

强关联费米气体的高温热力学性质^{*}刘夏姬¹ 胡辉^{1, 2, †} Drummond Peter D¹

(1 澳大利亚量子原子光学中心 澳大利亚斯温伯尔理工大学原子光学和超快光谱中心 墨尔本 3122)

(2 中国人民大学物理系 北京 100872)

摘要 文章首先简要评述了目前强关联超冷费米原子体系的研究现状. 由于缺少严格解和小相互作用参数, 强关联的量子气体一直缺乏清晰的理解. 在该项研究工作中, 文章作者提出了一种系统的维里级数展开方法来研究强相互作用费米气体在高温下的热力学行为. 方法中的控制小参量是逸度, 即 $\exp(\mu/k_B T)$, 其中 μ 是体系的化学势. 文章提出了一种实用的方法去计算均匀或势阱束缚下的费米气体的维里展开系数, 并首次精确得到了第三维里系数. 文章将计算得到的热力学状态方程与最近的实验测量及量子蒙特卡罗模拟结果进行了比较.

关键词 强关联费米气体, 高温热力学性质, 维里展开, 第三维里系数

High-temperature thermodynamics of a strongly correlated Fermi gas

LIU Xia-Ji¹ HU Hui^{1, 2, †} Drummond Peter D¹

(1 ACQAO, Centre for Atom Optics and Ultrafast Spectroscopy, Swinburne University of Technology, Melbourne 3122, Australia)

(2 Physics Department, Renmin University of China, Beijing, 100872, China)

Abstract We briefly review current research progress in the field of strongly correlated atomic Fermi gases. A deep understanding of strongly correlated quantum gases is plagued by the lack of either exact solutions or a controllable small interaction parameter. In this work, we present a systematic virial expansion method to study the high-temperature thermodynamics of a strongly correlated Fermi gas, where the controllable parameter is given by the fugacity, $\exp(\mu/k_B T)$, with μ being the chemical potential. A practical way is proposed to obtain the expansion coefficients for both homogeneous and harmonically trapped Fermi gases. We calculate, for the first time accurately, the third-order virial coefficient. The resulting equation of states at high temperatures is compared with a recent thermodynamic measurement and with Monte Carlo simulations.

Keywords strongly-correlated Fermi gas, high-temperature thermodynamics, virial expansion, third-order virial coefficient

1 引言

强关联费米系统的研究一直是令人感兴趣的课题, 也是现代物理中的难点问题. 在现实生活中, 这种系统普遍存在: 小到强子, 夸克, 大到中子星都是强关联的费米系统. 让人特别着迷并困惑的高温超

导体也是强关联费米系统一个典型代表. 最近几年, 在冷原子领域, Feshbach 共振技术的实现开辟

* ARC Discovery Grants (DP0984637, DP0984522)、国家自然科学基金(批准号: 10774190)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2006CB921404, 2006CB921306)资助项目

2009-07-06 收到

† 通讯联系人. Email: huihu@ruc.edu.cn

了一条研究强关联费米子系统的新途径. 利用共振技术, 实验科学家们能通过调节磁场来任意改变原子之间的相互作用; 比如, 原子间的散射长度(它是用来表征相互作用强度的物理量)可以从负值调到正值, 甚至是正负无穷大(这个极限情况称为么正极限“unitarity limit”). 随着这个调节过程, 在极低温度下两组分(即自旋 1/2)费米气体的基态可以从长程关联的库珀对的 BCS (Bardeen - Cooper - Schrieffer) 超流状态过渡到紧束缚对(或分子)的玻色-爱因斯坦凝聚态 BEC (Bose-Einstein condensation)^[1]. 这就是我们通常所说的 BCS-BEC 渡越交叉现象. 在过渡区域, 费米气体处于非常强的相互作用下, 并展现出一些奇异的性质. 这个过渡区域的研究将有助于人们理解谜一样的高温超导现象, 能够在地球上小小实验室中模拟几十万光年外中子星内部发生的事情, 并可能揭示人们所未知的物理机制.

