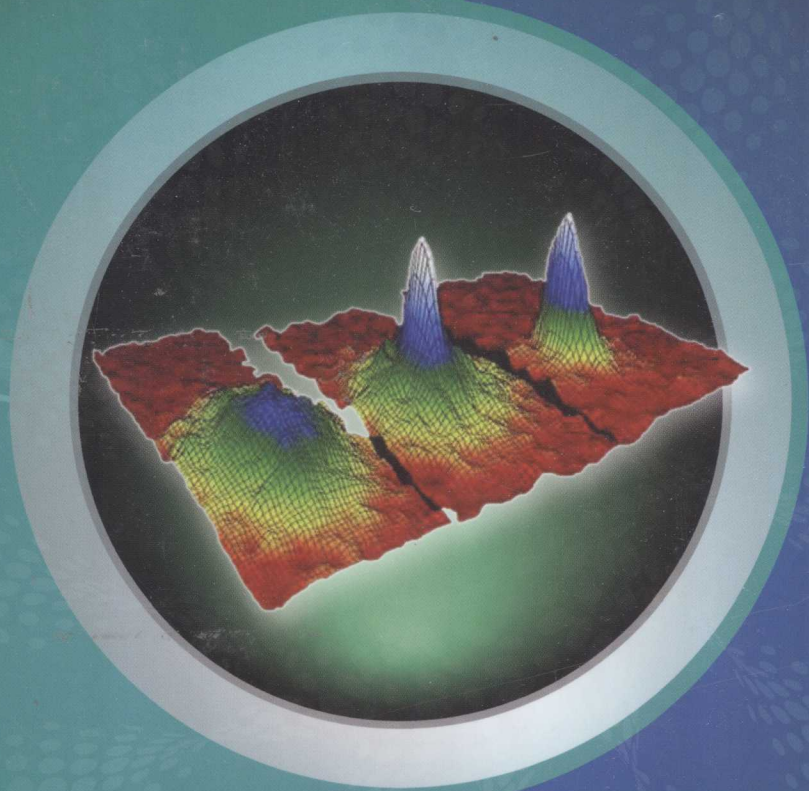


玻色-爱因斯坦凝聚体动力学

——非线性隧穿、相干及不稳定性

刘杰 著



科学出版社

www.sciencep.com

玻色-爱因斯坦凝聚体动力学

——非线性隧穿、相干及不稳定性

刘 杰 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是关于玻色-爱因斯坦凝聚体(BEC)动力学的一本专著. 全书共分9章, 着重探讨了 BEC 的非线性动力学, 特别是非线性量子隧穿、相干及不稳定性. 本书总结了作者近些年来关于 BEC 动力学方面的一些最新研究成果, 阅读本书可使读者尽快了解这一研究领域的前沿.

本书适合物理、力学、数学、天文等有关专业的科研人员及研究生参考, 也可供相关专业的科研人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

玻色-爱因斯坦凝聚体动力学: 非线性隧穿、相干及不稳定性/刘杰著.

—北京: 科学出版社, 2009

ISBN 978-7-03-025853-3

I. 玻… II. 刘… III. 玻色凝聚-研究 IV. O414.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 193315 号

责任编辑: 王飞龙 胡 凯 / 责任校对: 张 琪

责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

新 蕾 印 刷 厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2009 年 11 月第 一 版 开本: B5(720 × 1000)

2009 年 11 月第一次印刷 印张: 17

印数: 1—2500 字数: 331 000

定价: 58.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈环伟〉)

前 言

由量子薛定谔方程描述的微观世界, 展现出丰富多彩的行为, 如量子隧穿、相干等. 近年来, 由于实验技术的发展, 人们在实验室里观测到许多有趣的新现象. 例如, 1995 年实验室实现了玻色-爱因斯坦凝聚, 其丰富多彩的动力学行为引起了人们的广泛兴趣, 人们观测到宏观量子隧穿、相干、量子涡旋、非线性孤子和超流现象. 这些现象反映了量子波函数的非定域性以及海森伯不确定性以及起源于相互作用的玻色粒子的集体激发. 微观量子体系的运动是极其复杂的, 其解析求解或数值求解都是很困难的.

另外, 经典哈密顿系统的数学理论在过去的几十年里得到了长足发展. 人们的认识从寻找系统的首次积分开始, 直到发现具有足够多首次积分的经典哈密顿系统 (即可积系统) 实在是寥寥无几, 从而发展出处理近似可积系统的理论和方法, 如 KAM 理论等.

