Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, А. В. Чуркин, Об одном решении уравнения Гросса–Питаевского для конденсатной волновой функции, *Матем. заметки*, 2005, том 78, выпуск 4, 604–607

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm2618>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 18:22:45

УДК 519.21

ОБ ОДНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ГРОССА–ПИТАЕВСКОГО ДЛЯ КОНДЕНСАТНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

В. П. Маслов, А. В. Чуркин

В работе рассматривается приближенное решение уравнения Гросса–Питаевского в одномерном случае в виде собственной функции основного состояния гармонического осциллятора. Численный эксперимент показывает, что данное приближенное решение с высокой точностью удовлетворяет уравнению Гросса–Питаевского для потенциала межатомного взаимодействия в виде суперпозиции гауссовых функций.

Библиография: 4 названия.

Согласно [1]–[4] для описания состояния слабо неидеального бозе газа при близкой к абсолютному нулю температуре используется конденсатная волновая функция $\Theta(x, t)$, которая удовлетворяет уравнению Гросса–Питаевского

$$i\hbar \frac{\partial \Theta(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Theta(x, t) + \Theta(x, t) \int |\Theta(y, t)|^2 \Phi(|x - y|) dy. \quad (1)$$

Если записать решение уравнения (1) как

$$\Theta(x, t) = \Psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right),$$

то уравнение для стационарной части конденсатной волновой функции $\Psi(x)$ примет вид стационарного уравнения Шрёдингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x) + (E - U(x)) \Psi(x) = 0 \quad (2)$$

с самосогласованным потенциалом

$$U(x) = \int |\Psi(y)|^2 \Phi(|y - x|) dy. \quad (3)$$

Здесь $\Phi(|y - x|)$ – потенциал парного взаимодействия частиц слабо неидеального бозе газа.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 05-01-00824.

Известно, что уравнение (2) с потенциалом (3) в ограниченном объеме V имеет решение вида

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipx/\hbar}.$$

Опишем другой возможный вид приближенного решения нелинейного уравнения (2) с потенциалом (3) в одномерном случае с граничными условиями

$$\Psi(\pm\infty) = 0 \quad (4)$$

вблизи некоторой произвольной точки x_0 . В качестве модели потенциала парного взаимодействия выберем комбинацию двух гауссовых функций с амплитудами U_1, U_2 и дисперсиями σ_1, σ_2 :

$$\Phi(|x - y|) = U_1 \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{\sigma_1}\right) + U_2 \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{\sigma_2}\right). \quad (5)$$

ТЕОРЕМА. *Существует приближенное решение уравнения (2) с потенциалом (5), записываемое в виде функции основного состояния гармонического осциллятора*

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2\right) \quad (6)$$

с собственной частотой

$$\omega = -\frac{U_0}{\hbar} \frac{2r_1}{(1 + r_1)^{3/2}} - \frac{\gamma U_0}{\hbar} \frac{2r_2}{(1 + r_2)^{3/2}} > 0, \quad (7)$$

где параметры U_0, γ, r_1, r_2 удовлетворяют неравенству (7) и связаны с параметрами потенциала (5) следующими соотношениями:

$$\sigma_1 = \frac{1}{r_1} \frac{\hbar}{m\omega}, \quad \sigma_2 = \frac{1}{r_2} \frac{\hbar}{m\omega}, \quad U_1 = U_0, \quad U_2 = \gamma U_0. \quad (8)$$

При этом частота ω , вычисляемая по формуле (7), удовлетворяет следующему условию согласования:

$$U''(x_0) = m\omega^2,$$

а значение энергии E соответствует энергии основного состояния осциллятора, сдвинутому на постоянную величину $U(x_0)$:

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + U(x_0) = E_{\text{osc}} + U(x_0).$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Подставляя в формулу (3) потенциал (4) и волновую функцию (6), используя параметры (8) после интегрирования по y , получим

$$U(x) = \frac{U_0}{\sqrt{r_1 + 1}} \exp\left(-\frac{m\omega r_1}{\hbar(r_1 + 1)}(x - x_0)^2\right) + \frac{\gamma U_0}{\sqrt{r_2 + 1}} \exp\left(-\frac{m\omega r_2}{\hbar(r_2 + 1)}(x - x_0)^2\right). \quad (9)$$

