

Аналитические пробные функции для моделирования двумерного бозе-конденсата

Ю.В.Лиханова, С.Б.Медведев, М.П.Федорук, П.Л.Чаповский

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.

Ключевые слова: бозе-эйнштейновские конденсаты, двумерное уравнение Гросса–Питаевского, вариационный метод, пробные функции, приближенные аналитические решения.

1. Введение

Многие важные явления современной физики описываются нелинейными уравнениями, точные решения которых, к сожалению, в ряде случаев еще не найдены. В настоящее время эффективным способом решения задач нелинейной физики являются численные методы. Однако применение численных методов часто оказывается очень трудоемким, а полученные с их помощью решения не универсальны. В этой ситуации особенно полезными для задач нелинейной физики становятся приближенные аналитические решения. С их помощью возможны приближенные решения прямых и обратных задач, эффективный анализ экспериментальных данных. В частности, для бозе-эйнштейновских конденсатов становится возможным восстановление из экспериментальных данных коэффициентов уравнения Гросса–Питаевского, например, определение модифицированного излучением коэффициента межатомного взаимодействия в бозе-конденсате [1].

В работе [2] на основе вариационного подхода был сформулирован метод получения приближенных аналитических решений 2D уравнения Гросса–Питаевского. Основное внимание уделялось динамической задаче разлета бозе-газа после выключения магнитной ловушки. В настоящей работе с помощью предложенного в [2] метода получены приближенные аналитические решения стационарного 2D уравнения Гросса–Питаевского и исследованы их свойства. Точность найденных приближенных аналитических решений определена в настоящей работе их сравнением с прямым численным решением стационарного 2D уравнения Гросса–Питаевского.

Точность найденных приближенных аналитических решений определена в настоящей работе их сравнением с прямым численным решением стационарного 2D уравнения Гросса–Питаевского.

2. 2D уравнение Гросса–Питаевского

Теоретический анализ бозе-конденсатов в настоящее время традиционно основывается на уравнении Гросса–Питаевского [3]. Это уравнение стало особенно интенсивно изучаться после первых экспериментальных работ по созданию бозе-эйнштейновских конденсатов (БЭК) разреженных газов [4, 5]. Настоящее исследование было также инициировано работой [6], в которой проводилось сравнение экспериментальных данных и численных расчетов по разлету бозе-конденсата атомов рубидия после выключения магнитной ловушки. Трехмерное уравнение Гросса–Питаевского для волновой функции конденсата $\Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t})$, $\mathbf{r} = (x, y)$ имеет вид [7]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t})}{\partial \bar{t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t}) + V(\mathbf{r}, z) \Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t}) + NU_0 |\Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t})|^2 \Psi(\mathbf{r}, z, \bar{t}). \quad (1)$$

Здесь волновая функция нормирована на единицу; N – число конденсированных частиц; $V(\mathbf{r}, z) = m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)/2$ – гармонический потенциал ловушки; $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ – частоты колебаний атомов в ловушке; m – масса атома; $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ – межатомное взаимодействие; a – длина рассеяния s -волны.

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

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

движение по одной координате оказывается «замороженным». В этом случае волновая функция конденсата может быть представлена в виде [7]

Ю.В.Лиханова. Институт вычислительных технологий СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 6; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; e-mail: yulia.likhanova@gmail.com

С.Б.Медведев. Институт вычислительных технологий СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 6; e-mail: medvedev@ict.nsc.ru

М.П.Федорук. Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; Институт вычислительных технологий СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 6; e-mail: mifester@gmail.com

П.Л.Чаповский. Институт автоматизации и электротехники СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 1; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; e-mail: chapovsky@iae.nsk.su

$$\Psi(r, z, \bar{t}) = \Psi_r(r, \bar{t}) \frac{1}{\pi^{1/4} l_z^{1/2}} \exp(-z^2/2l_z^2),$$

$$l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z},$$

а $\Psi_r(r, \bar{t})$ находится как решение 2D уравнения Гросса–Питаевского

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_r(r, \bar{t})}{\partial \bar{t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \Psi_r(r, \bar{t}) + V_r \Psi_r(r, \bar{t}) + \frac{N U_0}{\sqrt{2\pi} l_z} |\Psi_r(r, \bar{t})|^2 \Psi_r(r, \bar{t}), \quad (2)$$

где $V(r) = 1/2 m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2)$, с нормировкой

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\Psi_r(r, \bar{t})|^2 dr = 1.$$

В настоящей статье мы ограничимся анализом 2D бозе-конденсатов, которые описываются уравнением (2). Для удобства будем рассматривать далее 2D уравнение Гросса–Питаевского в безразмерном виде,

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{s}{2} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) + \sigma |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t), \quad (3)$$

