

盒型势阱中的旋转偶极量子气体 *

李诗成¹⁾²⁾ 王帅¹⁾²⁾ 姚星灿^{1)2)3)†}

1) (中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026)

2) (中国科学技术大学, 上海量子科学研究中心, 中国科学院量子信息与量子科技创新研究院, 上海 201315)

3) (中国科学技术大学, 合肥国家实验室, 合肥 230088)

盒型势阱提供了均匀且边界锐利的囚禁势, 有效避免了简谐势阱所固有的势场非均匀性, 为研究偶极量子气体的旋转效应提供了理想平台。本文在旋转参考系下求解三维扩展 Gross-Pitaevskii 方程, 采用分步 Crank-Nicolson 方法结合虚时演化, 系统研究了盒型势阱中偶极玻色气体的基态密度分布与旋转下的涡旋构型。数值研究发现, 随接触散射长度 a_s 减小, 径向环状密度调制连续增强, 但体系始终保持旋转对称性; 当 a_s 降至临界值时, 旋转对称性发生自发破缺, 角向密度调制突然涌现。引入旋转后, 当转动频率超过临界值, 表面模式的软化使多个涡旋近乎同时进入凝聚体, 总环量子数随之由零跃变为有限值。相对偶极强度的增大进一步软化了表面模式, 降低了涡旋成核的能量代价, 使涡旋在更低转动频率下即可出现。随转动频率继续升高, 离心势将原子推向体系边缘, 中心形成低密度区域; 涡旋向中心汇聚, 形成当前空间分辨率下不可分辨的, 具有多环量子数的中心结构, 并与外围项链状单量子涡旋共存, 这明显不同于简谐势阱中常见的 Abrikosov 涡旋晶格。上述结果表明, 盒型势阱的锐利边界与偶极相互作用共同决定了旋转偶极超流中量子涡旋的空间构型, 为后续实验研究盒型势阱中的偶极量子气体提供了理论参考。

关键词: 偶极量子气体, 盒型势阱, 涡旋结构, 密度调制

PACS: 03.75.Lm, 03.75.Hh, 03.75.Kk, 67.85.Hj

1 引言

近年来, 随着 Dy、Er 等高磁矩原子的冷却与调控技术不断发展, 偶极量子气体为研究长程各向异性相互作用驱动的量子多体物理提供了高度可控的平台^[1-3]。与仅具有短程接触相互作用的玻色气体不同, 偶极量子气体中接触相互作用、偶极相互作用以及量子涨落之间相互竞争, 可诱导形成密度调制态、超固态 (兼具空间密度调制与超流性) 以及自束缚量子液滴等丰富量子多体现象^[4-11]。

对于超固态, 一个核心问题是如何在空间密度调制的背景下检验其超流性质。在常规 Bose-Einstein 凝聚体中, 旋转产生的量子涡旋是检验超流性的经典判据^[12, 13]。因此, 对于偶极量子气体, 特别是当其进

† 通信作者. E-mail: yaoxing@ustc.edu.cn

第一作者. E-mail: lsc010620@mail.ustc.edu.cn

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874340)、国家重点研发计划 (批准号: 2018YFA0306501)

入超固态参数区间时，能否在旋转下产生量子涡旋，是检验其超流存在性的重要途径。近年来，超固态中的量子涡旋研究取得显著进展：基于简谐势阱体系，理论方面围绕量子涡旋的产生开展了系统研究^[14,15]，实验方面则直接观测到了量子涡旋^[16]。相较于简谐势阱体系，盒型势阱具有内部囚禁势均匀、边界锐利等特点，为研究均匀势场下偶极量子气体的密度调制及旋转下的量子涡旋提供了新的实验平台^[17-20]。已有研究表明，盒型势阱中的偶极凝聚体可出现边界原子聚集、中心密度耗尽以及项链状环形调制等结构^[21]，但锐利边界与偶极相互作用如何共同决定旋转下涡旋的产生与空间构型，目前仍缺乏系统研究。

基于此，本文从旋转参考系下的扩展 Gross-Pitaevskii(eGP) 方程出发，采用分步 Crank-Nicolson 方法与虚时演化，建立了求解三维盒型势阱中旋转偶极量子气体的数值模拟方法。无旋转时，与简谐势阱中密度中心高、边缘低的分布相反，体系的密度由中心向边缘逐渐增高。随接触散射长度 a_s 减小，相对偶极强度 $\epsilon_{dd} \equiv a_{dd}/a_s$ (a_{dd} 为偶极散射长度) 增大，径向环状密度调制持续增强；当 a_s 降至约 $88.25a_0$ 时，旋转对称性发生自发破缺，角向密度调制突然出现。简谐势阱中则截然不同：旋子不稳定性^[22,23] 引发径向与角向的密度调制，二者相互交织，几乎同时出现。引入旋转后，当转动频率超过临界值，表面模式软化并失稳，多个涡旋在边界附近同时成核并进入凝聚体，总环量子数 Q_t 由零跃变为有限值。相对偶极强度 ϵ_{dd} 越大，密度调制越显著，由此诱导的模式软化使涡旋产生的转动频率阈值进一步降低。随转动频率继续升高，离心势将原子推向势阱边缘，中心形成低密度区；环量向中心集中，在中心聚集形成当前空间分辨率下不可分辨的，具有多环量子数的中心结构，并与外围项链状单量子涡旋共存，与简谐势阱中常见的 Abrikosov 涡旋晶格显著不同。当 $\Omega/2\pi > 25$ Hz 时， Q_t 随转动频率近似线性增长。上述结果为后续在盒型势阱中研究偶极量子气体的密度调制、旋转下的超流与超固态提供了理论参考。

2 旋转参考系下的 eGP 方程

2.1 理论模型

在零温极限下，本文采用 eGP 方程描述盒型势阱中含偶极相互作用的稀薄玻色气体^[24,25]。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g_s N |\psi|^2 + g_{dd} N \int d^3 r' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 + g_{qf} N^{3/2} |\psi|^3 - \Omega L_z \right] \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中波函数满足归一化条件 $\int |\psi|^2 d^3 \mathbf{r} = 1$ ，式中最后一项 $-\Omega L_z$ 表示旋转参考系引入的角动量耦合。盒型势阱的分布函数可以写为：

$$V(r, z) = V_0 \left\{ \exp \left[-\frac{(r - r_0)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z + z_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right\}. \quad (2)$$

其中 r_0 表示径向势垒的位置， z_0 表示上下方向势垒的位置， σ 用来控制势垒的宽度， V_0 则为势垒高度。

设粒子间的接触相互作用散射长度为 a_s ，定义接触相互作用强度系数 $g_s = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ 。类似地，偶极散射长度为 $a_{dd} = C_{dd}m/12\pi\hbar^2$ ，偶极相互作用强度系数 $g_{dd} = 4\pi\hbar^2 a_{dd}/m$ ，偶极相互作用 V_{dd} 为

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = \frac{3}{4\pi} \frac{(\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2) r^2 - 3(\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \mathbf{r})(\hat{\mathbf{e}}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5}. \quad (3)$$

