

國立交通大學

物理研究所

碩 士 論 文

二維雙偶極晶體的物理性質

Static and Dynamical Properties of a Two-Dimensional Dipolar Crystal



研 究 生：溫智媛

指 導 教 授：江進福 教授

程思誠 教授

中 華 民 國 九 十 八 年 一 月

二維雙偶極晶體的物理性質

Static and Dynamical Properties of a Two-Dimensional Dipolar Crystal

研究生：溫智媛

Student : Chih-Yuan Wen

指導教授：江進福

Advisor : Tsin-Fu Jiang

程思誠

Advisor : Szu-Cheng Cheng

國立交通大學
物理研究所
碩士論文



A Thesis
Submitted to Institute of Physics
College of Science
National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
Master
in
Physics

January 2009

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十八年一月

二 維 雙 偶 極 晶 體 的 物 理 性 質

學生：溫智媛

指導教授：江進福
程思誠

國立交通大學物理研究所碩士班

摘 要

對於具備偶極-偶極交互作用的準二維玻色愛因斯坦凝體，本文以高斯波包作為晶體相的試驗波函數。在高粒子密度的情形下，可將此波函數合理地當作偶極晶格點上的波函數。考慮非正交波函數基底的疊加效應，修正 Hartree-Fock 平均場近似，再透過數值計算找出晶體相的能量極小值。最後，經由聲子頻譜分析，以及切變模數與壓縮模數恆為正值的結果，證實高粒子密度條件下系統呈現晶體相的可能性。

Static and Dynamical Properties of a Two-Dimensional Dipolar Crystal

student : Chih-Yuan Wen

Advisors : Dr. Tsin-Fu Jiang
Dr. Szu-Cheng Cheng

Institute of Physics
National Chiao Tung University

ABSTRACT

The current work designs a Gaussian trial wavefunction for Bose-einstein condensates (BEC) with dipole-dipole interaction. The wavefunction is reasonably regarded as that of the dipole crystal under high particle density condition. Hartree-Fock mean field approximation has been modified under the consideration of the overlapping effect of non-orthogonal wavefunction.

The minimum energy of crystalline phase can therefore be found by numerical computations and phonon spectrum evaluation. These shear and compression modulus are shown to be definitely positive. Thus, it is concluded that quasi-2D dipolar crystal is a stable state under high condensed density.

誌 謝

論文付梓，終於。

首先我要感謝我的指導教授程思誠博士，帶領我走過這些作研究的日子；無論是老師對於問題關鍵處的精準掌握，抑或老師作研究的熱忱，在在都激勵我繼續未竟的工作，謝謝老師。也感謝我的共同指導教授江進福博士，感謝老師平時的指導與關心，並協助我完成論文口試。以及擔任論文口試委員的林貴林博士，感謝教授對於我的論文提供了許多寶貴的意見與指教，提醒我不少當時被我擱置的問題。謝謝老師。

感謝我的同學兼學長鄭世達達哥，感謝他在水深火熱的期末考週仍願意幫助我完成口試的校稿，也感謝他願意不卑不亢的回答我許多研究上的奇怪問題，給了我相當多犀利的提點，謝謝他。感謝徐煥鈞同學，在他畢業前也願意跟我進行一些討論，相當程度的也帶給我不少裨益。感謝研究室的同學與學弟妹，陪我聊天與玩耍，蹲研究室看棒球。感謝博士後的學長李漢傑博士，學長在我口試前夕提供的一些指點相當受用。謝謝你們。

論文的撰寫過程中，縱然絞盡腦汁徒呼負負，但忽然之間，有這麼一絲絲的體會葉慈(W.B. Yeats)何以說「a lonely impulse of delight」。這本論文的呈現也要感謝我的父母，讓我活過四分之一世紀了仍然不愁吃穿，並給我很多打氣與鼓舞，也感謝我的小弟一直以來的陪伴與勉勵，有你真好；更要感謝國家與諸位納稅人提供機會讓我接受高等教育直到今天，謝謝，也祈望國家挹注在我身上的資源，最終可以帶來一點點的美好。

目 錄

中文摘要	i
英文摘要	ii
誌謝	iii
目錄	iv
表目錄	v
圖目錄	vi
一、	緒論.....	1
二、	理論.....	7
三、	計算與結果分析.....	16
四、	結論.....	26
參考文獻	27
附圖	28



表目錄

表 3-1	16
表 3-2	23
表 3-3	23



圖目錄

圖 1-1	3
圖 1-2	4
圖 1-3	5
圖 1-4	5
圖 2-1	9
圖 2-2	14
圖 3-1	16
圖 3-2	22
圖 3-3	28
圖 3-4	28
圖 3-5	29
圖 3-6	29
圖 3-7	30
圖 3-8	30
圖 3-9	31
圖 3-10	31
圖 3-11	32
圖 3-12	32
圖 3-13	33
圖 3-14	33
圖 3-15	34
圖 3-16	34
圖 3-17	35
圖 3-18	35
圖 3-19	36

第一章 緒論

1.1 玻色愛因斯坦凝體

玻色愛因斯坦凝體(Bose-Einstein condensates, BEC)，出現在物質波長尺度達到粒子平均距離的時候。此時，各粒子的德布洛依波長疊加，得以形成同調的(coherent)巨觀波函數，因而這個巨觀波函數，可作為序參量(order parameter)，標誌著凝聚相的出現。因此凝體的運動方程也與它有關，即Gross-Pitaevskii(GP)方程。由此可知，我們討論的對象，BEC，是藉由量子力學的疊加效應給出的巨觀相。出現這個巨觀相的物質，經歷了一個完全由海森堡不確定原理(Heisenberg's uncertainty principle)所驅動的相變：量子相變(quantum phase transition)。

有交互作用(interacting)超冷氣體(ultracold gases)的尺度參數為：溫度10~100nK，密度 $10^{13}\sim 10^{14}\text{ cm}^{-3}$ ，粒子數 $10^3\sim 10^7$ ，尺寸大小 $10\mu\text{m}\sim 1\text{mm}$ ，生命週期10秒。大於或小於上述尺度的交互作用與外界作用，系統將不受其影響，而處於上述尺度的物質特性，將交付多體(many-body)效應定奪。實驗室必須透過雷射冷卻與囚禁(trap)，方可觀察到BEC相。因為產生BEC的先決條件是：形成高密度的相空間。換句話說，首先必須製造量子簡併氣體，即態密度大於(玻色子)或等於(費米子)一。為達成量子簡併，物質必須低溫以避免熱漲落效應，低密度以避免量子漲落與三體複合作用，從而使凝體粒子的交互作用以二體碰撞為主(故適用GP平均場方程)。由於粒子超冷，低能量散射下只有S波碰撞的貢獻重要，因為粒子密度稀薄，粒子交互作用可表示為零距位勢(zero-range potential)，其強度則以S波散射長度為表徵。此交互作用若引進一階微擾，則可精準求出低能量散射長度，將二體散射等效為接觸位勢，作為粒子在系統中感受到的平均場，並放入GP平均場方程作為Hartree近似場的角色。我們注意到，動量能量守恆律的必然結果是二體的彈性碰撞無法使系統趨於平衡，顯然GP方程必定是近似下的產物。

Hartree 近似的凝體(condensates)波函數，在無交互作用的情形下滿足(單粒子)時變薛丁格方程，在有交互作用出現的時候，凝體粒子運動方程又該如何表示？超冷稀薄氣體裡，粒子交互作用可表示為零距位勢(zero-range potential)，故低能量粒子散射的情形下，對於滿足李普曼-史溫格方程(Lippmann-Schwinger equation)的散射矩陣，我們可引進一階微擾近似(the first Born approximation)，致使三維的散射位勢透過s波散射長度 a_s 表現為平均場耦合常數 $g_{3D} = 4\pi\hbar^2 a_s/M$ ， M 為單粒子等效質量。每個粒子感受到一個猶如由其他粒子所形成的外加平均場，此 Hartree 自洽平均場(self-consistent mean field)正比於局部區域的凝體粒子密度(local condensed-particle density)，若將此平均場加入薛丁格方程即為非線性薛丁格方程，稱之(時變)GP 方程：

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) + g_{3D}|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right\}\Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1.1)$$

其中Hartree等效位能 $V_H = g_{3D}|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ，源自接觸位勢(pseudo-potential): $g_{3D}\delta(\vec{r})$ ，

其中 $\delta(\vec{r})$ 為狄拉克分布(Dirac-delta distribution)。當 S 波散射程度為正值對應於粒子交互作用的互斥勢，負值則為吸引勢。在凝聚態(condensates)粒子數目龐大的條件下，時變 GP 方程的時間演化將與化學勢 μ 有關：

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) + g_{3D} |\psi(\vec{r})|^2 \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) \quad (1.1.2)$$

穩態(stationary state)滿足的這一條不隨時變 GP 方程，亦可基於二階相變(second-order phase transition)的金斯堡-藍道(Ginsburg-Landau)理論，改從序參量 ψ 的藍道自由能(Landau free energy)著手：

$$E[\psi, \psi^*] = \int d^3\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + (V - \mu)\psi^*\psi + \frac{g_{3D}}{2} (\psi^*\psi)^2 \right] \quad (1.1.3)$$

其中，拉格朗日乘子(Lagrange multiplier) μ ，源於巨正則系綜(grand canonical ensemble)的限制式：平均粒子數漲落為零

$$\int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = N_0 \quad (1.1.4)$$

GP方程代表了當粒子平均距離遠大於s波散射長度(稀薄氣體)，也就是交互作用微弱的區間內，我們將粒子間的多體交互作用等效為二體交互作用時，在粒子數龐大的近似之下序參量(巨觀波函數)在Fock空間的運動方程，類比於古典場的方程。當然GP方程絕非單顆裸粒子之運動方程，但正因為我們早已將巨觀波函數的存在作為首要前提，凝體粒子們作為一個相同相位(phase)的同調性(coherent)的整體，所以GP方程同時也代表了單粒子以準粒子(quasi-particle)的身份在等效平均場下運動之方程。

由於 GP 方程只與該位置的凝體密度，以及與該位置的粒子是否受接觸位勢作用有關，顯然，GP 方程是條局域性(local)方程；彼此只透過單體密度矩陣(one-body density matrix)作交涉，故粒子之間的關聯性弱。(當然在這裡的意思並不是指 BEC 的非對角長程有序性(off-diagonal long range order)。)除了經由維度的降低與費希巴哈共振，還可以考慮凝體粒子之間發生的長程(long-range)偶極作用，增強粒子之間的關聯性。我們了解到，某些原子本身具備強(磁)偶極矩特性，如 ^{52}Cr 原子，具有 6 波耳磁子(Bohr magnetons)大小的磁矩，考慮偶極-偶極交互作用(dipole-dipole interaction)是合理的；進而充分討論當它們形成 BEC 時，所存在的各種可能的相(phases)。由於長程非等向性(anisotropic)偶極交互作用所帶來的相變與晶體相，跟之前我們熟悉的情形：透過等向性(isotropic)膺位勢達成短程交互作用的原子玻色氣體，關聯性小。顯然地，強偶極矩原子相較於以往的等效接觸勢原子，具備了不同的作用範圍(range)，與不同的對稱性(symmetry)，由他們形成的 BEC 定然擁有嶄新面貌。

相較於傳統的短程、等向性的接觸位勢，長程偶極-偶極交互作用提供了玻色愛因斯坦凝體更顯著的強關聯性，因而呈現更豐富的量子相與相變。一如電子的維格納晶體(Wigner crystal)，強場禁錮下的準二維偶極簡併玻色氣體，在高密度的情況下也顯現出晶體相。本文參照參考文獻[1]的方式，設計了一道試驗波函數。在高粒子密度的情形下，可將此波函數合理地當作偶極晶格點上的波函數。將Hartree-Fock平均

場近似(本文縮寫HFA)，仿效參考文獻[2]，將非正交波函數基底的疊加效應納入，再以數值計算方法找出晶體相的能量極小值。最後，經由聲子頻譜分析，與切變模數恆為正值的結果，證實準二維偶極晶格乃高密度下的穩定基態。

1.2 偶極玻色愛因斯坦凝體的晶體相

由海森堡不確定原理已知，電子的維格納晶體(Wigner crystal)，僅當電子-電子(庫侖)交互作用強過動能時，晶體相方可成為穩定基態。同樣的，偶極晶格的成因，勢必與長程的偶極交互作用有關。因此，參考文獻[3]裡，改以偶極交互作用對動能的強度比例參數，作為偶極晶體是否發生量子融化相變(quantum melting transition)的判準。我們便奠基於這項判準，謀求高密度偶極晶體的穩定基態能量。

由於位能(接觸勢 E_{con} 與偶極作用 E_{dd})與動能可分別作如下估計： $E_{con} = g_{3D}n = \frac{g_{3D}}{a^2}$ ， $E_{dd} = \frac{g_d}{a^3}$ ， $E_{kin} = \frac{\hbar^2}{ma^2}$ ，其中 a 為粒子的平均距離， g_d 為偶極作用強度。顯然，局域(local)的接觸勢與零點動能的相對強度並不依賴於 a ，這也符合了純接觸勢凝體只存在超流相而無法出現晶體相的情形。故參考文獻[3]的判準參數為：

$$r_s = \frac{E_{dd}}{E_{kin}} = \frac{g_d m}{\hbar^2 a} \quad (1.2.1)$$

參考文獻[3]得出當 r_s 等於 r_{QM} 時，分子偶極晶體始發生量子相變，其中 $r_{QM} = 18 \pm 4$ 。我們基於參考文獻[3]的數值結果，分別取 $r_s = 30, 40$ ， $d_z/\ell = 0.2, 0.6$ (關於準二維系統厚度 d_z/ℓ 值請見 2.1 節)的情形，求晶體相能量可能的極小值。

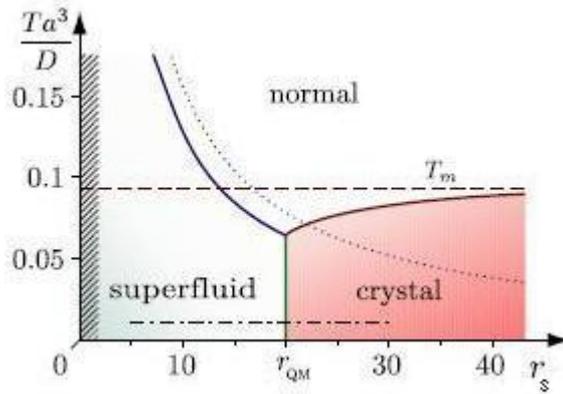


圖 1-1、參考文獻[3]Fig.3：偶極系統溫度對 r_s 圖。本文屬於零溫 ($T=0$) 情形，其量子融化 (quantum melting) 相變點為 $r_{QM} = 18 \pm 4$ ，當 r_s 小於 r_{QM} 晶體開始發生融化。

