

山西大学

2016 届博士学位论文

Weyl 耦合的旋量玻色气体的 基态相和自旋序

作者姓名	陈冠军
指导教师	张云波 教授
学科专业	凝聚态物理
研究方向	冷原子物理
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2012 年 9 月至 2016 年 6 月

二〇一六年六月

Thesis for Doctor's Degree, Shanxi University, 2016

Ground State Phases and Spin Orders of the Weyl
Coupled Spinor Bose Gases

Student Name	Guanjun Chen
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Specialty	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2012.09-2016.06

June, 2016

目 录

中文摘要.....	V
ABSTRACT	VII
第一章 绪论.....	1
1.1 旋量 BEC 的哈密顿量	1
1.2 旋量 BEC 的平均场基态	3
1.3 反铁磁凝聚体中的向列序	7
1.4 自旋轨道耦合	11
1.5 我们的工作	15
1.6 本文内容	16
第二章 拉曼诱导的自旋轨道耦合.....	17
2.1 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 BEC	17
2.1.1 单粒子基态	17
2.1.2 相互作用效应	20
2.1.3 三相临界点	22
2.1.4 基态的磁性质	27
2.2 自旋轨道耦合的自旋 1 BEC	28
2.2.1 单粒子基态	29
2.2.2 相互作用效应	31
第三章 Rashba 耦合的玻色-爱因斯坦凝聚体.....	37
3.1 Rashba 耦合的赝自旋 1/2 BEC	37
3.1.1 单粒子基态	37
3.1.2 相互作用效应	39
3.2 Rashba 耦合的自旋 1 BEC	42
3.3 势阱中的 Rashba 耦合的 BEC	45
3.3.1 SU(2)对称的相互作用	46
3.3.2 非 SU(2)对称的的相互作用	48
第四章 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 玻色气体.....	51

4.1 均匀系统的基态	51
4.2 简谐囚禁下的单粒子基态	54
4.3 变分波函数	56
4.4 能量泛函	58
4.5 基态相图	64
第五章 Weyl 耦合的自旋 1 玻色气体	71
5.1 单粒子基态	71
5.2 变分波函数	74
5.3 能量泛函	76
5.4 基态相图	77
总结与展望	87
参 考 文 献	89
攻读学位期间取得的研究成果	97
致 谢	99
个人简况及联系方式	101
承 诺 书	103
学位论文使用授权声明	105

Contents

Abstract in Chinese	V
ABSTRACT	VII
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Hamiltonian for Spinor BEC	1
1.2 Mean-field Ground States of Spinor BEC	3
1.3 Nematic Orders in Antiferromagnetic BEC	7
1.4 Spin-Orbit Coupling	11
1.5 Our Works.....	15
1.6 An Outline of this Thesis.....	16
Chapter 2 Raman-Induced Spin-Orbit Coupling.....	17
2.1 Pseudo-Spin-1/2 BEC.....	17
2.1.1 Single Particle Ground States.....	17
2.1.2 Effects of the Interaction	20
2.1.3 Quantum Tricriticality	22
2.1.4 Magnetic Orders	27
2.2 Spin-1 BEC.....	28
2.2.1 Single Particle Ground States.....	29
2.2.2 Effects of the Interaction	31
Chapter 3 Rashba Spin-Orbit Coupled BEC.....	37
3.1 Rashba Coupled Pseudo-Spin-1/2 BEC	37
3.1.1 Single Particle Ground States.....	37
3.1.2 Effects of the Interaction	39
3.2 Rashba Coupled Spin-1 BEC	42
3.3 Rashba Spin-Orbit Coupled BEC in a Trap.....	45
3.3.1 SU(2)-Symmetric Interactions	46
3.3.2 Non-SU(2) Symmetric Interactions.....	48
Chapter 4 Weyl Spin-Orbit Coupled Pseudo-Spin-1/2 BEC	51

4.1	Ground States of Homogeneous System	51
4.2	Single Particle Ground States of Trapped Gases	54
4.3	Variational Wave Function	56
4.4	Energy Functional	58
4.5	Ground State Phase Diagram.....	64
Chapter 5	Weyl Spin-Orbit Coupled Spin-1 BEC.....	71
5.1	Single Particle Ground States	71
5.2	Variational Wave Function	74
5.3	Energy Functional	76
5.4	Ground State Phase Diagram.....	77
	Conclusion and New Perspective	87
	Bibliography.....	89
	Research Achievements.....	97
	Acknowledgment	99
	Personal Profiles	101
	Letter of Commitment	103
	Authorization Statement.....	105

中文摘要

自旋轨道耦合是在物理学的诸多领域广泛存在的一种相互作用，它联系微观粒子的自旋和它的轨道运动。在原子和分子物理领域，它导致光谱的精细结构；在固态材料中，它刻画电子在晶体场中运动所感受到的依赖于电子动量的非均匀场；在自旋霍尔效应，拓扑绝缘体，拓扑超导体等其它领域也都起着至关重要的作用。对冷原子气体来说，由于原子是电中性的，并不存在内禀的自旋轨道耦合。2009年至2011年期间，NIST小组在一系列的实验中借助于激光与原子的相互作用在冷原子气体中相继实现了人工的矢势，磁场，电场，以及非阿贝尔的规范场，即自旋轨道耦合。从那以后，对自旋轨道耦合的冷原子气体性质的研究飞速发展。

NIST小组的实验所实现的一维自旋轨道耦合在一个空间方向上耦合冷原子的自旋和动量，在形式上等价于等权重的 Rashba 和 Dresselhaus 型自旋轨道耦合的叠加。近两年，新的实验进展不断出现，自旋轨道耦合的自旋为 1 的高自旋玻色气体，二维自旋轨道耦合的超冷费米气体和晶格玻色气体在实验上相继实现。在实验上实现更高对称性的三维的自旋轨道耦合，即 Weyl 耦合的方案也不断出现。对自旋轨道耦合的冷原子气体的性质的研究成了近年来持续的研究热点。

理论和实验研究都表明，自旋轨道耦合的玻色气体呈现新奇的基态相，对于 NIST 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 玻色气体，有平面波相，条纹超流相，以及零动量相；而对于自旋 1 的玻色气体，条纹相还将具有空间调制的向列序。这些相在二维的 Rashba 自旋轨道耦合的冷原子气体中也都存在，而 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 玻色气体存在平面波和条纹基态。当自旋轨道耦合的冷原子气体处于较强的囚禁之中时，还会出现半量子涡旋相以及自发局域的晶格相等。

在本论文中，我们分别研究了 Weyl 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 和自旋 1 的玻色气体，主要工作分为两部分：

第一部分，研究了 Weyl 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 的玻色气体的基态。

我们用变分方法研究了囚禁在外部谐振子势阱中的三维 Weyl 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 的玻色气体。我们注意到三维自旋轨道耦合会破坏宇称守恒，不同宇称的谐振子本征态之间存在相互作用，单粒子的总角动量仍然是好量子数。为此我们将谐振子的 s 波和 p 波态叠加作为近似的自旋轨道耦合的单粒子本征态。通常情况下，赝自旋 1/2 的玻色气体中两体相互作用是时间反演对称的，在考虑两体相互作用的情

况下，我们进一步将系统的变分波函数设为两个单粒子本征态的叠加。这两个单粒子本征态是彼此的时间反演态，具有相反的总角动量磁量子数。变分计算的结果表明，弱三维自旋轨道耦合的赝自旋 $1/2$ 的玻色气体的基态具有三维磁 skyrmion 自旋结构，与 Kawakami 等人最近的数值模拟所预言的结果一致[Phys. Rev. Lett. 109, 015301 (2012)]。我们的解析结果揭示了由于自旋轨道耦合的存在，基态不可避免会混入 p 波空间模从而导致两个自旋分量的相分离，这正是三维磁 skyrmion 基态出现的原因。除此之外，我们还发现由于相同和不同自旋分量之间两体相互作用的竞争会导致两种不同的磁 skyrmion 相，区别在于它们具有不同的密度分布对称性。其中之一的密度分布具有宇称对称性和旋转对称性，而另一相的密度分布只有在时间反演和 π 转动的联合操作下才具有不变性。我们的结果还预言当相互作用增长超过一临界值时，系统会发生两种磁 skyrmion 相之间的相变，相变伴随着密度分布的显著变化，而三维磁 skyrmion 自旋结构的拓扑性质不受影响。

第二部分，研究了 Weyl 自旋轨道耦合的自旋 1 的玻色气体的基态。

我们研究了囚禁在外部谐振子势阱中的弱的 Weyl 自旋轨道耦合的自旋 1 的玻色气体的基态，得到了其基态相图。我们发现依据密度-密度和自旋-自旋相互作用强度的大小，玻色气体凝聚在两个不同基态相，分别为磁性相和向列相，这一点与无自旋轨道耦合时的情形一致。不同之处有二：其一，无自旋轨道耦合时，磁性相和向列相分别对应负和正的自旋交换相互作用强度，自旋交换相互作用强度为零是两相的边界。当存在自旋轨道耦合和外部的囚禁时，磁性相和向列相的边界将会被修改。其二，我们发现磁性相的特征是三个自旋分量的密度分布呈相分离的状态，基态是三维的磁 skyrmion，存在相互竞争的磁序和双轴向列序。向列相的特征为三个自旋分量的密度分布总体上是相容的，基态没有自发磁化，仅显示空间调制的单轴向列序。

关键词：自旋轨道耦合；Weyl 耦合；三维磁 skyrmion；向列序

ABSTRACT

Spin-orbit coupling occurs extensively in many physical systems, it links a microscopic particle's quantum-mechanical spin to its spatial motion. It is responsible for the fine structure of the spectra in the field of atomic and molecular physics; For solid-state matter, it depicts the crystal's electric field felt when the electrons which carries spin move through; it also plays crucial roles in the spin-Hall effect, topological insulators and topological superconductors, etc. However, for the cold-atom gases, owing to the atoms are electric neutral, the spin-orbit coupling is not a intrinsic interaction. In the years 2009 to 2011, thanks to the Raman coupling techniques, a series of experiments carried out by the NIST group engineering the synthetic vector potential, magnetic field, electric field, and non-Abelian gauge fields, i.e. the spin-orbit coupling in successive. From then, the studies of the spin-orbit coupled cold-atom gases became a prolonged research interest in the cold-atom community.

The spin-orbit coupling realized experimentally by NIST group is a one-dimensional configuration which couples the spins of the cold atoms to their momenta in one spatial direction. It is equivalent to the equally weighted combination of the well-known Rashba- and Dresselhaus-type spin-orbit coupling in form. In the last two years, the field still attracts experimental interests, and persistent experimental progresses were reported, including the Raman spin-orbit coupled spin-1 Bose gases, two-dimensional spin-orbit coupled ultra-cold Fermi gases, and two-dimensional spin-orbit coupled Bose gases in optical lattice. The experimental schemes for the realization of the most symmetrical three-dimensional spin-orbit coupling, i.e. the Weyl spin-orbit coupling configuration also were proposed. All these experimental efforts make the spin-orbit coupled cold atom gases a persistent research interests in recent years.

The theoretical and experimental works both show that some novel quantum phases occur in the spin-orbit coupled Bose gases. There are plane wave phase, stripe superfluid phase, and zero-momentum phase for NIST spin-orbit coupled pseudospin-1/2 and spin-1 Bose gases, for the latter configuration, the spatially modulated nematic orders also appear

in the stripe phase. These ground state phases also appear in the Rashba coupled gases. For Weyl spin-orbit coupled pseudospin-1/2 Bose gases, the plane wave and the stripe ground states occur again in the homogeneous systems. When a tight external confinement presents, the various novel half-quantum vortex phases and spontaneously localized lattice phases will appear as the ground states.

In this thesis, we study the Weyl spin-orbit coupled pseudospin-1/2 and spin-1 Bose gases respectively. These works include two parts.

Firstly, we present a mean-field study of the ground state of Weyl spin-orbit coupled pseudospin-1/2 Bose gases.

We present a variational study of pseudospin-1/2 Bose gases in a harmonic trap with weak 3D spin-orbit coupling of Weyl type. We notice that the Weyl coupling breaks the parity symmetry, the harmonic oscillator states with different parities will interact with each other, leaving only the total angular momentum a constant of motion, which inspires us to approximate the single particle state as the superposition of harmonic s-wave and p-wave states. As the time reversal symmetry is protected by two-body interaction, we set the variational order parameter as the combination of two mutually time reversal symmetric eigenstates of the total angular momentum with opposite magnetic quantum numbers. The variational results essentially reproduce the 3D skyrmion-like ground state recently identified by Kawakami et. al. [Phys. Rev. Lett. 109, 015301 (2012)] We show that these skyrmion-like ground states emerging in this model are primarily caused by p wave spatial mode involving in the variational order parameter that drives two spin components spatially separated. We find the ground state of this system falls into two phases with different density distribution symmetries depending on the relative magnitude of intraspecies and interspecies interaction: one phase has parity symmetric and axisymmetric density distributions, while the other phase is featured with special joint symmetries of discrete rotational and time reversal symmetry. With the increasing interaction strength the transition occurs between two phases with distinct density distributions, while the topology of the 3D magnetic skyrmion-like spin texture is unaffected.

Secondly, we present the mean-field study of the ground state of Weyl spin-orbit coupled spin-1 Bose gases.

We present a variational study of the spin-1 Bose gases in a harmonic trap with three-dimensional spin-orbit coupling of Weyl type, and obtain a phase diagram. Two ground state phases, namely the magnetic and the nematic phases, are identified depending on the spin-independent and the spin-dependent interactions. Unlike the non-spin-orbit-coupled spin-1 Bose-Einstein condensate for which the phase boundary between the magnetic and the nematic phase lies exactly at zero spin-dependent interaction, the boundary is modified by the spin-orbit-coupling here. We also find the magnetic phase is featured with phase-separated density distributions, 3D skyrmion-like spin textures and competing magnetic and biaxial nematic orders, while the nematic phase is featured with miscible density distributions, zero magnetization and spatially modulated uniaxial nematic order.

Key words: spin-orbit coupling; Weyl coupling; 3D magnetic skyrmion; nematic order

第一章 绪论

伴随着冷却技术的发展, 1995 年在磁阱中相继实现了碱金属原子 ^{87}Rb , ^{23}Na 和 ^7Li 的玻色-爱因斯坦凝聚体(BEC), 磁阱仅能俘获单个自旋分量的碱金属原子, 称为标量玻色-爱因斯坦凝聚体。随后 1997 年, 在光阱中冷却碱金属原子 ^{23}Na 也获得成功[1]。与磁阱不同, 光阱能同时囚禁不同自旋分量的原子, 释放了原子的自旋自由度, 开启了旋量玻色-爱因斯坦凝聚体的研究。同年, Ho[2]与 Ohmi 和 Machida[3]同时利用平均场方法分析了自旋 1 的旋量玻色-爱因斯坦凝聚体的基态, 揭示了基态可能存在的铁磁和反铁磁两种不同的磁序。之后, 对旋量凝聚体的研究快速发展, 包括量子基态, 自旋混合动力学, 外场效应, 自旋结构, 低维系统, 偶极旋量凝聚体等[4]。此外, 在固体材料中, 人们很难了解复杂的材料结构的所有细节, 更难于操控。与之相比, 冷原子系统中原子所处的外部环境可以在实验室中精确控制, 实现各种各样的单粒子势, 相互作用也可以在较大幅度上进行调节, 具有良好的可控性。利用冷原子系统对固体材料进行量子模拟因此成为冷原子和凝聚态物理的研究前沿。美中不足的是, 许多的凝聚态现象源自于电子在固体材料内禀的电磁场中运动的效应, 或者电子的自旋轨道耦合。而电中性的冷原子由于没有自旋-轨道耦合效应, 为量子模拟带来了明显的局限性, 典型的例子是量子霍尔效应和拓扑绝缘体。因而如何在冷原子中实现有效的规范场是这个问题的关键。利用转动凝聚体的方法可以产生等效磁场, 来模拟分数量子霍尔效应, 但实验上发现转动的角频率接近势阱的频率时, 凝聚体变得不稳定, 致使实验上很难达到分数量子霍尔区域。2009 年起, NIST 的一系列实验利用拉曼(Raman)光与原子的相互作用在冷原子中逐步实现了人工的矢势[5], 磁场[6], 电场[7]以及非阿贝尔的规范场, 即自旋轨道耦合[8-10]。本章中我们首先介绍自旋 1/2 的 BEC 和自旋 1 的旋量 BEC 的平均场基态, 然后介绍自旋轨道耦合的基本概念及常见的自旋轨道耦合形式。

1.1 旋量 BEC 的哈密顿量

若旋量玻色气体是由超精细自旋为 s , 质量为 m 的玻色原子组成, 玻色原子由场算符 $\Psi_{m_s}(\mathbf{r})$ 描述, 其中, $m_s = -s, -s+1, \dots, s$ 标记玻色子的超精细态, 是自旋磁量子数。虽然玻色子是自旋量子数为整数的粒子, 但此处自旋 s 却可以是半整数, 例

如的 $s=1/2$ 的玻色气体常称为赝自旋 $1/2$ 的旋量 BEC 或两分量的旋量 BEC，其两个内态可以是同种玻色原子的两个超精细态，例如 ^{87}Rb 的 $|s=1, m_s=-1\rangle$ 和 $|s=2, m_s=1\rangle$ ；也可以是异核玻色原子的超精细态的混合，例如处于某一超精细态的 ^{41}K 和 ^{87}Rb 。玻色子属性全部由场算符 $\Psi_{m_s}(\mathbf{r})$ 满足的玻色子对易关系来体现。本文里总是假定赝自旋 $1/2$ 系统由质量为 m 的同种玻色原子的两个超精细态构成。对于（赝）自旋为 s 的旋量 BEC，其二次量子化的哈密顿算符[11]为

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1.1.1)$$

式中 H_0 为单粒子哈密顿量，包含动能，囚禁势能，外磁场中的磁势能以及自旋轨道耦合能等单体效应。在不考虑外磁场的情形下，单粒子哈密顿量可以写成

$$H_0 = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{trap}} + V_{\text{so}} \right) \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.1.2)$$

其中 $\Psi = (\Psi_s, \Psi_{s-1}, \dots, \Psi_{-s})^T$ ， V_{trap} 取决于 BEC 所处的外部囚禁势，对于囚禁于简谐势阱中的 BEC

$$V_{\text{trap}} = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2. \quad (1.1.3)$$

这里总是假定两种原子感受同样的囚禁势，例如在光偶极阱中囚禁同种玻色原子的两个超精细态。 V_{so} 是自旋轨道耦合，其可能的形式将在 1.3 节中作详细介绍。

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.1.4)$$

为相互作用哈密顿，稀薄的冷原子气体中的两体相互作用势 $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 通常可以近似地用短程的接触赝势

$$V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (1.1.5)$$

来描写， g 代表接触相互作用的强度。对于旋量 BEC 来说还要考虑不同的碰撞通道，其相互作用哈密顿也有所不同。具体的说，对于赝自旋 $1/2$ 的旋量 BEC，相互作用为

$$H_{\text{int}} = \frac{g_{\alpha\beta}}{2} \int d\mathbf{r} \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\beta(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}), \quad (1.1.6)$$

式中 $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ 代表两个自旋分量，重复指标默认求和。 $g_{\alpha\beta}$ 代表处于 α 和 β 两个超精细态的原子的相互作用，正比于相应态的 s 波散射长度 $a_{\alpha\beta}$

$$g_{\alpha\beta} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_{\alpha\beta}} a_{\alpha\beta}, \quad (1.1.7)$$

式中 $m_{\alpha\beta}^{-1} = m_{\alpha}^{-1} + m_{\beta}^{-1}$ 是约化质量。与真实自旋系统不同的是，赝自旋系统不具备自旋空间中的转动对称性， $g_{\uparrow\uparrow}$ ， $g_{\downarrow\downarrow}$ 和 $g_{\uparrow\downarrow}$ 一般是不相等的，这取决于实验中作为自旋上下两个分量的量子态。理论上常考虑的一种情形为上下两个分量对称的情形，即 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$ 。

对于自旋 1 的旋量 BEC，两体相互作用势

$$V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')(c_0 + c_2 \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2), \quad (1.1.8)$$

式中 $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ ， $c_2 = (g_2 - g_0)/3$ 分别是密度相互作用和自旋交换相互作用的强度。而 $g_{0,2} = 4\pi\hbar^2 a_{0,2}/m$ ， $a_{0,2}$ 分别表示总自旋 0 和 2 通道的 s 波散射长度。 \mathbf{s} 是自旋 1 的自旋算符，其形式为

$$s_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, s_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.1.9)$$

二次量子化的相互作用哈密顿为

$$H_{\text{int}} = \frac{c_0}{2} \int d\mathbf{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + \frac{c_2}{2} \int d\mathbf{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) \mathbf{s}_{\alpha\alpha'} \cdot \mathbf{s}_{\beta\beta'} \Psi_{\beta'}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{r}), \quad (1.1.10)$$

式中 $\alpha, \beta, \alpha', \beta' = 1, 0, -1$ 表示三个超精细能级。除短程接触势外，对于磁性原子，两体相互作用势 $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 还可以包含长程的偶极-偶极相互作用[11]。与单粒子能量相比，两体相互作用通常较弱，特别是其中自旋相互作用的部分，但却对凝聚体的磁性质起着决定性的作用。

1.2 旋量 BEC 的平均场基态

当 BEC 处于基态时，所有原子处于同一量子基态，可以用平均场方法近似处理。在平均场近似下，将场算符用其在基态的期待值代替，设 $\langle \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \rangle_0 = \langle \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle_0 = \Psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ ，从而将场算符 c 数化，忽略场算符的对易关系。

首先考虑两分量的旋量 BEC，其波函数可以写成 $\Psi = (\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow})^T$ ，在无自旋轨道耦合时， $V_{\text{so}} = 0$ ，此两分量 BEC 的 Gross-Pitaevskii(GP)能量泛函为

$$E[\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow}] = \int d\mathbf{r} \left[\sum_{i=\uparrow, \downarrow} \Psi_i^{\dagger} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{trap}} + \frac{g_{ii}}{2} |\Psi_i|^2 \right) \Psi_i + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 |\Psi_{\downarrow}|^2 \right]. \quad (1.2.1)$$

利用变分方法可以从能量泛函得到含时的 GP 方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_{\uparrow}}{\partial t} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\uparrow} + V_{\text{trap}} \Psi_{\uparrow} + g_{\uparrow\uparrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 \Psi_{\uparrow} + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 \Psi_{\uparrow}, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_{\downarrow}}{\partial t} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\downarrow} + V_{\text{trap}} \Psi_{\downarrow} + g_{\downarrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 \Psi_{\downarrow} + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 \Psi_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

设 $\Psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}, t) = \Psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}) e^{-i\mu_{\uparrow, \downarrow} t/\hbar}$, 代入可以得到定态的 GP 方程

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) + V_{\text{trap}} \Psi_{\uparrow} + g_{\uparrow\uparrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 \Psi_{\uparrow} + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 \Psi_{\uparrow} &= \mu_{\uparrow} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}), \\ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) + V_{\text{trap}} \Psi_{\downarrow} + g_{\downarrow\downarrow} |\Psi_{\downarrow}|^2 \Psi_{\downarrow} + g_{\uparrow\downarrow} |\Psi_{\uparrow}|^2 \Psi_{\downarrow} &= \mu_{\downarrow} \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

这里为了满足粒子数守恒的要求 $N_{\uparrow, \downarrow} = \int d\mathbf{r} |\Psi_{\uparrow, \downarrow}|^2$ 引入的拉格朗日乘子 $\mu_{\uparrow, \downarrow}$ 代表化学势。上下两个分量满足的方程是相互耦合的，这体现在 $g_{\uparrow\downarrow}$ 项上。上述定态 GP 方程的解已经在诸多文献(例如[12])中讨论过，这里不作详述。主要关注 $g_{\uparrow\uparrow}, g_{\downarrow\downarrow}, g_{\uparrow\downarrow}$ 的值对基态的影响。直觉告诉我们，当两个分量之间存在强的排斥相互作用，即 $g_{\uparrow\downarrow}$ 相对很大时，两个分量是相分离的。所谓相分离指的是两个自旋分量的空间密度分布是相互分开的。下面在 Thomas-Fermi 近似下讨论两分量 BEC 的基态[12]。Thomas-Fermi 近似指的是：在极低温度下，BEC 中原子的动能与势能、相互作用能相比可以忽略。在此近似下，设 $n_{\uparrow, \downarrow} = |\Psi_{\uparrow, \downarrow}|^2$ ，从定态的 GP 方程可得：在两相共存的区域，即 $n_{\uparrow} \neq 0$, $n_{\downarrow} \neq 0$ 时，基态的密度分布为

$$\begin{aligned} n_{\uparrow} &= \frac{g_{\downarrow\downarrow} \mu_{\uparrow} - g_{\uparrow\downarrow} \mu_{\downarrow} - g_{\downarrow\downarrow} V_{\text{trap}} + g_{\uparrow\downarrow} V_{\text{trap}}}{g_{\uparrow\uparrow} g_{\downarrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2} \\ &= \frac{1}{g_{\uparrow\uparrow} \Gamma_{\uparrow\downarrow}} \left(\mu_{\uparrow} - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\downarrow\downarrow}} \mu_{\downarrow} - \Gamma_{\downarrow\downarrow} V_{\text{trap}} \right), \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

$$\begin{aligned} n_{\downarrow} &= \frac{g_{\uparrow\uparrow} \mu_{\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow} \mu_{\uparrow} - g_{\uparrow\uparrow} V_{\text{trap}} + g_{\uparrow\downarrow} V_{\text{trap}}}{g_{\uparrow\uparrow} g_{\downarrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2} \\ &= \frac{1}{g_{\downarrow\downarrow} \Gamma_{\uparrow\downarrow}} \left(\mu_{\downarrow} - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\uparrow\uparrow}} \mu_{\uparrow} - \Gamma_{\uparrow\uparrow} V_{\text{trap}} \right), \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

这里，无量纲的参数 Γ 为

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow} = 1 - \frac{g_{\uparrow\downarrow}^2}{g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow}}, \quad (1.2.6)$$

$$\Gamma_{\uparrow\uparrow} = 1 - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\uparrow\uparrow}}, \quad (1.2.7)$$

$$\Gamma_{\downarrow\downarrow} = 1 - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\downarrow\downarrow}}, \quad (1.2.8)$$

利用两相共存的条件可以得到 $\Gamma_{\uparrow\downarrow} > 0$ ，即存在两相共存区域的条件为

$$g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2 > 0. \quad (1.2.9)$$

共存区域的边界由方程组

$$\mu_{\uparrow} - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\downarrow\downarrow}} \mu_{\downarrow} - \Gamma_{\downarrow\downarrow} V_{\text{trap}} = 0 \quad (1.2.10)$$

$$\mu_{\downarrow} - \frac{g_{\uparrow\downarrow}}{g_{\uparrow\uparrow}} \mu_{\uparrow} - \Gamma_{\uparrow\uparrow} V_{\text{trap}} = 0 \quad (1.2.11)$$

的解决定。而如果

$$g_{\uparrow\uparrow}g_{\downarrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2 < 0 \quad (1.2.12)$$

则不存在两相共存的区域，即两分量是完全空间分离的。单从相分离的条件已经可以看出，与标量 BEC 相比，由于相互作用参数的变化，即使是最简单的两分量旋量 BEC 已经显示出丰富的基态密度结构。

如果假定赝自旋 1/2 系统由同种玻色原子的两个超精细态构成，GP 能量泛函可以用赝自旋算符表示[12,13]。为此，设

$$\begin{aligned} \Psi &= \sqrt{n(\mathbf{r})} \chi \\ &= \sqrt{n(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} \chi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \chi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

其中 $n(\mathbf{r}) = n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + n_{\downarrow}(\mathbf{r})$ 是凝聚体的局域密度，归一化的复值旋量满足 $|\chi_{\uparrow}|^2 + |\chi_{\downarrow}|^2 = 1$ 。定义(归一化的)赝自旋密度为 $\Sigma(\mathbf{r}) = \chi^{\dagger} \sigma \chi$ ，其中 σ 是泡利矩阵，则

$$\begin{pmatrix} \Sigma_x \\ \Sigma_y \\ \Sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\text{Re}(\chi_{\uparrow}\chi_{\downarrow}^*) \\ -2\text{Im}(\chi_{\uparrow}\chi_{\downarrow}^*) \\ |\chi_{\uparrow}|^2 - |\chi_{\downarrow}|^2 \end{pmatrix}, \quad (1.2.14)$$

式中 Re 和 Im 分别代表取实部和虚部。在此赝自旋表示下，两分量 BEC 的 GP 能量泛函可以写成

$$E = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\sqrt{n})^2 + \frac{\hbar^2 n}{8m} (\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma})^2 + \frac{mn}{2} \mathbf{v}_{\text{eff}}^2 + nV_{\text{trap}} + \frac{n^2}{2} (c_0 + c_1 \Sigma_z + c_2 \Sigma_z^2) \right], \quad (1.2.15)$$

式中第一行是单粒子的能量，第二行是相互作用能。其中 $\mathbf{v}_{\text{eff}} = (\hbar/m) \text{Im} \left(\sum_{i=\uparrow, \downarrow} \chi_i^* \nabla \chi_i \right)$ ， $c_0 = (g_{\uparrow\uparrow} + g_{\downarrow\downarrow} + 2g_{\uparrow\downarrow})/4$ ， $c_1 = (g_{\uparrow\uparrow} - g_{\downarrow\downarrow})/2$ ， $c_2 = (g_{\uparrow\uparrow} + g_{\downarrow\downarrow} - 2g_{\uparrow\downarrow})/4$ 。注意不要将此处的 $c_{0,2}$ 与(1.1.10)式混淆。可以看出，即使在外无磁场的情况下，赝自旋 1/2 系统也会出现等效的磁场效应。如果 $g_{\uparrow\uparrow} \neq g_{\downarrow\downarrow}$ ，则会另外出现相互作用诱导的 $\Sigma_z(\mathbf{r})$ 项，表示等效的一次塞曼效应。若 $g_{\uparrow\uparrow} + g_{\downarrow\downarrow} \neq 2g_{\uparrow\downarrow}$ ，则会另外出现相互作用诱导的 Σ_z^2 项，表示等效的二次塞曼效应。磁场项的出现将导致转动赝自旋 $\boldsymbol{\Sigma}$ 时能量不简并，进而破坏自旋空间的 $\text{SU}(2)$ 对称性，此时仅绕 z 轴转动的 $\text{SO}(2)$ 对称性被保留。一种特殊的情况是两个自旋分量对称，即 $c_1 = 0$ ，此时 c_2 代表自旋-自旋相互作用的强度。 $c_2 > 0$ 代表反铁磁的相互作用， $c_2 < 0$ 代表铁磁的相互作用。另一种更特殊的情况是 $\text{SU}(2)$ 对称的相互作用，即 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g_{\uparrow\downarrow}$ ，此时 $c_1 = c_2 = 0$ 。

对于自旋 1 的旋量 BEC，其波函数可以写成 $\Psi = (\Psi_1, \Psi_0, \Psi_{-1})^T$ ，GP 能量泛函为

$$E[\Psi] = \int d\mathbf{r} \sum_{i=1,0,-1} \Psi_i^\dagger \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{trap}} \right) \Psi_i + \frac{c_0}{2} \int n^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{c_2}{2} \int \mathbf{S}^2 d\mathbf{r}. \quad (1.2.16)$$

这里 $n_{1,0,-1} = |\Psi_{1,0,-1}|^2$ 代表三个分量的粒子密度，

$$n(\mathbf{r}) = n_1(\mathbf{r}) + n_0(\mathbf{r}) + n_{-1}(\mathbf{r}), \quad (1.2.17)$$

表示总密度。

$$\mathbf{S} = \Psi^\dagger \mathbf{s} \Psi, \quad (1.2.18)$$

表示自旋密度。 c_0 称作密度相互作用强度， c_2 项常称作自旋交换相互作用。对于典

型的 ^{87}Rb 原子的自旋 1 的旋量 BEC, $c_2/c_0 \approx -0.005$, 而 ^{23}Na 原子 $c_2/c_0 \approx 0.04$ [13], 因而 $c_0 \gg c_2$, 此时相互作用中与自旋有关的部分几乎不影响凝聚体的空间分布, 这时可以使用单(空间)模近似。单模近似假设旋量 BEC 平均场波函数的不同自旋分量共享相同的空间模, 即

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi_0(\mathbf{r})\zeta = \Phi_0(\mathbf{r})(\zeta_1, \zeta_0, \zeta_{-1})^T, \quad (1.2.19)$$

其中, 空间模 $\Phi_0(\mathbf{r})$ 满足归一化条件 $\int \Phi_0^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N$, 或者写成 $\Phi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{n(\mathbf{r})}$, N 为凝聚体的总原子数。 $\zeta = (\zeta_1, \zeta_0, \zeta_{-1})^T$ 是归一化的旋量, 满足 $\zeta^\dagger \zeta = 1$ 。 $\Phi_0(\mathbf{r})$ 可以近似通过求解定态的平均场 Gross-Pitaevskii 方程

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + c_0 \Phi_0^2(\mathbf{r}) \right) \Phi_0(\mathbf{r}) = \mu \Phi_0(\mathbf{r}) \quad (1.2.20)$$

得到, 这里 μ 是化学势。旋量部分 ζ 通过最小化自旋有关的相互作用能 $\mathcal{E}_{\text{int}} = \frac{c_2}{2} \int \mathbf{S}^2 d\mathbf{r}$ 来确定。因此, 自旋 1 旋量 BEC 的基态会出现两种相[2]:

(1). $c_2 < 0$ 或 $g_2 < g_0$ 时, 最小化相互作用能要求自旋密度

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S} / n = \Psi^\dagger \mathbf{s} \Psi / \Psi^\dagger \Psi = \zeta^\dagger \mathbf{s} \zeta, \quad (1.2.21)$$

归一化, 即 $|\mathbf{S}| = 1$, 此时基态处于铁磁相。可能的基态旋量波函数为

$$\zeta = \mathcal{U} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2.22)$$

其中 $\mathcal{U}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-is_z \alpha} e^{-is_y \beta} e^{-is_z \gamma}$ 是自旋空间中的 SO(3) 转动算符, α, β, γ 是欧拉角。因此, 在无外磁场时, 基态是高度简并的, 这源于自旋 1 旋量 BEC 的相互作用是 SU(2) 对称的。 ^{87}Rb 原子的 BEC 是典型铁磁凝聚体。

(2). $c_2 > 0$ 或 $g_2 > g_0$ 时, 最小化相互作用能要求 $|\mathbf{S}| = 0$, 此时基态处于反铁磁相或称为极化(Polar) 相。可能的基态波函数为

$$\zeta = \mathcal{U} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.2.23)$$

^{23}Na 原子的 BEC 是典型反铁磁凝聚体。

1.3 反铁磁凝聚体中的向列序

本节讨论自旋为 1 系统的自旋序, 我们首先考虑二阶的自旋张量算符 \mathbf{Q} , 张量 \mathbf{Q}

有九个分量, $Q_{ij} = s_i s_j, (i, j = x, y, z)$ 。在坐标系转动变换下它的变换规则为

$$Q'_{ij} = \sum_{m,n} a_{im} a_{jn} Q_{mn}, \quad (1.3.1)$$

其中 a_{ij} 为一实的正交矩阵, 描述坐标系的转动

$$x'_i = \sum_j a_{ij} x_j, \quad (1.3.2)$$

满足

$$\sum_k a_{ik} a_{jk} = \delta_{ij}, \quad \sum_i a_{ik} a_{il} = \delta_{kl}, \quad \det a_{ij} = 1. \quad (1.3.3)$$

任意二阶张量都可以约化为一个对称的二阶张量和一个反对称的二阶张量, 以张量 \mathbf{Q} 为例

$$\mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{N}} + \mathbf{A}, \quad (1.3.4)$$

式中对称的张量 $\tilde{\mathbf{N}}$ 和反对称的张量 \mathbf{A} 的分量分别为

$$\tilde{N}_{ij} = \tilde{N}_{ji} = \frac{1}{2}(Q_{ij} + Q_{ji}), \quad A_{ij} = -A_{ji} = \frac{1}{2}(Q_{ij} - Q_{ji}). \quad (1.3.5)$$