где $V(x) = 1/2 (a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2)$, с нормировкой

$$N = \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (4)$$

Для сведения уравнения (2) к уравнению (3) в безразмерных переменных необходимо провести замену $\bar{t} = t\omega_x/\sqrt{s}$, $r = x/r_s$ и $\Psi_r(r, \bar{t}) = r_s \psi(x, t)$; при этом коэффициенты уравнений связаны между собой следующим образом:

$$a_1 = 1, \quad a_2 = \omega_y/\omega_x, \quad s = (l_x/r_s)^4, \quad \sigma = \delta s^{5/4}, \quad (5)$$

$$\delta = 2\sqrt{2\pi} aN/(l_x l_z), \quad l_x = \sqrt{\hbar/(m\omega_x)}, \quad l_z = \sqrt{\hbar/(m\omega_z)},$$

где r_s – характерный размер конденсата (в случае слабо взаимодействующего конденсата можно взять $r_s = O(l_x)$).

3. Вариационное решение задачи

Уравнение (3) может быть получено из стандартного действия (подробнее см. в [2])

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{i}{2} \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} \right) dx - \mathcal{H} \right] dt \quad (6)$$

с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^2} \left[\frac{s}{2} |\nabla \psi|^2 + V |\psi|^2 + \frac{\sigma}{2} |\psi|^4 \right] dx. \quad (7)$$

Введем представление

$$\psi(x, t) = B(x, t) \exp(i\varphi(x, t)), \quad (8)$$

где $B = (x, t)$ и $\varphi(x, t)$ – вещественные функции. Можно показать, что \mathcal{H} содержит четные степени: $B^2(x, t)$ и $B^4(x, t)$.

Потенциал $V(x)$ симметричен относительно отражений от координатных осей, поэтому функции φ и B^2 также являются симметричными. Для фазы φ ограничимся первыми членами разложения в ряд Маклорена,

$$\varphi(x, t) = \varphi_0 + \varphi_1 x_1^2 + \varphi_2 x_2^2, \quad (9)$$

а функцию B^2 представим в виде

$$B^2(x_1, x_2, t) = A f(B_1 x_1, B_2 x_2). \quad (10)$$

Здесь $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, A, B_1, B_2$ – функции, зависящие от времени; $f(\xi)$ ($\xi = (\xi_1, \xi_2)$) – некоторая симметричная пробная функция, нормированная так, что нулевой момент и вторые моменты равны единице:

$$\int_{\mathbb{R}^2} \xi f(\xi) d\xi = 0, \quad \int_{\mathbb{R}^2} f(\xi) d\xi = 1, \quad \int_{\mathbb{R}^2} \xi_i^2 f(\xi) d\xi = 1.$$

Примеры задания пробных функций $f(\xi)$ рассмотрены в п.4.1.

Представления (9) и (10) позволяют заменить действие S (6) для уравнения (3) на его конечномерную аппроксимацию

$$S = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(Q_0 \frac{dP_0}{dt} + Q_1 \frac{dP_1}{dt} + Q_2 \frac{dP_2}{dt} + H \right) dt, \quad (11)$$

где гамильтониан

$$H = \frac{s}{2} (P_1^2 + P_2^2) + \frac{s Q_0^2}{2} \left(\frac{C_1}{Q_1^2} + \frac{C_2}{Q_2^2} \right) + \frac{1}{2} (a_1^2 Q_1^2 + a_2^2 Q_2^2) + \frac{\sigma Q_0^3}{2} \frac{C_0}{Q_1 Q_2}. \quad (12)$$

Здесь константы C_0, C_1, C_2 определяются через интегралы от функции $f(\xi)$:

$$C_0 = \int_{\mathbb{R}^2} f^2 d\xi_1 d\xi_2, \quad C_i = \int_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{\partial f^{1/2}}{\partial \xi_i} \right)^2 d\xi_1 d\xi_2, \quad i = 1, 2. \quad (13)$$

Параметры P_1, P_2, Q_1, Q_2 связаны с функциями $B(x, t)$ и $\varphi(x, t)$ следующим образом:

$$A = \frac{Q_0^2}{Q_1 Q_2}, \quad B_1 = \frac{Q_0^{1/2}}{Q_1}, \quad B_2 = \frac{Q_0^{1/2}}{Q_2}, \quad (14)$$

$$\varphi_1 = \frac{P_1}{2Q_1}, \quad \varphi_2 = \frac{P_2}{2Q_2},$$

где Q_0 – нулевой момент; Q_1, Q_2 – соответствующие характерные размеры функции B^2 .

