

第五章 波色系统：波色-爱因斯坦凝聚

5.1 理想波色气体中的波色-爱因斯坦凝聚

回忆我们在前面获得的理想波色气体的物态方程：
$$\begin{cases} \frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \ln(1-z) \\ \frac{1}{v} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \end{cases}$$

这里比容 $v = V/N$, 平均热波长 $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$. 逸度 z 的定义为 $z = e^{\beta\mu}$, 其中 μ 为化学势。对波色气体, 我们有: $0 \leq z \leq 1$, $0 \leq z$ 由定义知显然成立; $z \leq 1$ 可由动量为 0 的态的平均占据数 $\langle n_0 \rangle = z/(1-z) \geq 0$ 确定。函数 $g_n(z)$ 一般地由下式确定:

$$g_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^n}.$$

当 z 取 0 至 1 的值时, $g_n(z)$ 是 z 的正的单调递增有界函数 (注意在费米系统里 z 可取任意大于 0 的值)。对于 $n > 1$ 有:

$$g_n(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} = \zeta(n) \quad (n > 1)$$

这是黎曼 Zeta 函数。当 $n \leq 1$, $g_n(1)$ 发散。容易发现 $g_{3/2}(z) \leq g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) = 2.612\dots$

• 产生凝聚的条件:

把比容的方程改写为: $\lambda^3 \frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{\lambda^3}{v} - g_{3/2}(z)$. 凝聚要求 $\frac{\langle n_0 \rangle}{V} > 0$. 当 $\frac{\lambda^3}{v} > g_{3/2}(1)$ 时, 这必然成立。这样系统可看作两个热力学“相”的混合, 一个相由动量为零的粒子组成, 另一个由动量不为零的粒子组成。

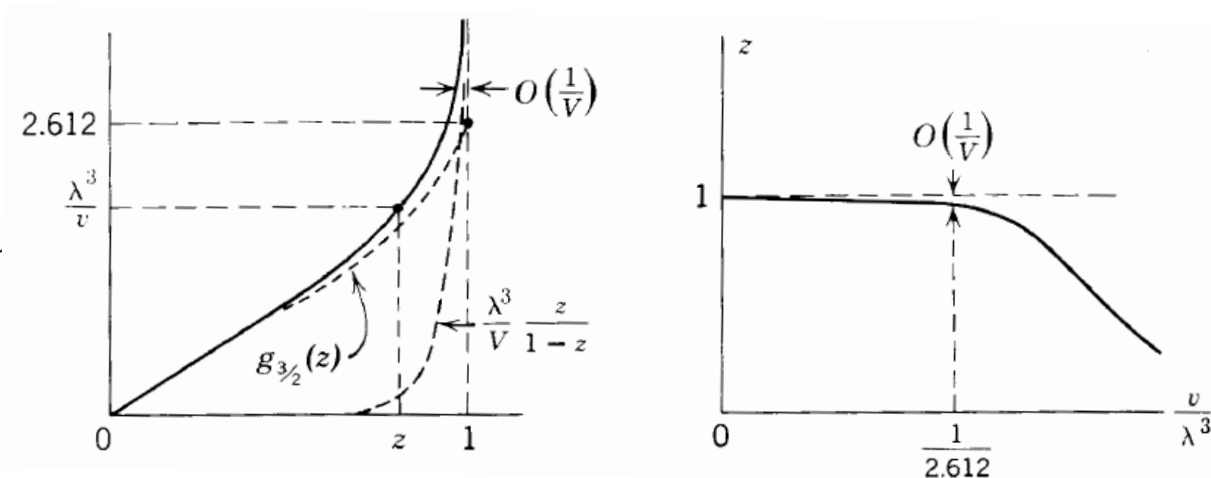
分割面方程由 $\frac{\lambda^3}{v} = g_{3/2}(z) \leq g_{3/2}(1)$ 确定, 由此可得临界温度 T_c 和临界比容 v_c (固定温度 T 时):

$$\frac{\lambda_c^3}{v} = g_{3/2}(1) \quad \text{or} \quad k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m[v g_{3/2}(1)]^{2/3}}, \quad v_c = \frac{\lambda^3}{g_{3/2}(1)}.$$

当 $T < T_c$ (v 一定) 或 $v < v_c$ (T 一定) 时, 将产生波色-爱因斯坦凝聚。即低温和高密度是产生波色-爱因斯坦凝聚的条件, 有凝聚时粒子的平均热波长与粒子平均间距有相同的数量级。

• 大V极限下的易逸度z:

右图1为比容物态方程的图形解，图2展示固定v时z和 λ^3/v 的关系。



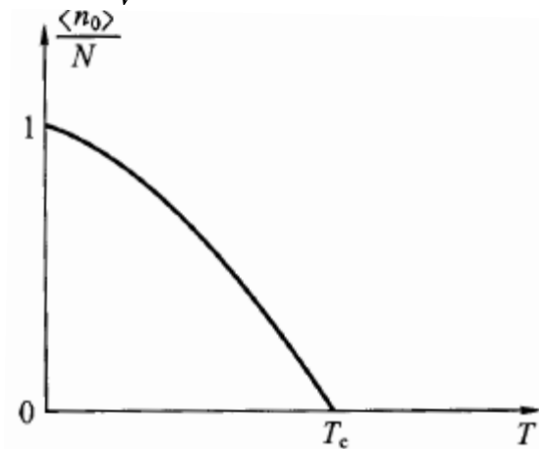
对宏观系统来说我们更关心体积V趋于无穷大的极限情形。由上面的图形解可知在大V极限下我们有：

$$z = \begin{cases} 1, & \left(\frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \right) \\ \text{the root of } g_{3/2}(z) = \lambda^3/v, & \left(\frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \right) \end{cases}$$

