

# 玻色-爱因斯坦凝聚和超流性

莱维·皮塔耶夫斯基, 桑德罗·斯特林加

2015年7月著, 2025年6月2日译



# Contents

<b>1</b>	<b>引言</b>	<b>9</b>
<b>I</b>		<b>15</b>
<b>2</b>	<b>长程序、对称性破缺与序参量</b>	<b>17</b>
2.1	单粒子密度矩阵与长程序 . . . . .	17
2.2	序参量 . . . . .	21
<b>3</b>	<b>理想玻色气体</b>	<b>25</b>
3.1	巨正则系综中的理想玻色气体 . . . . .	25
3.2	盒子中的理想玻色气体 . . . . .	29
3.3	涨落与双粒子密度 . . . . .	36
<b>4</b>	<b>弱相互作用玻色气体</b>	<b>39</b>
4.1	最低阶近似：基态能量和状态方程 . . . . .	39
4.2	高阶近似：激发谱和量子涨落 . . . . .	43
4.3	粒子和元激发 . . . . .	48
<b>5</b>	<b>零温下的非均匀玻色气体</b>	<b>53</b>
5.1	Gross-Pitaevskii 方程 . . . . .	53
5.2	托马斯-费米极限 . . . . .	58
5.3	弱相互作用玻色气体中的涡旋线 . . . . .	59
5.4	涡旋环 . . . . .	62
5.5	孤子 . . . . .	66

5.6	小振幅振荡 . . . . .	70
<b>6</b>	<b>超流性</b>	<b>75</b>
6.1	朗道的超流性判据 . . . . .	76
6.2	玻色-爱因斯坦凝聚与超流性 . . . . .	79
6.3	超流体的流体动力学理论: 零温 . . . . .	81
6.4	量子流体动力学 . . . . .	82
6.5	声子的别利亚耶夫衰变 . . . . .	84
6.6	二流体流体动力学: 第一声与第二声 . . . . .	86
6.7	相位的涨落 . . . . .	91
6.8	超流体的旋转 . . . . .	95
<b>7</b>	<b>线性响应函数</b>	<b>101</b>
7.1	动态结构因子与求和规则 . . . . .	101
7.2	密度响应函数 . . . . .	106
7.3	电流响应函数 . . . . .	111
7.4	一般不等式 . . . . .	112
7.5	理想玻色气体的响应函数 . . . . .	117
7.6	弱相互作用玻色气体的响应函数 . . . . .	119
<b>8</b>	<b>超流<sup>4</sup>He</b>	<b>123</b>
8.1	元激发和动态结构因子 . . . . .	124
8.2	热力学性质 . . . . .	131
8.3	量子化涡旋 . . . . .	135
8.4	动量分布和玻色-爱因斯坦凝聚 . . . . .	140
<b>9</b>	<b>原子气体: 碰撞与囚禁</b>	<b>145</b>
9.1	亚稳态性与碰撞的作用 . . . . .	145
9.2	低能碰撞与散射长度 . . . . .	147
9.3	二维中的低能碰撞 . . . . .	155
9.4	塞曼效应与磁囚禁 . . . . .	158
9.5	与辐射场的相互作用及光阱 . . . . .	164

# 作者序

本书是2003年由牛津大学出版社出版的《玻色-爱因斯坦凝聚》一书的扩充和更新版本。本书写作的契机是超冷原子领域持续且令人激动人心的进展。这些进展始于1995年首次在原子气体中实现玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)之后，至今仍吸引着全球数百位科学家参与其中。虽然BEC的基本理论在1995年之前就已发展起来，但将其应用于磁阱和光阱所实现的新构型则是较新近的事，并揭示了许多未曾预料特性，从而激发了进一步的实验和理论研究。

本书第一部分聚焦于玻色-爱因斯坦凝聚物理学的关键理论概念，并与1995年前理论的根本发展相联系。第二部分则主要强调BEC对在阱中冷却和约束的原子玻色气体所产生的后果。这些系统具有高度的非均匀性，因此展现出许多新颖的特性，这些特性正是当前密集研究活动的对象。本书第三部分讨论超冷费米气体的物理学，其实验研究在过去十年（指2005-2015）取得了惊人的进展，为凝聚态物理中的许多问题提供了新的见解，并与玻色-爱因斯坦凝聚及超流物理有着深刻的联系。最后一部分涵盖了玻色气体和费米气体研究共同感兴趣的课题，例如在光阱和低维构型中展现的新现象、量子混合物的性质，以及长程偶极相互作用的后果。

在撰写本书的过程中，我们得益于与世界各地许多同行的富有启发的讨论和合作。我们要特别感谢特伦托研究团队的朋友们，尤其是雅各布·卡鲁索托(Iacopo Carusotto)、弗朗哥·达尔福沃(Franco Dalfovo)、加布里埃莱·费拉里(Gabriele Ferrari)、斯特凡诺·乔尔吉尼(Stefano Giorgini)、贾科莫·兰波雷西(Giacomo Lamporesi)、基娅拉·梅诺蒂(Chiara Menotti)和阿莱西奥·雷卡蒂(Alessio Recati)。我们也要感谢乔瓦尼·马尔托内(Giovanni Martone)在本书最后准备阶段提供的帮助。

特伦托

2015年7月

莱维·皮塔耶夫斯基

桑德罗·斯特林加

# 译者序

《玻色-爱因斯坦凝聚和超流性》是国际著名理论物理学家皮塔耶夫斯基和斯特林加合作写的名著，这本书被相关领域的学生、教师，研究者广泛使用。这本书重视基本概念和基本结果的讨论，概念清晰，逻辑完备，为本人及更多的读者打下了在冷原子领域的基础。

实际上在本人读博期间就想翻译此书，但是限于时间和精力一直未能开始。不过这本书也为我完成博士毕业论文提供了很多的参考。今年以来，伴随着Deepseek冲击，让我看到了在不耗费太多精力的情况下翻译这本书的可能。随着Deepseek的更新，让这项工作看起来更容易完成。即使借助了AI，翻译过程中也遇到了很多问题，这让我了解到翻译本身就作为一件艰巨性的任务。

目前本人借助于AI只翻译了本书第一部分前9章的内容，即使是这些内容，内容量已经不小了。我想这不仅仅是为我之后的学习和研究提供便利，而且为了回馈广大的粉丝朋友，有必要提供一些基础的学习资料。因此我觉得此项工作还是有意义的。我相信本书的中译本可以更加方便相关领域的学生和研究者作为参考。毕竟母语仍然是一个人最熟悉的语言。

由于本人精力和能力有限，以及AI本身还有不完善的地方，文中肯定有很多地方值得商榷，如果有任何问题都可以在知乎评论区或者私信联系我，或者加入物理思享者群1群和2群讨论，群号为：856861176，1012519592。最后，本文仅供学习，不可用于商业目的。

刘易安

2025年6月2日



# Chapter 1

## 引言

1995年在稀薄原子气体中实验实现玻色-爱因斯坦凝聚（Bose-Einstein condensation, BEC）后，高简并条件下量子气体的研究已成为物理学的新兴领域，吸引了不同领域科学家的兴趣。

玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）的基本思想可追溯至1925年，当时A. Einstein基于印度物理学家S. N. Bose（1924）关于光量子统计描述的论文，预言了非相互作用原子气体中将发生相变。该相变与原子在最低能态的凝聚相关，是量子统计效应的结果。长期以来这些预言缺乏实际影响。1938年，F. London在液氦超流性（superfluidity）被发现（Kapitza, 1938; Allen and Misener, 1938）后立即提出，超流性可能是玻色-爱因斯坦凝聚的表现。第一个自洽的超流体理论由Landau于1941年基于流体的元激发谱（spectrum of elementary excitations）发展而来。这导致了二流体流体动力学（two fluid hydrodynamics）公式的形成，该概念最初由Tisza于1940年提出。1947年，Bogoliubov基于玻色-爱因斯坦凝聚概念，发展了首个相互作用玻色气体的微观理论。在Landau和Lifshitz（1951）、Penrose（1951）及Penrose和Onsager（1956）引入非对角长程序（nondiagonal long-range order）概念并探讨其与BEC关系后，密集的理论工作得以开展，旨在深入理解BEC与超流性间的关系。同期，超流氦的实验研究日益精进，证实了Landau对激发谱的预言，并通过动量分布测定首次实现了凝聚体分数的测量。该领域的重要进展包括Onsager（1949）和Feynman（1955）对量子化涡旋（quantized vortices）的预言，以及Hall和Vinen（1956）在实验中

发现这些涡旋。

稀薄原子气体的实验研究发展较晚，始于1970年代，得益于原子物理学中基于磁阱（magnetic trapping）、光阱（optical trapping）和先进冷却机制的新技术。初期研究聚焦于自旋极化氢（spin-polarized hydrogen），因其质量轻且能在气相中稳定至零温，被视为实现玻色-爱因斯坦凝聚的理想候选。在一系列实验中，氢原子先在稀释制冷机（dilution refrigerator）中冷却，再由磁场俘获，并通过蒸发冷却（evaporative cooling）进一步降温，逼近BEC条件。1980年代，基于激光的技术如激光冷却（laser cooling）和磁光阱（magneto-optical trapping）被开发用于冷却和俘获中性原子。碱金属原子（Alkali atoms）特别适合激光方法，因其光学跃迁可用现有激光激发，且具有利于深度冷却的内部能级结构。俘获后，可通过蒸发冷却进一步降低其温度。

通过整合不同冷却技术，康奈尔（Cornell）和维曼（Wieman）在博尔德（Boulder）的团队以及麻省理工学院（MIT）的克特勒（Ketterle）团队最终于1995年成功达到在 $^{87}\text{Rb}$ （Anderson et al., 1995）和 $^{23}\text{Na}$ （Davis et al., 1995）蒸气中观测BEC所需的温度和密度（见图1）。同年， $^7\text{Li}$ 蒸气中出现玻色-爱因斯坦凝聚的首批迹象也被报道（Bradley et al., 1995）。随后，BEC在自旋极化氢（Fried et al., 1998）、亚稳态 $^4\text{He}$ （Robert et al., 2001; Periera Dos Santos et al., 2001）、 $^{41}\text{K}$ （Modugno et al., 2001）及多种其他原子中实现。

同时，相互作用费米气体（interacting Fermi gases）的研究也成为热点，引起实验和理论界日益增长的关注，尤其在格雷纳（Greiner et al., 2003）用 $^{40}\text{K}$ 以及兹维莱因（Zwierlein et al., 2003）、布尔德（Bourdel et al., 2003）、巴滕斯坦（Bartenstein et al.）和帕特里奇（Partridge et al., 2005）用 $^6\text{Li}$ 首次在相互作用的费米子分子气体中实现BEC后（见图2），利用可调谐费什巴赫共振（tunable Feshbach resonances），弱相互作用费米子的巴丁-库珀-施里弗（Bardeen-Cooper-Schrieffer, BCS）超流态与费米子分子BEC间的连续过渡（BCS-BEC crossover）得以研究。后续重要实验结果证实了这些超冷相互作用费米气体的超流行为，如量子化涡旋出现（Zwierlein et al.）、超流转变附近比热的反常行为（Ku et al., 2012）及第二声传播（second sound propagation）（Sidorenkov et al., 2013）。理

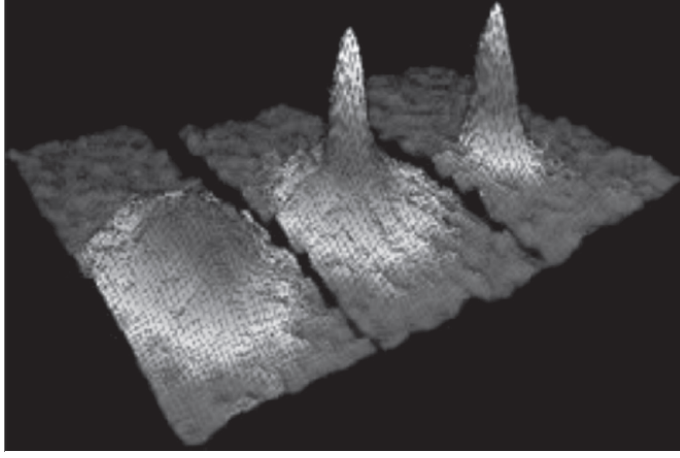


Figure 1.1: 安德森等人（1995）实验中铷原子速度分布的膨胀法（expansion method）成像。左图：凝聚温度之上的气体；中图：凝聚体刚出现后；右图：进一步蒸发后近乎纯净的凝聚体样品。来源：康奈尔（1996）。转载经美国国家标准与技术研究院（National Institute of Standards and Technology, US Department of Commerce）许可。

论方面，相互作用费米气体中超流相及BCS-BEC过渡的研究与超导现象（superconductivity）紧密相关。早期工作始于Eagles（1969），其指出强吸引电子间BCS理论方程描述小尺寸配对（pairs of small size），结合能与密度无关。Leggett（1980）的开创性论文全面讨论了推广BCS方法以散射长度（scattering length）描述过渡。该研究涉及基态性质，后由Nozieres和Schmitt-Rink（1985）及Sa de Melo、Randeria 和Engelbrecht（1993）扩展至有限温度以计算超流起始临界温度。这些理论通过单一相互作用参数及无量纲组合 $k_F a$ （ $a$ 为s波散射长度， $k_F$ 为费米波矢）描述BCS-BEC过渡中的多体性质。临界温度预测值表明，在 $k_F|a|$ 的宽值域内 $T_c$ 可达费米温度量级，故常称高温费米超流性（high- $T_c$  Fermi superfluidity）。

费米子系统研究在多方面与玻色子互补。依据Fermi（1926）和Dirac（1926）的开创性工作，量子统计在低温起主导作用。尽管量子简并起始温度标度相同（ $k_B T_{deg} \sim \hbar^2 n^{2/3}/m$ ， $n$ 为密度， $m$ 为原子质量），但量子简并的物理结果相异：玻色情形中量子统计效应关联于向BEC相的相变；非相互作用费米气体中量子简并温度仅对应经典与量子行为的平滑过渡。费米气体中超流相的出现只能源于相互作用。多体视角下，费米超流性研究开

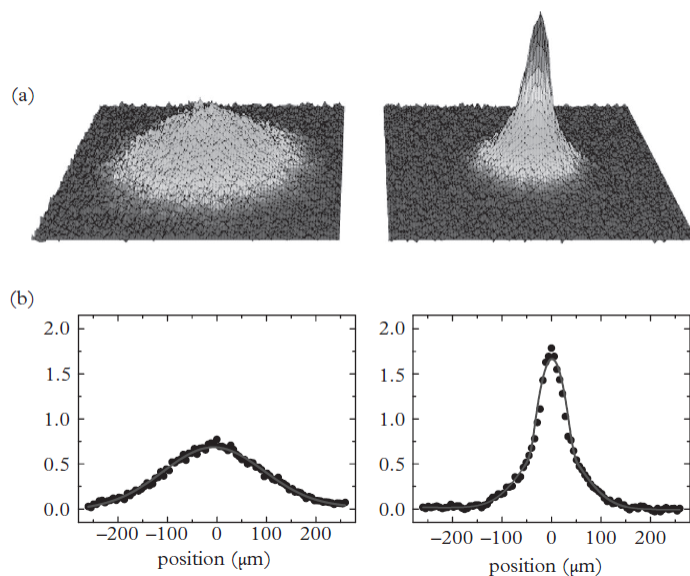


Figure 1.2:  $^{40}\text{K}$ 原子超冷费米气体中分子BEC的出现（飞行时间吸收成像观测）。左图：冷却至费米温度19%的弱相互作用费米气体密度分布，扫过费什巴赫共振（Feshbach resonance）后因样品过热未现BEC；右图：更冷样品扫过共振后出现双峰分布（bimodal distribution），显示分子BEC存在。来源：Greiner et al. (2003)。转载经《自然》（*Nature*）许可，426, 537; 2003，麦克米伦出版有限公司（Macmillan Publishers Ltd）。

启更丰富的问题集（本书第三部分讨论）。玻色与费米气体的另一关键差异在于碰撞过程：单组分费米气体中因泡利不相容原理（Pauli exclusion principle）抑制s波散射。这对依赖热化的蒸发冷却机制影响显著。费什巴赫共振可调节散射长度值甚至符号，使研究强相互作用费米原子（散射长度极大）成为可能。与玻色气体不同，费米子因泡利原理抑制三体损失（three-body losses），气体稳定性更高，可实现无限散射长度的幺正区（unitary regime），此时系统展现普适行为（universal behaviour）（Bertsch, 1999），气体同时稀薄且强相互作用（粒子间距大于力程但小于散射长度）。

低温下，BEC与相互作用费米气体因超流性具重要相似性（本书详述）。多体视角中，超流性是非对角单粒子（玻色子）及两粒子（费米子）密度长程序存在的关键结果。

本书旨在阐述玻色-爱因斯坦凝聚与相互作用费米气体的核心概念，着重探讨其超流行为。

第一部分始于第2章引入的BEC基础概念——非对角长程序；第3章总结理想玻色气体（具相变的量子统计可解模型）主要特性；第4章阐述Bogoliubov相互作用气体理论（BEC与两体相互作用共同导致声波传播）；第5章基于序参量经典描述（格罗斯-皮塔耶夫斯基理论）建立非均匀相互作用玻色气体理论；第6章探讨超流体一般性质（支配方程可由稀薄气体理论微观导出，亦适用于稠密超流体）；第7章概述线性响应理论形式体系；第8章总结超流氦关键特性（着重激发谱、量子化涡旋等可与稀薄玻色气体对比的参量）；第9章简述稀薄气体磁阱与光阱俘获的原子性质。

第二部分（囚禁BEC气体物理）：第10章研究谐振势阱中理想玻色气体（预测BEC临界温度等）；第11-12章应用非均匀相互作用气体理论于谐振势，导出零温平衡与动力学性质；第13章讨论相互作用对热力学行为的影响；第14章分析束缚气体旋转特性（聚焦量子化涡旋）；第15章探讨BEC气体相干性（干涉现象、类约瑟夫森效应）。

第三部分（低温相互作用费米气体及其超流性）：第16章概述BCS-BEC过渡；第17章讨论谐振势阱费米气体性质；第18章阐述热力学关系与接触参数（contact parameter）作用；第19章分析动力学与超流性；第20章研究自旋极化费米气体。

第四部分（玻色与费米气体共同主题）：量子混合物（第21章）；光学晶格物理（第22章）；低维构型（第23-24章）；偶极气体（第25章）。

本书仅涵盖BEC与费米气体物理的部分主题，发展并拓展了Dalfovo等（1999）和Giorgini等（2008）综述论文的理论研究。未涉及主题请参阅其他教材或综述。BEC跨学科讨论（涵盖物理多领域）见1993年莱维科会议（Levico conference）论文集（Griffin et al., 1995）。原子气体BEC物理理论见Pethick和Smith（2008）；光学晶格中超冷原子全面讨论见Lewenstein等（2012）。其他综述参考Leggett（2001）及Bloch等（2008）新近论文。玻色与费米气体实验理论文集见三次瓦雷纳学校（Varenna Schools）讲义（Inguscio et al., 1999, 2008, 2014）、2010年莱乌什学校（Les Houches School）（Salomon et al., 2013）及Zwenger编（2012）相互作用费米气体专著。非线性光学系统中极化激元（polaritons）与相互作用光子（具原子玻色气体相似性及超流现象）见Carusotto和Ciuti（2013）综述。量子磁体中的BEC亦为系统实验理论研究主题（新近综述见Zapf et al., 2014）。其他专题综述与书籍见本书各章。

# Part I



# Chapter 2

## 长程序、对称性破缺与序参量

长程序(long-range order)、对称性破缺(symmetry breaking) 和序参量(order parameter) 是玻色-爱因斯坦凝聚(Bose-Einstein Condensation, BEC) 现象的基础关键概念。这些概念通常在均匀宏观体系背景下讨论。由于本书重要部分致力于研究束缚在势阱中的原子气体BEC, 有必要从一开始建立形式理论以解释非均匀体系的新特征, 并探讨统计力学这些基本概念在多大程度上可推广至有限样品。

长程序与BEC 概念在费米气体中同样起关键作用。非相互作用费米子不表现BEC现象, 但相互作用可导致配对效应(pairing effects), 在超流相中表现为双粒子密度矩阵(two-body density matrix) 的特征长程序。此行为将在第16.7 节讨论。

### 2.1 单粒子密度矩阵与长程序

我们通过引入单粒子密度矩阵(one-body density matrix) 展开讨论:

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (2.1)$$

其中 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$  ( $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ ) 是在点 $\mathbf{r}$  产生 (湮灭) 粒子的场算符。平均值 $\langle \dots \rangle$  的含义稍后讨论。因 $n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (n^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}))^*$ , 矩阵 $n^{(1)}$  是厄米(hermitian) 的。

方程(2.1) 提供了普适定义, 适用于任何体系 (无论统计性质、平衡或非平衡态)。后者情形下密度矩阵显含时间。对玻色子系统, 方程(2.1) 的场算符满足著名对易关系(commutation relations):

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (2.2)$$

单粒子密度矩阵(2.1) 蕴含重要物理可观测量信息。令  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  可得体系对角密度(diagonal density):

$$n(\mathbf{r}) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \rangle = n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}). \quad (2.3)$$

总粒子数  $N = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ 。此式定义单粒子密度矩阵的归一化。密度矩阵(2.1) 也决定了动量分布(momentum distribution):

$$n(\mathbf{p}) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{\Psi}(\mathbf{p}) \rangle, \quad (2.4)$$

其中  $\hat{\Psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d\mathbf{r} \exp[-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar] \hat{\Psi}(\mathbf{r})$  是动量表象场算符。将  $\hat{\Psi}(\mathbf{p})$  代入(4) 式立得关系:

$$n(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{R} d\mathbf{s} n^{(1)}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{s}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}/\hbar} \quad (2.5)$$

其中  $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ,  $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ 。动量分布满足与对角密度相同的归一化  $\int d\mathbf{p} n(\mathbf{p}) = N$  (由总粒子数固定)。

若体系处于纯态(pure state), 由  $N$  体波函数  $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  描述, 则按量子力学标准规则取平均(2.1), 单粒子密度矩阵可写为:

$$n_n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \Psi_n^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi_n(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2.6)$$

涉及对  $N - 1$  个变量  $\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  的积分。此处多体波函数  $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  归一化为1。此形式可轻松扩展至包含自旋等额外自由度。

对统计混合(statistical mixture) 的更一般情形, 表达式(2.6) 应按体系处于不同态  $n$  的概率取平均。最重要例子是热力学平衡体系, 此时  $\Psi_n$  是哈密顿量本征态(eigenstates), 能量为  $E_n$ , 各态权重由因子  $\exp(-E_n/k_B T)$  固定, 密度矩阵变为:

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{Q} \sum_n e^{-E_n/k_B T} n_n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (2.7)$$

其中  $Q = \sum_n \exp(-E_n/k_B T)$  是配分函数(partition function)。

先考虑均匀各向同性体系： $N$  粒子占据体积  $V$ ，无外势场。在热力学极限 ( $N, V \rightarrow \infty$ ，密度  $n = N/V$  固定) 下，单粒子密度仅依赖相对变量模量  $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ： $n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n^{(1)}(s)$ ，并可写作：

$$n^{(1)}(s) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{p} n(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}/\hbar}. \quad (2.8)$$

对正常体系，动量分布在低动量处平滑，故单粒子密度在  $s \rightarrow \infty$  时趋于零。存在玻色-爱因斯坦凝聚时则不同，因动量  $\mathbf{p} = 0$  的单粒子态被宏观占据，动量分布含  $\delta$  函数项：

$$n(\mathbf{p}) = N_0 \delta(\mathbf{p}) + \tilde{n}(\mathbf{p}) \quad (2.9)$$

其权重  $N_0$  与总粒子数成正比。量  $N_0/N \leq 1$  称为凝聚体分数(condensate fraction)。通过傅里叶变换(2.8) 发现：存在BEC 时，单粒子密度矩阵在大距离不趋于零而逼近有限值：

$$n^{(1)}(s) \xrightarrow{s \rightarrow \infty} n_0, \quad (2.10)$$

由参数  $n_0 = N_0/V$  固定。此行为由Landau 和Lifshitz (1951)、Penrose (1951) 及Penrose 和Onsager (1956) 指出，常称为非对角长程序(off-diagonal long-range order)，因其涉及单粒子密度(1) 的非对角分量( $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ )。上述考虑在存在相互作用时仍成立（当然影响  $n_0$  值）。例如：理想气体中  $T = 0$  时全部粒子处于凝聚体( $N_0 = N$ )，而存在相互作用时  $T = 0$  仍有  $N_0 < N$ 。凝聚体分数  $N_0/N$  依赖样品温度，在BEC 临界温度  $T_c$  之上趋于零（体系呈正常行为）。图2.1 展示不同温度下  $n^{(1)}(s)$  的典型行为。为完备起见，展开单粒子密度矩阵的低  $s$  项亦有意义。由(8) 式立得：

$$n^{(1)}(s) \underset{s \rightarrow 0}{=} n \left( 1 - \frac{1}{2} \langle p_z^2 \rangle \frac{s^2}{\hbar^2} + \cdots \right), \quad (2.11)$$

其中  $\mathbf{s}$  沿  $z$  方向，且定义  $\langle p_z^2 \rangle = N^{-1} \int d\mathbf{p} n(\mathbf{p}) p_z^2$ 。

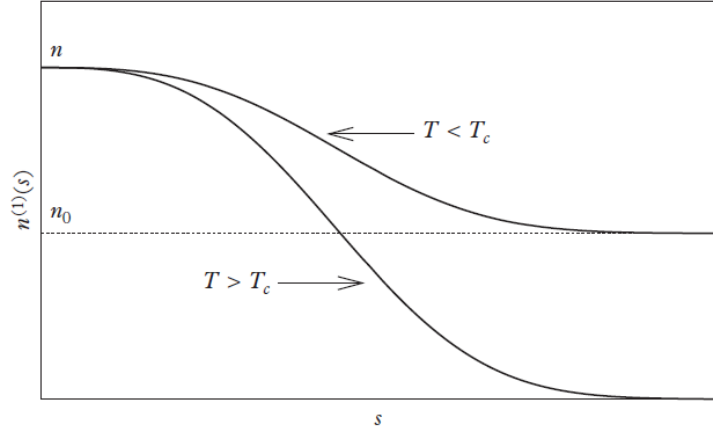


Figure 2.1: 非对角单粒子密度随相对距离  $s$  的变化。低于临界温度时，大  $s$  处  $n^{(1)}(s)$  趋近值  $n_0 = N_0/V$  ( $N_0$  为凝聚体粒子数)。  $s = 0$  时  $n^{(1)}(s)$  等于对角密度  $n = N/V$ 。

单粒子密度矩阵的长程序与其本征值  $n_i$  行为强相关，本征值由本征方程解定义：

$$\int d\mathbf{r}' n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}') = n_i \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

(2.12) 的解提供正交归一单粒子波函数自然基：  $\int \varphi_i^* \varphi_j d\mathbf{r} = \delta_{ij}$ 。将(2.12)乘以  $\varphi_i^*(\mathbf{r})$  并积分得归一化条件  $\sum_i n_i = N$ ，此式源于完备关系  $\sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  及对角密度归一化。注意：单粒子波函数  $\varphi_i$  不仅对理想气体有明确定义，对相互作用和非均匀体系亦然。已知函数  $\varphi_i$  和本征值  $n_i$  可将密度矩阵写成有用的对角化形式：

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i n_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}'). \quad (2.13)$$

在二次量子化语言中，本征值  $n_i$  给出单粒子态  $\varphi_i$  的占据数。

当单粒子态之一（此后称凝聚体， $i = 0$ ）被宏观占据（即  $n_{i=0} \equiv N_0$  为  $N$  量级），而其他单粒子态为微观占据（量级1）时，发生玻色-爱因斯坦凝聚。此时(2.13) 式可方便地改写为分离形式：

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N_0 \varphi_0^*(\mathbf{r}) \varphi_0(\mathbf{r}') + \sum_{i \neq 0} n_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}'). \quad (2.14)$$

在热力学极限( $N \rightarrow \infty$ )下,  $i \neq 0$  的求和可代之以积分, 从而在大距离  $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  处趋于零。反之, 凝聚体贡献在  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  距离内保持有限 (距离由  $\varphi_0$  函数范围决定)。

对均匀体系, (2.12) 的解为平面波:

$$\varphi_{\mathbf{p}_i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.15)$$

其中  $\mathbf{p}_i$  值由边界条件确定。此时占据数  $n_{\mathbf{p}_i}$  与动量分布  $n(\mathbf{p})$  有直接关联。将(2.14) 代入(2.5) 得:

$$n(\mathbf{p}) = N_0 \delta(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}_i \neq 0} n_{\mathbf{p}_i} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i), \quad (2.16)$$

将态  $\mathbf{p}_i \neq 0$  的求和替换为积分  $V/(2\pi\hbar)^3 \int d\mathbf{p}$ , 立即得(2.9) 式, 其中:

$$\tilde{n}(\mathbf{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} n_{\mathbf{p}}. \quad (2.17)$$

若体系非均匀, (2.12) 的解不再是平面波, 通常需数值求解。只要  $N$  足够大, 玻色-爱因斯坦凝聚概念在此情形下仍有明确定义——关联于单粒子态的宏观占据。

## 2.2 序参量

对角化(2.13) 的主要结果是可明确识别相互作用和非均匀体系的单粒子波函数  $\varphi_i$ 。这些函数可用于将场算符  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$  写作:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \varphi_i \hat{a}_i. \quad (2.18)$$

其中  $\hat{a}_i$  ( $\hat{a}_i^\dagger$ ) 是在态  $\varphi_i$  湮灭 (产生) 粒子的算符, 满足对易关系:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (2.19)$$

将(2.18) 式代入(2.1) 并与(2.14) 式比较, 发现算符  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i$  的期望值为  $\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle = \delta_{ij} n_i$ 。宏观本征值  $N_0$  对应的波函数在BEC 理论中起关键作用, 表征所谓

的凝聚体波函数。在场算符(2.18) 中分离“凝聚体”项 $i = 0$ 是有益的：

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r})\hat{a}_0 + \sum_{i \neq 0} \varphi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i. \quad (2.20)$$

此方程为引入博戈留波夫近似(Bogoliubov approximation) 提供了自然起点——该近似将算符 $\hat{a}_0$  和 $\hat{a}_0^\dagger$  替换为 $c$  数 $\sqrt{N_0}$ 。这等价于忽略算符 $\hat{a}_0$  和 $\hat{a}_0^\dagger$  的非对易性，对描述与BEC 相关的宏观现象是良好近似（此时 $N_0 = \langle a_0^\dagger a_0 \rangle \gg 1$ ）。因算符 $a_0$  和 $a_0^\dagger$  的对易子为1，而算符本身为 $\sqrt{N_0}$  量级。博戈留波夫近似等价于将场算符(2.20) 的宏观分量 $\varphi_0\hat{a}_0$  视为经典场，故(2.20) 式可改写为：

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

其中定义 $\Psi_0 = \sqrt{N_0}\varphi_0$ ， $\delta\hat{\Psi} = \sum_{i \neq 0} \varphi_i a_i$ 。若能忽略非凝聚分量 $\delta\hat{\Psi}$ （如极低温稀薄玻色气体），则场算符严格等同于经典场 $\Psi_0$ ，体系行为类似经典物体。这类似于量子电动力学的经典极限——经典电磁场完全取代光子微观描述。尽管分离(2.21) 在稀薄气体中特别有用（此时可获得场 $\Psi_0$  的闭合方程，见第5章），它也可用于强相互作用体系（如超流氦），其有效性由单粒子态宏观占据( $N_0 \gg 1$ ) 保证。

函数 $\Psi_0(\mathbf{r})$  称为凝聚体波函数，起序参量作用。它是复量，由模和相位表征：

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = |\Psi_0(\mathbf{r})|e^{iS(\mathbf{r})}. \quad (2.22)$$

模决定凝聚体对对角密度(2.3) 的贡献。相位 $S(\mathbf{r})$  在表征相干和超流现象中起主导作用（后文详述）。序参量(2.22) 表征玻色-爱因斯坦凝聚相，在临界温度以上消失。由其定义(2.14) 可见，序参量 $\Psi_0 = \sqrt{N_0}\varphi_0$  定义至多一个常数相位因子——总可乘以数值因子 $e^{i\alpha}$  而不改变任何物理性质。这反映问题所有物理方程的规范对称性(gauge symmetry)。明确选择序参量值（从而相位）对应于形式上的规范对称性破缺。

场算符的博戈留波夫假设(2.21) 可解释为：场算符的期望值 $\langle \hat{\Psi} \rangle$  非零。若左右态粒子数严格相同则不可能。物理上，此对称性破缺(symmetry breaking) 意味凝聚体起库(reservoir) 作用。因 $N_0 \gg 1$ ，向凝聚体添加粒子不改变体系物理性质。换言之，含 $N$  粒子的态 $|N\rangle$  与态 $|N+1\rangle \propto a_0^\dagger |N\rangle$ 、 $|N-1\rangle \propto a_0 |N\rangle$  物理等价（除 $1/N_0$  量级修正）。总之可写 $\Psi_0 = \langle \hat{\Psi} \rangle$ ，

需注意左边态凝聚体粒子数比右边少一个。类似有  $\Psi_0^* = \langle \hat{\Psi}^\dagger \rangle$ 。若对定态(stationary states) 取此平均 (其时间依赖由规律  $e^{-iEt/\hbar}$  支配), 易见序参量时间依赖为:

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (2.23)$$

其中  $\mu = E(N) - E(N-1) \approx \partial E / \partial N$  是化学势。值得注意的是: 序参量时间演化不受能量支配 (如通常波函数), 而由化学势支配——后者成为玻色-爱因斯坦凝聚物理的关键参数。



# Chapter 3

## 理想玻色气体

非相互作用玻色气体的量子统计描述是统计力学教材中的常见主题。理想玻色气体提供了实现玻色-爱因斯坦凝聚的最简单示例，其部分预言正确描述了实际体系的重要性质。London (1938) 最早凭直觉提出，超流氦的重要特征可用理想玻色气体的基本概念解释。近年来，理想玻色气体预言的临界温度值为实验学家在谐振势阱束缚的稀薄原子气体研究中达到BEC 区提供了宝贵指导。

### 3.1 巨正则系综中的理想玻色气体

下文将在巨正则系综背景下提供理想玻色气体的量子统计描述，该框架下形式理论尤为简洁。回顾巨正则系综中，体系在能量为 $E_k$  的态 $k$  上拥有 $N'$  个粒子的构型概率为：

$$P_{N'}(E_k) = e^{\beta(\mu N' - E_k)}, \quad (3.1)$$

其中 $\beta = 1/k_B T$ ， $\mu$  是与体系热平衡的库的化学势。统计力学的核心问题之一是计算巨正则配分函数：

$$Z(\beta, \mu) = \sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k P_{N'}(E_k) = \sum_{N'=0}^{\infty} e^{\beta\mu N'} Q_{N'}(\beta), \quad (3.2)$$

其中 $Q_{N'} = \sum_k e^{-\beta E_k}$  是 $N'$  粒子体系的正则配分函数，求和 $\sum_k$  包含哈密顿量能量为 $E_k$  的完备本征态集。巨正则系综的自然变量是温度、化学势，以

及表征力学约束所需的参数（如样品体积或谐振势阱中的振荡频率），后者仅通过哈密顿量本征值 $E_k$ 进入巨配分函数，未在方程(3.2)中显式标出。

由巨正则配分函数知识可直接通过下式评估体系热力学行为：

$$\Omega = -k_B T \ln Z \quad (3.3)$$

其中 $\Omega = E - TS - \mu N$ 为巨正则势，熵为：

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}, \quad (3.4)$$

总粒子数：

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad (3.5)$$

能量：

$$E = \Omega - T \frac{\partial \Omega}{\partial T} - \mu \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (3.6)$$

$N$ 和 $E$ 分别与巨正则平均 $\sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k N' P_{N'}(E_k)$ 及 $\sum_{N'=0}^{\infty} \sum_k E_k P_{N'}(E_k)$ 一致。

若体系均匀且占据体积 $V$ ，则巨势函数 $\Omega$ 简化为：

$$\Omega = -PV, \quad (3.7)$$

其中 $P$ 是作用在体系上的压强，故直接提供状态方程。

现考虑由独立粒子哈密顿量描述的系统：

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i^{(1)}. \quad (3.8)$$

此时本征态 $k$ 由单粒子态微观占据数集 $\{n_i\}$ 定义，通过求解薛定谔方程获得：

$$\hat{H}^{(1)} \varphi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

利用二次量子化形式，态：

$$|k\rangle \propto (a_0^\dagger)^{n_0} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots |\text{vac}\rangle \quad (3.10)$$

完整指定了哈密顿量(3.8)的多体本征态。此处 $a_i^\dagger$  ( $a_i$ )是相对第 $i$ 个单粒子态的粒子产生（湮灭）算符，对玻色子满足对易关系 $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ ，对费米子满足反对易关系 $\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ ，而 $|\text{vac}\rangle$ 是粒子真空( $a_i |\text{vac}\rangle = 0$ )。

对独立粒子哈密顿量(3.8), 巨正则函数(3.2) 可精确求解。此时  $N' = \sum_i n_i$  且  $E_k = \sum_i \epsilon_i n_i$ , 其中  $\epsilon_i$  由(3.9) 解确定的单粒子本征能, 巨配分函数(3.2) 可写为:

$$Z = \sum_{n_0} (e^{\beta(\mu-\epsilon_0)})^{n_0} \sum_{n_1} (e^{\beta(\mu-\epsilon_1)})^{n_1} \dots, \quad (3.11)$$

玻色统计中求和  $\sum_n$  覆盖  $n = 0, 1, 2, \dots$ , 费米情形则限于  $n = 0, 1$ 。注意(11) 中的求和不受总粒子数限制, 因巨正则求和(2) 包含所有可能的  $N'$  值。

理想玻色气体中求和(3.11) 给出巨正则势(3.3):

$$\Omega = k_B T \sum_i \ln(1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}). \quad (3.12)$$

利用(3.5) 可计算总粒子数:

$$N = \sum_i \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} = \sum_i \bar{n}_i, \quad (3.13)$$

可写为各单粒子态平均占据数之和:

$$\bar{n}_i = -\frac{\partial}{\partial \beta \epsilon_i} \ln Z = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1}. \quad (3.14)$$

其他所有热力学函数均可轻松计算。例如能量和熵分别为:

$$E = \sum_i \frac{\epsilon_i}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} \quad (3.15)$$

和

$$\begin{aligned} \frac{S}{k_B} &= \sum_i [(1 + \bar{n}_i) \ln(1 + \bar{n}_i) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i] \\ &= \sum_i \left[ \frac{\beta(\epsilon_i - \mu)}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} - \ln(1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}) \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

结果(3.14) 给出理想玻色气体化学势的重要约束  $\mu < \epsilon_0$ , 其中  $\epsilon_0$  是单粒子哈密顿量  $H^{(1)}$  的最小本征值。违反此不等式将导致能量低于  $\mu$  的态占据数为负。当  $\mu \rightarrow \epsilon_0$  时, 最低能态占据数:

$$N_0 \equiv \bar{n}_0 = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_0 - \mu)] - 1} \quad (3.17)$$

变得越来越大。这正是玻色-爱因斯坦凝聚的起源机制。将总粒子数写为：

$$N = N_0 + N_T, \quad (3.18)$$

其中：

$$N_T(T, \mu) = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i(T, \mu) \quad (3.19)$$

是非凝聚粒子数（亦称气体热成分）。 $N_T$  值正比于态密度，随体系尺寸增大（见下文(3.23) 式）。固定 $T$  时，函数 $N_T$  作为 $\mu$  的函数行为平滑，并在 $\mu = \epsilon_0$  处达到其最大值 $N_c$ （见图3.1）。 $N_0$  行为则迥异： $N_0$  通常量级为1，但当 $\mu$  接近 $\epsilon_0$  时发散。若 $N_c = N_T(T, \mu = \epsilon_0)$  大于 $N$ ，则方程(3.18) 在 $\mu < \epsilon_0$  时满足，且 $N_0$  相对 $N$  可忽略。由于函数 $N_c(T)$  是 $T$  的增函数，此情景发生在温度高于由下式定义的临界温度 $T_c$  时：

$$N_T(T_c, \mu = \epsilon_0) = N. \quad (3.20)$$

若 $N_c(T) < N$ （等价于 $T < T_c$ ），则凝聚体贡献对满足归一化条件(3.18) 至关重要，且 $\mu$  值将在热力学（大 $N$ ）极限下趋近 $\epsilon_0$ 。温度 $T_c$  即定义为玻色-爱因斯坦凝聚现象（单粒子态宏观占据）发生的临界温度。

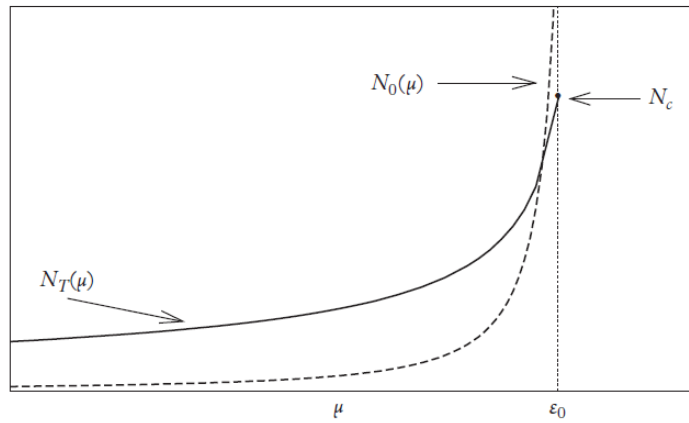


Figure 3.1: 理想气体模型。

## 3.2 盒子中的理想玻色气体

将上述形式理论应用于体积 $V$ 盒子中的理想玻色气体。此时单粒子哈密顿量形式简单：

$$H^{(1)} = \frac{p^2}{2m}, \quad (3.21)$$

在循环边界条件 $\varphi(x, y, z) = \varphi(x + L, y, z)$  等 ( $L = V^{1/3}$ ) 下，其解为平面波：

$$\varphi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (3.22)$$

能量 $\epsilon = p^2/2m$ ，动量 $\mathbf{p} = 2\pi\hbar\mathbf{n}/L$  ( $\mathbf{n}$  是分量 $n_x, n_y, n_z$  为0 或 $\pm$  整数的矢量)。最小本征值能量为零( $\epsilon_0 = 0$ )，故化学势恒为负。通过代换 $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow V/(2\pi\hbar^3) \int d\mathbf{p}$  计算 $\mathbf{p} \neq 0$  态求和，并利用变换 $p^2 = 2mk_B T x$ ，非凝聚原子数（凝聚体热损耗）可写为：

$$N_T = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{\exp[\beta(p^2/2m - \mu)] - 1} = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{\beta\mu}), \quad (3.23)$$

其中：

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (3.24)$$

为热波长，且：

$$g_{3/2}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^{1/2} \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} \quad (3.25)$$

是更一般的玻色函数类的特例：

$$g_p(z) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^\infty dx x^{p-1} \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{\ell=1}^\infty \frac{z^\ell}{\ell^p}. \quad (3.26)$$

此处 $z = \exp(\beta\mu)$  为逸度， $\Gamma(p)$  为阶乘函数 $(p-1)!$ 。函数 $g_p(z)$  满足递推关系：

$$g_p(z) = z \frac{dg_{p+1}(z)}{dz}. \quad (3.27)$$

注意在(3.23)-(3.25) 式推导中以积分替代求和仅当热能 $k_B T$  远大于单粒子能级间距（即 $k_B T \gg \hbar^2/2mV^{2/3}$ ）时成立。另注意上述结果在三维导出，低维下相应函数行为迥异。

前节讨论的BEC 判据给出玻色-爱因斯坦凝聚临界温度(3.20):

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left( \frac{n}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} \quad (3.28)$$

其中 $g_{3/2}(1) = 2.612$ 。方程(3.28) 表明, 束缚在三维盒子中的理想气体临界温度完全由密度 $n = N/V$  和组分质量决定。对 $T > T_c$ , 化学势值由(3.23) 式中设 $N_T = N$  获得:

$$g_{3/2}(z) = \lambda_T^3 n. \quad (3.29)$$

对 $T < T_c$ , 方程(3.18) 通过设 $N_T$  中 $\mu = 0$  求解。此时利用结果(3.28), 方程(3.23) 给出:

$$N_T = \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(1) V = \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} N \quad (3.30)$$

且凝聚体粒子数:

$$N_0(T) = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \quad (3.31)$$

变为宏观量 (图3.2)。类似地, 固定 $T$  时可定义临界体积:

$$v_c = \frac{\lambda_T^3}{g_{3/2}(1)}. \quad (3.32)$$

显然, 当比容 $v = 1/n$  小于 $v_c$  时发生玻色-爱因斯坦凝聚。结果(3.30) 反映玻色-爱因斯坦凝聚气体的饱和特性: 给定温度下热原子数 $N_T$  不依赖总数 $N$ , 仅由盒子体积决定。向体系添加更多原子将导致 $N_0$  增加而非 $N_T$ 。盒子中玻色-爱因斯坦凝聚气体的饱和特性已由Schmidutz 等人(2014) 实验证实。

方程(3.30) 表明低温下非凝聚粒子数 $N_T$  趋于零。这与理想气体模型(3.9) 中基态通过将所有粒子置于最低单粒子态( $N_0 = N$ ) 获得一致。但不应混淆体系处于基态的微观判据:

$$k_B T \ll (\epsilon_1 - \epsilon_0) = \frac{h^2}{2mV^{2/3}} \quad (3.33)$$

与 $N_T \ll N$  条件 (后者仅要求较弱条件 $T \ll T_c$ )。此处 $\epsilon_1$  是首个单粒子激发态能量。对大样品, 条件 $h^2/(2mV^{2/3}) \ll k_B T \ll k_B T_c$  可充分满足, 故

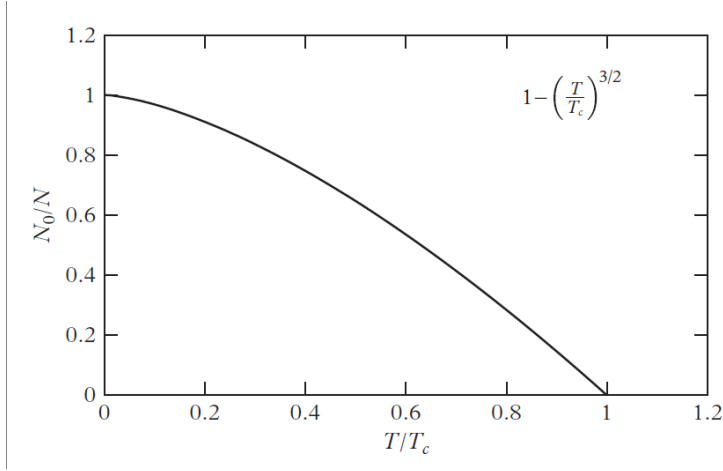


Figure 3.2: 凝聚体分数

此时玻色-爱因斯坦凝聚( $N_0$  为  $N$  量级) 也发生在这些宏观温度值。使用宏观  $T$  值对将热成分视为连续激发谱并将单粒子态求和替换为热力学函数计算中的积分至关重要。另一问题涉及  $\mu$  的精确值——在推导  $N_T$  结果(3.23) 时设为  $\epsilon_0$ 。  $\mu$  的实际值可由下式估算：

$$\epsilon_0 - \mu = k_B T \ln \left( 1 + \frac{1}{N_0} \right) \simeq \frac{k_B T}{N_0} \quad (3.34)$$