整个过渡区域中最让人感兴趣的是散射长度趋于无穷大的么正极限. 由于散射长度趋于无穷大, 所以它不在体系的描述过程中出现; 换言之, 在么正极限下, 我们可以只用一个特征尺度来描述体系的性质, 即原子间的距离. 因此在这种极限下, 体系将展示出一种有趣的普适性标度行为^[1,2]. 可是, 由于缺少严格解和小的相互作用参量(因此, 标准微扰理论的适用性也就存在质疑), 人们对其深刻本质的理解存在困惑. 另外, 数值计算的方法也不如人们预期的那样有帮助. 特别是对量子蒙特卡罗模拟方法来说, 由于臭名昭著的费米子符号问题的存在, 无法预言准确的物理结果^[3-5].

从 2003 年起, 这个领域的实验进展迅猛. 目前有 8 个实验组实现了 BCS-BEC 渡越交叉现象, 并给出非常漂亮的观测结果: 动量分布^[6]、密度^[7]、相互作用能^[8]、量子涡旋态^[9]、集体激发模式^[10]、分子的观测^[11]、布拉格散射谱^[12]和转变温度的测量^[13]等等. 这些实验结果迫切需要理论理解, 从而给理论工作者一个巨大挑战^[1]. 这里的难点问题: 如何找到一个在 BCS-BEC 渡越交叉区域可控制从而可靠的理论描述?

最近, 我们提议, 在适当的温度区域, 半经典的维里级数展开可以提供是一个非常可靠的理论描述. 在这里, 可控的小参量是体系的“易逸度”, 即 $z = \exp(\mu/k_B T)$, 这里 μ 是体系的化学势, T 是温度, k_B 是玻尔兹曼常数. 在温度非常高时, 化学势以对数方式趋于负无穷大, 所以易逸度 z 将是一个远

小于 1 的量. 因此, 体系的所有物理量将可以展开成为易逸度的一个收敛级数. 这个想法最早是由何天伦和他的合作者在 2004 年应用到冷原子领域^[14]. 在他们的先驱工作中, 维里级数展开到第二阶, 已知的第二维里系数被用来探讨了均匀费米气体在么正极限下的高温热力学性质. 强相互作用量子气体的高阶维里系数是非常让人感兴趣的, 但是在理论上异常难求.

在这项研究工作中, 我们提出了一个非常实用的方法去计算均匀或势阱束缚下的费米气体的维里展开系数, 并首次精确得到了第三维里系数. 基于这些系数, 我们计算了么正极限下费米气体的热力学状态方程, 并将理论结果和最近的实验结果和量子蒙特卡罗模拟结果进行了比较. 我们的理论预言和实验结果符合很好. 我们预期, 这项工作将提供一个探讨强相互作用量子气体在正常状态下异常行为的有力工具. 这个研究结果已发表在 2009 年 4 月 24 日的物理评论快报上^[15].

2 模型和结果

让我们考虑热力学势 $\Omega = -k_B T \ln Z$, 这里 $Z = \text{Tr} \exp[-(H - \mu N)/k_B T]$ 是巨配分函数. 进一步, 我们定义 n 粒子配分函数 $Q_n = \text{Tr}_n[\exp(-H/k_B T)]$, 这里 Tr_n 表示对 n 个粒子的所有量子状态求迹. 在高温下, 易逸度 $z = \exp(\mu/k_B T)$ 将是小量. 我们可以将巨配分函数展开为 z 的级数形式: $Z = 1 + zQ_1 + z^2Q_2 + \dots$. 相应地, 我们也可以将热力学势表示为 z 的级数形式:

$$\Omega = -k_B T Q_1 [z + b_2 z^2 + \dots + b_n z^n + \dots]. \quad (1)$$

在上式中, 我们定义了 n 阶维里系数 b_n . 将巨配分函数的级数展开式代入到热力学势的定义中(即 $\Omega = -k_B T \ln Z$), 我们可以立即得到维里系数的表达式($b_1 \equiv 1$):

$$\begin{aligned} b_2 &= (Q_2 - Q_1^2/2)/Q_1 \\ b_3 &= (Q_3 - Q_1 Q_2 + Q_1^3/3)/Q_1 \\ &\dots \end{aligned} \quad (2)$$

