

Applying BCS-BEC crossover Theory to high density
Fermi matter: studying superfluidity in high density

Fermi matter



Author's signature: Tingting Yang

Supervisor's signature: Qi jin Chen

External Reviewers: wei Yi
yi Zhou
fanlong Ning

Examining Committee Chairperson: [Signature]

Examining Committee Members: [Signature]
[Signature]
Qi jin Chen

Date of oral defence: 2011-06-02

浙江大学研究生学位论文独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得浙江大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已论文中作了明确的说明并表示谢意。

学位论文作者签名：杨婷婷 签字日期：2011年6月3日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解浙江大学有权保留并向国家有关部门或机构送交本论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和借阅。本人授权浙江大学可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索和传播，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

(保密的学位论文在解密后适用本授权书)

学位论文作者签名：杨婷婷

导师签名：

陈文雄

签字日期：2011年6月3日

签字日期：2011年6月3日

致 谢

衷心感谢我的导师陈启瑾教授对本论文的悉心指导。陈教授严谨的治学态度，对科研的独到见解，新颖的思想、对问题的敏锐洞察力和所掌握学科知识的广度与深度给了我很大影响，使我切身感受到科研精神的重要性。此外，陈教授对本人生活给予了多方面的关怀。在此，谨向我的导师致以最深的谢意。

作者在攻读硕士学位期间，得到了王继标博士、车彦明博士和张雷锋博士等在学习和生活上的帮助，在此，谨向他们致以衷心的感谢。

最后，感谢我的家人和朋友对我学业的支持和帮助。

杨婷婷

二零一一年五月于浙江大学

摘 要

根据量子统计理论的观点,玻色子和费米子具有完全不同的量子统计特征:对玻色子体系,当温度低于某一临界值时,将有宏观数量的粒子凝聚到一个或几个量子态的现象,称为玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)。而对于费米子体系,在低于费米温度时,由于泡利不相容原理,粒子将从最低能级开始一个一个的填充能量低于某一确定值的所有能量态,这个确定的能量值我们称为费米能级。

发现超导现象之后,人们开始了对超导微观机理的研究。1957年 Bardeen, Cooper 和 Schrieffer (BCS) 建立了超导的微观理论。在 BCS 理论中,超导的产生要经过两个基本的过程:(1)电子通过某种吸引相互作用形成配对;(2)配对的电子相位发生相干凝聚,形成超导。1986年,人们又发现了高温超导现象,之后有理论提出,当改变粒子间的散射长度从负到正时,费米子系统将发生从 BCS 到 BEC 的连续的转变。通过 Feshbach 共振调节原子间的散射长度,在实验上实现了从 BCS 到 BEC 的连续转变。之后人们对超冷费米气体和 BCS-BEC 渡越过程进行了大量的研究。

本篇论文组织如下:第一章分为四节,分别介绍玻色气体和费米气体的统计性质及其在绝对零度下的性质及出现的现象, Feshbach 共振、分子 BEC 和本文的研究意义。第二章主要介绍 BCS 理论的成功及不足, BCS-BEC 过渡理论的出现、具体的内容及近几年人们针对 BCS-BEC 渡越区域的研究进展。第三章运用 BCS-BEC 渡越理论研究高密度费米物质态。这一章是本篇论文的重点,利用 BCS-BEC 渡越理论,研究不同的相互作用强度下,在给定的有限范围的相互作用形式(P. Nozières 和 S. Schmitt-Rink 在研究费米气体的 BCS-BEC 渡越理论时所使用的势能的形式,简称 NSR)时,费米物质态的超流转变温度及超流能隙等随密度的变化,并在此基础上研究系统的热力学行为如能量、比热、熵等随温度的变化。我们着重研究要正极限或大散射长度的情形,因为他们同费米原子气体及核物质密切相关。研究表明,虽然超流转变温度开始时随密度增加而增加,但过高的密度对超流转变温度会有抑制作用。

关键词: BCS-BEC 过渡理论; 散射长度; 高密度费米物质; 超流转变温度

Abstract

According to the point of view in statistical theory, in a boson system, macroscopic numbers of particles are condensed to the lowest-energy state when the temperature falls below a critical temperature, which is defined as Bose-Einstein condensation (BEC). However, in a Fermi system, as the temperature of the system is below the Fermi temperature, no quantum state can be occupied by more than one particle in light of the Pauli principle. All states having energy below a certain value are inhabited, while the states with higher energy surpassing this critical energy remain unoccupied. The threshold energy is named as Fermi energy.

Since the superconductor was discovered, immense physical qualities on it had been studied. Bardeen, Cooper, and Schrieffer (BCS) gave the theory on conventional superconductor in 1957. According the BCS theory, there are two processes to make ordinary metals evolve from normal state to superconducting state: Firstly, two electrons are attracted into each other forming cooper pairs by an attracting interaction by means of phonons; Second, energy of cooper pairs is collectively condensed into a certain lowest energy. In 1986, cooper-based high-temperature superconductor was discovered. Numerous theories relevant to HTC superconducting mechanism was put forward in the process of research, namely: with the increase of attractive interaction strength, the ground-state wave function of cooper pairs evolves continuously from BCS situation to BEC situation. From the view of experiment, the BCS-BEC crossover can be achieved by using a Feshbach resonance in a magnetic field to tune the interaction. Subsequently, most of work in this field mainly focuses on the research of ultracold fermionic gases and the BCS-BEC crossover.

This thesis is arranged as follows:

In chapter 1, firstly, we discuss the properties and the phase transition at

zero temperature in both the Boson and Fermi system, then, we turn to background introduction and fundamental theories of Feshbach resonance. Finally, Fermi superfluidity, molecules BEC and the means to write this paper were discussed.

In chapter 2, we introduce the BEC theory which is the most successful theories in condensed matter physics, the background and development of the BCS-BEC crossover theory and the research results on the BCS-BEC crossover problems.

In chapter 3, we apply the standard mean-field description of BCS-BES crossover theory to high density Fermi matter and study the properties of superfluidity in high density Fermi matter. We assume the interacting form of high density Fermi matter is NSR, and research the influence of density on superfluid critical temperature and superfluid gap of Fermi matter. Based on the above research, we study the thermodynamic properties of high density Fermi matter. Our researches are mainly focusing on the situation with the scattering length $a \rightarrow \pm\infty$, because it is similar with the nuclear matter and Fermi atom gases. The result shows that the superfluid transition temperature increases with density, but the relevant increase will be suppressed by the extremely high density.

Keywords: BCS-BEC crossover; Scattering length; High density Fermi matter; Superfluid transition temperature

目 录

摘 要.....	i
Abstract.....	ii
第一章 绪 论.....	1
1.1 玻色-爱因斯坦凝聚和费米气体.....	2
1.2 磁场 Feshbach 共振.....	5
1.3 分子玻色-爱因斯坦凝聚.....	9
1.4 本文研究的意义.....	12
第二章 BCS-BEC 渡越理论.....	13
2.1 超导的 BCS 理论.....	13
2.2 BCS-BEC 渡越理论.....	17
2.3 BCS-BEC 渡越区域的超流行为和相变.....	22
第三章 对高密度费米物质态的研究.....	27
3.1 平均场近似情形下的 BCS-BEC 渡越理论.....	27
3.2 高密度费米物质态的超流性.....	31
3.2.1 绝对零度下的高密度费米物质态.....	31
3.2.2 有限温度下的高密度费米物质态.....	40
3.2.3 能隙函数.....	47
3.2.4 有限温度下高密度费米物质态的热力学行为.....	49
3.3 总结.....	55
参 考 文 献.....	57
附录: 作者已发表和待发表的文章目录.....	60

第一章 绪论

在量子统计中,由费米子(自旋为 $\hbar/2$ 奇数倍的粒子)组成的体系服从费米-狄拉克统计;由玻色子(自旋为 $\hbar/2$ 偶数倍的粒子)组成的体系服从玻色-爱因斯坦统计。在非简并条件下,玻色系统和费米系统几乎具有完全相同的性质。但在弱简并条件下,玻色气体和费米气体初步显示出差异。在低温条件下,玻色系统发生 BEC,而费米系统的基态则形成典型的费米球的结构。

在研究超导物理机制时, Eagles^[1]和 Leggett^[2]各自独立地发现了一个非常有趣的物理图像。当不同自旋态的电子间的吸引相互作用连续增加时,他们发现通常的电子库珀对的 BCS 基态波函数可以连续延拓到玻色-爱因斯坦凝聚的情形。对于囚禁在光阱中的两组分费米气体,人们也基于 Leggett 等人的理论进行了大量的研究。通过磁场 Feshbach 共振^[3],可以人为的改变不同自旋态的费米原子间的散射长度,从而可以在实现 BCS-BEC 的渡越过程。虽然费米系统不能直接发生玻色爱因斯坦凝聚,但通过磁场可以用 Feshbach 共振来调节原子间的相互作用。运用这个方法可以使费米原子形成分子,也可以在多体作用下形成费米原子配对,这些费米原子配对如同准玻色子,在温度够低的条件下可以得到分子的 BEC^[4-6]以及原子配对的凝聚体^[7-12],实现费米体系的超导与超流。低温超流性可以从弱相互作用的 BCS 极限连续的过渡到强相互作用的玻色爱因斯坦凝聚情形,并存在一个 BCS-BEC 的渡越过程^[13]。我们从玻色气体和费米气体的基本性质开始讨论。

1.1 玻色-爱因斯坦凝聚和费米气体

一般气体满足非简并条件 $e^\alpha \gg 1$ 或 $n\lambda^3 \ll 1$, 可以用波尔兹曼分布处理。对于弱简并即气体的 $e^{-\alpha}$ 或 $n\lambda^3$ 虽小但不可忽略的情形, 从中初步显示玻色气体和费米气态的差异^[14]。当理想玻色气体的 $n\lambda^3$ 等于或大于 2.612 的临界值时将出现独特的玻色-爱因斯坦凝聚现象, 这是爱因斯坦于 1925 年在理论上首先预言的。考虑由 N 个全同、近独立的玻色子组成的系统, 温度为 T 、体积为 V , 假设粒子的自旋为零, 根据玻色分布, 处在能级 ε_i 的粒子数为

$$a_i = \frac{\omega_i}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (1.1.1)$$

显然, 处在任一个能级的粒子数都不能取负值。从式 (1.1.1) 可看出, 这要求对所有能级 ε_i 均有 $e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}} > 1$ 。以 ε_0 表示粒子的最低能级, 这个要求也可以表达为

$$\varepsilon_0 > \mu \quad (1.1.2)$$

这就是说, 理想玻色气体的化学势必须低于粒子最低能级的能量。如果取最低能级的能量为能量的零点即 $\varepsilon_0 = 0$, 则式 (1.1.2) 可表达为

$$\mu < 0 \quad (1.1.3)$$

化学势由公式

$$\frac{1}{V} \sum_i \frac{\omega_i}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}} - 1} = \frac{N}{V} = n \quad (1.1.4)$$

确定, 为温度 T 及粒子数密度 n 的函数。注意 ε_i 和 ω_i 都与温度无关, 在粒子数密度给定的情形下, 温度愈低由式 (1.1.4) 确定的 μ 的值必然越高 ($|\mu|$ 愈小)。如果将上式的求和用积分代替, 可将之表达为

$$\frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} - 1} = n \quad (1.1.5)$$

化学势随温度的降低而升高, 当温度降低到某一临界温度 T_{BEC} 时, μ 将趋于 -0 。

这时 $e^{\frac{-\mu}{k_B T_{BEC}}}$ 趋于 1, 临界温度 T_c 由下式决定:

$$\frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T_{BEC}}} - 1} = n \quad (1.1.6)$$

因此对于给定的粒子数密度 n , 临界温度 T_{BEC} 为

$$T_{BEC} = \frac{2\pi}{(2.612)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk_B} (n)^{2/3} \quad (1.1.7)$$

温度低于 T_{BEC} 时会出现什么现象呢? 前面的讨论指出, 温度愈低时 μ 值愈高, 但在任何温度下 μ 必是负的。由此可知在 $T < T_{BEC}$ 时, μ 仍趋于 -0 。但这时式 (1.1.5) 的左边将小于 n , 与 $n = \frac{N}{V}$ 给定的条件矛盾。产生这个矛盾的原因是, 我们用式 (1.1.5) 的积分代替式 (1.1.4) 的求和。由于状态密度中含有因子 $\sqrt{\varepsilon}$, 在将式 (1.1.4) 改为 (1.1.5) 时, $\varepsilon = 0$ 的项就被弃掉了。由式 (1.1.4) 可以看出, 在 T_{BEC} 以上 μ 为负的有限值时, 处在能级 $\varepsilon = 0$ 的粒子数与总粒子数相比是一个小量, 用积分代替求和引起的误差是可以忽略的; 但在 T_{BEC} 以下 μ 趋于 -0 时, 处在能级 $\varepsilon = 0$ 的粒子数将是很大的数值, 不能忽略。因此在 $T < T_{BEC}$ 时, 应将式 (1.1.5) 改写为

$$n_0(T) + \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1} = n \quad (1.1.8)$$

其中第一项 $n_0(T)$ 是温度为 T 时处在能级 $\varepsilon = 0$ 的粒子数密度, 第二项是处在激发能级 $\varepsilon > 0$ 的粒子数密度 $n_{\varepsilon > 0}$ 。在第二项中已取极限 $\mu \rightarrow -0$ 。

首先计算式 (1.1.8) 的第二项。令 $x = \varepsilon/k_B T$, 并积分可得

$$n_{\varepsilon > 0} = n \left(\frac{T}{T_{BEC}} \right)^{3/2} \quad (1.1.9)$$

将式 (1.1.9) 代入式 (1.1.8) 可得, 温度为 T 时处在最低能级 $\varepsilon = 0$ 的粒子数密度为

$$n_0(T) = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_{BEC}} \right)^{3/2} \right] \quad (1.1.10)$$

由此可知, 在 T_{BEC} 以下 n_0 与 n 具有相同的量级。我们知道, 在绝对零度下粒子将尽可能占据能量最低的状态。对于玻色粒子, 一个量子态所能容纳的粒子数目不受限制, 因此, 绝对零度下玻色粒子将全部处在 $\varepsilon = 0$ 的最低能级。式 (1.1.10) 表明, 在 $T < T_{BEC}$ (T_{BEC} 为凝聚温度) 时就有宏观量级的粒子在能量 $\varepsilon = 0$ 凝聚。这一现象称为玻色-爱因斯坦凝聚, 简称玻色凝聚 (BEC)。凝聚在 $\varepsilon = 0$ 的粒子集合称为玻色凝聚体。凝聚体不但能量、动量为零, 由于凝聚体的微观状态完全确定, 熵也为零。

对于强简并 $e^{\alpha} \ll 1$ 或 $n\lambda^3 \gg 1$ 情形下的费米气体, 根据费米分布, 温度为 T 时处在能量为 ε 的一个量子态上的平均电子数为

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (1.1.11)$$

考虑到电子自旋在其动量方向的投影有两个可能值, 在体积 V 内, 在 $\varepsilon - \varepsilon + d\varepsilon$ 的能量范围内, 电子的量子态数为

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (1.1.12)$$

在给定电子数 N 、温度 T 和体积 V 时, 化学势 μ 由下式确定:

$$\frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} = N \quad (1.1.13)$$

由上式可知, μ 是温度 T 和电子密度 N/V 的函数。

现在讨论 $T = 0K$ 时电子的分布。以 $\mu(0)$ 表示 $0K$ 时电子气体的化学势, 由式

(1.1.11) 知, $0K$ 时,

$$\begin{aligned} f &= 1 & \varepsilon < \mu(0) \\ f &= 0 & \varepsilon > \mu(0) \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

上式表示, 在 $T = 0K$ 时, 在 $\varepsilon < \mu(0)$ 的每一量子态上平均电子数为 1, 在 $\varepsilon > \mu(0)$ 的每一量子态上平均电子数为零。这分布可以这样理解: 在 $T = 0K$ 时电子将尽可能占据能量最低的状态, 但泡利不相容原理限制每一量子态最多只能容纳一个

电子, 因此电子从 $\varepsilon = 0$ 的状态依次填充至 $\mu(0)$ 止, $\mu(0)$ 是 $T = 0K$ 时电子的最大能量, 也称费米能级, 用 ε_F 表示。定义费米温度:

$$k_B T_F = \mu(0) \quad (1.1.15)$$

我们看到, 与理想玻色气体在绝对零度下粒子全部处于能量、动量为零的状态且压强为零完全不同, 费米气体在绝对零度下具有很高的平均能量、动量, 并产生很大的压强。当温度低于费米温度时, 量子统计会根本性地影响系统的物理性质。因此, 对于费米气体, 人们将是否冷却到费米温度以下作为实现简并费米气体的一个判断标准^[15]。

自从 1995 年发现气态原子的玻色-爱因斯坦凝聚以来, 很多的研究工作都取得了丰硕的成果。首先获得稀薄碱金属原子气体状态 BEC 的 E. Cornell, W. Ketterle 和 C. Wieman 获得了 2001 年的诺贝尔物理奖^[16]。超冷费米气体的研究也在此基础上蓬勃发展。要制备简并费米气体, 首先要对它进行冷却。然而费米气体的有效冷却遇到了一个很大的困难。蒸发冷却需要原子间频繁的碰撞, 使具有较高动能的热原子离开约束势阱, 余下的原子通过碰撞而趋向平衡。然而同一内部态的费米原子间的 s-波散射长度为零, 碰撞的几率很低^[15]。1999 年 Jin 小组利用费米气体 ^{40}K 的不同的两个内部态成功的将其冷却到了 T_F 的 0.5 倍^[17]。对于这一两组分费米混合气体, 不同内部态的两个原子之间可以进行频繁的碰撞, 从而能够进行有效的蒸发冷却。Jin 等人从能量和动量分布等方面给出了量子简并行为的明确证据。2002 年 Duck 大学的 Thomas 小组^[3]在光阱中通过快速蒸发冷却将 6Li 的费米气体冷却到 $0.2T_F$ 以下, 从实验上给出了量子简并的有力证据。

1.2 磁场 Feshbach 共振

Feshbach 共振是美国物理学家 Herman Fesh 在原子核研究中首先发现的^[18]。在 1976 年, Stwalley^[19]就提出利用磁场作为外部控制手段来实现磁场的 Feshbach 共振以改变原子间的散射长度。20 世纪末, Hendricus T. C. Stoof 等预言了碱金属原子系统中存在有 Feshbach 共振^[20-21], 他们证明气体中的原子碰撞的散射长度可以通过调节磁场来改变。1999 年, Ketterle^[22]小组在玻色原子 ^{23}Na 中首先

观察到了磁场 Feshbach 共振, 之后其他小组又扩大到更多的玻色系统。目前人们也在费米原子 ${}^6\text{Li}$ 、 ${}^{40}\text{K}$ 中观察到了磁场 Feshbach 共振。勿容置疑, Feshbach 共振技术对于探索超冷费米原子气体至关重要, 下面简单介绍一下 Feshbach 共振理论的基本原理^[15]。

两个粒子在相互作用下发生碰撞时, 若两个入射粒子的总能量和相互作用势引起的束缚态能量非常接近 (即共振) 时, 两个粒子的碰撞会受到相互作用势的强烈影响。在束缚态及束缚态的能量 E_{res} 和两个入射粒子的总能量 E 接近时, 两个粒子的碰撞是一个二阶相互作用过程。根据微扰理论, 散射长度可以大概写为

$$a \sim \frac{\alpha}{E - E_{res}} \quad (1.2.1)$$

可以得出, 当束缚态能量与总能量非常接近时, 散射长度将受到很大的影响。而且, 可以通过改变 $E - E_{res}$ 的正负来改变散射长度的正负。Feshbach 共振通过调节磁场, 使得两个入射粒子的总能量和束缚态能量非常接近, 甚至相等。为了充分研究束缚态的存在对两个粒子间的碰撞行为的影响, Feshbach 共振理论的基本思想在于一般性的考虑了开道 (散射态) 和闭道 (束缚态) 之间存在耦合时两个粒子的碰撞行为。设两体碰撞的态矢量为 $|\Psi\rangle$, 这一态矢量可以写为开道和闭道这两个正交子空间中的态矢量的叠加。设 P 和 Q 分别为投影到开道和闭道中量子态的投影算符。我们有 $P + Q = 1$ 以及 $PQ = 0$ 。将 $|\Psi\rangle$ 分解为

$$|\Psi\rangle = |\Psi_P\rangle + |\Psi_Q\rangle \quad (1.2.2)$$

这里 $|\Psi_P\rangle = P|\Psi\rangle$ 以及 $|\Psi_Q\rangle = Q|\Psi\rangle$ 。值得指出的是 $|\Psi\rangle$ 的这种叠加态的形式反映了量子力学和经典力学中所考虑的碰撞过程的根本区别。两体碰撞过程中的定态薛定谔方程为

