

山 西 大 学

2013 届博士研究生学位论文

一维量子气体基态性质的 密度泛函理论研究

作者姓名	王红梅
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	2007 年 9 月至 2013 年 12 月

二〇一三年十二月

Dissertation for the Doctor's Degree
Of Shanxi University in 2013

**Density Functional Theory
for the Ground State Properties
of One Dimensional Quantum Gases**

Name	Hongmei Wang
Supervisor	Professor Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Field of Research	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2007. 09 - 2013. 12

December, 2013

目录

中文摘要	VII
ABSTRACT	VIII
第一章 绪论	1
第一节 一维量子气体	1
1.1.1 一维量子多体模型	1
1.1.2 理论简介	4
第二节 密度泛函理论	5
1.2.1 Hartree-Fock 近似	6
1.2.2 密度泛函理论	8
第三节 一维冷原子实验	11
1.3.1 一维系统的制备	11
1.3.2 相互作用强度的调节	13
1.3.3 物理量的探测	15
第四节 我们的工作	16
第五节 本文内容	16
参考文献	16
第二章 自旋-0 玻色气体	23
第一节 弱作用平均场方法	24
第二节 强作用玻色-费米映射方法	25
第三节 均匀系统 Bethe ansatz 方法	26
第四节 简谐势下的分离变量方法	29
2.4.1 单体问题	29
2.4.2 两体问题	30
2.4.3 多体问题	32
第五节 密度泛函方法	33
2.5.1 Kohn-Sham 方程	34
2.5.2 拟合公式	35
2.5.3 密度分布与基态能量	36

参考文献	40
第三章 自旋-1/2 费米气体	43
第一节 均匀系统 Bethe ansatz 解	44
3.1.1 Bethe ansatz 方程	44
3.1.2 吸引作用下的 Bethe ansatz 解	45
3.1.3 排斥作用下的 Bethe ansatz 解	49
第二节 外势束缚系统的 KS 方程	51
第三节 简谐外势下的吸引费米气体	52
第四节 与自旋相关的简谐外势下的排斥费米气体	56
参考文献	59
第四章 玻色费米混合气体	61
第一节 Kohn - Sham 方程	62
第二节 均匀系统的基态能	64
4.2.1 Bethe ansatz 方程	64
4.2.2 拟合公式	66
第三节 数值结果	68
4.3.1 极限相互作用情况	68
4.3.2 密度分布与基态能量	70
第四节 小结	75
参考文献	76
第五章 自旋-1 玻色气体	79
第一节 理论模型	80
第二节 均匀系统的 Bethe ansatz 方程	80
第三节 外势束缚系统的 Kohn-Sham 方程	85
第四节 数值结果	89
5.4.1 $P=0$ 系统	89
5.4.2 $P \neq 0$ 系统	91
第五节 小结	99
参考文献	99

总结与展望	103
攻读博士学位期间发表文章	105
致谢	107
个人简况及联系方式	109
承诺书	111
学位论文使用授权声明	113

CONTENTS

Chinese Abstract	VII
Abstract	VIII
Chapter 1 Introduction	1
1.1 1D Quantum Gas	1
1.1.1 The model of 1D Quantum Many Body System	1
1.1.2 Introduction to Theories	4
1.2 The Density Functional Theory	5
1.2.1 Hartree-Fock Approximation	6
1.2.2 The Density Functional Theory	8
1.3 Experiments for 1D Cold Atomic Gases	11
1.3.1 Relization of 1D System	11
1.3.2 Tuning the Strength of Interaction	13
1.3.3 Detecting the Physical Quantities	15
1.4 Our Work	16
1.5 Contents	16
References	16
Chapter 2 Spin-0 Bose Gas	23
2.1 The Mean Field Theory for Weak Interaction	24
2.2 The Bose-Fermi Mapping Method for Strong Interaction	25
2.3 Bethe ansatz Method for Homogeneous System	26
2.4 Separation of Variables for the System in a Harmonic Trap	29
2.4.1 One-Body	29
2.4.2 Two-Body	30
2.4.3 Many-Body	32
2.5 DFT Method	33
2.5.1 Kohn-Sham Equation	34
2.5.2 Fitting Formula	35
2.5.3 Density Distribution and Ground State Energy	36

References	40
Chapter 3 Spin-1/2 Fermi Gas	43
3.1 Bethe ansatz Exact Solution for Homogeneous System	44
3.1.1 Bethe ansatz Equations	44
3.1.2 Bethe ansatz Solutions for Attractive Interaction	45
3.1.3 Bethe ansatz Solutions for Repulsive Interaction	49
3.2 Kohn-Sham Equations of Trapped System	51
3.3 Attractive Fermi Gas in the Harmonic Trap	52
3.4 Repulsive Fermi Gas in the Spin-dependent Harmonic Trap	56
References	59
Chapter 4 Bose Fermi Mixture	61
4.1 Kohn-Sham Equations	62
4.2 The Ground State Energy of Homogeneous System	64
4.2.1 Bethe ansatz Equations	64
4.2.2 Fitting Formula	66
4.3 The Numerical Results	68
4.3.1 The Limiting Cases for Weak and Strong Interactions	68
4.3.2 Density Distribution and Ground State Energy	70
4.4 Conclusion	75
References	76
Chapter 5 Spin-1 Bose Gas	79
5.1 Theory Model	80
5.2 Bethe ansatz Equations for Homogeneous System	80
5.3 Kohn-Sham Equations for Trapped System	85
5.4 The Numerical Results	89
5.4.1 $P = 0$ System	89
5.4.2 $P \neq 0$ System	91
5.5 Conclusion	99
References	99

Summary and Outlook	103
Publications during Doctoral Study	105
Acknowledgements	107
Personal Profiles	109
Letter of Commitment	111
Authorization Statement	113

中文摘要

超冷原子气体为研究量子多体物理的基础问题提供了高度可控的实验基础，而且许多实验观察结果可以直接与精确可解理论相比较。一维空间中的多分量量子气体已经成为人们越来越感兴趣的话题。多分量气体可以是同一种原子的不同超精细态的混合物即旋量 BEC，也可以是不同种原子的混合物。与单分量冷原子系统相比，混合物系统中由于具有同种原子之间和不同种原子之间相互作用的竞争，其机制更为复杂，其表现出的物理现象也更为丰富。本文用密度泛函方法研究了一维外势下冷原子气体的基态性质，侧重研究简谐外势下的玻色费米混合物与旋量玻色气体。

首先，我们用密度泛函理论研究了束缚在一维简谐势阱中的具有相互排斥作用的玻色费米混合物。在局域密度近似和 Bethe ansatz 的精确解的基础上，通过数值计算 Kohn-Sham 方程得到了各分量的密度分布。结果表明，当相互作用较强时，一些费米子被排斥在势阱中心之外，显示出玻色费米部分相分离；玻色密度分布曲线上出现的振荡反映了玻色原子与费米原子间的强关联；当相互作用趋于无限强时，玻色费米混合物的基态能量和总密度与所有原子都费米化的情况相一致。

其次，我们为一维简谐束缚势下具有排斥密度-密度相互作用和反铁磁自旋交换相互作用的自旋-1 玻色气体的基态建立了密度泛函理论。基于局域密度近似和均匀系统的 Bethe ansatz 精确解推导出了 Kohn-Sham 方程。解该方程得到了具有不同总极化率和不同相互作用参数下自旋单体配对玻色子和极化玻色子的密度分布。我们发现密度相互作用和自旋交换相互作用之间的竞争使得中心密度与相互作用强度呈非单调性关系并出现了配对玻色子和极化玻色子相分离的现象。在强作用下，各自的密度分布曲线分别趋近于玻色-玻色对的 TG 气体和标量玻色 TG 气体。这为实验上观察旋量玻色气体中奇异的单体配对现象提供了理论基础。

关键词：一维系统；玻色费米混合物；旋量凝聚体；密度泛函理论；

Bethe ansatz 方程

ABSTRACT

Ultra-cold atomic gases provide a highly controllable testing ground to study fundamental problems in quantum many body physics and many experimental observations can be compared directly with exactly solvable theories. The degenerate quantum gases with many components in low spatial dimensions, especially in one dimension (1D), have become an increasingly interesting topic. Multi-component gases can be mixtures of the same species of atoms with different hyperfine states or mixtures of different species of atoms. The competition between the inter- and intra-species interactions make the mixture systems more complicated and exhibit richer physical phenomena than their single-component counterparts. This dissertation carries out the density functional theory (DFT) for the ground state properties of 1D trapped cold atomic gases. We mainly study the ground state of the Bose-Fermi mixture and the spinor Bosons in the harmonica traps.

Firstly, we present DFT for the 1D harmonically trapped Bose-Fermi mixture with repulsive contact interactions. The ground-state density distribution of each component is obtained by solving the Kohn-Sham equations numerically based on the local density approximation and the exact solution for the homogeneous system given by Bethe ansatz method. It is shown that for sufficiently strong interaction, a considerable amount of fermions are repelled out of the central region of the trap, exhibiting partial phase separation of Bose and Fermi components. Oscillations emerge in the Bose density curves, reflecting the strong correlation with fermions. For infinitely strong interaction, the ground-state energy of the mixture and the total density are consistent with the scenario that all atoms in the mixture are fully fermionized.

Secondly, we propose the DFT for 1D harmonically trapped spin-1 bosons in the ground state with repulsive density-density interaction and anti-ferromagnetic spin-exchange interaction. The density distributions of spin singlet paired bosons and polarized bosons with different total polarization for various interaction parameters are obtained by solving the Kohn-Sham equations which are derived based on the local

density approximation and the Bethe ansatz exact results for homogeneous system. Non-monotonicity of the central densities is attributed to the competition between the density interaction and spin-exchange. The results reveal the phase separation of the paired and polarized bosons, the density profiles of which respectively approach the Tonks-Girardeau gases of Bose-Bose pairs and scalar bosons in the case of strong interaction. We give the R-P phase diagram at strong interaction and find the critical polarization, which paves the way to direct observe the exotic singlet pairing in spinor gas experimentally.

Key Word: One dimensional system; Bose Fermi mixture; Spinor condensate;

Density functional theory; Bethe ansatz equation

第一章 绪论

物理学中通过物理学家致力于寻求物理现象的理论解释和物理规律的实验验证而使得理论与技术能够相互影响、相互促进。当前迅速发展的冷原子技术带动的其中一个重要研究领域便是一维量子多体问题。一维问题源于 1931 年 Bethe 在解一维海森堡自旋链时发展了一种后来被称作 Bethe ansatz (简称 BA, 中文称作贝脱方案) 的方法[1]。但早期由于一维系统缺乏对应的实际材料只被当做理论玩具。直到 60 年代 Lieb 和 Liniger (1963) 以此方法求解了一维接触作用的玻色气体[2]; 杨振宁等人发展了代数 BA 以求解一维接触作用的费米气并发现了 Yang-Baxter 方程才使得理论有了巨大突破[3-5]。从此 BA 可积性问题成为物理学中从凝聚态到弦论乃至数学领域中的热点[6-8]。这时期量子线等技术的发展, 使得 BA 方法所关注的大部分是关于一维电子的[9]。它所带动的其相关的一维理论也主要侧重于电子系统[10][11]。1995 年玻色-爱因斯坦凝聚体(Bose-Einstein Condensation, 简称 BEC)的实现[12-14], 开创了冷原子物理研究的新方向。与电子相比, 冷原子系统更干净, 其制备、调节和观察更为方便、更易操作。而且它为量子计算、量子信息等实际应用提供了可能。所以一维冷原子问题的研究成为目前国际上理论和实验研究的热点。这方面的综述文章可见[15-17]。

本章我们先介绍一维量子多体模型及其主要理论。然后介绍我们所用的密度泛函理论的历史发展和基本思想。最后简要介绍一维冷原子气体实验的主要方法。

第一节 一维量子气体

1.1.1 一维量子多体模型

一维相互作用量子多体模型的哈密顿量二次量子化形式为:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) \right] \hat{\Psi}(x) \\ & + \int dx dx' \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x') V_{int}(x-x') \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x'), \end{aligned} \quad (1.1)$$

或写成一次量子化形式

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_{ext}(x_i) \right] + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{int}(x_i - x_j). \quad (1.2)$$

其中 $\hat{\Psi}(x)$ 是系统场湮灭算符， N 是粒子数目， m 是粒子质量， $V_{ext}(x)$ 为外势， $V_{int}(x_i - x_j)$ 为粒子之间的两体相互作用势。粒子性质、粒子间相互作用方式和外势形式便是影响一维量子多体问题的主要因素。

粒子按照统计性可分为服从玻色-爱因斯坦统计的玻色子 (boson) 和服从费米-狄拉克统计的费米子 (fermion)。玻色子的自旋为零或 \hbar 的整数倍，其系统波函数是粒子交换对称的。同一个量子态上可容纳多个玻色子。在极低温下，所有的玻色子能够同时聚集到动量空间最低能态而形成系统的基态，这便是所谓的BEC。费米子的自旋为 $\hbar/2$ 或 $\hbar/2$ 的奇数倍，其系统波函数是粒子交换反对称的。受泡利不相容原理的限制，两个全同的费米子不能占据同一个量子态。极低温下费米系统的基态是费米子从低能级到高能级一个个排列的费米海分布，形成简并费米气。费米气体要发生凝聚只有在存在吸引相互作用的情况下，自旋相反的费米子先进行配对形成库柏 (cooper) 对，然后库柏对发生凝聚，这就是Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 超流。此外还有可以连续地遵循费米-狄拉克统计和玻色-爱因斯坦统计之间的任何统计的任意子 (anyon)，本文不予考虑。

系统可以由全同粒子组成，即单分量系统，也可以是不同粒子构成的混合物。一类混合物是不同种粒子的混合，如不同元素原子的混合、同种元素不同同位素原子的混合等。另一类是同种粒子不同自旋态的混合，后者常被称为旋量系统，如考虑自旋的电子，自旋-1的玻色原子等。

粒子之间的相互作用按照作用有效范围可以分为短程接触势和长程势。冷原子之间由于s-波散射而形成的相互作用可以用短程的两体接触势描述。超导线、约瑟夫森结、束缚离子等带电粒子间的库仑势以及偶极冷原子或一些玻色分子（如里德堡分子）间存在的偶极势便是典型的长程势。

物理学中最常见的外势是周期势和外加简谐束缚势。周期势可表示为 $V_{ext}(x) = V_0 \cos(kx)$ ，如电子处于原子晶格中、冷原子处于光晶格中等。这里 $k = 2\pi/a$ ， a 为晶格常数。 V_0 为最大的能量标度，表示晶格的深度。 $V_0 = 0$ 表示无外加周期势，即连续系统，粒子在空间连续运动，其波函数以及密度、动量等物理量为空间连续函数。 V_0 较小时为浅晶格，可以在连续系统的基础上用微扰的办法处理。

V_0 较大时为深晶格，这时常用品格模型处理。以玻色系统为例，将(1.1)中场算

符用Wannier函数 $w_0(x)$ 展开为

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{i=1}^L w_0(x-ia) \hat{b}_i, \quad (1.3)$$

其中 L 是晶格长度。考虑最低的Bloch能带，便得到

$$\hat{H} = - \sum_{i,j=1}^L t_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{i,j,k,l=1}^L V_{ik,jl}^{\text{int}} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_l. \quad (1.4)$$

其中

$$t_{i,j} = - \int dx w_0^*(x-ia) \hat{H}_0(x) w_0(x-ja),$$

$$\hat{H}_0 = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x),$$

$$V_{ik,jl}^{\text{int}} = \int dx dx' w_0^*(x-ia) w_0^*(x'-ka) V_{\text{int}}(x-x') w_0(x'-ja) w_0(x-la).$$

对于很深的晶格，可以只考虑最近邻作用项，(1.4)便简化为扩展的Hubbard模型

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \left[-t (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + H.C.) - \mu \hat{n}_i + \frac{U}{2} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i + V \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} \right], \quad (1.5)$$

其中 $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ 是格点占据算符， μ 为化学势， t 、 U 、 V 分别表示跃迁动能、单格点相互作用能和近邻相互作用能。

当相互作用的范围远小于晶格常数时，可以忽略(1.5)中的近邻相互作用项，得到Bose-Hubbard模型

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \left[-t (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + H.C.) - \mu \hat{n}_i + \frac{U}{2} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i \right]. \quad (1.6)$$

对长程相互作用， V 项不能忽略，如果 U 足够大能作近似 $U \rightarrow +\infty$ ，(1.5)约化到所谓的t-V模型

$$\hat{H}_{t-V} = \sum_{i=1}^L \left[-t (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + H.C.) - \mu \hat{n}_i + V \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} \right]. \quad (1.7)$$

低填充率($n_0 = N/L \ll 1$)的晶格系统可近似到连续系统，数值计算中常借用这种近似。无论连续系统或晶格系统，如果系统整体表现出空间一致性，我们称之为均匀系统。在处理均匀系统时，常利用周期边界条件 $\hat{b}_{L+1}^\dagger = \hat{b}_1^\dagger$, $\hat{b}_{L+1} = \hat{b}_1$ ，有时也用到开边界条件 $\hat{\Psi}(x=0, L) = 0$ 。不同边界条件的选取有时会影响到理论结果。

实验上为了将粒子限制于某空间区域常用激光或磁场产生一外加束缚势，最常

见的是简谐外势 $V_{ext}(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ 。外加势能够引起混合粒子系统的相分离。有时为了计算隧穿等效效应需要考虑双阱势、偏置势，有时还需考虑系统杂质引起的无序势等。

1.1.2 理论简介

综上所述，各种外势下不同相互作用形式的粒子会形成多种一维问题。在此，我们只限于讨论一维束缚外势下具有短程接触相互作用的连续冷原子系统。这时(1.2)的一般形式为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_{ext}(x_i) \right] + g \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j). \quad (1.8)$$

其中参数 g 表示粒子间相互作用的强度， g 的正、负表示原子之间是排斥或吸引。同种原子不同自旋分量间的自旋交换作用形式我们将在第五章具体介绍。现在有一些理论可以近似处理不同相互作用区间的系统。我们在此先简要介绍一下这些理论，在第二章将结合具体纯玻色系统详细阐述。

对于无相互作用系统， $g = 0$ ，(1.8)约化为单粒子薛定谔方程。多粒子系统波函数可以用单粒子波函数表示。玻色系统基态只占据最低能级。费米系统基态占据 N （无自旋费米子，即无相互作用费米子）或 $N/2$ （自旋 $1/2$ 费米子）个从最低依次排高的能级。

粒子间相互作用比较弱时，可以用 Gross-Pitaevskii (G-P) 方程或 Bogoliubov 方程[18][19]。G-P 方程中是利用凝聚体宏观波函数把相互作用能近似为与局域粒子密度成正比而得到的。Bogoliubov 理论考虑了宏观波函数存在的小涨落[16]。当 g 较大时这些方程失效。

当粒子间有很强的排斥或吸引作用时， $g \rightarrow \pm\infty$ 。玻色系统在 $g = +\infty$ 时为 Tonks-Girardeau (TG) 气体或硬核玻色气体[20][21]。当 $g \rightarrow -\infty$ ，玻色系统的基态为 Cluster 态[22]，亚稳的激发态被称为 Super Tonks-Girardeau (STG) 气体[23][24]。Girardeau 提出 TG 气体的波函数可由玻色-费米映射 (Bose-Fermi mapping) 方法用无相互作用费米系统波函数构造，系统基态时的密度和能量与无相互作用费米系统的相同[21]。随后这种映射方法被推广到无穷大吸引相互作用的费米气体[25]和具有无穷大排斥相互作用的玻色费米混合物系统[26]。

表 1-1 Bethe ansatz 精确可解模型

短程接触作用粒子	连续系统	晶格系统
自旋-0玻色子	Lieb-Liniger model [2]	近似解[27]
自旋-1/2费米子	Gaudin-Yang model [3][4]	Lieb-Wu model [28]
玻色费米混合物	Lai-Yang model [29]	近似解[30]
自旋-1玻色子	[31][32]	
自旋-3/2费米子	[32][33]	

对任意相互作用强度的系统，BA 方法对某些可积模型有精确解。这里可积性数学上简单地指存在解析解，物理上一般对应相干碰撞作用，或由 Yang-Baxter 方程判决。表 1-1 列举了一些无外势均匀系统时 BA 能够精确求解的一些模型。当外势为简谐势时，可以借助单粒子谐振子解和分离变量法来研究[34][35]。数值计算方法可以模拟较宽范围的作用强度和比较多样的外势，如精确对角化、量子蒙特卡罗 (QMC)、密度矩阵重整化群 (DMRG)、time evolving block decimation (TEBD) 等方法。这些方法适用于晶格系统，也可近似处理低填充率的连续系统。限于计算量，能够计算的粒子数目较少。

在此，为了研究实验上不同外势下可调相互作用且原子数目较大时的冷原子系统，我们考虑采用密度泛函方法 (DFT)。在第二章我们会通过单分量排斥作用的玻色气体具体详细地给出上述各种方法的解并加以比较。现在简述 DFT 的发展和核心思想。

第二节 密度泛函理论

量子力学中用以描述体系状态的波函数有 $3N$ 个坐标 (N 是体系粒子个数)，这在求解多电子体系的 Schrödinger 方程时是非常不便的。所以在量子力学建立不久，就有人试图用与波函数有关的但只有 3 个空间坐标的粒子密度作为描述体系的基本物理量。1927 年 Thomas-Fermi 模型的建立中便出现了密度泛函的概念[36]。1951 年 Slater 为减少求解 Hartree-Fock 方程的计算量而应用密度泛函方法将非定域的交换密度近似为定域的电子密度的泛函[37]。1964 年 Hohenberg 和 Kohn 证明了两条定理为密度泛函方法提供了理论依据[38]。随后 Kohn 和 Sham 找到了能具体实施密度泛函方法的方案，标志着现代密度泛函理论的建立[39]。自 1970 年代以来，密度泛函理论便成为电子结构计算的基础方法，在凝聚态物理和计算化学领域得到了广泛的应

用，其自身也得到了多方面发展[40]。近几年一些研究者将密度泛函理论推广应用到了冷原子研究领域，包括三维玻色气体[41][42]、三维玻色费米混合物[43]、二维光晶格中的费米气体[44]，及一维系统中[42][45-48]。

1.2.1 Hartree-Fock 近似

对于三维的 N 个库仑作用电子系统，设系统波函数为 $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ ，不考虑自旋-轨道耦合，多电子薛定谔方程为：

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (1.9)$$

其中 $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}_i)$ 为单电子哈密顿量，满足单电子薛定谔方程

$$\hat{H}_i \varphi_i(\vec{r}_i) = E_i \varphi_i(\vec{r}_i), \quad \varphi_i(\vec{r}_i) \text{ 满足正交归一化条件 } \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}.$$

解(1.9)时，可将系统波函数近似为单电子波函数的连积，即 Hartree 近似[49]：

$$\psi(\vec{r}) = \prod_{i=1}^N \varphi_i(\vec{r}_i). \quad (1.10)$$

这样形式的波函数被称为 Hartree 波函数。引入 Lagrange 乘子 E_i ，对基态能量

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle \text{ 作变分 } \delta \left[E - \sum_i E_i (\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle - 1) \right] = 0 \text{ 便得到 Hartree 方程}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = E_i \varphi_i(\vec{r}), \quad (1.11)$$

其中，Hartree 势

$$V_H(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j(\neq i)} \int d\vec{r}' \frac{|\varphi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

如果考虑电子是费米子，应满足交换反对称性，电子的系统波函数可由单电子波函数通过 Slater 行列式构造，此即 Hartree-Fock 近似[50][51]：

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{q}_1) & \varphi_2(\vec{q}_1) & \cdots & \varphi_N(\vec{q}_1) \\ \varphi_1(\vec{q}_2) & \varphi_2(\vec{q}_2) & \cdots & \varphi_N(\vec{q}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(\vec{q}_N) & \varphi_2(\vec{q}_N) & \cdots & \varphi_N(\vec{q}_N) \end{vmatrix}. \quad (1.12)$$

其中 $\varphi_i(\vec{q}_j)$ 表示第 i 个原子在坐标 \vec{q}_j 处的波函数， \vec{q}_j 包括空间坐标 \vec{r}_j 和自旋，且已假

定 $\varphi_i(\bar{q}_j)$ 是正交归一化的。同样将(1.12)代入(1.9)求 $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ 并对 E 作变分, 便得到 Hartree-Fock 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\bar{r}) + V_H(\bar{r}) \right] \varphi_i(\bar{r}) + V_{ex}(\bar{r}) \varphi_j(\bar{r}) = E_i \varphi_i(\bar{r}). \quad (1.13)$$

与 Hartree 方程(1.11)相比, Hartree-Fock 方程中多出一项交换势

$$V_{ex}(\bar{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j(\neq i), \parallel} \int d\bar{r}' \frac{\varphi_j^*(\bar{r}') \varphi_i(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|},$$

这里 \parallel 表示只对自旋平行项求和。因为 $V_{ex}(\bar{r})$ 与待求的 $\varphi_i(\bar{r}')$ 有关, 所以方程(1.13)只能通过迭代自洽求解。而且 $V_{ex}(\bar{r})$ 是作用到其它电子态 $\varphi_j(\bar{r})$ 上的, 使得解(1.13)时须处理 N 个联立方程组, 这在粒子数较大时是比较困难的。此外, 方程中没有包含自旋反平行电子之间相互排斥而引起的关联效应, 这也是理论上的缺陷。

引入密度函数

$$n(\bar{r}) = \sum_i |\varphi_i(\bar{r})|^2, \quad (1.14)$$

$$n_i^{HF}(\bar{r}, \bar{r}') = \sum_{j(\neq i), \parallel} \frac{\varphi_j^*(\bar{r}') \varphi_i(\bar{r}') \varphi_i^*(\bar{r}) \varphi_j(\bar{r})}{|\varphi_i(\bar{r})|^2}, \quad (1.15)$$

这里求和只对被电子占据的态进行。 $n(\bar{r})$ 表示 \bar{r} 处电子数密度; $n_i^{HF}(\bar{r}, \bar{r}')$ 为与所考虑的电子状态 $\varphi_i(\bar{r})$ 有关的非定域交换密度分布。Hartree-Fock 方程(1.13)便表示为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\bar{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\bar{r}' \frac{n(\bar{r}') - n_i^{HF}(\bar{r}, \bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \right] \varphi_i(\bar{r}) = E_i \varphi_i(\bar{r}). \quad (1.16)$$

为了解决(1.13)或(1.16)所面对的 N 个联立方程组的困难, J. C. Slater 提出了对 n_i^{HF} 取平均的办法[37], 将其近似为

$$n_{av}^{HF}(\bar{r}, \bar{r}') = \frac{\sum_i |\varphi_i(\bar{r})|^2 n_i^{HF}(\bar{r}, \bar{r}')}{\sum_i |\varphi_i(\bar{r})|^2} = \frac{\sum_i \varphi_j^*(\bar{r}') \varphi_i(\bar{r}') \varphi_i^*(\bar{r}) \varphi_j(\bar{r})}{\sum_i |\varphi_i(\bar{r})|^2}.$$

这里用与 i 无关的 n_{av}^{HF} 替换了(1.16)中的 n_i^{HF} , (1.16)中的积分项就只与 \bar{r} 有关, 它与外势项一起作为一个对所有电子均匀分布的有效势出现。这样描述多电子的薛定谔方程便简化为下列单电子有效势方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = E_i \varphi_i(\vec{r}), \quad (1.17)$$

其中

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_{\text{ext}}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{\text{ex}}(\vec{r}), \quad (1.18)$$

$$V_H(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (1.19)$$

$$V_{\text{ex}}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \frac{n_{\text{av}}^{\text{HF}}(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (1.20)$$

这种借助密度泛函得到的单电子近似在固体物理中曾被长期应用，但由于忽略了电子关联效应，理论上是不严格的。

1.2.2 密度泛函理论

现代的密度泛函理论的基础建立在 P. Hohenberg 和 W. Kohn 的关于非均匀电子的理论基础上[38]，它可归结为两个基本定理：

定理一（HK 引理）：作用在多体系统中每个粒子上的外势 $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ 与系统的基态电子数密度 $n(\vec{r})$ 之间存在着——对应关系。则相互作用多体系统的粒子数密度 $n(\vec{r})$ 是决定该系统基态物理性质的基本变量。基态能量是粒子数密度函数 $n(\vec{r})$ 的唯一泛函—— $E[n(\vec{r})]$ 。

定理二（HK 变分原理）：对给定的哈密顿量，存在一个普适于任何粒子数、任何外势的能量泛函 $E[n(\vec{r})]$ 。当 $n'(\vec{r})$ 为基态密度 $n(\vec{r})$ 时， $E[n'(\vec{r})]$ 具有最小值，即非简并基态能量值 E_0 。

以不计自旋的全同费米子（电子）为例。设 $n(\vec{r})$ 是与 $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ 唯一对应的非简并基态密度，能量泛函分成是否与外场有关的两部分：

$$E[n] = E_{\text{ext}}[n] + F_{\text{HK}}[n]. \quad (1.21)$$

其中外势能

$$E_{\text{ext}}[n] = \int d\vec{r} n(\vec{r}) V_{\text{ext}}(\vec{r}). \quad (1.22)$$

未知的 Hohenberg-Kohn 能量泛函 $F_{\text{HK}}[n]$ 包括三部分：

$$F_{\text{HK}}[n] = T[n] + E_H[n] + E_{\text{xc}}[n]. \quad (1.23)$$

第一项为动能，第二项是经典库仑能量泛函，即 Hartree 能

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \int d\bar{r} n(\bar{r}) V_H(\bar{r}) = \frac{1}{2} \int d\bar{r} d\bar{r}' \frac{e^2 n(\bar{r}) n(\bar{r}')}{4\pi\epsilon_0 |\bar{r} - \bar{r}'|}. \quad (1.24)$$

第三项是剩下的由交换、关联效应引起的泛函部分，即所谓的交换关联密度泛函。

求能量泛函(1.21)关于密度函数的变分极小值就可以得到基态密度 $n(\bar{r})$ 。但现在 $T[n]$ 和 $E_{xc}[n]$ 的具体形式未知。Kohn 和 Sham 解决 $T[n]$ 的办法是引入一个由 N 个无相互作用电子组成的辅助系统[39]。辅助系统与所考虑的相互作用系统有相同的基态密度 $n(\bar{r})$ 。用正交归一化的轨道波函数 $\varphi_i(\bar{r})$ ($i=1, 2, \dots, N$) 表示密度函数为

$$n(\bar{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\bar{r})|^2. \quad (1.25)$$

这样辅助系统动能成了 $n(\bar{r})$ 的泛函

$$T^{ref}[n] = -\sum_{i=1}^N \int d\bar{r} \varphi_i^*(\bar{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_i(\bar{r}).$$

用辅助系统动能泛函 $T^{ref}[n]$ 代替相互作用系统的系统动能泛函 $T[n]$ ，把两者的差别归入到交换关联能泛函中 $E_{xc}[n]$ 中，基态能量泛函(1.21)成为

$$E[n] = T^{ref}[n] + E_{ext}[n] + E_H[n] + E_{xc}[n].$$

现在 $E[n]$ 关于 $n(\bar{r})$ 的变分可代替为关于 $\varphi_i^*(\bar{r})$ 的变分。为保证 $\varphi_i(\bar{r})$ 的正交归一化或粒子数守恒条件 $N = \int d\bar{r} n(\bar{r})$ 需引入 Lagrange 因子 ϵ_i 。由

$$\frac{\delta \left\{ E[n(\bar{r})] - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \left[\int d\bar{r} |\varphi_i(\bar{r})|^2 - 1 \right] \right\}}{\delta \varphi_i^*(\bar{r})} = 0,$$

得到

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}[n(\bar{r})] \right\} \varphi_i(\bar{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\bar{r}). \quad (1.26)$$

其中

$$V_{KS}[n(\bar{r})] = V_{ext}(\bar{r}) + V_H[n(\bar{r})] + V_{xc}[n(\bar{r})],$$

$$V_{xc}[n(\bar{r})] = \frac{\delta E_{xc}[n(\bar{r})]}{\delta n(\bar{r})}.$$

(1.26)与(1.25)构成著名的 Kohn-Sham(KS)方程。对比 KS 方程(1.26)与 HF 方程(1.17), $V_{eff}(\bar{r})$ 成了 $V_{KS}(\bar{r})$, 或交换势 $V_{ex}(\bar{r})$ 成了交换关联势 $V_{xc}[n(\bar{r})]$ 。注意 $E_{xc}[n]$ 反映了除 $E_H[n]$ 之外相互作用带来的所有影响, 它包括交换能、关联能及相互作用系统与无相互作用系统动能的差值。

现在 $E_{xc}[n]$ 仍是未知的, 为此便有了一些近似方法。比较常用的是局域密度近似[39]。当外势比较缓, 电子密度是空间的缓慢变化函数, 可以在小的局域认为电子密度是均匀的。交换关联能写为

$$E_{xc}[n] = \int d\bar{r} \epsilon_{xc}^{\text{hom}}[n(\bar{r})]n(\bar{r}),$$

其中 $\epsilon_{xc}^{\text{hom}}$ 是均匀电子气中每个电子的平均交换关联能, 可以用数值计算并结合参数拟合等办法求出。如果电子密度随空间变化较快, 需要计入电子密度的梯度信息, 便是广义梯度近似 (Generalized Gradient Approximation, GGA)。

