

2017 届硕士学位论文

一维强相互作用冷原子气体中有效自旋链 模型研究

- 作者姓名 冯志强
- 指导教师 张云波 教 授
- 学科专业 凝聚态物理
- **研究方向** 冷原子气体理论
- 培养单位 理论物理研究所
- **学习年限** 2014年9月至2017年6月

山西大学

2017 届硕士学位论文

一维强相互作用冷原子气体中有效自旋链 模型研究

- 作者姓名 冯志强
- 指导教师 张云波 教 授
- **学科专业** 凝聚态物理
- 研究方向 冷原子气体理论
- **培养单位** 理论物理研究所
- **学习年限** 2014年9月至2017年6月

二〇一七年六月

Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2017

Effective Spin-Chain Model for Strongly Interacting One-Dimensional Atomic Gases

Student Name	Zhiqiang Feng
Supervisor	Prof. Yunbo Zhang
Major	Condensed Matter Physics
Specialty	Ultracold Atomic Physics
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2014.09-2017.06

June, 2017

目 录

中 文 摘 要	I
ABSTRACT	III
第一章 绪论	
1.1一维量子气体简介	
1.2一维有效自旋链的实验制备	
1.3一维量子气体中有效自旋链模型的研究	2
1.3.1 s 波相互作用的有效自旋链	
1.3.2 自旋轨道耦合的有效自旋链	7
1.3.3 p 波相互作用的有效自旋链	
1.4 本文内容	9
第二章 有效自旋链模型	11
2.1 玻色费米映射理论	11
2.1.1 玻色费米映射	11
2.1.2 玻色费米映射理论的推广	
2.2 有效自旋链模型中的等效哈密顿量	
2.3 近邻粒子之间交叠常数	
2.3.1 近邻交叠常数的精确解	
2.3.2 近邻交叠常数的近似解	19
2.4 本章小结	
第三章 有效自旋链模型中密度分布的研究	
3.1 有效自旋链密度分布的研究	
3.1.1 系统的空间密度分布	
3.1.2 系统的自旋密度分布	
3.2 磁场梯度对有效自旋链的影响	
3.2.1 磁场梯度对有效自旋链自旋密度分布的影响	
3.2.2 外势的改变对能级分布的影响	

3.2.3 磁场梯度对能级分布的影响	. 39
3.3 本章小结	. 40
第四章 总结与展望	. 41
参考文献	. 43
攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目	. 47
致谢	. 49
个人简况及联系方式	. 51
承 诺 书	. 53
学位论文使用授权声明	. 55

Contents

Chinese Abstract	I
ABSTRACT II	I
Chapter 1 Introduction	l
1.1 Introduction of one dimensional quantum gas	l
1.2 Experimental preparation for one dimensional effective spin chain	l
1.3 Effective spin chain in one dimensional gas	2
1.3.1 Effective spin chain with s-wave interaction	3
1.3.2 Effective spin chain with spin-orbit coupling	7
1.3.3 Effective spin chain with p-wave interaction	3
1.4 Research Content)
Chapter 2 Effective spin chain model	l
2.1 Theory of Bose-Fermi mapping	l
2.1.1 Bose-Fermi mapping	l
2.1.2 Generalization of Bose-Fermi mapping	2
2.2 Effective Hamiltonian in the effective spin chain model	1
2.3 The nearest-neighbor exchange constants	7
2.3.1 Exact derivation for the nearest-neighbor exchange constants	7
2.3.2 Approximative derivation for the nearest-neighbor exchange constants)
2.4 Conclusion	l
Chapter 3 Density distribution of the effective spin chain model	3
3.1 Density distribution of the effective spin chain	3
3.1.1 Spatial density distribution of system	3
3.1.2 Spin density distribution of system	5
3.2 Influence of magnetic field gradient on the effective spin chain	1
3.2.1 Influence of magnetic field gradient on density distribution	1
3.2.2 Influence of the change of external potential on energy spectrum	3

3.2.3 Influence of magnetic field gradient on energy spectrum	39
3.3 Conclusion	40
Chapter 4 Summary and Outlook	41
References	43
Research Achievements	47
Acknowledgment	49
Personal Profiles	51
Letter of Commitment	53
Authorization Statement	55

中文摘要

一维强相互作用冷原子气体模型一直是凝聚态物理学领域中最为基础也最具有 研究价值的理论模型之一。早期关于一维冷原子气体研究大多是在光晶格中进行的, 由于在光晶格中研究一维系统的局限性导致一些量子现象的缺失,例如:虽然短程 反铁磁关联在二聚物晶格中已经被探测到,但在光晶格中至今也没有探测到两组分 费米气体的反铁磁奈尔长程序。2015年德国Heidelberg大学Jochim小组利用简谐势阱 中囚禁的⁶Li原子在散射共振附近实现了反铁磁海森堡自旋链的精确制备,在无需外 加光晶格的情况下对少数几个粒子的精确操控使得有效自旋链模型成为可能。2016 年崔晓玲小组利用有效自旋链模型在考虑p波相互作用下的自旋1/2两组分费米气体 中研究了奈尔反铁磁关联。

本文利用玻色费米映射理论在一维强相互作用冷原子气体中推导出有效自旋链 模型,通过精确对角化的方法分别计算了囚禁在一维谐振子势阱和一维无限深方势 阱中两组分费米系统的自旋密度分布与能级排布。结果表明自旋平衡的自旋链系统 处于基态时两组分自旋密度分布相同,自旋非平衡的自旋链系统处于基态时两组分 自旋密度分布不同。外势阱改变后,系统密度分布峰值位置会发生改变,外势的改 变会导致能级发生偏移。随后计算了磁场梯度对自旋链系统密度分布和能谱的影响。 考虑磁场梯度后,自旋平衡的自旋链系统处于基态时自旋密度在空间交替排布即系 统处于反铁磁序基态,自旋非平衡的自旋链系统自旋密度分布的空间对称性会被磁 场梯度破坏掉。粒子间相互作用趋于无穷时系统是高度简并的,磁场梯度的引入消 除了系统的简并,并且随着磁场梯度的增加能隙会变大。在无需借助光晶格的情况 下便可以在理论和实验上实现有效自旋链模型,有效自旋链模型不仅适用于玻色系 统与费米系统也适用于多组分系统,这为我们研究一维冷原子气体的磁性开辟了另 一条途径。

关键词:密度分布;自旋链;一维量子气体;磁场梯度

I

ABSTRACT

One of the fundamental and meaningful theoretical models in the cold atom research area is the strongly interacting one-dimensional (1D) quantum gas. Early stage studies of cold gases in optical lattices witnessed the absence of some quantum phenomena due to the limitations in the optical lattices. For instance, although short-range antiferromagnetism has been verified in dimerized lattices, the N éel long-range order in two-component Fermi gases has not yet been observed. In the experiments of Jochim's team, they realized a Heisenberg antiferromagnetic spin chain in the vicinity of a scattering resonance by trapping ultracold ⁶Li atoms in a harmonic trap. Later, it was proposed that the N éel AFM may be realized in a spin-1/2 Fermi gas with p-wave interactions in a 1D harmonic trap.

In this thesis, we derive the effective spin-chain model for 1D strongly interacting atomic gases by means of the technique of Bose-Fermi mapping. We calculate the spin density distribution and energy spectrum of two components Fermi system by the exact diagonalization of the Hamiltonian matrix in a 1D harmonic oscillator and square potential well, respectively. The spin density distributions for balanced spin chain are the same at ground state, but not for an unbalanced spin chain. The change of external potential gives rise to a shift of density peak position and energy spectrum. Furthermore, applying a B-field gradient in the spin chain results in an alternating distribution of spin density distribution for balanced spin chain at ground state, indicating the antiferromagnetic order. The gradient destroys the spatial symmetry of spin density distribution for an unbalanced spin chain at ground state, and breaks the degeneracy for system with infinite interaction. The high tunability of ultracold atomic systems offers the fascinating possibility to realize an effective spin chain without the need for an optical lattice. The model of the effective chain is not only valid for bosons and fermions, but also valid for systems with more than two components. The

model offers an alternative simple scenario for the study of 1D quantum magnetism in cold gases.

Key words: Density distribution; Spin-chain; 1D quantum gases; *B*-field gradient

第一章 绪论

1.1一维量子气体简介

物理学家们在 20 世纪取得的两个非常瞩目的成果是量子理论和相对论。相对 论的创立从根本上改变了人们对原有的时间和空间的认识。量子力学的创立,开拓 了人们探索微观世界的道路,分子和原子的秘密也被揭开。大量事实已证实,没有 了量子理论,几乎所有的近代物理学科及相关的边沿学科的发展都是不敢想象的, 可以毫不夸张地说,没有量子理论的创立,就没有人类现代物质文明。一维问题在 数学上处理起来比较简单,从而能对结果进行细致的讨论,量子体系的许多特征, 都可以在这些一维问题中展示出来。此外,一维问题也是处理各种复杂问题的基础。 近几十年随着实验技术与理论知识逐渐成熟,一维量子气体一直是物理学家研究的 热点。实验上可以通过调节外部束缚势,实现在两个方向上压缩原子使其只存在零 点振动,这样就制备出准一维束缚量子气体^[1]。

1.2 一维有效自旋链的实验制备

我们研究的超冷原子气体大多是在光晶格里面制备的,例如:伊辛模型的仿真 是在倾斜的晶格^[2,3]中实现的;经典反铁磁性的研究是在三角晶格^[4]中来完成的;在 极化的晶格气体[5.6]中观测由自旋交换相互作用诱导产生偶极相互作用;短程反铁磁 性是在二聚物晶格^[7]中研究的。1987年实验^[8]上在具有反铁磁相的铜氧化物中观测 到了高温超导性后,物理学家们对于具有反铁磁关联的自旋 1/2 的费米子系统产生 了极大地兴趣。实验上大多是在深光晶格莫特绝缘态中研究相邻粒子间的超交换相 互作用,超交换相互作用在玻色化¹⁹和费米化的双阱系统¹¹⁰里已经被探测到了,费米 化原子中的短程相互作用在各式各样的光晶格[11,12,13]中也已经实现了,而且物理学。 家在一维量子气体中利用超交换相互作用在莫特绝缘态中研究了掺杂的自旋动力学 问题141。光晶格为我们研究超冷原子气体的量子磁性提供了适宜的条件,光晶格也 是凝聚态物理[15]中非常重要的领域。然而,实验上超交换相互作用需要在极低的温 度下才能实现,由于光晶格中冷却技术的限制,到目前为止在光晶格中也没能实现 自旋 1/2 的费米系统的反铁磁基态。无需再借助光晶格,物理学家在谐振子势阱中 实现了自旋 1/2 的费米系统的反铁磁基态。在强相互作用领域,费米系统^[16]和玻色 系统的空间波函数^[17, 18, 19]可以映射到无相互作用且不带自旋的费米子系统上,这也 叫作费米极化。强相互作用可以使得系统处于一种类似于魏格纳晶体态^[20, 21, 22],此

1

时系统的基态是高度简并^[23]的。在费米化极限附近,物理学家们利用萨瑟兰德^[24]有效自旋哈密顿量研究了接近多重基态的结构,并且在两组分系统中实现了海森堡自旋链模型^[20,25]。2014 年德国汉诺威大学 Deuretzbacher^[25]在理论上研究了谐振子势阱中一维强相互作用旋量气体的量子磁性问题,同时提出了在谐振子势阱中冷原子系统实现有效自旋链的理论依据。同一时期 Cui^[26]也研究了在谐振子势阱中自旋轨道耦合对强相互作用的一维费米气体的影响。2015 年德国 Heidelberg 大学 Jochim 小组^[27]利用简谐势阱中囚禁的⁶Li 原子在散射共振附近实现了反铁磁海森堡自旋链的精确制备,在无需外加光晶格的情况下少数几个粒子的精确操控,使得有效自旋链模型变为可能。这也为我们在冷原子气体中研究一维量子磁性开辟了另一条道路。如图 1.1,是实验上在一维谐振子势阱中实现海森堡有效自旋链示意图,它能制备出了铁磁态和反铁磁态。



图 1.1 海森堡自旋链在谐振子势阱中的精确制备^[27]

1.3 一维量子气体中有效自旋链模型的研究

强相互作用的一维量子气体一直是物理学家们研究的主要领域,尤其是近几年, 人们一直想要构造出具有强相互作用g(这里g是粒子间的相互作用强度,实验上可 以利用费什巴赫共振(Feshbach Resonance)^[28]来调节)或接近强相互作用^[29]一维旋 量费米气体或玻色气体的基态。在强相互作用领域,带有自旋的粒子处于系统的基 态时,由于系统的能量不依赖于粒子自旋的结构,这就导致系统具有很高的自旋简

并度^[30]。体系的能量本征值问题以及密度分布问题,除了极少数体系(例如;氢原子, 谐振子等)外,往往是很难进行严格求解的,所以在处理遇到的实际问题时,大多是 采取适当的模型来简化,有时候还需要采取适当的近似方法,(例如; 准经典近似, 绝热近似,变分法,玻恩近似法,微扰论等近似方法)。各种近似的方法都有其适用 的对象和范围,当然每种近似方法都有其优缺点,其中微扰近似法是应用最广泛的。 当粒子间的相互作用略小于极限强相互作用时,可以把1/g当作一个小的微扰参量。 利用微扰理论来处理系统的量子磁性问题时,可以把强相互作用极限(g→∞)的部 分作为未受微绕项,把粒子间无相互作用的部分作为微扰项。当粒子间具有强相互 作用时系统的基态往往是自旋简并的,为了消除系统的简并需要利用微扰近似把哈 密顿量展开到二阶进而构造出有效自旋链模型。有效自旋链模型的哈密顿量可以看 成是非传统的带有不变量的萨瑟兰德有效自旋哈密顿量[24],它是由近邻粒子间的有 效超交换相互作用引起的。这个有效超交换作用可以很直观的理解: 当粒子间为强 相互作用极限 ($g \rightarrow \infty$) 时粒子不能同时占据相同位置, 粒子也不可能与它相邻的粒 子进行位置交换。当粒子间的相互作用略小于强相互作用极限时,两个相邻粒子就 有一定的几率进行位置的交换,尽管此时两个粒子交换位置的几率极小,因此两个 粒子位置交换就产生了等效超交换相互作用。在一维强相互作用气体中研究最多的 是自旋 1/2 的费米系统,因为此时交换算符可以用自旋算符来表示,处理量子磁性 问题会变得更加简单和直观。利用有效自旋链模型经过计算可以得出: 当粒子间为 强排斥相互作用时自旋 1/2 的费米系统的基态为海森堡反铁磁态,当粒子间为强吸 引相互作用时不考虑紧束缚分子态,其基态为海森堡铁磁态。利用有效自旋链模型 研究一维强相互作用系统主要有两方面的优点: 第一, 在一维强相互作用领域, 有 效自旋链模型对强相互作用系统的量子磁性问题具有更加直观的描述:第二,与以 往的方法相比有效自旋链模型在处理系统的能量本征值,密度分布等问题时更加简 单,随着系统粒子数的增加以往方法就会遇到很多难题,处理起来也更加复杂,而 有效自旋链模型可以用来求解多粒子系统,计算方法简单而且节省时间。