其中 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ 为两原子之间的相对位移矢量， $r = |\mathbf{r}|$ ； $\hat{\mathbf{e}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_2$ 分别表示两个原子偶极矩取向的单位矢量。为考虑超越平均场的量子涨落效应，本文在局域密度近似下引入 Lee-Huang-Yang (LHY) 修正项，其对应的强度系数写为 $g_{qf} = \frac{32}{3\sqrt{\pi}} g_s a_s^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2} \epsilon_{dd}^2\right)^{[26-28]}$ 。此外 ΩL_z 一项代表旋转参考系对哈密顿量的贡献，其中 $L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$ ， $\Omega/2\pi$ 表示旋转参考系相对于实验室参考系的转动频率。

2.2 数值方法

为求解上述含非局域相互作用的三维旋转 eGP 方程, 本文首先对方程进行无量纲化处理。具体地, 取参考长度 l , 并以 $E_0 = \hbar^2/(2ml^2)$ 作为能量单位, 以 $t_0 = \hbar/E_0 = 2ml^2/\hbar$ 作为时间单位。相应地, 引入无量纲变量 $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/l$, $\tilde{t} = t/t_0$ 和 $\tilde{\psi} = l^{3/2}\psi$, 这里带波浪号的量表示无量纲变量。在该约定下, 波函数仍满足归一化条件 $\int |\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}})|^2 d^3\tilde{\mathbf{r}} = 1$ 。无量纲化后的旋转参考系下 eGP 方程可写为^[29]

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} = \left[-\tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}(\tilde{\mathbf{r}}) + \tilde{g}_s N |\tilde{\psi}|^2 + \tilde{g}_{dd} N \int d^3\tilde{\mathbf{r}}' \tilde{V}_{dd}(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') |\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}}')|^2 + \tilde{g}_{qf} N^{3/2} |\tilde{\psi}|^3 - \tilde{\Omega} \tilde{L}_z \right] \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}}). \quad (4)$$

其中 $\tilde{L}_z = -i \left(\tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} - \tilde{y} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \right)$, 无量纲转动角频率为 $\tilde{\Omega} = \Omega t_0 = 2ml^2\Omega/\hbar$ 。无量纲散射长度定义为 $\tilde{a}_s = a_s/l$ 和 $\tilde{a}_{dd} = a_{dd}/l$, 因此无量纲接触相互作用强度为 $\tilde{g}_s = 8\pi\tilde{a}_s$, 无量纲偶极相互作用强度为 $\tilde{g}_{dd} = 8\pi\tilde{a}_{dd}$ 。相对偶极强度保持为 $\epsilon_{dd} = a_{dd}/a_s = \tilde{a}_{dd}/\tilde{a}_s$ 。在局域密度近似下, Lee-Huang-Yang 修正项对应的无量纲系数为 $\tilde{g}_{qf} = (256\sqrt{\pi}/3)\tilde{a}_s^{5/2}(1 + 3\epsilon_{dd}^2/2)$ 。为简洁起见, 后文将在上述无量纲化方程的基础上展开, 并省略所有无量纲变量上的波浪号。

随后, 将波函数在三维空间网格上进行离散化, 并采用了分步 Crank-Nicolson 方法计算时间演化, 将哈密顿量分解为不含空间导数的相互作用部分以及三个空间方向上各自的导数部分^[29, 30]:

$$\begin{aligned} H_1 &= V(\mathbf{r}) + g_s N |\psi|^2 + g_{dd} N \int d^3\mathbf{r}' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}', t)|^2 + g_{qf} N^{3/2} |\psi|^3, \\ H_2 &= -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - i\Omega y \frac{\partial}{\partial x}, \\ H_3 &= -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + i\Omega x \frac{\partial}{\partial y}, \\ H_4 &= -\frac{\partial^2}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

其中, H_1 包含外势、接触相互作用、非局域偶极相互作用以及量子涨落修正; H_2 、 H_3 和 H_4 分别对应沿 x 、 y 和 z 方向的导数项, 其中 H_2 和 H_3 还包含由旋转耦合引入的一阶导数项。上述方法使得每个子步骤只涉及一个空间方向上的隐式求解, 无需直接处理完整三维离散哈密顿量所对应的大规模稀疏矩阵, 从而降低了存储需求和计算复杂度。

在单个时间步长 Δt 内, 波函数从第 n 步演化到第 $n+1$ 步可分解为四个子步骤。记经过第 i 个子步骤后的波函数为 $\Psi^{n+i/4}$ ($i = 1, 2, 3, 4$)。在数值实现中, 我们首先对相互作用部分 H_1 进行演化, 再依次处理 x 、 y 和 z 方向上的导数项。以前两个子步骤为例, 其演化形式可写为

$$\begin{aligned} \Psi^{n+1/4} &= e^{-i\Delta t H_1} \Psi^n, \\ i \frac{\Psi^{n+1/2} - \Psi^{n+1/4}}{\Delta t} &= \frac{1}{2} H_2 (\Psi^{n+1/2} + \Psi^{n+1/4}). \end{aligned} \quad (6)$$

对式 (6) 中的 H_2 采用离散化表示后, 可得到关于 $\Psi_i^{n+1/2}$ 的三对角线性方程

$$\begin{aligned} i \frac{\Psi_i^{n+1/2} - \Psi_i^{n+1/4}}{\Delta t} &= -\frac{\Psi_{i+1}^{n+1/2} - 2\Psi_i^{n+1/2} + \Psi_{i-1}^{n+1/2} + \Psi_{i+1}^{n+1/4} - 2\Psi_i^{n+1/4} + \Psi_{i-1}^{n+1/4}}{2h_x^2} \\ &\quad - i\Omega y \frac{\Psi_{i+1}^{n+1/2} - \Psi_{i-1}^{n+1/2} + \Psi_{i+1}^{n+1/4} - \Psi_{i-1}^{n+1/4}}{4h_x}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中, i 表示离散网格 x_i 处的格点指标, h_x 为 x 方向的网格间距。整理后, 上式可写为标准的三对角形式

$$A_i^- \Psi_{i-1}^{n+1/2} + A_i^0 \Psi_i^{n+1/2} + A_i^+ \Psi_{i+1}^{n+1/2} = B_i, \quad (8)$$

其递推解可表示为

$$\Psi_{i+1}^{n+1/2} = \alpha_i \Psi_i^{n+1/2} + \beta_i. \quad (9)$$

相应系数为

$$\begin{aligned} A^\pm &= \pm \frac{\Omega y \Delta t}{4h_x} - i \frac{\Delta t}{2h_x^2}, \\ A^0 &= 1 + \frac{i \Delta t}{h_x^2}, \\ B_i &= -A^+ \Psi_{i+1}^{n+1/4} + (A^0)^* \Psi_i^{n+1/4} - A^- \Psi_{i-1}^{n+1/4}, \end{aligned} \quad (10)$$

以及

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \frac{-A^-}{A^0 + A^+ \alpha_{i+1}}, \\ \beta_i &= \frac{-A^+ \beta_{i+1} + B_{i+1}}{A^0 + A^+ \alpha_{i+1}}. \end{aligned} \quad (11)$$

由此可见, α_i 和 β_i 满足从边界向内的后向递推关系。结合 Dirichlet 边界条件, 可取 $\alpha_{N_x} = 0$ 和 $\beta_{N_x} = 0$, 然后先反向求得全部递推系数, 再正向递推出当前时间步的波函数。对于 y 和 z 方向上的演化, 处理方式完全类似。