传统的量子物理与经典哈密顿的联系就是所谓的对应原理: 当有效普朗克常数远小于 1 时, 系统的量子行为将被抑制, 经典哈密顿力学将给出很好的近似描述. 这里有效普朗克常数可以是波长与系统尺度的比, 也可以是一个量子态在相空间所占体积与整个相空间体积的比. 但是, 由于薛定谔方程自身特有的结构, 其描述的 Hilbert 空间量子运动可以分解为一个总相位的时间演化和一个投影 Hilbert 空间的运动. 后者满足一个经典哈密顿正则方程. 注意, 这里我们不需要应用量子-经典对应原理的近似. 上述投影 Hilbert 空间中的经典哈密顿可以给出量子态演化的精确描述. 因而, 我们可以利用经典哈密顿理论, 包括不动点分析、正则变换、平均方法和庞加莱截面方法, 来研究量子运动. 这些方法具有如下优点: ① 相对于非定域的具有测不准性质的复空间的量子波函数, 实空间经典轨道可以给出简明直观的物理图像; ② 可以推广研究“非线性”的量子演化. 这里的“非线性”是指薛定谔方程中具有非线性项. 例如, 平均场描述玻色-爱因斯坦凝聚中相互作用项.

目前, 国内外关于玻色-爱因斯坦凝聚的实验和理论研究处于蓬勃发展时期, 值得强调的是国内的许多相关研究单位也做出了出色的工作. 国外已有几本相关的 BEC 专著, 但国内还没有见到关于 BEC 动力学的书. BEC 的研究涉及理论物理、原子分子光物理、凝聚态物理、量子计算和精密测量等学科或方向, 面非常宽. 本书着重探讨 BEC 的非线性动力学, 特别是非线性量子隧穿、相干及不稳定性, 因此是挂一漏万, 只当是做件抛砖引玉的事情. 由于作者的水平和能力有限, 本书难免存在许多不足之处, 敬请读者批评指正. 成书过程中, 作者与许多同事特别是傅立

斌研究员进行了很多有益的讨论,许多博士生在书稿整理上提供了很大帮助,如杨丽云、叶地发、刘彬、孟少英、栗生长等,在此一并感谢.

刘 杰

2009 年 3 月

于灰楼陋室 301

目 录

前言

第 1 章 BEC 动力学基本理论	1
1.1 引言	1
1.2 平均场下的 Gross-Pitaevskii 方程	2
1.3 准粒子激发的 Bogoliubov-de Gennes 方程	3
1.3.1 Bogoliubov 激发的基本动力学理论	4
1.3.2 准粒子 Bogoliubov 激发的半经典动力学	14
1.4 离散的 Gross-Pitaevskii 方程及等效经典哈密顿表示	17
参考文献	22
第 2 章 双势阱 BEC 的非线性量子隧穿	24
2.1 非线性 Josephson 周期振荡	24
2.2 通向自囚禁的量子相变	27
2.2.1 通向自囚禁的相变及标度律	28
2.2.2 多体量子涨落效应	31
2.3 双势阱 BEC 自囚禁现象的周期调制效应	36
2.3.1 高频调制 ($\omega \gg v$)	36
2.3.2 低频调制 ($\omega \ll v$)	37
2.3.3 共振情形 ($\omega \approx v$)	38
2.3.4 量子涨落对自囚禁的影响	38
2.4 非线性 Landau-Zener 隧穿	40
2.4.1 临界区 $c = v$	43
2.4.2 亚临界区 $c < v$	47
2.4.3 超临界区 $c > v$	48
2.5 非线性 Rosen-Zener 跃迁	50
2.5.1 模型	50
2.5.2 简并系统 ($\gamma = 0$)	51
2.5.3 解简并系统 ($\gamma \neq 0$)	58
2.5.4 应用和讨论	60
参考文献	61

第 3 章 三势阱中 BEC 的非线性量子隧穿	65
3.1 物理模型	65
3.2 对称三势阱, $\gamma = 0$	67
3.2.1 线性 Josephson 振荡解	68
3.2.2 弱相互作用情形 ($c < c_1$)	69
3.2.3 强相互作用情形 ($c > c_2$)	69
3.3 通向自囚禁态的转变	72
3.3.1 自囚禁在一个阱中的情形	72
3.3.2 自囚禁在两个阱中的情形	74
3.4 倾斜三势阱情形 ($\gamma \neq 0$)	75
3.4.1 线性振荡解	75
3.4.2 通向自囚禁态的转变	76
3.5 三势阱中的 Landau-Zener 隧穿	77
3.5.1 模型	78
3.5.2 能级结构	79
3.5.3 隧穿动力学	80
参考文献	88
第 4 章 周期光晶格上 BEC 的局域化与量子隧穿	90
4.1 光晶格中玻色-爱因斯坦凝聚动力学简述	90
4.2 一维光晶格中 BEC 的自囚禁	93
4.2.1 物理模型	94
4.2.2 波包演化动力学	95
4.2.3 与双势阱中自囚禁的关系	95
4.3 光晶格维数对玻色-爱因斯坦凝聚中自囚禁的影响	98
4.3.1 非线性离散模型	98
4.3.2 基于含时变分方法的理论分析	100
4.3.3 基于 GP 方程的数值模拟	105
4.3.4 总结	107
参考文献	108
第 5 章 BEC 的非线性量子干涉与测量	110
5.1 基于超冷原子的 Rosen-Zener 干涉仪	110
5.2 两分量玻色-爱因斯坦凝聚中的非线性 Ramsey 干涉	116
5.2.1 非线性 Ramsey 干涉	117
5.2.2 理论分析与数值模拟的比较	120
5.3 非线性量子 Zeno 效应	128