上述维里系数的定义是非常普遍的, 不但适合于均匀体系, 同时也适用于外势束缚下的体系. 根据表达式, 很容易看到, 为了求第 n 阶维里系数, 不可避免地需要求出 n 个粒子体系的所有能量本征值(为了求出 Q_n). 这在物理上是非常容易理解的: 在温度非常高的情况下, 粒子间的相互作用或统计(相互)作用可以忽略不计, 这时, 在维里级数展开中只

需保留首项就可以. 随着温度的降低, 我们需要逐渐计入相互作用或统计作用, 首先是两体, 然后是三体、四体, 依次增加, 这就意味着需要保留越来越多的维里展开项. 当温度降低达到一定程度时, 必须考虑任意粒子间的关联(比如 $n \rightarrow \infty$), 这时体系就进入了超流状态. 从这可以看出, 根据维里展开, 我们可以对强相互作用的量子气体在正常态的性质(如两体对关联、三体关联等等)做出理解. 这些少体关联效应有时会引起一些很独特异常的物理现象.

在目前的实验中, 为了防止原子逃逸, 强相互作用的费米气体必须要束缚在一个谐振子势阱中(通常是光阱). 针对这个实际情况, 我们考虑了体系在频率为 ω 的各向同性谐振子势阱下的第二维里系数和第三维里系数. 这需要严格求解两粒子和三粒子在谐振子势阱中本征态和本征值问题, 然后计算两粒子和三粒子的配分函数(Q_2 和 Q_3). 两粒子的解比较简单, 文献中已有充分探讨, 三粒子体系的解则非常复杂. 我们给出了所有受相互作用影响的三粒子本征态的通解形式和求解过程. 具体的少粒子哈密顿量和解法可参见文献[15]. 在图 1 中, 我们给出了三粒子体系在角动量 $l=1$ 的子空间中相对能谱结构随散射长度的变化情况. 在实际计算中, 对三粒子问题, 我们考虑了几十个角动量的子空间, 并在每个子空间中计算成千上万个能级, 每个能级的计算相对精度小于 10^{-6} .

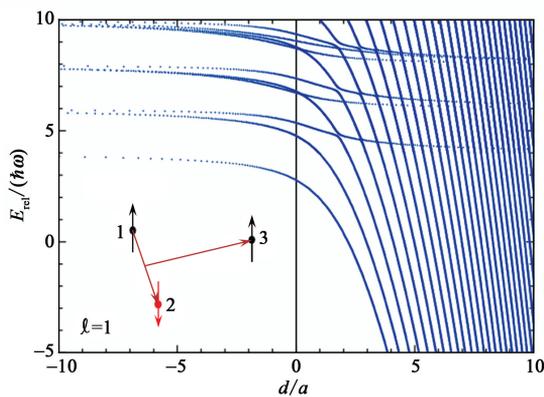


图 1 三费米子(两个自旋向上, 一个自旋向下, 如插图所示)体系在角动量 $l=1$ 子空间的相对能谱图. 这里, 我们没有计入三个粒子的总质心能量. 第三个粒子围绕粒子 1 和 2 所构成对的转动角动量是好量子数. 体系基态具有角动量 $l=1$, 所以图中能量最低的那个能级是体系的基态能级. 随着相互作用的增强, 即散射长度 a 的倒数 d/a 从负无穷大变为正无穷大(这里 $d = \sqrt{2\hbar/m\omega}$ 是谐振子势阱的特征长度), 能谱从简单的结构(即无相互作用极限)开始, 变得趋于复杂