• 填布数 $\langle n_0 \rangle$ 与温度和比容的关系（大V极限下）：利用 $\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{\langle n_0 \rangle}{V}$ 和上面的结果可得：

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} = 1 - \frac{v}{v_c}, & \left(\frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \right) \\ 0, & \left(\frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \right) \end{cases}$$

粒子在**动量空间**里凝聚。T=0时所有粒子都占据p=0态。



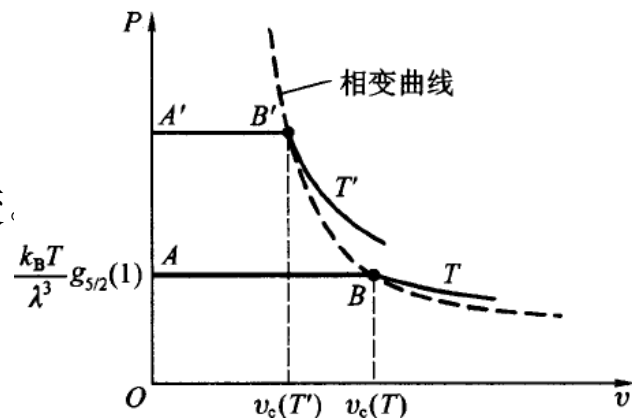
• 物态方程：压强方程中的第二项可忽略，因 $-\frac{1}{V} \ln(1-z) = -\frac{1}{V} \ln \frac{1}{\langle n_0 \rangle + 1}$ ，它最多是 $N^{-1} \ln N$ 的量级，对大系统可忽略。因此物态方程为

$$\frac{P}{k_B T} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z), & v > v_c; \\ \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & v \leq v_c. \end{cases}$$

物态方程在 $v = v_c$ 连续，但其导数不连续，因此相变为一級相变。

• 其它热力学量：应分为两段讨论，如内能：

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} P v = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{k_B T v}{\lambda^3} g_{5/2}(z), & v > v_c; \\ \frac{3}{2} \frac{k_B T v}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & v \leq v_c. \end{cases}$$



熵：

$$\frac{S}{N k_B} = \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln z, & v > v_c; \\ \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & v \leq v_c. \end{cases}$$

定容比热：

$$\frac{C_V}{N k_B} = \begin{cases} \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}, & v > v_c; \\ \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & v \leq v_c. \end{cases}$$

在 $T=0$ 附近我们有 $C_V \sim T^{3/2}$ ，这与光子和声子的行为不同，原因是它们的能谱不同。而在 T_c 处比热是连续的（因 $g_{1/2}(1)$ 发散），比热的导数不连续。

5.2 非理想波色气体中的波色-爱因斯坦凝聚

考虑 N 个无自旋波色粒子组成的稀薄气体系统，体积为 V ，系统处于低温且相互作用为二体碰撞。在一级近似下，系统哈密顿量修正近似为散射长度 $a > 0$ 的排斥势的一级项：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1} \nabla_i^2 + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j).$$

这里我们把势能项看作微扰。

设无微扰波函数（自由粒子系统波函数）为 $\Phi_n = \{\dots, n_p, \dots\}$ ，其中 n_p 为单粒子态中粒子的填布数。在一级近似下，系统能量为：

$$\begin{aligned} E_n &= (\Phi_n, \hat{H} \Phi_n) = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left(\Phi_n, \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Phi_n \right) \\ &= \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} \left(N^2 - \frac{1}{2} \sum_p n_p^2 \right) \end{aligned}$$

成立条件为 $a/v^{1/3} \ll 1, ka \ll 1$ ， \mathbf{k} 为一对粒子的相对波矢， a 是散射长度。即粒子只能激发到动量较小的态。

在基态，我们让 $n_0 = N$ ，其它所有 n_p 为零，基态能量为： $\frac{E_0}{N} = \frac{2\pi a \hbar^2}{mv} = \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 2\pi a \rho$ ， $\rho = \frac{Nm}{V} = \frac{m}{v}$ 而低激发态能级同时含有连续谱和分立谱。在极低温下，只有少量粒子激发，能量表达式可进一步近似为：

$$E_n = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} \left(N^2 - \frac{1}{2} n_0^2 \right).$$

下面我们要找到物态方程。我们考虑极低温的情况，即 $a/\lambda \ll 1, a\lambda^2/v \ll 1$ ，并用 \mathbf{n} 代表 $\{n_p\}$ ，能量的动能部分记为 $\varepsilon_n = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p$ ，记 $\xi \equiv n_0/N$ ，配分函数为：

$$Z_N \equiv \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta \varepsilon_n} e^{-N \left(\frac{a\lambda^2}{v}\right) (2-\xi^2)} = Z_N^{(0)} \langle e^{-N \left(\frac{a\lambda^2}{v}\right) (2-\xi^2)} \rangle_0$$

