

One- and two-channel Gross-Pitaevskii equation to model Bose-Einstein condensates at Feshbach-resonance

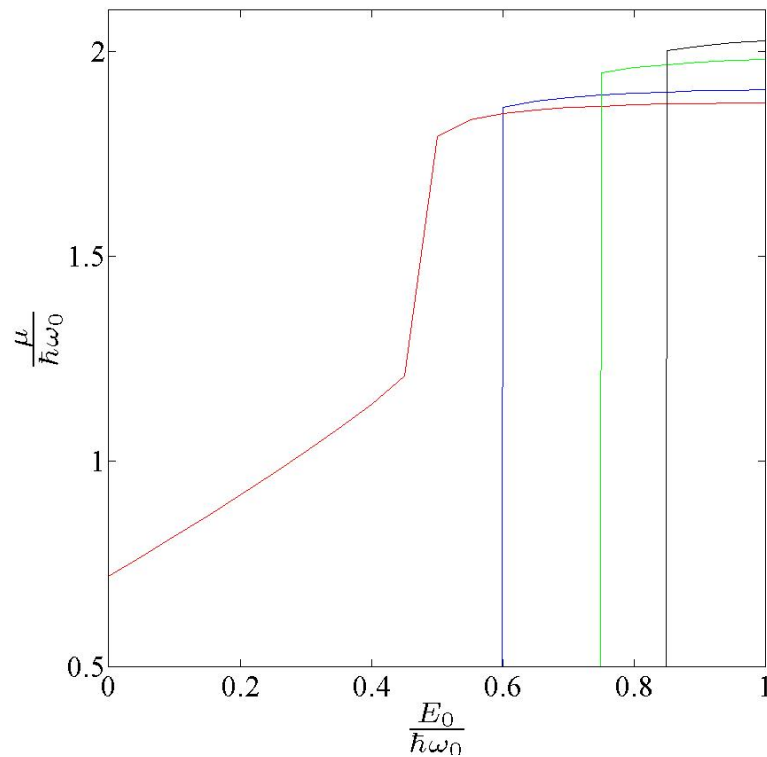
En- og to-kanal Gross-Pitaevskii ligning til modellering af Bose-Einstein kondensater ved Feshbach-resonans

Forfatter:

Mathias Mikkelsen 20081701

Vejleder:

Dmitri Fedorov



BACHELORROJEKT I FYSIK

5. juli 2011 INSTITUT FOR FYSIK OG ASTRONOMI

ÅRHUS UNIVERSITET

Abstract

In this project I look at Bose-Einstein condensates in dilute gases, at Feshbach resonances. Both a one- and two-channel model of the situation will be explored. The one-channel model is equivalent to the usual Gross-Pitaevskii equation. However the Gross-Pitaevskii equation is undefined when an external magnetic field equal to the resonant magnetic field is applied, since the Feshbach theory implies that the scattering length diverges towards $\pm\infty$ at this point. So I derive a simple two-channel version of the Gross-Pitaevskii equation, which can model the dependence on the external magnetic field directly, as opposed to indirectly through the effective scattering length, which diverges. This model also has the advantage that it doesn't assume all the particles to be in the same channel. In this project I define a Bose-Einstein condensate, then I go through the most important scattering theory results, which will be used throughout the project. I also derive both a one- and two-channel zero-range model for the Feshbach resonance itself. After that, the well-known time-independent Gross-Pitaevskii equation and the simple two-channel model will be derived by the variational method. Finally I solve both the one- and two-channel equations numerically by the self-consistent method, using the program Matlab. I found the well-known results for the one-channel model. For the two-channel model I found most of the physical implications of the one-channel model, without the divergence problem. I found that the collapse of the Bose-Einstein condensate and chemical potential depended upon both the number of particles and the magnetic field applied, though the chemical potential's dependence on the magnetic field did not seem as strong as in the one-channel model. Since the two-channel model describes most of the well-known experimental properties of the condensate, without the divergence problem, further investigation, implementing more direct experimental data, might be of interest.

Indhold

Abstract	i
Indhold	ii
1 Indledning	1
2 Bose-Einstein kondensatet	1
3 Spredningspotentialer og Feshbach-resonans	1
3.1 Lavenergi-spredning for alkali-metaller	2
3.2 Feshbach-resonanser	4
3.2.1 En-kanal model	5
3.2.2 To-kanal model	6
4 Gross-Pitaevskii ligningen	7
4.1 En-kanal Gross-Pitaevskii ligning	9
4.2 To-kanal Gross-Pitaevskii ligning	13
5 Numerisk Løsning af Gross-Pitaevskii ligningen	17
5.1 En-kanal Gross-Pitaevskii ligningen	20
5.2 To-kanal Gross-Pitaevskii ligningen	22
5.3 Kommentarer til selve de numeriske beregninger	28
6 Konklusion	29
Litteratur	30

1 Indledning

Vi vil i dette projekt se på Bose-Einstein kondensater i tynde gasser, ved Feshbach-resonans. Vi vil kigge på både en- og to-kanal modellering af dette fænomen. Normalt beskriver man Bose-Einstein-kondensater i tynde gasser ud fra Gross-Pitaevskii ligningen, som er en en-kanal model, da den regner med at alle atomerne er i samme kanal. Denne kan forenes med en-kanal model for Feshbach-resonans. Men Gross-Pitaevskii ligningen kan forstås som ufysisk i området omkring resonansmagnetfeltet, da spredningslængden her divergerer mod $\pm\infty$. Derfor vil vi i denne rapport lave en analog beskrivelse af et to-kanal-system, der kan komme uden om dette problem. For at belyse disse emner vil vi gennemgå dem på følgende vis: Vi starter med at definere hvad vi mener med et Bose-Einstein kondensat. Derefter gennemgås teorien for lav-energispredning, samt Feshbach-resonanser i både en- og to-kanal zero-range modellen. Derefter vil vi gennemgå udledningen af den kendte Gross-Pitaevskii ligning via variationsteoremet og bruge samme metode til at udlede en tilsvarende ligning for et to-kanal-system, som vi vil referere til som to-kanal Gross-Pitaevskii ligningen. Til sidst vil vi løse både en- og to-kanal-modellen numerisk via den selv-konsistente metode. Denne løsning vil udføres i matematik-programmet matlab. Dette projekt er inspireret af bachelorprojektet [Kristensen], men med en mere fysisk korrekt model for to-kanal kondensatet, hvor den enkelte partikel kan være i den ene eller anden kanal i modsætning til at alle partiklerne skal være i den ene eller den anden.

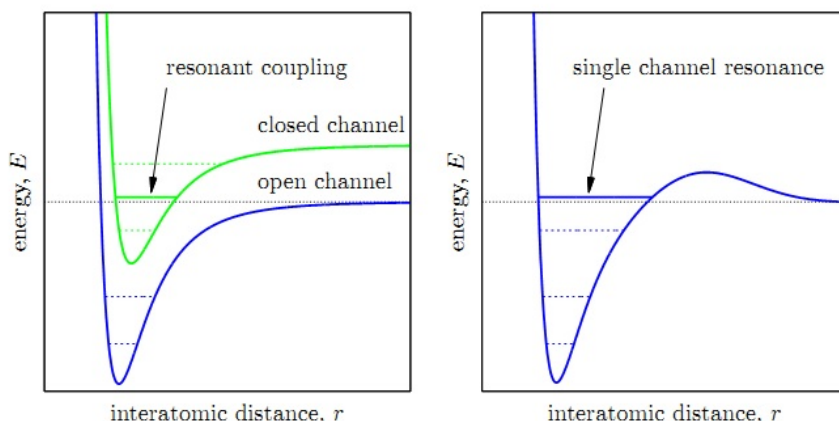
2 Bose-Einstein kondensatet

I dette projekt er vi interesseret i at beskrive et Bose-Einstein-kondensat. Ved et Bose-Einstein kondensat forstås en mængde af bosoner der allesammen befinder sig i samme kvantetilstand. Dette kan lade sig gøre for bosoner da den samlede bølgefunktion skal være symmetrisk, i modsætning til fermioner hvor den skal være anti-symmetrisk og vi derfor ikke kan have to fermioner i samme kvantetilstand, jvf. Pauli's eksklusionsprincip. Bose-Einstein kondensater vil generelt kun forekomme ved meget lave temperaturer, da de termiske energier her er så små, at bosonerne alle befinder sig i grundtilstanden. Typiske værdier for temperaturen ligger i størrelsesordenen 10-100 nK. Et Bose-Einstein-kondensat er en fase-tilstand, hvor man kan se kvanteeffekter på makroskopisk niveau, da alle partiklerne befinder sig i samme kvantetilstand. På den måde minder de lidt om den superledende tilstand, som visse metaller kan opnå. Vi vil generelt se på dannelsen af Bose-Einstein kondensater i tynde, kolde gasser, dvs. hvor der kun er få sammenstød mellem de enkelte partikler. Når dette er tilfældet kan vi nemlig beskrive kondensatets Hamilton-operator rimelig simpelt, ved at gå ud fra en række antagelser og approksimationer.

3 Spredningspotentialer og Feshbach-resonans

Vi er interesseret i Feshbach-resonanser. En resonans er når der ved en kollision af to partikler, under påvirkning af et ydre magnetfelt, opstår et metastabilt niveau i systemet. I resten af denne opgave vil vi generelt snakke om åbne og lukkede kanaler. Hvis energien af de kolliderende partikler overstiger separationsenergien for kanalen, er der tale om en

lukket kanal, hvis den ikke gør er der tale om en åben kanal. På figur 1 ses et eksempel på dette.

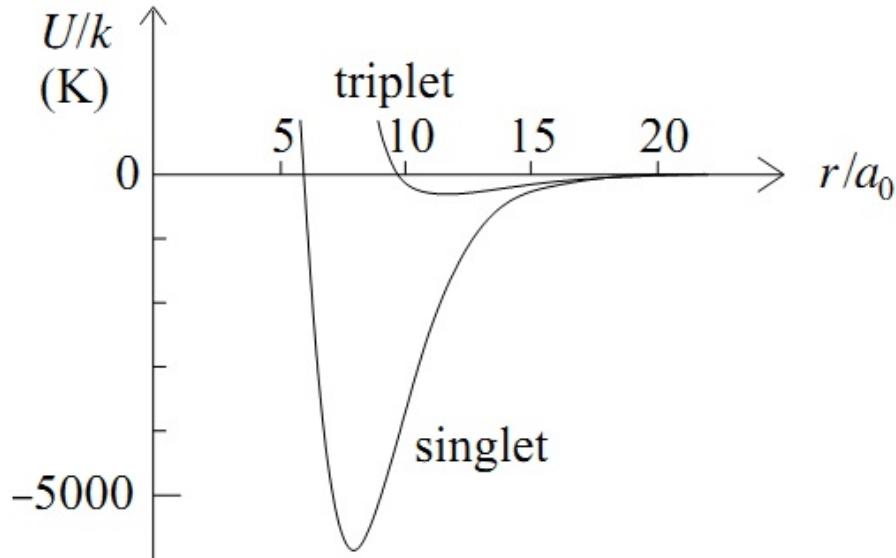


Figur 1: Eksempler på en- og to-kanal model for Feshbach-resonans, med potentialer svarende til åben og lukket kanal. Figuren til venstre viser to-kanal modellen, figuren til højre viser en-kanal modellen. Figuren kommer fra [Thøgersen]

I denne opgave vil vi kigge på alkali-metaller, herunder specifikt ${}^7\text{Li}$, som har to mulige kanaler svarende til om den er i triplet eller singlet tilstanden. Disse opstår fordi det samlede elektronspin i et alkali-metal er $\frac{1}{2}$, da spinnene for de lukkede underskaller summerer til 0. For ${}^7\text{Li}$ vil det samlede kernespin også være $\frac{1}{2}$, så ved hyperfinkoblingen mellem kernen og elektronens spin har vi to mulige kombinationer, vi kan få at $F=1$ og $F=0$. Da $F=1$ har 3 forskellige egentilstande kaldes denne triplet-tilstanden, mens $F=0$ kun har en egentilstand og derfor kaldes en singlet. Disse er begge bosoner, da de har heltalligt spin. Derfor kan vi bruge ${}^7\text{Li}$ til at skabe et Bose-Einstein kondensat. Som vi ser på figur 2 på næste side gælder det for ${}^{87}\text{Rb}$, men også for ${}^7\text{Li}$, at potentialet for triplet-tilstanden ligger højere end potentialet for singlet-tilstanden der har en reel potentialbrønd og derved større separationsenergi. Så triplet-tilstanden er en lukket kanal, hvorimod at singlet-tilstanden er en åben kanal, for energier mellem de to separationsenergier.