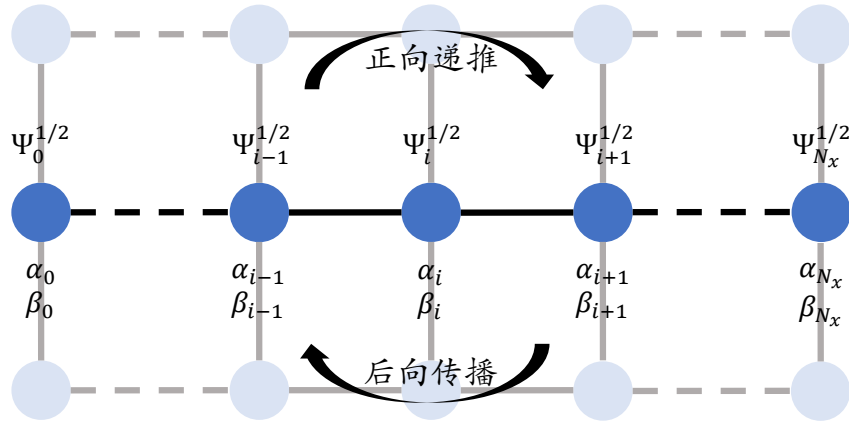


图 1 Crank-Nicolson 算法示意图

Fig. 1 Crank-Nicolson Algorithm Schematic Diagram

对于偶极相互作用项, 本文借助傅里叶卷积方法, 将实空间中高代价的三维非局域求和转化为傅里叶空间中的乘法运算。这样, 偶极项的计算量可由直接求和时的约 $O(N_{\text{grid}}^2)$ 降低为快速傅里叶变换所需的约 $O(N_{\text{grid}} \log N_{\text{grid}})$ ^[3,30]。具体计算形式如下:

$$\int d\mathbf{r}' V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}'; t)|^2 = \mathcal{F}^{-1} [\mathcal{F}(V_{\text{dd}}(\mathbf{r})) \mathcal{F}(|\Psi(\mathbf{r}; t)|^2)] . \quad (12)$$

其中偶极相互作用核 V_{dd} 如式 (3) 所示。如果所有原子偶极矩均由外磁场极化到同一方向, 则式 (3) 可化为

$$V_{\text{dd}}(\mathbf{r}) = \frac{3}{4\pi} \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \quad (13)$$

其中 θ 代表实空间相对位移矢量 $\mathbf{r}$ 与极化方向 $\hat{e}$ 之间的夹角。需要指出的是, 直接在傅里叶空间计算该项实际上等效于施加周期性边界条件, 这与本工作采用的 Dirichlet 边界条件并不一致。为减弱由此产生的边界伪影, 本文对实空间中的偶极相互作用核进行球形截断^[30]。对于截断半径为 R_c 的球形截断, 其傅

里叶变换形式可写为

$$\mathcal{F}[V_{\text{dd}}(\mathbf{r})] = 3(1 - 3\cos^2\alpha) \left[\frac{\sin kR_c}{(kR_c)^3} - \frac{\cos kR_c}{(kR_c)^2} - \frac{1}{3} \right]. \quad (14)$$

其中 α 代表傅里叶空间波矢 $\mathbf{k}$ 与偶极极化方向之间的夹角。这种处理既保留了傅里叶卷积在计算效率上的优势，又能够在一定程度上减弱周期性边界条件带来的数值伪影。

最后，为获得体系基态，本文采用虚时演化方法，即将实时间变量替换为虚时间变量^[29]。在这一替换下，实时间演化中的么正演化算符 $\exp(-iHt/\hbar)$ 转变为虚时演化中的非么正算符 $\exp(-H\tau/\hbar)$ ，对应的虚时间方程可写为

$$-\frac{\partial\Psi}{\partial\tau}(\mathbf{r},\tau) = H\Psi(\mathbf{r},\tau). \quad (15)$$

随着虚时间不断增大，初始态中高能激发成分将逐渐衰减，体系最终收敛到基态，即

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(\mathbf{r},\tau). \quad (16)$$

需要注意的是，在数值计算的过程中每个虚时间步之后均需要对波函数重新归一化。

在具体的数值计算中，为与实验平台研究的 ^{164}Dy 原子体系相对应^[31]，取偶极散射长度 $a_{\text{dd}} = 130.8a_0$ ^[3]，假设所有原子偶极矩均沿 z 轴方向极化，并将总原子数固定为 $N = 100000$ 。计算采用 $l = 1\ \mu\text{m}$ 作为参考长度，无量纲网格步长取为 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$ 。因此势阱的无量纲半径为 $r_0 = 10$ ，总高度为 $2z_0 = 8$ ，势阱边界平滑宽度长度取为 $\sigma = 0.3$ 。三维空间网格取为 $N_x \times N_y \times N_z = 360 \times 360 \times 240$ ，基态通过虚时演化获得，无量纲时间步长取为 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ 。偶极相互作用核采用球形截断，截断半径取为 $R_c = 18$ 。随后，通过改变接触散射长度 a_s 和转动频率 Ω ，系统研究不同相互作用强度和旋转条件下的基态密度分布及环流结构。

3 模拟结果

我们计算了无旋转条件下，体系基态随接触散射长度的变化，其结果如图 2 所示。随着 a_s 的减小，体系由常规凝聚态逐步演化为具有明显空间调制的状态。在较大 a_s 区域，体系已呈现出盒内中心区域相对耗尽、边界附近原子积聚的密度分布特征，这与盒型势阱中偶极体系已报道的边界主导密度重排现象一致^[21]。随着 a_s 的减小，体系首先表现出连续增强的径向环状密度调制；当 a_s 降低至 $88.63a_0$ 的临界散射长度附近时，角向对比度迅速增大，表明体系发生了旋转对称性的自发破缺，并形成明显的角向密度调制。

为定量刻画体系随接触散射长度变化所表现出的径向和角向密度不均匀性，我们分别定义径向对比度 C_r 和角向对比度 C_θ 。首先，对二维密度分布 $\rho(r, \theta)$ 进行角向平均，得到径向密度分布

$$\rho_r(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(r, \theta) d\theta. \quad (17)$$

为减小离散网格引起的局域起伏，并提高外侧主峰位置判定的稳健性，采用标准差为 $\sigma_0 = 0.4\ \mu\text{m}$ 的高斯核对 $\rho_r(r)$ 进行平滑：

$$\tilde{\rho}_r(r) = \int_0^\infty G_{\sigma_0}(r - r') \rho_r(r') dr', \quad (18)$$

随后，搜索平滑径向分布 $\tilde{\rho}_r(r)$ 的外侧最大值，并将其对应半径定义为 r_{peak} 。径向对比度定义为

$$C_r = \frac{\tilde{\rho}_{r,\text{max}} - \tilde{\rho}_{r,\text{min}}}{\tilde{\rho}_{r,\text{max}} + \tilde{\rho}_{r,\text{min}}}, \quad (19)$$

其中 $\tilde{\rho}_{r,\text{max}}$ 和 $\tilde{\rho}_{r,\text{min}}$ 分别为 $\tilde{\rho}_r(r)$ 在 $0 \leq r \leq r_{\text{peak}}$ 范围内的最大值和最小值。因此， C_r 的计算包含外壁主峰区域，但不包含主峰外侧的低密度尾部区域。图 2(d) 给出了 C_r 随 a_s 的变化关系。可以看到，随着

