

Lieb-Liniger model

Section 1: Introduction

Bethe Ansatz 与硬核玻色子模型推导

Bethe Ansatz 方法来源于 1931 年 Hans Bethe 求解海森堡自旋链的开创性工作，他假设一种特殊的波函数：

$$\chi = \sum_P A(P) e^{i\{k_{P_1}x_1 + \dots + k_{P_N}x_N\}} \quad (1)$$

其中 N 是下自旋的个数，而 $P_1 \dots P_N$ 代表着 $1, 2 \dots N$ 的一个置换。 N 阶置换的群元为 $N!$ ，这 $N!$ 个平面波是单个指数相位因子 $e^{ik_i x_j}$ 的 N 重积。这里 N 个不同波数 k_i 在 N 个不同坐标 x_j 之间排列。每个平面波的振幅系数可以通过求解哈密顿本征值问题确定。

Problem 1: 为什么可以这样假设？原理是什么？

事实上在一维系统中，任意粒子无法绕行，任何两粒子必须相撞，所以系统的动力学被两体散射所完全决定，如果两体散射是弹性且具有因果的，那么多体散射便可以还原为多个两体散射过程的组合（不需要考虑三阶及以上高阶的散射过程）。所以我们可以将多体波函数构造为各个区域是自由粒子平面波，粒子交换时产生散射相位，所有相位组合形成最终的波函数。在通过约束边界条件便可以得到约束准动量的 Bethe 方程。

硬核玻色子模型

硬核玻色子模型，即具有 δ 函数排斥势的一维无外场玻色子模型，也称为 Lieb-Liniger 模型，对于一个体系的研究其哈密顿量是非常重要的，其一次量子化形式为：

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

二次量子化形式则为：对于玻色场 $\hat{\psi}(x)$ ，满足正则对易关系，含有 N 个粒子的长度为 L 的一维箱型势哈密顿量为：

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \partial_x \hat{\psi}^\dagger \partial_x \hat{\psi} + \frac{g_{1D}}{2} \int_0^L \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \quad (2)$$

第一项为动能项，代表玻色子在一维空间中的传播；第二项是相互作用项，表示两个粒子位于同一位置时的 δ 作用。 g_{1D} 为耦合常数，由一维散射长度决定 $g_{1D} = -2\hbar^2/ma_{1D}$ 。这个哈密顿量的详细如下：

Problem 2: Lieb-Liniger 模型哈密顿量的推导

在低能情况，粒子的相互作用可以近似为接触相互作用： $V(x_1 - x_2) = \frac{g}{2}\delta(x_1 - x_2)$ ，因此相互作用能可以写作 $H_{int} = \frac{g}{2} \int \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} dx$ 对于两体薛定谔方程，考虑两个粒子间的 δ 势，其方程为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{g}{2} \delta(x_1 - x_2) \right] \psi(x) = E(x) \psi(x)$$

对于两体问题，我们取质心坐标系，约化质量为 $\mu = \frac{m}{2}$ ，相对坐标为 $x = x_1 - x_2$ ，因此薛定谔方程变为： $[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x_1 - x_2)]\psi(x) = E\psi(x)$ ，在 $x = 0$ 处，波函数导数不连续：

$$\frac{d\psi}{dx}|_{0+} - \frac{d\psi}{dx}|_{0-} = \frac{2\mu g}{\hbar^2} \psi(0)$$

由于 δ 函数势是偶宇称，散射态考虑偶宇称解 $\psi(x) = \cos(k|x| + \delta(k))$ ，在该情况下一阶导数为奇函数，所以代入跳跃条件可得： $\tan \delta = -\frac{\mu g}{\hbar^2 k}$ ，公式中的 δ 为相移。在非原点区域，波函数近似为线性函数 $\psi(x) = A|x| + B$ ，求解可得： $B = \frac{\hbar^2 A}{\mu g}$ ，因此散射长度定义为波函数外推为零的点， $a = -\frac{2\hbar^2}{mg}$ ，从而 $g = -\frac{2\hbar^2}{ma}$

定义空态 $|0\rangle$ ，场的运动方程由海森堡运动方程给出，

$$i\partial_t \hat{\psi}(x) = [\hat{H}, \hat{\psi}(x)] = -\partial_x^2 \hat{\psi}(x) + 2c\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)$$

(代入计算并利用对易关系，取 $2m = \hbar = 1$ ，令 $c = mg_{1D}/\hbar$)，其运动方程是一个非线性薛定谔方程。同时我们可以定义粒子的占有数算符与动量算符：

$$\hat{N} = \int_0^L \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} dx \quad \hat{P} = -\frac{i}{2} \int_0^L \{[\partial_x, \hat{\psi}(x)] \hat{\psi}(x)\} dx$$

这里的动量算符是自由玻色场

Problem 3: 为什么这里的动量算符是这个形式？

相较于单粒子量子力学，多粒子体系中的动量算符为总动量算符，需要满足厄米性，平移对称性且与粒子数算符相容。分析场的对易关系，可得动量密度算符 $\hat{\pi} \propto i\hat{\psi}^\dagger \partial_x \hat{\psi}$ ，更详细的了解需要量子场论的学习

注意，它们是与哈密顿量对易的，是该模型的守恒量。

Section 2 : Bethe Ansatz for the Lieb-Liniger Bose gas

波函数

二次量子化语言下波函数定义为产生算符作用于空态：

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int_0^L d^N x \Psi(x) |x\rangle$$

这里 $|x\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\dots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle$, 且本征函数在交换两个粒子的时候波函数不变。在稀薄量子气体中, 粒子间的平均距离远大于散射长度, 对于分别位于 x_ξ 和 x_η 的粒子有如下近距离行为:

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = -\frac{1}{a_{1D}}[\Psi(0^+) + \Psi(0^-)] \quad (3)$$

其中 $x = x_\eta - x_\xi$, $\Psi(x)$ 是两粒子的相对波函数。

Problem 4: 如何推导?

由于波函数连续, 对于哈密顿量中的狄拉克函数, 我们取薛定谔方程然后在 0 附近小区域内积分便可以得到该导数跳跃条件; 其实不难看出, 在推导 Lieb-Liniger 模型哈密顿量的时候已经给出了该关系, 因为波函数连续

在该模型中面对只有两粒子相遇时才有的相互作用, 利用 Bethe 假设, 我们根据粒子的位置将波函数分解为 $N!$ 个部分: $\Theta(P): x_{P_1} < x_{P_2} \dots < x_{P_N}$, 其中 P 是一个对于 $\{1, 2 \dots N\}$ 的排列, 波函数可以写成: $\Psi(x) = \sum_P \Theta(P) \psi_P(x)$, 由于玻色子波函数的对称性, 因此对于 $\psi_P = \psi_1$, 定义置换群的单位元为 $1 = \{1, 2 \dots N\}$, 而波函数则是 $N!$ 个平面波的叠加:

$$\psi_1 = \sum_P A(P) e^{i\{k_{P_1}x_1 + \dots + k_{P_N}x_N\}}$$

k 是粒子在周期性边界条件下携带的赝动量, 对于上述的边界条件 (3), 我们代入即可得到系数满足的关系为:

$$A(P') = \frac{k_{P_j} - k_{P_{j+1}} + ic}{k_{P_j} - k_{P_{j+1}} - ic} A(P)$$

而置换 P' 是在置换 P 的基础上更换 i 与 $i+1$ 位置上粒子的置换, 以上关系表明了二体散射问题在交换具有动量为 k_a 和 k_b 时会产生反对称的相位:

$$A(P') = e^{-i\theta(k_{P_j} - k_{P_{j+1}})} A(P)$$

其中 $\theta(k_a - k_b) = 2 \arctan\left(\frac{k_a - k_b}{c}\right)$, 如果赝动量相同, 那么波函数为零。

Problem 5: 不妨跟着证明一下

只考虑两个粒子的情况, 对应的 Bethe 波函数为

$$\psi_1 = A(1, 2) e^{i(k_1x_1 + k_2x_2)} + A(2, 1) e^{i(k_1x_2 + k_2x_1)}$$

, 那么对于相对坐标 $x = x_1 - x_2$, 当 x 大于与小于零波函数按顺序分为:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{i(k_1x_1 + k_2x_2)} + B e^{i(k_1x_2 + k_2x_1)} & x < 0 \\ B e^{i(k_1x_1 + k_2x_2)} + A e^{i(k_1x_2 + k_2x_1)} & x > 0 \end{cases}$$

现在代入计算边界关系, $\psi(0^+) = \psi(0^-) = (A + B) e^{iKX}$, 其中 $K = k_1 + k_2, X = (x_1 + x_2)/2$, 计算导数, 将这些都代入式 (3):

$$-i(k_1 - k_2)(A - B) e^{iKX} = c(A + B) e^{iKX}$$

, 整理即可得：

$$\frac{A}{B} = \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic} = \frac{A(P')}{A(P)}$$

对于下面的公式，相位偏离函数的定义为： $\theta(k) = 2 \arctan\left(\frac{k}{c}\right)$ ，对原始方程，将复数视为复平面上的点，转换为极坐标形式即可得到，复数相除等于幅角相减，同时简化形式，由于 $\arctan(x) + \arctan(1/x) = \pi/2$ ，因此指数项为负号，而-1 不影响观测结果可以略去，代入即可到化简后的结果：

$$A(P') = e^{-i\theta(k_{P_j} - k_{P_{j+1}})} A(P)$$

事实上以上系数关系可以写成散射矩阵形式，即 $A(P') = \hat{S}A(P)$ ，且有如下定理：如果散射矩阵满足

$$\hat{S}_{12}(\lambda - \mu) \hat{S}_{13}(\lambda) \hat{S}_{23}(\mu) = \hat{S}_{23}(\mu) \hat{S}_{13}(\lambda) \hat{S}_{12}(\lambda - \mu) \quad (4)$$

那么体系是可积的，该方程即 Yang-Baxter 方程。

Problem 6: Yang-Baxter 方程的物理意义是什么？

仔细观察方程散射矩阵的形式，描述三个粒子按不同顺序发生两两散射最终结果必须一致。方程成立意味着散射过程为无衍射的，保证一个多体系统可以还原为一系列两体散射矩阵乘积。

对于散射过程为 $1 \rightarrow P$ ，约定 $A(P) = \hat{S}(Pk)A(1)$ ，利用前面系数满足的关系我们可以得到散射矩阵的形式为：

$$\hat{S}(Pk) = \prod_{P_j < P_l} \frac{k_{P_j} - k_{P_l} - ic}{k_{P_j} - k_{P_l} + ic}$$

相应的，我们将散射矩阵代入到系统的波函数，那么：

$$\Psi(x) = \sum_P \Theta(P) \left(\prod_{P_j < P_l} \frac{k_{P_j} - k_{P_l} - ic}{k_{P_j} - k_{P_l} + ic} \right) e^{iP \cdot x}$$

Bethe Ansatz 方程组

假设系统周期性条件 $\Psi(\dots, x_\xi = 0 \dots) = e^{i\alpha} \Psi(\dots, x_\xi = L \dots)$ ，这里 $\alpha = 0$ 波函数为周期性的， $\alpha = \pi$ 则为反周期性的，以下讨论我们取周期性情况。代入上面的波函数那么我们可以求得动量满足的方程 (Lieb-Liniger 方程) 为：

$$e^{ik_i L} = -e^{-i\alpha} \prod_{j=1}^N \frac{k_i - k_j + ic}{k_i - k_j - ic}, \quad i = 1, 2 \dots N \quad (5)$$

