

山西大学

2011 届硕士学位论文

有限温度超流-莫特绝缘体相变

作者姓名	梁晋菊
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

Superfluid-Mott Insulator Phase Transition at Finite
Temperature

Student Name	Jin-ju Liang
Supervisor	Prof. Yun-bo 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.....	III
第一章 绪论.....	1
1.1 引言.....	1
1.2 玻色-哈伯德模型.....	3
1.2.1 微扰理论	4
1.2.2 扩展的玻色-哈伯德模型	5
1.3 参数 (U,t) 的取值.....	7
第二章 自旋为 1 的超流-莫特绝缘体相变.....	12
2.1 自旋为 1 的玻色-哈伯德模型.....	12
2.2 $t=0$ 极限下的莫特绝缘相.....	13
2.3 强相互作用极限下的平均场近似.....	15
2.3.1 占据数为偶数的MI态.....	16
2.3.2 占据数为奇数的MI态.....	17
第三章 光晶格中超冷原子的热力学性质.....	19
3.1 有限温度的平均场理论.....	19
3.2 数密度、超流密度、熵随化学势的变化.....	21
3.3 数密度、超流密度、熵的空间分布.....	23
结 论.....	28
参 考 文 献.....	29
攻读学位期间取得的研究成果.....	33
个人简况及联系方式.....	34
致 谢.....	35
承 诺 书.....	36
学位论文使用授权声明.....	37

Contents

Chinse Abstract	I
Abstract	III
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Overview.....	1
1.2 Bose-Hubbard Model.....	3
1.2.1 Perturbation theoty.....	4
1.2.2 Extended Bose-Hubbard Model	5
1.3 Calculation of parameters (U,t)	7
Chapter 2 Superfluid–Mott insulator transition of spin-1 bosons	12
2.1 Bose-Hubbard Model for spin-1	12
2.2 Mott Insulating phase in the limit of $t=0$	13
2.3 Mean filed approach in the strongly interacting limit.....	15
2.3.1 MI state with an even number of atoms.....	16
2.3.2 MI state with an odd number of atoms	17
Chapter 3 The thermodynamics peoperty of ultracold atoms in optical lattices	19
3.1 Mean-filed theory at finite temperature	19
3.2 The number density, the superfluid density and the entropy propagate with chemical potential	21
3.3 The spatial distribution of the number density, the superfluid density and the entropy	23
Conclusion	28
References	29
Research achievements	33
Personal profiles	34
Acknowledgment	35
Letter of commitment	36
Authorization statement	37

中文摘要

光晶格为量子隧穿模型和量子相变等物理问题的实现提供了可能。光晶格中超冷原子从超流相（SF）到莫特绝缘相（MI）的跃迁，翻开了可控条件下强关联机制领域研究的新篇章。目前，荧光成像技术可精确测量到单原子单格点的原子随空间和时间变化的量子相变。本文首先介绍了光晶格中玻色-哈伯德模型，以及将玻色-哈伯德模型推广到包含三体相互作用得到的扩展的玻色-哈伯德模型，再结合平均场近似和微扰理论，计算了超流相与莫特绝缘相边界，同时给出了相互作用 U 和隧穿矩阵 t 的详细计算。接着利用紧束缚近似讨论了光晶格中自旋为1的玻色-哈伯德模型，研究了极限条件下的莫特绝缘相，进而理论计算得到了在奇偶占据数下超流相到莫特绝缘相的边界，并画出了相图。最后在前面的基础上，结合热力学相关理论计算有限温度下位于二维（三维）光晶格中的冷原子的数密度、超流密度和熵随空间变化的图，结合超流相与莫特绝缘相的知识分析其物理意义。该研究方案在目前冷原子实验中有望被实现和直接观察。

关键词：莫特绝缘相；超流相；玻色-哈伯德模型；数密度；超流密度；熵

ABSTRACT

Optical lattices provided possibility for the realization of many physical problems, such as quantum tunneling model and quantum phase transitions. The phase transition of ultra cold atoms in the optical lattices from superfluid phase to Mott insulator phase opened a new door for the investigation of strong correlation mechanism under well controlled conditions. Currently the fluorescence imaging technique allows us to observe space- and time-resolved characterization of single-atom and single-site across the quantum phase transition. In this thesis, we first give a brief introduction of Bose-Hubbard model, and extended-Bose-Hubbard model with two- or three-body on-site interactions, and calculate the phase boundary of the superfluid state and the Mott-insulator state combining the mean-field approximation with the perturbation theory. Meanwhile we give details on how to evaluate the interaction parameter U and the hopping matrix t . Then starting from the spin-1 Bose-Hubbard model under the tight-binding approximation, we study the MI phase in the limit of $t=0$, calculate the phase boundary of the SF-MI transition, and discuss the phase diagram with the even-odd dependence of the MI phase. Finally, based on the above knowledge and the theory of thermodynamics, we study the number density, the superfluid density and the entropy of the atoms for the SF and MI states in two and three- dimensional optical lattices at finite temperature. Our

results can be readily verified in the current experiments.

Key words: Mott-Insulator Phase; Superfluid Phase; Bose-Hubbard Model;
Number density; Superfluid density; Entropy

第一章 绪论

1.1 引言

1924 年印度物理教师玻色的手稿引起了爱因斯坦的高度重视,并将其亲自翻译成德文送至 *Zeitschrift für Physik* 期刊发表,开始了玻色—爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein Condensation 简称为 BEC) 现象的研究,其最显著的特征是当温度足够低和密度足够大时,所有的原子会聚集在尽可能低的能量状态。1938 年伦敦 (London) 指出,超流现象可能是液氦原子的玻色—爱因斯坦凝聚的表现,并计算出转变温度为 3.2K,但当时没有实验证实。1947 年波戈留波夫 (Bogoliubov) 提出了弱相互作用的玻色气体理论,20 世纪 50 年代杨振宁、李政道和黄克逊提出了硬核玻色气体理论,由于这一理论适用于稀薄和较弱相互作用情况下,物理学界便寄希望于实现稀薄原子气体的玻色—爱因斯坦凝聚。

上世纪 80 年代激光冷却和中性原子捕获在实验上取得了重大进展。朱棣文 (Chu)、科亨-唐努季 (Cohen-Tannoudji) 和菲利普斯 (Phillips) 由于做出巨大贡献分享了 1997 年诺贝尔物理奖。物理学家开始了在原子气体中玻色—爱因斯坦凝聚的尝试,直到爱因斯坦预言后的 71 年,美国物理学家魏曼 (Wieman) 和康奈尔 (Cornell) 研究小组经过多年的努力于 1995 年 6 月在铷 (^{87}Rb) 原子蒸汽中观察到玻色爱因斯坦凝聚现象,几个月后麻省理工学院的物理学家凯特利 (Ketterle) 研究小组在钠 (^{23}Na) 原子蒸汽中实现了 BEC。这三位科学家也因此被授予 2001 年诺贝尔物理奖。

法国巴黎高等师范学校和美国国家标准局 (NIST) 的两个实验利用正交偏振的驻波首次给出了囚禁原子的一维周期光势阱的明确证据。一维光晶格是 Dalibard 和 Cohen-Tannoudji^[1, 2]在理论上提出的,他们指出光晶格是由正交线偏振相向传播的激光形成的呈周期阵列的格点,可以囚禁原子。由不同方向传播的驻波叠加可以形成二维和三维光晶格,如图 1.1 所示。

改变激光的频率、强度、布局和偏振等等可以来改变光晶格的性质,比如精确地控制原子间的相互作用。因此光晶格成为光谱学、激光冷却和量子计算研究中重要的工具之一。特别是为由玻色子和费米子组成的多种基本模型的实现提供了可

能。光晶格还有许多实际的应用，比如光晶格中的 BEC 的自发磁化现象可能会应用在弱磁场探测及磁传感器等技术领域；其自旋波的激发、控制与探测的研究，为量子计算及量子信息处理等领域探索提供重要的指导。

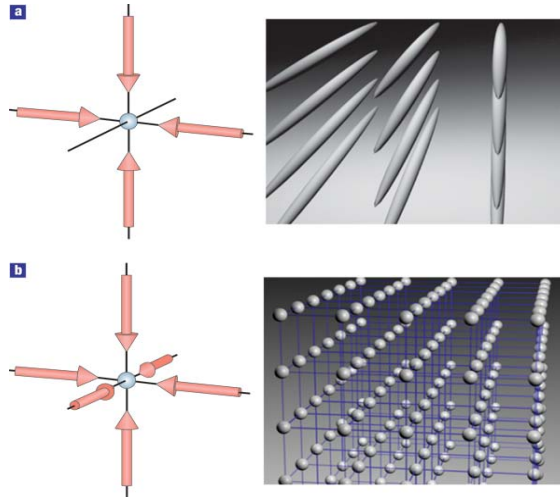


图1.1 a、b分别为四、六束相互正交的激光产生的二、三维晶格^[3]

光晶格中 BEC 的量子相变可以用玻色-哈伯德 (Bose-Hubbard) 模型来描述。2002 年格雷尼尔 (Grenier) 等人通过对光晶格势阱深度的控制，首次在实验上观察到光晶格中玻色-爱因斯坦凝聚体 (BEC) 从超流相 (Superfluid) 到莫特绝缘相 (Mott-Insulator) 的量子相变^[4]。

单量子粒子的可靠探测为量子光学和量子信息处理领域提供了很大的进展。最近 Bloch^[5]小组和 Greiner^[6]小组使用单原子-单格点高分辨率荧光成像技术，重构了原子在晶格中的分布并精确测量了系统的温度和熵。在单个格点上对原子的操控的能力打开了光晶格中强相互作用原子气体分析和应用的广阔前景。

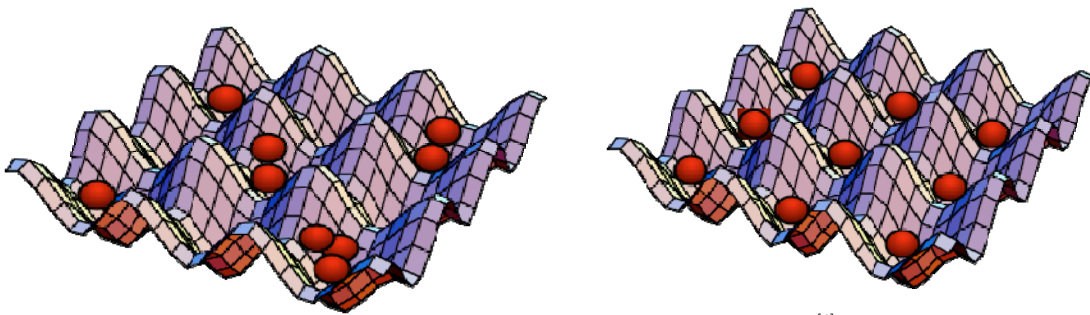


图 1.2 超流相和莫特绝缘相示意图^[4]

本文第一章详细介绍玻色-哈伯德模型以及含两体或三体相互作用的扩展玻色哈伯德模型，在微扰理论下得出超流相与莫特绝缘相的边界；第二章讨论自旋为 1

的玻色气体在光晶格中的量子相变；第三章利用平均场理论中的退耦合近似方法研究有限温度下光晶格中超冷原子气体的量子相变。

1.2 玻色-哈伯德模型

处于光晶格最低能带的原子的行为由玻色-哈伯德哈密顿量来描述：

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (1.1)$$

第一项中 $\langle i, j \rangle$ 表示对最近邻格点的求和， \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_i) 为玻色子的产生（湮灭）算符，参数 t 为跃迁系数（隧穿幅度）； $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ 为格点 i 处的粒子数算符， U 为玻色子间两体排斥相互作用强度；化学势 μ 的引入是为了保证巨正则系综中原子数守恒。

强耦合极限下，利用平均场近似，引入超流序参数^[7] $\psi = \sqrt{\langle \hat{n}_i \rangle} = \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_j \rangle$ 。

在等式

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j = (\hat{a}_i^\dagger - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle)(\hat{a}_j - \langle \hat{a}_j \rangle) + \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_j \rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle,$$

中忽略离开平衡值 $\langle O \rangle$ 偏差的二阶项，可以得到

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \approx \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_j \rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle = \psi (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j) - \psi^2,$$

这样有效哈密顿量写成

$$\hat{H}^{eff} = -zt\psi \sum_i (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) + zt\psi^2 N_s + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (1.2)$$

