



2019 届博士学位论文

自旋轨道耦合量子简并费米气体的热力学性质研究

作者姓名	梁成功
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	2009 年 9 月至 2019 年 6 月

二〇一九年六月

山西大学

2019 届博士学位论文

自旋轨道耦合量子简并费米气体的热力学性质研究

作者姓名	梁成功
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	2009 年 9 月至 2019 年 6 月

二〇一九年六月

Thesis for Doctor's Degree, Shanxi University, 2019

Thermodynamic Properties of Quantum Degenerate
Fermi Gas with Spin-Orbit Coupling

Student Name	Chenggong Liang
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Specialty	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2009.09-2019.06

June, 2019

目录

中文摘要.....	VII
ABSTRACT	IIX
第一章 绪论.....	1
1.1 超冷原子气体介绍	1
1.1.1 量子简并费米气体	2
1.1.2 Feshbach 共振	4
1.2 光晶格中的超冷费米原子	9
1.2.1 光晶格势能	9
1.2.2 Hubbard 模型	12
1.3 人工自旋轨道耦合	13
1.4 本文内容	18
第二章 研究理论和背景.....	21
2.1 BCS 理论	21
2.1.1 平均场近似	22
2.1.2 波戈留波夫变换	23
2.2 BCS-BEC 渡越理论	27
2.3 热力学-统计基础	29
2.3.1 热力学势和 Maxwell 关系	30
2.3.2 相关热力学量	33
2.4 小结	38
第三章 SOC 费米气体的超流拓扑相变.....	39
3.1 SOC 费米气体的平均场理论	39
3.2 数值结果分析	42
3.2.1 无量纲化	42
3.2.2 SOC 费米气体的超流拓扑相变	43
3.2.3 SOC 费米气体的相分离	48
3.3 小结	49

第四章 SOC 简并费米气体的热力学特性	51
4.1 理论模型	51
4.2 解析分析	54
4.2.1 等温压缩系数	54
4.2.2 压强和压强指数	58
4.3 数值结果分析	60
4.4 小结	64
第五章 光晶格中 SOC 简并费米气体的热力学特性	65
5.1 理论模型和方法	65
5.1.1 理论模型	65
5.1.2 平均场理论	67
5.2 粒子空穴对称性	70
5.3 解析分析	71
5.3.1 超流序参和化学势	72
5.3.2 等温压缩系数	74
5.3.3 压强和压强指数	77
5.4 数值结果分析	77
5.4.1 相互作用和占据数的影响	78
5.4.2 反常等温压缩系数	81
5.4.3 反常压强指数	86
5.5 小结	87
总结与展望	89
参 考 文 献	91
攻读学位期间取得的研究成果	101
致 谢	103
个人简况及联系方式	105
承 诺 书	107
学位论文使用授权声明	109

Contents

Abstract in chinese	VIII
ABSTRACT	IX
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Introduction of ultra-cold Fermi atomic gas.....	1
1.1.1 Quantum degenerate Fermi gas	2
1.1.2 Feshbach resonance	4
1.2 Ultra-cold Fermi atoms in optical lattices	9
1.2.1 Optical lattice potential.....	9
1.2.2 Hubbard model	12
1.3 Artificial spin-orbit coupling.....	13
1.4 An outline of this thesis.....	18
Chapter 2 The research background and theoretical basis	21
2.1 Standard BCS Theory	21
2.1.1 Mean field approximation	22
2.1.2 Bogoliubov transformation.....	23
2.2 BCS-BEC crossover Theory.....	27
2.3 Thermodynamics-statistical basis.....	29
2.3.1 Thermodynamic potential and Maxwell relation	30
2.3.2 Relevant thermodynamic quantities	33
2.4 Summary	38
Chapter 3 Superfluid topological phase transition of Fermi Gases with Spin-Orbit coupling.....	39
3.1 Mean field theory of Fermi gases with Spin-Orbit coupling.....	39
3.2 Analysis of numerical results	42
3.2.1 Procedure of dimensionless.....	42
3.2.2 Superfluid topological phases transition of Fermi gases with Spin-Orbit coupling.....	43
3.2.3 Phases separation of fermi gases with Spin-Orbit coupling	48

3.3	Summary	49
Chapter 4 Thermodynamic properties of Fermi gases with Spin-orbit coupling..51		
4.1	Theoretical models	51
4.2	Analytical analysis	54
4.2.1	Isothermal compressibility	54
4.2.2	Exponent of pressure	58
4.3	Analysis of numerical results	60
4.4	Summary	64
Chapter 5 Thermodynamic properties of Fermi gases with Spin-Orbit coupling in an optical lattice65		
5.1	Theoretical models and methods	65
5.1.1	Theoretical models	65
5.1.2	Mean field in an optical lattice	67
5.2	Partical-Hole symmetry.....	70
5.3	Analytical analysis	71
5.3.1	Superfluid order parameter and chemical potential.....	72
5.3.2	Isothermal compressibility	74
5.3.3	The exponent of pressure.....	77
5.4	Analysis of numerical results	77
5.4.1	Roles of filling factor and interaction strength.....	78
5.4.2	Anomalous isothemal compressibility	81
5.4.3	Anomalous exponent of pressure	86
5.5	Summary	87
Conclusion and New Perspective		89
Bibliography.....		91
Research Achievements.....		101
Acknowledgment		103
Personal Profiles		105
Letter of Commitment		107

Authorization Statement..... 109

中文摘要

等温压缩系数 κ_T ，是热力学物理中的一个重要物理量，可用来测定液体的流动性、固体的刚度。而在冷原子中，这个物理量广泛应用于判断系统从正常相到玻色爱因斯坦凝聚 (BEC) 相、从超流相到固体相如超固体和 Mott 绝缘相的相变。费米简并气体中的自旋轨道耦合 (SOC) 能从根本上改变 S -波超流的命运，从而产生拓扑超流和 Majorana 零模。本文我们主要研究了自由空间和光晶格中的费米简并气体，在 SOC 和 Zeeman 场并存的情况下的热力学性质，内容包括等温压缩系数、压强、压强指数等。

首先，我们介绍了，应用平均场理论研究的自由空间三维简并气体，在 SOC 和 Zeeman 场共同作用下的量子相变。当 Zeeman 场很大时破坏超流配对，与之相反 SOC 增强超流配对的形成。随着 Zeeman 场的增加，一系列的拓扑量子相变，从有能隙非拓扑保护的超流相到有四个费米点拓扑保护的超流相，再到有两个费米点拓扑保护的超流相。由于 SOC 和 Zeeman 场之间的竞争，相图从一个均匀超流相到涉及拓扑非平庸超流态的相分离。

其次，在基态量子相变的基础上我们研究该系统的热力学性质，如等温压缩系数、压强、压强指数等。从 Gibbs-Duhem 方程出发，发现等温压缩系数来自直接依赖于化学势的显式部分和依赖于序参的隐式部分。在 BCS 极限，等温压缩系数由显式部分决定，其正比于费米面上的态密度；相反在 BEC 极限，等温压缩系数由隐式部分决定，其反比于系统散射长度。在这两种极限之间，我们发现，在无能隙 Weyl 超流相区域，等温压缩系数会出现突然增大的反常行为，可以理解为相分离的剩余效应。等温压缩系数的反常行为直接导致反常的压强指数。

最后，鉴于自由空间和光晶格的不同，我们研究立方光晶格中费米简并气体的热力学性质。在光晶格中，平均占据数和粒子空穴关于半满填充的对称性成为重要的影响因数。随着平均占据数 n 的增加，等温压缩系数减小到一个很小的值，但 $n^2\kappa_T$ 却随 n 从零增加到 1 而单调增加。在强相互作用区域，这个值将趋于 $n^2\kappa_T=2/U$ ，这里 U 为相互作用。自旋轨道耦合和 Zeeman 场对等温压缩系数的作用是相反的，由于两者的互相竞争，在一些参数区域，等温压缩系数会出现突然增加的奇异行为，同样也会导致奇异的压强指数。在光晶格中这种奇异的等温压缩系数在能隙完全打

开的相和 Weyl 超流相都有发现。

关键词：自旋轨道耦合；等温压缩系数；压强指数；Zeeman 场

ABSTRACT

Isothermal compressibility κ_T , which measures the fluidity of the liquid or the stiffness of the solids, is one of the most important physical quantities in thermodynamic physics. In ultracold atoms, this quantity has been widely explored in the measurement of the transition from normal gas to Bose-Einstein condensate(BEC), as well as the transition from superfluids to solid phases, such as supersolids and Mott insulators. The spin-orbit coupling (SOC) in degenerate Fermi gases can fundamentally change the fate of s-wave superfluid, giving rise to topological superfluids and associated Majorana zero modes. In this thesis, we mainly study the thermodynamic properties of Fermi degenerate gas in the presence of spin-orbit coupling and Zeeman field between in the free space and the optical lattice, including isothermal compression coefficient, pressure, pressure index, etc.

Firstly, we introduce mean field theory for the quantum phase transition of the three-dimensional Fermi degenerate gases under the combined action of spin-orbit coupling and Zeeman field in the free space. It is known that the superfluid order parameter destroyed by a large Zeeman field can be restored by the SOC. With increasing strengths of the Zeeman field, there is a series of topological quantum phase transitions from a nontopological superfluid state with fully gapped fermionic spectrum to a topological superfluid state with four topologically protected Fermi points and then to a second topological superfluid state with only two Fermi points. In addition, We introduce that the SOC and the Zeeman field are counteracting, and that this competition tends to stabilize the uniform superfluid phase against the phase separation.

Secondly, we study the thermodynamic properties of the system, such as isothermal compression coefficient, pressure and the exponent of pressure. Starting from the Gibbs-Duhem equation, we show that κ_T comes from both the explicit contribution of chemical potential and implicit contribution of order parameter. In the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) limit, κ_T is determined by explicit compressibility,

which is proportional to the density of states at the Fermi surface; while in the BEC regime it is determined by the implicit compressibility, which is inversely proportional to the scattering length. Between these two limits, we find a pronounced enhanced compressibility in the gapless Weyl phase regime, which can be regarded as a remanent shadow effect of phase separation. This enhanced compressibility also lead to anomalous exponent of pressure, which mainly characterizes the role of many-body interaction.

Finally, motivated by the differences between the free space and the optical lattice, in the last part of the thesis, we examine thermodynamic properties in the spin-orbit-coupled degenerate Fermi gases in a square lattice model, in which the filling factor and particle-hole symmetry about half filling become an important influencing factor. With increasing particle density n , the compressibility decreases to a small magnitude, while $n^2\kappa_T$ may increase monotonically with increasing n from zero to half filling. In the strong-coupling regime, when the chemical potential and pairing strength are much larger than the tunneling strength and Zeeman field, this compressibility will approach $n^2\kappa_T=2/U$, where U is the on-site interacting strength. We show that SOC and the Zeeman field can play opposite roles in the behavior of compressibilities. The combination of these two terms can give rise to pronouncedly enhanced isothermal compressibility in some proper parameter regime. The anomalous compressibilities also give rise to an anomaly in the exponent of pressure. In the lattice model, the enhanced peak can be found in both the fully gapped phase and gapless Weyl phases.

Key words: Spin-orbit coupling; Isothermal compressibility; Exponent of pressure; Zeeman field

第一章 绪论

超冷原子物理是过去几十年里蓬勃发展的一个新型科学领域，是观测和研究量子现象的理想载体，备受物理学家的青睐。激光冷却与囚禁技术的突破和成功应用，使得超冷原子气体成为国内外物理学界的关注热点和研究前沿。目前全世界有上百家实验室在开展超冷原子方面的研究，该领域不仅有重要的理论价值而且具有十分重要的研究潜力和应用价值。这是因为超冷原子的研究成为原子分子物理、量子光学、凝聚态物理、核物理甚至天体物理等基础学科的交叉点，也极大推动了原子分子光学、单量子态调控、强关联的量子模拟等重要课题的研究，甚至精密光谱与测量、原子分子激光、原子干涉仪、原子芯片、原子光子钟、量子计算机等高新技术的发展[129]。

1.1 超冷原子气体介绍

二十世纪末，在激光冷却技术的推动下，人们在实验室成功制备了超冷原子气体，超冷原子气是一类接近零度的中性稀薄气体，它虽处于气态却能够展现出固体或超流体的诸多重要物理性质。典型的超冷原子气体温度在 $10^{-5} K$ 甚至更低，原子云密度在 $10^{13} - 10^{15} cm^{-3}$ 的量级。与之相比，而室温和大气压下空气中的分子密度约为 $10^{19} cm^{-3}$ [1]。在如此低的温度下，超冷原子气体在观察量子现象方面有很多优势如在有弱相互作用的玻色凝聚体中，所有原子占据同一最低量子态，这种凝聚现象可用类似原子 Hartree-Fock 近似的平均场来描述，因此是观测和研究量子效应的理想载体。通过光与原子相互作用来冷却和束缚原子最早由 Askar'yan[119]、Askin[120]、Hänsh 和 Schawlow[121]以及 Wineland 和 Dehmel[122]提出，直到 1978 年，Wineland 和 Drullinger 等用镁离子[123]，同时 Neuhauser 和 Hohensattd 等用钡离子[124]，首次实现激光制冷。随后激光冷却、囚禁与操控中性原子的理论和实验研究取得了一系列重大进展。其中特别有意义的是在温度如此低的原子气体中实现了量子简并[5]，1995 年，气态碱金属原子的玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)的实验实现[2-3]，激发了人们对超冷原子的研究热情[125]。1998 年，Kettle 小组在 ^{23}Na 超冷

原子气体中，实现了用 Feshbach 共振技术调控原子间相互作用[4]，至此超冷原子气体便活跃于各个物理学科。

1.1.1 量子简并费米气体

按照自旋量子数和交换对称性，原子可分为两类，自旋量子数为半整数的为费米子，自旋量子数为整数的为玻色子。另外，他们的多体波函数满足交换对称(玻色子)或交换反对称(费米子)性。在绝对零温，玻色子满足玻色爱因斯坦统计，单个量子态上粒子占据数不受限制，即所有玻色原子凝聚到能量最低态上。对于费米子，受限于两个全同费米子不能占据同一个量子态的泡利不相容原理，单个量子态上费米子占据数只能是 0 或 1，即两个全同费米子不能占据同一个量子态，因此在绝对零度以下，没有相互作用的费米子会一次占据能量最低的 N 个量子态，从而形成费米海，我们称这种费米子的零温行为为费米量子简并[5]。如图 1.1 对比了玻色和费米子在零温的占据行为。费米子能够填充的最高能态被定为费米面，这一最高能态所对应的能量为费米能 E_F 。对于均匀理想费米气体，费米能表示为 $E_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ ，其中 k_F 为费米动量。很明显此时的费米能为系统的化学势 $\mu = E_F$ 。因为此时系统每增

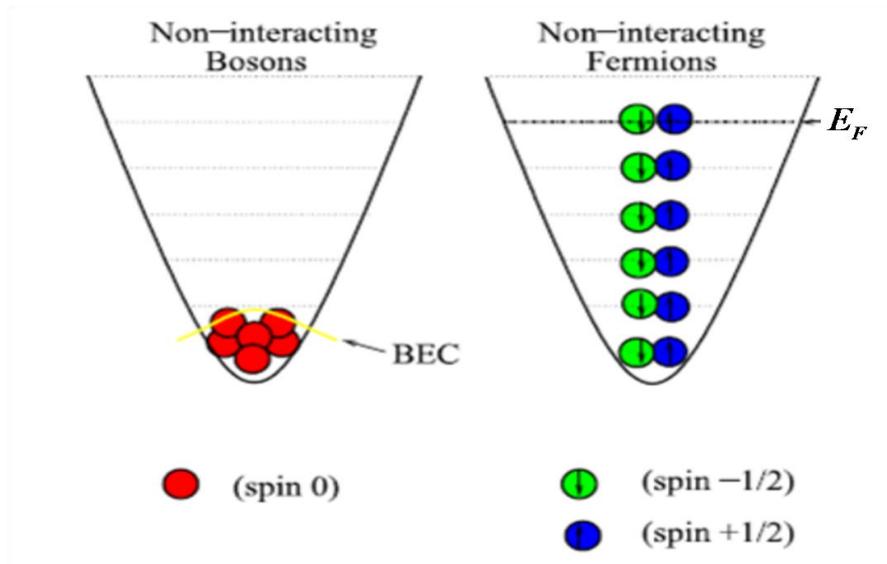


图 1.1 零温下，自由玻色和费米子的分布情形

加一个粒子的总能量增量也即为 E_F 。在量子统计物理中，费米能有时也用费米温度 $T_F = E_F / k_B$ 来衡量，因为二者仅差一个玻尔兹曼常数 k_B 。对于单分量理想均匀费米

气体而言，系统的平均粒子数密度为 $n = \frac{N}{V} = \frac{4\pi k_F^3}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3}{6\pi^2}$ ，其中 N 为粒子数，

V 为系统体积，很容易得出费米温度为 $T_F = \frac{(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2 n^{2/3}}{2mk_B}$ 。对于两分量（自旋 1/2）

理想均匀费米气体而言，平均粒子数密度增大一倍，即为 $n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$ 。由物态方程

$PV = 2N\mu/5$ ，可以得出零温费米气体的压强为[1]

$$P = \frac{2}{5} (6\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3}, \quad (1.1.1)$$

上式表明理想费米原子气体在零温也有压强，这点有别于玻色凝聚体 ($\mu=0$)，对于玻色凝聚体而言，其零温压强为 0。

接下来，我们考虑束缚在光阱中的费米气体[125]，其中光学势阱所提供的的外势可近似表示为谐振子势 $V = \frac{1}{2} m \sum_{\eta=x,y,z} \omega_\eta^2 \eta^2$ 。根据量子力学，此时单粒子本征能谱

为 $\varepsilon_{n_\eta} = \sum_{\eta} \left(n_\eta + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_\eta$ ，根据费米-狄拉克统计分布，在温度为 T 时，处在能量为 ε_{n_η}

态上的平均粒子数为

$$N_{n_\eta} = \frac{1}{\exp\left[\left(\varepsilon_{n_\eta} - \mu\right)/k_B T\right] + 1}, \quad (1.1.2)$$

μ 为化学势，对所有能态求和我们有

$$N = \sum_{n_\eta} N_{n_\eta} = \sum_{n_\eta} \frac{1}{\exp\left[\left(\varepsilon_{n_\eta} - \mu\right)/k_B T\right] + 1}, \quad (1.1.3)$$

其中 N 为总粒子数。为方便计算，通常人们把 ε_{n_η} 看做量子数 n 的连续函数 $\varepsilon(n)$ ，并

引入态密度 $\rho(\varepsilon)$ 的概念。态密度 $\rho(\varepsilon)$ 为表征能量 ε 至 $\varepsilon+d\varepsilon$ 能量区间内的量子态

数目。对于三维谐振子体系容易得到 $\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{2(\hbar\bar{\omega})^3}$ ，其中 $\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$ 。因而，

费米-狄拉克统计分布为 $f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon - \mu)/k_B T] + 1}$ 。在此基础之上，我们有总粒子

和总能的关系 $N = \int f(\varepsilon)\rho(\varepsilon)d\varepsilon$ 以及 $E = \int f(\varepsilon)\rho(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon$ 。在温度远低于费米温度时，化学势为

$$\mu \approx E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (1.1.4)$$

这里费米能为 $E_F = (6N)^{1/3} \hbar\bar{\omega}$ 。

当温度低于费米温度时，系统开始显现费米简并特性，此时量子统计会根本性地影响系统的物理性质[125]。但是，实际的超冷原子不可能是理想气体，其中原子间相互作用对费米超流的形成至关重要[125]。吸引相互作用的两分量费米气体，不同自旋的原子间相互吸引形成 BCS 超流态，从而让费米海不稳定。在零温，形成类似于玻色爱因斯坦凝聚的费米分子凝聚[6]，具有显著的宏观量子特性。目前实现的超冷费米气体十分稀薄，其平均粒子数密度很小约为 $n \approx 10^{12} \text{cm}^{-3}$ ，而粒子间距反比于粒子数密度约为 $n^{-1/3} \approx 1 \mu\text{m}$ 。在这种稀薄气体中，两粒子的碰撞散射主导整个哈密顿量，而多粒子的碰撞过程可以被忽略掉[7]。

1.1.2 Feshbach 共振

超冷原子气体体系中高度的可调控性是其相对其他量子模拟平台的优势，它为调节粒子间的相互作用提供了强有力的技术支撑。本小节我们就利用 Feshbach 共振来调节相互作用展开讨论。

Feshbach 共振由 Hermann Feshbach 于 1958 年在核物理领域提出[89]，Ugo Fano 也在其他物理领域对这种共振现象进行了探索[9-10]。因此有时也称为 Fano-Feshbach 共振，是用于调控稀薄玻色、费米气体中原子间相互作用的一项重要实验技术。对于玻色子，我们需要调节共振获得满意的 a_s 值来得到大的凝聚物 (^7Li [11-12]) 或者 BEC (^{87}Rb [13], ^{133}Cs [14], ^{39}K [15])。对于费米系统，Feshbach 共振

在探究强相互作用区域多体物理中起到不可或缺的作用，所谓强相互作用区域为调节散射长度 a_s 超过原子相互作用间距。2002 年，Loftus 等人首次在两分量费米气体中观测到 Feshbach 共振[94]。O'Hara 等人第一次实现强相互作用费米气体[95]。在 2003 年分子 BEC 在超冷原子费米气体 ^6Li 和 ^{40}K 中实现[90-93]，这一系列的成功和突破都与 Feshbach 共振密切相关。

Feshbach 共振可用双通道共振散射现象来解释。在超冷原子体系中我们可以将其简化成如图 1.2 所示的双原子模型，考虑具有两个相互作用势的体系，即为图 1.2 中的闭通道(closed channel)和开通道(open channel)，对应处于不同总电子态的两个原子的散射通道。通常，开通道的势能较低，而闭通道能量较高[16]，如图 1.2 中所示。当只考虑开通道时，两粒子靠近会受到束缚势阱散射，这一问题回到量子力学的势阱散射问题。但是，当考虑两通道作用时，在开通道相互靠近的两粒子有一定的几率会被闭通道势阱所束缚形成束缚分子。而 Feshbach 共振的核心思想是，当开通道的能量与闭通道的某个束缚能非常接近时，开通道中的散射过程会受到闭通道的强烈影响，特别当两通道能量完全相等达到共振时，开通道中原子散射长度趋于无穷。

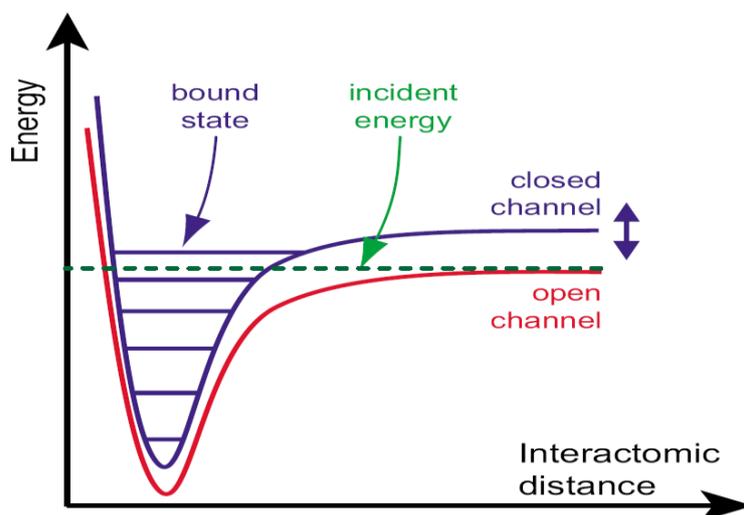


图 1.2 Feshbach 共振示意图，红色线为开通道，蓝色为闭通道，绿色为入射能量位置，横轴为两原子距离，纵轴为系统能量，本图引用[16]

下面具体推导 Feshbach 共振原理[1]，我们把系统的空间和自旋自由度分成两

个正交子空间，包含开通道的 P 和包含闭通道的 Q 。 \hat{P} 和 \hat{Q} 为投影到两个子空间的投影算符，满足， $\hat{P} + \hat{Q} = 1$ ， $\hat{P}^2 = \hat{P}$ ， $\hat{Q}^2 = \hat{Q}$ ， $\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0$ 。我们把状态矢量 $|\psi\rangle$ 写成其在两个投影子空间的和， $|\psi\rangle = |\psi_P\rangle + |\psi_Q\rangle$ ，其中， $|\psi_P\rangle = \hat{P}|\psi\rangle$ ， $|\psi_Q\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle$ 。系统满足薛定谔方程：

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.1.5)$$

方程(1.1.5)左乘 P ，

$$\hat{P}H|\psi\rangle = \hat{P}H(\hat{P}\hat{P} + \hat{Q}\hat{Q})|\psi\rangle = H_{PP}|\psi_P\rangle + H_{PQ}|\psi_Q\rangle = \hat{P}E|\psi\rangle = E|\psi_P\rangle, \quad (1.1.6)$$

得

$$(E - H_{PP})|\psi_P\rangle = H_{PQ}|\psi_Q\rangle, \quad (1.1.7)$$

同理有

$$(E - H_{QQ})|\psi_Q\rangle = H_{QP}|\psi_P\rangle. \quad (1.1.8)$$

其中， $H_{PP} = \hat{P}H\hat{P}$ ， $H_{QQ} = \hat{Q}H\hat{Q}$ ， $H_{PQ} = \hat{P}H\hat{Q}$ ， $H_{QP} = \hat{Q}H\hat{P}$ 。算符 H_{PP} 表示哈密顿量在 P 空间的投影，算符 H_{QQ} 表示哈密顿量在 Q 空间的投影， H_{PQ} 和 H_{QP} 是两子空间耦合的算符。由等式(1.1.8)得

$$|\psi_Q\rangle = (E - H_{QQ} + i\delta)^{-1} H_{QP}|\psi_P\rangle, \quad (1.1.9)$$

其中 δ 为分母加入的无穷小微扰，以保证散射波为向外传播。将方程(1.1.9) 带入(1.1.7)， $|\psi_P\rangle$ 方程变为

$$[E - H_{PP} - H'_{PP}]|\psi_P\rangle = 0, \quad (1.1.10)$$

其中

$$H'_{PP} = H_{PQ}(E - H_{QQ} + i\delta)^{-1} H_{QP}, \quad (1.1.11)$$

上式为描述 Feshbach 共振的项，类似于二阶微扰理论的能量改变，表示一个从 P 子空间到 Q 子空间再返回到 P 子空间的有效相互作用过程，对应开通道的非局域势。

由于能量依赖相互作用，所以在时间上可以延缓。我们将 H_{PP} 分成对角的不依赖相互作用的 H_0 和相互作用贡献的 U_1 ，其中 H_0 是相对运动的动能和超精细 Zeeman 项

的和。 $H_{PP}=H_0+U_1$ ，同时设 $U_2=H'_{PP}$ ，于是方程(1.1. 10)可写成

$$(E-H_0-U)|\psi_P\rangle=0, \quad (1.1. 12)$$

其中 $U=U_1+U_2$ 。把 Lippmann-Schwinger 方程[96]写成算符方程, $T=U+UG_0T$ ，

其中, $U_2=H'_{PP}$, $G_0=(E-H_{QQ}+i\delta)^{-1}$ 。利用矩阵公式 $A^{-1}[1+B(A-B)^{-1}]= (A-B)^{-1}$ ，

我们得到

$$T=T_1+(1-U_1G_0)^{-1}U_2(1-UG_0)^{-1}, \quad (1.1. 13)$$

其中, T_1 满足 $T_1=U_1+U_1G_0T_1$ ，为 T 矩阵在 P 子空间，如果转变到 Q 空间则为负的。

现在我们通过考虑在有两个相对动量 k 和 k' 的平面波态下的矩阵元来解释结果：

$$\langle k'|T|k\rangle=\langle k'|T_1|k\rangle+\langle k'|(1-U_1G_0)^{-1}U_2(1-UG_0)^{-1}|k\rangle。 \quad (1.1. 14)$$

只保留到 U_2 的一阶可得，

$$\langle k'|T|k\rangle\approx\langle k'|T_1|k\rangle+\langle k'|(1-U_1G_0)^{-1}U_2(1-U_1G_0)^{-1}|k\rangle, \quad (1.1. 15)$$

定义, $\langle k'|(1-U_1G_0)^{-1}=\left[(1-G_0U_1)^{-1}|k'\rangle\right]^\dagger\equiv\left[|k';U_1,-\rangle\right]^\dagger$ 表示 H_0+U_1 的本征态, 则 T 矩阵的矩阵元为

$$\langle k'|T|k\rangle=\langle k'|T_1|k\rangle+\langle k';U_1,-|U_2|k;U_1,+\rangle, \quad (1.1. 16)$$

其中 $+$ ($-$) 表示向外 (里) 传播。取 $k=k'=0$ ，则向外和向里传播的函数相同为 ψ_0 ，在

上式中插入闭通道空间的完备条件 $\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|=I$ ，我们得到，

$$\langle 0|T|0\rangle=\langle 0|T_1|0\rangle+\sum_n\frac{|\langle\psi_n|H_{QP}|\psi_0\rangle|^2}{\langle\psi_n|E-H_{QQ}|\psi_n\rangle}, \quad (1.1. 17)$$

由 T 矩阵和散射长度的关系 $\langle 0|T|0\rangle=\frac{4\pi\hbar^2}{m}a$ ，可得，

$$\frac{4\pi\hbar^2}{m}a=\frac{4\pi\hbar^2}{m}a_p+\sum_n\frac{|\langle\psi_n|H_{QP}|\psi_0\rangle|^2}{E_{th}-E_n}, \quad (1.1. 18)$$

其中, a_p 表示不考虑闭通道耦合时, 开通道的散射长度。

当入射能量 E_{th} 和束缚态的某个能级 E_{res} 接近时，这个对应项将起主导作用，其他项相对于能量的变化可以忽略，并且和开通道本身的散射作用合并起来，用 a_{nr} 表示，为非共振的背景散射。散射长度为[1,125]，

$$\frac{4\pi\hbar^2}{m} a = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_{nr} + \sum_n \frac{|\langle \psi_{res} | H_{QP} | \psi_0 \rangle|^2}{E_{th} - E_{res}}. \quad (1.1.19)$$

从上式可以看出，当入射能量 E_{th} 从左右趋于束缚能量 E_{res} ，散射长度趋于正负无穷。

在实验上，可以通过调节外部参量，如电场或者磁场，来调节 E_{th} 和 E_{res} 的差。

为明确起见，我们以调节磁场为例。设共振附近的磁场为 B_0 ，则

$$E_{th} - E_{res} \approx (\mu_{res} - \mu_\alpha - \mu_\beta)(B - B_0), \quad (1.1.20)$$

其中 $\mu_\alpha = -\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial B}$ ， $\mu_\beta = -\frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial B}$ ， $\mu_{res} = -\frac{\partial E_{res}}{\partial B}$ ，这里 μ_α ， μ_β 为入射原子磁矩， μ_{res} 为两

原子构成束缚态磁矩，因此散射长度可表示为

$$a = a_{nr} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.1.21)$$

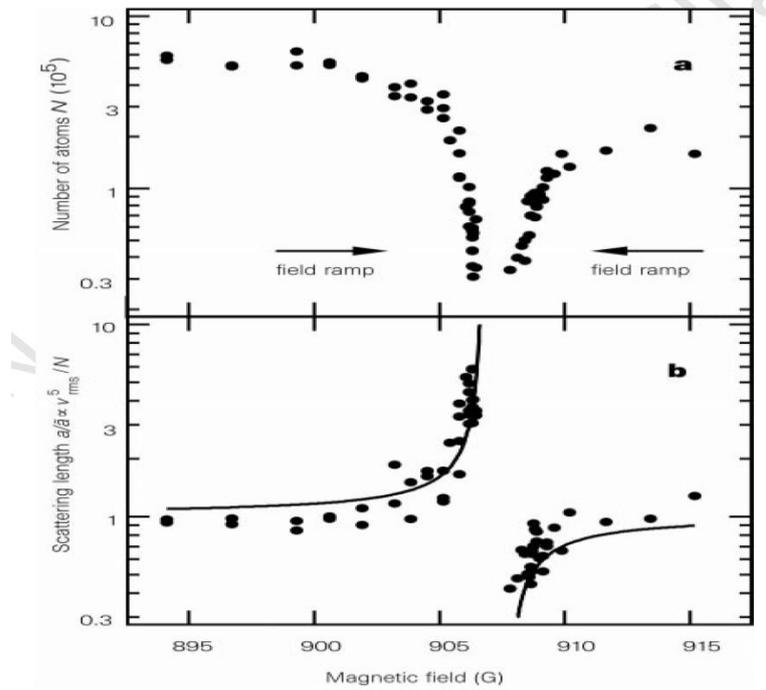


图 1.3 通过 Feshbach 共振调节 ^{23}Na 原子 BEC。上图显示的是原子散射长度随磁场的变化，下图显示的是在 Feshbach 共振，因三体相互作用，导致囚禁的原子数减少。本图引用自[4]。

其中, $\Delta B = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_{nr}} \frac{|\langle \psi_{res} | H_{QP} | \psi_0 \rangle|^2}{(\mu_\alpha + \mu_\beta - \mu_{res})}$, 公式(1.1. 21)说明我们可以通过调节磁场 B , 散射长度可变为正、负和零, 相应原子间相互作用也可变为排斥或吸引。如图 1.3 所示为实验中观测原子 ^{23}Na 散射长度随磁场的变化[4]。

1.2 光晶格中的超冷费米原子

光晶格是由一组相干驻波产生的周期势, 原子在其中感受到交流 Stark 效应(光频移)[97]。M. G. Prentiss 于 1993 年, 首次提出了原子光晶格的概念[17], 相关实验研究随之继起[18-19]。置于激光场中的原子, 激光的电场部分和原子的电偶极矩发生相互作用, 原子感受到一个周期势[117]。这一节我们研究束缚在由激光驻波形成的周期光晶格势中的冷原子。

1.2.1 光晶格势能

产生超冷光晶格气体的基本工具是光学势, 在激光振荡电场 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 中的电子, 获得偶极矩 \mathbf{d} 。当电场振荡远离共振(例如它们不会在原子中引起任何实际转变), 诱导偶极矩 $d_i = \sum_{j=x,y,z} \alpha_{ij}(\omega_L) E_j(r)$, 其中 d_i 为原子偶极矩 \mathbf{d} 沿 $i(x, y, z)$ 方向的值, $\alpha_{ij}(\omega_L)$ 为极化张量矩阵元, 一般依赖于激光频率和原子非共振激发态的能量。电子偶极相互作用 $V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$ 。因为原子能级在空间上不相等, 我们可以调节激光频率, 这样的改变会引进两个选择能级, 我们称为基态 $|g\rangle$ 和激发态 $|e\rangle$, 假定这两个能级形成完备基: $|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e| = I$, 这里 \hat{I} 单位矩阵。这样

$$\mathbf{d} = I\mathbf{d}I = \langle e|\mathbf{d}|g\rangle\sigma^+ + \langle e|\mathbf{d}|g\rangle\sigma^-, \quad (1.2. 1)$$