接下來透過參考文獻[4]，來檢驗我們設定參數的合理性。參考文獻[4]使用特徵

長度 $r_0 = \frac{c_{dd} m}{4\pi\hbar^2} = \frac{g_{dd} m}{\hbar^2}$ ，當二維粒子密度 n 達到 $nr_0^2 = 256$ 以上，便開始出現晶體相。請參照圖 1-2，橫座標軸應為參考文獻誤植。

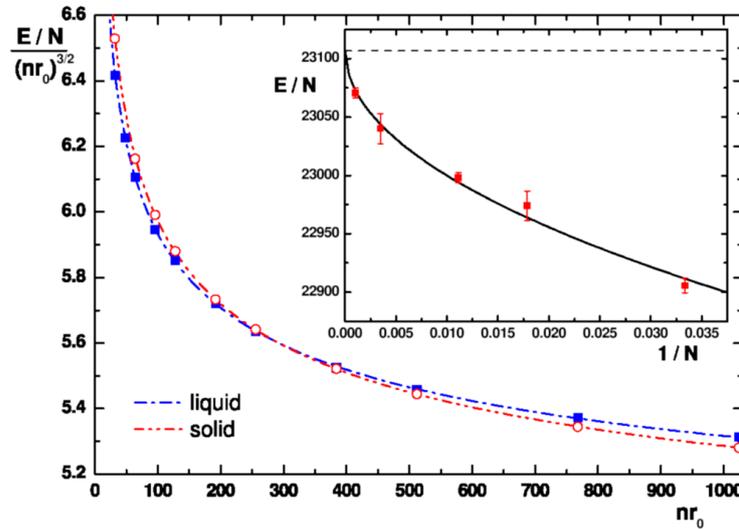


圖 1-2、參考文獻[4]的 Fig.1：偶極系統粒子能量對 nr_0^2 關係圖，當 $nr_0^2 = 256$ 以上可出現固體相(solid phase)。

在此，我們得到 $r_0 = 1$ (因為取長度單位 $g_d = 1$)，故 $r_s = 16$ ，落在參考文獻[3]的要求範圍內。故我們選用的參數亦符合參考文獻[4]的要求。

1.3 等效交互作用的調變：費希巴哈共振模式

超精細結構(hyperfine state)使得處於內部態(internal states)的原子(所有參與或不參與碰撞過程的原子)，可藉由外場，如磁場，帶來的基曼效應(Zeeman effect)，使得原子之間的交互作用，二體碰撞，透過外場耦合進而形成態相關位勢(state-dependent potential)。為求方便，我們標記了參與散射原子的超精細能階作為新的量子數：頻道(channel)，以取代各原子的角動量量子數，同樣的，原子交互作用亦表現為頻道相關位勢(channel-dependent potential)。

原子的低溫碰撞若加入磁場，便可透過基曼分裂(Zeeman splitting)調節，使閉鎖通道(closed channel)的束縛態(bound state)達到開放通道(open channel)的無窮遠處漸近能量，當然，這是基於兩個頻道均為系統允許態的前提之下。當調節至某一(共振)外場值時，一旦經由開放通道入射發生二體碰撞的粒子動能總和，等於閉鎖通道束縛態能量，兩頻道藉由超精細交互作用而相互耦合，此時入射原子的波函數可和(分子)束縛態的波函數耦合而有共振行為，是為費希巴哈共振(Feshbach resonance)，特徵表現為S波散射長度的發散。

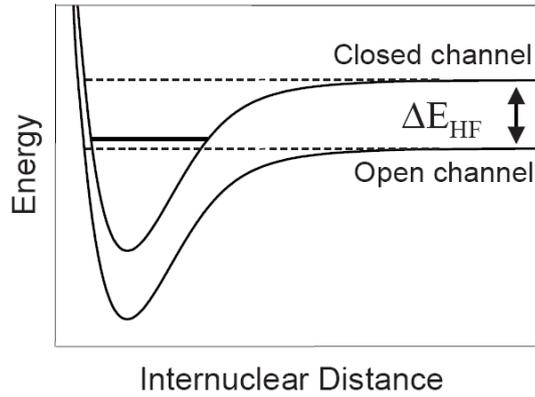


圖1-3、費希巴哈共振模式涉及的原子間交互作用。碰撞原子的位能與原子核間距之關係，以實線表示。位能的漸近能量(asymptotic energy)則以虛線表示，顯示兩頻道以兩者的超精細能階分裂 ΔE_{HF} 隔開。水平線標示著閉鎖頻道的低能量束縛態，它與開放頻道中具備漸近能量的自由態 (free state) 近乎簡併，亦稱此自由態的能量為門檻能量(threshold energy)。

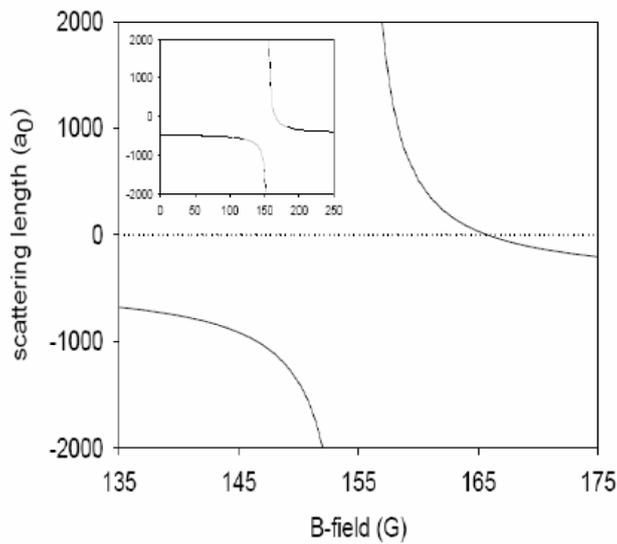


圖1-4、接近費希巴哈共振模式的散射長度對磁場關係圖。此為 ^{85}Rb ，散射長度為負值時可具有等效吸引勢，共振發生時的共振磁場約155高斯 (Gauss)。

在費米子的系統中，超過此一外場值，入射原子將形成費希巴哈分子(Feshbach molecule)，這也象徵著(等效)二體交互作用的變號，由相斥勢變為吸引勢，對應著物質巨觀相可能發生的相變，就是著名的BEC-BCS crossover，也是實驗室製備超冷分子(ultracold molecules)的方法之一。至於本文所描述的系統裡，三維冷原子碰撞觀察到的強非彈性耗損，可經外場極化(與二維禁錮作結合)，而加以避免。

$$a_s = a_{bg} \left(1 \pm \frac{\Delta B}{B - B_{res}} \right) \quad (1.3.1)$$

其中 B_{res} 即為共振發生時的磁場值， a_{bg} 代表背景(background)散射長度， ΔB 則取決於使得S波散射長度為零的磁場值，式子中正號或負號的選擇端看 a_{bg} 為負號或正號。

這樣的低能量縛態其實被量子力學所保證，屬於普遍束縛態(universal bound state)：

$$E_{binding} = -\frac{\hbar^2}{ma_s^2} \quad (1.3.2)$$

理由如下：極低溫下的原子相對速度小，碰撞時間長，入射原子相對能量的不準度能夠與束縛態的能量不準度相當，這才使得原子碰撞行為得以深究。一般而言，溫度小於1mK時，原子便進入量子效應顯著的低溫碰撞區間，可透過量子力學裡針對球對稱勢採用的分波法(partial wave)給出膺位勢(pseudopotential)。在此只需考慮前幾項(低分波通道)的貢獻，因為高分波通道的能量太低，無法克服離心位能障。可預期當BEC形成時s波將主宰超低溫原子碰撞，膺位勢的強度可透過s波(等向性)散射長度給出，它同時也是玻恩(Born)一階近似下的精確解。我們可透過費希巴哈共振對接觸位勢的抑制，進而使偶極作用的強度相對放大，讓低溫凝體系統達到強偶極作用之區間。

本文結構如下：

- 第一章描述了BEC場域的相關概要，以及加入偶極作用後新量子相 - 晶體相 - 的出現，並簡述一個早已被廣泛使用的接觸勢調節方法：費希巴哈共振模式(Feshbach resonance)，透過它對接觸勢的抑制，可使得原子的偶極作用被相對放大。
- 第二章則為本文所引進的理論分析模型。包括穩定基態能量的HFA計算方法及其適用的等效位勢、聲子激發態的理論依據；以及，透過短波長漸近行為分析而得出的數值分析方法。
- 第三章是晶體相基態能量與聲子頻譜的計算，並對於數值計算結果進行討論。
- 第四章我們作了總結以及未來展望。

第二章 理論

承襲參考文獻[5]，提供等效的偶極交互作用之處理方法；其次，再以參考文獻[3]所給出的條件：分子偶極晶體相僅出現在高粒子密度範疇(使得偶極作用在與動能之間的競爭中勝出)，作為基礎；最後，取穩定基態能量最低的三角晶格，配合 HFA 變分法，發展偶極晶體的穩定基態能量、聲子頻譜與切變模數計算。

2.1 偶極玻愛凝體的準二維等效勢

本文以參考文獻[5]的方法，將長程偶極作用納入凝體粒子的平均場位勢。首先，為避免三維偶極交互作用在實空間(real space)出現的奇異點，參考文獻[5]將之作傅立葉變換。由於偶極玻愛凝體氣體(Dipolar BEC gases)，在z軸囚禁位勢的強場禁錮下，發生維度限縮(dimensional reduction)，而呈現準二維(quasi-2D case)之行爲。於是，在諧振子囚禁勢下，BEC作快速的零點振動(zero point oscillations)，透過對z軸的高斯波函數作積分，可得出二維等效位勢。我們便由此等效位勢出發，進一步地使用Fock近似，再配合非正交單粒子波函數修正，謀求晶體相(cryalline phase)的基態能量。

猶如三維的接觸位勢(contact potential)透過s波散射長度 a_s ，等效為接觸型粒子-粒子作用的平均場耦合常數 $g_{3D} = 4\pi a_s$ ，偶極作用的耦合亦表現為長度單位，在磁偶極與電偶極系統中分別表示為 $g_d = \frac{\mu_0 d_m^2}{3}$ 與 $g_d = \frac{d_e^2}{3\epsilon_0}$ ，其中，原子系統往往為磁偶極作用，而擁有複雜能階結構的極性分子系統則多為電偶極交互作用系統。因為非局域(non-local)偶極-偶極作用影響了短程局域(local)的散射過程，所以參考文獻[5]涉及的 g_{3D}/g_d 均與(未屏蔽的) g_d 有關。

準二維偶極晶體的漢米爾頓量為

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \frac{\hat{P}_i^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_z^2 z^2 \right\} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \{ g_{3D} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + V_{dd}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \} \quad (2.1.1)$$

$$V_{dd}(\vec{r}) = \frac{3g_d}{4\pi} \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{|\vec{r}|^3} \quad (2.1.2)$$

準二維玻色愛因斯坦凝體的侷限軸，z軸，將作零點振動，故粒子密度可變數分離為

$$\rho(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi d_z^2}} \exp \left[-\frac{z^2}{d_z^2} \right] n(x, y) \quad (2.1.3)$$

其中 $n(x, y)$ 為侷限平面(即x-y平面)之二維粒子密度，此粒子密度滿足總粒子數N的歸一條件。作為準二維系統厚度的參數 $d_z = \sqrt{\hbar/M\omega_z}$ ，在 ^{52}Cr 系統約為微米級(μm)，相對應的 ω_z 約為 $2\pi 100\text{Hz}$ 至 $2\pi 1000\text{Hz}$ ，凝體尺寸(size)可達毫米級(mm)。在此亦適用於原子單位(atomic unit)。

由給出的z方向高斯波包(Gaussian wavepacket)，對z軸積分，可得偶極作用項的能量泛函為

$$\begin{aligned} H_{dd} &= \frac{1}{2} \int d^3 \vec{r} \int d^3 \vec{r}' \rho(\vec{r}) V_{dd}(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}') \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \tilde{\rho}(\vec{k}) \tilde{V}_{dd}(\vec{k}) \tilde{\rho}(-\vec{k}) \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

由於三維偶極-偶極作用 V_{dd} 在實空間上有發生奇異點之虞，解決之道則是作傅立葉變換以避免發散。偶極-偶極作用的傅立葉變換

$$\tilde{V}_{dd}(\vec{k}) = g_d \left(\frac{3k_z^2}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} - 1 \right) \quad (2.1.5)$$

發現傅立葉變換後的偶極作用不再出現奇異點。粒子密度的傅立葉變換

$$\tilde{\rho}(\vec{k}) = \exp\left[-\frac{k_z^2 d_z^2}{4}\right] \tilde{n}(k_x, k_y) \quad (2.1.6)$$

則得出二維平面上 (k_x, k_y) 空間中等效的偶極-偶極作用

$$\begin{aligned} H_{dd} &= \frac{g_d}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k} \tilde{n}(k_x, k_y) \tilde{n}(-k_x, -k_y) \\ &\quad \times \left\{ \frac{2}{\sqrt{2\pi} d_z} - \frac{3}{2} \exp\left[\frac{k^2 d_z^2}{2}\right] k \operatorname{erfc}\left(\frac{k d_z}{\sqrt{2}}\right) \right\} \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

其中令 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = q$ ，二維粒子密度取傅立葉變換為 $\tilde{n}(k_x, k_y)$ 。

同樣的我們取出能量泛函裡接觸位勢的部分，再度對z方向自由度的高斯波函數積分。

在 H_{dd} 裡我們已獲得偶極-偶極作用在交互作用能中的貢獻，現在我們對總位能，也就是合併了接觸位勢與偶極作用的交互作用能，再度進行傅立葉變換，可求出準二維等效總位勢：

$$\begin{aligned} v(q) &= \frac{g_d}{\left(\frac{d_z}{\ell}\right) \chi \ell} \left(1 - \frac{3}{2} \chi q \left(\frac{d_z}{\ell}\right) e^{\left(\frac{q^2}{2}\right) \left(\frac{d_z}{\ell}\right)^2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{q}{\sqrt{2}} \left(\frac{d_z}{\ell}\right)\right) \right) \\ &= \frac{g_d}{d_z \chi} - \frac{3 g_d}{2 \ell} q e^{\left(\frac{q^2}{2}\right) \left(\frac{d_z}{\ell}\right)^2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{q}{\sqrt{2}} \left(\frac{d_z}{\ell}\right)\right) \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

$$\chi = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{1 + \left(\frac{g_{3D}}{2 g_d}\right)} \quad (2.1.9)$$

