



山西大學
Shanxi University

2012 届 硕 士 学 位 论 文

双势阱模型中 BEC 隧穿特性研究

作者姓名	张小欧
指导教师	张云波 教授
学科专业	理论物理
研究方向	BEC 隧穿理论
培养单位	山西大学理论物理研究所
学习年限	2009 年 9 月—2012 年 6 月

二〇一二年五月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2012

**Analysis on Property of BEC Tunneling in Double-Well
Potential**

Name: Xiaoou Zhang

Supervisor: Prof. Yunbo Zhang

Major: Theoretical physics

Field of Research: BEC Tunneling Theory

Department: Institute of Theoretical Physics

Research Duration: 2009.9—2012.6

June, 2012

目录

中文摘要	I
ABSTRACT	II
引言	1
第一章 BEC 简介	3
1.1 原子云中的 BEC	3
1.2 Gross-Pitaevskii 方程来源	4
1.3 Bose-Hubbard 模型概述	6
第二章 双势阱模型中的 BEC	9
2.1 半经典近似解	9
2.2 非线性薛定谔方程数值解	13
第三章 基于 Bose-Hubbard 模型的 BEC 理论研究	19
3.1 排斥相互作用的 Spekkens-Sipe 模型	19
3.2 Bose-Hubbard 模型的动力学精确解	21
3.3 Bose-Hubbard 模型的量子相变	30
结束语	37
参考文献	38
致谢	42
个人简况	43
承诺书	43

Contents

CHINESE ABSTRACT.....	I
ABSTRACT	II
INTRODUCTION	1
Chapter 1 Brief introduction of BEC.....	3
1.1 BEC in atom clouds	3
1.2 Origin of Gross-Pitaevskii equation.....	4
1.3 Summary of Bose-Hubbard model	6
Chapter 2 BEC in double-well potential model	9
2.1 Solution in Semi-classical approximation	9
2.2 numerical solution of nonpolynomial Schrödinger equation.....	13
Chapter 3 BEC theory analysis on the basis of Bose-Hubbard model.....	19
3.1 Spekkens-Sipe model in repulsive interaction.....	19
3.2 Dynamics exact solution in Bose-Hubbard model.....	21
3.3 Quantum phase transition in Bose-Hubbard model.....	30
Ending.....	37
References	38
Acknowledgement	42
Personal profiles	43

中文摘要

近年来，双势阱中冷玻色原子的动力学吸引了物理学家们足够的注意力。本来将多体哈密顿量半经典化可很好地描述系统的性质，但是量子涨落的研究使得哈密顿量量子化表现出了很重要的，也是不可替代的优点，当然对比半经典近似和数值精确解在研究势阱中 BEC 隧穿性质中的影响也将会是一项非常有意义的工作。本文主要研究了在双势阱模型中 BEC 动力学和定态性质的解法，Smerzi 等人采用半经典近似得到约瑟夫森方程组实现的相干动力学，同样也将 3D-GP 转换到 1D，数值求解 1D 非线性薛定谔方程实现的量子相图，并分析二者方法上的不同导致的结果上的区别。基于玻色-哈伯顿模型研究 BEC 粒子系统的定态和动力学特性，并将它们的半经典近似结果和精确结果进行对比。本文结构如下：

第一章介绍了原子云中的玻色爱因斯坦凝聚 (BEC)，Gross-Pitaevskii 方程的理论来源，并追溯了对晶格模型中适用的玻色-哈伯顿 (Bose-Hubbard) 模型的认识。第二章我们讨论了弱相互作用玻色系统的 GP 方程，给出双势阱模型中 BEC 从约瑟夫森振荡转变为宏观量子自俘获的临界条件，并通过玻色-约瑟夫森结方程得到定态能量和相互作用的关系，以及实际构造三维双势阱，将其转变为一维 GP 方程，对比数值求解结果和双模近似结果的差别。最后一部分我们基于格点的 Bose-Hubbard 模型得到了吸引相互作用下 BEC 的动力学精确解，利用哈密顿量的精确对角化得到了 BEC 的基态相变，并且和半经典近似结果进行了对比。

关键词： BEC； GP 方程； 双势阱模型； Bose-Hubbard 模型

ABSTRACT

The dynamics of cold bosonic atoms in double-well potentials has deserved a great deal of attention in the last decade. A simplified many-body hamiltonian with semiclassical predictions similar to those of article before but with the important advantage of allowing the study the quantumm fluctuations on the top of the semiclassical quantum averages, also contrasting the semiclassical approximation and numercial results' impact in the study of tunneling property of BEC in double-well potential will be a very interesting work. The article mostly discuss the solution of tunneling and stationary states property of BEC in double well potential, include coherent dynamics based on a semi-classical approximation of the GP equation in Smerzi's article and quantum phase diagram of GPE from 3D to 1D by numerically solving the 1D nonpolynomial Schrödinger equation, and then made a contrast of two different solving method. Otherwise discussed the stationary states and tunneling dynamics on the basis of Bose-Hubbard model Hamidonlian, and made it comparaed with Semi-classical solution. The article included:

We first give a brief introduction to the BEC, including Bose-Einstein condensation in atomic clouds, Origin of Gross-Pitaevskii equation, and understanding of Bose-Hubbard model in optical lattices. And then we discuss the 1D Gross-Pitaevskii equation for dilute bose gases, give new criterion on the Josephson-type oscillation and macroscopic quantum self-trapping and find relation in the state energy and interaction through BJJ equation, followly we also construct 3D double-well potential and to be translated in to 1D Gross-Pitaevskii equation, numercial result are compared with those for Semi-classical approximation. In the last past we give the exact solution of dynamics and ground state energy on attractive BEC on the base of Bose-Hubbard model Hamitonian, enduce ground state phase transition in the help of exact diagonalization, the analytical results are compared with those for Semi-classical approximation.

Key word: BEC; GP equation; double-well potential; Bose-Hubbard model.

引言

一个关于 n 个全同粒子无法分辨的新观点被印度物理学家玻色 (S.N.Bose) 于 1924 年提出, 在该理论中如果使得每个光子的能量都满足爱因斯坦曾经提出的光量子假说, 那黑体辐射的半经验公式为什么会适用的问题就非常完美的解决了。随后爱因斯坦意识到这一工作的重要性, 随即发表两篇文章, 在研究一般原子系统的问题上引用玻色只是在光子问题上所运用的统计原理 (当然要求总粒子数守恒), 接着得出这样的假想: 当这类原子系统在温度低到一定程度时, 所有原子将全部突然集中到一个能量尽可能低的状态, 也就是发生了一种奇特的相变现象, 即形成了玻色-爱因斯坦凝聚^[1,2]。

在冷原子凝聚中, 原子之间的相互作用能和势阱间的隧穿能是非常重要的参数, 相互作用在实验上一般利用费斯巴赫 (Feshbach) 共振技术改变原子-原子相互作用的 s -波散射长度来调节相互作用的大小和正负, 隧穿能力则是通过调整势垒的高度和打入激光的强度来调节。对于玻色-爱因斯坦凝聚, 弱耦合情况下玻色原子基本都在凝聚体中, 散在激发态上的原子影响可忽略, 可用平均场近似方法下的 Gross-Pitaevskii (GP) 方程来描述^[4]。

Smerzi 等人正是在 1997 年发表论文首先讨论了对称双势阱中弱耦合 BEC 原子的隧穿动力学, 发现中性 BEC 原子不但发生粒子数差含时平均值为零的约瑟夫森振荡 (Josephson oscillation) 现象, 而且会在改变初始条件时出现粒子数差平均值不再为零的 macroscopic quantum self-trapping (MQST) 现象, 即随着时间的推移一个势阱的原子数却总是比另外一个势阱多, 原子分布呈稳定的不对称性, 这其实正是由于中性玻色原子间存在非线性相互作用从而导致的奇特振荡现象^[5]。实验上利用激光切割形成两段分裂 BEC 凝聚体, 束缚在其中的 BEC 原子流让我们联想到超导约瑟夫森效应 (SJJ) 中的电子流, 可以形成振荡的中性原子流, 只不过由于中性原子之间的非线性作用可产生不同于 SJJ 的宏观量子自俘获现象^[6]。

对于三维 GP 方程, 我们可构造一个三维的束缚势, 只是在 x 坐标上表现为双势阱, 然后将三维 GP 方程转换成 x 坐标上的一维 GP 方程。这样, 分别对两者进行数值分析, 并且都与半经典近似得到的玻色约瑟夫森结方程的结果进行对比, 观察他们之间的精确性差别^[28-30]。

两束激光相向传播通过干涉在空间形成周期性的场强分布,场强的强弱区域形成了所谓的光学晶格 (optical lattice)。类似于电子在晶体中具有某些周期性质我们光学晶格具有的周期特性也可以使得束缚在其中的原子具有同样的性质。虽然光晶格中的 BEC 粒子间在本质上不存在强相互作用,但是光晶格会减少囚禁在其中的原子的动能,从而相当于等效地增加了原子间的相互作用,因此光晶格可作为研究强相互作用的原子体系的很好的模型。当原子间的相互作用很大,占据主导地位时,弱耦合玻色原子气体的 GP 理论将不再适用,而是运用不局限于相互作用的光晶格中的 Bose-Hubbard 模型或者更准确的 Spekkens-Sipe 模型^[14,15]。物理学家雅克什 (Jaksch) 正是在 1998 年基于 Bose-Hubbard 模型理论上提出了从处于超流相超冷 BEC 原子会量子相变到 Mott-绝缘相的假设。这使得研究者可以通过调节模型的相关参数来研究强关联多体量子力学^[32]。

本文结构如下:第一章介绍了原子云中的玻色-爱因斯坦凝聚, Gross-Pitaevskii 方程的理论来源和 Bose-Hubbard 模型简要介绍。第二章介绍了 Gross-Pitaevskii 方程在双势阱模型中的半经典近似理论,三维势阱中 BEC 近似为一维后数值求解得到的相变和动力学分析。第三章我们研究了强排斥相互作用情况下的 Spekkens-Sipe 模型的 BEC 半经典近似理论,玻色-哈伯德模型的基态分析和量子相变,以及其与半经典近似结果的对比。最后对本文做出总结。

第一章 BEC 简介

BEC 作为一种让物理学家如此感兴趣的新物质，有太多的有趣特性可以被发掘，而它的历史背景，适用方程，基础模型也是不可不提的。这一章我们就介绍了原子云中的玻色爱因斯坦凝聚，BEC 适用的 Gross-Pitaevskii 方程的理论来源，以及在实验中通过激光束缚构成的光晶格中适用模型玻色-哈伯顿 (Bose-Hubbard) 模型。

1.1 原子云中的 BEC

玻色子是具有整数自旋的粒子。全同玻色子系统的波函数在任意两个粒子交换后保持对称性，在足够低的温度下玻色子可以占据相同的单粒子态。玻色爱因斯坦凝聚态的转变温度的大小估计需要量纲考虑，对于全同自由粒子，相关物理量是粒子质量 m ，单位体积的粒子数 n ，普朗克常数 $h = 2\pi\hbar$ ，组合这三个物理量从而具有能量量纲的唯一的量是 $\hbar^2 n^{2/3} / m$ 。除以波尔兹曼 (Boltzman) 常数 k ，我们就得到了转变温度，

$$T_c = C \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{mk} \quad (1.1.1)$$

这里 C 是近似为 3.3 的数值因子。当此公式用来计算液氦-4 时我们得知液氦-4 的转变温度近似为 3.13 K，它非常接近于液氦-4 超流相实现时的温度 2.17 K。

将转变温度和粒子密度建立关系的相同方式是将德布罗意波长 λ_T 和粒子平均占据空间 $n^{-1/3}$ 作比较，因为德布罗意波长定义是

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k T} \right)^{1/2} \quad (1.1.2)$$

在高温时，该波长很小，原子表现为经典气态。当转变温度非常低以至于 λ_T 可以和 $n^{-1/3}$ 作比较时，理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚就可实现。对于碱金属原子，实验上可达到的粒子密度从早期的 10^{13} cm^{-3} 到近年的 $10^{14} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，转变温度也可从几 μK 低到 100 nK 。对于氢原子，质量更小可使得转变温度更高。

在实验上，束缚在谐振子势中的气体是非理想化的。如果粒子数是 N ，气体密

度为 N/R^3 。将 $T = T_c$ 时密度值取代为 $n \approx N/R^3$ 并代入方程 (1.1.2) 中, 可得新的转变温度

$$kT_c = C_1 \hbar \omega_0 N^{1/3} \quad (1.1.3)$$

这里 C_1 是近似为 0.94 的数值因子。实验上的束缚频率一般为 10^2 Hz , 对应 $\omega_0 = 10^3 \text{ s}^{-1}$, 粒子数范围是 10^4 到 10^8 , 转变温度的大致范围就可得到。

早期实验的出发点是室温下的铷 (rubidium) 原子, 然后通过束缚和激光冷却到 $20 \mu\text{K}$, 接下来关掉激光, 让原子通过均匀外磁场被电子自旋的塞曼效应所磁束缚。如果我们忽略核自旋的作用, 电子自旋平行于磁场的原子将被吸引到磁场的最小值处。如果外势是四级磁场, 那增加一个小的谐振子偏差可防止势阱中心粒子的丢失。

从理论出发, 原子气体的实现基于粒子间的有效相互作用在低温时为单物理量——散射长度的事实。气体的稀薄依赖于散射长度必须小于粒子平均占据空间, 这就提高了计算系统性质的精确性。理想稀薄气体的相关理论和实验研究在 20 世纪 50,60 年代得到很好的发展, 但是束缚外势的出现却提供了很多新颖的物理现象。通过改变外磁场的强度调节相互作用大小的可能性使得研究散射长度科比与或者更大于粒子占据的实验研究变为可能。

1.2 Gross-Pitaevskii 方程来源

在能量很低时两个粒子之间的相互作用在动量表象中表现为常数, $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ 。在坐标表象中粒子间的相互作用值则用接触势 $U_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ 表示, 这里 \vec{r} 和 \vec{r}' 为粒子的位置。为了研究多体系统态能量我们采用 Hartree 或者平均场近似, 假设波函数是单粒子波函数的对称性结果。在全凝聚态中, 所有玻色子处于相同的单粒子态 $\phi(\vec{r})$, 我们可写出该大粒子数系统 (粒子数设为 N) 的波函数:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\vec{r}_i) \quad (1.2.1)$$

单粒子波函数 $\phi(\vec{r}_i)$ 归一化到 1.