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.2.3)$$

此外 $H = (P + Q)H(P + Q) = H_{PP} + H_{PQ} + H_{QP} + H_{QQ}$ 。

这里 $H_{PP} = PHP$, $H_{PQ} = PHQ$, $H_{QP} = QHP$, $H_{QQ} = QHQ$ 。这时, 定态的薛定谔方程可写为如下的耦合方程:

$$\begin{aligned}(E - H_{PP})|\Psi_P\rangle &= H_{PQ}|\Psi_Q\rangle \\ (E - H_{QQ})|\Psi_Q\rangle &= H_{QP}|\Psi_P\rangle\end{aligned}\quad (1.2.4)$$

基于这一耦合方程，可以得到 $|\Psi_P\rangle$ 满足如下的方程：

$$(E - H_{PP} - H'_{PP})|\Psi_P\rangle = 0 \quad (1.2.5)$$

这里 $H'_{PP} = H_{PQ}(E - H_{PP} + i\delta)^{-1}H_{PQ}$ ，其中无限小的正因子 δ 是为了保证散射波为出射波这一条件。从 H'_{PP} 的形式，可以看出它代表了开道的两个粒子形成束缚态后又跃迁至开道的二阶相互作用过程。

一般而言， H 可写为动能 H_0 和势能函数 U 之和。这时，我们有

$$H = H_0 + (P + Q)U(P + Q) = H_0 + U_{PP} + U_{QP} + U_{PQ} + U_{QQ} \quad (1.2.6)$$

这里 $U_{PP} = PUP$ 代表了开道粒子间的势能函数， $U_{QQ} = QUQ$ 则代表了闭道中束缚态所包含的两个粒子间的势能函数。值得指出的是， U_{PP} 和 U_{QQ} 可以很不一样。在上面的表达式中 $U_{PQ} = PUQ$ 和 $U_{QP} = QUP$ 则反映了开道和闭道之间的跃迁相互作用。我们自然可以得到

$$\begin{aligned}H_{PP} &= H_0 + U_{PP} \\ H_{PQ} &= H_0 + U_{PQ} \\ H_{QP} &= H_0 + U_{QP} \\ H_{QQ} &= H_0 + U_{QQ}\end{aligned}\quad (1.2.7)$$

方程(1.2.5)可以进一步写为

$$(E - H_0 - U_{eff})|\Psi_P\rangle = 0 \quad (1.2.8)$$

考虑到闭道后，在上面公式中我们引入了决定开道中态矢量定态解的有效势能 $U_{eff} = U_{PP} + H'_{PP}$ 。下面我们主要求解方程(1.2.8)以确定散射长度来展开讨论。在知道有效势能 U_{eff} 后，求解散射长度的一个很有用的方法是计算 T 算符的Lippmann Schwinger方程。其表达式为

$$T = U_{eff} + U_{eff}G_0T \quad (1.2.9)$$

这里 $G_0 = (E - H_0 + i\delta)^{-1}$ 为自由传播子。一旦算符 T 得以求解，在低能极限下，

散射长度可由如下方程得到:

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \langle k' \rightarrow 0 | T | k \rightarrow 0 \rangle \quad (1.2.10)$$

这里 k 为粒子间的相对波矢。

通过算符分析, 可以证明方程 (1.2.9) 可以进一步写为:

$$T = T_1 + (1 - U_{PP} G_0)^{-1} H'_{PP} (1 - G_0 U_{eff})^{-1} \quad (1.2.11)$$

这里 T_1 由下式给出:

$$T_1 = U_{PP} + U_{PP} G_0 T_1 \quad (1.2.12)$$

对于方程 (1.2.12), 一旦知道开道中的势能 U_{PP} , 已有标准的办法来求解 T_1 。

H'_{PP} 和 U_{PP} 相比时更高阶的相互作用, 在忽略更高阶的近似下, 可将 (1.2.11)

中的 U_{eff} 近似为 U_{PP} 。在这种近似下, T 矩阵为

$$\langle k | T | k \rangle = \langle k | T_1 | k \rangle + \langle k'; U_{PP}, - | H'_{PP} | k; U_{PP}, + \rangle \quad (1.2.13)$$

上式中 $|k; U_{PP}, + \rangle = (1 + G_0 U_{PP})^{-1} |k \rangle$ (这里加号表示 $|k; U_{PP}, + \rangle$ 包含出射波),

$\langle k'; U_{PP}, - | = \langle k' | (1 - U_{PP})^{-1}$ 。当 $k \rightarrow 0$ 和 $k' \rightarrow 0$ 时, 由公式 (1.2.10) 和 (1.2.11),

我们得到

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \frac{4\pi\hbar^2 a_P}{m} + \langle k' \rightarrow 0; U_{PP}, - | H'_{PP} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle \quad (1.2.14)$$

上式中 a_P 完全由开道中的势能函数 U_{PP} 确定。上式的最后一项计算如下:

$$\begin{aligned} & \langle k' \rightarrow 0; U_{PP}, - | H'_{PP} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle k' \rightarrow 0; U_{PP}, - | H'_{PQ} | n \rangle \langle n | \frac{1}{E - H_{QQ} + i\delta} | m \rangle \langle m | H_{PQ} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle \\ &= \sum_n \frac{|\langle n | H_{QP} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle|^2}{E - E_n} \end{aligned}$$

在上面的计算中运用了 $\sum_n |n \rangle \langle n| = 1$, 这里 $|n \rangle$ 为闭道的本征态。可以看出, 当 E_n

接近 E 时, 散射长度 a 由于闭道的存在发生很大变化。

考虑接近 Feshbach 共振处时, 起共振作用的束缚态能级通常只有一个, 可将式 (1.2.14) 进一步写为:

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{nr}}{m} + \frac{\left| \langle E_{res} | H_{QP} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle \right|^2}{E - E_{res}} \quad (1.2.15)$$

这里 E_{res} 为和 E 最接近的束缚态能级。非共振散射长度 a_{nr} 除了 a_p 外, 还包含了非共振的束缚态对散射长度的贡献。

磁场 Feshbach 共振的关键在于通过改变磁场可以调节 $E - E_{res}$ 的大小, 从而实现人为改变原子间的散射长度。假定在共振磁场 B_C 处, $E = E_{res}$ 。在这一临界磁场附近, 通过泰勒展开到一阶近似, 可以得到

$$E - E_{res} \approx (\mu_{res} - \mu_{|\uparrow\rangle} - \mu_{|\downarrow\rangle})(B - B_C) \quad (1.2.16)$$

这里 $\mu_{|\uparrow\rangle}$ 和 $\mu_{|\downarrow\rangle}$ 分别为两个不同内部态的费米原子的磁矩。 $\mu_{res} = -\left. \frac{\partial E_{res}}{\partial B} \right|_{B=B_C}$ 则

为在共振磁场 B_C 处, 能量本征值为 E_{res} 的束缚态的磁矩。由于原子间的相互作用, 通常 $\mu_{res} \neq \mu_{|\uparrow\rangle} + \mu_{|\downarrow\rangle}$ 。将 (1.2.16) 带入到 (1.2.15) 中, 可以得到

$$a = a_{nr} \left[1 + \frac{\Delta B}{B - B_C} \right] \quad (1.2.17)$$

这里共振磁场的宽度为

$$\Delta B = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_{nr}} \frac{\left| \langle E_{res} | H_{PQ} | k \rightarrow 0; U_{PP}, + \rangle \right|^2}{\mu_{res} - \mu_{|\uparrow\rangle} - \mu_{|\downarrow\rangle}} \quad (1.2.18)$$

在实际计算中, 确定 B_C 和 ΔB 涉及大量的计算。通常需要理论和实验的密切结合, 利用实验上测得的一些重要参数来从理论上预测 B_C 和 ΔB 的大小。

1.3 分子玻色-爱因斯坦凝聚

2003 年底, 利用磁场 Feshbach 共振, 人们成功的在光阱中的两组分费米气体中观察到了分子玻色-爱因斯坦凝聚的明确证据^[4-6]。在排斥相互作用区域, 原

子可以配对形成分子, 分子的束缚态能量为 $E_b = -\hbar^2/ma^2$, 分子几何尺度为 a 。当分子的大小与粒子间的平均距离相比小很多时, 可以将两个粒子组成的分子看成一个整体, 两个费米子组成的分子是一个玻色子, 应该满足玻色统计。很自然的可以想到, 在低于凝聚温度并达到热平衡后, 会出现 BEC 的现象, 即为分子的 BEC。Jin 小组在实验室实现了碱金属费米子 ^{40}K 的分子 BEC, Grimm 小组和 Ketterle 也利用费米子 ^6Li 的两种内部态混合气体也形成了分子 BEC^[23-25], 其分子 BEC 的形成机制与 Jin 小组采用的类似。随后 Thomas、Salomon、Hulet 等小组也各自实现了的 ^6Li 分子 BEC。在这里简单介绍一下 Jin 小组所做的工作。

Jin 小组将碱金属费米子 ^{40}K 的两种内部态 $|f=9/2, m_f=-7/2\rangle$ 和 $|f=9/2, m_f=-9/2\rangle$ 等比例的束缚在光阱中。这两种内部态的原子, 散射长度和外加均匀磁场之间的关系为 $a(B) = 174a_0[1 + \Delta B/(B_c - B)]$ 。(a_0 是玻尔半径), $\Delta B = 7.6 \pm 0.6\text{G}$, $B_c = 202.1 \pm 0.1\text{G}$ 。可以看出, 当磁场强度接近且小于 B_c 时, 散射长度 a 为正, 对应于分子 BEC 的情形。在磁场强度 $B = 201.54\text{G}$ 处, 通过测量分子 BEC 的密度分布, Jin 小组给出了分子 BEC 存在的强有力的证据。见图 1.1。假设分子 BEC 的凝聚温度为 T_c , 左图中系统的温度 $T = 250\text{nk} = 0.9T_c$, 这时, 分子 BEC 占的比例较小, 分子气体的密度分布图像满足高斯分布。右图中系统的温度 $T = 79\text{nk} = 0.49T_c$, 此时分子 BEC 占有明显的比例, 分子气体的密度分布图像不再满足高斯分布。总的分子气体的密度分布图像由分子 BEC 满足的托马斯-费米分布和热激发分子满足的高斯分布之和构成。右图的密度分布图像给出了分子 BEC 存在的有力证据。

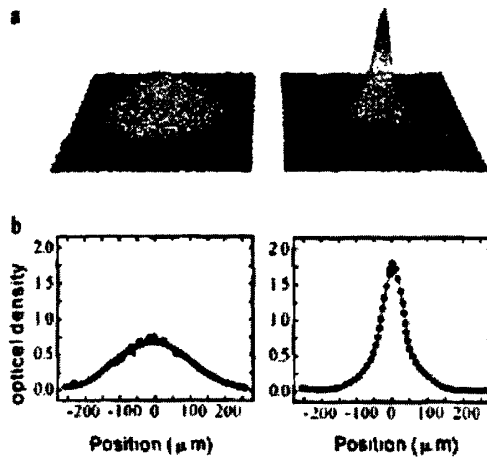


图 1.1 Jin 小组在实验上观测到的分子的密度分布。分子 BEC 的凝聚温度为 T_{BEC} ，左图中系统的温度 $T = 250nk = 0.9T_{BEC}$ ，这时分子 BEC 占的比例很小，分子气体的密度分布基本满足高斯分布。右图中系统的温度 $T = 79nk = 0.49T_{BEC}$ ，这时，分子 BEC 的比例很高，分子气体的密度分布不满足高斯分布。总的分子密度分布由热激发分子所满足的高斯分布和分子 BEC 所满足的托马斯-费米分布之和构成。

为了探测分子 BEC 的密度分布，Jin 小组首先关闭光阱，将分子和原子的混合气体自由膨胀 10~20 ms，然后，加上射频脉冲场，其持续时间为 140 μ s。将分子分解为 $|f = 9/2, m_f = -9/2\rangle$ 和 $|f = 9/2, m_f = -5/2\rangle$ 的两种原子态。射频脉冲与分子分解的阈能相比失协量为 50 kHz，此时，该射频脉冲不会影响处于态 $|f = 9/2, m_f = -7/2\rangle$ 上的未配对的原子。因此，这个新的原子态 $|f = 9/2, m_f = -5/2\rangle$ 的密度分布就直接给出了分子 BEC 的密度分布信息。值得注意的是，这里费米原子配对形成的分子是一种弱束缚的准分子，与通常所指的稳定分子不一样。因为弱束缚的分子在其他分子或原子的碰撞下很容易分解，无法稳定存在，所以有人曾怀疑这样的准分子是否有足够长的寿命来建立热平衡，形成稳定的分子 BEC。但是，对于这样的准分子来说，它们所处的系统实际上是分子和费米原子的混合气体，在热平衡下，分子和费米原子的比例可由各自的化学势相等来确定，对于费米原子，由于泡利不相容原理可知，在温度远小于费

米温度时,费米原子将在低于费米能量的能级上一个一个的紧密排列。在这种情况下,处于基态的弱束缚分子的分解受到了很大的抑制。当然粒子间的非弹性碰撞会影响分子 BEC 的稳定性,使得分子 BEC 的寿命有限。目前实验中分子 BEC 的寿命可达到几十秒。

1.4 本文研究的意义

近年来,有关高密度核物质的研究引起了广泛的关注。高密度核物质的特征同早期宇宙的形成,天体物理中中子星的特征,以及重粒子的碰撞等有密切的联系。原子核是有限数目的强子组成的束缚系统。中子星是超新星爆炸遗留下的核,是大质量恒星演化的产物,是一个高温高密物体,它的密度涵盖了一个广阔的密度范围,从表面大约 10 g/cm^3 到中心的数倍核物质的饱和密度。一般按中子星径向密度的变化可以将中子星分为大气层和四个内层,分别为:外壳层,内壳层,外核和内核^[26,27]。在内壳层,密度从最上端的中子滴线密度到最低端的 0.5 倍核物质饱和密度。该层是由极端相对论电子气体、自由中子气以及包裹于其中的非中子原子核组成。自由中子所占的比例随着密度的增加而增加,到该层的底部,原子核形成团簇,已经不再具有球形的形状,在壳层与核芯的交界处,原子核已经不复存在。核力使中子形成库伯对,从而在该层可能存在中子超流。在厚度为数公里的中子星的外壳层,原子核已经完全融合在一起发生相变成为核物质,该层是由处于 β 平衡中子、质子和电子(还可能有 μ 子)组成的混合体,其中中子占了绝大部分,电子和中子组成了近乎理想的费米气体。通过核力相互作用的质子和中子组成了强相互作用的费米流体并且可能处于超导和超流状态。我们运用 BCS-BEC 渡越理论对高密度费米物质态的超流性进行研究,有助于我们对核物质和中子星的超流性进行理解,从而对核物质和中子星的研究有一定的启示作用。

第二章 BCS-BEC 渡越理论

2.1 超导的 BCS 理论

超导电性是 H.Kamerlingh Onnes 1911 年在莱顿发现的, 也就是他首次把氦气液化后的三年发现的。在以后的几十年期间, 这一领域的科学家对这一现象做了很多的研究, 1957 年 Bardeen, Cooper and Schrieffer 提出了他们的划时代的超导电性配对理论 (BCS 理论) [28]。

在超导相, 对于超导体中的电子, 他们之间由于弱相互吸引作用而相互配对。Cooper 证明对于费米球外一对动量和自旋相反的电子, 只要存在净的吸引作用, 不管它多弱, 都能形成电子的束缚对[29], 因此存在吸引相互作用时正常态的费米球不再是系统稳定的分布。为了最大化电子配对的相空间, BCS 理论认为, 仅仅具有相反动量和自旋的粒子发生配对, 超导系统可由下面的哈密顿量来描述 [30]。

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \quad (2.1.1)$$

其中 $c_{k\sigma}^+$ 代表具有动量 k 自旋 σ 的电子的产生算符, $\epsilon_k = k^2/2m - \mu$ 是从化学势 μ 测量的电子的色散关系 (自然单位制, $\hbar = k_B = 1$)。通常情况下, 我们考虑一个可分离的势, $V_{kk'} = g\varphi_k\varphi_{k'}$, 其中 $g = -|g|$ 表示耦合强度, 动量的依赖函数 φ_k 决定了序参量的对称性。对于一般的金属导体, 吸引相互作用来源于电子声子耦合, 仅仅在费米面附近一个很窄的能壳内 $\varphi_k = 1$, 在其他区域 $\varphi_k = 0$ 。这个能壳的厚度由物质的声子德拜 (Debye) 频率来决定。在正常态, 对算符 $c_{-k}c_k$ (和它的么正算符) 的量子期待值为零。在超导态, 电子配对形成库伯对, 对算符的期待值不为零, 可以定义超导的序参量

$$\Delta_k \equiv -\sum_k V_{kk'} \langle c_{-k} c_{k'} \rangle = \Delta\varphi_k, \quad \Delta \equiv |g| \sum_k \varphi_k \langle c_{-k} c_k \rangle \quad (2.1.2)$$

BCS 理论的一个重要假设就是量子算符 $c_{-k}c_k$ 和它的平均场算符 $\langle c_{-k}c_k \rangle$ 之间相差很小, 因此二次方项 $(c_{-k}c_k - \langle c_{-k}c_k \rangle)^2$ 的值可以忽略, 运用平均场近似, 将哈

密顿量线性化,

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} - \sum_k (\Delta \varphi_k c_k^+ c_{-k}^+ + \Delta^* \varphi_k c_{-k} c_k) - \frac{\Delta^2}{g} \quad (2.1.3)$$

此时的哈密顿量是非对角的, 可通过波戈留波夫变换对角化:

$$c_k = u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^+ \quad c_{-k} = u_k \alpha_{-k} + v_k \alpha_k^+ \quad (2.1.4)$$

其中

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) \quad (2.1.5)$$

在这里 $E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2 \varphi_k^2}$ 是算符 α_k^+ 产生的准粒子的激发能。在这篇文章中我们假设 $\Delta = \Delta^*$ 为实数。对于平衡系统这个假设通常是成立的。

在绝对零度时, 系统的基态波函数可以写为下面的形式:

$$\Psi_0 = \prod_k (u_k + v_k c_k^+ c_{-k}^+) |0\rangle \quad (2.1.6)$$

在 $T \leq T_C$ 时, 对角化后的哈密顿量可以写为下面的形式:

$$H^{BCS} = E_0 + \sum_k E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \quad (2.1.7)$$

其中

$$E_0 = \sum_k (\epsilon_k - E_k) - \frac{\Delta^2}{g} \quad (2.1.8)$$

随温度 T 而变化。从边界的顶端算起的系统的能量 (单位体积) 可以写为:

$$E = \mu m + E_0 + 2 \sum_k E_k f(E_k) \quad (2.1.9)$$

在这里 $f(E_k)$ 是费米分布函数, n 是电子的密度。根据计算可以知道, 破坏一个库伯对至少需要 2Δ 的能量。因此与费米液体不同, 准粒子的激发是有能隙的。能隙的值由方程 (2.1.2) 来决定。将方程 (2.1.4) 代入到方程 (2.1.2) 可得:

$$\Delta = -g \sum_k \varphi_k u_k v_k [1 - 2f(E_k)] = -g \sum_k \frac{\Delta}{2E_k} [1 - 2f(E_k)] \varphi_k^2 \quad (2.1.10)$$

或者

$$1 + g \sum_k \frac{1 - 2f(E_k)}{2E_k} \varphi_k^2 = 0 \quad (2.1.11)$$

下面我们仔细的考察超导相的性质。在超导体中自旋向上的电子的动量分布

$n_{k\uparrow}$

$$\begin{aligned} n_{k\uparrow} &= \langle c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} \rangle \\ &= u_k^2 \langle \alpha_{k\uparrow}^+ \alpha_{k\uparrow} \rangle + v_k^2 (1 - \langle \alpha_{-k\downarrow}^+ \alpha_{-k\downarrow} \rangle) \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