对于该体系，因为动量与粒子数均为守恒量（与哈密顿量对易），因此对应相同的本征态，可以被同时对角化，对于给定的准动量 $\{k_j\}$ ，系统的总能量与总动量为：

$$P = \langle \hat{P} \rangle = \sum_j k_j \quad E = \langle \hat{H} \rangle = \sum_j k_j^2$$

我们可以将 Lieb-Liniger 方程写成另一种：

$$2\pi \frac{I_i}{L} = k_i + \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \theta(k_i - k_j) \quad (6)$$

tips: 这里文献中给出的是 $\theta(\frac{k_i - k_j}{c})$, 应该是笔误

如果 N 是奇数, 那么量子数是整数; N 为偶数则为半整数。对于给定的量子数 (与耦合常数无关), 存在唯一的动量值。总动量可表示为:

$$P = \frac{2\pi}{L} \sum_{i=1}^N I_i = \frac{2l\pi}{L}, l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

对基态, $P = 0$, 所有准动量位于间隔 $(-Q, Q)$ 中, 量子数满足:

$$I_j = -\frac{N-1}{2} + j - 1, j = 1, \dots, N$$

Problem 7: 对以上内容给出一点注释

首先, 对于公式 (5) 的推导, 其实是将 $x_\xi = 0$ 和 $x_\xi = L$ 两个条件代入上一节末尾的波函数, 相比于 $x_\xi = 0, x_\xi = L$ 多了一个指数因子 $e^{ik_i L}$, 为了保证对于所有 x_ξ 成立, 因此系数 $e^{ik_i L} = e^{-i\alpha \frac{A(P')}{A(P)}}$, 即得到了 (5) 式。

而对于量子系统, 总动量算符为 $\hat{P} = \sum_{j=1}^N (-i\partial_{x_j})$, 那么作用在贝特假设下的波函数 (坐标只出现在指数项中), 因此总动量算符的期望为动量之和; 而哈密顿量 $\hat{H} = -\sum_{j=1}^N \partial_{x_j}^2 +$ 相互作用项, 其期望代入计算则为动量平方之和。

对于另一种形式的变换 (6), 其实是将公式 (5) 取对数, 由于连乘内的形式可以参考 problem5 内相位偏离函数的定义, 由于 $-1 = e^{i(2n+1)\pi}, n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$, 所以对应不同的量子数, 记为 I_i 。对于 N 为奇数偶数, 因为对公式 (6) 索引 i 求和, 可以去掉相位偏移函数项, 得到: $\sum_{i=1}^N I_i = \frac{L}{2\pi} k_i$, 因为周期性边界条件 (PBO), 动量取值为 $k_i = \frac{2n\pi}{L}$, 因此总动量为整数。同时由于需要保持能量最低, 能量为动量平方之和, 因此动量必须对称分布, 而对于奇数与偶数两种情况, 动量必须连续且对称: $I_j = j - 1 - \frac{N-1}{2}, j = 1, \dots, N$ (好奇这个公式怎么来的, 因为量子数无空缺, 因此可以假设量子数为公差为 1 的等差数列, 求和结果由于需要满足平移对称性总动量为 0, 可以解得该结果), 因此 N 为偶数则量子数为半整数, N 为奇数则为整数。

总动量对 i 求和, 将公式 (6) 对 i 求和, 不难发现相位偏移函数同时对 i, j 求和 (双重求和项且对称), 且相位偏离函数是奇函数, 所以总动量等于系数乘上对量子数求和。对于基态, 是能量最低的情况, 总动量为 0, 为什么呢? 其实不难看出做一个坐标的平移哈密顿量是不变的, 那么该体系是满足平移对称性的, 所以基态必须为 0, 否则存在简并态。

事实上, 这里可以类比费米子海, 量子数扮演动量量子数角色, 不过笔者并没深究。

Section 3: Ground-State Energy, excitations, and correlations

取热力学极限 $N, L \rightarrow \infty$, 且粒子密度 $n = N/L$ 是守恒量, 则 Lieb-Liniger 方程 (6) 可改写为积分形式:

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \int_{-Q}^Q a(k-q)\rho(q)dq, |k| < Q \quad (7)$$

其中 $\rho(k)$ 是准动量的密度分布函数，定义为 $\rho(k) = \lim_{\Delta k \rightarrow 0} \frac{1}{L\Delta k}$ ，对应的粒子数与能量可以表示为：

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

Problem 8: 积分形式的推导过程

首先对于公式 (6)，热力学极限下量子数是等间距分布的，且量子数对应唯一的赝动量，因此可以假设 $k(I_i) = k_i$ ；赝动量密度分布函数的含义是在区间 $(k, k + dk)$ 内，粒子数为 $L\rho(k)dk$ ，且满足： $\int \rho(k)dk = n = N/L$ 。同时，在热力学极限下有离散到连续的变换：

$$\sum_{j=1}^N f(k_j) \approx L \int_{-Q}^Q f(q) \rho(q) dq$$

因此，将该公式代入到公式 (6) 中，可以得到：

$$\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \theta(k_i - k_j) \rightarrow \int \rho(q) \theta(k - q) dq$$

，其中 $k = k(I)$ ，因此：

$$2\pi \frac{I}{L} = k + \int \rho(q) \theta(k - q) dq$$

将该方程左右对 k 求导，并代入关系式 $\frac{dI}{dk} = L\rho(q)$ (因为赝动量与量子数一一对应)，化简即可得到积分形式 (7)，其中

$$a(x) = \frac{1}{2\pi} \theta'(x)$$

， $x = k - q$ 是动量差值

对于基态，能量依赖于无维度的标量 $\gamma = \frac{Lc}{N}$ ，通过标量变换：

$$k = Qx \quad c = Q\lambda \quad \rho(Qx) = g(x)$$

我们发现基态每个粒子的能量为：

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} e_0(\gamma) \quad e_0(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3} \int_{-1}^1 x^2 g_0(x) dx$$

且

$$g_0(x) = \frac{1}{2\pi} + \frac{\lambda}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{g_0(y)}{\lambda^2 + (x - y)^2} dy \quad (8)$$

公式 (8) 是标准的非齐次 Fredholm 方程。

Problem 9: 这两个公式的一点推导

对于原方程 (7)，核函数 $a(x) = \frac{1}{2\pi} \theta'(\frac{x}{c}) = \frac{1}{\pi} \frac{c}{x^2 + c^2}$ ，因此代入有：

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{c}{\pi} \int_{-Q}^Q \frac{1}{c^2 + (k - q)^2} \rho(q) dq$$

, 以及粒子数与能量密度约束为 :

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

现在进行标度变换, 代入标度变换公式 :

$$n = \int_{-1}^1 \rho(Qx) Q dx = Q \int_{-1}^1 g(x) dx \quad g(x) = \rho(Qx)$$

对于积分方程 (7), 标量替换关系为 : 积分限 $[-Q, Q] \rightarrow [-1, 1], k - q \rightarrow Q(x - y)$, 代入核函数 :

$$\frac{1}{\pi} \frac{c}{c^2 + (k - q)^2} = \frac{1}{\pi} \frac{\lambda}{Q[\lambda^2 + (x - y)^2]}$$

, 整理一下可以将 (7) 式改写为 :

$$g_0(x) = \frac{1}{2\pi} + \frac{\lambda}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{g_0(y)}{\lambda^2 + (x - y)^2} dy$$

并且由于 $\int_{-Q}^Q \rho(q) dq = n \rightarrow \int_{-1}^1 g(x) Q dx = N/L$, 所以存在截止条件 : $\int_{-1}^1 g_0(x) dx = \frac{N}{QL} = \frac{\lambda}{\gamma}$
我们来进一步计算基态单粒子能量 :

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{LQ^3}{N} \int_{-1}^1 g_0(x) x^2 dx = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} e_0(\gamma), n = \frac{N}{L} \quad e_0(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3} \int_{-1}^1 x^2 g_0(x) dx$$

基态

对于基态, 动能与相互作用势能的竞争取决于无维度标量 $\gamma = \frac{Lc}{N}$:

- 当 $\gamma = 0$ 对应为自由玻色子, 所有粒子凝聚在零动量态
- 对于较小的耦合常数, 所有的准动量是分离的
- 在参数 $\gamma \rightarrow \infty$, 强排斥势使分布与自由费米子类似

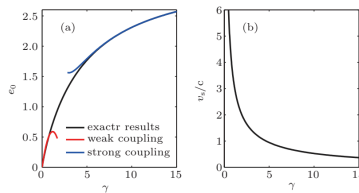


Fig. 2. The ground state energy and sound velocity for different coupling strength γ . (a) The ground energy density is a monotonic increasing function of γ when the linear density is fixed. Black line: the exact numerical result from Eq. (23). Red line: the weakly coupling expansion result (24). Blue line: the result obtained by the strongly coupling expansion (31). (b) The sound velocity is a monotonic decreasing function of γ . In the weakly coupling limit, the ratio turns to be infinite, while in the strong coupling limit, $v_s/c \rightarrow 2\pi/\gamma$ (see Eq. (45)).

Figure 1: 耦合强度与基态能密度

弱耦合极限：半圆定理

该部分参考文献M.Gaudin (1971)：相互作用强度 c 很小的情况下 ($Lc \ll 1$)，密度分布函数与能量密度服从半圆定理：

$$g_0(t) \approx \frac{Q}{2\pi c}(1-t^2)^{1/2} + \frac{1}{4\pi^2}(1-t^2)^{-1/2}(t \ln \frac{1-t}{1+t} + \ln \frac{16\pi e Q}{c}) \quad e = n^3 \left(\gamma - \frac{4}{3\pi} \gamma^{3/2} \right) \quad (9)$$

其结果由 Bogoliubov 微扰方法得出。当然也可以通过原始的方程 (5) 给出，在弱耦合极限下 ($Lc \ll 1$)，准动量正比于相互作用强度的平方根且 $c/(k_i - k_j)$ 也是小量。对于 $q_j = k_j \sqrt{L/2c}$ ，Lieb-Liniger 方程可以二阶展开为：

$$q_j = \sum_{l \neq j}^N \frac{1}{q_j - q_l}$$

若定义函数 $H_N(q) = \prod_{i=1}^N (q - q_i)$ ，我们可以得到：对于多项式 $F(q) = H_N''(q) - 2qH_N'(q)$ ，若 $F(q_j) = 0$ 则 $F(q)$ 和 $H_N(q)$ 都是自由度为 N 的多项式，且 $F(q_j) = H_N(q_j)$ ，二者互成正比。对于高阶的 q ， $F(q) = -2NH_N(q)$ ，满足以下方程：

$$H_N''(q) - 2qH_N'(q) + 2NH_N(q) = 0$$

其解为厄米多项式， q_j 是对应 $H_N(q) = 0$ 的根。排序 $q_j < q_{j+1}$ ，则：

$$(2N + 1 - q_j^2)^{1/2} > \pi/(q_{j+1} - q_j) > (2N + 1 - q_{j+1}^2)^{1/2}$$

相应的分布函数 $\rho(k) = \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{L(k_{j+1} - k_j)}$ 变成：

$$\rho(k) \approx \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{n}{c}} \left(1 - \frac{k^2}{Q^2} \right)^{1/2} + O\left(\frac{1}{Lnc}\right)$$

截止点 $Q = 2\sqrt{nc}$ ，准动量分布满足半圆定理

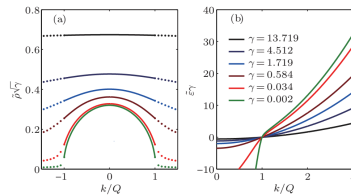


Fig. 1. Densities and dressed energies of pseudo momenta for the ground state. (a) Solid lines: the dimensionless densities of the pseudo momenta, $\tilde{\rho}(k) = \rho(k)/c$ obtained from Eq. (23); dotted lines: the corresponding dimensionless hole densities, $\tilde{\rho}_h(k) = \rho_h(k)/c$. When the coupling strength is small, the distribution function $\tilde{\rho}$ meets a semi-circle law (27). For the strong coupling limit, i.e., $\gamma \gg 1$, the distribution function gradually becomes flatter and flatter, and approaches $\rho(k) \approx 1/2\pi$. (b) Dimensionless dressed energy is defined by $\tilde{\epsilon}(k) = \epsilon(k)/c^2$, which is obtained from the dressed energy equation (64).