5.3.1 量子 Zeno 效应简介	128
5.3.2 测量理论	132
5.3.3 双势阱模型	133
5.3.4 测量的影响	135
参考文献	139
第 6 章 BEC 的不稳定性及 Bogoliubov 激发	144
6.1 体育场 (Stadium) 势中 BEC 的 Bogoliubov 准粒子激发	144
6.2 非谐势阱中 BEC 的 Bogoliubov 激发	146
6.2.1 变分法与控制方程	146
6.2.2 非谐变形引起的集体模式和频移	148
6.2.3 集体激发的衰减和复发	150
6.3 周期驱动环形势中的 BEC	151
6.3.1 物理模型	151
6.3.2 弱相互作用: 反共振和量子驱动	152
6.3.3 强相互作用: 系统通向不稳定性的相变	156
6.3.4 BEC 中的 Arnold 扩散	158
6.4 BEC 量子演化可信度的衰减	161
6.4.1 物理模型	161
6.4.2 经典运动	161
6.4.3 量子相干态的可信度	164
6.4.4 纠缠态的可信度	168
6.4.5 讨论 —— BEC 动力学不稳定性的根源	169
参考文献	170
第 7 章 超冷原子分子转变动力学	174
7.1 玻色原子到玻色分子转变和 Feshbach 共振	174
7.1.1 模型	174
7.1.2 多体效应	176
7.1.3 结论与讨论	184
7.2 多体效应对玻色系统非绝热 Feshbach 转化的影响: JILA 实验中原子 分子转换率之谜	185
7.2.1 模型	185
7.2.2 多体效应对同核 Feshbach 分子形成的影响	187
7.2.3 与 ^{85}Rb 的实验比较	190
7.2.4 多体效应在形成异核 Feshbach 分子过程中的影响	192
7.3 费米原子向玻色分子转变和 Feshbach 共振	195

7.3.1 模型	195
7.3.2 主要结果	198
7.3.3 讨论和结论	202
7.4 原子-分子光缔合	202
7.4.1 非线性三能级 Λ 系统原子-分子转化的绝热保真度	203
7.4.2 原子-异核三聚物分子转化系统暗态的绝热性和动力学稳定性	209
参考文献	218
第 8 章 BEC 的绝热演化理论	223
8.1 量子绝热理论再论	223
8.2 非线性量子演化的绝热条件与绝热不变量	230
8.3 半经典极限和绝热极限的可交换性问题	235
参考文献	242
第 9 章 Berry 相	245
9.1 非绝热几何相与经典 Hannay 角	246
9.2 原子-分子转化系统的 Berry 相及分数磁单极	251
9.3 Berry 相的非线性修正	256
参考文献	262

第1章 BEC 动力学基本理论

1.1 引言

气、液、固是人们所熟知的物质的三种基本形态,如水分子(H_2O)随着温度的不断升高可以表现为冰、水、水蒸气.乐于接受新知识的人还从时下流行的等离子体彩电中得知随着温度的继续升高还会出现等离子体态.一个有趣的问题是如果把物质不断冷下去,一直冷到不能再冷下去,如接近绝对零度(-273.16°C).在这样的极低温度下,物质又会出现什么奇异的状态呢?事实上早在1925年,著名物理学家玻色(Bose)和爱因斯坦(Einstein)就给出了这个问题的答案^[1].凡依随“玻色-爱因斯坦统计”规律,自旋为整数的粒子,包括光子、胶子、W及Z玻色子、希格斯粒子、 π 介子以及由偶数个核子组成的原子核和碱金属原子等,都称作玻色子.当不存在相互作用的玻色子,在一定温度下在其最低能量量子态上突然凝聚,并达到可观数量时,它就处于玻色-爱因斯坦凝聚态(BEC).当年,印度科学家玻色提出新的光子统计方式,爱因斯坦将其推广到带质量的理想气体,从而从理论上预言了BEC现象的存在.非常奇妙的是,实现凝聚的粒子具有宏观相干、隧穿和量子超流性等奇特的量子性质.因此,对BEC现象的深入探讨,不仅对基础研究有重要意义,在原子激光、原子钟、原子芯片技术、精密测量、量子计算机和纳米技术等领域都有很好的应用前景.

