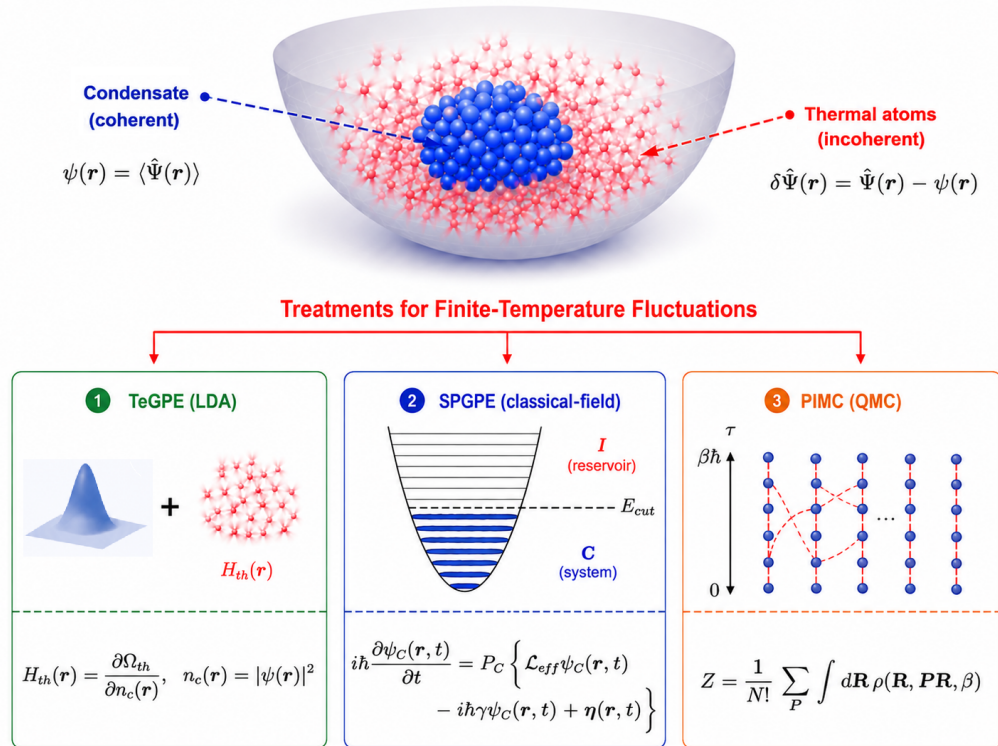


超冷原子气体的有限温效应

侯李丛 何亮君 董彪 张永昌[†]

(西安交通大学物理学院, 西安 710049)

自玻色-爱因斯坦凝聚体实验实现以来, 超冷原子体系已成为研究量子多体物理的理想平台之一。尽管零温平均场理论取得了巨大成功, 但实际系统温度不可能降至绝对零度, 必然面临有限温效应。热涨落不仅会导致非凝聚成分增加, 也可能引起其他反常物理效应, 例如偶极冷原子系统中温度驱动的超固态相变。本文总结了处理冷原子气体有限温效应的三大主要理论框架: 温度依赖的扩展 Gross-Pitaevskii 方程 (TeGPE)、连续空间经典场方法 (PGPE/SPGPE) 以及量子蒙特卡罗方法 (QMC), 梳理了上述方法在处理有限温基态相图、非平衡耗散动力学以及强关联涨落等物理问题中的理论优势与适用条件; 最后展望了能够实时自治追踪热原子气体反馈效应的量子动力学方法。



关键词: 玻色-爱因斯坦凝聚; 有限温效应; 偶极超固态; 经典场方法; 量子蒙特卡罗方法

1 引言

自 1995 年首次在稀薄原子气体中观测到玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) 以来^[1-3], 冷原子已成为研究量子多体物理与非平衡动力学的理想平台之一^[4-7]。在绝对零度 ($T \rightarrow 0$) 的极限下, 弱相互作用玻色气体的静态性质与动力学现象通常可由 Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 有效描述^[8-15]。然而, 实际系统都处于有限温条件下 ($0 < T < T_c$)。随着温度升高, 非凝聚成分占比增加^[16,17], GPE 对系统的描述变得不再准确, 必须引入对有限温热涨落效应的处理方法。

有限温效应不仅会导致凝聚占比的降低, 也能够作为核心物理驱动机制, 诱发宏观拓扑缺陷的非平衡耗散动力学^[18,19]。特别是在长程相互作用偶极量子气体等强关联体系或涉及 Lee-Huang-Yang (LHY) 修正的量子液滴模型中, 热涨落与量子涨落和多体相互作用竞争, 可以驱动超固态相变, 影响系统基态相图^[20-26]。因此, 开发兼具计算可行性与物理准确性的有限温动力学模型, 成为当前冷原子理论研究的重要任务。为应对这一挑战, 本文将系统回顾几种处理有限温多体问题的核心理论框架。

针对平衡态性质, 早期理论借鉴“双流体”模型^[27,28], 通过在平均场中引入热涨落修正 (Thermal correction, H_{th}) 以微扰方式处理非凝聚部分的物理效应^[29,30]。该方法用于处理远低于临界温度的近平衡态时较为有效, 但难以处理临界温度附近区域的大尺度涨落以及复杂的非平衡演化过程。

为了有效处理大尺度热涨落, 人们开发了基于能量截断的连续空间经典场方法 (c -field)。其中, 投影 Gross-Pitaevskii 方程 (PGPE)^[31,32] 利用投影算符约束低能激发模式, 为孤立系统在微正则系综下的热化与平衡态演化提供了完备的演化框架。进一步, 为了描述开放系统的耗散动力学, 随机投影 Gross-Pitaevskii 方程 (SPGPE)^[33-37] 将高能热原子视为巨正则热库, 引入与非相干热库的耗散耦合与随机噪声, 构建了可以描述非平衡相变及拓扑缺陷涌现 (如 Kibble-Zurek 机制^[38-40]) 的 Langevin 动力学模型。

尽管经典场方法取得了显著进展, 但其内禀的半经典近似 (在相干区内用 Rayleigh-Jeans 分布取代真实的 Bose-Einstein 统计^[41,42]) 忽略了高阶量子涨落。当系统进入强关联或高阶涨落主导的参数区时, 这种类似于平均场的方法往往受限。为此, 人们发展出了基于第一性原理的量子蒙特卡罗 (QMC) 方法, 特别是路径积分蒙特卡罗 (PIMC)^[43,44], 在有限温平衡态研究中展现出显著的优越性。PIMC 能够无偏地处理有限温热平衡态, 保持玻色统计对称性与精确的多体量子关联^[45,46], 它不仅为界定复杂相变边界提供了非微扰的精确数值解, 更为检验 PGPE、SPGPE 等半经典模型的物理有效性确立了可靠的参考标准^[22,47,48]。

† 通信作者. E-mail: zhangyc@xjtu.edu.cn

2 温度依赖扩展 Gross-Pitaevskii 方程 (TeGPE) 方法

2.1 TeGPE 的物理背景

描述弱相互作用玻色气体的理论起点是基于玻色场算符 $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ 的二次量子化多体场论^[11,21]。体系的动力学由包含单粒子动能、外加势场 $U(\mathbf{r})$ 及两体相互作用 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 的多体哈密顿量决定：

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

在此框架下，场算符的实时演化遵循 Heisenberg 方程：

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

在绝对零度且忽略量子涨落的极限下，上述方程通过 Bogoliubov 近似 ($\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) + \delta\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$) 可直接退化为经典的 GPE^[8,10]。

然而，为准确描述有限温系统，必须保留微观涨落算符的贡献。对于均匀体系，通过对角化哈密顿量可得到系统的总涨落自由能 (Thermodynamic potential) $\Omega_{\text{fluc}} = \Omega_{\text{qu}} + \Omega_{\text{th}}$ ^[49,50]。它由量子涨落 (准粒子零点能) 与热涨落 (热激发准粒子) 两部分共同构成^[51,52]。真实冷原子系统通常呈现非均匀特征，难以对涨落效应进行直观的解析描述。尽管理论上可以通过全空间数值对角化 (如求解高维 Bogoliubov-de Gennes 方程组^[53,54]) 来计算非均匀系统涨落效应，但这在处理真实三维大尺度多体系统时面临着极高的计算复杂度。一般可以借助局域密度近似 (LDA)^[29,55]，将均匀系统的涨落对局域凝聚体密度求泛函导数，便可将宏观涨落自治地映射为局部有效势能修正 $H_{\text{qu,th}}(\mathbf{r}) = \partial\Omega_{\text{qu,th}}/\partial|\psi(\mathbf{r})|^2$ 。

以偶极系统为例，通过对包含涨落有效势的总能量泛函进行变分，可得到温度依赖的扩展 Gross-Pitaevskii 方程 (TeGPE)^[21,30]：

$$\mu\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 + H_{\text{qu}}(\mathbf{r}) + H_{\text{th}}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

此处 μ 为化学势， a_s 为 s 波散射长度。 $V_{\text{dd}}(\mathbf{r}) = 3\hbar^2 a_{\text{dd}}(1 - 3\cos^2\theta)/(mr^3)$ 表示长程偶极相互作用势，其中 θ 对应极化方向与粒子间位移的夹角。量子涨落势 H_{qu} (即 LHY 修正)^[56,57] 与热涨落势 H_{th} ^[29,30] 的解析表达式为：

$$H_{\text{qu}}(\mathbf{r}) = \frac{32}{3\sqrt{\pi}} g \sqrt{a_s^3} Q_5(a_{\text{dd}}/a_s) |\psi(\mathbf{r})|^3; \quad (4)$$

$$H_{\text{th}}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{(e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}} - 1)} \tilde{V}(\mathbf{k}) \frac{\tau_{\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}. \quad (5)$$

其中 $\tilde{V}(\mathbf{k}) = 4\pi\hbar^2 a_s/m + (4\pi\hbar^2 a_{dd}/m)(3k_z^2/k^2 - 1)$ （假设偶极子沿 z 轴极化）为相互作用势的傅里叶变换，自由粒子动能 $\tau_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m$ ， $\varepsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\tau_{\mathbf{k}}[\tau_{\mathbf{k}} + 2|\psi(\mathbf{r})|^2\tilde{V}(\mathbf{k})]}$ 对应于给定局域密度下的 Bogoliubov 激发谱。参数 a_{dd} 描述偶极特征长度， $Q_5(a_{dd}/a_s) = \int_0^1 du[1 - a_{dd}/a_s + 3(a_{dd}/a_s)u^2]^{5/2}$ 。