Figure 2: 弱耦合极限下呈现半圆

Problem 10: 结合 M.Gaudin (1971) 给出以上内容的推导

从 Lieb-Liniger 方程出发，为了跟文献一致，我采用文献中的形式：

$$k_i L = 2\pi n_i + \sum_j \psi_{ij} \quad \tan \frac{1}{2} \psi_{ij} = c / (k_i - k_j)$$

这个公式与公式 (6) 形式一致但是有所出入，不能直接通过公式 (5) 得到，因为在前面的推导中与本文有所出入，这里可以不管。我们首先要在弱耦合极限下假设动量正比于相互作用强度 c 的指数幂，这背后的物理含义很好理解，观察这一节最开始的图可以发现在 $c^+ \rightarrow 0$ 时，基态总动量为 0，量子数为 0，因此 $k_i L = \sum_j \psi_{ij}$ ，而 $\psi_{ij} \approx \frac{2c}{k_i - k_j}$ ，因此在 $c^+ \rightarrow 0$ 时， $k_i \rightarrow 0$ ，因此可假设 $k_i \sim c^\alpha$ ，考虑求和，则 $c^\alpha \sim \frac{c}{c^\alpha}$ ，所以 $k_i \sim c^{1/2}$ 。

现在假设动量的具体形式： $k_i = (2c/L)^{1/2} q_i + O(c)$ ，为什么可以这样假设呢？我们将前面假设成正比的系数为 a_i ，那么代入求和：

$$(\sqrt{c} a_i) L = \sum_{i \neq j} \frac{2c}{\sqrt{c}(a_i - a_j)} + O(c)$$

，做一点化简 $a_i = \frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \frac{1}{a_i - a_j}$ ，做变换 $a_i = L^{-1/2} q_i$ 再代入，则：

$$q_i = \sum_{j \neq i} \frac{1}{q_i - q_j}$$

，最后结合标度关系，不难看出 $k_i = (2c/L)^{1/2} q_i + O(c)$

下一步，我们进行对多项式的一点证明：首先，定义多项式 $H_N(q) = \prod_{i=1}^N (q - q_i)$ ，以及辅助函数 $F(q) = H_N''(q) - 2qH_N'(q)$ ，对于 $H_N'(q) = H_N(q) \cdot \sum_{i=1}^N \frac{1}{q - q_i}$ ，在零点处 $H_N(q_j) = 0$ ，我们有恒等式：

$$\sum_{j \neq i} \frac{1}{q_j - q_i} = \frac{H_N''(q_j)}{2H_N'(q_j)} \quad (*)$$

我们给出一点证明，因为 $H_N'(q) = \sum_{m=1}^N \prod_{i \neq m} (q - q_i)$ ，在 $q = q_j$ 时， $H_N'(q_j) = \prod_{i \neq j} (q_j - q_i)$ 。而对于二阶导数： $H_N''(q) = \frac{d}{dq} [\sum_{m=1}^N \prod_{i \neq m} (q - q_i)]$ ，在 $m = j$ 时，其导数为： $\frac{d}{dq} [\prod_{i \neq j} (q - q_i)]|_{q=q_j} = \sum_{m \neq j} \prod_{i \neq j, m} (q_j - q_i)$ ；在 $m \neq j$ 时，其导数为： $\sum_{m \neq j} \prod_{i \neq m, j} (q_j - q_i)$ ，因此 $H_N''(q_j) = 2H_N'(q_j) \sum_{j \neq i} \frac{1}{q_j - q_i}$ 整理即得： $H_N''(q_j) = 2H_N'(q_j) \sum_{j \neq i} \frac{1}{q_j - q_i}$ 。所以 $F(q_j) = H_N''(q_j) - 2q_j H_N'(q_j) = 0$ ，即同时为二者零点。

对于弱耦合极限，因为 q 是大值，面对多项式我们只需要关注最高次幂即可。由于 $H_N(q)$ 领头项为 q^N ，而 $F(q)$ 的领头项为 $-2Nq^N$ ，所以有 $F(q) = -2NH_N(q)$ ，代入具体形式可得厄米多项式的微分方程，因此 q_j 为厄米多项式的根。对于不同的根，假设厄米多项式的零点依次为 $q_1 < q_2 < \dots < q_N$ ，当 $N \rightarrow \infty$ 时，零点密度满足 Winger 半圆率（这部分上网查资料）：

$$\rho_q(q) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - q^2} \quad |q| < \sqrt{2N}$$

，密度函数满足归一化： $\int_{-\sqrt{2N}}^{\sqrt{2N}} \rho_q(q) dq = N$ ，由于 $q = k \sqrt{\frac{L}{2c}} \iff k = q \sqrt{\frac{2c}{L}}$ ，二者密度仅相差一个系数，所以：

$$\rho_k(k) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2N - (k^2 \frac{L}{2c})} \cdot \sqrt{\frac{L}{2c}}$$

, 引入粒子数密度 $n = N/L$, 并化简获得单位长度密度函数:

$$\rho(k) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{n}{c}} (1 - \frac{k^2}{Q^2})^{1/2}, |k| \leq Q$$

, 其中 $Q = 2\sqrt{nc}$ 为截断条件, 满足: $\int_{-Q}^Q \rho(k) dk = n$

强耦合极限: 费米化

该部分参考文献为 [Ristivojevic \(2014\)](#): 在强排斥情况, 气体变为 Tonks-Girardeau 气体, 在 $\gamma \rightarrow \infty$ 情况, 通过玻色-费米映射法, 将玻色气体基态映射为无相互作用费米子。对于有限强的相互作用 $\gamma \gg 1$, 我们可以从 Lieb-Liniger 方程推出:

$$k_j = 2\pi \frac{I_j}{L} \left(1 - \frac{2}{\gamma} + \frac{4}{\gamma^2} - \frac{8}{\gamma^3} \right) + \frac{4\pi^3}{3c^3 L^4} \left[\left(N + \frac{1}{2} - j \right)^4 - \left(\frac{1}{2} - j \right)^4 \right] + O\left(\frac{1}{c^5}\right)$$

其中基态量子数 $I_j = -\frac{N-1}{2} + j - 1, j = 1, \dots, N$, 根据上面的公式我们可以推出基态能量为:

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\pi^2}{3} n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} + \frac{32}{\gamma^3} \left(\frac{\pi^2}{15} - 1 \right) \right] \quad (10)$$

Problem 11: 强耦合极限的计算

这部分的计算从公式 (6) 展开, 对于 $c \rightarrow \infty$, 可以将相位偏离函数进行展开: $\theta(x) = 2 \arctan(\frac{x}{c}) \approx 2(\frac{x}{c} - \frac{x^3}{3c^3})$, 因此公式 (6) 可以改写为:

$$2\pi I_i \approx k_i L + \frac{2}{c} \sum_{j \neq i}^N (k_i - k_j) - \frac{2}{3c^3} \sum_{j \neq i}^N (k_i - k_j)^3 \quad (a)$$

, 由于基态时总动量为 $\sum_i^N k_i = 0$, 因此一阶项可以写成: $\frac{2}{c} \sum_{j \neq i}^N (k_i - k_j) = \frac{2N}{c} k_i$, 因此公式 (a) 变成:

$$2\pi I_i \approx k_i L + \frac{2N}{c} k_i - \frac{2}{3c^3} \sum_{j \neq i}^N (k_i - k_j)^3 \quad (b)$$

, c 为大量, 忽略高阶项, 我们可以得到主要项, 利用泰勒展开我们计算得出主导项为:

$$k_i^{(0)} = \frac{2\pi I_i}{L} (1 + \frac{2N}{cL})^{-1} = \frac{2\pi I_i}{L} (1 + \frac{2}{\gamma})^{-1} \approx \frac{2\pi I_i}{L} (1 - \frac{2}{\gamma} + \frac{4}{\gamma^2} - \frac{8}{\gamma^3}) \quad (c)$$

, 接下来我们计算修正项: 在之前的计算中, 我们将 k_i 展开为微扰级数, 即:

$$k_i = k_i^{(0)} + k_i^{(1)} + k_i^{(2)} + k_i^{(3)} + \dots$$

, 其中 $k_i^{(0)} = \frac{2\pi}{L} I_i$ 表示的是 Tonks-Girardeau 极限, $k_i^{(2)} = -\frac{2}{\gamma} k_i^{(0)}, k_i^{(2)} = \frac{4}{\gamma^2} k_i^{(0)}, k_i^{(3)} = -\frac{8}{\gamma^3} k_i^{(0)} + \delta k_i^{(3)}$, 这里 $\delta k_i^{(3)}$ 表示的是由立方项引起的修正, 我们将以上代入公式 (b) 中, 可以得到:

$$L \cdot \delta k_i^{(3)} = \frac{2}{3c^3} \sum_{j \neq i} (k_i^{(0)} - k_j^{(0)})^3$$

, 其中用主导项代入求和, 这部分结果为: $\sum_{j \neq i} (k_i^{(0)} - k_j^{(0)})^3 = (\frac{2\pi}{L})^3 \sum_{j \neq i} (I_i - I_j)^3$, 而量子数可以通过公式 $I_j = -\frac{N-1}{2} + j - 1, j = 1, \dots, N$ 代入, 利用立方和公式 $\sum_{k=1}^m k^3 = \frac{m^2(m+1)^2}{4}$, 那么结果变为:

$$\sum_{j \neq i} (I_i - I_j)^3 = \sum_{j \neq i} (i - j)^3 = \sum_{k=1}^{i-1} k^3 - \sum_{k=1}^{N-i} k^3 = \frac{(i-1)^2 i^2}{4} - \frac{(N-i)^2 (N-i+1)^2}{4}$$

