

## 国防科技大学建校 70 周年专题

## 基于动力学平均场的光晶格超冷原子量子模拟\*

谭辉<sup>1)</sup> 曹睿<sup>1)</sup> 李永强<sup>1)2)†</sup>

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 极端条件物理与应用湖南省重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 4 月 29 日收到; 2023 年 6 月 17 日收到修改稿)

随着原子冷却技术与光晶格技术的发展, 光晶格与超冷原子气体组成的量子系统已经成为量子模拟中的有力工具. 光晶格纯净和高度可控的性质赋予其强大的调控能力, 如今, 人们可以模拟更复杂和有趣的物理现象, 从而加深对量子多体物理的认识. 本文综述了近年来本课题组利用玻色动力学平均场理论对强关联区间的光晶格玻色体系进行的一系列研究, 包括多组分玻色体系、高轨道玻色体系以及存在长程相互作用的体系等. 通过玻色动力学平均场理论的计算, 揭示了从弱相互作用区间到强相互作用区间出现的丰富物理现象, 包括不同磁序的量子相、多步凝聚、超固体相以及高轨道体系中的自旋-角动量耦合和阻挫效应.

**关键词:** 冷原子量子模拟, 玻色动力学平均场理论, 量子相变**PACS:** 37.10.Jk**DOI:** 10.7498/aps.72.20230701

## 1 引言

量子模拟简而言之就是利用其他可控的量子多体系统对真实复杂量子系统进行实验或理论研究的一种方法<sup>[1]</sup>. 光晶格中的超冷原子气体由于系统参数可控和成熟的实验技术, 已经成为了一个完善的量子模拟实验平台<sup>[2,3]</sup>. 光晶格通常是由相干激光束形成的, 通过控制激光的数目和角度来实现不同维度<sup>[4–6]</sup>和不同结构<sup>[7–11]</sup>的周期性晶格结构, 从而模拟固体中的晶格. 在光晶格中, 人们可以自由调节晶格深度<sup>[6]</sup>, 可以研究晶格无序性, 还可以设计出有等效磁场的系统, 其磁场强度可以达到目前固体物理实验室中最大磁场的数百倍<sup>[12]</sup>. 除此之外, 人们可以精确控制激光的相对相位, 实现可编程的连续可调晶格系统, 这些实验技术大大拓展了光晶格的调控和模拟能力<sup>[13,14]</sup>. 中性原子在激光的交变电场中被极化, 从而受到偶极力被陷俘在这

样的周期性光晶格中<sup>[15]</sup>. 根据激光波长的不同, 光晶格中的原子被陷俘在波结或波腹, 这种相干激光束产生的周期性晶格势会产生一系列布洛赫能带. 一般而言, 原子在转移到光学晶格之前就被冷却到了足够低的温度, 因此在绝热地装载在光晶格后只有最低的布洛赫带被填充, 当晶格势足够深时, 该体系可以用一个简单的单能带束缚模型描述<sup>[16]</sup>, 该模型主要包含原子在格点上的相互作用以及在格点间的跃迁振幅, 通过调节晶格深度或者通过费什巴赫 (Feshbach) 共振<sup>[17–19]</sup>改变跃迁振幅与原子间相互作用的比值大小可以观察到丰富的量子相.

1995 年, 玻色-爱因斯坦凝聚首次在实验中被观察到<sup>[20,21]</sup>, 六年后 Greiner 研究组<sup>[6]</sup>成功将原子装载在光晶格中并观察到了著名的莫特绝缘相, 莫特绝缘相是一个典型的强关联相, 由于原子间的相互作用非常强, 原子局域在各个格点上, 每个格点上的粒子数都是整数. 这一想法最开始来自 Jaksch 和他的同事<sup>[22]</sup>, 他们提出光晶格中的原子可以模

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12074431, 12374252) 和湖南省杰出青年科学基金 (批准号: 2021JJ10044) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li\_yq@nudt.edu.cn

拟固体材料中的电子行为,并模拟哈伯德模型.在 Greiner 等的实验之后,利用光晶格中的超冷原子进行量子模拟的实验和理论研究如雨后春笋般大量涌现.基于光晶格中超冷原子的量子模拟也成为了现代物理中不可或缺的一部分<sup>[23–31]</sup>.

随着实验技术的发展,人们开始对自旋玻色体系进行研究<sup>[32]</sup>,这里的自旋可以是原子不同的超精细态,也可以是不同种类的原子.在这样的体系中,自旋关联起着重要作用,并且会带来不同于标量玻色子体系的物理现象.在最近的实验中,旋量超冷玻色体系已经被实现了<sup>[33–37]</sup>,并出现了非常广泛的研究,如自旋混合<sup>[38,39]</sup>、自旋波<sup>[40,41]</sup>、自旋动力学<sup>[42–46]</sup>、自旋图案<sup>[47–49]</sup>以及相变<sup>[50–52]</sup>.这些实验为研究自旋关联凝聚体中的量子现象提供了新的路径,也激起了对光晶格中旋量玻色气体的进一步研究<sup>[53–58]</sup>.此外,研究表明:在外加磁场下,体系基态的简并被打破,自旋相互作用与原子间短程相互作用的竞争会引起丰富的强关联量子相<sup>[31,32,59,60]</sup>.

除了原子间的短程相互作用,长程相互作用也是强关联体系中的一个重要组成部分,具有长程相互作用的体系倾向于形成新的量子相<sup>[61]</sup>.长程相互作用通常出现在材料科学中,并与短程相互作用竞争导致空间调制相的出现<sup>[62]</sup>.在光晶格超冷原子体系中有两种方式可以带来长程相互作用:一是利用超冷原子间的偶极力<sup>[61]</sup>;二是将原子与高精度腔耦合,腔场自洽地将所有原子耦合在一起,可以等效地认为原子间具有长程相互作用<sup>[63–66]</sup>.偶极玻色-爱因斯坦凝聚体<sup>[67]</sup>、极性分子<sup>[68]</sup>和耦合到光学腔<sup>[63,69]</sup>的玻色-爱因斯坦凝聚体的实验实现,为具有长程相互作用的量子气体的研究开辟了新的道路,也为研究具有新奇性质的量子相提供了更多的途径.

此外,轨道自由度也是量子材料中重要的组成部分,其与自旋自由度、电荷自由度等一起构成了量子材料的物理特性.对于轨道自由度的研究,极大地丰富了人们对于基础物理机制的认知.在冷原子量子模拟中,这种高轨道原子系统具有的空间各向异性,带来了丰富的物理现象<sup>[70–79]</sup>.在实验方面,随着技术的不断提高,高轨道冷原子的相关实验也取得了丰硕的成果.最早在实验室观测到 p 能带现象是 2007 年由 Bloch 研究组<sup>[80]</sup>实现的,之后汉堡大学的 Hemmerich 小组<sup>[81,82]</sup>利用二分晶格

(bipartite lattice) 实现了正方晶格的 p 轨道玻色凝聚,并观测到 p 能带玻色系统中存在  $p_x + ip_y$  的手征超流.近年来,随着实验技术的不断提高,三角晶格、六角晶格的 p 轨道玻色系统和高轨道费米系统<sup>[83,84]</sup>也已经被实现,并观察到了非常有趣的物理现象<sup>[75,85–89]</sup>.

总的来说,光晶格中的超冷原子为量子多体问题的模拟提供了理想的平台,在凝聚态物理、统计物理、量子化学、高能量物理等领域中都起着重要作用<sup>[90]</sup>.第 2 部分详细介绍玻色动力学平均场理论,该理论对于研究高维强关联体系是非常有效的.第 3, 4, 5 部分分别介绍了我们近几年在旋量玻色体系、存在长程相互作用体系、高轨道玻色体系的研究.最后是总结和展望.

## 2 玻色动力学平均场理论

在多体系统中,由于粒子间复杂的相互作用,整个体系是密切关联在一起的,因此理论求解是非常困难的.要处理多体系统,只能采取近似处理、数值求解的方法.目前研究多体系统的方法有平均场理论、密度矩阵重整化群、量子蒙特卡罗方法、动力学平均场理论(dynamical mean-field theory, DMFT)、精确对角化等.本文主要介绍玻色动力学平均场理论(Bosonic dynamical mean-field theory, BDMFT).

动力学平均场理论的研究始于 1989 年, Vollhardt 和 Metzner<sup>[91]</sup>研究发现无穷维下 Fermion-Hubbard 模型可以进行简化.同年, Hartmann<sup>[92,93]</sup>指出在无穷维下关联将变得局域,动量将不再重要,这种局域的关联具有动力学属性,任何非局域的关联效应都可以用一个静态的平均场描述.之后, 1991 年, Janiš<sup>[94]</sup>利用动力学干涉势近似理论给出了无穷维下 Hubbard 模型的格林函数和自能的泛函方程.在此基础上, Georges 与 Kotliar<sup>[95]</sup>利用 Anderson 杂质模型将 DMFT 的自洽方程推广到了 Hubbard 模型, DMFT 的基本框架构建完成.从 1989 年开始,到 1991 年结束,短短三年的时间,动力学平均场理论就建立完成,动力学平均场理论被广泛地用于材料计算、多体系统等,拓展了数值求解物理问题的计算方法,是处理多体问题的一种高效的计算手段.

动力学平均场的核心思想是无穷维极限下系统的局域性. 在无穷维度下, 自能是严格局域的, 系统的空间涨落被冻结, 只剩下了局域的量子涨落, 此时就可以将多体系统解耦成单体问题, 因此动力学平均场理论是一种考虑了局部量子涨落的数值方法, 如图 1<sup>[96]</sup> 所示. 在无穷维度下自能是严格局域的, 因此动力学平均场理论对于低维度问题的计算误差比较大, 但随着研究发现, 二维、三维的多体系统中动力学平均场理论的结果也令人满意<sup>[97–99]</sup>. 因此, 动力学平均场理论是计算二维及以上维度强关联、弱耦合区间的一个主要方法.

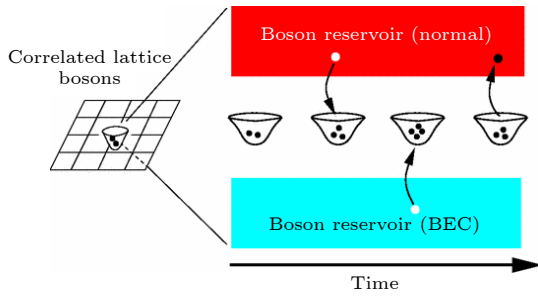


图 1 玻色动力学平均场示意图. 通过与普通玻色子热库和玻色-爱因斯坦凝聚热库耦合<sup>[96]</sup>, 多体格点问题退化为一个单格点问题

Fig. 1. Schematic picture of BDMFT. In BDMFT, the many-body lattice problem is reduced to a single lattice problem coupling with normal Bosonic reservoir and reservoir of Bose-Einstein condensate (BEC)<sup>[96]</sup>.

考虑一个一般的 Bose-Hubbard 模型, 其哈密顿量可写为

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \nu} \left( t_{\nu} \hat{b}_{i,\nu}^{\dagger} \hat{b}_{j,\nu} + \text{H.c.} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i, \nu \mu} U_{\nu \mu} \hat{n}_{i,\nu} (\hat{n}_{i,\mu} - \delta_{\nu \mu}) - \sum_{i, \nu} \varepsilon_{\nu} \hat{n}_{i,\nu}, \quad (1)$$

其中  $\nu, \mu$  表示不同组分的玻色子,  $\hat{b}_{i,\nu}^{\dagger} (\hat{b}_{i,\nu})$  是格点  $i$  上  $\nu$  组分玻色子的产生 (湮灭) 算符,  $\hat{n}_{i,\nu} \equiv \hat{b}_{i,\nu}^{\dagger} \hat{b}_{i,\nu}$  是格点  $i$  处  $\nu$  组分玻色子的粒子数算符,  $t_{\nu}$  为跃迁振幅,  $\langle i, j \rangle$  表示最近邻格点,  $U_{\nu \mu}$  和  $\varepsilon_{\nu}$  分别是相互作用和化学势,  $\delta_{\nu \mu}$  为克罗内克符号. 在巨正则系综下, 可以把系统的配分函数写为<sup>[96,100,101]</sup>

$$Z = \int \mathcal{D}[b^*, b] e^{-S[b^*, b]}, \quad (2)$$

式中,  $\mathcal{D}[b^*, b] = \prod_{i, \nu} db_{i,\nu}^* db_{i,\nu}$ , 此处的  $b_{i,\nu}$  是一个复数场. 对应的作用量可写为

$$S[b^*, b] = \int_0^{\beta} d\tau \left( \sum_{i, \nu} b_{i,\nu}^* (\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} b_{i,\nu} (\tau) + H(\tau) \right) = \int_0^{\beta} d\tau \left[ \sum_{i, \nu} b_{i,\nu}^* (\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{i,\nu} (\tau) - \sum_{\langle i,j \rangle, \nu} t_{\nu} (b_{i,\nu}^* (\tau) b_{j,\nu} (\tau) + \text{c.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{i, \nu \mu} U_{\nu \mu} n_{i,\nu} (\tau) (n_{i,\mu} (\tau) - \delta_{\nu \mu}) \right], \quad (3)$$

式中,  $\tau = it'$  是根据时间  $t'$  定义的虚时;  $H(\tau)$  为虚时下的体系哈密顿量;  $\beta = 1/(k_B T)$ , 其中  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为体系的温度. 可以将作用量分成 3 个部分  $S_0$ ,  $\Delta S$  和  $S^{(0)}$ , 其中,  $S_0$  是只有格点  $i = 0$  的有效作用量, 即

$$S_0 = \int_0^{\beta} d\tau \left[ \sum_{\nu} b_{0,\nu}^* (\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{0,\nu} (\tau) + \frac{1}{2} \sum_{\nu, \mu} U_{\nu \mu} n_{0,\nu} (\tau) (n_{0,\mu} (\tau) - \delta_{\nu \mu}) \right]; \quad (4)$$

$\Delta S$  是仅包含了  $i = 0$  格点与其周围格点的跃迁过程的作用量,

$$\Delta S = \int_0^{\beta} d\tau \sum_{i, \nu} -t_{\nu} (b_{0,\nu}^* (\tau) b_{i,\nu} (\tau) + \text{c.c.}) \equiv \int_0^{\beta} d\tau \Delta S(\tau); \quad (5)$$