在爱因斯坦理论预言之后,人们为实现这一物质形态作出了不懈的努力.直到70年后,也就是1995年,美国国家标准局和科罗拉多大学联合实验室(JILA)、莱斯大学(RICE)以及麻省理工学院(MIT)终于在各自的实验室实现了碱金属气体原子(^{87}Rb , ^7Li 和 ^{23}Na)的玻色-爱因斯坦凝聚^[2].在1995年底,这个重要发现被美国国际合众社评为“十大国际科技新闻”.人们宣称,“终于得到了物质的第五种状态”.BEC的实现具有重要的理论意义和潜在的实用价值.因此,2001年的诺贝尔物理学奖授予给了JILA实验室的E. A. Cornell博士、C. E. Wieman博士和MIT的W. Ketterle教授,以表彰他们的卓越成就.这个领域是整个物理学界的研究热点,不断有振奋人心的新结果出现.例如,2004年1月,JILA的D. S. Jin领导的实验小组实现了这一领域的又一重大突破——费米原子(^{40}K)对的凝聚^[3],这一成果在超导技术上的应用前景十分广阔,有助于对超导机理深入理解和下一代超导体的诞生.玻色-爱因斯坦凝聚的实现有着十分重要的科学意义和潜在的应用价值.首先它产生了一个新物态,从而为实验物理学家提供了一个独一无二的新介

质——利用物质波的相干性可开拓很多新的研究领域,如原子激光器的研究;类比如于非线性光学,可开展非线性原子光学研究;利用 BEC 相干性,可观察凝聚体的涡旋和孤子;利用 Feshbach 共振改变原子间相互作用可观测到类似超新星和黑洞的 BEC 爆炸;研制高准确度和稳定度的原子钟和精密原子干涉仪,从而改善精密测量的准确度,如超冷原子的碰撞截面和物理常数的测量;在量子信息科学中的应用,如光速减慢与光信息存储、量子信息传递和量子逻辑操作等;利用 BEC 相干性还可以进行微结构的刻蚀和制作微光电子回路等。但是,所有这些应用都需要首先从理论上对 BEC 的相干性、宏观量子隧穿、孤子涡旋的产生、BEC 不稳定性、Bogoliubov 激发等动力学性质有深刻的研究和理解。

本章做为本书的基础,我们将介绍关于 BEC 动力学的基本理论。在第二节简单介绍 BEC 定态平均场描述之后,在第三节和第四节我们将从二次量子化场方程出发严格地推出描述凝聚体及准粒子激发的动力学方程。

1.2 平均场下的 Gross-Pitaevskii 方程

在我们所考虑的超低温(相当于 nK 量级)的稀薄玻色气体(密度大约为 $10^{13} \sim 10^{15}/\text{cm}^3$)中,两粒子间的有效相互作用可以近似表示为 $U_0\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$,其中,相互作用常数正比于原子的 s 波散射长度,即 $U_0 = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ 。这里, $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 表示两粒子的空间位置。下面,我们采用平均场方法来研究多体系统的能量,并假设系统波函数可用单粒子波函数来表示。在凝聚态,所有的玻色子都处于同一个单粒子态上,用 $\phi(\mathbf{r})$ 表示,则 N 个粒子系统的波函数可以表示为

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \phi(r_i). \quad (1.1)$$

其中的单粒子波函数满足归一化条件:

$$\int d\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r})|^2 = 1. \quad (1.2)$$

系统的多体哈密顿为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right] + U_0 \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (1.3)$$

这里的 $V(\mathbf{r})$ 是原子感受的外势。式 (1.1) 的能量可表示为

$$E = N \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{(N-1)}{2} U_0 |\phi(\mathbf{r})|^4 \right]. \quad (1.4)$$

对于体积为 V 均匀分布的系统,单个粒子的基态波函数是 $1/V^{1/2}$,则两粒子间的相互作用能量为 U_0/V 。当 N 个玻色子处于同一个态时,系统能量为

$$E = \frac{N(N-1)}{2V}U_0 \approx \frac{1}{2}Vn^2U_0, \quad (1.5)$$

其中, $n = N/V$, 同时假设 $N \gg 1$.

