

2018 届硕士学位论文

单自旋翻转一维费米气体的关联函数研究

作者姓名	张瑞江
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	2015 年 9 月至 2018 年 6 月

二〇一八年六月

山西大学

2018 届硕士学位论文

单自旋翻转一维费米气体的关联函数研究

作者姓名	张瑞江
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	2015 年 9 月至 2018 年 6 月

二〇一八年六月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2018

**Correlation Function of Single Spin Flipped One
Dimensional Fermi Gas**

Student Name	Ruijiang Zhang
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Specialty	Cold Atom Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2015.09-2018.06

June, 2018

中文摘要.....	I
ABSTRACT.....	III
第一章 绪论.....	1
1.1 模型介绍.....	1
1.1.1 Lieb-Liniger 模型.....	1
1.1.2 Gaudin-Yang 模型.....	2
1.2 关联函数.....	3
1.2.1 波函数归一化.....	5
1.2.2 单体关联函数.....	6
1.2.3 二阶关联函数.....	8
1.2.4 高阶局域关联函数.....	10
1.3 本文结构安排.....	12
第二章 费米气体中的关联函数.....	13
2.1 无自旋费米系统.....	13
2.1.1 波函数的归一化.....	13
2.1.2 单体关联函数.....	16
2.1.3 二阶关联函数.....	17
2.2 单自旋翻转相互作用费米气体.....	19
2.2.1 归一化因子.....	20
2.2.2 单体关联函数.....	23
2.2.3 二阶关联函数.....	26
2.2.4 对关联函数.....	31
第三章 波函数和 Bethe Ansatz 方程组.....	35
3.1 波函数的推导.....	35
3.2 数值求解 Bethe Ansatz 方程组.....	40
第四章 蒙特卡洛方法求解关联函数.....	43
4.1 蒙特卡洛方法简介.....	43
4.1.1 随机投针法.....	44
4.1.2 蒙特卡洛平均值法.....	45

4.2 数值计算关联函数.....	48
第五章 总结与展望	51
附录 A.....	53
附录 B.....	55
参考文献.....	57
攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目	61
致 谢	63
个人简况及联系方式	65
承 诺 书.....	67
学位论文使用授权声明.....	69

Contents

Chinese Abstract	I
ABSTRACT	III
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Model Introduction	1
1.1.1 Lieb-Liniger Model	1
1.1.2 Gaudin-Yang Model	2
1.2 Correlation Function	3
1.2.1 Normalization of Wave Function	5
1.2.2 One Body Correlation Function	6
1.2.3 Second Order Correlation Function	8
1.2.4 High Order Local Correlation Function	10
1.3 Main Contents of this Thesis	12
Chapter 2 Correlation Functions in Fermi Gas	13
2.1 Spinless Fermi System	13
2.1.1 Normalization of Wave Function	13
2.1.2 One Body Correlation Function	16
2.1.3 Second Order Correlation Function	17
2.2 Single Spin Reversed 1D Interacting Fermi Gas	19
2.2.1 Normalization Factor	20
2.2.2 One Body Correlation Function	23
2.2.3 Second Order Correlation Function	26
2.2.4 Pair Correlation Function	31
Chapter 3 Wave Function and Bethe Ansatz Equations	35
3.1 Derivation of Wave Function.....	35
3.2 Numerical Solution of Bethe Ansatz Equations	40
Chapter 4 Monte Carlo Method for Solving Correlation Functions	43
4.1 Monte Carlo Method Introduction.....	43
4.1.1 Radom Shot.....	42
4.1.2 Mean Value of Monte Carlo	43

4.2 Numerical Calculation of Correlation Function	48
Chapter 5 Summary and Outlook	49
Appedix A	49
Appedix B	49
References	51
Research Achievements	61
Acknowledgment	63
Personal Profiles	59
Letter of Commitment	67
Authorization Statement	69

中文摘要

一维量子气体的研究多年来一直是冷原子物理领域的热点之一。根据系统的成分，量子气体可以分为费米、玻色和玻色费米混合物；根据系统中粒子的排布情况，可以分为连续模型和格点模型。本文主要简单介绍连续模型中关联函数的推导以及对单粒子翻转吸引费米气体模型中关联函数进行数值计算和分析。

本文主要对一维模型做了简单介绍，然后在不同的连续模型背景下，把模型中对应的各种关联函数进行了精确计算。从玻色系统出发，利用波函数的交换对称性和算符之间的对易关系，将模型中的单体关联，二阶关联以及高阶局域关联进行了解析推导。进而利用玻色系统中的计算思路将无自旋费米系统中的关联函数也进行计算，然后在无自旋费米系统中加入自旋这一自由度，系统就变成了 Gaudin-Yang 模型。

文中主要研究的模型为一个粒子自旋向下其余粒子自旋向上，吸引相互作用的特殊 Gaudin-Yang 模型，也即单自旋翻转费米气体。自旋向下的粒子相对于其余粒子可视为杂质，然后利用与前两个模型相同的方法对关联函数解析推导出表达式，接着利用 Bethe Ansatz(BA)方法将系统所对应的一次量子化波函数进行了解析推导，并用数值对模型所对应的 BA 方程组进行求解，得出每个粒子所对应的准动量以及系统的自旋速度，随后把它们带入波函数的表达式中，再利用蒙特卡洛方法对函数表达式的多重积分进行计算，从而得到关联函数的数值结果。

最后将单体关联函数和二阶关联函数在不同相互作用强度下作图。对比得出，向上自旋粒子的单体关联和二阶关联函数图像形状随相互作用强度变化，在尖端部分变的更窄，但趋势保持不变；将上下自旋粒子之间的二阶关联函数作图发现，有自旋向下粒子存在的位置，发现自旋向上粒子的概率很大，随着相互作用的增强，概率不断变大。说明吸引相互作用只对自旋相反粒子之间的关联有影响。

关键词：杂质；相互作用；Bethe Ansatz；关联函数

ABSTRACT

The study of one-dimensional quantum gas has been one of the hot spots in the field of cold atomic physics for many years. Quantum gas can be classified according to the statistical property into Fermi, Bose and Bose Fermi mixtures system, described by either the continuous model or the lattice model. This paper deals with the details of the derivation of correlation functions in continuous model, numerical calculation and analysis of correlation functions of an attractively interacting Fermi gas with single spin reversed.

With a brief introduction to one dimensional model, we accurately calculate all kinds of corresponding correlation functions in different continuous models. Starting from the Bose system, one-body correlation function, second-order correlation function and high-order local correlation function in the model are analytical derived by using the symmetry of wave functions and commutation relations between the operators. Then, the method in the Bose system is applied to calculate the correlation functions in the spinless Fermi system. Next, the spin degree is added to the spinless Fermi system, which becomes Gaudin-Yang model.

The model studied in this paper is a special Gaudin-Yang model in which one particle reverses its spin and interacts with other particles attractively. This model can be also called single spin flipped Fermi gas. The spin-down particle can be regarded as an impurity compared with the rest of particles. Then correlation functions are analytical calculated by the same method as the first two models. Then the Bethe Ansatz (BA) method is used to deduce first quantized wave function corresponding to the system. BA equations corresponding to the model are solved numerically. By doing all these, the quasi-momentum and the system's spin rapidity corresponding to each particle are obtained. And then they are brought into the expression of the wave function and we apply the Monte Carlo method to calculate the

multiple integrals of the function expression, to get the numerical results of the correlation functions.

We analyze the one-body correlation function and the second-order correlation function for different interaction strengths. By comparison, the shape of one-body correlation function and the second-order correlation function between up-spin particles change with the strength of interactions: it becomes narrower at the tip, but the trend remains unchanged. The second-order correlation function between spin up and spin down particles shows that at the position of the spin down particles, the probability of finding spin-up particles is large, and it becomes larger with the enhancement of interaction. This shows that the attraction interaction only affects on the correlation between up-spin and down-spin.

Key words: Impurity; Interaction; Bethe Ansatz; Correlation function

第一章 绪论

超冷量子气体为探索新的多体量子现象提供了崭新的研究平台^[1]。1995 年，玻色爱因斯坦凝聚(BEC)的首次实验实现^[2]标志着基于超冷原子的量子多体理论的研究进入一个飞速发展的时代。最初，人们在磁光阱中囚禁铷^[2]和钠原子蒸气团^[3]，再结合蒸发冷却技术来实现 BEC 的制备。而后来的光学偶极阱的出现解放了 BEC 的内部自由度^[4]，从而为旋量 BEC 的实验研究打开了一扇窗。当然，除玻色凝聚之外，费米子在量子简并状态下的物理性质也具有极为重要研究价值^[5]，例如在低温下，费米子从正常相向 BCS 超导相的相变一直是凝聚态物理中极为重要物理现象。此外，近些年人们所广泛关注的拓扑超流态、Majorana 费米子也是费米体系重要的研究课题^[5]。通常情况下，费米子的冷却温度较玻色子而言更低，因而在玻色-费米混合物中利用玻色子来冷却费米子的共同冷却技术的发展和应用于简并费米气体的实验制备提供了良好的技术支撑^[6]。目前，实验上较为常见的简并费米气体有 ^{40}K ^[7]和 ^6Li ^[8]并且人们已经在远低于临界温度之下的系统中观测到了 Cooper 对组成的超流态^[9]和分子^[10]。除上述讨论的连续系统外，如果利用激光驻波在一个或多个空间维度上形成光晶格偶极势阱，然后在晶格势中载入超冷原子，如此可以用来模拟真实固体中的晶体结构^[11]。相较于固体中的凝聚态材料，冷原子系统的最大优点是便于操控。例如，人们通过 Feshbach 共振技术可以在很大范围内调节原子间的相互作用，而原子间相互作用对多体的关联特性会产生很大的影响。

1.1 模型介绍

本文考虑连续系统，并且仅仅考虑原子间具有两体的 δ 接触相互作用。根据粒子种类的不同，我们依次分别介绍无自旋玻色子的 Lieb-Liniger 模型和两分量费米子的 Gaudin-Yang 模型。

1.1.1 Lieb-Liniger 模型

Lieb-Liniger 模型最早是在 1963 年由 Lieb 和 Liniger 两位科学家利用 BA 方法对分布均匀的无自旋玻色子给出了精确解，所以一般称之为 Lieb-Liniger 模型^{[12][13]}。在自然单位下，系统的哈密顿量可以表示为

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i<j}^N \delta(x_i - x_j) \quad (1.1)$$

式中第一项为动能，第二项为相互作用势能，考虑到系统为接触相互作用，所以只有当同一位置有至少两个粒子的时候，才有相互作用项。 i 是对粒子的编号， x_i 表示该粒子的坐标， c 为相互作用系数，单位为长度的倒数。当 $c > 0$ 时，粒子间的相互作用为排斥；当 $c < 0$ 时，相互作用为吸引。假定系统由 N 个粒子组成，系统长度为 L 。在实际计算中，从哈密顿量的一次化形式出发居多，故此不将哈密顿量二次量子化。

系统波函数的 BA 假设为

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{Q,P} \theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}) A(Q,P) e^{i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_{Q_j}} \quad (1.2)$$

式中 $\theta(x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N})$ 是阶跃函数，只有当 $x_{Q_1} < x_{Q_2} < \dots < x_{Q_N}$ 时为1，其余情况均为0。 Q 表示粒子所处位置的排序， P 表示粒子对应动量的排序， A 是波函数中的系数，由坐标排序和动量排序两者一起确定。系统波函数满足交换对称性，即交换任意两个粒子的坐标，波函数不变。

把(1.1)和(1.2)一起代入系统的本征方程 $H\psi = E\psi$ ，通过解方程得到本征能量为 $E = \sum_{i=1}^N k_i^2$ ，总的动量为 $K = \sum_{i=1}^N k_i$ ，利用系统的边界条件，连续性条件以及波函数的对称性，可以解出系统的 BA 方程组

$$e^{ik_j L} = \prod_{s \neq j}^N \frac{k_j - k_s + ic}{k_j - k_s - ic}, \quad j = 1, \dots, N \quad (1.3)$$

其中， k_j 和 k_s 是粒子的准动量。通过求解(1.3)，可以确定系统的波函数，进而计算更多的物理量。

1.1.2 Gaudin-Yang 模型

δ 接触相互作用下的系统中填充粒子是费米子情形在 1967 年分别由 Gaudin 和 C. N. Yang 独立给出了精确解，故一般称该模型为 Gaudin-Yang 模型^{[14][15]}。

Gaudin-Yang 模型假定系统的长度为 L ，里面填充了 N 个自旋为上或下的费米子，其哈密顿量为

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) \quad (1.4)$$

其形式与 Lieb-Liniger 模型的哈密顿量相同，不同之处在于，此处粒子的放置受到泡利不相容原理的限制，同一个态上只能放置自旋不相同的粒子。系统对应的波函数形式也与玻色系统的波函数相同，不一样的是此处波函数满足交换反对称，即交换任意两个粒子的坐标和自旋，波函数出现负号。所以和 Lieb-Liniger 模型计算方法相同，可以解得系统总能量和总动量也为 $E = \sum_{i=1}^N k_i^2$ 和 $K = \sum_{i=1}^N k_i$ 。

系统所对应的 BA 方程组为

$$e^{ik_j L} = \prod_{\alpha=1}^M \frac{k_j - \lambda_{\alpha} + ic'}{k_j - \lambda_{\alpha} - ic'}, \quad j=1, \dots, N \quad (1.5)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{k_j - \lambda_{\alpha} + ic'}{k_j - \lambda_{\alpha} - ic'} = \prod_{\beta=1}^M \frac{\lambda_{\alpha} - \lambda_{\beta} - ic'}{\lambda_{\alpha} - \lambda_{\beta} + ic'}, \quad \alpha=1, \dots, M \quad (1.6)$$

其中， M 表示向下自旋粒子数， k_j 为粒子的准动量， λ_{α} 和 λ_{β} 均为自旋速度， $c' = c/2$ 。通过上述条件以及费米子波函数的交换反对称性质，可以求解一系列物理量。

1.2 关联函数

关联函数是用来描述关联效应的一个函数，是根据变量之间的空间或时间间隔给出随机变量之间的统计相关性。考虑两个不同点测量相同数量随机变量之间的关联函数，通常称为自相关函数，也即单体关联。不同随机变量的相关函数被称为互相关函数，以强调正在考虑不同的变量。关联函数作为时间或空间间隔的函数是一个非常实用的物理量，可以用来评估样本点之间所需的距离。关联函数可以用于天文学，财务分析，计量经济学和统计力学，仅在它们所应用的特定随机过程中有所不同。在多体物理中，关联函数包括单体关联、两体(二阶)关联以及多体(高阶)关联。本文我们将研究不同系统的关联函数，在本节我们将对研究背景进行详细的介绍。

对于一维 Bose 均匀系统，如果粒子之间是排斥相互作用可以通过 Lieb-Liniger 模型进行描述。基于本模型对 Bose 气体动力学和关联性质的研究进展如下：Calabrese 等人研究了一维强相互作用 Bose 体系三体和二体的局域关联函数^{[16][17]}；Girardeau 和 Kheruntsyan 等人通过 Lieb-Liniger 模型研究了受限原子气体的关联和动力学性质^[18-23]；Ferray 等人通过蒙特卡洛的方法研究了 Lieb-Liniger 模型基态的关联函数的行为^[24]；Cherny 等人研究了一维 Bose 体系动力学密度-密度关联^[25]。

近年来，人们对关联函数的研究保持着相当高的热情，除了对于 Lieb-Liniger 模

型关联函数的计算，对于其他模型，也有不小的进展。2015年，Patu 以及 Klumper 等人阐述了非均匀一维旋量玻色气体的热力学，密度分布和关联函数^[26]；2016年，Pereira 小组研究了一维无自旋费米气体中掺杂一个杂质模型对应的含时关联函数^[27]，同年11月，Poboiko 等人研究了在 $T > 0$ 的情况下，XXZ 自旋链中准粒子的自旋关联函数和衰变^[28]；2017年，Held 小组探讨了 Falicov-Kimball 模型的任意阶的局部关联函数^[29]，随后，Kassan-Ogly 等人研究了一维 $s = 1$ 情况下 Ising 模型的关联函数^[30]；2018年，管习文小组研究了一维吸引相互作用下 Hubbard 模型的渐近关联函数和 FFLO 特征^[31]。

最近在囚禁玻色凝聚物技术方面所取得的进展使得准一维(1D)系统的实验得以实现^[32-37]。准一维物理条件已经在高度各向异性的势阱中实现，在这样的势阱中原子的轴向运动受到较弱的约束，而径向运动通过紧密的横向势阱被冻结为零点振荡。这些实验成果重新引起了人们对一维玻色气体性质理论研究的兴趣^[38]。因为解析结果只能在强相互作用的玻色系统中获得^{[39][40]}，所以关于关联函数的知识甚少，并且对于单体密度矩阵的长程行为也是如此^{[41][42]}。故本节以 Lieb-Liniger 模型为例，对关联函数进行推导。

对于玻色系统，场算符 $\psi(x)$ 满足的对易关系如下：

$$[\psi(x), \psi^\dagger(y)] = \delta(x - y) \quad (1.7)$$

$$[\psi(x), \psi(y)] = [\psi^\dagger(x), \psi^\dagger(y)] = 0 \quad (1.8)$$

假定系统是由 N 个粒子组成，其波函数可以写作：

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{G}} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) |x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \quad (1.9)$$

$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 为波函数的系数，也是玻色子一次量子化的波函数， $1/\sqrt{G}$ 是波函数的归一化系数。其中基矢为

$$|x_1, x_2, \dots, x_N\rangle = \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) |0\rangle \quad (1.10)$$

这个基矢的表示在位置 x_1, x_2, \dots, x_N 产生 N 个玻色子，这套符号是在占有数表象， x_i 不是第 i 个粒子所在的位置坐标，表示在该位置产生一个粒子。该情形下的粒子是全同粒子，对于玻色子来说，对于玻色子一次量子化的波函数，满足交换对称性，即任

意交换两个粒子，波函数的值不变。

$$\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = \psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad (1.11)$$

1.2.1 波函数归一化

在这一小节，我们推导波函数的归一化

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{G}} \int_0^L dy_1 \int_0^L dy_2 \dots \int_0^L dy_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \\ &\times \frac{1}{\sqrt{G}} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) |x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \int_0^L dy_2 \dots \int_0^L dy_N \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \\ &\times \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \end{aligned} \quad (1.12)$$