其中 $\sigma^+ \equiv |e\rangle\langle g|$, $\sigma^- \equiv |g\rangle\langle e|$ 分别为原子升降算符, 这里应用 $\langle g|\mathbf{d}|g\rangle = \langle e|\mathbf{d}|e\rangle = 0$, 因为空间反演变号。激光场用一个频率为 ω_L 的单模来描述

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_L}{2\epsilon_0}} [\hat{a}\mathbf{u}(\mathbf{r}) - \hat{a}^\dagger\mathbf{u}^*(\mathbf{r})], \quad (1.2. 2)$$

其中， $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 是由激光场边界条件决定的空间模函数， ε_0 是自由空间的介电常数。用旋波近似，舍去高频率项

$$\mathbf{V} = g\hat{a}\hat{\sigma}^+ + g^*\hat{a}^\dagger\hat{\sigma}, \quad (1.2.3)$$

其中， $g = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_L}{2\varepsilon_0}}\langle e|\hat{\mathbf{d}}|g\rangle\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 是偶极耦合常数。

我们考虑激光场与原子频率 ω_0 失谐 $\Delta = \omega_L - \omega_0$ 远大于吸收峰宽度的情况，由二阶微扰理论得

$$\mathbf{V}_{dipole}(\mathbf{r}) = \frac{|\langle e|\langle\alpha|\hat{\mathbf{V}}|\alpha\rangle|g\rangle|^2}{\hbar\Delta}, \quad (1.2.4)$$

其中，激光场假定为相干态 $e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha\hat{a}}|0\rangle$ ，联立方程(1.2.3)和(1.2.4)可得：

$$\mathbf{V}_{dipole}(\mathbf{r}) = \frac{\omega_L}{2\varepsilon_0} \frac{|\langle e|\hat{\mathbf{d}}|g\rangle|^2}{\hbar\Delta} \hat{I}(\mathbf{r}), \quad (1.2.5)$$

其中 $I(\mathbf{r}) \equiv |u(\mathbf{r})\alpha|^2$ 为激光强度，激发态衰变率(爱因斯坦 A 系数)给定为

$$\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} |\langle e|\hat{\mathbf{d}}|g\rangle|^2, \text{ 带入 } \Gamma,$$

$$\mathbf{V}_{dipole}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^3 \hbar \Gamma}{2\omega_0^3} I(\mathbf{r}) \quad (1.2.6)$$

其中，我们忽略了 $|\Delta/\omega_0| \ll 1$ 阶的项。这个结果暗示了当激光场为红失谐($\Delta < 0$)时光耦合势为吸引，当激光场为蓝失谐($\Delta > 0$)时光耦合势为排斥[128]。原子在激光场中的偶极相互作用为， $\mathbf{F}_{dipole} = -\nabla\mathbf{V}_{dipole}(\mathbf{r})$ ，在一束不同光强的地方，原子感受到的势能不同，由不同的红蓝失谐分别在光最强和最弱的位置对原子进行束缚[128]。如果激光强度是高斯型为

$$I(r, z) = \frac{2P}{\pi\omega^2(z)} e^{-\frac{2r^2}{\omega^2(z)}}, \quad (1.2.7)$$

其中， P 为总的激光能， r 为离 z 轴的径向距离， $\omega(z) = \omega_0\sqrt{1+(z/z_R)^2}$ ，光束 $1/e^2$ 的半径为 ω_0 ，瑞利长度为 $z_R = \pi\omega_0^2/\lambda$ 。在 $r = z = 0$ 处展开

$$I(r, z) = \frac{2P}{\pi\omega^2} \left(1 - \left(\frac{z}{z_R} \right)^2 - 2 \left(\frac{r}{\omega_0} \right)^2 \right), \quad (1.2.8)$$

所以光耦合势是以阱中心的谐振子势。

光晶格周期势是由激光驻波形成，当两束激光波长为 λ 相向传播发生相干产生波长为 $\lambda/2$ 的驻波。如果激光为高斯型的，相干导致的周期势为：

$$V(r, z) \simeq -V_0 e^{-\frac{2r^2}{\omega^2(z)}} \sin^2(kz), \quad (1.2.9)$$

其中， V_0 为势阱深度，波矢 $k = 2\pi/\lambda$ 。可通过改变两激光的相对倾斜来改变光晶格周期。对于高维光晶格可以通过朝不同方向传播的驻波叠加形成，如二维和三维(如图 1.4 的(a), (b))的光晶格。在阱深的情形，用频率为 ω_{trap} 一般为几十千赫兹。

$\hbar\omega_{\text{trap}} = 2E_r \sqrt{V_0/E_r}$ ，其中反冲能 $E_r = \hbar^2 k^2 / (2m)$ 。由高斯型 $1/e^2$ 半径为 ω_i ($i = x, y, z$) 激光束形成一红失谐光晶格，其光晶格势为：

$$V(\mathbf{r}) = - \sum_{i=x,y,z} V_i e^{-\frac{2r^2 - i^2}{\omega_i^2}} \sin^2(ki). \quad (1.2.10)$$

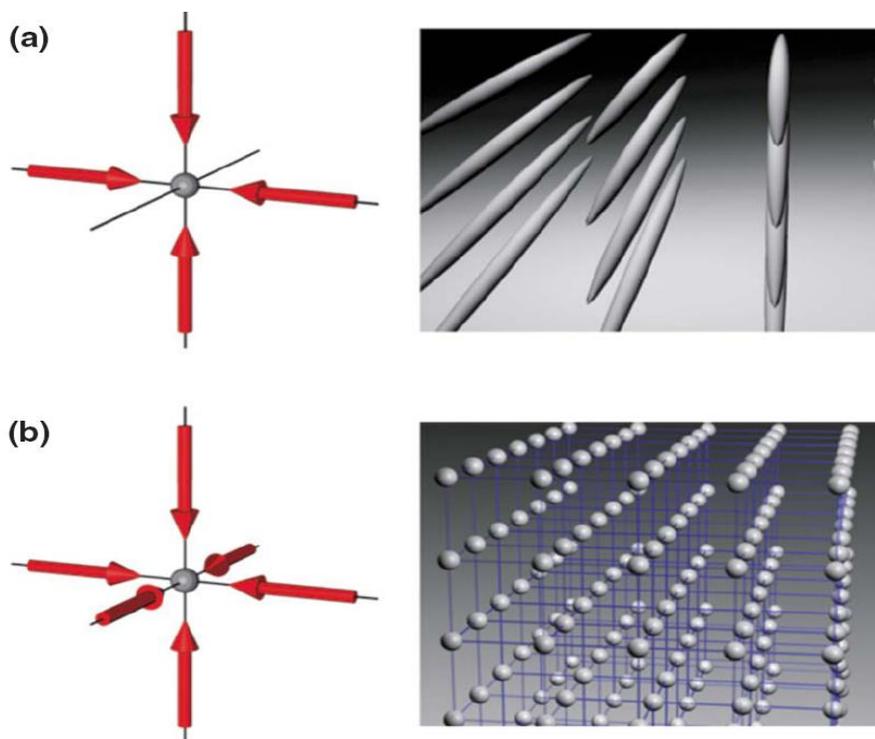


图 1.4 光学晶示意图，(a) 二维光晶格，(b) 三维简立方光晶格，本图引用自[16]。

其中 $k=2\pi/\lambda$ 为激光波矢，晶格常数 $d=\pi/k$ 。在阱中心，我们可以将其近似为快速振荡的正弦势和缓慢变化的三维谐振子势之和，

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=x,y,z} \left[-V_i \sin^2(ki) + \frac{M\omega_i^2}{2} i^2 \right]. \quad (1.2.11)$$

其中， $\omega_i = \sqrt{\frac{4}{M} \left(\sum_{j=x,y,z} \frac{V_j}{\omega_j^2} - \frac{V_i}{\omega_i^2} \right)}$ ， $\sin^2(ki)$ 是平均值。

1.2.2 Hubbard 模型

Hubbard 模型以 J. Hubbard 命名，他在一系列颇具影响的文章[20-22]中引入为模拟窄带电子关联的哈密顿量和提出许多关于处理多体问题的近似方法。如图 1.5 所示将两组分超冷费米原子置于三维光晶格势中，光晶格势为 $V(\mathbf{r})$ 由三个相互垂直的激光驻波形成，相邻格点间距 d 为激光波矢 λ 的一半。考虑对称晶格 $V_i e^{-2\frac{r^2-i^2}{\omega_i^2}} = V_0$ ，两组分对于电子是自旋向上和向下，对于超冷原子可以是一个原子或分子的两个不同内态(如，精细态)，在任何情况下，我们用赝自旋 $\sigma=\uparrow, \downarrow$ 标记。在标准的 Hubbard 模型中原子相互作用只考虑相同格点相互作用，有各种超 Hubbard 模型考虑长程相互作用，但本文不做研究。费米 Hubbard 模型的二次量子化形式可以写为：

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + g \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (1.2.12)$$

其中 $\hat{\psi}_0^\dagger(\mathbf{r})$ ($\hat{\psi}_0(\mathbf{r})$) 是费米场产生(湮灭)算符，满足费米-狄拉克统计， $g = \frac{4\pi\hbar a_s}{m}$ 为接触相互作用强度。采用瓦尼尔表象，在最低能带的瓦尼尔基中展开费米场算符，

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{j,\sigma} u(\mathbf{r}-r_j) \hat{c}_{j,\sigma} |\sigma\rangle, \quad (1.2.13)$$

其中 $\hat{c}_{j,\sigma}$ ， $u(\mathbf{r}-r_j)$ 分别是第 j 个格点的湮灭算符和瓦尼尔函数，光晶格中两分量费米 Hubbard 模型的哈密顿量可以写为：

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (1.2.14)$$

其中近邻格点跃迁矩阵元 $t = \int u^*(\mathbf{r}-r_i) \left(-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V(\mathbf{r}) \right) u(\mathbf{r}-r_j) d^3\mathbf{r}$ ，接触相互作用 $U = g \int |u(\mathbf{r})|^4 d^3\mathbf{r}$ ，可以通过 Feshbach 共振调节正(排斥相互作用)负(吸引相

相互作用)[23]。Hubbard 模型可调节吸引和排斥相互作用从而呈现出丰富的物理现象，在这个模型中费米统计和自旋自由度后面隐藏有许多有趣的物理现象。本文主要研究与吸引相互作用相关的费米超流、无能隙拓扑相变、等温压缩系数等，我们将在后面的章节进行详细讨论。

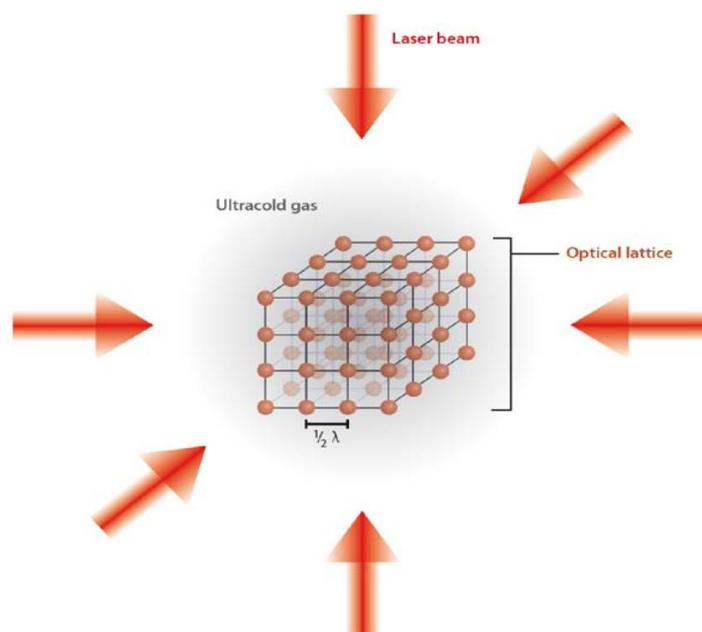


图 1.5 超冷原子置于三维光晶格中，相邻格点间距为激光波长 λ 的一半。本图引自[23]。

1.3 人工自旋轨道耦合

电子的自旋轨道耦合(Spin-Orbit Coupling, 简称 SOC)效应广泛存在于物理的各个领域，例如，原子物理中 SOC 在原子电子结构中起到重要作用，导致了精细结构的出现。在凝聚态物理中，SOC 其中一个主要的效应之一是控制半导体中的电子输运，近来 SOC 还被发现能产生新型材料如拓扑绝缘体、量子反常霍尔效应和拓扑超导体。相比电子而言，中性原子由于电中性的缘故无法直接在磁场中感受到规范效应，但是人们通过光与原子相互作用在中性原子系统中实现了人工 SOC。近十年，在冷原子物理中，量子气体 SOC 的研究成为了相关领域最热的方向之一，在这个方向无论是理论还是实验都取得了重要进展。一维[24-26]，二维[27-28] SOC 的相继实验实现，将基于 SOC 的超冷原子气体的相关研究推到了一个新高度。表 1.1 所示为人们在 SOC 实验上取得的重要突破。

表 1.1 人工 SOC 的实验进展

实验组	原子	SOC 类型/ 维度	基态	发表期刊
Spielman's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	Nature 471 , 83(2011)
Zhang's group	^{40}K	Fermion/1D	F=9/2	PRL 109 , 095301(2012)
		Fermion/2D	F=9/2	Nat. phys. 12 , 504(2016)
Zwierlein's group	^6Li	Fermion/1D	F=1/2	PRL 109 , 095302(2012)
Chen's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	Nat. phys. 10 , 314(2014)
	^{87}Rb	Boson/2D	F=1	Science 354 , 83(2016)
Chen's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	PRA 90 , 013616(2014)
Engels's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	PRL 114 , 070401 (2015)
Ketterle's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	PRL 117 , 185301 (2016)
Wang's group	^{87}Rb	Boson/1D	F=1	Sci. rep. 6 , 198983(2016)
Fallani's group	^{173}Yb	Fermion/1D	F=5/2	Science 349 , 1510(2015)
Jo's group	^{173}Yb	Fermion/1D	F=5/2	PRA 94 , 061604(2016)
Lev's group	^{173}Dy	Fermion/1D	F=21/2	PRX 6 , 031022(2016)
Ye's group	^{83}Sr	Fermion/1D	F=1	Nature 542 , 66(2017)

下面我们从 NIST 的 Spielman 组模型[133]出发, 以此了解人工 SOC 的形成原理[29], 首先我们考虑碱金属原子如 ^{87}Rb 和 ^{40}K , 他们的基态电子结构是 $^2S_{1/2}$ 。在这个实验中, 通过沿 x 方向对向传播的两束拉曼光将 ^{87}Rb 自旋态 $|F, m_F\rangle = |1, -1\rangle$ 耦合到 $|1, 0\rangle$, 将 $|1, 0\rangle$ 耦合到 $|1, 1\rangle$, 如图 1.6(a)和(b)所示, 可以用哈密顿量[132],

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \varepsilon_1 & \frac{\Omega}{2} e^{i2k_0 x} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} e^{-i2k_0 x} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} & \frac{\Omega}{2} e^{i2k_0 x} \\ 0 & \frac{\Omega}{2} e^{-i2k_0 x} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \varepsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (1.3.1)$$

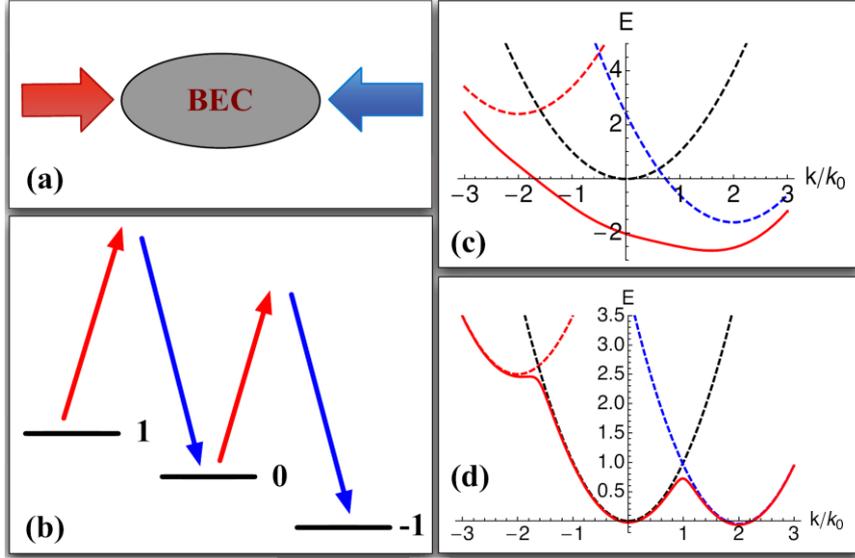


图 1.6 (a) NIST 实验方案示意图, (b) 三个 $F=1$ 的能级如何通过拉曼光耦合示意图, (c) 均匀矢量势区域的色散, (d) 非阿贝尔矢量势区域的色散。本图引自 [132]。

其中 $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ 是两束激光的波长, 所以 $2k_0$ 是两声子过程中的动量转换, $\varepsilon_1 = \Delta_1 + \delta\omega + \Delta_2$, $\varepsilon_2 = \Delta_1 + \delta\omega - \Delta_2$, 这里 Δ_1 为线性 Zeeman 能, $\delta\omega$ 为两拉曼光频率之差, Δ_2 为二次 Zeeman 能。对波函数做一么正变换 $\Phi = U\Psi$, 其中

$$U = \begin{pmatrix} e^{-i2k_0x} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i2k_0x} \end{pmatrix}. \quad (1.3.2)$$

有效哈密顿量为

$$H_{eff} = UHU^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2(k_x + 2k_0)^2}{2m} + \varepsilon_1 & \frac{\Omega}{2} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} & \frac{\Omega}{2} \\ 0 & \frac{\Omega}{2} & \frac{\hbar^2(k_x - 2k_0)^2}{2m} - \varepsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (1.3.3)$$

当 ε_1 和 ε_2 很大时, 有效哈密顿量的单粒子能量能谱如图 1.6(c) 所示, 有限的动量 k_x 对

应单一的能量最小点, 在 k_x 附近展开, 低能物理是由 $\frac{\hbar^2(k_x - A_x)^2}{2m}$ 描述的缀饰单态

占主导，其中 A_x 是一个常数。这样会导致一个均匀的矢量规范场。

在接下来得实验中，Spielman 组沿 y 方向加入 Zeeman 梯度磁场，在这种情况下， A_x 为 y 的函数而非常数，从而产生了非零人工磁场 $B_z = -\partial_y A_x \neq 0$ 。在某一临界磁场以上，实验中观测到了许多类似 BEC 中的涡旋。在另一个实验[24]中让 A_x 随时间变化，产生非零电场 $E_x = -\partial_t A_x \neq 0$ ，他们在电场脉冲后观测到 BEC 的集体振荡。

通过调节 Zeeman 能和激光频率，使 $\Delta_1 + \delta\omega \approx \Delta_2$ ，因此 $\varepsilon_2 \approx 0$ ，同时 $\varepsilon_1 \approx 2\Delta_2$ 依然很大，如图 1.6(d)所示，在这个区域，最低能谱包含两个能量极小，分别是态 $|1,0\rangle$ 和 $|1,-1\rangle$ ，Spielman 组系统可以约化为赝自旋-1/2 的系统，分别用 $|\uparrow\rangle \equiv |1,0\rangle$ ， $|\downarrow\rangle \equiv |1,-1\rangle$ 表示。沿有效耦合的 x 方向，实验室坐标系下单粒子哈密顿量可表示为

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{h}{2} & \frac{\Omega}{2} e^{2ik_0 x} \\ \frac{\Omega}{2} e^{-2ik_0 x} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{h}{2} \end{pmatrix}. \quad (1.3.4)$$

其中， $\frac{\Omega}{2}$ 为拉曼耦合强度， $h = \varepsilon_2$ ，非对角项描述伴随沿 x 方向的动量转移为 $2k_0$ 的自旋翻转，这是自旋轨道耦合效应的起源。为使自旋轨道耦合的物理更为明显，我们引入旋转规范变换[130]，

$$U = \begin{pmatrix} e^{-ik_0 x} & 0 \\ 0 & e^{ik_0 x} \end{pmatrix}, \quad (1.3.5)$$

在这个变换下，系统波函数变为 $\varphi = U\psi$ ，而与之相应的旋转框架下的单粒子哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= U \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{h}{2} & \frac{\Omega}{2} e^{2ik_0 x} \\ \frac{\Omega}{2} e^{-2ik_0 x} & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{h}{2} \end{pmatrix} U^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 (k_x + k_0)^2}{2m} + \frac{h}{2} & \frac{\Omega}{2} e^{2ik_0 x} \\ \frac{\Omega}{2} e^{-2ik_0 x} & \frac{\hbar^2 (k_x - k_0)^2}{2m} - \frac{h}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

用泡利矩阵来描述哈密度量为:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x - k_0\sigma_z)^2 + \frac{\Omega}{2}\sigma_x + \frac{h}{2}\sigma_z, \quad (1.3.7)$$

在赝自旋空间沿 y 方向旋转 $\pi/2$, $\sigma_x \rightarrow \sigma_z$, $\sigma_z \rightarrow -\sigma_x$, 哈密顿量可以写成,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x + k_0\sigma_x)^2 + \frac{\Omega}{2}\sigma_z - \frac{h}{2}\sigma_x. \quad (1.3.8)$$

其中第一项可以看成 Rashba 型 ($k_x\sigma_x + k_y\sigma_y$) 和 Dresselhaus 型 ($k_x\sigma_x - k_y\sigma_y$) SOC 的等权重叠加。在冷原子系统中, 许多理论文献感兴趣的是 Rashba SOC, 其单粒子哈密顿量

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2(k_x - k_0\sigma_x)^2}{2m} + \frac{\hbar^2(k_y - k_0\sigma_y)^2}{2m}. \quad (1.3.9)$$

尽管目前这种自旋轨道耦合还未被实现, 但理论上已经提出许多实验方案。

我们上面讨论的两种 SOC 可以以动量相关的 Zeeman 场写出,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mathbf{h}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.3.10)$$

对于拉曼场诱导的 SOC (1.3.8),

$$\mathbf{h}_k = \left\{ \frac{\Omega}{2}, 0, \frac{k_x k_0}{m} + \frac{h}{2} \right\}, \quad (1.3.11)$$

对于 Rashba SOC(1.3.9),

$$\mathbf{h}_k = \left\{ -\frac{k_x k_0}{m}, -\frac{k_y k_0}{m}, 0 \right\}. \quad (1.3.12)$$

这些单粒子哈密度测量仍然有平移对称性, 所以动量 \mathbf{k} 是一好量子数。他们的能谱为

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} \pm |h_{\mathbf{k}}|. \quad (1.3.13)$$

接下来我们将以反冲能量 $E_r = \hbar^2 k_0^2 / (2m)$ 作为能量单位。

对于拉曼诱导的 SOC, 当 $h=0$, 单粒子能谱(1.3.13)为

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} \pm \sqrt{\frac{k_x^2 k_0^2}{m^2} + \frac{\Omega^2}{4}}. \quad (1.3.14)$$

对 $\Omega < 4E_r$, 单粒子色散关系有两个简并极小点, 分别在

$$k_x = \pm k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega}{4E_r}\right)^2}. \quad (1.3.15)$$

随着 Ω 增加到 E_r ，在 $\Omega = 4E_r$ 这两个极小点重合，当 $\Omega > 4E_r$ ，在 $k_x = 0$ 只有一个极小。

对于 Rashba SOC，单粒子能谱(1.3.13)为

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \pm \frac{k_0 k_{\perp}}{m}, \quad (1.3.16)$$

其中 $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ，因此，单粒子基态在 $k_{\perp} = k_0$ ， $k_z = 0$ 。并且这个基态不依赖于角度 $\theta = \arctan(k_x / k_y)$ ，所以这个哈密顿量有一圈简并基态。后面的章节我们将研究在 Rashba SOC 和 Zeeman 场共存简并费米气体的热力学性质。

1.4 本文内容

本论文主要介绍费米简并气体在 SOC 和 Zeeman 场下的热力学特性，通过解析和数值分析两个重要热力学参数等温压缩系数和压强指数，我们发现了不同于以往的反常行为，本论文结构和布局如下：

第二章介绍了本文用到的理论背景和理论方法，从 BCS 理论开始，介绍了 BCS 理论中用到的波戈留波夫变换，以及研究了零温吸引相互作用的费米气体 BCS-BEC 渡越。从热力学统计重要的配分函数开始导出本文将研究的相关热力学量和他们间的关系，同时介绍了辅助记忆热力学势与其共轭变量的热力学方格和通过对热力学方格的拆分方法来记忆 Maxwell 关系。

第三章分节介绍了 SOC 和 Zeeman 场共存的三维费米气体的平均场理论，研究了 BCS-BEC 渡越和拓扑量子相变，在 SOC 和 Zeeman 之间的竞争下系统出现了亚稳态和非稳态即相分离，理论上相分离的判据为系统的等温压缩系数是否为负，最终通过与此直接相关的热力学势对序参的曲率来判定。

第四章介绍了自由空间 SOC 和 Zeeman 场共存的三维简并费米气体的等温压缩系数、压强和压强指数等热力学特性，我们发现 SOC 和 Zeeman 共存，等温压缩系数会出现突然增加的反常行为，这一反常行为还导致压强指数的反常行为，我们将从极限情形的理论分析到数值结果分析逐一论述。

第五章鉴于光晶格和自由空间简并费米气体的不同,我们研究了光晶格中, SOC 和 Zeeman 场共存的简并费米气体的热力学性质。光晶格中平均占据数和粒子空穴对称性将成为两个重要的影响因素,我们从极限情形的理论分析,结合数值结果分析、讨论了等温压缩系数、压强、压强指数,并且比较了与自由空间热力学性质的异同。

第二章 研究理论和背景

自从实验上实现人工的自旋轨道耦合(SOC)以来,人们对 SOC 简并费米气体做了大量的理论和实验研究,成为了超冷原子领域的研究热点[130]。类似于玻色子的玻色爱因斯坦凝聚(BEC)一样,费米子的宏观描述是通过基于 Cooper 对的 Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)理论来描述。其中研究超冷费米原子一个最重要的动机便是尽可能的观测 BCS 转变。借助 Feshbach 共振技术通过磁控调节超冷费米原子的散射长度,使得 BCS-BEC 渡越得以实现,其所有的特殊性成为相关的研究热点。巨正则配分函数是一个平衡态统计物理学中经常用到的概念,通过巨配分函数能够导出热力学中重要的可观测量,可以将微观状态和宏观物理量联系起来[60-61],也是我们研究超冷费米原子热力学性质的重要基础,也是本论文的基本理论基础,这些讨论将是后面研究工作的理论支撑。

2.1 BCS 理论

BCS 理论是由 Bardeen J., Cooper L. N. 和 Schrieffer J. R. 于 1957 年提出[31-32],可用于解释 1911 年发现的金属中超导现象的微观理论。超导可描述为 Cooper 对的凝聚,并有大量观测超导的实验可以用该理论解释。在解释超导方面和 Landau-Ginzburg 理论、Bogoliubov 理论同样重要。Bardeen、Cooper 和 Schrieffer 因为该理论分享了 1972 年的诺贝尔物理学奖。但遗憾的是没法解释 1986 年发现的高温超导[98]。

BCS 理论是基于 Cooper 于 1956 年提出的正常金属在绝对零度将不再稳定,因为吸引相互作用使费米海改组,形成 k 与 $-k$ 的束缚态[33]。BCS 理论是在研究超导体中电子行为时提出的,该理论并不限定费米子的种类,也可以用来描述费米气体中的费米凝聚[135],在超冷费米气体中,原子间的相互作用和超导体中电子的相互作用类似,所以我们以两组分费米气体为例来介绍 BCS 理论,系统哈密顿量[117],

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (2.1.1)$$

这里用赝自旋 σ 标记费米原子的精细态, $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ ($\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$) 为赝自旋 σ 原子的产生(湮灭)算

符, $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\sigma}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m}$ (m 是原子质量, $\hbar=1$) 是自由粒子动能, μ_{σ} 为化学势,

设定 $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu$ 。其中 $g < 0$ 为吸引接触相互作用强度, Cooper 指出, 当这些束缚对相对于费米海处于静止状态时, 它们具有最大的束缚能, 因此它们的质心动量 $\mathbf{q} = 0$ (有横向外磁场的情形, 质心动量非零, 但不是本文研究内容)[117], 所以系统哈密顿量可写为

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow}. \quad (2.1.2)$$

2.1.1 平均场近似

通常要精确求解有大量粒子的多体系统是极其困难的或者几乎是不可能的, 其中一个最为常用的近似是使问题容易处理的平均场近似。这意味着在涨落很小的情形, 我们在系统哈密顿量中用算符的平均值来替代算符[118]。

我们考虑算符 \hat{A} 、 \hat{B} 和他们的乘积 $\hat{A}\hat{B}$, 让我们把算符 \hat{A} 和 \hat{B} 写成其平均值和涨落之和(此时没有近似, 只是重写), $\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle + \delta\hat{A}$, $\hat{B} = \langle \hat{B} \rangle + \delta\hat{B}$ 然后计算乘积 $\hat{A}\hat{B}$

$$\hat{A}\hat{B} = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \delta\hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \delta\hat{A} + \delta\hat{A}\delta\hat{B}, \quad (2.1.3)$$

假设涨落很小, 保留到一阶项, 即 $\delta\hat{A}\delta\hat{B} \approx 0$, 将 $\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\delta\hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ 带入 $\delta\hat{A}\delta\hat{B} \approx 0$, 我们得到,

$$\hat{A}\hat{B} = \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (2.1.4)$$

我们也可以把这种考虑推广到两个以上算符的乘积 (Wick 定理) [118]。

现在我们用平均场近似来处理相互作用部分, 做 Hartree-Fock 近似, 只剩 Pairing 场,

$$\hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \approx \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} + \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} - \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle. \quad (2.1.5)$$

用 Pairing 场定义序参量,

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow} \rangle, \quad \Delta^* = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle. \quad (2.1.6)$$

这个量也即我们稍后会提到的激发谱能隙，本文 $\Delta = \Delta^*$ 为实数，在平均场近似下系统的哈密顿量为

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \right) + \Delta \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \right] - \frac{V}{g} \Delta^2. \quad (2.1.7)$$

2.1.2 波戈留波夫变换

上小结我们得到系统在 BCS 理论平均场近似的哈密顿量，现在计算系统的本征值和基态波函数，在 BCS 平均场理论下，系统哈密顿量是二次形式，所以可以写成矩阵形式，然后对角化，以便对系统能有更深入的了解，系统哈密顿量的矩阵形式为：

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{V}{g} \Delta^2. \quad (2.1.8)$$

因为哈密顿量是厄米共轭的，存在么正变换 U 可以将其对角化：

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BCS} &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} U U^\dagger \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} U U^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{V}{g} |\Delta|^2, \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger & \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{V}{g} |\Delta|^2 \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

其中 $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ ，BCS 平均场理论的有效哈密顿量为，

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - \frac{V}{g} \Delta^2. \quad (2.1.10)$$

为使过程更清晰，我们用费米子的波戈留波夫变换[99]，把准粒子(准空穴)看成是电子和空穴的混合。

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger = v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{cases}, \quad (2.1.11)$$

矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = U^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.1.12)$$

波戈留波夫的逆变换为

$$\begin{cases} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} = -v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{cases} \quad (2.1.13)$$

矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (2.1.14)$$

其中 $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ 为实数, $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} / \hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ ($\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} / \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$) 为准粒子/空穴湮灭(准粒子/空穴产生)算符。

为保证该变换为正则变换, 例如算符 $\alpha_{\mathbf{k}} / \beta_{\mathbf{k}}$ ($\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} / \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$) 同样满足费米-狄拉克统计,

这样需要满足局域限制条件 $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, 另外从么正变换的条件也可以得到此限制条件。将(2.1.13)带入哈密度量(2.1.8)可得

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} & \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \xi_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \Delta & (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \Delta + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \\ (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \Delta + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} & -((u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \xi_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \Delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{V}{g} |\Delta|^2 \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

为使(2.1.15)矩阵对角化须满足

$$\begin{cases} 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \Delta = 0 & \text{(a)} \\ |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 & \text{(b)} \end{cases} \quad (2.1.16)$$

方程(2.1.16)同除 $u_{\mathbf{k}}^2$, 我们能得到关于 $f_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} / u_{\mathbf{k}}$ 的方程

$$f_{\mathbf{k}}^2 \Delta - 2\xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} - \Delta = 0. \quad (2.1.17)$$

可得解 $f_{\mathbf{k}}^{\lambda} = (\xi_{\mathbf{k}} + \lambda E_{\mathbf{k}}) / \Delta$, $\lambda = \pm$ 对应准粒子(空穴)激发。因为准粒子-空穴对称性,

我们只考虑正的激发谱 $E_{\mathbf{k}}$ 对应的 $f_{\mathbf{k}}^+$, 从此处, 省去右上标, 标记为 $f_{\mathbf{k}}$ 。联立局域

限制条件方程(2.1.16)可解得

$$\begin{cases} u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{[E_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}]}{2E_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{[E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}]}{2E_{\mathbf{k}}} \end{cases} \quad (2.1.18)$$

从有效哈密顿量(2.1.10)可以看出第一项为正, 所以系统基态一定是准粒子算符 $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ 、

$\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ 的真空态。从序参 Δ 定义(2.1.6),

$$\begin{aligned}
\Delta &= -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
&= -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \left(-v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \right) \left(u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \rangle \\
&= -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \langle \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle - v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \right)
\end{aligned} \tag{2.1.19}$$

上式用到准粒子非对角平均值 $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = \langle \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ ；在零温， $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ ，得到零温能隙方程

$$\Delta = -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}}, \tag{2.1.20}$$

当 $\Delta \neq 0$ ，方程(2.1.20)简化为

$$\frac{1}{g} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tag{2.1.21}$$

为确定系统的基态，需要自洽求解能隙方程。从 BCS 超导元激发能谱可知，从费米面激发一个准粒子至少需要 Δ 的能量，所以 Δ 也称为激发谱能隙，如图 2.1 所示。