, 下一步, 我们将该公式化简就得到了需要的形式, 修正项代入后公式 (c) 变为:

$$k_j = 2\pi \frac{I_j}{L} \left(1 - \frac{2}{\gamma} + \frac{4}{\gamma^2} - \frac{8}{\gamma^3} \right) + \frac{4\pi^3}{3c^3 L^4} \left[\left(N + \frac{1}{2} - j \right)^4 - \left(\frac{1}{2} - j \right)^4 \right] \quad (d)$$

下一步, 我们来推导单位长度能量, 因为 $E = \sum_{i=1}^N k_i^2$, 那么对于公式 (d), 对主导项平方后只保留最低项:

$$k_i^2 \approx (k_i^{(0)})^2 \left(1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} - \frac{16}{\gamma^3} \right) + 2k_i^{(0)} \delta k_i^{(3)}$$

, 求和: 主导项为 $\sum_i (k_i^{(0)})^2 = (\frac{2\pi}{L})^2 \sum_i I_i^2 = (\frac{2\pi}{L})^2 \frac{N(N^2-1)}{12} \approx (\frac{2\pi}{L})^2 \frac{N^3}{12} = \frac{\pi^2}{3} n^3 L$ (因为量子数是对称分布的, 结果为 $2 \sum_{k=1}^{\frac{N-1}{2}} k^2$, 代入平方和公式); 对于修正项, $\sum_i 2k_i^{(0)} \delta k_i^{(3)} = \frac{16\pi^4}{3c^3 L^5} \sum_i I_i [(N + \frac{1}{2} - i)^4 - (\frac{1}{2} - i)^4]$ 对于方括号中的内容, 我们假设 $A_i = (N + \frac{1}{2} - i)^4 - (\frac{1}{2} - i)^4 = (a - i)^4 - (b - i)^4, a = N + \frac{1}{2}, b = \frac{1}{2}$, 那么利用展开我们可以得到:

$$A_i = -4i(a^3 - b^3) + 6i^2(a^2 - b^2) - 4i^3(a - b) + (a^4 - b^4)$$

, 代入量子数, 并由对称求和之后可以得到三项, 这里计算比较繁琐可自行验证, 利用幂级数求和公式得出结果后考虑 N 是大量, 只用抓住其幂最高项, 代入再化简最后我们得到的结果就是:

$$\frac{E}{L} \approx \frac{\pi^2}{3} n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} + \frac{32}{\gamma^3} \left(\frac{\pi^2}{15} - 1 \right) \right]$$

2014 年, Ristivojevic 得出了高精度的强耦合情况基态分布函数:

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi^2 \lambda} + \frac{2}{\pi^3 \lambda^2} + \frac{12 - \pi^2}{3\pi^4 \lambda^3} + \frac{8 - 2\pi^2}{\pi^5 \lambda^4} - \frac{k^2}{Q^2} \left(\frac{1}{\pi^2 \lambda^3} + \frac{1}{\pi^3 \lambda^4} \right) + O(\lambda^{-5})$$

其中 $\lambda = (\gamma + 2)/\pi - 4\pi/(3\gamma^2) + 16\pi/(3\gamma^3)$, 通过该公式可以进一步计算基态单位长度能量与粒子密度, 计算步骤与前文类似。

Problem 12: 这个公式一点细节: [Ristivojevic \(2014\)](#)

对于前文的公式 (7), 进行 1 型基本激发, 即在费米海之外添加一个动量, 在此情况下激发动量与能量分别为:

$$p = 2\pi \hbar Q \int_1^{k/Q} dx \rho(x) \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2 Q^2}{m} \int_1^{k/Q} dx \sigma(x) \quad (a)$$

我们定义新函数： $f(x) = \rho(Qk) + \sigma(x)$, 利用公式 (7)，我们可以得到 $f(x)$ 满足的方程：

$$f(x) - \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(y)}{\lambda^2 + (x-y)^2} dy = \frac{1}{2\pi} + x \quad (b)$$

, 且

$$\rho(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} \quad \sigma(x) = \frac{f(x) - f(-x)}{2} \quad (c)$$

, 到这里我们做出一些解释：

- 1、激发动量与能量的公式：激发一个粒子到 $Q = kx$ 处，那么其激发动量为 $p = \int_Q^{Qx} \hbar k \rho(k) dk$ 标度变换后即 $p = 2\pi \hbar Q \int_1^{k/Q} dx \rho(x)$ ；同理，能量也可这样推得
- 2、 $f(x)$ 的物理意义与公式 (c) 的意义：观察 (b) 形式，右边 $1/(2\pi)$ 表示的是 $f(x)$ 偶函数部分，即代表激发动量密度； x 表示奇函数部分扰动，也就是 $\sigma(x)$ 部分，只有在强耦合情况成立

接下来，面对公式 (b)，利用级数展开，展开基底为勒让德多项式，即 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x)$ ，得益于勒让德多项式的正交归一性，将公式左右在 $[-1, 1]$ 上积分，在 $k \leq M = 1$ 时截断级数，获得需要的解，然后利用公式 (c) (主要贡献来源于 $n = 0, 2$ 两项) 可以计算得出高精度的强耦合情况基态分布函数。

基本激发

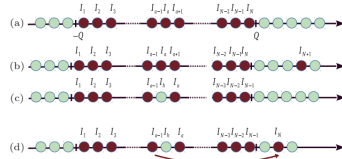


Fig. 3. Schematic diagrams of the ground state and elementary excitations. (a) Quantum numbers for the ground state. The quantum numbers for the ground state are symmetric around the origin. The largest quasimomentum denotes the "Fermi points" $\pm Q$. (b) Configuration of adding a particle near the right Fermi point with the quantum number I_{N+1} , so that the total number of particles is $N+1$. (c) A hole excitation. The hole at I_h is created so that the total number of particles is $N-1$. In panels (b) and (c), the parities of their quantum numbers are changed from half-odd (or integers) to integer (or half-odds) due to the changes of particle numbers. (d) A single particle-hole excitation. A particle at the position k_h is excited out of the pseudo Fermi sea. In this case, the total number of particles is still N , and the parity of quantum numbers does not change.

Figure 3: 基本激发图像

我们假设量子数是赭动量的函数： $I(k_i) = I_j$ ，因此有：

$$\frac{I(k)}{L} = \frac{k}{2\pi} + \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \frac{\theta(k - k_j)}{2\pi}$$

通常我们把满足方程的根分为粒子与空穴，对于空穴准动量 k_h ，其量子数为 $I_h = I(k_h) \in Z + (N + 1)/2$ (全部分布在费米点 Q 外，即 fig:3 中 (a) 情况)。

Problem 13: 基本激发的物理图像

粒子占据原本未占据的 Bethe 根，空穴未占据原本占据的根，激发对应移除或添加一个粒子形成空穴，也可以一个粒子从费米海内激发至海外留下一个空穴，形成粒子-空穴对；添加粒子或者移除粒子，会改变总粒子数，粒子-空穴激发则不会。在激发之后，会引起费米点的改变，以及赝动量的重新排列，因此会引起总动量与能量的改变。

对于基态，没有低于准费米动量的空穴，空穴的量子数在基态取值区间以外。热力学极限情况下，基态粒子密度与能量可以视为间断点的函数，激发可视为在费米点内的量子态被空穴替代，激发至区间外。对于单粒子激发，我们将赝动量分为两部分， $\rho_t(k) = \bar{\rho}(k) + \frac{1}{L}\delta(k - k_e)$ ，分别为低于费米点的密度与激发项贡献。热力学极限下， $\bar{\rho}(k)$ 满足积分方程（将假设代入公式（7））：

$$\bar{\rho}(k) = \frac{1}{2\pi} + \int_{-Q}^Q a(k - k')\bar{\rho}(k')dk' + \frac{1}{L}a(k - k_e) \quad (11)$$

假设满足方程（7）的分布函数为 $\rho_0(k)$ ，那么： $\rho_0(k) = \frac{1}{2\pi} + \int_{-Q}^Q a(k - k')\rho_0(k')dk' + \frac{1}{L}a(k - k_e)$ （基态动量 $|k| < Q$ ）。由于粒子的激发，会导致剩下 $N - 1$ 个赝动量重新排列，假设激发态与参考的赝动量分布函数差别为 $\Delta\rho(k) = \bar{\rho}(k) - \rho_0(k)$ ，我们可以得到：

$$\Delta\rho(k) = \frac{1}{L}a(k - k_e) + \int_{-Q}^Q a(k - k')\Delta\rho(k')dk'$$

同时，粒子的激发也会使费米点发生相应的变化，假设基态的费米点为 Q_G ，则 $\Delta Q = Q - Q_G$ ， Q_G 对应的粒子数为 $N = Ln_G(Q_G)$ ，而 Q 对应的激发态粒子数为 $N = Ln_G(Q) + L \int_{-Q}^Q dk \Delta\rho(k) + 1$ ，在热力学极限下，费米点的变化很小，对比基态与激发态的粒子数：

$$\Delta Q n'_G(Q_G) = - \left[\int_{-Q}^Q \Delta\rho(k)dk + \frac{1}{L} \right]$$

Problem 14: 公式推导

对比基态与激发态粒子数，由于 ΔQ 是小量，因此可进行泰勒展开，也就是：

$$\begin{aligned} Ln_G(Q_G) &= Ln_G(Q) + L \int_{-Q}^Q \Delta\rho(k)dk + 1 \\ \iff Ln_G(Q_G) - Ln_G(Q) &\approx -Ln'_G(Q_G)\Delta Q = L \int_{-Q}^Q \Delta\rho(k)dk + 1 \\ \implies \Delta Q n'_G(Q_G) &= - \left[\int_{-Q}^Q \Delta\rho(k)dk + \frac{1}{L} \right] \end{aligned}$$

相应的，由于间断点改变而引起的激发态的能量为：

$$\Delta E(k_c) = L \int_{-Q}^Q \Delta\rho(k)(k^2 - \mu)dk + (k_e^2 - \mu) \quad (12)$$

其中 μ 是化学势：

$$\mu = \frac{dN}{dE} = \frac{e'_G(Q_G)}{n'_G(Q_G)}$$

可以证明重整化能量可以表示为：

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu + \int_{-Q}^Q a(k - k')\varepsilon(k')$$

激发态的总数目为：

$$P = n\pi - 2\pi \int_0^{k_{e,h}} \rho_0(k)dk$$

在低能激发下， $k_e - Q$ 是一个非常小的量，因此低能情形可以被线性色散关系描述：

$$\Delta E = \varepsilon'_G(Q)|k \pm Q| = v_s P \quad v_s = \frac{\varepsilon'_G(Q)}{2\pi\rho_G(Q)}$$

，对于强耦合情况，可以通过基态能量来计算声速：

$$v_s = \sqrt{\frac{L}{mn} \frac{\partial^2 E}{\partial L^2}} \approx 2\pi n [1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} + \frac{16}{\gamma^3} (\frac{\pi^2}{3} - 2)]$$