首先计算内积，内积可以用产生湮灭算符的关系写出

$$\begin{aligned} \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ = \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.13)$$

在计算内积时，先将第一个湮灭算符作用到右矢

$$\begin{aligned} \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \\ = [\delta(y_1 - x_1) + \psi^\dagger(x_1) \psi(y_1)] \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

然后将 $\psi(y_1)$ 通过与产生算符的对易关系不断往后交换，直到湮灭算符移动到真空矢旁边，得到的结果可以整理为

$$\psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle = \sum_{i_1=1}^N \delta(y_1 - x_{i_1}) \prod_{j \neq i_1}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \quad (1.15)$$

同样的办法可以求得

$$\begin{aligned} \psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \\ = \sum_{i_1=1}^N \delta(y_1 - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(y_2 - x_{i_2}) \prod_{j \neq i_1, i_2}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.16)$$

据此可知

$$\begin{aligned} \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N = 1, \dots, N}^N \delta(y_1 - x_{i_1}) \delta(y_2 - x_{i_2}) \dots \delta(y_N - x_{i_N}) \langle 0 | 0 \rangle = \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(y_j - x_{P_j}) \end{aligned} \quad (1.17)$$

P 代表的是所有粒子的排列，一共有 $N!$ 种，可以看出上式是将 $\{y_j\}$ 作为固定排列，改变 $\{x_j\}$ 的排序使之与 $\{y_j\}$ 相对应，因此，我们可以类似的将 $\{x_j\}$ 固定，通过改变 $\{y_j\}$ 的排序与之对应。故(1.17)式也可以用表述为：

$$\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(x_j - y_{P_j}) \quad (1.18)$$

将(1.17)式代入(1.12)得

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(y_j - x_{P_j}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi^*(x_{P_1}, x_{P_2}, \dots, x_{P_N}) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi^*(x_1, x_2, \dots, x_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &= \frac{N!}{G} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 \end{aligned} \quad (1.19)$$

令(1.19)式结果为 1，得

$$G = N! \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 \quad (1.20)$$

以上第三个等号用到了波函数的交换对称性。 $\sum_P = N!$ 包含了 N 个粒子所有可能的排列。归一化因子 $1/\sqrt{G}$ 保证了在 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 归一的情况下， $|\Psi\rangle$ 也是归一的。

1.2.2 单体关联函数

单体关联函数也即一阶约化密度矩阵，定义为 $g_1(y, x) = \langle \psi^\dagger(y) \psi(x) \rangle$,

$$\begin{aligned} g_1(y, x) &= \langle \Psi | \psi^\dagger(y) \psi(x) | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \int_0^L dy_2 \dots \int_0^L dy_N \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \end{aligned} \quad (1.21)$$

计算的关键也是内积，据(1.15)式有

$$\psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \psi^\dagger(x_1) \dots \psi^\dagger(x_{i_1-1}) \psi^\dagger(x_{i_1+1}) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \quad (1.22)$$

此时内积变为

$$\begin{aligned} & \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_1) \psi^\dagger(y) \psi^\dagger(x_1) \dots \psi^\dagger(x_{i_1-1}) \psi^\dagger(x_{i_1+1}) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.23)$$

上式中的 x 下标中不包含 i_1 ，产生算符和湮灭算符都是 N 个，所以可以利用上述归一化过程中计算内积的方法。令

$$\{y, x_1, \dots, x_{i_1-1}, x_{i_1+1}, \dots, x_N\} = \{z_1, z_2, \dots, z_{i_1}, z_{i_1+1}, \dots, z_N\} \quad (1.24)$$

(1.23)式可以重新写为：

$$\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | z_1, z_2, \dots, z_N \rangle \quad (1.25)$$

为了计算方便，此时选择内积计算利用(1.18)式得到

$$\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \quad (1.26)$$

将(1.26)式带入(1.21)式得

$$\begin{aligned} & g_1(y, x) \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \int_0^L dy_2 \dots \int_0^L dy_N \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \\ & \times \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dy_{P_1} \int_0^L dy_{P_2} \dots \int_0^L dy_{P_N} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N \psi^*(y_{P_1}, y_{P_2}, \dots, y_{P_N}) \\ & \times \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \\ &= \frac{N!}{G} \sum_{i_1=1}^N \int_0^L dx_1 \dots dx_{i_1-1} dx_{i_1+1} \dots dx_N \psi^*(z_1, z_2, \dots, z_N) \psi(x_1, \dots, x_{i_1-1}, x, x_{i_1+1}, \dots, x_N) \\ &= N \frac{\int_0^L dx_2 \dots dx_N \psi^*(y, x_2, \dots, x_N) \psi(x, x_2, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2} \end{aligned} \quad (1.27)$$

上式中对 P 的全排列求和为 $N!$ ， i_1 的取值从 1 到 N ，任意一种情况都能根据波函数对称性将 y 和 x 都移动到第一个位置，所以 i_1 的取值不影响积分的结果，故此处令

$i_1 = 1$, (1.27)式即为单体关联函数。

1.2.3 二阶关联函数

二阶关联函数定义为

$$\begin{aligned} g_2(x, x') &= \langle \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, \dots, y_N) \psi(x_1, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle y_N, \dots, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle \end{aligned} \quad (1.28)$$

首先计算 $\psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle$, 利用(1.16)的结果有

$$\psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle = \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \prod_{j \neq i_1, i_2}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \quad (1.29)$$

所以

$$\begin{aligned} &\langle y_N, \dots, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_1) \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \prod_{j \neq i_1, i_2}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.30)$$

设置 N 个产生算符中的自变量为一个新序列:

$$\left\{ x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \right\} = \{ z_1, z_2, \dots, z_N \} \quad (1.31)$$

(1.30)式可表示为

$$\begin{aligned} &\langle y_N, \dots, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \langle y_N, \dots, y_1 | z_1, \dots, z_N \rangle \end{aligned} \quad (1.32)$$

再次利用(1.18)式, 可以解得上式为

$$\begin{aligned} &\langle y_N, \dots, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \end{aligned} \quad (1.33)$$

把(1.33)式的内积结果带回到(1.28)得到

$$\begin{aligned}
 & g_2(x, x') \\
 &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, \dots, y_N) \psi(x_1, \dots, x_N) \\
 & \quad \times \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \\
 &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dy_{P_1} \dots dy_{P_N} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_{P_1}, \dots, y_{P_N}) \psi(x_1, \dots, x_N) \\
 & \quad \times \sum_{i_1=1}^N \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \delta(x' - x_{i_2}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \tag{1.34} \\
 &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \psi^*(z_1, \dots, z_N) \psi(x_1, \dots, x_{i_1}, \dots, x_{i_2}, \dots, x_N)
 \end{aligned}$$

通过积分变量替换发现，积分的结果不依赖于 i_1 和 i_2 的取值，所以这里选择 $i_1 = 1$ ，

$i_2 = 2$ ，故(1.34)可以进一步计算，

$$\begin{aligned}
 & g_2(x, x') \\
 &= \frac{N! N(N-1) \int_0^L dx_3 \dots dx_N \psi^*(x, x', x_3, \dots, x_N) \psi(x, x', x_3, \dots, x_N)}{N! \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2} \tag{1.35} \\
 &= N(N-1) \frac{\int_0^L dx_3 \dots dx_N \psi^*(x, x', x_3, \dots, x_N) \psi(x, x', x_3, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \dots \int_0^L dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2}
 \end{aligned}$$

(1.35)式即为玻色系统的二阶关联函数表达式，表示两个原子分别在 x 和 x' 位置的联合概率。令 x' 的值为 0，考虑排斥相互作用，得到二阶关联函数图像如下：

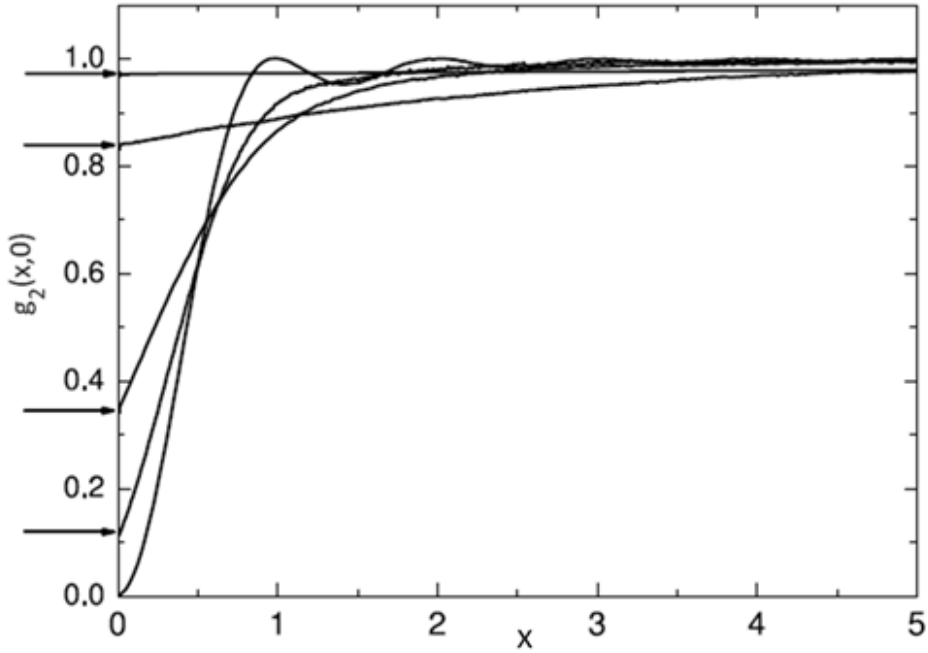


图 1.1 二阶关联函数示意图，标记从上到下代表相互作用强度从弱到强^[43]。

图 1.1 表明，由于粒子是玻色子，所以相互作用强度为 0 的时候，在 x' 位置观察到另一个粒子的概率最大；相互作用逐渐增强时，由于 x' 位置存在一个粒子，受到排斥作用的影响，在该位置观察到另一个粒子的概率逐渐趋向于 0。

1.2.4 高阶局域关联函数

系统 M 个粒子的局域波函数定义为^[44]：

$$g_M(0) = \left\langle (\psi^\dagger(0))^M (\psi(0))^M \right\rangle \quad (1.36)$$

把波函数(1.9)代入上式，可以整理为

$$g_M(0) = \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \times \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | (\psi^\dagger(0))^M (\psi(0))^M | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \quad (1.37)$$

首先根据(1.15)和(1.16)的算法，计算得到

$$(\psi(0))^M | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m}) \prod_{j \neq i_1, i_2, \dots, i_M}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \quad (1.38)$$

然后将左矢和产生算符都作用上来，得

$$\begin{aligned}
 & \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | (\psi^\dagger(0))^M (\psi(0))^M | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\
 &= \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m}) \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_2) \psi(y_1) (\psi^\dagger(0))^M \prod_{j \neq i_1, i_2, \dots, i_M}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle
 \end{aligned} \quad (1.39)$$

此时发现，上式中产生算符和湮灭算符的个数都是 N ，令

$$\left\{ \underbrace{0, \dots, 0}_M, \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, \dots, x_{i_M}} \right\} = \{z_1, \dots, z_M, z_{M+1}, \dots, z_N\} \quad (1.40)$$

利用(1.18)的结果，(1.39)式可以计算得到

$$\begin{aligned}
 & \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | (\psi^\dagger(0))^M (\psi(0))^M | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\
 &= \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j})
 \end{aligned} \quad (1.41)$$

将之代入高阶局域关联函数的定义式(1.37)中得到

$$\begin{aligned}
 g_M(0) &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\
 &\times \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m}) \sum_P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j})
 \end{aligned} \quad (1.42)$$

在做下一步计算时，我们需要把 ψ^* 中的自变量利用波函数的对称性，将之表示成 y_{P_j} 的形式，然后根据 δ 函数的挑选性，不难求得

$$\begin{aligned}
 & g_M(0) \\
 &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dy_{P_1} \dots dy_{P_N} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_{P_1}, y_{P_2}, \dots, y_{P_N}) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\
 &\times \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m}) \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \\
 &= \frac{1}{G} \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_M=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_M}}^N N! \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(z_1, \dots, z_M, z_{M+1}, \dots, z_N) \psi(x_1, \dots, x_N) \prod_{m=1}^M \delta(0 - x_{i_m})
 \end{aligned} \quad (1.43)$$

将上式中的变量 z_n 利用(1.40)还原成 x_n 的形式，进一步计算

$$\begin{aligned}
 g_M(0) &= \frac{N!}{(N-M)!} \frac{\int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{i_1}, \dots, x_{i_M}} \psi^* \left(0, \dots, 0, \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, \dots, x_{i_M}} \right) \psi \left(0, \dots, 0, \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, \dots, x_{i_M}} \right)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2} \\
 &= \frac{N!}{(N-M)!} \frac{\int_0^L dx_{M+1} \dots dx_N \psi^*(0, \dots, 0, x_{M+1}, \dots, x_N) \psi(0, \dots, 0, x_{M+1}, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2}
 \end{aligned} \tag{1.44}$$

式(1.44)即为 M 个粒子的局域关联函数。

接下来，本文对无自旋费米连续模型和单粒子翻转连续模型所对应的关联函数进行了推导，并着重对单粒子翻转的一维费米气体模型关联函数做了详细分析。

1.3 本文结构安排

文章主要对 Lieb-Liniger 模型，无自旋费米气体模型和单粒子翻转一维费米气体模型的关联函数进行了解析推导，并对其做了数值运算。

第一章简单介绍了冷原子物理中常用的一维模型，对 Lieb-Liniger 模型中的关联函数进行了推导。

第二章以无自旋费米气体模型为基础，利用一次量子化波函数的反对称关系以及算符之间的反对易关系进行推导。进而利用本模型的计算过程与方法，对单自旋翻转模型的关联函数做推导，得到单自旋翻转模型对应的单体关联和二阶关联函数。

第三章利用 BA 方法推导了单自旋翻转模型对应的波函数，并对模型的 BA 方程组，弱相互作用从 $c=0$ 出发，强相互作用从 $c=-1000$ 出发，做数值求解。

第四章将蒙特卡洛数值方法做简单介绍，并结合第三章对 BA 方程组数值结果对单自旋翻转模型的关联函数作图。

第五章对文章所做内容进行总结，并对相关内容在将来的发展趋势进行了展望。

第二章 费米气体中的关联函数

2.1 无自旋费米系统

无自旋费米系统中，填充的粒子没有自旋， N 个粒子构成的系统波函数形式与 Lieb-Liniger 模型中的波函数(1.17)形式上完全一致，不同之处在于，费米系统中的算符之间满足反对易关系。

$$\{\psi(x), \psi^\dagger(y)\} = \delta(x-y) \quad (2.1)$$

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = \{\psi^\dagger(x), \psi^\dagger(y)\} = 0 \quad (2.2)$$

一次量子化的波函数 $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 满足交换反对称，即交换任意两粒子的坐标，波函数会出负号

$$\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = -\psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad (2.3)$$

更通用的公式可以表示为

$$\psi(x_{P_1}, x_{P_2}, \dots, x_{P_N}) = (-1)^P \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2.4)$$

2.1.1 波函数的归一化

在这一部分，从二次量子化波函数出发推导一次量子波函数的归一化。归一化因子可以由 $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 的计算得出，根据(1.9)本征波函数的定义式， $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 可以写成(1.12)的形式，同玻色系统归一化一样，主要计算(1.17)的内积 $\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle$ ，将 $\psi(y_1)$ 作用到右矢上，利用(2.1)式算符之间的反对易关系把 $\psi(y_1)$ 与其它产生算符交换，直到其到达最右端，整理后的结果为：

$$\psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) |0\rangle = \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(y_1 - x_{i_1}) \prod_{j \neq i_1}^N \psi^\dagger(x_j) |0\rangle \quad (2.5)$$

我们发现由于反对易关系，求和中的每一项前面的正负号是交替出现的，下面再计算 $\psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) |0\rangle$ ，把(2.5)式的结果带入有

$$\psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) |0\rangle = \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(y_1 - x_{i_1}) \psi(y_2) \prod_{j \neq i_1}^N \psi^\dagger(x_j) |0\rangle \quad (2.6)$$

此时可以发现， $\psi(y_2)$ 后面跟的产生算符中缺了一项 $\psi^\dagger(x_{i_1})$ ，这个缺失会导致湮灭

算符往后移的过程中出现的 δ 函数在某处发生符号的转变, (由原来的+变成-, 或者由原来的-变成+). 整理其结果时, 并不能整理成(2.5)的简单形式, 所以引入 $(-1)^{p_1}$ 即可解决这个问题, (2.6)式的计算结果可以写成:

$$\begin{aligned} & \psi(y_2)\psi(y_1)\psi^\dagger(x_1)\psi^\dagger(x_2)\dots\psi^\dagger(x_N)|0\rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \delta(y_1 - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(y_2 - x_{i_2}) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i_1, i_2}}^N \psi^\dagger(x_j) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

p_1 的取值与 i_1 和 i_2 之间的大小有关

$$p_1 = \begin{cases} 0, & i_2 < i_1 \\ 1, & i_1 < i_2 \end{cases} \quad (2.8)$$

利用同样的方法可以得到

$$\begin{aligned} & \psi(y_3)\psi(y_2)\psi(y_1)\psi^\dagger(x_1)\psi^\dagger(x_2)\dots\psi^\dagger(x_N)|0\rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \delta(y_1 - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(y_2 - x_{i_2}) \\ & \times \sum_{i_3=1, i_3 \neq i_2 \neq i_1}^N (-1)^{p_2} (-1)^{i_3-1} \delta(y_3 - x_{i_3}) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i_1, i_2, i_3}}^N \psi^\dagger(x_j) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

p_2 的取值类似于 p_1 , 当 $i_1 > i_2$ 时,

$$p_2 = \begin{cases} 0, & i_3 < i_2 \\ 1, & i_2 < i_3 < i_1 \\ 2, & i_3 < i_1 \end{cases} \quad (2.10)$$

当 $i_1 < i_2$ 时,

$$p_2 = \begin{cases} 0, & i_3 < i_1 \\ 1, & i_1 < i_3 < i_2 \\ 2, & i_3 < i_2 \end{cases} \quad (2.11)$$