其中 $Z_N^{(0)}$ 为理想波色气体的配分函数。 $\langle \dots \rangle_0$ 是对理想波色气体的统计平均。

每个粒子的自由能为:

$$\frac{F}{N} = \frac{F^{(0)}}{N} - \frac{k_B T}{N} \ln \left\langle e^{-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2)} \right\rangle_0 \approx \frac{F^{(0)}}{N} + k_B T \frac{a\lambda^2}{v} \langle (2 - \xi^2) \rangle_0 = \frac{F^{(0)}}{N} + \frac{4\pi a \hbar^2}{mv} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \xi^2 \rangle_0 \right)$$

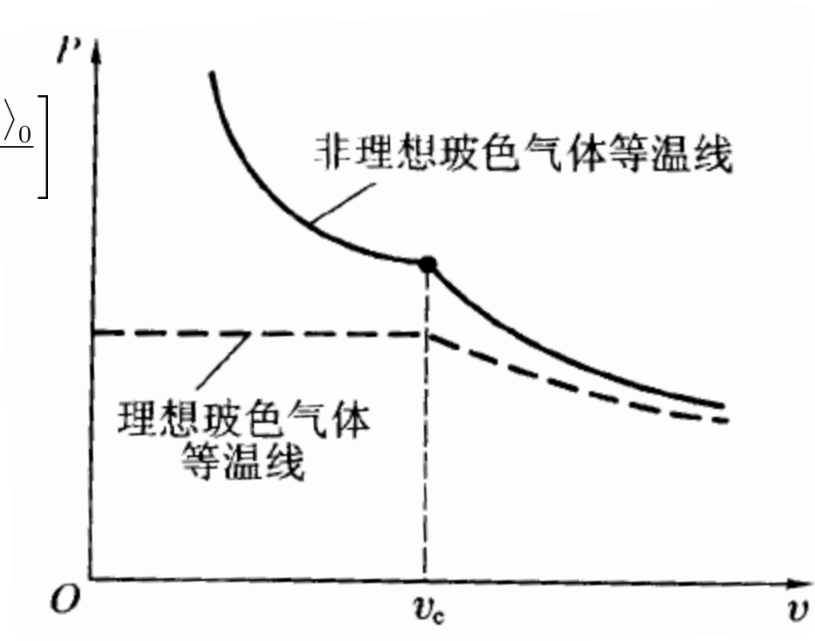
压强可由自由能得到:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial v} \right)_{T, N} = P^{(0)} + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left[\frac{1}{v^2} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \xi^2 \rangle_0 \right) + \frac{1}{2v} \frac{\partial \langle \xi^2 \rangle_0}{\partial v} \right]$$

注意到对理想玻色气体有: $\langle n_0^2 \rangle_0 - \langle n_0 \rangle_0^2 = \langle n_0 \rangle_0$
作近似 $\langle \xi^2 \rangle_0 \approx (\langle \xi \rangle_0)^2 = \xi^2$ 后可得:

$$P = \begin{cases} P^{(0)} + \frac{4\pi a \hbar^2}{mv^2} & (v > v_c, T > T_c) \\ P^{(0)} + \frac{2\pi a \hbar^2}{m} \left(\frac{1}{v^2} + \frac{1}{v_c^2} \right) & (v < v_c, T < T_c) \end{cases}$$

因此这个相变在当前的近似下是二级相变。



在一级近似下，系统能量的推导：

以填布数 $\{n_p\}$ 表示的波色系统对称波函数可写为（ \mathbf{P} 表示置换操作）：

$$\Phi_n(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} \sum_{\mathbf{P}} \delta_{\mathbf{P}} [u_{P\alpha_1}(1)u_{P\alpha_2}(2) \cdots u_{P\alpha_N}(N)]$$

$$\begin{aligned} \text{因此 } (\Phi_n, \Omega \Phi_n) &= \frac{N(N-1)}{2N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!} \sum_{\mathbf{P}} \sum_{\mathbf{P}'} \int d^{3N}r [u_{P\alpha_1}^*(1)u_{P\alpha_2}^*(2) \cdots u_{P\alpha_N}^*(N)] v_{12} [u_{P'\alpha_1}(1)u_{P'\alpha_2}(2) \cdots u_{P'\alpha_N}(N)] \\ &= \frac{N(N-1)}{2N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!} \sum_{\mathbf{P}} \sum_{\mathbf{P}'} \langle P\alpha_1, P\alpha_2 | v | P'\alpha_1, P'\alpha_2 \rangle (\delta_{P\alpha_3, P'\alpha_3} \cdots \delta_{P\alpha_N, P'\alpha_N}) \\ &= \frac{N(N-1)}{2N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!} \prod_{\alpha} (n_{\alpha}!) \sum_{\mathbf{P}} (\langle P\alpha_1, P\alpha_2 | v | P\alpha_1, P\alpha_2 \rangle + \langle P\alpha_1, P\alpha_2 | v | P\alpha_2, P\alpha_1 \rangle) \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} (\text{ways to obtain } \alpha_1, \alpha_2) \times (\langle \alpha_1, \alpha_2 | v | \alpha_1, \alpha_2 \rangle + \langle \alpha_1, \alpha_2 | v | \alpha_2, \alpha_1 \rangle) \end{aligned}$$

