

SIMULACIJA BOSE-EINSTEINOVIH KONDENZATOV

TOMAŽ CVETKO

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Bose-Einsteinov kondenzat hladnih atomov je faza snovi, v kateri večina atomov zasede osnovno enodelčno kvantnomehansko stanje. Članek se ukvarja s simulacijo Bose-Einsteinovih kondenzatov za eksperimentalno pomembne primere. Najprej je opisana metoda laserskega hlajenja atomov, ki v eksperimentu omogoča doseganje Bose-Einsteinovega kondenzata, sledi pregled teoretičnega modela plina hladnih atomov, zatem je nakazana izpeljava enačbe Grossa in Pitaevskega. V drugem delu članka so predstavljene spektralne metode kot učinkovit način za numerično reševanje nelinearne Schrödingerjeve enačbe. Na koncu članek analizira dva konkretna primera nelinearne Schrödingerjeve enačbe v eni dimenziji.

SIMULATION OF BOSE-EINSTEIN CONDENSATES

Bose-Einstein condensate is a state of matter of a dilute gas of bosons, where a macroscopic fraction of bosons occupies the lowest quantum state. This article discusses simulation of Bose-Einstein condensates and its relevance to experimental work with Bose-Einstein condensates. It starts with a description of laser cooling which enables condensation in experiments with cold atoms. An overview of the theoretical model for describing cold atom gas is then made and derivation of the Gross-Pitaevski equation briefly summarized. In the second part of the article an efficient algorithm based on spectral methods is presented as an efficient way of numerically solving nonlinear Schrödinger equation. An implementation of the algorithm is then applied to two specific one-dimensional examples and the results are compared to experiments.

1. Uvod

Bose-Einsteinovi kondenzati so v zadnjih letih ena izmed bolj popularnih tem raziskovanja tako na področju atomske fizike kot tudi na področju numeričnih simulacij. Začetni razmislek o obnašanju neločljivih delcev sega v leto 1924, ko je Bose z Einsteinovo pomočjo objavil članek o statistiki takšnih delcev v odvisnosti od njihove energije [1]. Kmalu je sledila napoved, da bozoni (neločljivi delci s celoštevilskim spinom) pri dovolj nizki temperaturi kondenzirajo v najnižje kvantno stanje.

Sistem bozonov, ki ima makroskopsko zasedeno osnovno, energijsko najnižje kvantno stanje, imenujemo Bose-Einsteinov kondenzat (v besedilu tudi BEC). Ta koncept je že v sredini prejšnjega stoletja zbudil relativno veliko pozornosti s teoretičnega vidika, medtem ko tehnologija še ni omogočala hlajenja atomov na dovolj nizke temperature. Razvoj laserskega hlajenja je omogočil izvedbo eksperimenta in leta 1995 so potrdili prvi BEC v plinu rubidijevih atomov. Od takrat so kondenzirali še mnoge druge alkalijske atome, nekatere molekule in leta 2010 fotone [2]. Eksperimentalno proučevanje Bose-Einsteinovih kondenzatov omogoča nov vpogled v delovanje kvantnomehanskih sistemov, saj je zaradi dimenzij teh večdelčnih sistemov njihova številska gostota, ki je v tesni zvezi z valovno funkcijo najnižjega energijskega stanja, neposredno merljiva. Ta lastnost omogoča različne aplikacije, zaenkrat predvsem kvantne simulacije drugih sistemov. Predvidene so tudi aplikacije v kvantnem računalništvu in natančnih merilnih napravah.

2. Eksperimenti s hladnimi atomi

Bose-Einsteinov kondenzat je stanje množice bozonov, v katerem končen delež bozonov zasede osnovno enodelčno stanje. Eksperimentalno odkritje Bose-Einsteinove kondenzacije leta 1995 v plinu hladnih atomov rubidija [3] je omogočilo novo vrsto raziskovanja kvantnih pojavov. Zaradi dimenzij plina atomov, v katerem se pojavi BEC, je mogoče nekatere lastnosti kvantnega sistema opazovati neposredno z optičnimi metodami. Prav tako so BEC v razredčenih plinih atomov zanimivi za eksperimente, ker jih je možno izjemno natančno nadzorovati z laserji in magnetnimi polji, med drugim pa se lahko spremeni tudi interakcija med atomi z mehanizmom Feschbachove resonance [4].

2.1 Hlajenje atomov

BEC v razredčenem plinu atomov nastopi pri zelo nizkih temperaturah. De Broglieva valovna dolžina kot posledica termične energije je podana z izrazom

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT} \right)^{1/2} \quad (1)$$

in je pri visokih temperaturah mnogo krajša od povprečne medatomske razdalje. Kritično temperaturo prehoda lahko ocenimo s tisto temperaturo, pri kateri je termična valovna dolžina primerljiva z značilno medatomsko razdaljo, ki je s številsko gostoto dana kot $n^{-1/3}$. Za gostote, ki jih dosegajo pri eksperimentih z BEC ($n \sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), so ustrezne temperature od 100 nK do nekaj μK [4]. Pri temperaturah, ki so znatno pod kritično temperaturo prehoda, lahko pričakujemo, da bo plin kondenziral v BEC.

Za eksperimentalno uresničitev Bose-Einsteinovega kondenzata je torej ključna zmožnost ohladiti plin atomov pod zgoraj navedene temperature. To že samo po sebi predstavlja izziv, saj takšnih temperatur ne srečamo niti v naravi niti v ostalih znanstvenih eksperimentih. Za primerjavo: superprevodni magneti pospeševalnika v CERN-u so s tekočim helijem hlajeni na 1.9 K [5]. Za doseganje temperatur nižjih redov se moramo poslužiti povsem drugačnega pristopa. Tehnologija, ki omogoča eksperimentalno realizacijo BEC, je lasersko hlajenje atomov.

