

旋量玻色-爱因斯坦凝聚体中的极化子

尹禹璵 刘波扬

(北京工业大学物理与光电工程学院理论物理研究所, 北京 100124)

摘要 本文研究了自旋杂质浸入到自旋为 1 的旋量玻色-爱因斯坦凝聚体中所形成的极化子现象。利用 Fröhlich 哈密顿量模型, 我们分别计算了弱耦合区和强耦合区中极化子的基态能量与有效质量。在弱相互作用区, 我们采用二阶微扰理论进行处理; 而在强耦合区, 我们构造了极化子态的解析近似解并使用变分法计算极化子的能量和有效质量。此外, 我们还对旋量玻色-爱因斯坦凝聚体中极化子效应的可观测特征进行了定量估算, 以供未来实验参考。

关键词 自旋杂质; 旋量玻色-爱因斯坦凝聚体; 自陷态转变; 二阶微扰理论

POLARONS IN SPINOR BOSE-EINSTEIN CONDENSATES

YIN Yucong LIU Boyang

(Institute of Theoretical Physics, School of Physics and Optoelectronic Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124)

Abstract This study investigates the polaron states formed by an impurity immersed in a spin-1 spinor Bose-Einstein condensate. Employing the Fröhlich Hamiltonian framework, we systematically calculated the ground-state energy and effective mass of polarons in both weak-coupling and strong-coupling regimes. For the weakly interacting regime, the analysis was conducted using second-order perturbation theory. In the strong-coupling regime, we constructed an analytical approximation for the polaron states and performed variational calculations to determine their energy and effective mass. Furthermore, we discussed the transition from the mobile state to the self-trapped state of the polaron in the strong-coupling region. We also estimate the signatures of polaron effects in spinor BEC for the future experiments.

Key words spinor impurity; spinor Bose-Einstein condensate; self-trapping state; second-order perturbation theory

极化子是凝聚态物理学中用于描述固体材料中电子与原子相互作用的一种准粒子概念, 也是物理学、化学与材料科学领域中研究最为广泛且具有高度交叉性的研究对象之一。该理论由列夫·朗道于 1933 年^[1]提出, 后由所罗门·佩卡尔^[2]于 1946 年进一步发展, 主要描述电子在介电晶体中的运动, 当电子通过晶体时, 会引起周围原子偏离

平衡位置, 形成声子云, 这种集体位移效应会有效屏蔽电子电荷, 由此形成的量子复合体可视为由虚声子云包裹电子或空穴构成的准粒子。如图 1 所示, 该过程导致两个重要结果——电子迁移率降低和有效质量增加。这种动态过程不仅保护粒子免受缺陷散射, 还显著影响材料的电学和光学性质。例如, 在钙钛矿材料中, 极化子的“气泡”直

收稿日期: 2025-03-31

通信作者: 刘波扬, byliu@bjut.edu.cn。

引文格式: 尹禹璵, 刘波扬. 旋量玻色-爱因斯坦凝聚体中的极化子[J]. 物理与工程, 2025, 35(4): 310-318.

Cite this article: YIN Y C, LIU B Y. Polarons in spinor Bose-Einstein condensates[J]. Physics and Engineering, 2025, 35(4): 310-318. (in Chinese)

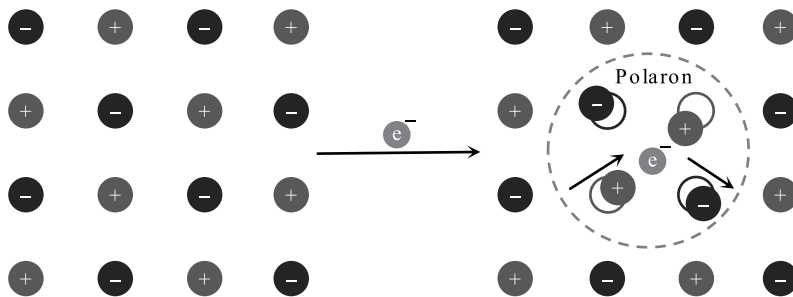


图1 极化子示意图

径可达数纳米,覆盖多个原子层,从而提升载流子迁移率,部分解释了其高效太阳能转换机制。实验上,通过超快 X 射线激光技术可捕捉这种瞬态畸变,揭示极化子在皮秒时间尺度内的形成与演化。极化子概念已被从传统固态体系^[1,3]拓展到其他物理学体系中,如量子液体^[4,5]、先进材料^[6]、化学系统^[7,8]及生物物理系统^[9,10]等领域。极化子的潜在应用广泛且深远,在能源领域,钙钛矿太阳能电池通过增强极化子效应,将光电转换效率推向 30% 以上;在光电器件中,极化子介导的超快载流子迁移(如过氧化锂中迁移率提升 8 个量级)为高通断比晶体管和探测器奠定基础。未来,结合激光、应变等多尺度调控手段,极化子研究有望拓展至量子计算、离子电池及光催化等跨学科领域,成为连接微观物理与宏观技术的关键桥梁。本论文中,我们将以冷原子中的极化子问题为例介绍极化子的概念以及它的理论模型,有助于学生更好地理解极化子的物理概念。

近年来,杂质原子浸入玻色-爱因斯坦凝聚体(BEC)的实验^[11,12]引起了学术界对玻色极化子^[13-26]的强耦合物理的广泛研究。这类研究的优势在于利用超冷原子系统参数的高度可调控性^[27],来探索传统极化子物理中长期难以实现的强耦合区域。本课题聚焦于带有自旋的杂质在旋量玻色-爱因斯坦凝聚体系统中的极化子现象。该体系中的极化子具有三个与标量 BEC 中极化子明显不同的特征:一,标量 BEC 仅提供无能隙声子模式,而旋量 BEC 存在多类集体激发模式(包括无能隙和有能隙模式),这一研究为利用冷原子平台模拟固态光学/声学极化子提供了理论框架^[1,28,29];二,杂质与 BEC 原子间的自旋交换碰撞导致不同自旋分量的极化子能量与有效质量发生劈裂,这一现象是自旋极化子的核心物理特征,