考虑非均匀分布的凝聚体, 凝聚态波函数可定义为

$$\psi(\mathbf{r}) = N^{1/2}\phi(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

则粒子密度为

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (1.7)$$

忽略掉 $1/N$ 阶项, 系统能量可表示为

$$E(\psi) = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2}U_0|\psi(\mathbf{r})|^4 \right]. \quad (1.8)$$

假设系统总粒子数守恒, 即

$$N = \int d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (1.9)$$

从而有关系 $\delta E - \mu\delta N = 0$, 化学势 μ 是拉格朗日乘数, 对于确定的 μ 求 $E - \mu N$ 的最小值, $E - \mu N$ 相对 $\psi^*(\mathbf{r})$ 的变化为零, 给出

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + U_0|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

式 (1.10) 就是不含时的定态 Gross-Pitaevskii (GP) 方程, 与薛定谔方程形式类似, 式中作用在粒子上的势能是外势场 V 和非线性项 $U_0|\psi(\mathbf{r})|^2$ 的和, 其中的非线性项考虑了其他玻色子产生的平均场效应. 注意到与线性薛定谔方程的本征值是单个粒子的能量不同, GP 方程的本征值是化学势. 对于没有相互作用的粒子, 当处于同一个态时, 其化学势等于粒子的能量, 而对于相互作用系统, 二者并不相等.

对于均匀分布的玻色气体, 从 GP 方程得

$$\mu = U_0|\psi(\mathbf{r})|^2 = U_0n, \quad (1.11)$$

这一结果与由热力学关系 $\mu = \partial E / \partial N$ 给出的均匀系统式 (1.5) 的化学势相同.

1.3 准粒子激发的 Bogoliubov-de Gennes 方程

由于 BEC 系统粒子间存在相互作用, 因此 BEC 系统的理论研究方法与没有相互作用系统有着根本的不同. 对于热平衡系统, 可以用纯数值的量子 Monte Carlo

方法来模拟^[4]. 在理论研究方面用得最多的是 Hartree-Fock 平均场近似方法, 该方法可以推广到非热平衡系统. 极低温度时, 凝聚态可以由 GP 方程来描述^[5, 6], 用纯数值方法研究该方程可以很好的解释实验结果^[7], 同时关于 GP 方程的解析解也得到了很好的研究^[8-11]. 在文献 [11] 中定量的解释了一些实验结果, 包括原子云的扩散^[12] 和凝聚体的集体激发^[13] 等. 前节介绍的平均场方法还不够系统化, 并没有给出含时 GP 方程的适用范围. 本节中我们将介绍一种研究由 GP 方程得到凝聚态量子涨落问题的理论方法.

Bogoliubov 提出了一种研究相互作用均匀气体凝聚态的方法, de Gennes 将该方法推广到了非均匀气体系统^[5, 14, 15]. Bogoliubov-de Gennes(BdG) 理论主要应用于 $U(1)$ 对称破缺系统——系统的态由相干态描述, 因此原子场算符具有非零期望值. BdG 理论研究了线性近似下场算符在非零平均值附近的量子涨落问题.

本节中我们将 N 个粒子系统场算符的演化方程系统展开来研究系统的动力学性质. 场算符可以劈裂为两部分, 分别描述发生凝聚的粒子和未发生凝聚的粒子. 通过考虑展开式中的高阶项, 可以得到波函数相对于 GP 方程解的偏离. 对于稳态和低温下的系统参数, GP 方程的解可以很好的描述系统的波函数, 但是, 对于某些含时过程, 系统存在某种不稳定性, 表现为未发生凝聚的粒子数将随时间指数地增长, 这时平均场的 GP 方程描述将不再适用^[16].

1.3.1 Bogoliubov 激发的基本动力学理论

理论模型

考虑 N 个玻色原子处于含时外场 $U(\mathbf{r}, t)$ 中. 玻色原子间存在两两相互作用, 该相互作用可以用局域赝势来代替,

$$V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = g\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \quad (1.12)$$

式中,

$$g = 4\pi\hbar^2 a_s / m \quad (1.13)$$

是粒子间的耦合系数, 其中, a_s 是 s 波散射长度, m 是玻色子的质量.

系统哈密顿的二次量子化形式为

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\mathcal{H}(t) + \frac{1}{2}g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (1.14)$$

其中, $\hat{\Psi}$ 是粒子的场算符. 单粒子哈密顿 $\mathcal{H}(t)$ 是粒子动能和含时势能 $U(\mathbf{r}, t)$ 之和, 即

$$\mathcal{H}(t) = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t). \quad (1.15)$$

哈密顿式 (1.14) 具有 $U(1)$ 对称性, 当原子态平均值 $\hat{\Psi}$ 不为零时系统发生对称破缺, 此时, 需要考虑总粒子数不同的态之间的相干叠加.

