DOI:10.19789/j.1004-9398.2018.01.007

一维 Rydberg 原子—腔系统

晏 浩 纪安春 孙 青

(首都师范大学物理系,北京 100048)

摘 要

原子与腔相互作用系统具有许多物理性质,如态稳定性和量子相变. 本文的模型是一维情形下 Rydberg 原子—腔相互作用系统,并对激发态 Rydberg 原子与腔场的耦合考虑了 Rydberg 原子间偶极—偶极相互作用的最近邻项. 文中从三个角度对系统 Hamilton 量进行能量求解,分别是平均场理论,强耦合展开和量子蒙卡模拟,并得到了相应的参数空间量子相图. 文中发现了超流相和介于超流相和固态相之间的稳定的超固态相,而且空穴激发的超固态相比粒子激发的更加稳定,不同相的存在和形状受有效化学势影响很大.

关键词: Rydberg 原子,量子相变,化学势,平均场理论,量子蒙卡.

中图分类号: O469

0 引 言

过去几十年来,量子多体问题和量子相变的研究在凝聚态物理学中得到了广泛的关注. 随着量子光学的发展和超冷原子物理学的兴起,原子与光场相互作用的研究变得越来越有趣和重要,并受到了很多理论工作者和实验工作者的青睐. 特别是在 20 年代的物理学成果中,玻色—爱因斯坦凝聚(BEC)在理论上的发现和实验上的实现,进一步推动了原子与场相互作用领域的发展与壮大.

原子与光场相互作用的研究在量子光学、超冷原子物理和凝聚态物理中都占有非常重要的地位,而且关于量子相变很多方面的特性在理论和实验两个角度都已经出现了很多理论成果和实验成果. 在著名的 Dicke 模型中,当考虑到一种两能级冷原子气体与光学腔耦合时,原子与光相互作用的非局域相干性就很好地支持了相变理论中的超辐射(SR)相变观点,而且许多先前的研究已经表明,不同的量子相特征的显示与不同的参数调校关联性很强[1-4].

在这篇文章中,我们研究了固态相、超流相(SF)和超固态相(SS)之间的相边界问题以及给出了相应的基态、激发态能量表达式. 我们考虑的模型是两能级的里德堡原子与光学腔的耦合系统,对原子考虑了它们之间偶极—偶极相互作用的最近邻项(C_6). 我们从三个不同角度对系统模型进行处理,分别是平均场理论、强耦合展开和量子 Monte Carlo 模拟,由此给出了相应的全参数空间的量子相图.

收稿日期: 2017-03-15

1 哈密顿模型

我们考虑的哈密顿量可如下表达:

$$\boldsymbol{H} = \omega a^{\dagger}a + \sum_{i=1}^{N} \varepsilon b_i^{\dagger} b_i + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} (b_i^{\dagger} a + b_i a^{\dagger}) + C_6 \sum_i n_i n_{i+1} - \mu \left(a^{\dagger}a + \sum_{i=1}^{N} b_i^{\dagger} b_i \right), \quad (1)$$

其中 $a^{\dagger}(a)$ 和 $b_i^{\dagger}(b_i)$ 分别是光子的产生(湮灭)算符和位置 i 处激发态里德堡原子的产生(湮灭)算符,ω 是单光子能量,ε 是两能级里德堡原子的自能,$g/\sqrt{N}$ 描述的是光场与激发态里德堡原子间的交换项(即耦合参数),C_6项即是里德堡原子间偶极—偶极相互作用的最近邻项,而 $n_i = b_i^{\dagger} b_i$ 则是位置 i 处激发态的里德堡原子数,μ 是化学势,它约束着整个系统的激发.

当 g 为零时,哈密顿量是对角化的,此时可以解析求解. 简化哈密顿量后,方程(1)变为

$$\boldsymbol{H} = \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} (b_i^{\dagger} a + b_i a^{\dagger}) + C_6 \sum_i n_i n_{i+1} - \left(\mu_a a^{\dagger}a + \mu_b \sum_{i=1}^{N} b_i^{\dagger} b_i \right), \quad (2)$$

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

上式中 $\mu_a = \mu - \omega$ 和 $\mu_b = \mu - \varepsilon$ 代表有效化学势. 为了避免光子数出现无穷大,我们假定 μ_a 和 μ_b 均小于零,也就是没有里德堡原子处于激发态. 当增大 μ_b 至大于零而小于 $2C_6$ 时,只有子晶格原子在近邻排斥作用下跳跃到激发态上,而当 μ_b 大于 $2C_6$ 时,源于化学势的能量增益能够克服排斥能,进而导致系统进入 Mott 绝缘态. 为了解决这个问题,可以选取有限的 g 值跳跃,并采用平均场理论、强耦合展开和量子蒙特卡罗模拟进行处理.