Problem 15: 能量公式的证明

公式 (12) 的推导：基态的能量为： $E_G = \int_{-Q}^Q \rho_0(k)k^2 dk$ ，而激发态的能量为： $E = L \int_{-Q-\Delta Q}^{Q+\Delta Q} \rho(k)k^2 dk + k_e^2$ ，那么相差的能量为：

$$\begin{aligned} \Delta E &= L \int_{-Q-\Delta Q}^{Q+\Delta Q} \rho(k)k^2 dk - L \int_{-Q}^Q \rho_0(k)k^2 dk + k_e^2 \\ &\approx L e'(Q) \Delta Q + L \int_{-Q}^Q \Delta \rho(k)k^2 dk + k_e^2 \\ &= L \int_{-Q}^Q \Delta \rho(k)(k^2 - \mu) dk + k_e^2 - \mu \end{aligned}$$

一步步解释，第一步是激发态与基态能量之差，由于费米点改变因此积分限要改变，同时因为 ΔQ 是小量，在边界可以近似为 $L e'(Q) \Delta Q$ （只有一边），而化学势定义为 $\mu = \frac{dE}{dN} = \frac{e'_G(Q_G)}{n'_G(Q_G)} = \frac{e'_G(Q_G)}{\rho_0(Q)}$ ，注意 $\frac{dN}{dQ} = L \rho_0(Q)$ （可以由变限积分求导公式得出），同时由于系统多加了一个粒子，费米点内创建一个空穴，因此存在粒子数约束：

$$\begin{aligned} \Delta N &= L \int_{-Q-\Delta Q}^{Q+\Delta Q} \rho(k) dk - L \int_{-Q}^Q \rho_0(k) dk \\ &= L \rho_0(Q) \Delta Q + L \int_{-Q}^Q \Delta \rho(k) dk = -1 \end{aligned}$$

因此，代入所有公式，我们可以得到：

$$L \Delta Q e'(Q) + L \mu \int_{-Q}^Q \Delta \rho(k) dk = -\mu$$

第二行公式左右分别加减 μ ，代入公式，即得到了文献中的结果。

在继续证明之前，先说明一个引理：对于任何两个函数 $f(k)$ 和 $g(k)$ ，若它们分别满足：

$$\begin{aligned} f(x) &= f_0(k) + \int_{-Q}^Q a(k-k')f(k')dk', |k| < Q, \\ g(k) &= g_0(k) + \int_{-Q}^Q a(k-k')g(k')dk', |k| < Q \end{aligned}$$

那么它们满足以下关系式：

$$\int_{-Q}^Q f(k)g_0(k)dk = \int_{-Q}^Q g(k)f_0(k)dk$$

现在证明重整化能量其实是一个电子粒子的激发能量：将 $\Delta\rho$ 和 ε 分别视为 $f(x), g(x)$ 表达式代入以上公式：

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_e) &= k_e^2 - \mu + \int_{-Q}^Q a(k_e - k')\varepsilon(k') \\ &= k_e^2 - \mu + L \int_{-Q}^Q (k_e^2 - \mu)\Delta\rho(k') \\ &= \Delta E(k_e) \end{aligned}$$

当然，空穴也有类似的公式，亦即： $\Delta E(k_h) = -\varepsilon(k_h)$ 。激发态的总动量为：

$$P = n\pi - 2\pi \int_0^{k_{e,h}} \rho_0(k)dk$$

，这里用到公式 $P = \int_0^Q 2\pi\rho_0(k)dk - \int_0^{k_{e,h}} 2\pi\rho_0(k)dk = n\pi - \int_0^{k_{e,h}} 2\pi\rho_0(k)dk$ 分别为基态能量与粒子空穴引起的动量变化项。

最后是低能激发部分，由于 $k_e - Q$ 是小量，因此：

$$\Delta E = \varepsilon(Q') - \varepsilon(Q) \approx \varepsilon'(Q)|k \pm Q| = v_s|P|$$

，其中

$$v_s = \frac{d\varepsilon}{dp}|_{k=Q} = \frac{d\varepsilon/dk}{dp/dk}|_{k=Q} = \frac{\varepsilon'_G(Q)}{dp/dk|_{k=Q}} = \frac{\varepsilon'_G(Q)}{2\pi\rho_G(Q)}$$

是费米速度，这部分推导可以同时参考 problem 8，以下给出必要证明：根据公式 (6)，以及 $p = \frac{2\pi}{L}I$ 可得：

$$p(k) = k + \int_{-Q}^Q \theta(k-k')\rho_0(k')dk'$$

，因此：

$$\frac{dp}{dk}|_{k=Q} = 1 + 2\pi \int_{-Q}^Q a(k-k')\rho_0(k')dk' = 2\pi\rho_G(Q)$$

，同时声速的定义还有公式： $v_s = \frac{1}{\sqrt{\rho\kappa}}$ ，其中 $\rho = mn = m\frac{N}{L}$ ， κ 为后文提到的压缩率，将二者代入可得：

$$v_s = \frac{1}{\sqrt{\rho\kappa}} = \sqrt{\frac{L}{mn} \frac{\partial^2 E}{\partial L^2}}$$

，将强耦合情况的公式（10）代入计算（最开始的简化条件 $2m = 1$ ），可以得到：

$$v_s^2 = \pi^2 [4n^2 - \frac{32}{c}n^3 + \frac{160}{c^2}n^4 + \frac{640}{c^3}(\frac{\pi^2}{15} - 1)n^5]$$

，开根即得到了文献中的结果。

超 Tonks-Girardeau 气体态相

超 TG 气体态描述的是吸引玻色气体的一种气体态。由于排斥性 TG 气体继承的高动能，粒子如费米子般的硬核行为阻止了相互作用从排斥转变为吸引后超 TG 态的坍塌。能量在 $c \rightarrow \pm\infty$ 时变为连续的，而通过 BAE，我们可以得出该情况下压缩率为：

$$\frac{1}{k} = 2\pi^2 n - \frac{16\pi^2}{c}n^2 + \frac{80\pi^2}{c^2}n^3 + \left(\frac{64}{3}\pi^2 - 320\right)\frac{n^4}{c^3}$$

不过对于弱排斥相互作用的 Lieb-Liniger 气体 ($0 < c \ll 1$)，压缩率为：

$$\frac{1}{k} = 2c - \frac{1}{\pi\sqrt{n}}c^{3/2}$$

相应的，类气相（超 TG 气体）弱吸引相互作用极限下 ($-1 \ll c < 0$)，能量为：

$$E = \frac{2\pi^2}{3}n^2 - |c|n^2$$

因此压缩率为：

$$\frac{1}{k} = 4\pi^2 n - 2|c|$$

这些不同的压缩率揭示了准动量的根模式重要特性。

Problem 16: 以上公式的推导

首先明确的问题是，什么是压缩率？文中计算压缩率的公式是 $\frac{1}{\kappa} = n^2 \frac{\partial^2 e}{\partial n^2}$ ，其中 $e = E/L$ 为能量密度， $n = N/L$ 为粒子密度。推导过程如下：

压缩性定义为： $\kappa = -\frac{1}{V}(\frac{\partial V}{\partial P})_{T,N}$ ，在一维系统中， V 由长度 L 代替，因此对于压强 P ，其为：

$$P = -(\frac{\partial E}{\partial L})_{N,T} = -\frac{\partial}{\partial L}(L \cdot e(n)) = -e(n) + n \frac{\partial e}{\partial n}$$

，而压强对长度求导为：

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \frac{\partial}{\partial L}(-e(n) + n \frac{\partial e}{\partial n}) = -\frac{n}{L} \frac{\partial}{\partial n}(-e(n) + n \frac{\partial e}{\partial n}) = -\frac{n^2}{L} \frac{\partial^2 e}{\partial n^2}$$

，将以上公式代入压缩率定义：

$$\kappa = -\frac{1}{L}(\frac{\partial L}{\partial P})_{T,N} = -\frac{1}{L}(-\frac{L}{n^2} \cdot \frac{1}{\frac{\partial^2 e}{\partial n^2}})$$

，亦即： $\frac{1}{\kappa} = n^2 \frac{\partial^2 e}{\partial n^2}$ ，在文中的计算中，省略了前面的 n^2 项，因为热力学极限下其为常量。而文中的公式分别为公式 (9),(10) 代入计算得到的结果，以强耦合情况为例：

$$\begin{aligned} e = \frac{E}{L} &\approx \frac{\pi^2}{3} n^3 \left[1 - \frac{4}{\gamma} + \frac{12}{\gamma^2} + \frac{32}{\gamma^3} \left(\frac{\pi^2}{15} - 1 \right) \right] \\ &= \frac{\pi^2}{3} \left[n^3 - \frac{4}{c} n^4 + \frac{12}{c^2} n^5 + \frac{32}{c^3} \left(\frac{\pi^2}{15} - 1 \right) n^6 \right] \end{aligned}$$

，代入计算：

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{\partial^2 e}{\partial n^2} = 2\pi^2 n - \frac{16\pi^2}{c} n^2 + \frac{80\pi^2}{c^2} n^3 + \left(\frac{64}{3}\pi^2 - 320 \right) \frac{n^4}{c^3}$$

，其他类似。

Luttinger 参数与关联函数

一维可积系统导致其基态关联函数在长距离或长时间渐进行为上呈现幂律特性，其有效哈密顿量可近似为共形哈密顿量，该哈密顿量用中心荷 $C = 1$ 的底层 Virasoro 代数的生成元来表示。低能激发在长波极限下呈现声子色散关系 $\Delta E(p) = v_s p$ 。在该极限下，所有粒子都参与激发并形成玻色子的集体运动，这被称为 Luttinger 液体。Lieb-Liniger 场论哈密顿量可以在长波极限下重写为一个有效哈密顿量，本质上描述了 Lieb-Liniger 玻色气体的低能物理：

$$H = \int dx \left[\frac{\pi v_s K}{2} \Pi^2 + \frac{v_s}{2\pi K} (\partial_x \phi)^2 \right]$$

其中，与相位共轭的正则动量满足标准的玻色场对易关系。 $\partial_x \phi$ 正比于密度涨落， v_s/K 定义了密度变化的能量标度，在此方法中，空间中的密度变化被视为简谐波的叠加。例如单粒子关联函数：

$$\langle \psi^\dagger(x) \psi(0) \rangle \sim 1/x^{1/2K}$$

唯一的由 Luttinger 参数 K 定义，其定义为声速与刚度的比值：

$$K = \frac{v_s}{v_N} = \frac{\pi}{\sqrt{3e_0(\gamma) - 2\gamma \frac{de_0(\gamma)}{d\gamma} + \frac{1}{2}\gamma^2 \frac{d^2 e_0(\gamma)}{d\gamma^2}}}$$

其中 $v_N = \frac{L}{\pi\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial N^2}$ 为刚度， $v_s = \sqrt{\frac{L^2}{mN} \frac{\partial^2 E}{\partial L^2}}$ 为声速。利用弱相互作用区域的基态能渐近展开结果和强相互作用区域的结果，我们可以找到 Luttinger 参数的渐进形式。利用公式 (9) 与公式 (10) 的结果进行基态和强耦合情况的渐近展开，可以得到 Luttinger 参数在两种极限下的形式分别为：

$$\begin{aligned} K|_{\gamma \ll 1} &= \pi \left(\gamma - \frac{1}{2\pi} \gamma^{3/2} \right)^{-1/2} \\ K|_{\gamma \gg 1} &= 1 + \frac{4}{\gamma} + \frac{4}{\gamma^2} - \frac{16\pi^2}{3\gamma^3} \end{aligned}$$