在强关联电子材料中具有重要的物理意义^[6,30];三,通过光学 Feshbach 共振技术^[31]可调控不同自旋分量的极化子特性,例如在强耦合区域实现自陷态的可控生成。本工作将利用 Fröhlich 哈密顿量模型研究自旋杂质在旋量 BEC 中的极化子问题。Fröhlich 哈密顿量是量子场论中最基础的模型之一,描述了单粒子与玻色场相互作用的物理过程。尽管已有多种 Fröhlich 哈密顿量的变体被深入研究^[32,33],但尚未有研究明确建立其自旋推广形式与真实物理系统的对应关系。

本文结构安排如下:第二节构建自旋推广的 Fröhlich 极化子哈密顿量;第三节基于微扰理论,在弱耦合区域揭示自旋相关相互作用诱导的极化子特性;第四节我们通过变分法建立强耦合区域的解析近似,重点分析不同自旋分量的能量与有效质量劈裂现象;第五节进行实验可行性分析及总结研究结论。

1 极化子哈密顿量

我们考虑一个 s 波相互作用的自旋为 1 的均匀玻色气体系统。该系统可用二次量子化哈密顿量^[34]表示为

$$H_{BEC} = \sum_{\mathbf{k}, f} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, f}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, f} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, f} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} (c_0 a_{\mathbf{k}_1, f_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2, f_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_3, f_2} a_{\mathbf{k}_4, f_1} + c_2 a_{\mathbf{k}_1, f_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2, f_2}^{\dagger} \mathbf{F}_{f_1 f_1'} \cdot \mathbf{F}_{f_2 f_2'} a_{\mathbf{k}_3, f_2'} a_{\mathbf{k}_4, f_1'}) \quad (1)$$

其中, f 为自旋指标,取值为 $\pm 1, 0$, $\mathbf{F}$ 是自旋为 1 的矩阵表示, $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m}$ 是质量为 m 的玻色子的动能。由于玻色气体极度稀薄,我们仅考虑二体相

互作用。当交换两个自旋为 f 的全同粒子时, 多体波函数将产生相位因子 $(-1)^{2f}$ 的变化, 波函数的自旋部分和轨道部分将分别产生 $(-1)^{F+2f}$ 和 $(-1)^L$ 的相位变化, 其中 F 表示两个粒子的总自旋, L 表示它们的相对轨道角动量。为保持一致性, $(-1)^{2f}$ 必须等于 $(-1)^{F+2f} \times (-1)^L$, 因此可得 $(-1)^{F+L} = 1$ 。这意味着无论粒子遵循何种统计规律, $F+L$ 都必须为偶数。在下文中, 我们仅考虑 s 波散射 ($L=0$), 因此两个相互作用粒子的总自旋必须为偶数。对于 $f=1$ 的粒子, 两个相互作用粒子的总自旋必须为 0 或 1, 所以该系统中相互作用可以写为上式中的形式。更多细节请参考论文^[31,37]。

当同样自旋为 1 的杂质原子浸入到由不同类型原子构成的自旋为 1 的 BEC 中时, 杂质与 BEC 间的接触势可表示为^[31]

$$V_{IB} = \lambda + \beta \mathbf{F} \cdot \mathbf{S} + \gamma \hat{P}_0 \quad (2)$$

其中, $\mathbf{S}$ 表示杂质的自旋为 1 的矩阵矢量, $\lambda = (g_1 + g_2)/2$ 是与自旋无关的相互作用强度, $\beta = (g_2 - g_1)/2$ 和 $\gamma = (2g_0 - 3g_1 + g_2)/2$ 是与自旋依赖的相互作用强度。在一阶微扰近似中, 相互作用强度可表示为 $g_F = 2\pi a_F^{IB}/\mu$, 其中 a_F^{IB} 是总自旋 F 通道中的 s 波散射长度, 其中相对质量为 $\mu = mM/(m+M)$ 。 $\hat{P}_0$ 是自旋单态通道的投影算符^[35]。

我们将聚焦于序参量为 $(1, 0, 0)^T$ 的旋量 BEC 的铁磁相, 该铁磁相在 $c_2 < 0$ 的条件下为系统基态^[34]。平均场近似下可将算符分解为以下形式

$$\begin{pmatrix} a_{k,1} \\ a_{k,0} \\ a_{k,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{n_0} + \tilde{a}_{k,1} \\ \tilde{a}_{k,0} \\ \tilde{a}_{k,-1} \end{pmatrix} \quad (3)$$

然后进行 Bogoliubov 变换^[35,36]:

$$\begin{aligned} b_{k,1} &= \sqrt{\frac{\epsilon_k + c_2 n_0 + \omega_{k,1}}{2\omega_{k,1}}} \tilde{a}_{k,1} + \sqrt{\frac{\epsilon_k + c_2 n_0 - \omega_{k,1}}{2\omega_{k,1}}} \tilde{a}_{-k,1}^\dagger \\ b_{k,0} &= \tilde{a}_{k,0} \\ b_{k,-1} &= \tilde{a}_{k,-1} \end{aligned} \quad (4)$$

其中, 算符 $b_{k,f}$ 是自旋为 1 的 BEC 中三种元激发的湮灭算符, 其色散关系如下^[34]: (i) 无能隙密度模 $\omega_{k,1} = \sqrt{\epsilon_k(\epsilon_k + 2(c_0 + c_2)n_0)}$, (ii) 铁磁自旋波模 $\omega_{k,0} = \epsilon_k$, (iii) 有能隙自旋四极模 $\omega_{k,-1} =$

$\epsilon_k + 2|c_2|n_0$, 其中 $c_0 = 4\pi(2a_2^{BB} + a_0^{BB})/(3m)$, $c_2 = 4\pi(a_2^{BB} - a_0^{BB})/(3m)$, a_F^{BB} 是总自旋 F 通道中的 s 波散射长度。

然后总哈密顿量可以表示为

$$H_{tot} = E_g + E_{IB} + H_{pol} \quad (5)$$

等式右边第一项是 BEC 的基态能量。第二项是杂质与 BEC 之间的平均场相互作用能, 该哈密顿量在杂质的自旋态下是对角的, 其形式为

$$E_{IB} = n_0 \begin{pmatrix} \lambda + \beta & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \beta + \frac{\gamma}{3} \end{pmatrix} \quad (6)$$