V eksperimentalni postavitvi atomi izhajajo iz pečice pri temperaturi 360 K. Pot nadaljujejo skozi Zeemanov upočasnjevalnik, kjer na curek atomov svetijo z laserskim snopom. Hlajenje je ekvivalentno zmanjševanju povprečne hitrosti v smeri potovanja atomov: atom absorbira foton, ki ima gibalno količino v nasprotni smeri potovanja atoma, in ga spontano emitira v naključni smeri. Učinek množice takšnih absorpcij in emisij je sunek sile, ki nasprotuje gibanju atomov, kar pomeni zniževanje hitrosti in s tem tudi temperature, ki je merilo za povprečno hitrost atoma. Lasersko hlajenje izkorišča specifičen prehod med energijskimi stanji atoma, ki so posledica hiperfine strukture. Za uspešno absorpcijo je ključno, da atomi pri emisiji preidejo nazaj v začetno stanje, saj se le na ta način cikel lahko ponavlja. Tak prehod pri emisiji ni zagotovljen, kar rešujejo z laserskim črpanjem (z drugo frekvenco) iz neustreznih stanj v začetno stanje. Med zmanjševanjem hitrosti pa atomi zaradi Dopplerjevega efekta vidijo fotone z različnimi frekvencami (rdeče premaknjene glede na frekvenco na začetku upočasnjevalnika), zato s spremenljivim zunanji poljem uravnavajo razcep hiperfinih stanj tako, da je frekvenca po Dopplerjevem premiku vedno v resonanci s frekvenco prehoda. Tako upočasnjeni atomi imajo hitrost okoli $20 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ ($T \approx 3 \text{ K}$) [6].

Počasne atome ujamejo v magneto-optično past (MOT), ki jo sestavlja 6 prekrizanih laserskih žarkov in kvadrupolno magnetno polje. Frekvenca laserjev je nekoliko rdeče premaknjena od frekvence za prej omenjeni prehod. V kolikor se atom izmakne iz središča, se razcep energijskih nivojev v magnetnem polju spremeni, frekvenca laserjev je v resonanci in prej opisana sipalna sila atom potisne proti središču pasti. S takšno metodo je mogoče doseči temperature do nekaj μK . S postopkom degeneriranega ramanskega hlajenja je nato mogoče doseči temperaturo 500 nK [6]. Bose-Einsteinovega kondenzata pa ni mogoče doseči samo s tehnikami laserskega hlajenja, temveč je potrebno ohlajanje dokončati z evaporacijskim hlajenjem. Pri tem iz pasti, v kateri so atomi termalizirani - njihove energije so porazdeljene po Boltzmannovi porazdelitvi - odstranijo atome z najvišjimi energijami. Ob ponovni termalizaciji se tako povprečna energija atomov zniža in več atomov kondenzira v osnovno stanje. Eksperimentalno je proces evaporacije zelo zahteven zaradi mnogih mehanizmov izgub, ki otežujejo uresničenje zadostne faznoprostorske gostote atomov, ki je potrebna za prehod v BEC [6]. Na Institutu "Jožef Stefan" so potrdili BEC cezijevega atomov 31. 3. 2017 pri 20 nK, z 1.5×10^4 atomi v pasti [7].

3. Teoretični opis Bose-Einsteinovih kondenzatov

3.1 Kondenzacija

Iz statistične mehanike je znan rezultat za povprečno zasedbeno število bozonov v odvisnosti od energije

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} - 1} . \quad (2)$$

Pri nizkih temperaturah je kemijski potencial μ blizu energije osnovnega stanja. V takšnem režimu zasedbeno število hitro pada z naraščanjem energije stanj in ima pol v ničli energije, ki jo postavimo na energijo osnovnega stanja. Vzbujena stanja lahko še vedno obravnavamo kot kontinuum stanj, osnovno stanje pa moramo upoštevati posebej. Pričakovano število delcev v vzbujenih stanjih tako izračunamo z integralom

$$N_{ex} = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon , \quad (3)$$

kjer je $g(\epsilon)$ ustrezna gostota stanj. Rezultat integrala je odvisen od števila prostostnih stopenj delcev in temperature, ni pa odvisen od celotnega števila delcev v plinu, ki ga obravnavamo. Lahko se torej zgodi, da je v sistemu pričakovano število delcev v vzbujenih stanjih znatno manjše od celotnega števila delcev. Kritična temperatura je tista temperatura, pri kateri je rezultat integrala (3) natanko enak številu delcev v plinu. V vzbujenih stanjih je takrat na voljo ravno "dovolj prostora" za vse delce. Pri nižjih temperaturah pa preostali del bozonov zaseda osnovno stanje in rečemo, da so delci prešli v Bose-Einsteinov kondenzat. Število delcev v kondenzatu prav tako izračunamo preko integrala (3) in zahtevamo ohranitev števila delcev $N_0 = N - N_{ex}$. Rezultat je preprost:

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^\alpha \right] . \quad (4)$$

V tem izrazu je α lastnost sistema (za plin v škatli $\alpha = 3/2$, za tridimenzionalni harmonski potencial $\alpha = 3$). Če zadostimo pogojema dovolj nizkih temperatur in visoke gostote delcev, lahko pričakujemo, da bomo našli končen delež bozonov v osnovnem enodelčnem stanju [4].

3.2 Interakcija med atomi

Tipičen plin atomov alkalijskih kovin v poskusih z BEC je dovolj redek, da v njem prevladujejo interakcije med pari atomov. Zaradi tega lahko pričakujemo zanesljive napovedi lastnosti takega plina, če poznamo sipanje dveh delcev. Alkalijski atomi so pri temperaturah, pomembnih za eksperimente z BEC, v osnovnem elektronskem stanju, lahko pa prehajajo med različnimi hiperfinimi stanji, ki smo jih omenjali že pri hlajenju.

V kontekstu sipanja imenujemo notranja stanja obeh atomov pred in po trku sipalni kanal. Pri elastičnem sipanju je končno stanje enako začetnemu, pri neelastičnih procesih pa se končno stanje atomov razlikuje od začetnega. Zaradi spremembe v notranji strukturi (v formalizmu se to odraža v različnih kvantnih številih) lahko na atom v končnem stanju deluje drugačen potencial kot na atom v začetnem stanju. Tako je lahko v magnetnem polju pasti atom z neko projekcijo magnetnega momenta v stabilni legi, atom z nasprotno projekcijo magnetnega momenta pa v labilni legi. Ker magnetno polje v pasti ustrezno deluje na atome v točno določenem stanju hiperfinega razcepa, je neelastično sipanje eden glavnih vzrokov za izgube v magnetnih pasteh. Če je energija končnega stanja nižja ali enaka energiji začetnega stanja, kanal označujemo za odprt, če pa je energija v končnem stanju previsoka, je takšen kanal zaprt. Sklapanje med kanali je vzrok za Feschbachove resonance, s pomočjo katerih je mogoče spreminjati tako moč kot tudi predznak sile med atomoma. Najpomembnejša vrsta interakcije med dvema alkalijskima atomoma je van der Waalsova sila, ki ima obliko potenciala $-\alpha/r^6$, kjer je r razdalja med atomoma.

