

# 简谐势阱中非理想气体玻色-爱因斯坦凝聚转变温度的数值研究

王 † 闫珂柱

(曲阜师范大学物理系, 曲阜 273165)

(2003 年 5 月 26 日收到 2003 年 7 月 31 日收到修改稿)

用数值计算的方法研究了简谐势阱中非理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚情况. 通过计算能级的分布, 用图形的方式给出了考虑相互作用时, 简谐势阱中体系转变温度相对无相互作用体系转变温度的变化趋势. 对于存在排斥作用的体系, 转变温度升高; 对于存在吸引作用的体系, 转变温度降低.

关键词: 玻色-爱因斯坦凝聚, 相互作用, 能级, 转变温度

PACC: 0365, 0570

## 1. 引 言

1924 年, 爱因斯坦提出了一定条件下体系中的原子将“凝聚”的理论预言, 即遵从玻色统计的气体将在一定的温度下发生宏观的基态占据. 该理论提出以来, 人们对玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)的研究热潮不断. 近年来相继报道的 BEC 实验<sup>[1-4]</sup>逐渐揭开了这一理论的神秘面纱. 凝聚的动力学问题、凝聚体系的相互作用如两体系的干涉<sup>[5]</sup>、凝聚体的量子特性<sup>[6]</sup>等是现今 BEC 研究的热点并都有所进展, 而对转变温度的研究作为 BEC 问题的出发点也有重要的意义.

BEC 理论最初是针对理想气体, 但这只是一种最简单的理论模型, 在实际的实验中无法忽略原子间的相互作用, 同时还要考虑外势场的作用. 为了计算 BEC 的转变温度就必须计入以上两种作用. 对于有相互作用的情况一般是应用 Bogoliubov 近似和微扰的方法处理<sup>[7]</sup>. 假设粒子间的相互作用依赖于粒子的  $s$  波散射长度  $\bar{a}$ 、粒子的波函数<sup>[8]</sup>和粒子数, 通过体系哈密顿量可以得到非线性薛定谔方程: Gross-Pitaevskii(G-P)方程<sup>[9,10]</sup>. 对于这样的方程想要解析求解非常困难, 我们不得不做近似或者另寻出路. 用数值方法可以模拟变量每一点的数值对应情况, 作为一种解非线性方程的方法是有一定优越性的. 本

文的主要思路就是用计算机对扩展后的 G-P 方程进行数值求解. 利用高精度的计算与波函数的特点求解系统的能级, 得出系统的能级分布, 根据玻色统计公式和转变温度的定义, 就可以得到系统给定粒子数和转变温度的关系.

## 2. 相互作用对 BEC 转变温度的影响

一般用 Bogoliubov 近似的方法得到的 G-P 方程<sup>[9,10]</sup>只是满足凝聚体的情况. 为了全面描述系统, 必须得到原子所有状态(基态、激发态)都满足的方程. 参照文献得到非线性薛定谔方程(NLSE)<sup>[11,12]</sup>

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}} + g|\Psi|^2 - E \right] \Psi = 0. \quad (1)$$

该方程给出的波函数不只是描写基态<sup>[12]</sup>, 还包含激发态. 作用常数  $g = Nu = \frac{4N\hbar^2 \bar{a}}{m}$  中的  $N$  代表体系的总粒子数, 即基态与激发态粒子数的总和. 通过方程(1)可以求出各个分立状态对应的能级, 这样就可以通过玻色-爱因斯坦分布函数<sup>[13]</sup>, 对系统的状态分布及其他特性进行研究. 本文只研究简谐势阱的情况.

### 2.1. 排斥势的情况

多数的碱金属原子体系存在排斥相互作用. 将势函数代入(1)式并在球对称的情况下作变量代换

†E-mail: wffly@eyou.com

得到<sup>[12]</sup>

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + \beta - \frac{x^2}{4} - C_0 \frac{\Phi^2(x)}{x^2} \right) \Phi(x) = 0, \quad (2)$$

其中  $C_0 = \frac{2N\bar{a}}{\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)^{1/2}}$  与总粒子数和散射长度有关.

