

量子统计

王延颀

2015 年 3 月 5 日

7. 玻色-爱因斯坦凝聚

玻色系统的粒子间存在统计吸引，因此玻色粒子倾向于具有相同的量子数，导致出现玻色-爱因斯坦凝聚现象。

7.1. 理想玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚

公式(5.51)给出的理想玻色气体状态方程为

$$\begin{cases} \frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \ln(1-z) \\ \frac{1}{v} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \end{cases} \quad (7.1)$$

对于理想玻色气体，公式(5.53)给出的 $\mathbf{p} = 0$ 态的平均粒子数为

$$\langle n_0 \rangle = \frac{z}{1-z} \quad (7.2)$$

因为必须有 $\langle n_0 \rangle \geq 0$ ，所以 z 的取值区间为

$$0 \leq z \leq 1 \quad (7.3)$$

并且对所有 z 都有

$$g_{3/2}(z) \leq g_{3/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612 \dots \quad (7.4)$$

其中 $\zeta(x)$ 是黎曼 Zeta 函数。

7.1.1. 产生凝聚的条件

式(7.2)代入(7.1)中的第二式得

$$\lambda^3 \frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{\lambda^3}{v} - g_{3/2}(z) \quad (7.5)$$

使得 $\langle n_0 \rangle > 0$ 的条件是

$$\frac{\lambda^3}{v} > g_{3/2}(1) \geq g_{3/2}(z) \quad (7.6)$$

即满足条件(7.6)的系统会有不可忽略的粒子数占据动量为零的单量子态，产生玻色-爱因斯坦凝聚。相空间由分割面方程

$$\frac{\lambda^3}{v} = g_{3/2}(1) \quad (7.7)$$

划分成凝聚区和非凝聚区两部分。对于给定的 v 值，可以确定转变热波长

$$\lambda_c^3 = v g_{3/2}(1) \quad (7.8)$$

对应于转变温度

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m (v g_{3/2}(1))^{2/3}} \quad (7.9)$$

同样，给定温度可以求得转变比容

$$v_c = \frac{\lambda^3}{g_{3/2}(1)} \quad (7.10)$$

因此，产生玻色-爱因斯坦凝聚的条件是

(a) v 一定时

$$T < T_c \quad (7.11)$$

或者 (b) T 一定时

$$v < v_c \quad (7.12)$$

即低温和高密度是产生玻色-爱因斯坦凝聚的条件。

7.1.2. 逸度与温度和比容的关系

用图解法可以画出 z 随 $\frac{v}{\lambda^3}$ 在有限 V (杨展如第 82 页图 3.1.3) 和 $V \rightarrow \infty$ (杨展如第 83 页图 3.1.4) 下的单调不增的函数关系。特别地，当 $V \rightarrow \infty$ 时，

$$z = \begin{cases} 1 & \text{当 } \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \\ g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v} \text{ 的根} & \text{当 } \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \end{cases} \quad (7.13)$$

7.1.3. 填布数与温度和比容的关系

由式(7.13)可知, 当 $\frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1)$ 时, $\langle n_0 \rangle = 0$; 而当 $\frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1)$ 时, $z=1$, 式(7.5)成为

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(1) + \frac{\langle n_0 \rangle}{V} \quad (7.14)$$

利用式(7.8)可得

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = 1 - \frac{\lambda_c^3}{\lambda^3} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (7.15)$$

再利用式(7.10)又可得

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = 1 - \frac{v}{v_c} \quad (7.16)$$

以上结果可以统一写为

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = \begin{cases} 0 & \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} = 1 - \frac{v}{v_c} & \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \end{cases} \quad (7.17)$$

其随温度的关系曲线(杨展如第 84 页图 3.1.5)显示类似于气液相变的一级相变行为。但是与气液相变的本质不同在于玻色-爱因斯坦凝聚的物理根源在于**玻色粒子间的“统计吸引”**引起的粒子在动量空间的凝聚, 并非粒子间相互作用导致的坐标空间的凝聚。

7.1.4. 状态方程的相变特性

当 $V \rightarrow \infty$ 时, (7.1)的第一式第二项为零, 因此有

$$\frac{P}{k_B T} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) & v > v_c, \text{ 非凝聚区} \\ \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(1) & v < v_c, \text{ 凝聚区} \end{cases} \quad (7.18)$$