1.3.1 s 波相互作用的有效自旋链

现在考虑一个由 N 个带自旋的粒子(费米子或玻色子)组成的一维强相互作用 量子系统。粒子被外势所束缚(通常为谐振子势),粒子之间的相互作用通常可以 等效成接触赝势(即δ相互作用),可利用费什巴赫共振(Feshbach Resonance)^[28] 来调节。对于自旋 1/2 的系统只考虑 s 波相互作用,其系统哈密顿量为:

$$H = \sum_{i} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_i) \right] + g \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j)$$
(1.1)

其中*M* 是粒子质量, $V(x_i)$ 是外势,通常令 $M = \hbar = 1$ 。当粒子间为无穷大排斥相互作用 $(g \to \infty)$ 时,粒子具有硬核特性并且可以等效成不带自旋的费米子。如果系统是由 *N* 个不带自旋的玻色子组成的,那么系统的多体波函数可以通过玻色费米映射理论^[17]构造。对于带有自旋的费米子系统,系统相应的波函数一般可以表示成:

$$\psi(x_1 \cdots x_N, \sigma_1 \cdots \sigma_N) = \sum_{P} (-1)^P P[\psi_F \theta \otimes \chi]$$
(1.2)

这里 x 表示粒子的位置, σ 是泡利算符表示粒子的自旋, ψ_F 表示由 N 个无相互作用的费米子组成的系统空间基态波函数, 即 Slater 行列式, 它可以由 N 个无自旋的费米子的单粒子波函数进行构造。 $\theta(x_1,...,x_N)$ 是阶跃函数, 如果 $x_1 \le x_2 \le \cdots \le x_N$ 那么 $\theta(x_1,...,x_N)=1$, 否则等于 0。 χ 表示由 N 个带有自旋的粒子组成的一个任意自旋态, 它可以由系统的一组正交完备的基矢来表示。P 是交换算符。

在一维具有强相互作用的旋量费米子系统中利用微扰理论可以得到系统的等效 哈密顿量,这里将强相互作用部分作为未受微扰项,把粒子间无相互作用的部分作 为微扰项,这个思想与在哈伯德模型^[15]中构造有效自旋链模型的思想相一致。应用 标准的简并微扰理论可以得出展开到二阶项的有效哈密顿量^[30]:

$$H_{\rm eff} = -\frac{1}{g} \sum_{i=1}^{N-1} C_i \left(1 - P_{i,i+1} \right)$$
(1.3)

这里 *P_{i,i+1}* 表示交换算符,它作用到任意一个自旋态 χ 上交换第 *i* 个粒子和第(*i*+1) 个粒子的自旋。系数 *C_i* 为正值且与自旋无关,可以表示为

$$C_{i} = N! \int \prod_{i} dx_{j} \left| \partial_{i} \psi_{F} \right|^{2} \delta\left(x_{i+1} - x_{i} \right) \theta\left(x_{1}, \dots, x_{N} \right)$$

$$(1.4)$$

可以看出系数*C_i* 只依赖于总的粒子数和外加束缚势,与粒子是玻色子还是费米子没有关系,也不依赖于单粒子的自旋。系统由 *N* 个粒子组成,那么系数*C_i* 就是 *N* 重积分。随着粒子数 *N* 的增加系数*C_i* 计算就变得相当困难了。当系统处于一维谐振子势阱时,系数*C_i* 可以约化成如下形式^[31]:

$$C_{i} = K \frac{-(i - N/2)^{2} + N^{2}/4}{N(N-1)/2}$$
(1.5)

这里 *K* 表示 Tan 关系^[32,33],一旦知道了 *K* 那么利用上述公式(1.5),所有的系数*C_i*都可以计算出来。这里我们介绍利用上面的约化公式(1.5)和积分公式(1.4)来计算由 8 个粒子和 13 个粒子组成的系统的系数*C_i*,如图 1.2 所示,连线和特征符号分别表示用约化公式和积分法得出的结果。可以得到这两种方法得出的系数*C_i*基本一致,当系统粒子数很大时在误差允许范围内可以用约化公式(1.5)来计算系统的系数*C_i*,

很大程度上约化了计算量,也节约了时间。将有效哈密顿量(1.3)式中交换算符前 的减号用加号代替就得到了带自旋的玻色子系统所对应的有效自旋链模型。



图 1.2 由 8 个和 13 个粒子组成的系统的系数 C_i ,连线表示用约化公式求得结果,特征符号表示用积分法所求的结果^[30]

现在利用有效自旋链模型计算系统的能谱,并与先前的方法进行比较。以自旋 1/2 的费米子系统为例,选取自旋向上的粒子数为 2,自旋向下的粒子数为 1。将束 缚外势选为频率为ø谐振子势阱,在计算过程中将令ø=M=ħ=1。首先在有效自 旋链模型中计算系统的能谱,计算结果如图 1.3 实线所示。用格林函数^[34]法计算上 述系统的能谱如图 1.3 点线所示。从计算结果来看,在强相互作用时,有效自旋链 模型与格林函数法得到的结果一致,也进一步验证了有效自旋链模型的准确性。



图 1.3 由 2 个自旋向上的费米子和 1 个自旋向下的费米子组成的系统的能谱^[30] 在有效自旋链模型中还可以计算系统实空间的密度分布和动量空间的密度分布,

还是以自旋 1/2 的费米子系统为例。对于自旋 1/2 的费米子,交换算符可以写成自旋算符的形式

$$P_{i,j} = \frac{1}{2} \left(1 + \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \right) \tag{1.6}$$

这样有效自旋链模型就可以表示成如下形式:

$$H_{eff} = -\frac{1}{g} \sum_{i=1}^{N-1} C_i \frac{\left(1 - \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j\right)}{2}$$
(1.7)

其中 $C_i/2g$ 表示第 *i* 个粒子与第 *i*+1 个粒子的超交换系数。当g < 0时表现为铁磁相互作用,当g > 0时表现为反铁磁相互作用。定义单体密度矩阵元^[30]形式如下:

$$\rho_{\sigma'\sigma}(x',x) = \sum_{\sigma_2 \cdots \sigma_N} \int dx_2 \cdots dx_N \psi^* (x', x_2 \cdots, x_N, \sigma', \sigma_2, \cdots, \sigma_N) \psi (x, x_2 \cdots, x_N, \sigma, \sigma_2, \cdots, \sigma_N)$$
(1.8)

利用单体密度矩阵元,实空间和动量空间的密度分布可以表示成如下形式:

$$\rho_{\sigma}(x) = N \rho_{\sigma,\sigma}(x, x) \tag{1.9}$$

$$\rho_{\sigma}(p) = (N/2\pi) \int dx \int dx' e^{-ip(x-x')} \rho_{\sigma,\sigma}(x',x) \qquad (1.10)$$

选取自旋向上的粒子数为 1,自旋向下的粒子数为 1,如图 1.4 所示,系统处于铁磁 态 (FM)时相邻自旋排布是完全对称的,无论在实空间还是在动量空间系统的密度 分布都不依赖于粒子间的相互作用强度,换言之,当系统处于铁磁态时系统的密度 分布完全确定。系统处于反铁磁态 (AFM)时相邻自旋排布是完全反对称的,此时不 管在实空间还是在动量空间系统的密度分布对粒子间的相互作用都非常的敏感。当 粒子间为无穷大相互作用 $(1/g \rightarrow 0)$ 时,在实空间中反铁磁态的密度分布与铁磁态的 密度分布相同,换言之,在实空间中反铁磁态的密度分布与铁磁态的密度分布不能 区分。在动量空间中反铁磁态的密度分布与铁磁态的密度分布与铁磁态的密度分布不能



图 1.4 由 1 个自旋向上的费米子和 1 个自旋向下的费米子组成的系统处于反铁磁态(实线)和 铁磁态(点线)时在不同相互作用强度下的密度分布^[30]

1.3.2 自旋轨道耦合的有效自旋链

本节利用有效自旋链模型计算自旋为1的玻色系统,在只考虑s波相互作用时 自旋为1的玻色系统的等效哈密顿量^[35]为:

$$H_{\rm eff} = -\sum_{i} J_{i} \left(\frac{1}{g_{0}} P_{S=0} \left(i, i+1 \right) + \frac{1}{g_{2}} P_{S=2} \left(i, i+1 \right) \right)$$
(1.11)

这里 g_0 、 g_2 分别对应总自旋S = 0、S = 2通道^[36]的相互作用常数, P_s 表示总自旋为S通道的交换算符。根据 g_0 、 g_2 相对强度的不同,冷原子系统可以处于反铁磁基态(²³Na, 0 < $g_0 < g_2$)或者铁磁基态(⁸⁷Rb, 0 < $g_2 < g_0$)。在系统中引入拉曼型的自旋轨道耦合项^[26,35]:

$$H_{SOC} = -\Omega \int dx \sum_{i} \left(e^{iqx} \psi_i^{\dagger}(x) \psi_{i+1}(x) + h.c. \right)$$
(1.12)

这里 Ω 是拉曼频率,在拉曼跃迁过程中会给粒子一个动量q同时使该粒子的自旋翻转,自旋轨道耦合可以等效成实空间中的旋转磁场^[37-42]。在图 1.5 中显示了自旋轨道耦合(*SOC*)对冷原子系统能谱的影响:以6个 $Na(g_0 < g_2)$ 原子组成的系统和6个 $Rb(g_0 > g_2)$ 原子组成的系统为研究对象。不存在自旋轨道耦合($\Omega=0$)时,Na原子系统基态是单重态S=0,系统能量随着总自旋S的增加而增加;Rb原子系统的基态是多重简并态S=N=6,系统能量随着总自旋S的增加而减少。存在自旋轨道耦合($\Omega>0$)时,原先在这两种系统中总自旋S相同磁量子数不同的态是简并的,考虑上自旋轨道后简并态被完全消除如图 1.5 (a, b)所示,不同颜色代表不同的总自旋



图 1.5 自旋轨道耦合强度 Ω 对²³Na 原子系统 (a) 的能谱和⁸⁷Rb 原子系统 (b) 的能谱的影响,每 个系统粒子数都为 6.^[35]

1.3.3 p 波相互作用的有效自旋链

由于光晶格中冷却技术的限制,实验上至今也没能探测到长程奈尔反铁磁相关 联。在理论和实验上物理学家通过各式各样的方法去探测巡游铁磁性,然而得到的 结果都不理想。在本节中,我们介绍如何利用有效自旋链模型^[43]对带有 s 波相互作 用和 p 波相互作用的自旋 1/2 的系统在一维谐振子势阱中实现奈尔反铁磁关联和巡 游铁磁关联。对于 s 波和 p 波相互作用的有效哈密顿量^[43]为:

$$H = H_0 + H_{eff}^s + H_{eff}^p$$
(1.13)

$$H_{eff}^{s} = -\frac{Ma_{1D}}{2} \sum_{i} J_{i} \left(s_{i} \cdot s_{i+1} - \frac{1}{4} \right)$$
(1.14)

$$H_{eff}^{p} = \sum_{m=0,\pm 1} \frac{M l_{p}^{(m)}}{2} \sum_{i} J_{i} P_{m}(i,i+1)$$
(1.15)

这里 H_{eff}^{s} 、 H_{eff}^{p} 分别表示考虑 s 波相互作用、p 波相互作用时系统的哈密顿量, a_{1D} 、 $l_{p}^{(m)}$ 分别表示在自旋单态和自旋三重态($m=0,\pm1$)通道的散射长度。当 p 波相互作用 占主体即 $|l_{p}/a_{1D}|\gg1$ 时,系统显示出两种磁性(铁磁性和反铁磁性),这取决于 l_{p} 前 的符号,我们将结果展示在图 1.6 中:当 $l_{p}<0$ 时表现为吸引 p 波相互作用,此时系 统处于铁磁基态,实现了巡游铁磁关联如图 1.6 (a1,b1);当 $l_{p}>0$ 时表现为排斥 p 波相互作用,此时系统处于反铁磁基态,实现了奈尔反铁磁关联如图 1.6 (a3,b3)。



图 1.6 上一行 (a1-a3) 和下一行 (b1-b3) 分别表示 6个+6↓和7个+6↓系统的自旋密度分布, l_p 是以 a_{1D} 为单位,从左到右依次取-3,0,3.^[43]

1.4 本文内容

本文主要利用有效自旋链模型计算两组分费米系统的自旋密度分布以及系统的 能谱。随后在有效自旋链模型中通过改变外势、增加磁场梯度等外在因素,研究这 些因素对系统的自旋密度分布以及能谱产生的影响。文章整体结构如下:

第一章:简要介绍关于一维有效自旋链的实验新进展以及在理论上利用简并微扰理 论可以得出有效自旋链模型,利用有效自旋链模型可以计算系统的能谱、密度分布 等物理量;