由于哈密顿关于准粒子算符是对角化的，准粒子应该满足费米分布

$$\langle \alpha_{k\uparrow}^+ \alpha_{k\uparrow} \rangle = \langle \alpha_{-k\downarrow}^+ \alpha_{-k\downarrow} \rangle = f(E_k) = [\exp(E_k/k_B T_c) + 1]^{-1} \quad (2.1.13)$$

所以电子的分布可写为

$$n_{k\uparrow} = (u_k^2 - v_k^2) f(E_k) + v_k^2 \quad (2.1.14)$$

在绝对零度下

$$n_{k\uparrow} = v_k^2 \quad (2.1.15)$$

容易证明自旋向下的电子具有相同的动量的分布 $n_{k\uparrow} = n_{k\downarrow}$ 。

BCS 理论预测标准化的激发能隙 $\Delta(T)/\Delta(0)$ 随单位化的温度 T/T_c 的变化是一条普适的曲线，而且 $2\Delta(0)/T_c = 3.52$ 也是普适的。

图 2.1 显示了对于一系列的金属 BCS 的预测和实验测得的数据。可以清楚的看出理论和实验之间符合的很好。这图也显示了当温度接近 T_c 时的激发能隙。事实上，BCS 理论很重要的一个特点是认为激发能隙和序参量的大小完全一样。这是由于在平均场近似下将哈密顿量线性化得到的结果。但是当量子算符 $c_{-k} c_k$ 和它的平均场算符 $\langle c_{-k} c_k \rangle$ 之间相差不再很小时，这一处理将不再适用。事实上，之所以 BCS 理论能够很好的解释一般金属的超导电性，是因为这些金属的相干长度 ξ (也可以说是库伯对的大小) 非常大，一个典型的 ξ 的值大约为 $10^3 \sim 10^4 \text{ \AA}$ 是晶格常数 a 的 $100 \sim 1000$ 倍。在这种配对情况下，对之间的重叠程度非常高，如图 2.2 所示。在这种情况下量子算符 $c_{-k} c_k$ 和它的平均场算符 $\langle c_{-k} c_k \rangle$ 之间相差确实很小，平均场近似是一个很好的近似。实际上，库伯对的尺寸很大意味着他

们之间的相互作用很弱，在这种情形下配对只在温度低于 T_c 时发生，因此，在 $T = T_c$ 时能隙变为 0。

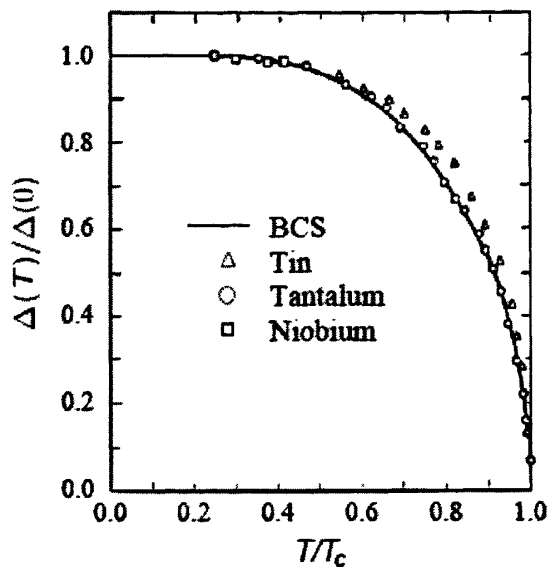


图 2.1: 对于一般金属超导体 BCS 理论预测与实验结果的对比

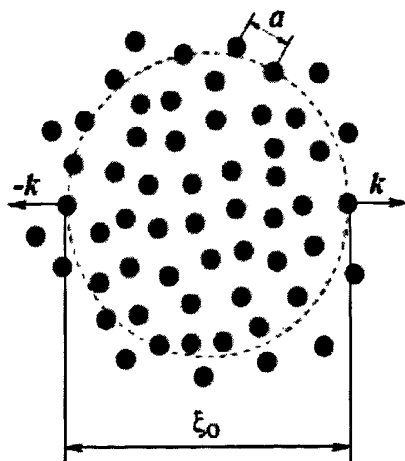


图 2.2 在 BCS 理论下库伯对的相互重叠程度很高

2.2 BCS-BEC 渡越理論

在一個玻色系統中，當體系的溫度 T 低於凝聚溫度 T_{BEC} 時，動量為零的態將被宏觀量級的粒子佔據，出現超流現象。對於一個費米系統來說，情況有所不同。費米子配對形成准玻色子對，在低密度、強耦合極限下，這些費米子形成緊束縛的對，相互之間不發生重疊，因此可以被看成一個一個的玻色子，這些玻色子在溫度低於凝聚溫度 T_{BEC} 時發生玻色凝聚。對於一個帶電的費米系統，將表現出超導電性，凝聚溫度 T_{BEC} 相當於超導轉變溫度 T_C [31]。

如果相互作用強度足夠強，兩個費米子形成一個自旋單態，即 $l=0$ 的束縛對，能量為 $\omega_q = -\varepsilon_0 + q^2/2M$ ，這裡 ε_0 是束縛能， $M = 2m$ 是兩個粒子的總質量。相應的產生算符為

$$b_q^+ = \sum_k \phi_k c_{k+q/2, \uparrow}^+ c_{-k+q/2, \downarrow}^+ \quad (2.2.1)$$

在這裡 ϕ_k 是內部波函數，作用的特徵範圍為 $a_0 \sim \varepsilon_0^{-1/2}$ 。如果兩個束縛對之間重疊很小，例如當 $Na_0^3 \ll 1$ 時，這些束縛對可以看成一個一個可以不用考慮內部軌道細節的玻色子。相應的，當這些束縛對的化學勢 $\mu_p = -\varepsilon_0$ 時，系統將會發生玻色凝聚，變成一個量子單態，總動量 $q=0$ 。在零階近似下，基態波函數是簡單的

$$|\Phi_0\rangle = \left[\exp(N_p^{1/2} b_0^+) \right] |vac\rangle \quad (2.2.2)$$

其中 $N_p = N/2$ 是對的總數目，動量為 k 的費米態的佔據數為 $n_k = N_p |\phi_k|^2$ ，只要 $Na_0^3 \ll 1$ ，就能得到 $n_k \ll 1$ ，在這種情況下我們不需要考慮不相容原理（也就是說費米子之間的交換相互作用可以忽略）。當 $Na_0^3 \gg 1$ 時，物理的圖像將會發生改變：束縛對之間相互重疊，費米交換相互作用成為主要的相互作用。這是因為不相容原理要求 $n_k < 1$ ，態態被填滿之後，內部波函數延伸到 k 空間。在這種情況下我們最好從正常等離子態的極限來考慮

$$|\Phi_{0N}\rangle = \prod_k c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ |vac\rangle \quad (2.2.3)$$

弱的相互作用给出一个不稳定的超导态，可以用正常 BCS 的波函数来很好的描述

$$|\Phi_{0s}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+) \text{vac} \quad (2.2.4)$$

$n_k = |v_k|^2 = 1 - |u_k|^2$ ，这个方程在接近费米能级时不再准确。在一定程度，超导电性可以看成是弱束缚的库伯对发生了玻色凝聚，利用方程 (2.2.1) 可以将强耦合的方程 (2.2.2) 表示成方程 (2.2.4) 的形式，同时得到下式

$$v_k = \frac{N_p^{1/2} \phi_k}{(1 + N_p |\phi_k|^2)^{1/2}} \quad (2.2.5)$$

从以上可以看出，基态波函数可以从一个极限连续的延拓到另一个极限。在强耦合的情况下， $v_k \cong N_p^{1/2} \phi_k \ll 1$ 表现了配对形成的“原子”的内部结构，它们的尺寸 $\sim \sqrt{N}$ 。在弱耦合极限下，库伯对在费米面附近形成（库伯对的半径远大于粒子空间）但是波函数的结构与玻色凝聚时的一致。

为了研究任意耦合强度下的超导电性，我们来研究一个下面的哈密顿：

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{kk'q} V_{kk'} c_{k+q/2\uparrow}^+ c_{-k+q/2\downarrow}^+ c_{-k'+q/2\downarrow} c_{k'+q/2\uparrow} \quad (2.2.6)$$

在这种情况下，我们考虑的费米配对不再是仅包括零动量凝聚态的费米配对而是全空间的费米配对。用此哈密顿来研究 BCS-BEC 渡越问题的研究要追溯到 1969 年 Eagles 所做的工作。这个工作在当时并没有引起人们足够的重视。到 1980 年 Leggett 对这个问题的零温情形做了仔细的分析^[2]。他的工作为以后对 BCS-BEC 渡越问题的研究打下了基础。Leggett 发现随着耦合常数 g 的增加，系统可以从 BCS 平滑的演化到 BEC 的情形。在他的工作当中，一个很重要的假设是在绝对零度时系统仍然可以用 BCS 理论中相同的波函数来描写。但是此时除了自洽决定序参数的方程外，系统的化学势也允许做相应的变化。化学势必须根据粒子数守恒自洽的决定。

$$\sum_k 2v_k^2 = \sum_k \left(1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{E_k} \right) = N \quad (2.2.7)$$

Leggett 认为，在强耦合极限下，序参量方程近似为双原子分子的薛定谔方程，这个双原子分子的波函数为 $\phi_k = u_k v_k = \Delta_k / 2E_k$ ，同时，系统的化学势 μ 是

一个大的负数，是两粒子体系束缚能的一半。这说明在强耦合极限系统原先的费米球的结构完全被破坏，系统的自由度已经不是原先的费米子，而是由库伯对转化而来的玻色性的分子，在绝对零度下这些玻色性的分子发生 BEC。并且当系统从弱耦合演化到强耦合时系统的化学势是光滑的改变的，中间没有相变。因此当相互作用从弱到强改变时，系统经历一个光滑的 BCS-BEC 转换。

根据 Griffin 的工作^[32]，我们证明在绝对零度下，形成的库伯对的波函数 $\phi_k = u_k v_k = \Delta_k / 2E_k$ 在强耦合时成为两粒子体系的本征函数。很普遍，BCS 的代数关系在任何密度都成立。 $\epsilon_k = k^2 / 2m - \mu$ 是费米能级减去化学势。超导的序参量为方程 (2.1.2)，它要满足自治方程^[33]：

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{2\epsilon_{k'}} (1 - 2n_{k'}) \quad (2.2.8)$$

在这里 n_k 是基态费米分布函数

$$n_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k}{(\epsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}} \right], \quad \sum_k n_k = N_p = \frac{N}{2} \quad (2.2.9)$$

引入方程 $\varphi_k = \Delta_k / (\epsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}$ ，我们可以将方程 (2.2.8) 写为

$$\begin{aligned} \left(\frac{k^2}{m} - 2\mu \right) \varphi_k &= (1 - 2n_k) \sum_{k'} V_{k,k'} \varphi_{k'} \\ n_k &= \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{sgn}(\epsilon_k) (1 - |\varphi_k|^2)^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

在稀薄（强耦合）极限， $\varphi_k \ll 1$ ，于是方程 (2.2.10) 可简化为下面的形式：

$$\left(\frac{k^2}{m} - 2\mu \right) \varphi_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \varphi_{k'} \quad (2.2.11)$$

这正是单束缚态对的薛定谔方程，化学势 2μ 是能量本征值：在零阶 $2\mu = -\epsilon_0$ 符合理想玻色气体发生 BEC 的条件。同样在零阶，取 $\varphi_k = 2N_p^{1/2} \phi_k$ 可得

$$N_p = \frac{1}{4} \sum_k |\varphi_k|^2 \quad (2.2.12)$$

这说明平均场近似能够很好的描述强耦合原子束缚对的 BEC。

与之相反的极限要么是强耦合下的高密度情形（束缚对之间相互重叠）或是

任意密度下的弱耦合情形（这时的相互强度不足以使两个粒子形成束缚对）。能隙函数 φ_k 以指数形式局域在接近费米波矢 $k_F = (6\pi^2 N_p)^{1/3}$ 的狭窄区域内，分布函数 n_k 近似为一个单位阶跃函数 $\theta(k_F - k)$ ，能隙拓宽到 $\varepsilon \approx \Delta_F$ ，在这里 Δ_F 是费米能隙

$$\Delta_F \approx \frac{4k_F^2}{m} \exp\left(-\frac{1}{v_0 V_{k,k_F}}\right) \quad (2.2.13)$$

（ $v_0 = mk_F/2\pi^2$ 是一个自旋的费米能级密度）。因此平均场近似能够很好的描述弱耦合和强耦合极限。介于弱耦合和强耦合之间，可以认为是插补策略，平均场近似方法也基本适用。我们用一个虚构的可分离的势

$$V_{k,k'} = \frac{V}{\left\{ \left(1 + k^2/k_0^2\right) \left(1 + k'^2/k_0^2\right) \right\}^{1/2}} \quad (2.2.14)$$

用这个势的强度 V 和作用范围 k_0^{-1} 来描述。当 V 大于最小值 $V_c = 4\pi\hbar^2/mk_0$ ，这个势通过一个束缚能

$$\varepsilon_0 = \frac{k_0^2}{m} \left(\frac{V}{V_c} - 1 \right)^2 \quad (2.2.15)$$

形成一个单态 S 波束缚态。当 V 接近于它的起点 V_c 时，这个束缚态的半径 $a_0 \sim \varepsilon_0^{-1/2}$ ；对于强耦合情形， $a_0 \sim k_0^{-1}$ 。如果密度满足 $N_p \ll k_0^3$ ，之前的讨论成立：对于强耦合的 V ，束缚对几乎不重叠，可以把它们看成玻色子发生凝集。对于另一种情形 $N_p \geq k_0^3$ ，即使是强耦合也不能忽略对之间的重叠，尽管如此，平均场近似仍然基本有效。

我们只讨论稀薄气体的情形 $N_p \ll k_0^3$ ，在这种情形下，转变图像是明显的。图 2.3 很好的描述了在粒子数 N 固定的情况下，粒子分布函数 n_k 随耦合强度 V 的增加而变化的曲线。在强耦合极限下 $V \rightarrow \infty$ ， n_k 的变化曲线类似束缚态波函数的平方。随着耦合强度 V 的减小， n_k 的大小由于束缚态空间的扩展而增大。由于不相容原理 n_k 接近 1 时达到饱和点。对于弱耦合强度情形 $V \rightarrow 0$ ， n_k 近似为

一个单位阶跃函数。图 2.3 显示从强耦合极限到弱耦合极限的转变是平滑的，这个结果也可以用其他的物理量来检验。在图 2.4 中我们给出了序参数 Δ_0 的图像，

$\Delta_k = \Delta_0 / (1 + k^2/k_0^2)^{1/2}$ ，是耦合强度的函数。它从强耦合时的值

$$\Delta_0 = \frac{(8\pi N_p k_0)^{1/2}}{m} \left(\frac{V}{V_c}\right)^{1/2} \left(\frac{V}{V_c} - 1\right)^{1/2} \quad (2.2.16)$$

变化到弱耦合时的值 $\Delta_0 = \Delta_F (1 + k_F^2/k_0^2)^{1/2}$ ，这里的 Δ_F 已在式 (2.2.13) 中给出。

对于对的化学势 μ_p 和能隙 ε_m (拆开一个凝聚对所需要的最小能量) 也成立。

μ_p 从 $-\varepsilon_0$ 平滑的变化到 k_F^2/m ， ε_m 从 ε_0 也平滑的变化到 $2\Delta_F$ 。

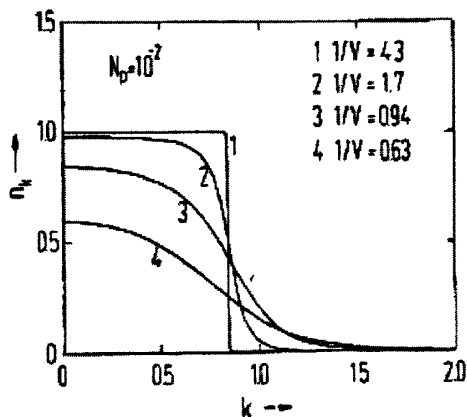


图 2.3 在 $N_p = 10^{-2}$ (以 k_0^3 为单位) 时，对于几个不同的耦合强度 V (以 V_c 为单位)，费米分布函数 n_k 随 k (以 k_0 为单位) 的变化。本图引至参考文献[33].

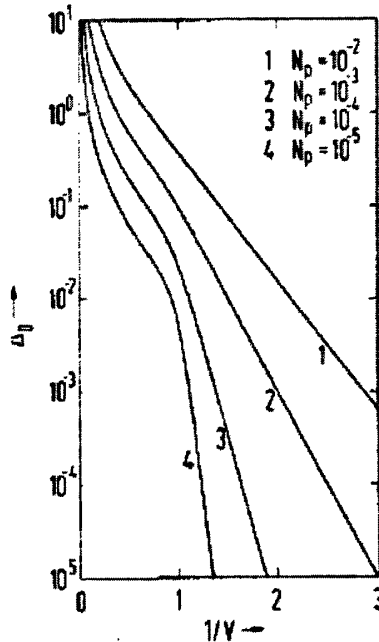


图 2.4 对于几个不同的密度 N_p (以 k_0^3 为单位), 序参量 Δ_0 (以 $k_0^2/2m$ 为单位) 随耦合强度 V (以 V_c 为单位) 的变化. 本图引至参考文献[33].

