



山西大學
Shanxi University

2019 届硕士学位论文

一维玻色费米混合物中的
Grüneisen参数

作者姓名	薛娅婷
指导教师	张云波 教授
学科专业	理论物理
研究方向	冷原子物理
培养单位	物理电子工程学院
学习年限	2016 年 9 月至 2019 年 6 月

二〇一九年六月

山西大学
2019 届硕士学位论文

一维玻色费米混合物中的 **Grüneisen**参数

作者姓名	薛娅婷
指导教师	张云波 教授
学科专业	理论物理
研究方向	冷原子物理
培养单位	物理电子工程学院
学习年限	2016 年 9 月至 2019 年 6 月

二〇一九年六月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2019

The Grüneisen Parameter in One-Dimensional
Bose-Fermi Mixture

Student Name	Yating Xue
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Theoretical Physics
Specialty	Cold Atomic Physics
Department	School of Physics and Electronic Engineering
Research Duration	2016.09-2019.06

June, 2019

目 录

中文摘要	I
ABSTRACT	III
第一章 绪论	1
1.1 一维超冷原子气体的实验进展	1
1.2 Bethe Ansatz 方法简介	3
1.3 玻色费米混合物的发展	4
1.4 Grüneisen 参数的简介	5
1.5 相变及量子临界点	7
1.6 本文内容	9
第二章 Lieb-Liniger 模型中的 Grüneisen 参数	11
2.1 Grüneisen 参数的定义	11
2.2 Lieb-Liniger 模型简介	13
2.3 Lieb-Liniger 模型中的 Grüneisen 参数	14
2.4 小结	18
第三章 玻色费米混合物中的 Grüneisen 参数	19
3.1 玻色费米混合物的理论模型	19
3.2 玻色费米混合物中的 Grüneisen 参数	21
3.2.1 Grüneisen 参数	22
3.2.2 磁化 Grüneisen 参数	23
3.3 玻色费米混合物的量子临界性	27
3.4 小结	29
第四章 总结与展望	31
附录 A	33
附录 B	35

参考文献	43
攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目	49
致谢	51
个人简况及联系方式	53
承诺书	55
学位论文使用授权声明	57

Contents

Chinese Abstract	I
ABSTRACT	III
Chapter 1 preface	1
1.1 Experimental progress of one-dimensional ultracold atomic gas	1
1.2 Introduction to Bethe Ansatz method	3
1.3 Bose-Fermi mixture.....	4
1.4 Brief introduction of Grüneisen parameter	5
1.5 Phase transition and quantum critical point.....	7
1.6 The content of this thesis	9
Chapter 2 Grüneisen parameter in the Lieb-Liniger model	11
2.1 Definition of Grüneisen parameter.....	11
2.2 Lieb-Liniger model.....	13
2.3 Grüneisen parameter in the Lieb-Liniger model	14
2.4 Conclusion.....	18
Chapter 3 Grüneisen parameter in the Bose-Fermi mixture	19
3.1 Bose-Fermi mixture model.....	19
3.2 Grüneisen parameter in the Bose-Fermi mixture	21
3.2.1 Grüneisen parameter.....	22
3.2.2 Magnetization Grüneisen parameter	23
3.3 Quantum criticality of Bose-Fermi mixtures.....	27
3.4 Conclusion.....	29
Chapter 4 Summary and outlook	31
Appendix A	33
Appendix B	35

References	43
Research achievements	49
Acknowledgements	51
Personal profiles	53
Letter of commitment	55
Authorization statement	57

中文摘要

近年来，一维冷原子气体在实验和理论上都引起了广泛的研究，超冷玻色子和费米子也得到了人们的关注。通过在一维势阱中加载冷原子，并通过 Feshbach 共振调节有效相互作用，可以模拟在整个相互作用范围内的一维相关系统中奇异的量子多体现象。超冷原子在低维空间的精确调控性为研究和测试精确可解多体系统理论提供了前所未有的机会，其中包括 Tonks-Girardeau(TG)气体、超 Tonks-Girardeau 气体、冷原子的 Yang-Yang 热力学等方面的显著实验进展。特别有趣的系统是玻色-费米混合物系统，这种混合物在自然界中很少发生，随着激光冷却和光捕获技术的发展，在实验中已经可以实现。鉴于实验进展，从理论上研究一维玻色-费米混合物的热力学性质是十分必要的。

量子临界性是凝聚态物理中最具挑战性的问题之一。为了提取正确的普适标度函数，在量子临界状态下控制适当的热涨落和量子涨落，需要对有限温度热力学物理量进行精确地研究。基于实验和理论上对重费米子材料关于 Grüneisen 参量 (Grüneisen parameter, 简称 GP) 的研究进展，为了描述体系不同的相，本文主要运用 GP 研究一维可积系统的相变及其在量子临界点的性质。我们主要运用数值迭代的方法得到热力学 Bethe Ansatz(TBA)方程，通过数值积分得到压强 p ，最后得到用压强表示的 GP。文章首先介绍了 Lieb-Liniger 模型中的 GP，发现该参量在强相互作用和弱相互作用区域具有理想玻色气体和理想费米气体的性质，因此该参数趋于常数 2。接下来我们研究了在玻色费米混合物系统中 GP 和磁化 GP 的性质，发现两者在玻色-混合相和费米-混合相两个相变点附近都会发生剧烈变化，但具有不同的行为特征，因此，可以作为实验和理论上研究相变的一个有力工具。最后研究了热力学量的二阶导（比如压缩率，磁化率等）在量子临界点的行为，发现当温度趋于零时，压缩率和磁化率有发散行为，且不同温度下都交于相变点，这是由于发生相变时态密度的改变而导致的。热力学性质的普适标度行为很好地描述了量子临界现象。

关键词：玻色费米混合物；Grüneisen 参数；相变；量子临界性

ABSTRACT

One-dimensional cold atomic gases have attracted intensive studies both experimentally and theoretically, mixtures of ultracold bosonic and fermionic atoms have also attracted much attention. By loading cold atoms in one-dimensional (1D) potential well and tuning the effective interactions by Feshbach resonance, it is possible to simulate striking quantum many-body phenomena in 1D strongly correlated systems in the whole regime of interaction strength. The exquisite tunability with ultracold atoms confined to low dimensions has provided unprecedented opportunities for investigating and testing the theory of exactly solvable many-body systems. These include remarkable experimental progress in the realization of Tonks-Girardeau (TG) gas, super-Tonks-Girardeau gas, Yang-Yang thermodynamics for ultracold atoms. Of particular interest is the Bose-Fermi mixture system, which is rare in nature and has been made experimentally possible with the development of laser cooling and light capture techniques. In view of the experimental progress, it is necessary to study the thermodynamic properties of 1D Bose-Fermi mixture theoretically.

Quantum criticality is among the most challenging of problems in condensed-matter physics. In order to extract correct universal scaling functions, which control proper thermal and quantum fluctuations at quantum criticality, a high precision of the finite-temperature thermodynamics is desirable. Based on the experimental and theoretical research progress on the Grüneisen parameters (GP) of heavy Fermion materials, in order to describe the different phases of the system, in this thesis, the phase transition of 1D integrable systems and the properties of quantum critical points are studied by using GP. We obtain the thermodynamic Bethe Ansatz (TBA) equation by numerical iteration method, and obtain the pressure by numerical integration. Finally, we get the GP expressed by pressure. In this thesis, the GP in Lieb-Liniger model is introduced, firstly. It is found that there are ideal Bose gas and Fermi gas in the strong and weak interaction region, which makes the

parameter tend to be constant 2. Next, we study the properties of GP and magnetized GP in a Bose-Fermi mixture system. It is found that both of them change dramatically near the transition points of bose-mixture phase and Fermi-mixture phase, but have different behavior characteristics. Therefore, they can be used as a powerful tool for experimental and theoretical study of phase transition. Finally, the behavior of the second derivative of thermodynamic quantities (such as compressibility, susceptibility, etc.) at the quantum critical point is studied, and it is found that the compressibility and magnetization have divergent behaviors when the temperature approaches zero, and they all intersect at the phase transition point at different temperatures, which is caused by the change of phase transition temporal density. The universal scaling behavior of thermodynamic properties describes primely quantum critical phenomena.

Key words: Bose-Fermi mixture; Grüneisen parameters; Phase transition; Quantum criticality

第一章 绪论

1.1 一维超冷原子气体的实验进展

在理论物理中，相对于高维系统来说，一维多体系统理论上处理起来相对简单些，其物理性质不同于三维系统。由于近年来冷原子方面量子调控和精密操控技术的飞速发展，使得越来越多的低维量子多体现象在实验上被人们观察到。2001年，美国 Ketterle 小组在实验上率先采用磁阱束缚凝聚体的方法实现了“雪茄”状玻色-爱因斯坦凝聚(Bose-Einstein condensation, 简称 BEC)^[1]。2004年，Weiss 小组以 ^{87}Rb 为对象在实验上观察到一维的 TG 气体^[2]。2008年，Amerongen 等人在原子芯片上制备了处于 $|F=2, m_F=2\rangle$ 的 ^{87}Rb 的准一维量子气体，该实验得到的密度分布与基于 Yang-Yang 热力学公式得到的结果符合得很好，第一次证实了由 Bethe ansatz(BA)方法发展而来的 Yang-Yang 热力学公式^[3]。

基于之前科学家们以两个具有相互作用并处于相反自旋状态的超冷费米气体为研究对象，观测到了它们可以形成具有玻色性质的 Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)对，2010年，Liao 在测量 ^6Li 原子气体有限温度密度分布的技术上有突破性进展^[4]，他们发现，由于费米子配对现象的存在，超冷费米气体在吸引相互作用和排斥相互作用情况下的相图完全不同，同时，他们的实验也很好地验证了可积模型的精确解所预言的零温相图^[5,6]。

2016年8月，中国科大潘建伟及其团队在国际上首次实现了对光晶格中超冷原子自旋比特纠缠态的产生、操控和探测，向基于超冷原子的可扩展量子计算和量子模拟迈出了至关重要的一步^[7]。该研究团队首先把 ^{87}Rb 超冷原子 BEC 装载到三维光晶格中的一层，再利用蒸发冷却将原子降到低于 10 纳开的超低温，并实现了这层二维晶格中的超流态到 Mott 绝缘态的量子相变，从而获得了每个格点上有且只有一个原子的人工晶体。研究人员创造性地开发了具有自旋依赖特性的超晶格系统，形成了一系列并行的双阱势，并且在每个双阱势中用光场产生了有效磁场梯度，结合微波场，实现了对超晶格中左右格点及两种原子自旋等自由度的高保真度量子调控。该团队还研发了一种光学分辨约为 1 微米的超冷原子显微镜，该显微镜可以对这层晶格中的原子进行高分辨率和高灵敏度的原位成像。通过以上关键实验技术的突破，该研究团队获得了光晶格中超冷原子量子调控能力的大幅提升，从而首次在光晶格中并行制备并测控了约 600 对超冷原子比特纠缠对。

紧接着,2017年10月潘建伟教授及其同事苑震生等与中科院武汉物理与数学研究所研究员管习文小组合作,通过对光晶格中的超冷原子进行量子调控和测量,结合量子可积系统理论,在国际上首次得到了一维有限温多体系统在经典气体和量子液体之间转变的量子临界性质,并通过测量其相位关联观测到了拉亭杰液体的幂定律关联特性,在低维量子多体系统研究领域取得了重要进展^[8]。该工作实验和理论结合,提供了研究低维量子系统的新实验方法,将推动低维量子模拟领域的研究进展。该工作得到了审稿人的高度评价:“这是一个高质量的、里程碑式的一维物理系统研究工作,不仅局限在超冷量子气体中,而将在其它物理体系中具有广泛的应用价值。”

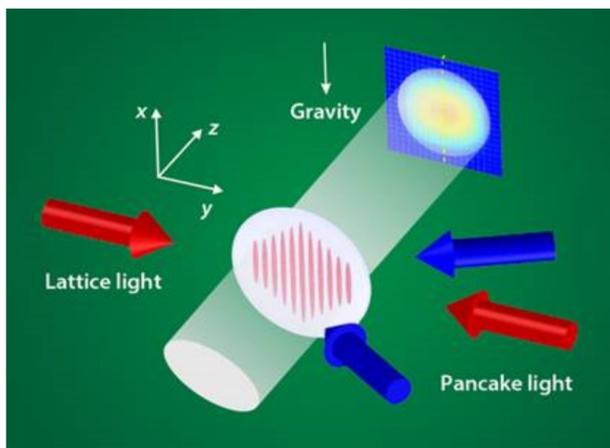


图 1.1 观测一维量子多体相变和拉亭杰液体的超冷原子实验装置示意图^[8]。

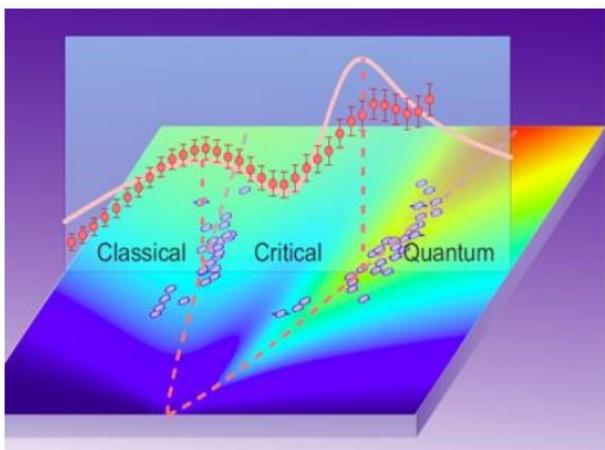


图 1.2 一维量子多体系统相图^[8]。

实验捕获和冷却原子气体的一系列进展,展示了量子力学的优美和精妙,特别

是近年来一维超冷原子的实验使得人们可以更进一步了解并研究低维量子多体系统的量子统计和动力学，一维超冷原子气体在“原子芯片”中的实验实现具有重要的意义，比如对显微技术，原子干涉仪，全息摄影技术，以及量子信息处理等领域的发展有深远的影响。

