

Bogoliubov 谱的微扰法*

张颖, 胡洁**

(首都师范大学物理系, 北京 100048)

摘要:在冷原子物理中研究超流问题时,需要求解准粒子的 Bogoliubov 激发谱,而这个过程是通过体系的哈密顿量做 Bogoliubov 变换得到.对于简单体系,可直接对哈密顿量矩阵对角化,但当体系涉及多个能带时,哈密顿量矩阵形式复杂,计算难度很大.本文提出利用非厄米矩阵微扰的方法对角化哈密顿量,同时由微扰近似波函数构成 Bogoliubov 变换矩阵完成哈密顿量的 Bogoliubov 变换.

关键词:微扰法;非厄米矩阵;投影算符;谱分解定理

中图分类号: O411

DOI: 10.19789/j.1004-9398.2021.05.005

0 引言

自从爱因斯坦预言的玻色-爱因斯坦凝聚态(Bose-Einstein condensation, BEC)于1995年首次在实验室产生以来^[1],超冷玻色和费米气体已成为当代物理学中热门研究领域之一.超冷原子是保持在接近绝对零度下的原子,通常低于几十 μK .冷原子物理实验系统为研究凝聚态物理问题,如 BEC^[2-4]和超流^[5]等,提供了较为理想的平台.超流性与 BEC 现象密切相关.超流体可以流过狭窄的毛细管或狭缝而不耗散能量,其剪切粘度为0.1938年, Kapitza^[6]与 Allen 和 Misener^[7]分别发现液体 ^4He 的超流性. Landau 很快解释了这一现象,如果基本激发谱满足适当的标准,流体的运动就不会引起耗散,其显著特征是线性色散,这会发生超流^[2].在研究超流态时,为求解出准粒子的能谱,需要利用 Bogoliubov 对体系的哈密顿量进行对角化^[8].由文献[9]可知,对于玻色子系统, Bogoliubov 变换为双曲变换,不再是么正变换,这意味着对角化 Bogoliubov 哈密顿量的问题,可以等价转化成求解泡利矩阵 σ_z 乘以 Bogoliubov 哈密顿量所对应的本征值和本征态问题.对于简单的能带系统,如只有2条能带,能带之间不存在耦合, Bogoliubov 哈密顿量的对角化等价于求解一个 2×2 的非厄米矩阵的对角化问题,很容易求解.然

而,当体系涉及多条能带时,能带之间相互耦合, Bogoliubov 哈密顿量矩阵的维度变得很高,计算变得非常困难.一般而言,无法利用解析的方法精确地对角化高维度的非厄米矩阵.因此,本文研究如何对多能带玻色系统做 Bogoliubov 变换.

1 玻色子哈密顿量

1.1 两能带玻色子哈密顿量

考虑一个简单的两能带的玻色子体系,二次量子化后的哈密顿量为^[8]

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{g}{2V} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}, \quad (1)$$

式中 $k_1 + k_2 = k_3 + k_4$, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ 是玻色子的动能, \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k) 为玻色子的产生(湮灭)算符, g 为玻色子间的相互作用强度, V 是系统的体积.利用平均场理论^[10], 设 $\langle \hat{a}_{k=0} \rangle = \sqrt{N_0}$, N_0 为宏观占据零动量态的玻色子数, 令4个动量 k_1, k_2, k_3 和 k_4 中的2个动量凝聚在基态, 即零动量处, 可以得到 Bogoliubov 哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k + gn_0) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{gN_0}{2V} + \frac{gn_0}{2} \sum_{k \neq 0} (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_{-k} \hat{a}_k), \quad (2)$$

式中 $N = N_0 + \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$, 将哈密顿量表示在 Nambu 表象下^[11-12]

收稿日期: 2021-01-26

* 国家自然科学基金项目(21503138)

** 通信作者: jie.hu@cnu.edu.cn

$$\hat{H} = \sum_{k \neq 0} \hat{\phi}_k^\dagger \mathbf{H}_k \hat{\phi}_k + \text{Const}, \quad (3)$$