通常，一维临界系统的关联函数的长距离或长时间渐进行为可以通过共形场论计算，初基场的关联函数在距离上呈现普适的幂律衰减：

$$\langle \psi^\dagger(\tau, y) \psi(0, 0) \rangle = \frac{\exp(2i\Delta k_F y)}{(v\tau + iy)^{2\Delta^+} (v\tau - iy)^{2\Delta^-}}$$

Problem 17: Luttinger 参数与关联函数

这部分内容比较多，主要参考内容为Sirker (2013), 以及Fabrizio (2022)Chapter 6, 具体的一些推导在 Appendix A 部分。Luttinger 参数是决定量子涨落强度，激发谱和关联函数幂律行为的关键参数，其小于 1 系统偏向于费米特性，大于 1 偏向于玻色特性，一维量子气体的低能激发是集体密度波，具有色散关系，关联函数呈现幂律行为；关联函数可以理解为在 0 位置的一个原子观察位置在 y 出现另一个原子的概率，它呈现幂律衰减属性。关联函数的详细介绍与推导见 Appendix B

Section 4 : Yang-Yang thermodynamics and quantum criticality

1969 年，杨振宁与杨振平提出了一种用巨正则系综描述 Lieb-Liniger 模型在有限温度下的热力学行为的方法。在该方法下，通常将热力学 Bethe Ansatz 方程（TBA 方程）替换为无维度的化学势 $\tilde{\mu} = \mu/c^2$ ，以及无维度温度 $\tilde{T} = T/c^2$ ，其中 c 为相互作用强度。将简并温度作为能量单位是方便的， $T_d = \hbar^2 n^2/2m$ ，这是讨论临界现象的重要部分。

Yang-Yang 巨正则系综

对于基态，一组量子数可以确定最低能量；但是对于有限温度情况，任何热平衡态包括许多微观态，这些本征态对应不同的量子数，在热力学极限下，量子数是赝动量的单调函数，我们定义 $dI(k)/(Ldk) = \rho(k) + \rho_h(k)$ ，其中 ρ_h 是空穴的密度，我们代入公式 (6)，可以得出：

$$\rho(k) + \rho_h(k) = \frac{1}{2\pi} + \int_{-\infty}^{\infty} a(k-k')\rho(k')dk' \quad (13)$$

在一个间隔 dk 内，总数为 $L(\rho(k) + \rho_h(k))dk$ ，其中包括粒子数为 $L\rho(k)dk$ ，空穴数为 $L\rho_h(k)$ ，那么总微观态的数目为：

$$dW = \frac{[L(\rho(k) + \rho_h(k))dk]!}{[L\rho(k)dk]![L\rho_h(k)]!}$$

热力学极限下， $L(\rho(k) + \rho_h(k))dk \gg 1$ ，且 $dk \rightarrow 0$ ，因此利用统计力学中的方法，可以求出熵为：

$$dS = \ln W \approx L\{\rho[1 + \eta] + \rho_h[1 + \eta^{-1}]\}dk$$

其中， $\eta(k) = \rho_h(k)/\rho(k)$ ，系统熵为 $S = \int dS$ 。在没有粒子或没有空穴的区域，无序度为零，因此基态熵为零。在这个体系中，吉布斯自由能为： $\Omega = E - TS - \mu N$ ，其中粒子数为 $N = L \int \rho(k)dk$

平衡态下，真实的物理态要求吉布斯自由能最小，假设虚位移 $\delta\rho, \delta\rho_h$ ，我们取吉布斯自由能变分：

$$\delta\Omega = \delta E - T\delta S - \mu\delta N = 0$$

注意，这里 $\delta\rho, \delta\rho_h$ 并不是独立的，在最小化条件下 BAE 方程导致的重整化能量为 (TBA 方程)：

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu + \int_{-\infty}^{\infty} a(k-k')\varepsilon_-(k')dk' \quad (14)$$

其定义为： $\varepsilon(k) = T \ln \eta(k)$ ， $\varepsilon_- = -T \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}]$

利用该方程，我们可以得到巨势： $\Omega = \frac{L}{2\pi} \int \varepsilon_-(k) dk$ ，因此压强表示为：

$$p = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial L} \right)_{\mu, c, T} = - \frac{1}{2\pi} \int \varepsilon_-(k) dk$$

Problem 18: 重整化能量与巨势推导

参考C.N.Yang (1969), 首先写出吉布斯自由能各项：能量与粒子数分别为：

$$N = L \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) dk \quad E = L \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) k^2 dk$$

，而熵为：

$$\begin{aligned} dS &= \ln W = \ln \frac{[L(\rho(k) + \rho_h(k)) dk]!}{[L\rho(k) dk]! [L\rho_h(k) dk]!} \\ &\approx L \int_{-\infty}^{\infty} [(\rho(k) + \rho_h(k)) \ln(\rho(k) + \rho_h(k)) - \rho(k) \ln \rho(k) - \rho_h(k) \ln \rho_h(k)] dk \\ &= L \int_{-\infty}^{\infty} [\rho \ln[1 + \eta] + \rho_h \ln[1 + \eta^{-1}]] dk \end{aligned}$$

其中利用了 Stirling 公式： $\ln n! \approx n \ln n - n, (n \rightarrow \infty)$ ，且 $\eta = \rho_k/\rho$ ，除以上外还存在约束条件：

$$\rho(k) + \rho_h(k) = \frac{1}{2\pi} + \int_{-\infty}^{\infty} a(k - k') \rho(k') dk' \quad (a)$$

，其中 $a(x) = \frac{1}{\pi} \frac{c}{c^2 + x^2}$ ，接下来代入所有公式进变分公式：

$$\delta \Omega = \delta E - T \delta S - \mu \delta N = 0$$

，计算熵项变分（其中 $f = \rho + \rho_h$ ）：

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \{ L \int [f \ln f - \rho \ln \rho - \rho_h \ln \rho_h] dk \} \\ &= L \int [\delta f \cdot \ln f + \delta f] dk - L \int [\delta \rho \cdot \ln \rho + \delta \rho] dk - L \int [\delta \rho_h \cdot \ln \rho_h + \delta \rho_h] dk \\ &= L \int [\delta \rho \ln \left(\frac{f}{\rho} \right) + \delta \rho_h \ln \left(\frac{f}{\rho_h} \right)] dk \end{aligned}$$

从而：

$$\begin{aligned} \delta \Omega &= L \int \delta \rho k^2 dk - TL \int [\delta \rho \ln \left(\frac{f}{\rho} \right) + \delta \rho_h \ln \left(\frac{f}{\rho_h} \right)] dk - \mu L \int \delta \rho dk \\ &= L \int \delta \rho [k^2 - \mu - T \ln \left(\frac{f}{\rho} \right)] dk - TL \int \delta \rho_h \ln \left(\frac{f}{\rho_h} \right) dk \\ &= L \int \delta \rho [k^2 - \mu - T \ln(1 + \eta)] dk - TL \int \delta \rho_h \ln(1 + \eta^{-1}) dk \end{aligned}$$

将约束条件 (a) 也进行变分：

$$\delta f = \delta \rho + \delta \rho_h = \frac{c}{\pi} \int \frac{\delta \rho(k')}{c^2 + (k - k')^2} dk'$$

, 代入以上表达式, 从而:

$$\begin{aligned}
\delta\Omega &= L \int \delta\rho[k^2 - \mu - T \ln(1 + \eta)]dk - TL \int [-\delta\rho + \frac{c}{\pi} \int \frac{\delta\rho(k')}{c^2 + (k - k')^2} dk'] \ln(1 + \eta^{-1}) dk \\
&= L \int \delta\rho[k^2 - \mu - T \ln(1 + \eta) + T \ln(1 + \eta^{-1})]dk + -TL \frac{c}{\pi} \int \int \frac{\delta\rho(k')}{c^2 + (k - k')^2} \ln(1 + \eta^{-1}) dk' dk \\
&= L \int \delta\rho \cdot A dk
\end{aligned}$$

注意该双重积分是对称的, 利用定义 $\varepsilon = T \ln \eta, \varepsilon_- = -T \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}] = -T \ln[1 + \eta^{-1}]$, 对重整化能量进行下一步化简:

$$\begin{aligned}
A = 0 &= k^2 - \mu - T \ln(1 + \eta) + T \ln(1 + \eta^{-1}) - T \frac{c}{\pi} \int \frac{1}{c^2 + (k' - k)^2} \ln(1 + \eta^{-1}) dk' \\
&= k^2 - \mu - \varepsilon - \int a(k' - k) \varepsilon_- dk'
\end{aligned}$$

因此得证:

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu + \int_{-\infty}^{\infty} a(k - k') \varepsilon_-(k') dk'$$

利用该方程可以进一步化简吉布斯自由能形式, 将以上各部分代入吉布斯自由能方程, 利用替换关系替换再代入 TBA 方程积分, 由于积分中存在对称项消去即得到最终结果。

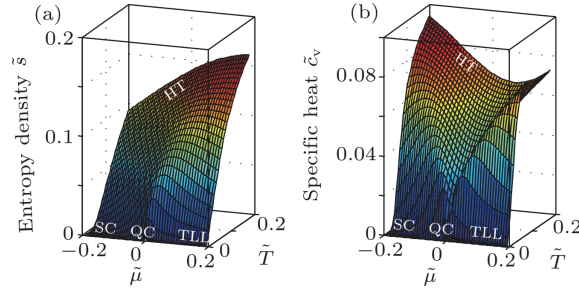


Fig. 7. Quantum critical regimes for the Lieb-Liniger model. (a), (b) Dimensionless entropy and specific heat in the \tilde{T} - $\tilde{\mu}$ plane, respectively. For $\tilde{T} \gg 1$, it is the HT regime. The TLL with the dynamical exponent $z = 2$ and correlation length exponent $\nu = 1$ lies in the region $\tilde{T} \ll 1$ and $\mu > \mu_c$. For $\tilde{T} \gg |\mu - \mu_c|$, the QC regime with $z = 2, d = 1$, and $\nu = 1/2$ fans out near the quantum phase transition point $\tilde{\mu}_c = 0$. It is obvious that the entropy and the specific heat have singularity properties near the critical point $\mu_c = 0$.