TeGPE 的核心价值在于：它将有限温准粒子激发与高阶量子涨落，以内禀有效势的形式集成于单粒子非线性方程中。这种理论推广不仅规避了全空间自洽求解多组分耦合方程组的巨大计算复杂度，更从根本上避免了经典场方法中对能量截断的人为选取，为研究有限温强关联气体（如偶极超固态）的稳态与近平衡动力学提供了一个物理图像直观且高效的理论工具。

2.2 TeGPE 方法的典型物理应用

TeGPE 将微扰涨落表示为化学势修正项，极大降低了求解复杂度，同时可以揭示有限温诱导的密度调制等反常效应。该方法在处理偶极或低维强关联量子气体时具有显著优势，主要应用包括以下两方面。

2.2.1 热涨落诱导的反常对称性破缺

在处理强关联偶极量子气体时，不同于传统相变理论通常认为热涨落会破坏长程有序，TeGPE 理论揭示了热涨落能够表现出促使空间平移对称性自发破缺的反常效应^[29,58]。其微观机制源于系统内禀的能量竞争：量子涨落（LHY 修正）提供维持系统稳定的排斥力，而热涨落修正 H_{th} 则随密度降低而递增，产生一种倾向于局部聚集的“聚焦效应”^[59]。这两者的非线性竞争导致旋子激发能隙软化，进而在宏观上反常驱动超固态相变。

这一反常现象首先在准一维偶极气体的研究中得到验证。Sánchez-Baena 等人^[58,59] 利用 TeGPE 模拟了准一维体系的热力学演化，如图1(c) 所示，理论结果展示了有限温驱动超固态相变的反常现象。在真实的镝（Dy）原子气体实验中^[60]，处于特定参数区间的系统在零温时本应为均匀超流态，但 TeGPE 成功预言了其在有限温下超固态的自发形成，且理论临界线与实验结果高度吻合 [图1(b)]。这一结果有力地证明了实验中观测到的周期性调制结构实质上是由有限温热涨落驱动。

上述在一维体系中确立的“热聚集”机制，自然引导理论研究向更高维度拓展。过去基于零温平均场理论的预测，二维蜂窝状和条纹状超固态的形成通常需要较高的粒子密度^[23,61]。然而，在实验中制备高粒子数的 BEC 极为困难，同时过高的密度会急剧放大非弹性三体复合损失，显著降低凝聚体寿命^[61]，导致实验观测困难。为了突破这一实验限制，何亮君等人将 TeGPE 方法拓展应用于二维偶极体系展开系统研究^[30]。结果表明，热涨落引起的密度聚集效应对二维空间调制结构同样具有显著的促进作用。如图1(d)

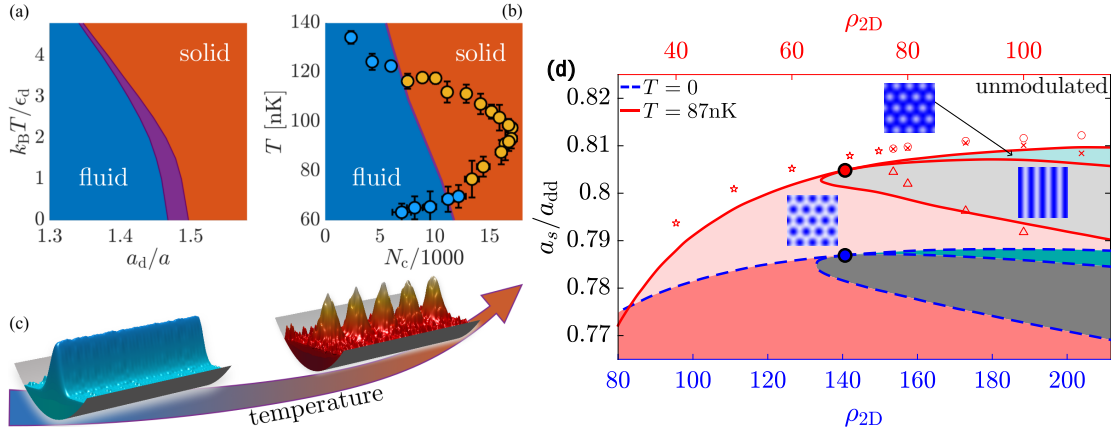


图 1 有限温偶极量子气体中热涨落诱导的对称性破缺 [30,59]。(a) 准一维 BEC 的理论热力学相图 [60]，展示了超流相（蓝色）、两相共存区（紫色）与超固态（红色）随温度和相互作用的变化规律；(b) 准一维超固态实验测量的密度对比度（散点）与理论相变边界（紫色实线）的对比；(c) 有限温驱动超固态相变的物理示意图；(d) 准二维偶极 BEC 在零温与有限温下的变分相图。

Fig. 1. Thermal fluctuations induced symmetry breaking of low-dimensional supersolids in dipolar quantum gases [30,59]. (a) Theoretical finite-temperature phase diagram of a quasi-1D BEC [60], displaying the superfluid (blue), two-phase coexistence (purple), and supersolid (red) phases; (b) Comparison between experimentally measured density contrast (scatter points) with the theoretical phase boundary (purple solid line) in quasi-1D; (c) Schematic illustration of heating-induced supersolidity; (d) Variational phase diagram of a pancake 2D dipolar condensate at zero and finite temperatures.

所示，在引入有限温修正（ $T = 87 \text{ nK}$ ）后，实现蜂窝型超固态所需的平均密度大约降低为零温条件下的一半，这为动态制备二维超固态提供了更可行的方案。该工作进一步通过淬火动力学模拟证实，在势阱较弱、粒子数较多的情况下，热涨落的存在使得系统在计入真实三体损失的情况下，仍能自发形成并维持长时间蜂窝特征密度分布；而同等参数下的零温模拟则完全无法观察到该结构。这种热涨落主导的超固态相变促进机制，大幅降低了实现二维高密度超固态所需要的粒子数。

综上所述，从一维体系中反常“加热致固”现象的精准预言，到二维体系中低维调制相实验观测窗口的大幅拓宽，TeGPE 展现出了处理强关联系统有限温效应的强大理论预测能力。它不仅在微观层面上深刻揭示了热涨落、量子涨落与长程相互作用之间的非线性竞争物理，更为探索和调控复杂量子流体中的新奇相变提供了一种物理图像直观、计算高效的方法。

2.2.2 有限温静态可观测量与宏观相图的定量定标

在利用经典场理论（如 PGPE 或 SPGPE）模拟复杂的非平衡动力学演化之前，准确获取系统的初始平衡态构型，是保证后续数值求解稳定与自洽的基础^[21]。建立在局域密度近似（LDA）基础上的 TeGPE，作为一种近平衡态的有效场模型，能够为复杂的 PGPE/SPGPE 提供合理的初态输入（如高能截断与初始化学势）。

更为重要的是，在大范围扫描参数空间（如温度 T 与散射长度 a_s ）时，TeGPE 展现出极高的计算效率。结合虚时演化（Imaginary-time evolution）算法，该方法能够快速收敛至体系的自由能极小值。例如，在近期关于偶极玻色气体热辅助超固态的研究中，理论人员利用 TeGPE 高效地绘制了简谐势阱下完整的有限温相图^[62]。该研究不仅清晰界定了超流相、单液滴与超固态的相变边界，还能直接提取密度对比度等核心序参量，定量证明了适度的有限温热力学效应能够稳定零温下原本处于动力学不稳定状态的调制相。

在定量标定实验观测量方面，TeGPE 能够计算存在显著热激发（Thermal depletion）时的真实凝聚比例。以近期极性分子（如 NaCs）BEC 实验为例，由于体系伴随着庞大的热激发损耗，传统的零温纯凝聚体演化方程完全失效。而通过引入热库与凝聚体的非线性耦合，TeGPE 不仅准确给出了有限温基态的峰值密度，其预测的飞行时间（Time-of-flight）膨胀密度分布也与极性分子实验测量结果取得了高度一致性^[63]。这种高效的稳态求解能力，使 TeGPE 成为连接宏观热力学观测量与复杂多体动力学的理想桥梁。

2.3 TeGPE 方法的适用范围与理论局限性

尽管 TeGPE 在处理强关联偶极量子气体的平衡态性质和稳态相图时展现出了显著的理论优越性，但其本质上仍属于一种基于局域密度近似（LDA）的修正理论。TeGPE 方法的核心优势在于用化学势修正项的形式处理微扰涨落，从而高效地揭示量子涨落与热涨落竞争的物理效应，如前文所述有限温驱动超固态相变现象。该方法在系统远低于临界温度且凝聚部分占主导的条件下，为实验中观测到的与温度相关的物理现象提供了直观且定量的物理解释。

然而，TeGPE 方法在处理更为复杂的多体关联与非平衡物理过程时面临着难以逾越的理论局限。首先，由于其依赖定态的 Bogoliubov 激发谱来计算热涨落积分，该理论无法自洽地描述系统在逼近相变临界区（ $T \rightarrow T_c$ ）时所伴随的大尺度涨落^[11,21]。其次，TeGPE 理论框架将非凝聚的热原子视为一种提供能量泛函修正的静态或绝热背景，完全忽略了宏观凝聚体与高能热原子气体之间实时的粒子和能量交换机制。这意味着它无法精准描述诸如系统受迫蒸发冷却、凝聚体动态生成、热化弛豫过程以及相干性从无

序热库中自发涌现等远离平衡的动力学现象。此外，在处理拓扑缺陷（如量子涡旋阵列^[64]与结构化孤子态^[65,66]）的自发产生与演化问题上，缺乏显式热噪声项和耗散机制的确定性波动方程，无法捕捉到引起局部相位随机变化的微观动力学涨落，进而难以解释动态相变中的缺陷生成率及其空间分布等性质。