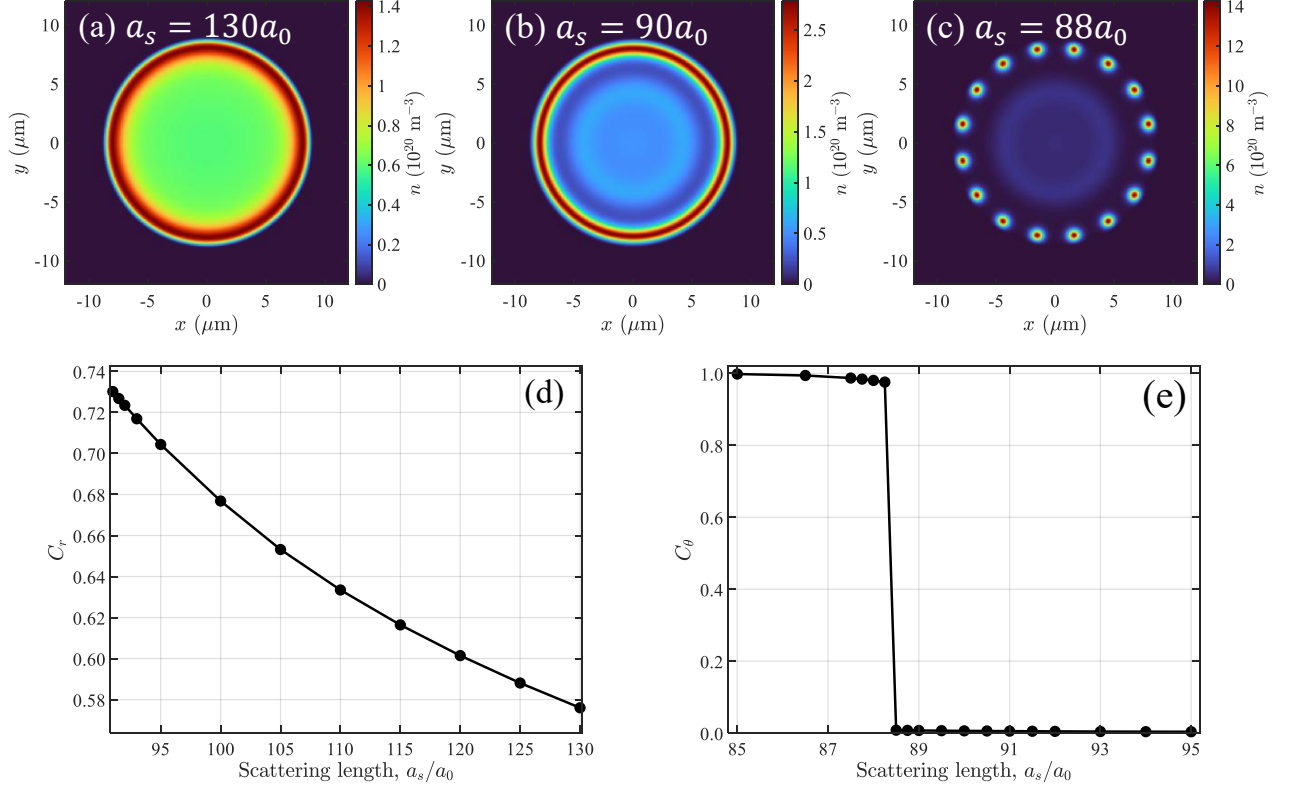


图 2 无旋转时体系基态密度分布随接触散射长度 a_s 的变化。图 (a)–(c) 分别给出 $a_s = 130a_0$ 、 $90a_0$ 和 $88a_0$ 时 $z = 0$ 平面的二维密度分布；图 (d) 为径向对比度 C_r 随 a_s 的变化，图 (e) 为角向对比度 C_θ 随 a_s 的变化。

Fig. 2 Ground-state density distributions without rotation for different contact scattering lengths a_s . Panels (a)–(c) show the two-dimensional density distributions in the $z = 0$ plane at $a_s = 130a_0$, $90a_0$, and $88a_0$, respectively. Panel (d) shows the radial contrast C_r and panel (e) shows the angular contrast C_θ , both as functions of a_s .

a_s 增大, C_r 单调降低, 说明较强的接触相互作用会逐渐抑制体系中的径向密度调制; 反之, 当 a_s 减小时, 径向密度起伏逐渐增强。

另一方面, 为定量描述角向密度调制强度, 我们选择在盒型势阱边缘的密度极大值 r_{edge} 附近取一个半宽为 $\Delta r = 0.5 \mu\text{m}$ 的环带, 并沿径向在该环带内进行径向平均得到角向密度分布 $\rho_\theta(\theta)$:

$$\rho_\theta(\theta) = \frac{1}{2\Delta r} \int_{r_{\text{edge}} - \Delta r}^{r_{\text{edge}} + \Delta r} \rho(r, \theta) dr. \quad (20)$$

类似地, 在对于角向密度分布 ρ_θ 进行高斯平滑后, 定义角向对比度

$$C_\theta = \frac{\tilde{\rho}_{\theta, \text{max}} - \tilde{\rho}_{\theta, \text{min}}}{\tilde{\rho}_{\theta, \text{max}} + \tilde{\rho}_{\theta, \text{min}}}, \quad (21)$$

其中 $\tilde{\rho}_{\theta, \text{max}}$ 和 $\tilde{\rho}_{\theta, \text{min}}$ 分别为平滑后角向密度分布 $\tilde{\rho}_\theta(\theta)$ 的最大值和最小值。图2(e) 给出了 C_θ 随 a_s 的变化。我们以发生 C_θ 发生突变的区间中点作为临界散射长度, 并以区间半宽作为有限扫描步长引起的不确定度, 那么在 $a_{s,c} = (88.63 \pm 0.13)a_0$ 附近, C_θ 由接近零迅速增大至接近 1, 表明体系的角向密度分布由近似均匀突然转变为强烈不均匀, 说明体系在该临界散射长度附近突然出现了显著的角向密度调制。

该阈值行为来源于偶极量子气体中旋子模式的软化。随着 a_s 减小, 相对偶极相互作用强度 ϵ_{dd} 增大, 激发谱中与有限波长密度起伏相关的旋子模式逐渐软化。当旋子能隙降低到 0 时, 沿环向排列的密度起伏成为能量上更有利的结构。此时轴对称密度分布失去稳定性, 体系会自发形成具有角向调制的基态结构, 从而破缺连续旋转对称性。因此, 角向对比度 C_θ 在临界散射长度附近表现明显的阈值行为。

与之相比, C_r 随 a_s 单调变化则不存在明显的阈值行为, 表明径向密度调制本质上是一种连续过渡过程, 不涉及对称性自发破缺。因此, 盒型势阱中的径向调制与角向调制是性质不同的两种物理过程: 前者为 ϵ_{dd} 增大驱动连续密度调制, 后者为真正的自发对称性破缺转变。这与简谐势阱中径向与角向旋子模式相互耦合、几乎同时涌现的情形形成鲜明区别。

接下来, 我们对体系施加转动, 研究旋转对基态结构的影响。为了清晰识别体系中的涡旋, 本文采用相位环量判据。在超流中, 闭合曲线的环量可以写为^[32]

$$\Gamma = \oint_C \frac{\hbar}{M} \nabla \phi \cdot d\mathbf{l} = 2\pi l_c \frac{\hbar}{M}, \quad (22)$$

