ，那么总粒子数为 $N_c = N_\uparrow + N_\downarrow$ ，且 $0 \leq N_c \leq 2N$ 。

系统本征态由 N_c 个准动量 k_j (k_j 表示无自旋时的空间准动量) 和 N_s 个参数 λ (λ 表示自旋波性质) 决定, 在周期边界条件下, 可以导出哈伯德模型的 Bethe-Ansatz 方程为

$$Nk_j = 2\pi I_j - \sum_{\beta=1}^{N_s} 2 \arctan \left(\frac{\sin k_j - \lambda_\beta}{U} \right), \quad j=1, 2, \dots, N \quad (3.53)$$

$$\sum_{j=1}^{N_c} 2 \arctan \left(\frac{\lambda_\alpha - \sin k_j}{U} \right) = 2\pi J_\alpha + \sum_{\beta=1}^{N_s} 2 \arctan \left(\frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta}{U} \right), \quad \alpha=1, 2, \dots, N_s \quad (3.54)$$

这里量子数 I_j 、 J_α 分别取整数和半整数:

$$I_j = \frac{N_c}{2}, \quad J_\alpha = \frac{N_c - N_s + 1}{2} \quad (3.55)$$

那么体系总能量为

$$E = -2 \sum_{j=1}^N \cos k_j \quad (3.56)$$

系统总动量为

$$K = \sum_{j=1}^N k_j = \frac{1}{N_c} \left(\sum_{j=1}^N I_j + \sum_{\alpha=1}^{N_s} J_\alpha \right) \quad (3.57)$$

BA 方程组(3.53)和(3.54)的基态解, 量子数是关于原点对称的, 因此基态的总动量 $K = 0$ 。

在热力学极限下, $N \rightarrow \infty$, $N_c \rightarrow \infty$, $N_s \rightarrow \infty$, 并且 N_c/N 和 N_s/N 为常数时, 实数解 k_j 和 λ 分别在区间 $[-Q, Q]$ 和 $[-B, B]$ 上连续分布, 假设其态密度分别为 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\lambda)$, 那么哈伯德模型 Bethe-Ansatz 方程的积分形式为

$$2\pi\rho(k) = 1 + \cos k \int_{-B}^B d\lambda \left(\frac{8U\sigma(\lambda)}{U^2 + 16(\sin k_j - \lambda)^2} \right) \quad (3.58)$$

$$\int_{-Q}^Q dk \left(\frac{8U\rho(k)}{U^2 + 16(\sin k_j - \lambda)^2} \right) = 2\pi\sigma(\lambda) + \int_{-B}^B d\lambda' \left(\frac{4U\sigma(\lambda')}{U^2 + 4(\lambda - \lambda')^2} \right) \quad (3.59)$$

费米海截断点 Q 和 B 由

$$\int_{-Q}^Q dk \rho(k) = N_c / N \quad (3.60)$$

$$\int_{-B}^B d\lambda \sigma(\lambda) = N_s / N \quad (3.61)$$

对应的能量的积分形式为

$$\frac{E}{N_c} = -2 \int_{-Q}^Q dk \rho(k) \cos k \quad (3.62)$$

可以看出哈伯德模型的BA方程也可以进一步推广至热力学Bethe-Ansatz方程, 但是因为多粒子哈伯德模型BA方程不能精确求解, 需要进一步对其进行讨论。

第四章 结论与展望

综合前几章的论述，本文主要计算了一维相互作用量子气体用 Bethe-Ansatz 方法得到的精确解模型。简单介绍了单分量玻色子和两分量量子气体在不同外势和不同边界条件下的 Bethe-Ansatz 方程的推导过程。并且详细讨论分析了一维单分量玻色子在周期边界条件和开边界条件下的 Bethe-Ansatz 方程的基态和激发态解，比较计算了不同相互作用强度下基态和激发态的基本性质。从热力学统计角度出发，可以将 Bethe-Ansatz 方程推广到热力学 Bethe-Ansatz 方程，即 TBA 方程，由此计算一维多体系统的热力学性质。然而一维多体量子体系的很多性质，例如其动力学演化过程等还需要进一步深入研究。