在此基础上, 我们计算了谐振子势中费米气体的

第二和第三维里系数. 图 2 展示了第二和第三维里系数在不同温度下, 随相互作用强度的变化关系. 按定义, 维里系数会强烈依赖于温度. 为了显示这个依赖关系, 我们考虑了粒子数 $N=100$ 的费米气体, 并定义了相应的费米简并温度 $T_F = (3N)^{1/3} (\hbar\omega/k_B)$ 和费米波矢 $k_F = (24N)^{1/6} / (d/\sqrt{2})$. 相互作用强度可以用一个无量纲的量 $1/(k_F a)$ 来表征. 通常来说, 强相互作用的 BCS - BEC 过渡交叉区域对应于 $-1 < 1/k_F a < 1$. 我们看到, 随着相互作用的增强, 第二维里系数增加而第三维里系数减少. 在图 2 中, 为了只显示相互作用的影响, 我们在维里系数中减掉了无相互作用情况下的相应维里系数 $b_n^{(1)}$ (即减除无相互作用情况下由于统计效应而引起的维里系数贡献). 图中很明显的-一个特点是, 维里系数在么正极限下对温度基本没有依赖关系. 这是么正极限下体系具有普适性标度关系的一个特征. 特别是对第三维里系数来说, 我们发现 $b_{3,\infty} - b_{3,\infty}^{(1)} \approx -0.06833960 + O(N^{-2/3})$. 第二项是有限大小势阱效应带来的对普适标度关系的修正, 它会随着体系粒子数的增加以 $N^{-2/3}$ 的形式迅速消失.

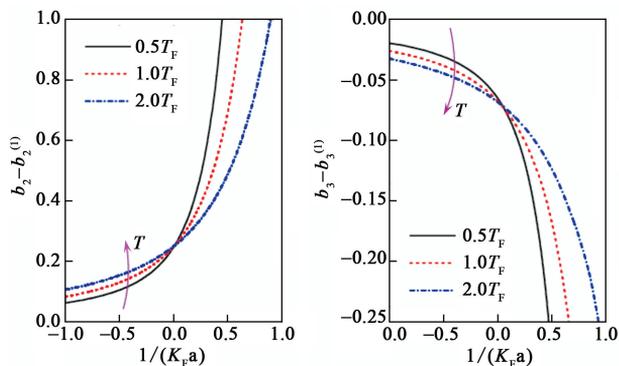


图 2 在不同温度下, 第二和第三维里系数随相互作用强度的变化图

进一步, 根据得到的谐振子势阱下的维里系数, 我们可以利用公式(1)中的热力学势, 根据标准热力学关系 $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)_T$ 来确定体系的易逸度或化学势, 并根据公式 $S = -(\partial\Omega/\partial T)_\mu$ 来求出体系的熵. 进而, 我们可以根据 $E = -\Omega + \mu N + ST$ 来计算体系的总能量. 在么正极限下, 我们计算了相互作用能(即总能量除去相应的无相互作用体系的能量)和熵的关系, 并将我们的理论预言和最近的杜克(Duke)大学实验测量结果进行了比较, 见图 3. 通过比较, 我们发现理论很好解释了在温度低于费米简并温度(见图中箭头所示)时的若干实验测量数据. 这说明对势阱中强相互作用的费米气体, 维里展开

即使在温度低于简并温度时仍然适用. 这是一个非常有趣的发现, 因为通常情况下, 维里展开必须在远高于费米简并温度时成立.

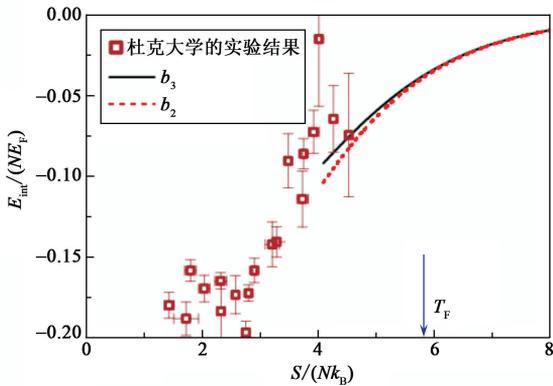


图3 么正极限下束缚在势阱中的费米气体状态方程. 理论预言(实线)和实验结果(方形符号)符合很好

为了理解这个现象, 我们对势阱进行了局域密度泛函近似处理. 我们发现由于谐振子势阱的高态密度, 势阱中维里系数相对于均匀体系的维里系数来说, 将大为减小. 这导致势阱中的维里级数展开收敛很快, 因此即使在温度低于费米简并温度时, 维里级数展开仍然有效. 定量地说, 我们发现, 在么正极限下, $b_{n,\infty} = b_{n,\infty}^{\text{hom}} / \sqrt{n}$, 其中 $b_{n,\infty}^{\text{hom}}$ 是均匀体系在么正极限下的第 n 维里系数.