其中，傅立葉變換下，偶極交互作用在動量空間中的等效強度為 g_d 。我們便以此作為長度的基本單位 ℓ

$$\ell = \frac{g_d M}{\hbar^2} = 1 \quad (2.1.10)$$

此外，已知參考文獻[5]描述的對象均為垂直於二維平面上的互斥偶極，可預期動量空間上的準二維等效勢屬於等向性位勢，即 $v(\vec{q})$ 可覆寫為純量自變數的 $v(q)$ ，並可經傅立葉變換

$$V(\vec{r}) = \int d\vec{q} v(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (2.1.11)$$

套用至參考文獻[2]所給出的總能 E 。

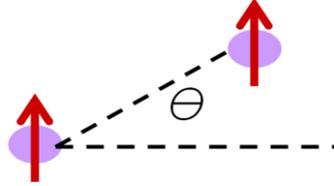


圖2-1、原子偶極-偶極示意圖。
 θ 代表偶極-偶極之間的夾角。

在此先指出準二維偶極作用的特性。已知三維的偶極作用所具備的非等向性，導致BEC呈現雪茄型或煎餅型，最終造成了系統的不穩定。本文將系統侷限在二維，導致偶極交互作用呈現吸引勢的可能被充分排除，也就是偶極偏好以並排的排列方式彼此互斥，頭尾相連的相吸偶極排列將不復存在，表現在組態空間(configuration space)裡則相應於作用力為負值的區域呈指數減小。本文所討論的系統要求就更嚴苛了，我們假定偶極完全垂直於侷限平面上(若系統改為費米粒子系統則一併保持了費米面而不發生變形)，凍結偶極之間傾斜夾角 θ 的自由度帶來全為正值的偶極作用組態空間。是以相較於三維的情形，準二維偶極凝體即使在偶極作用徹底主宰接觸位勢的情況下仍是穩定的。

對於凝體粒子之間在平均場近似下的交互作用，欲描述兩者 - 偶極作用與接觸位勢 - 相對的強度比例，可引進一無單位因次參數標誌之：

$$\epsilon_{dd} \equiv \frac{g_d m}{4\pi\hbar^2 a_s} \quad (2.1.12)$$

故 $\epsilon_{dd} = \frac{g_d}{g_{3D}}$ 。另外，也使得 $\chi = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{1 + \left(\frac{1}{2\epsilon_{dd}}\right)}$ 。

本文所描述的凝體系統， ϵ_{dd} 範圍大致落在 0.5 左右，屬於強偶極作用區間，故偶極作用不可忽略。相較於弱偶極系統例如 ^{87}Rb ，其 ϵ_{dd} 則約為 0.007。強磁矩原子 ^{52}Cr 的 s 波散射長度 a_s 約為奈米級(nm)， ϵ_{dd} 約為 0.16，至少需要考慮偶極作用的微擾效應(perturbative effect)，亦可透過費希巴哈共振(Feshbach resonance)再進一步達到強偶極作用區。鹼金族元素也能藉由費希巴哈共振將 S 波散射長度調為零，微弱的原子磁矩便能扮演交互作用的主要角色。

2.2 非正交基底的 Hartree-Fock 平均場理論

HFA 變分法尋求穩定基態能量，目標在於將穩定基態能量極小化，策略上則採用對(單粒子)波函數的變分尋找極小值。因此，首要之務便在於，本文將試驗波函數取為各晶格點上的高斯波包。

當玻愛凝體粒子透過長程偶極-偶極交互作用彼此聯繫，並且遭外場禁錮而形成準二維系統時，我們知道，一旦系統維度降低，動能的自由度下降可導致動能下降；但長程的非等向性偶極交互作用仍保持相同的自由度。這就導致了偶極交互作用被相對放大，進而使準二維偶極玻愛凝體透露出新的量子相—晶體相—的可能性。

我們知道，HFA 只適用於單粒子的正交歸一基底，但選用的高斯波函數，雖可滿足(無窮遠處)的歸一條件，卻互不正交。相較於一般性的正交基底問題，兩相對照之下，可以想見：在多體交互作用中，考慮 HFA 平均場的情況裡，基底不正交的部分，也就是各晶格點高斯波函數的疊加，將關鍵性的決定了系統能量之修正量。因此，我們將高斯波包的寬度， $1/\sqrt{\alpha}$ ，選作變分參數，從而完成了我們的第一步工作。

正因我們的單粒子試驗波函數不為正交基底，故以 HFA 近似前尚需考慮基底的疊加(overlap)效應。除了從 Sturm-Liouville 理論中的 Gram-Schmidt 正交化方法得到靈感，在參考文獻[2]提出的 LCAO 方法裡，已透過線性變換(linear transform)執行基底的正交化，建構出一組新的正交歸一原子軌域(atomic orbitals, AO)基底，使漢米爾頓量得以對角化。一旦完成了漢米爾頓量(Hamiltonian)的對角化程序，疊加積分影響能量的效應，便已納入考慮。

$$S_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu}^* \phi_{\nu} d\tau - \delta_{\mu\nu} \quad (2.2.1)$$

滿足 $S_{\mu\mu} = 0$ ， ϕ_{ν} 是單粒子波函數。因而波函數內積可表示成

$$t_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu}^* \phi_{\nu} d\tau = S_{\mu\nu} + \delta_{\mu\nu} \quad (2.2.2)$$

在我們的試驗高斯波函數裡 t 屬於實對稱矩陣，故為赫米(Hermitian)矩陣，並與漢米爾頓量互為對易(commute)。

H_{op} 是單粒子感受到的平均自洽場表現出來的等效漢米爾頓運算子

$$H_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu}^* H_{op} \phi_{\nu} d\tau \quad (2.2.3)$$

$$\Psi = \frac{1}{(N!)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\mu\nu}^{occupy} P_{\mu\nu} \phi_{\mu} \phi_{\nu} \cdots \phi_N \quad (2.2.4)$$

交換運算子(permutation) P ，在玻色系統中 $P=I$ 滿足粒子交換對稱性，在此亦扮演了各個基底波函數連乘積，佔多體波函數若干權重的係數角色。此時，多體系統能量的期望值為

$$E = \frac{\int \Psi^* H_{op} \Psi d\Omega}{\int \Psi^* \Psi d\Omega} \quad (2.2.5)$$

如今，在同一個($\{\phi\}$)的希爾伯特空間中，尋找一組新的正交歸一波函數 $\{\varphi\}$ 達成

漢米爾頓量的對角化，並作為單粒子態的新基底，將多體波函數改由這一組新的正交歸一基底建構而成。我們發現兩組完備基底可透過疊加積分相互構成： $\varphi = t^{-1}\phi$ 。以下是我們的分析：

已知新基底滿足正交歸一化條件： $\langle\varphi_\mu|\varphi_\nu\rangle = \delta_{\mu\nu}$ ，今設一線性變換 \mathcal{L} ，將波函數 ϕ 轉為 φ ，將漢米爾頓量矩陣 H 轉為對角化矩陣 \tilde{H} （假設對角化已完成。在此我們只想找出該疊加效應下的線性變換，無涉數學的嚴格證明）：

$$\varphi = \mathcal{L}\phi \quad (2.2.6)$$

$$\tilde{H}\varphi = \varepsilon\varphi \quad (2.2.7)$$

其中 ε 為相對應之能量本徵值。

接著，可以預期此線性變換必定與疊加積分 t 脫離不了干係，便在兩組新舊基底的歸一化關係式中取巧。仿效 t ，取 \mathcal{L} 為實對稱矩陣（赫米矩陣！），可知 \mathcal{L} 與 t 互為對易，並滿足 $\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}$ ：

$$\delta_{\mu\nu} = \langle\varphi_\mu|\varphi_\nu\rangle = \langle\phi_\mu|\mathcal{L}^\dagger\mathcal{L}|\phi_\nu\rangle = \langle\phi_\mu|\mathcal{L}\mathcal{L}|\phi_\nu\rangle \quad (2.2.8)$$

改寫成矩陣表示式，其中以 I 為單位矩陣(identity)：

$$I = \mathcal{L}t\mathcal{L} = \mathcal{L}\mathcal{L}t \quad (2.2.9)$$

找出線性變換 $\mathcal{L} = t^{-1}$ 。透過 \mathcal{L} ，可寫下 H_{op} 在新舊基底下的矩陣元變換式：

$$\tilde{H}_{\mu\nu} = \langle\varphi_\mu|H_{op}|\varphi_\nu\rangle = \langle\phi_\mu|\mathcal{L}H_{op}\mathcal{L}|\phi_\nu\rangle = \mathcal{L}H_{\mu\nu}\mathcal{L} \quad (2.2.10)$$

至此，漢米爾頓量矩陣的對角化已大功告成：

$$H \rightarrow \tilde{H} = t^{-1}Ht^{-1} = t^{-1}H = TH \quad (2.2.11)$$

其中 $T = t^{-1}$ ，在矩陣表示式裡為 t 的反矩陣，即為晶格點上高斯波函數的兩兩疊加積分。

由此可發現，基底正交化之前的本徵方程式：

$$TH\phi = \varepsilon\phi \quad (2.2.12)$$

終於我們可以在試驗波函數的基礎上，進行修正後的HFA平均場能量計算。

Hartree-Fock近似下將 E 寫成 \tilde{H} 裡的單體 \tilde{H}_1 與二體 \tilde{H}_2 作用（亦即忽略三體以上的多體交互作用）：

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\mu} \langle\mu|\tilde{H}_1|\mu\rangle + \sum_{\mu\nu} \{\langle\mu\nu|\tilde{H}_2|\mu\nu\rangle + \langle\mu\nu|\tilde{H}_2|\nu\mu\rangle\} \\ &= \sum_{\mu} \langle\mu|TH_1|\mu\rangle + \sum_{\mu\nu} \{\langle\mu\nu|TH_2|\mu\nu\rangle + \langle\mu\nu|TH_2|\nu\mu\rangle\} \\ &= \sum_{\mu\nu} T_{\nu\mu} \langle\mu|H_1|\mu\rangle + \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} \{T_{\kappa\mu} T_{\lambda\nu} \langle\mu\nu|H_2|\kappa\lambda\rangle + T_{\kappa\nu} T_{\lambda\mu} \langle\mu\nu|H_2|\kappa\lambda\rangle\} \end{aligned}$$

(2.2.13)

右手邊的三個項分別為單體作用帶來的動能，Hartree-direct 交互作用能與 Fock-exchange 交互作用能。其中 Fock 項加入總能中是爲了滿足玻色子交換對稱性，而被夾入的二體交互作用 \tilde{H}_2 ，則挪用參考文獻[5]在動量空間上的偶極(含接觸勢)交互作用放入 H_2 ，並與以上所討論的疊加效應修正 T 相乘，而作爲 $\tilde{H}_2 = TH_2$ 。

2.3 晶體諧振的古典理論

得到了晶體相的能量極小值，問題還沒結束。我們無從得知，它是穩定的穩定基態，或者只是某種半穩定的平衡態。除非，我們觀察系統對於微小擾動的反應，才能判斷晶格究竟屬於何種平衡狀態。我們先談論兩項晶格諧振的假設，而它們既是假設，也是微小擾動的必要條件。首先，粒子間的交互作用，只作用在粒子的瞬間位置座標上，忽略延遲效應(retardation effect)。此即爲瞬時粒子交互作用(instantly interparticle interaction)近似。再者，因爲晶格振盪時，距平衡點的位移充分小，則作爲位移函數的位能 U ，將可對平衡點 \vec{R} 作泰勒展開：

$$U(\vec{R} + \vec{u}) = U(\vec{R}) + \vec{u} \cdot \nabla U(\vec{R}) + \frac{1}{2} (\vec{u} \cdot \nabla)^2 U(\vec{R}) + \frac{1}{3!} (\vec{u} \cdot \nabla)^3 U(\vec{R}) + \dots \quad (2.3.1)$$

其中 \vec{u} 爲位移量。在諧和近似(the harmonic approximation)之下，可取至二階項，即能量對位移的變化爲二階。此外，在多體問題裡，一般將平衡點取爲各位置座標原點，使泰勒展開改爲麥克勞林展開。

由於恢復力在各個平衡點上都是零，故一次線性項爲零。如此一來，導致僅存的二階項，扮演了古典虎克定律(Hooke's law)中的力常數角色。鑒於此，從力的觀點出發，古典理論中描述晶格振盪的 $3N$ 條古典運動方程式(N 是粒子總數)爲：

$$M \ddot{u}_\mu(\vec{R}) = - \frac{\partial U}{\partial u_\mu(\vec{R})} = - \sum_{\vec{R}' \nu} D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') u_\nu(\vec{R}') \quad (2.3.2)$$

其中 M 爲粒子質量，並將二階微分項寫成如下形式：

$$D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_\mu(\vec{R}) \partial u_\nu(\vec{R}')} \right|_{\vec{u}=0} \quad (2.3.3)$$

其中 μ 表示自由度。發現若對各晶格點求和，將得出零。此乃肇因於固體晶格的平移不變性(translational invariance)。

由於古典理論以簡正模(normal mode)描述小振幅的振盪(量子理論則進一步以各簡正模中的線性諧振子表示之。兩者的相似，正是古典理論何以適用的原因)，故可將波動解帶入運動方程。而這也顯示出晶格振動波屬於一種集體激發(collective excitation)的本質。

將此解取為 $\vec{u}(\vec{R}, t) = \vec{\epsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)}$ ， $\vec{\epsilon}$ 表示偏振方向，帶回運動方程式。在週期性邊界條件下，可轉換為囿限於倒晶格動量空間中第一布里淵區(first Brillouin zone)的久期方程(secular equation)：

$$M\omega^2 \vec{\epsilon} = \Phi(\vec{k}) \vec{\epsilon} \quad (2.3.4)$$

其中，我們便將二階微分項的傅立葉級數，定義為動態矩陣(Dynamical matrix)：

$$\Phi(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (2.3.5)$$

因此，透過振動運動方程式的解的代入，我們可將一個 $3N$ (我們則是 $2N$)自由度的問題，轉換成 $3N$ 個單一自由度的問題。從此將各自由度的振動問題，視作 $3N$ 個獨立的諧振子，力常數 $M\omega^2$ 就是動態矩陣在動量空間上的本徵值。關於晶格彈性振動問題，對於原子的集體行為，在量子力學上可將這 N 個諧振子量子化為一種準粒子：聲子(phonon)。這便使得漢米爾頓量可簡寫為：

$$\hat{H} = \sum_l \frac{\hat{p}_l^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ll'} \hat{y}_l D_{ll'} \hat{y}_{l'} \quad (2.3.6)$$

