

博士研究生学位论文

题目: 超冷原子气的动力学性质研究

姓	名:	赵欣欣
学	号:	1301110162
院	系:	物理学院
专	<u>₩</u> :	凝聚态物理
研究方向:		超冷原子气的奇异物性
导	师:	吴飙教授, Lincoln D. Carr 教授

二O一九年四月

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人,未经本论文作者同意,不得将本 论文转借他人,亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则一旦引起有碍 作者著作权之问题,将可能承担法律责任。

摘要

玻色-爱因斯坦凝聚态是量子气体领域一个奇特的物态。1995年,人们第一次在实验中成功制造出玻色-爱因斯坦凝聚体,由于其实验具有高度可控的特性,从此大量与之有关的理论和实验研究相继展开。本论文着重讨论超冷玻色原子的动力学性质,主要研究内容分为两个方向:一个是玻色-爱因斯坦凝聚体的宏观量子隧穿,另一个是发生部分对称性破缺的环形晶格中超冷玻色子的动力学。

量子隧穿是量子力学中一个非常重要的现象。目前对量子隧穿的研究已经涵盖了 物理、化学和生物等领域。宏观量子隧穿是不同于单体或少体隧穿的一种现象。尽管 目前对宏观这个概念尚无严格的定义,但人们对宏观概念的理解通常涉及以下几个方 面:较长的长度、大量粒子、质量较大的物体和更多的自由度等。最近有一个实验将 数以万计的铷原子束缚在单阱中,通过观察其宏观量子隧穿现象,发现其粒子数呈现 非指数衰减趋势。本论文采用修正后的Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (JWKB)近似 证实了上述实验中的非指数衰减是受凝聚体中原子间相互作用的影响。在修正 JWKB 近似的过程中,本文将平均场效应引入模型中的势阱项,从而将势阱写为一个含时 的等效势。同时,本文将等效 JWKB 模型的结果与实验结果以及实验者提供的三维 Gross-Pitaevskii 数值模拟的结果进行比对。

本文研究第二个系统时采用玻色-哈伯德模型。玻色-哈伯德模型是描述晶格中有 相互作用但无自旋的玻色子系统的一个二次量子化模型。利用量子淬火技术,本文可 以在环形光晶格中制造出某一种形式的部分对称性破缺机制。经历过淬火过程后,原 来的均匀晶格转变成双重周期晶格。这一转变导致势阱内的凝聚体经历了一段长时间 的非平衡动力学演化过程,最终产生了一类临界现象。本文将定义对称性能量差和对 称性记忆等量子观测量。利用这些观测量,本文可以确定对称性破缺强度的临界点。 当对称性破缺强度超过临界点时,系统开始失去对其初态对称性的记忆。本文还包含 简并微扰论和平均场理论分析,并将其结果与数值模拟结果进行对比。在此需要澄清 一点,那就是分数或整数填充的 Mott 绝缘体与超流之间的相变是与系统基态相关的现 象。而与之不同的是,本文中的部分对称性破缺现象则是与激发态有关。因此它们是 完全不同的现象。进一步地,本文做了有限尺度标度的相关研究,并指出此类临界现 象在较大的系统中同样存在。

关键词: 超冷原子气, 玻色-爱因斯坦凝聚, 宏观量子隧穿, 部分对称性破缺

Quantum dynamics of ultracold bosons

Xinxin Zhao (Condensed Matter Physics) Directed by Prof. Biao Wu, Lincoln D. Carr

ABSTRACT

A Bose-Einstein condensate (BEC) is an extraordinary many-body quantum state in the field of quantum gases, which offers a high degree of controllability. Since the first gaseous BECs were created in the laboratory in 1995, numerous theoretical and experimental studies were undertaken. This thesis mainly focuses on the quantum dynamics of ultracold bosons and explores theoretical modeling of two important experimental case studies: macroscopic quantum tunneling escape of BECs and quantum dynamics of partial symmetry breaking for ultracold bosons in an optical lattice ring trap.

Quantum tunneling is one of the most significant effects discovered in quantum mechanics, and is now applied in physical, chemical and biological systems. Macroscopic quantum tunneling, distinct from single or few-body tunneling, explores the question of quantum macroscopicity. Although there is no single accepted definition of macroscopicity, the concept can be connected to notions such as large length scales, many particles, massive objects, more degrees of freedom, and quantum complexity. A recent experiment on macroscopic quantum tunneling of tens of hundreds to thousands ⁸⁷Rb atoms trapped in a single well demonstrated a nonexponential decay of the number of atoms. In this thesis, we demonstrate via a modified Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin (JWKB) approximation that the nonexponential decay stems from the interatomic interactions. The effective time-dependent potential therein is induced by a mean-field effect. Three-dimensional Gross-Pitaevskii simulations are shown for comparison with the experiment and our effective JWKB model.

The second system is a Bose-Hubbard model, which is a second quantized description of interacting spinless bosons on a lattice. Via a rapid quantum quench, we generate a certain pattern of partial rotational symmetry breaking on an optical ring lattice. During the quench process, the uniform lattice is transformed to a biperiodic one. Eventually, the trapped bosons experience long-time nonequilibrium quantum dynamics resulting in a new critical phenomenon. Using newly defined quantum measures, the symmetry energy difference and the symmetry memory, we are able to identify the critical symmetry breaking strength, beyond which the system begins to forget its initial symmetry properties. Degenerate perturbation and mean-field analyses are included together with numerical simulations. To clarify, both the fractional- and unit-filling Mott insulator to superfluid transition are related to ground states. In contrast, our partial symmetry breaking phenomena is based on excited states, primarily in the lowest rotational band of excitations. Therefore, our dynamics is not driven by Mott gaps but rather symmetry properties in low-lying excited states. We further supply a finite size scaling study to indicate the existence of similar critical phenomena in larger systems.

KEYWORDS: ultracold atomic gas, Bose-Einstein condensation, macroscopic quantum tunneling, partial symmetry breaking

ш	

第一章 量	子隧穿	1
1.1 一望	推势垒贯穿	1
1.2 JW	KB 近似	3
1.3 量子	子隧穿概述与分类	4
1.3.1	宏观、统计性质和准粒子	5
1.3.2	相互作用	7
1.3.3	束缚势阱	8
1.3.4	系统的维度	9
第二章 超	冷原子气: 玻色系统	11
2.1 玻色	色-爱因斯坦凝聚	11
2.2 光晶	晶格	13
2.2.1	原子与光场的相互作用	13
2.2.2	光晶格的产生	15
2.3 平均	勾场理论: Gross-Pitaevskii 方程	17
2.4 紧列	束缚模型和万尼尔函数	18
2.5 玻色	色-哈伯德模型	19
2.5.1	扩展的玻色-哈伯德模型	21
2.5.2	数值方法	22
第三章 宏	·观量子隧穿	25
3.1 —	个宏观量子隧穿实验	25
3.1.1	实验设计	25
3.1.2	实验数据和 3D 平均场模型	27
3.1.3	等效一维 JWKB 描述: 一个实验案例	31
3.2 描述	述宏观量子隧穿的等效一维 JWKB 模型	32
3.2.1	修正 JWKB 近似	32
3.2.2	紧束缚势阱构型	36
3.3 本章	章小结	38

第四章 环形势阱系统的部分对称性破缺		41
4.1 研究背景		41
4.2 对称性能量差和对称性记忆		43
4.2.1 对称性破缺强度临界点		47
4.2.2 数值方法及其精确度		49
4.2.3 简并微扰		50
4.2.4 平均场理论		52
4.2.5 部分对称性破缺与分数或单位填充 Mott-	超流转变的区别	53
4.2.6 有限尺度标度		54
4.3 本章小结		55
总结与展望		59
参考文献		61
致谢		69
发表文章目录		71

第一章 量子隧穿

量子隧穿是量子力学的一个标志现象,是描述微观粒子能够穿越经典力学下不允 许穿越的势垒的行为。在经典力学中,当粒子的总能量低于势垒能量时,粒子不能够 穿越该势垒,但是在量子力学中粒子却可以发生隧穿。

量子隧穿最早是在 1927 由 Friederich Hund 在研究双阱模型的基态时提出^[1]。随后 伽莫夫在 1928 年发表的论文中用量子隧穿解释 α 衰变^[2]。如今量子隧穿得到了广泛的 研究和应用,包含物理、化学和生物等领域,从原子核物理学中的双质子衰变和双重 β 衰变到跨学科应用于酶^[3] 的研究中,从量子宇宙学和星体核聚变^[4] 到分子光谱中手性 异构体的转变^[5,6]。随着电子器件进入纳米尺度,量子隧穿在纳电子学中的作用越来越 显著,比如隧道二极管等^[7]。最近,约瑟夫森结这类基于量子隧穿的宏观量子器件中, 对电压的测量也达到了极高的精确度^[8]。本文将在第三章中研究一个单阱宏观量子隧 穿实验。在此之前,本章首先介绍量子隧穿的基本知识,包括一维势垒贯穿、JWKB 近 似、量子隧穿的分类和宏观量子隧穿的概念。

1.1 一维势垒贯穿

本节讨论一个简单的量子隧穿模型——一维势垒贯穿。与一维无限深方势阱中体 系为分立的束缚态不同的是,势垒贯穿问题中由于势垒在无限远处为有限值,因此波 函数在无穷远处不为零,体系能量组成连续谱。考虑一维空间运动的粒子贯穿方形势 垒,其势能只在某一区域内(0 < x < a)为有限值 U₀(U₀ > 0),在其他区域及无穷远 处为零

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & 0 < x < a, \\ 0, & x < 0, x > a, \end{cases}$$
(1.1)

具有能量 *E* 的粒子,由势垒的一侧 (*x* < 0)向另一侧运动。在经典力学中,只有当粒子能量 *E* > *U*₀ 时,粒子才能越过势垒到达另一侧,如果 *E* < *U*₀ 则粒子在碰到势垒后将被弹回,不能穿过势垒。而在量子学中,当粒子能量 *E* < *U*₀ 时,粒子也有一定概率穿过势垒。下面本文根据薛定谔方程来做一个简单计算,首先列出该系统定态薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\psi = 0, (x < 0, x > a)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0, (0 < x < a)$$
(1.2)

当 $E > U_0$ 时,解得波函数为

$$\psi_{1} = Ae^{ik_{1}x} + A'e^{-ik_{1}x}, (x < 0)$$

$$\psi_{2} = Be^{ik_{2}x} + B'e^{-ik_{2}x}, (0 < x < a)$$

$$\psi_{3} = Ce^{ik_{1}x}, (x > a)$$
(1.3)

其中 $k_1 = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$, $k_2 = \left[\frac{2\mu(E-U_0)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}$, 且 $k_1 \pi k_2$ 都是正实数。 Ae^{ik_1x} 代表入射波, Ce^{it_1x} 代表投射波, $A'e^{-ik_1x}$ 代表反射波, 由波函数及其微商在 x = 0 和 x = a 处的连续条件 可以得到参数 C、A = A' 的关系为

$$C = \frac{4k_1k_2e^{-u_1a}}{(k_1+k_2)^2e^{-u_2a}-(k_1-k_2)^2e^{x_2a}}A$$

$$A' = \frac{2i(k_1^2-k_2^2)\sin ak_2}{(k_1-k_2)^2e^{4k_2a}-(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}}A$$
(1.4)

因此透射系数为

$$D = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2k_2^2}{\left(k_1^2 - k_2^2\right)^2\sin^2 ak_2 + 4k_1^2k_2^2}$$
(1.5)

反射系数为

$$R = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{\left(k_1^2 - k_2^2\right)^2 \sin^2 k_2 a}{\left(k_1^2 - k_2^2\right)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} = 1 - D$$
(1.6)

这反映了当粒子碰到势垒后一部分粒子穿透势垒到达另一侧,而剩下的粒子则被反弹 回去。

再看 $E < U_0$ 的情况,此时 k_2 是虚数,令 $k_2 = ik_3$,经过同样的计算过程得透射系数为

$$D = \frac{4k_1^2k_3^2}{\left(k_1^2 + k_3^2\right)^2 \operatorname{sh}^2 k_3 a + 4k_1^2k_3^2}$$
(1.7)

其中 sh 为双曲正弦函数。可以看出,此时粒子仍有一定概率可穿透势垒。

当粒子能量 *E* 很小,以致 $k_3a \gg 1$,则 $e^{k_3a} \gg e^{-k_3a}$, $sh^2 k_3a \approx \frac{1}{4}e^{2k_3a}$ 。考虑到 k_1 和 k_3 数量级相同,则透射系数公式可近似写为

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\pi}\sqrt{2\mu(U_0 - E)}a}$$
(1.8)

其中 D₀ 是常数,其数量级接近 1。由上式可以看出,透射系数随着势垒宽度或高度的 增加迅速减小,因此在宏观尺度下很难观察到隧穿效应。

1.2 JWKB 近似

JWKB 是以其提出者 Jeffreys、Wentzel、Kramers 和 Brillouin 命名,也可以称为 WKBJ 近似,但更常见的名字为 WKB 近似。1923 年数学家 Harold Jeffreys 提出了一种求解二阶线性微分方程的近似方法^[9],随后到了 1926 年,薛定谔方程提出后,这一方法便被 Wentzel^[10]、Kramers^[11]和 Brillouin^[12] 三位物理学家应用于求解薛定谔方程。JWKB 是一个半经典近似方法,主要思路是既然薛定谔方程可以在常数势阱时被轻易求解,那么也可以在势阱缓慢变化时采用近似方法求解。现在考虑粒子在一维势场 *V*(*x*) 中的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$
(1.9)

假设波函数为

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sigma(x)\right)$$
(1.10)

其中 σ(x) 通常是一个复函数。将波函数带入薛定谔方程中得到 σ(x) 满足的方程

$$0 = (\sigma')^2 - i\hbar\sigma'' + 2m[V(x) - E]$$
(1.11)

目前本节的推导还没有做任何近似,数学上公式1.11中与前述薛定谔方程等同。当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,量子力学蜕化为经典力学,这就是经典极限。此时,上式为(σ')² = 2m[E-V(x)], 形式上与经典力学中的 Jacobi-Hamilton 方程相同。WKB 就是利用经典极限做近似求 解薛定谔方程,因此也叫做半经典近似。其主要思想是将 \hbar 看作一个极小的量,然后 将 $\sigma(x)$ 按 \hbar 做幂级数展开

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + (-i\hbar)\sigma_1(x) + (-i\hbar)^2\sigma_2(x) + \cdots$$
(1.12)

将上式代入公式1.11中,并比较 \hbar 的同幂次项。通常当势阱 V(x) 空间变化较缓慢时, $\sigma(x)$ 的二阶以及高阶项可以忽略。此时得到 JWKB 一阶近似解为

$$\sigma(x) \approx \sigma_0(x) - i\hbar\sigma_1(x) \tag{1.13}$$

其中

$$\sigma'_0(x) = \pm p(x), \quad p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}$$
 (1.14)

当 E > V 时,这是经典允许的隧穿, $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ 为实数,是经典动量。当 E < V 时,是经典禁区, p(x)为纯虚数。一阶 JWKB 近似解得波函数为

$$\psi(x) \approx \frac{A_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') \, dx'\right] + \frac{A_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') \, dx'\right] \tag{1.15}$$

上式中参数 A_1 、 A_2 和 a 的具体数值由边界条件及归一化条件确定。JWKB 一阶近似解成立的条件是要求势场 V(x) 变化足够缓慢。数学表述为 $\left|\frac{d\lambda(x)}{dx}\right| \ll 1$,即粒子的德布罗意波 $\lambda(x)$ 在空间变化足够缓慢。且需要注意的是,在转折点,即 V(x) = E 附近, $p \approx 0$, 一级近似解不适用,需要用其他方法处理。

使用 JWKB 近似求解势阱中粒子的准经典束缚态可以得到类似的 Bohr-Sommerfeld 量子化条件。而使用 JWKB 近似求解粒子势垒隧穿问题中势垒穿透概率为

$$T \approx \left[\sqrt{\frac{q(x_1)}{q(x_2)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} q(x) dx\right)\right]^2$$
(1.16)

其中 $p(x) = \sqrt{2m(E - V)} = iq(x)$, $x_1 \ \pi x_2$ 依次为沿隧穿方向的两个转折点。第三章中本文将要用 JWKB 近似解释一个特定的宏观势垒隧穿实验。

1.3 量子隧穿概述与分类

有许多因素能影响量子隧穿,从而使隧穿行为产生不同的结果。本节将按照下面 四类概述。要说明的是,对量子隧穿的影响因素有很多,包含但不限于本节所列出的四 个类别。本节将首先讨论参与隧穿的粒子的统计性质对隧穿的影响,比如研究的对象 究竟是玻色子、费米子还是任意子^[13,14],以及系统是少体隧穿还是多体隧穿等。第二个 要讨论的因素是粒子之间的相互作用,相互作用从无到有^[15–19],其强度从弱至强^[20–22], 以及是吸引还是排斥相互作用^[23,24]等,这些细节都会抑制或是增强隧穿效应,甚至有 些还会改变势垒的构型^[25]。第三个要讨论的因素是势阱、晶格的形状或系统的其他几 何性质,比如自旋链和无序系统中的隧穿问题^[26,27]。最后一个要讨论的因素是系统的 维度,由于系统维度带来的额外自由度可能在隧穿动力学中引入混沌[28,29]。

若将以上因素和宏观的概念综合起来,便可以描绘出不同类型的宏观量子隧穿(MQT)。宏观(macroscopicity),这一概念最直观的理解就是和"大"物体相关。事实上,MQT中的宏观比这个简单的第一印象要更丰富。接下来本节将详细列出上面提到的部分可能性,作为未来研究的参考。这其中提到的不少方面尚需实验和理论工作来完善。

1.3.1 宏观、统计性质和准粒子

宏观(macroscopicity)是 MQT 概念中最突出的一点。但是目前并没有一个明确 的定义或是临界点来判定系统或现象是否是宏观的,但至少应该从以下四个方面来理 解它。首先,本文指的宏观现象是区别于相空间中的半经典现象的,但是这些宏观现 象又不能完全用经典力学描述。然而,有时对半经典极限做一些延伸也是可以适用的。 比如,对双模近似下有驱动的双阱玻色-爱因斯坦凝聚体的像空间类似物的研究指出这 类现象可以映射到两个摆式转子宏观叠加态上^[30]。第二,宏观概念对应的是大量粒子, 有许多可激活的自由度,并且可能导致某些涌现行为。举个例子,环形晶格中的超冷玻 色子系统在弱相互作用半经典极限下是暗孤子,在强相互作用极限下是转晕态(yrast state),这个过程中相位的连贯性被打破,相位的突然跳转导致了系统的状态出现连续 的缠绕(winding)和退绕(unwinding)^[31–33]。第三,宏观概念也和大质量物体相关,可 能需要在量子力学加入引力项,采用量子引力理论来解释。目前理论研究上已经有人 在薛定谔方程中加入万有引力项,构造薛定谔-牛顿方程^[34–36]。第四,宏观可能会放大 系统的复杂性,这一点也逐渐得到了广泛关注。比如,最近对基于量子交互信息的复 杂网络系统有研究主要考察了横场 Ising 模型和玻色-哈伯德模型的临界点^[37]。

隧穿的概念和运输关系密切。不严格地说,运输是在势垒之上越过,而隧穿则是 在势垒之中穿过。因此,参与隧穿的可以是质量,也可以是电荷、自旋等。量子隧穿 的概念远远不止是通常理解的粒子的隧穿,比如可以是磁化在铁磁薄膜中的隧穿,或 者是在自旋为1的 BEC 中隧穿,或是横向自旋波中隧穿^[38,39]。本文还可以研究在分子 态之间的隧穿,比如氨和其他锥形分子^[6,40,41],再比如约瑟夫森结就是此类隧穿最简单 的模型^[42]。

接下来讨论粒子隧穿问题中粒子的统计性质,分为以下几种情况。粒子是玻色子 还是费米子,在低维下还可以是任意子;隧穿粒子只有一种组分还是由多种组分组成 的混合物;隧穿粒子是否可以用涌现的准粒子比如涡旋、孤子和斯格明子(skyrmion) 来描述。上述情况大部分都可能在超冷量子气系统中出现。目前,对少体系统的相关 研究已经有一些结论,其中最多的是针对玻色子和费米子系统的研究。如图1.1(b)所



图 1.1 多体隧穿中可能出现的现象示意图。(a) 原子间相互作用重塑了原始的方形势垒(虚线)。 (b) Tonks-Girardeau 气体中粒子的统计性质,即费米子(红色曲线)与玻色子(蓝色曲线)对单粒子 隧穿的指数衰减曲线出现不同情况的短时偏移。(c) 原子在束缚势阱内的轨道可能会变为混沌,该 势阱采用本文第三章研究的实验势阱。尽管可能存在这些难题,本文后续提出的等效一维模型仍 然适用。

示,由于两者基态的不同,玻色和费米 Tonks-Girardeau 气体在短时内对指数衰减显示 出不同类型的偏离^[14]。在少体费米子隧穿问题中还需要考虑到成对机制,这是区别于 玻色体系的一个重要特征^[13]。另外相互作用对这两个系统的影响也不同,本文会在下 一节中详细讨论这一点。在超冷单原子隧穿系统中,非指数衰减可能在某些参数区域 出现^[43]。

另外,BEC 混合物或者是多组分 BEC 的隧穿同样也为 MQT 提供了更多可能性。 混合物这个概念可以按以下几种情况来理解:多种不同种类的原子;同种原子但具有 不同内部原子态,比如处于不同超精细态的⁸⁷Rb 原子,再比如两个弱连接超流的隧 穿^[44];或者是采用了势阱的不同外部态,比如不同量子涡旋的隧穿^[45]。通常,混合物 参与的隧穿要比单物质的隧穿包含更多的信息,以及相干或退相干等性质。