我们需要先从 N 个粒子里取出一对粒子再做置换，其方法数为： $f_{\alpha\beta} = (1 - \delta_{\alpha\beta})n_{\alpha}n_{\beta} + \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}n_{\alpha}(n_{\alpha} - 1)$ ，于是上面可化为：

$$(\Phi_n, \Omega \Phi_n) = \frac{N(N-1)}{2} \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha, \beta} (\langle \alpha, \beta | v | \alpha, \beta \rangle + \langle \alpha, \beta | v | \beta, \alpha \rangle)$$

$$\text{利用 } u_{\alpha}(\mathbf{r}) = u_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad \text{and} \quad v_{12} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

$$\text{可以发现 } \langle \alpha, \beta | v | \alpha', \beta' \rangle = \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) | \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 \rangle = \frac{1}{V}$$

$$\text{于是 } \left(\Phi_n, \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Phi_n \right) = \frac{1}{V} \left[\sum_{p \neq k} n_p n_k + \frac{1}{2} \sum_p n_p (n_p - 1) \right] = \frac{1}{V} \left(N^2 - \frac{N}{2} - \frac{1}{2} \sum_p n_p^2 \right) \approx \frac{1}{V} \left(N^2 - \frac{1}{2} \sum_p n_p^2 \right)$$

5.3 波色-爱因斯坦凝聚实验的基本原理

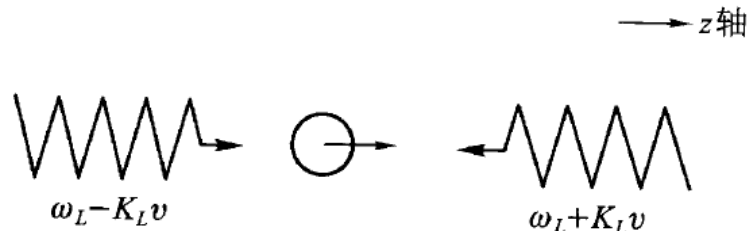
实验困难：大多数气体在极低温下不呈现气态。

1995年：三个研究组用Rb, Na 和Li蒸气在简谐磁陷阱中在极低温下观察到了波色-爱因斯坦凝聚现象。

实验的基本原理有两个：

(1) 多普勒致冷（动量空间的压缩）：恰当选取激光频率 $\omega_L < \omega_A$ ，这里 ω_A 是原子最低激发频率，可使得原子在多次吸收激光后，动量不断减小：

原子接受迎面光子激发（有方向性，动量减小），再通过自发辐射退激发（无方向性，损失动量平均为零）。

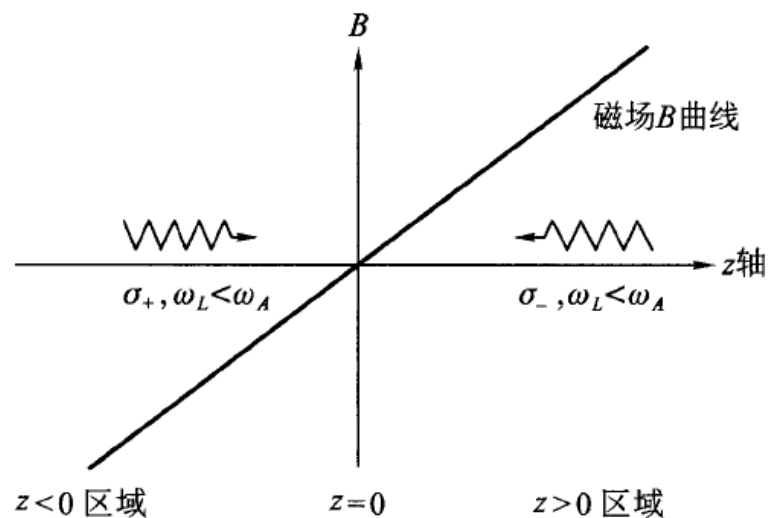


(2) 磁-光陷阱（坐标空间囚禁）：

在磁场中原子激发态能级发生分裂，激发能为：

$$E_{e-} = \hbar\omega_A - \mu B, E_{e0} = \hbar\omega_A, E_{e+} = \hbar\omega_A + \mu B.$$

原子通过两束沿z轴相对运动的激光激发。激光频率小于原子无磁场时的跃迁频率 ($\omega_L < \omega_A$)。这样，不论在 $z > 0$ 还是 $z < 0$ 区域内只能吸收向坐标原点方向传播的激光，受到一个指向 $z=0$ 点的辐射力 $F = -kz$ ，这样原子处于一个辐射力造成的简谐势阱中。



5.4 简谐势阱中理想波色气体中的波色-爱因斯坦凝聚

在简谐势阱里，理想气体的能谱不再是 $p^2/2m$ ，而是由简谐振子的能谱所代替，即

$$V(x, y, z) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

多体哈密顿量是单体哈密顿量之和，单体哈密顿量的本征值是：

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z, \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

处在简谐势中的无相互作用的波色粒子基态为单粒子基态 ($n_x = n_y = n_z = 0$) 之积：

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_i \varphi_0(\mathbf{r}_i), \quad \text{where } \varphi_0(\mathbf{r}_i) = \left(\frac{m\omega_{h0}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)}, \quad \omega_{h0} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}.$$