2.3 BCS-BEC 渡越区域的超流行为和相变

自从发现高温超导的现象以来, 很多将 BCS-BEC 渡越理论应用到高温超导和冷原子^[34]的文章发表出来. Randeria, Duan 和 Shieh, 认为渡越区域的物理性质和高温超导现象有联系, 他们利用一个可变的拟设配对, 对处于绝对零度下的二维系统进行了研究, 他们的方法与 NSR 的方法一致. 基于 NSR 的想法, Schmitt-Rink, Varma 和 Ruckenstein 发现^[35]二维系统的费米气体是不稳定的, 费米子之间通过任意弱的 S 波相互吸引势形成束缚对. 为了进一步完善 NSR 的想法, Haussmann^[36,37]用 T 矩阵的守恒近似, 在一个三维连续模型中, 计算渡越区域转变温度 T_C 随耦合常数的变化. 他发现随着耦合常数的增加, T_{BEC} 从低于转变温度 T_C 变化到接近转变温度 T_C , 正如物理上的预期. Janko, Mary 和他们的合作者^[38-40], 用第三种 T 矩阵的近似, 计算了在一个三维连续体模型中, 当温度等于或高于转变温度 T_C 时的 BCS-BEC 的渡越问题. 这些研究结果给出了一些

结论^[31]: (1) 从温度高于转变温度 T_C 来接近转变温度 T_C , T 矩阵出现一个共振, 在温度等于转变温度 T_C 时出现共振峰。相互作用越强, 温度越接近转变温度 T_C , 这个共振就越强。(2) 随着耦合常数的增加, 共振逐渐变的更重要, 在费米能级附近共振导致费米能态密度变为 0, 因此导致赝能隙的产生。

在实验上, 人们对费米气体的研究也取得了很大的进展^[15]。通过 Feshbach 共振调节粒子间的相互作用, 可以在实验上观察从 BCS 到 BEC 的演化。2004 年, 调节磁场使得散射长度大于零且 $|a| < l$ (l 为原子的平均间距) 时, 实验上观察到了费米原子将配对形成分子, 并在低于转变温度时形成分子的 BEC 存在的证据。在 BCS-BEC 的渡越区域, $|a| > l$, 系统为强关联的费米气体, 强关联的费米气体是人们非常关注的问题。为了研究 BCS-BEC 渡越区域的性质, Jin 等人^[8]首先将磁场加在 235.6G 处建立热平衡, 此处费米原子间为弱的吸引相互作用。之后, 将磁场的强度绝热的降至 B_C 附近的某个磁场强度 B_{hold} , 磁场的变化速度为每毫秒 0.1G。在这个过程中, 系统始终处在热平衡的状态, 在 B 处维持一段时间后, 快速的 (非绝热的) 将磁场强度降低 10G 至 B_f , 磁场的变化速度为每毫秒 20G。在磁场强度等于 B_f 处, 可以将原子对看成是深度束缚的分子。此时分子的密度分布可以通过施加射频场的办法来观测, 从而给出 BCS-BEC 渡越区域中, 在磁场为 B_{hold} 处已配对的原子的比例等重要信息。图 2.5 给出了实验上得到的原子配对的比例和 BCS-BEC 渡越区域中 B_{hold} 的关系。Ketterle 小组^[9]对 ${}^6\text{Li}$ 采用了类似的办法考察了 BCS-BEC 渡越区域中的强关联费米气体。Ketterle 小组与 Jin 小组得到的结果一致, 这表明在 BCS-BEC 渡越区域的确有原子的配对现象, 这些结果给出了深刻的启示: 在 BCS-BEC 渡越区域, 强关联费米气体可以表现出超流行为。Grimm 小组^[7]也采用 ${}^6\text{Li}$ 对 BCS-BEC 渡越过程中系统的基本性质进行了深入研究, Grimm 小组发现, 在共振磁场附近绝热的来回改变磁场强度, 分子 BEC 和费米凝聚体之间存在可逆的相互转化行为, 图 2.6 给出了这一结论的证据。他们还进一步研究了共振磁场 B_C 处强关联费米气体所呈现的普适行为。

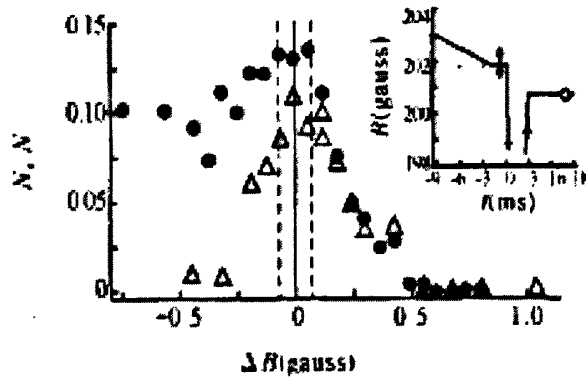


图 2.5 给出了原子配对的 N_p/N 比例与共振磁场 B_C 附近磁场强度的关系。

$\Delta B = B_{hold} - B_C$ ，实心小点表示 $t_{hold} = 2ms$ ，三角符号表示 $t_{hold} = 30ms$ 。右上角的图表示了磁场强度的改变过程。从图中可以看出，当散射长度为负时，原子配对占有明显的比例。本图取自文献[8]。

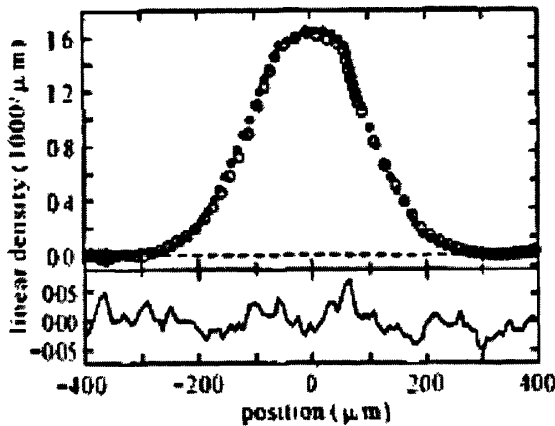


图 2.6 给出了分子 BEC 与费米凝聚气体之间存在可逆的相互转化行为的示意图。空心点是磁场等于 764G 时分子 BEC 的密度分布。在 764G 处出现分子 BEC 的现象后，将磁场强度绝热的增强至 1176G (对应于 BCS 超流体)，之后又绝热的降低至原来的磁场强度，此时出现的分子 BEC 用实心点表示。从图中可以看出，实心点与空心点完全吻合，这表明磁场强度在共振磁场附近的改变是一个可逆过程。本图取自文献[7]。

原子配对后的能隙是反映系统是否形成超流体的一个非常重要的物理量。人

们可以运用激光、射频场等手段来对束缚在光阱中的费米气体进行有效的研究。当处于两个不同内部态的 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 原子配对后，一个很自然的探测能隙的办法是将其中一个内部态的原子 $|2\rangle$ 通过射频场激发到另外一个原子态 $|3\rangle$ 。假设没有配对时，原子态 $|2\rangle$ 跃迁至原子态 $|3\rangle$ 需要的能量为 $\Delta E_{2\rightarrow 3}$ ，假设原子配对的能隙为 $\hbar\delta$ ，则在满足 $E_{RF} = \hbar\omega_{RF} = \hbar\delta + \Delta E_{2\rightarrow 3}$ 时，原子态 $|2\rangle$ 跃迁至原子态 $|3\rangle$ 的几率最大，在这里 ω_{RF} 为射频场的角频率。实验上，可以通过在不同射频场频率下探测原子态 $|2\rangle$ 的损失数目（即 $|2\rangle$ 跃迁至 $|3\rangle$ 的概率）来确定配对能隙 $\hbar\delta$ 。Grimm小组^[41]将 ${}^6\text{Li}$ 的两个不同内部态 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 的费米气体冷却到远低于费米温度，在不同的温度和磁场下，得到的实验结果如图 2.7。Kinnunen J、Rodriguez M 等人基于共振超流理论进行计算得到的结果^[42]与实验结果基本符合。MIT 小组^[43]在 BCS-BEC 渡越区域的强关联费米气体中实现了涡旋晶格，最为直接的证实了系统在 BCS-BEC 渡越区域的超流行为。

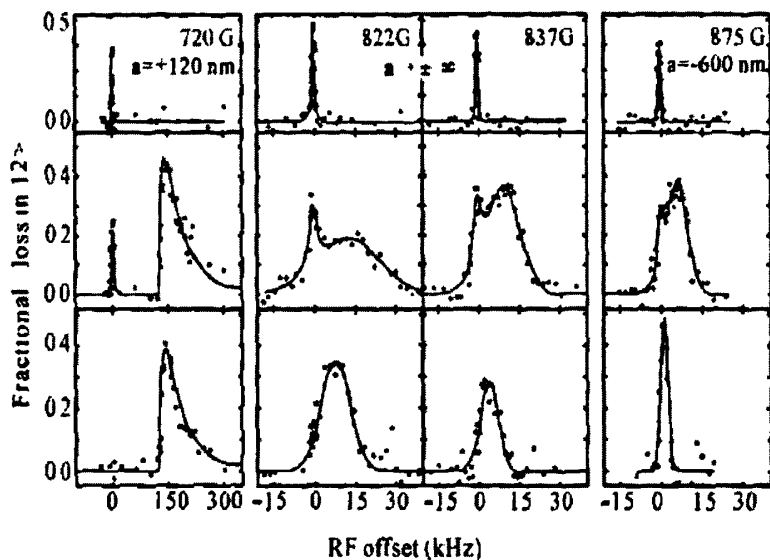


图 2.7 图中横坐标为 $\omega = \omega_{RF} - \Delta E_{2 \rightarrow 3} / \hbar$ 。峰值对应的 ω 即为反映能隙的 δ 。最上面的温度为 $6T_F$ ，在每个图中只有一个峰，峰对应的 δ 为零，这表示原子间没有配对。中间一排图的温度为 $0.5T_F$ ，此时温度在转变温度附近，原子配对和未配对的各占有一定的比例，出现了双峰结构。最下面一排图的温度低于 $0.2T_F$ ，温度低于费米温度，几乎所有的原子都参与配对，所以出现了一个偏离零点的峰。本图取自文献[41]。

第三章 对高密度费米物质态的研究

本章在平均场近似情形下的 BCS-BEC 渡越理论基础上, 对高密度的费米物质的超流性进行研究。根据平均场近似情形下 BCS-BEC 渡越理论的两个重要方程, 选取 NSR 方法所取的相互作用势, 引入动量空间的一个描述相互作用势的作用距离的物理量 k_0 , 其倒数表示相互作用力程。对比 $3\pi^2 n = k_F^3$, 我们定义 $3\pi^2 n_0 = k_0^3$ 。利用此来定义密度 n/n_0 , 表示单位相互作用空间所包含的粒子数。首先对高密度费米气体在绝对零度下, 取定不同的散射长度的值, 对超流能隙和化学势随密度的变化情况进行研究, 通过数值计算的方法对两个方程进行求解得出的结果进行作图讨论, 然后改变方程的自变量, 取定不同的 n/n_0 的值, 通过数值计算得出超流能隙和化学势随散射长度的变化情形。并进行作图讨论。其次在有限温度情形, 取定不同的散射长度, 研究超流转变温度和超流能隙随密度的变化, 然后取定不同的 n/n_0 的值, 研究超流转变温度随散射长度的变化。运用数值计算求解有限温度情形下平均场近似下的 BCS-BEC 渡越理论的两个方程, 得到超流转变温度和化学势随密度的变化结果, 并进行作图讨论。最后在温度介于绝对零度和超流转变温度之间时, 对高密度费米物质的热力学量如熵、比热、能量等随温度的变化的情况进行讨论。

3.1 平均场近似情形下的 BCS-BEC 渡越理论

我们研究一个由 N 个自旋为 $1/2$ 费米子组成的系统, 他们之间通过 $V_{k,k'} = g\varphi_k\varphi_{k'}$ ($g = -|g|$) 相互作用。我们从 BCS 理论出发来讨论^[30]:

$$\begin{aligned} H_{BCS} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{kk'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \\ &= \sum_k \epsilon_k (c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^+ c_{-k\downarrow}) + \sum_{kk'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

其中 $\epsilon_k = \varepsilon_k - \mu$ 。根据库伯对组成超导基态的想法, 可假定下列对算符的基态平均值存在, 且不为零

$$\begin{aligned} \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle &\equiv \langle 0 | c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ | 0 \rangle \neq 0 \\ \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle &\equiv \langle 0 | c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} | 0 \rangle \neq 0 \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

利用上式，可将算符写成^[44]

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ &= \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle + (c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle) \\ c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} &= \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

将上式代入哈密顿 (3.1.1)，为简化我们先考虑后一项

$$\begin{aligned} &\sum_{kk'} V_{k,k'} \left[\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle + (c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle) \right] \left[\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle) \right] \\ &= \sum_{kk'} V_{k,k'} \left[\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle) + (c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle) \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + \right. \\ &\quad \left. (c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle) (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle) \right] \end{aligned}$$

省略高阶项可以得到

$$\sum_{kk'} V_{k,k'} \left[\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle) + (c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle) \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \right] \quad (3.1.4)$$

定义

$$\begin{aligned} \Delta_k &\equiv -\sum_k V_{k,k'} \langle c_{-k} c_{k'} \rangle = \Delta \varphi_k \\ \Delta_k^* &\equiv -\sum_k V_{k,k'} \langle c_k^+ c_{-k}^+ \rangle = \Delta^* \varphi_k \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

则是 (3.1.4) 可以写为

$$\begin{aligned} &\sum_{kk'} V_{k,k'} \left[-\langle c_k^+ c_{-k}^+ \rangle \langle c_{-k} c_k \rangle + \langle c_k^+ c_{-k}^+ \rangle (c_{-k} c_k) + (c_k^+ c_{-k}^+ - \langle c_k^+ c_{-k}^+ \rangle) \langle c_{-k} c_k \rangle \right] \\ &= -\sum_k (\Delta \varphi_k c_k^+ c_{-k}^+ + \Delta^* \varphi_k c_{-k} c_k) - \frac{\Delta^2}{g} \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

所以哈密顿量可以写为

$$H_{BCS} = \sum_k \epsilon_k (c_k^+ c_k + c_{-k}^+ c_{-k}) - \sum_k (\Delta \varphi_k c_k^+ c_{-k}^+ + \Delta^* \varphi_k c_{-k} c_k) - \frac{\Delta^2}{g} \quad (3.1.7)$$

此时哈密顿量是非对角化的，我们利用玻戈留波夫变换

$$\begin{aligned} \alpha_k &= u_k c_k - v_k c_{-k}^+ \\ \alpha_{-k} &= u_k c_{-k} + v_k c_k^+ \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

代入哈密顿，可得

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right) \quad (3.1.9)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right)$$

在上面的计算中我们将 $\Delta = \Delta^*$ 视为常数, 其中 $E_k^2 = \Delta_k^2 + \epsilon_k^2$, $\Delta_k^2 = \Delta^2 \varphi_k^2$, 此时哈密顿量可写为

$$H_{BCS} = \sum_k (\epsilon_k - E_k) - \frac{\Delta^2}{g} + \sum_k E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \quad (3.1.10)$$

$$E_0 = \sum_k (\epsilon_k - E_k) - \frac{\Delta^2}{g} \quad (3.1.11)$$

我们将 (3.1.8) 代入 (3.1.5) 并经过计算可得

$$\Delta = -g \sum_k \frac{\Delta}{2E_k} [1 - 2f(E_k)] \varphi_k^2 \quad (3.1.12)$$

其中在运算过程中运用了 $\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = \langle \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k} \rangle = f(E_k)$, $f(E_k)$ 为费米分布函数

$f(E_k) = 1/(\exp(E_k/k_B T) + 1)$ 。同时方程 (3.1.12) 也可写为

$$1 + g \sum_k \frac{1 - 2f(E_k)}{2E_k} \varphi_k^2 = 0 \quad (3.1.13)$$

改写上式

$$\frac{1}{g} + \sum_k \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E_k} - \frac{2f(E_k)}{E_k} \right] \varphi_k^2 = 0 \quad (3.1.14)$$

结合Lippmann-Schwinger方程

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \frac{1}{g} + \sum_k \frac{\varphi_k^2}{2\epsilon_k} \quad (3.1.15)$$

其中 a 为散射长度, 联立上面两式可得

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_k \left[\frac{1}{2\epsilon_k} - \frac{1}{2E_k} + \frac{f(E_k)}{E_k} \right] \varphi_k^2 \quad (3.1.17)$$

对于总的粒子数 n (单位体积),

$$n = 2 \sum_k \langle c_k^+ c_k \rangle \quad (3.1.18)$$

上式中的因子2是由于自旋求和而得到的。将 (3.1.8) 代入上式并计算可得

$$n = 2 \sum_k \left[v_k^2 + \frac{\epsilon_k}{E_k} f(E_k) \right] \quad (3.1.19)$$

在文獻[2]中, Leggett 假設兩個粒子間的相互作用 $\phi_k^2 = 1$ 即 $V = g$, 在絕對零度 $T = 0$ 時,

$$f(E_k) = 0 \quad (3.1.20)$$

方程 (3.1.17) 可以寫為

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_k \left[\frac{1}{2\epsilon_k} - \frac{1}{2E_k} \right] \quad (3.1.21)$$

方程 (3.1.19) 可以寫為

$$n = 2 \sum_k v_k^2 = \sum_k \left(1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{E_k} \right) \quad (3.1.22)$$

方程 (3.1.21) 和 (3.1.22) 是文獻[2]中 Leggett 提出的 BCS-BEC 渡越理論中兩個重要的方程。我們可以通過一個稱之為自由費米能的因子 $\epsilon_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m$ 將這兩個方程單位化 $\tilde{\epsilon} \equiv \epsilon_k / \epsilon_F$, $\tilde{\mu} = \mu / \epsilon_F$, $\tilde{\Delta} = \Delta / \epsilon_F$, 並在自然單位制下, 利用

$\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k$ 將求和化為積分

$$\int_0^\infty \tilde{\epsilon}^{1/2} d\tilde{\epsilon} \left\{ \frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right\} = \pi\xi \quad (3.1.23)$$

$$\int_0^\infty \tilde{\epsilon}^{1/2} d\tilde{\epsilon} \left\{ 1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right\} = \frac{4}{3} \quad (3.1.24)$$

其中 $\xi \equiv (k_F a)^{-1}$, 方程 (3.1.23) 和 (3.1.24) 決定了變量 $\tilde{\mu}$ 和 $\tilde{\Delta}$ 隨 ξ 的變化。我們可以通過改變 ξ 的符號來改變相互作用的類型。

從上面的兩個方程可以直接驗證兩個極限情況 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 下的結果。當 $\xi \rightarrow +\infty$ 時, 對應於緊束縛的雙原子分子近似情形, 從上面兩個方程可以推斷 $\Delta \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow -\hbar^2 / 2ma^2$, 這正是兩粒子束縛態對應於散射長度為 a 時的束縛能的一半。就像我們期望的那樣, 在這種情形下, 束縛對不發生重疊, 並在一定條

件下發生分子BEC。在相反極限下 $\xi \rightarrow -\infty$ ，可以得到 $\tilde{\mu} \rightarrow 1$ ，並且可以得到 Δ 作為短程相互作用下稀薄費米氣體的超流能隙的值

$$\Delta = \text{const} \varepsilon_F \exp(-\pi/2k_F |a|) \quad (3.1.25)$$

因此，我們可以描述從緊束縛分子 ($\xi \rightarrow +\infty$) 情形連續轉化到庫伯對 ($\xi \rightarrow -\infty$) 情形。現在我們來看一下，在轉化的過程中，有什麼特殊點嗎？方程 (3.1.21) 和 (3.1.22) 並沒有給出這樣的一個點（在 $\xi = 0$ 時沒有任何特殊情形）。我們再來看一下的 Δ 物理解釋：用和BCS理論中相同的方法可以知道，動量為 k 的准粒子的激發能為 E_k ，因此能隙 Δ 可以看做是動量為 k 的粒子的最小激發能隙。當 $\mu > 0$ 時，可以證明 Δ 即是BCS理論中的激發能隙。但是當 $\mu < 0$ 時，能隙不再是 Δ 而是 $(|\mu|^2 + \Delta)$ ，在束縛能為 $-E_b$ 的緊束縛雙原子分子的極限下 $|\mu| = |E_b|/2$ 。因此，從緊束縛雙原子分子極限轉化到庫伯對的極限的轉化點發生在 $\mu = 0$ 處。對於多體系統來說，研究原子間有沒有形成束縛對不重要，關鍵是 μ 的符號。上面關於能隙的觀點對S波配對情形沒有什麼特別重要的意義，但對於P波配對來說（例如高度自旋激化的費米子系統）來說解決了一個長久存在的悖論：因為在庫伯對極限能隙存在結點，在緊束縛雙原子分子極限能隙是各項同性的，怎麼會有從前者到後者的連續轉化呢？當我們意識到能隙不總是 Δ 時，從緊束縛雙原子的極限到庫伯對極限的轉化就相當自然了^[2]。

3.2 高密度費米物質態的超流性

3.2.1 絕對零度下的高密度費米物質態

在絕對零度下，費米子的分布函數 $f(E_k) = 0$ ，相互作用勢中，假設

$$\phi_k^2 = \frac{1}{1 + k^2/k_0^2}$$

其中參量 k_0 是相互作用的距離的倒數， k_0 取值很小時，相互作用距離很大，相互作用的力程內有很多粒子，因此可以稱之為高密度，反之則為低密度^[30]。此時

$$\Delta_k^2 = \Delta^2 \phi_k^2 = \frac{\Delta^2}{1+k^2/k_0^2} \quad (3.2.1)$$

方程 (3.1.17) 可以写为

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_k \left[\frac{1}{2\varepsilon_k} - \frac{1}{2E_k} \right] \frac{1}{1+k^2/k_0^2} \quad (3.2.2)$$

方程 (3.1.18) 可以写为

$$N = 2 \sum_k v_k^2 = \sum_k \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right) \quad (3.2.3)$$

通过 $\varepsilon_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m$ 将这两个方程单位化 $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_k / \varepsilon_F$, $\tilde{\mu} = \mu / \varepsilon_F$, $\tilde{\Delta} = \Delta / \varepsilon_F$,

$\tilde{\varepsilon}_0 \equiv \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_F} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{\hbar^2 k_F^2} = \frac{k_0^2}{k_F^2} = X^2$, 且 $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$, 并在自然单位下, $k_B = 1, \hbar = 1$ 并利用