KS 方程的求解一般用迭代自洽方法。简单来说, 先假设系统的密度 $n_m(\bar{r})$, 代入方程(1.26)中求出本征函数 $\phi_i(\bar{r})$ 。然后把 $\phi_i(\bar{r})$ 代入(1.25)得到一个新的密度 $n_{out}(\bar{r})$ 。比较 $n_m(\bar{r})$ 与 $n_{out}(\bar{r})$, 如果相差在预设精度范围内, 即自洽, 则 $n_m(\bar{r})$ 便为系统所求结果, 用它可以求基态能量; 如果两密度相差太多, 则用它们构造一个新的密度输入(1.25), 重复上述过程直至自洽。

1980 年代后, 密度泛函理论有了飞速发展, HK 定理推广到了计入自旋、考虑相对论效应以及简并基态的情况[52]。衍生出计算动力学的含时密度泛函、计算热力学的有限温度密度泛函等。近来, 它被成功的推广到具有短程作用的冷原子系统, 如三维的玻色系统[41][42]、三维的玻色费米混合物[43]、二维光晶格中的费米系统[44]。在密度泛函方法中, 为了研究非均匀相互作用系统的基态性质, 在利用局域密度近似计算关联能的过程中需要借助均匀系统。因为 BA 能给出一维均匀系统的精确解, 有几位研究者发展了基于 BA 精确解的密度泛函方法来研究一维玻色冷原子系统[42][45][46]、一维费米冷原子系统[47][48]等。我们把这种方法应用到了一维玻色费米混合物系统和旋量 BEC 系统。

第三节 一维冷原子实验

1.3.1 一维系统的制备

我们先介绍三维凝聚体的制备。实验上最早实现量子简并气体的是 1995 年 6 月 5 日, JILA 的 Cornell 和 Wieman 小组实现了碱金属 ^{87}Rb 的 BEC[12]。同年 11 月美国 MIT 的 Ketterle 小组实现了 ^{23}Na 的 BEC[13], Rice University 的 Hulet 研究小组也报道了超冷 ^7Li 原子进入量子简并区域的实验[14]。通常是先用激光冷却的办法, 利用多普勒效应通过原子与光子的动量交换将原子气体冷却到 μK 的温度, 接着将冷却后的原子囚禁在由磁场与激光组成的磁-光阱中, 继续用蒸发冷却的办法把原子降低到量子简并 (nK) 温度。

囚禁过程中, 选用磁阱适于产生标量凝聚体, 如上述 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 的实验。光阱则可以产生旋量凝聚体。磁阱束缚是利用碱金属原子的磁矩在外磁场下受到的力。有些能级的磁矩与外磁场方向相反, 则该类能级的能量随磁场的增加而增加, 力趋向于磁场弱的地方。原子势能的最低点即为磁场最低点, 所以宜于磁囚禁, 被称为低场趋向态(low-field seeker)或囚禁态、束缚态。反之如果原子的磁矩与外磁场方向相同(称为强场趋向态 high-field seeker 或逃逸态、驱逐态)则易被赶出原子阱。磁阱自动筛选出的是具有单一自旋的低场趋向原子, 不能同时囚禁具有不同方向自旋的冷原子, 相当于原子的自旋被冻结, 形成标量凝聚体。光束缚是利用了光场对原子的机械力的作用, 实质是电场对电荷和磁场对电流(运动的电荷)的作用。这种相互作用与原子的极化率成正比, 而与原子的磁矩(或自旋)无关。也就是说处在所有塞曼能级的冷原子将被同时囚禁, 这时候原子的自旋成为一个新的自由度, 称作旋量凝聚体。1997 年 MIT 的 Ketterle 小组首次在光偶极阱中得到了钠原子的旋量 BEC[53]。

蒸发冷却过程中, 玻色原子可以直接进行蒸发冷却, 费米原子需另考虑同化冷却。蒸发冷却是让原子间频繁碰撞, 并让较高动能的热原子不断离开束缚势阱带走热量从而降低势阱内系统的温度。因为玻色子满足粒子交换对称性, 玻色子之间存在 s-波碰撞相互作用, 这就能有效降低玻色原子温度。但对于费米子, 因为它满足粒子交换反对称性, 同一内部态的费米原子间不能发生 s-波散射碰撞, 但不同内部态的两个原子间或两种不同类型的原子之间可以进行频繁的碰撞, 所以实验上采用

所谓的同化冷却技术，或者囚禁不同自旋态的费米子，或者采用玻色子作为中介同时囚禁玻色子和费米子。这样原子间就能发生碰撞，费米气体便能够被蒸发冷却达到费米简并。1999年 Jin 等人首次实现了费米子 ^{40}K 的量子简并气体，他们束缚的是 ^{40}K 的处在 $|f=9/2, m_f=9/2\rangle$ 和 $|f=9/2, m_f=7/2\rangle$ 内部态的原子[54]。2001年，有几个实验小组将玻色子 ^7Li 和费米子 ^6Li 束缚在磁阱中进行蒸发冷却，由于低温下的玻色子和费米子在同一个系统中都达到量子简并，这也实现了超冷玻色费米混合气体[55-57]。

将上述技术制备的三维标量或旋量BEC、简并费米气乃至玻色费米混合气体限制在一维空间中基本有三种方式：

一、外加各向异性束缚阱。将冷原子束缚在一个柱对称的简谐势阱中，即在径向施加一个很强的束缚势，当气体的温度足够低，则其径向振动就完全束缚在简谐势的基态。原子相当于只有横向方向的运动自由。2001年 Ketterle 小组将凝聚体束缚在径向和横向频率比约为 100 的简谐磁阱中，使凝聚体的横向半径远大于其径向半径，从而实现雪茄状 BEC[58]。

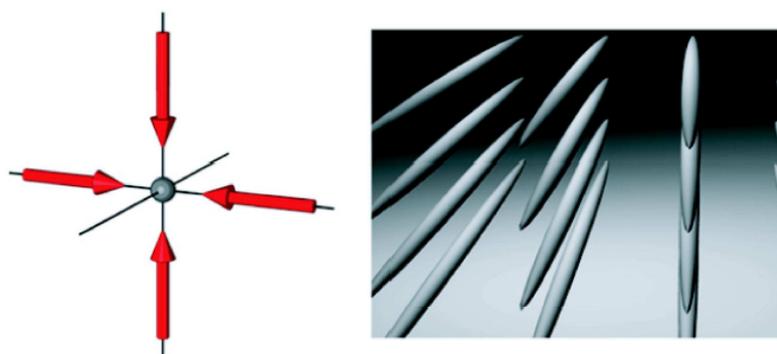


图 1-1 两个正交的驻波形成的二维光晶格，原子被束缚在一维势管中[59]。

二、置于二维光晶格中。用两束正交的激光驻波可以产生的二维的光晶格，便形成了一组紧束缚的管状势阱[59]，如图 1-1。凝聚气体被置于这样的二维光格子中后，在每个管状势阱中都可以形成一维量子气体。一维气体中的原子在径向受到很强的束缚，只能处在径向的基态上，径向激发则完全被抑制。将二维光晶格的激光强度调到很强时，各个一维气体之间不发生隧穿，会保持相互独立，形成准一维凝聚体。实验上为了束缚凝聚气体，常常在光晶格上再加（简谐）束缚势。

三、原子芯片技术。利用微刻技术可在“原子芯片”上制作微磁阱、一维波导等。其方便之处在于可以通过调节电流改变势阱的强度。如 2001 年 Hansel 等人实现了一维 ^{87}Rb 的 BEC[60]，如图 1-2。

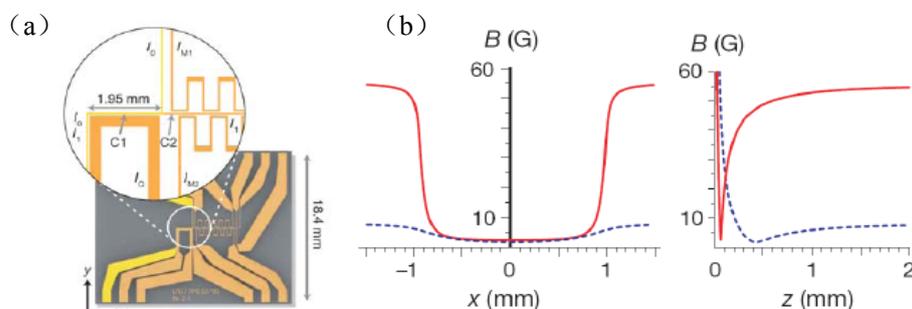


图 1-2 原子芯片及磁阱。(a) 衬底上刻蚀而成的金线；(b) 线中电流产生不同形状的束缚势[60]。

1.3.2 相互作用强度的调节

实验上生成的是准一维气体，其本质是三维的。将三维气体的散射理论约化到一维极限，Olshanii(1998)等人得出了一维气体相互作用强度 g_{1D} 、一维散射长度 a_{1D} 与三维 s 波散射常数 a_s 及外加束缚势间的关系[61]：

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}} = \frac{2\hbar^2 a_s}{ma_{\perp}^2} \frac{1}{1 - Aa_s/a_{\perp}}. \quad (1.27)$$

其中 $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ 、 $a_{\parallel} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\parallel}}$ 是简谐外势径向和横向特征长度， ω_{\perp} 和 ω_{\parallel} 是相应的频率，常数 $A=1.0326$ 。当 $|a_s| \ll a_{\perp}$ ， $g_{1D} = \frac{2\hbar^2 a_s}{ma_{\perp}^2}$ 。理论上可以通过调节 a_s 和 a_{\perp} 来调节 g_{1D} 。 a_{\perp} 在磁阱中可以通过改变线圈中的电流来调节，在二维光晶格中，可以通过改变激光的强度来调节。 a_s 则可利用 Feshbach 共振技术通过扫描磁场按照下列关系来改变其大小和符号：

$$a_s(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (1.28)$$

其中 a_{bg} 是原子远离共振时的背景散射长度， B 为磁场强度， B_0 和 ΔB 为发生共振势的磁场位置和宽度。1996 年 Stoof 等人最初提议用 Feshbach 共振技术调节自旋 1/2 费米子 ^6Li 的两内部态的吸引相互作用[62]，如图 1-3。后来这种技术发展到了可以调节玻

色原子间作用[63-65]，和不同种原子之间的相互作用[66-68]。

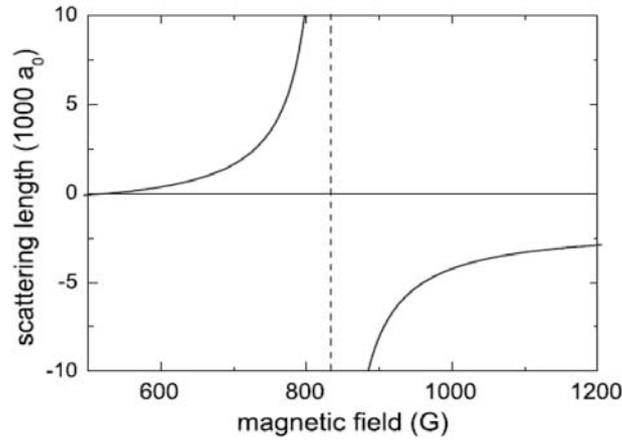


图1-3 Feshbach共振， ${}^6\text{Li}$ 的散射长度对磁场的依赖关系[62]。其中 $B_0 = 834\text{G}$ ， $a_s(B)$ 由正值变为负值时的位置决定了 $B + B_0 = 534\text{G}$ 。

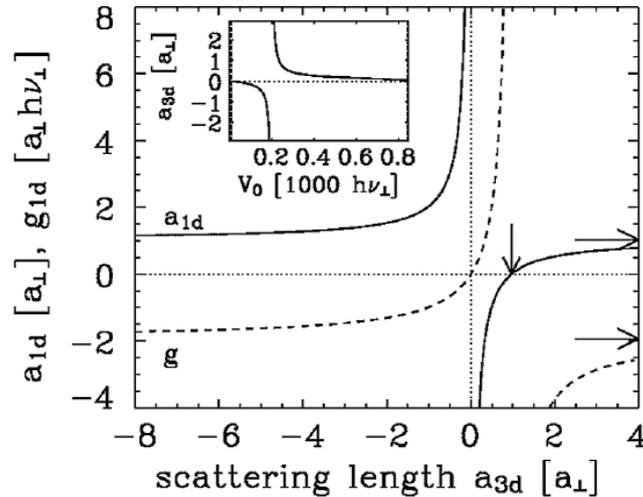


图 1-4 束缚诱导共振， $g_{1D} = g$ (虚线) 与 a_{1D} (实线) 随 $a_s = a_{3D}$ 变化[71]。

(1.27)表明，对于可调的 a_s ，有一临界 a_s^c 对应 $a_{1D} = 0$ 与 $|g_{1D}| \rightarrow \infty$ ，这种现象称为束缚诱导共振 (CIR)，如图1-4。因而 g_{1D} 可以从 $-\infty$ 调到 $+\infty$ ，即原子间可以从无限强的吸引区过渡到无限强的排斥区。这为研究多体问题的关联提供了方便。结合光晶格和束缚诱导共振技术，2004年Weiss小组[69]和Bloch小组[70]实现了 ${}^{87}\text{Rb}$ 在 $g_{1D} \rightarrow +\infty$ 的一维TG气体；Astrakharchik等人将相互作用调节到了 $g_{1D} < 0$ 的吸引作用

区[71]。2009年，Nägerl小组观察到了 $g_{1D} \rightarrow -\infty$ 的STG气体[72]。Jochim小组的一系列有关一维少体费米子的实验已能调节相互作用到任意强度并观察到了费米气体的TG态与亚稳的STG态[73-75]。

1.3.3 物理量的探测

多体量子问题的一个重要物理量是关联函数。它衡量不同位置和时间的原子场之间的关联，用于研究多体相干性和区分有序与无序。冷原子物理实验中用光成像(optical imaging)技术探测关联函数。

一阶关联函数，或单粒子关联函数为

$$G_{i,j}^{(1)}(x_1, x_2) = \langle \hat{\Psi}_i^\dagger(x_1) \hat{\Psi}_j(x_2) \rangle, \quad (1.29)$$

其中 $\hat{\Psi}_i(x_1)$ 表示原子在 $|i\rangle$ 态 x_1 位置处的场算符。当 $i = j$ 且 $x_1 = x_2$ 时，一阶关联函数(1.29)便是密度函数

$$n_i(x) = \langle \hat{\Psi}_i^\dagger(x) \hat{\Psi}_i(x) \rangle.$$

实验上用光成像技术可以测量密度分布。早期用共振成像，是一种破坏性测量。现在比较通用的是吸收成像(absorption imaging)。用激光照射，没有原子气时为参考光；加入原子气时为探测光。比较两光的成像，记录探测光的吸收率(fractional absorption)便获得密度的信息。在测量高密度原子气时，吸收成像具有很大的不确定性。所以，吸收成像之前让原子从阱中释放并扩散一段时间。这种成像方法被称为时间飞行成像(time-of-flight imaging) [76]。

在时间飞行成像中，吸收率正比于原子密度算符的期望值。假设飞行时间内弹道扩散过程中忽略原子间的碰撞效应，密度正比与初始动量分布，其中动量或波矢量为 $k = mx/t$ ，即

$$n_i(k) = \langle \hat{\Psi}_i^\dagger(k) \hat{\Psi}_i(k) \rangle \propto n_i(x, t).$$

如果飞行时间不够或原子碰撞效应不能忽略，上述关系不成立。近来，有人提到利用绝热短-截断的可控制扩散方法[77]。

二阶关联函数或两粒子关联函数为

$$G_{i,j}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \langle \Psi_i^+(x_1) \Psi_j^+(x_2) \Psi_j(x_3) \Psi_i(x_4) \rangle. \quad (1.30)$$

它的一个特例是密度-密度关联函数

$$\langle n_i(x_1)n_j(x_2) \rangle = \langle \Psi_i^+(x_1)\Psi_j^+(x_2)\Psi_j(x_2)\Psi_i(x_1) \rangle. \quad (1.31)$$

这可由分析不同时间飞行的成像来得到，这种技术被称为噪音波谱（noise spectroscopy）。在实验的不同阶段（run），在同一时间，时间飞行成像有技术噪音和量子涨落。为了研究密度算符的量子关联，技术噪音必须减小到量子涨落之下。为此，成像的测量时间 M 必须足够大使得统计误差 $1/\sqrt{M}$ 足够小。为了重现完整的关联函数，除了测量密度这种对角化关联外，有时我们还关心非对角化关联。动量的非对角化关联可用原子干涉仪（atomic interferometry）测量。如果研究动力学问题，则用 Bragg 散射技术测量动力学结构因子。

第四节 我们的工作

我们主要用密度泛函理论做了两方面的工作，第一，研究了简谐外势下的一维玻色费米混合物的基态能量和密度分布随相互作用强度和粒子数比率变化的规律，这里只限于玻色、费米粒子质量相同且玻色-玻色、玻色-费米相互作用相等的情况。与平均场和玻色-费米映射方法的结论比较，DFT 的方法适用于从弱到强所有相互作用区。在强相互作用下，费米子被排斥于势阱中心之外，发生相分离。第二，研究了简谐外势下自旋-1 玻色系统的基态能量和密度分布。粒子间有等值的密度-密度排斥作用和反铁磁的自旋-交换作用。随着相互作用强度的增大，出现了配对粒子与单个未配对粒子间密度分布的相分离。我们给出强相互作用下的基态相图，求出临界极化率。

第五节 本文内容

本文第二章、第三章介绍了利用 BA 精确解和密度泛函理论处理一维量子气体的基本方法，第四章和第五章介绍了我们的工作。具体来说，第二章总结了描述单分量玻色系统的平均场、玻色-费米映射等方法并与密度泛函方法的结果相比较；第三章回顾了简谐外势下一维自旋-1/2 费米气体的特性；第四章探讨了玻色费米混合物的基态性质；第五章研究了自旋-1 玻色气体的密度分布和基态能量。

参考文献

-
- [1] H. A. Bethe, *Z. Phys.* (1931) **71**, 205.
- [2] E. H. Lieb and W. Liniger, *Phys. Rev.* (1963) **130**, 1605; E. H. Lieb, *ibid.* (1963) **139**, 1616.
- [3] M. Gaudin, *Phys. Lett. A* (1967) **24**, 55.
- [4] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* (1967) **19**, 1312.
- [5] R. J. Baxter, *Ann. Phys* (1972) **70**, 193.
- [6] M. Jimbo, *Yang-Baxter Equation In Integrable Systems*, Singapore, World Scientific, 1990.
- [7] V. E. Korepin and F. H. L. Essler, *Exactly Solv-able Models of Strongly Correlated Electrons*, Singapore, World Scientific, 1994.
- [8] D. C. Mattis, *The Many-Body Problem: An En-cyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension*, Singapore, World Scientific, 1993.
- [9] B. Sutherland, *Beautiful Models - 70 years of exactly solved quantum many-body problems*, Singapore, World Scientific, 2004.
- [10] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems*, Cambridge University Press, 1999.
- [11] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, Cambridge University Press, 2004.
- [12] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Science* (1995) **269**, 198
- [13] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1995) **75**, 3969.
- [14] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* (1995) **75**, 1687.
- [15] V. A. Yurovsky, M. Olshanii, and D. S. Weiss, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* (2008), **55**, 61.
- [16] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, *Rev. Mod. Phys.* (2011), **83**, 1405.
- [17] X.-W. Guan, M. T. Batchelor and C. Lee, arXiv:1301.6446.

- [18] L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* (1961) **13**, 451.
- [19] E. P. Gross, *J. Math. Phys.* (1963) (N.Y.) **4**, 195.
- [20] L. Tonks, *Phys. Rev.* (1936) **50**, 955.
- [21] M. Girardeau, *J. Math. Phys.* (1960) **1**, 516.
- [22] J. B. McGuire, *J. Math. Phys.* (1964), **5**, 622.
- [23] E. Haller, M. Gustavasson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H. C. Nagerl, *Science*, (2009), **325**, 1224.
- [24] S. Chen, L. Guan, X. Yin, Y. Hao, and Xi-Wen Guan, *Phys. Rev. A* (2010) **81**, 031609.
- [25] M. D. Girardeau and E. M. Wright, *Phys. Rev. Lett.* (2005) **95**, 010406.
- [26] M. D. Girardeau and A. Minguzzi, *Phys. Rev. Lett.* (2007) **99**, 230402.
- [27] T.C. Choy, *Phys. Lett. A* (1980) **80**, 49; F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* (1980) **80**, 281; T.C. Choy and F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* (1982) **90**, 83; W. Krauth, *Phys. Rev. B* (1991) **44**, 9772.
- [28] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* (1968) **20**, 1445.
- [29] C. K. Lai and C. N. Yang, *Phys. Rev. A* (1971) **3**, 393.
- [30] S. J. Gu, J. Cao, and H.Q. Lin, *Phys. Rev. B* (2009) **80**, 224508
- [31] J. Cao, Y. Jiang, and Y. Wang, *EPL* (2007) **79**, 30005.
- [32] B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* (1968) **20**, 98.
- [33] Y. Jiang, J. Cao, and Y. Wang, *Europhys. Lett.* (2009) **87**, 10006.
- [34] T. Busch, B. Englert, K. Rzazewski, and M. Wilkens, *Found. Phys.* (1998), **28**, 549.
- [35] I. Brouzos and P. Schmelcher, *Phys. Rev. Lett.* (2012), **108**, 045301; *Phys. Rev. A* (2013) **87**, 023605.
- [36] L. H. Thomas, *Proc. Camb. Phil. Soc.* (1927) **23**, 542; E. Fermi., *Rend. Accad. Naz. Lincei* (1927) **6**, 602.
- [37] J. C. Slater, *Phys Rev* (1951) **81**, 385.
- [38] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* (1964) **136**, B864.
- [39] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* (1965) **140**, A1133; W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* (1999) **71**, 1253.

- [40] R. M. Dreizler and E. K. U. Gross, *Density Functional Theory*, Springer, Berlin, 1990.
- [41] G. S. Nunes, J. Phys. B (1999) **32**, 4293; A. Banerjee and M. P. Singh, Phys. Rev. A (2006) **73**, 033607; N. Argaman and Y. B. Band, *ibid.* (2011) **83**, 023612.
- [42] Y. E. Kim and A. L. Zubarev, Phys. Rev. A (2003) **67**, 015602.
- [43] A. P. Albus, F. Illuminati, and M. Wilkens, Phys. Rev. A (2003) **67**, 063606.
- [44] P. N. Ma, S. Pilati, M. Troyer, and X. Dai, Nature Phys. (2012) **8**, 601.
- [45] J. Brand, J. Phys. B (2004) **37**, S287.
- [46] Y. Hao and S. Chen, Phys. Rev. A (2009) **80**, 043608.
- [47] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and L. P. Pitaevskii, Phys. Rev. Lett. (2004) **93**, 050402; Y. E. Kim and A. L. Zubarev, Phys. Rev. A (2004) **70**, 033612; R. J. Magyar and K. Burke, *ibid.* (2004) **70**, 032508.
- [48] G. Xianlong, M. Polini, R. Asgari, and M. P. Tosi, Phys. Rev. A (2006) **73**, 033609; G. Xianlong and R. Asgari, *ibid.* (2008) **77**, 033604; G. Xianlong, M. Polini, D. Rainis, M. P. Tosi, and G. Vignale, Phys. Rev. Lett. (2008) **101**, 206402.
- [49] D. Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc. (1928) **24**, 89.
- [50] J. C. Slater, Phys. Rev. (1930) **35**, 210.
- [51] V. Fock, Z. Phys. (1930) **61**, 126.
- [52] M. Levy, Phys. Rev. A (1991) **43**, 4637.
- [53] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H. J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (1997) **80**, 2027.
- [54] B. DeMarco and D. S. Jin, Science (1999) **285**, 1703.
- [55] F. Schreck, G. Ferrari, K. L. Corwin, J. Cubizolles, L. Khaykovich, M.-O. Mewes, and C. Salomon, Phys. Rev. A (2001) **64**, 011402.
- [56] A. G. Truscott, A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, Science (2001) **291**, 2570.
- [57] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, and C. Salomon, Phys. Rev. Lett. (2001) **87**, 080403.
- [58] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R.

- Abo-Shaeer, A. P. Chikkature, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (2001) **87**, 130402.
- [59] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* (2008) **80**, 885.
- [60] W. Hänsel, P. Hommelhoff, T. W. Hänsch, and Reichel, *Nature* (2001) **413**, 498.
- [61] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **81**, 938; V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* (2001) **86**, 5413.
- [62] H. T. C. Stoof, M. Houbiers, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* (1996) **76**, 10.
- [63] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Nature* (1998) **392**, 151.
- [64] J. Stenger, S. Inouye, M. R. Andrews, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* (1999), **82**, 2422.
- [65] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* (2000), **85**, 1795.
- [66] G. Thalhammer, G. Barontini, L. D. Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* (2008) **100**, 210402.
- [67] S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* (2008) **101**, 040402.
- [68] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* (2010) **82**, 1225.
- [69] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss, *Science* (2004) **305**, 1125.
- [70] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature(London)* (2004) **429**, 277.
- [71] G. E. Astrakharchik, D. Blume, S. Giorgini, and B. E. Granger, *Phys. Rev. Lett.* (2004) **92**, 030402.
- [72] E. Haller, M. Gustavasson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H. C. Nägerl, *Science* (2009) **325**, 1224.
- [73] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz, and S. Jochim, *Science* (2011) **332**, 336.
- [74] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, and S. Jochim, *Phys. Rev. Lett.* (2012) **108**, 075303.

- [75] A. N. Wenzl, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe, and S. Jochim, arXiv:1307.3443.
- [76] E. Altman, E. Demler, and M. D. Lukin, Phys. Rev.A (2004) **70**, 013603.
- [77] A. del Campo, Phys. Rev. A (2011) **84**, 031606 (R); A. del Campo and M. G. Boshier, Sci. Rep. (2012), **2**, 648.

第二章 自旋-0 玻色气体

我们先研究最基本的一维自旋-0（又称标量或单分量）玻色冷原子气体。设 N 个具有接触相互作用的原子受限于一维外势 $V_{ext}(x)$ 中。系统哈密顿量的一次量子化形式为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_{ext}(x_i) \right] + g \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j). \quad (2.1)$$

二次量子化形式为

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(x) \right] \hat{\Psi}(x) \\ & + \frac{g}{2} \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x). \end{aligned} \quad (2.2)$$

其中 $\hat{\Psi}^\dagger$ 和 $\hat{\Psi}$ 为场算符； m 为原子质量； g 表示相互作用强度，其大小可以据第一章中的 Feshbach 共振与束缚诱导共振（CIR）技术调节，我们在本章只考虑 $g \geq 0$ 即排斥相互作用的情况。

一维问题中经常用到一个量纲为长度倒数的相互作用参数 $c = \frac{mg}{\hbar^2}$ ；另一个常用的是无量纲化相互作用参数 $\gamma = \frac{c}{n} = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ ，也称 Lieb-Liniger 参数，其中 n 是原子数密度。

在均匀系统中 n 和 γ 都是常数。在有外势的系统中它们是空间的函数， $\gamma(x) = \frac{c}{n(x)}$ 。

在第一章我们已解释过，具有接触相互作用的单分量一维玻色量子模型具有 Bethe ansatz 解[1]，但这只限于均匀系统。如果有非零外势时，弱相互作用下可用平均场的 G-P 方程[2][3]或 Bogoliubov 方法，无限强排斥作用下的 TG 气体有玻色-费米映射方法[4]。如果是简谐外势，则可以利用分离变量结合谐振子解的方法[5][6]。我们则试图应用密度泛函理论寻求适用于任意外势、任意相互作用下一维玻色原子的基态解。本章介绍密度泛函基本理论，并通过与其它方法计算结果的比较，表明密度泛函方法的便利性和应用广泛性。

第一节 弱作用平均场方法

无相互作用时，(2.1)约化到单粒子方程。设单个玻色子波函数为归一化函数 $\phi(x)$ ，满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) \right] \phi(x) = \epsilon \phi(x). \quad (2.3)$$

N 个玻色子粒子数密度为

$$n(x) = N |\phi(x)|^2, \quad (2.4)$$

基态能量为

$$E_0 = N\epsilon. \quad (2.5)$$

玻色子之间有相互作用时，如果是 BEC，由于基态时原子都凝聚于最低能态，每个粒子的波函数都相同，系统波函数仍可用宏观波函数 $\psi(x)$ 描述。如果相互作用或空间维度使系统偏离凝聚态，当相互作用比较小时，系统可分为凝聚部分和偏离凝聚的部分，(2.2)中的玻色场算符 $\hat{\Psi}(x)$ 用它的平均值 $\langle \hat{\Psi}(x) \rangle$ 和涨落算符 $\delta\hat{\Psi}(x)$ 表示，即

$$\hat{\Psi}(x) = \psi(x) + \delta\hat{\Psi}(x). \quad (2.6)$$

如果忽略(2.6)中的 $\delta\hat{\Psi}(x)$ ，即所谓平均场近似 (mean-field approximation, MFA)。

将 $\hat{\Psi}(x) = \psi(x)$ 代入哈密顿量(2.2)，可得到一维 Gross-Pitaevskii (G-P) 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) + g |\psi(x)|^2 \right] \psi(x) = \mu \psi(x). \quad (2.7)$$

其中 μ 是为保证粒子数守恒引进的 Lagrange 乘子，相当于化学势。实函数 $\psi(x)$ 满足归一化条件：

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int n(x) dx = N. \quad (2.8)$$

G-P 方程(2.7)中的相互作用项为平均场势，它相当于 Hartree 势。单粒子平均场能量为

$$\epsilon_M = \frac{1}{2} gn. \quad (2.9)$$

如果(2.6)中的 $\delta\hat{\Psi}(x)$ 不能完全忽略, 相当于考虑 $\hat{\Psi}(x)$ 的二阶近似, 便是 Bogoliubov 方法, 详细介绍可见文献[7]。

第二节 强作用玻色-费米映射方法

当一维玻色子之间存在无限强的排斥作用时, 便是 Tonks-Girardeau(TG)气体 [4][8]。这时如果粒子间发生碰撞时, 粒子的能量将趋于无穷大, 这是物理上所不允许的。所以 TG 玻色子是硬核的, 不能占据同一位置, 波函数需满足

$$\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) \Big|_{x_i=x_j} = 0, \quad (1 \leq i < j \leq N). \quad (2.10)$$

这类似于费米原子满足动量空间的泡利不相容原理。因此 Girardeau 提出了玻色-费米映射理论, 用无相互作用费米子的波函数 ψ_F 表示 TG 气体的波函数 ψ_{TG} , 但要考虑两种粒子的坐标交换对称性不同[4]。两个波函数的映射关系为:

$$\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) = A(x_1, x_2, \dots, x_N) \psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (2.11)$$

其中单位反对称函数 $A(x_1, x_2, \dots, x_N) = \prod_{i>j} \text{sgn}(x_i - x_j)$ 。这里的 $\text{sgn}(x)$ 是符号函数, 当 $x > 0$, $\text{sgn}(x) = 1$; 当 $x < 0$, $\text{sgn}(x) = -1$ 。 $A(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 使得 ψ_{TG} 满足了坐标交换对称性。

费米气体基态波函数可以用Slater行列式表示,

$$\psi_F(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{1}{N!}} \det_{l=0, j=1}^{N-1, N} [\phi_l(x_j)]. \quad (2.12)$$

其中 $\phi_l(x_j)$ 是单粒子波函数。相应的TG气体波函数可以写为

$$\psi_{TG}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \prod_{i>j} \text{sgn}(x_i - x_j) \det_{l=0, j=1}^{N-1, N} [\phi_l(x_j)]. \quad (2.13)$$

根据上式可以证明TG气体与无相互作用费米气体的密度分布和能量是完全相同的。但它们的单体密度矩阵和动量分布不同。

均匀系统中, 单粒子波函数为平面波 $\phi_l(x_j) = e^{ik_l x_j}$ 。考虑周期边界条件, 系统波函数满足

$$\psi(x_1, \dots, x_j = 0, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_j = L, \dots, x_N).$$

全同粒子系统中所有粒子都要满足这个条件。对其中的一个粒子 j ，将其从坐标 x_j 处移到坐标 x_j+L 处，粒子间要交换坐标 $N-1$ 次，所以 $e^{ik_l(x_j+L)} = (-1)^{N-1} e^{ik_l x_j}$ ，即 $e^{ik_l L} = (-1)^{N-1}$ 。为了将 k_l 表示的简洁并考虑由 k_l 所得能量最低，可以取 $(-1)^{N-1} = e^{-i\pi(N+1)} e^{i2l\pi}$ ，便有

$$k_l = \frac{2\pi}{L} \left(l - \frac{N+1}{2} \right) \quad (l=1, 2, \dots, N),$$

系统基态能量为

$$E = \sum_{l=1}^N \frac{\hbar^2 k_l^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{6m} \frac{N(N^2-1)}{L^2}. \quad (2.14)$$

在热力学极限下， $N \rightarrow \infty$ 、 $L \rightarrow \infty$ 、粒子数密度 $n = N/L$ 为有限值，上式给出基态单粒子平均能量

$$\varepsilon = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{6m}. \quad (2.15)$$

第三节 均匀系统 Bethe ansatz 方法

当(2.1)中的 $V_{ext}(x_i) = 0$ 时，系统为无外势均匀系统。Lieb 和 Liniger 于 1963 年用 Bethe ansatz (BA) 方法给出了基态和激发态的精确解，后来这个模型被称作 Lieb-Liniger 模型[1]。BA 方法的核心思想是将一维玻色子的 N 个位置进行排列，一种排列方式 P 对应一个局部区域，共有 $N!$ 种排列。在局部区域内部没有相互作用，波函数为平面波形式，是单粒子平面波的乘积。不同的排列是由粒子的碰撞实现的，碰撞的结果是平面波在粒子碰撞前后产生一个相位差，即每种排列对应着不同的相因子（或系数）。系统波函数可以写为局部区域平面波的叠加