第二章:介绍本文所用到的研究方法,即玻色费米映射理论。然后利用推广后的玻 色费米映射理论推导出有效自旋链模型所对应的有效哈密顿量,并且用不同的方法 计算出近邻粒子间的交叠常数;

第三章:利用有效自旋链模型分别在一维谐振子势阱和无限深方势阱中计算不同粒 子数组成的两组分费米系统的密度分布以及系统所对应的能谱;之后在此基础上考 虑与位置有关的磁场梯度对系统密度分布和能谱的影响;

第四章:总结及展望。

第二章 有效自旋链模型

具有强关联的一维冷原子气体近几十年一直备受关注,理论研究的发展同时也 推动着实验的进程。自从 Tonks-Girardeau^[18]气体在实验上得以实现后,人们在一维 冷原子领域又相继研究了两体关联系统和三体关联系统,以及一维冷原子气体的热 力学性质,Super Tonks- Girardeau^[44]气体在实验上也已经实现。随着实验技术的发 展,最近在实验^[27]上人们对于两组分少体系统实现了精确操控,可以实现对系统粒 子数,自旋取向,粒子间相互作用等的准确控制。这些实验引起了人们的高度的重 视,特别是对于在散射共振附近出现的一些新奇的物理现象格外有兴趣。在 Tonks-Girardeau 气体中粒子间的相互作用趋于无穷大,系统的能量本征态具有很高的自旋 简并^[29]。当粒子间的相互作用变为有限值即散射共振附近,此时将会降低系统的简 并度同时出现新颖的物理现象。一维具有强相互作用的多组分冷原子系统在散射共 振附近无需再借助光晶格便实现了有效自旋链模型^[25,30],这为我们研究一维冷原子 系统的量子性质开辟了一条新的途径。利用有效自旋链模型在求解系统的本征波函 数和本征能量时会变得更加简单,有效自旋链模型不仅适用于具有强相互作用的玻 色子系统也适用于费米子系统。

2.1 玻色费米映射理论

2.1.1 玻色费米映射

早在 1960 年, Girardeau^[17]为了求解一维多体玻色系统的严格解问题,建立起了 一维玻色系统和一维无自旋的费米子系统一一映射的关系,称为玻色费米映射。早 期的玻色费米映射理论是在两个严格的限制条件下才成立的:首先玻色系统必须是 一维无自旋系统;其次玻色系统是硬核玻色系统。这里的硬核玻色系统是指玻色子 间的相互作用很大导致系统中任意两个玻色子都无法靠的太近,可以用下面的波函 数来描述:

$$\psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0 \quad , \quad |x_i - x_j| \le a \tag{2.1}$$

这里 x₁,x₂,…,x_N 表示每个粒子的坐标, x_i, x_j分别表示任意的第 *i* 个粒子和第 *j* 个 粒子的坐标, *a* 表示玻色子的硬核直径。在满足上面两个限制条件下, 玻色系统和 费米系统满足下面一一映射的关系:

$$\psi_B = A \psi_F \tag{2.2}$$

这里 ψ_B 表示无自旋玻色系统的波函数, ψ_F 表示由 N个无相互作用费米子组成的系统空间基态波函数,A表示单位反对称函数,写成如下形式

$$A = \prod_{i < j} \operatorname{sgn}(x_i - x_j)$$
(2.3)

其中, sgn(x)表示关于 x 的代数符号函数, 单位反对称函数 A 可以取+1 和-1 两个值, 这取决于系统中粒子的排列顺序。(2.2) 式就是玻色费米映射理论所对应的表达式。

2.1.2 玻色费米映射理论的推广

旋量玻色气体一直是物理学家们比较关注的领域,近年来在实验上^[18,19]实现的 Tonks-Girardeau 气体中也发现了一维强相互作用的玻色系统具有费米系统的性质。 在 1960 年,Girardeau 建立的的玻色费米映射理论虽然已经提到过一维硬核玻色系 统可以通过费米系统来描述,但是,要彻底描述一维玻色系统就需要考虑自旋自由 度。令人感到遗憾的是玻色费米映射理论关于旋量玻色系统的研究并不多见。这里 我们将介绍玻色费米映射理论的一个推广^[21],进而使该理论也适用于带自旋的硬核 玻色系统。计算表明:一维强相互作用的旋量玻色系统的性质具有两重性,即该系 统既具有无相互作用费米系统的性质也具有自旋可分辨的自旋链系统的性质。系统 总的密度分布等于无相互作用费米系统的密度分布,其与自旋自由度无关。系统自 旋密度分布类似于一个自旋可分辨的局域自旋链所对应的自旋密度,我们将在第三 章详细讨论自旋密度分布。对于由N个粒子组成的系统处于基态时,系统就有N! 个排列 $\{(x_1, x_2, ..., x_N) \in \mathbb{R}^N, x_{P(1)} < ... < x_{P(N)}\}$,这里R表示实空间,P表示任意一种排 列,系统的每一种排列对应着一种局域波函数,各个局域波函数互相正交。先不考 虑自旋,系统处于基态时的一组正交完备基矢可以写成如下形式:

$$\langle x_1, \cdots, x_N | P \rangle = \sqrt{N!} \theta \Big(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \cdots, x_{P(N)} \Big) A \psi_F$$
(2.4)

现在我们将自旋部分考虑进去,系统的波函数可以看成是空间部分波函数与自旋部分波函数乘积的形式:

$$|\psi\rangle = \sqrt{N!}S_{\pm}(|P\rangle|\chi\rangle) \tag{2.5}$$

其中 $S_{\pm} = (1/N!) \sum_{P} (\pm 1)^{P} P$ 代表对称化算符,求和符号是对系统所有的排列求和。 $|\chi\rangle = \sum_{m_{1},m_{2},\cdots,m_{N}} c_{m_{1},m_{2},\cdots,m_{N}} |m_{1},\cdots,m_{N}\rangle$ 表示由N个考虑自旋的粒子组成的一个任意自旋 波函数,可以用来描述有效自旋链中自旋的排布, m_{i} 表示第i粒子的磁量子数。公 式(2.5)就是推广后的玻色费米映射理论所对应的表达式,这里用推广后的玻色费 米映射理论计算了两组分的费米系统和三组分的玻色系统处于任意自旋态 $|\chi\rangle$ 时的 自旋密度分布。系统的第m组分的密度分布^[25]可以表示成下面的形式:

$$\rho_m(x) = \sum_{i=1}^N \rho^{(i)}(x) \rho_m^{(i)}$$
(2.6)

这里 $\rho^{(i)}(x)$ 称为第*i*个粒子的空间密度分布函数,表示第*i*个粒子处于外势阱中在x处被找到的概率,此时无需考虑第*i*个粒子的自旋:

$$\rho^{(i)}(x) = N! \int dx_1 \cdots dx_N \delta(x - x_i) \theta(x_1, \cdots, x_N) |\psi_F|^2$$
(2.7)

 $\rho_m^{(i)}$ 表示第 i 个粒子处于任意一个自旋态 $|\chi\rangle$ 上自旋磁性等于 m 的概率:

$$\rho_m^{(i)} = \sum_{m_1, \cdots, m_N} \left| \left\langle m_1, \cdots, m_N \left| \chi \right\rangle \right|^2 \delta_{m, m_i}$$
(2.8)

首先考虑一个由 4 个自旋 1/2 的费米子组成的两组分费米系统,这里的两组分 是指自旋向上的组分和自旋向下的组分即 $m = \uparrow, \downarrow$ 。系统空间排布为 $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$, 系统的自旋波函数分别处于 (a). $|\chi\rangle = |\uparrow,\uparrow,\downarrow,\downarrow\rangle$ 、(b). $|\chi\rangle = |\uparrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle$ 时利用公式 (2.6)我们计算出了系统两组分的自旋密度分布,结果如图 2.1 所示,其中 ρ_{\uparrow} 表示 自旋向上组分的密度分布, ρ_{\downarrow} 表示自旋向下组分的密度分布。



组分自旋密度分布

然后考虑由 8 个自旋为 1 的玻色子组成的三组分玻色系统,这里的三组分是指 m = -1,0,1。计算系统空间排布为 $x_1 < x_2 < \cdots < x_7 < x_8$ 时,系统的自旋波函数分别处 于(a). $|\chi\rangle = |1,1,1,0,0,0,0,-1\rangle$ 、(b). $|\chi\rangle = 1/\sqrt{2}(|0,0,0,0,0,0,0,0\rangle + |1,-1,1,-1,1,-1\rangle)$ 时的自旋密度分布,结果如图 2.2 所示,其中 ρ_1 表示自旋磁量子数为 1 的组分的密 度分布, ρ_0 表示自旋磁量子数为 0 的组分的密度分布, ρ_{-1} 表示自旋磁量子数为-1 的组分的密度分布。从两组分系统和三组分系统的自旋密度分布结果可以得出以下 结论:当系统的空间排布确定后,系统的自旋密度分布类似于一个自旋可分辨的自旋链所对应的自旋密度分布,系统的自旋密度分布特征由 $\rho_m^{(i)}$ 所决定,不同的自旋 $\delta|\chi\rangle$ 对应一组不同的 $\left(\rho_m^{(1)},\rho_m^{(2)},\dots,\rho_m^{(N)}\right)$ 。



图 2.2 8 个自旋为 1 的玻色子组成的系统处于自旋态 $|1,1,1,0,0,0,0,-1\rangle$ (a), $|\chi\rangle = 1/\sqrt{2}(|0,0,0,0,0,0,0,0\rangle + |1,-1,1,-1,1,-1,1\rangle)$ (b) 时的三组分自旋密度分布

2.2 有效自旋链模型中的等效哈密顿量

考虑一个由 N 个带自旋的粒子(费米子或玻色子)组成的一维强相互作用系统, 这些粒子被沿着 x 方向的外势阱V(x)所束缚,外束缚势阱与自旋无依赖性,通常是 在谐振子势阱中研究系统的性质。粒子之间的相互作用通常可以等效成接触赝势 (即δ相互作用),对于一维强相互作用的冷原子系统,其哈密顿量通常可以表示成 如下形式:

$$H = \sum_{i} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V(x_i) \right] + g \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j)$$
(2.9)

相互作用 g 可利用费什巴赫共振 (Feshbach Resonance)^[28]来调节: g > 0表示排斥相 互作用, g < 0表示吸引相互作用。当相互作用为无穷大 ($g \rightarrow \infty$)时,根据玻色费米 映射理论^[21]系统处于基态多重态的波函数可以构造成如下形式:

$$\left|\psi\right\rangle = \sqrt{N!}S_{\pm}\left(\left|id\right\rangle\right|\chi\right)$$
(2.10)

 $|id\rangle$ 表示由 N 个粒子组成的多体空间波函数,并且我们规定粒子间有一个确定排序: $x_1 \le x_2 \le \cdots \le x_N$,空间波函数 $|id\rangle$ 的形式如下:

$$id \rangle = \sqrt{N!} \theta(x_1, x_2, \cdots, x_N) |\psi_F\rangle \tag{2.11}$$

通过玻色费米映射理论所构造的波函数 ψ ,在空间波函数 $|id\rangle$ 确定时,系统的自旋 波函数 $|\chi\rangle$ 与系统整体的波函数 $|\psi\rangle$ 就一一对应起来。2015 年德国 Heidelberg 大学 Jochim 小组^[27]利用简谐势阱中囚禁的 ⁶Li 原子在散射共振附近实现了反铁磁海森堡 自旋链的精确制备,实验上所说的散射共振附近是指相邻粒子间相互作用强度很大 但是一个有限值。我们的目的就是在玻色费米映射理论所构造的基矢 ψ 中,计算出 当粒子间相互作用强度处于散射共振附近即在1/g = 0的附近时一维强相互作用系 统所对应的等效哈密顿量。

在1/g = 0的附近,系统的等效哈密顿量^[25]推导如下:

$$\langle \psi | H | \psi' \rangle = (\langle m_1, m_2, \dots, m_N | \langle id | \rangle S_{\pm}^{\dagger} \sqrt{N!} H \sqrt{N!} S_{\pm} (|id \rangle | m_1', m_2', \dots, m_N' \rangle)$$

$$= (\langle m_1, m_2, \dots, m_N | \langle id | \rangle N! H S_{\pm} (|id \rangle | m_1', m_2', \dots, m_N' \rangle)$$

$$= (\langle m_1, m_2, \dots, m_N | \langle id | \rangle N! H (1/N!) \sum_P (\pm 1)^P P(|id \rangle | m_1', m_2', \dots, m_N' \rangle)$$

$$= \sum_P (\pm 1)^P (\langle m_1, m_2, \dots, m_N | \langle id | \rangle H P(|id \rangle | m_1', m_2', \dots, m_N' \rangle)$$

$$= \sum_P (\pm 1)^P \langle m_1, m_2, \dots, m_N | \langle id | H | P \rangle | m_{P(1)}', m_{P(2)}', \dots, m_{P(N)}' \rangle$$

$$(2.12)$$

在上面计算过程中我们用到下面一些公式: $S_{\pm}^{\dagger} = S_{\pm}, [H, S_{\pm}] = 0, S_{\pm}^{2} = S_{\pm}$ 。接下来我 们计算上式中的矩阵元 $\langle id | H | P \rangle$,矩阵元在1/g = 0处做泰勒展开到一阶,结果如下:

$$\langle id | H | P \rangle$$

$$= \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | H | P \rangle \right) + \frac{1}{g} \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \frac{d\left(\langle id | H | P \rangle \right)}{d1/g}$$

$$= \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | H | P \rangle \right) + \frac{1}{g} \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\frac{\partial \langle id |}{\partial 1/g} H | P \rangle + \langle id | \frac{\partial H}{\partial 1/g} | P \rangle + \langle id | H \frac{\partial | P \rangle}{\partial 1/g} \right)$$

$$= \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | H | P \rangle \right) + \frac{1}{g} \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(E \frac{\partial \langle id |}{\partial 1/g} | P \rangle + \langle id | \frac{\partial H}{\partial 1/g} | P \rangle + E \langle id | \frac{\partial | P \rangle}{\partial 1/g} \right)$$

$$= \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | H | P \rangle \right) + \frac{1}{g} \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(E \frac{\partial \langle id | P \rangle}{\partial 1/g} + \langle id | \frac{\partial H}{\partial 1/g} | P \rangle \right)$$

$$= \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | H | P \rangle \right) + \frac{1}{g} \lim_{\mathbb{V}_{g \to 0}} \left(\langle id | \frac{\partial H}{\partial 1/g} | P \rangle \right)$$

$$= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \lim_{g \to \infty} \left(g^2 \langle id | \frac{\partial H}{\partial g} | P \rangle \right)$$