$\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k$ 将求和化为积分

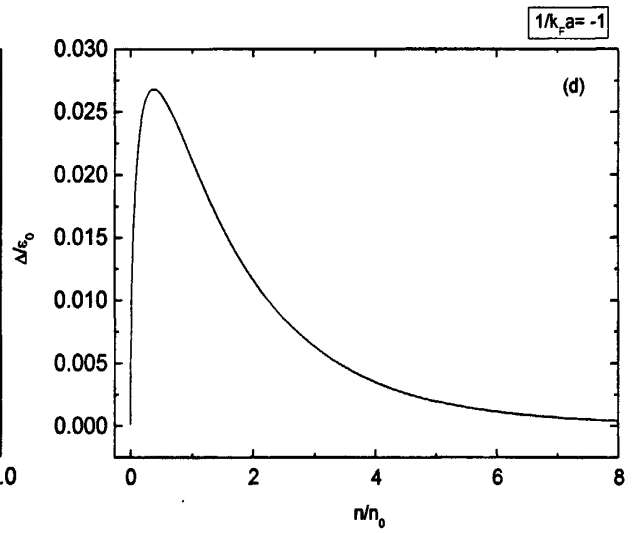
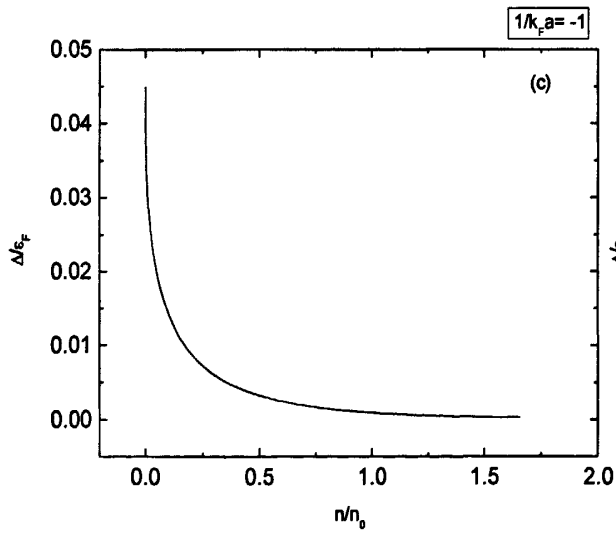
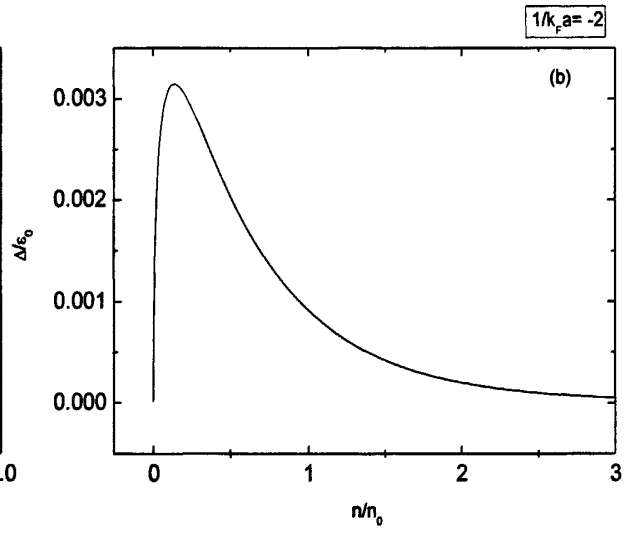
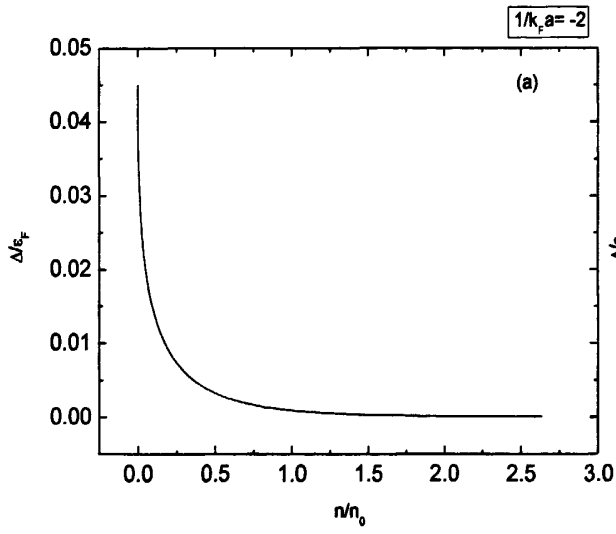
$$\int_0^\infty \tilde{\varepsilon}^{1/2} d\tilde{\varepsilon} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2 / (1 + \tilde{\varepsilon} / X^2)}} \right) = \frac{4}{3} \quad (3.2.4)$$

$$\int_0^\infty \tilde{\varepsilon}^{1/2} d\tilde{\varepsilon} \left(\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2 / (1 + \tilde{\varepsilon} / X^2)}} \right) \frac{1}{1+k^2/k_0^2} = \frac{\pi}{k_F a} \quad (3.2.5)$$

给定不同 $1/k_F a$ 的值, 上面两个方程给出了超流能隙 $\tilde{\Delta}$ 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随 X 的变化。

$X = \frac{k_0}{k_F} = \frac{k_0}{(3\pi^2 n)^{1/3}}$, 其中 n 表示粒子的浓度, 固定 $1/k_F a$ 的值, 将 $1/k_F a$ 的值分

别取 -2, -1, 0, 1, 通过数值计算可以得到超流能隙 $\tilde{\Delta}$ 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随密度 n/n_0 的变化。



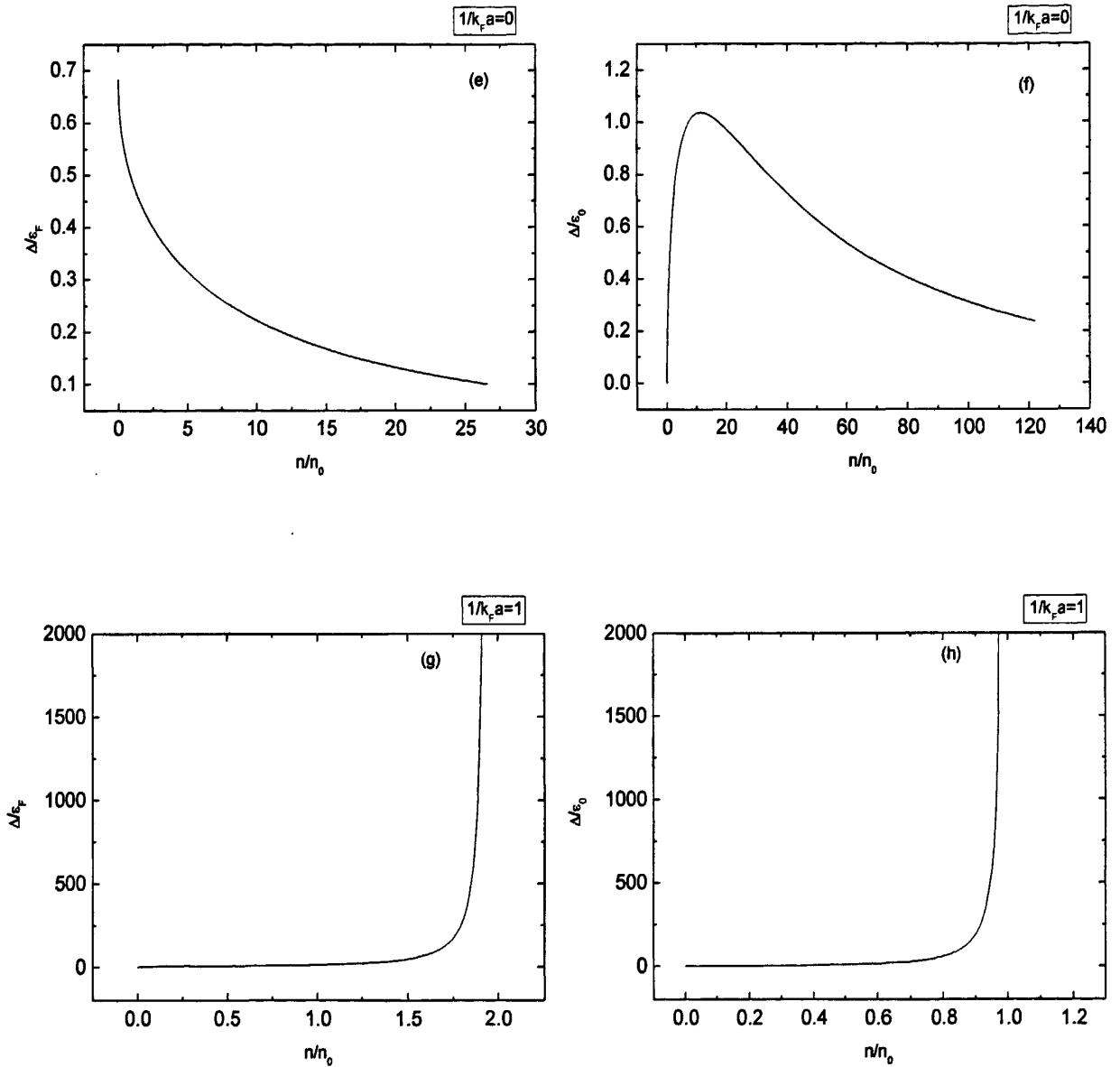
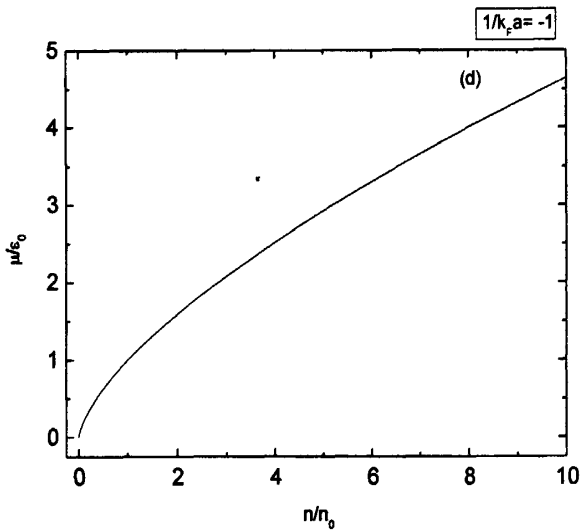
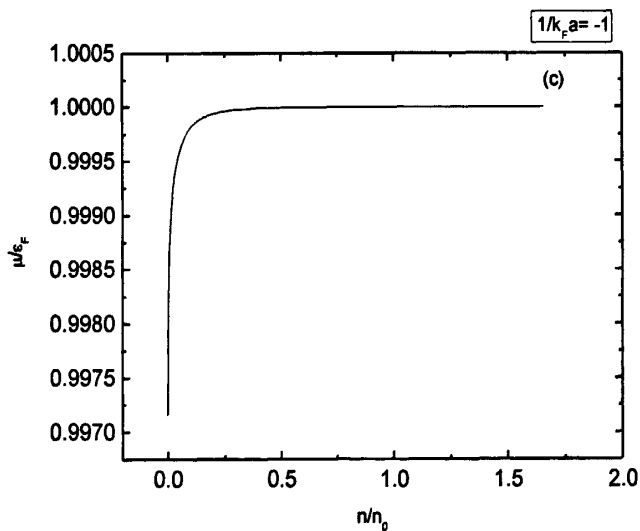
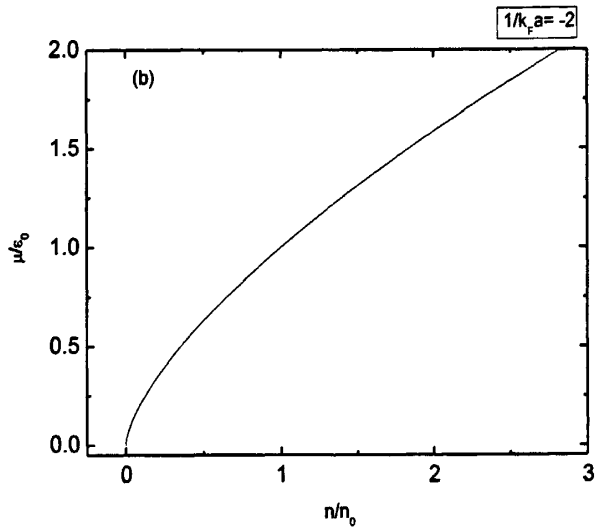
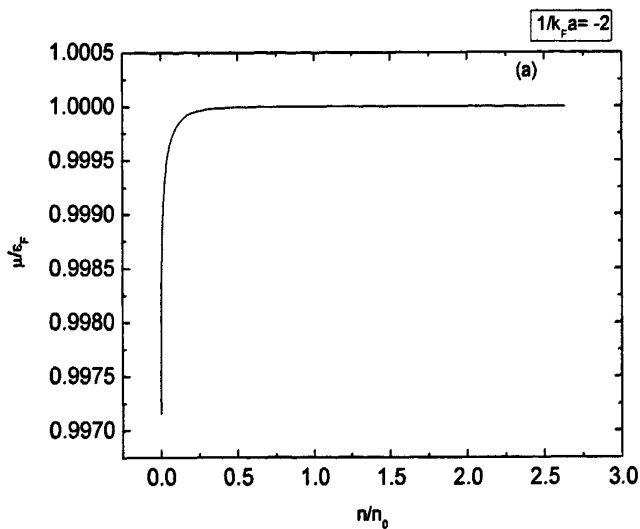


图3.1: 左侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取值-2到1时超流能隙 $\tilde{\Delta}$ (以 ϵ_F 为单位)随密度 n/n_0 的变化。右侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取值-2到1时超流能隙 $\tilde{\Delta}$ (以 ϵ_0 为单位)随密度 n/n_0 的变化。



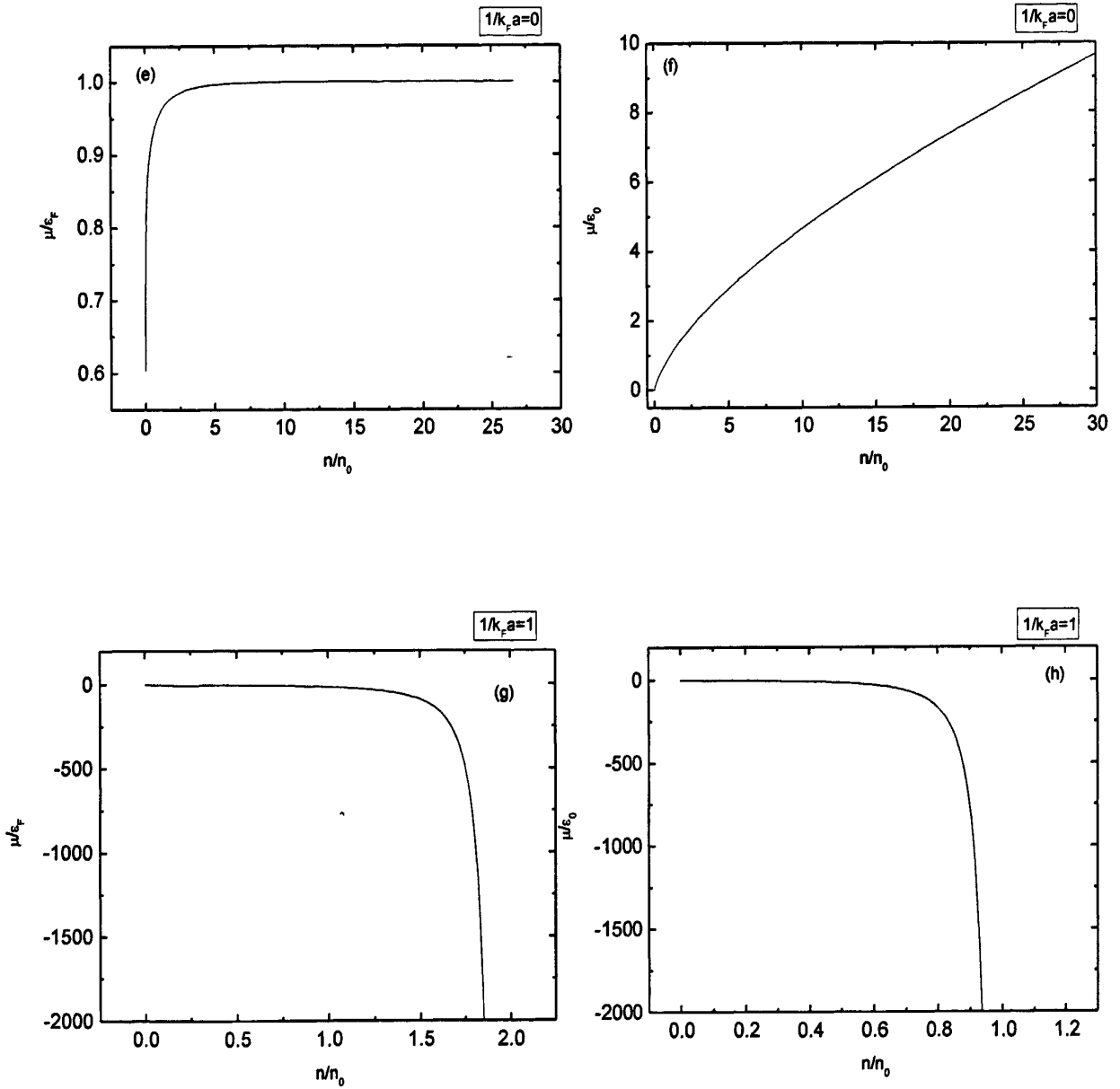


图3.2: 左侧的图描述了 $1/k_F a$ 取值为-2到1的情况下, 化学势 $\tilde{\mu}$ (以 ϵ_F 为单位) 随密度的变化。右侧的图描述了 $1/k_F a$ 取值为-2到1的情况下, 化学势 $\tilde{\mu}$ (以 ϵ_0 为单位) 随密度的变化。

在图 3.1 和图 3.2 中, 其中的 $\varepsilon_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ 。我们研究的是 $1/k_F a$ 的绝对值取较小的值 (即散射长度 a 的值很大, 甚至趋于无穷) 的情形。其中 $n_0 = k_0^3 / 3\pi^2$ 。 $n/n_0 = k_F^3 / k_0^3$ 表示单位相互作用空间所包含的粒子数。图 3.1 中, 在 $1/k_F a$ 取负值时, 即 BCS 区, 能隙的值较小, 这说明在 BCS 区形成的是弱束缚的对。从右侧的图可以看出, 当 n/n_0 的取值较小 (即为低密度) 时, 超流能隙 $\tilde{\Delta}$ 较小, 随着 n/n_0 的增加 (即密度的增加) 超流能隙 $\tilde{\Delta}$ 先是变大, 随后又随着密度的增加而减小, 最后趋于一个稳定的值。当 $1/k_F a$ 的值为正时, 即 BEC 区, 能隙的值较大。能隙随着密度先是缓慢的增加, 当密度大于某一值时, 这种增加变的非常显著。其中的 (e) 和 (f) 两图给出了 $1/k_F a$ 取零时的情形, 此时处在么正区, 能隙的值大于 BCS 区的能隙的取值, 在密度变化时, 能隙的值先是增加, 随后增加速度变缓, 最后增加速度有所减小。 $1/k_F a$ 取正负值时能隙随密度不同的变化趋势可以通过结合 Lippmann-Schwinger 方程来说明。

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \frac{1}{g} + \sum_k \frac{\varphi_k^2}{\varepsilon_k} \quad (3.1.15)$$

对上式进行无量纲化并积分可以得到:

$$\frac{1}{g/g_c} = \frac{1}{2} \left(\frac{k_0}{k_F} \right)^2 - \frac{1}{k_F a} \frac{k_F}{k_0} \quad (3.2.6)$$

其中 $g_c = -4\pi\hbar^2 / mk_0$ 。对上述方程进行分析可以发现, 在 $1/k_F a$ 取正值时 g/g_c 随着 k_0/k_F 的增加而一直减小。能隙的大小正比于 g/g_c 的值, 从而可以看出, 能隙随密度的增加一直在增加。在 $1/k_F a$ 取负值时, g/g_c 随着 k_0/k_F 的增加先是减小, 而后又开始增加。反应在能隙与密度的关系上则是能隙随密度先是增加, 而后又开始减小。正如图 3.1 所描述的情景。图 3.2 描述的是化学势的变化, 对于化学势来说, 在 $1/k_F a$ 的取值为负时其值为正, 随着密度的增加而增加。对比 (b), (d) 和 (h) 可以看出, $1/k_F a$ 取正和负时, 化学势随密度的变化趋势不一致, 反应了 BCS 和 BEC 区的不同。在 $1/k_F a$ 取 0 时, 化学势和 $1/k_F a$ 取负时有相同的变化趋势。在 $1/k_F a$ 取值为正值时化学势的值为负, 随着密度的增加先是