3 经典场方法

3.1 经典场演化的基础理论框架

尽管在前一章中探讨的 TeGPE 将微扰涨落表示为化学势修正项，成功给出了基态相图和近平衡动力学模拟。然而，在面对冷原子体系真实的非平衡动力学演化、凝聚体自发对称性破缺过程以及逼近临界区 ($T \rightarrow T_c$) 的大尺度涨落时，其将热原子气体视为绝热背景的限制性便凸显出来。为更准确描述系统的动力学演化，必须发展涵盖模式间非线性耦合的非微扰动力学理论，经典场理论正是处理有限温简并玻色气体实时非平衡动力学的代表性方案之一。

3.1.1 投影 Gross-Pitaevskii 方程 (PGPE)

经典场理论基于能量截断思想^[41]：在有限温条件下，低能模式的粒子占据数极高 ($n_k \gg 1$)，此时玻色场算符的对易子可以忽略 ($[\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger] \approx 0$)，量子场可近似为对易的经典复数场。因此，尽管低能区是量子简并的核心，这些高度占据的物质波模式动力学行为由经典热力学涨落主导，可等效替代为连续演化的经典波动场^[67-70]。

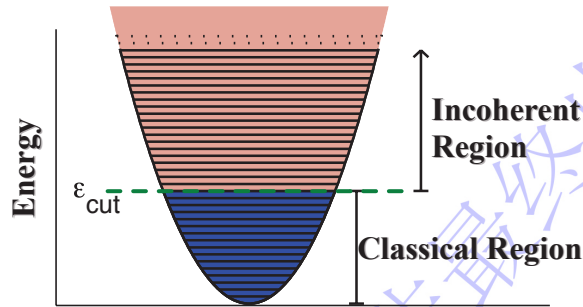


图 2 谐振子势阱中玻色气体单粒子能谱的经典区域与非相干区域^[71]。

Fig. 2. Classical and incoherent regions of the single particle spectrum for a harmonically trapped Bose gas^[71].

经典场方法通过引入截断能量（一般取 $\epsilon_{\text{cut}} \approx k_B T + \mu$ ^[72]），如图2所示，将系统划分为两部分：

1. 相干区 (c-field): $\epsilon_n \leq \epsilon_{\text{cut}}$ 的低能态，包含凝聚体及核心低能激发动力学。

2. 非相干区 (*I*-field): $\epsilon_n > \epsilon_{\text{cut}}$ 的高能态, 被视为处于热力学平衡的巨正则热库。

为使动力学严格封闭在相干区内, 引入投影算符 $\mathcal{P}_c\{F(\mathbf{r})\} \equiv \sum_{n \in \mathbf{C}} \phi_n(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \phi_n^*(\mathbf{r}') F(\mathbf{r}')$, 其中 $\{\phi_n(\mathbf{r})\}$ 为本征基底, $\mathbf{C}$ 表示相干模式集合^[73], 由此得到 PGPE^[41,71,74-76]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{P}_c \{ \mathcal{L}_{\text{eff}}[\psi_c(\mathbf{r}, t)] \}, \quad (6)$$

对于包含量子涨落效应 LHY 修正 (H_{qu}) 的偶极气体, 非线性演化算符 $\mathcal{L}_{\text{eff}}$ 为:

$$\mathcal{L}_{\text{eff}}[\psi_c] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' V_{\text{dd}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_c(\mathbf{r}')|^2 + g |\psi_c(\mathbf{r})|^2 + H_{\text{qu}}(\mathbf{r}) \right) \psi_c(\mathbf{r}). \quad (7)$$

PGPE 方法借助投影操作 $\mathcal{P}_c$ 剔除高能散射, PGPE 严格遵守相干区内的粒子数与能量的双重守恒, 对应微正则系综下的确定性演化。在没有外部热库介入的前提下, 孤立系统仅依靠内禀的非线性相互作用即可实现动量与能量的重新分配, 自发完成各态遍历与热化^[41,77,78]。

3.1.2 随机投影 Gross-Pitaevskii 方程 (SPGPE)

实际冷原子实验 (如蒸发冷却、凝聚体的动态生成以及拓扑缺陷的自发形成) 通常是高度非平衡的开放系统演化过程^[11,79,80], 相干区与高能热库间存在剧烈的粒子与能量交换。为此, 在 PGPE 方法的基础上, SPGPE 不再将系统视为封闭孤立的, 而是将非相干区域处理为温度 T 、化学势 μ 的巨正则热库^[42,81-83]。

凝聚体和热库的耦合主要源于两类碰撞机制: 碰撞后发生粒子交换的“生长过程”与仅交换能量的“散射过程”。由于生长机制主导了系统的耗散与涨落^[84], 理论上常采用简化的复 Langevin 动力学模型来描述^[81,85,86]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{P}_c \{ (1 - i\gamma) (\mathcal{L}_{\text{eff}}[\psi_c] - \mu) \psi_c(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t) \}, \quad (8)$$

其中, 无量纲阻尼系数 γ 驱动系统向热库化学势不可逆弛豫, 高斯白噪声 $\eta(\mathbf{r}, t)$ 模拟热涨落。为保证系统正确热化, 噪声必须严格满足涨落-耗散定理 (Fluctuation-Dissipation Theorem)^[41,87], 即 $\langle \eta^*(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\hbar\gamma k_B T \delta(t - t') \delta_C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 。此处 δ_C 为在相干区域投影的狄拉克函数, $\delta_C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{n \in \mathbf{C}} \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}')$ ^[88]。

与 PGPE 相比, SPGPE 的核心优势是能真实追踪开放系统的动态对称性破缺。例如, 通过调控外场参数, 它成功模拟了偶极气体受旋子不稳定性驱动生成超固态液滴的过程, 揭示了热涨落对缺陷寿命与全局相干性的调制机制^[23,89]。

3.2 孤立系统中的投影经典场动力学

PGPE 描述的是无外部热库交换的完全孤立系统，其本质是确定性且时间反演对称的偏微分方程。统计物理的核心问题在于：孤立多体系统如何在无外部驱动时抹去初始记忆并自发热化？本节重点探讨 PGPE 的内禀各态遍历性及其在有限尺寸系统中的弛豫行为。

3.2.1 孤立量子气体的各态遍历热化与临界涨落

PGPE 理论的首要应用是确立其各态遍历性 (Ergodicity)。尽管 PGPE 是封闭系统方程，其内禀的高维非线性相互作用网络可充当微观热库。Davis 等人证明^[73]，即便赋予随机初态，系统长时演化后也会丧失初始记忆，低能模式精确弛豫至经典 Rayleigh-Jeans 分布。

在非对称势阱中，演化基底变为空间各向异性模式，由物质波四波混频 (Four-wave mixing) 主导的模式间耦合更为复杂^[71]。如图3所示，人为构造各向异性压缩态，宏观可观测量（如均方根半径）在演化初期表现出强烈的集体振荡。随后，能量通过非线性级联耦合向高频模式输运，表现为宏观集体振荡的自发非线性阻尼与微观相空间的各态遍历铺展。经过足够长时间的弛豫，各方向方差最终收敛至微正则系综预测的平衡值 [图3(e),(f)]。这证明只要系统的非线性相互作用强度足以打破可积性的束缚并诱导经典波混沌，各态遍历与自发热化便是有限温弱相互作用玻色气体的普适动力学特征。

在成功模拟自发热化平衡态的基础上，PGPE 进一步展现了处理大尺度临界涨落的非微扰能力^[90]。当系统逼近超流相变临界点 ($T \rightarrow T_c$) 时，长波热涨落导致空间关联长度无标度发散。传统的微扰理论（如 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 平均场近似，该理论虽引入了热排斥与反常对关联涨落，但本质上依赖于对高阶相互作用的截断）在处理这种红外发散时往往失效。Bezett 等人利用 PGPE 完整保留相干区非线性相互作用的优势，研究了受限体系的一阶空间相干函数^[75]。

Bezett 等人通过拟合空间关联长度的散度，提取出该有限体系的临界指数 $\nu = 0.8 \pm 0.12$ 。尽管受势阱的有限尺寸效应影响，该拟合值较标准三维 XY 普适类的理论极值 ($\nu \approx 0.67$) 有所偏移，但在误差范围内取得了与 Donner 等人物质波干涉实验^[91] ($\nu = 0.67 \pm 0.13$) 一致的结果。这一结果不仅印证了经典场框架在处理大尺度临界涨落时的有效性，也为研究有限尺寸效应对连续相变临界动力学的修正提供了重要的数据参考。

PGPE 对临界指数 ν 的定量预测以及对有限尺寸展宽效应的再现，是经典场理论在临界区研究中的重要成果。该一致性不仅印证了经典场框架超越传统微扰近似的有效性，更表明在处理大尺度热涨落存在的连续相变临界动力学时，基于单粒子模式能量截断的投影经典波动方程，足以在红外极限下有效捕捉多

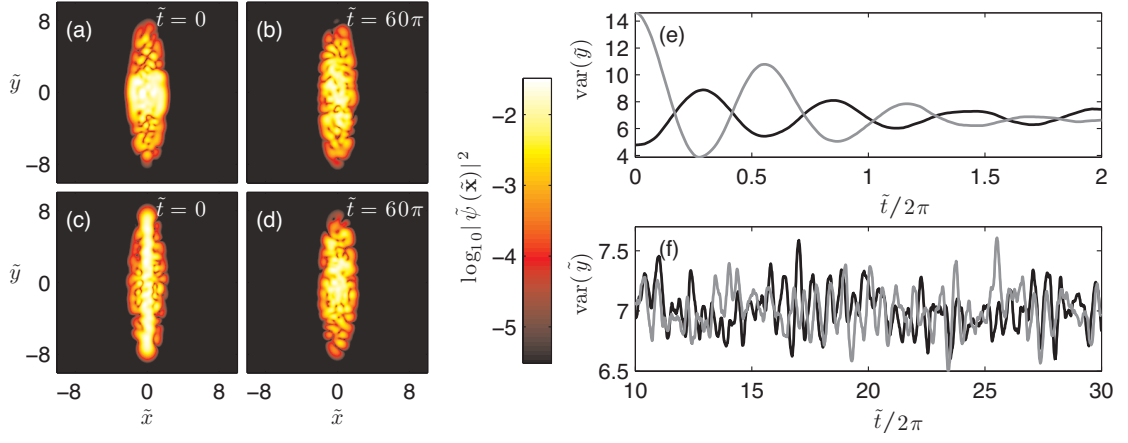


图 3 (a) y 方向压缩初始状态；(c) x 方向压缩初始状态；(b) 和 (d) 分别为对应演化的平衡状态；(e) 前两个周期内的方差；(f) 十个周期后的方差，黑线对应 (a) 所示初态，灰线对应 (c) 所示初态 [71]。

Fig. 3. (a) Initial state compressed along the y -direction, and (c) initial state compressed along the x -direction; (b) and (d) are the corresponding equilibrium states after evolution, respectively; (e) Variances during the first two trap periods, and (f) variances after ten periods. The black line corresponds to the initial state shown in (a), while the gray line corresponds to the initial state shown in (c) [71].