理解隧穿物的类型是区分隧穿问题属于哪种类型的重要一步,后续的计算也会因此而简化。比如,如果准粒子的概念可以成立的话,或是可以将多体系统看作是单粒子系统都可以大大简化计算。另外,准粒子的概念也会引入新的现象。比如,非平衡准粒子在约瑟夫森结中的隧穿会导致退相干和超导量子比特的能量衰减,甚至产生谐振腔^[46,47]。然而,在强相互作用系统中通常并不会出现准粒子表述,本文将在下一节中阐述。

1.3.2 相互作用

原子间的相互作用也是研究量子隧穿问题时需要着重考虑的一点。一个著名的例 子就是约瑟夫森结的动力学机制^[16-19],它是发生在弱耦合的宏观量子态之间。比如, 对于弱相互作用,隧穿主导现象有 AC 和 DC 约瑟夫森效应^[18,48]。其中,当相互作用的 强度达到某一临界值时,隧穿粒子会发生自陷(self-trap)^[18],也就是说隧穿行为被抑 制,粒子主要局域在某一个势阱内。类似的效应也存在于激子和极化凝聚体中^[19]。然 而,若强相互作用的系统内出现偏差(bias)也可能将隧穿时间减少数十至数百个数量 级^[49,50]。

原子之间的排斥和吸引相互作用会对隧穿产生不同的影响。目前对少体系统的研 究再次为多体系统提供了一些线索。排斥相互作用系统中两个可分辨的费米子会在隧 穿过程中出现费米化^[51],然而在强吸引相互作用系统中则会出现成对现象^[13,51,52]。随 着粒子间相互作用由强吸引变为强排斥,隧穿率也呈现出大范围内数量级的变化^[51,52]。

相互作用的强度决定了描述隧穿的理论模型。比如, 玻色子在弱相互作用下通常可以由平均场理论描述^[20,21,23]。如图1.1(a)中蓝色虚线所示, 弱排斥相互作用产生一个等效势, 这个等效势随着波函数的变化而改变, 从而导致粒子数非指数衰减。这也是本文第三章研究的内容。

相互作用的增强可能会导致关联、涨落和纠缠等^[53],这些现象的存在都会导致平 均场理论失效。在此,本文列出 MQT 中可能存在的一些现象。首先,BEC 可能出现 破碎(fragmentation)或是耗尽(depletion)。破碎是系统在单粒子密度矩阵的多个模 中都存在宏观占据的现象。当相互作用增强,系统能量超过一定阈值时,破碎就会出 现^[22]。初始处于相干态的束缚超冷玻色气体隧穿至开放空间的过程中,在经历一段的 演化时间后会产生破碎^[24,54]。由于相位的概念是建立在单一的宏观占据模式上,这些 破碎的组分不再是相位相干。因此半经典理论越来越不适用,隧穿和其最初的概念表 现得非常不同。尽管如此,本文仍然隧穿概念表示粒子能量低于势垒能量时穿越势垒 的行为。除了破碎,凝聚体还会发生耗尽。耗尽是指在大多数模式上不再存在宏观占 据^[24]。其次,相互作用可能增强或是削弱隧穿率。比如,准束缚多体态的隧穿率会被 排斥(吸引)相互作用加速(减速)^[24]。再次,涨落效应也会影响隧穿率。比如,约瑟 夫森结内 Josephson-Leggett 模式中的量子涨落能够极大地增强 MQT 的逃逸速率^[55,56]。 最后,耗散(dissipation)也可能改变隧穿行为。在 Josephson-Leggett 模式中,量子耗 散可以抑制 MQT^[56]。

强相互作用下由于一维玻色-费米对偶表示,一维玻色子将展现出和无相互作用费 米子类似的输运特征^[57]。一个著名的例子就是 Tonks-Girardeau 气体,这是一个强相互 作用系统,其中玻色原子的表现类似费米子^[58]。有研究表明玻色 Tonks-Girardeau 气体 在短时间内会出现非指数衰减,展现出少体衰减的特征。相应地,费米 Tonks-Girardeau 气体则出现玻色化,其衰减趋势在长时间内偏离指数衰减^[14]。做为强相互作用的一 个极端例子,可以考虑单一费米气及其在弱卷曲引力表象中的全息对偶(holographic dual)^[59]。目前,单一费米气的宏观量子隧穿仍然是应用全息技术的研究中一个尚待开 发的领域^[60]。

1.3.3 束缚势阱

势阱规定了隧穿的环境,并对隧穿时间有着重要的影响。一个贯穿物理、化学等 多个领域的重要例子就是从一个或几个的单势阱中的离散模式隧穿到自由空间的连 续模式中,例如准束缚或是逃逸问题。这也是本文第三章中要研究的情况,本文将会 研究粒子间相互作用对单阱隧穿的影响^[61]。对于谐振势阱,在 BECs (Bose-Einstein condensates)的宏观量子隧穿过程中可以在塌陷临界点观察到幂级数的特征,然而对 于非谐振势阱,并没有这一现象^[62]。

双阱隧穿则与单阱隧穿完全不同,比如一个微小的偏差(bias)就能对隧穿产生指数型抑制。双阱中,两个势阱都包含离散模式,因此隧穿过程描述的是从一个势阱的 离散模式到另一个势阱的离散模式。约瑟夫森效应^[16-19,48]就是双阱模型,符合上述隧 穿模式。相关方向的研究包括 BECs 绝热输运^[63]、相互作用参与的 BECs 输运^[64] 以及 三维极化费米子隧穿^[65]。在常见假设下,仅需考虑每个势阱中某几个模式。

除了上述例子之外,还有例如周期势等其他势阱构型,比如光晶格。在静止周期光 晶格势阱中,物质波的在短时间内以二次方扩张^[66]。除了考虑势阱构型,构成势阱的 材料也可能会影响隧穿过程。比较柱状硅和气凝胶这两个不同的材料做成的势阱,在 低速下平均场相互作用导致其量子反射呈现不同程度的抑制^[67]。除了上述裸势阱,还 存在一些缀饰阱(dressed potential),例如射频缀饰阱^[68]。研究表明在射频缀饰阱中, 中性原子之间在同一格点内的相互作用得到了极大的增强,从而影响隧穿^[69]。

除静态势阱外,还存在一些动力学势阱。比如,一个受驱动破坏空间-时间对称 性的环形势阱能在系统中引起混沌^[70,71]。振动晶格可以使隧穿率减小,甚至在某些参 数条件下可以完全抑制隧穿^[66,72-74],同样的现象也发生在受驱动的双阱系统内^[75]。在 具有周期调整幅度的单阱中,与无相互作用的情况相比,相互作用的存在能够抑制隧 穿^[76]。还有一些动力学势垒并不是直接由外界驱动形成,而是由其他手段形成。比如 图1.1(a)中所示,粒子之间的相互作用可能改变势阱的构型,将一个静态的势阱变为一 个动态势阱。

1.3.4 系统的维度

隧穿通常发生在势阱中束缚最薄弱的地方,因此该点的隧穿率也是最大的,在隧 穿过程中也会被优先选择。比如,在本文第三章中,隧穿就主要发生在势阱束缚较薄 弱的两个鞍点,其隧穿路径示意地画在图3.1(b)中。这个过程就如大坝泄水一般,水倾 向于从大坝最矮的位置流出。在这种观点下,隧穿可以被看作是一维或者准一维过程。 但是,高维度仍然可以带来新的现象。其中一个可能的现象就是混沌,混沌的参与极 大的增加了系统动力学的复杂性^[28]。图1.1(c)中所示的路径示意地描绘了势阱中可能 出现的混沌现象,在鞍点处的虚线代表此处发生的宏观量子隧穿。有混沌参与的隧穿 可能会引起隧穿振荡^[29],并在隧穿率中制造不规律涨落^[77,78]。对于三维双势阱中的大 量极化费米子来说,由额外自由度带来的另种一种可能的结果是不相干振荡^[65]。

第二章 超冷原子气: 玻色系统

本章本文介绍超冷玻色原子气的相关概念及其理论模型。作为本文的主要研究对象,本文首先介绍玻色系统超冷原子气中的玻色-爱因斯坦凝聚现象。接下来介绍束缚凝聚体的光势阱,也就是光晶格。随后介绍平均场 Gross-Pitaevskii 方程和描述光晶格中玻色系统的玻色-哈伯德模型,以及扩展的玻色-哈伯德模型。最后再简单介绍几种常用的数值模拟方法。

2.1 玻色-爱因斯坦凝聚

许多量子统计的教科书都会讲解玻色气体中发生的玻色-爱因斯坦凝聚现象^[79,80]。 首先简单介绍经典极限条件(非简并条件),它可以表述为

$$\frac{V}{N} (\frac{2\pi m k_B T}{\hbar^2})^{3/2} \gg 1$$
(2.1)

其中 N 为系统总粒子数,V 为气体体积,m 为粒子质量,T 为系统温度。满足上述条件的气体称为非简并气体。非简并气体、定域系统和经典系统都可以用经典统计描述, 其中粒子可以分辨,无论费米系统还是玻色系统都满足玻尔兹曼分布。反之,不满足 非简并条件的气体就是简并气体,其粒子不可分辨,需要用量子统计来计算,玻色系统对应玻色分布,费米系统对应费米分布,需要分别处理。

本节讨论处于上述临界条件的玻色系统中出现的独特现象,即玻色-爱因斯坦凝聚。这是 Satyendra Nath Bose 和爱因斯坦于 1924-1925 年前后在理论上首先预言的。考虑 N 个无相互作用的全同玻色子组成的系统处于热力学平衡态,其温度为 T,体积为 V。不考虑自旋等内部态的差异,假设所有粒子均处于同一内部态。此时,单粒子态 v 的平均占据数服从玻色分布

$$f(\epsilon_{\nu}) = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\nu}-\mu)/k_BT} - 1}$$
(2.2)

其中 ϵ_v 是单粒子态能级,由于系统满足粒子数守恒的条件,上式引入化学势 μ 。当系统满足总粒子数等于各个能级上粒子占据数之和时,化学势是 N 和 T 的函数。由于处在任一能级的粒子数都不能取负值,因此要求对所有能级 ϵ_v 均有 $e^{(\epsilon_v - \mu)/k_BT} > 1$ 。 ϵ_0 表示基态能级,也是系统最低能级,则这个要求还可以表述为 $\epsilon_0 > \mu$,即系统的化学势必须低于粒子最低能级的能量。

高温下,由于 μ ≪ ε₀,低能态粒子占据数远远小于 1,量子统计效应可以忽略不 计,上述分布函数近似为玻尔兹曼分布

$$f(\epsilon_{\nu}) \approx e^{-(\epsilon_{\nu}-\mu)/k_B T} \tag{2.3}$$

随着温度的降低,化学势增大,但不能超过 ϵ_0 ,平均占据数也随之增大。因此任意激发态的粒子平均占据数最大值为 $1/[e^{(\epsilon_r-\epsilon_0)/k_BT} - 1]$,如果此时激发态粒子数总和小于 N,那就意味着其余的粒子都处于基态。由于基态粒子占据数可以是无限大的,当温度极低时,基态聚集大量粒子,形成了玻色-爱因斯坦凝聚现象。本文将形成玻色-爱因斯坦凝聚的最高温度记为 T_C ,也叫转变温度或临界温度。当温度低于 T_C 时,凝聚态的化学势始终等于 ϵ_0 。基态的粒子占据数 N_0 为总粒子数 N减去所有激发态的占据数总和 N_{ex} 。 N_{ex} 可由系统态密度 $g(\epsilon)$ 算得

$$N_{ex} = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon)$$
 (2.4)

其中 $g(\epsilon) = C_{\alpha}\epsilon^{\alpha-1}$ 。 C_{α} 是一个常数, α 则与系统维度 d 有关, $\alpha = d/2$ 。假设系统最低 能量为零,则当温度为 T_C 时, $\mu = 0$,上式达到最大值,令 $x = \epsilon/kT_c$,则

$$N = N_{ex}(T_C, \mu = 0) = C_{\alpha}(k_B T_c)^{\alpha} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\alpha - 1}}{e^x - 1} = T(\alpha)\varsigma(\alpha)(k_B T_c)^{\alpha}$$
(2.5)

其中 $T(\alpha)$ 是伽马函数, $\varsigma(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\alpha}$ 是黎曼函数。对于一维均匀玻色气体, $\alpha = 1/2$, 其低能态密度发散,因此不存在玻色-爱因斯坦凝聚。对于二维均匀玻色气体, $\alpha = 1$,态密度为常数,上式积分发散,因此只有当 $T_C = 0$ 时玻色-爱因斯坦凝聚才会发生。而对于三维系统,玻色-爱因斯坦凝聚可以在有限温度下发生,对于三维均匀玻色气体, $\alpha = 3/2$,其转变温度为 $k_BT_C \approx 3.31 \frac{\hbar^2(N/V)^{3/2}}{m}$,而对于束缚在三维谐振势阱中玻色气体, $\alpha = 2$,其转变温度为非零有限值 $T_C \approx 4.5(\frac{(\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}/2\pi}{100H_z})N^{1/3} nK$,其中 ω_x 为谐振势阱在x方向上的频率, y_z 方向依此类推。由此可以看出能否发生玻色-爱因斯坦凝聚现象与系统的态密度和能量两者的关系密切相关。所以当二维或一维玻色气体的态密度由于束缚势阱等因素的不同而发生变化时,也有可能在零温或有限温度下发生玻色-爱因斯坦凝聚。

对于三维均匀玻色气体,温度为 T 时,凝聚态的占据数为 $N_0 = N[1 - (T/T_C)^{3/2}]$ 。可以看出,当 $T < T_C$ 时,有宏观数量级的粒子在基态凝聚,这些粒子的集合叫做玻色凝聚体。

距爱因斯坦的理论提出约 70 年后,直到 1995 年,实验上才在稀薄气体中成功制造出玻色-爱因斯坦凝聚体。这个实验先后由两个实验组完成,首先是科罗拉多大学博

尔得分校 NIST-JILA 实验室的 Eric Cornell 和 Carl Wieman 等人采用激光冷却和蒸发 冷却等技术将铷原子气冷却至 170*nK* 后获得玻色-爱因斯坦凝聚体^[81]。随后,麻省理 工 Wolfgang Ketterle 等人使用钠原子独立地获得了玻色-爱因斯坦凝聚体^[82]。三人因此 共享了 2001 年的诺贝尔物理学奖。他们里程碑式的实验开创了一个快速发展的新兴领 域——超冷原子气。目前,人们已经在¹H,⁷Li,²³Na,³⁹K,⁴¹K,⁵²Cr,⁸⁵Rb,⁸⁷Rb,¹³³Cs,¹⁷⁰Yb,¹⁷⁴Yb,⁴He^[83,84] 中实现玻色-爱因斯坦凝聚。另外,由⁶Li 或 ⁴⁰K 等费米 原子对组成的分子中也观测到了玻色-爱因斯坦凝聚。

尽管上述实验都是在稀薄气体中实现的,但其中原子之间仍然可以有很强的相互作用,因此这类实验也可以用来描述强关联多体系统。稀薄原子气的粒子数密度约为 10¹³ – 10¹⁵ cm⁻³。相对地,室温下空气中的分子数密度为 10¹⁹ cm⁻³。为了在如此低密度 的系统中观察到量子现象,需要将温度降至 10⁻⁵ K 以下,与固体和液体中发生量子现 象的温度相比是极低的。

玻色-爱因斯坦凝聚体在实验中有很多优点。首先,它的实验环境有着极其好的可 控性,比如通过 Feshbach 共振对相互作用的调节可以超过七个数量级^[85]。其次,实验 技术使用的射频磁势阱^[86] 和光势阱^[87] 更有利于对实验的调控。再次,利用玻色-爱因 斯坦凝聚可以实现一些其他实验中难以实现的多体量子态^[88]。第三章讲到的多体模拟 也可以阐明这一点。玻色-爱因斯坦凝聚体还具有可控的统计性质和空间维度。一至三 维光晶格中的玻色-爱因斯坦凝聚中可以实现对格点的光学显微术。最后,在玻色气体 中,原子干涉法可以观测到准一维系统中高至十阶的关联子^[89]。总之,玻色-爱因斯坦 凝聚有着广泛的应用。本文会在后面的章节中着重研究特定系统中的动力学性质。本 章接下来的章节会介绍描述玻色冷原子系统的几个常见理论模型,分别是基于平均场 理论的 Gross-Pitaevskii 方程和描述多体系统的玻色-哈伯德模型,以及其他相关内容。

2.2 光晶格

2.2.1 原子与光场的相互作用

当一个外加静电场在原子尺度上可以视为空间均匀分布时,该电场和原子之间相 互作用的哈密顿量可以用偶极近似表示为

$$H_{int} = -\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{\Xi} \tag{2.6}$$

其中, Ξ 是电场强度, d 是原子的偶极矩算符, $d = -e \sum_{j} r_{j}, r_{j}$ 是原子中电子相对于原 子核的位置算符, 求和遍历原子中的所有电子。通常, 可以用微扰论求解原子在电场 中的能量。由于, 在无外加电场的情况下, 由于大部分原子态可以很好的近似为宇称 算符的本征态,在此对称性下,其偶极动量为零,因此能量的一阶微扰修正为零。能 量的二阶微扰修正为

$$\Delta E_g = -\sum_e \frac{|\langle e|H_{int}|g\rangle|^2}{E_e - E_g}$$
(2.7)

 $|g\rangle$, $|e\rangle$ 分别表示原子的基态和激发态。通过原子极化率 α 可以将偶极矩的期望值和 电场联系起来, $\langle d \rangle = \alpha \Xi$, 此时能量修正又可以写为 $\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha \Xi^2$ 。做对比后可以得到 原子极化率

$$\alpha = -\frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \Xi^2} = \sum_{e} \frac{2|\langle e| \, \boldsymbol{d} \cdot \hat{\boldsymbol{e}} \, |g\rangle|^2}{E_e - E_g}$$
(2.8)

其中 \hat{e} 是电场方向的单位矢量。考虑到光场中的电场含时,可将频率为 ω 的电场写为 $\Xi(\mathbf{r},t) = \Xi_{\omega}e^{-i\omega t} + \Xi_{-\omega}e^{i\omega t}$,须符合条件 $\Xi_{-\omega} = \Xi_{\omega}^{*}$ 以保证电场是实数。采用含时微扰 可以解得二阶能量修正为

$$\Delta E_g = -\sum_e |\langle e| \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}} |g \rangle|^2 (\frac{1}{E_g - E_e + \hbar\omega} + \frac{1}{E_g - E_e - \hbar\omega}) |\Xi_\omega|^2 = -\alpha(\omega) |\Xi_\omega|^2 = -\frac{1}{2} \alpha(\omega) \langle \Xi(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t$$
(2.9)

实际操作中通常用到 $E_e - E_g \approx \hbar \omega$,因此在上述求和中可以仅保留满足这一共振条件的项,此时动力学极化率 $\alpha(\omega)$ 为

$$\alpha(\omega) = \frac{|\langle e | \boldsymbol{d} \cdot \hat{\boldsymbol{e}} | g \rangle|^2}{E_g - E_e - \hbar\omega}$$
(2.10)

上述讨论都是基于原子的激发态寿命是无穷大这一假设,但真实系统中原子的激发态会因自发辐射发射光子而衰减,因此它的寿命是有限的。假设激发态寿命为 $1/\Gamma_e$,则将上面的极化率公式中 E_e 换成 $E_e - i\hbar\Gamma_e/2$ 即可成立,相应的能量修正为 $\Delta E_g = V_g - i\hbar\Gamma_e/2$ 。其中

$$V_g = \frac{\hbar \Omega_R^2 \delta}{\delta^2 + \Gamma_e^2 / 4} \tag{2.11}$$

这里本文定义失谐 $\delta = \omega - (E_e - E_g)/\hbar$,并引入 Rabi 频率 $\Omega_R = |\langle e| \mathbf{d} \cdot \Xi | g \rangle |/\hbar$ 。原子 在光场中的能级移动可以看作是原子感受到一个等效势 V_g ,这个现象称为 AC Stark 效 应,势场 V_g 的大小和性质由失谐 δ 的大小和正负决定。 $\delta > 0$ 称为蓝失谐,对应排斥 势; $\delta < 0$ 称为红失谐,对应吸引势,光势阱就是利用红失谐来束缚原子的。

2.2.2 光晶格的产生

光晶格具有空间周期结构,产生一维光晶格的一个简单办法就是将两束相同频率的激光相向叠加。为简化计算,本文进一步假设这两束激光都是线性极化,且电场方向均沿 z 轴,此时总电场为

$$\Xi_z = \Xi_0 \cos(qx - \omega t) + \Xi_0 \cos(-qx - \omega t) = 2\Xi_0 \cos(qx)\cos(\omega t)$$
(2.12)

其中q是激光波矢, Ξ₀是电场强度,这时原子感受到的等效势可以写为

$$V = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle \Xi(\mathbf{r},t)^2 \rangle_t = \frac{V_0}{2}\cos(\frac{2\pi x}{d})$$
(2.13)

势场在 x 方向是周期的,其周期 $d = \pi/q = \lambda/2$ 为激光波长 λ 的一半,势阱的深度由激光的电场强度和极化率 $\alpha(\omega)$ 的实部决定。调节两束对射激光波矢的角度,可以改变势场的周期。

除以上静态光晶格之外,还可以产生移动的光晶格,研究其中 BEC 的动力学性质。 假设两束线性极化的激光频率和波矢分别为 ω_1, ω_2 和 q_1, q_2 ,它们叠加后的总电场对时 间的平均为

$$\langle \Xi^2 \rangle = \frac{1}{2} \Xi_1^2 + \frac{1}{2} \Xi_2^2 + \Xi_1 \cdot \Xi_2 cos[(\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2) \cdot \boldsymbol{r} - (\omega_1 - \omega_2)t + \delta_1 - \delta_2]$$
(2.14)

其中 δ_1, δ_2 分别表示两束光的相位。上式最后一项决定了晶格的空间周期性,同时如果两束光的电场极化方向相互垂直,则最后一项为零。如果 $\omega_1 \neq \omega_2$,则可以得到这个移动光晶格的速度为

$$v = \frac{\omega_1 - \omega_2}{|\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2|} \tag{2.15}$$