Гамильтониан H не зависит от P_0 , поэтому величина Q_0 является интегралом конечномерной системы, задаваемой (11), и совпадает с интегралом исходной непрерывной системы (3); в соответствии с нормировкой (4) $Q_0 = N = 1$. Уравнение (3) может быть сведено к конечномерным уравнениям движения [2]

$$\frac{dP_1}{dt} = -a_1^2 Q_1 + \frac{s C_1}{Q_1^3} + \frac{\sigma}{2} \frac{C_0}{Q_1^2 Q_2}, \quad \frac{dQ_1}{dt} = s P_1, \quad (15)$$

$$\frac{dP_2}{dt} = -a_2^2 Q_2 + \frac{sC_2}{Q_2^3} + \frac{\sigma}{2} \frac{C_0}{Q_1 Q_2^2}, \quad \frac{dQ_2}{dt} = sP_2, \quad (16)$$

которые получаются варьированием конечномерного действия (11).

Таким образом, задача нахождения решения (8) сводится к определению величин Q_1, Q_2, P_1 и P_2 по заданным параметрам задачи a_1, a_2, s, σ . Параметры C_0, C_1, C_2 задаются формой нормированной пробной функции $f(\xi)$ по формуле (13).

Для нахождения стационарного решения гамильтоновой системы (11), (12) достаточно в уравнениях движения (15), (16) приравнять нулю производные по времени. Это дает равенство нулю импульсов, $P_1 = P_2 = 0$, и систему алгебраических уравнений для размеров Q_1 и Q_2 :

$$-a_1^2 Q_1 + \frac{sC_1}{Q_1^3} + \frac{\sigma}{2} \frac{C_0}{Q_1^2 Q_2} = 0, \quad (17)$$

$$-a_2^2 Q_2 + \frac{sC_2}{Q_2^3} + \frac{\sigma}{2} \frac{C_0}{Q_1 Q_2^2} = 0. \quad (18)$$

Численное решение этих уравнений дает стационарные значения Q_1, Q_2 , подстановка которых в выбранную пробную функцию (10) дает искомое стационарное решение (см. п. 4.2):

$$B^2(x_1, x_2) = f\left(\frac{1}{Q_1} x_1, \frac{1}{Q_2} x_2\right) \frac{1}{Q_1 Q_2}. \quad (19)$$

Стационарное значение химического потенциала μ находим из уравнения

$$\mu = -\frac{dP_0}{dt} = \frac{\partial H}{\partial Q_0} = sQ_0 \left(\frac{C_1}{Q_1^2} + \frac{C_2}{Q_2^2} \right) + \frac{3}{2} \sigma C_0 \frac{Q_0^2}{Q_1 Q_2}.$$

Если задать параметры ловушки a_1, a_2 и размеры конденсата Q_1, Q_2 , то параметры s и σ можно найти из формул

$$s = \frac{Q_1^2 Q_2^2 (a_2^2 Q_2^2 - a_1^2 Q_1^2)}{C_2 Q_1^2 - C_1 Q_2^2}, \quad (20)$$

$$\sigma = 2 \frac{Q_1 Q_2 (C_2 a_1^2 Q_1^4 - C_1 a_2^2 Q_2^4)}{C_0 (C_2 Q_1^2 - C_1 Q_2^2)}.$$

Поскольку мы рассматриваем только положительные значения s и σ , то не все комбинации исходных параметров соответствуют этому условию. Возможны две взаимоисключающие ситуации, при которых s и σ положительны:

$$\frac{a_1^2}{a_2^2} \leq \frac{Q_2^2}{Q_1^2} \leq \sqrt{\frac{C_2}{C_1}} \frac{a_1}{a_2}, \quad \sqrt{\frac{C_2}{C_1}} \frac{a_1}{a_2} \leq \frac{Q_2^2}{Q_1^2} \leq \frac{a_1^2}{a_2^2}. \quad (21)$$

Далее будем считать, что $a_2 \sqrt{C_2} \geq a_1 \sqrt{C_1}$, и рассматривать первое условие из (21), дающее ограничение на отношение размеров.

Воспользуемся гамильтонианом (12) вариационной формулировки задачи и введем обозначения для его линейной (l), потенциальной (v) и нелинейной (n) частей:

$$l = \frac{s}{2} \left(\frac{C_1}{Q_1^2} + \frac{C_2}{Q_2^2} \right), \quad v = \frac{1}{2} (a_1^2 Q_1^2 + a_2^2 Q_2^2), \quad n = \frac{\sigma C_0}{2} \frac{1}{Q_1 Q_2}.$$

Подставив значения s и σ в l, n и H , получим

$$l = \frac{(a_2^2 Q_2^2 - a_1^2 Q_1^2)(C_2 Q_1^2 + C_1 Q_2^2)}{2(C_2 Q_1^2 - C_1 Q_2^2)},$$

$$n = \frac{C_2 a_1^2 Q_1^4 - C_1 a_2^2 Q_2^4}{C_2 Q_1^2 - C_1 Q_2^2}, \quad (22)$$

$$H = l + v + n = 2v = a_1^2 Q_1^2 + a_2^2 Q_2^2.$$

Выражение для гамильтониана следует из вириального соотношения $l + n = v$, которое проверяется непосредственно. Причем коэффициенты C_0, C_1 и C_2 могут быть любыми положительными числами. Интересно, что величина H формально зависит от a_1, a_2 и Q_1, Q_2 и не зависит от значений s и σ или C_0, C_1, C_2 .

