

Численное моделирование конденсата Бозе — Эйнштейна

1 Состав коллектива:

- Лиханова Юлия Викторовна — НГУ, ИВТ СО РАН, к.ф.-м.н.;
- Медведев Сергей Борисович — ИВТ СО РАН, НГУ, д.ф.-м.н.;
- Федорук Михаил Петрович — НГУ, ИВТ СО РАН, чл.-корр;
- Чаповский Павел Львович — ИАиЭ СО РАН, НГУ, д.ф.-м.н.

2 Научное содержание работы

2.1 Аннотация

В рамках проекта выполнено сравнение результатов экспериментального и численного анализа свободного разлета бозе-эйнштейновских конденсатов атомов рубидия при конечных температурах. Численный анализ был основан на 3D уравнениях Гросса — Питаевского. Показано, что взаимодействие конденсированных и неконденсированных атомов наиболее ярко проявляется в уменьшении плотности атомов в центре разлетающегося облака по сравнению с теоретическим предсказанием для чистого бозе-конденсата. Кроме того, вариационным методом получены приближенные аналитические решения стационарного 2D уравнения Гросса — Питаевского. Найденные решения сопоставлены с результатами прямых численных расчетов. Определена точность аналитических решений при различных условиях задачи, в первую очередь степени нелинейного взаимодействия атомов в бозе-конденсате.

2.2 Современное состояние проблемы

Вопрос изучения сложных квантовых систем на основе атомов, охлажденных до сверхнизких температур, важен в решении и фундаментальных и прикладных задач. Такие системы находят свое применение, например, в космических навигационных системах, в моделировании сверхтекучести, квантовой информатике, при разработке гравиметров и гироскопов. Эффективным инструментом для наблюдения коллективных квантовых эффектов является конденсат Бозе — Эйнштейна (БЭК). Основу БЭК составляют атомы, охлажденные до температур, близких к абсолютному нулю. В таком ультрахолодном состоянии сотни тысяч частиц скапливаются на самом низком энергетическом уровне, т.е. они ведут себя как одна макроскопическая квантовая волна. Таким образом, достигается максимально возможный контроль над частицами, который допускает квантовая механика. Что объясняет большое количество как экспериментальных, так и теоретических работ по изучению БЭК.

2.3 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

2.3.1 Изучение взаимодействия двух фракций в вырожденном бозе-газе

В физическом эксперименте классические и конденсированные атомы присутствуют одновременно и действительно демонстрируют различное поведение при разлете, что делает

изучение реальных бозе-газов достаточно сложной задачей. В рамках этой задачи были проведены экспериментальные и численные исследования бозе-конденсатов атомов рубидия с целью регистрации эффектов взаимодействия этих двух фракций. Метод был основан на количественном сравнении наблюдаемых характеристик БЭК с численными экспериментами, основанными на теории Гросса — Питаевского, которая хорошо описывает «чистые» бозе-конденсаты, т.е. БЭК без примеси классических частиц.

По теории Гросса — Питаевского, бозе-конденсат в ловушке с гармоническим потенциалом описывается волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$, которая удовлетворяет уравнению,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + N_c g |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

Здесь, m — масса атома; $\omega_{x,y,z}$ — частоты колебаний атома в ловушке; N_c — полное число атомов в конденсате; $g = 4\pi\hbar^2 a/m$; длина s-рассеяния для атомов ^{87}Rb , $a = 5.29$ нм. Функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ нормирована на 1, а локальная плотность частиц выражается так

$$n(\mathbf{r}, t) = N_c |\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (2)$$

Для выполнения расчета состояния конденсата с помощью уравнения (1) достаточно знать частоты колебаний атомов в ловушке и полное число конденсированных атомов.

Для расчета основного состояния конденсата в магнитной ловушке решалась краевая задача с нулевыми значениями волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ на границе достаточно большого параллелепипеда методом установления с использованием мнимого времени. Характеристики разлетающегося облака находились с помощью решения начально-краевой задачи (1) с нулевым внешним потенциалом и нулевыми граничными условиями на границе большого параллелепипеда и стационарным состоянием конденсата в качестве начального условия. В расчетах использовался метод расщепления по физическим процессам и быстрое преобразование Фурье. Отметим, что численное решение уравнения (1) оказывается достаточно трудоемким.