体系统的核心物理效应，从而为有限温非平衡相变提供了有力的理论依据。

3.2.2 量子湍流与能量级联

量子湍流的核心特征是动能在不同空间尺度间的级联输运 [92]。在模拟此类多尺度演化时，引入全局唯象耗散（如 SPGPE 中的 γ ）会导致级联能量发生过度耗散。此时，PGPE 的投影算符 $\mathcal{P}_c$ 展现出关键作用：它将演化严格限制在截断能量 ϵ_{cut} 以下，在规避高频数值网格发散的同时，保证了相干子空间内的纯哈密顿演化（能量守恒） [92]，从而能够自洽模拟量子流体的多尺度级联。

Bradley 和 Anderson 的工作 [92] 表明，不可压缩动能谱 $E_{\text{inc}}(k)$ 具有双标度特征。在远大于愈合长度 ξ 的红外惯性区，涡旋聚集形成团簇，表现出类经典流体的 Kolmogorov $k^{-5/3}$ 标度律；而在微观紫外色散区，受控于单涡旋拓扑奇异结构 ($1/r$ 速度场)，能谱呈现普适的 k^{-3} 幂律衰减（如图4所示）。PGPE 框架通过非线性模式耦合，将微量子涡旋与宏观湍流统计规律统一，为非平衡拓扑流体动力学提供了重要的理论支撑。

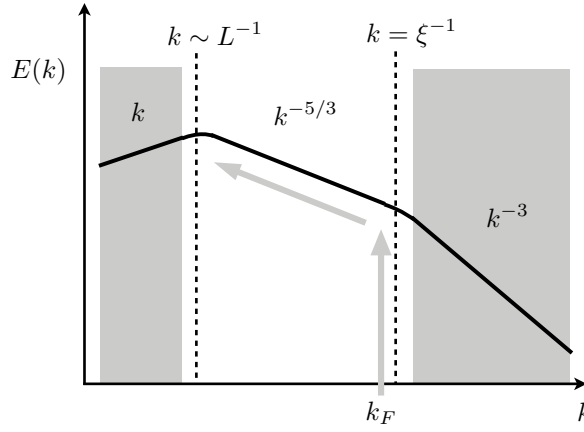


图 4 二维量子湍流的不可压缩动能谱，展示了宏观湍流惯性区 ($k^{-5/3}$) 与微观涡旋核心区 (k^{-3}) 的双标度律特征 [92]。

Fig. 4. Incompressible kinetic energy spectrum of 2D quantum turbulence, showing the dual scaling laws of the macroscopic turbulent inertial range ($k^{-5/3}$) and microscopic vortex cores (k^{-3}) [92].

3.3 开放系统的随机耗散动力学

实际系统不可避免地与热原子库存在能量和粒子交换。本节围绕 SPGPE，探讨相干凝聚体与巨正则热库耦合时，在跨越相变点、拓扑缺陷演化以及复杂体系（如超固态）温度淬火中的非平衡动力学机制。

3.3.1 拓扑缺陷的动态涌现与耗散结晶

快速冷却穿过相变临界点会触发 Kibble-Zurek (KZ) 机制：临界慢化效应导致系统动力学“冻结”，碎裂为多个相位独立的相干畴，并在交界处自发形成量子化涡旋。SPGPE 引入的高斯随机噪声 $\eta(\mathbf{r}, t)$ 在此过程中提供了对称性破缺的随机相位“种子”。

Weiler 等人 [76] 利用 SPGPE 模拟了简谐势阱中的淬火生长全过程，证实涡旋密度与温淬火速率之间存在严格的幂律标度关系。为消除简谐势阱引发的顺次凝聚效应，Navon 等人 [93] 在处于平底盒形势阱的均匀气体中实现了对涡旋密度随淬火时间普适标度律的精确测量，确立了非平衡破缺过程中的动态普适标度律，印证了 SPGPE 在开放系统非平衡相变研究中的价值。

在拓扑缺陷大量涌现之后，系统随后的长时演化便由 SPGPE 中的阻尼系数 γ 主导。 γ 定量表征了经典场与热库间的非相干散射 [21]，在相空间重构、各向异性耗散 [94] 以及自发空间有序化过程中展现出关键的耗散弛豫作用 [88]。如图5所示，快速淬火最初生成的往往是高度无序的“涡旋缠结”。若无耗散，拓扑缺陷将在封闭空间内持续碰撞，陷入类湍流状态。而 SPGPE 的耗散项将过剩转动能与声子释放至热库，驱使无序缠绕的涡旋发生重联与空间重排，最终结晶为高度对称的 Abrikosov 点阵。这确立了耗散机制在开

放量子流体中的关键动力学作用。

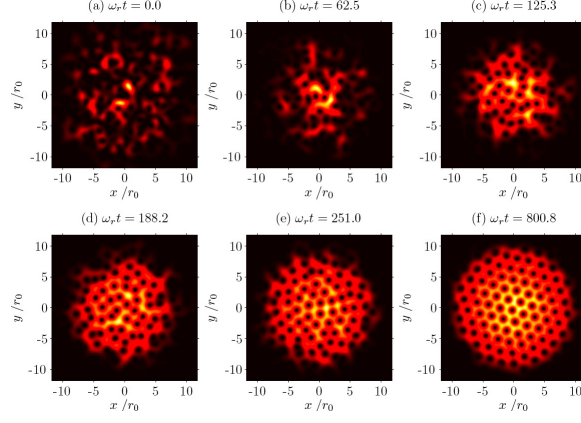


图 5 旋转势阱中热原子气体淬火冷却生成有序 Abrikosov 涡旋点阵的动态演化过程 [88]。在 SPGPE 耗散项的驱动下，系统从最初高度无序的涡旋缠结状态，逐渐通过能量弛豫结晶为高度对称的拓扑有序结构。

Fig. 5. Dynamical evolution of the formation of an ordered Abrikosov vortex lattice following the quench cooling of a thermal cloud in a rotating trap [88]. Driven by the dissipation term in the SPGPE, the system relaxes from an initially highly disordered vortex tangle and crystallizes into a highly symmetric topologically ordered structure.

3.3.2 长程相互作用系统超固态动态制备与相变机制

具有长程偶极-偶极相互作用的超冷原子系统因其能够自发打破连续空间平移对称性与 $U(1)$ 规范对称性，成为在实验上实现超固态（Supersolidity）的理想平台。在制备二维偶极超固态的实验与理论探索中，如何引导系统平稳进入超固态相而不破坏其超流特性，是一个关键的动力学问题。

Bland 等人关于二维超固态动态制备的理论模拟 [23]，深刻揭示了不同非平衡动力学路径对系统最终相干性质的影响。若采用传统的相互作用淬火方式，不连续一阶相变过程会引发强烈的局域密度塌缩，强烈的动力学涨落会严重破坏液滴间的全局相干性，导致体系最终碎裂为非相干液滴阵列。

为了规避这一非平衡碎裂机制，Bland 等人利用 SPGPE 模拟了更贴近实验真实操作的蒸发冷却路径如图6(c) 所示。通过动态调节系统的温度 T 与化学势 μ ，系统能够直接从热原子气体状态被冷却至相图中的超固态区域。在这一演化路径下，有限温的热涨落与耗散弛豫在非平衡演化中为系统提供了跨越势垒的随机弛豫通道，帮助体系平稳演化并弛豫至能量极小值对应的晶格构型上，从而成功规避了由直接旋子不稳定性带来的剧烈相干性破坏。这一由耗散诱导的平缓演化机制，确保了系统在形成宏观周期性密度调制的同时，背景中仍保留着足以维持全局相干的超流成分。SPGPE 理论框架对这些复杂非平衡演化路径

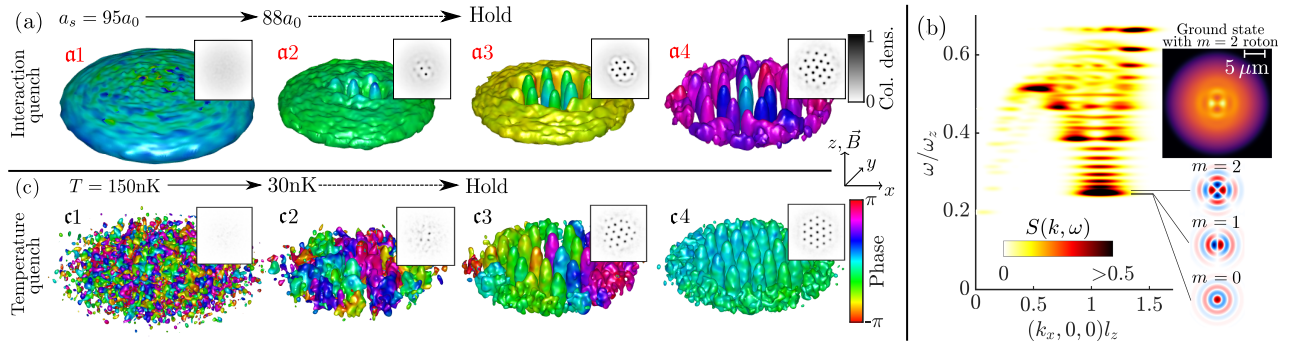


图 6 二维偶极超固态在不同制备路径下的动态演化 [23]。相比于相互作用淬火引发的相干性丧失，通过有限温蒸发冷却路径（即动态调节 T 与 μ ），系统能够在热涨落的辅助下规避剧烈的旋子不稳定性，温和地寻找并稳定在保持全局相干的超固态晶格上。

Fig. 6. Dynamical evolution of a two-dimensional dipolar supersolid under different preparation pathways [23]. Compared to the loss of coherence induced by an interaction quench, the finite-temperature evaporative cooling pathway (dynamic tuning of T and μ) allows the system, assisted by thermal fluctuations, to circumvent the violent roton instability and gently stabilize into a supersolid lattice with robust global phase coherence.