在坐标系转动变化下, 对称张量和反对称张量在各自的分量间变换。实际上, 我们可以作进一步的约化。反对称张量 \mathbf{A} 仅有三个独立分量 A_{12}, A_{23}, A_{31} 无法进一步约化,

而对于对称张量 $\tilde{\mathbf{N}}$, 它的迹是坐标转动不变的

$$\sum_i \tilde{N}'_{ii} = \sum_{ilm} a_{il} a_{im} \tilde{N}_{lm} = \sum_{lm} \delta_{lm} \tilde{N}_{lm} = \sum_m \tilde{N}_{mm}. \quad (1.3.6)$$

因而我们可以要求对称张量 $\tilde{\mathbf{N}}$ 的迹为零, 把它进一步约化为 $\tilde{\mathbf{N}} = \mathbf{N} + \boldsymbol{\tau}$ 。因此, 自

旋张量 \mathbf{Q} 可以约化[14]为

$$\mathbf{Q} = \mathbf{N} + \mathbf{A} + \boldsymbol{\tau}. \quad (1.3.7)$$

其中

$$\tau_{ij} = \frac{1}{3} \text{Tr}(Q_{ij}) \delta_{ij}, \quad (1.3.8)$$

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(Q_{ij} - Q_{ji}), \quad (1.3.9)$$

$$N_{ij} = \frac{1}{2}(Q_{ij} + Q_{ji}) - \frac{1}{3} \text{Tr}(Q_{ij}) \delta_{ij}. \quad (1.3.10)$$

分别为不可约的零阶(直角)张量(标量), 一阶(直角)张量(矢量)和二阶(直角)张量, 其独立分量数分别为 1, 3, 5。我们可以用它们取代 \mathbf{Q} 来作为系统的自旋算符: 由于

$$\text{Tr}(Q_{ij}) = \sum_i s_i^2 = \mathbf{s}^2 = 2, \quad \boldsymbol{\tau} \text{ 只有一个独立分量与自旋的大小有关, 是自旋空间转动不变的;}$$

由 $Q_{ij} - Q_{ji} = s_i s_j - s_j s_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} s_k$ 可知反对称的张量 \mathbf{A} 的三个独立分量

A_{23}, A_{31}, A_{12} 分别正比于 s_x, s_y, s_z , 即自旋算符 \mathbf{s} ; 对称张量 \mathbf{N} 的分量为

$$N_{ij} = \frac{1}{2}(s_i s_j + s_j s_i) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (1.3.11)$$

称为向列张量算符[14]。上面的约化过程即是直积群的 $\text{SU}(2)$ 约化

$$1 \otimes 1 = 0_{\text{sym}} \oplus 1_{\text{asym}} \oplus 2_{\text{sym}}, \quad (1.3.12)$$

利用向列张量算符, 我们可以定义向列张量密度[13]为

$$\mathcal{N} = \Psi^\dagger \mathbf{N} \Psi. \quad (1.3.13)$$

与(1.2.21)类似地, 我们可以定义归一化的向列张量密度

$$\boldsymbol{\mathfrak{n}} \equiv \frac{\mathcal{N}}{n} = \frac{\Psi^\dagger \mathbf{N} \Psi}{\Psi^\dagger \Psi}. \quad (1.3.14)$$

向列张量密度的“期待值”, 定义为 $\langle \mathcal{N} \rangle = \int \Psi^\dagger \mathbf{N} \Psi d\mathbf{r}$, 可以作为四极自旋序参数[15,16], 又称为向列序参数。当向列序参数非零时, 系统具有四极自旋序, 或向列序。向列序描写各项异性的自旋涨落[4]。而前面(1.2.18)式定义的自旋密度的“期待值” $\langle \mathbf{S} \rangle = \int \Psi^\dagger \mathbf{s} \Psi d\mathbf{r}$ 则可以作为偶极自旋序参数, 又称为磁序参数, 它取非零值时, 系统具有偶极自旋序或磁序。对于自旋 1 系统而言, 这两种自旋序是相互竞争的, 可以证明[17]

$$\frac{1}{2} \mathfrak{S}^2 + \text{Tr}(\boldsymbol{\mathfrak{n}}^2) = \frac{2}{3}, \quad (1.3.15)$$

式中的两个量 \mathfrak{S}^2 和 $\text{Tr}(\boldsymbol{\mathfrak{n}}^2)$ 都是非负的标量。需要注意的是, 这些讨论是针对自旋 1 系统的。对于自旋 1/2 不存在向列序, 只有磁序。而且对于自旋 1 系统, 在文献

中, 向列张量密度有不同的定义方法。例如 Mueller 等[17,18]将其定义为 $\frac{1}{3} \delta_{ij} - \boldsymbol{\mathfrak{n}}_{ij}$,

其方便之处除了三个本征值均是半正定的之外, 在这种定义下, $\text{Tr} \boldsymbol{\mathfrak{n}} = 1$ 。Ueda 等

[13,19-21]的定义是 $\mathfrak{n}_{ij} + \frac{2}{3}\delta_{ij}$ ，我们有， $\text{Tr}\mathfrak{n} = 2$ ，其好处是，对于完全向列态， \mathfrak{n} 的三个对角分量直接对应三个方向的自旋涨落。但这些定义本质上都是相同的。

对于前面的单模近似下的基态(1.2.22)和(1.2.23)而言，自旋密度不随空间变化。(1.2.22)式是完全磁化的铁磁态，它的自旋密度 $|\mathfrak{S}| = 1$ 。我们用矢量来表示它的特征。而自旋密度 $\mathfrak{S} = 0$ ，向列序张量密度非零的反铁磁态(1.2.23)是完全向列的态，是一种纯粹的量子现象。而且它的序参数稍微复杂，描述起来困难。

对于简单的完全向列态，比如纵向 Polar 态 $\boldsymbol{\zeta} = (0, 1, 0)^T$ ，非零的向列张量密度分量为 $\mathfrak{n}_{xx} = \mathfrak{n}_{yy} = 1/3$ ， $\mathfrak{n}_{zz} = -2/3$ ，因而向列张量密度 \mathfrak{n} 的本征值为 $1/3, 1/3$ 和 $-2/3$ (在 Mueller 的定义下，有一个本征值为 1，另外两个是 0；在 Ueda 定义下，有一个本征值为 0，另外两个是 1)。考虑到自旋密度 $\mathfrak{S} = 0$ ，从(1.3.11)和(1.3.14)式可以得出 z 方向的自旋涨落 $\langle s_z^2 \rangle - \langle s_z \rangle^2 = \mathfrak{n}_{zz} + 2/3 = 0$ ， xy 方向的涨落是各向同性的，波函数具有沿 z 轴的旋转对称性，这个方向称为向列方向(director)，用 \mathbf{u} (或 $-\mathbf{u}$) 来表示。它也是本征值 $-2/3$ 所对应的本征矢的方向。这正是为什么称其为纵向 Polar 态的原因。为描述纵向 Polar 态，可以用空间中无箭头的小棒来表示向列方向。

再比如横向 Polar 态 $\boldsymbol{\zeta} = (1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})^T$ ，非零的向列张量密度分量为 $\mathfrak{n}_{xx} = \mathfrak{n}_{zz} = 1/3$ ， $\mathfrak{n}_{yy} = -2/3$ ，向列方向沿 y 轴。这些都是单轴向列态，其特征为沿向列方向 \mathbf{u} 的自旋涨落为零，即 $\langle (\mathfrak{S} \cdot \mathbf{u})^2 \rangle = 0$ 。

一般而言，向列张量密度 \mathfrak{n} 有三个不同的本征值，这样的态称为双轴向列态。此时无法用单一的向列轴来表示。在 Mueller 的定义下可以用一个椭球来描述双轴向列态，其原理是利用 \mathfrak{n} 可以唯一确定一个椭球，球心设为 $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$ 时，椭球面上的各点 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ 满足 $\mathbf{x}^T \mathfrak{n} \mathbf{x} = 1$ ，椭球的三个半轴的方向对应向列张量密度 \mathfrak{n} 的三个本征矢，半轴的长度为对应各自本征值的平方根的倒数。前述的单轴向列态，例如纵向和横向 Polar 态，在 Mueller 的定义下， \mathfrak{n} 有两个本征值为零，此时椭球有两个半轴长度为零，椭球退化为不带箭头的小棒。而对于如(1.2.22)描述的(纵向)铁磁态，例如 $\boldsymbol{\zeta} = (1, 0, 0)^T$ ，非零的向列张量密度分量为 $\mathfrak{n}_{xx} = \mathfrak{n}_{yy} = 1/2$ ，此时椭球沿 z 方向的半轴长度为零，另两半轴长度相等，说明在此平面上自旋涨落是各向同性的，椭球此时退化为一圆盘，圆盘的一面的法线方向正是归一化自旋密度 \mathfrak{S} 的方向。

以上考虑的是单模近似下的态，若单模近似不适用，例如对于具有较强的自旋

交换作用或偶极相互作用同的旋量凝聚体和我们将要讨论的自旋轨道耦合的凝聚体来说，自旋和空间运动相互影响。此时自旋序参数随空间变化，在二维的纸面上难以呈现双轴向列序而不损失信息。此时可以选择 $\text{Tr}(\mathfrak{n}^2)$ 的空间变化，甚至可以以向列张量密度 \mathfrak{n} 的两个最大的本征值的差的空间变化[22]来间接反映向列张量密度的空间变化。

1.4 自旋轨道耦合

在前几节中忽略(1.1.2)式中的自旋轨道相互作用 V_{so} ，讨论了无自旋轨道耦合的旋量玻色-爱因斯坦凝聚体的基态。本节来介绍自旋轨道相互作用 V_{so} 的可能的形式。

(a) Experimental layout

(b) Level diagram

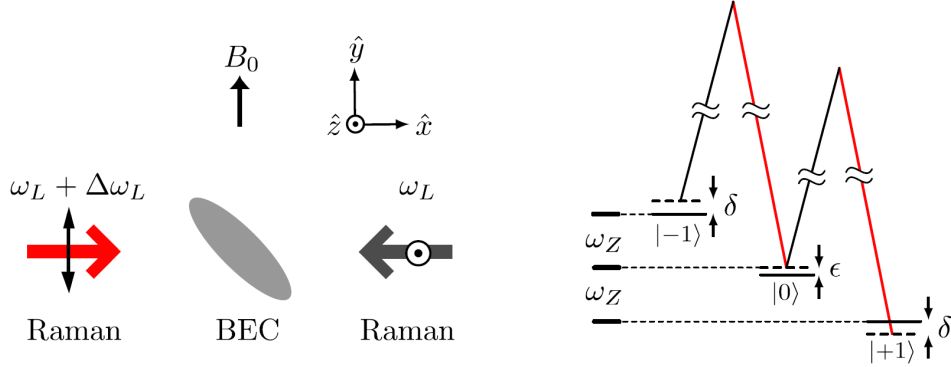


图 1.1 拉曼诱导的矢势[5]。(a)实验示意图，(b)能级图。

2009年，NIST的Lin等人首次在 ^{87}Rb 的BEC中实现了人造矢势[5]，掀起了冷原子中人工规范场的研究热潮。实验如图1.1(a)所示， ^{87}Rb 的BEC囚禁在光偶极阱中，在 y 方向加偏置磁场 B_0 ，两束沿 x 方向相对传播的线偏振拉曼光频率分别为 ω_L 和 $\omega_L + \Delta\omega_L$ ，分别沿 z 和 y 方向偏振，耦合 ^{87}Rb 的超精细态 $|s=1, m_s\rangle$ 中 $\Delta m_s = \pm 1$ 并且线动量 x 分量差为 $2\hbar k_r$ 的两个内态， $\hbar k_r = h/\lambda$ 是单光子反冲动量， λ 是拉曼光的波长，一次和二次塞曼效应分别为 ω_z 和 ε ，能级如图1.1(b)所示。因为拉曼光引起的动量转移发生在 x 方向，单粒子哈密顿可以写成

$$H_0 = H_{0x}(k_x) + \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + k_z^2) + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}), \quad (1.4.1)$$

其中

$$H_{0x} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \omega_z & \frac{\Omega_R}{2} e^{i(2k_r x - \Delta\omega_L)} & 0 \\ \frac{\Omega_R}{2} e^{-i(2k_r x - \Delta\omega_L)} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \varepsilon & \frac{\Omega_R}{2} e^{i(2k_r x - \Delta\omega_L)} \\ 0 & \frac{\Omega_R}{2} e^{-i(2k_r x - \Delta\omega_L)} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \omega_z \end{pmatrix}. \quad (1.4.2)$$

Ω_R 是双光子 Rabi 频率，在旋波近似下，

$$H_{0x} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \delta & \frac{\Omega_R}{2} e^{i2k_r x} & 0 \\ \frac{\Omega_R}{2} e^{-ie^{i2k_r x}} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \varepsilon & \frac{\Omega_R}{2} e^{i2k_r x} \\ 0 & \frac{\Omega_R}{2} e^{-ie^{i2k_r x}} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \delta \end{pmatrix}. \quad (1.4.3)$$

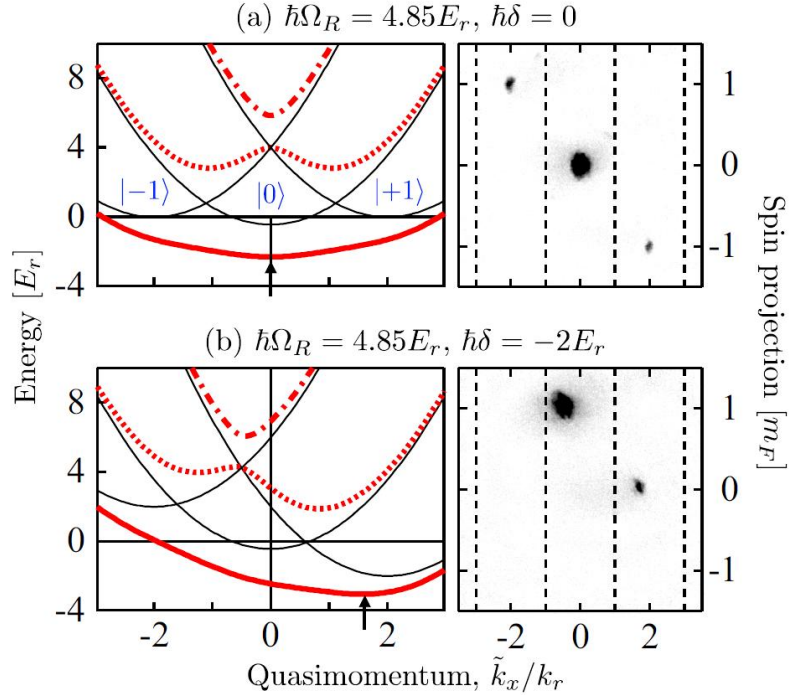
其中 $\delta = \Delta\omega_L - \omega_z$ 为拉曼光的双光子失谐。应用么正变换 $U = e^{i2k_r x s_z}$ ，系统沿 x 方向运动的哈密顿量可以写成

$$H_{0x} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (k_x - 2k_r)^2 - \delta & \frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ \frac{\Omega_R}{2} & \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 - \varepsilon & \frac{\Omega_R}{2} \\ 0 & \frac{\Omega_R}{2} & \frac{\hbar^2}{2m} (k_x + 2k_r)^2 + \delta \end{pmatrix}. \quad (1.4.4)$$

对角化单粒子哈密顿量可以得到单粒子的能谱，如图 1.2 所示，图中取反冲动能 $E_r = \hbar^2 k_r^2 / 2m$ 为能量单位。在强的拉曼缀饰情况下，最低的单粒子能谱呈现单一的能量最小点。将色散关系在最低点附近作展开，得

$$E_0(k_x) \approx \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x - A_x)^2, \quad (1.4.5)$$

m^* 是有效质量， A_x 为最小点的动量，形式上可以看作是拉曼光诱导的阿贝尔规范场，即矢势。可以知道，在拉曼共振 $\delta = 0$ 时， $A_x = 0$ 。在接下来的实验中，为了获得人工的磁场，Lin 等人[6]在 y 方向加入梯度磁场，即将偏置场强设为 $B = B_0 - b'y$ 。此时双光子失谐具有沿 y 方向的梯度 $g\mu_B b' / \hbar$ ，进而导致 A_x 是 y 的函数，产生了近似均匀的人工的磁场 $B_z = -\partial A_x / \partial y$ 。与转动凝聚体类似，实验中


 图 1.2 能量动量色散曲线[5]。(a) $\delta = 0$, (b) $\delta = -2E_r$ 。

也发现, 当人工磁场超过某临界值时, 实验上观察到了许多涡旋产生。为了获得人工电场[7], 可以调节 A_x 随时间变化, 而 $E_x = -\partial A_x / \partial t$ 。2011 年, Lin 等人进一步在实验上调节双光子失谐使 $\delta \approx \varepsilon$, 而较大的 $\delta + \varepsilon$ 使(1.4.4)式中的 $m_s = 1$ 能级的布局数可以忽略, 从而在赝自旋 $1/2$ 玻色-爱因斯坦凝聚体中实现了非阿贝尔的规范场[8]。可以用有效的单粒子哈密顿量

$$H_{0x} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(k_x - k_r)^2 + \frac{\delta}{2} & \frac{\Omega_R}{2} \\ \frac{\Omega_R}{2} & \frac{\hbar^2}{2m}(k_x + k_r)^2 - \frac{\delta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.4.6)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}(k_x - k_r \sigma_z)^2 + \frac{\Omega_R}{2} \sigma_x + \frac{\delta}{2} \sigma_z \quad (1.4.7)$$

来描述, 式中重新定义了 $\varepsilon - \delta \rightarrow \delta$ 。在赝自旋空间的自旋转动 $\sigma_x \rightarrow \sigma_z$, $\sigma_z \rightarrow -\sigma_x$ 下, 哈密顿量可以写成

$$H_{0x} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x + k_r \sigma_x)^2 + \frac{\Omega_R}{2} \sigma_z - \frac{\delta}{2} \sigma_x, \quad (1.4.8)$$

式中 $\sigma_x k_x$ 是自旋轨道耦合项, k_r 表明自旋轨道耦合的强度, 实验上也是可以调节的

[23]。当 $\Omega_R < 4E_L$ 时，其单粒子能谱出现两个能量极小点，分别对应两个缀饰态。当 $\Omega_R > 4E_L$ 时，两个极小点重合，如图 1.3 所示。在强耦合极限下，低能能谱描述一个无自旋的玻色子具有如前所述的人工规范势。

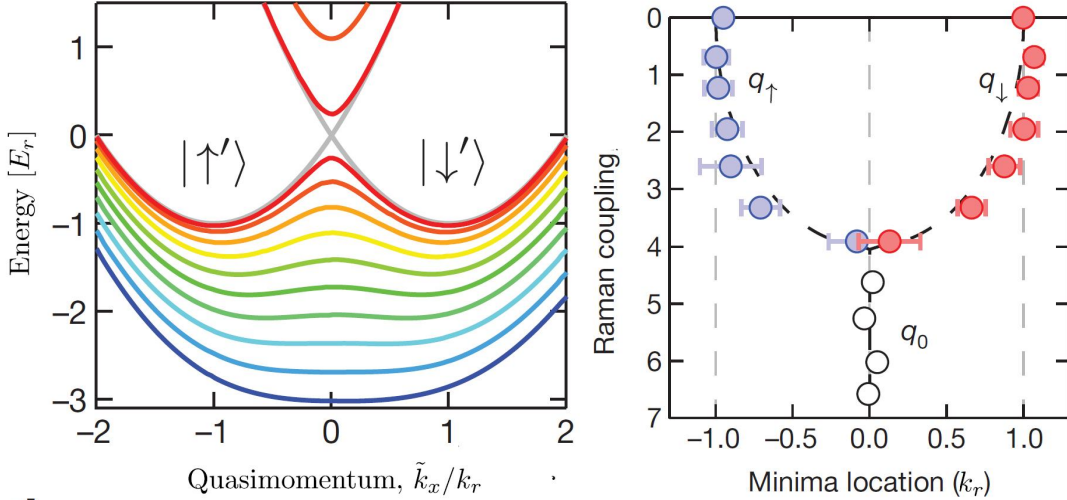


图 1.3 能量动量色散[8]。 $\delta = 0$ ， Ω_R 从零(灰)增加到 $5E_r$ (蓝)。

随后，在 2012 年山西大学张靖[24]研究组和 MIT 的 Zwierlein[25]小组利用该方案实现了自旋轨道耦合的简并费米气体。原则上，实验中可以通过同时调节三个塞曼能级实现哈密顿(1.4.4)描写的自旋轨道耦合的自旋 1 BEC。2015 年，Campbell 等人[26]通过增加一束拉曼光来实现对二次塞曼效应的调节，实现了自旋轨道耦合的自旋 1 BEC，可以用哈密顿量

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x - 2k_r s_z)^2 + \frac{\Omega_R}{2} s_x + \frac{\delta}{2} s_z + \frac{\varepsilon}{2} s_z^2 \quad (1.4.9)$$

来描述，其中 s_i 是自旋 1 矩阵，形式见(1.1.9)。

无论是自旋 1/2 还是自旋 1，拉曼光诱导的一维自旋轨道耦合都形如 $\sigma_x k_x$ ，可以看成是固体材料中常见的 Rashba 耦合 $\sigma_x k_x + \sigma_y k_y$ 和 Dresselhaus 耦合 $\sigma_x k_x - \sigma_y k_y$ 的等权重叠加。自旋轨道耦合将原子的自旋和空间运动联系在一起，它的形式并不仅限于 $\sigma_x k_x$ 的形式。人们感兴趣的耦合形式还有：

(1) Rashba 耦合。Rashba 耦合形如 $\sigma_x k_x + \sigma_y k_y$ ，是二维的自旋轨道耦合。这种耦合形式很早便引起了理论上的强烈兴趣[27]。2010 年，翟荟等人[28]在均匀的 Rashba 耦合的 BEC 中发现了著名的平面波和条纹基态。理论上还发现囚禁在势阱中的 Rashba 耦合的 BEC 会出现新奇的 half-quantum vortex 等基态[29-32]。实验上，Campbell 等人[33]设想的环状耦合方案(Loop Scheme)，磁耦合方案[34,35]等等[36-38]

来实现二维的自旋轨道耦合。最近, 已有实验方面的进展, 山西大学的张靖[39]等人在费米气体中实现了二维的耦合; 中国科学技术大学的陈帅、潘建伟等人[40]在晶格 ^{87}Rb 玻色气体中也实现了二维的自旋轨道耦合。

(2) Weyl 耦合。Weyl 耦合也是理论和实验上感兴趣的耦合形式, 形如 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ 。它将进一步将 Rashba 耦合推广到三维。实验上, 有四面体耦合方案[41](Tetrahedron Scheme), 磁耦合方案[34]等等来可以实现这种自旋轨道耦合。2012 年, Kawakami [42], Li [43,44]和 Anderson[45]等人都研究了 Weyl 耦合的 BEC 的基态。几乎同时, Kawakami 等人[42]和 Li 等人[43,44]都发现 Weyl 耦合的两分量 BEC 的基态是三维 skyrmion。Li 等人[43,44]还发现在自旋轨道耦合很强时, 系统的基态是 skyrmion 晶格相。Zhang 等人[46]则研究了光晶格中 Weyl 耦合的玻色气体。此外, 散射问题[47], 相互作用[48]以及 Weyl 耦合的费米气体[49-52]等也有很多研究。

(3) SU(3)耦合。上述耦合都是 SU(2)的, 体现在只有最多三个自旋矩阵 \mathbf{s} (对于赝自旋 1/2 系统即是 Pauli 矩阵)耦合到动量, 三个自旋矩阵 s_i 是 SU(2)群的生成元。对于自旋 1 的玻色气体, 还有可能实现另一种自旋轨道耦合, SU(3)耦合[53-55], 其形式为 $\sum_{i=1}^8 b^i(\mathbf{k}) \cdot \lambda_i$, 其中 $b^i(\mathbf{k})$ 是和动量有关的函数, λ_i 是八个 SU(3)群的生成元, 可以是 Gell-Mann 矩阵, 等价地, 也可以是(1.3.9)式的三个自旋矩阵 s_i 外加(1.3.10)式的五个独立的向列张量分量 N_{ij} 。SU(3)耦合会在自旋 1 的三个塞曼态之间建立任意两个之间的耦合, 将可能导致许多有趣的新现象。

(4) 自旋轨道角动量耦合。这是最近在理论上提出的一种自旋轨道耦合方案[56-60]。与前面利用线偏振的拉曼光在原子的超精细内态之间传递动量不同, 该理论方案设想利用两束同向的高斯-拉盖尔光在原子的内态之间传递角动量, 从而实现类似原子物理中导致精细结构的自旋-轨道角动量耦合, 其形式为 $\sigma_z l_z$ 。

1.5 我们的工作

我们主要做了两方面的工作, 其一是用变分方法研究了囚禁在外部谐振子势阱中的三维 Weyl 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 的玻色气体的平均场基态。我们通过对单粒子哈密顿量的分析, 利用谐振子的 s 波和 p 波态叠加构造了近似的单粒子基态。进一步构造了系统的变分波函数。变分计算得到了弱三维自旋轨道耦合的赝自旋

1/2 的玻色气体的基态，与 Kawakami 等人最近的数值模拟所预言的结果一致。分析了基态出现相分离的原因，以及三维磁 skyrmion 基态的性质，预言了当相互作用增长超过一临界值时，系统会发生两种磁 skyrmion 相之间的相变。这一工作将在本论文第四章中介绍。其二是利用变分方法研究了 Weyl 自旋轨道耦合的自旋 1 的玻色气体的基态，得到了其基态相图。我们发现在不同的相互作用强度区域，玻色气体可以凝聚在两个不同基态相，分别称为磁性相和向列相，确定了两相的边界。研究了磁性相的密度分布，空间调制的自旋密度(三维的磁 skyrmion)和与磁序相互竞争的双轴向列序, 还研究了向列相的密度分布，单向列轴的空间调制。这一工作将在本论文第五章中介绍。

1.6 本文内容

本论文主要讨论自旋轨道耦合的旋量玻色爱因斯坦凝聚体的平均场基态相。研究 Weyl 耦合的旋量凝聚体基态的自旋序参数的性质。论文的结构和布局如下：

第二章介绍目前已经在实验上实现的 Raman 诱导的一维自旋轨道耦合的旋量玻色爱因斯坦凝聚体的实验，平均场基态相图。包括赝自旋 1/2 和自旋 1 两种旋量凝聚体。讨论赝自旋 1/2 旋量凝聚体平面波相，条纹相和零动量中的磁序，以及自旋 1 旋量凝聚体铁磁条纹，Polar 条纹相的磁序以及向列序。

第三章简要介绍二维 Rashba 耦合的旋量玻色爱因斯坦凝聚体的平均场基态相。主要是均匀的赝自旋 1/2 旋量凝聚体的平面波相，条纹相和零动量相，以及简谐势阱中赝自旋 1/2 旋量凝聚体的半量子涡旋相和晶格相，讨论自旋轨道耦合和两体相互作用强度对基态相的影响。

第四章首先简要介绍均匀的三维 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 旋量玻色爱因斯坦凝聚体的平均场基态相。然后重点研究了存在外部简谐势阱时赝自旋 1/2 旋量玻色爱因斯坦凝聚体的平均场基态，探讨其磁 skyrmion 基态的成因及其性质。

第五章进一步研究简谐势阱中弱三维 Weyl 耦合的自旋 1 旋量玻色爱因斯坦凝聚体的基态相。着重探讨其基态的磁 skyrmion 相中的磁序和双轴向列序以及向列相中向列张量密度的空间调制。

第二章 拉曼诱导的自旋轨道耦合

自从实验上实现人工的自旋轨道耦合以来，人们对自旋轨道耦合的凝聚体做了大量的理论和实验研究，成为了冷原子领域的研究热点。本章分两节来讨论拉曼诱导的自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 和自旋 1 的旋量玻色爱因斯坦凝聚体的平均场基态相，条纹态和自旋序。

2.1 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 BEC

对于拉曼诱导的自旋轨道耦合，由于系统仅存在 x 方向的耦合，可以将 y 和 z 方向的运动分离出来。在极低温下，设凝聚体处在 y 和 z 方向的动量基态，即 $k_y = k_z = 0$ ，则单粒子的哈密顿量可以具有(1.4.7)式的形式

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x - k_r \sigma_z)^2 + \frac{\Omega_R}{2} \sigma_x + \frac{\delta}{2} \sigma_z, \quad (2.1.1)$$

忽略一个不重要的常数项，上式可以写做如下形式

$$H_0 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \mathbf{h}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.1.2)$$

其中 \mathbf{h}_k 相当于一个依赖于动量的塞曼场[61]

$$\mathbf{h}_k = \left\{ \frac{\Omega_R}{2}, 0, -\frac{\hbar^2 k_r k_x}{m} + \frac{\delta}{2} \right\}, \quad (2.1.3)$$

$$\mathbf{h}_k = |\mathbf{h}_k| \hat{e}_h. \quad (2.1.4)$$

2.1.1 单粒子基态

首先忽略双光子失谐，设 $\delta = 0$ ，并采用 $\hbar = m = 1$ 的单位制。单粒子的哈密顿量(2.1.1)具有明显的平移对称性，可以证明 $[k_x, H_0] = 0$ ，因此动量是运动常数。除此之外，可以定义“螺旋度”算符 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h$ ，表示自旋在塞曼场 \mathbf{h}_k 方向的投影，同样可以证明 $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h, H_0] = 0$ ，因此“螺旋度”也是运动常数。因为自旋沿任意方向的投影只能是 ± 1

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h)^2 = 1, \quad (2.1.5)$$

所以螺旋度算符的本征值为 ± 1 ，用量子数 \pm 来标记，分别代表自旋平行于和反平行于塞曼场的方向。对应的本征态设为 χ_{\pm} ，则本征方程为

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h \chi_{\pm} = \pm \chi_{\pm}. \quad (2.1.6)$$

因 \hat{e}_h 矢量在 xz 平面，在球坐标下设其为 $\hat{e}_h = (1, \theta, 0)$ ，即

$$\cos \theta = -k_r k_x / \sqrt{k_r^2 k_x^2 + (\Omega_R/2)^2}. \quad (2.1.7)$$

则

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h &= \sin \theta \sigma_x + \cos \theta \sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

容易解得

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \chi_- = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.9)$$

因此，哈密顿(2.1.1)的本征态可以利用动量和螺旋度算符的本征值来分类

$$\psi_{k_x, \pm} = e^{ik_x x} \chi_{\pm}. \quad (2.1.10)$$

相应的本征值谱分为两支

$$\begin{aligned} E_0^{k_x, \pm} &= \frac{k_x^2}{2} \pm |\mathbf{h}_k| \\ &= \frac{k_x^2}{2} \pm \sqrt{k_r^2 k_x^2 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2}. \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

低能的一支对应“螺旋度”为负，单粒子本征态为

$$\psi_{k_x, -} = e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.12)$$

对 $E_0^{k_x, -}$ 求导数

$$\frac{\partial E_0^{k_x, -}}{\partial k_x} = 0 \quad (2.1.13)$$

得到当 $\Omega_R < 4E_r$ 时, 单粒子能谱的极值出现在

$$k_0 = 0, k_{\pm} = \pm k_r \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_R}{4E_r}\right)^2}. \quad (2.1.14)$$

其中 $k_0 = 0$ 点对应局域极大, 而后两个对应对称的全局极小点。而当 $\Omega_R > 4E_r$, 只有一个极小点, 能谱如图 1.3 所示。

在左边的极小点 $k_- = -k_r \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_R}{4E_r}\right)^2}$ 时, 由(2.1.7)式知

$$\cos \theta_- = \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_R}{4E_r}\right)^2} = -\frac{k_-}{k_r}, \quad (2.1.15)$$

单粒子本征态为

$$\psi_{k_{-},-} = e^{ik_-x} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_-}{2} \\ -\cos \frac{\theta_-}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.16)$$

而在右边的极小点 $k_+ = +k_r \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_R}{4E_r}\right)^2}$

$$\cos \theta_+ = -\sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_R}{4E_r}\right)^2} = -\frac{k_+}{k_r} = \frac{k_-}{k_r}, \quad (2.1.17)$$

从(2.1.15)可知

$$\theta_+ = \pi - \theta_-, \quad (2.1.18)$$

单粒子本征态为

$$\psi_{k_{+},-} = e^{ik_+x} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_+}{2} \\ -\cos \frac{\theta_+}{2} \end{pmatrix} = e^{ik_+x} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_-}{2} \\ -\sin \frac{\theta_-}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.19)$$

从“螺旋度”为负低能能谱(2.1.11)或对应能谱图 1.3 上可以看出, $\Omega_R < 4E_r$ 时, 动量为 k_{\pm} 的两个本征态(2.1.16)和(2.1.19)是简并的, 玻色气体可以凝聚在动量空

间 k_+ 或 k_- 或 k_{\pm} 的任意叠加态上。 $\Omega_R > 4E_r$ 时, 玻色气体凝聚在动量空间 $k_0 = 0$ 点。

当双光子失谐 $\delta \neq 0$ 时, 并不造成本质上的不同, 用上述同样的方法可以得到单粒子螺旋度为 \pm 的两支能谱为

$$E_0^{k_x, \pm} = \frac{k_x^2}{2} \pm \sqrt{\left(k_r k_x - \frac{\delta}{2}\right)^2 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2}. \quad (2.1.20)$$

此时动量空间的两个极小点不再简并, 但它们仍是局域的极小点。设

$$\cos \theta_p = \left(-k_r k_x + \frac{\delta}{2}\right) / \sqrt{\left(k_r k_x - \frac{\delta}{2}\right)^2 + \left(\Omega_R/2\right)^2}, \quad (2.1.21)$$

两处的单粒子本征态分别为

$$\psi_{k_{+,-}} = e^{ik_+x} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_p}{2} \\ -\cos \frac{\theta_p}{2} \end{pmatrix} \quad (2.1.22)$$

和

$$\psi_{k_{-,-}} = e^{ik_-x} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_p}{2} \\ -\sin \frac{\theta_p}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.1.23)$$

2.1.2 相互作用效应

当 Ω_R 很小时, 在动量空间中, 单粒子谱存在两个局域极小点, 玻色气体如何在动量空间中凝聚将由相互作用来决定[62,63]。在平均场近似下, 两分量 BEC 的相互作用能由(1.1.6)式描写

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left(g_{\uparrow\uparrow} n_{\uparrow}^2(\mathbf{r}) + g_{\downarrow\downarrow} n_{\downarrow}^2(\mathbf{r}) + 2g_{\uparrow\downarrow} n_{\uparrow}(\mathbf{r}) n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \right), \quad (2.1.24)$$

不失一般性, 可以假设凝聚体的波函数为两个具有不同动量的非正交的缀饰自旋态的叠加

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n} \left[\cos \alpha \begin{pmatrix} \cos \theta'_+ \\ -\sin \theta'_+ \end{pmatrix} e^{ik_+x} + \sin \alpha \begin{pmatrix} \cos \theta'_- \\ -\sin \theta'_- \end{pmatrix} e^{ik_-x} \right]. \quad (2.1.25)$$

这里 $\cos \alpha$ 和 $\sin \alpha$ 是归一化系数, $0 \leq \alpha \leq \pi/2$ 。而 $\alpha, \theta'_{\pm}, k_{\pm}$ 是变分参数, 由此可以计算

$$n_{\uparrow} = n \left[\cos^2 \alpha \cos^2 \theta'_+ + \sin^2 \alpha \cos^2 \theta'_- + \sin 2\alpha \cos \theta'_+ \cos \theta'_- \cos(\delta k \cdot x) \right], \quad (2.1.26)$$

$$n_{\downarrow} = n \left[\cos^2 \alpha \sin^2 \theta'_+ + \sin^2 \alpha \sin^2 \theta'_- + \sin 2\alpha \sin \theta'_+ \sin \theta'_- \cos(\delta k \cdot x) \right], \quad (2.1.27)$$