源自方程(3.17)，并表明仅当  $N_0 \rightarrow \infty$  的热力学极限下  $\mu \rightarrow \epsilon_0$ 。在  $N_T$  计算中以  $\epsilon_0$  替代  $\mu$  仅在  $(\epsilon_1 - \epsilon_0) \gg (\epsilon_0 - \mu) \sim k_B T / N_0$  (即满足  $N_0 \gg k_B T V^{2/3} 2m / h^2$ ) 时合理。

所有热力学函数现均可轻松计算。能量(3.15) 在  $T < T_c$  时为：

$$E = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(1), \quad (3.35)$$

$T > T_c$  时为：

$$E = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z), \quad (3.36)$$

其中函数  $g_{5/2}(z)$  为：

$$g_{5/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^{3/2} \frac{1}{z^{-1} e^x - 1} \quad (3.37)$$

对应  $p = 5/2$  玻色函数(3.26),  $z = 1$  时  $g_{5/2}(1) = 1.342$ 。比热  $C_V = \partial E / \partial T$  亦有简明结果:  $T < T_c$  时:

$$\frac{C_V}{k_B N} = \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda_T^3} g_{5/2}(1), \quad (3.38)$$

$T > T_c$  时:

$$\frac{C_V}{k_B N} = \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}. \quad (3.39)$$

比热在  $T_c$  处有典型尖点, 但在相变点连续 (图3.3)。因  $z \rightarrow 1$  时玻色函数  $g_{1/2}(z)$  发散。但比热连续性并非理想玻色气体普适规则。例如谐振势阱中理想玻色气体模型的比热在  $T = T_c$  处存在不连续性 (见第10 章)。

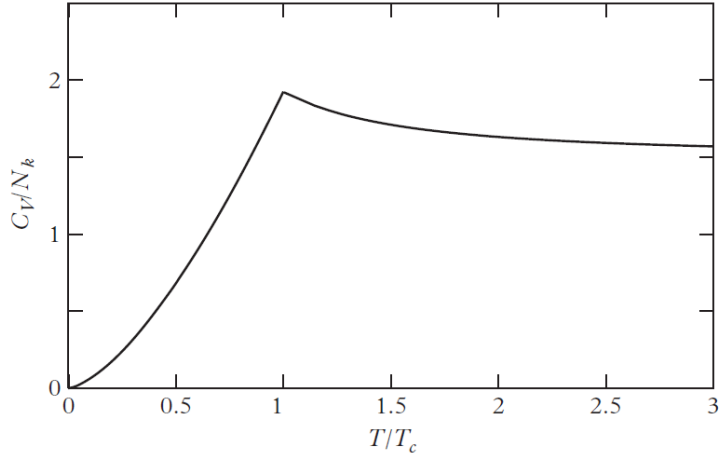


Figure 3.3: 比热

利用三维理想气体热力学关系:

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V}, \quad (3.40)$$

及气体能量结果(3.35) 和(3.36), 亦可轻松计算状态方程  $P(V)$ 。值得注意的是, 在玻色-爱因斯坦凝聚相 ( $T < T_c$ ) 中能量随体积线性增加 (见(35) 式), 故气体压强:

$$P = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(1) \quad (3.41)$$

与体积无关。这意味着BEC 相中等温压缩率 $\kappa_T = (\partial n / \partial P)_T / n$  ( $n = N/V$  为气体密度) 为无穷大。此病态特征可通过包含两体相互作用消除 (见第4章)。绝热压缩率在 $T_c$  以下仍有限, 仅当 $T \rightarrow 0$  时发散:

$$\kappa_S = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial n}{\partial P} \right)_S = \frac{3}{5g_{5/2}(1)} \frac{\lambda_T^3}{k_B T}. \quad (3.42)$$

图3.4 展示理想玻色气体状态方程。气体展现BEC 的转变线由定律 $Pv^{5/3} = (2\pi\hbar^2 m)g_{5/2}(1) / (g_{3/2}(1))^{5/3}$  确定, 亦示于图中。

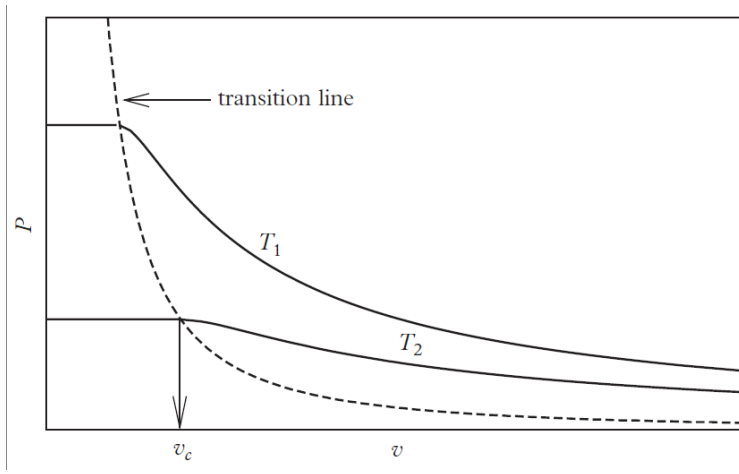


Figure 3.4: 不同温度下理想玻色气体的压强, 这里 $v = V/N$ 。

非相互作用玻色气体中亦可轻松计算非对角单粒子密度(2.1), 此为理解长程序本质的关键量:

$$n^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i \bar{n}_i \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_i(\mathbf{r}_2), \quad (3.43)$$

其中 $\varphi_i$  是薛定谔方程(3.9) 的解,  $\bar{n}_i$  为巨正则系综计算的平均占据数(3.14)。对比(2.12) 式可见, 单粒子密度矩阵的本征函数和本征值与薛定谔方程解及相应平均占据数一致。此性质亦适用于理想费米气体, 是体系非相互作用性的结果。在(3.43) 式中分离凝聚体( $i = 0$ ) 和热成分( $i \neq 0$ ) 贡献, 并对 $\varphi_i$  使用平面波解(3.22), 最终得( $\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ):  $T < T_c$  时:

$$n^{(1)}(s) = n_0 + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}/\hbar}}{e^{\beta p^2/2m} - 1}, \quad (3.44)$$

其中  $n_0 = N_0/V$  为凝聚体分数； $T > T_c$  时：

$$n^{(1)}(s) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}/\hbar}}{e^{\beta(p^2/2m-\mu)} - 1}. \quad (3.45)$$

回顾第2.1 节讨论的单粒子密度矩阵与动量分布  $n(\mathbf{p})$  关系，可立即识别理想玻色气体动量分布。在玻色-爱因斯坦凝聚相 ( $T < T_c$ )：

$$n(\mathbf{p}) = N_0\delta(\mathbf{p}) + \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta p^2/2m} - 1}, \quad (3.46)$$

$T > T_c$  时：

$$n(\mathbf{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta(p^2/2m-\mu)} - 1}. \quad (3.47)$$

$T < T_c$  时动量分布中  $\delta$  函数的存在是玻色-爱因斯坦凝聚的明确特征。

讨论单粒子密度矩阵  $n^{(1)}(s)$  在大距离行为颇具意义。此行为由动量分布的低  $\mathbf{p}$  行为决定。 $T < T_c$  时可利用低  $p$  展开：

$$\frac{1}{\exp[\beta p^2/2m] - 1} \approx \frac{2mk_B T}{p^2}, \quad (3.48)$$

故方程(3.44) 在大  $s$  处以  $1/s$  行为为特征：

$$n^{(1)}(s) \rightarrow n_0 + \frac{1}{(2\pi)^3 \lambda_T^2} \frac{1}{s}, \quad (3.49)$$

其中  $\lambda_T$  为热波长(3.24)。需注意动量分布的  $1/p^2$  红外发散并非理想玻色气体特有。第16 章将证明此行为是有限温度玻色-爱因斯坦凝聚的普遍结果，亦适用于相互作用体系。

为讨论  $T_c$  以上单粒子密度行为，宜通过复平面积分

$Vn^{(1)}(s) = (4\pi/s) \int_0^\infty n(p)p \sin(ps/\hbar)dp = (2\pi/s) \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} n(p)pe^{ips/\hbar} dp$  计算动量分布的傅里叶变换(2.8)。将积分围道移入上半平面，积分的大  $s$  主导贡献来自第一极点  $p = ip_c$  ( $p_c = \sqrt{2m|\mu|}$ )。在奇点附近：

$$n(p) \approx \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2mk_B T}{p^2 + p_c^2}, \quad (3.50)$$

积分给出汤川型渐近律：

$$n^{(1)}(s) \propto \frac{e^{-p_c s/\hbar}}{s}, \quad (3.51)$$

适用于  $s \gg \hbar/p_c$ 。上述结果明确显示：  $T > T_c$  时单粒子密度在微观距离内趋于零（距离由化学势固定）；仅当  $T < T_c$  时，因玻色-爱因斯坦凝聚 ( $n_0 \neq 0$ )，其在宏观距离仍非零。

结果(3.44) 和(3.45) 在薛定谔方程解施加循环边界条件下导出。另一选择是设波函数  $\varphi$  在盒子边界消失（狄利克雷边界条件），对应无限高墙盒子。宏观体系（大  $N, V$ ）的热力学行为应不依赖边界条件选择（预期仅改变边界微观距离处的性质）。但理想玻色气体是例外，因凝聚体波函数形状对边界性质极度敏感。自由粒子哈密顿量  $p^2/2m$  的基态波函数服从狄利克雷边界条件（即边界处  $\varphi = 0$ ）：

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right), \quad (3.52)$$

其中  $x, y, z$  在  $[0, L]$  区间定义。方程(3.52) 显示凝聚体贡献  $N_0|\varphi_0|^2$  在体系尺寸量级的宏观长度上展现非均匀行为，与循环边界条件的均匀行为截然不同（图3.5）。理想玻色气体模型对边界条件的敏感性反映其在BEC 相的无限压缩率。第11.1 节将表明，包含两体相互作用可恢复凝聚体的均匀性（边界微观距离除外）。

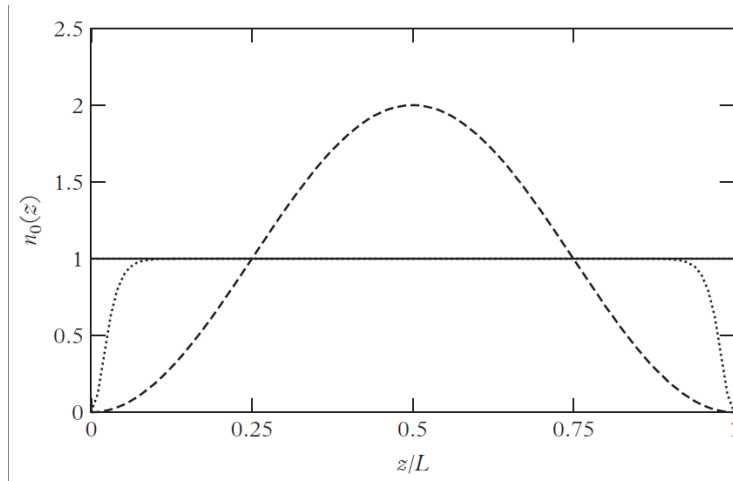


Figure 3.5: 密度剖面

### 3.3 涨落与双粒子密度

前节讨论了理想玻色气体模型预言的单粒子密度(2.1) 行为。理想玻色气体的有趣特征是单粒子密度 $n^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  也决定双粒子密度行为:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (3.53)$$

这可通过将场算符按单粒子算符 $\hat{a}_i$  展开 (见方程2.20) 并计算相应粒子算符乘积期望值说明:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m,n,k,l} \varphi_m^*(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}') \varphi_k^*(\mathbf{r}') \varphi_l^*(\mathbf{r}) \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l \rangle. \quad (3.54)$$

先考虑 $T_c$  以上的理想玻色气体。此时平均值可安全地用巨正则系综计算 (各本征态 $\varphi_i(\mathbf{r})$  统计独立占据)。仅 $k = m, l = n$  和 $k = n, l = m$  项对(3.54) 有非零贡献, 由巨配分函数表达式(3.11) 得简单关系:

$$\langle \hat{n}_i \hat{n}_k \rangle - \bar{n}_i \bar{n}_k = \frac{\partial^2}{\partial(\beta\epsilon_i) \partial(\beta\epsilon_k)} \ln Z = \delta_{ik} \bar{n}_i (\bar{n}_i + 1), \quad (3.55)$$

其中 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ ,  $\bar{n}_i = \langle \hat{n}_i \rangle$  为平均占据数(3.14)。可证双粒子关联函数形式为:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') + |n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2, \quad (3.56)$$

其中第二项为量子统计交换项, 并利用了非对角单粒子密度结果(3.43)。这体现玻色子成团倾向 (聚束效应)。费米子情形此项为负, 反映泡利不相容原理后果。当 $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$  时, 它对配对关联函数值的贡献相对无关联结果 $n^2(\mathbf{r})$  产生因子2 的增加。

临界温度以下需更谨慎处理, 因理想气体无限压缩率导致巨正则系综无法正确描述凝聚体原子涨落。此时凝聚体原子涨落不应由(3.55) 式计算, 而应使用结果:

$$\langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \rangle - \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle = O(N), \quad (3.57)$$

与第2.2 节讨论的博戈留波夫方案一致。 $T < T_c$  时双粒子密度取不同形式:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') + |n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 - n_0(\mathbf{r})n_0(\mathbf{r}'), \quad (3.58)$$

其中 $n_0(\mathbf{r})$ 为凝聚体原子密度。方程(3.56-3.58)在均匀与非均匀玻色气体中均成立。 $T = 0$ 时 $n(\mathbf{r}) = n_0(\mathbf{r})$ , (3.58)式简化为 $n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2$ , 展现完美的二阶相干性。特别当 $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ 时,  $n^2(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = n^2(\mathbf{r})$ , 比 $T_c$ 以上相应值小因子2。

有限温度玻色气体中的聚束现象已由Schellekens 等人(2005) 实验观测——他们在原子气体中重复著名的Hanbury-Brown 和Twiss (1956) 光子实验, 测量了膨胀云中玻色-爱因斯坦凝聚阈值上下原子的双粒子关联。费米子样品的类似实验则指出相反的抗聚束效应(Jeltes 等人, 2007)。

结果(3.55) 可用于显式计算非凝聚原子总数 $N_T = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i$  的涨落:

$$\Delta(N_T^2) = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i(\bar{n}_i + 1). \quad (3.59)$$

盒子势情形中,  $T > T_c$  时可安全以积分 $(V/(2\pi\hbar)^3) \int d\mathbf{p}$  替代求和 $\sum_{\mathbf{p}}$ , (3.59) 式与盒子体积 $V$  成正比。 $T \leq T_c$  (即存在玻色-爱因斯坦凝聚) 时情况不同。此时单粒子态占据数为 $\bar{n}_{\mathbf{p}} = (\exp(\beta p^2/2m) - 1)^{-1}$ , 且在 $p$  小时 $\bar{n}_{\mathbf{p}}(\bar{n}_{\mathbf{p}} + 1)$  以 $1/p^4$  发散。故无法通过常规代换 $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow (V/(2\pi\hbar)^3) \int d\mathbf{p}$  计算求和(3.59)。求和(3.59) 的主贡献来自 $\hbar/L \sim \hbar/V^{1/3}$  量级的低动量, 暗示热成分涨落遵循独特规律:

$$\Delta(N_T^2) \propto \frac{m^2(k_B T)^2 V^{4/3}}{\hbar^4}, \quad (3.60)$$

故大于广延量的常规值。但相对涨落 $\Delta(N_T^2)/N_T^2$  在热力学极限下仍趋于零 (因 $N_T$  随体积线性增加)。 $\Delta(N_T^2)$  展现的独特依赖(3.60) 是玻色-爱因斯坦凝聚的非平庸结果, 且在正则系综中仍保持 (其中单粒子态平均占据数(3.14) 和热成分涨落(3.60) 均可精确导出)。

如前所述, 凝聚体原子数涨落无法在巨正则系综计算 (因(3.55) 式将预言非物理病态结果 $\Delta(N_0^2) = N_0(N_0 + 1)$ )。 $\Delta(N_0^2)$  值可在正则系综安全计算 (其中总数 $N = N_0 + N_T$  不涨落), 故得简单结果 $\Delta(N_0^2) = \Delta(N_T^2)$ 。此时凝聚体涨落遵循与热成分相同的规律(3.60), 且在 $T \rightarrow 0$  时消失。

上述结果对理想玻色气体导出。Giorgini 等人(1998) 讨论了两体相互作用效应, 证明存在相互作用时涨落仍遵循相同规律(3.60)。



# Chapter 4

## 弱相互作用玻色气体

前一章讨论的理想玻色气体是一个非常特殊的系统。只需记住，在存在玻色-爱因斯坦凝聚的情况下，它具有无限的可压缩性。因此，即使对于非常稀薄的样品，粒子之间的相互作用也会以剧烈的方式影响气体的性质，这并不奇怪。另一方面，近理想玻色气体的问题并非平凡，因为在没有相互作用时其基态能量为零，传统的微扰技术无法应用。这个问题由博戈留波夫(Bogoliubov) (1947) 解决。博戈留波夫理论基于一种新的微扰技术，并为现代处理稀薄气体中玻色-爱因斯坦凝聚的方法奠定了基础。描述该理论是本章的主要目的。

### 4.1 最低阶近似：基态能量和状态方程

让我们讨论稀薄气体的一些普遍特征。在这些系统中，以下条件成立（稀薄条件）：

$$r_0 \ll d, \quad (4.1)$$

其中 $r_0$  是原子间力的作用范围， $d = n^{-1/3}$  是由气体密度 $n = N/V$  确定的粒子间平均距离。这个条件允许我们只考虑涉及成对相互作用的粒子构型，而可以安全地忽略三个或更多粒子同时相互作用的构型。第二个重要推论是，两个粒子之间的距离总是足够大，足以证明使用由其相对运动波函数的渐近表达式是合理的，该波函数由散射振幅确定。这意味着系统的所有性质都可以用这个量来表示，并且动量的相关值应始终满足不等

式 $pr_0/\hbar \ll 1$ 。在这样的动量下，散射振幅变得与能量以及散射角无关，并且可以安全地替换为其低能值，根据标准散射理论，该值由 $s$ 波散射长度 $a$ 决定（见第9.2节）。总之，人们期望一个单一参数，即 $s$ 波散射长度 $a$ ，能够表征相互作用对气体物理性质的所有影响。

通常，散射长度与粒子间平均距离相比，可以很小也可以很大。如果满足条件

$$|a| \ll d \quad (4.2)$$

则该气体可被视为弱相互作用的。这等价于要求所谓的气体参数 $n|a|^3$ 很小。在接近费什巴赫共振相互作用的稀薄气体中，可能会出现不同的情况，其中不等式(4.1)仍然成立，但条件(4.2)通常不满足（见第9.2节）。满足相反条件 $|a| \gg d$ 的大散射长度相互作用气体的一个重要例子是么正费米气体(unitary Fermi gas)（见第16.6节）。

让我们用场算符 $\hat{\Psi}$ 写出系统的哈密顿量：

$$\hat{H} = \int \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}' d\mathbf{r}, \quad (4.3)$$

其中 $V(\mathbf{r})$ 是两体势，并且目前我们还没有包括外场。对于占据体积 $V$ 的均匀气体，场算符可以方便地写成以下形式：

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}, \quad (4.4)$$

其中 $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ 是湮灭动量为 $\mathbf{p}$ 的单粒子态上粒子的算符，并且 $\mathbf{p}$ 的值满足通常的循环边界条件。将(4.4)代入(4.3)给出哈密顿量的等价表达式

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} \sum V_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \quad (4.5)$$

其中 $V_{\mathbf{q}} = \int V(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar] d\mathbf{r}$ 。在实际系统中，原子间势总是包含一个短程项，这使得在微观水平上求解薛定谔方程变得困难。特别是，慢粒子的散射无法使用微扰理论解决。另一方面，根据上述关于稀薄判据的讨论，我们得出结论，只要势能给出正确的 $s$ 波散射长度值，两体势的实际形式对于描述气体的宏观性质并不重要。为了以最简单的方式推导多体形式，因此方便地用有效的软势 $V_{eff}$ 替换微观势 $V$ （见图4.1），微扰理论可以安

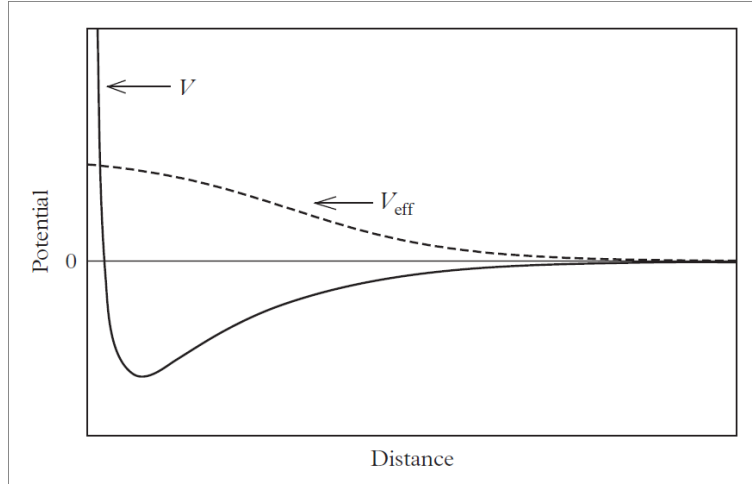


Figure 4.1: 原子间势 $V$ （实线）和有效势 $V_{eff}$ 的示意图。 $V$ 和 $V_{eff}$ 产生相同的 $s$ 波散射长度 $a$ 。为了应用博戈留波夫理论，两种势的范围应远小于平均距离 $n^{-1/3}$ 。

全地应用于此。由于物理性质必须唯一地依赖于散射长度的值，只要涉及到系统的宏观性质，此过程将为多体问题提供正确的答案。

由于在多体问题的求解中只涉及小动量，我们可以只考虑 $V_{eff}$ 的傅里叶变换的 $q = 0$ 值：

$$V_0 = \int V_{eff}(r) d\mathbf{r} \quad (4.6)$$

并将哈密顿量写成以下形式：

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2V} V_0 \sum \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}. \quad (4.7)$$

该理论现在的关键点是使用博戈留波夫假定，即在哈密顿量(4.7)中用 $c$ -数替换算符 $\hat{a}_0$ ：

$$\hat{a}_0 \equiv \sqrt{N_0} \quad (4.8)$$

这种替换不能用于真实的势，因为在短距离（量级为 $r_0$ ）上，势很强且量子关联很重要，这样做会导致糟糕的近似。相反，对于其微扰在所有距离上都较小的软势，这种替换是精确的。在 $T = 0$ 的理想气体中，所有原子都处于凝聚体中，且 $N_0 = N$ 。在稀薄气体中，对于 $\mathbf{p} \neq 0$ 的态，占据数是有限但很小的。这意味着，在第一近似下，我们可以在哈密顿

量(4.7) 中忽略所有包含算符 $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  和 $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$  (其中 $\mathbf{p} \neq 0$ ) 的项。由于在同一近似下, 有 $N_0 \sim N$ , 因此可以用 $\sqrt{N}$  替换 $\hat{a}_0$ , 基态能量取以下形式

$$E_0 = \frac{N^2 V_0}{2V} . \quad (4.9)$$

在同一阶近似下, 使用玻恩近似的结果 $V_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ , 可以很容易地将(4.9) 中的参数 $V_0$  用散射长度 $a$  表示。基态能量(4.9) 可以重写为

$$E_0 = \frac{1}{2} N g n , \quad (4.10)$$

其中 $n = N/V$  是气体密度, 并且我们引入了相关的相互作用耦合常数

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} , \quad (4.11)$$

由 $s$  波散射长度 $a$  确定。

根据本章第一部分提出的考虑, 将基态能量与 $s$  波散射长度联系起来的结果(4.10) 和(4.11), 对于任意相互作用都是有效的, 包括硬球势的极端情况。相反, 散射长度与参数 $V_0$  之间的关系 $V_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$  仅在一阶玻恩近似适用时才成立。

方程(4.10) 表明, 与理想情况相反, 弱相互作用玻色气体的压力在零温下不为零:

$$P = - \frac{\partial E_0}{\partial V} = \frac{g n^2}{2} . \quad (4.12)$$

相应地, 可压缩性也是有限的:

$$\frac{\partial n}{\partial P} = \frac{1}{g n} \quad (4.13)$$

并且当 $g \rightarrow 0$  时趋于无穷大。使用可压缩性的流体动力学关系

$$\frac{1}{m c^2} = \frac{\partial n}{\partial P} \quad (4.14)$$

可以得到声速的重要表达式

$$c = \sqrt{\frac{g n}{m}} \quad (4.15)$$

在下一节中, 我们将证明 $c$  的这个结果与从长波长极限下元激发的色散关系出发得到的值一致。

热力学稳定性条件意味着量 $\partial n/\partial P$ 必须为正, 即 $a > 0$ 。于是我们得出一个重要结论: 只有当 $s$ 波散射长度的值为正时, 稀薄的均匀玻色-爱因斯坦凝聚气体才能存在。在第11.6节中, 我们将证明, 在存在外场的情况下, 如果散射长度为负且足够小, 玻色-爱因斯坦凝聚气体也可以以亚稳态构型存在。

最后重要的是要指出, 与理想气体不同, 相互作用气体的化学势不等于零, 而是由下式给出:

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = gn, \quad (4.16)$$

并且在零温下总是正的。使用声速结果(4.15), 稀薄玻色气体的化学势也可以写为

$$\mu = mc^2. \quad (4.17)$$

结果(4.17)仅对稀薄玻色气体成立。通常, 化学势与 $T = 0$ 声速之间的关系由公式 $mc^2 = n\partial\mu/\partial n$ 给出。

## 4.2 高阶近似：激发谱和量子涨落

基态能量结果(4.10)是通过在方程(4.7)中仅考虑 $\mathbf{p} = 0$ 的粒子算符 $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ 和 $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ 而得到的。在哈密顿量(4.7)中, 仅包含一个 $\mathbf{p} \neq 0$ 的粒子算符的项不会出现, 因为动量守恒。通过保留 $\mathbf{p} \neq 0$ 的粒子算符中的所有二次项, 我们得到哈密顿量的以下分解:

$$\hat{H} = \frac{V_0}{2V} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{V_0}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (4\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}}). \quad (4.18)$$

如前所述, 我们可以在方程(4.18)的第三项中用 $\sqrt{N}$ 替换 $\hat{a}_0^\dagger$ 和 $\hat{a}_0$ 。然而, 在第一项中, 必须使用归一化关系 $\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} = N$ 或忽略高阶项,

$$\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 = N^2 - 2N \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}. \quad (4.19)$$

当超越最低阶玻恩近似, 寻找 $V_0$ 和散射长度 $a$ 之间的关系时, 也会发生类似的情况。在这种情况下, 必须计算 $a$ 至 $V_0$ 的二次项。使用高阶微扰理论,

得到结果（例如，见Landau and Lifshitz, 1987b）：

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left( V_0 - \frac{V_0^2}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{m}{p^2} \right) \quad (4.20)$$

或者，以等效精度，

$$V_0 = g \left( 1 + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{m}{p^2} \right), \quad (4.21)$$

其中 $g$  通过方程(4.11) 与散射长度相关。方程(4.21) 重整化了有效势与物理耦合常数 $g$  之间的关系。在方程(4.21) 的求和中，对于大的 $\mathbf{p}$  出现的发散是矩阵元 $V_{\mathbf{q}}$  被常数值 $V_0$  替换的结果。这一项对于确保在更高阶近似下计算的基态能量（见下面的方程(4.30)）得到收敛结果至关重要。

将方程(4.19) 和(4.21) 代入(4.18) 得到哈密顿量的以下表达式：

$$\hat{H} = g \frac{N^2}{2V} + \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} g n \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left( 2 \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \frac{m g n}{p^2} \right), \quad (4.22)$$

该式被证明唯一地由相互作用耦合常数 $g$  确定。哈密顿量(4.22) 在算符 $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$  中是二次型的，可以通过线性变换对角化

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} + v_{-\mathbf{p}}^* \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger = u_{\mathbf{p}}^* \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger + v_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}, \quad (4.23)$$

这被称为博戈留波夫变换。这个变换引入了一组新的算符 $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  和 $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$ ，我们要求它们满足与原始粒子算符 $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  和 $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$  所遵守的相同的玻色对易关系 $\hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}'}^\dagger - \hat{b}_{\mathbf{p}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ 。很容易检查，如果满足

$$|u_{\mathbf{p}}|^2 - |v_{-\mathbf{p}}|^2 = 1, \quad (4.24)$$

即如果能够写成

$$u_{\mathbf{p}} = \cosh \alpha_{\mathbf{p}}, \quad v_{-\mathbf{p}} = \sinh \alpha_{\mathbf{p}}. \quad (4.25)$$

(4.25) 则满足对易关系。选择参数 $\alpha_{\mathbf{p}}$  是为了使哈密顿量(4.22) 中非对角项 $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger$  和 $\hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}}$  的系数消失。这个条件的形式为

$$\frac{g n}{2} (|u_{\mathbf{p}}|^2 + |v_{-\mathbf{p}}|^2) + \left( \frac{p^2}{2m} + g n \right) u_{\mathbf{p}} v_{-\mathbf{p}} = 0. \quad (4.26)$$

(4.26) 利用性质  $\cosh 2\alpha = \cosh^2 \alpha + \sinh^2 \alpha$  和  $\sinh 2\alpha = 2 \cosh \alpha \sinh \alpha$ ，可以立即发现方程(4.26) 通过选择

$$\coth 2\alpha_{\mathbf{p}} = -\frac{p^2/2m + gn}{gn} \quad (4.27)$$

来求解，并且系数  $u_p$  和  $v_p$  的显式形式变为

$$u_{\mathbf{p}}, v_{-\mathbf{p}} = \pm \left( \frac{p^2/2m + gn}{2\epsilon(p)} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2}, \quad (4.28)$$

其中  $\epsilon(p)$  由下面的方程(4.31) 定义。凭借博戈留波夫变换(4.23) 和  $u_{\mathbf{p}}$  与  $v_{-\mathbf{p}}$  的结果(4.28)，哈密顿量(4.22) 最终可以简化为对角形式

$$\hat{H} = E_0 + \sum \epsilon(p) \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}}, \quad (4.29)$$

其中

$$E_0 = g \frac{N^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \left[ \epsilon(p) - gn - \frac{p^2}{2m} + \frac{m(gn)^2}{p^2} \right] \quad (4.30)$$

是在更高阶近似下计算的基态能量，而

$$\epsilon(p) = \left[ \frac{gn}{m} p^2 + \left( \frac{p^2}{2m} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.31)$$

是著名的博戈留波夫(Bogoliubov) 色散律，描述系统的元激发(Bogoliubov, 1947)。结果(4.29)-(4.31) 具有深刻的物理意义。它们表明，原始的相互作用粒子系统可以用独立准粒子的哈密顿量来描述，这些准粒子具有能量  $\epsilon(\mathbf{p})$ ，其湮灭和产生算符分别由  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$  和  $\hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger$  给出。相互作用系统的基态则对应于准粒子的真空：

$$\hat{b}_{\mathbf{p}} |vac\rangle = 0 \quad (4.32)$$

对于任何  $\mathbf{p} \neq 0$ 。基态能量(4.30) 可以通过在动量空间中求和替换为积分来轻松计算。结果是(Lee and Yang, 1957; Lee et al., 1957)

$$E_0 = g \frac{N^2}{2V} \left[ 1 + \frac{128}{15\sqrt{\pi}} (na^3)^{1/2} \right], \quad (4.33)$$

而化学势  $\mu = \partial E_0 / \partial N$  由下式给出：

$$\mu = gn \left[ 1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}} (na^3)^{1/2} \right]. \quad (4.34)$$

不难看出, 在产生上述结果的积分中, 只有值  $p \sim \sqrt{mgn} = mc$  是重要的。对于这样的动量, 参数  $pa/\hbar \sim (na^3)^{1/2}$  远小于1, 这与我们最初的假设一致。这为重整化散射长度(4.20) 的计算中, 用  $V_0$  替换  $V_q$  提供了后验的合理性。还值得指出的是, 展开式(4.33) 的微扰参数由  $(na^3)^{1/2}$  给出。可以证明, 展开式中的下一项与  $(na^3) \ln(na^3)$  成正比。对数前面的系数也可以用适当的精度计算出来。而对数内部的系数则取决于相互作用的细节(Wu, 1959)。

李-黄-杨(Lee-Huang-Yang, LHY) 展开(4.33)-(4.34) 也可以表述为以下形式:

$$P(\mu, a) = \frac{\hbar^2}{ma^5} h(\nu), \quad (4.35)$$

其中  $\nu = \mu a^3/g = \mu m a^2/(4\pi\hbar^2)$  且

$$h(\nu) = 2\pi\nu^2 \left( 1 - \frac{128}{15\sqrt{\pi}} \sqrt{\nu} \right), \quad (4.36)$$

这利用了玻色气体压力对散射长度和化学势的依赖性。在这种形式下, 状态方程非常适合与囚禁原子气体中的可用实验数据进行直接比较。方程(4.36) 中的第一项对应于博戈留波夫理论预测的平均场结果, 而第二项是LHY 修正。从囚禁原子气体的密度分布出发, 实验上获得均匀物质状态方程的方法将在第13.6 节讨论。在图4.2 中, 我们报告了纳冯(Navon) 等人(2011) 在最低可用温度下获得的实验结果, 这些结果与理论相当吻合, 定量地指出了超越平均场效应在稀薄玻色-爱因斯坦凝聚气体状态方程中所起的作用。

我们经常将(4.10) 或(4.33) 称为相互作用多体系统的基态能量。然而, 这种说法并不完全正确。事实上, 众所周知, 大多数与原子间势相互作用的物理系统的基态并不对应于气体, 而是对应于固体。对于这样的系统, 量子简并区域的气相实际上只代表一种亚稳态构型, 其中热化由两体碰撞确保。上面讨论的博戈留波夫理论描述了这种亚稳态相。该理论忽略了在实际系统中最终会将系统驱动到固体构型的三体碰撞。对几种原子物种进行的实验不仅证明了量子气相可以实现, 而且它可以存活足够长的时间以允许对许多相关物理量进行系统测量。考虑到这一点, 我们在下文中将(4.32) 和(4.33) 分别称为系统的基态和基态能量。

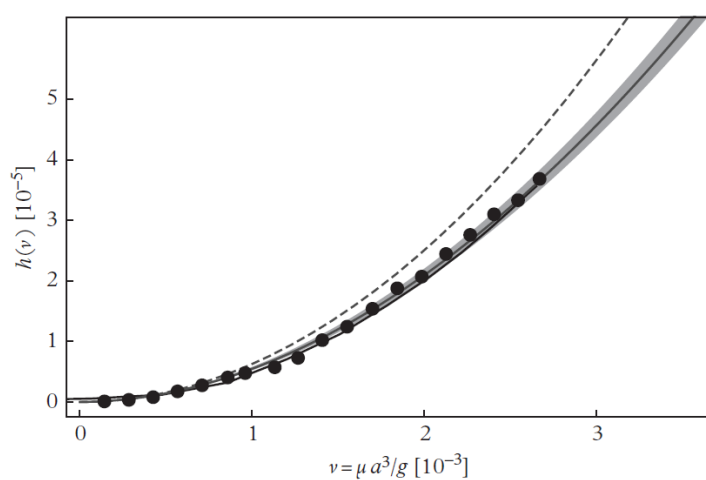


Figure 4.2: 均匀玻色气体的实验状态方程(EoS)，表示为归一化压力 $h$ 作为气体参数 $\nu$ 的函数（见正文）。实线对应于LHY 预测，虚线对应于平均场EoS  $h(\nu) = 2\pi\nu^2$ 。在 $T/T_c = 0.25$  时获得的量子蒙特卡罗(QMC) EoS 的预测几乎与LHY EoS 无法区分。来自Navon 等人(2011)。转载自《物理评论快报》(Physical Review Letters), 107, 135301; 2011, 美国物理学会(American Physical Society)，获得许可。

### 4.3 粒子和元激发

在前一节中，我们已经表明，相互作用玻色气体的激发态可以用非相互作用的准粒子气体来描述（见方程(4.29)）。

对于小动量  $p \ll mc$ ，准粒子的色散律(4.31) 取类声子形式

$$\epsilon(p) = cp. \quad (4.37)$$

其中  $c = \sqrt{gn/m}$  是声速，与从状态方程(4.12) 推导出的结果(4.15) 一致。因此，博戈留波夫理论预测相互作用玻色气体的长波长激发是声波。这些激发也可以被视为与玻色-爱因斯坦凝聚引起的规范对称性破缺相关联的戈德斯通(Goldstone) 模。还值得注意的是，在声子区域，表征博戈留波夫变换(4.23) 的系数(4.28) 表现出发散的红外行为： $u_{\mathbf{p}} \rightarrow -v_{-\mathbf{p}} \rightarrow (mc/2p)^{1/2}$ 。这反映了在声子区域，博戈留波夫变换相对于理想气体在元激发的性质上引入了剧烈的修改。

在相反的极限  $p \gg mc$  下，色散律接近自由粒子律：

$$\epsilon(p) \approx \frac{p^2}{2m} + gn. \quad (4.38)$$

相应地，有  $|v_{-\mathbf{p}}| \ll u_{\mathbf{p}} \sim 1$  和  $a_{\mathbf{p}} \sim b_{\mathbf{p}}$ 。

声子区域和粒子区域之间的过渡发生在  $p^2/2m \sim gn = mc^2$  时，即  $p \sim mc$  时（见图4.3）。通过令  $p^2/2m = gn$  且  $p = \hbar/\xi$ ，可以定义特征相互作用长度

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mgn}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{mc}, \quad (4.39)$$

(4.39) 也称为愈合长度。这个量的物理意义将在第5章讨论。

独立激发（准粒子）气体的热力学行为可以很容易地获得，从第3.1 节为理想气体推导的结果出发，只需将化学势设为零，并使用表达式(4.31) 作为元激发的能量。在低温下这个假设是正确的，此时元激发彼此不相互作用，可以安全地使用博戈留波夫色散律(4.31)。

携带动量  $\mathbf{p}$  的准粒子的平均占据数  $N_{\mathbf{p}}$  由下式给出（见方程(3.14)）

$$N_{\mathbf{p}} \equiv \langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{\exp[\beta\epsilon(p)] - 1}. \quad (4.40)$$

这不应与粒子平均占据数 $\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle$ （见下面的方程(4.43)）混淆。在这方面值得注意的是，准粒子气体的化学势根据定义为零，因为它们的数量不是固定的，而是由热力学平衡条件决定，类似于普朗克(Planck)的黑体辐射定律。通过在方程(3.15)-(3.16)中设 $\mu = 0$ ，我们还可以评估与准粒子气体相

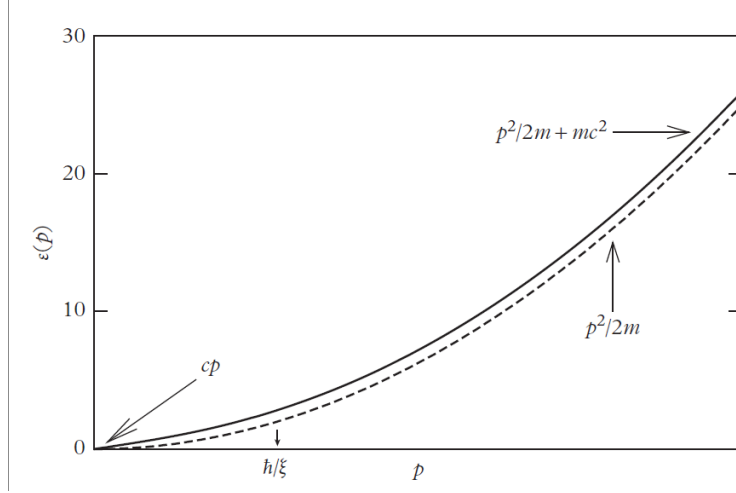


Figure 4.3: 元激发的博戈留波夫色散（见方程(4.31)，其中 $gn = mc^2$ ）。声子区域( $cp$ )和自由粒子区域( $p^2/2m$ )之间的过渡发生在 $p \sim \hbar/\xi$ 处。能量以 $mc^2$ 为单位。

关的自由能 $A = E - TS$ 。我们得到

$$A(T, V) = E_0 + k_B T V \int \ln [1 - e^{-\beta \epsilon(p)}] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (4.41)$$

其中我们添加了系统在零温下评估的能量 $E_0$ （基态能量）。请注意， $A$ 的热贡献受到两体相互作用的影响，因为 $\epsilon(p)$ 依赖于相互作用耦合常数 $g$ （见方程(4.31)）。方程(4.41)的低 $T$ 展开给出结果

$$A = E_0 - V \frac{\pi^2 (k_B T)^4}{90 \hbar^3 c^3}, \quad (4.42)$$

适用于 $k_B T \ll mc^2$ 。方程(4.42)再现了声子区域中比热的特征性 $T^3$ 定律。这不同于理想气体的预测，后者的比热行为类似于 $T^{3/2}$ 。

如前所述，区分由(4.40)给出的准粒子占据数 $\langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle$ 和粒子占据数 $\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle$ （已在第2.2节引入并直接与粒子动量分布相关）是很重要的。

这可以通过使用博戈留波夫变换(4.23) 将算符 $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}$  用算符 $\hat{b}$  和 $\hat{b}^\dagger$  表示来轻松计算。由于平均值 $\langle \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}} \rangle$  和 $\langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger \rangle$  恒为零, 我们很容易得到有用的关系式

$$n_{\mathbf{p}} = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = |v_{-\mathbf{p}}|^2 + |u_{\mathbf{p}}|^2 \langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle + |v_{-\mathbf{p}}|^2 \langle \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{p}} \rangle, \quad (4.43)$$

适用于 $p \neq 0$ 。凝聚体中的原子数可以通过关系式计算

$$N_0 = N - \sum_{\mathbf{p} \neq 0} n_{\mathbf{p}} = N - \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \left[ |v_{\mathbf{p}}|^2 + \frac{|u_{\mathbf{p}}|^2 + |v_{-\mathbf{p}}|^2}{\exp[\beta\epsilon(p)] - 1} \right], \quad (4.44)$$

其中我们使用了结果(4.40) 表示 $\langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle$ 。气体中的相互作用导致即使在绝对零度(此时 $\langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle = 0$ ) 也存在具有非零动量的粒子。这是量子涨落的结果, 由方程(4.43) 右边的第一项解释。使用 $v_{-\mathbf{p}}$  的结果(4.28), 我们发现, 在 $T = 0$  时, 粒子占据数由下式给出:

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{p^2/2m + mc^2}{2\epsilon(p)} - \frac{1}{2}. \quad (4.45)$$

方程(4.45) 在小动量处表现出奇异行为:

$$(n_{\mathbf{p}})_{p \rightarrow 0} = \frac{mc}{2p}. \quad (4.46)$$

在第7.4 节中, 我们将证明这种红外发散不是稀薄玻色气体的特性, 而是零温下玻色-爱因斯坦凝聚系统表现出的普遍性质。在高动量下, 我们反而发现渐近行为

$$(n_{\mathbf{p}})_{p \rightarrow \infty} = \frac{m^2 c^2}{p^4}, \quad (4.47)$$

适用于 $p \gg mc$ 。对于所谓的反常粒子分布 $\tilde{n}_{\mathbf{p}} = \langle \tilde{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \tilde{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger \rangle$ , 也得到了一个简单结果:  $\tilde{n}_{\mathbf{p}} = mc^2/2\epsilon(p)$ 。

在 $T = 0$  时对(4.44) 积分, 得到凝聚体密度的结果

$$n_0 \equiv \frac{N_0}{V} = n \left[ 1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (na^3)^{1/2} \right] \quad (4.48)$$

表明凝聚体的量子亏损由表征基态能量一阶修正的相同参数 $\sqrt{na^3}$  确定(见方程(4.33))。与能量的LHY 展开(4.33) 不同, 凝聚体分数的第一阶修正不需要散射长度的重整化。这是因为, 在最低阶,  $n_0$  的值不依赖于 $a$ , 等于总密度 $n$ 。还值得注意的是, 积分 $\int d\mathbf{p} |v_{-\mathbf{p}}|^2$  由高达 $p \sim mc$  的动量贡

献，这与博戈留波夫理论的适用性一致。在大动量下结果(4.48) 的收敛性由粒子动量分布(4.45) 在大动量下表现为 $1/p^4$  这一事实（见方程(4.47)）确保。然而，收敛非常缓慢，需要积分到 $p \sim 10mc$  才能饱和积分的90%。由于 $n_{\mathbf{p}}$  的 $1/p^4$  行为，动能

$$\langle KE \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} n_{\mathbf{p}} \quad (4.49)$$

表现出紫外发散，这表明该量无法从粒子动量分布的博戈留波夫预测开始计算，并且对包含更微观尺度上的动态关联敏感。在 $T = 0$  时动能的实际值可以用散射长度 $a$  对原子质量的依赖性表示。实际上，根据精确恒等式 $\langle KE \rangle = m^{-1} \partial E_0 / \partial m^{-1}$ ，其中 $E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle$  是基态能量，并使用 $E_0$  的结果(4.10)，我们找到了非平凡的恒等式(Cherny and Shanenko, 2000)

$$\langle KE \rangle = 2\pi \frac{\hbar^2}{m} N n \frac{\partial(am^{-1})}{\partial m^{-1}}. \quad (4.50)$$

在气体与硬球势相互作用的情况下，其中 $a$  与 $m$  无关，方程(4.50) 直接表明动能与总能 $E_0$  一致。还值得注意的是，与动能的计算不同，在总能（动能加相互作用能）的求和(4.30) 中没有遇到紫外发散，该量在博戈留波夫方法中可以安全评估（见方程(4.33)）。

从 $T = 0$  结果(4.45) 出发，可以计算单体密度矩阵（见第2 章）。使用方程(2.8) 以及动量分布 $n(\mathbf{p})$  与粒子占据数 $n_{\mathbf{p}}$  之间的关系(2.17)，得到结果

$$n^{(1)}(s) = n_0 + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} |v_{-\mathbf{p}}|^2 e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}/\hbar} = n_0 + \frac{1}{\xi^3} D(s/\xi), \quad (4.51)$$

其中 $\xi$  是愈合长度(4.39)，并且我们定义了无量纲函数

$$D(\tilde{s}) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk \left( \frac{1+k^2}{\sqrt{k^4+2k^2}} - 1 \right) e^{i\tilde{s}\cdot k} \quad (4.52)$$