Введем параметр v для отношения линейной и нелинейной частей гамильтониана:

$$v = \frac{l}{n} = \frac{(a_2^2 Q_2^2 - a_1^2 Q_1^2)(C_2 Q_1^2 + C_1 Q_2^2)}{2(C_2 a_1^2 Q_1^4 - C_1 a_2^2 Q_2^4)}. \quad (23)$$

Эта формула позволяет по положительным параметрам a_1, a_2 и по положительному уровню нелинейности v и значению Q_1 определить однозначную положительную величину Q_2 . Далее по формуле (20) можно найти s и σ . При этом коэффициенты C_0 и C_1 определяются из вида нормированной пробной функции по формуле (13). Таким образом, с помощью параметра нелинейности можно удобно задавать различные нелинейные режимы для заданных параметров ловушки и размера конденсата. Величина нелинейности диктует выбор пробной функции. Для средней нелинейности $v = 1$ в качестве пробной функции выберем гауссову функцию с соответствующими значениями C_0 и C_1 . Для сильно нелинейного случая, когда верно приближение Томаса–Ферми, возьмем в качестве пробной супергауссову функцию.

4. Пробные функции

В качестве аналитических пробных функций рассмотрим функцию Гаусса, функцию Томаса–Ферми уравнения Гросса–Питаевского с гармоническим потенциалом и супергауссову функцию [8].

4.1. Нормированные пробные функции

Нормированная вариационная функция Гаусса имеет вид

$$f_{VG}(\xi) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right),$$

где $\xi = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}$. Константы C_0 и C_1 таковы:

$$C_0 = \frac{1}{4\pi}, \quad C_1 = C_2 = \frac{1}{4}. \quad (24)$$

Эта функция наиболее распространена в вариационном методе, поскольку позволяет вычислять большинство интегралов в явном виде.

Решение Томаса–Ферми широко используется для описания БЭК. В нормированном виде это решение есть

$$f_{TF}(\xi) = \frac{6 - \xi^2}{18\pi}. \tag{25}$$

Поскольку для этого приближения членами с лапласианом пренебрегают, то в дальнейших вычислениях можно положить $C_1 = C_2 = 0$; таким образом, для вычислений имеем

$$C_0 = \frac{2}{9\pi}, \quad C_1 = C_2 = 0. \tag{26}$$

В случае сильной нелинейности приближение Томаса–Ферми работает хорошо, но имеет сингулярности. Поэтому в [9] предлагалось использовать гладкие приближения, которые получаются с помощью разложения показателя степени для экспоненциального представления функции Томаса–Ферми.

Рассмотрим супергауссову функцию, которая является гладкой. Выбор свободного параметра k позволяет достаточно хорошо приблизить ее к функции Томаса–Ферми из условия, что значения в нуле нормированных функций Томаса–Ферми и супергауссовой совпадают. Нормированная супергауссова функция имеет следующий вид:

$$f_{sG}^k(\xi) = \frac{1}{4\pi} \frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma^2(2k+1)} \exp\left[-\left(\frac{\xi}{2} \sqrt{\frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma(2k+1)}}\right)^{1/k}\right],$$

где Γ – гамма-функция; параметр $k > 0$. При $k = 1/2$ получаем нормированную функцию Гаусса.

Соответствующие константы таковы:

$$C_0 = \frac{4^{k-1} \Gamma(2k+1/2)}{\pi^{3/2} \Gamma(2k+1)}, \quad C_1 = C_2 = \frac{16^{k-1} \Gamma(2k+1/2)}{\sqrt{\pi} k \Gamma(2k+1)}.$$

Численно найдем значение $k_* = 0.2791$ из условия

$$f_{sG}^{k_*}(0) = f_{TF}(0) \text{ или } \frac{1}{3\pi} = \frac{1}{4\pi} \frac{\Gamma(4k_*+1)}{\Gamma^2(2k_*+1)},$$

которому соответствуют константы

$$C_0 = 0.0721, \quad C_1 = 0.2986. \tag{27}$$

Отметим также, что параметр k можно выбирать из других критериев близости супергауссовой функции и функции Томаса–Ферми. Например, можно выбрать такое значение k , чтобы четвертые моменты решения этих двух функций совпадали. В этом случае для вероятностных распределений говорят, что их эксцесс одинаков. Для функции Гаусса эксцесс равен нулю.