我们将 l_c 称为环量子数。在二维密度切片上逐个检查由相邻网格点构成的闭合回路: 当闭合回路上的相位变化量接近 2π 时, 将其识别为一个单量子涡旋。对于中心低密度区域中彼此接近、无法通过相邻网格回路独立分辨的环流结构, 我们不再逐个统计涡旋核, 而是在其外侧有限密度区域选取闭合路径确定整体区域的总环量子数。

图 3(a)–(c) 展示了在固定散射长度 $a_s = 130a_0$ 下, 不同转动频率下的基态结构。当转动频率为 $\Omega/2\pi = 20 \text{ Hz}$ 时, 体系主体内部尚未形成稳定涡旋。如图 3(a) 所示, 此时密度分布仍然接近无旋转情形, 但相位在外部低密度区域附近已经出现明显扭转。图 3(b) 的转动频率为 $\Omega/2\pi = 27 \text{ Hz}$, 对应该散射长度下涡旋开始进入凝聚体的临界转动频率, 此时多个涡旋会近乎同时进入体系, 并在势阱内部呈现近似规则的四重对称分布。这一行为可以从边界模软化的角度理解。对于有限尺寸的凝聚体, 涡旋通常并非直接在高密度主体内部产生, 而是首先出现在密度较低的边界区域附近。边界附近存在一系列携带角动量的表面模式激发, 其密度扰动可以表示为 $\delta n(r, \theta) \sim u_m(r) \cos(m\theta)$, 其中 m 为角量子数。该模式的激发能量 $\hbar\omega'_m$ 会受到旋转项 $-\Omega L_z$ 的修正, 随着转动频率 Ω 增大, 具有较大角动量的表面模式在旋转参考系中的能量逐渐降低。当某一表面模式满足 $\omega'_m \approx 0$ 时, 边界密度起伏的能量代价显著降低, 圆形边界对角向形变变得不稳定。此时边界附近的相位缺陷可以在多个等价角向位置近乎同时形成, 并借助边界形变进入凝

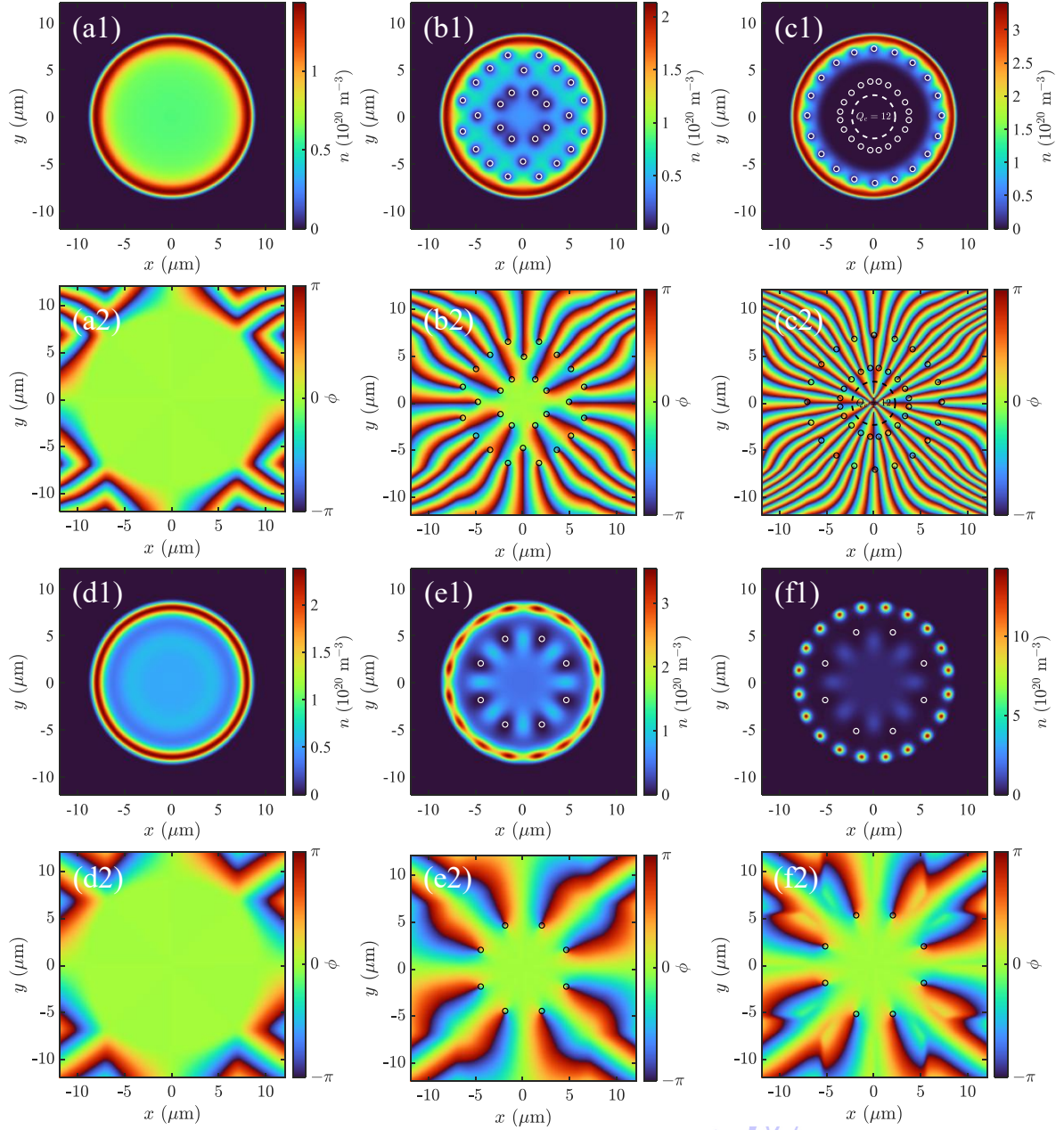


图 3 不同转动频率和接触散射长度下的基态涡旋结构。图 (a1)–(c2) 为固定接触散射长度 $a_s = 130a_0$ 时， $\Omega/2\pi = 20$ Hz、27 Hz 和 50 Hz 的结果；图 (d1)–(f2) 为固定转动频率 $\Omega/2\pi = 10$ Hz 时， $a_s = 94a_0$ 、 $92a_0$ 和 $88a_0$ 的结果。每一列中，上方子图为 $z = 0$ 平面的密度分布，下方子图为对应的相位分布。密度图中的白色圆圈和相位图中的黑色圆圈表示识别出的单量子涡旋。图 (c1) 和 (c2) 中的虚线圆表示用于计算中心区域总环量子数 Q_c 的积分回路。

Fig. 3 Ground-state vortex structures for different rotation frequencies and contact scattering lengths. Panels (a1)–(c2) show the results for a fixed contact scattering length $a_s = 130a_0$ at $\Omega/2\pi = 20$ Hz, 27 Hz, and 50 Hz; panels (d1)–(f2) show the results for a fixed rotation frequency $\Omega/2\pi = 10$ Hz at $a_s = 94a_0$, $92a_0$, and $88a_0$. In each column, the upper panel shows the density distribution in the $z = 0$ plane, whereas the lower panel shows the corresponding phase distribution. White circles in the density maps and black circles in the phase maps denote the identified singly quantized vortices. The dashed circle in panel (c1) and (c2) marks the integration contour used to calculate the central circulation quantum number Q_c .