其中 $z \equiv 2D$ 为光晶格的配位数，其中 D 为光晶格的维数； N_s 为光格点总数。该哈密顿量关于格点 i 是对角化的。总的哈密顿量 \hat{H}^{eff} 可以写成单个格点 i 处的哈密顿量

\hat{H}_i^{eff} 之和： $\hat{H}^{eff} = zt \sum_i \hat{H}_i^{eff}$ ，而

$$\hat{H}_i^{eff} = \frac{\bar{U}}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \bar{\mu} \hat{n}_i - \psi (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) + \psi^2 \quad (1.3)$$

引进无量纲参数 $\bar{U} = U / zt$ ， $\bar{\mu} = \mu / zt$ ，以便更好地说明玻色子间排斥相互作用强度 U 与跃迁系数 t 的关系。由于哈密顿量 \hat{H}_i^{eff} 与格点位置无关，因此在后面的讨论中忽略指标 i 。

1.2.1 微扰理论

在 $U \gg t$ 时, 应用微扰理论计算方程的能量。将方程 (1.3) 写成如下形式:

$$\hat{H}^{eff} = \hat{H}^{(0)} + \psi \hat{V} \quad (1.4)$$

其中, $\hat{H}^{(0)} = \frac{\bar{U}}{2} \hat{n}(\hat{n}-1) - \bar{\mu} \hat{n} + \psi^2$ 为哈密顿量的非微扰部分, 微扰部分为 $\hat{V} = -(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$,

以 Fock 态为基矢, $|n\rangle$ 分别表示粒子占据数为 n 时所对应的非微扰态。 $\hat{H}^{(0)}$ 的基态能量为:

$$E_g^{(0)} = \left\{ E_n^{(0)} \Big|_{n=0,1,2,\dots} \right\}_{\min} \quad (1.5)$$

$E_n^{(0)}$ 表示填充粒子数为 n 时, 哈密顿量的非微扰部分 $\hat{H}^{(0)}$ 对应的能量。 g 是整数,

表征单个格点的平均粒子数。对比 $E_n^{(0)}$ 和 $E_{n+1}^{(0)}$ 可知:

$$E_g^{(0)} = \begin{cases} 0 & \text{if } \bar{\mu} < 0 \\ \frac{1}{2} \bar{U} g (g-1) - \bar{\mu} g & \text{if } \bar{U} g (g-1) < \bar{\mu} < \bar{U} g \end{cases} \quad (1.6)$$

二阶微扰对应的能量表达式为:

$$E_g^{(2)} = \psi^2 \sum_{n \neq g} \frac{\left| \langle g | \hat{V} | n \rangle \right|^2}{E_g^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (1.7)$$

$n = g$ 对应基态, 因为相互作用 V 使得基态增加一个或减少一个粒子。因此:

$$E_g^{(2)} = a_2 \psi^2 = \frac{g}{\bar{U}(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu} - \bar{U}g} \quad (1.8)$$

对于二阶相变, 根据一般的步骤, 将基态能量写为:

$$E_g(\psi) = a_0(g, \bar{U}, \bar{\mu}) + [1 + a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu})] \psi^2 + O(\psi^4)$$

最小化含超流序参数 ψ 的能量, 由朗道理论可知: $a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) + 1 > 0$ 时, 要求 $\psi = 0$;

$a_2(g, \bar{U}, \bar{\mu}) + 1 < 0$ 时, 要求 $\psi \neq 0$ 。因此莫特绝缘相和超流相的边界为:

$$a_2 + 1 = \frac{g}{\bar{U}(g-1) - \bar{\mu}} + \frac{g-1}{\bar{\mu} - \bar{U}g} + 1 = 0 \quad (1.10)$$

求解(1.10)式可得莫特绝缘相和超流相的上下边界为

$$\bar{\mu}_{\pm} = \frac{1}{2}[(2g-1)\bar{U} - 1] \pm \frac{1}{2}\sqrt{\bar{U}^2 - 2\bar{U}(2g+1) + 1} \quad (1.11)$$

每个叶形区 \bar{U} 的最小值为

$$\bar{U}_c = 2g + 1 + \sqrt{(2g+1)^2 - 1} \quad (1.12)$$

即 $\bar{U}_c = 5.83, ^{[7-9]} 9.89, 13.92 \dots$, 当 $g=1, 2, 3 \dots$ 。根据 (1.11) 和 (1.12) 式以 \bar{U} 为横轴, 以 $\bar{\mu}$ 为纵轴可以绘出玻色哈伯德模型的相图, 如图 1.3 左图所示, 其中实线是通过二阶微扰理论得出的三维情况下莫特绝缘相与超流相边界, 点线是通过零阶微扰理论得到的相图。以 t/U 为横轴, 以 μ/U 为纵轴可以给出这个模型量子相的另一种表示, 如图 1.3 右图所示, 这里虚线是三维情况下莫特绝缘相与超流相边界相图, 实线是二维情况莫特绝缘相与超流相边界相图。

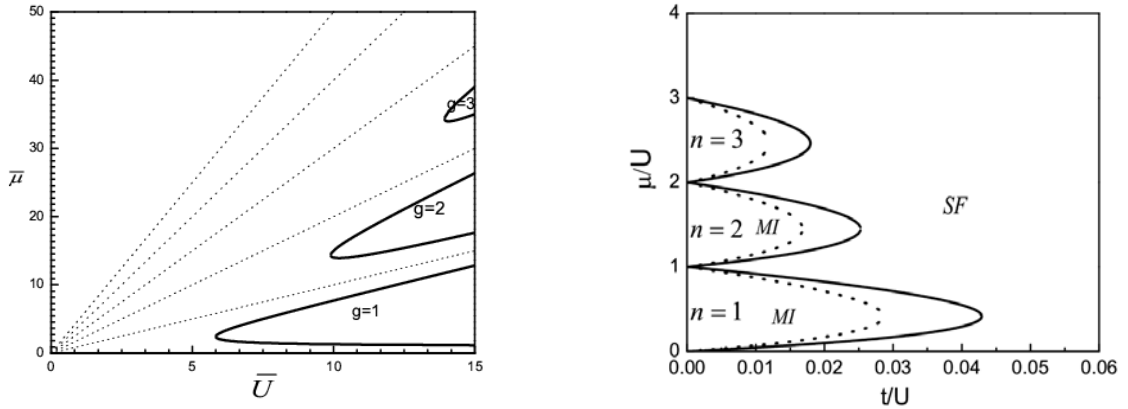


图 1.3 玻色-哈伯德模型相图

1.2.2 扩展的玻色-哈伯德模型

将玻色-哈伯德模型推广到包含三体相互作用得到的扩展的玻色-哈伯德模型, 其哈密顿量的形式为^[9]:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{W}{6} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (1.13)$$

U 和 W 分别为玻色子间两体和三体排斥相互作用强度。同样根据退耦合近似得到的有效哈密顿量为:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{eff} = & -zt\psi \sum_i (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) + zt\psi^2 N_s + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \\ & + \frac{W}{6} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2) - \mu \sum_i \hat{n}_i\end{aligned}\quad (1.14)$$

单个格点 i 处的有效哈密顿量可写为:

$$\hat{H}_i^{eff} = \frac{\bar{U}}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{\bar{W}}{6} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) (\hat{n}_i - 2) - \bar{\mu} \hat{n}_i - \psi (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) + \psi^2 \quad (1.15)$$

此处引入无量纲参数 $\bar{W} = W / zt$ 。在 $U, W \gg t$ 时, 应用微扰理论计算方程 (1.15)

对应的能量。先将上式写成如下形式:

$$\hat{H}^{eff} = \hat{H}^{(0)} + \psi \hat{V} \quad (1.16)$$

其中, $\hat{H}^{(0)} = \frac{\bar{U}}{2} \hat{n} (\hat{n} - 1) + \frac{\bar{W}}{6} \hat{n} (\hat{n} - 1) (\hat{n} - 2) - \bar{\mu} \hat{n} + \psi^2$ 为非微扰部分的哈密顿量, 微扰

部分 $\hat{V} = -(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ 。 $\hat{H}^{(0)}$ 的基态能量为:

$$E_g^{(0)} = \{E_n^{(0)} |_{n=0,1,2,\dots}\} = \frac{\bar{U}}{2} g(g-1) + \frac{\bar{W}}{6} g(g-1)(g-2) - \bar{\mu} g \quad (1.17)$$

由 (1.7) 式, 可以得到二阶微扰对应的能量为: $E_g^{(2)} = a_2 \psi^2$, 其中:

$$a_2 = \frac{g}{(g-1)\bar{U} + \frac{1}{2}(g-1)(g-2)\bar{W} - \bar{\mu}} + \frac{g+1}{\bar{\mu} - g\bar{U} - \frac{1}{2}g(g-1)\bar{W}} \quad (1.18)$$

对于二阶相变, 在强耦合情况下, 将基态能量按波函数超流序参量 ψ 展开为

$$\begin{aligned}E_g(\psi) &= E_g^{(0)} + E_g^{(2)} + \dots \\ &= a_0(g, \bar{U}, \bar{W}, \bar{\mu}) + [1 + a_2(g, \bar{U}, \bar{W}, \bar{\mu})] \psi^2 + O(\psi^4)\end{aligned}\quad (1.19)$$

莫特绝缘相和超流相的边界仍由 $1 + a_2 = 0$ 决定, 结果为

$$\bar{\mu}_\pm = \frac{1}{2} \left[(2g-1)\bar{U} + (g-1)^2 \bar{W} - 1 \right] \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta} \quad (1.20)$$

其中:

$$\Delta = \bar{U}^2 + (g-1)^2 \bar{W}^2 + 2(g-1)\bar{U}\bar{W} - 2(2g+1)\bar{U} - 2(2g+1)(g-1)\bar{W} + 1 \quad (1.21)$$

根据 (1.20) 式, 图 1.4 给出扩展玻色哈伯德模型的莫特绝缘相与超流相的边界相图。其中虚线为三体相互作用的相图 ($U=0$), 以 zt/W 为横轴, μ/W 为纵轴; 实线表示二体相互作用的相图 ($W=0$), 以 zt/U 为横轴, μ/U 为纵轴。可以

看出：三体相互作用下的莫特绝缘区与两体相互作用下的相比，莫特绝缘相的区域明显变大了。两体相互作用下， g 取不同值时， $\mu(U)$ 对应的幅度均为 1，但三体相互作用下， g 取不同值时， $\mu(W)$ 对应的幅度为 $(g-1)$ 。

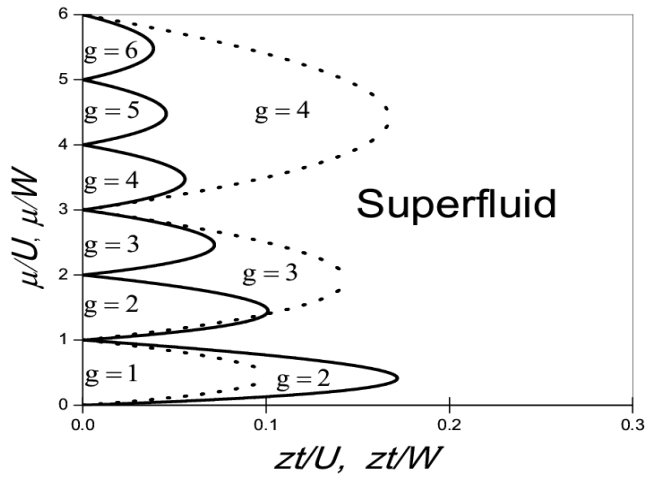


图 1.4 扩展玻色哈伯德模型的莫特绝缘相与超流相的边界

1.3 参数 (U, t) 的取值

玻色哈伯德模型的物理意义就是隧穿幅度 t 与相互作用参数 U 之间的竞争。如图 1.6 所示，假设每个格点中有一个粒子，它位于阱内基态上（左阱黑点）。如果它跳到右阱中，那么对于原本只有一个粒子的右阱来说，相互作用就提高 U 。而跳跃带来能量降低 t 。因此体系的基态由 U 和 t 的竞争来决定，这里我们给出这两个参数的详细计算过程。

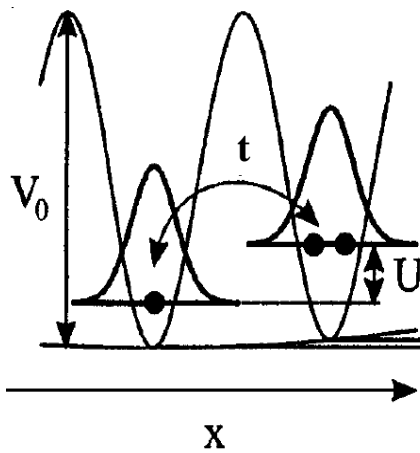


图 1.5 光晶格周期势^[8, 10]