3.2.1 Osnove sipalne teorije in sipalna dolžina

Pri obravnavi medsebojnega sipanja dveh alkalijskih atomov se lahko takoj omejimo na sferično simetrični potencial. V nadaljevanju uporabljamo r , θ in ϕ kot standardno vpeljane sferne koordinate in problem obravnavamo v težiščnem sistemu obeh atomov. Valovno funkcijo za delec, ki se sipa, lahko zapišemo v obliki $\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \psi_{sc}(\mathbf{x})$, torej vpadnega dela in sipanega dela. Vpadni val naj potuje vzdolž osi z . Sferno simetričen potencial ima tudi simetrijo po ϕ , zato lahko valovno funkcijo, ki ustreza vpadnemu ravnemu valu, razvijemo po sfernih harmonikih, ki so odvisni le od θ :

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (5)$$

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \quad (6)$$

$$\psi_k(\mathbf{x}) = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\theta). \quad (7)$$

Tak pristop imenujemo parcialni valovi. V limiti nizkih energij delcev, torej $k \rightarrow 0$, pa v razvoju ostanejo pomembni le še izotropni členi, tako imenovani valovi s . Kotna odvisnost f_k se izgubi in valovno funkcijo lahko v približku zapišemo tudi kot $\psi(\mathbf{x}) = 1 - \frac{a}{r}$ [4]. V tej limiti definiramo sipalno dolžino prek faznega zamika kot

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a}, \quad (8)$$

kjer je δ fazni zamik izhajajočega valovanja [8].

V območju majhnih energij, ki je za obravnavo BEC ustrezno, lahko interakcijo med atomi opišemo s sipalno dolžino a . Sipalne dolžine ni mogoče analitično izračunati, ne le ker so atomi alkalijskih kovin mnogodelčni sistemi, ampak tudi zato, ker je na zelo zapleten način odvisna od energij različnih notranjih kanalov, v katere se lahko atoma sipljeta.

3.2.2 Povezava efektivne interakcije s sipalno dolžino

Interakcije med atomi so močne, a nastopijo le, ko so atomi zelo blizu skupaj, kar nam pove že oblika van der Waalove sile. Da bi se izognili natančni obravnavi interakcij med posameznimi atomi, je ugodno vpeljati efektivno interakcijo, ki bo povzela medsebojno delovanje atomov v približku dolgih valovnih dolžin oziroma nizkih frekvenc. Spomnimo se, da je za obravnavo Bose-Einsteinovih kondenzatov primerna limita ničelne energije, ki ustreza ničelnim valovnim vektorjem k iz (7). Račun v reprezentaciji gibalne količine (\hat{p}), ki je podrobneje opisan v [4], v limiti $k = 0$ pokaže, da se efektivni potencial zapiše kot

$$U_0(k, k', E)|_{k=k'=E=0} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (9)$$

Tako sta torej povezana medatomska interakcija in sipalna dolžina a . V koordinatni reprezentaciji (\hat{x}) interakciji ustreza inverzna Fourierova transformacija izraza (9), torej $U_0\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, kjer sta \mathbf{x} in \mathbf{x}' legi dveh delcev. V tem približku atomi vplivajo drug na drugega le ob neposrednem stiku. Temu rečemo tudi kontaktna interakcija.

3.3 Enačba Grossa in Pitaevskega

V prejšnjih poglavjih smo obravnavali posamezne atome in njihovo interakcijo v parih. Ogleдали smo si tudi termodinamski pogled na redek plin atomov pri nizkih temperaturah. Ob takšnem

poteku razprave se naravno postavi vprašanje, kaj lahko povemo o lastnostih plina, če o njem razmišljamo kot o kvantnomehanskem sistemu veliko delcev. Odgovor na to vprašanje predstavlja enačba Gross-Pitaevskega (v nadaljevanju tudi GPE), ki opisuje dinamiko nehomogenega plina bozonov pri temperaturi nič.

Ko plin v celoti doseže stanje Bose-Einsteinove kondenzacije, v zelo dobrem približku velja, da vsi bozoni zasedajo isto enodelčno stanje $\phi(\mathbf{r})$. Valovno funkcijo mnogodelčnega sistema lahko potem zapišemo kot

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i), \quad (10)$$

kjer so produkti na desni strani enačaja tenzorski. Valovna funkcija ϕ je normirana na 1. Sistem opisuje Hamiltonov operator

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right] + U_0 \sum_{i<j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (11)$$

kjer smo že upoštevali efektivno interakcijo (9), privzeli smo torej, da je plin redek. Poleg tega da vsi bozoni v BEC zasedajo isto enodelčno stanje, vemo tudi, da ima to stanje najnižjo energijo. Do enačbe Gross-Pitaevskega torej vodi minimizacija energije mnogodelčnega stanja (10) pri zahtevi, da je število delcev konstantno. Ker iščemo ustrezno valovno funkcijo, gre za variacijski problem. Zapišemo lahko torej $\delta F = \delta E - \mu \delta N = 0$, kjer je F ravno prosta energija in μ kemijski potencial. Celotno energijo s prej definirano valovno funkcijo (10) zapišemo kot

$$E = N \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{N-1}{2} U_0 |\phi(\mathbf{r})|^4 \right] \quad (12)$$

in variacijo izvedemo po ϕ^* . Valovna funkcija je kompleksna in pri variaciji sta realni in kompleksni del funkcije neodvisna. Temu pa je ekvivalentno, da variacijo izvedemo neodvisno po ϕ in ϕ^* . Rezultat obeh variacij sta kompleksno konjugirani enačbi, tako da zadostuje zapis le ene od enačb (torej en variacijski račun).