2　平均场理论

平均场理论下系统波函数如下给出:

$$|\lambda,\theta\rangle = \exp\left(\frac{\lambda\sqrt{N}a^{\dagger}}{2}\right)\prod_i\left(\cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right)b_i^{\dagger} + \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right)\right)|0\rangle, \tag{3}$$

其中 $|0\rangle$ 是系统真空态,代表所有的原子都处在基态上,λ 和 θ 都是可变参数. 为了找到基态能,我们需要对每个位置的平均场能量求极值:

$$\begin{aligned} E_{MF} &\equiv 4\langle\lambda,\theta|\boldsymbol{H}|\lambda,\theta\rangle/N + Const \\ &= -g\lambda(\sin\theta_A + \sin\theta_B) - \mu_a\lambda^2 - (\mu_b - C_6)\cdot \\ &\quad (\cos\theta_A + \cos\theta_B) + C_6\cos\theta_A\cos\theta_B. \end{aligned} \tag{4}$$

这里我们假设对不同子晶格 A 和 B 来说 θ 是相同的.

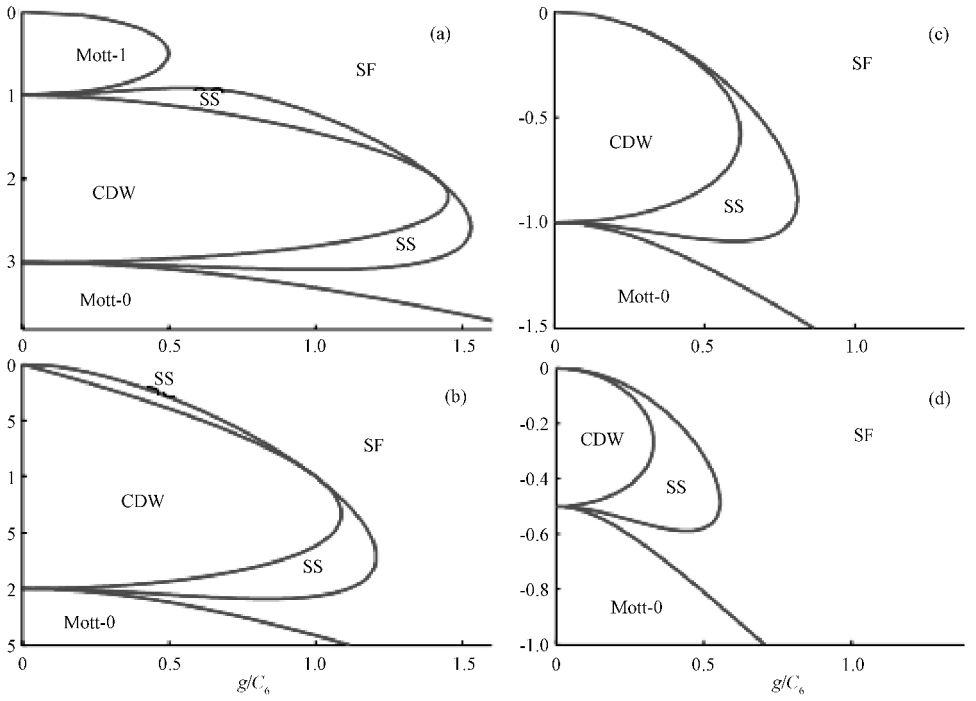


图 1　平均场理论得到的相位图,图(a) $\Delta = 3$, 图(b) $\Delta = 2$, 图(c) $\Delta = 1$ 和图(d) $\Delta = 0.5$ 均取 C_6 为单位长度

由于 μ_a 远大于零时 λ 无限大,故我们只考虑 $\mu_a < 0$ 的情况. 因此,我们对平均场能量 E_{MF} 求极值时取 $\lambda_c = -g(\sin\theta_A + \cos\theta_B)/(2\mu_a)$,因为它是 λ 的二次函数. 将 λ_c 带入到平均场能量 E_{MF} 中可得:

$$\begin{aligned} E_{MF} &= -g^2(\sin\theta_A + \sin\theta_B)/(4\mu_a) - (\mu_b - C_6)\cdot \\ &\quad (\cos\theta_A + \cos\theta_B) + C_6\cos\theta_A\cos\theta_B. \end{aligned}$$

然后通过数值模拟的方法,分别就上式中 θ_A 和 θ_B 对能量求极值,由此可得图 1 所示的全参数空间的相图.