的成功复现，不仅在动力学层面深化了对热涨落、量子涨落与各向异性长程相互作用非线性强耦合机制的理解，更为经典场动力学处理复杂多体非平衡相变现象提供了重要的方法论基础。

3.4 经典场方法的适用条件与物理局限性

尽管以 PGPE 和 SPGPE 为代表的经典场方法在处理有限温热涨落、非平衡拓扑缺陷演化以及超流相变动力学等方面取得了显著进展，然而应当指出的是：该理论框架的底层物理假设决定了其固有的适用边界。

首先，经典场方法将高度占据的物质波模式 ($n_{\mathbf{k}} \gg 1$) 近似为经典的宏观连续场，从而在相干区内用复数场变量替换了满足 $[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 对易关系的玻色场算符 [92]。这一近似导致经典场的统计热化结果本质上服从的是 Rayleigh-Jeans 分布，而非真实的 Bose-Einstein 分布 [41,42,79]。这意味着该理论未能包含高频模式中的量子零点涨落 (Zero-point fluctuations) [21,72]。在极低温区 ($T \rightarrow 0$)，在热涨落被完全抑制、非凝聚组分开始主导体系的物理性质时，经典场方法中缺失了诸如 Bogoliubov 声子的自发辐射等纯量子散射机制，导致其对低温热力学量、元激发寿命以及量子关联函数的预测产生显著偏差 [93]。

其次，为了区分凝聚体与热库，引入能量截断 ϵ_{cut} 会带来内在的“截断依赖性”与紫外灾难 (Ultraviolet

catastrophe) [41,72]。由于非线性相互作用的模式耦合效应，宏观物理可观测量对截断的具体选取表现出非物理的敏感性。尽管通过有效相互作用强度的重整化（Renormalization）可以部分缓解这一问题，但在强相互作用或非均匀度极高的偶极体系中，能量截断的依赖依然是该半经典理论难以完全消除的内在局限。

同时，在处理开放系统动力学的 SPGPE 等模型中，其马尔可夫噪声的成立前提是“时间尺度分离（Time-scale separation）”，即假设高能热库模式能瞬间完成弛豫 [21,85]。然而，相变临界点固有的“临界慢化（Critical slowing down）”效应会导致弛豫时间发散，导致该类方法在定量预测非平衡临界动力学时存在理论困难。

此外，经典场方法作为一种基于相干态（相空间分布）的理论，内禀地假设了系统具有明确的宏观经典相位 [41]。这使得它在处理深光晶格中的 Mott 绝缘体相变 [4,46]、强关联的一维 Tonks-Girardeau 气体，以及存在宏观量子叠加态（如多体薛定谔猫态）或强量子纠缠的体系时不再适用。在这些强关联区域，多体波函数的粒子数反常涨落和非局域量子纠缠起主导作用，基于平均场及其经典统计涨落扩展的理论范式已无法提供正确的物理图像。

4 蒙特卡罗方法

4.1 第一性原理与 PIMC 的物理基础

为了突破经典场理论在极低温、强关联以及严格量子统计方面的固有局限，理论上需引入基于非微扰的第一性原理数值框架的量子蒙特卡罗（QMC）方法。与依赖局部微扰或对称性破缺假设的场论方法不同，QMC 方法仅以真实的粒子空间分布与相互作用为基本条件，通过高维概率抽样自治地处理多体关联与高阶涨落，为确立宏观相变边界以及获取热力学极限定标基准方面提供了可靠的数值依据 [86,95]。

在 QMC 方案中 [1,17]，波函数优化类方法是主流选择，其核心在于通过对多体波函数的变分优化或虚时投影获取基态信息。虽然此类方法原则上可通过系综加权扩展至有限温，但在处理强关联体系的热激发统计特性时，其计算复杂度与收敛难度显著增加。相比之下，在研究有限温多体平衡态时，路径积分蒙特卡罗（PIMC）方法 [96-100] 展现出独特的理论优势。PIMC 将配分函数映射为虚时路径积分，能够在同一个数学框架下自然地融合量子涨落与热涨落，通过直接在热力学系综层面进行采样，实现了对有限温多体平衡态的自治描述 [43]。

PIMC 的核心在于多体配分函数 $Z = \text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})$ ($\beta = 1/k_B T$) 的路径积分描述。由于多体哈密顿量 $\hat{H}$ 中的动能算符与势能算符互不对易，PIMC 利用 Trotter-Suzuki 分解，将热力学统计算符沿虚时间轴进

行离散化切分。当切分步长趋于无穷小极限时，量子配分函数被严格转化为连续空间上的 Feynman 路径积分^[43]。在这一数学框架下，PIMC 将表现出量子涨落的物理粒子等效映射为沿虚时间轴演化的空间轨迹集合，其中虚时间轴的周期长度直接等同于参数 β 。通过这种方式，复杂的多体量子热力学统计问题被转化为对虚时演化轨迹集合的概率抽样与统计分析。

对于全同玻色子体系，量子统计要求粒子满足内禀的不可分辨性。在 PIMC 的路径积分表象中，这一特性表现为不同粒子的虚时演化轨迹可以相互连接与交换^[43,48]。当系统温度逐渐降低，热德布罗意波长与粒子间距相当时，原本局域且独立的单粒子轨迹会自发地首尾相连，融合成贯穿整个宏观体系的多粒子集体相干轨迹。这种微观演化轨迹的空间长程联结，从第一性原理层面物理解释了玻色-爱因斯坦凝聚与超流相变的微观本质^[48]。

此外，PIMC 框架能够将宏观的量子物理量直接关联到轨迹的微观拓扑特征上。例如，通过计算虚时演化轨迹在周期性边界条件下的总拓扑缠绕数（Winding number）的均方涨落，PIMC 能够无偏地计算出系统的超流分数^[101]。这种将量子相干性还原为高维空间演化轨迹拓扑几何属性的方法，规避了近似流体力学方程中唯象参数的引入。因此，PIMC 在全温度区间内为有限温强关联玻色气体的热力学属性提供了清晰的理论方案。

4.2 有限温量子气体的精确非微扰定标

作为第一性原理框架的核心，量子蒙特卡罗方法在解决冷原子物理长期存在的热力学难题上展现出关键的定标作用。本节选取有限温演化中的代表性物理场景，阐述 PIMC 在突破传统微扰近似局限方面的具体应用。

4.2.1 相互作用诱导的临界温度变化与普适类标定

排斥相互作用如何影响均匀玻色气体的 BEC 临界温度 T_c ，是多体物理学中的关键问题。在临界区域，通过传统的逐级微扰展开计算这一修正面临着显著的红外发散问题。Baym 等人的研究指出^[102]，当系统温度逼近相变临界点时，长波（低动量）模式的热涨落占主导地位，导致微扰级数不再收敛。根据 Ginzburg 准则，在临界区域内，所有高阶相互作用项在数量级上变得同等重要，系统从理想气体的高斯普适类转变为由相互作用主导的三维 XY 普适类^[102,103]。基于量纲分析与标度理论，临界温度的相对变化满足 $\Delta T_c/T_c^{(0)} = C_0 a_s n^{1/3}$ 的普适形式^[44,104]，其中 a_s 为 s 波散射长度， n 为系统密度。然而，由于微扰展开在红外极限下的局限性，早期各种解析近似方法得出的无量纲系数 C_0 并不一致。

这一物理难题的定量解决，得益于蒙特卡罗方法在处理大尺度临界涨落时提供精确数值基准的能力。考虑到临界区域内系统的长波行为具有高度的普适性，Kashurnikov 等人采用了一种更为高效的等效计算方案：他们并未直接模拟计算开销巨大的连续量子气体，而是利用蠕虫算法（Worm algorithm）对严格等效于连续系统长波极限的三维格点 $|\psi|^4$ 模型进行了高精度的蒙特卡罗采样^[44]。

为了有效消除数值模拟中固有的有限边界效应，研究团队引入了有限尺寸分析。通过在不同系统尺寸 L 下提取发生相变时的临界密度，并利用三维 XY 普适类已知的临界指数进行重整化外推，模拟数据在标度函数上实现了良好的数据塌缩。基于高维相空间中的高精度统计采样与标度外推，蒙特卡罗计算确定临界温度变化系数为 $C_0 = 1.29 \pm 0.05$ ^[44]。这一结论定量地证实了排斥相互作用对临界温度具有正向的提升效应，展示了蒙特卡罗方法在界定多体系统普适类与提取非微扰临界参数时作为数值基准的物理精确性。

4.2.2 强偶极作用下的自束缚量子液滴与高阶涨落

弱相互作用偶极量子气体的液滴态源于平均场相互作用与 LHY 量子涨落间的能量竞争，该机制通常用广义 Gross-Pitaevskii 方程（gGPE）描述^[56,57]。然而，当实验拓展至强偶极参数区（如低 a_s 或极性分子）时，基于一阶微扰的 LHY 修正逐渐暴露出处理高阶多体关联的理论局限。此时，量子蒙特卡罗方法展现出了独特的优势。Ghosh 等人利用 PIMC 定量考察了柱状势阱中的偶极玻色气体^[105]。如图7(a)所示，在大散射长度的 BEC 区域，PIMC 与 gGPE 预测高度吻合；但在偶极吸引主导的强关联液滴区，PIMC 给出了显著高于 gGPE 预测的峰值密度与量子动能。这定量证实了微扰理论在强关联极限下严重低估了量子涨落的实际强度。