这里 $\delta k = k_+ - k_-$ 。将(2.1.26)和(2.1.27)代入能量泛函表达式

$$E_0 + E_{\text{int}}, \quad (2.1.28)$$

其中

$$E_0 = \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) | H_0 | \Psi(\mathbf{r}) \rangle. \quad (2.1.29)$$

最小化系统能量，可以得到这些参数的值，进而获得凝聚体的波函数。对于 NIST 实验，赝自旋上下分量是不对称的， $g_{\uparrow\uparrow} = c_0$ ， $g_{\downarrow\downarrow} = g_{\uparrow\downarrow} = c_0 + c_2$ ，这时两个局域极小点 k_{\pm} 是不对称的。其基态的 $\delta - \Omega$ 相图如 2.1 所示。

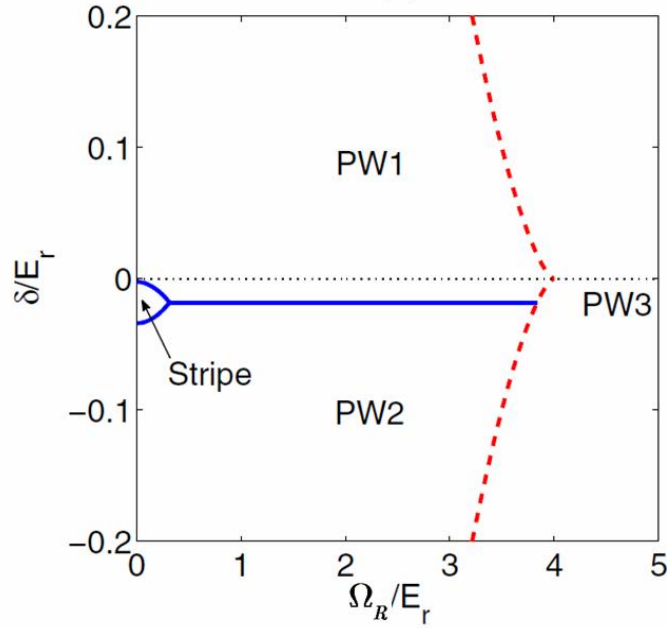


图 2.1 自旋轨道耦合的 ^{87}Rb 凝聚体的基态相图[62]。

相图包含如下相[62]:

(I)条纹相(Stripe)。该相出现在弱的拉曼耦合和很小的双光子失谐时，凝聚体基态是不同动量的两个单粒子态的叠加， $0 < \alpha < \pi/2$ 。由于动量 k_+ 和 k_- 的单粒子自旋函数不交，在条纹相总密度是空间周期调制的。这可以从(2.1.26)和(2.1.27)的最后一项看出。正是由于密度的空间调制，密度相互作用能会增加，因此在 $\text{SU}(2)$ 对称的相互作用情形，即 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g_{\uparrow\downarrow}$ 时，条纹相不会出现。而此时， $g_{\downarrow\downarrow}g_{\uparrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2 < 0$ ，在无拉曼缀饰 $\Omega_R = 0$ 的情况下，基态时两相均匀混合；在有拉曼缀饰时，此混合相

将变成条纹相。条纹相的性质，诸如密度分布[64]，激发谱[65]等已经被深入研究。另一方面，随着拉曼耦合 Ω_R 的增强，基态将由条纹相进入平面波相。对于 NIST 实验，相变的临界值为 $\Omega_{c1} \approx \sqrt{-8c_2/c_0} E_r \approx 0.19 E_r$ 。

(II)平面波相(Plane Wave)。当双光子失谐和(或)拉曼耦合 Ω_R 较大时，单粒子色散的两个极小点能量相差很大，变分将得到 $\alpha = 0$ 或 $\pi/2$ ，凝聚体倾向于凝聚在单一的动量态上，形成平面波态 PW1 或 PW2。处于平面波态的凝聚体，从(2.1.26)和(2.1.27)可以看出其上下两个分量的密度都是均匀的。平面波相的激发谱[62,66-68]，超流[69]，集体震荡[70]，Zitterbewegung[71]等性质也已经被广泛研究。

(III)零动量相(Zero momentum)。当 $\Omega_R > \Omega_{c2} \approx 4E_R$ 时，单粒子色散只有单一的最小点 $k_0 = 0$ ，此时凝聚体凝聚在零动量态上，形成零动量相 PW3，或称为单最小相。Hamner 等人[72]发现，自旋轨道耦合的系统可以等价于量子光学中的 Dicke 模型，平面波相到零动量相之间的相变对应 Dicke 模型中超辐射相到正常相之间的相变。

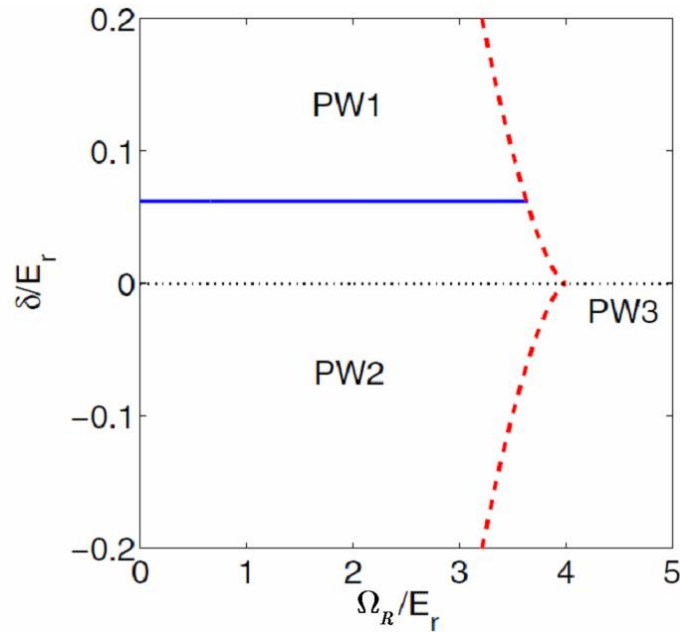


图 2.2 自旋轨道耦合的 ^{23}Na 凝聚体的基态相图[62]。

对于相应的 ^{23}Na 凝聚体，相图如 2.2 所示。不同之处是，相互作用参数满足 $g_{\downarrow\downarrow}g_{\downarrow\downarrow} - g_{\uparrow\downarrow}^2 < 0$ ，根据第一章的讨论，在无拉曼缀饰 $\Omega_R = 0$ 时，基态不出现两相共存的区域，因此有拉曼缀饰时，条纹相也不会出现。

2.1.3 三相临界点

前面讨论了双光子失谐 $\delta \neq 0$ 且 $g_{\uparrow\uparrow} \neq g_{\downarrow\downarrow}$ 的情况，自旋的对称性是破缺的，对应

NIST 实验的情形。从(1.2.15)式可以看出这相当于 $c_1 \neq 0$ ，实际上，在实验中适当调节双光子失谐可以抵消 $g_{\uparrow\uparrow} \neq g_{\downarrow\downarrow}$ 这种不对称。理论上，本小节来讨论 $\delta = 0$ ，且 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$ 这种自旋对称的情况[73]，虽然做了简化，我们将看到所有的基态相都会保留下来。不仅如此，对于 NIST 实验， $g_{\uparrow\uparrow}, g_{\downarrow\downarrow}, g_{\uparrow\downarrow}$ 相差很小，条纹相到平面波相的相变临界值很小，仅为 $\Omega_{c1} \approx 0.19E_r$ 。在[73]中，通过增加密度来增加有效的相互作用，此时， Ω_{c1} 随密度增加而增加，而 Ω_{c2} 却随密度增加而减小，在某临界密度时，它们相等，从而形成三相临界点。

当双光子失谐 $\delta = 0$ ，且 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$ 时，系统具有 Z_2 对称性 ($k_x \rightarrow -k_x, \sigma_z \rightarrow -\sigma_z$)，可以合理假设两个两个局域极小点 k_{\pm} 是对称的，也就是说，假设 $k_+ = k_1$ ，则 $k_- = -k_1$ 。仍然使用变分方法，设基态的波函数为

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0} \left[C_1 \begin{pmatrix} \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} e^{ik_1 x} + C_2 \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} e^{-ik_1 x} \right]. \quad (2.1.30)$$

$n_0 = N/V$ 是平均粒子数密度。此波函数为精确的理想(无相互作用)玻色气体的基态，即单粒子哈密顿的基态。这里，考虑到(2.1.18)式，在两个叠加的缀饰态中使用相同的参数 θ ，它由变分来决定，除了参数 θ 之外，变分参数还有 C_1 ， C_2 和 k_1 ，它们的值由最小化能量泛函来确定，且须满足归一化条件 $\sum_{i=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r} |\Psi_i|^2 = N$ ，即 $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ 。首先，从(2.1.15)和(2.1.17)可以知道，参数 θ 依赖于 k_1 的值，最小化单粒子能量可以确定

$$\theta = \arccos(k_1/k_r)/2. \quad (2.1.31)$$

同样我们可以得到，当 $\Omega_R < 4E_r$ 时，单粒子能谱有两个对称的全局极小点，出现在 $\pm k_r \sqrt{1 - (\Omega_R/4E_r)^2}$ ，基态是简并的，单粒子能量与 C_1 ， C_2 的取值无关。而当 $\Omega_R > 4E_r$ ，只有一个极小点，所有原子凝聚在零动量态。

利用波函数(2.1.30)，可以计算

$$n_{\uparrow} = n_0 \left[|C_1|^2 \cos^2 \theta + |C_2|^2 \sin^2 \theta + |C_1 C_2| \sin 2\theta \cos(2k_1 x + \varphi) \right], \quad (2.1.32)$$

$$n_{\downarrow} = n_0 \left[|C_1|^2 \sin^2 \theta + |C_2|^2 \cos^2 \theta + |C_1 C_2| \sin 2\theta \cos(2k_1 x + \varphi) \right]. \quad (2.1.33)$$

这里 φ 是 C_1 , C_2 的相对相位, 而总密度为

$$n(x) = n_0 \left[1 + 2|C_1 C_2| \frac{\sqrt{k_r^2 - k_1^2}}{k_r} \cos(2k_1 x + \varphi) \right]. \quad (2.1.34)$$

这里, 利用了(2.1.31)式, 归一化的自旋密度

$$\Sigma_x(x) = \frac{n_0}{n(x)} \left[-\frac{\sqrt{k_r^2 - k_1^2}}{k_r} - 2|C_1 C_2| \cos(2k_1 x + \varphi) \right], \quad (2.1.35)$$

$$\Sigma_y(x) = \frac{n_0}{n(x)} \left[2\frac{k_1}{k_r} |C_1 C_2| \sin(2k_1 x + \varphi) \right], \quad (2.1.36)$$

$$\Sigma_z(x) = \frac{n_0}{n(x)} \left[\frac{k_1}{k_r} \left(|C_1|^2 - |C_2|^2 \right) \right]. \quad (2.1.37)$$

将波函数(2.1.30)和密度代入能量泛函, 可以计算出总能量。实际上, 对于 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$ 这种自旋对称的情况, 用(1.2.15)来计算相互作用能更方便, 而且有 $c_1 = 0$ 。经计算, 能量泛函为

$$\frac{E}{N} = \frac{k_r^2}{2} - \frac{\Omega_R}{2} \frac{\sqrt{k_r^2 - k_1^2}}{k_r} - \frac{1}{2} F(\beta) \frac{k_1^2}{k_r^2} + G_1 (1 + 2\beta). \quad (2.1.38)$$

此式中, 我们令

$$\beta = |C_1|^2 |C_2|^2, \quad (0 \leq \beta \leq 1/4) \quad (2.1.39)$$

可见, 能量只依赖于 C_1 , C_2 的这种特殊组合, 后面会看到, 这是一种由自旋相互作用导致的普遍的现象。并且

$$F(\beta) = (k_r^2 - 2G_2) + 4(G_1 + 2G_2)\beta, \quad (2.1.40)$$

式中 G_1, G_2 是重新定义的系统的有效相互作用参数

$$G_1 = 2n_0 c_0, \quad G_2 = 2n_0 c_2. \quad (2.1.41)$$

正比于平均粒子数密度。(2.1.38)中需要由变分确定的变分参数只剩 β 和 k_1 。

如果 $\Omega_R > 2F(\beta)$, 能量最小化要求 $k_1 = 0$, 反之 $\Omega_R < 2F(\beta)$ 则要求

$$k_1(\beta) = k_r \sqrt{1 - \frac{\Omega_R^2}{4[F(\beta)]^2}}. \quad (2.1.42)$$

与(2.1.14)相比,可以看出相互作用修改了基态的动量分布,使之偏离了理想气体的结果。代入(2.1.38)得

$$\frac{E}{N} = -\frac{\Omega_R^2}{8F(\beta)} + G_1 + G_2(1 - 2\beta). \quad (2.1.43)$$

最小化(2.1.43)得到优化的 β 值,进而可以得到系统的基态将会出现上一小节提到的三种相。

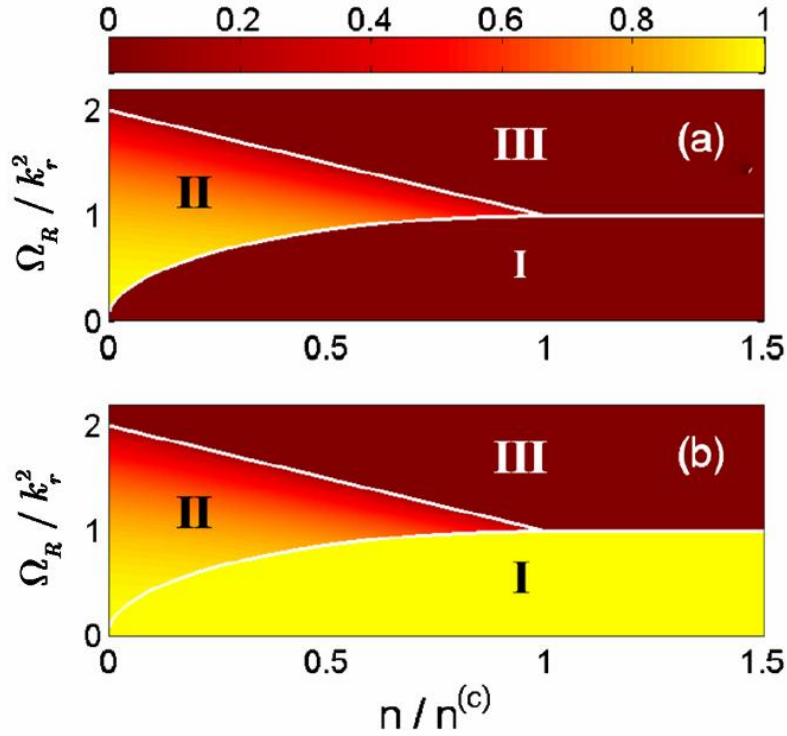


图 2.3 自旋轨道耦合的基态 $n - \Omega$ 相图[73]。(a) $\langle \sigma_z \rangle$, (b) k_1 / k_r 。

$$g = 100a_B, \gamma = 0.0012, k_r^2 = 2\pi \times 80\text{Hz}$$

条纹相(I相)对应变分参数是 $k_1 \neq 0$, $\beta = 1/4$, 经过前面的讨论我们已经知道,它只能出现在相互作用参数 $G_2 > 0$, 即反铁磁的自旋相互作用的系统,此时,若 Ω_R 较小,系统凝聚在条纹相。因为条纹周期和对比度的原因,实验上要直接看到条纹相是困难的[74]。随着拉曼耦合的增加,系统会进入平面波相,临界的拉曼耦合为

$$\Omega_R^{\text{I-II}} = 2 \left[(k_r^2 + G_1)(k_r^2 - 2G_2) \frac{2G_2}{G_1 + 2G_2} \right]^{1/2}. \quad (2.1.44)$$

在平面波相(II 相) 对应变分参数取值是 $k_1 \neq 0$, $\beta = 0$ 。与上一小节不同的是, 此处没有双光子失谐, 因此, 原子凝聚在动量 k_1 或 $-k_1$ 中的哪一个仅取决于实验中自旋对称自发破缺的机制。并且, 在平面波相, 如果相互作用是 SU(2)对称的, 即 $G_2 = 0$, 从(2.1.40)可以知道此时 $F(\beta) = k_r^2$, (2.1.42)式回到理想气体的结果(2.1.14), 可见密度相互作用此时不影响动量分布。进一步增加拉曼耦合达到

$$\Omega_R^{\text{II-III}} = (k_r^2 - 2G_2) \quad (2.1.45)$$

时系统将进入零动量相, 对应变分参数取值是 $k_1 = 0$ 。若 $\Omega_R^{\text{I-II}} > \Omega_R^{\text{II-III}}$, 系统将直接从条纹相进入零动量相, 存在条纹相到平面波相相变的条件为

$$4G_2 + (4G_2^2/G_1) < k_r^2. \quad (2.1.46)$$

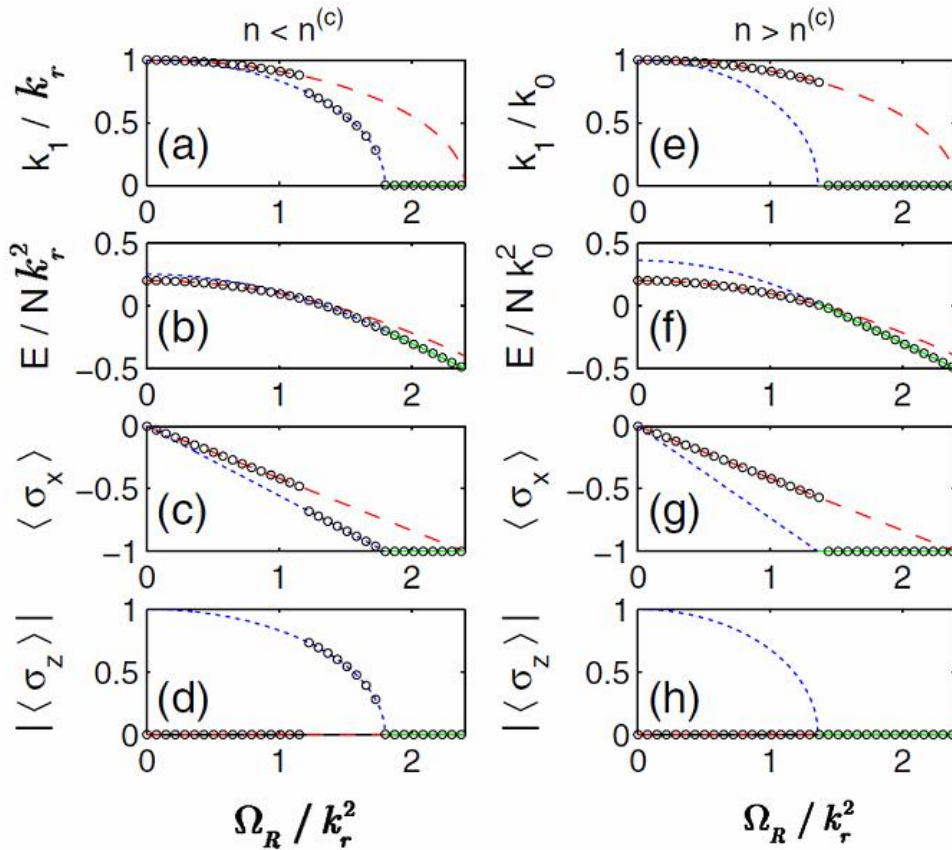


图 2.4 变分参数 k_1 , 基态能量 E/N , 横向磁化 $\langle \sigma_x \rangle$ 和纵向磁化 $\langle \sigma_z \rangle$ [73]。

若系统的有效相互作用不满足此条件, 平面波相不能存在。条纹相到到零动量相的

临界耦合为

$$\Omega_R^{\text{I-III}} = 2(k_r^2 + G_1) - 2[(k_r^2 + G_1)G_1]^{1/2}. \quad (2.1.47)$$

由(2.1.46)式可以得到平面波相消失的临界相互作用是

$$G_1^{(c)} = \frac{k_r^2}{4\gamma(1+\gamma)}, \quad (2.1.48)$$

γ 是一无量纲相互作用参数，由相互作用强度确定，与密度无关

$$\gamma = \frac{G_2}{G_1} = \frac{g - g_{\uparrow\downarrow}}{g + g_{\uparrow\downarrow}}, \quad (2.1.49)$$

因而对于确定的 $g_{\alpha\beta}$ ，临界密度为

$$n^{(c)} = \frac{k_r^2}{2\gamma g}. \quad (2.1.50)$$

基态的 $n - \Omega$ 相图如 2.3 所示。图 2.3(b)中颜色标示基态的 k_1 值，从图 2.4(a)- (b)和(e)- (f)中可以明显看到临界密度左右两种相变的区别。图 2.3 所示的相图是零温相图，Ji 等人曾研究了温度升高时零温相图中的三种相如何向正常相转变[75]。

2.1.4 基态的磁性质

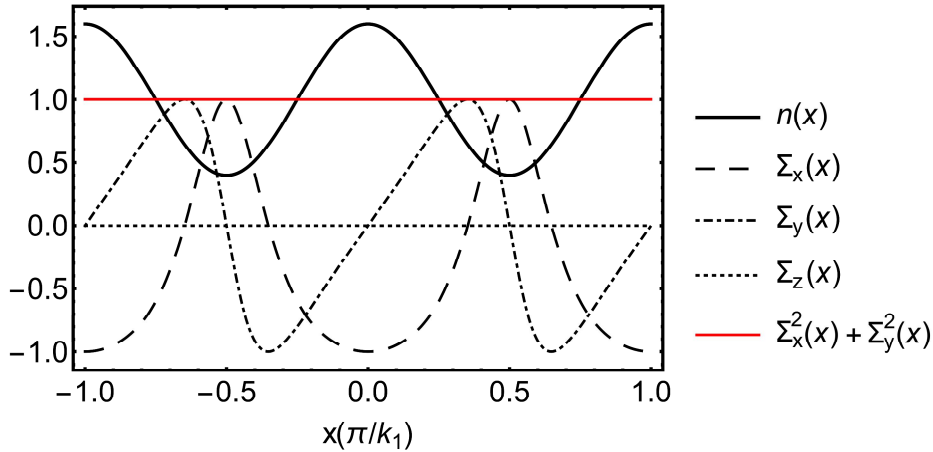


图2.5 归一化的自旋密度。

利用(2.1.34)-(2.1.37)，我们可以计算基态的密度分布和归一化的自旋密度。对于条纹相如图 2.5 所示，条纹相密度和横向自旋密度呈现空间周期变化，波长为 π/k_1 ，条纹位置由 C_1 ， C_2 的相对相位 φ 决定，破缺了平移对称性，在图中我们仅画出了两个波长。由于 Z_2 对称性未破缺，凝聚体无纵向磁化，自旋密度分量 $\Sigma_z(x) = 0$ ，

但有式(2.1.35)和(2.1.36)所描述的横向的自旋螺旋结构。凝聚体的磁序参数

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}) | \sigma_x | \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \rangle}{n_0} = \frac{-\sqrt{k_r^2 - k_1^2}}{k_r} \quad (2.1.51)$$

描述宏观磁化。而 $\langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$ 。但要注意，我们此处讨论的自旋密度是在旋转坐标系中讨论的，回退到实验室系只有 $n(x)$ 和 $\Sigma_z(x)$ 是不受影响的， $\Sigma_x(x)$ 和 $\Sigma_y(x)$ 是受影响的。

对于平面波相，与条纹相正好相反，平移对称性保持，而 Z_2 对称性自发破缺，所以密度是均匀的，自旋结构也是平庸的。平面波相不为零的磁序参数有 $\langle \sigma_z \rangle = k_1/k_r$ ， $\langle \sigma_x \rangle = -\sqrt{k_r^2 - k_1^2}/k_r$ ，非零的 $\langle \sigma_z(x) \rangle$ 是由于 Z_2 对称性的破缺。

零动量相则不破缺任何对称性，不为零的磁序参数为 $\langle \sigma_x \rangle = -1$ ，它是沿 x 方向完全磁化的。三个相的磁序参数 $\langle \sigma_z \rangle$ 已经反映在图 2.3(b) 和图 2.4(d)和(h)中，横向磁化 $\langle \sigma_x \rangle = -1$ 反映在图 2.4 (c)和(g)中。

2.2 自旋轨道耦合的自旋 1 BEC

2014 年 Lan 等人[76]设想在 NIST 自旋轨道耦合的基础上，原则上可以利用依赖超精细态的囚禁势或微波缀饰来调节二次塞曼效应，进而调控拉曼缀饰，同时可以调节双光子失谐 $\delta = 0$ ，来实现自旋轨道耦合的自旋 1 BEC。Lan 等人理论研究了单粒子基态，发现二次塞曼效应较小时，低能的色散谱具有动量空间的三极小结构，在考虑相互作用效应时，发现在铁磁和反铁磁相互作用时，会出现两种条纹相，铁磁和 Polar 条纹相，条纹波长分别为 $2\pi/k_r$ 和 π/k_r 。同年 Natu[22]等人研究了自旋交换相互作用下的自旋 1 的自旋轨道耦合，给出了 $\epsilon - c_2$ 相图，详细讨论了可能存在的各种基态相以及其中的自旋序，特别是在反铁磁相互作用区存在具有双轴向列序的条纹态，2015 年 Campbell 等人[26]通过增加一束拉曼光来实现对二次塞曼效应的调节，在实验上独立耦合 $|m_s = -1\rangle \leftrightarrow |m_s = 0\rangle$ 和 $|m_s = 0\rangle \leftrightarrow |m_s = 1\rangle$ ，第一次实现了自旋 1 的自旋轨道耦合。并研究了基态相之间的相变，具体地说是其中巡游铁磁相和无磁化(unmagnetized)的相之间的相变，以及拉曼耦合强度决定的一级相变和二级相变和临界点。同年，Sun 等人[77]进一步在相图中发现了两种新的铁磁条纹相，在这两种新的铁磁条纹态里，向列张量密度分别随密度同相振荡和反相振荡，这两种新的相只占据相图的很小区域。几乎同时 Martone 等人[78]和余增强[79]也研究了此问题，Martone 等人没有选择 ^{87}Rb ，而是选择 ^7Li 来研究，因为 ^{87}Rb 和 ^7Li 不同的自旋交换相互作用强度，铁磁条纹相占据相图的较大区域，同时他们还研究

了反铁磁的相图。余增强研究了 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 的基态相，相变以及激发等问题。本节来我们简单介绍自旋轨道耦合的自旋 1 凝聚体。

2.2.1 单粒子基态

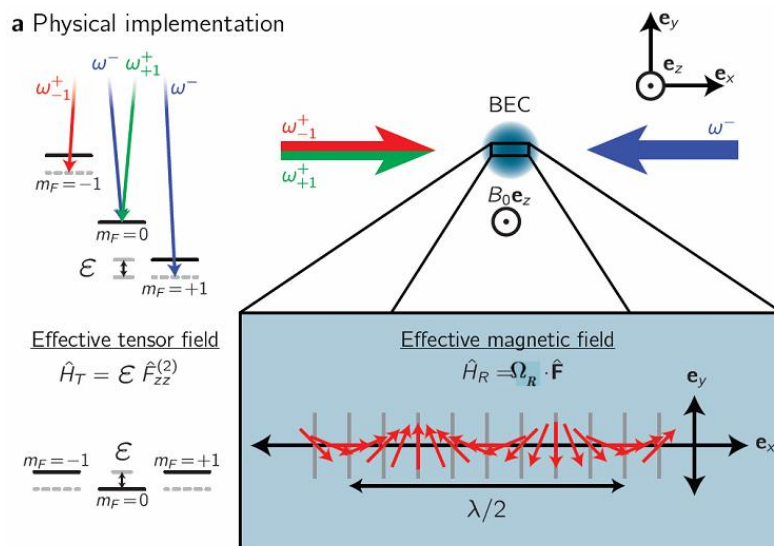


图 2.6 自旋为 1 的自旋轨道耦合实验[26]

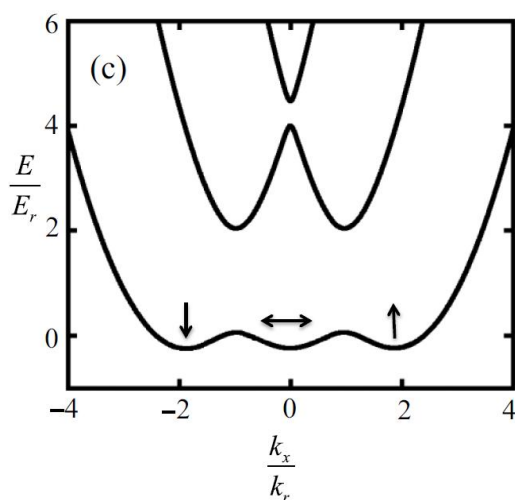


图 2.7 Raman 耦合的自旋 1 BEC 的单粒子色散[76]。 $\Omega_R = 2E_r$ ， $\epsilon = -0.23E_r$

2015 年 Campbell 等人[26]利用图 2.6 所示的实验方案实现了自旋 1 的自旋轨道耦合，单粒子的哈密顿量为

$$H_0 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \mathbf{\Omega}_R(x) \cdot \mathbf{s} + \epsilon N_{zz}, \quad (2.2.1)$$

其中 $\mathbf{\Omega}_R(x)/\Omega_R = \cos(2k_r x) \mathbf{e}_x - \sin(2k_r x) \mathbf{e}_y$ ，如图中所示，它相当于一个有效的空间

周期为 π/k_r 的螺旋状 Zeeman 场与原子自旋相互耦合，除此外还有一项类似于 Zeeman 耦合的张量耦合，强度为 ε ，它与向列张量的分量 N_{zz} 耦合，与二次 Zeeman

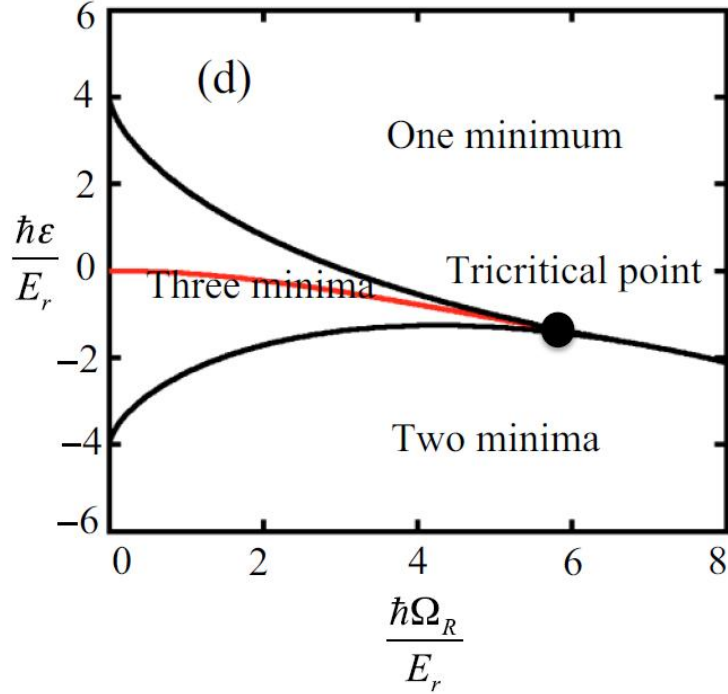


图 2.8 单粒子相图[76]。

效应等价。相差一个自旋空间沿 z 轴的旋转变换，哈密顿(2.2.1)与(1.4.9)式等价。讨论拉曼共振 $\delta = 0$ 的情况，对于给定的拉曼耦合 Ω_R 和二次塞曼效应 ε ，对角化单粒子哈密顿量，可以得到单粒子的能谱[76]，当 $\Omega_R = 2E_r$ ， $\varepsilon = -0.23E_r$ 时，单粒子的三支能谱如图 2.7 所示，与赝自旋 $1/2$ 不同，最低的一支可以有三个简并极小点。对于不同的 Ω_R, ε 值，能谱会有不同。单粒子 $\Omega_R - \varepsilon$ 相图如图 2.8 所示。图中的三个相，分别对应单粒子最低的能谱有单个极小(one minimum)，两个极小(two minima)和三个极小(three minima)，红线表示其上的三极小点是简并的。对单粒子相图的结构可以作如下定性的解释：首先当 Ω_R, ε 都为零时，能谱为三个裸态对应的抛物线，底部分别位于 $k_x/k_r = -2, 0, 2$ ，随着拉曼缀饰的增强，能谱在交叉点打开。正的 ε 增加使两边的极小抬高直至和邻近的极大点重合而进入单极小区，反之负的 ε 使中间的最小抬高直至和邻近的极大点重合而进入两极小区。图 2.7 即是在三极小区的一个例子。还可以看到，当拉曼耦合超过图中的三相临界点，三极小便不再存在(要注意这里的三相临界点不同于上节，这里是在单粒子层面讨论)。Campbell 等人[26]测量了不同拉曼耦合强度时系统稳态和亚稳态的数量及其磁化与此单粒子相图所预

言的结果能很好的吻合。

至于单粒子的波函数，我们注意到动量仍是好量子数，单粒子波函数仍可设为

$$\psi = e^{ik_x x} \Phi \quad (2.2.2)$$

这样的形式，其中 Φ 是三分量的缀饰态旋量波函数，通过求解单粒子的本征方程来确定。

2.2.2 相互作用效应

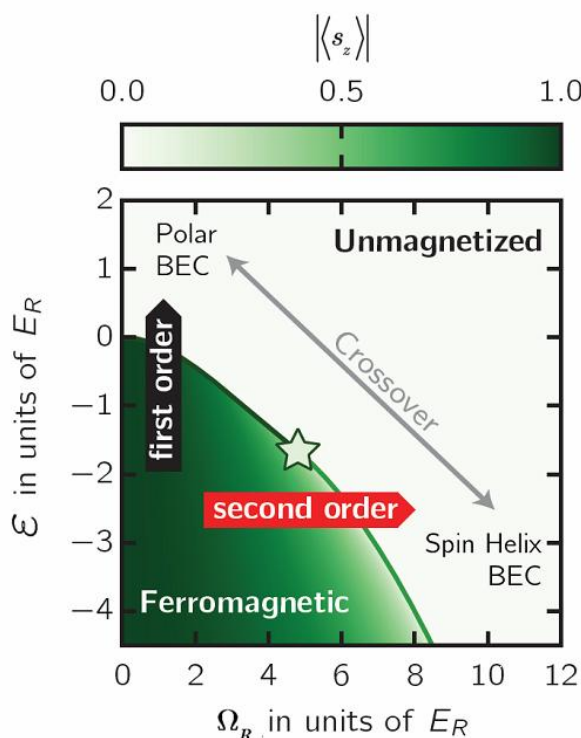


图 2.9 Raman 耦合的自旋 1 ^{87}Rb BEC 的基态相图[26]。

现在我们来讨论相互作用对上述单粒子相图的影响，我们将看到相互作用将带来新奇的基态相，但单粒子相图的结构和三相临界点的位置受相互作用的影响很小。自旋 1 玻色气体的相互作用由(1.1.10)式描述。对于弱的铁磁相互作用，可以做如下考虑[26]，单粒子哈密顿(2.2.1)描述一个具有动能和磁势能的简单巡游磁性系统，对于无限小的 Ω_R ，当张量场(二次塞曼) $\varepsilon > 0$ 时，系统倾向于凝聚在 Polar 态， $\langle s_z \rangle = 0$ ； $\varepsilon < 0$ 时，系统倾向于凝聚在铁磁态， $\langle s_z \rangle = 1$ [80]，两相之间是一级相变。而当拉曼耦合 Ω_R 增强时，自旋将极化到图 2.6 所示的局域 Zeeman 场的反方向上而形成自旋螺旋 BEC (Helix BEC)，也有 $\langle s_z \rangle = 0$ ，但与铁磁相之间是二级相变。理论和实验测定的相图如图 2.9 所示。两类相变在图中五角星所示的位置 $(\Omega_R^*, \varepsilon^*)$ 连接。

有趣的是, 在实验中 Campbell 等人[26]分别固定 ε 和 Ω_R 沿着相图近似水平和垂直扫描并测量了向列序参数 $\langle \mathfrak{n}_{zz} + 2/3 \rangle$ 。受实验所限, 水平扫描实际沿着图 2.10 所示的红虚线分别在 $\varepsilon < \varepsilon^*$ 和 $\varepsilon > \varepsilon^*$ 即二级和一级相变区沿 Ω_R 下降的方向进行。测