2.3.2 Использование аналитических пробных функций для моделирования двумерного бозе-конденсата

Существенное упрощение уравнения (1) возникает для двумерной (2D) задачи. Например, для дископодобного конденсата с частотами $\omega_z \gg \omega_x \approx \omega_y$ и химическим потенциалом $\mu < \hbar\omega_z$, где

$$\mu \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V(\mathbf{r}, z) |\Psi|^2 + NU_0 |\Psi|^4 \right] \text{drdz},$$

движение по одной координате оказывается «замороженным». В этом случае волновая функция конденсата может быть представлена в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t}) = \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t}) \frac{1}{\pi^{1/4} l_z^{1/2}} \exp(-z^2/2l_z^2), \quad l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z},$$

а $\Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t})$ находится как решение 2D уравнения Гросса — Питаевского

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t})}{\partial \bar{t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t}) + V_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t}) + \frac{NU_0}{\sqrt{2\pi} l_z} |\Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t})|^2 \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t}), \quad (3)$$

где $V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} [\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2]$, с нормировкой $\int_{\mathbb{R}^2} |\Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, \bar{t})|^2 \text{dr} = 1$.

Для удобства рассматривали двумерное уравнение Гросса — Питаевского в безразмерном виде

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{s}{2} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) + \sigma |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \psi(\mathbf{x}, t), \quad (4)$$

где $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2)$, с нормировкой $\mathcal{N} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1$.

С помощью вариационного метода были получены приближенные аналитические решения стационарного 2D уравнения Гросса — Питаевского (4), исследованы их свойства. Точность найденных приближенных аналитических решений определялась сравнением с прямым численным решением стационарного 2D уравнения Гросса — Питаевского. Для нахождения этого стационарного решения, соответствующего минимальному уровню энергии, использовался метод мнимого времени и конечно-разностная схема стабилизирующей поправки с итерационным уточнением.

2.4 Полученные результаты

- Анализ, выполненный в исследовании, показывает, что для сильно вытянутого сигарообразного облака ультрахолодных атомов, присутствие большого количества классических атомов приводит к аномально быстрому разлету конденсированной фракции в радиальном направлении. Удобной количественной характеристикой этого эффекта является сравнение плотности конденсированных атомов в центре разлетающегося облака с предсказаниями теории Гросса — Питаевского.
- Получены приближенные аналитические решения и формулы, связывающие интегральные характеристики стационарных бозе-конденсатов (характерные масштабы, гамильтониан и химический потенциал, число частиц) с параметрами уравнения (частоты колебаний атомов в ловушке, параметр нелинейности). Полученные аналитические соотношения позволяют решать как прямую задачу определения характеристик бозе-конденсата по параметрам уравнения Гросса — Питаевского, так и обратную задачу восстановления параметров уравнения по некоторым заданным характеристикам задачи, например по заданным размерам облака.