因此可以画出 $P-v$ 图（等温图）（杨展如第 86 页图 3.1.6），在凝聚区压强与体积无关，是一条等值线，而在非凝聚区的相变曲线上的压强为

$$P = \frac{k_B T_c}{\lambda^3} g_{5/2}(1) = \frac{k_B T_c}{v g_{3/2}(1)} g_{5/2}(1) \quad (7.19)$$

代入式(7.9)，得

$$P = \frac{g_{5/2}(1)}{v g_{3/2}(1)} \frac{2\pi\hbar^2}{m [v g_{3/2}(1)]^{2/3}} \quad (7.20)$$

整理后得玻色-爱因斯坦凝聚的相变曲线方程为

$$P v^{5/3} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{g_{5/2}(1)}{(g_{3/2}(1))^{5/3}} \quad (7.21)$$

在 $v \leq v_c$ 的凝聚区的水平线代表 $\langle n_0 \rangle > 0$ 的状态，随 v 增加 $\langle n_0 \rangle$ 上的粒子数单调减少。

同样，对于 $P-T$ 图（杨展如第 86 页图 3.1.7），相变曲线上任一点的压强为

$$P = \frac{k_B T}{\lambda^3} g_{5/2}(1) \quad (7.22)$$

由于在非凝聚区，有

$$\frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} = \frac{v_c}{v} = \left(\frac{T_c}{T} \right)^{3/2} \quad (7.23)$$

把式(7.10)、(7.9)和(7.23)代入式(7.22)，得

$$P = \frac{k_B T}{v_c g_{3/2}(1)} g_{5/2}(1) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{5/2}(1) (k_B T)^{5/2} \quad (7.24)$$

凝聚区的压强(7.22)对温度进行微分，得到

$$\frac{dP}{dT} = \frac{1}{T v_c} \left(\frac{5}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \right) \quad (7.25)$$

与气液相变的克拉珀龙方程形式相同，对应的潜热为

$$L = \frac{5}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} > 0 \quad (7.26)$$

因此玻色-爱因斯坦凝聚具有一级相变的特征， $\langle n_0 \rangle$ 对应于液相， $\langle n_{p \neq 0} \rangle$ 对应于气相， $P-v$ 图上的水平线段对应于气液共存区。

7.1.5. 热力学量

理想玻色气体的内能为

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} P v = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{k_B T v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) & v > v_c \text{ 或 } T > T_c \\ \frac{3}{2} \frac{k_B T v}{\lambda^3} g_{5/2}(1) & v < v_c \text{ 或 } T < T_c \end{cases} \quad (7.27)$$

熵等于

$$\frac{S}{N K_B} = \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln z & v > v_c \text{ 或 } T > T_c \\ \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1) & v < v_c \text{ 或 } T < T_c \end{cases} \quad (7.28)$$

定容比热为

$$\frac{C_V}{N K_B} = \begin{cases} \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} & v > v_c \text{ 或 } T > T_c \\ \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1) & v < v_c \text{ 或 } T < T_c \end{cases} \quad (7.29)$$

7.2. 非理想玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚

7.2.1. 系统本征能量

理想玻色气体的粒子之间计入二体碰撞，则系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (7.30)$$

其中 $a > 0$ 是散射长度。以下用微扰法求解该系统。

设无微扰哈密顿量 $\hat{H}_0 = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2$ 对应的波函数为 $\Phi_n = \{\dots, n_p, \dots\}$ ，其中 n_p 是动量为 p 的单态的填布数。由量子微扰论可知，一级近似下系统的能量为

$$E_n = (\Phi_n, \hat{H} \Phi_n) = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left(\Phi_n, \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Phi_n \right) \quad (7.31)$$

计算表明（杨展如第 93-95 页），在 $\frac{a}{v^{1/3}} \ll 1$ 和 $ka \ll 1$ （ k 是一对粒子的相对波矢）的条件下，上式结果为

$$E_n = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} \left(N^2 - \frac{1}{2} \sum_p n_p^2 \right) \quad (7.32)$$

系统的基态为所有粒子凝聚在 $p=0$ 的单态，此时每个粒子的能量

$$\frac{E_0}{N} = \frac{4\pi a \hbar^2}{mVN} \left(n_0^2 - \frac{1}{2} n_0^2 \right) = \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 2\pi a \rho \quad (7.33)$$