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P a(P) \exp\left(\sum_{j=1}^N ik_{P_j} x_j\right). \quad (2.16)$$

其中 $\{k_j\}$ 为 N 个粒子的波矢（准动量）， $a(P)$ 是与 P 有关的系数， \sum_P 表示对所有 $N!$ 种排列的求和。系统能量为

$$E = \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} k_j^2. \quad (2.17)$$

取局部区域 $R_1: 0 \leq x_1 \leq x_2 \cdots x_N \leq L$ 。由于玻色子的波函数满足粒子交换对称性，不在区域的波函数可以通过交换 R_1 区域的波函数中的粒子坐标而得到。所以区域 R_1 波函数所满足的下面的周期边界条件（或开边界条件）和接触边界条件也适用于全空间波函数。考虑周期边界条件，设系统的长度为 L ，有

$$\psi(0, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_N) = \psi(x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_N, L). \quad (2.18)$$

如果采用开边界条件，波函数在边界处的值为零，系统的性质会有所不同，可参见[9]的详细解释。另外，在局部区域中，当相邻两个粒子 x_j, x_{j+1} 发生碰撞，占据同一个位置时，波函数连续，但 δ 相互作用可以导致波函数导数不连续，这就是接触边界条件：

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_{j+1}} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \psi(x_1, \cdots, x_j, x_{j+1}, \cdots, x_N) \Big|_{x_{j+1}=x_j} = c \psi(x_1, \cdots, x_j, x_{j+1}, \cdots, x_N) \Big|_{x_{j+1}=x_j}. \quad (2.19)$$

将(2.18)(2.19)两个条件，代入所设波函数(2.16)，便得到 BA 方程

$$\exp(ik_j L) = - \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{(k_j - k_i) + ic}{(k_j - k_i) - ic}. \quad (2.20)$$

这是 N 个联立的方程组，通过求解方程组(2.20)，便得到一组准动量解 $\{k_j\}$ 。然后将准动量解代入(2.17)即可求得系统总能量。局域波函数的系数可以表示为

$$a(P) = (-1)^P \prod_{j < l}^N \frac{i(k_{P_j} - k_{P_l}) + c}{\sqrt{(k_{P_j} - k_{P_l})^2 + c^2}}. \quad (2.21)$$

BA 方程在在吸引作用 $g < 0$ 时有复数解，玻色子间形成束缚态[10]。我们这里考虑排斥相互作用 $g > 0$ 。这时 k_j 为实数，对 BA 方程(2.20)两边取对数得到

$$k_j = \frac{2\pi}{L} I_j - \frac{2}{L} \sum_{i=1}^N \arctan \left(\frac{k_j - k_i}{c} \right). \quad (2.22)$$

其中 $\{I_j\}$ ($j=1, 2, \cdots, N$) 为一组整数 (N 为奇数) 或是半整数 (N 为偶数)，当 I_j 确定，就确定了一组本征态，因此 I_j 为决定能级的量子数。

在热力学极限下, 即 $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ 但粒子数密度 $n = N/L$ 为有限值, 方程(2.22)的分立波矢 k_j 趋于连续分布, I_j 也成了连续数。定义连续区间 $(k, k+dk)$ 内的粒子个数为 $dI = L\rho(k)dk$ 。方程(2.22)写成连续形式

$$k = \frac{2\pi}{L}I - \frac{2}{L} \int_{-Q}^Q \arctan\left(\frac{k-q}{c}\right) L\rho(q) dq. \quad (2.23)$$

上式两边对 k 求导, 可以得到积分形式的 BA 方程

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + 2c \int_{-Q}^Q \frac{\rho(q)}{c^2 + (k-q)^2} dq \right]. \quad (2.24)$$

其中积分区间或 k 的取值范围要满足总粒子数守恒的归一化条件

$$n = N/L = \int_{-Q}^Q \rho(k) dk. \quad (2.25)$$

能量(2.17)的积分形式为

$$E = L \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk. \quad (2.26)$$

为了方便计算, 做变量替换, 令 $k = Qx$, $k = Qx$, $\rho(k) = \rho(Qx) = g(x)$ 。公式(2.24)-(2.26)转换为下列(2.27)-(2.29)式:

$$g(x) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + 2\lambda \int_{-1}^1 \frac{g(y) dy}{\lambda^2 + (x-y)^2} \right], \quad (2.27)$$

$$\lambda = \gamma \int_{-1}^1 g(x) dx, \quad (2.28)$$

$$\varepsilon(n, \gamma) = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2m} n^2 e(\gamma). \quad (2.29)$$

其中

$$e(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3} \int_{-1}^1 x^2 g(x) dx. \quad (2.30)$$

(2.27)与(2.28)组成的 Fredholm 方程, 可用数值迭代方法求解。将解得的 $g(x)$ 代入(2.30)及(2.29)便可求得基态能量。在弱相互作用时, 由平均场近似 $\varepsilon = gn/2$ 可得

$$e(\gamma \rightarrow 0) = \gamma. \quad (2.31)$$

在强相互作用时, 方程(2.27)中可以将右边被积函数 $g(x)$ 近似为常数, 便得到

$$e(\gamma \rightarrow +\infty) = \frac{\pi^2}{3} \left(1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} + \dots \right). \quad (2.32)$$

可见 TG 极限时从(2.15)公式可得到的

$$e(\gamma = +\infty) = \frac{\pi^2}{3} \quad (2.33)$$

相当于(2.32)的零阶近似。

图 2-1 比较了这几种结果，它表明平均场近似约在 $\gamma < 0.5$ 时有效；强作用的近似公式(2.32)在 $\gamma > 10$ 近似成立；当 $\gamma > 50$ 可认为接近 TG 气体。

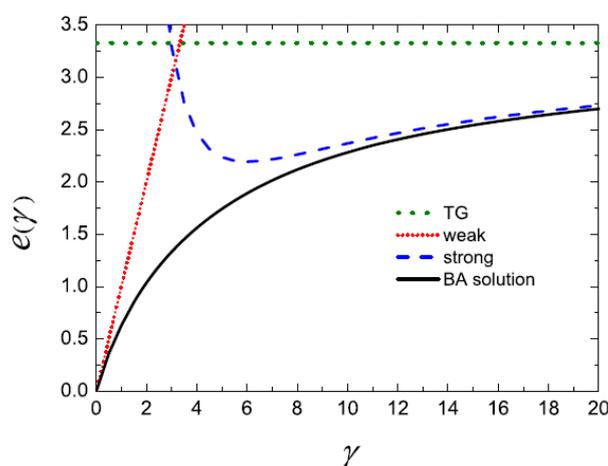


图 2-1 一维均匀玻色气体单粒子平均基态能量为 $\varepsilon(n, \gamma) = \hbar^2 n^2 e(\gamma) / 2m$ 。图中黑实线为 BA 方程数值解；红点线为弱相互作用平均场近似(2.31)；蓝虚线为强相互作用近似(2.32)；绿点线表示 TG 极限的 $e(\gamma)$ 为常数 $\pi^2/3$ 。

第四节 简谐势下的分离变量方法

简谐势是最基本、最常用、也是一个理论上容易处理的外势，其空间对称性便于分离变量运算。

2.4.1 单体问题

在简谐外势下，可以直接利用谐振子的解。单粒子本征波函数和本征能量为

$$\phi_l(x) = \left[\frac{1}{a\sqrt{\pi}2^l l!} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) H_l\left(\frac{x}{a}\right), \quad (2.34)$$

$$\epsilon_l = \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \quad (2.35)$$

其中 $l = 0, 1, 2, \dots$, $H_l(x)$ 为厄米多项式 (Hermite polynomial)。

无相互作用时玻色气体的粒子数密度为

$$n(x) = N |\phi_0(x)|^2 = \frac{N}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right). \quad (2.36)$$

系统基态能量为

$$E_0 = N\epsilon_0 = \frac{N}{2} \hbar \omega. \quad (2.37)$$

在无限强相互作用时, 即 TG 气体或无相互作用费米气体粒子数密度为

$$n(x) = \sum_{l=1}^N |\phi_l(x)|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{2^l l!} H_l^2\left(\frac{x}{a}\right). \quad (2.38)$$

系统基态能量为

$$E_0 = \sum_{l=0}^{N-1} \epsilon_l = \frac{N^2}{2} \hbar \omega. \quad (2.39)$$

2.4.2 两体问题

1998 年 Busch 等人用分离变量法给出了两个粒子在三维谐振子势中的解析波函数和能级[5]。我们介绍它在一维情形时的应用, 详细推导可见[11][12]。在这一节, 我们取比较方便的谐振子单位, 长度单位 $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 、能量单位 $\hbar\omega$ 、动量单位 $\sqrt{\hbar m\omega}$ 、时间单位 $2\pi/\omega$ 。哈密顿量(2.1)约化为

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2} x_1^2 + \frac{1}{2} x_2^2 + g\delta(x_1 - x_2). \quad (2.40)$$

引入质心坐标 R 和相对坐标 r :

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad (2.41)$$

$$r = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2). \quad (2.42)$$

设两粒子波函数为 $\Psi(x_1, x_2) = \Psi_R(R)\Psi_r(r)$ 。由 $H\Psi = E\Psi$, 并令 $E = E_R + E_r$, 可得

到系统分离变量为质心部分 $H_R \Psi_R = E_R \Psi_R$ 和相对部分 $H_r \Psi_r = E_r \Psi_r$ ，其中

$$H_R = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{2} R^2, \quad (2.43)$$

$$H_r = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} r^2 + \frac{\sqrt{2}}{2} g \delta(r). \quad (2.44)$$

质心部分是标准的谐振子方程，它的解即(2.34)和(2.35)给出的第 l 个本征态及相应的本征能量：

$$\Psi_R^l(R) = C_R \exp\left(-\frac{R^2}{2}\right) H_l(R), \quad (2.45)$$

$$E_R^l = l + \frac{1}{2} \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (2.46)$$

其中 C_R 为归一化系数。

相对部分满足玻色对称性的第 m 个能级的本征态及本征能量为

$$\Psi_r^m(r) = C_r U\left(-\nu_m, \frac{1}{2}, r^2\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right), \quad (2.47)$$

$$E_r^m = 2\nu_m + \frac{1}{2}. \quad (2.48)$$

其中 C_r 是归一化系数， $U(\alpha, \beta, x)$ 为合流超几何函数， ν_m 是相对部分量子数，由下面的关系确定：

$$\frac{\Gamma\left(-\nu_m + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(-\nu_m)} + \frac{g}{2} = 0 \quad (m = 0, 2, 4, \dots). \quad (2.49)$$

其中 $\Gamma(x)$ 为伽马函数。对每一个 g ，方程有无穷多个解， ν_m 表示其中第 m 个最小的解。可见相对部分是与相互作用 g 有关的。

还原到原始坐标，两粒子的本征波函数和能级为

$$\Psi_m(x_1, x_2) = C H_l\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)\right) U\left(-\nu_m, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}(x_1 - x_2)^2\right) \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}\right), \quad (2.50)$$

$$E_m = l + 2\nu_m + 1, \quad (2.51)$$

其中 C 为两粒子波函数归一化系数。两粒子系统的基态波函数与基态能量为

$$\Psi_{00}(x_1, x_2) = CU \left(-v_0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} (x_1 - x_2)^2 \right) \exp \left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2} \right), \quad (2.52)$$

$$E_{00} = 2v_0 + 1. \quad (2.53)$$

2.4.3 多体问题

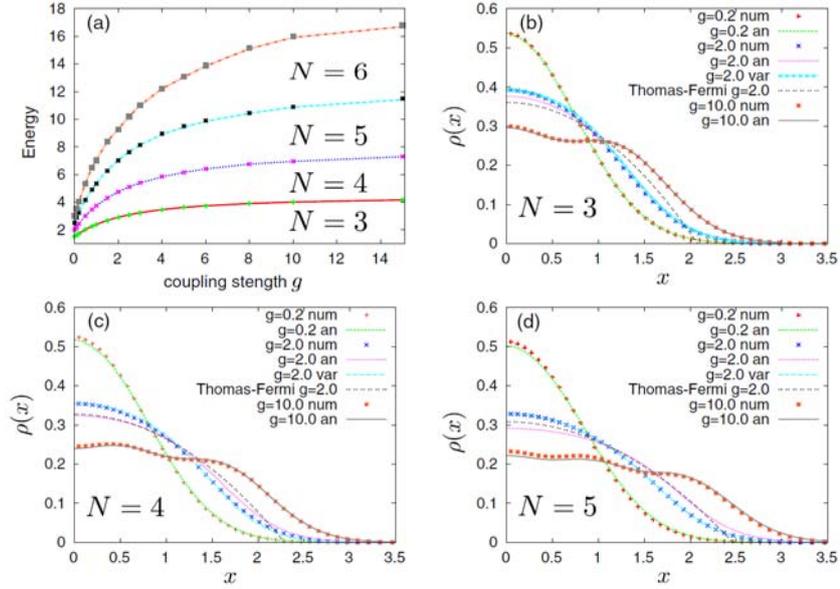


图 2-2 总能量(a)和密度分布(b)-(d)的数值结果(标记)与解析结果(线)的比较[5]。

2012年Brouzos和Schmelcher[6]将分离变量法推广到多粒子系统,质心坐标(2.43)和相对坐标(2.44)推广为:

$$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \quad (2.54)$$

$$r = |x_i - x_j|. \quad (2.55)$$

质心哈密顿量(2.43)成为

$$H_R = -\frac{1}{2N} \left(-i \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{N}{2} R^2. \quad (2.56)$$

质心部分仍是谐振子,基态波函数为

$$\Psi_R(R) = C_R \exp \left(-\frac{NR^2}{2} \right). \quad (2.57)$$

相对部分哈密顿量(2.44)现在成为

$$H_r = -\frac{1}{2N} \sum_{i<j}^P \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{1}{2N} \sum_{i<j}^P r_{ij}^2 + g \sum_{i<j}^P \delta(r_{ij}). \quad (2.58)$$

这里 $P = N(N-1)/2$ 是粒子两两相互作用的对的数目。

Brouzos 和 Schmelcher 提出相对部分(2.58)的基态波函数是抛物柱面函数 $D_\mu(x)$ 乘积的形式:

$$\Psi_r = C_r \prod_{i<j}^P D_\mu(\beta r_{ij}). \quad (2.59)$$

其中参数 β 和 μ 是由下述条件所确定的待定参数。

一是接触边界条件, 在 $r_{ij} = 0$ 处, 有

$$2\beta \frac{\partial D_\mu(\beta r_{ij})}{\partial(\beta r_{ij})} = g D_\mu(\beta r_{ij}). \quad (2.60)$$

由此能给出

$$\frac{g}{\beta} = -2^{3/2} \Gamma\left(\frac{1-\mu}{2}\right) / \Gamma\left(\frac{-\mu}{2}\right). \quad (2.61)$$

另一条件, 在下面三个特殊情况下, 均能得到 $\beta = \sqrt{2/N}$, 而 μ 的取值各异:

(i) 当 $g = 0$, $\Psi_{g=0} = C_0 \exp\left(-\sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{2}\right)$, $\mu = 0$;

(ii) 当 $g \rightarrow +\infty$ 时, TG 气体波函数为 $\Psi_{g \rightarrow +\infty} = C_\infty \exp\left(-\sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{2}\right) \prod_{i<j}^P |x_i - x_j|$, $\mu = 1$;

(iii) 当 $N = 2$ 时, 波函数为(2.52)式, μ 由解方程(2.61)或(2.49)求得。

在一般的给定 g 和 N 情况下, β 作为变分参数被求出。图 2-2 是这种方法与数值解的比较, 可见它们符合得很好。这种预设波函数的方法比较直观, 但不能用于非简谐外势中。

第五节 密度泛函方法

密度泛函方法是在研究费米系统——电子的基础上发展起来的。Nunes 最早将它

用于三维玻色冷原子中[13]。Kim 和 Zubarev 将它发展到了一维到三维的玻色系统中[14]。对于用来表达交换关联势的均匀系统基态能量，他们在三维时采用了Huang-Yang 理论的近似解[15]，在二维时用到 Lieb 和 Yngvason 给出的近似解[16]，在一维则采用 BA 精确解[1]。我们在此较为详细地介绍一下一维玻色系统中结合 BA 解的密度泛函方法。

2.5.1 Kohn-Sham 方程

按照密度泛函理论 Hohenberg-Kohn 定理 I[17]我们把(2.1)或(2.2)的基态能量写成密度的泛函形式：

$$E_0[n(x)] = T^{ref}[n(x)] + \int dx n(x) V_{ext}(x) + \frac{g}{2} \int dx n^2(x) + E_{xc}[n(x)] \quad (2.62)$$

上式中第一项是无相互作用参考系统的动能，第二项是外势能，第三项是Hartree-Fock 能 E_{HF} ，即相互作用能的平均场近似，最后一项是交换关联能，它包括平均场能之外的所有相互作用所贡献的能量。

引入正交归一化的轨道函数 $\phi(x)$ ，密度表示为：

$$n(x) = N \phi^*(x) \phi(x). \quad (2.63)$$

动能项表示为

$$T^{ref} = -N \int dx \phi^*(x) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x). \quad (2.64)$$

对于交换关联能这一项，采用局域密度近似

$$E_{xc}[n(x)] \approx \int dx n(x) \mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}}[n(x)]. \quad (2.65)$$

其中 $\mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}}[n(x)]$ 为 x 处所对应的密度为 n 的均匀一维相互作用玻色气体单粒子交换关联能，它是单粒子基态能 \mathcal{E}^{hom} 与单粒子平均场能量 $\mathcal{E}_M^{\text{hom}}$ 的差值

$$\mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}} = \mathcal{E}^{\text{hom}} - \mathcal{E}_M^{\text{hom}}. \quad (2.66)$$

\mathcal{E}^{hom} 即取 Lieb-Liniger 模型中(2.29)的结果； $\mathcal{E}_M^{\text{hom}}$ 取平均场近似中(2.9)的形式。

根据 Hohenberg-Kohn 定理 II[17]，基态密度分布是由对 E_0 作关于 $n(x)$ 的变分得

到的，这等价于对方程(2.62)作关于轨道函数 $\phi^*(x)$ 的变分。将方程(2.66)代入(2.65)，再将方程(2.63)-(2.65)代入方程(2.62)。为保证 ϕ^* 的归一化引入 Lagrange 乘子 ϵ ，变分形式为

$$\frac{\delta \left(E_0 - \epsilon N \left(\int \phi^* dx \phi - 1 \right) \right)}{\delta \phi^*} = 0. \quad (2.67)$$

由此我们就得到一维玻色气体的 Kohn-Sham 方程 (KSE):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{ext}(x) + \mu^{\text{hom}} [n(x)] \right) \phi(x) = \epsilon \phi(x). \quad (2.68)$$

其中

$$\mu^{\text{hom}} = \frac{\partial (n \epsilon^{\text{hom}})}{\partial n} \quad (2.69)$$

是对应的均匀系统的化学势。

在方程(2.68)的两边左乘 $\phi^*(x)$ 再积分，利用 $\phi(x)$ 的归一性，我们能得到公式(2.64)中定义的动能 T^{ref} 的表达式。将这个动能表达式代入基态能量泛函公式(2.62)中，则基态能可以用(2.68)中解得的 ϵ 表示为：

$$E_0 = N\epsilon + \int n(x) \epsilon^{\text{hom}}(x) dx - \int n(x) \mu^{\text{hom}}(x) dx. \quad (2.70)$$

利用迭代方法可以求解(2.68)与(2.63)的联立方程组，得出基态密度分布 $n(x)$ 。根据(2.62)或(2.70)便得出基态能量 E_0 。

2.5.2 拟合公式

在解KS方程中，每一 x 处的 n 不同，因此各处L-L参数 $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ 不同，它是空间的函数， $\gamma(x) = \frac{mg}{\hbar^2 n(x)}$ 。如果在几千次的迭代中每一 x 处都通过求解BA方程得到 $e(\gamma)$ 从而得到 ϵ^{hom} 和 μ^{hom} 将会比较耗时。为此我们可以拟合一个 $e(\gamma)$ 的有理表达式以优化计算。结合 $e(\gamma)$ 在弱相互作用区的平均场结果(2.31)、强相互作用时近似公式(2.32)，以及BA方程的数值解，我们找到一个参数公式：

$$\tilde{e}(\gamma) = \frac{\pi^2}{3} \frac{\gamma^3 + a_2 \gamma^2 + a_1 \gamma}{\gamma^3 + b_2 \gamma^2 + b_1 \gamma + b_0}. \quad (2.71)$$

其中 $b_1 = 11.37$ 、 $b_2 = 4.68$ 、 $a_1 = 12 + b_1 - 4b_2$ 、 $a_2 = -4 + b_2$ 、 $b_0 = \pi^2 a_1 / 3$ 。图 2-3 给出了 $e(\gamma)$ 的精确数值解结果与拟合公式 $\tilde{e}(\gamma)$ 的比较。显然在整个相互作用区，拟合公式都很好地描绘了精确结果。

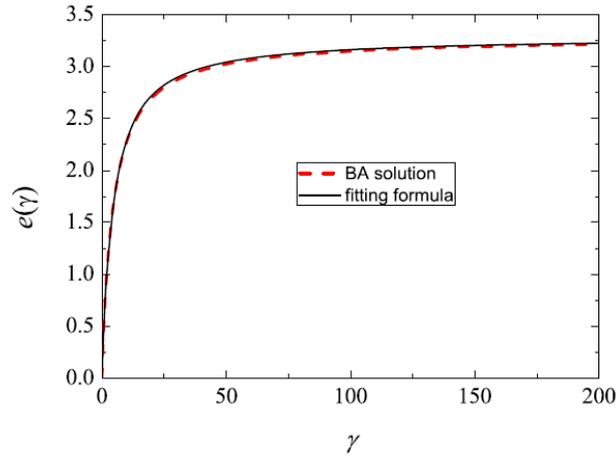


图 2-3 比较函数 $e(\gamma)$ 的 BA 方程解结果（红虚线）与拟合公式结果（黑实线）。

2.5.3 密度分布与基态能量

由(2.29)所给出均匀系统的单粒子基态能量 $\mathcal{E}^{\text{hom}}(n, \gamma)$ ，可将基态化学势表示为

$$\mu_B^{\text{hom}}(n, \gamma) = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \left(3e - \gamma \frac{\partial e}{\partial \gamma} \right). \quad (2.72)$$

在弱相互作用下，由 $e(\gamma \rightarrow 0) = \gamma$ 可得 $\mu_B^{\text{hom}}(n, \gamma) \approx \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \cdot 2\gamma = gn$ ，这时 KS 方程(2.68)

回到 G-P 方程(2.7)。当相互作用比较强时，可以对 KS 方程作 Thomas-Fermi 近似 (TFA)，忽略偏微分动能项，有

$$\mu^{\text{hom}}[n(x)] + V_{\text{ext}}(x) = \mu^0. \quad (2.73)$$

其中 μ^0 是由粒子数归一化条件(2.8)所确定的常数。

对于相互作用无限强的 TG 气体， $e(\gamma = +\infty) = \frac{\pi^2}{3}$ ，相应的 $\mu_B^{\text{hom}}(n, \gamma) = \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 n^2$ 。

KS 方程成为 Kolomeisky 等人[18]提出的下列形式:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{ext}}(x) + \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 |\phi(x)|^4 \right] \phi(x) = \epsilon \phi(x). \quad (2.74)$$

考虑简谐外势 $V_{\text{ext}}(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, 其中 ω 为谐振频率。引入特征长度 $a = \sqrt{\hbar / m \omega}$ 和相互作用参数 $U = \frac{g}{a \hbar \omega}$ 。TG 极限下 KS 方程的 TFA 形式为

$$\frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 n^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \mu^0. \quad (2.75)$$

则有

$$n^2(x) = \max \left[\frac{2m}{\hbar^2 \pi^2} \left(\mu^0 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right), 0 \right]. \quad (2.76)$$

设一维玻色气体的边界为 $\pm R$, 即 $n(x = \pm R) = 0$, 上式给出

$$\mu^0 = \frac{1}{2} m \omega^2 R^2, \quad (2.77)$$

同时粒子数归一化条件要求

$$\int_{-R}^R n(x) dx = N. \quad (2.78)$$

由(2.76)-(2.78)可得出

$$R = a \sqrt{2N}. \quad (2.79)$$

密度分布为

$$n(x) = \max \left[\frac{\sqrt{2N - x^2/a^2}}{\pi a}, 0 \right] \quad (2.80)$$

势阱中心的粒子数密度为

$$n(x=0) = \frac{\sqrt{2N}}{\pi a}. \quad (2.81)$$

可见 TG 气体的粒子数密度呈半椭圆形状分布, 气体在势阱中所占的范围及势阱中心的密度随粒子数的增多而变大。

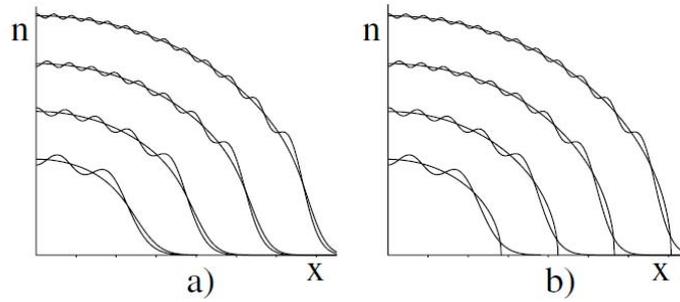


图2-4 粒子数分别为4,9,16,25时的密度分布。振荡曲线对应玻色-费米映射方法所给的(2.38)式，平滑的曲线对应：(a)图中，KS方程在强相互作用下近似公式(2.74)；(b)图中，对方程(2.74)作Thomas-Fermi近似后所得(2.80)式。长度单位为 $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 。[18]

图 2-4 比较了 TG 极限下各种方法对不同粒子数情况的计算结果，(a)比较玻色费米映射给出公式(2.38)的结果与 KS 方程在 TG 极限下所得公式(2.74)的结果，除了振荡以外，两密度分布很接近，随着粒子数的增大，振荡的效应可以忽略。(b)比较了玻色费米映射公式(2.38)与 TG 极限下 KS 方程的 TFA 公式(2.80)的结果。在中心区域两种方法给出的密度曲线也很接近，除振荡之外。在气体边界，TFA 边界很整齐，TG 极限下的 KS 方程由于考虑了动能，边界上有一小段过渡区。

现在我们以 $N=10$ 为例，给出 KS 方程(2.68)和(2.63)在不同相互作用强度 $U=0,0.1,0.5,1,5,10$ 及 $U=+\infty$ 时解得的密度分布，如图 2-5。随着相互作用强度 U 的增大，密度曲线从标准的高斯型变化到半椭圆型。比较玻色系统在 $U=+\infty$ 和无相互作用费米子系统的密度曲线，我们发现除了密度振荡外它们彼此符合地很好。这个结果表明具有无限强排斥相互作用的玻色子基本上和无相互作用费米子的密度分布是相同的。密度分布曲线上的振荡反映的是强作用下一维系统粒子间的不相容性。数值算法[19]或解析方法[6]能细致描绘这些振荡如何随相互作用增大而逐渐出现。我们的结果缺少振荡是由于在(2.63)中采用了单个泛函轨道假设。Brand 曾质疑过这种单轨道函数的假设，他尝试引用多个轨道函数，并设轨道个数及轨道占据数与相互作用有关，其关系在均匀系统可由能量极小确定，但很难用于有外势的系统中[20]。

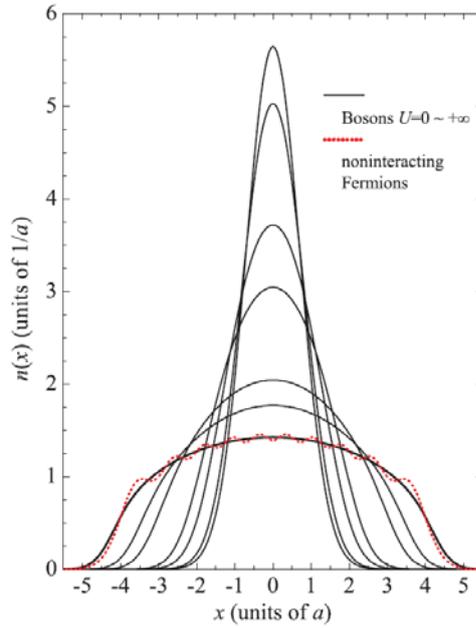


图 2-5 无相互作用费米子 (红点线) 与不同相互作用参数 U 下玻色子的密度分布图 (黑实线)。六条黑实线从上到下表示 $U = 0, 0.1, 0.5, 1.5, 10, +\infty$, 粒子数 $N = 10$ 。

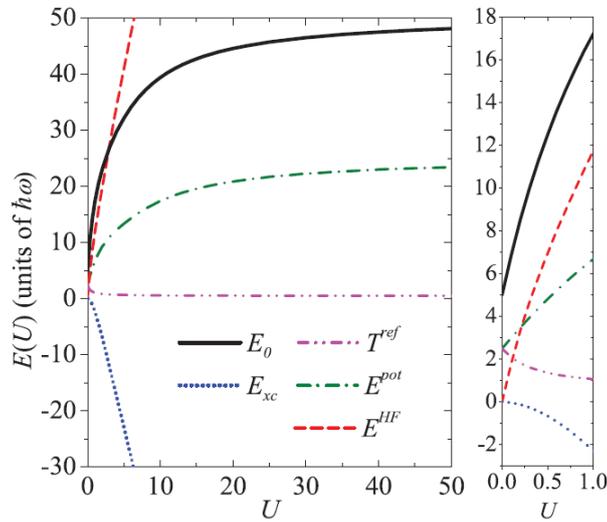


图 2-6 $N = 10$ 个玻色子的能量随增大的相互作用强度 U 而演化的图。基态能 E_0 包括动能 T^{ref} 、外势能 E_{pot} 、哈特里-福克能 E_{HF} 、交换关联能 E_{xc} 。右边小图为弱相互作用平均场区的放大。

图 2-6 给出基态能随 U 的变化。如图所示, 随着相互作用 U 的增大, 动能 T^{ref} 缓

慢减小，表明相互作用限制了原子的运动。粒子在阱中占据的区域增大，使得外势能增长。这两种能量都逐渐演化到常数能量。Hartree-Fock 能 E_{HF} 几乎线性增长而交换关联能 E_{xc} 在整个相互作用区都在减小。这两项能量在强相互作用区造成的影响更大且几乎彼此抵消。所有这些能量共同形成总基态能 E_0 。它从无相互作用时的 $5\hbar\omega$ 开始演化，然后逐渐趋近于强相互作用极限时的能量 $50\hbar\omega$ 。当 $U < 0.9$ 时，交换关联能比总能量小的多，有 $|E_{xc} / E_0| < 0.1$ 。这可看作平均场理论有效区。对 $U = +\infty$ 的 TG 气体， $\mu_B^{\text{hom}} = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m$ ，方程(2.68)的数值解给出 $E_0 = 50.5024\hbar\omega$ 。这比理论值 $50\hbar\omega$ 略高一点。这是因为我们引入的轨道泛函 $\phi(x)$ 只是一个辅助的变分函数而不是相互作用系统的真正波函数。

综上所述，DFT 能够描述一维玻色系统从弱到强的所有相互作用区域。虽然它不能给出密度振荡等细节，但它不受粒子数限制，适用于大粒子系统，而且不受外势形式限制，可以用到偏置势、双阱乃至与粒子性质（自旋、相互作用等）有关的外势中。所以 DFT 在研究冷原子物理中是比较有效的、适用范围也是比较广泛的。

参考文献

- [1] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. (1963) **130**, 1605; E. H. Lieb, *ibid.* (1963) **139**, 1616.
- [2] L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP (1961) **13**, 451.
- [3] E. P. Gross, J. Math. Phys. (1963) (N.Y.) **4**, 195.
- [4] M. Girardeau, J. Math. Phys. (1960) **1**, 516.
- [5] T. Busch, B. Englert, K. Rzazewski, and M. Wilkens, Found. Phys. (1998), **28**, 549.
- [6] I. Brouzos and P. Schmelcher, Phys. Rev. Lett. (2012), **108**, 045301.
- [7] V. A. Yurovsky, M. Olshanii, and D. S. Weiss, Adv. At. Mol. Opt. Phys. (2008), **55**, 61.
- [8] L. Tonks, Phys. Rev. (1936) **50**, 955.
- [9] Y. Hao, Y. Zhang, J. Liang, and S. Chen, Phys. Rev. A (2006) **73**, 063617.
- [10] J. B. McGuire, J. Math. Phys. (1964), **5**, 622.

- [11] T. Sowinski, M. Brewczyk, M. Gajda, *et al.*, Phys Rev A, (2010) **82**, 053631.
- [12] 刘太丰, 硕士学位论文: STG 气体的的动力学研究, 山西大学 (2012)。
- [13] G. S. Nunes, J. Phys. B (1999) **32**, 4293.
- [14] Y. E. Kim and A. L. Zubarev, Phys. Rev. A (2003) **67**, 015602.
- [15] K. Hang and C. N. Yang, Phys. Rev. **105**, 767 (1957); T. D. Lee and C. N. Yang, *ibid.* **105**, 1119 (1957); T. D. Lee *et al.*, *ibid.* **106**, 1135 (1957); T. T. Wu, Phys. Rev. **115**, 1390 (1959); N. Hugenholtz and D. Pines, *ibid.* Phys. Rev. **116**, 489 (1959).
- [16] H. Lieb and J. Yngvason, J. Stat. Phys. 103, 509 (2001).
- [17] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. (1965) **140**, A1133; W. Kohn, Rev. Mod. Phys. (1999) **71**, 1253.
- [18] E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley, and X. Qi, Phys. Rev. Lett. (2000) **85**, 1146.
- [19] F. Deuretzbacher, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche, Phys. Rev. A (2007) **75**, 013614.
- [20] J. Brand, J. Phys. B (2004) **37**, S287.