当它们的比值 t/U 大小不同时，会出现两个性质不同的基态：超流态和莫特绝缘态。当光格子深度 V_0 较小时，此时隧穿矩阵元 t 的值较大，相互作用矩阵元 U 的值较小，此时 t/U 的比值较大，易发生隧穿，系统处于超流态；当光格子深度 V_0 较大时，排斥能 U 开始占主导地位，跳跃极为困难，格点的粒子数填充是固定不变的，涨落为 0，格点间的相位没有关联，此时原子处于莫特绝缘态。填充因子决定于局域化学势 μ 。玻色哈伯德模型二次量子化的哈密顿量可写为：

$$H = \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_0(\mathbf{r}) - \mu \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.22)$$

其中 $V_0(\mathbf{r})$ 是三维光晶格的周期势， $g = 4\pi\hbar^2 a_s / m$ 为两个玻色子间的排斥势耦合常数。用瓦涅尔函数将场算符展开为 $\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{a}_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ ，这里我们将势阱中最低能

带的瓦涅尔函数近似取为三维简谐振子的基态波函数 $w(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\alpha^2 r^2 / 2}$ ，其中

$\alpha^{-1} = (\hbar^2 / 2mV_0 k)^{1/4}$ 为谐振子的特征长度。代入 (1.22) 式即可得到哈密顿量 (1.1)，

而三维相互作用参数 U 为^[9, 11-14]

$$\begin{aligned} U &= g \int d\mathbf{r} |w(\mathbf{r})|^4 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int_0^{+\infty} 4\pi r^2 \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^3 e^{-2\alpha^2 r^2} dr \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\hbar^2 a_s}{m} \alpha^3 = \frac{8}{\sqrt{\pi}} k a_s E_R \left(\frac{V_0}{E_R} \right)^{3/4} \end{aligned} \quad (1.23)$$

$E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ 为反冲能量。隧穿幅度 t

$$t = - \int d\mathbf{r} w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\mathbf{r}) \right) w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.24)$$

的计算需要用到马修 (Mathieu) 方程^[11, 15-17]。我们所用的三维光晶格构成一个简立方格子模型，它的势的形式为^[9, 11]：

$$V(\mathbf{r}) = V(x, y, z) = V_0 (\sin^2 kx + \sin^2 ky + \sin^2 kz)$$

其周期为 $d = \pi / k$ ， $k = 2\pi / \lambda$ 是激光束的波矢。三维光晶格势满足薛定谔方程：

$$-\left(\hbar^2 / 2m \right) \nabla^2 u + V(r)u = Eu \quad (1.25)$$

将波函数分离变量 $u = u_x(x)u_y(y)u_z(z)$ ，对应的能量满足 $E = E_x + E_y + E_z$ ， x 方向

的薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_x(x)}{dx^2} + V_0 \sin^2 kx u_x(x) = E_x u_x(x) \quad (1.26)$$

将其势函数原点平移 $\pi/2k$ ，或者等效地 $\sin^2 kx \rightarrow \cos^2 kx$ ，我们得到著名的马修方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_x(x)}{dx^2} + V_0 \cos^2 kx u_x(x) = E_x u_x(x) \quad (1.27)$$

令 $u_x(x) \rightarrow y$, $kx \rightarrow \nu$ ，上式变形为文献[16]中的 20.1.1 式

$$\frac{d^2 y}{d\nu^2} + (a - 2q \cos 2\nu) y = 0 \quad (1.28)$$

其中

$$a = \frac{2m}{\hbar^2 k^2} (E_x - V_0 / 2) = \frac{E_x - V_0 / 2}{E_R}, \quad q = \frac{mV_0}{2\hbar^2 k^2} = \frac{V_0}{4E_R} \quad (1.29)$$

方程 (1.28) 的解周期为 π 或者 2π ，因此可以设为 $y = \sum_{m=0}^{\infty} (A_m \cos m\nu + B_m \sin m\nu)$ ，

将其代入可得：

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-2}^{\infty} \left[(a - m^2) A_m - q(A_{m-2} + A_{m+2}) \right] \cos m\nu \\ & + \sum_{m=-1}^{\infty} \left[(a - m^2) B_m - q(B_{m-2} + B_{m+2}) \right] \sin m\nu = 0 \end{aligned} \quad (1.30)$$

注意： $A_{-m}, B_{-m} = 0, m > 0$ 。(1.30) 式中共有四种类型的解

$$\begin{aligned} y_0 &= \sum_{m=0}^{\infty} A_{2m+p} \cos(2m+p)\nu, & p=0 \text{ or } 1 \\ y_1 &= \sum_{m=0}^{\infty} B_{2m+p} \sin(2m+p)\nu, & p=0 \text{ or } 1 \end{aligned} \quad (1.31)$$

$p=0$ 时周期是 π ， $p=1$ 时周期是 2π 。

可以证明存在一系列的可数的、无穷的特征值 $a = a_r(q)$ ($r=0, 1, 2, 3, \dots$)，此时方程 (1.28) 周期解为偶函数 y_0 ；存在另一系列特征值 $a = b_{r+1}(q)$ ，此时方程 (1.28) 周期解为奇函数 y_1 。即方程 (1.28) 存在以 $k\pi$ (k 为任意整数) 为周期的解。这些特征值对于含有任意参数 a 、 q 的微分方程的一般理论是至关重要的。图 1.6 给出了这些特征值随 q 的变化趋势。数学手册[16]的 20.2.31 式给出 $q \rightarrow \infty$ 时邻近特征值的渐近关系

$$b_{r+1} - a_r \sim 2^{4r+5} \sqrt{2/\pi} q^{\frac{1}{2}r + \frac{3}{4}} e^{-4\sqrt{q}} / \sqrt{r!} \quad (1.32)$$

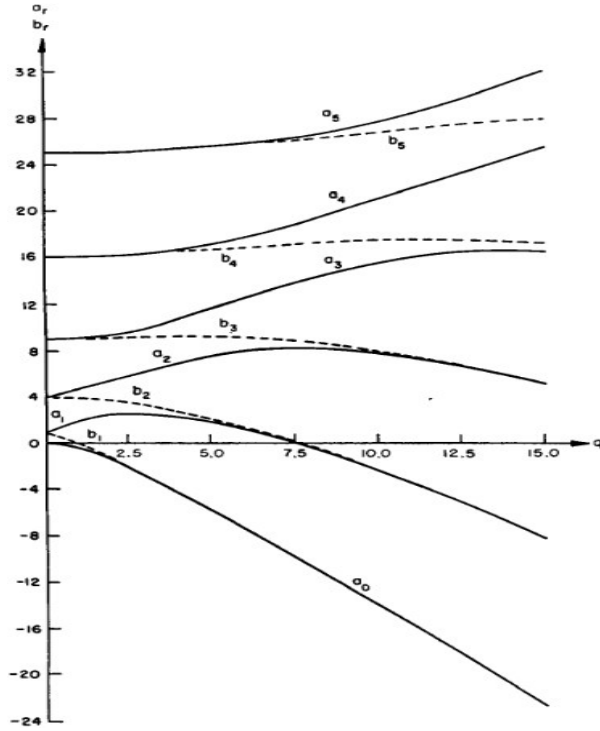


图 1.6 特征值的关系图 [16]

以 π 为周期的马修方程的解 y_0 [15] 的特征值给出带边 $k'/k = 0$ 的能量; 以 2π 为周期的解 y_1 特征值给出带边 $k'/k = \pm 1$ 的能量, 这里 k' 为 Bloch 定理中的准动量。马修方程的偶数解和奇数解特征值分别为 $a_r(q)$, $b_{r+1}(q)$ 。定义

$$\alpha_r^{(0)}(q) = \begin{cases} a_r(q), & r = 0, 2, 4, \dots, \\ b_{r+1}(q), & r = 1, 3, 5, \dots \end{cases}$$

$$\alpha_r^{(1)}(q) = \begin{cases} b_{r+1}(q), & r = 0, 2, 4, \dots, \\ a_r(q), & r = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (1.33)$$

对应能量为

$$E_r(k'/k = 0) = \alpha_r^{(0)}(q)E_R, \quad E_r(k'/k = 1) = \alpha_r^{(1)}(q)E_R \quad (1.34)$$

图 1.7 给出了 $q = 1.25$, 即 $V_0/E_R = 5$ 时光晶格最低三个能带的色散关系图。 $r = 0$ 时, $(b_1 - a_0)E_R$ 便为一维马修方程中最低能带的宽度。再根据文献 [11] 中 (7) 式可知最低能带宽度与隧穿幅度 t 的关系: $(b_1 - a_0)E_R = 4t$ 。将 (1.29) 代入 (1.32) 式, 在极

限条件 $q \rightarrow \infty$ 下, 即 $V_0 \gg E_R$ 时可以得到隧穿幅度 t 的准确解:

$$t = \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_R \left(\frac{V_0}{E_R} \right)^{3/4} e^{-2\sqrt{V_0/E_R}} \quad (1.35)$$

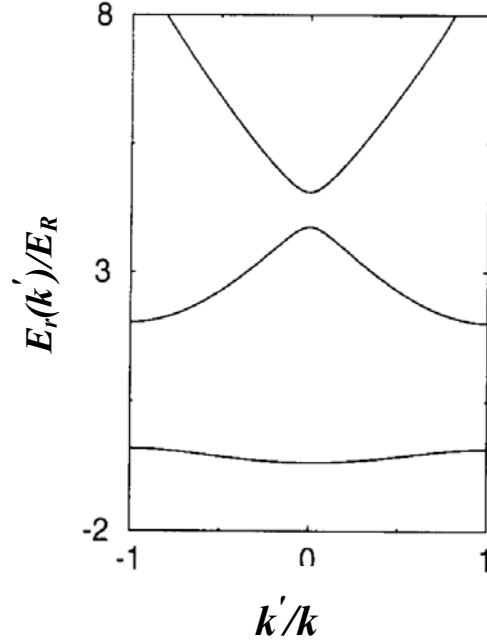


图 1.7 光晶格最低能带的色散关系图^[15]

在以后的计算中, 能量全部以反冲能量 E_R 为基本单位, 比如在 Greiner 小组^[4]的实验中最深的光晶格的取值为 $V_0 = 22E_R$ 。

第二章 自旋为 1 的超流-莫特绝缘体相变

本章研究光晶格中，反铁磁相互作用下自旋为 1 的玻色超流相-莫特绝缘相 (SF-MI) 的相变^[19]。从自旋为 1 的紧束缚玻色哈伯德的模型出发，利用平均场近似，得到了零温相图。格点占据数为偶数的 MI 相是自旋单态；在跃迁矩阵元 $t=0$ 的极限下，格点占据数为奇数的 MI 相的总自旋 $S=1$ 。计算表明光晶格中自旋为 1 的玻色子的超流相与简谐势阱囚禁的自旋为 1 的玻色凝聚体一样处于极化态。由于占据数为偶数时，自旋单态对的形成，莫特绝缘相更为稳定。

2.1 自旋为 1 的Bose-Hubbard模型

我们考虑由光晶格和光学势阱共同束缚的超精细自旋 $F=1$ 的玻色子，其哈密顿量为：^[4, 7, 8, 18-21]

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_0(\mathbf{r}) + V_{ho}(\mathbf{r}) - \mu \right) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \\
 & + \frac{c_0}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d\mathbf{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \\
 & + \frac{c_2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d\mathbf{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \mathbf{F}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{F}_{\gamma\delta} \psi_{\delta}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}(\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

其中超精细态 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$ ($\alpha=1,0,-1$) 的原子场算符为 $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ ， M 为原子的质量， \mathbf{F} 是自旋为 1 的矩阵，其分量为

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

系数 $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ ， $c_2 = (g_2 - g_0)/3$ ， $g_F = 4\pi\hbar^2 a_F / M$ ($F=0,2$)， a_F 是两个原子碰撞通道的总自旋为 F_{tot} 的 s -波散射长度，由于玻色子波函数的对称性，总自旋 $F_{tot}=1$ 的散射是不允许的。(2.1) 式的第二项表示与自旋无关的相互作用项，第三项是与自旋有关的相互作用项。