易知在基态粒子被外势局限而分布在一个**有限的空间范围**里，由特征长度确定，即 $a_{h0} = (\hbar/m\omega_{h0})^{1/2}$ 。

在典型实验里，有 $a_{h0} \sim 1 \mu\text{m}$ 。

对单粒子波函数作傅里叶变换可得凝聚部分中原子的动量分布：

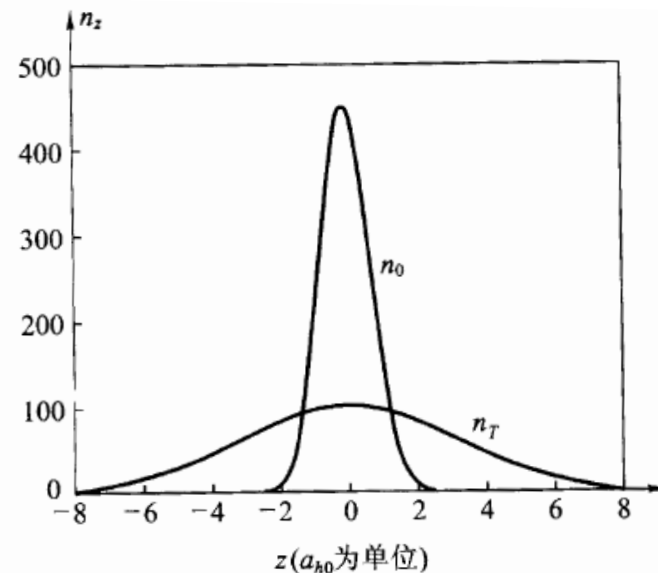
$$\varphi_p = \int d\mathbf{r} \varphi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = \left(\frac{m\omega_{h0}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \left[\left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_x}\right)^{1/2} e^{-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega_x}} \right] \times$$

$$\left[\left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_y}\right)^{1/2} e^{-\frac{p_y^2}{2\hbar m\omega_y}} \right] \left[\left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_z}\right)^{1/2} e^{-\frac{p_z^2}{2\hbar m\omega_z}} \right].$$

当 $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ 时，由上有

$$\varphi_p = 2^{3/2} \left(\frac{\pi\hbar}{m}\right)^{3/4} \omega^{-5/4} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}.$$

因此**基态动量分布也是中心在零点的高斯分布**。



在简谐势阱 ($\omega_x = \omega_y = \omega_z$) 中的凝聚部分 n_0 和非凝聚部分 n_T 的密度分布图

下面考虑在低温下粒子在能级的分布。设温度为 T ，粒子数为 N ，其中占据最低能级的粒子数为 N_0 。发生凝聚时， N_0 和 N 在相同的数量级。这个要求在化学势与最低能级相等时达到。这时

$$\mu \rightarrow \mu_c = \frac{1}{2} \hbar(\omega_x + \omega_y + \omega_z) = \frac{3}{2} \hbar\bar{\omega},$$

$$N - N_0 = \sum_{n_x, n_y, n_z \neq 0} \frac{1}{e^{\beta[\hbar\omega_x(n_x+1/2) + \hbar\omega_y(n_y+1/2) + \hbar\omega_z(n_z+1/2) - \mu]} - 1} = \sum_{n_x, n_y, n_z \neq 0} \frac{1}{e^{\beta\hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)} - 1}.$$

当 $k_B T \gg \hbar\omega_{h0}$ 和势阱里原子数很多时，我们可以把上面的求和换为积分，结果为

$$N - N_0 = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_{h0}} \right)^3 \zeta(3).$$

上式令 $N_0 = 0$ 即可得波色-爱因斯坦凝聚的相变温度： $k_B T_c = \hbar\omega_{h0} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} = 0.94 \hbar\omega_{h0} N^{1/3}$.

再代入到原式中可得 $N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right]$.

这与均匀空间波色-爱因斯坦凝聚的结果不同。

在简谐势情况下，由于空间不均匀，热力学极限取为： $N \rightarrow \infty, \omega_{h0} \rightarrow 0$, and $N\omega_{h0}^3 = \text{const}$. 这样在取极限时相变温度不变。

5.5 简谐势阱中非理想波色气体中的波色-爱因斯坦凝聚

温度很低时，原子的德布罗意波长（热波长）比原子相互作用程大很多，原子间的相互作用是很弱的，完全被量子力学中讨论过的S-波散射所支配，因此我们只需考虑二体碰撞。S-波散射可以用散射长度 a 来表征， $a>0$ 对应排斥势， $a<0$ 对应吸引势。相互作用势可近似写为：

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = U_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad U_0 = 4\pi \hbar^2 a / m.$$

因此在外界简谐势场 $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ 中，弱相互作用波色气体的哈密顿量为：

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}).$$

这里 $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ 是波色粒子的产生算符， $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 是湮灭算符，统称为玻色场算符。它们满足（海森堡绘景，坐标表象）：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \left[\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H} \right] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + U_0 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

这个方程可在平均场近似下求解。关键是把波色场算符分为凝聚部分和非凝聚部分(波戈留波夫近似)：

均匀空间情形：

理想波色气体的基态是所有粒子都处于单粒子的零动量态，其低激发态仍有量级为 N 的粒子占据零动量态，而 $p \neq 0$ 的态的占据数很少。我们假定这对近理想波色气体仍然成立。

令 $\hat{a}_p(\hat{a}_p^\dagger)$ 为动量为 \mathbf{p} 的单粒子态的湮灭(产生)算符，我们有 $\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 = N_0 \approx N$, $\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger - \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 = 1 \ll N$. 故 $\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger = N_0 + 1 \approx \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0$.