为了方便定义凝聚系统^[17]的波函数, 我们首先引入单粒子密度算符 ρ_1

$$\langle \mathbf{r}' | \rho_1(t) | \mathbf{r} \rangle \equiv \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \rangle, \quad (1.16)$$

其中, $\hat{\Psi}$ 是海森伯表象的波函数, $\langle \cdots \rangle$ 表示系统在初始状态 $t = 0$ 时的平均值. 我们假设系统的粒子数为 N (即 $\text{tr}[\rho_1] = N$), 同时假设系统的初始状态处于温度为 T 的平衡态.

当算符 ρ_1 具有本征态 $|\Phi_{\text{ex}}\rangle$ 时, 其对应本征值 N_{ex} 与系统总粒子数 N 同量级, 即 N_{ex} 远大于 ρ_1 的其他本征值时, 系统发生玻色-爱因斯坦凝聚, N_{ex} 个粒子同时处于 $|\Phi_{\text{ex}}\rangle$ 态上.

$$\rho_1 |\Phi_{\text{ex}}\rangle = N_{\text{ex}} |\Phi_{\text{ex}}\rangle. \quad (1.17)$$

态 $|\Phi_{\text{ex}}\rangle$ 满足归一化条件:

$$\langle \Phi_{\text{ex}} | \Phi_{\text{ex}} \rangle = 1. \quad (1.18)$$

宏观态 Φ_{ex} 的存在将场算符劈裂为两部分 —— 平均场和量子涨落, 分别对应于发生凝聚和没有发生凝聚的粒子:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}(t) + \delta \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1.19)$$

其中,

$$\hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}} = \int d\mathbf{r} \Phi_{\text{ex}}^*(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1.20)$$

在薛定谔表象中, $\hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}(t)$ 表示在凝聚波函数 $\Phi_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)$ 态上湮没一个粒子. 因为 $\langle \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger(t) \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}(t) \rangle$ 的期望值是 N_{ex} , 所以矩阵元与 $\sqrt{N_{\text{ex}}}$ 同量级. 将场算符 $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ 投影到 Φ_{ex} 的垂直分量上可以给出场算符的量子涨落 $\delta \hat{\Psi}$ 满足的表达式:

$$\delta \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | Q_{\text{ex}}(t) | \mathbf{r}' \rangle \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \quad (1.21)$$

其中, $Q_{\text{ex}}(t) = 1 - |\Phi_{\text{ex}}\rangle \langle \Phi_{\text{ex}}|$ 投影到单粒子态上, 与凝聚波函数 Φ_{ex} 正交. 为了简化表达式, 我们引入符号“ $\circ$ ”, 表示单体算符 O 作用到空间场算符上的结果, 如 O 作用到 $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ 上, 可以表示为

$$O \circ \hat{\Psi} \equiv \int d\mathbf{s} O(\mathbf{s}) \hat{\Psi}(\mathbf{s}). \quad (1.22)$$

则式 (1.21) 可表示为

$$\delta \hat{\Psi}(t) = Q_{\text{ex}}(t) \circ \hat{\Psi}(t). \quad (1.23)$$

这个关系表明 $\delta \hat{\Psi}$ 与波函数 Φ_{ex} 正交:

$$\langle \Phi_{\text{ex}} | \circ \delta \hat{\Psi} = \int d\mathbf{r} \Phi_{\text{ex}}^*(\mathbf{r}, t) \delta \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1.24)$$

$\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 满足准玻色对易关系:

$$[\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \delta\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = \langle \mathbf{r} | Q_{\text{ex}}(t) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (1.25)$$

同时与 $\hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger$ 对易.

没有发生凝聚的粒子数由下式给出:

$$\langle \delta\hat{N} \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \langle \delta\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle \ll N_{\text{ex}} \approx N. \quad (1.26)$$

由于 $\delta\hat{\Psi}$ 和 $\hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}$ 的矩阵元分别同 $\sqrt{\langle \delta\hat{N} \rangle}$ 和 $\sqrt{N}$ 同量级, 所以在考虑了量子涨落后, 展开系数是 $\sqrt{\langle \delta\hat{N} \rangle / N}$ 的平方项.

为了保证未发生凝聚的粒子与总粒子数的比值 $\langle \delta\hat{N} \rangle / N$ 足够小, 同时避免热激发, 必须要求系统所处的温度非常低, 即 $T \ll T_c$, 其中, T_c 是 BEC 的临界温度. 事实上, 即便是在绝对零度, 由于粒子间存在相互作用, 并不是所有的粒子都能凝聚到基态.