\hat{y}_l 為各粒子座標， $D_{ll'}$ 定義請參見(2.3.3)。若取倒晶格向量 \vec{G} ，我們發現 $\Phi(\vec{k}) = \Phi(\vec{k} + \vec{G})$ ，動態矩陣的週期性指向一個事實：晶格彈性波(聲子)也是運行於週期性位勢的波(粒子)。當然聲子並不具有能帶結構(band structure)，因為聲子的自由度侷限在第一布里淵區(FBZ)。

2.4 偶極晶格的聲子激發態

數值計算找出晶體相的能量極小值之後，我們便由此極值出發，探討偶極晶體的聲子激發態。我們所處理的準二維偶極晶格，每一個波向量 \vec{k} 具有2個正交本徵向量，而晶格點上是沒有內在基元(basis)的，故能預期聲子激發態將呈現兩條聲頻聲子支(acoustic branch)：一為縱向模式(longitudinal mode)，另一者為橫向模式(transverse mode)；表現為固體裡的聲音(sound)。此外，每一聲子支有 N 個模式， $2N$ 個自由度與系統相空間一致。

最後，透過動態矩陣，我們檢驗此時的切變模數(shear modulus)， C_{66} ，是否為正值。因為準二維偶極晶體相成為穩定基態的必要條件，即是切變模數不可小於或等於零。至此我們便可充分了解，高粒子密度下的偶極玻愛凝體，除了一般的超流相以外，是否具有進入晶體相的可能性。

2.5 數值方法：Fock 位能在短波長極限下的行為

經由參考文獻[5]的準二維偶極作用(含接觸勢)等效勢 \hat{v}_{tot}^{2D} ，即 $v(\vec{q})$ 的無窮遠處極限性質，針對(3.1.17)棘手的 Fock 位能裡的無窮積分部分：

$$\int_0^{\infty} dq q v(\vec{q}) e^{[-\frac{q^2}{4\alpha}]} J_0\left(\frac{q}{2}|\vec{R}_j - \vec{R}_m|\right) \quad (2.5.1)$$

本文發展了一個極限項的數值分析方法，使數值計算準確性提高。

由於接觸勢與偶極作用強度相等時($g_{3D} = g_d$)，準二維等效勢的傅立葉變換可趨於零(請參見圖2-2)，基於等效勢中與動量無關的項： $g_d/d_z \chi$ 有HFA位能解析解的理由，我們便取出與動量有關的項在無窮遠處極限值，發現這個一階項(first-order term)如預期的也存在解析解！擷取這兩個可解析的項之後，只剩下等效勢在無窮遠處展開的高階項(H.O.T, high-order term)被保留在數值積分中。透過這道程序，我們降低了數值計算帶來的誤差，使得數值無窮積分更加準確。

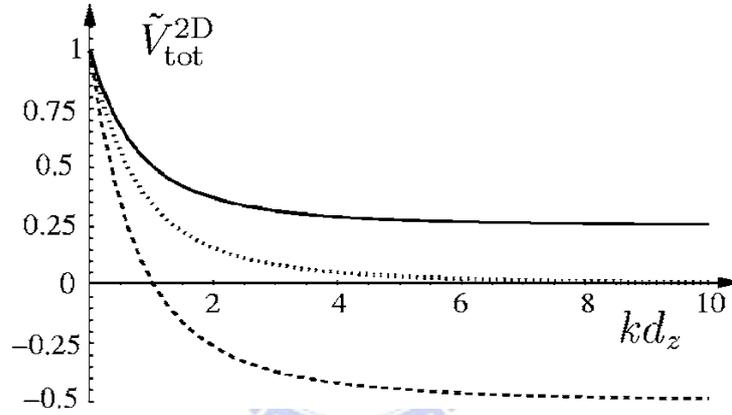


圖2-2、準二維等效偶極(含接觸勢)交互作用位能的傅立葉分析，以 $g_d/d_z \chi$ (與動量無關的項，即接觸勢大小)作為能量單位。實線(solid line)代表 $g_{3D} = 2g_d$ (即 $\chi = \sqrt{\pi}/2\sqrt{2}$)的情形，點線(dotted line)代表 $g_{3D} = g_d$ (即 $\chi = 2\sqrt{\pi}/3\sqrt{2}$)的情形，描線(dashed line)代表 $g_{3D}/g_d \rightarrow 0$ (即 $\chi = \sqrt{\pi}/2$)由偶極作用支配的情形。本文屬於實線所描述之系統。

針對(2.1.7)的準二維等效勢，首先針對與動量 q 無關的的接觸勢部分作解析處理：

$$V_c = \frac{g_d}{d_z \chi} \quad (2.5.2)$$

$$\int_0^{\infty} dq q V_c e^{[-\frac{q^2}{4\alpha}]} J_0\left(\frac{q}{2}|\vec{R}_j - \vec{R}_m|\right) = \frac{g_d}{d_z \chi} 2\alpha e^{[-\frac{\alpha}{4}|\vec{R}_j - \vec{R}_m|^2]} \quad (2.5.3)$$

再將與動量有關的散射位勢：

$$V_s = -\frac{3 g_d}{2 \ell} q e^{\left(\frac{q^2}{2}\right)\left(\frac{d_z}{\ell}\right)^2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{q}{\sqrt{2}}\left(\frac{d_z}{\ell}\right)\right) \quad (2.5.4)$$

提出無窮遠處極限值，列入一階項：

$$V_sFO = -\frac{3 g_d}{\sqrt{2\pi}d_z} \quad (2.5.5)$$

剩餘部份即為高階項(H.O.T)：

$$V_sHO = V_s - V_sFO = \frac{3 g_d}{\sqrt{2\pi}d_z} - \frac{3 g_d}{2 \ell} q e^{\left(\frac{q^2}{2}\right)\left(\frac{d_z}{\ell}\right)^2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{q}{\sqrt{2}}\left(\frac{d_z}{\ell}\right)\right) \quad (2.5.6)$$

將一階項放入無窮積分，也能得到解析解：

$$\int_0^{\infty} dq q V_sFO e^{[-\frac{q^2}{4\alpha}] } J_0\left(\frac{q}{2}|R_j - R_m|\right) = -\frac{3 g_d}{\sqrt{2\pi}d_z} 2\alpha e^{[\frac{-\alpha}{4}|R_j - R_m|^2]} \quad (2.5.7)$$

最終只剩高階項的位能留在數值積分中，精準度遠比準二維勢直接積分要來得大為提高。接著，我們令 $\mu = \frac{q}{\sqrt{2}}\left(\frac{d_z}{\ell}\right)$ 作變數變換可以明顯發現：

$$V_sHO = -\frac{3 g_d}{\sqrt{2\pi}d_z} (\sqrt{\pi} \exp(\mu^2) \operatorname{Erfc}(\mu) - 1) \quad (2.5.8)$$

當 μ 趨近於無窮遠處，高階項的極限值為零，換句話說，當 $q \rightarrow \infty$ 時，等效為排斥或吸引位勢將取決於 V_c 與 V_sFO 間的競爭。(2.5.8) 並指出高階項與一階項的比例關係：

$$r = \frac{V_sHO}{V_sFO} = \sqrt{\pi} \exp(\mu^2) \operatorname{Erfc}(\mu) - 1 \quad (2.5.9)$$

事實上，高階項隨 μ 增加而遞減的幅度甚劇。以 $\mu = 5$ 為例，比例 r 約為 -0.0189，當 $\mu = 10$ 時更只剩不到 -0.005，而這也是兩項解析解： V_c 、 V_sFO 的積分值，何以佔據了大部分(90%以上)Fock位能的原因。

此外，在我們取用的參數 $g_{3D} = 2g_d$ 裡，使得 $\chi = \sqrt{\pi}/2\sqrt{2}$ ，導致 V_c 與 V_sFO 的比例關係為：

$$V_c = \frac{g_d}{d_z \chi} = \frac{g_d^4}{d_z \sqrt{2\pi}} = -\frac{4}{3} V_sFO \quad (2.5.10)$$

故當 $q \rightarrow \infty$ 時，等效位勢為排斥或吸引勢的結果便明朗了：

$$V_c + V_sFO = -\frac{1}{3} V_sFO > 0 \quad (2.5.11)$$

除了符合準二維雙偶極交互作用的互斥事實，也能簡化兩解析解的計算程序。

第三章 計算與結果分析

3.1 晶體相穩定基態能量

我們首先參照參考文獻[1]的計算方法，謀求三角晶格的穩定基態能量計算公式，再透過數值計算尋找可能的能量極小值。

由參考文獻[6]可知，三角晶格為晶體相最穩定的排列方式：

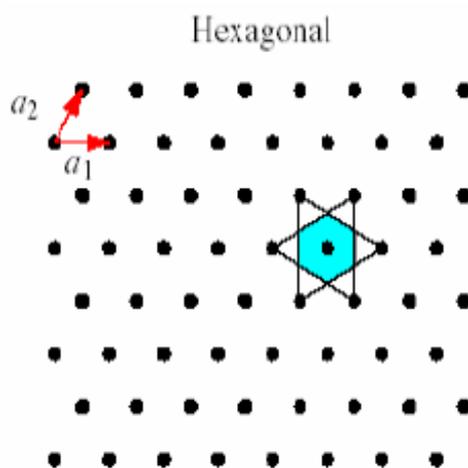


圖 3-1、晶體相的穩定排列方式。

我們所使用的晶格向量 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 與倒晶格向量 \vec{b}_1 、 \vec{b}_2 ，符合表 3-1 的六角晶格 (Hexagonal)。

Bravais lattice	\vec{a}_1	\vec{a}_2	\vec{b}_1	\vec{b}_2	a
Oblique	$(a, 0)$	(c, b)	$2\pi\left(\frac{1}{a}, -\frac{c}{ab}\right)$	$2\pi\left(0, \frac{1}{b}\right)$	a
Primitive rectangular	$(a, 0)$	$(0, b)$	$2\pi\left(\frac{1}{a}, 0\right)$	$2\pi\left(0, \frac{1}{b}\right)$	a
Centered rectangular	$(a, 0)$	$\left(\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}b\right)$	$2\pi\left(\frac{1}{a}, -\frac{1}{b}\right)$	$2\pi\left(0, \frac{2}{b}\right)$	$\frac{1}{2}$
Square	$(a_0, 0)$	$(0, a_0)$	$\frac{2\pi}{a_0}(1, 0)$	$\frac{2\pi}{a_0}(0, 1)$	a_0
Hexagonal	$a_0(1, 0)$	$a_0\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{a_0}\left(1, -\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$	$\frac{2\pi}{a_0}\left(0, \frac{2\sqrt{3}}{3}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$

表 3-1、二維晶體的五種 Bravais 晶格。以 Hexagonal 亦即三角晶格的能量最穩定。

由參考文獻[1]可得知粒子密度 n 與晶格長度 a_L (即表 3-1 的 a_0)的關係：

$$n = \frac{1}{\frac{\sqrt{3}}{2} a_L^2} \quad (3.1.1)$$

由表 3-1 可知 $a_0 b_0 = 4\pi/\sqrt{3} = 2\pi/\cos 30^\circ$ ，其中 b_0 為倒晶格空間上最鄰近晶格點的距離長度，符合倒晶格與晶格空間相互旋轉 30° 。在此，我們將試驗波函數取為晶格點 \vec{R}_i 上的高斯波函數：

$$\phi_{\vec{R}_i}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{R}_i \rangle = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} e^{-\alpha(\vec{r}-\vec{R}_i)^2} \quad (3.1.2)$$

其中 α 為變分參數(variational parameter)。可檢驗此非正交基底符合無窮遠處歸一條件：

$$\langle \phi_{\vec{R}_i} | \phi_{\vec{R}_j} \rangle = \langle \vec{R}_i | \vec{R}_j \rangle = e^{-\frac{\alpha}{2}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)^2} \quad (3.1.3)$$

根據晶格的平移不變性(Translational invariance)(參考文獻[1])，我們只需要計入各晶格點對原點的疊加效應，乘上總粒子數 N 即為系統總能：

$$\begin{aligned} E = \langle H \rangle &= \sum_{ij} T_{ji} \left\langle \vec{R}_i \left| \frac{P^2}{2M} \right| \vec{R}_j \right\rangle \\ &+ \frac{1}{2L^2} \sum_{\vec{q}} \sum_{ijlm} v(\vec{q}) (T_{ji} T_{ml} + T_{jl} T_{mi}) \langle \vec{R}_i, \vec{R}_l | e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} | \vec{R}_j, \vec{R}_m \rangle \\ &= N \sum_j T_{j0} \left\langle 0 \left| \frac{P^2}{2M} \right| j \right\rangle \\ &+ \frac{N}{2L^2} \sum_{jlm} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) T_{j0} T_{m0} \langle 0, l | e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} | j, m+l \rangle \\ &+ \frac{N}{2L^2} \sum_{jlm} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) T_{j0} T_{m0} \langle 0, l | e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} | j+l, m \rangle \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

其中，承自(2.1.7)的 $v(\vec{q})$ 與(2.2.12)的矩陣元 T_{j0} 。

針對單體或二體漢米爾頓量的區別，我們將單體動能項與二體位能項分開：

$$\frac{E}{N} = \frac{K}{N} + \frac{V}{N} \quad (3.1.5)$$

其中動能項部分為：

$$\frac{K}{N} = \sum_j T_{j0} \left\langle 0 \left| \frac{P^2}{2M} \right| j \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_j T_{j0} \frac{\hbar^2}{2M} (2\alpha - \alpha^2 R_j^2) e^{-\frac{\alpha}{2} R_j^2} \\
&= \frac{\hbar^2}{M} \sum_j T_{j0} \alpha \left(1 - \frac{\alpha}{2} R_j^2\right) e^{-\frac{\alpha}{2} R_j^2}
\end{aligned} \tag{3.1.6}$$

其中，尚未參入疊加積分效應的動能運算子，在單粒子態的內積為：

$$\left\langle \bar{R}_i \left| \frac{p^2}{2M} \right| \bar{R}_j \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2M} \left[2\alpha - \alpha^2 (\bar{R}_i - \bar{R}_j)^2 \right] e^{-\frac{\alpha}{2} (\bar{R}_i - \bar{R}_j)^2} \tag{3.1.7}$$

接著，計算 HFA 位能的部分：

$$\begin{aligned}
\frac{V}{N} &= \frac{1}{2L^2} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) \sum_{jlm} T_{j0} T_{m0} \langle 00 | e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2 - \bar{R}_l)} | j, m \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2L^2} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) \sum_{jlm} T_{j0} T_{m0} \langle 0l | e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} | j + l, m \rangle
\end{aligned} \tag{3.1.8}$$