最后的  $S^{(0)}$  则包含了所有跟  $i = 0$  格点无关的项,

$$S^{(0)} = \int_0^{\beta} d\tau \left[ \sum_{i \neq 0, \nu} b_{i,\nu}^* (\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{i,\nu} (\tau) - \sum'_{\langle i,j \rangle, \nu} t_{\nu} (b_{i,\nu}^* (\tau) b_{j,\nu} (\tau) + \text{c.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq 0, \nu \mu} U_{\nu \mu} n_{i,\nu} (\tau) (n_{i,\mu} (\tau) - \delta_{\nu \mu}) \right], \quad (6)$$

式中的  $\sum'$  是除了 0 格点外所有的最近邻的求和符号. 因此, 可以将系统的配分函数写成

$$Z = \int \mathcal{D}[b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} \times \int \left( \mathcal{D}^{(0)} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-\Delta S} e^{-S^{(0)}} \right). \quad (7)$$

考虑到,  $S^{(0)}$  描述的系综平均值可以写成

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z^{(0)}} \int \mathcal{D}^{(0)} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] A e^{-S^{(0)}}, \quad (8)$$

代入 (7) 式, 配分函数被写成

$$Z = \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} Z^{(0)} \langle e^{-\Delta S} \rangle_0, \quad (9)$$

将  $\langle e^{-\Delta S} \rangle_0$  展开到二阶, 引入超流序参量  $\phi_{i,\nu}(\tau) = \langle b_{i,\nu}(\tau) \rangle_0$  和连通格林函数

$$G_{i\nu,j\mu}^{(0)}(\tau_1, \tau_2) = - \left\langle \begin{pmatrix} b_{i\nu}(\tau_1) - \langle b_{i\nu}(\tau_1) \rangle_0 \\ b_{i\nu}^*(\tau_1) - \langle b_{i\nu}^*(\tau_1) \rangle_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{j\mu}(\tau_2) - \langle b_{j\mu}(\tau_2) \rangle_0 \\ b_{j\mu}^*(\tau_2) - \langle b_{j\mu}^*(\tau_2) \rangle_0 \end{pmatrix}^T \right\rangle, \quad (10)$$

最终可以将配分函数写成

$$Z = Z^{(0)} \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\nu} -t_\nu [b_{0,\nu}^*(\tau) \phi_{i,\nu}(\tau) + b_{0,\nu}(\tau) \phi_{\nu,i}^*(\tau)] \right. \\ \left. + \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{i,\nu} \sum_{j,\mu} t_\mu t_\nu G_{i\nu,j\mu}^{(0)}(\tau_1, \tau_2) \right\}. \quad (11)$$

观察 (11) 式的形式, 可以定义一个有效的杂质格点 ( $i=0$ ) 的配分函数

$$Z_{\text{imp}} \equiv \frac{Z}{Z^{(0)}} = \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_{\text{imp}}}, \quad (12)$$

其中杂质格点的作用量可写成

$$S_{\text{imp}} = - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\nu\mu} \begin{pmatrix} b_{0\nu}^*(\tau_1) \\ b_{0\nu}(\tau_1) \end{pmatrix}^T \mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) \begin{pmatrix} b_{0\mu}(\tau_2) \\ b_{0\mu}^*(\tau_2) \end{pmatrix} \\ + \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_{\nu\mu} \frac{1}{2} U_{\nu\mu} n_{0\nu}(\tau) (n_{0\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{i,\nu} t_\nu (b_{0\nu}^*(\tau) \phi_{i,\nu}(\tau) + \text{c.c.}) \right\}, \quad (13)$$

(13) 式中引入了 Weiss 格林函数, 有

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = (\partial_{\tau_1} \sigma_z - \varepsilon_\nu) \delta_{\nu\mu} + G_{i\nu,j\mu}^{(0)}, \quad (14)$$

其中,  $\sigma_z$  是泡利矩阵. 由于考虑的是高维情况, 为了使得此时动能不发散, 需要对跃迁项做变换  $t \rightarrow z\tilde{t}$ ,  $z$  是配位数 [96,97,102]. 其原因是在计算最近邻跃迁的过程中, 会多出一个配位数  $z$ , 因此在无穷维度下, 会出现动能发散的情况, 故需要在此处进行一个修正. 上面的这种将杂质格点从整个多体系统中解耦出来, 变成一个杂质格点与热浴耦合的方法, 被称为“空腔方法” [96,97,103].

在松原频率的表象下, Weiss 格林函数可写成

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n) = (i\omega_n \sigma_z + \varepsilon_\nu) \delta_{\nu\mu} - t_\nu t_\mu \sum_{i,j}' G_{i\nu,j\mu}^{(0)}(i\omega_n), \quad (15)$$

其中,  $\omega_n = 2\pi n/\beta$  是松原频率. Weiss 格林函数满足 Dyson 方程:

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1} = \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) + G_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n), \quad (16)$$

式中,  $\Sigma_{\text{imp}}$  是杂质格点的自能; 杂质格点的格林函

数  $G_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n)$  满足

$$G_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n \sigma_z + \varepsilon - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - \varepsilon_k}, \quad (17)$$

其中,  $\varepsilon_k$  是色散关系. 在这里, 近似认为自能是个局域的量, 即  $\Sigma(k, i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$ . 这个近似在系统处于无穷维度时是严格成立的, 在高维下基本符合. 但这种近似无法处理由空间关联所带来的物理现象, 对于长程相互作用、自旋液体等物理问题无法得到很好的结果. 现在,  $\Sigma_{\text{imp}}$  和  $\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n)$  互相包含了对方, DMFT 的自洽回路已形成. 给 Weiss 格林函数一个试探值, 就可以求解作用量 (13) 式, 之后就可求出自能  $\Sigma_{\text{imp}}$  等物理量, 利用 Dyson 方程 (16), 可以得到新的  $\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n)$ , 构成一个自洽回路.

在上面的自洽过程中, 求解作用量是非常困难的, 因此比较好的方法是将作用量映射到可以求解的模型上. 这个可解的模型要能够较为完美地描述杂质格点与环境的物理状态, 对于杂质格点不仅要



考虑到单格点, 还需要考虑到其和环境的关联, Georges 和 Kotliar<sup>[95]</sup> 提出 Anderson 杂质模型的

映射方法是现在 DMFT 广泛使用的方法. Anderson 杂质模型哈密顿量可写为<sup>[103,104]</sup>

$$\begin{aligned} \hat{H}_A = & - \sum_{\nu} z t_{\nu} \left( \phi_{\nu}^* \hat{b}_{\nu} + \text{H.c.} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} U_{\nu\mu} \hat{n}_{\nu} (\hat{n}_{\mu} - \delta_{\nu\mu}) \\ & - \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} \hat{n}_{\nu} + \sum_l \varepsilon_l \hat{a}_l^{\dagger} \hat{a}_l + \sum_{l,\nu} \left( V_{\nu,l} \hat{a}_l^{\dagger} \hat{b}_{\nu} + W_{\nu,l} \hat{a}_l \hat{b}_{\nu} + \text{H.c.} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

(18) 式中, 相互作用部分和化学势直接从 Hubbard 模型中得到. 玻色-爱因斯坦凝聚的玻色子热库由超流序参量  $\phi_{\nu}$  描述, 普通玻色子的热库由一定数目的轨道表示, 其中  $a_l^{\dagger}$  和  $\varepsilon_l$  为轨道的产生算符和能量. 杂质格点通过正常跃迁振幅  $V_{\nu,l}$  和反常跃迁振幅  $W_{\nu,l}$  与轨道耦合起来, 因此  $\{\varepsilon_l, V_l, W_l\}$  也被称为 Anderson 参数. 哈密顿量 (18) 的作用量分别有杂质部分作用量

$$S_{\text{loc}} = \int_0^{\beta} d\tau \left[ \sum_{\nu} b_{\nu}^*(\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{\nu}(\tau) - z t_{\nu} (\phi_{\nu}^*(\tau) b_{\nu}(\tau) + \text{c.c.}) + \sum_{\nu,\mu} \frac{U_{\nu\mu}}{2} n_{\nu}(\tau) (n_{\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) \right] \quad (19)$$

和轨道部分作用量

$$S_0 = \int_0^{\beta} d\tau \sum_l \left\{ a_l^*(\tau) (\varepsilon_l + \partial_{\tau}) a_l(\tau) + V_l [a_l^*(\tau) b(\tau) + a_l(\tau) b^*(\tau)] + W_l [a_l(\tau) b(\tau) + a_l^*(\tau) b^*(\tau)] \right\}. \quad (20)$$

将轨道部分积出去, Anderson 杂质模型的有效作用量可以写成

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} = & - \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\nu,\mu} b_{\nu}^*(\tau_1) [(\partial_{\tau_1} \sigma_z - \mu_{\nu}) \delta_{\nu\mu} + \Delta_{\nu,\mu}(\tau_1, \tau_2)] b_{\mu}(\tau_2) \\ & + \left\{ \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\nu,\mu} \frac{1}{2} U_{\nu\mu} n_{\nu}(\tau) (n_{\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{\nu} z t_{\nu} (b_{\nu}^*(\tau) \phi_{\nu}(\tau) + \text{c.c.}) \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

其中, 引入了南部表象

$$\mathbf{b}_{\nu}(\tau) = \begin{pmatrix} b_{\nu}(\tau) \\ b_{\nu}^*(\tau) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_{\nu}^*(\tau) = \begin{pmatrix} b_{\nu}^*(\tau) & b_{\nu}(\tau) \end{pmatrix}, \quad (22)$$

以及杂质函数矩阵

$$\Delta_{\nu,\mu}(\tau_1, \tau_2) = \begin{pmatrix} \Delta_{\nu,\mu}^1(\tau_1, \tau_2) & \Delta_{\nu,\mu}^2(\tau_1, \tau_2) \\ (\Delta_{\nu,\mu}^2)^*(\tau_1, \tau_2) & (\Delta_{\nu,\mu}^1)^*(\tau_1, \tau_2) \end{pmatrix}. \quad (23)$$

通过对比相互作用量, 在松原频率表象下, 有

$$\Delta_{\nu\mu}(\mathrm{i}\omega_n) \doteq t_{\nu} t_{\mu} \sum'_{i,j} \mathbf{G}_{i\nu,j\mu}^0(\mathrm{i}\omega_n), \quad (24)$$

此时杂质函数为

$$\Delta_{\nu\mu}^1(\mathrm{i}\omega_n) \equiv - \sum_l \left( \frac{V_{\nu,l} V_{\mu,l}}{\varepsilon_l - \mathrm{i}\omega_n} + \frac{W_{\nu,l} W_{\mu,l}}{\varepsilon_l + \mathrm{i}\omega_n} \right), \quad \Delta_{\nu\mu}^2(\mathrm{i}\omega_n) \equiv - \sum_l \left( \frac{V_{\nu,l} W_{\mu,l}}{\varepsilon_l - \mathrm{i}\omega_n} + \frac{W_{\nu,l} V_{\mu,l}}{\varepsilon_l + \mathrm{i}\omega_n} \right).$$

因此, 可以得到 Weiss 格林函数新的表达方式如下:

$$\mathcal{G}_{\lambda\nu}^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) = (\mathrm{i}\omega_n \sigma_z + \mu_{\lambda}) \delta_{\nu,\mu} - \Delta_{\nu\mu}(\mathrm{i}\omega_n). \quad (25)$$

对于 Anderson 杂质模型, 可以利用数值的方式求解这个单体哈密顿量. 在动力学平均场方法中, 这

种求解 Anderson 杂质模型所用不同的数值手段就叫做杂质求解器. 常用的杂质求解器有精确对角化<sup>[105,106]</sup>、量子蒙特卡罗方法<sup>[107]</sup>、数值重整化群<sup>[108]</sup>等. 对应于不同的物理系统, 杂质求解器的选取非常重要. 通过杂质求解器求解 Anderson 杂质模型, 就可以得到哈密顿量的本征态和本征能量, 以及超

流序参量等物理量. 在 Lehmann 表象下, 可以用本征态和本征能量表示局域格林函数

$$G_{\text{imp},\nu\mu}^1(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \langle m | \hat{b}_\nu | n \rangle \langle n | \hat{b}_\mu^\dagger | m \rangle \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m + i\hbar\omega_n} + \beta\phi_\nu\phi_\mu^*,$$

$$G_{\text{imp},\nu\mu}^2(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \langle m | \hat{b}_\nu | n \rangle \langle n | \hat{b}_\mu | m \rangle \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m + i\hbar\omega_n} + \beta\phi_\nu\phi_\mu, \quad (26)$$

其中,  $|m\rangle$  为本征态,  $E_m$  为对应的能量. 因此, 系统的自能可以写成

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{lat}}(i\omega_n) = i\omega_n\sigma_z + \varepsilon - \Delta - \mathbf{G}_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n), \quad (27)$$

此处, 考虑了自能近似, 即认为自能是局域的, 因此满足  $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{lat}}(i\omega_n)$ . 由 Dyson 方程 (16), 能够得到格点格林函数为

$$\mathbf{G}_{\text{lat}}(k, i\omega_n) = 1 / (i\omega_n\sigma_z + \varepsilon_\nu - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - \varepsilon_k). \quad (28)$$

现在, 利用 Anderson 杂质模型构造的动力学平均场方法的自洽循环便完成了. 利用 Anderson 杂质模型, 成功绕开求解作用量来实现动力学平均场的自洽过程. 在 Anderson 杂质模型中, 动力学平均场的循环为: 先给出 Anderson 参数的试探值, 利用杂质求解器求解 Anderson 杂质模型哈密顿量, 便能够得到系统的本征态和本征能量, 进一步可以求得自能、超流序参量等物理量, 然后利用 (28) 式求得新的格点格林函数. 利用新求得的格点格林函数, 可以得到新的 Anderson 参量, 然后再重新循环上述过程, 直到满足自洽条件, 输出最终所求系统的物理量, 如图 2 所示.

虽然用 Anderson 杂质模型可以很好地求解动力学平均场, 但在真实的实验中, 由于外场或人工规范场, 冷原子系统并不是各向同性的. 因此, 需要对现在的动力学平均场理论进行进一步拓展. 类似于费米系统的实空间动力学平均场理论 [109,110], 我们发展了实空间玻色动力学平均场理论 (RBDMFT). 在实空间玻色子动力学平均场理论中, 虽然自能是局域的, 但各个空间位置的自能是不同的, 即  $\Sigma_{ij,\lambda\nu} = \Sigma_{\lambda\nu}^i \delta_{ij}$ . 因此, 利用实空间动力学平均场理论, 可以求解各向异性的 Hubbard 模型, 并得到较好的结果.