Z uvedbo valovne funkcije kondenzata ψ , tako da je $\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{N} \phi(\mathbf{r})$, se stacionarna oblika enačbe Gross-Pitaevskega zapiše kot

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + U_0 |\psi(\mathbf{r})|^2 \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Vrednosti valovne funkcije kondenzata so sorazmerne vrednostim enodelčne valovne funkcije, ki jo zasedajo vsi bozoni v BEC. Tako kvadrat absolutne vrednosti ϕ predstavlja verjetnost, da na nekem mestu najdemo bozon, kvadrat absolutne vrednosti ψ pa številsko gostoto delcev v kondenzatu na danem mestu.

S podobnim računom, pri katerem bi iskali ekstremal akcije pri konstantnem številu delcev, bi prišli do časovno odvisne enačbe Gross-Pitaevskega:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + U_0 |\psi(\mathbf{r})|^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (14)$$

Enačba (13) ima obliko nelinearne Schrödingerjeve enačbe, kjer je potencial sestavljen iz prispevka zunanjega potenciala V in nelinearnega člena $U_0 |\psi(\mathbf{r})|^2$, ki opiše interakcijo med bozoni. Izpeljava je povzeta po [4] in [9].

4. Numerično reševanje enačbe Gross-Pitaevskega

Enačba (14) opisuje dinamiko Bose-Einsteinovega kondenzata. V tem poglavju se bom posvetil reševanju takšne enačbe in se osredotočil predvsem na spektralne metode, ki so za ta problem najprimernejše [10, 11].

4.1 Brezdimenzijska oblika enačbe

Za numerično računanje je ugodno enačbe zapisati v brezdimenzijski obliki, saj se tako lahko izognemo numeričnim napakam, ki bi nastale kot posledica računanja z zelo velikimi oziroma z zelo majhnimi števili. Izhodišče ostaja enačba (14), a se omejimo na konkretni primer, ko se kondenzat nahaja v zunanjem harmoničnem potencialu v treh dimenzijah

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) . \quad (15)$$

Brezdimenzijski čas vpeljemo z $\tilde{t} = \omega_x t$ in lego skaliramo z $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/a_0$, kjer je $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$ (karakteristična dolžina harmonskega oscilatorja). Obravnavamo za faktor pomnoženo valovno funkcijo s predpisom $\tilde{\psi} = a_0^{3/2}\psi$. Na ta način lahko časovno odvisno GPE zapišemo v od dimenzij neodvisni obliki (vijuge nad brezdimenzijskimi količinami so izpuščene)

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V_d(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) + \kappa_d|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\psi(\mathbf{r}, t) , \quad (16)$$

kjer je κ parameter medatomske interakcije [10]. Indeks d v potencialu in interakcijskem parametru označuje, da enačbo lahko prilagodimo tudi za računanje v dveh ali eni dimenziji, ko $\mathbf{r} = (x, y)$ ali $\mathbf{r} = x$. Za tri dimenzije potencial zapišemo kot

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2) , \quad (17)$$

pri čemer sta parametra definirana kot $\gamma_y = \omega_y/\omega_x$ in $\gamma_z = \omega_z/\omega_x$. Enačba Grossa in Pitaevskega je za harmonični zunanji potencial določena s tremi parametri v treh dimenzijah, z dvema v dveh, v eni dimenziji pa enačbo določa le parameter κ [10].

Takšna redukcija na nižje dimenzije je uporabna, ker je v eksperimentu možno doseči BEC oblike diska ali cigare, in postane katera izmed dimenzij "nepomembna". Za takšen režim lahko pričakujemo, da bomo lahko kvalitativno pravilno napovedali pojave tudi z računom v manj dimenzijah, ki je ustrezno računsko lažji. Zniževanje dimenzij pa je koristno tudi za analizo metode reševanja, ki jo bom predstavil v nadaljevanju.

4.2 Trotter-Suzukijev razcep

Enačbo Gross-Pitaevskega lahko formalno prepisemo v operatorsko obliko

$$i\partial_t\psi = (\hat{D} + \hat{N})\psi , \quad (18)$$

kjer smo uvedli operator \hat{D} kot linearen operator kinetične energije in \hat{N} kot nelinearen operator, ki predstavlja vsoto potenciala in nelinearnega člena v enačbi (16). Rešitev linearne Schrödingerjeve enačbe lahko formalno zapišemo z operatorjem časovnega razvoja kot $\psi(x, t) = \exp(-it\hat{H})\psi(x, 0)$, začetno stanje torej z eksponentno funkcijo Hamiltonovega operatorja propagiramo v času. Takšen zapis analitično velja za vse čase t . Enačbo bomo reševali numerično, zato se napakam ne bomo mogli izogniti. Zato tudi rešitev enačbe (18), ki sicer ni linearna, formalno zapišemo kot razvoj začetnega stanja z eksponentno funkcijo tokrat nelinearnega operatorja

$$\psi(x, t + dt) = \exp(-idt(\hat{D} + \hat{N}))\psi(x, t) . \quad (19)$$

Pri tem se zavedamo, da v okviru numerične integracije vse zveze veljajo le znotraj enega časovnega koraka [12].

Eksponentna funkcija takšnega sestavljenega operatorja ni eksplicitno izračunljiva, zato ni primerna za uporabo v numeričnih izračunih. Znano pa je, da je operatorska eksponentna funkcija

$\exp(z\hat{A})$ eksplicitno izračunljiva v prikladni bazi (na primer v bazi lastnih funkcij splošnega operatorja \hat{A}). V primeru operatorskih funkcij eksponent vsote seveda ni enak produktu eksponentov, saj operatorja \hat{A} in \hat{B} v splošnem ne komutirata. Za poenostavitev računov se moramo torej poslužiti približka s faktorizacijo, motivacija za katero je Trotterjeva formula

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \exp\left(\frac{z}{n}\hat{A}\right) \exp\left(\frac{z}{n}\hat{B}\right) \right\}^n, \quad (20)$$

ki nam zagotavlja, da za majhne vrednosti eksponenta vsaj približno velja enakost med eksponentom vsote in produktom eksponentov. Natančnost približka s faktorizacijo lahko izboljšamo do drugega reda v z s simetrično shemo [13]

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right) \exp(z\hat{B}) \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right) + \mathcal{O}(z^3). \quad (21)$$

S pomočjo takšne faktorizacijske formule lahko numerično integriramo GPE v okviru spektralnih metod, ki jih predstavim v nadaljevanju.