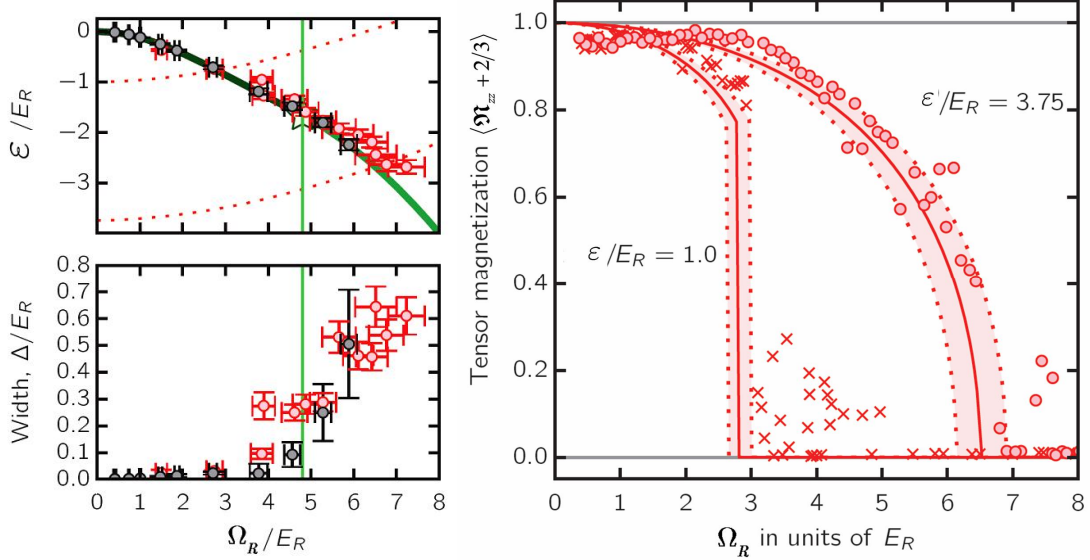


图 2.10 水平扫描[26]。左图中黑色和红色符号分别是利用垂直和水平扫描确定的两相的分界线。

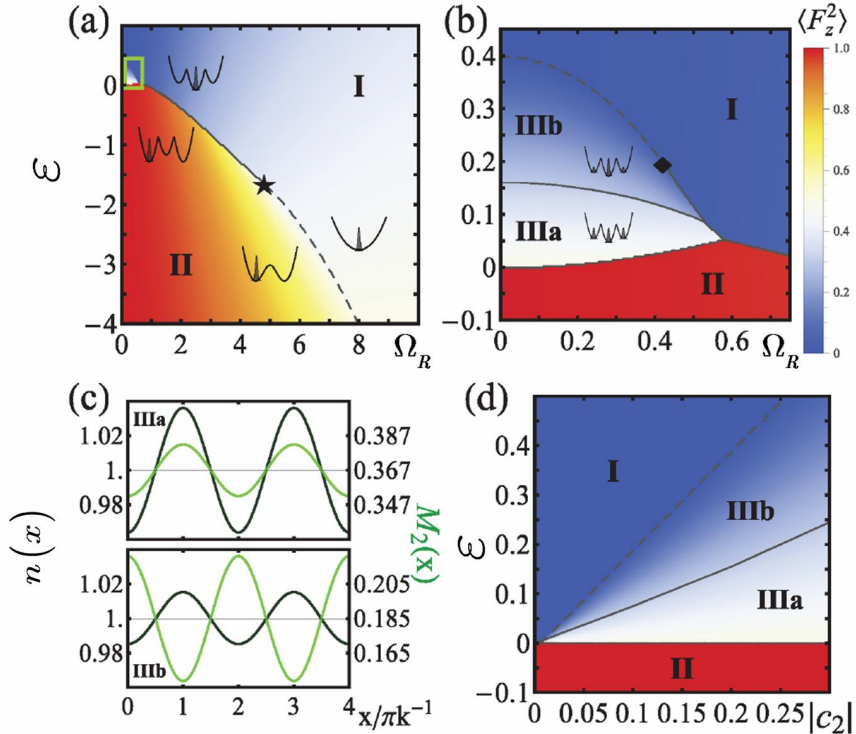


图 2.11 Raman 耦合的自旋 1 ^{87}Rb BEC 的基态相图。 $(c_0, c_2) = (10, -0.2)$,

$$M_2 = \mathfrak{n}_{zz} + 2/3 [77]$$

量的向列序参数 $\langle \mathfrak{n}_z + 2/3 \rangle$ 如图 2.10 所示, 可以看到与二极相变相比一级相变的宽度(20%-50%)很窄。实验还观察到在一级相变区系统经垂直扫描由 Polar 相进入铁磁相, 系统会较长时间处于亚稳态 $\langle s_z \rangle = 0$ 上, 反之也会长时间处于亚稳态 $|\langle s_z \rangle| = 1$ 上, 经历较长时间的驰豫过程。而沿着 $\varepsilon = -2$ 水平扫描, 系统在 Ω_R 较小时有三个亚稳态, 靠近 Ω_R^* 时下降为两个, 跨过 Ω_R^* 则进入单极小区。这与单粒子相图相吻合。

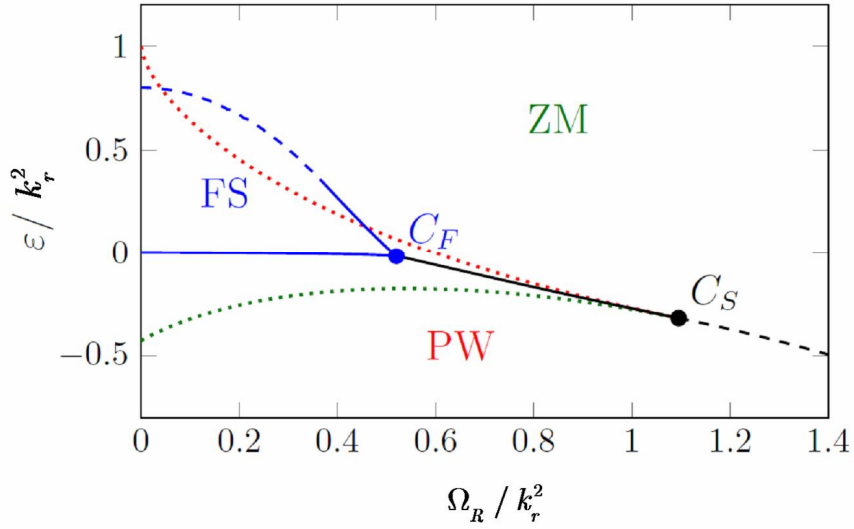


图 2.12 Raman 耦合的自旋 1 ^7Li BEC 的基态相图[78]。

定量讨论时, 将(2.2.1)在自旋空间沿 z 轴作旋转变换, 即得到与(1.4.9)式形式相同的哈密顿

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x - 2k_r s_z)^2 + \frac{\Omega_R}{2} s_x + \frac{\varepsilon}{2} s_z^2. \quad (2.2.3)$$

这里取 $\delta = 0$ 。对于(1.1.10)式描述的相互作用, 与自旋 1/2 相同, 可以利用变分方法来计算[77], 将波函数设为

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0} \sum_{m=1,0,-1} C_m e^{imk_1 x} \Phi_m, \quad (2.2.4)$$

这里 C_m 是叠加系数, 满足归一化条件 $\sum_{m=1,0,-1} |C_m|^2 = 1$ 。最小化能量泛函可以得到波

函数。所得的基态相图如图 2.11 所示, 与图 2.9 相似, 除了在图 2.11 (a)所示的小区域会出现 III 相, 放大后如图 2.11 (b)所示, 命名为铁磁条纹相(FS)。I, II, III 这三个相与无自旋轨道耦合的凝聚体相对应。我们知道, 平均场预言[80]在 $\varepsilon > 4|c_2|n_0$ 时, 无自旋轨道耦合的凝聚体基态是纵向 Polar 态, 对应这里的 I 相, 即零动量(ZM)相;

在 $0 < \varepsilon < 4|c_2|n_0$ 且 $\delta = 0$ 时，基态是横向铁磁态，对应这里的 III 相铁磁条纹(FS)相；在 $\varepsilon < 0$ 时，基态是纵向铁磁态，对应这里的 II 相，即平面波相(PW)。ZM 相的特征是原子只占居色散谱的中间极小， $C_0 = 1$ ，此相具有均匀的密度分布，磁序参数 $\langle S_z \rangle = 0$ 。在 ZM 相的左上区域，基态近似是纵向 Polar 态，而在右下区域，则具有宏观横向磁化 $\langle S_x \rangle \neq 0$ ，回退到实验室系则是图 2.9 所示的自旋螺旋 BEC (Helix BEC)。PW 相的区域是单粒子谱的两极小区，粒子凝聚在其中一个极小，其特征是密度分布均匀， Z_2 对称破缺，磁序参数 $\langle S_z \rangle \neq 0$ 。在图 2.11 (b)所示的区域 Sun 等人发现铁磁条纹相的出现，铁磁条纹相 III(a)和 III(b)共同的特征是两个单粒子极小都有占据，且 $|C_0| > |C_1| = |C_{-1}| > 0$ 。在条纹相密度分布 $n(r)$ ，自旋密度 S_x, S_y 和向列张量密度 $\mathfrak{n}_{xx}, \mathfrak{n}_{yy}, \mathfrak{n}_{xy}, \mathfrak{n}_{zz}$ 都是空间调制的，调制波长为 $2\pi/k_r$ ，而自旋密度 S_z 是均匀的。但仍然要注意，只有 $n(r)$ ， S_z 和 \mathfrak{n}_{zz} 是自旋空间绕 z 轴转动不变的[78]。铁磁条纹相 III(a)和 III(b)的区别是 III(a)相密度分布和向列张量密度 \mathfrak{n}_{zz} 是同相位振荡的，III(b) 相密度分布和向列张量密度 \mathfrak{n}_{zz} 是反相位的，如图 2.11 (c)所示。

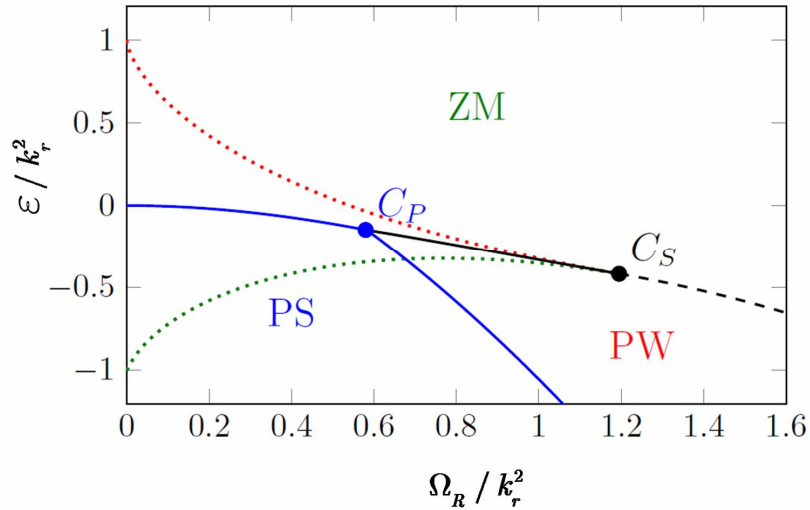


图 2.13 Raman 耦合的自旋 1 ^{23}Na BEC 的基态相图[78]。

在相边界处将能量泛函对 ε 求一次导数，即序参数 $\langle s_z^2 \rangle$ 不连续时，系统发生一级相变，而当二次导数，即序参数 $\partial \langle s_z^2 \rangle / \partial \varepsilon$ 不连续时，相变是二级相变[77]，在图

2.11 (a)中分别用实线和虚线来表示。图 2.11 (d)表明条纹相占据的面积随 $|c_2|$ 的增加而增加。几乎与 Sun 等人[77]同时 Martone[78]等人也研究了此问题，而且选取 ^7Li 为研究对象，相图如 2.12 所示，FS 相区域相对增大了。Martone[78]等人同时还研究了反铁磁相互作用的相图，如图 2.13 所示。我们知道在无拉曼耦合时，平均场预言[80]在 $\varepsilon > 0$ 时，基态是纵向 Polar 态，向列方向平行 z 轴，对应这里的零动量(ZM)相；在 $\varepsilon < 0$ 时，基态是横向 Polar 态，向列方向在 xy 平面，对应这里的 Polar 条纹相(PS)。当拉曼耦合增强时，将发生密度调制的 Polar 条纹相到密度均匀的零动量相或平面波相(PW)的相变。ZM 相和 PW 相的特征与前面 ^{87}Rb 铁磁凝聚体类似；Polar 条纹相出现在单粒子相图的两极小区，特征为 $|C_0| = 0$ ， $|C_1| = |C_{-1}|$ 。自旋密度 $S_z = 0$ 。而密度 $n(r)$ ，自旋密度 S_x, S_y 和向列张量密度 $\mathfrak{n}_{xx}, \mathfrak{n}_{yy}, \mathfrak{n}_{xy}, \mathfrak{n}_{zz}$ 都是空间调制的，反映自发的平移对称性破缺，调制波长为 π/k_r ，只有铁磁条纹相的一半。仍然，只有 $n(r)$ ， S_z 和 \mathfrak{n}_{zz} 是自旋空间绕 z 轴转动不变的[78]，可以与实验测量直接比较。同时，Martone[78]等人还计算了不同参数区域的亚稳态的情况，在图 2.12 和 2.13 中以点状线来分割不同的区域，虽然原子种类不同，但结构与图 2.8 的单粒子相图，以及实验[26]所测得的亚稳态数目相类似。

第三章 Rashba 耦合的玻色-爱因斯坦凝聚体

本章我们简单讨论二维的自旋轨道耦合—Rashba 耦合的 BEC 的基态。第一节先讨论 Rashba 耦合的赝自旋 1/2 BEC 单粒子哈密顿的基态,然后在第二节中考虑相互作用的影响,解释基态相图,讨论各相的特征,密度以及自旋序。第三节讨论 Rashba 耦合的自旋 1 BEC 的基态。最后,在第四节简单介绍在存在外部囚禁势时的基态相图。

3.1 Rashba 耦合的赝自旋 1/2 BEC

对于二维各向同性的 Rashba 自旋轨道耦合的赝自旋 1/2 BEC,在自旋轨道耦合很强时,可以忽略外部的简谐囚禁势,认为系统是近似均匀的,具有平移对称性,此时动量算符 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ 。正如在第二章讨论拉曼诱导的自旋轨道耦合时的做法,将 z 方向的运动分离出来,在讨论凝聚体的基态时,认为其处在 z 方向的动量基态而将其忽略,即 $k_z = 0$ 。若采用 $\hbar = m = 1$ 的单位制,则 Rashba 自旋轨道耦合的单粒子的哈密顿量形式为

$$H_0 = \frac{(\mathbf{k}_\perp - \kappa\boldsymbol{\sigma})^2}{2}. \quad (3.1.1)$$

这里 $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$, κ 是自旋轨道耦合强度,忽略一个不重要的常数项,上式仍可以写做如下形式

$$H_0 = \frac{1}{2}\mathbf{k}_\perp^2 - \mathbf{h}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.1.2)$$

其中 \mathbf{h}_k 相当于一个依赖于动量的塞曼场[61]

$$\mathbf{h}_k = \kappa\mathbf{k}_\perp = \{\kappa k_x, \kappa k_y, 0\}, \quad (3.1.3)$$

若 \hat{e}_h 为 \mathbf{h}_k 方向的单位矢量,则

$$H_0 = \frac{1}{2}\mathbf{k}_\perp^2 - |\mathbf{h}_k| \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h. \quad (3.1.4)$$

3.1.1 单粒子基态

对于 (3.1.1) 式的单粒子哈密顿,与拉曼耦合相似,除了平移对称性,即 $[\mathbf{k}_\perp, H_0] = 0$ 之外,可以定义螺旋度 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h$,表示自旋在有效的 Zeeman 场方向的投影,只不过这里由于 \hat{e}_h 平行于 \mathbf{k}_\perp 且 $k_z = 0$,螺旋度就表示自旋在动量方向的投影,与其

通常的定义一致。可以证明 $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h, H_0] = 0$ ，因此螺旋度也是运动常数，反映了在绕 z 轴将自旋和动量同时转动时哈密顿是不变的。

对于自旋 1/2 的系统，螺旋度的本征值为 ± 1 ，用量子数 \pm 来标记，分别代表自旋平行于和反平行于动量的方向。对应的本征态仍设为 χ_{\pm} ，因此时 \hat{e}_h 矢量在 xy 平面，在球坐标下设其为 $\hat{e}_h = (1, \pi/2, \varphi_k)$ ，即

$$\tan \varphi_k = k_y / k_x. \quad (3.1.5)$$

则

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h &= \cos \varphi_k \sigma_x + \sin \varphi_k \sigma_y \\ &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi_k} \\ e^{i\varphi_k} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

代入本征方程(2.1.6)容易解得

$$\chi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix}, \chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\varphi_k} \end{pmatrix} \quad (3.1.7)$$

单粒子哈密顿的本征态仍可以利用动量和螺旋度算符的本征值来分类

$$\psi_{\mathbf{k}_{\perp}, \pm} = e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \chi_{\pm} \quad (3.1.8)$$

相应的本征值谱分为两支

$$E_0^{\mathbf{k}_{\perp}, \pm} = \frac{k_{\perp}^2}{2} \mp \kappa k_{\perp} \quad (3.1.9)$$

其中， $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ，式(3.1.9)与 φ_k 无关表明色散曲线也是绕 z 轴转动对称的。低能的一支对应螺旋度为正，单粒子本征态为

$$\psi_{\mathbf{k}_{\perp}, +} = e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix} \quad (3.1.10)$$

对 $E_0^{\mathbf{k}_{\perp}, +}$ 求导数

$$\frac{\partial E_0^{\mathbf{k}_{\perp}, +}}{\partial k_{\perp}} = 0 \quad (3.1.11)$$

得到单粒子能谱的极小点出现在面内动量的大小

$$k_{\perp} = \kappa \quad (3.1.12)$$

时，且与 φ 无关。单粒子色散如图 3.1 所示。与拉曼诱导的自旋轨道耦合不同之处有两点，其一是高对称性，这里哈密顿和能谱都是 $SO(2)$ 对称的，而拉曼耦合只是 Z_2

对称的($k_x \leftrightarrow -k_x$ 同时 $\sigma_z \leftrightarrow -\sigma_z$), 这导致拉曼耦合时基态是两重简并的, 而现在简并度为无穷大, 因此在理想气体的情况, 粒子如何凝聚仍是不确定的。其二, 由于不存在拉曼耦合项, 两支谱在 $k_{\perp} = 0$ 处能隙为零。

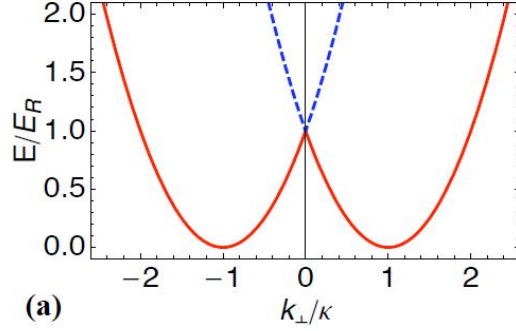


图 3.1 Rashba 耦合下的单粒子色散[81]。 $E_R = \kappa^2/2$ 。

3.1.2 相互作用效应

仍然考虑形式如 (1.2.15) 式描述的相互作用, 且考虑自旋对称的情形, 即 $c_1 = (g_{\uparrow\uparrow} - g_{\downarrow\downarrow})/2 = 0$ 或 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$, 则

$$E_{\text{int}} = \int d\mathbf{r} \left[\frac{c_0}{2} n^2 + \frac{c_2}{2} (n\Sigma_z)^2 \right], \quad (3.1.13)$$

这里 $c_0 = (g + g_{\uparrow\downarrow})/2$, $c_2 = (g - g_{\uparrow\downarrow})/2$ 。相互作用将会从简并度为无穷大的单粒子基态中挑选出合适的基态。

在 Rashba 耦合下, 单粒子谱在动量空间 $k_{\perp} = \kappa$ 的圆环上各点都是简并的, 这给构造变分波函数制造了困难。原则上讲, 变分波函数总可以写成 Rashba 环(Rashba ring)上简并单粒子态的叠加

$$\Psi = \sum_{\varphi_{\mathbf{k}}} c_{\varphi_{\mathbf{k}}} e^{i\kappa(\cos\varphi_{\mathbf{k}}x + \sin\varphi_{\mathbf{k}}y)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (3.1.14)$$

其中 c_{φ} 是叠加系数。翟荟[28]等人的计算表明, 从能量角度考虑, 在基态时凝聚体波函数只包含最多一对 $\varphi_{\mathbf{k}}$ 的叠加, 即要么只有一个单粒子态, 要么是 $\varphi_{\mathbf{k}}$ 和 $\varphi_{-\mathbf{k}}$ 两项的叠加。因此可以假设变分的波函数为

$$\begin{aligned}\Psi &= \sqrt{n_0} \left[C_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} + C_{-\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_{-\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \right] \\ &= \sqrt{\frac{n_0}{2}} \begin{pmatrix} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} + C_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} (C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} - C_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}}) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (3.1.15)$$

这里利用了 $\varphi_{-\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}} + \pi$, $C_{\pm\mathbf{k}}$ 是叠加系数且满足归一化条件 $|C_{\mathbf{k}}|^2 + |C_{-\mathbf{k}}|^2 = 1$ 。从(3.1.15)式可以计算两个赝自旋分量的密度

$$n_{\uparrow} = n_0 \left[\frac{1}{2} + C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}} \cos(2\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}) \right], \quad (3.1.16)$$

$$n_{\downarrow} = n_0 \left[\frac{1}{2} - C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}} \cos(2\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (3.1.17)$$

与拉曼耦合不同的是这里总密度 n 是均匀的, 这是因为(3.1.15)中两个单粒子自旋波函数是正交的, 代入(3.1.13)式得

$$\frac{E_{\text{int}}}{N} = \frac{c_0 n_0}{2} + c_2 n_0 |C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}}|^2 \quad (3.1.18)$$

即相互作用与动量无关, 不会改变单粒子色散的极小点。最小化系统总能量仍会得到 $k_{\perp} = \kappa$ 。而 $C_{\pm\mathbf{k}}$ 仅由最小化自旋相互作用得到。结果是

(1) 平面波相。 $c_2 > 0$ 时, $|C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}}|^2 = 0$, 对应叠加系数取 $|C_{\mathbf{k}}| = 1, |C_{-\mathbf{k}}| = 0$ 或 $|C_{\mathbf{k}}| = 0, |C_{-\mathbf{k}}| = 1$ 。波函数是单个平面波, \hat{e}_h 可以沿 xy 平面的任意方向, 若取为 x 方向, 则

$$\Psi = \sqrt{\frac{n_0}{2}} e^{i\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.19)$$

此时每个分量的密度和总密度都是均匀的, 但每个自旋分量的相位是沿 x 方向周期调制的, 周期为 $2\pi/k$, 见图 3.2 (a)。平面波态自发破缺时间反演对称性, 不为零的自旋序参数有 $\langle \sigma_x \rangle = 1$, 自旋沿 x 方向极化, 与动量方向相同。

(2) 条纹相。 $c_2 < 0$ 时, $|C_{\mathbf{k}} C_{-\mathbf{k}}|^2 = 1/4$, 对应叠加系数取 $|C_{\mathbf{k}}| = |C_{-\mathbf{k}}| = 1/\sqrt{2}$ 。波函数是两个动量相反的平面波的叠加。不失一般性, \hat{e}_h 仍可以取为 x 方向, 则

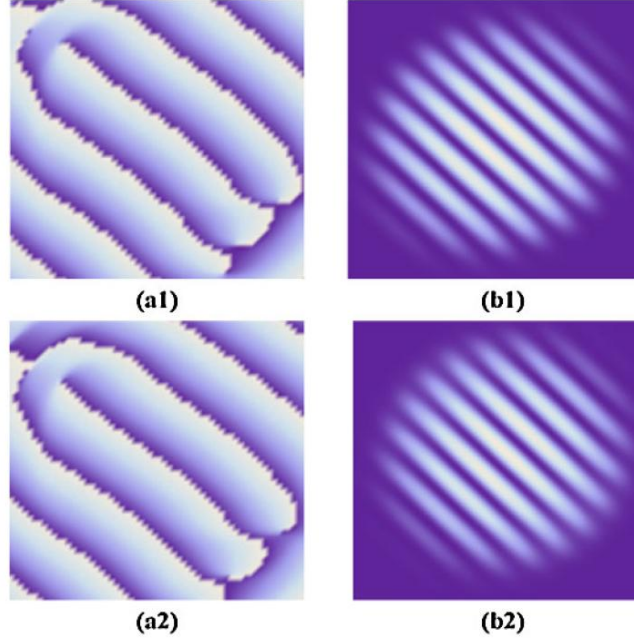


图 3.2 Rashba 耦合的基态[28]。(a)平面波相两个自旋分量的相位, (b)条纹相两个自旋分量的密度。

$$\begin{aligned}\Psi &= \frac{\sqrt{n_0}}{2} \left[e^{i\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-i\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \sqrt{n_0} \begin{pmatrix} \cos \kappa x \\ i \sin \kappa x \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (3.1.20)$$

这里取了 $C_{\mathbf{k}}, C_{-\mathbf{k}}$ 同相位。此时两个分量的密度互补, 即某一分量的高密度区正对应另一分量的低密度区以减小分量间的相互作用 ($g_{\uparrow\downarrow}$), 导致自旋密度 $\Sigma_z = \cos(2\kappa x)$, 它和两个分量的密度均沿 x 轴周期调制形成自旋密度波态, 周期为 π/k , 见图 3.2 (b)。 $C_{\mathbf{k}}, C_{-\mathbf{k}}$ 的相位差会影响条纹的位置, 因此沿条纹方向的平移对称性自发破缺, 而 Z_2 对称性 ($\mathbf{k}_{\perp} \leftrightarrow -\mathbf{k}_{\perp}$ 同时 $\sigma_{\perp} \leftrightarrow -\sigma_{\perp}$) 是保持的。

进一步的研究发现, 均匀系统的条纹态具有沿 y 方向的粒子流, 会导致粒子在有限尺寸系统的边界积聚。为此可以将条纹相作修改[82]

$$\Psi = \gamma(x, y) e^{i\phi(x, y)} \begin{pmatrix} \cos \kappa x \\ i \sin \kappa x \end{pmatrix}, \quad (3.1.21)$$

其中 $\gamma(x, y) = ce^{-\xi\kappa y^2/2}$, $\phi(x, y) = \sin(2\kappa x)\xi\kappa y/(\xi + 2)$, ξ 是一变分参数。计算表明, 修改的条纹态可以避免粒子在边界积聚同时还具有更低的能量。

至于为什么凝聚体处于平均场基态时(3.1.14)只能至多包含一对动量的单粒子态叠加, 可以作如下考虑[81]: 均匀的总密度能最小化相互作用(3.1.18)中 c_0 项, 平面波态和条纹态能最小化相互作用(3.1.18)中 c_2 项。若(3.1.14)中出现多于一对 (\mathbf{k} 与

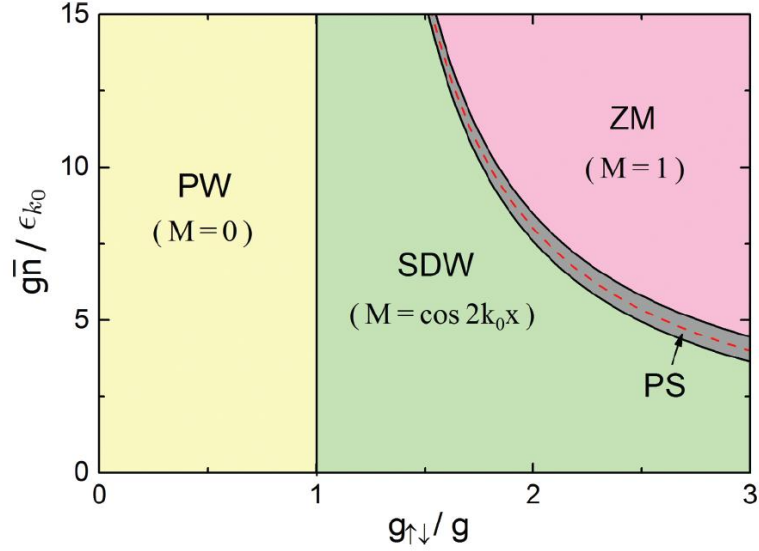


图 3.3 Rashba 耦合的基态相图[83]。

$-\mathbf{k}$)动量的单粒子态，凝聚体的总密度将总是非均匀的，不可避免地增加密度相互作用。实际上，文献中也有这方面的讨论，而且会出现许多有趣的量子态，例如，若将 Rashba 环上的所有单粒子态作等权重的叠加，将得到半量子涡旋(half-quantum vortex)态[27-29]。而有限多个单粒子态的叠加将导致各种各样的 skyrmion 晶格相。这些态都不是均匀系统的基态。但当存在强的简谐囚禁势时，密度不可能再是均匀的，这时候相互作用，外部势，自旋轨道耦合的相互竞争将导致复杂的基态相，比如当相互作用弱时，会出现上述半量子涡旋(half-quantum vortex)态[29-31]，或者在强自旋轨道耦合时，在某些弱相互区域会出现 skyrmion 晶格相[30,31]。这些将在 3.3 节中讨论。

当然，相互作用很强时，也可能导致单粒子态的动量不是沿 xy 平面，自旋也未必一定极化到动量方向，一个更一般的单粒子态(3.1.7)应该是

$$\psi_{\mathbf{k}_{\perp,+}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \cos \gamma \\ \sin \gamma e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (3.1.22)$$

γ 决定粒子的自旋极化。以此单粒子态作叠加，变分计算系统的基态，余增强[83]发现当 $c_2 < 0$ 时，即在条纹相区，还有一个自旋完全沿 z 方向极化的零动量相与自旋密度波相相互竞争，是自旋轨道耦合强度较弱时的基态，相图如 3.3 所示。

3.2 Rashba 耦合的自旋 1 BEC

对于 Rashba 自旋轨道耦合的自旋 1 玻色-爱因斯坦凝聚体，单粒子哈密顿量与 (3.1.2)类似

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{k}_\perp^2 - \mathbf{h}_k \cdot \mathbf{s}. \quad (3.2.1)$$

单粒子哈密顿量具有平移对称性, 即 $[\mathbf{k}_\perp, H_0] = 0$, 螺旋度对称性 $[\mathbf{s} \cdot \hat{e}_h, H_0] = 0$, 设 \hat{e}_h 矢量在球坐标下坐标为 $\hat{e}_h = (1, \pi/2, \varphi_k)$, 这里仍定义

$$\tan \varphi_k = k_y / k_x \quad (3.2.2)$$

则

$$\begin{aligned} \mathbf{s} \cdot \hat{e}_h &= \cos \varphi_k s_x + \sin \varphi_k s_y \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi_k} & 0 \\ e^{i\varphi_k} & 0 & e^{-i\varphi_k} \\ 0 & e^{i\varphi_k} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

代入本征方程(2.1.6)容易解得螺旋度为正的本征态为

$$\chi_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_k} \\ \sqrt{2} \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix}. \quad (3.2.4)$$

它对应最低的能谱。单粒子哈密顿的本征态仍可以写成动量和螺旋度算符的共同本征态

$$\psi_{\mathbf{k}_\perp,+} = e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} \chi_+. \quad (3.2.5)$$

相应的本征值谱为

$$E_0^{\mathbf{k}_\perp,+} = \frac{k_\perp^2}{2} - \kappa k_\perp. \quad (3.2.6)$$

单粒子能谱的极小点出现在面内动量的大小 $k_\perp = \kappa$ 时。

对于自旋 1 的系统, 考虑形式如(1.2.16)描述的相互作用

$$E_{\text{int}} = \frac{c_0}{2} \int n^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{c_2}{2} \int \mathbf{S}^2 d\mathbf{r}. \quad (3.2.7)$$

假设变分的波函数为

$$\Psi = \sqrt{n_0} \left[C_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_k} \\ \sqrt{2} \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix} + C_{-\mathbf{k}} \frac{1}{2} e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_{-\mathbf{k}}} \\ \sqrt{2} \\ e^{i\varphi_{-\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \right] \quad (3.2.8)$$

$C_{\pm\mathbf{k}}$ 满足归一化条件 $|C_{\mathbf{k}}|^2 + |C_{-\mathbf{k}}|^2 = 1$ 。由于 $\varphi_{-\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}} + \pi$

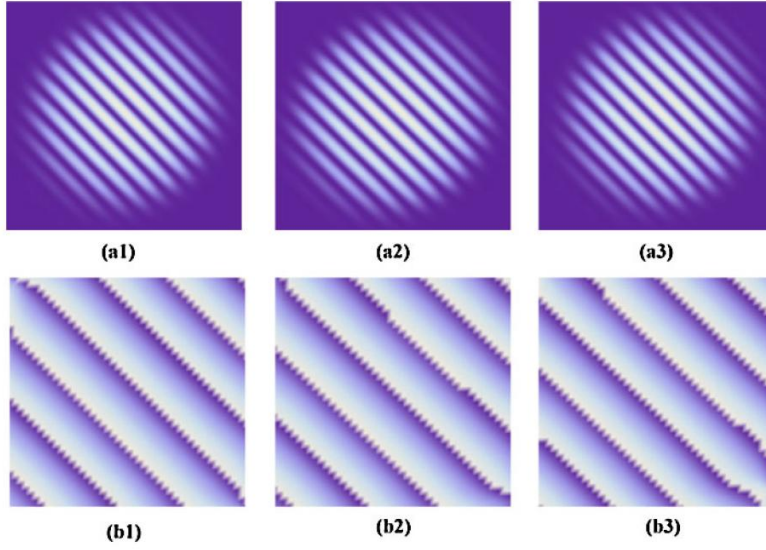


图 3.3 Rashba 耦合自旋 1 的基态[28]。(a) 条纹相的三个自旋分量密度, (b) 平面波相三个自旋分量的相位。

$$\Psi = \frac{\sqrt{n_0}}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_k} (C_k e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} - C_{-k} e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}}) \\ \sqrt{2} (C_k e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} + C_{-k} e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}}) \\ e^{i\varphi_k} (C_k e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}} - C_{-k} e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.9)$$

计算三个自旋分量的密度得

$$n_1 = \frac{1}{4} n_0 [1 - C_k C_{-k} \cos(2\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r})], \quad (3.2.10)$$

$$n_0 = \frac{1}{2} n_0 [1 + C_k C_{-k} \cos(2\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r})], \quad (3.2.11)$$

$$n_1 = \frac{1}{4} n_0 [1 - C_k C_{-k} \cos(2\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r})]. \quad (3.2.12)$$

可见总密度 n 仍是均匀的, 而自旋密度

$$S_x = n_0 \cos \varphi_k (|C_k|^2 - |C_{-k}|^2), \quad (3.2.13)$$

$$S_y = n_0 \sin \varphi_k (|C_k|^2 - |C_{-k}|^2), \quad (3.2.14)$$

$$S_z = 0. \quad (3.2.15)$$

因此

$$\mathbf{S}^2 = n_0^2 (1 - 4|C_k|^2 |C_{-k}|^2), \quad (3.2.16)$$

代入(3.2.7)得

$$\frac{E_{\text{int}}}{N} = \frac{c_0 n_0}{2} + \frac{c_2 n_0}{2} - 2c_2 n_0 |C_{\mathbf{k}}|^2 |C_{-\mathbf{k}}|^2. \quad (3.2.17)$$

$C_{\pm\mathbf{k}}$ 可以通过最小化自旋相互作用得到。结果是：

(1) 平面波相。 $c_2 < 0$ 时，叠加系数取 $|C_{\mathbf{k}}|=1, |C_{-\mathbf{k}}|=0$ 或 $|C_{\mathbf{k}}|=0, |C_{-\mathbf{k}}|=1$ 。波函数是单个平面波， \hat{e}_h 可以沿 xy 平面的任意方向，取为 x 方向，则

$$\Psi = \frac{\sqrt{n_0}}{2} e^{i\kappa x} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2.18)$$