最后一项具有与 Fröhlich 极化子哈密顿量相似的形式^[1]

$$H_{pol} = \frac{p^2}{2M} + \sum_{k,f} \omega_{k,f} b_{k,f}^\dagger b_{k,f} + \sum_{k,f} (V_{k,f} b_{k,f} e^{ik \cdot r} + \text{h. c.}) \quad (7)$$

接下来的内容中, 我们令 $\hbar=1$, M 和 r 分别为杂质原子的质量和坐标。将旋量 BEC 的基态视为静态平均场, 在此基础上激发态为三种不同类型的玻色元激发准粒子热库。杂质原子与旋量 BEC 集体激发模式间的耦合矩阵可计算如下

$$\begin{aligned} V_{k,1} &= \sqrt{n_0} W_k \begin{pmatrix} \lambda + \beta & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \beta + \frac{\gamma}{3} \end{pmatrix}, \\ V_{k,0} &= \sqrt{n_0} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta - \frac{\gamma}{3} & 0 \end{pmatrix} \\ V_{k,-1} &= \sqrt{n_0} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma}{3} & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $W_k = \frac{\xi k}{\sqrt{2 + (\xi k)^2}}$, 旋量 BEC 的愈合长度定义为 $\xi = \frac{1}{\sqrt{2mn_0(c_0 + c_2)}}$ 。这些矩阵是杂质浸入

标量 BEC 情况下耦合函数的推广形式^[14,15], 相应的碰撞过程按种间自旋交换相互作用进行分类。由于大多数原子凝聚在 $f=1$ 分量中, 矩阵 $V_{k,1}$ 因密度波与杂质原子的耦合而必然呈对角形式。对于自旋交换过程, 我们应注意杂质与 BEC 原子

是可区分的。不同于杂质与 BEC 属于同类原子的情况^[34], 此处不受全同玻色子的统计约束, 因而存在 $V_{k,0}$ 和 $V_{k,-1}$ 两种自旋交换过程。具体而言, $V_{k,0}$ 项描述伴随自旋涨落的 $\hbar$ 角动量交换, 而 $V_{k,-1}$ 描述伴随自旋四极涨落的 $2\hbar$ 角动量交换。

我们将杂质与玻色-爱因斯坦凝聚体 (BEC) 之间的无量纲耦合强度定义为

$$\alpha_f = \frac{a_f^2}{a_2^{BB} \xi} \quad (9)$$

其中, $a_1 = a_2^{IB}$, $a_0 = (a_1^{IB} + a_2^{IB})/2$, $a_{-1} = (2a_0^{IB} + 3a_1^{IB} + a_2^{IB})/6$ 。相应地, 平均场能量可以用散射长度 a_f 表示为 $E_{IB,f} = 2\pi n_0 a_f / \mu$ 。

众所周知, Fröhlich 哈密顿量 (7) 难以得到精确解析解, 在弱耦合 ($\alpha_f \ll 1$) 和强耦合 ($\alpha_f \gg 1$) 区域具有定性不同的特征, 在接下来的两小节中我们将分别在弱耦合和强耦合区域讨论极化子的能量以及有效质量。

2 弱耦合区域的微扰处理

本小节中我们将讨论弱耦合的情况。我们将式 (7) 的最后一项

$$H' = \sum_{k,f} (V_{k,f} b_{k,f} e^{ik \cdot r} + \text{h. c.}) \quad (10)$$

视为微扰^[38], 它会改变准粒子数, 因此在准粒子真空态下, 一阶微扰能量为零。考虑不同自旋分量的二阶微扰过程, 所有初态均为具有动量 p 的杂质, 且初态中无集体激发^[39]。在中间态 $|n\rangle$ 中, 杂质和集体激发的动量分别为 $(p-k)$ 和 k , 所以初态能量和中间态能量分别为 $E_0 = \frac{p^2}{2M}$ 和 $E_{n,f} = \frac{(p-k)^2}{2M} + \omega_{k,f}$ 。如图 2(a) 所示, 能量的二阶微扰修正可计算为

$$\Delta E_f = \sum_n \frac{|\langle n | H' | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_{n,f}} \quad (11)$$

对于处于 $f=1$ 态的杂质原子, 其能量修正为

$$\Delta E_1(p) = (\lambda + \beta)^2 n_0 \sum_k \frac{W_k}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,1} - \frac{(p-k)^2}{2M}} \quad (12)$$

这与固体物理中的声学极化子类似。在二阶微扰理论中需注意, $g_2 = \frac{2\pi a_2^{IB}}{\mu}$ 并非精确, 且仅在一级

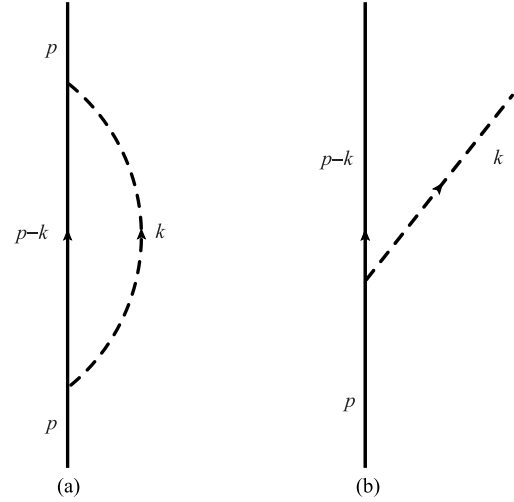


图 2 能量修正以及耗散过程的费曼图

(a) 能量的二阶微扰修正, 虚线代表动量为 k 的集体激发模式;
(b) 杂质通过产生自旋波模式耗散能量, 这是在小动量下唯一的耗散过程

近似下有效。在二阶情况下, 有^[21]

$$\frac{2\pi a_2^{IB}}{\mu} = g_2 - g_2^2 \sum_k \frac{2\mu}{k^2} \quad (13)$$

通过上式我们可以消除式 (12) 中的紫外发散, 从而得到 $f=1$ 态极化子能量的有限结果 (下文中,

我们取能量单位为 $\frac{1}{M\xi^2}$)

$$\Delta E_1(0) = \alpha_1 I_1(\tilde{m}) \quad (14)$$

其中

$$I_1(\tilde{m}) = \frac{(1 + \tilde{m})^2}{\tilde{m}} \int_0^\infty \frac{dx}{2\pi} \times \left(\frac{1}{1 + \tilde{m}} - \frac{x^2}{\tilde{m}x \sqrt{2 + x^2} + 2 + x^2} \right) \quad (15)$$