对于排斥势, 散射长度为正值.

在边界条件及归一化条件的约束对方程数值求解, 得各激发态能级的相对关系大体上满足  $\beta_n - \beta_{n-2} = 2 - \alpha/n^{0.8}$ ,  $n$  取奇数. 这样求出第一激发态的能级就可以确定能级状况, 也就得知了系统的状态分布. 相互作用常数  $C_0$  取值的不同导致  $\alpha$  值的变化. 表 1 给出了几组对应关系.

表 1  $C_0$  与  $\alpha$  的部分对应关系

$C_0$	0.1	1	5	10
$\alpha$	0.01370466	0.1175113	0.371108985	0.52794993

当排斥势存在时, 能级应该是被抬高的, 我们的计算结果也显示了这一情况. 图 1 给出了基态、第一激发态能量随作用常数  $C_0$  的变化情况. 图 2 则给出了系统各能级被抬高的情况. 当粒子数一定时, 作用

常数  $C_0$  与散射长度成正比, 不同作用常数所对应图形的比较结果表明: 散射长度越大, 排斥作用越强, 系统的能级被抬高的也越厉害. 从玻色统计公式看, 能级抬高意味着激发态在相同的温度下可容纳的粒子数减少, 如果粒子总数给定, 则处于基态的粒子数增大. 就是说在一定的范围内, 排斥相互作用有利于 BEC 的形成.

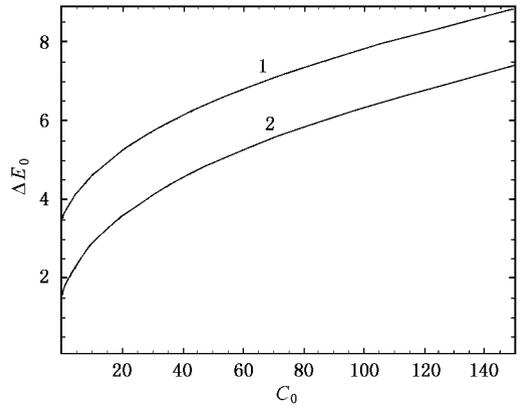


图 1 基态和第一激发态的能级随作用常数  $C_0$  的变化 (曲线 2 为基态的情况, 曲线 1 为第一激发态的情况)

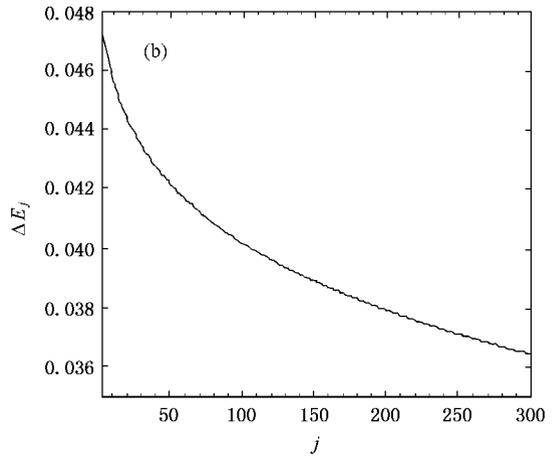
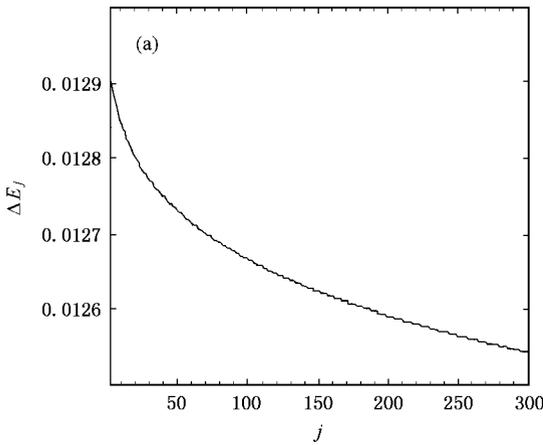