在 1931 年 Bethe 用 Ansatz 方法得到一维海森堡模型的波函数之后不久的时间里，一维相互作用自旋 $1/2$ 粒子的模型以及其他混合物的精确解模型也相继建立起来。因此理论物理研究领域，一维多体量子系统受到物理学家和数学家的关注已经将近一个世纪时间。由于真实三维世界里不可能存在严格的一维量子气体，这些一维模型一度被称作理论物理学家的“玩具”，只存在于理论计算的范围内。然而，二十世纪末和二十一世纪初，实验技术飞速发展，通过化学合成或是各种物理技术手段制备了准一维系统，因此怎样利用一维模型的理论结果来解释分析实验上准一维系统的性质就成为很多学者感兴趣的研究热点，这也是为什么还有诸多的物理学家还在不断地探索一维模型的原因。

附录A：一维气体量子场论哈密顿量和量子力学哈密顿量

用量子场论可以描述多体系统的量子力学问题，在坐标空间里，每个粒子看做一个“场”。一般情况下，粒子是可以产生或是湮灭的，粒子总数不守恒。Bethe-Ansatz方法要求把哈密顿量写成量子力学形式，但是系统的物理性质用量子场论来描述会更好，这里我们将要证明对于一维多体系统量子场论的哈密顿量和量子力学哈密顿量是等价的。

一维玻色气体的场算符为 $\Psi(x, t)$ ，在 t 时刻，其对易关系为

$$[\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] = \delta(x-y) \quad (\text{A.1})$$

$$[\Psi(x), \Psi(y)] = [\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(y)] = 0 \quad (\text{A.2})$$

量子场论中的哈密顿量为

$$H = \int dx (\partial_x \Psi^\dagger(x) \partial_x \Psi(x) + c \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi(x)) \quad (\text{A.3})$$

定义 Fock 态 $|0\rangle$ ，满足关系 $\Psi(x)|0\rangle = 0$ ， $x \in \mathbb{R}$ ，也叫做赝真空态，对应的左手赝真空态为 $\langle 0| = \langle 0|^\dagger$ ，同时满足 $\langle 0|\Psi(x)^\dagger = 0$ ， $\langle 0|0\rangle = 1$ 。

上述粒子总数为 N 的哈密顿量可以在下面的基矢上展开，

$$|\psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \quad (\text{A.4})$$

因为是玻色子系统，这里 $\chi_N(x_1, \dots, x_N)$ 是满足对所有的 x_j 交换对称的函数。这个波函数表示在赝真空态上利用产生算符在 x_1, \dots, x_N 位置上生成玻色子。这里我们需要证明，如果波函数 $|\psi_N\rangle$ 是 H 本征态，即 $H|\psi_N\rangle = E_N|\psi_N\rangle$ ，那么 χ_N 就是 H_N 的本征态，即 $H_N \chi_N = E_N \chi_N$ ，且

$$H_N = -\sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2c \sum_{j>k}^N \delta(x_j - x_k) \quad (\text{A.5})$$

那么首先利用分部积分和对易关系计算哈密顿量的第一项得

$$\begin{aligned} & \int dx \partial_x \Psi^\dagger(x) \partial_x \Psi(x) |\psi_N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \partial_x \Psi^\dagger(x) \partial_x \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) (\partial_x (\partial_x \Psi^\dagger(x) \Psi(x)) - \partial_x^2 \Psi^\dagger(x) \Psi(x)) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) (-\partial_x^2 \Psi^\dagger(x)) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) (-\partial_x^2 \Psi^\dagger(x)) \left(\sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N) \right) |0\rangle
\end{aligned}$$

这里用到关系式

$$\Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle = \sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle$$