第三章 自旋-1/2 费米气体

考虑一维外势 $V_{ext}(x)$ 下的自旋-1/2 费米气体，忽略 p 波散射，只考虑不同自旋费米子之间的 s 波碰撞作用，其哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_{ext}(x_i) \right] + g \sum_{i=1}^{N_{\uparrow}} \sum_{j=1}^{N_{\downarrow}} \delta(x_i - x_j). \quad (3.1)$$

其中 $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ 是费米原子总数； N_{\uparrow} (N_{\downarrow}) 是自旋向上 (下) 原子数，据此可定义总极化率 $P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N}$ ； m 为原子质量； g 为不同自旋原子间作用强度，可以通过

Feshbach 共振技术和束缚诱导共振 (CIR) 技术调节其大小。

当外势 $V_{ext}(x) = 0$ 时，即均匀系统。上世纪 60 年代应用 Bethe ansatz (BA) 方法在

解决这一问题时有了重要进展。1965、1966 年 McGuire 解决了只有一个费米子与其它费米子自旋相反，即 $N_{\downarrow} = 1$ 的情况[1]。1967 年 Flicker 和 Lieb 研究了 $N_{\downarrow} = 2$ 的系统[2]。同年 Gaudin[3]和 Yang[4]各自给出了普遍的极化率 P 为任意值时的 BA 解，发展了代数 BA 方法。Gaudin 侧重 $g < 0$ 系统，指出相互吸引作用下 $P = 0$ 的完全配对系统对应于排斥相互作用下的一维玻色系统或 Lieb-Linger 模型。Yang 则关注 $g > 0$ 系统，在解决基态本征值问题的过程中建立了著名的 Yang-Baxter 方程。后来均匀系统的(3.1)式便被称为 Gaudin-Yang 模型。

近来吸引相互作用下的一维费米气体更加引发人们的兴趣，是由于它涉及到配对与极化共存的状态——FFLO 态的研究。FFLO 态源于 1964 年 Fulde 和 Ferrell 对部分极化 ($P \neq 0$) 的电子系统的研究[5]。他们发现超导电子对 (BCS 对) 形成时出现非零的质心动量和自旋极化。次年 Larkin 和 Ovchinnikov 提出超导序参数是空间振荡函数[6]。随后科学家们便尝试在相互作用可调的冷原子系统中寻找 FFLO 态。对三维外势束缚系统，理论上指出 FFLO 态会占据很小的区域[7][8]，但实验上没有发现[9-11]。

2007 年 Orso[12]与胡辉等人[13]在 Gaudin-Yang 模型基础上结合局域密度近似研

究一维简谐外势下具有相互接触吸引作用的费米气体。他们绘出强作用下的基态相图，表明 FFLO 态可以占据很大区域。2010 年 Liao 等人用实验验证了这些结果[14]。这也激发了各种方法对相关内容的研究热潮，包括密度泛函方法对基态电荷密度与自旋密度的研究[15]，热力学 Bethe ansatz (TBA) 方法对强吸引作用下的热力学行为和量子临界性质[16][17]的研究，费米 STG 态的研究[18-20]等。期间还有许多数值方法用于研究一维光晶格系统中的类似问题[21-24]。

我们在此主要介绍关于一维连续系统基态性质研究的一些主要方法和重要结果，包括吸引作用和排斥作用下的两分量费米气体。

第一节 均匀系统 Bethe ansatz 解

3.1.1 Bethe ansatz 方程

当外势 $V_{ext}(x) = 0$ 时，Gaudin[3]和 Yang[4]给出(3.1)的 Bethe ansatz 方程为

$$\exp(ik_i L) = \prod_{\alpha=1}^{N_{\downarrow}} \frac{k_i - \Lambda_{\alpha} + ic/2}{k_i - \Lambda_{\alpha} - ic/2}, \quad (3.2)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\Lambda_{\alpha} - k_j + ic/2}{\Lambda_{\alpha} - k_j - ic/2} = - \prod_{\beta=1}^{N_{\downarrow}} \frac{\Lambda_{\alpha} - \Lambda_{\beta} + ic}{\Lambda_{\alpha} - \Lambda_{\beta} - ic}. \quad (3.3)$$

这里 $\{k_i\}$ $i=1,2,\dots,N$ 为准动量， $\{\Lambda_{\alpha}\}$ $\alpha=1,2,\dots,N_{\downarrow}$ 为自旋快度 (rapidities)， L 为系统长度， $c = \frac{mg}{\hbar^2}$ 。系统能量为

$$E = \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} k_j^2. \quad (3.4)$$

考虑热力学极限情况，即粒子数 $N \rightarrow \infty$ ，系统长度 $L \rightarrow \infty$ ，而粒子数密度 $n = N/L$ 、 $n_{\uparrow} = N_{\uparrow}/L$ 、 $n_{\downarrow} = N_{\downarrow}/L$ 都有限。在此引入 Lieb-Linger 参数 $\gamma = \frac{c}{n} = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ 和极化率 $\zeta = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n}$ 。先讨论极限情况的一些能量。

i) 对于完全无极化 $\zeta = 0$ 系统，费米子从低能级到高能级依次排布，每个能级上有不同自旋的两个费米子。最高能级上费米波矢 $k_F = \pi n / 2$ ，相应的费米能为

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8m}. \quad (3.5)$$

ii) $\zeta = 1$ 的完全极化系统相当于单分量费米系统。这时粒子间没有相互作用能，只有动能。每个量子能级上有一个费米子，单粒子平均动能为

$$\begin{aligned} \kappa(n, \zeta = 1) &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/L=n}} \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{\hbar^2 \pi^2 l^2}{2mL^2} \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/L=n}} \frac{1}{N} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \frac{N(N+1)(2N+1)}{6} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{6m}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

iii) 对于普遍的极化系统，在无相互作用时的单粒子的平均动能为

$$\begin{aligned} \kappa(n, \zeta) &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ N/L=n}} \frac{1}{N} \left[\sum_{l=1}^{N_\uparrow} \frac{\hbar^2 \pi^2 l^2}{2mL^2} + \sum_{l=1}^{N_\downarrow} \frac{\hbar^2 \pi^2 l^2}{2mL^2} \right] \\ &= \frac{1}{n} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n_\uparrow^3 + n_\downarrow^3}{3} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{24m} (1 + 3\zeta^2). \end{aligned} \quad (3.7)$$

有相互作用时，Hartree 能为

$$\varepsilon_H(n, \zeta, \gamma) = \frac{gn_\uparrow n_\downarrow}{n} = \frac{\hbar^2 n^2}{4m} (1 - \zeta^2) \gamma. \quad (3.8)$$

在弱相互作用下， $|g| \rightarrow 0$ 或 $|\gamma| \rightarrow 0$ ，单粒子平均基态能量近似为(3.7)与(3.8)的和

$$\varepsilon(n, \zeta, |\gamma| \rightarrow 0) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{24m} (1 + 3\zeta^2) + \frac{\hbar^2 n^2}{4m} (1 - \zeta^2) \gamma. \quad (3.9)$$

对于一般相互作用条件下的 Bethe ansatz 解，我们分吸引和排斥两种相互作用情况来介绍。

3.1.2 吸引作用下的 Bethe ansatz 解

对于吸引作用 $g < 0$ ，不同自旋费米子形成两体束缚态，即 N 个费米子中， $2N_\downarrow$

个费米子结成了 N_\downarrow 个费米对，剩下的 $N - 2N_\downarrow = N_\uparrow - N_\downarrow$ 个是单个的未配对费米子。

$\{k_i\}$ 和 $\{\Lambda_\alpha\}$ 各有 N_\downarrow 对共轭复数解 $k_\alpha = \lambda_\alpha \pm ic/2$ ， $\Lambda_\alpha = \lambda_\alpha \pm ic/2$ ， λ_α 是实数。 $\{k_i\}$ 还有 $N_\uparrow - N_\downarrow$ 个实数解，如图 3-1 所示[25]。这时基态能量(3.4)成为

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_{j=1}^{N_\uparrow - N_\downarrow} k_j^2 + 2 \sum_{\alpha=1}^{N_\downarrow} \lambda_\alpha^2 \right) - \varepsilon_b N_\downarrow. \quad (3.10)$$

其中 ε_b 为每一费米对的束缚能：

$$\varepsilon_b = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{c}{2} \right)^2 \times 2 = \frac{mg^2}{4\hbar^2}. \quad (3.11)$$

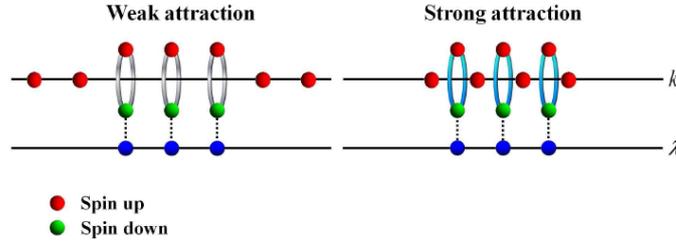


图 3-1 强和弱吸引作用下 Gaudin-Yang 模型的 BA 方程(3.2)(3.3)的解[25]。

在热力学极限下，Bethe ansatz 方程(3.2)(3.3)在吸引作用时的积分形式为：

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + 4c \int_{-B}^B d\lambda \frac{\sigma(\lambda)}{c^2 + 4(k-\lambda)^2} \right], \quad (3.12)$$

$$\sigma(\lambda) = \frac{1}{\pi} \left[1 + 2c \int_{-Q}^Q dk \frac{\rho(k)}{c^2 + 4(k-\lambda)^2} + c \int_{-B}^B d\lambda' \frac{\sigma(\lambda')}{c^2 + (\lambda-\lambda')^2} \right]. \quad (3.13)$$

积分边界由下列归一化条件确定：

$$\int_{-Q}^Q dk \rho(k) = n_\uparrow - n_\downarrow, \quad (3.14)$$

$$\int_{-B}^B d\lambda \sigma(\lambda) = n_\downarrow. \quad (3.15)$$

由(3.10)，粒子平均基态能量用准动量分布 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\lambda)$ 表示为：

$$\varepsilon(n, \zeta, \gamma) = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mn} \left\{ \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk + 2 \int_{-B}^B \lambda^2 \sigma(\lambda) d\lambda \right\} - \frac{n_\downarrow}{n} \varepsilon_b. \quad (3.16)$$

解 BA 方程(3.12)-(3.15)求出 $\rho(k)$ 和 $\sigma(\lambda)$ ，代入(3.16)便得到 $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 。图 3-2 给出了 $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 的求解结果，这里能量是以(3.5)式中的费米能为单位的。

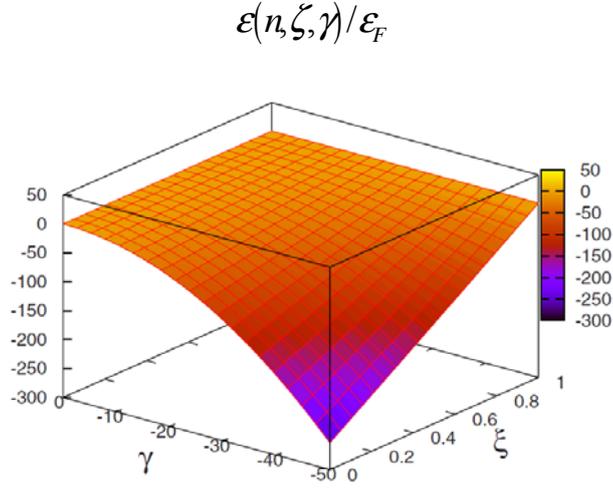


图 3-2 粒子平均基态能 ε 作为 ζ, γ 的函数。 ε 以费米能 $\varepsilon_F = \hbar^2 n^2 \pi^2 / (8m)$ 为单位。[15]

现在分析一下 $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 的结果。

在无极化 $\zeta = 0$ 即 $N_\uparrow = N_\downarrow$ 时，费米子完全配对，方程(3.2)中 $\{k_i\}$ 没有实数解，只有 $N_\downarrow = N/2$ 对共轭复数解。相应的积分方程即能量关系(3.12)-(3.16)约化为

$$\sigma(\lambda) = \frac{1}{\pi} \left[1 + c \int_{-B}^B d\lambda' \frac{\sigma(\lambda')}{c^2 + (\lambda - \lambda')^2} \right], \quad (3.17)$$

$$\int_{-B}^B d\lambda \sigma(\lambda) = \frac{n}{2}, \quad (3.18)$$

$$\varepsilon(n, \zeta = 0, \gamma) = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mn} 2 \int_{-B}^B \lambda^2 \sigma(\lambda) d\lambda - \frac{\varepsilon_b}{2}. \quad (3.19)$$

记 $y = \frac{2\gamma}{\pi}$ ，令 $\varepsilon(n, \zeta = 0, \gamma) = \varepsilon_F e(y)$ 。Gao[15]给出 $e(y)$ 的拟合参数公式为

$$e(y) = \frac{1}{3} - \frac{|y|}{\pi} - \frac{y^2 + a_m |y| + b_m y^2}{y^2 + c_m |y| + d_m} \frac{1}{4} \quad (3.20)$$

其中系数 $a_m = -0.331117$ 、 $b_m = 0.458183$ 、 $c_m = a_m + \frac{4}{\pi}$ 、 $d_m = \frac{4a_m}{\pi} + b_m + \frac{16}{\pi^2} - 1$ 。这个拟合公式表明了无极化费米子在弱相互作用和强相互作用时的如下的渐进行为：

$$e(y) = \begin{cases} \frac{1}{3} + \frac{y}{\pi} + \dots & \text{当 } y \rightarrow 0^-, \\ -\frac{y^2}{4} + \frac{1}{12} + \dots & \text{当 } y \rightarrow -\infty. \end{cases} \quad (3.21)$$

在任意极化情况，当相互作用比较强时， $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 表达为

$$\varepsilon(n, \zeta, \gamma \rightarrow -\infty) = -\frac{\hbar^2 n^2}{8m}(1-\zeta)\gamma^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{96m}(1+15\zeta) + O\left(\frac{1}{\gamma}\right). \quad (3.22)$$

根据各种相互作用极限和特殊极化条件下粒子平均基态能量 $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 的渐近行为并结合 BA 方程精确解，Gao[15] 将粒子平均基态能量(3.16)表示为

$$\varepsilon(n, \zeta, \gamma) = \kappa(n, \zeta) + f(\zeta, y)\varepsilon_F, \quad (3.23)$$

其中 $\kappa(n, \zeta)$ 是无相互作用系统单粒子动能， ε_F 是费米能， $f(\zeta, y)$ 被拟合为

$$f(\zeta, y) = \left[e(y) - \frac{1}{3} \right] \{ 1 + \alpha(y)|\zeta| + \beta(y)\zeta^2 - [1 + \alpha(y) + \beta(y)]\zeta^3 \}. \quad (3.24)$$

(3.24) 中另外两个函数按照 Padé 近似给出

$$\alpha(y) = \frac{y^3 + A_\alpha y}{-y^3 + B_\alpha y + C_\alpha}, \quad (3.25)$$

$$\beta(y) = \frac{A_\beta y + B_\beta}{y^3 + C_\beta y^2 + D_\beta y - B_\beta}. \quad (3.26)$$

其中各系数的值为 $A_\alpha = -0.065\ 238\ 5$ ， $B_\alpha = -1.873\ 53$ ， $C_\alpha = 3.088\ 73$ ， $A_\beta = 3.905\ 15$ ， $B_\beta = 19.423\ 9$ ， $C_\beta = -4.534\ 57$ ， $D_\beta = -7.298\ 26$ 。

引入各分量化学势

$$\mu_{\uparrow, \downarrow} = \frac{\partial(E/L)}{\partial N_{\uparrow, \downarrow}} = \frac{\partial(n\varepsilon)}{\partial n_{\uparrow, \downarrow}}. \quad (3.27)$$

定义自旋密度 $s = n_\uparrow - n_\downarrow$ ，并引入局域化学势

$$\mu = \frac{\partial(n\varepsilon)}{\partial n} = \frac{\mu_\uparrow + \mu_\downarrow}{2}, \quad (3.28)$$

和局域磁场

$$h = \frac{\partial(n\epsilon)}{\partial s} = \frac{\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}}{2}. \quad (3.29)$$

将解 BA 方程所得基态能量解(3.19)代入(3.28)与(3.29), 在 $s=0$ 与 $s=n$ 条件下, $\mu-h$ 相图上出现三个区域: 完全配对、完全极化及部分极化 (FFLO) 区, 如图 3-3。

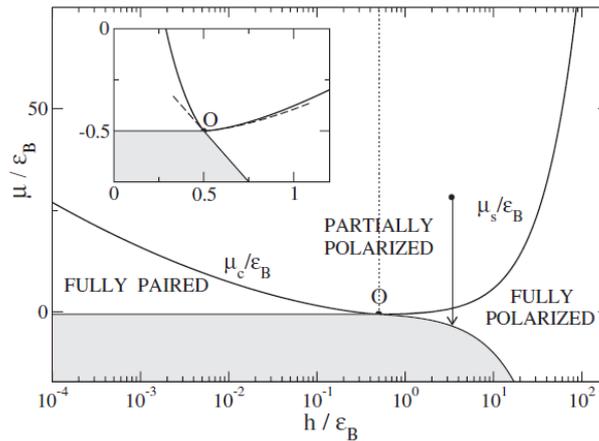


图 3-3 两分量吸引均匀费米气体的基态 $\mu-H$ 相图。[12]

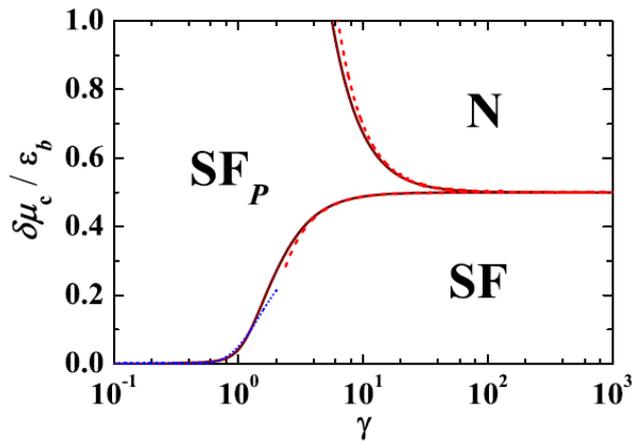


图 3-4 两分量吸引均匀费米气体的基态 $\delta\mu - \gamma$ 相图。[13]

图 3-4 是在 $\delta\mu - \gamma$ 相图中给出三个区域: 完全极化的正常相 (N)、类 BCS 的无极化超流态 (SF) 和部分极化的超流态 (SF_P)。 SF_P 态即具有 FFLO 特征。这里的 $\delta\mu$ 即(3.29)中的 h , 图中以束缚能为单位。

3.1.3 排斥作用下的 Bethe ansatz 解

在基态时, 对于排斥作用 $g > 0$, Bethe ansatz 方程(3.2)(3.3)中的 k_i 、 λ_{α} 都有实数

解。在热力学极限下，其积分形式为

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + \int_{-B}^B d\Lambda \frac{4c\sigma(\Lambda)}{c^2 + 4(k-\Lambda)^2} \right], \quad (3.30)$$

$$\sigma(\Lambda) = \frac{1}{2\pi} \left[\int_{-Q}^Q dk \frac{4c\rho(k)}{c^2 + 4(\Lambda-k)^2} - \int_{-B}^B d\Lambda' \frac{2c\sigma(\Lambda')}{c^2 + (\Lambda-\Lambda')^2} \right]. \quad (3.31)$$

归一化条件为

$$\int_{-Q}^Q dk \rho(k) = n, \quad (3.32)$$

$$\int_{-B}^B d\Lambda \sigma(\Lambda) = n_{\downarrow}. \quad (3.33)$$

单粒子平均基态能量为

$$\varepsilon = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mn} \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk. \quad (3.34)$$

当粒子间有无限强的排斥作用 $g = +\infty$ 时，系统相当于完全极化的单分量费米气体。由(3.6)式给出单粒子平均基态能量

$$\varepsilon(n, \zeta, \gamma = +\infty) = \kappa(n, \zeta = 1) = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{6m}. \quad (3.35)$$

用无相互作用系统动能(3.7)和费米能(3.5)将单粒子平均基态能量表示为

$$\varepsilon(n, \zeta, \gamma) = \kappa(n, \zeta) + f(\zeta, y) \varepsilon_F, \quad (3.36)$$

其中 $y = 2\gamma/\pi$ 。根据各种相互作用极限和各种特殊极化条件下的解析解以及

Bethe-ansatz方程精确解，Abedinpour等人[26]将(3.36)中的 $f(\zeta, y)$ 拟合为

$$f(\zeta, y) = \left[e(y) - \frac{1}{3} \right] \left\{ 1 + \alpha(y) \zeta^2 + \beta(y) \zeta^4 - [1 + \alpha(y) + \beta(y)] \zeta^6 \right\}, \quad (3.37)$$

其中

$$e(y) = \frac{4y^2/3 + a_p y + b_p}{y^2 + c_p y + d_p}, \quad (3.38)$$

$$\alpha(y) = \frac{-y^2 + a_{\alpha} y + b_{\alpha}}{y^2 + c_{\alpha} y - b_{\alpha}}, \quad (3.39)$$

$$\beta(y) = \frac{a_\beta y}{x^2 + b_\beta y - c_\beta}. \quad (3.40)$$

各参数为 $a_p = 5.780126$, $b_p = -(8/9)\ln 2 + \pi a_p / 4$, $c_p = (8/\pi)\ln 2 + 3a_p / 4$, $d_p = 3b_p$; $a_\alpha = -1.68894$, $b_\alpha = -8.0155$, $c_\alpha = 2.74347$; $a_\beta = -1.51457$, $b_\beta = -2.59864$, $c_\beta = 6.58046$ 。给出这种拟合的均匀系统的单粒子基态能量公式有利于多次迭代求解 KS 方程。

第二节 外势束缚系统的 KS 方程

外势束缚下的一维两分量费米气体的 KS 方程为

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{KS}^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] \right\} \varphi_{\alpha,\sigma}(x) = \varepsilon(\alpha, \sigma) \varphi_{\alpha,\sigma}(x). \quad (3.41)$$

其中自旋 $\sigma = \uparrow, \downarrow$, 后面用 $\bar{\sigma}$ 表示相反的自旋, 如 $\bar{\uparrow} = \downarrow$ 。基态密度分布由方程的本征函数决定

$$n_\sigma(x) = \sum_{\alpha=1}^{N_\sigma} |\varphi_{\alpha,\sigma}(x)|^2. \quad (3.42)$$

两分量的粒子数各自守恒

$$\int n_\sigma(x) dx = N_\sigma. \quad (3.43)$$

(3.41) 中的 KS 势 $V_{KS}^{(\sigma)}$ 包括 Hartree 势 $V_H^{(\sigma)}$, 交换关联势 $V_{xc}^{(\sigma)}$ 和外势 V_{ext} ,

$$V_{KS}^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] = V_H^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] + V_{xc}^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] + V_{ext}(x). \quad (3.44)$$

其中

$$V_H^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] = g n_{\bar{\sigma}}(x). \quad (3.45)$$

$$V_{xc}^{(\sigma)}[n_\sigma(x)] = \frac{\delta E_{xc}[n_\sigma(x)]}{\delta n_\sigma(x)}. \quad (3.46)$$

这里的 $E_{xc}[n_\sigma(x)]$ 表示交换关联能泛函, 对它采用局域密度近似

$$E_{xc}[n_\sigma(x)] = \int dx n(x) \varepsilon_{xc}^{\text{hom}}(n, \zeta, \gamma). \quad (3.47)$$

$\varepsilon_{xc}^{\text{hom}}(n, \zeta, \gamma)$ 表示均匀系统的粒子平均交换关联能, 表示为

$$\varepsilon_{xc}^{\text{hom}}(n, \zeta, \gamma) = \varepsilon(n, \zeta, \gamma) - \kappa(n, \zeta) - \varepsilon_H(n, \zeta, \gamma). \quad (3.48)$$

此处的 $\varepsilon(n, \zeta, \gamma)$ 即均匀系统粒子平均基态能(3.16)，可以用拟合公式(3.23)求出， $\kappa(n, \zeta)$ 即为(3.6)式给出的均匀无相互作用系统粒子的平均动能， $\varepsilon_H(n, \zeta, \gamma)$ 为 Hartree 能(3.8)。

引入各分量化学势

$$\mu_{\sigma}^{\text{hom}}[n_{\sigma}] = \frac{\delta(n\varepsilon)}{\delta n_{\sigma}}. \quad (3.49)$$

KS 方程表示为

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) + \mu_{\sigma}^{\text{hom}}[n_{\sigma}(x)] - \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 n_{\sigma}^2(x) \right\} \varphi_{\alpha, \sigma}(x) = \varepsilon(\alpha, \sigma) \varphi_{\alpha, \sigma}(x). \quad (3.50)$$

采用 TFA，忽略偏微分动能项，可以得到

$$V_{\text{ext}}(x) + \mu_{\sigma}^{\text{hom}}[n_{\sigma}(x)] = \mu_{\sigma}^0. \quad (3.51)$$

其中 μ_{σ}^0 由归一化条件(3.43)确定。

第三节 简谐外势下的吸引费米气体

对于简谐势 $V_{\text{ext}}(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ 的情况，引入参数 $a = \sqrt{\hbar / m\omega}$ ， $U = g / a\hbar\omega$ ， $\eta = 4N / U^2 = N(a_{1D} / a)^2$ ，其中 a_{1D} 为一维 s 波散射长度。

图 3-5 给出了中等相互作用 $\eta = 1$ 时不同总极化率 P 下的密度分布，比较了 KS 方程与 TFA 的计算结果。可见两者所得密度曲线的整体外形 (overall shape) 很接近。局部上 KS 方程计算结果出现了振荡，且气体边界比较光滑。在 $P=0.56$ 时出现了密度分布的双壳 (two-shell) 或双模 (bi-modal) 结构，势阱中心区域是部分极化的两种自旋分量的混合，外围只有完全极化的自旋向上的费米气体。 $P=0.11$ 时部分极化超流相仍在中心区域，而外围出现的是完全配对的超流相。在很小极化率 $P=0.06$ 时，外围两翼的完全配对 BCS 区域变大。

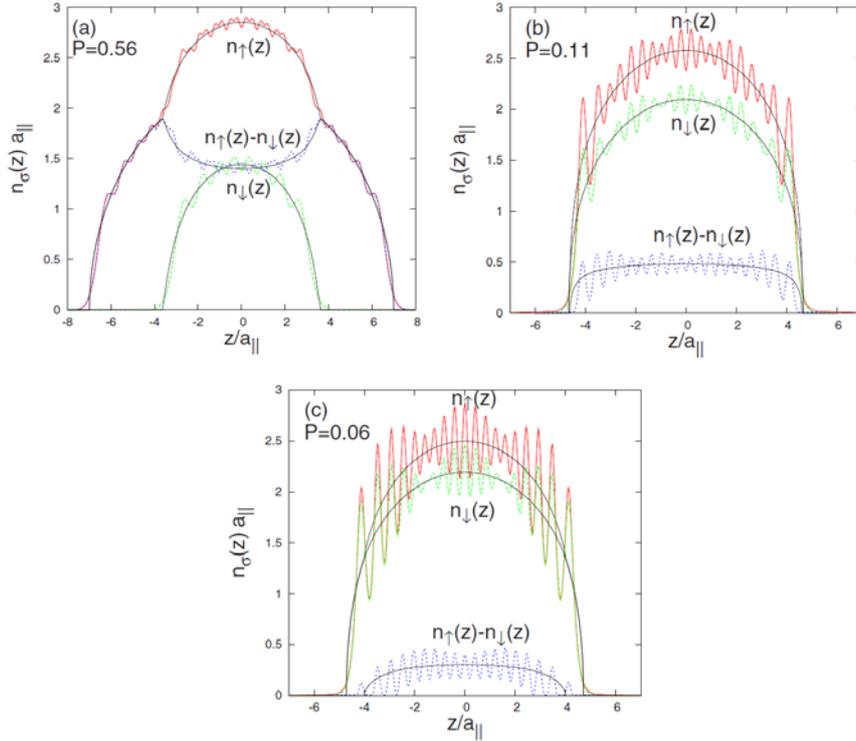


图 3-5 不同极化率 P 下 $N=36$, $\eta=1$ 时自旋 1/2 费米系统各分量与总密度分布。振荡线为 DFT 结果, 实线为 TFA 结果。其中长度单位 $a_{\parallel} = a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 。 [15]

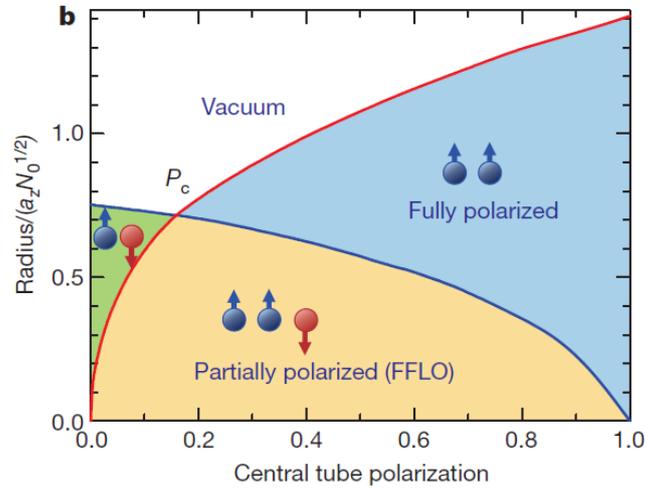


图 3-6 强吸引作用下一维自旋 1/2 费米气体的 R-P 相图 [12][13][14]。

在 $V_{ext}(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ 且 $g \rightarrow -\infty$ 时, TFA 形式(3.51)给出

$$\begin{aligned} R_1 &= \sqrt{2NP}a, \\ R_2 &= \sqrt{\frac{N(1-P)}{2}}a. \end{aligned} \quad (3.52)$$

其中 R_1 表示 $n_\uparrow - n_\downarrow$ 的半径， R_2 表示 n_\downarrow 的半径。两者交叉点即为发生相分离的临界极化率。如图 3-6，理论上根据(3.52)，由 $R_1 = R_2$ 得到 $P_c = 0.2$ [12][13]。Orso[12]和 Hu 等人[13]按照 TFA(3.52)给出 P_c 随相互作用的变化，如图 3-7， P_c 从弱相互作用下的 0 变到强相互作用的 0.2。

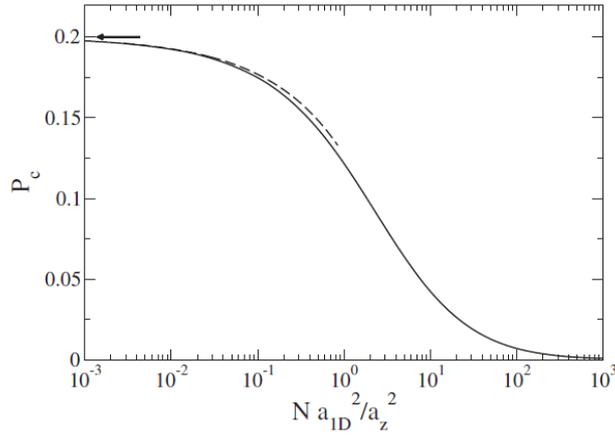


图 3-7 临界自旋极化率随相互作用强度的变化。 [13]

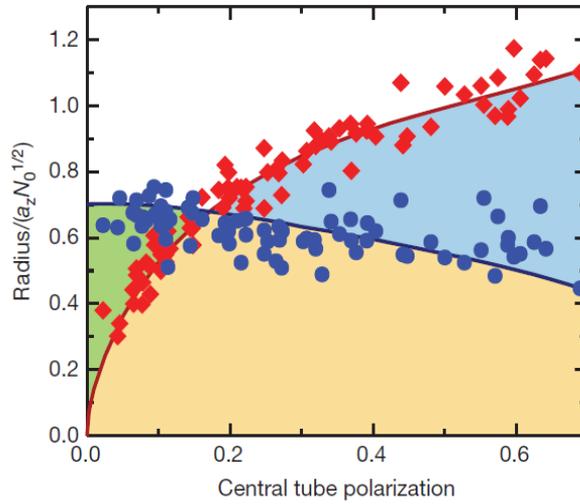


图 3-8 强吸引作用下一维自旋 1/2 费米气体的 R-P 相图。图中实线为理论解，符号标记为实验值。 [14]

2010 年 Liao 等人用实验检验了上述结果。如图 3-8，有限温度下一维强相互吸引费米气体的临界极化率的实验值略小，约为 $P_c = 0.17$ [14]。实验中，他们先在光阱中制备超冷 ^6Li 气体使其处于两个最低超精细态 $|1\rangle, |2\rangle$ （处于 $|1\rangle$ 态的粒子数较多）。