质量比为 $\tilde{m} = m/M$ 。这与标量 BEC 中的极化子结果相同^[15]。

对于处于 $f=0$ 态的杂质原子, 在二阶微扰理论中存在两种可能的中间态, 形式如下

$$\Delta E_0(p) = \lambda^2 n_0 \sum_k \frac{W_k}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,1} - \frac{(p-k)^2}{2M}} + \beta^2 n_0 \sum_k \frac{1}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,0} - \frac{(p-k)^2}{2M}} \quad (16)$$

通过相同的步骤, 求得处于 $f=0$ 态的静态极化子能量为

$$\Delta E_0(0) = \alpha_0 I_1(\tilde{m}) \quad (17)$$

与 $f=1$ 态不同, 无论处于 $f=0$ 态的杂质初始速度多小, 它都会通过产生无能隙的自旋波模式(磁振子)来耗散能量, 如图 2(b) 所示。换言之, $f=0$ 态杂质的临界速度为零, 这与 $f=1$ 态的声速存在本质区别。

对于 $f=-1$ 态, 杂质与有能隙的自旋四极激发之间的耦合对极化子能量有额外贡献, 这类似于固态物理中的光学极化子。二阶微扰理论给出

$$\begin{aligned} \Delta E_{-1}(p) &= (\lambda - \beta + \gamma/3)^2 n_0 \cdot \\ &\sum_k \frac{W_k}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,1} - \frac{(p-k)^2}{2M}} + \\ &\left(\beta - \frac{\gamma}{3}\right)^2 n_0 \sum_k \frac{1}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,0} - \frac{(p-k)^2}{2M}} + \\ &\left(\frac{\gamma}{3}\right)^2 n_0 \sum_k \frac{1}{\frac{p^2}{2M} - \omega_{k,-1} - \frac{(p-k)^2}{2M}} \end{aligned} \quad (18)$$

$f=-1$ 态的极化子能量可以用多种散射长度表示

$$\begin{aligned} \Delta E_{-1}(0) &= \alpha_{-1} I_1(\tilde{m}) + \sqrt{\frac{2(a_0^{BB} - a_2^{BB})}{3a_2^{BB}}} \times \\ &\left(\frac{2a_0^{IB} - 3a_1^{IB} + a_2^{IB}}{12a_2^{IB}}\right)^2 \alpha_1 \frac{\sqrt{1+\tilde{m}}}{\tilde{m}} \end{aligned} \quad (19)$$

如果要跟实验测量中测得的极化子能量 $\Delta E_f(0)^{[11,12]}$ 进行对比, 我们还需要考虑平均场相互作用能 $E_{IB,f}$, 因为实验中实际测量的是杂质与 BEC 相互作用引起的总能量位移

$$\Delta_f = E_{IB,f} + \Delta E_f(0) \quad (20)$$

将三个自旋分量的极化子能量与相应的平均场相互作用能相结合, 我们得到杂质的总能量位移, 如图 3(a) 所示, 三种不同自旋的极化子的总能量位移都随着 a_2^{IB} 的增加而增加。

杂质的有效质量可通过对方程(11)进行小量展开求得

$$E_f(p) = \Delta E_f(0) + \frac{p^2}{2M_f^*} + \mathcal{O}(p^4) \quad (21)$$

现在我们计算三种内态杂质的有效质量, 由下式给出

$$\frac{M_f^*}{M} = \frac{1}{1 - M |E_f''(0)|} \quad (22)$$

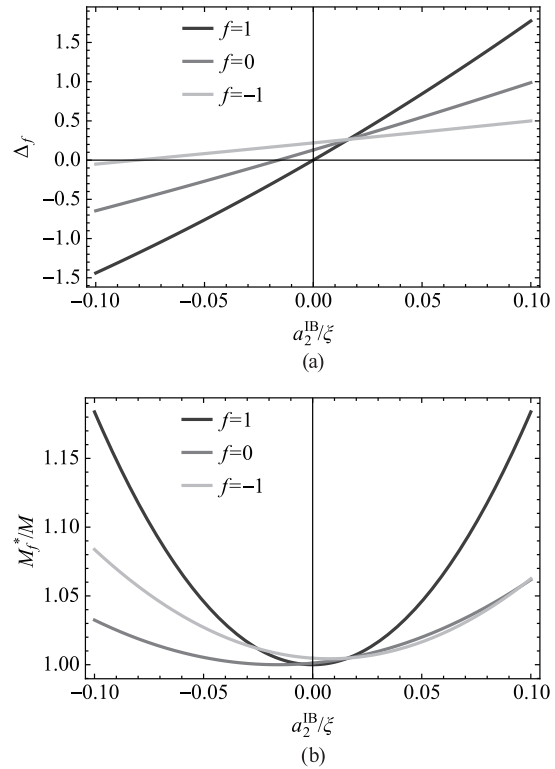


图3 弱耦合区域极化子的总能量位移以及有效质量随散射长度的变化

(a) 极化子在不同自旋分量态的总能量位移随散射长度的变化; (b) 不同自旋分量极化子的有效质量随散射长度的变化。在所有的图中固定 $a_0^{IB} = 84.1a_B$ 和 $a_1^{IB} = 81.4a_B$ ^[31], 调节 $^{23}\text{Na}-^{87}\text{Rb}$ ($\tilde{m} = 3.78$) 的散射长度 a_2^{IB} , 其中 a_B 为玻尔半径。 ^{87}Rb 的散射长度为 $a_0^{BB} = 101.8a_B$ 和 $a_2^{BB} = 100.4a_B$ ^[41]。利用玻色-爱因斯坦凝聚体的典型密度 $n_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 可算得愈合长度为 $\xi = 270 \text{ nm}$ 。在绘图范围 $|a_2^{IB}/\xi| < 0.1$ 内, 三个耦合常数 $\alpha_f < 0.5$, 我们认为在此范围内微扰理论是可靠的