3.1 Lavenergi-spredning for alkali-metaller

Vi ser på alkali-metaller, for hvilke der ved kollision vil være en dipol-dipol interaktion mellem dem, da alkali-metaller kun har en elektron i yderste skal. Når de kommer tæt nok på hinanden vil der opstå kovalent binding, da de har elektroner udenfor lukkede underskaller og vi får derfor en potentialbrønd, når to atomer befinder sig i en vis afstand fra hinanden. Når man kommer for tæt på vil kernerne naturligvis frastøde hinanden. Denne kovalente binding afhænger stærkt af om metallet befinder sig i en triplet eller singlet-tilstand. Potentialet for ${}^{87}\text{Rb}$ kan ses på figur 2 på den følgende side.



Figur 2: Det interatomare potential for to ^{87}Rb -atomer, figur kommer fra [Pehtick]

Vi vil generelt kigge på Bose-Einstein kondensater bestående af i størrelsesordenen 1000 partikler, så vi snakker om tynde gasser. Da vi befinder os ved meget lave temperaturer vil kollisionerne mellem partikler være ved lav energi. Da denne betingelse er opfyldt kan vi bruge den såkaldte Born approksimation, hvor vi tilnærmer den spredte del af bølgefunktionen ved en linear funktion af vekselvirkningen. Vi beskriver desuden sammenstød mellem to ens partikler, så deres masse er den samme. Vi kan nu simpelt beskrive det interatomare potentiale som en delta-funktion:

$$V_{ij} = V_0 \cdot \delta(r_i - r_j) \quad (3.1)$$

hvor r_i og r_j er afstanden for henholdsvis den ene og anden partikel, så det vil sige at dette potential er nul alle steder bortset fra når de to partikler er samme sted. Her er V_0 givet ved

$$V_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (3.2)$$

Dette er beskrivelsen af en-kanal spredning via et effektivt potential. Så rent fysisk går vi ud fra at der ingen interaktion er mellem de to partikler førend de rammer hinanden, hvor de vil være udsat for en spredning beskrevet ved potentialet V_0 , dvs. ud fra spredningslængden af partiklerne. Vi går også ud fra at der aldrig sker sammenstød mellem mere end to partikler ad gangen. a er den såkaldte spredningsparameter, vi ser at hvis den er negativ så svarer det til et attraktivt potential mellem partiklerne, hvis den er positiv så svarer det til et frastødende potential. Derfor er spredningslængden for en lukket kanal generelt negativ, mens den er positiv for en åben kanal.

3.2 Feshbach-resonanser

Hvis man påvirker et atom med et eksternt magnetfelt vil det give anledning til Zeeman-effekt, som splitter atomets energistruktur i hyperfinopsplitningen ved

$$\Delta E = \mu_F \cdot B M_F$$

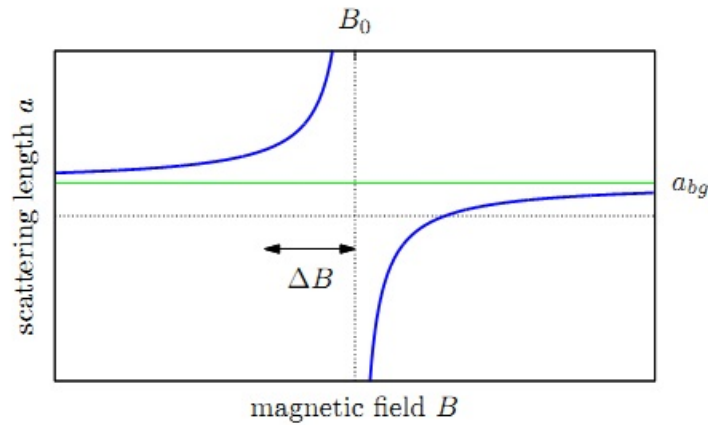
hvor μ er det magnetiske moment af partiklen i det givne F-niveau, F er det samlede kerne, elektron og orbitalspin $\vec{F} = \vec{I} + \vec{S} + \vec{L}$ og M_F er givet ved

$$-F, -F + 1, \dots, F - 1, F$$

Da det magnetiske moment μ_F afhænger af tilstanden F kan der opstå resonans mellem to forskellige energiniveauer, da de to niveauer kan skubbes tættere på hinanden. Dette vil ændre på den effektive spredningslængde, som man så kan kontrollere ved at kontrollere magnetfeltet og kigge på kanaler med forskelligt magnetisk moment. Eksperimentelle data kan generelt fittes til formlen

$$a = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_{res}} \right) \quad (3.3)$$

hvor a_{bg} er baggrundsresonansen, Δ er bredden af resonansen og B_{res} er resonans-magnetfeltet. Denne eksperimentelle formel giver os altså en model for Feshbachresonanser der divergerer omkring resonansfeltet og har form som kan ses på figur 3



Figur 3: Effektiv spredningslængde som funktion af magnetfeltet, ved Feshbach-resonans. Figur kommer fra [Thøgersen]

Vi vil nu beskrive Feshbach-resonanser ud fra et zero-range potentiale. Dette kan gøres i både en en- og to-kanal model. Et zero-range potentiale er en meget simpel konstruktion hvor man går ud fra at partiklerne bevæger sig som frie partikler, hvor man kun definerer et potentiale når 2 partikler rammer hinanden, dvs. når afstanden mellem dem er 0. Så kan vi beskrive bølgefunktionen fuldstændigt ud fra dens randbetingelser. Vi går

ud fra at der er sfærisk symmetri og vi begrænser os til s-bølgefunktionen hvilket naturligt vil være tilfældet i et Bose-Einstein kondensat, da denne befinder sig i grundtilstanden. Så vi kan beskrive bølgefunktionen som

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

Derved får vi en stationær schrödingerligning der ser således ud:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} = Eu(r)$$

hvor man kan udregne at Laplace-operatoren på den radiale del af schrödingerligningen bare giver os den partielt afledte divideret med r , som så går ud med r på den anden side af lighedstegnet.

Generelt vil vi se på elastiske spredningsprocesser. For en-kanal-modellen vil dette bare sige spredningsprocesser da der kun er en kanal, mens at der i to kanal-modellen også findes mulighed for inelastisk spredning, hvor spredningen ikke kan give anledning til kanalskift.

3.2.1 En-kanal model

Vi kan beskrive randbetingelserne for Feshbach resonans i det en-dimensionale tilfælde på følgende vis

$$\left. \frac{du(r)}{dr} \right|_{r=0} = \frac{u(0)}{a}$$

For at finde tilstande med elastisk spredning skal $E > 0$, dvs. at de to partikler ikke er bundet. Dette giver asymptotiske løsninger på formen

$$u(r) = A \sin(\kappa r + \delta(\kappa)) \quad , \quad \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.4)$$

Vi kan nu finde $\cot(\delta(\kappa))$, ved at indsætte vores randbetingelse

$$\frac{\kappa A \cos(\delta(\kappa))}{A \sin(\delta(\kappa))} = \kappa \cot(\delta(\kappa)) = \frac{1}{a}$$

Så kan vi finde den effektive spredningslængde, samt den effektive rækkevidde ved

$$\lim_{k \rightarrow 0} (k \cot(\delta(\kappa))) = \frac{1}{a_{\text{eff}}} + \frac{1}{2} R_{\text{eff}} k^2 + \dots$$

hvor vi i vores tilfælde tydeligt ser at den effektive spredningslængde er givet som $a_{\text{eff}} = a$ og den effektive rækkevidde ved $R_{\text{eff}} = 0$.

3.2.2 To-kanal model

For to-kanal modellen har vi at de to partikler kan være i både en åben og en lukket kanal, så vi skal bruge en bølgefunktion der kan beskrive sådanne to samtidig.

$$\psi(r) = \begin{bmatrix} u_o(r) \\ u_c(r) \end{bmatrix}$$

Vi udvider vores randbetingelser for to-kanal modellen på samme måde som i artiklen [Sørensen] og får derved

$$\left. \frac{du_o(r)}{dr} \right|_{r=0} = \frac{1}{a_o} u_o(0) + \frac{b}{a_o} u_c(0)$$

samt

$$\left. \frac{du_c(r)}{dr} \right|_{r=0} = \frac{1}{a_c} u_o(0) + \frac{b}{a_o} u_c(0)$$

dvs. at vi har en kobling mellem de to kanaler, som vi måler i enheder af spredningslængden for den åbne kanal.

Vi kigger nu på en energi der ligger mellem 0 og E_0 hvor vi vil se resonanseffekter ved elastisk spredning. Bølgefunktionen for den åbne kanal, hvor $E > 0$ vil være givet ved

$$u_o(r) = A \sin(kr + \delta(k)) \quad , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

mens der for den lukkede kanal må gælde at den totale energi er $E - E_0 < 0$, dvs. at bølgefunktionen svarer til en bundet tilstand, som er givet ved

$$u_c(r) = B e^{-r\kappa} \quad , \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2m(E - E_0)}}{\hbar}$$

Så vi kan nu indsætte vores randbetingelser og vi får to ligninger:

$$k A \cos(\delta(k)) = \frac{1}{a_o} A \sin(\delta(k)) + \frac{b}{a_o} B$$

og

$$-B\kappa = \frac{1}{a_c} B + \frac{b}{a_o} A \sin(\delta(k))$$

Nu kan vi isolere $k \cot(\delta(k))$

$$k \cot(\delta(k)) = \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\kappa + \frac{1}{a_c})}$$

For at gøre vores udregninger lettere vil vi definere konstanten λ

$$\kappa^2 = \frac{-2m(E - E_0)}{\hbar^2} = \frac{2mE_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} = \lambda^2 - k^2$$

Så vi kan indsætte denne på κ 's plads og ved at se på systemet i grænsen $k \rightarrow 0$ finde et udtryk for spredningslængden, samt den effektive rækkevidde. For at få $k \cot(\delta(k))$ på en form så vi kan bruge udtrykket fra 3.4 på side 5, vil vi benytte binomialformlen til at approksimere vores udtryk, dvs. at

$$(1+x)^n \approx 1+nx \quad \text{for } |x| \ll 1$$

som vi kan bruge i variabelen k , da denne skal gå mod nul. Så vi får at

$$\begin{aligned} k \cot(\delta(k)) &= \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\sqrt{\lambda^2 - k^2} + \frac{1}{a_c})} \approx \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda - \frac{k^2}{2\lambda} + \frac{1}{a_c})} = \\ &= \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda - \frac{k^2}{2\lambda} \frac{1+\lambda a_c}{a_c(\lambda + \frac{1}{a_c})} + \frac{1}{a_c})} = \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda - \frac{k^2}{2(\lambda + \frac{1}{a_c})} - \frac{k^2}{2a_c\lambda(\lambda + \frac{1}{a_c})} + \frac{1}{a_c})} = \\ &= \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda + \frac{1}{a_c}) \left(1 - \frac{k^2}{2\lambda(\lambda + \frac{1}{a_c})}\right)} \approx \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda + \frac{1}{a_c})} \left(1 + \frac{k^2}{2\lambda(\lambda + \frac{1}{a_c})}\right) = \\ &= \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\lambda + \frac{1}{a_c})} - \frac{b^2}{2a_o^2\lambda(\lambda + \frac{1}{a_c})^2} k^2 = \frac{1}{a_{eff}} + \frac{1}{2} r_{eff} k^2 \end{aligned}$$

Dvs. at vi nu har fundet

$$\frac{1}{a_{eff}} = \frac{1}{a_o} - \frac{b^2}{a_o^2(\frac{2mE_0}{\hbar^2} + \frac{1}{a_c})}$$

samt

$$r_{eff} = -\frac{b^2}{a_o^2\lambda(\lambda + \frac{1}{a_c})^2}$$

Når vi husker på at spredningslængden for den lukkede kanal er negativ, ser vi at vi finder divergensen mod $\pm\infty$, så den stemmer overens med den fænomenologiske formel, givet ved ligning 3.3 på side 4. Derfor kan vi finde koblingskonstanten b ved at fitte til data.