4.2. Приближенные аналитические решения

В п.4.1 были представлены пробные функции в нормированном виде. Здесь же мы приведем приближенные аналитические решения, получаемые с помощью этих нормированных функций. Учитывая формулу (19) и формулы для нормированных пробных функций, получим следующие приближения:

вариационная функция Гаусса:

$$\phi_{vG}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Q_1 Q_2}} \exp\left(-\frac{x_1^2}{4Q_1^2} - \frac{x_2^2}{4Q_2^2}\right); \tag{28}$$

супергауссова функция:

$$\phi_{sG}(x_1, x_2) = \sqrt{f_{sG}(x_1, x_2)}, \tag{29}$$

где

$$f_{sG}(x_1, x_2) = \frac{1}{4\pi Q_1 Q_2} \frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma^2(2k+1)} \times \exp\left\{-\left[\frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{x_1^2}{Q_1^2} + \frac{x_2^2}{Q_2^2}\right) \frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma(2k+1)}}\right]^{1/k}\right\},$$

$$k_* = 0.2791;$$

приближение Томаса–Ферми:

$$\phi_{TF}(x_1, x_2) = \frac{1}{3\sqrt{2\pi Q_1 Q_2}} \sqrt{6 - \left(\frac{x_1^2}{Q_1^2} + \frac{x_2^2}{Q_2^2}\right)}. \tag{30}$$

Непосредственной проверкой можно показать, что вариационный метод дает в точности такой же результат, как и стандартное приближение Томаса–Ферми:

$$\phi(x_1, x_2) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu - V(\mathbf{x})}{\sigma}}, & V(\mathbf{x}) < \mu, \\ 0, & V(\mathbf{x}) \geq \mu, \end{cases}$$

где $\mu = \sqrt{\sigma a_1 a_2 / \pi}$ находится из нормировки (4).

Отметим, что величины Q_1 и Q_2 из вариационного решения в данном случае совпадают со стандартными определениями размеров облака:

$$Q_1 = \sigma_1 = \sqrt{\langle (x_1 - \langle x_1 \rangle)^2 \rangle}, \quad Q_2 = \sigma_2 = \sqrt{\langle (x_2 - \langle x_2 \rangle)^2 \rangle},$$

где

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}.$$

5. Сравнение аналитических и численных решений

Для численного нахождения стационарного решения $\psi_{st}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$ уравнения (3), соответствующего минимальному уровню энергии, мы использовали метод мнимого времени [10] и схему стабилизирующей поправки [11] с итерационным уточнением.

В данном разделе сравниваются результаты, полученные с помощью численного и вариационного методов, для слабоанизотропной ловушки. Показано, как ведут себя вариационные приближения. Кроме того, мы провели сравнение численного решения и решения, полученного с использованием функции Гаусса, которая является аналитическим решением соответствующей линейной задачи (в уравнении (3) коэффициент $\sigma = 0$)

$$\phi_G(x_1, x_2) = \frac{\sqrt[4]{a_1 a_2}}{\sqrt{\pi} \sqrt[4]{s}} \exp\left(-\frac{a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2}{2\sqrt{s}}\right), \tag{31}$$

поскольку эта функция часто используется для оценки решения на практике.

Численные эксперименты построены в терминах интегрального уровня нелинейности $[v]_{vG} = [I/n]_{vG}$ (см. формулу (23)). Такой подход позволяет более корректно и наглядно определить тип уравнения (сильно-, слабо- или

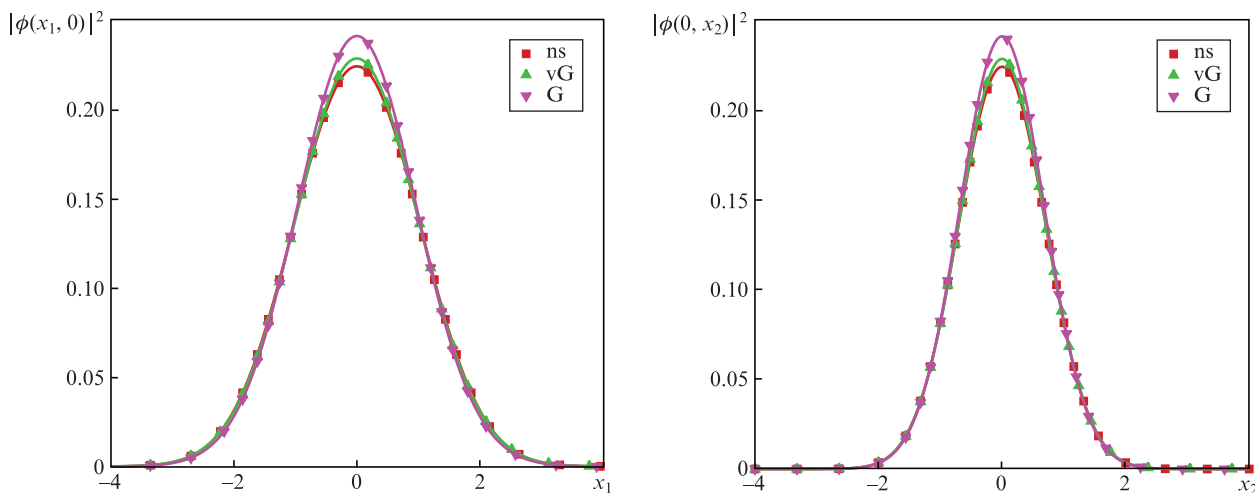


Рис.1. Профили плотности решения в случае слабой нелинейности: $[l/n]_{vG} = 10$ ($[l/n]_{ns} = 10.078$). Цветные варианты рис.1–3 помещены на сайте нашего журнала <http://www.quantum-electron.ru>.