式中 $\hat{\phi}_k = (\hat{a}_k, \hat{a}_{-k}^\dagger)^\top$ 为 Nambu 表象下的玻色子场算符, Bogoliubov 哈密顿量矩阵 \mathbf{H}_k 为

$$\mathbf{H}_k = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon_k + gn_0 & gn_0 \\ gn_0 & \varepsilon_k + gn_0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

需要做 Bogoliubov 变换以将体系的哈密顿量转换至自身表象下表示. 对于玻色子系统, 准粒子需要满足对易关系, 对角化 Bogoliubov 哈密顿量矩阵等价于求解 $\sigma_z \mathbf{H}_k$ 的本征值问题^[9].

定义新的哈密顿量 $\mathbf{H}_k^{\text{new}} = \sigma_z \mathbf{H}_k$, 则有

$$\mathbf{H}_k^{\text{new}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon_k + gn_0 & gn_0 \\ -gn_0 & -(\varepsilon_k + gn_0) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

对于 2×2 的非厄米矩阵, 可以通过求解其所对应的久期方程, 得到体系的能量本征值, 得到超流能谱

$$E_{k,1} = -E_{k,2} = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2gn_0)}, \quad (6)$$

设 $E_{k,i}$ 对应的本征态为 $\psi_i(k) = (\psi_{k,ia}, \psi_{k,ib})^\top$, 其中 $i = 1, 2$ 分别表示体系的 2 个本征态. 由文献[9]可知, 2 个本征态的形式分别为:

$$\psi_1(k) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k + gn_0}{E_{k,1}} + 1 \right)} \\ -\sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k + gn_0}{E_{k,1}} - 1 \right)} \end{pmatrix}, \quad \psi_2(k) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k + gn_0}{E_{k,1}} - 1 \right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k + gn_0}{E_{k,1}} + 1 \right)} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

由此, 可以得到 Bogoliubov 变换矩阵 $\mathbf{U} = (\psi_{k,1}, \psi_{k,2})$, 则准粒子可表示为 $\hat{\phi}_k = \mathbf{U} \hat{\phi}_k$, 其中 $\hat{\phi}_k = (\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{-k}^\dagger)^\top$, $\hat{\alpha}_k^\dagger$ ($\hat{\alpha}_k$) 为准粒子的产生(湮灭)算符, 而在准粒子表象下的哈密顿量矩阵为

$$\mathbf{H} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{H}_k^{\text{new}} \mathbf{U} = \begin{pmatrix} E_{k,1} & 0 \\ 0 & -E_{k,2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

完成了 Bogoliubov 哈密顿量矩阵的对角化, 此时哈密顿量在自身表象中是对角矩阵, 对角项为 Bogoliubov 能量本征值, 即准粒子能谱.

1.2 多能带玻色子哈密顿量

当体系涉及更多能带时, Bogoliubov 哈密顿量矩阵的维度也变得更高, 此时对角化矩阵有一定难度. 一般而言, 无法解析求解出 Bogoliubov 谱, 在此,

引入一种微扰的方法来求解 Bogoliubov 谱. 将非厄米的 $\sigma_z \hat{H}$ 分为 2 部分 $\sigma_z \hat{H} = \sigma_z \hat{H}_0 + \sigma_z \hat{H}'$. 其中 $\sigma_z \hat{H}_0$ 部分可以严格求解出相应的本征态和本征值, $\sigma_z \hat{H}'$ 对于 $\sigma_z \hat{H}_0$ 而言, 是小量, 记作微扰^[13]. 因此, 可以在 $\sigma_z \hat{H}_0$ 的本征解的基础上, 将微扰的影响逐级考虑进去, 从而可求得尽可能精确的近似能谱解.