Figure 4: Lieb-Liniger 模型的量子临界区

通过热力学关系我们可以进一步计算熵, 可压性, 比热等一些热力学量, 同时可以绘出相图。在巨正则系综中, 零温下存在量子相变点 $\mu_c = 0$, 通用的热力学仅适用于低于简并温度 $T < T_d = \hbar^2 n^2 / 2m$ 下情况; 高于该温度 (HT) ($T \gg T_d$) 系统行为更倾向于经典的玻尔兹曼气体, 对于化学势 $\mu < \mu_c = 0$ 且低温情况, 气体变得去相干, 此相为半经典相 (SC); 而 $\mu > \mu_c$ 且温度 $T < |\mu - \mu_c|$ 情况, 展现出 Tomonaga-Luttinger 液体相。量子临界点位于 SC 相与 TLL 相之间。

Yang-Yang 方程与量子统计

在低于简并温度存在三个不同相：半经典，量子临界，TTL 临界相；而在高温下，并不存在普适的行为；温度趋于无限时，气体趋于玻尔兹曼气体。所以 Yang-Yang 方程对应不同的量子统计。例如当耦合强度 $\gamma \rightarrow 0$ ，系统行为趋于自由玻色子；而强耦合情况下，行为如同自由费米子；高温下，趋于玻尔兹曼气体……

当耦合强度趋于零时，积分核 $a(x) = \frac{1}{\pi} \frac{c}{c^2+x^2} \rightarrow \delta(x)$ （可验证 $c \rightarrow 0$ 时积分核满足归一性），因此重整化能量：

$$\lim_{c \rightarrow 0} \varepsilon(k) = T \ln[e^{(k^2-\mu)/T} - 1]$$

单位长度势能为 $\lim_{c \rightarrow 0} \Omega/L = \int_0^\infty 2\sqrt{\varepsilon}/[e^{(k^2-\mu)/T} - 1]$ ，因此分布函数服从玻色爱因斯坦统计：

$$\lim_{c \rightarrow 0} g(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} - 1}$$

在而对于 $\gamma \rightarrow \infty$ ， $\lim_{c \rightarrow \infty} \varepsilon(k) = k^2 - \mu$ ，该极限下，BAE 变为：

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi(1 + \rho_h(k)/\rho(k))}$$

即对应费米狄拉克统计，相应的单位长度势能为 $\lim_{c \rightarrow \infty} \Omega/L = \int_0^\infty 2\sqrt{\varepsilon}/[e^{(k^2-\mu)/T} + 1]$ ，因此分布函数服从：

$$\lim_{c \rightarrow \infty} g(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1}$$

在高温情况下，Yang-Yang 方程可以给出麦克斯韦-玻尔兹曼分布，这样的统计粒子是可分辨的。在弱耦合极限与高温极限下，考虑位力展开，则：

$$e^{-\varepsilon(k)/T} = \mathcal{Z} e^{-k^2/T} e^{\int_{-\infty}^\infty dq a(k-q) \ln(1 + \mathcal{Z} e^{-q^2/T})}$$

这里 $\mathcal{Z} = e^{\mu/T}$ 是逸度，经过计算我们发现，计算到第二位力系数的压强为：

$$p = p_0 + \frac{T^{3/2}}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{Z}^2 p_2$$

其中 $p_2 = -\frac{1}{2} + \int_{-\infty}^\infty dq' a(2q') e^{-2q'^2/T}$ 表示两体作用影响； $p_0 = -\frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk \ln(1 - \mathcal{Z} e^{-k^2/T})$ 为自由费米子压强。其结果在 $T \rightarrow \infty$ 时给出玻尔兹曼统计

事实上，强耦合极限情况下 $\gamma \gg 1$ ，系统可视为含有分数统计的理想气体；弱耦合极限下，其基态可看成准玻色爱因斯坦凝聚。

Problem 19: 以上内容的计算

首先，对于 $\gamma \rightarrow 0$ 情况：由于 TBA 方程变为：

$$\varepsilon(k) = k^2 - \mu + \varepsilon_-(k) \iff \varepsilon = k^2 - \mu - T \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}]$$

，两边指数化化简可得到结果为：

$$e^{\varepsilon(k)/T} = e^{(k^2-\mu)/T} - 1 \iff \varepsilon(k) = T \ln[e^{(k^2-\mu)/T} - 1]$$

同时可以得到 $\varepsilon_- = T \ln [1 - e^{-(k^2 - \mu)/T}]$, 统计概率因子为: $P(\varepsilon) \propto e^{-\varepsilon/T}$, 所以代入结果:

$$g(\varepsilon) = e^{-\varepsilon/T} = e^{-\ln[e^{(k^2 - \mu)/T} - 1]} = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/T} - 1}$$

对于强相互作用情况, 其相互作用与费米子泡利互不相容原理一致, 满足费米-狄拉克统计。
对于高温与弱耦合极限, 我们来推导位力展开形式方程, 因为弱耦合高温情况下有 $\ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}] \approx e^{-\varepsilon(k)/T} \approx e^{(\mu - k^2)/T} = \mathcal{Z}e^{-k^2/T}$

$$\begin{aligned}\varepsilon(k) &= k^2 - \mu - T \int_{-\infty}^{\infty} dq a(k - q) \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}] \\ &\approx k^2 - \mu - T \int_{-\infty}^{\infty} dq a(k - q) \cdot \mathcal{Z}e^{-q^2/T}\end{aligned}$$

两边除以 T , 并指数化 \Longleftrightarrow

$$e^{-\varepsilon/T} = \mathcal{Z}e^{-k^2/T} \exp\left\{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dq a(k - q) \cdot \mathcal{Z}e^{-q^2/T}\right)\right\}$$

而压强的推导利用了第二位力系数, 考虑展开 $\ln(1 + x) \approx x - \frac{x^2}{2} + O(x^2)$, 将左右两边同时进行展开并化简

Luttinger 液体与量子临界

状态方程

对 TLL 相, 对 TBA 方程作索末菲展开, 通过迭代可以得出压强主要项为:

$$p = p_0 + \frac{\pi^2 T^2}{3} \frac{\rho_0(Q)}{\varepsilon'(Q)} = p_0 + \frac{\pi T^2}{6\nu_s}$$

因此单位长度的自由能为:

$$F(T)/L = \mu n - p \approx E_0 - \frac{\pi C (k_B T)^2}{6\hbar\nu_s}$$

在 $C = 1, k_B = 1$ 的情况下, TLL 相的比热容为: $C_v = \frac{\pi T}{3n\nu_s}$

Problem 20: 索末菲展开与计算

首先对于压强计算公式, 在费米点附近利用线性色散关系有 $\varepsilon = v_s(k - Q)$, 而零温压强为 p_0 , 压强公式为 $p = \frac{T}{2\pi} \int \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}] dk$, 计算积分为:

$$\begin{aligned}p &= p_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_-(q) dq \\ &= p_0 + 2 \int_0^{\infty} \varepsilon_-(Q + q) dq + 2 \int_0^{\infty} \varepsilon_-(-Q - q) dq \\ &= p_0 + 4 \int_0^{\infty} \varepsilon_-(Q + q) dq\end{aligned}$$

这里假设 ε_- 是对称的, 接下来利用线性色散假设: $q + Q \approx v_s q$, 并换元 $x = v_s q/T$, 所以原式

变为：

$$\begin{aligned}
p &= p_0 + 4 \int_0^\infty \varepsilon_-(Q+q) dq \\
&= p_0 + 4 \int_0^\infty \varepsilon_-(v_s q) dq \\
&= p_0 + \frac{2T}{\pi} \int_0^\infty \ln[1 + e^{-v_s q/T}] dq \\
&= p_0 + \frac{2T^2}{\pi} \int_0^\infty \ln[1 + e^{-x}] \frac{dx}{v_s} \\
&= p_0 + \frac{\pi T^2}{6v_s}
\end{aligned}$$

将该结果代入自由能中，将自然单位制还原即得到：

$$F(T)/L = \mu n - p \approx E_0 - \frac{\pi C (k_B T)^2}{6 \hbar v_s}$$

不过在温度 $T > T^* \sim |\mu - \mu_c|$ ，其激发给出非线性色散， $\Delta E \sim p^2$ 。

对于强耦合与低温情况， $\gamma \gg 1$ $\tilde{T} \ll 1$ ，压强为：

$$p = -\frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi}} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{A/T}) \left[1 + \frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi}c^3} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{A/T}) \right]$$

这里 $A = \mu + 2p/c + (T^{5/2}/2\sqrt{\pi}c^3) Li_{\frac{3}{2}}(-e^{A/T})$ ，多项式 $Li_n(x) = \sum_{k=1}^\infty \frac{x^k}{k^n}$

这样我们可以利用热力学关系计算出粒子密度，压缩率，比热容等……

Problem 21: 该部分参考Guan (2011)

从 TBA 方程出发，符号采用引文中一致：

$$\varepsilon(k) = \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} \ln[1 + e^{-\varepsilon(q)/T}]$$

由于是强耦合且低温情况， c 为大量，可以将积分核进行展开：

$$\begin{aligned}
\frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} &= \frac{2c}{c^2 + k^2 - 2kq + q^2} = \frac{2c}{(c^2 + k^2)(1 - \frac{2kq - q^2}{c^2 + k^2})} \\
&\approx \frac{2c}{c^2 + k^2} (1 + \frac{2kq - q^2}{c^2 + k^2} + \dots)
\end{aligned}$$

而我们注意到积分函数势偶函数，所以积分核展开的奇数幂在积分后为零。而同时我们有 $p = \frac{T}{2\pi} \int \ln[1 + e^{-\varepsilon(k)/T}] dk$ ，可以代入简化方程。所以我们将 TBA 方程改写为：

$$\begin{aligned}
\varepsilon(k) &= \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{2c}{c^2 + (k-q)^2} \ln[1 + e^{-\varepsilon(q)/T}] \\
&\approx \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{2c}{c^2 + k^2} (1 + \frac{2kq - q^2}{c^2 + k^2}) \ln[1 + e^{-\varepsilon(q)/T}] \\
&\approx \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{2cp}{c^2 + k^2} + \frac{cT}{\pi(c^2 + k^2)^2} \int_{-\infty}^\infty q^2 \ln[1 + e^{-\varepsilon(q)/T}] dq
\end{aligned}$$

到这里我们将 $\varepsilon^0(k) - \mu - \frac{2cp}{c^2+k^2}$ 视为主要项，并进行自洽迭代，且 $\frac{2cp}{c^2+k^2} \approx \frac{2p}{c}$ ，代入压强公式迭代，可以得到修正后的化学势为： $A_0 = \mu + \frac{2r}{c} - \frac{4\mu^{5/2}}{15\pi c^3}$ 。而对于能量公式，我们引入多对数函数 $Li_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k^n}$ 进行展开，并且注意到 $\ln(1+e^a) = -Li_1(-e^a)$ ，现在重点处理高阶项：

$$\frac{cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} q^2 \ln[1+e^{-\varepsilon(q)/T}] \approx \frac{cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} q^2 \ln[1+e^{-(\varepsilon^0-\mu)/T}]$$

换元，令 $\varepsilon^0 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ ，则积分变为：

$$\frac{cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} q^2 \ln[1+e^{-\frac{\hbar^2 q^2}{2mT}+\mu/T}] = -\frac{2cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \int_0^{\infty} q^2 Li_1(-e^{-\frac{\hbar^2 q^2}{2mT}+\mu/T})$$

接下来处理积分项，为了便于处理，我们选取系数为 a, b :

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} q^2 Li_1(-e^{a-bq^2}) &= \int_0^{\infty} [\sum_{k=1}^{\infty} q^2 \frac{(-1)^k e^{ak-bkq^2}}{k}] dq \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{ak}}{k} (\int_0^{\infty} q^2 e^{-bkq^2} dq) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{ak}}{k} (\frac{\sqrt{\pi}}{4b^{3/2}k^{3/2}}) \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{4b^{3/2}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{ak}}{k^{5/2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{4b^{3/2}} Li_{5/2}(-e^a) \end{aligned}$$