根据 g_F 与 a_F 的关系, 可知系数 c_2 正比于散射长度差 $(a_2 - a_0)$ 。当自旋相互作用系数 $c_2 < 0$ (即 $a_2 < a_0$) 时, 为铁磁相互作用; $c_2 > 0$ (即 $a_2 > a_0$) 时, 为反铁磁相互作用。本章我们以 ^{23}Na [19] 为例讨论反铁磁相互作用的情况。

在周期势阱中单个原子的能量本征态是布洛赫态。任何布洛赫的波函数 $\phi_{\mathbf{nk}}(\mathbf{r})$ (n 是带数, \mathbf{k} 是准动量) 都可写为瓦涅尔函数的线性组合 $\phi_{\mathbf{nk}}(\mathbf{r}) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, 其中 $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 为第 n 能带第 i 个格点附近瓦涅尔函数, 所有的 n 和 \mathbf{k} 组合下的瓦涅尔函数构成一组完备集。假设光晶格较深, 且第一能带到第二能带间的能级间隙大于化学势时, 我们只考虑最低能带。 $w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 表示被局限在第 i 个格点时, 最低能带的瓦涅尔函数。利用瓦涅尔函数将场算符 $\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{a}_{i\alpha} w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 展开, (2.1) 可简化为紧束缚模型的哈密顿量

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_\alpha (\hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{j\alpha} + \hat{a}_{j\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\alpha}) - \sum_i \sum_\alpha (\mu - \varepsilon_i) \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\alpha} + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\beta}^\dagger \hat{a}_{i\beta} \hat{a}_{i\alpha} + \frac{1}{2} U_2 \sum_i \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\gamma}^\dagger \mathbf{F}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{F}_{\gamma\delta} \hat{a}_{i\delta} \hat{a}_{i\beta} \quad (2.2)$$

这里 $U_F = c_F \int d\mathbf{r} |w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4$ ($F = 0, 2$) [8]。 ε_i 描述的是由于外加简谐势而引起的每个格点的能量补偿, 其表达式为: $\varepsilon_i \equiv \int d\mathbf{r} V_{ho}(\mathbf{r}) |w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^2$ 。后面的叙述忽略简谐势的影响, 即 $\varepsilon_i = 0$ 。

2.2 $t=0$ 极限下的莫特绝缘相

我们从 $t=0$ 极限下的莫特绝缘相出发, 此时的哈密顿量关于格点是对角化的:

$$H = \sum_i H_i^0 \quad (2.3)$$

$$H_i^0 = -\mu \hat{n}_i + \frac{1}{2} U_0 \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{1}{2} U_2 (\hat{\mathbf{S}}_i^2 - 2\hat{n}_i) \quad (2.4)$$

定义原子处在超精细态 $|F=1, m_F=\alpha\rangle$ ($\alpha = 1, 0, -1$) 的自旋算符 $\hat{\mathbf{S}}_i \equiv \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \mathbf{F}_{\alpha\beta} \hat{a}_{i\beta}$, 每个自旋组分的数算符 $\hat{n}_{i\alpha} = \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\alpha}$, 则原子数的总算符为 $\hat{n}_i = \sum_{\alpha=\pm 1, 0} \hat{n}_{i\alpha}$, (2.4) 式——单个格点的哈密顿量已在 [23] 研究过。自旋算符的分量为:

$$\hat{S}_i^+ = \hat{S}_{ix} + i\hat{S}_{iy} = \sqrt{2}(\hat{a}_{i1}^\dagger \hat{a}_{i0} + \hat{a}_{i0}^\dagger \hat{a}_{i-1}) \quad (2.5)$$

$$\hat{S}_i^- = \hat{S}_{ix} - i\hat{S}_{iy} = \sqrt{2}(\hat{a}_{i0}^\dagger \hat{a}_{i1} + \hat{a}_{i-1}^\dagger \hat{a}_{i0}) \quad (2.6)$$

$$\hat{S}_{iz} = \hat{n}_{i1} - \hat{n}_{i-1} \quad (2.7)$$

$\hat{S}_{i\nu}$ 满足一般的角动量对易关系 $[\hat{S}_{i\nu}, \hat{S}_{i\rho}] = i\epsilon_{\nu\rho\lambda} \hat{S}_{i\lambda}$, 同时可以得到:

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^2 = & 2\hat{n}_{i1}\hat{n}_{i0} + 2\hat{n}_{i0}\hat{n}_{i-1} + \hat{n}_{i1} + 2\hat{n}_{i0} + \hat{n}_{i-1} + \hat{n}_{i1}^2 - 2\hat{n}_{i1}\hat{n}_{i-1} \\ & + \hat{n}_{i-1}^2 + 2\hat{a}_{i1}^\dagger \hat{a}_{i-1}^\dagger \hat{a}_{i0}^2 + 2(\hat{a}_{i0}^\dagger)^2 \hat{a}_{i1} \hat{a}_{i-1} \end{aligned} \quad (2.8)$$

(2.8) 式的最后两项是不同自旋分量的组合, 但不会改变总自旋。

可以证明 \hat{S}^2 、 \hat{S}_{iz} 、 \hat{n}_i 互相对易, 因此单个格点哈密顿量的本征态可用 $|S_i, m_i; n_i\rangle$ 来表示, 对应的本征值如下:

$$\hat{S}_i^2 |S_i, m_i; n_i\rangle = S_i(S_i + 1) |S_i, m_i; n_i\rangle \quad (2.9)$$

$$\hat{S}_{iz} |S_i, m_i; n_i\rangle = m_i |S_i, m_i; n_i\rangle \quad (2.10)$$

$$\hat{n}_i |S_i, m_i; n_i\rangle = n_i |S_i, m_i; n_i\rangle \quad (2.11)$$

由自旋算符的对易关系可知 m_i 满足 $-S_i \leq m_i \leq S_i$, 利用 (2.9-2.11) 式可以得到单个格点哈密顿量的本征值方程为:

$$H_i^0 |S_i, m_i; n_i\rangle = E^{(0)}(S_i, n_i) |S_i, m_i; n_i\rangle \quad (2.12)$$

能量本征值为

$$E^{(0)}(S, n) = -\mu n + \frac{1}{2}U_0 n(n-1) + \frac{1}{2}U_2 [S(S-1) - 2n] \quad (2.13)$$

因此对于所有的原子, 每个格点波函数的轨道部分是瓦涅尔方程作用的结果, 任何两个原子满足交换对称性。由于玻色统计, 波函数的自旋部分也是对称的。因此当 n_i 为偶数时 S_i 也为偶数, 当 n_i 为奇数时 S_i 也为奇数。文献^[22]给出了严格的证明。下文用产生算符 $\hat{a}_{i\alpha}^\dagger$ 来表示 $|S_i, m_i; n_i\rangle$ ^[23], 特别地对最高权态

$$|S_i, S_i; n_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{f(Q, S_i)}} (\hat{a}_{i1}^\dagger)^{S_i} (\Theta_i^\dagger)^Q |vac\rangle \quad (2.14)$$

这里

$$Q = \frac{n_i - S_i}{2} \quad (2.15)$$

$$f(Q, S_i) = \frac{S_i! Q! 2^Q (2Q + 2S_i + 1)!!}{(2S_i + 1)!!} \quad (2.16)$$

其中 $\Theta_i^\dagger = \hat{a}_{i0}^{\dagger 2} - 2\hat{a}_{i1}^\dagger \hat{a}_{i-1}^\dagger$ 和 $\Theta_i = \hat{a}_{i0}^2 - 2\hat{a}_{i1} \hat{a}_{i-1}$ 是自旋单态的产生湮灭算符，自旋单态对是由总自旋为 0 的两个玻色子组成，它们满足的对易关系为 $[\Theta_i, \Theta_i^\dagger] = 4\hat{n}_i + 6$ 。其它的态 $|S_i, m_i; n_i\rangle (m_i < S_i)$ ，可用 \hat{S}_i^- 作用到 $|S_i, S_i; n_i\rangle$ 上得到。

我们考虑反铁磁相互作用（即 $U_2 > 0$ ）的情况， H_i^0 对应的基态有最小的总自旋 S_i 。格点占据数为偶数的莫特绝缘态 $|0, 0; n_i\rangle$ 有 $n_i/2$ 个单态对，格点占据数为奇数的莫特绝缘态 $|1, m_i; n_i\rangle$ 的总自旋 $S = 1$ 。所以偶占据和奇占据需要分情况讨论。基态占据数 n_i 为偶数时，基态的最小能量 $E^{(0)}(0, n_i)$ 满足 $E^{(0)}(1, n_i - 1) > E^{(0)}(0, n_i) < E^{(0)}(1, n_i + 1)$ ，即 $(n_i - 1)U_0 - 2U_2 < \mu < n_i U_0$ 。基态占据数 n_i 为奇数时， $E^{(0)}(1, n_i)$ 满足 $E^{(0)}(0, n_i - 1) > E^{(0)}(1, n_i) < E^{(0)}(0, n_i + 1)$ ，即 $(n_i - 1)U_0 < \mu < n_i U_0 - 2U_2$ 。

2.3 强相互作用极限下的平均场近似

为了研究 SF-MI 的跃迁，我们用平均场近似的方法^[7]。对于自旋为 0 的玻色哈伯德模型，近似方法给出的结果与量子蒙特卡洛模拟^[24, 25]的结果很吻合。

首先考虑 t 为有限值情况下的超流相变，引入超流序参量 $\psi_\alpha \equiv \langle \hat{a}_{i\alpha} \rangle \equiv \sqrt{n_s} \zeta_\alpha$ ，其中 n_s 表示每个格点原子的占据数目， ζ_α 为归一化旋量，满足 $\sum_{\alpha=\pm 1, 0} \zeta_\alpha^* \zeta_\alpha = 1$ ^[18]，忽略离开平衡值偏差的二阶项，利用 $\hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{j\alpha} \sim (\psi_\alpha \hat{a}_{i\alpha}^\dagger + \psi_\alpha^* \hat{a}_{j\alpha}) - \psi_\alpha^* \psi_\alpha$ ，将跃迁项简写为：

$$-t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\alpha} (\hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{j\alpha} + \hat{a}_{j\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\alpha}) \sim -zt \sum_i \sum_{\alpha} (\psi_\alpha^* \hat{a}_{i\alpha} + \psi_\alpha \hat{a}_{i\alpha}^\dagger) + zt N_S \sum_{\alpha} \psi_\alpha^* \psi_\alpha \quad (2.17)$$

利用该近似，哈密顿量简写为：

$$H = \sum_i H_i^{mf} \quad (2.18)$$

$$H_i^{mf} = H_i^0 + V_i + zt \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} \quad (2.19)$$

$$V_i = -zt \sum_{\alpha} (\psi_{\alpha} \hat{a}_{i\alpha} + \psi_{\alpha}^* \hat{a}_{i\alpha}^{\dagger}) \quad (2.20)$$

V_i 描述的是第 i 个格点与凝聚体 ψ_{α} 之间原子的跃迁。假设 t 很小时, V_i 被当作微扰。 n_i 为偶数时, 非微扰哈密顿量 H_i^0 的基态为 $|0, 0; n_i\rangle$; n_i 为奇数时, 非微扰哈密顿量 H_i^0 的基态为 $|1, m_i; n_i\rangle$ 。下面利用微扰理论计算不同情况下的基态能量 (在后面的讨论中忽略角标 i)。

2.3.1 占据数为偶数的MI态

我们首先讨论占据数为偶数的 MI-SF 相变边界。为了计算基态能量的二阶微扰, 首先求出微扰项在基态 $|0, 0; n\rangle$ 和中间态 $|1, m; n \pm 1\rangle$ 之间的矩阵元 $\langle 1, m; n \pm 1 | V | 0, 0; n \rangle, (m = \pm 1, 0)$,

$$\begin{aligned} V | 0, 0; n \rangle = & -zt \left(-\sqrt{\frac{n}{3}} \psi_1^* | 1, -1; n-1 \rangle + \sqrt{\frac{n+3}{3}} \psi_1 | 1, 1; n+1 \rangle + \sqrt{\frac{n}{3}} \psi_0^* | 1, 0; n-1 \rangle \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{n+3}{3}} \psi_0 | 1, 0; n+1 \rangle - \sqrt{\frac{n}{3}} \psi_{-1}^* | 1, 1; n-1 \rangle + \sqrt{\frac{n+3}{3}} \psi_{-1} | 1, -1; n+1 \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