泡利矩阵与 Bogoliubov 哈密顿量的乘积 $\sigma_z \hat{H}$ 是非厄米的, 满足方程:

$$\sigma_z \hat{H} |\psi_n^R\rangle = E_n |\psi_n^R\rangle, \quad (9)$$

$$\langle \psi_n^L | \sigma_z \hat{H} = \langle \psi_n^L | E_n, \quad (10)$$

式中 E_n 为体系的能量本征值, $\langle \psi_n^L |$ 和 $|\psi_n^R\rangle$ 分别为左右本征波函数, 被称为双正交基, 其正交性和完备性分别为

$$\langle \psi_m^L | \psi_n^R \rangle = \delta_{mn} \langle \psi_m^L | \psi_n^R \rangle, \sum_n |\psi_n^R\rangle \langle \psi_n^L| = 1. \quad (11)$$

$\sigma_z \hat{H}_0$ 也是非厄米的, 满足方程:

$$\sigma_z \hat{H}_0 |\psi_n^{R(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{R(0)}\rangle, \quad (12)$$

$$\langle \psi_n^{L(0)} | \sigma_z \hat{H}_0 = \langle \psi_n^{L(0)} | E_n^{(0)}, \quad (13)$$

等式(12)两边同时右乘 $\langle \psi_n^{L(0)} |$, 可得

$$\sigma_z \hat{H}_0 |\psi_n^{R(0)}\rangle \langle \psi_n^{L(0)}| = E_n^{(0)} |\psi_n^{R(0)}\rangle \langle \psi_n^{L(0)}|. \quad (14)$$

定义算符

$$\hat{P}_n = \frac{|\psi_n^R\rangle \langle \psi_n^L|}{\langle \psi_n^L | \psi_n^R \rangle}, \quad (15)$$

可知算符 \hat{P}_n 满足 $\hat{P}_n = \hat{P}_n^2$, $\sum_n \hat{P}_n = 1$ 且 $\hat{P}_n \cdot \hat{P}_m = 0$ ($m \neq n$), 即算符 \hat{P}_n 为投影算符^[14]. 将等式(15)代入等式(14), 可得

$$\sigma_z \hat{H}_0 \hat{P}_n^{(0)} = E_n^{(0)} \hat{P}_n^{(0)}. \quad (16)$$

结合投影算符的性质可进一步推出

$$\sigma_z \hat{H}_0 = \sum_n E_n^{(0)} \hat{P}_n^{(0)}, \quad (17)$$

该式被称为谱分解定理^[14].

按照微扰论逐级展开的基本原理, 令

$$|\psi_n^R\rangle = |\psi_n^{R(0)}\rangle + |\psi_n^{R(1)}\rangle + |\psi_n^{R(2)}\rangle + \dots, \quad (18)$$

$$\langle \psi_n^L| = \langle \psi_n^{L(0)}| + \langle \psi_n^{L(1)}| + \langle \psi_n^{L(2)}| + \dots, \quad (19)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad (20)$$

并约定波函数的各高级近似解与零级近似解均正交, 即

$$\langle \psi_n^{L(s)} | \psi_n^{R(0)} \rangle = 0, \langle \psi_n^{L(0)} | \psi_n^{R(s)} \rangle = 0, s = 1, 2, 3, \dots. \quad (21)$$

将等式(18)和(20)代入等式(9), 可得

$$\begin{aligned} & (\sigma_z \hat{H}_0 + \sigma_z \hat{H}') \left(|\psi_n^{R(0)}\rangle + |\psi_n^{R(1)}\rangle + |\psi_n^{R(2)}\rangle + \dots \right) = \\ & (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots) \left(|\psi_n^{R(0)}\rangle + |\psi_n^{R(1)}\rangle + |\psi_n^{R(2)}\rangle + \dots \right). \end{aligned} \quad (22)$$

比较等式两边同量级项, 可得出各级近似下的本征方程为:

$$\sigma_z \hat{H}_0 |\psi_n^{R(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{R(0)}\rangle, \quad (23)$$

$$(\sigma_z \hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\psi_n^{R(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') |\psi_n^{R(0)}\rangle, \quad (24)$$

$$(\sigma_z \hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |\psi_n^{R(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') |\psi_n^{R(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{R(0)}\rangle. \quad (25)$$

将等式(17)分别代入等式(24)和(25)中, 可得:

$$\left(\sum_m E_m^{(0)} \hat{P}_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) |\psi_n^{R(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') |\psi_n^{R(0)}\rangle, \quad (26)$$

$$\left(\sum_m E_m^{(0)} \hat{P}_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) |\psi_n^{R(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') |\psi_n^{R(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{R(0)}\rangle. \quad (27)$$