4.3 Spektralne metode

Spektralne metode so skupina tehnik za numerično reševanje diferencialnih enačb. Iskano funkcijo zapišemo kot (končno) vsoto baznih funkcij in začetno diferencialno enačbo prevedemo na enačbe za koeficiente razvoja, ki poenostavijo problem [14]. Izbira baznih funkcij je odvisna od problema, vsekakor stremimo k temu, da bi problem z metodo poenostavili.

Vrnimo se zdaj na naš konkretni problem. Za časovno odvisno enačbo Gross-Pitaevskega v eni dimenziji, lahko na formalnem zapisu rešitve (19) uporabimo razcep (21), napaka približka z razcepom je odvisna od dolžine časovnega koraka dt . Eksponentna funkcija operatorja \hat{D} je eksplicitno izračunljiva v prostoru valovnih vektorjev k ; za koeficiente Fourierove transformiranke ψ je $\exp(-idt\hat{D}) = \exp(-idt k^2/2)$. Simbolno lahko računamo

$$\begin{aligned} \psi(x, t + dt) &= e^{-\frac{idt}{2}\hat{N}} e^{-idt\hat{D}} e^{-\frac{idt}{2}\hat{N}} \psi(x, t) = \\ &= e^{-\frac{idt}{2}\hat{N}} \mathcal{F}^{-1} \left[e^{-idt k^2/2} \mathcal{F} \left[e^{-\frac{idt}{2}\hat{N}} \psi(x, t) \right] \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Z oznako \mathcal{F} smo označili Fourierovo transformacijo po x , z oznako \mathcal{F}^{-1} pa njeno inverzno transformacijo [12].

Enačba (22) predstavlja predlogo, po kateri lahko zasnujemo algoritem za numerični izračun in ga nato implementiramo.

4.4 Diskretizacija

Zvezno funkcijo prostorske in časovne spremenljivke nadomestimo z naborom kompleksnih funkcijskih vrednosti na diskretni mreži. Lastnosti mreže ključno vplivajo na natančnost izračunov. Diskretizacijo opravimo za eno dimenzijo, posplošitev na več dimenzij namreč ni odvisna od konkretne enačbe (GPE).

Izberemo interval na katerem numerično rešujemo enačbo $x \in [a, b]$, prostorsko velikost mreže $h = \Delta x = (b-a)/M$ za neko sodo pozitivno število M in časovni korak $\tau = \Delta t > 0$. Tedaj označimo

$$x_j := a + j h, \quad t_n := n \tau; \quad j = 0, 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

Notaciji dodamo še $\psi_j^n = \psi(x_j, t_n)$, aproksimacijo valovne funkcije na j -ti točki pri n -tem času. V eksperimentu je kondenzat prostorsko omejen s potencialom in praktično je izbrati dovolj velik interval $[a, b]$, tako da ima na robovih območja valovna funkcija zanemarljivo majhne vrednosti

$\psi_0^n \sim \psi_M^n \sim 0$. V tem primeru sta oba robna pogoja smiselna in ekvivalentna: Dirichletov ($\psi_0^n = \psi_M^n = 0$) in periodični ($\psi_0^n = \psi_M^n$). Za uporabo Fourierove transformacije je mnogo bolj praktičen periodični robni pogoj, medtem ko se za metode končnih diferenc uporablja Dirichletovega.

Izbira velikosti in natančnosti mreže neposredno vpliva na natančnost numerične metode, ki jo uporabljamo. Ker pa je uporabljena spektralna metoda dovolj stabilna, pogosto hujšo omejitev kot metoda predstavljajo fizikalni pojavi, ki jih simuliramo. V primeru enačbe GPE namreč lahko majhne spremembe parametrov privedejo do velikih razlik v rezultatih - konkreten primer so časovne in prostorske modulacije količin. Prostorsko mrežo je potrebno izbrati tako, da dobro opiše morebitne valove, ki bi nastali med časovnim potekom - to za ravni val pomeni več kot dve točki na valovno dolžino, praktično pa jih seveda želimo še vsaj nekaj več. V časovnem delu se lahko spreminja zunanji potencial ali pa vrednost interakcijskega parametra κ_d in časovni korak mora spet dobro vzorčiti časovni potek sprememb, v primeru konstantnega harmonskega potenciala pa je pomembno, da je časovni korak nekajkrat manjši od nihajnega časa v potencialu. V kolikor zadostimo ostrejšim izmed pogojev, ki jih postavljajo na eni strani enačba sama in na drugi strani uporabljena metoda, lahko pričakujemo, da bo numerična simulacija dala fizikalno smiselne rezultate.

4.4.1 Časovno-razcepna spektralna metoda (TSSP)

Metoda teoretično opisana v 4.2 in 4.3 razdeli enačbo v časovnem koraku od t_n do t_{n+1} na dva dela. Efektivno najprej rešujemo:

$$i\partial_t\psi(x, t) = -\frac{1}{2}\partial_{xx}\psi(x, t) , \tag{24}$$

in potem za isti korak še enačbo

$$i\partial_t\psi(x, t) = \frac{x^2}{2}\psi(x, t) + \kappa_1|\psi(x, t_n)|^2\psi(x, t) . \tag{25}$$

Prvo enačbo lahko prek Fourierove transformacije integriramo točno, druga enačba pa je linearna navadna diferencialna enačba, saj se da pokazati, da pri (25) velja tudi $\partial_t|\psi|^2 = 0$ in jo prav tako integriramo točno [11]. Ta razcep simetrično zapišemo po obrazcu (21):

$$\begin{aligned} \psi_j^* &= \exp\left[-i\frac{\tau}{2}\left(\frac{x_j^2}{2} + \kappa_1|\psi_j^n|^2\right)\right]\psi_j^n \\ \psi_j^{**} &= \frac{1}{M}\sum_{l=-M/2}^{M/2-1}\exp\left[-i\tau\frac{k_l^2}{2}\right]\hat{\psi}_l^*\exp[ik_l(x_j - a)], \quad j = 0, 1, \dots, M - 1 \\ \psi_j^{n+1} &= \exp\left[-i\frac{\tau}{2}\left(\frac{x_j^2}{2} + \kappa_1|\psi_j^{**}|^2\right)\right]\psi_j^{**}, \quad j = 0, 1, \dots, M - 1 , \end{aligned} \tag{26}$$

kjer $\hat{\psi}_l^*$ predstavlja Fourierov koeficient vmesne funkcije ψ^* in je definiran prek diskretne Fourierove transformacije

$$k_l = \frac{2\pi l}{b - a}, \quad \hat{\psi}_l^* = \sum_{j=0}^{M-1}\psi_j^*\exp[-ik_l(x_j - a)], \quad l = -M/2, \dots, M/2 - 1 . \tag{27}$$

Napaka aproksimacije izvira izključno iz časovnega razcepa enačbe (Trotter Suzukijevega razcepa). Povzeto po [10].