由於試驗波函數處在實空間，準二維等效勢則在倒晶格空間，我們首先處理傅立葉變換帶來實空間上的內積：

$$\langle \bar{R}_i | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \bar{R}_j \rangle = e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (\bar{R}_i - \bar{R}_j)^2 - \frac{q^2}{8\alpha} + \frac{i}{2} \vec{q} \cdot (\bar{R}_i + \bar{R}_j) \right]} \tag{3.1.9}$$

已知，對所有晶格點向量 \bar{R}_i 均滿足 $e^{i\vec{G} \cdot \bar{R}_i} = 1$ 的集合 G ，可形成倒晶格(reciprocal lattice) 向量；而晶格向量與倒晶格向量具有關係式如下：

$$\sum_{\bar{R}_i} e^{i\vec{q} \cdot \bar{R}_i} = N \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{q}\vec{G}} = \begin{cases} 0, & \text{若 } \vec{q} \neq \vec{G} \\ N, & \text{若 } \vec{q} = \vec{G} \end{cases} \tag{3.1.10}$$

將(3.1.9)與(3.1.10)套入 HFA 位能計算：

$$\begin{aligned}
\frac{V}{N} &= \frac{n}{2} \sum_{\vec{G}} v(\vec{G}) \sum_{jlm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (R_j^2 + R_m^2) - \frac{G^2}{4\alpha} + \frac{i}{2} \vec{G} \cdot (\bar{R}_j - \bar{R}_m) \right]} \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \frac{v(\vec{q})}{L^2} \sum_{jlm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (\bar{R}_j + \bar{R}_l)^2 - \frac{\alpha}{2} (\bar{R}_m - \bar{R}_l)^2 - \frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2} \vec{q} \cdot (\bar{R}_j - \bar{R}_m) \right]}
\end{aligned} \tag{3.1.11}$$

由於參考文獻[6]愛華德公式(Ewald's generalized theta function transformation)說明了離散實空間與離散動量空間的連結：

$$\sum_l e^{-t(\vec{r} - \bar{R}_l)^2 + i\vec{q} \cdot \bar{R}_l} = \frac{\pi}{a_c t} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{G} + \vec{q}) \cdot \vec{r} - \frac{(\vec{G} + \vec{q})^2}{4t}} \tag{3.1.12}$$

a_c 代表單元晶胞(primitive cell)面積，等於 $\frac{\sqrt{3}}{2} a_L^2$ 。在我們的位能計算裡，則適用於 $\vec{q} = 0$ 的情形：

$$\sum_l e^{-t(\vec{r}-\vec{R}_l)^2} = \frac{\pi}{a_c t} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{G})\cdot\vec{r} - \frac{(\vec{G})^2}{4t}} \quad (3.1.13)$$

將各個變數帶入後可得：

$$\sum_l e^{-\alpha\left(\frac{\vec{R}_m-\vec{R}_j}{2}-\vec{R}_l\right)^2} = \frac{n\pi}{\alpha} \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{G})\cdot\left(\frac{\vec{R}_m-\vec{R}_j}{2}\right) - \frac{(\vec{G})^2}{4\alpha}} \quad (3.1.14)$$

接著，可將 Fock 位能改寫成：

$$\begin{aligned} V_F &= \frac{n\pi}{2\alpha} \sum_{\vec{q}} \frac{v(\vec{q})}{L^2} \sum_{jm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{4}(\vec{R}_j+\vec{R}_m)^2 - \frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{q}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \sum_{\vec{G}} e^{\left[-\frac{G^2}{4\alpha} - \frac{i}{2}\vec{G}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \\ &= \frac{n\pi}{2\alpha} \sum_{\vec{G}} \sum_{jm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{4}(\vec{R}_j+\vec{R}_m)^2 - \frac{G^2}{4\alpha} - \frac{i}{2}\vec{G}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{q} v(\vec{q}) e^{\left[-\frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{q}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

由於零階貝索函數(Bessel function) $J_0\left(\frac{q}{2}|\vec{R}_j-\vec{R}_m|\right)$ 具有如下關係：

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{ix \sin \theta} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{ix \cos \theta} \quad (3.1.16)$$

終於我們得出 Hartree 項加上 Fock 項的總位能：

$$\begin{aligned} \frac{V}{N} &= \frac{n}{2} \sum_{\vec{G}} v(\vec{G}) \sum_{jm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2}(R_j^2+R_m^2) - \frac{G^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{G}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \\ &\quad + \frac{n}{4\alpha} \sum_{\vec{G}} \sum_{jm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{4}(\vec{R}_j+\vec{R}_m)^2 - \frac{G^2}{4\alpha} - \frac{i}{2}\vec{G}\cdot(\vec{R}_j-\vec{R}_m)\right]} \int_0^\infty dq q v(\vec{q}) e^{\left[-\frac{q^2}{4\alpha}\right]} J_0\left(\frac{q}{2}|\vec{R}_j-\vec{R}_m|\right) \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

至此，便已進入數值計算的工作。我們選取 61 個晶格點進行數值模擬，分別計算動能、位能，加總而得出穩定基態總能量。請見圖 3-3 至圖 3-10，與表 3-2。

3.2 激發態：聲子頻譜

假如找到了晶體相的能量極小值，我們便以此能量極值與其相對應的變分參數 α ，試探此時系統對於微擾的反應，看看這個晶體相是否確為系統的穩定基態。晶體總位能 $\langle V \rangle$ ，取決於兩兩晶格點之間相對位能之總和。利用晶體的平移對稱性，可再進一步改寫，變成各晶格點 \vec{R} 與原點的相對位能，乘上晶格點總數 N ：

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} \sum_{li} V(\vec{R}_l - \vec{R}_i) = \frac{N}{2} \sum_{\vec{R} \neq 0} V(\vec{R}) \quad (3.2.1)$$

其中 N 是晶格點總數，亦為晶體中原始晶格晶胞(primitive unit cells)的總數。

但因聲子自由度受限於第一布里淵區(簡寫為 FBZ)內，故加總 $\vec{q} = \vec{G}$ 會變成對於 FBZ 內的 \vec{q} 作加總。因此各晶格點 \vec{R} ，相對於原點的位能 $V(\vec{R})$ 為：

$$\begin{aligned} V(\vec{R}) &= \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{q}} \sum_{jm} v(\vec{q}) T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2}(R_j^2 + R_m^2) - \frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m)\right]} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{q} v(\vec{q}) \sum_{jm} T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2}(R_j^2 + R_m^2) - \frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m)\right]} e^{(-\alpha R^2 - \alpha(\vec{R}_j - \vec{R}_m) \cdot \vec{R})} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

其中，承自(2.1.7)的 $v(\vec{q})$ 與(2.2.12)的矩陣元 T_{j0} 。令：

$$\tau(j, m, \vec{q}) = T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2}(R_j^2 + R_m^2) - \frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2}\vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m)\right]} \quad (3.2.3)$$

則：

$$\tau(\vec{q}) = \sum_{jm} \tau(j, m, \vec{q}) \quad (3.2.4)$$

故可將位能改寫為：

$$\begin{aligned} V(\vec{R}) &= \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) \tau(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{jm} \int d\vec{q} v(\vec{q}) \tau(j, m, \vec{q}) e^{[-\alpha R^2 - \alpha(\vec{R}_j - \vec{R}_m) \cdot \vec{R}]} \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

對位能作一階、二階微分，以期寫下動態矩陣：

$$\begin{aligned} \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial R^\alpha} &= \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) \tau(\vec{q}) (-iq^\alpha) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{jm} \int d\vec{q} v(\vec{q}) \tau(j, m, \vec{q}) (-2\alpha R^\alpha - \alpha R_j^\alpha + \alpha R_m^\alpha) e^{[-\alpha R^2 - \alpha(\vec{R}_j - \vec{R}_m) \cdot \vec{R}]} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V(\vec{R})}{\partial R^\alpha \partial R^\beta} &= \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) \tau(\vec{q}) (-q^\alpha q^\beta) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \\ &- \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{jm} \int d\vec{q} v(\vec{q}) \tau(j, m, \vec{q}) e^{[-\alpha R^2 - \alpha(\vec{R}_j + \vec{R}_m) \cdot \vec{R}]} \\ &\quad \times \left[2\alpha \delta_{\alpha\beta} - (2\alpha \vec{R} + \alpha \vec{R}_j - \alpha \vec{R}_m)^\alpha (2\alpha \vec{R} + \alpha \vec{R}_j - \alpha \vec{R}_m)^\beta \right] \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

可得傅立葉變換下的動態矩陣：

$$\begin{aligned}
& \Phi^{\alpha\beta}(\vec{k}) \\
&= \sum_{\vec{R}} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{R}) \frac{\partial^2 V}{\partial R^\alpha \partial R^\beta} \\
&= n \sum_{\vec{G}} \left[v(\vec{k} + \vec{G}) \tau(\vec{k} + \vec{G}) (\vec{k} + \vec{G})^\alpha (\vec{k} + \vec{G})^\beta \right] \\
&\quad - \frac{n}{4\pi\alpha} \sum_{jm} \sum_{\vec{G}} \int d\vec{q} v(\vec{q}) \tau(j, m, \vec{q}) \\
&\quad \times e^{\left[-\frac{(\vec{k} + \vec{G})^2}{4\alpha} + \frac{\alpha}{4} (\vec{R}_j - \vec{R}_m)^2 - \frac{i}{2} (\vec{k} + \vec{G}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m) \right]} (\vec{k} + \vec{G})^\alpha (\vec{k} + \vec{G})^\beta
\end{aligned} \tag{3.2.8}$$

上標 α, β 代表二維系統自由度，其中

$$\begin{aligned}
\int d\vec{q} v(\vec{q}) \tau(j, m, \vec{q}) &= T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (R_j^2 + R_m^2) \right]} \int d\vec{q} v(\vec{q}) e^{\left[-\frac{q^2}{4\alpha} + \frac{i}{2} \vec{q} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m) \right]} \\
&= T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (R_j^2 + R_m^2) \right]} (2\pi) \int_0^\infty dq q v(q) e^{\left[-\frac{q^2}{4\alpha} \right]} \mathcal{J}_0 \left(\frac{q}{2} |\vec{R}_j - \vec{R}_m| \right) \\
&= 2\pi T_{j0} T_{m0} e^{\left[-\frac{\alpha}{2} (R_j^2 + R_m^2) \right]} U(j, m)
\end{aligned} \tag{3.2.9}$$

並且令無窮積分爲：

$$U(j, m) = \int_0^\infty dq q v(q) e^{\left[-\frac{q^2}{4\alpha} \right]} \mathcal{J}_0 \left(\frac{q}{2} |\vec{R}_j - \vec{R}_m| \right) \tag{3.2.10}$$

至此，動態矩陣可改寫爲：

$$\begin{aligned}
& \Phi^{\alpha\beta}(\vec{k}) \\
&= n \sum_{\vec{G}} \left[v(\vec{k} + \vec{G}) \tau(\vec{k} + \vec{G}) (\vec{k} + \vec{G})^\alpha (\vec{k} + \vec{G})^\beta \right] \\
&\quad + \frac{n}{2\alpha} \sum_{jm} \sum_{\vec{G}} T_{j0} T_{m0} U(j, m) e^{-\frac{\alpha}{4} (\vec{R}_j + \vec{R}_m)^2} e^{\left[-\frac{(\vec{k} + \vec{G})^2}{4\alpha} - \frac{i}{2} (\vec{k} + \vec{G}) \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_m) \right]} (\vec{k} + \vec{G})^\alpha (\vec{k} + \vec{G})^\beta
\end{aligned} \tag{3.2.11}$$

套入動態矩陣的本徵方程式(2.3.4)，以求得聲子頻譜：

$$\begin{vmatrix} \frac{\Phi^{11}}{M} - \omega^2 & \frac{\Phi^{12}}{M} \\ \frac{\Phi^{21}}{M} & \frac{\Phi^{22}}{M} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{3.2.12}$$

本徵值即爲我們所預期的兩條聲頻聲子支：

$$2M\omega^2 = (\Phi^{11} + \Phi^{22}) \pm \sqrt{(\Phi^{11} - \Phi^{22})^2 + 4\Phi^{12}\Phi^{21}} \quad (3.2.13)$$

參照參考文獻[6]，沿著圖 3-2 的特殊方向： Γ 、J、X、 Γ ，畫出聲子頻譜。

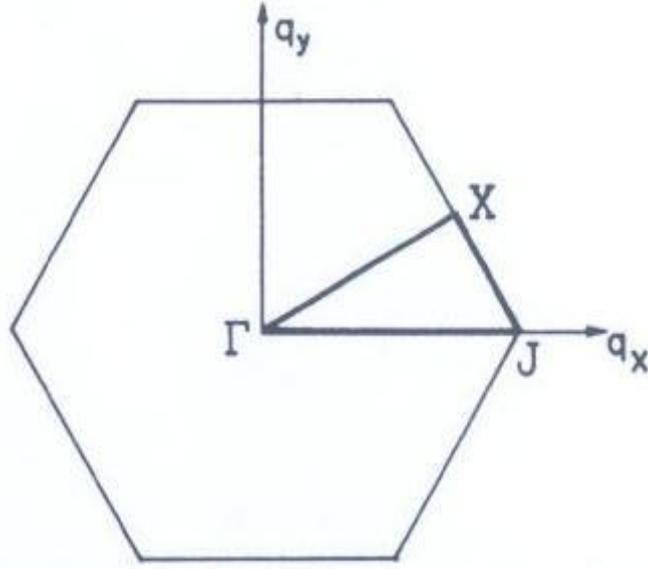


圖 3-2、二維 hexagonal 晶格的第一布里淵區(first Brillouin zone)，座標軸 q_x 、 q_y 即我們的 k_x 、 k_y 。粗黑線的三角形區域為第一布里淵區的不可化約單元(irreducible element)。

另外，我們利用二維晶體僅存的兩個獨立的彈性係數，來檢查晶體相的穩定性：

$$\begin{aligned} \Phi^{\alpha\beta}(\vec{k}) &= C_{11} k^\alpha k^\beta - C_{66} k^\alpha k^\beta + C_{66} k^2 \delta_{\alpha\beta} \\ &= (C_{11} - C_{66}) k^\alpha k^\beta + C_{66} k^2 \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

壓縮模數(compression modulus)：

$$C_{11} = \frac{1}{2} \frac{d^2 \Phi^{xx}(k_x)}{dk_x^2} \Big|_{(k_y=0)} \quad (3.2.15)$$

切變模數(shear modulus)：

$$C_{66} = \frac{1}{2} \frac{d^2 \Phi^{xx}(k_y)}{dk_y^2} \Big|_{(k_x=0)} \quad (3.2.16)$$