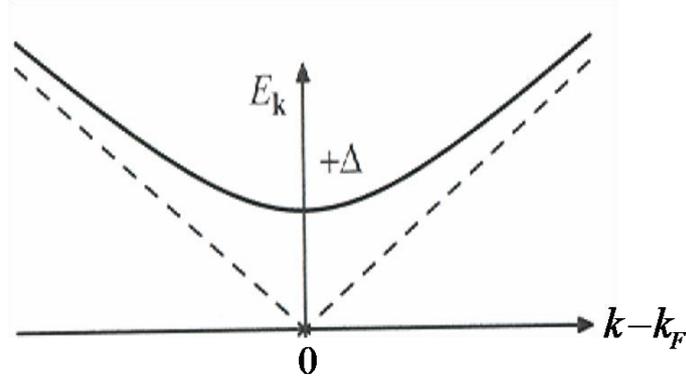


图 2.1 超导元激发能谱

另外，用变分法与上面方法一样也可以得到同样结果，基于上面的讨论，系统基态为准粒子真空态 $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}|G\rangle = \hat{\beta}_{\mathbf{k}}|G\rangle = 0$ ，例如，最简单的基态形式可写为 $|\psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}} |vac\rangle$ ，满足上述条件，其中 $|vac\rangle$ 为费米子真正的真空态 ($c_{\mathbf{k}\uparrow}|Vac\rangle = 0$)，将逆变换(2.1.11)带入基态波函数

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) (v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}) |vac\rangle \\
 &= \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}) |vac\rangle. \quad (2.1.22) \\
 &= \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |vac\rangle \propto \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |vac\rangle
 \end{aligned}$$

所以,我们把超导基态的变分试探波函数取为 $|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |vac\rangle$, 即 BCS 波函数。极小化 $\langle BCS|H|BCS\rangle$ 求得 $u_{\mathbf{k}}$ 和 $v_{\mathbf{k}}$ 。BCS 波函数是相当直观的,对于相互作用为零的情形,从方程(2.1.18)可得:

$$\begin{aligned}
 u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) = \begin{cases} 1 & (k \geq k_F) \\ 0 & (k < k_F) \end{cases} \\
 v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) = \begin{cases} 0 & (k > k_F) \\ 1 & (k \leq k_F) \end{cases}. \quad (2.1.23)
 \end{aligned}$$

此时系统将会变得平庸:在费米面以下 $v_{\mathbf{k}}$ 是均匀,费米面以外是 0(当 $\mathbf{k} \leq k_F$ $v_{\mathbf{k}}=1$), $u_{\mathbf{k}}$ 的情形与之相反。 $v_{\mathbf{k}}^2$ 动量分布显示了一个很尖的边缘如图 2.2.(a)所示,其中, $v_{\mathbf{k}}^2 = \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle$, 此时 BCS 波函数可以写为

$$|BCS\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} |vac\rangle. \quad (2.1.24)$$

有相互作用时, Δ 为一有限值, $v_{\mathbf{k}}^2$ 和 $u_{\mathbf{k}}^2$ 的分布将变得光滑,不再有费米面,在费米面内、外同时出现,在 $T=0$,不仅在 $k < k_F$ 区域能产生准空穴, $k > k_F$ 区域也能产生准空穴(相应准粒子亦是如此),如图 2.2.(b)所示。

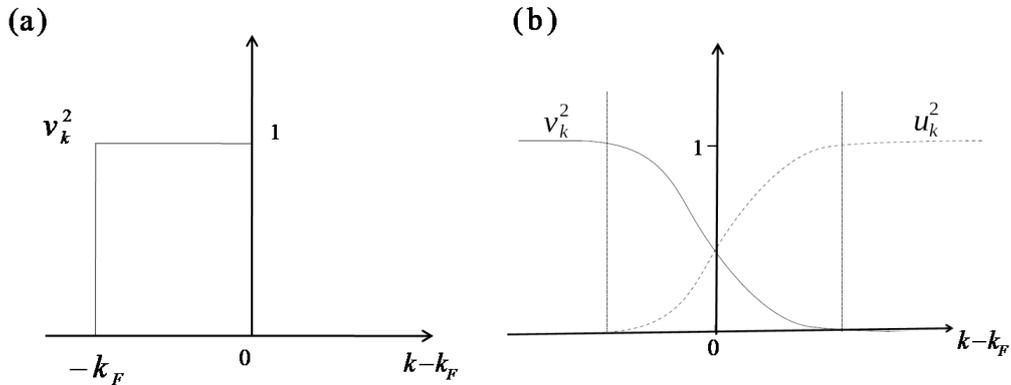


图 2.2 (a) 相互作用为零时准粒子分布, (b) 在吸引相互作用下准粒子在费米面附近形成 Cooper 对。

2.2 BCS-BEC 渡越理论

当系统在整个费米球都存在吸引相互作用，且这个相互作用较强时，系统会怎样？对于这个问题可追溯到 Eagles D. M. (1969)[34]和 Leggett A. J. (1980)[35]的工作，他们提出，零温情形下超导、超流体和 BEC 的波函数可以平滑连接，BCS 与 BEC 之间有着深刻的联系，BCS 波函数能够描述 Cooper 对从弱相互作用到强相互作用极限的耦合。近几十年，随着实验技术的进步，特别是 Feshbach 共振技术、超冷费米凝聚的实验实现，BCS-BE 渡越[100]的研究引起了人们极大的关注。本小节我们将介绍基于平均场理论下的 BCS-BEC 渡越。由于吸引相互作用不再局限于费米面的窄壳中，化学势 $\mu \neq E_F$ ，此时化学势需要通过粒子数方程来自洽求解，

$$n = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2. \quad (2.2.1)$$

在弱相互作用极限，对费米子影响很小，系统表现为标准的 BCS 行为，即 BCS 极限；在强吸引相互作用下，库珀对的长度变短，表现出玻色子的行为[131]，如在零温，Cooper 对分子会发生波色爱因斯坦凝聚，由此开启在同一系统中研究玻色和费米-狄拉克统计之间联系的先河。此时，系统费米结构完全被破坏，化学势是 Cooper 对结合能的一半，是一负数。如图 2.3 所示，从弱相互作用到强相互作用的耦合，系统光滑的过渡，Cooper 对的大小或者两粒子关联的相干长度单调减小，在常规定的超导体中一般为 $10^3 - 10^4 \text{ \AA}$ ，尽管用的是平均场方法，但还是能够定性的描绘零温的 BCS-BEC 渡越的正确图像。

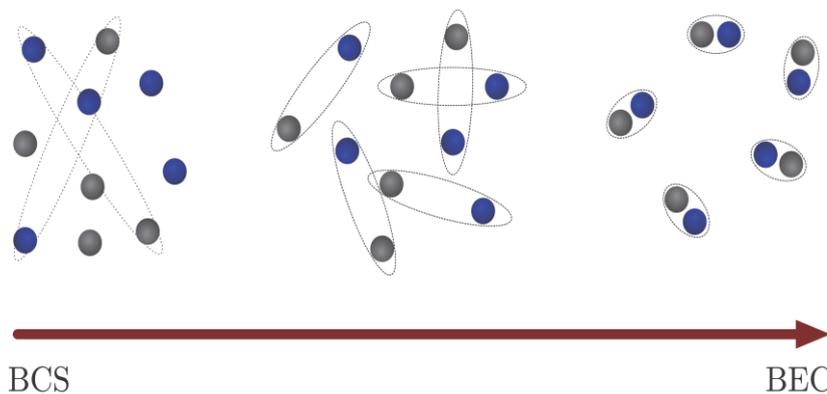


图 2.3 两组分费米原子在 BCS-BEC 渡越过程中，Cooper 对尺寸的变化。

现在我们考虑三维两组分超冷费米原子，在 BCS 理论下我们已经获了能隙方程

和粒子数方程:

$$\begin{cases} \frac{1}{g} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \\ n = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \end{cases} \quad (2.2.2)$$

因为是三维系统对 \mathbf{k} 的求和是整个动量空间, 上面的求和化积分, 对是三维存在紫外的发散, 原因是在 BCS 理论中近似的认为相互作用是一个 δ 相互作用, 这样粒子相互作用后, 所有满足能量守恒的末态将不论初态是什么几率都一样[131], g 在全空间都是常数, 这并不物理, 我们需要重整化, 使 g 与实验可测量-散射长度 a_s 相关联, 从而消除发散, 同时也能够将实验测量的物理量和理论中所得物理量相对应。重整化过程即用我们的哈密顿量计算一少体问题, 从而使少体散射的可观测量和理论物理量相关联[1]。

我们利用 Lippman-Schwinger 方程,

$$T = U + U \frac{1}{E - H_0 + i\delta} T. \quad (2.2.3)$$

将 g 带入方程 (2.2.3) 得,

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{m} + i\delta} \left[T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) \left(1 - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}''} \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}''^2}{m} + i\delta} \right) \right] - g = 0. \quad (2.2.4)$$

由于我们考虑的是零温极限的低能有效模型, $T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = T(0, 0; 0) = g_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s$,

$E \rightarrow 0, \mathbf{k} \rightarrow 0$, 零能散射极限(因此可忽略 $i\delta$), 可得

$$\frac{1}{g} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} - \frac{1}{V} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.2.5)$$

这个重整化的过程在后面我们处理连续模型自旋轨道耦合简并费米气体时会用到, 重整化后的能隙方程为:

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right). \quad (2.2.6)$$

接下来, 我们以费米能 $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ 为单位, 求解粒子数方程和能隙方程可得到如

图 2.4 序参 Δ 和化学势 μ 随 $\frac{1}{k_F a_s}$ 的变化曲线。从图 2.4 中可以能够看到随相互作用的变化，序参量 Δ 都不为零，即存在配对场的态在相互作用整个的变化过程中都是体系的基态。另外可以看到 $\frac{1}{k_F a_s} \ll 0$ ，体系的化学势 μ 几乎恒定为 1。这时体系的统计还是费米统计，随着 $\frac{1}{k_F a_s}$ 的不断增大，体系的 μ 开始不断变小。当 $\frac{1}{k_F a_s}$ 变化到 0 时，费米面消失，粒子开始散开。到 $\frac{1}{k_F a_s} \gg 0$ 的地方，体系的粒子出现凝聚，即进入了配对的凝聚状态，化学势能 μ 为一负值。而在整个过程中可以看到的是一个连续变化过程，所以我们称之为 BCS-BEC 渡越。

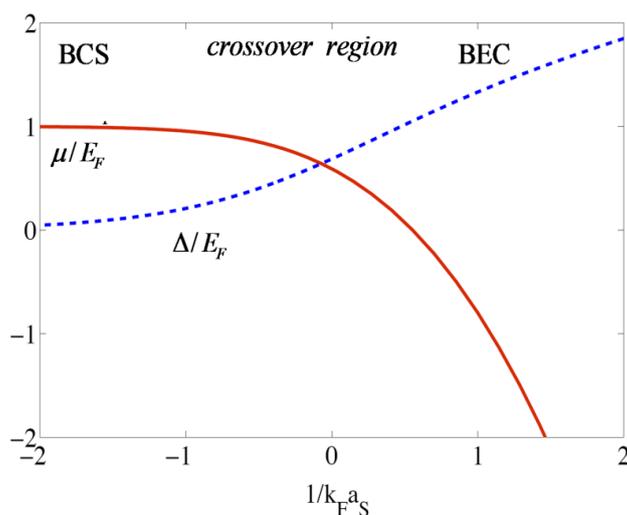


图 2.4 化学势 μ/E_F 和序参 Δ/E_F 随 $\frac{1}{k_F a_s}$ 的变化曲线，红色曲线为 μ/E_F ，蓝色曲线为

Δ/E_F 。

2.3 热力学-统计基础

超冷原子气体的热学性质已经通过统计物理学中的比热、熵、集体模、声速、临界速度、等温压缩系数做了大量研究。在统计物理学中，配分函数是建立统计物

理的核心，因为所有表征系统热力学性质的热力学函数均可由配分函数和巨热力学势计算和表示。

2.3.1 热力学势和 Maxwell 关系

这一节我们将从巨配分函数出发导出常用热学量，为导出不同的热力学量，首先了解几个重要的热力学势，以及他们之间的关系。同时为方便以后的计算，我们给出了几个热力学势(函数)在正则系综和巨正则系综的全微分形式和 Maxwell 关系，通过图 2.5 来说明， U 、 F 、 H 、 G 分别表示系统的内能、自由能、焓、吉布斯自由能， S 、 P 、 V 、 T 分别是热力学共轭变量，熵、压强、体积、温度。蓝色虚线方框表示正则系综，粒子数 N 确定，内能 U 是 S 、 V 的函数，自由能 F 是 V 、 T 的函

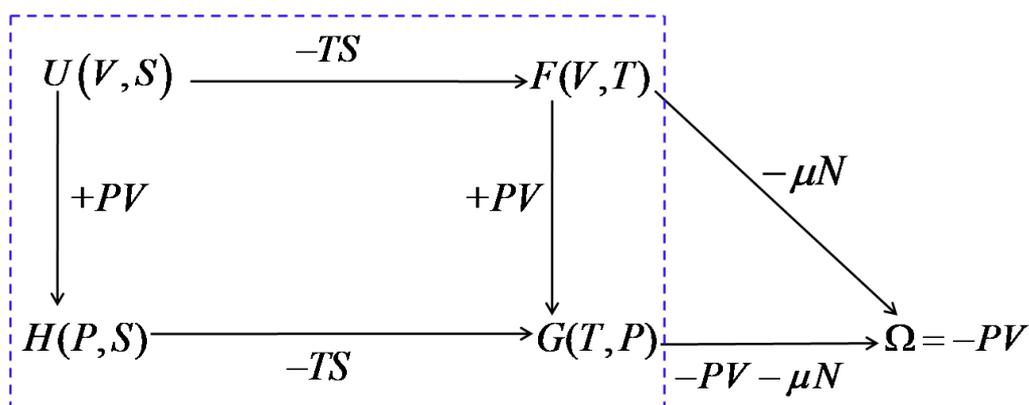


图 2.5 热力学势关系图，蓝色虚线方框内为正则系综， Ω 为巨热力学势。

数，焓 H 是 P 、 S 的函数，吉布斯自由能 G 是 T 、 P 的函数。根据热力学第一定律导出的热力学基本方程：

$$dU = TdS - PdV. \quad (2.3.1)$$

此形式是粒子数确定的正则系综，四个热力学势之间通过勒让德变换有图 2.5 所示的关系，这样我们可以导出其他热力学势的全微分形式，例如：对自由能 $F = U - TS$ ，其全微分形式为

$$dF = -PdV - SdT. \quad (2.3.2)$$

在巨正则系综，粒子数是变量，所以内能 U 是 S 、 V 、 N 的函数，对多组分系统，热力学基本方程(2.3.1)变为

$$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i, \quad (2.3.3)$$

这里 N_i 和 μ_i 分别是第 i 个组分的粒子数和化学势，内能和自由能之间的关系不变，所以在巨正则系综下，自由能的全微分为

$$dF = -PdV - SdT + \sum_i \mu_i dN_i. \quad (2.3.4)$$

我们将热力学势在正则系综和巨正则系综的全微分列于表 2.1。不同的热力学势之间关系比较复杂，为方便记忆，玻恩于 1929 年，在一次讲座中展示了热力学方格或玻恩方格[36]，1935 年出现在 Koenig F. O. 的论文中[37]，方格的四个角代表四个共轭变量，边代表热力学势，每条边是各自两个端点所代表共轭量的函数，如图 2.6 所示，例如，内能 U 是 S 、 V 的函数，焓 H 是 S 、 P 的函数，依次类推。全微分的记忆借助方格里面的两条带箭头的线，每条边的全微分是箭头(箭尾)指向的变量乘以各自端

表 2.1: 热力学势及其全微分形式

热力学势	符号	共轭变量		全微分	
		正则系综	巨正则系综	正则系综	巨正则系综
内能	U	S, V	$S, V, \{N_i\}$	$dU = TdS - PdV$	$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i$
自由能	F	V, T	$V, T, \{N_i\}$	$dF = -SdT - PdV$	$dF = -SdT - PdV + \sum_i \mu_i dN_i$
焓	H	P, S	$P, S, \{N_i\}$	$dH = TdS + VdP$	$dH = TdS + VdP + \sum_i \mu_i dN_i$
吉布斯自由能	G	T, P	$T, P, \{N_i\}$	$dG = VdP - SdT$	$dG = VdP - SdT + \sum_i \mu_i dN_i$
巨热力学势	Ω	/	$V, T, \{\mu_i\}$		$d\Omega = -PdV - SdT - \sum_i N_i d\mu_i$

点所代表变量的全微分相加。注意，箭头指向的变量为正，箭尾指向的变量相乘会出“-”号，比如内能中的 TdS ， T 为箭头指向的变量为“+”，而 $-PdV$ 中的 P 是箭头尾所对的物理量，所以出“-”。在巨正则系综粒子数不定，所以都加“ $\sum_i \mu_i dN_i$ ”。

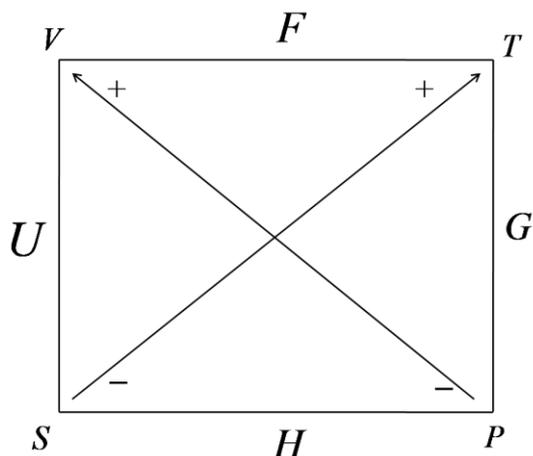


图 2.6 热力学方格图

在正则系综我们可以看到内能 U 是 S 、 V 的函数，那么其全微分

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S dV, \quad (2.3.5)$$

比较等式(2.3.1)，我们得到，

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V = T, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S = -P, \quad (2.3.6)$$

考虑到全微分存在，求偏导的顺序可以交换，即 $\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S}$ ，可得，

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = - \left(\frac{\partial P}{\partial S} \right)_V, \quad (2.3.7)$$

类似地，由焓的全微分，可得，

$$\left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_P = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_S, \quad (2.3.8)$$

由自由能的全微分可得，

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V, \quad (2.3.9)$$

由吉布斯自由能的全微分可得，

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P. \quad (2.3.10)$$

这四个共轭变量偏导数之间的关系，是 Maxwell 首先导出的，称为 Maxwell 关系。利用此关系可以把一些实验上没法测的量用实验可测量来表示。同时我们也可借助热力学方格图来辅助记忆 Maxwell 关系。如图 2.7 所示，把热力学方格图(a)分别以焓 H 为底边和以吉布斯自由能 G 为底边按图(b)拆分，拆分的小方格有共同的底边(图(b)上图以 H 为底边，下图以 G 为底边)。每个拆分成的小方格，只标一个变量竖线所对横线的端点变量，在该变量不变的情况下，两条竖线端点变量求偏导，例如，(b)上图，左小图 $\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P$ ，右小图是 $\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S$ ，而他们是由横线的热力学势 H 导出的关系，值得注意的是，左右两个小图中的箭头以纵轴对称，所以不出“-”即 $\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S$ ，图(b)下图，变量 P 、 T ，对应横线代表的热力学势是吉布斯自由能 G 。我们发现和上图相比，拆分的左右两小图中的箭头以纵轴反对称(箭头和箭尾重合)，这样就会出“-”。把每个热力学势边做底边进行如是拆分和记忆，就能很好的记住 Maxwell 关系。

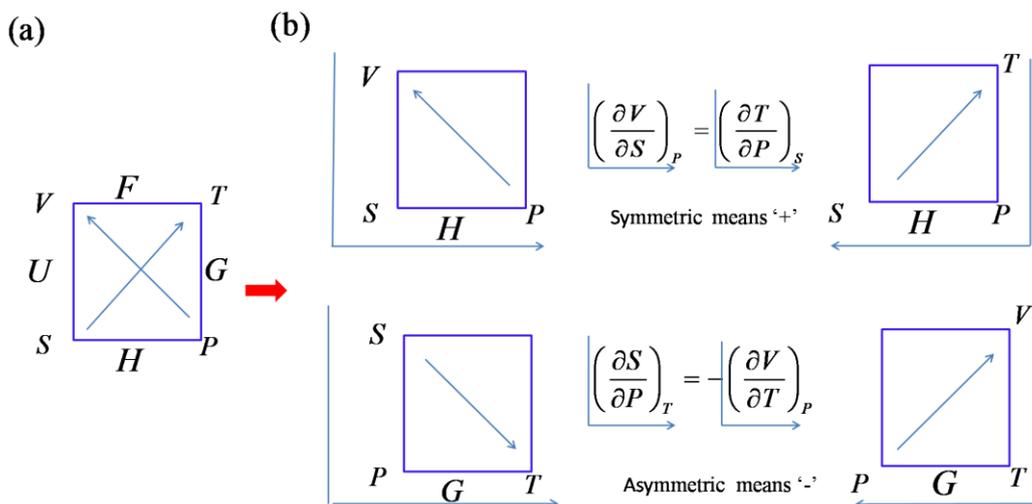


图 2.7 借助热力学方格图记忆 Maxwell 关系，图(a)为热力学方格，图(b)分别是以 H 和 G 为底边对热力学方格的拆分。

2.3.2 相关热力学量

我们研究超冷原子体系，其巨正则配分函数量子表达式为：

$$Z_G(\alpha, \beta) = \sum_N \sum_p e^{(\alpha N - \beta E_p)}, \quad (2.3.11)$$

包括两重求和, 对某一粒子数 N , 所有可能的微观状态 p 的求和。能量 E_p 对应微观状态 p 的能量(计及微观状态全同性原理的要求), 粒子数 N 可以取 0 到 ∞ 的任何值; 再对所有可能粒子数求和。 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $\alpha = \beta\mu$, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为系统的温度, μ 为系统的化学势, 引入能量为 ε_p 微观状态 p 的粒子数为 n_p , 则

$$Z_G = \sum_N e^{\beta\mu \sum_p n_p} \left(\sum_{\sum_p n_p = N} e^{\left(-\beta \sum_p n_p \varepsilon_p\right)} \right), \quad (2.3.12)$$

上式双重求和恰恰等效于各个 n_p 的独立求和(不受 $\sum_p n_p = N$ 的约束)。所以

$$\begin{aligned} Z_G &= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \dots \left[\left(e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_0} \right)^{n_0} \left(e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_1} \right)^{n_1} \dots \right] \\ &= \left[\sum_{n_0} \left(e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_0} \right)^{n_0} \right] \left[\sum_{n_1} \left(e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_1} \right)^{n_1} \right] \dots, \\ &= \prod_p \left[\sum_{n_p} e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)n_p} \right] \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

对于费米子 $n_p = 0, 1$ (不计自旋); 对于玻色子 $n_p = 0, 1, 2, \dots$ 等式(2.3.14)可进一步写为,

$$Z_G = \begin{cases} \prod_p \left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)} \right) & \text{费米气体} \\ \prod_p \left(\frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)}} \right) & \text{玻色气体} \end{cases}. \quad (2.3.14)$$

在巨正则系综有一个基本的热力学量是巨热力学势 Ω , 其定义为

$$\Omega = -PV = -k_B T \ln(Z_G). \quad (2.3.15)$$

从表 2.1 可知巨正则势的全微分形式为(以单组分为例),

$$d\Omega = -PdV - SdT - Nd\mu. \quad (2.3.16)$$

所以对系统总粒子数和熵为:

$$\begin{aligned}
N &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} \\
S &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \\
P &= -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu}
\end{aligned} \tag{2.3.17}$$

从巨配分函数可以推导出，在温度 T 下的整个系统在能量 ε_p 的单粒子态的物理参数平均值，在量子态 ε_p 的平均粒子数为，

$$\langle n_p \rangle = \frac{\sum_{n_p} n_p e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)n_p}}{\sum_{n_p} e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)n_p}} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_G}{\partial \varepsilon_p} \tag{2.3.18}$$

带入方程(2.3.14)可得，

$$\begin{cases} \langle n_p \rangle_f = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} + 1} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p - \alpha} + 1} \\ \langle n_p \rangle_b = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p - \alpha} - 1} \end{cases} \tag{2.3.19}$$

平均总粒子数 $\langle N \rangle_{f/b} = \sum_p \langle n_p \rangle_{f/b}$ 。在温度 T ，能量 $E = \sum_p \varepsilon_p n_p$ ，内能 U 为能量 E 的统计平均值，结合(2.3.13)，系统的内能可以通过下式计算，

$$\begin{aligned}
U = \bar{E} &= \frac{\sum_{n_p} \varepsilon_p n_p e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)n_p} \sum_N}{\sum_{n_p} e^{\beta(\mu - \varepsilon_p)n_p} \sum_N} \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} (-\beta \Omega(T)) \\
&= \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Omega(T)) \\
&= \Omega(T) + \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \Omega(T)
\end{aligned} \tag{2.3.20}$$

接下来定义巨正则系统的等温压缩系数、体胀系数、压强系数分别为

$$\begin{aligned}\kappa_T &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T,N} \\ \alpha &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} \\ \beta' &= \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V,N}\end{aligned}\quad (2.3.21)$$

其中，无论固体还是液体，温度升高而保持其体积不变是难以实现的，因此压强系数 β' 需要通过测定的 κ_T 、 α 来表示，用数学微分的循环法则，偏微分有下面的关系

$$\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T,N} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V,N} \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_{P,N} = -1, \quad (2.3.22)$$

所以有 $\alpha = \kappa_T \beta' P$ 。

现在我们考虑两组分费米子系统， σ 标记冷原子自旋，由 $\Omega = -PV$ ， $\Omega = G - PV - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} N_{\sigma}$ 可得 $G = \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} N_{\sigma}$ ，那么吉布斯自由能 G 的全微分为

$$dG = \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} dN_{\sigma} + \sum_{\sigma} N_{\sigma} d\mu_{\sigma}. \quad (2.3.23)$$

从全微分表 2.1 可知

$$dG = VdP - SdT + \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} dN_{\sigma}. \quad (2.3.24)$$

方程(2.3.23)和方程(2.3.24)相等，可得

$$\sum_{\sigma} N_{\sigma} d\mu_{\sigma} = -SdT + VdP. \quad (2.3.25)$$

方程(2.3.25)即为 Gibbs-Duhem 方程[60-61]。我们定义粒子数密度 $n_{\sigma} = \frac{N_{\sigma}}{V}$ ，压强 $P = P(T, \mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow})$ 和化学势 $\mu_{\sigma} = \mu_{\sigma}(T, n_{\uparrow}(N_{\uparrow}, V), n_{\downarrow}(N_{\downarrow}, V))$ 。温度不变，即 $dT = 0$ ，从 Gibbs-Duhem 方程(2.3.25)可得

$$dP|_T = \sum_{\sigma} \frac{N_{\sigma}}{V} d\mu_{\sigma}|_T, \quad (2.3.26)$$

其偏导数形式为

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \mu_{\uparrow}} \right)_{T, \mu_{\downarrow}} = n_{\uparrow}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \mu_{\downarrow}} \right)_{T, \mu_{\uparrow}} = n_{\downarrow}. \quad (2.3.27)$$

根据两组分等温压缩系数的定义

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\kappa_T} &= -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T, N_\uparrow, N_\downarrow} \\
&= -V \left(\left(\frac{\partial P}{\partial \mu_\uparrow} \right)_{T, \mu_\downarrow} \left(\frac{\partial \mu_\uparrow}{\partial V} \right)_{N_\uparrow, N_\downarrow} + \left(\frac{\partial P}{\partial \mu_\downarrow} \right)_{T, \mu_\uparrow} \left(\frac{\partial \mu_\downarrow}{\partial V} \right)_{N_\uparrow, N_\downarrow} \right) \\
&= -V \left(n_\uparrow \left(\frac{\partial \mu_\uparrow}{\partial V} \right)_{N_\uparrow, N_\downarrow} + n_\downarrow \left(\frac{\partial \mu_\downarrow}{\partial V} \right)_{N_\uparrow, N_\downarrow} \right) \\
&= -V \sum_{\sigma} n_{\sigma} \left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial V} \right)_{N_\uparrow, N_\downarrow}
\end{aligned} \tag{2.3.28}$$

由粒子数密度可得, $\left(\frac{\partial n_{\sigma}}{\partial V} \right)_{N_{\sigma}} = -\frac{N_{\sigma}}{V^2} = -\frac{n_{\sigma}}{V}$, 等温压缩系数为,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\kappa_T} &= -V \sum_{\sigma} n_{\sigma} \left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial V} \right)_{T, N_\uparrow, N_\downarrow} \\
&= -V \sum_{\sigma} n_{\sigma} \left(\left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial n_{\uparrow}} \right)_{T, n_{\downarrow}} \left(\frac{\partial n_{\uparrow}}{\partial V} \right)_{N_{\uparrow}} + \left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial n_{\downarrow}} \right)_{T, n_{\uparrow}} \left(\frac{\partial n_{\downarrow}}{\partial V} \right)_{N_{\downarrow}} \right) \\
&= V \sum_{\sigma} n_{\sigma} \left(\left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial n_{\uparrow}} \right)_{T, n_{\downarrow}} \left(\frac{n_{\uparrow}}{V} \right) + \left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial n_{\downarrow}} \right)_{T, n_{\uparrow}} \left(\frac{n_{\downarrow}}{V} \right) \right) \\
&= \sum_{\sigma\sigma'} \left(n_{\sigma} n_{\sigma'} \left(\frac{\partial \mu_{\sigma}}{\partial n_{\sigma'}} \right)_{T, n_{\bar{\sigma}'}} \right)
\end{aligned} \tag{2.3.29}$$

这便是两组分等温压缩系数, 此式可推广到任意组分的情形。利用这个表达式, 等温压缩系数可通过热力学势 Ω 来直接计算, $n_{\sigma} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_{\sigma}} \right)$, $\left(\frac{\partial n_{\sigma}}{\partial \mu_{\sigma'}} \right) = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu_{\sigma} \mu_{\sigma'}} \right)$ 。等温压缩系数是一个用于气体、液体甚至是天体物理里的基本计量单位[103-106]。我们可以从一个简单的模型来理解这个定义, 比如理想气体, 由克拉伯伦方程可知 $PV \propto T$, 从等温压缩系数定义(2.3.21)可得 $\kappa_T = 1/P$ [107]。

利用 Gibbs-Duhem 方程还可以得到另一个重要的热力学量, 即压强指数[134],

$$\nu = \frac{1}{\kappa_T P} \tag{2.3.30}$$

对于理想气体, $\nu=1$, 是一无量纲量。我们可以通过压强的变化来理解这个物理量,

假定长度为 L ，变化后 $L' = e^\lambda L \approx (1 + \lambda)L$ ，那么体积的改变 $dV = n\lambda V$ ，这里 n 是系统维度，根据等温压缩系数定义(2.3.21)，可得压强变化为

$$dP = -\frac{1}{V} \frac{dV}{\kappa_T} = -\frac{1}{V} \frac{n\lambda V}{\kappa_T} P = -n\lambda \nu P. \quad (2.3.31)$$

变化前后压强的关系，

$$P' = e^{-n\lambda \nu} P = (1 - n\lambda \nu) P. \quad (2.3.32)$$

其中压强 $P = -\frac{\Omega}{V}$ ，可由巨热力学势求出。本文主要研究的就是在 SOC 和 Zeeman 场共存的简并费米气体，等温压缩系数、压强、压强指数等热力学量的性质。

2.4 小结

本章着重讨论研究超冷费米原子气体热力学特性要用得到的理论方法和相关的热力学量。首先我们介绍了基于 Cooper 对的 BCS 平均场理论，对四算符相互作用项做了平均场处理，这样就可以通过波戈留波夫变换将哈密顿量对角化，从而得到准粒子激发能谱和基态波函数，另外通过变分法也能得到一样的结果。BCS-BEC 渡越是超冷费米原子在吸引相互作用的又一重要特性，我们就零温的费米原子做了简单的讨论。其次我们通过介绍热力学方格，可以更为方便记忆热力学势和共轭变量间的关系，和由热力学势函数导出的 Maxwell 关系，为从巨配分函数导出重要的热力学量做好准备。最后我们从巨配分函数导出要研究的热力学量，以及用 Maxwell 关系将这些量转化为可测量和方便计算的热力学量。

第三章 SOC 费米气体的超流拓扑相变

近十几年来, 自旋轨道耦合(SOC)一直是凝聚态物理中的热门课题, 主要因为, (1) SOC 在认识非平庸拓扑中起到了重要作用。(2) SOC 可以诱导一个自旋三重态配对场, 导致超导的产生。(3) 在简并费米气体中的 SOC 能极大的改变 s 波超流。最近几年, SOC 在实验取得重大进展(如第一章表 1.1 所列), 开启了令人兴奋的研究途径, 特别是随着 Feshbach 共振技术的发展, 可以有效控制原子间相互作用, 这样就可以利用超冷原子的特征, 干净的环境和可控参数。所以 SOC 简并费米气体成为研究重要物理现象的理想载体, 如在实验上已经观测到的 BCS-BEC 渡越[38]、涡旋[126]等。

研究显示, 在 BCS 区域, SOC 能够增强超流配对的形成, 另外对于极化费米气体, SOC 和占据非平衡之间会产生竞争, 导致拓扑非平庸相的出现, 相边界可以通过自洽求解能隙方程和粒子数方程来确定[39]。由于不同相之间的相互竞争, 自洽方程的解将导致系统出现亚稳态和非稳态, 即相分离[40-41]。本章节将介绍二维 Rashba SOC 的三维费米气体, 在加纵向 Zeeman 场的情况下, 数值计算和解析分析其中的 BCS-BEC 渡越、拓扑相变、相分离等。

3.1 SOC 费米气体的平均场理论

为了研究的普适性, 文献中考虑三维费米气体在 $x-y$ 平面加 Rashba SOC, Zeeman 场沿 z 方向。系统哈密顿量[39-41]为

$$\hat{H} = \hat{H}_{BCS} + \hat{H}_{SOC} + \hat{H}_z, \quad (3.1.1)$$

其中, \hat{H}_{BCS} 为 BCS 理论给出的(2.1.2), Rashba SOC 和 Zeeman 场共存部分为

$$\hat{H}_{SOC} + \hat{H}_z = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \left[\alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) + h_z\sigma_z \right]_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma'}. \quad (3.1.2)$$

α 为 SOC 强度, h_z 为 Zeeman 场强度, 类似第二章(2.1.5)做 Hartree-Fock 平均场近似, 系统哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left((\xi_{\mathbf{k}} + h_z) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} + \Delta \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right. \\ \left. + \gamma_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + (\xi_{\mathbf{k}} - h_z) \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \right) - \frac{V|\Delta|^2}{g}. \quad (3.1.3)$$