将该结果代入，并且将化学势换成修正后的结果，可以得到修正项为：

$$\begin{aligned} &-\frac{2cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \int_0^{\infty} q^2 Li_1(-e^{-\frac{\hbar^2 q^2}{2mT}+\mu/T}) \\ &= -\frac{2cT}{\pi(c^2+k^2)^2} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{4(\frac{\hbar^2 q^2}{2mT})^{3/2}} Li_{5/2}(e^{-A_0/T}) \\ &\approx -\frac{1}{2\sqrt{\pi}c^3} \frac{T^{5/2}}{(\frac{\hbar^2}{2m})^{3/2}} Li_{5/2}(-e^{A_0/T}) \end{aligned}$$

总能量为：

$$\varepsilon = \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{2cp}{c^2+k^2} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}c^3} \frac{T^{5/2}}{(\frac{\hbar^2}{2m})^{3/2}} Li_{5/2}(-e^{A_0/T})$$

已经有了能量公式，那么计算压强和其他热力学量就好办了，现在我们计算压强，对于已有的重整化能量，我们选取主要项为 $\varepsilon(k) \approx \varepsilon^0 - \mu - \mu - \frac{2cp}{c^2+k^2}$ ，将该项代入压强计算公式，可得：

$$p = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \ln[1+e^{-(\varepsilon^0-\mu-\frac{2cp}{c^2+k^2})/T}]$$

由于 c 是大量，可以采取泰勒展开，首先针对重整化能量修正化学势，并且做出额外近似。

$$\frac{2c}{c^2+k^2} = \frac{2}{c} (1 - \frac{k^2}{c^2} + \frac{k^4}{c^4})$$

保留到三次项，可以得到：

$$\varepsilon = \varepsilon^0(k) - \mu - \frac{2p}{c} (1 - \frac{k^2}{c^2}) - \frac{1}{2\sqrt{\pi}c^3} \frac{T^{5/2}}{(\frac{\hbar^2}{2m})^{3/2}} Li_{5/2}(-e^{A_0/T})$$

引入化学势 $A = \mu + \frac{2p}{c} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}c^3} \frac{T^{5/2}}{(\frac{\hbar^2}{2m})^{3/2}} Li_{5/2}(-e^{A_0/T})$, 因此 $\varepsilon = \varepsilon^0 - A + \frac{2pk^2}{c^3}$, 现在将其代入公式, 具体计算如下:

$$e^{-(\varepsilon^0 - A + \frac{2pk^2}{c^3})/T} \approx (1 - \frac{2pk^2}{Tc^3})e^{-(\varepsilon^0 - A)/T}$$

$$\Rightarrow \ln[1 + (1 - \frac{2pk^2}{Tc^3})e^{-(\varepsilon^0 - A)/T}] \approx \ln[1 + e^{-(\varepsilon^0 - A)/T}] + \frac{2pk^2 e^{-(\varepsilon^0 - A)/T}}{Tc^3(1 + e^{-(\varepsilon^0 - A)/T})}$$

假设 $p = p_0 + \Delta p$, 分别对应展开两项, 现在计算主要项与修正项: 主要项的计算与前面步骤一致, 代入假设后将级数积分再求和, 结果为:

$$I_0 = \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ln[1 + e^{-(\varepsilon^0 - A)/T}] dk = -\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} T^{3/2} Li_{3/2}(-e^{A/T})$$

而修正项的计算比较麻烦,

$$I_1 = \frac{p}{\pi c^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2}{(1 + e^{(\varepsilon^0 - A)/T})} dk$$

除了需要代入 $\varepsilon^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 外, 还需要利用费米积分公式:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{1 + e^{x-\mu}} = -\Gamma(s) Li_s(-e^{\mu})$$

代入计算可得:

$$I_1 = -\frac{p}{2\sqrt{\pi}c^3} \left(\frac{T}{\hbar^2/2m}\right)^{3/2} Li_{3/2}(-e^{A/T})$$

整理合并即可得到压强, 作自然单位制处理:

$$p = -\frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi}} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{A/T}) \left[1 + \frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi}c^3} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{A/T})\right]$$

量子临界

在零温时, Lieb-Liniger 气体在临界点 $\mu_c = 0$ 发生从真空相到 TLL 相的量子相变。按重整化群理论, 低温下的临界区域存在普遍的标度性质。最近, 研究发现玻色气体的量子临界与多对数函数有关, 从状态方程出发可获得:

$$n(T, \mu) \approx n_0 + T^{d/z+1-1/v_z} \mathcal{F}\left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{1/v_z}}\right)$$

其中背景密度 $n_0 = 0$, 标量函数 $\mathcal{F} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} Li_{\frac{1}{2}}(-e^x)$ ($z = 2, \nu = \frac{1}{2}$), 对应压缩率为:

$$k^* = k_0 + T^{d/z+1-1/v_z} \mathcal{K}\left(\frac{\mu - \mu_c}{T^{1/v_z}}\right)$$

其中 $\mathcal{K}(x) = -\frac{c}{2\varepsilon\sqrt{\pi}} Li_{-1/2}(e^{-x})$

Problem 22: 计算

针对前一节的结果，通过代入公式 $n = (\frac{\partial p}{\partial \mu})_T$ ，以及 $\kappa = (\frac{\partial n}{\partial \mu})_T$ ， $s = (\frac{\partial p}{\partial T})_\mu$ 并约定： $f_n = Li_n(e^{A/T})$ ，对于多对数函数，利用关系：

$$\frac{\partial f_n}{\partial \mu} = \frac{1}{T} f_{n-1}$$

可以计算出粒子数密度，压缩率与熵密度等物理量。在临界点 μ_c 附近，存在普遍标度律。对于粒子数密度 $\frac{d}{z} + 1 - \frac{1}{\nu z} = \frac{1}{2}$ ，且 $\frac{1}{\nu z} = 1$ ，因此临界指数与关联长度指数分别为 $z = 2, \nu \frac{1}{2}$ ，对于 $d=1$ 维系统。当然压缩率也存在类似的关系。

局部配对关联与 Tan 常数

在学习一维相互作用玻色气体时，一个非常重要的性质是局域二体关联函数 g_2 ，从物理上讲，这个函数描述的是粒子之间的非弹性散射率。这个量反映的是两个粒子处于同一位置的概率，也被称作接触量，这一性质已被 Tan 关系式得到验证。

双体关联函数可以用来划分不同区域：例如 $g_2 \rightarrow 0$ 的 Tonks-Girardeau 区， $g_2 = 1$ 的 Gross-Pitaevskii 区， $g_2 = 2$ 的极弱耦合区（完全退相干区）。这些区域的关联函数可以通过 $g_2 = \langle \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \rangle$ 来计算，在 $T = 0$ 时刻 $dE_0/dc = Lg_2$ ；弱耦合极限下， $g_2/n^2 = 4\pi^2/3\gamma^2(1 - 6/\gamma)$ 。一般而言，引入的局域对关联可研究有限温度下的相位相干行为；引入单粒子自由能： $f(\gamma, T) = F/N$ ，归一化的双粒子局域关联为：

$$g_2 = \frac{\langle \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) \rangle}{n^2} = \frac{2m}{\hbar^2 n^2} \left(\frac{\partial f(\gamma, T)}{\partial \gamma} \right) \Big|_{n, T}$$

对于强耦合区域，局域关联函数可以通过状态方程计算；另一方面，一维体系谐振子势阱下基本热力学关系式：

$$dp = nd\mu + sdT - \frac{\rho_s}{2} dw^2 - C da_{1D}$$

其中 ρ_s, C 分别为超流体密度与接触量， $w = v_s - v_n$ 表示超流体组分与正常组分速度之差

因此我们可以通过上述关系式得出热力学麦克斯韦关系，更进一步可以计算接触量：

$$C = -\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial p}{\partial c} \right)_{\mu, T} \approx \frac{1}{2\pi} T^2 f_{\frac{1}{2}} f_{\frac{3}{2}} \times \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\pi c}} T^{1/2} f_{\frac{1}{2}} \right)$$

Problem 23: 参考 [Chen \(2014\)](#)

体关联函数描述的是在同一个位置（或无限接近的位置）找到两个粒子的相对概率，是相互作用强度的度量，相互作用越强，粒子便越倾向于避免或聚集在彼此附近。Tan 关系式由凝聚态物理学家谭青山提出，是描述接触量与系统宏观物理量关系的普适方程，Tan 接触量更具体的定义为粒子间距趋于零时双体关联函数的渐进行为系数，量化极短距离上的双体关联函数。我们从哈密顿量出发：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g_{1D} \sum_{i < j}^N \delta(x_i - x_j)$$

利用 *Hellmann – Feynman* 定理，我们得到能量对参数的导数：

$$\frac{\partial E}{\partial g_{1D}} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial g_{1D}} \right\rangle = \left\langle \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) \right\rangle = \frac{1}{2} \int dx \langle \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \rangle = \frac{L}{2} n^2 g_2$$

在有限温度下用自由能代替能量，并利用无量纲耦合常数 $\gamma = \frac{mg_{1D}}{\hbar^2 n}$ ，则：

$$\frac{\partial F}{\partial \gamma} = \frac{\partial F}{\partial g_{1D}} \cdot \frac{\partial g_{1D}}{\partial \gamma} = \frac{L \hbar^2 n^3}{2m} g_2 \implies g_2 = \frac{2m}{\hbar^2 n^2} \left(\frac{\partial f(\gamma, T)}{\partial \gamma} \right) |_{n, T}$$

在强弱耦合极限情况下分别利用前文结果可计算相应的双体关联函数。与热力学里面的麦克斯韦关系类似：

$$\left(\frac{\partial C}{\partial \mu} \right)_{T, a_{1D}} = - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial a_{1D} \partial \mu} \right) = - \left(\frac{\partial n}{\partial a_{1D}} \right)_{\mu, T}$$

最后我们利用该关系与前文部分结果可得接触量的计算。

Appendix

Appendix A: Correlation Function and Form Factor

动力学关联函数定义为：

$$\mathcal{G}(x, t) = \langle \hat{O}^\dagger(x, t) \hat{O}(0, 0) \rangle_{\{\lambda\}} = \sum_{\{\lambda\}} \frac{\langle \{\lambda\} | \hat{O}^\dagger(x, t) | \{\mu\} \rangle \langle \{\mu\} | \hat{O}(0, 0) | \{\lambda\} \rangle}{\|\{\lambda\}\|^2 \cdot \|\{\mu\}\|^2}$$

References

- Chen (2014). Critical behaviours of contact near phase transitions. *10.1038/ncomms6140*.
- C.N.Yang (1969). Thermodynamics of a one dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction. *J.Math.Phys, Volume 10, Number 7*.
- Fabrizio (2022). *A Course in Quantum Many-Body Theory*. Springer.
- Guan (2011). Polylogs, thermodynamics and scaling functions of one-dimensional quantum many-body systems. *J.Phys.A:Math.Theor.44 102001(10pp)*.
- M.Gaudin (1971). Boundary energy of a bose gas in one dimension. *Phys.Rew.A, Volume 4, Number 1*.
- Ristivojevic (2014). Excitation spectrum of lieb-liniger model. *PRL 113, 01531*.
- Sirker (2013). The luttinger liquid and integrable model.