然后将它装载于二维光晶格中，并外加简谐束缚势。晶格势 $V = V_0 \cos^2(kx) + V_0 \cos^2(ky)$ ，其中 V_0 为势阱深度， $k = 2\pi/\lambda$ 为波矢， λ 为激光波长。实验中取 $\lambda = 1,064\text{nm}$ ， $V_0 = 12\varepsilon_r$ ，其中 $\varepsilon_r = \hbar^2 k^2 / 2m$ 为反冲能。简谐势的横向频率 $\omega_{\perp} = (2\pi)2 \times 10^5 \text{Hz}$ ，轴向频率 $\omega_z = (2\pi)200 \text{Hz}$ 。所制备一维费米气体温度 $T \approx 175 \text{nK}$ ，中心区域的势管中处于 $|1\rangle$ 态的粒子数 $N_1 \approx 120$ 。调节外磁场到 890G ，使得一维相互作用处于强吸引区域。

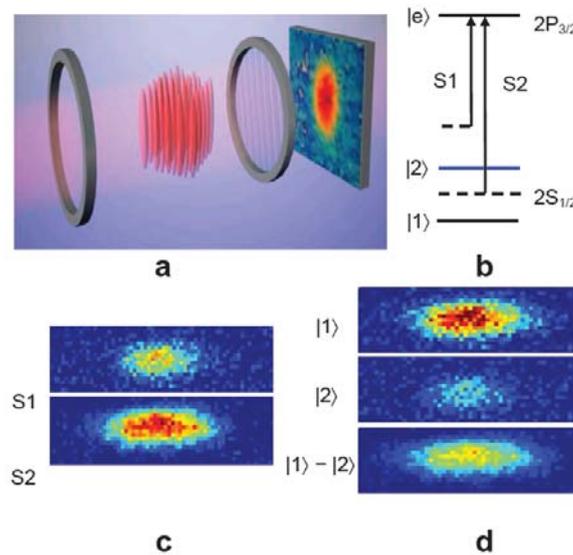


图 3-9 成像过程。a，相位对比偏振成像装置。线性偏振探测光首先通过 $1/4$ 波片（左）转化为圆偏振光，然后经费米原子相干散射为椭圆偏振光，最后被偏振器（右）分解并由 CCD 摄像机成像。b，相关的能级和探测光频率。第一束探测光与态 $|1\rangle$ 红失谐 15Γ ，第二束光 S2 被调到态 $|1\rangle$ 与态 $|2\rangle$ 的中间。c，在极化率 $P = 0.63$ 时由探测光 S1 和 S2 得到的柱密度成像。d，由 S1 和 S2 的探测成像去卷积得到态 $|1\rangle$ 与态 $|2\rangle$ 的柱密度谱及其差值。

最后用两次原位相位对比偏振成像 (*in situ* phase-contrast polarization imaging) 探测两分量密度及其差值，即用两束探测激光相继成像来测量两自旋态的原位密度。如图 3-9，态 $|1\rangle$ 与态 $|2\rangle$ 的跃迁频率相距 78.5MHz ，第一束光 S1 红失谐于态 $|2\rangle$ 为 15Γ ，其中 $\Gamma = 5.9\text{MHz}$ 为探测光的跃迁频率线宽。第二束光 S2 被调谐到态 $|1\rangle$ 与态 $|2\rangle$ 的跃

迁频率的中间。对两次探测成像去卷积得到 $|1\rangle$ 与 $|2\rangle$ 的柱密度图像，即沿径向积分得到轴向密度。从原子云的轴密度图像得到轴半径，即密度消失的位置。实验中选取中间势管的轴半径，因为这里的轴半径较大。通过反 Abel 变换得到中心势管中处于 $|1\rangle$ 、 $|2\rangle$ 态的粒子数与极化率。图 3-9 给出的便是反映极化率与轴半径关系的相图。

配对的费米子与极化费米子共存的相被称为 FFLO 相。这是 Fulde 和 Ferrell 以及 Larkin 和 Ovchinnikov 在四十多年前所预言的一种状态[5][6]。但三维情况很难实现。一维冷原子技术的发展验证了这种相的存在，是冷原子领域比较重要的一个发现。

第四节 与自旋相关的简谐外势下的排斥费米气体

与吸引费米气体不同，排斥费米气体在简谐外势下并不出现相分离现象。如图 3-10 与图 3-11 是 Gao 等人求解 K-S 方程(3.41)的结果[27]。这里参数 $\lambda = g / a_{\parallel} \hbar \omega_{\parallel}$ 。图 3-10 给出了简谐势中 $N_{\uparrow} = 2$ 与 $N_{\downarrow} = 1$ 个费米子在不同排斥相互作用强度 λ 下的各分量密度分布与总密度分布。 n_{\uparrow} (绿点)、 n_{\downarrow} (蓝三角) 各以双峰和单峰曲线表征。总密度 n (红圈) 从弱相互作用下的单峰逐渐过渡到强相互作用下的三峰。表明强相互作用下的部分极化费米气体的密度接近于无相互作用的单分量费米气体或 TG 气体的密度。在不同相互作用强度下，两分量密度的边界都相同，表示没有发生两分量之间的相分离。图中还给出精确对角化数值算法的结果 (黑实线) 加以比较。可见对于这种少粒子系统，在强相互作用下，DFT 给出的总密度比较精确，但分量密度的峰值幅度差别比较大。

对于大粒子系统中，精确对角化等数值算法不能处理，而 DFT 依然有效且更准确。图 3-11 给出总粒子数 $N = 40$ 的费米气体在极化率 $P = 0.1$ (a 图) 和 $P = 0.7$ (b 图) 时总密度 n 随相互作用强度 λ 的变化。在强相互作用时，总密度曲线出现 $N = 40$ 个峰，接近于无相互作用的单分量费米气体的密度。在不同总极化率和任意排斥相互作用强度下，粒子都集中于势阱中心部分，无双模分布出现。表示没有相分离现象。

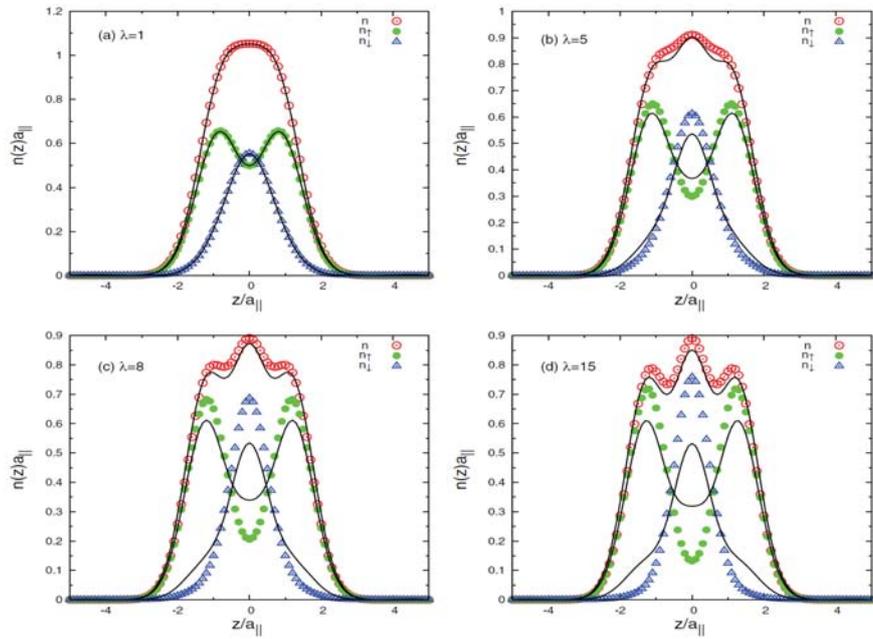


图 3-10 简谐势中 $N_{\uparrow} = 2$ 与 $N_{\downarrow} = 1$ 个费米子在不同排斥相互作用强度 λ 下的各分量密度分布与总密度分布。有标记的是 DFT 结果，黑实线是精确对角化数值算法的结果。 [27]

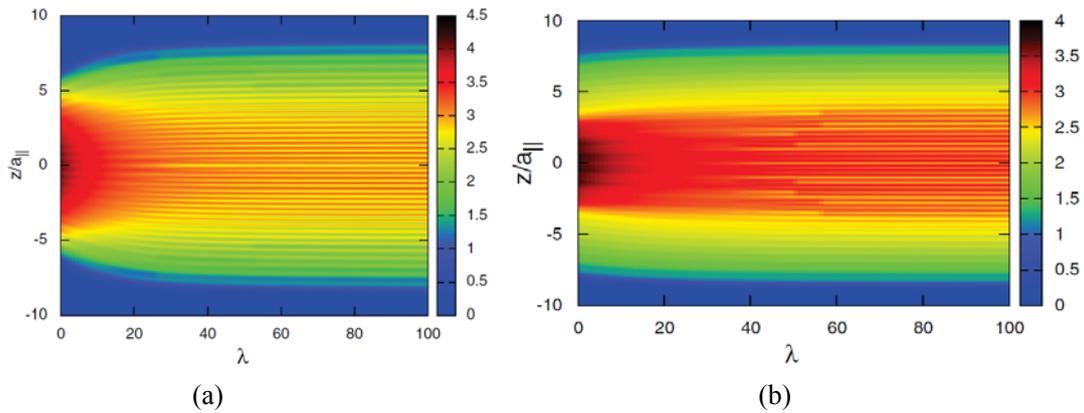


图 3-11 总粒子数 $N = 40$ 的两分量费米气体的总密度 n 随相互作用强度 λ 的变化。(a) $P = 0.1$, (b) $P = 0.7$ 。 [27]

如果外势与自旋相关，则会出现相分离[28]。考虑对各自旋分量不同的简谐势 $V_{\text{ext}}^{(\sigma)}(x) = m\omega_{\sigma}^2 x^2 / 2$ 。令频率比例参数 $\gamma = \omega_{\uparrow}^2 / \omega_{\downarrow}^2$ ，特征长度 $a_{\uparrow} = (\hbar / m\omega_{\uparrow})^{1/2}$ ，相互作用参数 $\lambda = g / a_{\uparrow} \hbar \omega_{\uparrow}$ 。图 3-12 给出 $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 20$ 费米气体在频率比例 $\gamma = 1/9$ 及不同相互作用强度 λ 下的总密度 (a)、各分量密度 (b) (c) 和局域磁性 (d)。由于外势对不同分量的束缚作用不同。所以尽管两分量的粒子总数相同，它们的密度分

布不同。在无相互作用时， $\lambda = 0$ ，自旋向上费米子受束缚小，占据范围较宽，中心密度较小。相应受束缚较大的自旋向下费米子占据较小范围，中心密度较大。这时两分量密度都是中心高，两侧低。总密度呈双模分布，势阱中心是自旋向上、向下粒子混合的区域（phase-mixed region, PM），势阱两侧只有自旋向下费米子。随着相互作用的增大，自旋向上费米子越来越集中在势阱中心。而自旋向下费米子却被排斥于势阱中心之外，中心密度值越来越小。当自旋向下费米子中心密度值为零时，中心便成了相分离区（phase-separated region, PS）。由于密度的振荡性，取下列条件作为出现相分离的判据：

$$\int_{-\Delta x}^{\Delta x} dx n_{\downarrow}(x) \leq 10^{-3}, \quad (3.53)$$

其中 $\Delta x = 0.1$ 。在图 3-12 中出现相分离的临界相互作用强度为 $\lambda = 8.71$ 。

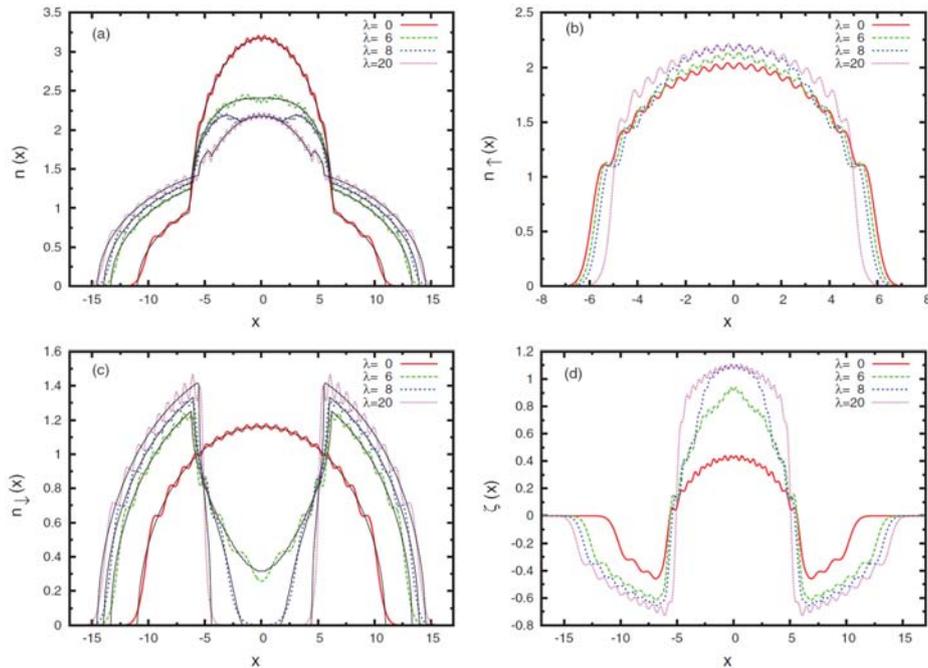


图 3-12 两分量费米气体在自旋相关外势阱中不同相互作用强度 λ 下的总密度 (a) 各分量密度 (b)(c) 和局域磁性 (d)。这里 $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 20$ ， $\gamma = \omega_{\uparrow}^2 / \omega_{\downarrow}^2 = 1/9$ 。[28]

图3-13给出不同极化率 $P = 0 \sim 0.9$ 下临界相互作用强度 λ 随频率比 γ 的变化曲线。所示曲线上方是势阱中心的PS态，下方是PM态。对于某一固定极化率 P ，频率比 γ 越小，势阱对两分量束缚的差别越大，出现相分离所需的相互作用 λ 越弱。对于某一固定频率比 γ ，极化率 P 越大，势阱中心的向下自旋费米子越容易被完全排斥出

去，对应的相互作用 λ 越小。

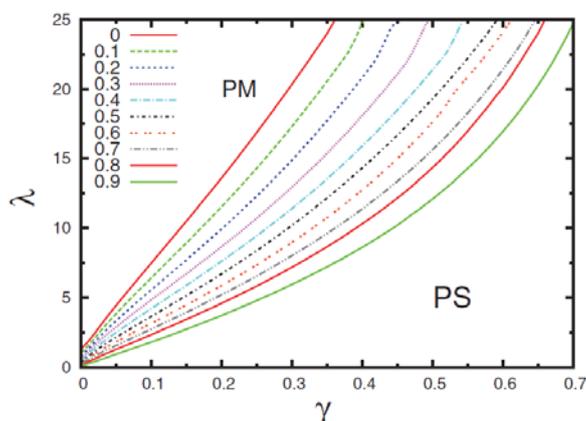


图 3-13 不同总极化率 $P=0\sim 0.9$ 下两分量排斥费米气体的 (λ, γ) 相图[28]。

综上所述，两分量费米气体在简谐外势中，相互吸引作用下会出现相分离，相互排斥作用下不会相分离。但在自旋相关简谐外势中，相互排斥作用下也会相分离。与第二章的单分量气体相比，外势下多分量气体表现出了更复杂更有趣的物理现象。

参考文献

- [1] J. B. McGuire, J. Math. Phys. (1965) **6**, 432; *ibid.* (1966), **7**, 123.
- [2] M. Flicker and E. H. Lieb, Phys. Rev. (1967) **161**, 179.
- [3] M. Gaudin, Phys. Lett. A (1967) **24**, 55.
- [4] C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. (1967) **19**, 1312.
- [5] P. Fulde and A. Ferrell, Phys. Rev. (1964) **135**, A550.
- [6] A. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP (1965) **20**, 762.
- [7] D. E. Sheehy and L. Radzihovsky, Ann. Phys. (2007) **322**, 1790.
- [8] A. Bulgac and M. Forbes, Phys. Rev. Lett. (2008) **101**, 215301.
- [9] M. W. Zwierlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle, Science (2006) **311**, 492.
- [10] G. B. Partridge, W. Li, R. I. Kamar, Y.-A. Liao, and R. G. Hulet, Science (2006) **311**, 503.
- [11] Y.-I. Shin, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, Nature (2008) **451**, 689.
- [12] G. Orso, Phys. Rev. Lett. (2007) **98**, 070402.

- [13] H. Hu, X.-J. Liu, and P. D. Drummond, Phys. Rev. Lett. (2007) **98**, 070403.
- [14] Y. Liao, A. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. Patridge, R. Hulet, S. Baure, and E. Mueller, Nature (London) (2010) **467**, 567.
- [15] G. Xianlong, M. Polini, R. Asgari, and M. P. Tosi, Phys. Rev. A (2006) **73**, 033609; G. Xianlong and R. Asgari, *ibid.* (2008) **77**, 033604.
- [16] X.-W. Guan, T.-L. Ho, Phys. Rev. A (2011) **84**, 023616.
- [17] X. Yin, X.-W. Guan, S. Chen, and M. T. Batchelor, , Physical Review A (2011) **84**, 011602 (R).
- [18] L. Guan and S. Chen, Phys. Rev. Lett. (2010) **105**, 175301.
- [19] S. Chen, X.-W. Guan, X. Yin, L. Guan, and M. T. Batchelor, Phys. Rev. A (2010) **81**, 031608(R).
- [20] X. Yin, X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and S. Chen, Phys. Rev. A (2011) **83**, 013602.
- [21] M. Tezuka and M. Ueda, New J. Phys. (2010) **12**, 055029.
- [22] G. G. Batrouni, M. H. Huntley, V. G. Rousseau, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. (2008) **100**, 116405.
- [23] A.-H. Chen and X. Gao, Phys. Rev. B (2012) **85**, 134203.
- [24] L. Wang, Z. Xu, and S. Chen, Eur. Phys. J. D (2012) **66**, 265.
- [25] X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and C. Lee, arXiv:1301.6446.
- [26] S. H. Abedinpour, M. Polini, G. Xianlong, and M. P. Tosi, Phys. Rev. A (2007) **75**, 015602.
- [27] G. Xianlong, Phys. Rev. A (2012) **86**, 023616.
- [28] G. Xianlong, Phys. Rev. A (2013) **87**, 023628.

第四章 玻色费米混合气体

玻色费米混合物最初在实验中是作为同化冷却 (sympathetic cooling) 技术被应用的, 即通过玻色子中介冷却费米子到量子简并态[1-5]。其间物理学家发现了玻色费米混合物的独特物理性质, 如相分离[6]、配对[7]、超流和莫特 (Mott) 绝缘体相变[8]、BEC 和 BCS 转化[9]等。许多理论已经研究了一维玻色费米混合物, 包括均匀系统以及外势束缚下的系统。对于均匀系统, Das 根据平均场理论画出了基态相图, 指出玻色气体和费米气体两种分量的相分离, 有时称作反混合 (demixing) [10]。Luttinger 液体理论给出, 无论玻色子处于凝聚态或者是硬核状态, 混合物中的两分量在相互作用足够强的时候都会彼此排斥而反混合[11]。而利用精确的 Bethe ansatz (BA) 来求解具有相同质量和相等耦合常数的一维混合物却得出, 在任意的排斥相互作用下都没有反混合[12][13]。这表明平均场理论和拉亭格液体理论只在非常弱的相互作用条件下才是有效的。当系统置于光晶格中时, 其相图和关联函数已经用玻色化 (bosonization) 方法[14]和量子蒙特卡洛 (Quantum Monte Carlo) 方法研究过[15]。对于外势阱束缚的系统, 基于 BA 解的局域密度近似结果表明, 简谐束缚的一维混合物在强相互作用下会部分地相分离[13]。有限温度的 Yang-Yang 热力学 BA (TBA) 分析和量子临界分析也支持相分离的描述[16]。在无限强相互作用即 TG (Tonks-Girardeau) 作用区, 玻色-费米映射方法[17]则表明两种分量的密度分布没有相分离, 即完全混合。实际上这时基态是高度简并的而这里只选择了一个对称性程度最高的情况[18-20]。文献[21]详细计算了基态的各种简并形式, 但依然给出了 TG 极限下玻色费米混合物不会出现相分离现象的结果。

我们在本章用密度泛函理论 (DFT) 来研究一维简谐束缚势下玻色费米混合物的基态性质。首先利用局域密度近似为一维束缚玻色费米混合物导出普遍的 Kohn-Sham 方程, 并给出交换关联能的表达式。接着利用具有相同玻色子和费米子质量及相等玻色-玻色作用和玻色-费米作用的均匀玻色费米混合物的 BA 方法精确解, 为基态能量找到一个拟合公式以简化后面的数值迭代计算。然后求解 Kohn-Sham 方程, 给出并讨论混合物的基态密度分布和基态能。

第一节 Kohn - Sham 方程

考虑一维束缚的由 N_B 个玻色子和 N_F 个费米子构成的玻色费米混合物，原子总数为 $N = N_B + N_F$ ，系统的哈密顿量为

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^{N_B} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_B(x_i) \right] + \sum_{j=1}^{N_F} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_F} \frac{d^2}{dx_j^2} + V_F(x_j) \right] \\
 & + \frac{g_{BB}}{2} \sum_{i,j=1}^{N_B} \delta(x_i - x_j) + g_{BF} \sum_{i=1}^{N_B} \sum_{j=1}^{N_F} \delta(x_i - x_j).
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

这里 m_B 和 m_F 是玻色子和费米子质量， $V_B(x)$ 和 $V_F(x)$ 是外势， g_{BB} 和 g_{BF} 是有效的实验上可调的一维玻色-玻色和玻色-费米相互作用参数[22][23]。此处没有考虑费米-费米相互作用是因为泡利（Pauli）不相容原理限制了 s 波散射而 p 波散射被忽略了。根据密度泛函理论的 Hohenberg - Kohn 定理 I，一个外势中束缚的相互作用粒子系统的基态密度唯一地决定这个外势[24]。也就是说通过求解定态或含时 Schrödinger 方程，密度完全决定了所有从哈密顿量 H 推导出的物理性质。虽然这套理论最初是用于费米子的，它也可以直接推广到玻色子以及此处的玻色费米混合物。

分别记玻色子和费米子的密度为 $n_B(x)$ 和 $n_F(x)$ 。总密度为 $n(x) = n_B(x) + n_F(x)$ 。玻色子和费米子粒子数分别守恒，即 $\int dx n_B(x) = N_B$ ， $\int dx n_F(x) = N_F$ ， $\int dx n(x) = N$ 。基态能是密度的泛函，它可以分成以下几个部分：

$$\begin{aligned}
 E_0[n_B(x), n_F(x)] = & T_B^{ref}[n_B(x), n_F(x)] + T_F^{ref}[n_B(x), n_F(x)] \\
 & + \int dx n_B(x) V_B(x) + \int dx n_F(x) V_F(x) \\
 & + \frac{g_{BB}}{2} \int dx n_B^2(x) + g_{BF} \int dx n_B(x) n_F(x) \\
 & + E_{xc}[n_B(x), n_F(x)].
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

上式中前两项是无相互作用参考系统的动能，接下来的两项是外势能，第三行中的两项是 Hartree-Fock 能，即相互作用能的平均场近似（mean-field approximation, MFA）；最后一项是交换关联能，它包括平均场能之外的所有相互作用所贡献的能量。

设想玻色子处于凝聚态且费米子处于正常态，为此引入正交归一化的单个玻色轨道函数 $\phi(x)$ 和 N_F 个费米轨道函数 $\psi_j(x)$ ，其中 $j = 1 \cdots N_F$ 。则密度用这两个轨道

函数表示为

$$n_B(x) = N_B \phi^*(x) \phi(x) \text{ 和 } n_F(x) = \sum_{j=1}^{N_F} \psi_j^*(x) \psi_j(x). \quad (4.3)$$

动能表示为

$$T_B^{ref} = -N_B \int dx \phi^*(x) \frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x), \quad (4.4)$$

$$T_F^{ref} = -\sum_{j=1}^{N_F} \int dx \psi_j^*(x) \frac{\hbar^2}{2m_F} \frac{d^2}{dx^2} \psi_j(x). \quad (4.5)$$

对于交换关联能这一项，如果束缚外势比较弱（缓和），可以采用局域密度近似。也就是说可以假定外势中的系统在空间每一点 x 是局域均匀的。因此 $E_{xc}[n_B, n_F]$ 近似为均匀相互作用混合物的单粒子交换关联能 $\mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}}(n_B, n_F)$ 的积分，即

$$E_{xc} \approx \int dx n(x) \mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}}(n_B, n_F). \quad (4.6)$$

对于均匀相互作用混合物，

$$\mathcal{E}_{xc}^{\text{hom}} = \mathcal{E}^{\text{hom}} - \mathcal{E}_M^{\text{hom}} - \kappa_s^{\text{hom}}. \quad (4.7)$$

其中 \mathcal{E}^{hom} 是单粒子基态能， $\mathcal{E}_M^{\text{hom}} = g_{BB} n_B^2 / 2n + g_{BF} n_B n_F / n$ 是单粒子平均场相互作用能， $\kappa_s^{\text{hom}} = \hbar^2 \pi^2 n_F^3 / 6m_F n$ 是动能压力项，即无相互作用均匀混合物中费米子和玻色子的平均动能。显然这里玻色子的动能贡献为零。动能全部来自于费米子所占据的不相容量子态。

Hohenberg-Kohn 定理 II 指出，基态密度分布是由对 E_0 作关于 $n_B(x)$ 和 $n_F(x)$ 的变分得到的，等价于对方程(2.62)作关于玻色和费米泛函轨道 ϕ^* 和 ψ_j^* 的变分[24]。将方程(2.66)代入(2.65)，然后将方程(2.63)-(2.65)代入方程(2.62)，我们得到泛函变分：

$$\delta \left(E_0 - \epsilon N_B \left(\int \phi^* dx \phi - 1 \right) \right) / \delta \phi^* = 0, \quad (4.8)$$

$$\delta \left(E_0 - \sum_{j=1}^{N_F} \eta_j \left(\int \psi_j^* dx \psi_j - 1 \right) \right) / \delta \psi_j^* = 0. \quad (4.9)$$

其中 ϵ 和 η_j ($j=1, 2, \dots, N_F$) 是 Lagrange 乘子，用来保证 ϕ^* 和 ψ_j^* 的归一化。这样我们就得到 Kohn-Sham 方程 (KSE)：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dx^2} + V_B(x) + \mu_B^{\text{hom}}([n_B, n_F]; x) \right) \phi(x) = \epsilon \phi(x), \quad (4.10)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_F} \frac{d^2}{dx^2} + V_F(x) - \frac{\hbar^2}{2m_F} \pi^2 n_F^2(x) + \mu_F^{\text{hom}}([n_B, n_F]; x) \right) \psi_j(x) = \eta_j \psi_j(x). \quad (4.11)$$

此处 $\mu_B^{\text{hom}} = \partial(n\epsilon^{\text{hom}})/\partial n_B$ 和 $\mu_F^{\text{hom}} = \partial(n\epsilon^{\text{hom}})/\partial n_F$ 是均匀相互作用混合物的玻色和费米化学势； ϵ 和 η_j 是 KSE 的最低本征值。在方程(2.63)中， $n_F(x)$ 是对 N_F 个最小的 η_j 所对应的 ψ_j 进行的求和。

在方程(4.11)的两边左乘 ψ_j^* ，对 j 求和并对 x 求积分，我们能得到公式(4.5)中定义的动能 T_F^{ref} 的表达式。类似地从 $\phi(x)$ 的归一性我们能得到公式(2.64)中定义的 T_B^{ref} 的表达式。将这两个动能表达式代入基态能公式(2.62)中，基态能可以用 ϵ 和 η_j 表示为：

$$\begin{aligned} E_0 = & N_B \epsilon + \sum_{j=1}^{N_F} \eta_j + \frac{\hbar^2 \pi^2}{3m_F} \int n_F^3(x) dx + \int n(x) \epsilon^{\text{hom}}(x) dx \\ & - \int n_B(x) \mu_B^{\text{hom}}(x) dx - \int n_F(x) \mu_F^{\text{hom}}(x) dx. \end{aligned} \quad (4.12)$$

如果 $\epsilon^{\text{hom}}[n_B, n_F]$ 已知，我们便能结合(2.63)式数值求解 KSE 而得到密度分布 $n_B(x)$ 和 $n_F(x)$ 。然后据(2.70)能求得基态能 E_0 。下面我们介绍由 BA 方法得到的 $\epsilon^{\text{hom}}[n_B, n_F]$ 的结果。

第二节 均匀系统的基态能

4.2.1 Bethe ansatz 方程

没有外势阱时系统是均匀的，在下列限制条件下可以用 BA 方法精确求解：

$$g_{BB} = g_{BF} = g > 0, \quad m_B = m_F = m. \quad (4.13)$$

上式描述的是玻色子-玻色子和玻色子-费米子之间都以同样的强度彼此排斥且玻色子和费米子的质量相等。文献[13]曾详细考虑过如何在冷原子实验中实现这种情形。第一个条件可以通过结合 Feshbach 共振(用以控制相互作用)及调节势阱激光频率(用以调整粒子的径向束缚比)来满足。第二个条件通过选用同种原子的不同同位素来

满足。同位素混合物在实验中被广泛应用因为它能避免外势中由于不同质量而造成的重量拖曳 (gravitational sag)。实验中已经实现了 $^6\text{Li} - ^7\text{Li}$ [2]、 $^{173}\text{Yb} - ^{174}\text{Yb}$ [4]、 $^{40}\text{K} - ^{41}\text{K}$ [5]的三维同位素混合物，实现一维系统应该没什么技术障碍。在(4.13)条件下，一维均匀玻色费米混合物的哈密顿量为：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{d^2}{dx_i^2} + g \sum_{i<j} \delta(x_i - x_j). \quad (4.14)$$

这个一维玻色子和自旋-1/2费米子混合的模型于1971年被Lai和Yang用BA解过[12]，此后便被称为Lai – Yang模型。近几年Imambekov和Demler详细研究了它的基态性质[13]。另外一些相关研究涉及热力学性质和临界行为等[16][25-27]。我们在此主要回顾一下文献[12][13][27]中的主要结论。在周期边界条件和热力学极限条件（即系统的长度和原子数无限大但原子密度保持有限）下，BA积分方程为

$$\begin{aligned} \rho(k) &= \frac{1}{2\pi} \left[1 + \int_{-B}^B \frac{c\sigma(\Lambda)d\Lambda}{c^2/4 + (\Lambda - k)^2} \right], \\ \sigma(\Lambda) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-Q}^Q \frac{c\rho(k)dk}{c^2/4 + (\Lambda - k)^2}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

其中 $c = mg / \hbar^2$ ， k 是准动量， Λ 是谱参数 (spectral parameter)， $\rho(k)$ 和 $\sigma(\Lambda)$ 表示相关的密度分布。积分边界 B 和 Q 由下列归一化条件决定的：

$$\begin{aligned} n_B &= \int_{-B}^B \sigma(\Lambda) d\Lambda, \\ n &= \int_{-Q}^Q \rho(k) dk. \end{aligned} \quad (4.16)$$

单原子基态能记为：

$$\varepsilon^{\text{hom}}(n_B, n_F, g) = \frac{1}{n} \int_{-Q}^Q \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rho(k) dk. \quad (4.17)$$

为了计算方便，定义玻色子比率 $\alpha = n_B / n$ 和无量纲参数 $\gamma = mg / (\hbar^2 n)$ ，引入变量 $x = k / Q$ 和 $y = \Lambda / B$ 使得 $\rho(k) = \rho(xQ) = g_c(x)$ ， $\sigma(\Lambda) = \sigma(yB) = g_s(y)$ 。则方程(4.15)-(4.17)变换为下列(4.18)-(4.20)式：

$$g_c(x) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + \frac{1}{\lambda_s} \int_{-1}^1 \frac{g_s(y) dy}{1/4 + (y/\lambda_s - x/\lambda_c)^2} \right], \quad (4.18)$$

$$g_s(y) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\lambda_c} \int_{-1}^1 \frac{g_c(x) dx}{1/4 + (y/\lambda_s - x/\lambda_c)^2},$$

$$\lambda_c = \gamma \int_{-1}^1 g_c(x) dx, \quad \lambda_s = \frac{\gamma}{\alpha} \int_{-1}^1 g_s(y) dy, \quad (4.19)$$

$$\varepsilon^{\text{hom}}(n, \gamma, \alpha) = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} e(\gamma, \alpha). \quad (4.20)$$

其中

$$e(\gamma, \alpha) = \frac{\gamma^3}{\lambda_c^3} \int_{-1}^1 x^2 g_c(x) dx. \quad (4.21)$$

现在讨论极限情况。当 $\alpha = 0$ 或 1 时，系统分别是纯费米子或纯玻色子。则 $e(\gamma, 0) = \pi^2/3$ 为一常数，而 $e(\gamma, 1)$ 与 Lieb-Liniger 模型中的 $e(\gamma)$ 函数一致[28]。

当相互作用较弱时， $\gamma \ll 1$ ，文献[10][13]中已得到方程(4.20)的平均场结果。当相互作用较强时， $\gamma \gg 1$ ，方程(4.18)中可以忽略掉被积函数对 x 的依赖，使得函数 $g_c(x)$ 近似为常数 g_c 。由此可得到 $e(\gamma, \alpha)$ 函数关于 γ 的非对称行为：

$$\begin{aligned} e(\gamma \rightarrow 0, \alpha) &= \frac{\pi^2}{3} (1 - \alpha)^3 + (2\alpha - \alpha^2) \gamma, \\ e(\gamma \rightarrow +\infty, \alpha) &= \frac{\pi^2}{3} \left(1 - \frac{4F(\alpha)}{\gamma} + \frac{12F^2(\alpha)}{\gamma^2} \right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