$$\int d\vec{r}\phi(\vec{r})=1 \quad (1.2.2)$$

这个波函数不包括当原子互相接近时的量子关联。这个效应可通过运用有效相互作用 $U_0\delta(\vec{r}-\vec{r}')$ 来解决，这里忽略了自由度的短波影响。在平均场近似处理中，我们不考虑自由度间的相互作用（也就是散射长度小于粒子的空间长度），有效哈密顿量可写为：

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right] + U_0 \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (1.2.3)$$

$V(\vec{r}_i)$ 是外势阱。态能量也可以给出

$$E = N \int dr \left[+ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\phi(r)|^2 + V(\vec{r})|\phi(r)|^2 + \frac{N-1}{2} U_0 |\phi(r)|^4 \right] \quad (1.2.4)$$

在 Hartree 近似中，所有原子处于态 ϕ 。而在真实的波函数中，一些原子将会处于更多空间变量的能态，这是因为在原子小的占据空间内的关联，处于态 $\phi(\vec{r})$ 的总粒子数将小于 N 。然而从全同玻色气体的宏观理论出发，凝聚体中粒子数的相对损耗，也就是取决于相互作用的凝聚耗散一般处于 $(na^3)^{1/2}$ 的级别范围， n 为粒子密度。考虑粒子可分离的量度，我们引入半径为 r_s 的球等于每个粒子的所占体积可以得出粒子密度

$$n = \frac{1}{(4\pi/3)r_s^3} \quad (1.2.5)$$

粒子密度通过方程 (1.2.5) 得到。至今做过的大部分实验中损耗 (depletion) 只是占到 1% 或者更小，而在大多数情况下由于相互作用引起的凝聚耗散是可忽略的。

我们从考虑全同玻色气体出发。在一个体积为 V 的全同体系中，基态中每个粒子的波函数为 $1/V^{1/2}$ ，每个粒子对的相互作用能为 U_0/V 。这样 N 粒子全部处于相同态的态能量是每个粒子对的数量相加，总能量则为

$$E = \frac{N(N-1)}{2V} U_0 \approx \frac{1}{2} V n^2 U_0 \quad (1.2.6)$$

这里 $n = N/V$ ，假设 $N \gg 1$ 。

接下来通过下面的定义就可方便的引入凝聚体的波函数的概念

$$\psi(\vec{r}) = N^{1/2} \phi(\vec{r}) \quad (1.2.7)$$

粒子密度为

$$n(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 \quad (1.2.8)$$

忽略 $1/N$ 的小项，系统能量处理为

$$E(\psi) = \int d\vec{r} \left[+ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\vec{r})|^2 + V(\vec{r}) |\phi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\phi(\vec{r})|^4 \right] \quad (1.2.9)$$

为了找到 ψ 的最佳形式，在总粒子数守恒为零的情况下用独立变量 $\psi(\vec{r})$ 和它的共轭变量 $\psi^*(\vec{r})$ 最小化系统能量。束缚条件是拉格朗日 (Largrange) 乘子方法。

$\delta E - \mu \delta N = 0$ ，化学势 μ 是确保粒子数守恒的拉格朗日乘子。 $E - \mu N$ 对 $\psi^*(\vec{r})$ 求变分得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) + U_0 |\psi(\vec{r})|^2 \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) \quad (1.2.10)$$

这就是含时的 Gross-Pitaevskii (GP) 方程。这也是作用在每个粒子上的势是外势 V 和考虑平均场下由其他玻色子导致的非线性项 $U_0 |\psi(\vec{r})|^2$ 。本征值是化学势，不是一般线性 Schrödinger 方程得到的每个粒子的能量。对于处于同一态的所有没有相互作用的粒子，化学势就等于每个粒子的能量。

1.3 Bose-Hubbard 模型概述

激光束相向传播形成驻波，驻波峰谷之间形成周期点阵，原子在点阵中受到交流斯塔克效应，从而相当于形成周期势。光学晶格中冷玻色粒子在束缚外势下的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3 r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3 r d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

$\hat{\Psi}(\vec{r})$ 表示玻色场算符， $V(\vec{r} - \vec{r}')$ 表示玻色子间的相互作用接触势。

当粒子间相互作用很小时，多体系统的量子态可以很好的近似为单粒子布洛赫

(Bloch) 态的叠加。基态上所有粒子占据最低能态的布洛赫态，系统呈现为不同格点凝聚波函数相位强关联的 BEC。定域在每个格点上的 Wannier 态是单粒子布洛赫态适当的组合，不同格点的 Wannier 态波函数间彼此具有正交性。选择光晶格中把玻色场算符 $\hat{\Psi}(r)$ 展开在近邻格点间处于最低的能态的 Wannier 基矢空间上：

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \hat{a}_1 \chi(\vec{r} - \vec{r}_1) + \hat{a}_2 \chi(\vec{r} - \vec{r}_2) \quad (1.3.2)$$

代入到 (1.3.1) 得到多体系统哈密顿量的二次量子化形式：

$$H = -J(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + \varepsilon_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \varepsilon_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \frac{1}{2} U [\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2] \quad (1.3.3)$$

我们采用近束缚近似方法，只考虑其中两个格点间的近邻相互作用，不包括其他格点的贡献。 $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ 是每个格点的原子数。方程 (1.3.3) 右边第一项系数是跃迁参数，描述玻色子在 1,2 格点间的隧穿能量，隧穿强度由

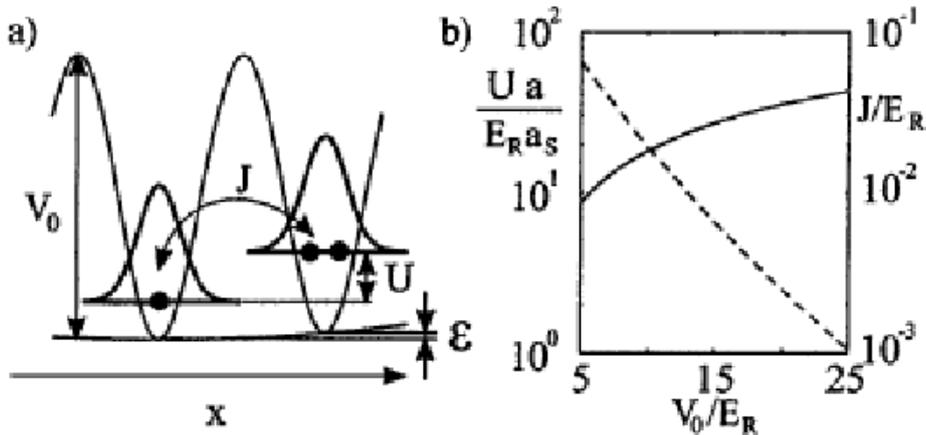
$$J = -\int d^3 r \chi^*(r - r_1) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{e,x}(r) \right] \chi(r - r_2) \quad (1.3.4)$$

第二项系数代表原子在各个格点中没有粒子间相互作用和格点间隧穿情况下的最低态上粒子的能量参数，

$$\varepsilon_{1,2} = -\int d^3 r \chi^*(r - r_{1,2}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{e,x}(r) \right] \chi(r - r_{1,2}) \quad (1.3.5)$$

第三项系数表示每个格点上原子间的相互作用能参数，

$$U = U_{1,2} = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \int d^3 r |\chi(r - r_{1,2})|^4 \quad (1.3.6)$$



1.1 光格子中玻色-哈伯顿模型的示意图

基态出现什么样的性质取决于格点原子相互作用参数 U 与隧穿参数 J 的比值大小^[10-12]：假设每个格点只有一个粒子，都处在格点的基态上。如果左边粒子跳到右边，而右边本来就有一个粒子，这时二者间的相互作用会提高能量 U 。当 $U/J \ll 1$ 时，隧穿参数相对于相互作用参数起到决定性的作用，原子在两个格点间可以随意的移动，也就是说每个格点内的原子数是任意的，系统处于一种所谓的超流态，动能占据总能量主要部分，系统波函数是非局域化的，单原子波函数扩展到整个点阵。用算符表示：

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

这里 M 代表格点数， N 表示系统原子总数。与此相反，当 $U/J \gg 1$ 时，相互作用参数相对于隧穿参数起到决定性的作用，原子更愿意待在自己的格点中，当每个格点间的原子数相同时能量最小，系统的波函数是局域化的，是格点局域化福克态（Fock states）的乘积，此称为 Mott-绝缘态^[13,14]。基态波函数可写作：

$$|\Psi_{MI}\rangle|_{J=0} \propto \prod_{i=1}^M (\hat{a}_i^+)^N |0\rangle$$

这样占据的 Mott-绝缘态，每个格点具有确定的粒子数，量子涨落为零，相位失去相干性，系统不能用一个宏观波函数来描述。

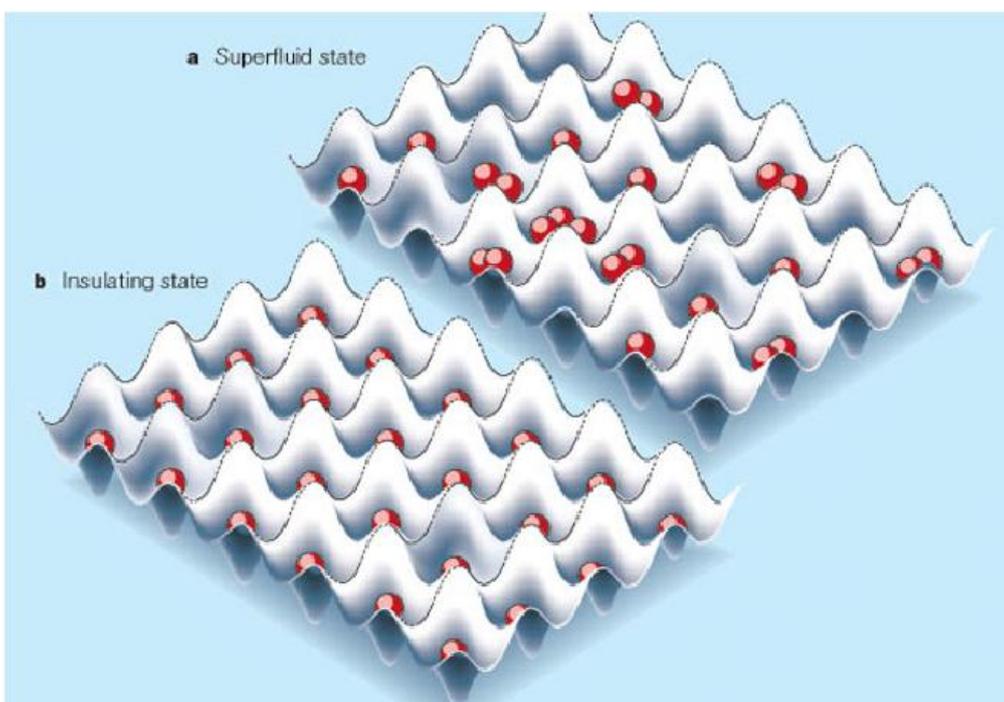


图 1.2 光晶格中 BEC 超流相与 Mott-绝缘相的转变

玻色-哈伯顿模型哈密顿量中两个重要的变量隧穿参数和原子间相互作用能参数的比较决定了该系统粒子在晶格中的表现是处于超流态还是 Mott-绝缘态。当二者的比值等于一个特定的量子临界值 $(U/J)_c$ 时，系统粒子会因为宏观尺度上无法观察的量子涨落出现连续的量子相变^[15]。相互作用的正负情况下我们会在随后进行详细的相变分析，其实在科学家提出相变理论后，很快就由研究小组在实验上验证了这个奇特而又重要的结果。

第二章 双势阱模型中的 BEC

2.1 半经典近似解

事实上，破缺对称性显示凝聚原子可用宏观单体波函数 $\psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho} e^{i\theta}$ 表示（序参量，其中 ρ 为凝聚体密度）。在实验上，宏观尺度上能否观察到有趣的，新颖的量子现象已经成为近年来 BEC 相关实验的新目标。对于弱耦合相互作用的 BEC，序参量遵守非线性 Schrödinger 或者 Gross-Pitaevskii 方程^[16],

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V_{ext}(\vec{r})\psi + U_0 |\psi|^2 \psi \quad (2.1.1)$$

$V_{ext}(\vec{r})$ 为束缚外势， $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ 为相互作用散射长度， a 为 s-波散射长度^[17-19]。

Smerzi 等人用激光分离一团凝聚原子，在其中形成一个高势垒并产生两个不同的势阱。当中间势垒足够高时，两磁势阱中凝聚波函数的线性组合构成该势阱中大粒子系统波函数，在双态模型（two state model）近似下我们的系统波函数可表示为：

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1(t)\Phi_1(r) + c_2(t)\Phi_2(r) \quad (2.1.2)$$

其中， $c_{1,2} = \sqrt{N_{1,2}} e^{i\theta_{1,2}}$ ， $N_{1,2}$ 和 $\theta_{1,2}$ 分别表示 1,2 势阱中的粒子数和相位。 $\Phi_{1,2}(\vec{r})$ 表示 1,2 势阱中的基态解，满足正交归一性：

$$\int d\vec{r} |\Phi_{1,2}|^2 = \delta_{1,2} \quad (2.1.3)$$

将方程代入 two-state model 得到玻色约瑟夫森结方程组（BJJ）

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial c_1}{\partial t} &= (E_1^0 + U_1 N_1) c_1 - K c_2 \\ i\hbar \frac{\partial c_2}{\partial t} &= (E_2^0 + U_2 N_2) c_2 - K c_1 \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

其中

$$\begin{aligned}
 E_{1,2}^0 &= \int d\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi_{1,2}|^2 + \Phi_{1,2}^2 V_{e,x} \right], \\
 U_{1,2} &= -U_0 \int d\vec{r} \Phi_{1,2}^4, \\
 K &= -\int d\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Phi_1 \nabla \Phi_2) + \Phi_1 \Phi_2 V_{e,x} \right]
 \end{aligned} \tag{2.1.5}$$

这里，对于两个对称的势阱来说，1,2 势阱中的零点能 $E_1^0 = E_2^0$ ， $U_{1,2}$ 各个势阱中原子间的相互作用能 $U_1 = U_2 = U$ ， K 为势阱间的隧穿率，推导过程中忽略了来自于 1,2 势阱中波函数交叠部分对系统的影响^[20-23]。

定义相位差 $\phi = \theta_2 - \theta_1$ 和分数粒子数差 $-1 < z = \frac{N_1 - N_2}{N} < 1$ ，则方程变成

$$\begin{aligned}
 \dot{z} &= -\sqrt{1-z^2} \sin \phi, \\
 \dot{\phi} &= -\Lambda z + \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi + \Delta E,
 \end{aligned} \tag{2.1.6}$$