含有二阶微扰的基态能量可写为 $E_n(\psi) = E^{(0)}(0, n) + A(n, t, U_0, U_2, \mu) \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}$, 其中

$$A(n, t, U_0, U_2, \mu) = zt + \frac{1}{3} \left(\frac{n+3}{\mu - U_0 n} + \frac{n}{-\mu - U_0(n-1) - 2U_2} \right) \times (zt)^2 \quad (2.22)$$

最小化基态能量就可以得到序参量的值。当 $A > 0$ 时, 基态是莫特绝缘态, 对应 $\psi_{\alpha} = 0$; 当 $A < 0$ 时, 基态是超流态, 对应 $\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}$ 为有限值。因此莫特绝缘相和超

流相的边界是 $A = 0$, 求解 A 关于 μ 的方程, 可得到相边界:

$$\begin{aligned} \mu_{\pm} = & -U_2 + \frac{1}{2} [(2n-1)U_0 - zt] \pm \frac{1}{6} \{ 9U_0^2 + 6[6U_2 - (2n+3)zt]U_0 \\ & + [36U_2^2 - 12(2n+3)ztU_2 + 9(zt)^2] \}^{1/2} \end{aligned} \quad (2.23)$$

μ_+ 和 μ_- 分别对应相边界的上限和下限。对于给定的 n , 在 μ_+ 与 μ_- 相等时, 根据

(2.23) 式可以得到每个莫特绝缘相叶形区的 t 最大值:

$$zt_c = \frac{U_0 + 2U_2}{3} \left[(zn + 3) - \sqrt{4n^2 + 12n} \right] \quad (2.24)$$

只有在 $t < t_c$ 条件下, 才能讨论莫特绝缘相和超流相的边界, 而且 $\mu_{\pm} > 0$ 。

2.3.2 占据数为奇数的MI态

接下来, 我们讨论占据数为奇数的 MI-SF 相变。此时 MI 态 $|1, m; n\rangle$ 是三重简并的 ($m=1, 0, -1$), 为了得到二阶微扰能量 $E_n^{(2)}$, 我们需要求解一般的特征方程

$$\det \left(\left\langle 1, m; n \left| V \frac{1}{E^{(0)}(1, n) - H_0} V \right| 1, m'; n \right\rangle - E_n^{(2)} \delta_{mm'} \right) = 0 \quad (2.25)$$

也就是求解矩阵 $M_{m, m'}$ 的本征值:

$$M_{m, m'} = \left\langle 1, m; n \left| V \frac{1}{E^{(0)}(1, n) - H_0} V \right| 1, m'; n \right\rangle = \sum_l \frac{\langle 1, m; n | V | l \rangle \langle l | V | 1, m'; n \rangle}{E^{(0)}(1, n) - E_l^{(0)}}$$

由上式可以得到二阶微扰能量 $E_n^{(2)}$

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} = & -3(\beta + \alpha)(zt)^2 \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} - \frac{1}{2} [(\alpha + \gamma) + 7(\beta + \delta)] (zt)^2 \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} \\ & \pm \frac{1}{2} \left\{ [(\alpha - \gamma) - 5(\beta - \delta)]^2 \left(\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} \right)^2 \right. \\ & \left. + 4(3\beta + \gamma - \delta)(\alpha - 2\beta + 3\delta) n_s \left| \zeta_0^2 - 2\zeta_1 \zeta_{-1} \right| \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (2.26)$$

其中:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{n+2}{3} \frac{1}{\Delta E^{(0)}(0, n-1)} & \beta &= \frac{n-1}{15} \frac{1}{\Delta E^{(0)}(2, n-1)} \\ \gamma &= \frac{n+1}{3} \frac{1}{\Delta E^{(0)}(0, n+1)} & \delta &= \frac{n+4}{15} \frac{1}{\Delta E^{(0)}(2, n+1)} \end{aligned}$$

$$\Delta E^{(0)}(S, l) = E^{(0)}(S, l) - E^{(0)}(1, n) > 0 \quad (2.27)$$

观察 (2.26) 式, 可知取负号时对应基态能量。又因为 $(3\beta + \gamma - \delta)$ 与 $(\alpha - 2\beta + 3\delta)$

均大于 0, 即:

$$\begin{aligned} 3\beta + \gamma - \delta &= \frac{1}{15\Delta E^{(0)}(0, n+1)\Delta E^{(0)}(2, n-1)\Delta E^{(0)}(2, n+1)} \\ &\times \{3(n-1)\Delta E^{(0)}(0, n+1)^2 + 3(n-1) \times [\Delta E^{(0)}(2, n-1) \\ &+ 3U_2] \Delta E^{(0)}(0, n+1) + 15(n+1)U_2 \Delta E^{(0)}(2, n-1)\} > 0 \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\alpha - 2\beta + 3\delta = \frac{1}{15\Delta E^{(0)}(2, n-1)\Delta E^{(0)}(0, n-1)\Delta E^{(0)}(2, n+1)} \times \{3(n+4)\Delta E^{(0)}(0, n+1)^2 + 3(n+4) \times [\Delta E^{(0)}(2, n+1) + 3U_2]\Delta E^{(0)}(0, n-1) + 15(n+2)U_2\Delta E^{(0)}(2, n+1)\} > 0 \quad (2.29)$$

因此基态能量取最小值时， $|\zeta_0^2 - 2\zeta_1\zeta_{-1}|^2 = 1 - \langle F \rangle^2$ 取最大值，即： $\langle F \rangle = 0$ 。这时超流相的基态为极化态，与 n 取偶数的情况相同。此时对应的基态能量为：

$E = E^{(0)}(1, n) + D(n, t, U_0, U_2, \mu)n_S$ ，其中：

$$D(n, t, U_0, U_2, \mu) = zt [1 - (\alpha + 4\beta + \gamma + 4\delta)zt] \quad (2.30)$$

对于 n 为奇数的情况，求解 $D(n, t, U_0, U_2, \mu) = 0$ ，可得到 SF 相与 MI 相的边界。

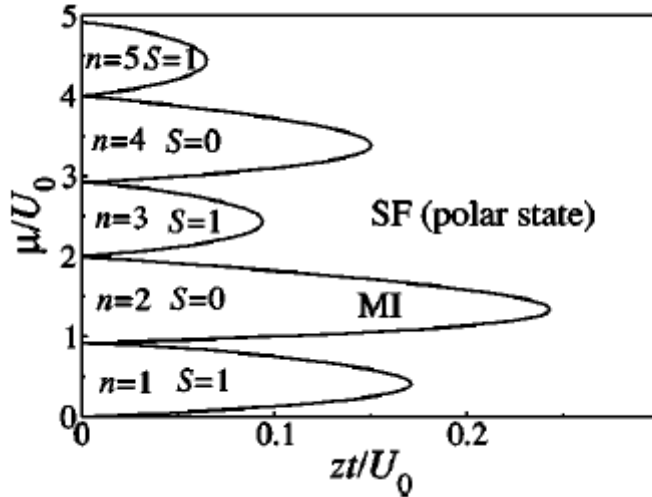


图 2.1 自旋为 1 的玻色哈伯德模型的相图^[19]

取 $U_2/U_0 = 0.04$ ，图 2.1 给出了自旋为 1 的玻色哈伯德模型的相图。可以看出，占据数为偶数的 MI 相区域明显比占据数为奇数的 MI 相比较大且稳定，不易是超流相。这一点可以理解为，占据数为偶数的 MI 态，每个格点上的所有原子能形成自旋单态对，因此自旋单态对被牢牢地局限在单格点中，原子不能跃迁到相邻的格点。占据数为奇数的 MI 态，格点上一定有一个原子不能形成自旋单态对，它会跳跃到其它格点而无需破坏自旋单态对。

相互作用为铁磁相互作用时（即 $U_2 < 0$ ），相边界不再与原子数目的奇偶有关，这是因为此时每个格点有较高的自旋，单态自旋对不能形成。

第三章 光晶格中超冷原子的热力学性质

光晶格中量子气体的研究越来越受关注，它为低温物理性质的实现提供了一个干净、可调的系统。目前，利用荧光成像技术，在实验上能够观察到随时间和空间变化的单原子单格点量子相变^[5,6]，他们给出了有限温度下不同阱深、原子数目不同的原子在二维光晶格中的径向分布。荧光成像技术为可精确测量到单格点的量子相变的观察打开了大门，该技术使研究方法从量子统计转变到了单原子单格点成像。光晶格在实验上还有许多应用，例如利用光晶格观察光的布拉格散射^[26]或布洛赫振荡^[27]；用光晶格囚禁原子或观察量子隧穿等等。本章我们研究有限温度下二维或三维光晶格中⁸⁷Rb原子的量子性质，结合玻色哈伯德模型及平均场理论分析了超流相和莫特绝缘相的数密度、超流密度和熵随化学势和空间的分布。

3.1 有限温度的平均场理论

我们仍然从光晶格中自旋为 1 的玻色子的哈密顿量 (2.2) 式出发^[28]

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} (\hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{j\alpha} + \hat{a}_{j\alpha}^\dagger \hat{a}_{i\alpha}) + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i) - \sum_i \mu \hat{n}_i \quad (3.1)$$

方程 (3.1) 的第一项描述的是相邻格子间与自旋相关的跃迁，第二项中的 U_0 为同一格点处粒子间的相互排斥势， U_2 表示与自旋有关的相互作用，该项可正可负也可 0。相对于自旋为 0 的模型，自旋为 1 的模型中与自旋有关的相互作用 U_2 极大地修正了哈伯德模型的物理意义。由于玻色子波函数的对称性，总自旋 $F_{tot} = 1$ 时的散射被禁戒，在 $F_{tot} = 0$ 和 $F_{tot} = 2$ 两通道中，散射长度的差代表自旋耦合。 $U_2 < 0$ (即 $a_2 < a_0$) 对应铁磁态，比如⁸⁷Rb； $U_2 > 0$ (即 $a_2 > a_0$) 对应反铁磁态，比如²³Na。我们两种情况都会考虑， U_2 的取值范围为 $-1 < U_2 / U_0 < 1/2$ 。

零温度下，已用数值方法计算出对于自旋为 1 的模型的相图，比如量子蒙特卡罗方法 (QMC)^[29, 30]、密度矩阵重整化群 (DMRG)^[31, 32] 和平均场近似方法^[33, 34]。

有限温度下，利用平均场方法分析了大量的相图^[34]，包括一阶相变和二阶相变。格点间跃迁 t 很小时，每个格点平均填充一个粒子的旋量玻色哈伯德模型可以映射到双线性双二次海森堡模型，该理论已被许多学者研究^[19, 35]，以便更好地理解莫特相的本质。我们将平均场方法推广到有限温度来计算熵。在平均场近似下，忽略离开平衡值 $\langle O \rangle$ 偏差的二阶项，利用 $\hat{a}_{i\alpha}^\dagger \hat{a}_{j\alpha} \approx \langle \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \rangle \hat{a}_{j\alpha} + \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \langle \hat{a}_{j\alpha} \rangle - \langle \hat{a}_{i\alpha}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{j\alpha} \rangle$ ，同时定义超流序参量 $\psi_\alpha \equiv \langle \hat{a}_{j\alpha}^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_{j\alpha} \rangle$ ，将系统的哈密顿量写成单个格点哈密顿量之和：

$$H = \sum_i H_i^{mf} \quad (3.2)$$

$$H_i^{mf} = \frac{U_0}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{U_2}{2} (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i) - \mu \hat{n}_i - \sum_\alpha \psi_\alpha (\hat{a}_{i\alpha}^\dagger + \hat{a}_{i\alpha}) + \sum_\alpha |\psi_\alpha|^2 \quad (3.3)$$

计算中取 $zt = 1$ 为能量单位。超流相对应的序参量 ψ_α ($\alpha = 1, 0, -1$) 至少有一个是非零的。为了计算 ψ_α ，首先求出平均场下单个格点哈密顿量 H_i^{mf} 的矩阵元。首先我们选取 Fock 态 $|n_{i,-1}, n_{i,0}, n_{i,1}\rangle$ 为基矢， $n_{i,\alpha}$ 表示第 i 个格点自旋为 α 的玻色子的占据数， $n_i = \sum_\alpha n_{i,\alpha}$ 为第 i 个格点玻色子的总数。为方便计算假定每个格点处玻色子的最大填充数为 4（即 $n_{\max} = 4$ ），通过与 $n_{\max} = 2, 3$ 的结果比较，我们知道这个值的选取对于所选的 U_0 值来说足够大，截断效应不明显。因此单个格点的 Hilbert 空间的维数为 35，哈密顿量 (3.3) 可写成一个 35×35 的矩阵^[28, 34]。对角化此矩阵，可得到它的本征值 E_σ 和本征矢 $|\phi_\sigma\rangle$

$$H_i^{mf} |\phi_\sigma\rangle = E_\sigma |\phi_\sigma\rangle, \quad \sigma = 1, \dots, 35 \quad (3.4)$$