4 Gross-Pitaevskii ligningen

Vi vil i de følgende to sektioner udlede Gross-Pitaevskii ligningen, i en en- og to-kanal udgave. Vi vil bruge en generel metode til udledningen af en-kanal-modellen, således at vi kan bruge samme metode til udledningen af to-kanal modellen. Vi vil gerne beskrive en tynd gas bestående af n bosoner som befinder sig ved meget lav temperatur, således at de alle har grundtilstandsenergien. Dette vil være et Bose-Einstein kondensat. For at beskrive dette går vi ud fra at hver partikel har en kinetisk energi, at atomerne bevæger sig i et fældepotentiale V_{ext} og at der kun vil ske sammenstød mellem to partikler af gangen, ikke 3 eller flere, hvilket er rimeligt da vi har en tynd gas. Så kan vi beskrive de enkelte sammenstød ud fra teorien i afsnit 2. I resten af denne opgave vil der blive gået ud fra de følgende approksimationer og antagelser:

- Born-approximationen, som nævnt i afsnit 3. Den er nødvendig for at vi kan bruge zero-range approximationen for sammenstød.
- Som nævnt sker der kun stød mellem to partikler ad gangen
- Relativistiske effekter negligeres, hvilket ikke er et problem, da vi befinder os ved så lave termiske energier. Så impulsoperatoren er ikke-relativistisk.
- Vi bruger middelfeltsapproximationen, herunder Hartree-anzatsen. Så i stedet for at lade partiklerne påvirke hinanden med diverse udviklede potentialer, går vi ud fra at man kan beskrive partiklerne som om de bevæger sig i et gennemsnitligt potentiale der er ens for hver af dem og i vores tilfælde kan beskrives ved interaktionspotentialer. For alkali-metaller som vi senere vil regne på er dette ganske rimeligt, da der i hvert fald ikke er nogen coulomb-interaktion mellem dem, når de har en vis afstand fra hinanden.

Med middelfeltsapproximationen, kan vi opskrive den samlede hamiltonoperator som en simpel sum af hamiltonoperatorerne for de enkelte partikler, samt en sum af operatorerne for sammenstød mellem partikler.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n (\hat{T}_i + \hat{V}_{i,ext}) + \sum_{i<j} \hat{V}_{ij} \quad (4.1)$$

og ud fra hartree-anzatsen får vi

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \prod_{i=1}^n \phi(r_i) \quad (4.2)$$

hvor $\phi(r_i)$ er normeret på sædvanlig vis, dvs. som

$$\langle \phi(r_i) | \phi(r_i) \rangle = \int_V |\phi(r_i)|^2 dr_i^3 = 1$$

hvorved ψ også er normeret. I resten af denne opgave vil vi med $\int f(r) dr^3$ mene $\int_V f(r) dr^3$, dvs. integralet over hele rummet.

Ideen i udledningen er nu at bruge variationsteoremet, hvorved vi kan få en størsteværdi for gassens grundtilstandsenergi, som jo netop svarer til kondensatets energi, da alle partiklerne er i grundtilstanden. Ifølge variationsteoremet finder vi denne værdi ved at minimere ligningen

$$\langle E \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_{\text{grundtilstand}}$$

Så for at finde en øvre grænse for grundtilstandsenergien skal vi kunne finde forventningsværdien af en hamilton-operator med bølgefunktion som beskrevet ovenfor. For at kunne regne dette vil vi se på hvordan forventningsværdien af en operator der virker på den i 'te partikel ser ud.

$$\langle \psi | \hat{A}_i | \psi \rangle = \langle \prod_{j=1}^n \phi(r_j) | \hat{A}_i | \prod_{j=1}^n \phi(r_j) \rangle =$$

$$\prod_{j \neq i} \langle \phi(r_j) | \phi(r_j) \rangle \cdot \langle \phi(r_i) | \hat{A}_i | \phi(r_i) \rangle =$$

$$\langle \phi(r_i) | \hat{A}_i | \phi(r_i) \rangle$$

hvor vi har brugt at

$$\langle \phi | a \cdot \phi \rangle = a \cdot \langle \phi | \phi \rangle$$

hvis a er en skalar. Da de enkelte indre produkter er skalarer kan vi altså sætte dem uden for det samlede indre produkt. Derudover bruger vi at funktionerne $\phi(r_i)$ er indbyrdes orthonormale, da de danner basis for løsningsrummet. Dvs. at

$$\langle \phi(r_i) | \phi(r_j) \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{hvis } i = j \\ 0, & \text{hvis } i \neq j \end{cases}$$

Dette gælder ligegyldigt hvordan bølgefunktionerne $\phi(r_i)$ ser ud, så vi kan bruge resultatet både i udledningen af en- og to-kanal Gross-Pitaevskii ligningen, hvor de henholdsvis er skalar- og vektor-funktioner.

Forventningsværdien for en operator der virker på den i 'te og j 'te partikel vil via samme princip være givet ved

$$\langle \psi | \hat{V}_{ij} | \psi \rangle = \langle \phi(r_i) \phi(r_j) | \hat{V}_{ij} | \phi(r_i) \phi(r_j) \rangle$$

Definitionen af det indre produkt i alle vores udregninger er

$$\langle \phi(r_i) | \hat{A}_i | \phi(r_i) \rangle = \int \phi^*(r_i) \hat{A}_i \phi(r_i) dr_i^3$$

Til at finde minimum i praksis for de udledte forventningsværdier vil vi bruge Lagrange multiplikator metode og minimere

$$\langle \psi | H - \mu n | \psi \rangle \tag{4.3}$$

således at vi kan opskrive løsningen som et egenværdiproblem. Vi minimerer ved at sætte en differentialkvotient lig nul. Vi tjekker at dette er et minimum, ikke et maksimum ved at se på om løsningen er konsistent med vores forventninger til de fysiske egenskaber for systemet.

4.1 En-kanal Gross-Pitaevskii ligning

I denne sektion vil vi udlede den kendte tidsuafhængige Gross-Pitaevskii ligning via variationsregning som beskrevet ovenover. Man kan også udregne denne via andre metoder, som man gør i f.eks. [Pethick]. Jeg vælger dog at udlede den via variationsregning, da denne metode er en generel metode til at finde grundniveau for en operator, så dvs. at vi kan bruge den for både en-kanal og to-kanal modellen. Samtidig kan vi se at metoden virker for en kanal, da den giver samme udtryk som udledningen i [Pethick].

For at udlede Gross-Pitaevskii ligningen skal vi første finde forventningsværdien af hamiltonoperatoren, som er beskrevet ved ligning 4.1 på forrige side. Vi beskriver sammenstød

af partikler ud fra formel 3.1 på side 3 under antagelse af at de alle befinder sig i samme kanal, dvs. at alle sammenstød er ens. Vi kan nemt beskrive bølgefunktionen for denne situation, den er givet ved ligning 4.2 på side 8, hvor normeringen vil se således ud

$$\int |\phi(r_i)|^2 dr^3 = 1$$

Vi kan nu finde forventningsværdien af den kinetiske energi og fældepotentialet på følgende vis:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{T} + \hat{V}_{ext} | \psi \rangle &= \sum_{i=1}^n \langle \phi(r_i) | \hat{T}_i + \hat{V}_{i,ext} | \phi(r_i) \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^n \int \phi^*(r_i) \frac{-\hbar}{2m} \nabla_i^2 \phi(r_i) + \phi^*(r_i) V_{ext} \phi(r_i) dr_i^3 = \\ &= n \cdot \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(r)|^2 + V_{ext} |\phi(r)|^2 dr^3 \end{aligned}$$

hvor vi har brugt at alle partiklerne i Bose-Einstein kondensatet vil være i grundtilstanden, dvs. at deres energier er ens og vi kan udskifte summeringen med n gange den konstante energi per partikel, hvorved vi også kan fjerne indekseringen i. Derudover har vi brugt at den kinetiske energioperator er hermitisk til at sætte

$$\phi^*(r_i) \frac{-\hbar}{2m} \nabla_i^2 \phi(r_i) = \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(r)|^2$$

For vores interaktions-potentiale får vi følgende forventningsværdi

$$\sum_{i < j} \langle \psi | \hat{V}_{ij} | \psi \rangle = \sum_{i < j} \int \int \phi^*(r_i) \phi^*(r_j) \delta(r_i - r_j) V_0 \phi(r_i) \phi(r_j) dr_j^3 dr_i^3$$

I denne ligning tager vi integralet over delta-potentialet $\delta(r_i - r_j)$, som jo netop er defineret som funktionsværdien i r_i , så dvs. at

$$\sum_{i < j} \int \phi^*(r_i) \phi^*(r_j) \delta(r_i - r_j) V_0 \phi(r_i) \phi(r_j) dr_j^3 = \sum_{i < j} \phi^*(r_i) \phi^*(r_i) V_0 \phi(r_i) \phi(r_i)$$

Vi kan nu igen benytte at alle sammenstød vil give anledning til samme energiændring, da kondensatet består af partikler i grundtilstanden. Antallet af sammenstød vil være $\frac{n(n-1)}{2}$. Dette ses let, for vi kan vælge en partikel ud af de n partikler på n måder, derefter kan vi udvælge den partikel den skal kollideres med på n-1 måder. Da vi ikke kan kende forskel på partiklerne skal vi dividere antal mulige kombination med 2, så vi ikke tæller hver mulig kollision dobbelt. Så når vi bruger dette kommer vi frem til at forventningsværdien bliver

$$\langle \hat{V}_{ij} \rangle = \frac{n(n-1)}{2} \int V_0 |\phi(r)|^4 dr^3$$

Da vi generelt arbejder med $n \gg 1$, vil vi benytte at $\frac{n(n-1)}{2} \approx \frac{n^2}{2}$.

Vi vil nu minimere denne funktion via Lagrange-multiplikator metode som nævnt. Vi vil beskrive bølgefunktion som

$$\phi(r) = \psi(r) + \lambda z(r)$$

og finde minimum for formel 4.3 på side 9, ved at variere denne, hvilket giver minimum for vores oprindelige ϕ , hvis man evaluerer den i $\lambda \rightarrow 0$. For at finde minimum skal man naturligvis finde differentialkvotienten af vores middelværdi. Vi går ud fra at bølgefunktionerne er ”pæne”, således at vi kan bytte rundt på differentialkvotient og integral. Vi finder differentialkvotienten separat for vores forskellige led, så hvis vi starter med den kinetiske energi får vi:

$$\begin{aligned} & \left. \frac{d[n \cdot \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla(\psi(r) + \lambda z(r))|^2 dr^3]}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \\ & \left. \frac{d[n \cdot \int \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi(r) + \lambda\nabla z(r)) (\nabla\psi^*(r) + \lambda\nabla z^*(r)) dr^3]}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \\ & \left. \frac{n\hbar^2}{2m} \int \frac{d[\nabla\psi(r)\nabla\psi(r)^* + \lambda(\nabla z(r)\nabla\psi(r)^* + \nabla\psi(r)\nabla z^*(r)) + \lambda^2\nabla z^*(r)\nabla z(r)]}{d\lambda} dr^3 \right|_{\lambda=0} = \\ & \left. \frac{n\hbar^2}{2m} \int \nabla z(r)\nabla\psi(r)^* + \nabla\psi(r)\nabla z^*(r) + 2\lambda\nabla z^*(r)\nabla z(r) dr^3 \right|_{\lambda=0} = \\ & \frac{n\hbar^2}{2m} \int \nabla z(r)\nabla\psi(r)^* + \nabla\psi(r)\nabla z^*(r) dr^3 = \\ & n \frac{\hbar^2}{2m} ([\nabla\psi^*(r)z(r) + z^*(r)\nabla\psi(r)]_{-\infty}^{\infty} - \int \nabla^2\psi^*(r)z(r) + \nabla^2\psi(r)z^*(r) dr^3) = \\ & n \frac{-\hbar^2}{2m} \int \nabla^2\psi^*(r)z(r) + \nabla^2\psi(r)z^*(r) dr^3 \end{aligned}$$