这里我们已经重新标度时间 $2Kt \rightarrow t$ ， $\Lambda = UN/2K$ ，并做无量纲处理 $\hbar = m = 1$ （自然单位制）。参量表示为

$$\Delta E = \frac{E_1^0 - E_2^0}{K} + N \frac{U_1 - U_2}{2K}, \Lambda = N \frac{U_1 + U_2}{4K} \tag{2.1.7}$$

z, ϕ 分别为正则变量，用 $\dot{z} = -\frac{\partial H}{\partial \phi}$, $\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial z}$ 哈密顿量可以给出

$$H = \frac{\Lambda}{2} z^2 - \sqrt{1-z^2} \cos \phi + \Delta E z \tag{2.1.8}$$

H 可描述成一个非刚性单摆，摆角 ϕ ，摆长正比于 $\sqrt{1-z^2}$ ，并随“角动量” z 的增大而减小。

我们考虑一个对称双势阱的特殊情况。在对这样一个非刚性的单摆分析中，给定的角动量初始条件足够大时单摆会越过 $\phi = \pi$ 的方向垂直向上的点（此点在刚性单摆模型中是不稳定的，而这里由于非线性相互作用提供了受限制下的振荡），然后做旋转运动。根据能量守恒定律和隧穿能的边界条件，当相互作用 Λ 为正（排斥）时，发生 macroscopic quantum self-trapping (MQST) 的条件可表示为

$$H_0 = H\left(z(0), \frac{\pi}{2}\right) = H(0, \pi) \quad (2.1.9)$$

即：

$$\Lambda_c = 2 \frac{1 + \sqrt{1 - z(0)^2} \cos \phi(0)}{z(0)^2} = \frac{50}{9} \quad (2.1.10)$$

从图中可知 z 在临界值 Λ_c 以下时玻色原子在双势阱中做 Josephson 振荡， z 在临界值 Λ_c 以上时就会发生 MQST 现象（这是宏观粒子相干性的量子现象，不同于单电子极化束缚和液氦 II 受到的外引力效应）^[23,24]。

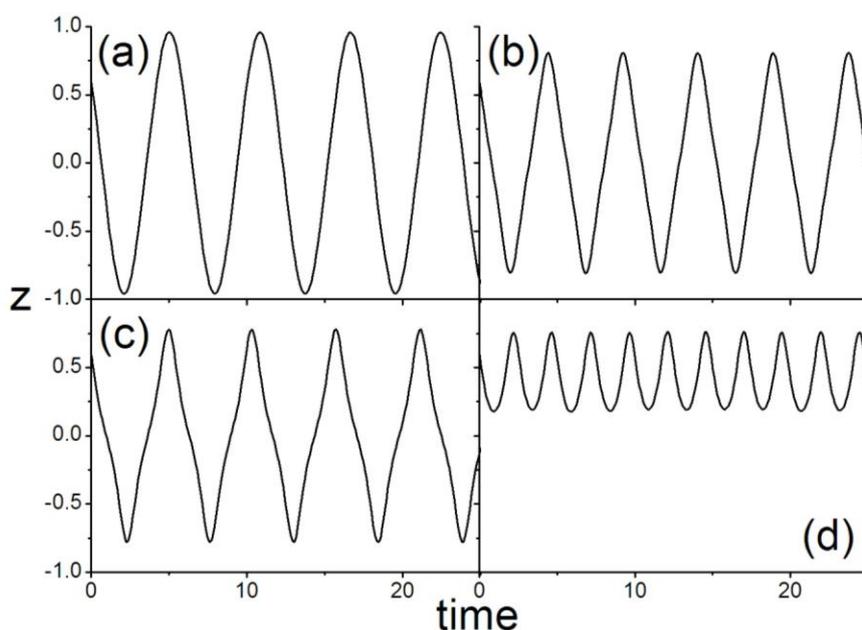


图 2.1 分数粒子数差 $z(t)$ 的时间演化图。初始条件： $z(0) = 0.6$ ， $\phi(0) = \pi/2$ ，以及 $\Lambda = 1$ (a)， $\Lambda = 4$ (b)， $\Lambda = 5$ (c)， $\Lambda = 6$ (d)

从 (2.1.8) 式写出系统的初始哈密顿量：

$$H_0 = \frac{\Lambda}{2} z(0)^2 - \sqrt{1 - z(0)^2} \cos \phi(0) \quad (2.1.11)$$

其中 Λ 为正（负）分别代表排斥（吸引）相互作用，我们前面已经知道该式 (2.1.11) 可被描述成一个非刚性单摆的哈密顿量，摆长正比于 $\sqrt{1 - z^2}$ ，它随着“角动量” z 的增大而减少，摆角为 ϕ 。其实一个普通的单摆，我们都清楚摆长确定，而且有一个垂直向下的稳定点。现在我们可以寻找此非刚性单摆的稳定点，即系统能量的定态。先从对称势阱玻色约瑟夫森结方程组 (BJJ) (2.1.6) ($\Delta E = 0$) 出发。我们讨论相互

作用为零 ($\Lambda=0$) 的情况, 定态处粒子数差和相位都不随时间变化 ($\dot{z}=0, \dot{\phi}=0$),

$$\begin{aligned} 0 &= -\sqrt{1-z^2} \sin \phi \\ 0 &= \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

结论得到:

$$E_+ = -1: \phi_s = 2n\pi, z_s = 0 \quad (2.1.13a)$$

$$E_- = 1: \phi_s = (2n+1)\pi, z_s = 0 \quad (2.1.13b)$$

对称 BJJ 的基态解是有本征能量为 $E_+ = -1$ ($\phi_s = 2n\pi, z_s = 0$) 的对称本征函数, 而下一个定态则是具有更高能量为 $E_- = 1$ ($\phi_s = (2n+1)\pi, z_s = 0$) 的反对称波函数。当然对于对称双势阱中的无相互作用原子, 其薛定谔方程的本征态必然是对称或者反对称的 ($z_s = 0$)。总之, 我们得出非刚性单摆将会有两个稳定点 (多了一个反向坐标的垂直向上最高点), 对应系统能量的基态和最高能态。但是在有相互作用 ($\Lambda \neq 0$) 的情况下

$$\begin{aligned} 0 &= -\sqrt{1-z^2} \sin \phi \\ 0 &= \Lambda z + \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

对称破缺的 GPE 简并本征态为

$$\Lambda < 0: \phi_s = 2n\pi \quad z_s = \pm \sqrt{1 - \frac{1}{\Lambda^2}} \quad (2.1.15a)$$

$$\Lambda > 0: \phi_s = (2n+1)\pi \quad z_s = \pm \sqrt{1 - \frac{1}{\Lambda^2}} \quad (2.1.15b)$$

该本征态对应能量为 $E_{sb} = \frac{1}{2} \left(\Lambda + \frac{1}{\Lambda} \right)$ 。对于吸引相互作用 $\Lambda < 0$, 基态为对称波函数, 基态对应能量为 $E_{sb} = \frac{1}{2} \left(\Lambda + \frac{1}{\Lambda} \right)$; 对于排斥相互作用 $\Lambda > 0$, 基态为反对称波函数, 对应能量为 -1 ($\phi_s = 2n\pi, z_s = 0$), 最高能态为反对称波函数, 最高能态对应能量为

$$E_{sb} = \frac{1}{2} \left(\Lambda + \frac{1}{\Lambda} \right)^{[25,26]}.$$

2.2 非线性薛定谔方程数值解

考虑一个零温时束缚在外势 $V_{trap}(r)$ 的稀薄的相互作用 BEC。这个外势是一个横向轨道平面的各向同性谐振子势和 x 坐标上的双势阱 $V_{Dw}(x)$ 的叠加^[28,29]

$$V_{trap}(r) = V_{Dw}(x) + \frac{m\omega_T^2}{2} \rho^2 \quad (2.2.1)$$

这里 ρ 是圆柱径向坐标， m 是原子质量， ω_T 是径向平面上的束缚频率。描述这个 N 粒子系统的宏观波函数 $\Psi(r, t)$ 遵循 3D GP 方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{trap}(\vec{r}) + U_0 |\Psi|^2 \right] \Psi \quad (2.2.2)$$

a_s 是 s-波玻色-玻色散射长度， $\Psi(r, t)$ 归一化到 N 。3D GPE 通过一个非局域外势概括了塌缩初始态的主要性质，塌缩态是一个因为两体和三体碰撞而衰减的高密度态。我们选择波函数 $\Psi(r, t)$ 作为坐标复合波函数 $f(x, t)$ 和径向宽度为 σ 的高斯横向波函数的结合，这里 σ 取决于坐标波函数 $f(x, t)$ 。坐标以 $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ 为单位，时间以 ω_{\perp}^{-1} ，能量以 $\hbar\omega_{\perp}$ 为单位，很容易得到 $f(x, t)$ 和 $\sigma(x, t)$ 满足的方程：

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{Dw}(x) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sigma^2} + \sigma^2 \right) + \frac{\Gamma |f|^2}{\sigma^2} \right] f \quad (2.2.3)$$

$$\sigma^4 = 1 + \Gamma |f|^2 \quad (2.2.4)$$

这里 $\Gamma = 2a_s N / a_{\perp}$ 和 $f(x, t)$ 归一化到 1。将式 (2.2.4) 代入 (2.2.3) 我们叫做 (1D nonpolynomial Schrödinger equation) 1D NPSE，它对于再制造横向谐振子束缚条件下的 3D GPE 的描述是非常精确的。

我们通过运用虚时 Crank-Nicolson 方法解 1D NPSE 得到对称双势阱中 BEC 的基态，在数值分析中双势阱 $V_{Dw}(x)$ 是两个 Poschl-Teller 势和高度为 $U_0 = 0.8\hbar\omega_{\perp}$ 的势垒

的结合，局域最小值位于 $-x_0 = -2a_{\perp}$ 和 $x_0 = 2a_{\perp}$ [30]。

$$V_{DW}(x) = V_L(x) + V_R(x) = -U_0 \left[\text{Sech}^2 \left(\frac{x+x_0}{a} \right) \right] - U_0 \left[\text{Sech}^2 \left(\frac{x-x_0}{a} \right) \right]$$

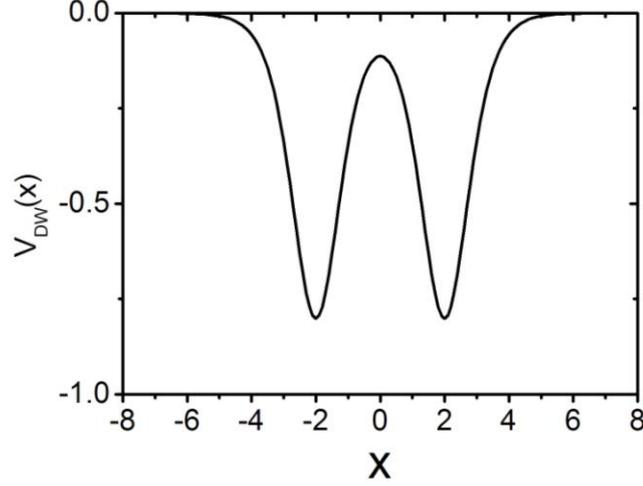


图 2.2 对称双势阱 $V_{DW}(x)$ ($x_0 = 2$, $U_0 = 0.8$, $a = 1$)

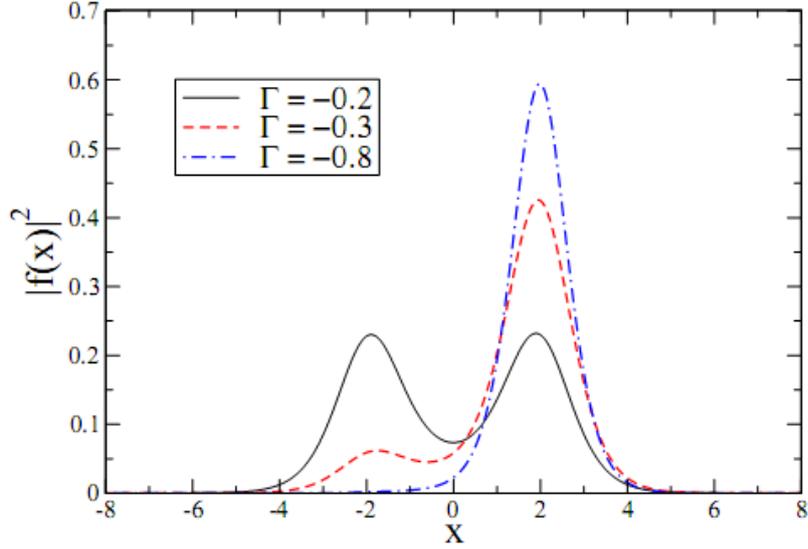


图 2.3 在对称双势阱 $V_{DW}(x)$ 中吸引 BEC 的坐标几率密度 $|f(x)|^2$ ，

$\Gamma = 2a_s N / a_{\perp}$ 是相互作用强度。

$\Gamma < 0$ 时，基态总是一个能量等于负无穷大的塌缩态，这样我们应该寻找最低有限能量的亚稳态。我们发现这个亚稳态在 $\Gamma_{SSB} < \Gamma < 0$ 时是对称的 (Josephson phase)， $\Gamma_C < \Gamma < \Gamma_{SSB}$ 时对称性破缺 (SSB phase)， $\Gamma < \Gamma_C$ 时变成一个塌缩基态。从图中可知我们考虑一个微不对称的初始态，并继续收敛为一个稳定的图像。 $\Gamma = -0.2$ 时亚稳态

是对称的，而 $\Gamma = -0.3$ 时则不是，直到 $\Gamma = -0.8$ 时 BEC 将只局域在右势阱，另外 $\Gamma = -1.2$ 时出现了塌缩。

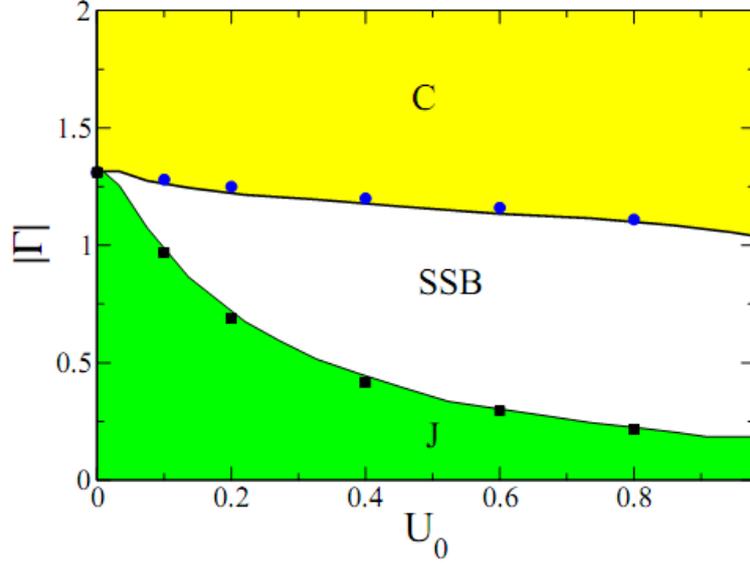


图 2.4 对称双势阱 $V_{DW}(x)$ 中吸引 BEC 的量子相图 ($|\Gamma|, U_0$)。黑线是 1D NPSE 的数值结果；圆圈和方块是 3D GPE 的结果。