例如三个粒子的时候有关系

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^3 \Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_1)] \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle + \Psi^\dagger(x_1) [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_2)] \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle + \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_3)] |0\rangle \\
&= \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle - \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle + \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle \\
&\quad - \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle + \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle - \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) \Psi(x) |0\rangle \\
&= \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \Psi^\dagger(x_3) |0\rangle
\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}
&\int dx \partial_x \Psi^\dagger(x) \partial_x \Psi(x) |\psi_N\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) (-\partial_x^2 \Psi^\dagger(x)) \left(\sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_1) \cdots \delta(x-x_k) \cdots \Psi^\dagger(x_N) \right) |0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N x \left(\sum_{k=1}^N \left(-\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \chi_N(x_1, \dots, x_N) \right) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) \right) |0\rangle
\end{aligned}$$

同理第二项也可以化简为

$$\begin{aligned}
&\int dx c \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi(x) \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
&= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x) \left(\sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N) \right) |0\rangle \\
&\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int dx \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \Psi^\dagger(x) \left(\sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N) \right) |0\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x) (\Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N)) |0\rangle \\
 &\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \int dx \Psi^\dagger(x) (\Psi^\dagger(x_1) \cdots [\Psi(x), \Psi^\dagger(x_k)] \cdots \Psi^\dagger(x_N)) |0\rangle \\
 &= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi^\dagger(x) (\Psi^\dagger(x_1) \cdots \delta(x-x_k) \cdots \Psi^\dagger(x_N)) |0\rangle \\
 &\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \int dx \Psi^\dagger(x) (\Psi^\dagger(x_1) \cdots \delta(x-x_k) \cdots \Psi^\dagger(x_N)) |0\rangle \\
 &= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_k) \Psi(x_k) \Psi^\dagger(x_k) (\Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_{k-1}) \Psi^\dagger(x_{k+1}) \cdots \Psi^\dagger(x_N)) |0\rangle \\
 &\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_k) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_{k-1}) \Psi^\dagger(x_{k+1}) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
 &= \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) \sum_{k=1}^N \Psi^\dagger(x_k) \Psi(x_k) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
 &\quad - \frac{c}{\sqrt{N!}} \int d^N x \chi_N(x_1, \dots, x_N) N \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^N x \left(\sum_{j < k}^N 2c \delta(x_j - x_k) \chi_N(x_1, \dots, x_N) \right) \Psi^\dagger(x_1) \cdots \Psi^\dagger(x_N) |0\rangle
 \end{aligned}$$

这样可以得出

$$H_N \chi_N(x_1, \dots, x_N) = \left(-\sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2c \sum_{j < k}^N \delta(x_j - x_k) \right) \chi_N(x_1, \dots, x_N) = E_N \chi_N(x_1, \dots, x_N)$$

附录B：排斥相互作用Bethe-Ansatz方程的解为实数的证明

这一节将要证明，当 $c > 0$ 时，Bethe-Ansatz 方程组 (2.7) 的解为实数。这里要用到以下数学性质：

$$\operatorname{Im}(k) \geq 0 \text{ 时, } \left| \exp(ik_j L) \right| \leq 1, \quad \left| \frac{k+ic}{k-ic} \right| \geq 1 \quad (\text{B.1})$$

$$\operatorname{Im}(k) \leq 0 \text{ 时, } \left| \exp(ik_j L) \right| \geq 1, \quad \left| \frac{k+ic}{k-ic} \right| \leq 1 \quad (\text{B.2})$$

假设满足方程组

$$\exp(ik_j L) = - \prod_{i=1}^N \frac{(k_j - k_i) + ic}{(k_j - k_i) - ic}$$

的解 $\{k_j\}$ 为复数解，那么可以定义 k_j 中虚部最大的值为 k_{\max} ，因此

$$\operatorname{Im}(k_{\max}) \geq \operatorname{Im}(k_j), \quad j=1,2,\dots,N, \quad k_{\max} \in \{k_j\} \quad (\text{B.3})$$