其中 $\rho \equiv \frac{Nm}{V} = \frac{m}{v}$ 是质量密度。当系统中有粒子激发到动量增量非常小的低激发态时，每个粒子的平均能量近似为

$$\frac{E_n}{N} \approx \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 4\pi a \rho \left[1 - \frac{1}{2} \sum_p \left(\frac{n_p}{N} \right)^2 \right] \quad (7.34)$$

上式当所有激发粒子具有同样的动量值时最小，所以粒子间的空间排斥作用（ $a > 0$ ）导致了动量空间的吸引。

7.2.2. 状态方程

当只有极少数粒子处于激发态时，式(7.32)近似写为

$$E_n \approx \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} \left(N^2 - \frac{1}{2} n_0^2 \right) \quad (7.35)$$

在满足下列条件

$$\frac{a}{\lambda} \ll 1, \quad \frac{a\lambda^2}{v} \ll 1 \quad (7.36)$$

的区域内，令 n 代表所有粒子的集合 $\{n_p\}$ ，对应的动能 $\varepsilon_n = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p$ ，并引入参量 $\xi \equiv \frac{n_0}{N}$ ，

则式(7.35)改写为

$$E_n \approx \varepsilon_n + \frac{N}{\beta} \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \quad (7.37)$$

相应的配分函数

$$\begin{aligned} Z_N &\equiv \text{tr} \exp(-\beta \hat{H}) = \sum_n \exp(-\beta \varepsilon_n) \exp \left(-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \right) \\ &= Z_N^0 \left\langle \exp \left(-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \right) \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (7.38)$$

其中 Z_N^0 是理想玻色气体的配分函数，而

$$\left\langle \exp \left(-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \right) \right\rangle_0 = \frac{\sum_n \exp(-\beta \varepsilon_n) \exp \left(-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \right)}{\sum_n \exp(-\beta \varepsilon_n)} \quad (7.39)$$

尖括号中的值是相对于理想玻色气体的系综平均。由此求得每个粒子的自由能为

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= \frac{F^0}{N} - \frac{k_B T}{N} \ln \left\langle \exp \left(-N \left(\frac{a\lambda^2}{v} \right) (2 - \xi^2) \right) \right\rangle_0 \\ &\approx \frac{F^0}{N} + k_B T \frac{a\lambda^2}{v} \langle 2 - \xi^2 \rangle_0 \\ &= \frac{F^0}{N} + \frac{4\pi a \hbar^2}{mv} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \xi^2 \rangle_0 \right) \end{aligned} \quad (7.40)$$

因此可以得到压强为

$$P = - \left. \frac{\partial F}{\partial v} \right|_{T,N} = P^0 + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left(\frac{1}{v^2} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \xi^2 \rangle_0 \right) + \frac{1}{2v} \frac{\partial \langle \xi^2 \rangle_0}{\partial v} \right) \quad (7.41)$$

对理想气体，有

$$\langle n_0^2 \rangle_0 - \langle n_0 \rangle_0^2 = \langle n_0 \rangle_0 \quad (7.42)$$

则

$$\begin{aligned} \langle \xi^2 \rangle_0 &= \left\langle \left(\frac{n_0}{N} \right)^2 \right\rangle_0 = \frac{1}{N^2} \langle n_0^2 \rangle_0 = \frac{1}{N^2} (\langle n_0 \rangle_0^2 + \langle n_0 \rangle_0) \\ &\approx \frac{1}{N^2} \langle n_0 \rangle_0^2 = \langle \xi \rangle_0^2 \end{aligned} \quad (7.43)$$

式(7.41)近似为

$$P = P^0 + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left(\frac{1}{v^2} \left(1 - \frac{1}{2} \langle \xi \rangle_0^2 \right) + \frac{1}{v} \langle \xi \rangle_0 \frac{\partial \langle \xi \rangle_0}{\partial v} \right) \quad (7.44)$$

代入式(7.17)，得到非理想玻色气体的近似状态方程为

$$P = \begin{cases} P^0 + \frac{4\pi a \hbar^2}{mv^2} & v > v_c, T > T_c \\ P^0 + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \left(\frac{1}{v^2} + \frac{1}{v_c^2} \right) & v > v_c, T > T_c \end{cases} \quad (7.45)$$