以上的 i_3 分别打乱了+和-的正常交替顺序 0,1,2 次, 而 p_1 和 p_2 可以一起构成这三种序列:

$$p_1 + p_2 = \begin{cases} e, i_3 < i_2 < i_1 \\ o, i_2 < i_3 < i_1 \\ e, i_2 < i_1 < i_3 \\ o, i_3 < i_1 < i_2 \\ e, i_1 < i_3 < i_2 \\ o, i_1 < i_2 < i_3 \end{cases} \quad (2.12)$$

也就是对于初始排序 (i_3, i_2, i_1) ，可以通过交换奇数次或者偶数次得到任何排序。对于 N 粒子的系统，所有的排序都可以分为奇排列和偶排列，所以

$$\begin{aligned} & \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \dots \psi^\dagger(x_N) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N = 1(i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_N)}^N (-1)^{i_1 + \dots + i_N - N} (-1)^{p_1 + p_2 + \dots + p_{N-1}} \prod_{j=1}^N \delta(y_j - x_{i_j}) \\ &= \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(y_j - x_{P_j}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

如果上式中初始排序我们选择用 $(1, 2, \dots, N)$ 而不是 $(N, N-1, \dots, 1)$ 的话，因子 $(-1)^{i_1 + \dots + i_N - N} = (-1)^{N(N-1)/2}$ 将正好被约。其中， P 代表 N 个粒子的排列。或者内积结果还可以表示成

$$\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(x_j - y_{P_j}) \quad (2.14)$$

将这个结果带入(1.12)

$$\begin{aligned} & \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ & \times \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(y_j - x_{P_j}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P (-1)^P \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(x_{P_1}, x_{P_2}, \dots, x_{P_N}) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &= \frac{N!}{G} \int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

第二个等号和第三个等号利用了波函数的反对称性(2.4)。进而得到

$$G = N! \int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 \quad (2.16)$$

2.1.2 单体关联函数

定义单体关联函数

$$g_1(y, x) = \langle \psi^\dagger(y) \psi(x) \rangle = \langle \Psi | \psi^\dagger(y) \psi(x) | \Psi \rangle \quad (2.17)$$

将波函数的形式(1.17)带入上式得

$$\begin{aligned} g_1(y, x) &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

按照归一化的思路，我们首先计算 $\psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle$ ，利用(2.5)的结果很容易得到

$$\psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle = \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(x - x_i) \psi^\dagger(y) \prod_{j \neq i}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \quad (2.19)$$

利用(1.24)的定义，

$$\begin{aligned} &\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(y) \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(x - x_i) \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | z_1, z_2, \dots, z_N \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(x - x_i) \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

带入到(2.18)有

$$\begin{aligned} g_1(y, x) &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\quad \times \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(x - x_i) \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \end{aligned} \quad (2.21)$$

将式中 $\psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N)$ 中的自变量排序变为 P 排序，然后利用 δ 函数的挑选性有

$$\begin{aligned} g_1(y, x) &= \frac{1}{G} \sum_P \int_0^L dy_{P_1} \dots dy_{P_N} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_{P_1}, y_{P_2}, \dots, y_{P_N}) \\ &\quad \times \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \delta(x - x_i) \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_i} \psi^*(z_1, z_2, \dots, z_N) \psi(x_1, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_N) \quad (2.22)$$

将式子中 z 的变量利用(1.24)的定义还原，然后利用波函数的交换反对称性将式中 $\psi(x_1, \dots, x_{i-1}, x, x_{i+1}, \dots, x_N)$ 的变量 x 交换到第一个位置，之后将其余自变量做变量替换，得到

$$g_1(y, x) = N \frac{\int_0^L dx_2 \dots dx_N \psi^*(y, x_2, \dots, x_N) \psi(x, x_2, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2} \quad (2.23)$$

可知，不论 i_1 取多少，都可以利用交换反对称性使之变成(2.23)的形式。此即为无自旋费米系统的单体关联函数与玻色系统的单体关联函数结果一致。

2.1.3 二阶关联函数

二阶关联函数的定义式为 $g_2(x, x') = \langle \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) \rangle$ ，把波函数(1.9)代入得到

$$\begin{aligned} g_2(x, x') &= \frac{1}{G} \int_0^L dy_1 \dots dy_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_1, y_2, \dots, y_N) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

计算的核心是该式中的内积，首先计算

$$\begin{aligned} &\psi(x') \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{i_2-1} \delta(x' - x_{i_2}) \prod_{j \neq i_1, i_2}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.25)$$

上式的计算利用了(2.6)式，然后整个内积也即将左矢和剩余两个产生算符作用到上式得到

$$\begin{aligned} &\langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \delta(x - x_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{i_2-1} \delta(x' - x_{i_2}) \\ &\quad \times \langle 0 | \psi(y_N) \dots \psi(y_2) \psi(y_1) \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \prod_{j \neq i_1, i_2}^N \psi^\dagger(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.26)$$

可以看到，式中存在 N 个湮灭算符和 N 个产生算符，由于产生算符的自变量不统一，为了计算方便，将其自变量按照(1.31)进行定义，然后利用(2.14)式，很容易求得

$$\begin{aligned}
 & \langle y_N, \dots, y_2, y_1 | \psi^\dagger(x) \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(x) | x_1, x_2, \dots, x_N \rangle \\
 &= \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{i_2-1} \delta(x-x_{i_1}) \delta(x'-x_{i_2}) \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

把(2.27)的结果代入(2.24)式，首先把 ψ^* 中的自变量重新排为 P 排序，然后利用 δ 函数的挑选性，

$$\begin{aligned}
 & g_2(x, x') \\
 &= \frac{1}{G} \sum_P (-1)^P (-1)^P \int_0^L dy_{P_1} \dots dy_{P_N} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \psi^*(y_{P_1}, y_{P_2}, \dots, y_{P_N}) \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \\
 & \times \sum_{i_1=1}^N (-1)^{i_1-1} \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{i_2-1} \delta(x-x_{i_1}) \delta(x'-x_{i_2}) \prod_{j=1}^N \delta(z_j - y_{P_j}) \quad (2.28) \\
 &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N (-1)^{i_1-1} (-1)^{i_2-1} \\
 & \times \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \psi^*(z_1, z_2, \dots, z_N) \psi(x_1, \dots, x_{i_1-1}, x_{i_1+1}, \dots, x_{i_2-1}, x_{i_2+1}, \dots, x_N)
 \end{aligned}$$

进而把挑选得到的自变量 x 和 x' 利用波函数的交换反对称性交换到前两个位置，可以求得

$$g_2(x, x') = \frac{1}{G} \sum_P \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \psi^*(z_1, z_2, \dots, z_N) \psi \left(x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \right) \quad (2.29)$$

再将自变量 z_n 利用(1.31)的定义式还原，可以得到

$$g_2(x, x') = \frac{1}{G} \sum_P \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^N \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \psi^* \left(x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \right) \psi \left(x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{i_1}, x_{i_2}} \right) \quad (2.30)$$

因为对于 i_1 和 i_2 的取值从1到 N 是任意的，取值不影响计算结果，所以此时令 $i_1=1$ ， $i_2=2$ ，然后把求和直接计算，将波函数中的自变量做变量替换，得到上式的结果为：

$$g_2(x, x') = N(N-1) \frac{\int_0^L dx_3 \dots dx_N \psi^*(x, x', x_3, \dots, x_N) \psi(x, x', x_3, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2} \quad (2.31)$$

据此可得，二阶关联函数表达式为(2.31)。

2.2 单自旋翻转相互作用费米气体

当自旋向上的粒子中加入一个自旋相反的粒子，会在新的环境中产生极化子，添加进去的自旋相反费米子便被视为杂质，本节以 Gaudin-Yang 模型的一种特例计算关联函数。即向下自旋粒子数为 1，其余粒子均自旋向上。在此环境中计算关联函数对研究从极化子到分子转变的过程有很大的意义。

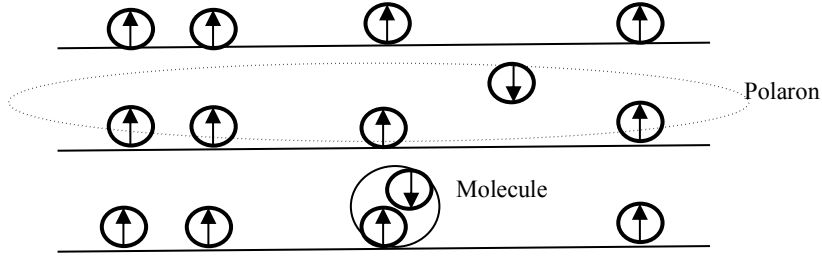


图 2.1 一个自旋向下的费米杂质进入自旋向上的费米海的示意图。在弱相互作用下，杂质粒子被费米海粒子所包围，随着相互作用强度的增加，杂质粒子和费米海中的某个粒子束缚成两个粒子组成的分子态。

二次量子化的系统总波函数为

$$|f_{tot}\rangle = \frac{1}{\sqrt{G}} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) |\downarrow_j\rangle \quad (2.32)$$

G 表示系统的归一化因子，基矢 $|\downarrow_j\rangle$ 表示第 j 个粒子自旋向下，其余粒子自旋都向上，此时需要注意的是，这个态是依赖于坐标的，所以基矢之间对于不同的 j 并不正交，也即 $\langle \downarrow_j | \downarrow_j \rangle \neq 0$ ，将基矢表示成产生算符作用到真空态的形式，如下：

$$|\downarrow_j\rangle = a_{\uparrow}^{\dagger}(x_1) \dots a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(x_N) |0\rangle \quad (2.33)$$

该式表示，在位置 $x_1, \dots, x_j, \dots, x_N$ 处产生 N 个粒子，处于 x_j 位置的粒子是自旋向下，其余 $N-1$ 个粒子的自旋向上。系统一次量子化的波函数完整符号为 $f_{\uparrow_1 \uparrow_2 \dots \downarrow_j \dots \uparrow_N}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N)$ ，满足交换反对称性，即交换任意两粒子的坐标和自旋总波函数会出一个负号，也即

$$f_{\uparrow_1 \uparrow_2 \dots \downarrow_j \dots \uparrow_N}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) = -f_{\uparrow_1 \uparrow_2 \dots \uparrow_j \dots \downarrow_N}(x_1, \dots, x_N, \dots, x_j) \quad (2.34)$$

$$f_{\dots \uparrow_m \dots \downarrow_j \dots \uparrow_n \dots}(\dots, x_m, \dots, x_j, \dots, x_n, \dots) = -f_{\dots \uparrow_m \dots \downarrow_j \dots \uparrow_n \dots}(\dots, x_n, \dots, x_j, \dots, x_m, \dots) \quad (2.35)$$

或者简写为:

$$f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) = -f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N, \dots, x_j) \quad (2.36)$$

$$f_{\downarrow_j}(\dots, x_m, \dots, x_j, \dots, x_n, \dots) = -f_{\downarrow_j}(\dots, x_n, \dots, x_j, \dots, x_m, \dots) \quad (2.37)$$

(2.36)表示杂质粒子和自旋向上粒子之间的交换，所以下标变为 N ，(2.37)式表示两个自旋向上的粒子相互交换坐标和自旋。系统中出现的算符反对易关系为

$$\{a_\sigma(x), a_{\sigma'}^\dagger(x')\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x-x') \quad (2.38)$$

$$\{a_\sigma(x), a_{\sigma'}(x')\} = \{a_\sigma^\dagger(x), a_{\sigma'}^\dagger(x')\} = 0 \quad (2.39)$$

2.2.1 归一化因子

这一部分，我们通过系统本征波函数(2.32)式推导归一化因子 G 的值。

$$\begin{aligned} & \langle f_{tot} | f_{tot} \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dx'_1 \dots dx'_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \\ & \times \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_{j'}}^*(x'_1, \dots, x'_{j'}, \dots, x'_N) f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.40)$$

计算(2.40)式，第一步先求内积 $\langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle$ ，将内积均写为算符作用到态上的形式有：

$$\langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle = \langle 0 | a_\uparrow(x'_N) \dots a_\downarrow(x'_{j'}) \dots a_\uparrow(x'_1) a_\uparrow^\dagger(x_1) \dots a_\downarrow^\dagger(x_j) \dots a_\uparrow^\dagger(x_N) | 0 \rangle \quad (2.41)$$

因为自旋向下粒子的存在，使得直接计算(2.41)式比较麻烦，所以利用反对易关系(2.39)，将自旋向下的算符移动到所有算符的两端，如下

$$\begin{aligned} & \langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle \\ &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_\downarrow(x'_{j'}) a_\uparrow(x'_N) \dots a_\uparrow(x'_{j'+1}) a_\uparrow(x'_{j'-1}) \dots a_\uparrow(x'_1) \\ & \times a_\uparrow^\dagger(x_1) \dots a_\uparrow^\dagger(x_{j-1}) a_\uparrow^\dagger(x_{j+1}) \dots a_\uparrow^\dagger(x_N) a_\downarrow^\dagger(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.42)$$

上式可以看出， x_n 和 x'_n 的下标存在断点，在计算中，较难直接写出通式，所以令

$$\{x'_1, \dots, x'_{j'-1}, x'_{j'+1}, \dots, x'_N\} = \{y'_1, \dots, y'_{N-1}\} \quad (2.43)$$

$$\{x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_N\} = \{y_1, \dots, y_{N-1}\} \quad (2.44)$$

此时，(2.42)式可以用以上两式表示为：

$$\begin{aligned} \langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\times a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

计算的实质是让所有的湮灭算符利用反对易关系与产生算符交换到最右端，所以我们先把第一个湮灭算符 $a_{\uparrow}(y'_1)$ 作用到右矢上，得

$$a_{\uparrow}(y'_1) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle = \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(y'_1 - y_{i_1}) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \quad (2.46)$$

同样的办法将第二个湮灭算符作用到上式，计算过程与无自旋费米气体情形下类似，由于产生算符的缺失，需要引入因子 $(-1)^{p_1}$ ，计算结果为

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}(y'_2) a_{\uparrow}(y'_1) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(y'_1 - y_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(y'_2 - y_{i_2}) \prod_{n \neq i_1, i_2}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

再将第三个湮灭算符作用到(2.47)式，同样的方法计算得

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}(y'_3) a_{\uparrow}(y'_2) a_{\uparrow}(y'_1) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(y'_1 - y_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(y'_2 - y_{i_2}) \\ &\times \sum_{i_3=1, i_3 \neq i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_2} (-1)^{i_3-1} \delta(y'_3 - y_{i_3}) \prod_{n \neq i_1, i_2, i_3}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.48)$$

以此类推，将所有自旋向上的湮灭算符作用到右矢上得

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{\substack{i_1, i_2, \dots, i_{N-1}=1 \\ i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_{N-1}}}^{N-1} (-1)^{i_1 + \dots + i_{N-1} - (N-1)} (-1)^{p_1 + \dots + p_{N-2}} \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y'_n - y_{i_n}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y'_n - y_{P_n}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

这里的求和号是对 $N-1$ 个自旋向上粒子的全排列，然后将左矢真空态和自旋向下的湮灭算符作用到上式，把常数项提前，利用反对易关系把产生湮灭算符互换得：

$$\begin{aligned} &\langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_P (-1)^P \delta(x'_{j'} - x_j) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y'_n - y_{P_n}) \end{aligned} \quad (2.50)$$

所以把(2.50)带入(2.45)式，得到内积结果为

$$\langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle = (-1)^{2N-j-j'} \sum_P^{N-1} (-1)^P \delta(x'_{j'} - x_j) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y'_n - y_{P_n}) \quad (2.51)$$

该结果可以重新表示为

$$\langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle = (-1)^{2N-j-j'} \sum_P^{N-1} (-1)^P \delta(x_j - x'_{j'}) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y_n - y'_{P_n}) \quad (2.52)$$

利用波函数反对称(2.36)和(2.37)，首先把 f^* 中自旋向下粒子的坐标 $x'_{j'}$ 交换到第 N 个位置，把 f 中自旋向下的粒子坐标交换到第 N 个位置，得到

$$\begin{aligned} & \langle f_{tot} | f_{tot} \rangle \\ &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dx'_1 \dots dx'_{j'-1} dx'_{j'+1} \dots dx'_N dx'_j \int_0^L dx_1 \dots dx_{j-1} dx_{j+1} \dots dx_N dx_j \\ & \quad \times (-1)^{2N-j-j'} f_{\downarrow_N}^*(x'_1, \dots, x'_N, x'_{j'}) f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N, x_j) \langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.53)$$

将定义式(2.43)和(2.44)带入其中，(2.53)可以重新写作：

$$\begin{aligned} & \langle f_{tot} | f_{tot} \rangle \\ &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_1 \dots dy'_{N-1} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \\ & \quad \times (-1)^{2N-j-j'} f_{\downarrow_N}^*(y'_1, \dots, y'_{N-1}, x'_{j'}) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.54)$$

然后再把内积的计算结果(2.51)带入(2.54)式，利用 δ 函数的挑选性有：

$$\begin{aligned} & \langle f_{tot} | f_{tot} \rangle \\ &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_1 \dots dy'_{N-1} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j (-1)^{2N-j-j'} f_{\downarrow_N}^*(y'_1, \dots, y'_{N-1}, x'_{j'}) \\ & \quad \times f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) (-1)^{2N-j-j'} \sum_P^{N-1} (-1)^P \delta(x'_{j'} - x_j) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(y'_n - y_{P_n}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \sum_P^{N-1} (-1)^P f_{\downarrow_N}^*(y_{P_1}, \dots, y_{P_{N-1}}, x_j) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \end{aligned} \quad (2.55)$$

把上式 $f_{\downarrow_N}^*(y_{P_1}, \dots, y_{P_{N-1}}, x_j)$ 中在 P 排序下坐标 y_{P_n} 还原成自然排序 y_n ，会抵消掉因子 $(-1)^P$ ，再将自变量 $\{y_1, \dots, y_{N-1}\}$ 利用定义式(2.44)的逆变换还原，然后把 x_j 通过交换反对称回到原来的位置，得到

$$\langle f_{tot} | f_{tot} \rangle = \frac{1}{G} \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \sum_P^{N-1} f_{\downarrow_j}^* (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) f_{\downarrow_j} (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (2.56)$$

此时，令上式等于 1，得，

$$G = N! \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N \left| f_{\downarrow_j} (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \right|^2 \quad (2.57)$$