进一步地,调节两束光的频率使之随时间变化,还可以产生加速运动的光晶格。从量 子力学的角度理解,光晶格的产生可以看作是原子从一束光中吸收一个光子,然后在 另一束光中释放出一个光子,导致原子动量改变 ħ(**q**₁ - **q**₂)。这是一个拉曼过程。

叠加两束以上具有不同波矢的激光可以产生高维光晶格。简单起见,本文考虑这些线性极化的激光具有相同的频率,则叠加后的总电场为 $\Xi = \sum_i \Xi_i cos(q_i \cdot r - \omega t + \delta_i)$, i 代表每一束激光。电场对时间的平均为

$$\langle \mathbf{\Xi}^2 \rangle = \frac{1}{2} \Xi_i^2 + \sum_{i < j} \Xi_i \cdot \Xi_j cos[(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) \cdot \mathbf{r} + \delta_i - \delta_j]$$
(2.16)

可见产生二维周期晶格至少需要两对独立的 $q_i - q_j$,则至少需要三束激光干涉,同理 产生三维周期晶格则至少需要四束激光干涉。实际应用中,为了操作便利一般采用更 多数量的激光来产生二维和三维的光晶格。通过改变激光的空间排列可以产生不同的 晶格形状。以三维立方晶格为例,忽略常数项,写出其势场空间部分的形式为

$$V(x, y, z) = \frac{V_0}{2} [\cos(2qx) + \cos(2qy) + \cos(2qz)]$$
(2.17)

图 2.1展示了一组二维和三维光晶格的示意图,对于二维光晶格,当另外一个维度的势场很弱时可以忽略原子在势阱之间的跃迁,原子被束缚在雪茄型的管状势阱中,此时该系统可以视为准一维系统。



图 2.1 由二或三组正交驻波叠加形成二维(a)和三维(b)光晶格。对于二维光晶格,原子被束缚在一维紧束缚的管状阵列中。三维光晶格排成简单立方体的形状,每一个光格子可以近似看作 是紧束缚的谐振子模型。图片摘自 Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008)。

2.3 平均场理论: Gross-Pitaevskii 方程

平均场近似是将一个单体受到的所有外界影响近似为一个平均的等效外场,它可以将多体问题简化为单体问题进行求解。玻色系统中常用的平均场模型是 Gross-Pitaevskii 方程,简称 GP 方程。它是一个非线性薛定谔方程,描述低温下非均匀稀释 玻色子的动力学方程,其非线性项反映的是粒子间的相互作用。通常,在外场中弱相 互作用的玻色系统的多体哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = \int d\boldsymbol{r} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ext}(\boldsymbol{r}) \right] \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2} \int \int d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}') V_{int}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r}') \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(2.18)

其中, *m* 是单粒子质量, *V_{ext}* 是外势, *V_{int}* 是粒子之间的相互作用, $\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 为玻 色子产生和湮灭算符, 满足对易关系 [$\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$] = $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r})$ 。本文考虑低温稀释原子 气, 此时原子间距足够大, 原子间相互作用十分微弱, 可以由 s 波散射描述, 且以两体 散射为主。本文进一步假设, 原子之间为弹性碰撞, 且只在碰撞时发生相互作用。此 时, 原子之间的相互作用可以写为一个 δ 势, *V_{int}*(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = $g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r})$, 其中 $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$, a_s 为玻色子 s 波散射长度。g 代表了相互作用的强度和性质, g > 0 代表原子间为排斥 相互作用, g < 0 代表原子间为吸引相互作用。

场算符的时间演化可以由海森堡方程写出

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t),\hat{H}] = [-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(\boldsymbol{r}) + g\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)]\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)$$
(2.19)

接下来本文做平均场近似。首先将场算符做分解 $\hat{\psi}(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r},t) + \hat{\psi}(\mathbf{r},t)$,其中 $\psi(\mathbf{r},t) \equiv \langle \hat{\psi}(\mathbf{r},t) \rangle$ 是场算符的系综平均, $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ 代表场算符围绕平均值的涨落。 将上述式子带入,并忽略涨落部分,可以得到平均场 Gross-Pitaevskii 方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 + V_{ext}(\boldsymbol{r}) + g|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\right]\psi(\boldsymbol{r},t)$$
(2.20)

归一化条件为 $\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = N$, N 为粒子总数。

同时,本文将用另一种方法推导出 GP 方程。首先考虑做赝势假设的多体系统哈 密顿量

$$\hat{H} = \int d\boldsymbol{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ext}(\boldsymbol{r}) + g\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{\prime}) \right]$$
(2.21)

在 Hartree-Fock 近似下,N个玻色子的多体波函数可以写为单粒子波函数的乘积形式

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = (\frac{1}{\sqrt{N}} \psi(\mathbf{r}_1)) (\frac{1}{\sqrt{N}} \psi(\mathbf{r}_2)) ... (\frac{1}{\sqrt{N}} \psi(\mathbf{r}_N))$$
(2.22)

归一化条件为 $\int |\Phi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = N$,则哈密顿量在该波函数下的期待值为

$$E = \int d\mathbf{r} [(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g|\psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}\prime)|^4]$$
(2.23)

将上式的作用量对 ψ^* 做变分 $\delta[-i\hbar \int_{t_1}^{t_2} \int \psi * \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{r} dt + \int_{t_1}^{t_2} E dt] = 0$ 得到公式2.20形式的 GP 方程。

从上面的推导过程可以看出,平均场近似就是将粒子之间的相互作用用一个等效的平均场来替代。对于低温下的稀薄玻色气体,绝大部分原子处于凝聚态,此时 GP 方程的描述是非常好的。对于光晶格系统,只需要将上式中的外势 V_{ext} 换成光晶格势阱即可。当外势为零时,GP 方程具有平面波解,其能量多出一个与相互作用因子 g 有关的常数项。由于 GP 方程是非线性方程,由非线性项可引出许多新奇的量子现象,比如二能级系统中的非线性 Landau-Zener 隧穿^[90] 以及孤子等。孤子解是 GP 方程的一个经典的精确解,根据吸引和排斥相互作用分为亮孤子和暗孤子,后续研究中还扩展至高阶孤子。如果在 GP 方程中加入一个随机项描述原子的热效应,还可以用来描述有限温度下的玻色-爱因斯坦凝聚体^[91,92]。对于带自旋的粒子,也可以通过修改 GP 方程来描述^[93]。

2.4 紧束缚模型和万尼尔函数

紧束缚模型(Tinght-binding model,简称 TB 模型)与原子轨道线性组合法(Linear combination of atomic orbitals method,简称 LCAO 方法)类似,是将晶格中单粒子波函数近似为孤立粒子局域波函数的叠加。孤立原子的定域波函数 $\varphi_m(r - R_n)$ 满足孤立势场下的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 + U(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)\right]\varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n) = E_n\varphi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)$$
(2.24)

其中 R_n 是晶格的正格矢,标记格点位置。m 标记第 m 个能级。 $\varphi_m(r - R_n)$ 是孤立原子 哈密顿量 H_{at} 本征能级 E_n 对应的本征波函数。当原子位于晶格中时,由于这个原子的 波函数会和临近格点内原子的波函数重叠,所以 $\varphi_m(r - R_n)$ 不是晶格哈密顿量的本征 波函数。紧束缚近似假设格点对原子的束缚力很强,不同格点波函数的重叠部分很小。 此时,可以将晶格的哈密顿量写为每个格点上势阱 $H_{at}(r - R_n)$ 的叠加,然后将格点之 间的重叠 ΔU(r) 视为微扰,具体形式为

$$H(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{R}_n} H_{at}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n) + \Delta U(\boldsymbol{r})$$
(2.25)

根据紧束缚近似,其本征波函数 $\psi_m(\mathbf{r})$ 可以写为原子轨道波函数 $\varphi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 的线性叠加

$$\psi_m(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} b_m(\mathbf{R}_n)\varphi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$$
(2.26)

由于光晶格是周期势,其波函数需满足布洛赫定理。即当平移晶格矢量 **R**_n时,同一能量本征值的波函数只增加相位因子 *e^{ik·R_n}*,其中 *k* 是波函数的波矢,即波函数为调幅平面波。因此可以得到 *b_m* 的形式,并将波函数重新写为

$$\psi_m(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{R}_n} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n} \varphi_m(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)$$
(2.27)

此时可以将波函数视为一组定域波函数的展开。同时也可以将上式视为布洛赫波函数的傅里叶变换。此时, $\varphi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 为一组正交完备基,称作万尼尔(Wannier)函数,记为 $w_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 。万尼尔函数最早由 Gregory Wannier 提出^[94,95],作为一组正交完备基,已经被广泛应用于许多领域。万尼尔函数有多种选取方式,最常见的方式就是通过布洛赫函数的傅里叶变换构造而得。现在将上式做傅里叶变换得到万尼尔函数

$$w_m(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_n} \psi_m(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$$
(2.28)

在万尼尔表象下, 波函数可以写为

$$\psi_m(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = \sum_n c_n w_m(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)$$
(2.29)

接下来要讨论的玻色-哈伯德模型就是在万尼尔表象下得到的二次量子化哈密顿量。

2.5 玻色-哈伯德模型

玻色-哈伯德模型,英文为 Bose-Hubbard model,简称 BH 模型,描述晶格中有相 互作用但无自旋的玻色子系统。它是哈伯德模型在玻色系统中的应用,最早由 Gersch 和 Knollman 于 1963 年引入^[96]。BH 模型有许多重要的应用,比如超流-Mott 绝缘体相 变。不同于前面讲述的平均场 GP 方程,BH 模型是多体系统的二次量子化模型,也是 多体层面的描述。

首先,本文仍从公式2.18开始推导 BH 模型。对粒子之间的相互作用仍然引入前述 赝势假设,多体系统哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r}\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 + V_{ext}(\mathbf{r})\right]\hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g\int d\mathbf{r}\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$$
(2.30)

进一步将哈密顿量分为无相互作用的部分 \hat{H}_0 和有相互作用的部分 \hat{H}_{int} , 分别为

$$\hat{H}_0 = \int d\boldsymbol{r} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) [-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ext}(\boldsymbol{r})] \hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \qquad (2.31)$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2}g \int d\boldsymbol{r} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \hat{\psi}(\boldsymbol{r})$$
(2.32)

考虑紧束缚近似,将场算符用最低能带的万尼尔基展开为

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i} w(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{i})\hat{b}_{i}, \qquad (2.33)$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) = \sum_{i}^{\prime} w^{*}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{i})\hat{b}_{i}^{\dagger}$$
(2.34)

其中,*i*标记晶格上不同格点, \hat{b}_i 和 \hat{b}_i^{\dagger} 分别为第*i*个格点上玻色子的湮灭和产生算符。 由于万尼尔函数的完备性, \hat{b}_i 和 \hat{b}_i^{\dagger} 需满足[$\hat{b}_i, \hat{b}_i^{\dagger}$] = δ_{ij} ,这也正是玻色子产生湮灭算符的对易关系。

将公式2.34代入多体系统哈密顿量无相互作用部分 Ĥ₀ 中可以得到

$$\hat{H}_{0} = -\sum_{i \neq j} J_{i,j} \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{j} - J_{i,i} \sum_{i} \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{i}, \qquad (2.35)$$

$$J_{i,i} = -\int d\mathbf{r}(w^*)_i(\mathbf{r}) [-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V_{ext}(\mathbf{r})] w_j(\mathbf{r})$$
(2.36)

将最后一项吸入化学势中,则 \hat{H}_0 中仅剩 $i \neq j$ 的求和项,这一项代表粒子在不同格点 之间的跃迁, $J_{i,j}$ 为跃迁系数。BH 模型中仅考虑粒子在最近邻格点之间的跃迁,忽略 其他跃迁项,记 $J = J_{i,i\pm 1}$,则 $\hat{H}_0 = -\sum_{\langle i,j \rangle} J \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j$ 。

将公式2.34代入多体系统哈密顿量有相互作用的部分 Ĥint 中得到

$$\hat{H}_{int} = \sum_{ijkl} g \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_k \hat{b}_l$$
(2.37)

取i = j = k = l可得

$$\hat{H}_{int} = \frac{U}{2} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i \hat{b}_i = \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \qquad (2.38)$$

$$U = g \int d\boldsymbol{r} |w_i(\boldsymbol{r})|^4 \tag{2.39}$$

其中 $\hat{n}_i = \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i$,为第 *i* 个格点上玻色子的总数。*U* 代表单个格点内两个粒子之间的相 互作用,只有当单个格点内粒子数大于 1 时,这一项才不为零。当 *U* < 0 时玻色子之 间为吸引相互作用,当 *U* > 0 时玻色子之间为排斥相互作用。

2.5.1 扩展的玻色-哈伯德模型

在上一节的推导中,对于多体系统哈密顿量有相互作用的部分 \hat{H}_{int} ,本文选择公式2.37中 i = j = k = l的项,这也是 \hat{H}_{int} 中较大的一项。接下来本文计算出其他几项。取 $i = j, k = l = i \pm 1$ 以及其所有排列组合形式,公式2.37右边可以分为两种情况讨论。一种情况是

$$\hat{H}_P = P \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_j \hat{b}_j, \qquad (2.40)$$

$$V = \frac{g}{2} \int d\boldsymbol{r} w_i^*(\boldsymbol{r}) w_j^*(\boldsymbol{r}) w_j(\boldsymbol{x}) w_i(\boldsymbol{r})$$
(2.41)

Ĥ_P代表两个粒子同时在最近邻格点之间的跃迁。另一种情况为

$$\hat{H}_{V} = V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{j} \hat{b}_{i} = V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_{i}(\hat{n}_{j}), \qquad (2.42)$$

$$V = \frac{g}{2} \int d\boldsymbol{r} w_i^*(\boldsymbol{r}) w_j^*(\boldsymbol{r}) w_j(\boldsymbol{x}) w_i(\boldsymbol{r})$$
(2.43)

 \hat{H}_{V} 代表两个最近邻格点i和j格点上粒子之间的相互作用。需要注意的是V和P的取值是一样的,只是意义不同,所以采用不同字母来区分。取 $i = j = k, l = i \pm 1$ 以及其

所有排列组合形式,公式2.37右边可得

$$\hat{H}_{W} = W \sum_{\langle i,i \rangle} [(\hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{j} \hat{n}_{j} + \hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{j} \hat{n}_{i}) + (\hat{n}_{j} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{i} + \hat{n}_{i} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{i})], \qquad (2.44)$$

$$W = \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} w_i^*(\mathbf{r}) w_k^*(\mathbf{r}) w_j(\mathbf{r}) w_i(\mathbf{r})$$
(2.45)

 \hat{H}_W 代表由于最近邻格点内粒子与本格点内粒子相互作用而导致单粒子在这两个格点 之间的跃迁,也叫最近邻格点辅助跃迁。需要注意的是不同格点之间场算符对易,再 结合粒子数算符的定义,可以将求和内的场算符重新组合,从而写出不同的表达形 式,但这些形式都是等价的。将上述推导结合起来,可以得到扩展的玻色-哈伯德模型 (EBHM) \hat{H}_{EBH} 的形式为

$$\begin{split} \hat{H}_{EBH} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + h.c.) - \tilde{\mu} \sum_i \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \\ &+ V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} + P \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j \hat{b}_j \\ &+ \sum_{\langle i,j \rangle} W(\hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j \hat{n}_j + \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j \hat{n}_i + h.c.) \end{split}$$

通常文献中能见到的扩展玻色-哈伯德模型是加入V和P项,或是其中某一项。后续加入的项在数量级上通常小于BH模型的U项。不过当U项为零时,后续项的重要性会突出。本文还可以接着计算次近邻等其他更高阶的项,至于在哪里做截断要视具体情况而定。

相对于 BH 模型,EBHM 包含长程相互作用,同时也带来了新的相位,比如玻色 Haldane 绝缘体相^[97]。将 EBHM 应用到自旋系统中同样也会改变相图,出现成对超流 相^[98]。另外,描述无序系统的哈密顿量是在 BH 模型上加入描述扰动相关的项,也算 是一种扩展的 BH 模型^[99]。

2.5.2 数值方法

精确对角化(ED)是一种简单的直接求解哈密顿量基态及激发态的方法。其具体 过程是在一套完备基下得到哈密顿量的矩阵形式,通过酉变换将矩阵对角化,求得其 所有本征值和本征态。对于 BH 模型来说,最常用的完备基是 Fock 态。理论上来讲, 精确对角化完全可以求解 BH 模型和 EBHM 中的问题,但是随着系统尺寸变大,比如 增加粒子数或格点数,精确对角化方法所需要的计算空间急剧增加,这就迫使人们通 过做一些近似来寻求其他的数值方法。不过对于尺寸较小的系统,精确对角化通常是 最佳选择。

上文提到的近似方法在一维系统中包含玻色子的多配置时变Hartree 方法(multiconfigurational time-dependent Hartree for bosons,简称 MCTDHB),密度矩阵重整化群(Density Matrix Renormalization Group,简称 DMRG)和与之相关的时间演化块湮灭(Time-evolving Block Decimation,简称 TEBD)。两者都可以将计算的范围扩展至上千个粒子及上千个格点的系统中,同时还可以计算其中的时间演化动力学。比如,采用 TEBD 模拟玻色-哈伯德模型中的超流衰变的研究验证了数值方法在计算瞬子问题上的限制^[100,101]。在量子逃逸问题中可以采用 MCTDHB 方法^[54,102]。另外也可以改进这些方法扩大计算范围,比如采用时适应的 MCTDHB 去研究约瑟夫森结^[103]。

由于高维度系统中纠缠的快速增长,计算难度加大,目前常用的数值计算方法是 量子蒙特卡罗方法。

第三章 宏观量子隧穿

最近位于多伦多的实验组做了一个单阱宏观量子隧穿实验,他们发现在隧穿过程中势阱内处于准束缚态的粒子数呈现非指数衰减趋势^[61]。本章将通过实验和理论两个方面来验证这种非指数衰减的结果是由粒子之间的相互作用造成的。本章采用Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin 近似来模拟数万个处于玻色-爱因斯坦凝聚态的⁸⁷Rb原子的量子隧穿过程,并将该模型中的势能换为由平均场效应引起的等效势。随后,本章将等效平均场模型与三维Gross-Pitaevskii方程的数值模拟结果对比。

3.1 一个宏观量子隧穿实验

在参考文献^[61]中,实验组首次在单阱隧穿实验中观测到粒子数呈非指数衰减趋势。本节将为该实验提供一套理论描述,并介绍前述文献中未发表的一些实验数据及 其中的三维平均场模拟结果,最后本节采用第3.2章中介绍的等效一维JWKB理论模型 来拟合一组实验数据。

3.1.1 实验设计

这个实验研究了具有排斥相互作用且处于准束缚态的⁸⁷Rb BEC 原子的单阱隧穿 现象。其中,势阱在 *x* 和 *z* 轴方向为谐振势,其频率分别为 ω_x 和 ω_z。由于重力和一 个磁场梯度的存在,势阱在 *y* 轴方向(也就是竖直方向)有一个常量加速度 *a*。势阱在 *y-z* 平面的剖面图为图3.1(b),三维势阱的数学表达式为

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 - may + V_b(x, y, z),$$

$$V_b(x, y, z) = V_0 \exp\left(-2y^2/\omega(z)^2\right),$$

$$\omega(z) = \omega_0 \left(1 + (z/z_R)^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(3.1)

其中 V_0 是势阱的最高峰值, $z_{\rm R} = 8 \, \mu {\rm m}$ 是瑞利长度, ω_0 是势垒宽度, $\omega_0 = 1.3(0.1) \, \mu {\rm m}$, $\omega(z)$ 是高斯光束的束腰半径。

该实验中采用了两种势阱构型,即弱束缚和紧束缚构型。弱束缚势阱构型的参数 为 $\omega_x = 2\pi \times 32.7(0.24)$ Hz, $\omega_z = \omega_x/2$ 和 a = 2.08(0.04) m/s²,紧束缚势阱构型的参数 为 $\omega_x = 2\pi \times 86.6(0.6)$ Hz, $\omega_z = \omega_x/2$ 和 a = 8.40(0.06) m/s²。由于紧束缚势阱对粒子的



图 3.1 宏观量子隧穿实验。(a) 在 BEC 中研究 MQT 的实验过程示意图。(b) 弱束缚势阱构型的三 维形状,图中势垒高度为 190 nK(峰值)。鞍点距势阱最低点为 $x_0 = 18(1) \mu m$ 。图示紫色区域代表 束缚在势阱中的 BEC,箭头示意其隧穿路径经过鞍点。(c) 束缚在势阱中的粒子数 N 的实验数据显示了非指数衰减的趋势。粉色虚线为背景损耗速率。竖直虚线用来划分经典溢出、MQT 和背景损耗区域。
第三章 宏观量子隧穿

			11/103
哞值 (nK)	• 較尚 (nK)	$x_0 (\mu {\rm m})$	$N_0/10^3$
146 ± 10	46 ± 3	16 ± 1	423 ± 21
170 ± 11	52 ± 10	17 ± 2	548 ± 37
190 ± 13	58 ± 4	18 ± 1	559 ± 33
221 ± 16	69 ± 5	20 ± 1	630 ± 26
260 ± 18	81 ± 6	21 ± 1	583 ± 32
299 ± 21	92 ± 6	23 ± 1	663 ± 54

表 3.1 实验数据和估测值。表中数据源于弱束缚势阱构型,分别为峰值、鞍高、x₀和 N₀。其中, x₀ 是从局域最低点至鞍点的水平距离, N₀为束缚在势阱中的初始粒子总数。