图 2 排斥势下激发态各能级的能量对标准简谐振子能级的偏移 (a)  $C_0$  为 0.1, (b)  $C_0$  为 1

另外我们计算了当体系的粒子数给定时, 处于凝聚状态的粒子数与转变温度的关系, 并与体系不存在相互作用的情况相比较 (图 3). 从图 3 可看出, 在温度相同且粒子数给定的情况下, 有排斥势时处于基态的粒子数多. 这是由于在排斥势作用下, 激发态容纳粒子数少的缘故.

图 4 给出了基态粒子数随温度变化的情况, 并对有、无排斥势的情况做了比较.

图 5 给出了激发态粒子数按能级的占据情况, 并对有、无排斥势时的情况进行了对比. 从图 5 可以看出有排斥势时, 激发态容纳的粒子数比无排斥势时少.

从以上的结果可以看出, 在排斥势存在的情况下, 系统的能级被抬高, 系统激发态上容纳的粒子数减小 (相对于同条件下的标准简谐振子). 当系统的总粒子数一定时, 处于基态的粒子数就相应增多, 相

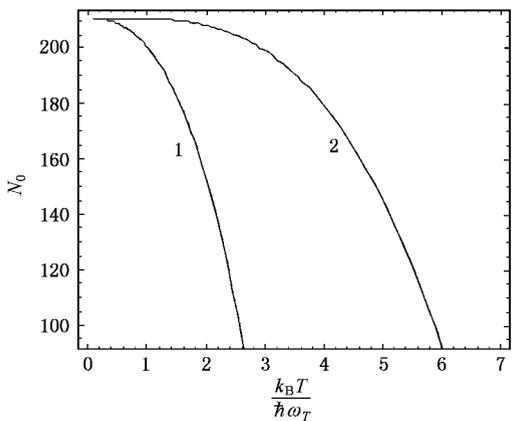


图3 基态粒子数与温度的对应关系(曲线1为无排斥势的情况,曲线2为有排斥势的情况)

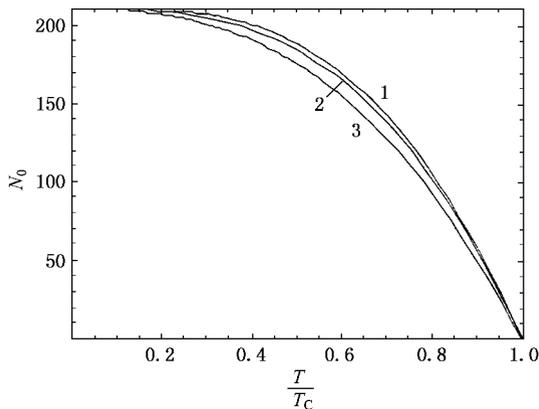


图4 基态粒子数与温度的关系(曲线1为  $C_0 = 0.1$  对应的曲线,曲线2为无排斥的积分方法对应的曲线,曲线3为无排斥数值求和方法的对应曲线)

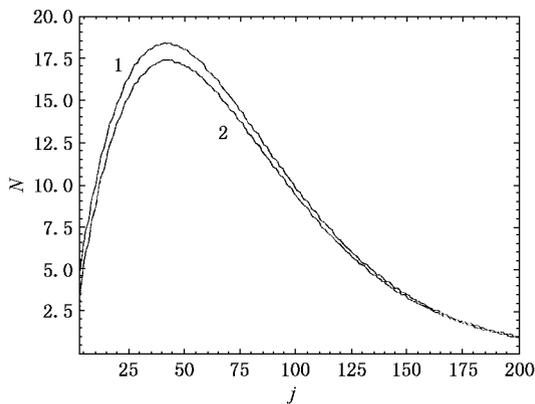


图5 激发态各能级对应的粒子数(曲线1为无排斥势的情况,曲线2为有排斥势的情况)

论<sup>[8,14,15]</sup>、实验<sup>[16]</sup>研究了相互作用对转变温度的影响,所得的结果并不一致,本文的结果是在排斥作用下转变温度升高.在粒子数相同的条件下,排斥势体系相对无相互作用体系临界温度的偏移如图6所示.