在上面的计算过程中我们用到下面一些公式: $H|P\rangle = E|P\rangle$, $\partial \langle id|P \rangle / \partial 1/g = 0$,

上式中的哈密顿量 *H* 是一维强相互作用系统一般哈密顿量如公式(2.9),我们将哈 密顿量 *H* 代入公式(2.13)并插入一完备集 $\int |x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \langle x_1, x_2, \dots, x_N | dx_1 dx_2 \dots dx_N \cap$ 公式(2.13)因此变成如下形式:

$$\begin{aligned} \left\langle id \left| H \right| P \right\rangle \\ &= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \left\langle id \right| \frac{\partial H}{\partial g} \right| P \right) \right) \\ &= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \sum_{i < j} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \left\langle id \left| \delta \left(x_i - x_j \right) \right| P \right) \right) \end{aligned}$$

$$&= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \sum_{i < j} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \int dx_1 \dots dx_N \delta \left(x_i - x_j \right) \left\langle id \right| \left| x_1, \dots, x_N \right\rangle \left\langle x_1, \dots, x_N \right| \left| P \right\rangle \right) \end{aligned}$$

$$&= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \sum_{i < j} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \int dx_1 \dots dx_N \delta \left(x_i - x_j \right) \left(\psi_{id} \right)^* \psi_P \right)$$

$$&= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} \sum_{i < j} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \int dx_1 \dots dx_N \delta \left(x_i - x_j \right) \sqrt{N!} \theta \left(x_1, x_2, \dots \right) \psi_F^* \sqrt{N!} \theta \left(x_{P(1)}, x_{P(2)}, \dots, x_{P(N)} \right) \psi_F$$

$$&= E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} N! \sum_{i < j} \lim_{s \to \infty} \left(g^2 \right) \int dx_1 \dots dx_N \delta \left(x_i - x_j \right) \theta \left(x_1, x_2, \dots \right) \delta_{j,i+1} \left(\delta_{P,id} + \delta_{P,P_{i,j+1}} \right) \left| \psi_F \right|^2$$

上式中出现了多重积分,波函数 ψ_{id} 与波函数 ψ_p 在满足正交归一时才对多重积分有贡献。计算过程中利用 δ 函数的性质: $\int f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$ 和边界条件:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_{i}}-\frac{\partial}{\partial x_{j}}\right)\psi\Big|_{x_{i}=x_{j}^{+}}-\left(\frac{\partial}{\partial x_{i}}-\frac{\partial}{\partial x_{j}}\right)\psi\Big|_{x_{i}=x_{j}^{-}}=\frac{2Mg}{\hbar^{2}}\psi\Big|_{z_{i}=z_{j}}$$
(2.15)

上式(2.14)可以进一步计算得出如下形式:

$$\langle id | H | P \rangle$$

= $E_F \delta_{P,id} - \frac{1}{g} N! \frac{\hbar^4}{M^2} \sum_i \left(\delta_{P,id} + \delta_{P,P_{i,i+1}} \right) \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \delta(x_i - x_{i+1}) \theta(x_1, x_2, \cdots, x_N) \left| \frac{\partial \psi_F}{\partial x_i} \right|^2$ (2.16)

最后我们把公式(2.16)代入(2.12)并通过整理可得到:

$$H_{s} = \left(E_{F} - \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}\right) \pm \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}P_{i,i+1}$$
(2.17)

其中正号应用于费米子系统,负号应用于玻色子系统, E_F 是系统的动能项和势能项之和,与外势阱V(x)的具体形式有关。这里

$$J_{i} = \frac{N!\hbar^{4}}{M^{2}} \int dx_{1} \cdots dx_{N} \delta(x_{i} - x_{i+1}) \theta(x_{1}, \cdots, x_{N}) \left| \frac{\partial \psi_{F}}{\partial x_{i}} \right|^{2}$$
(2.18)

是近邻粒子之间的交叠常数也就是公式(1.4)中的*C_i*,我们将粒子从左到右依次标记。从公式(2.18)可以看出,要精确求解近邻粒子之间的交叠常数*J*就需要先求解多重积分,系统的粒子个数*N*与*N*重积分相一致,当粒子数*N*比较小时利用积

分法还是比较容易求解近邻粒子之间的交叠常数 *J*,随着粒子数 *N*的增加,当粒子数大于 8 时,用公式(2.18)求解近邻粒子之间的交叠常数 *J*就已经变得相当困难。 幸运的是,对于求解近邻粒子之间的交叠常数有一种很好的近似方法,随着系统粒 子数的增加用近似法计算的近邻粒子之间的交叠常数 *J*与用积分法所得到的结果基本相一致。我们所用的近似法^[25]的表达式如下:

$$J_{i} = \frac{\hbar^{4} \pi^{2} n_{TF}^{3}(\bar{x}_{i})}{3M^{2}}$$
(2.19)

这里 $n_{TF}(\bar{x}_i)$ 叫做密度的托马斯费米分析, \bar{x}_i 表示第i个粒子和第i+1个粒子的质量中心的位置,可分别表示成如下形式:

$$n_{TF}(\bar{x}_i) = \frac{1}{l\pi} \sqrt{2N - \left(\frac{\bar{x}_i}{l}\right)^2}$$
(2.20)

$$\bar{x}_{i} = \frac{1}{2} \int x \left[\rho^{(i)}(x) + \rho^{(i+1)}(x) \right] dx \qquad (2.21)$$

其中 $\rho^{(i)}(x)$ 、 $\rho^{(i+1)}(x)$ 分别表示第 *i* 个粒子、第 *i*+1 个粒子的空间密度分布, *l*表示 外势阱的特征长度。下一节我们利用积分公式(2.18)和近似法(2.19)在一维谐 振子势阱中分别计算由 3 粒子、4 粒子组成的一维强相互作用系统的近邻粒子之间 的交叠常数 *J*,并且分析了这两种方法的优缺点。

2.3 近邻粒子之间交叠常数

2.3.1 近邻交叠常数的精确解

我们将外势阱V(x)选为一维谐振子势阱,现在计算一个由 3 个自旋 1/2 的费米 子组成的系统,由于一维谐振子势阱具有空间对称性,所以近邻粒子之间的交叠常 数 J 具有如下关系: $J_1 = J_2$ 。由 3 个无相互作用费米子组成的系统的空间基态波函 数 ψ_F 可以用 Slater 行列式来描述:

$$\psi_{F} = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \varphi_{1}(x_{1}) & \varphi_{1}(x_{2}) & \varphi_{1}(x_{3}) \\ \varphi_{2}(x_{1}) & \varphi_{2}(x_{2}) & \varphi_{2}(x_{3}) \\ \varphi_{3}(x_{1}) & \varphi_{3}(x_{2}) & \varphi_{3}(x_{3}) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{P} \delta_{P} P \varphi_{1}(x_{1}) \varphi_{2}(x_{2}) \varphi_{3}(x_{3})$$
(2.22)

这里 $\varphi_N(x)$ 表示在一维谐振子势阱中单粒子处于第 N 个能级时的本征波函数。量子 力学中关于谐振子的能量本征值问题,在历史上海森伯格和薛定谔分别用矩阵力学 和波动力学的方法得到圆满的解决,这两种方法最后取得的结果相一致,之后狄拉 克与薛定谔分别利用升降算子的方法和因式分解的方法也给出了相当漂亮的解。我 们以利用薛定谔的定态波动方程推导出的谐振子的本征波函数和能量本征值为例, 正交归一的谐振子的定态波函数可以写成如下形式:

$$\varphi_n(x) = A_n \exp\left(\frac{-\alpha^2 x^2}{2}\right) H_n(\alpha x)$$
(2.23)

这里的系数 $A_n = \left(\alpha / \sqrt{\pi} 2^n \cdot n! \right)^{1/2}$ 表示归一化系数,其中 $\alpha = \sqrt{M\omega/\hbar}$, $H(\alpha x)$ 表示厄 米多项式满足递推关系: $H_{n+1}(\alpha x) - 2\alpha x H_n(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x) = 0$ 。利用递推关系可 以计算出处于任意单粒子能级上的本征波函数,我们将最低的三条能级上的谐振子 本征波函数表示如下

$$\varphi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} \exp\left(\frac{-\alpha^2 x^2}{2}\right)$$
(2.24)

$$\rho_{1}(x) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}} \alpha x \exp\left(\frac{-\alpha^{2} x^{2}}{2}\right)$$
(2.25)

$$\varphi_2(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \left(2\alpha^2 x^2 - 1 \right) \exp\left(\frac{-\alpha^2 x^2}{2}\right)$$
(2.26)

同理我们也研究了一个由 4 个自旋 1/2 的费米子组成的的系统,由于一维谐振子势 阱具有空间对称性,所以近邻粒子之间的交叠常数 J 具有如下关系: $J_1 = J_3 \neq J_2$ 。由 4 个无相互作用费米子组成的系统的空间基态波函数 ψ_F 可以用 Slater 行列式来 描述:

$$\begin{split} \psi_{F} &= \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} \varphi_{1}(x_{1}) & \varphi_{1}(x_{2}) & \varphi_{1}(x_{3}) & \varphi_{1}(x_{4}) \\ \varphi_{2}(x_{1}) & \varphi_{2}(x_{2}) & \varphi_{2}(x_{3}) & \varphi_{2}(x_{4}) \\ \varphi_{3}(x_{1}) & \varphi_{3}(x_{2}) & \varphi_{3}(x_{3}) & \varphi_{3}(x_{4}) \\ \varphi_{4}(x_{1}) & \varphi_{4}(x_{2}) & \varphi_{4}(x_{3}) & \varphi_{4}(x_{4}) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4!}} \sum_{P} \delta_{P} P \varphi_{1}(x_{1}) \varphi_{2}(x_{2}) \varphi_{3}(x_{3}) \varphi_{4}(x_{4})$$

$$(2.27)$$

将3粒子系统和4粒子系统中的空间基态波函数带入表达式(2.18)中可得到近邻 粒子之间的交叠常数J的具体数值。用同样的方法,我们也计算了由5个和6个粒 子组成的系统的近邻粒子之间的交叠常数J。利用积分表达式(2.18)计算出来的 交叠常数J的具体数值结果见表2.1。

N	$J_1/(\hbar^2\omega^2 l)$	$J_2/(\hbar^2\omega^2 l)$	$J_3/(\hbar^2\omega^2 l)$
2	0. 7979		
3	1.3464		
4	1.7877	2.3465	
5	2. 1661	3. 1772	
6	2.5022	3. 9021	4. 3571

表 2.1 通过积分法我们得到由不同粒子数组成的系统(N≤6)在谐振子势阱中近邻粒子之间 的交叠常数^[25]

2.3.2 近邻交叠常数的近似解

这里我们用近似法在数值上计算了上述各个系统中的近邻粒子之间的交叠常数 J,从近似计算方法的表达式(2.19)中可以看出来,要计算近邻粒子之间的交叠常 数 J_i 首先就得先求出第i个粒子 $n_{TF}(\bar{x}_i)$ 。同样我们将外势阱V(x)选为一维谐振子势 阱,首先研究一个由 3 个和 4 个自旋 1/2 的费米子组成的系统。要计算第i个粒子 的 $n_{TF}(\bar{x}_i)$,就需要先计算出第i粒子的空间密度分布即 $\rho^{(i)}(x)$,利用公式(2.7)在 一维谐振子势阱中可以计算出每个粒子的空间密度分布。

当N=3时,每个粒子的空间密度分布结果如下:

$$\rho^{(1)}(x) = 0.8923 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x + 1.3297}{0.5532}\right)^2\right)$$
(2.28)

$$\rho^{(2)}(x) = 0.9681 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x}{0.5100}\right)^2\right)$$
(2.29)

$$\rho^{(3)}(x) = 0.8923 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x - 1.3297}{0.5532}\right)^2\right)$$
(2.30)

得到 $\rho_1(x)$ 、 $\rho_2(x)$ 表达式后,利用公式(2.21)我们就可以计算出第1粒子和第2 个粒子质量中心的位置 \bar{x}_1 ,表达式如下:

$$\overline{x}_{1} = \frac{1}{2} \int x \left[\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) \right] dx$$

= $\frac{1}{2} \int x \left[0.8923 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x + 1.3297}{0.5532} \right)^{2} \right) + 0.9681 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x}{0.5100} \right)^{2} \right) \right] dx$ (2.31)

得到 \bar{x}_1 值后,利用公式(2.20)我们就可以计算出第1个粒子的 $n_{TF}(\bar{x}_1)$,再利用公

式(2.19)得出J₁的具体数值。

当N=4时,我们将每个粒子的空间密度分布表达式列于下:

$$\rho^{(1)} = 0.7630 \exp\left(\frac{-0.5(x+1.7694)^2}{0.5223^2}\right)$$
(2.32)

$$\rho^{(2)} = 0.8549 \exp\left(\frac{-0.5(x+0.5550)^2}{0.4669^2}\right)$$
(2.33)

$$\rho^{(3)} = 0.8549 \exp\left(\frac{-0.5(x - 0.5550)^2}{0.4669^2}\right)$$
(2.34)

$$\rho^{(4)} = 0.7630 \exp\left(\frac{-0.5(x - 1.7694)^2}{0.5223^2}\right)$$
(2.35)