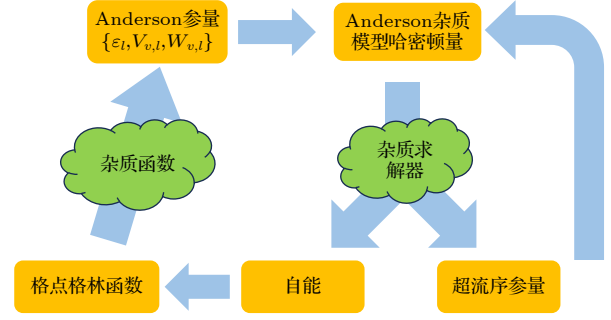


图 2 Anderson 杂质模型下动力学平均场方法的自洽循环示意图. 给 Anderson 参数初值, 利用杂质求解器求解 Anderson 杂质模型, 得到物理量和自能, 通过自能得到格点格林函数, 利用 Dyson 方程得到杂质函数, 从而得到新的 Anderson 参量, 构成自洽过程

Fig. 2. Schematic picture of BDMFT loop in Anderson impurity model. For an initial value of Anderson parameters, physical quantities and self-energy are obtained by solving the Anderson impurity model. After obtain lattice Green function through self-energy, impurity functions are attained. Finally, the loop is complete by fetched new Anderson parameters from impurity functions.

### 3 光晶格中多组分玻色子体系的磁性研究

#### 3.1 三维光晶格中自旋-1 超冷玻色气体的磁性相变研究

随着超冷原子气体在光晶格中的实现, 理论研究也变得非常广泛, 量子蒙特卡罗方法和密度重整化群理论可以在一维情形下进行研究 [53–56], 而在三维体系中, 对强关联量子相的研究一般都是通过晶格规范理论预测 [111], 强耦合极限下的有效自旋模型 [112,113] 以及静态平均场理论 [114–118] 等方法. 而超越了静态平均场理论, 从弱耦合到强耦合极限下的量子多体相图还几乎没有人研究. 因此本课题组利用玻色动力学平均场理论研究了自旋-1 玻色体系中的量子相变 [119]. 在适当的晶格深度下, 自旋-1 的玻色子体系可以用紧束缚近似下的玻色-哈伯德模型描述:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma}) + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{1}{2} U_2 \sum_i (\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (29)$$

这里  $\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger (\hat{b}_{i,\sigma})$  是格点  $i$  上超精细态  $m_F = \sigma$  的产生 (湮灭) 算符;  $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i,\sigma}$ , 其中  $\hat{n}_{i,\sigma} \equiv \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma}$  是

格点  $i$  处  $\sigma$  态的粒子数算符;  $\hat{S}_i \equiv \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{F}_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\sigma'}$  为总自旋算符,  $\mathbf{F}_{\sigma\sigma'}$  是自旋-1 玻色子的自旋矩阵;  $\mu$  是体系的化学势; 此外还有最近邻格点间的跃迁振幅  $t$ , 原子间的相互作用  $U_0$  以及自旋相互作用  $U_2$ .

对于这一哈密顿量, 我们基于玻色动力学平均场理论在铁磁自旋相互作用 ( $U_2/U_0 > 0$ ) 的情形下计算了体系的零温相图. 通过定义不同的序参量如凝聚序参量  $\phi_\alpha^1 \equiv \langle \hat{b}_\alpha \rangle$ 、向列序参量  $\phi_{\alpha\beta}^2 \equiv \langle \hat{S}_\alpha^\dagger \hat{S}_\beta \rangle - \delta_{\alpha\beta}/3 \langle \hat{S}^2 \rangle$ 、对凝聚序参量  $\varphi_{\alpha\beta}^2 \equiv \langle \hat{b}_\alpha \hat{b}_\beta \rangle$  以及局域磁化  $\mathbf{M} \equiv \langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$ , 我们发现体系呈现非常多不同的量子相, 在格点上粒子数为奇数时, 体系形成向列相绝缘体 (nematic insulator, NI), 对应于  $\phi_\alpha^1 = 0$ ,  $\phi_{\alpha\beta}^2 > 0$ ,  $\mathbf{M} = 0$ , 而在粒子数为偶数时, 体系形成自旋单态绝缘相 (spin-singlet insulator, SSI), 对应  $\phi_\alpha^1 = 0$ ,  $\phi_{\alpha\beta}^2 = 0$ . 并且随着铁磁相互作用的增强, SSI 的区域会逐渐增大, 相反 NI 的区域逐渐减小直至从体系消失并伴随着新的自旋单态凝聚相 (spin-singlet condensate, SSC) 的出现, 对应于  $\phi_\alpha^1 = 0$ ,  $\phi_{\alpha\beta}^2 = 0$ ,  $\langle \hat{S}^2 \rangle = 0$ ,  $\mathbf{M} = 0$ ,  $\Theta \equiv \langle -2\hat{b}_{-1}\hat{b}_1 + \hat{b}_0^2 \rangle \neq 0$ , 如图 3<sup>[119]</sup> 所示.

进一步地, 研究了温度对体系的影响, 并观察

到超流体可以通过一阶 (二阶) 相变被加热成具有偶 (奇) 填充的莫特绝缘体, 类似于  $^3\text{He}$  中的 Pomeranchuk 效应. 我们发现有序态 (如向列绝缘相和自旋单态绝缘相) 的临界温度在现有的冷却方案范围内, 这表明有机会使用现有的实验技术直接观察这些相.

### 3.2 三维光晶格中磁场下自旋-1 超冷玻色气体的相变研究

研究多组分超冷原子气体的磁序和玻色-爱因斯坦凝聚体之间的联系是一个有趣的话题. 对于旋量气体, 理论上已经预测了多步凝聚<sup>[120–125]</sup>, 并在实验中被观察到了<sup>[50,126,127]</sup>. 例如, 对于较小的塞曼场, 反铁磁相互作用定性地改变了相图并导致在超精细态  $m_F = \pm 1$  态下的凝聚<sup>[128]</sup>, 然而对光晶格中自旋玻色气体的多步凝聚目前还没有人进行研究. 因此紧接着上面的工作, 本课题组基于玻色动力学平均场理论, 系统地研究了该自旋-1 玻色子体系在存在外部塞曼相互作用时的性质<sup>[129]</sup>. 体系的哈密顿量与无磁场的自旋-1 玻色子体系相比, 多了线性塞曼能量  $p$  和二次塞曼能量  $q$  这两项:

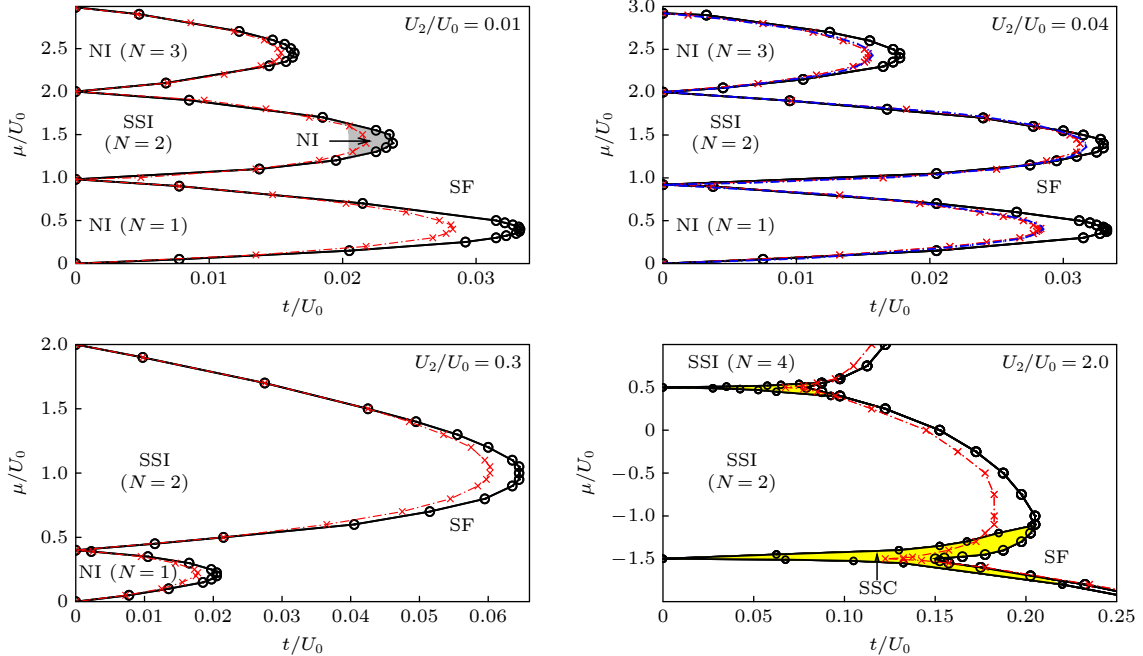


图 3 三维光晶格中自旋-1 超冷玻色子在不同反铁磁相互作用下的零温相图<sup>[119]</sup>,  $U_2/U_0$  分别为 0.01, 0.04 ( $^{23}\text{Na}$ ), 0.3, 和 2.0. 数据来源于 BDMFT (黑线), Gutzwiller (红线) 以及文献<sup>[117]</sup> (蓝线) 中的计算. 体系中存在 4 种不同的相, 即超流相 (SF)、向列绝缘相 (NI)、自旋单态绝缘相 (SSI) 和自旋单态凝聚相 (SSC)

Fig. 3. Zero-temperature phase diagram for spin-1 ultracold bosons in a 3D cubic lattice<sup>[119]</sup> for different antiferromagnetic interactions  $U_2/U_0 = 0.01, 0.04$  ( $^{23}\text{Na}$ ), 0.3, and 2.0, respectively, obtained via BDMFT (black circle), Gutzwiller (red cross) and in Ref. <sup>[117]</sup> (blue dashed). There are four different phases in these diagrams: superfluid (SF), nematic insulator (NI), spin-singlet insulator (SSI) and spin-singlet condensate (SSC).

$$\begin{aligned}\hat{H} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma} \right) \\ & + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \\ & + \frac{U_2}{2} \sum_i \left( \hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i \right) + p \hat{S}_{iz} \\ & + q \sum_{i,\sigma} \sigma^2 \hat{n}_{i,\sigma} - \mu \sum_i \hat{n}_i,\end{aligned}\quad (30)$$

这是由于外加磁场导致超精细态 ( $m_F = 1, 0, -1$ ) 退简并的塞曼效应, 其中  $p = (E_{-1} - E_1)/2$ ,  $q = (E_1 + E_{-1} - 2E_0)/2$ ,  $U_0$  为原子间的相互作用,  $U_2$  为自旋相互作用. 在这一体系中, 塞曼相互作用与自旋相互作用的竞争会出现非常多有趣的相. 对于反铁磁自旋相互作用, 以  $^{23}\text{Na}$  ( $U_2/U_0 \approx 0.037$  [52]) 为例, 计算该体系的多体相图, 体系存在向列绝缘相、铁磁相、自旋单态绝缘相和不同类型的超流相. 计算表明二次塞曼项使得粒子数为偶数的区域出现了向列绝缘相, 在塞曼能量非常大时, 体系的莫特绝缘区完全处于向列莫特绝缘相. 对于铁磁自旋相互作用的情况, 以  $^7\text{Li}$  ( $U_2/U_0 \approx -0.7$  [112]) 和  $^{87}\text{Rb}$  ( $U_2/U_0 \approx -0.005$  [20]) 为例, 绘制了铁磁和向列绝缘相、超流体相等相图, 计算结果表明随着塞曼能量的增强, 铁磁绝缘相的区域逐渐由向列绝缘相取代. 此外, 我们还研究了这些量子相对热涨落的稳定性, 得到了有限温度下的相图.

同时, 对超流体的分步凝聚进行了研究, 给出了各个塞曼组分的临界凝聚温度  $T_c$  与纵向磁化强度的关系. 有趣的是, 在反铁磁相互作用下我们观察到了超精细态  $m_F = -1$  组分的临界温度随着纵向磁化强度的非连续变化: 随着纵向磁化强度的增加, 临界温度首先降低至 0, 然后逐渐增长到某一最大值后再逐渐降为 0; 而对于铁磁相互作用, 超精细态  $m_F = 0$  的临界凝聚温度  $T_c$  会首先减小到某一极小值点, 然后增长到某一极大值, 最后减小到 0. 这反映了强关联超冷玻色气体的独特性质.

### 3.3 自旋碱金属与碱土金属混合体系的磁性研究

量子磁性在固态系统中起着重要作用, 揭示量子多体系统磁序背后的机制一直是理论研究和实验研究的热点. 最近, 超冷旋量玻色子的异核混合物已经在实验上被实现, 如旋量碱金属原子的异核混合物 [130]、旋量碱金属和碱土金属原子的混合物 [131,132],

然而在光晶格中还没有对旋量碱金属和碱土金属原子混合体系的研究. 在 3.1 节和 3.2 节中研究了自旋-1 玻色子体系的基态相图, 以及该体系存在磁场时的性质. 本节主要研究三维光晶格中自旋-1 碱金属原子与自旋-0 碱土金属原子混合体系的基态相图 [133]. 体系的哈密顿量由紧束缚近似下的玻色-哈伯德模型描述:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & - \sum_{\langle ij \rangle, \nu, \sigma} t_{\nu\sigma} \left( \hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\nu\sigma} + \text{H.c.} \right) \\ & + \sum_{i,\sigma} U_{12} \hat{b}_{i,20}^\dagger \hat{b}_{i,1\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,1\sigma} \hat{b}_{i,20} \\ & + \sum_i \left[ \frac{1}{2} U_1 \hat{n}_{i,1} (\hat{n}_{i,1} - 1) + \frac{1}{2} U_1' (\hat{S}_{i,1}^2 - 2\hat{n}_{i,1}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} U_2 \hat{n}_{i,2} (\hat{n}_{i,2} - 1) - \mu_1 \hat{n}_{i,1} - \mu_2 \hat{n}_{i,2} \right],\end{aligned}\quad (31)$$

其中,  $\hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger$  ( $\hat{b}_{i,\nu\sigma}$ ) 是格点  $i$  处对于超精细态  $\sigma$  的  $\nu$  种类原子的产生 (湮灭) 算符.  $\hat{n}_{i,\nu} = \sum_\sigma \hat{n}_{i,\nu\sigma}$ ,  $\hat{n}_{i,\nu\sigma} = \hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\nu\sigma}$  为粒子数算符,  $\hat{S}_{i,1} = \sum_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \cdot \boldsymbol{\Gamma}_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\nu\sigma'}$  是自旋-1 粒子的自旋算符.  $\boldsymbol{\Gamma}_{\sigma\sigma'}$  为常用的自旋-1 的矩阵,  $\mu_\nu$  表示  $\nu$  种类粒子的化学势,  $t_{\nu\sigma}$  为近邻格点间的隧穿振幅.  $U_1$  为自旋-1 粒子间的相互作用,  $U_1'$  为自旋相互作用, 此外还有自旋-0 粒子间的相互作用  $U_2$  以及自旋-1 和自旋-0 粒子间的相互作用  $U_{12}$ . 我们的研究主要围绕两种原子间的相互作用展开, 并计算了体系的基态相图, 如图 4 [133] 所示.