这表明在这种近似下我们可以忽略 $\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger$ 的非对易性，把它们当作非算符的量（C数）且

$$\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0}.$$

这样场算符可以写为两部分（C数和算符部分）：

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_p \psi_p(\mathbf{r}) \hat{a}_p = \psi_0 \hat{a}_0 + \sum_{p \neq 0}' \psi_p(\mathbf{r}) \hat{a}_p = \sqrt{\frac{N_0}{V}} + \hat{\psi}'(\mathbf{r}).$$

推广到空间非均匀和与时间有关的情形，我们令：

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) + \hat{\psi}'(\mathbf{r}, t),$$

这里 $\Phi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$, $\hat{\psi}'(\mathbf{r}, t)$ 是围绕平均值的量子涨落（一个小量）， $|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ 代表凝聚部分的密度。带入到上面的方程即得（GP方程）：

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}, t), \text{ where } \int d^3\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 = N_0.$$

用巨正则系综我们可以研究系统的平衡性质。凝聚部分的哈密顿量为：

$$\begin{aligned} K_0 &= H_0 - \mu N_0 = H_0 - \mu \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}} - \mu \right] \Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} U_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2 \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

零温情况下，统计平衡时系统的 \hat{K} 的平均值有极小值，故有 $\delta K_0 / \delta \Phi^* = 0$. 从上式代入并解之得：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = \mu \Phi(\mathbf{r})$$

这是个非线性方程，一般不可能解析求解。

解的情况:

(一)。排斥势:

当 $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ 是各向同性简谐势, 且粒子间有弱排斥作用; 或 $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ 是部分各向异性即 $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$, 且粒子间有弱排斥作用时, 数值计算表明凝聚体的波函数变宽, 形状偏离高斯分布。对后者来说, 在谐振频率最小的方向, 变宽的程度最大。

考虑各向异性势阱: $\omega_x = \omega_y = \omega_{\perp}, \omega_z = \lambda\omega_{\perp}$, 在两种极限条件下可以解析求解, 记

$$d_{\perp} = (\hbar/m\omega_{\perp})^{1/2}, \quad \bar{u}_0 = 8\pi a N_0/d_{\perp}.$$

(1) 当 $\bar{u}_0 = 0$ 时, 粒子间无相互作用;

(2) 在强排斥力极限下, $\bar{u}_0 \gg 1$, 相当于 N_0 很大时, 可忽略动能项。

具体可见杨展如书106-107页。

(二)。吸引势:

在均匀空间中, 系统不可能出现凝聚, 其激发谱的有些模会使激发能变为虚数, 导致系统不稳定; 在简谐势里, 只要粒子数不超过某个临界值, 则可能零点能超过吸引势能, 使凝聚体保持稳定!

考虑各向同性简谐势, $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$, so $V_{\text{trap}} = m\omega^2 r^2/2$.

可把凝聚体能量写为:

$$E_0[\Phi(\mathbf{r})] = \int d^3\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 |\Phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{2\pi a \hbar^2}{m} |\Phi(\mathbf{r})|^4 \right].$$

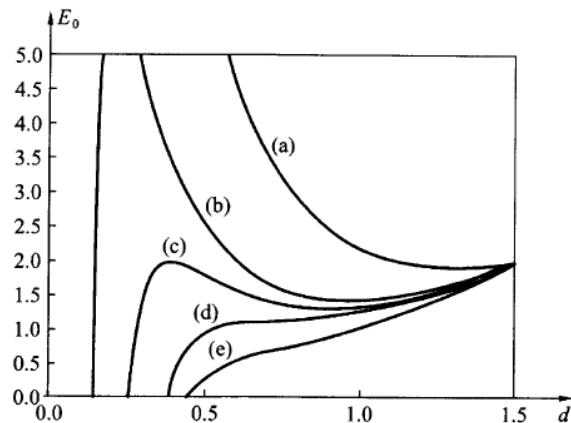
对 $\Phi(\mathbf{r})$ 求变分即得解。利用近似波函数

$$\Phi(\mathbf{r}) = \left(\frac{N_0}{d^3 \pi^{3/2}} \right)^{1/2} e^{-r^2/2d^2},$$

我们发现

$$E_0(d) = \frac{3\hbar^2 N_0}{4md^2} + \frac{3}{4} N_0 m \omega^2 d^2 + \frac{\hbar^2 a N_0^2}{\sqrt{2\pi} m d^3}.$$

由右图知 $N_{0c} \geq 1450$ 时曲线不出现极小值, 不能产生凝聚。



纵轴为每个粒子的能量(以 $\hbar\omega$ 为单位). (a) 代表理想气体;

(b) $N_0 = 600$; (c) $N_0 = 1000$; (d) $N_0 = 1450$; (e) $N_0 = 2000$

($a = -27.3a_0, a_0$ 为玻尔半径, $\omega = 2\pi \times 160$ Hz)

5.6 波色-爱因斯坦凝聚的序参量和判据

序参量：描述连续相变（二级相变）特征（自发对称破缺）的参量。在相变点附近，它是唯一重要的热力学量。

理想波色气体系统：

我们考察单粒子密度矩阵： $\rho_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \langle \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{y})} \langle a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle$