聚体主体区域^[13,33]。随着转动频率进一步增大，体系中的总环量继续增加，并且更多地集中在中心区域。如图 3(c) 所示，高转动频率下体系中涡旋进一步在中心聚集，形成了一个携带多个环量量子数的整体结构，并在其外侧同时分布着两圈项链状的单量子涡旋。

另一方面，图 3(d)–(f) 给出了在固定转动频率 $\Omega/2\pi = 10$ Hz 下，不同接触散射长度对应的基态分布。当散射长度为 $a_s = 94a_0$ 时，体系主体内部仍未形成稳定涡旋，密度分布接近无涡旋基态，仅在外侧低密度区域出现相位扭转，如图 3(d) 所示。当散射长度减小至 $a_s = 92a_0$ 时，相对偶极相互作用 ϵ_{dd} 增大，体系的旋转对称性发生自发破缺，并伴随着涡旋进入凝聚体内部。如图 3(e) 所示，此时 8 个单量子涡旋在凝聚体内沿角向形成项链状分布。这一结果表明，密度调制及相关软化模式的发展能够降低涡旋进入的能量代价。

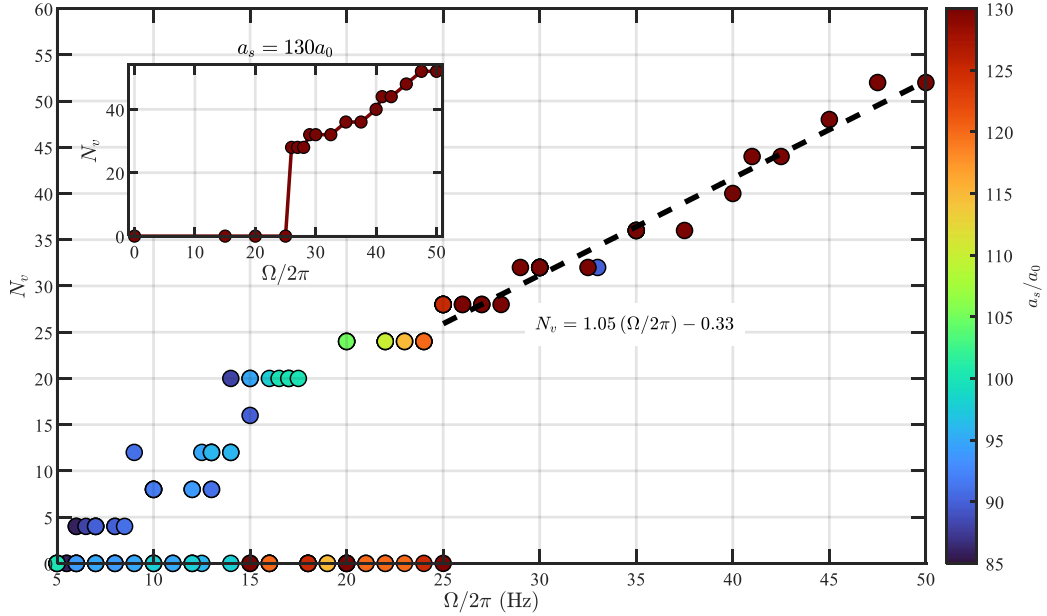


图 4 总环量量子数 Q_t 随转动频率 $\Omega/2\pi$ 的变化。数据点的颜色对应不同的接触散射长度 a_s 。黑色虚线为 $\Omega/2\pi > 25$ Hz 数据的线性拟合。插图给出了 $a_s = 130a_0$ 时， Q_t 在临界频率处的阶跃式跳变及随后的线性增长趋势。

Fig. 4 Total circulation quantum number Q_t as a function of the rotation frequency $\Omega/2\pi$. The color of each point represents the corresponding contact scattering length a_s . The inset shows the step-like jump of Q_t at the critical frequency and the subsequent linear growth trend for $a_s = 130a_0$. The black dashed line denotes a linear fit to the data for $\Omega/2\pi > 25$ Hz.

为了进一步定量刻画体系所携带总环量的变化，图 4 给出了凝聚体中总环量量子数 Q_t 随旋转频率 $\Omega/2\pi$ 的变化关系。当体系中仅存在彼此分离的单量子涡旋时， Q_t 等价于可分辨的涡旋个数；而当中心区域出现多量子涡旋结构时， Q_t 则表征中心区域与外围涡旋共同携带的总环量量子数。

从图 4 中可以看到，对于不同散射长度 a_s ，在较低转动频率下均有 $Q_t = 0$ ，表明此时旋转尚未在凝聚体主体内部产生稳定涡旋。当转动频率超过相应的临界值后， Q_t 由零跃变至有限值；这一特征在插图所示 $a_s = 130a_0$ 结果中更为清楚。在较低转动频率区域，涡旋产生受到不同边界模式软化的影响，不同接触散射长度下得到的总环量分布较为分散。随着旋转频率进一步增大，中心携带更大环量的涡旋在旋转参考系中变得更加有利。对 $\Omega/2\pi > 25$ Hz 区域的数据进行线性拟合可以看到，在高转动频率下，不同 a_s

对应的 Q_t 近似线性增长。结合图 3(c) 中的密度与相位分布可知，高转动频率对应的结构不再是简单的规则涡旋晶格，并且中心区域涡旋之间的距离随着转动角频率的增大越来越近，可以推测在不断增大转动角频率的过程中，将会形成中心为多量子涡旋并与外围项链状单环量涡旋共存的构型。

通过前面的结果可以看到，快速旋转下的盒型势阱中并未形成简谐势阱中常见的规则 Abrikosov 涡旋晶格，而是表现出与快速旋转简谐加四次势阱中讨论的多量子涡旋相似的结构特征^[34, 35]。在旋转参考系中，盒内原子感受到的有效势可近似写为^[36]

$$V_{\text{eff}}(r) \simeq -\frac{1}{2}m\Omega^2 r^2. \quad (23)$$

该离心项会降低势阱外侧相对于中心区域的有效势能，使原子密度向 $r \simeq R$ 附近重新分布，并导致中心区域的局域化学势降低，从而进一步压低中心密度。

对于半径为 R 的圆柱盒型体系，若用无转动下的化学势 μ_0 表征体系的平均相互作用能量尺度，则中心密度趋近于零的转动频率尺度可粗略估计为

$$\Omega_h \simeq \sqrt{\frac{2\mu_0}{mR^2}}, \quad (24)$$

其中 m 为原子质量。如果取 $a_s = 90a_0$ 下基态无旋转的化学势 $\mu_0/h \approx 600$ Hz，盒型势阱半径 $R = 10 \mu\text{m}$ ，并取 m 为 ^{164}Dy 原子的质量，可以估算出 $\Omega_h/2\pi \approx 27$ Hz。这一估计与图中 Q_t 开始进入近线性增长的转动频率接近，表明该趋势与离心势对中心密度的进一步压低密切相关。

为理解这一线性增长趋势，考虑中心低密度区域携带总环量 q 的环流图像。在该区域外侧，远场速度场可近似为^[36]

$$v_\theta(r) = \frac{q\hbar}{mr}. \quad (25)$$

对应的每粒子环流动能代价为

$$\Delta E_k \simeq \frac{\hbar^2 q^2}{2mN} \int d^3r n(r, z) \frac{1}{r^2}, \quad (26)$$