此时与自旋 1/2 相同，每个分量的密度和总密度都是均匀的。但每个自旋分量的相位是沿 x 周期调制的，周期为 $2\pi/\kappa$ 。基态自发破缺时间反演对称性，不为零的自旋序参数有 $\langle S_x \rangle / n_0 = 1$ ，自旋沿 x 方向极化，与动量方向相同。

(2) 条纹相。 $c_2 > 0$ 时，叠加系数取 $|C_{\mathbf{k}}|=|C_{-\mathbf{k}}|=1/\sqrt{2}$ 。波函数是两个动量相反的平面波的叠加。若 \hat{e}_h 仍可以取为 x 方向，则

$$\Psi = \sqrt{\frac{n_0}{2}} \begin{pmatrix} i \sin(\kappa x) \\ \sqrt{2} \cos(\kappa x) \\ i \sin(\kappa x) \end{pmatrix}.$$

这里也取了 $C_{\mathbf{k}}, C_{-\mathbf{k}}$ 同相位。此时自旋 ± 1 两个分量与 0 分量的密度互补，它们均沿 x 轴周期调制形成自旋密度波态，周期还为 $2\pi/\kappa$ 。总密度仍是均匀的。自旋密度 $S_x = S_y = S_z = 0$ 。考虑 $C_{\mathbf{k}}, C_{-\mathbf{k}}$ 的相位差会改变条纹的位置，平移对称性是破缺的，而时间反演对称是保持的。

3.3 势阱中的 Rashba 耦合的 BEC

前两节讨论了均匀的或近似均匀的系统，本节我们讨论存在外部囚禁势时，Rashba 自旋轨道耦合的自旋 1/2 的基态。尽管对于目前拉曼诱导的自旋轨道耦合实验来说，自旋轨道耦合远强于囚禁势能，总可以将凝聚体看成是近似均匀的。但 Rashba 耦合仍未在实验上实现，而利用磁场来诱导高维自旋轨道耦合的方案却有可能实现弱的自旋轨道耦合。理论上已经有文献探索强的囚禁势可能导致的效应，包括前面提到了 half-quantum vortex, skyrmion 晶格等奇特的基态相。外部势将强烈地

影响 BEC 的基态，我们本节来简单讨论此问题。

3.3.1 SU(2)对称的相互作用

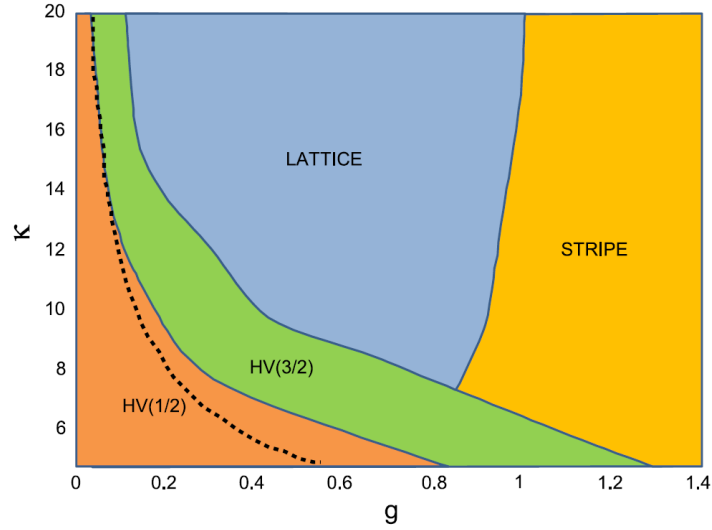


图 3.4 简谐囚禁下 Rashba 耦合的基态[30]，相互作用是 SU(2)对称的。\$g\$ 以 \$\hbar^2/m\$ 为单位。

若 Rashba 耦合的凝聚体处于外部的二维简谐势阱中，囚禁势能，自旋轨道耦合和相互作用之间的相互竞争将导致丰富的基态相图。Sinha 等人[30]曾研究过此问题。他们发现，相互作用不强时，基态是 half-vortex (HV(1/2))态，具有角动量 \$m\$ 满足 \$|m + 1/2| = 1/2\$，吴从军[29]等人在早些时候就曾发现过此相，随着相互作用的增加 Sinha 等人[30]发现还有可能出现 HV(3/2)基态，具有 \$|m + 1/2| = 3/2\$；当自旋轨道耦合足够大时，由 HV(3/2)进入一个六边形对称(hexagonally-symmetric)的晶格相，而在两体相互作用足够大时，基态进入条纹相。基态相图如图 3.4 所示。

在自旋轨道耦合很强时，可以在动量表象中求解单粒子基态，在动量表象中，简谐囚禁势是动量表象中的微分算符 \$V_{\text{trap}} = -\nabla_k^2/2\$，可将单粒子波函数设为

$$\psi = \sum_m k^{-1/2} f_m e^{im\varphi_k} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi_k} \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

引入无量纲的参数 \$\tilde{\kappa} = \kappa l_T\$，\$l_T\$ 为囚禁势的谐振子长度。在 \$\tilde{\kappa} \gg 1\$，即自旋轨道耦合远强于外部囚禁时，可以将单粒子色散在动量 \$k \approx \tilde{\kappa}\$ 附近展开为

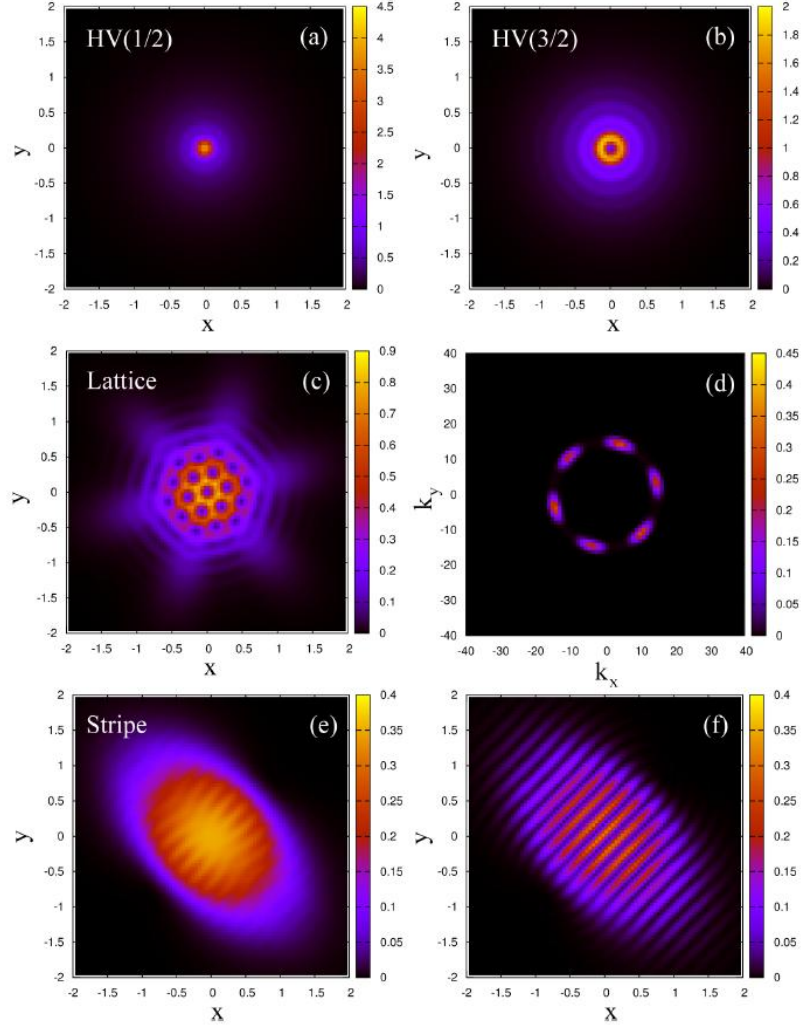


图 3.5 Rashba 耦合的基态[30]。 $\tilde{\kappa} = 15$ 时的总密度分布(a) $gm/\hbar^2 = 0.05$, (b) $gm/\hbar^2 = 0.1$, (c) $gm/\hbar^2 = 0.85$, (e) $gm/\hbar^2 = 2.0$, (d)是(c)态对应的动量分布, (f)是(e)态中自旋态"up"分量的密度分布。

$$E_0^{nm} = n + \frac{1}{2} + \frac{\left(m + \frac{1}{2}\right)^2}{2\tilde{\kappa}^2}. \quad (3.3.2)$$

由于 $\tilde{\kappa} \gg 1$, 以 m 标记的角向激发是低能的, 而量子数 n 描述高能径向激发。

对无相互作用的基态有 $n = 0$ 而 $|m + 1/2| = 1/2$, 因此对于很弱的两体相互作用, 基态是 HV(1/2)态, 其总密度分布如图 3.5(a)所示, 可以看出中心密度很大, 随着相互作用强度的增加, 相互作用能快速增加, 因而基态将过渡到 HV(3/2)态, 如 3.5(b)所示, HV(3/2)态的中心密度为零, 与 HV(1/2)态相比相互作用能更低。此时若自旋轨道耦合强度增加, 则转动对称性破缺, 出现晶格相如图 3.5(c)所示, 从对应

的动量分布图 3.5(d)可以看出, 晶格相是由于 Rashba 环上三对动量的单粒子态叠加而成。它的出现可以用动量空间中的环状模型[84]来理解。而当相互作用足够强时, 囚禁势便不再重要, 即回到我们前面讨论的条纹相, 密度如图 3.5(e)所示。

3.3.2 非 SU(2)对称的的相互作用

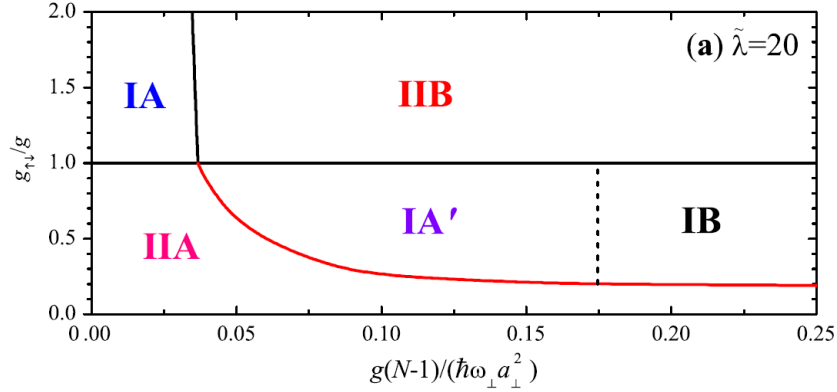


图 3.6 强 Rashba 耦合的基态[31]。

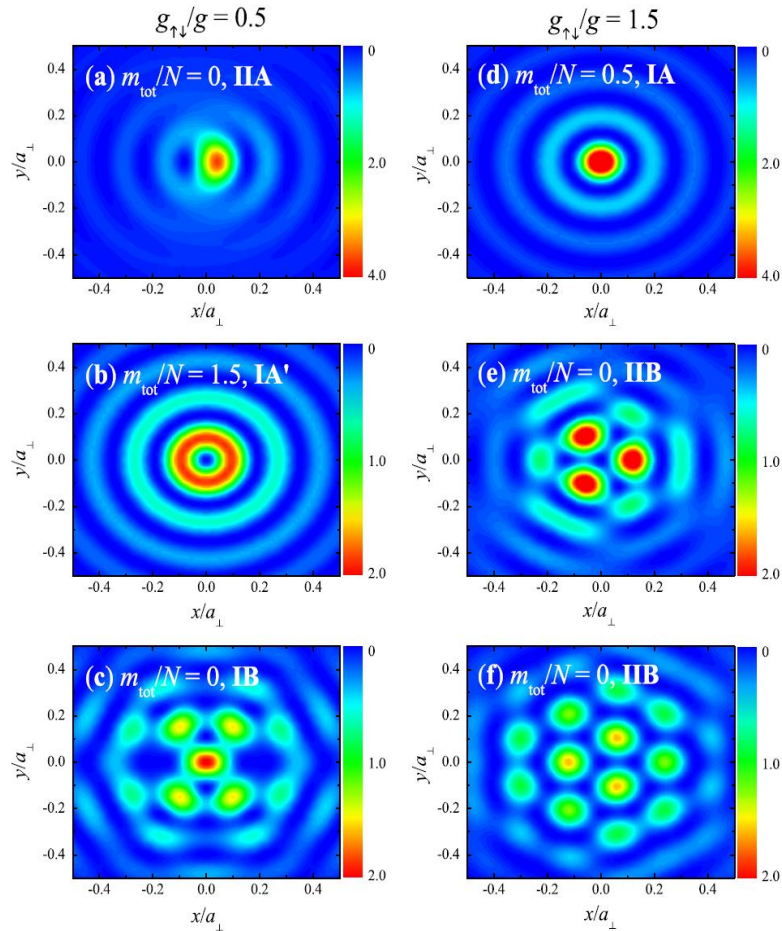


图 3.7 强 Rashba 耦合各基态相的自旋态"up"分量的密度分布[31], 各相分别对应图 3.6。

前面讨论了 SU(2)对称的相互作用, 即 $c_2 = 0$ 。差不多与 Sinha 等人同时, 胡辉

[31]等人考虑了 $g \neq g_{\uparrow\downarrow}$ 即 $c_2 \neq 0$ 时的基态相图，强自旋轨道耦合时相图如图 3.6 所示。各相的密度分布见图 3.7，根据各相的对称性可将量子相分为两类：I 相满足宇称对称性，II 相满足宇称-时间反演对称性。每类又根据密度分布和(或)总角动量分为若干子相：IA, IA', IB, IIA 和 IIB。当 g 不超过临界值时， $c_2 < 0$ 时基态是 HV(1/2)态，而 $c_2 > 0$ 时基态是两个简并的 HV(1/2)态的叠加。随着相互作用的增加，IIA 相过渡到 IA'，而 IA 相过渡到 IIB 相，分别近似是 HV(3/2)态和两个 HV(3/2)态的叠加。

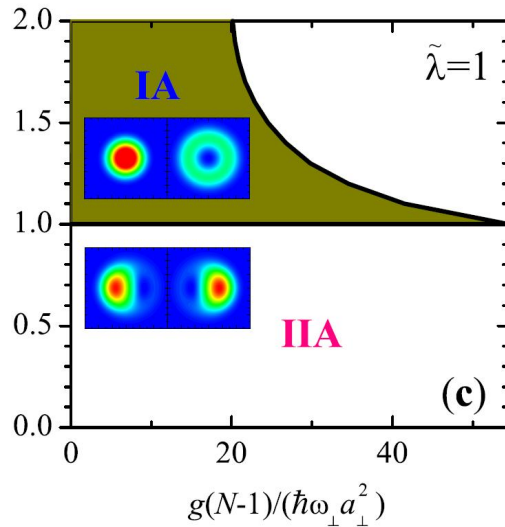


图 3.8 弱 Rashba 耦合时的基态相图[31]。

自旋轨道耦合较弱时相图如图 3.8 所示，此时 IA 和 IIA 占据相图的大部分区域。在自旋轨道耦合强度趋于无穷的极限下，IA 和 IIA 相不再存在。

除了赝自旋 1/2 和自旋 1 的 BEC 之外，Kawakami[85]和 Xu[86]等人还研究了 Rashba 耦合的自旋为 2 的 BEC 的基态相；Wilson[87]和 Gopalakrishnan[88]等人研究了 Rashba 耦合的偶极玻色气体的基态相图；Wen[89]等人研究了外场的效应；还有对涡旋[90,91]，耗散[92,93]，破裂凝聚体[94]等性质的研究，在此都不作讨论。

第四章 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 玻色气体

随着对自旋轨道耦合的 BEC 的深入研究, 具有更高对称性的三维自旋轨道耦合, 即 Weyl 耦合也进入人们的视野, Weyl 耦合是简单将 Rashba 耦合推广至三维, 其形式为 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, 在三个空间方向上耦合原子的自旋和空间运动。这种自旋轨道耦合形式也是潜在实验可实现的, 例如可以在原子芯片上利用非均匀的脉冲磁场诱导出来[34]。2012 年, Kawakami [42], Li [43,44]和 Anderson[45]等人都研究了此问题。Kawakami 等人[42]利用虚时演化方法求解了囚禁在简谐势阱中的 Weyl 耦合的两分量 BEC 的基态, 发现基态是人们长期以来在寻找的三维 skyrmion。Li 等人[43,44]也发现了在自旋轨道耦合不太强时, 系统出现此三维 skyrmion 基态, 同时, 他们还发现在强自旋轨道耦合时, 系统的基态处于 skyrmion 晶格相。Anderson[45]等人则研究了 Weyl 耦合的单粒子物理, 发现在自旋轨道耦合较弱时, 能谱具有三维谐振子能谱的特征, 伴有能级之间的混合; 而在强自旋轨道耦合时, 低能的单粒子能谱经历一个从三维到一维的维度约化(dimensional reduction), 能谱具有朗道能级的特征。此外, Zhang 等人[46]研究了光晶格中 Weyl 耦合的玻色气体, 在 Mott 绝缘区发现了众多的新奇相, 还有对存在 Weyl 耦合时的散射[47], 相互作用[48]以及 Weyl 耦合的费米气体[49-52]的研究。本章我们研究简谐囚禁的两分量 BEC 的基态相图。

4.1 均匀系统的基态

首先考虑均匀的 Weyl 耦合的两分量 BEC 的基态。单粒子的哈密顿量形式为

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{k}^2 + \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (4.1.1)$$

λ 是自旋轨道耦合强度, 与前两章相同, 单粒子哈密顿相当于

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{k}^2 + \mathbf{h}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.1.2)$$

描述原子在一个依赖于动量的塞曼场[63]

$$\mathbf{h}_k = \lambda \mathbf{k} = \{ \lambda k_x, \lambda k_y, \lambda k_z \} \quad (4.1.3)$$

中运动。或者

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{k}_\perp^2 + |\mathbf{h}_k| \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h, \quad (4.1.4)$$

$|\mathbf{h}_k| = \lambda k$, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ 。同样可以证明, $[\mathbf{k}, H_0] = 0$, $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h, H_0] = 0$, 在球

坐标下设 $\hat{e}_h = (1, \theta_k, \varphi_k)$, 即

$$\cos \theta_{\mathbf{k}} = k_z / \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}, \quad \tan \varphi_{\mathbf{k}} = k_y / k_x. \quad (4.1.5)$$

则

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{e}_h &= \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \varphi_{\mathbf{k}} \sigma_x + \sin \theta_{\mathbf{k}} \sin \varphi_{\mathbf{k}} \sigma_y + \cos \theta_{\mathbf{k}} \sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{k}} & \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ \sin \theta_{\mathbf{k}} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} & -\cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

容易解得，对应于螺旋度算符本征值为 \pm 的本征态是

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -\cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (4.1.7)$$

单粒子哈密顿的本征态是动量和螺旋度算符的共同本征态

$$\psi_{\mathbf{k},\pm} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\pm}, \quad (4.1.8)$$

相应的本征值谱为

$$E_0^{\mathbf{k},\pm} = \frac{k^2}{2} \pm \lambda k. \quad (4.1.9)$$

低能的一支螺旋度为负，单粒子本征态为

$$\psi_{\mathbf{k},-} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -\cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (4.1.10)$$

对 $E_0^{\mathbf{k},-}$ 求导数得到单粒子能谱的极小点出现在动量空间中 $k = \lambda$ 的一个球面上[43]，

与方向 $\theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}$ 无关。简并度为无穷大。考虑(3.1.13)式的相互作用时，假设凝聚体的波函数为

$$\begin{aligned} \Psi &= \sqrt{n_0} \left[\cos \alpha \psi_{\mathbf{k},-} + \sin \alpha \psi_{-\mathbf{k},-} \right] \\ &= \sqrt{n_0} \begin{pmatrix} \cos \alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \sin \alpha e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -\cos \alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} + \sin \alpha e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

$\cos \alpha$, $\sin \alpha$ 是叠加系数且满足归一化条件。两分量的密度分别为

$$n_{\uparrow} = n_0 \left[\cos^2 \alpha \sin^2 \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right], \quad (4.1.12)$$

$$n_{\uparrow} = n_0 \left[\cos^2 \alpha \cos^2 \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \sin^2 \alpha \sin^2 \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} - \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (4.1.13)$$

总密度均匀，自旋密度 z 分量为

$$n_{\uparrow} - n_{\downarrow} = n_0 \left[-\cos 2\alpha \cos \theta_{\mathbf{k}} + \sin 2\alpha \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos(2\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right], \quad (4.1.14)$$

相互作用能

$$\frac{E_{\text{int}}}{N} = \frac{c_0 n_0}{2} + \frac{c_2 n_0}{2} \left[\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} - \sin^2 2\alpha \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \right) \right]. \quad (4.1.15)$$

最小化系统的能量可以得到基态相。Liao 等人[95]曾考虑过一个更一般的三维自旋轨道耦合

$$V_{so} = \lambda (\boldsymbol{\sigma}_{\perp} \cdot \mathbf{p}_{\perp} + \gamma \sigma_z p_z). \quad (4.1.16)$$

式中 γ 是表示耦合各向异性的参数， $\gamma = 0$ 的极限是上一章讨论的 Rashba 耦合， $\gamma = 1$ 即是 Weyl 耦合，Liao 等人[95]分析得到了两分量 BEC 的基态相图，如图 4.1 所示。

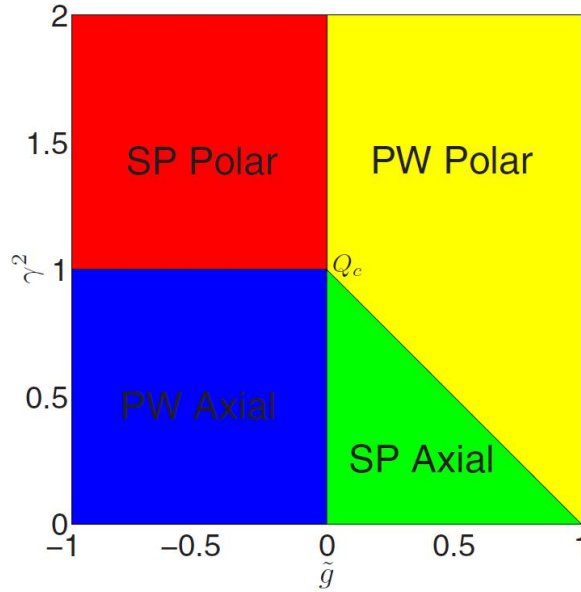


图 4.1 Weyl 耦合的均匀两分量 BEC 的基态相图[95]。 $\tilde{g} = -2c_2 n_0 / \lambda^2$

相图上仍然分为平面波(PW)和条纹(SP)两类相，但是对于三维的自旋轨道耦合，由于 $\gamma \neq 0$ ，单粒子基态的动量可能会有 z 分量，即 $k_z \neq 0$ ，命名为“Polar”，而当凝聚体的动量在 xy 平面时，命名为“Axial”，因此，相图上出现四种相，分别为：PW-Axial，PW-Polar，SP-Axial 和 SP-Polar。

4.2 简谐囚禁下的单粒子基态

在存在外部囚禁 $V_{\text{trap}} = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$ 时，单粒子动量不是好量子数，这时，采用自然单位 $\hbar = m = \omega = 1$ 是方便的。在自然单位之下，长度，能量，时间单位分别为 $l_T = \sqrt{\hbar/m\omega}$ ， $\hbar\omega$ ， ω^{-1} 。单粒子的哈密顿量为

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} + \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (4.2.1)$$

这里 $\mathbf{p} = -i\nabla$ ， λ 具有速度的量纲 $\sqrt{\hbar\omega/m}$ 。(4.2.1)式的前两项即是谐振子的哈密顿量，描述一个无自旋粒子在谐振子势阱中运动。对于谐振子，我们知道，轨道角动量 $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ 和自旋角动量 $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 都是运动常数。谐振子的本征方程也是众所周知的

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} \right) \phi_{n_r, l, m_l}(r, \theta, \varphi) = \varepsilon_{n_r, l} \phi_{n_r, l, m_l}(r, \theta, \varphi). \quad (4.2.2)$$

其中，本征值为

$$\varepsilon_{n_r, l} = 2n_r + l + \frac{3}{2}, \quad (4.2.3)$$

n_r 是径向量子数， l 是角向量子数。本征函数为

$$\phi_{n_r, l, m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r, l}(r) Y_{l, m_l}(\theta, \varphi), \quad (4.2.4)$$

这里 $Y_{l, m_l}(\theta, \varphi)$ 是球谐函数， $R_{n_r, l}(r)$ 是径向函数

$$R_{n_r, l}(r) = \frac{2^{l+2-n_r} (2n_r + 2l + q)!!}{\sqrt{\pi} n_r! [(2l+1)!!]^2} r^l e^{-\frac{r^2}{2}} F\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, r^2\right), \quad (4.2.5)$$

$F(\alpha, \beta, \gamma)$ 是合流超几何函数。由于(4.2.1)最后一项—Weyl 耦合项是自旋和轨道之间的耦合，致使对于哈密顿量(4.2.1)而言，轨道角动量 \mathbf{l} 和自旋角动量 $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 都不再守恒，但可以证明总角动量 $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 仍然是守恒量，证明如下：显然总角动量与(4.2.1)式前两项是对易的，而

$$[\mathbf{l}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] = i(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}), \quad (4.2.6)$$

$$\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right] = -i(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}), \quad (4.2.7)$$

因此

$$[\mathbf{j}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] = 0. \quad (4.2.8)$$

对于一个自旋量子数 $1/2$ 的原子在谐振子阱中运动，其非耦合表象下的本征函数为 $\phi_{n_r, l m_l m_s}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r, l}(r) Y_{l m_l}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2} m_s}(\sigma_z)$ ， $\chi_{\frac{1}{2} m_s}(\sigma_z)$ 是自旋函数。等价地也可以用耦合表象的本征函数

$$\phi_{n_r, l j m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r, l}(r) Y_{j m_j}^{l \frac{1}{2}}(\Omega) \quad (4.2.9)$$

来表示，式中

$$Y_{j m_j}^{l \frac{1}{2}}(\Omega) = \sum_{m_l + m_s = m_j} C_{l m_l \frac{1}{2} m_s}^{j m_j} Y_{l m_l}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2} m_s}(\sigma_z) \quad (4.2.10)$$

是旋量球谐函数[14]， $j = l \pm 1/2$ ， $C_{l m_l \frac{1}{2} m_s}^{j m_j}$ 是 Clebsch-Gordan 系数。在耦合表象下，谐振子的本征方程仍为

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} \right) \phi_{n_r, l j m_j}(r, \theta, \varphi) = \varepsilon_{n_r, l} \phi_{n_r, l j m_j}(r, \theta, \varphi). \quad (4.2.11)$$

本征值与 j, m_j 无关。例如，耦合表象下谐振子的基态波函数为

$$\begin{aligned} \phi_{00 \frac{1}{2} \frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) &= R_{00}(r) Y_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{0 \frac{1}{2}}(\Omega) \\ &= R_{00}(r) \begin{pmatrix} Y_{00}(\theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

或

$$\begin{aligned} \phi_{00 \frac{1}{2} -\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi) &= R_{00}(r) Y_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}}^{0 \frac{1}{2}}(\Omega) \\ &= R_{00}(r) \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{00}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

它们是简并的。这是由于无论是谐振子哈密顿，还是单粒子哈密顿(4.2.1)都是时间反演对称的。时间反演算符[96]是

$$T = -i \sigma_y K. \quad (4.2.14)$$

其中 K 表示取复共轭， T 是反幺正算符， $T^2 = -1$ 。 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 \mathbf{p} 均不是时间反演变换下的不变量，但 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ 是时间反演不变的。

由于对于单粒子哈密顿(4.2.1)，总角动量 \mathbf{j} 和 j_z 仍然是守恒量，可以以耦合表象下谐振子的本征函数 $\phi_{n_r, l j m_j}(r, \theta, \varphi)$ 作为基矢来求解单粒子哈密顿的本征谱。不同的 $j m_j$ 子空间是相互独立的，在每个 $j m_j$ 确定的子空间，谐振子哈密顿是宇称守恒的表明对于量子数 l 它是对角的，而自旋轨道耦合与轨道角动量 \mathbf{l} 不对易，会破坏宇称对称性，从而在每个 $j m_j$ 子空间哈密顿量对于量子数 l 都是三对角的。对角化此哈

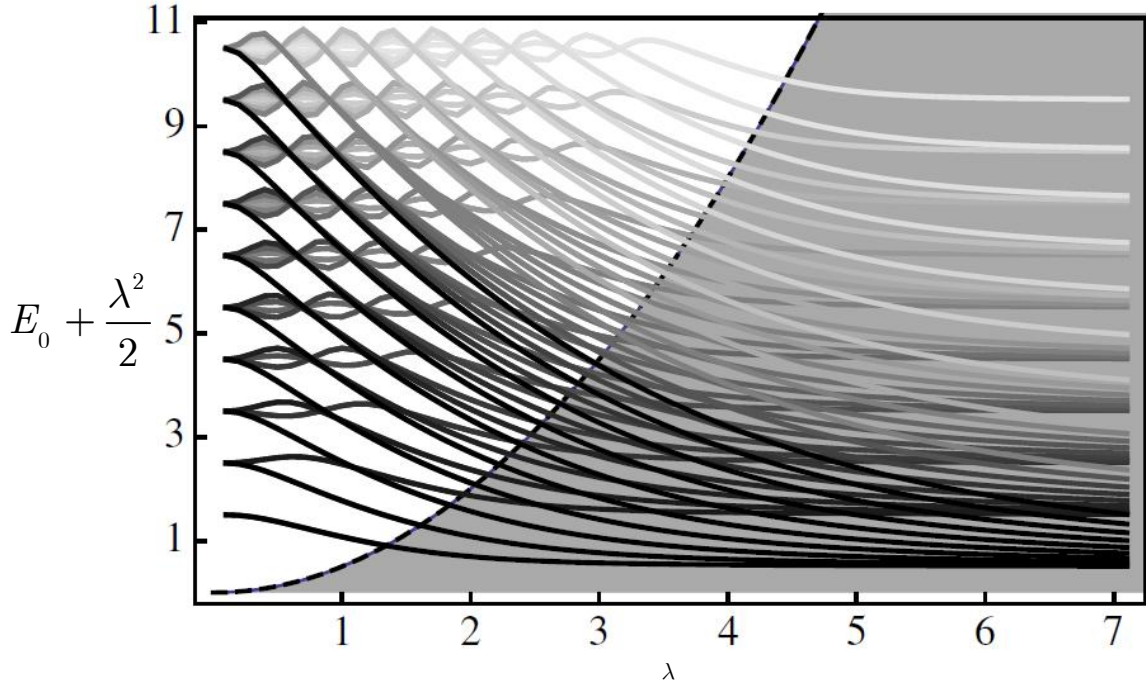


图 4.2 Weyl 耦合的单粒子能谱[45]。灰度由深到浅依次是 $j = 1/2$ 到 $j = 21/2$

密顿量就可以得到单粒子的能谱。Anderson 等人[45]曾研究了此问题，所得到的单粒子能谱如图 4.2 所示，由于缺乏如动量这样的准连续守恒量，能谱明显是离散的。在自旋轨道耦合很弱时，能谱近似为

$$E_0 = 2n_r + l + \frac{3}{2} - \frac{\lambda^2}{2}. \quad (4.2.15)$$

相当于伴随有轻微能级混合的三维谐振子谱。而当自旋轨道耦合很强时，他们发现能谱近似为

$$E_0 \approx \left(n_r + \frac{1}{2} \right) + \frac{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2}{2\lambda^2} - \frac{\lambda^2}{2}. \quad (4.2.16)$$

相同 n_r 不同 j 值的能级形成一组一组的朗道能级。

4.3 变分波函数

在 4.2 节我们讨论了在简谐阱中 Weyl 耦合的自旋 1/2 粒子的单粒子能谱，发现在自旋轨道耦合很弱时，其相当于伴随有轻微能级混合的三维谐振子谱。在考虑到如 (3.1.13) 式的两体相互作用时，按照惯常的做法，我们可以以此单粒子的能谱为出发点来构造一个近似的变分波函数，再通过最小化系统的相互作用能来求得凝

聚体的基态波函数。我们已经知道耦合表象下谐振子的基态波函数为(4.2.12)和(4.2.13), 它们是 $l=0$ 的 s 波态, 第一激发态为 $l=1$ 的 p 波态 $\phi_{0\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi)$, 更高的激发态与基态之间耦合很弱。作为近似, 我们可以构造一个微扰的谐振子态

$$\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}} = N_\alpha \left(\phi_{00\frac{11}{22}} + i\alpha \phi_{01\frac{11}{22}} \right) \quad (4.3.1)$$

作为近似的单粒子基态, 其中 $N_\alpha = (1 + \alpha^2)^{-1/2}$ 为归一化系数, α 代表 s 波态和 p 波态的相对权重, 前面引入 i 是因为自旋轨道耦合在(4.3.1)式中的两个态之间的矩阵元是纯虚数[43-45], 这种单粒子基态已经被证明在自旋轨道耦合比较弱时非常接近真实的单粒子基态[43-45]。利用(4.2.10)可以计算 p 波态 $\phi_{0\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}}(r, \theta, \varphi)$ 中的旋量球谐函数

$$\begin{aligned} Y_{\frac{1}{2}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) &= \sum_{m_l+m_s=\frac{1}{2}} C_{1m_l\frac{1}{2}m_s}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{1m_l}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2}m_s}(\sigma_z) \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{10} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

代入(4.3.1)可得

$$\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}} = N_\alpha \begin{pmatrix} R_{00} Y_{00} - i\alpha \sqrt{\frac{1}{3}} R_{01} Y_{10} \\ i\alpha \sqrt{\frac{2}{3}} R_{01} Y_{11} \end{pmatrix}. \quad (4.3.3)$$

同时, 由于单粒子哈密顿与 j_z 对易, 因此可知 $\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}}$ 与 $\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}}$ 是互相简并的态, 依照同样的方法, 我们有

$$\begin{aligned} \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}} &= N_\alpha \left(\phi_{00\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + i\alpha \phi_{01\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right) \\ &= N_\alpha \begin{pmatrix} -i\alpha \sqrt{\frac{2}{3}} R_{01} Y_{1-1} \\ R_{00} Y_{00} + i\alpha \sqrt{\frac{1}{3}} R_{01} Y_{10} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

这里用到了

$$\begin{aligned} Y_{\frac{1}{2}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) &= \sum_{m_l+m_s=-\frac{1}{2}} C_{1m_l\frac{1}{2}m_s}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} Y_{1m_l}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2}m_s}(\sigma_z) \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{10} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

借用拉曼诱导的自旋轨道耦合中的语言，我们可以说，单粒子色散有两个简并的极小，对应于量子数 $m_j = \pm \frac{1}{2}$ ，在这两个色散的极小点，单粒子波函数近似具有(4.3.3)和(4.3.4)式的形式，而且这两个简并的极小是由于时间反演对称导致的，即(4.3.3)和(4.3.4)是彼此的时间反演态

$$\begin{aligned} T\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}}^* \\ &= N_\alpha \begin{pmatrix} -i\alpha \sqrt{\frac{2}{3}} R_{01} Y_{1-1} \\ R_{00} Y_{00} + i\alpha \sqrt{\frac{1}{3}} R_{01} Y_{10} \end{pmatrix} \\ &= \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

这里我们用到了球谐函数的性质 $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l-m}$ 。同样有

$$T\psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}} = \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}}. \quad (4.3.7)$$

这类似自旋 1/2 系统中的 Kramers 简并。

由于单粒子色散在角动量空间中两个简并的极小，原子如何凝聚取决于相互作用，按照通常的做法，我们可以假设凝聚体的基态波函数为

$$\Psi = C_+ \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}} + C_- \psi_{j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}} \quad (4.3.8)$$