图 1 中,Mott-0 和 Mott-1 分别标识 Mott 绝缘态没有占据和完全占据两种状态. 首先,我们定义 $\Delta = \mu_b - \mu_a$ 作为化学势失谐量,当 Δ 大于 $\Delta_{c1} = 2C_6$ 时,Mott-0 和 Mott-1 两种状态同时存在; 当 Δ 小于 Δ_{c1} 时,只有 Mott-0 状态存在. 其次,在逐渐减小 Δ 的过程中维持(π,π) 电荷密度波(CDM) 的固态相叶会收缩,直到 Δ 小于零时系统中只存在 Mott-0 状态和超流相(SF) 状态.

系统的临界相是超固态相(SS) ,它能够维持(π,π) CDM 并且是可压缩的,然后通过计算不同子晶格的平均场密度 $\rho = \cos(\theta/2)^2 = (\cos\theta + 1)/2$,能够发现它们之间的差异大于 0 而小于 1. 因此它既不是固态相也不是超流相.

为了更好的理解相变问题,我们利用强耦合展开分析 $\Delta > \Delta_c$ 区域的临界线问题.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

3 强耦合展开

在强耦合 $g \ll C_6$ 区域,我们将交换项作为对角部分的微扰来处理,所以我们就可以利用熟悉的量子力学微扰理论来计算临界线,也就是比较基态能量和准粒子激发态能量.

首先,我们考虑 Mott-0 相的全波函数即 $\psi_0 = |0\rangle$,当 μ_b 达到临界线时一个粒子就会被激发,系统也就发生了相变. 取激发态波函数为 $\psi_{0e} = \sum_{i=1}^{N} b_i^{\dagger}\psi_0/\sqrt{N}$,此时比较容易知道空态能量值为 0,激发态的二级微扰能量 $E_{0e} = -\mu_b + \frac{g^2}{N}\Big/(-\mu_b + \mu_a) \times N = -\mu_b - g^2/N$,所以临界线为 $\mu_{bc1} = -g^2/N$.

其次,我们考虑固态相,其零级基态可以用 $\psi = (\prod_{i\in A} b_i^{\dagger} + \prod_{i\in B} b_i^{\dagger})/\sqrt{2}\psi_0$ 代替,这里由于转移对称性,我们只需考虑 $\psi_s = \prod_{i\in A} b_i^{\dagger}\psi_0$ 即可,基态能量达到二级 $E_s = -(\mu_b N + g^2/\Delta)/2$. 考虑两种激发态分别由空穴激发和粒子激发. 空穴激发态波函数 $\psi_{s1} = \sum_{i\in A} b_i\psi_s/\sqrt{N/2}$, 它的二级能量:

$$E_{s1} = -\mu_b\left(\frac{N}{2} - 1\right) - \frac{g^2}{N(\mu_b - \mu_a)} \cdot \frac{2}{N}\left(P(N/2, N) + \frac{N}{2}\left(\frac{N}{2} - 1\right)\right)$$

$$\lim_{N\to\infty} E_{s1} = -\mu_b\left(\frac{N}{2} - 1\right) - g^2/\Delta. \quad (5)$$

因此二级临界线为 $\mu_{bc2} = g^2/2\Delta$. 对于粒子激发来说,其零级波函数为 $\psi_{s2} = \sum_{i\in B} b_i^{\dagger}\psi_s/\sqrt{N/2}$, 它的二级能量:

$$E_{s2} = -\mu_b\left(\frac{N}{2} + 1\right) + 2C_6 - (g^2/\Delta + g^2/(\Delta - 2C_6))/2, \quad (6)$$

因此其临界线为 $\mu_{bc3} = 2C_6 - g^2/(2\Delta - 4C_6)$.