hvor vi har anvendt partiel integration og det faktum at da vores bølgefunktion er normerbar, vil både $\psi(r)$, $\nabla\psi(r)$ gå imod 0 for r gående mod $\pm\infty$. De resterende to led er simple, og hvis vi inkorporerer $-\mu n \langle \phi | \phi \rangle$ i ledet for V_{ext} , får vi

$$\begin{aligned} & n \int \frac{d[(V_{ext}(r) - \mu)(\psi(r) + \lambda z(r))(\psi^*(r) + \lambda z^*(r))]}{d\lambda} dr^3 \Big|_{\lambda=0} = \\ & \int (V_{ext}(r) - \mu)(\psi^*(r)z(r) + \psi(r)z^*(r)) dr^3 \end{aligned}$$

samt

$$\int \frac{d[\frac{n^2 V_0}{2} (\psi(r)\psi^*(r) + \lambda(\psi^*(r)z(r) + \psi(r)z^*(r)) + \lambda^2 z^*(r)z(r))]^2}{d\lambda} dr^3 \Big|_{\lambda=0} =$$

$$\int n^2 V_0 |\psi(r)|^2 (\psi^*(r)z(r) + \psi(r)z^*(r)) dr^3$$

For at finde minimum skal vi sætte den samlede ligning lig nul, dvs. at vi får

$$\frac{dE}{d\lambda} \Big|_{\lambda=0} = n \int \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \psi^*(r)z(r) + \nabla^2 \psi(r)z^*(r))$$

$$+ (V_{ext}(r) - \mu)(\psi^*(r)z(r) + \psi(r)z^*(r)) + n^2 V_0 |\psi(r)|^2 (\psi^*(r)z(r) + \psi(r)z^*(r)) dr^3 =$$

$$n \int f(\psi(r), z^*(r)) + (f(\psi(r), z^*(r)))^* dr^3 = 0$$

Integralet giver nul, hvis integranden er lig nul, så derfor sætter vi denne lig nul. Hvis $f(\psi(r), z^*(r))$ er nul, så må dens konjugerede også være nul, derfor kan vi finde minimum ved bare at løse for denne. Vi ser at vi kan dividere igennem med n og med $z^*(r)$ og så får vi

$$\frac{-\hbar^2 \nabla^2 \psi(r)}{2m} + (V_{ext}(r) - \mu)\psi(r) + nV_0 |\psi(r)|^2 \psi(r) = 0$$

Som kan omskrives til egenværdiligningen

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) + nV_0 |\psi(r)|^2 \right] \psi(r) = \mu \psi(r)$$

Dvs. at denne egenværdiligning giver os en størsteværdi for grundtilstandsenergien af den enkelte partikel i den oprindelige hamiltonoperator og vi vil derfor beskrive systemet ud fra denne nye hamiltonoperator, kendt som Gross-Pitaevskii ligningen og som kan løses numerisk på forholdsvis simpel vis. Vi kan fortolke egenværdien μ som det kemiske potential, dvs. den energi der skal til for at tilføre en partikel til systemet. Dette ses, da vi minimerede $\langle \psi | H - \mu n | \psi \rangle$ ved at differentialkvotienten var sat lig nul. Derfor må det gælde om differentialet at $d\langle E \rangle - \mu dn = 0$ hvorved μ netop opfylder definition af det kemiske potential

$$\frac{d\langle E \rangle}{dn} = \mu$$

Denne fortolkning vil også gælde for to-kanal udledningen da vi minimerer et udtryk på samme form.

Til sidst vil vi kigge på selve Gross-Pitaevskii ligningen for at se hvad de forskellige

parametre vil bevirke. Hvis vi går ud fra at fældepotentialet er en harmonisk oscillator, som vi generelt gør i denne opgave, så vil det samle partikler i bunden af potentialbrønden, dvs. at den virker samlende. Partiklernes kinetiske energi vil til gengæld skubbe partikler væk fra områder med høj krumning af bølgefunktionen og generelt sprede partiklerne. For $V_0 > 0$ frastøder partiklerne hinanden og interaktionen vil derfor sprede partiklerne yderligere. For $V_0 < 0$ samler stødene til gengæld partiklerne, så densiteten vokser. Hvis den numeriske værdi af spredningspotentialet bliver stor nok og den er negativ, så vil kondensatet kollapse, da den kinetiske energi ikke længere kan opretholde det. Ved Feshbach-resonans styres spredningslængden a , af det eksterne magnetfelt, dvs. at kollapset styres af magnetfeltet. Vi ser også at ligningen ikke er defineret i resonansfeltet, da a her vil divergere mod $\pm\infty$. Da n også indgår i spredningsleddet vil et større antal partikler også på et tidspunkt give kollaps, hvis vi har en negativ spredningslængde.

4.2 To-kanal Gross-Pitaevskii ligning

For to-kanal systemet vil ϕ_i være en kombination af to forskellige egentilstande, for henholdsvis den åbne og lukkede kanal, svarende til f.eks. singlet og triplet tilstanden for ${}^7\text{Li}$. Så vi får

$$\phi_i(r_i) = u(r_i)|0\rangle + w(r_i)|1\rangle = \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix}$$

hvor $u(r_i)$ beskriver den åbne kanal, $w(r_i)$ den lukkede. Dette produkt af bølgefunktioner er et Kronecker tensor produkt, som vil give en vektor af dimension 2^n , hvor hvert element vil være de mulige produkter $u(r_1)w(r_2)u(r_3)\dots w(r_n)$. Alle de mulige produkter af disse vil være indeholdt som elementer i den fremkommende vektor. Dvs. at den endelige bølgefunktion er en vektor, så den overholder de generelle krav for at være en bølgefunktion. Den vil også være normeret, hvis hver bølgefunktion $\phi(r_i)$ er normeret. Det indre produkt er igen defineret på samme måde som i en-kanal modellen, normeringen er givet ved

$$\int \phi(r_i)^* \phi(r_i) dr^3 = \int \begin{bmatrix} u^*(r_i) & w^*(r_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} dr^3 = \int |u(r_i)|^2 + |w(r_i)|^2 dr^3 = 1$$

Vi kan nu finde forventningsværdierne for den potentielle og kinetiske energi på samme måde som for en-kanal systemet. Da den potentielle energi er uafhængig af partiklens indre stadier, kan vi simpelt beskrive den via en diagonal 2x2 matrix der virker ens på $u(r_i)$ og $w(r_i)$

$$\hat{V}_{i,ext} = \begin{bmatrix} V_{ext}(r_i) & 0 \\ 0 & V_{ext}(r_i) \end{bmatrix}$$

Den kinetiske energi er også uafhængig af de indre tilstande, så vi kan igen beskrive den som en diagonalmatrix. For at simulere afhængigheden af et ydre magnetfelt vil vi addere E_0 til den lukkede kanal, dvs. at vi direkte simulerer afhængigheden af magnetfeltet, til modsætning af en-kanal modellen hvor den kommer fra spredningslængdens afhængighed af B . Når vi så definerer interaktionsenergien vil vi gå ud fra at spredningslængderne for den lukkede og åbne kanal er konstante. På denne måde undgår vi en-kanal modellens problem, der opstår når den effektive spredningslængde divergerer.

$$\hat{T}_i = \begin{bmatrix} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 & 0 \\ 0 & \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + E_0 \end{bmatrix}$$

Vi kan nu finde forventningsværdien:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle &= \sum_{i=1}^n \langle \phi(r_i) | \hat{T}_i + \hat{V}_{i,ext} | \phi(r_i) \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^n \int [u^*(r_i) \quad w^*(r_i)] \begin{bmatrix} V_{ext}(r_i) & 0 \\ 0 & V_{ext}(r_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} \\ &+ [u^*(r_i) \quad w^*(r_i)] \begin{bmatrix} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 & 0 \\ 0 & \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + E_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} dr_i^3 = \\ n \cdot \int u(r)^* V_{ext}(r) u(r) + w^*(r) V_{ext}(r) w(r) - \frac{\hbar^2}{2m} (u^*(r) \nabla^2 u(r) + w^*(r) \nabla^2 w(r)) + w^*(r) E_0 w(r) dr^3 = \\ n \cdot \int V_{ext}(r) |u(r)|^2 + (E_0 + V_{ext}(r)) |w(r)|^2 - \frac{\hbar^2}{2m} (u^*(r) \nabla^2 u(r) + w^*(r) \nabla^2 w(r)) dr^3 \end{aligned}$$

Vi har igen brugt at alle partiklerne i et Bose-Einstein kondensat er i samme tilstand, nemlig grundtilstanden og derfor beskriver vi den samlede energi som n ganget med energien for $\phi(r)$.

Forventningsværdien for interaktions-ledet vil være noget mere kompliceret. Her kan vi nemlig ikke bare beskrive værdien som en diagonal 2x2 matrix, da de to kanaler ikke er uafhængige af hinanden. Vi vil beskrive interaktionen via en simpel udvidelse af spredningsteorien for en-kanal, så vi bruger stadig delta-potentialet som approksimation. Vi vil nu beskrive V_0 som en 2x2 matrix indeholdende en koblingskonstant β . Derudover har vi værdier α_w og α_u for den åbne og lukkede kanal. Værdierne af disse konstanter lader vi svare til værdien for en-kanal modellen beskrevet i ligning 3.2 på side 3, men hvor spredningskonstanten er defineret svarende til parametrene i to-kanal Feshbach-resonans modellen, hvor vi beskriver koblingen i forhold til spredningslængden for den åbne kanal.

$$\alpha_w = \frac{4\pi\hbar^2 a_w}{m}, \quad \alpha_u = \frac{4\pi\hbar^2 a_u}{m}, \quad \beta = \frac{4\pi\hbar^2 a_u}{m} \frac{a_w}{b}$$

og operatoren der beskriver interaktionen ser ud som følger

$$\hat{V}_{ij} = \delta(r_i - r_j) \cdot \begin{bmatrix} \alpha_w & \beta \\ \beta & \alpha_u \end{bmatrix} = \delta(r_i - r_j) \cdot V_0$$

Så vi kan nu udregne forventningsværdien for interaktionsoperatoren

$$\sum_{i < j} \langle \psi | \hat{V}_{ij} | \psi \rangle = \sum_{i < j} \int \int \phi^*(r_i) \phi^*(r_j) \delta(r_i - r_j) V_0 \phi(r_i) \phi(r_j) dr_j^3 dr_i^3 =$$

$$\sum_{i < j} \int \phi^*(r_i) \phi^*(r_i) V_0 \phi(r_i) \phi(r_i) dr_i^3 =$$

$$\sum_{i < j} \int \begin{bmatrix} u^*(r_i) & w^*(r_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^*(r_i) & w^*(r_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_w & \beta \\ \beta & \alpha_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} dr_i^3 =$$

$$\frac{n(n-1)}{2} \int (\alpha_u [|u(r)|^4 + |u(r)|^2 |w(r)|^2] + \alpha_w [|w(r)|^4 + |u(r)|^2 |w(r)|^2]$$

$$+ \beta [|u(r)|^2 u^*(r) w(r) + |u(r)|^2 w^*(r) u(r) + |w(r)|^2 w^*(r) u(r) + |w(r)|^2 u^*(r) w(r)] dr^3)$$

Vi har 8 led, svarende til 8 forskellige mulige partikel kollisioner. Man skulle ellers tro at vi ville få 16 led, da dette svarer til de mulige kombinationer af to forskellige tilstande før sammenstødet, samt to forskellige tilstande efter sammenstødet, hvilket giver $2^4 = 16$ muligheder. Hvis vi udregner disse 16 led individuelt ved at splitte det indre produkt op i led af typen

$$\langle u(r)w(r) | 01 \rangle \langle V_0 | u(r)w(r) | 10 \rangle$$

ser vi at de led som har forskellige indre tilstande $|1 \rangle$ og $|0 \rangle$ i den første og sidste egentilstand i vores indre produkt giver nul, da de er orthonormale. De 2 andre tilstande kan sagtens være forskellige, da vores operator V_0 kombinerer de to egentilstande. Fysisk giver det mening at man kun tæller, for eksempel $|0 \rangle \rightarrow |1 \rangle$ og $|1 \rangle \rightarrow |0 \rangle$ kombinationen en gang, så det ikke betyder noget hvilken af de to partikler der var i hvilken tilstand, da sammenstødet skete, da vi ikke kan kende forskel på dem.