对应的 $P-v$ 图（杨展如第 93 页图 3.2.1）和 $P-T$ 图（杨展如第 93 页图 3.2.2）不再具备一级相变的特征。

7.2.3. 简谐势阱中理想玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚

玻色-爱因斯坦凝聚于 1995 年才由多普勒致冷和磁-光陷阱技术在极低温下的

^{87}Rb , ^{23}Na , ^7Li 蒸汽中观察到。这些实验中用来限制粒子位置空间分布的势可以近似看作简谐势阱:

$$V_h(x, y, z) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (7.46)$$

单体能量本征值是

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z \quad (7.47)$$

其中 $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$, 多体能量是单体能量之和。该势场中无相互作用玻色粒子基态为

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_i \varphi_0(\mathbf{r}_i) \quad (7.48)$$

其中

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)\right) \quad (7.49)$$

是单粒子基态, 对应于 $n_x = n_y = n_z = 0$, $\omega_0 = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ 。概率密度 $N|\varphi_0(\mathbf{r})|^2$ 的空间分布的宽度用特征长度

$$a_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2} \quad (7.50)$$

来度量。典型实验中 a_0 在微米量级。对式(7.49)作傅里叶变换以得到凝聚原子的动量分布

$$\begin{aligned} \varphi_p &= \int \varphi_0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar) d\mathbf{r} \\ &= \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_x}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega_x}\right) \left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_y}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{p_y^2}{2\hbar m\omega_y}\right) \left(\frac{2\pi\hbar}{m\omega_z}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2\hbar m\omega_z}\right) \end{aligned} \quad (7.51)$$

当 $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ 时, 有

$$\varphi_p = 2\sqrt{2} \left(\frac{\pi\hbar}{m}\right)^{3/4} \omega^{-3/4} \exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}\right) \quad (7.52)$$

上式表明理想玻色气体在简谐势阱中的基态动量分布和坐标分布相似, 也是中心在零点的高斯分布。而自由玻色气体只在动量空间凝聚, 在坐标空间是均匀分布的。

推导 (杨展如第 100-102 页) 得在 $T < T_c$ 时, 发生凝聚的粒子数

$$N_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right) \quad (7.53)$$

其中

$$T_c = 0.94 \frac{\hbar \omega_0}{k_B} N^{1/3} \quad (7.54)$$

与自由粒子气体（式(7.17)）的规律（ $\sim \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}$ ）完全不同。

7.2.4. 简谐势阱中非理想玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚

研究最简单的理论模型：只考虑二体硬球势碰撞相互作用，粒子间相互作用势

$$U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = U_0 \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (7.55)$$

其中 $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ ， a 是 S-波散射长度， $a > 0$ 对应排斥势， $a < 0$ 对应吸引势。在简谐势

场(7.46)作用下，体系的哈密顿量在二次量子化的坐标表象下写为

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_h(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (7.56)$$

其中 $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ 是玻色子的产生算符， $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 玻色子的湮没算符，统称为玻色场算符，由单粒子的产生湮没算符 $\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\alpha$ 组合而成

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) &= \sum_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}) \hat{a}_\alpha^+ \\ \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}) \hat{a}_\alpha \end{aligned} \quad (7.57)$$

其中 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ 是单粒子波函数， $\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\alpha$ 的定义为

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha^+ |N_0, N_1, \dots, N_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{N_\alpha + 1} |N_0, N_1, \dots, N_\alpha + 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_\alpha |N_0, N_1, \dots, N_\alpha, \dots\rangle &= \sqrt{N_\alpha} |N_0, N_1, \dots, N_\alpha - 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (7.58)$$

在平均场近似下，将湮没算符写成系综平均和涨落两部分

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \hat{\psi}'(\mathbf{r}) \quad (7.59)$$

其中 $\Phi(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle$ ， $|\Phi(\mathbf{r})|^2$ 代表凝聚部分的密度， $\hat{\psi}'(\mathbf{r})$ 描写围绕平均值的量子涨落

落。在巨正则系综下，“巨正则”哈密顿量为

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad \hat{N} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (7.60)$$

在低温下，利用平均场近似(7.59)，写出凝聚部分的“巨正则”哈密顿量

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 &= \hat{H}_0 - \mu \hat{N}_0 \\ &= \int d^3r \Phi^*(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_h - \mu \right] \Phi(r) + \frac{1}{2} \int d^3r U_0 \Phi^*(r) \Phi^*(r) \Phi(r) \Phi(r) \end{aligned} \quad (7.61)$$