我们处理的是一个均匀的系统，因此在下文中将忽略角标 i 。引入配分函数

$$Z(\mu, U_0, U_2, T, \psi_\alpha) = \sum_\sigma e^{-E_\sigma/T} \quad (3.5)$$

和自由能^[28, 34]

$$F(\mu, U_0, U_2, T, \psi_\alpha) = -T \ln Z(\mu, U_0, U_2, T, \psi_\alpha) \quad (3.6)$$

在计算中将玻耳兹曼常数 k_B 设为 1, 在 μ, U_0, U_2 和 T 给定的情况下, 通过最小化自由能可得到超流序参数, 即解方程

$$\partial F / \partial \psi_\alpha = 0,$$

得到 ψ_α 的平衡值 $\psi_1^{eq}, \psi_0^{eq}, \psi_{-1}^{eq}$, 进而得到其它物理量。 F^{eq} 为最小自由能, E_σ^{eq} 为最小自由能对应的本征值, ϕ_σ^{eq} 为最小自由能对应的本征态。在这些物理量的基础上, 可以得到数密度 ρ , 超流密度 ρ_s 和熵 S ^[28, 34]。

$$\rho = -\partial F / \partial \mu = \frac{1}{Z} \sum_\sigma e^{-E_\sigma^{eq}/T} \langle \phi_\sigma^{eq} | \hat{n} | \phi_\sigma^{eq} \rangle \quad (3.7)$$

$$\rho_s = \sum_\alpha |\psi_\alpha^{eq}|^2 \quad (3.8)$$

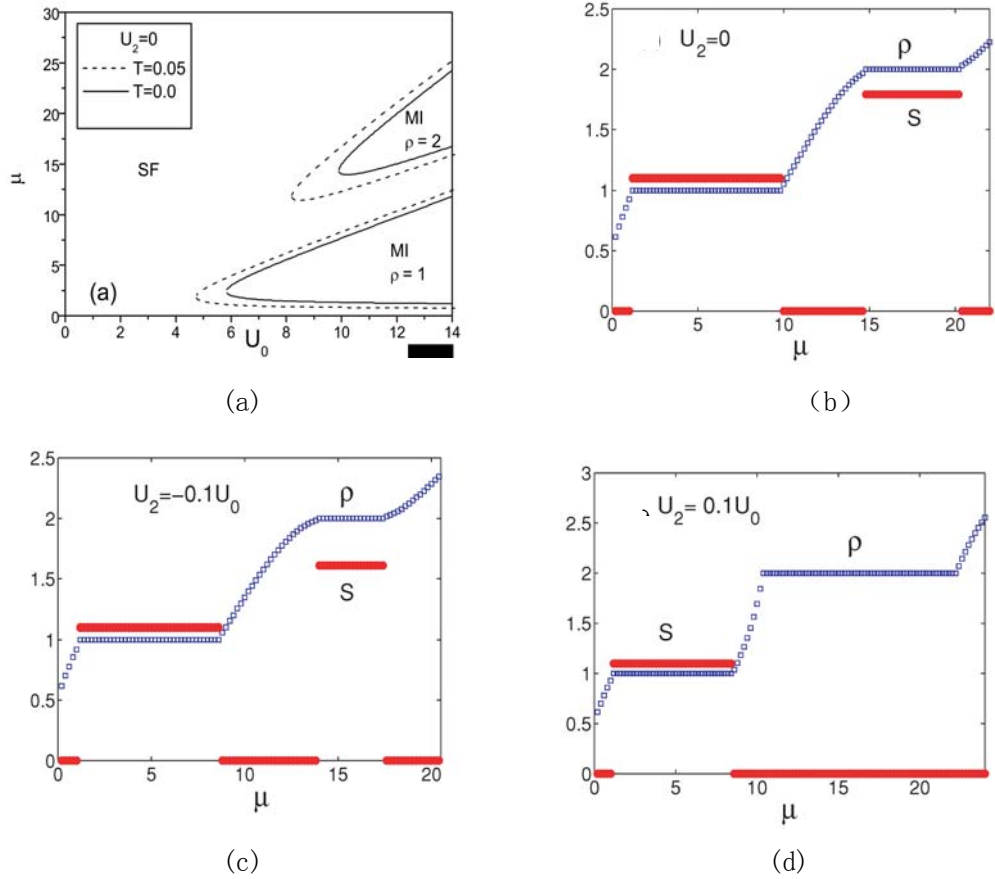
$$S = -\partial F / \partial T = \ln Z + \frac{1}{ZT} \sum_\sigma E_\sigma^{eq} e^{-E_\sigma^{eq}/T} \quad (3.9)$$

Pai 等人^[34]已经对不同相下的超流序参数 $\psi_1^{eq}, \psi_0^{eq}, \psi_{-1}^{eq}$ 做出了详细分析: 处于反铁磁(极化)超流态时, 对应 $\psi_1 = \psi_{-1} > 0, \psi_0 = 0$ 或者 $\psi_1 = \psi_{-1} = 0, \psi_0 > 0$; 处于铁磁超流态时, 对应 $\psi_1 = \psi_{-1}, \psi_0 = \sqrt{2}\psi_1$ 。超流密度 $\rho_s > 0$ 时, 对应铁磁超流相或极化超流相, $\rho_s = 0$ 对应莫特绝缘相。

3.2 数密度、超流密度、熵随化学势的变化

图 3.1 (a) 是 $T = 0, 0.05$ (以 zt/k_B 单位) 时超流相与莫特绝缘相的边界图。实线是 $T=0$ 时的相变界, 虚线是 $T=0.05$ 时的相变界。垂直于 U_0 轴观察 $T=0$ 时的相图, 可以看到随着 μ 的增加, 数密度 ρ 取非整数时对应超流态, 数密度 $\rho = 1, 2$ 时, 对应莫特绝缘态。图 3.1 (b、c、d) 为零温 $T = 0$, $U_0 = 12zt$ 时的熵和数密度图。图 3.1

(b) 中 $U_2 = 0$, 超流态对应的熵为 0, 莫特绝缘态对应的熵不为 0。当数密度 $\rho = 1$ 时, 熵 $S = \ln(3)$; 当数密度 $\rho = 2$ 时, 熵 $S = \ln(6)$ 。非零基态熵可以如下理解: 对于数密度 $\rho = 1$ 时 (图 3.1 (a) 第一个叶形区), 每个格点有一个自旋为 1 的粒子,

图 3.1 数密度和熵随化学势的变化图^[28, 34]

这样就有三个简并的自旋组分 ($\alpha = 1, 0, -1$)，因此熵 $S = \ln(3)$ 。对于 $\rho = 2$ 时 (图 3.1 (a) 第二个叶形区)，每个格点有两个自旋为 1 的粒子，总自旋为 $F_{tot} = 0, 1, 2$ 。由于自旋函数的对称性， $F_{tot} = 1$ 被禁止。 $F_{tot} = 2$ 时有五个简并的组分； $F_{tot} = 0$ 时只贡献一个，因此熵 $S = \ln(6)$ 。图 3.1 (c) 表示 $U_2 < 0$ (即铁磁) 时，对应的熵和数密度图，此时取 $U_2 = -0.1U_0$ 。与图 3.1 (b) 不同的是：负的自旋耦合 U_2 下，总自旋倾向于取最大值，即在数密度 $\rho = 2$ 时，只取 $F = 2$ 的情况，熵 $S = \ln(5)$ ；数密度 $\rho = 1$ 时，总自旋 $F_{tot} = 1$ ，熵 $S = \ln(3)$ 。图 3.1 (d) 表示 $U_2 > 0$ (即反铁磁) 的情况，此时取 $U_2 = 0.1U_0$ 时，对应的熵和数密度图。正的自旋耦合 U_2 下，总自旋倾向于取最小值，这时只取 $F_{tot} = 0$ 的情况，熵 $S = 0$ ；数密度 $\rho = 1$ 时，总自旋 $F_{tot} = 1$ ，熵 $S = \ln(3)$ 。

与自旋为 0 的玻色子相比，光格子中自旋为 1 的玻色子的超流绝缘体相变在有限温度下会呈现一阶相变和二阶相变。由图 3.2(a)可知，在 $T = 0.1$, $U_0 = 12$, $U_2 = 0$ 时，结合 (μ, T) 图，熵会穿越不同的相边界；数密度，超流密度，熵在一阶相边界是不连续的。由热力学可知，在有限温度下，一阶相边界遵循克劳修斯-克拉伯龙 (Clausius-Clapeyron) 方程，此时熵是不连续的，其他参数的在相边界是有梯度的。观察图 3.2 (a) 可以证实这一点，此时的 $\Delta S / \Delta \rho = 3.10$ 。随着温度增加，熵变减少，最终在三临界点消失。二阶相变时熵是连续的，正如图 3.2 (b) 中所示，温度为 $T = 0.2$ 。

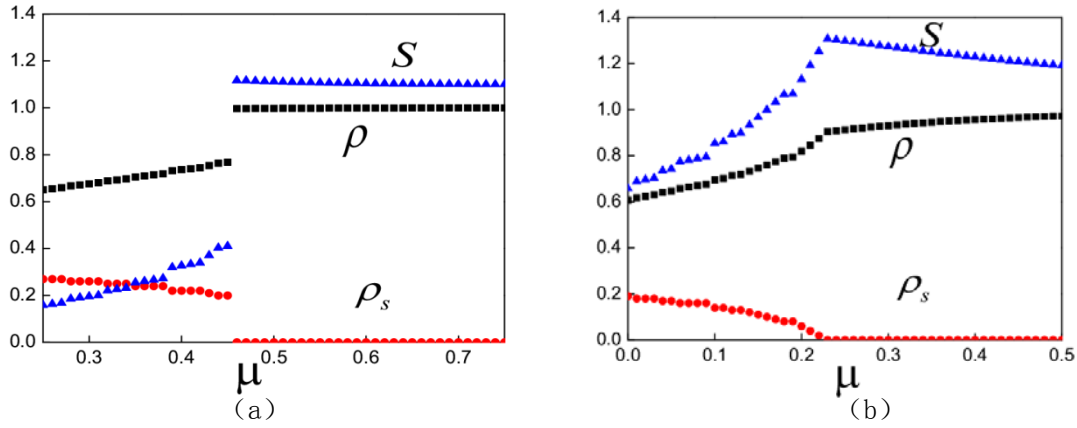


图 3.2 一阶 (a) 和二阶 (b) 相边界图

3.3 数密度、超流密度、熵的空间分布

本节我们将研究开边界光晶格中，无自旋的玻色哈伯德模型的热力学性质，哈密顿量为：

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu \hat{n}_i + E_c \sum_i r_i^2 \hat{n}_i \quad (3.10)$$

前三项在前面已经提过，这里主要强调第四项，该项是一个外加的频率为 ω 的缓变简谐势，其中 $E_c = \frac{1}{2} m \omega^2 d^2$ ， d 是光晶格的周期，也就是波长的一半。同样在退耦近似下，定义超流序参量 $\psi \equiv \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \equiv \langle \hat{a}_j \rangle$ 。将哈密顿量写成单个格点哈密顿量^[36]之和： $H = \sum_i H_i^{mf}$ ，

$$H_i^{mf} = \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i + E_c r_i^2 \hat{n}_i - \psi (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i) + |\psi|^2 \quad (3.11)$$

对于三维情况,我们所用的势阱是沿 z 方向对称的,不妨设 $\omega = \omega_x = \omega_y = \omega_z / \kappa$, 那么 $E_c r_i^2 \hat{n}_i = \frac{1}{2} m \omega^2 d^2 (r_x^2 + r_y^2 + \kappa^2 r_z^2) \hat{n}_i$ [37-39], κ 为势阱的纵横比。而在二维情况下 $E_c r_i^2 \hat{n}_i = \frac{1}{2} m \omega^2 d^2 (r_x^2 + r_y^2) \hat{n}_i$, 其中 r_x, r_y, r_z 表示 x, y, z 方向格点的数目, 它们的取值为 $(r_x, r_y, r_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ 。

