Kolektivní a kooperativní jevy – zadání příkladu na BEC

1. Numerické řešení Grossovy-Pitaevského rovnice

Pro přibližný popis kondenzátu slabě interagujících atomů v pasti lze použít Grossovu-Pitaevského rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\rm ext}(\boldsymbol{r}) + g\phi^2(\boldsymbol{r})\right]\phi(\boldsymbol{r}) = \mu\,\phi(\boldsymbol{r})\ ,$$

která byla odvozena zahrnutím kontaktní interakce $V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = g\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ na úrovni přiblížení středního pole. Interakční parametr g se obvykle vyjadřuje pomocí rozptylové délky a jako

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\ .$$

Vlnová funkce kondenzátu $\phi(\boldsymbol{r})$ splňuje normovací podmínku

$$\int \phi^2(\boldsymbol{r})\ \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = N\ ,$$

kde N je počet atomů v pasti a potenciál pasti $V_{\rm ext}$ nabývá pro izotropní harmonickou past tvaru

$$V_{\rm ext}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}m\omega_{\rm HO}^2\boldsymbol{r}^2\ .$$

Zavedeme charakteristickou délku $a_{\rm HO} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\rm HO}}$ a převedeme GP rovnici do bezrozměrných veličin $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{r}/a_{\rm HO}$, $\tilde\phi = \phi/\sqrt{Na_{\rm HO}^3}$, $\tilde\mu = \mu/\frac{1}{2}\hbar\omega_{\rm HO}$:

$$\left[-\nabla^2_{\boldsymbol{\xi}} + \xi^2 + 8\pi\frac{Na}{a_{\rm HO}}\,\tilde\phi^2(\boldsymbol{\xi})\right]\tilde\phi(\boldsymbol{\xi}) = \tilde\mu\,\tilde\phi(\boldsymbol{\xi}) \qquad \text{s normováním} \quad \int\tilde\phi^2(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\xi} = 1\ .$$

Parametr $A = 8\pi(Na/a_{\rm HO})$ má význam poměru interakční energie odhadnuté jako $E_{\rm int} \propto gN(N/a_{\rm HO}^3)$ a kinetické energie neinteragujících bosonů odhadnuté jako $E_{\rm kin} \propto N\frac{1}{2}\hbar\omega_{\rm HO}$. Řešení GP rovnice odpovídá vlnové funkci základního stavu a je tedy sféricky symetrické. Můžeme položit $\tilde\phi(\boldsymbol{\xi}) = u(\xi)/\xi$ a obdržet finální rovnici

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2 + A\,\tilde\phi^2(\xi)\right]u(\xi) = \tilde\mu\,u(\xi) \qquad \text{s okrajovými podmínkami} \quad u(0)=0,\ u(\infty)=0\ ,$$

jejíž řešení je třeba nalézt numericky. Vyřešte tuto rovnici pro parametr $Na/a_{\rm HO} = 0,\ 1,\ 10$ a 100 a graficky znázorněte odpovídající $\tilde\phi$ v závislosti na ξ.

Poznámky k numerickému řešení:

Potenciál $V = A\,\tilde\phi^2$ vystupující v rovnici určíme iteračním postupem, v iteraci $n+1$ použijeme k výpočtu V založený na $\tilde\phi$ získané v iteraci n. Pro velké hodnoty A je nutné stabilizovat iterační postup tlumením změn potenciálu podle předpisu $V^{(n+1)} \to (1-\lambda)V^{(n)} + \lambda A(\tilde\phi^{(n)})^2$, kde horní index značí pořadí iterace a λ je vhodně zvolené číslo menší než 1.

Jednou z možností, jak nalézt vlnovou funkci základního stavu pro daný potenciál $\xi^2 + A\tilde\phi^2(\xi)$, je použití mříže diskrétních bodů $\xi_j = \xi_{\rm max}j/n$, $j = 0\ldots n$ (s např. $\xi_{\rm max} = 6$, $n = 300$) a nahrazení druhé derivace diferencí $-\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}\xi^2 \approx (2u_j - u_{j+1} - u_{j-1})/(\xi_{\rm max}/n)^2$. Řešení diferenciální rovnice se tím převede na diagonalizaci tridiagonální matice reprezentující operátor $-\mathrm{d}^2/\mathrm{d}\xi^2 + \xi^2 + A\,\tilde\phi^2(\xi)$ a vlnová funkce základního stavu je obsažena ve vhodně normovaném vektoru příslušejícím nejnižší vlastní hodnotě. Okrajové podmínky zohledníme položením $u_0 = 0$ a $u_n = 0$.