束缚更强,所以紧束缚势阱中的初始粒子总数约为弱束缚势阱中的五分之一。粒子数的大幅减少影响了参考文献^[61]中平均场计算下 Thomas-Fermi 近似的有效性,因此需要为其动能项增加一个补偿项,具体细节将在第3.2.2章中介绍。尽管在首次介绍实验的参考文献^[61]中主要介绍了紧束缚势阱构型的实验,但是本章介绍的理论模型依然会从弱束缚势阱构型出发然后覆盖紧束缚势阱构型,从而将等效平均长理论扩展至不同范围。

图3.1(a) 描述实验过程。首先将一团处于基态 | F = 2, $m_F = 2$ 〉的 ⁸⁷Rb 原子通过一个杂交势阱载入实验所需势阱。然后采用蒸发冷却技术对原子降温,直至它们能够形成 BEC。随后对于弱(紧)束缚势阱构型,在 20 ms (5 ms)内以非绝热过程降低其势阱高度。此时,凝聚体将被束缚在势阱中约 0.1 ms 至 1.2 s。最后,突然将势阱撤掉,并观测凝聚体的飞行时间膨胀图像。

表3.1展示了弱束缚势阱构型的基本参数,其中鞍点的高度大约是峰值的三分之一。 需要注意的是,MQT 主要发生在势阱中束缚最弱的地方也就是两个鞍点,而不是发生 在峰值处。本章中所有图中均以峰值标记。在势阱中,x₀是势阱底部(即局域最低点) 至其中一个鞍点的水平距离。本文将在第3.2节中展示理论拟合参数与x₀的趋势吻合。 N₀是在势阱经历非绝热降低高度过程后的总粒子数,也是隧穿动力学实验开始后的初 始总粒子数。图3.1(c)展示了一组典型的原始实验数据,研究表明粒子数呈现明显的非 指数衰减趋势。下一节中,本文会展示详细数据和分析。

3.1.2 实验数据和 3D 平均场模型

图3.2显示了化学势随粒子数的变化关系。图3.3显示了势阱中处于准束缚态的粒子数随时间的变化关系,图中分别显示了弱和紧束缚势阱构型的情况。同时附上平均场模拟的结果,并与前述结果对比。实验者所做的平均场模拟采用分步法计算 3D Gross-Pitaevskii 方程 (GPE),并采用虚时演化求解系统的基态。实验测得的势阱参数和初始粒子数作为模拟的输入参数,除此之外未引进其它自由参量。为模仿图3.1(a)中的



图 3.2 实验和数值 3D Gross-Pitaevskii 化学势。化学势 μ 随总粒子数 N 的变化趋势。(a) 弱束缚势 阱峰值: $V_0 = 460(30) \text{ nK}$ (红色圆圈)、260(18) nK (蓝色菱形)和170(11) nk (绿色方形)。(b) 紧束 缚势阱峰值: $V_0 = 330(35) \text{ nK}$ (红色圆圈)、290(30) nK (蓝色菱形)和240(25) nK (绿色方形)。平 均场模拟预测的化学势 (黑色曲线)与实验数据一致,数值模拟中分别设定势阱峰值为 (a) 350 nK 和 (b) 300 nK。

实验过程,将数值模拟中的势阱高度线性下降至终值。为避免已经逃逸出势阱的粒子 撞击边界后再次进入势阱中,数值模拟采用吸收边界条件。最后,实验数据提供的化 学势采用了 Thomas-Fermi 近似^[61]。如图3.2(a)所示,这一近似与弱束缚势阱构型完美 吻合,但如图3.2(b)所示,这一近似在紧束缚势阱构型中引入了一个系统误差,这是由 于紧束缚势阱构型中系统有较大的动能或零点能,因此 Thomas-Fermi 近似并不十分适 用。相反地,图3.3中平均场模拟与实验数据定性拟合,但是在两种束缚势阱类型中都 存在一定误差。这些结论都说明了平均场模型可以重现实验结果的主要特征,但是需 要附加一些修正,可能是对势阱构型的修正,也可能是需要加入一些平均场之外的效 应。

无论是实验数据还是平均场理论的预测都清晰的显示在两种束缚势阱构型中出现 了非指数衰减。图3.3(a)展示了弱束缚势阱构型中势阱峰值为 V₀ = 260(18) nK(蓝色圆 圈), V₀ = 190(13) nK(紫色菱形),和 V₀ = 170(11) nK(蓝绿色方形)的粒子数衰减 情况。图3.3(b)展示了紧束缚势阱构型中势阱峰值为 V₀ = 330(35) nK(红色圆圈),V₀ = 290(30) nK(蓝色菱形),V₀ = 240(25) nK(绿色方形)的粒子数衰减情况。图3.3(a) 中按照由底部至项部的顺序,灰色实线代表的 3D GPE 模拟对应的势阱峰值为 120、 130、140、210、220 nK,而在图3.3(b)中相应的势阱峰值为 230、240、290、300、340、 350 nK。数值模拟中需要选择合适势阱峰值,从而达到数值结果和实验数据的吻合。在 图3.3(b)所示的紧束缚势阱构型中,数值模拟中用到的势阱峰值和实验测得的值相近。 然而,在图3.3(a)所示的弱束缚势阱构型中,这两组数据还存在着一些矛盾。这也许 可以归因于构造势阱的离轴光束带来的偏差,因为这一偏差会影响对势阱高度的准确 估计。在弱(紧)束缚势阱构型实验中,量子隧穿在实验开始后大约 40 ms (20 ms) 后



图 3.3 3D Gross-Pitaevskii 数值模拟和实验数据。(a) 弱和(b) 紧束缚势阱构型中粒子数的半对数衰减图。弱(紧)束缚势阱构型实验开始后大约 40 ms(20 ms)为经典溢出过程,也包含在图中数据点内。灰色曲线是 3D GPE 数值模拟结果。超过(a) 0.8 s 和(b) 0.6 s 后,系统的动力学由损耗主导。(c) 3D 模拟重现了衰减率和化学势之间的关系。灰色数据点来自经典溢出区域。黑色虚线是拟合曲线。图中所有的数据点都来自于实验。



图 3.4 案例研究:理论模型与宏观量子隧穿实验数据的拟合。红色圆圈代表来源于实验数据的粒子数随时间的变化关系,数据点是平均值且具有 1*o* 误差条。蓝色实线代表粒子数的理论拟合,穿过量子隧穿主导区域的黑色点划线为指数衰减拟合,几乎呈水平状倾斜的粉色虚线是实验的背景损耗。两个垂直虚线将衰减曲线分为三部分:初始阶段短暂的经典溢出过程,(A)平均场辅助的量子隧穿区域,其中粒子数呈现非指数衰减,以及(B)实验背景损耗主导的区域。伴随蓝色理论拟合线条的绿色(深灰色)区域代表等效 JWKB 模型中拟合参数的不确定性,而黄色(浅灰色)区域则代表由实验参数不确定性、数据不确定性和拟合参数不确定性组成的联合不确定性。

出现。图3.3(a) 和图3.3(b) 中, 粒子数在量子隧穿区域所呈现非指数衰减的特性将会在图3.4中更加突出。

进一步地,本文考虑图3.3(c) 所示紧束缚势阱构型中衰减率和化学势之间的关系。 图中势阱峰值分别为 V₀ = 240(25) nK (绿色方形), V₀ = 290(30) nK (蓝色菱形),和 V₀ = 330(35) nK (红色圆形)。相应的三维平均场模拟所采用的势阱峰值分别为 230 和 240 nK, 290 和 300 nK, 340 和 350 nK。三维平均场模拟与紧束缚势阱构型吻合较好, 而不是弱束缚势阱构型。这是因为紧束缚势阱构型中并没有在动力学初始阶段出现强 烈的经典溢出过程,而弱束缚势阱构型中存在界限分明的经典溢出过程量子隧穿过程, 进一步的细节会在第3.2节中讨论。通过观察,衰减率可以拟合为与化学势有关一个简 单指数函数中,具体形式为

$$\Gamma = \Gamma_{\rm bg} + \exp(\alpha + \beta \mu). \tag{3.2}$$

其中 Γ_{bg} 是背景损耗率,在实验中有 Γ_{bg} = 0.31(0.02)Hz。这些拟合结果在图3.3(c)中以 黑色虚线表示。

3.1.3 等效一维 JWKB 描述: 一个实验案例

在弱束缚势阱构型中,实验开始后约 40 ms 内,由经典溢出过程主导系统动力学, 在 40 ms 至 1 s 左右的过程为量子隧穿,之后便是背景损耗过程。然而在紧束缚势阱构 型中,经典溢出过程持续约 0~20 ms,量子隧穿过程处于 20 ms 至 1.1 s,之后是背景 损耗过程。在粒子隧穿出势阱的过程中,粒子会优先选择势阱束缚最弱的部分也就是 鞍点隧穿,同时粒子的量子态经历了由势阱中的准束缚态向连续态的转变。图3.1(b)以 示意图的形式画出了粒子的隧穿路径。一个有意思的问题是,在这个复杂的势阱构型 中是否仍然可以针对粒子的隧穿选择一条半经典路径,做等效一维近似,然后采用著 名的 JWKB 近似来描述粒子的隧穿,从而抓住其动力学过程的主要特征。为了验证这 个想法,本文将选择如图3.1中所示的一条简单直接的路径,即选择连接势阱的最低点 与鞍点连成的直线为粒子隧穿路径,从而构造一个等效一维模型。

图3.4以弱束缚势阱构型中势阱峰值为 190(13) nK 的实验为例来说明本文的观点。 本文将动力学过程分为三个部分: 短暂的经典溢出过程、平均场辅助的宏观量子隧穿 过程和背景损耗过程,由图中竖直虚线分隔。在接下来的讨论中,本文会略过实验初 始阶段短暂的经典溢出过程。V. 是鞍点势能和势阱最低点的差值。当化学势等于V. 时, 系统动力学进入宏观量子隧穿过程。对于弱束缚势阱构型,大约在 t = 20 至 40 ms 进 入宏观量子隧穿过程,也就是图中的区域 A。在这个区域中,粒子数的衰减趋势变缓, 并且表现出非指数衰减趋势。图中黑色实线为一个具有 χ^2 = 3.32 的指数衰减拟合,而 本文的理论模型的拟合则具有 $\chi^2 = 1.21$ 。非指数衰减的现象是由平均场效应造成的, 也可以说是由粒子之间的相互作用造成的。这一点会由等效 JWKB 模型的拟合结果以 及 3D GPE 的模拟结果来验证。正如第3.2节中所示,本文的理论模型需要考虑相互作 用后才能和实验数据吻合。随着粒子数衰减过程的持续,被束缚的粒子总数和凝聚体 的化学势在不断减小,与此同时平均场效应也在减弱。因此,本文得到了一个等效动 力学势阱高度,它随时间逐渐降低。综合考虑以上所有因素,可以看到在区域 A 的 开头部分粒子数迅速衰减,而到了末尾部分粒子数衰减变缓。最终,在区域 B 中粒子 数的衰减由背景损耗率主导。图中蓝色曲线是理论模型的拟合结果,带有误差条的红 色点为实验数据。伴随理论拟合曲线的绿色误差区域是由拟合参数引入的误差,拟合 参数为 a 和 w,将在下一节中介绍。黄色误差区域代表总误差,结合了拟合参数的不 确定性、粒子总数的误差(带有误差条的红色点)和实验参数的不确定性。实验参数 引入的误差最主要的来源是量子隧穿开始时初始粒子数 δN_0 的标准差,以及势阱峰值 δV 、的不确定性,对于弱(紧)束缚势阱构型其不确定性大约为6% (11%)。在实验初 期 $t < 100 \mu s$ 时, δN_0 和 δV_s 对总误差的贡献约为 $O(10^3 \sim 10^4)$ 。之后, δN_0 对总误差的 贡献降了 1-2 个数量级,而 δV_s 的贡献几乎不变。其余参数对误差的贡献通常比 δV_s 的

贡献小一个数量级。紧束缚势阱构型中也有类似的结论,不过此时更少的粒子数会导 致更大的误差,详细讨论见第3.2.2节。本文还计算了理论模型在两种势阱构型中的约 化卡方,进一步证实了本文的理论模拟在实验误差范围内与实验数据吻合良好。

事实上,图3.4中所展示的模式存在于弱和紧束缚势阱构型的各组实验数据中,本 文将在接下来的小节中展开论述。

3.2 描述宏观量子隧穿的等效一维 JWKB 模型

在这一节中,本文将推导并讨论一个经过修正的等效一维JWKB模型,并和实验结果做定量对比。修正的意思是说在通常的JWKB近似中加入平均场效应。平均场效应将是实验观察到非指数衰减的关键因素。

3.2.1 修正 JWKB 近似

本文最初的假设是希望通过构造势阱的形状来重现非指数衰减的特征。三角形势 垒是一个比较简单的模型,它的势垒宽度会随着粒子数的减少和化学势的降低而增大, 这样就会使衰减过程逐渐变缓。另外,三角形势垒在解析上也比较容易计算。同时, 长方形势垒的模型不能和实验数据吻合,此外其中的高斯积分增加了计算难度却没有 改善该模型的精度。回到三角形势垒,设其鞍点高度为 V_s ,三角势垒中心所在位置为 $x = \pm x_0$, x_0 的值由实验数据确定。另外还有一个自由参数半高宽 w,对应的三角形势 垒的斜率为 $\pm V_s/w$ 。三角形势垒的数学表达式可以写为

$$V_{\rm tri}(x) = \begin{cases} -\frac{V_{\rm s}}{w} |x \pm x_0| + V_{\rm s}, & |x \pm x_0| < w, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$
(3.3)

正如图3.5所示,结合上述公式可得 JWKB 近似的隧穿概率为

$$P_{\rm tri} = \exp\left(-\frac{8}{3\hbar}w\sqrt{2mV_{\rm s}}\left(1-\frac{E}{V_{\rm s}}\right)^{3/2}\right),\tag{3.4}$$

粒子在势阱中的半经典振荡时间为

$$\tau_{\rm tri} = \sqrt{2m} \frac{(x_0 - w)}{\sqrt{E}} + 2\sqrt{2m} \frac{w\sqrt{E}}{V_{\rm s}},\tag{3.5}$$

鞍点处的隧穿率为



图 3.5 等效 JWKB 模型势阱示意图。三维实验势阱中的隧穿可以等效为一个简单的一维模型。对 实验数据的拟合需要满足(1)一个裸一维势阱,其高度为 V_s ,宽度为 2w (金色实线);(2)包含 平均场效应,用以创造等效势阱,其高度为 $V_s(1+a)$,且 $a \propto N(t)$ (蓝绿色虚线);(3)对化学势做 Thomas-Fermi 近似, $\mu \propto N^{1/3}$ (红色虚线)。按此规则选择的模型可以保证能够在通常的 JWKB 近 似中用 μ 来代替能量 E,同时采用等效势 $V_{\text{eff}}(x) = V(x) + g|\psi|^2$ 代替裸势 V(x)。

$$\Gamma_{\rm tri} = \frac{P_{\rm tri}}{\tau_{\rm tri}}.$$
(3.6)

实验测得的背景损耗率为 $\Gamma_{bg} \approx 0.31(0.02)$ Hz。留在势阱中的粒子数随时间的变化满足 衰减方程

$$\dot{N}(t) = -(\Gamma_{\rm tri} + \Gamma_{\rm bg})N(t) = -\Gamma N(t). \tag{3.7}$$

本文进一步假设用 Thomas-Fermi 图像来描述系统,参考文献^[61] 中对化学势的估算也 用到了这一假设,因此可得

$$\mu = bN^{1/3},\tag{3.8}$$

其中对于弱(紧)束缚势阱构型 *b* = 1.15(8) nK [3.03(5) nK]。注意此处忽略 *b* 随势垒高度的变化,因为这一变化引入的误差相对于实验误差和拟合参数的误差可以忽略不计。

接下来的逻辑是要将公式3.4和公式3.5中的 *E* 用合适的单粒子能量,即公式3.8中的化学势来替代。然而这个方法并不能精确重现实验结果,因为这个模型计算出的隧 穿持续时间很短,隧穿很快就会停止,以至于隧穿动力学的后半部分消失。因此,除 用公式3.8中的μ来代替 *E* 之外,还需要加入平均场效应才能与实验数据拟合。平均场 效应使得公式3.7中的隧穿率 Γ 随时间变化,这一点与复标度法类似^[104]。为了将含时 平均场效应考虑进来,本文在三角形势阱中增加含时项,从 GPE 方程中构造等效平均 场势阱 $V_{\text{eff}}(x) = V(x) + g | \psi(x,t) |^2$,这同样也和公式3.8的隐藏条件——Thomas-Fermi 近 似自洽,可以参考阅读文献^[21,105]。综上所述,描述这个隧穿现象最简单的势阱模型为

$$V_{\rm eff}(x,t) = \begin{cases} -\frac{V_{\rm mf}}{w} |x \pm x_0| + V_{\rm mf}, & |x \pm x_0| < w, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

$$V_{\rm mf} = V_{\rm s} \Big[1 + a \frac{N(t)}{N_0} \Big]. \tag{3.9}$$

其中, N₀ 是当量子隧穿过程开始时(t_{QT})势阱中的总粒子数, a > 0 是一个无量纲的平 均场参数, V_{mf} 是随时间变化的势阱参数,它和平均场有关。V_{mf} 中 a 的作用是引入动 力学等效势垒,随着粒子从势阱中不断泄露,这个等效势垒会逐渐减弱直至回到裸势 阱的形式。图3.5画出了在量子隧穿初始阶段公式3.3所示的裸势阱和公式3.9所示的等 效势阱的示意图。需要注意的是,平均场相互作用可能会改变系统的基态波函数。等 效 JWKB 模型只有两个自由参数 w 和 a,它是描述实验现象的一个最简模型,可以为 多体动力学提供一些思路。最后,将公式3.4和公式3.5中的相应参数替换为公式3.8和 公式3.9的形式,得到修正后 JWKB 近似下的隧穿概率和半经典振荡时间为

$$P_{\rm eff} = \exp\left(-\frac{8}{3\hbar}w\sqrt{2mV_{\rm mf}}\left(1 - \frac{bN^{1/3}}{V_{\rm mf}}\right)^{3/2}\right),\tag{3.10}$$

$$\tau_{\rm eff} = \sqrt{2m} \frac{(x_0 - w)}{\sqrt{bN^{1/3}}} + 2\sqrt{2m} \frac{w\sqrt{N^{1/3}}}{V_{\rm mf}},\tag{3.11}$$

随后,将它们代入公式3.6和公式3.7。

图3.6包含了拟合势阱的半高宽 w、鞍点势垒高度 V_s 和量子隧穿初始时刻($t = t_{QT}$)的平均场等效鞍点高度 $V_{mf} = V_s(1+a)$ 。图中 w 随势垒峰值的增长趋势反映了实验势阱的宽度随着其高度增长而增大的事实,如表格3.1所示。图3.6(a)中 V_{mf} 总体趋势是随峰值增长而增加,意味着势阱逐渐变深。更深的势阱能束缚住更多的粒子,而更多的粒子则意味着更强的平均场效应,也就是说更大的等效势垒。更大的等效势垒会使粒子的最大隧穿率降低,正如图3.7(b)所示,但峰值为 260 nK 的实验是个例外。对于峰值为 260 nK 的这组实验数据,在模拟的过程中,它的鞍点高度由裸高度 V_s 变换为等效高度 V_{mf} 的时具有小于预期的增幅。尽管 260 nK 的鞍点裸高度 V_s 比 221 nK 的裸高度增



图 3.6 量子隧穿的拟合参数。(a)量子隧穿过程开始时的等效鞍点高度(蓝绿色方形)的最优化值 与实验测得的裸鞍点高度(红色三角)随着裸势垒峰值的变化。对比两者可以看到平均场效应对隧 穿动力学的改变。(b)弱束缚势阱构型的等效势垒宽度 w。等效势垒宽度和等效鞍点高度都随着实 验势垒峰值 V 的升高而增大。

长 10%, 但是 260 nK 的 V_{mf} 却具有与 221 nK 的相近等效鞍点高度,这意味着 260 nK 这组实验中的势垒的构造过程存在一些未知的系统误差。 $V_0 = 260$ nK 实验的初始粒子数 $N_0 \approx 583,000$,这和 $V_0 = 190$ nK 实验的初始粒子数 $N_0 \approx 560,000$ 非常相近,反而 与 $V_0 = 221$ nK 实验的初始粒子数 $N_0 \approx 630,000$ 相差较远。这一点也在紧束缚势阱构型的实验中也有所体现,参见第3.2.2节。

在实验中,对于弱和紧束缚势阱构型本文都可以拟合出实验隧穿率 Γ_{exp} 和公式3.2中化学势的近似指数关系,分别如图3.7(a)和图3.3(c)所示。图3.7(a)展示了弱束缚势阱构型中的实验数据和三维平均场模拟,其势垒峰值分别为 $V_0 = 170(11)$ nK (蓝绿色方形)、 $V_0 = 190(13)$ nK (紫色菱形)和 $V_0 = 260(18)$ nK (蓝色圆圈)。图3.7(b)中依据等效 JWKB 模型,本文计算了瞬时衰减率 Γ 随化学势 μ 的变化,并用公式3.2的结果与之对比。紧束缚势阱构型将会在第3.2.2节中讨论。观察图3.7可以得到指数拟合公式(3.2)的结果与实验数据以及等效 JWKB 模型基本吻合,将同样势垒峰值对应的结果相比对时,这一结论更为明显。在图3.7(b)中,对于势垒峰值 $V_0 \le 221$ nK,指数拟合公式(3.2)的尾部依然和等效 JWKB 模型的结果有所偏差,这意味着此时量子隧穿仍然在主导动力学。

最后,本文要展示图3.4中等效 JWKB 模型对 N(t) 预测的范例作用。图3.8显示弱 束缚势阱构型中其余五个实验的理论模型所得的 N(t) 曲线,相应的拟合参数见图3.6, 它们的宏观量子隧穿都具有同样的非指数衰减趋势。为简便起见,本文并没有标注误 差条和误差区域,但是它们和图3.4所示范例具有相同的规律。