这里 $\langle \dots \rangle$ 表示系综平均 $\text{Tr}(\hat{\rho} a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}})$, $\hat{\rho}$ 为正则系综统计算符, $\hat{\psi}(\mathbf{y})$ 为单自由粒子场算符（可用平面波展开）， $\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ 分别为平面波的波矢量为 \mathbf{k} 的湮灭和产生算符。上式表示如在 \mathbf{y} 处失去一个粒子，则可在 \mathbf{x} 处找到一个粒子的概率密度。

考虑一个有平移不变性的系统，这时动量和哈密顿量对易，利用 $\text{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{Tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$ 可证：

$$\langle [\hat{p}, a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}] \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} [\hat{p}, a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}]) = 0 \quad \left(\hat{p} = \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{k}' a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} \text{ and } \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \right)$$

另一方面，直接计算可得：

$$[\hat{p}, a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}] = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}.$$

因此对这种系统我们有 $\langle a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$ 。

$$\begin{aligned} \text{于是 } \rho_1(x, y) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{mk_B T}{2\hbar^2} \frac{e^{-r/r_0}}{r} \quad \left(r_0 \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2mk_B T |\ln z|}} \right) \end{aligned}$$

当 $r=|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\rightarrow\infty$ 时，上式中的积分为零。因此在这个极限下 $\rho_1(\mathbf{x},\mathbf{y})\rightarrow\frac{\langle N_0 \rangle}{V}$ 与空间位置无关。

物理意义：在系统里存在着恒定密度的零动量粒子。这正是波色-爱因斯坦凝聚存在的标志。

有相互作用的系统：

单粒子动量不是一个好量子数， \hat{N}_0 与哈密顿量不对易，上面的计算不适用。Penrose和Onsager建议采用下列波色-爱因斯坦凝聚存在的一般判据：

$$\rho_1(\mathbf{x},\mathbf{y})\equiv\langle\hat{\psi}^+(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{y})\rangle\stackrel{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|\rightarrow\infty}{\longrightarrow}\langle\hat{\psi}^+(\mathbf{x})\rangle\langle\hat{\psi}(\mathbf{y})\rangle,$$

这里 $\langle\hat{\psi}(\mathbf{x})\rangle=r(\mathbf{x})e^{i\alpha(\mathbf{x})}\equiv\Phi(\mathbf{x})$ 为序参量，若 $r(\mathbf{x})>0$ 则说明存在动量空间的有序，即波色-爱因斯坦凝聚。这时非对角矩阵 $\rho_1(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 也必定不为零。**非零**序参量的出现表征系统中出现了“**对称破缺**”。

5.7 陷阱中波色-爱因斯坦凝聚的激发态

在5.5节我们把一般的场算符分为了两部分： $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)=\Phi(\mathbf{r},t)+\hat{\psi}'(\mathbf{r},t)$ ，并考虑了C数部分 $\Phi(\mathbf{r},t)$ 的贡献，这里我们将考虑涨落算符 $\hat{\psi}'(\mathbf{r},t)$ 的贡献。

涨落算符的对易关系与常算符的相同，因此有：

$$[\hat{\psi}'(\mathbf{r}),\hat{\psi}'^+(\mathbf{r}')]=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}');\quad [\hat{\psi}'(\mathbf{r}),\hat{\psi}'(\mathbf{r}')]=[\hat{\psi}'^+(\mathbf{r}),\hat{\psi}'^+(\mathbf{r}')]=0.$$

哈密顿量为： $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \hat{K}_0 + \hat{K}'$ ，其中

$$\hat{K} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) [\hat{T} + V_{\text{trap}}] \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{U_0}{2} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) - \mu \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r});$$

$$\hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu\hat{N}_0 = \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) [\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu] \Phi(\mathbf{r}) + \frac{U_0}{2} \int d^3\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r})|^2 \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r});$$

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad \hat{N}_0 = \int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r});$$

$$\hat{K}' = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}'^+(\mathbf{r}) [\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu + 2U_0|\Phi(\mathbf{r})|^2] \hat{\psi}'(\mathbf{r}) + \frac{U_0}{2} \left[\int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}'^+(\mathbf{r}) (\Phi(\mathbf{r}))^2 \hat{\psi}'^+(\mathbf{r}) + c.c. \right].$$

上面最后一式里我们已经略去了涨落算符二次方以上的项。由上可知粒子数密度为：

$$n(\mathbf{r}) = \langle \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) \rangle + \langle \hat{\psi}'^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}'(\mathbf{r}) \rangle = n_0(\mathbf{r}) + n'(\mathbf{r}).$$

$$\text{故总粒子数为： } N = \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r} n_0(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r} n'(\mathbf{r}) = N_0 + N'.$$

而 \hat{K}_0 实际是一个C数。由此我们可写出涨落算符的动力学方程（海森堡方程）：

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}'}{\partial t} = [\hat{\psi}', \hat{K}'], \quad i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}'^+}{\partial t} = [\hat{\psi}'^+, \hat{K}'].$$

把 \hat{K}' 的表达式带入，可得：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}'}{\partial t} &= (\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu + 2U_0|\Phi|^2) \hat{\psi}' + U_0(\Phi)^2 \hat{\psi}'^+, \\ -i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}'^+}{\partial t} &= (\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu + 2U_0|\Phi|^2) \hat{\psi}'^+ + U_0(\Phi^*)^2 \hat{\psi}'. \end{aligned}$$

