

玻色爱因斯坦凝聚读书笔记

大白菜

2018-1-15

目录

1 玻色爱因斯坦凝聚的基础	5
1.1 全同粒子的不可区辩性	5
1.2 均匀系统中的理想玻色气体	6

Chapter 1

玻色爱因斯坦凝聚的基础

1.1 全同粒子的不可区别性

全同粒子不可分辨性在量子统计里占据了主导地位. 整数 (半整数) 自旋粒子 (\hbar 的整数或半整数倍) 叫做玻色子 (费米子). 玻色子服从 Bose-Einstein 统计, Bose-Einstein 统计对单粒子占据数没有要求. 费米子服从 Fermi-Dirac 统计, Fermi-Dirac 统计要求单粒子态只能占据一个粒子. 全同玻色子 (费米子) 的多体波函数在交换任意两个单粒子时一定是对称的. 对称性急剧的减少了系统可行的量子态数目, 在低温下导致了高度非经典的现象. 为了理解这点, 假设我们通过求解薛定谔方程得到一个二粒子系统的波函数 $\Phi(\xi_1, \xi_2)$, 其中 ξ_1 和 ξ_2 代表二粒子的空间坐标和可能的自旋坐标. 对于理想玻色子 (费米子), 对称 (反对称) 波函数为

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi(\xi_1, \xi_2) \pm \Phi(\xi_2, \xi_1)] \quad (1.1)$$

其中加号 (减号) 对应的是玻色子 (费米子). 两个粒子在 ξ_1, ξ_2 处的联合概率为

$$|\Psi(\xi_1, \xi_2)|^2 = \frac{1}{2}\{|\Phi(\xi_1, \xi_2)|^2 + |\Phi(\xi_2, \xi_1)|^2 \pm 2\text{Re}[\Phi^*(\xi_1, \xi_2)\Phi(\xi_2, \xi_1)]\} \quad (1.2)$$

其中 Re 表示实部. 由于方程 ((1.2)) 中的最后一项是干涉项, 在相同坐标找到两个全同玻色子的概率 $|\Psi(\xi, \xi)|^2$ 是 $|\Phi(\xi, \xi)|^2$ 的两倍, $|\Phi(\xi, \xi)|^2$ 是可分辨粒子对应相同点找到的概率. 相反地, 对于费米子, $|\Psi(\xi, \xi)|^2$ 趋于 0 (Pauli 不相容原理).

当玻色子数目变得足够大时, 玻色子这样的集体效应变得越来越明显. 对于 N 粒子玻

色系统, 对称波函数是

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_N)} \Phi(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \dots, \xi_{i_N}) \quad (1.3)$$

其中求和遍历所有的 i_1, i_2, \dots, i_N 的排列 $N!$. 在相同坐标找到所有 N 个粒子的联合概率是可分辨玻色子概率 $|\Phi(\xi, \xi, \dots, \xi)|^2$ 的 $N!$ 倍.

$$|\Psi(\xi, \xi, \dots, \xi)|^2 = N! |\Phi(\xi, \xi, \dots, \xi)|^2 \quad (1.4)$$

只有当玻色子的波包相互交叠的时候, 这个概率振幅的干涉项才是有效的. 在温度为 T 时, 每一个波包有一个空间宽度¹ $\Delta x \sim \hbar / \sqrt{M k_B T}$, 其中 M 是玻色子的质量, k_B 是玻尔兹曼常数. 通过让 Δx 等于粒子间的平均距离 $n^{-1/3}$, 我们能估计 Bose-Einstein 凝聚的相变温度 T_0 , 其中 n 是粒子数密度

$$k_B T_0 \sim \frac{\hbar^2}{M} n^{2/3} \quad (1.5)$$

在方程 ((1.4)) 中, 由于 $N!$ 倍的增强, 低于 T_0 时大量的粒子数凝聚在单粒子态上. 当 N 是一个宏观的数量时, 这种凝聚开始变得突出, 赋予了 BEC 一个明显的量子相变特征. 用 $n = N/V$ 替换 ((1.5)) 得到

$$k_B T_0 \sim \frac{\hbar^2}{M V^{2/3}} N^{2/3} \quad (1.6)$$

其中 V 是系统的体积, 而 $\hbar^2 / (M V^{2/3})$ 给了基态和第一激发态的带隙. 低于 $T_{cl} \sim \hbar^2 / (k_B M V^{2/3})$ 经典粒子将会凝聚在基态. 方程 ((1.6)) 展示了 BEC 发生在一个相当高的温度; 进一步说, 这个大的倍数因子 $N^{2/3}$ 可归功于之前讨论的干扰项.