此外，PIMC 揭示了量子液滴独特的热力学稳定性。有限温演化结果表明，系统从热原子气体相变为盘状液滴的临界温度，显著高于其相变为普通排斥型 BEC 的临界温度。这表明由强相互作用与量子涨落共同维持的自束缚液滴对有限温热涨落具有显著的稳定性，为实验制备新型偶极量子多体态提供了理论参考。在偶极作用更强的极性分子体系中，Langen 等人利用 QMC 模拟揭示了微观空间重组现象^[106]。如图7(b)所示，强偶极相互作用与外势的协同引发了“局域阻挫”效应，导致连续的单液滴自发碎裂为微小液滴阵列。由于此时分子间距与短程屏蔽核心尺寸相当（约 50 nm），传统稀薄气体近似彻底失效。通过构型空间的无偏采样，QMC 不仅精确刻画了反偶极液滴特有的长椭球形密度分布，还预言在低至临界粒子数 $N_{\text{crit}} = 7$ 的极端条件下，强量子涨落依然足以维持系统的自束缚状态。

通过自洽处理复杂的微观相互作用与多体关联，蒙特卡罗方法在强偶极机制下弥补了微扰场论的理论局限。其提供的定量数值解不仅确立了有效场理论的适用范围，也为深入理解有限温多体涨落如何影响量

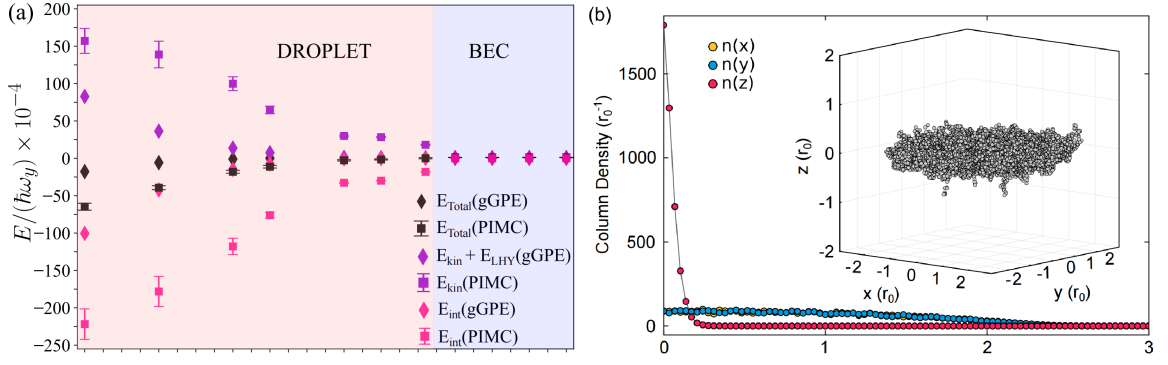


图 7 (a): 双偶极玻色气体在不同散射长度下的基态能量对比。在强偶极占优的液滴区域，PIMC（紫色方形）揭示的量子动能显著高于 gGPE（紫色菱形）的预测，证明了高阶量子涨落的非微扰特性^[105]；(b): 强相互作用下的分子偶极液滴^[107]。由于分子间的反偶极相互作用，单个自束缚液滴（ $\delta_r = 0.75$ ）呈现出高度扁长的密度分布形态。

Fig. 7. (a): Ground-state energy comparison of a dipolar Bose gas at different scattering lengths. In the strongly dipolar-dominated droplet regime, the quantum kinetic energy revealed by PIMC (violet squares) is significantly higher than that predicted by gGPE (violet diamonds), demonstrating the nonperturbative nature of higher-order quantum fluctuations^[105]; (b): Dipolar molecular droplets in the strongly interacting regime^[107]. Density distribution of a single self-bound droplet ($\delta_r = 0.75$), exhibiting a strongly prolate shape due to antidipolar interactions.

子流体结构提供了可靠的定量参考。

4.2.3 有限温驱动超固态相变的非微扰验证

在前文中，我们已经通过 TeGPE 的热修正有效势与 SPGPE 的经典涨落动力学，详细探讨了热涨落如何在偶极量子气体中反常地诱导并稳定超固态。然而，这些有效理论与真实的非平衡动力学实验（如蒸发冷却）往往伴随着其他物理变量的耦合（例如实验中必然导致总粒子数的损失），且微扰或半经典场方法难以在强关联区间无偏地计算系统的超流响应。为了在第一性原理层面严格确证这一反常相变行为，并彻底剥离其他自由度的干扰，Bombín 等人利用 PIMC 方法对简谐势阱中的 ^{162}Dy 原子气体正则系综进行了数值模拟^[22]。

该工作与前述经典场方法研究的相同之处在于，其通过严格的底层多体计算再次印证了“热涨落驱动空间对称性破缺”的物理图像；而其核心区别与突破则在于：PIMC 模拟在演化中严格固定了系统总原子数，成功剥离了粒子数变化的影响，确凿证明了单纯的“温度”即可独立作为驱动偶极超固态形成的关键热

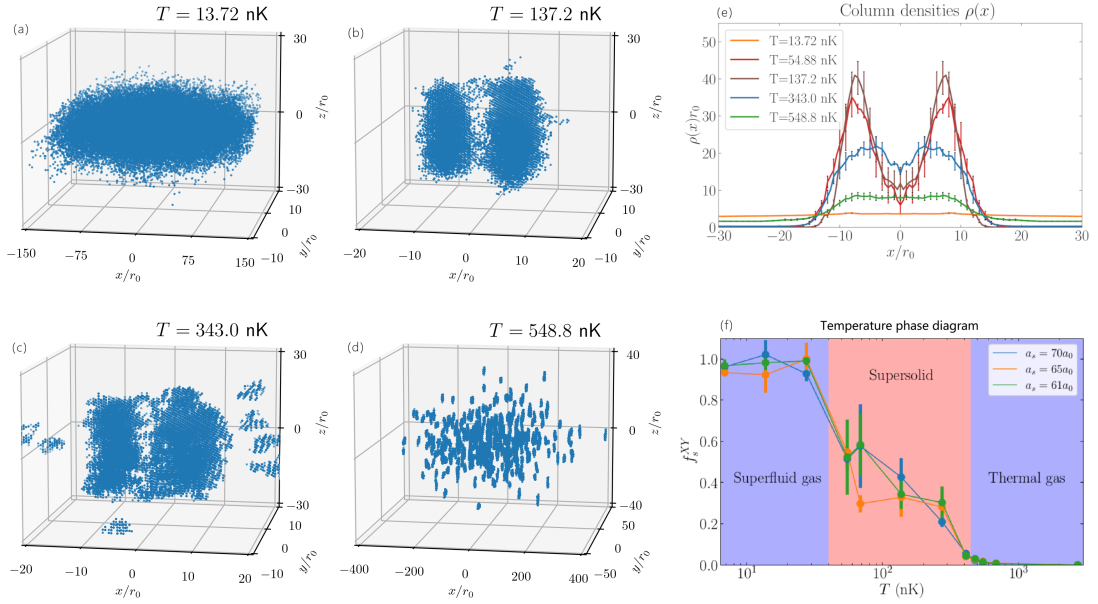


图 8 (a)-(d) 通过 PIMC 模拟的 ^{162}Dy 偶极气体随温度演化的密度分布；(e) 对应 x 方向密度调制；(f) 偶极量子气体的超流分数随温度的演化 [22]。

Fig. 8. (a)–(d) Temperature evolution of the density distribution of a ^{162}Dy dipolar gas from PIMC simulations; (e) Corresponding density modulation along the x direction; (f) Superfluid fraction of the dipolar quantum gas as a function of temperature [22].

力学参量。

如图8所示，系统在极低温 ($T = 13.72 \text{ nK}$) 下表现为无调制的凝聚基态。当温度升至中间区间 (40 nK 至 450 nK) 时，系统自发产生轴向密度调制。在空间晶格序的确立过程中，PIMC 展现了不依赖平均场能量截断的非微扰优势，通过计算系统对虚时转动边界条件的响应，无偏地提取了平面内的超流分数。数值计算证实，在涌现空间调制的温度窗口内，系统依然维持着有限的超流信号 [图8(f)]，从而在严格统计物理意义上排除了其为普通热晶体的可能，确立了真正的“有限温超固态” [22]。

当温度继续升高 ($T > 450 \text{ nK}$) 时，空间调制与超流信号同步趋于零，系统发生热力学融化。为进一步确认量子统计的内在贡献，该研究通过调节路径积分表象，揭示了传统微扰场论难以触及的微观图像：通过关闭 PIMC 中的全同粒子置换循环（等效模拟可分辨的麦克斯韦-玻尔兹曼粒子），结果表明，尽管玻色统计引起的聚束效应（Bunching effect）能显著增强密度对比度，但缺乏交换对称性的系统在加热后依然展现出空间调制。这进一步澄清了有限温诱导密度调制的微观机制：其本质上源于外加势场、热激发与各向异性偶极相互作用间的非线性强竞争，而量子涨落在其中主要起到正向的稳定作用。

4.3 量子蒙特卡罗方法的适用边界与多尺度物理互补

尽管 PIMC 方法在处理强关联多体涨落与精确测定热力学相界方面具有显著的理论优势，但其底层的数学结构与算法机制也决定了其固有的适用局限。首先，虚时演化与实时非平衡动力学之间存在的理论鸿沟^[43]——与经典场方法（如 PGPE 或 SPGPE）能够直观且高效地模拟凝聚体的动态生长、量子湍流的能量级联^[92]以及拓扑缺陷的自发产生^[76]截然不同，PIMC 建立在热力学配分函数的虚时间（Imaginary-time）演化算符之上，其核心物理输出严格受限於虚时间域。尽管理论上可以借助最大熵方法（Maximum Entropy Method）等解析延拓技术从虚时数据中提取实时的动态结构因子，但在数学上这属于典型的病态逆问题（Ill-posed problem），对于解析复杂的多体激发谱或捕捉远离平衡态的非线性演化通常难以提供高分辨率的可靠预测^[43]。因此，在描绘系统的动态弛豫与开放耗散过程时，经典场理论展现出了显著的力学解析能力与物理直观性。