數值計算之結果請參照圖 3-11 至圖 3-14，與表 3-3。

3.3 數值結果分析

在設定環境參數 $g_d=1$ 、 $g_{3D}=2$ 的情況下，取 61 個晶格點(sites)，分別在 $r_s=30, 40$ 、 $d_z/\ell=0.2, 0.6$ 的情形下得出四組相關資料：能量極值、聲子激發譜、壓縮係數與切變係數。請見表 3-2 與表 3-3。此外，尚有實際的 ^{52}Cr 實例： ε_{dd} 約為 0.16。請見圖 3-15。

首先，就我們可成功得出能量極小值的事實，檢驗這個平衡態是否合於物理條件。由於量子相屬於物質波動性發生疊加的結果，鑒於此，我們有一個簡單的判準：the Lindemann criterion of melting，可估計晶體是否發生量子融化。局域波函數寬度一旦達到粒子平均距離的尺度，晶體相很可能開始變得不穩定。在我們所使用的參數裡，對應的判別方式可寫成： $1/\sqrt{\alpha} \geq a$ 。由於我們使得調變參數 $r_s = 1/a$ ，導致二維粒子密度 $n = 1/a^2 = r_s^2$ ，也改寫了判別方式： $n \geq \alpha$ 。在我們選用的 $d_z/\ell = 0.2, 0.6$ 範圍內， $r_s = 30, 40$ 的情況下，晶體相發生能量極小值的變分參數 α ，數量級都在 $10^2 \sim 10^3$ ，由此可知，至少在這個簡單判別式下，還稱得上吻合。

	α_{min}	穩定基態能量	位能	動能	Hartree	Fock
rs=30, $d_z/\ell=0.2$	425	7240.6	4531.5	2709.1	3590.6	940.88
rs=30, $d_z/\ell=0.6$	456	4248.9	1524.2	2724.7	1196.9	327.24
rs=40, $d_z/\ell=0.2$	996	12994.2	8067.1	4927.2	6385.6	1681.40
rs=40, $d_z/\ell=0.6$	793	7544.3	2709.1	4835.2	2127.8	581.24

表 3-2、四個組合裡： $r_s=30, 40$ 、 $d_z/\ell=0.2, 0.6$ ，個別的 α_{min} 之下所對應的穩定基態能量、位能、動能、Hartree 位能與 Fock 位能。 α_{min} 表示在不同的 $r_s, d_z/\ell$ 組合之下，發生能量極值的 α 值(variational parameter)。

	LA (J)	TA (J)	LA (X)	TA (X)	聲頻範圍	C_{11}	C_{66}
rs=30, $d_z/\ell=0.2$	57056	57056	52696	4108.9	60000	9277.53	84.25
rs=30, $d_z/\ell=0.6$	26844	26844	25523	2436.1	30000	3168.12	47.56
rs=40, $d_z/\ell=0.2$	46898	46898	48122	7688.1	50000	18287.12	865.24
rs=40, $d_z/\ell=0.6$	50839	50839	47900	4275.8	60000	5597.28	71.10

表 3-3、四個組合裡： $r_s=30, 40$ 、 $d_z/\ell=0.2, 0.6$ ，LA 與 TA 分別在 J 點與 X 點的聲子頻率、聲子頻譜範圍、壓縮模數 C_{11} 與切變模數 C_{66} 。J、X 點定義請見圖 3-2。

綜合分析(請參照附圖的部分)：

- (1) 相同 d_z/ℓ 之下，其密度愈高者，產生能量極值的 α_{min} 也愈大；顯示當粒子的平均距離愈短，疊加的波包寬度必須更窄，避免晶體相融化成超流相。
- (2) 相同 r_s 者，動能相仿，僅取決於 α_{min} 值；由於(2.5.2)的 V_c 與(2.5.5)的 V_{sFO} 反比於 d_z/ℓ ，故相同 r_s 者，其 Hartree 位能、Fock 位能與總位能，與 d_z 趨勢上大致上是成反比的。
- (3) $d_z/\ell=0.2$ 者位能大於動能， $d_z/\ell=0.6$ 者位能小於動能。暗示了愈趨於二維的系統(較小的 d_z/ℓ 值)，穩定基態也許具有愈傾向晶體相的可能(位能大過動能)；但由於此時的

位能包括偶極作用與接觸勢，我們可藉由 V_c 的 Hartree 項與 Fock 項相等之事實，以及(2.5.11)，大致地估算偶極作用與接觸勢的比例多寡。

- (4) 聲子頻譜範圍均一致落在 10 的 4 次方數量級。在 $rs=30$, $d_z/\ell=0.6$ 情形下，聲頻略低。總體而言，我們的聲子頻譜與參考文獻[6]的 Fig. 2 在大致的走向上相符(請參照附圖的圖 3-16)，應該具有相當的可靠度。
- (5) 縱向聲子頻率(LA)對應於動態矩陣本徵方程中的 even mode，它在 k 趨近於零處的頻率較高，橫向聲子頻率(TA)則為 odd mode。請參照參考文獻[6]。
- (6) 長波長極限下，參考文獻[6]顯示(請參照附圖的圖 3-16)，波向量 k 趨近於零處，較高頻率的 LA 以 \sqrt{k} 趨於零，較低頻的 TA 則以 k 趨於零。我們的結果無從得出對 k 的精確的幕次比例，但仍呈現了 LA 聲頻下降較 TA 迅速的傾向；合理表現出晶格破壞連續平移對稱性，所帶來的 Goldstone 激發態。
- (7) 由於 J 點的對稱性使得兩聲頻聲子支 LA、TA 於 J 點發生簡併； Φ^{xy} 趨於零，使得動態矩陣的本徵方程出現重根。X 點處則兩支(branches)頻率差距最大，若降為零則意味著 C_{66} 出現負值，晶體以 X 的波向量振盪可能發生崩解。
- (8) 二維的晶體若為穩定基態，切變模數 C_{66} 必定為正值。我們的四組模擬資料也顯示出這個情形。並且 $rs=40$, $d_z/\ell=0.2$ 的 C_{11} 與 C_{66} 數量級大於他者，合理地反應出系統愈趨於二維，粒子密度愈高，將愈容易形成偶極晶格的傾向。請見圖 3-17 至圖 3-19。
- (9) 穩定的二維晶體允許壓縮模數(compression modulus)， C_{11} ，呈現負值。而我們四組資料均顯示正值的 C_{11} ，這是因為我們的試驗波函數在設計時，就沒有考慮高斯波包寬度的振動。(負值 C_{11} 的意義為，晶體相也許不為完美剛體(rigid)；偶極晶格可能也具備類似於密度波(density wave)的激發模式，類比於電中性維格納晶格的電漿子(plasmon)。存在此激發坐實了偶極交互作用作為一種長程力的本質；因為密度波(density wave)乃玻色粒子群在它們共同作為一個整體的情況下，所產生的一種集體激發(collective excitation)。局部波函數寬度的變化給出粒子密度振盪的平均頻率(在電子的維格納晶體中則表現為電漿頻率)，故二維晶體的 C_{11} 未必恆為正值。)

此外，在我們的求解方法裡，接觸勢的Hartree項會等於其Fock項，也符合費米子(我們是玻色系統)沒有s波散射，故不受接觸勢作用的結果，某種程度的檢驗了本文計算方法的正確性。事實上低能散射裡，只限於角動量為奇數的分波($l=1, 3, 5, \dots$)，方可出現在費米系統的散射矩陣中，玻色系統則作偶數角動量的分波散射($l=0, 2, 4, \dots$)。因對稱性的緣故，使得散射振幅只取用奇數或偶數的散射矩陣元，也使得被取用的分波散射截面積(cross-section)相較於全同粒子的情形，竟大了整整一倍。

我們發現，純接觸勢(g_{3D})的BEC雖然無法形成晶體相，一旦引進偶極作用形成偶極晶格後，接觸勢在晶格裡竟扮演關鍵性角色。在 $g_{3D}=0$ 的例子中(保持 $gd=1$)，我們算出複數的聲子頻譜，故短波長極限下為吸引勢的系統(請見圖2-2)，可能仍為超流相。純二維偶極晶格相關研究中，向來將位能的部分僅專注於偶極作用的貢獻；在此，我們發現，準二維的情況下，單單考慮偶極作用而意圖產生晶體相居然是不可行的。沒

有接觸勢(即 $g_{3D}=0$)的納入，甚至考慮了接觸勢卻小於偶極作用時(即 $g_{3D} \leq g_d=1$)，準二維偶極晶格將回到超流相。請見圖3-17。



第四章 結論

當接觸勢大於等於偶極作用，準二維偶極玻愛凝體在高粒子密度情形下將出現晶體相。

本文取長程偶極作用與動能的比例 $r_s=30,40$ (密度 $n=900, 1600$)，厚度 $d_z/\ell=0.2, 0.6$ 時，透過本文所建構的高斯波函數，可經由Hartree-Fock平均場得出能量極值；再由HFA位能的動態矩陣(dynamical matrix)分析聲子激發態，並從切變模數(與壓縮模數)恆為正值的結果看來，晶體相應為高粒子密度下準二維玻愛凝體的穩定基態。我們發現準二維與純二維晶體相不同之處在於，純二維晶體相可忽略接觸勢而僅考慮偶極作用對位能的貢獻，但準二維接觸勢必須大於等於偶極作用(即 $g_{3D} \geq g_d=1$)，否則無法形成準二維偶極晶格。

此外，參考文獻[3]談論的系統，為分子的偶極晶格，涉及分子複雜的內部能階。我們採納參考文獻[3]的晶體相判準，卻凍結這些內部自由度，回歸原子系統。由於分子偶極晶格波函數，可透過原子軌域線性組合(LCAO)，或布洛赫理論(Bloch theorem)來構成，所以本文的計算方法仍有延伸至分子偶極凝體的可能。



參考文獻

- [1] Szu-Cheng Cheng, CHINESE JOURNAL OF PHYSICS VOL. 35, NO. 6-I, 718 (1997).
- [2] P. O. Lowdin, J. Chem. Phys. 18, 365 (1950).
- [3] H. P. Büchler, E. Demler, M. Lukin, A. Micheli, N. Prokof'ev, G. Pupillo, and P. Zoller, Phys. Rev.Lett. **98**, 060404 (2007).
- [4] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, I. L. Kurbakov, and Yu. E. Lozovik, Phys. Rev.Lett. **98**, 060405 (2007).
- [5] U. R. Fischer, Phys. Rev. A **73**, 031602(R) (2006).
- [6] L. Bonsall and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B15, 1959 (1977).



附圖

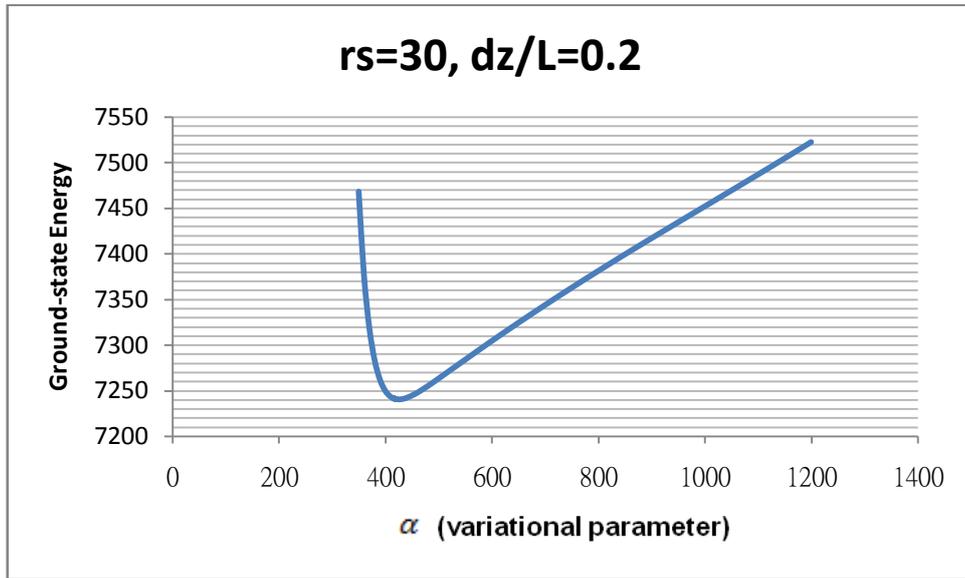


圖 3-3、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的基態能量對 α 關係圖。單位能量為 $\hbar^2/2M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

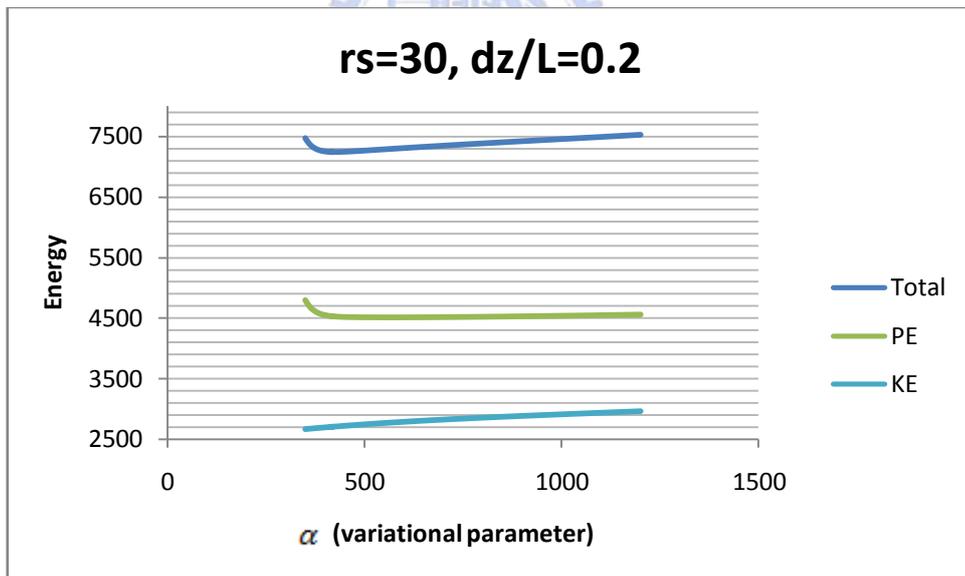


圖 3-4、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的基態能量(Total)、位能(PE)、動能 KE)分別對 α 作圖(對應的曲線為上、中、下)。單位能量為 $\hbar^2/2M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