其中设 $k = p\xi/\hbar$  且 $\tilde{s} = s/\xi$ 。对于大的 $\tilde{s}$ ，函数 $D(\tilde{s})$  行为类似于 $(\sqrt{32\pi^2}\tilde{s}^2)^{-1}$ ，而对于 $\tilde{s} \rightarrow 0$ ，它趋近于常数值 $(3\sqrt{8\pi^2})^{-1}$ 。方程(4.51) 表明 $\xi$  是表征零温下稀薄气体单体密度矩阵行为的相关长度。

方程(4.43) 也通过项 $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$  解释了热激发对 $n_p$  的贡献。在 $\epsilon \ll k_B T$  的低能区域，激发的占据数遵循定律 $\langle \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p \rangle \simeq kT/\epsilon(p)$ ，这从(4.40) 中清晰可见。

另一方面，从方程(4.28)，在声子区域发现 $|u_p|^2 + |v_{-p}|^2 \rightarrow mc^2/\epsilon(p)$ ，因此在有限温度下，粒子分布函数表现出发散行为

$$n_p \rightarrow \frac{mkT mc^2}{\epsilon^2(p)} = \frac{mkT}{p^2}, \quad (4.53)$$

这比在零温下发生的那次更强（见方程(4.46)）。红外发散(4.53) 除了一个因子2 外，等同于理想玻色气体在有限温度下表现出的发散（见方程(3.48)）。

通过积分方程(4.44) 中包含玻色因子的项，可以计算凝聚体的温度依赖性，对于满足不等式 $kT \ll mc^2$  的温度，其形式为

$$\frac{n_0(T) - n_0(T=0)}{n_0(T=0)} = -\frac{m(k_B T)^2}{12n\hbar^3}. \quad (4.54)$$

最后，让我们评论一下上述理论的适用范围。基本假设是大多数原子处于凝聚体中，即 $N_0 \approx N$ 。这特别意味着修正(4.54) 必须很小。在足够低的温度下，这个结果是显而易见的。然而，在量级为化学势的温度下，凝聚体的亏损也很小，此时我们得到 $\delta n_0/n_0 \sim (na^3)^{1/2} \ll 1$ 。在更高的温度下，主要贡献于亏损的元激发满足条件 $\epsilon(p) \gg mc^2$ ，因此对应于自由粒子。因此，在这个区域， $n_0(T)$  的温度依赖性趋近于理想气体给出的形式。另一方面，在稀薄气体中，条件 $mc^2 \ll k_B T_c$ （其中 $T_c$  是临界温度(2.28)）必须始终满足，这完全等价于稀薄条件(4.2)。于是我们得出结论，只要满足条件

$$T \ll T_c^0 \quad (4.55)$$

那么“声子”区域( $k_B T \ll mc^2$ ) 和“粒子”区域( $k_B T \gg mc^2$ ) 都与使用博戈留波夫方法兼容。应用博戈留波夫方法的一个例子涉及稀薄玻色气体中第一声和第二声的混合机制，该机制发生在温度量级为 $k_B T \sim mc^2$  时（见第6.6 节）。

# Chapter 5

## 零温下的非均匀玻色气体

本章将发展非均匀稀薄玻色气体的理论。这个问题的重要性至少有两个原因。一方面，原子气体中的玻色-爱因斯坦凝聚是在囚禁势中实验实现的，其中气体自然是非均匀的。另一方面，非均匀性引发了一系列新现象，系统的量子性质以独特方式显现。该理论可同时处理稳态和非稳态情况，因此能研究广泛的物理问题。本章发展的形式体系将在本书第二部分广泛用于讨论实验感兴趣的各种情形。

### 5.1 Gross-Pitaevskii 方程

为研究相互作用的非均匀气体，必须推广前一章介绍的博戈留波夫理论。为此，我们将使用场算符的博戈留波夫假定的一般形式(2.20)。这意味着在最低阶近似和极低温下，可直接用经典场 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ （也称为序参量或凝聚体的波函数）替换算符 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 。此过程具有深刻的物理意义：这种替换类似于从量子电动力学到经典电磁描述的过渡。我们知道，当大量光子处于同一量子态时，这种做法是合理的。此时场算符的非对易性不再重要，可用经典函数（即电场和磁场）描述电磁场，它们服从麦克斯韦方程。在我们的情形中，大量原子处于单态（玻色-爱因斯坦凝聚体）允许引入经典函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 。然而，我们尚未建立支配此场的方程。为此我们回顾，在海森堡绘景中场算符 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 满足精确方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (5.1)$$

该式可通过哈密顿量 $\hat{H}$ 的表达式(4.3)及场算符的对易关系(2.2)得到。

现在可沿用第4章的思路。对真实势而言，用 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 替换 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 是错误的。但若使用有效的软势 $V_{eff}$ （玻恩近似适用），此替换是精确的。势 $V_{eff}$ 应重现裸势 $V$ 给出的相同低能散射性质。假定函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 在原子间力作用范围量级的距离上缓慢变化，可在 $\Psi$ 的参数中将 $\mathbf{r}'$ 替换为 $\mathbf{r}$ ，最终得到序参量方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.2)$$

其中 $g = \int V_{eff}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ 。将此积分用 $s$ 波散射长度 $a$ 表示，可再次得到关系式(4.11)：

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (5.3)$$

如第4章所述，方程(5.2)和(5.3)的有效性不仅限于软势，而普遍适用于任意力，其中 $s$ 波散射振幅 $a$ 提供了相关相互作用参数。此方程由格罗斯(Gross, 1961)和皮塔耶夫斯基(Pitaevskii, 1961)独立导出，是研究低温下非均匀稀薄玻色气体的主要理论工具。它具有平均场方程的典型形式，其中序参量需以自洽方式计算。

前已指出，序参量 $\Psi$ 的方程(5.2)在经典电动力学中扮演类似麦克斯韦方程的角色。可以说凝聚体波函数代表了德布罗意波的经典极限，此时物质的粒子性不再重要。然而，与麦克斯韦方程不同，方程(5.2)显式包含量子常数 $\hbar$ 。这种差异源于光子和原子的能量( $\epsilon$ )与动量( $p$ )关系不同，导致相应波的频率 $\omega = \epsilon/\hbar$ 与波矢 $k = p/\hbar$ 的关系不同。对光子，关系 $\epsilon = cp$ 给出经典色散关系 $\omega = ck$ 。对原子，关系 $\epsilon = p^2/2m$ 则给出显含 $\hbar$ 的色散律 $\omega = \hbar k^2/2m$ 。这尤其意味着相干现象（如干涉）依赖于普朗克常数的取值（见第15章）。Gross-Pitaevskii方程(5.2)的另一重要特性是其非线性，源于粒子间的相互作用，导致原子气体中的玻色-爱因斯坦凝聚与非线性光学之间存在重要类比。相干性和相互作用效应是可基于Gross-Pitaevskii方程

研究的重要特征，它们使玻色-爱因斯坦凝聚的物理成为实验和理论研究的丰富领域。

简要讨论方程(5.2)的适用条件。首先，原子总数需足够大，因为仅此情况下才能使用玻色-爱因斯坦凝聚的概念。其次，为用经典场替换场算符，必须满足弱相互作用条件(4.3)且样品温度足够低。这允许忽略凝聚体的量子亏损和热亏损，并意味着序参量归一化为总原子数： $\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = N$ 。这些条件同样是推导弱相互作用玻色气体博戈留波夫理论最低阶近似所需（见4.1节），并意味着凝聚体密度与气体密度重合：

$$n(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (5.4)$$

进一步的条件是，仅当研究发生在远大于散射长度的距离上的现象时，才可使用Gross-Pitaevskii 方程(5.2)。因为在微观距离上，推导(5.2)所需的近似不再成立。

不难构建对应于Gross-Pitaevskii方程给定解 $\Psi_a$ 的多体波函数。实际上，由于气体的稀薄性，在一阶近似下可忽略粒子间关联，并将系统的多体波函数写成因子化形式（哈特里-福克(Hartree-Fock)近似）：

$$\Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \Psi_a(\mathbf{r}_1) \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \Psi_a(\mathbf{r}_2) \right) \dots \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \Psi_a(\mathbf{r}_N) \right), \quad (5.5)$$

其中 $\Psi_a$ 是通过求解Gross-Pitaevskii方程得到的序参量。

由于Gross-Pitaevskii方程是非线性的，对应不同化学势值 $\mu_a$ 和 $\mu_b$ 的两个解 $\Psi_a$ 和 $\Psi_b$ 不一定正交，即量 $N^{-1} \int d\mathbf{r} \Psi_a^* \Psi_b$  可不为零。初看这与量子力学预言的正交条件矛盾。然而，不应混淆序参量与多体波函数。序参量的GP方程非线性直接源于场算符方程(5.1)的非线性。实际上，方程(5.5)使我们易于理解GP方程的非线性为何与相应多体波函数的正交性兼容。即使GP方程的两个解不正交，相应的多体波函数(5.5) 在热力学极限下变得正交，其标量积由表达式 $(\Phi_a, \Phi_b) = (N^{-1} \int d\mathbf{r} \Psi_a^* \Psi_b)^N$ 给出。当 $N \rightarrow \infty$ 时该量趋于零，因为除非 $\Psi_a \equiv \Psi_b$ ，积分 $N^{-1} \int d\mathbf{r} \Psi_a^* \Psi_b$  总小于1。该结果也证实，由Gross-Pitaevskii方程表达的平均场图像的一致性仅在大 $N$  值下得以保证。

推导含时方程(5.2)的另一方法是施加平稳条件：

$$\delta \left[ -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \, dx dt + \int E dt \right] = 0 \quad (5.6)$$

于作用量，得到序参量方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\delta E}{\delta \Psi^*(\mathbf{r}, t)} \quad (5.7)$$

其中

$$E = \int \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4 \right) d\mathbf{r} \quad (5.8)$$

是系统的能量泛函。讨论与方程(5.2)相关的守恒律。首先，此方程保证原子数  $N = \int |\Psi|^2 d\mathbf{r}$  守恒。将(5.2)乘以  $\Psi^*$  并减去所得表达式的复共轭，易得连续性方程：

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0, \quad (5.9)$$

其中使用了气体密度的方程(5.4)，并引入流密度：

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = n \frac{\hbar}{m} \nabla S. \quad (5.10)$$

这里  $S$  是序参量的相位，定义为：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{iS(\mathbf{r}, t)}. \quad (5.11)$$

由方程(5.9)立得  $dN/dt = 0$ 。方程(5.10)表明向量：

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{r}, t) \quad (5.12)$$

是凝聚体流动的速度，它是无旋的 ( $\text{curl} \mathbf{v}_s = 0$ )，这是超流体的典型特征，将在第6章讨论。

由方程(5.2)还可得系统能量(5.8)守恒，即  $dE/dt = 0$ 。这可通过直接微分(5.8)并使用 Gross-Pitaevskii 方程(5.2)验证。当然，此结果仅当外势不依赖时间时成立。

最后，气体动量密度的方程可写成形式：

$$m \frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = -n \frac{\partial V_{ext}}{\partial x_i}, \quad (5.13)$$

其中

$$\Pi_{ik} = \frac{\hbar^2}{4m^2} \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x_k} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x_i \partial x_k} + \text{c.c.} \right] + \frac{gn^2}{2} \delta_{ik}, \quad (5.14)$$

是动量流张量。方程(5.13)显式表明，无外场时总动量 $\mathbf{p} = m \int \mathbf{j} d\mathbf{r}$ 也守恒。

推导序参量相位 $S$ 的显式方程也很有用。将(5.11)代入(5.2)得方程：

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} S + \left( \frac{1}{2} m v_s^2 + V_{ext} + gn - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right) = 0. \quad (5.15)$$

(5.15) 值得指出，连续性方程(5.9)和相位方程(5.15)构成闭耦合方程组，严格等价于原始Gross-Pitaevskii方程。普朗克常数 $\hbar$ 通过含密度梯度的项进入(5.15)右侧，该项称为“量子压力”项，揭示出量子效应在非均匀气体中的重要性。

对稳态解，Gross-Pitaevskii方程(5.2)取简单形式，其中凝聚体波函数按规律随时间演化（见方程(2.22)）：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i\mu t}{\hbar}\right). \quad (5.16)$$

时间依赖性由化学势固定：

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}, \quad (5.17)$$

(5.17) 而Gross-Pitaevskii方程简化为：

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2 - \mu \right) \Psi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (5.18)$$

此处假定外势不依赖时间。化学势 $\mu$ 的值由归一化条件 $\int |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = N$ 固定。利布(Lieb)等人(2000)给出了严格数学证明：方程(5.18)描述具有排斥力的稀薄玻色气体粒子的基态。含时GP方程(5.2)的严格推导由厄尔多斯(Erdos)等人(2010)给出。

方程(5.18)也可通过将能量(5.8)在固定原子数 $N$ 下对 $\Psi_0^*$ 的变分取平稳性得到。这对应于在变分计算中使用巨正则能量：

$$E' = E - \mu \int |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (5.19)$$

代替 $E$ 。此时自然的热力学变量是化学势而非粒子数，后者可通过关系式 $N = -(\partial E'/\partial \mu) = \int |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ 确定。

方程(5.18)允许不同解。能量最低的解定义基态的序参量，通常为实函数。激发解通常由复函数给出，涡旋态是最著名的例子。Gross-Pitaevskii方程(5.18)将在本书第二部分系统用于计算囚禁于势阱中的相互

作用玻色气体凝聚体的波函数。形式类似的方程也曾被用于讨论 $\lambda$ 点附近超流性的理论（金兹堡和皮塔耶夫斯基, 1958），但其中方程的系数有不同含义。

对均匀气体（无外势），方程(5.18)简化为 $\mu = g|\Psi_0|^2 = gn$ ，与(4.16)一致。同一极限下方程(5.8)与博戈留波夫基态能量表达式(4.10)重合。因此我们得出结论：本节理论应用于基态时，对应于第4章均匀气体情形下博戈留波夫理论的最低阶近似。

## 5.2 托马斯-费米极限

若气体密度在空间缓慢变化，则方程(5.15)中与 $\hbar^2$ 成正比的量子压力项可忽略，运动方程进一步简化。设 $D$ 为表征系统中密度变化的典型距离。对基态，这可以是凝聚体尺寸；对含时构型，可以是密度振荡的波长。量子压力项标度为 $\nabla^2\sqrt{n}/\sqrt{n} \sim D^{-2}$ ，根据方程(5.15)，当 $D$ 远大于愈合长度 $\xi = \hbar/\sqrt{2mgn}$ 时（第4章引入，见方程(4.39)，用于讨论博戈留波夫激发谱中声子区与单粒子区的过渡）可忽略。比较愈合长度与粒子间平均距离 $d = n^{-1/3}$ 是有趣的。比值：

$$\frac{\xi}{d} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \frac{1}{(na^3)^{1/6}} \quad (5.20)$$

随气体参数值减小而增大，但其对量 $na^3$ 的依赖很弱。

若在方程(5.15)中忽略量子压力项（托马斯-费米近似），则得相位的梯度方程：

$$m \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_s + \nabla \left( \frac{1}{2} m \mathbf{v}_s^2 + V_{ext} + gn \right) = 0. \quad (5.21)$$

注意方程(5.21)中普朗克常数已消失。实际上，此方程与无粘性势流气体的经典欧拉方程一致，其压力为 $P = gn^2/2$ 。该气体的声速为 $c = \sqrt{gn/m}$ ，与博戈留波夫结果(4.15)一致。另一方面，连续性方程(5.9)可用超流速度 $\mathbf{v}_s$ 改写为：

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}_s n) = 0. \quad (5.22)$$

方程(5.21)和(5.22)具有超流体流体动力学方程的典型形式（见第6章），将在本书中广泛使用。

在托马斯-费米极限下，基态构型取特别简单的形式。事实上，使用  $v_s = 0$  的方程(5.21)，或等价地忽略(5.18)中的动能项，得结果：

$$gn(r) + V_{ext}(r) = \mu, \quad (5.23)$$

其中  $\mu$  是基态化学势。方程(5.23)表达了局部平衡条件：对无外场时化学势由博戈留波夫关系  $\mu = gn$  给出的系统。

### 5.3 弱相互作用玻色气体中的涡旋线

如前所述，Gross-Pitaevskii方程的稳态解以序参量随时间通过化学势固定的全局相位变化为特征（见方程(5.16)），序参量方程取形式(5.18)。本节将讨论的GP方程的涡旋解展现出非平凡特性，因存在密度趋于零的核心区。该区域尺寸量级为愈合长度，故涡旋解无法用上节发展的流体动力学方程描述，而需显式包含量子压力项。涡旋通常不是稳定构型，仅在高角速度旋转的参考系中，它们对应于能量泛函(5.8)的局部或全局极小值。量子化涡旋线由翁萨格(Onsager, 1949)和费曼(Feynman, 1955)预言。本节理论由格罗斯(Gross, 1961)和皮塔耶夫斯基(Pitaevskii, 1961)发展。

涡旋研究为旋转问题提供了重要视角，这是超流体物理中极相关的主题。事实上，已知超流体无法像正常流体那样旋转。通常系统中，对应旋转的速度场由刚体形式给出： $v = \Omega \times r$ ，其特征是扩散的涡量： $\text{curl} v = 2\Omega \neq 0$ 。此速度场与超流体的无旋条件(5.12) 矛盾，因此预期超流体以不同方式旋转。

取气体囚禁于半径  $R$ 、长度  $L$  的宏观圆柱形容器，寻找Gross-Pitaevskii方程对应绕圆柱轴旋转的解。此解可形式（见方程(5.11)）求得：

$$\Psi_0(r) = e^{is\varphi} |\Psi_0(r)|, \quad (5.24)$$

其中引入柱坐标  $r$ 、 $\varphi$  和  $z$ ，且  $|\Psi_0| = \sqrt{n}$ 。因问题的对称性，序参量模仅依赖径向变量  $r$ 。参数  $s$  为整数以确保波函数(5.24)单值。此波函数是角动量  $\ell_z = sh$  的本征态，故涡旋携带的总角动量等于  $L_z = Nsh$ 。波函数(5.24)表示气体绕  $z$  轴旋转，其切向速度为（见方程(5.12)）：

$$v_s = \frac{\hbar s}{m r}. \quad (5.25)$$

此规律完全不同于刚性旋转场  $\mathbf{v} = \Omega \times \mathbf{r}$  (后者也是切向的, 但其模随  $r$  增大) (见图5.1)。速度场绕  $z$  轴闭合回路的环量为:

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = 2\pi s \frac{\hbar}{m}. \quad (5.26)$$

结果以  $\hbar/m$  为单位量子化, 与回路半径无关。这是速度场(5.25)的涡量按规律集中于  $z$  轴的结果:

$$\text{curl} \mathbf{v}_s = 2\pi s \frac{\hbar}{m} \delta^{(2)}(\mathbf{r}_\perp) \hat{\mathbf{z}}, \quad (5.27)$$

其中  $\mathbf{r}_\perp$  是  $x, y$  平面内的二维向量,  $\hat{\mathbf{z}}$  是  $z$  方向的单位向量。结果(5.24)和(5.27)表明, 除涡旋线上, 与玻色-爱因斯坦凝聚相关的无旋准则处处满足。

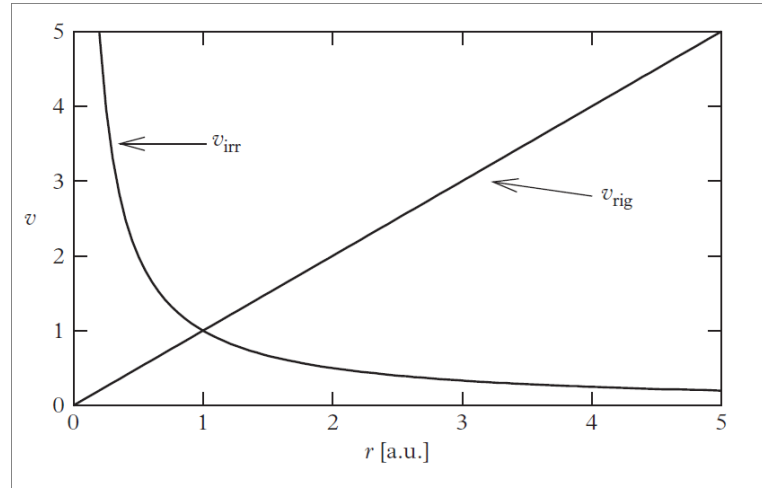


Figure 5.1: 无旋流( $v_{irr}$ )与刚性旋转流( $v_{rig}$ )的切向速度场。当  $r \rightarrow 0$  时, 无旋速度场以  $1/r$  发散。此处  $r$  和  $v$  以任意单位(a.u.)度量。

将(5.24)代入方程(5.18), 得  $|\Psi_0|$  的方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d|\Psi_0|}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 s^2}{2mr^2} |\Psi_0| + g|\Psi_0|^3 - \mu|\Psi_0| = 0. \quad (5.28)$$

在远离涡旋线处, 气体密度须趋近其未受扰均匀值  $n$ , 故  $|\Psi_0| \rightarrow \sqrt{n}$ 。这建议引入无量纲函数:

$$|\Psi_0| = \sqrt{n} f(\eta), \quad (5.29)$$

其中 $\eta = r/\xi$ ,  $\xi = \hbar/\sqrt{2mgn}$ 是愈合长度。实函数 $f(\eta)$ 满足方程:

$$\frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left( \eta \frac{df}{d\eta} \right) + \left( 1 - \frac{s^2}{\eta^2} \right) f - f^3 = 0, \quad (5.30)$$

约束条件为 $f(\infty) = 1$ 。当 $\eta \rightarrow 0$ 时, (5.30)的物理解以 $f \sim \eta^{|s|}$  趋于零, 故液体密度 $n(r) = |\Psi_0(r)|^2$ 在涡旋轴上趋于零。由方程(5.30)的无量纲性质可见, 涡旋线核心(即轴附近密度显著扰动区域)量级为愈合长度 $\xi$ 。图5.2展示了 $s = 1$ 和 $s = 2$ 值的函数 $f(\eta)$ 。 涡旋能量通过用波函数(5.24)计

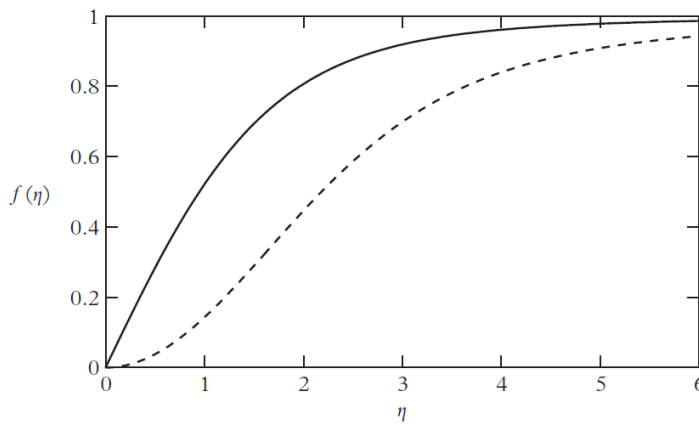


Figure 5.2: 涡旋解

算积分(5.8), 并从此表达式中减去占据圆柱体积 $V = L\pi R^2$  的均匀气体基态能量得到。然而, 此减法应在固定 $N$ 下进行, 故需考虑大距离处气体密度因涡旋线存在的变化。我们可在固定化学势 $\mu$ 下进行计算以避免此问题, 并使用巨正则能量(5.19)。换言之, 涡旋线能量计算为 $E_v = E' - E'_g$ , 其中 $E'_g = Vgn^2/2 - \mu Vn_0$ 。

现在可安全地引入化学势 $\mu = gn$ 至 $E_v$ , 因为涡旋线存在导致的 $\mu$ 修正可忽略。用无量纲函数 $f$ 表示:

$$E_v = \frac{L\pi\hbar^2 n}{m} \int_0^{R/\xi} \left[ \left( \frac{df}{d\eta} \right)^2 + \frac{s^2}{\eta^2} f^2 + \frac{1}{2} (f^2 - 1)^2 \right] \eta d\eta. \quad (5.31)$$

积分(5.31)得 $s = 1$ 涡旋激发能量的结果(皮塔耶夫斯基, 1961):

$$E_v = L\pi n \frac{\hbar^2}{m} \ln \left( \frac{1.46R}{\xi} \right) \quad (5.32)$$

适用于  $R \gg \xi$ 。  $E_v$  的主要贡献来自动能项，它源于速度场(5.25)的大  $r$  行为的主导项。能量  $E_v$  在宏观上很大，因其随样品尺寸按  $L \ln R$  增大。然而，相对于基态能量的相对变化  $E_v/E_g$  在热力学极限下可忽略。这与气体的化学势在同一极限下未改变的事实一致。

结果(5.32)在实验室系导出。在角速度  $\Omega$  旋转的参考系中，应考虑哈密顿量：

$$H = H_0 - \Omega L_z, \quad (5.33)$$

其中  $H_0$  和  $L_z$  分别为实验室系中的哈密顿量和角动量。易见在旋转系中，携带角动量  $L_z = N\hbar$  的涡旋解在  $\Omega$  足够高时变得能量上优于  $H_0$  的基态解。这发生在角速度大于临界值时：

$$\Omega_c = \frac{E_v}{N\hbar} = \frac{\hbar}{mR^2} \ln \left( \frac{1.46R}{\xi} \right). \quad (5.34)$$

## 5.4 涡旋环

除上节讨论的涡旋构型外，还可研究对应更复杂形式涡旋线的解。本节考虑所谓涡旋环，即半径为  $R_0$  的圆形闭合涡旋线（见图5.3）。这些解与密度分布的局域扰动相关，相对于流体以恒定速度运动。因此，它们对应于移动参考系中 Gross-Pitaevskii 方程的稳态解。

对大涡旋环（ $R_0 \gg \xi$ ），涡旋能量可从上节讨论的结果轻松计算。事实上，此时可引入截断距离  $R_c$  以分离近涡旋线区域（ $r_\perp \ll R_c$ ）与远涡旋线区域（ $r_\perp \gg R_c$ ）。这里  $r_\perp$  是到涡旋线的距离，且  $R_c$  应满足条件  $\xi \ll R_c \ll R_0$ 。在第一区域，可将涡旋视为直线，其能量可直接用方程(5.32)计算。在第二区域，气体可视为不可压缩流体，其激发能源于动能项。两项贡献之和与  $R_c$  无关，得简单结果（阿米特和格罗斯, 1966；罗伯茨和格兰特, 1971）：

$$\epsilon(R_0) = 2\pi^2 R_0 \frac{\hbar^2}{m} n \ln \left( \frac{1.59R}{\xi} \right). \quad (5.35)$$

涡旋环的独特特性是其速度流产生净动量  $\mathbf{p} = m \int d\mathbf{r} n \mathbf{v}_s$ 。对大环此计算简单。事实上，若  $\xi \ll R_0$  可忽略涡旋线产生的密度不均匀性，并写  $\mathbf{p} = mn \int d\mathbf{r} \nabla S$ 。此积分可转化为面积分  $mn \int ds S$ ，其中面积应包含相位  $S$  的  $2\pi$  不连续性切口。最终得结果：

$$\mathbf{p} = 2\pi^2 \hbar n R_0^2 \mathbf{n}, \quad (5.36)$$

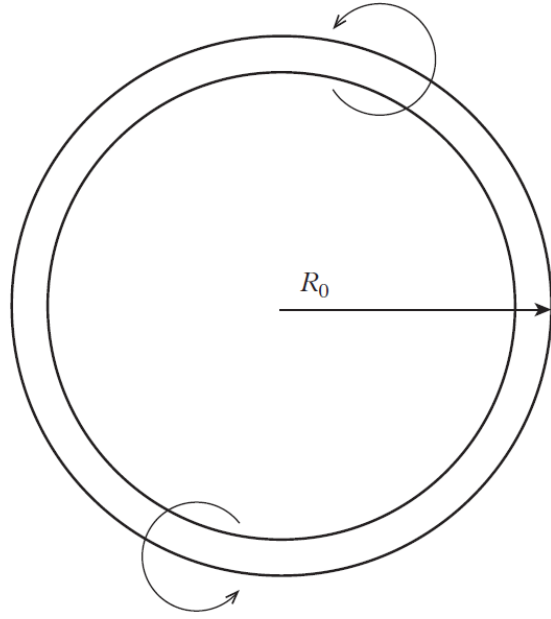


Figure 5.3: 对大涡旋环，相位 $S$ 在环包围的曲面上展现不连续性。

其中 $\mathbf{n}$ 是垂直于环的单位向量。但应回顾，速度 $\mathbf{v}_s$ 在大距离处以 $1/r^3$ 减小，故包含环的远表面贡献不可忽略。我们总可考虑在初始时刻产生涡旋环的非稳态构型。则对大而有限的时间，速度 $v_s$ 在无穷远处为零，远表面积分消失（亦见皮塔耶夫斯基, 2014）。

与直线涡旋不同，涡旋环并非静止，而以速度运动：

$$v = \frac{de}{dp} = \frac{de/dR_0}{dp/dR_0}, \quad (5.37)$$

显式微分得结果：

$$v = \frac{\hbar}{2mR_0} \ln \left( \frac{4.32R}{\xi} \right), \quad (5.38)$$

适用于满足条件 $R_0 \gg \xi$ 的大环。方程(5.38)表明，随环尺寸增大，速度越来越小。

从Gross-Pitaevskii方程出发，也可获得尺寸与愈合长度相当的环的解，此时结果(5.35)-(5.38)不适用。考虑中心在 $z$ 轴并沿 $z$ 方向运动的环。可形式：

$$\Psi(r, t) = \Psi_0(r, z - vt)e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (5.39)$$

寻找运动方程的解，其中速度 $v$ 为常数参数。引入无量纲柱变量 $\eta = r/\xi$ 和 $\zeta = (z - vt)/\xi$ ，并写序参量为：

$$\Psi_0(r, z - vt) = \sqrt{n}f(\eta, \zeta). \quad (5.40)$$

将方程(5.40)代入(5.2)，得波函数 $f$ 的方程：

$$2iU \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} + f(1 - |f|^2), \quad (5.41)$$

其中无量纲速度 $U$ 定义为：

$$U = \frac{mv\xi}{\hbar} = \frac{v}{c\sqrt{2}}, \quad (5.42)$$

这里 $c$ 是通常声速，且设 $\mu = gn$ 。方程(5.41)应在边界条件 $\eta, \zeta \rightarrow \infty$ 时 $f \rightarrow 1$ 下求解。琼斯(Jones)和罗伯茨(Roberts)(1982)解决了此问题。需计算的重要量是环的能量和动量。激发能 $\epsilon$ 可通过从(5.8)减去均匀气体能量得到。类似于涡旋能量计算，使用巨正则能量 $E'$ 较方便。用无量纲变量可写：

$$\epsilon = E' - E'_g = \frac{\hbar^2}{m} \xi n \bar{\epsilon}, \quad (5.43)$$

其中：

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{2} \int \left[ \left| \frac{\partial f}{\partial \eta} \right|^2 + \left| \frac{\partial f}{\partial \zeta} \right|^2 + \frac{1}{2} (1 - |f|^2)^2 \right] 2\pi \eta d\eta d\zeta. \quad (5.44)$$

对涡旋环动量，则得结果：

$$p = \hbar n \xi^2 \tilde{p}, \quad (5.45)$$

其中：

$$\tilde{p} = \frac{i}{2} \int \left[ (f - 1) \frac{\partial f^*}{\partial \zeta} - (f^* - 1) \frac{\partial f}{\partial \zeta} \right] 2\pi \eta d\eta d\zeta. \quad (5.46)$$

推导结果(5.46)时，从总动量 $m \int d\mathbf{r} n \nabla S$ 减去了量 $(in\hbar\xi) \int (\partial f^*/\partial \zeta - \partial f/\partial \zeta) \pi \eta d\eta d\zeta$ ，此量可转化为远表面积分，且根据方程(5.36)后的论证可安全设为零。这确保了积分(5.46)的收敛性。上述形式体系的显著特征是，环的速度 $v$ （进入Gross-Pitaevskii方程解的假设(5.39)）精确满足关系 $v = de/dp$ ，或以无量纲单位 $U = d\bar{\epsilon}/d\tilde{p}$ 。这可用方程(5.41)及结果(5.44)和(5.46)形式证明。 $\epsilon$ 和 $p$ 的计算揭示了有趣特性。在小速度 $U$ （对

应大环)下, 能量和动量趋近结果(5.35)和(5.36), 且 $f$ 的相位绕涡旋线获得 $2\pi$ 值。环半径随 $U$ 增大而减小, 在 $U = U_1 = 0.62$  (对应 $v = 0.88c$ )时变为零。对 $U > U_1$ , 序参量相位变为单值。此外,  $\tilde{\epsilon}$ 和 $\tilde{p}$ 在 $U = U_2 = 0.66$ 处有极小值。这意味着在 $\epsilon - p$ 平面上存在两支解, 在 $U = U_2$ 处分岔 (见图5.4)。上支不稳定。因值 $U = 1/\sqrt{2} = 0.71$ 对应 $v = c$ , 故最小能量激发的速度 $U_2$ 量级小于声速。环的速度在渐近极限 $p, \epsilon \rightarrow \infty$ 时对上述支激发趋近声速。还值得注意的是, 能量的最小值标度 (见方程(5.43))为 $\hbar^2 \xi n/m \sim \mu/(na^3)^{1/2}$ , 故远大于由化学势固定的元激发典型能量。

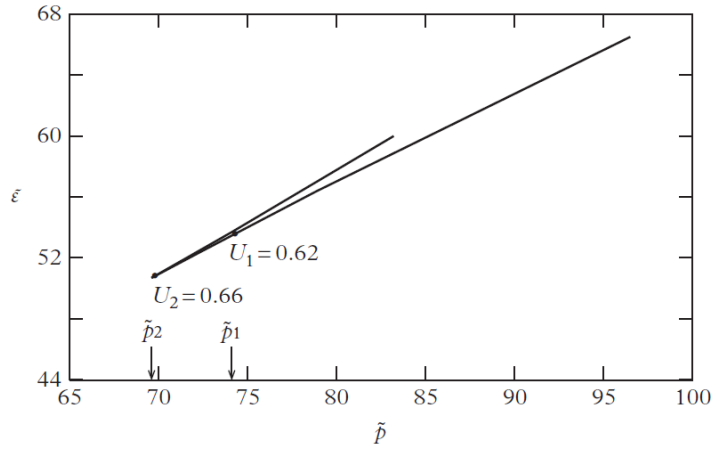


Figure 5.4: 约化单位下涡旋环的能量-动量图 (见正文)。下支稳定, 且对 $\tilde{p} \gg \tilde{p}_1$ , 速度场绕涡旋线的环量非零。上支不稳定, 其速度在 $\tilde{p} \gg 1$ 时趋近声速( $U = 1/\sqrt{2}$ )。

另一有趣问题是涡旋对, 对应两条平行但环量相反的涡旋, 间距为 $d$ 。若 $d \gg \xi$ 问题易解。此时能量和动量用导出方程(5.35)和(5.36)的相同方法计算。在对数精度内得单位长度能量结果:

$$\epsilon = 2\pi \frac{n\hbar^2}{m} \ln \left( \frac{d}{\xi} \right) \quad (5.47)$$

及单位长度动量:

$$p = 2\pi n\hbar d \quad (5.48)$$

类似于环, 涡旋对不静止, 而以速度 $v = de/dp = \hbar/md$ 运动。

涡旋对也可在更微观区域（ $d$ 量级为愈合长度或更小）研究。此时宜用无量纲笛卡尔坐标 $x/\xi$ 和 $y/\xi$ （涡旋沿 $z$ 轴排列）改写方程(5.41)，并将单位长度能量和动量为 $\epsilon = (\hbar^2/m)n\tilde{\epsilon}$ 和 $p = \hbar n\xi\tilde{p}$ ，其中 $\tilde{\epsilon}$ 和 $\tilde{p}$ 为无量纲量。解可再次作为约化速度 $U = mv\xi/\hbar$ 的函数讨论（见方程(5.42)）。但新解的性质不同于环中所得。在 $U = U_1 = 0.5$ 处再次出现临界速度值。若 $U < U_1$ ，存在两点序参量为零，对应涡旋对。然而，两涡旋间距 $d$ 在 $U \rightarrow U_1$ 时趋于零。对 $U > U_1$ ，解不再对应涡旋对，而是对应无奇点的局域密度扰动。此解在 $\tilde{p} \rightarrow 0$ （其中 $U \rightarrow 1/\sqrt{2}$ 且 $v \rightarrow c$ ）极限下也存在（琼斯和罗伯茨, 1982）。涡旋对激发的色散律示于图5.5。

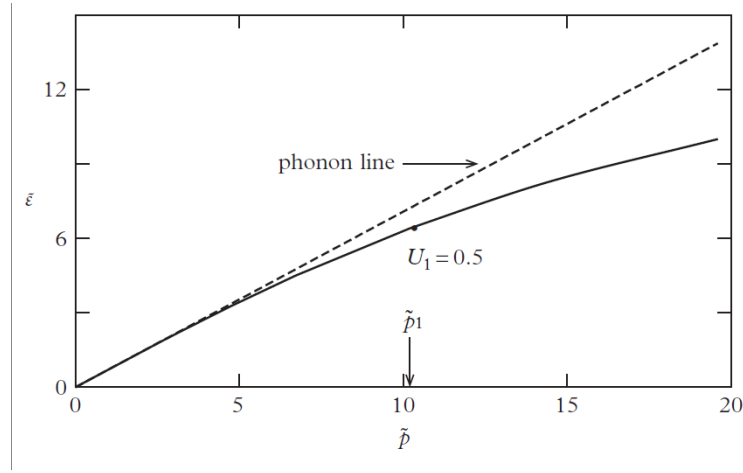


Figure 5.5: 约化单位下涡旋-反涡旋对的能量-动量图。小动量时斜率趋近声速。

## 5.5 孤子

本节将考虑含时Gross-Pitaevskii方程(5.2)的特殊解，称为孤子。对排斥力情形，这些解对应密度分布的局域调制，在介质中以恒定速度运动，使得系统的内在形状随时间保持。扰动区域的轮廓以密度相对体值抑制为特征（灰孤子）。

灰孤子的存在直接关联于GP方程的非线性，其效应被动能产生的量子压力项补偿。表征密度调制范围的典型长度由愈合长度固定。本节考虑一

维解，其中序参量 $\Psi_0$ 仅通过组合 $z - vt$ 依赖坐标 $z$ 。引入如方程(5.40)的无量纲变量，可写 $\Psi(z, t) = \Psi_0(z - vt) e^{-i\mu t/\hbar} \equiv \sqrt{n} f(\zeta) e^{-i\mu t/\hbar}$ ，类比(5.41)得方程：

$$2iU \frac{df}{d\zeta} = \frac{d^2 f}{d\zeta^2} + f(1 - |f|^2), \quad (5.49)$$

其中：

$$\zeta = \frac{(z - vt)}{\xi} \quad (5.50)$$

且波函数现不依赖“径向”变量 $\eta$ 。目标是构建满足边界条件的“局域”解：

$$|f| \rightarrow 1, \frac{df}{d\zeta} \rightarrow 0 \quad (5.51)$$

当 $\zeta \rightarrow \pm\infty$ 。将方程(5.49)乘以 $f^*$ 并减去复共轭方程，简单积分后得：

$$U(1 - |f|^2) + f_1 \frac{df_2}{d\zeta} - f_2 \frac{df_1}{d\zeta} = 0, \quad (5.52)$$

这与边界条件(5.51)一致，其中 $f_1$ 和 $f_2$ 分别是复函数 $f = f_1 + if_2$ 的实部和虚部。方程(5.52)实际是新变量下表达的连续性方程(5.9)。函数 $f$ 的第二方程可由(5.49)的虚部导出：

$$2U \frac{df_1}{d\zeta} = \frac{d^2 f_2}{d\zeta^2} + f_2(1 - |f|^2). \quad (5.53)$$

从前两方程消去 $df_1/d\zeta$ 得：

$$f_2 \frac{d^2 f_2}{d\zeta^2} - 2U f_1 \frac{df_2}{d\zeta} + (f_2^2 - 2U^2)(1 - |f|^2) = 0. \quad (5.54)$$

此方程有显然解 $f_2 = \sqrt{2U} = v/c$ ，满足第二边界条件(5.51)。代入(5.52)得实部 $f_1$ 的方程：

$$\sqrt{2} \frac{df_1}{d\zeta} = \left(1 - \frac{v^2}{c^2} - f_1^2\right) \quad (5.55)$$

积分(5.55)直接得非平凡结果 (Tsuzuki, 1971)：

$$\Psi_0(z - vt) = \sqrt{n} \left( \frac{v}{c} + \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \tanh \left[ \frac{z - vt}{\sqrt{2}\xi} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right] \right) \quad (5.56)$$

描述序参量的时空演化，其中已重新引入初始物理变量。密度轮廓取形式  $n(z - vt) = |\Psi_0|^2 = n + \delta n(z - vt)$ ，其中：

$$\delta n(z - vt) = -n \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \cosh^{-2} \left( \frac{z - vt}{\sqrt{2}\xi} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right). \quad (5.57)$$

因此密度在孤子中心有最小值，对应  $n(0) = nv^2/c^2$ （见图5.6）。对零速传播的孤子（暗孤子），此值为零。还值得注意的是，孤子宽度由愈合长度  $\xi$  固定，但被因子  $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$  放大，该因子在  $v \rightarrow c$  时越来越大。另注意波函数相位经历有限变化：

$$\Delta S \equiv S(+\infty) - S(-\infty) = -2 \arccos \left( \frac{v}{c} \right) \quad (5.58)$$

当  $z$  从  $-\infty$  变化到  $+\infty$ 。对暗孤子，函数  $\Psi_0$  为实奇函数，相位变化为  $\Delta S = -\pi$ 。

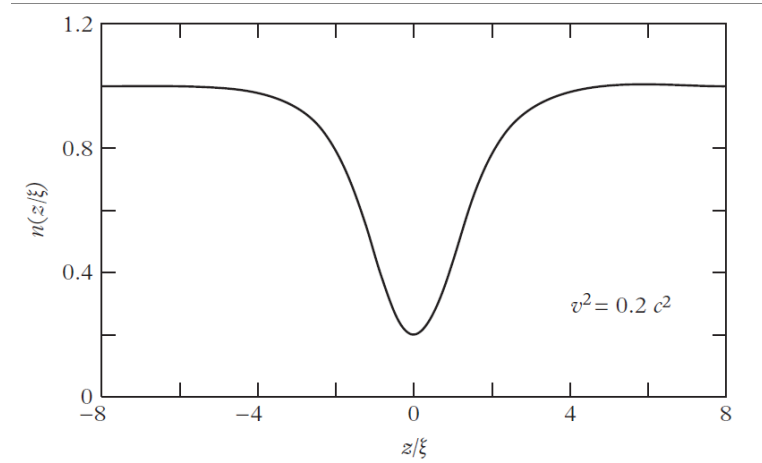


Figure 5.6: “灰”孤子的密度轮廓。孤子宽度与愈合长度  $\xi$  成正比，并在孤子速度趋近声速时越来越大。

单位表面积孤子的能量  $\epsilon$  可通过取存在孤子时的巨正则能量 ( $E'$ ) 与不存在时 ( $E'_g$ ) 的差来评估。所得表达式：

$$\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\Psi_0}{dz} \right|^2 + \frac{g}{2} (|\Psi_0|^2 - n)^2 \right] dz \quad (5.59)$$

可通过将积分变量从 $z$ 变为 $f_1$ ，并借助(5.55)计算 $df_1/dz$ 来轻松计算。最终结果为：

$$\epsilon = \frac{4}{3}\hbar cn \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2} = \frac{4}{3}\frac{\hbar}{\sqrt{mg}}\mu^{3/2} \left(1 - \frac{mv^2}{\mu}\right)^{3/2}, \quad (5.60)$$

其中第二式将单位表面积孤子能量用速度和化学势表示。上述孤子解展现出值得讨论的若干有趣特征。首先注意，对小 $v$ 值，孤子按方程(5.60)表现为负质量粒子 $m_s = -4\hbar n/c$ ，符合密度扰动(5.57)实际对应\*空穴\*而非\*粒子\*的事实。孤子的另一非平凡特征涉及其动量。事实上，虽然按方程(5.57)速度 $v$ 显式决定密度轮廓的时间演化，但孤子动量的识别需更仔细讨论。可轻松计算与波函数(5.56)携带的流 $j_z = \hbar n(z)\partial_z S$ 相关的动量 $p = m \int dz j_z$ 。结果为：

$$p = -2\hbar n \frac{v}{c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (5.61)$$

我们将此量称为“局域动量”，因流的主要贡献产生于孤子宽度量级的空间区域。然而， $p$  非孤子的总动量，因大距离处出现逆流，其应补偿渐近相位变化(5.58)。逆流携带动量 $\Delta p = -\hbar n \int \partial_z S dz = -\hbar n \Delta S$ ，但因逆流占据大范围区域，其对能量无贡献。若考虑在半径极大的环面中构建孤子，此效应易理解。因波函数需单值，且在远离孤子处相位差由方程(5.58)给出，则动量的额外贡献 $\Delta p$ 应源于环面中密度均匀的其余区域。总之，孤子的总动量为 $p_c = p + \Delta p$ ，即：

$$p_c = p - \hbar n \Delta S = 2\hbar n \left[ \arccos\left(\frac{v}{c}\right) - \frac{v}{c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right]. \quad (5.62)$$

不难验证动量(5.62)满足正则关系 $v = (\partial\epsilon/\partial p_c) = (\partial\epsilon/\partial v)(\partial v/\partial p_c)$ 。因此动量 $p_c$ 是孤子的正则动量。另注意 $p_c$ 正是传递给流体以产生孤子的动量，且是守恒量（例如在衰变过程中）。更详细讨论见琼斯和罗伯茨(1982)、舍甫琴科(Shevchenko)(1988)及斯科特(Scott) 等人(2011)。

小速度时局域动量趋于零，但正则动量因逆流贡献趋近有限值 $\pi\hbar n$ 。当 $v \rightarrow c$ ，方程(5.62)给出：

$$p_c \approx \frac{4\hbar n}{3} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2} = \frac{\epsilon}{c}, \quad (5.63)$$

表明此极限下扰动的类声子性质。

上述解实际对横向 $x$ 和 $y$ 方向的密度涨落不稳定（库兹涅佐夫(Kuznetsov)和图里钦(Turitsyn), 1988）。实验上可通过合适囚禁几何（例如雪茄形阱）抑制不稳定性（伯格(Burger) 等人, 1999；登施拉格(Denschlag)等人, 2000）。最后值得注意，孤子速度随其能量减小而增大。这意味着耗散效应（例如与热激发的碰撞）将导致孤子加速并最终在 $v \rightarrow c$ 时消失。