在本文第3.1.3节中提出了一个问题,即一个等效一维 JWKB 模型是否能重现实验 结果,本节会说明这是完全可行的。本文在构造理论模型的过程中用到了两个假设,一



图 3.7 实验数据和理论拟合曲线的对比: 衰减率随化学势的变化关系。(a) 弱束缚势阱构型(彩色 点)的实验数据、三维 GPE 模拟(灰色曲线)以及公式(3.2)的结果(灰色虚线)。(b) 修正后 JWKB 近似下的到的隧穿率(彩色实线)与公式(3.2)的结果(灰色虚线)。两者基本吻合,说明了简单的 一维等效 JWKB 模型可以描述实验中隧穿率对化学势的指数依赖关系。(a) 和 (b) 图中标记的点代 表势垒的峰值 V_s。

个是将三维实验简化为一维理论模型,另一个是 JWKB 近似仍然适用。JWKB 近似的 适用条件是要求德布罗意波函数的空间微分 $\lambda_{dB} = \hbar/p(x)$ 比较小,即 $d\lambda_{dB}/dx \ll 1$,其 中 p(x) 是半经典动量。显然,本文的模型符合这一要求。但是一个三维系统要如何满 足这一条件呢?其实,三维势阱可以被等效的处理为对所有半经典路径的平均,然后 用 JWKB 近似计算隧穿,参见文献^[106]。公式3.9所示的等效 JWKB 模型在势阱内部是 平坦的,然而真实一维路径是可以包含公式3.1中的谐振和高斯势的贡献。不过本文的 模型依然可以描述由真实三维体系中各种复杂半经典路径在势垒处形成的经典振荡的 平均结果。关键的一点是,本文采用的 JWKB 近似并不是第一性原理计算,而是一个 等效模型,且其计算结果与实验数据吻合良好。

3.2.2 紧束缚势阱构型

根据三维 GPE 模拟对动能项的计算,紧束缚势阱构型中的化学势需要修正。这是因为之前实验者在估测化学势时采用的是 Thomas-Fermi 近似^[61]。但是对于紧束缚势阱构型,由于势阱对粒子束缚更强,势阱中留下的粒子减少,实验中紧束缚势阱中的粒子数大约是弱束缚势阱中的五分之一。这导致了紧束缚势阱构型中动能项增大,因此对于不同势全高度的实验中化学势的修正大约为 6~21 nK。图3.9展示弱和紧束缚势阱构型中的动能项,图中数据是通过虚时演化数值求解完整的三维 GPE 方程得到的。对于弱束缚势阱构型,动能项相对要小很多,可以忽略,因此 Thomas-Fermi 是一个很好的近似,它也确实与实验数据吻合良好。但与之相反的是紧束缚势阱构型中动能项增大,以至于不能被忽略。本章中所有图中的化学势都已经依据图3.9经过修正。



图 3.8 对弱束缚势阱构型中粒子数的理论拟合结果。所有的拟合结果都显示了与图3.4中同样的趋势。灰色虚线代表对应势垒高度的实验中的背景损耗。不同颜色代表弱束缚势阱构型中的不同势 垒高度,以 nK 为单位。

紧束缚势阱构型中的涨落更大,势阱的形变也更加严重,导致势阱或多或少脱离 公式3.1设想的理想构型。而本文的理论模型又恰恰对势阱的形状较为敏感。紧束缚势 阱构型中的 V_{ts} 的不确定性大约是弱束缚势阱构型中的两倍。与弱束缚势阱构型相似 的是,对误差区域贡献最大的误差仍然是势垒高度的不确定性和粒子数的波动,其他 类型的误差比这两者小了约1~2个数量级。粒子数波动带来的误差主要影响量子隧 穿的早期过程,时间范围约为*t*<100 ms,其最大误差可以达到 *O*(10³~10⁴),随后下 降1~2个数量级,此时由势垒高度不确定性带来的误差份额增加至约 *O*(10³~10⁴)。 因此,尽管紧束缚势阱构型中的误差并不算大,但由于粒子数减少,由实验数据不确 定性引入理论模型的误差相对增加。

所有紧束缚势阱构型的拟合结果都可以为两种趋势。图3.10显示两种典型的拟合结果,分别是峰值为 290 nK 和 330 nK 的实验。两个图像中都分别画出了理论模型产生的误差(绿色区域)以及由实验数据不确定性产生的误差(黄色区域)。与图3.4中弱束缚势阱构型不同的是,后者的总误差并不比实验数据的误差条要大。在紧束缚势阱构型中,量子隧穿大约维持在前 600 ms,随后背景损耗过程很快占据主导。而弱束缚势阱构型的量子隧穿过程大约是这个时间的两倍。紧束缚势阱构型中不少实验数据点或是具有如图3.10(a)所示的较大的实验误差和涨落,或是像图3.10(b)所示虽然数据点的实验误差比较小,但仍然有很大的涨落。除 *V*₀ = 240 nK 之外,其余的实验的 *N*(*t*)值对应的约化卡方均为为 *O*(0.05 ~ 0.10)。由于紧束缚势阱构型中的误差较大,以至于本文无法深入的研究其中等效 JWKB 模型中两个自由参数的变化规律。尽管如此,本



图 3.9 动能项对于化学势的修正。在 (a) 弱和 (b) 紧束缚势阱构型中,随着粒子数的增加动能项增大,需要在 Thomas-Fermi 近似中加入补偿项。紧束缚势阱构型中由于粒子数减少导致动能项增加。彩色的点来源于三维 GPE 的数值计算,连结点与点之间的曲线是为方便观察人为增添的。



文的理论模型还是能够描述宏观量子隧穿实验的大体趋势。

图 3.10 紧束缚势阱构型中实验数据和理论模拟。紧束缚势阱构型中理论模拟为蓝色曲线。两组 实验数据中,(a) V=290 nK 具有较大的实验误差和较小的拟合误差,(b) V=330 nK 具有较少的数据 点和相对大的拟合误差。红色点为势阱中粒子数的平均值,具有大小为 1σ 的误差条。粉色虚线为 背景损耗。绿色区域为理论模型的误差,黄色区域为实验数据误差与理论模型误差的总和。

3.3 本章小结

本章首先描述一个宏观量子隧穿实验,其中粒子数呈现非指数衰减趋势。本文采 用等效平均场模型得出的粒子数衰减曲线和衰减率与实验数据和三维平均场模拟均吻 合良好。另外,三维平均场模拟计算的动能项可以作为对紧束缚势阱构型中动能项的 补偿。等效平均场理论模型能够重现粒子数的非指数衰减趋势,且证实这一现象是由 于粒子之间的相互作用参与隧穿过程而导致的。实验中隧穿过程可以被分为三个阶段。 第一个阶段是,初始经典溢出过程,粒子从势阱束缚相对薄弱的两个鞍点快速溢出,粒 子数衰减曲线呈现迅速下降的趋势。第二个阶段是量子隧穿阶段,由于粒子间相互作 用的影响,粒子数呈现非指数衰减趋势。第三个阶段是背景损耗阶段。

接下来,本文详细介绍了修正后的 JWKB 近似。当鞍点的相对势能与化学势相等时,系统进入量子隧穿阶段,此时需要采用 JWKB 近似来计算粒子数的衰减。本文在JWKB 近似中加入了等效平均场项,正是这一项改变了势阱构型,使得粒子感受到的势阱不再是裸势阱而是一个随时间变化且与粒子之间相互作用相关的的等效势。原始实验文献中曾提出一个经验公式,那就是衰减率和化学势之间的指数关系,本文在本章采用的三维平均场模拟和等效一维 JWKB 模型的计算结果都验证了这一关系。本章提出的等效 JWKB 模型中有两个拟合参数,分别是与平均场有关的参数 *a* 和鞍点势垒宽度 *w*。等效平均场鞍点高度 *V*_{mf} 就是使用这两个参数构造的。拟合结果显示,参数 *w* 随着实验中势垒高度的增加而增大,这和真实实验的趋势一致。而不断增长的 *V*_{mf} 则反映了随着势垒峰值的增长,该实验中的最大隧穿率在降低。

第四章 环形势阱系统的部分对称性破缺

本章研究环形晶格中 BEC 在系统经历量子淬火(quench)发生部分对称性破缺后 涡旋态的动力学过程。本章首先对比宏观观测量粒子流(current)、微观观测量保真 度(fidelity)和对称性记忆的结果,发现只有对称性记忆能够反映出系统的对称性破 缺强度存在临界点。超过这个临界点,则系统逐渐丧失对其初始对称性的记忆。接下 来,本章定义对称性破缺记忆和对称性破缺能量差,然后找出对称性破缺强度临界点。 随后,本章会讨论用到的数值方法及其精确度,同时将简并微扰理论与数值结果对比。 然后,作为对比,本章展示平均场理论的结果,同时讨论分数或单位填充 Mott-超流转 变与本章研究的部分对称性破缺问题的区别。最后,本章讨论有限尺度标度(finite size scaling),以预测较大系统中的对称性破缺动力学。

4.1 研究背景

非平衡量子动力学是一个快速发展的领域,部分原因是由于将大量量子仿真器 (quantum simulator)集合在多重结构上,为探索控制晶格结构、相互作用强度、以及 玻色费米统计性质等新问题提供了极大的灵活度和便利^[107-110]。例如,对于结合非平 衡动力学和量子相变中的临界现象的 Kibble-Zurek 过程,全局量子淬火动力学有助于 更深入的理解其力学机制^[111]。相反的,对局域淬火或是微扰的研究则表明短程和长程 相互作用对关联演化过程中量子速度极限的影响^[112,113]。多体局域化实验中首次出现 通过淬火将具有双重周期的光晶格转变为均匀晶格^[114,115]。量子仿真器能够提供非同 寻常的局域系统和较长的量子相干时间,这为研究系统对初态的记忆提供了条件,例 如广义吉布斯系综^[89] 就用到了这一点。通过采用与多体局域化实验相反的操作,也就 是通过淬火将均匀晶格变换为双重周期晶格,从而实现环形晶格的离散旋转对称性部 分破缺。由此本文发现一个新的基于长时间演化的动力学现象,并通过定义对称性能 量差和对称性记忆等新的量子观测量来说明系统只能在对称性破缺强度低于临界点时 才保留对其初态对称性的记忆。

张量网络^[116,117] 是计算较大尺度系统的有效方法。然而在本章研究的问题中发生 量子淬火后,纠缠增长迅速,因此难以用张量网络的方法来描述系统的长时动力学性 质。所以在本章的研究中主要采用精确对角化方法来计算较小的系统,如玻色子粒子 数 *N* = 2 至 10,格点数 *L* = 6 至 10 的环形晶格。同时采用简并微扰论的方法来证实数 值结果,并推断相互作用较强时的变化趋势。6 格点环形晶格中的部分对称性破缺可



图 4.1 部分对称性破缺晶格示意图。左图为 6 重旋转对称光晶格。右图为部分对称性破缺后的 3 重旋转对称性光晶格。以半透明橙色和蓝色来表示势阱,三维图下方是势阱在二维平面的投影,势阱由蓝色至红色逐渐变高。左图的六角晶格也可以看作是蜂巢晶格的最小基本单元,从左图到右图的过程可以看作是打破蜂巢晶格的 A-B 子格子对称性,同时在狄拉克点引入一个能隙。图中数轴的数值为任意取值,不反应实验参数。需要注意部分对称性破缺后的三维示意图中,无论势阱顶部还是底部发生变化都对应同样的哈密顿量,因为哈密顿量的跃迁项系数是通过对局域的相邻两个量子态做积分和叠加而得,因此两种画法得到的跃迁项系数是一样的。

以与石墨烯中打破 A-B 子格子的对称性相对应,同时在狄拉克点打开一个能隙[118-120]。 本文主要讨论基于玻色冷原子的量子仿真器结构。利用这类系统,目前针对玻色冷原 子体系中的量子动力学已经有许多突破性的研究成果,且通常用玻色-哈伯德哈密顿 量(BHH)来描述这类系统^[121]。在激光束缚的玻色爱因斯坦凝聚体中,离散旋转对 称的环形晶格[122-125] 是研究由淬火引起的量子对称性破缺的理想势阱。可以通过两束 互相干涉的 XX 和 YY 拉格朗日-高斯光束来产生这类势阱, 然后引入量子淬火来改 变势阱的构型,破坏奇偶子格子的对称性,这个过程的示意图参见图4.1。另外,采 用"着色"的势阱(painted potential)和超快激光也可以实现相同的势阱构型[126-128]。 Berzinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT)相变^[129]和玻色-哈伯德超晶格中的分数 Mott 绝 缘体相[130] 等现象均与基态有关,与此不同的是,本章的研究内容需要采用不同于保 真度和粒子流的量来描述系统中旋转态或者说是涡旋态的量子动力学。本文将引入对 称性能量差和对称性记忆这两个概念,前者是定义在低能激发态能级簇中的一个观测 量,后者的定义是基于旋转量子数投影的时间平均。这类投影与 BEC 实验中对离散环 形晶格系统的环绕数的测量相对应。尽管对旋转量的测量早已在大尺度连续系统中实 现^[131],但是随着超冷显微技术^[132]以及一些对较小系统精确控制的技术^[89]的出现,旋 转量的投影为未来量子动力学实验的探测提供了新的途径。比如本章研究的6格点系 统就可以看作是蜂巢晶格[133]的一个基本单元,实验中可对蜂巢晶格中的众多类似基 本单元做一次性量子平均。

4.2 对称性能量差和对称性记忆

部分对称性破缺系统的哈密顿量(PSBH)为

$$\frac{\hat{H}_{\varepsilon}}{\bar{J}} = \frac{U}{2\bar{J}} \sum_{i=1}^{L} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_{\langle i,j \rangle} (1 + \varepsilon_{ij}) (\hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_i)$$
(4.1)

它是在常见玻色-哈伯德哈密顿量(BHH)的基础上进行调整,成为一个两重周期模型。其中 *U* 代表同一格点内两个粒子之间的相互作用, $\langle i, j \rangle$ 表示对最近邻格点求和, $\hat{b}_i^{\dagger}(\hat{b}_i)$ 是格点 *i* 的产生(湮灭)算符,满足 $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^{\dagger}] = \delta_{ij}$, $\hat{n}_i \equiv \hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_i$ 是粒子数算符, $\varepsilon_{ij} \equiv \text{Sign}(i, j)(J_e - J_o)/(J_e + J_o)$,且 $|\varepsilon_{ij}| \in [0, 1]$ 。函数 $\text{Sign}(i, j) \equiv \pm 1$,其中正(负)号的 取值决定于格点 *i* 的偶(奇)性。两重周期晶格中的跃迁能 $J_e(J_o)$ 仍可以由常规积分 方法求得^[134]。在本文计算中,上述模型的能量均以跃迁能的平均值 $\bar{J} \equiv (J_e + J_o)/2$ 为 单位来衡量,因此能量的单位为 \bar{J} ,时间的单位为 \hbar/\bar{J} 。

接下来,本文定义对称性能量差 $\varepsilon = |\varepsilon_{ij}|$ 。本文将在后续的研究中表明在这个环形 晶格系统中有一个决定涡旋动力学性质的临界值 ε_c 。当 $\varepsilon = 0$ 时,PSBH 回归到常见的 BHH,同时具有 *L* 重离散旋转对称性;当 $\varepsilon \neq 0$ 时,PSBH 中引入 J_e, J_o ,且系统具有 *L*/2 重离散旋转对称性(为简单起见,本文只考虑 *L* 为偶数的情况)。在周期边界条件 下,PSBH 的跃迁项和 Su-Schrieffer-Heeger (SSH)模型类似,在这两个模型中,粒子 跃迁能沿格点起伏变化。但是,这两个模型有一个显著的不同之处,这就是:SSH 模型 中不包含在同一个格点上两粒子间的相互作用项,也就是上式中 *U* 所在的那一项。而 PSBH 中有这一项,且正是由于这种相互作用导致了粒子间的纠缠。另外,本文研究的 PSBH 模型中会涉及到强相互作用的情况,这时系统的动力学将由相互作用项主导。

n 重离散旋转对称性算符 \hat{C}_n 的本征值方程是 $\hat{C}_n |m_n\rangle = e^{i2\pi m_n/n} |m_n\rangle$,其中 m_n 是 本征态 $|m_n\rangle$ 对应的旋转量子数,也叫做环绕数 (winding number)。现在考虑一个六 角环形晶格系统 L = 6。在 t < 0 时刻,对 n = 6 和 $\varepsilon = 0$ 的系统快速淬火,那么在 $t \ge 0$ 时,系统将变为 n = 3 和 $\varepsilon \ne 0$ 。同时如图4.2所示,由于 PSBH 具有时间反演对 称性,因此与 $\pm m_n$ 相对应的本征态为简并态,系统的能量仅依赖 $|m_n|$ 。在淬火过程之 后,即 t > 0 时,原来的 6 重旋转对称性被部分破缺,变为 3 重旋转对称性,同时其 能量本征态具有对应的 m_3 旋转量子数。在群论中^[135],三重旋转对称群 C_3 是六重旋 转对称群 C_6 的一个子群,比如,将某个态按照 \hat{C}_6 操作两次相当于将其按照 \hat{C}_3 操作一 次。因此对于某个 \hat{C}_6 的本征态有 $\hat{C}_3 |i\rangle = \hat{C}_6^2 |i\rangle = e^{i2\pi m_6*2/6} |i\rangle$ 。通常,对于 $\ell = 2n$,有 $\hat{C}_\ell |i\rangle = \hat{C}_n^2 |i\rangle = e^{i2\pi m_n*2/n} |i\rangle$ 。考虑到存在一个 2π 的整数倍的任意相位,上式可以改写 为 $e^{i2\pi m_\ell/\ell} = e^{i2\pi m_n*2/n} e^{i2p\pi}$,其中 p 是一个整数。对于六格点系统有 $m_6 - m_3 = 3p$ 。因 此,每一个 m_3 都对应着一对有 $p\pi$ 相位差的 m_6 。上述讨论对更多格点的系统依然成 立,例如8格点系统的对称性 \hat{C}_8 可以部分破缺为 \hat{C}_4 ,10格点系统的对称性 \hat{C}_{10} 可以部分破缺为 \hat{C}_5 ,依此类推即可。



图 4.2 能级簇和对称性能量差。强相互作用 U/J = 30 时,N = 6 个粒子在 6 重旋转对称环形晶格中的本征能谱显示其能级在 Mott 能隙之上呈现为离散的簇状。插入的图片显示在最低的激发态能级簇中存在一个新的能隙,叫做对称性能量差。它是研究部分对称性破缺环形系统中涡旋动力学性质的一个重要工具。

超流相和 Mott 绝缘体相是 BHH 模型中两个非常著名的量子相。在介观系统中 类似的两个相也存在于正则系综和巨正则系综中^[136,137],只是此时量子相是由量子 观测量的剧变定义的,而不是由一个奇点定义,例如在量子仿真器实验中就使用上 述概念来定义量子相^[108,112-114]。整数填充情况下发生的 BKT 转变临界值范围大致为 $(U/J)_{crit} \simeq 1/0.305 \simeq 3.28^{[138,139]}$ 。对于 6 至 10 格点的环形晶格介观系统,量子相变的 临界值范围大致是 $(U/J)_{crit} \simeq 5 至 10$,具体取值由本文选取的量子测量所测得的极限 行为来判断。本文定义低于(高于)临界值为弱(强)相互作用。图4.2显示由精确对 角化方法(ED)算得 BHH 模型的本征能谱,图中所示的能谱为强相互作用下 6 格点 系统中总粒子数为 N = 6 的单位填充的情形,此时存在 Mott 能隙。在同一能级簇中 本征态近乎简并,这种现象叫做能级簇。现在本文考虑 6 重旋转对称性经过部分对称 性破缺转变为 3 重旋转对称性的体系,这个过程可以看作是将 L = 6 的 6 格点 BHH 系统中 \hat{C}_6 算符的某一个本征态与所有与其具有相同 m_3 值的态的混合,由群论分析可 知,一个 m_3 值对应一对 m_6 值,因此参与混合的这些态需包含所这对 m_6 值对应的所 有本征态。因此,以 6 格点系统为例,在系统随时间演化的过程中有 $\varepsilon \neq 0$,任何满足 $m_3 = +1$ 的 \hat{C}_3 的本征态都将会演化为 $m_6 = +1, -2$ 态的线性组合态。另外,由有限尺寸 效应所引发的量子递推的时间尺度和本文所探讨的问题无关。为了描述上述部分对称 性破缺问题的时间演化性质,本文需要回溯到其本征能谱,并定义对称性能量差 Δ_s 为

$$\Delta_s = |E_{(m_3=+1,m_6=-2)} - E_{(m_3=+1,m_6=+1)}|$$
(4.2)

可以看出, Δ_s 定义为某一个 m_3 值对应的一对最近邻 m_6 态的能量差。在更多格点的系统中也可以作类似的定义。随着系统格点数的增加,在能谱中会有更多类似的对称性能量差。但通常情况下,能谱中能量最低的对称性能量差足以描述这类离散旋转对称性的动力学性质,这点和连续旋转对称性中的转晕态(Yrast state)类似^[140]。本文会在研究对称性记忆的时间演化过程以及对称性破缺临界点时进一步阐述这一点。需要注意的是,对称性能量差 Δ_s 的定义与系统的填充数和相互作用强度都无关。对于格点数较少的系统,比如N = 6时对称性能量差就是对称态之间的能隙。如图4.2所示,在N = 6,L = 6系统的能谱中能量最低的两个 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 态之间存在着一个对称性能隙。不过对于格点数较多的系统,比如N = 12,L = 12的系统中 $\Delta_s(N = 12, L = 12) = |E_{(m_6+1,m_{12}=5)} - E_{(m_6+1,m_{12}=+1)}|$,相应的能量最低的两个对称性态为 $m_{12} = -5$ 和 $m_{12} = +1$,它们之间还存在几个 $m_{12} = +1$ 的态以及其他 m_{12} 值的对称性态,这个时候 Δ_s 不是能隙,只能称作对称性能量差。因此,本文在定义 Δ_s 的时候,统一将其称为对称性能量差。在转晕态中也有类似的情况,在旋转的效应下不同的环绕数会交叉,但是角动量流形中最低的那些态和它们之间的能量差仍然有明确定义。