缓慢变化，密度增大到一定程度时开始迅速减小。接着我们来研究一下当 k_0/k_F 的取值一定即密度一定时，超流能隙 $\tilde{\Delta}$ 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随 $1/k_F a$ 的变化。通过计算和作图，可以得到以下图形

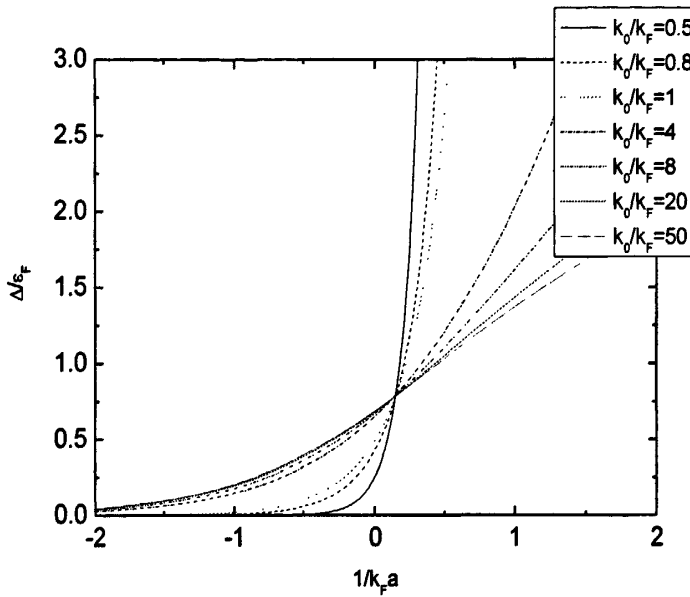


图3.3: 描述了 k_0/k_F 分别取不同值时，超流能隙 $\tilde{\Delta}$ (以 ϵ_F 为单位) 随 $1/k_F a$ (即散射长度) 的变化。

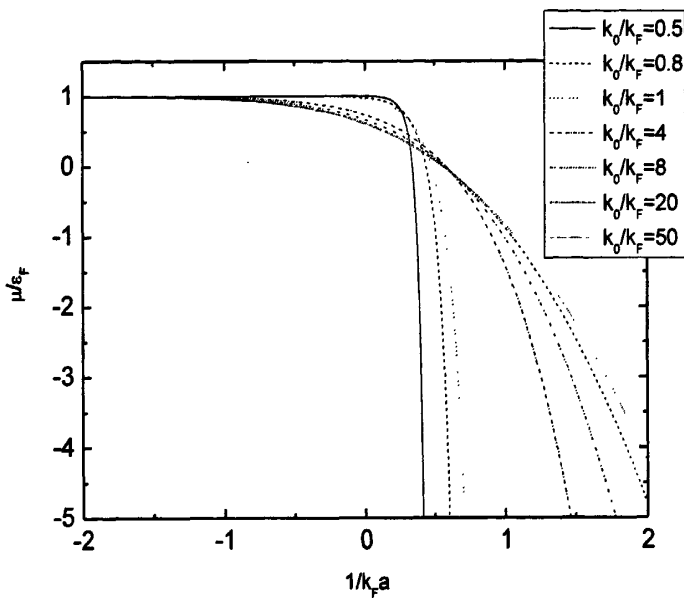


图3.4: 给出了当 k_0/k_F 取不同的值时, 化学势 $\tilde{\mu}$ (以 ε_F 为单位) 随 $1/k_F a$ (即散射长度) 的变化。

从图3.3和图3.4可以得出结论, 无论低密度还是高密度情形, 从BCS区经过么正区到达BEC区, 费米气体的超流能隙和化学势随散射长度均平滑的连续变化。在图3.3中超流能隙随着 $1/k_F a$ 的增加 (即散射长度的减小) 而增加, 在散射长度取负值时, k_0/k_F 的值越大, 超流能隙就越大。在 $1/k_F a$ 为正值时 (即散射长度从正无穷逐渐减小), k_0/k_F 的值越大, 超流能隙就越小。在 $1/k_F a$ 等于零附近, 可以看出不同的 k_0/k_F 所对应的曲线交于一点, 即在 $1/k_F a$ 取零附近的值时, 不同的 k_0/k_F 对应相同的超流能隙的值。从而也进一步说明了图3.1中超流能隙随密度的变化情形。在图3.4中化学势则随着 $1/k_F a$ 增加而减小, 在 $1/k_F a$ 为负值 (即散射长度为负) 时化学势取正值, k_0/k_F 的值越小对应的化学势越大。当 $1/k_F a$ 为正值 (即散射长度取正值) 时, 化学势取负值, k_0/k_F 取值越大对应的化学势的值越大。也进一步说明了图3.2中化学势随密度的变化情形。

3.2.2 有限温度下的高密度费米物质态

上一小节研究了绝对零度下转变能隙 $\tilde{\Delta}$ 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随密度的变化, 我们现在来看有限温度下的情形, 研究超流转变温度和化学势随密度的变化关系。根据公式 (3.1.17) 和 (3.1.19) 同样可以计算高密度费米气体的超流转变温度与密度的关系。在温度 $T = T_C$ 时,

$$\Delta(T_C) = 0 \quad (3.2.6)$$

方程 (3.1.17) 可以写为

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_k \left[\frac{1}{2\varepsilon_k} - \frac{1}{2|\varepsilon_k - \mu|} + \frac{f(E_k)}{|\varepsilon_k - \mu|} \right] \frac{1}{1 + k^2/k_0^2} \quad (3.2.7)$$

其中 $f(E_k)$ 为费米分布函数

$$f(E_k) = \frac{1}{\exp(E_k/k_B T) + 1} \quad (3.2.8)$$

在温度 $T = T_C$ 时可写为

$$f(E_k) = \frac{1}{\exp(\varepsilon_k - \mu/k_B T_C) + 1} \quad (3.2.9)$$

将方程 (3.2.9) 带入到方程 (3.2.7) 中可得

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \sum_k \left[\frac{1}{2\varepsilon_k} - \frac{1}{2|\varepsilon_k - \mu|} + \frac{1/(\exp(\varepsilon_k - \mu/k_B T_C) + 1)}{|\varepsilon_k - \mu|} \right] \frac{1}{1 + k^2/k_0^2} \quad (3.2.10)$$

方程 (3.1.19) 可以写为

$$N = \sum_k \left[1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{|\varepsilon_k - \mu|} + \frac{\varepsilon_k - \mu}{|\varepsilon_k - \mu|} \left(2/(\exp(\varepsilon_k - \mu/k_B T_C) + 1) \right) \right] \quad (3.2.11)$$

通过 $\varepsilon_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m$ 将这方程 (3.2.10) 和 (3.2.11) 单位化, $\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon_k / \varepsilon_F$, $\tilde{\mu} = \mu / \varepsilon_F$, $\tilde{\Delta} = \Delta / \varepsilon_F$,

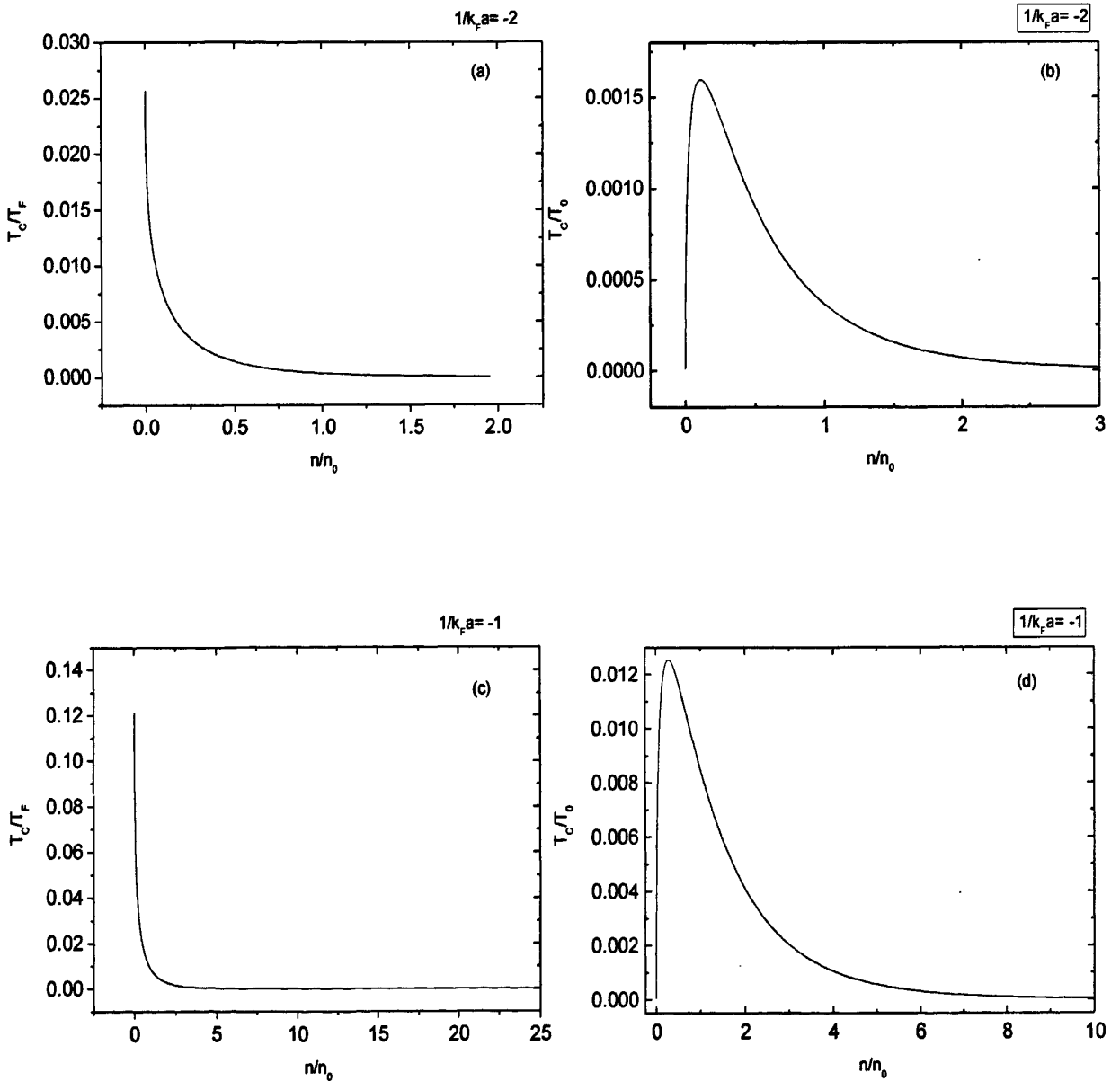
$\tilde{T}_C = T_C / T_F$, $\tilde{\varepsilon}_0 \equiv \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_F} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{\hbar^2 k_F^2} = \frac{k_0^2}{k_F^2} = X^2$, 且 $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$, 并在自然单位下, $k_B = 1, \hbar = 1$,

利用 $\sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k$ 将求和化为积分

$$\int_0^\infty \tilde{\varepsilon}^{1/2} d\tilde{\varepsilon} \left(\frac{1}{\tilde{\varepsilon}} - \frac{1 - 2/\exp(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}/\tilde{T}_C + 1)}{|\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}|} \right) \frac{1}{1 + \tilde{\varepsilon}/X^2} = \pi \tilde{\xi} \quad (3.2.12)$$

$$\int_0^{\infty} \tilde{\varepsilon}^{1/2} d\tilde{\varepsilon} \left(1 + \frac{\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}}{|\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}| \left(\exp\left(\frac{\tilde{\varepsilon} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}_C}\right) + 1 \right)} - 1 \right) = \frac{4}{3} \quad (3.2.13)$$

对于给定的不同的 $\xi = 1/k_F a$ 的值, 上面两个方程给出了超流转变温度 \tilde{T}_C 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随密度 n/n_0 的变化。对上述两个方程进行数值计算可以得出在给定散射长度即取定 $1/k_F a$ 的值时, 超流转变温度 \tilde{T}_C 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随密度 n/n_0 的变化。



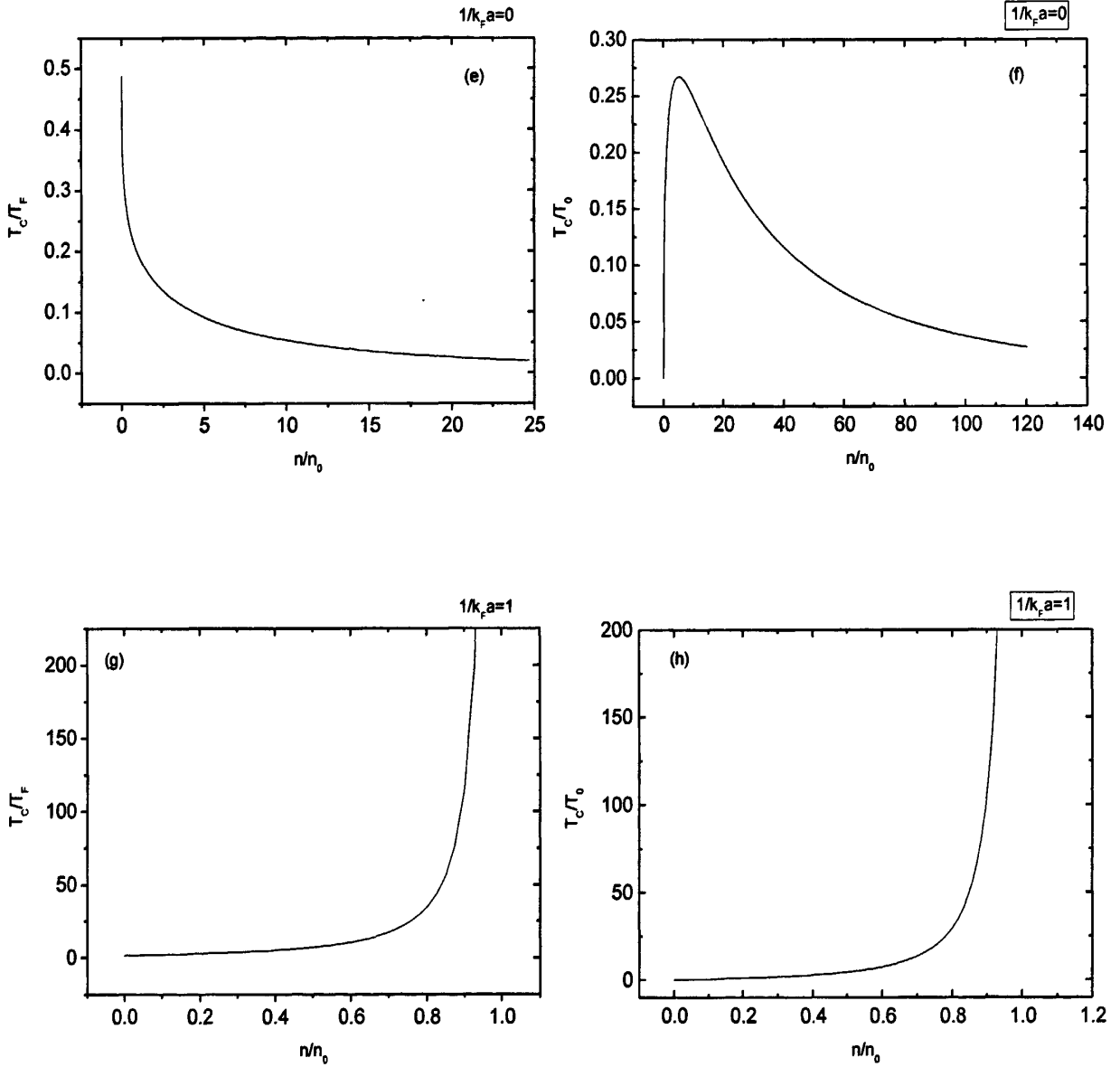
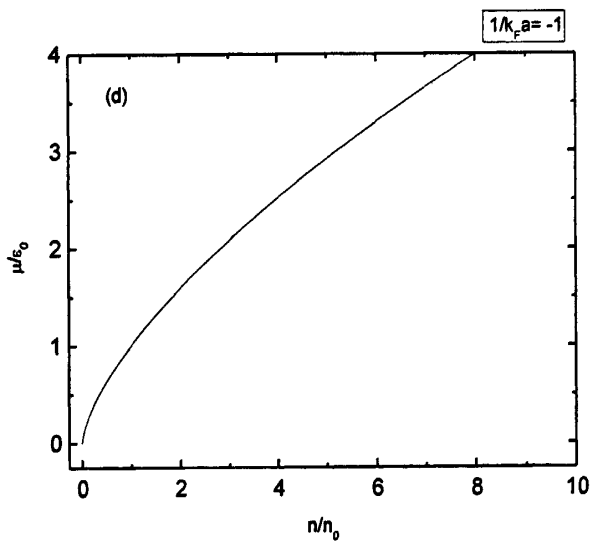
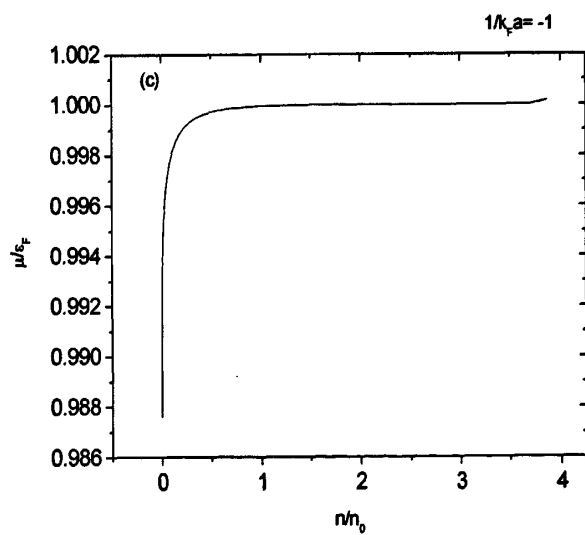
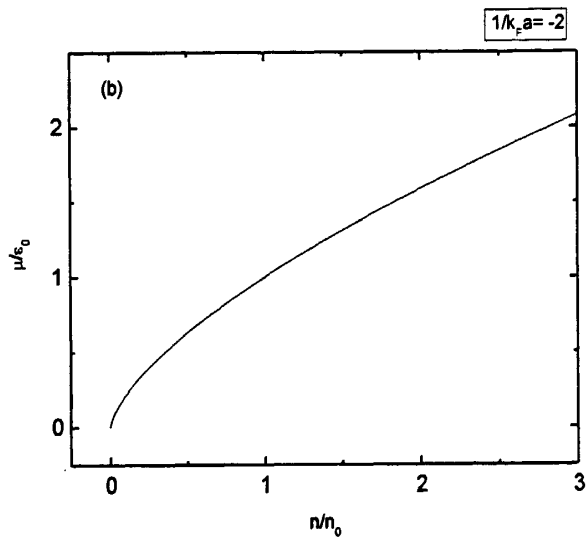
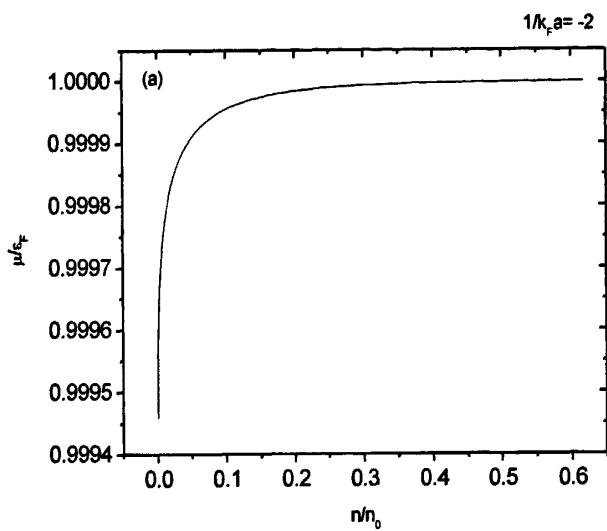


图3.5: 左侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取-2、-1、0、1时, 超流转变温度(以 T_F 为单位)随密度 n/n_0 的变化。右侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取-2、-1、0、1时, 超流转变温度(以 T_0 为单位)随密度 n/n_0 的变化。