1.2 Bethe Ansatz 方法简介

在多体物理中，有一类模型是可以严格求解的，这一类模型通常被称为可积模型。可积性的概念最早来源于经典力学，一个经典力学系统一般可以用一组微分方程来描述，通过求解这组微分方程，如果我们能找到和系统自由度个数相同的独立守恒量，则可以说这个系统是完全可以积的。

对于量子可积性概念的理解，要追溯到 1931 年，Hans Bethe 为精确求解一维海森堡自旋链(考虑近邻相互作用)的能量本征值问题，他构造了一种特殊形式的波函数，即将波函数写成一维自旋链上所有可能平面波的叠加^[9],

$$\psi = \sum_P A(P) e^{i(k_{P_1} x_1 + \dots + k_{P_N} x_N)}, \quad (1.1)$$

其中， N 是自旋向下的粒子数目， P_1, \dots, P_N 表示对于 $1, 2, \dots, N$ 的一个确定排列，所以上述波函数是 $N!$ 个平面波的叠加， k_i, x_i 分别表示波矢和坐标，Bethe 的假设提出后，并未引起大家的关注，直到 30 多年后，H. Lieb 和 W. Liniger 利用 Bethe Ansatz (BA) 第一次精确求解了一维 δ 相互作用的玻色气体^[10]。一维 δ 相互作用的玻色气体的精确解，是由一系列满足 BA 方程的波数 $k_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 给出，该方程称为 Lieb-Liniger 方程。量子可积模型的重要性体现在，BA 方程的解可帮助人们精确地理解多体系统中诸多物理现象，如量子统计，热力学，量子流体，量子关联及量子临界现象等等。通常能够精确求解的物理体系包括自旋链，相互作用量子气体，强关联电子系统，Kondo 杂质问题，Gaudin 磁性链等等。

基于 H. Lieb 和 W. Liniger 在 1963 年的工作，杨振宁和杨振平于 1969 年成功解决了该模型的有限温度热力学问题，首次给出了 Lieb-Liniger 模型在平衡态下的巨正则统计物理描述，建立了 Yang-Yang 热力学。这是第一次真正意义上严格求解了一个有相互作用的多体系统的热力学问题。具体思想是，在有限温情况下，系统平衡态存在很多微观态，通过引入熵，并利用最小化吉布斯自由能给出系统满足的 Yang-Yang 方程，即热力学 BA (TBA) 方程。由 Yang-Yang 热力学方程就可得到

Lieb-Linger 模型中的诸如压强，密度，压缩率，磁化率，等所有热力学量^[11]。这就是本文中所用到的 Yang-Yang 热力学方法。

近年来，数值方法被运用到 TBA 方程的求解中，例如两分量 δ -相互作用的玻色气体^[11]，玻色费米混合物气体等，这些数值结果与实验十分吻合，使我们能更进一步了解 TBA。2009 年，管习文及其合作者 Batchelor 等利用 polylog 函数精确求解了一维玻色气体在强相互作用极限下的 Yang-Yang 热力学方程^[12]，得到了一系列体系在低温下的量子临界性标度方程。2012 年，尹相国等人用 polylog 函数渐近展开方法精确求解了玻色费米混合物系统在强相互作用极限下的 Yang-Yang 热力学方程^[13]。最近几年，管习文，Batchelor 等利用 Yang-Yang 热力学方法在研究量子临界现象，量子关联，Luttinger 液体性质等方面都做出了突出性的贡献^[14]。

1.3 玻色费米混合物的发展

众所周知，自然界的粒子按照自旋的不同被分成了两类。凡自旋为 \hbar 的半奇数倍粒子 ($s = \hbar/2, 3\hbar/2, 5\hbar/2, \dots$) 波函数对于交换两个粒子总是反对称的，例如，电子、质子及中子等。这些粒子服从费米狄拉克分布，被称为费米子；凡自旋为 \hbar 的整数倍粒子 ($s = 0, \hbar, 2\hbar, \dots$) 波函数对于交换两个粒子总是对称的，如 π 介子、光子，这类粒子遵守玻色爱因斯坦统计，因而被称为玻色子。但自然界不存在它们的混合物。近年来，由于激光冷却技术得到了长足的发展，2001 年，几个实验小组将玻色子 ${}^7\text{Li}$ 和费米子 ${}^6\text{Li}$ 束缚在磁阱中进行蒸发冷却，最终使费米子冷却到费米温度 T_F 的 0.21 倍^[15,16]。同时，由于玻色子 ${}^7\text{Li}$ 的存在，可以说他们实现了由玻色费米混合物组成的量子气体。

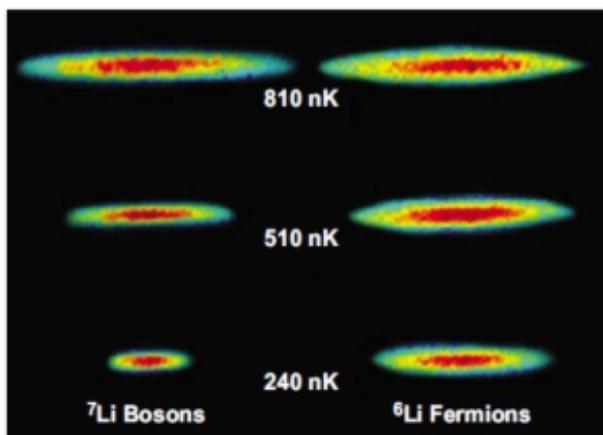


图 1.3 同时冷却的玻色子 ${}^7\text{Li}$ 和费米子 ${}^6\text{Li}$ 的密度分布^[15]。费米压阻碍了费米子在空间的凝聚。

2006年, K. Gunter 等人在三维光晶格中研究了费米子 ^{40}K 和玻色子 ^{87}Rb 的混合物。通过研究物质波干涉图样的可见性和玻色子的相干长度, 观察到费米子种类的不断增多降低了玻色子的相位相干性。并通过对晶格中非相互作用的玻色费米混合物的热力学分析, 提出了晶格中费米子交感冷却的机制^[17]。

2011年, 德国科学家 J. Heinze 和 S. Götze 等人对超冷费米子在光晶格中的能带激发和隧穿特性进行了详细的实验研究。利用一种新的费米子多能带光谱技术, 可以高精度地测量费米子的全能带结构和隧穿能。在一个具有吸引相互作用的玻色子费米混合物中, 由于原子的自陷作用引起晶格深度的增加, 导致费米子隧穿能量的显著降低^[18]。

随着冷原子系统实验技术的进步, 最近实验上已经成功实现了玻色与费米混合系统的超流。2017年, 翟荟以及中国科学院武汉物理与数学研究所副研究员姜玉铸等证明了当费米超流体从 BCS 区域调谐到 BEC 区域时, 玻色费米超流体混合物中的涡旋晶格结构会经历一系列的结构转变。这是由于在 BCS 和 BEC 区域中, 费米超流体的涡核结构存在差异。因此, 随着玻色与费米超流体之间的密度相互作用, 两组涡旋晶格在 BEC 区域中的相互作用增强, 从而产生涡旋晶格的结构转变^[19]。

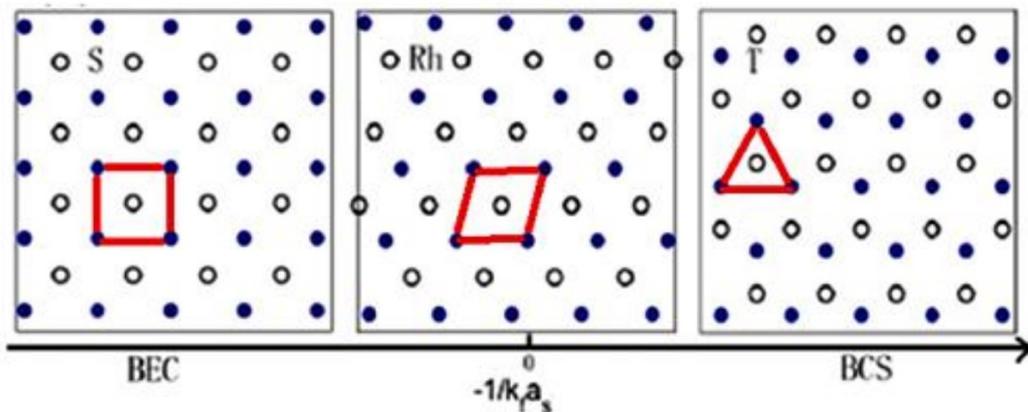


图 1.4 BEC-BCS 过渡中, 涡旋经历了三个不同的集合结构相变: 从正方形到平行四边形, 再到三角形格子^[19]。

1.4 Grüneisen 参数的简介

1908年, Eduard Grüneisen 在研究晶格体积变化对其振动频率的影响时引入了一个无量纲参数, 即 Grüneisen 参数(GP)^[20,21], 它与声子频率对体积的导数有关, 在物理学的各个领域都得到了广泛的研究。例如, 在爱因斯坦模型中, 固体中的激发用 N

个相同频率 ω_0 的声子来描述，定义为^[20,21]

$$\Gamma \equiv -\frac{V}{\omega_0} \frac{\partial \omega_0}{\partial V}, \quad (1.2)$$

其中 V 是系统的体积，该式用来刻画体系中体积的改变对频率振动特性的影响。事实上，不同的物理现象与 GP 的不同定义有关，但它们却具有相同的起源。

虽然在固体地球物理^[22,23]、化学物理^[24]、高压物理和等离子体物理^[25,26]等领域 GP 已经被广泛地研究，但其在冷原子系统中的行为，如冷原子气体、量子气体中的行为却很少有人关注。这很可能是由于在这些系统对热膨胀 β 和比热 C_V 进行高精度测量都十分困难造成的。直到 2003 年，德国物理学家 R. Küchler 等人在实验上通过利用位于量子临界点附近的 CeNi_2Ge_2 和 $\text{YbRh}_2(\text{Si}_{0.95}\text{Ge}_{0.05})_2$ 测量了低温下的体积热膨胀 β 和比热 C_V 。对于这两种系统，发现热膨胀 β 显示出比 C_V 更强的温度依赖性，因此随着温度 $T \rightarrow 0$, $\Gamma \propto \beta / C_V$ 趋于发散^[27]。后来，有人用 $\text{CeIn}_{3-x}\text{Sn}_x$ ($0.55 \leq x \leq 0.8$) 单晶体也研究了低温热膨胀和 GP^[26]。

2013 年，A. Steppke 等人发现在重费米子金属铁磁体 $\text{YbNi}_4(\text{P}_{0.92}\text{As}_{0.08})_2$ 的量子临界点附近存在着非常规超导性和其他以前未知的物质相：物质在绝对零度时的连续相变。并通过精密的低温测量发现该材料在冷却到 $T = 0$ 时对压力的微小变化极为敏感，这种压力敏感性体现在 GP 值的高度增强上，这将对量子临界材料的研究产生很大的影响^[28]。

2016 年，德国物理学家 P. Gegenwart 在实验中以重费米子金属材料 CeCu_2Si_2 为研究对象，因为其低温下的物理性质以 f 电子及其与传导电子的反铁磁交换为主，着重讨论了 GP 在量子临界点附近的发散性及其类似物——绝热磁热效应^[29]。2018 年，美国科学家 E. T. Ritz 和 N. A. Benedek 发现 PbTiO_3 中的负热膨胀(negative thermal expansion, 简称 NTE)涉及该材料的 GP 与各向异性弹性之间存在微妙的相互作用。这为我们从根本上理解材料的热性能和在新材料类中寻找 NTE 开辟了新的途径^[30]。

由此发现低温下的 GP 在量子临界点有发散行为，因此被视为简单实验中判断量子临界点的标准^[31-33]，从这个意义上说，GP 可以作为实验和理论研究上检测和研究量子临界相变的有效工具。本文中，我们主要研究 GP 在玻色费米混合物中是如何刻画系统的量子相变的。

1.5 相变及量子临界点

在当代凝聚态物理中一个极其重要的物理问题是，当系统在 $t=0$ 处通过调节某些控制参数(如压强 p 、掺杂或磁场 H)，系统能量最低的基态行为会有质的不同。这表明，在绝对零温的情况下，当改变控制参数沿相边界变化时，系统就会发生真正的相变，一般来讲，这就是量子相变 (Quantum Phase Transition)。与由温度驱动的热相变明显不同的是，量子相变的发生是源于控制系统基本相互作用的参量之间的竞争。宏观上，相变发生在调制参数的一个特定的临界值。在临界点左右，量子力学的基态性质发生改变。一个比较吸引人的特点是量子相变中存在有趣的临界现象。这种量子临界现象在凝聚态物质系统，特别是相互作用的多粒子系统的物理性质中起着重要的甚至决定性的作用。

在量子相变点附近，当某个参数 g 趋于临界点 g_c 时，在接近相变点附近能量 Δ 是按以下行为趋于零，

$$\Delta \sim J |g - g_c|^{\nu z}, \quad (1.3)$$

其中， Δ 表示零温下体系的特征能量，当体系有能隙时， Δ 为第一激发态与基态能量之差， J 具有能量量纲， ν, z 分别为只与相变类型有关的临界指数。例如，Yang-Gaudin 模型描述的是自旋为 $1/2$ 的费米气体，Lieb-Lininger 模型描述的是无自旋的玻色气体，但它们在相变点的临界指数是完全一样的。这两个临界指数的普适性可以利用重整化群的观点来解释。