系统随时间演化的初态选为环绕数为 +1 的涡旋态,即对于 L = 6 的系统,选择位于能谱中低能量段的 m₆ = +1 激发态。时间演化中旋转对称性算符对时间的平均值为

$$\langle \psi(t) | \hat{C}_6 | \psi(t) \rangle = \eta(t) e^{i \frac{2\pi}{6} m_6(t)}$$
(4.3)

如果波函数 $|\psi(t)\rangle \in \hat{C}_6$ 的一个本征态,那么上式中 $\eta(t) = 1$,且 $m_6(t)$ 是一个不随时间 变化的常数。由于在对称性能量差定义中,本文选择能谱中能量最低的 $m_6 = +1$ 态为初 态,那么在时间演化的每一个时间点 $m_6(t)$ 的值只可能为 $m_6 = +1$ 或 $m_6 = -2$ 。淬火后 $\varepsilon \neq 0$, $|\psi(t)\rangle$ 将保持其原始的 m_3 值,同时 $|\psi(t)\rangle$ 会演化为所有对称性满足 $m_6 = +1, -2$ 的态的叠加态。在时间演化的每一个时间点 t, $|\psi(t)\rangle$ 的 6 重旋转对称性 $m_6(t)$ 对应 的 m_6 值是由对称性满足 $m_6 = +1, -2$ 的瞬时叠加态的投影情况决定的,因此 $m_6(t)$ 的 值随时间变化。实数 $\eta(t)$ 的取值在-1 和 +1 之间变化,它反映了波函数 $|\psi(t)\rangle$ 中满足 $m_6 = +1, -2$ 的两组组分的比例。当 $\eta(t) = 0$ 时,满足 $m_6 = +1$ 的态和满足 $m_6 = -2$ 的



图 4.3 微观、宏观和基于对称性的量子测量。左列:相互作用强度分别为 $U/\bar{J} = 0.001, 3, 30$ (黑色、蓝色和红色曲线)时的时间演化。右列:左侧物理量的时间平均值随对称性破缺强度的变化。 其中(a)和(b)图是保真度,(c)和(d)是粒子流。这两个物理量都没有表现出临界现象。图 (e)中由量子投影定义的旋转量子数 $m_6(t)$ 是一个基于系统对称性的观测量。图(f)显示了在 ε_c 点出现一个临界现象,即旋转对称性算符 \hat{C}_6 的时间平均值对称性记忆(定义见公式(4.4)在对称性破缺强度 ε_c 点上剧变。图(f)中另外两条曲线是采用平均场方法计算这一临界现象,其中绿色曲线代表的弱相互作用情况,且与BHH模型的结论吻合,而橙色曲线代表的强相互作用情况则无法重现类似的临界现象。

态恰好在波函数 |ψ(t)〉中占据同等比例,此时波函数 |ψ(t)〉的对称性呈现中性,即这个 瞬时波函数不显示出任何 6 重旋转对称性。当然,在数值计算中 η(t)的值不会精确取 到零,由此本文可以定义对称性记忆为

$$M_{\rm s} \equiv \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \, m_6(t) \tag{4.4}$$

在 6 格点模型中初态被限制为 $m_6 = +1$, 只有对称性满足 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 的 态才能参与到 $|\psi(t)\rangle$ 的时间演化过程中。相应的 $m_6(t)$ 就在 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 两个值 中选取,因此对称性记忆的取值在 +1 和-2 之间。对称性记忆是基于对称性的量子观测量,图 4.3(f)显示了其中的临界现象。与此形成对比的是,图4.3(b)中的微观观测量时间平均的保真度 $\bar{f}/f(\varepsilon = 0) \equiv \tau^{-1} \int_0^\tau dt |\langle \psi(t)|\psi(0)\rangle|$ 和图 4.3(d)中的宏观观测量时间平均的粒子流 $\bar{I}/I(\varepsilon = 0) \equiv \tau^{-1} \int_0^\tau dt |\langle \psi(t)|\psi(0)\rangle|$ 和图 4.3(d)中的宏观观测量时间平均的粒子流 $\bar{I}/I(\varepsilon = 0) \equiv \sum_{j=1}^{L} (1 + \varepsilon_{j,j+1})\tau^{-1} \int_0^\tau dt \langle \psi(t)|i(\hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1})|\psi(t)\rangle$,两者均未观测到这一临界现象。在上述定义中,本文默认将晶格常量和 \hbar 约化为单位 1。尽管在图 4.3(e)中弱相互作用情况下 $m_6(t)$ 的时间演化在某些周期内似乎呈现不规则振荡,但是对称性记忆作为 $m_6(t)$ 的时间统计上的平均仍然会在足够长的时间演化 τ 后趋于稳定。因此,总演化时间 τ 的选择必须是图 4.3(a),(c),(e)中所示周期的数百倍,物理上可以理解为 τ 是环形晶格上粒子流周期的数百倍。BECs 的典型跃迁频率为千赫兹,因此 τ 的数量级应该为毫秒的数十倍。

4.2.1 对称性破缺强度临界点

图4.3(e) 中 ε = 0.5 时, $m_6(t)$ 的时间演化在相互作用较强和较弱的时候结果完全不同。相互作用强度较强的情况下,在 ε = 0.5 时 $m_6(t)$ 在整个时间演化的过程中始终保持其初始值 $m_6(t = 0) = +1$,因此在图4.3(f)中其对应的 M_s = 1。反之,在相互作用强度较弱的情况下, $m_6(t)$ 在演化的某些时间点无法保持其初始值而跃变为 $m_6(t) = -2$,因此最终在图4.3(f)中 ε = 0.5 点呈现 $M_s < 1$ 。另外,根据之前的讨论,本文知道给定初始值 $m_6(t = 0) = +1$ 则时间演化过程中只可能出现 $m_6(t) = +1, -2$ 。图4.3(f)中分别画出在强相互作用 U/\bar{J} = 30和弱相互作用 U/\bar{J} = 3情况下,对称性记忆 M_s 随着对称性破缺强度 ε 的变化。注意到无论是在强相互作用还是弱相互作用的情况下, M_s 都会在某一个特殊的 ε 值处突然下降,以至 $M_s < 1$ 。事实上,图4.4可以印证,对于不同的相互作用强度 U/\bar{J} 都会有类似的现象。本文将相应 ε 的临界值称作对称性破缺强度临界点,并记作 ε_c 。当 $\varepsilon < \varepsilon_c$ 时,对称性记忆始终保持 $M_s = 1$;当 $\varepsilon > \varepsilon_c$ 时,对称性记忆 $M_s < 1$,这意味着从此系统逐渐失去其初始对称性。图4.3中绿色和橙色的曲线是根据平均场理论算得的对称性记忆,弱相互作用情况下(绿色曲线)平均场理论得到的对



图 4.4 临界现象随相互作用强度变化趋势。在相互作用 U/\bar{J} 较强时,对称性破缺强度临界点 ε_c (左轴,红色曲线)与对称性能量差 Δ_s/\bar{J} (右轴,黑色曲线)的变化趋势保持一致。图中所示为 6 格点系统中总粒子数为 N = 2,3,4,5的情况。采用微扰论得出的对称性能量差(右轴,蓝色虚线)有助于理解 ε_c 和 Δ_s/\bar{J} 随相互作用强度变化呈现上升或下降趋势的机制。伴随着 ε_c 曲线出现的绿色区域(左轴)为其数值计算的收敛误差,是通过增加总演化时间至四倍的 τ 以及提高 ε_c 的精确 度得到的。图(a)中插入的是当相互作用强度较弱时采用平均场理论得到和 PSBH 理论的结论类 似的临界现象。

称性记忆随对称性破缺强度变化趋势与前述多体理论 PSBH 模型一致,均展示出对称性破缺强度的临界现象,而平均场理论算得的强相互作用情况(橙色曲线)则无法体现这一临界现象。图4.4(a)中插入图进一步展示了平均场理论在计算这类现象时受限于相互作用较弱的情形。

那么上述现象的物理机制是什么呢?如图4.4所示,可以看到图4.2中定义的对称性能量差与 ε_c 与相互作用强度的变化趋势一致。这一点表明虽然事实上图4.2中所有能级簇都参与了系统的动力学演化,但是处于最低能级簇中对称性能量差对演化结果的贡献最大。要详细解释这一点,本文需要回溯到对称性记忆的时间演化过程中,接下来仍以6格点系统为例。首先,本文选择对称性能量差 Δ_s 定义中能量较低的本征态作为时间演化过程的初态。它既是哈密顿量的本征态,同时也是旋转对称算符 \hat{C}_6 和 \hat{C}_3 的本征态,分别对应旋转量子数 $m_6 = +1$ 和 $m_3 = +1$ 。在系统按照部分对称破缺的哈密顿量 PSBH 做时间演化时,系统波函数 $|\psi(t)\rangle$ 只可能由两类旋转量子数 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 对应的本征态叠加而得。这是因为系统在部分对称性破缺后仍保留了3 重旋转对称性,因此初态的3 重旋转对称性在时间演化的过程中也应该被保留下来,而这两

类本征态恰好具有和初态一致的 3 重旋转对称性 $m_3 = +1$ 。对于该系统的波函数来说, 时间演化的过程就是初态波函数在部分对称性破缺的系统中克服能级差演变为多组分 叠加态的过程。在所有旋转量子数满足 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 的本征态中,位于图4.2能 谱中最低能级簇的本征态由于与初态能量差最小,因而最容易融入到波函数 $|\psi(t)\rangle$ 中。 所以本征能谱中能级最低的本征态 $m_6 = -2$ 对系统波函数 $|\psi(t)\rangle$ 的对称性性质影响最 大。综和上述讨论,可以得出以下结论:以低能激发态 $m_6 = +1$ 和 $m_6 = -2$ 定义的对 称性能量差能够刻画淬火后系统涡旋的大部分动力学性质。这也是由公式4.2定义的对 称性能量差能够有效预测部分对称性破缺临界现象的主要原因。

4.2.2 数值方法及其精确度

这一节讨论本章数值计算涉及到一些实际问题,以及这些问题对精确度的影响。 首先,改变系统的相互作用强度,由公式4.2定义的对称性能量差在能谱中可能会移动 位置,也就是说Δ_s并不是本征能谱中固定在某两个位置的本征态能量之差,它的最终 位置是要根据系统的具体参数算得本征能谱各个本征态的对称性之后才能确定。这一 点要特别注意。考虑到这个因素,本文在前文类似图4.4的计算中均确认过对称性能量 差的具体位置。其物理机制是角动量不同流形之间的交叉与相互作用强度有关。

其次,本文讨论数值模拟的过程中遇到的一些问题。总演化时间的长短和对称性 破缺强度 ε 会影响图4.3、图4.4和图4.6中曲线的精确度。若演化时间足够长则可以保 证系统已经完成了淬火后的过渡期,同时还可以保证对称性记忆做时间平均时有足够 的样本来统计系统的总对称性。通常系统的格点数越多、系统中总粒子数越大,则系 统的希尔伯特空间越大,其需要总演化时间越长。总之,总演化时间大约是环形晶格 上粒子流周期的数百倍。而 ε_c 的精确度直接和总演化时间相关。为了估测这个效应,本文延长总演化时间 τ 至原来的四倍,并将最终的收敛误差以绿色区域标注在图4.4和 图4.6的曲线上。

在本章的讨论中,所有的数值计算均采用精确对角化。因为在经历量子淬火较长 一段时间后,基于张量网络的近似方法会失效^[112,117],这是非平衡量子仿真器中一个众 所周知的强有力的论据。此外,对势阱的淬火会引发格点上粒子数的巨大涨落以及引 入量子纠缠。因此,张量网络中纠缠的常规近似方法会在时间演化过程中失效,尤其 是会使约化密度矩阵的模激增^[141,142]。通常就量子淬火而言,尽管张量网络方法在满足 面积定律的 $\varepsilon \ll \epsilon_c$ 范围内有效,但为了找到对称性破缺的临界点,研究者需要在满足 体积定律的 $\varepsilon \ge \epsilon_c$ 区域探索。综上所述,在本章节的讨论的问题中张量网络失效。本 文避开张量网络的初衷和多体局域化问题有类似的理由,在多体局域化问题中从体积 定律(热化(thermalizing),弱相互作用)转换到面积定律(无热化(non-thermalizing),



图 4.5 临界对称性破缺强度的截断测试。(a)截断系统中的临界对称性破缺强度 ε_c 及其(b)相 对误差, $\Delta \varepsilon_c / \varepsilon_c$ 。其中 $\Delta \varepsilon_c$ 是截断系统与未截断系统中 ε_c 的绝对偏差。图中未截断的系统为 L = 8, N = 4,其中每个格点允许同时容纳的最大粒子数为 $n_i^{max} = 4$ 。系统的相互作用强度 U/\overline{J} 从弱相 互作用增强至强相互作用,可以观察到强相互作用下 ε_c 的误差明显减少。其中误差最大的例子是 $n_i^{max} = 2$ 的情况,由截断带来的相对误差最大值大约为 20% 至 30%。这一误差会随着每个格点允 许同时容纳的最大粒子数上升至 3 个以上时大大减小。

强相互作用,多体局域化)张量网络并不是寻找临界相互作用强度的有效方法。最后, 精确对角化可以得到完整的本征能谱并定位对称性能量差,而张量网络并不能有效处 理激发态能级的相关问题。

因此本章节的研究受限于精确对角化方法,不过本章依然引入了另一类近似方法 辅助讨论,那就是对单格点的希尔伯特空间的维度做截断。这种方法对于模拟较大规 模的系统很有必要,因为如果不做截断,系统的希尔伯特空间将变得非常大,具体可 以通过 (^{L+N-1}) 算得。现在以图4.5所示的 4 个粒子分布在 8 个格点上的系统为例作为 截断近似测试。在强相互作用区域内,截断近似的误差低于 1%,可以认为非常有效。 在截断近似运用效果比较糟糕的情况如图4.5(b)中 n_i^{max} = 2 以及弱相互作用的例子中, 临界对称性破缺强度的相对误差达到了 20% 至 30%。这是因为满足 n_i^{max} = N 的 Fock 态在时间演化过程中的参与比重不容忽视。尽管如此, n_i^{max} = 2 的截断近似得到的结论 对于本文讨论更大规模的系统依然有效。还要注意到格点数 L 越少的系统中粒子数涨 落越大,本文以格点数为 L = 8 的系统为例展示截断近似对格点数增加至 L = 18 的系 统可能出现的最不理想的结果。

4.2.3 简并微扰

在之前的讨论中,可以发现对于 L = 6 的系统以及图4.6中格点数更多的系统,其 临界对称性破缺强度在强相互作用区间会呈现两类趋势,即或为 (i) 上涨至某一非零 值,或 (ii) 下降至趋于零,系统呈现哪类趋势似乎和粒子总数 N 有关联。接下来本文 展示一个简单的二阶简并微扰计算来分析为何会出现这两类趋势。以6格点系统为例,



图 4.6 临界对称性破缺的介观延伸。临界对称性破缺强度 ε_c 随着相互作用强度 U/J 的变化趋势。 图中所示为粒子数 N = 2, 3, 4, 5 和格点数 L = 6, 8, 10 (分别为红色、蓝色、黑色曲线)的系统。尽管精确对角化可以计算系统规模有限,这些结果已经足够支撑进一步的推断,那就是临界现象在此类对称性破缺的系统中是普适的,甚至有助于猜测热力学极限时是否会有类似临界现象。图中还显示临界对称性破缺在强相互作用时与图4.4中结果类似的两类典型趋势。图中绿色区域代表收敛误差,计算方法与图4.4中相同。

假定淬火发生前 PSBH 中的跃迁项为微扰,对公式4.2定义的对称性能量差 Δ_s 作简并 微扰计算。 Δ_s 定义在系统未经淬火的本征能谱中,此时 PSBH 蜕化为常见的 BHH,即 $\hat{H} = \frac{U}{2} \sum_{i=1}^{L} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \bar{J} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_i^{\dagger} \hat{b}_j + \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_i)$ 。以 \bar{J} 所在的跃迁项为微扰,则近似到二阶 \bar{J}^2 有 $\Delta_s \simeq a(N)U + b(N)\bar{J} + c(N)\bar{J}^2/U$ 。其中 a(N)U 是零阶微扰项,由不含跃迁项仅含 相互作用 U 项的 BHH 算得。 $b(N)\bar{J}$ 是一阶微扰项,根据微扰论这一项是由跃迁项决定 的。 $c(N)\bar{J}^2/U$ 是二阶微扰项,其能量以 \bar{J}^2/U 为单位来度量。接下来,为了与前文保 持一致,本节重新将能量以 \bar{J} 度量,得到 $\Delta_s/\bar{J} \simeq a(N)U/\bar{J} + b(N) + c(N)\bar{J}/U$ 。

由于 Δ_s 定义中的上层和下层的本征态在零阶微扰时简并在同一个能级簇中(参考图4.2),对于任何粒子数为 N 的系统均有零阶微扰项 a(N) = 0。接下来仍以 6 格点系统为例,对于 N = 2 至 12 可以得到 b(N) = 0,1,0,2,1.58,4,0,2,0,4,2.97 和 c(N) = 8/3, -2, 8/3, 0, 3.15, 0, 8/3, -2, 8/3, 0, 6.78, 此处将结果保留至小数点后两位。对 于 N = 2,4,8,10, <math>b(N) = 0。在这些粒子数对应的系统中,决定对称性能量差的两个本征态在一阶微扰计算后仍然保持简并,此时则必须依赖二阶微扰来解开简并,因而 c(N) 称为影响 Δ_s 变化趋势的主导因子。与此相反的是 N = 3,5,6,7,9,11,12 的系统,其中 $b(N) \neq 0$,这意味着一阶微扰能够将两个态的简并打开。然而本文还是要对所有的 例子都计算至二阶微扰项,此时可以发现其中 N = 5,7,11 的系统二阶微扰项系数 c(N) 为零。最后, N = 1 的情况不在微扰论的讨论范围内,因为此时 PSBH 中相互作用项为 零,无法应用微扰论。计算至二阶微扰项已经足以描述强相互作用极限下临界点的趋势,同时微扰论也验证了之前的数值模拟的结果。对于图4.4(b)和 (d)中的 (i) 类趋势,非零一阶微扰项系数 b(N) 主导 Δ_s 的变化趋势,引发上升趋势。反之,b(N) = 0对应 图4.4(a)和 (c)中的 (ii) 类趋势,此时 Δ_s 由二阶微扰项系数 c(N) 主导,产生下降趋势。

需要注意的是 *b*(*N*) = 0 或者 *c*(*N*) = 0 并不是源于总粒子数 *N* 的奇偶效应,而是 由系统的粒子填充情况决定,后者改变了系统本征能谱中本征态之间的简并情况。在 6 格点系统中, *N* = 9 对应的本征能谱与 *N* = 3 类似,同理 *N* = 2,4,8,10 情况下的本征 谱相似。*N* = 6 时是单位填充,是一个特殊情况。微扰论中 *b*(*N*) 和 *c*(*N*) 的值也印证了 上述结论。

4.2.4 平均场理论

为弄清楚平均场理论是否也能得到上述临界对称性破缺现象,本节将以图4.3(f)和 图4.4(a)中所示的6格点系统为例探讨平均场模拟。玻色-哈伯德模型的平均场近似,也 就是一维晶格中的离散非线性薛定谔方程(DNLS),表达为

$$i\hbar\dot{\psi}_i = -J(\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) + gN|\psi_i|^2\psi_i.$$
(4.5)

其中相较于标准的 BHH,平均场 g*N 项对应于 BHH 中相互作用 U 项。平均场中的标量波函数 $\psi(t)$ 归一化为 1。假设多体波函数可以写作一系列 Glauber 相干态的乘积,即 $\langle \hat{b}_i^{\dagger}\hat{b}_i\hat{b}_i \rangle = \psi_i^*\psi_i\psi_i$,其中 $\psi_i \equiv \langle \hat{b}_i \rangle$ 。然后在海森堡表象下将场算符 \hat{b}_i 按照 BHH 做时间 演化可以得到上述 DNLS。为了描述离散 6 格点环形晶格系统,本文采用极坐标将系 统改写为一维模型。通过旋转 DNLS 的基态得到具有不同旋转量子数的态,还可以利用这一点来探测某个态中包含的各个旋转态的组分。DNLS 中的对称性记忆的定义和 PSBH 中公式4.4一致。在图4.3(f)中,本文采用平均场方法做时间演化分别得到了弱相 互作用和强相互作用时的对称性记忆,并以绿色和橙色曲线画出。在图中,本文可以 清楚的看到对于弱相互作用区域平均场理论可以重现类似的临界现象,然而在强相互 作用区域,平均场方法的结果大大偏离了多体 BHH 模型的结论。因此本章得到的结论 虽然看似与平均场效应密不可分,实则并非平均场所独有,而是延伸至强相互作用区域,且并不局限于 Glauber 相干态的假设或是具有某相位的单粒子模。

4.2.5 部分对称性破缺与分数或单位填充 Mott-超流转变的区别



图 4.7 部分对称性破缺系统哈密顿量随对称性破缺强度 ϵ 的变化趋势。图中曲线为强相互作用 U/J = 30 时 6 格点系统中基态(红色曲线)和第一级能级簇中所有的激发态(黑色曲线)。图中对称性能量差和 Mott 能隙定义在 $\epsilon = 0$ 时。本文追踪两者随 ϵ 由 0 至 1 变化时的演化情况。(a)强相 互作用下粒子数 N = 6 单位填充的系统中,对称性能量差(纵轴紫色条形区域)在能谱中的位置远 远高于 Mott 能隙(纵轴蓝色条形区域)。(b)强相互作用下粒子数 N = 3 分数填充的系统中,对称 性能量差在能谱中的位置始终高于分数 Mott 能隙。Mott 能隙与基态密切相关,因此定义在激发态 中的对称性能量差是与 Mott 能隙完全不同的概念。