除了在时间演化维度上的局限，蒙特卡罗方法在极低温极限与宏观空间尺度上也面临着严峻的计算瓶颈。根据 Trotter-Suzuki 分解原理，虚时间切片的数量 $M = \beta/\delta\tau \propto 1/T$ 会随着系统温度 $T \rightarrow 0$ 而呈现线性发散。在极低温极限下，虚时演化轨迹的节点数急剧增加，导致算法在构型空间中的自相关时间显著延长，产生严重的遍历性阻滞（Ergodicity block）^[43,48]。更为棘手的是，当体系包含长程偶极相互作用时，计算高维轨迹间的多体势能开销巨大。相比之下，基于平均场和能量截断近似的经典场方法在处理包含数十万个原子的三维真实宏观势阱时具备显著的计算可行性。然而，这种计算效率的代价是经典场方法在极低温下会不可避免地退化为 Rayleigh-Jeans 分布，从而遗漏了纯量子零点涨落的贡献；而 PIMC 能够严格保持全阶量子涨落与玻色统计对称性，能够保留这一贡献^[41,43]。二者在温度极限与空间规模上的物理适用性形成了高度的互补关系。

鉴于上述理论与计算限制，现代冷原子物理的研究已逐渐从单一理论方法，转向构建多尺度的理论互补体系。在这一研究范式中，PIMC 扮演着关键的数值基准角色，负责在强关联或大尺度临界涨落区域提供精确的基态相图与热力学可观测量。它不仅能检验微扰场论的适用范围，更重要的是为经典场理论提供了无偏的相互作用重整化参数，有效弥补了经典场依赖人为能量截断的底层缺陷。随后，经过严格校准的经典场动力学理论（如 TeGPE 与 SPGPE）则接管宏观尺度下的实时演化任务，定量复现实验中的复杂非平衡演化过程。这种“第一性原理标定静态基准，经典场理论接管实时演化”的深度融合机制，有机结合了微观统计精确性与宏观流体动力学，为全面揭示有限温多体系统的深层物理规律提供了系统且自治的理论处理方法。

5 总结与展望

有限温冷原子气体的理论研究，本质上是在宏观量子相干性与微观多体涨落之间寻求自洽描述。从零温平均场下的 GPE，到引入量子涨落和热涨落的 TeGPE，再到整合热涨落的 SPGPE，冷原子理论在处理有限温效应时已逐渐摆脱对简单微扰的依赖，建立了非微扰的连续演化图像。由于单一理论难以覆盖多体系统的所有物理尺度，目前的研究范式已演进为：以 QMC 为代表的第一性原理方法为静态热力学性质提供基准支撑，而以经典场动力学为代表的有效理论则专注于描述复杂拓扑缺陷的非平衡动力学演化。

尽管上述多尺度框架已取得进展，但现有耗散模型（如 SPGPE）在底层假设上仍存在局限：它们通常将非凝聚的高能原子简化为处于平衡态的热库，这在处理剧烈蒸发冷却或强烈外场淬火等极端非平衡过程时，难以捕捉热原子云自身的动力学效应。为解决这一难题，一种可行的路径是采用 ZNG（Zaremba-Nikuni-Griffin）^[108] 等量子动力学形式体系。ZNG 理论通过耦合演化方程，在利用广义 GPE 描述相干低能模式的同时，利用量子玻尔兹曼方程（Quantum Boltzmann Equation, QBE）对非相干热库的碰撞动力学与相空间演化进行自洽追踪。

近年来，将 SPGPE 的随机涨落特征与 ZNG 的自洽动力学结合，已成为理论尝试的关键方向之一^[24]。然而，这种将热涨落、量子涨落与动态热库统一的构想，目前主要处于形式推导阶段。ZNG 类模型在数值实现上存在困难，尤其是求解描述热原子的高维 QBE 时，其复杂的碰撞积分对算力要求极高。ZNG 包含描述凝聚体与热原子交换的 C_{12} 碰撞，以及描述热原子间散射的 C_{22} 碰撞过程^[24]。其中， C_{22} 过程需要在每一个空间格点和时间演化步长上，计算满足能量与动量双重守恒的高维相空间积分，这消耗了极大的计算资源。若进一步与包含高频随机噪声的 SPGPE 场进行时间与空间上的自洽耦合，其跨尺度动力学的数值不稳定性与庞大的计算开销，使得针对大尺度三维系统的完全自洽非平衡模拟仍是一项艰巨挑战。

随着磁性偶极原子与极性分子实验的飞速发展，长程各向异性相互作用为有限温动力学引入了新的探索空间。在近期确立的偶极超固态现象中，有限温热涨落表现出反常的促进作用。如何利用包含量子涨落与热涨落修正的非微扰数值工具，准确刻画超固态中的拓扑缺陷动力学（如位错与晶界的动态演化）、探究多激发声子分支在有限温下的非线性耦合，将是理论与实验面临的核心课题。冷原子体系的高可控性使其成为探索复杂强关联物理的精密平台。随着有限温多体理论的不完善与多尺度算法的深度融合，我们不仅能更深刻地揭示量子气体自身的非平衡动力学行为，更有望将冷原子系统打造为探索凝聚态强关联相变、自发对称性破缺等前沿领域的定量基准工具。

致谢

感谢量子通信与量子计算机国家科技重大专项 (2024ZD0300600)、小米青年学者、西安交通大学青年拔尖人才计划 A 类对本研究的支持。

参考文献

- [1] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [2] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [3] Bradley C C, Sackett C A, Tollett J J, Hulet R G 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1170
- [4] Lewenstein M, Sanpera A, Ahufinger V, Damski B, Sen(De) A, Sen U 2007 *Adv. Phys.* **56** 243
- [5] Bloch I, Dalibard J, Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885
- [6] Cornell E A, Wieman C E 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 875
- [7] Ketterle W 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 1131
- [8] Pitaevskii L P 1961 *Sov. Phys. JETP* **13** 451
- [9] Gross E P 1963 *J. Math. Phys.* **4** 195
- [10] Gross E P 1961 *Nuovo Cimento* **20** 454
- [11] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P, Stringari S 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 463
- [12] Leggett A J 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 307
- [13] Wenzel M, Böttcher F, Langen T, Ferrier-Barbut I, Pfau T 2017 *Phys. Rev. A* **96** 053630
- [14] 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
- [15] Chomaz L, Petter D, Ilzhöfer P, Natale G, Trautmann A, Politi C, Durastante G, Van Bijnen R, Patscheider A, Sohmen M, et al. 2019 *Phys. Rev. X* **9** 021012

- [16] Pitaevskii L, Stringari S 2003 *Bose-Einstein Condensation* (Oxford: Clarendon Press)
- [17] Pethick C J, Smith H 2008 *Bose-Einstein condensation in dilute gases* (Cambridge University Press)
- [18] Pitaevskii L P 1996 *Phys. Rev. A* **53** R2936
- [19] Abo-Shaeer J R, Raman C, Vogels J M, Ketterle W 2001 *Science* **292** 476
- [20] Proukakis N 2008 In *Emergent Nonlinear Phenomena in Bose-Einstein Condensates: Theory and Experiment* (Springer), pp 353–373
- [21] Proukakis N P, Jackson B 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 203002
- [22] Bombín R, Boronat J, Mazzanti F, Sánchez-Baena J 2025 *arXiv:2506.03071*
- [23] Bland T, Poli E, Politi C, Klaus L, Norcia M A, Ferlaino F, Santos L, Bisset R N 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 195302
- [24] Proukakis N P, Rigopoulos G, Soto A 2024 *arXiv:2407.20178*
- [25] McDonald R G, Barnett P S, Atayee F, Bradley A 2020 *SciPost Phys.* **8** 029
- [26] Mehdi Z, Hope J J, Szigeti S S, Bradley A S 2023 *Phys. Rev. Res.* **5** 013184
- [27] Salasnich L 2018 *Appl. Sci.* **8** 1998
- [28] Natale G, Van Bijnen R, Patscheider A, Petter D, Mark M J, Chomaz L, Ferlaino F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 050402
- [29] Sánchez-Baena J, Politi C, Maucher F, Ferlaino F, Pohl T 2023 *Nat. Commun.* **14** 1868
- [30] He L J, Sánchez-Baena J, Maucher F, Zhang Y C 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** 023019
- [31] Tanzi L, Maloberti J, Biagioni G, Fioretti A, Gabbanini C, Modugno G 2021 *Science* **371** 1162
- [32] Henkel C, Sauer T O, Proukakis N 2017 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **50** 114002
- [33] Schützhold R, Uhlmann M, Xu Y, Fischer U R 2006 *Int. J. Mod. Phys. B* **20** 3555
- [34] Choi S, Morgan S, Burnett K 1998 *Phys. Rev. A* **57** 4057

- [35] Tisza L 1938 *Nature* **141** 913
- [36] Jackson B, Zaremba E 2002 *Phys. Rev. A* **66** 033606
- [37] Jackson B, Zaremba E 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 100404
- [38] Märkle J, Allen A, Federsel P, Jetter B, Günther A, Fortágh J, Proukakis N, Judd T 2014 *Phys. Rev. A* **90** 023614
- [39] Griffin A 1996 *Phys. Rev. B* **53** 9341
- [40] Proukakis N, Burnett K 1996 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **101** 457
- [41] Blakie P B, Bradley A, Davis M, Ballagh R, Gardiner C 2008 *Adv. Phys.* **57** 363
- [42] Góral K, Gajda M, Rzazewski K 2002 *Phys. Rev. A* **66** 051602
- [43] Ceperley D M 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67** 279
- [44] Kashurnikov V, Prokof'Ev N, Svistunov B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 120402
- [45] Holzmann M, Krauth W 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 2687
- [46] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [47] Parisi L, Giorgini S 2020 *Phys. Rev. A* **102** 023318
- [48] Boninsegni M, Prokof'Ev N, Svistunov B 2006 *Phys. Rev. E* **74** 036701
- [49] Pitaevskii L, Stringari S 2003 *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Oxford University Press)
- [50] Pitaevskii L, Stringari S 2016 *Theory of Quantum Fluids* (Oxford University Press)
- [51] Lee T D, Huang K, Yang C N 1957 *Phys. Rev.* **106** 1135
- [52] Andersen J O 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 599
- [53] Ronen S, Bortolotti D C E, Bohn J L 2006 *Phys. Rev. A* **74** 013623
- [54] Hutchinson D, Zaremba E, Griffin A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1842