与求解3粒子系统的近邻粒子之间交叠常数的步骤类似,我们可以得到4粒子系统中近邻粒子之间的交叠常数J₁与J₂。用同样的方法,我们也计算了由5个和6个粒子组成的系统的近邻粒子之间的交叠常数J,用近似表达式(2.19)得出的结果见表 2.2。

表 2.2 利用近似法得到不同粒子数组成的系统(N≤6)在谐振子势阱中近邻粒子之间的交叠 常数,其中括号中的数字表示用近似法和积分法得到的结果的相对误差

N	$J_1/(\hbar^2\omega^2 l)$	$J_2/(\hbar^2\omega^2 l)$	$J_3/(\hbar^2\omega^2 l)$
2	0.8013 (0.43%)		
3	1.3040 (-3.15%)		
4	1.8009 (0.74%)	2.4021 (2.37%)	
5	2.0931 (-3.37%)	3.2112 (1.07%)	
6	2.4992 (-0.12%)	4.0152 (2.90%)	4.4108 (1.23%)

综上,我们利用两种方法计算出不同粒子数组成的系统的近邻粒子之间的交叠 常数J,对比表格2.1与表格2.2,可以得出用积分法公式(2.18)所得到的结果与 用近似表达式(2.19)所求出来的数值大体上相一致。随着粒子数N的不断增加, 用积分法计算近邻粒子之间的交叠常数J会变得越来越困难也很费时间,而用近似 表达式计算近邻粒子之间的交叠常数J就会变得相对容易,所以对于由多粒子组成 的系统若在误差允许的范围内,我们可以采用近似表达式(2.19)求解近邻粒子之 间的交叠常数J。

2.4 本章小结

在本章中,我们介绍了玻色费米映射理论,及其推广,使玻色费米映射理论也 适用于一维旋量硬核玻色系统;然后利用玻色费米映射理论在散射共振附近推导出 了一维强相互作用原子气体中的有效自旋链模型;最后我们利用积分法和近似法求 解了不同粒子数组成的系统中近邻粒子之间的交叠常数,并比较了这两种方法的优 缺点。

第三章 有效自旋链模型中密度分布的研究

为了探究微观世界中粒子运动的奥秘,例如原子中电子运动的轨迹、能量、角 动量等等,物理学家们做了大量的实验。1921 年 Stern 和 Gerlach 在磁场中直接观 测到原子的空间取向是量子化的,当时在实验中测的是银原子,先让银原子通过一 条狭缝形成细束,然后银原子再经过一个不均匀的磁场区域(用不均匀的磁场是要 把不同的磁矩值的原子分出来),银原子运动方向与磁场的方向垂直,最后银原子 会停留在相片上。在经过显像处理后的相片上会出现两条黑斑,这表明了银原子在 经过不均匀磁场区域时已经分成了两束,说明了银原子在磁场中只有两个空间取向。 实验上出现的现象理论上也找到了合理的解释,原来银原子的基态是²S_{1/2},原子总 的角动量量子数等于1/2,磁量子数就等于1/2、-1/2,所以会出现两条黑线。这里 的1/2 的数值来源于自旋量子数1/2和*S*态的*l*等于 0 (对应*S*波相互作用)。实验上 利用 Stern 和 Gerlach 实验可以将不同自旋的原子气体分离,从而测量系统不同组分 的密度分布。

3.1 有效自旋链密度分布的研究

3.1.1 系统的空间密度分布

单粒子的空间密度分布如公式(2.7)所示,系统的空间密度分布等于系统中每 个单粒子的空间密度分布之和:

$$\rho(x) = \sum_{i}^{N} \rho^{(i)}(x)$$
 (3.1)

系统的空间密度分布的具体形式与系统所处的外势V(x)有关,在第二章中我们简 单介绍了一维谐振子势阱的有关内容。在本节,我们先将外束缚势选为一维谐振子 势阱,计算不同粒子数组成的系统的空间密度分布,然后我们将外束缚势换成一维 无限深方势阱,同样计算其空间密度分布,最后比较在这两种不同外束缚势阱下相 同粒子数组成的系统的空间密度分布会出现何种不同,我们发现势阱改变后对单粒 子空间密度分布和系统总的空间密度分布都会产生影响。

我们以3粒子系统为例,利用公式(2.7)我们计算了该系统中每个粒子的空间 密度分布,当*i*取1时第一个粒子的空间密度分布计算过程如下所示:

$$\rho^{(1)}(x) = 3! \int dx_1 dx_2 dx_3 \delta(x - x_1) \theta(x_1, x_2, x_3) | \psi_F(x_1, x_2, x_3) |^2$$

$$= 3! \int dx_2 dx_3 \theta(x, x_2, x_3) | \psi_F(x, x_2, x_3) |^2$$

$$= \int dx_2 dx_3 \theta(x, x_2, x_3) \begin{vmatrix} \varphi_1(x) & \varphi_1(x_2) & \varphi_1(x_3) \\ \varphi_2(x) & \varphi_2(x_2) & \varphi_2(x_3) \\ \varphi_3(x) & \varphi_3(x_2) & \varphi_3(x_3) \end{vmatrix}$$

$$= \int dx_2 dx_3 \theta(x, x_2, x_3) \begin{bmatrix} \varphi_1(x) \varphi_2(x_2) \varphi_3(x_3) + \varphi_1(x_2) \varphi_2(x_3) \varphi_3(x) + \varphi_1(x_3) \varphi_2(x) \varphi_3(x_2) \\ -\varphi_1(x_3) \varphi_2(x_2) \varphi_3(x) - \varphi_1(x_2) \varphi_2(x) \varphi_3(x_3) - \varphi_1(x) \varphi_2(x_3) \varphi_3(x_2) \end{bmatrix}^2$$

(3.2)

我们将 $\varphi_1(x)$ 、 $\varphi_2(x)$ 、 $\varphi_3(x)$ 的表达式带入公式(3.2)中经过计算可得到第1个粒子的空间密度分布:

$$\rho^{(1)}(x) = 0.8923 \exp\left(-0.5 \left(\frac{x + 1.3297}{0.5532}\right)^2\right)$$
(3.3)

当 *i* 取 2、3 时利用公式(2.7)可以计算出第 2、3 粒子的空间密度分布。我们按照 同样的方法在一维谐振子势阱中又分别计算了 *N* = 4,6,8系统对应的单粒子空间密度 分布,结果如图 3.1 所示。图中粒子都是从左到右依次排序分别记为第一个粒子, 第二个粒子…,重叠部分代表近邻粒子之间的交叠常数。我们也可以认为在谐振子 势阱中单粒子的密度分布是人为构造的,在实验上无法测量,因为粒子都是全同的, 给粒子从左到右编上号码只是为了理论上研究方便,但系统中自旋密度分布在实验 上可以测量,我们下节将会讨论。



图 3.1. 由 3 个粒子(a),4 个粒子(b),6 个粒子(c),8 个粒子(d)组成的系统在谐振子势阱下单粒子的空间密度分布。

现在我们将外束缚势由一维谐振子势阱换成一维无限深方势阱,在新的势阱中 计算由3个粒子、4个粒子组成的系统的空间密度分布。一维无限深方势阱单粒子 能级上的本征函数为:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} Sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right), \quad -a < x < a \quad , \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$
(3.4)

$$\varphi_n(x) = 0, \quad x > a, x < a \tag{3.5}$$

这里*a*表示束缚势的边界,将公式(3.4)带入到单粒子空间密度公式(2.7)中得到 由3个粒子、4个粒子组成的系统中每个粒子的空间密度分布,如图3.2所示。我 们经过计算得出结论:系统空间密度分布会出现峰值,峰值的数量与粒子个数保持 一致。当系统处于一维谐振子势阱时,系统的空间密度分布呈现两边峰值低中间峰 值高而空间对称分布的形式;当系统处于无限深方势阱时,系统的空间密度分布呈 现两边高中间低空间对称分布的形式。



图 3.2 在一维无限深方势阱下 3 粒子系统 (a)、4 粒子系统 (b) 中单粒子空间密度分布, 图 (c)、(d) 中虚线 (*p*_{har})表示在一维谐振子势阱下 3 粒子系统、4 粒子系统总的空间密度 分布,实线 (*p*_{squ})表示在一维无限深方势阱下 3 粒子系统、4 粒子系统总的空间密度分布。

3.1.2 系统的自旋密度分布

实验上利用史特恩和盖拉赫实验可以将不同自旋的原子气体分离,从而测量系统不同组分的密度分布。现在我们利用有效自旋链模型在一维谐振子势阱中计算一个两组分系统的自旋密度分布,这里我们用 $\{N_{\uparrow};N_{\downarrow}\}$ 表示 N_{\uparrow} 个自旋向上的粒子数和 N_{\downarrow} 个自旋向下的粒子数,系统总的粒子数满足 $N=N_{\uparrow}+N_{\downarrow}$ 。这里计算一个自旋 1/2 的费米子组成的系统,系统的自旋结构是 $\{2;1\}$,其有效哈密顿量可以表示成:

$$H_{s} = \left(E_{F} - \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{2}J_{i}\right) + \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{2}J_{i}P_{i,i+1}$$

$$= \left(E_{F} - 2\frac{1}{g}J_{1}\right) + \frac{1}{g}\left(J_{1}P_{1,2} + J_{1}P_{2,3}\right)$$

$$= \left(E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g}\right) + \frac{J_{1}}{g}\left[S^{2} - S_{13}^{2} + \frac{1}{4}\right]$$
(3.6)

这里*S*₁₃表示 1 粒子自旋与 3 粒子自旋耦合后的总自旋, *S*表示 3 个粒子的总自旋。 利用量子力学中算符对应的本征值, (3.6) 式可以分情况讨论:

- $S_{13}=1$, S=1/2时利用公式 (3.7) 基态能量 E_0 可以得到如下结果: $E_0 = \left(E_F - 2\frac{1}{g}J_1\right) + \frac{1}{g}J_1\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1) + \frac{1}{4}\right] = E_F - 3\frac{J_1}{g}$ (3.7)
- • $S_{13}=1$, S=3/2时第二激发态的能量 E_2 可以得到如下结果:

$$E_{2} = \left(E_{F} - 2\frac{1}{g}J_{1}\right) + \frac{1}{g}J_{1}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2} + 1\right) - 1\left(1 + 1\right) + \frac{1}{4}\right] = E_{F}$$
(3.8)

• $S_{13} = 0$, S = 1/2 时第一激发态的能量 E_1 可以得到如下结果:

$$E_{1} = \left(E_{F} - 2\frac{1}{g}J_{1}\right) + \frac{1}{g}J_{1}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) - 0 + \frac{1}{4}\right] = E_{F} - \frac{J_{1}}{g}$$
(3.9)

自旋结构为{2;1}的系统对应的一组正交完备基矢为: |↑,↑,↓,,|↑,↓,↑,,),|↓,↑,↑,), 系 统的哈密顿量(3.6)在基矢下的矩阵形式可以写成成如下形式:

$$H_{s} = \begin{pmatrix} E_{F} - \frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 \\ \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} \\ 0 & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \end{pmatrix}$$
(3.10)

通过精确对角化的方法我们求得该系统处于基态和激发态时所对应的本征波函数,

结果如下:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\uparrow \uparrow \downarrow \rangle - 2 |\uparrow \downarrow \uparrow \rangle + |\downarrow \uparrow \uparrow \rangle \right)$$
(3.11)

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right) \tag{3.12}$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$$
(3.13)

该系统对应的本征能量,结果如下:

$$E_0 = E_F - 3\frac{J_1}{g} \tag{3.14}$$

$$E_{1} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g}$$
(3.15)

$$E_2 = E_F \tag{3.16}$$

从上面计算结果可以得出:用算符所对应的本征值的方法与精确对角化方法得到的本征能量值相等。我们现在计算系统处于基态时的自旋密度分布,由公式(2.6)可知要求解系统处于基态时自旋向上组分的密度分布首先就得求出每个粒子处于基态时自旋向上的概率,计算过程如下:

根据公式(2.8)我们可以计算出第1个粒子处于基态时自旋向上的概率:

$$\begin{split} \rho_{\uparrow}^{(1)} &= \sum_{m_{1},\cdots,m_{N}} \left| \langle m_{1},\cdots,m_{N} | 0 \rangle \right|^{2} \delta_{m,m_{i}} \\ &= \left| \langle \uparrow,\uparrow,\downarrow | 0 \rangle \right|^{2} + \left| \langle \uparrow,\downarrow,\uparrow | 0 \rangle \right|^{2} \\ &= \left| \langle \uparrow,\uparrow,\downarrow | \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle - 2|\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle + |\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle \right) \right] \right|^{2} + \left| \langle \uparrow,\downarrow,\uparrow | \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle - 2|\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle + |\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle \right) \right] \right|^{2} \\ &= \frac{5}{6} \end{split}$$
(3.17)

第2个粒子处于基态时自旋向上的概率:

$$\begin{split} \rho_{\uparrow}^{(2)} &= \sum_{m_{1},\cdots,m_{N}} \left| \langle m_{1},\cdots,m_{N} | 0 \rangle \right|^{2} \delta_{m,m_{i}} \\ &= \left| \langle \uparrow,\uparrow,\downarrow | 0 \rangle \right|^{2} + \left| \langle \downarrow,\uparrow,\uparrow | 0 \rangle \right|^{2} \\ &= \left| \langle \uparrow,\uparrow,\downarrow \left| \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\left| \uparrow,\uparrow,\downarrow \rangle - 2 \left| \uparrow,\downarrow,\uparrow \rangle + \left| \downarrow,\uparrow,\uparrow \rangle \right\rangle \right) \right] \right|^{2} + \left| \langle \downarrow,\uparrow,\uparrow \left| \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\left| \uparrow,\uparrow,\downarrow \rangle - 2 \left| \uparrow,\downarrow,\uparrow \rangle + \left| \downarrow,\uparrow,\uparrow \rangle \right\rangle \right) \right] \right|^{2} \\ &= \frac{1}{3} \end{split}$$
(3.18)