图 2.4 给出了对称双势阱中吸引 BEC 作为势垒高度 U_0 的函数的量子相。在增加势垒高度 U_0 的同时，SSB 相变的 $|\Gamma_{SSB}|$ 相互作用强度突然下降，而达到塌缩相的临界 $|\Gamma_c|$ 却缓慢下降。为了验证 NPSE 的精确性，运用圆柱对称的虚时 Crank-Nicolson 方法解 3D GPE，结果表明二者的一致性非常好，然而 3D GPE 和 1D NPSE 是基于零程相互作用势。更精确的相互作用的描述可以体现出 SSB 相和塌缩相的微小的不同相变。

现在我们考虑 1D NPSE 的两模近似。双势阱中势垒足够高对应左右势阱的弱耦合，

$$f(x, t) = f_L(t)\phi_L(x) + f_R(t)\phi_R(x) \quad (2.2.5)$$

函数 $\phi_L(x)$ 和 $\phi_R(x)$ 是正交归一的，并且分别局域在左右势阱中。考虑同势阱中 $\phi_\alpha(x)$ ($\alpha = L, R$) 的叠加，忽略不同势阱 $\phi_\alpha(x)$ 的耦合，我们得到

$$i\hbar \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sigma_\alpha^2} + \sigma_\alpha^2 \right) + \frac{g}{\sigma_\alpha^2} |f_\alpha|^2 + \varepsilon \right] f_\alpha - K f_\beta \quad (2.2.6)$$

$$\sigma_\alpha^4 = 1 + g|f_\alpha|^2 \quad (2.2.7)$$

这里的参数 ε, K, g 被给到

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \int d\bar{r} \phi_\alpha(x) \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{DW}(x) \right] \phi_\alpha(x) \\ g &= \Gamma \int d\bar{r} (\phi_\alpha(x))^4 \\ K &= \int d\bar{r} \phi_\beta(x) \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{DW}(x) \right] \phi_\alpha(x) \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

我们写出 $f_\alpha(t)$ 的含时形式 $f_\alpha(t) = \sqrt{N_\alpha(t)} e^{i\theta_\alpha(t)}$, $N_\alpha(t)$ 是各个势阱的玻色子的占据分数, $\theta_\alpha(t)$ 对应相位。 $z(t) = N_L(t) - N_R(t)$ (这里 $N_L(t) + N_R(t) = 1$), $\theta(t) = \theta_R(t) - \theta_L(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= -2K \sqrt{1-z^2} \sin \theta \\ \dot{\theta} &= 2K \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \theta + \frac{\sqrt{1+z}(4+3g(1+z))}{2\sqrt{2}\sqrt{1+z}(2+g(1+z))} \\ &\quad - \frac{\sqrt{1-z}(4+3g(1-z))}{2\sqrt{2}\sqrt{1-z}(2+g(1-z))} \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

这两个方程称为 nonpolynomial Josephson equations (NPJEs), 当耦合程度 g 很小时, NPJEs 变为^[30]:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= -2K \sqrt{1-z^2} \sin \theta \\ \dot{\theta} &= 2K \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \theta + gz \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

它是一个类似于以前出现过的 Josephson equations (JEs)。

定态 Josephson 区域对应 $z=0$ 和 $\theta=0$ 的单摆稳定点。JEs 和 NPJEs 显示定态 Josephson 相只出现在 $\Gamma_{SSB} < \Gamma < 0$ 。由 JEs 得到的 Γ_{SSB} 值非常接近于方程 NPJEs 得到的数值结果。 Γ_{SSB} 下面的点对应 SSB 相。根据 JEs, 这个相存在于 $\Gamma_{SSB} < \Gamma < 0$ 中的一些值, 而根据 NPJEs, SSB 相直到塌缩相互作用临界值 Γ_c 才会消失。而且 NPJEs 描绘了塌缩相, JEs 则不能。

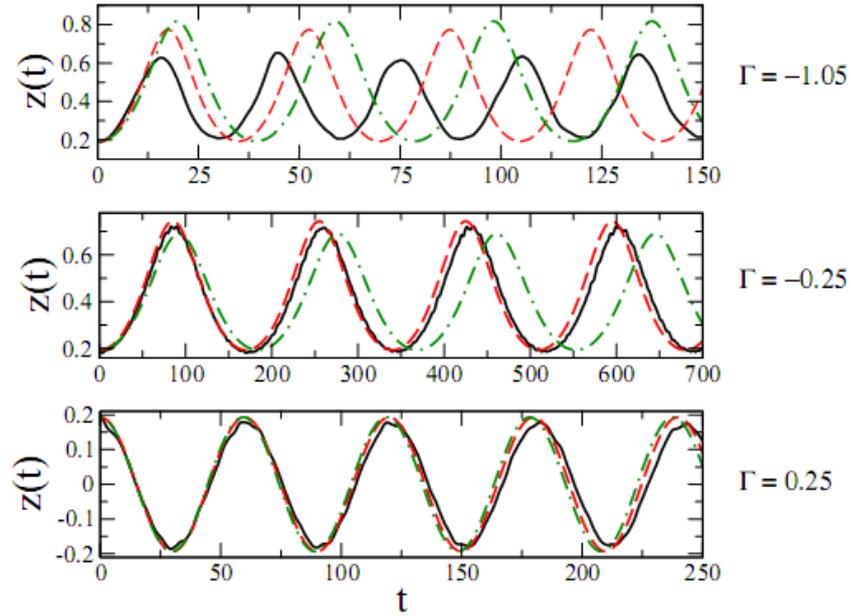


图 2.5 粒子数差 z 随时间的演化图。黑线是 1D NPSE 的结果；破折线是 NPJE 的结果；点划线是 JE 的结果。初始条件是：

$$z(0) = 0.2, \theta(0) = 0$$

从图 (2.5) 中可知, NPJE 比起 JE 更接近于 NPSE 结果。不过对于强的有效相互作用, NPJE 将不再适用。当 $\Gamma = 0.25$ 时系统处于 Josephson oscillation ($z = 0$), $\Gamma = -0.25$ 和 $\Gamma = -1.05$ 时存在 SSB oscillation ($z = z_{SSB} \neq 0$)。

第三章 基于 Bose-Hubbard 模型的 BEC 理论研究

3.1 排斥相互作用的 Spekkens-Sipe 模型

在双势阱 BEC 或者双分量凝聚体的研究中，低能多体哈密顿量一般采用常见的双模近似。我们引入在束缚外势中弱耦合玻色原子的多体哈密顿量的二次量子化形式 (1.3.1)，并采用 Spekkens 和 Sipe 介绍的全新模型，这个模型中的非线性项依然结合玻色-哈伯顿模型。场算符利用瓦尼尔态代入到新双模哈密顿量中，展开后得到：

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon N + (\varepsilon_{12} + gT_1(N-1))(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \\
 & + \frac{gT_0}{2}(N_1^2 + N_2^2 - N) + \frac{gT_2}{2}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_1 + 4N_1 N_2]
 \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

其中， T_0 为每个势阱中的平均场下的相互作用能， T_1, T_2 为原子间交叉相互作用能。

$$\varepsilon = \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -\int d^3 r \psi_1^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) \right] \psi_1(r)$$

$$\varepsilon_{12} = -\int d^3 r \psi_1^*(r) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) \right] \psi_2(r)$$

$$T_0 = \int d^3 r \psi_1^4(r)$$

$$T_1 = \int d^3 r \psi_1^3(r) \psi_2(r)$$

$$T_2 = \int d^3 r \psi_1^2(r) \psi_2^2(r)$$

我们将单粒子能量和隧穿能参数作单参数近似

$$g = 1, \quad \varepsilon_{12} = T_0 = 1, \quad T_1 = -e^{-\alpha}, \quad T_2 = -e^{-2\alpha} \quad (3.1.2)$$

这个参数化使得线性和非线性隧穿用单参数 α 做了简单的研究。在我们的运算中忽略 T_2 项，其随着 $e^{-2\alpha}$ 衰减。多体哈密顿量将会简化成

$$H = \varepsilon N + (\varepsilon_{12} + gT_1(N-1))(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) + \frac{gT_0}{2}(N_1^2 + N_2^2 - N) \quad (3.1.3)$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ 是单个格点上基态能量， ε_{12} 表示粒子在格点间的跃迁能力， T_0 表示原子间自相

相互作用能, T_1, T_2 为单粒子和双粒子的隧穿矩阵元。中间保留了所有阶, 没有做任何近似^[31]。

我们的态矢量可以以粒子数态 $|n_L, n_R\rangle$ 作为基矢展开

$$\Psi = \sum_{k=0}^N c_k |k, N-k\rangle \quad (3.1.4)$$

然后将哈密顿量 (3.1.3) 做对角化得到本征态能量和本征态的 c_k 分布。

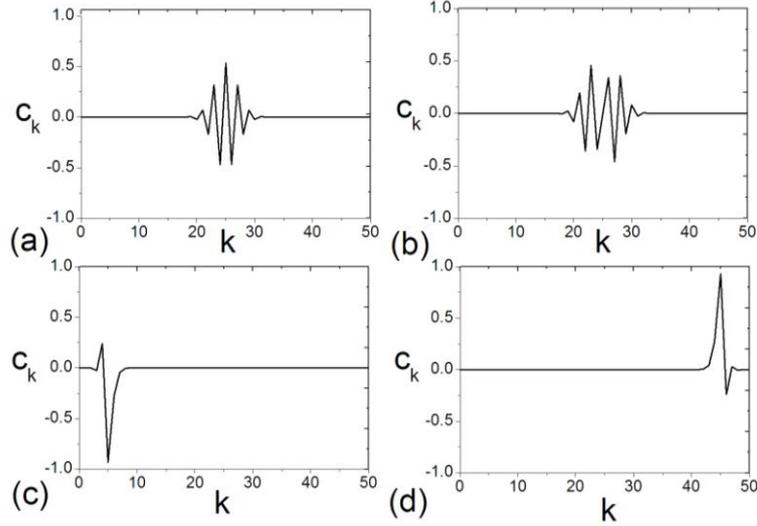


图 3.1 $N=50$ 的 Fock 态系数分布: (a) 基态; (b) 第一激发态; (c) 第 40 个态; (d) 第 41 个态。

我们从图 3.1 来看本征态系数体现出的基态和激发态的有趣性质。(a) 和 (b) 显示 $\alpha=5$ 时 50 个粒子两个最低能态的系数分布, 它们看起来更像坐标空间的谐振子波函数; (c) 和 (d) 显示了较高能态的系数分布, 而这些图却更像宏观占据左或者右势阱的粒子数态。而对于接近简并的薛定谔猫态和奇异态, 系数分布的获得就需要更高精度的计算。

对于双势阱模型的半经典近似, 如果 N 数目很大, 我们可以将 \hat{a}_i 算符 c 数化, 用 $\sqrt{n_i} e^{i\theta_i}$ 代替,

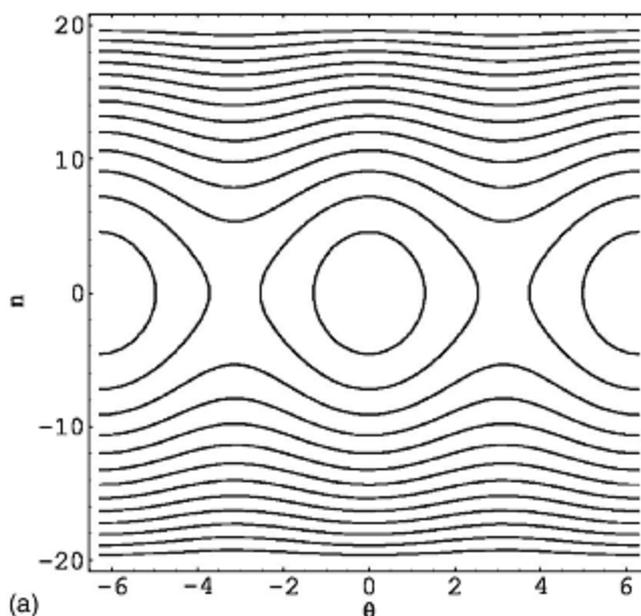
$$H = E_c n^2 - E_J \sqrt{1 - \left(\frac{2n}{N}\right)^2} \cos \theta \quad (3.1.5)$$

其中 $E_c = gT_0$ 和 $E_J = -N[\varepsilon_{12} + gT_1(N-1)]$ 。这里 n 和 θ 是共轭变量, 运动方程可写出

[32]

$$\dot{n} = -E_J \sqrt{1 - \left(\frac{2n}{N}\right)^2} \sin \theta \quad (3.1.6)$$

$$\dot{\theta} = 2E_c n + \frac{4E_J n}{\sqrt{1 - \left(\frac{2n}{N}\right)^2}} \cos \theta \quad (3.1.7)$$


 图 3.2 $N=40$ 的经典能图

3.2 Bose-Hubbard 模型的动力学精确解

自从实验上获得玻色-爱因斯坦凝聚后，人们开始通过各种方法研究它的很多有趣特性，对于弱耦合相互作用的 BEC，我们已经知道通过 Gross-Pitaevskii (GP) 方程来解决，并引入一个简单实用的双势阱模型。Smerzi 等人发现了类似于超导约瑟夫森结的玻色约瑟夫森结，以及相互作用达到一定值时出现的奇特的宏观量子自俘获现象 (MQST) 的结果。根据双势阱模型的特殊性，我们将光晶格中近邻点阵间的原子隧穿提出了玻色-哈伯顿模型，它是我们研究双势阱粒子动力学的基本量子模型，对于排斥相互作用，已经被用来研究约瑟夫森振荡 (Josephson oscillation) 和 MQST 之间的相变，当然对于吸引相互作用或者排斥相互作用来说，研究 BEC 动力学也是一个不错的选择。