После подстановки решения (6) в уравнение (2) с учетом (8) получаем

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_0(x)}{\partial x^2} + (E - U(x)) \Psi_0(x) \\ &= U_0 \left(\frac{cd}{\pi}\right)^{1/4} e^{-cd(x-x_0)^2/2} \left(c_1(1 - e^{-c_3 cd(x-x_0)^2})\right. \\ &\quad \left.+ c_2(1 - e^{-c_4 cd(x-x_0)^2}) + c^2 d^2 \frac{(x - x_0)^2}{2}\right), \end{aligned}$$

где безразмерные параметры имеют вид

$$c = -2(c_1 c_3 + c_2 c_4),$$

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + r_1}}, \quad c_2 = \frac{\gamma}{\sqrt{1 + r_2}}, \quad c_3 = \frac{r_1}{1 + r_1}, \quad c_4 = \frac{r_2}{1 + r_2},$$

а d – масштабный множитель: $d = mU_0/\hbar^2$.

Невязка рассматриваемого приближенного решения (6) вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \|f(x)\| &= \left(\int f^2(x) dx\right)^{1/2} \\ &= U_0 \left(\frac{3}{16} c^2 + (c_1 + c_2)^2 + \frac{c(c_1 + c_2)}{2} - \frac{2c_1^2}{\sqrt{1 + c_3}}\right. \\ &\quad \left.- \frac{2c_2^2}{\sqrt{1 + c_4}} - \frac{2c_1 c_2}{\sqrt{1 + c_3}} - \frac{2c_1 c_2}{\sqrt{1 + c_4}} + \frac{2c_1 c_2}{\sqrt{1 + c_3 + c_4}}\right. \\ &\quad \left.+ \frac{c_1^2}{\sqrt{1 + 2c_3}} + \frac{c_2^2}{\sqrt{1 + 2c_4}} - \frac{cc_1}{2(1 + c_3)^{3/2}} - \frac{cc_2}{2(1 + c_4)^{3/2}}\right)^{1/2}. \quad (10) \end{aligned}$$

В тех же обозначениях

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + U(x_0) = U_0 \left(\frac{c}{2} + (c_1 + c_2)\right). \quad (11)$$

Тогда относительная погрешность в определении энергии для приближенного решения (6) имеет вид

$$\delta E = \frac{\|f(x)\|}{E}. \quad (12)$$

Для иллюстрации полученного результата выберем $\gamma = -6$. Пусть $x_0 = 0$, $U_0 = 1000$ К, $m = 6 \times 10^{-27}$ кг, $r_1 = 0.1$, $r_2 = 10^{-6}$. Данным значениям соответствует собственная вычисленная по формуле (7) частота $\omega = 2.13 \times 10^{13}$ с $^{-1}$ и энергия основного состояния $E_{\text{osc}} = \hbar\omega/2 = 86.67$ К. При этом величина невязки по отношению к

полной энергии нижнего энергетического уровня, вычисленная по формулам (10)–(12) дает погрешность приближенного решения менее 1%:

$$\delta E = \frac{\|f(x)\|}{E} \approx 0.00476.$$

На графике (см. рис. 1) показаны самосогласованный потенциал $U(x)$, вычисленный по формуле (9) с указанными выше числовыми параметрами, потенциал осциллятора

$$U_{\text{osc}}(x) = U(x_0) + \frac{m\omega x^2}{2}$$

с той же собственной частотой ω и соответствующий энергетический уровень

$$E_{\text{osc}} = \frac{\hbar\omega}{2},$$

которому соответствует эффективная скорость $v = \sqrt{2E_{\text{osc}}/m} = 596$ м/с. Из графика следует, что ширина потенциальной ямы на уровне основного состояния составляет около 1 Å.

Рис. 1. Самосогласованный потенциал, отвечающий основному состоянию осциллятора

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Gross E. P. Hydrodynamics of a superfluid condensate // J. Math. Phys. A. 1963. V. 4. P. 195–207.
- [2] Питаевский Л. П. Вихревые нити в неидеальном бозе-газе // ЖЭТФ. 1961. Т. 40. № 2. С. 646–651.
- [3] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния вещества. М.: Наука, 1978.
- [4] Bongs K., Sengstock K. Physics with Coherent Matter Waves // Report on Progress in Physics. A. 2004. V. 67. P. 907–963.

Московский государственный университет им М. В. Ломоносова
E-mail: viktor_maslov@hotmail.com, churandr@mail.ru

Поступило
10.03.2005
Исправленный вариант
28.04.2005