在 Nambu-Gorkov 自旋基 $\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, -\hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)^T$, $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger = (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}, -\hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow})$ 下展开, 其 Bogoliubov-de-Genes(BdG)形式的有效哈密顿量为:

$$\hat{H}_{BdG} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} (\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger M_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}} + 2\xi_{\mathbf{k}}) - \frac{V|\Delta|^2}{g}. \quad (3.1.4)$$

BdG 算符的形式为:

$$M_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} + h_z & \gamma_{\mathbf{k}} & \Delta & 0 \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* & \xi_{\mathbf{k}} - h_z & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & -(\xi_{-\mathbf{k}} - h_z) & -\gamma_{\mathbf{k}} \\ 0 & \Delta^* & -\gamma_{\mathbf{k}}^* & -(\xi_{-\mathbf{k}} + h_z) \end{pmatrix}. \quad (3.1.5)$$

其中用到

$$\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu \\ \xi_{-\mathbf{k}} = \varepsilon_{-\mathbf{k}} - \mu = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu = \xi_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{\mathbf{k}} = \alpha(k_y + ik_x), \quad , \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* = \alpha(k_y - ik_x) \\ |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 = \alpha^2(k_x^2 + k_y^2) = \alpha^2 k_{\perp}^2 \quad (3.1.6)$$

为使矩阵对角化, 我们做么正变换,

$$\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow}^+ \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^+ \\ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^+ \end{pmatrix} = U \hat{P}_{\mathbf{k}}, \quad (3.1.7)$$

系统有效哈密顿量可写为:

$$\hat{H}_{eff} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{P}_{\mathbf{k}}^\dagger U^\dagger M_{\mathbf{k}} U \hat{P}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{V|\Delta|^2}{g}, \\ = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}^+ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^- \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}) + C_0 \quad (3.1.8)$$

激发能谱

$$E_{\mathbf{k}}^\lambda = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + h_z^2 + |\Delta|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2} + 2\lambda E_0, \quad (3.1.9)$$

其中 $E_0 = \sqrt{h_z^2 (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2) + \xi_{\mathbf{k}}^2 |\gamma_{\mathbf{k}}|^2}$, $\lambda = \pm$ 对应两支激发能谱, 基态能量,

$$C_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (2\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^+ - E_{\mathbf{k}}^-) - \frac{V|\Delta|^2}{g}. \quad (3.1.10)$$

根据第二章的推导，巨热力学势为 $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr}(e^{-\beta H})$ ，我们得到

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - k_B T \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \ln \left(2 \cosh \frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) - \frac{V|\Delta|^2}{g}. \quad (3.1.11)$$

由 $\partial\Omega/\partial\Delta=0$ ， $N = -\partial\Omega/\partial\mu$ ，这样可以得到能隙方程和粒子数方程为：

$$\begin{cases} \frac{\Delta}{g} = -\frac{\Delta}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(1 + \lambda \frac{h_z^2}{E_0} \right) f(E_{\mathbf{k}}^\lambda) \\ n = \frac{N}{V} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{1}{2} - \left(1 + \lambda \frac{h_z^2 + \alpha^2 k_\perp^2}{E_0} \right) \xi_{\mathbf{k}} f(E_{\mathbf{k}}^\lambda) \right) \end{cases}, \quad (3.1.12)$$

其中， $f(E_{\mathbf{k}}^\lambda) = \frac{\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}^\lambda / 2)}{4E_{\mathbf{k}}^\lambda}$ ， \mathbf{k} 的求和是整个动量空间，方程(3.1.12)求和化积分，

对于三维存在紫外发散，需要做重整化计算，

$$\frac{1}{g} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} - \frac{1}{V} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.1.13)$$

能隙方程重整化后为：

$$\frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 a_s} = -\frac{\Delta}{V} \left(\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\left(1 + \lambda \frac{h_z^2}{E_0} \right) f(E_{\mathbf{k}}^\lambda) \right) - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right). \quad (3.1.14)$$

注意到，(1) 当 $h_z=0$ ， $\alpha \neq 0$ ，即没有 Zeeman 场的情形， $E_0 = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 |\gamma_{\mathbf{k}}|^2}$ ， $E_{\mathbf{k}}^\lambda = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + 2\lambda \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 |\gamma_{\mathbf{k}}|^2}} = \sqrt{|\Delta|^2 + (\xi_{\mathbf{k}} + \lambda |\gamma_{\mathbf{k}}|)^2}$ ，回到文献[43]的结果。(2) 当 $h_z=0$ ， $\alpha=0$ ，也就是既没有 Zeeman 场也没有 SOC，这时 $E_0=0$ ， $E_{\mathbf{k}}^\lambda = E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$ ，回到了我们第二章介绍的标准的 BCS 理论，此时激发能谱简并。下一小结我们将介绍通过数值自洽求解这两个方程来研究超流相变、BCS-BEC 渡越以及极化费米气体的相分离等。

3.2 数值结果分析

在做数值计算时，通常会选定物理量的单位，首先对自洽方程及涉及的物理量做无量纲化处理。

3.2.1 无量纲化

选定费米能 $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ 为能量单位，其中 \mathbf{k} 空间费米半径为 $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ ，在连续模型，以费米能为单位，相应粒子数密度 n 就确定了。现在做如下变换：

$$\begin{aligned} q &= \frac{k}{k_F}, & \tilde{\mu} &= \frac{\mu}{E_F}, & \tilde{\Delta} &= \frac{\Delta}{E_F} \\ \tilde{\alpha} &= \frac{\alpha}{E_F}, & \tilde{h}_z &= \frac{h_z}{E_F}, & \tilde{T} &= \frac{T}{E_F} \\ \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} &= \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_F} = \mathbf{q}^2, & \tilde{\xi}_{\mathbf{q}} &= \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}{E_F} = \mathbf{q}^2 - \tilde{\mu} \\ \tilde{E}_{\mathbf{q}}^{\lambda} &= \frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{E_F} = \sqrt{(\mathbf{q} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\alpha}^2 k_F^2 q_{\perp}^2 + \tilde{h}_z^2 + |\tilde{\Delta}|^2 + 2\lambda E_0 / E_F^2} \\ \tilde{E}_0 &= \frac{E_0}{E_F} = \sqrt{\tilde{h}_z^2 \left((\mathbf{q}^2 - \tilde{\mu})^2 + |\tilde{\Delta}|^2 \right) + \tilde{\alpha}^2 k_F^2 q_{\perp}^2 (\mathbf{q}^2 - \tilde{\mu})^2} \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

求和化积分， $\sum_{\mathbf{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \iiint d^3k = \frac{3\pi^2 n V}{(2\pi)^3} \iiint d^3q$ ，那么自洽方程无量纲化，求和化为积分

$$\begin{cases} \frac{\pi^2 \tilde{\Delta}}{8 k_F a_s} = -\tilde{\Delta} \iiint \left(\left(1 + \lambda \frac{\tilde{h}_z^2}{\tilde{E}_0} \right) \tilde{f}(\tilde{E}_{\mathbf{q}}^{\lambda}) - \frac{1}{2\mathbf{q}^2} \right) d^3q \\ 1 = \frac{6}{\pi} \iiint \left(\frac{1}{2} - \left(1 + \lambda \frac{(\tilde{\alpha}^2 k_F^2 q_{\perp}^2 + \tilde{h}_z^2)}{\tilde{E}_0} \right) (\mathbf{q}^2 - \tilde{\mu}) \tilde{f}(\tilde{E}_{\mathbf{q}}^{\lambda}) \right) d^3q \end{cases} \quad (3.2.2)$$

这样就可以数值求解(3.2.2)，当 SOC 强度 α 和 Zeeman 场强度 h_z 给定时，就可以给出序参 Δ 和化学势 μ 随 $1/k_F a_s$ 的变化曲线如图 3.1，下面我们就数值求解的结果做一些讨论。

3.2.2 SOC 费米气体的超流拓扑相变

在零温，通过数值求解自洽方程(3.2.2)得到，SOC 参数和 Zeeman 场($\alpha k_F, h_z$) 分别等于(0,0)、(0,0.5)和(0.5,0.5)的情况下，化学势 μ 和序参 Δ 随相互作用 $1/k_F a_s$ 的变化情况，如图 3.1 所示。

众所周知，在没有 SOC 的情况下，Zeeman 场 h_z 会破坏自旋 \uparrow 和自旋 \downarrow 态之间的简并，当 h_z 大于配对结合能时，将破坏超流配对[39,42]。我们也可以从能隙方程

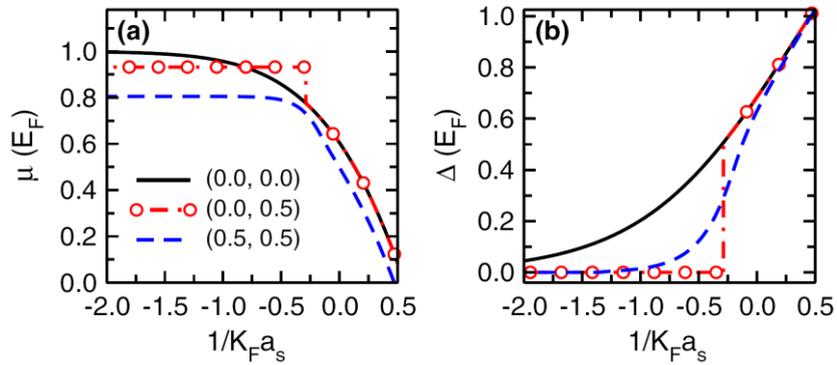


图 3.1 温度 $T = 0$ ，在参数 $(\alpha k_F, h_z)$ 化学势 μ (a) 和超流序参 Δ (b) 随相互作用

$1/k_F a_s$ 的变化，本图引自 [39]。

来理解，准粒子激发能隙 $E_g = \left| \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2} - h_z \right| = 0$ ，当 $|h_z| > \Delta$ ，总能找到合适的 \mathbf{k} 使能隙 $E_g = 0$ 。如图 3.1(b)所示当 $\alpha k_F = 0$ ， $h_z > \Delta$ ，这时 Zeeman 场将破坏超流对。当 $\alpha k_F \neq 0$ ，单粒子哈密顿量有两支能谱，因为自旋翻转，每支能谱既有自旋 \uparrow 也有自旋 \downarrow ，即使 h_z 很大，也会因为同一能谱上两个动量相反的粒子而形成超流 Cooper 对。SOC 导致非零超流 Cooper 对，可以清楚的从图 3.1 中看到。在温度为零时的 BEC 极限，SOC 和 Zeeman 对超流配对没有影响， $(\alpha k_F, h_z)$ 三情形下的曲线重合。所以我们着重考虑 BCS 这边，在 $\alpha k_F = 0$ ，如我们之前分析，当 $h_z > \Delta$ ，超流配对势被破坏，与此相反当 $h_z < \Delta$ ，化学势 μ 和序参 Δ 都不依赖于 h_z ，这时曲线与 $\alpha k_F = 0, h_z = 0$ 的曲线重合。所以在 $\alpha k_F = 0$ ，当 $h_z = \Delta$ 时有个跃变。从图 3.1 还能看到

当 $\alpha k_F \neq 0$ ，即使一个很小的值，超流序参都不会为零。

下面我们介绍相互作用靠近 BEC 极限，此时的化学势为负，发生了 BCS-BEC 渡越，比较图 3.1 和 3.2，自旋轨道耦合会增强超流配对的形成。从图 3.2 (a)可知，在 SOC 确定时，Zeeman 场抑制超流配对的形成。化学势随 Zeeman 场增加而减小。

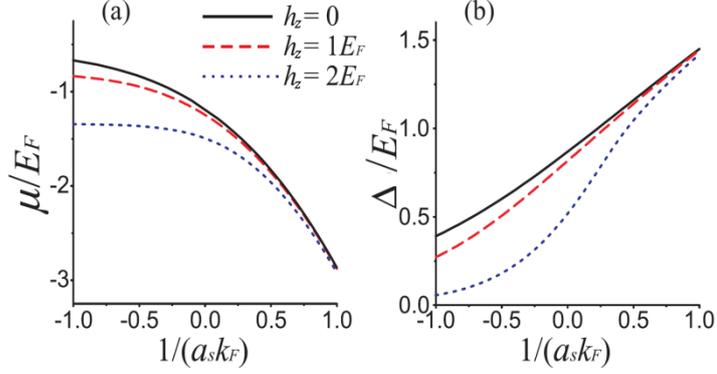


图 3.2 在 $\alpha k_F = 2$ ，化学势 μ (a) 和超流序参 Δ (b) 随相互作用 $1/k_F a_s$ 的变化。本图引自 [44]

通过我们的分析，当相互作用一定时超流序参随 SOC 和 Zeeman 场的变化。如图 3.3(a) 所示，超流序参 Δ ，在 BCS 附近，相互作用 $1/k_F a_s = -1$ ，温度 $T = 0$ ，随 SOC 强度

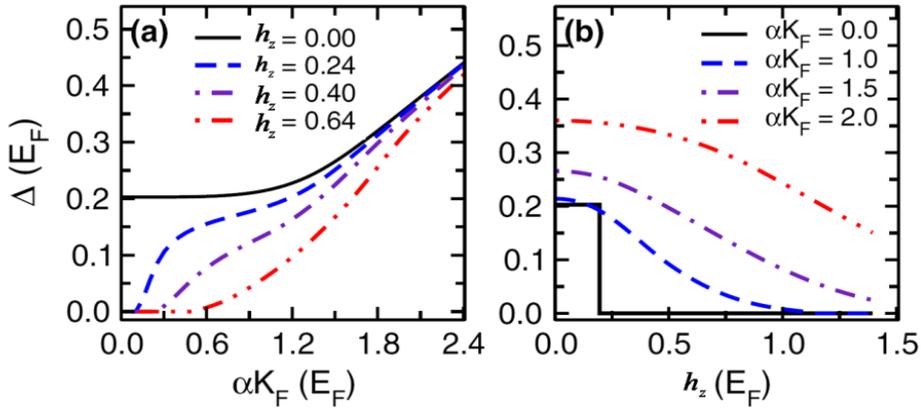


图 3.3 (a) 在相互作用 $1/k_F a_s = -1$ ，取不同的 Zeeman 场，序参 Δ 随 SOC 的变化。(b) 不同 SOC 下序参 Δ 随 Zeeman 的变化。本图引自 [39]。

αk_F 的变化，其他的相互作用和温度，结果类似。当 $\alpha k_F = 0$ ， $h_z < \Delta$ ，配对势 Δ 在不同的 h_z ，达到相同的点(由相互作用强度 $1/k_F a_s$ 确定)，当 $\alpha k_F = 0$ ， h_z 超过某一临界

值，超流序参 Δ 消失，但是当 αk_F 非零，超流序参 Δ 就不会为零，这时尽管有很大的 Zeeman 场 h_z ，超流序参依然能够观测到。如图 3.3(b) 所示，超流序参 Δ 在不同的自旋轨道耦合下，随 Zeeman 场的变化。如我们之前的讨论，在 $\alpha k_F=0$ ， $h_z=\Delta$ 我们观测到一个突然的跃变。在 Zeeman 场强度 h_z 很大时， $\Delta \sim \chi \Gamma^{-2}$ ，其中 χ 是依赖于 SOC 的一个常数。

由 SOC 诱导的超流不能自动的决定其拓扑性质。在三维情形的均匀超流，动量 \mathbf{k} 是一个好的量子数，在零温，超流拓扑序可由确定的外参数 $(\alpha k_F, h_z, 1/k_F a_s)$ 准粒子激发谱的费米点来分类[40](例如， $E_{\mathbf{k}}^- = 0$ 的点)。由 $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$ 可以得到：

$$E_{\mathbf{k}}^+ E_{\mathbf{k}}^- = \left(\xi_{\mathbf{k}}^2 - h_z^2 + \Delta^2 - \alpha k_{\perp}^2 \right)^2 + 4\Delta^2 \alpha k_{\perp}^2, \quad (3.2.3)$$

因此，当 $k_{\perp} > 0$ ，一定存在有限的能隙，并且所有的费米点一定分布在 k_z 轴。如

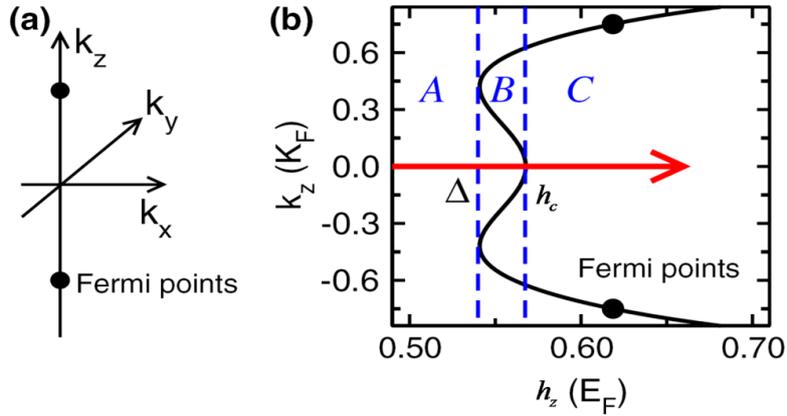


图 3.4 所示，(a) 费米点沿 k_z 轴。(b) 在由 Zeeman 场驱使的三维费米气体的量子相变，其中 $T=0, \alpha k_F = E_F, 1/k_F a_s = 0.1$ ，实线表示能隙 $E_g = 0$ ，其沿着如图红色的箭头变化。本图引自 [39]。

图 3.4(a) 所示。当 $k_{\perp} = 0$ ，准粒子激发能隙谱为：

$$E_g = \left| h_z - \sqrt{\left(\mu - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right)^2 + \Delta^2} \right|. \quad (3.2.4)$$

取 $\alpha k_F = E_F$, $1/k_F a_s = 0.1$ 来研究由 Zeeman 场诱导的拓扑相变。如图 3.4(b) 所示, 文献[39]中画出在 (k_z, h_z) 平面, 对于确定的 h_z , $E_g = 0$ 的个数, 对应三种不同的相: (a) 当 $h_z < \Delta$, 没有费米点, 能隙完全打开, 对应有能隙非拓扑超流态。(b) 当 $\Delta < h_z < h_c = \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$, 每一个 h_z 值对应四个费米点为第一类拓扑超流态 W_4 SF。(c) 当 $h_z > h_c$, 每一个 h_z 值, 对应两个费米点对应第二类超流态 W_2 SF。在每个费米点附近, 已经验证, $E_{\mathbf{k}}$ 是线性的, 费米点的行为有点像 Weyl 费米子, 受拓扑保护的拓扑电荷。在费米点附近的准粒子激发能谱认识了长期以来粒子物理寻找的类似低温的 Weyl 费米子。 h_z 的两个临界点 ($h_z = \Delta$, $h_z = \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$), 出现了拓扑电荷, 费米子形成了陈数为 0 的拓扑平庸费米点, 随着 Zeeman 场的增加然后消失。拓扑保护的费米点其陈数为 ± 1 在如图 3.4 显示的 B 和 C 区域。并且在量子临界点不会随 Zeeman 场的变化消失。这里的拓扑量子相变(两个临界点)完全不用于 p -波 Feshbach 共振(改变相互作用强度)的三维 $p_x + ip_y$ BCS 超流变到 BEC 的单粒子拓扑点的临界值为 $\mu=0$ [101-102] 另外, 在文献研究的系统中, 当准粒子激发能隙关闭, $p_x + ip_y$ 超流[101-102]会消失, 而超流配对势依然是有限的值[39]。

有严格 s -波超流势 ($\Delta \neq 0$) 的特殊相 W_4 SF (对应图 3.4, B) 和 W_2 SF (对应图 3.4, C), 却是受拓扑保护的费米点, 是一种新的物质状态。在实验上通过动量分辨的光发射光谱来区分这些相以及拓扑临界点。在相变中因为没有对称性破缺和出现序参, 这些拓扑量子临界点在通常的实验中是很难观测的。在发射光谱实验中, $E_{\mathbf{k}}$ 对应固定的 k_z (或者是一个小的区域), 是可以通过分析相同的 k_z 飞行时间图像来测量的。通过这个测量 $E_g(k_z, h_z) = 0$, 可以画出如图 3.4(b), 下面我们画, 当 $k_z = 0$, E_g 随 Zeeman 场 h_z 的变化, (如图 3.4(b) 中水平的红色箭头), 结果和 $k_z \neq 0$ 的情形类似。对于 $k_z = 0$, E_g 在 A 和 B 的临界点不会关闭, 因此, 其准粒子激发是有能隙的, 当 $h_z < h_c$ (例如 A 和 B 一起出现), 是非拓扑的。 E_g 在 $h_z = h_c$ 关闭但在 $h_z > h_c$ 重新打开, 此时, 准粒

子激发是拓扑非平庸的。如图 3.5(a)所示。在 $T=0$ ，画了在 $k_z=0$ ， E_g 随 Zeeman 场 h_z 的变化以及对应的序参 Δ 和化学势 μ 。当 h_z 扫过 $h_c=0.56E_F$ ， E_g 先关闭然后打开，标志着非拓扑准粒子激发到无能隙激发再到到拓扑激发。在 h_c ，尽管 E_g 是一个节点，

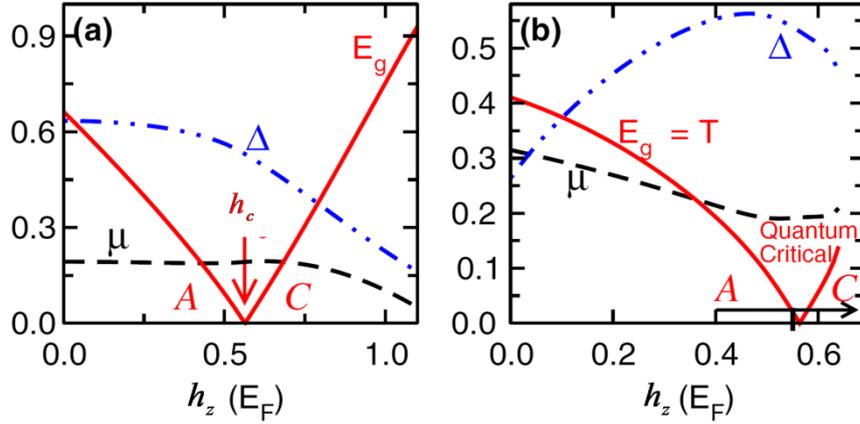


图 3.5(a) 在 $\mathbf{k}=0, 1/k_F a_s = -0.1, \alpha k_F = E_F, T=0$ ， E_g ， Δ 和 μ 随 h_z 的变化，(b) 有限温度拓扑相的转变，红色曲线通过方程(3.2.5)给出。箭头指示相的转变点，A 和 C 分别代表拓扑和非拓扑激发，本图引自 [39]。

依然能看到很强的配对势 $\Delta=0.52E_F$ 。对于 $k_z \neq 0$ ，对应的 h_c ，也可以类似的通过 E_g 的消失来确定，因此其三维的拓扑相变在图 3.5(b)所示。在真实实验中，只能是有限的温度，温度将导致热激发破坏超流。热成分很大程度上取决于 $E_g/k_B T$ 。注意在有限温度，不同相之间没有明确的界限：例如，只有有限温度相的渡越。尽管如此还是如图 3.5(b)所示，通过

$$E_g(\alpha, 1/k_F a_s, h_z, T) = k_B T, \quad (3.2.5)$$

来说明拓扑渡越区域。注意到， E_g 依赖于温度方程，可以联立方程(3.2.2)自洽的求解。因此，序参 Δ 随 Zeeman 场 h_z 的变化和零温(如图 3.5(a)所示)的情形相当不同。有限温度水平箭头线(图 3.4(b))相变如图 3.5(b)所示。相 A 和 C 有一个量子临界区域，该有限温度产生了许多准粒子激发。

3.2.3 SOC 费米气体的相分离

SOC 极化费米子中, SOC 和 Zeeman 场共同作用会导致在 Feshbach 共振附近两分量费米气体的基态相图出现稳定超流相或者相分离。观测 BCS-BEC 演化区域, 如图 3.6 画列出了主要的结果

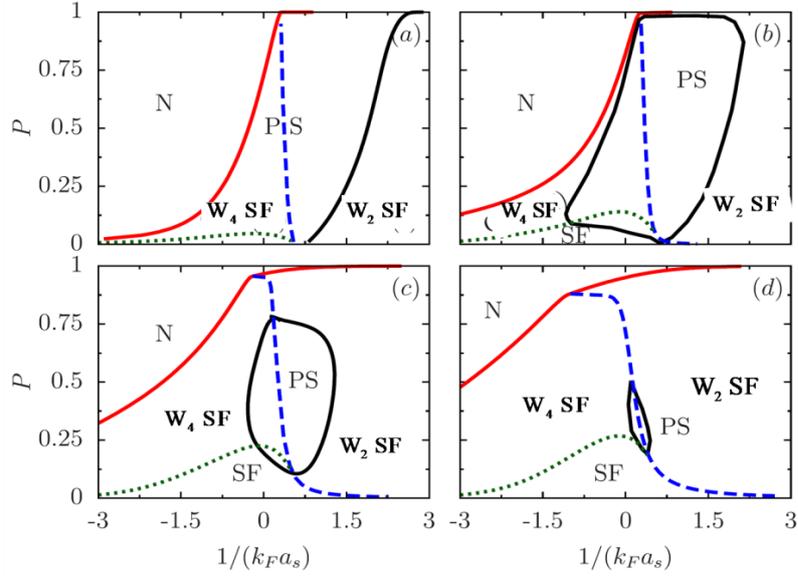


图 3.6 以占据非平衡和相互作用 $1/k_F a_s$ 为变量的基态相图, 其中 αk_F (a) 0.005, (b) 0.05, (c) 0.15, (d) 0.25。Normal (N), Phase separation (PS), Gapped superfluid (SF) Gapless superfluid ($W_{2/4}$ SF)。本图引自[40]

其中, 占据非平衡(极化率) $P = (N_\uparrow - N_\downarrow) / N$, 自旋轨道耦合 αk_F 取四个不同的值。首先, 能够清楚的看出 SOC 和占据非平衡 P 之间的竞争导致稳定的 GSF 和 PS 之间的竞争, 因此, 在任意给定的 P , 随着 SOC 的增加, 即使相互作用 $1/k_F a_s$ 很小, 系统最终变为 GSF。另一方面, 我们发现当 P 很小时, 因为 SOC 增加了态密度, 所以是稳定的 GSF 和 N 之间的竞争, 在 P 很大时, 是非稳的 GSF 和 N 之间的竞争。

上面的相图是通过解自洽方程(3.2. 2)和用等温压缩来判断其是否发生相分离。等温压缩系数矩阵如我们在第二章导出的两分量等温压缩系数(2.3. 29), 压缩系数矩阵元为

$$\kappa_{\sigma\sigma'}(T) = -\frac{\partial^2 \Omega}{(\partial \mu_\sigma \partial \mu_{\sigma'})}. \quad (3.2.6)$$

系统处于稳定相需要该项正定，与此直接相关的是热力学势关于 Δ 的曲率(将在第四章我们有详细推导) $\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta^2}$ 为正。当此项为负时，其均匀平均场解对应热力学势并非极小，而是亚稳态或者非稳态，对应非均匀超流相，如相分离。如图 3.7. 由于 SOC 和 h_z 之间的竞争，(a)-(c) 的热力学势出现了双阱的形状，因此其平均场解对应的是亚稳态(局域极小)或不稳定态出现了相分离。

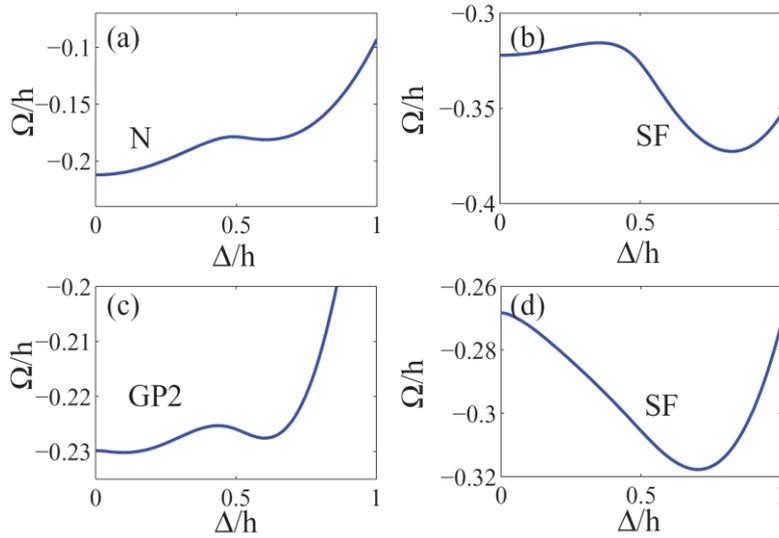


图 3.7 热力学势关于序参 Δ 的变化曲线，图 (a)-(d) 对应不同的 αk_F 和 h_z ，本图引自 [41]

3.3 小结

这一章我们主要介绍了极化 SOC 简并费米气体的一些性质。利用 SOC 费米气体的平均场理论，得到在 Nambu-Gorkov 自旋基下 BdG 形式的哈密顿量，通过么正变换将其对角化得到对角化的有效哈密顿量。由巨热力学势我们得到能隙方程和粒子数方程，通过数值自洽求解这两个方程，我们发现 SOC 增强超流配对，于此相反 Zeeman 场则是压制配对的形成，他们之间的竞争导致了更为丰富的相图。文献研究了 BSC-BEC 渡越，以及拓扑相变，尤其 SOC 和 Zeeman 场之间的竞争，还出

现了系统处于亚稳态和非稳态的相分离。在理论上通过求解自治方程，分析能谱我们可以确定其相边界，同时还利用等温压缩系数来判断是否出现相分离。

第四章 SOC 简并费米气体的热力学特性

在玻色气体中，基态有限动量的平面波相或条纹相，主要取决于粒子内和粒子间的散射长度。这两种相的转变可用 Dick 模型来描述，近来这个模型还用来寻找超固体相和通过 Kibble-Zurek 机制的淬火动力学研究缺陷的尺度律。但是，费米简并气体中物理完全不同，这种相互作用能使自旋极化依赖于动量，因此，当垂直的塞曼场将能隙打开，只有 s -波相互作用的相同能带中出现有效的 p -波对。利用这种原理在实验上寻找拓扑超导和 Majorana 零模。在超冷原子中自旋轨道耦合 (SOC) 能改变单粒子能带结构，因此，从根本上改变了简并费米气体中的 s -波超流，从而产生拓扑超流相变和与之相关的 Majorana 零模。这种相互作用导致拓扑超流的出现。如果反转对称性破缺，该系统还出现了有限动量的拓扑超流。这些拓扑超流已被广泛研究，但他们的热力学性质还很少涉及。

等温压缩系数 κ_T 广泛用于研究液体的流动性和固体的刚度，判断体系正常相到超流；从超流到固体以及从超固到莫特绝缘等物理相变。等温压缩系数和压强之间的关联系数压强指数 ν 正比于压强的维度。在热力学和统计物理实验中通过测量粒子数涨落来测定等温压缩系数，同时通过循环规则能够计算另外两个重要热力学量，体胀系数 α 和压强系数 β' 。自旋轨道耦合费米气体中自旋轨道耦合对等温压缩系数的影响已有相关研究，本章主要研究 SOC 和 Zeeman 场共存的简并费米气体的热力学特性，内容涉及反常等温压缩系数、压强和反常压强指数等。

4.1 理论模型

鞍点近似的平均场理论，忽略涨落等因素的影响，这样不能很好的描述低维如一维和二维系统的物理，所以我们承接第三章的 SOC 和 Zeeman 场共存的三维简并费米气体。在 SOC 简并费米气体平均场理论我们能够得到如(3.1. 8)的有效哈密顿量和方程(3.1. 12)的自洽方程。在巨正则系综，在解自洽方程时，平均粒子数 ($n = k_F^3 / 3\pi^2$) 确定，等温压缩系数(2.3. 29)可以直接写成[45-46]，

$$\kappa_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T = \frac{1}{n^2} \left(\left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,e} + \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,i} \right). \quad (4.1. 1)$$

等温压缩系数的贡献来自两部分，显式(用 e 标记)和隐式(用 i 标记)两部分，显式是粒子数密度对化学势的偏微分，因为序参 Δ 为化学势 μ 的隐函数，所以隐式可写为：

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,i} = \left(\frac{\partial n}{\partial \Delta}\right)_{T,e} \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i}, \quad (4.1.2)$$

由第二章的推导可知系统的热力学势为：

$$\Omega(T) = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}}) - \frac{V|\Delta|^2}{g} - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \ln \left(2 \cosh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2} \right) \right). \quad (4.1.3)$$

所以显式部分

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,e} = \left(-\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2}\right)_{T,e}, \quad (4.1.4)$$

隐式部分

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,i} = \left(\frac{\partial n}{\partial \Delta}\right)_{T,e} \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i} = \left(\frac{-\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu}\right)_{T,e} \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i}. \quad (4.1.5)$$

我们定义能隙方程 $f(\Delta, \mu) \equiv \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} = 0$ ，利用 $df = \left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right)_{\Delta} d\mu + \left(\frac{\partial f}{\partial \Delta}\right)_{\mu} d\Delta = 0$ ，有

$$\left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i} = -\left(\frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right)_{\Delta}}{\left(\frac{\partial f}{\partial \Delta}\right)_{\mu}}\right) = -\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu \partial \Delta} / \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta^2}\right), \quad (4.1.6)$$

同理，隐式部分也可以直接由热力学势计算，

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,i} &= \left(\frac{-\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu}\right)_{T,e} \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i} \\ &= \left(\frac{-\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu}\right)_{T,e} \left(-\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu \partial \Delta}\right) / \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta^2}. \\ &= \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu}\right)_{T,e}^2 / \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta^2} \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

这样计算等温压缩系数，只需计算下面几个式子，

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,e} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(\frac{\partial \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2k_B T} \right) \right)}{\partial \mu} \left(\frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \mu} \right) + \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2k_B T} \right) \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \mu^2} \right) \right), \quad (4.1.8)$$

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu} = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta \partial \mu} \right) + \frac{\partial \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \right)}{\partial \Delta} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \mu} \right), \quad (4.1.9)$$

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial^2 \Delta} = \frac{-2}{g} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{\partial \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \right)}{\partial \Delta} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta} + \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta^2} \right). \quad (4.1.10)$$