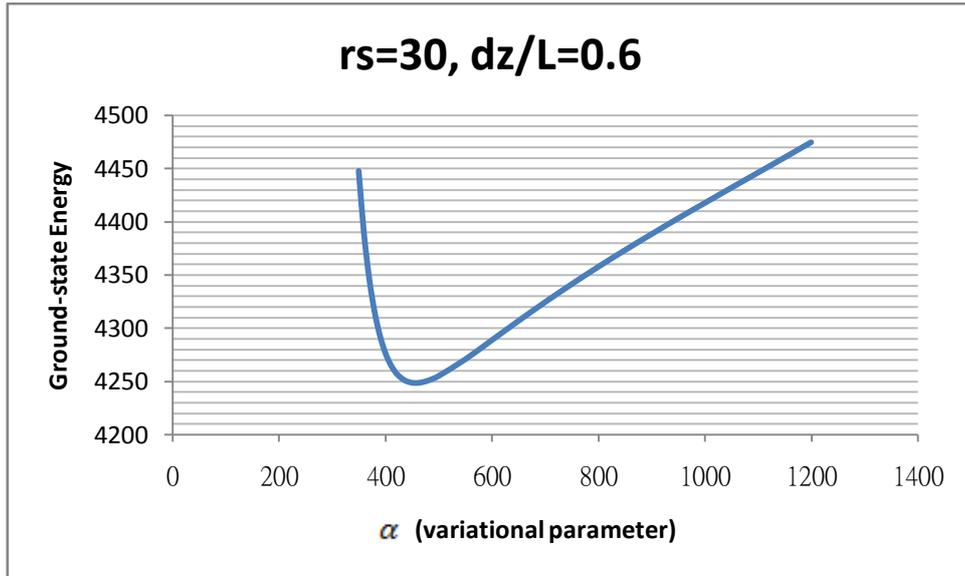


圖 3-5、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的基態能量對 α 關係圖。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

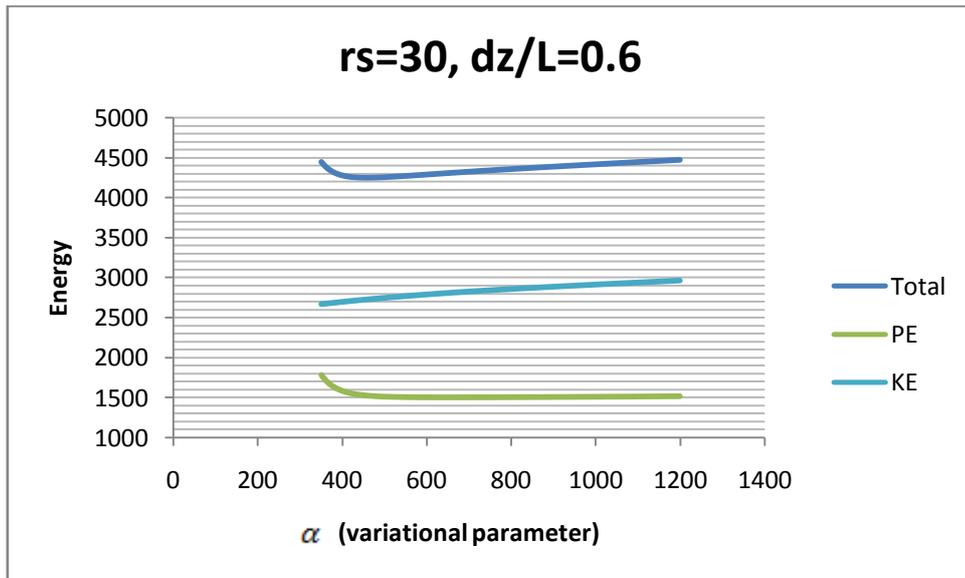


圖 3-6、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的基態能量(Total)、位能(PE)、動能(KE)分別對 α 作圖(對應的曲線為上、下、中)。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

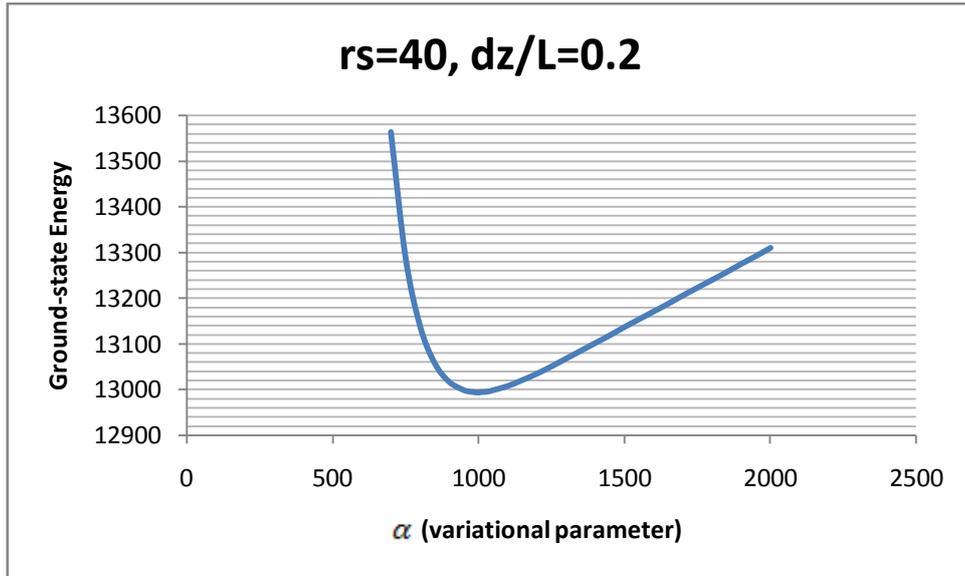


圖 3-7、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的基態能量對 α 關係圖。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

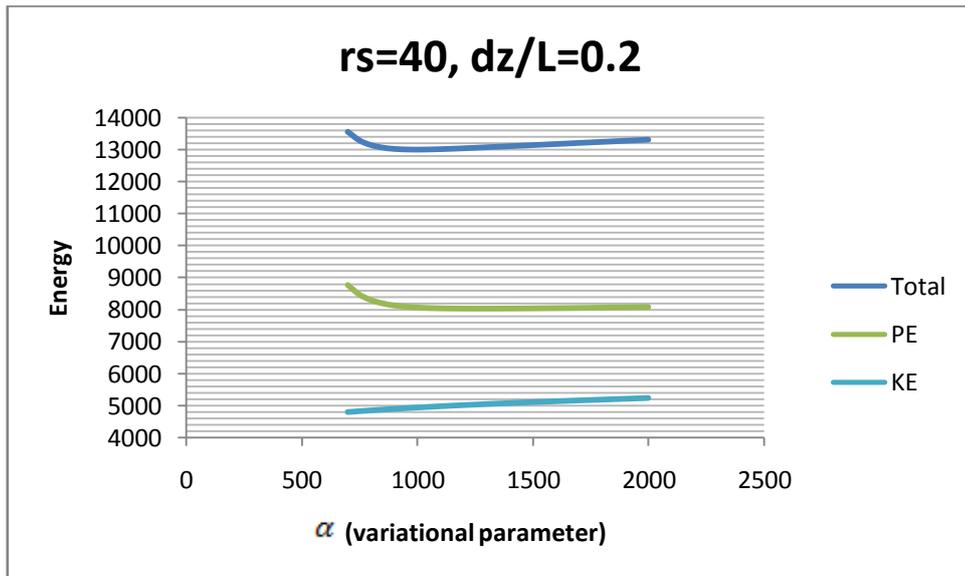


圖 3-8、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的基態能量(Total)、位能(PE)、動能(KE)分別對 α 作圖(對應的曲線為上、中、下)。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

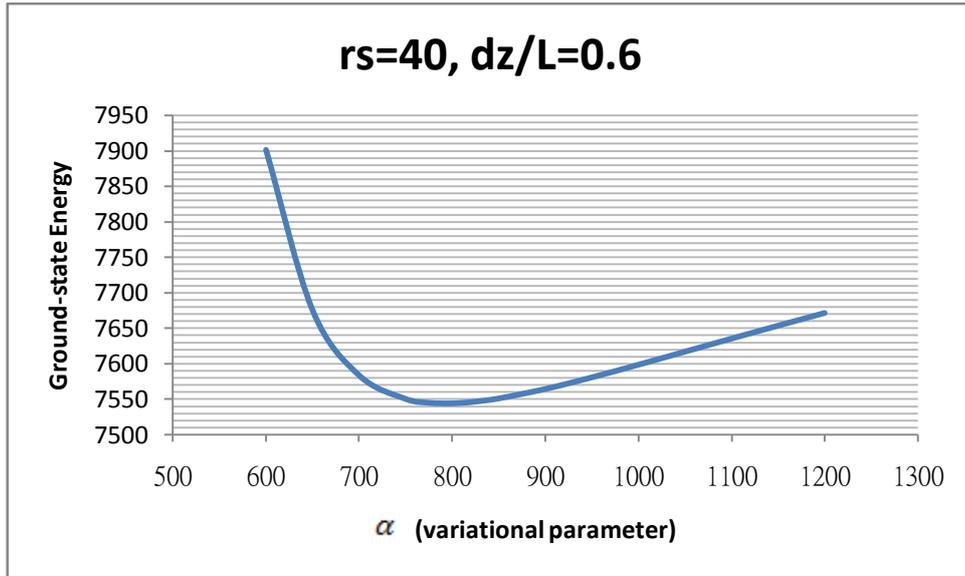


圖 3-9、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的基態能量對 α 關係圖。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

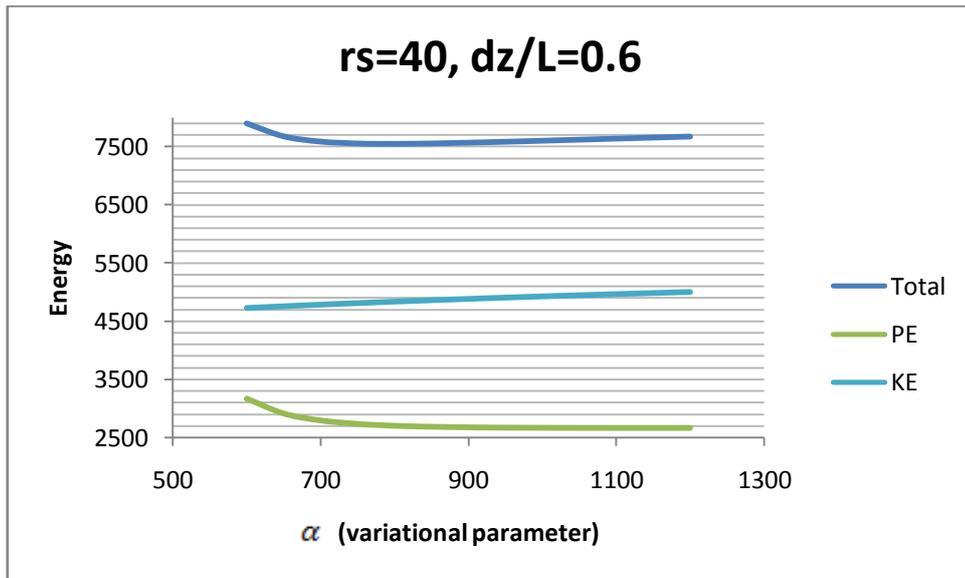


圖 3-10、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的基態能量(Total)、位能(PE)、動能(KE)分別對 α 作圖(對應的曲線為上、下、中)。單位能量為 $\hbar^2/M\ell^2$ ， α 單位為 $1/\ell^2$ 。

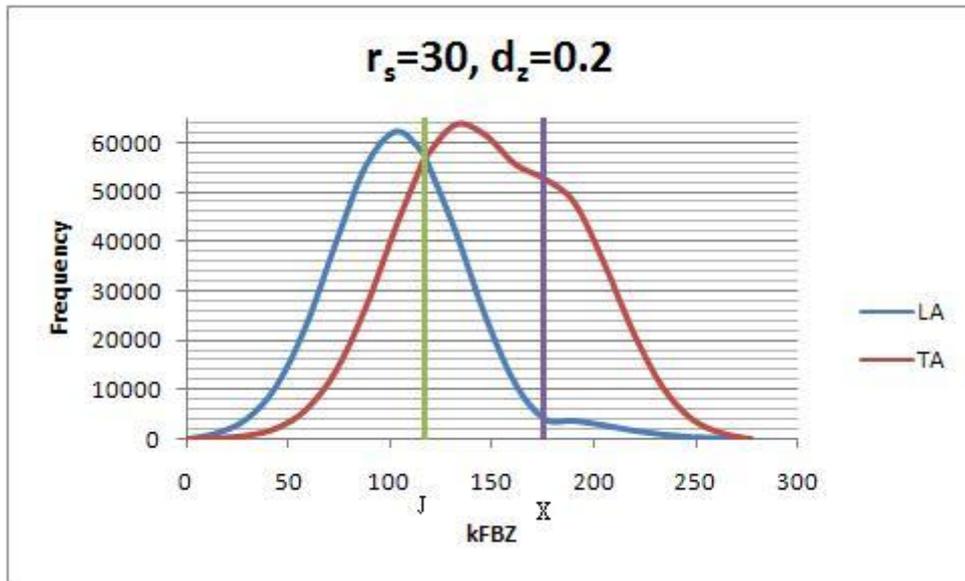


圖 3-11、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的聲子頻譜。橫軸波向量單位為 $1/\ell$ ，縱軸頻率單位為 $\hbar/M\ell^2$ 。

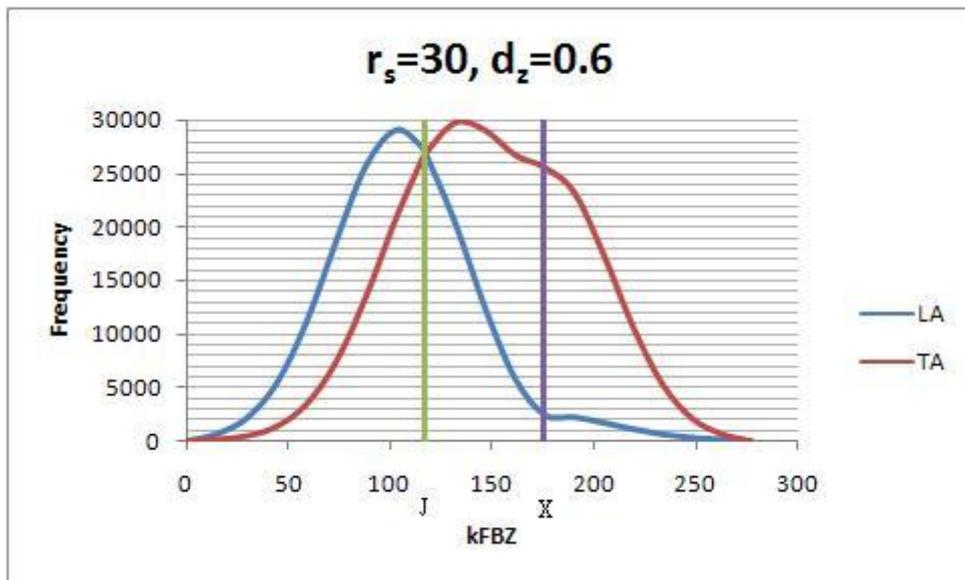


圖 3-12、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=30$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的聲子頻譜。橫軸波向量單位為 $1/\ell$ ，縱軸頻率單位為 $\hbar/M\ell^2$ 。