若相互作用为吸引( $a < 0$ )，GP方程允许另一类孤子解，对应 $z$ 方向的局域波包（亮孤子）。易验证不含时GP方程(5.18)有解：

$$\Psi_0(z) = \Psi_0(0) \frac{1}{\cosh[z/\sqrt{2\xi}]}, \quad (5.64)$$

其中 $n_0 = |\Psi_0(0)|^2$ 是中心密度，且定义 $\xi = \hbar/\sqrt{2m|g|n_0}$ 。此解对应的化学势为：

$$\mu = -\frac{1}{2}|g|n_0 \quad (5.65)$$

且为负。此波包可像普通粒子般沿 $z$ 方向自由运动。然而，亮孤子是非稳定构型。它们可在径向紧束缚的阱中产生，此时失稳机制减弱（海科维奇(Khaykovich)等人, 2002；斯特雷克(Strecker)等人, 2002）。

## 5.6 小振幅振荡

GP方程的一类重要含时解是小振幅振荡，其中序参量相对于稳态构型的时空变化很小。许多情形下这些解强调了相互作用玻色气体展现的集体行为。本节基于经典GP理论介绍这些振荡的一般形式。小振幅振荡也可解释为系统的元激发，它们允许自然的量子描述（本节稍后讨论）。后续章节将阐述多个例子。除小振幅振荡外，还可探索大振幅解，包括释放阱后气体膨胀的最重要问题。该问题将在12.7节直接讨论。

系统围绕平衡的小振荡可通过形式：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t)e^{-i\mu t/\hbar} = [\Psi_0(\mathbf{r}) + \vartheta(\mathbf{r}, t)]e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (5.66)$$

研究序参量，其中 $\vartheta$ 是小量，我们寻找形式解：

$$\vartheta(\mathbf{r}, t) = \sum_i [u_i(\mathbf{r})e^{-i\omega_i t} + v_i^*(\mathbf{r})e^{+i\omega_i t}], \quad (5.67)$$

其中 $\omega_i$ 是振荡频率。注意, 利用方程(5.7),  $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ 的GP方程可写为:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\delta E'}{\delta \Psi_0^*(\mathbf{r}, t)}, \quad (5.68)$$

其中 $E'$ 是巨正则能量(5.19)。函数 $u_i(\mathbf{r})$ 和 $v_i(\mathbf{r})$ 通过在线性极限下求解Gross-Pitaevskii方程确定。收集所有时间演化项 $e^{-i\omega_i t/\hbar}$ 和 $e^{i\omega_i t/\hbar}$ , 得微分方程组(博戈留波夫方程):

$$\hbar\omega_i u_i(\mathbf{r}) = (\hat{H}_0 - \mu + 2gn(\mathbf{r}))u_i(\mathbf{r}) + g(\Psi_0(\mathbf{r}))^2 v_i(\mathbf{r}), \quad (5.69)$$

$$-\hbar\omega_i v_i(\mathbf{r}) = (\hat{H}_0 - \mu + 2gn(\mathbf{r}))v_i(\mathbf{r}) + g(\Psi_0^*(\mathbf{r}))^2 u_i(\mathbf{r}), \quad (5.70)$$

其中 $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r})$ , 下标 $i$ 标记第 $i$ 个解。方程(5.69)的形式体系由皮塔耶夫斯基(Pitaevskii, 1961)发展以描述涡旋线的振荡。

方程(5.69)提供系统的本征频率及振幅 $u$ 和 $v$ 的正规模。通常需数值求解。解析可解例子由均匀气体( $V_{ext} = 0$ )基态附近的集体振荡提供, 其中 $\mu = gn$ ,  $\Psi_0$ 与 $\mathbf{r}$ 无关且可选为实( $\Psi_0 = \sqrt{n}$ )。此时得解 $u(\mathbf{r}) = ue^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 和 $v(\mathbf{r}) = ve^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , 方程(5.69)简化为:

$$\hbar\omega u = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u + gn(u + v), \quad (5.71)$$

$$-\hbar\omega v = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v + gn(u + v). \quad (5.72)$$

方程(5.70)允许频率作为波矢 $k$ 函数的解析解:

$$(\hbar\omega)^2 = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{m} gn \quad (5.73)$$

令 $p = \hbar k$ 和 $\epsilon = \hbar\omega$ 后, 方程(5.71)与博戈留波夫色散律(4.31)一致。

方程(5.69)的解展现重要性质值得讨论。首先, 取这些方程的合适组合易得结果:

$$(\omega_i - \omega_i^*) \int d\mathbf{r} (|u_i|^2 - |v_i|^2) = 0, \quad (5.74)$$

这表明除非 $\int d\mathbf{r} |u_i|^2 = \int d\mathbf{r} |v_i|^2$ , 否则博戈留波夫方程(5.69)仅允许实频率解。复频率的出现关联于系统的动态不稳定性。下文仅考虑动态稳定构型。第二重要性质是, 两个频率 $\omega_i \neq \omega_j$ 的解满足正交关系:

$$\int (u_i^* u_j - v_i^* v_j) d\mathbf{r} = 0. \quad (5.75)$$

此外，对每个频率 $\omega_i$ 的解 $u_i$ 和 $v_i$ ，存在另一解 $v_i^*$ 和 $u_i^*$ 对应频率 $-\omega_i$ 。两解代表相同的物理振荡，这通过方程(5.67)易见。另注意 $\omega_i=0$ 总是(5.69)的解，其中 $u = \alpha\Psi_0$ 和 $v = -\alpha\Psi_0^*$ 。此时序参量(5.66)取形式 $\Psi_0(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r})(1 + (\alpha - \alpha^*)) \exp[-i\mu t/\hbar]$ ，对应规范变换（序参量相位被量 $(\alpha - \alpha^*)/i$ 修正）。此变换不导致系统的任何物理激发。

有用量是与平衡附近小振荡(5.66)相关的能量变化。因 $\vartheta$ 的定义(5.66)显含化学势，宜从计算巨正则能量 $E'$ (定义见(5.19))出发。势 $E'$ 的性质是：对给定 $\mu$ ，其在 $\Psi' = \Psi_0$ 时取平稳值。这意味着在 $E'$ 中， $\vartheta$ 、 $\vartheta^*$ 的线性项消失，故至 $\vartheta$ 和 $\vartheta^*$ 的二次项，可写：

$$E' = E'_0 + E^{(2)}, \quad (5.76)$$

其中平衡值 $E'_0$ 通过将稳态解 $\Psi_0(\mathbf{r})$ 代入方程(5.8)和(5.19)简单得到。项 $E^{(2)}$ 为 $\vartheta$ 、 $\vartheta^*$ 的二次型，满足欧拉恒等式：

$$\int \left[ \vartheta(\mathbf{r}) \frac{\delta E^{(2)}}{\delta \vartheta(\mathbf{r})} + \vartheta^*(\mathbf{r}) \frac{\delta E^{(2)}}{\delta \vartheta^*(\mathbf{r})} \right] d\mathbf{r} = 2E^{(2)}. \quad (5.77)$$

另一方面，由变分方程(5.68)知函数 $\vartheta$ 满足方程：

$$i\hbar \frac{\partial \vartheta(\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{\delta E^{(2)}}{\delta \vartheta^*(\mathbf{r})} \quad (5.78)$$

代入方程(5.75)得结果：

$$E^{(2)} = \frac{i\hbar}{2} \int \left[ \vartheta^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \vartheta(\mathbf{r})}{\partial t} - \frac{\partial \vartheta^*(\mathbf{r})}{\partial t} \vartheta(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} \quad (5.79)$$

将 $\vartheta$ 的表达式(5.67)代入并使用正交关系(5.73)，最终得能量变化的表达式：

$$E^{(2)} = \sum_i \int d\mathbf{r} (|u_i|^2 - |v_i|^2) \hbar \omega_i \quad (5.80)$$

现可用“小增量”定理（朗道和栗弗席兹, 1980, 第24节），根据该定理，在固定 $N$ 和 $\mu$ 下分别计算的 $E$ 和 $E'$ 的微扰修正重合。这意味着含时解的相对能量为：

$$E = E_0 + E^{(2)}, \quad (5.81)$$

其中 $E^{(2)}$ 与进入巨正则能量的值相同。

方程(5.78)显式表明, 为确系统稳定性, 对每个模量 $\int d\mathbf{r}(|u_i|^2 - |v_i|^2)\hbar\omega_i$ 须为正。出现该量为负的解是能量不稳定性的直接标志, 揭示稳态解 $\Psi_0$ 不对应能量泛函(5.8)的极小值。能量不稳定性不应与伴随 $\omega_i$ 值虚部出现的动态不稳定性混淆。与动态不稳定性相反, 能量不稳定性可在存在耗散项时使系统失稳, 这些耗散项驱动系统向更低能量构型。此类不稳定性的例子见于量子化涡旋研究, 将在本书第二部分讨论 (见第14章)。

最后, 宜将进入能量(5.78)的积分 $\int d\mathbf{r}(|u_i|^2 - |v_i|^2)$ 用相应解关联的序参量(5.11)的密度变分 $\delta n_i$ 和相位变分 $\delta S_i$ 表示。与方程(5.66)和(5.67)比较表明 $u_i = (\delta n_i^+/(2n_0) + i\delta S_i^+) \Psi_0$ 和 $v_i = (\delta n_i^+/(2n_0) - i\delta S_i^+) \Psi_0$ , 其中 $\delta n_i^+$ 和 $\delta S_i^+$ 定义为:

$$\delta n_i(\mathbf{r}, t) = \delta n_i^+(\mathbf{r})e^{-i\omega_i t} + \delta n_i^-(\mathbf{r})e^{+i\omega_i t}, \quad (5.82)$$

$$\delta S_i(\mathbf{r}, t) = \delta S_i^+(\mathbf{r})e^{-i\omega_i t} + \delta S_i^-(\mathbf{r})e^{+i\omega_i t}. \quad (5.83)$$

这产生恒等式:

$$\int d\mathbf{r}(|u_i|^2 - |v_i|^2) = -i \int d\mathbf{r} (\delta n_i^+ \delta S_i^- - \text{c.c.}). \quad (5.84)$$

结果(5.78)和(5.82)可用于借助流体动力学形式体系探索稳定性条件, 其中正规模自然用密度和相位 $S$ 的小振荡描述 (见5.2 节), 而非振幅 $u$ 和 $v$ 。

线性化Gross-Pitaevskii方程的解提供系统小振荡的本征频率。这些解在多体哈密顿量本征态意义上的解释需要量子化程序 (费特(Fetter), 1972)。在二次量子化形式体系中, 哈密顿量可通过用相应场算符 $\hat{\Psi}$ 替换经典场 $\Psi$ 从方程(5.8) 得到, 并取形式:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (5.85)$$

其中我们适当考虑了场算符的阶数。宜在海森堡绘景下工作, 并将玻色场算符写成形式:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ \Psi_0(\mathbf{r}) + \hat{\vartheta}(\mathbf{r}, t) \right] e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (5.86)$$

其中算符 $\hat{\vartheta}$ 类比经典场(5.67)为:

$$\hat{\vartheta}(\mathbf{r}, t) = \sum_i [u_i(\mathbf{r}) \hat{b}_i e^{-i\omega_i t} + v_i^*(\mathbf{r}) \hat{b}_i^\dagger e^{i\omega_i t}]. \quad (5.87)$$

这里 $u_i$ 、 $v_i$ 和 $\omega_i$ 是博戈留波夫方程(5.69)的解， $\hat{b}_i$ 和 $\hat{b}_i^\dagger$ 分别是第 $i$ 个元激发的湮灭和产生算符，满足通常玻色对易规则 $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ ，其余为零。

将(5.85)代入(5.83)并使用线性化含时Gross-Pitaevskii方程(5.69)解满足的正交性(5.73)，得表达式：

$$H^{(2)} = \sum_i \int d\mathbf{r} \hbar \omega_i \left[ (|u_i|^2 - |v_i|^2) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \right], \quad (5.88)$$

它取代了经典项(5.78)，且我们已省略源于算符 $\hat{b}_i$ 和 $\hat{b}_i^\dagger$ 对易的常数项。此常数项（对基态能量有贡献）的精确计算需散射长度的重整化（如均匀情形所讨论）。若方程(5.69)的解归一化为1，即满足正交归一条件：

$$\int [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})] d\mathbf{r} = \delta_{ij}, \quad (5.89)$$

则算符(5.86)取形式：

$$H^{(2)} = \sum_i \hbar \omega_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \quad (5.90)$$

为独立准粒子气体的哈密顿量。在此归一化选择下，若第 $i$ 个解能量稳定则元激发频率 $\omega_i$ 为正，否则为负。归一化条件完成了量子化程序，将上一章介绍的博戈留波夫结果推广至非均匀气体情形。

最后值得指出，哈密顿量(5.87)的基态不同于哈特里-福克(Hartree-Fock)多体波函数(5.5)。事实上，它对应准粒子的真空( $\hat{b}_i |0\rangle = 0$ )，并以量子关联的出现为特征，这导致凝聚体的量子亏损和关联函数的重要变化（如第3章均匀相互作用气体中所讨论）。

# Chapter 6

## 超流性

超流性与玻色-爱因斯坦凝聚现象密切相关。超流体可以无耗散地流过狭窄的毛细管或狭缝，其剪切粘度为零。液氦-4在所谓的 $\lambda$ 点以下的超流性由卡皮察（Kapitza）(1938) 以及艾伦（Allen）和米泽纳（Misener）(1938) 各自独立发现。这一现象很快被朗道(1941) 解释，他证明了如果元激发的谱满足适当的判据，则流体的运动不会引起耗散。在本章中，我们将发展朗道的论证，并讨论无旋性在表征超流体运动中所起的关键作用。无旋性与玻色-爱因斯坦凝聚直接相关，因为它自然地与序参量的相位相关联，而相位决定了速度势的形状。本章中，我们还将讨论超流体流体动力学理论的主要特征，该理论在宏观层面上提供了对此类系统动力学行为的普遍描述。流体动力学理论尤其允许计算序参量相位的涨落，从而在超流性和玻色-爱因斯坦凝聚之间提供了进一步的关联。在本章的最后部分，我们将重点关注旋转性质，特别强调量子化涡旋的行为。超流体所展现的一些重要特征（无旋性、流体动力学理论的适用性以及量子化涡旋的出现）已在上一章讨论过，该章专门讨论了稀薄玻色气体。在本章中，我们将展示这些概念具有更广泛的适用性，包括最著名的超流氦-4和超流费米气体的情况。这也使得我们能够更清晰地阐明超流性与玻色-爱因斯坦凝聚在概念上的区别，这种区别在三维稀薄气体中并非总是清晰显现。

## 6.1 朗道的超流性判据

在朗道的超流体理论中，能量和动量在伽利略变换下的变换定律起着重要作用。设 $E$ 和 $\mathbf{P}$ 分别是参考系 $K$ 中流体的能量和动量。在以速度 $\mathbf{V}$ 相对于 $K$ 运动的系统 $K'$ 中，能量和动量由下式给出：

$$E' = E - \mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2}MV^2, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P} - M\mathbf{V}, \quad (6.1)$$

其中 $M$ 是流体的总质量。

首先考虑一个均匀流体在零温度下以恒定速度 $\mathbf{v}$ 沿毛细管流动。如果流体是粘性的，运动将导致能量耗散，从而产生加热和动能减少。接下来，我们将只考虑通过产生元激发而发生的耗散过程。让我们在随流体运动的参考系中描述该过程。如果流体中出现一个动量为 $\mathbf{p}$ 的单个激发，那么总能量为 $E_0 + \epsilon(\mathbf{p})$ ，其中 $E_0$ 和 $\epsilon(\mathbf{p})$ 分别是基态能量和激发能量，而流体携带的动量为 $\mathbf{p}$ 。现在让我们转到毛细管静止的参考系。在这个相对于流体以速度 $-\mathbf{v}$ 运动的系中，根据(6.1)，能量 $E'$ 和动量 $\mathbf{P}'$ 由下式给出：

$$E' = E_0 + \epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}Mv^2, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{p} + M\mathbf{v}. \quad (6.2)$$

方程(6.2)表明，量 $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ 和 $\mathbf{p}$ 分别是由于激发的出现而引起的能量和动量的变化。因此我们可以得出结论， $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ 是在毛细管静止的参考系中一个元激发的能量。现在的关键点是，只有当它在能量上“有利”时，即当激发能量为负时，激发的自发产生过程才会发生：

$$\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} < 0. \quad (6.3)$$

如果 $v > \epsilon(\mathbf{p})/p$ ，并且当然我们假设样品可以将动量 $\mathbf{p}$ 传递给毛细管，这种情况是可能的。在这种情况下，流体的流动是不稳定的，其动能将转化为热能。反之，如果速度小于以下值

$$v_c = \min_{\mathbf{p}} \frac{\epsilon(\mathbf{p})}{p}, \quad (6.4)$$

其中最小值是对所有 $\mathbf{p}$ 的值计算的，那么条件(6.3)永远不会满足，并且没有激发会在流体中自发产生。朗道的超流性判据于是可以写成如下形式

$$v < v_c, \quad (6.5)$$

它确保了如果流体与毛细管之间的相对速度小于临界值(6.4)，则将存在无摩擦的持续流动。所实现的构型对应于亚稳态平衡的状态。它实际上对于元激发的产生是稳定的，但与整个系统处于静止状态的完全热力学平衡不同。亚稳流以及可能的衰变机制将在14.9节关于环形构型的背景下讨论。

通过观察玻戈留波夫激发谱(4.31)，人们很容易得出结论：弱相互作用玻色气体满足朗道的超流性判据，并且临界速度由声速给出。强相互作用超流体，如 $^4\text{He}$ ，也满足朗道判据，尽管在这种情况下，由于激发谱更复杂的结构，临界速度小于声速。根据(6.4)和(6.5)给出的朗道判据，理想玻色气体则不是超流体。事实上，在这种情况下 $\epsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ ， $v_c$ 的值等于零。

朗道关于临界速度的判据(6.4)也可以通过不同的方法推导出来，该方法基于引入一个相对于静止流体以速度 $v$ 运动的重杂质，并在流体上产生形式为 $U(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) = \int d\mathbf{q} \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{v}t)) U_q$ 的弱微扰，其中 $U_q$ 是微扰的傅里叶变换。使用响应函数理论的形式体系（见第7章），很容易证明费米黄金定则只有在 $v \geq \epsilon(p)/p$ 时才会流体中引起有限的跃迁，从而产生耗散，其中 $\epsilon(p)$ 是流体的激发谱，且 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$ 。运动的杂质方法将在24.5节中用于计算一维玻色气体中的摩擦力。

现在让我们考虑一个在有限但较小的温度下的均匀流体，并假设系统的热力学性质等效于处于热平衡的非相互作用激发（准粒子）气体的性质。这些准粒子可以传输系统的一部分质量，但是根据上述论证，由于超流体相对于毛细管的运动，不会产生新的激发。与热激发的准粒子相关的额外质量流不是超流体的。这些激发可以与毛细管壁碰撞并交换动量和能量。由于这些碰撞，系统中会产生新的激发，相应的运动会像普通流体一样表现出耗散。因此，我们有以下情景：在非零温度下，流体的一部分表现为正常的粘性液体，而剩余部分表现为无粘性的超流体。碰撞在激发气体中建立热力学平衡。在平衡状态下，该气体的速度 $\mathbf{v}_n$ 与毛细管静止的参考系的速度一致。超流体与毛细管的相对速度由 $\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n$ 给出，因此在毛细管参考系中元激发的能量由 $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n)$ 给出，其中 $\epsilon(\mathbf{p})$ 和 $\mathbf{p}$ 是在超流体静止的坐标系中激发的能量和动量。相应地，元激发的平衡分布函数 $N_p$ 为

$$N_p = \left[ \exp \left( \frac{\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n)}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (6.6)$$

这个方程再次揭示了朗道判据(6.5)的一致性。事实上，只有当相对速度 $|\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n|$ 小于临界速度 $v_c$ 时，分布函数(6.6)才对所有 $\mathbf{p}$ 的值都是正的。还需注意，由函数(6.6)所表征的热力学平衡的存在意味着液体的正常组分和超流组分之间不存在摩擦。摩擦的存在实际上将违反(6.6)的意义。

根据上述描述，超流液体的质量密度可以写成正常组分和超流组分的和 $\rho = \rho_s + \rho_n$ ，分别以速度 $\mathbf{v}_s$ 和 $\mathbf{v}_n$ 运动（遵循标准文献，在本章中我们将使用质量密度 $\rho = mn$ ，而不是前面章节中使用的数密度 $n$ ）。液体的质量流，即单位体积的动量，取以下形式

$$m\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n. \quad (6.7)$$

方程(6.7)允许我们用系统中存在的元激发推导出流体正常密度的显式形式。让我们转到超流体静止的参考系，即 $\mathbf{v}_s = 0$ 。那么 $m\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n$ 。另一方面，在该参考系中流体携带的总动量可以写成 $\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{p}} N_{\mathbf{p}} \mathbf{p}$ ，其中求和遍及所有元激发。如果我们把这个方程写成单位体积的形式，我们就得到了表达式

$$m\mathbf{j} = \int \mathbf{p} N_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (6.8)$$

将方程(6.7)与(6.8)比较，得到正常密度的以下方程：

$$\rho_n \mathbf{v}_n = \int \mathbf{p} N_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (6.9)$$

其中 $N_{\mathbf{p}}$ 由方程(6.6)给出，且 $\mathbf{v}_s = 0$ 。现在让我们假设速度 $\mathbf{v}_n$ 很小，并将 $N_{\mathbf{p}}$ 按 $\mathbf{v}_n$ 的幂次展开。零阶项消失，而线性项经过一些直接运算后给出结果

$$\rho_n = -\frac{1}{3} \int \frac{dN_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{d\varepsilon} p^2 \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (6.10)$$

其中我们使用了元激发的分布函数是 $\mathbf{p}$ 的各向同性函数这一事实。方程(6.10)是朗道超流体理论的核心结果，它允许根据元激发的分布函数 $N_{\mathbf{p}}$ 计算正常组分。然而，我们记得这个方程只有在元激发定义良好且不相相互作用时才有意义。这个条件通常在足够低温的均匀系统中满足。然而，在较高温度下，特别是在临界点附近，热激发数量众多且相互相互作用，这个条件被破坏。即使在低温下，朗道公式(6.10)也并非在所有情况下都适用。例如，在存在无序的情况下，元激发的概念定义不清，流体的

正常组分应使用不同的程序计算。作为方程(6.10)的一个简单应用，我们计算第3章讨论的弱相互作用玻色气体的正常密度。在积分(6.10)中，只有 $k_B T$ 量级的能量是重要的，并且对于低温 $k_B T \ll \mu$ ，只有谱的声子部分对积分有贡献。在方程(6.6)和(6.10)中代入 $\epsilon(p) = cp$ ，并通过分部积分，我们得到结果

$$\rho_n = -\frac{1}{3u} \int \frac{dN_{\mathbf{p}}}{dp} p^2 \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2\pi^2(k_B T)^4}{45\hbar^3 c^5}, \quad (6.11)$$

这表明 $\rho_n$ 的温度依赖性与凝聚体的热耗尽（见方程4.53）所表现的不同，后者在低温下是 $T^2$ 量级的。在相反的极限 $k_B T \gg \mu$ 下，积分(6.10)由谱的单粒子部分 $\epsilon(p) = p^2/2m$ 主导。在这个区域，粒子和准粒子占据数重合，人们发现结果

$$\rho_n = m \int n_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = mn_T, \quad (6.12)$$

表明在这种情况下，正常部分与凝聚体的热耗尽一致。然而，我们再次强调，这个计算在临界温度附近是无效的，因为它忽略了激发之间的相互作用。

值得注意的是，将表达式(6.10)应用于 $\epsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ 的理想气体，会对所有 $T$ 值给出 $\rho_n$ 的结果(6.12)，表明系统在 $T_c$ 以下是超流体的。这个结果似乎与理想玻色气体不满足临界速度的朗道判据这一事实相矛盾。这个矛盾只是一个表面现象。事实上， $\rho_n$ 的结果(6.10)是通过对方程(6.6)的动量分布在 $\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n$ 的小值下进行线性展开得到的。对于 $v_c \neq 0$ 的超流体，我们总是可以进行展开，并且积分一致收敛到其线性极限；而在理想气体中，不仅展开没有意义，而且(6.6)中给出的 $N_{\mathbf{p}}$ 的定义本身就违反了正定性条件。

## 6.2 玻色-爱因斯坦凝聚与超流性

现在让我们讨论玻色-爱因斯坦凝聚与超流性之间的关系。为了理解这一重要联系，考虑凝聚体波函数 $\Psi_0$ 在伽利略变换下的性质是有益的。值得注意的是，即使系统是均匀的且凝聚体密度 $|\Psi_0|^2$ 是常数，函数 $\Psi_0$ 本身也不是伽利略不变的，因为它会获得一个相位因子。通过回忆在海森堡绘景中，场算符 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 满足方程（见方程(5.1)，其中 $V_{ext} = 0$ ）

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (6.13)$$

可以很容易地计算出这个因子。立即可以验证, 如果 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 满足(6.13), 那么

$$\hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t) = \hat{\Psi}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, t) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2}mv^2t \right) \right], \quad (6.14)$$

是一个解, 其中 $\mathbf{v}$ 是一个常矢量。这个方程给出了我们所寻求的场算符的伽利略变换。序参量对应于算符(6.14)的凝聚体分量, 或者如第2章所讨论的, 对应于其期望值 $\langle \hat{\Psi} \rangle$ , 它遵循相同的变换规律。在样品处于平衡状态的坐标系中, 均匀流体的凝聚体波函数由 $\Psi_0 = \sqrt{n_0}e^{-i\mu t/\hbar}$ 给出, 其中 $n_0$ 是一个与 $\mathbf{r}$ 无关的常数。在流体以速度 $\mathbf{v}$ 运动的参考系中, 序参量则取形式 $\Psi_0 = \sqrt{n_0}e^{iS}$ , 其中

$$S(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\hbar} \left[ m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - \left( \frac{1}{2}mv^2 + \mu \right) t \right] \quad (6.15)$$

是新的相位, 而模量 $\sqrt{n_0}$ 没有改变。方程(6.15)表明速度与相位的梯度成正比

$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar}{m} \nabla S \quad (6.16)$$

并且可以被识别为超流体速度。虽然是为恒定速度推导的, 但方程(6.16)对于在空间和时间上缓慢变化的 $\mathbf{v}_s$ 同样有效。这个方程确立了超流体运动的无旋性, 序参量的相位扮演着速度势的角色。注意, 在推导方程(6.16)时, 我们从未假设系统是稀薄气体, 也没有假设工作在零温。结果(6.16)是玻色-爱因斯坦凝聚的一个真正结果, 即与场算符的宏观分量相关联的经典场 $\Psi_0$ 的存在的结果。将超流体速度与序参量相位的梯度等同起来, 代表了玻色-爱因斯坦凝聚与超流性之间的一个关键关系。值得注意的是, 这种关系不涉及序参量的模量, 与相位 $S$ 不同, 模量在超流性理论中扮演着更间接的角色, 并不直接影响系统的热力学性质。在这方面, 我们回顾一下, 将凝聚体密度 $mn_0 = m|\Psi_0|^2$ 与超流体密度 $\rho_s$ 等同起来是错误的。在 $T = 0$ 时, 根据上述讨论, 整个流体是超流体的, 因此 $\rho_s = \rho$ , 而凝聚体密度 $m|\Psi_0|^2$ 由于凝聚体的量子耗尽而小于 $\rho$ , 此时这些量之间的区别已经很明显了。

从微观角度看, 玻色-爱因斯坦凝聚与超流体动力学行为之间的联系一直是大量文献的主题, 这些文献基于复杂的多体方法的发展 (例如, 见Griffin, 1993)。

## 6.3 超流体的流体动力学理论：零温

在零温下，描述超流体宏观动力学的方程具有无旋流体动力学的经典形式。事实上，在没有热激发的情况下，超流体的宏观状态可以用两个变量来描述，即密度和超流体速度。质量密度 $\rho = mn$ 的方程由连续性方程给出

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}_s \rho) = 0, \quad (6.17)$$

表达了质量守恒。为了推导第二个方程，我们利用根据(6.15)，序参量的相位遵循以下规律

$$\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = - \left( \frac{1}{2} m v_s^2 + \mu \right). \quad (6.18)$$

正如前一节已经提到的，很自然地预期这个方程不仅适用于平衡状态（此时方程两边都与位置和时间无关），也适用于 $\mathbf{v}_s$ 和 $\rho$ 在空间和时间上变化足够缓慢的情况。对相位方程取梯度，并使用超流体速度的表达式(6.16)，我们得到结果

$$m \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \left( \frac{m}{2} \mathbf{v}_s^2 + \mu(\rho) \right) = 0, \quad (6.19)$$

其中化学势是通过取密度为 $\rho$ 的均匀流体的值在局域计算的。方程(6.19)与非粘性液体势流的欧拉方程具有相同的形式。在存在外部势 $V_{ext}$ 的情况下，方程(6.19)中的化学势应替换为 $\mu(\rho) + V_{ext}$ ，速度场的方程变为

$$m \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \left( \frac{m}{2} \mathbf{v}_s^2 + \mu(\rho) + V_{ext} \right) = 0. \quad (6.20)$$

方程(6.20)的一个非平凡解由平衡构型给出，其中 $\mathbf{v}_s = 0$ 。在这种情况下，密度分布满足方程

$$\mu(\rho(\mathbf{r})) + V_{ext}(\mathbf{r}) = \mu_0, \quad (6.21)$$

这提供了在所谓的托马斯-费米近似下的基态密度分布。在这个方程中， $\mu_0$ 在存在外部束缚的情况下固定了基态的化学势值，并由归一化条件 $\int d\mathbf{r} \rho = Nm$ 确定。对于稀薄气体，流体动力学方程(6.17)-(6.20)可以从含时Gross-Pitaevskii方程出发并取托马斯-费米极限来显式推导（见5.2节）。在这种情况下，化学势表现出对密度的线性依赖性，方程(6.20)约化为(5.23)。然而，流体动力学方程的有效性更为普遍，也适用于强相互作用超流体，如氦，以及费米超流体，其中化学势对密度的依赖关系非常不同。它们的适用性总是限于宏观现象的研究。

## 6.4 量子流体动力学

根据方程(6.17)-(6.19)，液体的微小振荡是声波。在量子力学中，这些振荡对应于声子，即声波的量子，可以在一个量子方案框架下描述，其中密度和速度场被适当的算符取代。相对于5.6节描述的经典场量子化的传统程序（该程序非常适合讨论稀薄玻色气体），流体动力学方程的量子化具有也适用于高度关联系统的优点。该方法的一个重要应用是声子的别利亚耶夫（Beliaev）衰变，这是在超流氦中实验观察到的现象，将在下一节讨论。

为了建立密度和速度势算符之间的对易规则，使用哈密顿形式体系推导经典方程是方便的。液体的能量，将表示为 $H$ ，可以写成以下形式

$$H = \int \left( \frac{\rho}{2} (\nabla \phi)^2 + e(\rho) \right) d\mathbf{r}, \quad (6.22)$$

其中我们引入了由 $\mathbf{v}_s = \nabla \phi$ 定义的速度势 $\phi$ ，而 $\rho$ 是流体密度， $e(\rho)$ 是单位体积的内能。由于化学势 $\mu$ 可以根据定律 $\mu = m de/d\rho$ 从 $e(\rho)$ 得到，因此对于 $H$ 的变分，有

$$\delta H = \int \left[ -\text{div}(\rho \mathbf{v}_s) \delta \phi + \left( \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\mu(\rho)}{m} \right) \delta \rho \right] d\mathbf{r}. \quad (6.23)$$

因此，流体动力学方程(6.17)-(6.19)可以重写为以下形式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \rho},$$

这使得我们可以将变量 $\rho$ 和 $\phi$ 识别为该问题的共轭变量。这表明量子化程序是通过将这些经典可观测量替换为满足对易规则（朗道, 1941）的算符来实现的：

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}') - \hat{\rho}(\mathbf{r}') \hat{\phi}(\mathbf{r}) = -i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.24)$$

量子化(6.24)将经典流体动力学转变为量子流体动力学。同样，在新方案中，凝聚体的相位 $S$ （它通过关系(6.16)固定了速度势）根据以下关系成为一个算符：

$$\hat{S} = \frac{m}{\hbar} \hat{\phi}. \quad (6.25)$$

量子哈密顿量可以从(6.22)通过选择适当的对称化表达式得到：

$$\hat{H} = \int \left( \nabla \hat{\phi} \frac{\hat{\rho}}{2} \nabla \hat{\phi} + e(\hat{\rho}) \right) d\mathbf{r}. \quad (6.26)$$

量子流体动力学，像任何局域量子场论一样，表现出紫外发散。在我们的情况下，这些发散有明确的物理起源。事实上，我们知道流体动力学理论只在宏观的小波矢区域有效。尽管存在这些发散，该理论仍可有效地用于描述重要的声子过程并计算相关关联函数的红外行为。这在玻戈留波夫理论不适用的系统中尤为重要，例如强关联超流体或低维系统。

让我们使用对易关系(6.24)将算符 $\hat{\rho}$ 和 $\hat{\phi}$ 用声子的湮灭和产生算符 $\hat{b}$ 和 $\hat{b}^\dagger$ 表示。为此，引入对应于密度变化 $\hat{\rho}' = \hat{\rho} - \bar{\rho}$ 的算符是方便的，其中 $\bar{\rho}$ 是系统的恒定密度（在本节中我们只考虑均匀系统）。算符 $\hat{\rho}'$ 可以表示为

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} A_{\mathbf{k}} (\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}), \quad (6.27)$$

其中 $V$ 是系统的体积，我们使用了平面波函数的完备基。算符 $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ 和 $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$ 要求满足通常的玻色对易关系

$$\hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger - \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (6.28)$$

而系数 $A_{\mathbf{k}}$ 将被选择用来将哈密顿量化为对角形式（当在 $\hat{\rho}'$ 和 $\hat{\phi}$ 中展开到二次项时）。满足与密度算符的对易规则(6.24)的算符 $\hat{\phi}$ 由下式给出：

$$\hat{\phi} = -\frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} i\hbar (A_{\mathbf{k}})^{-1} (\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}). \quad (6.29)$$

这可以通过使用恒等式 $V^{-1} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ （对大 $V$ 成立）来轻松验证。

让我们将(6.26)关于 $\hat{\rho}'$ 展开。线性项由于质量守恒（ $\int d\mathbf{r} \hat{\rho}' = 0$ ）而消失。算符 $\hat{\rho}'$ 和 $\hat{\phi}$ 的二次项由下式给出：

$$H^{(2)} = \int \left( \frac{1}{2} \bar{\rho} (\nabla \hat{\phi})^2 + \frac{c^2}{2} \frac{\hat{\rho}'^2}{\bar{\rho}} \right) d\mathbf{r}, \quad (6.30)$$

其中 $c^2 = (\rho/m) d\mu/d\rho$ 是声速的平方。通过将方程(6.27)和(6.29)代入(6.30)，我们发现(6.30)取对角形式

$$H^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \quad (6.31)$$

这是具有色散 $\omega_k = ck$ 的独立声子的哈密顿量的典型形式，前提是我们做出选择

$$A_{\mathbf{k}} = \left( \frac{\hbar k \bar{\rho}}{c} \right)^{1/2}, \quad (6.32)$$

这确定了算符 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\rho}$ 用声子算符 $b$ 和 $b^\dagger$ 表示的最终形式。在推导方程(6.31)时，我们省略了源于算符 $b$ 和 $b^\dagger$ 的非对易性的常数项。流体动力学哈密顿量(6.26)对角化为形式(6.31)与第4章在弱相互作用玻色气体背景下对玻戈留波夫哈密顿量的对角化有密切关系。特别是，速度势 $\hat{\phi}$ 中出现的红外发散（见方程(6.29)和(6.32)）与表征玻戈留波夫变换(4.23)的参数 $u$ 和 $v$ 所表现出的发散密切相关。在6.7节中，我们将探讨这些发散性的物理后果，它们导致序参量相位的涨落中出现有趣的特征。

哈密顿量(6.26)展开中的下一项描述了声子之间的相互作用。例如，涉及三个声子的过程由三阶项描述：

$$H^{(3)} = \int \left( \nabla \hat{\phi} \frac{\hat{\rho}}{2} \nabla \hat{\phi} + \frac{1}{6} \left( \frac{d}{d\rho} \frac{c^2}{\rho} \right) (\hat{\rho})^3 \right) d\mathbf{r}, \quad (6.33)$$

该式将在下一节用于计算与一个声子衰变成两个声子相关的别利亚耶夫阻尼。

## 6.5 声子的别利亚耶夫衰变

在本节中，我们应用量子流体动力学形式体系来讨论一个携带动量 $\mathbf{p}$ 的声子衰变为两个动量分别为 $\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ 的声子的问题。这是一个非线性过程，只能通过将哈密顿量中的三阶项(6.33)包含进来才能描述。能量守恒给出条件

$$\epsilon(p) = \epsilon(q) + \epsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) \quad (6.34)$$

其中 $\epsilon(p)$ 是声子色散定律。对于具有线性色散（ $\epsilon = up$ ）的声子，这个方程只有在所有三个粒子的动量都平行时才能满足。在展开式中包含下一项

$$\epsilon(p) \approx cp + \alpha p^3 \quad (6.35)$$

（对于小的 $p$ ）通常会产生不同的结果。事实上，在这种情况下，方程(6.34)取形式 $c(p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|) = -\alpha(p^3 - q^3 - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|^3)$ 。在小的 $p$ 下，

声子相对于初始声子方向以小的角度 $\vartheta$ 发射。在左边我们有

$$p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx -\frac{pq}{p - q} (1 - \cos \vartheta), \quad (6.36)$$

而在右边只需代入 $|\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx (p - q)$ 。然后我们得到关系式

$$1 - \cos \vartheta = 3\alpha (p - q)^2, \quad (6.37)$$

它固定了发射角 $\vartheta$ 的值。这个方程只有在系数 $\alpha$ 为正时才能满足。在相反的情况下，衰变过程不能发生。对于稀薄玻色气体，系数 $\alpha$ 很容易使用玻戈留波夫色散定律(4.31) 计算出来，并且是正的： $\alpha = (8m^2c)^{-1}$ 。在超流 $^4\text{He}$ 中， $\alpha$ 在零压下是正的（见图8.5），但在较高压力下变为负值。

为了计算衰变的概率，我们必须评估哈密顿量的三阶项(6.33)的矩阵元。负责跃迁的算符 $\hat{\rho}'$ 中的项为

$$\hat{\rho}' \sim \frac{1}{\sqrt{2V}} \left( A_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} + A_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} + A_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^\dagger e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}/\hbar} \right),$$

$\hat{\phi}$ 类似。将这些算符代入(6.33)并收集具有组合 $\hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^\dagger$ 的项，我们得到相关矩阵元 $H_{if}^{(3)} = \langle \mathbf{p} | H^{(3)} | \mathbf{q}, \mathbf{p} - \mathbf{q} \rangle$ 的结果：

$$H_{if}^{(3)} = -i \frac{1}{\sqrt{2V}} \left( \frac{c}{\rho} pq(p - q) \right)^{1/2}. \quad (6.38)$$

结果(6.38)适用于小的 $p$ 值，此时 $\mathbf{p}$ 、 $\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ 的方向几乎相同。一个声子衰变成两个声子的单位时间概率由“黄金定则”给出：

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |H_{if}^{(3)}|^2 \frac{1}{2} \delta(\epsilon(p) - \epsilon(q) - \epsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|)), \quad (6.39)$$

其中因子1/2考虑了具有动量 $\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ 的声子对的双重计数。通过代入矩阵元(6.38)并对 $\mathbf{q}$ 积分，我们得到结果

$$w = p^5 \frac{3}{320\pi\rho\hbar^4} \left( 1 + \frac{\rho^2}{3c^2} \frac{d}{d\rho} \frac{c^2}{\rho} \right)^2. \quad (6.40)$$

值得注意的是，只要 $\alpha$ 的值为正，这个概率不依赖于参数 $\alpha$ 的显式值。

声子的有限寿命意味着其能量具有虚部，该虚部与衰变概率通过关系 $\text{Im}\epsilon(p) = -\hbar w/2$ 相关联。因子2源于激发归一化积分 $\int |\psi_{ph}|^2 d^3x$ 对声子

波函数的二次依赖，因此像 $e^{-2\text{Im}ct/\hbar}$ 一样衰减。对于稀薄玻色气体，量 $c^2$ 在密度上是线性的，因此方程(6.40) 右边括号中的第二项消失，声子频率的虚部变为（别利亚耶夫，1958）

$$\gamma \equiv -\text{Im } \epsilon(p) = \frac{3p^5}{640\pi\rho\hbar^3}. \quad (6.41)$$

上面讨论的声子衰变在文献中被称为别利亚耶夫衰变。这种衰变机制也可以在非均匀系统中研究。在这种情况下应特别注意元激发谱的离散性。

## 6.6 二流体流体力学：第一声与第二声

本节致力于描述有限温度下超流体的动力学。我们将考虑元激发的自由程远小于其波长的情况，并且碰撞确保了局域热力学平衡。在这种情况下，可以在流体的每一点定义密度和温度（或熵）。还必须定义局域超流体速度和正常速度。这些量的普遍方程组由朗道(1941) 获得（另见Landau and Lifshitz, 1987a）。

下面我们将限于描述小振幅振荡。这种振荡在有限温度下的传播为研究超流性的后果提供了重要工具。首先， $\mathbf{v}_s$  的方程具有与零温下相同的(6.19)形式。忽略 $\mathbf{v}_s^2$ 项，我们可以写出

$$m \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \mu = 0, \quad (6.42)$$

其中，在有限温度下，应考虑化学势 $\mu$ 不仅依赖于 $\rho$ ，还依赖于 $T$ 。

密度的方程具有连续性方程的通常形式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(m\mathbf{j}) = 0, \quad (6.43)$$

其中，根据方程(6.7)，动量密度可以分离为正常分量和超流分量：

$$m\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n, \quad (6.44)$$

并且密度 $\rho_s$ 和 $\rho_n$ 可以取其平衡值。动量密度 $m\mathbf{j}$ 的时间导数等于单位体积的力，在线性近似下，该力由压力的梯度固定（这里我们忽略了外部场的存在）。因此我们有方程

$$m \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \nabla P = 0. \quad (6.45)$$

最后一个方程是单位体积熵 $s$ 的方程。这可以从一般论证推导出来。事实上，如果不存在诸如粘性和热传导之类的耗散过程，则熵守恒， $s$ 的方程取连续性方程的形式。此外，只有元激发对熵有贡献，因此熵的输运由流体的正常速度 $\mathbf{v}_n$ 固定。单位体积熵的方程于是取形式

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \text{div}(s\mathbf{v}_n) = 0, \quad (6.46)$$

其中，在线性区域，第二项中的熵应取平衡值。

进入上述方程的热力学量不是独立的，并服从吉布斯-杜亥姆（Gibbs-Duhem）热力学方程

$$\rho d\mu = -msdT + mdP. \quad (6.47)$$

还值得注意的是，这个热力学恒等式仅在线性区域有效。事实上，一般来说，热力学函数也可能表现出对正常速度和超流体速度之间相对速度 $\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s$ 的依赖关系。

通过从方程(6.43)和(6.45)中消去 $\mathbf{j}$ ，我们得到一个重要的方程

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla^2 P, \quad (6.48)$$

它分别将密度和压力的时空变化联系起来。

我们现在的目的是推导一个将温度和熵的时空变化联系起来的方程。为此，将方程(6.46)用单位质量熵 $\tilde{s} = s/\rho$ 重写是方便的。利用连续性方程(6.43)，可以写出

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} + \frac{\tilde{s}\rho_s}{\rho} \text{div}(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s) = 0. \quad (6.49)$$

另一方面，利用热力学关系(6.47)以及方程(6.42)和(6.45)，我们发现

$$\rho_n \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s) + \rho \tilde{s} \nabla T = 0, \quad (6.50)$$

将其与方程(6.49)结合，得到所需的方程

$$\frac{\partial^2 \tilde{s}}{\partial t^2} = \frac{\rho_s \tilde{s}^2}{\rho_n} \nabla^2 T. \quad (6.51)$$

利用关系式

$$\delta\rho = \frac{\partial\rho}{\partial P}\delta P + \frac{\partial\rho}{\partial T}\delta T, \quad \delta\tilde{s} = \frac{\partial\tilde{s}}{\partial p}\delta p + \frac{\partial\tilde{s}}{\partial T}\delta T \quad (6.52)$$

我们发现方程(6.48)和(6.51)提供了压力和温度的耦合方程。通过寻找在时间和空间上按 $e^{-i\omega(t-x/c)}$ 变化的平面波解，我们得到声速的以下方程：

$$\left[ \frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} \frac{\partial \rho}{\partial P} - \frac{\partial \tilde{s}}{\partial P} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right] c^4 - \left[ \frac{\partial \tilde{s}}{\partial T} + \frac{\rho_s \tilde{s}^2}{\rho_n} \frac{\partial \rho}{\partial P} \right] c^2 + \frac{\rho_s \tilde{s}^2}{\rho_n} = 0, \quad (6.53)$$

其中对 $T$ 的导数在恒定压力下取，反之亦然。基于标准热力学关系，一个冗长但直接的计算允许我们将方程(6.53)重写为更便利的形式（朗道，1941）：

$$c^4 - \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{\tilde{s}} + \frac{\rho_s T \tilde{s}^2}{\rho_n \tilde{c}_v} \right] c^2 + \frac{\rho_s T \tilde{s}^2}{\rho_n \tilde{c}_v} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = 0, \quad (6.54)$$

其中 $\tilde{c}_v = T(\partial \tilde{s} / \partial T)_\rho$ 是单位质量的定容比热，在恒定 $\tilde{s}$ 下的导数对应于等熵变换，因为量 $Nm\tilde{s}$ 与系统的熵一致。

如果 $\rho_s \neq 0$ ，方程(6.54)会产生两个不同的声速。这是超流体中存在两个与正常组分和超流组分相关的自由度的结果。在玻色-爱因斯坦凝聚系统中存在两种类型的声波首先由蒂萨（Tisza）（1940）注意到。

方程(6.54)在 $T \rightarrow T_c$ 时很容易求解，即接近转变温度 $\rho_s \rightarrow 0$ 。在这种情况下，上解（第一声）由等熵速度给出

$$c_1^2 = \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{\tilde{s}}, \quad (6.55)$$

并且在 $T_c$ 以上连续过渡到通常的声速。在相同的极限下，下解（第二声）取形式

$$c_2^2 = \frac{\rho_s T \tilde{s}^2}{\rho_n \tilde{C}_p}, \quad (6.56)$$

并且在转变点 $\rho_s = 0$ 时恒等于零。在上面的方程中，我们引入了定压比热 $\tilde{C}_p$ ，它通过热力学关系 $\tilde{C}_p / \tilde{C}_v = (\partial P / \partial \rho)_{\tilde{s}} / (\partial P / \partial \rho)_T$ 与 $\tilde{C}_v$ 相关联。