第3个粒子处于基态时自旋向上的概率:

$$\begin{aligned} \rho_{\uparrow}^{(3)} &= \sum_{m_{1},\cdots,m_{N}} \left| \langle m_{1},\cdots,m_{N} | 0 \rangle \right|^{2} \delta_{m,m_{i}} \\ &= \left| \langle \uparrow,\downarrow,\uparrow | 0 \rangle \right|^{2} + \left| \langle\downarrow,\uparrow,\uparrow | 0 \rangle \right|^{2} \\ &= \left| \langle\uparrow,\downarrow,\uparrow | \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\left| \uparrow,\uparrow,\downarrow \rangle - 2 \left| \uparrow,\downarrow,\uparrow \rangle + \left| \downarrow,\uparrow,\uparrow \rangle \right\rangle \right) \right] \right|^{2} + \left| \langle\downarrow,\uparrow,\uparrow | \left[\frac{1}{\sqrt{6}} \left(\left| \uparrow,\uparrow,\downarrow \rangle + \left| \downarrow,\uparrow,\uparrow \rangle \right\rangle \right) \right] \right|^{2} \\ &= \frac{5}{6} \end{aligned}$$

$$(3.19)$$

根据公式(2.6)系统处于基态时自旋向上组分的密度分布就可以表示成:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \sum_{i=1}^{N} \rho^{(i)}(x) \rho_{\uparrow}^{(i)}$$

$$= \rho^{(1)}(x) \rho_{\uparrow}^{(1)} + \rho^{(2)}(x) \rho_{\uparrow}^{(2)} + \rho^{(3)}(x) \rho_{\uparrow}^{(3)}$$

$$= \frac{5}{6} \rho^{(1)}(x) + \frac{1}{3} \rho^{(2)}(x) + \frac{5}{6} \rho^{(3)}$$
(3.20)

同理可以计算出系统处于基态时,自旋朝下组分的密度分布:

$$\rho_{\downarrow}(x) = \frac{1}{6}\rho^{(1)}(x) + \frac{2}{3}\rho^{(2)}(x) + \frac{1}{6}\rho^{(3)}$$
(3.21)

我们也计算出了该系统处于激发态时两组分的自旋密度分布,结果如下: 系统处于第一激发态:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \frac{1}{2}\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) + \frac{1}{2}\rho^{(3)}(x)$$
(3.22)

$$\rho_{\downarrow}(x) = \frac{1}{2}\rho^{(1)}(x) + \frac{1}{2}\rho^{(3)}(x)$$
(3.23)

系统处于第二激发态:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \frac{2}{3}\rho^{(1)}(x) + \frac{2}{3}\rho^{(2)}(x) + \frac{2}{3}\rho^{(3)}(x)$$
(3.24)

$$\rho_{\downarrow}(x) = \frac{1}{3}\rho^{(1)}(x) + \frac{1}{3}\rho^{(2)}(x) + \frac{1}{3}\rho^{(3)}(x)$$
(3.25)

系统处于基态、激发态时,自旋向上、下组分的自旋密度分布如图 3.3 所示。理论 计算结果与实验上的测量结果如图 1.1 (b)所示相一致,可以很明显的得出当系统 处于基态时,系统处于反铁磁态(AF);当系统处于第二激发态时,系统处于铁磁态 (F);第一激发态相当于一个中间态,起到反铁磁态与铁磁态过度的作用,理论计 算结果与实验测量结果相一致也进一步证明了有效自旋链模型的准确性。



随后我们将外势换为一维无限深方势阱后计算了该系统处于基态和激发态时两组分的自旋密度分布,如图 3.4 所示:



利用有效自旋链模型在一维谐振子势阱中计算一个由 4 个自旋 1/2 的费米子组成的系统,系统的自旋结构为{3;1},有效哈密顿量可以表示成:

$$H_{s} = \left(E_{F} - \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}\right) + \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}P_{i,i+1}$$

$$= \left(E_{F} - 2\frac{1}{g}J_{1} - \frac{1}{g}J_{2}\right) + \frac{1}{g}(J_{1}P_{1,2} + J_{2}P_{2,3} + J_{1}P_{3,4})$$
(3.26)

系统的一组正交完备基矢可以表示成; $|\uparrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle$, $|\uparrow,\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle$, $|\uparrow,\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle$, 有效哈密顿量在这组基矢下的矩阵形式可以表示成:

$$H_{s} = \begin{pmatrix} E_{F} - \frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 & 0 \\ \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - \frac{J_{1}}{g} - \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{2}}{g} & 0 \\ 0 & \frac{J_{2}}{g} & E_{F} - \frac{J_{1}}{g} - \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{1}}{g} \\ 0 & \frac{J_{2}}{g} & E_{F} - \frac{J_{1}}{g} - \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{1}}{g} \\ 0 & 0 & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \end{pmatrix}$$
(3.27)

通过精确对角化的方法我们求得该系统处于基态和激发态时所对应的本征波函数, 结果如下:

$$\begin{split} |0\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{J_2}{\sqrt{J_1^2 + J_2^2}}} \left(\uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle - \left| \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \right) - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{J_2}{\sqrt{J_1^2 + J_2^2}}} \left(\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle - \left| \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \rangle \right) \right) \\ &= 0.2261 \left(\uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle - \left| \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \right) - 0.6700 \left(\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle - \left| \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \rangle \right) \right) \end{split}$$
(3.28)

$$|1\rangle = \frac{1}{2} \left(\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle - |\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle - |\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \rangle + |\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \right)$$
(3.29)

$$|2\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{J_2}{\sqrt{J_1^2 + J_2^2}}} \left(|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \right) + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{J_2}{\sqrt{J_1^2 + J_2^2}}} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$$

$$= 0.6700 \left(|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \right) + 0.2261 \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$$

$$(3.30)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{2} \left(\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle + |\uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle + |\uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle + |\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \right)$$
(3.31)

该系统对应的本征能量,结果如下:

$$E_0 = E_F - \frac{J_1}{g} \left(1 + \frac{J_2}{J_1} + \sqrt{1 + \frac{J_2^2}{J_1^2}} \right)$$
(3.32)

$$E_1 = E_F - 2\frac{1}{g}J_1 \tag{3.33}$$

$$E_{2} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \left(1 + \frac{J_{2}}{J_{1}} - \sqrt{1 + \frac{J_{2}^{2}}{J_{1}^{2}}} \right)$$
(3.34)

$$E_3 = E_F \tag{3.35}$$

利用公式(2.6),得出系统处于基态和激发态时的自旋密度分布,结果如下所示。 系统处于基态时:

$$\rho_{\uparrow}(x) = (0.2261^2 + 2.0.6700^2) (\rho^{(1)}(x) + \rho^{(4)}(x)) + (2.0.2261^2 + 0.6700^2) (\rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x)) \quad (3.36)$$

$$\rho_{\downarrow}(x) = 0.2261^{2} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(4)}(x)\right) + 0.6700^{2} \left(\rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x)\right)$$
(3.37)

系统处于第一激发态时:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \frac{3}{4} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x) + \rho^{(4)}(x) \right)$$
(3.38)

$$\rho_{\downarrow}(x) = \frac{1}{4} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x) + \rho^{(4)}(x) \right)$$
(3.39)

系统处于第二激发态时:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \left(2 \cdot 0.2261^2 + 0.6700^2\right) \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(4)}(x)\right) + \left(0.2261^2 + 2 \cdot 0.6700^2\right) \left(\rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x)\right)$$
(3.40)

$$\rho_{\downarrow}(x) = 0.6700^{2} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(4)}(x)\right) + 0.2260^{2} \left(\rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x)\right)$$
(3.41)

系统处于第三激发态时:

$$\rho_{\uparrow}(x) = \frac{3}{4} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x) + \rho^{(4)}(x) \right)$$
(3.42)

$$\rho_{\downarrow}(x) = \frac{1}{4} \left(\rho^{(1)}(x) + \rho^{(2)}(x) + \rho^{(3)}(x) + \rho^{(4)}(x) \right)$$
(3.43)

系统处于基态和激发态时两组分系统的自旋密度分布如图 3.5 所示:从图中我们会 得到以下结论:处于基态和激发态时系统的自旋密度分布具有空间对称性;系统处 于第一激发态和第三激发态时系统的两组分自旋密度分布是相同的,虽然在这两个 激发态上系统的波函数和能量都不一样,但对比公式(3.29)和(3.31)可以得出这两 个波函数的主要区别是基矢前面系数的正负号不同而系数的大小一样,从公式(2.8) 可以看出自旋密度分布只与系数的平方有关,而与系数的正负没有关系,所以才出 现在第一、三激发态上两组分的自旋密度分布相同的结果。



图 3.5 在一维谐振子势阱中系统 [3;1] 处于基态和各个激发态时两组分自旋密度分布



外势换为一维无限深方势阱后,系统处于基态和激发态时的自旋密度分布如图 3.6 所示。

图 3.6 在一维无限深方势阱中系统 [3;1] 处于基态和各个激发态时两组分自旋密度分布

利用有效自旋链模型在一维谐振子势阱中我们计算了自旋配置为{2;1}、{3;1} 系统的自旋密度分布,随后计算了这两个系统对应的能谱。这里我们将 E_F 选为零 点能,以-1/g为横坐标,将这两个系统的能谱排布展示在图 3.7 中,从图中我们可 以得到以下结论:在-1/g=0处,系统具有能级简并度;在 $-1/g \rightarrow 0$ 的附近,能 量是关于-1/g线性变化的。



图 3.7 在一维谐振子势阱中 {2;1} 系统(a) 和 {3;1} 系统(b) 能级分布

以上我们在一维谐振子势阱中计算了自旋配置为{2;1}、{3;1}系统的自旋密度 分布,这类系统也叫做自旋非平衡的两组分自旋链系统。现在我们计算自旋配置为 {2;2}系统的自旋密度分布,这类系统也叫做自旋平衡的两组分自旋链系统。和之 前计算过程一样,首先写出该系统对应的有效哈密顿量:

$$H_{s} = \left(E_{F} - \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}\right) + \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}P_{i,i+1}$$

$$= \left(E_{F} - 2\frac{1}{g}J_{1} - \frac{1}{g}J_{2}\right) + \frac{1}{g}(J_{1}P_{1,2} + J_{2}P_{2,3} + J_{1}P_{3,4})$$
(3.44)

系统的一组正交完备基矢为: $|\uparrow,\uparrow,\downarrow,\downarrow\rangle,|\uparrow,\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle|\uparrow,\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow\rangle,|\downarrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow\rangle,$ 有效哈密顿量在这组基矢下的矩阵形式如下:

$$H_{s} = \begin{pmatrix} E_{F} - \frac{J_{2}}{g} & 0 & \frac{J_{2}}{g} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 & \frac{J_{1}}{g} & 0 \\ \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} - \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} & \frac{J_{1}}{g} & 0 \\ 0 & \frac{J_{1}}{g} & 0 & \frac{J_{1}}{g} & E_{F} - 2\frac{J_{1}}{g} - \frac{J_{2}}{g} & \frac{J_{2}}{g} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_{2}}{g} & E_{F} - \frac{J_{2}}{g} \\ \end{pmatrix}$$
(3.45)

通过精确对角化的方法我们求得该系统处于基态和激发态时所对应的本征波函数, 结果如下:

$$|0\rangle = 0.1986 (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + 1.8645 |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 2.8645 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + 1.8645 |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 2.8645 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle)$$
(3.46)

$$|1\rangle = 0.3138 \left(-|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + 2.0190 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - 2.0190 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right)$$
(3.47)

$$|2\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \left(\downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle - |\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \rangle \right)$$
(3.48)

$$|3\rangle = 0.5421 \left(|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - 0.8172 |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 0.1828 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - 0.8172 |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 0.1828 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \right) \quad (3.49)$$

$$|4\rangle = 0.6336 \left(|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - 0.4953 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + 0.4953 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \right)$$
(3.50)

$$\left|5\right\rangle = \frac{\sqrt{6}}{6} \left(\left|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle\right)$$
(3.51)

该系统对应的本征能量,结果如下:

$$E_{0} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \left(2 + \frac{J_{2}}{J_{1}} + \sqrt{4 - 2\frac{J_{2}}{J_{1}} + \left(\frac{J_{2}}{J_{1}}\right)^{2}} \right)$$
(3.52)

$$E_{1} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \left(1 + \frac{J_{2}}{J_{1}} + \sqrt{1 + \left(\frac{J_{2}}{J_{1}}\right)^{2}} \right)$$
(3.53)

$$E_2 = E_F - 2\frac{J_1}{g}$$
(3.54)

$$E_{3} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \left(2 + \frac{J_{2}}{J_{1}} - \sqrt{4 - 2\frac{J_{2}}{J_{1}} + \left(\frac{J_{2}}{J_{1}}\right)^{2}} \right)$$
(3.55)

$$E_{4} = E_{F} - \frac{J_{1}}{g} \left(1 + \frac{J_{2}}{J_{1}} - \sqrt{1 + \left(\frac{J_{2}}{J_{1}}\right)^{2}} \right)$$
(3.56)

$$E_5 = E_F \tag{3.57}$$

从计算结果可以得出,系统不论处于基态还是激发态时都没有出现简并态,我们进 而根据自旋密度公式(2.6)计算出系统处于基态和各个激发态时两组分系统的自旋 密度分布,计算结果如图 3.8 所示。这里我们会看到一个比较有趣的现象:虽然系 统处于基态和激发态时对应的波函数不一样,但是系统在基态和各个激发态时的两 组分密度分布却相同,这可以与之前自旋配置为{3;1}系统处于第一激发态和第三 激发态时自旋密度分布相比较。通过计算我们得出以下结论:在自旋平衡的自旋链 系统中系统的两组分自旋密度分布是完全相同的,这与系统处于基态还是激发态无 关,这也是自旋平衡的自旋链系统独特的性质。