为了方便计算, 我们将式 (1.17) 投影到 $\langle \mathbf{r} |$, 同时利用式 (1.16)、式 (1.19) 和式 (1.20) 可以得到

$$\langle \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger(t) \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0. \quad (1.27)$$

式 (1.27) 表明在凝聚体和任何与 $|\Phi_{\text{ex}}\rangle$ 正交的态之间, 不存在单粒子相干态, 即单体密度算符的非对角矩阵元都为零.

我们引入算符 $\hat{\Lambda}_{\text{ex}}$,

$$\hat{\Lambda}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\hat{N}}} \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger(t) \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1.28)$$

其中, $\hat{N}$ 是总粒子数算符. 算符 $\hat{\Lambda}_{\text{ex}}$ 与 $\hat{N}$ 对易, 即系统粒子数守恒. $\hat{\Lambda}_{\text{ex}}$ 的矩阵元与 1 等量级, 其期望值为 0, 即

$$\langle \hat{\Lambda}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0. \quad (1.29)$$

系统满足上式, 从而保证 Φ_{ex} 是单体密度算符的本征态.

粒子间相互作用非常弱 (对于均匀凝聚体, 没有发生凝聚的粒子数与总粒子数比值 $\rho a_s^3 \ll 1$) 时, 我们才可以将算符展开. 系统满足弱相互作用的条件, 则必须有

$$N \rightarrow +\infty, Ng = \text{const} \equiv g_N. \quad (1.30)$$

以上条件等价于 $N \rightarrow \infty$ 时 $a_s \rightarrow 0$. 在该条件下, $\langle \delta\hat{N} \rangle$ 趋于一个有限大小的值, 所以展开系数满足下式

$$\sqrt{\langle \delta\hat{N} \rangle / \hat{N}} \propto 1 / \sqrt{\hat{N}}. \quad (1.31)$$

在式 (1.30) 的极限下, $\hat{\Lambda}_{\text{ex}}$ 和 Φ_{ex} 可以展开

$$\hat{\Lambda}_{\text{ex}} = \hat{\Lambda} + \frac{1}{\sqrt{\hat{N}}} \hat{\Lambda}^{(1)} + \frac{1}{\hat{N}} \hat{\Lambda}^{(2)} + \dots, \quad (1.32a)$$

$$\Phi_{\text{ex}} = \Phi + \frac{1}{\sqrt{\hat{N}}} \Phi^{(1)} + \frac{1}{\hat{N}} \Phi^{(2)} + \dots. \quad (1.32b)$$

由式 (1.18) 给出的归一化条件, 我们知道 $|\Phi\rangle$ 是归一化的, 同时由式 (1.29) 得出 $\hat{\Lambda}$ 的期望值趋于 0, 从而可以确定 Φ . 由式 (1.26) 可以得出 $\hat{\Lambda}$ 满足以下的对易关系:

$$[\hat{\Lambda}(\mathbf{r}', t), \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = \langle \mathbf{r} | Q(t) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (1.33)$$

其中,

$$Q = 1 - |\Phi\rangle\langle\Phi|. \quad (1.34)$$

设想系统的单粒子可观测量 $\hat{X} = \sum_{i=1}^N X(i)$, 其中, $X(i)$ 表示作用在第 i 个粒子态上. 对于 N 个粒子的系统, 可观测量的实际测量值往往是实验上所有可能测量结果的统计平均, 因此 $\hat{X}$ 的期望值由下式给出:

$$\langle X(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | X(1) | \mathbf{r}' \rangle \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \rangle. \quad (1.35)$$

由式 (1.19) 可以分别给出凝聚粒子和未发生凝聚粒子对 $\langle X(t) \rangle$ 的贡献,

$$\langle X \rangle = \langle \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}} \rangle \langle \Phi_{\text{ex}} | X(1) | \Phi_{\text{ex}} \rangle + \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | X(1) | \mathbf{r}' \rangle \langle \delta \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \delta \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \rangle. \quad (1.36)$$

由于 $\langle \hat{\Lambda}_{\text{ex}}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, 因此上式中不存在 Φ_{ex} 和 $\delta \hat{\Psi}$ 的交叉项. 利用展开式 (1.32), 式 (1.36) 可化为

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &\approx (N - \langle \delta \hat{N} \rangle) \langle \Phi | X(1) | \Phi \rangle + \langle \Phi | X(1) | \Phi^{(2)} \rangle + \langle \Phi^{(2)} | X(1) | \Phi \rangle \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | X(1) | \mathbf{r}' \rangle \langle \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Lambda}(\mathbf{r}') \rangle. \end{aligned} \quad (1.37)$$

式 (1.37) 右边的第一项与 N 同量级, $N - \langle \delta \hat{N} \rangle$ 表示凝聚体的粒子数, 小于系统的总粒子数 N . 上式中还考虑了零阶近似 Φ 对凝聚体波函数的贡献, 零阶展开项 Φ 通常是归一化的并可由 GP 方程确定:

$$i\hbar \partial_t \Phi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(\mathbf{r}, t) + [U(\mathbf{r}, t) + Ng|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2] \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.38)$$

其中, $U(\mathbf{r}, t)$ 是系统的势能.