待定参数 C_\pm 满足 $C_+^2 + C_-^2 = 1$ ，它们和 s 波态与 p 波态的相对权重 α ，都可由最小化系统的总能量来确定。

4.4 能量泛函

利用凝聚体的变分波函数(4.3.8)，我们可以计算能量泛函。对于单粒子哈密顿部分

$$E_0 = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} + \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right) \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \quad (4.4.1)$$

可以分成谐振子部分和自旋轨道耦合部分分别计算

$$E_0^h = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} \right) \Psi^\dagger(\mathbf{r}), \quad (4.4.2)$$

$$E_0^s = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) (\lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}). \quad (4.4.3)$$

对于宇称守恒的谐振子部分，不为零的积分是

$$E_0^h = N_\alpha^2 \left[\left\langle \phi_{00\frac{11}{22}} \left| \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} \right) \right| \phi_{00\frac{11}{22}} \right\rangle + \alpha^2 \left\langle \phi_{01\frac{11}{22}} \left| \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} \right) \right| \phi_{01\frac{11}{22}} \right\rangle \right]. \quad (4.4.4)$$

利用谐振子本征方程(4.2.11)，很容易可以计算得

$$E_0^h = N_\alpha^2 \left[\frac{3}{2} + \frac{5}{2} \alpha^2 \right]. \quad (4.4.5)$$

而对于宇称破缺的自旋轨道耦合项(4.4.3)，不为零的积分是

$$E_0^s = i2N_\alpha^2 \alpha \left\langle \phi_{00\frac{11}{22}} \left| \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{01\frac{11}{22}} \right\rangle, \quad (4.4.6)$$

由于 $[j_z, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] = 0$ 可知

$$\left\langle \phi_{00\frac{11}{22}} \left| \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{01\frac{11}{22}} \right\rangle = \left\langle \phi_{00\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \left| \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{01\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right\rangle. \quad (4.4.7)$$

在得出(4.4.6)式时，已经用到了关系式(4.4.7)。为了计算(4.4.6)式，我们注意到， $\phi_{n,lj m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l m_j}^j(\Omega)$ 是径向函数和旋量球谐函数的乘积，因此若能将 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ 也化作类似的形式，便可以利用不可约张量[14,97]的方法来计算它。

利用一阶(球面)不可约张量与一阶直角张量(矢量)之间的关系[97]，动量算符的一阶不可约张量形式为

$$\begin{aligned} p_{+1}^{(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x + ip_y) = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= (-i) \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} \right) \frac{\partial}{\partial r} \\ &\quad + \frac{i\sqrt{2}}{r} \left[\frac{1}{2} \left(\cos \theta e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{1}{\sin \theta} e^{i\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.4.8)$$

$$\begin{aligned} p_0^{(1)} &= p_z = i \frac{\partial}{\partial z} \\ &= (-i) (\cos \theta) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i\sqrt{2}}{r} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right], \end{aligned} \quad (4.4.9)$$

$$\begin{aligned} p_{-1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - ip_y) = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ &= (-i) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} \right) \frac{\partial}{\partial r} \\ &\quad + \frac{i\sqrt{2}}{r} \left[\frac{1}{2} \left(-\cos \theta e^{-i\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{1}{\sin \theta} e^{-i\varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

而角动量算符的一阶不可约张量形式为

$$\begin{aligned} l_{+1}^{(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(l_x + il_y) = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \end{aligned} \quad (4.4.11)$$

$$l_0^{(1)} = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad (4.4.12)$$

$$\begin{aligned} l_{-1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(l_x - il_y) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \end{aligned} \quad (4.4.13)$$

单位矢量的一阶不可约张量形式为

$$\begin{aligned} C_{+1}^{(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{i\varphi}, \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

$$C_0^{(1)} = \cos\theta, \quad (4.4.15)$$

$$\begin{aligned} C_{-1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{-i\varphi}, \end{aligned} \quad (4.4.16)$$

将单位矢量 $C^{(1)}$ 与角动量 $l^{(1)}$ 作一阶张量积[97]

$$\left\{C^{(1)}l^{(1)}\right\}_{\mu}^{(1)} = \sum_{\mu_1+\mu_2=\mu} C_{1\mu_1 1\mu_2}^{1\mu} C_{\mu_1 \mu_2}^{(1)l^{(1)}}. \quad (4.4.17)$$

$C_{1\mu_1 1\mu_2}^{1\mu}$ 是 Clebsch-Gordan 系数。经计算得

$$\left\{C^{(1)}l^{(1)}\right\}_{+1}^{(1)} = \frac{1}{2}\left(\cos\theta e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\sin\theta}e^{i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \quad (4.4.18)$$

$$\left\{C^{(1)}l^{(1)}\right\}_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}, \quad (4.4.19)$$

$$\left\{C^{(1)}l^{(1)}\right\}_{-1}^{(1)} = \frac{1}{2}\left(-\cos\theta e^{-i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{1}{\sin\theta}e^{-i\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \quad (4.4.20)$$

利用 (4.4.14)–(4.4.16) 以及 (4.4.18)–(4.4.20) 可以将动量算符写成

$$p^{(1)} = -iC^{(1)} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i\sqrt{2}}{r} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)}. \quad (4.4.21)$$

而自旋轨道耦合 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ 即是由两个一阶不可约张量 $\sigma^{(1)}$ 和 $p^{(1)}$ 构成的不变算符(标量积)

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = -\sqrt{3} \left\{ \sigma^{(1)} p^{(1)} \right\}^0, \quad (4.4.22)$$

其中 $\sigma^{(1)}$ 的三个分量为

$$\sigma_{+1}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + i\sigma_y), \quad (4.4.23)$$

$$\sigma_0^{(1)} = \sigma_z, \quad (4.4.24)$$

$$\sigma_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x - i\sigma_y). \quad (4.4.25)$$

将(4.4.21)代入(4.4.22)得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} &= -\sqrt{3} \left\{ \sigma^{(1)} \left[i\sqrt{2} \frac{1}{r} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} - i \frac{\partial}{\partial r} C^{(1)} \right] \right\}^0 \\ &= -i\sqrt{6} \frac{1}{r} \left\{ \sigma^{(1)} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} \right\}^0 + i\sqrt{3} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \sigma^{(1)} C^{(1)} \right\}^0. \end{aligned} \quad (4.4.26)$$

利用(4.4.26)可以方便地来计算(4.4.6)式的积分

$$\begin{aligned} &\left\langle \phi_{00 \frac{11}{22}} \left| \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{01 \frac{11}{22}} \right\rangle \\ &= -i\sqrt{6} \left\langle R_{00}(r) \left| \frac{1}{r} \right| R_{01}(r) \right\rangle \left\langle Y_{\frac{11}{22}}^{0\frac{1}{2}}(\Omega) \left| \left\{ \sigma^{(1)} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} \right\}^0 \right| Y_{\frac{11}{22}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) \right\rangle \\ &\quad + i\sqrt{3} \left\langle R_{00}(r) \left| \frac{\partial}{\partial r} \right| R_{01}(r) \right\rangle \left\langle Y_{\frac{11}{22}}^{0\frac{1}{2}}(\Omega) \left| \left\{ \sigma^{(1)} C^{(1)} \right\}^0 \right| Y_{\frac{11}{22}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.4.27)$$

径向的积分是容易计算的, 分别为

$$\left\langle R_{00}(r) \left| \frac{1}{r} \right| R_{01}(r) \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad (4.4.28)$$

和

$$\left\langle R_{00}(r) \left| \frac{\partial}{\partial r} \right| R_{01}(r) \right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{6}}. \quad (4.4.29)$$

这里利用了谐振子的径向函数 $R_{00}(r) = \sqrt{4/\sqrt{\pi}} e^{-r^2/2}$ 和 $R_{01}(r) = \sqrt{8/(3\sqrt{\pi})} r e^{-r^2/2}$ 。计算

(4.4.27)式中的角向自旋积分需要用到 Wigner-Eckart 定理，张量积的矩阵元为

$$\begin{aligned} & \left\langle j_1 j_2 j_z \left| \left\{ T^{(k)} U^{(k')} \right\}_Q^{(K)} \right| j'_1 j'_2 j'_z \right\rangle \\ &= (-1)^{j-j_z} \begin{pmatrix} j & K & j' \\ -j_z & Q & j'_z \end{pmatrix} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)(2K+1)} \\ & \times \begin{pmatrix} j_1 & j'_1 & k \\ j_2 & j'_2 & k' \\ j & j' & K \end{pmatrix} \left\langle j_1 \left\| T^{(k)} \right\| j'_1 \right\rangle \left\langle j_2 \left\| U^{(k')} \right\| j'_2 \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.4.30)$$

式中

$$\begin{pmatrix} j & K & j' \\ -j_z & Q & j'_z \end{pmatrix} = (-1)^{j-K-j'_z} \frac{1}{\sqrt{2j'+1}} C_{j-j_z K Q}^{j'-j'_z} \quad (4.4.31)$$

是 Wigner 3j 符号。而

$$\begin{pmatrix} j_1 & j'_1 & k \\ j_2 & j'_2 & k' \\ j & j' & K \end{pmatrix}$$

是 9j 符号[97]， $\langle j \parallel \dots \parallel j' \rangle$ 称为约化矩阵元。从(4.4.30)也可以得出(4.4.7)式的关系。

由(4.4.30)可得

$$\begin{aligned} & \left\langle Y_{\frac{1}{2}}^{0\frac{1}{2}}(\Omega) \left| \left\{ \sigma^{(1)} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} \right\}^0 \right| Y_{\frac{1}{2}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) \right\rangle \\ &= 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & Q & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \left\langle l=0 \left\| \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} \right\| l'=1 \right\rangle \left\langle s \left\| \sigma^{(1)} \right\| s' \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.4.32)$$

利用约化矩阵元[14]

$$\begin{aligned} & \left\langle l \left\| \left\{ C^{(k)} l^{(1)} \right\}^{(k)} \right\| l' \right\rangle = (-1)^{k+l'} (2l'+1) \\ & \times \sqrt{(2l+1)(2k+1)l'(l'+1)} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & 1 & k \\ l' & 1 & l' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.4.33)$$

和

$$\left\langle s \left\| \sigma^{(1)} \right\| s' \right\rangle = 2\sqrt{s(s+1)(2s+1)} \delta_{ss'} = \sqrt{6} \delta_{ss'} \quad (4.4.34)$$

以及 3j, 9j 符号的值，可以计算得到

$$\left\langle Y_{\frac{1}{2}}^{0\frac{1}{2}}(\Omega) \left| \left\{ \sigma^{(1)} \left\{ C^{(1)} l^{(1)} \right\}^{(1)} \right\}^0 \right| Y_{\frac{1}{2}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}. \quad (4.4.35)$$

同样地，可以计算

$$\left\langle Y_{\frac{1}{2}}^{0\frac{1}{2}}(\Omega) \left| \left\{ \sigma^{(1)} C^{(1)} \right\}^0 \right| Y_{\frac{1}{2}}^{1\frac{1}{2}}(\Omega) \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}. \quad (4.4.36)$$

这里需要用到

$$\langle l \| C^{(k)} \| l' \rangle = (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4.37)$$

最终我们得到

$$\left\langle \phi_{00\frac{1}{2}} \left| \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right| \phi_{01\frac{1}{2}} \right\rangle = -i\sqrt{\frac{3}{2}}. \quad (4.4.38)$$

将(4.4.38)和(4.4.5)代入(4.4.1)得单粒子能量为

$$E_0 = N_\alpha^2 \left[\frac{3}{2} + \frac{5}{2} \alpha^2 + \sqrt{6} \alpha \lambda \right]. \quad (4.4.39)$$

在相互作用参数 $g_{\uparrow\uparrow} = g_{\downarrow\downarrow} = g$ 时, 定义 $c = g_{\uparrow\downarrow}/g$, 相互作用能可以写成

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \int d\mathbf{r} \left(\frac{c_0}{2} n^2 + \frac{c_2}{2} (n\Sigma_z)^2 \right) \\ &= \frac{1}{4} \int d\mathbf{r} \left[(g + cg) n^2 + (g - cg) (n\Sigma_z)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.4.40)$$

这里, 在谐振子单位之下, 相互作用参数 g 以 $\hbar\omega_T^3/N$ 为单位。利用变分的凝聚体波函数(4.3.8)不难算得

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 \left[R_{00}^2(r) + \alpha^2 R_{00}^2(r) \right] \quad (4.4.41)$$

是球对称的。而

$$\begin{aligned} n\Sigma_z &= \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 \left[(C_+^2 - C_-^2) (R_{00}^2 + \alpha^2 R_{01}^2 \cos 2\theta) \right. \\ &\quad \left. - 2C_+ C_- (2\alpha R_{00} R_{01} \sin \theta \sin \varphi - \alpha R_{01}^2 \sin 2\theta \cos \varphi) \right] \end{aligned} \quad (4.4.42)$$

是各向异性的。由此可以计算密度相互作用能和自旋相互作用

$$\int d\mathbf{r} n^2 = \frac{1}{12} N_\alpha^4 \sqrt{\frac{1}{(2\pi)^3}} (5\alpha^4 + 12\alpha^2 + 12), \quad (4.4.43)$$

$$\int d\mathbf{r} (n\Sigma_z)^2 = \frac{1}{3} N_\alpha^4 \sqrt{\frac{1}{(2\pi)^3}} \left[\frac{1}{12} (7\alpha^4 - 12\alpha^2 + 36) - C_+^2 C_-^2 (\alpha^4 - 12\alpha^2 + 12) \right]. \quad (4.4.44)$$

将(4.4.43), (4.4.44)代入(4.4.40)再结合(4.4.39)最终得到能量泛函为

$$\begin{aligned}
E(\alpha, C_+, C_-) = & N_\alpha^2 \left[\frac{3}{2} + \frac{5}{2} \alpha^2 + \sqrt{6} \alpha \lambda \right] + \frac{1}{72} N_\alpha^4 \sqrt{\frac{1}{(2\pi)^3}} \\
& \times \left[(11\alpha^4 + 12\alpha^2 + 36)g + (4\alpha^4 + 24\alpha^2)cg \right. \\
& \left. - 6C_+^2 C_-^2 (g - cg)(\alpha^4 - 12\alpha^2 + 12) \right]. \tag{4.4.45}
\end{aligned}$$

4.5 基态相图

对于给定的系统参数 c 和 g ，最小化能量泛函(4.4.45)式可以得到凝聚体的基态相图。我们看到只有在(4.4.45)式的最后一项出现 C_+, C_- 的组合 $C_+^2 C_-^2$ ，这与前面讨论的拉曼耦合和 Rashba 耦合的两份量 BEC 相同。显然在最小化时， $C_+^2 C_-^2$ 只能取它的极值 0 或 $1/4$ ，具体取何值取决于 $(g - cg) = 2c_2$ 和多项式 $f(\alpha) = \alpha^4 - 12\alpha^2 + 12$ 的符号， $C_+^2 C_-^2$ 的两种取值分别对应凝聚在单个极小和两个极小的叠加，因而形成两种基态相， $c = 1$ 显然将相图分为两部分。对于弱的自旋轨道耦合，取 $\lambda = 0.2$ ，相图如图 4.3 所示。

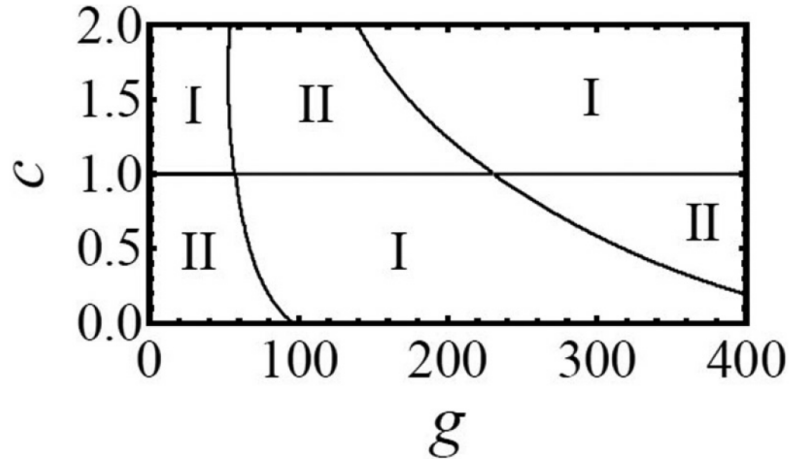


图 4.3 Weyl 耦合的自旋 1/2 BEC 的基态相图[98]， $\lambda = 0.2$ ，相互作用参数 g 以

$\hbar\omega_t^3/N$ 为单位。

在 I 相，变分参数的取值为 $|C_+|^2 = 1, |C_-|^2 = 0$ 或 $|C_+|^2 = 0, |C_-|^2 = 1$ ，而在 II 相， $|C_+|^2 = |C_-|^2 = 1/2$ 。由于自旋轨道耦合强度 $\lambda > 0$ ，而(4.4.45)式中除了自旋轨道耦合的能量之外，其余能量贡献均是 α 的偶次项，变分必然得到 $\alpha < 0$ 。当相互作用强度 g 增加时，系统交替进入相 I 和 II，相变的临界由 $f(\alpha) = 0$ 即 $\alpha_{\pm} = -\sqrt{6 \pm 2\sqrt{6}}$ 决定。对于典型的 ^{87}Rb 实验，无量纲的参数 $g \sim 10 - 100$ ，当 g 较小时，变分参数 $\alpha > \alpha_-$ ，因此 $f(\alpha) > 0$ ，此时 $c > 1$ 的区域是相 I， $c < 1$ 的区域是相 II。实验上可以通过调节囚禁势和粒子数来调节 g ，在临界值处， $f(\alpha)$ 改变符号，将观察到两相

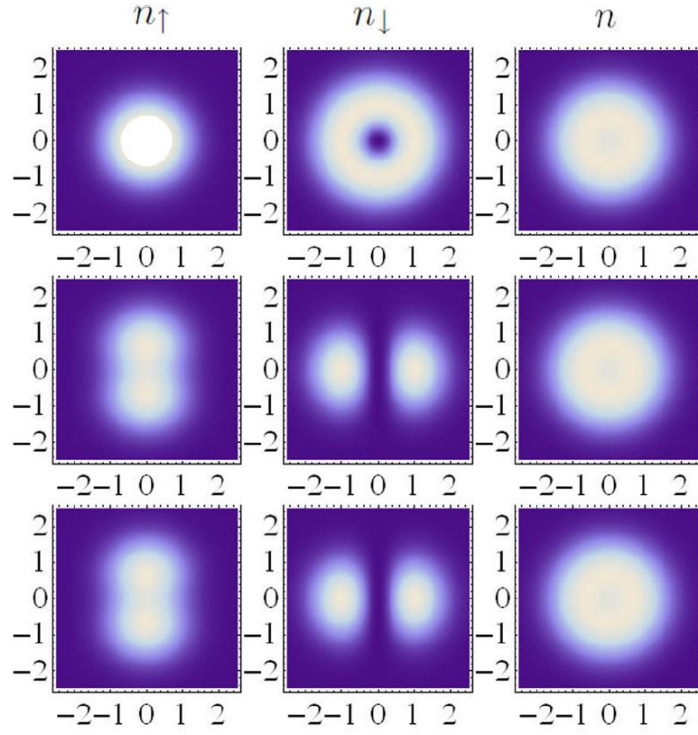


图 4.4 I 相的密度分布。从上到下分别是 xy , yz , xz 平面上的密度分布。 $\alpha = -1.6$ 的交替。

I 相对应变分参数 $|C_+|^2 = 1, |C_-|^2 = 0$ 或 $|C_+|^2 = 0, |C_-|^2 = 1$ ，从波函数的性质可知，它们是彼此的时间反演态。 $|C_+|^2 = 1, |C_-|^2 = 0$ 时，典型的 I 相的密度分布如图 4.4 所示，而 $|C_+|^2 = 0, |C_-|^2 = 1$ 时密度分布与此类似，只不过上下两分量互换。此时波函数形如

$$\Psi = \frac{N_\alpha}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} R_{00}(r) - i\alpha R_{01} \cos\theta \\ -i\alpha R_{01}(r) \sin\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (4.5.1)$$

因此上下分量的密度分别为

$$n_\uparrow(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 \left[R_{00}^2(r) + \alpha^2 R_{00}^2(r) \cos^2\theta \right], \quad (4.5.2)$$

$$n_\downarrow(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 \alpha^2 R_{00}^2(r) \sin^2\theta. \quad (4.5.3)$$

它们具有绕 z 轴的旋转对称性和宇称对称性，即

$$n_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}) = n_{\uparrow\downarrow}(r, \theta), \quad (4.5.4)$$

$$n_{\uparrow\downarrow}(r, \theta) = n_{\uparrow\downarrow}(r, \pi - \theta). \quad (4.5.5)$$

图中可以看出, xz 和 yz 面上的密度分布相同, 具有明显的 p 波的特征, 即自旋上分量沿 z 轴呈哑铃状, 自旋下分量沿 xy 面呈环状分布, 但总密度是各向同性的。

利用波函数(4.5.1)可以计算自旋密度

$$n\Sigma_x = \frac{1}{2\pi} N_\alpha^2 (\alpha R_{00} R_{01} \sin\theta \sin\varphi + \alpha^2 R_{01}^2 \sin\theta \cos\theta \cos\varphi), \quad (4.5.6)$$

$$n\Sigma_y = \frac{1}{2\pi} N_\alpha^2 (-\alpha R_{00} R_{01} \sin\theta \cos\varphi + \alpha^2 R_{01}^2 \sin\theta \cos\theta \sin\varphi), \quad (4.5.7)$$

$$n\Sigma_z = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 (R_{00}^2 + \alpha^2 R_{01}^2 \cos 2\theta). \quad (4.5.8)$$

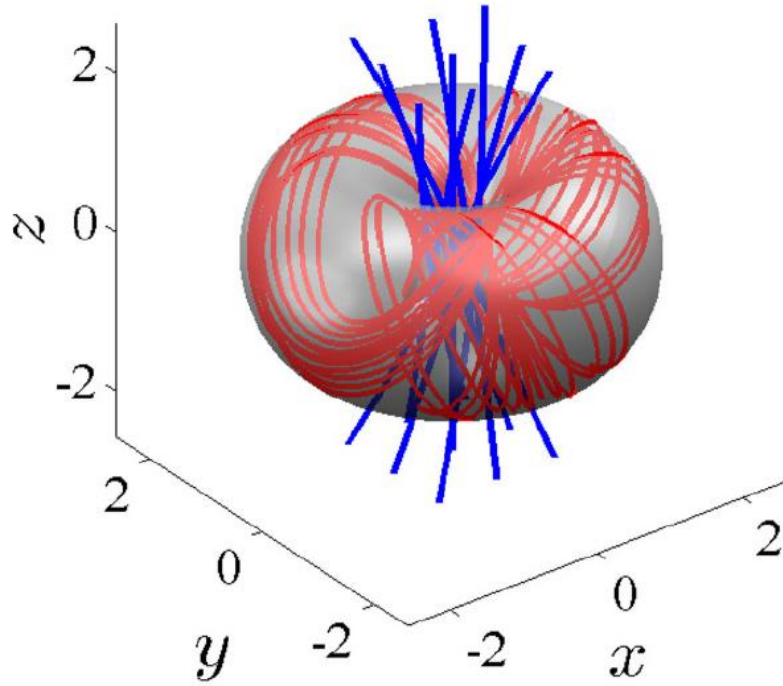


图 4.5 I 相的自旋流线图。 $\alpha = -1.6$

由(4.5.6)-(4.5.7)可知, 磁序参数为零, 即 $\langle \sigma_x \rangle = 0$, $\langle \sigma_y \rangle = 0$ 。由于角动量空间 Z_2 对称性 ($m_j = 1/2 \leftrightarrow m_j = -1/2$) 的破缺, $\langle \sigma_z \rangle \neq 0$ 。自旋结构是三维的 skyrmion。对归一化的自旋密度 Σ 作流线绘图如图 4.5。自旋矢量场线在 xy 平面附近形成环状结构, 而在 z 轴附近是近乎竖直的。Kawakami 等人[42]通过数值求解 GP 方程首先发现了此三维的 skyrmion 基态, 几乎同时, Li 等人[43]也在弱的自旋轨道耦合区发现了此 skyrmion 基态。

实际上, 如果我们对基态波函数(4.5.1)稍作变形, 它就是文献中经常出现的 3D skyrmion。我们注意到波函数(4.5.1)可以看作是将沿 z 轴极化的旋量波函数

$$\zeta_z = \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.9)$$

作局域自旋转动

$$\Psi_z = \sqrt{n(r)} \exp\left[-\frac{i}{2} \mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\right] \zeta_z. \quad (4.5.10)$$

这里 $n(r)$ 即是 (4.4.41) 式的密度, \mathbf{s} 是自旋算符, 而 $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) = \omega(r)\mathbf{r}/r$ 。 (4.5.10) 式

表示在 \mathbf{r} 处将自旋沿轴 \mathbf{r}/r 转过 $\omega(r)$ 角, 且转动角随位置变化

$$\omega(r) = 2 \arctan \frac{\alpha R_{01}(r)}{R_{00}(r)}. \quad (4.5.11)$$

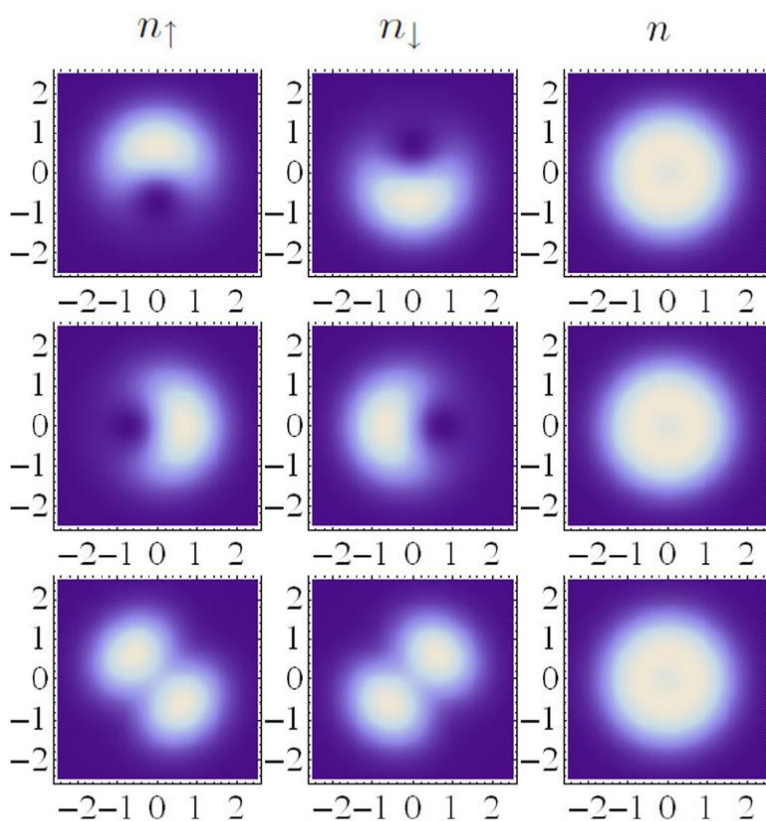


图 4.6 II 相的密度分布。从上到下分别是 xy , yz , xz 平面上的密度分布。 $\alpha = -1.6$

$\mathbf{\Omega}(\mathbf{r})$ 的形式决定了三维 skyrmion 的拓扑性质。极化的旋量波函数 ζ_z 描述均匀系统, 自旋沿 z 轴极化, 作了局域自旋转动操作之后, 自旋方向将随空间位置变化。(4.5.11) 式描述的局域转动对应一种最对称的 skyrmion, 这种三维 skyrmion 态曾在 [99-104] 中讨论过, 不同的是这些都是赝自旋 1/2 或者铁磁自旋 1 系统中的激发态, 尽管可

能是亚稳态。而在这里，当存在 Weyl 耦合时，三维 skyrmion 是系统稳定的基态。

II 相对应变分参数 $|C_+|^2 = |C_-|^2 = 1/2$ ，基态可以是两类态 $C_+ = C_- = \pm 1/\sqrt{2}$ 或 $C_+ = -C_- = \pm 1/\sqrt{2}$ ，它们也是彼此的时间反演态。以 $C_+ = C_- = \pm 1/\sqrt{2}$ 为例，波函数形如

$$\Psi = \frac{N_\alpha}{\sqrt{8\pi}} \begin{pmatrix} R_{00}(r) - i\alpha R_{01}(\cos\theta + \sin\theta e^{-i\varphi}) \\ R_{00}(r) - i\alpha R_{01}(r)(-\cos\theta + \sin\theta e^{i\varphi}) \end{pmatrix}. \quad (4.5.12)$$

因此上下分量的密度分别为

$$n_\uparrow(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi} N_\alpha^2 \left[R_{00}^2(r) + \alpha^2 R_{00}^2(r) - 2\alpha R_{00} R_{01} \sin\theta \sin\varphi + \alpha R_{01}^2 \sin 2\theta \cos\varphi \right], \quad (4.5.13)$$

$$n_\downarrow(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi} N_\alpha^2 \left[R_{00}^2(r) + \alpha^2 R_{00}^2(r) + 2\alpha R_{00} R_{01} \sin\theta \sin\varphi - \alpha R_{01}^2 \sin 2\theta \cos\varphi \right]. \quad (4.5.14)$$

可以看出密度由两部分组成，一部分是两分量相同的，各向同性的，且是总密度的一半，另一部分是两分量互补的，见(4.5.13)和(4.5.14)式的第二行。 xy ， yz 和 xz 面上的密度分布如图 4.6 所示。密度分布具有如下对称性

$$n_\uparrow(r, \pi - \theta, 2\pi - \varphi) = n_\downarrow(r, \theta, \varphi), \quad (4.5.15)$$

$$n_\uparrow(r, \theta, \pi + \varphi) = n_\downarrow(r, \theta, \varphi). \quad (4.5.16)$$

即在绕 x 或 z 轴的 π 转动和时间反演联合操作下密度分布不变。而绕 y 轴的 π 转动下密度分布也保持不变，即

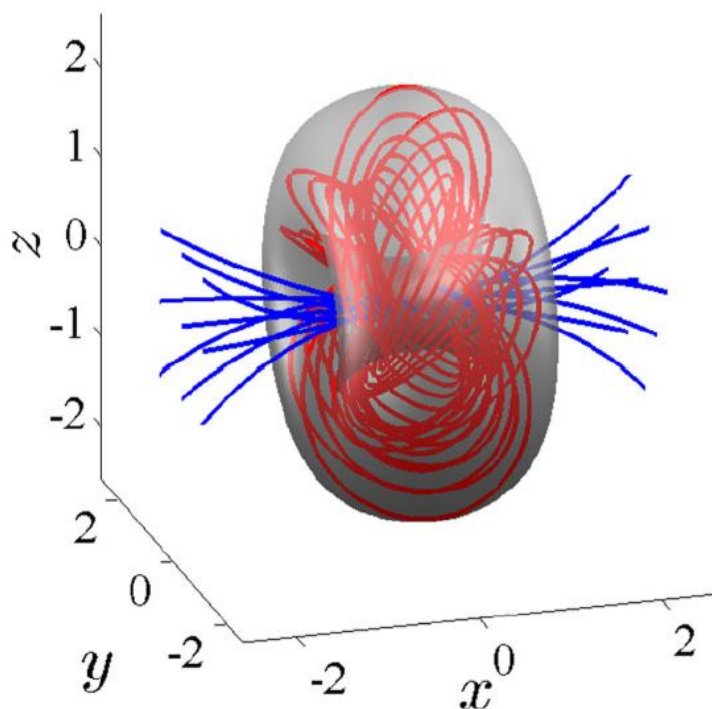
$$n_{\uparrow,\downarrow}(r, \pi - \theta, \pi - \varphi) = n_{\uparrow,\downarrow}(r, \theta, \varphi). \quad (4.5.17)$$

对于此态，自旋密度为

$$n\Sigma_x = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 \left[R_{00}^2 + \alpha^2 R_{01}^2 (\sin^2\theta \cos 2\varphi - \cos^2\theta) \right], \quad (4.5.18)$$

$$n\Sigma_y = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 (2\alpha R_{00} R_{01} \cos\theta + \alpha^2 R_{01}^2 \sin^2\theta \sin 2\varphi), \quad (4.5.19)$$

$$n\Sigma_z = \frac{1}{4\pi} N_\alpha^2 (-2\alpha R_{00} R_{01} \sin\theta \sin\varphi + \alpha^2 R_{01}^2 \sin 2\theta \cos\varphi). \quad (4.5.20)$$

图 4.7 II 相的自旋流线图。 $\alpha = -1.6$

角动量空间 Z_2 对称性不破缺, 必有 $\langle \sigma_z \rangle = 0$, 同时 $\langle \sigma_y \rangle = 0$, 但有横向磁化 $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$ 。自旋结构也是三维的 skyrmion。对归一化的自旋密度 Σ 作流线绘图如图 4.7。自旋矢量场线在 yz 平面附近形成环状结构, 而在 x 轴附近形成一束穿过环的中心区域。我们同样注意到波函数(4.5.12)可以看作是将沿 x 轴极化的旋量波函数

$$\zeta_x = \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (4.5.21)$$

作局域的自旋转动

$$\Psi_z = \sqrt{n(r)} \exp\left[-\frac{i}{2} \mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\right] \zeta_x. \quad (4.5.22)$$

而得到。虽然旋量 ζ_x 可以由 ζ_z 绕 y 轴转动 $\pi/2$ 得到, 但相 II 的自旋结构却与将相 I 的自旋结构整体绕 y 轴转动 $\pi/2$ 不同。尽管如此, 它们的拓扑性质均由 $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r})$ 决定, 当 α 相同时, 是完全相同的。Kawakami 等人[42]也注意到了此 skyrmion 基态。

我们发现无论是 I 相还是 II 相, 尽管自旋轨道很弱时, 会出现较大的两项共存区域, 但两个自旋分量的密度分布总体上在三个空间维度上是趋于相分离的。这种情况也出现在一维[105]和二维[31,32]的自旋轨道耦合时。这里是由于在波函数中自旋轨道耦合诱导的 p 波空间模使两个自旋分量趋向于空间分离。三维 skyrmion 态曾作为两分量 BEC 的激发态出现在[99-104]等文献中, 在作为激发态时, 拓扑稳定的

skyrmion 从能量角度讲往往是不稳定的。需要额外的机制来稳定它, 例如 Battye[106] 曾讨论过此问题, 稳定的 skyrmion 存在的先决条件之一即是凝聚体处在相分离状态。在此处, Weyl 自旋轨道耦合充当了此作用, 因为越强的自旋轨道耦合趋向于将两个自旋分量越明显的分开。Kawakami 等人[48]的数值计算也证明了这一点。

第五章 Weyl 耦合的自旋 1 玻色气体

对于拉曼诱导的自旋轨道耦合的自旋 1 凝聚体, 2014 年, Natu[22]等人曾研究了其基态相以及其中的自旋序, 在反铁磁相互作用区发现了具有双轴向列序的条纹态, 次年 Campbell 等人[26]在实验上实现了自旋 1 的自旋轨道耦合, 同年, Sun 等人指出在实验系统中应该存在两种铁磁条纹相, 虽然这两种铁磁条纹相只占据相图的很小区域。铁磁条纹相具有周期调制的向列密度张量, 分别随密度同相振荡和反相振荡。几乎同时 Martone 等人[78]和余增强[79]也研究了此问题, Martone 等人在 ${}^7\text{Li}$ 系统中也发现了具有向列序的铁磁条纹相。基于我们第四章对 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 的 BEC 的研究, 我们期待对于 Weyl 耦合的自旋 1 BEC, 基态会出现同时具有磁序和向列序的量子相。那么, Weyl 耦合的自旋 1 BEC 基态会出现哪些相, 相图是什么样? 基态相中空间调制的磁序(3D 磁 skyrmion)和空间调制的向列序之间如何调和都是令人感兴趣的。本章我们研究弱 Weyl 耦合的自旋 1 BEC 的基态相。

5.1 单粒子基态

与 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 BEC 类似, 在自然单位制下, 存在外部简谐囚禁势时, Weyl 耦合的自旋 1 BEC 单粒子的哈密顿量为