其中积分在中心低密度区域截断。记

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_n = \frac{1}{N} \int d^3r n(r, z) \frac{1}{r^2}, \quad (27)$$

若中心密度较高， $1/r^2$ 权重使中心环流付出较大动能代价；当离心效应使中心密度显著降低后，中心区域容纳相位奇点的能量代价大幅下降，环量因而倾向于向中心集中。

在旋转参考系中，中心高环量结构相对于无环流态的每粒子能量变化可近似为

$$\Delta E' \simeq \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_n - \Omega q \hbar, \quad (28)$$

将 q 视为连续变量并对上式最小化，得

$$q_0 = \frac{m\Omega}{\hbar} \frac{1}{\langle 1/r^2 \rangle_n}. \quad (29)$$

因此，在中心低密度区域承载总环量的图像下， q 随 Ω 近似线性增加。

这一线性关系在形式上与旋转超流体的 Feynman 关系^[13, 37] 相似，但物理内涵不同：Feynman 关系中的 Q_t 对应均匀分布于有效面积内的单量子涡旋数目，而本文的 Q_t 为中心整体环流与外围单量子涡旋共同携带的总环量。随着转动频率升高，新增环量不断向中心低密度区域汇聚，使 Q_t 的增长主要由中心环量 q 的线性增长主导。

4 结论

本文通过数值求解旋转参考系下的扩展 Gross-Pitaevskii 方程，系统研究了盒型势阱中偶极玻色气体的基态密度调制与量子涡旋构型。结果表明，盒型势阱的锐利边界与偶极相互作用共同驱动了径向密度调制，其随 ϵ_{dd} 增大连续增强；旋子不稳定性只在角向上触发真正的自发对称性破缺。而在简谐势阱中，径向密度调制与角向自发对称性破缺均由旋子不稳定性引发，二者相互交织、同时发生。在旋转条件下，表面模式软化使量子涡旋以近似跃变的方式进入凝聚体，偶极相对强度的增大进一步降低了涡旋进入的转动频率阈值。在快速旋转下，离心势将原子推向体系边缘，而环量则向中心聚集形成在当前空间分辨率下不可分辨的具有多环量量子数的整体结构，并与外围项链状单量子涡旋共存——这一空间构型本质上不同于简谐势阱中由单量子涡旋构成的 Abrikosov 晶格。未来可在实时演化框架下引入含时转动方案与有限温度效应，更真实地模拟盒型势阱实验中的涡旋动力学与超固相变过程。

录用稿件，非最终出版稿

参考文献

- [1] Lu M, Burdick N Q, Youn S H, Lev B L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 190401
- [2] Aikawa K, Frisch A, Mark M, Baier S, Rietzler A, Grimm R, Ferlaino F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 210401
- [3] Lahaye T, Menotti C, Santos L, Lewenstein M, Pfau T 2009 *Rep. Prog. Phys.* **72** 126401
- [4] Ferrier-Barbut I, Kadau H, Schmitt M, Wenzel M, Pfau T 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 215301
- [5] Chomaz L, van Bijnen R M, Petter D, Faraoni G, Baier S, Becher J H, Mark M J, Waechtler F, Santos L, Ferlaino F 2018 *Nat. Phys.* **14** 442
- [6] Tanzi L, Lucioni E, Famà F, Catani J, Fioretti A, Gabbanini C, Bisset R N, Santos L, Modugno G 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 130405
- [7] Böttcher F, Schmidt J N, Wenzel M, Hertkorn J, Guo M, Langen T, Pfau T 2019 *Phys. Rev. X* **9** 011051
- [8] Chomaz L, Petter D, Ilzhöfer P, Natale G, Trautmann A, Politi C, Durastante G, van Bijnen R M W, Patscheider A, Sohmen M, Mark M J, Ferlaino F 2019 *Phys. Rev. X* **9** 021012
- [9] Zhang S, Yuan W, Bigagli N, Kwak H, Karman T, Stevenson I, Will S 2026 *Nature* **651** 601
- [10] Biagioni G, Antolini N, Donelli B, Pezzè L, Smerzi A, Fattori M, Fioretti A, Gabbanini C, Inguscio M, Tanzi L, Modugno G 2024 *Nature* **629** 773
- [11] He Y, Zhen H, Parit M K, Huang M, Defenu N, Boronat J, Sánchez-Baena J, Jo G B 2025 arXiv:2512.13280 [cond-mat.quant-gas]
- [12] Abo-Shaeer J R, Raman C, Vogels J M, Ketterle W 2001 *Science* **292** 476
- [13] Fetter A L 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 647
- [14] Šindik M, Recati A, Rocuzzo S M, Santos L, Stringari S 2022 *Phys. Rev. A* **106** L061303
- [15] Bland T, Poli E, Politi C, Klaus L, Norcia M A, Ferlaino F, Santos L, Bisset R N 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 195302
- [16] Casotti E, Poli E, Klaus L, Litvinov A, Ulm C, Politi C, Mark M J, Bland T, Ferlaino F 2024 *Nature* **635** 327
- [17] Navon N, Smith R P, Hadzibabic Z 2021 *Nat. Phys.* **17** 1334
- [18] Li X, Wang S, Luo X, Zhou Y Y, Xie K, Shen H C, Nie Y Z, Chen Q, Hu H, Chen Y A, Yao X C, Pan J W 2024 *Nature* **626** 288
- [19] Li X, Luo X, Wang S, Xie K, Liu X P, Hu H, Chen Y A, Yao X C, Pan J W 2022 *Science* **375** 528

- [20] Xi Z H, Yang X Y, Tang N, Song L, Li X L, Shi Y R 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 230501 (in Chinese)
[席忠红, 杨雪滢, 唐娜, 宋琳, 李晓霖, 石玉仁 2018 物理学报 **67** 230501]
- [21] Roccuzzo S, Stringari S, Recati A 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 013086
- [22] Ronen S, Bortolotti D C E, Bohn J L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 030406
- [23] Schmidt J N, Hertkorn J, Guo M, Böttcher F, Schmidt M, Ng K S H, Graham S D, Langen T, Zwerlein M, Pfau T 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 193002
- [24] Gross E P 1961 *Nuovo Cim.* **20** 454
- [25] Pitaevskii L P 1961 *Sov. Phys. JETP* **13** 451
- [26] Lima A R, Pelster A 2011 *Phys. Rev. A* **84** 041604
- [27] Wächtler F, Santos L 2016 *Phys. Rev. A* **94** 043618
- [28] Bisset R, Wilson R, Baillie D, Blakie P 2016 *Phys. Rev. A* **94** 033619
- [29] Lončar V 2017 *Ph.D. Dissertation* (Novi Sad: University of Novi Sad)
- [30] Ronen S, Bortolotti D C E, Bohn J L 2006 *Phys. Rev. A* **74** 013623
- [31] Xie K, Li X, Zhou Y Y, Luo J H, Wang S, Nie Y Z, Shen H C, Chen Y A, Yao X C, Pan J W 2025 *Phys. Rev. A* **111** 023327
- [32] Kim J K, Fetter A L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043624
- [33] Klaus L, Bland T, Poli E, Politi C, Lamporesi G, Casotti E, Bisset R N, Mark M J, Ferlaino F 2022 *Nat. Phys.* **18** 1453
- [34] Bretin V, Stock S, Seurin Y, Dalibard J 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 050403
- [35] Chen G P, Qiao C B, Guo H, Wang L X, Wang Y J, Tan R B 2019 *Chin. Phys. B* **28** 010308
- [36] Fetter A L, Jackson B, Stringari S 2005 *Phys. Rev. A* **71** 013605
- [37] Feynman R P 1955 *Progress in Low Temperature Physics* (Vol. 1) (Amsterdam: Elsevier) pp17–53