结果(6.55)和(6.56)在 $T \rightarrow 0$ 极限下也成立，此时可以设 $(\partial P / \partial \rho)_T = (\partial P / \partial \rho)_{\tilde{s}}$ 和 $\tilde{C}_p = \tilde{C}_v$ 。在这个极限下，所有热力学函数以及正常密度 $\rho_n$ 都由声子的热激发固定，方程(6.56)对第二声速给出结果 $c_2^2 = c_1^2 / 3$ 。

对于具有小热膨胀系数（因此等温和绝热压缩率几乎相等）的系统，方程(6.56)在整个超流区域 $0 < T < T_c$ 内为第二声速提供了一个极好的近似。这些系统包括著名的超流 $^4\text{He}$ 和处于么正性的相互作用费米气体（见16.6节）。方程(6.56)明确指出了超流体密度所起的关键作用，并且实际

上被用来在宽温度范围内确定液氦 $^4\text{He}$ 中超流体密度的温度依赖性 (Dash and Taylor, 1957)。

然而, 方程(6.55)和(6.56)不足以描述稀薄玻色气体在中间 $T$ 值下的声速, 因为这些系统表现出高等温压缩率。一个简单的描述可以通过注意到, 对于温度 $k_B T \gg \mu = gn$ , 弱相互作用玻色气体的所有热力学函数 (等温压缩率除外) 都可以安全地使用理想玻色气体模型来评估。这显著简化了方程(6.54)的计算。事实上, 在理想玻色气体模型中, 人们发现简单结果

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\bar{s}} + \frac{\rho_s T \bar{s}^2}{\rho_n \tilde{C}_v} = \frac{\rho T \bar{s}^2}{\rho_n \tilde{C}_v} \quad (6.57)$$

适用于 $c^2$ 项的系数。现在很容易推导出满足条件 $c_1 \gg c_2$ 的两个解。为了得到较大的速度 $c_1$ , 可以忽略(6.54)中的最后一项。利用理想玻色气体模型的热力学关系 (见3.2节), 并将正常密度等同于热密度 ( $\rho_n = mn_T = mN_T/V$ ), 得到第一声速的预测 (Lee and Yang, 1959):

$$c_1^2 = \frac{5}{3} \frac{g_{5/2}}{g_{3/2}} \frac{k_B T}{m}. \quad (6.58)$$

相互作用对 $c_1^2$ 的修正已由Griffin and Zaremba (1997)计算。当 $T \rightarrow T_c$ 时, 这个分支趋近于理想玻色气体在 $T_c$ 以上的通常声速。

为了计算 $c_2$ , 我们必须在(6.54)中忽略 $c^4$ 项, 并使用结果(6.57), 我们发现

$$c_2^2 = \frac{\rho_s}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T. \quad (6.59)$$

在一级近似下, 弱相互作用玻色气体的逆等温压缩率 $\rho(\partial P/\partial \rho)_T$  (除了接近临界温度的情况) 等于其零温值 $g\rho^2/m^2$ 。这个结果很容易在哈特里-福克近似下理解 (见13.2节), 该近似给出化学势 $\mu = g(n + n_T)$ 的结果, 其中 $n_T$ 是热密度。使用热力学恒等式 $(\partial P/\partial \rho)_T = n(\partial \mu/\partial \rho)_T$ , 并注意到在一级近似下 $n_T$ 与密度无关, 我们得到结果 $(\partial P/\partial \rho)_T = gn/m$ , 这允许我们将第二声速重写为

$$c_2^2 = \frac{gn_0(T)}{m}, \quad (6.60)$$

其中, 与上面所做的近似一致, 我们设 $\rho_s(T) = mn_0(T) = mN_0(T)/V$ 。

在远小于 $T_c$  (其中 $n_0(T) \sim n$ ) 但仍远大于 $\mu/k_B T$ 的温度下, 结果(6.60)趋近于 $T = 0$ 的玻戈留波夫声速(4.15)。这是第一声模和第二声模之间发生

杂化的明显标志，图6.1示意性地说明了这一点。这种杂化的出现首先在Lee and Yang (1959)的开创性工作中被识别。为了在中间区域 $k_B T \sim \mu$ 获得 $c_1^2$ 和 $c_2^2$ 的结果，应该使用元激发的玻戈留波夫谱来计算热力学函数。通过引入无量纲变量 $\tilde{t} = k_B T / gn$ 和 $\eta = gn / k_B T_c$ （其中 $T_c$ 是理想玻色气体的临界温度）可以方便地描述这个区域。玻戈留波夫理论提供了正确的热力学函数，前提是 $T \ll T_c$ ，即 $\tilde{t} \ll \eta^{-1}$ 。因此，杂化区域 $\tilde{t} \sim 1$ 与玻戈留波夫理论的使用是兼容的，前提是 $\eta \ll 1$ ，因此 $T \ll T_c$ 。在这个温度范围内，可以安全地使用 $T = 0$ 的玻戈留波夫元激发谱来计算热力学函数。对于自由能，人们发现以下表达式（Verney et al., 2015）

$$\frac{A}{gnN} = \frac{E_0}{gnN} + \frac{2\tilde{t}}{\zeta(3/2)\sqrt{2\pi}}\eta^{3/2} \int_0^\infty \tilde{p}^2 \ln \left( 1 - e^{-\tilde{p}\sqrt{\tilde{p}^2+4/2\tilde{t}}} \right) d\tilde{p} \quad (6.61)$$

（用 $\tilde{t}$ 和 $\eta$ 表示），从中可以很容易地计算出所有的热力学函数。 $E_0$ 这里是基态能量。使用朗道的定义(6.10)，正常密度取形式

$$\frac{\rho_n}{\rho} = \frac{2}{3\zeta(3/2)\tilde{t}\sqrt{2\pi}}\eta^{3/2} \int_0^\infty \frac{\tilde{p}^4 e^{\tilde{p}\sqrt{\tilde{p}^2+4/2\tilde{t}}}}{\left( e^{\tilde{p}\sqrt{\tilde{p}^2+4/2\tilde{t}}} - 1 \right)^2} d\tilde{p}. \quad (6.62)$$

现在的想法是针对固定在大约1的 $\tilde{t}$ 值计算(6.54)的两个解，并取极限 $\eta \rightarrow 0$ 。从物理上讲，这对应于考虑非常低的温度（ $\mu$ 量级）和非常小的气体参数 $na^3 \sim \eta^3$ 。通过将方程(6.54)的解用 $T = 0$ 玻戈留波夫声速 $c_B = \sqrt{gn/m}$ 表示，发现在 $\eta \rightarrow 0$ 极限下，两个声速仅依赖于无量纲参数 $\tilde{t}$ ，并由下式给出：

$$c_+^2 = c_B^2 \quad c_-^2(\tilde{t}) = c_B^2 f(\tilde{t}), \quad (6.63)$$

其中 $f(\tilde{t})$ 是一个由下式确定的无量纲函数

$$f(\tilde{t}) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{m\rho T S^2}{\rho_n \tilde{c}_v gn}. \quad (6.64)$$

两个速度在 $\tilde{t} = \tilde{t}_{cr} \sim 0.6$ 处重合（杂化点）。在更低的温度下， $c_-^2$ 如预期的那样趋近于零温值 $c_B^2/3$ 。包含有限但小的 $\eta$ 值会在杂化点导致两个分支之间出现一个间隙，该间隙与 $\eta^{3/4}$ 成正比。杂化机制允许识别一个上分支 $c_1$ （在 $\tilde{t} < \tilde{t}_{cr}$ 时与 $c_+$ 重合，在 $\tilde{t} > \tilde{t}_{cr}$ 时与 $c_-$ 重合）和一个下分支 $c_2$ （在 $\tilde{t} < \tilde{t}_{cr}$ 时与 $c_-$ 重合，在 $\tilde{t} > \tilde{t}_{cr}$ 时与 $c_+$ 重合）。上述讨论解释了为什么在温度大于 $\mu/k_B$

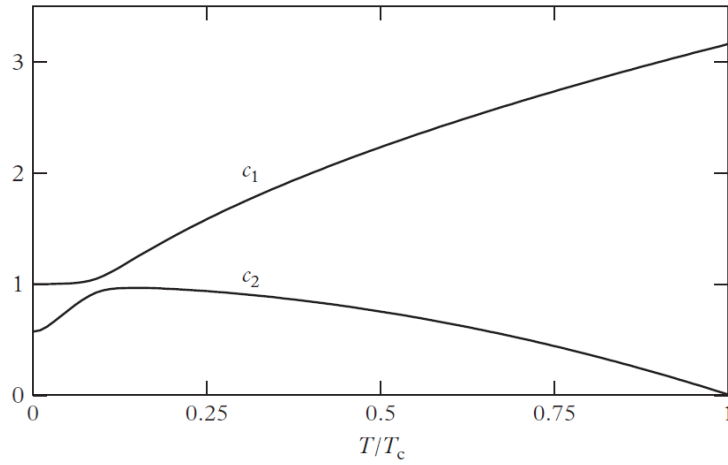


Figure 6.1: 稀薄玻色气体中第一声速和第二声速随温度变化的示意图 (以  $T = 0$  玻戈留波夫速度  $\sqrt{gn/m}$  为单位)。该图指出了在低温下发生在两个模式之间的杂化效应。在  $T_c$  以上, 只有第一声存在。

时, 下分支 (第二声) 在物理上与凝聚体的振荡一致, 具有与玻戈留波夫理论预测的  $T = 0$  声模相同的物理行为。这种行为已被 Meppelink et al. (2009) 实验证实。

本节说明的结果在所有热力学量在元激发平均自由程量级的距离上缓慢变化时才有效。这个条件在低温下相当苛刻, 因为此时碰撞稀少。在这方面, 应该研究的另一个区域是无碰撞区域, 这在低温下尤为重要 (见 13.7 节)。

## 6.7 相位的涨落

通过发展 6.4 节中的流体动力学形式体系, 我们推导出了密度和速度势算符用声子产生和湮灭算符  $\hat{b}^\dagger$  和  $\hat{b}$  表示的显式形式 (见方程 (6.27) 和 (6.29))。这些结果使我们能够计算密度的涨落以及凝聚体相位的涨落。事实上, 序参量的相位通过关系 (6.25) 与速度势相关联。利用结果 (6.32), 密度和相位算符取以下形式 (在  $\rho_s \sim \rho$  的低温下成立):

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\bar{\rho} \hbar k}{c} \right)^{1/2} (\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}), \quad (6.65)$$

和

$$\hat{S} = -\frac{\mu t}{\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k}} i \left( \frac{mc}{\rho \hbar k} \right)^{1/2} (\hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}) \quad (6.66)$$

这明确表明相位算符的傅里叶分量在  $k \rightarrow 0$  时变得越来越大。值得注意的是，动能项依赖于相位梯度的平方，因此相位的红外发散不会在能量中导致任何特殊效应。然而，其他物理量，如单体密度矩阵的长程行为，则受到这种发散的强烈影响，我们将在下面讨论。

单体密度矩阵  $n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \rangle$  可以在长程极限下使用场算符的以下宏观表示来计算：

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n_0} e^{i\hat{S}}, \quad (6.67)$$

其中  $n_0$  是凝聚体密度， $\hat{S}$  是相位算符，我们将使用流体动力学表达式(6.66)。在写出(6.67)时，我们使用了这样一个事实：在计算大距离处的单体矩阵时， $n_0$  的算符性质可以忽略，因为主导效应是由相位的涨落给出的。利用相位涨落出现的概率分布是高斯分布这一事实，单体密度矩阵可以写成以下形式：

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n_0 \left\langle e^{-i(\hat{S}(\mathbf{r}) - \hat{S}(\mathbf{r}'))} \right\rangle = n_0 e^{-\langle (\hat{S}(\mathbf{r}) - \hat{S}(\mathbf{r}'))^2 \rangle / 2} = n_0 e^{-(\chi(0) - \chi(s))}, \quad (6.68)$$

其中我们定义了相位关联函数

$$\chi(s) = \langle S(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}') \rangle \quad (6.69)$$

且  $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ 。单体密度矩阵与相位关联函数之间的关系(6.68)在零温和有限温度下都成立。将指数展开到相位关联函数中的线性项，我们发现

$$n^{(1)}(s) \approx n_0 e^{-\chi(0)} (1 + \chi(s)). \quad (6.70)$$

注意，与单体密度矩阵不同，相位关联函数不是规范不变的。在进行展开(6.69)时，我们假设当  $s \rightarrow \infty$  时  $\chi$  消失（这总是可以通过对相位的绝对值进行适当选择来强制实现）。根据一般定义(2.10)，量  $n_0 e^{-\chi(0)}$  提供了重整化的凝聚体比例值，即使在  $T = 0$  时，由于量子耗尽，该值也小于1（在下面，这个重整化的值仍将用  $n_0$  表示）。使用相位算符的结果(6.66)，函数  $\chi$  在低温下取形式

$$\chi(s) = \frac{m^2 c}{\rho} \int \left( N_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right) \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} / \hbar}}{p} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi \hbar)^3}, \quad (6.71)$$

其中  $s = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ,  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ,  $N_{\mathbf{p}} = \langle \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} \rangle = [e^{cp/k_B T} - 1]$  是声子的热分布。(6.69)的傅里叶变换允许我们计算粒子占据数 (见方程(2.5)和(2.17)), 我们得到结果

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{n_0 mc}{np} \left( N_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right) \quad (6.72)$$

(在小的  $p$  下)。在  $N_{\mathbf{p}} = 0$  的零温下, 人们发现在小的  $p$  处存在发散行为 (Gavoret and Nozieres, 1964):

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{n_0 mc}{2np}, \quad (6.73)$$

导致大  $s$  处的渐近行为

$$n^{(1)}(s) = n_0 + n_0 \frac{mc}{s^2 4\pi^2 \hbar}. \quad (6.74)$$

结果(6.73)和(6.74)与为  $n_0 \approx n$  的稀薄气体推导的方程(4.46)和(4.51)一致。在有限温度下, 对于  $cp \ll k_B T$ , 人们发现

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{n_0 m k_B T}{np^2} \quad (6.75)$$

(Hohenberg and Martin, 1965)。这个方程也与为稀薄气体推导的结果(4.52)一致。

方程(6.72)允许计算凝聚体的热耗尽。事实上, 对  $\mathbf{p} \neq 0$  的粒子的动量分布进行直接积分, 得到以下结果 (Ferrell et al., 1968):

$$\frac{n_0(T) - n_0(0)}{n_0(0)} = -\frac{mc}{n} \int \frac{N_{\mathbf{p}}}{p} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{m(k_B T)^2}{12nc\hbar^3}, \quad (6.76)$$

这已在第4章为弱相互作用玻色气体推导过 (见方程(4.54))。值得注意的是, 零温下的量子耗尽不能用这种方法计算, 因为相应的积分包含紫外发散。

相位的热涨落不仅可以在  $\rho_s \sim \rho$  的低温下计算, 也可以在直至转变点的更高温度下计算, 从动能的表达式出发:

$$E_{kin} = \int d\mathbf{r} \left( \frac{1}{2} \rho_s \mathbf{v}_s^2 + \frac{1}{2} \rho_n \mathbf{v}_n^2 \right). \quad (6.77)$$

为此, 将序参量的相位写成以下形式是方便的:

$$S(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (6.78)$$

因此, 利用超流体速度的表达式  $\mathbf{v}_s = \hbar/m \nabla S$ , (6.77) 中超流部分的贡献可以写成

$$\frac{1}{2} \int \rho_s \mathbf{v}_s^2 d\mathbf{r} = \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \frac{\rho_s}{2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 |S_{\mathbf{k}}|^2. \quad (6.79)$$

这个方程意味着产生具有傅里叶分量  $S_{\mathbf{k}}$  的相位涨落的概率  $P(S_{\mathbf{k}})$  由下式给出:

$$P(S_{\mathbf{k}}) = e^{-\delta E/kT} = \exp \left[ -\frac{\hbar^2 \rho_s k^2}{2m^2 k_B T} \frac{\langle |S_{\mathbf{k}}|^2 \rangle}{V} \right], \quad (6.80)$$

相应的  $|S_{\mathbf{k}}|^2$  的平均值为

$$\frac{\langle |S_{\mathbf{k}}|^2 \rangle}{V} = \frac{k_B T m^2}{k^2 \hbar^2 \rho_s}. \quad (6.81)$$

利用关系式

$$\langle S(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}} \frac{\langle |S_{\mathbf{k}}|^2 \rangle}{V} \quad (6.82)$$

和结果(6.81), 可以评估单体密度矩阵(6.68)的长程行为。我们发现

$$n^{(1)}(s)_{s \rightarrow \infty} = n_0 \left( 1 + \frac{k_B T m^2}{s 4\pi \hbar^2 \rho_s} \right) \quad (6.83)$$

或者等价地, 粒子占据数

$$(n_{\mathbf{p}})_{\mathbf{p} \rightarrow 0} = \frac{k_B T n_0 m^2}{p^2 \rho_s}, \quad (6.84)$$

其中  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ 。这个方程将结果(6.75)推广到  $\rho_s \neq \rho$  的更高温度, 甚至在  $n_0$  和  $\rho_s$  都趋于零的转变点附近也有效。然而, 在转变点附近的应用条件变得严格, 因为愈合长度非常大, 并且流体动力学方法的适用性仅限于非常小的  $p$  值。

让我们通过讨论速度场热涨落的行为来结束本节。方程(6.81)允许我们直接计算超流体速度  $\mathbf{v}_s$  的涨落。事实上, 根据  $v_{\ell} = (1/V) \sum_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}})_{\ell} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  定义速度场的傅里叶分量, 我们发现超流体速度的傅里叶变换由  $i\mathbf{k} S_{\mathbf{k}} \hbar/m$  给出, 因此

$$\langle (v_{s\mathbf{k}})_{\ell} (v_{s\mathbf{k}})_{m}^* \rangle = \frac{k_B T}{k^2 \rho_s} k_{\ell} k_m V. \quad (6.85)$$

正常速度  $\mathbf{v}_n$  的涨落可以直接从正常组分对动能(6.77)的贡献中计算出来。它们由下式给出:

$$\langle (v_{n\mathbf{k}})_{\ell} (v_{n\mathbf{k}})_{m}^* \rangle = \frac{k_B T}{\rho_n} \delta_{\ell m} V \quad (6.86)$$

并且相对于(6.85)表现出不同的张量结构。这种差异是超流体速度场所服从的无旋性约束的结果。使用流(6.7)的表达式，我们最终可以得到流 $k$ 分量的涨落的以下结果：

$$\langle (j_{\mathbf{k}})_\ell (j_{\mathbf{k}})_m^* \rangle = \frac{\rho_s}{m^2} \frac{k_B T}{k^2} k_\ell k_m V + \frac{\rho_n}{m^2} k_B T \delta_{\ell m} V. \quad (6.87)$$

这个关系在“高”温区域 $k_B T \gg \epsilon(p)$ （其中 $\epsilon$ 是元激发的能量， $p = \hbar k$ ）成立。在这些条件下，相位的涨落由热效应主导，人们可以安全地忽略在较低温度下才变得重要的量子涨落。

## 6.8 超流体的旋转

我们已经提到过，超流体不能像普通液体那样旋转。如果液体被封闭在一个绕其对称轴旋转的圆柱形容器中，只有正常组分会被带动旋转。在足够低的角速度下，超流体部分将保持静止。然而，对于足够大的角速度，这种状态在能量上变得不利。原因在于，在随容器以角速度旋转的参考系中（预期热力学平衡在此发生），需要最小化的物理量是

$$E_r = E - \Omega \cdot \mathbf{L}, \quad (6.88)$$

其中 $E$ 和 $\mathbf{L}$ 分别是实验室坐标系中的能量和角动量， $\Omega$ 是容器的角速度。从方程(6.88)可以推断，对于足够大的 $\Omega$ ，具有 $\Omega \cdot \mathbf{L} > 0$ 的状态在热力学上将比 $\mathbf{L} = 0$ 的状态（对应于静止的超流体）更有利。由于超流体不能以刚性方式旋转，最终将通过产生量子化的涡旋线来实现旋转。在5.3节中，我们在稀薄玻色气体中研究了这种构型。在本节中，我们将其推广到任意超流体。

首先计算超流体速度围绕这样一条线的环量（circulation）。超流体速度可以通过方程(6.16)用凝聚体波函数的相位 $S$ 表示。这意味着环量取以下形式：

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = \oint \frac{\hbar}{m} \nabla S \cdot d\mathbf{l} = 2\pi \frac{\hbar}{m} s, \quad (6.89)$$

其中 $s$ 应该是一个整数，以确保波函数是单值的。这意味着环量以 $\hbar/m$ 为单位量子化。

考虑一条沿圆柱形容器对称轴的直涡旋线。在这种情况下， $\mathbf{v}_s$ 的流线是位于垂直于对称轴的平面上的圆，根据方程(6.89)，有

$$v_s = s \frac{\hbar}{mr}, \quad (6.90)$$

其中 $r$ 是到该线的距离。这个规律应与刚体旋转相关的速度场 $v = \Omega r$ 进行比较。流体的角动量 $L_z$ 很容易计算，并由下式给出：

$$L_z = \int \rho_s v_s r d\mathbf{r} = \pi R^2 L s \rho_s \frac{\hbar}{m}, \quad (6.91)$$

其中 $L$ 是容器的长度， $R$ 是其半径。在推导最后一个等式时，我们假设涡旋核心的尺寸 $r_c$ （表征超流体密度显著扰动的区域）远小于 $R$ ，并且 $\rho_s$ 是远离核心处的超流体密度值。

与涡旋线相关的能量由动能项主导。一个简单的计算得出：

$$E_v = \int \frac{1}{2} \rho_s v_s^2 d\mathbf{r} = L \pi \rho_s s^2 \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \ln \left( \frac{R}{r_c} \right), \quad (6.92)$$

其中对径向变量的积分在涡旋核心尺寸 $r_c$ 和样品半径 $R$ 之间进行。在超流氦的情况下，核心尺寸约为原子间距量级，而在稀薄气体中，它由愈合长度固定（ $r_c = \xi/1.46$ ）。然而，请注意，(6.92)对 $r_c$ 的依赖是对数关系，因此涡旋的能量对核心尺寸的实际值非常不敏感。方程(6.91)和(6.92)也解释了为什么 $|s| > 1$ 的涡旋在能量上是不稳定的。这源于能量 $E_v$ 按 $s^2$ 标度，而 $L_z$ 随 $s$ 线性增加的事实。

利用结果(6.92)，我们可以很容易地找到存在能量稳定涡旋线的临界值 $\Omega_c$ 。该值通过要求由于产生涡旋而引起的能量 $E_r$ (6.88)的变化等于 $E_v$ 来得到。使用(6.91)和(6.92)，我们对于具有单一量子环量 $s = 1$ 的涡旋找到（费曼, 1954）

$$\Omega_c = \frac{E_v}{L_z} = \frac{\hbar}{mR^2} \ln \left( \frac{R}{r_c} \right). \quad (6.93)$$

值得强调的是，涡旋线只有在超流体中才能作为稳态构型存在。事实上，即使存在很小的剪切粘度，表征涡旋的旋度（vorticity）

$$\text{curl} \mathbf{v}_s = 2\pi \frac{\hbar}{m} \delta^{(2)}(\mathbf{r}_\perp) \hat{\mathbf{z}}, \quad (6.94)$$

将从 $z$ 轴扩散出去，并最终扩展到容器的整个体积，导致类似固体的旋转。由此可见，量子化涡旋线的存在可以被视为不存在粘性并因此存在超流性的证明。

如果考虑远大于 $\Omega_c$ 的角速度，那么更多的涡旋将出现在流体中。对于非常大的 $\Omega$ ，系统的旋转将类似于刚体的旋转，其规律为 $\text{curl} \mathbf{v}_s = 2\mathbf{\Omega}$ 。利用结果(6.94)，发现单位面积的平均旋度为 $\text{curl} \mathbf{v}_s = (\hbar/m)n_v \hat{\mathbf{z}}$ ，其中 $n_v$ 是单位面积的涡旋数，因此涡旋密度与角速度 $\Omega$ 的关系为：

$$n_v = \frac{m}{\pi \hbar} \Omega. \quad (6.95)$$

方程(6.95)可用于评估在给定面积内可以容纳的最大涡旋数作为角速度的函数。

在有限温度下，涡旋的存在以实质性的方式改变了超流体的性质。涡旋线相对于超流体是静止的，并且实际上代表一种缺陷。正常部分的元激发可以在其上散射，传递动量。结果，在垂直于该线的平面上存在相对运动 $\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n$ 时，这种碰撞会在正常组分和超流组分之间产生相互摩擦力，导致能量耗散。这意味着，在存在涡旋线的情况下，元激发的平衡分布(6.6)无法实现，除非 $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_n$ 。相互摩擦的概念是由戈特（Gorter）和梅林克（Mellink）(1949)经验性地引入的，并由霍尔（Hall）和维嫩（Vinen）(1956)在旋转的超流 $^4\text{He}$ 中测量。

上面讨论的涡旋构型对应于系统的均匀旋转。如果涡旋线具有更复杂的形式，则可能发生不同的旋转运动。如在稀薄气体情况下一样，人们可以产生例如涡旋环，其在5.4节第一部分中提出的宏观描述也适用于一般的超流体。下面我们将讨论轻微变形的涡旋线的长波振荡行为。在这些振荡中，涡旋线呈现为旋转的螺旋线。该线的坐标可以表示为

$$x = d \cos(kz - \omega t), \quad y = d \sin(kz - \omega t), \quad (6.96)$$

对应于一个沿 $z$ 轴传播的波长为 $\lambda = 2\pi/k$ 的波。角速度 $\omega$ 的值决定了螺旋的进动（precession），并且可以从螺旋涡旋线携带的能量和角动量的知识计算出来。

与变形线相关的动能 $(1/2) \int \rho_s v_s^2 d\mathbf{r}$ 应该从速度场的表达式 $\mathbf{v} = (\hbar/2m) \int d\mathbf{l} \times \mathbf{r}/r^3$ 开始计算，其中 $d\mathbf{l}$ 是线的一个元素。该问题等价于计算与载有稳恒电

流的弯曲导线相关的磁能，超流体速度场扮演磁场的角色。在对数精度内，能量可以从为直线推导的结果(6.92)出发得到。进入方程(6.92)的长度 $L$ 变为变形线的长度，并由简单表达式给出：

$$L = \int \sqrt{1 + \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)^2} dz \simeq L_0 \left(1 + \frac{1}{2}d^2k^2\right), \quad (6.97)$$

其中 $L_0$ 是静止时线的长度。下面我们将考虑满足条件 $\lambda = 2\pi/k \ll R$ 的振荡，其中 $R$ 是样品的径向尺寸。在这种情况下，对由变形引起的能量变化有贡献的空间区域扩展到 $\lambda$ 量级的径向距离。事实上，对于更大的距离，速度场的变化迅速消失，螺旋表现得像一条直线。总之，由变形引起的能量变化由简单规律给出：

$$\delta E_v = L_0 d^2 \frac{\pi}{2} \rho_s \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 k^2 \ln\left(\frac{1}{k\tilde{r}_c}\right), \quad (6.98)$$

其中 $\tilde{r}_c$ 的实际值对由涡旋核心尺寸设定的短程截断以及振荡波长量级的长程截断都很敏感。如果 $\lambda$ 与径向尺寸相当或更大，则计算 $\delta E_v$ 所需的径向积分将延伸到 $R$ ，在这种情况下， $\delta E_v$ 的值将明确依赖于样品的径向尺寸。

现在让我们计算螺旋的角动量。这个计算由于在长波长极限下结果与 $k$ 无关而得以简化，因此可以通过考虑一条从 $z$ 轴位移距离 $d$ 的直涡旋线来推导。通过将积分(6.91)在圆柱坐标系 $r$ 、 $\varphi$ 、 $z$ 中写出（即相对于圆柱轴，也就是静止涡旋线的轴），人们发现

$$L_z = \rho_s L_0 \int r dr_\perp d\varphi r v_\varphi = \rho_s L_0 \int r dr \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l}, \quad (6.99)$$

其中积分回路 $\oint$ 对应于一个半径为 $r$ 的圆。如果 $r < d$ ，相应的积分为零，因为此时回路没有包围涡旋线。相反，对于 $r > d$ ，有 $\oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = 2\pi\hbar/m$ 。总之，我们简单地发现结果

$$\delta L_z = -\pi d^2 L_0 \rho_s \frac{\hbar}{m}, \quad (6.100)$$

表明涡旋线的变形总是减少角动量的值。进动的角速度现在可以使用一般方程 $\omega = \partial E_v / \partial L_z$ 计算。我们发现

$$\omega = \frac{\partial E_v / \partial d}{\partial L_z / \partial d} = -\frac{\hbar}{2m} k^2 \ln\left(\frac{1}{kr_c}\right), \quad (6.101)$$

并且结果是负的。这意味着螺旋的旋转方向与液体的旋转方向相反。色散定律(6.101)首先由开尔文勋爵 (Lord Kelvin) 推导出, 他研究了经典涡旋的小振荡 (开尔文波 (Kelvin waves)) (汤姆孙 (Thomson), 1880)。在稀薄玻色气体中, 可以通过求解格罗斯-皮塔耶夫斯基方程来计算  $\tilde{r}_c$  的精确值。结果是  $\tilde{r}_c$  的值实际上与愈合长度一致 (Roberts, 2001 and 2003)。

上面讨论的涡旋线的简谐振荡可以自然地量子化。这提供了一类由存在涡旋线的超流体所展现的有趣的元激发。在量子图像中, 每个激发具有能量  $\hbar|\omega|$ 。通过比较方程(6.101) 与(6.98), 发现与单个激发量子相关的  $d^2$  值由关系  $\pi d^2 L_0 \rho_s / m = 1$  固定。根据(6.100), 这意味着每个激发量子携带的角动量为  $-\hbar$ 。



# Chapter 7

## 线性响应函数

线性响应理论是一种强大的工具，用于探索相互作用的量子多体系统在零温以及有限温度下的动力学行为。它可以用来获取有关系统宏观激发的集体行为以及动量分布的有价值信息，其中动量分布决定了高动量转移下的响应，此时外部探针与单个组分发生非相干散射。在玻色-爱因斯坦凝聚系统中，集体激发和动量分布都表现出值得讨论的独特特征。在本章中，我们将通过引入动态极化率、动态结构因子和求和规则的概念，对该形式体系进行一般性讨论。我们将特别强调密度激发，但为了与超流性理论建立联系，也会考虑对电流场的响应。我们还将基于线性响应理论的形式体系推导一般不等式，这些不等式为激发能量以及物理可观测量涨落提供了有用的界限。在本章最后一部分，我们将以理想和弱相互作用的玻色气体为例，明确说明该形式体系。

### 7.1 动态结构因子与求和规则

考虑一个由哈密顿量 $H$ 描述的多体系统，并令 $F$ 和 $G$ 为两个物理上感兴趣的线性算符。不失一般性，我们可以假设在平衡时这些算符的平均值为零。线性响应函数，也称为动态极化率，提供了由通过含时哈密顿量耦合到系统的外场所产生的涨落 $\delta\langle F^\dagger \rangle$ ：

$$H_{\text{pert}}(t) = -\lambda G e^{-i\omega t} e^{\eta t} - \lambda^* G^\dagger e^{+i\omega t} e^{\eta t}. \quad (7.1)$$

在方程(7.1)中,  $\lambda$ 是外场的强度, 将被视为足够小以便应用线性响应理论。因子 $e^{\eta t}$  ( $\eta$ 为正且小)的存在确保了在 $t = -\infty$ 时系统由未微扰的哈密顿量 $H$ 支配。该因子所隐含的绝热条件对于在线性区工作至关重要。由微扰引起的涨落 $\delta\langle F^\dagger \rangle$ 以与外场(7.1)相同的频率 $\omega$ 振荡。动态极化率 $\chi_{F^\dagger, G}$ 由以下关系定义:

$$\delta\langle F^\dagger \rangle = \lambda e^{-i\omega t} e^{\eta t} \chi_{F^\dagger, G}(\omega) + \lambda^* e^{+i\omega t} e^{\eta t} \chi_{F^\dagger, G^\dagger}(-\omega) \quad (7.2)$$

并满足性质 $\chi_{F^\dagger, G}^*(\omega) = \chi_{F, G^\dagger}(-\omega)$ 。函数 $\chi_{F^\dagger, G}(\omega)$ 仅取决于无外部探针时系统的性质, 并且可以使用微扰理论直接计算。假设在 $t = -\infty$ 时系统处于温度 $T$ 的热平衡状态。然后得到结果 (久保 (Kubo), 1956, 1957):

$$\chi_{F^\dagger, G}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} Q^{-1} \sum_{m, n} e^{-\beta E_m} \left[ \frac{\langle m | F^\dagger | n \rangle \langle n | G | m \rangle}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} - \frac{\langle m | G | n \rangle \langle n | F^\dagger | m \rangle}{\omega + \omega_{nm} + i\eta} \right], \quad (7.3)$$

其中 $|n\rangle$ 和 $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ 是未微扰哈密顿量的本征态和跃迁频率 ( $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ ), 而 $Q = \sum_m \exp(-\beta E_m)$ 是配分函数。玻尔兹曼因子 $\exp(-\beta E_n)$ 考虑了初始构型的热平衡。如果激发算符不守恒总粒子数, 则使用巨正则系综是方便的, 并用 $E_n - \mu N$ 替换 $E_n$ 。

一个有用的量是相对于算符 $F$ 的动态结构因子:

$$S_F(\omega) = Q^{-1} \sum_{m, n} e^{-\beta E_m} |\langle n | F | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{nm}), \quad (7.4)$$

在零温下简化为:

$$S_F(\omega) = \sum_n |\langle n | F | 0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{n0}) \quad (7.5)$$

其中只有基态 $|0\rangle$ 对方程(7.4)中的求和 $\sum_m$ 有贡献。方程(7.5)表明, 在 $T = 0$ 时, 对于 $\omega < 0$ , 动态结构因子恒等于零。实际上, 激发能量 $\hbar\omega_{n0}$ 总是正的, 因为系统处于基态。在有限温度下, 动态结构因子遵循以下重要关系:

$$S_F(\omega) = e^{\beta\hbar\omega} S_{F^\dagger}(-\omega), \quad (7.6)$$

该关系由(7.4)通过交换求和中的指标 $m$ 和 $n$ 得到。该关系表达了细致平衡原理, 表明系统由于与外部微扰的耦合而吸收和释放能量的概率 (分别正比于 $S_F(\omega)$  和 $S_{F^\dagger}(-\omega)$ ) 通过玻尔兹曼因子 $e^{\beta\hbar\omega}$ 相互关联。

接下来我们将考虑两个算符 $F$ 和 $G$ 重合的最简单情况： $F = G$ 。用动态结构因子 $S_F$ 表示，相应的响应函数 $\chi_F \equiv \chi_{F^\dagger, F}$ 可以写为：

$$\chi_F(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left[ \frac{S_F(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{S_{F^\dagger}(\omega')}{\omega + \omega' + i\eta} \right]. \quad (7.7)$$

使用狄拉克关系：

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x - a + i\eta} = P \frac{1}{x - a} - i\pi \delta(x - a), \quad (7.8)$$

其中 $P$ 表示主值，函数 $\chi$ 可以自然地分离为实部和虚部：

$$\chi_F(\omega) = \chi'_F(\omega) + i\chi''_F(\omega). \quad (7.9)$$

从方程(7.7)可得关系式：

$$\chi'_F(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left[ S_F(\omega') P \frac{1}{\omega - \omega'} - S_{F^\dagger}(\omega') P \frac{1}{\omega + \omega'} \right] \quad (7.10)$$

和

$$\chi''_F(\omega) = \pi(S_F(\omega) - S_{F^\dagger}(-\omega)), \quad (7.11)$$

这表明函数 $\chi'$ 和 $\chi''$ 分别关于 $\omega$ 和 $F$ 到 $-\omega$ 和 $F^\dagger$ 的变换是偶函数和奇函数。使用细致平衡关系(7.6)，方程(7.11)也可以重写为以下有用形式：

$$\chi''_F(\omega) = \pi(1 - e^{-\beta\hbar\omega})S_F(\omega). \quad (7.12)$$

函数 $\chi''$ 也称为响应函数的耗散分量。实际上，使用二阶微扰理论，从外场(7.1)到系统的单位时间能量转移可以写为 ( $F = G$ ):

$$\frac{dE}{dt} = 2|\lambda|^2 \omega \chi''_F(\omega) \quad (7.13)$$

加上以频率 $2\omega$ 振荡的项，对应于系统的可逆形变。通过(7.11)也可以写为：

$$\frac{dE}{dt} = 2\pi|\lambda|^2 \omega (S_F(\omega) - S_{F^\dagger}(-\omega)), \quad (7.14)$$

表明能量变化率由两项之差给出。前者对应于微扰向系统转移能量 $\hbar\omega$ 的概率，而后者给出从系统提取能量 $\hbar\omega$ 的概率。这两个过程都是由外微扰(7.1)

( $F = G$ ) 诱导的。注意，如果系统处于热平衡状态，因此关系(7.12)成立，则总变化率 $dE/dt$ 始终为正。

上述考虑在有限温度下尤其重要。事实上，在 $T=0$ 时， $\chi_F''(\omega)$  和  $S_F(\omega)$  对于正的 $\omega$ 一致，并且只允许向系统转移能量的过程；而在有限温度下，如果 $\beta\omega$ 很小，这两个函数则显著不同。一般来说，动态结构因子对 $T$ 的依赖性比 $\chi''$ 强得多，因此从多体理论的角度来看， $\chi''$  代表了一个更基本的量。

让我们简要回顾响应函数 $\chi_F$ 的解析性质。考虑复 $\omega'$ 平面上的积分：

$$\int_C \frac{\chi_F(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' = 0 \quad (7.15)$$

其中轮廓 $C$ 如图7.1所示。该积分等于零，因为作为外部微扰(7.32)中因子 $e^{\eta t}$ 的结果，响应函数的极点位于复平面的下半平面。由于对于大的 $\omega$ ，响应函数至少以 $1/\omega$ 的速度衰减（见下面的方程(7.23)），对(7.15)的贡献来自沿实轴的积分（主值）以及围绕点 $\omega$ 的半圆积分。通过将 $\chi$ 分离为实部和虚部，最终得到克拉默斯-克勒尼希关系（克勒尼希（Kronig），1926；克拉默斯（Kramers），1927）：

$$\chi_F'(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \chi_F''(\omega') P \frac{1}{\omega - \omega'} \quad (7.16)$$

和

$$\chi_F''(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \chi_F'(\omega') P \frac{1}{\omega - \omega'}, \quad (7.17)$$

它们表达了对微扰响应的因果性。

响应函数或等效地动态结构因子的显式确定通常需要薛定谔方程的完全解，从而得到本征能量和方程(7.3)的矩阵元。关于动态结构因子行为的有用信息由求和规则方法提供，该方法提供了一种代数方法来计算动态结构因子的矩：

$$m_p(F) = \hbar^{p+1} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega^p S_F(\omega). \quad (7.18)$$

使用完备性关系 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ 和动态结构因子的定义(7.4)，容易得到以下精确恒等式：

$$m_0(F) + m_0(F^\dagger) = \langle \{F^\dagger, F\} \rangle, \quad (7.19)$$

$$m_0(F) - m_0(F^\dagger) = \langle [F^\dagger, F] \rangle, \quad (7.20)$$

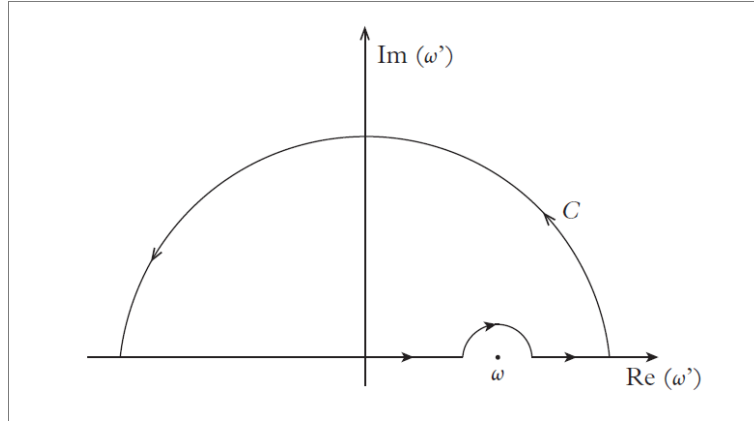


Figure 7.1: 用于推导克拉默斯-克勒尼希关系的积分轮廓。

$$m_1(F) + m_1(F^\dagger) = \langle [F^\dagger, [H, F]] \rangle, \quad \text{和} \quad (7.21)$$

$$m_1(F) - m_1(F^\dagger) = \langle \{F^\dagger, [H, F]\} \rangle, \quad (7.22)$$

其中我们仅考虑了最低阶矩。通常， $S_F \neq S_{F^\dagger}$ ，因此求和规则(7.20)和(7.22)也可能不为零。求和规则(7.20)和(7.21)表征了动态响应函数的高频展开形式：

$$\chi_F(\omega)_{\omega \rightarrow \infty} = -\frac{1}{\hbar\omega} \langle [F^\dagger, F] \rangle - \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \langle [F^\dagger, [H, F]] \rangle, \quad (7.23)$$

表明高频展开中的主导项通常表现为 $1/\omega$ 。在密度响应函数的情况下，该项消失，因为密度算符与其伴随算符对易。方程(7.23)还表明，包含反对易子的求和规则(7.19)和(7.22)不参与上述展开。在小 $\omega$ 的相反极限下，动态极化率根据以下规律接近其静态极限（静态极化率）：

$$\chi_F(0) \equiv \chi_F(\omega)_{\omega \rightarrow 0} = m_{-1}(F) + m_{-1}(F^\dagger), \quad (7.24)$$

其中 $m_{-1}$ 是动态结构因子的逆能量加权矩。与 $p \geq 0$ 的矩不同，逆能量加权矩不能简化为对易子形式，通常通过直接计算静态响应来评估。

使用 $\chi''$ 与动态结构因子之间的关系(7.12)，以及反对称性 $\chi_F^*(\omega) = \chi_{F^\dagger}(-\omega)$ ，可以推导出重要关系：

$$\langle \{F^\dagger, F\} \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (S_F(\omega) + S_{F^\dagger}(\omega)) = \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_F''(\omega) \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} d\omega, \quad (7.25)$$

该关系也被称为涨落-耗散定理。方程(7.25)将响应函数的耗散分量 $\chi''$ 与算符 $F$ 的涨落 $\langle\{F^\dagger F\}\rangle$ 联系起来。利用性质 $\chi''(\omega) \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \geq \chi''(\omega)2/\beta\hbar\omega$  (该性质对正负 $\omega$ 均成立) 以及恒等式:

$$\chi_F(0) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\chi_F''(\omega)}{\omega}, \quad (7.26)$$

该式由克拉默斯-克勒尼希关系(7.16)导出, 可推导出不等式:

$$\langle\{F^\dagger, F\}\rangle \geq 2k_B T \chi_F(0), \quad (7.27)$$

该式在高温经典区成为恒等式, 其中 $\coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} = 2/\beta\hbar\omega$ 。

## 7.2 密度响应函数

在本节中, 我们将线性响应理论的形式体系应用于最重要的密度响应函数问题 (派恩斯 (Pines) 和诺齐埃 (Nozieres), 1966)。

考虑密度算符的 $\mathbf{q}$ 分量:

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) \quad (7.28)$$

其中密度算符定义为:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (7.29)$$

其中 $\mathbf{r}_i$ 是相对于第 $i$ 个粒子的坐标算符。我们将使用符号 $\rho_{\mathbf{q}}$ 表示 $n(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换, 以避免与符号 $n_{\mathbf{p}}$ 混淆, 后者在本书其余部分用于指定粒子占据数。

密度响应函数 (以下称为 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ ) 通过在方程(7.3)中选择 $F = G = \delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger$ 得到, 其中 $\delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger = \rho_{\mathbf{q}}^\dagger - \langle\rho_{\mathbf{q}}^\dagger\rangle_{eq}$ 。平均值 $\langle\rho_{\mathbf{q}}^\dagger\rangle_{eq}$ 在平衡时计算, 在均匀系统中, 若 $\mathbf{q} \neq 0$ 则为零。可以写为:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\hbar} Q^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \left[ \frac{|\langle m | \delta\rho_{\mathbf{q}} | n \rangle|^2}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} - \frac{|\langle m | \delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger | n \rangle|^2}{\omega + \omega_{nm} + i\eta} \right]. \quad (7.30)$$

类似地，动态结构因子 $S(\mathbf{q}, \omega)$ 的形式为（见方程(7.4)，其中 $F = \delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger$ ）：

$$S(\mathbf{q}, \omega) = Q^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} |\langle n | \delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger | m \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{nm}). \quad (7.31)$$

动态结构因子表征了非弹性反应的散射截面，其中散射探针向系统传递动量 $\hbar\mathbf{q}$ 和能量 $\hbar\omega$ 。假设探针粒子与系统弱耦合，因此散射过程可以在玻恩近似中描述，微扰可写为：

$$H_{\text{pert}} = v_{\mathbf{q}} \delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\omega t} e^{\eta t} + h.c., \quad (7.32)$$

其中 $v_{\mathbf{q}}$ 是外部微扰的傅里叶变换。在这些条件下，探针向系统传递动量 $\hbar\mathbf{q}$ 和能量 $\hbar\omega$ 的单位时间概率 $P(\mathbf{q}, \omega)$ 通过以下关系与动态结构因子相关联：

$$P(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi |v_{\mathbf{q}}|^2 S(\mathbf{q}, \omega). \quad (7.33)$$

这种非弹性反应的一个重要例子是液氦的中子散射（见下一章）。

对于低动量转移，响应函数 $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ 对系统的集体振荡敏感。在均匀玻色-爱因斯坦凝聚系统中，这些振荡是声子。在高 $\mathbf{q}$ 极限下，系统的集体特征不再相关，因为探针与系统的单个组分发生非相干散射。这种机制适用于研究样品的动量分布 $n(\mathbf{p})$ ，这是存在玻色-爱因斯坦凝聚时的主要关注量。在高 $\mathbf{q}$ 机制下，动态结构因子可写为：

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \int d\mathbf{p} n(\mathbf{p}) \delta\left(\hbar\omega - \frac{(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{q})^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right), \quad (7.34)$$

该式也称为冲量近似（霍恩伯格（Hohenberg）和普拉茨曼（Platzman），1966），并由样品的动量分布唯一确定。将表达式(2.9)代入(7.34)，由于BEC的存在，预测在反冲频率 $\omega_r = \hbar q^2/2m$ 处出现 $\delta$ 峰。然而，在实际系统中情况并非如此简单。例如，在氦的情况下，即使对于最大的 $\mathbf{q}$ 值，末态相互作用也不能忽略，并导致峰相对于预测(7.34)的展宽。在囚禁原子气体中，样品的有限尺寸会产生额外的展宽。这些主题将在第8章和第12章讨论。

现在讨论动态结构因子的矩的行为：

$$m_p(\mathbf{q}) = \hbar^{p+1} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^p S(\mathbf{q}, \omega) d\omega \quad (7.35)$$