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{r^2}{2} + \lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{p}. \quad (5.1.1)$$

自旋轨道耦合的强度仍用 λ 表示。单粒子哈密顿(5.1.1)仍是时间反演对称的。对于自旋 1 系统, 时间反演算符[96]取为

$$T = -is_y K. \quad (5.1.2)$$

同时, 单粒子哈密顿在坐标和自旋空间同时作三维转动 $\text{SO}(3)_{\text{R+S}}$ 时保持不变, 总角动量是守恒量。在自旋轨道耦合很弱时, 单粒子能量仍由(5.1.1)式的前两项, 即谐振子部分主导[43-45,98]。利用耦合表象谐振子的本征态为基数可以构造近似的单粒子基态, 不同的是对于自旋量子数 $s = 1$ 的原子在谐振子阱中运动, 其耦合表象的本征函数用

$$\phi_{n_r l m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r l}(r) Y_{l m_j}^l(\Omega) \quad (5.1.3)$$

来表示, 式中

$$Y_{jm_j}^{l1}(\Omega) = \sum_{m_l+m_s=m_j} C_{lm_l 1m_s}^{jm_j} Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{1m_s}(s_z) \quad (5.1.4)$$

是矢量球谐函数[14], $j = l + 1, l, |l - 1|$ (当 $l = 0$ 时, 只能取 $j = 1$), $C_{lm_l 1m_s}^{jm_j}$ 仍是 Clebsch-Gordan 系数。耦合表象下, 谐振子的基态具有量子数 $n_r = l = 0$, 因此 $j = 1$, 且 $m_j = 1, 0, -1$, 波函数分别为

$$\phi_{001\pm 1}(r, \theta, \varphi) = R_{00}(r) Y_{1\pm 1}^{01}(\Omega) \quad (5.1.5)$$

和

$$\phi_{0010}(r, \theta, \varphi) = R_{00}(r) Y_{10}^{01}(\Omega). \quad (5.1.6)$$

它们是简并的。其中矢量球谐函数

$$Y_{11}^{01}(\Omega) = \begin{pmatrix} Y_{00} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, Y_{1-1}^{01}(\Omega) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Y_{00} \end{pmatrix}, \quad (5.1.7)$$

$$Y_{10}^{01}(\Omega) = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{00} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1.8)$$

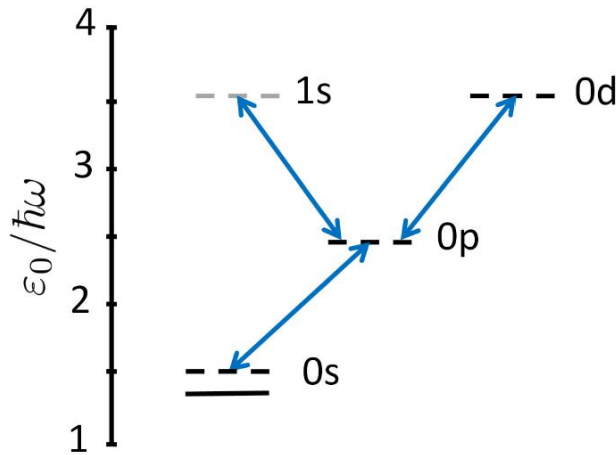


图 5.1 3D 谐振子的能级(虚线)和自旋轨道耦合的单粒子基态(实线)。自旋轨道耦合不同宇称的能级(双向箭头)。

在图 5.1 中, 我们画出了谐振子最低的一些本征态, 量子数 n_r 用数字标记, $l = 0, 1, 2, \dots$ 分别用光谱符号 s, p, d... 标记。例如激发态 0p, $n_r = 0, l = 1, j = 1$, 其态函数为

$$\phi_{011m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{01}(r) Y_{1m_j}^{11}(\Omega), \quad (5.1.9)$$

$$Y_{11}^{11}(\Omega) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2}}Y_{10} \\ \sqrt{\frac{1}{2}}Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix}, Y_{10}^{11}(\Omega) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2}}Y_{1-1} \\ 0 \\ \sqrt{\frac{1}{2}}Y_{11} \end{pmatrix}, Y_{1-1}^{11}(\Omega) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2}}Y_{1-1} \\ \sqrt{\frac{1}{2}}Y_{10} \end{pmatrix}. \quad (5.1.10)$$

激发态 $0d$, $n_r = 0$, $l = 2$, $j = 1$ 的态函数为

$$\phi_{021m_j}(r, \theta, \varphi) = R_{01}(r)Y_{1m_j}^{21}(\Omega), \quad (5.1.11)$$

$$Y_{11}^{21}(\Omega) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{20} \\ -\sqrt{\frac{3}{10}}Y_{21} \\ \sqrt{\frac{3}{5}}Y_{22} \end{pmatrix}, Y_{10}^{21}(\Omega) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{10}}Y_{2-1} \\ -\sqrt{\frac{2}{5}}Y_{20} \\ \sqrt{\frac{3}{10}}Y_{21} \end{pmatrix}, Y_{1-1}^{21}(\Omega) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{5}}Y_{2-2} \\ -\sqrt{\frac{3}{10}}Y_{2-1} \\ \sqrt{\frac{1}{10}}Y_{20} \end{pmatrix}. \quad (5.1.12)$$

对于单粒子哈密顿(5.1.1), 总角动量 \mathbf{j} 和 j_z 仍然是守恒量, 本征态可以用量子数 j , m_j 来标记, 由于自旋轨道耦合会耦合不同宇称的谐振子态, 具有不同宇称但相同 j , m_j 量子数的态之间相互耦合。单粒子本征态是具有不同量子数 n_r , l 的耦合表象谐振子本征函数 $\phi_{n_r l m_j}(r, \theta, \varphi)$ 的叠加。例如基态量子数 $j = 1$, 可以是 s , p , d 波态的叠加, 如图 5.1 中的双向箭头所示。在耦合表象谐振子本征态基矢下, 对角化单粒子哈密顿, 可以得到 $m_j = 1$ 的基态能级, 在图 5.2 中用实线表示, 在自旋轨道耦合较弱时, 波函数具有如下近似形式

$$\psi_{j=1, m_j=1} = A_0 \phi_{0011} + iA_1 \phi_{0111} - A_2 \phi_{0211}. \quad (5.1.13)$$

这里 $A_l (l = 0, 1, 2)$ 是不同轨道角动量谐振子态的叠加系数。这里忽略了激发态 $1s$ 的贡献, 一方面因为它与 $0s$ 有相同的矢量球谐函数, 可以合并在一起。另一方面, 我们经过计算确认在弱相互作用参数区, 忽略它并不会影响我们的主要结论。 A_1 前面添加了一个纯虚数 i 的原因与前一章相同, 即自旋轨道耦合在不同宇称的谐振子态之间的矩阵元是纯虚数[43,45]。因为 j_z 与单粒子哈密顿(5.1.1)对易, $j = 1$ 的单粒子基态也是简并的, $m_j = 0$ 和 $m_j = -1$ 的态

$$\psi_{j=1, m_j=0} = A_0 \phi_{0010} + iA_1 \phi_{0110} - A_2 \phi_{0210} \quad (5.1.14)$$

和

$$\psi_{j=1, m_j=-1} = A_0 \phi_{001-1} + iA_1 \phi_{011-1} - A_2 \phi_{021-1} \quad (5.1.15)$$

与 $m_j = 1$ 都对应基态能级。

5.2 变分波函数

上节我们得到了三个简并的近似单粒子基态，分别为(5.1.13)—(5.1.15)，将(5.1.7)，(5.1.8)，(5.1.10)和(5.1.12)式的矢量球谐函数代入，它们的表达式分别为

$$\psi_{j=1, m_j=1} = \begin{pmatrix} A_0 R_{00} Y_{00} - i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{10} - A_2 \sqrt{\frac{1}{10}} R_{02} Y_{20} \\ i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{11} + A_2 \sqrt{\frac{3}{10}} R_{02} Y_{21} \\ -A_2 \sqrt{\frac{3}{5}} R_{02} Y_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.2.1)$$

$$\psi_{j=1, m_j=0} = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{1-1} - A_2 \sqrt{\frac{3}{10}} R_{02} Y_{2-1} \\ A_0 R_{00} Y_{00} + A_2 \sqrt{\frac{2}{5}} R_{02} Y_{20} \\ i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{11} - A_2 \sqrt{\frac{3}{10}} R_{02} Y_{21} \end{pmatrix}, \quad (5.2.2)$$

$$\psi_{j=1, m_j=-1} = \begin{pmatrix} -A_2 \sqrt{\frac{3}{5}} R_{02} Y_{2-2} \\ -i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{1-1} + A_2 \sqrt{\frac{3}{10}} R_{02} Y_{2-1} \\ A_0 R_{00} Y_{00} + i\sqrt{\frac{1}{2}} A_1 R_{01} Y_{10} - A_2 \sqrt{\frac{1}{10}} R_{02} Y_{20} \end{pmatrix}. \quad (5.2.3)$$

利用 $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l-m}$ 容易证明

$$T\psi_{j=1, m_j=\pm 1} = \psi_{j=1, m_j=\mp 1}, \quad (5.2.4)$$

$$T\psi_{j=1, m_j=0} = -\psi_{j=1, m_j=0}. \quad (5.2.5)$$

可见在角动量空间中，单粒子色散有三个简并的极小，对于相互作用的多体系统，可以设变分的基态波函数为

$$\Psi = C_{1+} \psi_{j=1, m_j=1} + C_{10} \psi_{j=1, m_j=0} + C_{1-} \psi_{j=1, m_j=-1}, \quad (5.2.6)$$

式中 C_{1+}, C_{10}, C_{1-} 是变分系数，满足粒子数守恒条件 $|C_{1+}|^2 + |C_{10}|^2 + |C_{1-}|^2 = 1$ ，由最小化系统的相互作用能来确定。一般情况下，它们都是复数，从前面几章可以看出它们的相对相位只是决定条纹相的条纹位置。在这里，我们为了简化计算将其设为实数，后面再对此问题作讨论。

在 1.3 节中，我们在直角坐标系下讨论了自旋 1 系统的自旋序。而在第四章中，我们已经看到对于我们研究的具有明显球对称的系统，球面张量能带来很多方便，此时通常用极化算符(polarization operator) [14]来描述自旋序。对于自旋 s 的系统，极化算符为 $T_m^{(l)}(s)$ ，其中 $l = 0, 1 \dots 2s$ ， $m = -l, -l+1, \dots, l$ 。因此，极化算符是 $(2s+1)^2$ 个算符的集合，相同指标 l 为一组，构成一个 l 阶的球面不可约张量，在 $SO(3)$ 转动

下，按照转动群的 $2l+1$ 维不可约表示变换。 $l=0$ 的极化算符正比于 $(2s+1) \times (2s+1)$ 的单位矩阵

$$T_0^{(0)}(s) = \frac{1}{\sqrt{2s+1}} I, \quad (5.2.7)$$

$l=1$ 的极化算符是一阶的球面张量，正比于一阶的球面自旋张量

$$T_m^{(1)}(s) = \sqrt{\frac{3}{s(s+1)(2s+1)}} s_m^{(1)}, \quad (m = -1, 0, 1) \quad (5.2.8)$$

与(4.4.8)-(4.4.10)一样，一阶球面张量和直角张量(矢量)的分量之间的关系是

$$s_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (s_x \pm i s_y), \quad s_0^{(1)} = s_z. \quad (5.2.9)$$

$T_m^{(1)}(s)$ 与 1.3 节中的偶极自旋序相对应。 $l=2$ 的极化算符是二阶的球面张量

$$T_m^{(2)}(s) = \sum_{\mu+\nu=m} C_{1\mu 1\nu}^{2m} s_\mu^{(1)} s_\nu^{(1)}, \quad (\mu, \nu = -1, 0, 1) \quad (5.2.10)$$

与 1.3 节中的四极自旋序相对应。它们之间的关系是

$$T_{\pm 2}^{(2)} = \frac{1}{2} (N_{xx} - N_{yy} \pm 2i N_{xy}), \quad (5.2.11)$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \mp (N_{xz} \pm i N_{yz}), \quad (5.2.12)$$

$$T_0^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}} N_{zz}. \quad (5.2.13)$$

利用这些极化算符，我们可以将变分波函数(5.2.6)式写成

$$\Psi = U(\mathbf{r}) \zeta, \quad (5.2.14)$$

这里

$$\zeta = \begin{pmatrix} C_{1+} \\ C_{10} \\ C_{1-} \end{pmatrix} \quad (5.2.15)$$

是归一化的均匀旋量。 $U(\mathbf{r})$ 是一局域变换算符

$$U(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2s+1}{4\pi}} \sum_{l=0}^{2s} (-i)^l A_l R_{0l}(r) C^{(l)} \cdot T^{(l)}. \quad (5.2.16)$$

这里 $C_m^{(l)} = \sqrt{4\pi/(2l+1)} Y_{lm}$ 称为修正(modified)球谐函数[14]，(4.4.14)-(4.4.16)式中的

$C^{(l)}$ 即是一阶修正球谐函数。 $C^{(l)} \cdot T^{(l)}$ 表示两个同阶的不可约张量组成的不变算符，或者叫标量积[97]

$$C^{(l)} \cdot T^{(l)} = \sum_m (-1)^m C_m^{(l)} T_{-m}^{(l)} \quad (5.2.17)$$

(5.2.16)式将 $U(\mathbf{r})$ 算符利用 $C^{(l)} \cdot T^{(l)}$ 的级数展开，最高阶 $l = 2s$ 。虽然标量积是自旋轨道耦合空间转动的不变算符，但是 $C^{(l)}$ 和 $T^{(l)}$ 分别作用在轨道空间和自旋空间将导致自旋轨道耦合的旋量气体出现复杂的空间密度图样和自旋结构。(5.2.16)式若用于 $s = 1/2$ 系统，它正比于一个局域自旋转动，描写自旋密度的空间调制情况，正如(4.5.10)和(4.5.22)所示那样。但对于自旋 1 的系统，由于除了磁序之外还有向列序存在，(5.2.16)描述对自旋密度和向列张量密度同时作空间调制。

5.3 能量泛函

基态波函数(5.2.6)包含六个变分参数 $A_0, A_1, A_2, C_{1+}, C_{10}$ 和 C_{1-} ，满足两个约束条件

$$\sum_{l=0,1,2} A_l^2 = 1 \text{ 和 } |C_{1+}|^2 + |C_{10}|^2 + |C_{1-}|^2 = 1. \text{ 据此我们可以计算能量泛函，单粒子能量}$$

的计算与赝自旋 1/2 的方法相同。可得

$$E_0 = \frac{3}{2} A_0^2 + \frac{5}{2} A_1^2 + 2\lambda A_0 A_1 + \Delta_0. \quad (5.3.1)$$

这里我们把所有来自 \mathbf{d} 波态的贡献(包含 A_2 的项)放在 Δ_0 中

$$\Delta_0 = \frac{7}{2} A_2^2 - 2\sqrt{\frac{5}{6}} \lambda A_1 A_2, \quad (5.3.2)$$

这里用到了

$$\langle \phi_{0011} | \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} | \phi_{0111} \rangle = -i, \quad (5.3.3)$$

$$\langle \phi_{0111} | \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} | \phi_{0211} \rangle = i\sqrt{\frac{5}{6}}. \quad (5.3.4)$$

相互作用仍取作(1.1.10)式标准形式，经过冗长的计算，我们得到密度相互作用能

$$\frac{c_0}{2} \int n^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{c_0}{8\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[A_0^4 + A_0^2 A_1^2 + \frac{1}{16} (7+x) A_1^4 + \Delta_n \right], \quad (5.3.5)$$

和自旋交换相互作用

$$\frac{c_2}{2} \int \mathbf{S}^2 d\mathbf{r} = \frac{c_2}{8\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[A_0^4 + A_0^2 A_1^2 + \frac{5}{16} A_1^4 + \Delta_s \right] (1-x). \quad (5.3.6)$$

两式中 $x = \left[1 - (C_{1+} + C_{1-})^2 \right]^2$ ，相互作用只依赖于变分参数的 C_{1+}, C_{1-} 的这一特定组合。同样我们把来自于 \mathbf{d} 波态的贡献分别放在 Δ_n 和 Δ_s 中

$$\begin{aligned} \Delta_n = & -\sqrt{\frac{1}{12000}} (10A_0A_1^2A_2 - 7A_0A_2^3)(1+3x) \\ & + \frac{3}{10} A_0^2 A_2^2 (2+x) + \frac{7}{240} A_1^2 A_2^2 (19-3x) + \frac{63}{1600} A_2^4 (7+x), \end{aligned} \quad (5.3.7)$$

$$\Delta_s = \sqrt{\frac{1}{480}} (10A_0A_1^2A_2 - 7A_0A_2^3) + \frac{35}{48} A_1^2 A_2^2 + \frac{63}{320} A_2^4. \quad (5.3.8)$$

将(5.3.1), (5.3.5)和(5.3.6)式相加即得到每粒子的总能量。

5.4 基态相图

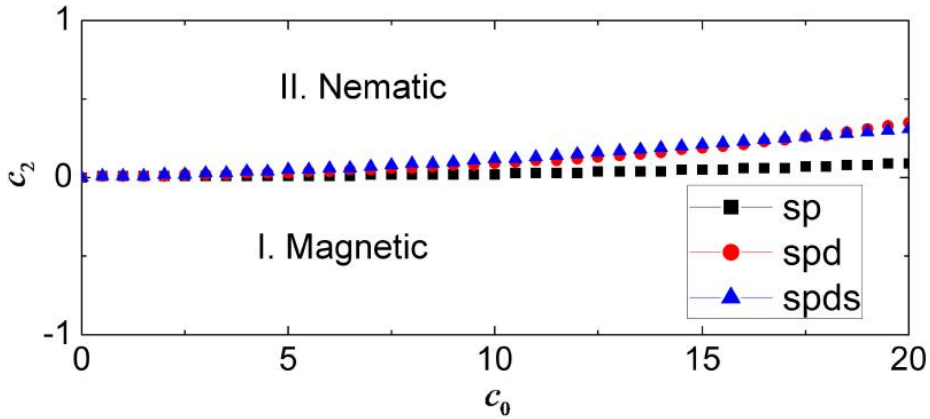


图 5.2 Weyl 耦合的自旋 1 BEC 的基态相图。耦合强度 $\lambda = 0.4$ 。利用不同的近似变分波函数计算了两相的边界，以 $0s$ 和 $0p$ 为基础，逐步加入 $0d$ 和 $1s$ 轨道。相互作用参数 c_0 和 c_2 以 $\hbar\omega l_T^3/N$ 为单位。

利用磁场诱导的 Weyl 耦合实验方案[34]，将冷原子囚禁在原子芯片之上，在三个方向上作用脉冲梯度磁场可以实现弱 Weyl 自旋轨道耦合。而两体相互作用可以通过调节原子数和光阱，或者利用 Feshbach 共振技术在较大幅度上进行调节，在众多的理论工作中相互作用参数的范围在 $0.1-10^3$ 之间。不失一般性，我们可以选取自旋轨道耦合强度 $\lambda = 0.4$ ，相互作用参数 c_0 在 10 附近来研究凝聚体的基态相。而

相互作用参数 c_2 则取决于原子种类[13], 对于 ^{87}Rb , ^{23}Na 和 ^7Li 原子的 BEC, c_2/c_0 分别为 -0.005, 0.04 和 -0.5。选定了自旋轨道耦合强度, 最小化能量泛函可以得到基态的 $c_0 - c_2$ 相图如图 5.2 所示。首先, 变分参数 x 的取值范围在 0 到 1 之间。如果密度相互作用参数 $c_0 = 0$, 从(5.3.6)式可以看出在忽略 Δ_s 时(后面我们将说明, 来自 d 波态的贡献 Δ_s 是很小的), 若 $c_2 < 0$, 最小化自旋相互作用得到 $x = 0$; 反之 $c_2 > 0$, 最小化自旋相互作用得到 $x = 1$ 。由此我们得到两个基态相。

(I) $x = 0$ 时 $C_{1+} + C_{1-} = \pm 1$, 则(5.2.15)式 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 代表均匀的铁磁态, 系统波函数(5.2.14)是调制的铁磁态, 其特征是磁序参数 $\langle \mathbf{S} \rangle \neq 0$, 我们称之为磁性 (Magnetic)相。

(II) $x = 1$ 时 $(C_{1+} + C_{1-})^2 = 0$ 或 2 , (5.2.15)式 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 代表均匀的 Polar 态, 系统波函数(5.2.14)是调制的 Polar 态, 其特征是磁序参数 $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, 但向列序参数 $\langle \mathfrak{N} \rangle$ 非零, 我们称之为向列(Nematic)相。

这两个基态相与第一章讨论的无自旋轨道耦合的系统一致, 无自旋轨道耦合时平均场理论预言若 $c_2 < 0$ ($c_2 > 0$), 铁磁(Polar)基态分别能最小化自旋相互作用能 [2,3]。而对于 Weyl 耦合的玻色气体, 当密度相互作用参数 $c_0 \neq 0$ 且 $c_2 > 0$ 时, 从(5.3.5)式可知单独最小化密度相互作用总是要求 $x = 0$, 从(5.3.6)式知单独最小化自旋相互作用则要求 $x = 1$ 。此时存在密度相互作用和自旋相互作用的竞争, 我们得到铁磁和 Polar 相的边界将向 $c_2 > 0$ 一侧偏离。

变分参数 A_0, A_1, A_2 的优化值并不会影响到基态相, 变分结果揭示当密度相互作用参数 c_0 增加时, 来自 p 波和 d 波的贡献也相应增加, 而 s 波的贡献则减少。在相图所示区域 $c_0 = 0 \sim 20$, $|A_0|^2$ 从 0.884 减少至 0.723, $|A_1|^2$ 从 0.110 增加至 0.260, 而 $|A_2|^2$ 从 0.003 增加至 0.014。因此, 来自 d 波态的贡献 $\Delta_{n,s}$ 总是很小, 忽略 d 波态并不影响相图的结构特征。为此我们分别计算了三种不同近似情况时的两相边界:

“sp”近似，在波函数中只考虑最低的 s 波和 p 波单粒子态，即设 $A_2 = 0$ ；“spd”近似，在“sp”近似的基础上加入 d 波态；“spds”近似则进一步加入更高的 1s 态。从相图中可以看出即使考虑更高的 1s 态的贡献，两相边界也不会有显著的变化。虽然相图 5.2 与无自旋轨道耦合的相图定性一致，但自旋轨道耦合效应表现在它会调制自旋空间的铁磁和 Polar 自旋结构，并同时在坐标空间形成丰富的密度分布[76]

我们首先考察磁性相的特征。磁性相基本上出现在相图的下半空间，参数 $C_{1+} + C_{1-} = \pm 1$ 。我们来计算未调制的均匀态 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 的自旋矢量，有

$$\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \operatorname{Re}(C_{1+} C_{10}^* + C_{10} C_{1-}^*) \\ -\sqrt{2} \operatorname{Im}(C_{1+} C_{10}^* + C_{10} C_{1-}^*) \\ |C_{1+}|^2 - |C_{1-}|^2 \end{pmatrix} \quad (5.4.1)$$

由于我们将 C_{1+}, C_{10} 和 C_{1-} 设为实数，这里总有 $S_y = 0$ 。参数 $C_{1+} + C_{1-} = \pm 1$ 意味着均匀旋量 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 总是描述一个沿 xz 轴磁化的铁磁态。从对称性的角度讲，这里 y 轴并无任何特殊，而是我们为了简化计算人为地将变分参数设为实数导致的。如果允许变分参数取复数值，则沿三维空间任意方向磁化的铁磁态都应该属于此相，从而导致基态简并度为无穷大。两个具有代表性的基态分别对应未调制的旋量 $\zeta_z = (1, 0, 0)^T$ 和 $\zeta_x = (1/2, 1/\sqrt{2}, 1/2)^T$ ，分别是纵向和横向的铁磁态。磁性相自发破缺时间反演对称性，例如 ζ_z 的时间反演态是 $\zeta_{-z} = (0, 0, 1)^T$ ，而 ζ_x 的时间反演态是 $\zeta_{-x} = (1/2, -1/\sqrt{2}, 1/2)^T$ ，系统自发磁化，与赝自旋 1/2 系统类似[98]。与之不同的是，对于赝自旋 1/2 系统，非 $SU(2)$ 对称的相互作用导致横向和纵向磁化态能量不简并，只有时间反演引起的两重 Kramers 简并。而在这里，相互作用是 $SU(2)$ 对称的，横向和纵向磁化的态是简并的，当然 Kramers 简并也是存在的，不过包括在 $SU(2)$ 对称导致的简并之中。

首先来看纵向铁磁态 $\zeta_z = (1, 0, 0)^T$ 。基态波函数是(5.2.14)式，我们在图 5.3(a) 中画出了此态三个自旋分量的密度分布。从图中可以明显看出沿纵向轴的旋转对称性。密度分布显示 +1 分量占主导地位且占据势阱中心，这也是凝聚体出现纵向磁化的原因。0 和 -1 两个分量的密度具有环状结构环绕 +1 分量。-1 分量的密度全部

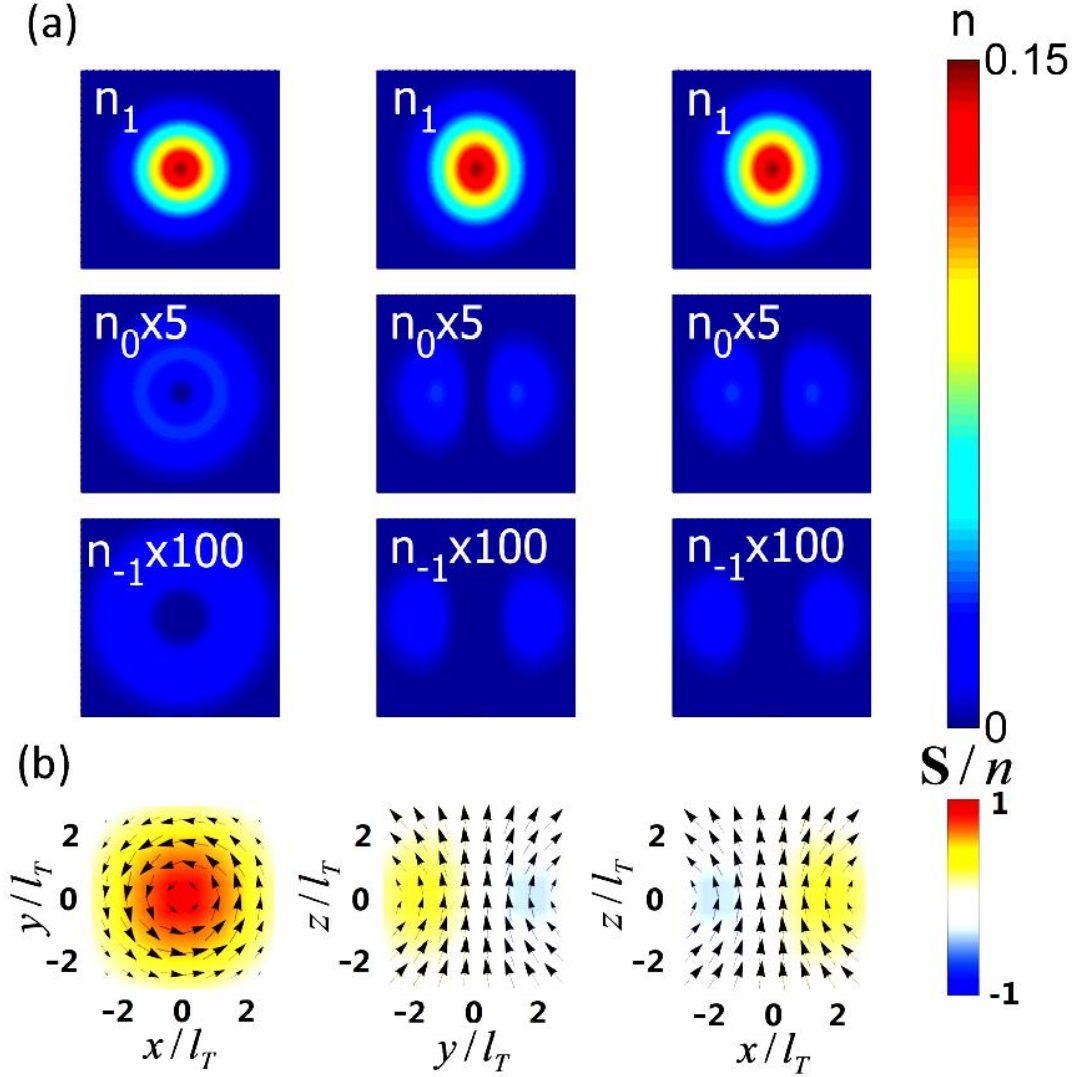


图 5.3 纵向铁磁态 ζ_z 的(a)密度分布和(b)自旋结构。(a)图从左到右分别是 xy ,

yz , xz 平面上的密度分布。 $c_0 = 10$, $c_2 / c_0 = -0.005$ 。

由 d 波贡献，分布在最外层且几乎可以忽略不计，为了看清楚它被放大了 100 倍。一般而言，在基态只有低密度的分量的分布才能具有复杂的空间结构，因为复杂结构出现在高密度分量之中会显著增加凝聚体的总动能[107]。 ζ_z 的时间反演态是 $\zeta_{-z} = (0, 0, 1)^T$ ，它们的密度分布类似，只不过 $+1$ 分量和 -1 分量互换。

纵向磁化态的归一化自旋密度的空间调制如图 5.3(b)所示。图中可以看出自旋密度随粒子数密度同步调制， $+1$ 分量占据势阱中心因此自旋沿 z 轴方向，由中心向外，由于 0 和 -1 分量依次增加导致局域自旋连续向 xy 平面偏转，形成磁 skyrmion 自旋结构，与自旋 $1/2$ 系统基态性质相似[42,43]，是 Rashba 耦合时出现的半量子涡旋态 $HV(1/2)$ 的三维推广[30,32]。

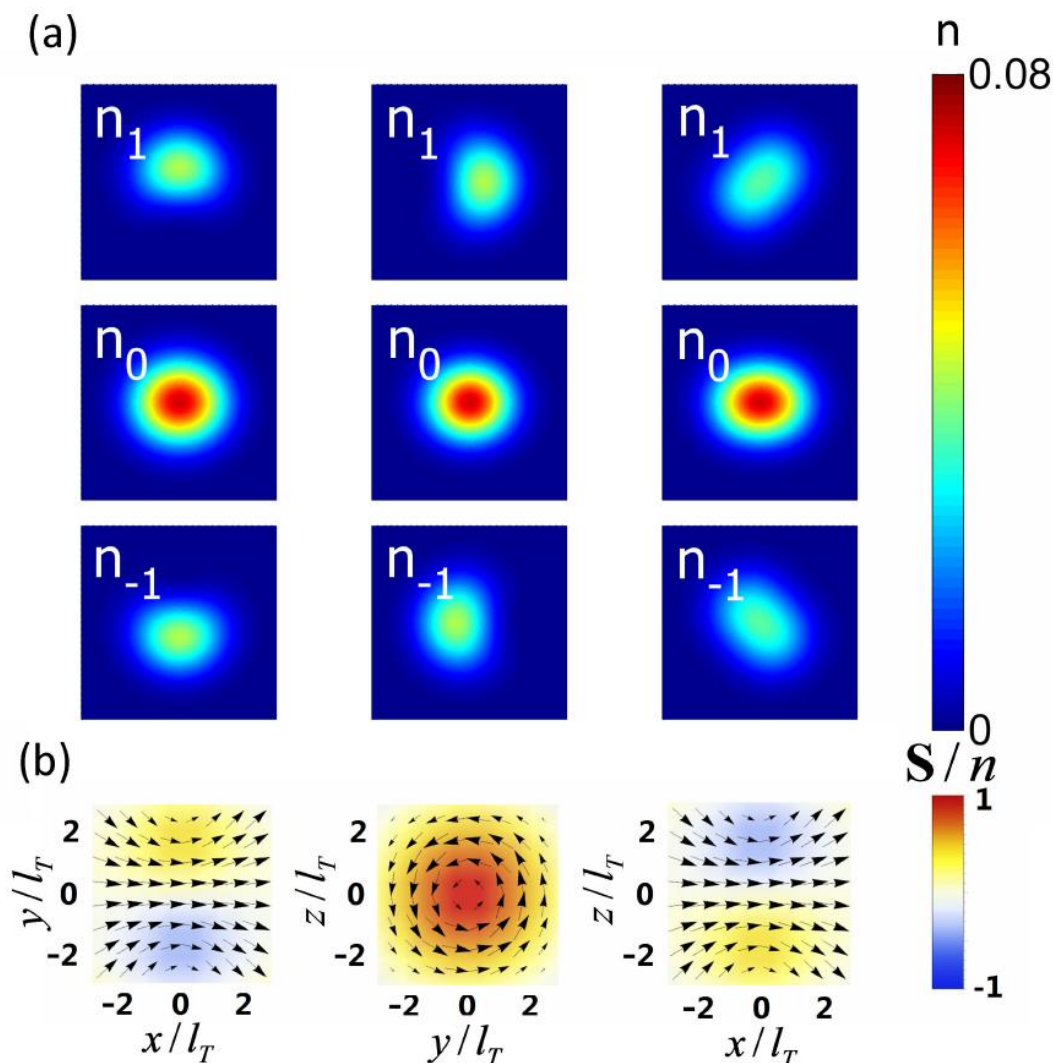


图 5.4 横向铁磁态 ζ_x 的(a)密度分布和(b)自旋结构。。(a)图从左到右分别是 xy , yz , xz 平面上的密度分布。 $c_0 = 10$, $c_2 / c_0 = -0.005$ 。

横向的铁磁态 $\zeta_x = (1/2, 1/\sqrt{2}, 1/2)^T$ 对应的基态密度分布如图 5.4 所示，与纵向铁磁态有很大不同。一半的原子布居在 0 分量，+1 和 -1 分量是空间分离的，导致系统出现横向磁化[107]。三个分量的相分离情况与纵向铁磁态也不同，粗略地说，+1(-1)分量主要布居在 $+y(-y)$ 半空间且它的密度中心沿着 III 和 VIII 卦限(I 和 VI 卦限)，0 分量镶嵌在两者之间且密度中心沿 x 轴。相应的自旋密度的空间调制如图 5.4(b)所示。这也是一个磁 skyrmion 自旋结构，不过在势阱中心局域自旋沿 x 轴极化。远离势阱中心，+1 和 -1 分量沿相对的方向增加，导致局域自旋在 yz 平面形成涡旋结构。