其中需要用到

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \mu} &= -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} Q_{\mathbf{k}}^\lambda, & \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta} &= \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} S_{\mathbf{k}}^\lambda \\ \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial^2 \mu} &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} \left(Q_{\mathbf{k}}^\lambda - \frac{\lambda \xi_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}}}{E_0^3} - \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^\lambda}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} \right)^2 \right) \\ \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta^2} &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} \left(S_{\mathbf{k}}^\lambda - \left(\frac{\Delta S_{\mathbf{k}}^\lambda}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} \right)^2 - \frac{\lambda \Delta^2 h_z^4}{E_0^3} \right). \\ \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^\lambda}{\partial \Delta \partial \mu} &= \frac{\Delta \xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} \left(\frac{Q_{\mathbf{k}}^\lambda S_{\mathbf{k}}^\lambda}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} + \lambda \frac{h_z^2 P_{\mathbf{k}}}{E_0^3} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \Delta} \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \right) &= \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}^\lambda} S_{\mathbf{k}}^\lambda Y_{\mathbf{k}}^\lambda \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

我们在上面计算中引入了下面的定义，

$$Y_{\mathbf{k}}^\lambda = \frac{\left(1 - \tanh^2 \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2k_B T} \right) \right)}{2k_B T} \quad (4.1.12)$$

$$P_{\mathbf{k}} = h_z^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2$$

$$Q_{\mathbf{k}}^\lambda = 1 + \lambda P_{\mathbf{k}} / E_0$$

$$S_{\mathbf{k}}^\lambda = 1 + \lambda h_z^2 / E_0$$

至此，就得到等温压缩系数 $\kappa_T = \kappa_{T,e} + \kappa_{T,i}$ ，其中，

$$\kappa_{T,e} = \frac{\sum_{\mathbf{k},\lambda} \left((Y_{\mathbf{k}}^{\lambda} - X_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \left(-\frac{\xi_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}} \right)^2 + X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \left(Q_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \lambda \frac{(\xi_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}})^2}{E_0^3} \right) \right)}{2n^2V} \quad (4.1.13)$$

$$\kappa_{T,i} = \frac{\left(\sum_{\mathbf{k},\lambda} \xi_{\mathbf{k}} (X_{\mathbf{k}}^{\lambda} - Y_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \frac{Q_{\mathbf{k}}^{\lambda} S_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}} + \lambda X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \frac{h_z^2 P_{\mathbf{k}}}{E_0^3} \right)^2}{2n^2V \left((X_{\mathbf{k}}^{\lambda} - Y_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \frac{(S_{\mathbf{k}}^{\lambda})^2}{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}} - \lambda X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \frac{h_z^4}{E_0^3} \right)} \quad (4.1.14)$$

等式(4.1.13)和等式(4.1.14)是本论文的两个重要公式。为了方便我们称 $\kappa_{T,e}$ 为显等温压缩系数， $\kappa_{T,i}$ 为隐等温压缩系数。在做数值计算时，像第三章所讲，以费米能为单位做无量纲化处理，其中等温压缩系数以 $1/(nE_F)$ 为单位[43]。根据热力学势 $\Omega = -PV$ ，同样可以计算系统的压强为

$$P = -\frac{\Omega}{V} = \frac{|\Delta|^2}{g} + \frac{1}{V\beta} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \ln \left(2 \cosh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2} \right) \right) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \quad (4.1.15)$$

由第二章的定义(2.3.30)，压强指数为一无量纲的量。至此，SOC和Zeeman场共存的三维简并费米气体所要计算的物理就都可由巨热力学势导出。为使上面的分析更加清晰，需要对一些极限情况逐一讨论，下面我们解析讨论等温压缩系数、压强及压强指数在各种极限的情形。

4.2 解析分析

4.2.1 等温压缩系数

上一小节我们分别从热力学势求出了等温压缩系数、压强和压强指数，这一小节就等温压缩系数的一些极限情形做一些讨论。

(1) 在没有相互作用即为自由粒子情形， $\Delta=0$ ，我们有， $E_0 = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + h_z^2)}$ ，

$E_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \xi_{\mathbf{k}} + \lambda \sqrt{|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + h_z^2}$ ，那么计算等温压缩系数所需的

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \mu} = -1, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \mu^2} = 0, \quad \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \Delta} = 0, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \Delta^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \Delta \partial \mu} = 0.$$

由粒子数密度方程可知，

$$\begin{aligned}
 n &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right) \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} 1 + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2k_B T} \right) \frac{\partial E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{\partial \mu} \right) \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{1}{\exp \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{k_B T} \right) + 1} \right)
 \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

等式(4.2.1)表示, 在没有相互作用的情形, 自由费米子满足费米-狄拉克统计。由等温压缩系数定义, 序参是化学势的隐函数, 才有隐等温压缩系数 $\kappa_{T,i}$, 现在序参 Δ 为零, 显然 $\kappa_{T,i} = 0$, 同时也可以通过计算,

$$\kappa_{T,i} = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,i} = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta \partial \mu} \right)_{T,e} \bigg/ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \Delta^2} = \frac{1}{n^2} * 0 \bigg/ \frac{-2}{g} = 0. \tag{4.2.2}$$

这样, 没有相互作用的等温压缩系数主要来自于显等温压缩系数中粒子数对化学势的偏导, 当温度为零时

$$\kappa_T = \kappa_{T,e} = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,e} = \frac{1}{2n^2 V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \delta(E_{\mathbf{k}}^{\lambda}) = \frac{1}{2n^2 V} \rho(\mu). \tag{4.2.3}$$

其中, $\rho(\mu) \propto \sqrt{\mu}$ 是费米面上的态密度, 我们知道金属相态密度非零, 绝缘相态密度为零, 这样我们就可以利用等温压缩系数来判断 Mott 绝缘相甚至超固相[47-51]。二维无质量狄拉克费米子有狄拉克锥的结构和态密度在锥附近是线性色散关系[52], 三维情形, 态密度狄拉克点附近是二次型的色散关系, 所以通过等温压缩系数也可以寻找无质量狄拉克费米子[52]。

(2) 没有 SOC 和 Zeeman 场, 即 $\alpha k_F = 0, h_z = 0$, 此时零温压缩系数可以解析求解, 此时是标准的 BCS 理论方程。 $E_{\mathbf{k}}^+ = E_{\mathbf{k}}^- = E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ 计算等温压缩系数所需的,

$$\frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \mu} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial \mu^2} = \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}^2} \right), \quad \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \Delta} = \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}}, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial \Delta^2} = \frac{\left(1 - \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}^2} \right)}{E_{\mathbf{k}}}, \quad \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial \Delta \partial \mu} = \frac{\Delta \xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^3}$$

粒子数密度为 $n = 1 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh(\beta E_{\mathbf{k}} / 2)$, 显和隐等温压缩系数分别为

$$\kappa_{T,e} = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,e} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \left(\left(\frac{1 - \tanh^2\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right)}{2k_B T} - \frac{\tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right)}{E_{\mathbf{k}}} \right) \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 + \frac{\tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right)}{E_{\mathbf{k}}} \right)}{n^2 V},$$

和

$$\kappa_{T,i} = \frac{1}{n^2 V} \left(\sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{\beta \left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)\right)}{2} \right) \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^2} \right)^2 / \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}}^2} \left(\frac{\tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{\beta \left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)\right)}{2} \right) \right)$$

当温度 $T \rightarrow 0$, 则有 $\frac{\tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)}{E_{\mathbf{k}}} \rightarrow 1$, $\frac{\beta \left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)\right)}{2} \rightarrow 0$, 所以显和隐等温压

缩系数可以简化为

$$\kappa_{T,e} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}^3} \right)}{n^2 V}, \quad (4.2.4)$$

$$\kappa_{T,i} = \frac{1}{n^2 V} \left(\sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^3} \right) \right)^2 / \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}}^3} \right). \quad (4.2.5)$$

为解析求解(4.2.4)、(4.2.5), 我们定义两个积分,

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^3} \right) = \frac{m^{3/2} K(x)}{\sqrt{2\pi^2} \varepsilon_g^{1/2}} \\ I_2 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}^3} = m^{3/2} \frac{2\varepsilon_g E(x) + (\mu - \varepsilon_g) K(x)}{\sqrt{2\pi^2} \Delta^2 \varepsilon_g^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

$$x = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mu}{\varepsilon_g} \right)$$

其中 $\varepsilon_g = \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 为动量为零的能量, $K(x)$ 和 $E(x)$ 分别为第一类和第二类完全椭圆积分, 利用积分定义, 等温压缩系数及其显式和隐式分别为:

$$\begin{aligned}\kappa_{T,e} &= \frac{1}{n^2 V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left(1 - \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right) = \frac{I_2 \Delta^2}{n^2} \\ \kappa_{T,i} &= \frac{1}{n^2 V} \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^3} \right)^2 / \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}^3} \right) = \frac{(I_1)^2}{n^2 I_2}. \\ \kappa_T &= \frac{I_2 \Delta^2}{n^2} + \frac{(I_1)^2}{n^2 I_2}\end{aligned}\quad (4.2.7)$$

无量纲化后, 利用(4.2.7)可以解析求出等温压缩系数如图 4.1 所示。从 4.1 可以看出, 数值和解析在相互作用 $1/k_F a_s$ 从 -2 到 4 之间吻合的很好, 但随相互作用很大到 BEC 极限逐渐会有些差别。

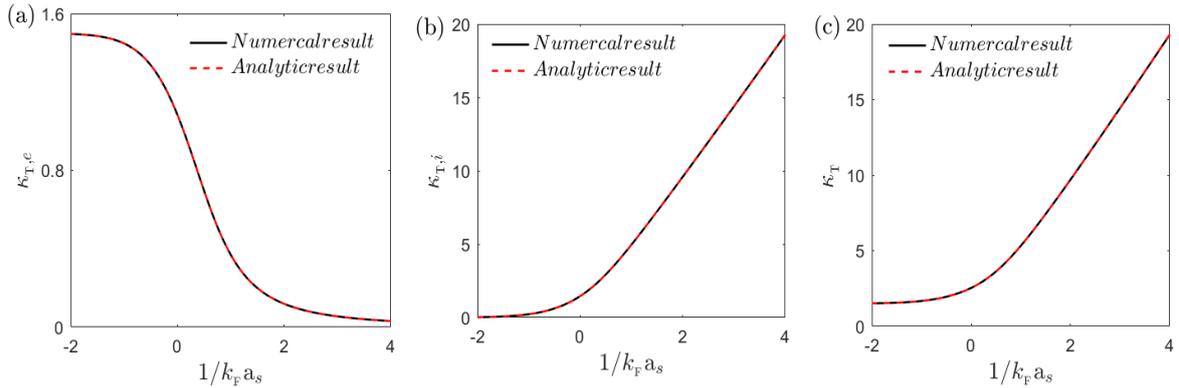


图 4.1 在 $\alpha k_F = 0, h_z = 0$, 等温压缩系数随相互作用变化曲线, 数值和解析的等温压缩系数对比, (a) 为显等温压缩系数 $\kappa_{T,e}$, (b) 为隐等温压缩系数 $\kappa_{T,i}$, (c) 为等温压缩系数 κ_T , 红色虚线为解析结果, 黑色实线为数值结果。

接下来我们分析没有 SOC 和 Zeeman 场分别在 BCS 和 BEC 极限情形。(I) 在 BCS 极限 $\Delta=0$, $\mu = E_F$, $E_{\mathbf{k}} = |\xi_{\mathbf{k}}|$, 此时隐式等温压缩系数 $\kappa_{T,i}=0$, 主要的贡献来自显式部分:

$$\begin{aligned}
 \kappa_T &= \kappa_{T,e} = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T,e} \\
 &= \frac{2}{n^2 V} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_{\mathbf{k}}) \\
 &= \frac{2}{n^2 (2\pi)^3} \iiint \delta(E_{\mathbf{k}}) d^3 \mathbf{k} \\
 &= \frac{1}{\pi^2} \sqrt{2\mu} \\
 &= \frac{1}{\pi^2} \kappa_F
 \end{aligned} \tag{4.2.8}$$

(II) 在 BEC 极限, $1/k_F a_s \gg 1$, $\mu \gg \Delta$, $E_{\mathbf{k}} \approx |\xi_{\mathbf{k}}|$, 我们有下面的解[62],

$$\Delta = \frac{2\sqrt{n\pi}}{\sqrt{a_s m}}, \quad \mu = \frac{\varepsilon_b}{2} + \frac{a_s n \pi}{m}. \tag{4.2.9}$$

其中分子结合能 $\varepsilon_b = -(ma_s^2)^{-1}$ 。利用上面的结果,

$$\kappa_{T,e} \rightarrow 0, \quad \kappa_{T,i} \rightarrow \sqrt{2m^{3/2}} \sqrt{-\mu} / (\pi n^2). \tag{4.2.10}$$

在 BEC 极限, 化学势对结合能起作用, 不依赖于粒子数密度, 所以粒子数密度对隐式部分没有作用, 从(4.2.10)我们可以看出 $\kappa_T \propto 1/a_s$, 这就是为什么在 BEC 极限, 等温压缩系数和相互作用 $1/k_F a_s$ 成线性关系。

4.2.2 压强和压强指数

在 4.1 中我们从热力学势得到压强, 为讨论方便, (4.1.15)也可以写为

$$P = \frac{|\Delta|^2}{g} + \frac{k_B T}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \ln(1 + \exp(-E_{\mathbf{k}}^\lambda / k_B T)) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2} \right). \tag{4.2.11}$$

当温度 $T \rightarrow 0$, 压强

$$P = \frac{|\Delta|^2}{g} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2} \right), \tag{4.2.12}$$

相互作用需重整化计算(3.1.13), 压强可重新写为

$$P = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left(\frac{E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2} - \xi_{\mathbf{k}} - \frac{|\Delta|^2}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) + \frac{m|\Delta|^2}{4\pi a_s}. \tag{4.2.13}$$

无量纲化, $\tilde{P} = \frac{P}{nE_F}$, $\tilde{E}_q^\lambda = \frac{E_k^\lambda}{E_F}$, $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{E_F}$, $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta}{E_F}$, $q = \frac{k}{k_F}$, 求和化积分, 我们能够得到

系统的零温压强为:

$$\tilde{P} = \frac{3}{8\pi} \iiint \left\{ \frac{\tilde{E}_k^\lambda}{2} - \frac{|\Delta|^2}{2q^2} - (q^2 - \mu) \right\} + \frac{3\pi m}{8a_s k_F} |\Delta|^2 \quad (4.2.14)$$

(1) 在 BCS 极限, $\Delta=0$, $\mu \approx 1$, $\tilde{E}_k^\lambda = |\varepsilon_k - 1|$, 求和化积分 $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{3}{2} \int_0^\infty r^2 dr$

所以可得无量纲的压强

$$\tilde{P} = \frac{3}{2} \int r^2 \left\{ |r^2 - 1| - (r^2 - 1) \right\} dr, \quad (4.2.15)$$

其中,

$$|r^2 - 1| - (r^2 - 1) = \begin{cases} 0, & r^2 - 1 \geq 0 \\ 2(1 - r^2), & r^2 - 1 < 0 \end{cases} \quad (4.2.16)$$

这样我们得到在零温 BCS 极限下的压强为

$$\tilde{P} = \frac{3}{2} \int_0^1 2r^2(1 - r^2) dr = 3 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) = \frac{2}{5}. \quad (4.2.17)$$

在上一节我们得到在 BCS 极限的等温压缩系数 $\kappa_T = \frac{1}{\pi^2} \kappa_F$, (以 $1/nE_F$ 为单位无量纲化, $\kappa_T=3/2$), 由压强指数的定义(2.3.30), 此时的压强指数 $\nu = \frac{5}{3}$, 这个指数类似于其他一些物理中广泛探究的常数, 如随相互作用改变的, Wilson 比率[53]、Wiedemann-Franz 定律 [54-58]和 Grüneisen 常数[59], 所以压强指数反映了多体相互作用对超流的影响。

(2) 在 BEC 极限, $1/k_F a_s \gg 1$, $\mu \gg \Delta$, 因为宏观粒子数占据低能态, 动量 $k \neq 0$ 非常小, 在低阶近似, 我们忽略所用动量不等于零的项, 基态能为 $E_0 = \frac{g_0}{2V} N_0^2 \approx \frac{g_0}{2V} N^2$ [1], 其中 N_0 为动量为零的粒子数, $g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$ 。与理想气体的

BEC 不同, 弱相互作用玻色气体在零温压强并没有消失, $P \equiv -\frac{\partial E_0}{\partial V} = \frac{g_0}{2} n^2$, 其中,

$n = \frac{N}{V}$, 总的粒子数 N 是定的, 所以 $P \propto \frac{1}{V^2}$, 由等温压缩系数定义

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right) = \frac{1}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial P} \right) = \frac{1}{g_0} \left(\frac{1}{n} \right)^2. \quad (4.2.18)$$

那么在 BEC 极限压强指数

$$\nu = \frac{1}{\kappa_T P} = 2. \quad (4.2.19)$$

这两种极限情形，我们在下一节的数值计算中都能很好的吻合。另外等式(4.1.13)和等式(4.1.14)在没有 Zeeman 场即 $h_z=0$ ，就直接回到文献[43]只有 SOC 的结果。有意义的一点是，SOC 和 Zeeman 场共同作用，激发谱如我们在第三章讨论的在 Weyl 超流激发能谱将出现无能隙的情形，同时等温压缩系数也不再是永远大于零，有小于零的区域，系统相应出现亚稳态和非稳态即相分离，接下来的数值结果我们将会论述这些特征。

4.3 数值结果分析

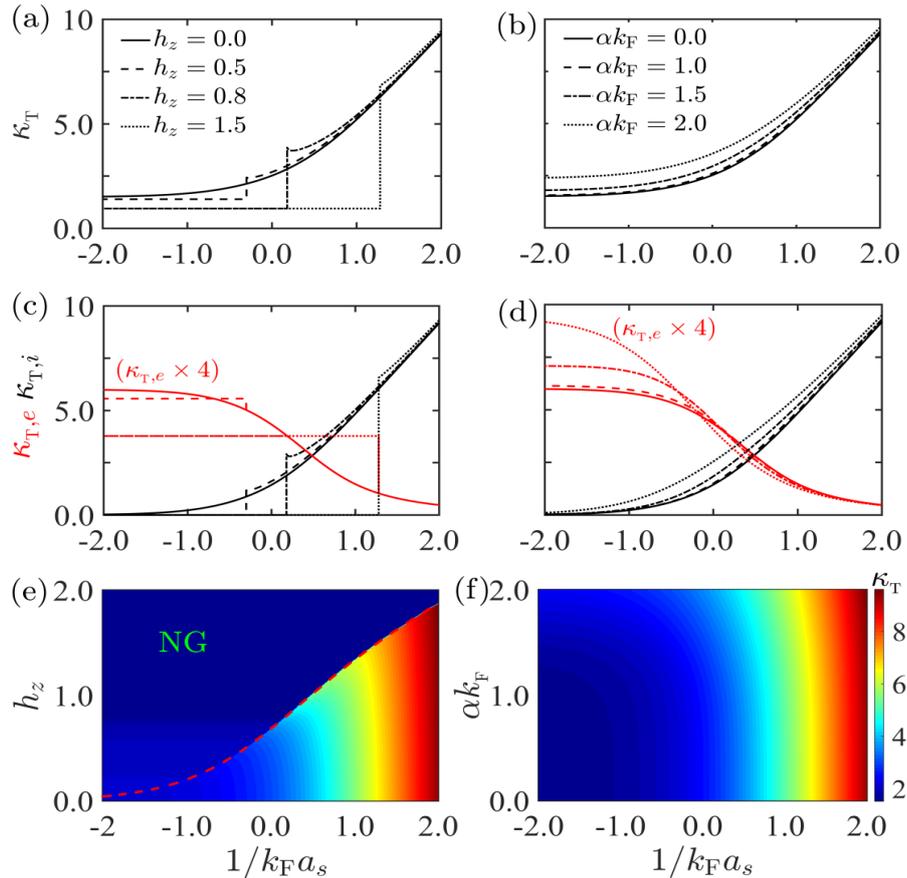


图 4.2 (a) 和 (b) 为只有 Zeeman 场 (左) 和 SOC (右) 的等温压缩系数。(c) 和 (d) 为等温压缩系数的两部分显式 ($\kappa_{T,e}$) 和隐式 ($\kappa_{T,i}$)，其中为显示清晰显式 ($\times 4$)，(e) 和 (f) 等高线图分别为等温压缩系数在不同 Zeeman 场 (SOC) 随相互作用的变化，在 NG 相， $\Delta=0$ 。

我们在第三章已经讨论过以费米能为单位，自洽求解能隙方程和粒子数方程来确定序参 Δ 和化学势 μ [39-41]。在数值计算做无量纲化时，第二节解析分析已经给出，等温压缩系数以 $\kappa_0=1/nE_F$ 为单位，压强以 $P_0=nE_F$ 为单位，压强指数为没有量纲的量。

首先，我们考虑如图 4.2 所示，SOC 和 Zeeman 场单独作用的情形。有很强 Zeeman 场，BCS 这边，当 $|h_z|>\Delta$ ，如我们在第三章的讨论，超流序参会被完全破坏 $\Delta=0$ ，因此出现了 Normal 相。在仅有 Zeeman 场的 BCS 极限，我们发现当 $h_z=0$ ， $\kappa_T=1.5$ (等温压缩系数. (4.2. 8)以 $1/nE_F$ 为单位无量纲化， $\kappa_T=3/2$)。 $h_z > 0.8$ 出现完全极化， $\kappa_T=0.945$ ，这与理论预测值 $2^{3/2}$ 相吻合。这些结果同时也证明了，SOC 和 Zeeman 的作用相反，分别是增强和减弱密度态。其次，在 BEC 这边， $\kappa_T \propto 1/k_F a_s$ 。由图 4.2(a)和(b)可知等温压缩系数在 BCS 和 BEC 极限完全和我们在上一节理论分析中得到的结果一致。

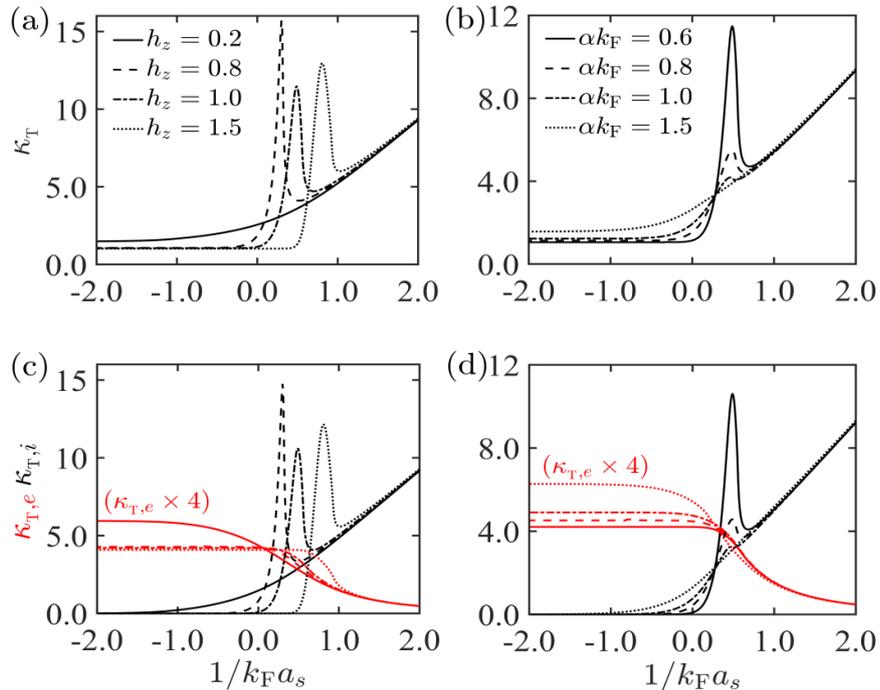


图 4.3 (a) 和 (b) 是等温压缩系数在 SOC 和 Zeeman 场共同作用下随相互作用的变化，(c) 和 (d) 为对应的显示和隐式等温压缩系数。其他参数 (a) 和 (c) SOC $\alpha k_F = 0.6$ ，(b) 和 (d) Zeeman 场 $h_z = 1.0$

其次，我们考虑 SOC 和 Zeeman 场共同作用的情形，其物理却完全不同。如在图 4.3 所示，我们发现，在一些参数区域，隐等温压缩系数会出现了一个大约一个数量级显著增强的反常行为，这个增强一般出现在 Zeeman 场强于 SOC 的情形。在图 4.3 (c)和(d)我们发现，这个反常尖峰来自等温压缩系数隐式部分，因为显等温压缩系数随相互作用 $1/k_F a_s$ 总是光滑的曲线。为进一步探究产生反常尖峰的原因，如图 4.4，我们画了等温压缩系数隐式部分(4.1. 14)的分子和分母随相互作用的变化

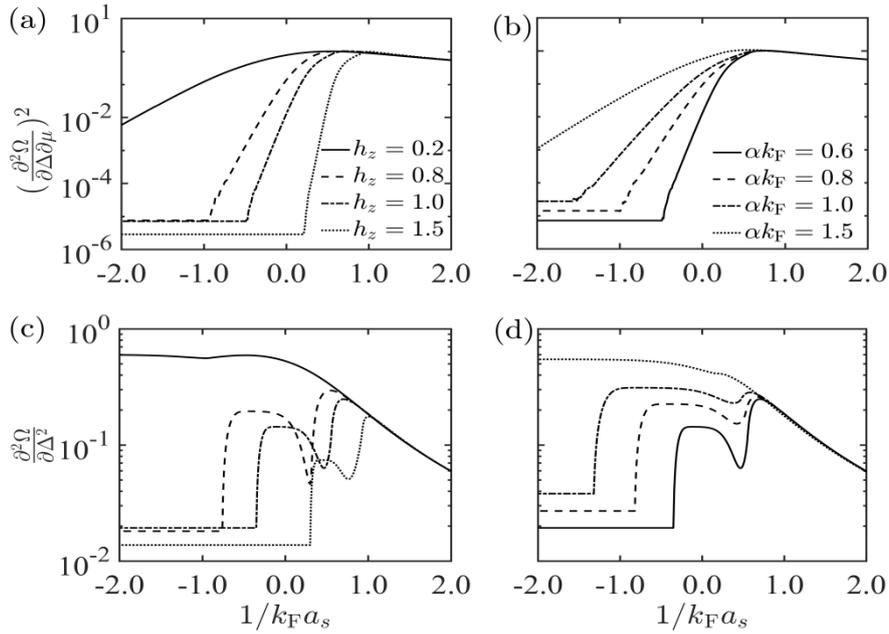


图 4.4 隐式等温压缩系数 κ_T 的分子和分母，在不同 SOC 和 Zeeman 场下随相互作用的变化，当

$$\Delta=0, \kappa_{T,i} = 0。$$

曲线，发现其分子如图 4.4(a)-(b)一直是平滑的曲线，但是随着相互作用从 BCS 到 BEC 的变化，其分母如图 4.4(c)-(d)展现了一些反常的行为。分母中的局域极小正是导致等温压缩系数反常行为的直接原因。这些反常行为一般发生在无能隙超流区域，为说明这一点，我们画了如 4.5(a)-(b)在图 4.3(a)-(b)所对应的三个峰的激发能谱，发生在有两个 Weyl 点的无能隙超流区域，随着散射长度的增加，Weyl 点被破坏，超流进入拓扑平庸的完全有能隙超流态。因为 $\kappa_T \propto 1/k_F a_s$ ，此时的等温压缩系数非常大。在图 4.5(c)-(d) 我们根据第三章所讨论的按照 Weyl 点的个数分类的相图，根据

$\kappa_T < 0$ ，有一个很小的相分离区域，在这个区域，热力学势出现了双阱的形状[41]，系统进入亚稳态或者非稳态。由于有效的 p -波对，SOC 会抑制这种相分离的出现。在这个区域附近，通过调节 Zeeman 场的大小，我们发现了完全有能隙的超流和两个 Weyl 点无能隙超流的边界，隐等温压缩系数如图 4.5(c)所示，显著增强，在特殊区域，峰的位置主要依赖于 Zeeman 场。因此我们可以认为这种反常行为是相分离的残余效应，发生在有能隙超流相和无能隙 Weyl 相边界附近。

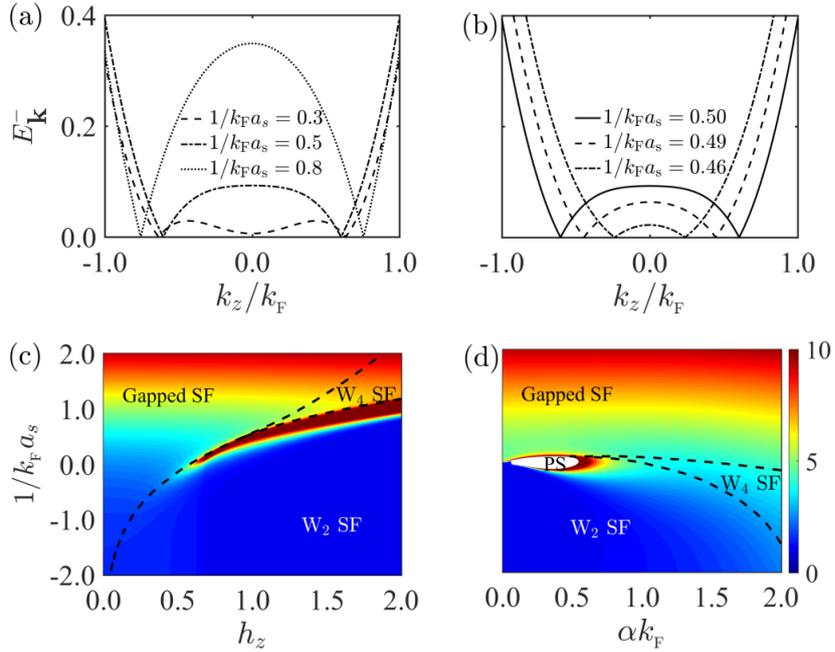


图 4.5 (a) 和 (b) 为对应图 5.2 中峰的位置的激发能谱 $E_{\mathbf{k}}^-$ ，分别在 $k_x = k_y = 0$ 随 k_z 的变化，其中 $E_{\mathbf{k}}^- = 0$ 对应 Weyl 点。(c) 和 (d) 等温压缩系数和相图，(d) 中的白色区域为 $\kappa_T < 0$ 相分离区域。

$W_{2/4}$ SF 指两个/四个点的 Weyl 超流。

最后，我们研究反常等温压缩系数带来的重要影响，在第二章已经给出了压强、压强指数的概念，并且在上一小节，我们还解析分析了压强和压强指数的极限情形，接下来如图 4.6 所示，画出了压强和压强指数随相互作用的变化曲线。我们发现压强指数 ν 在 BCS-BEC 渡越之间，出现了一个局域极小，这个极小值的位置和振幅依赖于 Zeeman 和 SOC 的大小，在等温压缩系数反常的地方，发现压强指数大幅度减小。对比如图 4.6，在插图中，压强从 BCS 极限到 BEC 极限平滑变化，所以可以断定压强指数的反常行为来自等温压缩系数。特别在 BCS 极限，我们发现压强和等温压缩系数强烈依赖于 SOC 和 Zeeman 场，但是压强指数却主要由多体相互作用来

决定，SOC 和 Zeeman 场对其影响很弱，这一点也揭示了简并费米气体中等温压缩系数隐式部分的重要作用。

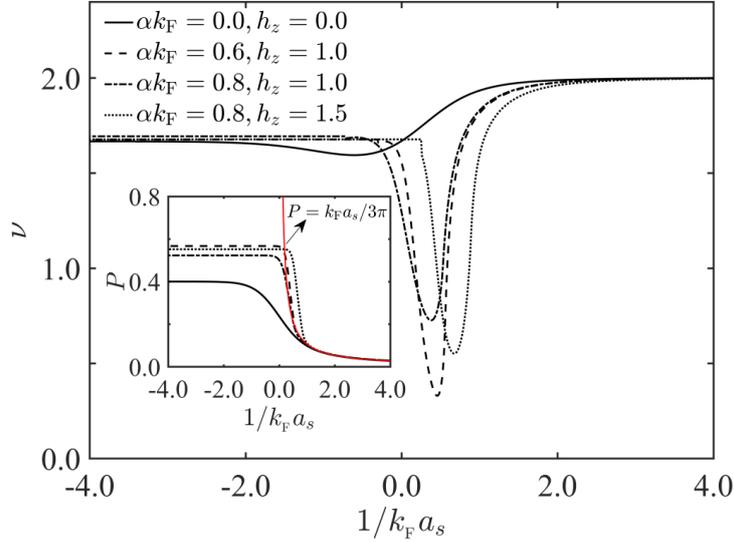


图 4.6 简并费米气体中的压强指数 ν ，小插图对应的是压强。

4.4 小结

从 Gibbs-Duhem 方程导出的等温压缩系数来自依赖于化学势的显等温压缩系数和依赖于序参的隐等温压缩系数两部分，在 BCS 和 BEC 极限，等温压缩系数有简单的意义，在 BCS 极限，等温压缩系数和费米面态密度成正比，在 BEC 极限正比于 $1/a_s$ 。在这两种极限之间，在 SOC 和 Zeeman 共同作用区域，能观测到大约一个数量级放大的等温压缩系数的反常行为，可以理解为相分离的残余效应。这种等温压缩系数的反常行为也导致了表征多体相互作用的压强指数的反常行为。这些研究为探索其他热力学特性铺平了道路，其中包括非零动量的无能隙超流等[45]。在实验上，增强一个数量级的等温压缩系数非常有意义，可以通过来自 Newton-Laplace 方程 $c \propto \sqrt{\kappa_T}$ 的反常声速和通过 $\langle \delta n^2 \rangle \sim \kappa_T k_B T$ [60–61] 中密度涨落来测定。

SOC 和 Zeeman 场共存的简并费米气体的反常等温压缩系数和压强指数是我们这一章主要研究的内容。我们将在下一章探究光晶格中简并费米气体等温压缩系数和压强指数的反常行为。在光晶格中，平均占据数 ($0 \leq n \leq 2$) 和粒子空穴对称性也是两个重要的参数。在这种情形由于粒子空穴对称性，在 $n > 1$ 等温压缩系数的粒子数密度将被重新定义，用空穴密度来代替。

第五章 光晶格中 SOC 简并费米气体的热力学特性

光晶格是简并费米气体研究的重要平台，因其可调控性一直倍受物理学家的青睐。上一章我们研究了自由空间 SOC 简并费米气体的热力学特性，鉴于连续模型和光晶格中 SOC 简并费米气体的不同，在光晶格中，粒子数密度和粒子空穴对称性等起到关键作用。等温压缩系数中的粒子数密度要根据粒子空穴关于半满对称重新定义为粒子数密度或者是空穴密度。本章我们主要研究立方光晶格中 SOC 简并费米气体的等温压缩系数、压强和压强指数等热力学特性。