把 k_{\max} 代入 Bethe-Ansatz 方程得

$$\exp(ik_{\max} L) = - \prod_{i=1}^N \frac{(k_{\max} - k_i) + ic}{(k_{\max} - k_i) - ic}$$

根据 (B.1)，则上式满足

$$\left| \exp(ik_{\max} L) \right| = \left| - \prod_{i=1}^N \frac{(k_{\max} - k_i) + ic}{(k_{\max} - k_i) - ic} \right| \geq 1 \quad (\text{B.4})$$

又由于 (B.2)，因此 $\operatorname{Im}(k_{\max}) \leq 0$ ，所以对于任意 k_j ，

$$\operatorname{Im}(k_j) \leq \operatorname{Im}(k_{\max}) \leq 0 \quad (\text{B.5})$$

相反的，如果定义 k_j 中虚部最小的值为 k_{\min} ，满足

$$\operatorname{Im}(k_{\min}) \leq \operatorname{Im}(k_j), \quad j=1,2,\dots,N, \quad k_{\min} \in \{k_j\}$$

同理可以导出

$$\left| \exp(ik_{\min} L) \right| = \left| - \prod_{i=1}^N \frac{(k_{\min} - k_i) + ic}{(k_{\min} - k_i) - ic} \right| \leq 1 \quad (\text{B.6})$$

所以

$$\operatorname{Im}(k_j) \geq \operatorname{Im}(k_{\min}) \geq 0 \quad (\text{B.7})$$

综合上述结论，对所有的 $\{k_j\}$ 解唯一满足的结果就是 $\operatorname{Im}(k_j) = 0$ ，也就是说对于排斥相互作用，BA 方程组的解只能为实数。

参考文献

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, *Science*, 1995, **269**, 198.
- [2] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms, *Phys. Rev. Lett*, 1995, **75**, 3969.
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tolett, and R. G. Hulet, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, *Phys. Rev. Lett*, 1995, **75**, 1687.
- [4] L. Tonks, The Complete Equation of State of One, Two and Three-Dimensional Gases of Hard Elastic Spheres, *Phys. Rev.*, 1936, **50**, 955; M. Girardeau, Relationship between Systems of impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension, *J. Math. Phys.*, 1960, **1**, 516.
- [5] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Tonks-Girardeau Gas of Ultracold Atoms in an Optical Lattice, *Nature(London)*, 2004, **429**, 277.
- [6] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, Observation of a One-Dimensional Tonks-Girardeau Gas, *Science*, 2004, **305**, 1125.
- [7] M. Erhard, H. Schmaljohann, J. Kronjäger, K. Bongs, and K. Sengstock, Measurement of a Mixed-Spin-Channel Feshbach Resonance in ^{87}Rb , *Phys. Rev. A*, 2004, **69**, 032705.
- [8] A. Widera, O. Mandel, M. Greiner, S. Kreim, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Entanglement Interferometry for Precision Measurement of Atomic Scattering Properties, *Phys. Rev. Lett*, 2004, **92**, 160406.
- [9] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, R. G. Hulet, Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms, *Science*, 2001, **291**, 2570.
- [10] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, and T. Esslinger, Exciting Collective Oscillations in a Trapped 1D Gas, *Phys. Rev. Lett.* 2003, **91**, 250402.
- [11] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R.

- Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* 2001, **87**, 130402.
- [12] E. Haller, M. Gustavasson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H. C. Nägerl, Realization of an Excited, Strongly Correlated Quantum Gas Phase, *Science*, 2009, **325**, 1224.
- [13] W. Hänsel, P. Hommelhoff, T. W. Hänsch, and Reichel, Bose-Einstein Condensation on a Microelectronic Chip, *Nature*, 2001, **413**, 498.
- [14] A. H. Amerongen, J. J. P. Vanes, P. Wicke, K. V. Kheruntsyan, and N. J. van Druten, Yang-Yang Thermodynamics on an Atom Chip, *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**, 090402.
- [15] M. Olshanii, Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 938; V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, Bosons in Cigar-Shaped Traps: Thomas-Fermi Regime, Tonks-Girardeau Regime, and In Between, *Phys. Rev. Lett.*, 2001, **86**, 5413.
- [16] P. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. Abeelen, and B. J. Verhaar, Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 69 .
- [17] S. Inouye, M R Andrews, J. Stenger, H-J Miesner, D M Stamper-Kurn and W Ketterle, Observation of a Feshbach Resonance in a Bose-Einstein Condensate , *Nature*, 1998, **392**, 6672.
- [18] C. Ospelkaus and S. Ospelkaus, Heteronuclear Quantum Gas Mixtures, *J. Phys. B: At Mol Opt*, 2008, **41**, 203001.
- [19] H. A. Bethe, Eigenvalues and Eigenfunctions for the Linear Atomic Chain, *Z. Phys*, 1931, **71**, 205.
- [20] E. H. Lieb and W. Liniger, Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State, *Phys. Rev.*, 1963, **130**, 1605; E. H. Lieb, Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum, *Phys. Rev.*, 1963, **139**, 1616.
- [21] J. G. Muga, and R. F. Snider, Solvable Three-Boson Model with Attractive δ Function Interactions, *Phys. Rev. A*, 1998, **57**, 3317.
- [22] K. Sakman, A. I. Streltsov, O. E. Alon, and L. S. Cederbaum, Exact Ground State of Finite Bose-Einstein Condensates on a Ring, *Phys. Rev. A*, 2005, **72**, 033613.

- [23] S. Chen, L. Guan, X. Yin, Y. Hao, and X. Guan, Transition from a Tonks-Girardeau Gas to a Super-Tonks-Girardeau Gas as an Exact Many-Body Dynamics Problem, *Phys. Rev. A*, 2010, **81**, 030609(R).
- [24] G. E. Astrakharchik and S. Giorgini, Beyond the Tonks-Girardeau Gas: Strongly Correlated Regime in Quasi-One-Dimensional Bose Gases, *Phys. Rev. L*, 2005, **95**, 190407.
- [25] M. T. Batchelor, M. Mortz, X. Guan, and N. Oelkers, Evidence for the Super Tonks-Girardeau Gas, *J. State. Mech*, 2005, L10001.
- [26] C. N. Yang and C. P. Yang, Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction, *J. Math. Phys*, 1969, **10**, 1115.
- [27] X. W. Guan, M. T. Batchelor and M. Takahashi, Ferromagnetic Behavior in the Strongly Interacting Two-Component Bose Gas, *Phys. Rev. A*, 2007, **76**, 043617.
- [28] Y. Hao, Y. Zhang, J. Q. Liang, and S. Chen, Ground-State Properties of One-Dimensional Ultracold Bose Gases in a Hard-Wall Trap, *Phy. Rev. A*, 2007, **73**, 063617.
- [29] M. Flicker, E. H. Lieb, Delta-Function Fermi Gas with Two-Spin Deviates, *Phys. Rev*, 1967, **161**, 179.
- [30] M. Gaudin, Investigation of the Fermi Surface of V_3Si by Means of Positron Annihilation, *Phys. Lett*, 1967, **24**, 55.
- [31] C. N. Yang, Some Exact Results for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction, *Phys. Rev. Lett*, 1967, **19**, 1312.
- [32] L. D. Faddeev, Algebraic Aspects of the Bethe Ansatz, arXiv: hep-th/ (1994), 9404013v1.
- [33] E. Zhao, X. W. Guan, W. V. Liu, M. T. Batchelor and M. Oshikawa, Analytic Thermodynamics and Thermometry of Gaudin-Yang Fermi Gases, *Phys. Rev. Lett*, 2009, **103**, 140404; E. Zhao and W. V. Liu, Theory of Quasi-One-Dimensional Imbalanced Fermi Gases, *Phys, Rev, A*, 2008, **78**, 063605.
- [34] X. W. Guan, M. T. Batchelor, C. Lee and M. Bortz, Phase Transitions and Pairing Signature in Strongly Attractive Fermi Atomic Gases, *Phys. Rev. B*, 2007, **76**, 085120.
- [35] S. Chen, X. Guan, X. Yin, L. Guan, and M. T. Batchelor, Realization of Effective Super Tonks-Girardeau Gases via Strongly Attractive One-Dimensional Fermi Gases,