关联长度是体系的一个特征长度，当体系的尺寸小于该特征长度时，所有的物理性质与大尺寸时的行为有非常大的差别。换言之，当观测的体系尺寸与关联长度的数量级差的不是很大时，微观涨落就不能被忽略，不同位置的粒子具有很强的关联。一般情况下，关联长度与原子间的距离是同一量级的，存在一阶相变时关联长度一般也是有限大小的。但是量子相变一般是二阶相变，这时关联长度在相变点发散，在任意尺度上体系的物理性质都是相同的，因此体系具有标度不变性。在相变点附近，体系的关联长度以下面的方式发散，即

$$\xi^{-1} \sim \Lambda |g - g_c|^{\nu}, \quad (1.4)$$

这里， Λ 与体系中动量的截断为同一量级。因此，体系的特征能量和关联函数满足如下关系：

$$\Delta \sim \xi^{-z}, \quad (1.5)$$

根据不确定关系，体系中关联时间(涨落寿命)为：

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1.6)$$

所以在相变点处，关联函数与关联时间为无限大，涨落存在于任意尺寸及时间间隔，体系存在标度不变性。

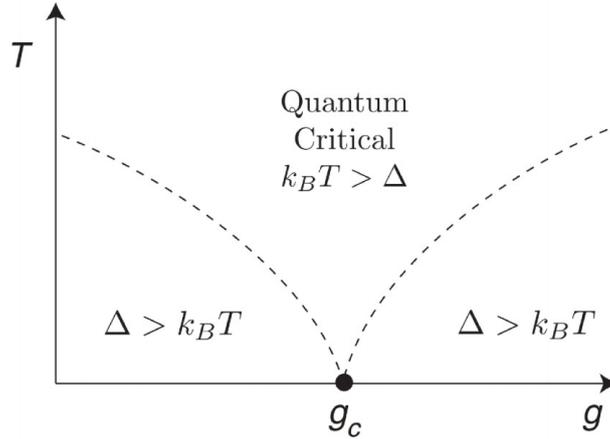


图 1.5 量子相变图^[34]。在 $T=0$ 时，相变点为 $g = g_c$ 。体系的特征能量 Δ 以 $\Delta \sim J|g - g_c|^{1/z}$ 的速度趋向于 0。在 $k_B T > \Delta$ 的区域量子涨落与热涨落具有同样的量级，为量子临界区域，热力学量满足普适的标度规律。在 $k_B T \ll \Delta$ 时，量子涨落占主导地位。

当为有限温度时，体系还有第二个能量尺度 $k_B T$ ，在 $k_B T > \Delta$ 时，在相变点附近，由于 $\Delta \rightarrow 0$ ，所以即使是非常小的温度也能产生高能的激发，此时系统具有很强的量子涨落和热涨落，两者之间相互竞争，这一区域被称为量子临界区域，如图 1.5 所示。

超冷原子气体是实现和研究量子临界性的有力工具。2007 年，Donner 在实验中通过囚禁玻色气体，率先观察到了量子临界现象^[35]。2010 年，周琦和何天伦教授给出了一套利用实验密度分布来确定体系当 $T=0$ 时的相边界，以及在量子临界区域的标度函数，还提出了消除势阱有限尺寸效应的方案，并用精确可解模型证明了方案的有效性^[36]。

2015 年，管习文研究员与周琦教授合作，在关于冷原子量子多体系统中的两体关联和临界性方面的研究中取得了新进展^[37]。通过普适的热力学微分形式，建立了 Tan Contact 与热力学量及超流密度之间的直接关系，发现 Tan Contact 的二体短程关联和多体临界现象之间存在深刻的内在关系。此外，他们还发现 Tan Contact 本身可

给出连续量子相变的普适的临界行为，包括标度函数、动力学临界指数、关联函数临界指数、Luttinger 流体行为等。另外，应用一维精确可解 Yang-Gaudin 模型完全验证了 Tan Contact 的临界标度理论。其研究表明，在连续的经典或者量子相变中，Tan Contact 的临界指数可以表明体系其所属临界性的普适类。这为实验上界定一维系统的临界区域及理解普适的 Luttinger 流体行为提供了可靠的理论基础。

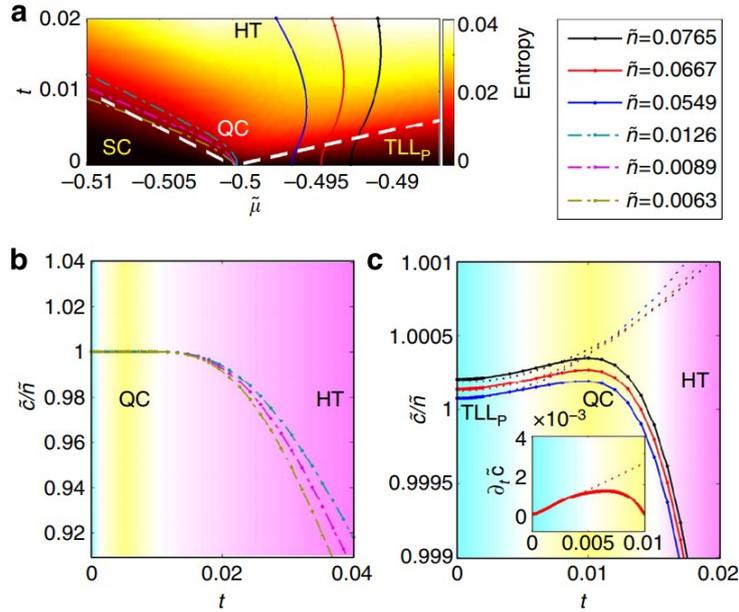


图 1.6 一维费米气体系统 Tan Contact 的量子临界性^[37]. 图(a)为从 TBA 方程的数值解中得到的熵密度图，用来突出关于 $\tilde{\mu} \sim t$ 平面上相变的不同区域。SC 表示极低密度的半经典区域，QC 表示具有非相对论性色散的临界态，HT 表示没有普遍热力学行为的高温区域，TLL_P 表示线性相对论色散对的 TLL；图(b)为在固定低密度时每个粒子接触 \tilde{c}/\tilde{n} 与温度的关系，这里 $\tilde{n} = n|a_{1D}|/2$ 是无量纲低密度；图(c)为高密度时的 \tilde{c}/\tilde{n} ，实线为 TBA 方程得到的数值结果。

1.6 本文内容

本文的整体结构如下：

第一章：主要叙述了一维量子气体的最新实验进展及 Bethe Ansatz (BA) 方法，玻色费米混合物的制备以及 GP 的发展，并且介绍了相变及量子临界点的概念和意义；

第二章：主要介绍了 GP 的定义以及在 Lieb-Liniger 模型中该参数的行为性质；

第三章：主要介绍了在玻色费米混合物系统中 GP 和磁化 GP 的行为，以及热力学的二阶导在量子临界点的行为特征；

第四章：对前文的结果和结论进行总结，以及对相关内容在未来的发展方向作了展望。

第二章 Lieb-Liniger 模型中的 Grüneisen 参数

在理论方面,人们利用分子动力学、晶格动力学、统计力学等方法对 GP 进行了大量研究,根据描述的物理现象不同,GP 也有不同的定义式^[38-40],但它们都具有相同的起源。由于热力学中许多性质和导数之间的等价关系(如麦克斯韦关系),GP 的许多公式都是同样有效的,导致了对其含义的许多不同但正确的解释。然而理论方法求出的 GP 还存在模型难以检验等问题^[41]。在实验方面,人们利用超声测量技术、热弹性应力技术、快速增压技术等手段对 Γ 参数进行了大量研究。

本章的主要目的是在可积模型的框架下理解相互作用系统中的 GP。首先介绍了 GP 不同定义的等价性,对于理想气体和范德瓦尔斯(van der Waals)气体的结果,以及在 Lieb-Liniger 模型中的性质和现象。

2.1 Grüneisen 参数的定义

固体物理中考虑热力学量的最简单模型是爱因斯坦模型,从微观角度来看,对于原始定义(1.2)式,表示的是 N 个具有相同频率 ω_0 的声子来描述固体中的激发,或者说,固体是由 N 个具有能量为 $E_n = (n+1/2)\hbar\omega_0$ 的独立谐振子构成 (n 是表征振子的运动状态和能量的量子数)^[42],根据配分函数公式

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)}, \quad (2.1)$$

并利用 $1+x+x^2+\dots+x^n+\dots = \frac{1}{1-x}$, ($|x| < 1$), 将式(2.1)中的因子 $e^{-\beta\hbar\omega_0}$ 看作 x , 因此配分函数为

$$\log Z = Nf(\hbar\omega_0\beta), \quad (2.2)$$

其中, $\beta = 1/(k_B T)$, k_B 是玻尔兹曼常数, T 是温度, 解析函数 $f(x) = \frac{1}{2}x - \log(e^x - 1)$,

熵为

$$\begin{aligned} S &= k_B \left(\log Z - \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) \\ &= Nk_B [f(\hbar\omega_0\beta) - \hbar\omega_0\beta f'(\hbar\omega_0\beta)], \end{aligned} \quad (2.3)$$

根据能量 $E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$, 得比热

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z, \quad (2.4)$$

$$= Nk_B \left[(\hbar \omega_0 \beta)^2 f''(\hbar \omega_0 \beta) \right],$$

$$\omega_0 \frac{\partial S}{\partial \omega_0} = -Nk_B \left[(\hbar \omega_0 \beta)^2 f''(\hbar \omega_0 \beta) \right], \quad (2.5)$$

事实上，我们知道 $C_V = -\omega_0 \frac{\partial S}{\partial \omega_0}$ ，因为声子的频率取决于固体的大小，我们有

$$C_V = -\omega_0 \frac{\partial S}{\partial \omega_0} = -\frac{\omega_0}{V} \frac{\partial V}{\partial \omega_0} \left(V \frac{\partial S}{\partial V} \right), \quad (2.6)$$

如果我们定义 $\Gamma \equiv -\frac{\omega_0}{V} \frac{\partial V}{\partial \omega_0}$ ，根据上式(2.6)，得到

$$\Gamma = \frac{V \frac{\partial S}{\partial V}}{C_V}, \quad (2.7)$$

这个定义来源于 E. Grüneisen 的原始研究，虽然最初系统是用声子的频率来描述的，而声子是一个微观的量，但(2.7)式是用热力学量表示的，这就把微观量与热力学量联系起来，说明 ω_0 和 V 之间的关系可能与某些可观测的热力学量有关。

例如，在对冲击压缩固体的研究中，GP 被定义为

$$\Gamma = V \left(\frac{dp}{dE} \right)_V, \quad (2.8)$$

其中， p 是压强， E 代表系统的内能。接下来我们根据热力学关系推导 Γ 的变形式。当我们取 T, V 为自变量时，根据热力学关系可知 $dF = -SdT - pdV$ ，其它所有热力学量的全微分都可由 T, V 得到，

$$dp = \frac{\partial p}{\partial T} dT + \frac{\partial p}{\partial V} dV,$$

$$dE = \frac{\partial E}{\partial T} dT + \frac{\partial E}{\partial V} dV,$$

当 V 的全微分 $dV=0$ ，所以， $\frac{dp}{dT} = \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_V$ ， $\frac{dE}{dT} = \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_V$ ，可得，

$$\Gamma = V \left(\frac{dp}{dE} \right)_V = V \left(\frac{\frac{dp}{dT}}{\frac{dE}{dT}} \right)_V = V \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_V}{\frac{\partial E}{\partial T} \Big|_V}, \quad (2.9)$$

首先考虑理想气体的情况，众所周知， n 摩尔理想气体的物态方程为 $pV = nRT$ ，能量为 $E = \frac{3}{2}nRT$ ，根据(2.8)式，得 $\Gamma = \frac{3}{2}$ 。对于实际气体的范德瓦尔斯方程为

$$\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT, \text{ 根据(2.8)式得, } \Gamma = \frac{3}{2} \frac{V}{(V - Nb)}.$$

2.2 Lieb-Liniger 模型简介

本节简要地介绍了系统长度为 L ， N 个粒子间具有 δ 接触相互作用的一维玻色气体的 Lieb-Liniger 模型，该模型哈密顿量的二次量子化形式为(取 $\hbar=2m=1$)

$$H = \int_0^L dx \partial_x \Psi^\dagger(x) \partial_x \Psi(x) + c \int_0^L dx \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi(x), \quad (2.10)$$

其中， m 表示玻色子的质量， c 是相互作用强度。正则玻色场算符 $\Psi(x)$ 满足以下的对易关系：

$$[\Psi(x), \Psi^\dagger(y)] = \delta(x - y), \quad [\Psi(x), \Psi(y)] = [\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(y)] = 0. \quad (2.11)$$

该模型的一次量子化形式为

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j), \quad (2.12)$$

第一项为动能项， x_i 是第 i 个粒子的坐标，第二项为粒子间的相互作用能。 c 表示粒子间的相互作用强度， $c = mg / \hbar^2$ ，当 c 为正值时，粒子间相互排斥， c 为负值时，粒子间相互吸引。系统的本征方程为

$$\left[-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j) \right] \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E \psi(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (2.13)$$

其中 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 是本征函数， E 是本征能量。当两个粒子发生碰撞时，波函数是连续的。根据波函数的连续性边界条件，一阶不连续接触条件，以及周期性边界条件，可以得到 N 个粒子的 BA 方程，

$$e^{ik_j L} = \prod_{s \neq j}^N \frac{k_j - k_s + ic}{k_j - k_s - ic}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (2.14)$$

其中 k 表示波矢。在热力学极限($N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$)并保证粒子数密度 $n = N/L$ 是常数，以及有限温度 T 下可得到热力学 BA(TBA)方程，又被称为 Yang-Yang 热力学方程，以及压

强 p :

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq a_2(k-q) \ln[1 + \exp(-\varepsilon(q)/T)], \quad (2.15)$$

$$p = \frac{T}{2\pi} \int_0^L dk \ln[1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)], \quad (2.16)$$

其中, μ 是化学势, T 是温度, 积分内核标记为 $a_2(x) = \frac{2c}{c^2 + x^2}$.