图 3.8 自旋平衡的自旋链系统 [2;2] 处于基态 (a) 和激发态 (b) 时两组分自旋密度分布

3.2 磁场梯度对有效自旋链的影响

3.2.1 磁场梯度对有效自旋链自旋密度分布的影响

上节在一维谐振子势阱中计算了自旋平衡的自旋链系统,该系统自旋两组分的 密度分布是完全确定的,与系统处于基态或激发态无关。本节在自旋平衡的自旋链 系统中引入磁场梯度,研究磁场梯度对自旋密度分布的影响,系统加上磁场梯度后 的有效哈密顿量如下:

$$H_{s} = \left(E_{F} - \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}\right) \pm \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N-1}J_{i}P_{i,i+1} + \left(\frac{G}{l}\right)\sum_{i=1}^{N}\langle x \rangle_{i}\sigma_{z}^{i}$$
(3.58)

G表示磁场梯度的大小,l表示外势的特征长度, $\langle x \rangle_i = \int x \rho^{(i)}(x) dx$ 表示第i个粒子的平均局域坐标。这里计算磁场梯度对自旋配置为{2;2}系统的密度分布的影响。利用精确对角化的方法计算出系统在考虑上磁场梯度后处于基态时的本征波函数。计算中取 G/l=0.1 时:

 $|0\rangle' = 0.4905 |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + 0.2282 |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 0.8003 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + 0.2282 |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 0.1194 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + 0.0215 |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ (3.60) 利用自旋密度分布公式 (2.6) 我们计算了系统处于基态时两组分系统的密度分布并 得出以下结论:对于自旋平衡的自旋链系统 { $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$ }例如 {2;2},磁场梯度将使有效 自旋链两组分自旋密度分布在空间交替排布,即系统处于基态反铁磁序如图 3.9 所 示,并且随着磁场梯度的增加反铁磁序分布更加显著如图 3.9 (b)所示。



图 3.9 自旋配置为 {2;2} 的两组分系统处于基态时在考虑磁场梯度后两组分的自旋密度分布。 (a) 图 G/l=0.1 (b) 图 G/l=1

通过上面的计算我们得出,在一维谐振子势阱中磁场梯度对自旋平衡的自旋链 系统会产生很大的影响即自旋组分会出现反铁磁排序。那么磁场梯度对自旋非平衡 的自旋链的密度分布会产生怎样的影响呢?在 3.12 节中我们已经计算了自旋非平衡 的自旋链系统的自旋密度分布,系统处于基态时两组分的自旋密度分布具有空间对 称性。现在考虑上磁场梯度后,我们计算系统{2;1}、{3;1}处于基态时两组分自旋 密度分布。根据自旋密度分布公式(2.6),我们计算了自旋非平衡的自旋链系统处 于基态时两组分的自旋密度分布,得出以下结论:考虑磁场梯度后,自旋非平衡的的自旋链系统 { $N_{\uparrow \neq} N_{\downarrow}$ },比如 {2;1}、{3;1}系统处于基态时两组分的自旋密度分布 在实空间内不再是对称分布如图 3.10 与 3.11,而且随着磁场梯度的增大,两组分在 实空间内的密度分布变得更加混乱如图 3.10 (b)与 3.11 (b)。由于粒子数守恒, 系统总的密度分布不受磁场梯度的影响而发生变化如下图中虚线 $\rho = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}$ 所示。



图 3.10 自旋配置为 $\{2;1\}$ 的系统处于基态时在考虑磁场梯度后两组分的自旋密度分布, (a) 图 G/l=0.1, (b) 图 G/l=1。



图 3.11 自旋配置为 $\{3;1\}$ 的系统处于基态时在考虑磁场梯度后两组分的自旋密度分布, (a) 图 G/l=0.1, (b)图G/l=1。

通过上面的计算我们得出,在一维谐振子势阱中磁场梯度对自旋平衡的自旋链 系统和自旋非平衡的自旋链系统处于基态时两组分自旋密度分布会产生很大的影响。 那么当系统处于激发态时,磁场梯度对系统的两组分密度分布会产生怎样的影响呢? 这里我们计算了自旋平衡的自旋链系统处于激发态时磁场梯度对两组分自旋密度分

布的影响。通过精确对角化的方法可以求解出考虑上磁场梯度后系统 {2;2} 处于各
个激发态时对应的本征波函数,我们的结果如下所示。
当
$$G/l = 0.1$$
时:
|1>=0.3130|↑↑↓↓>-0.0618|↑↓↓↑>-0.5681|↑↓↑↓>-0.0618|↓↑↑↓>+0.6887|↓↑↓↑>-0.3120|↓↓↑↑> (3.61)
|2>=0.0721|↑↑↓↓>-0.7667|↑↓↓↑>-0.0292|↑↓↑↓>-0.6329|↓↑↑↓>+0.0410|↓↑↓↑>-0.0624|↓↓↑↑> (3.62)
|3>=0.6435|↑↑↓↓>-0.4267|↑↓↓↑>-0.0046|↑↓↑↓>-0.4267|↓↑↑↓>+0.01747|↓↑↓↑>+0.4373|↓↓↑↑> (3.63)
|4>=-0.6033|↑↑↓↓>-0.1769|↑↓↓↑>-0.4129|↑↓↑↓>-0.1769|↓↑↑↓>+0.1779|↓↑↓↑>+0.6093|↓↓↑↑> (3.64)
|5>=-0.2598|↑↑↓↓>-0.3856|↑↓↓↑>-0.3189|↑↓↑↓>-0.3856|↓↑↑↓>-0.4681|↓↑↓↑>-0.5606|↓↓↑↑> (3.65)
当 $G/l = 1$ 时:
|1>[']=0.6346|↑↑↓↓>+0.1014|↑↓↓↑>+0.5087|↑↓↑↓>+0.1014|↓↑↑↓>-0.5845|↓↑↓↑>+0.1913|↓↓↑↑> (3.66)
|2)[']=0.5851|↑↑↓↓>+0.1014|↑↓↓↑>+0.5087|↑↓↑↓>+0.1014|↓↑↑↓>-0.5845|↓↑↓↑>+0.1913|↓↓↑↑> (3.67)
|3[']=0.0027|↑↑↓↓>+0.7071|↑↓↓↑>+0.0046|↑↓↑↓>-0.7071|↓↑↑↓>-0.0017|↓↑↓↑>+0.014|↓↓↑↑> (3.68)
|4[']=-0.1196|↑↑↓↓>-0.5361|↑↓↓↑>-0.3015|↑↓↑↓>-0.5361|↓↑↑↓>+0.3751|↓↑↓↑>+0.9136|↓↓↑↑> (3.69)
|5[']=0.0081|↑↑↓↓>+0.1079|↑↓↓↑>+0.0351|↑↓↑↓>+0.1079|↓↑↑↓>+0.3751|↓↑↓↑>+0.9136|↓↓↑↑> (3.70)

本节最后,我们将外束缚势从一维谐振子势阱换成一维无限深方势阱后,计算 了磁场梯度对自旋配置为{2;2}的系统的自旋密度分布的影响。计算结果表明:对 于自旋平衡的自旋链系统{2;2},考虑上磁场梯度后,系统自旋向上组分的概率密 度不再等于自旋向下组分的密度分布,而是两组分密度分布在空间交替出现,呈现 出反铁磁序的排列方式。当系统处于激发态时考虑上磁场梯度后,系统的自旋分布 则出现磁畴及更复杂的自旋密度分布如图 3.12 所示(计算中我们取*G/l*=0.1)。



3.2.2 外势的改变对能级分布的影响

这里利用有效自旋链模型计算一个由 4 个自旋 1/2 的费米子组成的系统的能谱, 系统的自旋结构为{2;2}。首先我们将外势选为一维谐振子势阱,因为谐振子势阱的 空间对称性,所以近邻粒子间的交叠常数满足 $J_1 = J_3 \neq J_2$,利用公式(2.18)计算 得到 $J_2/J_1 = 1.3126$ 。在 3.12 节我们计算出了该系统的能谱如图 3.13(a)所示,可以 看出强相互作用下系统不管处于基态还是激发态,能级都随着-1/g线性增加^[45]。随 后我们将外势选为一维无限深方势阱,还是计算{2;2}系统的能级分布,因为一维 无限深方势阱是一个均匀的势阱,所以在一维无限深方势阱中近邻粒子间的交叠常 数满足 $J_1 = J_2 = J_3$,可以计算出该系统能谱:

$$E_0 = E_F - \left(3 + \sqrt{3}\right) \frac{J_1}{g} \tag{3.71}$$

$$E_{1} = E_{F} - \left(2 + \sqrt{2}\right) \frac{J_{1}}{g}$$
(3.72)

$$E_2 = E_F - 2\frac{J_1}{g}$$
(3.73)

$$E_3 = E_F - \left(3 - \sqrt{3}\right) \frac{J_1}{g}$$
(3.74)

$$E_4 = E_F - \left(2 - \sqrt{2}\right) \frac{J_1}{g} \tag{3.75}$$

$$E_5 = E_F \tag{3.76}$$

无限深方势阱中系统的能谱如图 3.13 (b) 所示,由上述公式可表明在 $-1/g \rightarrow 0$ 的附 近能量是关于-1/g线性变化的,比较图 3.13 (a) 和 (b) 可以看出系统能量的排布不 依赖与交叠常数的比值 J_2/J_1 。现在我们来研究势阱的改变对能量的影响,当处于 谐振子势阱时 $E_0 = 5.0727(-1/g), E_1 = 3.9628(-1/g);$ 当系统处于一维无限深方势 阱时 $E_0 = 4.7321(-1/g), E_1 = 3.4142(-1/g)$ 。一维谐振子势阱的能量 $E_0 \propto E_1$ 与无限 深方势阱比较能级关于-1/g的斜率分别偏移了 0.3406, 0.5486。



图 3.13 系统 {2;2} 处于谐振子势阱 (a) 和无限深方势阱 (b) 时的能级排布。

3.2.3 磁场梯度对能级分布的影响

在 3.1.2 节中我们计算了自旋结构为{2;1}系统的能级分布,在相互作用趋于无 穷大即-1/g→0处系统是简并的,对于自旋结构为{3;1}、{2;2}系统在相互作用趋 于无穷大时也是简并的。在自旋链系统中考虑上磁场梯度,那么系统的能级分布会 发生怎样的变化呢?我们在这节详细研究了磁场梯度对能级分布的影响,我们将外 势选为一维谐振子势阱,磁场梯度如公式(3.58)所示,计算磁场梯度对自旋结构 为{2;1}系统的能级分布的影响。考虑磁场梯度后该系统的有效哈密顿量形式如下:

$$H = \begin{pmatrix} E_F - J_1 + \frac{G}{l} (\langle x \rangle_1 + \langle x \rangle_2 - \langle x \rangle_3) & J_1 & 0 \\ J_1 & E_F - 2J_1 + \frac{G}{l} (\langle x \rangle_1 - \langle x \rangle_2 + \langle x \rangle_3) & J_1 \\ 0 & J_1 & E_F - J_1 + \frac{G}{l} (-\langle x \rangle_1 + \langle x \rangle_2 + \langle x \rangle_3) \end{pmatrix}$$
(3.77)

通过精确对角化的方法我们计算出了系统处于基态和激发态时的能级分布,计算中 我们将 E_F 选为零点能,以-1/g为横坐标,将该系统对应的能级排布展示在图 3.14 中。通过计算得出结论:不考虑磁场梯度,在相互作用趋于无穷大时即-1/g=0, 系统是能级简并的;考虑上磁场梯度,在相互作用为无穷大时即-1/g=0,系统的 简并度消除如图 3.14 所示,并且随着磁场梯度的增加系统能级之间的空隙会增大如 图 3.14 (b)所示,(计算中我们分别取G/l=0.1,G/l=1)。



图 3.14 自旋链系统 [2;1] 在磁场梯度 G/l=0.1 (a)、 G/l=1 (b) 下的能级分布

3.3 本章小结

在本章中,我们主要是利用有效自旋链模型计算了自旋非平衡的自旋链系统和 自旋平衡的自旋链系统的自旋密度分布以及能谱;随后通过改变外势阱后我们研究 了系统的自旋密度分布和能谱会产生哪些改变,结果表明外势的改变会影响系统空 间密度分布峰值的位置,但并不会影响系统能级的排布,外势改变后系统的能级只 会发生偏移;在此基础上我们引进一个与位置有关的磁场梯度,磁场梯度的加入会 对两组分系统的密度分布和能谱都会产生很明显的影响,磁场梯度能够使自旋平衡 的自旋链系统处于基态时自旋分布呈现反铁磁排序,并且随着磁场梯度的增加反铁 磁序更加明显;磁场梯度的加入会使原先系统在相互作用趋于无穷大时即-1/g→0 简并度消除,并且随着磁场梯度的增加,能级间隙会变大。

第四章 总结与展望

一维强相互作用的多组分冷原子系统在散射共振附近无需再借助光晶格便实现 了有效自旋链模型,这为研究强相互作用一维旋量气体提供了一个新颖的方法。本 文首先利用玻色费米映射理论将一般的强相互作用系统的哈密顿量约化为有效哈密 顿量即有效自旋链模型。利用此模型分别在谐振子势阱和无限深方势阱中计算了由 不同粒子数组成的系统的空间密度分布,结果表明:系统空间密度分布会出现峰值, 峰值的数量与粒子个数保持一致。当系统处于一维谐振子势阱时,粒子的空间密度 分布呈现两边峰值低中间峰值高而空间对称分布的形式: 当系统处于一维无限深方 势阱时,粒子的空间密度分布呈现两边高中间低空间对称分布的形式。然后利用有 效自旋链模型计算了由不同粒子数组成的两组分费米系统的自旋密度分布,经过计 算我们得出: 自旋平衡的自旋链系统处于基态和激发态时两组分自旋密度分布是相 同的; 自旋非平衡的自旋链系统处于基态和激发态时两组分自旋密度分布会出现不 同。紧接着我们利用有效自旋链模型分别在谐振子势阱和无限深方势阱中计算了由 不同粒子数组成的系统的能级排布,当外势阱改变后系统的能级排序不会改变但能 级会发生偏移。最后我们在原先的哈密顿量的基础上引入了一项与位置有关的磁场 梯度,我们分别在谐振子势阱和无限深方势阱中研究了磁场梯度对系统自旋密度分 布的影响。计算结果表明磁场梯度能够改变系统的自旋密度分布,磁场梯度的加入 破坏了自旋非平衡的自旋链系统自旋密度分布的空间对称性,也使得自旋平衡的自 旋链系统处于基态时,两组分自旋密度分布在空间上会呈现出交替排布的反铁磁排 序,对系统激发态的影响则出现磁畴及更加复杂的自旋密度分布现象。在粒子间相 互作用趋于无穷大时,系统是简并的,随着磁场梯度的加入系统的简并被消除并且 随着磁场梯度的增大能级的间隙也在变大。