For at beskrive bølgefunktionen for et Bose-Einstein kondensat vil vi igen finde minimumsværdien af ligning 4.3 på side 9 Vi løser dette på samme måde som for en-kanal Gross-Pitaevskii ligningen, nu med $\phi(r_i)$ på formen

$$\phi = \begin{bmatrix} u'(r) + \lambda_y y(r) \\ w'(r) + \lambda_x x(r) \end{bmatrix}$$

Så vi finder minimum for denne og lader $\lambda_y \rightarrow 0$ og $\lambda_x \rightarrow 0$. Vi kan løse dette for hvert led, ligesom vi gjorde for en-kanal modellen. Vi kunne forsøge at finde et generelt minimum, men dette er meget kompliceret og giver ikke en løsning der er på egenværdiform. Hvis vi derimod begrænser vores funktioner $u(r)$ og $w(r)$ til at være reelle, så er det muligt at få en løsning der er på form af en egenværdiligning. Derudover vil vi igen antage at funktionerne er "pæne" som i en-kanal modellen. Først ser vi at forventningsværdien af hamilton-operatoren er næsten symmetrisk med hensyn til $u(r)$ og $w(r)$, så hvis vi løser problemet for en af de to, kan vi nemt finde løsningen for den anden. For at lette notationen i de følgende udregninger, lader vi r -afhængigheden være implicit. Vi starter med at løse problemet for u :

$$\left. \frac{\partial [n \int \frac{\hbar^2}{2m} \nabla(u' + \lambda_y y)^2 + w \nabla^2 w dr^3]}{\partial \lambda_y} \right|_{\lambda_y=0} =$$

$$n \int \frac{\hbar^2}{2m} \nabla u' \nabla 2y dr^3 = n \int \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 u' 2y dr^3$$

Vi fik dette på samme måde som for en-kanal modellen. Potentialer er også præcist det samme, bortset fra at vi nu kun løser for reelle værdier. Ligesom for en-kanal modellen inkorporerer vi $-\mu n < \phi | \phi >$ i dette led.

$$\left. \frac{\partial [n \int V_{ext}(u' + \lambda_y y)^2 + V_{ext} w^2 - \mu(u' + \lambda_y y)^2 - \mu w^2 dr^3]}{\partial \lambda_y} \right|_{\lambda_y=0} =$$

$$n \int (V_{ext} - \mu) u' 2y dr^3$$

Til sidst har vi interaktions-potentialet som er noget længere end for en-kanal modellen. For α_u -ledet får vi

$$\left. \frac{\partial [\frac{n^2}{2} \int \alpha_u [(u' + \lambda_y y)^4 + (u' + \lambda_y y)^2 w^2] dr^3]}{\partial \lambda_y} \right|_{\lambda_y=0} =$$

$$\frac{n^2}{2} \int \alpha_u [2u'^3 + u'w^2] 2y dr^3$$

for α_w -ledet får vi

$$\left. \frac{\partial [\frac{n^2}{2} \int \alpha_w [w^4 + w^2(u' + \lambda_y y)^2] dr^3]}{\partial \lambda_y} \right|_{\lambda_y=0} =$$

$$\frac{n^2}{2} \int \alpha_w u' w^2 2y dr^3$$

og endelig får vi for β -ledet, efter at have reduceret det til reelle funktioner, følgende værdi

$$\left. \frac{\partial [\frac{n^2}{2} \int \beta [2(u' + \lambda_y y)^3 w + 2w^3(u' + \lambda_y y)] dr^3]}{\partial \lambda_y} \right|_{\lambda_y=0} =$$

$$\frac{n^2}{2} \int \beta [3u'^2 w + w^3] 2y$$

For at minimere forventningsværdien sætter vi nu den samlede afledte lig nul. Hvis integranden af et integral giver nul, så vil integralet også give nul, så vi sætter intetgranden lig nul. Når vi gør dette kan vi dividere hele vores ligning igennem med $2ny$ og vi får følgende udtryk:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 u' + V_{ext} u' + \frac{n}{2} [\alpha_u (2u'^3 + u'w^2) + \alpha_w w^2 u' + \beta (3u'^2 w + w^3)] = \mu u'$$

hvor vi husker at w var konstant under denne minimering og hvor vi nu kan navngive vores u til at være u igen, da $u(r) = u'(r) + \lambda_y y$ er evalueret i $\lambda_y = 0$.

Hvis vi minimerer med hensyn til λ_x får vi samme ligning, vi skal bare ændre hvert eneste u til et w og hver eneste w til et u og addere E_0 i den kinetiske energioperator:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 w + (V_{ext} + E_0)w + \frac{n}{2} [\alpha_w(2w^3 + wu^2) + \alpha_u u^2 w + \beta(3w^2 u + u^3)] = \mu w$$

Så vi har nu to ligninger med to ubekendte som beskriver vores to-kanal Bose-Einstein kondensat. Vi kan omskrive dette til et egenverdiproblem som er matematisk ækvivalent, ved at konstruere en 2×2 matrix der, når man bruger den på ϕ , vil udtrykke de samme to ligninger.

$$\hat{H} \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix} = \mu \begin{bmatrix} u(r_i) \\ w(r_i) \end{bmatrix}$$

hvor \hat{H} er givet ved

$$\hat{H} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + n\alpha_u u(r)^2 & \frac{n}{2} [\alpha_u u(r)w(r) + \alpha_w u(r)w(r) + \beta(3u(r)^2 + w(r)^2)] \\ \frac{n}{2} [\alpha_w u(r)w(r) + \alpha_u u(r)w(r) + \beta(3w(r)^2 + u(r)^2)] & \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + n\alpha_w w(r)^2 + E_0 \end{bmatrix}$$

Så vi ser at denne simple to-kanal model giver os en hamilton-operator, hvori Gross-Pitaevskii ligningen for henholdsvis den åbne og lukkede kanal indgår i \hat{H}_{11} og \hat{H}_{22} og hvor der vil være en kobling mellem de to kanaler, der afhænger af bølgefunktionen for både den lukkede og åbne kanal, så den er ikke helt simpel. For at se på hvorledes denne beskriver de fysiske egenskaber for et Bose-Einstein kondensat, vil vi se på en numerisk løsning af ligningen.

5 Numerisk Løsning af Gross-Pitaevskii ligningen

Før vi kigger nærmere på selve metoden, vil vi se på hvilken ligning vi skal løse. Vi anvender for både en og to-kanal modellen en harmonisk oscillator som fældepotential

$$V_{ext} = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$$

så gassen vil besidde sfærisk symmetri. For at forsimple problemet vil vi kun løse den radiale del af bølgeligningen. Under antagelse af sfærisk symmetri kan man opskrive bølgefunktionen i polære koordinater på følgende vis:

$$\psi(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\phi, \theta) = \frac{P(r)_{nl} Y_{lm}(\phi, \theta)}{r} \quad (5.1)$$

hvor

$$P_{nl}(r) = r \cdot R_{nl}(r)$$

Hvis vi nu går ud fra at vi befinder os i grundtilstanden, hvilket Bose-Einstein kondensatet gør per definition, vil vi kun se på situationen hvor $n=l=m=0$. Når dette er tilfældet så vil $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Vi vil gerne omskrive Gross-Pitaevskii ligningen til at operere på $P(r)$ frem for $R(r)$. Grunden til at vi gør dette er at den radiale del af bølgefunktionen kun er defineret for positive værdier af r , så $\lim_{r \rightarrow 0} P(r) = 0$ for at den opfylder normeringsbetingelserne. Når vi skriver bølgefunktionen som i ligning 5.1 på forrige side, vil dette klart være tilfældet. Da vores fældepotential er en harmonisk oscillator er et gæt på en løsning en modificeret løsning for grundtilstanden i den harmoniske oscillator

$$R(r) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \pi\hbar e^{-\frac{m\omega_0 r^2}{2\hbar}}$$

Den harmoniske oscillators løsning, har maksimum i nul og går derefter symmetrisk ud til hver side, så derfor er denne omskrivning vigtig. Hvis vi går ud fra at $R(r)$ svarer i form til grundtilstanden for en harmonisk oscillator vil dette også betyde at $P(r)$ er antisymmetrisk omkring nul. Den anden normeringsbetingelse er at $\lim_{r \rightarrow \infty} P(r) = 0$, som igen er opfyldt hvis vi går ud fra at $R(r)$ er en lettere modificeret grundtilstand for den harmoniske oscillator, da eksponentialfunktioner aftager hurtigere end lineære funktioner vokser.

Generelt ser vi at bølgefunktionen selv indgår i hamilton-operatoren for vores system. Så vi vil gerne finde egenværdier samt egenfunktioner iterativt. Dvs. at vi starter med et gæt på en egenfunktion, som nævnt bruger vi gæt svarende til grundtilstanden for en harmonisk oscillator. Så udregner vi hamilton-operatoren og finder derpå egenværdierne, samt egenfunktionerne for denne. Vi bruger så den nye egenfunktion for grundtilstanden til at lave en ny hamiltonoperator osv. indtil at vores egenværdier konvergerer omkring en stabil værdi, altså når vi får en selvkonsistent løsning.

For at bruge denne metode skal vi kunne beskrive vores kinetiske energioperator. Det er naturligvis nemt at beskrive vores potential-operator, samt vores interaktions-operator som matricer, da dette bare vil være en diagonalmatrix med diagonalindgange svarende til værdier i et diskret positionsrum. Dvs. værdier for r_i . Hvordan disse helt præcis ser ud, vil jeg beskrive nærmere når vi kommer til de specifikke udregninger. Hvis vi vil beskrive hamiltonoperatoren, må vi finde en måde at beskrive ∇^2 numerisk i et diskret positionsrum. Hvis vi begrænser problemet til en dimension er en af de simpleste måder at gøre dette via 5-punktsmetoden. 5-punktsmetoden giver os den dobbelt-afledede på følgende vis:

$$f''(r) = \frac{-f(r - 2\Delta r) + 16f(r - \Delta r) - 30f(x) + 16f(r + \Delta r) - f(r + 2\Delta r)}{12\Delta r^2} \quad (5.2)$$

Vi kan nu opstille en matrix der ved brug på den diskrete bølgefunktion vil give et udtryk svarende til udtrykket ovenover. Når vi definerer vores r , samt vores bølgefunktion, så sørger vi for at r -vektoren er ækvidistant og at differensen mellem punkter svarer til Δr . Vi sørger også for at denne ækvidistante afstand er afstanden til nul, fra første punkt dvs. at

$$r = [\Delta r; r_{max}]$$

i skridt af Δr . Derfor vil værdien for $f(r - \Delta r)$ være værdien der ligger lige før den værdi vi udregner f'' for i bølgefunktionsvektoren. På samme måde er $f(r - 2\Delta r)$ værdien der ligger to skridt før osv. Dvs. at mellem den 3. og den 3. sidste værdi for vektoren, skal matricen have 5 indgange $[-1 \ 16 \ -30 \ 16 \ -1]$, samt nuller således at disse finder f'' for den rigtige værdi af ϕ . For de 3 første og 3 sidste defineres f'' via de værdier der er mulige at have med. Et eksempel på en sådan matrix kan ses nedenunder:

$$f'' = \frac{1}{12\Delta x^2} \cdot \begin{bmatrix} -30 & 16 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 16 & -30 \end{bmatrix}$$

Men for at få ordentlige resultater må vi også tage højde for normeringsbetingelserne for bølgefunktionen. Som tidligere nævnt skal $\lim_{r \rightarrow 0} P(r) = 0$ og $\lim_{r \rightarrow \infty} P(r) = 0$. Da $P(0)=0$ og den er anti-symmetrisk omkring nul kan vi udregne hvordan dette vil ændre 5-punkts-værdien for første værdi i vores r vektor. Denne skal nemlig bestå af alle ledene i ligning 5.2 på foregående side. Hvis vi nu siger at ledet inden 0 er $f(r_0)$ betyder dette at $-f(r_{-2}) = f(r_0)$ og at $f(r_{-1}) = 0$, dvs. at 30 skal laves om til 29.