2.5 Иллюстрации, визуализация результатов

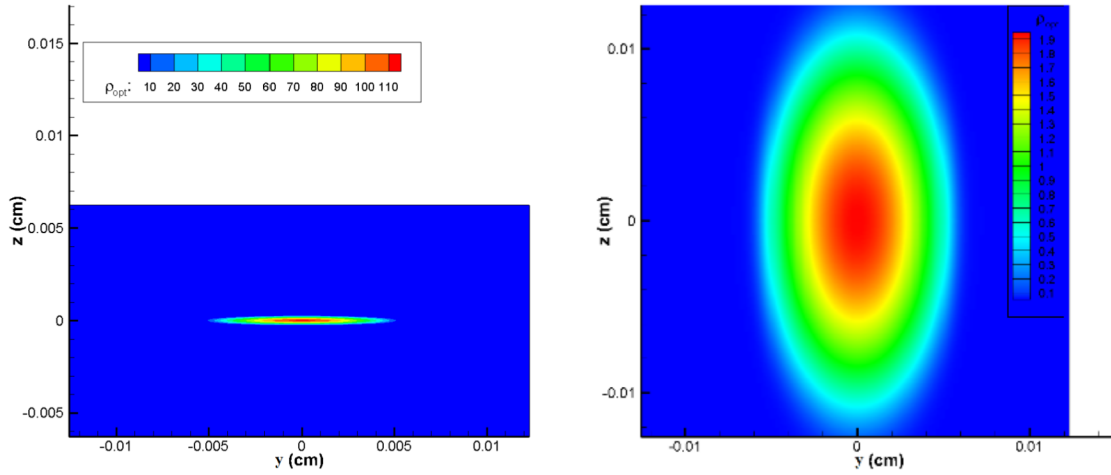


Рис. 1: Поведение расчетной безразмерной интегральной плотности конденсированных атомов $N = 2.3 \times 10^5$ при разлете: *слева* – конденсат в удерживающей ловушке в начальный момент времени, *справа* — анизотропный разлет конденсата после выключения удерживающего поля на больших временах

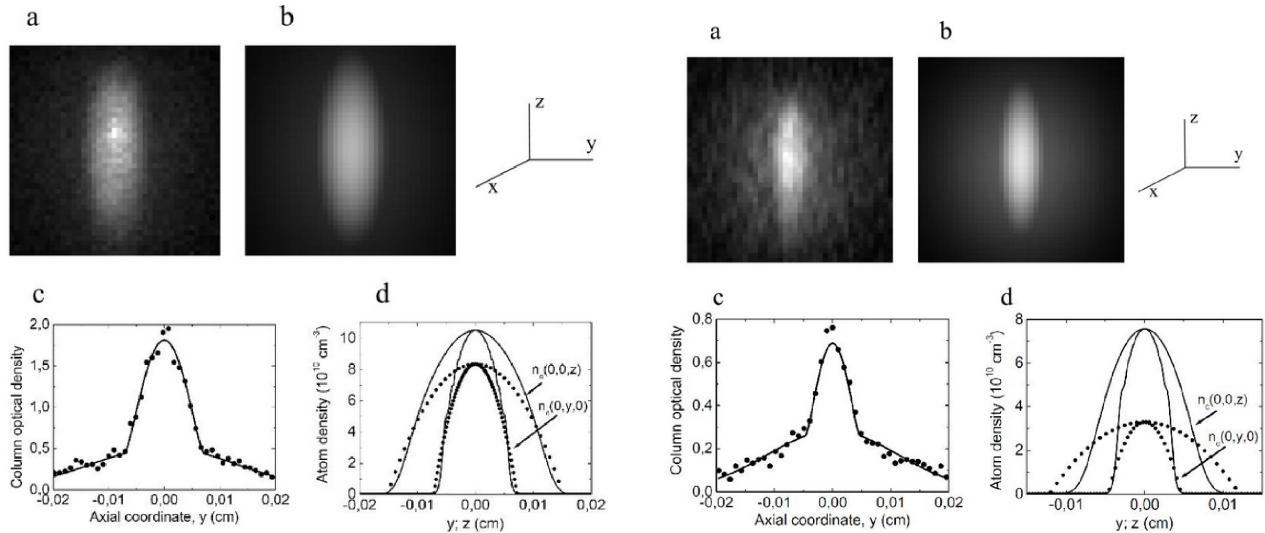


Рис. 2: Результаты сравнения физического эксперимента и численных расчетов для числа конденсированных атомов $N = 2.3 \times 10^5$ (*слева*) и $N = 3.8 \times 10^4$ (*справа*): экспериментальные (кружки) и полученные численно по теории Гросса — Питаевского (сплошные линии) распределения плотностей конденсированных атомов по осям y и z в центре облака