由此, 我们容易得到均匀费米气体在么正极限下的第三维里系数: $b_{3,\infty}^{\text{hom}} = -0.29095295$. 这个结果和已有的利用有效场论方法得到的结果(Rupak的结果, 见文献[16])是不一致的, 甚至连符号也相反. 对么正极限下的高温相互作用能, 我们将我们的理论预言、Rupak的结果和最新的量子蒙特卡罗(QMC)模拟结果^[3,5]进行了比较, 见图4. 我们发现我们的理论结果和量子蒙特卡罗模拟符合很好, 而Rupak的预言和量子蒙特卡罗模拟差别较大.

3 结论¹⁾

综上所述, 利用半经典的维里系数级数展开方法, 我们研究了在费米简并温度附近强关联冷费米气体的热力学行为. 我们给出了一种非常有效的计算束缚势阱和均匀体系的高阶维里系数的方法, 并应用这个方法首次计算了强相互作用费米气体的第三维里系数. 我们的理论结果很好地解释了在费米简并温度左右的实验测量数据. 更多高阶维里系数的计算将有助于理解强相互作用费米气体在正常态

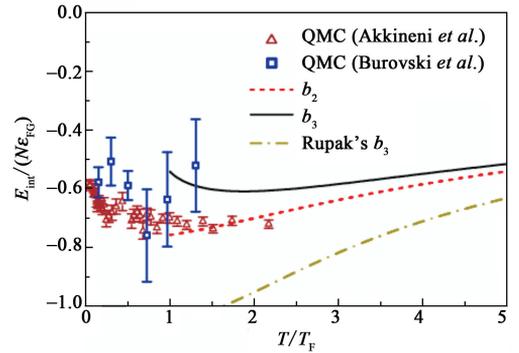


图4 么正极限下均匀费米气体的相互作用能. 我们对维里展开理论预言、最新的量子蒙特卡罗模拟和以往Rupak的结果进行了比较

下的行为. 我们期望, 维里级数方法将提供理解强相互作用量子气体的一个有效手段.

值得指出, 目前并没有温度高于费米简并温度的实验测量结果. 量子蒙特卡罗模拟结果在高温时也存在较大的数值误差. 我们严格的高温维里结果对验证量子蒙特卡罗模拟结果的准确性和理解进一步的实验结果, 有着非常重要的意义.

参考文献

- [1] Giorgini S, Pitaevskii L P, Stringari S. *Rev. Mod. Phys.* 2008, 80: 1215
- [2] Hu H, Drummond P D, Liu X J. *Nature Physics*, 2007, 3: 469
- [3] Akkineni V K, Ceperley D M, Trivedi N. *Phys. Rev. B* 2007, 76: 165116
- [4] Bulgac A, Drut J E, Magierski P. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 090404
- [5] Burovski E *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 160402
- [6] Regal C A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95: 250404
- [7] Bartenstein M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 120401
- [8] Bourdel T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 050401
- [9] Zwierlain *et al.* *Nature (London)*, 2005, 435: 1047
- [10] Kinast J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 150402; Bartenstein M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 203201
- [11] Partridge G B *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95: 020404
- [12] Veeravalli G *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 250403
- [13] Inada Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 180406
- [14] Ho T L, Mueller E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 160402
- [15] Liu X J, Hu H, Drummond P D. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 160401
- [16] Rupak G. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98: 090403
- [17] Nascimbene S *et al.* *Nature*, 2010, 463: 1057

1) 2009年11月, 法国巴黎高等师范学校的Salomon实验小组精确测量了温度高于费米简并温度时强相互作用费米气体的状态方程. 在他们发表在*Nature*系列杂志的预印本文章中^[17], 对我们的工作做了大幅度的专门引用, 指出实验测量准确地验证了我们预言的第三维里系数. 实验测量也给出了第四维里系数的实验值. 文章表明, 第四维里系数的理论值可按照我们提出的方法进行计算