根据压强 p 便可求出体系的其他热力学量, 如粒子数密度, 熵等。

$$n = \left. \frac{\partial p}{\partial \mu} \right|_{c,T},$$

$$S = \left. \frac{\partial p}{\partial T} \right|_{c,\mu},$$

2.3 Lieb-Liniger 模型中的 Grüneisen 参数

本节讨论 Lieb-Liniger 模型中的 GP。我们已经知道 GP 在理想气体, 自由玻色气体和自由费米气体中是常数^[43],

$$\Gamma = \frac{2}{f}, \quad (2.17)$$

f 为系统的维度, 当系统是一维时, $\Gamma=2$ 。这儿我们用定义式(2.7)

$$\Gamma = \frac{V}{T} \frac{\left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{T,N}}{\left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{V,N}}, \quad (2.18)$$

从 TBA 方程(2.15)式可知, 压强由 μ, T, c 决定, 压强 p 是在巨正则系综中解得的, 而 GP 的定义式(2.18)是在总粒子数 N 固定的正则系综中, 因此, 我们必须特别注意 *Maxwell* 关系以及热力学量之间的转化应用。

首先, 从巨热学势 Ω 出发, 已知它是关于 V, T, μ 三个独立变量的特性函数, 其它热力学量都可以写成关于 V, T, μ 的函数。对于均匀系统, 根据 *Gibbs-Duhem* 方程,

$$SdT - Vdp + \sum_i N_i d\mu_i = 0, \quad (2.19)$$

其中 i 为不同的组分, 当只考虑单组分时, 上式变为

$$SdT - Vdp + Nd\mu = 0, \quad (2.20)$$

$$Nd\mu = -SdT + Vdp, \quad (2.21)$$

已知吉布斯能的全微分形式为 $dG = -SdT + Vdp + \mu dN$ ，根据(2.21)式得

$$dG = Nd\mu + \mu dN,$$

因此，得出

$$G = \mu N,$$

又已知巨正则系综中的巨热力学势定义为 $\Omega = F - \mu N$ ，根据上式得

$$\Omega = F - G = -p(T, \mu)V, \quad (2.22)$$

巨热力学势 Ω 关于 V, T, μ 的全微分形式为

$$d\Omega = \frac{\partial\Omega}{\partial V}dV + \frac{\partial\Omega}{\partial T}dT + \frac{\partial\Omega}{\partial\mu}d\mu, \quad (2.23)$$

还已知，

$$d\Omega = -pdV - SdT - Nd\mu, \quad (2.24)$$

比较(2.24)式和(2.23)式，以及利用(2.22)式，得

$$N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{V,T} = V\left(\frac{\partial p}{\partial\mu}\right)_{V,T}, \quad (2.25)$$

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} = V\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,\mu}, \quad (2.26)$$

又因为粒子数 N 和熵 S 关于 V, T, μ 的全微分可以写为

$$dN = \frac{\partial N}{\partial V}dV + \frac{\partial N}{\partial T}dT + \frac{\partial N}{\partial\mu}d\mu, \quad (2.27)$$

$$dS = \frac{\partial S}{\partial V}dV + \frac{\partial S}{\partial T}dT + \frac{\partial S}{\partial\mu}d\mu, \quad (2.28)$$

从(2.18)式的分子可以得知 $dN = 0, dT = 0$ ，根据(2.27)以及(2.25)式得

$$\begin{aligned}
 dN &= \frac{\partial N}{\partial V} dV + \frac{\partial N}{\partial T} dT + \frac{\partial N}{\partial \mu} d\mu \\
 &= \frac{\partial N}{\partial V} dV + \frac{\partial N}{\partial \mu} d\mu \\
 &= \frac{\partial p}{\partial \mu} dV + V \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right) d\mu \\
 &= 0 \\
 \therefore \frac{\partial p}{\partial \mu} dV &= -V \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right) d\mu, \tag{2.29}
 \end{aligned}$$

根据熵 S 的全微分，以及利用(2.29)式得

$$\begin{aligned}
 dS &= \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial T} dT + \frac{\partial S}{\partial \mu} d\mu \\
 &= \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial \mu} d\mu \\
 &= \frac{\partial p}{\partial T} dV + V \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial p}{\partial \mu} dV}{-V \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}} \\
 &= \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial p}{\partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial p}{\partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}} dV
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

$$\therefore \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_{N,T} = \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial p}{\partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial p}{\partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}}, \tag{2.31}$$

对于(2.18)式分母，我们可以知道有条件 $dN = 0, dV = 0$ ，同理可得，

$$\frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{N,V} = V \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \right)^2}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}}, \tag{2.32}$$

最终可得，

$$\Gamma = \frac{V \frac{\partial S}{\partial V} |_{N,T}}{T \frac{\partial S}{\partial T} |_{N,V}} = \frac{1}{T} \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial p}{\partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial p}{\partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \right)^2}. \quad (2.33)$$

当我们确定 μ, T, c 三个参数，根据 TBA 方程(2.15)数值迭代可以得出压强 p 的一阶导和二阶导，这个问题的解析解和数值解都已经被很好地建立^[44]。图 2.1 为 GP 从弱相互作用($c \rightarrow 0$)到强相互作用($c \rightarrow \infty$)区域的变化，在弱相互作用($c \rightarrow 0$)时具有玻色气体的性质，强相互作用($c \rightarrow \infty$)是 TG 气体，具有自由费米子的特性，可以看出 GP 在弱相互作用($c \rightarrow 0$)和强相互作用($c \rightarrow \infty$)区域趋于常数 2。

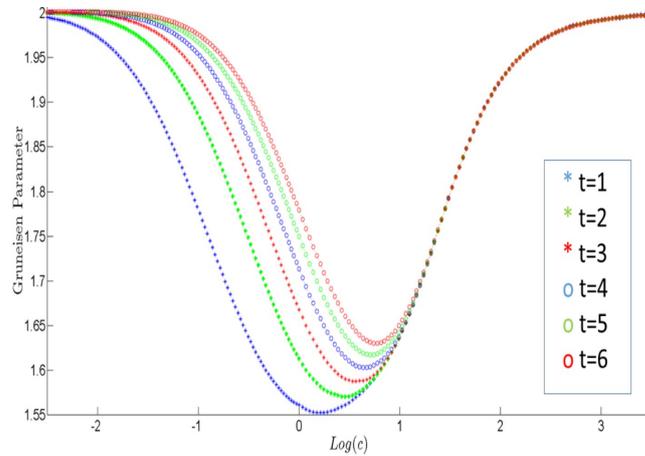
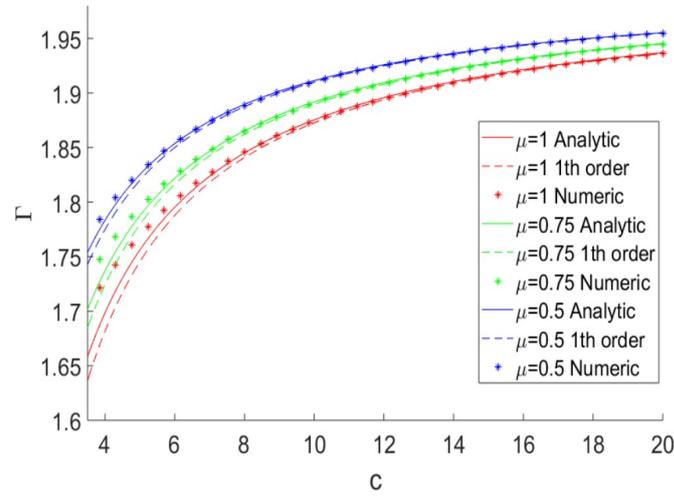


图 2.1 Lieb-Liniger 模型中一维玻色气体的相互作用强度从弱耦合区到强耦合区

GP 的变化。 t 表示的是不同的温度^[43]。

在强相互作用极限，气体是 TG 气体，在冷原子的实际实验中，观察强耦合区域的量子简并气体是可行的，玻色-费米映射可以通过无相互作用费米子的波函数来绘制玻色气体的基态性质。结果如图 2.2 所示，TG 气体不仅在基态，而且在有限温度下也表现出自由费米子行为。事实上，polylogarithm 展开法^[45]可以很好地理解这一结果。从图中可以看出在强相互作用区域，当化学势取不同值时，随着相互作用的增大 Γ 值趋于 2，且解析结果和数值吻合的比较好。


 图 2.2 Lieb-Liniger 模型中 Γ 函数在 $T \ll \mu \ll c^2$ 时的数值结果和解析结果的对比^[43]。

最终，我们根据推导过程中用到的基本热力学量总结得出它们之间的关系，如表 2.1 所示。

表 2.1 正则系综和巨正则系综中的热力学量

定义		正则系综	自变量	巨正则系综	自变量
内能	$U = W + Q$	$dU = TdS - pdV$	(S, V)	$dU = TdS - pdV + \mu dN$	(S, V, N)
自由能	$F = U - TS$	$dF = -SdT - pdV$	(T, V)	$dF = -SdT - pdV + \mu dN$	(T, V, N)
吉布斯能	$G = U - TS + pV$	$dG = -SdT + Vdp$	(T, p)	$dG = -SdT + Vdp + \mu dN$	(T, p, N)
巨热力学势	$\Omega = F - \mu N$	/	/	$dF = -SdT - pdV - Nd\mu$	(T, V, μ)

2.4 小结

由于 GP 在各个不同领域都有广泛应用以及研究对象的不同，因此有很多不同的定义式，本章我们首先对 GP 的不同定义式做了一个系统的推导，证明了不同形式之间它们的等价性。然后介绍了 Lieb-Liniger 模型以及在该模型中 GP 的性质，发现在相互作用强度很大或很小时，GP 趋于常数 2，也就是说具有无相互作用理想玻色气体或理想费米气体的性质，并且说明了在强相互作用区域，用 polylogarithm 函数展开方法得到的解析结果和数值解果十分吻合。

第三章 玻色费米混合物中的 Grüneisen 参数

冷原子系统中最有趣的现象之一是量子相变，它是通过基态性质的变化在零温下发生的，因此量子临界点(Quantum critical point, 简称 QCP)的讨论一直是理论和实验研究广泛关注的一个问题。在 Lieb-Liniger 模型中仅存在一个 QCP: 从真空态到 Luttinger 流体相, Guan 和 Batchelor 从 polylogarithm 函数的角度对其进行了深入的研究^[44]。然而, 由于 GP 是在保证粒子数 N 不变的正则系综中定义的, 因此在真空-FFLO 的量子临界点上对 GP 进行讨论失去了一般的物理意义。另一方面, 实验上对冷原子系统中 GP 的行为越来越感兴趣, 现在 GP 被认为是 QCP 存在的一个很有力的证明, 因此, 完全有必要在 BA 的框架下讨论 GP 在 QCPs 的性质和意义。

为了研究量子临界点的 GP, 我们现在转向具有 δ 相互作用的玻色费米混合物系统, 利用 BA 可积模型所得到的精确结果, 使我们能够更好地研究更广泛的量子多体现象的性质和微观根源。

3.1 玻色费米混合物的理论模型

我们考虑在系统长度为 L , 满足周期性边界条件, 且具有 δ 相互作用的 1D 玻色费米混合物, 该模型哈密顿量的二次量子化形式为

$$H = \int_0^L dx \left[\frac{\hbar^2}{2m_b} \partial_x \Psi_b^\dagger \partial_x \Psi_b + \frac{\hbar^2}{2m_f} \partial_x \Psi_f^\dagger \partial_x \Psi_f + \frac{1}{2} g_{bb} \Psi_b^\dagger \Psi_b^\dagger \Psi_b \Psi_b + g_{bf} \Psi_b^\dagger \Psi_f^\dagger \Psi_b \Psi_f \right], \quad (3.1)$$

其中, Ψ_b^\dagger , Ψ_b 和 Ψ_f^\dagger , Ψ_f 分别是玻色子和费米子的产生和湮灭算符, m_b 和 m_f 分别是玻色子和费米子的质量, g_{bb} 和 g_{bf} 是玻色子和玻色子以及玻色子和费米子之间的相互作用强度。哈密顿量(3.1)式中前两项是动能项, 后两项是相互作用项。我们考虑完全极化的费米子, 由于泡利不相容原理, 费米子与费米子之间不可能发生相互作用碰撞, 因此 $g_{ff} = 0$ 。只有当 $m_b = m_f = m$ 且 $g_{bb} = g_{bf} = g$, 即, 当玻色子和费米子的质量相等, 且玻色子和玻色子之间的相互作用强度等于玻色子和费米子之间的相互作用强度时, 该模型才是精确可解的。为了方便, 我们通常令 $\hbar = 2m = 1$ 。它的一次量子化形式为

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

第一项为动能项, x_i 是第 i 个粒子的坐标, 第二项为粒子间的相互作用能。 c 表示粒子

间的相互作用强度， $c = mg / \hbar^2$ ，当 c 为正值时，粒子间相互排斥， c 为负值时，粒子间相互吸引。总粒子数 $N = N_b + N_f$ ， N_b 是玻色子的粒子数， N_f 是费米子的粒子数。多体波函数应该是满足关于 $i = \{1, 2, \dots, N_b\}$ (玻色子) 是交换对称的，以及 $i = \{N_b + 1, N_b + 2, \dots, N\}$ (费米子) 是交换反对称的。