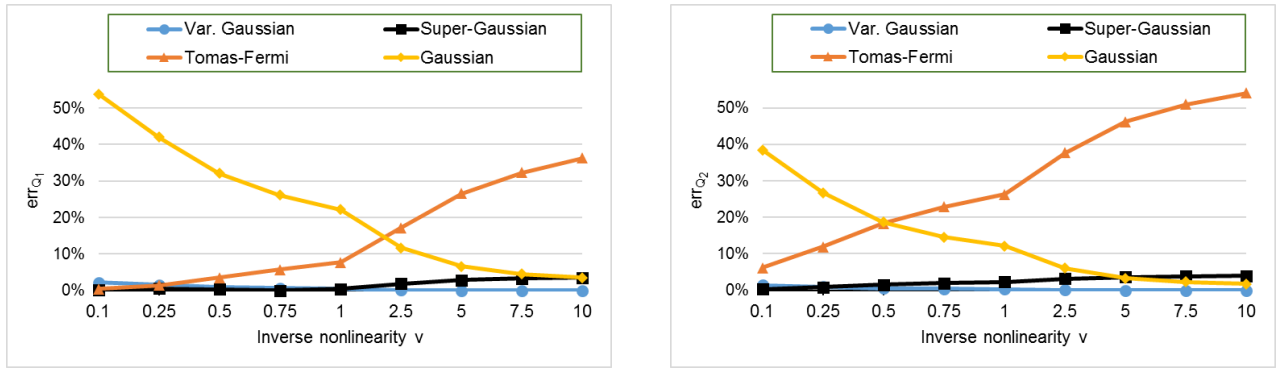


Рис. 3: Поведение относительной ошибки по размерам: err_{Q_1} (слева) и err_{Q_2} (справа) при разных параметрах нелинейности $(\nu)_{VG} = [l/n]_{VG}$

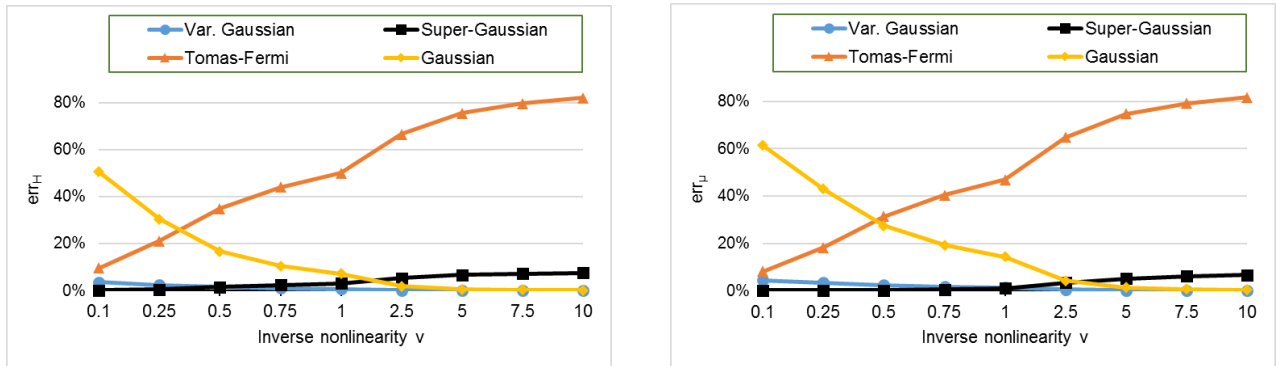


Рис. 4: Поведение относительной ошибки гамильтониана err_H (слева) и химического потенциала err_μ (справа) при разных параметрах нелинейности $(\nu)_{VG} = [l/n]_{VG}$

3 Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Задача требовала трудоёмких расчетов для различных параметров задач. Использование кластера позволило проводить такие расчеты в параллельном режиме.

4 Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Лиханова Ю.В., Медведев С.Б., Федорук М.П., Чаповский П.Л. «Взаимодействие двух фракций в вырожденном бозе-газе при конечных температурах» // Письма в ЖЭТФ — 2016. — Т. 103, вып. 6, С. 452–457 (Импакт-фактор: 1,363);
2. Лиханова Ю.В., Медведев С.Б., Федорук М.П., Чаповский П.Л. Ответ на Комментарий к работе «Взаимодействие двух фракций в вырожденном бозе-газе при конечных температурах» // Письма в ЖЭТФ — 2016. — Т. 103, вып. 12, С. 898 (Импакт-фактор: 1,363);
3. Ю.В. Лиханова, С.Б. Медведев, М.П. Федорук, П.Л. Чаповский. «Аналитические пробные функции для моделирования двумерного бозе-конденсата» // Квантовая электроника — 2017. — Т. 47, № 5, С. 484–490 (Импакт-фактор: 1,093);