средненелинейное) и показать возможности использования вариационного метода.

Во всех численных экспериментах параметры потенциала ловушки $a_1 = 1, a_2 = 2$. Задача решалась в области $S^2 = [-6.6] \times [-4.4]$.

Проведено также сравнение результатов прямого численного моделирования с представленными выше приближенными аналитическими решениями: вариационной функцией Гаусса $\phi_{vG}(x_1, x_2)$ (28); супергауссовой функцией $\phi_{sG}(x_1, x_2)$ (29); функцией Томаса–Ферми $\phi_{TF}(x_1, x_2)$ и функцией Гаусса, являющейся точным решением линейной задачи, $\phi_G(x_1, x_2)$ (31).

Поведение профилей плотности решения $|\psi_{st}(x_1, x_2)|^2 = |\phi(x_1, x_2)|^2$ показано на рис.1–3.

На рис.4, 5 представлено поведение относительных ошибок для различных интегральных характеристик (размеров Q_1, Q_2 , гамильтониана \mathcal{H} и химического потенциала системы μ) в случае разных решений в зависимости от уровня нелинейности $v_{vG} = [l/n]_{vG}$. Относительная ошибка вычислялась следующим образом. Например, для вариационной гауссовой функции значение err_{Q_1} находилось по формуле

$$err_{Q_1}^{vG} = \frac{|Q_1^{vG} - Q_1^{ns}|}{\max(Q_1^{vG}, Q_1^{ns})} \times 100\%,$$

где индекс «ns» соответствует численному решению. Для остальных видов функций относительная ошибка рассчитывалась аналогично.

Результаты сравнения вариационного подхода и прямого численного моделирования, представленные в данном разделе, можно использовать следующим образом. По коэффициентам уравнения (3) найти значения параметров Q_1, Q_2 и затем определить уровень нелинейности в терминах вариационной функции Гаусса ($v_{vG} = [l/n]_{vG}$). По этому значению выбрать соответствующую пробную функцию (ориентируясь на представленные результаты сравнения: в слабонелинейном и средненелинейном случаях – на вариационную гауссову функцию, в сильнелинейном случае – на супергауссову функцию или приближение Томаса–Ферми) и построить вариационное приближение. Далее использовать его для предварительной оценки решения, задания начального приближения для итерационного процесса или для оценки интегральных параметров (которые, как мы видим из численных экспериментов (рис.4, 5), с высокой точностью приближаются с помощью вариационного подхода).

Отметим также существенную роль анизотропии, которая проявляется в смещении области применимости пробных функций в зависимости от продольного и поперечного размеров ловушки. Для Q_1 точки пересечения кри-

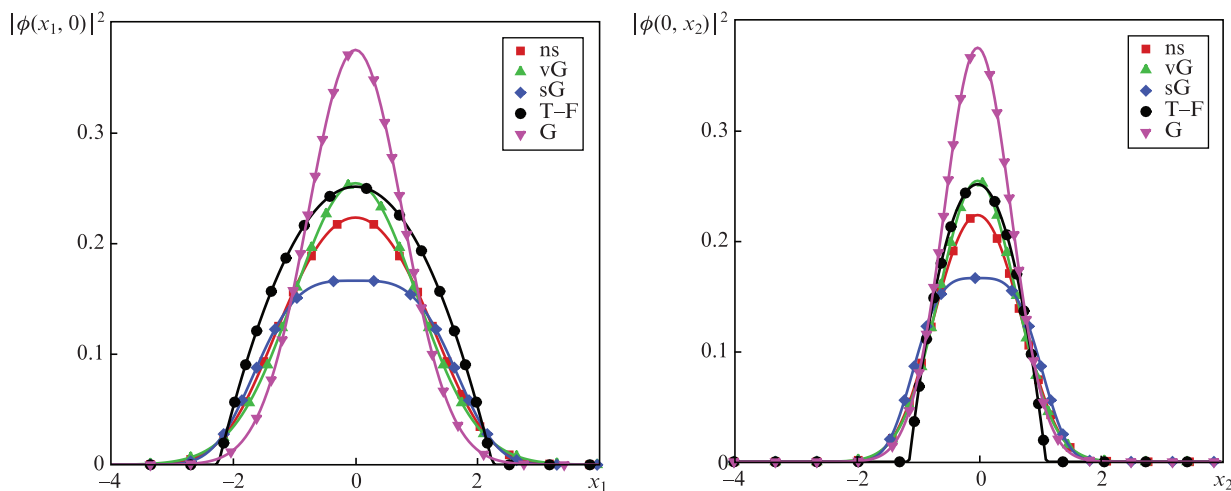


Рис.2. Профили плотности решения в случае среднесильной нелинейности: $[l/n]_{vG} = 1$ ($[l/n]_{ns} = 1.067$).