等式(26)两边同时左乘 $\langle \psi_n^{L(0)} |$, 并利用波函数的性质(11), 可求得能量的一级修正为

$$E_n^{(1)} = \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_n^{L(0)} | \psi_n^{R(0)} \rangle}. \quad (28)$$

等式(27)两边同时左乘 $\langle \psi_n^{L(0)} |$, 结合上式求出的一级修正, 可求得能量的二级修正为

$$E_n^{(2)} = \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{R(1)} \rangle}{\langle \psi_n^{L(0)} | \psi_n^{R(0)} \rangle}. \quad (29)$$

在此, 求出了能量的各级修正. 由此可知, Bogoliubov 变换矩阵 U 由本征态组成, 继续求解哈密顿量 $\sigma_z \hat{H}$ 对应的本征态 $\langle \psi_n^L |$ 和 $|\psi_n^R\rangle$.

等式(24)两边同时左乘 $\langle \psi_s^{L(0)} |$ ($s \neq n$), 并利用式(11), 可得

$$\langle \psi_s^{L(0)} | \psi_n^{R(1)} \rangle = \frac{\langle \psi_s^{L(0)} | \sigma_z \hat{H}' | \psi_n^{R(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_s^{(0)}}. \quad (30)$$

利用投影算符的完备性, 可将一级微扰近似波函数改写为

$$|\psi_n^{R(1)}\rangle = \sum_m \hat{P}_m^{(0)} |\psi_n^{R(1)}\rangle = \sum_m \frac{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_n^{R(1)} \rangle}{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_m^{R(0)} \rangle} |\psi_m^{R(0)}\rangle. \quad (31)$$

将等式(30)代入式(31), 可将一级近似微扰波函数表示为

$$|\psi_n^{R(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{L(0)} | \sigma_z \hat{H}' | \psi_n^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_m^{R(0)} \rangle} \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{R(0)}\rangle. \quad (32)$$

将所求的一级近似微扰波函数, 代入能量的二级修正表达式(29)中, 并结合投影算符的性质, 可得出二级能量修正的简化表示形式

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\text{tr} [\hat{P}_n \sigma_z \hat{H}' \hat{P}_m \sigma_z \hat{H}']}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (33)$$

综上, 准确到二级近似下, 能量的本征值为

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \sigma_z \hat{H}' | \psi_n^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_n^{L(0)} | \psi_n^{R(0)} \rangle} + \sum_{m \neq n} \frac{\text{tr} [\hat{P}_n \sigma_z \hat{H}' \hat{P}_m \sigma_z \hat{H}']}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (34)$$

同理, 可求出一级微扰近似下左本征波函数为

$$\langle \psi_n^{L(1)} | = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_m^{R(0)} \rangle} \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{L(0)}\rangle. \quad (35)$$

因此, 在一级近似下, 能量的左右本征波函数分别为:

$$\langle \psi_n^L | = \langle \psi_n^{L(0)} | + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_m^{R(0)} \rangle} \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{L(0)}\rangle, \quad (36)$$

$$|\psi_n^R\rangle = |\psi_n^{R(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{L(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{R(0)} \rangle}{\langle \psi_m^{L(0)} | \psi_m^{R(0)} \rangle} \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{R(0)}\rangle. \quad (37)$$

得到能量 E_n 的本征态后, 便可获得 Bogoliubov 变换矩阵 U , 进而确定玻色子场算符与准粒子算符之间的关系, 将 Bogoliubov 哈密顿量从玻色子场表象转换至准粒子表象, 完成 Bogoliubov 变换, 最终得到 Bogoliubov 谱, 即准粒子能谱.