有效自旋链模型为我们在一维强相互作用冷原子气体中研究量子磁性开辟了另 一条道路。冷原子气体实际上是很复杂的,本文中我们只考虑了自旋 1/2 的两组分 少体费米子系统,有效自旋链模型也适用于多组分系统以及多粒子系统。利用有效 自旋链模型我们只在实空间内计算了系统的密度分布和能谱,我们也可以在动量空 间研究系统的密度分布和能谱,这种情况也值得我们进一步去研究。另外我们下一 步打算利用有效自旋链模型研究玻色系统以及玻色费米混合系统的密度分布和能谱。

41

参考文献

- H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, M. Kohl, and T. Esslinger. Confinement Induced Molecules in a 1D Fermi Gas[J]. Phys. Rev. Lett. 94, 210401 (2005).
- [2] J. Simon, W. S. Bakr, R. Ma, M. E. Tai, P. M. Philipp, and M. Greiner. Quantum Simulation of Antiferromagnetic Spin Chains in an Optical Lattice[J]. Nature 472,307 (2011).
- [3] F. Meinert, M. J. Mark, E. Kirilov, K. Lauber, P. Weinmann, A. J. Daley, and H. C. Nager. Quantum Quench in an Atomic One-Dimensional Ising Chain[J]. Phys. Rev. Lett. 111, 053003 (2013).
- [4] J. Struck, C. Ölschläger, T. R. Le, P. Soltan-Panahi, A. Eckardt, M. Lewenstein, P. Windpassinger, and K. Sengstock. Quantum Simulation of Frustrated Classical Magnetism in Triangular Optical Lattices[J]. Science 333, 996 (2011).
- [5] B. Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. P. Covey, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin, and J. Ye. Observation of Dipolar Spin-Exchange Interactions with Lattice Confined Polar Molecules[J]. Nature (London) 501, 521 (2013).
- [6] A. Paz, A. Sharma, A. Chotia, E. Marechal, J. H. Huckans, P. Pedri, L. Santos, L. Vernac, and B. Laburthe-Tolra. Nonequilibrium Quantum Magnetism in a Dipolar Lattice Gas[J]. Phys. Rev. Lett. 111, 699 (2013).
- [7] D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, L. Tarruell, and T. Esslinger. Short-Range Quantum Magnetism of Ultracold Fermions in an Optical Lattice[J]. Science 340, 1307 (2013).
- [8] 赵忠贤,陈立泉,崔长庚,黄玉珍,刘锦湘,陈赓华,李山林,郭树权,何业治.Sr(Ba)-La-Cu氧化物的高临界温度超导电性[J].科学通报, 32, 177(1987).
- [9] S. Trotzky, P. Cheinet, S. Fölling, M. Feld, U. Schnorrberger, A. M. Rey, A. Polkovnikov, E. A. Demler, M. D. Lukin, and I. Bloch. Time-resolved Observation and Control of Superexchange Interactions with Ultracold Atoms in Optical Lattices[J]. Science 319, 295 (2008).
- [10] S. Murmann, A. Bergschneider, V. M. Klinkhamer, G. Zürn, T. Lompe, and S. Jochim. Two Fermions in a Double Well: Exploring a Fundamental Building Block of the Hubbard Model[J]. Phys. Rev. Lett. **114**, 080402 (2015).
- [11] S. Nascimbène, Y. A. Chen, M. Atala, S. Trotzky, B. Paredes, and I. Bloch.

Experimental Realization of Plaquette Resonating Valence-Bond States with Ultracold Atoms in Optical Superlattices[J]. Phys. Rev. Lett. **108**, 205301 (2012).

- [12] R. A. Hart, P. M. Duarte, T-L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, and N. Trivedi. Observation of Antiferromagnetic Correlations in the Hubbard Model with Ultracold Atoms[J]. Nature (London) 519, 211 (2015).
- [13] M. Messer, R. Desbuquois, T. Uehlinger, G. Jotzu, S. Huber, D. Greif, and T. Esslinger. Exploring Competing Density Order in the Ionic Hubbard Model with Ultracold Fermions[J]. Phys. Rev. Lett. 115, 115303 (2015).
- [14] T. Fukuhara, A. Kantian, M. Endres, M. Cheneau, P. Schauß, S. Hild, D. Bellem, U. Schollwöck, T. Giamarchi, C. Gross, I. Bloch, and S. Kuhr. Quantum Dynamics of a Mobile Spin Impurity[J]. Nature. Physics 9, 235 (2012).
- [15] A. Auerbach. Interacting Electrons and Quantum Magnetism [M]. 世界图书出版 公司, (2009).
- [16] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, and S. Jochim. Fermionization of Two Distinguishable Fermions[J]. Phys. Rev. Lett. 108, 075303 (2012).
- [17] M. Girardeau. Relationship Between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in one Dimension[J]. Math. Phys. 1, 516 (1960).
- [18] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T.W. Hänsch, and I. Bloch. Tonks-Girardeau Gas of Ultracold Atoms in an Optical Lattice[J]. Nature (London) 429, 277 (2014).
- [19] T. Kinoshita, T. Wenger, and D. S. Weiss. Observation of a one dimensional Tonks -Girardeau gas[J]. Science 305, 1125 (2004).
- [20] K. A. Matveev. Conductance of a Quantum Wire in the Wigner-Crystal Regime[J].Phys. Rev. Lett. 92, 106801 (2004).
- [21] F. Deuretzbacher, K. Fredenhagen, D. Becker, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche. Exact Solution of Strongly Interacting Quasi-One-Dimensional Spinor Bose Gases[J]. Phys. Rev. Lett. 100, 160405 (2008).
- [22] K. A. Matveev, and A. Furusaki. Spectral Functions of Strongly Interacting Isospin Bosons in One Dimension[J]. Phys. Rev. Lett. 101, 170403 (2008).
- [23] M. D. Girardeau and A. Minguzzi. Soluble Models of Strongly Interacting

Ultracold Gas Mixtures in Tight Waveguides[J]. Phys. Rev. Lett. 99, 230402 (2007).

- [24] B. Sutherland. Model for a Multicomponent Quantum System[J]. Phys. Rev. B 12, 3795 (1975).
- [25] F. Deuretzbacher, D. Becker, J. Bjerlin, S. M. Reimann, and L. Santos. Quantum Magnetism without Lattices in Strongly Interacting One-dimensional Spinor Gases[J]. Phys. Rev. A 90, 013611 (2014).
- [26] X. L. Cui and T. L. Ho. Spin-Orbit-Coupled One-Dimensional Fermi Gases with Infinite Repulsion[J]. Phys. Rev. A 89, 432 (2014).
- [27] S. Murmann, F. Deuretzbacher, G. Zürn, J. Bjerlin, S. M. Reimann, L. Santos, and S. Jochim. Antiferromagnetic Heisenberg Spin Chain of a Few Cold Atoms in a One-Dimensional Trap[J]. Phys. Rev. Lett. 115, 215301 (2015).
- [28] C. Cheng, R. Grimm, and P. Julienne. Feshbach Resonances in Ultracold Gases[J]. Rev. Mod. Phys 82, 63 (2010).
- [29] A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, M. Valiente, and N. T. Zinner. Strongly Interacting Confined Quantum Systems in One Dimension[J]. Nature. Communications. 5, 5300 (2014).
- [30] L. Yang, L. M. Guan, and H. Pu. Strongly Interacting Quantum Gases in One-Dimensional Traps[J]. Phys. Rev. A 91, 043634 (2015).
- [31] J. Levinsen, P. Massignan, G. M. Bruun, and M. M. Parish. Strong-Coupling Ansatz for the One-Dimensional Fermi Gas in a Harmonic Potential[J]. Sci. Adv. 1, 1500197 (2015).
- [32] M. Barth and W. Zwerger. Tan Relations in One Dimension[J]. Annals of Physics, 326, 2544 (2011).
- [33] S. Tan. Energetics of a Strongly Correlated Fermi Gas[J]. Annals of Physics. 323, 2952 (2008).
- [34] S. E. Gharashi and D. Blume. Correlations of the Upper Branch of 1D Harmonically Trapped Two-Component Fermi Gases[J]. Phys. Rev. Lett. 111, 045302 (2013).
- [35] L. J. Yang and X. L. Cui. Effective Spin-Chain Model for Strongly Interacting One-Dimensional Atomic Gases with an Arbitrary Spin[J]. Phys. Rev. A 93, 013617 (2016).

- [36] R. P. Feynman. Forces in Molecules[J]. Phys. Rev. 56, 340 (1939).
- [37] Y. J. Lin, R. L. Compton, K. Jim énez-Garc áet, J. V. Porto, and I. B. Spielman. Synthetic Magnetic Fields for Ultracold Neutral Atoms[J]. Nature 462, 628 (2010).
- [38] J. Y. Zhang, S. C. Ji, Z. Chen, L. Zhang, Z. D. Du, H. Zhai, and J. W. Pan. Collective Dipole Oscillations of a Spin-rbit Coupled Bose-Einstein Condensate[J]. Phys. Rev. Lett. 109, 115301 (2012).
- [39] P. J. Wang, Z. Q. Yu, Z. K. Fu, J. Miao, L. H. Huang, S. J. Chai, H, Zhai, and J. Zhang. Spin-Orbit Coupled Degenerate Fermi Gases[J]. Phys. Rev. Lett. 109, 095301 (2012).
- [40] L. W. Cheuk, A. T. Sommer, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, W. S. Bakr, and M. W. Zwierlein Spin-Injection Spectroscopy of a Spin-Orbit Coupled Fermi Gas.[J]. Phys. Rev. Lett. 109, 095302 (2012).
- [41] R. W. Williams, M. C. Beeler, L. J. LeBlanc, K. Jimenez-Garcia, and I. B. Spielman. Raman-Induced Interactions in a Single-Component Fermi Gas Near an s -Wave Feshbach Resonance[J]. Phys. Rev. Lett. 111, 095301 (2013).
- [42] C. Qu, C. Hamner, M. Gong, C. Zhang, and P. Engels. Observation of Zitterbewegung in a Spin-Orbit-Coupled Bose-Einstein Condensate[J]. Phys. Rev. A 88, 021604 (2013).
- [43] L. J. Yang, X. W. Guan, and X. L. Cui. Engineering Quantum Magnetism in One-Dimensional Trapped Fermi Gases with p-wave Interactions[J]. Phys. Rev. A 93, 051605 (2016).
- [44] E. Haller, M. Gustavasson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, and H. C. Nagerl. Realization of an Excited, Strongly Correlated Quantum Gas Phase[J]. Science 325,1224 (2009).
- [45] X. L. Cui and T. L. Ho. Ground-State Ferromagnetic Transition in Strongly Repulsive One-Dimensional Fermi Gases[J]. Phys Rev A 89, 303 (2014).

攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目

冯志强,张云波,强相互作用一维冷原子气体有效自旋链模型中密度分布的研究 山西大学学报(自然科学版)

致 谢

研究生即将毕业,这也意味着我的学生阶段也即将结束。回首过往,这里是我 接触学术科研的起点,虽然在这里只度过短短的三年时光,但在这里我深深体会到 了学术探索的艰辛与惆怅,导师们兢兢业业、献身科学的精神也会在以后的学习和 工作中激励着我前进。在这里我想对那些不管在科研上还是生活中给予我无私帮助 的人说一声感谢!是你们让我在严肃的科研氛围中也感受到了舒心与温暖。

感谢我的导师张云波教授,您是我科研探索的引路人,与您相识的三年里一直 被您严谨的工作态度与崇高的学术素养所感染着。在学习和生活中您给了我很多指 导和帮助,让我受益匪浅。尤其在论文的选题和修改阶段,张老师都付出了大量的 心血与智慧,甚至连标点符号的修改老师都能帮我指出来。在此深深的感谢张老师, 在您身上我学到了很多知识和做人的道理。

此外我还要感谢感谢我们小组的每一位成员,在论文修改和论文的有关推导过 程中给予我无私帮助的刘彦霞师姐和徐志浩老师,以及小组里面的师兄师姐师妹师 弟们:梁成功、毛丽君、李甜甜、陈冠军、陈立、王丽敏、李旗、王乐、刘敬鹄、 高春平、刘娜、刘聪明、张瑞江、胡蕊、王凤梅、田康康、薛娅婷、张奋华、黄甫 宏丽还有杨利民老师、王利老师、郭丽平老师、尹相国老师。每当遇到学习上的问 题总能够得到他们热情的帮助,也是你们在学习之余给我带来了欢乐与笑声。

感谢研究生阶段给我上过课的梁九卿教授、李志坚教授、闫维贤教授、姜晓庶 副教授。他们对待学术的敬业精神一直激励着我。感谢物电学院的裴建文书记、郜 江瑞院长、聂一行所长等给我提供了温馨的学习环境,感谢刘玉萍班主任在生活和 学习上的关心和帮助,我表示诚挚的谢意!

最后感谢我的家人,感谢山西大学,回首在理论物理研究所度过的三年时光, 我将终生难忘。

冯志强

2017年5月于山西大学理论物理研究所

49

个人简况及联系方式

姓名: 冯志强

性别:男

籍贯: 山西省运城市新绛县

学习经历: 2014年9月至2017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: 15735172716

电子邮箱: 15735172716@163.com

承诺书

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

作者签名:

20 年 月 日

学位论文使用授权声明

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

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名:

导师签名:

20 年 月 日