尽管微扰理论在到达奇点前已失效^[33], 但在 $|E_f''(0)| = 1/M$ 处的奇异性仍预示着强耦合区域基态的突变。平均场位移对有效质量没有贡献, 并且在后续计算中不存在任何紫外发散。

对于处于 $f=1$ 态的杂质原子, 二阶微扰的直接计算表明

$$\frac{M_1^*}{M} = 1 + \alpha_1 I_2(\tilde{m}) \quad (23)$$

其中

$$\begin{aligned} I_2(\tilde{m}) &= \frac{4(1+\tilde{m}^{-1})^2}{3\pi} \times \\ &\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(\tilde{m}^{-1} \sqrt{2+x^2} + x)^3 \sqrt{2+x^2}} \end{aligned} \quad (24)$$

相对于裸质量,有效质量的增加表明杂质原子的移动性降低。相应地,处于 $f=0$ 和 $f=-1$ 态的杂质原子的有效质量分别为

$$\begin{aligned}\frac{M_0^*}{M} &= 1 + \alpha_0 I_2(\tilde{m}) \\ \frac{M_{-1}^*}{M} &= 1 + \alpha_{-1} I_2(\tilde{m}) + \sqrt{\frac{3a_2^{BB}}{2(a_0^{BB} - a_2^{BB})}} \times \\ &\quad \left(\frac{2a_0^{IB} - 3a_1^{IB} + a_2^{IB}}{12a_2^{IB}} \right)^2 \alpha_1 \frac{\tilde{m}}{\sqrt{1+\tilde{m}}}\end{aligned}\quad (25)$$

在弱耦合区域,不同自旋分量的有效质量的差别仅在百分之几量级以内,如图 3(b)所示。需要注意的是,这些结果与 Lee-Low-Pines 的中间耦合理论在 α_f 阶上是一致的^[40]。杂质的迁移率取决于超精细自旋态,因为周围集体模式的屏蔽效应取决于不同类型的色散。不同自旋态有效质量的分裂是自旋极化子物理中的一个特征现象^[6,30]。

3 强耦合区域中的极化子能量与有效质量

本小节中我们讨论强耦合区域的极化子理论。我们将基于体系中存在的基本集体激发模式,为哈密顿量(7)构造如下试探波函数

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle |\chi\rangle |\psi_1\rangle |\psi_0\rangle |\psi_{-1}\rangle \quad (26)$$

其中 $|\phi\rangle$ 和 $|\chi\rangle$ 分别是杂质的归一化空间函数与自旋函数, $|\psi_f\rangle$ 是仅集体激发模式的归一化函数。这里我们利用变分原理,对能量求极值确定系统基态

$$\begin{aligned}\langle \Psi | H_{pol} | \Psi \rangle &= - \left\langle \phi \left| \frac{\nabla^2}{2M} \right| \phi \right\rangle + \\ &\quad \sum_{\mathbf{k},f} \omega_f(\mathbf{k}) \langle \psi_f | b_{\mathbf{k}f}^\dagger b_{\mathbf{k}f} | \psi_f \rangle + \\ &\quad \sum_{\mathbf{k},f} (G_f^*(\mathbf{k}) \langle \psi_f | b_{\mathbf{k}f} | \psi_f \rangle + \text{h. c.})\end{aligned}\quad (27)$$

其中定义

$$G_f^*(\mathbf{k}) \equiv \langle \phi | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \phi \rangle \langle \chi | V_{\mathbf{k}f} | \chi \rangle \quad (28)$$

并重新定义一个集体激发模式算符

$$B_f(\mathbf{k}) \equiv b_{\mathbf{k}f} + \frac{G_f(\mathbf{k})}{\omega_f(\mathbf{k})} \quad (29)$$

其满足正则对易关系。于是极化子能量可计算为

$$\begin{aligned}\langle \Psi | H_{pol} | \Psi \rangle &= - \left\langle \phi \left| \frac{\nabla^2}{2M} \right| \phi \right\rangle - \sum_{\mathbf{k},f} \frac{|G_f(\mathbf{k})|^2}{\omega_f(\mathbf{k})} + \\ &\quad \sum_{\mathbf{k},f} \omega_f(\mathbf{k}) \langle \psi_f | B_{\mathbf{k}f}^\dagger B_{\mathbf{k}f} | \psi_f \rangle\end{aligned}\quad (30)$$

其中,第二项始终非负,因为 $B_{\mathbf{k}f}^\dagger B_{\mathbf{k}f}$ 是二次厄米算符,且绝对零度下的热力学稳定性要求 $\omega_f(\mathbf{k}) \geq 0$ ^[36]。选择满足 $B_f(\mathbf{k}) |\psi_f^0\rangle = 0$ 的集体模式变分函数 $|\psi_f^0\rangle$,则变分能量可计算为

$$\langle \Psi | H_{pol} | \Psi \rangle = - \left\langle \phi \left| \frac{\nabla^2}{2M} \right| \phi \right\rangle - \sum_{\mathbf{k},f} \frac{|G_f(\mathbf{k})|^2}{\omega_f(\mathbf{k})} \quad (31)$$

一般来说,杂质的自旋波函数 $|\chi\rangle$ 是三个内部状态的叠加。接下来我们仅关注自旋本征态的情形,此时式(31)最后一项由 $V_{\mathbf{k}1}$ 的对角元决定。为计算基态能量,需指定杂质试探波函数 $\phi(\mathbf{r})$ 的具体形式,最简单的选择是类氢基态波函数^[1]

$$\phi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{t^3}{\pi \xi^3}} e^{-tr/\xi} \quad (32)$$