在求解 Bogoliubov 能谱时, 对于式(1)体系的哈密顿量只保留了玻色子 $\hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_k)$ 算符的二次项, 因此, 准粒子激发是具有良好定义的本征模式. 在下一阶计算中, 只将 4 个动量 k_1, k_2, k_3 和 k_4 中的任意 1 个替换为零动量, 得到

$$V_{\text{int}} = \frac{g\sqrt{N_0}}{V} \sum_{k_1 k_2 k_3} \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} + \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_3}. \quad (38)$$

此时, Bogoliubov 准粒子存在相互作用, 不再是具有良好定义的本征模式, 将导致准粒子具有有限的寿命, 即发生衰变. 而通过对体系哈密顿量做 Bogoliubov 变换得到的准粒子能谱, 变换矩阵为计

算准粒子的 Beliaev 衰变和 Landau 衰变^[15]等行为, 提供了重要的物理参数.

2 结 论

本文研究了玻色子超流问题, 当体系涉及多个能带时, 提出一种非厄米矩阵微扰的方法求解 Bogoliubov 能谱, 同时, 由近似本征波函数构成

Bogoliubov 变换矩阵, 完成玻色子场表象到准粒子表象的转换, 以实现体系哈密顿量的 Bogoliubov 变换. 当考虑到玻色子场算符高阶项时, 准粒子数不守恒, 发生衰变. 准粒子的寿命决定了量子多体系统的许多基本性质, 如输运和热化等, 为进一步研究准粒子的其他物理性质如衰变等, 提供了尽可能精确的物理参数.

参 考 文 献

- [1] DAVIS K B, MEWES M O, ANDREWS M R, et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms [J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75(22): 3969.
- [2] PETHICK C J, SMIYH H. Bose-Einstein condensation in dilute gases[M]. New York: Cambridge University Press, 2002: 265-267.
- [3] ANDERSON M H, ENSHER J R, MATTHEWS M R, et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor[J]. *Science*, 1995, 269(5221): 198-201.
- [4] BRADLEY C, SACKETT C, TOLLETT J J, et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interaction[J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75(9): 1687-1690.
- [5] NOZIÈRES P, PINES D. The theory of quantum liquids[M]. New York: CRC Press, 2018: 3-18.
- [6] KAPITZA P. Viscosity of liquid helium below the λ -point[J]. *Nature*, 1938, 141(3558): 74.
- [7] ALLEN J F, MISENER A D. Flow of liquid helium II[J]. *Nature*, 1938, 141(3558): 75.
- [8] 杨展如. 量子统计物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2007: 118-131.
- [9] 白伊秀, 胡洁. 玻色子体系中的 Bogoliubov 变换[J]. 首都师范大学学报(自然科学版), 2021, 42(1): 10-13.
- [10] NEGELE J W, ORLAND H. Quantum many particle system[M]. Boulder: Westview Press, 1988: 195-204.
- [11] NAMBU Y. Structure of Green's function in quantum field theory[J]. *Physical Review*, 1955, 100(1): 394.
- [12] 蔡建华, 龚昌德, 姚希贤, 等. 量子统计的格林函数理论[M]. 北京: 科学出版社, 1982: 293-301.
- [13] 曾谨言. 量子力学卷 I [M]. 北京: 高等教育出版社, 2005: 361-364.
- [14] 曾谨言. 量子力学卷 II [M]. 北京: 高等教育出版社, 2005: 12.
- [15] BELIAEV S T. Application of the methods of quantum field theory to a system of bosons[J]. *Soviet Physics JETP*, 1958, 7: 289.

Perturbation method of Bogoliubov spectrum

ZHANG Ying, HU Jie

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

Abstract: When studying superfluid problems in cold atomic physics, it is necessary to solve the Bogoliubov excitation spectrum of quasi-particles, and this process is obtained by Bogoliubov transformation of the Hamiltonian of the system. For a simple system, the Hamiltonian matrix can be diagonalized directly, but when the system involves multiple energy bands, the Hamiltonian matrix is complex and difficult to calculate. In this paper, the Hamiltonian is diagonalized by the perturbation method of non-Hermitian matrix, and the Bogoliubov transformation matrix is formed by the perturbation approximate wave function to complete the Bogoliubov transformation of the Hamiltonian.

Keywords: perturbation method; non-Hermitian matrix; projection operator; spectral decomposition theorem

(责任编辑: 兰丽丽)