5.1 理论模型和方法

5.1.1 理论模型

我们考虑囚禁在立方光晶格中具有两维 SOC 的两分量简并费米气体，其哈密顿量的单粒子部分，

$$\hat{h}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \chi_x \sigma_x \hat{P}_x + \chi_y \sigma_y \hat{P}_y + V(\mathbf{x}), \quad (5.1.1)$$

其中 m 是原子质量， \hat{P} 是动量算符， $\chi_{x/y}$ 表示沿 x, y 方向的 SOC 强度，本文我们研究 x, y 方向的 Rashba SOC[24, 65-66]，沿 x, y 方向 SOC 强度一样 $\chi_{x/y} = \chi$ ， $\sigma_{x,y,z}$ 为 Pauli 矩阵。

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{\eta=x,y,z} V_\eta \sin^2(k_0 \eta), \quad (5.1.2)$$

是由三束驻波形成的简立方光晶格束缚势，其中激光的波长为 λ ，波矢为 $k_0 = 2\pi/\lambda$ ，相应的晶格常数为 $a = \pi/k$ ，光晶格深度 V_η 正比于原子极化率与激光强度的乘积。设非阿贝尔规范势 $\mathbf{A} = -m\chi(\sigma_x, \sigma_y, 0)$ [67-70]，则单粒子哈密顿量(5.1.1)

可重新表示为，

$$\hat{h}_0 = \frac{(\hat{P} - \mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{x}), \quad (5.1.3)$$

其中，忽略了常数项 $m\alpha_x^2 \sigma_x^2 + m\alpha_y^2 \sigma_y^2$ ，所以单粒子哈密顿量的二次量子化形式为：

$$\hat{H}_0 = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{h}_0 \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}, \quad (5.1.4)$$

其中, $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})(\hat{\psi}(\mathbf{x}))$ 是费米场产生(湮灭)算符, 满足费米-狄拉克统计。当 \mathbf{A} 在晶格尺度上近似均匀时, 我们可以利用 Peierls 替换得到紧束缚近似下的单粒子哈密顿量 [71-72],

$$\hat{H}_0 = \sum_{\langle i, i+\eta \rangle, \sigma, \sigma'} \left(t_\eta \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger R_\eta^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i+\eta, \sigma'} + H.c. \right)_{\sigma\sigma'}, \quad (5.1.5)$$

其中如图 5.1(a)所示, t_η 为近邻格点原子的跃迁矩阵元, $R_\eta^{\sigma\sigma'}$ 为 Peierls 相 $R_\eta = e^{-\frac{i}{\hbar} A_\eta a}$ 的自旋矩阵元, 对角项为自旋保护的跃迁, 非对角项为自旋轨道耦合引起的自旋翻转。令 $-\frac{i}{\hbar} A_\eta a = i\alpha_\eta \sigma_\eta$, $\alpha_\eta = m\chi_\eta \pi / \hbar k_0$ 为光晶格中重新定义的沿 $\eta(x, y)$ 方向自旋轨道耦合的强度。跃迁矩阵做级数展开为 $R_\eta = e^{i\alpha_\eta \sigma_\eta} = \cos(\alpha_\eta) \hat{I} + i \sin(\alpha_\eta) \sigma_\eta$, 当 α_η 很小, $R_\eta \approx \hat{I} + i\alpha_\eta \sigma_\eta$, 这里 \hat{I} 为单位矩阵, 引入沿 z 方向的 Zeeman 场,

$$\hat{H}_z = \sum_i \mu_\sigma \hat{n}_{i\sigma}. \quad (5.1.6)$$

其中 $\mu_\uparrow = \mu + h_z$, $\mu_\downarrow = \mu - h_z$, 代表占据非平衡。 $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$, $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$, $\hat{n}_{i\uparrow}(\hat{n}_{i\downarrow})$ 为 i 格点上自旋向上(向下)的粒子数算符。

另外, 考虑单格点吸引相互作用, 为保证粒子空穴对称性, 相互作用哈密顿量为 [63-64],

$$\hat{H}_I = -U \sum_i \left(\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (5.1.7)$$

其中, $-U (U > 0)$ 为吸引相互作用, 其大小由矩阵元 $U = g \int d\mathbf{x} |u(\mathbf{x})|^4$ 决定, 相互作用强度可由 Feshbach 共振调节其大小。在光晶格中动量做 π/a 的截断, 限定在第一布里渊区, 这样动量 \mathbf{k} 是有限值, g 不需要像连续模型那样做重整化的计算。所以, 在立方光晶格中, 既有 SOC 又有沿 z 方向 Zeeman 场共存的简并费米气体的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_z + \hat{H}_I \\ &= \sum_{\langle i, i+\eta \rangle, \sigma, \sigma'} \left(t_\eta \hat{c}_{i, \sigma}^\dagger R_\eta^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i+\eta, \sigma'} + H.c. \right)_{\sigma\sigma'} + \sum_i \mu_\sigma \hat{n}_{i\sigma} - U \sum_i \left(\hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (5.1.8)$$

下一节我们将介绍利用平均场理论来研究该模型。

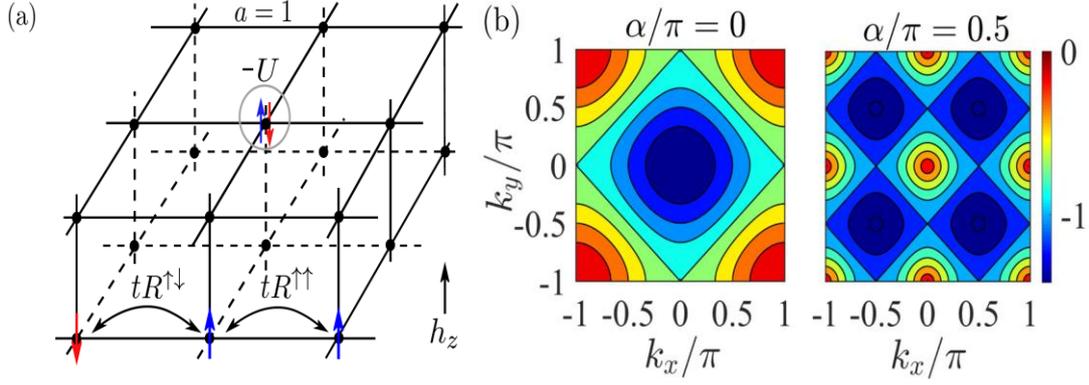


图 5.1 (a) 三维光晶格模型(在本文晶格长度 $a=1$), 近临格点之间的跃迁为 $tR^{\sigma\sigma'}$ (哈密顿量 (5.1. 8)), 格点相互作用为 $-U(U>0)$ (b) 当粒子能谱中能量低的分支的能带结构 $t=1, h_z=0$, 没有 SOC (左), 右面 SOC $\alpha=\pi/2$ 。左图菱形的马鞍状图为半满填充没有 SOC 的费米面, 右图在 SOC 下出现了四个菱形。

5.1.2 平均场理论

在平均场理论近似下, 我们定义忽略相位像的序参, 取为实数 $\Delta=U\langle\hat{c}_{i,\downarrow}\hat{c}_{i,\uparrow}\rangle$, 如在第二章(2.1.5)所介绍的 Hartree-Fock 近似, 单格点吸引相互作用项可写为

$$\hat{H}_I = -U \sum_i \left(\begin{array}{l} \Delta^* \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Delta \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \frac{|\Delta|^2}{U} \\ + \frac{(n-1)}{2} (\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}) \end{array} \right). \quad (5.1.9)$$

利用,

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, & \hat{c}_{j\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \\ \hat{c}_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, & \hat{c}_{j\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \end{aligned}, \quad (5.1.10)$$

将哈密顿量 (5.1.8) 变换到动量空间 $\mathbf{k}=(k_x, k_y, k_z)$, 其 Bogoliubov-de-Gennes(BdG) 形式的有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{BdG} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} (\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger M_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}} + 2\xi_{\mathbf{k}}) + \frac{V|\Delta|^2}{U}. \quad (5.1.11)$$

在 Nambu-Gorkov 自旋基 $\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow})^T$ 下展开, 其 BdG 算符的形式为:

$$M_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} + h_z & -\Delta & \gamma_{\mathbf{k}} & 0 \\ -\Delta^* & -(\xi_{\mathbf{k}} - h_z) & 0 & \gamma_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* & 0 & \xi_{\mathbf{k}} - h_z & \Delta \\ 0 & \gamma_{\mathbf{k}}^* & \Delta^* & -(\xi_{\mathbf{k}} + h_z) \end{pmatrix}, \quad (5.1.12)$$

引入了下面的标记,

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{k}} = -2t \cos(\alpha) (\cos(k_x) + \cos(\alpha_y) \cos(k_y)) - 2t \cos(k_z) - \mu \\ \gamma_{\mathbf{k}} = 2t \sin(\alpha) (\sin(k_x) + \sin(k_y)) \end{cases} \quad (5.1.13)$$

通过对角化哈密顿量, 我们得到系统的有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} (E_{\mathbf{k}}^+ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}^- \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}) + c_0, \quad (5.1.14)$$

基态能为

$$c_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} (2\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^\lambda) + V \frac{|\Delta|^2}{U}. \quad (5.1.15)$$

激发能 $E_{\mathbf{k}}^\lambda = \sqrt{|\Delta|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + h_z^2 + 2\lambda E_0}$, 其中 $E_0 = \sqrt{h_z^2 (\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2) + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 \xi_{\mathbf{k}}^2}$, $\lambda = \pm$ 对应两支激发能谱。根据配分函数 $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = e^{-\beta \Omega}$, 我们得到热力学势为

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}^\lambda}{2} \right) \right) + V \frac{|\Delta|^2}{U}. \quad (5.1.16)$$

由 $\partial \Omega / \partial \Delta = 0$ 和 $N = -\partial \Omega / \partial \mu$, 可以得到能隙方程和粒子数方程:

$$\begin{cases} \frac{\Delta}{U} = \frac{\Delta}{4V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} S_{\mathbf{k}}^\lambda X_{\mathbf{k}}^\lambda \\ n = 1 - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \xi_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^\lambda X_{\mathbf{k}}^\lambda \end{cases}. \quad (5.1.17)$$

在这个方程中我们引入了下面的标记,

$$\left\{ \begin{array}{l} X_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2}\right) / E_{\mathbf{k}}^{\lambda} \\ Y_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \beta \left[1 - \tanh^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2}\right) \right] / 2 \\ P_{\mathbf{k}} = h_z^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 \\ Q_{\mathbf{k}}^{\lambda} = 1 + \lambda P_{\mathbf{k}} / E_0 \\ S_{\mathbf{k}}^{\lambda} = 1 + \lambda h_z^2 / E_0 \end{array} \right. \quad (5.1.18)$$

根据 Gibbs-Dehum 方程和 Maxwell 关系我们能够得到一个非常重要的热力学参数等温压缩系数 [45, 46],

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right) = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right). \quad (5.1.19)$$

因为粒子数密度 $n(T, \mu, \Delta(T, \mu))$, 和在连续模型一样等式(5.1.19)一部分来自化学势的贡献为显式, 另部分来自序参的贡献为隐式, 所以 $\kappa_T = \kappa_{T,e} + \kappa_{T,i}$, 其中, 显等温压缩系数为

$$\kappa_{T,e} = \frac{\sum_{\mathbf{k}, \lambda} (Y_{\mathbf{k}}^{\lambda} - X_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}} \right)^2 + X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \left(Q_{\mathbf{k}}^{\lambda} - \lambda \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2 P_{\mathbf{k}}}{E_0^3} \right)}{2n^2 V}. \quad (5.1.20)$$

隐等温压缩系数为

$$\kappa_{T,i} = \frac{\left\{ \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \xi_{\mathbf{k}} \left[(X_{\mathbf{k}}^{\lambda} - Y_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \frac{Q_{\mathbf{k}}^{\lambda} S_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{(E_{\mathbf{k}}^{\lambda})^2} + \lambda X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \frac{h_z^2 P_{\mathbf{k}}}{E_0^3} \right] \right\}^2}{2n^2 V \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left[(X_{\mathbf{k}}^{\lambda} - Y_{\mathbf{k}}^{\lambda}) \frac{S_{\mathbf{k}}^{\lambda 2}}{E_{\mathbf{k}}^{\lambda}} - \lambda X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \frac{h_z^4}{E_0^3} \right]}. \quad (5.1.21)$$

在零温, $X_{\mathbf{k}}^{\lambda} \rightarrow 1/E_{\mathbf{k}}$, $Y_{\mathbf{k}}^{\lambda} \rightarrow 0$, 上面关于等温压缩系数的表达式还可以进一步简化。

根据 $P = -\frac{\Omega}{V}$, 我们可以得到光晶格中的另一个重要的热力学量压强,

$$P = \frac{1}{V\beta} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}^{\lambda}}{2} \right) \right) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - \frac{|\Delta|^2}{U}. \quad (5.1.22)$$

另外, 压强指数已在第三章给出(2.3.30), 在后面的小节, 我们将分别从理论和数值, 对光晶格中费米气体的热力学量进行讨论研究。和在连续模型不同, 粒子数密度和

粒子空穴关于半满填充的对称性成为重要的影响因素，接下来我们首先就光晶格中粒子空穴对称性进行讨论。

5.2 粒子空穴对称性

Fermi-Hubbard 模型粒子-空穴对称性的起源可以从一个变换来理解[73-74]，

$$\hat{c}_{i\uparrow} \rightarrow (-1)^i \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \quad \hat{c}_{i\downarrow} \rightarrow -(-1)^i \tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger, \quad (5.2.1)$$

其中， $\tilde{d}_{i\sigma}^\dagger$ ($\tilde{d}_{i\sigma}$) 是湮灭(产生)一个自旋为 σ 费米子算符，或者产生(湮灭)一个自旋为 σ 空穴算符，如图 5.1 所示三维光晶格，格点 $i = (i_x, i_y, i_z)$ ，所以， $(-1)^i = (-1)^{i_x+i_y+i_z}$ ，对于奇数格点，将引入一个负号。由于出现了 SOC 和 Zeeman 场，我们的变换和之前文献[73-74]，稍有点不同。我们定义 $\tilde{n}_{i\sigma} = \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{i\sigma}$ ， $\tilde{n}_i = \tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow}$ 。在上面的变换下，粒子数密度将变到空穴密度，

$$\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \rightarrow -\left(\tilde{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right), \quad \hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \rightarrow -\left(\tilde{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right). \quad (5.2.2)$$

那么这个变换意味着，

$$\hat{n}_i - 1 \rightarrow -(\tilde{n} - 1), \quad \hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow \rightarrow \tilde{n}_\uparrow - \tilde{n}_\downarrow. \quad (5.2.3)$$

相互作用项，

$$\left(\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) \rightarrow \left(\tilde{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(\tilde{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right), \quad (5.2.4)$$

明显不变，在 Extend Hubbard 模型中，考虑次紧邻相互作用，这种对称性依然成立[74]。到现在粒子空穴对称性中，我们还没有用到等式(5.2.1)第二项的那个负号。接下来我们考虑 $i \neq j$ ，近邻格点之间的跃迁和由 Zeeman 场引入的同一格点 $i=j$ 的自旋劈裂项。我们用矩阵元 $T_{ij}^{\sigma\sigma'}$ 来标记这个过程，双线性算符将变成

$$T_{ij}^{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'} \rightarrow (-1)^{i+j} \chi_\sigma \chi_{\sigma'} T_{ij}^{\sigma\sigma'} \tilde{d}_{i\bar{\sigma}}^\dagger \tilde{d}_{j\bar{\sigma}'}, \quad (5.2.5)$$

我们分两种不同情形讨论这一结果。(i) 对于 $i=j$ ，我们有 $(-1)^{i+j} = 1$ ；等式(5.2.1)第二项的负号保证

$$\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \rightarrow (-1) \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger = \tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger. \quad (5.2.6)$$

因此，粒子空穴变换能保证 Zeeman 场项不变。(ii) 我们考虑 SOC 的作用和由近邻格点之间的跃迁。其中 $(-1)^{i+j} = -1$ ，我们发现 $\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \rightarrow \tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{j\downarrow}$ 和 $\hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \rightarrow \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{j\uparrow}$ 和 $\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \rightarrow \tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{j\uparrow} + \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{j\downarrow}$ ，因此，我们认为化学势 μ 和序参 Δ 是载荷密度 n 的函数满足

$$\begin{cases} \mu(n) = -\mu(2-n) \\ \Delta(n) = \Delta(2-n) \end{cases}, \quad (5.2.7)$$

这种普适的特性意味着 $\mu(n=1) = 0$ 。在这种情形下，序参将达到最大值(看图 5.2)， $\Delta_{\max} = U/2$ 。哈密顿量在这种变换下， $H(t, \alpha, \mu, U | \hat{c}, \hat{c}^\dagger)$ 变到新的哈密顿量 $H(t, \alpha, -\mu, U | \tilde{d}, \tilde{d}^\dagger)$ ，在新的模型中化学势变为 $-\mu$ ，其他所有的参数都不变。值得注意的是这种对称性在考虑次近邻跃迁时就会被打破，但在真实物理实验中这种情形几乎可以忽略[75-77]。

在动量空间，一个内在的对称定义为， $\Theta = \sigma_0 \otimes \sigma_x \kappa$ ，其中 $\sigma_{0,x}$ 是泡利矩阵，对应粒子和空穴空间， κ 为复共轭算符，在这种内在对称性，BdG 算符(5.1.12)将变为， $\Theta M_{\mathbf{k}} \Theta^{-1} = -M_{\mathbf{k}}$ [108-109]，这种对称性是 BdG 形式的一种内在属性，为确保粒子满足费米统计，有时候在一些文献，算符 Θ 也被当成共轭算符或者是粒子-空穴对称算符 [39,108-111]。

5.3 解析分析

光晶格和连续模型有许多不同的地方，首先，在光晶格模型实验中，平均占据数将变成一个重要的可控参数。因为泡利不相容原理，每个格点最多只能占据两个不同原子(自旋不同)，最大平均占据数 $n=2$ 。另外，粒子空穴关于半满填充对称，意味着填充数是 n (粒子数密度 $n < 1$) 和空穴是 $(2-n)$ (粒子数密度 $n > 1$) 的情形是一样的[64][75]。在数值计算时，动量空间求和限定在第一布里渊区，不需要像连续模型那样做重整化处理[39][78-79]。这些将导致光晶格中费米简并气体和连续模型有很多不同，这一节我们将解析地分析几种极限情形。

5.3.1 超流序参和化学势

(1) 没有 SOC 和 Zeeman 场, 即 $\alpha=0$, $h_z=0$ 。粒子数和能隙方程(5.1. 17)将变成[71,80],

$$\begin{cases} \frac{\Delta}{U} = \frac{\Delta}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y dk_z \frac{1}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \\ n = 1 - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y dk_z \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \end{cases} \quad (5.3.1)$$

在大 U 极限下, 从图 5.2 可以看出化学势和序参都远远大于跃迁项 t , $|\mu| \gg |t|$, $|\Delta| \gg |t|$ 。在这种极限下, 有 $\xi_{\mathbf{k}} \simeq \mu$, $E_{\mathbf{k}}^{\lambda} \simeq \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 方程. (5.3.1)变为,

$$\begin{cases} \frac{1}{U} = \frac{1}{2\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} \\ n = 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} \end{cases}, \quad (5.3.2)$$

可以解析求解

$$\begin{cases} \mu = \frac{1}{2}(n-1)U \\ \Delta = \frac{1}{2}\sqrt{(2-n)nU} \end{cases}, \quad (5.3.3)$$

在这种极限下, 化学势和序参不依赖于跃迁 t , 我们可以用一个单点 Hubbard 模型来解释, 其中, 哈密顿量可以写为:

$$F = \mu(n-1) - U \left(\frac{n}{2} - \frac{1}{2} \right)^2, \quad (5.3.4)$$

其中化学势由 $\frac{\partial F(n)}{\partial n} = 0$ 决定, 可以产生(5.3.3)中 μ 的解。为了确定(5.3.3)中 Δ 的解,

我们需要计算 $U \langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \rangle$ 关于基态波函数,

$$|G\rangle = \sqrt{n/2} |\uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{1-n} |0\rangle, \quad (5.3.5)$$

满足 $\langle G | \hat{n}_i | G \rangle = n$, 用这个定义能解出序参 Δ 的解。上面的波函数我们用到

$F(n=0)=F(n=2)=-U/4 < F(n=1)=0$, 所以基态波函数是真空态和双占据态的叠加, 这直接来自粒子空穴的对称性。上面的讨论是普适的, 和系统维度没有关系,

这个解甚至在有限 Zeeman 场 $|h_z| < Un/2$ ，也是成立的。 Δ 的解意味着在半满填充附近超流配对最强。同时我们还惊奇的发现，在半满填充，即使没有前面的假定条件都是成立的。

(2) 在大 U 极限，我们考虑跃迁 t 的贡献到 η ($\eta=t^2/U^2$) 的一阶，自洽方程将变为

$$\begin{cases} \frac{1}{U} = \frac{1}{2\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} \left[1 + \frac{t^2(6\mu^2 - 3\Delta^2)}{(\mu^2 + \Delta^2)^2} \right], \\ n = 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} \left[1 - \frac{9t^2\Delta^2}{(\mu^2 + \Delta^2)^2} \right], \end{cases} \quad (5.3.6)$$

这两个方程的解将是对(5.3.3)的序参和化学势的一阶修正，

$$\begin{cases} \mu = \frac{U(n-1)}{2}(1+24\eta) \\ \Delta = \frac{\sqrt{(2-n)nU}}{2}(1-12\eta) \end{cases}. \quad (5.3.7)$$

我们可以看出，这个极限是不依赖 SOC，此时 $|h_z| \ll U$ 。另外，粒子数密度 n 和 $(2-n)$ 的序参相等，化学势互为相反数。为得到这些结果，我们利用了光晶格中单粒子色散是有限的特性。这点与自由空间的 $|\mathbf{k}|$ 为无穷，将发生发散，所以需要重整化的计算[112-115]不同。

(3) 当 U 不是足够大，如图 5.3，在 $t \ll U$ 和 $|h_z| \ll U$ ，保留到 η^2 ($\eta^2=t^4/U^4$) 的二阶近似，在这个区域，序参和化学势将比 t 和 h_z 大。这时， $E_{\mathbf{k}}^2$ 为 $\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 加一些微扰，在动量空间可以精确积分。通过保留高阶项，这可以帮助我们理解小 U 区域。

首先，我们考虑没有 SOC 和 Zeeman 场的情形，自洽方程为：

$$\begin{cases} \frac{1}{U} = \frac{1}{2\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} (1 + q_1 t^2 + q_2 t^4) \\ n = 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} (1 + p_1 t^2 + p_2 t^4) \end{cases}, \quad (5.3.8)$$

其中， $q_1 = 3(2\mu^2 - \Delta^2)/(\mu^2 + \Delta^2)^2$ ， $q_2 = 45(3\Delta^4 - 24\Delta^2\mu^2 + 8\mu^4)/4(\mu^2 + \Delta^2)^4$ ，

$p_1 = -9\Delta^2 / (\Delta^2 + \mu^2)^2$, $p_2 = 225(3\Delta^4 - 4\Delta^2\mu^2) / (\Delta^2 + \mu^2)^4$, 我们假定解是

$$\begin{cases} \mu = \mu_0(1 + \alpha_1\eta + \alpha_2\eta^2) \\ \Delta = \Delta_0(1 + \beta_1\eta + \beta_2\eta^2) \end{cases}, \quad (5.3.9)$$

其中 μ_0 和 Δ_0 是在没有 SOC 和 Zeeman 的化学势和序参(5.3. 3), 将上面的解带入自治方程 (5.3. 8), 让 t^2 和 t^4 的泰勒系数为 0, 我们得到, $\alpha_1 = 24, \alpha_2 = 144[2 - 7n(2 - n)]$
 $\beta_1 = -12, \beta_2 = -252[2 - 3n(2 - n)]$, 前面的两项 α_1 和 β_1 在等式(5.3. 7)已经用到, 其不依赖于粒子数密度。

其次, 我们考虑有 SOC 和 Zeeman 场的情形, $|h_z| \ll U$, 用相同的方法我们得到:

$$\mu = \mu_0 \left(1 + \frac{8t^2}{U^2} Q \right), \quad \Delta = \Delta_0 \left(1 - \frac{12t^2}{U^2} Q \right), \quad (5.3.10)$$

其中 $Q = 3 + 8h_z^2 \sin^2(\alpha) / U^2$, 用这些极限表达式我们就能够计算在这些极限情形的等温压缩系数、压强及压强指数等热力学量。

5.3.2 等温压缩系数

我们在第四章已经研究了连续模型的等温压缩系数, 在没有 SOC 和 Zeeman 场甚至还可以精确求解, 在 BCS 极限, 等温压缩系数由费米面的态密度决定, 在 BEC 极限等温压缩系数由散射长度决定, 我们尽量揭示和讨论他们在几个极限的有趣物理。在光晶格中, 有两种情形, 隐等温压缩系数精确为 0。我们有下面的精确结果。

(1) 在 Normal 相, 当 $U = 0$, 或者 $|h_z| \gg \Delta$, 此时序参 $\Delta = 0$, 隐等温压缩系数 $\kappa_{T,i} = 0$ 。这一点可以这样理解, 因为, 占据数 n 和化学势 μ 是 Δ^2 的函数,

$\frac{\partial \Omega}{\partial \Delta} = 2\Delta \frac{\partial \Omega}{\partial \Delta^2} = 0$, 这一点我们在第四章也做过讨论。在自由空间, 显式等温压缩系数将化简到态密度

$$\kappa_{T,e} = \frac{1}{2n^2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \delta(E_{\mathbf{k}}^\lambda) \propto \frac{\rho(\mu)}{n^2}, \quad (5.3.11)$$

其中, $\rho(\mu)$ 在连续模型是理想费米气体费米面的态密度, 而在光晶格则是零能费米面的态密度。我们知道, SOC 增强能增强态密度[39-41], 所以, SOC 增强等温压缩系数, 相反 Zeeman 则抑制等温压缩系数。同时 SOC 对态密度的增强还可以增大超导的临界温度。

(2) 在半满填充, 即 $n=1$, 由于体系粒子空穴关于半满填充的对称性, 我发现配对序参此时达到最大值, 其中 $\Delta(1+\delta n) = \Delta(1-\delta n)$, 同时化学势 $\mu \propto \delta n$, 因此,

$$\left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{n=1} = 0. \quad (5.3.12)$$

从隐式等温压缩系数的定义, 其会精确为零, 即 $\kappa_{T,i} = 0$ 。但是在自由空间, 只有像(1)讨论的一种隐式等温压缩系数为零的情况, 没有这种情形。

如上一小节讨论的在大 U 极限, 其他一些参数已经求出, 所以相应情形的等温压缩系数也可以精确求解。即使是 SOC 和 Zeeman 场共存, $|h_z| \ll U$, 利用

$X_{\mathbf{k}}^\lambda = 1/E_{\mathbf{k}}^\lambda \simeq 1/\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$, $Y_{\mathbf{k}}^\lambda = 0$ 和 $\xi_{\mathbf{k}} \simeq -\mu$, 我们有:

$$\begin{cases} n^2 \kappa_{T,e} = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,e} = \frac{2}{U} [1 - (1-n)^2] \\ n^2 \kappa_{T,i} = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,i} = \frac{2}{U} (1-n)^2 \end{cases}, \quad (5.3.13)$$

根据以上两个结果, 我们发现等温压缩系数、粒子数密度和相互作用有下面的关系

$$n^2 \kappa_T = \frac{2}{U}. \quad (5.3.14)$$

这一点也可以从单点 Hubbard 模型 $F(n)$ 来理解, 利用等式 (5.3.4), 这些结果来自

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,e} = \frac{1}{\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}} - \frac{\mu^2}{(\sqrt{\mu^2 + \Delta^2})^3} \\ \left(\frac{\partial n}{\partial \Delta}\right)_{T,e} = -\frac{\mu \Delta}{(\sqrt{\mu^2 + \Delta^2})^3} \end{cases}, \quad (5.3.15)$$

根据 $f = \frac{1}{U} - \frac{1}{2\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}}$, 我们得到

$$\left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i} = \frac{\partial f}{\partial \mu} / \frac{\partial f}{\partial \Delta} = -\frac{\mu}{\Delta}. \quad (5.3.16)$$

等温压缩系数可以通过

$$n^2 \kappa_T = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_{T,e} + \left(\frac{\partial n}{\partial \Delta}\right)_{T,e} \left(\frac{\partial \Delta}{\partial \mu}\right)_{T,i}, \quad (5.3.17)$$

联立等式(5.3.15)、(5.3.16), 我们可以得到(5.3.17)的结果。另外, 上面的结果也可以直接从 $\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T = 2/U$ 得到, 为得到更为精确的解, 用等式(5.3.7), 我们得到

$$Un^2 \kappa_T = \frac{2}{1+24\eta}. \quad (5.3.18)$$

这意味着, 近邻格点之间的跃迁会压制等温压缩系数。上面的结果, 当平均占据数大于 1 的时候, 由粒子空穴对称性, 上面的 n 要用 $2-n$ 代替。相同对称性的使用, 在文献[81]的 Fermi-Hubbard 模型也用到过。这个极限的物理意义是来自相互作用和散射长度的关系 $U = g \int d\mathbf{x} |w(\mathbf{x})|^4$, 其中 $w(\mathbf{x})$ 为光晶格瓦尼尔函数, $g = \frac{4\pi a_s}{m} \propto a_s$, 对于接触相互作用 $V(\mathbf{x}) = g\delta(\mathbf{x})$ [82-85]。因此, 在强相互作用极限, 等温压缩系数和散射长度之间的关系为 $\kappa_T \propto \frac{1}{a_s}$, 这和我们在第四章连续模型, 相互作用较大的 BEC 极限得到的结果类似。

当保留到 t 的更高阶, 利用等式(5.3.9)的结果, 我们发现,

$$Un^2 \kappa_T = \frac{2}{1+24\eta+144[16-21n(2-n)]\eta^2}. \quad (5.3.19)$$

如图 5.3 所示, 等式(5.3.19)的解适合 $n > 0.5$ 的结果, 而等式(5.3.18)对于 $n < 0.5$ 情形会更好些。利用等式(5.3.10)则得到,

$$Un^2 \kappa_T = \frac{2U^2}{U^2 + 8t^2 Q}. \quad (5.3.20)$$

这些结果显示了粒子空穴对称性的存在, 对于等温压缩系数, 粒子数密度用 $n(n < 1)$ 空穴密度时用 $2-n(n > 1)$, 我们同时发现在大 U 极限, Zeeman 场总是抑制等温压缩系数, 在 SOC 为零, Zeeman 场对等温压缩系数的贡献为 h_z^2 , 这一点也可以从单点

Hubbard 模型来理解,

$$F(\hat{n}_\uparrow, \hat{n}_\downarrow) = h_z(\hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow) + \mu(\hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow - 1) + U\left(\hat{n}_\uparrow - \frac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_\downarrow - \frac{1}{2}\right). \quad (5.3.21)$$

只有 Zeeman 场, $n_\downarrow = (-2h_z + nU)/2U$ 和 $n_\uparrow = (-2h_z + nU)/2U$, 化学势可以通过等式(5.3.21)求解, 由粒子空穴对称性 $F(n=0) = F(n=2)$, 所以等温压缩系数不依赖于 h_z 的一阶项。在 $n=0$ 极限, 所有原子占据单粒子能带底部, 应用一些近似, 这时将简化到上章讨论过的情形, 不同的是决定化学势的方法是文献[116]提到的。在这些情形, 我们发现 $\kappa_T \propto n^{-\delta}$, 理想气体 $\delta = (d+2)/3$, 其中 d 为体系维度, 我们的系统 $d=3$, 因此 $\delta=5/3$ 。

5.3.3 压强和压强指数

在第二节我们已经给出光晶格中简并费米气体的压强 (5.1.22), 在大 U 极限, $|\Delta| \gg t$, 这时可以忽略 SOC 和 Zeeman 场的作用, 设定 $\xi_{\mathbf{k}} = -\mu$, 和 $E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} = \mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 。利用等式(5.3.3)的结果可以得到,

$$P = \frac{n^2 U}{4} \propto \frac{1}{V^2}, \quad (5.3.22)$$

$$\nu = \frac{1}{\kappa_T P} = 2. \quad (5.3.23)$$

这是一个非常有趣的结果, 压强指数和自由空间 BEC 极限的相同, 不依赖于平均占据数 n 。另外我们发现 $P \propto a_s$, 这一点也和自由空间一样。

5.4 数值结果分析

在这一节, 我们将讨论等温压缩系数、压强、压强指数等热力学量的数值结果。首先, 我们讨论在没有 SOC 和 Zeeman 场时, 填充因子和粒子空穴对称性对等温压缩系数的独特作用, 特别是, 强相互作用极限和上一节解析结果相比对。然后讨论 SOC 和 Zeeman 场共存, 研究他们对等温压缩系数的不同作用, 以及他们共同

作用导致的反常等温压缩系数。在我们的数值模拟中，我们在第一布里渊区积分 $k_i \in [-\pi, \pi]$ 。由于在光晶格中动量做了截断，所以不需要像连续模型一样做重整化的计算。在我们这一章的数值计算中，设定 $t=1$ 作为基本能量单位，另外，等温压缩系数的单位设定为 $\kappa_0 = a^3/t$ ，压强的单位 $P_0 = t/a^3$ 。在通常实验中，将用 $t \sim 0.1\text{kHz}$ ， $a \sim 1\mu\text{m}$ ，因此， $P_0 \sim 1.0 \times 10^{-14} \text{Pa}^{-1}$ ， $k_0 \sim 1.0 \times 10^{-14} \text{Pa}^{-1}$ 。在三维我们不会更多的关注拓扑相变，因为穿过相变点，化学势、序参和等温压缩系数都是光滑的曲线，和三维不同在一维有发散的等温压缩系数[86]。