(2.57)即为归一化因子 G 。

2.2.2 单体关联函数

定义系统向上自旋的单体关联函数为

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') = \langle a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') \rangle = \langle f_{tot} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') | f_{tot} \rangle \quad (2.58)$$

将波函数(2.33)带入，与(2.40)类似，可以写成

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') &= \frac{1}{G} \int_0^L dx'_1 \dots dx'_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_{j'}}^* (x'_1, \dots, x'_{j'}, \dots, x'_N) \\ &\quad \times f_{\downarrow_j} (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.59)$$

与归一化因子计算过程类似，我们先计算上式的内积，由于自旋向下的粒子夹在中间，给计算过程带来了很大的不便，所以同样将基矢用算符和真空态的形式表示出来，并利用定义式(2.43)和(2.44)，内积变为

$$\begin{aligned} &\langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \\ &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.60)$$

根据(2.46)可以得

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x' - y_{i_1}) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{i_1-1}) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{i_1+1}) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.61)$$

注意到

$$\begin{aligned} &(-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{i_1-1}) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{i_1+1}) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

仍然可以写成 $\langle \downarrow_{j'} | \tilde{\downarrow}_j \rangle$ 的形式，而右矢 $|\tilde{\downarrow}_j \rangle$ 中的坐标可以重新标记为

$$\{x, y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_{N-1}, x_j\} = \{z_1, z_2, \dots, z_i, z_{i+1}, \dots, z_{N-1}, x_j\} \quad (2.63)$$

再根据(2.52)计算得到

$$\begin{aligned} & \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) \langle \downarrow_{j'} | \tilde{\downarrow}_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) (-1)^{2N-j-i} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'}) \end{aligned} \quad (2.64)$$

此时将(2.59)式与(2.53)式一样，先将自旋向下的坐标移动到波函数的最右端位置，然后把剩余自旋向上算符的坐标做变量替换，用(2.43)和(2.44)的定义式表示，接着把(2.64)代入，得到

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_1 \dots dy'_{N-1} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \\ & \times f_{\downarrow_N}^*(y'_1, \dots, y'_{N-1}, x'_{j'}) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) (-1)^{2N-j-j'} \\ & \times \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) (-1)^{2N-j-i} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_{P_1} \dots dy'_{P_{N-1}} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j f_{\downarrow_N}^*(y'_{P_1}, \dots, y'_{P_{N-1}}, x'_{j'}) \\ & \times f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'}) \end{aligned} \quad (2.65)$$

利用 δ 函数的挑选性，消去对 y'_{P_n} 及 $x'_{j'}$ 的积分，上式化为

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \\ & \times f_{\downarrow_N}^*(z_1, z_2, \dots, z_{N-1}, x_j) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \end{aligned} \quad (2.66)$$

上式中 P 的求和乘以 j' 的求和正好是 $N!$ ，将上述变量 z_n 换回到 y_n ，利用 $\delta(x' - y_i)$ 将上式中的积分消去一重，得到

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') &= \frac{N!}{G} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{N-1} \int_0^L dy_1 \dots dy_{i-1} dy_{i+1} \dots dy_{N-1} dx_j \\ & \times f_{\downarrow_N}^*(x, y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_{N-1}, x_j) f_{\downarrow_N}(x', y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_{N-1}, x_j) \end{aligned} \quad (2.67)$$

此处利用了一次量子化波函数的交换反对称性，将 x' 移动到第一个位置，不影响其余位置的排序，需要交换 $i_1 - 1$ 次，正好消去(2.66)式中的因子 $(-1)^{i_1 - 1}$ 。此时波函数中的坐标除了 x 和 x' 以外完全相同。事实上，为了得到上式中的 $N - 2$ 个坐标：

$$(y_1, y_2, \dots, y_{i_1-1}, y_{i_1+1}, \dots, y_{N-1}) \quad (2.68)$$

我们的做法是从下列 $N - 1$ 元素中抽取一个 y_{i_1} ，

$$(y_1, y_2, \dots, y_{j-1}, y_j, \dots, y_{N-1}) \quad (2.69)$$

此时 i_1 的取值从 1 到 $N - 1$ 。另一方面我们可以首先将(2.69)式的坐标利用(2.44)还原成

$$(x_1, x_2, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_N) \quad (2.70)$$

此时对这一套坐标做相同的抽取，也有 $N - 1$ 种取法，但需要注意的是被选择的 x 下标只能从 $1, 2, \dots, j - 1, j + 1, \dots, N$ 中选择，将此时 x 对应的下标称作 m ，那么 m 的取值是从 1 到 N ，但不等于 j 。保持 x 和 x' 不动，把(2.68)中的自变量全部根据(2.44)式替换回到最初的坐标序列，同时将 f^* 和 f 中的 x_j 还原到原来的位置， x_j 每挪动一次 f^* 和 f 同时出负号，所以整体符号不变，此时的关联函数变为

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') \\ &= \frac{N!}{G} \sum_{m=1, m \neq j}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dx_1 \dots dx_{m-1} dx_{m+1} \dots dx_N f_{\downarrow_N}^*(x, x_1, \dots, x_{m-1}, x_{m+1}, \dots, x_N) \\ & \quad \times f_{\downarrow_N}(x, x_1, \dots, x_{m-1}, x_{m+1}, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (2.71)$$

上式中的 m 取值从 1 到 N 只是要求不等于 j ，把 $m \neq j$ 的限制条件放到对 j 的求和，此时 m 的取值变成从 1 到 N 。可以看出无论 m 取值多少，都可以利用波函数的交换反对称性让其改变排序和上式相等，所以令 $m = 1$ ，其余积分变量做变量替换得到

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') = \frac{N!}{G} N \sum_{j=2}^N \int_0^L dx_2 \dots dx_j \dots dx_N f_{\downarrow_j}^*(x, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) \times f_{\downarrow_j}(x', x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (2.72)$$

把归一化因子(2.57)式表达式带入上式，化简整理得到

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') = N \frac{\int_0^L dx_2 \dots dx_N \sum_{j=2}^N f_{\downarrow_j}^*(x, x_2, \dots, x_j, \dots, x_N) f_{\downarrow_j}(x', x_2, \dots, x_j, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N |f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N)|^2} \quad (2.73)$$

再根据波函数的反对称性把 x_j 移动至第 N 个位置，其余坐标顺序保持不变，此时相当于把自旋向下的粒子固定在 x_N 处。重新定义积分变量，不难得到

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') = (N-1) \frac{\int_0^L dx_2 \dots dx_N f_{\downarrow_N}^*(x, x_2, \dots, x_N) f_{\downarrow_N}(x', x_2, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N)|^2} \quad (2.74)$$

(2.74)式即为单自旋翻转费米系统中的单体关联函数。

2.2.3 二阶关联函数

因为该模型包含自旋，所以二阶关联函数分为两种，一种是自旋向上粒子之间的二阶关联，另一种是自旋上下粒子之间的二阶关联。

定义自旋向上粒子之间的二阶关联函数为：

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= \langle a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dx'_1 \dots dx'_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_{j'}}^*(x'_1, \dots, x'_{j'}, \dots, x'_N) f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.75)$$

为了解上式，我们首先计算内积 $\langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle$ 。类似于(2.45)，将下自旋算符移至两端

$$\begin{aligned} &\langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \\ &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.76)$$

与前面计算过程相同，首先计算两个湮灭算符作用到变换后的右矢上，根据(2.47)得

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) \sum_{\substack{i_2=1 \\ i_2 \neq i_1}}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(x'-y_{i_2}) \prod_{n \neq i_1, i_2}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.77)$$

注意到

$$\begin{aligned}
& (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\
& \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') \prod_{n \neq i_1, i_2}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle
\end{aligned} \tag{2.78}$$

仍然可以写成 $\langle \downarrow_{j'} | \tilde{\downarrow}_j \rangle$ 的形式，其中右矢 $|\tilde{\downarrow}_j\rangle$ 中的坐标可以重新标记为

$$\left\{ x, x', \underbrace{y_1, \dots, y_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}, y_{i_2}}, x_j \right\} = \{ z_1, z_2, \dots, z_{N-1}, x_j \} \tag{2.79}$$

使用(2.52)式，(2.76)式变为

$$\begin{aligned}
& \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \\
& = \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x - y_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(x' - y_{i_2}) \\
& \times (-1)^{2N-j-j'} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'})
\end{aligned} \tag{2.80}$$

类似于归一化过程中改变变量符号，将(2.80)代入(2.75)得：

$$\begin{aligned}
g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{1}{G} \int_0^L dy'_1 \dots dy'_{N-1} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_N}^*(y'_1, \dots, y'_{N-1}, x'_{j'}) \\
& \times f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) (-1)^{2N-j-j'} \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x - y_{i_1}) \\
& \times \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(x' - y_{i_2}) (-1)^{2N-j-j'} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'}) \\
& = \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_{P_1} \dots dy'_{P_{N-1}} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j \\
& \times f_{\downarrow_N}^*(y'_{P_1}, \dots, y'_{P_{N-1}}, x'_{j'}) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \\
& \times \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x - y_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(x' - y_{i_2}) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x_j - x'_{j'})
\end{aligned} \tag{2.81}$$

然后利用 δ 函数的挑选性，我们先将 f^* 中的所有自变量给替换得到

$$\begin{aligned}
& g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') \\
& = \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j f_{\downarrow_N}^*(z_1, \dots, z_{N-1}, x_j) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \\
& \times \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x - y_{i_1}) \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1} \delta(x' - y_{i_2})
\end{aligned} \tag{2.82}$$

将上式中 f^* 的自变量用(2.79)还原，另外的两个 δ 函数也利用挑选性将积分去除两重，替换完的 x 和 x' 与其余坐标逐个交换至第一和第二位置，交换出现的因子正好是 $(-1)^{i_1-1} (-1)^{p_1} (-1)^{i_2-1}$ ，与式中的相同因子抵消掉得

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') \\ &= \frac{N!}{G} \sum_{j=1}^N \sum_{i_1=1}^{N-1} \sum_{i_2=1, i_2 \neq i_1}^{N-1} \int_0^L \underbrace{dy_1 \dots dy_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}, y_{i_2}} dx_j f_{\downarrow_N}^* \left(x, x', \underbrace{y_1, \dots, y_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}, y_{i_2}}, x_j \right) f_{\downarrow_N} \left(x, x', \underbrace{y_1, \dots, y_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}, y_{i_2}}, x_j \right) \end{aligned} \quad (2.83)$$

对 $N-1$ 个粒子全排列的求和乘以 j' 从 1 到 N 的求和，结果为 $N!$ ，接下来将波函数中坐标 y_n 利用(2.44)换回到 x_n ，方法与单体关联函数中换坐标的方法相同，缺失的坐标 y_{i_1} 和 y_{i_2} 在换回 x_n 的表示形式时，定义 $y_{i_1} = x_{m_1}$ ， $y_{i_2} = x_{m_2}$ ，可知 m_1 的取值范围为 1 到 N 但不能等于 j ， m_2 的取值范围为 1 到 N 不等于 j 且不等于 m_1 ，

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{N!}{G} \sum_{j=1}^N \sum_{m_1 \neq j}^N \sum_{m_2 \neq m_1, j}^N \int_0^L \underbrace{dx_1 \dots dx_N}_{\text{except } x_{m_1}, x_{m_2}, x_j} dx_j \\ &\times f_{\downarrow_N}^* \left(x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{m_1}, x_{m_2}, x_j}, x_j \right) f_{\downarrow_N} \left(x, x', \underbrace{x_1, \dots, x_N}_{\text{except } x_{m_1}, x_{m_2}, x_j}, x_j \right) \end{aligned} \quad (2.84)$$

把 $m_1 \neq j$ 和 $m_2 \neq j$ 的限制条件放到对 j 的求和中，由于 m_1 和 m_2 的取值都可以通过同时交换 f^* 和 f 的坐标使之与上式相同，同时交换式子整体不出负号，所以直接令 $m_1 = 1$ ， $m_2 = 2$ ，并将 x_j 还原到原来的第 j 个位置得

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{N!}{G} N(N-1) \sum_{j=3}^N \int_0^L dx_3 \dots dx_j \dots dx_N \\ &\times f_{\downarrow_j}^* (x, x', x_3, \dots, x_j, \dots, x_N) f_{\downarrow_j} (x, x', x_3, \dots, x_j, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (2.85)$$

把归一化因子(2.57)代入上式有

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') \\ &= \frac{N! N(N-1) \sum_{j=3}^N \int_0^L dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_j}^* (x, x', x_3, \dots, x_j, \dots, x_N) f_{\downarrow_j} (x, x', x_3, \dots, x_j, \dots, x_N)}{N! \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j=1}^N \left| f_{\downarrow_j} (x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \right|^2} \end{aligned} \quad (2.86)$$

利用波函数的交换反对称性与单体关联函数整理方法相同，上式变为

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') = (N-1)(N-2) \frac{\int_0^L dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_N}^*(x, x', x_3, \dots, x_N) f_{\downarrow_N}(x, x', x_3, \dots, x_N)}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N)|^2} \quad (2.87)$$

此式即为相同自旋粒子之间的二阶关联函数。

与上自旋粒子之间关联函数类似，上下自旋粒子间二阶关联函数定义式为

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') &= \langle a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dx'_1 \dots dx'_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_{j'}}^*(x'_1, \dots, x'_{j'}, \dots, x'_N) f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.88)$$

接下来计算式中的内积，跟前面的方法类似，将下自旋移至两端

$$\begin{aligned} &\langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \\ &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.89)$$

坐标 y'_n 和 y_n 只表示向上自旋粒子的坐标。首先计算两个湮灭算符作用到变换后的右矢上，利用(2.46)和(2.38)式，可以得到

$$\begin{aligned} &a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) a_{\downarrow}(x') \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) (-1)^{N-2} \delta(x'-x_j) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.90)$$

进一步可得

$$\begin{aligned} &a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) \delta(x'-x_j) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.91)$$

注意到

$$\begin{aligned} &(-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.92)$$

仍然可以写成 $\langle \downarrow_{j'} | \downarrow_j \rangle$ 的形式，而右矢 $|\downarrow_j\rangle$ 中的坐标可以重新标记为

$$\{x, y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_{N-1}, x'\} = \{z_1, z_2, \dots, z_{N-1}, x'\} \quad (2.93)$$

据(2.52)，(2.89)的结果为

$$\begin{aligned} & \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x') a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x) | \downarrow_j \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) \delta(x'-x_j) (-1)^{2N-j-j'} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x'-x'_{j'}) \end{aligned} \quad (2.94)$$

将上式代回到(2.88)得到

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') \\ &= \frac{1}{G} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_1 \dots dy'_{N-1} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j f_{\downarrow_N}^*(y'_1, \dots, y'_{N-1}, x'_{j'}) \\ & \times f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) (-1)^{2N-j-j'} \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) \delta(x'-x_j) \\ & \times (-1)^{2N-j-j'} \sum_P (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x'-x'_{j'}) \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^L dy'_{P_1} \dots dy'_{P_{N-1}} dx'_{j'} \int_0^L dy_1 \dots dy_{N-1} dx_j f_{\downarrow_N}^*(y'_{P_1}, \dots, y'_{P_{N-1}}, x'_{j'}) \\ & \times f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, y_{N-1}, x_j) \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x-y_{i_1}) \delta(x'-x_j) \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x'-x'_{j'}) \end{aligned} \quad (2.95)$$

利用 δ 函数将上式的自变量全部替换得到

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') \\ &= \frac{1}{G} \sum_P \sum_{j'=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \int_0^L \underbrace{dy_1 \dots dy_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}} dx_j f_{\downarrow_N}^*(z_1, \dots, z_{N-1}, x') f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, x, \dots, y_{N-1}, x') \end{aligned} \quad (2.96)$$

进一步计算，将 x 与其余坐标交换，使之排在第一个位置，并且将 f^* 中的自变量用(2.93)还原，有

$$\begin{aligned} & g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') \\ &= \frac{N!}{G} \sum_{j=1}^N \sum_{i_1=1}^{N-1} \int_0^L \underbrace{dy_1 \dots dy_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}} f_{\downarrow_N}^* \left(x, \underbrace{y_1, \dots, y_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}}, x' \right) f_{\downarrow_N} \left(x, \underbrace{y_1, \dots, y_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}}, x' \right) \end{aligned} \quad (2.97)$$

上式中 i_1 的取值对积分计算结果无影响，无论其取多少，都可以通过变量替换将上式

换成 $i_1 = 1$ 的形式, 所以选择 $i_1 = 1$, 上式变为

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{N!}{G} N(N-1) \int_0^L dy_2 \dots dy_{N-1} f_{\downarrow_2}^*(x, x', y_2, \dots, y_{N-1}) f_{\downarrow_2}(x, x', y_2, \dots, y_{N-1}) \end{aligned} \quad (2.98)$$

将波函数中的坐标利用(2.44)变换回 x_n 的形式得

$$\begin{aligned} g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{N!}{G} N(N-1) \int_0^L dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_2}^*(x, x', x_3, \dots, x_N) f_{\downarrow_2}(x, x', x_3, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (2.99)$$

将归一化因子代入, 并将下自旋固定在 x_N 处, 得到

$$g_{\uparrow\downarrow}^{(2)}(x, x') = (N-1) \frac{\int_0^L dx_2 \dots dx_{N-1} f_{\downarrow_N}^*(x, x_2, \dots, x_{N-1}, x') f_{\downarrow_N}(x, x_2, \dots, x_{N-1}, x')}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N)|^2} \quad (2.100)$$

可知, (2.100)即为上下粒子之间的二阶关联函数表达式。

2.2.4 对关联函数

对关联函数定义为 $\langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle$, 利用算符之间的反对易关系, 可以得到

$$\begin{aligned} \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle &= \langle a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') \rangle \\ &= \frac{1}{G} \int_0^L dx'_1 \dots dx'_N \int_0^L dx_1 \dots dx_N \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N f_{\downarrow_{j'}}^*(x'_1, \dots, x'_{j'}, \dots, x'_N) f_{\downarrow_j}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \\ &\quad \times \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \end{aligned} \quad (2.101)$$

计算式中的内积, 跟前面的方法类似, 将下自旋移至两端

$$\begin{aligned} &\langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \\ &= (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ &\quad \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.102)$$

坐标 y'_n 和 y_n 只表示向上自旋粒子的坐标。根据(2.90)有

$$\begin{aligned} &a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} (-1)^{i-1} \delta(x' - y_i) a_{\downarrow}(x') \prod_{n \neq i}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) | 0 \rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x' - y_{i_1}) (-1)^{N-2} \delta(x' - x_j) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) |0\rangle \quad (2.103)$$