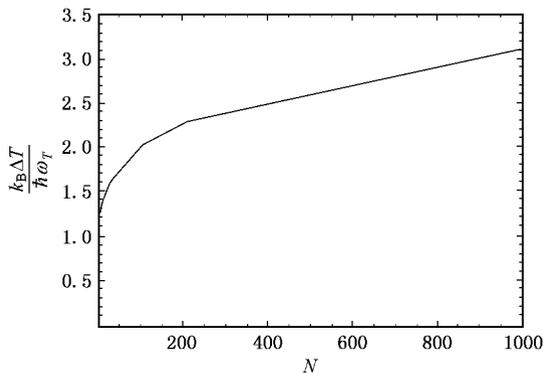


图6 转变温度随粒子数的偏移

图中  $\Delta T = T_C - T_0$ ,  $T_C$  为有排斥势时的转变温度,  $T_0$  为无排斥势时的转变温度.从图中可以看出随粒子数的增加,转变温度升高得越多.这是由于排斥作用随粒子数的增加而增强,而排斥作用的增强使能级的抬高程度增强.

### 2.2. 吸引势的情况

对于 Li 原子,粒子之间的相互作用不是排斥作用而是吸引作用.我们再针对吸引势计算一下转变温度的情况.对于吸引势的情况,散射长度为负值.对(1)式进行变换得到<sup>[17]</sup>

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} + \beta - \frac{x^2}{4} - C_0 \Phi^2(x) \right) \Phi(x) = 0, \tag{3}$$

其中  $C_0 = 2N \bar{a} / \left( \frac{\hbar}{2m\omega_T} \right)^{1/2}$ , 对于粒子数一定的体系,  $C_0$  的绝对值越大表明相互作用越强.

在波函数的取值<sup>[13,17,18]</sup>限制下,求解该非线性方程得到系统的能级大致满足  $\beta_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) - \alpha / n^{0.487}$ .其中  $\alpha$  随作用常数  $C_0$  的变化而变化,  $C_0 = -0.1$  时,  $\alpha = 0.0306956$ .与排斥势相反,吸引势对原来的能级有降低作用.这使得在温度与总粒子数相同的条件下,激发态容纳的粒子数在吸引作用下增加,相应的处于基态的粒子数就减小,可以推断出吸引势不利于凝聚的形成.图7给出了基态能级随  $C_0$  的变化关系.可以看出吸引势越强,能级降低越

当于使得系统发生凝聚的温度提高了.有一些理

大.在吸引势的作用下,基态能级会出现降到负能量的情况,这样就相当于改变了粒子的存在形式,会产生部分原子的结合,使得对凝聚的研究更加困难,不在本文的讨论范围.

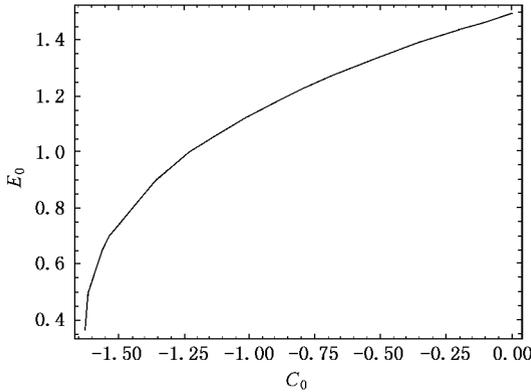


图7 基态能级随  $C_0$ (吸引作用大小)的变化关系

另外我们计算了基态凝聚的粒子数随温度的变化关系,比较了有吸引势与无吸引势的情况(见图8).如果使系统基态凝聚的粒子数相同,有吸引势时对应的转变温度要低于无吸引势的情况,也就是说吸引势的存在使得凝聚的转变温度降低.