式 (1.37) 右边的第二项和第三项与 N^0 同量级, 也是发生凝聚的粒子的贡献. 由于系统的实际波函数与 GP 方程得到的 Φ 不同, 因此需要考虑 N^0 对 $\langle X \rangle$ 的修正, 该修正主要是未发生凝聚的粒子对凝聚体粒子作用的结果. 式 (1.37) 右边的最后一项也与 N^0 同量级, 其中包含场算符 $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$, 对应于未发生凝聚粒子的贡献. $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ 描述在零阶近似下, 未发生凝聚粒子的动力学性质, 满足 BdG 方程:

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \\ \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \mathbf{L}(t) \begin{pmatrix} \hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \\ \hat{\Lambda}^\dagger(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (1.39)$$

其中,

$$\mathbf{L}(t) = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix}, \quad (1.40)$$

$$\mathcal{L}_{11} = \mathcal{H}_{\text{GP}}(t) + g_N Q(t) |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 Q(t) - \xi(t); \quad (1.41a)$$

$$\mathcal{L}_{12} = g_N Q(t) \Phi^2(\mathbf{r}, t) Q^*(t); \quad (1.41b)$$

$$\mathcal{L}_{21} = -g_N Q^*(t) \Phi^{*2}(\mathbf{r}, t) Q(t); \quad (1.41c)$$

$$\mathcal{L}_{22} = -\mathcal{H}_{\text{GP}}(t) - g_N Q^*(t) |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 Q^*(t) + \xi(t); \quad (1.41d)$$

式中, $\xi(t)$ 是任意实函数, 对应于波函数 Φ 的相位. 在后文中我们将给出偏微分算符 $\mathbf{L}(t)$ 的物理解释: 假设 GP 方程的解为 Φ , 系统波函数相对于 Φ 的偏离 $\delta\Phi$ 随线性化 GP 方程演化, 其垂直分量 $\delta\Phi_\perp$ 与 Φ 正交, 也满足 BdG 方程:

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \delta\Phi_\perp(\mathbf{r}, t) \\ \delta\Phi_\perp^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \mathbf{L}(t) \begin{pmatrix} \delta\Phi_\perp(\mathbf{r}, t) \\ \delta\Phi_\perp^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (1.42)$$

由上式我们可以通过线性化 GP 方程来研究未发生凝聚粒子的动力学行为.

$\hat{N}^{1/2}$ 量级 —— Gross-Pitaevskii 方程

通过研究系统的 $1/\hat{N}^{1/2}$ 量级的展开式, 给出含时 GP 方程, 从而可以确定 Φ_{ex} 的零阶近似项 Φ . 同时还可以给出 $\hat{\Lambda}_{\text{ex}}, \hat{\Lambda}_{\text{ex}}^\dagger$ 的零阶近似 $\hat{\Lambda}$ 和 $\hat{\Lambda}^\dagger$ 的演化方程.

由式 (1.28) 并利用式 (1.23), 可得

$$\frac{d}{dt} \hat{\Lambda}_{\text{ex}} = \frac{1}{\sqrt{\hat{N}}} \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger \left[\left(\frac{d}{dt} Q_{\text{ex}} \right) \circ \hat{\Psi} + Q_{\text{ex}} \circ \left(\frac{d}{dt} \hat{\Psi} \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\hat{N}}} \left(\frac{d}{dt} \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}}^\dagger \right) Q_{\text{ex}} \circ \hat{\Psi}. \quad (1.43)$$

式 (1.43) 右边括号内的第一项可写成

$$\left(\frac{d}{dt} Q_{\text{ex}} \right) \circ \hat{\Psi} = -Q_{\text{ex}} \left(\frac{d}{dt} |\Phi_{\text{ex}}\rangle \right) \hat{a}_{\Phi_{\text{ex}}} - |\Phi_{\text{ex}}\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \Phi_{\text{ex}}| \right) \circ \delta \hat{\Psi}, \quad (1.44)$$

很显然, 这一项与 $\sqrt{\hat{N}}$ 同量级, 对式 (1.43) 的贡献最大.