- Phys. Rev. A, 2010, **81**, 031608(R).
- [36] C. K. Lai and C. N. Yang Ground-State Energy of a Mixture of Fermions and Bosons in One Dimension with a Repulsive δ -Function Interaction, Phys. Rev. A, 1971, **3**, 393.
- [37] A. Imambekov and E. Demler, Exactly Solvable Case of a One-Dimensional Bose–Fermi Mixture, Phys. Rev. A, 2006, **73**, 021602(R); A. Imambekov and E. Demler, Applications of Exact Solution for Strongly Interacting One-Dimensional Bose–Fermi Mixture: Low-temperature Correlation Functions, Density Profiles, and Collective Modes, Ann. Phys, 2006, **321**, 2390.
- [38] X. Yin, S. Chen, and Y. Zhang, Yang-Yang Thermodynamics of a Bose-Fermi Mixture, Phys. Rev. A, **79**, 053604.
- [39] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Absence of Mott Transition in an Exact Solution of Short Range One Band Model in One Dimension, Phys. Rev. Lett, 1968, **20**, 1445.

攻读学位期间取得的研究成果

[1]李花, 一维玻色费米混合物热力学 Bethe-Ansatz 方程高阶迭代展开, 山西大学学报(自然科学版), 第 34 卷.

[2] Hua Li, Taifeng Liu, Yaojiang Hao, Yunbo Zhang, Tonks-Girardeau gas, super-Tonks-Girardeau gas, and bound states of one-dimensional bosons in a hard-wall trap, arXiv: 1105.0293, submitted to EPL.

致 谢

求学路是一条没有终点的攀登之路，科学是没有峰顶的喜马拉雅山，在就读硕士研究生的学习过程中，我只是初窥到科研工作的门径，然而这短短三年学习生活，理论物理研究所严肃又活泼的科研氛围，导师们严谨认真的工作态度，深深地影响着我。在这里我收获的不仅是知识，更重要的是一种不断进取、勇于创新的精神，还有就是老师、同学和朋友们的教诲和友谊。

在此论文完成之际，我要特别感谢我的导师张云波教授，他是一位治学严谨的老师，在工作上，从来都是一丝不苟，兢兢业业。在学习和生活中，他给了我很多指导和帮助。忘不了在过年过节时，他还在办公室忙碌的身影，晚自习结束，经常能看见他是最后一个关灯离开的人，他的人格魅力和学术造诣留给我深刻的印象。同时我也要感谢聂一行教授、李卫东教授、李录教授、李志坚教授、张素英教授、阎维贤教授、姜晓庶教授等理论所导师和院校领导，是他们教会了我专业知识，教会了我如何学习，如何做人做事。

感谢尹相国、郝亚江、郭利平、王红梅等师兄师姐给我的建议和帮助，感谢张杰、杜磊、梁成功、梁晋菊、毛丽君、刘太丰、李甜甜、张小欧、王娟、白守燕、万鹏宇等学友的交流学习。感谢家人和朋友们对我的关心和支持。

感谢山西大学、物理电子工程学以及理论物理研究所给我的学习机会和就学环境，在这里我度过了一段最美好的时光！

个人简况及联系方式

个人简况:

姓名: 李花

性别: 女

籍贯: 山西省晋城市泽州县

个人简历: 2008年9月—2011年6月 山西大学理论物理研究所 硕士

联系方式:

手机: 15034061716

电子信箱: lihua1985@126.com

承 诺 书

本人郑重声明：所提交的学位论文，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。

作者签名：

20 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