双势阱中 N 个玻色原子系统演化遵循的含时薛定谔方程为：

$$\frac{i}{N} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

其中 \hat{H} 为两对称近邻格点的玻色-哈伯德模型的哈密顿量 (1.3.3)，两边同除以 NJ ，得到单体哈密顿量

$$\hat{H} = -\frac{1}{N} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1) + \frac{\Lambda}{N^2} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \hat{a}_2) \quad (3.2.1)$$

$\Lambda = \frac{NU}{2J}$ ， $\Lambda > 0$ 和 $\Lambda < 0$ 分别对应排斥和吸引相互作用， \hat{a} 代表势阱中的粒子湮灭算符，下角标 1, 2 分别代表左右势阱。此系统的 Fock 态基可写为 $|n_1, n_2\rangle$ ，其希尔伯特空间为 $N+1$ 维： $\{|0, N\rangle, |1, N-1\rangle, \dots, |N, 0\rangle\}$ 。将 t 时刻的波函数在此 Fock 态基矢上展开，如同 (2.2.4) ^[33]。

将 (3.2.1) 式代入上面的含时薛定谔方程，左乘 $\langle k, N-k|$ ， $c_k(t)$ 的含时解将有如下形式

$$\frac{i}{N} \frac{d}{dt} c_k = -(b_{k-1} c_{k-1} + b_k c_{k+1}) + a_k c_k \quad (3.2.2)$$

其中：

$$b_k = \frac{1}{N} \sqrt{(k+1)(N-k)}, a_k = \frac{\Lambda}{N^2} [k^2 + (N-k)^2]$$

现在我们引入一个新的变量 $x = k/N$ ，并且假设在粒子数很大的系统中 ($m = 1/N$ 很小)，我们令 $\Psi(x) = c_k / \sqrt{N}$ 和 $b(x) = b_k$ 。这样 (2.3.2) 式可写作如下的连续变量形式

$$\frac{i}{N} \frac{d}{dt} \Psi(x) = -[e^{-i\hat{p}} b(x) + b(x) e^{i\hat{p}}] + a(x) \Psi(x) \quad (3.2.3)$$

这里 $\hat{p} = -im\hat{c}x$ ，这里我们假设了 c_k 变化的平滑性，即对于所有 k ：

$sign(c_{k+1}) = sign(c_k)$ 。这是我们讨论的一种情况，就是不管是吸引相互作用还是排斥相互作用下的基态，对称态能量将低于反对称态。所以我们假设 $\Lambda < 0$ ，只讨论吸引

相互作用。对方程 (3.2.3) 中的 $e^{\pm i\hat{p}}$ 和 $b(x)$ ，我们做级数展开，保留到 m 的二阶次：

$$e^{\pm i\hat{p}} \approx 1 \pm m\partial_x + \frac{1}{2}m^2\partial_x^2$$

$$b_m(x) \approx b_0(x) + m\partial_m b_m(x)\Big|_{m=0} + \frac{1}{2}m^2\partial_m^2 b_m(x)\Big|_{m=0}$$

方程 (3.2.3) 化简为：

$$\frac{i}{N} \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\hat{p} \sqrt{x(1-x)} \hat{p} + a(x) - 2\sqrt{x(1-x)} \right) \psi$$

x 的范围是 $[0,1]$ ，为了方便我们引入新变量 $z = 1 - 2x$ 表示双势阱中的粒子数差， $z \in [-1,1]$ 。这样我们的方程就最终化为^[34]

$$i\partial_t \psi = \left(-\frac{2}{N} \frac{d}{dz} \sqrt{1-z^2} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \Lambda N z^2 - N \sqrt{1-z^2} \right) \psi \quad (3.2.4)$$

方程 (3.2.4) 可看做一类含时薛定谔方程，只是动能项略有变化。在 MATLAB 中我们可仿照解薛定谔方程所用的差分回代法求波函数的解。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hat{H}\psi, \quad \hat{H} = -\frac{2}{N} \frac{d}{dz} \sqrt{1-z^2} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \Lambda N z^2 - N \sqrt{1-z^2}$$

我们考虑这样的离散格式

$$\frac{\psi_j^{k+1} - \psi_j^k}{dt} = -i\hat{H} \left[\frac{1}{2} (\psi_j^{k+1} + \psi_j^k) \right]$$

其形成的演化算符明显么正，可保证波函数的范数在一切时刻相同。定义：

$$\chi = 2 \left(1 + \frac{i}{2} \Delta t \hat{H} \right)^{-1} \psi_j^k$$

上式整理为：

$$\left(1 + \frac{i}{2} \Delta t \hat{H} \right) \chi = 2\psi_j^k \quad (3.2.5)$$

$k+1$ 时刻的波函数与 k 时刻的波函数的关系为

$$\psi_j^{k+1} = \chi - \psi_j^k \quad (3.2.6)$$

我们试着将哈密顿量在波函数 χ 上的作用改为离散格式，首先整理哈密顿量：

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{2}{N}\sqrt{1-z^2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{N}\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}\frac{d}{dz} + \frac{1}{2}\Lambda Nz^2 - N\sqrt{1-z^2} \\ &= -2V_2(z)\frac{d^2}{dz^2} + 2V_3(z)\frac{d}{dz} + V_1(z)\end{aligned}$$

其中我们已经定义了一些量，可分别表示为：

$$V_1(z) = \frac{1}{2}\Lambda Nz^2 - N\sqrt{1-z^2}, \quad V_2(z) = \frac{1}{N}\sqrt{1-z^2}, \quad V_3(z) = \frac{1}{N}\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}$$

然后按照差分法的宗旨写出哈密顿量作用在波函数 χ 上的离散格式：

$$\begin{aligned}\frac{i}{2}\Delta t\hat{H}\chi &= \frac{i}{2}\Delta t\left[-2V_2(z)\frac{d^2}{dz^2} + 2V_3(z)\frac{d}{dz} + V_1(z)\right]\chi \\ &= -iV_2(z)\frac{\Delta t}{h^2}(\chi_{j+1}^k + \chi_{j-1}^k - 2\chi_j^k) + iV_3(z)\frac{\Delta t}{h}(\chi_{j+1}^k - \chi_j^k) + \frac{i}{2}\Delta tV_1(z)\chi_j^k\end{aligned}$$

这样将上式代入 (3.2.5) 式，我们在 k 时刻的空间迭代离散格式可写成：

$$\begin{aligned}2\psi_j^k &= \left[-iV_2(z)\frac{\Delta t}{h^2} + iV_3(z)\frac{\Delta t}{h}\right]\chi_{j+1}^k + \left[-iV_2(z)\frac{\Delta t}{h^2}\right]\chi_{j-1}^k \\ &\quad + \left[2iV_2(z)\frac{\Delta t}{h^2} - iV_3(z)\frac{\Delta t}{h} + \frac{i}{2}\Delta tV_1(z) + 1\right]\chi_j^k\end{aligned}\quad (3.2.7)$$

时间维度上的迭代离散格式为

$$\psi_j^{k+1} = \chi_j^k - \psi_j^k \quad (3.2.8)$$

从 (3.2.8) 式看出理论上在给定初始时刻的波函数后，可得到任何时刻的波函数。

接下来的工作主要是找到一个简便的方法来解离散格式 (3.2.7)，通过同一时刻的 ψ_j^k 得到 χ_j^k 的所有值。定义： $a = \frac{\Delta t}{h^2}$ ，(3.2.7) 式可化为如下的三对角简易线性方程：

$$a1_j\chi_{j-1}^k + a2_j\chi_j^k + a3_j\chi_{j+1}^k = 2\psi_j^k \quad (3.2.9)$$

其中：

$$\begin{aligned}a1_j &= -iaV_2(z_j) \\ a2_j &= 2iaV_2(z_j) - V_3(z_j)\frac{i\Delta t}{h} + \frac{i}{2}\Delta tV_1(z_j) + 1 \\ a3_j &= -iaV_2(z_j) + V_3(z_j)\frac{i\Delta t}{h}\end{aligned}$$

我们考虑在 $z = \pm 1$ 处的波函数为零的边界条件，即：

$$\psi_{N+1}^k = 0, \quad \psi_{N+1}^{k+1} = 0, \quad \chi_{N+1}^k = 0$$

它们显然满足 $\psi_{N+1}^{k+1} = \chi_{N+1}^k - \psi_{N+1}^k$, 为求解该三对角方程, 我们假设:

$$\chi_{j+1}^k = \alpha_j^k \chi_j^k + \beta_j^k, \quad j=1,2,\dots,N \quad (3.2.10)$$

显然 $j=N$ 时,

$$\chi_{N+1}^k = 0 = \alpha_N^k \chi_N^k + \beta_N^k \quad (3.2.11)$$

$$a1_N \chi_{N-1}^k + a2_N \chi_N^k + a3_N \chi_{N+1}^k = 2\psi_N^k \quad (3.2.12)$$

方程可化为:

$$\chi_N^k = -\frac{1}{a2_N} a1_N \chi_{N-1}^k - \frac{1}{a2_N} [a3_N \chi_{N+1}^k - 2\psi_N^k] \quad (3.2.13)$$

将 (3.2.11) 式代入到 (3.2.13) 式, 整理后得到:

$$\chi_N^k = -\frac{1}{a2_N + a3_N \alpha_N^k} a1_N \chi_{N-1}^k - \frac{1}{a2_N + a3_N \alpha_N^k} (a3_N \beta_N^k - 2\psi_N^k) \quad (2.3.14)$$

比较 (3.2.13) 和 (3.2.14), 可得到:

$$\begin{aligned} \alpha_N^k &= 0 \\ \beta_N^k &= \chi_{N+1}^k \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

类似地 $j=N, N-1, \dots, 2$ 时, 将 (3.2.10) 代入 (3.2.9) 得出:

$$a1_j \chi_{j-1}^k + a2_j \chi_j^k + a3_j (\alpha_j^k \chi_j^k + \beta_j^k) = 2\psi_j^k$$

也即:

$$\chi_j^k = \gamma_j^k a1_j \chi_{j-1}^k + \gamma_j^k (a3_j \beta_j^k - 2\psi_j^k) \quad (3.2.16)$$

其中:

$$\gamma_j^k = -\frac{1}{a2_j + a3_j \alpha_j^k}$$

比较 (3.2.10) 和 (3.2.16), 可得到:

$$\begin{aligned} \alpha_j^k &= \gamma_{j+1}^k a1_{j+1} \\ \beta_j^k &= \gamma_{j+1}^k (a3_{j+1} \beta_{j+1}^k - 2\psi_{j+1}^k) \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

总之, 定义初始时刻的 ψ_j^1 , α_N^1 , β_N^1 可知, 然后用(17)式和所有的 $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ 值,

通过 (3.2.10) 式就可得到所有的 χ_j^1 ，然后利用所有得到的 ψ_j^1 和 χ_j^1 值通过 (3.2.8) 式可求出下一个时刻的 ψ_j^2 ，继续回代到上面的循环，这样就得到了所有时刻的 ψ_j^k 。

这样我们就完成了数值计算的理论分析，利用 MATLAB 编程就可得到粒子数差 $z(t) = \int \psi^* z \psi dz$ 和涨落 $e(t) = \sqrt{\int \psi^* z^2 \psi dz - \left(\int \psi^* z \psi dz\right)^2}$ 在不同相互作用下的动力学。

为了研究不同初态的 BEC 的动力学，我们定义两种初态 (1) 初态为 Fock 态： $c_k = \delta(k - k_0)$ ， $\Psi(0) = |k_0, N - k_0\rangle$ ，此态在 Fock 态基矢上的展开系数为 $\psi_0(z) = \delta(z - z_0)$ ；(2) 初态为相同单粒子态在 N 粒子下的相干态

$$\Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sqrt{\frac{1+z_0}{2}} a_1^+ + e^{i\phi_0} \sqrt{\frac{1-z_0}{2}} a_2^+ \right)^N |0\rangle,$$

在连续化极限下，此态在 Fock 态基矢上的展开系数趋于高斯函数

$$\psi_0(z) = 4 \sqrt{\frac{N}{2\pi(1-z_0^2)}} e^{-\frac{N(z-z_0)^2}{4(1-z_0^2)}}$$

接下来我们分析这两种初态下的 BEC 的动力学。

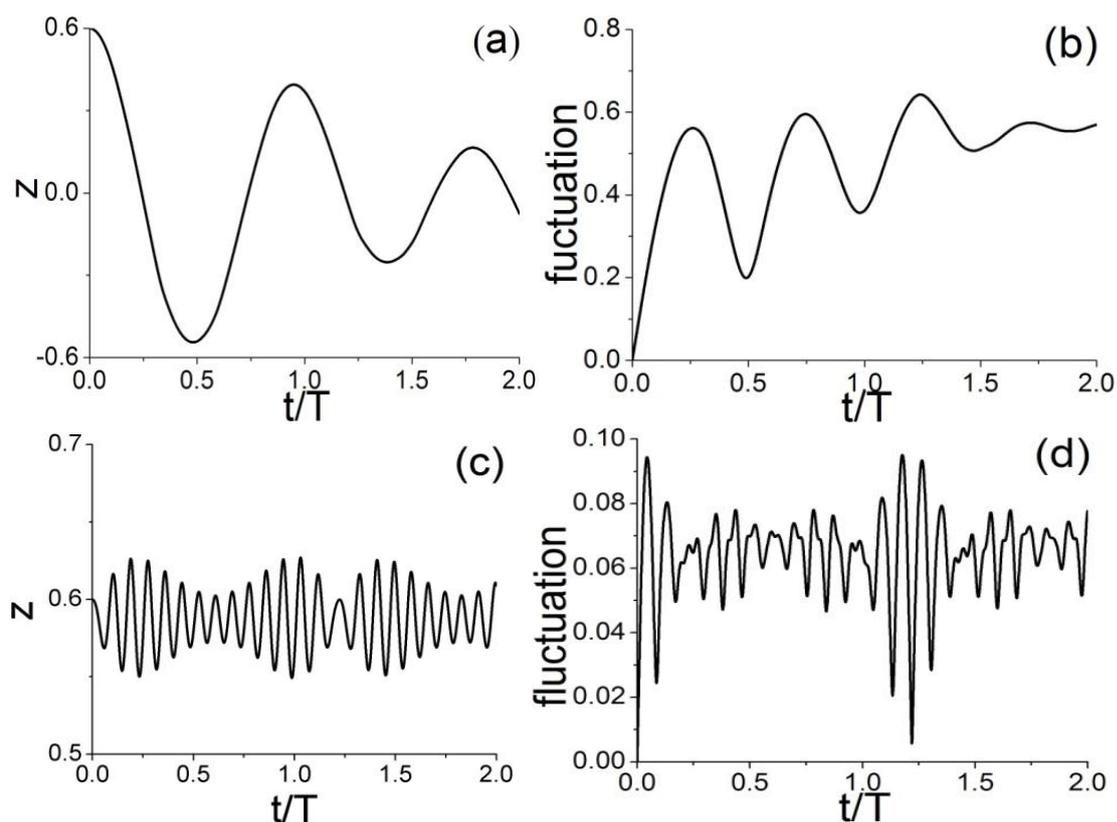


图 3.3 粒子数差 $z(t)$ 和涨落 $e = \sqrt{\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2}$ 随 t/T 的演化图 ($T = \pi J$)。