进一步可得

$$\begin{aligned} & a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') a_{\uparrow}^{\dagger}(y_1) \dots a_{\uparrow}^{\dagger}(y_{N-1}) a_{\downarrow}^{\dagger}(x_j) |0\rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x - y_{i_1}) \delta(x' - x_j) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.104)$$

注意到

$$\begin{aligned} & (-1)^{2N-j-j'} \langle 0 | a_{\downarrow}(x'_{j'}) a_{\uparrow}(y'_{N-1}) \dots a_{\uparrow}(y'_1) \\ & \times a_{\uparrow}^{\dagger}(x) \prod_{n \neq i_1}^{N-1} a_{\uparrow}^{\dagger}(y_n) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.105)$$

仍然可以写成 $\langle \downarrow_{j'} | \tilde{\downarrow}_j \rangle$ 的形式，而右矢 $|\tilde{\downarrow}_j\rangle$ 中的坐标可以重新标记为

$$\{x, y_1, \dots, y_{i_1-1}, y_{i_1+1}, \dots, y_{N-1}, x\} = \{z_1, z_2, \dots, z_{N-1}, x\} \quad (2.106)$$

据(2.52)，(2.102)的结果为

$$\begin{aligned} & \langle \downarrow_{j'} | a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\downarrow}(x') a_{\uparrow}(x') | \downarrow_j \rangle \\ &= \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \delta(x' - y_{i_1}) \delta(x' - x_j) (-1)^{2N-j-j'} \sum_P^{N-1} (-1)^P \prod_{n=1}^{N-1} \delta(z_n - y'_{P_n}) \delta(x - x'_{j'}) \end{aligned} \quad (2.107)$$

代(2.107)到(2.101)，做与(2.95)相同的操作，利用 δ 函数的挑选性得

$$\begin{aligned} & \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle \\ &= \frac{1}{G} \sum_P^{N-1} \sum_{j'=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{i_1=1}^{N-1} (-1)^{i_1-1} \int_0^L \underbrace{dy_1 \dots dy_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}} dx_j f_{\downarrow_N}^*(z_1, \dots, z_{N-1}, x) f_{\downarrow_N}(y_1, \dots, x', \dots, y_{N-1}, x') \end{aligned} \quad (2.108)$$

进一步计算，将 x 与其余坐标交换，使之排在第一个位置，并且将 f^* 中的自变量用

(2.106)还原，有

$$\begin{aligned} & \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle \\ &= \frac{N!}{G} \sum_{j=1}^N \sum_{i_1=1}^{N-1} \int_0^L \underbrace{dy_1 \dots dy_{N-1}}_{\text{except } y_{i_1}} f_{\downarrow_N}^* \left(\underbrace{x, y_1, \dots, y_{N-1}, x}_{\text{except } y_{i_1}} \right) f_{\downarrow_N} \left(\underbrace{x', y_1, \dots, y_{N-1}, x'}_{\text{except } y_{i_1}} \right) \end{aligned} \quad (2.109)$$

上式中 i_1 的取值对积分计算结果无影响，无论其取多少，都可以通过变量替换将上式

换成 $i_1 = 1$ 的形式，所以选择 $i_1 = 1$ ，上式变为

$$\begin{aligned}
& \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle \\
&= \frac{N!}{G} N(N-1) \int_0^L dy_2 \dots dy_{N-1} f_{\downarrow_2}^*(x, x, y_2, \dots, y_{N-1}) f_{\downarrow_2}(x', x', y_2, \dots, y_{N-1})
\end{aligned} \tag{2.110}$$

将波函数中的坐标利用(2.44)变换回 x_n 的形式得

$$\begin{aligned}
& \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle \\
&= \frac{N!}{G} N(N-1) \int_0^L dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_2}^*(x, x, x_3, \dots, x_N) f_{\downarrow_2}(x', x', x_3, \dots, x_N)
\end{aligned} \tag{2.111}$$

将归一化因子代入，并将下自旋固定在 x_N 位置，

$$\begin{aligned}
& \langle a_{\downarrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}^{\dagger}(x) a_{\uparrow}(x') a_{\downarrow}(x') \rangle \\
&= \frac{(N-1) \int_0^L dx_2 \dots dx_{N-1} f_{\downarrow_N}^*(x, x_2, \dots, x_{N-1}, x) f_{\downarrow_N}(x', x_2, \dots, x_{N-1}, x')}{\int_0^L dx_1 \dots dx_N |f_{\downarrow_N}(x_1, \dots, x_N)|^2}
\end{aligned} \tag{2.112}$$

此式为对关联函数的表达式。为了数值求解本模型的关联函数，我们首先需要将模型对应的一次量子化波函数解出，然后通过 BA 方程组的数值求解，将系统的动量和自旋快速度解出，代入一次量子化波函数，然后通过蒙特卡洛对关联函数的多重积分进行求解。

第三章 波函数和 Bethe Ansatz 方程组

对于单自旋翻转费米气体，当相互作用常数 $c = 0$ 时，系统可视作 $N - 1$ 个向上自旋粒子组成的费米海和向下自旋的杂质粒子相互独立。系统外势为零，所以波函数就是单粒子平面波叠加的形式。单粒子静态薛定谔方程可以表示为：

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = Ef \quad (3.1)$$

f 是系统一次量子化波函数， E 是系统单粒子所对应的本征能。采用周期性边界条件，解得系统本征波函数和本征能分别为：

$$f = Ae^{ikx}, \quad E = \frac{4m^2\pi^2}{L^2} \quad (3.2)$$

所以 N 个粒子间无相互作用时的波函数可以写为：

$$f(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^N e^{ik_{P_j} x_j} \quad (3.3)$$

将自旋向下的粒子固定在 x_N 的位置上，波函数变成

$$f_{\downarrow_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \left(\sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^{N-1} e^{ik_{P_j} x_j} \right) e^{ik_N x_N} \quad (3.4)$$

求和号是对 $\{1, 2, \dots, N - 1\}$ 所有排列的求和。当系统处于基态时， k 的值为 $2\pi / L$ 的整数倍，粒子数是偶数时，

$$k_j = \frac{2\pi}{L} \left(0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N-2}{2} \right), \quad j = 1 \dots N - 1 \quad (3.5)$$

L 表示系统的总长度，此时(3.4)的 k_N 为 0。这是由于无相互作用时，向下自旋粒子可以与向上自旋粒子的动量相同，而在基态就决定了其动量为 0。

3.1 波函数的推导

单自旋翻转费米气体可以理解成 Gaudin-Yang 模型的一种特例，所以当相互作用强度不为 0 时，此处可以借用普适 Gaudin-Yang 模型所对应的哈密顿量(1.4)来求解波函数。假设粒子坐标 x_j 对应自旋向下的态，其余坐标是向上自旋的态，则波函数

在区域 1: $x_1 < x_2, \dots, x_N$ 中可以写为

$$f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P A_1(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j\right) \quad (3.6)$$

此时, 求和号是对 $\{1, 2, \dots, N\}$ 所有排列的求和。等号左边 f 的下标表示第一个粒子自旋向下, 等号右边 A 的下标表示在区域 1 中。根据波函数的交换反对称性(2.37), 可得

$$A_1(\dots P_i \dots P_j \dots) = -A_1(\dots P_j \dots P_i \dots) \quad (3.7)$$

由于系统中只有自旋向上和自旋向下粒子之间才有接触相互作用, 所以接触边界条件为

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_i}\right) f_{\downarrow_1} \Big|_{x_1=x_i+} - \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_i}\right) f_{\downarrow_1} \Big|_{x_1=x_i-} = 2c f_{\downarrow_1} \Big|_{x_1=x_i} \quad (3.8)$$

同时波函数在相互作用点的连续性给出

$$f_{\downarrow_1} \Big|_{x_1=x_i-} = f_{\downarrow_1} \Big|_{x_1=x_i+} \quad (3.9)$$

定义 $x_i < x_1 < x_2, \dots, x_N$ 为区域 2, 表示下自旋位于第二个位置。将波函数(3.6)代入(3.8), 计算得到的接触相互作用结果为

$$i(k_{P_1} - k_{P_i}) [A_2(P) - A_1(P) - A_2(P') + A_1(P')] = 2c (A_1(P) + A_1(P')) \quad (3.10)$$

其中, $P = \{P_1, P_2, \dots, P_i, \dots, P_N\}$, $P' = \{P_i, P_2, \dots, P_1, \dots, P_N\}$ 。

波函数(3.6)代入连续性边界条件(3.9)

$$\sum_P A_1(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j\right) \Big|_{x_1=x_i-} = \sum_P A_2(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j\right) \Big|_{x_1=x_i+} \quad (3.11)$$

解得

$$A_2(P') = A_1(P) + A_1(P') - A_2(P) \quad (3.12)$$

将(3.12)代入(3.10)解得

$$A_2(P') = -\frac{c}{i(k_{P_1} - k_{P_i})} A_1(P) + \left[1 - \frac{c}{i(k_{P_1} - k_{P_i})}\right] A_1(P') \quad (3.13)$$

令 $S_{1i} = i(k_{P_1} - k_{P_i})/c$, 得到

$$\begin{pmatrix} A_2(P) \\ A_2(P') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{S_{li}} & \frac{1}{S_{li}} \\ -\frac{1}{S_{li}} & 1 - \frac{1}{S_{li}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(P) \\ A_1(P') \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

(3.14)可以将两个近邻的坐标区域联系在一起。

根据周期边界条件，对于坐标 x_i 有

$$f_{\downarrow_i}(x_1, \dots, x_i = 0, \dots, x_N) = -f_{\downarrow_i}(x_1, \dots, x_i = L, \dots, x_N) \quad (3.15)$$

这里的 $i \neq 1$ ，等号左边的波函数 x_i 最小，所以坐落在区域 2 中，等号右边的波函数 x_i 最小，坐落在区域 1 中，所以通过(3.6)，上式变为

$$\sum_P A_2(P) \exp\left(i \sum_{j=1, j \neq i}^N k_{P_j} x_j\right) = \sum_P A_1(P) \exp\left(ik_{P_i} L + i \sum_{j=1, j \neq i}^N k_{P_j} x_j\right) \quad (3.16)$$

解之得

$$A_2(P) = A_1(P) \exp(ik_{P_i} L) \quad (3.17)$$

所以

$$\begin{pmatrix} A_2(P) \\ A_2(P') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(ik_{P_i} L) & 0 \\ 0 & \exp(ik_{P_i} L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(P) \\ A_1(P') \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

将方程(3.18)和(3.14)联立，有

$$\begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{S_{li}} - \exp(ik_{P_i} L) & \frac{1}{S_{li}} \\ -\frac{1}{S_{li}} & 1 - \frac{1}{S_{li}} - \exp(ik_{P_i} L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(P) \\ A_1(P') \end{pmatrix} = 0 \quad (3.19)$$

要使方程成立，需要满足行列式为 0，解得

$$S_{li} = \frac{\exp(ik_{P_i} L) - \exp(ik_{P_i} L)}{[1 - \exp(ik_{P_i} L)][1 - \exp(ik_{P_i} L)]} \quad (3.20)$$

把(3.20)反带回(3.19)易得

$$A_1(P') = -\frac{1 - \exp(ik_{P_i} L)}{1 - \exp(ik_{P_i} L)} A_1(P) = -\frac{\alpha_{P_i}}{\alpha_{P_i}} A_1(P) \quad (3.21)$$

这里的 $\alpha_j = 1 - \exp(ik_j L)$ 。

所以在区域 1 ($x_1 < x_2, \dots, x_N$) 中的波函数(3.6), 选择基础振幅,

$$A_1(123\dots N) = 1 - \exp(ik_1L) = \alpha_1 \quad (3.22)$$

根据(3.21)系数之间的关系可以得到

$$A_1(2134\dots N) = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1} A_1(123\dots N) = -\alpha_2 \quad (3.23)$$

$$A_1(3124\dots N) = -\frac{\alpha_3}{\alpha_1} A_1(1324\dots N) = -\frac{\alpha_3}{\alpha_1} [-A_1(1234\dots N)] = \alpha_3 \quad (3.24)$$

类似的有

$$A_1(q123\dots N) = (-1)^{q+1} \alpha_q \quad (3.25)$$

所以区域 1 内的波函数可以写成

$$\begin{aligned} f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \sum_P A_1(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_j\right) \\ &= \sum_{q, Q} A_1(q, Q) \exp(ik_q x_1) \exp\left(i \sum_{j=1}^{N-1} k_{Q_j} x_{j+1}\right) \\ &= \sum_{q, Q} A_1(q123\dots N) (-1)^Q \exp(ik_q x_1) \exp\left(i \sum_{j=1}^{N-1} k_{Q_j} x_{j+1}\right) \\ &= \sum_{q=1}^N (-1)^{q+1} \alpha_q \exp(ik_q x_1) \sum_Q (-1)^Q \exp\left(i \sum_{j=1}^{N-1} k_{Q_j} x_{j+1}\right) \\ &= \begin{pmatrix} \alpha_1 \exp(ik_1 x_1) & \alpha_2 \exp(ik_2 x_1) & \dots & \alpha_N \exp(ik_N x_1) \\ \exp(ik_1 x_2) & \exp(ik_2 x_2) & \dots & \exp(ik_N x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \exp(ik_1 x_N) & \exp(ik_2 x_N) & \dots & \exp(ik_N x_N) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.26)$$

其中, Q 是对 $\{1, 2, \dots, q-1, q+1, \dots, N\}$ 的全排列。

对于区域 2 的一个特例 $x_2 < x_1 < x_3, \dots, x_N$, 根据周期性边界条件有

$$f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) = f_{\downarrow_1}(x_1, x_2 + L, \dots, x_N) \quad (3.27)$$

此时可以看出该区域内的波函数可以通过周期边界条件投影到区域 1 中。因此我们

可将系统整个区域按照下自旋所在位置依次划分为区域 i ($i = 1, 2, \dots, N$), 其中下自旋

位于第 i 个位置, 而上自旋位置排序任意。对于区域 i : $x_2, \dots, x_i < x_1 < x_{i+1}, \dots, x_N$ 的波

函数，都可以利用周期性边界条件将之变成区域 1 的波函数，即

$$f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) = f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |_{x_2, \dots, x_i \rightarrow x_2+L, \dots, x_i+L} \quad (3.28)$$

将(3.26)的行列式写成多项式形式有

$$f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P (-1)^P \alpha_{P_1} \exp(ik_{P_1}x_1 + ik_{P_2}x_2 + \dots + ik_{P_N}x_N) \quad (3.29)$$

在区域 $x_2, \dots, x_i < x_1 < x_{i+1}, \dots, x_N$ 中的波函数利用(3.28)可以写成

$$f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P (-1)^P \alpha_{P_1} \exp(ik_{P_2}L + \dots + ik_{P_i}L) \exp(ik_{P_1}x_1 + \dots + ik_{P_N}x_N) \quad (3.30)$$

系统 BA 方程组为

$$e^{ik_j L} = \frac{k_j - \lambda + ic'}{k_j - \lambda - ic'}, \quad j = 1 \dots N \quad (3.31)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{k_j - \lambda + ic'}{k_j - \lambda - ic'} = 1 \quad (3.32)$$

其中， k_j 为粒子的准动量， λ 为自旋速度， $c' = c/2$ ，其中 $j = 1, 2, \dots, N$ 。方程数目为 $N+1$ 个，未知数也是 $N+1$ 个，根据(3.31)可以解得

$$\alpha_{P_1} \exp(ik_{P_2}L + \dots + ik_{P_i}L) = B \prod_{j=2}^i (k_{P_j} - \lambda + ic') \prod_{j=i+1}^N (k_{P_j} - \lambda - ic') \quad (3.33)$$

其中， $B = \frac{-2ic'}{\prod_{j=1}^N (k_j - \lambda - ic')}$ 。所以对于全空间的系统波函数可以据此解得，

$$\begin{aligned} f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \sum_{i=1}^N \theta(x_2, \dots, x_i < x_1 < x_{i+1}, \dots, x_N) f_{\downarrow_1}(x_1, x_2, \dots, x_N) |_{x_2, \dots, x_i \rightarrow x_2+L, \dots, x_i+L} \\ &= \sum_P (-1)^P B \prod_{j=2}^i (k_{P_j} - \lambda + ic') \prod_{j=i+1}^N (k_{P_j} - \lambda - ic') \exp(ik_{P_1}x_1 + \dots + ik_{P_N}x_N) \\ &= B \sum_P (-1)^P \exp(ik_{P_1}x_1) \prod_{j=2}^N \left[(k_{P_j} - \lambda + ic' \operatorname{sgn}(x_1 - x_j)) \exp(ik_{P_j}x_j) \right] \end{aligned} \quad (3.34)$$

符号函数为

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x = 0 \\ -1, & x < 0 \end{cases} \quad (3.35)$$

为了对应 $c = 0$ 时理想气体波函数的形式，通过波函数反对称性(2.36)，可以写出

$$\begin{aligned}
 & f_{\downarrow N}(x_1, x_2, \dots, x_N) \\
 &= (-1)^{N-1} B \sum_P (-1)^P \prod_{j=1}^{N-1} \left[(k_{P_j} - \lambda + ic' \operatorname{sgn}(x_N - x_j)) \exp(ik_{P_j} x_j) \right] \exp(ik_{P_N} x_N) \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

式中准动量和自旋速度可以根据 BA 方程组(3.31)和(3.32)解得。(3.36)为 N 阶行列式，可以利用代数余子式分解为 N 个 $N-1$ 阶行列式加减交替的形式，而不是全部相加。

3.2 数值求解 Bethe Ansatz 方程组

我们考虑粒子间是吸引相互作用的情况，所以 BA 方程组会出现一个二弦解。假设 k_1, k_2, \dots, k_{N-2} 是实数， k_{N-1} 和 k_N 形成二弦解，是复共轭的关系，可以用 $p \pm i\beta$ 来表示，其中实数 p 是准动量的实部，实数 $\beta > 0$ 是准动量的虚部。自旋速度 λ 一直是实数。将二弦解 $p \pm i\beta$ 代入 BA 方程组(3.31)，可得

$$e^{(ip-\beta)L} = \frac{p - \lambda + i\beta + ic'}{p - \lambda + i\beta - ic'} \quad (3.37)$$

$$e^{(ip+\beta)L} = \frac{p - \lambda - i\beta + ic'}{p - \lambda - i\beta - ic'} \quad (3.38)$$