Ved hamiltonoperatoren for både en- og to-kanal modellen kan det betale sig at skalere Gross-Pitaevskii ligningen med den karakteristiske længde for den harmoniske oscillator

$$a_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \equiv 1 \quad (5.3)$$

som vi definerer til grundenheden 1. På samme måde vil vi skalere energierne med energikvanten fra den harmoniske oscillator $\hbar\omega_0 \equiv 1$. På denne måde får vi en dimensionsløs ligning.

Vi vil se på ${}^7\text{Li}$, som har to kanaler svarende til singlet og triplet tilstande. Man kan finde eksperimentelle værdier for spredningslængderne af disse til et magnetfelt på 0, via fotoassociation. Vi bruger resultaterne fra [Pehtick], hvor de står givet til $a_t = -27,6a_0$ og $a_s = 33a_0$, hvor a_0 er Bohr-radius. Derudover kender vi naturligvis massen af Lithium som er $m=7,016u$ og vi kan definere en harmonisk oscillator med en bestemt frekvens, f.eks. på $2\pi \cdot 180\text{Hz}$, som svarer til typiske eksperimentelle værdier. Så vi kan beskrive vores spredningslængder i enheder af oscillatorlængder, der er defineret som ovenover: $a_t = -5,16 \cdot 10^{-4}$ og $a_s = 6,17 \cdot 10^{-4}$.

Til sidst skal det nævnes at vi også kan finde radius af skyen i vores kondensat ud fra følgende formel

$$\frac{R}{a_{osc}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{4\pi \int x^2 P(x)^2}$$

hvor $|P(x)|$ naturligvis skal erstattes af $|P_w(x)|^2 + |P_u(x)|^2$ for to-kanal-modellen.

Jeg implementerer den numeriske løsning i programmet matlab og alle figurer i de to følgende sektioner kommer som resultat af denne implementering. Alle resultater for det kemiske potential og radius er beregnet med en præcision på 4 decimaler. M-filen der beskriver proceduren kan hentes på [Matlab-program].

5.1 En-kanal Gross-Pitaevskii ligningen

Vi går ud fra at Lithium-partiklerne enten alle befinder sig i singlet eller alle befinder sig i triplet-tilstanden, da en-kanal Gross-Pitaevskii ligningen kun kan tage højde for at de alle er i samme kanal. For at løse problemet bruger vi den ovenfor beskrevne metode og vi vil indsætte $P(r) = r \cdot R(r)$ i Gross-Pitaevskii ligningen, samt skalere med ligning 5.3 på forrige side, hvilket vi praktisk gør ved at dividere igennem med oscillatorenergien $\hbar\omega_0$

$$\frac{\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0 r^2 + n V_0 \frac{P(r)^2}{r^2} \right]}{\hbar\omega_0} P(r) = \mu \frac{P(r)}{\hbar\omega_0} \Leftrightarrow$$

$$\left[\frac{\nabla^2}{2} a_{osc}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{a_{osc}} \right)^2 + n 4\pi \frac{a}{a_{osc}} \frac{P(r)^2}{\left(\frac{r}{a_{osc}} \right)^2} a_{osc} \right] P(r) = \frac{\mu}{\hbar\omega_0} P(r)$$

og da a_{osc} er defineret til enhedslængden for systemet får vi bare at vi skal løse

$$\left[\frac{\nabla^2}{2} + \frac{1}{2} x^2 + n 4\pi a \frac{P(x)^2}{x^2} \right] P(x) = \frac{\mu}{\hbar\omega_0} P(x)$$

hvor

$$x = \frac{r}{a_{osc}}$$

og spredningslængden a også er målt i oscillatorlængder. Så vi kan nu løse denne ligning iterativt som beskrevet ovenfor, hvor vi renormerer vores bølgefunktion hver gang ved

$$4\pi A^2 \int P(x)^2 dx \equiv 1$$

via den simple trapzodiale metode. Vi starter med et gæt svarende til grundtilstanden for den harmoniske oscillator omskrevet til $P(x)$, hvor vi igen lader den være dimensionsløs, dvs.

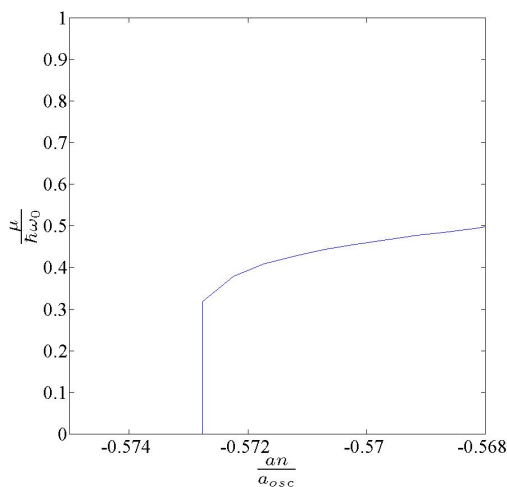
$$P(x) = A x e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Så vi løser en matrix bestående af

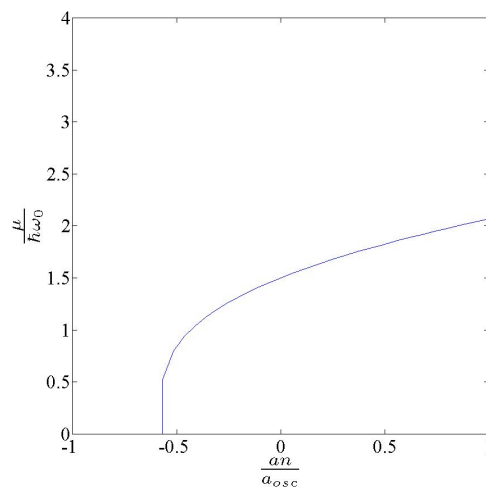
$$\hat{T} + \text{diag}(\hat{V}_{ext}) + \text{diag}(\hat{V}_{ij})$$

hvor T er beskrevet ud fra 5-punkts metoden. Vi varierer nu antallet af partikler n og ser hvad der sker for både den åbne og lukkede kanal. Som nævnt regner vi med at der sker kollaps når vi når et vist antal partikler med negativ spredningslængde. På figur 4 og 6 på næste side ses et nærbillede af kollapsområdet for den negative spredningslængde, mens der på figur 5 og 7, på samme side, ses variation af antal partikler mellem 0 og 2000 for både den negative og positive spredningslængde. Vi har plottet $\frac{\mu}{\hbar\omega_0}$ som en funktion af $\frac{an}{a_{osc}}$, da man så også kan fortolke vores graf som om n er konstant, men at vi i stedet

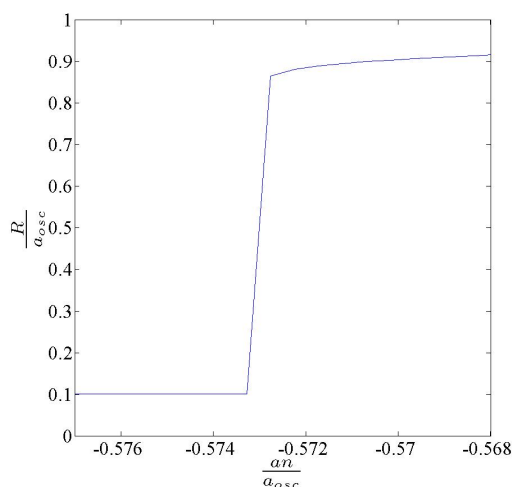
varierer spredningslængden, som vi jo netop kan ved at variere et magnetfelt og skabe Feshbach-resonans.



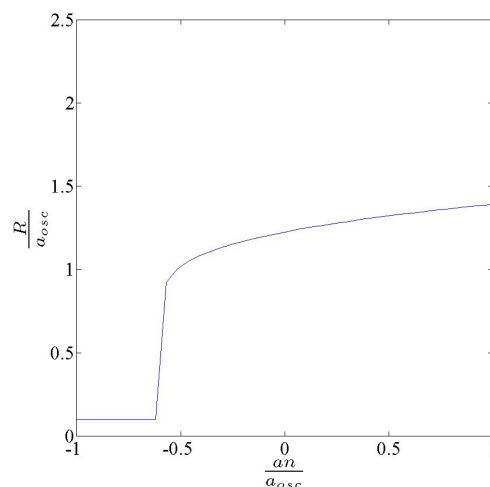
Figur 4: Præcis beregning omkring kollapsområdet for det kemiske potential, n varierer i skridt af 1



Figur 5: Energieniveauerne, for $\frac{an}{a_{osc}}$ mellem -1 og 1, n varierer i skridt af 100



Figur 6: præcis beregning omkring kollapsområdet for radius, n varierer i skridt af 1

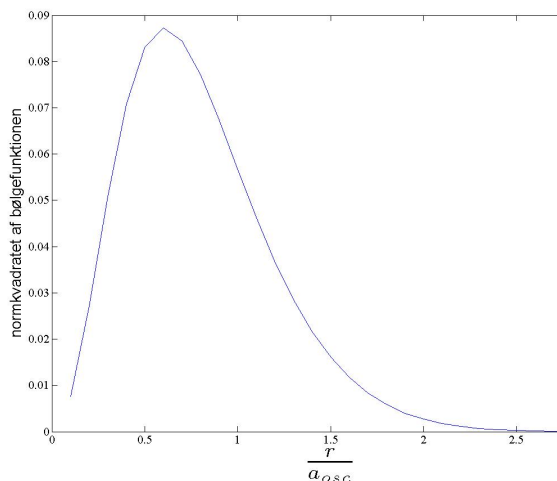


Figur 7: Radius, for $\frac{an}{a_{osc}}$ mellem -1 og 1, n varierer i skridt af 100

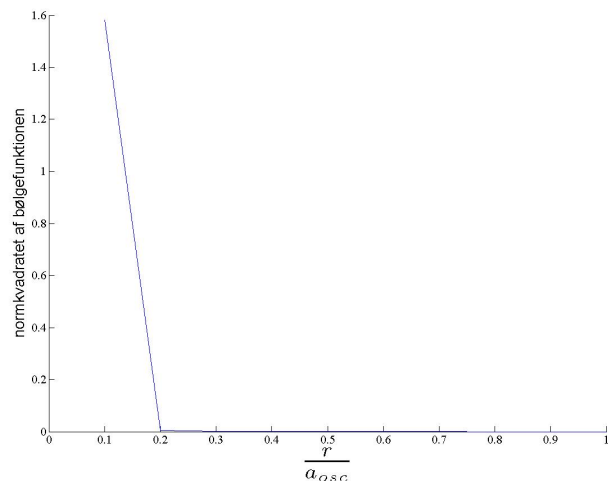
Vi ser at der sker kollaps ved 1111 partikler, svarende til $\frac{an}{a_{osc}} = -0,5738$, hvor det kemiske potential falder til størrelsesordenen $-8000 \frac{\mu}{h\omega_0}$. Radius efter kollapset falder til $\frac{R}{a_{osc}} = 0,1009$, så vi har ikke længere en kondensat-”sky”, men en mængde partikler der er samlet meget tæt. Denne værdi for hvor der sker kollaps stemmer overens med værdien der opnås i [Pethick], der også informerer os om at den reelle værdi ligger til højre for

den fundne. Dette er fordi vores løsningsmetode har et begrænset antal frihedsgrader. Vi ser også at værdien af det kemiske potential og radius afhænger af antal partikler/spredningslængden hvilket stemmer overens med eksperimentelle resultater.

Til sidst kan vi kigge på formen af bølgefunktionen svarende til grundtilstandsenergien, dvs. til kondensatets tilstand, før og efter kollaps. På figur 8 og 9 ses et eksempel på dette.



Figur 8: Bølgefunktionen før kollaps



Figur 9: Bølgefunktionen efter kollaps

Før kollapset ligner bølgefunktionen en lettere deformeret bølgefunktion for grundtilstanden til en harmonisk oscillator, hvilket passer fint med vores forventning. Efter kollapset er bølgefunktionen ikke længere en pæn gauss-lignende kurve, men er koncentreret på et meget lille område, svarende til at skyen er kollapset.