图 3.3 中表示初态为 Fock 态时粒子数差 $z(t)$ 和涨落 $e(t)$ 随时间的演化的精确解结果，图中对应参数为 $N = 50$ ， $z_0 = 0.6$ ， $\Lambda = 0.5$ (a, b)， $\Lambda = 20$ (c, d)。从图 (3.3-a, b) 可看出在约瑟夫森振荡区域时动力学塌缩越来越明显，涨落逐步增加到很大的值；从图 (3.3-c, d) 可看出在 MQST 区域，动力学在很小的范围振荡，塌缩不太明显，对应涨落保持在很小的值。

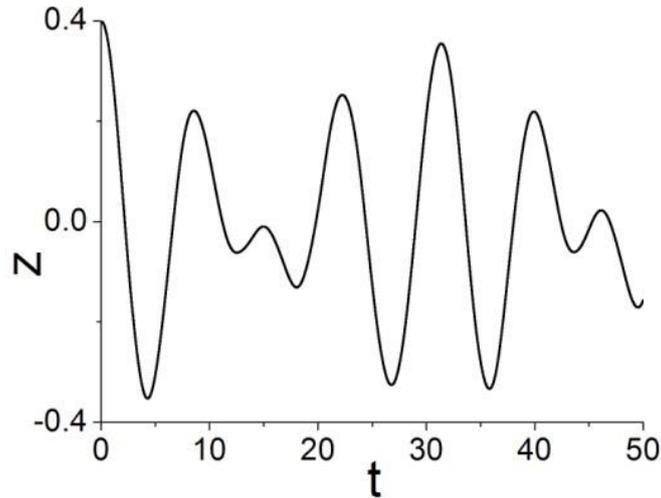
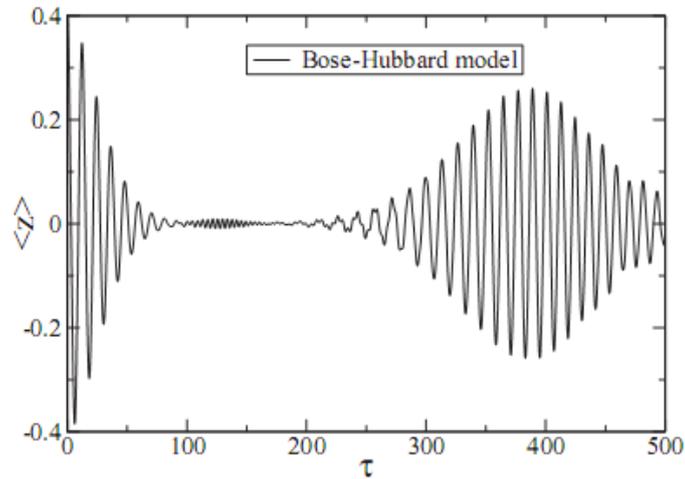

 图 3.4 粒子数差 $z(t)$ 随 t 的演化图 (t/s) ($N=50$)。

 图 3.5 粒子数差 $z(t)$ 随 t 的演化图 (t/s)^[35] ($N=1000$)。

图 (3.4) 表示初态为相干态时 $\Lambda=1$ 粒子数差在时间 $t=50s$ 内的动力学演化的精确解结果 ($N=50$, $z_0=0.4$), 而图 (3.5) 则是初态为相干态时 $\Lambda=1$ 粒子数差在时间 $t=500s$ 内的动力学演化的精确解结果 ($N=1000$, $z_0=0.4$)。从图中我们可看出在动力学演化中不仅有塌缩现象, 还会出现复苏现象, 这也是在半经典近似中看不到的新的动力学特性, 塌缩和复苏时间与总粒子数相关。

总之, 我们通过哈密顿量的玻色-哈伯顿模型的 Fock 态展开发展了一套求解 BEC 隧穿动力学的数值方法, 特别考虑了吸引相互作用下对称双势阱中的情况, 并给出了粒子数差和涨落的动力学演化。从图中我们可以看出 BEC 动力学在约瑟夫森振荡

区域和 MQST 区域的区别，在相干初态情况下发生塌缩-复苏现象，复苏时间和总粒子数有关。

我们利用前面 N 个粒子系统的玻色-哈伯德模型在 Fock 态上展开，考虑吸引相互作用情况的 Fock 态展开系数满足的一维类薛定谔方程 (3.2.4)：

$$i \frac{1}{N} \partial_t \psi = \left(-\frac{2}{N^2} \frac{d}{dz} \sqrt{1-z^2} \frac{d}{dz} + V(z) \right) \psi \quad (3.2.18)$$

$$V(z) = \frac{1}{2} \Lambda z^2 - \sqrt{1-z^2} \quad (3.2.19)$$

对于 $\Lambda < -1$ ， $V(z)$ 会有两个对称的最小值，深度随着 Λ 的增大而减小。两个势阱的间距为 $2\sqrt{1-1/\Lambda^2}$ ，势垒高度为 $\Delta = (1+\Lambda)^2 / (2|\Lambda|)$ 。

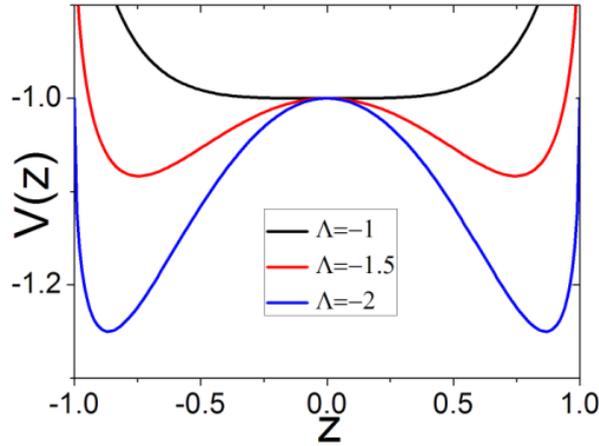


图 3.6 外势 $V(z)$ 在不同的相互作用 Λ 下随 z 变化的图像

因为 $V(z)$ 表现出来的特殊性，我们可以通过用抛物线近似这些最小值来得到系统的能量。

$$V(z) \cong V(z_m) + \frac{1}{2} V''(z_m) (z \pm z_m)^2 \quad (3.2.20)$$

$z_m = \sqrt{1-1/\Lambda^2}$ ， $V(z_m) = \frac{1}{2} \Lambda + \frac{1}{2\Lambda}$ ， $V''(z_m) = \Lambda - \Lambda^3$ 。如果我们再加入一个近似，

即将薛定谔方程右边的第一项中 z 用 z_m 代替，因为波函数 $\psi(z)$ 在最小值 z_m 附近是一个尖锐的波峰。这样的话，定态薛定谔方程可以被写作：

$$\left[-\frac{2}{N^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} (\Lambda^4 - \Lambda^2) (z - z_m)^2 \right] \psi = [-\Lambda E + (1 + \Lambda^2)/2] \psi \quad (3.2.21)$$

它的频谱可对比于谐振子：

$$\frac{\hbar^2}{2m} \rightarrow \frac{2}{N^2}, \quad m\omega^2 \rightarrow \Lambda^2(\Lambda^2 - 1), \quad \hbar\omega/2 \rightarrow -\frac{1}{N}\Lambda\sqrt{\Lambda^2 - 1}$$

从上面的分析可以很容易的得到基态能量^[34]

$$E_{GS} \rightarrow \frac{1}{2\Lambda} + \frac{\Lambda}{2} + \frac{1}{N}\sqrt{\Lambda^2 - 1} \quad (3.2.22)$$

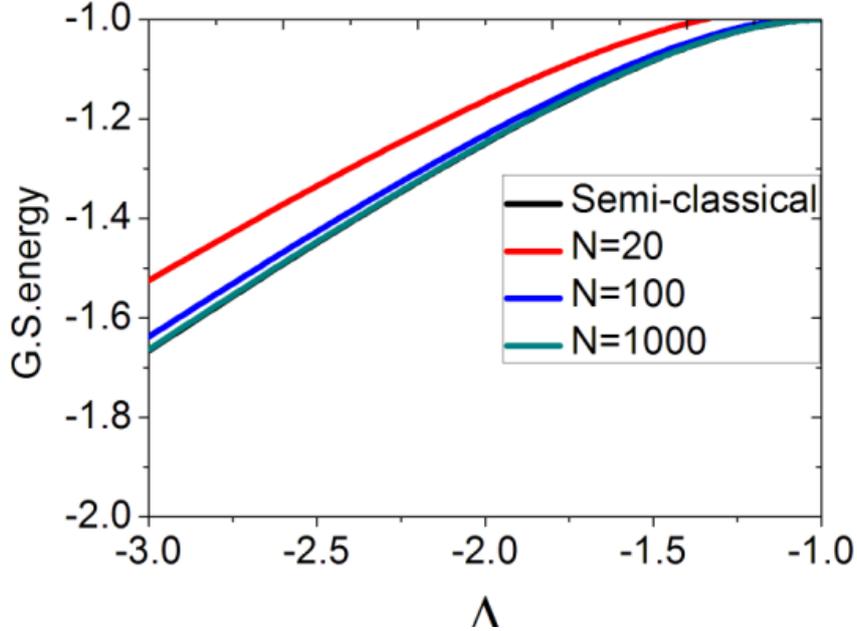


图 3.7 半经典近似得到的基态能量（黑线）和玻色哈伯德模型讨论在不同粒子数下得到的近似基态能量

从图（3.7）中可知，粒子数越大，我们得到的基态能量越接近于半经典近似得到的基态能量，半经典近似是一种大粒子数系统下的一种很好的近似。

3.3 Bose-Hubbard 模型的量子相变

冷原子物理学，比如 BECs 为解决宏观尺度的量子物理学的基本问题提供了有效的基础。弱耦合的玻色气体可以很好地用平均场近似来解释，像 Gross-Pitaevskii（GP）方程。也就是说在一个合适的程度上，量子涨落和关联在一系列的现象里相对来说是不重要的。

平均场近似可以用在平均场解释上加入小的高斯涨落描述来改进。这些涨落用 Bogoliubov-de Gennes 方程来描述，并且很好地在实验和理论上被研究^[36,37]。特殊的来讲，在一些强关联的量子系统比如光晶格中的冷原子或者低维气体中是完全不合

适的。Josephson 机制到 MQST 机制的相变决定于量子关联，为了解决这个问题，我们考虑 Bose-Hubbard 哈密顿量的精确对角化，并且与半经典近似结果作比较，就可看到在相变区域原子远不是相同的单粒子态，而是会出现两个宏观占据单粒子态 (MSPSs)。

双势阱中的 BECs 的动力学因为理论预测粒子数的 Josephson 振荡和 MQST 振荡的出现吸引了很大的注意。在吸引相互作用和排斥相互作用情况下都存在相变。在吸引相互作用 BEC 情况，基态是一个处于合适初始条件的 Schrödinger 猫态，而排斥相互作用情况下，猫态只是出现在能谱的顶端，对于基态并没有出现。在我们的分析中会特别注意到凝聚体的分裂，它是发生在量变机制的强量子关联的直接结果。

我们从 BH 哈密顿量的讨论开始，分析凝聚分数的关系，单体密度矩阵的本征态和哈密顿量本征态的对称性质。用一个简单的双势阱模型中 N 原子的双模 BH 哈密顿量 (1.3.3)：

$$H = -J(\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_2 + \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_1) + \varepsilon(\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1 - \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2) + \frac{1}{2}U[\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1 \bar{a}_1 + \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2 \bar{a}_2]$$

这里 $a_1^+ |n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1 + 1} |n_1 + 1, n_2\rangle$, $a_1 |n_1, n_2\rangle = \sqrt{n_1} |n_1 - 1, n_2\rangle$, 1,2 表示左右势阱。

假设一个小的零点能偏差, $0 < \varepsilon \ll J$, 数值分析上我们考虑 $\varepsilon/J = 10^{-10}$ 。

哈密顿量在 $N+1$ 维的 Fock 基矢空间 $\{|N, 0\rangle, |N-1, 1\rangle, \dots, |1, N-1\rangle, |0, N\rangle\}$ 上对角化, 这里 $|n_1, n_2\rangle = 1/\sqrt{n_1! n_2!} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} |0\rangle$ 。哈密顿量两边同除以 NJ 得到

$$H' = -\frac{1}{N}(\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_2 + \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_1) - \frac{\varepsilon}{NJ}(\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1 - \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2) + \frac{\Lambda}{N^2}[\bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1 \bar{a}_1 + \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2 \bar{a}_2] \quad (3.3.1)$$

系统的动力学性质将由比值 $\Lambda = \frac{NU}{2J}$ 决定, 它可由原子间的相互作用或势垒高度控制。此大粒子数系统波函数定义为 Fock 态的叠加 $|\Psi\rangle = \sum c_k |k, N-k\rangle$, 则势阱粒子数 $N_i = \langle \Psi | a_i^+ a_i | \Psi \rangle$, 分数粒子数差 $z = (\bar{a}_2^\dagger \bar{a}_2 - \bar{a}_1^\dagger \bar{a}_1)/N$ 。观察一个双势阱模型的 N 粒子系统的稳态性质, 它是一个再好不过的选择, 它的变化可以很突出地显示出该系统的相变以及有趣的稳态性质。

为了描述系统在任何时刻的凝聚程度, 我们引进单体密度矩阵 ρ , 对于一个系统波函数 Ψ , $\rho_{i,j} = \langle \Psi | \hat{\rho}_{i,j} | \Psi \rangle$, $\hat{\rho}_{i,j} = a_i^+ a_j$ $i, j = 1, 2$ 。 ρ 的迹归一化到总粒子数 N ,

我们定义它的两个本征态 $\psi_{1(2)}$ 和它的归一化本征值 $n_{1(2)}$, ($n_1 \geq n_2 \geq 0$), 当然我们总是有 $n_1 + n_2 = 1$, n_i 对应于宏观占据态 ψ_i 的凝聚分数。