在我们的计算中, 每个格点的粒子数填充最多为 2, 因此对角化哈密顿量后, 得到一个 3×3 的矩阵, 根据 (3.4) 式我们得到它的本征值 E_σ 和本征矢 $|\phi_\sigma\rangle$ 。然后根据 (3.5-3.9) 式计算数密度、超流密度和熵。下图中 a、b、c 分别表示沿 i ($i=x, y, z$) 方向观察时, 数密度、超流密度和熵在空间的平均分布。温度取 $T = 0.15$ 。

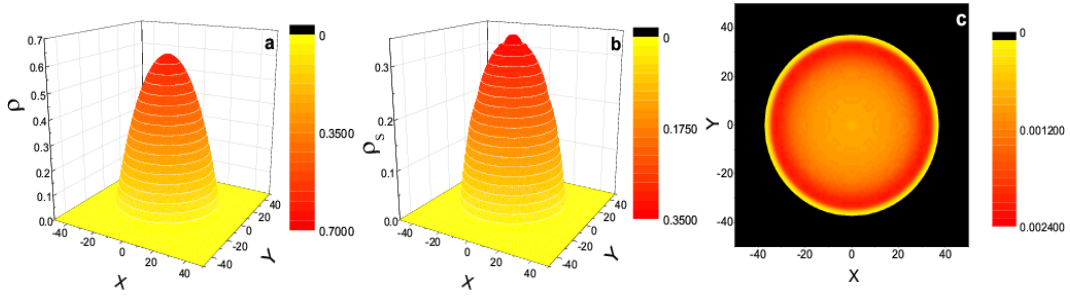


图 3.3 数密度、超流密度和熵在各向同性三维空间的分布图 ($U = 3, \mu = 2$)

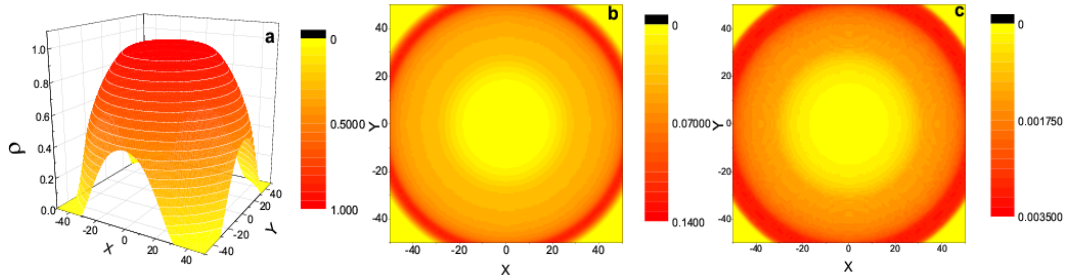


图 3.4 数密度、超流密度和熵在各向同性三维空间的分布图 ($U = 12, \mu = 7.8$)

图 3.3、3.4 表示势阱的纵横比 $\kappa = 1$ (各向同性) 时, 沿 x (y 或 z) 方向观察时平均每层数密度、超流密度和熵在三维空间的分布图。 x, y, z 方向的格点数目总数为 $51 \times 51 \times 51$, 此时 $U = 3zt, \mu = 2zt$ ($0 < \mu/U < 1$ 时, 每个格点的粒子数填充小于 1, $U < 5.83$ 时处于超流态), $\omega = 50\text{Hz}$ 。

观察图 3.3-a 我们可以看到在中心位置的粒子数目分布较多, 周围较小, 到边

界时几乎无粒子填充；图 3.4-b（超流密度分布）与图 3.3-a（数密度分布）相比，超流密度较小，分布趋势相同（中心位置分布较多，周围较小）；观察图 3.3-c 我们可以看到中心区域的熵很小，接近 0，而在相边界比较混乱，因此熵较大。图 3.4 与图 3.3 相比：取值除 U 、 μ 的取值不同外，其余参数均相同。此时 $U = 12zt$ ， $\mu = 7.8zt$ ($0 < \mu/U < 1$ ，每个格点的粒子数填充小于 1，在叶形区内 $U > 5.83$ 时处于莫特绝缘态)，观察图 3.4-a，我们可以看到在中心位置的粒子数目分布 $\rho = 1$ ；图 3.4-b 中心位置的超流密度分布 $\rho_s = 0$ ，因此我们可以得到中心区域为莫特绝缘区，而周围的区域为超流区。观察图 3.4-c 我们可以看到中心位置的熵很小，周围的熵比较大，越到边界越大，特别是在原子分布接近 0 时。即中间的原子比较有序，而周围原子排列比较无序、混乱。

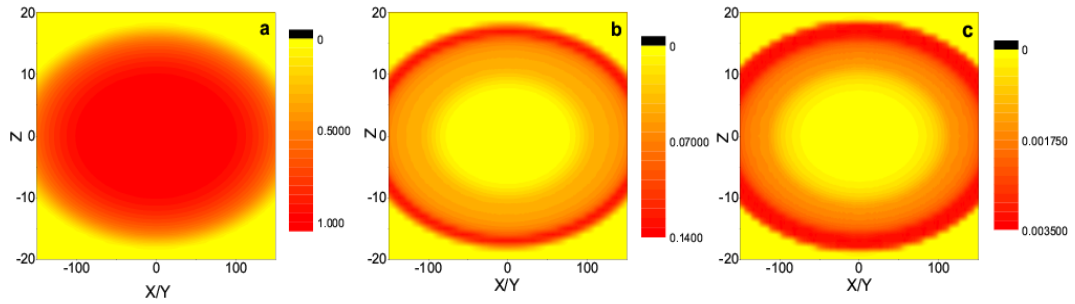


图 3.5 数密度、超流密度和熵在各向异性三维空间 ($\kappa > 1$) 沿 x/y 方向观察时的分布图 ($U = 12$, $\mu = 7.8$)

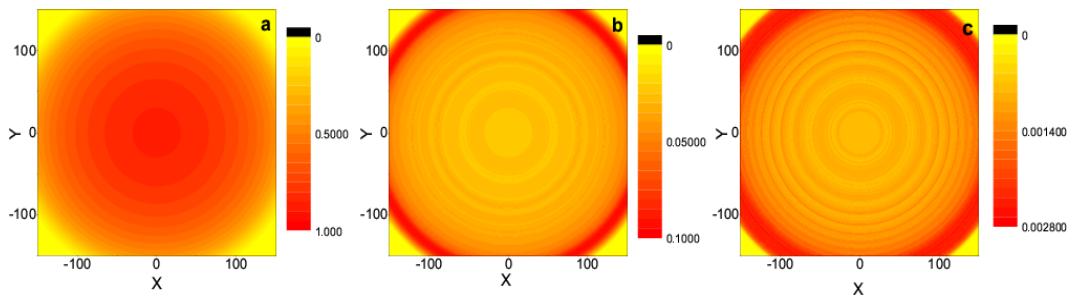


图 3.6 数密度、超流密度和熵在各向异性三维空间 ($\kappa > 1$) 沿 z 方向观察时的分布图 ($U = 12$, $\mu = 7.8$)

图 3.5、3.6 表示势阱的纵横比 $\kappa > 1$ （各向异性）时，平均每层数密度、超流密度和熵在三维空间的分布图。在本文中我们取 $\kappa = 10$ ， x, y, z 方向的格点数目总数为 $301 \times 301 \times 41$ ，图 3.5 表示沿 x (y) 方向观察时的分布图，图 3.6 表示沿 z 方

向观察时的分布图。此时 $U = 12zt$, $\mu = 7.8zt$ ($0 < \mu/U < 1$ 时, 每个格点的粒子数填充小于 1, $U < 5.83$ 时处于超流态), $\omega = 50\text{Hz}$ 。

观察上面的两图我们可以看到该原子分布呈饼状, 而且在图 3.5、图 3.6 的 a 图的中间部分密度为 1, 因此每个格点只填充一个粒子, b 图的中间部分几乎为 0, 因此我们可断定该原子云处于莫特态。

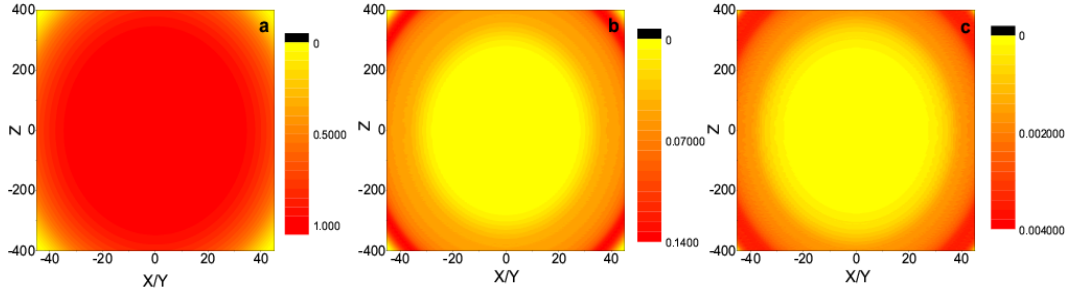


图 3.7 数密度、超流密度和熵在各向异性三维空间 ($\kappa < 1$) 沿 x/y 方向观察时的分布图 ($U = 12$, $\mu = 7.8$)

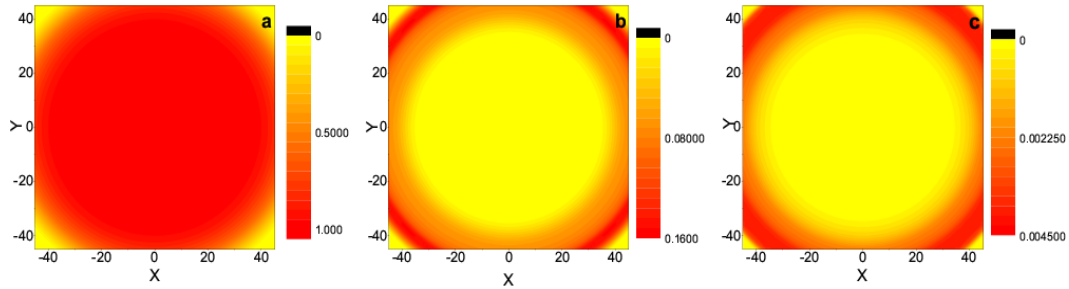


图 3.8 数密度、超流密度和熵在各向异性三维空间 ($\kappa < 1$) 沿 z 方向观察时的分布图 ($U = 12$, $\mu = 7.8$)

图 3.7、3.8 表示势阱的纵横比 $\kappa < 1$ (各向异性) 时, 平均每层数密度、超流密度和熵在三维空间的分布图。在本文中我们取 $\kappa = 0.1$, x, y, z 方向的格点数目总数为 $91 \times 91 \times 801$, 图 3.5 表示沿 x (y) 方向观察时的分布图, 图 3.6 表示沿 z 方向观察时的分布图。此时 $U = 12zt$, $\mu = 7.8zt$ ($0 < \mu/U < 1$ 时, 每个格点的粒子数填充小于 1, $U < 5.83$ 时处于超流态), $\omega = 50\text{Hz}$ 。观察上面的两图我们可以看到该原子分布呈雪茄状, 而且此时原子也处于莫特态。

下面是 MIT 凯特利研究小组实验的一些典型数据, 凝聚体的温度是 150nk , 凝

聚体的大小（球型的直径是 $10\sim 50\mu\text{m}$ ；雪茄型的长度是 $300\mu\text{m}$ ，直径是 $15\mu\text{m}$ ，钠原子的个数是 2×10^7 ^[17]）。而我们的数据：光晶格的周期为 532nm ，与文献^[5]相同，每个格点平均分布一个原子，球型的原子数目大约是 1.33×10^5 ；直径为 $27\mu\text{m}$ ；雪茄型的原子数目大约是 6.63×10^6 ，雪茄型的长度是 $426\mu\text{m}$ ，直径是 $48\mu\text{m}$ ；饼状的原子数目大约是 3.71×10^6 ，饼状的高度是 $22\mu\text{m}$ ，直径是 $160\mu\text{m}$ 。

上面我们讨论的是平均每层的情况，同样也可以求解单个壳层或者可数的几个壳层的情况，该结果可以与 Bloch 小组^[40]的实验进行对比。Bloch 小组是利用微波脉冲将某一薄层原子云分离出来，研究该薄层原子的数密度等等。