其中, t 是与极化子半径相关的无量纲变分参数:

$$\frac{\sqrt{\langle r^2 \rangle}}{\xi} = \frac{\sqrt{3}}{t} \quad (33)$$

将式(32)代入式(31),可直接计算自旋 f 本征态杂质的变分能量

$$\mathcal{E}_f = \frac{t^2}{2} - \tilde{\alpha}_f I_3(t) \quad (34)$$

其中, $\tilde{\alpha}_f \equiv \alpha_f(1+\tilde{m})(1+\tilde{m}^{-1})$, 且

$$I_3(t) = \frac{2}{\pi} t^3 \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^4 (1+2t^2 x^2)} \quad (35)$$

强耦合极化子对应于变分能量为负值的解。能量与耦合常数 $\tilde{\alpha}_f$ 有关。只有当 $\tilde{\alpha}_f$ 超过某个临界值时,变分能量的极小值才会低于零。此时杂质原子可从移动态转变为局域态,即所谓的自陷态。这一相变特征如图 4 所示,变分理论预测杂质在临界耦合强度

$$\alpha_f^* = \frac{15.8}{(1+\tilde{m})(1+\tilde{m}^{-1})} \quad (36)$$

处开始定域。现在我们考虑低密度自旋杂质原子浸入旋量 BEC 的体系。该体系中杂质-BEC 相互作用可由三个散射长度表征,而杂质原子之间的

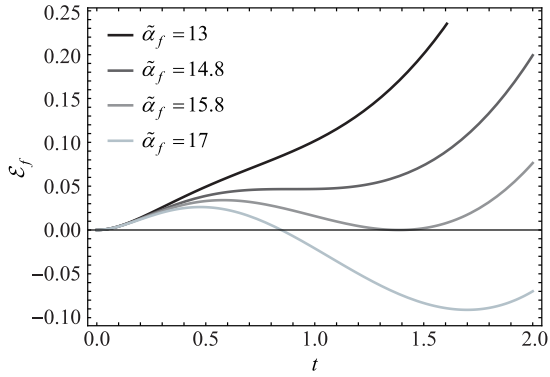


图4 变分能量作为变分参数的函数在不同耦合强度下的变化图像。当 $\tilde{\alpha}_f > 14.8$ 时,变分能量出现局部极小值。在临界耦合强度 $\tilde{\alpha}_f = 15.8$ 时,极化子能量转变为负值,这标志着系统从非束缚态向局域态的转变。对应于能量极小值时,变分参数 t 出现不连续性,从 0 跃变到 1.39

相互作用可忽略不计。由式(36)和式(9)推断,我们可以通过调节异核散射长度来操控不同自旋分量极化子的形成。如图 5(a)所示的 $^{23}\text{Na}-^{87}\text{Rb}$ 系统,我们绘制了定义为 $\Delta_f = E_{IB,f} + \mathcal{E}_f$ 的杂质总能量曲线。在保持 a_0^{IB} 和 a_1^{IB} 不变的情况下增加 a_2^{IB} 时, $f=1$ 的极化子将首先在 $a_2^{IB}/\xi = 0.23$ 时首先形成定域态。随后, $f=0$ 和 $f=-1$ 的极化子则分别在 $a_2^{IB}/\xi = 0.44$ 和 $a_2^{IB}/\xi = 1.28$ 时实现局域化。从式(33)可知,极化子可在小于愈合长度的区域内自局域化,这标志着系统从弱耦合区域向强耦合区域的过渡。

上述极化子的能量解是静态的,此时杂质定域于坐标原点并被 BEC 密度畸变所束缚。为了研究强耦合区域的有效质量,假设杂质态函数 $|\tilde{\phi}\rangle$ 以小速度 $\mathbf{u}$ 运动。此时需对下式进行能量极小化^[42]

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{\Psi} | H_{pol} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P} | \tilde{\Psi} \rangle \\ &= - \left\langle \tilde{\phi} \left| \frac{\nabla^2}{2M} \right| \tilde{\phi} \right\rangle + i\mathbf{u} \cdot \langle \tilde{\phi} | \nabla | \tilde{\phi} \rangle + \\ & \sum_{\mathbf{k},f} (G_f^*(\mathbf{k}) \langle \psi_f | b_{\mathbf{k}f} | \psi_f \rangle + \text{h.c.}) + \\ & \sum_{\mathbf{k},f} (\omega_f(\mathbf{k}) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{k}) \langle \psi_f | b_{\mathbf{k}f}^\dagger b_{\mathbf{k}f} | \psi_f \rangle \end{aligned} \quad (37)$$

其中,拉格朗日乘子 $\mathbf{u}$ 表示极化子的速度,总动量算符为 $\mathbf{P} = -i\hbar \nabla + \sum_{\mathbf{k},f} \mathbf{k} b_{\mathbf{k},f}^\dagger b_{\mathbf{k},f}$ 。通过重新定义

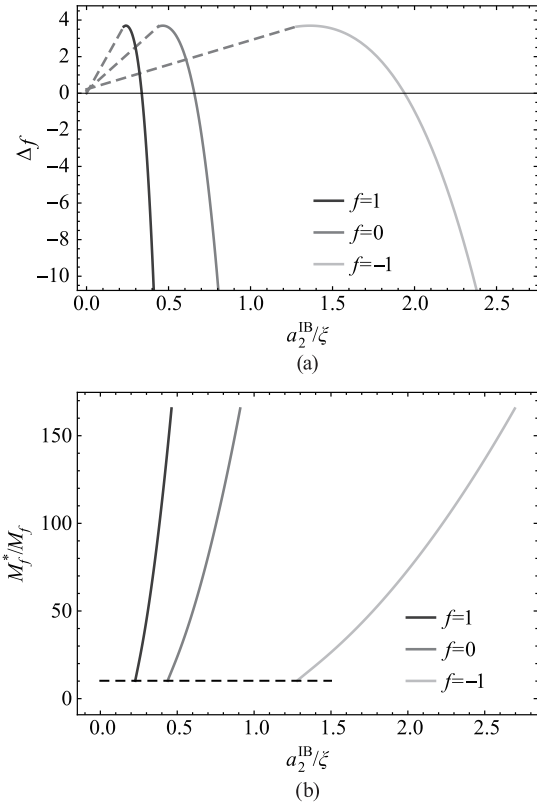


图5 强耦合区域极化子的总能量位移以及有效质量随散射长度的变化

(a) 在强耦合区域,不同自旋分量极化子的能量随散射长度的变化曲线。虚线表示达到临界耦合强度前能量;(b) 不同自旋分量的极化子的有效质量。相关参数的选取如图 2(a)所示