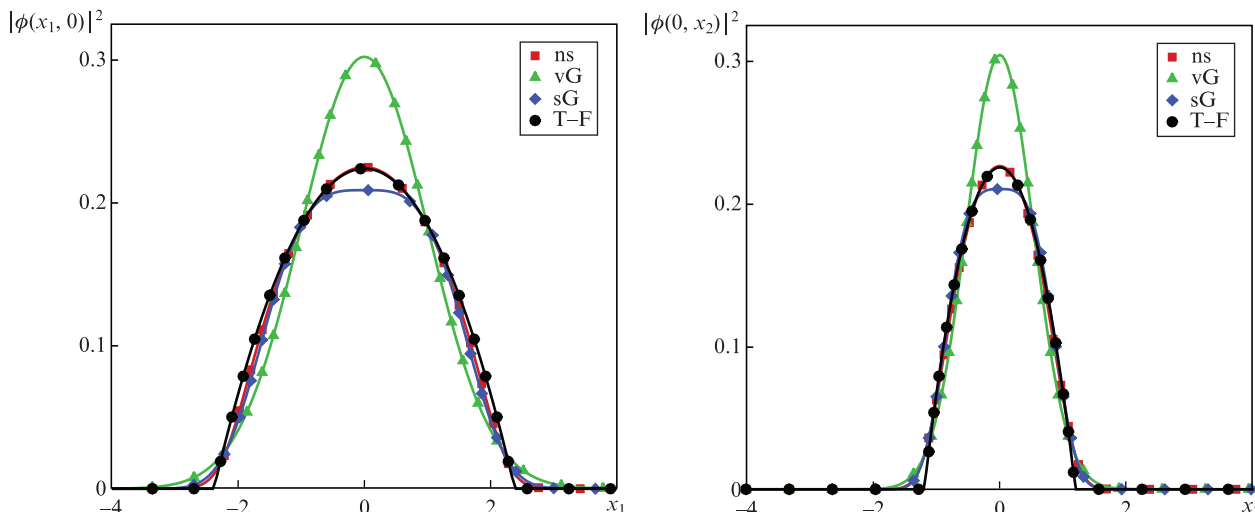


Рис.3. Профили и плотности в случае сильной нелинейности: $[[ln]_{vG} = 0.1$ ($[[ln]_{ns} = 0.13$).

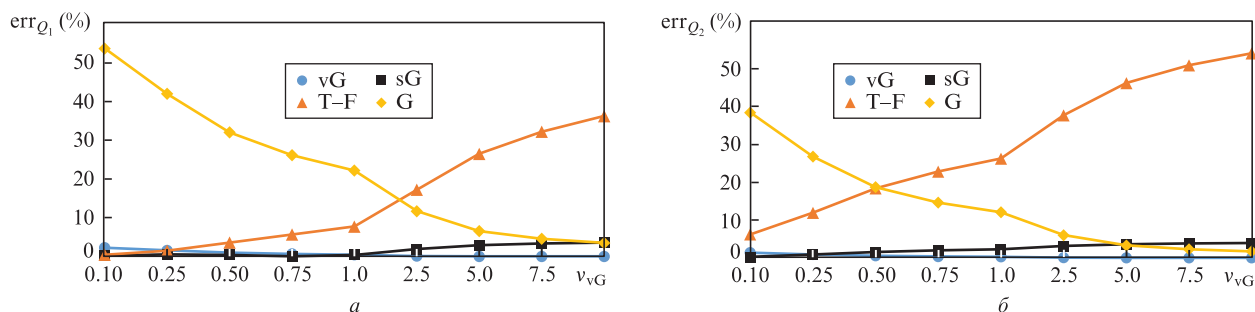


Рис.4. Зависимости относительной ошибки по размерам err_{Q_1} (a) и err_{Q_2} (\bar{b}) от параметров нелинейности ($v_{vG} = [[ln]_{vG}$).