方程求解：

把涨落算符用一套简正模集合 u_λ, v_λ 来展开（波戈留波夫变换）：

$$\hat{\psi}'(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} \left[u_{\lambda}(\mathbf{r}) \hat{\beta}_{\lambda}(t) + v_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \hat{\beta}_{\lambda}^+(t) \right],$$

$$\hat{\psi}'^+(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} \left[u_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \hat{\beta}_{\lambda}^+(t) + v_{\lambda}(\mathbf{r}) \hat{\beta}_{\lambda}(t) \right].$$

同时令 $\hat{\beta}_{\lambda}(t) = \hat{\beta}_{\lambda} e^{-iE_{\lambda}t/\hbar}$, $\hat{\beta}_{\lambda}^+(t) = \hat{\beta}_{\lambda}^+ e^{iE_{\lambda}t/\hbar}$, 并设 $\hat{\beta}_{\lambda}, \hat{\beta}_{\lambda}^+$ 遵守等时波色对易关系。带入到方程中得：

$$(\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu + 2U_0|\Phi(\mathbf{r})|^2)u_{\lambda}(\mathbf{r}) + U_0(\Phi(\mathbf{r}))^2v_{\lambda}(\mathbf{r}) = E_{\lambda}u_{\lambda}(\mathbf{r});$$

$$(\hat{T} + V_{\text{trap}} - \mu + 2U_0|\Phi(\mathbf{r})|^2)v_{\lambda}(\mathbf{r}) + U_0(\Phi^*(\mathbf{r}))^2u_{\lambda}(\mathbf{r}) = -E_{\lambda}v_{\lambda}(\mathbf{r}).$$

解之即得 u_{λ}, v_{λ} 和相关的本征值。相应地，通过上面的展开式 \hat{K}' 也可简单地表示成：

$$\hat{K}' = \text{const.} + \sum_{\lambda} E_{\lambda} \hat{\beta}_{\lambda}^+ \hat{\beta}_{\lambda} = \text{const.} + \sum_{\lambda} E_{\lambda} \hat{n}_{\lambda}.$$

即 \hat{K}' 可用假想的波色粒子的湮灭和产生算符来表达，它是能量为 E_{λ} 的各种假想的无相互作用的波色粒子的能量之和，这种粒子称为**准粒子**。

5.1 节正常相热力学公式的推导

首先我们有物态方程： $\left\{ \begin{array}{l} \frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \ln(1-z) \\ \frac{1}{v} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \end{array} \right.$ 。对正常相，第二项是

正比于 $1/V$ 的小量可略去，故在此相有： $\left\{ \begin{array}{l} \frac{PV}{k_B T} = \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \\ g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v} \end{array} \right.$

我们从巨配分函数出发进行计算。对理想波色气体有：

$$\frac{PV}{k_B T} = \ln \Xi(z, V, T) = - \sum_p \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon_p}).$$

利用上式，可知**内能**为（杨展如书P.45，**必须取 z, V, T （或 β ）为独立变量！**）：

$$U = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi(z, V, T) \Big|_{V, z} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \right]_{V, z} = -V g_{5/2}(z) \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{1}{\lambda^3} \right] = \frac{3V}{2\beta \lambda^3} g_{5/2}(z).$$

熵：取巨正则系综，由全微分 $d\Omega = \frac{S}{k_B} \frac{1}{\beta^2} d\beta - PdV - Nd\mu$ 。可知我们必须取 **μ, V, T （或 β ）为独立变量！**所以由热力学公式和 $\ln z = \ln(e^{\beta\mu}) = \beta\mu$ 可得：

$$\begin{aligned} S &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu} = k_B \beta^2 \left(\frac{\partial [-\beta^{-1} \ln \Xi]}{\partial \beta} \right)_{V, \mu} = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial \left[\frac{V}{\lambda^3 \beta} g_{5/2}(z) \right]}{\partial \beta} \right)_{V, \mu} \\ &= -k_B V \beta^2 \left[\frac{\partial (1/\lambda^3 \beta)}{\partial \beta} g_{5/2}(z) + \frac{1}{\lambda^3 \beta} \frac{\partial g_{5/2}(z)}{\partial \beta} \right] = k_B N \left[\frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \beta \mu \frac{v}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \right] \\ &= k_B N \left[\frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln z \right]. \end{aligned}$$

定容比热： 取正则系综，由定义有

$$\begin{aligned}\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{Nk_B} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{-k_B \beta^2}{Nk_B} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{3V}{2\beta\lambda^3} g_{5/2}(z) \right)_{N,V} \\ &= -\frac{3\beta^2 v}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\beta\lambda^3} g_{5/2}(z) \right)_{N,V} = \frac{3\beta^2 v}{2} \left[\frac{5}{2} \frac{1}{\lambda^3 \beta^2} g_{5/2}(z) - \frac{\mu}{\beta\lambda^3} g_{3/2}(z) \right]_{N,V} \\ &= \left[\frac{15v}{4\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{3\beta\mu}{2} \right]_{N,V}.\end{aligned}$$

下面利用 N, V 不变作进一步计算。由（两边对 β 求导）：

$$\frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} = \frac{1}{v} = \text{constant}. \Rightarrow -\frac{3}{2\beta\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{\mu}{\lambda^3} g_{1/2}(z) = 0 \Rightarrow \beta\mu = \frac{3}{2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}.$$

于是我们最终得到：

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}.$$