在周期性边界条件下，Imambekov 和 Demler 得到了 Bethe ansatz 方程(BAEs)^[46]:

$$e^{ik_j L} = \prod_{\beta=1}^M \frac{k_j - \Lambda_\beta + ic/2}{k_j - \Lambda_\beta - ic/2}, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

$$1 = \prod_{i=1}^N \frac{k_i - \Lambda_\alpha + ic/2}{k_i - \Lambda_\alpha - ic/2}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, M. \quad (3.3)$$

其中，波矢 k_1, \dots, k_N 是一系列不相等的实数，谱参数 $\Lambda_1, \dots, \Lambda_M$ 是和波矢同类型的量。对以上方程取对数，可得到离散的 BAEs 为:

$$k_j L = 2\pi I_j + \sum_{\beta=1}^M \theta(2k_j - 2\Lambda_\beta),$$

$$2\pi I_\alpha = \sum_{i=1}^N \theta(2k_i - 2\Lambda_\alpha), \quad (3.4)$$

其中， $\theta(x) = -2 \arctan(x/c)$ ， I_j 和 J_α 是两组整数或半整数的量子数。

在热力学极限 ($N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$ ，且 N/L 是一个有限的值) 并且是有限温度下，对于系统的热力学平衡态来说，系统的熵是最大的，同时，系统受到单位长度内粒子数目和能量值的约束，即吉布斯自由能的极值条件决定了系统的平衡态。采用文献^[46]的思路，令混合气体吉布斯自由能的变分为零，便得到平衡态的非线性积分方程，即 TBA 方程:

$$\varepsilon(k) = k^2 - \left(\mu + \frac{H}{2} \right) - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a_1(k - \Lambda) \ln [1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)],$$

$$\varphi(\Lambda) = H - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a_1(\Lambda - k) \ln [1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)], \quad (3.5)$$

其中，化学势 μ 和有效磁场强度 H 可表示为和 $\mu = (\mu_b + \mu_f)/2$ 和 $H = \mu_f - \mu_b$ ， μ_f 和 μ_b 分

别是费米子和玻色子的化学势， T 是温度。积分内核 $a_1(z) = \frac{4c}{c^2 + 4z^2}$ 。对于固定温度 μ, H 和 T ，可得压强 p 为：

$$p = \frac{T}{2\pi} \int_0^L dk \ln [1 + \exp(-\varepsilon(k)/T)], \quad (3.6)$$

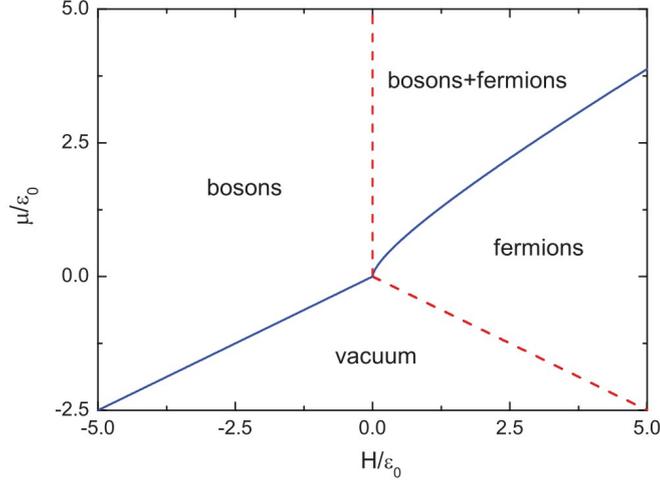
其它热力学量，如玻色子和费米子的粒子数密度和压缩率分别为 n_b ， n_f 和 κ_b ， κ_f ，磁化率 χ 等，

$$\begin{aligned} n_i &= N_i / L = \partial p / \partial \mu_i, \quad i = b, f, \\ \kappa_i &= \partial p^2 / \partial \mu_i^2, \quad i = b, f, \\ \chi &= \partial^2 p / \partial H^2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.2 玻色费米混合物中的 Grüneisen 参数

首先，我们介绍零温下玻色费米混合物的相图。玻色费米混合物的相图可根据(3.8)式解析得到^[47]。如图(3.1)所示，除去真空态相图由三个量子相构成，纯玻色相，纯费米相，以及玻色费米混和相，它们由四条边界线分隔，边界条件由玻色子密度 $n_b = 0$ 或费米子密度 $n_f = 0$ 决定。调节有效磁场强度 H 和化学势 μ 可得到不同的相，也就是说，当 $H < 0$ 且 $\mu > H/2$ 时是纯玻色相， $H > 0$ 且满足条件(3.9)式为混合相， $H > 0$ 以及 $\mu > -H/2$ 为费米相，从真空态到费米相的相边界为 $\mu = -H/2$ ，从费米相到混合相的相边界可通过下式得到，

$$H = \frac{1}{2\pi} \left[\left(4 \left(H + \frac{\mu}{2} \right) + 1 \right) \arctan \sqrt{4 \left(H + \frac{\mu}{2} \right)} - \sqrt{4 \left(H + \frac{\mu}{2} \right)} \right]. \quad (3.8)$$


 图 3.1 玻色费米混合物的相图^[47]，其中 $\varepsilon_0 = c^2$ 。

3.2.1 Grüneisen 参数

对于玻色费米混合物系统中的 GP，它具有和玻色系统一样的结果，

$$\Gamma = \frac{1}{T} \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial p}{\partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial p}{\partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \right)^2}, \quad (3.9)$$

我们可以通过数值计算得到不同有效磁场强度下的 GP。计算思路如下：首先对方程组(3.5)的两边都除以 c^2 （令 $\varepsilon_0 = c^2$ ），然后利用数值迭代方法(见附录 A)可得到 TBA 方程组(3.5)的解 $\varepsilon(k)/c^2$ 和 $\varphi(\Lambda)/c^2$ ，然后通过公式(3.6)的数值积分得到压强 p ，最后通过公式(3.10)得到 GP。为了减小计算的误差，公式(3.10)中的偏导数没有采用直接差分的办法，而是通过他们满足的积分方程(见附录 B)的数值迭代计算得到的。

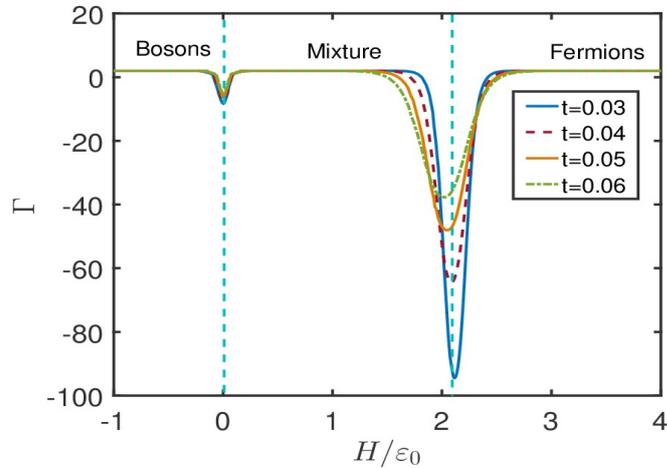

 图 3.2 三个不同相的 GP，其中化学势 $\mu/\varepsilon_0 = 2$ 。

图 3.2 给出了 GP 随有效磁场强度 H 的变化。蓝色垂直虚线为当 $\mu/\varepsilon_0=2$ 时的零温解析得到的相变点，当系统处于基态时，随着有效磁场强度的变大，系统从玻色相变到玻色费米混合相，再到费米相。在远离基态相变点区域，GP 几乎保持一个恒定的常数，而在相变点附近，GP 剧烈变化，出现了一个非常明显的低谷（极低值）。随着温度的降低，低谷的深度变深。当温度趋向于绝对零度时，GP 在相变点发散。通过调节参数 H 可使 Γ 经过三个不同相，因此可以作为判断是否发生相变的一个有效的工具。

3.2.2 磁化 Grüneisen 参数

类似地，这一节我们介绍另一个无量纲的参数，如果把 GP 中的体积 V 用磁场 H 代替，称为磁化的 GP(MGP)^[42]，即为：

$$\Gamma_{mag} = \frac{H \frac{\partial S}{\partial H} |_{N,T,V}}{T \frac{\partial S}{\partial T} |_{N,V,H}}, \quad (3.10)$$

对于磁场诱导的量子临界点，由于临界点熵的增强，也可以很好地描述相变。实际上，MGP 在凝聚态物理实验中更为普遍，因为分子与磁熵变化有关，而磁熵变化是可以测量的，在磁性材料的研究中具有重要意义。

同样的，我们从巨热力学势 Ω 出发，它是关于四个独立变量 V, T, μ, H 的特性函数，全微分形式为

$$d\Omega = \frac{\partial \Omega}{\partial V} dV + \frac{\partial \Omega}{\partial T} dT + \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} d\mu + \frac{\partial \Omega}{\partial H} dH, \quad (3.11)$$

其它热力学量都可用这四个独立变量表示

$$dN = \frac{\partial N}{\partial V} dV + \frac{\partial N}{\partial T} dT + \frac{\partial N}{\partial \mu} d\mu + \frac{\partial N}{\partial H} dH, \quad (3.12)$$

$$dS = \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial T} dT + \frac{\partial S}{\partial \mu} d\mu + \frac{\partial S}{\partial H} dH, \quad (3.13)$$

已知，有磁场的吉布斯能 G 和自由能 F 分别为

$$G = U - TS + pV - mH,$$

$$F = U - TS - mH,$$

从(2.19)式得知，两组分的为 Gibbs-Duhem 方程为

$$SdT - Vdp + N_f d\mu_f + N_b d\mu_b = 0, \quad (3.14)$$

又因为 $N = N_f + N_b$, $\mu = \frac{\mu_b + \mu_f}{2}$, $H = \mu_f - \mu_b$, $m = \frac{N_f - N_b}{2}$, 对上式做变量替换, 得

$$SdT - Vdp + Nd\mu + mdH = 0, \quad (3.15)$$

$$Nd\mu = -SdT + Vdp - mdH, \quad (3.16)$$

还已知巨正则系综中有磁场的吉布斯自由能全微分为

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN - mdH, \quad (3.17)$$

根据式(3.16)和(3.17)得出 $dG = Nd\mu + \mu dN$, 所以 $G = \mu N$, 又已知磁场中巨热力学势的定义式为 $\Omega = F - G - mH$, 所以

$$\Omega = -p(T, \mu, H)V, \quad (3.18)$$

又已知巨正则系综中有磁场的巨热力学势的全微分形式为

$$d\Omega = -pdV - SdT - Nd\mu - mdH, \quad (3.19)$$

对比(3.11)式和(3.19)式, 以及利用(3.18)式可得

$$\therefore N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{V,T,H} = V\left(\frac{\partial p(T, \mu, H)}{\partial\mu}\right)_{V,T,H}, \quad (3.20)$$

$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu,H} = V\left(\frac{\partial p(T, \mu, H)}{\partial T}\right)_{V,\mu,H}, \quad (3.21)$$

从(3.11)式中我们可知, 对于分子有限制条件 $dN = 0, dT = 0, dV = 0$, 根据(3.12)以及(3.20)式, 可得

$$\begin{aligned} dN &= \frac{\partial N}{\partial V} dV + \frac{\partial N}{\partial T} dT + \frac{\partial N}{\partial\mu} d\mu + \frac{\partial N}{\partial H} dH \\ &= V \frac{\partial}{\partial\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial\mu}\right) d\mu + V \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\partial p}{\partial\mu}\right) dH, \\ &= 0 \\ \therefore -\frac{\partial^2 p}{\partial\mu^2} d\mu &= \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial\mu} dH, \end{aligned} \quad (3.22)$$

根据熵的全微分(3.13)式以及(3.21)式，可得

$$\begin{aligned}
 dS &= \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial T} dT + \frac{\partial S}{\partial \mu} d\mu + \frac{\partial S}{\partial H} dH \\
 &= \frac{\partial S}{\partial \mu} d\mu + \frac{\partial S}{\partial H} dH \\
 &= V \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial H \partial \mu} dH}{-\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}} + V \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial T} dH \\
 &= V \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}} dH
 \end{aligned}$$

最终，我们得出分子为

$$\frac{\partial S}{\partial H} \Big|_{N,T,V} = V \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial \mu}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}} dH, \quad (3.23)$$

对于(3.11)式的分母有限制条件，

$$dN = 0, dH = 0, dV = 0, \quad (3.24)$$

根据分子中类似的推导，可得出

$$\therefore \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{N,V,H} = \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \right)^2}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}}, \quad (3.25)$$

因此，最终可得

$$\Gamma_{mag} = \frac{H}{T} \frac{\frac{\partial S}{\partial H} \Big|_{N,T,V}}{\frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{N,V,H}} = \frac{H}{T} \frac{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial T} - \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial H} \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T}}{\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \right)^2}. \quad (3.26)$$

最后，我们根据推导过程中用到的基本热力学量总结得出它们之间的关系，如表 3.1 所示。

表 3.1 正则系综和巨正则系综中有磁场时的热力学量

定义		正则系综	自变量	巨正则系综	自变量
内能	$U = W + Q$	$dU = TdS - pdV + Hdm$	(S, V, m)	$dU = TdS - pdV + Hdm + \mu dN$	(S, V, m, N)
自由能	$F = U - TS$	$dF = -SdT - pdV + Hdm$	(T, V, m)	$dF = -SdT - pdV + Hdm + \mu dN$	(T, V, m, N)
吉布斯能	$G = U - TS + pV - mH$	$dG = -SdT + Vdp - mdH$	(T, p, H)	$dG = -SdT + Vdp - mdH + \mu dN$	(T, p, H, N)
巨热力学势	$\Omega = F - \mu N - mH$	/	/	$d\Omega = -SdT - pdV - mdH - Nd\mu$	(T, V, H, μ)