Rotating Dipolar Quantum Gas in a Box Trap*

LI Shicheng¹⁾²⁾ WANG Shuai¹⁾²⁾ YAO Xingcan^{1)2)3)†}

1) (*Hefei National Research Center for Physical Sciences at the Microscale, School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

2) (*Shanghai Research Center for Quantum Sciences, CAS Center for Excellence in Quantum Information and Quantum Physics, University of Science and Technology of China, Shanghai 201315, China*)

3) (*Hefei National Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230088, China*)

Abstract

A box trap provides nearly uniform confinement with a sharp boundary, thereby largely removing the trap-induced density inhomogeneity in the central region associated with a harmonic trap and offering a distinct platform for investigating interaction-driven density modulation and rotational phenomena in dipolar quantum gases. In this work, we systematically study the ground-state density distributions and rotation-induced vortex configurations of a dipolar Bose gas confined in a cylindrical box trap. The system is described by the three-dimensional extended Gross–Pitaevskii equation, including the contact interaction, the long-range anisotropic dipole–dipole interaction, the Lee–Huang–Yang quantum-fluctuation correction, and the rotational term $-\Omega L_z$. The equation is solved by combining imaginary-time evolution with a split-step Crank–Nicolson scheme. The nonlocal dipolar interaction is evaluated using a Fourier-space convolution method, with a spherical cutoff of the dipolar kernel introduced to suppress numerical artifacts associated with the periodicity implicit in the fast Fourier transform.

In the absence of rotation, we find that decreasing the contact scattering length a_s produces two qualitatively different stages of density modulation. First, the radial ring-like modulation continuously increases while the density distribution remains rotationally symmetric. When the scattering length is further reduced to a critical value, the angular density contrast increases abruptly, signaling the spontaneous breaking of continuous rotational symmetry. This behavior differs from that in harmonically trapped dipolar condensates, where radial and angular density modulations are closely connected with roton softening and tend to develop together. The box geometry therefore allows the continuous radial density redistribution and the symmetry-breaking angular modulation to be clearly distinguished.

When rotation is introduced, vortices nucleate only after the rotation frequency exceeds an interaction-dependent critical value. Near the threshold, several vortices enter the condensate almost simultaneously,

*Project supported by NSFC of China (grant no. 11874340) and the National Key R&D Program of China (grant no. 2018YFA0306501).

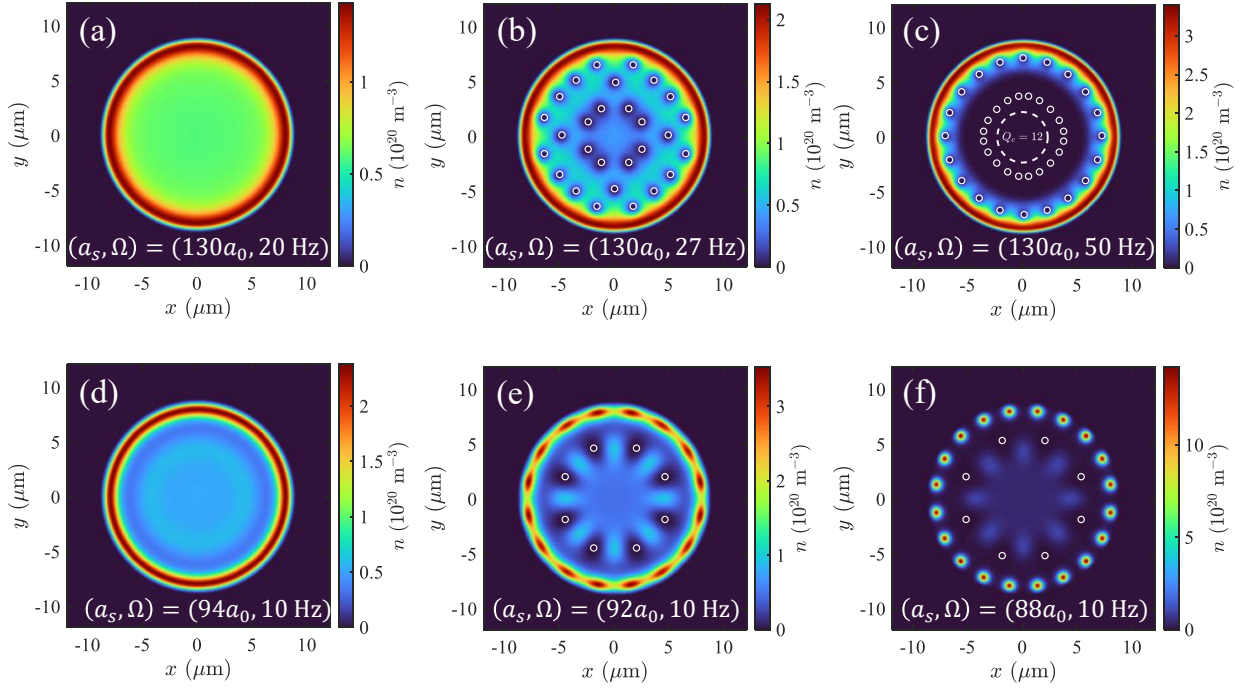
† Corresponding author. E-mail: yaoxing@ustc.edu.cn

The First Author. E-mail: lsc010620@mail.ustc.edu.cn

resulting in a finite jump of the total circulation quantum number Q_t . We attribute this behavior to the softening of surface modes carrying finite angular momentum. Increasing the relative dipolar interaction strength $\epsilon_{dd} = a_{dd}/a_s$ enhances the density modulation and further lowers the energetic cost of vortex nucleation, so that vortices can enter the condensate at lower rotation frequencies.

At higher rotation frequencies, the centrifugal effect redistributes atoms toward the outer region of the box and strongly suppresses the density near the center. As a result, vortices become increasingly concentrated in the central region, forming a central high-circulation structure whose internal configuration cannot be resolved at the current spatial resolution. This structure coexists with necklace-like arrays of singly quantized vortices and is markedly different from the Abrikosov vortex lattice in a harmonic trap. For $\Omega/2\pi > 25$ Hz, the calculated total circulation Q_t exhibits an approximately linear dependence on the rotation frequency.

Our results demonstrate that the sharp boundary of a box trap, the long-range dipolar interaction, and rotation jointly give rise to density-modulated and vortex states that are qualitatively different from those in conventional harmonic confinement. The present work clarifies the mechanisms underlying symmetry breaking, vortex nucleation, and circulation redistribution in rotating dipolar gases, and provides a theoretical basis for future experimental investigations of rotating dipolar superfluids and supersolid-related states in homogeneous box potentials.



Keywords: dipolar quantum gas, box trap, vortex structure, density modulation