在许多情况下, 这些矩可以通过求和规则方法评估。如果动态结构因子  $S(\mathbf{q}, \omega)$  呈现出一个尖锐的峰, 消耗了这些矩的显著部分, 则该方法特别有用。使用恒等式可以简化求和规则的推导:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = S(-\mathbf{q}, \omega), \quad (7.36)$$

如果未微扰构型在宇称或时间反演变换下不变, 则该式成立。在本书讨论的大多数情况下, 这一点都得到保证。违反这种不变性的一个重要例子由自旋轨道耦合的玻色-爱因斯坦凝聚提供 (见第21.4节)。

首先考虑  $p = 0$  矩。使用完备性关系  $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$  和方程(7.36), 容易找到非能量加权矩的结果:

$$m_0(\mathbf{q}) = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{q}, \omega) d\omega = NS(\mathbf{q}) \quad (7.37)$$

其中:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} (\langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle - |\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle|^2) \quad (7.38)$$

是由密度涨落决定的静态结构因子。平均值取在系统的平衡构型上, 如果在零温下工作, 则与基态一致。静态结构因子与两体密度矩阵相关:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (7.39)$$

通过表达式:

$$S(\mathbf{q}) = 1 + \frac{1}{N} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [n^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - n(\mathbf{r}_1)n(\mathbf{r}_2)] e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}. \quad (7.40)$$

在均匀系统中, 两体密度矩阵仅取决于相对距离  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , 方程(7.40)变为:

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n \int d\mathbf{s} [g(\mathbf{s}) - 1] e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}} \quad (7.41)$$

或等价地,

$$g(\mathbf{s}) = 1 + \frac{1}{n(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} [S(\mathbf{q}) - 1] e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}}, \quad (7.42)$$

其中  $n = N/V$  是密度,  $g(\mathbf{s}) = n^{(2)}(\mathbf{s})/n^2$  是对关联函数。在小  $\mathbf{q}$  时, 静态结构因子对热关联和动力学关联敏感。然而, 在高  $\mathbf{q}$  时, 它接近与模型无关的值  $S(\mathbf{q})_{\mathbf{q} \rightarrow \infty} = 1$ 。在此极限下, 进入方程(7.38)的和  $\rho_{\mathbf{q}}^\dagger \rho_{\mathbf{q}} =$

$\sum_{ij} \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]$  由  $i = j$  项耗尽。方程(7.39)-(7.42)表明, 可以从动态结构因子的研究中推断出关于两体关联的有价值信息。

另一个重要的求和规则由能量加权矩给出:

$$m_1(\mathbf{q}) = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{q}, \omega) \omega d\omega = \frac{1}{2} \langle [\delta\rho_{\mathbf{q}}^\dagger, [H, \delta\rho_{\mathbf{q}}]] \rangle, \quad (7.43)$$

涉及哈密顿量与密度算符之间的双重对易子。使用完备性关系和恒等式(7.36)容易得到结果(7.43)。能量加权矩固定了响应函数的高 $\omega$ 行为, 如从方程(7.23)所见 (在这种情况下,  $1/\omega$ 项恒等于零):

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{(\hbar\omega)^2} m_1(\mathbf{q}). \quad (7.44)$$

对于速度无关的势, 只有动能对  $[H, \delta\rho_{\mathbf{q}}]$  有贡献, 该式变为:

$$[H, \delta\rho_{\mathbf{q}}] = -\hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}_{\mathbf{q}}, \quad (7.45)$$

其中:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \mathbf{p}_i] = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (7.46)$$

是电流密度算符的 $\mathbf{q}$ 分量:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i]. \quad (7.47)$$

(7.43)的双重对易子得到  $[\rho_{\mathbf{q}}, [H, \rho_{-\mathbf{q}}]] = N\hbar^2 q^2/m$ , 最终找到与模型无关的结果:

$$m_1(\mathbf{q}) = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{q}, \omega) \omega d\omega = N \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad (7.48)$$

该结果也称为 $f$ -求和规则 (普拉切克 (Placzek), 1952; 诺齐埃 (Nozieres) 和派恩斯 (Pines), 1958)。该求和规则是原子光谱中流行的偶极托马斯-赖希-库恩求和规则的类似物, 从多个角度来看都值得注意。一方面, 它适用于广泛的相互作用多体系统, 与统计和温度无关。另一方面, 正如我们稍后将看到的, 它可以与其他矩一起用于估计集体激发的频率。 $f$ -求和

规则与连续性方程有直接联系。事实上，通过对任意非平衡构型上的方程(7.45)的傅里叶变换取平均，可以恢复熟悉的连续性方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n(\mathbf{r}) \rangle + \nabla \cdot \langle \mathbf{j}(\mathbf{r}) \rangle = 0. \quad (7.49)$$

由于这种联系， $f$ -求和规则也被认为表达了粒子数守恒。

现在讨论逆能量加权矩：

$$m_{-1}(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega} S(\mathbf{q}, \omega) d\omega. \quad (7.50)$$

该矩通过关系与静态响应相关（见方程(7.24)）：

$$N\chi(\mathbf{q}) \equiv \chi(\mathbf{q}, 0) = 2m_{-1}(\mathbf{q}). \quad (7.51)$$

在均匀系统中，静态响应的低 $\mathbf{q}$ 极限与等温压缩率相关。事实上，在这种情况下，由外力引起的形变可以精确地用压力的局部变化表示，简单计算得到结果（压缩率求和规则）：

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{q}, \omega) \frac{1}{\omega} d\omega = \frac{N}{2mc_T^2}, \quad (7.52)$$

其中 $1/mc_T^2$ 是介质的等温压缩率。方程(7.52)被称为压缩率求和规则。

虽然 $m_1$ 和 $m_{-1}$ 矩对应于响应函数 $\chi$ 的重要极限（分别为高频和低频极限，见方程(7.44)和(7.51)），但 $m_0 = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} S(\mathbf{q}, \omega) d\omega$ 与 $\chi$ 之间的关系不那么直接。应用于密度算符的涨落-耗散定理(7.25)提供了重要关系：

$$NS(\mathbf{q}) = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi''(\mathbf{q}, \omega) \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2} d\omega. \quad (7.53)$$

当 $\mathbf{q}$ 很小时，积分(7.53)由“经典”区域 $|\omega| \ll kT$ 主导，并且可以将 $\coth \beta \hbar \omega / 2$ 替换为 $2k_B T / \hbar \omega$ 。使用方程(7.11)和(7.52)，然后在有限温度下得到静态结构因子的低 $q$ 行为：

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} S(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{mc_T^2}. \quad (7.54)$$

在非常低的 $T$ 下，(7.54)的有效性仅限于非常小的波矢区间。在这种情况下，存在重要的 $\mathbf{q}$ 范围，其中积分(7.53)不由“经典”区域 $|\hbar \omega| \ll kT$ 耗尽，并且静态结构因子对量子涨落的存在敏感。

## 7.3 电流响应函数

线性响应理论的一个有用应用涉及电流响应函数的研究。由于理解超流性的一些重要含义的可能性，该问题具有高度的物理意义。我们已经在方程(7.46)中引入了电流算符。区分该算符的纵向和横向分量是有用的。取向量 $\mathbf{q}$ 沿 $z$ 轴方向。纵向（ $L$ ）和横向（ $T$ ）分量由下式给出：

$$j_q^{L,T} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N (p_i^{z,x} e^{-iqz_i} + e^{-iqz_i} p_i^{z,x}), \quad (7.55)$$

并分别对应于与 $\mathbf{q}$ 平行和正交的电流分量。

通过在一般表达式(7.3)中设置 $F = G = j_q^{L,T}$ ，得到静态（ $\omega = 0$ ）电流响应的以下表达式：

$$\chi_{L,T}(q, 0) = \frac{2}{\hbar} Q^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} |\langle m | j_q^{L,T} | n \rangle|^2 \frac{1}{\omega_{nm}}, \quad (7.56)$$

其中我们再次使用了未微扰构型具有宇称或时间反演对称性的事实。该形式体系可以很容易地推广到张量：

$$\chi_{\ell m}(\mathbf{q}, 0) = \frac{2}{\hbar} Q^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \langle m | (j_{\mathbf{q}})_{\ell} | n \rangle \langle n | (j_{\mathbf{q}})_{\ell}^{\dagger} | m \rangle \frac{1}{\omega_{nm}}, \quad (7.57)$$

其中 $(j_{\mathbf{q}})_{\ell,m}$ 是电流算符 $\mathbf{j}_{\mathbf{q}}$ 的 $\ell$ 和 $m$ 分量。对于各向同性系统，该张量可以写成以下有用形式：

$$\chi_{\ell m}(\mathbf{q}, 0) = \frac{q\epsilon q_m}{q^2} \chi_L(q, 0) + \left( \delta_{\ell m} - \frac{q\epsilon q_m}{q^2} \right) \chi_T(q, 0), \quad (7.58)$$

其中 $\chi_L$ 和 $\chi_T$ 由(7.56)给出。纵向响应的评估是直接的。事实上，对易关系(7.45)可以写为 $[H, \delta\rho_{\mathbf{q}}] = -\hbar q j_{\mathbf{q}}^L$ ，且 $\chi_L$ 简化为：

$$\chi_L(q, 0) = \frac{1}{\hbar^2 q^2} \langle [\delta\rho_{\mathbf{q}}, [H, \delta\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}]] \rangle = \frac{N}{m}, \quad (7.59)$$

其中在最后一个等式中，我们使用了 $f$ -求和规则(7.48)。方程(7.59)表明静态纵向响应与模型无关，并由总粒子数固定。该结果非常普遍，适用于任何 $q$ 值，对玻色和费米系统均成立。然而， $\chi_T$ 的评估不能如此容易地进行。事实上，当 $q \rightarrow 0$ 时，横向响应可能接近不同的值。为了理解这种行为

的物理起源，用电流算符的涨落表示张量(7.58)是有用的。将涨落-耗散定理(7.25)应用于电流响应函数，对于小 $q$ ，得到恒等式：

$$\langle (j_{\mathbf{q}}^\dagger)_\ell (j_{\mathbf{q}})_m \rangle = k_B T \chi_{\ell m}(\mathbf{q}, 0). \quad (7.60)$$

通过将方程(7.60)与使用双流体流体动力学理论导出的结果(6.87)进行比较，得到重要关系：

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_T(q, 0) = \frac{\rho_n}{\rho} \frac{N}{m}. \quad (7.61)$$

方程(7.61)允许我们根据横向响应函数的宏观极限识别正常（非超流）密度 $\rho_n$ 。同样的比较提供了一致的纵向响应函数描述，正如预期的那样，与结果(7.59)一致。用正常和超流密度表示，长波极限下的响应函数(7.58)可以写为：

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{\ell, m}(\mathbf{q}, 0) = \frac{N}{m\rho} \left( \frac{q_\ell q_m}{q^2} \rho_s + \delta_{\ell m} \rho_n \right). \quad (7.62)$$

最后值得注意的是， $\chi^T$ 和 $\chi^L$ 之间的差异反映了电流响应中长程效应的出现。事实上，将张量(7.57)写成其傅里叶变换形式：

$$\chi_{\ell m}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{s} \chi_{\ell m}(\mathbf{s}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}}. \quad (7.63)$$

如果函数 $\chi_{ij}(\mathbf{s})$ 没有长程尾部，则可以安全地对(7.63)在小 $\mathbf{q}$ 下展开，并且纵向和横向响应一致，与 $\mathbf{q}$ 的方向无关。

横向响应的另一个重要例子由旋转场的静态响应给出，该响应定义了转动惯量。该量可以通过实验测量，并提供了超流性的有用指标。在接下来的章节中，关于超流氦和囚禁原子气体，将广泛讨论其行为。

## 7.4 一般不等式

使用线性响应函数的形式体系，可以推导出几个普遍有效的不等式。其中一些将应用于本书的其他章节，以讨论具有物理意义的具体问题。

第一类不等式可以在 $T = 0$ （基态）下推导，其中动态结构函数具有在 $\omega < 0$ 时消失的性质（见方程(7.5)和图7.2）。因此，可以为算符 $F$ 激发的最低态的能量 $\omega_{min}$ 推导严格的上界：

$$\hbar\omega_{min} \leq \frac{m_{p+1}}{m_p}, \quad (7.64)$$

该式对任何 $p$ 值都成立。类似地，可以容易地证明矩(7.18)满足不等式：

$$\frac{m_{p+1}}{m_p} \geq \frac{m_p}{m_{p-1}}. \quad (7.65)$$

对于 $p = 0$ ，方程(7.65)可以写为：

$$m_0 \leq \sqrt{m_1 m_{-1}}, \quad (7.66)$$

并为非能量加权矩 $m_0$ 提供了上界。上述不等式仅在系统的单个激发态耗尽了算符 $F$ 的强度时成为恒等式，或者换句话说，如果动态结构因子具有 $\delta$ 结构形式 $S_F(\omega) \propto \delta(\hbar\omega - \hbar\bar{\omega})$ 。在这种情况下， $\omega_{min} = \bar{\omega}$ ，并且对于任何 $p$ 值，比值 $m_{p+1}/m_p$ 与 $\hbar\bar{\omega}$ 一致。

最著名的应用是通过选择密度算符 $\rho_q$ 作为 $F$ 得到的。设 $p = 0$ 并使用结果(7.37)和(7.48)，发现 $\omega_{min}$ 的一个有用上界由所谓的费曼能量（费曼，1954）给出：

$$\hbar\omega_F(q) = \frac{m_1(q)}{m_0(q)} = \frac{\hbar^2 q^2}{2mS(q)}, \quad (7.67)$$

该式根据静态结构因子为元激发的能量提供了有用的估计。费曼估计(7.67)已被广泛用于讨论超流氦的激发谱作为 $q$ 的函数（见第8章）。或者，方程(7.66)的形式为：

$$S(q) \leq \sqrt{\frac{\hbar^2 q^2}{4m} \chi(q)}, \quad (7.68)$$

其中我们使用了 $f$ -求和规则的结果作为 $m_1$ ，并且 $m_{-1}$ 已用静态响应函数表示（见方程(7.51)）。该结果在 $q$ 很小时特别有用，其中 $\chi(q)$ 接近压缩率 $1/mc^2$ ，其结果是，在 $T = 0$ 时， $S(q)$ 像以下形式消失：

$$S(q) \leq \frac{\hbar q}{2mc} \quad (7.69)$$

当 $q \rightarrow 0$ 时。在同一极限下，使用不等式：

$$\hbar\omega_{min} \leq \sqrt{\frac{m_1}{m_{-1}}}, \quad (7.70)$$

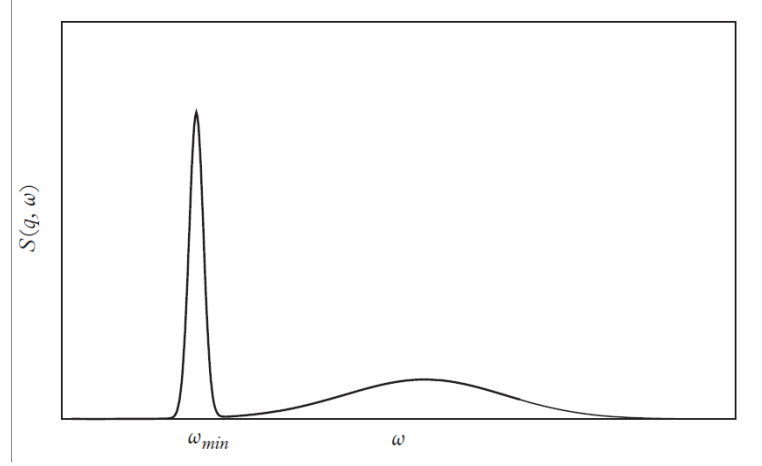


Figure 7.2:  $T = 0$ 时动态结构因子的示意图。强度在 $\omega$ 的负值处消失。图中动态结构因子包括一个尖锐的峰，对应于集体模式的激发，以及一个在更高频率处的更宽结构。

该式在 $T = 0$ 时也成立，发现最低激发频率 $\omega_{min}$ 像以下形式消失：

$$\omega_{min}(q) \leq cq. \quad (7.71)$$

上述结果是在非常普遍的基础上推导出来的，除了 $f$ -求和规则的有效性和压缩率有限的事实外，没有对系统的性质做任何假设。如方程(7.69)和(7.71)所示，这些简单的假设足以证明激发谱是无能隙的，并且由 $S(q)$ 给出的密度涨落在长波长极限下是无限小的。正如我们将在第7.6节中看到的，在弱相互作用玻色气体的情况下，界限(7.69)和(7.71)成为恒等式，其中所有矩都由单个激发态耗尽。实际上，在稀薄玻色气体中，这对于所有 $q$ 值都是正确的。同样值得注意的是，在具有强关联的超流氦中，界限(7.69)和(7.71)在小 $q$ 极限下成为恒等式。

在有限温度下，一个重要的可从响应函数形式体系推导的不等式是所谓的博戈留波夫不等式（博戈留波夫，1962）：

$$|\chi_{F^T G}(0)|^2 \leq \chi_F(0)\chi_G(0), \quad (7.72)$$

涉及两个一般算符 $F$ 和 $G$ 的静态响应，并且我们设 $\chi_F \equiv \chi_{F^T F}$ 和 $\chi_G \equiv$

$\chi_{G^T G}$ 。静态响应由以下方程定义（见 $\omega = 0$ 时的方程(7.3)）：

$$\chi_{F^T G}(0) = \frac{1}{\hbar} Q^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \left[ \frac{\langle m|F^T|n\rangle \langle n|G|m\rangle}{\omega_{nm}} + \frac{\langle m|G|n\rangle \langle m|F^T|n\rangle}{\omega_{nm}} \right], \quad (7.73)$$

其中我们假设，不失一般性， $F$ 和 $G$ 的期望值在平衡时为零。如果算符 $F$ 或 $G$ 不与粒子数算符 $\hat{N}$ 对易，则使用巨正则系综是方便的，用巨正则能量 $E_m - \mu N$ 替换能量 $E_m$ 。

不等式(7.72)是施瓦茨不等式应用于两个算符 $F$ 和 $G$ 之间的标量积的结果，定义为 $(F, G) \equiv \chi_{F^T G}(0)$ 。实际上，可以容易地验证量 $\chi_{F^T G}(0)$ 满足应用施瓦茨不等式所需的所有要求。特别是，线性性来自静态响应的定义，并且如果系统处于热力学平衡状态，则条件 $(F, F) \geq 0$ 得到保证。事实上，根据关系(7.12)，静态响应(7.26)总是正的。

我们现在可以将不等式(7.72)与不等式(7.27)结合起来：

$$\langle \{F^T, F\} \rangle \geq 2k_B T \chi_F(0), \quad (7.74)$$

该式来自涨落-耗散关系(7.25)。此外，通过根据 $G = [H, C]$ 定义算符 $C$ ，得到有用的恒等式 $\chi_G(0) = \langle [C^+, [H, C]] \rangle$ 和 $\chi_{F^T G}(0) = \langle [F^+, C] \rangle$ ，这些恒等式简单地来自定义(7.73) 和使用完备性关系。用算符 $F$ 和 $C$ 表示，不等式(7.72)最终意味着结果：

$$\langle [F^+, F] \rangle \geq 2k_B T \frac{|\langle [F^+, C] \rangle|^2}{\langle [C^+, [H, C]] \rangle}, \quad (7.75)$$

也称为博戈留波夫不等式。方程(7.75)为一般算符 $F$ 的涨落提供了关于辅助算符 $C$ 的严格下界。该不等式已被用于证明在具有连续对称性的重要类别的二维和一维问题中不存在长程有序（默明（Mermin）和瓦格纳（Wagner），1966；霍恩伯格（Hohenberg），1967）。博戈留波夫不等式(7.75)的一个有用应用是通过研究玻色-爱因斯坦凝聚系统的粒子分布 $n_p$ 所表现出的红外行为给出的。让我们选择 $F = a_p$ ， $C = \rho_q^\dagger$ ，其中 $q = p/h$ ，其中 $a_p$ 是通常的粒子湮灭算符，而 $\rho_q$ 是密度算符(7.28)，在二次量子化中形式为 $\rho_q^\dagger = \sum_k a_{k+ha}^\dagger a_k$ ，其中求和遍历一组完整的 $k = 2\pi\hbar n/L$  值。根据上述选择，容易得到结果：

$$\langle [F^+, F] \rangle = 2n_p + 1, \quad (7.76)$$

表明算符 $F$ 的涨落由粒子占据数 $n_p = \langle a_p^\dagger a_p \rangle$ 决定，即由系统的动量分布决定（见方程(2.17)）。此外，容易得到结果：

$$\langle [F, C] \rangle = \langle a_0 \rangle = \sqrt{n_0 N} \quad (7.77)$$

和

$$\langle [C, [H, C^\dagger]] \rangle = N \frac{p^2}{m}, \quad (7.78)$$

其中 $n_0 = N_0/N$ 是凝聚分数，并且在推导(7.77)时，我们假设了规范对称性破缺，以及博戈留波夫预设 $a_0 \equiv \sqrt{N_0}$ 。方程(7.78)则与 $f$ -求和规则一致。收集上述结果，不等式(7.75)最终形式为：

$$2n_p + 1 \geq m \frac{2k_B T}{p^2} n_0. \quad (7.79)$$

该不等式被霍恩伯格（1967）用于排除二维和一维系统中的BEC。它利用了第6.7节中已经讨论过的特征性 $1/p^2$ 红外发散性。本推导代表了一个严格的证明，仅基于 $f$ -求和规则的有效性和与玻色-爱因斯坦凝聚相关的规范对称性自发破缺的存在。实际上，结果(7.79)也假设系统处于热平衡状态，并且仅在有限温度下有用。

根据第6.7节的讨论（见方程(6.84)），可以将结果(7.79)解释为相位热涨落的结果，该涨落由博戈留波夫不等式(7.75)适当考虑。在 $T = 0$ 时，只有量子涨落存在，博戈留波夫不等式没有提供关于算符 $F$ 涨落的任何有用信息。因此，寻找一个直接利用量子涨落效应的替代不等式是有趣的。新的不等式由相对于两个算符 $F$ 和 $C$ 的不确定性关系提供。通过将施瓦茨不等式应用于由 $(A, B) \equiv \langle A^\dagger, B \rangle$ 定义的标量积，推导不等式：

$$\sqrt{\langle F^\dagger F \rangle \langle C^\dagger C \rangle} + \sqrt{\langle F F^\dagger \rangle \langle C C^\dagger \rangle} \geq |\langle F^\dagger C \rangle| + |\langle C F^\dagger \rangle| \geq |\langle [F^\dagger, C] \rangle|. \quad (7.80)$$

从这个不等式，注意到 $|a| + |b| \geq 2\sqrt{|a||b|}$ ，并选择 $a = \langle F^\dagger F \rangle \langle C C^\dagger \rangle$ ， $b = \langle F F^\dagger \rangle \langle C^\dagger C \rangle$ ，得到结果：

$$\langle \{F^\dagger, F\} \rangle \geq \frac{|\langle [F^\dagger, C] \rangle|^2}{\langle \{C^\dagger, C\} \rangle}, \quad (7.81)$$

这也为一般算符 $F$ 的涨落提供了关于辅助算符 $C$ 的下界。值得将不确定性不等式(7.81)与博戈留波夫不等式(7.75)进行比较。两者都提供了严格的

界限。然而，与方程(7.75)相反，不确定性不等式(7.81)不显式依赖于温度，并且也可以在 $T = 0$ 时使用。

让我们做与之前相同的选择，即 $F = a_{\mathbf{p}}$ 和 $C = \rho_{\mathbf{q}}$ ，其中 $\mathbf{q} = \mathbf{p}/\hbar$ 。量 $\{C^\dagger, C\}$ 与静态结构因子 $S(\mathbf{q})$ 成正比（见方程(7.38)），因此使用结果(7.76)和(7.77)，最终找到非平凡结果（Pitaevskii和Stringari, 1991）：

$$2n_{\mathbf{p}} + 1 \geq \frac{n_0}{2S(\mathbf{p}/\hbar)}, \quad (7.82)$$

该式根据静态结构因子为粒子分布函数 $n_{\mathbf{p}}$ 提供了严格界限。方程(7.82)确立，在存在玻色-爱因斯坦凝聚的情况下，相位涨落（由 $n_{\mathbf{p}}$ 解释）和密度涨落（由 $S(p/\hbar)$ 解释）不能同时太小。该不等式在小 $p$ 极限下具有重要结果，其中在 $T = 0$ 时，可以使用静态结构因子的进一步不等式(7.68)-(7.69)。然后发现，当 $p \rightarrow 0$ 时，粒子分布函数像以下形式发散：

$$n_{\mathbf{p}} \geq \frac{n_0 m c}{2p}. \quad (7.83)$$

这种红外发散性是两体相互作用的结果，该作用使系统的压缩率有限。玻色-爱因斯坦凝聚系统的动量分布中的 $1/p$ 发散性首先由加沃雷（Gavoret）和诺齐埃（1964）识别。不等式(7.83)在二维系统中具有重要结果，其中它允许我们排除在 $T = 0$ 时玻色系统中长程序的出现（见第24.3节）。

## 7.5 理想玻色气体的响应函数

在理想玻色气体中，密度响应函数可以解析计算。这是前几节发展的形式体系的一个指导性应用，尽管应该始终记住，由于相互作用的作用，该模型不足以描述气体在小 $\mathbf{q}$ 处的动力学（见下一节）。

进入方程(7.30)和(7.31)的矩阵元 $\langle m | \delta p_{\mathbf{q}} | n \rangle$ 可以通过在二次量子化形式中写 $p_{\mathbf{q}}$ 容易地计算：

$$p_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}}. \quad (7.84)$$

由于在理想气体中， $H$ 的本征态由每个单粒子态的占据数 $n_{\mathbf{p}}$ 固定，矩阵元 $\langle m | a_{\mathbf{p}-\hbar\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}} | n \rangle$ 消失，除非能量差 $E_n - E_m$ 等于单粒子能量 $\epsilon_0(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{q}) - \epsilon_0(\mathbf{p}) = \hbar^2 q^2 / 2m + \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{p} / m$ 。使用完备性关系 $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ 和性质 $\langle n_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}+\hbar\mathbf{q}} \rangle =$

$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle \langle n_{\mathbf{p}+\mathbf{h}\mathbf{q}} \rangle$  (在理想气体中成立), 响应函数的虚部和动态结构因子分别变为:

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \pi \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{h}\mathbf{q}}) \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} \right) \quad (7.85)$$

和

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} (1 + n_{\mathbf{p}+\mathbf{h}\mathbf{q}}) \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} \right), \quad (7.86)$$

其中  $n_{\mathbf{p}} = \langle a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} \rangle$  是粒子的平均占据数, 由  $n_{\mathbf{p}} = (\exp[\beta(p^2/2m - \mu)])^{-1}$  给出。结果(7.85)也适用于费米气体, 其中当然  $n_{\mathbf{p}}$  应根据费米统计评估。费米气体的动态结构因子则通过将方程(7.86)中的  $(1 + n_{\mathbf{p}+\mathbf{h}\mathbf{q}})$  替换为  $(1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{h}\mathbf{q}})$  得到。在存在玻色-爱因斯坦凝聚的情况下, 应分离来自凝聚的贡献并对其余求和进行积分。  $\chi''$  的结果为:

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \pi \left[ N_0(T) \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) + \int d\mathbf{p} \hat{n}(\mathbf{p}) \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} \right) \right] - [\omega \rightarrow -\omega], \quad (7.87)$$

其中  $\hat{n}(\mathbf{p}) = V/h^3 n_{\mathbf{p}}$  是凝聚体外部粒子的动量分布 (见定义(2.9))。方程(7.87)的特征是在  $\omega = \pm \hbar q^2/2m$  处有一个尖锐的峰, 以及来自气体热分量的连续激发。该  $\delta$  峰代表了低温 ( $T \ll T_c$ ) 下的主导贡献, 其中  $N_0(T) \sim N$ , 并且在此机制下, 函数(7.87)接近  $T = 0$  值:

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \pi N \left[ \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) - \delta \left( \hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) \right]. \quad (7.88)$$

在同一极限下, 动态结构因子变为:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{N}{1 - \exp[-\hbar\omega/k_B T]} \left[ \delta \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) - \delta \left( \hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right) \right]. \quad (7.89)$$

与  $\chi''$  不同, 尽管  $T \ll T_c$ , 动态结构因子表现出重要的温度依赖性。积分(7.89)得到结果:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{\hbar}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S(\mathbf{q}, \omega) = \coth \frac{\hbar^2 q^2}{4mk_B T} \quad (7.90)$$

对于静态结构因子, 当  $q$  远大于热波长  $\lambda_T = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$  的倒数时, 该值接近1。对于小于  $\lambda_T^{-1}$  的波矢  $q$ , 方程(7.90)表现出发散行为  $4mk_B T/\hbar^2 q^2$ , 反映了在存在玻色-爱因斯坦凝聚时理想气体的无限压缩率 (见图7.3)。

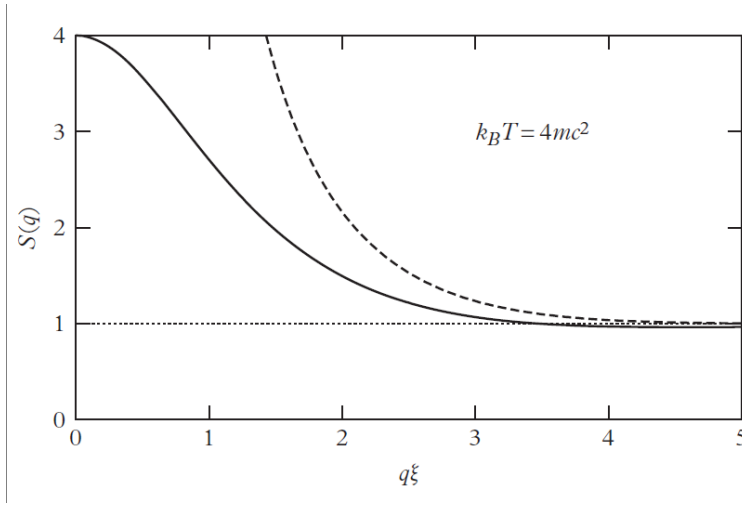


Figure 7.3: 静态结构因子作为无量纲变量 $q\xi$ 的函数，在 $k_B T = 4mc^2$ 温度下计算于相互作用的玻色-爱因斯坦凝聚气体中。虚线给出了理想气体的预测。相互作用效应在低动量下是重要的。当 $q \rightarrow 0$ 时，由于相互作用使气体的压缩率有限，静态结构因子接近有限值。

## 7.6 弱相互作用玻色气体的响应函数

在第3章中，我们介绍了弱相互作用气体的博戈留波夫理论。该理论可应用于温度远小于临界值（ $T \ll T_c$ ）的情况，其中凝聚的热耗散很小。此外，该理论适用于满足弱相互作用条件 $na^3 \ll 1$ 的气体参数值。使用 $T_c$ 的结果(3.28)，可以很快看出该条件等价于要求化学势 $\mu = mc^2$ 也应远小于临界温度（ $\mu \ll k_B T_c$ ）。然而，温度 $T$ 不一定必须小于 $\mu/k_B$ 。

密度算符矩阵元的评估由于以下事实而简化：作为博戈留波夫变换(4.23)的结果，哈密顿量采用对角化形式(4.29)。因此，哈密顿量的本征态根据准粒子激发的占据数分类，基态对应于准粒子的真空。然后策略包括用准粒子的产生和湮灭算符写密度算符(7.84)。在博戈留波夫方法的精度内，有：

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sqrt{N}(a_{h\mathbf{q}}^\dagger + a_{-h\mathbf{q}}), \quad (7.91)$$

使用博戈留波夫变换(4.23)，简化为：

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sqrt{N}(u_q + v_q)(b_{h\mathbf{q}}^\dagger + b_{-h\mathbf{q}}), \quad (7.92)$$

其中博戈留波夫振幅 $u$ 和 $v$ 被选择为实数，并且在 $\mathbf{q}$ 到 $-\mathbf{q}$ 的变换下不变（见方程(4.28)）。经过一些简单代数，得到响应函数虚部的结果：

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \pi \frac{\hbar^2 q^2}{2m\epsilon(\mathbf{q})} N [\delta(\hbar\omega - \epsilon(\mathbf{q})) - \delta(\hbar\omega + \epsilon(\mathbf{q}))] \quad (7.93)$$

其中我们引入了元激发的博戈留波夫能量(4.31)，并且与低温假设一致，我们设 $N_0 = N$ 。动态结构因子则形式为：

$$S(\mathbf{q}, \omega) = N \frac{\hbar^2 q^2}{2m\epsilon(\mathbf{q})} \frac{1}{1 - \exp[-\hbar\omega/k_B T]} [\delta(\hbar\omega - \epsilon(\mathbf{q})) - \delta(\hbar\omega + \epsilon(\mathbf{q}))]. \quad (7.94)$$

相对于理想玻色气体的低温预测（方程(7.88)-(7.90)），自由粒子能量被博戈留波夫能量(4.31)取代，并且峰的强度相应地重新归一化。使用上述 $S(\mathbf{q}, \omega)$ 的结果，容易验证 $f$ -求和规则(7.48)完全满足，而逆能量加权矩由下式给出：

$$m_{-1}(\mathbf{q}) = N \frac{\hbar^2 q^2}{2m\epsilon(\mathbf{q})^2}. \quad (7.95)$$

与理想玻色气体相反，当 $\mathbf{q} \rightarrow 0$ 时，方程(7.95)接近常数值 $N/2mc^2$ ，因为在此极限下 $\epsilon(q) = c\hbar q$ 。玻色气体中压缩率的有限性是相互作用的重要结果，并被博戈留波夫理论适当考虑。静态结构因子也很容易评估，并采取非平凡形式：

$$S(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m\epsilon(\mathbf{q})} \coth \frac{\epsilon(\mathbf{q})}{2k_B T}, \quad (7.96)$$

该式推广了理想玻色气体结果(7.90)，并在 $T = 0$ 时简化为：

$$S(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m\epsilon(\mathbf{q})} \quad (7.97)$$

注意静态结构因子(7.97)像以下形式消失：

$$S(\mathbf{q}) \rightarrow \frac{\hbar q}{2mc} \quad (7.98)$$

当 $\mathbf{q} \rightarrow 0$ 时（见图7.4）。正如已经指出的，这种行为不是稀薄玻色气体特有的，而是普遍适用于相互作用的超流体。对于大 $\mathbf{q}$ ，则发现结果：

$$S(\mathbf{q}) \rightarrow 1 - \frac{2m^2 c^2}{\hbar^2 q^2}. \quad (7.99)$$

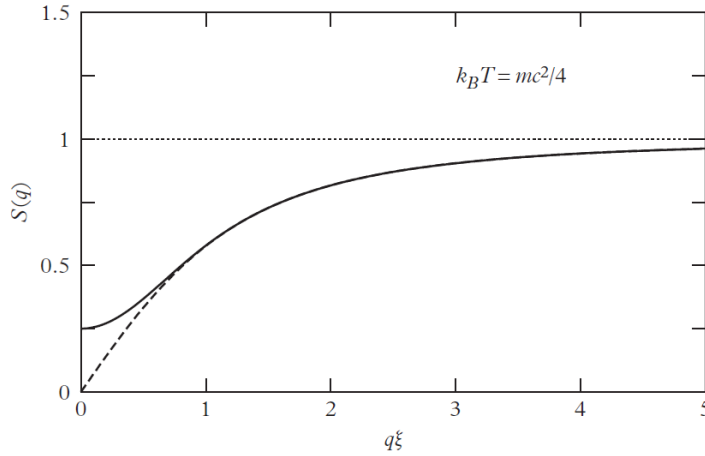


Figure 7.4: 静态结构因子作为无量纲变量 $q\xi$ 的函数，在 $k_B T = mc^2/4$ 温度下计算于相互作用的玻色-爱因斯坦凝聚气体中。虚线给出了博戈留波夫理论的 $T = 0$ 预测。热效应在小 $q$ 时很重要，并且由于涨落-耗散定理，导致 $S(q)$ 在 $q = 0$ 时为有限值。

讨论(7.96)在两个相反机制 $k_B T \gg mc^2$ 和 $k_B T \ll mc^2$ 下的行为是有用的。由于 $\mu \ll k_B T_c$ ，两种机制都与应用博戈留波夫理论所需的条件 $T \ll T_c$ 兼容。

i)  $k_B T \gg mc^2$ 。在这种情况下， $S(q)$ 的行为类似于理想气体，除了在小 $q$ 处，声子的热激发很重要，并且静态结构因子由压缩率求和规则决定，接近值 $k_B T/mc^2$ 。

ii)  $k_B T \ll mc^2$ 。在这种机制下，气体的行为类似于 $T = 0$ ，除了非常小的 $q$ 处，它接近“经典”值 $k_B T/mc^2$ 。

图7.3和图7.4非常清楚地表明，尽管系统温度非常低（ $T \ll T_c$ ）并且响应函数的虚部已达到其 $T = 0$ 值(7.93)，但静态结构因子表现出对 $T$ 的重要依赖性。

Hung等人（Hung et al., 2011）在二维玻色气体中对不同耦合常数下的静态结构因子进行了系统的实验研究，其中对关联函数更容易测量。该分析明确指出了在小波矢处讨论的结构因子的不同行为，取决于 $k_B T/mc^2$ 的值，并以精确的方式确认了一般结果方程(7.54)的有效性，该结果来自涨落-耗散定理，并且适用于在所有温度下具有有限压缩率的系

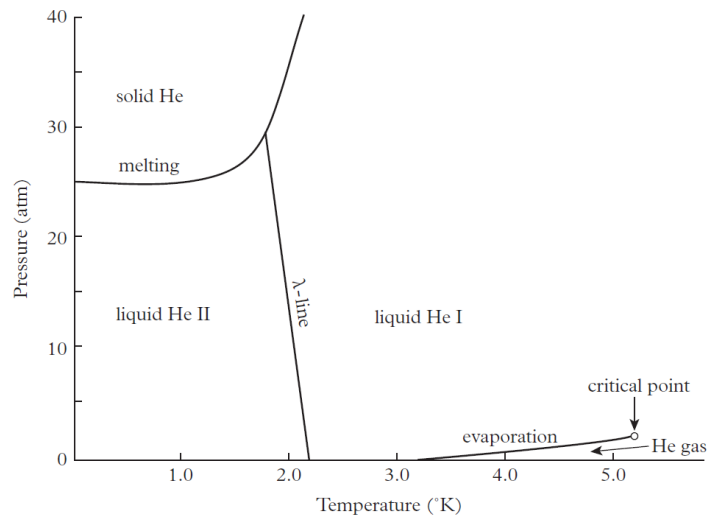
统，与它们的维度无关。

# Chapter 8

## 超流<sup>4</sup>He

在磁阱中约束的碱金属气体实现玻色-爱因斯坦凝聚之前，液态<sup>4</sup>He 多年来是唯一可用于实验研究超流性和玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）现象的系统。

处于液相状态的氦是一个致密系统。原子间的平均距离实际上在几埃的量级，这是原子间力的典型作用范围。因此，氦的行为与稀薄气体截然不同，在稀薄气体中，小气体参数 $na^3$  是理解其大多数物理性质的起点。尽管短程关联很重要，但由于原子质量轻，液氦表现出关键性的量子涨落，这使得它即使在零温下也不会凝固。实际上，氦是自然界中唯一永久性的液体，只有通过增大压力才会经历液-固相变。在温度 $T_\lambda = 2.17$  K 以下，液氦变为超流体（见图8.1）。Fritz London (1938) 首先认识到 $T_\lambda$  的实验值接近理想玻色气体模型在相同密度下预测的BEC 转变临界值 $T_c = 3.1$  K，从而表明超流现象和玻色-爱因斯坦凝聚之间存在关联。London 的论文开启了一系列重要工作的起点，旨在更深入地探索表征简并玻色系统的这两个重要特征之间的基本联系。本章的目的是总结超流氦表现出的与本书总体背景相关，特别是与玻色-爱因斯坦凝聚阱中气体的物理相关联的一些关键性质。关于氦的超流行为的更详尽讨论，有许多优秀的教科书可供参考（例如，参见Wilks, 1967）。

Figure 8.1: <sup>4</sup>He压力-温度相图

## 8.1 元激发和动态结构因子

让我们首先讨论超流<sup>4</sup>He 的元激发的色散关系 $\epsilon(p)$ 。这种色散关系使我们能够理解许多重要的热力学和超流性质。图8.2 显示了零温和零压这种最相关情况下的色散律。它在低动量处呈现出典型的线性斜率，随后在较高动量处出现一个极大值（maxon，极大子）和一个极小值（roton，旋子）。这种谱的形式最初由Landau (1947) 基于相关热力学量的实验数据提出。特别是，熵和比热的温度依赖性允许估计旋子极小值处的能隙 $\Delta$  的值，而超流体密度的测量则给出了旋子动量 $p_0$  的值（见方程(8.4)）。

谱的起始部分对应于声子的线性律 $\epsilon = cp$ ，其中声速 $c$  由压缩率 $\partial P/\partial n$  定义为

$$c = \left( \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} \right)^{1/2}. \quad (8.1)$$

(8.1) 在上式中， $m = 6.65 \times 10^{-24}$  g 是<sup>4</sup>He 原子的质量， $n = N/V$  是密度。液态<sup>4</sup>He 的状态方程在实验上是已知的，并且在零温下，可以通过唯象参数化每个粒子的能量很好地再现：

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{2}bn + \frac{1}{2}c_2n^2 + \frac{1}{3}c_3n^3 \quad (8.2)$$

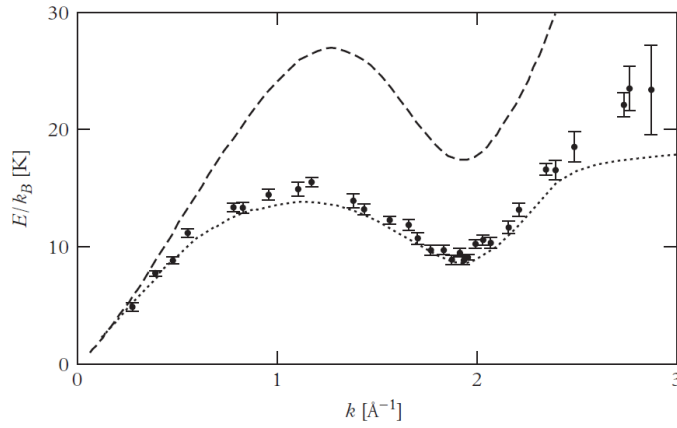


Figure 8.2: 液态氦在饱和压力和低温下的激发谱。

(8.2) 从(8.2) 出发，利用热力学关系

$$P = n^2 \frac{\partial}{\partial n} \left( \frac{E}{N} \right), \quad (8.3)$$

(8.3) 可以容易地计算压强和压缩率。在方程(8.2) 中，参数  $b = -719 \text{K}\text{\AA}^6$ ,  $c_2 = -2.42 \times 10^4 \text{K}\text{\AA}^6$  和  $c_3 = 1.86 \times 10^6 \text{K}\text{\AA}^9$  已通过唯象方式固定，以再现零压下的结合能( $-7.14 \text{ K}$ )、密度( $0.0218 \text{\AA}^{-3}$ ) 和声速( $238 \text{ m/sec}$ )。方程(8.2) 在很宽的压强范围内准确地再现了状态方程（见图8.3 和图8.4）。它预测旋节点（sound velocity vanishes）的压强值  $P \sim -9 \text{ atm}$ ，与状态方程的从头算计算(Boronat et al., 1994) 非常吻合，并且与空化实验(Caupin and Balibar 2001) 的可用数据一致。 $^4\text{He}$  激发谱的一个特点是，对于固定的  $p$  值，在给定的能量阈值以下不存在激发。这是满足朗道超流判据的关键条件（参见第6.1 节）。另一个重要特征是旋子极小值的出现，其色散可以表示为：

$$\epsilon(p) = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*}, \quad (8.4)$$

(8.4) 其中零压值为  $\Delta = 8.7 \text{ K}$ ,  $p_0/\hbar = 1.9 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$  和  $m^* = 0.14m$ 。对于这种类型的谱，朗道临界速度(6.1) 由旋子极小值决定： $v_c \approx \Delta/p_0$ ，结果约为  $60 \text{ m/sec}$ ，比声速小四倍。

值得注意的是，在零压下，谱曲线在其起始部分对于  $p/\hbar < 0.54 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$  保持在“声线”  $\epsilon = cp$  之上（见图8.5）。因此，位于该线上方区域的

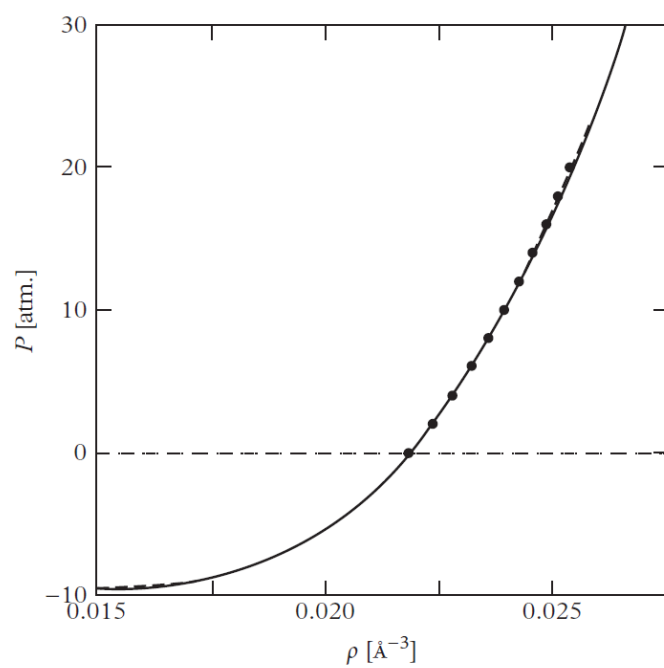


Figure 8.3: 液氦低温下的状态方程。

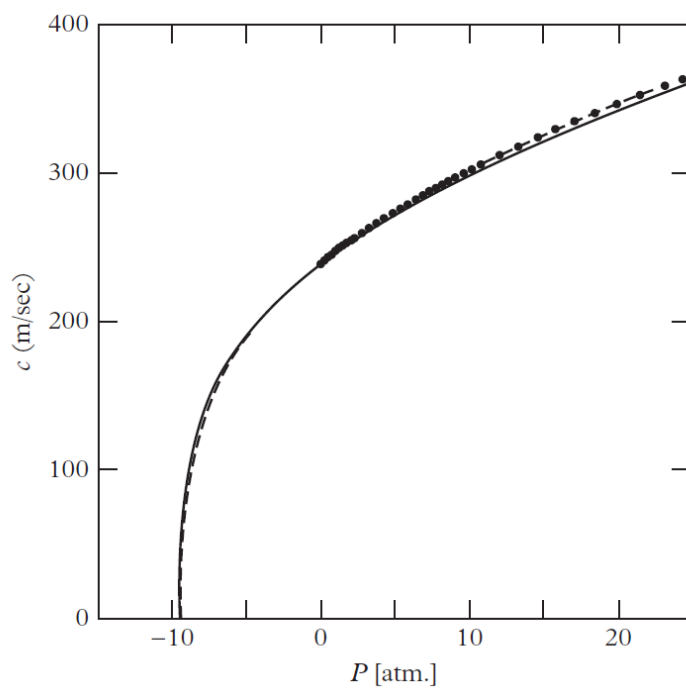


Figure 8.4: 液氦低温下的声速。

声子可以衰变为两个或多个具有较小动量的激发，从而产生别利亚耶夫衰减(Maris and Massey, 1970; Maris, 1977)，这将在第6.5 节讨论。衰减在更高动量处消失，因此，在零温下，能量足够高的激发，特别是旋子，没有阻尼。别利亚耶夫阻尼已在超流 $^4\text{He}$  中被实验探测到。在该实验中，在液体中产生具有明确能量值的声子，并由放置在离源一定距离处的探测器探测。在发生别利亚耶夫阻尼的区域，声子的平均自由程约为100，而能量更高的声子可以传播到几毫米远。此外，在旋子区域上方，元激发的谱也展