对比相图 3.1, 我们讨论 MGP 在三个不同相内的情况。图 3.3 为随着有效磁场强度 H 的变化, MGP 从纯玻色相到玻色费米混合相, 再到纯费米相的变化。蓝色垂直虚线为零温时当化学势 $\mu/\varepsilon_0=2$ 时解析得到的从纯玻色相到混合相和混合相到纯费米相的相变点。在纯玻色和纯费米区域的极限情况下, 可以很容易地得到 $\Gamma_{mag}=0$ 。从图中可以看出, 当温度趋向于绝对零度时, MGP 在相变点会发生剧烈变化, 不同于 GP 的是, MGP 在两个相变点的峰值为一正一负, 且变化都较大。

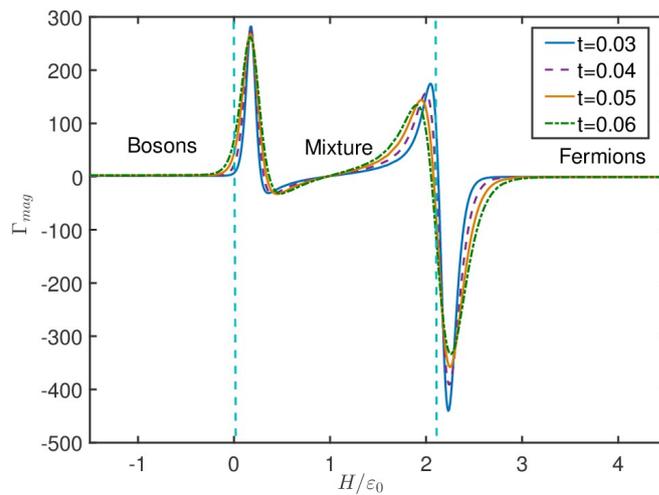

 图 3.3 通过调节磁场强度得到 MGP 在三个不同相内的行为变化, 化学势 $\mu/\varepsilon_0=2$ 。

图 3.4 为关于 Γ_{mag} 的玻色费米混合物有限温相图。图中的黑色虚线为解析得到的玻

色费米混合物的零温相图^[47]，对比零温解析得到的相图，我们来分析低温下 Γ_{mag} 在量子临界点的行为。从图 3.4 中我们可以看出 Γ_{mag} 能够清晰地标注相区，在每一个相区内 Γ_{mag} 值基本不变，但在相边界附近有峰值出现，从玻色态到混合态的峰值为正，从费米态到混合态的峰值为负，通过调节参数 H, μ 可以使 Γ_{mag} 取不同的值。

与 GP 相比，MGP 在量子临界点附近的行为尺度变化更明显，是研究量子相变一个很有利的工具。实验上已经对某些材料的这种行为进行了实验观察和研究^[36,48]。

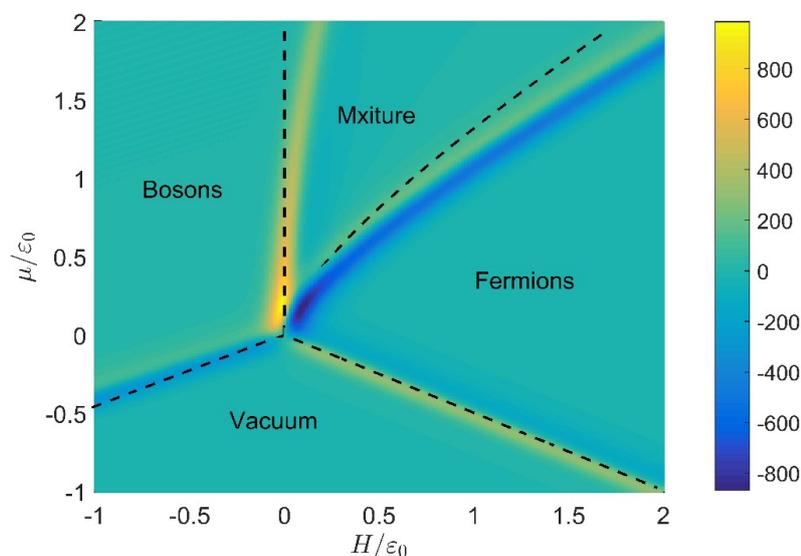


图 3.4 关于 MGP 的有限温相图。横坐标是有效磁场强度 H/ε_0 ，纵坐标是化学势 μ/ε_0 ，通过调节这两个参数可以使系统穿过四个不同的相区。颜色条代表的是 Γ_{mag} 值，这里温度取为

$$t = T/\varepsilon_0 = 0.03.$$

3.3 玻色费米混合物的量子临界性

量子临界现象是当前固体物理学中广泛关注的一个热点，在这一背景下，大量的相关材料被研究，而重费米子扮演着尤为重要的角色，越来越多的重费米子(HF)金属明确地显示出磁量子临界点^[49-51]。这些系统中的实验有望为量子临界金属的一般物理学提供相当多的线索。事实上，最近的实验^[49,50]表明，至少在某些 HF 金属中，传统的金属磁性量子相变理论已经失败了。文献^[51]中有一幅图像描述了 $T = 0$ 时自旋密度波(SDW)的跃迁，并相应地描述了量子临界行为的平均场型。最近的研究表明，近藤共振的破坏会导致自旋密度波图^[51,52]的破坏；取而代之的是一些新的局域临界的量子临界点^[52]。

从绝缘磁铁、重费米子化合物到铜酸盐超导体等越来越多的系统中所观察到的异常行为都归因于量子临界点的存在。当系统在 $T = 0$ 时通过不断地调节某些控制参数（化学势或磁场）会诱导连续量子相变发生，这种零温临界点可以决定材料在大范围温度下的性能。一般来说，量子临界点比经典临界点更难描述。在经典临界点，热力学量通常是发散的；相关的临界指数在我们最终理解尺度和普适性时发挥了核心作用。然而，其中一些发散必须在量子临界点上消失：由于相变是在零温度下发生的，所以热力学第三定律对其进行了限制。考虑到这些实验和理论的发展，这里，我们主要研究在玻色费米混合物中用热力学量的二阶导描述相变点的行为。我们通过数值求解 TBA 方程，探讨了热力学性质在量子临界状态下的普适标度行为。

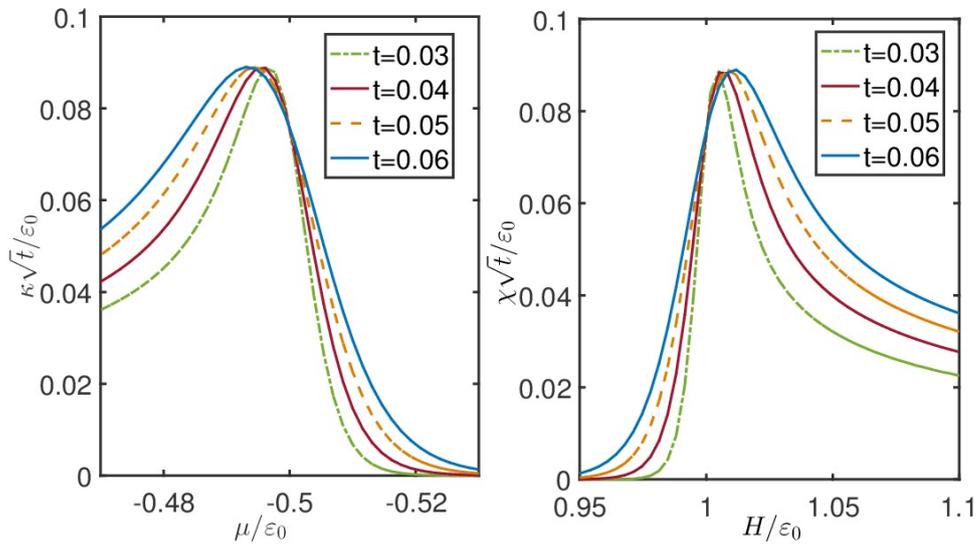


图 3.5 压缩率和磁化率在相变点的行为。左图为不同温度下 $H / \varepsilon_0 = -1$ 时重新标度的压缩率 κ 随着化学势变大在从真空态到玻色态的行为；右图为不同温度下 $\mu / \varepsilon_0 = -0.5$ 时重新标度的磁化率 χ 随着磁场强度变大在从真空态到纯费米子态的行为。

在这里，我们数值演示了玻色子和费米子混合物的普遍标度行为，用 TBA 方程(3.5)很容易数值解出用压缩系数 κ 和磁化率 χ ，它们刻画了从真空态到自由玻色子和从真空态到自由费米子的量子相变行为。如图 3.5 所示，我们发现不同温度下的压缩系数和磁化率都相交于临界点。在这两种情况下，随着温度的降低，压缩系数和磁化率总是呈现一个峰值，这表示相变发生时态密度的变化。当温度接近极限 $T \rightarrow 0$ 时，压缩系数和磁化率在临界点趋向于发散。

我们通过数值求解 TBA 方程(3.5)来显示不同温度下重新标度的密度分布，如图 3.6 左图所示。同样也可以看出在不同温度下从纯玻色态到混合态粒子数密度相交于临界点

$H/\varepsilon_0 = 0$ 。图 3.6 右图显示为从纯费米态到混合态时磁化率随有效磁场强度的变化情况。可以看出它们在临界点交于一点，这是由于低温下临界点附近态密度的变化。量子临界态下热力学性质的普遍标度行为为量子临界现象提供了物理根源。

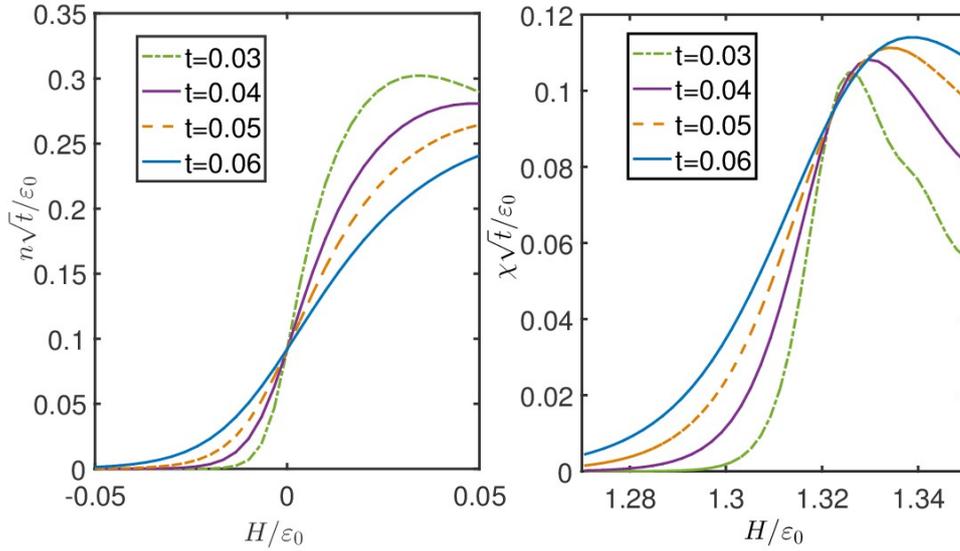


图 3.6 粒子数密度和磁化率在相变点的情况。左图是不同温度下从纯玻色态到混合态相变点附近粒子数密度随有效磁场强度的变化情况。右图为不同温度下 $\mu/\varepsilon_0 = 1$ 时从纯费米态到混合态时磁化率随有效磁场强度的变化情况。

3.4 小结

本章我们首先介绍了玻色费米混合物模型，然后在玻色费米混合物系统中研究了 GP 和 MGP，发现两者在量子临界点都会发生剧烈变化，但有不同的行为尺度，以及作出关于 MGP 的相图，参照解析得到的玻色费米混合物零温相图，发现其在零温时的相变点附近有明显变化，说明在低温下该参数也可以很好地描述相变。最后，我们数值得到粒子数密度和压缩率，磁化率在不同量子临界点的行为，发现它们接近零温时有发散行为，且不同温度是时它们都交于临界点，这是由于在相变点态密度的改变。

第四章 总结与展望

本文首先介绍了一维量子可积系统中玻色费米混合物的制备以及 GP 的背景知识，然后主要介绍了一维 Lieb-Liniger 模型中 GP 的性质。它在强相互作用区域（理想费米气体）和弱相互作用区域（理想玻色气体）都具有理想气体的性质，趋于常数 2。第三章主要介绍了玻色费米混合物系统中的 GP 和 MGP，发现两者在玻色相-混合相和费米-混合相的相变点都会发生剧烈变化，在远离相变点几乎都保持一个恒定的常数，区别是两者在相变点具有不同的行为尺度特性，GP 在两个相变点的变化值都为负，且在玻色相到混合相临界点的变化值较小，MGP 在两个相变点的值为一正一负，且变化的尺度都较大。最后介绍了热力学量的二阶导（比如压缩率，磁化率等）在量子临界点的行为，发现当温度趋于零时，压缩率和磁化率有发散行为，并且由于低温下临界点附近态密度的变化，可以看出它们在临界点交于一点。

本文对两个参数的研究是在低温下进行的，但是与之比较的却是玻色费米混合物的零温相图，因此 GP 和 MGP 对相变点的描述可能会产生偏差。我们是在一维可积模型中研究的两个参数，对于三维模型，其他模型是否适用，也有待进一步的证明研究。