1.2 均匀系统中的理想玻色气体

粒子系统的巨配分函数 Ξ 可以用哈密顿算符 \hat{H} 和粒子数算符 \hat{N} 表示成

$$\Xi = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \quad (1.7)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$, Tr 表示求迹, 化学势 μ 作为拉格朗日乘子, 由粒子的平均值确定

对于理想的全同玻色子, 色散关系为 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}$

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k}} \quad (1.8)$$

¹ $\Delta p \sim p \sim \sqrt{ME} = \sqrt{M k_B T}$, $\Delta x \Delta p \sim \hbar / \sqrt{M k_B T}$

其中 $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ 表示波矢为 \mathbf{k} 的粒子数算符. 把(1.8)代入(1.7)得到

$$\begin{aligned}\Xi &= \text{Tre}^{-\beta \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k}'}} \\ &= \sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \langle n_{\mathbf{k}} | e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}'} (\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k}'}} | n_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \prod_{\mathbf{k}} e^{-\beta (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) n_{\mathbf{k}}}\end{aligned}\quad (1.9)$$

方程 ((1.9)) 是一个几何级数, 收敛条件为 $e^{-\beta (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} < 1$. 由于 $\epsilon_{\mathbf{k}} \geq 0$, 可知

$$\mu < 0 \quad (1.10)$$

这样方程(1.9)可以计算出结果

$$\Xi = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})}}$$

由巨配分函数可以计算出巨热力势

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})}) = \sum_{\mathbf{k}} \Omega_{\mathbf{k}} \quad (1.11)$$

其中

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\beta} \ln(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})}) \quad (1.12)$$

波矢为 \mathbf{k} 的粒子数²为

$$\bar{n}_{\mathbf{k}} = -\frac{\partial \Omega_{\mathbf{k}}}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \quad (1.13)$$

这正是 Bose-Einstein 分布函数. 玻色子总数的平均值可以表示为

$$N = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \quad (1.14)$$

对于给定的 N , μ 由满足上式 ((1.14)) 来决定.

$$\begin{aligned}dU &= TdS - pdV + \mu dn \\ dH &= TdS + Vdp + \mu dn \\ dF &= -SdT - pdV + \mu dn \\ dG &= -SdT + Vdp + \mu dn \\ d\Omega &= -SdT - pdV - nd\mu \\ \Omega &= F - \mu n = F - G = -pV\end{aligned}$$

在 $N, V \rightarrow \infty$, N/V 保持不变的热力学极限下, 对 \mathbf{k} 的求和可以做下列替换

$$\sum_{\mathbf{k}} \mapsto \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad (1.15)$$

方程 ((1.14)) 可表为

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} \quad (1.16)$$

当温度逐渐下降, 而 N/V 保持常数, μ 会逐渐增加最终在 T_0 点变为 0. 将 $\mu = 0$ 和 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 代入方程 ((1.16)) 得到

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{(Mk_B T_0)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx \\ &= \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{Mk_B T_0}{2\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = 2.612 \left(\frac{Mk_B T_0}{2\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned} \quad (1.17)$$

其中 $\zeta(x)$ 是黎曼 zeta 函数, 此外还用了下列公式

$$\int_0^\infty \frac{x^{a-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(a)\zeta(a), \quad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (1.18)$$

根据方程(1.17)BEC 相变点温度 T_0 为

$$k_B T_0 = \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{M} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = 3.31 \frac{\hbar^2}{M} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (1.19)$$

这与方程 ((1.5)) 一致. 对于 $T < T_0$, 玻色子的非零部分应该保持在基态, 凝聚在最低能量态上. 对于 $T < T_0$ 情况, 替换 ((1.15)) 仅仅只能用于粒子能量为正数 ($\epsilon > 0$) 的那部分, 由于 \sqrt{x} 在被积函数分子上, 粒子能量为 0 ($\epsilon = 0$) 的部分对积分没有任何贡献. 从方程 ((1.17)) 我们可以看到, T_0 依赖于粒子数密度 N/V

$$\frac{N}{V} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{Mk_B T_0}{2\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.20)$$

对于 $T < T_0$, 我们有

$$\frac{N_{\epsilon>0}}{N} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{Mk_B T}{2\pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.21)$$

从方程 ((1.20)) 和 ((1.21)) 可以得到

$$\frac{N_{\epsilon>0}}{N} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.22)$$

这个值表示的是正常组分, 因此凝聚体组分是

$$\frac{N_{\epsilon=0}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.23)$$

BEC 发生在玻色子的德布罗意波相互交叠的时候, 也就是说当量子简并发生的时候. 德布罗意热波长定义为

$$k_B T = \frac{1}{2\pi M} \left(\frac{h}{\lambda_{th}} \right)^2 \mapsto \lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2\pi M k_B T}} \quad (1.24)$$

这里 λ_{th} 表征单独的玻色子波包的空间延展. 将上式代入方程 ((1.20)) 得到

$$n\lambda_{th}^3 = \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \simeq 2.612, \quad T = T_0 \quad (1.25)$$