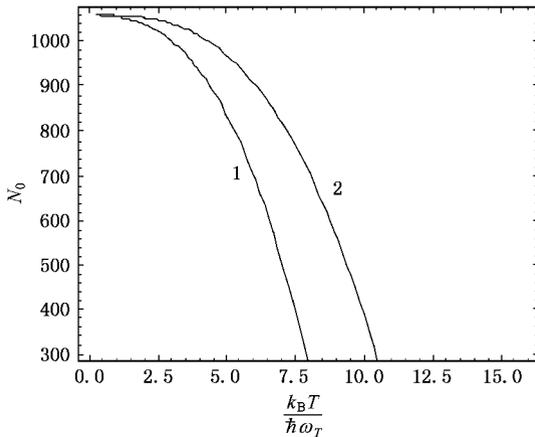


图8 基态占据数随温度的变化关系(曲线1表示有吸引势,曲线2表示无吸引势)

图9比较了有、无吸引势激发态的占据数.可以看出相同条件下,有吸引势时激发态容纳粒子数增多.

从以上比较可以看出,在吸引势存在的情况下,系统发生凝聚的临界温度降低.我们计算了有、无吸引势时转变温度的差值随粒子数的变化(图10).图中纵坐标为  $\Delta T = T_0 - T_c$ ,  $T_c$  为有吸引势时的转变

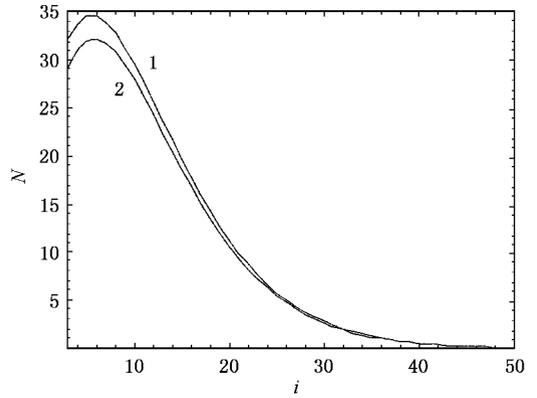


图9 存在吸引势时激发态各能级的粒子数占据情况(曲线1为有吸引势的情况,曲线2为无吸引势的情况)

温度  $T_0$  为无吸引势时的转变温度.从图10可以看出随着粒子数的增加,吸引作用对能级的降低作用越强,转变温度降低得越多.

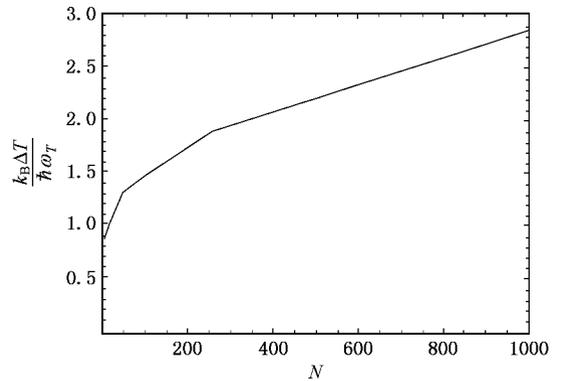


图10 转变温度偏移与粒子数的关系

实际上当吸引势存在时,系统发生凝聚的条件是很苛刻的.粒子数密度过大会导致原子云的塌缩<sup>[19]</sup>,系统原子的存在方式发生变化,整个体系也就无法发生凝聚.这里对该问题不作进一步研究.