总之，量子临界性是凝聚态物理中最具挑战性的问题之一，研究它对物理学的发展具有重大意义。

附录 A

这部分我们介绍用数值迭代方法求解 TBA 方程组的方法步骤。玻色费米混合物的 TBA 方程为

$$\varepsilon(k) = k^2 - \left(\mu + \frac{H}{2} \right) - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda K(k - \Lambda) \ln \left[1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T) \right], \quad (\text{A.1})$$

$$\varphi(\Lambda) = H - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk K(\Lambda - k) \ln \left[1 + \exp(-\varepsilon(k)/T) \right]. \quad (\text{A.2})$$

其中，积分内核 $K(z) = \frac{4c}{c^2 + 4z^2}$ 。

- a、首先给定温度 T ，磁场强度 H ，相互作用强度 c 和化学势 μ 的值；
- b、根据理想气体的费米分布估计出 k 的边界 k_0 取值， Λ 的边界 Λ_0 取比 k_0 大的一个值，在 $[-k_0, k_0]$ 范围内离散准动量 k 和在 $[-\Lambda_0, \Lambda_0]$ 范围内离散 Λ ；
- c、设缀饰能的初值为 $\varepsilon_0(k) = k^2 - \left(\frac{H}{2} + \mu \right)$ ； $\varphi_0(\Lambda) = H$ ；
- d、用初值 $\varepsilon_0(k)$ 代替积分方程(A.1)右边积分号中的函数 $\varepsilon(k)$ ，通过积分计算得到新的 $\varphi(\Lambda)$ ；用 $\varphi_0(\Lambda)$ 代替积分方程(A.2)右边积分号中的函数 $\varphi(\Lambda)$ ，通过计算得到新的 $\varepsilon(k)$ ，其中运用 Simpson 公式计算积分，

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + \dots \right] + O(h^2),$$

$$\left[+2f(a+2(n-1)h) + 4f(a+(2n-1)h) + f(b) \right]$$

其中 h 为步长， $h = \frac{b-a}{2n}$ ；

- e、然后用缀饰能 $\varepsilon_1(k)$ 代替 $\varepsilon(k)$ ，可以得到新的 $\varphi_2(\Lambda)$ ，同样的，用 $\varphi_1(\Lambda)$ 代替得到的 $\varphi(\Lambda)$ ，可以得到新的 $\varepsilon_2(k), \dots$ 。定义相对误差公式为

$$err = \frac{\sqrt{\sum_i (\varepsilon_{n+1}(i) - \varepsilon_n(i))^2} + \sqrt{\sum_i (\varphi_{n+1}(i) - \varphi_n(i))^2}}{\sqrt{\sum_i \varepsilon_n^2(i)} + \sqrt{\sum_i \varphi_n^2(i)}},$$

当相对误差值小于一个极小的数值，比如 10^{-10} ，停止迭代，此时我们认为 $\varepsilon_n(k)$ ， $\varphi_n(\Lambda)$ 是 TBA 方程组的解；

- f、最后根据(3.6)式可得到压强 p 。

附录 B

下面给出 Γ 函数(3.9)式所用到的压强 p 的导数所满足的积分方程。

我们首先对(A.1)和(A.2)做无量纲处理。对(A.1)式左右两边同除以 c^2 ，得

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon(k)}{c^2} &= \frac{k^2}{c^2} - \left(\frac{H/c^2}{2} + \frac{\mu}{c^2} \right) - \frac{T/c^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda \frac{4c}{c^2 [1 + 4(k/c - \Lambda/c)^2]} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-\varphi(\Lambda)/c^2}{T/c^2} \right) \right] \\ &= \frac{k^2}{c^2} - \left(\frac{H/c^2}{2} + \frac{\mu}{c^2} \right) - \frac{T/c^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d \left(\frac{\Lambda}{c} \right) \frac{4}{[1 + 4(k/c - \Lambda/c)^2]} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-\varphi(\Lambda)/c^2}{T/c^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

对式(B.1)作如下替换

$$\frac{\epsilon(k)}{c^2} \rightarrow \tilde{\epsilon}(k), \frac{\varphi(\Lambda)}{c^2} \rightarrow \tilde{\varphi}(\Lambda), \frac{T}{c^2} \rightarrow \tilde{T}, \frac{\mu}{c^2} \rightarrow \tilde{\mu}, \frac{H}{c^2} \rightarrow \tilde{H}, \frac{k}{c} \rightarrow \tilde{k}, \frac{\Lambda}{c} \rightarrow \tilde{\Lambda}, \quad (\text{B.2})$$

因此，(B.1)式可表示为

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}(k) &= \tilde{k}^2 - \left(\frac{\tilde{H}}{2} + \tilde{\mu} \right) - \frac{2\tilde{T}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\Lambda} \frac{1}{[1 + 4(\tilde{k} - \tilde{\Lambda})^2]} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-\tilde{\varphi}(\Lambda)}{\tilde{T}} \right) \right] \\ &= \tilde{k}^2 - \left(\frac{\tilde{H}}{2} + \tilde{\mu} \right) - \frac{2\tilde{T}}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\Lambda} a(\tilde{k} - \tilde{\Lambda}) \ln \left[1 + \exp \left(\frac{-\tilde{\varphi}(\Lambda)}{\tilde{T}} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

其中，积分核 $a(z) = \frac{1}{1+4z^2}$ 。为了方便书写，我们把(B.3)式写作

$$\epsilon(k) = k^2 - \left(\frac{H}{2} + \mu \right) - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \ln [1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)], \quad (\text{B.4})$$

同样，可得

$$\varphi(\Lambda) = H - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda - k) \ln [1 + \exp(-\epsilon(k)/T)], \quad (\text{B.5})$$

接下来我们给出关于压强 p 的各阶导数。首先利用 TBA 方程推导出关于压强 p 对化学势 μ 的积分方程。

$$p = \frac{T}{2\pi} \int_0^L dk \ln [1 + \exp(-\epsilon(k)/T)], \quad (\text{B.6})$$

对(B.6)式求导，得

$$\frac{\partial p}{\partial \mu} = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{1}{T} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)}, \quad (\text{B.7})$$

TBA 方程对化学势 μ 求导，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} &= -1 - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{-\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{T} \\ &= -1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)},\end{aligned}\quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu} &= -\frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{1}{T} \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)}.\end{aligned}\quad (\text{B.9})$$

根据附录 A 过程我们已经得出关于 $\epsilon(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 的结果，把 $\epsilon(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 当做已知，把 $\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}$ 和 $\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}$ 当做未知变量，按照附录 A 同样的步骤迭代解得 $\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}$ 和 $\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}$ 的值，最后根据(B.7)得出 $\frac{\partial p}{\partial \mu}$ 的值。

同理得，压强 p 对磁场强度 H 的偏导数为

$$\frac{\partial p}{\partial H} = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{1}{T} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)}, \quad (\text{B.10})$$

TBA 方程对磁场强度 H 求导，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} &= -\frac{1}{2} - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{-\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{1}{T} \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)},\end{aligned}\quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H} &= 1 - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{1}{T}, \\ &= 1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)}\end{aligned}\quad (\text{B.12})$$

同理得，压强 p 对温度 T 的偏导数为

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial T} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] + \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2}, \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T},\end{aligned}\quad (\text{B.13})$$

TBA 方程对温度 T 求导, 得

$$\begin{aligned}\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[k^2 - \left(\frac{H}{2} + \mu \right) - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \ln[1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)] \right] \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \ln[1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)] - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{-\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T + \varphi(\Lambda)}{T^2} \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \left[\ln[1 + \exp(-\varphi(\Lambda)/T)] + \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{-\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T + \varphi(\Lambda)}{T} \right]\end{aligned}\quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[H - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] \right] \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] - \frac{2T}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \frac{1}{1 + \exp[\epsilon(k)/T]} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2} \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \left[\ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] + \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T} \right],\end{aligned}\quad (\text{B.15})$$

经过同样的计算, 在一阶导数的基础上我们也可以得到二阶导数的积分方程。压强 p 对 μ 的二阶导数, 即为压缩率, 用 κ 表示,

$$\kappa \equiv \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu^2} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2}, \quad (\text{B.16})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu^2} &= \frac{\partial}{\partial \mu} \left[-1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \right] \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu^2} (1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu} \exp(\varphi(\Lambda)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))^2},\end{aligned}\quad (\text{B.17})$$

$$\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu^2} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu^2} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2}, \quad (\text{B.18})$$

压强 p 对 H 的二阶导数为磁化率, 用 χ 表示,

$$\begin{aligned} \chi \equiv \frac{\partial^2 p}{\partial H^2} &= \frac{\partial}{\partial H} \left[-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H^2} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H^2} &= \frac{\partial}{\partial H} \left[-\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \right] \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial H^2} (1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H} \exp(\varphi(\Lambda)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H}}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial H^2} = \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H^2} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2}, \quad (\text{B.21})$$

同理可得, 压强 p 对 T 的二阶导数为比热, 用 C_V 表示,

$$\begin{aligned} C_V \equiv \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \ln[1 + \exp(-\epsilon(k)/T)] + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2} \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[\frac{-\exp(\epsilon(k)/T)}{[1 + \exp(\epsilon(k)/T)]^2} \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} - \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T} + \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \left[-\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2} + \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} \right] \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \left[\frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2} - \frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2} + \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} \right] + \frac{\exp(\epsilon(k)/T)}{[1 + \exp(\epsilon(k)/T)]^2} \frac{\left[\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k) \right]^2}{T^3} \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left\{ \frac{-\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} + \frac{\exp(\epsilon(k)/T)}{[1 + \exp(\epsilon(k)/T)]^2} \frac{\left[\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k) \right]^2}{T^3} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2} &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \frac{-\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T + \varphi(\Lambda)}{T^2} \\
&\quad - \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \left[\frac{-\exp(\varphi(\Lambda)/T)}{[1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)]^2} \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T - \varphi(\Lambda) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T + \varphi(\Lambda)}{T^2} \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T + \varphi(\Lambda)}{T} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \left(-\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial T^2} + \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T - \varphi(\Lambda)}{T^2} \right) \right] \\
&= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \left\{ \frac{-\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial T^2}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} + \frac{\exp(\varphi(\Lambda)/T)}{[1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)]^2} \frac{\left(\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T - \varphi(\Lambda) \right)^2}{T^3} \right\},
\end{aligned} \tag{B.23}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial T^2} &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda-k) \left\{ \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \frac{-\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2} + \frac{1}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \left[-\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2} + \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{-\exp(\epsilon(k)/T)}{[1 + \exp(\epsilon(k)/T)]^2} \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T^2} \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T + \epsilon(k)}{T} \right\} \\
&= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda-k) \left\{ \frac{\exp(\epsilon(k)/T)}{[1 + \exp(\epsilon(k)/T)]^2} \frac{\left[\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k) \right]^2}{T^3} + \frac{-\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial T^2}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right\},
\end{aligned} \tag{B.24}$$

最后，根据(3.9)式中所涉及的得出压强 p 关于参数 H, μ, T 的三组二阶交叉导数，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial H} &= \frac{\partial}{\partial H} \left[-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
&= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial H} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \left(\exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \right)}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
\end{aligned} \tag{B.25}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial H} &= \frac{\partial}{\partial H} \left[-1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \right] \\
&= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu \partial H} (1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu} \left(\exp(\varphi(\Lambda)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H} \right)}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))^2},
\end{aligned} \tag{B.26}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu \partial H} &= \frac{\partial}{\partial H} \left[\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
 &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial H} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \left(\exp(\epsilon(k)/T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \right)}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
 \end{aligned} \tag{B.27}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial T} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
 \end{aligned} \tag{B.28}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[-1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \right] \\
 &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k - \Lambda) \frac{\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu \partial T} (1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu} \left(\exp(\varphi(\Lambda)/T) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T - \varphi(\Lambda)}{T^2} \right)}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))^2},
 \end{aligned} \tag{B.29}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial \mu \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
 &= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dka(\Lambda - k) \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial \mu \partial T} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu} \left(\exp(\epsilon(k)/T) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} \right)}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
 \end{aligned} \tag{B.30}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 p}{\partial H \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H \partial T} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \exp(\epsilon(k)/T) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2}}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
 \end{aligned} \tag{B.31}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[-1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H}}{1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)} \right] \\
&= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Lambda a(k-\Lambda) \frac{\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial H \partial T} (1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T)) - \frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial H} \left(\exp(\varphi(\Lambda)/T) \frac{\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial T} T - \varphi(\Lambda)}{T^2} \right)}{(1 + \exp(\varphi(\Lambda)/T))^2},
\end{aligned} \tag{B.32}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \varphi(\Lambda)}{\partial H \partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H}}{1 + \exp(\epsilon(k)/T)} \right] \\
&= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk a(\Lambda-k) \frac{\frac{\partial^2 \epsilon(k)}{\partial H \partial T} (1 + \exp(\epsilon(k)/T)) - \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial H} \left(\exp(\epsilon(k)/T) \frac{\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial T} T - \epsilon(k)}{T^2} \right)}{(1 + \exp(\epsilon(k)/T))^2},
\end{aligned} \tag{B.33}$$

最后，我们总结数值迭代求解(3.9)式的计算过程。首先，根据附录 A 中过程解得 TBA 方程，得出 $\epsilon(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ ，然后与得出 $\epsilon(k)$ 和 $\varphi(\Lambda)$ 的迭代过程类似，根据(B.8)和(B.9)