Tako definirana metoda se izkaže za najbolj učinkovit način reševanja GPE. TSSP je eksplicitna metoda, saj na nobenem koraku ni potrebno reševati sistema enačb. Metoda ohranja vsoto $|\psi_j|^2$ (torej število delcev). Časovna zahtevnost je $\mathcal{O}(M^d \log(M))$, kar ustreza zahtevnosti FFT. Tudi iz sheme (26) je razvidno, da razen Fourierovih transformacij algoritem zahteva le množenje vrednosti na mreži s števili.

4.4.2 Alternativne metode

Med potencialne alternativne načine reševanja spada veliko metod, a eksplicitne in implicitne metode končnih diferenc niso primerljive z učinkovitostjo TSSP metode [10]. Kot alternativa se omenja Crank-Nicolsonova metoda končnih diferenc (CNFD), a je časovno izjemno zahtevna, saj na vsakem koraku zahteva reševanje sklopljenega sistema nelinearnih enačb, ki ima časovno zahtevnost mnogo višjo od $\mathcal{O}(M^d)$ (odvisnost za sistem linearnih enačb), kjer d predstavlja dimenzijo problema. Pri reševanju s CNFD se tudi ni mogoče izogniti računanju z numerično natančnostjo, saj v nasprotnem primeru račun ne ohranja energije [11]. Časovno zahtevnost izboljšajo relaksacijska metoda končnih diferenc (ReFD) in semi-implicitna metoda končnih diferenc (SIFD), ki v primerjavi s CNFD aproksimirata nelinearen člen v enačbi GPE in s tem poenostavita sistem na vsakem koraku na linearen sistem enačb (v eni dimenziji gre kar za tridiagonalen sistem, ki ga s Thomasovim algoritmom rešimo v $\mathcal{O}(M)$) [11]. O izbiri metode na koncu odločajo predvsem praktični vidiki, torej v grobem razmerje natančnosti in računske zahtevnosti ter zahtevnosti za implementacijo. V vseh primerjavah, ki so jih opravili [10] in [11], pa je TSSP metoda natančnejša in manj računsko zahtevna od vseh zgoraj navedenih metod in je prepričljivo najustreznejši način za simulacijo Bose-Einsteinovih kondenzatov.

4.5 Simulacija

Simulacijo začnemo z iskanjem lastnega stanja sistema, ki ga potem izpostavimo nenadni spremembi in opazujemo njegov časovni razvoj. Stacionarne rešitve GPE (16) za atome brez medsebojne interakcije so enake lastnim stanjem harmonskega oscilatorja. Najnižje stanje za kvantni harmonski oscilator predstavlja funkcija $\psi(x) = \pi^{-1/4} \exp(-x^2/2)$, ki jo vzamemo tudi za začetni približek lastnega stanja BEC z interakcijo v harmonični pasti.

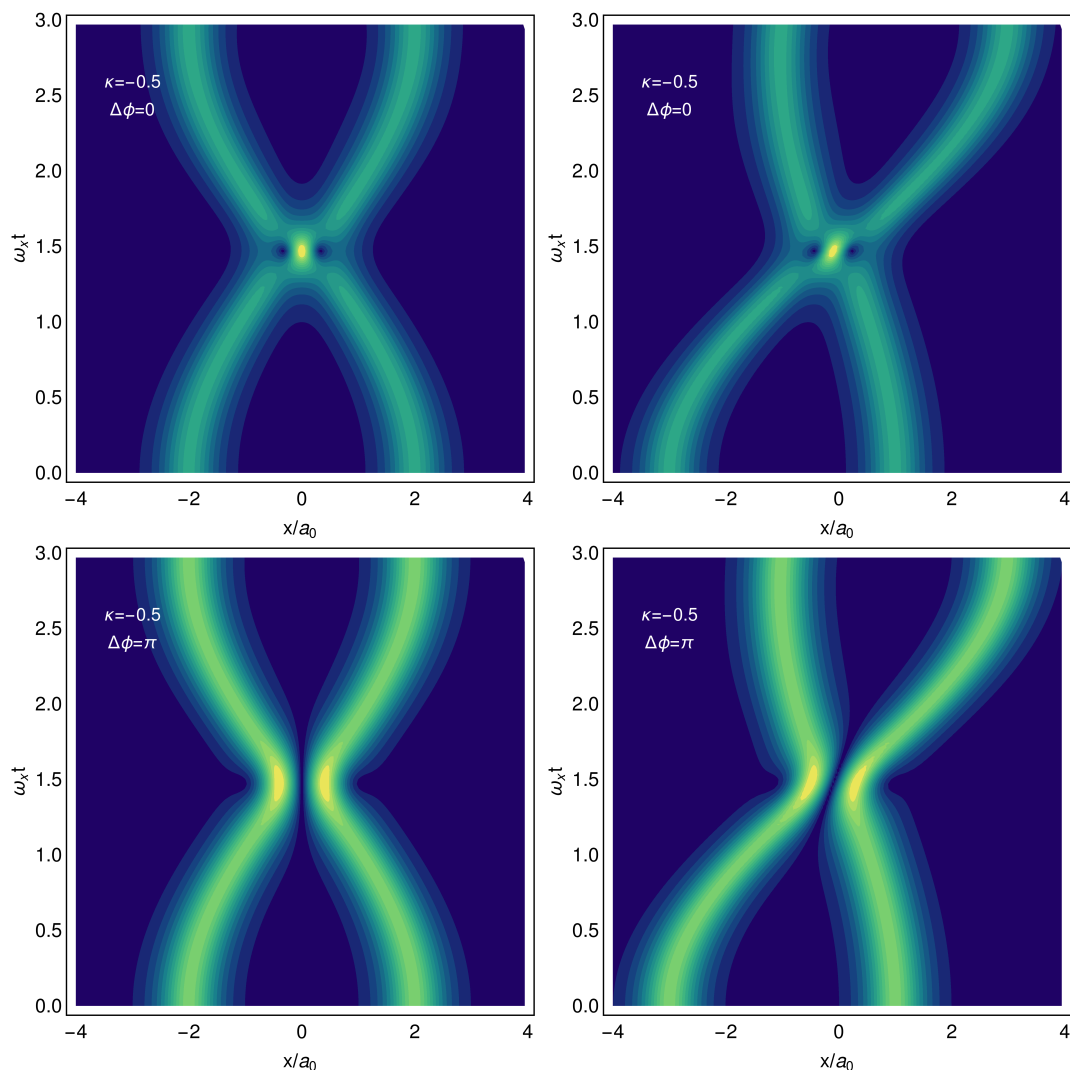
Boljši približek lastnega stanja poiščemo z iteracijo v imaginarnem času. To je standarden postopek za numerično iskanje osnovnega stanja, ki v linearni teoriji temelji na razvoju po lastnih stanjih. Če vpeljemo imaginarni čas τ kot $\tau = it$ vidimo, da vsi koeficienti razvoja v času eksponentno pojemajo, saj za set lastnih funkcij linearnega hamiltonjana $|\psi_i\rangle$ velja