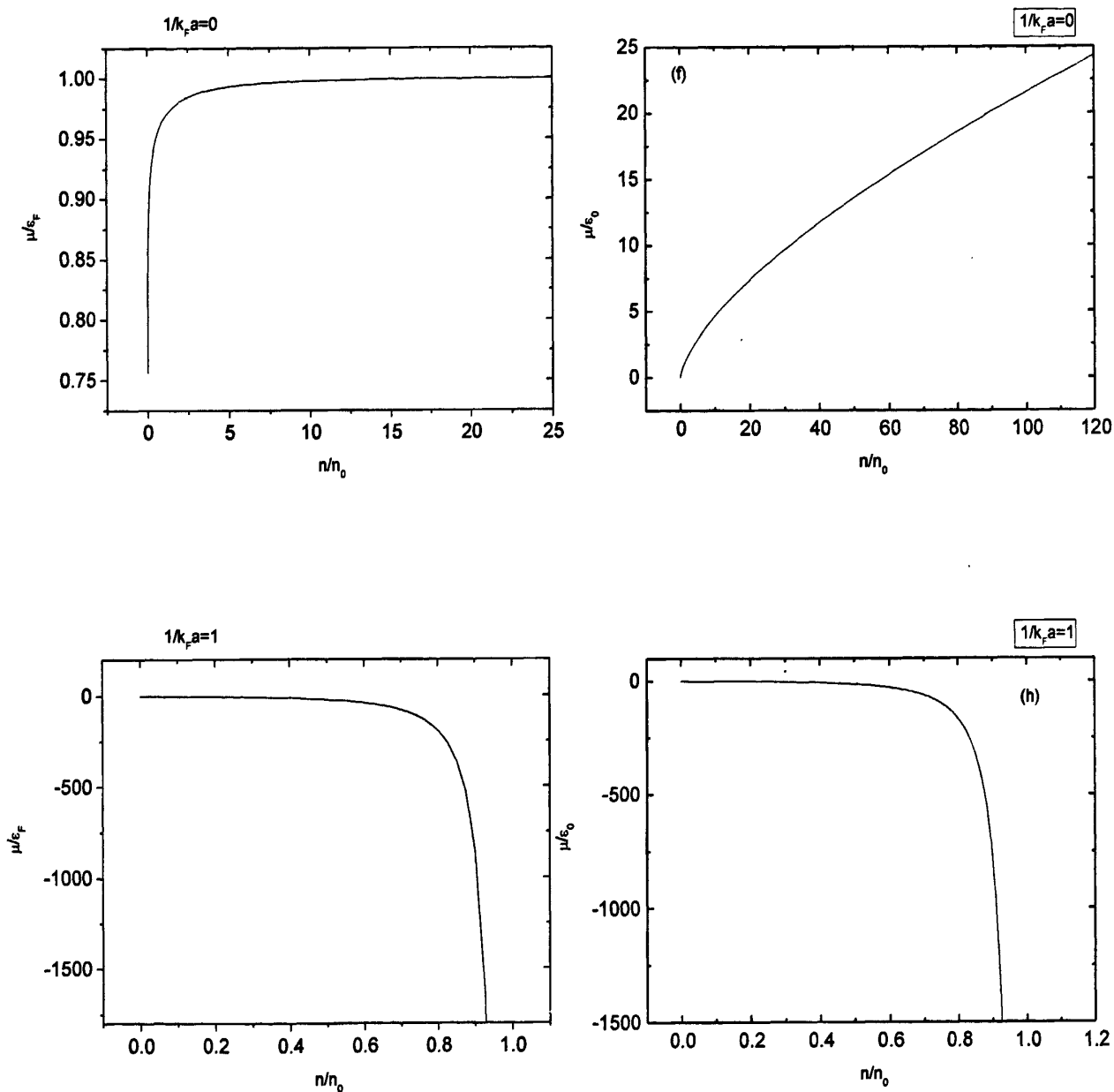


图3.6: 左侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取-2、-1、0、1时, 系统的化学势 (以 ϵ_F 为单位) 随密度 n/n_0 的变化。左侧的图描述了 $1/k_F a$ 分别取-2、-1、0、1时系统的化学势 (以 ϵ_0 为单位) 随密度 n/n_0 的变化。

在图3.5和图3.6中, 其中的 $T_0 = \varepsilon_0/k_B$ 。图3.5中当 $1/k_F a$ 取负值即处在BCS区时, 对不同的 $1/k_F a$ 的值, 超流转变温度随着密度有相同的变化趋势: 转变温度先是随着密度的增加而增加, 随后又随着密度的增加而减小。同时可以看到 $1/k_F a$ 的值越大, 对应的转变温度的值越大。BEC区的转变温度大于BCS区的转变温度。当 $1/k_F a$ 取值为0时, 从图(e)和(f)中可以看出, 超流转变温度随密度的增加先是迅速的增加, 然后又随着密度的增加而减小。但是当 $1/k_F a$ 取值为正时, 超流转变温度则随密度的增加先是缓慢的增加, 当 $1/k_F a$ 达到一定值时开始迅速增加。在图3.6中对不同的 $1/k_F a$ 的取值, 系统的化学势随密度也有不同的变化趋势。当 $1/k_F a$ 取值为负或0时, 化学势为正, 随密度的增加而增加, $1/k_F a$ 的取值越大, 对应的化学势的变化范围越大。当 $1/k_F a$ 取值为正时, 化学势为负, 随着密度的增加而减小, 减小的速度先是平缓变化之后迅速变大。

下面我们来看下对于给定的 k_0/k_F 的值 (即给定的密度的值) 时超流转变温度 \tilde{T}_C 和化学势 $\tilde{\mu}$ 随 $1/k_F a$ 的变化。

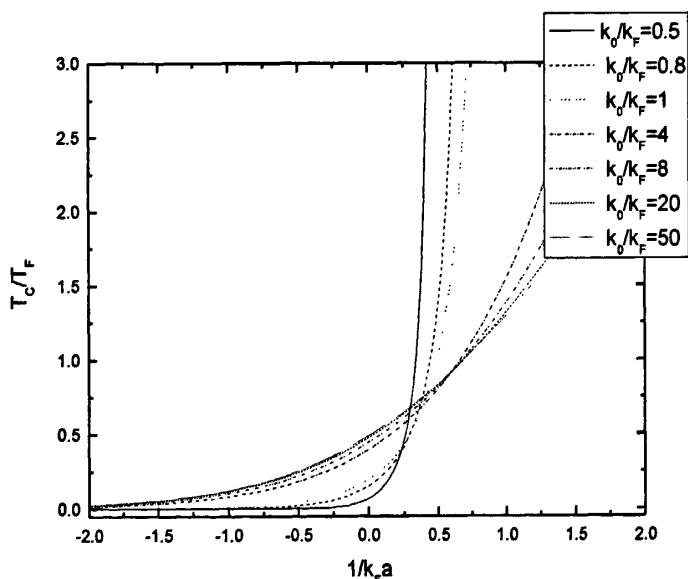


图3.7描述了不同的 k_0/k_F 取值情况下, 超流转变温度 \tilde{T}_C (以 T_F 为单位) 随 $1/k_F a$ (即散射长度) 的变化。

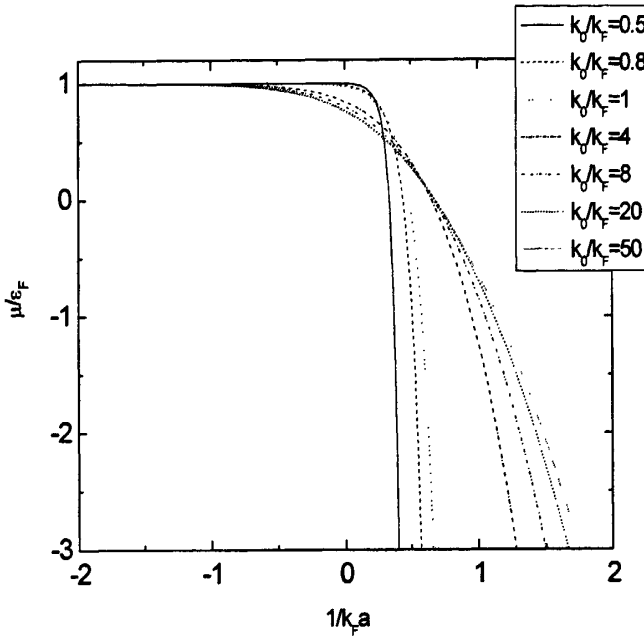
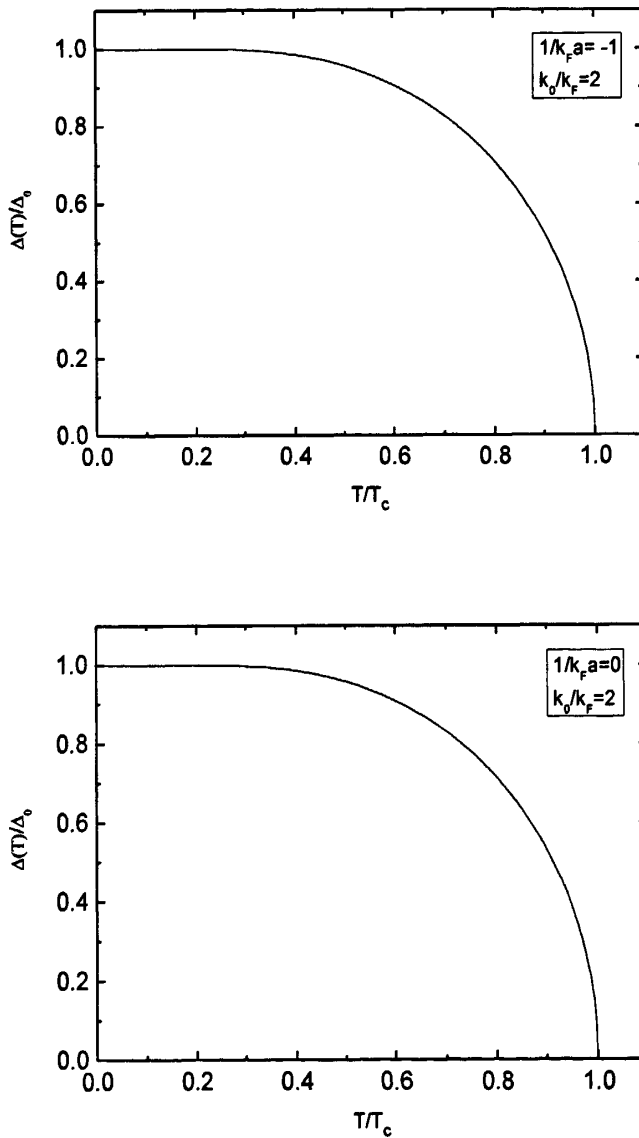


图3.8: 描述了当 k_0/k_F 分别取不同的值时, 化学势 $\tilde{\mu}$ (以 ε_F 为单位) 随 $1/k_F a$ (即散射长度) 的变化。

图3.7和图3.8给出了不同密度情形下超流转变温度和化学势随 $1/k_F a$ (即散射长度) 的变化。从图3.7中可以看出无论是高密度还是低密度情形, 超流转变温度随着 $1/k_F a$ 的变化趋势基本一致, 先是随着 $1/k_F a$ 的增加缓慢的变化, 当 $1/k_F a$ 增加到一定值后开始迅速增加。在 $1/k_F a$ 取零附近所有的曲线几乎交于一点。在 $1/k_F a = 0$ 的左侧, 对于横坐标上某一确定的 $1/k_F a$ 的值所对应的不同 k_0/k_F 的取值, 可以看出 k_0/k_F 的值越大, 对应的转变温度的值越大, 也就是说密度的值越小, 对应的转变温度的值越大。在 $1/k_F a = 0$ 的右侧, k_0/k_F 的值越小, 对应的转变温度的值越大, 即密度越大, 转变温度越大。这就说明在BCS区, 对于超流转变温度来说, 虽然随着密度的增加而增加, 但过高的密度则会抑制超流转变温度的增加。对于化学势来说, 在不同的密度情形下也有几乎相同的变化趋势: 先是随着 $1/k_F a$ 的增加缓慢的减小, 当 $1/k_F a$ 增加到一定值后开始迅速减小。

3.2.3 能隙函数

以上两节考虑的是零温时和温度等于临界温度时的两种极限情形，参考一般对超导体的研究，我们在这一节给出系统的能隙函数，即在温度从零变化到临界温度的过程中（全温度区间）能隙的变化。根据方程 (3.1.17) 和 (3.1.19) 通过数值方法求解，可以得到系统的能隙函数曲线。图 3.9 给出了散射长度分别取负值、零和正值时的能隙随温度的变化曲线。



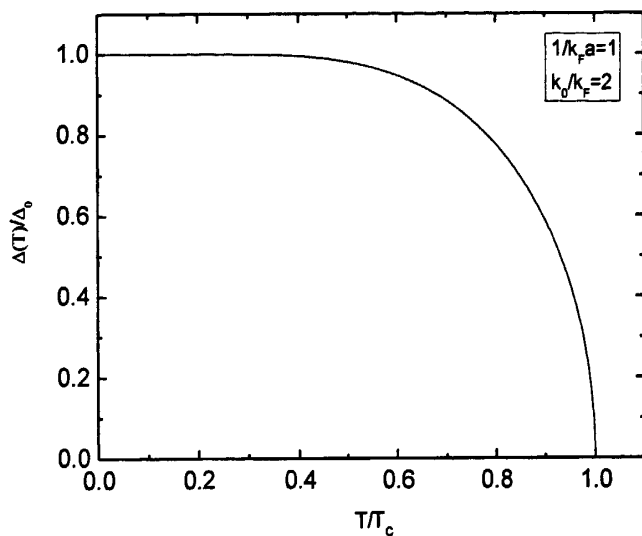


图 3.9 $1/k_F a$ 取 -1、0、1, k_0/k_F 取 2 时, 能隙 $\Delta(T)/\Delta_0$ 随温度 T/T_C 的变化关系。

从图 3.9 中可以看出, 对不同的 $1/k_F a$ 的值, 能隙随温度由相同的变化趋势。而且其能隙 $\Delta(T)/\Delta_0$ 随温度 T/T_C 的变化关系与超导的 S 波配对有相同的变化曲线。

3.2.4 有限温度下高密度费米物质态的热力学行为

接着我们来研究温度从绝对零度变化的超流转变温度时高密度费米物质态的热力学行为。根据热力学统计理论^[45]，将系统的热力学量与粒子系统的哈密顿量联系起来。则系统的热力学势可以写成如下的形式

$$\Omega = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \text{Tr}(\exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}))) \quad (3.2.14)$$

其中

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = H = E_0 + \sum_k E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \quad (3.2.15)$$

其中， H 的 c 数项部分在有限温度下可改写为

$$\sum_k \left(\epsilon_k - \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)} \phi_k^2 + \frac{\Delta^2(T)}{g} \right) \quad (3.2.16)$$

H 中含准粒子算符的部分为

$$-k_B T \ln \text{Tr} \exp \left(-\beta \sum_k E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \right) \quad (3.2.17)$$

由于 $E_{-k} = E_k$ ，并且求和中各项独立，上式可以写为

$$-2k_B T \ln \prod_k \text{Tr} \exp(-\beta E_k \alpha_k^+ \alpha_k) \quad (3.2.18)$$

而

$$\text{Tr} \exp(-\beta E_k \alpha_k^+ \alpha_k) \equiv \sum_n \langle n | \exp(-\beta E_k \alpha_k^+ \alpha_k) | n \rangle \quad (3.2.19)$$

其中 $\alpha_k^+ \alpha_k | n \rangle = n | n \rangle$ ，对于费米子系统 $n = 0, 1$ ，则从上式可算出

$$\text{Tr} \exp(-\beta E_k \alpha_k^+ \alpha_k) = 1 + \exp(-\beta E_k) = (1 - f(E_k))^{-1} \quad (3.2.20)$$

因此式(3.2.18)可写为

$$2k_B T \sum_k \ln(1 - f(E_k)) \quad (3.2.21)$$

因此系统的热力学势可写为

$$\Omega(T) = 2k_B T \sum_k \ln(1 - f(E_k)) + \sum_k \left(\epsilon_k - \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)} \phi_k^2 + \frac{\Delta^2(T)}{g} \right) \quad (3.2.22)$$

系统的能量可写为

$$E(T) = \mu m + \sum_k (\epsilon_k - E_k) - \frac{\Delta^2(T)}{g} + 2 \sum_k E_k f(E_k) \quad (3.2.23)$$

其中 E 表示单位体积的能量。因熵满足下式

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu} \quad (3.2.24)$$

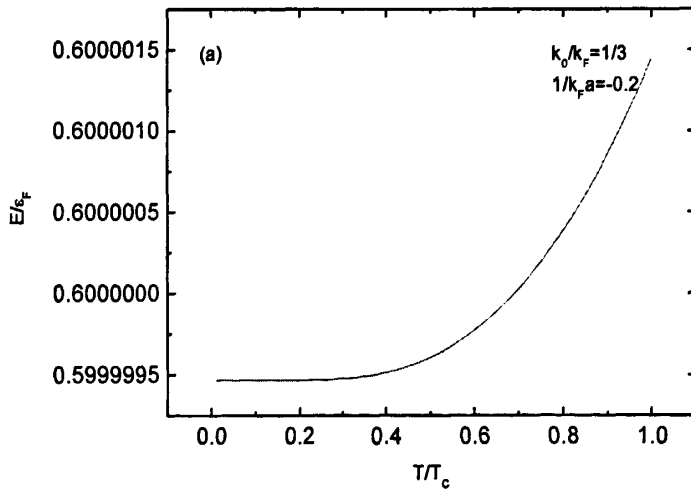
由此可定出系统的熵

$$s(T) = -2k_B \sum_k [(1 - f(E_k)) \ln(1 - f(E_k)) + f(E_k) \ln f(E_k)] \quad (3.2.25)$$

其中 s 表示单位体积的熵。系统的比热

$$\begin{aligned} C &= T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} \\ &= 2\beta^2 k_B \sum_k f(1-f) \left(E_k^2 - \beta(\epsilon_k - \mu) \frac{d\mu}{d\beta} + \frac{1}{2} \beta \phi_k^2 \frac{d\Delta^2}{d\beta} \right) \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

其中既包含化学势所引起比热容的变化，又包含超流能隙所引起的比热容的变化。根据式 (3.2.23)，(3.2.25) 和 (3.2.26) 我们可以得出系统的能量、熵和比热随温度的变化。