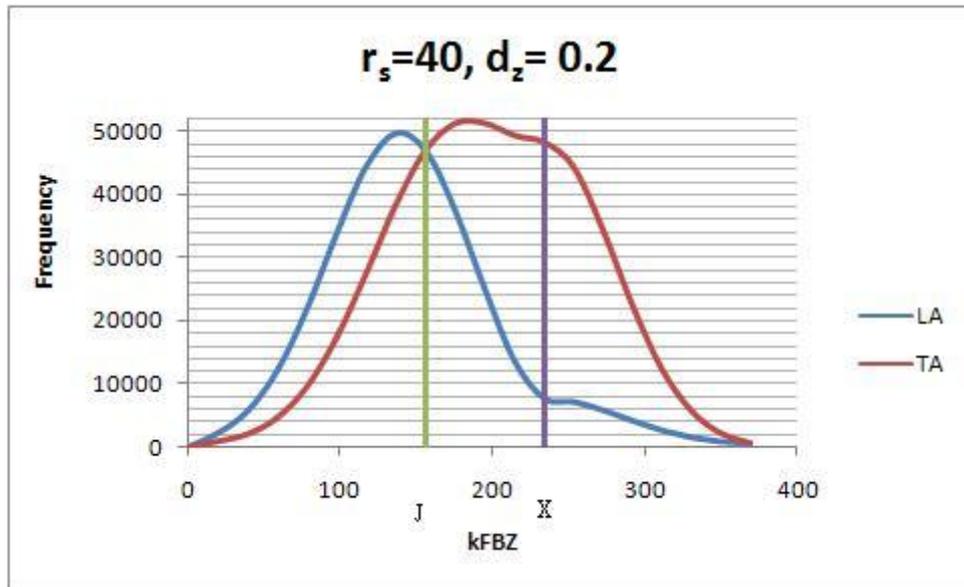


圖 3-13、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.2$ 的聲子頻譜。橫軸波向量單位為 $1/\ell$ ，縱軸頻率單位為 $\hbar/M\ell^2$ 。

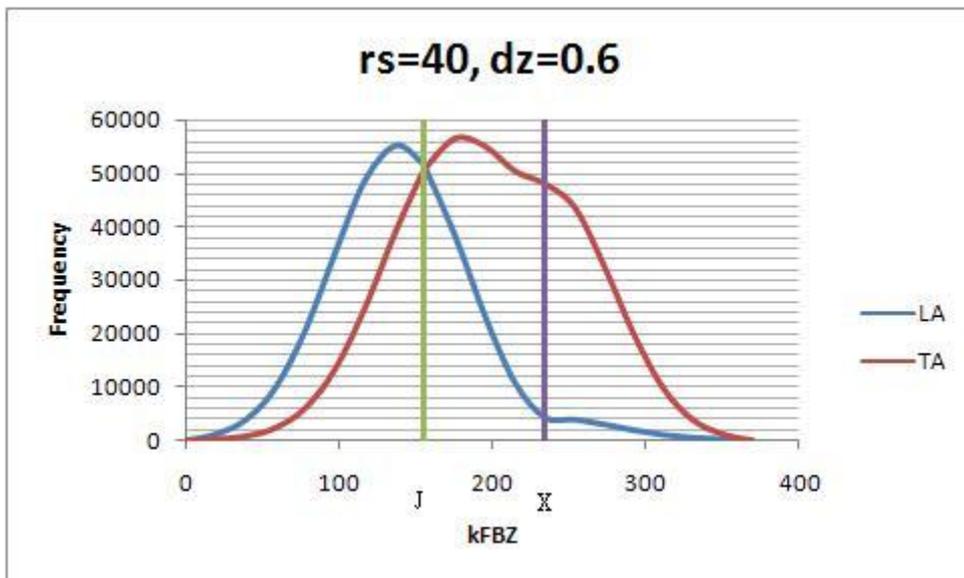


圖 3-14、 $g_d=1$ ， $g_{3D}=2$ ， $r_s=40$ ， $d_z/\ell=0.6$ 的聲子頻譜。橫軸波向量單位為 $1/\ell$ ，縱軸頻率單位為 $\hbar/M\ell^2$ 。

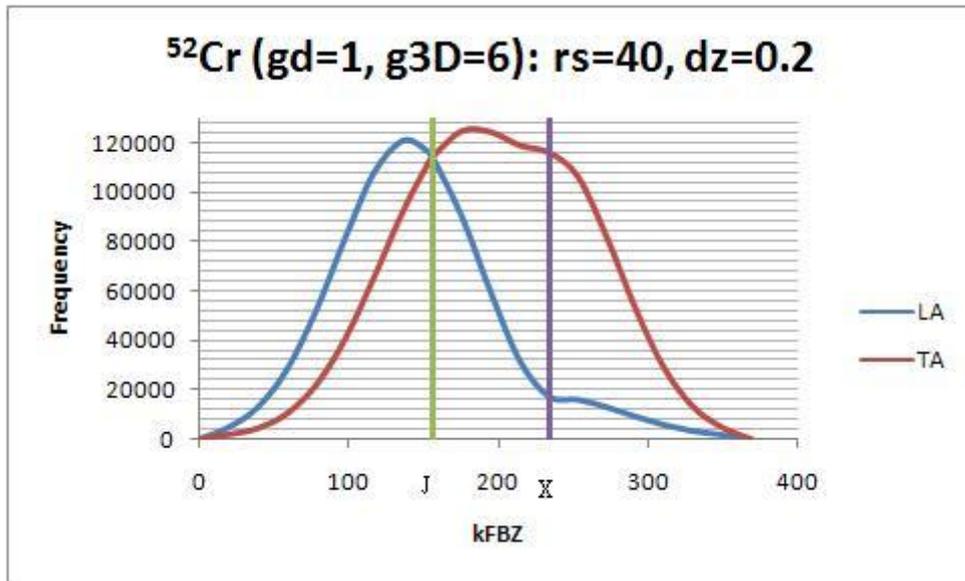


圖 3-15、 ^{52}Cr 實例： ε_{dd} 約為 0.16。當 $rs=40$ ， $d_z/\ell=0.2$ 可得 $\alpha_{min}=965$ ，總能 $E=25779$ ， $C_{11}=50807.67$ ， $C_{66}=3646.97$ 。橫軸波向量單位為 $1/\ell$ ，縱軸頻率單位為 $\hbar/M\ell^2$ 。彈性係數 C_{11} 與 C_{66} 單位亦為能量單位 $\hbar^2/M\ell^2$ 。

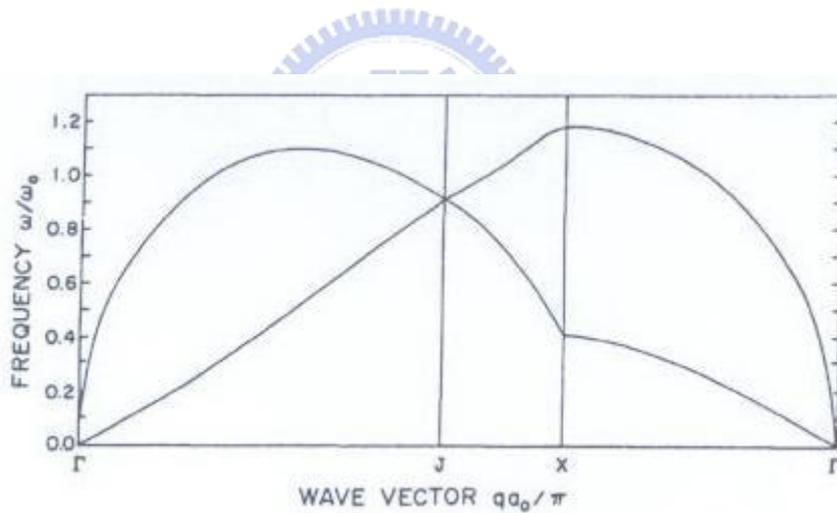


圖 3-16、參考文獻[6]的 Fig. 2。二維的電子維格納晶格之聲子頻譜。

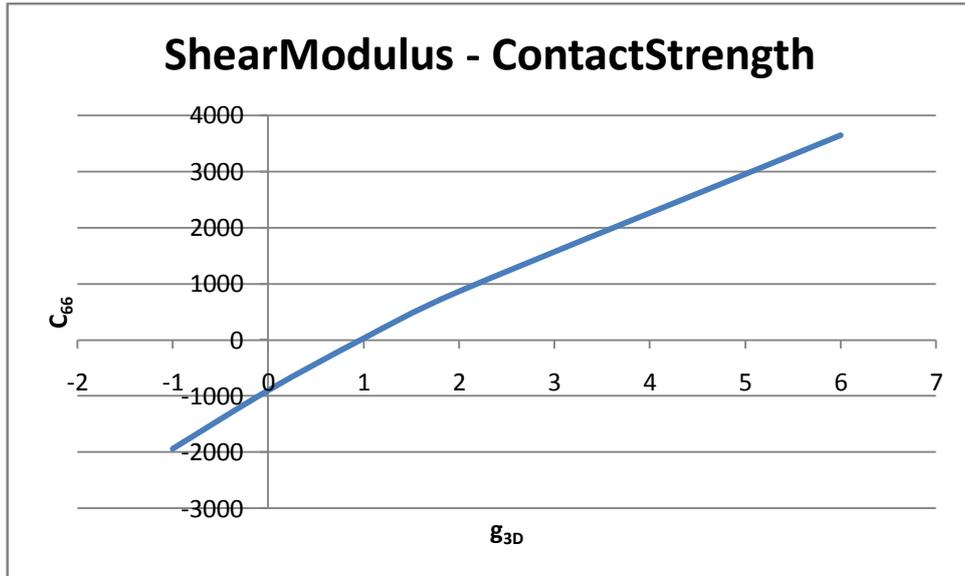


圖 3-17、切變模數(C_{66})與接觸勢強度(g_{3D})關係圖。 C_{66} 單位亦為能量單位 $\hbar^2/M\ell^2$ ， g_{3D} 單位為 $\hbar^2\ell/M$ 。

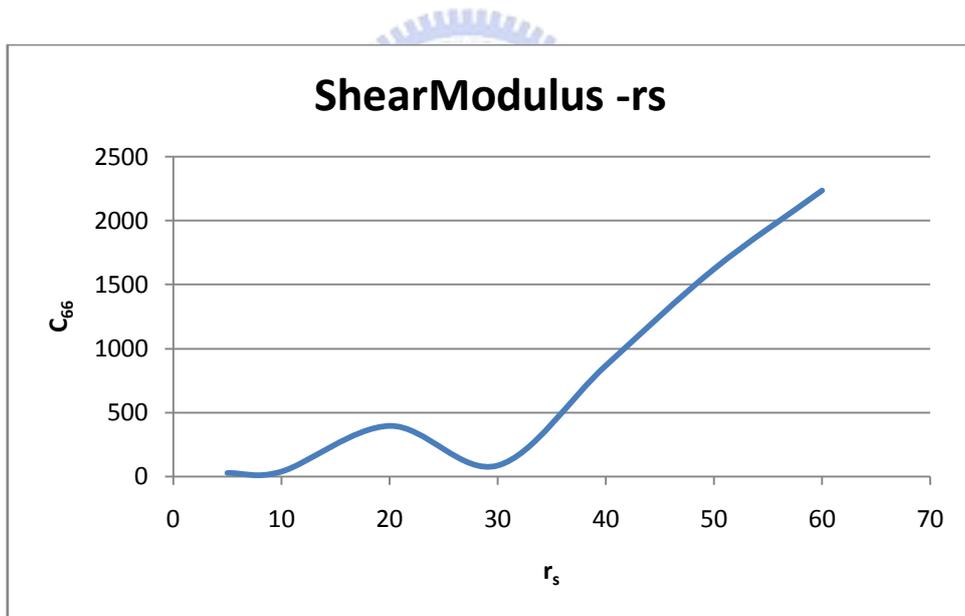


圖 3-18、切變模數(C_{66})，對偶極作用與接觸勢相對強度(r_s)之關係圖。跳點(jump)恰發生於參考文獻[2]的相變點 $r_{QM} = 18 \pm 4$ 處。 C_{66} 單位亦為能量單位 $\hbar^2/M\ell^2$ ， r_s 為無單位量綱。

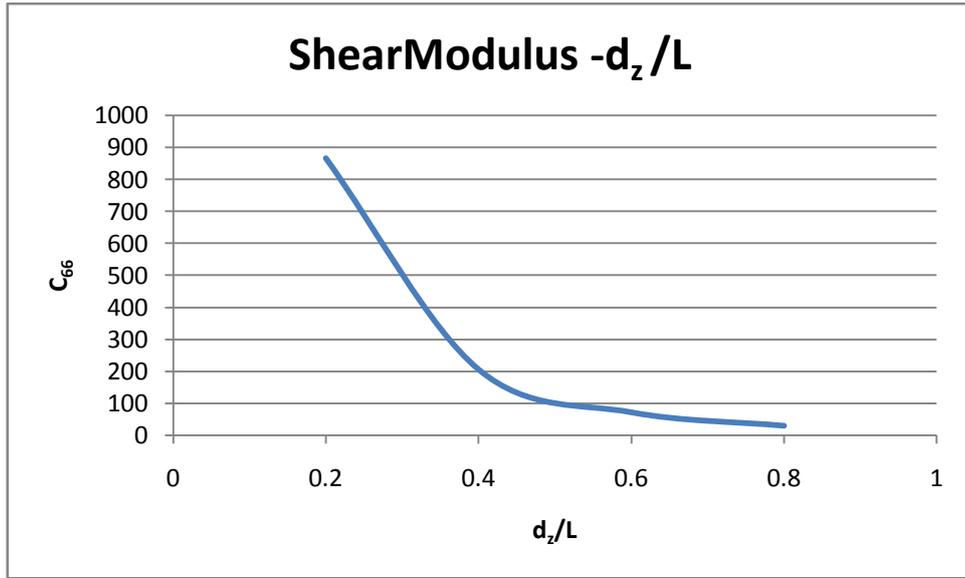


圖 3-19、切變模數(C_{66})與準二維系統厚度(d_z/ℓ)關係圖。 C_{66} 單位亦為能量單位 $\hbar^2/M\ell^2$ 。