$$|\psi, t\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} c_i |\psi_i\rangle e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} = \sum_{i=0}^{\infty} c_i |\psi_i\rangle e^{-\frac{E_i}{\hbar}\tau} = e^{-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau} |\psi, 0\rangle . \quad (28)$$

Najpočasneje pojema ravno koeficient pred stanjem z najnižjo energijo, torej osnovnim stanjem sistema. Iteracijo izvajamo v kratkih časovnih intervalih (z metodo opisano v 4.3) in na vsakem koraku valovno funkcijo normiramo. Na tak način valovna funkcija konvergira proti osnovnemu stanju sistema. Ko s takšno metodo poiščemo lastno stanje, spremenimo parametre sistema in z razvojem v realnem času opazujemo dinamiko kondenzata. Za vse numerične simulacije sem uporabljal programsko opremo, ki jo je prispeval dr. Rok Žitko [15].

4.5.1 Trk solitonov

V primeru brez zunanega potenciala ima GPE za privlačno interakcijo med atomi ($\kappa_1 < 0$) v 1D točno solitonsko rešitev [16]. Soliton je valovni paket, ki pri potovanju s konstantno hitrostjo in pri trkih z drugimi solitoni ohranja svojo obliko. Za njegovo obstojnost so ključni nelinearni pojavi, ki nasprotujejo disperziji. Radi bi preverili, ali osnovno stanje BEC v harmonski pasti izkazuje solitonske lastnosti. Če osnovno stanje sistema v primeru privlačne interakcije izmaknemo iz minimuma potenciala, valovni paket niha in pri tem ohranja svojo obliko.



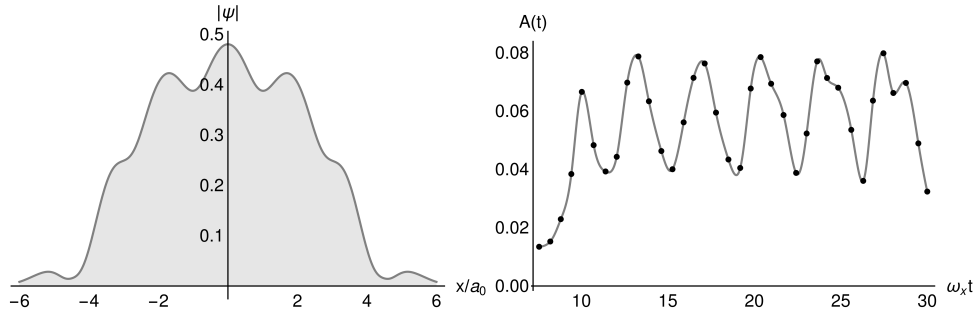
Slika 1. Simetričen in nesimetričen trk solitonov v harmonskem potencialu. Zgoraj: solitona z enako fazo, spodaj: solitona z nasprotno fazo.

Oglejmo si trk dveh solitonov v eni dimenziji. Iz osnovnega stanja sistema sestavimo dva valovna paketa, vsakega na svoji strani minimuma potenciala. Poleg lokacije obeh solitonov je pomembna tudi faza njune valovne funkcije in na mestu trka lahko pričakujemo kvantne interferenčne pojave, zanimali pa se bomo seveda za $|\psi|^2$. Ločimo lahko dva mejna primera: solitona sta v fazi in solitona sta v protifazi. Na sliki 1 so prikazani trki solitonov. Pri trku solitonov v fazi je opazen intenziven vrh na mestu trka, takoj po trku pa imata solitona enako hitrost kot ob vstopu. Pri trku solitona ohranita svoje lastnosti tudi v primeru protifaze $\Delta\phi = \pi$, kar prav tako vidimo na sliki 1. Simulacija predvideva, da solitona nemoteno preideta drug skozi drugega, kar je razvidno iz naklona obeh črt, ki ju v času opišeta vrhova solitonov - naklon pred trkom je enak kot po njem. Solitoni se med seboj torej ne odbijajo, hitrost ostaja enako predznačena za oba solitona. Takšno obnašanje BEC je bilo kvalitativno potrjeno tudi v eksperimentih [16].

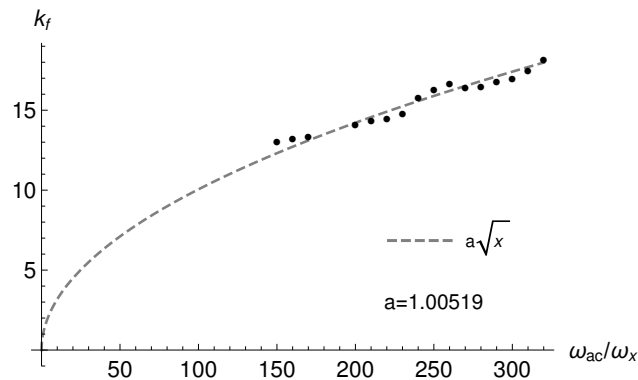
4.5.2 Modulacija interakcije

Enačba (16) ima v eni dimenziji en sam prost parameter, κ . Zanimiv je primer, ko je κ odvisen od časa, saj je mogoče predznak in moč medatomske interakcije spreminjati tudi v eksperimentu. V numeričnem računu za časovni potek $\kappa(t)$ privzamemo znano obliko signala $\kappa(t) = \kappa_{DC} + \kappa_{AC} \sin \omega_{ac} t$.