首先研究种间相互作用  $U_{12}$  对相图的影响. 对于较小的种间相互作用  $U_{12} < \sqrt{U_1 U_2}$ , 两种原子是互相混合的. 但是对于较大的种间相互作用  $U_{12} > \sqrt{U_1 U_2}$ , 体系会出现相分离. 当种间相互作用减小时,  $n = 1$  的区域会减小, 而  $n = 2$  的区域会增大. 这是因为在  $U_{12} \ll U_{1,2}$  的条件下,  $n = 2$  的区域更容易形成自旋单重态. 对于较大的种间相互作用  $U_{12}/U_1 = 2$ , 我们观察到体系出现了相分离. 这里只得到了自旋-1  $^{87}\text{Rb}$  原子的相图. 作为比较, 也用 Gutzwiller 平均场理论计算了自旋-1 和自旋-0 混合体系的基态相图, 如图 4 [133] 中的红线所示. Gutzwiller 的计算结果是小于 BDMFT 的计算结果的, 这正是由于 BDMFT 包含了量子涨落.

为了更好地描述  $^{87}\text{Rb}$  和  $^{84}\text{Sr}$  的混合体系, 我们把  $^{87}\text{Rb}$  当作自旋  $\downarrow$ , 把  $^{84}\text{Sr}$  当作自旋  $\downarrow$ . 计算表明, 系统在填充数  $n \equiv n_{\text{Rb}} + n_{\text{Sr}} = 1$  ( $n_{\text{Rb}} = n_{\text{Sr}} = 0.5$ ) 时具有非零的磁性,  $M_{\text{tot}} \neq 0$ , 而在填充数  $n = 2$



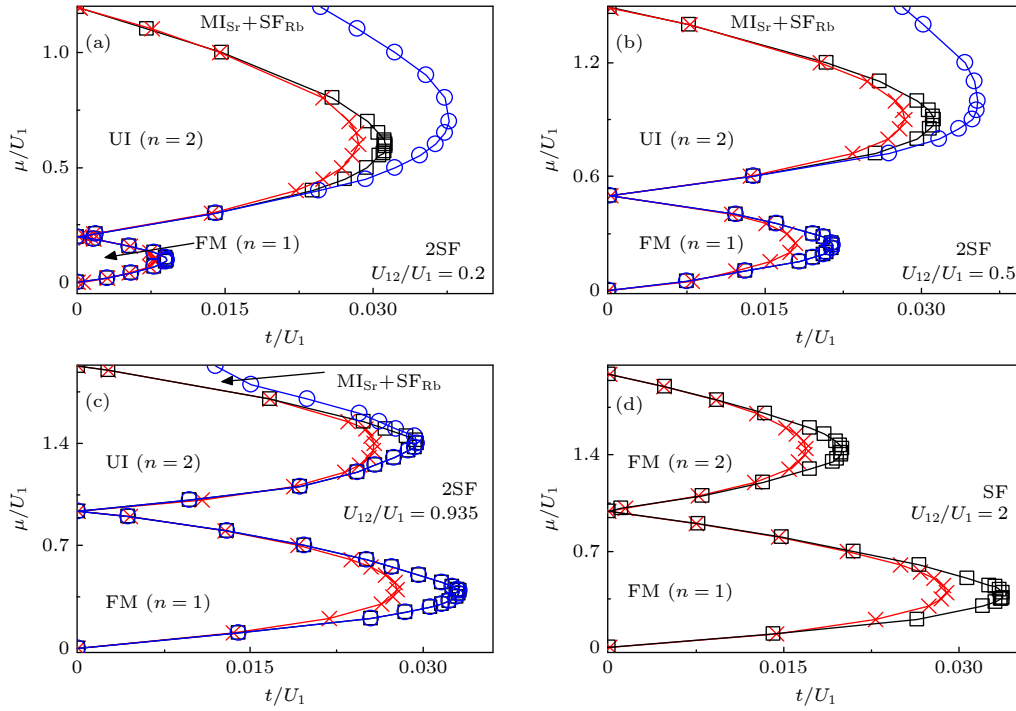


图 4 三维光晶格中由 BDMFT 计算得到的自旋-1  $^{87}\text{Rb}$  ( $U'_1/U_1 = -0.0046$ ) 和自旋-0  $^{84}\text{Sr}$  异核玻色子混合体系在不同种间相互作用  $U_{12}/U_1 = 0.2, 0.5, 0.935$  和 2 下的基态相图<sup>[133]</sup>. 格点上粒子填充数为 1 时, 系统处在铁磁绝缘相. 格点上粒子填充数为 2 时, 体系为无序绝缘相. 此外随着隧穿振幅的增大会出现两种不同的超流相. 其中具有铁磁相互作用的三组分自旋-1  $^{87}\text{Rb}$  原子也处在铁磁相. 注意, 当种间相互作用特别大 ( $U_{12}/U_1 = 2$ ) 时, 系统中只有自旋 1 的玻色子. 作为比较, 红色线条是 Gutzwiller 平均场理论的计算结果. 其他参数为  $t \equiv t_{1\sigma} \approx 0.97t_{20}$ ,  $U_2/U_1 = 1.26$

Fig. 4. Phase diagrams of heteronuclear mixtures of ultracold spin-1  $^{87}\text{Rb}$  (spin-dependent interaction  $U'_1/U_1 = -0.0046$ ) and spin-0  $^{84}\text{Sr}$  bosons in a three dimensional (3D) cubic lattice for different interspecies interactions  $U_{12}/U_1 = 0.2, 0.5, 0.935$  and 2, obtained by BDMFT<sup>[133]</sup>. The system favors ferromagnetic insulating phase (FM) at filling  $n = 1$ , unorder insulating phase (UI) at  $n = 2$ , and two types of superfluid ( $\text{MI}_{\text{Sr}} + \text{SF}_{\text{Rb}}$ , and 2SF), where the three-components of spin-1  $^{87}\text{Rb}$  demonstrate ferromagnetic order as a result of ferromagnetic interactions. Note here that the system favors phase separation for  $U_{12}/U_1 = 2$ , and here we only show the phase diagram of spin-1 bosons. For comparisons, the red cross is obtained by Gutzwiller mean-field theory. The other parameters  $t = t_{1\sigma} \approx 0.97t_{20}$ , and  $U_2/U_1 = 1.26$ .

时磁性为零,  $M_{\text{tot}} = 0$ , 这里  $n_{\text{Sr}}$  ( $n_{\text{Rb}}$ ) 表示  $^{84}\text{Sr}$  ( $^{87}\text{Rb}$ ) 在格点上的填充数. 也就是说整个体系在格点上粒子数为 1 时处于铁磁绝缘相, 在粒子填充数为 2 时处于无序绝缘相. 这其中的物理规律可以通过在强相互作用下推导的玻色-玻色混合体系的有效自旋模型来理解. 当格点上粒子填充数为 1 时, 由于几乎相同的隧穿振幅  $t_{1\sigma} \approx t_{2\sigma}$ , 铁磁自旋耦合占据主导, 因此体系表现为铁磁序. 而当格点上粒子数为 2 时, 由于种间相互作用  $U_{12} \ll U_{1,2}$ , 自旋涨落被抑制, 于是体系表现为无序绝缘相. 在远离莫特绝缘区时, 随着隧穿振幅的增大, 密度涨落成为主导, 系统经历量子相变进入超流相  $\phi_{\nu_\sigma} \neq 0$ . 并且由于质量的不平衡, 质量较大的 Rb 会先解除局域化 ( $\text{MI}_{\text{Sr}} + \text{SF}_{\text{Rb}}$ ), 之后随着隧穿振幅的继续增大, 两种原子都会处于非局域化的状态 (2SF).

此外还研究了在三维光晶格中具有反铁磁相

相互作用的  $^{23}\text{Na}$  ( $U'_1/U_1 = 0.037$ ) 和  $^{84}\text{Sr}$  原子的混合体系. 对于  $^{23}\text{Na}$  和  $^{84}\text{Sr}$  原子的混合体系, 在填充数为 1 的区域是铁磁相 (FM), 在填充数为 2 的区域是无序相 (UI). 有趣的是自旋-1  $^{23}\text{Na}$  原子在填充数为 1 和 2 的情形都展示了从向列绝缘相到极化超流相的相变, 这与单独将  $^{23}\text{Na}$  原子放在光晶格中偶数填充的情形是不一样的.

## 4 具有长程相互作用的光晶格体系的研究

### 4.1 偶极玻色气体中的超固态相研究

为了实现由两体相互作用诱导的超固态相 (supersolid, SS), 人们在极性分子<sup>[68, 134–140]</sup>、磁性<sup>[16, 67, 141]</sup>和里德伯原子<sup>[142–150]</sup>上付出了巨大的努力, 然而理论上提出的方案通常在实验上都难以实现. 本课题组提出一种可行的方案, 研究了二维光晶格中双

组分玻色混合体系的超固态相<sup>[151]</sup>, 其中一个组分通过非共振激光被耦合到了里德伯态, 因此在这一组分之间存在长程相互作用, 如图 5<sup>[151]</sup> 所示.

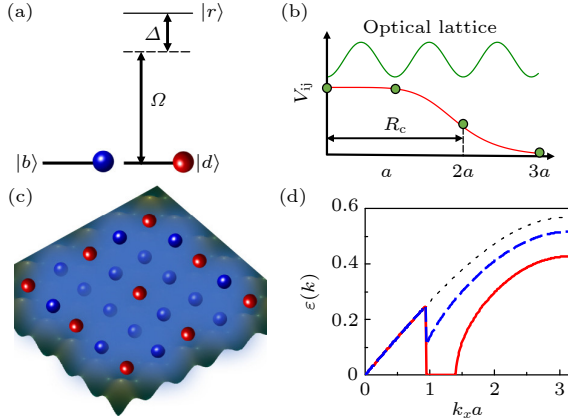


图 5 (a) 考虑两个电子基态  $|b\rangle$  (蓝色),  $|d\rangle$  (红色) 和一个里德伯态  $|r\rangle$ . 一束非共振激光 (拉比频率为  $\Omega$ , 失谐量为  $\Delta$ ) 将态  $|d\rangle$  与  $|r\rangle$  耦合. (b) 里德伯态  $|d\rangle$  间的软核型相互作用势  $V_{ij}$  (红线). 软核半径  $R_c$  可以大于晶格间距  $a$ , 图中展示的是  $R_c = 2a$  的情形. (c) 被修饰原子处于有序密度波 (DW) 时的裸态处于 SS. (d) 裸态的 Roton 不稳定性. 声子的 Bogoliubov 色散关系 (沿  $k_x$  轴) 被种间相互作用显著地改变. 当种间相互作用  $U_{bd}$  增加时, 会出现类 Roton 不稳定性, 表明基态相由均匀的超流体转变为超固体. 图中  $U_{bd}/U = 0$  (点线),  $U_{bd}/U = 0.45$  (虚线),  $U_{bd}/U = 1$  (实线), 其他参数为  $k_y = 0$ ,  $V/U = 0.4$ , 和  $t/U = 0.04$  <sup>[151]</sup>

Fig. 5. (a) Two electronic ground states  $|b\rangle$  (blue) and  $|d\rangle$  (red) and a Rydberg state  $|r\rangle$  are considered. An off-resonant laser (with Rabi frequency  $\Omega$  and detuning  $\Delta$ ) weakly couples the state  $|d\rangle$  to  $|r\rangle$ . (b) The soft-core shape interaction potential  $V_{ij}$  (red) between atoms in the Rydberg dressed state  $|d\rangle$ . The soft-core radius  $R_c$  can be larger than the lattice spacing  $a$ . Here,  $R_c = 2a$  is shown. (c) SS of the bare state when dressed atoms are in an ordered density wave (DW). (d) Roton instability of the bare species. The Bogoliubov dispersion relation (along the  $k_x$  axis) of phonons is significantly modified by the interspecies interaction. A rotonlike instability emerges when the interspecies interaction  $U_{bd}$  is increased, indicating that the groundstate phase changes from a homogeneous superfluid to supersolid. We show  $U_{bd}/U = 0$  (dotted line),  $U_{bd}/U = 0.45$  (dashed line), and  $U_{bd}/U = 1$  (solid line). Other parameters are  $k_y = 0$ ,  $V/U = 0.4$ , and  $t/U = 0.04$  <sup>[151]</sup>.

在适当深的光晶格中, 体系由一个单带双组分哈伯德模型描述:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{\sigma} \left( \hat{b}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j, \sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i < j} V_{ij} \hat{n}_{i, d} \hat{n}_{j, d} - \sum_i \left[ \frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma'} U_{\sigma \sigma'} \hat{n}_{i, \sigma} (\hat{n}_{i, \sigma'} - \delta_{\sigma \sigma'}) - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} \hat{n}_{i, \sigma} \right], \quad (32)$$

这里算符下标  $\sigma = d$  表示处于里德伯态的原子, 下标  $\sigma = b$  表示另一组分的原子,  $t_{\sigma}$  表示  $\sigma$  组分原子的跃迁振幅,  $V_{ij}$  表示不同格点间原子的相互作用,  $U_{\sigma \sigma'}$  为同一格点上同种或不同种原子间的相互作用.