两式相乘和两式相除，并同时化简整理得：

$$\tan(pL) = \frac{2c'(p - \lambda)}{(p - \lambda)^2 - c'^2 + \beta^2} \quad (3.39)$$

$$(p - \lambda)^2 = -\beta^2 - c'^2 + \frac{2\beta c'(1 + e^{-2\beta L})}{(e^{-2\beta L} - 1)} \quad (3.40)$$

再将其余 $N-2$ 个实数准动量方程(3.31)两边同时取对数得

$$k_j L = 2\pi I_j + 2 \arctan\left(\frac{c'}{k_j - \lambda}\right), \quad j = 1 \dots N-2 \quad (3.41)$$

其中 I_j 是实数准动量对应的量子数。当粒子数是偶数时，基态的量子数

$I_j \in \{\pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N-2)/2\}$ 。最后将所有准动量代入方程(3.28)化简整理得

$$\sum_{j=1}^{N-2} \arctan\left(\frac{c'}{k_j - \lambda}\right) - \arctan\left(\frac{p - \lambda}{\beta + c'}\right) + \arctan\left(\frac{p - \lambda}{\beta - c'}\right) + 2n_p \pi = 0 \quad (3.42)$$

其中弦解动量实部对应的量子数 n_p 在基态时为 0。方程(3.39)到方程(3.42)是包含

$N+1$ 个方程的非线性方程组，并且不含虚单位，同时未知数全部是实数。只要给出了量子数 $\{l_j\}$ 和 n_p ，我们便可以数值求解。

我们可以用牛顿迭代法数值求解上面的非线性方程组，也可以直接调用一些求解非线性方程的非常成熟的程序包，例如 Matlab 内置的 `fsolve` 函数。直接调用程序包可以节省大量的时间和精力。当求解这些非线性方程组时，需要给每个未知数赋初始值，或者叫试探解。实数准动量的初始值为无相互作用时的解，即 $k_j = 2\pi l_j / L$ 。 p 和 λ 的初始值为零，即 $p = \lambda = 0$ 。 β 的初始值对计算结果影响比较敏感，如果取得不合适，得到的结果便不正确。我们发现，当取初始值 $\beta = -c' + 0.6$ 时，得到的解在弱吸引相互作用下都满足 $\beta + c' \geq 0$ ，保证解的连续性。

在强吸引的情况下，用上面的方程得到解并不准确。因为(3.42)中的第二项三角函数中分母 $\beta + c'$ 趋向于零，同时分子也趋向于 0，所以在数值上，这一项很难处理，导致解会有一个大的误差，进而此时用错误的解得到的波函数会不自洽且破坏周期性边界条件。

在强吸引作用下， $\beta \gg 1$ ，所以 $e^{-2\beta} \ll 1$ ，将(3.40)在大 β 情况下展开得到

$$\begin{aligned}
 (p - \lambda)^2 &= -\beta^2 - c'^2 + \frac{2\beta c'(1 + e^{-2\beta L})}{(e^{-2\beta L} - 1)} \\
 &= -\beta^2 - c'^2 + \frac{2\beta c'(1 + e^{-2\beta L})^2}{((e^{-2\beta L})^2 - 1)} \\
 &= -\beta^2 - c'^2 - 2\beta c'(1 + e^{-2\beta L})^2 \\
 &\approx -\beta^2 - c'^2 - 2\beta c' - 4\beta c' e^{-2\beta L} \\
 &\approx -(\beta + c')^2
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

方程(3.43)给出 $p \approx \lambda = 0$ 。同时，我们发现二弦解的实部和自旋速度在任何吸引强度下始终相差不远。 $p \approx \lambda$ 可以大大的化简我们的非线性方程组。将 $p \approx \lambda = 0$ 代回方程(3.40)得

$$\beta \tanh\left(\frac{\beta L}{2}\right) + c' = 0 \quad (3.44)$$

同时方程(3.37)变为

$$k_j L = 2\pi I_j + \arctan\left(\frac{c'}{k_j}\right), \quad j = 1, 2, \dots, N-2 \quad (3.45)$$

上面一共 $N-1$ 个方程，但是每个方程只含有一个未知数，因为这些方程是相互独立的，所以我们只需要解单变量的非线性方程即可。同样使用 `fsolve` 求解。

我们计算了 $N=8$ 的基态准动量。从图 3.1 可以看出，随着吸引相互强度的增加，对应量子数为 1 的准动量 k_4 从 2π 变为 π 。其他的准动量也是从 π 的偶数倍变为 π 的奇数倍。强相互作用下， $\beta = -c'$ 。

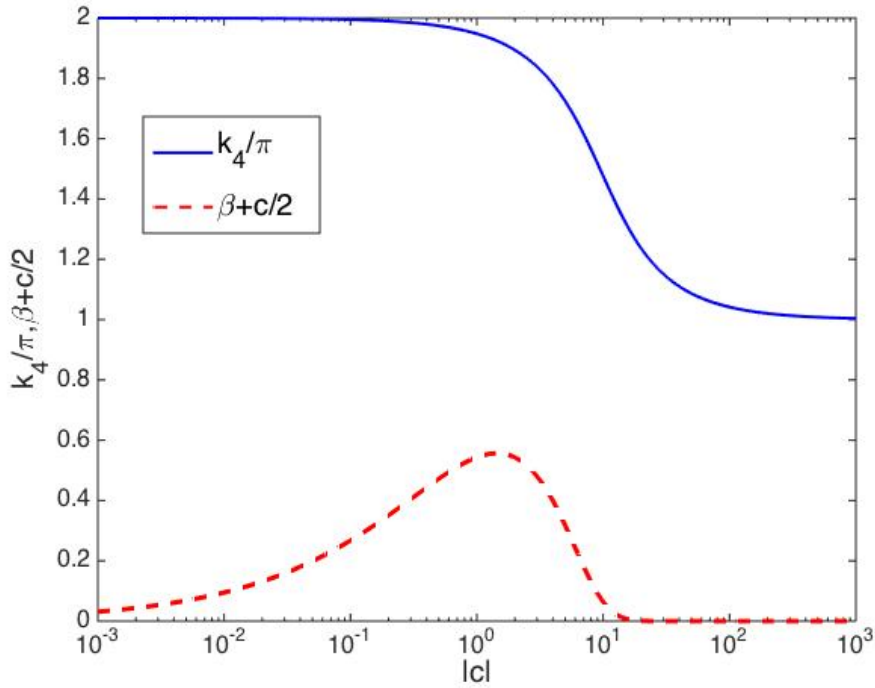


图 3.1 准动量 k_4 和 $\beta+c/2$ 随相互作用强度的变化。 $L=1$ 。

将不同相互作用强度下解出的准动量、自旋快度的值代入一次量子化的波函数，再将波函数的表达式代入关联函数，进一步计算即可求出关联函数的数值结果。在积分过程中，由于关联函数的积分重数较多，从三重积分开始，使用程序中的命令直接计算就会很乏力，所以我们选取蒙特卡洛方法来解决系统关联函数的多重积分问题。

第四章 蒙特卡洛方法求解关联函数

4.1 蒙特卡洛方法简介

蒙特卡洛方法，也被称为统计模拟方法，是数值求解积分的有力工具。蒙特卡洛方法以概率统计理论作为指导，将积分问题转化为概率统计问题，再结合计算机强大的计算能力来进行积分的数值模拟。

我们知道，传统的直接数值积分方法，例如矩形积分、梯形积分、龙贝格积分、辛普森积分等等，一般以函数自变量域的直接离散化作为出发点，并不依赖于概率统计。而传统积分的积分难度和计算量会随着被积函数维度的增加而指数升高。简单举例，在保证数值精度的情况下，如果一个一维被积函数 $f(x)$ 做矩形积分的离散化格点数为 d ，那么简单对于 N 重积分的离散化格点数应当在 d^N 量级。当然，即便人们想出了各种各样如辛普森离散、龙贝格离散等的离散化方法来优化直接数值积分的效率和精度，但是随系统维度的指数发散问题依然是直接积分的一大难题。然而，对于高维积分，蒙特卡洛方法却是非常有利的计算工具。大数定理告诉我们，蒙特卡洛方法的计算误差为 $Var(f) \propto 1/\sqrt{N_{mc}}$ ，其中 N_{mc} 为蒙特卡洛采样次数，即蒙特卡洛方法的计算准确性只与采样次数相关，而不依赖于维度，这就为高维的函数的数值积分提供了一种极为有力的数学工具。为了清晰地说明蒙特卡洛方法的核心原理，下面，我们分两部分，分别介绍蒙特卡洛投针法和蒙特卡洛平均值法，并简要讨论二者的关系。

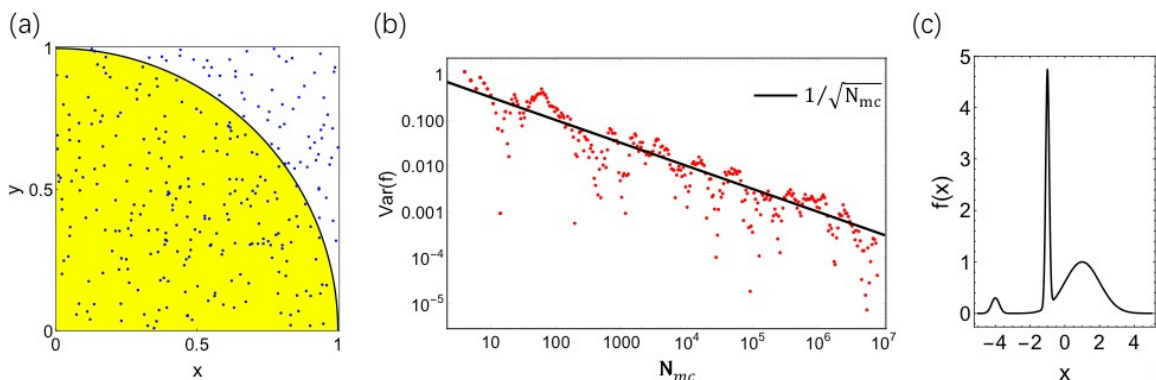


图 4.1 (a) 蒙特卡洛投针法求圆的面积示意图，其中蓝点为投针位置，图中共投针 $N_{mc} = 10^2$ 个
 (b) 投针法的数值误差应正比于 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 。图中红点表示数值结果，而黑色实线表征 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 曲线
 (c) 举例说明不容易积分的被积函数

4.1.1 随机投针法

首先考虑半径为 1 的圆的面积积分，如图 4.1(a)所示。根据微积分容易得到圆的面积为 π 。根据对称性可以简单地把这个问题理解为被积函数

$$f(x) = \sqrt{1-x^2} \quad (4.1)$$

在 $x \in [0,1]$ 上的积分。很明显，函数 y 的域值为 $y = f(x) \in [0,1]$ ，而积分结果表征曲线在自变量域内所围成的面积，即

$$\frac{S}{4} = \int_0^1 f(x) dx \quad (4.2)$$

求解这个问题，我们可以利用计算机在 $x, y \in [0,1]$ 的方形域内生成 N_{mc} 个随机数对 $\{x_n, y_n\}$ ，而这些随机数在方形域内满足均匀分布。这个过程就等同于在方形域内随机投下 $N_{mc} \gg 1$ 个投针（蒙特卡洛投针），其中第 n 个投针的横纵坐标为 $\{x_n, y_n\}$ 。对于任意一个投针，例如第 n 个投针，它可能落在待积函数的内侧，此时有 $y_n - f(x_n) < 0$ ，同时，也有可能在外侧，此时有 $y_n - f(x_n) > 0$ ，如果以 M 标记在被积函数内侧的总的投针数，那么原则上当 $N_{mc} \gg 1$ 时， M / N_{mc} 反映了被积函数在积分域内所围成的面积与 $x, y \in [0,1]$ 矩形面积的比值，即有

$$S(N_{mc}) = 4 \int_0^1 f(x) dx \approx 4 \left(\frac{M}{N_{mc}} \times 1 \right) \quad (4.3)$$

其中 $S(N_{mc})$ 为 N_{mc} 次蒙卡投针后所算出的面积，而等式右侧的 1 表示矩形面积。我们利用 Mathematica 数值计算了这一投针过程，计算中取 $N_{mc} = 10^7$ 。特别地，当投下 100 枚蒙特卡洛针时，投针的分布如图 4.1(a)所示，此时有 $M = 71$ 。当所有投针全部投完后，我们统计 $M \approx 7.8548 \times 10^6$ ，因而我们有 $S(N_{mc}) = 3.14192$ 的数值结果，可见结果已经非常接近精确值 π 了。此外，我们还利用误差公式

$$Var(f) = \frac{|S(N_{mc}) - \pi|}{\pi} \quad (4.4)$$

计算了蒙特卡洛投针的相对误差随总投针数 N_{mc} 的变化如图 4.2(b)所示，其中红色圆

点为数值结果，而黑色实线给出了 $Var = 1/\sqrt{N_{mc}}$ 的参考线。明显能够发现，数值误差随投针总数 N_{mc} 是以 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 的方式衰减的。

上述蒙特卡洛投针方法可以轻松地推广至高维积分，即从简单的二维投针变为 L 维投针。但是，我们需要注意到，上面介绍的方法有一些局限性：(1) 在上述例子中，被积函数总是一个正值，因而判断是否计数的依据十分简单，但是实际情况下被积函数不仅有可能是包含负值，而且还可能存在于复数域内；(2) 上述例子中，如果想知道一个函数曲线在被积域内与坐标轴所围成的面积，至少要知道一个更大的已知面积的投针域 C ，例如我们的 $x, y \in [0, 1]$ 矩形域，而最后的结果是 $C \times M / N_{mc}$ ，但实际情况中我们并不能准确得知一些复杂的被积函数的值域；(3) 即便我们知道了某些函数的值域，但是它的值域跨度极大，例如图 4.1(c) 所示的函数，因而如果我们简单选取 $x, y \in [-5, 5]$ 的矩形区域内进行随机投针，投针落在曲线内侧的概率很低，这样蒙特卡洛方法的投针效率很低，只有选取很大的 N_{mc} ，程序才能收敛至一个比较精确的结果，对计算资源的消耗也很严重。下面，我们介绍另一种方法——蒙特卡洛平均值法，这种方法可以在复数域内工作，并且可以处理一些复杂的无法知道值域的被积函数的数值定积分问题。但是，我们将会看到，当被积函数在自变量空间呈现极为局域化的函数分布时，平均值法依然面临上述(3)所示的有效采样效率低的问题。

4.1.2 蒙特卡洛平均值法

我们依然考虑上述半径为 1 圆的面积积分问题。如图 4.2(a) 所示，这次我们将曲线下区域划分为 m 个等份，每一个等份为 $[\Delta x \times f(x_m)]$ 的矩形，其中 $\Delta x = 1/m$ 。那么在 $m \rightarrow \infty$ 极限下 $\Delta x \rightarrow 0$ ，积分结果 S 正是这些矩形面积的加和。接下来，我们令计算机随机地在 $x \in [0, 1]$ 之间生成满足均匀分布的随机数，即随机地向 $x \in [0, 1]$ 之间投针，而统计结果如图 4.2(b) 所示，图中纵轴表征落在 $[x_m, x_m + \Delta x]$ 内的投针数目 N_m 。容易发现，在 N_{mc} 较小的情况下，落在 $[x_m, x_m + \Delta x]$ 内的投针数目是不均匀的，但是当 N_{mc} 较大时，落在 $[x_m, x_m + \Delta x]$ 内的投针数目是近似相等的，即

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N_m = N_{mc} \times \Delta x = \Delta x N_{mc} \quad (4.5)$$

因而，对于大 N_{mc} 的情况下，我们可以近似认为曲线所包围的面积是

$$\begin{aligned} S(N) &= \sum_m \Delta x \times f(x_m) \\ &\approx \sum_m \frac{N_m}{N_{mc}} \times f(x_m) = \frac{1}{N} \sum_m N_m \times f(x_m) \end{aligned} \quad (4.6)$$

故 N_m / N_{mc} 可以看做是一个均匀的几率密度，用它我们求出了函数 $f(x_m)$ 的平均值 $S(N_{mc}) = \langle f(x_m) \rangle$ ，因而我们称这种方法为平均值蒙特卡洛方法。上述表达式给我们提供了如下的积分方法，首先我们在被积自变量域内生成均匀分布的随机数，每生成一个随机数，我们计算一次函数值 $f(x_m)$ ，而最后的积分结果等同于这些所有函数值之和再除以 N_{mc} 。当然，这里其实我们已经假设了自变量域的长度 $L=1$ 。如果长度不为 1，我们需要算完后再整体乘以长度 L ，即

$$S(N_{mc}) = \frac{L}{N_{mc}} \sum_m N_m \times f(x_m) \quad (4.7)$$

我们利用平均值法计算了半径为 1 的圆的面积，计算中我们取 $N_{mc} = 10^7$ ，并最终得到了 $S(N_{mc}) = 3.14143$ 的结果。图 4.2(c) 中，利用误差公式给出了平均值法的相对误差随 N_{mc} 的变化情况，我们容易发现误差以 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 的方式衰减。

在上述推导过程中，我们并没有假设 $f(x)$ 的具体形式，因而无论函数值是正数还是负数，是实数还是复数平均值法都是适用的。为了具体佐证这一点，我们计算了 $f(x) = e^{ix/3}$ 在 $x \in [0, 1]$ 之间积分结果。微积分给出的解析结果为

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 e^{ix/3} dx = \frac{3(i + \sqrt{3})}{2\pi} \approx 0.82699 + 0.47747i \quad (4.8)$$

我们同样取 $N_{mc} = 10^7$ 并最终得到了 $S(N_{mc}) = 0.82697 + 0.47751i$ 的结果，并且容易验证相对数值误差依然是以 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 的方式衰减的。