其中 $F(\alpha) = \alpha + \sin(\alpha\pi)/\pi$ 。在极限 $\gamma = 0$ 的情况时， $e(0, \alpha) = \pi^2 (1 - \alpha)^3 / 3$ ，因此 $\varepsilon^{\text{hom}}(n, 0, \alpha) = \hbar^2 \pi^2 n_F^3 / 6mn = \kappa_s^{\text{hom}}$ 。这时能量全部来自自由费米子的动能。在 TG 极限时， $e(+\infty, \alpha) = \pi^2/3$ ，意味着有无限强排斥作用的一维玻色费米混合物的能量等于将所有原子当作自由费米子的能量。

4.2.2 拟合公式

结合 $e(\gamma, \alpha)$ 的极限情况表达式及其数值解，我们将它拟合为下列参数公式：

$$\tilde{e}(\gamma, \alpha) = \frac{\pi^2}{3}(1-\alpha)^3 + f_1(\gamma) \left\{ 1 + f_2(\gamma)(1-\alpha)^2 - [1 + f_2(\gamma)](1-\alpha)^3 \right\}. \quad (4.23)$$

其中 $f_1(\gamma)$ 是 Lieb-Liniger 模型中的 $e(\gamma)$ 的近似, 即我们在第二章给出的 $\tilde{e}(\gamma)$ 。函数 $f_2(\gamma)$ 是由许多 γ 处的数值解决定的, 形式为:

$$f_2(\gamma) = c_0 \exp(c_1 \gamma) - (c_0 + 1) \exp(c_2 \gamma). \quad (4.24)$$

其中 $c_0 = 0.21$ 、 $c_1 = -0.02$ 、 $c_2 = -1.45$ 。 $\tilde{e}(\gamma, \alpha)$ 在极限 $\alpha = 0, \gamma = 0, +\infty$ 时给出了精确行为, 在极限 $\alpha = 1$ 时近似到 Lieb-Liniger 模型中的 $e(\gamma)$ 。在 α 和 γ 的中间值处, $\tilde{e}(\gamma, \alpha)$ 在 $\gamma \approx 2.5, \alpha \approx 0.9$ 处偏离数值结果的最大相对误差为 0.03。我们在图 4-1 中展示了各种相互作用强度 γ 与各种玻色子比率 α 处 $e(\gamma, \alpha)$ 的精确数值解结果, 并与拟合公式 $\tilde{e}(\gamma, \alpha)$ 比较。显然在整个相互作用区以及任意玻色子比率的情况, 拟合公式都描绘地很好。

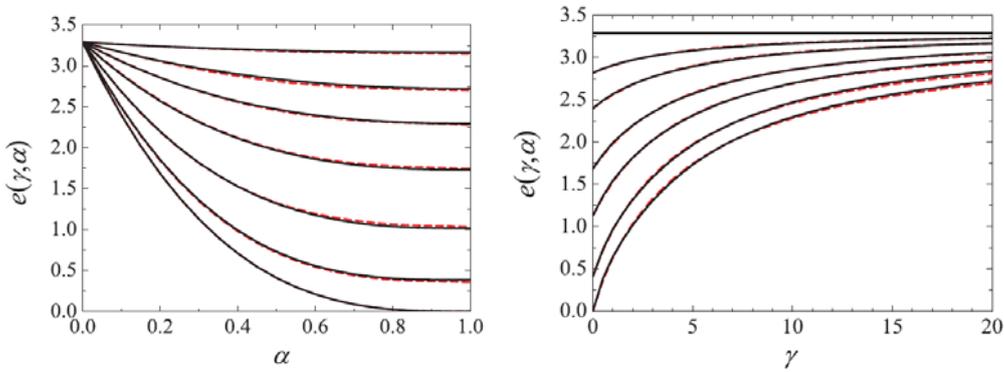


图 4-1 均匀玻色费米混合物基态能函数 $e(\gamma, \alpha)$ 图。方程(4.18)(4.19)的数值精确解结果(红虚线)与方程(2.71)的拟合结果(黑实线)相比较。(a) 从底部到顶部的线对应 $\gamma = 0, 0.5, 2.5, 10, 20, 100$; (b) 从顶部到底部的线对应 $\alpha = 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 1$ 。

由均匀系统单粒子基态能量的表达式(4.20)可得到基态的玻色和费米化学势

$$\begin{aligned} \mu_B^{\text{hom}}(n, \alpha, \gamma) &= \frac{\hbar^2 n^2}{2m} f_B(\gamma, \alpha), \\ \mu_F^{\text{hom}}(n, \alpha, \gamma) &= \frac{\hbar^2 n^2}{2m} f_F(\gamma, \alpha). \end{aligned} \quad (4.25)$$

其中

$$\begin{aligned} f_B(\gamma, \alpha) &= 3e - \gamma \frac{\partial e}{\partial \gamma} + (1 - \alpha) \frac{\partial e}{\partial \alpha}, \\ f_F(\gamma, \alpha) &= 3e - \gamma \frac{\partial e}{\partial \gamma} - \alpha \frac{\partial e}{\partial \alpha}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

根据 $e(\gamma, \alpha)$ 极限情况的解，可以得到(4.26)在极限情况的值： $f_B(0, \alpha) = 0$ ，

$$f_F(0, \alpha) = \pi^2(1 - \alpha)^2, \quad f_B(+\infty, \alpha) = f_F(+\infty, \alpha) = \pi^2.$$

第三节 数值结果

将方程(2.72)代入 KSE(2.68)和(4.11)并假定玻色子和费米子受限于相同的频率为 ω 的简谐外势 $V_B(x) = V_F(x) = m\omega^2 x^2 / 2$ 中，用数值迭代方法解约束条件(2.63)下的 KSE 便能得到每一分量的基态密度谱。随即由方程(2.70)便能得到基态能。引入长度单位 $a = \sqrt{\hbar / m\omega}$ 和一个无量纲的相互作用参数 $U = g / a\hbar\omega$ 使得 Lieb-Linger 参数能表示为 $\gamma(x) = U / a n(x)$ 。在详细介绍密度泛函的结果之前，先讨论一些极限情况。

4.3.1 极限相互作用情况

当混合物中没有相互作用时 $U = 0$ ，KSE 便约化到简谐势阱中无相互作用的玻色子和无相互作用费米子的方程。玻色分量和费米分量的密度分别是

$$n_B(x) = \frac{N_B}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2 / a^2), \quad (4.27)$$

$$n_F(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2 / a^2) \sum_{l=0}^{N_F-1} \frac{H_l^2(x/a)}{2^l l!}. \quad (4.28)$$

其中 $H_l(x)$ 为厄米多项式 (Hermite polynomial)。此处，无相互作用玻色子的密度曲线是标准的高斯形状 (Gaussian-like shape)，而费米曲线的特点是带 N_F 个振荡的半椭圆。这两种分量的基态能分别为：

$$E_{0B} = \frac{N_B}{2} \hbar\omega, \quad (4.29)$$

$$E_{0F} = \sum_{l=0}^{N_F-1} \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (4.30)$$

总基态能为 $E_0 = E_{0B} + E_{0F}$ 。

当相互作用较弱时，忽略掉方程(2.62)中的交换关联能 E_{xc} ，KSE 简化到我们熟悉的平均场形式：

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + g(n_B + n_F) \right) \phi &= \epsilon \phi, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + g n_B \right) \psi_j &= \eta_j \psi_j. \end{aligned} \quad (4.31)$$

对于玻色子，它正是稀化气体的 G-P 方程。对于费米子，此方程让我们想到了由玻色子和两分量费米子形成的配对 BCS 态而构成的混合物的超流理论，但那里只考虑了单个的费米轨道[29]。

当相互作用较强时，对于大粒子数系统，即 $N_B, N_F \gg 1$ ，可以使用 Thomas-Fermi 近似（TFA）。相当于能量泛函公式(2.62)中的动能 T_B^{ref} 和 T_F^{ref} 分别近似为零和 $\int n(x) \kappa_s^{\text{hom}}(x) dx$ 。作 E_0 关于 $n_B(x)$ 和 $n_F(x)$ 的极小化，得到 TFA 形式：

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \mu_B^{\text{hom}}([n_B, n_F]; x) &= \mu_B^0, \\ \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \mu_F^{\text{hom}}([n_B, n_F]; x) &= \mu_F^0. \end{aligned} \quad (4.32)$$

其中 μ_B^0 和 μ_F^0 是由归一化条件 $\int n_B(x) dx = N_B$ 和 $\int n_F(x) dx = N_F$ 所确定的常数。这表示在缓慢变化的外势阱中 x 处的化学势与势阱中心 $x=0$ 处的化学势（ μ_B^0 和 μ_F^0 ）相关。方程(4.32)在文献[13]中被解释成 x 处化学势的 LDA 且在文献[16][26]中被广泛应用。

当排斥作用无限强时 $\mu_B^{\text{hom}} = \mu_F^{\text{hom}} = \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2m$ ，方程组(4.32)约化到单个方程：

$$\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} n^2(x) = \mu^0, \quad (4.33)$$

其中 μ^0 是由 $\int n(x) dx = N$ 所确定的常数。我们由(4.33)可得到总密度分布为

$$n(x) = \frac{\sqrt{2N - x^2/a^2}}{\pi a}. \quad (4.34)$$

这时基态能为

$$E_0 = \frac{N^2}{2} \hbar \omega. \quad (4.35)$$

可见它们正好是简谐势阱中 N 个自由费米子的密度分布和能量。方程(4.33)却不能给出玻色分量和费米分量各自的密度分布。而玻色-费米映射方法给出玻色分量和费米分量的密度为[17][18]

$$n_{B,F}(x) = \frac{N_{B,F}}{N\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a^2) \sum_{n=0}^{N-1} \frac{H_n^2(x)}{2^n n!}. \quad (4.36)$$

这表示两组分量是完全混合的，与文献[18]中广义 BA 波函数方法的结果一致。

4.3.2 密度分布与基态能量

DFT 的计算结果总结在图 4-2——图 4-6 中。引入平均玻色子比率 $\bar{\alpha} = N_B / N$ 。当 $\bar{\alpha} = 0$ ，系统为无相互作用费米气体，基态为费米海分布。当 $\bar{\alpha} = 1$ ，系统成为单分量玻色气体，其性质我们已在第二章讨论过。

先来看 $\bar{\alpha} = 0.5$ 时 $N_B = 10$ 个玻色子和 $N_F = 10$ 个费米子组成的混合物的主要结论。在解 KSE(2.68)和(4.11)) 时，以无相互作用混合物的密度公式(4.27)(2.38)作为迭代的出发点来求相互作用参数较小时的解（如 $U = 0.1$ ）。迭代到期望的精度后解得本征值 ϵ_j 、 η_j 和泛函轨道 ϕ_j 、 ψ_j 。所得密度作为下一步求更大一点相互作用的迭代过程的初始值，以此类推。图 4-2 给出不同 U 下的密度曲线。由图可见，随着相互作用的增大，密度中心的位置单调下降，原子占据更广泛的空间区域。费米分量的密度幅值变化比较平缓，而玻色分量的密度变得越来越平坦并在强相互作用时开始出现振荡。

在弱相互作用 $U = 0.1, 1$ 时，如图 4-2 (a) 和 (b)，玻色子和费米子都聚集在势阱的中心。对中等强度的相互作用，例如 $U = 5$ ，如图 4-2 (c)，一些费米子被排斥到势阱中心之外而玻色子仍主要在中心位置。注意到玻色密度曲线上出现振荡，它反映了和费米子的强关联。当相互作用更强时，如图 4-2 (d) (e) 中 $U = 20, 100$ ，更多的费米子被排出中心，显然出现了玻色-费米相分离的现象。高密度的分立玻色子被费米子包围，但费米子仍有机会挤在玻色子的间隔中。在图 4-2 (f) $U = +\infty$ 时总密度曲线

接近半椭圆形状。

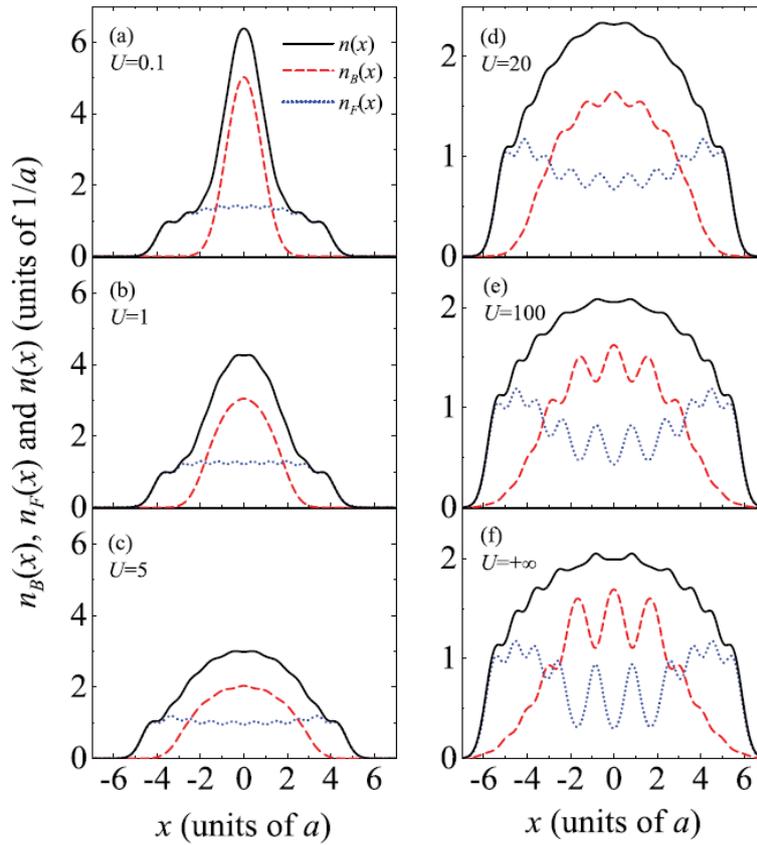


图 4-2 $N_B = 10$ 玻色子和 $N_F = 10$ 个费米子在不同相互作用参数 $U = 0.1, 1, 5$ (左列图) 和 $U = 20, 100, +\infty$ (右列图) 下的密度分布。

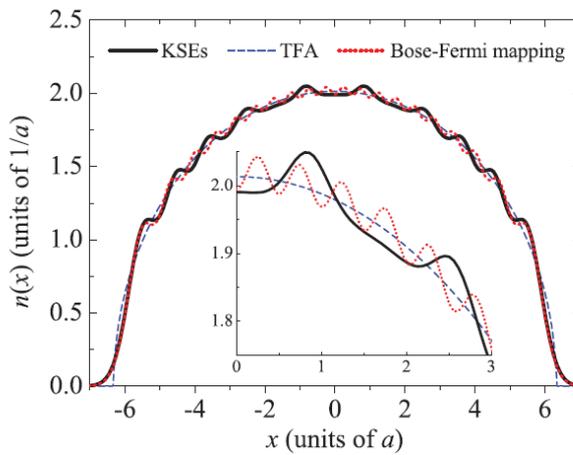


图 4-3 $N_B = N_F = 10$ 的混合物在 $U = +\infty$ 时的密度曲线 n 随 x 的变化。图中比较了 KSE (黑实线)、TFA (蓝虚线) 和玻色-费米映射 (红点线) 理论的结果。小插图显示各理论中振荡的细微差别。

图 4-3 给出相互作用无穷大时更为详细的观察。此图中比较了 DFT、TFA 以及玻色-费米映射方法给出的总密度的结果。除了一些细小的有关振荡的数目、位置和幅度上的差别，显然它们是一致的。图 4-3 中的小插图进一步将此放大。对于大粒子数系统，这些振荡间的区别非常小以致可以忽略。

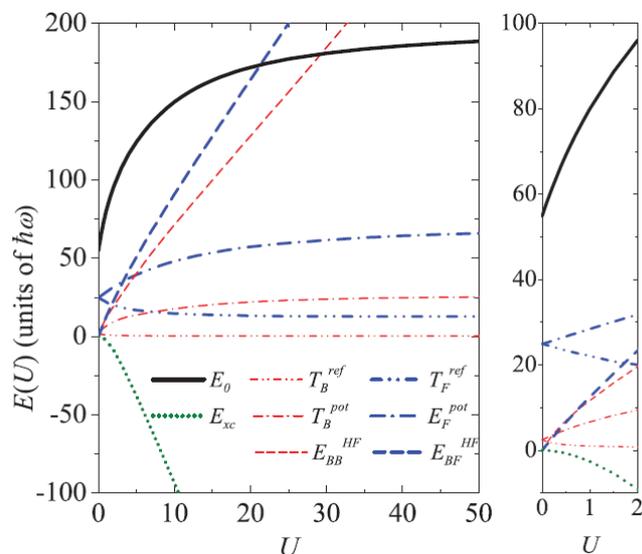


图 4-4 $N_B = N_F = 10$ 的玻色-费米混合物的基态能 E_0 及各部分能量随 U 的变化。

右图是平均场区的放大图。

图 4-4 描述了方程(2.62)中所有对能量有贡献的项随 U 的变化。各能量的线型标记与第二章中纯玻色气体的相同，除了现在的动能和外势能各包括有关玻色子（红色）和费米子（蓝的）两项。这些线的变化趋势及原因也类似于纯玻色气体。根据(4.29)和(4.30)，总基态能从 10 个理想玻色子和 10 个理想费米子的总能 $55\hbar\omega$ 演化到 20 个完全费米化原子的总能 $200\hbar\omega$ 。在相互作用 $0 < U < 2$ 区间， $|E_{xc} / E_0| < 0.1$ ，平均场理论有效。在 $U = +\infty$ ，我们的数值解得到一个基态能量上限 $E_0 = 200.1364\hbar\omega$ 。这非常接近全费米化的结果 $E_0 = 200\hbar\omega$ 。

对于 TG 极限下外势束缚混合物各分量的空间结构，存在两种完全相反的观点：相分离和完全混合。文献[13]的作者们用 BA 方法证明无外势时混合物处于稳定的混合态。也就是说，玻色子和费米子均匀地混合在一起不显示空间分量结构。然后他们结合 BA 精确解和 TFA 发现简谐束缚的混合物在很强但有限的相互作用下出现相

分离的现象，即玻色子和少量费米子居于中间，外围只有费米子。有限温度下的 TBA 方法[16]和现在的 DFT 在很强但有限的排斥作用下（如图 4-2）是支持这种描述的。唯一不同的是，我们在这里得到的相分离是不彻底的，玻色子仍有很小的几率占据外围费米子区域。

另一方面，文献[17][18]中用玻色-费米映射的方法对 TG 混合物提出了完全混合的观点。他们表明 $N_B = N_F$ 的混合物的分量是完全相同的，正如(4.36)式给出的密度分布，因而没有相分离。但这些研究者在文献[18]中已注意到用这种方法给出的基态是高度简并的。他们随后用广义 BA 的波函数给出无穷大相互作用下的完全混合结果[21]。其中波函数中的“轨道”部分用外势下单粒子的 Schrödinger 方程之解的 Slater 行列式构造。他们进一步用数值方法 DMRG 模拟了晶格中 $N_B = N_F = 2$ 的混合物来验证这种完全混合结果。但我们显然可见文献[21]中图 4 在相互作用比较强（ $U = 100$ ）时的相分离结构。直观来看，TG 极限下相分离和完全混合的不同结果是由于选用 BA 或玻色-费米映射方法不同的结果。我们期望实验能揭示束缚超冷原子混合物空间结构的本质。

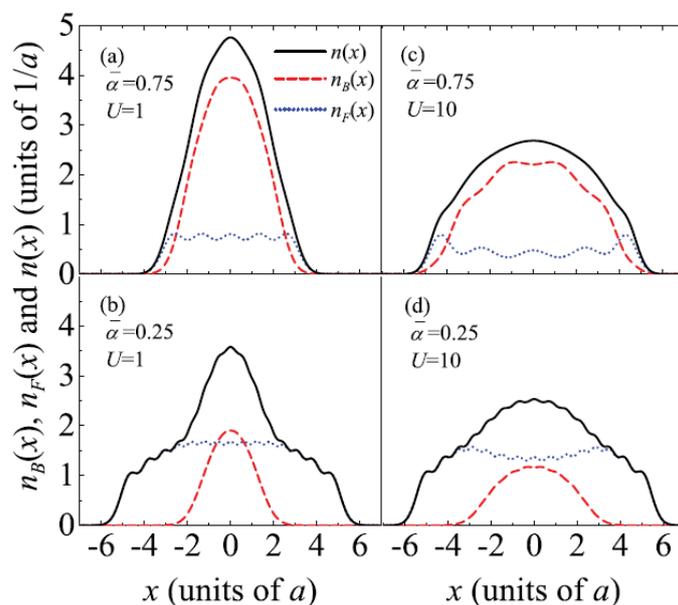


图 4-5 $N = 20$ 的混合物在不同的平均玻色子比率 $\bar{\alpha} = N_B / N$ 和不同的相互作用参数 U 下的密度分布。

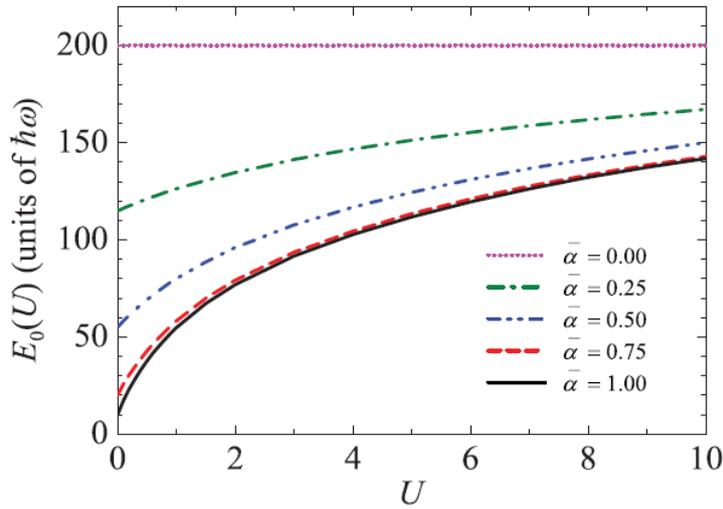


图 4-6 $N = 20$ 的玻色费米混合物在不同的平均玻色子比率 $\bar{\alpha} = N_B / N$ 下其基态能量随相互作用参数 U 变化图。

最后我们讨论玻色原子数占据率 $\bar{\alpha}$ 在密度曲线上的效应。图 4-5 展示了总原子数为 $N = 20$ 的玻色-费米混合物在 $\bar{\alpha} = 0.25, 0.75$ 和 $U = 1, 10$ 时各分量的密度。图 4-6 比较了它们的能量。无论在强或弱相互作用下，玻色子主导总密度曲线。当气体中的费米子较多时，总密度由玻色高斯形状叠加费米半椭圆形状而形成了双模 (bi-modal) 结构。在强相互作用极限，无论玻色子和费米子的粒子数目多少，总密度都接近典型的半椭圆形状。在弱相互作用下费米子对基态能的贡献更多一些。在强作用时情况有所变化，此时各种 $\bar{\alpha}$ 值的混合物能量值都接近全费米化系统的极限值。

在强相互作用下，可以用 TFA(4.32)式来计算密度。图 4-7 给出了相互作用参数 $U = 100$ ，总粒子数 $N = 20$ 的系统在不同玻色粒子数 N_B 情况下的总密度和各分量密度分布。这里 $N_B = 1, 4, 16, 19$ 对应于平均玻色子比率 $\bar{\alpha} = N_B / N = 0.05, 0.2, 0.8, 0.95$ 。由图可见，随着玻色粒子数比率增大，势阱中心玻色密度在增大，费米密度在减小。相应的玻色气体在势阱中所占范围逐渐增大，费米气体的范围略有减小。用分布半径 R 描述气体在势阱中的占据范围，指势阱中心到气体密度消失的处的距离。图 4-8 给出了费米分量分布半径 R_F 与玻色分量半径 R_B 随玻色子比率的变化。可见外围总是

只有费米子, $R_F > R_B$ 。 R_B 增加比较快而 R_F 减小的比较慢。

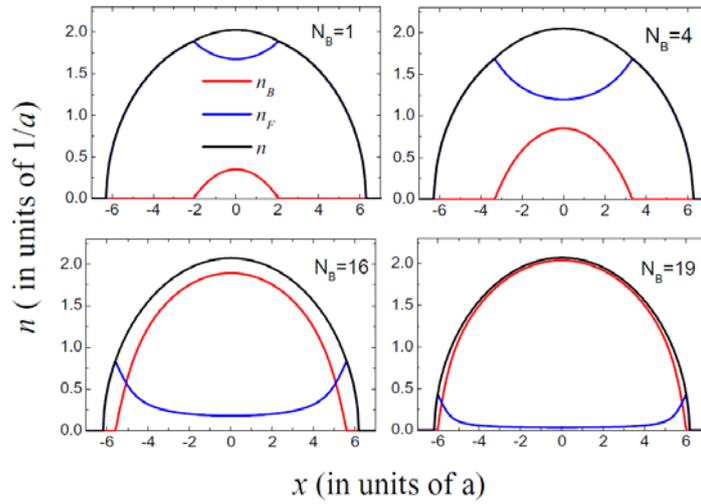


图 4-7 根据 TFA 计算的强相互作用 $U = 100$ 下总粒子数 $N = 20$ 的玻色费米混合气体在不同玻色粒子数时的密度分布。

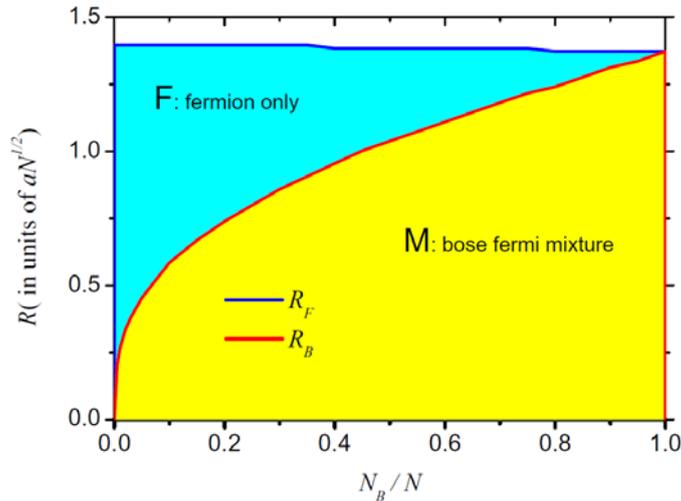


图 4-8 玻色费米混合气体在强相互作用 $U = 100$ 下具有不同玻色子比率时的各分量的分布半径。

第四节 小结

总之, 我们应用密度泛函方法研究了准一维简谐势阱中玻色-费米混合物的基态能量和密度分布。基于 BA 对混合物的精确解, 我们设法得到了均匀系统基态能量函数 $e(\gamma, \alpha)$ 的拟合公式。通过对束缚混合物的能量泛函作关于玻色和费米分量的变

分，得到 KSE。我们发现，当原子之间的相互作用从零变到正无穷时，混合物的基态能量会演化到无相互作用费米子的常数能量，总密度接近半椭圆曲线。许多费米子被排斥出势阱中心之外，而玻色子占据中心区域。强相互作用下玻色子和费米子的相分离与 BA 结合 LDA 的方法所得结果一致。这里的计算方案同样适用于纯玻色气体、不同玻色子比率的情况以及 TG 极限下。我们的理论也适用于光晶格里的混合物并能推广到研究混合物的动力学和热力学现象。

参考文献

- [1] B. DeMarco and D. S. Jin, *Science* (1999) **285**, 1703.
- [2] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, *Science* (2001) **291**, 2570.
- [3] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R. J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio, *Science* (2001) **294**, 1320; G. Modugno, G. Roati, F. Riboli, F. Ferlaino, R. J. Brecha, and M. Inguscio, *Science* (2002) **297**, 2240; S. Ospelkaus, C. Ospelkaus, O. Wille, M. Succo, P. Ernst, K. Sengstock, and K. Bongs, *Phys. Rev. Lett.* (2006) **96**, 180403.
- [4] T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, and Y. Takahashi, *Phys. Rev. A* (2009) **79**, 021601.
- [5] C.-H. Wu, I. Santiago, J. W. Park, P. Ahmadi, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. A* (2011) **84**, 011601(R).
- [6] K. Mølmer, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **80**, 1804.
- [7] M. Lewenstein, L. Santos, M. A. Baranov and H. Fehrmann, *Phys. Rev. Lett.* (2004) **92**, 050401.
- [8] F. Hebert, F. Haudin, L. Pollet, and G. G. Batrouni, *Phys. Rev. A* (2007) **76**, 043619.
- [9] F. Illuminati and A. Albus, *Phys. Rev. Lett.* (2004) **93**, 090406.
- [10] K. K. Das, *Phys. Rev. Lett.* (2003) **90**, 170403.
- [11] M. A. Cazalilla and A. F. Ho, *Phys. Rev. Lett.* (2003) **91**, 150403.
- [12] C. K. Lai and C. N. Yang, *Phys. Rev. A* (1971) **3**, 393.
- [13] A. Imambekov and E. Demler, *Phys. Rev. A* (2006) **73**, 021602(R); A. Imambekov and E. Demler, *Ann. Phys.* (2006) **321**, 2390.
- [14] L. Mathey, D. W. Wang, W. Hofstetter, M. D. Lukin, and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* (2004) **93**, 120404; L. Mathey and D. W. Wang, *Phys. Rev. A* (2007) **75**, 013612.
- [15] Y. Takeuchi and H. Mori, *Phys. Rev. A* (2005) **72**, 063617; P. Sengupta and L. P.

- Pryadko, Phys. Rev. B (2007) **75**, 132507; L. Pollet, M. Troyer, K. Van Houcke, and S. M. A. Rombouts, Phys. Rev. Lett. (2006) **96**, 190402.
- [16] X. Yin, S. Chen, and Y. Zhang, Phys. Rev. A (2009) **79**, 053604; X. Yin, X.-W. Guan, Y. Zhang, and S. Chen Phys. Rev. A (2012) **85**, 013608.
- [17] M. D. Girardeau and A. Minguzzi, Phys. Rev. Lett (2007) **99**, 230402.
- [18] B. Fang, P. Vignolo, C. Miniatura and A. Minguzzi, Phys. Rev. A (2009) **79**, 023623.
- [19] K. Lelas, D. Jukić and H. Buljan, Phys. Rev. A (2009) **80**, 053617.
- [20] X. Lü, X. Yin and Y. Zhang, Phys. Rev. A (2010) **81**, 043607.
- [21] B. Fang, P. Vignolo, M. Gattobigio, C. Miniatura, and A. Minguzzi, Phys. Rev. A (2011) **84**, 023626.
- [22] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. (1998) **81**, 938.
- [23] M. Rizzi and A. Imambekov, Phys. Rev. A (2008) **77**, 023621.
- [24] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. (1964) **136**, B864; W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. (1965) **140**, A1133; W. Kohn, Rev. Mod. Phys. (1999) **71**, 1253.
- [25] H. Frahm and G. Palacios, Phys. Rev. A (2005) **72**, 061604(R).
- [26] X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and J.-Y. Lee, Phys. Rev. A (2008) **78**, 023621.
- [27] Y. Hao, Chin. Phys. Lett. (2011) **28**, 010302.
- [28] E. H. Lieb, W. Liniger, Phys. Rev. (1963) **130**, 1605.
- [29] S. K. Adhikari, B. A. Malomed, L. Salasnich, and F. Toigo, Phys. Rev. A (2010) **81**, 053630.