基于实空间玻色动力学平均场理论, 计算了该体系的完整相图. 在强耦合极限下 (即原子间的短程相互作用远大于动能) 体系倾向于形成莫特绝缘相或密度波相 (density wave phase). 有趣的是我们发现了一个原子总密度分布不均匀的密度波相 ( $n_{i, b} = 1, n_{i, d} = 2$ ), 它打破了晶格平移对称性. 在远离莫特区的地方, 如中间区域, 观察到两种从莫特绝缘相到超固体相的量子相变, 即未耦合的基态从莫特绝缘态到裸态形成的超固体 (SS1) 的相变, 而被修饰的原子仍然处于莫特绝缘态. 进一步增加隧穿振幅  $t$ , 两种原子都进入了超固体相 (SS2). 有趣的是, 在模拟中观察到一个明显的超固体区域, 这是两种原子间相互作用的结果, 表明与单组分情况<sup>[152]</sup> 相比, 在现实实验中直接观察到这些相变过程的概率更高. 事实上, 还观察到 SS1 和 SS2 的宽度随种间相互作用的减小而缩小, 对于较小的种间相互作用  $U_{bd}$ , SS1 相消失了. 此外还发现, 虽然裸态原子只具有短程相互作用, 但是另外一种原子间的长程相互作用依旧移动了 MI 和 SS1 之间的相变.

最后在  $t \gg U_{\sigma \sigma'}$  的弱相互作用区间, 体系形成原子总密度分布均匀的超流态, 并且两种原子的密度分布也是均匀的. 这是由于剧烈的密度涨落破坏了晶体序, 因此体系只能形成密度分布均匀的超流态.

## 4.2 光腔中的超辐射相研究

2010 年, Baumann 等<sup>[63]</sup> 实现了玻色-爱因斯坦凝聚体与光腔耦合的开放系统中的 Dicke 量子相变, 并观察到了自组织相的出现. 该相变是由凝聚体原子之间的无限长程相互作用驱动的, 由涉及腔模和泵浦光场的双光子过程引起. 简单来说, 均匀原子密度中的量子涨落使得所应用的横向驻波激光中的光子被集体散射到腔模中. 反过来, 散射到腔中的光子又非线性地作用于原子, 并放大了 BEC 密度的涨落. 当泵浦光功率小于临界泵浦光功率时, 腔模中的光子数为 0, 原子凝聚在低动量态上. 在横向激光的临界泵浦功率以上, 低动量态的原子被散射到高动量态, 系统经历可逆的零温量

子相变成为完美和有序的晶体. 近年来在这一领域出现了非常多的研究, 包括对多模光腔<sup>[153–155]</sup>、极限环<sup>[156]</sup>、时间晶体<sup>[157]</sup>、拓扑相变<sup>[158]</sup>以及对非厄米趋肤效应<sup>[159]</sup>的研究. 理论上, 通过改变激光频率与腔共振的关系, 可以将腔诱导的原子间相互作用从吸引调到排斥, 在蓝失谐驱动的高精细腔中也出现了非常多有趣的研究, 如对 Su-Schrieffer-Heeger 模型<sup>[160]</sup>、时间晶体<sup>[161–164]</sup>、p-轨道自组织相<sup>[165]</sup>以及结构相变的研究<sup>[166]</sup>.

本课题组研究了超冷玻色气体与蓝失谐激光驱动的高精细腔的耦合体系, 探索该体系在弱相互作用与强相互作用区间可能出现的量子相<sup>[167]</sup>. 实验装置如图 6<sup>[167]</sup> 所示.

$^{87}\text{Rb}$  原子被装载在耗散  $\kappa = 40\omega_r$  的高精细单模光腔中,  $\omega_r$  是反冲频率. 原子由垂直于腔模方向, 即  $y$  方向的两束对向传播的波长为 780.1 nm 的蓝失谐激光驱动, 这可以通过一束激光和反射镜实现. 这两束对向传播激光强度的不平衡由镜子的反射率控制  $\eta \equiv E_-/E_+$ , 这里  $E_+$  和  $E_-$  分别为入射光和反射光的振幅. 在第 3 个方向, 也就是  $z$  方向, 用一束非常强的激光来冻结原子的运动自由度. 体系由下面的玻色-哈伯德模型描述:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} J_{\sigma\sigma}^{ij} \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} - \sum_{i,\sigma} \mu_\sigma \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma} - \hbar \Delta_c \hat{a}^\dagger \hat{a} \\ & + \sum_{i,\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \frac{U_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}}{2} \hat{b}_{i,\sigma_1}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma_2}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma_3} \hat{b}_{i,\sigma_4} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \end{aligned} \quad (33)$$

式中  $J_{\sigma_1\sigma_2}^{ij}$  是格点上 ( $i = j$ ) 和最近邻格点间 ( $i \neq j$ ) 的跃迁振幅;  $\mu_\sigma$  为化学势;  $\hat{a}^\dagger$  ( $\hat{a}$ ) 是光子的产生 (湮灭) 算符;  $U_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}$  为原子间的相互作用; 失谐量  $\Delta_c = \omega_p - \omega_c$ , 其中  $\omega_p$  为泵浦光频率,  $\omega_c$  为腔模的频率; 泵浦光和腔模间的散射项为

$$\begin{aligned} \hat{V}_1 = & \frac{1+\eta}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sum_{ij} (-1)^i \\ & \times (J_{sd}^{ij} \hat{b}_{i,s}^\dagger \hat{b}_{j,d} + J_{p_x p_y}^{ij} \hat{b}_{i,p_x}^\dagger \hat{b}_{j,p_y} + \text{H.c.}), \\ \hat{V}_2 = & -i \frac{1-\eta}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \sum_{ij} (-1)^i \\ & \times (J_{sp_x}^{ij} \hat{b}_{i,s}^\dagger \hat{b}_{j,p_x} + J_{p_y d}^{ij} \hat{b}_{i,p_y}^\dagger \hat{b}_{j,d} + \text{H.c.}). \end{aligned}$$

通常来说在光腔系统中, 主要过程为泵浦光和腔模通过原子而发生的散射过程, 散射项的宇称和系统的维度起着重要作用. 在红失谐光的条件下, 由于散射项是偶宇称的, 原子处在 s-轨道. 然而在蓝失

谐体系中, 由于散射项为奇宇称, 原子可以从 s-轨道散射到更高的轨道. 在我们考虑的二维蓝失谐体系中, 原子可以被散射到奇宇称的 p-轨道和偶宇称的 d-轨道, 形成稳定的强关联高轨道相. 如图 6(c)<sup>[167]</sup> 所示, 由于  $\hat{V}_1$  在  $x$  和  $y$  方向都是奇宇称的, 因此它会改变轨道在  $x$  和  $y$  方向的宇称, 从而将原子从 s-轨道散射到 d-轨道以及从  $p_x$ -轨道散

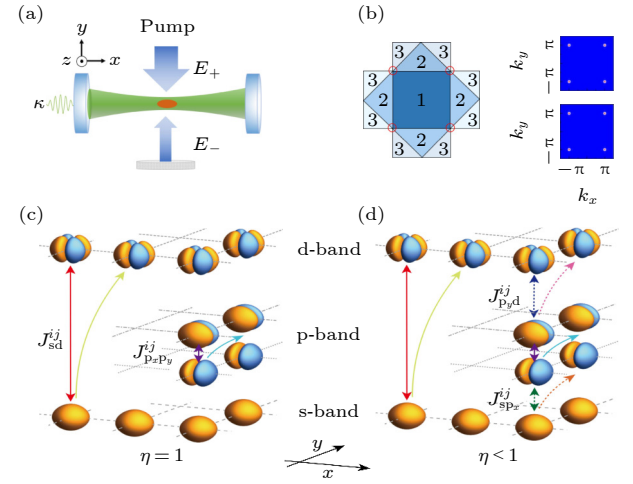


图 6 原子在光腔中耦合高轨道态示意图<sup>[167]</sup> (a) 原子被陷俘在光腔中, 由一束不平衡因子  $\eta = E_-/E_+$  的横向泵浦光驱动; (b) 四方晶格的布里渊区示意图, 原子从动量态  $\mathbf{k} = (0, 0)$  被散射到  $(\pi, \pi)$ , 右侧上下两幅图分别为 p-轨道和 d-轨道能带原子的动量分布图; (c), (d) 腔模和泵浦光之间的主要散射过程, 其引起了高轨道激发. 通过控制参数  $\eta = 1$  (c), 原子可以选择性地被散射到偶宇称的 d-轨道态, 当  $\eta < 1$  (d), 原子被散射到奇宇称的 p-轨道态. 此处  $J_{sd}^{ij}$ ,  $J_{p_x p_y}^{ij}$ , 和  $J_{p_y d}^{ij}$  分别表示 s-轨道和  $d_{xy}$ -轨道,  $p_x$ -轨道和  $p_y$ -轨道, s-轨道和  $p_x$ -轨道,  $p_y$ -轨道和  $d_{xy}$ -轨道在格点  $i$  和格点  $j$  间由散射引起的轨道反转跃迁

Fig. 6. Populating higher-orbital states with ultracold atoms in an optical cavity<sup>[167]</sup>: (a) Atoms are prepared in an optical cavity, pumped by a blue-detuned laser in the transverse direction with an imbalance parameter  $\eta = E_-/E_+$ . (b) Brillouin zone of the square lattice, where atoms are scattered from the quasimomentum state  $\mathbf{k} = (0, 0)$  to the excite state  $(\pi, \pi)$ , with quasimomentum distributions for the p- and d-orbital bands shown in right upper and lower panels, respectively; (c), (d) dominating scattering processes of atoms induced by cavity, leading to higher-orbital excitations. By controlling  $\eta$ , atoms can be selectively scattered into the even-parity  $d_{xy}$ -orbital state with a single node in both  $x$  and  $y$  directions for  $\eta = 1$  (c), or into the odd-parity p-orbital state with a single node only in one direction for  $\eta < 1$  (d). Here,  $J_{sd}^{ij}$ ,  $J_{p_x p_y}^{ij}$ ,  $J_{sp_x}^{ij}$ , and  $J_{p_y d}^{ij}$  denote cavity induced orbital-flip hoppings between sites  $i$  and  $j$  for the s- and  $d_{xy}$ -orbitals,  $p_x$ - and  $p_y$ -orbitals, s- and  $p_x$ -orbitals, and  $p_y$ - and  $d_{xy}$ -orbitals, respectively.



射到  $p_y$ -轨道. 如图 6(d)<sup>[167]</sup> 所示,  $\hat{V}_2$  在  $x$  方向是奇宇称, 在  $y$  方向是偶宇称, 因此它只改变轨道在  $x$  方向的宇称, 从而将原子从  $s$ -轨道散射到  $p_x$ -轨道以及从  $p_y$ -轨道散射到  $d$ -轨道. 有趣的是, 与红失谐泵浦光体系超辐射相伴随着电荷-密度波的出现不同, 在蓝失谐的腔中, 由于散射导致的轨道-翻转隧穿, 自组织相的形成伴随着轨道-密度波的出现.

总的来说我们发现在二维光晶格中, 通过改变泵浦光的反射率, 原子可以被散射到偶宇称的  $d$ -轨道能带和奇宇称的  $p$ -轨道能带, 形成稳定的高轨道自组织超流相和莫特-绝缘相, 这提供了一种新的调控高轨道现象的机制.

## 5 光晶格中的高轨道玻色子体系研究

### 5.1 旋转对称性增强的 $p$ 轨道玻色子自旋和角动量的耦合

$p$  轨道冷原子系统的实验实现给研究轨道自由度提供了一个有利的工具. 在轨道物理中, 一个有趣的方向是自旋-轨道耦合. 在之前的冷原子实验中, 人们借助激光构建人工规范场, 从而实现了冷原子系统中的自旋-轨道耦合<sup>[168–191]</sup>. 自然而然地, 对于高轨道玻色系统, 其中的自旋自由度和轨道自由度的相互作用会不会带来有趣的物理效应<sup>[192,193]</sup>? 本课题组首先研究了正方晶格中的两组分  $p$  能带玻色系统, 相较于之前的相关研究<sup>[71,72,77]</sup>, 引入了自旋自由度, 希望研究自旋角动量与轨道角动量的相互作用<sup>[194]</sup>.  $\hat{p}_{\nu\sigma,r}$  表示格点  $r$  位置的湮灭算符,  $\nu = x, y$  表示  $p_x$  和  $p_y$  轨道自由度,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  表示不同的组分 (赝自旋). 为了简便, 引入旋量  $\hat{\Phi}_{\nu,r} = [\hat{p}_{\nu\uparrow,r}, \hat{p}_{\nu\downarrow,r}]^T$ , 哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{r,m} t_{//} \hat{\Phi}_{m,r}^\dagger \hat{\Phi}_{m,r+e_m} - \sum_{r,m} t_{\perp} \hat{\Phi}_{m,r}^\dagger \hat{\Phi}'_{m,r+e_m} \\ & + \text{H.c.} + \frac{U_0}{2} \sum_r \left[ \frac{2}{3} : \hat{n}^2 : - \frac{1}{3} : \hat{L}_z^2 : + \frac{1}{3} : \hat{S}^2 : \right] \\ & + \frac{U_2}{2} \sum_r \left[ \frac{1}{3} : \hat{n}^2 : - \frac{1}{3} : \hat{L} \hat{S}_z^2 : + \left( : \hat{S}_z^2 : - \frac{1}{3} : \hat{S}^2 : \right) \right], \end{aligned} \quad (34)$$

其中, 平行或垂直两个最近邻格点方向的  $p$  轨道玻色子的跃迁振幅分别为  $t_{//}$  和  $t_{\perp}$ .  $t_{//}$  的旋量湮灭

算符为  $\hat{\Phi}_{m,r} \equiv [(\hat{p}_{x\uparrow,r} e_x + \hat{p}_{y\uparrow,r} e_y) \cdot e_m, (\hat{p}_{x\downarrow,r} e_x + \hat{p}_{y\downarrow,r} e_y) \cdot e_m]^T$ , 对应的单位矢量有  $e_1 = e_x$ ,  $t_{\perp}$  的旋量湮灭算符为  $\hat{\Phi}'_{m,r} \equiv [(\hat{p}_{x\uparrow,r} e_x + \hat{p}_{y\uparrow,r} e_y) \cdot e'_m, (\hat{p}_{x\downarrow,r} e_x + \hat{p}_{y\downarrow,r} e_y) \cdot e'_m]^T$ , 对应的单位矢量为  $e'_1 = e_y$ . 相互作用强度为  $U_{\alpha=0,2} = c_{\alpha} \int d^3r w_{\mu}^4$ ,  $w_{\mu}$  为局域万尼尔函数, 引入  $U_{//} = U_0 + U_2$  和  $U_{\perp} = U_0 - U_2$ , 分别对应于同组分相互作用和不同组分相互作用.  $\hat{n} = \sum_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}^\dagger \hat{\Phi}_{\mu}$  是粒子数密度算符,  $\hat{L}_z = [i\hat{\Phi}_y^\dagger \hat{\Phi}_x + \text{H.c.}]$  和  $\hat{S} = \sum_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}^\dagger \sigma \hat{\Phi}_{\mu}$  分别是角动量算符和自旋算符, 自旋-轨道耦合算符为  $\hat{L} \hat{S}_z = [i\hat{\Phi}_y^\dagger \sigma_z \hat{\Phi}_x + \text{H.c.}]$ .