位移算符 $\tilde{B}_f(\mathbf{k}) \equiv b_{\mathbf{k}f} + \frac{G_f(\mathbf{k})}{\omega_f(\mathbf{k}) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{k}}$, 声子基态

可由 $\tilde{B}_f(\mathbf{k}) |\tilde{\psi}_f^0\rangle = 0$ 解得。此时展开至速度的二阶项后,变分能量可表示为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_f(\mathbf{u}) = & - \left\langle \tilde{\phi} \left| \frac{\nabla^2}{2M} \right| \tilde{\phi} \right\rangle + \frac{1}{2} M u^2 - \\ & \sum_{\mathbf{k},f} \frac{|G_f(\mathbf{k})|^2}{\omega_f(\mathbf{k})} + \sum_{\mathbf{k},f} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{k})^2 |G_f(\mathbf{k})|^2}{\omega_f^3(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (38)$$

自旋 f 本征态的有效质量可以用变分参数表示为

$$\frac{M_f^*}{M} = 1 + \tilde{m}^2 \tilde{\alpha}_f I_4(t) \quad (39)$$

其中

$$I_4(t) = \frac{8}{3\pi} t^3 \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^4 (1+2t^2 x^2)^2} \quad (40)$$

通过对变分能量(34)的极小化,我们可以为每个超过临界值的耦合常数 $\bar{\alpha}_f$ 确定变分参数 t 的最优解。如图5(b)所示,与弱耦合区域中有效质量仅百分之几的增幅相比,极化子有效质量在强耦合区域可提升数个量级。不同自旋分量间显著的有效质量分裂现象在强耦合区域得以体现,该特性可通过测量杂质迁移率进行实验观测。我们还应注意到,由于式(39)中存在 m^2 因子,较轻杂质的有效质量增强效应会更加显著。多数固体材料中的有效质量是很难实现的^[43]。因此,超冷原子体系中有有效质量的大幅增加为探索这一固体中难以触及的物理区域开辟了新途径。

4 结语

综上所述,我们揭示了自旋为1的杂质原子浸入旋量BEC铁磁相中的极化子效应。在弱耦合区域,我们通过微扰理论研究了不同类型集体模式的贡献;在强耦合区域,无能隙声子模式在自陷态形成中起主导作用。通过变分法处理,我们预测了耦合常数的临界值——此时杂质开始从移动态向局域态转变。本研究成果对探索旋量BEC中极化子效应的新特征具有重要意义,这些特征与标量BEC情形存在本质区别。此外,本工作也可以作为一个基本的教学案例,帮助学生理解极化子这一重要物理概念。如文中所示,我们在强相互作用和弱相互作用区域分别介绍了极化子的能量和有效质量的计算,这些计算为学生演示了极化子的基本理论处理方式。

致谢:感谢余小鲁对本工作的建议和讨论。

参 考 文 献

- [1] FRÖHLICH H F. Electrons in lattice fields[J]. *Advances in Physics*, 1954, 3(11): 325-361.
- [2] PEKAR S I. Research in electron theory of crystals[J]. 1946.
- [3] DEVREESE J. Physics of solids and liquids[M]. Plenum Press, 1967.
- [4] MILLER A, PINES D, NOZIÈRES, Philippe. Elementary excitations in liquid helium[J]. *Physical Review*, 1962, 127(5): 1452-1464.
- [5] HERNANDEZ, John P. Electron self-trapping in liquids and dense gases[J]. *Review of Modern Physics*, 1991, 63(3): 675-697.
- [6] ALEXANDROV A S. Polarons in advanced materials[M]. *Polarons in Advanced Materials*, 2008.
- [7] EMIN D. Polarons[J]. *Polarons*, by David Emin, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2012, 2010.
- [8] BREDAS J L, STREET G B. Polarons, bipolarons, and solitons in conducting polymers[J]. *Accounts of Chemical Research*, 1985, 18(10): 309-315.
- [9] Alwyn Scott. Davydov's soliton [J]. *Physics Reports*, 1992, 217(1): 1-67.
- [10] CONWELL E. Charge transport in DNA in solution: The role of polarons[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2005, 102(25): 8795-8799.
- [11] HU M G, Van D G M J, KEDAR D, et al. Bose polarons in the strongly interacting regime[J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(5): 055301.
- [12] JØRGENSEN, NILS B, WACKER L, SKALMSTANG K T, et al. Observation of attractive and repulsive polarons in a Bose-Einstein condensate[J]. 2016, 117(5): 055302.
- [13] MATHEY L, WANG D W, HOFSTETTER W, et al. Luttinger liquid of polarons in one-dimensional Boson-Fermion mixtures[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93(12): 120404. 1-120404. 4.
- [14] BEI-BING H, SHAO-LONG W. Polaron in Bose-Einstein Condensation system[J]. *Chinese Physics Letters*, 2009, 26(8): 80302-80302.
- [15] TEMPERE J, CASTEELS W, OBERTHALER M K, et al. Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(18): 2665-2668.
- [16] CUCCHIETTI F M, TIMMERMANS E. Strong-coupling polarons in dilute gas Bose-Einstein condensates[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96(21): 210401.
- [17] YOSHIDA S M, ENDO S, LEVINSSEN J, et al. Universality of an impurity in a Bose-Einstein condensate[J]. *Physical Review X*, 2017, 8(1).
- [18] WANG J, LIU X J, HU H. Roton-induced Bose polaron in the presence of synthetic spin-orbit coupling[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(21): 213401.
- [19] RATH S P, SCHMIDT R. Field-theoretical study of the Bose polaron [J]. *Physical Review A*, 2013, 88(5): 53632.
- [20] LI W, DAS Sarma S. Variational study of polarons in Bose-Einstein condensates[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(1): 4804-4810.
- [21] SHASHI A, GRUSDT F, ABANIN D A, et al. Radio frequency spectroscopy of polarons in ultracold Bose gases [J]. *Physical Review A*, 2014, 89(5): 12707-12715.
- [22] BLINOVA A A, BOSHIER M G, TIMMERMANS E. Two polaron flavors of the Bose-Einstein condensate impurity[J]. *Physical Review A*, 2013, 88(5).