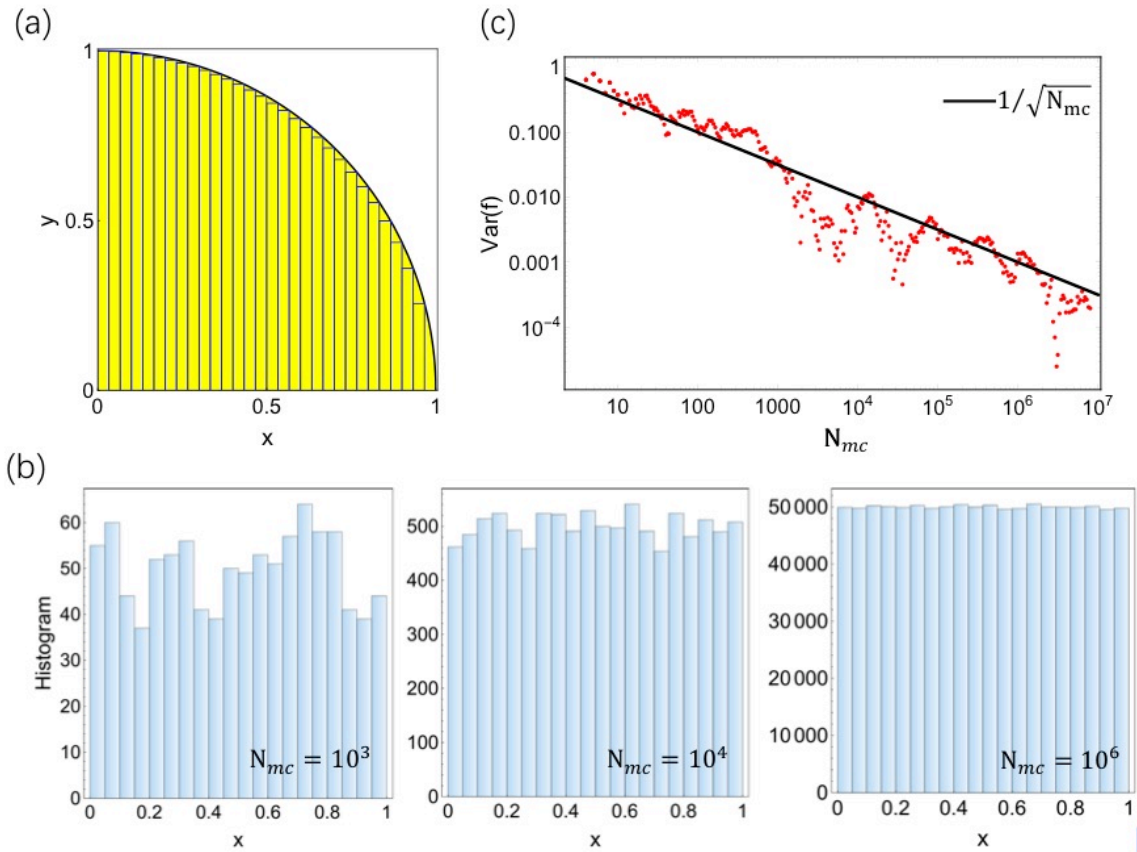


图 4.2 (a)蒙特卡洛平均值法求圆面积示意图，小矩形的宽度都相等，宽 $1/m$ 。

(b) 举例说明 N_{mc} 的不同，投针落在各个区域内的均匀程度。

(c) 投针法的数值误差应正比于 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 。图中红色点表示数值结果，而黑色实线表征 $1/\sqrt{N_{mc}}$ 曲线。

最后，我们做几点小的讨论：

- 1) 平均值蒙特卡洛积分方法可以简单地推广至高维，即每次需要生成 N_{mc} 个随机数，利用这些随机数求出函数值，最后将这些函数值相加并求平均。
- 2) 第一部分所示蒙特卡洛随机投针方法求圆的面积，从另一个角度也可视为一个二维的平均值蒙特卡洛方法。其中，我们可以定义一个二元函数为

$$f(x,y) = \begin{cases} 1 & x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0 & x^2 + y^2 > 1 \end{cases} \quad (4.9)$$

因而，我们在自变量和值域的随机投针过程就是平均值方法中的对函数 f 的自变量域 (x,y) 的随机取值过程，而投针过程中的统计过程正好对应每一次算出函数值后 $f(x,y)$ 的求和过程。因而，可以说投针法是平均值的特例。

3) 我们依然需要注意一种情况，即如图 4.1(c)所示，当函数值在自变量空间呈现极为局域分布时，平均值法依然不能获得很好的积分效果。这是因为，我们在 x 空间产生的随机数绝大多数对函数平均值的贡献为 0，而极少数有贡献，因而当我们仅看局域波包附近的 x 的等高分布时，依然无法做到一个均匀分布。容易想到，简单粗暴的解决方法是采用更大的 N_{mc} ，但这样会极大地增加计算负担。当然，计算数学的研究者们针对这种情况也做了大量的研究，比如，当已知局域函数的大致分布时，可以采用重要性抽样来替代之前一直所说的均匀抽样，但是绝大多数情况下，复杂被积函数的大致分布也是不可预知的。因而，我们可以利用 Matlab、Python 等语言所提供的并行计算包来加速计算大 N_{mc} 过程。当然，近些年来人们所关注的 GPU 并行亦为蒙特卡洛计算提供了有力的计算平台。

4.2 数值计算关联函数

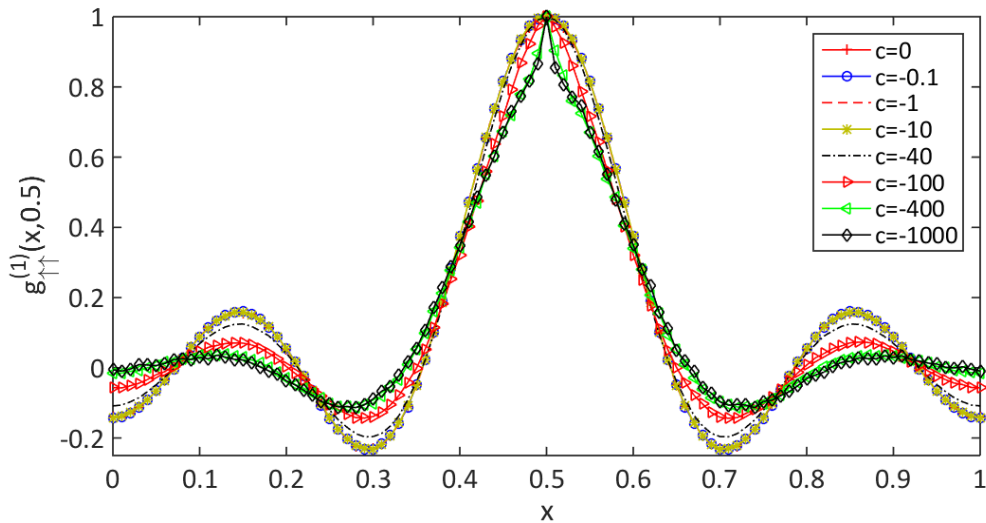


图 4.3 基态单体关联函数。在不同相互作用强度下，单体关联函数随被观察位置 x 的变化，这里选取 $x'=0.5$ 和 $L=1$ 。

选取系统的粒子数为 8，将 x' 固定在 0.5 处，利用蒙特卡洛方法计算多重积分，我们给出不同相互作用强度下的单体关联函数，如图 4.3 所示。可以看出单体关联函数随观测距离的增大在空间呈现振荡行为。图 4.3 中，我们将所有单体关联函数值用同一相互作用下的最大值做了重新标度。极大值出现在固定点 $x=0.5$ 处，在 $x \approx 0.15$ 和 $x \approx 0.85$ 处出现次极极大。次极极大峰随 c 的增大向两边移动。当吸引相互强度非常小时，从 BA 方法得到的单体关联函数和无相互作用下的费米波函数得到的曲线

符合的非常好，印证了两个波函数的一致性。随着相互作用强度的增大，单体关联函数图像在峰值部位变的越来越窄，但整体趋势未发生改变，原因是自旋朝上的费米子之间只受泡利不相容原理的影响，不直接受相互作用 c 的影响，只有自旋朝上和单个杂质之间存在相互作用，因而相互作用对自旋朝上费米子的单体关联函数影响非常有限。当相互作用非常强时，峰值部位变的越来越窄，即短程关联以更快速率衰减，说明强吸引会使单个粒子被观察到高概率的范围变小。

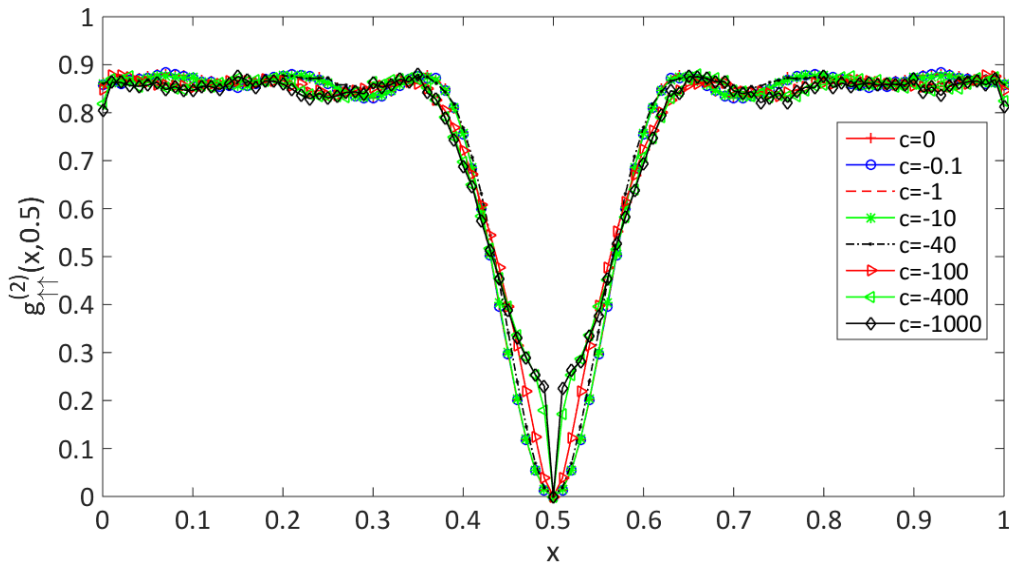


图 4.4 基态二阶关联函数。在不同相互作用强度下，向上自旋粒子间二阶关联函数随被观察位置 x 的变化，这里选取 $x'=0.5$ 和 $L=1$ 。

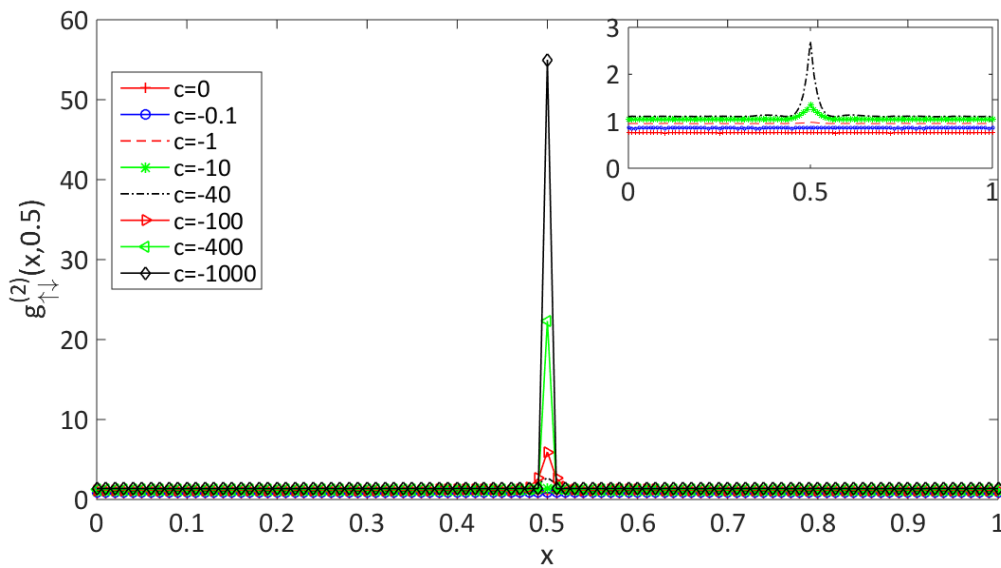


图 4.5 二阶上下粒子关联函数，选取 $x'=0.5$ ，在不同相互作用下，基态关联函数随被观察位置 x 的变化；小图画的 c 取值为 -40 到 0。这里选取 $L=1$ 。

同样利用蒙特卡洛方法计算多重积分，我们给出了自旋向上的两个粒子间二阶关联函数(图 4.4)。 $x = 0.5$ 的值为零，表明两个相同自旋的费米子不能占据同一个位置。离开 0.5 处，关联函数出现周期性振动，并呈现 6 个峰值，表示在这些峰值处观察到粒子的概率最大。因为一个自旋朝上的粒子固定时，剩下的只有 6 个自旋朝上的粒子，所以有 6 个峰值。随着相互作用强度的增加，关联函数中在 x' 位置附近图像变的越来越窄，但总体趋势保持不变。

相同的数值方法得到图 4.5 中向上自旋粒子和向下自旋粒子之间的二阶关联函数图像，令 $x' = 0.5$ ，通过图中可以看到，随着相互作用强度的增加，在 $x = 0.5$ 的位置慢慢开始突起，且越来越高，其余地方几乎是一条直线。

所以可以论证，吸引相互作用下，相同自旋粒子之间的关联几乎不受相互作用强度的影响，不同自旋粒子之间的关联，随着相互作用的不断增强，关联性质也在加强。

第五章 总结与展望

本文对一维连续模型进行了简单介绍,对所有模型对应的关联函数做了详细的解析推导。在 Lieb-Liniger 模型的推导中发现,由于多个玻色子可以占据同一位置,相应的关联函数有单体关联,二阶关联以及多体局域关联等;对于无自旋费米子系统,受到泡利不相容原理的限制,一个粒子只能占据一个位置,所以对应的关联函数有单体关联和二阶关联;而单粒子翻转的相互吸引费米气体作为一种特殊的 Gaudin-Yang 模型,由于自旋自由度的引入,对应的关联函数会更加丰富。单体关联函数的定义是在 x' 位置湮灭一个粒子的同时,在 x 位置发现该粒子的概率,所以存在的单体关联函数只有向上自旋间的关联。对于二阶关联函数,有上上二阶关联和上下二阶关联。

通过对单粒子翻转的相互吸引费米气体模型中关联函数的计算分析发现,相互作用会增强自旋上下粒子之间的二阶关联,表明在存在自旋向下粒子的位置,发现自旋向上粒子的概率更大。而对于自旋向上粒子的单体关联和两体关联函数的研究发现,由于泡利不相容原理的存在,在自旋向上粒子存在的位置,发现被观察粒子的概率为 0,随着与固定点位置距离的增加,关联函数出现了周期性振荡,其峰值个数为除去一对上下自旋对之外的上自旋粒子个数 $N-2$ 。

关联函数的研究,对于观察系统内部粒子之间的运动规律有很大的帮助。通过关联函数的计算可以看出被观察变量与其余变量之间的直接关系。

除了文中计算的偶数个粒子的情况,我们还可以计算系统中有奇数个粒子的情况,还可以改变系统的边界条件,比如计算开边界情况下的极化子。对于其他可积模型,我们可利用相同的方法从 BA 方法解得波函数,然后通过波函数的对称性和算符之间的对易关系推导出不同的关联函数,进而通过数值计算得到关联函数随其他变量之间的变化关系。在关联函数基础上可以继续利用傅里叶变换,使之变到动量空间,从而对系统的动量分布进行计算分析,也可以利用关联函数去计算大动量分布,还可以计算动力学结构因子等内容。波函数是解任何模型的基础,而关联函数是做任何物理量的基础。只有对关联函数掌握透彻,才能对其他更深的物理做出相应的拓展。

附录 A

只有无相互作用时，可以解析解得关联函数表达式，有相互作用时只能借助于数值方法求解。故在本节附录，我们简单推导单体关联函数的解析表达式。

将(3.4)重写得到

$$f_{\downarrow N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = e^{ik_N x_N} \sum_P (-1)^P e^{ik_{P_1} x_1} \prod_{n=2}^{N-1} e^{ik_{P_n} x_n} \quad (\text{A.1})$$

将 x_1 分别用 x 和 x' 替换得到

$$f_{\downarrow N}^*(x, x_2, \dots, x_N) = \sum_P (-1)^P e^{-ik_{P_1} x} \prod_{n=2}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} \quad (\text{A.2})$$

$$f_{\downarrow N}(x', x_2, \dots, x_N) = \sum_{P'} (-1)^{P'} e^{ik_{P'_1} x'} \prod_{n=2}^{N-1} e^{ik_{P'_n} x_n} \quad (\text{A.3})$$

此时我们发现， $P = P'$ ，否则 $f_{\downarrow N}^* f_{\downarrow N}$ 对积分的贡献为 0， $f_{\downarrow N}^* f_{\downarrow N}$ 去掉求和号为

$$(-1)^P (-1)^{P'} e^{i(k_{P'_1} x' - k_{P_1} x)} \prod_{n=2}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} \prod_{n=2}^{N-1} e^{ik_{P'_n} x_n} \quad (\text{A.4})$$

如果 $P' \neq P$ ，必然存在 $n = k (k \neq 1)$ 使得 $P'_k \neq P_k$ ，对 x_k 的积分为

$$\int_0^L e^{-ik_{P'_k} x_k} e^{ik_{P_k} x_k} dx_k = \frac{1}{i(k_{P'_k} - k_{P_k})} e^{i(k_{P'_k} - k_{P_k}) x_k} \Big|_0^L \quad (\text{A.5})$$

由边界条件知道任意两个不相等的动量之间都差 $2\pi/L$ 的整数倍，即 $\Delta k = 2n\pi/L$ ，由于泡利不相容原理， $n \neq 0$ 。

$$\frac{1}{i(k_{P'_k} - k_{P_k})} e^{i(k_{P'_k} - k_{P_k}) x_k} \Big|_0^L = 0 \quad (\text{A.6})$$

由于(A.4)中对 $x_2 \dots x_N$ 的积分是相乘的形式，所以只要有一项积分为 0，整体就为 0，因此 $P_n = P'_n$ ，其中 $n = 2, 3, \dots, N-1$ 。由于 P 和 P' 均表示 $N-1$ 个粒子的排列，所以 $P_1 = P'_1$ 。

$$f_{\downarrow N}^*(x, x_2, \dots, x_N) f_{\downarrow N}(x', x_2, \dots, x_N) = \sum_P e^{ik_{P_1}(x'-x)} \prod_{n=2}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} e^{ik_{P_n} x_n} = \sum_P e^{ik_{P_1}(x'-x)} \quad (\text{A.7})$$