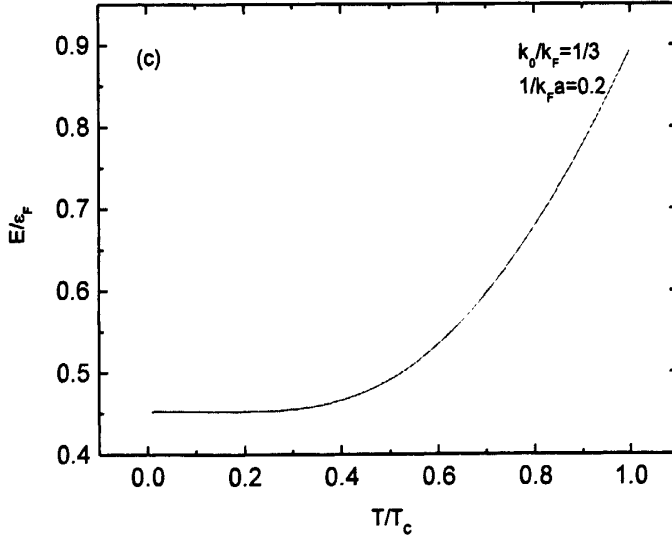
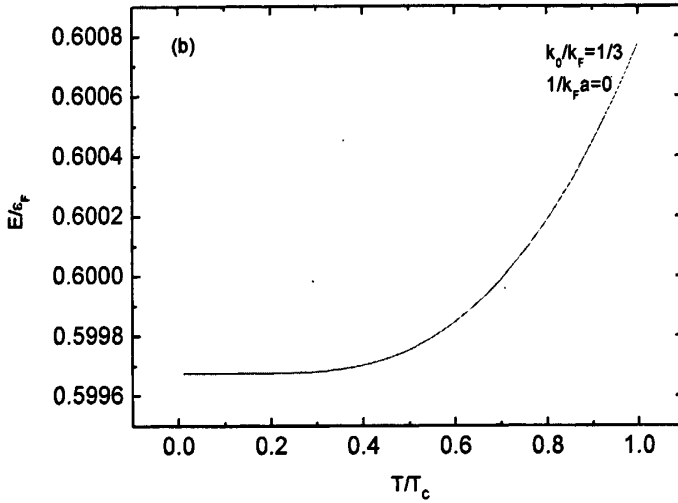
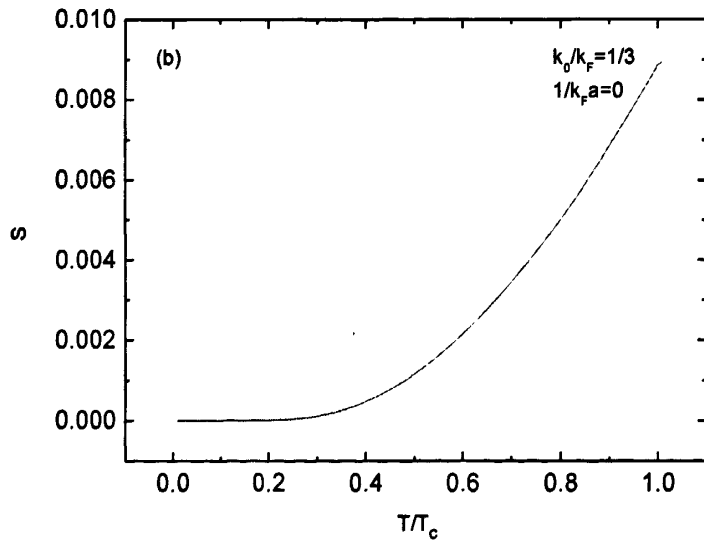
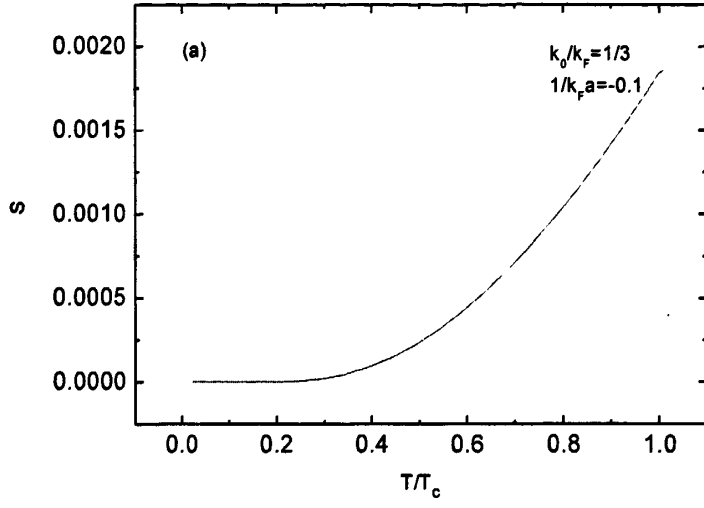


图 3.10 其中的图 a、图 b、图 c 分别给出了在 k_0/k_F 取 $1/3$ (即高密度) 时, $1/k_F a$ 分别取 -0.2 、 0 、 0.2 的情况下系统的能量 (单位体积, 以 ϵ_F 为单位) 随温度的变化。



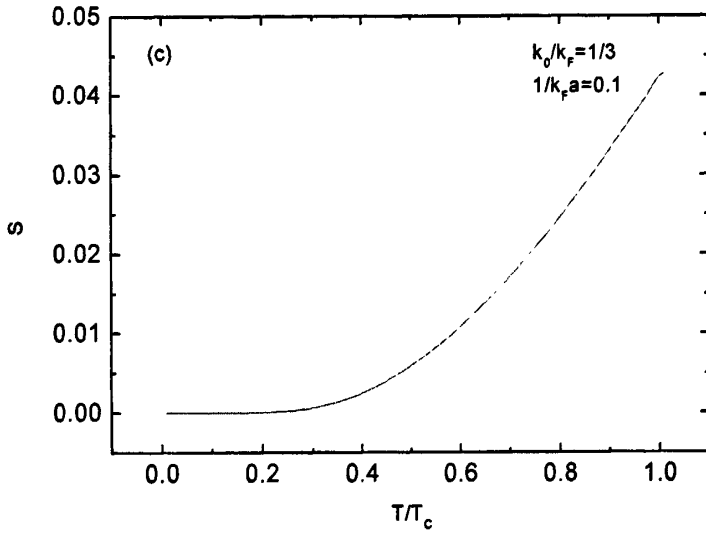
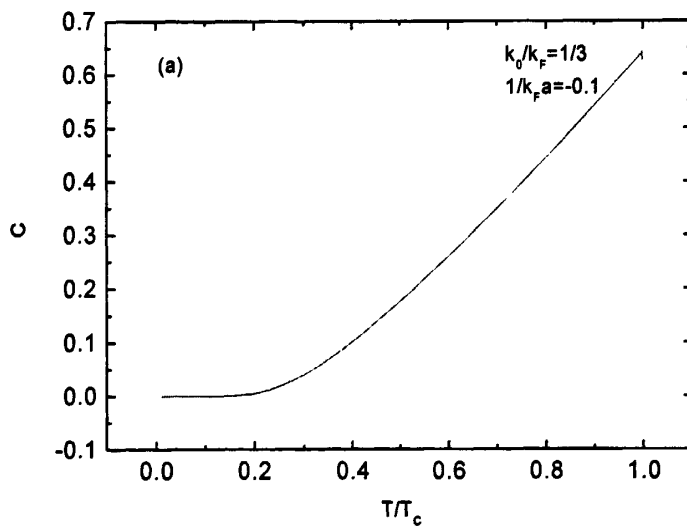


图 3.11 其中的图 a、图 b、图 c 分别给出了 k_0/k_F 取 $1/3$ (即高密度) 时, $1/k_F a$ 分别取 -0.1 、 0 、 0.1 时。系统的熵 (单位体积) 随温度的变化。



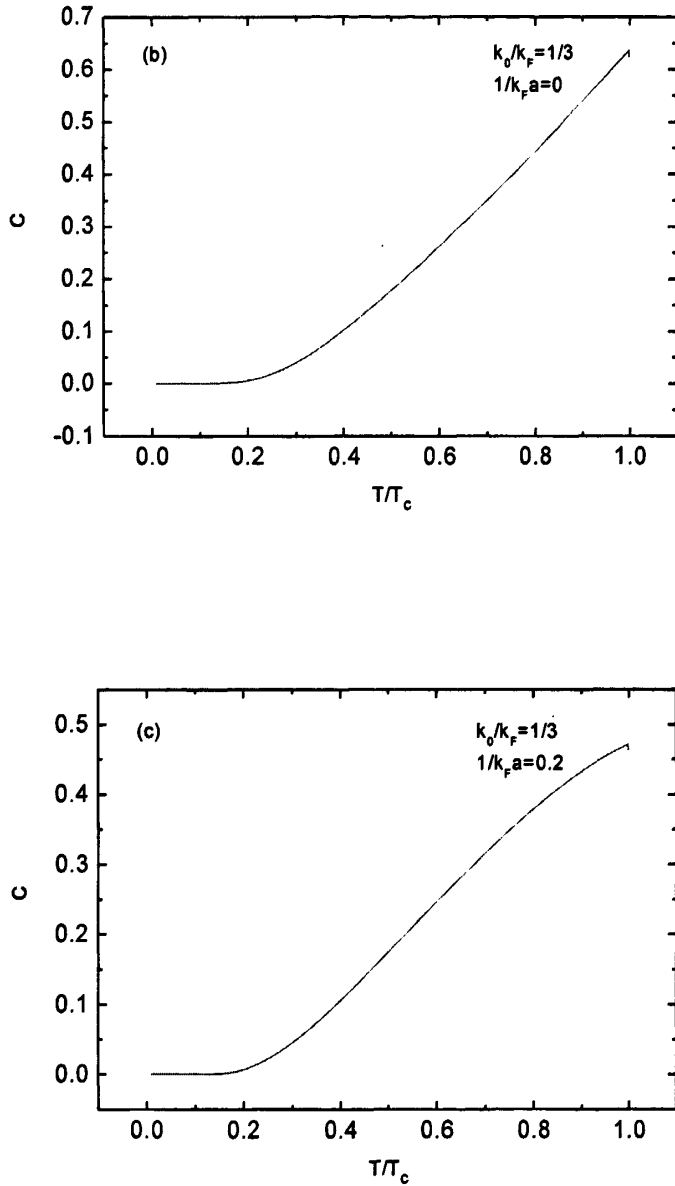


图 3.12 其中的图 a、图 b、图 c 分别给出了 k_0/k_F 取 $1/3$ (即高密度) 时, $1/k_F a$ 分别取 -0.1 、 0 、 0.2 时系统的比热容 (单位体积) 随温度的变化。

从图 3.10、图 3.11 和图 3.12 可以看出高密度费米物质的热力学行为。在温度从 0 变化到 T_c 时, 系统不发生相变, 系统的能量、熵和比热均随着温度单调平滑的增加。在零温时, 三个物理量的值均为零, 在温度很小时变化平缓, 在温度达到某一个温度附近时开

始迅速的增加。从而给出在此系统中的配对为 S 波配对。

3.3 总结

本文利用平均场近似情形下的BCS-BEC渡越理论,建立了绝对零度下决定散射长度、超流能隙、化学势及密度关系的两个方程和有限温度下决定散射长度、超流转变温度、化学势及密度关系的两个方程。固定散射长度或密度,能够研究剩余三个物理量之间的关系,从而可以对高密度费米物质态的超流性进行研究。最后对有限温度情形下高密度费米物质态的热力学行为进行了讨论。

(1) 绝对零度下,固定散射长度时,在 $1/k_F a$ 取值为负时,费米物质态的超流能隙随着密度的增加明显的增加,但当密度增加到一定程度时超流能隙反而随密度的增加而减小,最后趋于平缓, k_0/k_F 越大,对应的超流能隙的值越大。在 $1/k_F a$ 取值为正时,超流能隙随密度平缓的增加后迅速增加, k_0/k_F 越大,对应的超流能隙的值越小。对于系统的化学势来说, $1/k_F a$ 取负值和零时,化学势取正值,随密度的增加而增加。 $1/k_F a$ 取正值时化学势取负值,随着密度先是平缓的减小,之后迅速减小。固定密度时,在 $1/k_F a$ 取零附近时,不同的密度的超流能隙的变化曲线交于一点,在 $1/k_F a$ 取零的两侧,不同密度对应的超流能隙随 $1/k_F a$ 的变化趋势进一步的反应了图3.1中得出的结论。对应系统的化学势来说,化学势则随着 $1/k_F a$ 增加而减小, k_0/k_F 的值越小对应的化学势越大。当 $1/k_F a$ 为正值(即散射长度取正值)时,化学势取负值, k_0/k_F 取值越大对应的化学势的值越大。也进一步说明了图3.2中化学势随密度的变化情形。

(2) 有限温度 $T=T_C$ 情形下,固定散射长度时, $1/k_F a$ 取正值和负值时所对应的超流转变温度随密度有不同的变化趋势。 $1/k_F a$ 取负值和零时,超流转变温度随着密度在经过迅速增加的过程后开始减小,最后趋于平缓。在 $1/k_F a$ 取正值时,超流转变温度在经过平缓的增加后开始迅速增加。对于化学势来说,在 $1/k_F a$ 取负值和零时,随着密度增加。在 $1/k_F a$ 取正值时随密度平缓的变化后迅速减小。固定密度时,超流转变温度在高密度和低

密度情形均随 $1/k_F a$ 的增加先是缓慢的变化,到达某一点时开始迅速变化。对于化学势来说,先是随着 $1/k_F a$ 的增加缓慢的减小,到达某一点时开始迅速的减小。在BCS区, k_0/k_F 的值越大,对应的转变温度的值越大,也就是说密度的值越小,对应的转变温度的值越大。在BEC区, k_0/k_F 的值越小,对应的转变温度的值越大,即密度越大,转变温度越大。这就说明在BCS区,对于超流转变温度来说,虽然随着密度的增加而增加,但过高的密度则会抑制超流转变温度的增加。对于化学势来说,在不同的密度情形下也有几乎相同的变化趋势:先是随着 $1/k_F a$ 的增加缓慢的减小,当 $1/k_F a$ 增加到一定值后开始迅速减小。在温度取绝对零度和超流转变温度之间的值时,高密度费米物质态的能量、熵和比热在不同的 $1/k_F a$ 情况下随温度的变化有相同的变化趋势。其变化趋势均随温度的增加而增加。

(3) 本文所做的工作给出了高密度费米物质态的超流特性及有限温度情形下的热力学特性,对于高密度的核物质和中子星内部超流情形的研究有了一定的启示作用。但由于本工作是在平均场近似下做的,并未考虑到粒子间的配对涨落,所以给出的超流转变温度严格意义上只是粒子间开始出现配对的温度,并不是出现超流现象的温度,在图3.5和3.7中温度随着密度和 $1/k_F a$ 的增加最后出现了不可思议的很大的值。今后要做的工作要在考虑配对涨落的基础上展开,即在平均场近似下得到的两个方程的基础上再加入赝隙方程,从而将配对出现时的温度与超流出现时的温度即超流转变温度区分开来。

参考文献

- [1] Eagles D M, Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors, *Phys. Rev.*, 1969, 186(2): 456-463.
- [2] Leggett A J, *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, edited by A. Pekalski and J. Przystawa., Springer-Verlag :Berlin, 1980, 13-27.
- [3] O'Hara K M, Hemmer S L, Gehm M E, et al. Observation of a Strongly Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms, *Science*, 2002, 298(5601): 2179-2182.
- [4] Jochim S, Bartenstein M, Altmeyer A, et al. Bose-Einstein Condensation of Molecules, *Science*, 2003, 302(5653): 2101-2103.
- [5] Greiner M, Regal C A, Jin D S, Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas, *Nature*, 2003, 426(6966): 537-540.
- [6] Zwierlein M W, Stan C A, Schunck C H, et al. Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91(25): 250401.
- [7] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, et al. Crossover from a Molecular Bose-Einstein Condensate to a Degenerate Fermi Gas, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(12): 120401.
- [8] Regal C A, Greiner M, Jin D S, Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(4): 040403.
- [9] Zwierlein M W, Stan C A, Schunck C H, et al. Condensation of Pairs of Fermionic Atoms near a Feshbach Resonance, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(12):120403.
- [10] Kinast J, Hemmer S L, Gehm M E, et al. Evidence for Superfluidity in a Resonantly Interacting Fermi Gas, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(15):150402.
- [11] Bourdel T, Khaykovich L, Cubizolles J, et al. Experimental Study of the BEC-BCS Crossover Region in Lithium 6, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93(5): 50401.
- [12] Part ridge GB, St recker K E, Kamar R I, et al, Preprint cond-mat/ 0505353.
- [13] Yi Yu, Q.J. Chen, Superfluidity in atomic Fermi gases, *Physica. C*, 2010, 470:s900-s903.
- [14] 汪志诚, *热力学统计物理*, 北京, 高等教育出版社, 2006: 298-317.
- [15] 熊宏伟, 吕宝龙, 刘淑娟, 詹明生, 超冷费米气体研究的新进展, *物理学进展*, 2005,25(3): 296-316.

- [16] 张礼, 费米原子对的玻色-爱因斯坦凝聚, 物理与工程, 2005, 1(1): 6-9.
- [17] DeMarco B, Jin D S, Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas, *Science*, 1999, 285(5434): 1703-1706.
- [18] H.Feshbach, *Theoretical Nuclear Physics*, New York, Wiley, 1992
- [19] Stwalley W C, Stability of Spin-Aligned Hydrogen at Low Temperatures and High Magnetic Fields: New Field-Dependent Scattering Resonances and Predissociations, *Phys. Rev. Lett*, 1976, 37(24):1628-1631.
- [20] E.Tiesinga, B.J.Verhaar and H.T.C.Stoof, Threshold and resonance Phenomena in ultracold ground-state collisions, *Phy. Rev*, 1992, A47: 4114-4122.
- [21] A.J. Moerdijk, B.J. Verhaar and A. Avelsson, Resonances in Untracold Collisions of 6Li , 7Li , and 23Na , *Phy. Rev*, 1995, A51:4852.
- [22] S. Inouye, Pfau T, Gupta S , et al. Phase-coherent amplification of atomic matter waves, *Nature*, 1998 , 402 (6762):641-644.
- [23] Chu S, Hollberg L, Bjorkholm J E, et al, Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure, *Phy. Rev. Lett*, 1986, 55(1):48-51.
- [24] Kasebich M, Chu S, Laser Cooling Below a Photon Recoil with Three-level Atoms, *Phy. Rev. Lett*, 1992, 69(12):1741-1744.
- [25] Ashkin A, Trapping of Atoms by Resonance Radiation Pressure, *Phy. Rev. Lett*, 1978, 40(12):729-723.
- [26] D.G. Yakovlev, K.P. Levenfish, and Yu A. Shibanov, *Phys. Usp*, 1999, 825:169.
- [27] I. Bombaci, EOS for Dense Isospin Asymmetric Nuclear Matter For Astrophysical Applications in the book *Isospin Physics in Heavy-Ion Collisions at Intermediate Energies*, edited by B. A. Li, and W. U. Schroder, Nova. Science Publishers, Inc, New York, 2001.
- [28] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, 3rd ed. Perseus Books, Reading, MA, 1983.
- [29] Cooper L N. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas, *Phys. Rev*, 1956, 104:1189.
- [30] Q.J. Chen, Generalization of BCS theory to short coherence length superconductors: A BCS-Bose-Einstein crossover scenario, Ph.D Dissertation, Chicago, University of Chicago, 2000.
- [31] Renyuan Liao, Fermi pair and BCS-BEC crossover in novel System, Kent, Kent state university, 2008, 14-19.

- [32] Cote R, Griffin A, Cooper pair-condensate fluctuations and plasmons in layered superconductors, *Phys. Rev. B*, 1993, 48:10404-10425.
- [33] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp, Bose Condensation in an Attractive Fermion Gas: From Weak to Strong Coupling Superconductivity, *J. Low Temp. Phys*, 1985, 59: 195-211.
- [34] Q.J. Chen, J. Stajic, S.N. Tan, K. Levin, BCS-BEC crossover: From high temperature superconductors to ultracold superfluids, *Phys. Rep*, 2005, 412: 1-88.
- [35] S Schmitt, C.M. Varma, and A.E. Ruckenstein, Pairing in two dimensions, *Phys. Rev. Lett*, 1989, 63: 445-448.
- [36] R. Haussmann, Crossover from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation: A self-consistent theory, *Z. Phys. B*, 1993, 91:291.
- [37] R. Haussmann, Properties of a Fermi liquid at the superfluid transition in the crossover region between BCS superconductivity and Bose-Einstein condensation, *Phys. Rev. B*, 1994, 49: 12975-12983.
- [38] B. Janko, J. Maly, and K. Levin, Pseudogap effects induced by resonant pair scattering, *Phys. Rev. B*, 1997, 56: R11407-R11410.
- [39] J. Maly, B. Janko, and K. Levin. Superconductivity from a pseudogapped normal state: A mode-coupling approach to precursor superconductivity, *Phys. Rev. B*, 1999, 59: 1354-1357.
- [40] J. Maly, B. Janko, and K. Levin, Numerical studies of the s-wave pseudogap state and related T_c : the "pairing approximation" theory, *Physica C*, 1999, 321:113.
- [41] Chin C, Bartenstein M, Altmeyer A, et al. Observation of the Pairing Gap in a Strongly Interacting Fermi Gas, *Science*, 2004, 305(5687): 1128-1130.
- [42] Kinnunen J, Rodriguez M, Torma P, Pairing Gap and In-Gap Excitations in Trapped Fermionic Superfluids, *Science*, 2004, 305(5687): 1131-1133.
- [43] Zwierlein M W, Abo-Shaeer J R, Schirotzek A, et al. Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas, *Nature*, 2005, 435(7045): 1047-1051.
- [44] 李正中, 固体理论, 北京, 高等教育出版社, 2002.
- [45] A.L 费特, J.D 瓦立克, 多粒子系统的量子理论, 科学出版社, 1984.

附录：作者已发表和待发表的文章目录

- [1] 杨婷婷, 高密度费米气体的超流特性研究 (准备中)