Časovni razvoj začnemo v lastnem stanju sistema pri $\kappa = \kappa_{DC}$. Spreminjanje valovne funkcije v času spominja na vzbujanje nihala, saj sta obdobje neurejenega vzbujanja in urejenega nihanja dokaj jasno ločeni. Modulacija interakcije povzroči periodično spreminjanje valovne funkcije. Ob približno nespremenjeni ovojnici lahko v $|\psi|$ opazimo pojav, ki spominja na stoječe valovanje (levo na sliki 2). Sčasoma se vzpostavi stacionarno stanje, v katerem pa amplituda modulacije ni konstantna, temveč se periodično spreminja s časom. Spreminjanje prikazuje graf desno na sliki 2.



Slika 2. Časovno odvisni parameter $\kappa(t) = 3 + 2.5 \sin 20\omega_x t$ Levo: značilna oblika absolutne vrednosti valovne funkcije kondenzata, desno: časovna odvisnost amplitude gostotne modulacije.



Slika 3. Valovno število gostotne modulacije pri različnih vrednostih frekvence vzbujanja ω_{ac} , brez zunanega harmoničnega potenciala in parameter $\kappa(t) = -0.3 + 3.5 \sin \omega_{ac} t$

Med seboj lahko primerjamo tudi lastnosti modulacije gostote pri različnih parametrih vzbujanja. Takšne odvisnosti so tudi eksperimentalno lažje preverljive, saj je večina merilnih tehnik invazivnih in je le s težavo mogoče spremljati številsko gostoto kondenzata v času. Za valovno število gostotne modulacije velja preprosta analitična formula $k_f = \sqrt{m\omega_{ac}/\hbar}$ [17], ki sem jo preveril z numeričnimi izračuni. Rezultat je prikazan na sliki 3, od koder je razvidno, da se izračuni dobro ujemajo z napovedjo, celo do numerične vrednosti prilagoditvenega parametra a . Vsaka točka na grafu predstavlja izvedeno simulacijo, torej celoten razvoj začetnega stanja v času.

5. Zaključek

Bose-Einsteinovi kondenzati so fizikalni sistemi, ki nam omogočajo neposreden vpogled v kvantnomehanske pojave. Ker je mogoče atome natančno nadzorovati z laserji in magnetnimi polji, se na tem področju odpira ogromno možnosti za eksperimente. Za boljše načrtovanje smiselnih eksperimentov so potrebni trdni teoretični temelji, ki jih v primeru BEC predstavlja numerične simulacije.

Enačba Grossa in Pitaevskega določa dinamiko sistema in zaradi nelinearnosti enačbe se ni mogoče izogniti numeričnemu reševanju. V tej vlogi je zelo uporabna predstavljena spektralna metoda TSSP, ki omogoča učinkovito računanje, hkrati pa je časovno simetrična in ohranja normalizacijo [11].

Kljub temu da brezdimenzijska enačba Gross-Pitaevskega nima veliko prostih parametrov, omogoča časovno odvisni problem veliko možnosti za raziskave lastnosti Bose-Einsteinovih kondenzatov. Velika prednost tovrstnih raziskav pa je tesna povezava z eksperimentom, ki odloča o pravilnosti napovedi.

Zahvala

Rad bi se zahvalil mentorju dr. Roku Žitku za vsa izčrpna pojasnila, nasvete in konstruktivno kritiko pri nastajanju članka.

LITERATURA

- [1] "Bose-Einstein statistics - Wikipedia, the free encyclopedia." https://en.wikipedia.org/wiki/Bose%E2%80%93Einstein_statistics#History. Dostop 24. 3. 2019.
- [2] "Bose-Einstein condensate - Wikipedia, the free encyclopedia." https://en.wikipedia.org/wiki/Bose%E2%80%93Einstein_condensate. Dostop 24. 3. 2019.
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor," *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [4] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2 ed., 2002.
- [5] "Cryogenics: Low temperatures, high performance." <https://home.cern/science/engineering/cryogenics-low-temperatures-high-performance>. Dostop 27. 2. 2019.
- [6] T. Mežnaršič, "Lasersko hlajenje cezijeveh atomov," 2016.
- [7] "Spletna stran laboratorija za hladne atome IJS." <http://ultracool.ijs.si>. Dostop 28. 2. 2019.
- [8] "Scattering length - Wikipedia, the free encyclopedia." https://en.wikipedia.org/wiki/Scattering_length. Dostop 10. 3. 2019.
- [9] J. Rogel-Salazar, "The Gross-Pitaevskii equation and Bose-Einstein condensates," *European Journal of Physics*, vol. 34, p. 247, 2013.
- [10] W. Bao, D. Jaksch, and P. A. Markowich, "Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation," *Journal of Computational Physics*, vol. 187, pp. 318–342, 2003.
- [11] X. Antoine, W. Bao, and C. Besse, "Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equations," *Computer Physics Communications*, vol. 184, pp. 2621–2633, 2013.
- [12] "Split-step method - Wikipedia, the free encyclopedia." https://en.wikipedia.org/wiki/Split-step_method. Dostop 17. 3. 2019.
- [13] T. Prosen, "POGLAVJE II: Trotter-Suzukijev razcep: Simpleklična integracija in kvantni mnogodelčni problemi."
- [14] "Spectral method - Wikipedia, the free encyclopedia." https://en.wikipedia.org/wiki/Spectral_method. Dostop 18. 3. 2019.
- [15] R. Žitko, "GPE Ljubljana - Gross-Pitaevski equation solver." <http://auger.ijs.si/gpe/>. Dostop 7. 4. 2019.
- [16] T. Arh, "Solitary matter-waves in Bose-Einstein condensates," *Matrika*, vol. 5, no. 2, 2018.
- [17] H. Fu, L. Feng, B. M. Anderson, L. W. Clark, J. Hu, J. W. Andrade, C. Chin, and K. Levin, "Density Waves and Jet Emission Asymmetry in Bose Fireworks," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 121, p. 243001, 2018.