关联函数(2.74)的分子项

$$\begin{aligned} & (N-1) \int_0^L dx_2 dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_N}^*(x, x_2, \dots, x_N) f_{\downarrow_N}^*(x', x_2, \dots, x_N) \\ &= (N-1)! L^{N-1} \sum_{P_1=1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

分母即为 $(N-1)!L^N$ ，所以单体关联函数为

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}(x, x') = \frac{(N-1)! L^{N-1} \sum_{P_1=1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)}}{(N-1)! L^N} = \frac{1}{L} \sum_{P_1=1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)} \quad (\text{A.9})$$

由(3.5)知， $k_{P_1} = \frac{2\pi}{L} \left(0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N-2}{2} \right)$ ， $P_1 = 1, 2, \dots, N-1$ ，所以 $\sum_{P_1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)}$ 为等比数

列的求和，令 $X = \frac{2\pi(x'-x)}{L}$ ，根据公式有

$$\begin{aligned} \sum_{P_1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)} &= e^{-i\frac{(N-2)}{2}X} + e^{-i\frac{(N-4)}{2}X} + \dots + e^0 + \dots + e^{i\frac{(N-4)}{2}X} + e^{i\frac{(N-2)}{2}X} \\ &= \sum_{j=-(N-2)/2}^{(N-2)/2} (e^{iX})^j = \frac{e^{-i\frac{(N-2)}{2}X} - e^{i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{iX}} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

化简之后得到

$$\sum_{P_1}^{N-1} e^{ik_{P_1}(x'-x)} = \frac{e^{-i\frac{(N-2)}{2}X} - e^{i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{iX}} = \frac{\sin\left[\frac{(N-1)\pi}{L}(x'-x)\right]}{\sin\left[\frac{\pi}{L}(x'-x)\right]} \quad (\text{A.11})$$

令 $x' = L/2$ ，将(A.11)代入(A.9)得自旋向上粒子间单体关联函数解析表达式

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(1)}\left(x, \frac{L}{2}\right) = \frac{1}{L} \frac{\sin\left[\frac{(N-1)\pi}{L}\left(\frac{L}{2} - x\right)\right]}{\sin\left[\frac{\pi}{L}\left(\frac{L}{2} - x\right)\right]} = \frac{1}{L} (-1)^{\frac{N-2}{2}} \frac{\cos\left[\frac{(N-1)\pi}{L}x\right]}{\cos\left[\frac{\pi}{L}x\right]} \quad (\text{A.12})$$

附录 B

在本节附录，我们解析推导二阶关联函数表达式。

根据(3.4)得

$$f_{\downarrow_N}(x, x', x_3, \dots, x_N) = e^{ik_N x_N} \sum_{P'}^{N-1} (-1)^{P'} e^{ik_{P_1} x} e^{ik_{P_2} x'} \prod_{n=3}^{N-1} e^{ik_{P_n} x_n} \quad (\text{B.1})$$

因此

$$\begin{aligned} & f_{\downarrow_N}^*(x, x', x_3, \dots, x_N) f_{\downarrow_N}(x, x', x_3, \dots, x_N) \\ &= \sum_P^{N-1} \sum_{P'}^{N-1} (-1)^P (-1)^{P'} e^{-ik_{P_1} x} e^{-ik_{P_2} x'} e^{ik_{P_1} x} e^{ik_{P_2} x'} \prod_{n=3}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} \prod_{n=3}^{N-1} e^{ik_{P'_n} x_n} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

因为计算二阶关联函数时，积分是对 x_3 到 x_N 的积分，所以上式计算中对 P_1 、 P'_1 、 P'_2 和 P_2 的排列有限制条件，如果 $P' \neq P$ ，必然存在 $n=k$ ($k > 2$) 使得 $P'_k \neq P_k$ ，如(A.5)-(A.6)的证明，由于(B.2)中对 x_3, \dots, x_N 的积分是相乘的形式，所以只要有一项积分为 0，整体就为 0，因此 $P_n = P'_n$ ，其中 $n = 3, \dots, N-1$ 。由于 P 和 P' 均表示 $N-1$ 个粒子的排列，所以

$$P'_1 P'_2 P'_3 \dots P'_{N-1} = P_1 P_2 P_3 \dots P_{N-1} \quad (\text{B.3})$$

$$P'_1 P'_2 P'_3 \dots P'_{N-1} = P_2 P_1 P_3 \dots P_{N-1} \quad (\text{B.4})$$

故

$$\begin{aligned} & \int_0^L dx_3 \dots dx_N f_{\downarrow_N}^*(x, x', x_3, \dots, x_N) f_{\downarrow_N}(x, x', x_3, \dots, x_N) \\ &= \int_0^L dx_3 \dots dx_N \sum_P^{N-1} e^{-ik_{P_1} x} e^{-ik_{P_2} x'} e^{ik_{P_1} x} e^{ik_{P_2} x'} \prod_{n=3}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} e^{ik_{P_n} x_n} \\ &+ \int_0^L dx_3 \dots dx_N \sum_P^{N-1} (-1)^P e^{-ik_{P_1} x} e^{-ik_{P_2} x'} e^{ik_{P_2} x} e^{ik_{P_1} x'} \prod_{n=3}^{N-1} e^{-ik_{P_n} x_n} e^{ik_{P_n} x_n} \quad (\text{B.5}) \\ &= \int_0^L dx_3 \dots dx_N \sum_P^{N-1} \left[1 - e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x' - x)} \right] \\ &= (N-3)! L^{N-2} \sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} \left[1 - e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x' - x)} \right] \end{aligned}$$

将(A.7)和(B.5)代入向上自旋粒子间二阶关联函数(2.87)得

$$\begin{aligned}
 g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= (N-1)(N-2) \frac{(N-3)! L^{N-2} \sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} \left[1 - e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x'-x)} \right]}{(N-1)! L^N} \\
 &= \frac{1}{L^2} \sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} \left[1 - e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x'-x)} \right] = \frac{(N-1)(N-2)}{L^2} - \sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x'-x)}
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

我们首先计算 $\sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x'-x)}$ ，根据附录 A 中的定义 $X = \frac{2\pi(x'-x)}{L}$ ，得

$$\begin{aligned}
 \sum_{P_1=1}^{N-1} \sum_{P_2=1, P_2 \neq P_1}^{N-1} e^{i(k_{P_1} - k_{P_2})(x'-x)} &= \sum_{j=-(N-2)/2}^{(N-2)/2} (e^{iX})^j \sum_{k=-(N-2)/2, k \neq j}^{(N-2)/2} (e^{-iX})^k \\
 &= \sum_{j=-(N-2)/2}^{(N-2)/2} (e^{iX})^j \left[\frac{e^{i\frac{N-2}{2}X} - e^{-i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{-iX}} - (e^{-iX})^j \right] = \sum_{j=-(N-2)/2}^{(N-2)/2} \left[\frac{e^{i\frac{N-2}{2}X} - e^{-i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{-iX}} (e^{iX})^j - 1 \right] \\
 &= \frac{e^{i\frac{N-2}{2}X} - e^{-i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{-iX}} \frac{e^{-i\frac{N-2}{2}X} - e^{i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{iX}} - (N-1)
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

将(B.7)代回到(B.6)，并将 X 的值代入得

$$\begin{aligned}
 g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') &= \frac{(N-1)(N-2)}{L^2} - \frac{1}{L^2} \frac{e^{i\frac{N-2}{2}X} - e^{-i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{-iX}} \frac{e^{-i\frac{N-2}{2}X} - e^{i\frac{N}{2}X}}{1 - e^{iX}} + \frac{(N-1)}{L^2} \\
 &= \frac{(N-1)^2}{L^2} - \frac{1}{L^2} \frac{\sin\left(\frac{N-1}{2}X\right) \sin\left(-\frac{N-1}{2}X\right)}{\sin\left(\frac{X}{2}\right) \sin\left(-\frac{X}{2}\right)} \\
 &= \frac{(N-1)^2}{L^2} - \frac{1}{L^2} \frac{\sin^2\left(\frac{(N-1)\pi}{L}(x'-x)\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi}{L}(x'-x)\right)}
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

令 $x' = L/2$ ，解(B.8)得到自旋向上粒子间二阶关联函数解析表达式

$$g_{\uparrow\uparrow}^{(2)}(x, x') = \frac{(N-1)^2}{L^2} - \frac{1}{L^2} \frac{\cos^2\left(\frac{(N-1)\pi}{L}x\right)}{\cos^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)} \tag{B.9}$$

参考文献

- [1] C. Pethick and H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases: Cambridge University Press, New York, (2008).
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher and M. R. Matthews, Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor, *Science* **269**, 198 (1995).
- [3] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. Van druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [4] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, W. Ketterle, Optical confinement of a Bose-Einstein condensate, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2027 (1998).
- [5] S. R. Granade, M. E. Gehm, O'Hara K M, et al. All-optical production of a degenerate Fermi gas, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 120405 (2002).
- [6] A. G. Truscott, K.E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge and R. G. Hulet, Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms, *Science* **291**, 2570 (2001)
- [7] B. DeMarco and D. S. Jin. Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas, *Science* **285**, 1703 (1999).
- [8] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 120403 (2004).
- [9] P. Jaikumar, M. Prakash, Neutrino pair emission from Cooper pair breaking and recombination in superfluid quark matter, *Phys. Lett. B* **516**, 345 (2001).
- [10] N. D. Mermin, P. Muzikar, Cooper pairs versus Bose condensed molecules: The ground-state current in superfluid He 3 - A, *Phys. Rev. B* **21**, 980 (1980).
- [11] D. B. M. Dickerscheid, D. V. Oosten, P. J. H. Denteneer, et al, Ultracold atoms in optical lattices, *Phys. Rev. A* **68**, 113 (2003).
- [12] E. H. Lieb and W. Liniger, Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State, *Phys Rev.* **130**, 1605 (1963).
- [13] E. H. Lieb, Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. II. The Excitation Spectrum, *Phys. Rev.* **130**, 1616 (1963).
- [14] C. N. Yang, Some Exact Results for the Many-Body Problem in one Dimension with

- Repulsive Delta-Function Interaction, Phys. Rev. Lett. **19**, 1312 (1967).
- [15] E. J. K. P. Nandani, R. A. Roemer, S. Tan, et al, Higher-order local and non-local correlations for 1D strongly interacting Bose gas, New J. Phys. **18**, 055014 (2016).
- [16] J. S. Calabrese, Dynamical density-density correlations in the one-dimensional Bose gas, Phys. Rev. A **74**, 396 (2006).
- [17] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, J. T. Walraven, Regimes of quantum degeneracy in trapped 1D gases, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).
- [18] M. D. Girardeau and E. M. Wright, Dark solitons in a one-dimensional condensate of hard core bosons, Phys. Rev. Lett. **84**, 5239 (2000).
- [19] V. Dunjko, V. Lorent and M. Olshanii, Bosons in cigar-shaped traps: Thomas-Fermi regime, Tonks-Girardeau regime, and in between, Phys. Rev. Lett. **86**, 5413 (2001).
- [20] C. Menotti and S. Stringari, Collective oscillations of a one-dimensional trapped Bose-Einstein gas, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002).
- [21] P. Ohberg and L. Santos, Dynamical Transition from a Quasi-One-Dimensional Bose-Einstein Condensate to a Tonks-Girardeau Gas, Phys. Rev. Lett. **89**, 240402 (2002).
- [22] D. M. Gangardt and G. V. Shlyapnikov, Stability and Phase Coherence of Trapped 1D Bose Gases, Phys. Rev. Lett. **90**, 010401(2003).
- [23] K. V. Kheruntsyan, D. M. Gangardt, P. D. Drummond, et al, Pair correlations in a finite-temperature 1D Bose gas, Phys. Rev. Lett. **91**, 040403 (2003).
- [24] M. Ferray, A. L'Huillier, X. F. Li, et al. Multiple-harmonic conversion of 1064nm radiation in rare gases, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. **21**, L31 (1988).
- [25] A. Y. Cherny, J. Brand, Dynamic and static density-density correlations in the one-dimensional Bose gas: exact results and approximations, Phys. Rev. A **79**, 043607 (2008).
- [26] O. I. Patu, A. Klumper, Thermodynamics, density profiles and correlation functions of the inhomogeneous one-dimensional spinor Bose gas, Phys. Rev. A **92**, 043631 (2015).
- [27] O. Gamayun, A. G. Pronko, M. B. Zvonarev, Time and temperature-dependent correlation function of an impurity in a one-dimensional Fermi gas as a Fredholm determinant, New J. Phys, **18**, 045005 (2016).

-
- [28] I. Poboiko, M. Feigel'Man, Spin correlation functions and decay of quasiparticles in XXZ spin chain at $T > 0$, *Phys. Rev. B* **94**, 195420 (2016).
- [29] T. Ribic, G. Rohringer, K. Held, Local correlation functions of arbitrary order for the Falicov-Kimball model, *Phys. Rev. B*, **95**, 155130 (2017).
- [30] A. I. Proshkin, T. Y. Ponomareva, I. A. Menshikh, et al. Correlation function of one-dimensional $s=1$ Ising model, *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 929 (2017).
- [31] S. Cheng, Y. Jiang, Y. C. Yu, et al. Asymptotic correlation functions and FFLO signature for the one-dimensional attractive Hubbard model, *Nucl. Phys. B*, **929**, 353 (2018).
- [32] A. Gorlitz et al, Realization of Bose-Einstein condensates in lower dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [33] F. Schreck et al, Quasipure Bose-Einstein condensate immersed in a Fermi sea *Phys. Rev. Lett.* **87**, 080403 (2001).
- [34] H. Moritz, T. Stoferle, M. Köhl, et al, Exciting collective oscillations in a trapped 1D gas, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 250402 (2003).
- [35] B. L. Tolra, W. D. Phillips, K. M. O'Hara, J. H. Huckans et al, Observation of reduced three-body recombination in a correlated 1D degenerate Bose gas, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 190401 (2004).
- [36] B. Paredes, A. Widera, and V. Murg, Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice, *Nature*, **429**, 277 (2004).
- [37] T. Kinoshita, T. Wenger and D. S. Weiss, Observation of a One-Dimensional Tonks-Girardeau Gas, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [38] E. H. Lieb and W. Liniger, Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. I. The General Solution and the Ground State, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963).
- [39] H. G. Vaidya and C. A. Tracy, One-Particle Reduced Density Matrix of Impenetrable Bosons in One Dimension at Zero Temperature, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 3 (1979).
- [40] M. Jimbo, T. Miwa, Y. Mori and M. Sato, Density matrix of an impenetrable Bose gas and the fifth Painlevé transcendent, *Physica D* **1**, 80 (1980).
- [41] M. Schwartz, Off-diagonal long-range behavior of interacting Bose systems *Phys. Rev. B* **15**, 1399 (1977).
- [42] F. D. M. Haldane, Effective Harmonic-Fluid Approach to Low-Energy Properties of

One-Dimensional Quantum Fluids Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981).

[43]G. E. Astrakharchik, S. Giorgini, J. Phys. B-At. Mol. Opt. **39**, S1 (2005).

[44]E. J. K. P. Nandani, R. A. Roemer, S. Tan, et al. Higher-order local and non-local correlations for 1D strongly interacting Bose gas. New J. Phys. **18**, 055014 (2016).

攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目

张瑞江, 尹相国, 陈立, 张云波, 单自旋翻转的一维吸引费米气体, 山西大学学报(自然科学版)

致谢

硕士三年的光阴转瞬即逝，随着这篇文章的写完，为这段时间的努力画上了句号。科研生活给我的感觉只有忙碌，对于喜欢科研的人来说，这确实是个很好的机会充实自己，这里有很多的资源供我们学习，提高自己。硕士生涯让我体验到了一种不同于之前的新生活，有了一种除了学习没什么可以去做的感觉，走在路上躺在床上，满脑子都是产生湮灭算符与基矢的作用，翻来覆去失眠的多个夜晚，始终得不到自己想要的结果。这种生活给了我很多好处，锻炼了心性，磨砺了毅力，让我有了更积极的人生态度。

感谢自己选择走这一条路，虽然走的并不畅快，但每一种经历都是一种成长，都是一笔宝贵的财富。一帆风顺的人生只会让自己失去对生活的警惕。选择了这条路并且走完，是对自己的负责任，也是对自己的提高。感谢导师张云波教授的教导，整个三年，从大方向的掌控到小细节的推导，无不用心审查，缜密的逻辑，严谨的科研态度以及一丝不苟的精神，都在深深的影响着我。老师的生活，几乎没有寒暑假，没有周末，晚上也常在办公室工作，这样兢兢业业的工作态度值得我学习。这是我人生中很重要的一位导师。

感谢 CAT 小组里的每一位老师和同学，如果说老师都是我们学生的掌舵人，那么师兄师姐师弟师妹们便是帮我们撑帆的，科研的海洋过于浩瀚，如果是一个人单干，会始终徘徊在原地，无法前行。感谢刘彦霞师姐和李旗师姐在我刚来之际指点迷津以及在我准备开始推导时帮我做准备工作，感谢尹相国老师、王利老师和陈立师兄对我不厌其烦的教导。最需要感谢的是相互扶持的“吉祥四宝”，一起吃饭，一起学习，一起聊天，没有这三位同学的力挺，这三年会过的很难。感谢组里其他成员对我的无私关怀，这三年的生活会让我铭记。感谢班主任刘玉萍老师对我的关怀，感谢硕士期间给我上课的每一位老师，如果没有你们的教诲，我将无法学到那么些基础知识，更难以开展我的工作。感谢物理楼的每一位成员，为我们营造了良好的学习和工作氛围。感谢本届的小伙伴们，和大家的朝夕相处我很开心，各位的热心帮助让我三冬都觉暖。感谢支持理解我的好兄弟们，不因我的缺席而责怪。感谢家人，感谢山西大学的每一寸土地，伴我成长。

特别感谢参加阅读和答辩的各位评审专家与教授。

个人简况及联系方式

姓名： 张瑞江

性别： 男

籍贯： 山西省临县

学习经历： 2015年9月至2018年6月在山西大学理论物理研究所攻读硕士学位

联系方式： 15735174942

电子邮箱： ruijiang1992@qq.com

承 诺 书

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

作者签名：

20 年 月 日

学位论文使用授权声明

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

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：

导师签名：

20 年 月 日