### 3. 结 论

由于非线性薛定谔方程的解析求解很困难,本文通过数值计算的方法对简谐势阱中存在排斥和吸引相互作用的体系进行了研究,求得了体系的能级分布、相互作用对各能态占据数的影响以及相互作用对玻色-爱因斯坦凝聚转变温度的影响.当然实际的情况不仅限于简谐势阱,有文献对非谐振子势进行了研究<sup>[20]</sup>,如果对这种情况的非线性问题进行简化,就可以应用数值方法对更多的体系进行定性的

研究.数值方法为求解非线性的问题提供了一条有效的途径,希望随着计算机的发展和程序的改进,数值

方法能更全面细致地描述相互作用体系的凝聚问题.

- [ 1 ] Anderson M H *et al* 1995 *Science* **269** 198
- [ 2 ] Davis K B *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [ 3 ] Bradley C C *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687
- [ 4 ] Fried D G *et al* 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3811
- [ 5 ] Liu W M, Wu B and Niu Q 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2294
- [ 6 ] Liu W M, Fan W B, Zheng W M, Liang J Q and Chui S T 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 10408
- [ 7 ] Fetter A L 1972 *Ann. Phys. (N.Y.)* **70** 67  
Fetter A L 1996 *Phys. Rev. A* **53** 4225
- [ 8 ] Huang K 1987 *Statistical Mechanics* (New York: John Wiley sons)
- [ 9 ] Pitaevskii L P 1961 *Zh. Eksp. Teor. Fiz., Sov. Phys. JETP* **40** 646
- [ 10 ] Gross E P 1963 *J. Math. Phys.* **4** 195
- [ 11 ] Landau L D and Lifshitz E M 1958 *Quantum Mechanics* (English Edition) (London: Pergamon Press) p55
- [ 12 ] Yan K Z and Tan W H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1185 (in Chinese)  
[ 闫珂柱、谭维翰 1999 物理学报 **48** 1185 ]
- [ 13 ] Editing Group for Quantum Statistical Physics of the Physical Department in Peking University 1987 *Quantum Statistical Physics* (Beijing: Peking University Press) p137—180 (in Chinese) [ 北京大学物理系《量子统计物理学》编写组 1987 量子统计物理学(北京:北京大学出版社)第 137—180 页 ]
- [ 14 ] Gruter P, Ceperley D and Laloe F 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3549
- [ 15 ] Holzmann M, Gruter P and Laloe F 1999 *Eur. Phys. J. B* **10** 239
- [ 16 ] Toyoda T 1982 *Ann. Phys. (N.Y.)* **141** 154
- [ 17 ] Yan K Z and Tan W H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1911 (in Chinese)  
[ 闫珂柱、谭维翰 2000 物理学报 **49** 1911 ]
- [ 18 ] Zeng J Y 1998 *Introduction to Quantum Mechanics* (Beijing: Peking University Press) p37—80 (in Chinese) [ 曾谨言 1998 量子力学导论 第二版(北京:北京大学出版社)第 37—80 页 ]
- [ 19 ] Ruprecht P A, Holland M J, Burnett K and Edwards M 1995 *Phys. Rev. A* **51** 4704
- [ 20 ] Chen C Y and Liu Y W 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 536 (in Chinese)  
[ 陈昌远、刘友文 1998 物理学报 **47** 536 ]

## Numerical research on critical temperature of Bose-Einstein condensation for gas with interaction in harmonic trap

Wang Chong<sup>†</sup> Yan Ke-Zhu

( Department of Physics, Qufu Normal University, Qufu 273165, China )

( Received 26 May 2003; revised manuscript received 31 July 2003 )

### Abstract

In this article we study Bose-Einstein condensation of the gas with interactions in a harmonic trap using a numerical method. The distribution of the energy states was given, by which the author calculated the shift of the critical temperature and made a comparison with the situation without interactions. We have obtained a positive shift of critical temperature for systems with repulsive interaction, and a negative one for systems with attractive interaction.

**Keywords:** Bose-Einstein condensation, interaction, energy level, critical temperature

**PACC:** 0365, 0570

<sup>†</sup>E-mail: wffly@eyou.com