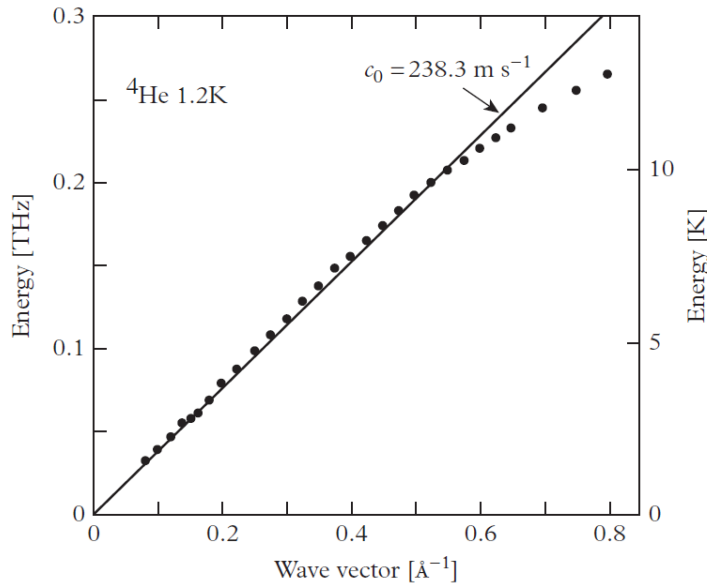


Figure 8.5: 超流氦在1.2K时的色散曲线与声线对比

现出有趣的特征。特别是，可以证明，如果谱曲线在某个点 $p < 2p_0$  达到能量 $2\Delta$ ，那么该激发相对于衰变成两个旋子是不稳定的(Pitaevskii, 1959)。

实验上，研究液氦能谱最有力的方法是通过慢中子的非弹性散射测量动态结构因子 $S(q, \omega)$ 。与散射中子的相互作用由哈密顿量描述：

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{M} a_n \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (8.5)$$

其中 $a_n$  是中子-原子s 波散射长度， $M$  是中子-原子约化质量， $\hat{n}(\mathbf{r})$  是原子密度算符。使用玻恩近似，对于在动量间隔 $d\mathbf{p}'$  内散射的中子，单位时间

的散射概率给出如下结果（见方程(7.33)）：

$$dP(\mathbf{q}, \omega) = \frac{a_n^2}{M^2} \frac{1}{V} S(\mathbf{q}, \omega) d\mathbf{p}', \quad (8.6)$$

其中 $S(\mathbf{q}, \omega)$  是液体的动态结构因子， $V$  是体积， $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ ，且 $\hbar\omega = E - E'$ 。这里 $\mathbf{p}$ ,  $E$  和 $\mathbf{p}'$ ,  $E'$  分别是中子的初始和末态动量与能量。

在 $T = 0$  时，液态<sup>4</sup>He 的动态形状因子可以如下参数化：

$$S(q, \omega) = Z(q) \delta \left[ \omega - \frac{\epsilon(q)}{\hbar} \right] + \tilde{S}(q, \omega), \quad (8.7)$$

其特征是一个描述单激发产生过程的delta 函数贡献和一个描述多激发过程并在 $\omega < \epsilon(q)/\hbar$  时消失的连续项 $\tilde{S}$ 。在方程(8.7) 中，我们使用波矢 $q$  代替动量 $p = \hbar q$  来标记色散律。实际上，方程(8.7) 没有考虑别利亚耶夫阻尼效应，该效应在低 $q$  时导致delta 峰的平滑化。然而，别利亚耶夫衰变的影响非常小，在后续讨论中将忽略。

首次在超流氦中测量动态结构因子是由Palevsky et al. (1957) 完成的。目前，通过中子散射数据，在 $q$  和 $\omega$  的广泛取值范围内，现在可以获得相当系统的关于 $S(q, \omega)$  的实验信息，不仅限于delta 谱线附近，还包括多声子过程重要的高能区域（图8.6）。了解 $S(q, \omega)$  使我们能够计算静态形状因子

$$S(q) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} S(q, \omega) d\omega, \quad (8.8)$$

根据(7.40)，它直接与两体关联函数相关。静态结构因子 $S(q)$  也可以通过X 射线或中子的漫散射直接测量(Swensson et al., 1980)。  $S(q)$  的测量结果如图8.7 所示，温度为 $T = 1.38\text{K}$ ，饱和蒸气压。这个量在 $q \sim 2 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$  处有一个典型的极大值，反映了这种高度关联液体所表现出的内在凝固趋势。请注意，根据涨落-耗散定理，静态结构因子在 $q \rightarrow 0$  时不会像 $T = 0$  时那样消失，而是趋近于值 $S(q) \rightarrow k_B T / mc_T^2$ （见方程(7.54)）。在图8.8 中，我们显示了与 $S(q)$  通过方程(7.42) 相关联的对关联函数 $g(r)$ 。对关联函数 $g(r)$  以及由此而来的静态结构因子的理论确定，在 $T = 0$  和有限温度下都已成为许多微观计算的对象。在图8.7 和图8.8 中，我们展示了在接近实验值的温度下进行的路径积分蒙特卡罗(PIMC) 模拟(Ceperley, 1995) 的预测。理论与实验之间的吻合非常出色。

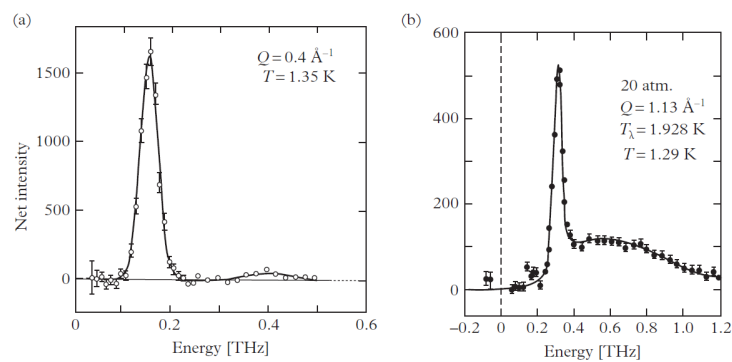


Figure 8.6: 格莱德在1991年对低温下两种不同传递波矢量 $Q$ 的超流氦散射强度的测量（来自Wyatt和Lauter，1991年，第3页）

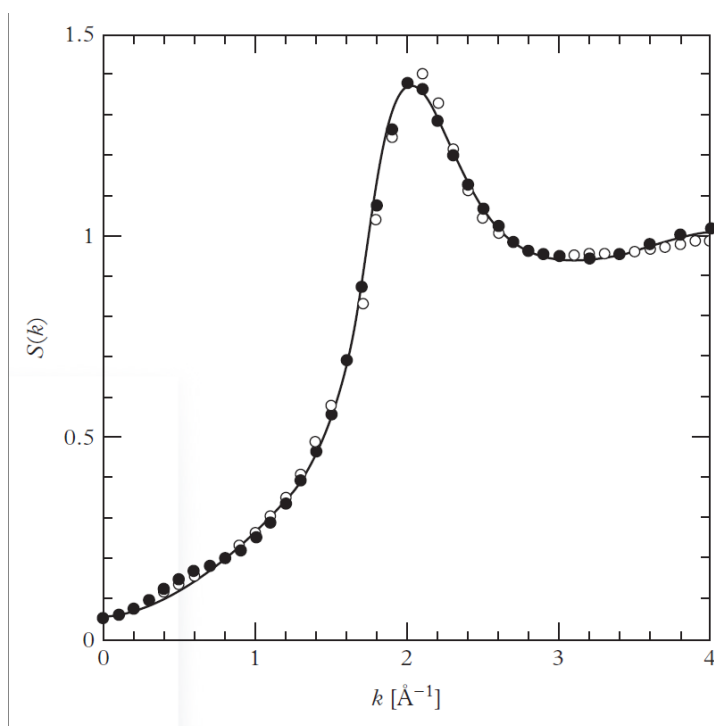


Figure 8.7: 在1.38K和饱和蒸气压下的静态结构因子

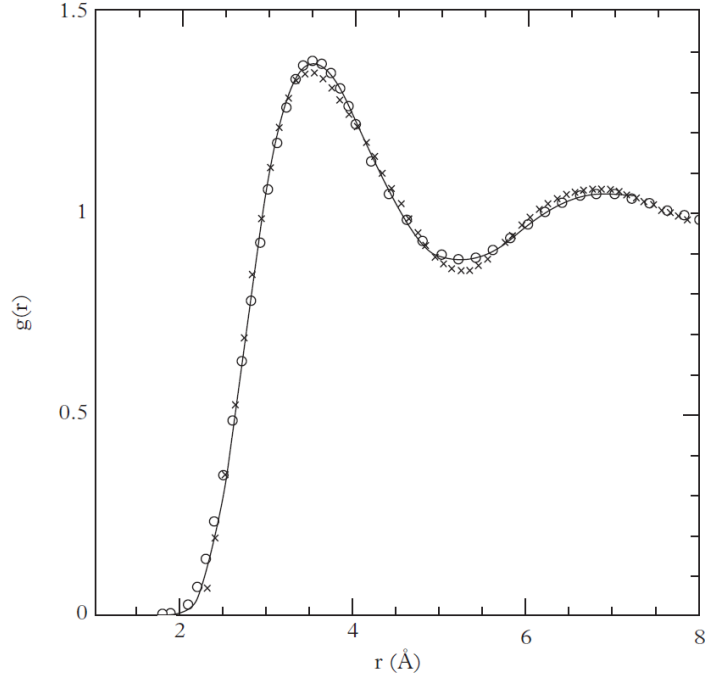


Figure 8.8: 饱和蒸汽压下液氦的低温对关联函数。

根据静态结构因子(8.8) 的行为, 可以对能谱表现出的旋子极小值提供定性的解释。事实上, 根据(8.7), 动态结构因子在  $\omega < \epsilon(q)/\hbar$  时消失。因此, 费恩曼能量(7.67)

$$\epsilon_F = \frac{m_1}{m_0} = \frac{\hbar^2 q^2}{2mS(q)} \quad (8.9)$$

(8.9) 为超流氦中元激发的能量提供了一个严格的上限。结果(8.9) 最初由Feynman (1954) 使用拟设推导出:

$$|\Psi_F\rangle = \rho_{\mathbf{q}}|\Psi_0\rangle \quad (8.10)$$

作为动量为  $\hbar\mathbf{q}$  的激发态波函数。这里  $\rho_{\mathbf{q}}$  是密度算符的傅里叶分量 (见方程(7.28)),  $\Psi_0$  是基态多体波函数。利用性质  $H|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$  以及  $H$  和  $\rho_{\mathbf{q}}$  之间的对易规则, 我们可以立即恢复激发能  $\epsilon_F = \langle\Psi_F|H|\Psi_F\rangle/\langle\Psi_F|\Psi_F\rangle - E_0$  的结果(8.9)。费恩曼公式的一个主要优点是, 它明确地将旋子极小值与静态结构因子中极大值的出现联系起来。

费恩曼公式可以利用低温下  $S(q)$  的实验结果, 无需任何额外的理论计算, 来提供激发谱的初步估计。

正如我们在第7.6节中指出的, 在稀薄气体中, 由于不存在多重激发, 费恩曼估计(8.9) 与所有 $q$  值的精确色散律一致。在致密超流体中, 费恩曼能量仅在声子极限 $q \rightarrow 0$  时才与激发能一致。实际上, 在零温下, 静态结构因子 $S(q)$  的行为类似于 $\hbar q/(2mc)$ , 并且当 $q \rightarrow 0$  时 $\epsilon_F(q) \rightarrow c\hbar q$ 。在这种情况下, 多声子过程对矩 $m_1$  和 $m_0$  给出高阶贡献, 因此可以忽略。这直接得到了 $S(q, \omega)$  实验数据 (见图8.6a) 的证实, 该数据显示如果 $q$  很小, 多声子过程也很小。费恩曼近似的质量随着 $q$  的增加而变得越来越差, 在旋子区域, 它高估了实验数据约两倍 (见图8.2)。为了改进费恩曼估计, 需要显式考虑多过程效应的多体方法。这些理论通常基于在多体波函数中显式包含回流和更高阶关联。在图8.2 中, 我们报告了基于投影波函数(shadow wave functions)方法计算得到的激发谱(Moroni et al., 1998)。理论与实验的吻合在旋子区域尤其好。本章中关于液氦的所有从头算计算都使用了半经验的Aziz 原子间势。相对于传统的Lenard-Jones 势, Aziz 势在短距离上更好地描述了原子间力, 解释了在很宽能量范围内的原子-原子散射实验数据。

## 8.2 热力学性质

在足够低的温度下, 液态 $^4\text{He}$  的热力学性质可以从能谱 $\epsilon(p)$  出发, 利用玻色分布函数

$$N_{\mathbf{p}} = \left[ \exp \frac{\epsilon(p)}{k_B T} - 1 \right]^{-1}, \quad (8.11)$$

来计算, 该函数给出了携带动量 $p$  的热激发数量。热力学函数的主要贡献来自声子 (小 $p$ ) 区域和旋子区域, 其中可以进行解析计算。声子对自由能和正常密度的贡献分别由方程(4.41) 和(6.11) 给出。

关于旋子贡献, 应该注意到旋子能隙 $\Delta$  远大于温度 $T$ 。那么, 有 $e^{\epsilon(p)/k_B T} \gg 1$ , 因此玻色分布简化为经典的玻尔兹曼表达式 $N_p = e^{-\epsilon(p)/k_B T}$ , 其中 $\epsilon(p)$  由(8.4) 给出。自由能 $A = E - TS$  于是很容易计算, 并取如下形式:

$$A_r = -TVn_r, \quad (8.12)$$

(8.12) 其中

$$n_r = \int e^{-\epsilon(p)/k_B T} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_0^2 (m^* k_B T)^{1/2}}{2^{1/2} \pi^{3/2} \hbar^3} e^{-\Delta/k_B T} \quad (8.13)$$

(8.13) 是旋子密度。类似地，旋子对象热和正常部分(6.11) 的贡献为

$$C_{rot} = V n_r \left[ \left( \frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 + \frac{\Delta}{k_B T} + \frac{3}{4} \right] \quad (8.14)$$

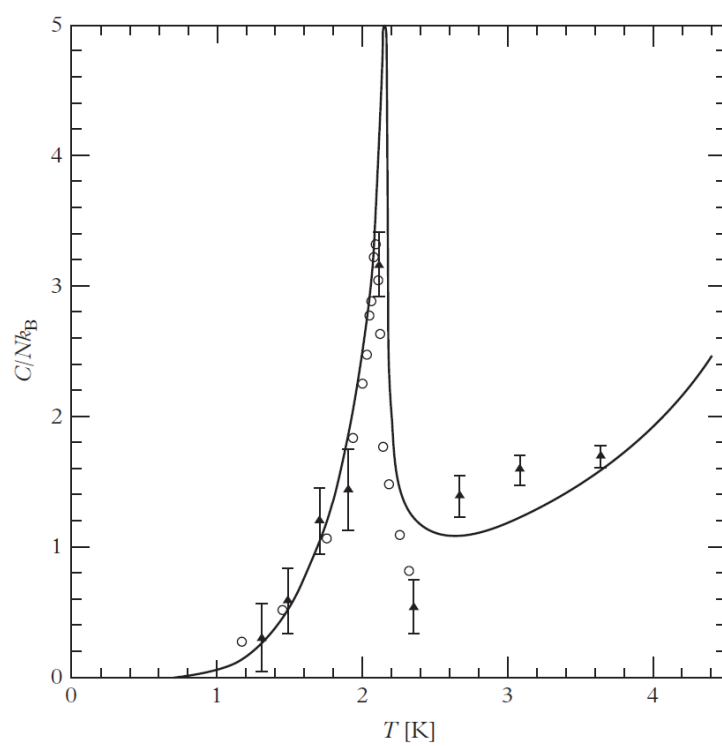
(8.14) 和

$$\rho_{nr} = \frac{p_0^2}{3k_B T} n_r, \quad (8.15)$$

(8.15) 分别。由于 $n_r$  中的指数因子，旋子对热力学的贡献在低温下可以忽略不计。然而，由于携带高动量的旋子具有很大的统计权重，随着 $T$  的升高，这种贡献很快变得重要起来。声子和旋子对象热和正常部分的贡献分别在约0.8 K 和0.6 K 时相当。

从理论角度来看，对超流氦热力学函数最精确的描述是由路径积分蒙特卡罗(PIMC) 技术提供的（参见Ceperley, 1995 的综述）。比热曲线如图8.9 所示，表明这种多体方法非常适合描述在 $\lambda$  点发生的相变，提供了临界温度的定量正确值。

类似地，在图8.10 中，我们显示了超流密度与温度的函数关系结果。同样，在这种情况下，理论与实验的吻合也非常好。实验上，首次直接测量超流<sup>4</sup>He 中的正常部分 $\rho_n$  (Andronikashvili, 1946) 是通过使用一系列绕充满超流氦的圆柱体轴线振荡的圆盘实现的。在这个实验中，圆盘列拖曳正常部分，而超流部分保持静止。转动惯量的变化随后允许提取 $\rho_n$  的值。值得指出的是，这个实验是在非稳态条件下进行的。实际上，圆盘的速度高于产生涡旋所需的临界速度，然而在实验中并未产生涡旋。超流体密度的准确结果也从第二声测量中获得(Peshkov, 1944, 1946)。根据方程(6.56)，第二声速实际上对 $\rho_s/\rho_n$  的比值很敏感。比值 $\rho_s/\rho$  的实验数据(Dash and Taylor, 1957) 报告在图8.10 中。值得强调的是，在低温下，超流分数等于1，即使在像<sup>4</sup>He 这样的强关联液体中也是如此，这揭示了在零温下整个系统是超流的。这种行为与凝聚体分数的行为完全不同，我们将在第8.4 节讨论。

Figure 8.9:  $^4\text{He}$ 比热

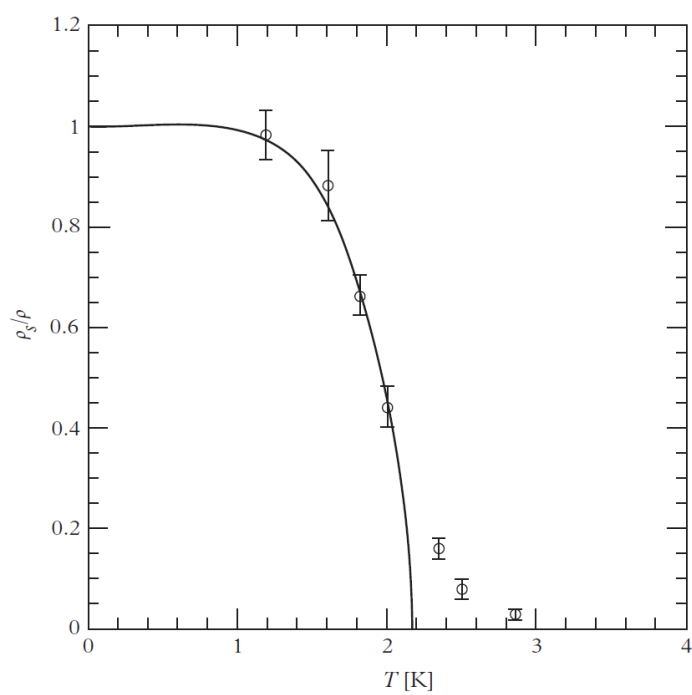


Figure 8.10: 超流体密度与总密度之比

## 8.3 量子化涡旋

量子化涡旋的出现是超流性的另一个壮观结果。在超流 $^4\text{He}$  中的首次实验证明是由Hall 和Vinen (1956) 获得的，他们研究了垂直于旋转样品轴线传播的第二声的阻尼。液体正常部分和超流部分之间的摩擦导致声的额外阻尼，该阻尼结果与涡线数量成正比，因此根据方程(6.95)，与角速度成正比。

对环流量子化(6.89) 的直接证明是由维宁 (Vinen (1961)) 获得的，他将一根金属线沿着旋转毛细管的轴线放置。在足够高的角速度下，液体绕金属线的旋转表现出与存在单个环流量子相关的跳跃。通过研究金属线的振荡，可以推断涡旋的出现。事实上，在没有涡旋线的情况下，这些振荡是双重简并的，频率与偏振无关。环流消除了简并性，导致两个频率之间出现分裂。这个实验允许测量单条涡旋线的环流量子 (图8.11)。 涡旋的

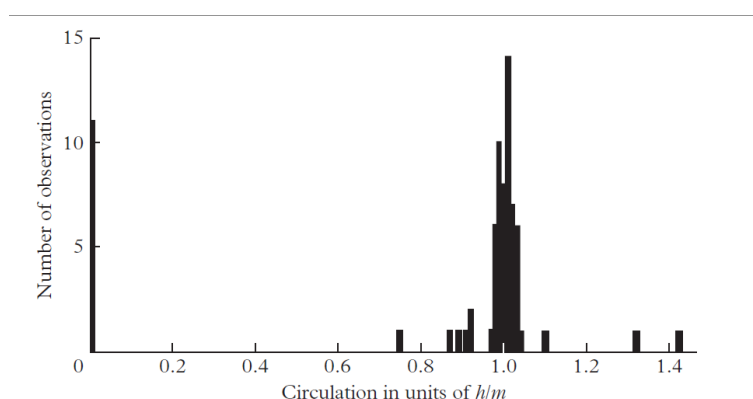


Figure 8.11: 直方图显示维宁实验中的循环值

直接可视化在Packard 和Sanders (1972) 的实验中实现。在这个实验中，将一束电子注入旋转的液态 $^4\text{He}$  圆柱体中。涡旋线俘获电子，然后电子在电场作用下沿涡线加速，最终在逸出液体后成像。电子在荧光屏上产生斑点，使用这种技术可以成像单个量子化涡旋线以及阵列 (见图8.12)。 另一个值得一提的实验是Hess 和Fairbank (1967) 的实验。在这个实验中，首先让被旋转圆柱体约束的液体在 $T_\lambda$  以上旋转。然后将系统冷却到超流相，通过测量容器角速度的变化，可以提取液体转动惯量的相应变化。根据容器的角

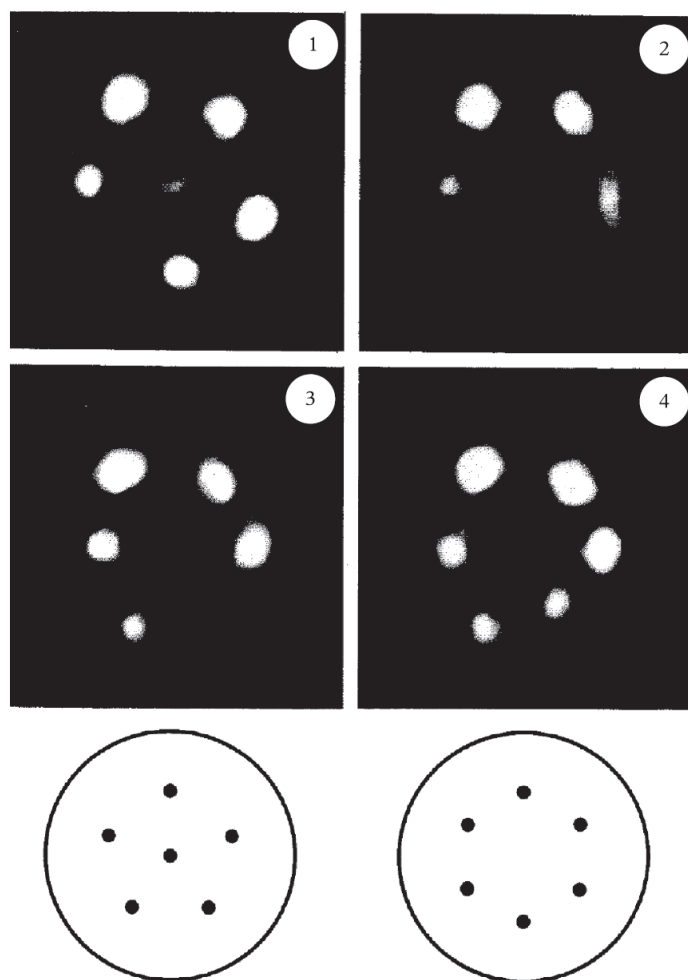


Figure 8.12: 超流氦中涡旋阵列的照片。

速度，会发生不同的情景。对于小于临界值（见方程(6.93)）的角速度

$$\Omega_{cr} = \frac{\hbar}{mR^2} \ln \frac{R}{r_c} \quad (8.16)$$

(8.16) 人们预测液体中不会产生涡旋。因此，在足够低的温度下，液体不携带角动量，因为系统完全超流。方程(8.16) 对应于在旋转坐标系中涡旋构型在能量上变得稳定的角速度（见第6.8 节）。 $\Omega_{cr}$  的值由圆柱体的半径（在此实验中约为0.09 cm）和涡核半径决定，在氦中，涡核半径预计在 $10^{-8}$  cm 量级。这得出值 $\ln(R/r_c) \sim 15$  和临界频率 $\Omega_{cr}/2\pi \sim 1.2 \text{ s}^{-1}$ 。通过将角速度增加到 $\Omega_{cr}$  以上，预计会出现与产生一条涡旋线相关的角动量跳跃。通过增加角速度会产生额外的涡旋。在这个实验中，精度不足以分辨单个涡旋线的角动量，但足以区分实际超流的角动量和经典旋转的角动量（见图8.13）。同一作者探索了系统在低角速度区域下随温度变化的响应，在该区域预计不会激发涡旋。在这种情况下，由于热效应系统是部分超流的，只有正常部分对液体的转动惯量有贡献。获得的角动量结果与第二声测量得到的超流体密度数据一致。在Hess-Fairbank 和Packard 实验中，关键都是在将系统冷却到超流相之前旋转容器。只有通过这样的程序，量子化涡旋的热成核才是可控的。如果试图旋转一个冷的超流体，成核机制将被超流成分产生的势垒所抑制，因此被迫以远高于临界速度(8.16) 的角速度旋转容器。这种行为是有趣的滞后现象的根源。

上述实验探测了量子化涡旋的宏观性质，但没有提供任何关于微观结构的信息，例如涡核的密度分布。涡旋的微观结构可以通过多体波函数的从头算理论确定。最简单的方法由费恩曼拟设提供：

$$|\Psi_v\rangle = \prod_k e^{i\varphi_k} |\Psi_R\rangle, \quad (8.17)$$

(8.17) 其中 $\varphi_k$  是相对于第 $k$  个粒子的方位角， $\Psi_R$  是一个多体实波函数。使用真实的两体相互作用对 $\Psi_R$  进行能量最小化，然后提供涡旋的波函数，据此可以计算密度分布、能量等。在图8.14 中，我们展示了使用这种变分技术计算的典型分布。该图显示涡旋的尺寸非常小( $\sim 1 \text{ \AA}$ )，证实了这种高度关联系统的愈合长度是一个微观量。涡旋密度分布表现出的振荡是短程关联的结果，并具有旋子激发的典型波长。

当应用于均匀物体时，密度泛函简化为典型形式(8.2)。费恩曼拟设和密度泛函计算都忽略了涡旋线涨落的影响，预计这会导致涡核的部分填充。

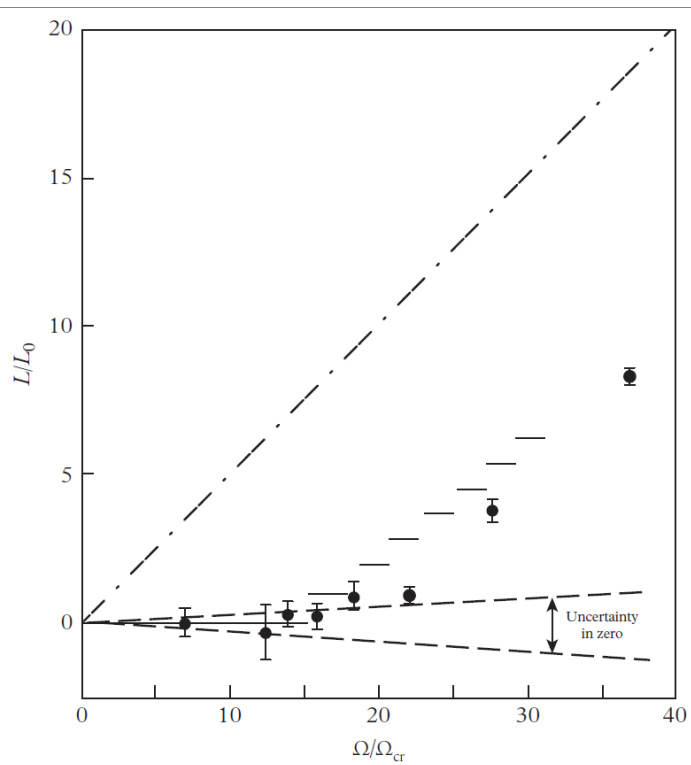


Figure 8.13: 超流体的角动量与角速度之比，在氦在旋转中冷却后测量。

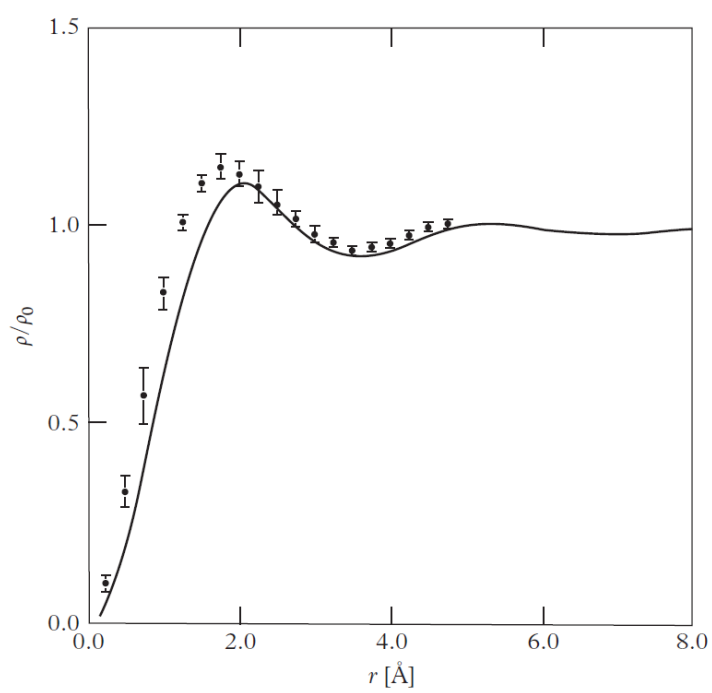


Figure 8.14: 零压力和零温度下涡旋的密度分布

这种效应的重要性仍然是一个有争议的主题。不幸的是，目前在超流氦中还没有量子化涡旋密度分布的直接测量。

除了涡线，量子化涡环也可以在超流氦中观察到。环是在被电场加速的 $^4\text{He}$  正负离子周围产生的。这个复合物体（环加离子）的能量主要来自环的能量(Rayfield and Reif, 1964)，通过测量离子的速度，可以验证第5.4节讨论的能量-速度关系。

## 8.4 动量分布和玻色-爱因斯坦凝聚

前几节对 $^4\text{He}$  的元激发以及热力学和超流性质的讨论尚未明确指出玻色-爱因斯坦凝聚的作用。更直接揭示BEC 效应的物理量是动量分布。这个量不应与元激发的分布函数(8.11) 混淆，它通过关系式（见方程(2.5)）与非对角单粒子密度 $n^{(1)}(s)$  相关联：

$$n(\mathbf{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{s} n^{(1)}(s) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}/\hbar} = N_0\delta(\mathbf{p}) + \tilde{n}(\mathbf{p}), \quad (8.18)$$

并且可以在零温和有限温度下使用从头算多体技术计算。在这些计算中，动量分布中delta 函数的存在是通过分析单粒子密度矩阵的长程行为推断出来的，该行为通过关系式

$$\lim_{s \rightarrow \infty} n^{(1)}(s) = n_0 \quad (8.19)$$

直接给出凝聚体密度 $n_0 = N_0/V$ 。几乎所有在零压和零温下进行的可用多体计算都预测液氦的凝聚分数约为10%。值得注意的是，这个值与Penrose和Onsager (1956) 基于简单硬球模型做出的首次估计相当接近。超流氦的结果应与稀薄气体的情况相比较，在稀薄气体中，零温下大多数原子处于凝聚体中，量子耗尽在一级近似下可以忽略。

$n(p)$  在存在BEC 时表现出的另一个重要特征是在小 $p$  处出现红外发散（见第6.7 节），这是导致大距离处非对角单粒子密度具有特殊 $s$  依赖性(6.72) 的根源。在数值模拟中显式出现这种发散的条件是多体波函数中存在适当的长程关联。

超流氦动量分布，特别是凝聚分数的实验确定，是一个具有挑战性的问题。原则上，高动量转移的中子散射实验非常适合探索 $n(p)$  的行为。事

实上，如果动量转移远大于粒子间平均距离的倒数，原子的行为就像独立粒子。在这些条件下，在这些实验中测量的量——动态结构因子，趋近于冲量近似(IA) 极限(7.34)。在IA 极限下，动态结构因子可以改写为有用的形式：

$$S_{\text{IA}}(q, \omega) = \frac{m}{q} J(Y), \quad (8.20)$$

它在变量

$$Y = \frac{m}{q} \left( \omega - \frac{q^2}{2m} \right) \quad (8.21)$$

中表现出有用的标度行为。标度函数

$$J(Y) = \int dp_x dp_y n(p_x, p_y, Y) \quad (8.22)$$

(8.22) 通常被称为纵向动量分布（我们这里假设动量转移 $\mathbf{q}$ 沿 $z$ 轴方向）。结果(8.20)-(8.22) 表明，原则上，测量动态结构因子可以了解系统的动量分布。特别是，由玻色-爱因斯坦凝聚在 $n(p)$  中产生的 $p = 0$  奇点，应在 $J(Y)$  中 $Y = 0$  处表现为一个delta 峰。实际上，情况并非如此简单，因为未被IA 考虑的末态相互作用永远无法忽略，并导致测量信号的展宽（见图8.15）。因此，实验数据的最终分析，特别是凝聚分数的确定，总是基于依赖模型的程序。在图8.16 和图8.17 中，我们显示了从这些中子散射实验中提取的凝聚分数随温度和压强的变化结果。正如预期的那样，凝聚分数随着 $T$  和 $P$  的增加而减少。特别是，对于高于 $T_\lambda$  的温度和对应于固相的高压，所确定的凝聚分数值实际上为零，这支持了提取其值所遵循的一般程序的可靠性（参见Sokol,1995）。

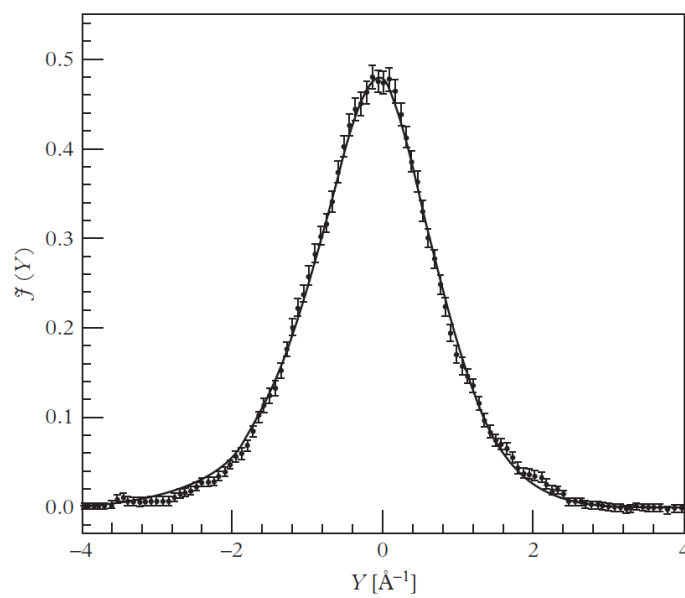


Figure 8.15: 在  $T = 0.35$  K 时测量的标度函数  $J(Y)$ 。

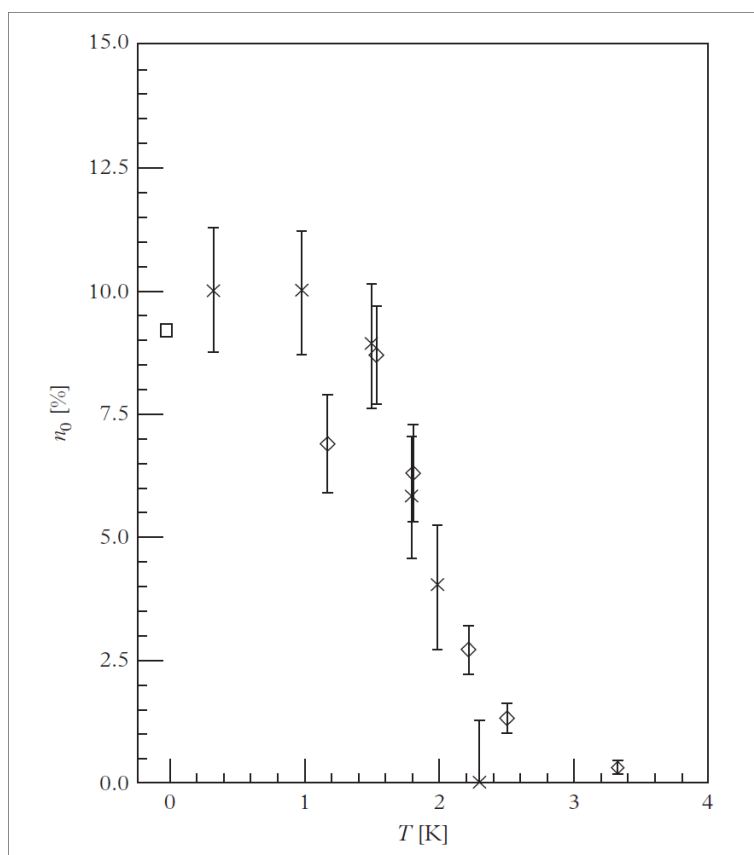


Figure 8.16: 在密度为 $0.147 \text{ g cm}^{-3}$ 时，超流氦的冷凝分数随温度变化的实验值。

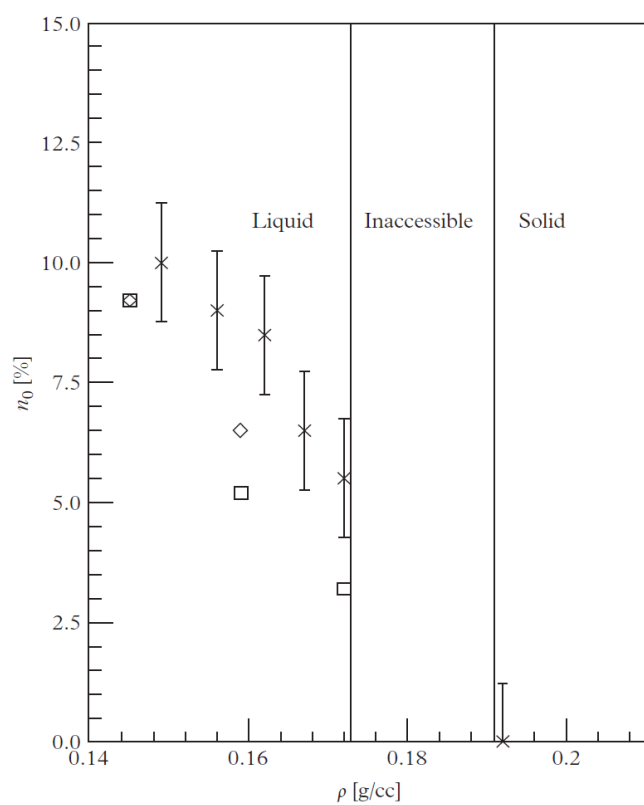


Figure 8.17: 在0.75K时，超流氦的冷凝分数随密度的函数的实验值（叉）。

# Chapter 9

## 原子气体：碰撞与囚禁

在讨论了超冷原子气体的亚稳态性的一般考量之后，本章我们将概述低能下一些相关的原子间碰撞性质，并简要描述基于原子与磁场及电磁场相互作用的最重要囚禁方案。低能碰撞对于理解相互作用在稀薄气体中的作用至关重要，并由s波散射长度决定。这是基本的相互作用参数，使我们能够描述稀薄玻色-爱因斯坦凝聚气体以及超流费米气体的多种多体性质。该相互作用参数还使我们能够描述在费施巴赫共振存在下原子束缚对的形成。特别讨论将集中于二维中的碰撞效应研究（第9.3节）。本章最后部分阐述了目前用于约束中性原子的典型磁囚禁（第9.4节）和光囚禁（第9.5节）方案。

### 9.1 亚稳态性与碰撞的作用

所有相互作用的原子系统（除氦以外）在足够低的温度下都会发生相变进入固相。这种行为如图9.1所示，图中展示了一个典型的压力-温度相图。图中我们还画出了表征理想玻色气体BEC相变的 $P(T)$ 线（参见公式3.41）。在该线上方，稀薄气体将发生玻色-爱因斯坦凝聚。然而，这种构型是不稳定的，因为在这样的压力和温度条件下，热力学平衡对应于晶相。

<sup>1</sup> 请注意，这种情况无法避免，因为与固体平衡共存的气体始终是经典的，

---

<sup>1</sup>氢原子（具有平行电子自旋）是一个例外。此类原子表现出强排斥相互作用，自旋极化的氢在温度降至零时仍保持气体状态（Hecht, 1959; Stwalley and Nosanow, 1976）。

因此分隔固体与气体的 $P(T)$ 线始终位于BEC线之下。在低温下，BEC气相的衰变机制主要由三体重组事件主导，这些事件导致分子形成，最终使系统进入热力学稳定的固相。乍看之下，这个讨论排除了达到玻色-爱因斯坦凝聚的可能性。然而，如果满足一些重要标准，亚稳态条件下仍可确保BEC相的存在：

\*气体密度应足够低，使得三体碰撞稀少。实际上，在气态BEC区域达到的典型密度对应于 $10^{13} - 10^{15}$  原子/cm<sup>3</sup>。密度更高时，重组效应变得重要。如此小的密度值意味着，为了突出量子统计效应，必须在极低的温度下工作，约为微开尔文量级。

\*气体应远离任何材料壁面，在那里与其他原子的相互作用会促进分子形成。

上述条件可以通过将极稀薄、低温且自旋极化的气体约束在磁阱中来实现。这实际上是在原子气体中实现玻色-爱因斯坦凝聚的实验所遵循的自然途径，尽管现在也可以在光阱中约束和实现BEC气体。本书无意讨论实现原子气体BEC实验所经历的各种中间步骤。这些步骤包括复杂的冷却、囚禁和成像技术（最新综述参见，例如，Inguscio and Fallani, 2013）。在本章中，我们仅提及在BEC区域用于冷气体的囚禁方案的几个特征，这些特征与本书的总体讨论相关。非弹性过程（尤其是三体重组）因气体的稀薄性而被抑制，且完全平衡构型由固相表征，这一事实并不排除气体在二体碰撞方面处于动力学平衡的可能性。只要相应的弛豫时间明显短于样品的寿命（在当前可用构型中通常为几秒），这些碰撞就能确保热化。因此，二体碰撞在实现囚禁原子气体中的玻色-爱因斯坦凝聚方面起着至关重要的作用。实际上，蒸发冷却机制（将系统带入BEC相的最后冷却步骤）如果系统不能足够快地热化，就不可能实现。在蒸发冷却中，高能原子通过射频跃迁被允许从样品中逸出，从而降低了剩余原子的平均能量。二体碰撞在原子间重新分配能量，使得速度分布重新呈现统计平衡形式，但处于较低温度。这使得原子样品可以被冷却许多数量级。二体碰撞过程不仅对于确保动力学平衡很重要，它们也是显著相互作用效应的根源，这些效应以独特的方式表征了玻色-爱因斯坦凝聚相中气体的行为。实际上，相互作用影

---

因此，在强磁场中H原子的玻色-爱因斯坦凝聚可以在真正的平衡中实现（Fried et al., 1998）。

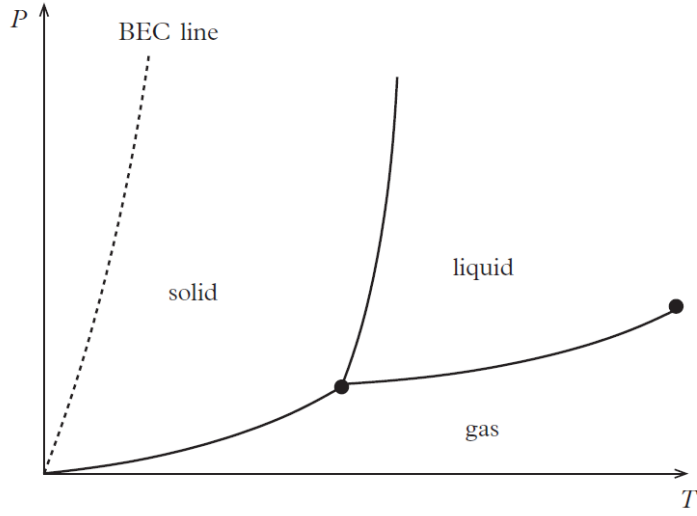


Figure 9.1: 典型P-T相图。BEC线位于系统处于平衡状态时为固体的区域。因此，气体的BEC相只能存在于亚稳态条件下。

响许多具有高度物理相关性的可测量量，如平衡密度分布、基态能量和集体频率。在稀薄冷气体中，碰撞可以通过s波散射长度恰当地描述，它代表了此类系统的关键相互作用参数。

如前所述，三体重组在系统失稳（尤其是在原子损失率方面）起着关键作用。Kagan等人（1985）指出，由于表征凝聚体波函数的量子统计关联，三体重组应比相同密度下的热云中的重组少一个因子 $3! = 6$ 。这一效应已被Burt等人（1997）的实验所证实。