5.4.1 相互作用和占据数的影响

这一小节我们来看在 SOC 和 Zeeman 共存的情况下，粒子空穴对称和平均占据数在序参和化学势中的体现。

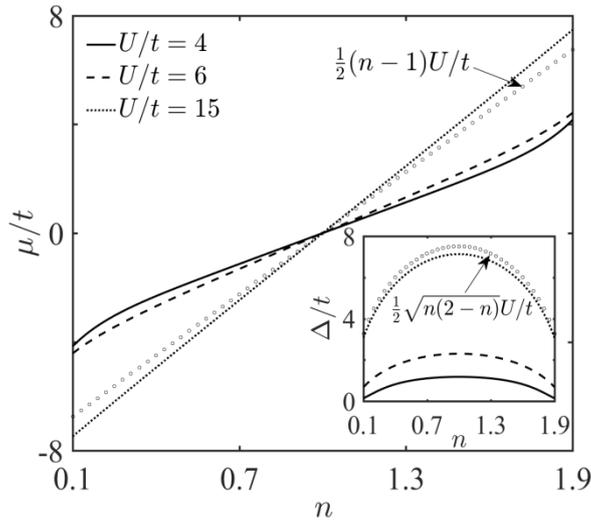


图 5.2 化学势 μ 和序参 Δ 在不同相互作用下 $U = 4$ (实线)， 6 (虚线)， 15 (点线) 随平均占据数的变化，此时在大 U 极限， $\alpha = h_z = 0$ 。

首先，我们研究粒子空穴对称性，结果如图 5.2 所示。根据(5.2.7)我们可以得到半满填充 $n=1$ ， $\mu=0$ 。(I) 当 U 很弱时，化学势与相互作用之间的关系表现出很强的非线性，当 U 很强时 ($U=15$)，则为线性关系 (等式(5.3.3))。另一方面，序参 Δ

关于半满填充对称 $\Delta(n) = \Delta(2-n)$ ，在半满填充，大 U 极限，达到最大值 $\Delta_{\max} = U/2$ 。当 $n=0, 2, \Delta=0$ 我们发现对于 $U=15$ ，序参能用等式(5.3. 3)很好的描述。这个特征导致等式(5.3. 13)的第二中隐式等温压缩系数为零的情形。(II) 当 U 极限很大时，下面我们看如图 5.3 所示的极限情形，等式(5.3. 14)， $Un^2\kappa_T$ 对于不同的占据数都会趋于同一极限值 $Un^2\kappa_T=2$ 。在 $U < 15$ ，这个值将很大程度上依赖于相互作用 U ，等式(5.3. 18)考虑了 η 一阶精度的贡献，这样会吻合的更好一点，能粗略地描绘等温压缩系数随相互作用的变化趋势，然而，近似到 η 一阶的等温压缩系数依然和占据数没有关系，要依赖于粒子数密度需要保留到二阶 η^2 (看公式(5.3. 19))。如图 5.3，我们也画了显式等温压缩系数和隐式等温压缩系数随 U 的变化曲线，在大 U 极限，也逼

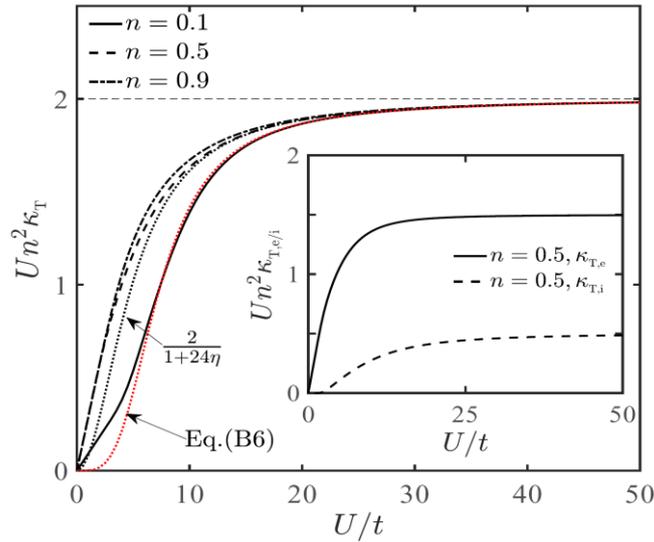


图 5.3，在低占据数 $n=0.1$ (实线)，中间占据数 $n=0.5$ (虚线) 和接近半满 $n=0.9$ (点线) 大 U 极限下的等温压缩系数。插图为大 U 极限 $n=0.5$ 的显式和隐式等温压缩系数，其中，在这些极限下，解析结果如等式(5.3. 18)，若考虑高阶项的贡献，解析结果如等式(5.3. 19)，其中 $\eta=t^2/U^2$ ，注意， $U^2 n \kappa_T$ 是一个无量纲的量。

近通过(5.3. 14)定义的极限。我们再次强调，这些保留到高阶的结果也遵从粒子空穴对称性，所以对于粒子数密度的 $n^2\kappa_T$ 严格等于对于空穴的 $(2-n)^2\kappa_T$ ，这些结果也印证了我们基于单点哈伯德模型基本图像的有效性。

其次，我们讨论相互作用在不同占据数中的作用，结果如图 5.4 所示一般地，

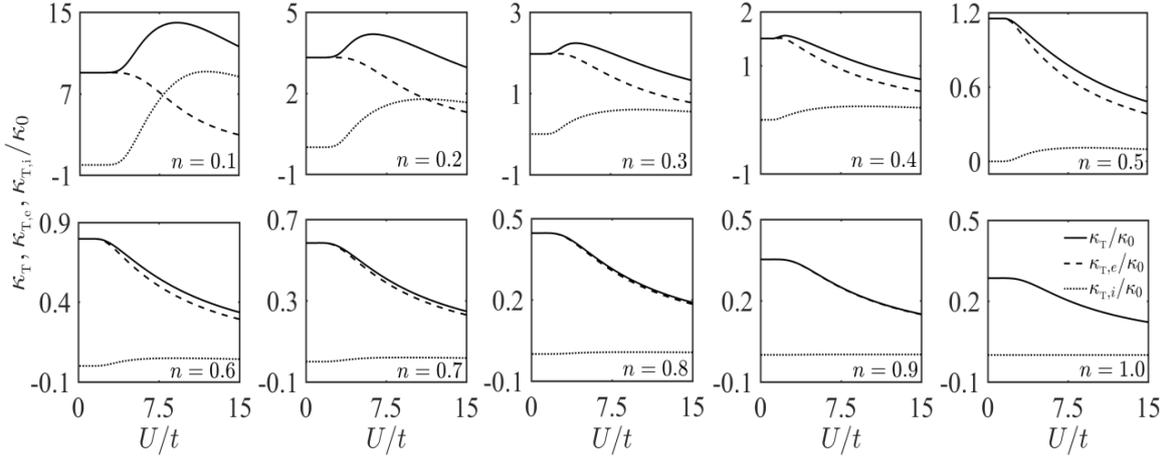


图 5.4 等温压缩系数 κ_T (实线) 和其显式(虚线)、隐式(点线)在不同平均占据数 n 随相互作用的变化曲线。注意, 因为粒子-空穴对称性, n 和 $2-n$ 有相同的结果, 所以我们只考虑了 $n \leq 1$

随着相互作用的增减, 等温压缩系数都是先增加到一个最大值然后减小。基本趋势分成三个不同的区域, 在弱相互作用极限(例如, $n=0.1, U < 3$), 序参很小, $\Delta \simeq 0$ (例如 $n=0.1, U=3, \Delta=0.023$), 由于是吸引相互作用的不稳定性, 在费米面附件打开一个有限的能隙, 其对等温压缩系数的贡献可以忽略。另外, 隐等温压缩系数明显小于显等温压缩系数。在中间区域 ($U \sim 3-8$), 配对序参的贡献将变得越来越重要, 隐等温压缩系数的增加非常快, κ_T 有一极大值。在这个过程中, 显等温压缩系数总是随相互作用 U 减小。在大 U 极限 ($U > 10$), 符合等式(5.3.14)的极限行为, 因此, 所有等温压缩系数随 U 的增加进一步减小, 从 BCS 极限(由等式(5.3.11)决定)到 BEC 极限(由等式(5.3.14))一直单调减小, 这与自由空间等温压缩系数, 由于凝聚的形成, 等温压缩系数将接近无穷大的情形不同。

平均占据数对等温压缩系数也起到重要的作用, 如图 5.4(a)所示, $n=0.1$, 在低占据数极限, 等温压缩系数非常大, 在一些参数区域, 隐等温压缩系数甚至超过显等温压缩系数, 这时类似于自由空间。随着平均占据数的增加, 我们发现等温压缩系数减小到很小。随着平均占据数的增加, 序参 Δ 也增加, 但隐等温压缩系数减小很快。在半满填充附近 ($n=0.7-1.3$), 我们发现隐等温压缩系数比显等温压缩系数小的多。在半满填充, $n=0.1$, 由于等式(5.3.12)隐等温压缩系数严格等于 0。为进一步理解平均占据数对整个压缩系数的作用, 如图 5.5 所示为几个特定的相互作用下等温压缩系数随粒子数的变化, 通常随 n 的增加, 我们发现等温压缩系数单

调减小，这一点和图 5.4 相互作用 U 非单调行为不同。最重要的一点是，如果我们画 $n^2\kappa_T$ ，结合方程(5.3.12)，对于相互作用， $U = 4, 6$ ，在半满填充附近，这些参数将趋于一些只和相互作用有关的常数。在强相互作用极限，从方程(5.3.12)，(5.3.18)可知，这些值不依赖于 n 。注意相互作用 $U = 15$ ，已经达到大 U 极限(如图 5.2)。因此，在图 5.4 和 5.5 中等温压缩系数的增加主要来自平均占据数 n ，与光晶格不同平均占据数的作用在自由空间的简并费米气体不做讨论。

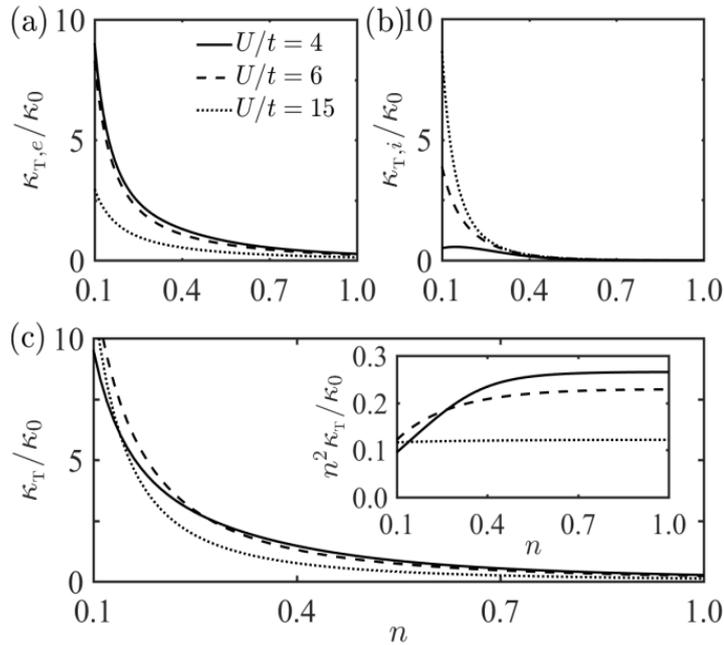


图 5.5 在不同相互作用下 $U = 4$ (实线)， 6 (虚线)， 15 (点线) 等温压缩系数随平均占据数的变化：(a) 显式等温压缩系数，(b) 隐式等温压缩系数 (c) 总的等温压缩系数。插图为 $n^2\kappa_T$ 随平均占据数的变化

5.4.2 反常等温压缩系数

前面的讨论为我们研究 SOC 和 Zeeman 对等温压缩系数的作用提供了重要的基础。众所周知，Zeeman 场将破坏超流配对的形成导致超流相到 Normal 相的转变。当 Zeeman 劈裂大于配对强度 [39, 41]，如图 5.6， $n = 0.1$ (低占据) 和图 5.7， $n = 0.9$ (高占据) 中等温压缩系数随相互作用的变化，此时配对序参 $\Delta = 0$ ，化学势不依赖于相互作用 U ，在这种情形，由等式(5.3.11)，等温压缩系数由费米面态密度决定。随着 Zeeman 场的增加，态密度减小，这导致等温压缩系数也减小。另外因为

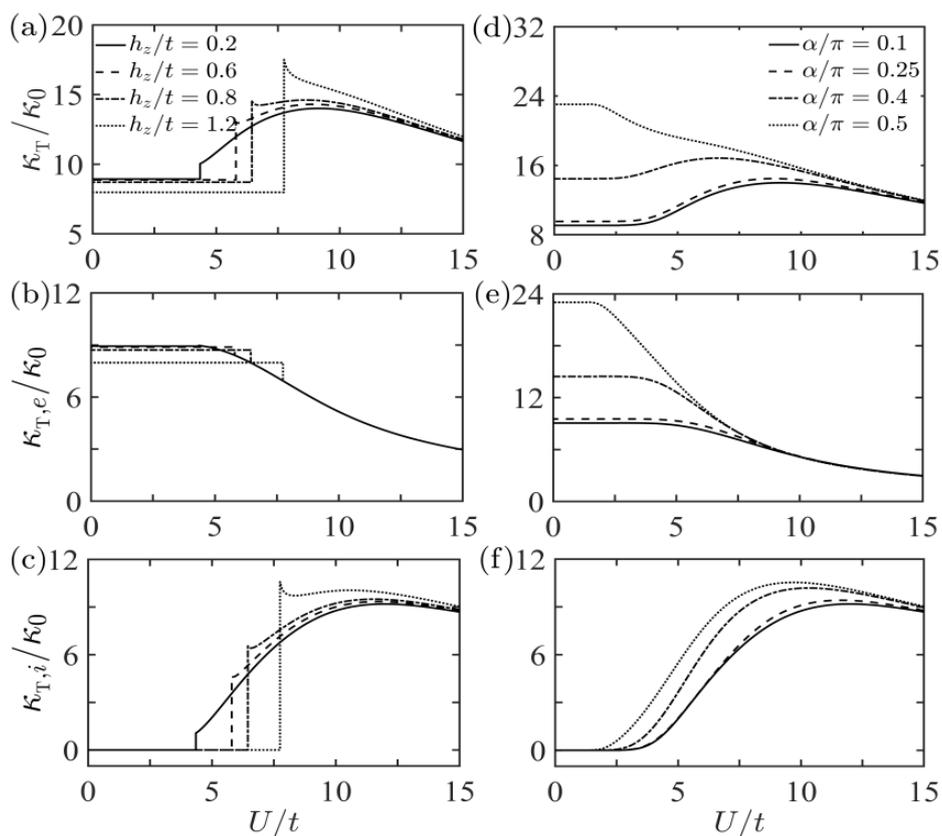


图 5.6 (a)-(c) 只有 Zeeman 场, (d)-(f) 只有 SOC 的等温压缩系数, 平均占据数为 $n = 0.1$

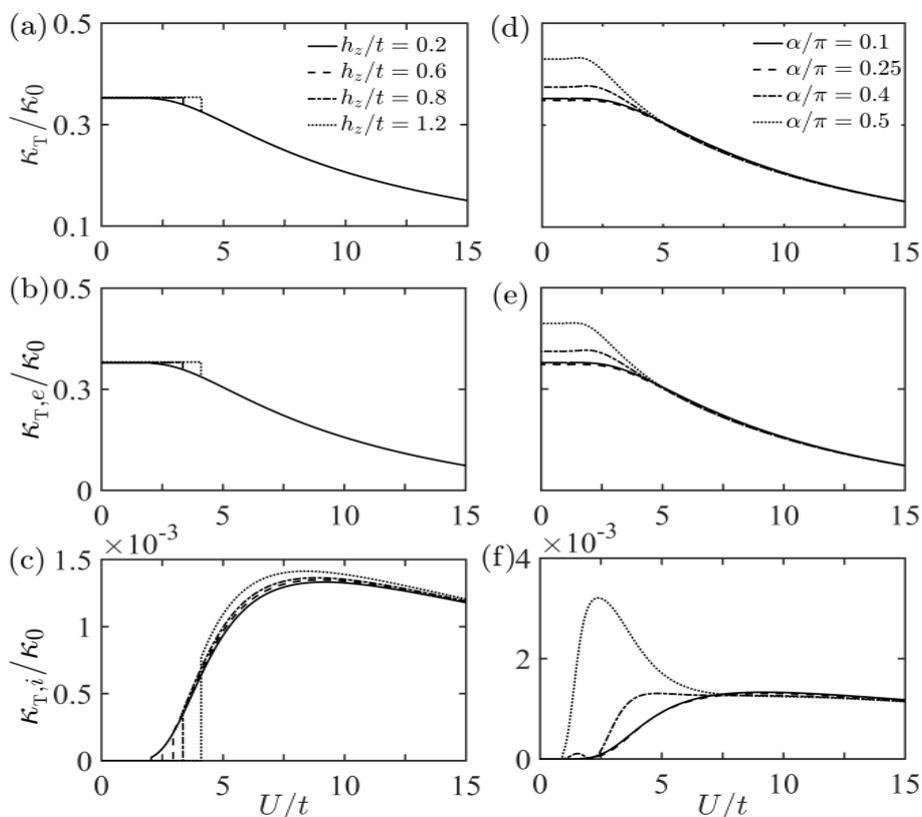


图 5.7 (a)-(c) 只有 Zeeman 场、(d)-(f) 只有 SOC 的等温压缩系数, 平均占据数为 $n = 0.9$

序参 $\Delta = 0$ ，隐等温压缩系数也为零。随着相互作用的增加，当配对序参 $\Delta > h_z$ ，有限的序参将导致等温压缩系数跃变到一个有限的值，这是一个二阶相变过程。在这些区域，我们将发现 Zeeman 场的作用在小占据数和接近半满填充的作用完全不一样。在小占据数情形，等温压缩系数较大，所以 Zeeman 场的影响也比较大，但是，在接近半满填充，甚至在 Normal 相，Zeeman 场的影响非常小甚至可以忽略。Normal 相到超流相的转变将通过看等温压缩系数是否跃变。因此，在实验上用此来定 Normal 相和超流相的相边界。在超流相区域，我们发现等温压缩系数随 Zeeman 场的增加而增强。在接近半满填充隐等温压缩系数的增加相对显等温压缩系数非常小几乎可以忽略，有类似图 5.4 的非单调行为。

通常，对于理想气体，相比 Zeeman 场 SOC 对超流的作用是相反的，是增加费米面态密度，因此增强等温压缩系数。为理解这一点，首先考虑没有相互作用情形 $U = 0$ ，这时单粒子谱可写为 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} + |\gamma_{\mathbf{k}}|$ 。我们发现等温压缩系数很大程度上依赖于自旋轨道耦合强度 α 。可以做如下理解，在没有 SOC 即 $\alpha = 0$ ，色散的最小值在 $\mathbf{k} = 0$ ，费米面如图 5.1(b)，随着 SOC 的增加，特别是当 $\alpha = \pi/2$ ，色散关系变成 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos(k_z) \pm 2\sqrt{\sin(k_x) + \sin(k_y)}$ ，在布里渊区中心，形成一个标准的鞍点结构， $\mathbf{k} = \left(\pm \frac{\pi}{4}, \pm \frac{\pi}{4}, 0\right)$ 有四个极小点。这个变化增加了费米面态密度，如图 5.1(b) 所示。

因此，我们发现低占据数(如图 5.6)和高占据数(如图 5.7)两种情形，在小 U 极限 SOC 都是增加等温压缩系数，在大 U 极限，当 $U \gg t$ 和 $U \gg |h_z|$ ，SOC 和 Zeeman 场对等温压缩系数影响将变得不重要，完全决定于相互作用 U 。在这种情形等温压缩系数由我们之前推导的等式(5.3.12)(5.3.18)来决定。类似前面的讨论，等温压缩系数在接近半满填充很大程度上被压制，隐等温压缩系数由等式(5.3.12)可知等于零。为更详细了解 SOC 和 Zeeman 场对等温压缩系数的影响，我们，扫描所有参数区域，如图 5.8 所示，因为 SOC 能增强等温压缩系数，因为 SOC 能增强态密度，所以我们预测 SOC 能增加超流到 Normal 相的临界转变温度 T_c [127]。同时可以看到 SOC 和 Zeeman 场对等温压缩系数的作用完全不同，简单情形已在图 5.6、5.7 给出。图 5.8 中虚线是等温压缩系数从零跃变到非零的边界。

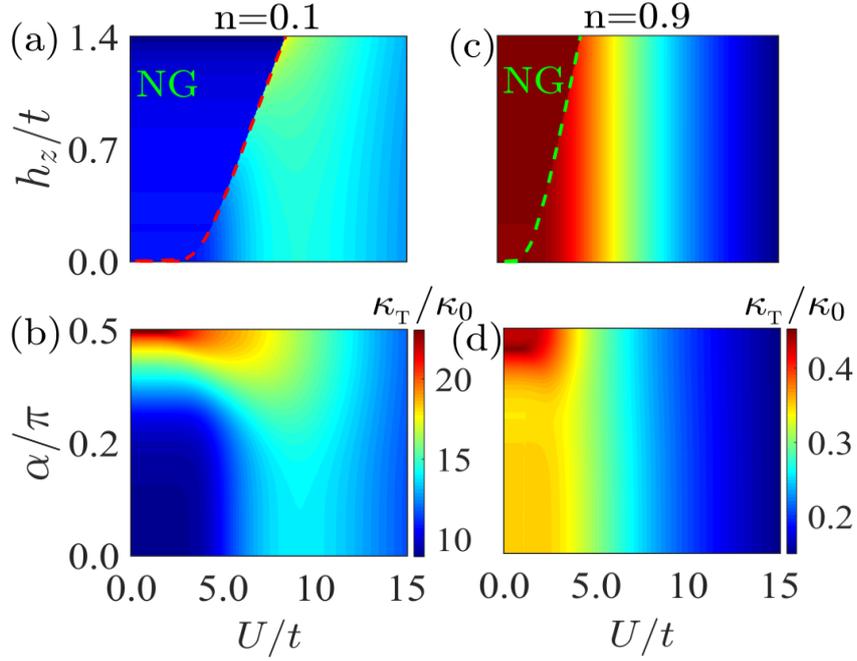


图 5.8 (a)-(c) 是平均占据数 $n=0.1$ 和 $n=0.9$ ，等温压缩系数随 Zeeman 场的变化，(b)-(d) 是平均占据数 $n=0.1$ 和 $n=0.9$ ，等温压缩系数随 SOC 的变化，NG 指 Normal 相， $\Delta=0$ 。

现在我们看等温压缩系数的反常行为，数值结果在如图 5.9 和 5.10，前面我们已经在不同平均占据数下计算过这些等温压缩系数，在这两幅图我们只在不同 SOC 和 Zeeman 场下计算 $n=0.1$ ， $n=0.5$ ， $n=0.9$ 的等温压缩系数随相互作用的变化情况。可以直接和图 5.4 比较，我们首先注意到的是，显等温压缩系数，在所有情况都是非单调变化。SOC 和 Zeeman 场主要对显式等温压缩系数有影响。当 $U < 4$ ，由于有 SOC，在低的 Zeeman 场，在同一能带，有限三重配对态总是存在，这是一些文献研究的各种超流相变的基本机制，甚至在 Zeeman 劈裂大于序参也能发现有限序参的超流相。在图 5.9、5.10 和图 5.6、5.7 相比最大的不同，对于隐式等温压缩系数出现了一个显著增加的峰（如图 5.9）。峰的高度很大程度依赖于 SOC、Zeeman、相互作用和平均占据数。因此，总的等温压缩系数同样能看到这么一个峰。类似第四章自由空间的讨论，这个峰来自隐式等温压缩系数分母的局域极小。在一些参数区域，等温压缩系数甚至小于零 ($\kappa_T < 0$)，标志稳定的均匀相到不稳定的相分离 [40-41]。本章考虑等温压缩系数都为正，系统为稳定的情形。同时我们也注意到隐式等温压缩系数的这种反常行为，在各种平均占据数下都能看到，但在接近半满填充，这种奇异行为太小了，所以实验观测也会非常难。

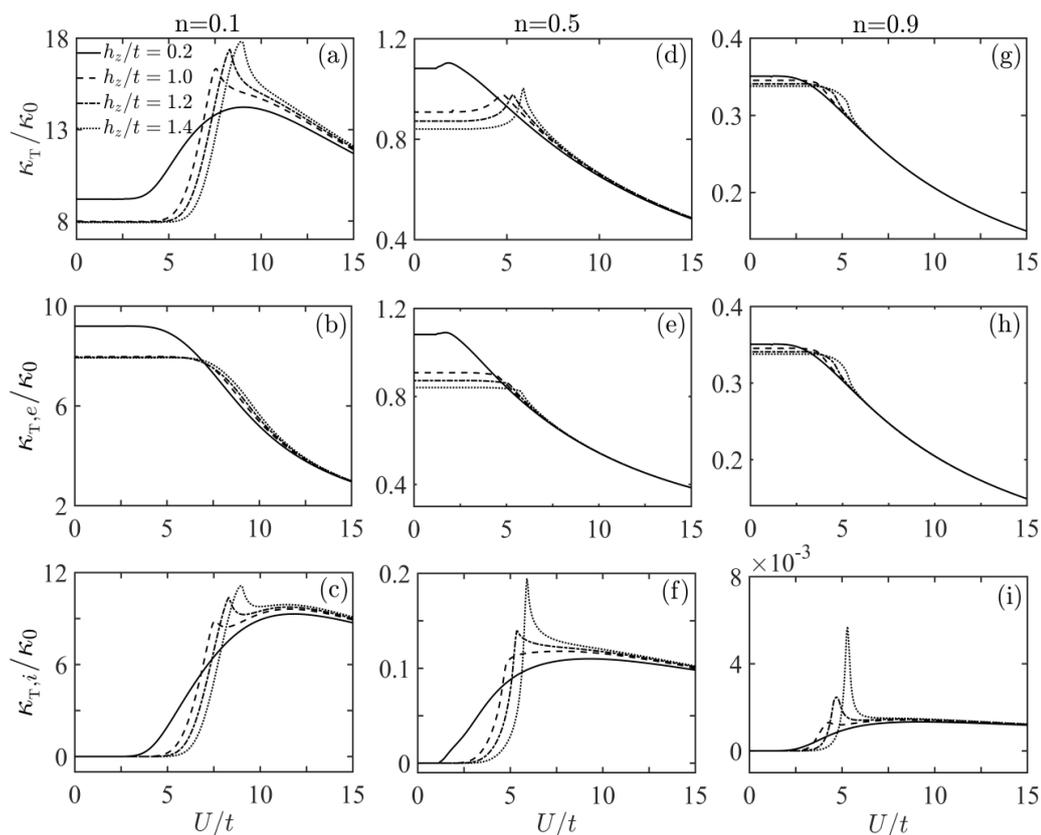


图 5.9 在 SOC 和 Zeeman 场共存的等温压缩系数、显式等温压缩系数、隐式等温压缩系数在平均占据数 $n=0.1$, $n=0.5$, $n=0.9$ 随相互作用的变化。此时 SOC 强度, $\alpha/\pi=0.2$ 。

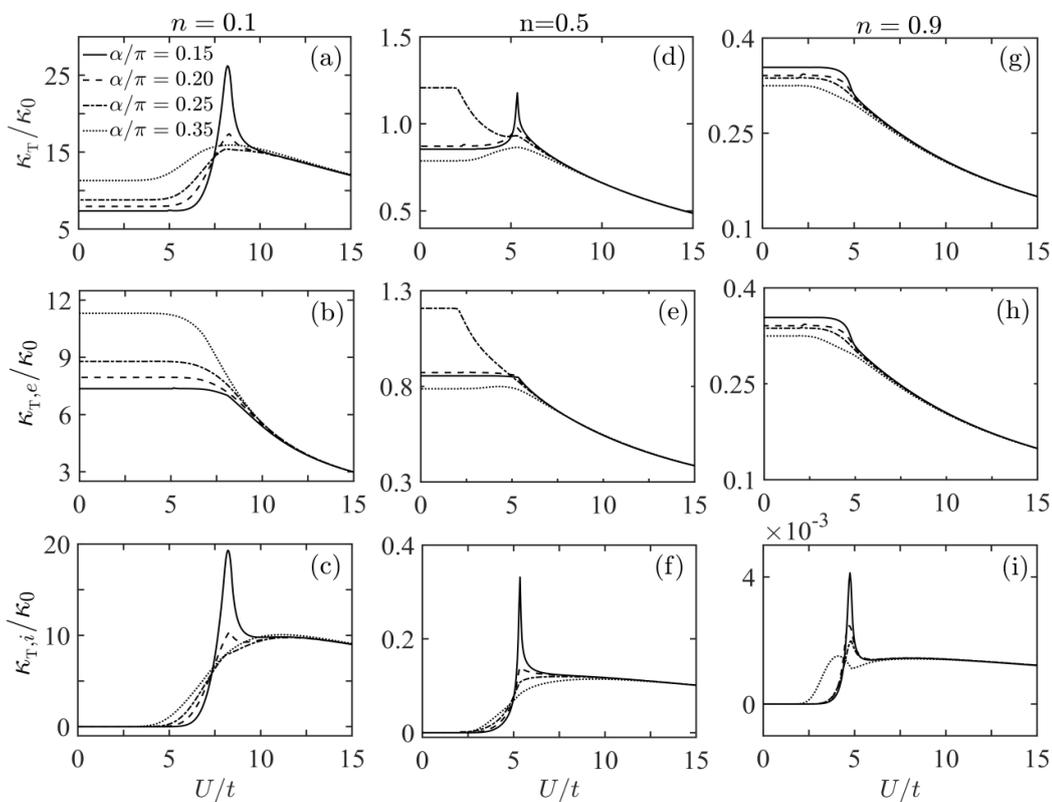


图 5.10 在 SOC 和 Zeeman 场共存的等温压缩系数、显式等温压缩系数、隐式等温压缩系数在平

均占据数 $n = 0.1$, $n = 0.5$, $n = 0.9$ 随相互作用的变化。此时 Zeeman, $h_z = 1.2$ 。

那么一个很自然的问题就是，在实验上什么地方能够发现这种奇异行为？在第四章我们画了在实验上发现这些奇异行为的相图，在自由空间，这中奇异行为最可能在有能隙超流相附近。在光晶格中，相同的超流相也能观测到，但是整个相图更复杂，因为，拓扑相变不仅在布里渊区中心，在其它高对称点也有。出现无能隙点并不是这些奇异行为的必要条件，因为通过这些无能隙点，其它参数和化学势总是光滑的函数，在图 5.11 我们画了沿这些能隙唯一可能位置的 z 轴，准粒子能谱 $E_{\mathbf{k}}^-$ 的能带。对应图 5.9 和 5.10 峰的位置的参数。我们发现在光晶格中峰的位置在完全有能隙相和完全无能隙相都有。

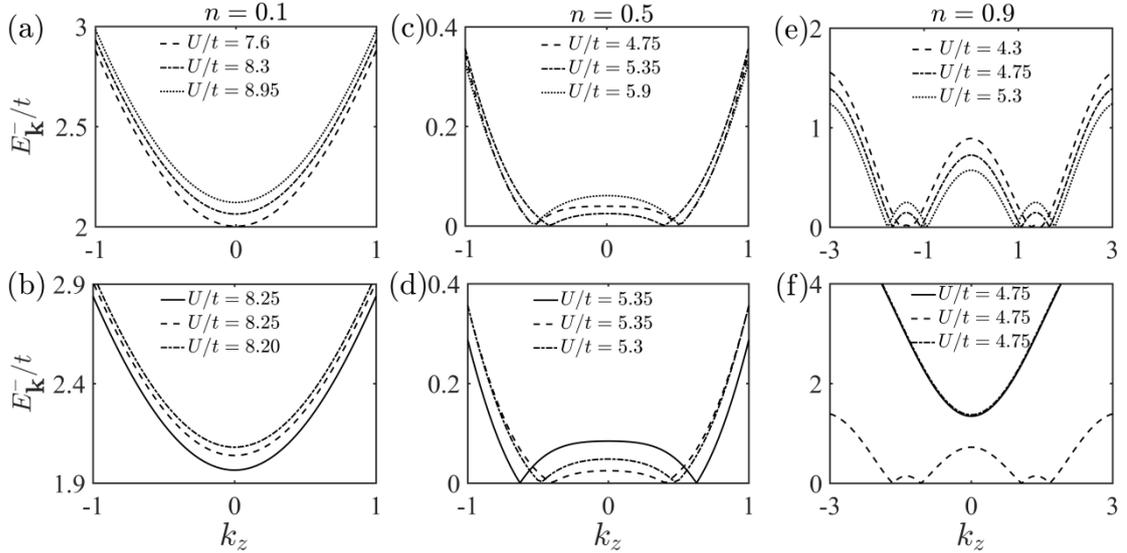


图 5.11 SC0 和 Zeeman 场共存的能带结构, (a), (c), (e) 对应图 5.9 峰的位置, (b), (d), (f) 对应图 5.10 峰的位置,

5.4.3 反常压强指数

等温压缩系数的这种反常行为对物理会产生什么样的影响？从等温压缩系数的基本定义，我们可以从不同角度去理解，所有这些理解是等价的。在前面的计算中，我们用到了化学势和载荷密度之间的关系为 $\kappa_T \propto \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ ，也就是等温压缩系数正比粒子数密度的涨落，这个涨落在实验上能够直接测量[87-88]。尽管总的粒

子数一定，但体积的改变会直接影响粒子数密度，在前面我们已经给出了压强指数的定义，在第四章我们也已经讨论自由空间等温压缩系数对压强指数的影响，例如，在没有相互作用费米气体 $\nu = \frac{5}{3}$ ，在 BEC 极限 $\nu = 2$ 。这些参数反应了多体相互作用可以直接对压强产生影响。在光晶格，如图 5.12 当 $U \sim 0$ ，压强指数强烈依赖于 SOC 和 Zeeman 场，因为等温压缩系数得反常性，压强指数也表现出反常的行为。和我们解析分析相吻合。在强相互作用极限，压强指数将趋于一个极限值 $\nu = 2$ 。