由变分原理，得到不含时格罗斯—皮达也夫斯基（GP）方程

$$\begin{aligned} \frac{\delta K_0}{\delta \Phi^*} &= \int d^3r \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_h - \mu \right] \Phi(r) + \int d^3r |\Phi(r)|^2 \Phi(r) = 0 \\ \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_h + U_0 |\Phi(r)|^2 \right] \Phi(r) &= \mu \Phi(r) \end{aligned} \quad (7.62)$$

其中化学势

$$\mu = \frac{\partial E_0(N)}{\partial N} + O\left(\frac{1}{N}\right) \quad (7.63)$$

是增加一个粒子所引起的基态能量 E_0 的增量。以下分情况讨论：

（1）排斥情形（ $a > 0$ ）下 GP 方程没有解析解，数值解表明与理想玻色气体相比，凝聚体的波函数变宽，形状明显偏离高斯分布。

（2）吸引情形（ $a < 0$ ）下 GP 方程有近似的解析解。为简单起见，考虑各向同性简谐势 $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ ，则

$$V_h = \frac{m}{2} \omega^2 r^2 \quad (7.64)$$

根据式(7.62)，凝聚体的能量

$$E_0[\Phi(\mathbf{r})] = \int d^3r \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi(r)|^2 + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 |\Phi(r)|^2 + \frac{2\pi \hbar^2 a}{m} |\Phi(r)|^4 \right) \quad (7.65)$$

其中右边第一项由 $\int d^3r \Phi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Phi(r)$ 分部积分得到。原则上可以通过变分原理解

出 $\Phi(\mathbf{r})$ ，但是解析求解有困难，所以给出一个近似的高斯型波函数作为猜测解

$$\Phi(\mathbf{r}) = \left(\frac{N_0}{d^3 \pi^{3/2}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{r^2}{2d^2} \right) \quad (7.66)$$

归一化条件为

$$\int \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3r = N_0 \quad (7.67)$$

其中 d 是变分参数, 代表 $\Phi(\mathbf{r})$ 的有效宽度。把式(7.66)代入式(7.65), 得

$$E_0(d) = \frac{3\hbar^2 N_0}{4md^2} + \frac{3}{4} N_0 m \omega^2 d^2 + \frac{\hbar^2 a N_0^2}{\sqrt{2\pi m} d^3} \quad (7.68)$$

该式的图解表明稳定的局部极小值只能在粒子数小于某个临界值时才可以出现, 此时零点能可以阻止粒子彼此靠近, 形成玻色—爱因斯坦凝聚; 当粒子数大于临界值时, 不存在能量极小, 过大的吸引力导致凝聚体不再稳定。

7.3. 玻色—爱因斯坦凝聚的序参量和判据

自由理想玻色气体的单粒子密度矩阵为

$$\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \langle \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \exp(i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)) \langle a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} \rangle \quad (7.69)$$

其中系综平均 $\langle a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2})$, 其物理意义为如果在 $\mathbf{k}_2$ 处失去一个粒子, 则在 $\mathbf{k}_1$ 处找到一个粒子的概率密度。因为平移不变系统的总动量算符 $\hat{p} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$ 与哈密顿量对易,

利用 $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \hat{H})$ 和 $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$, 可证

$$\langle [\hat{p}, a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}] \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} [\hat{p}, a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}]) = 0 \quad (7.70)$$

直接计算可得

$$[\hat{p}, a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}] = \hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} \quad (7.71)$$

上两式比较可得对平移不变系统有

$$\langle a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (7.72)$$

代入式(7.69), 得

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} > 0} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{mk_B T}{2\hbar^2} \frac{\exp(-r/r_0)}{r} \end{aligned} \quad (7.73)$$

其中 $r_0 \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2mk_B T |\ln z|}}$ 。当 $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ 时,

$$\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow \frac{\langle N_0 \rangle}{V} \quad (7.74)$$

与空间位置无关。因此对理想玻色气体而言存在恒定密度的零动量粒子是玻色—爱因斯坦凝聚存在的标志。

对于有相互作用的系统， $\hat{N}_0$ 与哈密顿量不对易，因此以上计算不适用。此时把式(7.59)中定义的凝聚体波函数

$$\Phi(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = R(\mathbf{r}) \exp(i\alpha(\mathbf{r})) \quad (7.75)$$

作为序参量，则出现玻色—爱因斯坦凝聚的判据为存在非对角长程序（**off-diagonal long-range order**），即存在非零的矩阵元

$$\rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \langle \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \rangle \xrightarrow{|\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2| \rightarrow \infty} \langle \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \rangle \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (7.76)$$