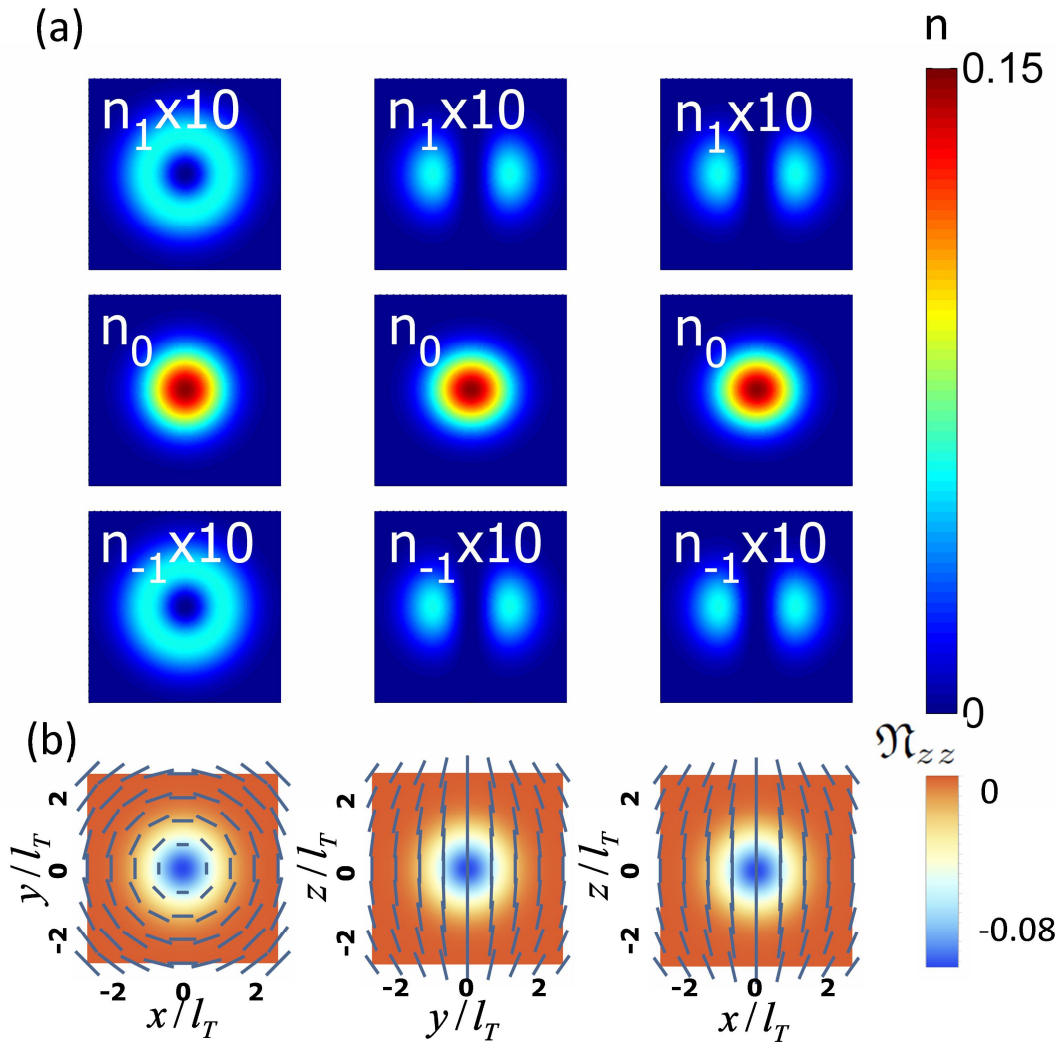


图 5.5 纵向 Polar 态 ζ_{pz} 的(a)密度分布和(b)向列方向。(a)图从左到右分别是 xy ,

yz , xz 平面上的密度分布。 $c_0 = 10$, $c_2 / c_0 = 0.04$ 。

其它与纵向和横向铁磁态简并的基态具有相似的性质，除了磁化轴不在沿 z 和 x 方向，而是由具体的参数值 C_{1+} , C_{10} 和 C_{1-} 决定。

其次，我们来研究向列相。向列相基本上出现在相图的上半空间，参数 $C_{1+} + C_{1-} = 0$ 或 $\pm\sqrt{2}$ 。我们先来计算未调制的均匀态 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 的自旋矢量，同样由于我们将 C_{1+} , C_{10} 和 C_{1-} 设为实数且满足归一化条件，由(5.4.1)式可以得出对向列相总有磁序参数 $\langle \mathbf{s} \rangle = 0$ ，因此向列相里没有磁化。而且参数 C_{1+} , C_{1-} 的取值意味着均匀旋量 $\zeta = (C_{1+}, C_{10}, C_{1-})^T$ 总是描述一个单轴向列态，基态简并度也为无

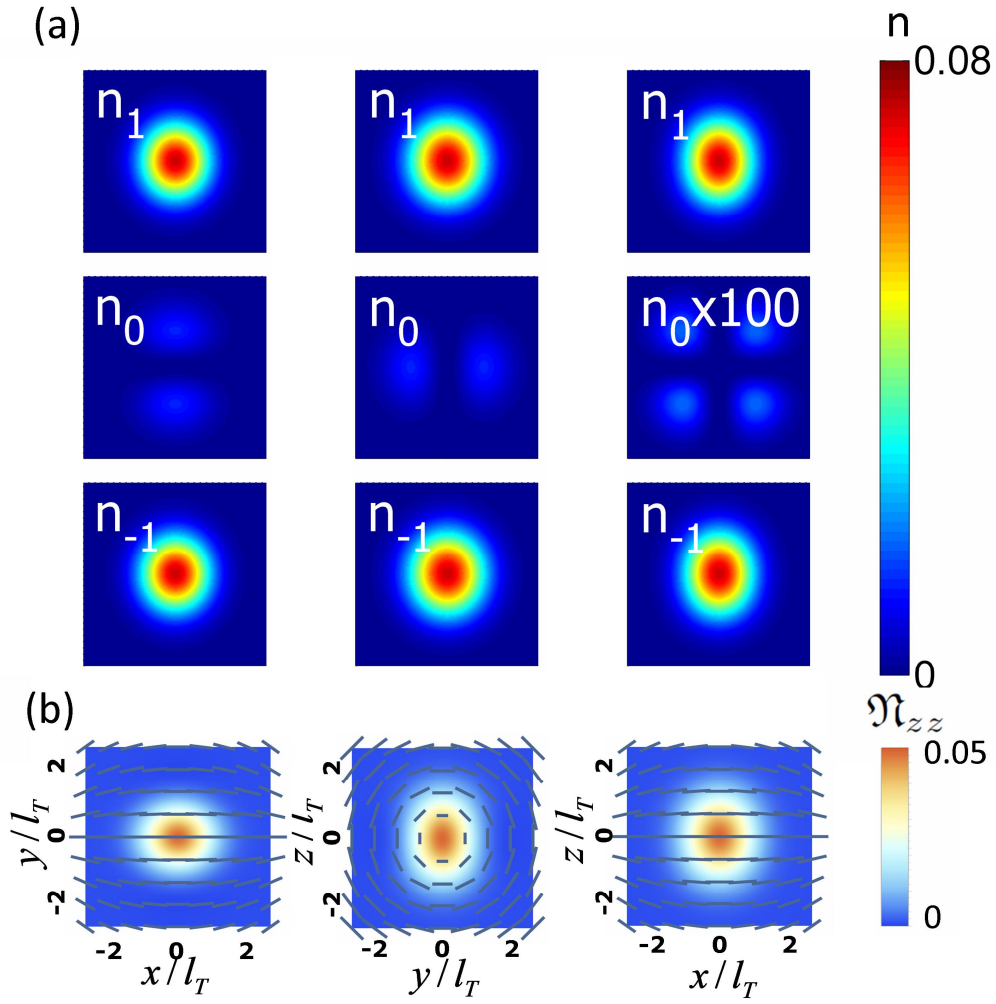


图 5.6 横向 Polar 态 ζ_{px} 的(a)密度分布和(b)向列方向。 $c_0 = 10, c_2 / c_0 = 0.04$ 。

穷大。两个具有代表性的向列基态分别对应未调制的旋量 $\zeta_{pz} = (0, 1, 0)^T$ 和 $\zeta_{px} = 1/\sqrt{2}(1, 0, -1)^T$ 分别代表纵向和横向的 Polar 态，即它们的相列轴分别沿 z 和 x 轴。向列相保持时间反演对称性，上述纵向和横向的 Polar 态是它们自己的时间反演态，因此系统无自发磁化。

对于纵向的 Polar 态，基态的密度分布如图 5.5(a)所示。我们看到 0 分量占主导地位，而 +1 和 -1 分量的布居相同，是相容的(miscible)。正因如此凝聚体不会出现磁化。由于磁序参数恒为零，我们来研究高阶的自旋序一向列序。在向列相，可以计算(1.3.14)式的归一化的向列密度张量 \mathfrak{n} 。将其对角化，我们得到它的三个本征值为 $1/3, 1/3$ 和 $-2/3$ ，因而基态是单轴向列态。与本征值 $-2/3$ 所对应的本征矢定义局域的向列轴如图 5.5(b)所示，分别画出了 xy ， yz 和 xz 平面上的向列轴，以无箭头的矢

量表示，同时还画出了向列密度张量的分量 \mathfrak{N}_{zz} 。可以看到与均匀的纵向 Polar 态不同，这里由于自旋轨道耦合，向列轴是空间调制的。在势阱中心只有 0 分量，态函数可近似为纵向 Polar 态，向列轴也沿纵向，由中心向外，向列轴连续调制，间接反映了向列密度张量本身是空间调制的。向列密度张量的分量 \mathfrak{N}_{zz} 称为张量磁化强度，已经被用来区分自旋轨道耦合的自旋 1 系统中发生的二阶相变[26,58]，它沿自旋轨道耦合方向的空间调制也已经被研究过[22,78]。

而对于横向的 Polar 态，基态的密度分布如图 5.6(a)所示。我们看到+1 和-1 分量布居也相同，是相容的(miscible)，与纵向的 Polar 态不同的是它们占主导地位。

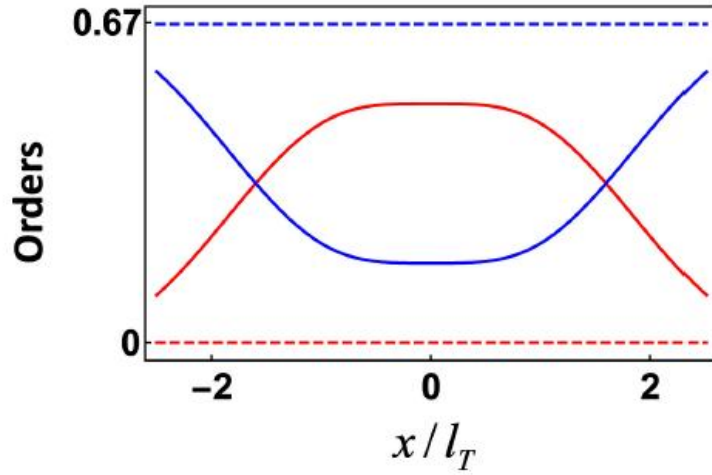


图 5.7 磁性相和向列相的自旋密度 $1/2\mathfrak{S}^2$ (红色)和向列张量密度 $\text{Tr}(\mathfrak{N}^2)$ (蓝色)。实线为磁性相，虚线为向列相。 $c_0 = 10$, 对磁性相 $c_2 / c_0 = -0.005$ ；对向列相

$$c_2 / c_0 = 0.04。$$

而此时 0 分量布居很少，把它在 xz 平面上的布局放大 100 倍之后，可以看到 d 波的特征。同样由于时间反演对称性保持，我们看不到相分离的出现，凝聚体也不会出现磁化。与纵向的 Polar 态相同，磁序参数恒为零。对角化向列张量密度同样得到这是一个单轴向列态。局域向列轴如图 5.6(b)所示，此时势阱中心只有 ± 1 分量布局，态函数近似为横向 Polar 态，向列轴沿 x 方向，由中心向外，向列轴也被连续调制。

在磁性相中由于并没有完全磁化，由第一章我们知道实际上也存在向列序与磁序相竞争，两种自旋序满足关系(1.3.15)。为了直观地理解这一点，在图 5.7 中我们用实线画出了沿 x 轴上两种序的竞争关系，我们看到向列序与磁序此消彼长。在磁

性相，如果我们对角化向列密度张量将得到三个不同的本征值，反映磁性相的双轴向列性质。而对于向列相，自旋密度和向列张量密度的迹如图 5.7 中的虚线所示，可以看到只有单轴向列序存在。

总结与展望

本论文利用变分法和不可约张量代数方法研究了 Weyl 耦合的旋量 BEC 的基态相, 密度分布, 磁序和向列序等性质。主要结论是: 对于 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 BEC, 发现了两种具有不同磁序的三维 skyrmion 基态相, 它们有相同的自旋结构拓扑。对于 Weyl 耦合的自旋 1 BEC, 发现在铁磁相互作用区系统的基态也有着三维 skyrmion 的自旋结构, 而在反铁磁相互作用区系统可能出现没有自发磁化的单轴向列相, 它具有空间调制的向列序。

文中首先介绍旋量 BEC 的平均场基态和自旋轨道耦合的基本理论。对于赝自旋 1/2 的旋量 BEC, 我们在 Thomas-Fermi 近似下讨论了其基态出现两相共存区域和两相分离的条件。对于自旋 1 的 BEC, 讨论了平均场近似下的铁磁和反铁磁基态相, 着重讨论了反铁磁相中的向列序。介绍了文献中常见自旋轨道耦合的形式, 包括 NIST 的拉曼耦合形式, Rashba 耦合, Weyl 耦合, SU(3) 耦合和自旋-轨道角动量耦合。特别地, 对拉曼诱导的自旋轨道耦合, 分别总结了赝自旋 1/2 和自旋 1 的 BEC 的基态相, 即平面波相, 条纹相和零动量相。讨论了各相的密度分布, 磁序, 以及自旋 1 BEC 中出现的空间调制的向列序。对 Rashba 自旋轨道耦合的 BEC, 仍然就赝自旋 1/2 和自旋 1 两种情况分别讨论了均匀系统的平面波和条纹基态相的密度分布和磁性质。还介绍了囚禁在外部简谐势阱中的 BEC 呈现出新奇的半量子涡旋相和晶格相。

在这些已有工作的基础上, 我们研究了 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 旋量 BEC 的基态相。首先介绍均匀系统的基态和存在外部囚禁势时的单粒子基态。当自旋轨道耦合较弱时, 单粒子基态近似是微扰的谐振子态。我们分析发现自旋轨道耦合作为微扰时会耦合不同宇称的谐振子本征态, 进而破坏宇称守恒, 对单粒子而言只有总角动量是好量子数。因此, 我们将谐振子的 s 波和 p 波态叠加作为近似的单粒子基态, 然后将简并的单粒子基态叠加, 构造了一种近似的变分波函数, 用变分方法研究了三维 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 的 BEC 的基态相。结果表明, 当自旋轨道耦合较弱时, 基态具有三维磁 skyrmion 自旋结构, 与 Kawakami 等人的数值数值计算的结果一致。通过对解析的变分波函数的分析, 我们发现由于自旋轨道耦合而导致的 p 波空间模驱动两个自旋分量相分离, 进而导致了三维磁 skyrmion 基态。我们还发现不同自旋分量之间两体相互作用的竞争将导致基态出现两种具有不同的密度分布对称性的 skyrmion 相, 它们有着相同的自旋结构拓扑。当相互作用超过临界值时, 系统还将

发生两种磁 skyrmion 相之间的相变。无论是利用 Raman 光还是利用脉冲磁场来实现 Weyl 耦合的赝自旋 1/2 BEC, 当调节二次塞曼效应时, 原则上也可以在相似的实验装置上实现自旋 1 BEC。我们还利用不可约张量代数方法结合变分法研究了 Weyl 耦合的自旋 1 的玻色气体的基态结构。结果表明在不同的相互作用参数区, 玻色气体凝聚在两种基态相, 分别称为磁性相和向列相, 确定了两相的边界。发现磁性相具有三维的磁 skyrmion 自旋结构, 三个自旋分量的密度分布是相分离的, 基态有着相互竞争的磁序和双轴向列序。而向列相的突出特点是基态没有自发磁化, 但显示出有趣的空间调制的单轴向列序。

本论文只讨论了弱 Weyl 耦合的旋量 BEC 的基态相。在第三章中我们注意到强 Rashba 耦合的两分量 BEC 可能出现各种各样的晶格相。我们预计这种现象也会出现在强 Weyl 耦合的 BEC 中。今后的工作中, 可以对这一课题进一步展开研究, 探索自旋轨道耦合、囚禁势和相互作用之间的竞争如何影响 BEC 的基态。此外, 自旋轨道耦合的高自旋的冷原子气体的量子相, 自旋序, 以及 Weyl 耦合的偶极凝聚体中的自旋序等都是值得深入研究的课题。

参 考 文 献

- [1] Stamper-Kurn D. M., Andrews M. R., Chikkatur A. P., Inouye S., Miesner H. J., Stenger J., and Ketterle W. Optical confinement of a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, 80, 2027.
- [2] Ho T. -L. Spinor Bose condensate in optical trap. *Phys. Rev. Lett.* 1998, 81, 742.
- [3] Ohmi T., Machida K. Bose-Einstein condensate with internal degree of freedom in alkali atom gases. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1998, 67, 1822.
- [4] Kawaguchia Y. and Ueda M. Spinor Bose-Einstein condensates. *Phys. Rep.*, 2012, 520, 253.
- [5] Lin Y. J., Compton R. L., Perry A. R., Phillips W. D., Porto J. V., and Spielman I. B. Bose-Einstein condensate in a uniform light-induced vector potential. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102, 130401.
- [6] Lin Y. J., Compton R. L., Jimnez-Garca K., Porto J. V., Spielman I. B. Synthetic magnetic fields for ultracold neutral atoms. *Nature*, 2009, 462, 628.
- [7] Lin Y. J., Compton R. L., Jimnez-Garca K., Phillips W. D., Porto J. V., and Spielman I. B. A synthetic electric force acting on neutral atoms. *Nature Physics*, 2011, 7, 531.
- [8] Lin Y. J., Jimenez-Garcia K., Spielman I. B. Spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. *Nature*, 2011, 471, 83.
- [9] Galitski V., Spielman I. B. Spin-orbit coupling in quantum gases. *Nature*, 2013, 494, 49.
- [10] Goldman N., Juzeliunas G., and Ohberg P., and Spielman I. B. Light-induced gauge fields for ultracold atoms. *Rep. Prog. Phys.*, 2014, 77, 126401.
- [11] Pethick C. J., Smith H. Bose-Einstein condensate in dilute gases. New York: Cambridge university press. 2008.
- [12] Kasamatsu K, Tsubota M, Ueda M. Vortices in Multicomponent Bose-Einstein Condensates. *Int. J. Mod. Phys. B.* 2005, 19, 1835-1904.
- [13] Stamper-Kurn D. M. and Ueda M. Spinor Bose gases: Exploration of symmetries, magnetism and quantum dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 2013, 85, 1191.
- [14] Varshalovich D., Moskalev A., and Khersonskii V. Quantum Theory of Angular

- Momentum. Singapore: World Scientific, 1988.
- [15] Fridman Y. A., Kosmachev O. A., Kolezhuk A. K., and Ivanov B. A. Spin nematic and antinematic states in a spin-3/2 isotropic non-Heisenberg magnet. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106, 097202.
- [16] Podolsky D., and Demler E. Properties and detection of spin nematic order in strongly correlated electron systems. *New J. Phys.*, 2005, 7, 59.
- [17] Mueller E. J. Spin texture in slowly rotating Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. A*, 2004, 69, 033606.
- [18] Mizushima T., Kobayashi N., and Machida K. Coreless and singular vortex lattices in rotating spinor Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 2004, 70, 043613.
- [19] Diener R. B., and Ho T. -L. ^{52}Cr spinor condensate: a biaxial or uniaxial spin nematic. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96, 190405.
- [20] Yukawa E., Ueda M., and Nemoto K. Classification of spin-nematic squeezing in spin-1 collective atomic system. *Phys. Rev. A*, 2013, 88, 033629.
- [21] Zibold T., Corre V., Frapolli C., Dalibard J., and Gerbier F. Spin nematic order in antiferromagnetic spinor condensates. Preprint, arXiv: 1506.06176.
- [22] Natu S. S., Li X. P. and Cole W. S. Striped ferronematic ground states in a spin-orbit-coupled $S=1$ Bose gases. *Phys. Rev. A*, 2015, 91, 023608.
- [23] Jimenez-Garcia K., LeBlanc L. J., Williams R. A., Beeler M. C., Qu C., Gong M., Zhang C., and Spielman I. B. Tunable spin-orbit coupling via strong driving in ultracold-atom systems. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114, 125301.
- [24] Wang P. J., Yu Z. -Q., Fu Z. K., Miao J., Huang L. H., Chai S. J., Zhai H. and Zhang J. Spin-orbit coupled degenerate Fermi gases. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109, 095301.
- [25] Cheuk L. W, Sommer A. T., Hadzibabic Z., Yefsah T., Bakr W. S., and Zwierlein M. W. Spin-injection spectroscopy of spin-orbit coupled Fermi gases. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109, 095302.
- [26] Cambell D. L., Price R. M., Putra A., Valdés-Curiel A., Trypogeorgos D. and Spielman I. B. Itinerant magnetism in spin-orbit coupled Bose gases. Preprint, 2015, arXiv:1501.05984.
- [27] Stanescu T. D., Anderson B., and Galitski V. Spin-orbit coupled Bose-Einstein

- Condensates. Phys. Rev. A, 2008, 78, 023616.
- [28] Wang C., Gao C., Jian C. -M. and Zhai H. Spin-orbit coupled spinor Bose-Einstein Condensates. Phys. Rev. Lett., 2010, 105, 160403.
- [29] Wu C. J., Ian M. S. and Zhou X. F. Unconventional Bose-Einstein Condensates from spin-orbit coupling. Chin. Phys. Lett., 2011, 28, 097102.
- [30] Sinha S., Nath R. and Santos L. Trapped two-dimensional condensates with synthetic spin-orbit coupling. Phys. Rev. Lett., 2011, 107, 270401.
- [31] Hu H., Ramachandhran B., Pu H., and Liu X. -J. Spin-orbit coupled weakly interacting Bose-Einstein Condensates in harmonic traps. Phys. Rev. Lett., 2012, 108, 010402.
- [32] Ramachandhran B., Opanchuk B., Liu X. -J., Pu H., Drummond P. D., and Hu H. Half-quantum vortex state in a spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensate. Phys. Rev. A, 2012, 85, 023606.
- [33] Cambell D. L., Juzeliunas G., and Spielman I. B. Realistic Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling for neutral atoms. Phys. Rev. A, 2011, 84, 025602.
- [34] Anderson B. M., Spielman I. B., and Juzeliunas G. Magnetically generated spin-orbit coupling for ultracold atoms. Phys. Rev. Lett., 2013, 111, 125301.
- [35] Xu Z. F., You L., and Ueda M. Atomic spin-orbit coupling synthesized with magnetic-field-gradient pulses. Phys. Rev. A, 2013, 87, 063634.
- [36] Xu Z. F., You L. Dynamical generation of arbitrary spin-orbit coupling for neutral atoms. Phys. Rev. A, 2012, 85, 043605.
- [37] Cambell D. L., and Spielman I. B. Rashba realization: Raman with RF. Preprint, arXiv: 1511.01588.
- [38] Juzeliunas G., Ruseckas J., and Dalibard J.. Generalized Rashba-Dresselhaus spin-orbit coupling for cold atoms. Phys. Rev. A, 2010, 81, 053403.
- [39] Huang L. H., Meng Z. M., Wang P. J., Peng P., Zhang S. -L., Chen L. C., Li D. H., Zhou Q. and Zhang J. Preprint, 2015 arXiv:1506.02861.
- [40] Wu Z., Zhang L., Sun W., Xu X. -T., Wang B. -Z., Ji S. -C., Deng Y. J., Chen S., Liu X. -J. and Pan J. -W. Preprint, 2015 arXiv:1511.08170.
- [41] Anderson B. M., Juzeliunas G., Galitski V. M. and Spielman I. B. Synthetic 3D spin-orbit coupling. Phys. Rev. Lett., 2012, 108, 235301.

- [42] Kawakami T., Mizushima T., Nitta M., and Machida K. Stable Skyrmions in SU(2) Gauged Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109, 015301.
- [43] Li Y., Zhou X., and Wu C. 3D quaternionic condensation and spin textures with Hopf invariants from synthetic spin-orbit coupling. Preprint, arXiv:1205.2162.
- [44] Zhou X., Li Y., Cai Z., and Wu C. Unconventional states of bosons with the synthetic spin-orbit coupling. *J. Phys. B.*, 2013, 46, 134001.
- [45] Anderson B. M., and Clark C.W. Three-dimensional spin-orbit coupling in a trap. *J. Phys. B*, 2013, 46, 134003.
- [46] Zhang D. -W., Chen J. -P., Shan C. -J., Wang Z. D. and Zhu S. -L. Superfluid and magnetic states of an ultracold Bose gas with synthetic three-dimensional spin-orbit coupling in an opticle lattice. *Phys. Rev. A*, 2013, 88, 013612.
- [47] Cui X. L. Mixed-partial-wave scattering with spin-orbit coupling and validity of pseudopotentials. *Phys. Rev. A*, 2012, 85, 022705.
- [48] Gupta R., Singh G. S., and Bosse J. Weyl spin-orbit-coupling-induced interactions in uniform and trapped fluids. *Phys. Rev. A*, 2013, 88, 053607.
- [49] Vyasanakere J. P., and Shenoy V. B. Rashbons: properties and their significance. *New J. Phys.*, 2012, 14, 043041.
- [50] Vyasanakere J. P., and Shenoy V. B. Bound states of two spin-1/2 fermions in a synthetic non-Abelian gauge field. *Phys. Rev. B*, 2011, 83, 094515.
- [51] Vyasanakere J. P., Zhang S. Z., and Shenoy V. B. BCS-BEC crossover induced by a synthetic non-Abelian gauge field. *Phys. Rev. B*, 2011, 84, 014512.
- [52] Ghosh S. K., Vyasanakere J. P., and Shenoy V. B. Trapped fermions in a synthetic non-Abelian gauge field. *Phys. Rev. B*, 2011, 84, 053629.
- [53] Han W., Zhang X. -F., Song S. -W., Saito H., Zhang W., Liu W. M., and Zhang S. -G. Double-quantum spin vortices in SU(3) spin-orbit coupled Bose gases. Preprint, 2016, arXiv:1601.06935
- [54] Barnett R., Boyd G. R., and Galitski V. SU(3) spin-orbit coupling in systems of ultracold atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109, 235308.
- [55] Hu Y. X., Miniatura C., Wilkowski D. and Gremaud B. U(3) artificial gauge fields for cold atoms. *Phys. Rev. A*, 2014, 90, 023601.
- [56] Hu Y. X., Miniatura C., and Gremaud B. Half-skyrmion and vortex-antivortex pairs

- in spinor condensates. *Phys. Rev. A*, 2015, 92, 033615.
- [57] Qu C. L., Sun K., and Zhang C. W. Quantum phases of Bose-Einstein Condensates with synthetic spin-orbit angular momentum coupling. *Phys. Rev. A*, 2015, 91, 053630.
- [58] Sun K., Qu C. L., and Zhang C. W. Spin-orbit angular momentum coupled Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. A*, 2015, 91, 063627.
- [59] DeMarco M., and Pu H. Angular spin-orbit coupling in cold atoms. *Phys. Rev. A*, 2015, 91, 033630.
- [60] Chen L., Pu H., and Zhang Y. B. Spin-orbit angular momentum coupling in a spin-1 Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 2016, 93, 013629.
- [61] Zhai H. Degenerate quantum gases with spin-orbit coupling. *Rep. Prog. Phys.*, 2015, 78, 026001.
- [62] Zheng W., Yu Z. -Q., Cui X. L., and Zhai H. Properties of Bose gases with Raman-induced spin-orbit coupling. *J. Phys. B.*, 2013, 46, 134007
- [63] Ho T. -L., and Zhang S. Z. Bose-Einstein condensate with spin-orbit interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107, 150403.
- [64] Lu Q. -Q., and Sheehy E. E. Density profiles and collective modes of a Bose-Einstein condensate with light-induced spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A.*, 2013, 88, 043645.
- [65] Li. Y., Martone G. I., Pitaevskii L. P., and Stringari S. Superstripes and the excitation spectrum of a spin-orbit coupled Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110, 235302.
- [66] Martone G. I., Li. Y., Pitaevskii L. P., and Stringari S. Anisotropic dynamics of a spin-orbit coupled Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 2012, 86, 063621.
- [67] Khamsehchi M. A., Zhang Y. P., Hamner C., Busch T. and Engels P. Measurement of collective excitations in a spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 2014, 90, 063624.
- [68] Ji S. -C., Zhang L., Xu X. T., Wu Z., Deng Y. -J, Chen S., and Pan J. -W. Softening of roton and phonon modes in a Bose-Einstein condensate with spin-orbit-coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114, 105301.
- [69] Ozawa T. Pitaevskii L. P., and Stringari S. Supercurrent and dynamical instability

- of spin-orbit-coupled ultracold Bose gases. *Phys. Rev. A.*, 2013, 87, 063610.
- [70] Zhang J. Y., Ji S. C., Chen Z., Zhang L., Du Z. D., Yan B., Pan G. S., Zhao B., Deng Y. J., Zhai H., Chen S., and Pan J. W. Collective dipole oscillations of a spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109, 115301.
- [71] Qu C. L., Hamner C., Gong M., Zhang C. W. and Engels P. Observation of Zitterbewegung in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 2013, 88 021604(R).
- [72] Hamner C., Qu C. L., Zhang Y. P., Chang J. J., Gong M., Zhang C. W. and Engels P. Dicke-type phase transition in a spin-orbit coupled Bose-Einstein condensate. *Nat. Commun.*, 2014, 5, 4023.
- [73] Li. Y., Pitaevskii L. P., and Stringari S. Quantum tricriticality and phase transitions in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108, 225301.
- [74] Martone G. I., Li. Y., and Stringari S. Approach for making visible and stable stripes in a spin-orbit-coupled Bose-Einstein superfluid. *Phys. Rev. A.*, 2014, 90, 041604(R).
- [75] Ji S. -C., Zhang J. -Y., Zhang L., Du Z. -D., Zheng W., Deng Y. -J., Zhai H., Chen S. and Pan J. -W. Experimental determination of the finite-temperature phase diagram of a spin-orbit-coupled Bose gas. *Nat. Phys.*, 2014, 10, 314.
- [76] Lan Z. H. and P. Öhberg. Raman-dressed spin-1 spin-orbit-coupled quantum gas. *Phys. Rev. A.*, 2014, 89, 023630.
- [77] Sun K., Qu C. L., Xu Y., Zhang Y. P., and Zhang C. W. Interacting spin-orbit-coupled spin-1 Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A.*, 2016, 93, 023615.
- [78] Martone G. I., Pepe F. V., Facchi P., Pascazio S., and Stringari S. Tricriticalities and quantum phases in spin-orbit-coupled spin-1 Bose gases. 2015, Preprint, arXiv: 1511.09225.
- [79] Z.-Q. Yu. Phase transitions and elementary excitations in spin-1 Bose gases with Raman induced spin-orbit coupling. 2015, arXiv:1512.04091.
- [80] Stenger J., Inouye S., Stamper-Kurn D. M., Miesner H.-J., Chikkatur A. P., and Ketterle W. Spin domains in ground-state Bose-Einstein condensates. *Nature*, 1998,

- 396, 345.
- [81] Zhai H. Spin-orbit coupled quantum gases. *Int. J. Mod. Phys. B*, 2012, 26, 1230001.
- [82] Ozawa T., Baym G. Striped states in weakly trapped ultracold Bose gases with Rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2015, 85, 063623.
- [83] Yu Z. -Q. Ground-state phase diagram and critical temperature of two-component Bose gases with Rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2013, 87, 051606(R).
- [84] Chen X., Rabinovic M., Santos L. Ring model for trapped condensates with spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2014, 90, 043632.
- [85] Kawakami T., Mizushima T., and Machida K. Textures of $F=2$ spinor Bose-Einstein condensates with spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2011, 84, 011607(R).
- [86] Xu Z. F., Lu R., and You L. Emergent patterns in a spin-orbit coupled spin-2 Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 2011, 83, 053602.
- [87] Wilson R. M., Anderson B. M., and Clark C. W. Meron ground state of Rashba spin-orbit coupled dipolar Bosons. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 111, 185303.
- [88] Gopalakrishnan S., Martin I., and Demler E. A. Quantum quasicrystals of spin-orbit coupled dipolar Bosons. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 111, 185304.
- [89] Wen L., Sun Q., Wang H. Q., Ji A. C. and Liu W. M. Ground state of spin-1 Bose-Einstein condensates with spin-orbit coupling in a Zeeman field. *Phys. Rev. A*, 2012, 86, 043602
- [90] Nikolic P. Vortices and vortex states in Rashba spin-orbit coupled condensates. *Phys. Rev. A*, 2014, 90, 023623.
- [91] Xu Z. F., Kobayashi S., and Ueda M. Gauge-spin-space rotation-invariant vortices in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 2013, 88, 013621.
- [92] Zhou Q., and Cui X. L. The fate of Bose-Einstein condensates in the presence of spin-orbit coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110, 140407.
- [93] Cui X. L., and Zhou Q. Enhancement of condensate depletion due to spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2013, 87, 031604(R).
- [94] Song S. -W., Zhang Y. -C., Zhao H., Wang X. and Liu W. -M. Fragmentation of spin-orbit coupled spinor Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 2014, 89, 063613.

- [95] Liao R. Y., Fialko O., Brand J., and Zulicke U. Multicriticality, metastability, and roton feature in Bose-Einstein condensates with three-dimensional spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2015, 92, 043633.
- [96] Greiner W., Muller B. *Quantum mechanics : symmetries*. Berlin: Springer. 1994.
- [97] 喀兴林. 高等量子力学 (第二版). 北京: 高等教育出版社. 1999.
- [98] Chen G. J., Li T. T., and Zhang Y. B. Symmetry-protected skyrmions in three-dimensional spin-orbit-coupled Bose gases. *Phys. Rev. A*, 2015, 91, 053624.
- [99] Khawaja U. A., and Stoof H. T. C. Skyrmion physics in Bose-Einstein ferromagnets. *Phys. Rev. A*, 2001, 64, 043612.
- [100] Khawaja U. A., and Stoof H. T. C. Skyrmions in a ferromagnetic Bose-Einstein condensate. *Nature (London)*, 2001, 411, 918.
- [101] Ruostekoski J., and Anglin J. R. Creating vortex rings and three-dimensional Skyrmions in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, 86, 3934.
- [102] Savage C. M., and Ruostekoski J. Energetically stable particlelike Skyrmions in a trapped Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91, 010403.
- [103] Herbut I. F., and Oshikawa M. Stable Skyrmions in spinor condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97, 080403.
- [104] Tokuno A., Mitamura Y., Oshikawa M., and Herbut I. F. Skyrmion in spinor condensates and its stability in trap potentials. *Phys. Rev. A*, 2009, 79, 053626.
- [105] Gautam S., and Adhikari S. K. Phase separation in a spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 2014, 90, 043619.
- [106] Battye R. A., Cooper N. R., and Sutcliffe P. M. Stable Skyrmions in two-component Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, 88, 080401.
- [107] Deng Y., Cheng J., Jing H., Sun C. -P., and Yi S. Spin-orbit-coupled dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108, 125301.

攻读学位期间取得的研究成果

- [1] **Guanjun Chen**, Tiantian Li and Yunbo Zhang, Symmetry-protected skyrmions in three-dimensional spin-orbit-coupled Bose gases. *Phys. Rev. A*, 2015, **91**, 053624.
- [2] **Guanjun Chen**, Li Chen and Yunbo Zhang, Magnetic and nematic phases in a Weyl type spin-orbit-coupled spin-1 Bose gas. *New J. Phys.* Accepted.

致 谢

在此毕业论文完成之际，感谢期间帮助过我的老师，朋友和亲人，没有你们的关怀，鼓励与付出，学习很难完成。

首先，向我的导师张云波教授表示感谢和尊敬！自进入理论所以来，学业和研究等各方面都是在张老师的关心指导下才得以完成。四年来，从入门到撰写论文每个环节都凝聚着张老师的心血。张老师治学严谨，学术上精益求精，小到每个符号的使用，每行公式的推导都细细过问，事必躬亲；大到拟定课题，撰写论文也往往N易其稿，反复斟酌，务求做到最好。张老师常年不知疲倦地工作，常常夜半发来微信消息讨论问题。老师这种钻研问题、撰写论文的态度让我受益良多，我会把它带到今后的学习和工作中，不辜负张老师的教导。在此，再次表示我诚挚的感谢！

其次，感谢理论物理研究提供的学习环境。感谢诸位老师的不吝帮助。

感谢诸位同学朋友多年的陪伴，他(她)们是王红梅，杜磊，郭利平，梁成功，毛丽君，李甜甜，徐卫平，王艳，陈立，刘彦霞，李鹏飞，许丽，周晓艳，李岩等等。

还要特别感谢我的爱人几年来的默默奉献，我的家人多年来的无怨无悔，这些都激励我每天进步，使得我能顺利完成学业。

愿你们身体健康，天天开心！

个人简况及联系方式

姓名：陈冠军

性别：男

籍贯：山西省泽州县

学习经历：2012年9月至2016年6月于山西大学理论物理研究所凝聚态物理专业读博

E-Mail: tynuphys@126.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：

2016 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：

2016 年 月 日