分析系统在 Fock 态上的展开度可引进函数 $S = -\sum_{k=0}^N |c_k|^2 \log [c_k^2]$, S 是正的有限值, 当然在粒子占据最大态 $c_k^2 = 1/N$ 时有最大值, 在最大局域态 $c_k = \delta_{k,k_0}$ 时为最小值零。

我们首先描绘系统哈密顿量 $H\Psi_\lambda = E_\lambda \Psi_\lambda$ 作为相互作用 Λ 时的本征矢量 $|c_\lambda(k)\rangle^2$ 的频谱^[38]。

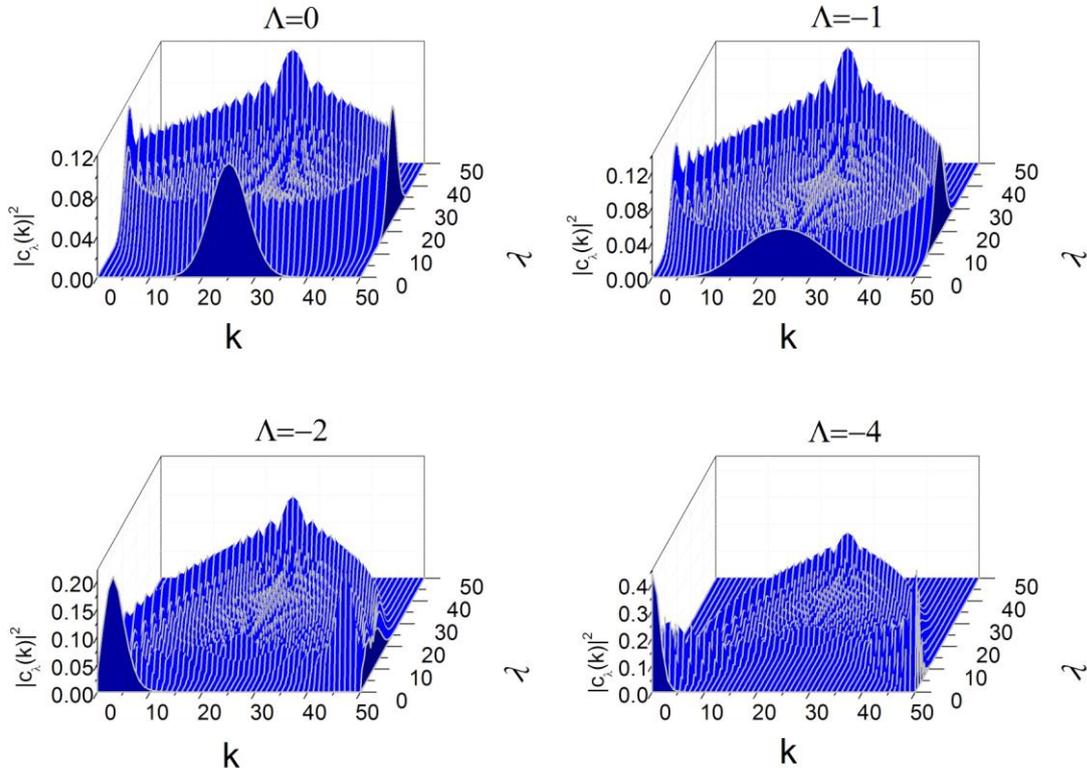


图 3.8 $|c_\lambda(k)\rangle^2$ 密度图, $\lambda=0,1, \dots, 50$ 代表本征态, 例如 $\lambda=0$ 表示基态;

$\Lambda=0, -1, -2, -4, N=50$

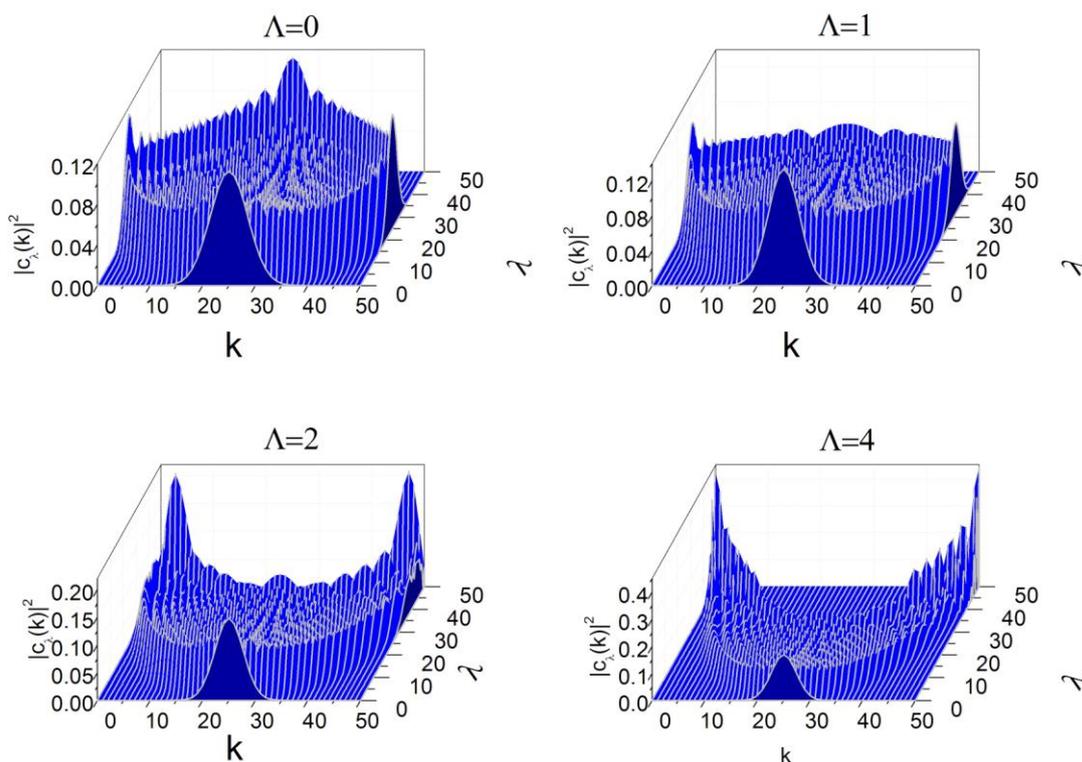


图 3.8 $|c_\lambda(k)|^2$ 密度图, $\lambda=0,1, \dots,50$ 代表本征态, 例如 $\lambda=0$ 表示基态;

$\Lambda=0, 1, 2, 4, N=50$

从图(3.10)中可看出, 我们可详细得到吸引相互作用下的基态具体分析: 当 $\varepsilon=0$ 时, 基态在没有相互作用情况下是对称的二项式分布

$$\Psi_{GS} = 1/\sqrt{N!} \left[(1/\sqrt{2})(a_1^+ + a_2^+) \right]^N |0\rangle.$$

当相互作用增大时, 基态的扩展越大, 然后开始和下一个激发态简并, 它的分布会出现两个不同的波峰, 从而形成猫态。当 $\varepsilon > 0$, 且很小时, 我们增加相互作用后, 前面简并对中的其中一个会发展成一个突出的粒子非平衡状态, 分布的波峰只会出现在 Fock 态的某一区域。这其中重要的是对称性的破缺来源于一个临界的相互作用值, 基态也就自发形成明显的粒子不平衡现象。和以前的分析不同的是我们描绘对称性破缺得到了小的零点能差的帮助。通过这种方法两个简并本征态通过不平衡性就得到了很好的区分, 我们的图强调了在系统从猫态到宏观量子自俘获态演变时的对称破缺现象。排斥相互作用基态情况是类似的: 没有相互作用情况下依然是对称的二项分布, 相互作用增加时, 高斯波包受到一定的挤压, 但仍然保持波包的二项性和 $\langle z \rangle = 0$ 的对称性, 没有出现吸引相互作用下特有的猫态, 以及宏观量子自俘获

现象。

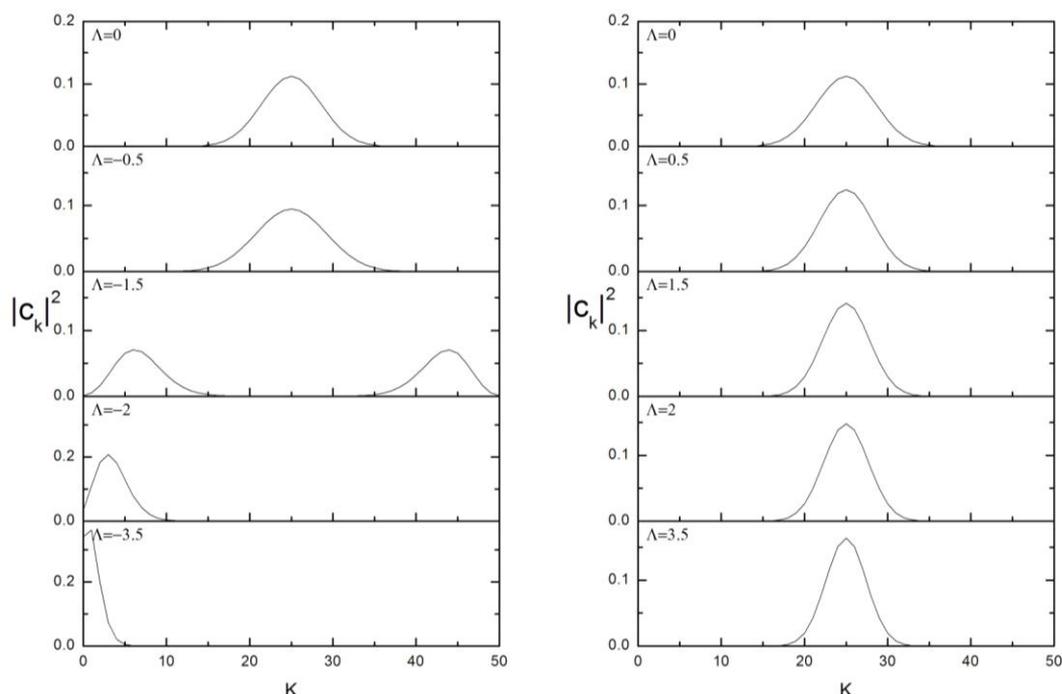


图 3.10 基态频谱 $|c_0(k)|^2$ ，左边 $\Lambda=0, -0.5, -1.5, -2, -3.5$ ；右边 $\Lambda=0, 0.5, 1.5, 2, 3.5$. $N=50$

为了更深层次的研究问题，我们需要研究基态的其他稳态性质。我们利用哈密顿量的精确对角化得到相互作用从吸引变化到排斥过程中基态的一些性质的变化情况，并和半经典近似结果作比较。第一个就是分数粒子数差，从图（3.11）中我们可知在排斥相互作用情况下，精确结果和半经典近似结果基本一样，都基本保持在 $z=0$ 值。这也同时说明排斥相互作用情况下的基态一直保持 $z=0$ 对称的粒子数空间几率分布，只是随着相互作用的增大，分布波包会受到一定的挤压。另外在吸引相互作用情况下，精确结果和半经典近似结果则在某些区域有了明显的区别，精确结果中 z 值直到 $|\Lambda|=2$ 前一直保持在零值，在 Λ 值继续减小时 z 值会突然趋近于 1。而半经典近似结果中在 $|\Lambda|=1$ 时 z 值就已经开始缓慢增加，在 $|\Lambda|=2$ 时 z 值基本趋近于 1。 $|\Lambda|=1$ 之前基态属于超流相， $|\Lambda|=2$ 之后基态属于 Mott-绝缘相， $1 < |\Lambda| < 2$ 相变区域内精确结果和半经典近似结果有很大的差异，这个差异会随着总粒子数 N 的增加而逐渐减小，当然这个差异的由来是因为猫态的出现和态的扩展而引起涨落的突然增大。

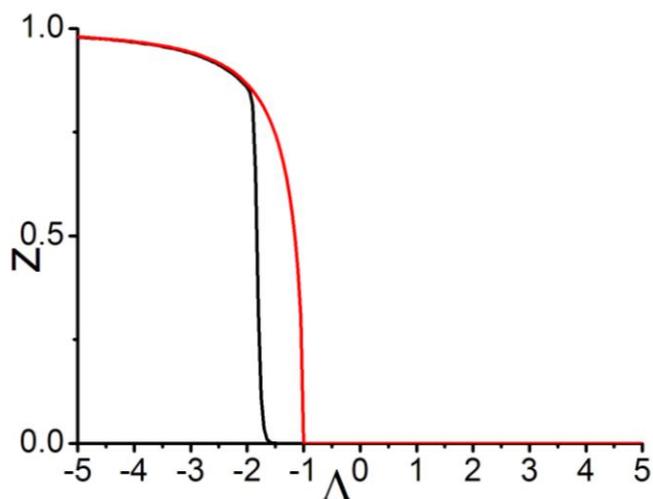


图 3.11 相互作用从吸引变化到排斥过程中基态分数粒子数差 z 的变化。精确结果（黑线），半经典近似结果（红线）。

第二个性质是 Fock 态扩展度 S ，半经典近似结果和 Fock 态没有关系，不能知道其扩展度怎么变化，所以图 (3.12) 只描绘了 S 变化的精确结果，但是我们依然可以通过它解释图 (3.11) 中 z 值的精确结果中的突变，从图中可看出排斥相互作用情况下，扩展度 S 缓慢变化，可解释系统没有发生明显的相变，而在吸引相互作用情况下， $1 < |\Lambda| < 2$ 相变区域态扩展度 S 由于基态猫态的形成而导致扩展度的突变，为相变提供了有效的说服力。

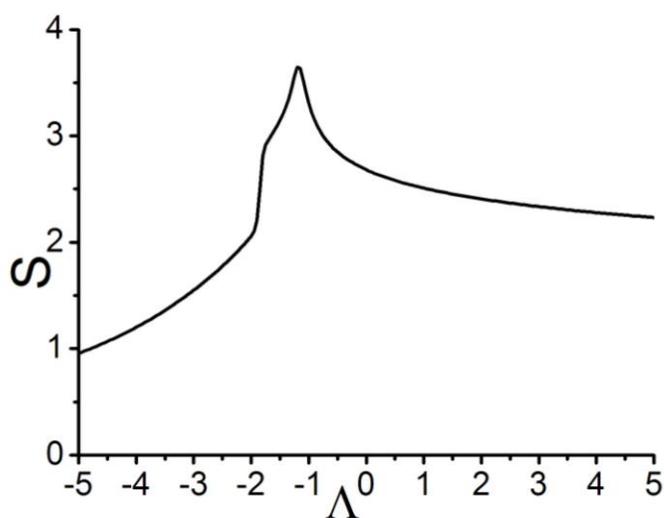


图 3.12 相互作用从吸引变化到排斥过程中基态态扩展度 S 的变化的精确结果。

第三个基态性质是单粒子密度矩阵，由于前面的分析排斥相互作用情况系统的

基态不发生相变，精确结果和半经典近似结果保持一致，所以我们只描绘了吸引相互作用情况下单粒子密度矩阵的变化情况。在半经典近似下，系统保持完全凝聚，并不依赖于相互作用值。而在精确结果中相变区域 $1 < |\Lambda| < 2$ 情况并不是这样的，在这个区域会出现两个 MSPS（宏观占据单粒子态），从而使它不可能很好地用平均场理论解释。