在强相互作用玻色-哈伯德模型中, 粒子数单位填充时会出现如图4.7(a) 所示的

Mott 相和 Mott 能隙。在跃迁项经历部分对称性破缺后,系统变成了玻色-哈伯德超晶格。对基态相图^[130]的进一步研究表明,分数填充 Mott 绝缘体相会出现在超晶格中。 在本章研究部分对称性破缺的情况中,同样也会有分数填充 Mott 绝缘体相。在前面章 节中,本文引入了对称性能量差Δ_s来描述临界对称性破缺现象并选择对称性能量差定 义中较低的本征态作为时间演化的初态,它是图4.2中本征能谱的一个低能激发态。相 比之下,超流相、Mott 相和分数填充 Mott 相均与系统的基态有关,且它们和第一能级 簇中的激发态以及其中的能隙没有任何关联。正如图4.7中纵轴的紫色和蓝色条形区所 示,对称性能量差与整数和分数 Mott 能隙在能谱中处于完全不同的位置。另外,由于 图4.7中所示的系统希尔伯特空间的维度并不大,其中的对称性能量差蜕化为对称性能 隙。

由于系统波函数是在部分对称性破缺的哈密顿量 PSBH 下做时间演化,因此对于 淬火后的 6 格点系统,波函数的演化为所有具有与初态相同 m_3 旋转量子数的态的叠 加态。一般来说,系统基态所对应的 \hat{C}_3 对称性与所选初态并不相同,因此基态永远不 会参与到波函数的时间演化过程中,这一点再次证明了无论是整数还是分数 Mott 能隙 都与系统的演化动力学无关。图4.7中能量本征谱展示了选定的初态即具有特定 \hat{C}_3 对 称性最低能级激发态与系统基态之间的能量差。从图中可以看出,与对称性相关的现 象所涉及的态在能谱中始终高于基态,也就是说这些现象不会受 Mott 绝缘体-超流转 变的影响。总之,本章研究的对称性破缺和分数填充的 Mott 相无关,也和 Mott 绝缘 体-超流转变完全不同。

4.2.6 有限尺度标度

到目前为止,本文的研究内容大部分集中在 L = 6 的例子上。尽管如章节4.2.2中 所述,本文的数值模拟法受限于精确对角化方法,但采用对局域希尔伯特空间做截断 近似可以将计算范围扩大,以便计算更大尺度的系统。截断近似的核心是设定单个格 点能同时容纳的粒子数上限,记为 n_i^{max} 。图4.8中仅列出 N = 5, L = 8 和 N = 8, L = 8 两 个系统为例来说明截断近似对对称性现象的影响。图中两个系统的结果均显示在强相 互作用下对称性能量差 Δ_s (红色曲线)几乎不随 n_i^{max} 变化,而是保持某一常量,这说 明了强相互作用情况下截断近似的效应可以忽略不计。然而,与图4.5中结论类似的是, 在弱相互作用下(蓝色曲线)当 n_i^{max} 较小时 Δ_s 变化显著。不过,与 n_i^{max} 取最大值时 的 Δ_s 值对比, Δ_s 值的浮动成都约为几个百分比,仍在有限尺度标度的可接受范围内。

采用截断近似后,本文便可以继续用精确对角化方法求解更大尺度的系统。图4.9中 所有例子均设定 $n_i^{\text{max}} = 2$ 。粒子数密度 N/L 是平均每个格点上的粒子数量。图4.9中 N/L 分别为 1/4, 1/3, 1/2, 1。 Δ_s 的在强或弱相互作用下的变化趋势在这四种不同的粒



图 4.8 对称性能量差的截断近似测试。(a) N = 8, L = 8 和(b) N = 5, L = 8 系统中单格点局域 希尔伯特空间做截断近似后的对称性能量差 Δ_s/\bar{J} ,对应截断程度分别为(a) $n_i^{\text{max}} = 2, 3, 4, 5$ 和(b) $n_i^{\text{max}} = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ 。在强相互作用区域(红色曲线), Δ_s 几乎不随 n_i^{max} 变化。在弱相互作用区域 (蓝色曲线), Δ_s 随 n_i^{max} 的变化有小幅度变动。

子填充情况中保持一致,具有一定的规律。 Δ_s 似乎呈现出两种不同的趋势,对其深层 次的理解尚不清楚。但是依据图4.9所示,可以确信对于格点数多至 20 的系统,对称 性能量差 Δ_s 仍然非常大,这个结论至少对于 N/L = 1/3,1的情况来说是正确的。这 意味着在具有几十个格点的较大尺度的系统中仍然可以发现类似的对称性破缺临界现 象。需要注意的是,对于尺度较大的系统,能谱中具有 $m_n = +1$ 的态以及具有其他旋 转量子数的态都可能会出现在 Δ_s 中,这些态将会作为时间演化过程中的内部噪声源, 干扰数值计算的结果。对这一点该如何做修正仍有待研究。图4.9 (c)(d)中的误差条 取 $n_i^{max} = 3 和 n_i^{max} = 2 中 \Delta_s$ 的相对误差,虽然本文目前展示的粒子中系统尺度 L 和总 粒子数 N 仍然不够大,但是观察这些曲线的趋势也足以说明截断近似引入的误差非常 小。事实上,当相互作用强度很强时(红色曲线),这点误差会非显得非常小,图中有 些误差条的长度甚至比数据点还要小,因此这些误差可以忽略不计。而当相互作用强 度比较弱时(蓝色曲线),相对误差也不超过1%。

4.3 本章小结

总之,本章研究了环形晶格中玻色子涡旋态的非平衡动力学。淬火后系统变为部 分对称性破缺的晶格,经过时间演化后本章发现了一种临界现象,它由离散晶格系统 中不同旋转量子数的投影所决定的。如果部分对称性破缺的强度在临界值之下,则在 相当长的一段时间内系统能够保持其初始环绕数。一旦部分对称性破缺强度超过临界 值,则系统有时会失去其对初态对称性的记忆,导致这种记忆逐渐缺失。对称性记忆



图 4.9 对称性能量差的有限尺度标度分析。粒子数密度 N/M 固定为 (a) 1/4, (b) 1/3, (c) 1/2, (d) 1 的系统随格点数 L 的增加的变化趋势。按照图4.8中截断近似的方法对所有系统取截断 $n_i^{max} = 2$ 。 红色曲线代表强相互作用 $U/\overline{J} = 30$ 的例子,蓝色曲线代表弱相互作用 $U/\overline{J} = 3$ 的例子。同时对强和弱相互作用情况下 L=6, 8, 10 中 (c) 半填充和 (d) 单位填充的画出误差条可以看出截断误差非常小。对于尺度增至 20 个格点的系统,其对称性能量差依然较大,由此可以推断至少在介观体系此类由对称性破缺引发的临界现象依然存在。

也可以说是上述投影的时间平均。它与定义在能谱中最低能级簇的激发态中的对称性 能量差的变化趋势保持一致。本章采用精确对角化的数值模拟研究可以做为量子仿真 器实验中探究对称性相关的新奇现象的早期探索。

这里仍然有一个重要的遗留问题,那就是本章对这些小系统的研究结果是否能够 推广至诸如量子仿真器实验之类的较大系统中呢?首先,图4.6显示了比 6 格点系统 大一些的系统中也会有类似的对称性破缺临界现象,且其变化趋势也呈现类似的两 种典型趋势。因此,依据图4.9中所示的结果,可以推断出系统尺度大至 20 个格点的 环形晶格中也会有对称性破缺的临界点,超过这个临界点系统就会丧失对其初态对称 性的记忆。其次,本章对 6 格点系统所做的研究可以作为蜂巢晶格的一个最简研究 单元。这些结论有助于研究涡旋态在晶格中的分布以及 *A-B* 子格子对称性破缺对其 影响。这类双周期晶格之前是被应用在方形晶格的 C-NOT 门中^[143]。本章对 6 至 20 个格子的介观环形晶格系统的研究结果为较大系统中类似的部分对称性破缺过程提 供了研究基础。需要注意的是,如果将本章的研究结果扩展至蜂巢晶格中一定要引入 额外的动力学,因为蜂巢晶格中六角单元之间存在耦合以及交叠等复杂的关联。通常 Berzinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT)相变是由于锁定了涡旋-反涡旋对而引起的"有限 序"的相变。如果将对称性破缺与 BKT 相变结合也将会是一个非常有趣的课题。部分 对称性破缺从石墨烯的角度说就是引入 A-B 子格子能隙,它可以在适当的条件下阻断 BKT 相变。通常在弱相互作用情况下,对没有任何涡旋态的凝聚体使用干涉等标准手 段,其分布是干涉图案的一列分叉^[131]。量子显微术也许可以用于近距离测量^[132] 蜂巢 晶格中六角单元的环绕数^[133],尤其针对是强相互作用的情况。依据与淬火后部分对称 性破缺系统相关的体积定律,这类研究展示了一个全新的具有量子霸权的量子动力学 实验^[144],也就是说量子模拟不能应用于经典计算机中,但可以完美的应用于量子仿真 器实验中。

总结与展望

本论文主要研究玻色-爱因斯坦凝聚体在两个特定系统中的动力学演化过程,涉及 到单阱宏观量子隧穿和环形晶格的部分对称性破缺。第一章和第二章分别针对这两个 系统介绍相关背景知识和后文中使用的理论方法。

论文第一章首先介绍了一个简单的量子隧穿系统——一维方势垒贯穿。然后介绍 计算量子隧穿问题的 JWKB 半经典近似。最后针对量子隧穿问题,本文按照统计性质、 相互作用、束缚势阱和系统维度等四个方面进行分类讨论,这个总结也可以为宏观量 子隧穿领域提供研究方向。

论文第二章主要介绍玻色-爱因斯坦凝聚体及计算超冷玻色原子气的几个理论方法。第二章首先从量子统计的角度介绍玻色-爱因斯坦凝聚现象。随后作为后续内容的铺垫,本文介绍一种常用的束缚势阱——光晶格,及其产生机制。然后,本文提供两种思路来推导平均场理论中的 Gross-Pitaevskii 方程。随后,本文利用紧束缚近似在万尼尔表象下推导出玻色-哈伯德模型。二次量子化形式的玻色-哈伯德模型可以描述晶格中有相互作用但无自旋的玻色系统。将玻色-哈伯德模型推广至扩展玻色-哈伯德模型可以描述由高阶项引发的物理现象。最后,本文简单对比了几种用以计算玻色-哈伯德模型的数值方法。

论文的第三章和第四章是本论文的主要部分。论文第三章主要研究玻色-爱因斯 坦凝聚体在单阱中的宏观量子隧穿。本文首先介绍实验过程及其主要结果。实验中观 察到束缚在势阱内的粒子数呈现非指数衰减趋势。针对这一发现,本文采用修正后的 JWKB 模型来计算隧穿实验的动力学演化,最终得到的粒子数衰减趋势、衰减率和化 学势等物理量与实验结果符合良好。修正 JWKB 模型的主要思路是将势能项更换为由 平均场效应引发的等效势。等效势中包含粒子间的相互作用,正是相互作用影响粒子 数的衰减过程,产生非指数衰减趋势。

论文的第四章主要研究超冷玻色子在发生部分对称性破缺的环形晶格中的非平衡 动力学演化过程。本文首先介绍环形晶格发生部分对称性破缺前后对应的理论模型, 即玻色-哈伯德模型中的跃迁项由均一模式转变位双重周期模式。随后,本文定义对称 性能量差和对称性记忆,这两者都是基于系统对称性定义的观测量。通过观察对称性 记忆随部分对称性破缺强度的变化趋势,本文发现存在对称性破缺强度临界点。当对 称性破缺强度大于临界点时,系统会失去对其初态对称性的记忆。当相互作用较强时, 临界点与对称性能量差的趋势保持一致。然后,本文采用简并微扰论计算对称性能量 差,并解释其变化趋势。随后,本文将平均场理论计算的结果与玻色-哈伯德模型的结 果对比。最后,通过研究有限尺度标度问题,本文指出较大系统发生部分对称性破缺后,系统中同样存在此类临界现象。第四章的研究内容可以为诸如石墨烯和量子模拟器等较大系统提供研究思路。

参考文献

- [1] F. Hund. "Linienspektren und Periodisches System der Elemente". Nature, 1927, 120(3025): 580.
- [2] R. W. Gurney and E. U. Condon. "Quantum Mechanics and Radioactive Disintegration". Phys. Rev. 1929, 33: 127–140.
- [3] J. B. Rommel, Y. Liu, H.-J. Werner et al. "Role of Tunneling in the Enzyme Glutamate Mutase". The Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116(46): 13682–13689.
- [4] S. Coleman. "Fate of the false vacuum: Semiclassical theory". Phys. Rev. D, 1977, 15: 2929–2936.
- [5] F. Hund. "Zur Deutung der Molekelspektren. I". Zeitschrift für Physik, **1927**, 40(10): 742–764.
- [6] P. W. Anderson. "More Is Different". Science, 1972, 177(4047): 393–396.
- [7] K. Choi, G. Ryu, F. Yesilkoy et al. "Geometry enhanced asymmetric rectifying tunneling diodes". Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena, 2010, 28(6): C6O50–C6O55.
- [8] P. D. Dresselhaus, M. M. Elsbury, D. Olaya et al. "10 volt programmable Josephson voltage standard circuits using NbSi-barrier junctions". IEEE Transactions on Applied Superconductivity, 2011, 21(3): 693–696.
- [9] H. Jeffreys. "On Certain Approximate Solutions of Lineae Differential Equations of the Second Order*". Proceedings of the London Mathematical Society, 1925, s2-23(1): 428–436.
- [10] G. Wentzel. "Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik". Zeitschrift für Physik, 1926, 38(6): 518–529.
- [11] H. A. Kramers. "Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung". Zeitschrift für Physik, 1926, 39(10): 828–840.
- [12] L. Brillouin. "La mécanique ondulatoire de Schrödingerschen: une méthode générale de resolution par approximations successives". Comptes Rendus, **1926**, 183: 24–26.
- [13] G. Zürn, A. N. Wenz, S. Murmann et al. "Pairing in Few-Fermion Systems with Attractive Interactions". Phys. Rev. Lett. 2013, 111: 175302.
- [14] A. del Campo, F. Delgado, G. Garca-Calderón et al. "Decay by tunneling of bosonic and fermionic Tonks-Girardeau gases". Phys. Rev. A, 2006, 74: 013605.
- [15] Zhou Y., Wang Y., Luo W.-C. et al. "Tunneling and Self-Trapping of Superfluid Fermi Gases in BCS-BEC Crossover". Communications in Theoretical Physics, 2012, 57(2): 188.
- [16] M. Abbarchi, A. Amo, V. G. Sala *et al.* "Macroscopic quantum self-trapping and Josephson oscillations of exciton polaritons". Nature Physics, **2013**, 9: 275–279.
- [17] C. Lee, W. Hai, X. Luo et al. "Quasispin model for macroscopic quantum tunneling between two coupled Bose-Einstein condensates". Phys. Rev. A, 2003, 68: 053614.
- [18] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling et al. "Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction". Phys. Rev. Lett. **2005**, 95: 010402.

- [19] I. A. Shelykh, D. D. Solnyshkov, G. Pavlovic *et al. "Josephson effects in condensates of excitons and exciton polaritons"*. *Phys. Rev. B*, **2008**, 78: 041302.
- [20] L. Salasnich, A. Parola and L. Reatto. "Pulsed macroscopic quantum tunneling of falling Bose-Einstein condensates". Phys. Rev. A, 2001, 64: 023601.
- [21] L. D. Carr, M. J. Holland and B. A. Malomed. "Macroscopic quantum tunnelling of Bose-Einstein condensates in a finite potential well". Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2005, 38(17): 3217.
- [22] A. I. Streltsov, O. E. Alon and L. S. Cederbaum. "Formation and Dynamics of Many-Boson Fragmented States in One-Dimensional Attractive Ultracold Gases". Phys. Rev. Lett. 2008, 100: 130401.
- [23] M. Ueda and A. J. Leggett. "Macroscopic Quantum Tunneling of a Bose-Einstein Condensate with Attractive Interaction". Phys. Rev. Lett. **1998**, 80: 1576–1579.
- [24] D. A. Alcala, J. A. Glick and L. D. Carr. "Entangled Dynamics in Macroscopic Quantum Tunneling of Bose-Einstein Condensates". Phys. Rev. Lett. 2017, 118: 210403.
- [25] D. Aghamalyan, L. Amico and L.C. Kwek. "*Effective dynamics of cold atoms flowing in two ring shaped optical potentials with tunable tunneling*". *Phys. Rev. A.* **2013**, 88: 063627.
- [26] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger et al. "Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond". Advances in Physics, 2007, 56(2): 243–379.
- [27] I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger. "Many-body physics with ultracold gases". Rev. Mod. Phys. 2008, 80: 885–964.
- [28] K. A. Mitchell and D. A. Steck. "Fractal templates in the escape dynamics of trapped ultracold atoms". Phys. Rev. A, 2007, 76: 031403.
- [29] D. A. Steck, W. H. Oskay and M. G. Raizen. "Fluctuations and Decoherence in Chaos-Assisted Tunneling". Phys. Rev. Lett. 2002, 88: 120406.
- [30] K. W. Mahmud, H. Perry and W. P. Reinhardt. "Quantum phase-space picture of Bose-Einstein condensates in a double well". Phys. Rev. A, 2005, 71: 023615.
- [31] R. Kanamoto, L. D. Carr and M. Ueda. "*Topological Winding and Unwinding in Metastable Bose-Einstein Condensates*". *Phys. Rev. Lett.* **2008**, *100*: 060401.
- [32] R. Kanamoto, L. D. Carr and M. Ueda. "Metastable quantum phase transitions in a periodic one-dimensional Bose gas: Mean-field and Bogoliubov analyses". Phys. Rev. A, 2009, 79: 063616.
- [33] R. Kanamoto, L. D. Carr and M. Ueda. "Metastable quantum phase transitions in a periodic one-dimensional Bose gas. II. Many-body theory". Phys. Rev. A, 2010, 81: 023625.
- [34] L. Diósi. "Gravitation and quantum-mechanical localization of macro-objects". Physics Letters A, 1984, 105(4): 199–202.
- [35] R. Penrose. "On Gravity's role in Quantum State Reduction". General Relativity and Gravitation, 1996, 28(5): 581–600.
- [36] R. Penrose. "Quantum computation, entanglement and state reduction". Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1998, 356(1743): 1927–1939.
- [37] M. A. Valdez, D. Jaschke, D. L. Vargas et al. "Quantifying Complexity in Quantum Phase Transitions via Mutual Information Complex Networks". Phys. Rev. Lett. **2017**, 119: 225301.
- [38] S. Watabe and Y. Kato. "Transmission and Reflection of Collective Modes in Spin-1 Bose-Einstein Condensate". Journal of Low Temperature Physics, **2009**, 158(1): 23.
- [39] S. Watabe, Y. Kato and Y. Ohashi. "Tunneling properties of Bogoliubov mode and spin wave modes in supercurrent states of a spin-1 ferromagnetic spinor Bose-Einstein condensate". Phys. Rev. A. 2011, 83: 033627.
- [40] S.T. Tserkis, Ch.C. Moustakidis, S.E. Massen et al. "Quantum tunneling and information entropy in a double square well potential: The ammonia molecule". Physics Letters A, 2014, 378(5-6): 497–504.
- [41] G. Jona-Lasinio, C. Presilla and C. Toninelli. "Interaction Induced Localization in a Gas of Pyramidal Molecules". Phys. Rev. Lett. 2002, 88: 123001.
- [42] I. Zapata, F. Sols and A. J. Leggett. "Josephson effect between trapped Bose-Einstein condensates". Phys. Rev. A, 1998, 57: R28–R31.
- [43] G. Garca-Calderón and R. Romo. "Nonexponential tunneling decay of a single ultracold atom". Phys. Rev. A, 2016, 93: 022118.
- [44] L. Salasnich, N. Manini and F. Toigo. "Macroscopic periodic tunneling of Fermi atoms in the BCS-BEC crossover". Phys. Rev. A, 2008, 77: 043609.
- [45] M. A. García-March, D. R. Dounas-Frazer and L. D. Carr. "*Macroscopic Superposition of Ultracold Atoms with Orbital Degrees of Freedom*". *Phys. Rev A*, **2011**, 83: 043612.
- [46] J. M. Martinis, M. Ansmann and J. Aumentado. "Energy Decay in Superconducting Josephson-Junction Qubits from Nonequilibrium Quasiparticle Excitations". Phys. Rev. Lett. 2009, 103: 097002.
- [47] G. Catelani, S. E. Nigg, S. M. Girvin et al. "Decoherence of superconducting qubits caused by quasiparticle tunneling". Phys. Rev. B, 2012, 86: 184514.
- [48] I. Shomroni S. Levy E. Lahoud and J. Steinhauer. "*The a.c. and d.c. Josephson effects in a Bose– Einstein condensate*". *Nature*, **2007**, 449: 579–583.
- [49] D. R. Dounas-Frazer, A. M. Hermundstad and L. D. Carr. "Ultracold Bosons in a Tilted Multilevel Double-Well Potential". Phys. Rev. Lett. 2007, 99: 200402.
- [50] L. D. Carr, D. R. Dounas-Frazer and M.-A. García-March. "Dynamical Realization of Macroscopic Superposition States of Cold Bosons in a Tilted Double Well". Europhys. Lett. **2010**, 90: 10005.
- [51] R. Lundmark, C. Forssén and J. Rotureau. "*Tunneling theory for tunable open quantum systems of ultracold atoms in one-dimensional traps*". *Phys. Rev. A*, **2015**, *91*: 041601.
- [52] S. E. Gharashi and D. Blume. "*Tunneling dynamics of two interacting one-dimensional particles*". *Phys. Rev. A*, **2015**, *92*: 033629.