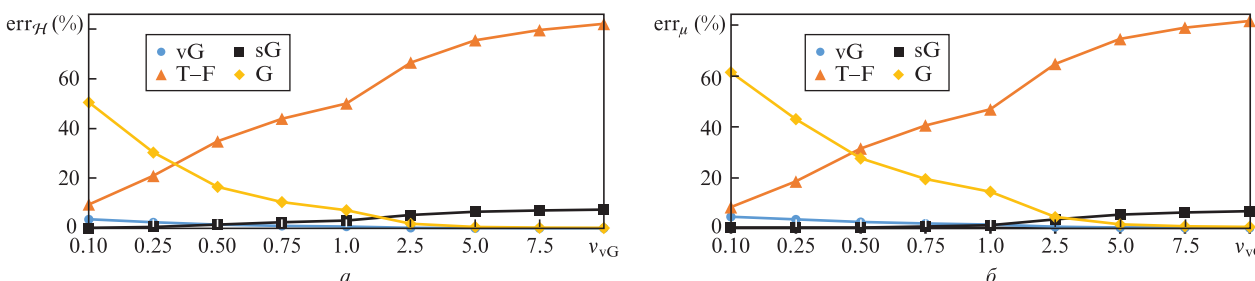


Рис.5. Зависимости относительной ошибки гамильтониана err_H (a) и химического потенциала err_μ (\bar{b}) от параметров нелинейности ($v_{vG} = [[ln]_{vG}$).

вых ошибок для пробных функций приходятся на меньший уровень нелинейности (для большего значения обратной нелинейности) по сравнению с соответствующими точками для Q_2 .

Кроме того, предложенный подход может быть использован и для оценки информации о задаче. Например, используя формулу (20), по заданным размерам конденсата Q_1 , Q_2 и параметрам удерживающей ловушки a_1 , a_2 можно восстановить значения коэффициентов s , σ , напрямую связанные с числом частиц и межатомным взаимодействием (см. формулу (5)).

6. Выводы

Получены приближенные аналитические решения и формулы, связывающие интегральные характеристики стационарных бозе-конденсатов (характерные масшта-

бы, 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.

Представленный метод является эвристическим, поэтому точность найденных приближенных аналитических функций (гауссовой, супергауссовой и решения Томаса–Ферми) проверена сопоставлением с численным решением 2D уравнения Гросса–Питаевского. Сравнение было проведено для различных уровней нелинейности и показало, что использование решения линеаризованного уравнения и решения Томаса–Ферми ограничено

соответственно слабой и очень сильной нелинейностями. В то же время для промежуточных значений параметра нелинейности вариационный подход на основе гауссовой и супергауссовой функций демонстрирует большую точность. Кроме того, для рассмотренных значений параметра нелинейности супергауссова функция с фиксированной степенью дает большую точность, чем решение Томаса–Ферми. Для пробных функций на сравнительную точность существенно влияет анизотропия. Приближение Томаса–Ферми становится лучше линейного приближения при большем уровне нелинейности и меньшем поперечном размере.

Отметим также, что можно выбирать и другие пробные функции, кроме предложенных в данной работе, например экспоненциальные приближения для решения Томаса–Ферми [9]. В первом порядке это приближение совпадает с функцией Гаусса, а в высшем весьма близко к решению Томаса–Ферми в нулевой точке. Кроме того, можно использовать и рациональные функции с компактным носителем [12], хотя они, как и решение Томаса–Ферми, имеют сингулярности.

Работа П.Л.Чаповского поддержана ИАиЭ СО РАН и РФФИ (грант № 15-02-05754). Работа Ю.В.Лихановой, С.Б.Медведева и М.П.Федорука выполнена в рамках гранта Президента РФ государственной поддержки ведущих научных школ РФ № НШ-7214.2016.9 и НШ-9161.2016.9.

1. Ильичев Л.В., Чаповский П.Л. *Квантовая электроника*, **47** (5), 463 (2017).
2. Медведев С.Б., Лиханова Ю.В., Федорук М.П., Чаповский П.Л. *Письма в ЖЭТФ*, **100** (12), 935 (2014).
3. Dalfovo F., Giorgini S., Pitaevskii L.P., Stringari S. *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 463 (1999).
4. Cornell E.A., Wieman C.E. *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 875 (2002).
5. Ketterle W. *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 1131 (2002).
6. Лиханова Ю.В., Медведев С.Б., Федорук М.П., Чаповский П.Л. *Письма в ЖЭТФ*, **103** (6), 452 (2016).
7. Salasnich L., Parola A., Reatto L. *Phys. Rev. A*, **65** (4), 43614 (2002).
8. Biswas A. *Progr. Electromagn. Res.*, **33**, 119 (2001).
9. Keçeli M., Ilday F., Oktel M. *Phys. Rev. A*, **75** (3), 35601 (2007).
10. Bao W., Du Q. *Siam J. Sci. Comput.*, **25** (5), 1674 (2004).
11. Яненко Н.Н. *Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики* (Новосибирск: Наука, 1967).
12. Fetter A.L. *J. Low Temperat. Phys.*, **106** (5-6), 643 (1997).