当不同组分相互作用  $U_{\perp} = 0$  或等效为  $U_0 = U_2$  时, (34) 式退化为与自旋无关的  $p$  轨道玻色-哈伯德模型, 此时系统在弱相互作用时的基态正是  $p_x \pm ip_y$  的手征玻色凝聚. 为了便于描述系统的基态, 引入角动量携带算符  $\tilde{\Phi}_{\pm}(q) = \sum_r e^{iq \cdot r} [(-)^{r_x} \hat{\Phi}_{x,r} \pm i(-)^{r_y} \hat{\Phi}_{y,r}]$ , 此时系统的四重简并基态可写为  $1/\sqrt{N_{\uparrow}!N_{\downarrow}!} [\tilde{\Phi}_{\pm\uparrow}^\dagger(0)]^{N_{\uparrow}} [\tilde{\Phi}_{\pm\downarrow}^\dagger(0)]^{N_{\downarrow}} |0\rangle$ , 其中  $|0\rangle$  是真空态. 按照算符  $\hat{L}_z$  和  $\hat{L} \hat{S}_z$  将基态表示为

$$\begin{aligned} \left[ \sum_r (-1)^{r_x+r_y} \hat{L}_z \right] |\chi_{\pm}^c\rangle &= \pm N |\chi_{\pm}^c\rangle, \\ \left[ \sum_r (-1)^{r_x+r_y} \hat{L} \hat{S}_z \right] |\chi_{\pm}^s\rangle &= \pm N |\chi_{\pm}^s\rangle, \end{aligned} \quad (35)$$

在  $U_2 = 0$  时,  $\hat{L}_z$  和  $\hat{L} \hat{S}_z$  的本征值是系统的好量子数. 但当  $U_2 \neq 0$  时,

$$[\hat{L}_z, \hat{S}^2] = 0, \quad [\hat{L} \hat{S}_z, \hat{S}^2] \neq 0, \quad (36)$$

此时态  $|\chi_c\rangle$  仍是守恒量, 而  $|\chi_s\rangle$  则不再守恒. 由于相互作用的调制, 系统的基态变成了  $|\chi_s\rangle$ . 此时, 系统的基态便出现了自发的自旋角动量耦合  $\langle \hat{L} \hat{S}_z \rangle = \pm \rho$ , 称之为 SAI 相 (spin angular-momentum interwined superfluid). 在这种相中, 原子的轨道角动量与自旋角动量锁定在了一起, 即自旋向上的原子的轨道角动量为  $p_x + ip_y$ , 自旋向下的原子的轨道角动量锁定为  $p_x - ip_y$ , 如图 7(a)<sup>[194]</sup> 所示.

为了证明上述的理论预测, 采用玻色动力学平均场理论来计算系统基态, 得到的基态相图如图 7(d) 和图 7(e)<sup>[194]</sup> 所示. 可以看出, SAI 相是系统处于超流态时的基态, 而在强相互作用区间的基态分别是无序绝缘态 (UI) 和有序绝缘态 (OI). 为了证明 SAI 态的鲁棒性, 分别计算了不同相互作用



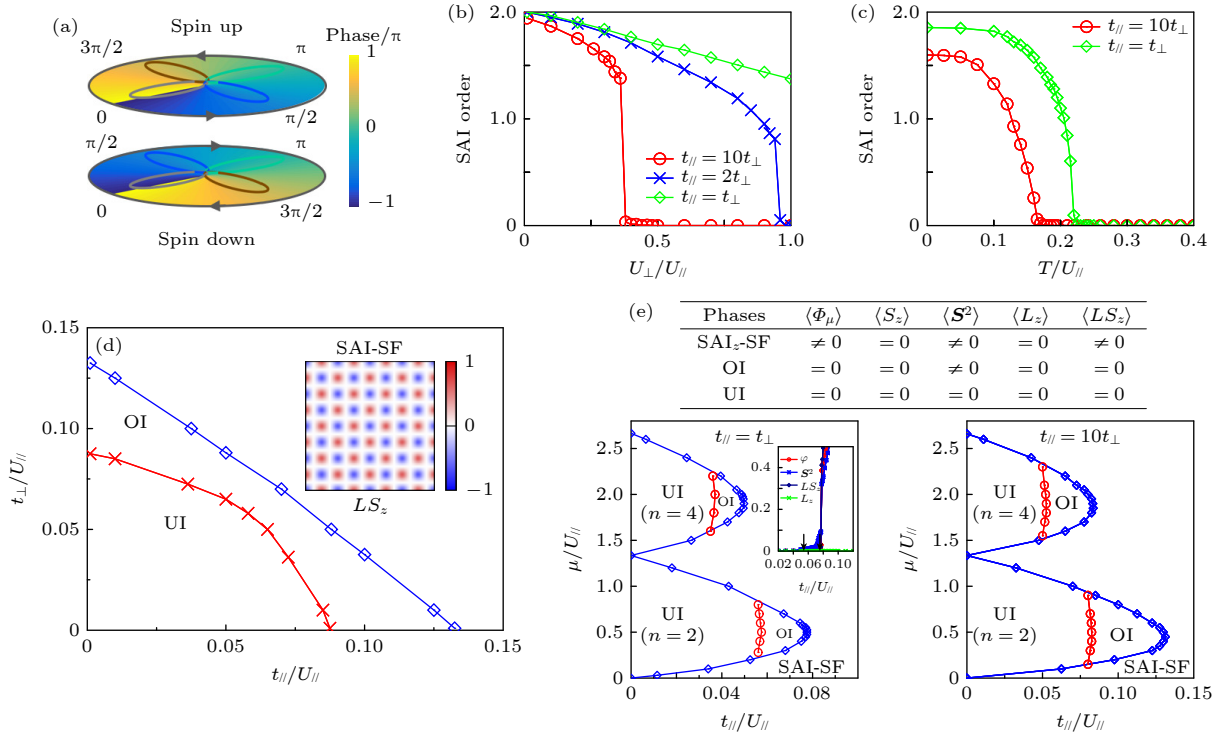


图 7 (a) SAI 相的示意图, 在 SAI 相中, 由于自发的自旋-轨道耦合, 粒子的自旋自由度和轨道自由度相互锁定; (b) 在不同相互作用强度下, SAI 相的稳定性; (c) 在不同的温度下, SAI 相的稳定性; (d) 粒子数填充  $\langle n \rangle = 2$  时, 玻色动力学平均场方法得到的两组分 p 轨道玻色系统基态相图, 相互作用强度设置为  $U_{//} = U_{\perp}$ ; (e) 表为不同相之间序参量的表征, 下左图和右图分别为  $t_{//}/t_{\perp} = 1$  和 10 时, 不同填充数情况下基态相图, 下左图的插图为相变时序参量的变化. 相互作用强度设置为  $U_{//} = U_{\perp}$  [194]

Fig. 7. (a) Pictorial illustration of SAI order. In presence of spontaneous spin angular-momentum coupling, the phase of spatial wave-function is entangled with the internal degrees of freedom of an atom in each optical lattice site. (b) Stability of SAI order against interaction quantum fluctuations. (c) Stability of SAI order against thermal fluctuations. (d) Phase diagram of the spinful p-orbital system with an even integer filling. The phase diagram is obtained via BDMFT. The atomic filling is fixed at  $\langle n \rangle = 2$ , we set  $U_{//} = U_{\perp}$ . (e) Table is the characterization of different quantum phase. Left and right picture are phase diagrams of spinful p-orbital bosons at generic fillings for  $t_{//}/t_{\perp} = 1$  and 10. The inset in left shows the evolution of the order parameters. We use interaction strengths  $U_{//} = U_{\perp}$  [194].

用比例  $U_{\perp}/U_{//}$  和不同的热涨落下, SAI 相的相变曲线, 如图 7(b) 和图 7(c)[194] 所示. 同时计算了不同的跃迁比例下, 整个系统的基态相图, 也证明了 SAI 相的稳定性.

## 5.2 六角光晶格中自旋诱导的轨道阻挫效应研究

p 轨道超冷原子提供了一个研究轨道自由度和自旋自由度相互作用的理想平台, 但对于复杂的晶格体系中的自旋、轨道自由度的相互作用仍然是一个有趣的问题, 在复杂的晶格中, 由于晶格的几何结构会带来阻挫效应, 这种阻挫效应会带来丰富的物理现象 [78,195–201]. 本课题组进一步研究六角晶格中两组分 p 能带玻色系统, 探索不同的晶格结构对这种自旋-轨道耦合现象的影响 [202]. 系统的哈密顿量与 (34) 式一样, 但是单位矢量需要做修

正, 其中  $e_m$  改为  $e_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}e_x + \frac{1}{2}e_y$  和  $e_3 = -e_y$ , 而  $e'_m$  变成  $e'_{1,2} = -\frac{1}{2}e_x \pm \frac{\sqrt{3}}{2}e_y$  和  $e'_3 = e_x$ , 具体如图 8(a)[202] 所示.

首先研究在强相互作用下, 系统的基态量子相的表征. 为了理解强关联区间的物理, 引入轨道极化矢量  $\mathcal{P}_{\sigma,r} = [\langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^x \rangle, \langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^y \rangle, \langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^z \rangle]$ , 其中  $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^x \equiv \frac{1}{2}(\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r})$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^y \equiv \frac{1}{2}(\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r})$  和  $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^z \equiv \frac{1}{2i}(\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r})$ . 当  $U_{//} = U_{\uparrow,\downarrow} \geq U_{\uparrow\downarrow} = U_{\perp} > 0$ , 最低的 Mott 填充为  $n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = 2$ , 此时在跃迁振幅为零的极限时, 系统的单格点基态为  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_{x\uparrow}, p_{y\downarrow} - |p_{x\downarrow}, p_{y\uparrow}\rangle)$ , 说明在深的 Mott 绝缘区系统没有轨道极化  $\mathcal{P}_{\uparrow,\downarrow} = 0$ . 当略微增加跃迁振幅时, 可以通过二阶微扰的方法得到一个有效哈密顿量. 为了强调相互

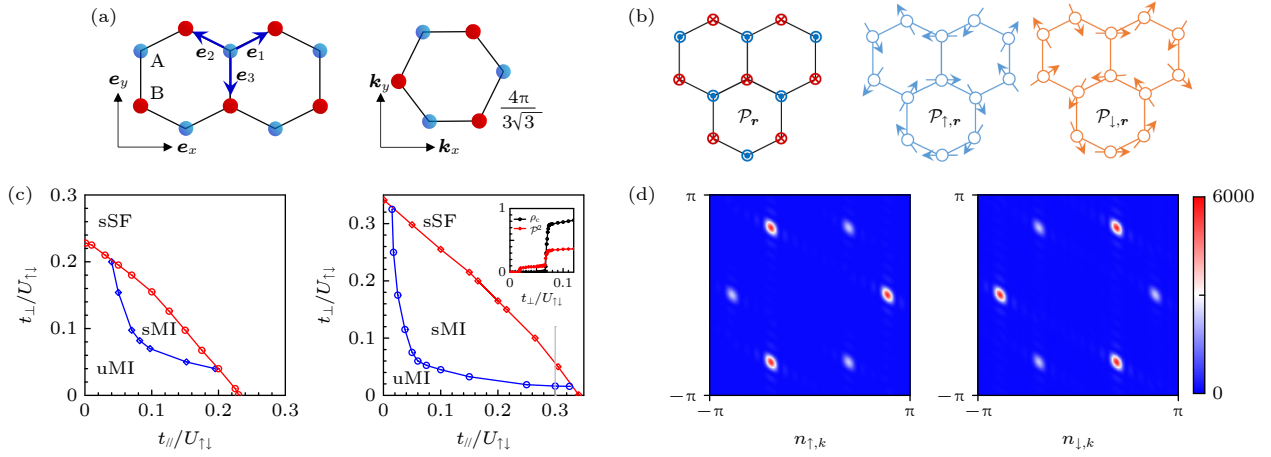


图 8 (a) 左图为二维六角晶格的几何结构, 晶格的格矢为  $\mathbf{e}_m$ , 右图为晶格的第一布里渊区. (b) 强关联区间轨道极化矢量  $\mathcal{P}$  在实空间的分布图. 左图为无自旋玻色子的 Ising 型结构, 中间和右图分别为自旋向上、自旋向下玻色子的平面内轨道涡旋结构. (c) 粒子填充数  $\langle n \rangle = 2$  时, 实空间玻色动力学平均场得到的两组分六角晶格 p 轨道玻色系统多体基态相图. 左图和右图的相互作用分别为  $U_{\uparrow} = U_{\downarrow} = U_{\uparrow\downarrow}$  和  $U_{\uparrow} = U_{\downarrow} = 2U_{\uparrow\downarrow}$ . 右图的插图是右图灰色垂直线路径下, 序参量的相应变化. (d) 不同自旋组分在动量空间下密度的分布 [202]

Fig. 8. (a) Geometry of two-dimensional hexagonal lattice with lattice vector  $\mathbf{e}_m$  (left), and the first Brillouin zone (right). (b) Cartoons of real-space orbital polarization  $\mathcal{P}$  for strongly interacting many-body phases in p-orbital bands of the two-dimensional (2D) hexagonal lattice, where left picture is spinless bosons demonstrate out-of-plane Ising-type orbital order, middle and right are spinful case in-plane orbital textures. (c) Hopping-dependent phase diagrams of spinful bosonic gases in p-orbital bans of a 2D hexagonal lattice for fixed filling  $\langle n \rangle = 2$ , obtained via real-space bosonic dynamical mean-field theory. The left and right are set  $U_{\uparrow} = U_{\downarrow} = U_{\uparrow\downarrow}$  and  $U_{\uparrow} = U_{\downarrow} = 2U_{\uparrow\downarrow}$ . Inset picture is the evolution of order parameter along the gray vertical line. (d) Momentum-space distributions of density  $n_{\sigma,\mathbf{k}}$  [202].