## 9.2 低能碰撞与散射长度

在本节中，我们将回顾慢粒子弹性散射理论的一些基本特征（参见，例如，Landau and Lifshitz, 1987b）。忽略小的相对论性自旋-自旋和自旋-轨道相互作用，计算两个碰撞原子散射振幅的问题简化为求解具有正能量（ $E > 0$ ）的相对运动的薛定谔方程：

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(r) - E \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (9.1)$$

这里 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  且 $m^* = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  是两个原子的约化质量。需要在

渐近区域  $r \gg r_0$  找到该方程的解，其中  $r_0$  是势  $V$  的作用范围。在此区域，解可写为：

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (9.2)$$

其中

$$k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}} \quad (9.3)$$

且  $\theta$  是  $\mathbf{r}$  方向与  $z$  轴之间的夹角。函数  $f(\theta)$  称为散射振幅。通常它依赖于散射能量  $E$ ，并根据下式确定散射截面：

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = |f(\theta)|^2 2\pi \sin\theta d\theta, \quad (9.4)$$

其中  $0 < \theta < \pi$ 。正如我们即将展示的，当  $E \rightarrow 0$  时，散射振幅趋于一个常数值，独立于  $E$  和  $\theta$ ：

$$f(\theta)_{E \rightarrow 0} = -a. \quad (9.5)$$

量  $a$  称为 s 波散射长度，在低能散射过程中起着关键作用。其值由进入薛定谔方程(9.1) 的原子间势决定。结果(9.4) 适用于非全同粒子的散射，例如不同同位素的原子或占据不同态的原子。对于全同原子，波函数的轨道部分必须是对称或反对称的，这取决于两个粒子的总自旋是偶数还是奇数。相应地，散射截面取以下形式：

$$d\sigma = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 d\Omega, \quad (9.6)$$

其中  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ 。对于完全极化的玻色子，总自旋为偶数，因此在此方程中必须考虑正号。相反，对于完全极化的费米子，必须考虑负号。这意味着当  $E \rightarrow 0$  时，极化费米子的散射截面趋于零，而极化玻色子的总截面将趋近于值：

$$\sigma = 8\pi a^2. \quad (9.7)$$

为了计算散射振幅，必须将波函数按角动量  $l$  的值展开。此展开形式为：

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \frac{\chi_{kl}(r)}{kr}, \quad (9.8)$$

其中  $P_l$  是勒让德多项式，径向函数  $\chi_{kl}(r)$  满足方程：

$$\frac{d^2\chi_{kl}}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_{kl} + \frac{2m^*}{\hbar^2}[E - V(r)]\chi_{kl} = 0. \quad (9.9)$$

对于大距离  $r \gg r_0$ , 可以忽略(9.9) 中的相互作用以及离心项。此时方程的解具有一般形式:

$$\chi_{kl}(r) = A_l \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right), \quad (9.10)$$

其中  $\delta_l(k)$  是所谓的相移,  $k$  由方程(9.3) 给出。利用指数函数  $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$  按勒让德多项式的展开式, 即:

$$e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[ e^{ikr} - e^{-i(kr-\pi l)} \right], \quad (9.11)$$

并选择  $A_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$  以消除差式  $\psi - e^{ikz}$  中的因子  $e^{-ikr}$  (参见方程(9.2)), 容易得到结果:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1). \quad (9.12)$$

对于全同粒子, 只有  $l$  的偶数值或奇数值对散射截面(9.6) 有贡献, 这取决于双体波函数的对称性。

要显式计算相移  $\delta_l$ , 必须求解薛定谔方程(9.9)。对于满足条件

$$kr_0 \ll 1. \quad (9.13)$$

的低能解, 情况较简单。此时, 对于距离  $r \ll 1/k$ , 可以在方程(9.9) 中设  $E = 0$ 。我们将看到, 这个简化方程足以计算相移, 从而计算散射振幅(9.12)。让我们讨论最重要的  $l = 0$  情况, 其中简化方程形式为:

$$\frac{d^2 \chi_{k0}}{dr^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} V(r) \chi_{k0} = 0. \quad (9.14)$$

方程(9.14) 解的示意行为分别在图9.2(a,b) 中针对散射长度的正值和负值显示。方程(9.14) 的解应在区域

$$r_0 \ll r \ll \frac{1}{k}. \quad (9.15)$$

与渐近形式(9.10) 匹配。实际上, 在此区间内方程(9.10) 和(9.14) 均适用。在区域  $r \gg r_0$ , 可以忽略(9.14) 中的相互作用项, 解取线性形式:

$$\chi_{k0} = c_0(1 - \kappa r), \quad (9.16)$$

$\kappa$  的值明确依赖于势  $V(r)$  的选择。另一方面，如果  $kr \ll 1$ ，方程(9.10) 也可以展开，得到相同形式(9.16)，其中  $c_0 = e^{i\delta_0} \sin \delta_0$  且

$$\kappa = -k \cot \delta_0. \quad (9.17)$$

这使得我们可以从与  $k$  无关的方程(9.14) 出发确定相关的相移  $\delta_0$ 。注意，由

$$\kappa = - \left[ \frac{1}{\chi_{k0}} \frac{d\chi_{k0}}{dr} \right]_{r=0}. \quad (9.18)$$

满足的函数(9.10) 的匹配条件也可以表述为边界条件（Bethe and Peierls, 1935）的形式。当  $k \rightarrow 0$  时，方程(9.17) 给出相移  $\delta_0$  的线性律：

$$\delta_0 = -\frac{k}{\kappa}. \quad (9.19)$$

类似的研究表明，更高  $l$  值的相移表现为  $\delta_l \propto k^{2l+1}$ ，因此对散射振幅(9.12) 的低  $k$  行为贡献高阶项。总之，当  $k \rightarrow 0$  时，只有  $l = 0$  项保留下来，并且可以通过关系式

$$a = -\frac{\delta_0}{k} = \frac{1}{\kappa}. \quad (9.20)$$

识别散射长度(9.5)。因此，在区域(9.15) 内的波函数形式为：

$$\psi_{k0} = c_0 \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right). \quad (9.21)$$

上述考虑可以以不同形式呈现，这对许多应用很有用。不是施加边界条件(9.18)，而是可以用“赝势”替换真实的双体势  $V(r)$ ：

$$\hat{V}_{ps}(r) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m^*} \delta(\mathbf{r}) \frac{d}{dr} r. \quad (9.22)$$

事实上，容易验证波函数(9.21) 是方程：

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \hat{V}_{ps}(r) \right) \psi_{k0}(\mathbf{r}) = 0. \quad (9.23)$$

的解。确实， $\hat{V}_{ps}(r) \psi_{k0} = -c_0 2\pi\hbar^2 \delta(\mathbf{r}) / m^*$  且  $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ 。因此，使用赝势完全等价于施加边界条件(9.18)。

在第4章和第5章中，我们已经表明散射长度的值在玻色-爱因斯坦凝聚气体的物理中起着至关重要的作用，它是理论的临界相互作用参数。因此，

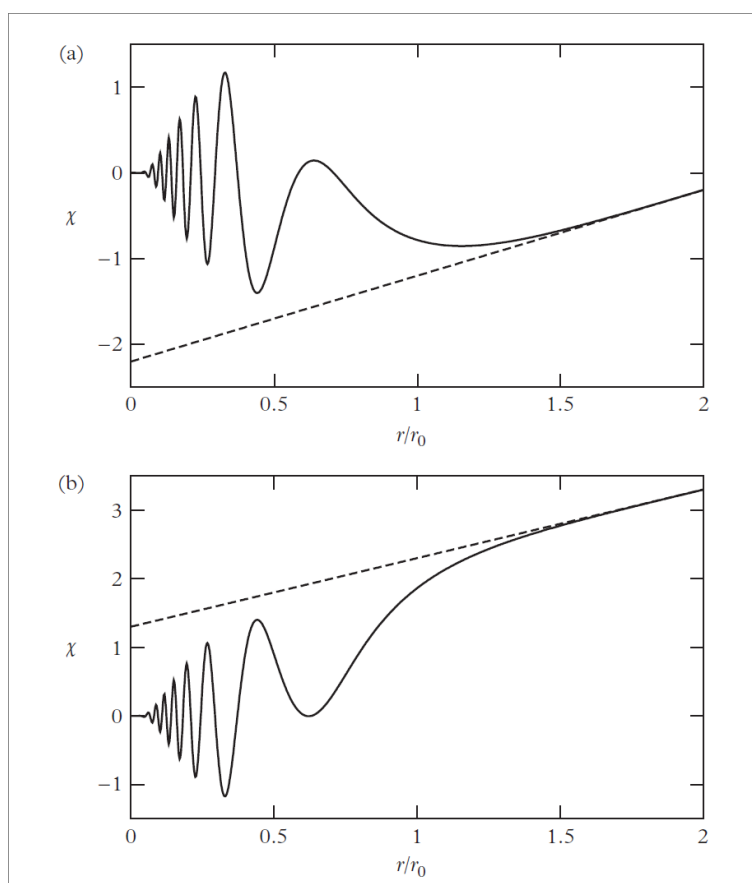


Figure 9.2: 散射问题 (9.14) 解的示意图行为。(a)和(b)中的曲线分别对应于散射长度的正值和负值。

基于直接实验测量了解其值非常重要。 $a$  的值可通过几种实验技术获得。这些包括基于束缚态分子和光缔合光谱的测量，以及基于弛豫现象研究的弹性截面 $8\pi a^2$  的更宏观测定（综述参见Dalibard, 1999 和Heinzen, 1999）。在低外场下，散射长度的值范围可以从非常小的值（如自旋极化氢中 $a$  约为玻尔半径量级）到相对较大的值（如 $^{87}\text{Rb}$  和 $^{23}\text{Na}$  中 $a$  约为几纳米量级）。在某些情况下散射长度为负值，如 $^7\text{Li}$  或 $^{85}\text{Rb}$ 。此外，正如我们稍后将讨论的，在某些情况下，可以利用费施巴赫共振的存在来调节 $a$  的值。这为操纵原子间相互作用提供了新的可能性。关于碱金属中散射长度的详尽讨论，包括三重态和单重态构型的区别，我们参考Heinzen (1999) 或Pethick and Smith (2008)。一份完整的最新综述，报告了大多数已研究原子种类和混合物的测量散射性质，可在Chin et al. (2010) 中找到。

一个有趣的情况是当两个碰撞原子在解离阈值正下方具有一个束缚态。在这种情况下，束缚态的径向波函数具有渐近形式（为简单起见，我们在此假设 $l = 0$  并设 $m_1 = m_2 = m$ ）：

$$\psi = A \frac{e^{-r\sqrt{m|\varepsilon|/\hbar}}}{r} \quad (9.24)$$

对于 $r \gg r_0$ ，其中 $\varepsilon < 0$  是束缚态的能量。如果条件

$$\frac{\sqrt{m|\varepsilon|}}{\hbar} r_0 \ll 1 \quad (9.25)$$

满足，则波函数(9.24) 在 $r \gg r_0$  的广泛 $r$  值区间内满足薛定谔方程(9.9)，在此区间势 $V$  可以安全忽略。通过重复上述相同的考虑，我们发现方程(9.24) 可以展开为形式(9.21)，从而得到识别 $a = \hbar/\sqrt{m|\varepsilon|}$ 。然后可以用散射长度表示结合能：

$$\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{ma^2}. \quad (9.26)$$

通常，如果 $a$  值很大，包括上述讨论的弱束缚态情况，散射振幅的能量依赖性即使在小的 $k$  下也很重要。根据s 波散射振幅的表达式 $f = (e^{2i\delta_0} - 1)/(2ik)$  和 $\cot \delta_0$  的结果(9.17)，我们得到关系式：

$$f = -\frac{1}{\kappa + ik}, \quad (9.27)$$

当 $\kappa = 0$  时，产生散射截面 $\sigma = 8\pi/k^2$  的发散行为（幺正极限）。实际上，方程(9.27) 仅提供了 $f^{-1}$  按 $(ik)$  幂级数展开的前两项。通常，下一项（量级

为 $k^2 \sim E$ ) 也可能很重要, 在这种情况下, 将散射振幅表示为以下形式是方便的:

$$f = -\frac{1}{m^{1/2}\beta(E - \varepsilon_0)/\hbar + ik}, \quad (9.28)$$

其中 $\beta$  和 $\varepsilon_0$  是参数, 其物理意义将变得清晰。如果能量 $\varepsilon_0$  为正且 $\beta$  足够大使得 $\beta^2\varepsilon_0 \gg 1$ , 则振幅在 $E = \varepsilon_0$  处具有强共振特征。在共振附近( $E \simeq \varepsilon_0$ ), 散射振幅可写为:

$$f \approx -\frac{\Gamma/2}{(m\varepsilon_0/\hbar^2)^{1/2}(E - \varepsilon_0 + i\Gamma/2)}, \quad (9.29)$$

其中量 $\Gamma = 2\varepsilon_0^{1/2}/\beta \ll \varepsilon_0$  是共振宽度。在这种情况下, 由(9.5) 定义的共振能量 $\varepsilon_0$  与散射长度 $a$  之间的关系不是由(9.26) 给出, 而是由表达式 $a = (\Gamma/2\varepsilon_0)(m\varepsilon_0/\hbar^2)^{-1/2} \ll (m\varepsilon_0/\hbar^2)^{-1/2}$  给出。在相反情况 $\beta^2|\varepsilon_0| \ll 1$  下, 可以忽略(9.28) 中的 $E$ , 我们恢复方程(9.27), 其中 $\kappa = -m^{1/2}\beta\varepsilon_0/\hbar$ , 包括对应于 $\varepsilon_0 < 0$  的情况(9.26)。

需要指出的是, 边界常数 $\kappa$  对原子间势的实际值以及外场的存在可能非常敏感。一个特别重要的情况是出现所谓的法诺-费施巴赫共振 (Fano-Feshbach resonance)。虽然费施巴赫的工作起源于核物理背景 (Feshbach, 1958, 1962), 但法诺 (Fano) 从原子物理背景处理了该问题 (Fano, 1961), 重新表述并扩展了他早期的工作 (Fano, 1935)。如今, 术语“费施巴赫共振”在文献中最为广泛地用于指代共振现象本身。在原子物理中引起费施巴赫共振的典型机制如图9.3所示。下线描述了在没有任何与闭通道 (上线) 耦合的情况下散射原子所感受到的势。在我们的情况下, 闭通道可以描述处于

不同自旋态 (与散射通道中考虑的自旋态不同) 的原子之间的相互作用。如果在两个通道中考虑的原子磁矩不同, 则可以通过改变外部磁场来连续调节两条曲线之间的相对位置。因此, 可以从束缚态位于阈值正下方 (图9.3a) 的情况转变为同一束缚态位于阈值正上方 (图9.3b) 的情况。这两种状态之间的转变发生在某个磁场值处, 以下表示为 $B_0$ 。在两个通道之间存在弱耦合 (例如由交换相互作用引起) 的情况下, 因此可以预期, 在低能下提供散射振幅行为的参数 $\kappa$  在束缚态存在时 (图9.3a) 为正, 在相反情况下为负。通过在 $B = B_0$  附近展开 $\kappa = 0$  并使用方程(9.20), 可以得到在共振附近散射长度的结果 $a \sim 1/(B - B_0)$ 。相反, 如果束缚态远离共

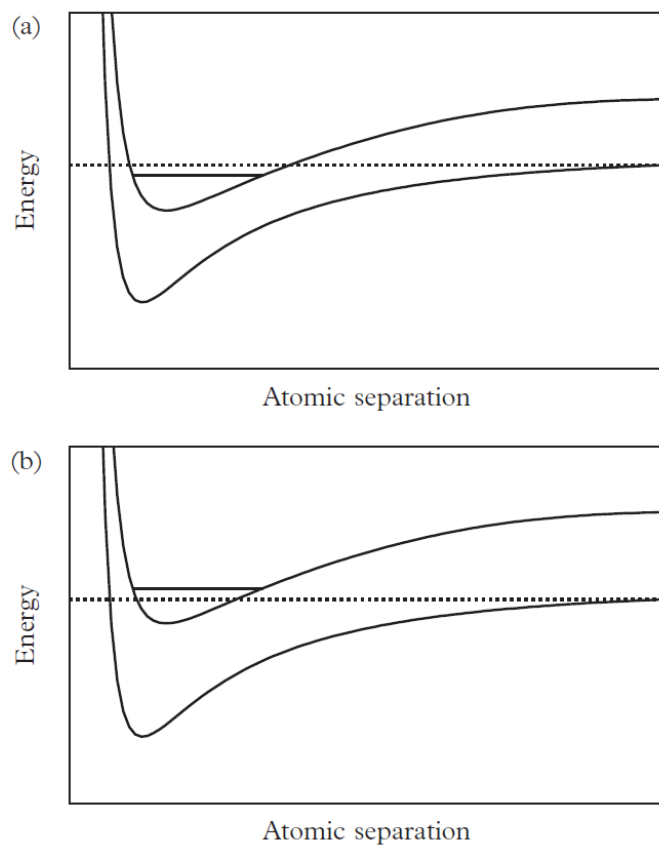


Figure 9.3: 引起费施巴赫共振的机制。下线描述给定自旋态下两个原子之间的散射势。上线代表不同自旋态下的相互作用势。通过用外部磁场调节两条曲线之间的相对位置，可以实现共振构型（见正文）。在(a)和(b)中，束缚态分别位于阈值正下方和正上方。

振，散射长度将取一个常数值 $\tilde{a}$ ，因此散射长度作为磁场的函数可以有效地参数化为形式：

$$a = \tilde{a} \left( 1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (9.30)$$

其中 $\Delta$  确定了共振的宽度。图9.4显示了Inouye等人（1998）在光学囚禁的Na原子BEC中观测到的费施巴赫共振。这个早期例子突出了费施巴赫共振的两个最显著特征：散射长度的可调性和共振区域内原子的快速损失。后者可归因于费施巴赫共振附近三体重组和分子形成的强烈增强。

到目前为止，我们主要考虑了散射过程中涉及两个全同粒子，但描述费施巴赫共振的机制也适用于处于不同内部态的原子，甚至适用于两种不同种类原子的情况。近年来，在单种、多组分和多种类原子中，一系列费施巴赫共振已在实验中被观察到。Chin等人（2010）报告了此类测量，提供了包括单种和混合物在内的完整情况。特别是，占据不同超精细态的费米子原子中费施巴赫共振的可用性，为实现强相互作用费米气体和研究BCS-BEC渡越（见第16章）铺平了道路。

并非所有原子或混合物天然拥有可用于调节散射长度的便利费施巴赫共振。共振的位置和宽度在某些情况下可能构成实验限制。另一种允许我们修改和精细调节原子间相互作用的机制可以通过改变系统的维度引入。沿一个或两个空间方向的强约束，在足够低的温度下，可以导致仅在这些方向上占据谐振子的基态，并通过调节约束势的振荡频率来移动费施巴赫共振的位置。该机制首先在理论上被预言（Olshanii, 1998），并在费米（Moritz et al., 2005）和玻色（Haller et al., 2010）系统的准一维几何中观察到。

在不同原子种类的混合物情况下，种类选择性的光学操控（LeBlanc et al., 2007）（见第9.4节）已导致实现了具有不同维度组分的系统，其相互作用由混合维度共振描述（Massignan et al., 2006; Nishida et al., 2008; Lamporesi et al., 2010）。

## 9.3 二维中的低能碰撞

现代实验技术允许创建冻结原子沿 $z$  方向运动的外场。在这种情况下，慢原子的散射具有二维性质，并且行为与三维情况非常不同。我们将在此

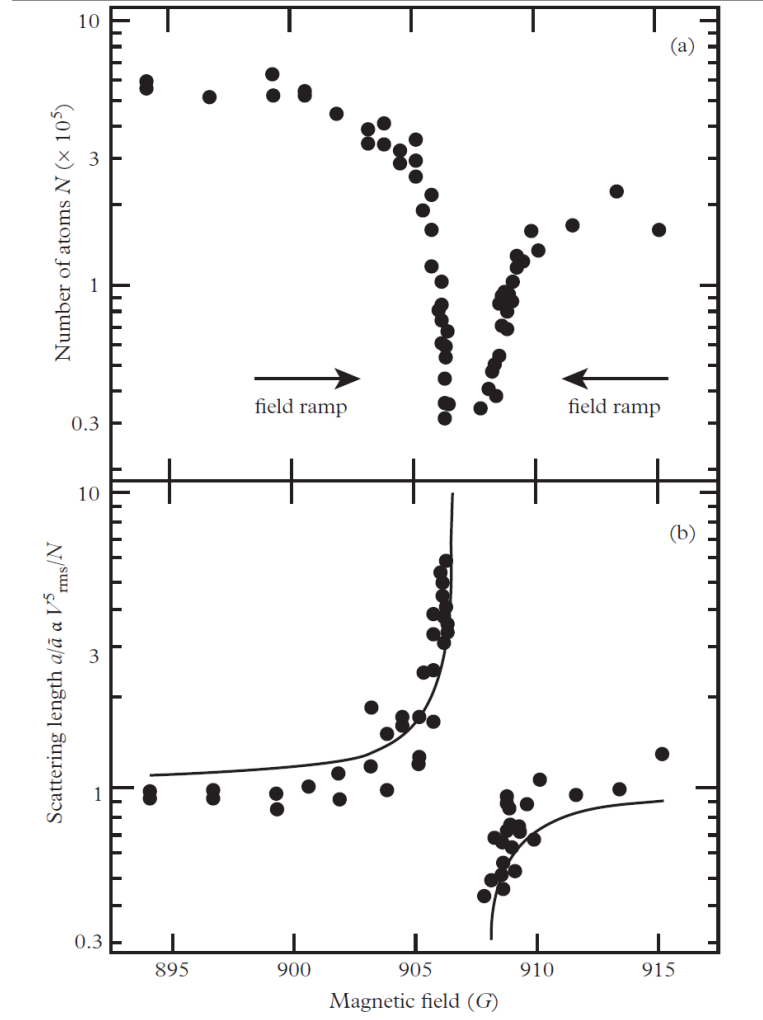


Figure 9.4: 在光学囚禁的Na原子BEC中观测到的磁调谐费施巴赫共振。上图显示在共振附近原子的强烈损失，这是由于增强的三体重组所致。下图显示散射长度 $a$ 的色散形状，在共振附近归一化到背景值 $\bar{a}$ 。磁场以G为单位，其中 $1\text{G} = 10^{-4}\text{T}$ 。来自Inouye et al. (1998)。经许可转载自*Nature*, **392**, 151; 1998, Macmillan Publishers Ltd。

简要介绍相应理论，该理论在条件

$$kr_0 \ll 1, \quad (9.31)$$

下成立，其中  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  是相对运动的二维波矢， $r_0$  是双体势的作用范围。散射问题需要求解方程(9.1)，其中  $\Delta$  是二维拉普拉斯算子，且  $\mathbf{r} \equiv \rho$  是  $x$ - $y$  平面中的径矢。波函数的渐近行为，对于  $\rho \gg 1/k$ ，可写为：

$$\psi(\rho) = e^{ikx} + f_{2D} \frac{e^{ik\rho}}{\sqrt{-i\rho}}. \quad (9.32)$$

函数  $f_{2D}(k, \varphi)$  具有二维散射振幅的含义， $\varphi$  是  $\mathbf{k}$  与  $x$  轴之间的夹角。注意在三维中，类似的渐近方程(9.2) 在较弱条件  $r \gg r_0$  下有效。分母中的因子  $\sqrt{-i}$  是为简化形式而引入的。类比三维方程(9.8)，可以将波函数表示为：

$$\psi = \sum_{m=-\infty}^{\infty} Q_l(\rho) e^{il\varphi}, \quad (9.33)$$

且低能散射由  $l = 0$  项主导。因此，散射振幅  $f_{2D}$  不依赖于角度，但与三维情况相反，它依赖于能量，我们将对此进行讨论。

为了找到满足条件(9.31) 的  $f_{2D}$  的极限方程，让我们考虑距离  $\rho \gg r_0$  上的波函数。考虑到低能散射解的各向同性，在(9.32) 中用自由运动二维方程的精确  $l = 0$  解替换函数  $e^{ik\rho}/\sqrt{-i\rho}$  是足够的：

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d\Phi}{dr} + k^2 \Phi = 0, \quad (9.34)$$

该解满足大  $\rho$  时的渐近行为  $e^{ik\rho}/\sqrt{-i\rho}$ 。满足此条件的波函数是：

$$\psi(\rho) = e^{ikx} + f_{2D} \sqrt{\frac{\pi k}{2}} i H_0^{(1)}(k\rho), \quad (9.35)$$

其中  $H_0^{(1)}(x)$  是汉克尔函数，且  $f_{2D}$  独立于  $\varphi$ 。使用小  $x$  展开：

$$H_0^{(1)}(x)_{x \rightarrow 0} = -i \frac{2}{\pi} \ln \frac{2i}{e^\gamma x}, \quad (9.36)$$

其中  $\gamma$  是欧拉常数，我们可以在区间  $r_0 \ll \rho \ll 1/k$  内将波函数表示为  $\psi \approx c_1 - c_2 \ln(kr)$ ，其中

$$c_1 = 1 + f_{2D} \sqrt{\frac{2k}{\pi}} \ln \frac{2i}{e^\gamma}, c_2 = f_{2D} \sqrt{\frac{2k}{\pi}}. \quad (9.37)$$

比率 $c_1/c_2$  由求解 $E = 0$  的二维薛定谔方程确定，类似于三维情况（见方程(9.14)）。设 $c_1/c_2 = \ln(ka_{2D})$ ，其中 $a_{2D}$  是一个具有长度量纲的正常数，称为二维散射长度。它是这样定义的：对于无限高二维势垒上的散射，长度 $a_{2D}$  等于势垒的半径。那么二维散射振幅取以下形式：

$$f_{2D}(k) = -\sqrt{\frac{\pi}{2k}} \frac{1}{\ln[2/(e^\gamma k a_{2D})] + i\pi/2}, \quad (9.38)$$

相应的总二维散射截面为：

$$\sigma_{2D} = 2\pi |f_{2D}|^2 = \frac{\pi^2}{k} \frac{1}{\ln^2[2/(e^\gamma k a_{2D})] + \pi^2/4}. \quad (9.39)$$

当 $ka_{2D} = 2e^{-\gamma}$  时，截面取最大值 $4/k$ 。这称为二维么正极限。然而，由于分母的对数依赖性，共振作为能量的函数非常平缓。

众所周知，如果双体势产生一个能量为 $\epsilon < 0$  的束缚态，则作为 $k$  函数的散射振幅在虚数值 $k = i\sqrt{2m^*|\epsilon|}$  处有一个极点，其中 $m^* = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  是两个相互作用粒子的约化质量。从(9.38) 可知，这种发散行为对应于结合能的以下表达式：

$$\epsilon = -\frac{2\hbar^2}{m^* (e^\gamma a_{2D})^2}, \quad (9.40)$$

相应束缚态的大小为 $e^\gamma a_{2D}/2$ 。

二维散射振幅的对数依赖性导致了相互作用耦合常数的新的行为，该行为将在稀薄二维量子气体的多体描述中使用。这个问题将在第23章讨论。

## 9.4 塞曼效应与磁囚禁

中性原子的磁囚禁基于使用非均匀磁场。为了理解这种囚禁机制，简要总结决定原子系统与外部磁场相互作用的自旋性质至关重要。为简单起见，我们关注碱金属原子（自旋 $S = 1/2$ ）的情况。碱金属的电子结构非常简单，因为除了外部价电子外，所有电子都占据闭合壳层。由于轨道角动量 $L$  在基态为零，总电子角动量 $J$  等于 $1/2$ 。核自旋 $I$  的值则取决于同位素种类。因为在碱金属中质子数是奇数，系统的量子统计性质由中子数决定。

如果中子数为偶数，则核自旋为奇数，原子是玻色子。另一方面，如果中子数为奇数，则核自旋为偶数，原子是费米子。相同的分类适用于氢原子及其同位素。电子自旋和核自旋之间的耦合产生总角动量：

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J} \quad (9.41)$$

原子的两种可能值：要么 $F = I - 1/2$ ，要么 $F = I + 1/2$ 。在表9.1中，我们列出了碱金属原子基态的量子数 $F$ 。在没有外部磁场的情况下，电子自旋

Table 9.1: 表9.1 碱金属原子基态的量子数。

atom	${}^6Li$	${}^7Li$	${}^{23}Na$	${}^{39}K$	${}^{40}K$	${}^{41}K$	${}^{85}Rb$	${}^{87}Rb$	${}^{133}Cs$
$I$	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	4	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{7}{2}$
$F$	$\frac{1}{2}; \frac{3}{2}$	1; 2	1; 2	1; 2	$\frac{7}{2}; \frac{9}{2}$	1; 2	2; 3	1; 2	3; 4

和核自旋之间的耦合（超精细耦合）可以消除两种构型的简并性。这种相互作用通常表示为 $H_{hf} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$ 形式，其中 $A$ 是相关的耦合常数。使用标准关系：

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}(F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)). \quad (9.42)$$

可以容易地表达 $H_{hf}$ 为量子数 $I, J$ 和 $F$ 的函数。哈密顿量 $H_{hf}$ 在两个超精细态 $F = I \pm 1/2$ 之间产生的能量分裂很容易计算，并由公式 $\Delta E = A(I + 1/2)$ 给出。典型值范围在1到10 GHz之间。

在存在外部磁场的情况下，我们必须将磁场的外部磁相互作用加到超精细相互作用上。这产生了总哈密顿量：

$$H = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + 2\mu_B J_z B, \quad (9.43)$$

其中 $\mu_B = |e|\hbar/2m_e$ 是玻尔磁子， $z$ 表示磁场方向。在方程(9.43)中，我们忽略了核磁矩与磁场相互作用的小贡献。由于未微扰态是 $\mathbf{J}^2$ 、 $\mathbf{I}^2$ 、 $\mathbf{F}^2$ 和 $F_z$ 的本征态，对于小磁场，我们得到原子与外部场之间相互作用能的以下结果：

$$E_B = \langle F, m_F | 2\mu_B J_z B | F, m_F \rangle = g_F \mu_B m_F B, \quad (9.44)$$

其中 $m_F$ 是 $F_z$ 的本征值，且

$$g_F = \frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} g_J \quad (9.45)$$

是超精细朗德因子，其中 $g_J$  是精细结构朗德因子（当 $L = 0$  且 $S = J = 1/2$  时 $g_J \simeq 2$ ）（Foot, 2005）。

对于任意磁场，(9.43) 的本征态和本征值应通过对角化确定。本征态将用量子数 $F$  和 $m_F$  标记。通过根据 $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = I_z J_z + (I_+ J_- + I_- J_+)/2$  用通常的升降算符表示 $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$ ，可以在基 $|m_I, m_J\rangle$ （其中 $-I \leq m_I \leq +I$  且 $m_J = \pm 1/2$ ）上容易地构造(9.43) 的矩阵元。

矩阵的对角化是直接的。让我们考虑相关情况 $I = 3/2$ 。具有 $F = 2$  和 $m_F = \pm 2$  的态简单地由 $|\pm 3/2, \pm 1/2\rangle$  给出，并且立即发现这些态的能量由下式给出：

$$E_{m_F=+2} = \frac{3}{4}A + \frac{1}{2}C \quad (9.46)$$

和

$$E_{m_F=-2} = \frac{3}{4}A - \frac{1}{2}C, \quad (9.47)$$

其中 $C = 2\mu_B B$ 。要计算其他态的能量，我们只需对角化 $2 \times 2$  矩阵。首先考虑具有 $m_J + m_I = 1$  的矩阵。该矩阵的基由 $|+3/2, -1/2\rangle$  和 $|+1/2, +1/2\rangle$  给出，相应的本征值为：

$$E_{m_F=+1} = -\frac{1}{4}A \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A+C)^2}. \quad (9.48)$$

具有 $m_J + m_I = -1$  的矩阵的本征值通过将 $C$  替换为 $-C$  简单地得到：

$$E_{m_F=-1} = -\frac{1}{4}A \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A-C)^2}. \quad (9.49)$$

最后，具有 $m_J + m_I = 0$  的矩阵的基由 $|+1/2, -1/2\rangle$  和 $|-1/2, +1/2\rangle$  给出。其对角化产生本征值：

$$E_{m_F=0} = -\frac{1}{4}A \pm \sqrt{A^2 + \frac{1}{4}C^2}. \quad (9.50)$$

在图9.5中，我们绘制了哈密顿量(9.43) 的八个本征值。在没有磁场的情况下（ $C = 2\mu_B B = 0$ ），八个能级分为两个超精细能级 $F = 2$  和 $F = 1$ ，能量分别为 $E = (3/4)A$  和 $-(5/4)A$ 。然而，在高磁场极限下，它们趋近于两个能级 $E = \pm\mu_B B$ 。还值得注意的是，占据不同磁态的原子之间的相互作用通常是不同的。散射长度的值实际上对原子间力的细节以及外部磁场的值敏感。

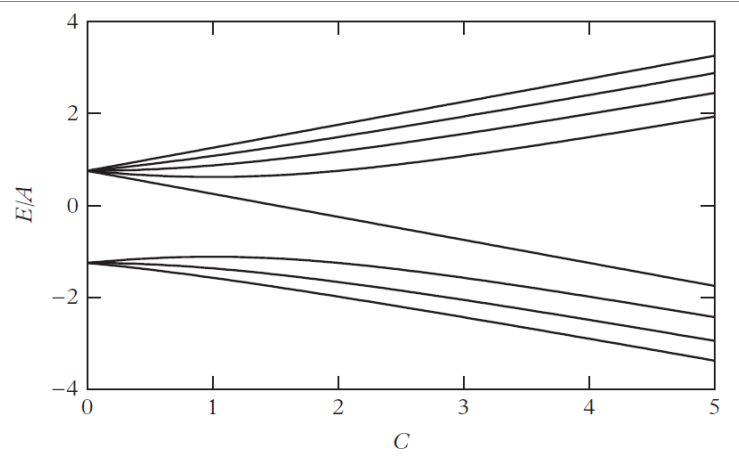


Figure 9.5:  $I = 3/2$  碱金属原子的超精细结构随磁场强度的变化。

碱金属所展现的丰富原子能级结构以及磁阱的可用性为原子操控开辟了重要的可能性。其中值得回顾的有以下几点：

\*在不同磁态中囚禁原子的可能性，允许实现在同一磁阱中同时囚禁不同种类的凝聚体的混合物。

\*在囚禁态和非囚禁态之间诱导跃迁的可能性（见下文讨论），从而控制蒸发机制以及凝聚体中原子的相干发射机制。

我们现在准备讨论由空间变化磁场产生的囚禁机制。我们将采用绝热近似，假设在原子参考系中看到的磁场方向变化发生的时间尺度远大于拉莫尔频率的倒数。这确保了原子将保持在相对于瞬时磁场方向的相同量子态。因此，如果给定量子态的能量随磁场增加而增加，那么处于该态的原子将被驱动朝向低磁场区域（低场寻求态）。另一方面，如果能量随磁场增加而减少，那么原子将被驱动朝向高磁场区域（高场寻求态）。根据结果(9.44)（它提供了在线性极限下与磁场的相互作用能），可以得出结论：低场寻求态是在 $F = 2$ 多重态中 $m_F = +2$ 和 $m_F = +1$ 的态（其中超精细朗德因子 $g_F$  (9.45) 为正），以及在 $F = 1$ 多重态中 $m_F = -1$ 的态（其中 $g_F$ 为负）。在最早的铷和钠实验中，分别使用态 $F = 2, m_F = +2$ 和 $F = 1, m_F = -1$ 来囚禁气体。有趣的是，相对于两个超精细能级 $F = 2$ 和 $F = 1$ 的朗德因子(9.45) 模值相等，但符号相反。这意味着态 $F = 2, m_F = +1$ 和 $F = 1, m_F = -1$ 具有相同的磁矩（见方程(9.44)），因此占据这些态的原子将感受到相同的约束势。

容易证明，静态磁场的模量在真空中不可能有最大值（Wing, 1984）。事实上，根据麦克斯韦方程导出的关系  $\nabla^2 B_i = 0$ ，可以推导出不等式：

$$\nabla^2 B^2 = 2 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( B_i \frac{\partial B_i}{\partial x_k} \right) = 2 B_i \nabla^2 B_i + 2 \left( \frac{\partial B_i}{\partial x_k} \right)^2 > 0. \quad (9.51)$$

这个一般性结果与最大值的存在不相容，后者要求对每个  $k$  有  $\partial B^2 / \partial x_k = 0$  和  $\partial^2 B^2 / \partial x_k^2 < 0$ 。这证明高场寻求态不能被磁囚禁，除非使用射频或微波缀饰（Hofferberth et al., 2006）。因此，在碱金属情况下，磁囚禁的良好候选态是态  $F = 2, m_F = +2, +1$  和  $F = 1, m_F = -1$ 。原则上，由于磁场的二阶效应， $F = 2, m_F = 0$  态也是一个低场寻求态。

让我们考虑线性四极阱的最简单情况。这是首个用于在碱金属中达到BEC区域的阱。该阱的特征是磁场在所有方向线性变化，可以通过两个线圈以“反亥姆霍兹”构型产生。磁场由简单定律给出：

$$\mathbf{B} = B'(x, y, -2z), \quad (9.52)$$

满足条件  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  和  $\text{curl } \mathbf{B} = 0$ 。磁场的强度在原点处有最小值，因此占据低场寻求态的原子将被驱动朝向中心，而占据高场寻求态的原子将被驱出阱外。

由于磁阱仅约束低场寻求态，如果原子跃迁到高场寻求态，它们将会损失。当磁场的值太小，以至于原子由于其运动不再能够绝热地跟随磁场方向时，就会发生这种情况。这些自旋跃迁被称为“马约拉纳”（Majorana）跃迁（Majorana, 1932）。在四极阱中，原子大部分时间花费在阱中心附近，那里磁场消失，这在低温下（此时气体尺寸很小）会产生严重后果。最终结果是，除非采取额外预防措施，否则四极阱在容纳BEC气体方面效率不高。第一个BEC的实验实现（在博尔德完成）实际上是通过在四极阱上叠加一个快速旋转的均匀磁场来实现的（Anderson et al., 1995）。相应的阱被称为TOP阱（Time-averaged Orbiting Potential trap）。TOP阱中的磁场形式为：

$$\mathbf{B} = (B'x + B_0 \cos \omega t, B'y + B_0 \sin \omega t, -2B'z), \quad (9.53)$$

其中  $B'$  是四极阱的径向梯度， $B_0$  是旋转偏置场的模量， $\omega$  是其角速度。角速度应远大于原子运动的典型频率，以便可以对  $B$  的模量取时间平均，

但同时应小于拉莫尔频率，以便原子磁矩在 $B$  瞬时方向上的投影保持恒定。 $\omega$  的典型值为几千赫兹。通过在短距离处展开(9.53) 的模量并取相应的时间平均 $\bar{B}$ ，可以找到结果：

$$\bar{B} \simeq B_0 + \frac{(B')^2}{4B_0} (x^2 + y^2 + 8z^2), \quad (9.54)$$

这明确显示磁场在阱中心不再消失，并且原子感受到的最终势（由 $g_F \mu_B m_F B$  给出，见方程(9.44)）是谐振的。

在MIT进行的第一个钠实验中使用了另一种避免马约拉纳自旋翻转跃迁的方法（Davis et al., 1995）。在这种情况下，添加了一个紧密聚焦的蓝失谐激光束，以将原子从四极阱中心排斥开。原子与激光场相互作用的机制将在下一节讨论。

现在可以构建不同类型的磁阱，它们借助静态偏置场产生谐振势，抑制马约拉纳跃迁，从而克服四极阱的困难。使用此类阱，可以产生不同对称性的有效势，包括雪茄形、三轴甚至接近球形的阱。此类阱中最著名的一种是所谓的约飞-普里查德阱（Ioffe-Pritchard trap）。该阱由三组线圈组成。第一组由两对平行于 $z$  轴、距其等距放置的线性棒提供。在轴线附近产生的磁场不依赖于 $z$ ，可描述为：

$$B_x = B'x, \quad B_y = -B'y, \quad (9.55)$$

前提是棒穿过 $x$  轴和 $y$  轴，并且相邻棒中的电流以相反方向流动。该场确保原子的径向约束。为了达到 $z$  方向的约束，必须添加一组辅助的所谓夹缩线圈（pinch coils）。假设这些线圈是同轴的，并放置在距原点相同距离处。它们具有相同的半径并承载相同的电流。这些线圈在原点附近产生的磁场由 $B_z = B_0 + (B''/2)(z^2 - r^2/2)$  和 $B_r = -(zr/2)B''$  给出，其中 $z$  和 $r$  是柱坐标。第三对线圈（偏置线圈）的半径比夹缩线圈大，并产生一个实际上均匀的场，允许改变恒定分量 $B_0$  而不干扰二次项。假设偏置场 $B_0$  为正且足够大，可以计算 $B = |B|$  到 $z$  和 $r$  的二次项。结果为：

$$B = B_0 + \frac{1}{2}B''z^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{B'^2}{B_0} - \frac{B''}{2}\right)r^2. \quad (9.56)$$

然后，可以通过改变偏置场 $B_0$  的值来方便地控制阱的形状。

这里提到的所有磁阱通常在实验室中使用尺寸为几十厘米的线圈实现，放置在真空系统外部。以实现小型化和实现可运输的基于原子的设备为目标，在2000年代初（Hensel et al., 2001）首次在芯片上实验实现了BEC。最早的微阱产生了kHz范围内非常强的谐振约束，有可能接近准一维区域。

## 9.5 与辐射场的相互作用及光阱

原子与激光场的相互作用在玻色-爱因斯坦凝聚体的操控中起着至关重要的作用，并为原子气体的约束提供了丰富的新可能性，丰富了磁囚禁已有的性能（一般综述参见，例如，Grimm et al. (2000)）。这种相互作用可以在偶极近似下以高精度处理，因为激光辐射的波长远大于典型的原子尺寸。在偶极近似下，相互作用可以写为：

$$V(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (9.57)$$

其中 $\mathbf{d}$ 是单个原子的电偶极算子，且

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + c.c. \quad (9.58)$$

是一个以频率 $\omega$ 振荡的时变电场。相互作用(9.57)在原子电子结构中诱导出偶极极化，该极化以辐射场的相同频率振荡：

$$\langle \mathbf{d} \rangle = \alpha(\omega)(\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + c.c.), \quad (9.59)$$

其中

$$\alpha(\omega) = \hbar^{-1} \sum_n |\langle n | \mathbf{d} \cdot \hat{\epsilon} | 0 \rangle|^2 \frac{2\omega_{n0}}{\omega_{n0}^2 - (\omega + i\eta)^2} \quad (9.60)$$

是偶极动态极化率， $\hat{\epsilon}$ 是电场方向的单位矢量。极化产生系统能量的变化（斯塔克移动），这可以使用二阶微扰理论计算。这种能量变化可被视为每个原子感受到的一个有效势：

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \alpha(\omega) \overline{\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t)}, \quad (9.61)$$

其中横线表示时间平均。势的时间平均是合理的，因为激光场(9.58)的时间变化远快于原子运动的典型频率。在推导(9.61)时，我们假设了线性响

应理论的适用性，并且 $\alpha(\omega)$  是一个实数量。这意味着 $\omega$  不应太接近原子共振（那里吸收过程变得重要）。研究吸收效应需要显式包含 $\alpha$  的虚部。

与磁相互作用能(9.44)（由于原子的固有磁矩，它与 $B$  呈线性关系）相反，电相互作用能(9.61) 与 $E$  呈二次关系，这是原子偶极极化率的结果。还要注意，不应将（涉及单个原子电子自由度的）线性响应函数(9.60) 与第7章引入的响应函数混淆，后者涉及系统的原子自由度。

如果辐射场的强度随位置变化，则能量变化(9.61) 产生一个力：

$$\mathbf{f} = \alpha(\omega) \nabla \frac{E^2(\mathbf{r}, t)}{2}, \quad (9.62)$$

该力影响原子的运动。力的行为关键取决于辐射强度 $E^2(\mathbf{r}, t)$  的空间分布以及激光频率的确切值。为了理解后者的影响，让我们假设偶极极化率(9.60) 由单个共振频率 $\omega_R$  主导。在这种情况下， $\alpha$  的值关键取决于所谓的失谐 $\delta = \omega - \omega_R$ （激光频率与共振频率之差）的值，并且在共振附近（ $|\delta| \ll \omega_R$ ），极化率表现为 $\alpha(\omega) = |\langle R | \mathbf{d} \cdot \hat{\epsilon} | 0 \rangle|^2 / \hbar(\omega_R - \omega)$ ，其中 $|R\rangle$  是共振态。失谐应较小以强调偶极力效应，但不应太小，否则吸收过程变得重要。失谐的符号至关重要。事实上，如果 $\delta > 0$ （蓝失谐），能量变化(9.61) 为正，激光场将迫使原子移向低场区域（排斥效应）。另一方面，如果失谐为负（红失谐），原子将被吸引向较高电场区域。我们已在前一节中提到，具有蓝失谐的辐射场的相互作用在MIT的第一个实验中被用于将原子从四极阱中心排斥开。在随后的实验中，红失谐被用来提供玻色-爱因斯坦凝聚体的光学约束（光阱）。

光阱提供了磁囚禁的有用替代方案（Stamper-Kurn et al., 1998a）。它们通常可以更紧致，并在不同方向的囚禁频率选择上提供更大的自由度。这使得实现低维系统和在实验上探索新的有趣现象成为可能。

实际上，无需使用磁囚禁即可在光阱中实现BEC（Barrett et al., 2001）。光阱具有许多优点。囚禁不限于特定磁态，因此可用于研究多自旋分量的共存（包括强场寻求态）以及可能出现的新磁相。另一个有趣的机会有通过添加磁场来调节散射长度的值。在特殊条件下，由于费施巴赫共振的出现（如第9.2节所述），原子间的相互作用会变得对施加的磁场值极其敏感。这些调制已借助光阱成功实现。与激光场的相互作用允许对玻色-爱因斯坦凝聚体进行许多其他操控。例如，它们可用于构建盒阱、低维

阱、原子导引、光晶格、旋转阱等。作为一个说明性例子，我们展示辐射场产生的偶极力如何用于产生光学晶格。如果辐射场沿 $z$ 方向被反射以产生形式为：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E \cos(qz) e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad (9.63)$$

的驻波，则时间平均有效场(9.61) 取形式：

$$U(\mathbf{r}) = -\alpha(\omega) E^2 \cos^2(qz), \quad (9.64)$$

(9.64) 对应于沿 $z$ 方向的周期性势，波长为 $2\lambda$ ，其中 $\lambda = 2\pi/q$ 是激光场的波长。该周期性势叠加在磁阱上，如果其强度足够高，可以产生凝聚体阵列。现在可以产生一维、二维和三维光学晶格。这使得研究具有高度物理意义的新构型成为可能。

使用两个轻微失谐激光场的组合可以实现与激光场相互作用的其他有趣应用。在这种情况下，产生一个时间依赖的势，其频率由两个激光器之间的失谐固定。由此产生的时间依赖势可用于在气体中产生动态激发，从而研究系统的动态响应（见第12.9节）。