- [23] ARDILA L A P, POHL T. Ground-state properties of dipolar Bose polarons[J]. IOP Publishing, 2019(1).
- [24] GUENTHER N E, MASSIGNAN P, LEWENSTEIN M, et al. Bose polarons at finite temperature and strong coupling[J]. Physical Review Letters, 2018, 120(5): 050405.
- [25] ICHMOUKHAMEDOV T, TEMPERE J. Feynman path-integral treatment of the Bose polaron beyond the Fröhlich model[J]. Physical Review A, 2019, 100(4): 043605.
- [26] FIELD B, LEVINSSEN J, PARISH M M. Fate of the Bose polaron at finite temperature [J]. Physical Review A, 2020, 101(1): 013623.
- [27] CHIN C, GRIMM R, JULIENNE P, et al. Feshbach resonances in ultracold gases[J]. Reviews of Modern Physics, 2008, 82(2): 1225-1286.
- [28] YUTAKA T. Self-Trapping of an Electron by the acoustical mode of lattice vibration. I[J]. Progress of Theoretical Physics, 1961(1): 29-44.
- [29] SUMI A, TOYOZAWA Y. Discontinuity in the polaron ground state[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1973, 35(1): 137-145.
- [30] GENNES P G D. Effects of double exchange in magnetic crystals[J]. Physical Review, 1960, 118(1): 141-154.
- [31] LI X, ZHU B, HE X, et al. Coherent heteronuclear spin dynamics in an ultracold spinor mixture[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(25): 255301-255301.
- [32] DEVREESE J T, ALEXANDROV A S. Fröhlich Polaron and Bipolaron: Recent developments[J]. Reports on Progress in Physics, 2009, 72(6): 066501.
- [33] MITRA T K, CHATTERJEE A, MUKHOPADHYAY S. Polarons[J]. Physics Reports, 1987, 153(2-3): 91-207.
- [34] HO, Tin-Lun. Spinor Bose condensates in optical traps [J]. Physical Review Letters, 1998, 81(4): 742-745.
- [35] XU Z F, WANG D J, YOU L. Quantum spin mixing in a binary mixture of spin-1 atomic condensates[J]. Physical Review A, 2012, 86(1): 164-164.
- [36] BOGOLYUBOV N N. On the theory of superfluidity[M]. 1971.
- [37] KAWAGUCHI Y, UEDA M. Spinor Bose-Einstein condensates[J]. Physics Reports, 2012, 520(5): 253-381.
- [38] FRÖHLICH H, PELZER H, ZIENAU S. XX. Properties of slow electrons in polar materials[J]. Philosophical Magazine, 2009, 41(314): 221-242.
- [39] FEYNMAN R P. Statistical mechanics: A set of lectures [M]. 2018.
- [40] LEE T D, LOW F E, PINES D. The motion of slow electrons in a polar crystal[J]. Physical Review, 1953, 90(2): 297-302.
- [41] Van KEMPEN E G M, KOKKELMANS S J J M F, HEINZEN D J, et al. Interisotope determination of ultracold rubidium interactions from three high-precision experiments[J]. Physical Review Letters, 2002, 88(9): 93201-93201.
- [42] PROVIDENCIA J D, RUIVO M D C, CÉLIA A de Sousa. The Hartree-Fock and generator coordinate methods in field theory. The polaron problem[J]. Annals of Physics, 1975, 91(2): 366-374.
- [43] PEETERS F M, DEVREESE J T. Acoustical polaron in three dimensions: The ground-state energy and the self-trapping transition [J]. Phys Rev B Condens Matter, 1985, 32(6): 3515-3521.

(上接第 309 页)

- [11] XIA T, CHENG S B, TAO S H. A general n-fractal aperiodic zone plate [J]. Journal of Modern Optics, 2019, 66(11): 1179-1189.
- [12] LIU S, LIU X J, XIONG Y, et al. Multi-helix beams generated with binary helico-conical phase patterns[J]. Journal of the Optical Society of America A-Optics Image Science and Vision, 2023, 40(9): 1706-1713.
- [13] LIU Y J, DAI H T, SUN X W, et al. Electrically switchable phase-type fractal zone plates and fractal photon sieves [J]. Optics Express, 2009, 17(15): 12418-12423.
- [14] DAI H T, LIU J H, SUN X C, et al. Programmable fractal zone plates (FraZPs) with foci finely tuned[J]. Optics Communications, 2008(22), 281: 5515-5519.
- [15] FURLAN W D, SAAVEDRA G, MONSURIU J A. White light imaging with fractal zone plates[J]. Optics Letters 2007, 32(15): 2109-2111.
- [16] BRUNO-ALFONSO A, REYES-GÓMEZ E, CAVALCANTI S B, Oliveria L E. Band edge states of the $\langle n \rangle = 0$ gap of Fibonacci photonic lattices [J]. Physical Review A, 2008, 78(3): 035801.
- [17] GELLERMANN W, KOHMOTO M, SUTHERLAND B. Localization of light waves in Fibonacci dielectric multilayers[J]. Physical Review Letters, 1994, 72(5): 633-636.
- [18] DAI H T, LIU Y J, SUN X W. The focusing property of the spiral Fibonacci zone plates [J]. 2012, Proceedings SPIE 8257, 82570T.
- [19] GAO N, ZHANG Y C, XIE C Q. Circular Fibonacci gratings[J]. Applied Optics, 2011, 50(31): G142-G148.
- [20] OH G Y, LEE M H. Band-structural and Fourier-spectral properties of one-dimensional generalized Fibonacci lattices [J]. Physical Review B, 1993, 48(17): 465-477.