最后,我们来分析 Mott-1 相,其中零级波函数为 $\psi_1 = \prod_{i=1}^{N} b_i^{\dagger}\psi_0$,它的二级能量 $E_1 = -(\mu_b - C_6)N - g^2/(\Delta - 2C_6)$. 此处也有两种激发,对空穴激发态来说,其基态波函数为 $\psi_{m1} = \sum_{i=1}^{N} b_i\psi_1/\sqrt{N}$, 二级能量:

$$E_{m1} = -(\mu_b - C_6)N + \mu_b - 2C_6 - \frac{2g^2}{N}\left(\frac{N-3}{\Delta - 2C_6} + \frac{2}{\Delta - C_6}\right)$$

$$\lim_{N\to\infty} E_{m1} = -(\mu_b - C_6)N + \mu_b - 2C_6 - \frac{2g^2}{\Delta - 2C_6}, \quad (7)$$

所以临界线为 $\mu_{bc4} = 2C_6 + g^2/(\Delta - 2C_6)$. 同样对于粒子激发来说,其零级波函数 $\psi_{m1} = a^{\dagger}\psi_1$, 所以其二级能量为:

$$E_{m1} = -(\mu_b - C_6)N - \mu_a - \frac{2g^2}{\Delta - 2C_6}. \quad (8)$$

通过比较得到的能量即可知道我们所求的临界线为 $\mu_{ac} = -g^2/(\Delta - 2C_6)$.

从临界线的表达式出发我们可以看出不同的不可压缩的状态的叶片会随着 Δ 的增加而收缩,这种特性是合理的,因为很大的化学势失谐量 Δ 可以减少二级跳跃. 为了详细地搞清楚不同相及其相边界问题,我们运用随机级数展开来模拟系统,这种展开也是一种量子蒙特卡罗的算法模拟.

4 量子蒙特卡罗

为了区分不同的相我们模拟系统平均密度 $\rho = \langle(a^{\dagger}a + \sum_{i=1}^{N} b_i^{\dagger}b_i)\rangle/N$ 用来找到密度平稳区间,模拟结构因子 $S(Q)/N = \langle\left|\sum_{k=1}^{N} n_k e^{iQr_k}\right|^2\rangle/N^2$ 用来测量 $Q = \pi$ 电荷密度波 CDM 和模拟可压缩性 $\kappa = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2$ 用来找到液相.

从图 2 可知,在半填充固相和超流相之间存在着一种居间相,它具有有限的结构因子和可压缩性,这种压缩性具有很小的有限尺寸影响. 如果其密度低于一半,我们便可确信这是一种由空穴激发而诱导的超固态相(SS).

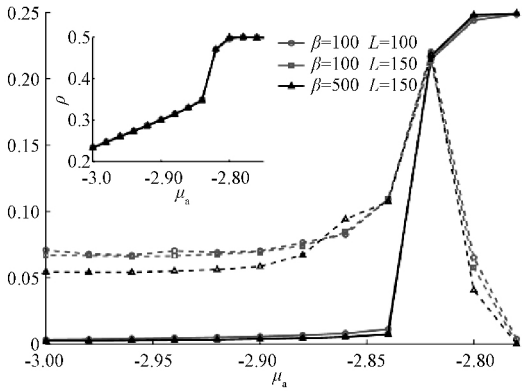


图 2 结构因子 $S(Q)/N$(实线) 和压缩性 κ / 10(虚线),其中已取 $C_6 = 1$ 和 $\Delta = 3$,并考虑不同温度和尺寸 $\beta = 100$, $L = 100$(圆状),$\beta = 100$, $L = 150$(方状) 和 $\beta = 500$, $L = 150$(三角状). 插图为平均密度 ρ

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

接下来我们看看不同的相变问题. 从图 3 的左侧我们可以发现超固态相能稳定地存在于固相和超流相之间,并且它的区域几乎不受 Δ 影响. 与之相比,粒子激发诱导的超固态相表现出相同的性质. 类似于三角晶格中得到的超固态相[5],这里的超固态相与固态相之间的相变属于二级相变,而超固态相与超流相之间的相变则属于一级相变. 由于图 3 中横轴是用 μ_{bc2} 和 μ_{bc3} 调谐定标的,所以很容易得出固态相叶会随着 Δ 的增加而出现收缩,这与我们用平均场理论得出的结果一致.