作用的效应, 冻结自旋- $\downarrow$ 的自由度, 而仅考虑自旋- $\uparrow$ 组分, 在  $t_{\parallel} \approx t_{\perp}$  时, 得到有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{m,r \in A} J_x \hat{\mathcal{P}}_{\uparrow,r}^x \hat{\mathcal{P}}_{\uparrow,r+\mathbf{e}_m}^x, \quad (37)$$

其中,  $J_x < 0$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_{\uparrow,r}$  是与键的方向  $\mathbf{e}_m$  相关的. 自旋- $\uparrow$ 的有效自旋模型说明, 在缺少自旋自由度的时候, 强关联区间 Mott 相应是一个反铁磁性, 而自旋自由度将会诱导出平面内的轨道阻挫相, 如图 8(b) [202] 所示. 在跃迁振幅为零时, 系统是无轨道极化的自旋单态, 而在强关联区间的量子相是轨道阻挫相, 说明在 Mott 绝缘态时也存在一个相变.

为了验证上述结果, 采用实空间玻色动力学平均场方法进行数值计算, 得到的结果如图 8(c) [202] 所示. 在 Mott 绝缘区, 当  $t_{\parallel} \approx t_{\perp}$  时, Mott 相表征为  $\mathcal{P}^2 \neq 0$  的 sMI 相 (spin-orbital intertwined Mott-insulating), 对应的动量空间密度凝结在  $\mathcal{Q}_{\pm} = \pm \frac{4\pi}{9} (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2)$ , 见图 8(d) [202]. 系统还存在两个量子相, 一个是 Mott 区的无轨道极化  $\mathcal{P}^2 = 0$  的 uMI 相 (unordered Mott-insulating), 另一个是  $\mathcal{P}^2 \neq 0$  和  $\rho_c \neq 0$  的 sSF 相 (spin-orbital intertwined superfluid).

## 6 结论与展望

本文主要回顾了本课题组利用玻色动力学平均场理论对光晶格中强关联玻色体系进行的一系列研究. 主要结果可以概括为: 基于 BDMFT 计算了三维光晶格中自旋-1 超冷玻色气体在零温和有限温下的相图, 发现了自旋单态凝聚相的存在, 并观察到超流体可以通过一阶 (二阶) 相变被加热成具有偶 (奇) 填充的莫特绝缘体. 在存在磁场时, 基态简并被打破, 体系中存在非常丰富的量子相, 如向列相、铁磁相、自旋单态绝缘相、极化超流以及轴对称破缺超流, 此外还观察到了多步凝聚. 进一步计算了自旋-1 碱金属原子与自旋-0 碱土金属原子混合体系的零温相图, 发现系统表现出非零磁性长程序, 当填充数  $n = 1$  时表现为二阶莫特绝缘-超流体相变, 当填充数  $n = 2$  时, 表现为一阶莫特绝缘-超流体相变, 还观察到了由于质量不平衡带来的两步莫特绝缘-超流体相变. 在对长程相互作用的研究中, 首先利用里德伯原子进行了研究, 发现了两种不同的超固体相, 随后在原子与高精度腔耦合的体系中通过控制泵浦光的反射, 实现了耦合到不同轨道的超辐射相. 最后对高轨道玻色体系进行

了研究,首先在正方晶格中提出了一种基于多体关联和自发对称性破缺的自旋-轨道角动量耦合的新机制,然后在六角晶格中研究了阻挫效应,基于对称分类,发现轨道阻挫和强相互作用之间的相互作用导致了奇异的莫特绝缘相和自旋轨道交织的超流体相.

总的来说,基于BDMFT对光晶格中超冷玻色体系的自旋自由度、轨道自由度和长程相互作用进行了研究,这些体系中存在丰富的量子相,以及自旋-轨道角动量耦合效应、阻挫效应等,揭示了丰富的量子多体物理现象.目前我们的研究还只是对稳态的研究,在未来的研究中,将发展非平衡动力学平均场理论,对光晶格中的强关联非平衡体系进行研究.

## 参考文献

- [1] Chu S 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 685
- [2] Cohen-Tannoudji C N 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 707
- [3] Phillips W D 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 721
- [4] Orzel C, Tuchman A K, Fenselau M L, Yasuda M, Kasevich M A 2001 *Science* **291** 2386
- [5] Greiner M, Bloch I, Mandel O, Hänsch T W, Esslinger T 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 160405
- [6] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I 2002 *Nature* **415** 39
- [7] Taie S, Ozawa H, Ichinose T, Nishio T, Nakajima S, Takahashi Y 2015 *Sci. Adv.* **1** e1500854
- [8] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R, Lebrat M, Uehlinger T, Greif D, Esslinger T 2014 *Nature* **515** 237
- [9] Becker C, Soltan-Panahi P, Kronjäger J, Dörscher S, Bongs K, Sengstock K 2010 *New J. Phys.* **12** 065025
- [10] Jo G B, Guzman J, Thomas C K, Hosur P, Vishwanath A, Stamper-Kurn D M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 045305
- [11] Viebahn K, Sbroscia M, Carter E, Yu J C, Schneider U 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 110404
- [12] Goldman N, Budich J C, Zoller P 2016 *Nat. Phys.* **12** 639
- [13] Xu M, Kendrick L H, Kale A, Gang Y, Ji G, Scalettar R T, Lebrat M, Greiner M 2022 *Nature* **620** 971
- [14] Wei D, Adler D, Srakaew K, Agrawal S, Weckesser P, Bloch I, Zeiher J 2023 *Phys. Rev. X* **13** 021042
- [15] Grimm R, Weidemjeller M, Ovchinnikov Y B 2000 *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics* (San Diego: Academic Press) pp95–170
- [16] Aikawa K, Frisch A, Mark M, Baier S, Rietzler A, Grimm R, Ferlaino F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 210401
- [17] Inouye S, Andrews M R, Stenger J, Miesner H J, Stamper-Kurn D M, Ketterle W 1998 *Nature* **392** 151
- [18] Stwalley W C 1976 *Phys. Rev. Lett.* **37** 1628
- [19] Courteille P, Freeland R S, Heinzen D J, van Abeelen F A, Verhaar B J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 69
- [20] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [21] 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
- [22] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [23] Bloch I, Dalibard J, Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885
- [24] Bloch I, Dalibard J, Nascimbène S 2012 *Nat. Phys.* **8** 267
- [25] Dutta O, Gajda M, Hauke P, et al. 2015 *Rep. Prog. Phys.* **78** 066001
- [26] Gross C, Bloch I 2017 *Science* **357** 995
- [27] Schäfer F, Fukuhara T, Sugawa S, Takasu Y, Takahashi Y 2020 *Nat. Rev. Phys.* **2** 411
- [28] Altman E, Brown K R, Carleo G, et al. 2021 *PRX Quantum* **2** 017003
- [29] Fraxanet J, Salamon T, Lewenstein M 2022 *arXiv: 2204.08905 [quant-ph]*
- [30] Choi J Y 2023 *J. Korean Phys. Soc.* **82** 875
- [31] Lewenstein M, Sanpera A, Ahufinger V, Damski B, Sen(De) A, Sen U 2007 *Adv. Phys.* **56** 243
- [32] Stamper-Kurn D M, Ueda M 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1191
- [33] Stamper-Kurn D M, Andrews M R, Chikkatur A P, et al. 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2027
- [34] Stenger J, Inouye S, Stamper-Kurn D M, Miesner H J, Chikkatur A P, Ketterle W 1998 *Nature* **396** 345
- [35] Hall D S, Matthews M R, Ensher J R, Wieman C E, Cornell E A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1539
- [36] Matthews M R, Hall D S, Jin D S, et al. 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 243
- [37] Barrett M D, Sauer J A, Chapman M S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 010404
- [38] Law C K, Pu H, Bigelow N P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5257
- [39] Pu H, Law C K, Raghavan S, Eberly J H, Bigelow N P 1999 *Phys. Rev. A* **60** 1463
- [40] McGuirk J M, Lewandowski H J, Harber D M, Nikuni T, Williams J E, Cornell E A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 090402
- [41] Gu Q, Bongs K, Sengstock K 2004 *Phys. Rev. A* **70** 063609
- [42] Chang M S, Hamley C D, Barrett M D, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 140403
- [43] Schmaljohann H, Erhard M, Kronjäger J, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 040402
- [44] Widera A, Gerbier F, Fölling S, Gericke T, Mandel O, Bloch I 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190405
- [45] Widera A, Gerbier F, Fölling S, Gericke T, Mandel O, Bloch I 2006 *New J. Phys.* **8** 152
- [46] Chang M S, Qin Q, Zhang W, You L, Chapman M S 2005 *Nat. Phys.* **1** 111
- [47] Vengalattore M, Leslie S R, Guzman J, Stamper-Kurn D M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 170403
- [48] Kronjäger J, Becker C, Soltan-Panahi P, Bongs K, Sengstock K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 090402
- [49] Eto Y, Saito H, Hirano T 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 185301
- [50] Jacob D, Shao L, Corre V, Zibold T, De Sarlo L, Mimoun E, Dalibard J, Gerbier F 2012 *Phys. Rev. A* **86** 061601
- [51] Zhao L, Jiang J, Tang T, Webb M, Liu Y 2014 *Phys. Rev. A* **89** 023608
- [52] Zhao L, Jiang J, Tang T, Webb M, Liu Y 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 225302
- [53] Batrouni G G, Rousseau V G, Scalettar R T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 140402
- [54] Apaja V, Syljuasen O F 2006 *Phys. Rev. A* **74** 035601
- [55] Rizzi M, Rossini D, De Chiara G, Montangero S, Fazio R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 240404
- [56] Bergkvist S, McCulloch I P, Rosengren A 2006 *Phys. Rev. A* **74** 053419
- [57] Mazurenko A, Chiu C S, Ji G, et al. 2017 *Nature* **545** 462
- [58] Sun H, Yang B, Wang H Y, Zhou Z Y, Su G X, Dai H N, Yuan Z S, Pan J W 2021 *Nat. Phys.* **17** 990

- [59] Wu C 2006 *Mod. Phys. Lett. B* **20** 1707
- [60] Mobarak M, Pelster A 2013 *Laser Phys. Lett.* **10** 115501
- [61] Trefzger C, Menotti C, Capogrosso-Sansone B, Lewenstein M 2011 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **44** 193001
- [62] De'Bell K, MacIsaac A B, Whitehead J P 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 225
- [63] Baumann K, Guerlin C, Brennecke F, Esslinger T 2010 *Nature* **464** 1301
- [64] Maschler C, Mekhov I B, Ritsch H 2008 *Eur. Phys. J. D* **46** 545
- [65] Ritsch H, Domokos P, Brennecke F, Esslinger T 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 553
- [66] Mivehvar F, Piazza F, Donner T, Ritsch H 2021 *Adv. Phys.* **70** 1
- [67] Griesmaier A, Werner J, Hensler S, Stuhler J, Pfau T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 160401
- [68] Ni K K, Ospelkaus S, de Miranda M H G, et al. 2008 *Science* **322** 231
- [69] Zhang X, Chen Y, Wu Z, Wang J, Fan J, Deng S, Wu H 2021 *Science* **373** 1359
- [70] Wu C 2009 *Mod. Phys. Lett. B* **23** 1
- [71] Liu W V, Wu C 2006 *Phys. Rev. A* **74** 013607
- [72] Wu C, Liu W V, Moore J, Sarma S D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 190406
- [73] Isacsson A, Girvin S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 053604
- [74] Kock T, Hippler C, Ewerbeck A, Hemmerich A 2016 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **49** 042001
- [75] Soltan-Panahi P, Lühlmann D S, Struck J, Windpassinger P, Sengstock K 2012 *Nat. Phys.* **8** 71
- [76] Zhou Q, Porto J V, Das Sarma S 2011 *Phys. Rev. A* **84** 031607
- [77] Li X, Liu W V 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 116401
- [78] Liu B, Zhang P, Gao H, Li F 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 015303
- [79] Pinheiro F, Bruun G M, Martikainen J P, Larson J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 205302
- [80] Müller T, Fölling S, Widera A, Bloch I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 200405
- [81] Wirth G, Ölschläger M, Hemmerich A 2011 *Nat. Phys.* **7** 147
- [82] Kock T, Ölschläger M, Ewerbeck A, Huang W M, Mathey L, Hemmerich A 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 115301
- [83] Hachmann M, Kiefer Y, Riebesehl J, Eichberger R, Hemmerich A 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 033201
- [84] Kiefer Y, Hachmann M, Hemmerich A 2023 *Nat. Phys.* **19** 794
- [85] Jin S, Zhang W, Guo X, Chen X, Zhou X, Li X 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 035301
- [86] Jin S, Chen X, Zhou X 2022 *Front. Phys.* **10** 957151
- [87] Wang X Q, Luo G Q, Liu J Y, Liu W V, Hemmerich A, Xu Z F 2021 *Nature* **596** 227
- [88] Wang X Q, Luo G Q, Liu J Y, et al. 2022 arXiv: 2211.05578 [cond-mat.quant-gas]
- [89] Huang G H, Xu Z F, Wu Z 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 185301
- [90] Georgescu I M, Ashhab S, Nori F 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 153
- [91] Metzner W, Vollhardt D 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 324
- [92] Müller-Hartmann E 1989 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **74** 507
- [93] Müller-Hartmann E 1989 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **76** 211
- [94] Janiš V 1991 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **83** 227
- [95] Georges A, Kotliar G 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6479
- [96] Byczuk K, Vollhardt D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235106
- [97] Georges A, Kotliar G, Krauth W, Rozenberg M J 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 13
- [98] Limelette P, Wzietek P, Florens S, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 016401
- [99] Vollhardt D 1993 *Correlated Electron Systems* (Singapore: World Scientific) pp57–117
- [100] Vollhardt D 2010 *AIP Conf. Proc.* **1297** 339
- [101] Negele J, Orland H 1998 *Quantum Many-Particle System* (Boca Raton: CRC Press) pp47–68
- [102] Snoek M, Hofstetter W 2013 *Quantum Gases: Finite Temperature and Non-Equilibrium Dynamics* (Singapore: World Scientific) pp355–365
- [103] Hubener A, Snoek M, Hofstetter W 2009 *Phys. Rev. B* **80** 245109
- [104] Li Y 2012 *Ph. D. Dissertation* (Frankfurt am Main: Johann Wolfgang Goethe-Universität)
- [105] Caffarel M, Krauth W 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1545
- [106] Rozenberg M, Kotliar G, Kajueter H, Thomas G, Rapkine D, Honig J, Metcalf P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 105
- [107] Hirsch J E, Fye R M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2521
- [108] Wilson K G 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 773
- [109] Helmes R W, Costi T A, Rosch A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 056403
- [110] Snoek M, Titvinidze I, Töke C, Byczuk K, Hofstetter W 2008 *New J. Phys.* **10** 093008
- [111] Demler E, Zhou F 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 163001
- [112] Imambekov A, Lukin M, Demler E 2003 *Phys. Rev. A* **68** 063602
- [113] Snoek M, Zhou F 2004 *Phys. Rev. B* **69** 094410
- [114] Tsuchiya S, Kurihara S, Kimura T 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043628
- [115] Ashhab S 2005 *J. Low Temp. Phys.* **140** 51
- [116] Pai R V, Sheshadri K, Pandit R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 014503
- [117] Kimura T, Tsuchiya S, Kurihara S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 110403
- [118] Natsu S S, Pixley J H, Das Sarma S 2015 *Phys. Rev. A* **91** 043620
- [119] Li Y, He L, Hofstetter W 2016 *Phys. Rev. A* **93** 033622
- [120] Lang G, Witkowska E 2014 *Phys. Rev. A* **90** 043609
- [121] Isoshima T, Ohmi T, Machida K 2000 *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** 3864
- [122] Zhang W, Yi S, You L 2003 *New J. Phys.* **5** 77
- [123] Zhang W, Yi S, You L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043611
- [124] Kis-Szabó K, Szépfalussy P, Szirmai G 2007 *Phys. Lett. A* **364** 362
- [125] Phuc N T, Kawaguchi Y, Ueda M 2011 *Phys. Rev. A* **84** 043645
- [126] Liu Y, Jung S, Maxwell S E, Turner L D, Tiesinga E, Lett P D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 125301
- [127] Jiang J, Zhao L, Webb M, Liu Y 2014 *Phys. Rev. A* **90** 023610
- [128] Frapolli C, Zibold T, Invernizzi A, Jiménez-García K, Dalibard J, Gerbier F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 050404
- [129] Zan X, Liu J, Han J, Wu J, Li Y 2018 *Sci. Rep.* **8** 9143
- [130] Li X, Zhu B, He X, Wang F, Guo M, Xu Z F, Zhang S, Wang D 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 255301
- [131] Barbé V, Ciamei A, Pasquiou B, Reichsöllner L, Schreck F, Żuchowski P S, Hutson J M 2018 *Nat. Phys.* **14** 881
- [132] Ciamei A, Szczepkowski J, Bayerle A, et al. 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 26221
- [133] Tan H, Han J, Yuan J, Li Y 2020 *Phys. Rev. A* **101** 063611
- [134] Moses S A, Covey J P, Miecnikowski M T, Yan B, Gadway B, Ye J, Jin D S 2015 *Science* **350** 659
- [135] Deiglmayr J, Grochola A, Repp M, Mörtlbauer K, Glöck C, Lange J, Dulieu O, Wester R, Weidemüller M 2008 *Phys.*