第五章 自旋-1 玻色气体

旋量气体制备在光阱中, 光阱中诱导电子偶极动量决定了光和原子间的作用引起大量玻色原子凝聚到所有可能的超精细态的相干叠加态上。三维旋量气体中粒子间与自旋有关的自旋交换相互作用远小于与自旋无关的短程密度-密度相互作用。如最早实现的玻色旋量气体 ^{23}Na [1][2]和 ^{87}Rb [3][4], 上述两种相互作用强度的比例分别为 $c_2/c_0(\text{Na})=0.03$ [5]和 $c_2/c_0(\text{Rb})=-0.005$ [6]。因此通过最小化自由能而得到的旋量波函数便可表示为基态波函数[7-9]。物理学家们已经发现了自旋交换作用引起的许多物理现象, 如自旋磁畴 (spin domains) [1]、自旋结构 (spin textures) [7]、自旋混合动力学[10-13]、铁磁凝聚[14-16]等, 其详细介绍可见综述文献[17][18]。受限于一维空间的旋量气体也得到了理论上的关注[19-26], 并在近期的实验中被实现[27-29]。

在有关一维旋量玻色气体的理论研究中, 有些方法类似于三维情况, 考虑到自旋交换作用比密度-密度相互作用小的多。这方面有张文献和尤力应用平均场理论验证了横向密度谱在弱相互作用区的 Gaussian 假设和在强相互作用区的 Thomas-Fermi 假设的有效性[19]。郝亚江等人基于 Lieb-Lininger 模型的精确解用修正的 G-P 方程揭示了当密度-密度相互作用足够强时一维旋量玻色气体会表现出一维标量玻色气体的 TG 性质[19]。而 Deuretzbacher 等人[21]和 Girardeau[22]等人用玻色-费米映射方法详细地研究了一维旋量玻色气体的 TG 和 STG 性质等。

另外一些理论则考虑了自旋交换作用与密度-密度相互作用的强度在相同数量级的情况。曹俊鹏等人发现一维旋量玻色气在 $c_0=c_2$ 的条件下可以用 Bethe ansatz (BA) 方法精确求解[20]。Essler 等人表示它的低能自由度等效于自旋电荷分离理论, 电荷部分由 U(1) Tomonaga - Luttinger 液体描述, 自旋部分由 O(3)非线性 σ 模描述[23]。Lee 和 Kuhn 等人则用 TBA 方法研究了强相互作用下一维自旋-1 玻色气体的普遍热力学行为及量子临界性质[24][25]。

本章用密度泛函理论 (DFT) 来研究一维简谐势束缚下自旋-1玻色气的基态性质。我们结合BA解和局域密度近似 (LDA) 推导出Kohn-Sham方程组 (KSE), 并用数值迭代方法求解KSE以得到不同极化情况和不同相互作用下的基态密度分布和基态能量。

第一节 理论模型

考虑各向异性光偶极阱中 N 个质量为 m 的自旋-1玻色子系统，原子间具有 δ 函数型的密度-密度和自旋交换相互作用。阱可以用径向和轴向角频率 ω_{\perp} 、 ω 表征，它们各自对应简谐振动长度 $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ 和 $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 。当 $\omega_{\perp} \gg \omega$ ，径向 Thomas-Fermi 半径足够小使得只有轴向的自旋区域形成，便可看作一维旋量气体 [27][28]。一次量子化形式的哈密顿量写为

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) + \sum_{i < j} [c_0^{1D} + c_2^{1D} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] \delta(x_i - x_j). \quad (5.1)$$

其中 $\mathbf{S}_{i,j}$ 是自旋-1算符； c_0^{1D} 和 c_2^{1D} 是一维相互作用参数，它可由总自旋 $S = 0, 2$ 通道相互作用参数 g_s^{1D} 表示为 $c_0^{1D} = (g_0^{1D} + 2g_2^{1D})/3$ 和 $c_2^{1D} = (g_2^{1D} - g_0^{1D})/3$ 。而 g_s^{1D} 能通过 a_{\perp} 和三维散射长度 a_s^{3D} 按照 $g_s^{1D} = 2\hbar^2 a_s^{3D} / m a_{\perp}^2 (1 - A a_s^{3D} / a_{\perp})$ 来调节，其中常数 $A = 1.0326$ [30]。因此与三维旋量系统相比， c_0^{1D} 和 c_2^{1D} 有更广泛的调节范围。

对应 $s = +1, 0, -1$ 自旋态的原子数 N_+ 、 N_0 和 N_- 并不守恒，因为两个自旋 $s = \pm 1$ 的原子间的散射能产生两个 $s = 0$ 的原子或反之。然而总原子数 $N = N_+ + N_0 + N_-$ 和 z 分量总自旋 $S^z = N_+ - N_-$ 守恒。因此可以将系统的原子分为两部分，部分 I 的粒子数为 $N_1 = S^z$ ，这些自旋平行的原子形成铁磁相；部分 II 的粒子数为 $2N_2$ ，它们在自旋态 $s = \pm 1$ 之间或 $s = 0$ 之间构成 N_2 个配对。总粒子数为 $N = N_1 + 2N_2$ ，总极化率为 $P = N_1 / N$ 。在此假设 $N_+ \geq N_-$ 且 N_0 为偶数。 c_0^{1D} 的正负决定原子间的作用是排斥的或吸引的。 c_2^{1D} 的正负决定配对内的自旋交换作用是铁磁的还是反铁磁的。

第二节 均匀系统的 Bethe ansatz 方程

无外势时，哈密顿量(5.1)在下列特殊条件下可用 BA 方法求解：

$$c_0^{1D} = c_2^{1D} = g > 0,$$

即排斥密度-密度相互作用等于反铁磁自旋交换相互作用[20]。BA 方程为

$$e^{ik_j L} = \prod_{i=1, i \neq j}^N \tilde{e}_4(k_j - k_i) \prod_{\alpha=1}^{2N_2} \tilde{e}_{-2}(k_j - \Lambda_\alpha), \quad (5.2)$$

$$\prod_{i=1}^N \tilde{e}_2(\Lambda_\alpha - k_i) = - \prod_{\beta=1}^{2N_2} \tilde{e}_2(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta). \quad (5.3)$$

其中 $\tilde{e}_n(x) = (x + inc') / (x - inc')$, $c' = c/4$, $c = 2mg / \hbar^2$ (注意前几章中 $c = mg / \hbar^2$)。

方程中 $\{k_i\}$ 是准动量集, $\{\Lambda_\alpha\}$ 是自旋快度 (spin rapidity) 集。系统的基态能为

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N k_i^2. \quad (5.4)$$

因为 $c_2^{1D} > 0$, 自旋交换相互作用是反铁磁的。 $2N_2$ 个粒子在两个 $s = \pm 1$ 原子间或两个 $s = 0$ 原子间形成自旋单体束缚对。而 N_1 个粒子是极化的。方程(5.2)和(5.3)中有 N_1 个 $k_i (i=1, \dots, N_1)$ 的实数解和 N_2 对 k_α 和 $\Lambda_\alpha (\alpha=1, \dots, 2N_2)$ 的共轭复数解或弦解 (string solution) [20][24], 即

$$k_\alpha = \lambda_l \pm ic', \quad \Lambda_\alpha = \lambda_l \pm ic'. \quad (5.5)$$

其中 $\lambda_l (l=1, \dots, N_2)$ 是实数。采用热力学极限, 即气体的长度 $L \rightarrow \infty$ 、粒子数 $N, N_1, N_2 \rightarrow \infty$, 但密度 $n = N/L$ 、 $n_1 = N_1/L$ 、 $n_2 = N_2/L$ 有限。将(5.5)代入(5.2)和(5.3)便得到 BA 积分方程

$$2\pi\rho_1(k) = 1 + 2 \int_{-B}^B dk' \rho_1(k') a_4(k, k') + 2 \int_{-Q}^Q d\lambda \rho_2(\lambda) (a_5 - a_1)(k, \lambda), \quad (5.6)$$

$$\pi\rho_2(\lambda) = 1 + \int_{-B}^B dk \rho_1(k) (a_5 - a_1)(k, \lambda) + \int_{-Q}^Q d\lambda' \rho_2(\lambda') (a_6 + a_4 - a_2)(\lambda, \lambda'). \quad (5.7)$$

其中

$$(a_n - a_m)(x_1, x_2) = a_n(x_1, x_2) - a_m(x_1, x_2), \quad (5.8)$$

$$a_n(x_1, x_2) = \frac{n|c'|}{(nc')^2 + (x_1 - x_2)^2}, \quad (5.9)$$

$\rho_1(k)$ 和 $\rho_2(\lambda)$ 是 k 和 λ 的密度。积分边界 B 和 Q 由下列归一化条件决定:

$$n_1 = \int_{-B}^B dk \rho_1(k), \quad (5.10)$$

$$n_2 = \int_{-Q}^Q d\lambda \rho_2(\lambda). \quad (5.11)$$

由(5.4)可以得到单位长度的基态能

$$\frac{E}{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-B}^B dk k^2 \rho_1(k) + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-Q}^Q d\lambda 2\lambda^2 \rho_2(\lambda) - \epsilon_b n_2, \quad (5.12)$$

其中每一配对中的束缚能

$$\epsilon_b = \frac{\hbar^2 c^2}{2m \cdot 8}. \quad (5.13)$$

为了求解 BA 方程，引入无量纲 L-L 相互作用参数 $\gamma = c/2n = mg/\hbar^2 n$ 和极化参数 $p = n_1/n$ 。令 $k = Bx$ 、 $\lambda = Qy$ 、 $B = c/\beta_1$ 、 $Q = c/\beta_2$ ，准动量和自旋快度的密度变为 $\rho_1(k) = g_1(x)$ 和 $\rho_2(\lambda) = g_2(y)$ 。BA 积分方程(5.6)和(5.7)转化为：

$$2\pi g_1(x) = 1 + \frac{2}{\beta_1} \int_{-1}^1 dx' g_1(x') b_4 \left(\frac{x}{\beta_1}, \frac{x'}{\beta_1} \right) + \frac{2}{\beta_2} \int_{-1}^1 dy g_2(y) (b_5 - b_1) \left(\frac{x}{\beta_1}, \frac{y}{\beta_2} \right), \quad (5.14)$$

$$\pi g_2(y) = 1 + \frac{1}{\beta_1} \int_{-1}^1 dx g_1(x) (b_5 - b_1) \left(\frac{x}{\beta_1}, \frac{y}{\beta_2} \right) + \frac{1}{\beta_2} \int_{-1}^1 dy' g_2(y') (b_6 + b_4 - b_2) \left(\frac{y}{\beta_2}, \frac{y'}{\beta_2} \right). \quad (5.15)$$

其中

$$(b_n - b_m)(x_1, x_2) = b_n(x_1, x_2) - b_m(x_1, x_2), \quad (5.16)$$

$$b_n(x_1, x_2) = \frac{n/4}{(n/4)^2 + (x_1 - x_2)^2}. \quad (5.17)$$

归一化条件(5.10)(5.11)现在成为

$$\beta_1 = \frac{2\gamma}{p} \int_{-1}^1 g_1(x) dx, \quad (5.18)$$

$$\beta_2 = \frac{4\gamma}{1-p} \int_{-1}^1 g_2(y) dy. \quad (5.19)$$

由(5.12)可知，均匀一维旋量玻色气体的单粒子基态能为

$$\mathcal{E}^{\text{hom}}(n, \gamma, p) = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} e(\gamma, p). \quad (5.20)$$

其中

$$e(\gamma, p) = e_1(\gamma, p) + e_2(\gamma, p) + e_b(\gamma, p), \quad (5.21)$$

$$e_1(\gamma, p) = \frac{8\gamma^3}{\beta_1^3} \int_{-1}^1 x^2 g_1(x) dx, \quad (5.22)$$

$$e_2(\gamma, p) = \frac{16\gamma^3}{\beta_2^3} \int_{-1}^1 y^2 g_2(y) dy, \quad (5.23)$$

$$e_b(\gamma, p) = -\frac{\gamma^2(1-p)}{4}. \quad (5.24)$$

这里(5.22)和(5.23)能通过数值求解积分方程(5.14)(5.15)和归一化条件(5.18)(5.19)而得到。现在化学势由(5.20)的微分得到：

$$\mu_1^{\text{hom}}(n, \gamma, p) = \frac{\partial(n\mathcal{E}^{\text{hom}})}{\partial n_1} = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} f_1(\gamma, p), \quad (5.25)$$

$$\mu_2^{\text{hom}}(n, \gamma, p) = \frac{\partial(n\mathcal{E}^{\text{hom}})}{\partial n_2} = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} f_2(\gamma, p). \quad (5.26)$$

其中

$$f_1(\gamma, p) = 3e - \gamma \frac{\partial e}{\partial \gamma} + (1-p) \frac{\partial e}{\partial p}, \quad (5.27)$$

$$f_2(\gamma, p) = 2 \left(3e - \gamma \frac{\partial e}{\partial \gamma} - p \frac{\partial e}{\partial p} \right). \quad (5.28)$$

可见，当 $p=1$ ，系统是自旋极化玻色子组成的铁磁相。此时 $e(\gamma, p=1)$ 与第二章中具有相互作用参数 2γ 的 L-L 模型中的标量玻色气体的 $e(\gamma)$ 一致。当 $p=0$ ，所有的原子形成配对，系统处于完全反铁磁相。

在 $\gamma=0$ 极限下，系统约化到自由玻色气体， $e(\gamma=0, p)=0$ 。当 γ 非常大，(5.14)和(5.15)式给出 $g_1(x) \approx 1/2\pi$ ， $g_2(x) \approx 1/\pi$ 。这时

$$e(\gamma \rightarrow +\infty, p) \approx \frac{\pi^2 p^3}{3} + \frac{\pi^2 (1-p)^3}{48} - \frac{\gamma^2 (1-p)}{4}. \quad (5.29)$$

强相互作用下单位长度的能量为

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi^2 n_1^3}{3} + \frac{\pi^2 n_2^3}{6} - \frac{c^2 n_2}{8} \right). \quad (5.30)$$

能量密度由三部分组成： N_1 个质量为 m 的自由费米子的， N_2 个质量为 $2m$ 的组合费米子的以及组合子的束缚能密度 $N_2 \epsilon_b / L$ 。这时的化学势为：

$$\mu_1^{\text{hom}}(\gamma \rightarrow +\infty, p) \approx \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 n_1^2, \quad (5.31)$$

$$\mu_2^{\text{hom}}(\gamma \rightarrow +\infty, p) \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi^2}{2} n_2^2 - \frac{c^2}{8} \right). \quad (5.32)$$

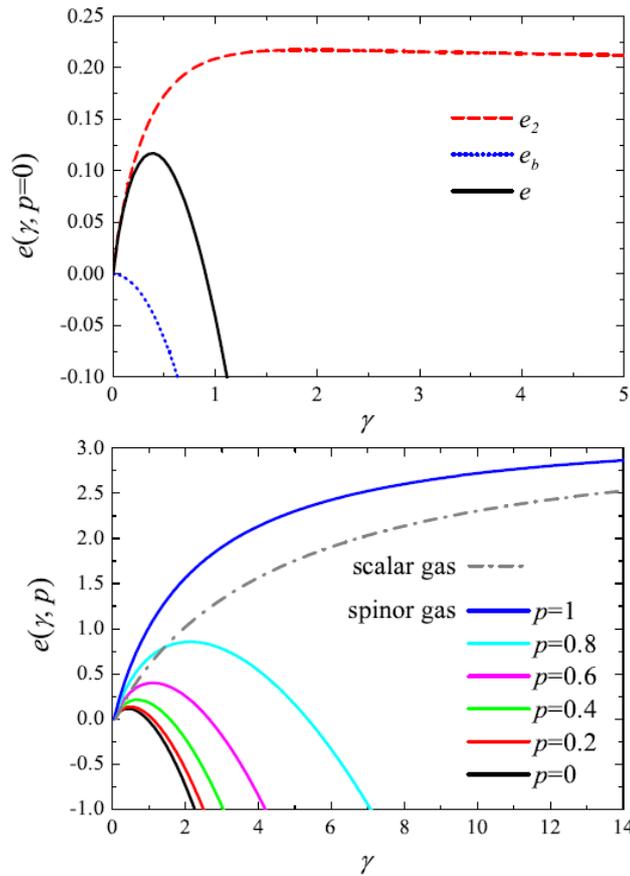


图 5-1 一维均匀自旋-1 玻色气体的基态能函数 $e(\gamma, p)$ 。上图中 $p=0$ ；下图中从底

到顶的实线分别对应 $p=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ，点划线为标量玻色气体的 $e(\gamma)$ 。

在图 5-1, 我们描绘了 $e(\gamma, p)$ 随极化率 p 和相互作用参数 γ 的变化, 并把它与标量玻色气体的情况比较。上图是 $p=0$ 即所有原子形成配对的情况, 显然 $e_1=0$ 。数值求解方程(5.15)(5.19)并代入(5.23)得到 $e_2(\gamma)$ (红虚线), 可见它在 $\gamma \ll 1$ 时随 γ 线性增加, 在 $\gamma \gg 1$ 时慢慢趋近于常数 $\pi^2/48$ 。 $e_2(\gamma)$ 和平方反比函数 $e_b(\gamma) = -\gamma^2/4$ 共同决定了 $e(\gamma)$ 是非单调的, 在 $\gamma=0.4$ 处有最大值 0.1169。下图是 $e(\gamma, p)$ 在不同 p 的情况。从下到上的实线分别对应 $p=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ 。可见, 在同一 γ 处, 能量函数随 p 增大。当 $p=1$ 即完全铁磁相时, $e(\gamma)$ 单增到常数 $\pi^2/3$, 这正是标量玻色气体 (灰色点划线) 的渐进值。

第三节 外势束缚系统的 Kohn-Sham 方程

现在用 DFT 的方法研究外势为 $V_{ext}(x) = m\omega^2 x^2/2$ 的简谐势阱中的自旋玻色气体。这套理论能使我们处理非均匀系统基态的能量和密度分布。根据 DFT 中 Hohenberg-Kohn 定理 I, 外势下相互作用受限系统的基态密度唯一地决定这个势。现在分别记粒子 I 和粒子 II 的密度为 $n_1(x)$ 和 $2n_2(x)$, 总密度为 $n(x) = n_1(x) + 2n_2(x)$ 。粒子数归一化到

$$\int n_1(x) dx = N_1, \quad (5.33)$$

$$\int n_2(x) dx = N_2. \quad (5.34)$$

基态能是密度的泛函, 即 $E_0[n_1(x), n_2(x)]$ 。它可以分解为无相互作用参照系统的动能泛函 $T^{ref}[n_1(x), n_2(x)]$ 、外势能泛函 $E_{ext}[n_1(x), n_2(x)]$ 以及涉及相互作用的 KS 能泛函 $E_{KS}[n_1(x), n_2(x)]$, 即:

$$E_0[n_1, n_2] = T^{ref}[n_1, n_2] + E_{ext}[n_1, n_2] + E_{KS}[n_1, n_2]. \quad (5.35)$$

引入两个正交归一化的轨道函数 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$, 将密度表示为

$$n_1(x) = N_1 \phi_1^*(x) \phi_1(x), \quad (5.36)$$

$$n_2(x) = N_2 \phi_2^*(x) \phi_2(x). \quad (5.37)$$

动能泛函写为

$$T^{ref}[n_1, n_2] = -N_1 \int dx \phi_1^*(x) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_1(x) - 2N_2 \int dx \phi_2^*(x) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_2(x). \quad (5.38)$$

外势能泛函为

$$E_{ext}[n_1, n_2] = \int dx V_{ext}(x) n(x). \quad (5.39)$$

注意每一部分玻色气体都对应的是单个的轨道函数，这意味着玻色子处于准凝聚态。这与费米子的情况不同，那时轨道函数的个数是由费米子数目决定的。在第二章、第四章已表明 DFT 中单个玻色轨道函数假设的有效性。

$E_{KS}[n_1, n_2]$ 包括所有相互作用贡献的能量。前几章中，我们将它分为 Hartree-Fock 能（即相互作用能的平均场近似）和交换关联能。现在则利用 LDA 将它处理为一个整体。即假设，外势下的系统在每一 x 处都局域平衡。其单原子局域能为均匀系统相互作用能。因此相互作用能泛函 $E_{KS}[n_1, n_2]$ 可以表示为

$$E_{KS}[n_1, n_2] \approx \int dx n(x) \mathcal{E}^{\text{hom}}[n_1(x), n_2(x)]. \quad (5.40)$$

其中密度 $n_1(x)$ 、 $n_2(x)$ 对应 x 处的值； $\mathcal{E}^{\text{hom}}[n_1(x), n_2(x)]$ 采用方程(5.20)的形式。注意 L-L 参数 $\gamma(x) = mg / \hbar^2 n(x)$ 和极化参数 $p(x) = n_1(x) / n(x)$ 现在也是随时间变化的。由(5.35)中所含三项的确切表示，基态能量泛函可写为

$$\begin{aligned} E_0[n_1(x), n_2(x)] = & N_1 \int dx \phi_1^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \phi_1(x) \\ & + 2N_2 \int dx \phi_2^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \phi_2(x) \\ & + \int dx n(x) \mathcal{E}^{\text{hom}}[n_1(x), n_2(x)]. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Hohenberg-Kohn 定理 II 假设基态密度是由对 E_0 作关于 $n_1(x)$ 和 $n_2(x)$ 的变分最小化决定的。相当于对自由能泛函 $F = E_0 - N_1 \epsilon_1 - 2N_2 \epsilon_2$ 作关于 ϕ_1^* 和 ϕ_2^* 的变分。其中 ϵ_1 和 ϵ_2 是为保证粒子数 N_1 和 $2N_2$ 的守恒而引入的 Lagrange 因子。由此我们得到 Kohn-Sham (KS) 方程：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \mu_1^{\text{hom}} [n_1(x), n_2(x)] \right) \phi_1(x) = \epsilon_1 \phi_1(x), \quad (5.42)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \mu_2^{\text{hom}} [n_1(x), n_2(x)] \right) \phi_2(x) = \epsilon_2 \phi_2(x). \quad (5.43)$$

其中局域空间 x 处的密度 n_1 、 n_2 所对应的均匀系统化学势 μ_1^{hom} 、 μ_2^{hom} 由方程(5.25)、(5.26)给出。利用(5.42)(5.43)的本征值，基态能也可表示为：

$$E_0 = N_1 \epsilon_1 + 2N_2 \epsilon_2 + \int dx n(x) \mathcal{E}^{\text{hom}}(x) - \int n_1(x) \mu_1^{\text{hom}}(x) dx - \int n_2(x) \mu_2^{\text{hom}}(x) dx. \quad (5.44)$$

由 x 处不同的 n_1 、 n_2 对应的精确解 \mathcal{E}^{hom} ，结合轨道函数定义(5.36)和(5.37)，便可以求解 KS 方程(5.42)(5.43)以得到密度分布 $n_1(x)$ 和 $n_2(x)$ ，并进而从方程(5.44)计算出基态能 E_0 。

现在讨论 KS 方程在弱和强极限相互作用的情况。无相互作用时，KS 方程正确地约化到一维简谐振子的薛定谔方程。玻色密度曲线是标准的高斯形状：

$$n_{1,2}(x) = \frac{N_{1,2}}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a^2). \quad (5.45)$$

当相互作用较强时，忽略(5.42)、(5.43)中的动能可得到 TFA 方程：

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \mu_1(x) = \mu_1^0, \quad (5.46)$$

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{\mu_2(x)}{2} = \frac{\mu_2^0}{2}. \quad (5.47)$$

常数 μ_1^0 、 μ_2^0 是由归一化条件(5.33)、(5.34)决定的。Kuhn 等人根据(5.46)、(5.47)给出强相互作用下的基态相图并发现在强相互作用区域单体配对和未配对玻色子形成两分量的 Luttinger 液体[26]。当相互作用接近无限强时，由(5.31)、(5.32)中化学势的极限值及归一化条件(5.33)(5.34)，求解(5.47)便给出下列半椭圆的分布曲线：

$$n_{1,2}(x) \approx \frac{\sqrt{2N_{1,2} - (x/a_{1,2})^2}}{\pi a_{1,2}}. \quad (5.48)$$

其中 $a_1 = a$ 、 $a_2 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ 。可见粒子 I 的密度正是 N_1 个质量为 m 的无相互作用费

米子的。粒子 II 的密度正是 N_2 个质量为 $2m$ 的无相互作用费米子的。这表明在无限强相互作用下，粒子 II 的性质接近于玻色-玻色配对形成 TG 气体。借助玻色-费米映射方法[21][22]，可以将配对和未配对分量的密度映射到无相互作用费米子上：

$$n_{1,2}(x) = \frac{1}{a_{1,2}\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a_{1,2}^2) \sum_{l=0}^{N_{1,2}-1} \frac{H_l^2(x/a_{1,2})}{2^l l!}. \quad (5.49)$$

其中 $H_l(x)$ 是 Hermite 多项式。

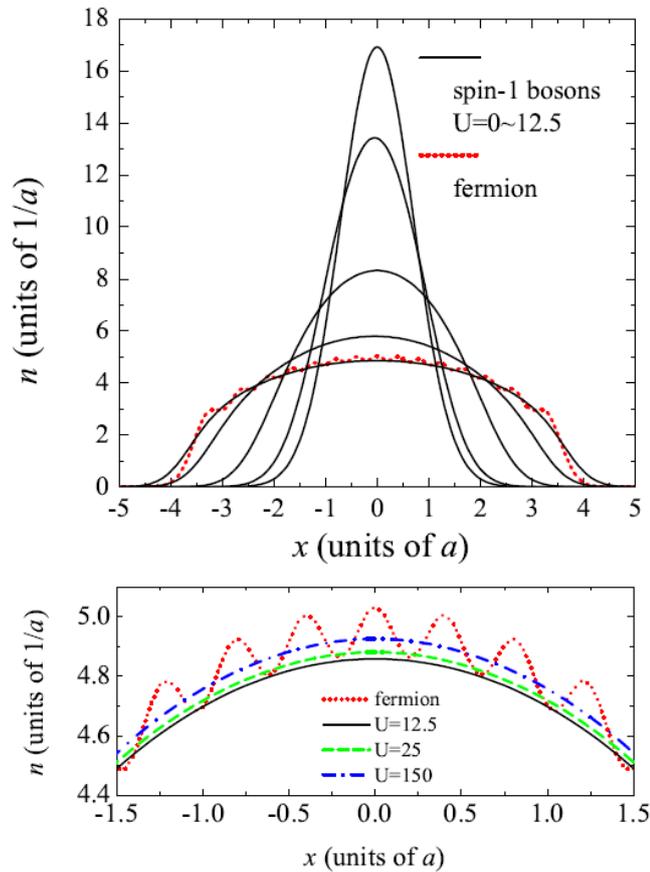


图 5-2 $N = 30, P = 0$ 的一维自旋-1 玻色气体的密度分布。上图中，从上到下 5 条黑实线分别对应 $U = 0, 0.1, 0.5, 2, 12.5$ ；红点线是质量为 $2m$ 的 15 个无相互作用费米子的分布。下图是强相互作用 $U = 12.5, 25, 150$ 下势阱中部的密度。可见在 $U > 12.5$ 以后中心密度略有上升。

第四节 数值结果

引入相互作用参数 $U = g / a\hbar\omega$ 。随空间变化的 L-L 参数表示为 $\gamma(x) = U / an(x)$ 。对于给定 N 、 P 、 U 的一维自旋玻色气体,我们用数值迭代方法解 KS 方程(5.42)(5.43)以得到粒子 I 和粒子 II 的密度 $n_1(x)$ 和 $n_2(x)$ 。基态能 E_0 可由关系式(5.44)给出。这些数值结果总结在图 5-2—图 5-11 中。

5.4.1 $P=0$ 系统

首先考虑 $N=30$ 且 $P=0$ 的系统。在这种完全配对的情况,长度、密度和能量的单位分别是 a 、 $1/a$ 和 $\hbar\omega$ 。图 5-2 给出密度曲线如何随相互作用变化。上图是 $U=0,0.1,0.5,2,12.5$ 的情况;下图是 $U=12.5,25,150$ 的情况。随着 U 的增长,总密度曲线从标志着无相互作用玻色气体的标准高斯形状变化到标志着无相互作用费米气体的半椭圆形状。有趣的是我们发现在强相互作用 $U=150$ 时, N 个质量为 m 的玻色气体的密度曲线接近 $N/2$ 个质量为 $2m$ 的无相互作用费米子的密度曲线,除了后者中存在密度振荡。这意味着强相互作用时所有反铁磁自旋-1 原子都彼此配对,表现出玻色-玻色配对 TG 气体的行为。

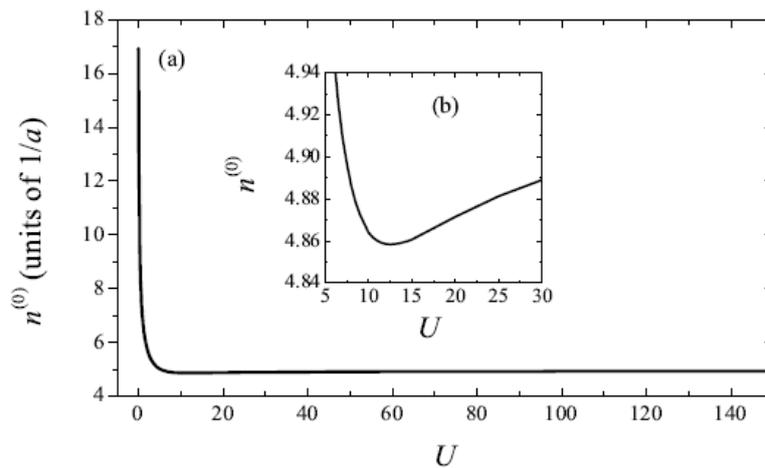


图 5-3 $N=30, P=0$ 的一维自旋-1 玻色气体的中心密度 $n^{(0)}$ 随 U 变化的非单调性。

小插图中给出 $n^{(0)}$ 在 $U=12.5$ 时有最小值。

我们注意到密度曲线并不随着相互作用参数单调变化。中心密度 $n^{(0)}$ （势阱中心 $x=0$ 处的密度）的整个变化趋势在图 5-3 中。其中的小插图特别展示了 $n^{(0)}$ 的非单调性。我们发现中心密度在达到强相互作用时的无相互作用费米子中心密度常数之前先于 $U=12.5$ 处减小到 $n_{\min}^{(0)} = 4.858/a$ 。这种现象可理解为是密度-密度排斥作用和反铁磁交换作用之间竞争的结果。排斥的密度-密度相互作用趋向于增大玻色子之间的距离，而反铁磁交换作用导致 $s = \pm 1$ 玻色子之间或 $s = 0$ 玻色子之间实质上的吸引。当 $U < 12.5$ 时，玻色子之间的排斥占主导，使玻色气体扩展到更大的空间领域并使得势阱中心的密度减小到最小值。当 $U > 12.5$ 时，反铁磁效应占优势，使得玻色气体略有收缩。

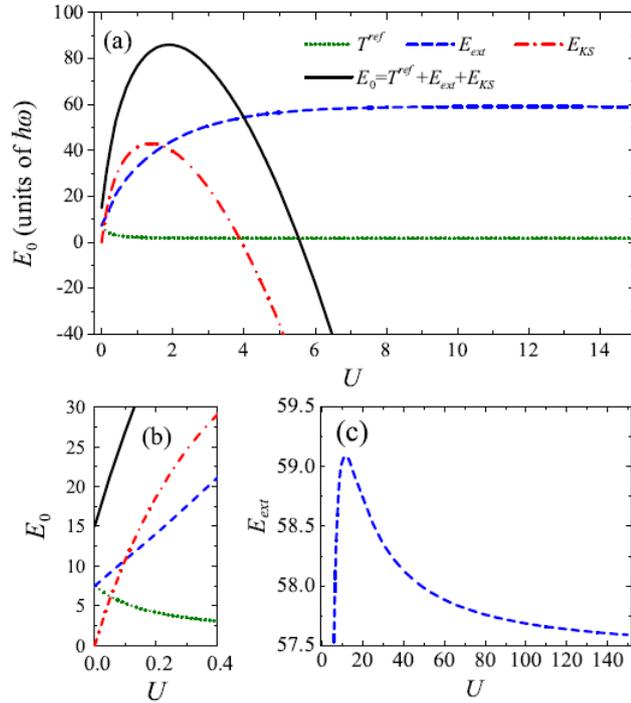


图 5-4 (a) $N = 30, P = 0$ 的一维自旋-1 玻色气体的基态能及各部分能量随相互作用 U 的变化；(b) 弱相互作用区的密度；(c) 外势能的细节。

图 5-4 描绘了方程(5.35)中基态能 E_0 及其所包含的各能量项随相互作用参数 U 的演化。整个演化趋势在图(a)中，图(b)给出平均场区域的细节。可见动能 T^{ref} 逐渐减小到一个能量常数，这是由于相互作用限制了原子的运动。而外势能 E_{ext} 则是增加

的，这是由于原子占据了势阱中更大的区域。对应于 $n^{(0)}$ 的非单调性， E_{ext} 也表现出非单调性，这可由图(c)看出。 E_{ext} 在 $U = 11.5$ 时达到它的最大值 $E_{ext}^{max} = 59.092\hbar\omega$ ，这时的相互作用 U 值接近于图 5-3 中 $n_{min}^{(0)}$ 对应的临界相互作用 $U = 12.5$ 。 $n^{(0)}$ 的非单调性对其它能量并没有造成明显影响。类似于均匀自旋-1 系统的基态能量函数 $e(\gamma, p=0)$ (图 5-1 中的上图)，相互作用能 E_{KS} 在弱相互作用区间线性增加并在 $U = 1.4$ 时达到最大值 $E_{KS}^{max} = 43.033\hbar\omega$ 。此处的中心 L-L 相互作用参数 (势阱中心的 γ 值) 为 $\gamma^{(0)} = 0.222$ 。 E_{KS} 在强作用区单调减小。 T^{ref} 、 E_{ext} 和 E_{KS} 共同决定了基态能 E_0 在 $U = 1.9$ 时达到最大值 $E_0^{max} = 85.994\hbar\omega$ (此时的 $\gamma^{(0)} = 0.324$) 然后单减。我们注意到 E_0^{max} 对应的 $\gamma^{(0)} = 0.324$ 接近于图 5-1 上图中最大 e 值所对应的 $\gamma = 0.4$ 。这种现象可解释为，类似于均匀系统中出现 $e(\gamma, p)$ 的非单调性，玻色子间的排斥作用和玻色-玻色配对内的束缚能使得 E_0 在 $U = 1.9$ 处有极值。同时密度-密度排斥作用和反铁磁交换作用的竞争使得 $n^{(0)}$ 在 $U = 12.5$ 有极值。

5.4.2 $P \neq 0$ 系统

当 $P = 1$ 时，没有形成配对的玻色子，系统约化到具有密度-密度相互作用为 $2g$ 的标量玻色气体。其基态性质我们已用 DFT 在第二章研究过。随着 U 的增大，系统的密度分布和能量接近单分量 TG 气体的。

在此我们研究总极化率 $0 < P < 1$ 的部分极化相互作用系统。这里长度、密度和能量的单位各自为 $N^{1/2}a$ 、 $N^{1/2}/a$ 和 $\hbar\omega$ 。图 5-5 给出了不同总极化率 $P = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ (对应从左到右各列的小图) 和不同相互作用 $U = 0.1, 2, 10, 50$ (对应从上到下的各行小图) 下极化粒子的密度 n_1 (红虚线)、配对玻色子的密度 $2n_2$ (蓝实线) 和总密度 n (黑点线)。