- [55] Aybar E, Oktel M 2019 *Phys. Rev. A* **99** 013620
- [56] Lima A R, Pelster A 2011 *Phys. Rev. A* **84** 041604
- [57] Lima A R, Pelster A 2012 *Phys. Rev. A* **86** 063609
- [58] Sánchez-Baena J, Pohl T, Maucher F 2024 *Phys. Rev. Res.* **6** 023183
- [59] Sánchez-Baena J, Politi C, Maucher F, Ferlaine F, Pohl T 2022 *arXiv:2209.00335*
- [60] Sohmen M, Politi C, Klaus L, Chomaz L, Mark M J, Norcia M A, Ferlaine F 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 233401
- [61] Norcia M A, Politi C, Klaus L, Poli E, Sohmen M, Mark M J, Bisset R N, Santos L, Ferlaine F 2021 *Nature* **596** 357
- [62] Yu C, Li J, Xi K T 2025 *arXiv:2510.24419*
- [63] Sánchez-Baena J, Pascual G, Bombín R, Mazzanti F, Boronat J 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** 033080
- [64] Chen G P, Qiao C B, Guo H, Wang L X, Wang Y J, Tan R B 2019 *Chin. Phys. B* **28** 010308
- [65] Zhang G, Lv L Z, Gao P, Yang Z Y 2023 *Chin. Phys. B* **32** 110303
- [66] Li X Y, Cui X H, Mao J J 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 090301. (in Chinese) [李新月, 崔晓华, 毛杰健 2023 物理学报 72 090301]
- [67] Svistunov B 1991 *J. Moscow Phys. Soc.* **1** 373
- [68] Kagan Y, Svistunov B 1994 *Sov. Phys. JETP* **105** 353
- [69] Kagan Y, Svistunov B 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3331
- [70] Damle K, Majumdar S N, Sachdev S 1996 *Phys. Rev. A* **54** 5037
- [71] Blakie P B 2008 *Phys. Rev. E* **78** 026704
- [72] Sinatra A, Lobo C, Castin Y 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 3599
- [73] Davis M, Morgan S, Burnett K 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 160402

- [74] Wright T M, Proukakis N P, Davis M J 2011 *Phys. Rev. A* **84** 023608
- [75] Bezett A, Blakie P 2009 *Phys. Rev. A* **79** 033611
- [76] Weiler C N, Neely T W, Scherer D R, Bradley A S, Davis M J, Anderson B P 2008 *Nature* **455** 948
- [77] Kagan Y M, Svistunov B, Shlyapnikov G 1992 *Sov. Phys. JETP* **74** 279
- [78] Marshall R, New G, Burnett K, Choi S 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2085
- [79] Brewczyk M, Gajda M, Rzażewski K 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** R1
- [80] Blakie P B, Davis M J 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 2043
- [81] Davis M, Morgan S, Burnett K 2002 *Phys. Rev. A* **66** 053618
- [82] Krauth W 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3695
- [83] Penrose O, Onsager L 1956 *Phys. Rev.* **104** 576
- [84] Yang C N 1962 *Rev. Mod. Phys.* **34** 694
- [85] Gardiner C, Davis M 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 4731
- [86] Stoof H T 1999 *J. Low Temp. Phys.* **114** 11
- [87] Gardiner C, Anglin J, Fudge T 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 1555
- [88] Bradley A, Gardiner C, Davis M 2008 *Phys. Rev. A* **77** 033616
- [89] Blakie P B, Davis M J 2005 *Phys. Rev. A* **72** 063608
- [90] Simula T P, Blakie P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 020404
- [91] Donner T, Ritter S, Bourdel T, Ottl A, Kohl M, Esslinger T 2007 *Science* **315** 1556
- [92] Bradley A S, Anderson B P 2012 *Phys. Rev. X* **2** 041001
- [93] Navon N, Gaunt A L, Smith R P, Hadzibabic Z 2015 *Science* **347** 167
- [94] Yang J, Zhao L J, Wang Y J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 190301. (in Chinese) [杨娇, 赵丽君, 王宇杰 2020 物理学报 69 190301]

- [95] Wachter J, Walser R, Cooper J, Holland M 2002 *arXiv:cond-mat/0212432*
- [96] Saito H 2016 *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** 053001
- [97] Cinti F, Boninsegni M 2017 *arXiv:1703.10291*
- [98] Jain P, Cinti F, Boninsegni M 2011 *Phys. Rev. B* **84** 014534
- [99] Nho K, Landau D 2005 *Phys. Rev. A* **72** 023615
- [100] Boninsegni M 2021 *Results Phys.* **31** 104935
- [101] Pollock E L, Ceperley D M 1987 *Phys. Rev. B* **36** 8343
- [102] Baym G, Blaizot J P, Holzmann M, Laloë F, Vautherin D 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1703
- [103] Campostrini M, Hasenbusch M, Pelissetto A, Rossi P, Vicari E 2001 *Phys. Rev. B* **63** 214503
- [104] Arnold P, Moore G D 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 120401
- [105] Ghosh R, Ciardi M, Nath R, Cinti F 2024 *Phys. Rev. B* **110** 014513
- [106] Langen T, Boronat J, Sanchez-Baena J, Bombin R, Karman T, Mazzanti F 2025 *Phys. Rev. Lett.* **134** 053001
- [107] Proukakis N, Burnett K, Stoof H 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1230
- [108] Zaremba E, Nikuni T, Griffin A 1999 *J. Low Temp. Phys.* **116** 277

Finite-Temperature Effects in Ultracold Atomic Gases

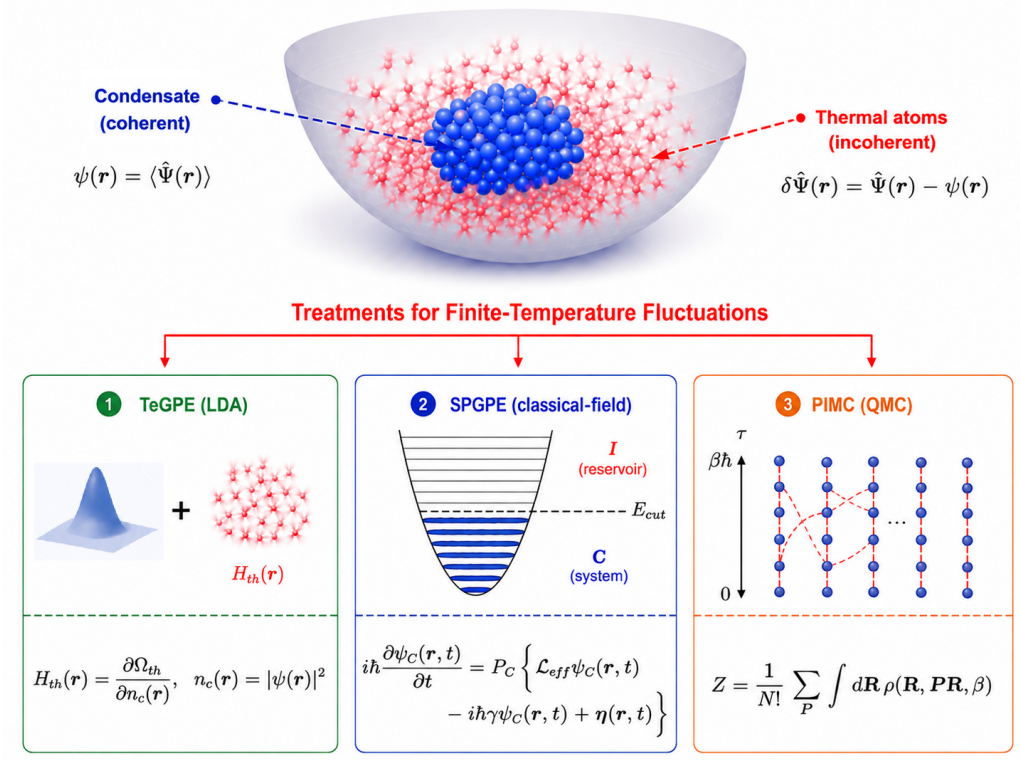
HOU Licong HE Liangjun DONG Biao ZHANG Yongchang[†]

(*School of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

Abstract

Since the first experimental realization of Bose–Einstein condensates, ultracold atomic gases have been one of the most promising platforms for exploring quantum many-body physics. While zero-temperature mean-field theories successfully describe various equilibrium and dynamical phenomena, realistic experimental systems inevitably operate at finite temperatures, where thermal fluctuations always exist. Thermal fluctuations not only deplete the condensate fraction but can also lead to unexpected physical effects, e.g., temperature-driven superfluid–supersolid phase transitions in dipolar gases. In this review, we summarize three major theoretical approaches for treating finite-temperature effects in ultracold Bose gases: the temperature-dependent extended Gross–Pitaevskii equation (TeGPE), classical-field methods based on projected Gross–Pitaevskii equations (PGPE/SPGPE), and quantum Monte Carlo (QMC) techniques. Specifically, we mainly discuss their underlying physical assumptions, regimes of applicability, and representative applications to equilibrium phase diagrams, dissipative dynamics, and fluctuation-dominated phenomena. The TeGPE incorporates thermal and quantum fluctuations through effective mean-field potentials within the local density approximation, providing an efficient description of equilibrium properties and phase transitions. Classical-field approaches, including PGPE and SPGPE, describe highly occupied low-energy modes and are particularly suitable for studying thermalization, dissipative evolution, and non-equilibrium dynamics. In contrast, QMC methods, especially path integral Monte Carlo, preserve the full Bose statistics and many-body correlations, providing reliable benchmarks for strongly correlated finite-temperature systems. Finally, we outline recent developments toward quantum kinetic descriptions that permit a self-consistent description of the interplay between condensates and thermal clouds in real-time dynamics.

[†] Corresponding author. E-mail: zhangyc@xjtu.edu.cn



Keywords: Bose-Einstein condensate; finite-temperature effects; dipolar supersolid; classical-field methods; quantum Monte Carlo methods