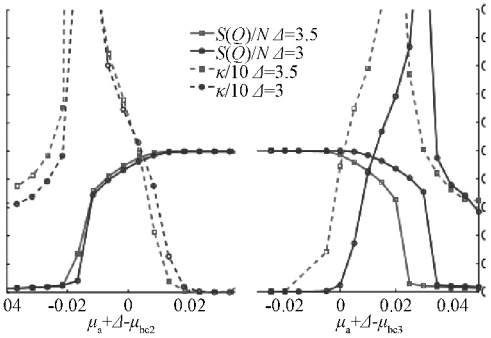


图 3　结构因子 $S(Q)/N$(实线) 和压缩性 κ / 10(虚线),其中已取 $C_6 = 1$, $g = 0.8(0.6)$, $\beta = 100$, $L = 100$ 分别代表左侧(右侧),同时左、右侧分别是空穴激发和粒子激发

在图 4 中我们得到了 $\Delta = 3$ 时的相图,其临界线很好地吻合了先前强耦合展开工作中的结果[5-6]. 依据平均场理论的预测,由粒子激发诱导的超固态相的区域要较小于空穴激发诱导的区域,然而两者的超固态相区域都很窄,这种性质同考虑

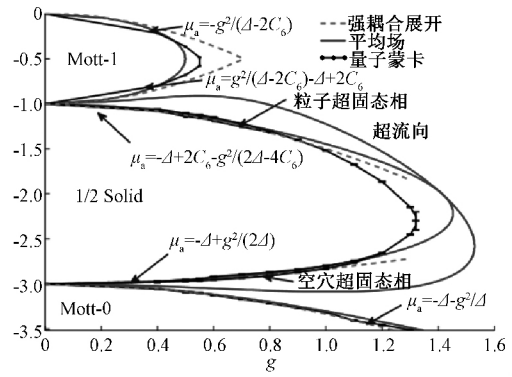


图 4　由三种方法平均场理论、强耦合展开和量子蒙特卡罗模拟得到的相图,已取 $C_6 = 1$ 和 $\Delta = 3$

次近邻相互作用的方形晶格得到的超固态相很类似[7].

5　结　论

本文主要研究的是一维情况下里德堡原子与腔场相互作用的系统,通过平均场理论、强耦合展开和量子蒙特卡罗模拟,我们得到了全参数空间的相图. 除了 Mott 绝缘态之外,我们不仅发现了 π 电荷密度波的部分填充固态相,当交换项 g 值很大时还发现了超流相,最重要的是发现了位于固态相与超流相(SF) 之间的稳定的超固态相(SS).

同时,粒子激发诱导的超固态相相比空穴激发诱导的更加不稳定,最后我们还发现前面文中定义的化学势失谐量 Δ 强烈地影响着不同相的存在和形状.

参　考　文　献

[1] Weimer H, Löw R, Pfau T, et al. Quantum critical behavior in strongly interacting Rydberg gases [J]. Phys Rev Lett, 2008, 101(25): 250601.

[2] Weimer H, Büchler H P. Two-stage melting in systems of strongly interacting Rydberg atoms [J]. Phys Rev Lett, 2010, 105(23): 230403.

[3] Guerlin C, Brion E, Esslinger T, et al. Cavity quantum electrodynamics with a Rydberg-blocked atomic ensemble [J]. Phys Rev A, 2010, 82(5): 053832.

[4] Eastham P R, Littlewood P B. Bose condensation of cavity polaritons beyond the linear regime: the thermal equilibrium of a model microcavity [J]. Phys Rev B, 2001, 64(23): 235101.

[5] Zhang X F, Dillenschneider R, Yu Y, et al. Supersolid phase transitions for hard-core bosons on a triangular lattice [J]. Phys Rev B, 2011, 84(17): 174515.

[6] Zhang X F, Wen Y C, Yu Y. Three-body interactions on a triangular lattice [J]. Phys Rev B, 2011, 83(18): 184513.

[7] Hébert F, Batrouni G G, Scalettar R T, et al. Quantum phase transitions in the two-dimensional hardcore boson model [J]. Phys Rev B, 2001, 65(1): 014513.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

The Cavity on the Rydberg Atoms in One Dimensional System

Yan Hao Ji Anchun Sun Qing

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048)

Abstract

The system of cavity interacting with atoms presented many physical properties such as state stability and the quantum phase transition. The model in this paper was cavity coupling with Rydberg atoms in one dimension, and the coupling of the excited state Rydberg atoms and cavity field was taken into consideration of the nearest neighbor of the dipole of the Rydberg atoms. By using the mean-field theory, strong coupling expansion and the Quantum Monte Carlo simulation, some diagrams related to the phase transition were obtained in the article. The most important findings were the stable supersolid phase which was located between the superfluid and the solid phase. The existence and the shape of different phases were changed with the effective chemical potential.

Key words: Rydberg atom, quantum phase transition, chemical potential, mean-field theory, Quantum Monte Carlo.

(C)1994-2020 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net