下面我们简单讨论二维情况下数密度、超流密度和熵的分布图。

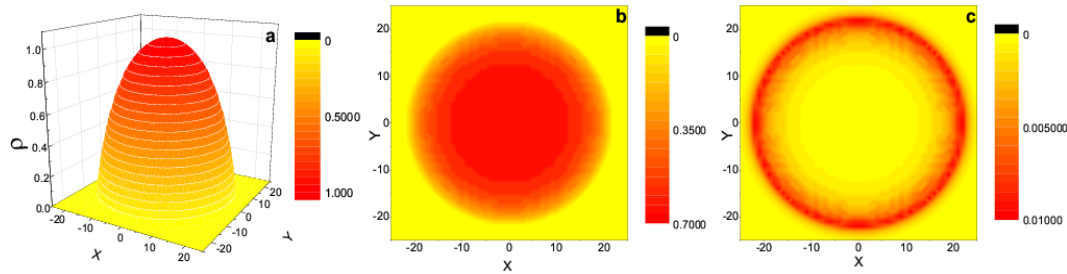


图 3.9 数密度、超流密度和熵在二维空间的分布图 ($U = 1.675$, $\mu = 0.61975$)

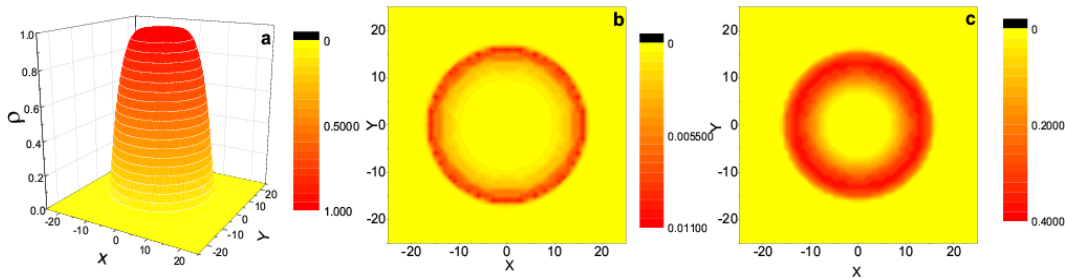


图 3.10 数密度、超流密度和熵在二维空间的分布图 ($U = 6.25$, $\mu = 2.3125$)

图 3.9 和图 3.10 表示的是二维情况下， 51×51 个格点的分布。图 3.9 表示的是超流态，而图 3.10 表示的莫特态。图 3.9 和图 3.10 中的参数：相互作用和化学势的取值是根据文献^[41]而定的，温度仍旧取 $T = 0.15$ 。Wessel 与 Rigol 等人^[41, 42]先后利用量子蒙特卡洛 (QMC) 方法模拟研究了一维、二维和三维光晶格中玻色冷原子的特性，这些研究在原子实验探测方面有一定的指导作用。

结 论

本文讨论了光晶格中自旋为 0 和自旋为 1 的超冷原子的玻色哈伯德模型，利用平均场理论以及朗道判据，研究了它们的有效哈密顿量，理论计算了超流相和莫特绝缘相的边界。同时结合热力学的相关知识，计算了有限温度下，二维或三维光晶格中玻色子的莫特绝缘相和超流相的数密度、超流密度和熵在空间的分布。论文中给出的是光晶格中物理量的平均分布，该方法同样适用于精确计算单个格点相关的物理量。二维光晶格计算的结果与 QMC(Quantum Monte Carlo)方法模拟计算的结果一致，因此不失为一种较好的理论计算方法。另外该结果与单原子-单格点高分辨率荧光成像技术的探测结果符合。特别是此研究结果可能引导单个格点的低熵阶段的工作。只是在计算中自由能最小值的求解不是很理想，接下来我们会寻求较好的方法来求解相关的物理量。下一步的工作包括将自洽条件引入到自由能极小值的计算中。

参考文献

- [1] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models, *J. opt. Soc. Am.*, 1989, 2023.
- [2] C. Cohen-Tannoudji and W.D. Phillips, New Mechanisms for Laser Cooling, *Phys. Today*, 1990, 33.
- [3] R. Grimm, M. Weidemüller, Y. B. Ovchinnikov, Optical Dipole Traps for Neutral Atoms, *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 2000, **42**, 95-170.
- [4] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms, *Nature*, 2002, **415**, 39.
- [5] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, and S. Kuhr, Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator, *Nature*, 2010, **467**, 68.
- [6] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet, M. Greiner, Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level, *Science*, 2010, **329**, 547.
- [7] D. van Oosten, P. van der Straten, and H. T. C. Stoof, Quantum phases in an optical lattice, *Phys. Rev. A*, 2001, **63**, 053601.
- [8] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 3108.
- [9] B.-l. Chen, X.-b. Huang, and S.-p. Kou, Mott-Hubbard transition of bosons in optical lattices with three-body interactions, *Phys. Rev. A*, 2008, **78**, 043603.
- [10] 张礼, 近代物理学进展, 北京, 清华大学出版社, 2009, 276-295.
- [11] W. Zwerger, Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.*, 2003, **5**, S9.

- [12] A. Posazhennikova, Colloquium: Weakly interacting, dilute Bose gases in 2D, *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, 2006, **78**, 1111.
- [13] M. Holthaus, Bloch oscillations and Zener breakdown in an optical lattice, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.*, 2000, **2**, 589.
- [14] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, Bose-Einstein Condensation in Quasi-2D Trapped Gases, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**, 2551.
- [15] K. Drese, M. Holthaus, Ultracold atoms in modulated standing light waves, *Chemical Physics*, 1997, **217**, 201.
- [16] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, New York, Dover Publications, 1970, 721.
- [17] J. C. Slater, A Soluble Problem in Energy Band, *Phys.Rev.*, 1952, **87**, 807.
- [18] T.-L. Ho, Spinor Bose Condensates in Optical Traps, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 742.
- [19] S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kimura, Superfluid–Mott insulator transition of spin-1 bosons in an optical lattice, *Phys. Rev. A*, 2004, **70**, 043628.
- [20] T. Ohmi and K. Machida, Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1998, **67**, 1822.
- [21] A. A. Svidzinsky and S. T. Chui, Insulator-superfluid transition of spin-1 bosons in an optical lattice in magnetic field, *Phys. Rev. A*, 2003, **68**, 043612.
- [22] Y. Wu, Simple algebraic method to solve a coupled-channel cavity QED model. *Phys. Rev. A*, 1996, **54**, 4534.
- [23] T.-L. Ho, and S. K. Yip, Fragmented and Single Condensate Ground States of Spin-1 Bose Gas, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**, 4031. C.K. Law, H. Pu, and N.P. Bigelow, Quantum Spins Mixing in Spinor Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 5257.
- [24] J. K. Freericks and H. Monien, Phase diagram of the Bose-Hubbard Model, *Europhys. Lett.* 1994, **26**, 545.

-
- [25] G. G. Batrouni, R.T. Scalettar, and G.T. Zimanyi, Quantum critical phenomena in one-dimensional Bose systems, *Phys. Rev.Lett.*, 1990, **65**, 1765.
- [26] G. Birkl, M. Gatzke, I.H. Deutsch, S.L. Rolston, and W.D. Phillips, Bragg Scattering from Atoms in Optical Lattices *Phys, Rev. Lett.*, 1995, **75**, 2823.
- [27] M. Weidemüller, A. Hemmerich, A.Görlitz, T. Esslinger, and T.W. Hänsch, Bragg Diffraction in an Atomic Lattice Bound by Light, *Phys. Rev. Lett.*, 1995,**75**, 4583.
- [28] K. W. Mahmud, G. G. Batrouni, and R. T. Scalettar, Isentropes of spin-1 bosons in an optical lattice, *Phys. Rev. A*, 2010, **81**, 033609.
- [29] G. G. Batrouni, V. G. Rousseau, and R. T. Scalettar, Magnetic and Superfluid Transitions in the One-Dimensional Spin-1 Boson Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **102**, 140402.
- [30] V. Apaja, O. F. Syljuåsen, Dimerized ground state in the one-dimensional spin-1 boson Hubbard model, *Phys. Rev. A*, 2006, **74**, 035601.
- [31] S. Bergkvist, I. P. McCulloch, and A. Rosengren, Spinful bosons in an optical lattice, *Phys. Rev. A*, 2006, **74**, 053419.
- [32] M. Rizzi, D. Rossini, G. D. Chiara, S. Montangero, and R. Fazio, Phase Diagram of Spin-1 Bosons on One-Dimensional Lattices, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**, 240404.
- [33] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, Superfluid and Insulating Phases in an Interacting-Boson Model: Mean-Field Theory and the RPA, *Europhys. Lett.*, 1993, **22**, 257
- [34] R. V. Pai, K. Sheshadri, and R. Pandit, Phases and transitions in the spin-1 Bose-Hubbard model: Systematics of a mean-field theory, *Phys. Rev. B*, 2008, **77**, 014503.
- [35] T. Kimura, S. Tsuchiya, and S. Kurihara, Possibility of a First-Order Superfluid –Mott -Insulator Transition of Spinor Bosons in an Optical Lattice, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**, 11043.
- [36] K. Sheshadri, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, and T. V. Ramakrishnan, Percolation

- Enhanced Localization in the Disorderd Bosonic Hubbard Model, *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**, 4075.
- [37] J.-N. Zhang and S. Yi, Thermodynamic properties of a dipolar Fermi gas, *Phys. Rev. A*, 2010, **81**, 033617.
- [38] P. B. Blakie, A. Bezett, and P. Buonsante, Degenerate Fermi gas in a combined harmonic-lattice potential, *Phys. Rev. A*, 2007, **75**, 063609.
- [39] L. Hackermüller, U. Schneider, M. M.-Cardoner, T. Kitagawa, T. Best, S. Will, E. Demler, E. Altman, I. Bloch, and B. Paredes, Anomalous Expansion of Attractively Interacting Fermionic Atoms in an Optical Lattice, *Science*, 2010, **327**, 1621.
- [40] S. Fölling, A. Widera, T. Müller, F. Gerbier, and I. Bloch, Formation of Spatial Shell Structure in the Superfluid to Mott Insulator Transition, *Phys. Rev. Lett.*, 2006, **97**, 060403.
- [41] S. Wessel, F. Alet, M. Troyer, and G. George Batrouni, Quantum Monte Carlo simulations of confined bosonic atoms in optical lattices, *Phys. Rev.A*, 2004, **70**, 053615.
- [42] M. Rigol, G. G. Batrouni, and V. G. Rousseau, State diagrams for harmonically trapped bosons in optical lattices, *Phys. Rev. A*, 2009, **79**, 053605.

攻读学位期间取得的研究成果

梁晋菊

有限温度下 Mott 相与超流相的热力学性质

山西大学学报(自然科学版)。34(SI): 30~32, 2011.

个人简况及联系方式

姓名：梁晋菊

性别：女

籍贯：山西省洪洞县

学习经历：2008年9月至2011年6月在山西大学理论物理研究所攻读硕士学位

E-Mail: liang_jinju@163.com

致 谢

论文的写作终于接近了尾声，三年的硕士研究生学习即将画上一个圆满的句号。这段期间，老师、同学以及身边的朋友给予了我无私的关怀、热情的帮助和鼓励，在此我对他们表示衷心的感谢。

首先感谢我的导师张云波教授，三年来，张老师渊博的知识、严谨的治学态度、废寝忘食的工作精神、以及对问题敏锐的洞察力和富有启发性的建议指导，都使我终身受益。不仅教给我基本科学的思维方式和正确的科研方法，还使我明白了许多为人处世的道理。在此我表示深深的敬意和感谢！这篇论文是在张老师的悉心指导下完成的，从选题、构思到定稿无不渗透着张老师的心血和汗水。

感谢硕士期间的带课老师梁九卿教授、张素英教授、李志坚教授、姜晓庶副教授，是你们耐心的讲解和严格的要求让我对物理知识有了更为全面的认识和产生了浓厚的兴趣。另外特别感谢聂一行教授在我学习和论文写作期间给予的指导和帮助。

感谢郭丽萍、尹相国、杜磊、张杰、王红梅、梁成功、蔚晓红、吕晓龙、李花、毛丽君、李甜甜、张小欧、刘太丰、白守燕、王娟、万鹏宇、韩伟、贾继峰等学友的无私帮助和友好合作，是你们让我有了不畏艰难的信心和勇气。

感谢我挚爱的亲人们，谢谢你们始终如一的关怀、理解、支持和付出。

感谢在山西大学研究生学习阶段所有物电学院的领导和前辈以及和我一起学习生活过的同学们，在这里我度过了一段人生中美好的时光！感谢山大，感谢物电！

梁晋菊

2011年6月于山西大学

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