- [53] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci *et al.* "Scaling of entanglement close to a quantum phase transition". *Nature*, **2002**, *416*: 608–610.
- [54] A. U.J. Lode, A. I. Streltsov, K. Sakmann et al. "How an interacting many-body system tunnels through a potential barrier to open space". Proceedings of the National Academy of Sciences, 2012, 109(34): 13521–13525.
- [55] Y. Ota, M. Machida and T. Koyama. "Macroscopic quantum tunneling in multigap superconducting Josephson junctions: Enhancement of escape rate via quantum fluctuations of the Josephson-Leggett mode". Phys. Rev. B, 2011, 83: 060503.
- [56] H. Asai, Y. Ota, S. Kawabata et al. "Theory of macroscopic quantum tunneling with Josephson-Leggett collective excitations in multiband superconducting Josephson junctions". Phys. Rev. B, 2014, 89: 224507.
- [57] Y. Qian, M. Gong and C. Zhang. "Quantum transport of bosonic cold atoms in double-well optical lattices". Phys. Rev. A, 2011, 84: 013608.
- [58] M. Girardeau. "Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension". Journal of Mathematical Physics, 1960, 1(516): 516–523.
- [59] A. Adams, L. D. Carr, T. Schaefer et al. "Focus on Strongly Correlated Quantum Fluids: from Ultracold Quantum Gases to QCD Plasmas". New J. Phys. 2012, 14: 115009.
- [60] A. Adams, P. M. Chesler and H. Liu. "Holographic Turbulence". Phys. Rev. Lett. 2014, 112: 151602.
- [61] S. Potnis, R. Ramos, K. Maeda et al. "Interaction-Assisted Quantum Tunneling of a Bose-Einstein Condensate Out of a Single Trapping Well". Phys. Rev. Lett. 2017, 118: 060402.
- [62] S. K. Haldar, P. K. Debnath and B. Chakrabarti. "Macroscopic quantum many-body tunneling of attractive Bose-Einstein condensate in anharmonic trap". The European Physical Journal D, 2013, 67(9): 188.
- [63] V. O. Nesterenko, A. N. Novikov, A. Yu Cherny et al. "An adiabatic transport of Bose-Einstein condensates in double-well traps". Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2009, 42(23): 235303.
- [64] V. O. Nesterenko, A. N. Novikov and E. Suraud. "Transport of the repulsive Bose-Einstein condensate in a double-well trap: interaction impact and relation to the Josephson effect". Laser Physics, 2014, 24(12): 125501.
- [65] T. Macrì and A. Trombettoni. "Tunneling of polarized fermions in 3D double wells". Laser Physics, 2013, 23(9): 095501.
- [66] C. E. Creffield, F. Sols, D. Ciampini *et al.* "*Expansion of matter waves in static and driven periodic potentials*". *Phys. Rev. A*, **2010**, 82: 035601.
- [67] T. A. Pasquini, M. Saba, G.-B. Jo et al. "Low Velocity Quantum Reflection of Bose-Einstein Condensates". Phys. Rev. Lett. 2006, 97: 093201.
- [68] O. Zobay and B. M. Garraway. "Two-Dimensional Atom Trapping in Field-Induced Adiabatic Potentials". Phys. Rev. Lett. 2001, 86: 1195–1198.

- [69] M. Shotter, D. Trypogeorgos and C. Foot. "Enhancement of on-site interactions of tunneling ultracold atoms in optical potentials using radio-frequency dressing". Phys. Rev. A, **2008**, 78: 051602.
- [70] M. Heimsoth, D. Hochstuhl, C. E. Creffield *et al.* "*Effective Josephson dynamics in resonantly driven Bose-Einstein condensates*". *New Journal of Physics*, **2013**, *15*(10): 103006.
- [71] M. A. Valdez, G. Schedrin, M. Heimoth *et al.* "Many-Body Quantum Chaos and Entanglement in a Quantum Ratchet". Phys. Rev. Lett. **2018**, 120: 234101.
- [72] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini et al. "Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials". Phys. Rev. Lett. 2007, 99: 220403.
- [73] C. E. Creffield. "Quantum Control and Entanglement using Periodic Driving Fields". Phys. Rev. Lett. 2007, 99: 110501.
- [74] C. Sias, H. Lignier, Y. P. Singh et al. "Observation of Photon-Assisted Tunneling in Optical Lattices". Phys. Rev. Lett. 2008, 100: 040404.
- [75] F. Grossmann, T. Dittrich, P. Jung *et al.* "*Coherent destruction of tunneling*". *Phys. Rev. Lett.* **1991**, 67: 516–519.
- [76] S. Wüster, B. J. Da browska-Wüster and M. J. Davis. "Macroscopic Quantum Self-Trapping in Dynamical Tunneling". Phys. Rev. Lett. 2012, 109: 080401.
- [77] A. Mouchet, C. Miniatura, R. Kaiser *et al.* "*Chaos-assisted tunneling with cold atoms*". *Phys. Rev. E*, **2001**, *64*: 016221.
- [78] S. Tomsovic and D. Ullmo. "Chaos-assisted tunneling". Phys. Rev. E, 1994, 50: 145–162.
- [79] C. J. Pethick and H. Smith. "Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases". 2nd ed. Cambridge University Press, 2008.
- [80] L. P. Pitaevskii and S. Stringari. "Bose-Einstein Condensation". Clarendon Press, 2003.
- [81] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews et al. "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor". Science, 1995, 269(5221): 198–201.
- [82] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews et al. "Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms". Phys. Rev. Lett. 1995, 75: 3969–3973.
- [83] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett *et al.* "Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions". Phys. Rev. Lett. **1995**, 75: 1687–1690.
- [84] C. C. Bradley, C. A. Sackett and R. G. Hulet. "Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number". Phys. Rev. Lett. 1997, 78: 985–989.
- [85] S. E. Pollack, D. Dries, M. Junker et al. "Extreme Tunability of Interactions in a ⁷Li Bose-Einstein Condensate". Phys. Rev. Lett. 2009, 102: 090402.
- [86] T. Fernholz, R. Gerritsma, P. Krüger et al. "Dynamically controlled toroidal and ring-shaped magnetic traps". Phys. Rev. A, 2007, 75: 063406.
- [87] A. Ashkin, J. M. Dziedzic, J. E. Bjorkholm *et al.* "Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles". Opt. Lett. **1986**, 11(5): 288–290.
- [88] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai et al. "Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level". Science, 2010, 329(5991): 547–550.

- [89] T. Langen, S. Erne, R. Geiger et al. "Experimental observation of a generalized Gibbs ensemble". Science, 2015, 348: 207–211.
- [90] B. Wu and N. Qian. "Nonlinear Landau-Zener tunneling". Physical Review A, 2000, 61(2): 023402.
- [91] C. W. Gardiner, J. R. Anglin and T. I. A. Fudge. "*The stochasticGross-Pitaevskii equation*". Journal of Physics B Atomic Molecular and Optical Physics, **2002**, 35(6): 1555–1582.
- [92] C. W. Gardiner and M. J. Davis. "The stochastic Gross-Pitaevskii equation II". Condensed Matter, 2003, (8).
- [93] S. K. Dan and M. Ueda. "Spinor Bose gases: Symmetries, magnetism, and quantum dynamics". Reviews of Modern Physics, 2013, 85(3): 1191–1244.
- [94] G. H. Wannier. "The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals". Phys. Rev. 1937, 52: 191–197.
- [95] G. H. Wannier. "Dynamics of Band Electrons in Electric and Magnetic Fields". Rev. Mod. Phys. 1962, 34: 645–655.
- [96] H. A. Gersch and G. C. Knollman. "Quantum Cell Model for Bosons". Phys. Rev. 1963, 129: 959– 967.
- [97] Davide R. and Rosario F. "*Phase diagram of the extended Bose-Hubbard model*". *New Journal of Physics*, **2012**, *14*(6): 065012.
- [98] K. Góral, L. Santos and M. Lewenstein. "Quantum Phases of Dipolar Bosons in Optical Lattices". Phys. Rev. Lett. 2002, 88: 170406.
- [99] V. Gurarie, L. Pollet, N. V. Prokof'ev *et al.* "*Phase diagram of the disordered Bose-Hubbard model*". *Phys. Rev. B*, **2009**, 80: 214519.
- [100] I. Danshita and A. Polkovnikov. "Accurate numerical verification of the instanton method for macroscopic quantum tunneling: Dynamics of phase slips". Phys. Rev. B, 2010, 82: 094304.
- [101] I. Danshita and A. Polkovnikov. "Quantum phase slips in one-dimensional superfluids in a periodic potential". Phys. Rev. A, **2012**, 85: 023638.
- [102] R. Beinke, S. Klaiman, L. S. Cederbaum *et al. "Many-body tunneling dynamics of Bose-Einstein condensates and vortex states in two spatial dimensions"*. *Phys. Rev. A*, **2015**, *92*: 043627.
- [103] K. Sakmann, A. I. Streltsov, O. E. Alon et al. "Exact Quantum Dynamics of a Bosonic Josephson Junction". Phys. Rev. Lett. 2009, 103: 220601.
- [104] P. Schlagheck and S. Wimberger. "*Nonexponential decay of Bose–Einstein condensates: a numerical study based on the complex scaling method*". Applied Physics B, **2007**, 86(3): 385–390.
- [105] N. Moiseyev, L. D. Carr, B. A Malomed et al. "Transition from resonances to bound states in nonlinear systems: application to Bose - Einstein condensates". Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2004, 37(9): L193.
- [106] N. Makri and W. H. Miller. "A semiclassical tunneling model for use in classical trajectory simulations". The Journal of Chemical Physics, 1989-10: 4026–4036.
- [107] I. Buluta and F. Nori. "Quantum Simulators". Science, 2009, 326: 108–111.

- [108] J. Eisert, M. Friesdorf and C. Gogolin. "Quantum many-body systems out of equilibrium". Nature *Physics*, **2015**, *11*(2): 124–130.
- [109] D. Thingna J.and Manzano and J. Cao. "Dynamical signatures of molecular symmetries in nonequilibrium quantum transport". Sci. Rep. 2016, 6: 28027.
- [110] C.-Y. Lai and C.-C. Chien. "Quantification of the memory effect of steady-state currents from interaction-induced transport in quantum systems". Phys. Rev. A, 2017, 96: 033628.
- [111] A. Polkovnikov, A. Sengupta K.and Silva and M. Vengalattore. "Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems". Rev. Mod. Phys. 2011, 83: 863–883.
- [112] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti *et al.* "*Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*". *Nature*, **2012**, *481*(7382): 484–487.
- [113] P. Richerme, Z.-X. Gong, A. Lee *et al.* "Non-local propagation of correlations in quantum systems with long-range interactions". Nature, **2014**, *511*(7508): 198–201.
- [114] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia *et al.* "*Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice*". *Science*, **2015**, *349*: 842–845.
- [115] R. Nandkishore and D. A Huse. "Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics". Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2015, 6(1): 15–38.
- [116] D. Gobert, C. Kollath, U. Schollwöck *et al.* "*Real-time dynamics in spin-(1/2) chains with adaptive time-dependent density matrix renormalization group*". *Phys. Rev. E*, **2005**, *71*: 036102.
- [117] C. Kollath, A. M. Lauchli and E. Altman. "Quench dynamics and nonequilibrium phase diagram of the Bose-Hubbard model". Phys. Rev. Lett. **2007**, 98: 180601.
- [118] A. K. Geim and K. S. Novoselov. "The rise of graphene". Nature Materials, 2007, 6: 183–191.
- [119] M. Calandra and F. Mauri. "*Electronic structure of heavily doped graphene: The role of foreign atom states*". *Phys. Rev. B*, **2007**, *76*: 161406.
- [120] L. H. Haddad and L. D. Carr. EPL (Europhysics Letters), 2011, 94(5): 56002.
- [121] I. Bloch, J. Dalibard and S. Nascimbene. "Quantum simulations with ultracold quantum gases". Nature Physics, 2012, 8: 267–276.
- [122] K. Henderson, C. Ryu, C. MacCormick et al. "Experimental demonstration of painting arbitrary and dynamic potentials for Bose - Einstein condensates". New Journal of Physics, 2009, 11(4): 043030.
- [123] S. Eckel, A. Kumar, T. Jacobson *et al.* "A Rapidly Expanding Bose-Einstein Condensate: An Expanding Universe in the Lab". Phys. Rev. X, **2018**, 8: 021021.
- [124] Sergej O. Demokritov, Alexander A. Serga, Vladislav E. Demidov *et al.* "*Experimental observation of symmetry-breaking nonlinear modes in an active ring*". *Nature (London)*, **2003**, 426: 159.
- [125] L. Corman, L. Chomaz, T. Bienaimé et al. "Quench-Induced Supercurrents in an Annular Bose Gas". Phys. Rev. Lett. 2014, 113: 135302.
- [126] C. Ryu and M. G. Boshier. "Integrated coherent matter wave circuits". New Journal of Physics, 2015, 17(9): 092002.

- [127] C. Ryu, P. W. Blackburn, A. A. Blinova et al. "Experimental Realization of Josephson Junctions for an Atom SQUID". Phys. Rev. Lett. 2013, 111: 205301.
- [128] C. Ryu, K. C. Henderson and M. G. Boshier. "Creation of matter wave Bessel beams and observation of quantized circulation in a Bose - Einstein condensate". New Journal of Physics, 2014, 16(1): 013046.
- [129] L. Campos Venuti, M. Cozzini, P. Buonsante *et al.* "*Fidelity approach to the Hubbard model*". *Phys. Rev. B*, **2008**, 78: 115410.
- [130] P. Buonsante, V. Penna and A. Vezzani. "Fractional-filling loophole insulator domains for ultracold bosons in optical superlattices". Phys. Rev. A, 2004, 70: 061603.
- [131] S. Stock, Z. Hadzibabic, B. Battelier et al. "Observation of Phase Defects in Quasi-Two-Dimensional Bose-Einstein Condensates". Phys. Rev. Lett. 2005, 95(19): 190403.
- [132] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai *et al.* "Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level". Science, **2010**, 329: 547–550.
- [133] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke *et al.* "Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices". Nature Physics, **2011**, 7: 434–440.
- [134] A. Lewenstein M. S., V. Ahufinger, B. Damski *et al.* "Ultracold atomic gases in optical lattices: *Mimicking condensed matter physics and beyond*". *Adv. Phys.* **2007**, *56*: 243–379.
- [135] A. Ferrando, M. Zacarés, M. A. Garca-March *et al.* "Vortex Transmutation". Phys. Rev. Lett. 2005, 95: 123901.
- [136] L. D. Carr, M. L. Wall, D. G. Schirmer *et al.* "Mesoscopic effects in quantum phases of ultracold quantum gases in optical lattices". *Phys. Rev. A*, **2010**, *81*: 013613.
- [137] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. New York: Cambridge University Press, 1999.
- [138] S. Ejima, H. Fehske and F. Gebhard. "Dynamic properties of the one-dimensional Bose-Hubbard model". Europhys. Lett. 2011, 93: 30002.
- [139] M. Rigol. "Scaling of the gap, fidelity susceptibility, and Bloch oscillations across the superfluidto-Mott-insulator transition in the one-dimensional Bose-Hubbard model". Phys. Rev. A, 2013, 87: 043606.
- [140] R. Kanamoto, L. D. Carr and M. Ueda. "Metastable quantum phase transitions in a periodic one-dimensional Bose gas: II. Many-body theory". Phys. Rev. A, 2010, 81: 023625.
- [141] U. Schollwock. "The density-matrix renormalization group". Rev. Mod. Phys. 2005, 77: 259.
- [142] M. L. Wall and L. D. Carr. "Out of equilibrium dynamics with matrix product states". New. J. Phys. 2012, 14: 125015.
- [143] J. Sebbey-Strabley, M. Anderlini, P. S. Jessen *et al.* "*Lattice of double wells for manipulating pairs of cold atoms*". *Phys. Rev. A*, **2006**, *73*: 033605.
- [144] S. Boixo, S. V. Isakov, V. N. Smelyanskiy *et al.* "*Characterizing Quantum Supremacy in Near-Term Devices*". *Nature Physics*, **2018**, *14*: 595–600.

致谢

时光荏苒,转眼就到了毕业的时候。回首往昔,有初入燕园的激动,有紧张的学 习生活,有初到美国的兴奋与忐忑,也有做研究的曲折,这一切都记忆犹新。

在本文完成之际,首先我要衷心感谢我的两位指导老师,吴飙教授和 Lincoln D. Carr 教授。感谢两位老师这些年来对我的谆谆教诲。吴老师对科研有一股钻研精神。 对待课题,吴老师喜欢刨根问底,把问题想得透彻、明白,每一步的逻辑和推导都力 求严谨。吴老师严谨的研究态度,使我受益匪浅。另外,吴老师还有一股质疑精神,总 能及时发现问题、提出问题,是我学习的榜样。有些看似自然的过程,经他提出来便 觉得确实值得反复推敲。吴老师对学生总是很有耐心,每当我遇到困难的时候,吴老 师都愿意花时间精力在细节上给予帮助和讨论。每当我不知所措的时候,吴老师还会 教导我们怎么样从简单的问题入手,或是抛开数学推导,从物理的本质看待问题。非 常感谢吴老师对我包容和支持。在吴老师这里,我学到的不仅仅是知识,更重要的是 研究问题的态度与方法。

感谢吴老师推荐我到 Lincoln D. Carr 教授这边访问,使我能够有机会体验不同的 研究风格。Lincoln D. Carr 教授的风格与吴老师略有不同,这里面也有一部分源于文化 差异。Lincoln 组里的对外合作相对多一些,课题涉猎广泛,有许多合作文章和项目。 Lincoln 的思维相对来说更加活跃,他鼓励奇思妙想,有时候同学们的想法甚至让我感 到很惊讶。Lincoln 对学生的指导更倾向于先做一个全局规划,然后再一步一步执行。 遇到具体问题时,这里更提倡自己想办法解决。感谢 Lincoln 在学术上的悉心指导,特 别是在英文文章的写作过程中,令我收获颇丰。偶尔也会有遇到挫折、感到沮丧的时 候,感谢 Lincoln 给予我鼓励和帮助,使我尽快重整心情。在 Lincoln 这里,除了学术 上的收获,因为不同文化的碰撞,我开阔了眼界,改变了一些看法和处事的方式。比 如做事要有详细的计划,这样才能保证如期完成。学习和生活要注意劳逸结合,学习 的时间全身心投入,休息的时候充分沉浸在自我空间中,无论是坚持一项体育运动还 是参加社团活动,总之业余生活中都要保持一个固定的兴趣爱好。

感谢研究课题的合作者们: Diego Alcala、Marie McLain、Kenji Maeda、Shreyas Potnis、Ramon Ramos、Aephraim M. Steinberg、Javier Vijande、Albert Ferrando、Miguel Garcia-March。感谢他们认真的讨论,我们一起完成了本论文第三章和第四章课题的研究工作。还要特别感谢 Diego Alcala 和 Marie McLain。我和两位同学的合作过程是很愉快的。每个人思维方式不一样,所擅长的方面也不一样,大家可以很好的分工,又可以愉快的集体讨论。后期写文章的过程中,他们在语言和学术上都给了我很大的帮助。

感谢国家留学基金委和北京大学为我提供的资助和各种帮助,使我能够顺利完成 课题研究。

此外,我还要感谢同组的师兄师弟:朱起忠师兄、毛润欣师兄、朱少奇师兄、赵义 强、胡志刚、薛海鹏、赵川、王振铎,以及 Lincoln D. Carr 教授组里的 Daniel Jaschke 、David Vargas、Gavriil Shchedrin、Anastasia Gladkina、Majed Alotaibi 和 Michael Wall。 感谢他们在学习上给与我的支持和帮助。特别是感谢朱起忠师兄在我刚入门时对我的 无私帮助。感谢科罗拉多矿业大学的韩伟同学,他在生活上和学术上都给予我很多帮 助。感谢刘慧颖和杨倩学姐在生活上的陪伴,我们一起度过了愉快的校园生活。此外 还要感谢我的同学和朋友们:刘静、梁慧、丁宁、栗宇航、魏祎雯、王帅、李朝凯师 兄、张银寒师兄、潘廷瑞、任霄、张成龙,以及北京大学量子材料中心的所有老师和 其他同学们。愿千帆历尽,归来仍是少年。

最后还要特别感谢我的父母,感谢他们质朴的爱,以及对我无私的关怀和支持。

发表文章目录

[1] **Xinxin Zhao**, Diego A. Alcala, Marie A. McLain, Kenji Maeda, Shreyas Potnis, Ramon Ramos, Aephraim M. Steinberg, and Lincoln D. Carr, "*Macroscopic Quantum Tunneling Escape of Bose-Einstein Condensates*", Phys. Rev. A, v. 96, p. 063601, Editor's Suggestion (2017)

[2] **Xinxin Zhao**, Marie A. McLain, J. Vijande, A. Ferrando, Lincoln D. Carr, and M. A. Garcia-March, "*Nonequilibrium quantum dynamics of partial symmetry breaking for ultracold bosons in an optical lattice ring trap*", New J. Phys. 21, 043042 (2019)

北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明:所呈交的学位论文,是本人在导师的指导下,独立进行研究工作 所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外,本论文不含任何其他个人或集体已经 发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体,均已在文中 以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名: 日期: 年 月 日

学位论文使用授权说明

(必须装订在提交学校图书馆的印刷本)

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定,即:

- 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本;
- 学校有权保存学位论文的印刷本和电子版,并提供目录检索与阅览服务,在校园
 网上提供服务;
- 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文;
- 因某种特殊原因需要延迟发布学位论文电子版,授权学校在ロ一年/ロ两年/ロ三年以后在校园网上全文发布。

(保密论文在解密后遵守此规定)

论文作者签名: 导师签名: 日期: 年 月 日