5.2 To-kanal Gross-Pitaevskii ligningen

Vi går her ud fra at kondensatet kan befinde sig i både singlet og triplet tilstanden. Det er klart at der vil ske kollaps hvis alle atomerne er i triplet-tilstanden, dvs. den lukkede kanal, og vi har et antal atomer der er større end den kritiske værdi for kollaps under en-kanal modellen. Hvis de alle befinder sig i singlet tilstanden vil situationen svare til en-kanal modellen, hvorfor kondensatet opretholdes. I virkeligheden vil der opstå en kombination af triplet og singlet tilstande, når vi nærmer os overgangsenergien. For når partiklerne i den åbne kanal får mulighed for at sænke energien af kondensatet ved at gå over i den lukkede kanal, vil de gøre det. Hvis vi går ud fra at a_s og a_t er konstante ved variation af det eksterne magnetfelt vil kondensatets afhængighed af dette, kunne beskrives ved dets afhængighed af E_0 , som jo afhænger af

$$E_0 = \Delta\mu \cdot B$$

Dvs. at E_0 ændres, når magnetfeltet ændres. Vi kan nu se på hvordan kondensatet afhænger af antallet af partikler n samt magnetfeltet B , når man har defineret en bestemt interaktion b mellem de to kanaler. Vi vælger $b=4$.

For at regne på kondensatet vil vi skalere to-kanal hamiltonoperatoren med oscillatorlængden, samt indsætte $P(r) = r \cdot R(r)$. Udregningerne er af præcis samme karakter som for en-kanal modellen, der er bare flere led af samme form. Vi kommer frem til følgende

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{2}x^2 + 4\pi n a_u \left(\frac{P_u(x)}{x}\right)^2 & \frac{2\pi n}{x^2} [a_u P_u(x)P_w(x) + a_w P_u(x)P_w(x) + \frac{a_u}{b}(3P_u(x)^2 + P_w(x)^2)] \\ \frac{2\pi n}{x^2} [a_w P_u(x)P_w(x) + a_u P_u(x)P_w(x) + \frac{a_u}{b}(3P_w(x)^2 + P_u(x)^2)] & -\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{2}x^2 + 4\pi n a_w \left(\frac{P_w(x)}{x}\right)^2 + \frac{E_0}{\hbar\omega_0} \end{bmatrix}$$

hvor x og a måles i oscillatorlængder som for en-kanal modellen.

Vi kan nu løse denne ligning i matlab ud fra den generelle metode. I forhold til en-kanal modellen er der dog et par tekniske og teoretiske ændringer der er relevante. Normeringen er naturligvis en anden, den defineres nemlig som

$$4\pi A^2 \int (P_u(x)^2 + P_w(x)^2) dx \equiv 1$$

hvor vi stadig udregner integralet via den trapzodiale metode. De egenvektorer vi finder som løsninger, vil være på formen

$$P(x) = \begin{bmatrix} P_u(x) \\ P_w(x) \end{bmatrix}$$

så vi skal splitte dem op efter hver iteration, for at kunne bruge dem til at skabe den nye matrix. Selve matricen, der beskriver hamiltonoperatoren, vil også være anderledes end for en-kanal modellen. Den vil have dobbelt så store dimensioner, da den vil bestå af 4 blokmatrixer svarende i størrelse til matricen for en kanal-modellen. Så

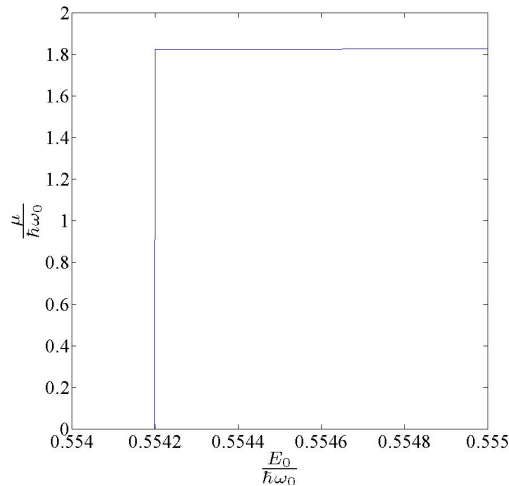
$$\hat{H} = \begin{bmatrix} GP_s & \text{diag}(k_1) \\ \text{diag}(k_2) & GP_t + \text{diag}(E_0) \end{bmatrix}$$

hvor GP_s og GP_t svarer til de blokmatrixer vi konstruerede for en-kanal modellen for henholdsvis singlet og triplet-tilstanden. k_1 og k_2 svarer til koblingen mellem de to tilstande, der simpelt defineres som diagonalmatrixer, hvor diagonalindgangene svarer til regneudtrykkene som kan ses i hamiltonmatricen vi løser. E_0 vil også bare beregnes som en diagonalmatrix med E_0 for hver diagonalindgang.

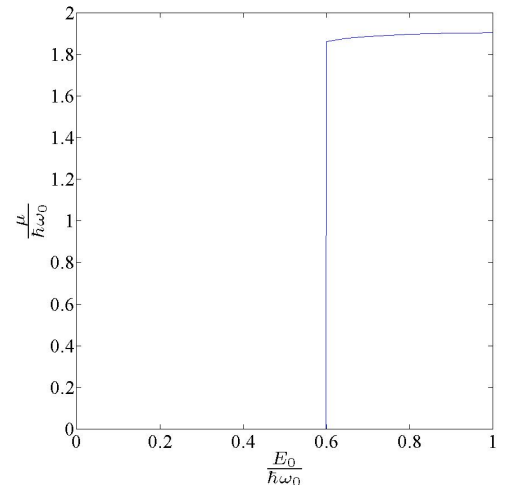
Vi starter med et gæt svarende til den harmoniske oscillators grundtilstand, omregnet til dimensionsløs $P(x)$, dvs.

$$\phi(x) = A \begin{bmatrix} x e^{-\frac{x^2}{2}} \\ x e^{-\frac{x^2}{2}} \end{bmatrix}$$

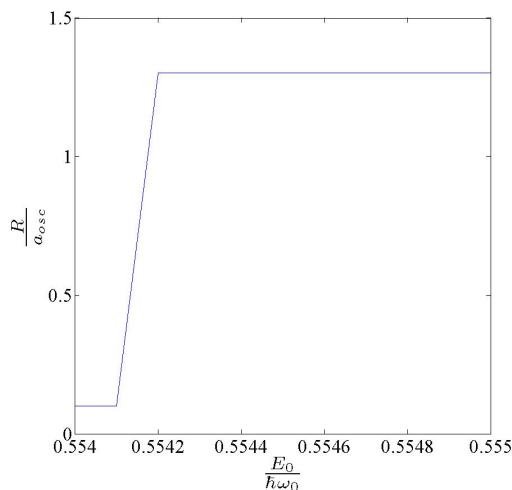
Vi vil kigge på hvorledes kondensatet afhænger af separationsenergien mellem de to kanaler E_0 og dermed af magnetfeltet. Så vi varierer nu E_0 for at se hvor vi har kollaps og for at se hvordan det kemiske potentiale opfører sig både før og efter kollapsområdet. Vi sætter $n=1111$, da dette var antal partikler for hvilken en-kanal Gross-Pitaevskii ligningen gav kollaps. Så vi finder ud af hvilken energi, der med den givne kobling b , vil svare til en effektiv spredningslængde der kan sammenlignes med det en-dimensionelle tilfælde uden magnetfelt. Jeg får følgende resultater:



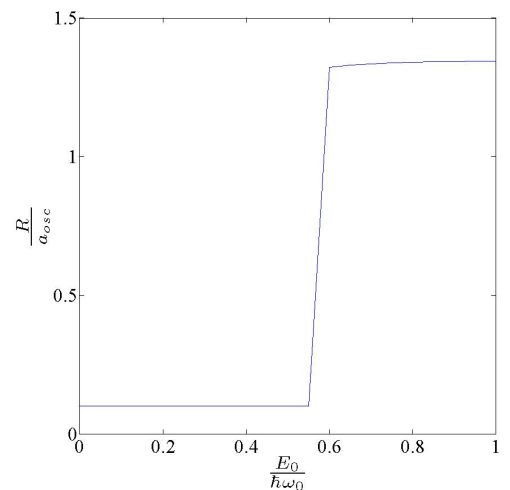
Figur 10: Præcis beregning omkring kollapsområdet for det kemiske potentiale, E_0 varierer i skridt af 0,0001



Figur 11: Det kemiske potentiale, for E_0 mellem 0 og 1, hvor E_0 varierer i skridt af 0,05

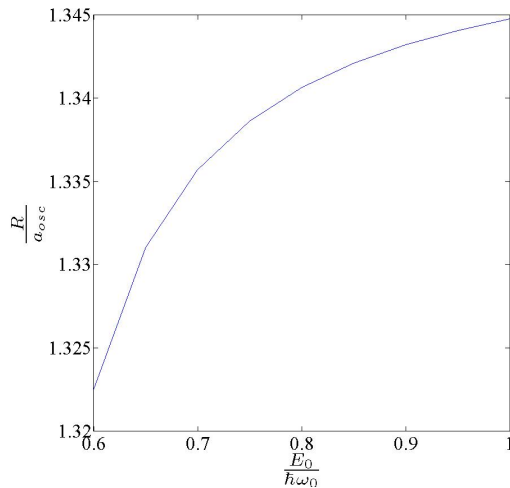


Figur 12: Præcis beregning omkring kollapsområdet for radius, E_0 varierer i skridt af 0,0001

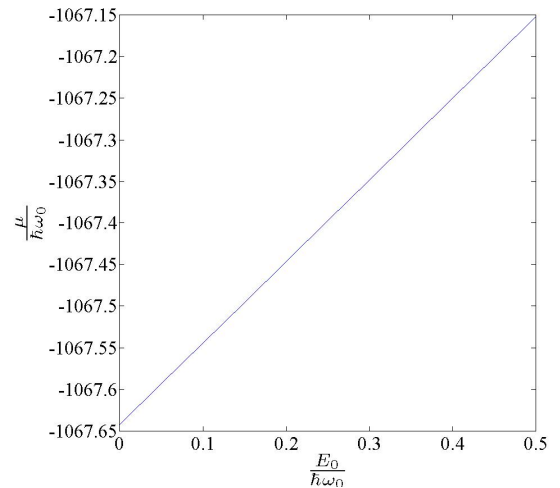


Figur 13: Radius, for E_0 mellem 0 og 1, hvor E_0 varierer i skridt af 0,05

På figur 10 og 13 ses et tydeligt kollaps ved $E_0 = 0,5541$, hvor $\frac{\mu}{\hbar\omega_0}$ falder til i størrelsesordenen -1000 . Vi får at radius af skyen efter kollaps er $0,1009 \frac{R}{a_{osc}}$, hvilket stemmer overens med en-kanal modellen. Det er også interessant at se hvorledes potentialet ændrer sig før og efter kollapset, som kan ses på figur 14 og 15 på den følgende side

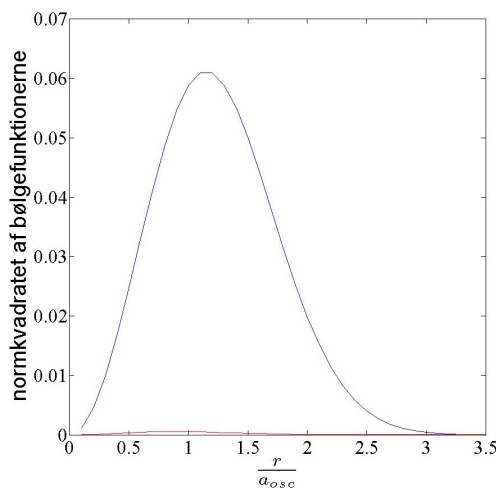


Figur 14: Det kemiske potential som funktion af E_0 før kollaps

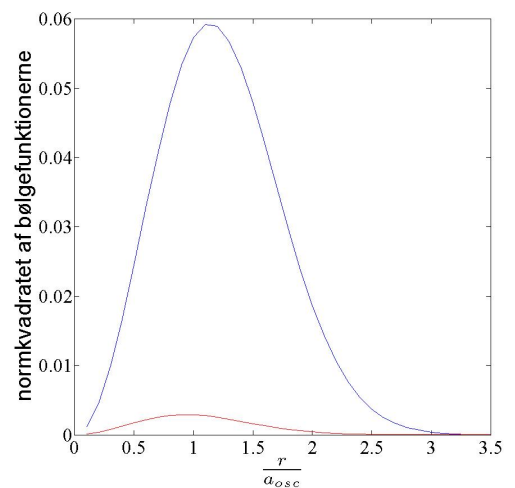


Figur 15: Det kemiske potential som funktion af E_0 efter kollaps

Så vi ser at potentialet varierer med magnetfeltet. Før kollapset vil energien af det kemiske potential per partikel falde, når E_0 bliver mindre. For at forstå dette kan vi se på bølgefunktionerne af vores system ved en energi på 1 og ved en energi på 0,6, hvor vi har en forskel i kemisk potential på $0,044\hbar\omega_0$. Disse 2 kan ses på figur 16 og 17, hvor den blå graf er $|u(x)|^2$ og den røde er $|w(x)|^2$. Denne farvemærkning vil gå igen for alle grafer indeholdende de to bølgefunktioner.