式的一阶导数积分方程得出 $\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial \mu}$ 和 $\frac{\partial \varphi(\Lambda)}{\partial \mu}$ 值，然后根据(B.7)式积分得到 $\frac{\partial p}{\partial \mu}$ ，同理得出

其余两个一阶导数积分方程，进而利用同样的迭代步骤得出其余的二阶导数积分方程，最后可以得出关于压强 p 的所有导数，则可得出 Γ 值。

参考文献

- [1] A. Gorlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, *et al*, Realization of Bose-Einstein condensates in lower dimensions, *Phys. Rev. Lett.* 2001, **87**, 130402.
- [2] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, Observation of a one-dimensional Tonks-Girardeau gas, *Science*, 2004, **305**, 1125.
- [3] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, *et al*, Tonks–Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice, *Nature (London)*, 2004, **429**, 277.
- [4] Y. A. Liao, A. S. C. Rittner, T. Paprotta, Spin-imbalance in a one-dimensional fermi gas, *Nature*, 2010, **467**, 567.
- [5] M. T. Batchelor, M. Bortz, X. W. Guan, *et al*, Exact results for the 1D interacting Fermi gas with arbitrary polarization, *J. Phys. Conf. Ser.*, 2006, **42**, 5.
- [6] X. W. Guan, and Z. Q. Ma, One-dimensional multicomponent fermions with δ -function interaction in strong- and weak-coupling limits: Two-component Fermi gas, *Phys. Rev. A* 2012, **85**, 033632.
- [7] H. N. Dai, B. Yang, A. Reingruber, *et al*, Generation and detection of atomic spin entanglement in optical lattices, *Nature Physics*, 2016, **12**, 783-787.
- [8] B. Yang, Y. Y. Chen, Y. G. Zheng, *et al*, Quantum criticality and the Tomonaga-Luttinger liquid in one-dimensional Bose gases, *Phys. Rev. Lett.* 2017, **119**, 165701.
- [9] H. Bethe, Zur Theorie der Metalle, *Zeitschrift Für Physik*, 1931, **71**, 3.
- [10] E. H. Lieb, and W. Liniger, Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state, *Phys. Rev.* 1963, **130**:1605–1616.
- [11] C. N. Yang, and C. P. Yang, Thermodynamics of a one-dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction, *Journal of Mathematical Physics*, 1969, **10**, 7:1115–1122.
- [12] E. Zhao, X. W. Guan, W. V. Liu, *et al*, Analytic thermodynamics and thermometry of Gaudin-Yang Fermi gases, *Phys. Rev. Lett.* 2009, **103**. 140404.
- [13] X. Yin, X. W. Guan, Y. B. Zhang, *et al*, Quantum criticality of a one-dimensional

- Bose-Fermi mixture, Phys. Rev. A 2012, **85**, 013608.
- [14] X. W. Guan, T. Batchelor, C. Lee, Fermi gases in one dimension: From Bethe ansatz to experiments, Reviews of Modern Physics, 2013, **85**, 4:1633.
- [15] P. Mausbach, A. Koster, G. Rutkai, *et al*, Comparative study of the Grüneisen parameter for 28 pure fluids, Journal of Chemical Physics, 2016, **144**, 24.
- [16] J. Shanker, K. Sunil, and B. S. Sharma, The Grüneisen parameter and its higher order derivatives for the earth lower mantle and core, Physics of the Earth and Planetary Interiors, 2017, **262**: 41–47.
- [17] K. Gunter, T. Stöferle, H. Moritz, *et al*, Bose-Fermi mixtures in a three-dimensional optical lattice, Phys. Rev. Lett. 2006, **96**, 180402.
- [18] J. Heinze, S. Götze, J. S. Krauser, *et al*, Multiband spectroscopy of ultracold fermions: Observation of reduced tunneling in attractive Bose-Fermi mixtures, Phys. Rev. Lett. 2011, **107**, 135303.
- [19] Y. Jiang, R. Qi, and H. Zhai, Vortex lattices in the Bose-Fermi superfluid mixture, Phys. Rev. Lett. 2017, **118**, 080403.
- [20] E. Grüneisen, Über die thermische ausdehnung und die spezifische wärme der metalle, Annalen Der Physik, 1908, **331**(6): 211–216.
- [21] E. Grüneisen, Theorie des festen zustandes einatomiger elemente, Annalen Der Physik, 1912, **344**(12): 57–306.
- [22] D. F. Stacey, Theory of thermal and elastic properties of the lower mantle and core, Physics of the Earth and Planetary Interiors, 1995, **89**(3): 219–245.
- [23] G. Liu, J. Zhou, and H. Wang, Anisotropic thermal expansion of SnSe from first principles calculations based on Grüneisen’s theory, Physical Chemistry Chemical Physics, 2017, **19**(23): 15187–15193.
- [24] L. Wang, M. T. Dove, V. V. Brazhkin, *et al*, Supercritical Grüneisen parameter and its universality at the frenkel line, Phys. Rev. E 2017, **96**, 1.
- [25] S. Kumar, S. K. Sharma, and O. P. Pandey, Brief report: Volume dependence of Grüneisen parameter for solids under extreme compression, Pramana-Journal of

- Physics, 2016, **87**, 2.
- [26] R. Kuchler, P. Gegenwart, C. Geibel, *et al*, Systematic study of the Grüneisen ratio near quantum critical points, *Science and Technology of Advanced Materials*, 2007, **8**(5): 428–433.
- [27] R. Kuchler, N. Oeschler, P. Gegenwart, *et al*, Divergence of the Grüneisen ratio at quantum critical points in heavy fermion metals, *Phys. Rev. Lett.* 2003, **91**, 6.
- [28] A. Steppke, R. Kuchler, S. Lausberg, *et al*, Ferromagnetic quantum critical point in the heavy-fermion metal $\text{YbNi}_4(\text{P}_{1-x}\text{As}_x)$, *Science*, 2013, **339**(6122): 933–936.
- [29] P. Gegenwart, Grüneisen parameter studies on heavy fermion quantum criticality, *Reports on Progress in Physics*, 2016, **79**(11).
- [30] E. T. Ritz, and N. A. Benedek, Interplay between phonons and anisotropic elasticity drives negative thermal expansion in PbTiO_3 , *Phys. Rev. Lett.* 2018, **121**, 255901.
- [31] Y. Tokiwa, T. Radu, C. Geibel, *et al*, Divergence of the magnetic Grüneisen ratio at the field-induced quantum critical point in YbRh_2Si_2 , *Phys. Rev. Lett.* 2009, **102**(6): 066401.
- [32] B. Wolf, Y. Tsui, D. Jaiswal-Nagar, *et al*, Magnetocaloric effect and magnetic cooling near a field-induced quantum critical point, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2011, **108**(17): 6862.
- [33] B. Wolf, A. Honecker, W. Hofstetter, *et al*, Cooling through quantum criticality and many-body effects in condensed matter and cold gases, *International Journal of Modern Physics B*, 2014, **28**, 26.
- [34] S. Subir, Quantum phase transitions[M], 2011.
- [35] T. Donner, S. Ritter, T. Bourdel, *et al*, Critical behavior of a trapped interacting bose gas, *Science*, 2007, **315**, 1556.
- [36] Q. Zhou, and T. L. Ho, Signature of quantum criticality in the density profiles of cold atom systems, *Phys. Rev. Lett.* 2009, **105**, 245702.
- [37] Y.Y. Chen, X. W. Guan, and Q. Zhou, Critical behaviours of contact near phase transitions, *Nature communications*, 2014, **10**, 1038.

- [38] 吴强. 金属材料高压物态方程及 Grüneisen 系数的研究[D]. 绵阳:中国工程物理研究院, 69-79 (2004). Q. WU. Studies on equation of state and Grüneisen parameter for metals at high pressures and temperatures [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2004, 69-79.
- [39] F. Quareni, and F. Mulargia, The validity of the common approximate expressions for the Grüneisen parameter, *Geophysical Journal International*, 1988, **93**: 505-519.
- [40] V. Y. Vaschenko, and V. N. Zubarev, Concerning the Grüneisen constant, *Soviet Physics-Solid State*, 1963, **5**: 653-655.
- [41] O. L. Anderson, The Grüneisen ratio for the last 30 years, *Geophysical Journal International*, 2000, **143**(2): 279-294.
- [42] Y. C. Yu, S. Zhang, and X. W. Guan, Grüneisen parameters: origin, identity and quantum refrigeration.(unpublished)
- [43] M. de Souza, P. Menegasso, R. Paupitz, *et al*, Grüneisen parameter for gases and superfluid helium, *European Journal of Physics*, 2016, **37**, 5.
- [44] X. W. Guan and M. T. Batchelor, Polylogs, thermodynamics and scaling functions of one-dimensional quantum many-body systems, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2011, **44**(10): 102001.
- [45] A. Imambekov and E. Demler, Exactly solvable case of a one-dimensional Bose-Fermi mixture, *Phys. Rev. A* 2006, **73**, 021602(R).
- [46] X. G. Yin, X. W. Guan, S. Chen, *et al*, Quantum criticality of a one-dimensional Bose-Fermi mixture, *Phys. Rev. A* 2016, **85**, 013608.
- [47] F. Weickert, R. Kuchler, A. Steppke, *et al*, Low-temperature thermodynamic properties near the field-induced quantum critical point in $\text{NiCl}_2\cdot 4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$, *Phys. Rev. B* 2012, **85**(18): 184408.
- [48] G. R. Stewart, Non-Fermi-liquid behavior in d- and f-electron metals, *Rev. Mod. Phys.* 2001, **73**, 797.
- [49] A. Schroder, G. Aeppli, R. Coldea, *et al*, Onset of antiferromagnetism in heavy fermion metals, *Nature (London)* 2000, **407**, 351.

- [50] P. Gegenwart, F. Kromer, M. Lang, *et al*, Non-Fermi-Liquid Effects at Ambient Pressure in a Stoichiometric Heavy-Fermion Compound with Very Low Disorder: CeNi_2Ge_2 , *Phys. Rev. Lett.* 1999, **82**, 1293.
- [51] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, *et al*, Locally critical quantum phase transitions in strongly correlated metals, *Nature (London)* 2001, **413**, 804.
- [52] P. Coleman, C. Pepin, Q. Si, *et al*, How do Fermi liquids get heavy and die? *J. Phys. Condens. Matter* 2001, **13**, R723.

攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目

薛娅婷, 尹相国, 张云波, 一维玻色费米混合气体的Grüneisen参数, 山西大学学报(自然科学版)

致 谢

时光荏苒，岁月如梭，记忆的雪花翩翩起舞，思绪定格在凤凰花开的季节。这三年的时光既漫长又短暂，其中充满了酸甜苦辣，更有收获和成长，挥洒过汗水也滴落过眼泪，这里有我熟悉的一切，有我热爱的一切。站在毕业的门槛上，回首往昔，奋斗和辛劳成为丝丝的回忆，甜美与欢笑也都尘埃落定。值此毕业论文完成之际，我谨向所有关心、爱护、帮助我的人们表示最诚挚的感谢与最美好的祝愿。

在论文即将梓刻之际，回想三年给我提供帮助的人颇多。首先最应该感谢的是我的导师张云波教授。感谢张老师将我纳入门墙，使我从一个科学的门外汉向一个科学的探索者一步步蜕变。初识张老师，觉得他不苟言笑，十分严肃，几经接触讨论，发现张老师不仅有深厚的学术造诣，严谨的治学风格，严肃的科学态度，更有乐观的性格，以及幽默机智的谈吐更令我深深的折服。使我由刚开始对冗长公式，繁琐推导的抵触，到后来试着接触它，静下心来解决它，渐渐地发现自己也可以提出问题，并且有勇气努力去解决它，探索它。三年的时间，虽不足以水滴石穿，但也足以让我养成一种良好的学习习惯，一种认真细心的工作态度，以及一定的逻辑思维能力。再次对张老师道一声：“张老师，谢谢您！”

其次，我还要感谢尹相国老师，是尹老师教我一步步入门，从最基本的一维玻色模型的哈密顿量出发引导我，从最基本的程序出发教会我，犹记得我第一个简短的 notes 被尹老师孜孜不倦地从分段，标点改了八次，第一个 matlab 小程序尹老师一个语句手把手地教我，每当我疑惑不解时，与尹老师讨论总是收获颇丰，使我一步步进步，真心的感谢您！

还要感谢科研小组的每一位成员，那些既关心我生活又帮助我学习的师兄师姐、师弟师妹们。感谢昌茂林，陆展鹏师兄每次我遇到问题时总能第一时间与我讨论，解决问题，感谢皇甫宏丽，张奋华同学在我失意，遇到挫折心情不好时给予我信心与前进的动力，与你们同行我十分开心。

感谢那一群可爱又可亲、默契如家人的舍友们！感谢一直默默支持我，鼓励我的家人们！感谢这三年里遇到的所有人和事，教会我成长！

凤凰涅槃需要经历烈火的煎熬和痛苦的考验，迈进象牙塔时的激动仍在内心回荡，不知不觉完成了人生中最大的一次蜕变，蜕变需要经历过磨练，磨练可以让我更坚强，去面对生活中遇到的困难和挫折。

“长风破浪会有时，直挂云帆济沧海，”这是我最喜欢的一句诗句，就用这句话作为这篇论文的结尾，作为一段生活的结束。

掩卷而思，唯有感激，唯有自省，唯有不懈地追寻！

个人简况及联系方式

姓名：薛娅婷

性别：女

籍贯：山西省运城市

学习经历：2016年9月至2019年6月在山西大学理论物理研究所攻读硕士学位

联系方式：18335181377

电子邮箱：xyt1084602295@163.com

承 诺 书

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

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