- Rev. Lett.* **101** 133004
- [136] Takekoshi T, Reichsöllner L, Schindewolf A, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 205301
- [137] Molony P K, Gregory P D, Ji Z, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 255301
- [138] Park J W, Will S A, Zwierlein M W 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 205302
- [139] Capogrosso-Sansone B, Trefzger C, Lewenstein M, Zoller P, Pupillo G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 125301
- [140] Pollet L, Picon J D, Büchler H P, Troyer M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 125302
- [141] Lu M, Burdick N Q, Youn S H, Lev B L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 190401
- [142] Henkel N, Cinti F, Jain P, Pupillo G, Pohl T 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 265301
- [143] Mattioli M, Dalmonte M, Lechner W, Pupillo G 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 165302
- [144] Dalmonte M, Lechner W, Cai Z, Mattioli M, Läuchli A M, Pupillo G 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045106
- [145] Iskin M, Freericks J K 2009 *Phys. Rev. A* **79** 053634
- [146] Angelone A, Mezzacapo F, Pupillo G 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 135303
- [147] Baier S, Mark M J, Petter D, Aikawa K, Chomaz L, Cai Z, Baranov M, Zoller P, Ferlaino F 2016 *Science* **352** 201
- [148] Cinti F, Macr T, Lechner W, Pupillo G, Pohl T 2014 *Nat. Commun.* **5** 3235
- [149] Seo B, Huang M, Chen Z, Parit M K, He Y, Chen P, Jo G B 2022 arXiv: 2210.01586 [cond-mat.quant-gas]
- [150] Wu X, Wang Z, Yang F, Gao R, Liang C, Tey M K, Li X, Pohl T, You L 2023 arXiv: 2305.20070 [cond-mat.quant-gas]
- [151] Li Y, Geißler A, Hofstetter W, Li W 2018 *Phys. Rev. A* **97** 023619
- [152] Pupillo G, Micheli A, Boninsegni M, Lesanovsky I, Zoller P 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 223002
- [153] Guo Y, Kroeze R M, Marsh B P, Gopalakrishnan S, Keeling J, Lev B L 2021 *Nature* **599** 211
- [154] Kroeze R M, Marsh B P, Lin K Y, Keeling J, Lev B L 2023 *PRX Quantum* **4** 020326
- [155] Masalaeva N, Ritsch H, Mivehvar F 2023 arXiv: 2305.16244 [cond-mat.quant-gas]
- [156] Gao P, Zhou Z W, Guo G C, Luo X W 2023 *Phys. Rev. A* **107** 023311
- [157] Nie X, Zheng W 2023 *Phys. Rev. A* **107** 033311
- [158] Fraxanet J, Dauphin A, Lewenstein M, et al. 2023 arXiv: 2305.03409 [cond-mat.quant-gas]
- [159] Li H, Wu H, Zheng W, Yi W 2023 arXiv: 2305.03891 [cond-mat.quant-gas]
- [160] Mivehvar F, Ritsch H, Piazza F 2016 *Phys. Rev. Lett.* **118** 073602
- [161] Griesser T, Ritsch H 2011 *Opt. Express* **19** 11242
- [162] Keßler H, Cosme J G, Hemmerling M, Mathey L, Hemmerich A 2019 *Phys. Rev. A* **99** 053605
- [163] Kongkhambut P, Skulte J, Mathey L, Cosme J G, Hemmerich A, Keßler H 2022 *Science* **377** 670
- [164] Dreon D, Baumgärtner A, Li X, Hertlein S, Esslinger T, Donner T 2022 *Nature* **608** 494
- [165] Zupancic P, Dreon D, Li X, Baumgärtner A, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 233601
- [166] Li X, Dreon D, Zupancic P, et al. 2021 *Phys. Rev. Research* **3** L012024
- [167] Tan H, Han J, Zheng W, Yuan J, Li Y 2022 *Phys. Rev. A* **106** 023315
- [168] Liu X J, Borunda M F, Liu X, Sinova J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 046402
- [169] Liu X J, Law K T, Ng T K 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 086401
- [170] Liu X J, Liu Z X, Cheng M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 076401
- [171] Dalibard J, Gerbier F, Juzeliūnas G, Öhberg P 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1523
- [172] Wang P, Yu Z Q, Fu Z, Miao J, Huang L, Chai S, Zhai H, Zhang J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 095301
- [173] Cheuk L W, Sommer A T, Hadzibabic Z, Yefsah T, Bakr W S, Zwierlein M W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 095302
- [174] DeMarco M, Pu H 2015 *Phys. Rev. A* **91** 033630
- [175] Chen H R, Lin K Y, Chen P K, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 113204
- [176] Zhang D, Gao T, Zou P, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 110402
- [177] Chiu N C, Kawaguchi Y, Yip S K, Lin Y J 2020 *New J. Phys.* **22** 093017
- [178] Chen X L, Peng S G, Zou P, Liu X J, Hu H 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033152
- [179] Chen K J, Wu F, Peng S G, Yi W, He L 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260407
- [180] Chen K J, Wu F, Hu J, He L 2020 *Phys. Rev. A* **102** 013316
- [181] Chen L, Pu H, Zhang Y 2016 *Phys. Rev. A* **93** 013629
- [182] Wang L L, Ji A C, Sun Q, Li J 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 193401
- [183] Chen K J, Wu F, He L, Yi W 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 033023
- [184] Cao R, Han J, Wu J, Yuan J, He L, Li Y 2022 *Phys. Rev. A* **105** 063308
- [185] Zhai H 2015 *Rep. Prog. Phys.* **78** 026001
- [186] Zhang L, Liu X J 2018 *Synthetic Spin-Orbit Coupling in Cold Atoms* (Singapore: World Scientific) pp1–87
- [187] Galitski V, Spielman I B 2013 *Nature* **494** 49
- [188] Wu Z, Zhang L, Sun W, Xu X T, Wang B Z, Ji S C, Deng Y, Chen S, Liu X J, Pan J W 2016 *Science* **354** 83
- [189] Huang L, Meng Z, Wang P, Peng P, Zhang S L, Chen L, Li D, Zhou Q, Zhang J 2016 *Nat. Phys.* **12** 540
- [190] Wang Z Y, Cheng X C, Wang B Z, et al. 2021 *Science* **372** 271
- [191] Ji Q, Zhang R, Zhang W 2020 *Phys. Rev. A* **102** 063313
- [192] You J S, Liu I K, Wang D W, Gou S C, Wu C 2016 *Phys. Rev. A* **93** 053623
- [193] Li X, Nan J, Pan X 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 263002
- [194] Li Y, Yuan J, Hemmerich A, Li X 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 093401
- [195] Semeghini G, Levine H, Keesling A, et al. 2021 *Science* **374** 1242
- [196] Balents L 2010 *Nature* **464** 199
- [197] Nisoli C, Moessner R, Schiffer P 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1473
- [198] Keselman A, Balents L, Strykh O A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 187201
- [199] Hébert F, Cai Z, Rousseau V G, Wu C, Scalettar R T, Batrouni G G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 224505
- [200] Lewenstein M, Liu W V 2011 *Nat. Phys.* **7** 101
- [201] Struck J, Ölschläger C, Targat R L, et al. 2011 *Science* **333** 996
- [202] Li Y, Yuan J, Zhou X, Li X 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 033274

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

# Quantum simulation of ultracold atoms in optical lattice based on dynamical mean-field theory<sup>\*</sup>

Tan Hui<sup>1)</sup> Cao Rui<sup>1)</sup> Li Yong-Qiang<sup>1)2)†</sup>

1) (College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

2) (Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

( Received 29 April 2023; revised manuscript received 17 June 2023 )

## Abstract

With the development of atomic cooling technology and optical lattice technology, the quantum system composed of optical lattice and ultracold atomic gas has become a powerful tool for quantum simulation. The purity and highly controllable nature of the optical lattice give it a strong regulatory capability. Therefore, more complex and interesting physical phenomena can be simulated, which deepens the understanding of quantum many-body physics. In recent years, we have studied different Bose systems with strong correlations in optical lattice based on the bosonic dynamical mean-field theory, including multi-component system, high-orbit bosonic system, and long-range interaction system. In this review, we introduce the research progress of the above mentioned. Through the calculation by using bosonic dynamical mean-field theory which has been generalized to multi-component and real space versions, a variety of physical phenomena of optical crystal lattice Bose system in weak interaction intervals to strong interaction intervals can be simulated. The phase diagram of spin-1 ultracold bosons in a cubic optical lattice at zero temperature and finite temperature are drawn. A spin-singlet condensate phase is found, and it is observed that the superfluid can be heated into a Mott insulator with even (odd) filling through the first (second) phase transition. In the presence of a magnetic field, the ground state degeneracy is broken, and there are very rich quantum phases in the system, such as nematic phase, ferromagnetic phase, spin-singlet insulating phase, polar superfluid, and broken-axisymmetry superfluid. In addition, multistep condensations are also observed. Further, we calculate the zero-temperature phase diagram of the mixed system of spin-1 alkali metal atoms and spin-0 alkali earth metal atoms, and find that the system exhibits a non-zero magnetic ordering, which shows a second-order Mott insulation-superfluid phase transition when the filling number is  $n = 1$ , and a first-order Mott insulation-superfluid phase transition when the filling number is  $n = 2$ . The two-step Mott-insulating-superfluid phase transition due to mass imbalance is also observed. In the study of long-range interactions, we first use Rydberg atoms to find two distinctive types of supersolids, and then realize the superradiant phase coupled to different orbits by controlling the reflection of the pump laser in the system coupled to the high-finesse cavity. Finally, we study the high-orbit Bose system. We propose a new mechanism of spin angular-momentum coupling with spinor atomic Bosons based on many-body correlation and spontaneous symmetry breaking in a two-dimensional optical lattice, and then study the orbital frustration in a hexagonal lattice. We find that the interaction between orbital frustration and the strong interaction results in exotic Mott and superfluid phases with spin-orbital intertwined orders.

**Keywords:** quantum simulation of ultracold atoms, bosonic dynamical mean-field theory, quantum phase transition

**PACS:** 37.10.Jk

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230701

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074431, 12374252) and the Science Foundation for Distinguished Young Scholars of Hunan Province, China (Grant No. 2021JJ10044).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [li\\_yq@nudt.edu.cn](mailto:li_yq@nudt.edu.cn)

## 基于动力学平均场的光晶格超冷原子量子模拟

谭辉 曹睿 李永强

### Quantum simulation of ultracold atoms in optical lattice based on dynamical mean-field theory

Tan Hui Cao Rui Li Yong-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 183701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230701

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

光腔中两组分玻色-爱因斯坦凝聚体的受激辐射特性和量子相变

Stimulated radiation characteristics and quantum phase transition for two-component Bose-Einstein condensate in optical cavity

物理学报. 2018, 67(18): 183701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180971>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>

双轨道Hubbard模型的动力学平均场理论研究

Dynamical mean-field theory of two-orbital Hubbard model

物理学报. 2022, 71(14): 147103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220286>

各向异性ruby晶格中费米子体系的Mott相变

Mott transition of fermions in anisotropic ruby lattice

物理学报. 2021, 70(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210963>

一维扩展量子罗盘模型的拓扑序和量子相变

Topological orders and quantum phase transitions in a one-dimensional extended quantum compass model

物理学报. 2018, 67(19): 190301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180855>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森堡模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>