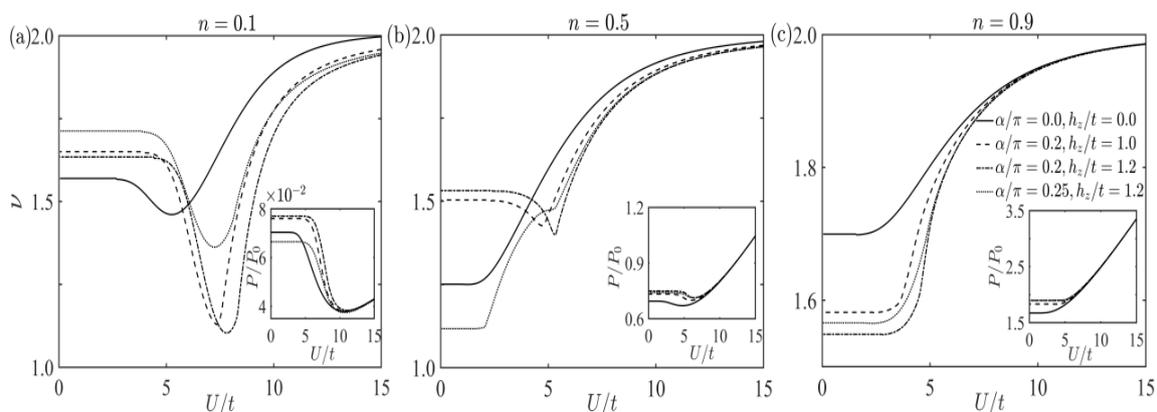


图 5.12 光晶格中，在各种不同参数下的压强指数，每一个插图对应的是随相互作用变化的压强，大 U 极限根据等式(5.3.22)可知 $P \propto U$

5.5 小结

这一章我们主要讨论立方光晶格中简并费米气体的等温压缩系数。我们发现在光晶格同在自由空间情形不同，又多了两个影响因素，例如，粒子空穴关于半满填充的对称性和平均占据数。这使得和自由空间相比，有些完全不同的物理。在计算等温压缩系数时，对于平均占据数 $n < 1$ ，用的是粒子数密度，当平均占据 $n > 1$ 用的是空穴的密度。在光晶格中，我们讨论在没有 SOC 和 Zeeman 场，平均占据数和相互作用对等温压缩系数的影响，显式等温压缩系数和隐式等温压缩系数都有贡献。在 SOC 和 Zeeman 场共同作用的情形，在某些常数区域出现反常等温压缩系数。和连续空间不同，这种反常的峰在有能隙超流和无能隙 Weyl 超流相都有出现。在强相互作用极限，我们证明等温压缩系数将逼近一个仅依赖粒子数密度和相互作用的极限值。因此，在强相互作用，等温压缩系数将变得非常小。反常等温压缩系数将导致反常的压强指数。该指数表征压强随体积的改变，在强相互作用极限，压强指

数 $\nu = 2$ ，和自由空间情形类似。在弱相互作用极限将受到 SOC 和 Zeeman 场的共同影响。

总结与展望

本论文利用平均场理论研究了自由空间和光晶格中费米简并气体的热力学性质，其中包括等温压缩系数、压强、和压强指数等热力学量。主要结论是：在自旋轨道耦合和 Zeeman 场共存的情形，等温压缩系数在一些参数区域会出现突然增加的反常行为，这种反常性还会导致表征多体理论相互作用的压强指数也出现反常性。

文中，首先介绍了基于 Cooper 对的标准 BCS 理论，以及平均场理论中常用的波戈留波夫变换，在此基础上我们介绍了零温 BCS-BEC 渡越理论，这是超冷费米原子在吸引相互作用下的又一重要特性。另外我们从巨配分函数出发，导出所要研究的热力学量，等温压缩系数、压强、压强指数等。文中还简要介绍了热力学方格，方便我们今后研究其他的热力学量。

在已有理论基础上我们介绍了三维简并费米气体，在自旋轨道耦合和 Zeeman 场共存下的一些性质。文献发现 SOC 增强超流配对的形成，相反 Zeeman 场会压制超流配对的形成，特别当 $|h_z| > \Delta$ ，会使得超流序参突然下降到零同时化学势突然升至费米能。SOC 和 Zeeman 场共同作用导致了有能隙拓扑超流相变。文献给出两个相变临界点 $|h_z| = \Delta$ 和 $|h_z| = \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}$ 。另外，SOC 和 Zeeman 场的竞争还会导致系统从稳定的均匀超流相到亚稳或非稳态的相分离。

在第四章，我们研究了这个系统中的热力学性质，发现在 BCS 极限，等温压缩系数和费米面上的态密度成正比，在 BEC 极限，等温压缩系数和散射长度成反比。在这两个极限之间，SOC 和 Zeeman 共同作用，在一些参数区域出现了等温压缩系数突然增加的峰，这个峰的位置和高度取决于 Zeeman 场、SOC、相互作用。等温压缩的反常性直接导致压强指数 ν 在相应位置也出现了反常行为，特别指出的是压强指数在 BCS 极限， $\nu = \frac{5}{3}$ ，这个指数类似于其他一些物理中广泛探究的常数，如随相互作用改变的 Wilson 比率、Wiedemann-Franz 定律和 Grüneisen 常数，所以压强指数反应了多体相互作用对超流的影响。

最后鉴于光晶格和连续模型的不同，我们还研究了三维光晶格中费米简并气体的热力学性质，首先在光晶格中，平均占据数和粒子空穴关于半满填充的对称性成

为两个重要的因素。特别是在接近半满填充时，由于 $\kappa_T \propto \frac{1}{n^2}$ ，等温压缩系数变得非常小，但是 $n^2 \kappa_T$ 单调增加，在强相互作用极限 $\kappa_T = 2/Un^2$ 。在平均占据数 $n > 1$ ，上式应为 $\kappa_T = 2/U(2-n)^2$ ，此时应为空穴的密度。和连续模型不同，等温压缩系数随相互作用的变化表现出非单调行为，隐式等温压缩系数除了在正常相严格为零以外，在半满填充时，也为 0。在 SOC 和 Zeeman 场共同作用的情形下，在一些参数区域，等温压缩系数也出现了奇异增加的峰，和连续模型不同这个峰在能隙完全打开的超流相和有能隙超流相都有出现。等温压缩系数的反常性同样也导致了压强指数的反常性。在 BEC 极限和连续模型一样压强指数 $\nu=2$ 。

在第二章导出的等温压缩系数公式可以推广到三组分甚至更多，同时还发现我们的结果同样适用于理解忽略量子涨落的零温低维物理。我们期望用本文的方法去理解其他模型的等温压缩系数。同样用这种思想去研究简并气体的其他热力学参数，如，体胀系数、比热、压缩性、Wiedemann-Franz 定律和 Grüneisen 常数等，当然这其中的一些参数在费米气体甚至高温超导物理中已有相关的研究。

参 考 文 献

- [1] Pegal C. J. and Smith H., Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. Cambridge University Press, 2008, 1-2
- [2] Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R. et al., Observation of Bose-Einstein condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 1995, **269**, 198
- [3] Bradley C. C., Sackett C. A., Tollett J. J., et al., Evidence of Bose-Einstein condensation in an Atomic Gas with Attractive Interaction. *Phys. Rev. Lett.* 1995, **75**, 1687
- [4] Inoué S, Andrews M. R., Stenger J., Miesner H. J., Stamper-Kurn D. M. and Ketterle W., Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, 1998, **392**, 151
- [5] Demarco B., Jin D. S., Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atom Gases. *Science*, 1999, **285**, 1703
- [6] Greiner M., Rega C.A., Jin D. S., Emergence of a molecular Bose-Einstein condensation from a Fermi gas. *Nature*, 2003, **426**, 537.
- [7] 曾谨言. 量子力学: 卷 I [M]. 科学出版社, 2013.
- [8] Feshbach H., A unified theory of nuclear reactions, *Annals of Physics*, 1958, **5** 357–390.
- [9] Tiesinga E., Verhaar B. J. and Stoof H. T. C., Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions. *Phys. Rev. A*, 1992, **47**, 4114.
- [10] Moerdijk A. J., Verhaar B. J. and Axelsson A., Resonances in ultracold collisions of ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, and ${}^{23}\text{Na}$. *Phys. Rev. A*, 1995, **51**, 4852.
- [11] Khaykovich L., Schreck F., Ferrari G. Bourdel T., et al. Formation of a Matter-Wave Bright Soliton. *Science*, 2002, **296**, 1290.
- [12] Strecker K. E., Partridge G. B., Truscott A. G. and Hulet R. G., Formation and propagation of matter-wave soliton trains. *Nature*, 2002, **417**, 150
- [13] Cornish S. L., Claussen N. R., Roberts J. L., Cornell E. A. and Wieman C.E., *Phys. Rev. Lett.* 2000, **85** 1795.
- [14] Weber T., Herbig J., Mark M., Nagerl H.C. and Grimm R., *Science*, 2003, **299**, 232.

- [15] Roati G., Zaccanti M. et al., Phys. Rev. Lett. 2002, **88**, 173201
- [16] Bloch I. Dalibard J. and Zwirger W., Many-body physics with Ultracold gases. Rev. Mod. Phys., 2008, **80**, 885.
- [17] Hemmerich A. and Hänsch T. W. Two-dimensional atomic crystal bound by light. Phys. Rev. Lett., 1993, **70**, 410.
- [18] Petsas K. I., Coates A.B., and Grynberg G., Phys. Rev. A, 1994, **50**, 5173.
- [19] Hemmerich A. and Hansch T.W., Phys. Rev. Lett. (1993) **70**, 410.
- [20] Hubbard J., Electron correlations in narrow energy bands, Proc. R. Soc. (London) A, 1963, **276**, 238.
- [21] Hubbard J., Electron correlations in narrow energy bands. 3. Improved solution. Proc. R. Soc. (London) A , 1964, **281**, 401.
- [22] Hubbard J., Electron correlations in narrow energy bands. V. A perturbation expansion about atomic limit. Proc. R. Soc. (London) A, 1967, **296**, 82.
- [23] Esslinger T., Fermi-Hubbard physics with atoms in an optical lattice. arXiv: 1007.0012.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] Cheuk L. W., Sommer A. T., Hadzibabic Z., Yefsah T., Bakr W. S., Zwierlein M. W., Spin-Injection Spectroscopy of a Spin-Orbit Coupled Fermi Gas. Phys Rev Lett, 2012, **109**, 095302.
- [27] Wu Z., Zhang L., Sun W., Xu X. T., Wang B. Z., Ji S. C., Deng Y. J., Chen S., Liu X. J., Pan J. W., Realization of two dimensional spin-orbit coupling for Bose-Einstein condensates. Science, 2016, **354**, 6308.
- [28] 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., Experimental realization of two-dimensional synthetic spin-orbit coupling in ultracold Fermi gases. Nature physics, 2016, **12**, 540.
- [29] Lin Y. J., Jimenez-Garcia K., Spielman I. B., Spin-orbit-coupled Bose-Einstein

- condensates. *Nature*, 2011, **471**, 83.
- [30] Cui X., Lian B., Ho T. L., et al. Synthetic gauge field with highly magnetic lanthanide atoms. *Phys. Rev. A*, 2013, **88**, 011601.
- [31] Barden J., Cooper L. N., Schrieffer J. R., Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 1957, **106**, 162.
- [32] Barden J., Cooper L. N., Schrieffer J. R., T theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 1957, **108**, 1175.
- [33] Cooper L. N., Bound Electron pairs in a Degenrate Fermi Gas. *Phys. Rev.*, 1956, **104**, 162
- [34] Eagles D. M., Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors. *Phys. Rev.*, 1969, **186**, 456
- [35] Leggett. *Modern trends in the Theory of Condensed Matter*. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [36] Callen, Herbert B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* 2nd Ed. 1985, 183
- [37] Koenig F.O. Families of Thermodynamic Equations. I The Method of Transformations by the Characteristic Group. *J. chem. Phys.* 1935, **3**, 29.
- [38] Chen Q. J., Stajic J., Tan S., and Levin K., *Phys. Rep.* 2005, **412**, 1.
- [39] Gong M., Tewari S., and Zhang C. W., BCS-BEC Crossover and Topological Phase Transition in 3D Spin-Orbit Coupled Degenerate Fermi Gases. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 2011, 195303.
- [40] Iskin M. and Subasi A. L., *Phys. Rev. Lett.* 2011, **107**, 050402.
- [41] Yi W. and Guo G. C., Phase separation in a polarized Fermi gas with spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2011, **84**, 031608.
- [42] Bedaque P. F., Caldas H., and Rupak G., *Phys. Rev. Lett.* 2003, **91**, 247002.
- [43] Han L. and Sá de Melo C. A. R., Evolution from BCS to BEC superfluidity in the presence of spin-orbit coupling. *Phys. Rev. A*, 2012, **85**, 011606(R).
- [44] Jiang L., Liu X. J., Hu H. and Pu H., Rashba spin-orbitcoupled atomic Fermi gases. *Phys. Rev. A*, 2011, **84**, 063618.
- [45] Zheng Z., Pu H., Zou X. and Guo G. C., Thermodynamic properties of Rashba

- spin-orbit-coupled Fermi gas. *Phys. Rev. A*, 2014, **90**, 063623.
- [46] Seo k., Zhang C. W. and Tewari Sumanta, Thermodynamic signatures for topological phase transitions to Majorana and Weyl superfluids in ultracold Fermi gases. *Phys. Rev. A*, 2013, **87**, 063618
- [47] Guo H., He Y., Chien C. C. and Levin K., Compressibility in strongly correlated superconductors and superfluids: From the BCS regime to Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 2013, **88**, 043644 .
- [48] Wang H. Y., Zheng Z., Zhuang L. and Liu W. M., Topological supersolidity of dipolar Fermi gases in a spin-dependent optical lattice. arXiv preprint arXiv:1709.02688 (2017).
- [49] Costa N. C., Araújo M. V., Lima J. P., et al., Compressible ferrimagnetism in the depleted periodic Anderson model. *Rev. B*, 2018, **97**, 085123.
- [50] Zhang W., Greschner S., Fan E., Scott T. C. and Zhang Y., Ground-state properties of the one-dimensional unconstrained pseudo-anyon Hubbard model. *Phys. Rev. A* 2017, **95**, 053614.
- [51] Duarte P. M., Hart R. A., Yang T. L., Liu X., Paiva T., Khatami E., Scalettar R. T., Trivedi N. and Hulet R. G., Compressibility of a fermionic Mott insulator of ultracold atoms. *Phys. Rev. Lett.* 2015, **114**, 070403.
- [52] Zhu S. L., Wang B. W. and Duan L. M., Simulation and Detection of Dirac Fermions with Cold Atoms in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* 2015, **114**, 070403
- [53] Yang B., Chen Y. Y., Zheng Y. G., Sun H., Dai H. N., Guan X. W., Yuan Z. S. and Pan J. W., Quantum criticality and the Tomonaga-Luttinger liquid in onedimensional Bose gases. *Phys. Rev. Lett.* 2017, **119**, 165701.
- [54] Kubala B., König J. and Pekola J., Violation of the Wiedemann-Franz law in a single-electron transistor. *Phys. Rev. Lett.* 2008, **100**, 066801.
- [55] Crossno J., Shi J. K., Wang K., Liu X., Harzheim A., Lucas A., Sachdev S., Kim P., Taniguchi T., Watanabe K., Ohki T. A. and Fong K. C., Observation of the Dirac fluid and the breakdown of the Wiedemann-Franz law in graphene. *Science* **351**, 1058 (2016).
- [56] Völklein F., Reith H., Cornelius T. W., Rauber M. and Neumann R., The

- experimental investigation of thermal conductivity and the Wiedemann-Franz law for single metallic nanowires. *Nanotechnology* 2009, **20**, 325706 .
- [57] Stojanovic N., Maithripala D. H. S., Berg J. M. and Holtz M., Thermal conductivity in metallic nanostructures at high temperature: Electrons, phonons, and the Wiedemann-Franz law. *Phys. Rev. B* 2010, **82**, 075418 .
- [58] Garg A., Rasch D., Shimshoni E. and Rosch A., Large violation of the Wiedemann-Franz law in Luttinger liquids. *Phys. Rev. Lett.* 2009, **103**, 096402.
- [59] M. de Souza, Menegasso P., Paupitz R., Seridonio A. and Lagos R. E., Grüneisen parameter for gases and superfluid helium. *Eur. J. Phys.* **37**, 055105 (2016).
- [60] Lifshitz E. M. and Pitaevskii L. P., *Statistical physics: theory of the condensed state.* Vol. 9 (Elsevier, 2013).
- [61] Pathria R. K. and Beale P. D., *Statistical mechanics*, 3rd ed. (Elsevier/Academic Press, Amsterdam ; Boston, 2011).
- [62] Ketterle W. and Zwierlein M. W., Making, probing and understanding ultracold Fermi gases. arXiv preprint arXiv:0801.2500 (2008).
- [63] Zheng D., Zhang G. M. and Wu C. J., Particle-hole symmetry and interaction effects in the Kane-Mele-Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 2011, **84**, 205121.
- [64] Xu Y., Qu C. L., Gong M. and Zhang C. W., Competing superfluid orders in spin-orbit-coupled fermionic cold-atom optical lattices. *Phys. Rev. A*, 2014, **89**, 013607.
- [65] Cheuk L. W., Sommer A. T., Hadzibabic Z., Yefsah T., Bakr W. S. and Zwierlein M. W., Spin-Injection Spectroscopy of a Spin-Orbit Coupled Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.* 2012, **109**, 095302.
- [66] Meng Z. M., Huang L. H., Peng P., D. Li H., L. Chen C., Xu Y., Zhang C. W., Wang P. J. and Zhang J., Experimental Observation of a Topological Band Gap Opening in Ultracold Fermi Gases with Two-Dimensional Spin-Orbit Coupling. *Phys. Rev. Lett.* 2016, **117**, 235304 .
- [67] Radić J., Di Ciolo A., Sun K. and Galitski V., Exotic Quantum Spin Models in Spin-Orbit-Coupled Mott Insulators. *Phys. Rev. Lett.* 2012, **109**, 085303.
- [68] Cole W. S., Zhang S. Z., Paramekanti A. and Trivedi N., Bose-Hubbard Models with Synthetic Spin-Orbit Coupling: Mott Insulators, Spin Textures, and

- Superfluidity. Phys. Rev. Lett. **109**, 2012, 085302.
- [69] Goldman N., Kubasiak A., Bermudez A., Gaspard P., Lewenstein M. and Martin-Delgado M. A., Non-Abelian Optical Lattices: Anomalous Quantum Hall Effect and Dirac Fermions. Phys. Rev. Lett. 2009, **103**, 035301.
- [70] Sato M., Takahashi Y. and Fujimoto S., Non-Abelian Topological Order in s-Wave Superfluids of Ultracold Fermionic Atoms. Phys. Rev. Lett. 2009, **103**, 020401.
- [71] Sun Q., Zhu G. B., Liu W. M. and Ji A. C. Spin orbit coupling effects on the superfluidity of a Fermi gas in an optical lattice. Phys Rev A, 2013, **88**, 063637
- [72] 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 lattice. Phys Rev A, 2013, **88**, 013612.
- [73] Zheng D., Zhang G. M. and Wu C. J., Particle-hole symmetry and interaction effects in the Kane-Mele-Hubbard model. Phys. Rev. B, 2011, **84**, 205121.
- [74] Dhar A., Kinnunen J. J. and Törmä P., Population imbalance in the extended Fermi-Hubbard model. Phys. Rev. B , 2016, **94**, 075116 .
- [75] Denteneer P. J. H., Scalettar R. T. and Trivedi N., Particle- Hole Symmetry and the Effect of Disorder on the Mott- Hubbard Insulator. Phys. Rev. Lett. 2001, **87**, 146401.
- [76] Lee S. S., Ryu S., Nayak C. and Fisher M. P. A., Particle-Hole Symmetry and the $\nu=5/2$ Quantum Hall State. Phys. Rev. Lett. 2007, **99**, 236807.
- [77] Lin H. Q. and Hirsch J. E., Two-dimensional Hubbard model with nearest- and next-nearest-neighbor hopping. Phys. Rev. B 1987, **35**, 3359.
- [78] Gong M., Chen G., Jia S. T. and Zhang C. W., Searching for Majorana Fermions in 2D Spin-Orbit Coupled Fermi Superfluids at Finite Temperature. Phys. Rev. Lett. 2012, **109**, 105302.
- [79] Xu Y., Qu C. L., Gong M. and Zhang C. W., Competing superfluid orders in spin-orbit-coupled fermionic cold-atom optical lattices. Phys. Rev. A 2014, **89**, 013607.
- [80] Shen Z., Radzihovsky L. and Gurarie V., Reentrant BCS-BEC Crossover and a Superfluid-Insulator Transition in Optical Lattices. Phys. Rev. Lett. 2012, **109**, 245302

- [81] Duarte P. M., Hart R. A., Yang T. L., Liu X. X., Paiva T., Khatami E., Scalettar R. T., Trivedi N. and Hulet R. G., Compressibility of a Fermionic Mott Insulator of Ultracold Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 2015, **114**, 070403.
- [82] Jaksch D. and Zoller P., The cold atom Hubbard toolbox. *Ann. Phys.* 2005, **315**, 52.
- [83] Greiner M., Mandel O., Esslinger T., Hänsch T. W., and Bloch I., Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature (London)* 2002, **415**, 39.
- [84] Jaksch D., Bruder C., Cirac J. I., Gardiner C.W., and Zoller P., Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 1998, **81**, 3108.
- [85] Schneider U., Hackermüller L., Will S., Best T. H., Bloch I., Costi T. A., Helmes R. W., Rasch D. and Rosch A., Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice. *Science* 2008, **322**, 1520.
- [86] Nozadze D. and Trivedi N., Compressibility as a probe of quantum phase transitions in topological superconductors. *Phys. Rev. B*, 2016, **93**, 064512.
- [87] Esteve J., Trebbia J. B., Schumm T., Aspect A., Westbrook C. I., and Bouchoule I., Observations of Density Fluctuations in an Elongated Bose Gas: Ideal Gas and Quasicondensate Regimes. *Phys. Rev. Lett.* 2006, **96**, 130403.
- [88] T. Jacqmin, J. Armijo, T. Berrada, K. V. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, Sub-Poissonian Fluctuations in a 1D Bose Gas: From the Quantum Quasicondensate to the Strongly Interacting Regime. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 230405 (2011).
- [89] Feshbach H., A unified theory of nuclear reactions II. *Annals of Physics*, 1962, 19 287–313.
- [90] Cubizolles J., Bourdel T., Kokkelmans S., et al., Production of Long-Lived Ultracold Li₂ Molecules from a Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**, 240401.
- [91] Strecker, K. E., Partridge, G. B. and Hulet R. G., Conversion of an atomic Fermi gas to a long-lived molecular Bose gas. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**, 080406.
- [92] Jochim, S., Bartenstein, M., Altmeyer, A., Hendl, G., Chin, C., Hecker-Denschlag, J. and Grimm, R., Pure gas of optically trapped molecules created from fermionic atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**, 240402.
- [93] Regal, C. A., Greiner, M. and Jin D. S., Lifetime of molecule-atom mixtures near a

- Feshbach resonance in 40K. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, **92**, 083201.
- [94] Loftus T., Regal C. A., Ticknor C., Bohn J. L., and Jin D. S., Resonant control of elastic collisions in an optically trapped Fermi gas of atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**, 173201.
- [95] O'Hara K. M., Hemmer S. L., Gehm M. E., Granade S. R. and Thomas J. E., Observation of a strongly interacting degenerate Fermi gas of atoms. *Science*, 2002, **298**, 2179.
- [96] Lippmann B. A. and Schwinger J. Variational Principles for Scattering Process. I. *Phys. Rev.* 1950, **79**, 469
- [97] Grimm R., Weidemuller M., Ovchinnikov Y. B., Optical dipole traps for neutral atoms. *Advances in atomic, molecular, and optical physics*, 2000, **42**,95-170.
- [98] Bednorz J. G., Müller K. A. Possible high TC superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B.* 1986, **64**, 189.
- [99] Bogoljubov N. N., On a new method in the theory of superconductivity . *Il Nuovo Cimento.* 1958, **7**, 794。
- [100] Partridge G. B., Strecker K. E., Kamar R.I., Jack M. W. and Hulet R. G. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**, 020404.
- [101] Botelho S. S. and Sa' de Melo C. A. R., *J. Low Temp. Phys.* 2005, **140**, 409.
- [102] Gurarie V., Radzihovsky L., and Andreev A.V., *Phys. Rev. Lett.* 2005, **94**, 230403 .
- [103] Prassides K., Iwasa Y., Ito T., Dam H. Chi, Uehara K., NishiborE. i, Takata M., Sakata M., Ohishi Y., Shimomura O. et al., Compressibility of theMgB2 superconductor. *Phys. Rev. B*, 2001, **64**, 012509.
- [104] Peterson O. G., Batchelder D. N., and Simmons R. O., Measurements of x-ray lattice constant, thermal expansivity, and isothermal compressibility of argon crystals. *Phys. Rev.* 1966, **150**, 703.
- [105] Palmer J. C., Martelli F., Liu Y., Car R., Panagiotopoulos A. Z., and Debenedetti P. G., Metastable liquid-liquid transition in a molecular model of water. *Nature (London)* 2014, **510**, 385.
- [106] Mo J. X. and Liu W. B., Ehrenfest scheme for P-V criticality of higher dimensional charged black holes, rotating black holes, and Gauss-Bonnet AdS black holes. *Phys. Rev. D* 2014, **89**, 084057.

- [107] Turns S. R., *Thermodynamics: Concepts and Applications* (Cambridge University Press, New York, 2006).
- [108] Schnyder A. P., Ryu S. S., Furusaki A., and Ludwig A. W. W., Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B.* 2008, **78**, 195125.
- [109] Kitaev A., in *Proceedings of the Landau Memorial Conference on Advances in Theoretical Physics*, edited by V. Lebedev and M. Feigel'man. AIP Conf. Proc. No. 1134 (AIP, New York, 2009), pp. 22–30.
- [110] Zheng Z., Gong M., Zhang Y. C., Zou X. B., Zhang C.W. and Guo G. C., FFLO superfluids in 2D spin-orbit coupled Fermi gases. *Sci. Rep.* **4**, 6535 (2014).
- [111] Zhang W. and Yi W., Topological Fulde-Ferrell-Larkin- Ovchinnikov states in spin-orbit-coupled Fermi gases, *Nat. Commun.* **4**, 2711 (2013).
- [112] Ueda M., *Fundamentals and New Frontiers of Bose-Einstein Condensation* (World Scientific, Singapore, 2010).
- [113] Dvorak V. and Pekalski A., in *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter, Proceedings of the XVI Karpacz Winter School of Theoretical Physics, Karpacz, 1979*, edited by A. Pekalski and J. Przystawa (Springer, Berlin, 1980), Vol. **115**, p. 447.
- [114] Hofmann B., *Regularization for Applied Inverse and Ill-Posed Problems: A Numerical Approach* (Springer, Berlin, 2013), Vol. **85**.
- [115] Amor H., Marigo J. J. and Maurini C., Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments, *J. Mech. Phys. Solids* 2009, **57**, 1209.
- [116] Shen Z., Radzihovsky L. and Gurarie V., Reentrant BCS-BEC Crossover and a Superfluid-Insulator Transition in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 2012, **109**, 245302.
- [117] Han Y. J., Yi W. and Zhang W. *Physics of Ultracold Quantum Gases*. Peking university press, 2014, 205-214.
- [118] Kadanoff, L. P., More is the Same; Phase Transitions and Mean Field Theories. *Journal of Statistical Physics.* 2009, **137**, 777.
- [119] Asskar'yan G. A., *Sov. Phys. JETP* 1962, **15**, 1088.

- [120] Ashkin A., Phys. Rev. Lett. 1970, **25**, 1321.
- [121] Hänsh T. and Schawlow. Opt. Commum. 1975, **13**, 68.
- [122] Wineland D., Drullinger H. Bull. Am. Phys. Soc. 1975, **20**, 637.
- [123] Wineland D., Dehmelt and Walls F. Phys. Rev. Lett. 1978, **40**, 1639.
- [124] Neuhauser W., Hohenstatt M., Toschek P. and Dehmelt H. Phys. Rev. Lett. 1978, **41**, 23.
- [125] 熊宏伟, 吕宝龙, 刘淑娟, 詹明生. 超冷费米气体研究的新进展. 物理学进展, 2005, 25, 0542.
- [126] Kazuki Sasaki, Naoya Suzuki, and Hiroki Saito. Bénard–von Kármán Vortex Street in a Bose-Einstein Condensate. Phys. Rev. Lett., 2010, **104**.150404.
- [127] H. Guo, Y. He, C. C. Chien, and K. Levin, Compressibility in strongly correlated superconductors and superfluids: From the BCS regime to Bose-Einstein condensates. Phys. Rev. A, 2013, **88**, 043644.
- [128] Ueda M., Fundamentals and New Frontiers of Bose-Einstein Condensation. Peking university press, 2014, 277-283
- [129] 文文, 周昱, 超冷费米原子气体的宏观特性的理论研究, 江苏大学出版社, 2013, 001-003
- [130] Zhai H., Degenerate quantum gases with spin-orbit coupling: a review. Rep. Prog. Phy. 2015, **78**, 026001.
- [131] Zwerger W., The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi gas, springer, 2012, 4-5.
- [132] Zhai H., Spin-orbit coupled quantum gases. International Journal of Modern Physics B, 2012, **26**, 1230001.
- [133] Lin Y. J., Compton R. L., Jimenez-Garcia K., Porto J. V. and Spielman, I. B.. Synthetic magnetic fields for ultracold neutral atoms. Nature, 2009 **462**, 628
- [134] Liang C. G., Huang Y. X., Liu F. H., et al. Isothermal compressibility in Fermi gases in an optical lattice[J]. Physical Review A, 2019, **99**, 023624
- [135] Gor'kov L P, Melik-Barkhudarov T K. Contribution to the theory of superfluidity in an imperfect Fermi gas. Sov. Phys. JETP, 1961, **13**, 1018.

攻读学位期间取得的研究成果

- [1] **Cheng-Gong Liang**, Yue-Xin Huang, Fei-Hong Liu, Yunbo Zhang Guang-Can Guo and Ming Gong, Isothermal compressibility in Fermi gases in an optical lattice. Phys. Rev. A, 2019, **99**, 023624.
- [2] **Cheng-Gong Liang**, Yue-Xin Huang, Fei-Hong Liu, Yunbo Zhang Guang-Can Guo and Ming Gong, Anomalous isothermal compressibility in spin-orbit coupled degenerate Fermi gases. Phys. Rev. Lett., with referee.
- [3] **Cheng-Gong Liang**, Ze-Gang Liu, Yunbo Zhang, Simulation and detection of Weyl fermions in cold atoms with Raman-assisted spin-orbit coupling, Scientific Reports, with referee.
- [4] **梁成功**, 陈立, 王建明, 张云波, 光晶格中三维自旋轨道耦合费米气体的热力学性质, 山西大学学报(自然科学版)
- [5] **梁成功**, 张云波, 自旋轨道耦合二维费米气体的热力学性质, 上海大学学报(自然科学版)

致 谢

回首山大的岁月，内心百感交集，亢奋、彷徨、无奈、苦楚、激动...，但更多的还是感激。值此论文完成之际，我向这段艰难历程中曾经给予我帮助的老师、同学、亲人和朋友们表示真挚的感谢，如果没有你们，我很难坚持下来。

首先我要由衷的感谢我的导师张云波老师，感谢他这么多年来对我严格的要求、悉心的指导、循循的鼓励和不断的鞭策。他不但给我提供精神鼓励，而且在学术指导、论文修改上倾注了大量的心血和精力，当我科研受挫时，是张老师及时纠正方向，并一次次为我提供继续学习的机会，生活上源源不断的给予支助。张老师治学严谨认真、待人宽厚和善、工作兢兢业业，是我终生学习的榜样。

特别感谢中科大国家量子信息重点实验室的龚明老师！感谢龚老师在我科大访问学习期间，耐心指导、并传授我研究技能。他高效的工作效率和先进的学习方法让我大开眼界，他敏锐的洞察力和深厚的理论功底让人叹服，他能迅速准确的找到研究热点，让我顺利完成了两个研究课题。

特别感谢兰州大学罗洪刚老师，感谢罗老师在我去兰大学习期间在学术和生活上给予的指导和照顾，感谢平时罗老师的答疑解惑，每次提问，无论多忙总是第一时间及时回复，从罗老师那里学到了很多知识和技能，让我受益匪浅。

感谢国家授时中心的张晓斐老师、韩伟老师、高峰老师，中科大国家量子信息重点实验室的易为老师、韩永建老师、周祥发老师，北京师范大学的寇谔鹏老师，复旦大学的陈炎老师，太原理工大学的张万舟老师，感谢他们的指导、照顾、鼓励及帮助。

感谢山西大学理论研究所的梁九卿老师、梁军军老师、余增强老师，李卫东老师、李志坚老师、聂一行老师、张素英老师、刘福虎老师、李禄老师、姜晓庶老师、李军奇老师、王月明老师、温新建老师，光谱所陈刚老师，他们中有些是授业老师，有些在科研上给予我无私的指导，有些在生活中给予我帮助。

感谢郭丽平、尹相国、王利、徐志浩、陈立、杜磊、杨利民、陈冠军、王红梅、毛丽君、李甜甜、刘彦霞、张杰、吕晓龙、梁晋菊、尉小红、李花、万鹏宇、张彦伟、白守燕、王娟、刘敬鹄、高春平、胡蕊、张瑞江、王凤梅、田康康、刘聪明、

冯志强、刘娜、王乐、王丽敏、陆展鹏、薛娅婷、皇甫宏丽、张奋华、游慧敏、渠天涛、武璟楠、张瑶、刘青、张荣等“CAT”小组的所有成员，大家一起营造了这么一个温馨和谐的大家庭，让我的研究生生涯留下了美好的回忆。

感谢和我同届的杨国全、臧峰、谢海卿、赵雪松、刘吉利、刘渊、牛鹏斌等同学在学习和日常生活中的帮助；感谢初高中、大学的同学朋友们，是你们的关心、鼓励、支持和肯定让我在那些艰难的日子里不再孤单，在想要放弃时再次咬紧牙关。

感谢在中科大结识的张舜尧、刘泽刚、徐洪泽、陈加明、郑振、黄月新、庄伟峰、王瑞强、刘飞宏等在科研和生活上给予了我许多帮助，让我在中科大度过一段充实难忘的时光。

最后还要特别感谢我的爱人、儿子和所有家人，感谢你们这么多年无私的奉献和默默的支持，你们的理解、包容和关爱是我不断前进的动力。

愿所有的老师、同学、亲人们身体健康、万事如意！

梁成功

2019年4月

个人简况及联系方式

姓名：梁成功

性别：男

籍贯：山西省五台县

学习经历：2009年9月至2019年7月于山西大学理论物理研究所凝聚态物理专业读博，2017年8月至2018年10月期间到中国科学院量子信息重点实验室龚明小组访问学习。

E-Mail:lcgsyssx@163.com

承 诺 书

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

作者签名：



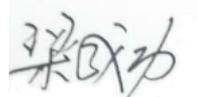
2019年5月24日

学位论文使用授权声明

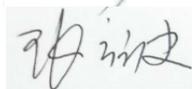
本人完全了解山西大学有关保留，使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关机关或机构送交论文的复印件和电子文档，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印，缩印或扫描等手段保存，汇编学位论文。同意山西大学可以用不同方式在不同媒体上发表，传播论文的全部或部分内容。

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：



导师签名：



2019 年 5 月 24 日