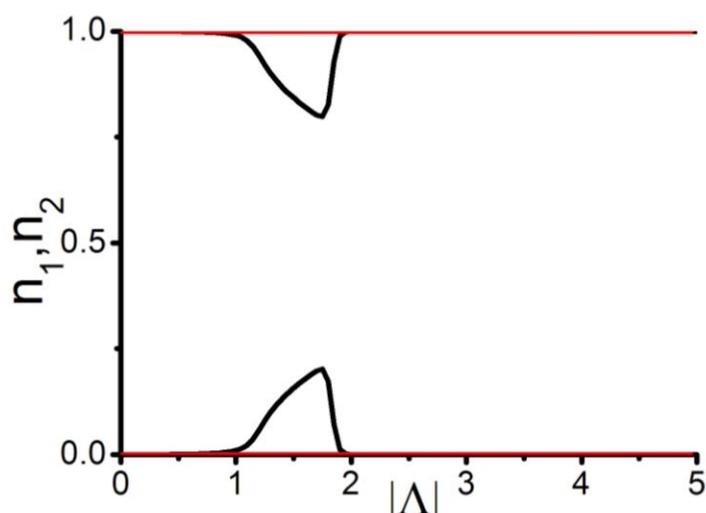


图 3.13 吸引相互作用变化过程中单粒子密度矩阵 n_1, n_2 的变化。精确结果（黑线），半经典近似结果（红线）。

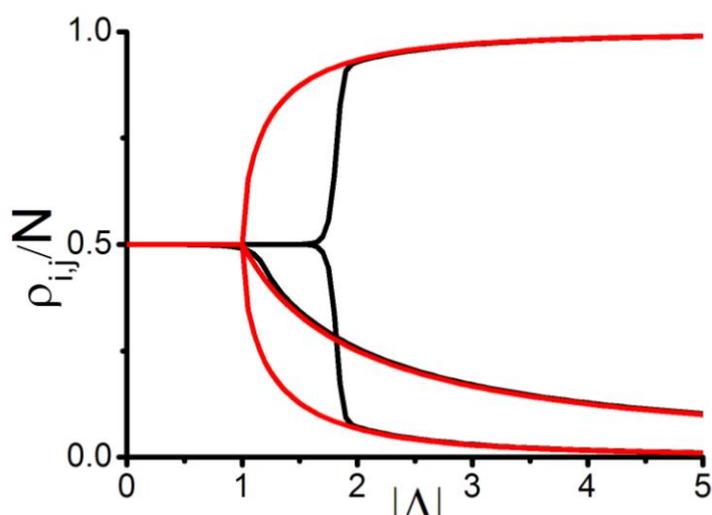


图 3.14 吸引相互作用变化过程中单粒子密度矩阵的矩阵元 n_1, n_2 的变化的精确结果。精确结果（黑线），半经典近似结果（红线）。

单粒子密度矩阵中含有四个矩阵元，我们已经通过单粒子密度矩阵看出相变区域精确结果和半经典近似结果区别的特殊体现，可是为什么它有如此的区别，我们

还需要从单粒子密度矩阵中含有的四个矩阵元来具体分析，从图 (3.14) 中可看出非对角元 ρ_{12} 和 ρ_{21} 的半经典近似结果和精确结果区别是非常不明显的，级数在 1%，近似到可以忽略，而对角元 ρ_{11} 和 ρ_{22} 值却在相变区域 $1 < |\Lambda| < 2$ 时发生了明显的变化，这也正是单粒子密度矩阵在相变区域明显变化的直接原因。

总之，我们仔细观察了不论是吸引还是排斥相互作用下 BEC 的在超流相和 Mott-绝缘相的量子相变特征，找到了两种相互作用情况下 BEC 相变的区别，吸引相互作用情况下 BEC 在不同相中表现出来的性质以及超流相和 Mott-绝缘相过渡的细节问题。从上面的讨论我们认识到相变的性质解决了左右势阱对称性的破缺，而它是由量子涨落所控制，这也正是系统半经典近似描述所欠缺的。

结束语

我们构造三维的双势阱束缚外势，通过将三维 GP 方程转化为一维，并得到了他们的数值结果；接着利用玻色哈伯顿模型的 Fock 态近似，得到了吸引相互作用情况下 BEC 的动力学精确解；最后利用玻色哈伯顿模型哈密顿量的精确对角化，得到了 BEC 的量子相变，将结果与半经典近似结果结果作比较，并以图像说明。

上面我们只是讨论了双势阱模型和近邻格点的玻色哈伯顿模型，如果变换外势模型，比如三势阱，多格点模型，所用到的方法和考虑的束缚和近似条件也将不同，实验上表现出来的性质都将不同；一般来说我们不考虑粒子的自旋，而物理上自旋却是原子的必须的内禀属性，本文讨论时忽略了原子的自旋，如果考虑自旋对原子两个状态的影响，将会有不同的临界条件和判断以及更加复杂的动力学性质，我们还可以在研究以上情形中，加入两种原子的混合，比如双分量，三分量，都将会更有更丰富的物理现象。

参考文献

- [1]BOSE S N. Plank's law and light quantum hypothesis[J]. Z Phys, 1924, 26:178-181.
- [2]EINSTEIN A, SITZUNGSBER K, PREUSS,et al. Phys Math KI,1924,22:261.
- [3]ANDERSON M H, ENSHER J R, MATTHEWS M R, et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor[J]. Science, 1995, 269: 198-201.
- [4]GROSS E P. Structure of a quantized vortex in boson systems[J].Nuovo Cimento, 1961,20: 454-477; J Math Phys, 1963, 4: 195.
- [5]TRUSCOTT G, STRECKER K E, MCALEXANDER W I, PARTRIDGE G B, HULET R G Observation of Fermi pressure in a gas of trapped atoms[J]. Science,2001,291 :2570.
- [6]BO XIONG, JIANGBIN GONG, HAN PU, WEIZHU BAO, BAOWEN LI, Symmetry breaking and self-trapping of a dipolar Bose-Einstein condensate in a double-well potential[J], Phys Rev A,2009,79:013626.
- [7]JOSEPHSON B D. Possible new effects in superconductive tunneling[J]. Phys Lett, 1962,1:251.
- [8]GIOVANAZZI S, SMERZI A, FANTONI S. Josephson effects in dilute Bose-Einstein condensates[J]. Phys Rev Lett, 2000, 84:4521-4524.
- [9]PETHICK C J, SMITH H. Bose-Einstein Condensation In Dilute Gases[M]. Cambridge, England: Cambrige University Press, 2002.
- [10]HENK T C, STOOFF. Bose-Einstein condensation: Breaking up a superfluid[J], Nature,2002,415: 25-26.
- [11]GRAEFE E M, KORSCH H J, Semiclassical quantization of an N-particle Bose-Hubbard model[J], Phys Rev A, 2007, 76, 032116.
- [12]GREINER M, MANDEL O, ESSILINGER T, et al. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices[J]. physica B, 2009,404: 517-520.
- [13]JAKSCH D, BRUDER C, CIRAC J I, et al. Cold bosonic atoms in optical lattices[J]. Phys Rev Lett, 1998, 81: 3108-3111.

- [14]GREINER M, ZWERGER. Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices[J], J Opt B, 2003, 5: S9-S16.
- [15]DUPUIS N, SENGUPTA K, Superfluid to Mott-insulator transition of cold atoms in optical lattices[J]. physica B, 2009, 404: 517-520.
- [16]DALFOVO F, GIORGINI S, PITAEVSKII L P, et al. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases[J], Rev Mod Phys, 1999, 71: 463-512.
- [17]ANKER TH, ALBIEZ M, GATI R, et al. Nonlinear self-trapping of matter waves in periodic potentials[J]. Phys Rev Lett, 2005, 94: 020403(4).
- [18]ALBIEZ M, GATI R, FOLLING J, et al. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95: 010402(4).
- [19]LEVY S, LAHOUD E, SHOMRONI I. The a.c. and d.c. Josephson effects in a Bose-Einstein condensate[J], Nature, 2007, 449: 579-583.
- [20]INOUE S, ANDREWS M R, STENGER J, et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate[J], Nature 1998, 392: 151-154.
- [21]ANANIKIAN D, BERGEMAN T. Gross-Pitaevskii equation for Bose particles in a double well potential:Two mode modes and beyond[J]. Phys Rev A, 2006, 74: 039905(E).
- [22]ROBERTS J L, CLAUSSEN N R, CORNISH S L, et al. Controlled collapse of a Bose-Einstein condensate[J]. Phys Rev Lett, 86: 4211-4214.
- [23]SMERZI A, FANTONI S, GIOVANAZZI, et al. Quantum coherent atomic tunneling between two trapped Bose-Einstein condensates[J]. Phys Rev Lett, 1977, 79: 4950-4953.
- [24]MILBURN G J, CORNEY J, Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential[J]. Phys Rev A, 1997, 55:4318-4324.
- [25]RAGHAVAN S, SMERZI A, FANTONI S, et al. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates:Josephson effects, π oscillations, and macroscopic quantum self trapping[J]. Phys Rev A, 1999, 59: 620-633.
- [26]JULIA-DIAZ B, MARTORELL J, MELE-MESSEGUER M, POLLS A, Beyond standard two-mode dynamics in bosonic Josephson junctions[J]. Phys Rev A, 2010,82:063626.

- [27] CHAOHONG LEE, WENHUA HAI, LEI SHI, XIWEN ZHU, KELIN GAO, Chaotic and frequency-locked atomic populational oscillations between two coupled Bose-Einstein condensates[J], Phys Rev A, 2001,64:053604.
- [28] GIOVANNI, MAZZARELLA, LUCA SALASNICH, Spontaneous symmetry breaking and collapse in bosonic Josephson junctions[J]. Phys Rev A, 2010, 82:033611.
- [29] SALASNICH L, PAROLA A, REATTO L, Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates[J], Phys Rev A, 2002, 65:043614.
- [30] GIOVANNI MAZZARELLA, MACRO MORATTI, LUCA SALASNICH, MARIO SALERNO, FLAVIO TOIGO, Atomic Josephson junction with two bosonic species[J], J. Phys. B:At. Mol.Opt. Phys. 42(2009) 125301.
- [31] KHAN W. MAHMUD, HEIDI PERRY, WILLIAM P. REINHARDT, Quantum phase-space picture of Bose-Einstein condensates in a double well[J], Phys Rev A, 2005, 71:023615.
- [32] SPEKKENS R W, SIPE J E. Spatial fragmentation of a Bose-Einstein condensate in a double-well potential[J], Phys Rev A, 1999, 59: 3868-3877.
- [33] SHCHESNOVICH V S, TRIPPENBACH M, Fock-space WKB method for the boson Josephson model describing a Bose-Einstein condensate trapped in a double-well potential[J]. Phys Rev A, 2008, 78:023611.
- [34] JULIA-DIAZ B, MARTORELL J, POLLS A, et al. Bose-Einstein condensates on slightly asymmetric double-well potentials[J]. Phys Rev A, 2010, 81, 063625.
- [35] KRZYSZTOF PAWLOWSKI, PAWEL ZIN, KAZIMIERZ RZAZAWSKI, MAREK TRIPPENBACH, et al. Revivals in an attractive Bose-Einstein condensate in a double-well potential and their decoherence[J]. Phys Rev A, 2011, 83:033606.
- [36] JAVANAINEN J, IVANOV M YU, et al. Splitting a trap containing a Bose-Einstein condensate: Atom number fluctuations[J]. Phys Rev A 1999, 60, 2351.
- [37] ZIN P, CHWEDENCZUK J, OLES B, SACHA K, TRIPPENBACH M, et al. Critical fluctuations of an attractive Bose gas in a double-well potential[J]. Euro. Phys. Lett. 2008, 83, 64007.
- [38] JULIA-DIAZ B, DAGNINO D, LEWENSTEIN M, MARTORELL J, POLLS A, et al.

Macroscopic self-trapping in Bose-Einstein condensates: Analysis of a dynamical quantum phase transition[J]. Phys Rev A, 2010,81:023615.

致谢

光阴荏苒，研究生阶段的学习生活即将结束。在理论物理所这个大家庭里，导师们兢兢业业，献身科学的精神在我心中刻下了永久的印记。很高兴自己能在这片浓厚的科研氛围和良好的工作环境中学习成长。

感谢我的导师张云波教授，在张老师的细心指导下，我充分认识到了所学专业的重要性，不仅从理论上弥补了自己以前认识的不足，深化了对专业知识的理解，而且学到了书本上没有的只是，开阔了自己的事业。这些知识的储备都为本文的写作打下了坚实的基础。从论文的选题，调研到最后的完成和修改，张老师都付出了大量的心血和智慧。导师学识渊博，治学严谨，高尚的师德，平易近人的作风都是我人生的楷模。衷心感谢张老师对我的悉心关怀和谆谆教诲！谢谢您的信任和鼓励！

感谢理论所梁九卿教授，聂一行教授，李卫东教授，李禄教授，阎维贤教授，李志坚教授，张素英教授等老师的关心和帮助，让我受益匪浅。

感谢师姐郭利平，王红梅，李花，梁晋菊和师兄张杰，梁成功，每当遇到学习上的问题，总是能够得到他们热情的帮助。感谢我的学友李甜甜，刘太丰等人，很高兴能与他们一起走过这三年难忘的学习生活。感谢学弟白守燕，学妹王娟，万鹏宇，刘艳霞，正是因为有了大家积极的参与，小组的讨论才更精彩，迸发出许多思维的火花。

感谢我学习生活了三年的母校——山西大学！

张小欧

2012年5月 太原

个人简历

姓名：张小欧

性别：男

籍贯：山西长治

学习经历：2009.9-2012.7 山西大学理论物理研究所攻读硕士学位

E-Mail: zhangxiaou1102@163.com

承诺书

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

学位论文作者（签章）

年 月 日

学位论文使用授权说明

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