Figur 16: Normkvadrateret på bølgefunktioner for separationsenergi på $E_0 = 1$

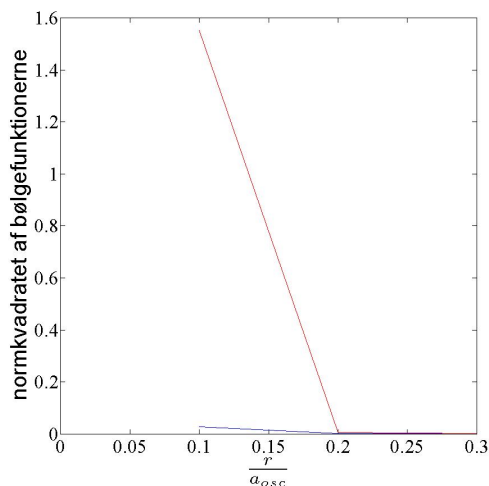


Figur 17: Normkvadrateret på bølgefunktioner for separationsenergi på $E_0 = 0.6$

Vi ser at når vi kommer tættere på den kritiske værdi, så vil en større del af partiklerne være i den lukkede kanal, hvor de har en lavere energi. Vi ser også at for omkring $E_0 = 1$ er

populationen af den lukkede kanal næsten negligerbar og vi ser at potentialet begynder at gå asymptotisk mod en fast værdi. Afhængigheden er umiddelbart svagere end for en-kanal modellen.

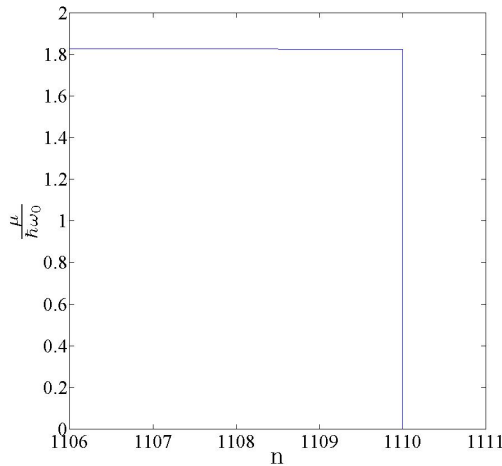
Efter kollapset, vil næsten hele populationen af partikler være gået over i den lukkede kanal og vi ser at bølgefunktionerne kommer til at se ud som på figur 18



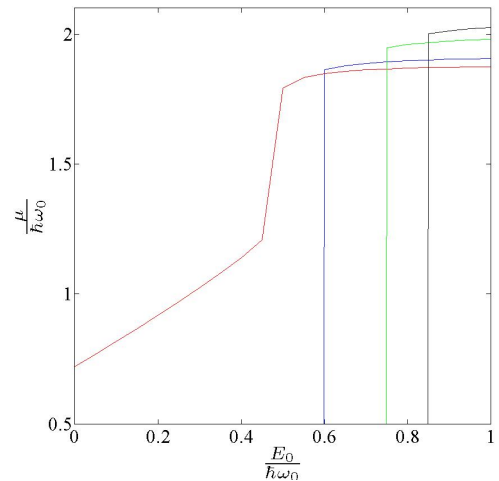
Figur 18: Normkvadrattet på bølgefunktioner efter kollaps

Så de er ikke længere pæne gauss-lignende kurver som de var under kondensatet, formen af bølgefunktionen for den lukkede kanal bliver ligesom formen af den lukkede kanal efter kollaps i en-kanal modellen.

Vores kollaps vil naturligvis stadig være afhængigt af antallet af partikler. Vi kan holde E fast på 0,5541 og se hvordan det kemiske potential afhænger af antal partikler. Det er også interessant om denne vil svare til formen af en-kanal modellen. Derudover kan vi se hvorledes det kemiske potential afhænger af partikelantallet, ved at simulere kollapset for et forskelligt antal partikler. Grafer svarende til disse to simulationer, kan ses på figur 19 og 20 på den følgende side

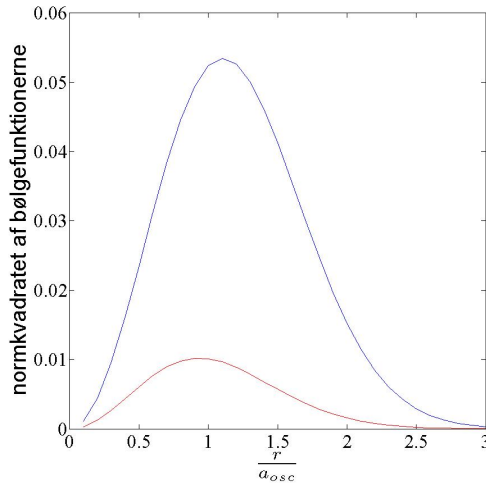


Figur 19: μ som en funktion af antal partikler n , til energien $E=0,5541$

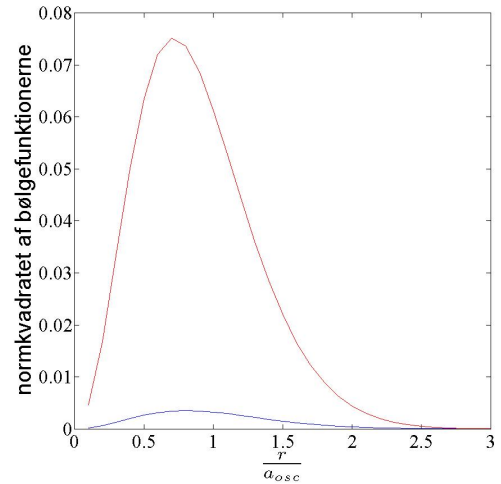


Figur 20: Kollaps af μ for forskellige n , rød svarer til $n=1000$, blå $n=1111$, grøn $n=1400$, sort $n=1600$

Vi ser at både energien for hvilken der sker kollaps og værdien af det kemiske potential er afhængig af antal partikler. Til gengæld kan vi ikke direkte modellere det kemiske potentials afhængighed af antal partikler før kollapset ved fast E_0 , kun selve kollapsets afhængighed. Jeg forsøgte også at lade n gå fra 800-1200, men så ingen ændring. Vi ser desuden at for $n=1000$ er kondensatet stabilt og overgangen fra den åbne til den lukkede kanal vil i stedet give sig udtryk i en sænkning af energien svarende til energidifferensen mellem dem. Den potentielle energi sænkes nogenlunde lineært med E_0 derefter, da E_0 jo var adderet til energien for den lukkede kanal. Efter dette "kollaps" har bølgefunktionerne det modsatte størrelsesforhold af hvad de havde før, som kan ses på figur 21 og 22 på næste side. Vi ser også at omkring kollapsområdet vil populationen være mere fordelt mellem de to kanaler, end for de ikke-stabile kondensater.



Figur 21: Bølgefunktionerne lige før ”kollaps” for $n=1000$



Figur 22: Bølgefunktionerne efter ”kollaps” for $n=1000$

5.3 Kommentarer til selve de numeriske beregninger

Matlab-programmerne brugt til at løse en- og to-kanal modellen kan som tidligere nævnt findes på [Matlab-program].

For to-kanal modellen er løsningen meget følsom overfor præcisionen i input. F.eks. hvor mange punkter der vælges til diskret at repræsentere radius-vektoren. For 100 punkter konvergerer resultatet ikke, men springer rundt mellem forskellige værdier. Man skal op på i hvert fald 500 punkter førend den konvergerer mod en værdi. Man skal også vælge området for radiusvektoren korrekt, ellers konvergerer den heller ikke. $r_{max} = 10$ virker ikke, mens $r_{max} = 50$ gør (målt i oscillatorlængder), på trods af at det i vores resultater ser ud til at bølgefunktionen går mod nul allerede omkring 3. Man skal dog heller ikke vælge r_{max} for stort, da for lille præcision i Δr også gør at resultaterne ikke konvergerer. Udregningerne i denne opgave er lavet med $r_{max} = 100$ og $\Delta r = 0.1$, hvilket giver 1000 punkter og ser ud til at opfylde præcisionskravene for alle 3 faktorer. Programmet ser også ud til at virke for f.eks. $r_{max} = 50$ og $\Delta r = 0.05$. Det kan godt betale sig at optimere disse parametre yderligere, da det tager i størrelsesordenen en dag, at beregne en af graferne, der er brugt i ovenstående sektion, med de valgte parametre (på en intel core 2 duo 3,16 GHz). Jeg har desuden brugt de samme værdier for en-kanal udregningen. En anden interessant egenskab ved programmet er at når vi nærmer os kollapsområdet, skal der flere iterationer til førend at værdien konvergerer endeligt.

6 Konklusion

Vi har i denne opgave set på de kendte resultater for den klassiske Gross-Pitaevskii ligning svarende til en en-kanal model og har derudover set på resultaterne for en simpel to-kanal udvidelse af denne model. I to-kanal udvidelsen kan vi undgå at ligningen er udefineret omkring resonansmagnetfeltet ved Feshbach-resonans, da vi modellerer afhængigheden af magnetfeltet direkte via E_0 og lader spredningslængderne for den lukkede og åbne kanal, der indgår eksplicit i ligningen, være konstante. Ved numerisk løsning af to-kanal modellen genfinder vi de vigtigste fysiske egenskaber fra en-kanal modellen, som er i overensstemmelse med eksperimenter. Vi finder at kollapset er afhængig af både antal partikler, samt magnetfeltets styrke. Derudover finder vi at værdien af det kemiske potential μ afhænger af magnetfeltet før kondensatets kollaps, dog ikke nær så kraftigt som i en-kanal modellen. Vi modellerer også at energien afhænger af antal partikler som man kan se på figur 20 på side 27. Så det ser ud til at to-kanal modellen genfinder alle de væsentlige fysiske egenskaber fra en-kanal-modellen, uden singularitetsproblemet. Det ville være interessant at finde koblingskonstanten b for et alkali-metal ved at fitte eksperimentelle data til f.eks. zero-range modellen for to-kanal Feshbach-resonans, således at man kan lave en numerisk simulation svarende til simulationen i denne opgave, men med reelle værdier for b . Man kunne så lave en mere rigid sammenligning af en- og to-kanal modellen, samt en sammenligning med eksperimentelle data for Bose-Einstein kondensater ved Feshbach-resonanser.

Litteratur

- [Pehtick] C. J. Pethick H:Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge, Second Edition, 2008
- [Thøgersen] Martin Thøgersen *Universality in Ultra-Cold Few- and Many-Boson Systems*, Department of Physics and Astronomy, Århus University, 2009
- [Langake] K. Langake, J. A. Maruhn *Computational Nuclear Physics 1*, Springer Verlag, 1991
- [Griffths] D.J. Griffths *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson, 2005
- [Sørensen] P.K.Sørensen, D.M. Fedorov, A.S Jensen, *Three-Body System with Two-Channel Zero-Range Interaction Model of Feshbach Resonance*, 21st European Conference on Few-Body Problems in Physics (Salamanca 2010)
- [Bransden] B.H. Bransden, C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, prentice Hall, Second Edition, 2003
- [Kristensen] Irina Kristensen *En- og To-kanal Mean-Field Model for BEC nær Feshbach Resonans*, Institut for Fysik og Astronomi Århus Universitet, 2010
- [Matlab-program] Skrevet af Mathias Mikkelsen. Kan downloades på følgende URL:
<http://www.mediafire.com/?p5132ced4q3gdpa>