水平方向小图显示随着 P 的增大，密度曲线 n_1 在逐渐扩展而 $2n_2$ 在收缩。这两种密度使得中心密度 $n^{(0)}$ 随 P 的增大略有减小。竖直方向随 U 增大的小图 (注意在弱作

用 $U = 0.1$ 时我们用了不同的纵坐标) 表明 $2n_2$ 从无相互作用玻色气体的 Gauss 分布平滑地过渡到玻色-玻色配对 TG 气体的半椭圆分布。

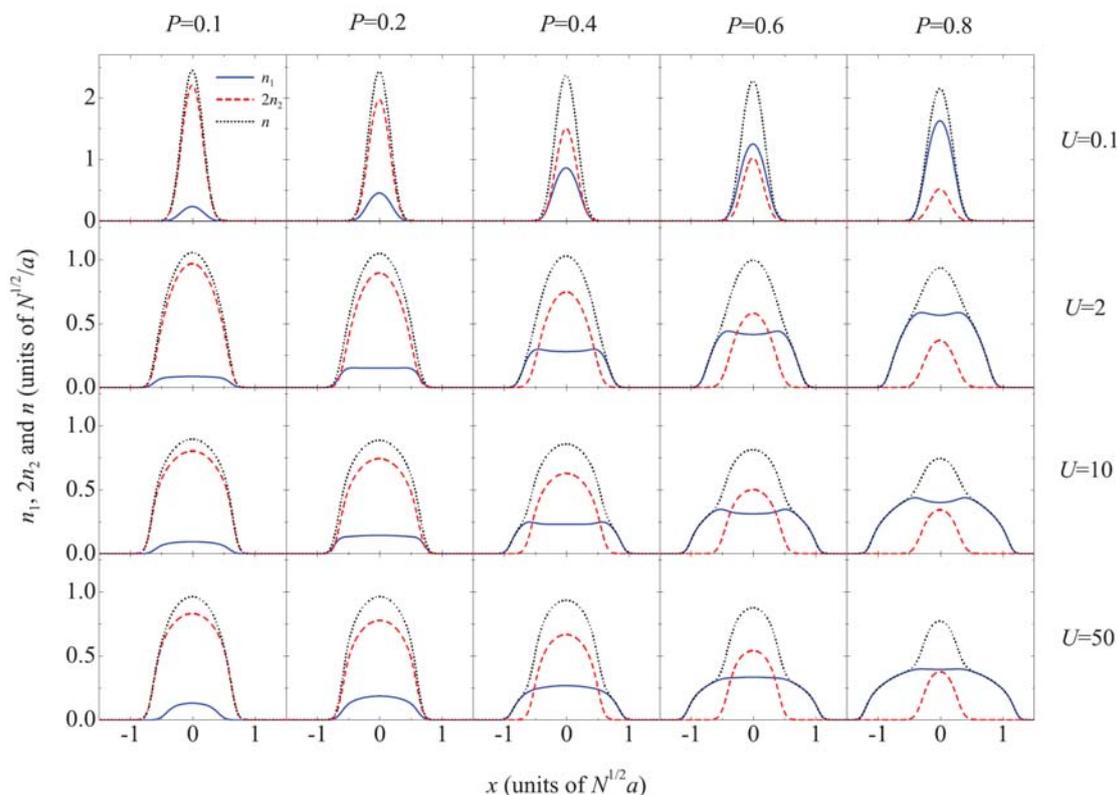


图 5-5 一维自旋 -1 玻色气体在 $P=0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ (从左到右的小图) 和 $U=0.1, 2, 10, 50$ (从上到下的的小图) 时的密度分布。蓝色实线表示极化粒子的密度 n_1 ; 红色虚线表示配对玻色子的密度 $2n_2$; 黑色点线表示总密度 n 。

在所有相互作用强度下, 密度 n, n_2 的峰值总在势阱中心。密度 n_1 的情况有些复杂。弱相互作用 ($U = 0.1$) 时 n_1 显示高斯分布。中等相互作用强度时 ($U = 2, 10$) 粒子 I 中的玻色子倾向于占据更广的空间, 势阱中心的粒子被排斥到中心之外, n_1 的单峰曲线变成了双峰。这类似于第四章中有相同质量和相等排斥作用的玻色费米混合物的相分离。现在的情况是, 系统中发生了配对玻色子和未配对玻色子的相分离。即, 一维玻色气体的中间是配对和未配对玻色子的混合核心区域。外围在 $P > 0.2$ 时是极化玻色子, 在 $P < 0.2$ 时是配对玻色子。在很强的相互作用 $U = 50$ 时, n_1 的峰又回到了势阱中心。 n_1 的密度曲线接近 TG 气体的半椭圆分布。然而强相互作用时相分

离的现象变得更显著。

两分量密度分布的结果是总密度 n 在弱相互作用 ($U = 0.1$) 时是整体上的 Gauss 分布, 形成 n_1 和 $2n_2$ 完全混合的相。当相互作用增大时, 我们发现总密度呈双模 (bi-model) 分布, 粒子 II 的密度曲线叠加在粒子 I 密度曲线的上面。即, 大 U 和大 P 时, 粒子 I 和粒子 II 混合的核心区域被只包含极化玻色子的两翼所包围 (见图 5-5 的右下几个小图)。

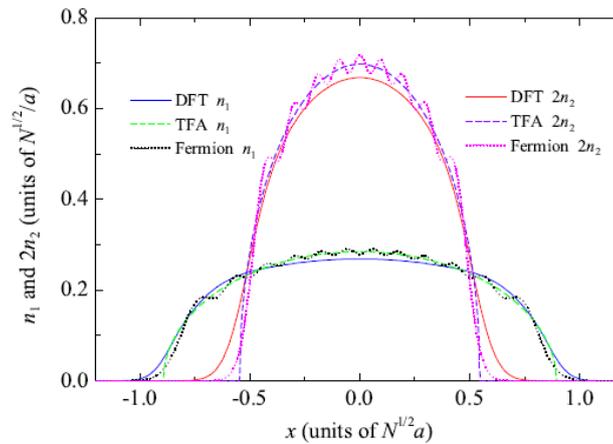


图 5-6 一维自旋-1 玻色气体在强相互作用及 $P = 0.4$ 时的密度分布。 n_1 、 $2n_2$ 的计算分别根据 $U = 50$ 时的 DFT (实线)、 $U = +\infty$ 时的 TFA (虚线) 及 $N = 30$ 的无相互作用费米子 (点线)。图中呈现相分离, 玻色气体的两翼由极化粒子构成。DFT 得到的密度范围显然要大于 TFA 的结果。

以 $P = 0.4$ 为例, 我们在图 5-6 比较了不同方法计算所得的两分量密度。实线是 DFT 方法迭代求解 KS 方程(5.42)(5.43)的结果。虚线是 TFA 在相互作用无穷大时公式(5.48)的解析结果。图中还给出了根据玻色-费米映射方法所得到的 $N = 30$ 个无相互作用费米子的密度分布。我们容易识别出极化分量密度 n_1 在 TG 极限下具有 12 个小峰的密度振荡; 以及配对分量密度 n_2 的 9 个小峰的密度振荡, 表示形成了玻色-玻色配对的 TG 气体。

有意义的是中心密度 $n^{(0)}$ 的非单调性, 它在 $P = 0$ 时已经发生过。我们仔细考察一下极化玻色子、配对玻色子和总密度峰值的升降。图 5-7 给出了中心密度在不同 P

下随相互作用参数 U 的演化。极化玻色子的中心密度 $n_1^{(0)}$ 在 $P=0$ 时是常数 0，因为这时没有粒子 I；在 $P=1$ 时成为标量玻色气体的单减曲线。在部分极化 $0 < P < 1$ 的情况， $n_1^{(0)}$ 的峰值很快减小到极小值 $n_{1\min}^{(0)}$ 然后慢慢趋近于强相互作用时的常数值。随着 P 的增大，对应 $n_{1\min}^{(0)}$ 的相互作用强度 U 逐渐偏移至强相互作用区直至 $P=1$ 时无极值出现。另一方面，配对玻色子的中心密度 $n_2^{(0)}$ 在 $P=1$ 时是常数值 0，因为此时系统中没有配对粒子，在完全配对 $P=0$ 时好像是一条单减曲线。但我们已从图 5-3 中知道， $P=0$ 情况确实也存在由于密度-密度作用和自旋交换作用竞争而引起的极小值。竞争在所有部分极化的情况依然存在。它导致了中心密度 $n_2^{(0)}$ 随相互作用变化的曲线上出现一些微小的浅湾区。由图 5-7 中间的小图可以看出显现最小值 $n_{2\min}^{(0)}$ 的地方是随着 P 的增大而偏向弱作用区的。总中心密度是上述两分量中心密度的叠加， $n^{(0)} = n_1^{(0)} + 2n_2^{(0)}$ 。右小图表明对于所有极化和完全极化 $0 \leq P < 1$ 的情况， $n^{(0)}$ 都会出现最小值。在强相互作用区 $n^{(0)}$ 随着 P 的增大开始略有增加然后几乎线性减小。

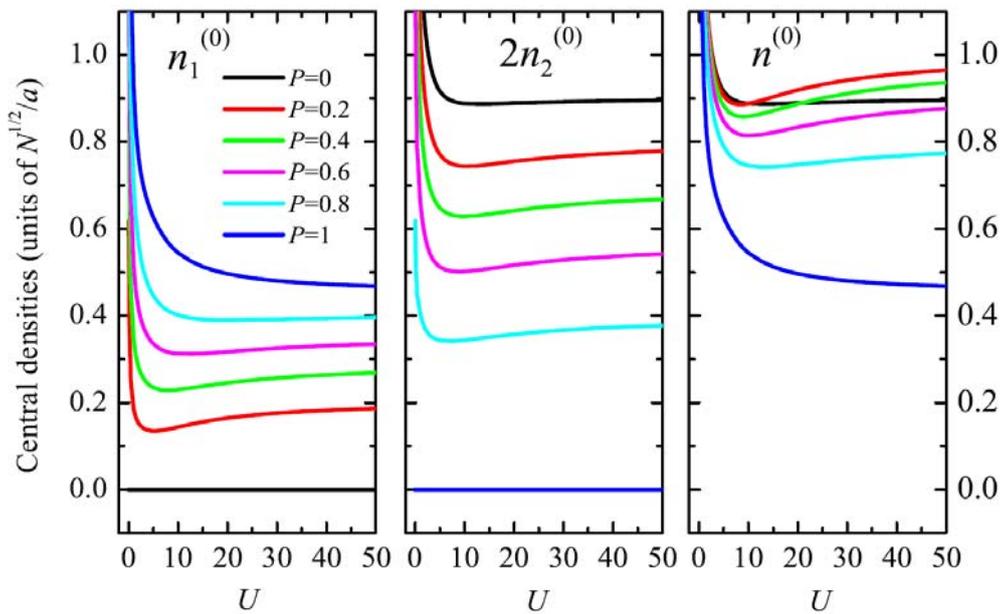


图 5-7 一维自旋-1 玻色气体的中心密度 $n_1^{(0)}$, $n_2^{(0)}$, $n^{(0)}$ (从左到右的小图) 随相互作用 U 的变化。在部分极化情况 $0 < P < 1$ ，这些中心密度都呈现非单调性。

中心密度与相互作用的非单调关系是平均场理论所没有发现的。在平均场理论中，设第 i ($i=+, -, 0$) 分量的序参数为 φ_i ，平均场能量泛函则为

$$E_0 = \int dx \left[\varphi_i^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \varphi_i + \frac{c_0^{1D}}{2} n^2 \right] + \int dx \left[\frac{c_2^{1D}}{2} \varphi_k^* \varphi_i^* (S_\eta)_{ij} (S_\eta)_{kl} \varphi_j \varphi_l \right], \quad (5.50)$$

其中 $S_{\eta=x,y,z}$ 是自旋-1 矩阵，总密度 $n = \sum_i n_i$ 且 $n_i = |\varphi_i|^2$ 。自旋相关项的确切表示为

$$\varphi_k^* \varphi_i^* (S_\eta)_{ij} (S_\eta)_{kl} \varphi_j \varphi_l = n_+^2 + n_-^2 + 2n_0 n_- + 2n_+ n_0 - 2n_+ n_- + 2\varphi_0^{*2} \varphi_+ \varphi_- + 2\varphi_0^2 \varphi_+^* \varphi_-^*. \quad (5.51)$$

由 $i\hbar \partial \varphi_i / \partial t = \delta E_0 / \delta \varphi_i^*$ ，从(5.50)能得到下列 G-P 方程：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_+ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + c_0^{1D} n + c_2^{1D} (n_+ + n_0 - n_-) \right] \varphi_+ + c_2^{1D} \varphi_0^2 \varphi_-^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_0 &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + c_0^{1D} n + c_2^{1D} (n_+ + n_-) \right] \varphi_0 + 2c_2^{1D} \varphi_+ \varphi_- \varphi_0^*, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_- &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + c_0^{1D} n + c_2^{1D} (n_- + n_0 - n_+) \right] \varphi_- + c_2^{1D} \varphi_0^2 \varphi_+^*. \end{aligned}$$

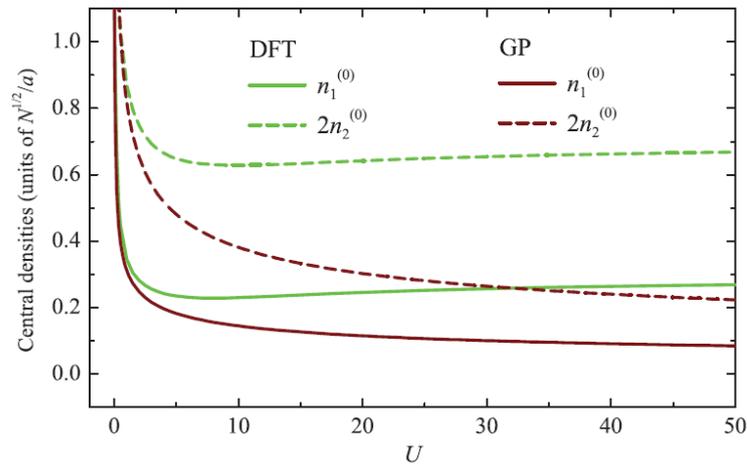


图 5-8 比较两种理论所计算的中央密度 $n_1^{(0)}$ (实线) 和 $2n_2^{(0)}$ (虚线)。平均场理论 G-P 方程给出的是酒红色线，密度泛函 KS 方程对应的是绿色线。在此总极化率 $P=0.4$ 。

在 $c_0^{1D} = c_2^{1D} = g > 0$ 条件下，并以 $P=0.4$ 为例，我们基于上述 G-P 方程计算了不

同相互作用强度下的各分量密度分布。正如文献[20][31]对 ^{23}Na 的研究, 因为 $c_2^{1D} > 0$, 这里同样得到 $n_0 = 0$, 则 $n_2 = n_-$ 。计算结果在图 5-8 中, 中心密度 $n_1^{(0)}$ 和 $2n_2^{(0)}$ 分别标记为酒红色的实线与酒红色的虚线。可见它们都随相互作用 U 的增大而单调减小。同时, 图 5-8 也给出了 DFT 的结果 (绿色的实线与虚线, 即图 5-7 中的绿线) 作比较。显然, 在弱相互作用区域两种理论的结果一致, 但相互作用变大时, 两理论的结果出现不同。平均场理论不能给出强相互作用区的非单调性, 而且它由于忽略了配对之间的束缚能而低估了中心密度的值。我们的 DFT 则顾及到了这一点。

图 5-9 展示了强相互作用 ($U = 50$) 时随着 P 的增加, 总中心密度的非单调性以及极化玻色子 (逐渐向上) 和配对玻色子 (逐渐向下) 中心密度的单调性。图中 DFT 的计算结果和 TFA 的解析结果做了比较。我们发现在 $U = 50$ 时所有极化情况的中心密度都接近 TFA 的极限值。TFA 在强极限相互作用时的密度分布可从(5.48)推得为:

$$\begin{aligned} n_1^{(0)} &= \frac{\sqrt{2NP}}{\pi a}, \\ 2n_2^{(0)} &= \frac{2\sqrt{2N(1-P)}}{\pi a}, \\ n^{(0)} &= \frac{\sqrt{2N}(\sqrt{P} + 2\sqrt{1-P})}{\pi a}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

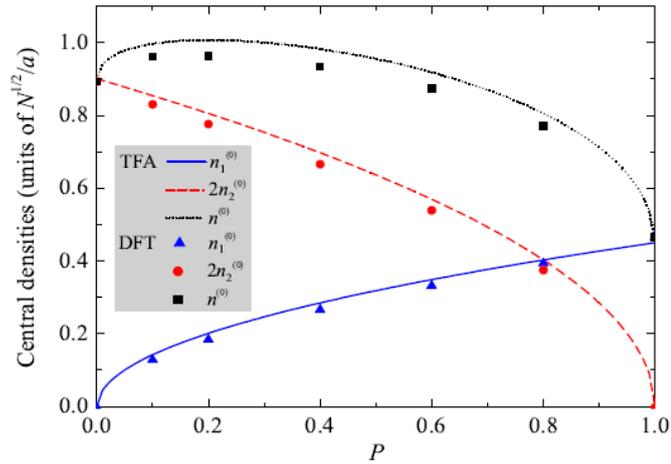


图 5-9 一维自旋-1 玻色气体的中心密度 $n_1^{(0)}$, $n_2^{(0)}$, $n^{(0)}$ 在强相互作用下随总极化率 P 的变化。 $U = 50$ 时的 DFT 结果 (符号) 符合 $U = +\infty$ 时的 TFA 的结果 (线)。

可以通过定义轴半径（即气体半径，指密度消失处至势阱中心的距离）来进一步详细研究旋量气体的量子相。图 5-10 给出了极化和配对分量的轴半径作为总极化率 P 的函数的相图。其中给出的是数值求解 KS 方程在相互作用参数 $U = 50$ 的结果。不失一般性，我们令数值模拟中标度密度消失的阈值为 0.02。两条轴半径的交叉将相平面分为三个量子相：自旋单体配对相 S、铁磁自旋极化相 F、玻色-玻色配对和未配对玻色子的混合相 M。另外 V 表示真空区。在低极化率区间，势阱中心形成部分极化区。随着极化率的增加这个区域的半径增大。在临界极化率 P_c 处，部分极化的区域扩展到整个气体云的边界。当极化率进一步增加时，原子云的边界变成全极化的。这个过程可以清楚地从图 5-5 中最下一行小图中看出。

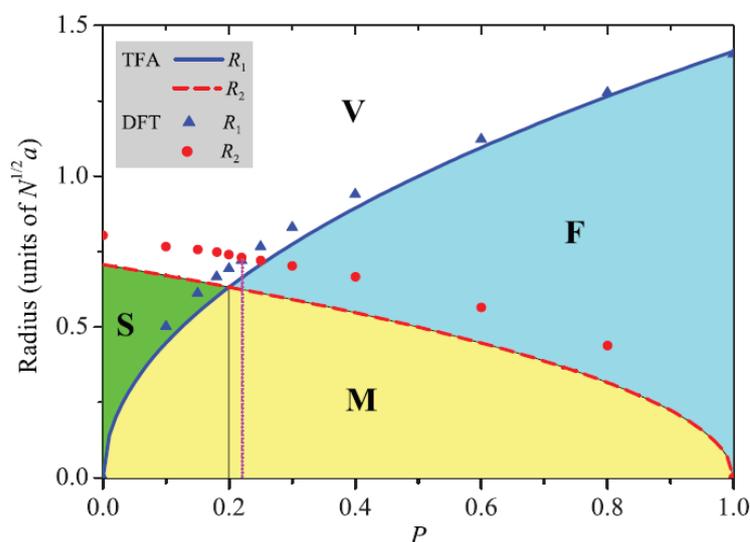


图 5-10 一维自旋-1 玻色气体的 $R-P$ 相图。三个量子相为：自旋单体配对相 (S)，自旋平行铁磁相 (F) 配对和未配对玻色子的混合相 (M)，V 表示真空态。图中比较了 $U = 50$ 时的 DFT 结果 ($n_1, 2n_2 < 0.02$ 看作标度密度消失的条件) 和 $U = +\infty$ 时的 TFA 的解析结果。

图 5-10 还给出了 TFA 的理论结果以作对比。据(5.48)，TFA 计算密度消失对应的半径为：

$$\begin{aligned} R_1 &= \sqrt{2NP}a, \\ R_2 &= \sqrt{\frac{N(1-P)}{2}}a. \end{aligned} \quad (5.53)$$

当上面两半径相等时，可求得临界极化率 $P_c = 0.2$ 和临界半径 $R_c = 0.63$ 。DFT 求得的

极化和完全配对情况下两分量的半径显然都大于 TFA 的结果。这可以从图 5-10 中两种方法所求密度的边界看出。这种差别是由于 TFA 中忽略了动能。由 DFT 方法得到的临界极化率 $P \approx 0.23$ ，临界半径 $R_c \approx 0.63$ 。这些值比 TFA 得到的都略大。

文献[25]也研究了强相互作用时的相分离现象。在那里，他们用 TBA 的方法作了强相互作用时 n_1 、 n_2 的 Thomas-Fermi 半径随 P 变化的相图，但不同于我们的图 5-10。我们的方法适用于整个相互作用区，而且我们发现了中等作用区间极化玻色气体密度的双模结构。在第三章所介绍的有关自旋非平衡的两分量费米气体的实验中，束缚在一维通道中超冷 ${}^6\text{Li}$ 原子两自旋混合物的相分离现象已被报道过[27]。实验中部分极化核被两翼的配对或极化费米气所包围，这取决于极化率 P 。在本章的玻色旋量气体中，密度排斥作用影响到配对机制，这使得相分离的规律更为复杂。

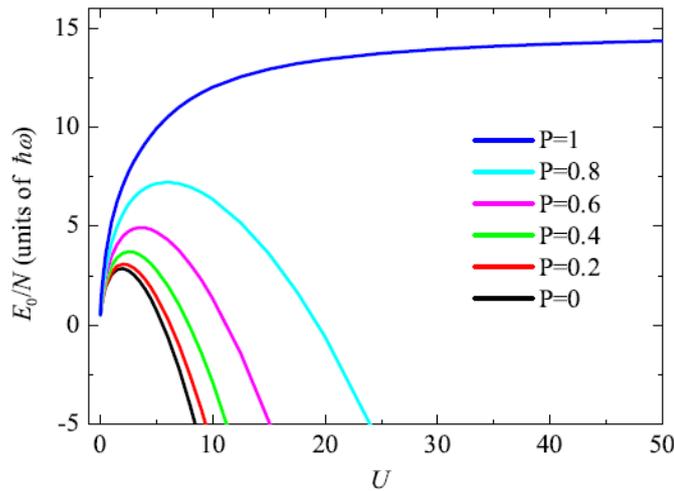


图 5-11 一维自旋-1 玻色气体的单粒子基态能在不同总极化率 P 下随相互作用强度 U 的变化。从下到上的实线对应 $P = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ 。

最后我们在图 5-11 描绘了单原子基态能量 E_0 随相互作用 U 和总极化率 P 的变化。此处 $P=0$ 的黑实线重复了图 5-4 中的结果。完全极化 $P=1$ 的系统等效于第二章所研究的一维简谐势下的排斥标量玻色气体，但作用强度相当于后者的二倍，这时 E_0 单调增加并趋近于无相互作用费米系统的基态能量。在这两极限之间是部分极化 $0 < P < 1$ 的系统，其间有正能量（包括动能、外势能、密度-密度排斥相互作用能）

和负能量（反铁磁玻色-玻色配对中的束缚能）的竞争，从而引起 E_0 与 U 的非单调性关系。在弱相互作用时，排斥相互作用占优势， E_0 随 U 增加。强相互作用时，排斥相互作用能增加很慢并逐渐趋于常数，而束缚能一直二次项降低。大的极化率一个破坏玻色原子间的配对从而减小配对束缚能的效应直至 $P=1$ 时 E_0 的单调行为。

第五节 小结

总之，我们用 DFT 方法研究了一维简谐束缚下自旋-1 玻色气体的基态密度分布和能量，求解了基于 LDA 和 BA 精确解的 KS 方程。其结果显示密度-密度排斥相互作用和反铁磁交换相互作用之间的竞争使得密度分布和能量随相互作用的变化很复杂。我们发现了自旋单体配对和极化玻色子中心密度的非单调行为。中等相互作用强度时，一些极化玻色子被排斥于势阱中心之外显示了密度分布曲线上的双峰结构。总密度表现为配对玻色子加在极化玻色子之上的双模分布。强相互作用时发生相分离，随 P 不同，部分极化核被两翼的配对或极化玻色子所包围。我们还给出了强相互作用时的 R-P 相图并发现 DFT 方法所得的临界值比 TFA 的结果略大。虽然这里处理的是一个具有相等强度的密度-密度排斥作用和反铁磁自旋交换作用的可积系统，其结果可以为相关的旋量气体研究提供参考。我们推测，类似于一维外势下的费米气体[27]，这里研究的新奇量子现象可以通过实验上的原位成像 (*in situ imaging*) 技术探测到。

参考文献

- [1] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (1998) **80**, 2027.
- [2] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. (1999) **82**, 2228.
- [3] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. (1999) **83**, 2498.
- [4] M. D. Barrett, J. A. Sauer, and M. S. Chapman, Phys. Rev. Lett. (2001) **87**, 010404.
- [5] A. Crubellier, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, M. Elbs, H. Knockel, and E. Tiemann,

- Eur. Phys. J. D (1999) **6**, 211.
- [6] E. G. M. van Kempen, S. J. J. M. F. Kokkelmans, D. J. Heinzen and B. J. Verhaar, Phys. Rev. Lett. (2002) **88**, 093201.
- [7] T. Ohmi and K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. (1998) **67**, 1822.
- [8] T.-L. Ho, Phys. Rev. Lett. (1998) **81**, 742.
- [9] M. Koashi and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. (2000) **84**, 1066.
- [10] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. (1998) **81**, 5257.
- [11] H. Pu, C. K. Law, S. Raghavan, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. A (1999) **60**, 1463.
- [12] W. Zhang, D. L. Zhou, M-S. Chang, M. S. Chapman, and L. You, Phys. Rev. A (2005) **72**, 013602.
- [13] J. Zhang, T. Li, and Y. Zhang, Phys. Rev. A (2011) **83**, 023614.
- [14] T.-L. Ho and S.-K. Yip, Phys. Rev. Lett. (2000) **84**, 4031.
- [15] E. J. Mueller, T.-L. Ho, M. Ueda, and G. Baym, Phys. Rev. A (2006) **74**, 033612.
- [16] J. Zhang, Z. F. Xu, and L. You, Y. Zhang, Phys. Rev. A (2010) **82**, 013625.
- [17] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, Rev. Mod. Phys. (2011) **83**, 1405.
- [18] X.-W. Guan, M. T. Batchelor and C. Lee, arXiv:1301.6446.
- [19] W. Zhang and L. You, Phys. Rev. A (2005) **71**, 025603.
- [20] Y. Hao, Y. Zhang, J. Q. Liang, and S. Chen, Phys. Rev. A (2006) **73**, 053605.
- [21] J. Cao, Y. Jiang, and Y. Wang, Europhys. Lett. (2007) **79**, 30005.
- [22] F. Deuretzbacher, K. Fredenhagen, D. Becker, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche, Phys. Rev. Lett. (2008) **100**, 160405.
- [23] M. D. Girardeau, Phys. Rev. A (2011) **83**, 011601(R).
- [24] F. H. L. Essler, G. V. Shlyapnikov, and A. M. Tsvelik, J. Stat. Mech. (2009) **02**, P02027.
- [25] J. Y. Lee, X.-W. Guan, M. T. Batchelor, and C. Lee, Phys. Rev. A (2009) **80**, 063625.
- [26] C. C. N. Kuhn, X. W. Guan, A. Foerster, and M. T. Batchelor, Phys. Rev. A (2012) **85**,

- 043606; *ibid.* (2012) **86**, 011605(R).
- [27] Y. Liao, A. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. Patridge, R. Hulet, S. Baure, and E. Mueller, *Nature (London)* (2010) **467**, 567.
- [28] S. De, D. L. Campbell, R. M. Price, A. Putra, B. M. Anderson, and I. B. Spielman, *arXiv:1211.3127*.
- [29] A. Vinit, E. M. Bookjans, C. A. R. Sá de Melo, and C. Raman, *Phys. Rev. Lett.* (2013) **110**, 165301.
- [30] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* (1998) **81**, 938; T. Bergeman, M.G. Moore, and M. Olshanii, *ibid.* (2003) **91**, 163201.
- [31] W. Bao and F. Y. Lim, *SIAM J. Sci. Comput.* (2008) **30**, 1925.

总结与展望

一维量子多体系统是典型的强关联系统，而一维多分量气体由于不同粒子相互作用的竞争会表现出更为复杂的性质。我们从理论上借助密度泛函理论关注了外势束缚下一维多分量冷原子气体在不同相互作用区及不同粒子数比例下的基态性质。

对于一维简谐势阱中的具有相互排斥作用的玻色费米混合物，我们发现随着相互作用强度的增大，玻色分量的密度曲线会从标准的高斯曲线逐渐趋近于 TG 气体时的半椭圆形状，同时密度曲线上出现了反映玻色费米间强关联性质的振荡。费米分量的中心密度随相互作用的增大而减小，当相互作用到一定强度时，一些费米子被排斥在势阱中心之外，显示出玻色费米部分相分离。在无限强排斥相互作用下，玻色费米混合物的基态能量和总密度与都相当于完全费米化。

对于一维简谐束缚势下具有排斥密度-密度相互作用和反铁磁自旋交换相互作用的自旋-1 玻色子，这时系统中存在自旋分量为+1 和-1 或 0 和 0 玻色子结成的配对以及未参与配对自旋分量为+1 的极化玻色子。我们发现在一定的相互作用强度和一定的粒子数比例下，会出现配对分量和极化分量的相分离。在强作用下，它们各自趋近于玻色-玻色对的 TG 气体和标量玻色 TG 气体的密度分布曲线。密度相互作用和自旋交换之间的竞争会引起中心密度与相互作用强度关系的非单调性。

下一页的表格中总结和比较了两分量费米气体、自旋-1 玻色气体及玻色费米混合物在简谐外势中相分离的特点。目前两分量费米气体的相分离现象已经被实验证实，期望我们关于自旋-1 玻色气体与玻色费米混合物的理论结果也能得到实验检验。本论文中主要研究的是一维量子系统的基态性质，下一阶段我们将研究它们的热力学和动力学性质。

一维简谐外势下多分量量子系统的相分离

系统	相分离			解释
	势阱中心	外围		
		$P < P_c$	$P > P_c$	
自旋-1/2 费米气体	FFLO 相： 配对费米子 与 极化费米子	配对费米子	极化费米子	配对： $s=+1/2$ 与 $s=-1/2$ 的两个费米子。
自旋-1 玻色气体	M 相： 配对玻色子 与 极化玻色子	配对玻色子	极化玻色子	配对： $s=+1$ 与 $s=-1$ 的两个玻色子，或两个 $s=0$ 的玻色子。 非单调性：源于不同 相互作用之间的竞争。
玻色费米 混合气体	M 相： 玻色子 与 费米子	费米子		玻色费米映射方法： 无相分离； 密度泛函理论：有相 分离。

攻读博士学位期间发表文章

[1] **Hongmei Wang**, Yajiang Hao, and Yunbo Zhang, **Density-functional theory for one-dimensional harmonically trapped Bose-Fermi mixture**, *Phy. Rev. A* (2012) **85**, 053630. (SCI)

[2] **Hongmei Wang** and Yunbo Zhang, **Density-functional theory for the spin-1 bosons in a one-dimensional harmonic trap**, *Phy. Rev. A* (2013) **88**, 023626. (SCI)

致谢

借毕业论文完成之际，谨向所有在我读博期间给予关心和帮助的各位表示衷心感谢！

感谢我的导师张云波教授！张老师以其严谨认真的科研态度和严格负责的治学态度，在我六年多的学习中给予悉心的指导和教诲；在我论文的选题、理论问题的每一步推导、文章逐字逐句的修改等各方面都耗费了大量的时间和心血，这种敬业精神和辛苦使我感动和感激。

感谢张云波老师研究小组各位同学的相互帮助和鼓励！

感谢山西大学物电学院理论所各位老师所创建的良好学习环境！

感谢浙江师范大学数理信息学院高先龙教授在密度泛函方法上，及在我浙江师大访问期间所提供的帮助！

感谢中科院武汉物理与数学研究所管习文研究员和中科院物理所曹俊鹏研究员就一维问题所作的有益讨论！

感谢太原师范学院物理系各位领导和同事的关心和支持！

感谢我家人的理解和关爱！

王红梅

2013年12月

个人简况及联系方式

姓名：王红梅

性别：女

籍贯：山西省灵丘县

学习经历：

1992.9——1996.7 山西大学物理系理论物理专业，本科生

1996.9——1999.7 山西大学科技与社会研究所科学哲学专业，硕士研究生

2007.9——2013.12 山西大学理论物理研究所凝聚态物理专业，博士研究生

工作经历：

1999.7——今 太原师范学院物理系，教师

电子邮箱：stwhmei@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：

年 月 日

学位论文使用授权声明

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

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：

导师签名：

年 月 日

