

轴对称谐振势阱中玻色凝聚气体 基态和单涡旋态解^{*}

徐志君^{1)†} 施建青¹⁾ 林国成¹⁾

1) 浙江工业大学应用物理系, 杭州 310032)

2) 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

(2006 年 4 月 18 日收到, 2006 年 5 月 14 日收到修改稿)

对囚禁在轴对称谐振势阱中的玻色凝聚气体, 提出一种新的试探波函数, 运用 Gross-Pitaevski(G-P)平均场能量泛函和变分的方法, 得到玻色凝聚气体基态和单涡旋态波函数的解析表达式, 并计算出凝聚原子的平均能量、原子云轴向和径向尺度比, 以及产生单涡旋态的临界角速度等重要物理量与凝聚原子数 N 之间的关系. 其结果与 Dalfovo 等人直接数值求解 G-P 方程所得到的结果相一致.

关键词: 玻色凝聚气体, G-P 泛函, 波函数, 谐振势阱

PACC: 0365, 0530J, 0260

1. 引 言

自 1995 年实验上实现玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)以来^[1-3], 对囚禁在轴对称谐振势阱(axisymmetric harmonic trap)中玻色凝聚气体(Bose-condensed gas)性质的实验和理论研究一直是一个重要而基础的问题^[4-18]. 当前, 理论研究主要是基于平均场理论, 运用各种数值计算方法求解自洽的 Gross-Pitaevski(G-P)方程^[19-24], 并考察其稳态行为和动力学描述. 或者在凝聚气体原子数 N 较大时进行托马斯-费米近似处理^[22-24]. 就我们所知, 目前还没有人给出玻色凝聚气体基态和单涡旋态的解析波函数. 事实上, 要给出基态和单涡旋态精确的解析波函数是非常困难的^[25]. 本文提出一种新的试探波函数, 基于 G-P 平均场能量泛函和变分的思想^[7, 8]给出了玻色凝聚气体基态和单涡旋态波函数的统一解析表达式, 进而讨论玻色凝聚气体的各种性质, 如反映原子云速度分布各向异性的轴向和径向尺度比(aspect ratio), 化学势和凝聚原子平均能量, 以及产生涡旋态的临界角速度等重要物理量与凝聚原子数 N 之间的关系. 最后, 通过实例计算表明, 本文所得结果

与 Dalfovo^[21, 26]等人直接的数值计算结果相一致.

2. G-P 能量泛函和玻色凝聚气体波函数

囚禁在谐振势阱中的稀薄玻色凝聚气体, 原子间的平均距离远远大于原子间相互作用力程. 这样的弱相互作用系统, 能被 G-P 理论^[27, 28]精确地描述. 实际上 G-P 理论最初就是被用来研究弱相互作用玻色系统的涡旋态的. 在温度大大低于临界凝聚温度 T_c 时, 质量为 m 的玻色凝聚气体的能量泛函为

$$E(\Psi) = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right], \quad (1)$$

其中 $\Psi(\mathbf{r})$ 是凝聚体的波函数, 或称之为序参量(order parameter), $V(\mathbf{r})$ 为外加的磁阱势能, 实验上通常选择轴对称谐振势阱. 设其轴向和径向角频率分别为 ω_z 和 ω_\perp , 则磁阱的谐振势为

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} (\omega_\perp^2 x^2 + \omega_\perp^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) = \frac{m}{2} (\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (2)$$

^{*} 波谱与原子分子物理国家重点实验室基金(批准号: T152501)和浙江省教委基金(批准号: 20040599)资助的课题.

[†] E-mail: xzj@zjut.edu.cn, xuzhijun@zj165.com

而 $\frac{1}{2}g|\Psi(\mathbf{r})|^4$ 表示其他玻色子产生的平均场效应, $g = 4\pi a_s \hbar^2/m$ 为耦合常数, a_s 为 s 波散射长度. 波函数满足如下归一化条件

$$\int d^3r |\Psi(\mathbf{r})|^2 = N, \quad (3)$$

在 $T \rightarrow 0$ 的极限条件下, N 就是被势阱囚禁的总凝聚原子数.

波函数所满足的波动方程可通过对方程(1)变分而得到, 即通常所称的不含时的 G-P 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}). \quad (4)$$

方程(4)的本征值不是线性定态薛定谔方程的能量, 而是化学势 μ . 求解方程(4)是研究玻色凝聚气体性质的主要理论出发点, 但由于方程(4)中存在非线性项 $g|\Psi(\mathbf{r})|^2$, 难以求解出波函数的解析表达式. 因此往往直接从方程(4)出发进行数值求解或在一定极限条件下进行近似求解(如托马斯-费米近似等)^[22-24], 得到了与实验相符的结论.

在这里我们考虑单涡旋态沿 z 轴有一涡旋线, 并且所有凝聚原子以量子涡旋的形态围绕 z 轴转动. 则轴对称凝聚体的波函数可表示为^[26]

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \exp[iS(\mathbf{r})], \quad (5)$$

其中 $\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n(\mathbf{r})}$ 为波函数的模, $n(\mathbf{r})$ 为凝聚原子数密度. 而相位 $S(\mathbf{r})$ 为速度势(velocity potential), 即 $\mathbf{v} = (\hbar/m) \nabla S(\mathbf{r})$. 在柱坐标中设 ϕ 为绕 z 轴旋转的角度, 则速度势可表示为 $S(\mathbf{r}) = \kappa \phi$, 其中 κ 为涡旋环绕数, 其切向速度为^[26]

$$v = \frac{\hbar}{mr_{\perp}} \kappa, \quad (6)$$

沿着 z 轴的角动量为 $N\kappa\hbar$.

将复数波函数(5)式代入方程(1), 并进行无量纲变换, 即以径向谐振特征长度 $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ 为长度单位, 以谐振特征能量 $\hbar\omega_{\perp}$ 为能量单位, 进行如下变换: $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/a_{\perp}$ 和 $\epsilon^{\kappa} \rightarrow E(\hbar\omega_{\perp})$, $\mu^{\kappa} \rightarrow \mu(\hbar\omega_{\perp})$ (其中 ϵ^{κ} 和 μ^{κ} 为玻色凝聚原子的平均能量和化学势); 相应地也将函数 $\psi(\mathbf{r})$ 进行变换, 即 $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \sqrt{a_{\perp}^3/N} \psi(\mathbf{r})$, 则函数 $\psi(\mathbf{r})$ 在新坐标中将归一化. 再引入轴对称 BEC 的形状因子 $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp}$, 则 G-P 能量泛函和 G-P 方程可分别简化为

$$\epsilon^{\kappa} = \frac{1}{2} \int d^3r \left[|\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 + (\kappa^2 r_{\perp}^2 + r_{\perp}^2 + \lambda^2 z^2) |\psi(\mathbf{r})|^2 + 4\pi\gamma |\psi(\mathbf{r})|^4 \right], \quad (7)$$

$$\left[-\nabla_{\perp}^2 + \kappa^2 r_{\perp}^2 + r_{\perp}^2 + \lambda^2 z^2 + 4\pi\gamma |\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = 2\mu^{\kappa} \psi(\mathbf{r}), \quad (8)$$

其中无量纲参数 $\gamma = Na_s/a_{\perp}$ 是表征玻色凝聚气体相互作用强度的一个重要参数, 它与凝聚气体的原子数 N 、原子间相互作用的性质(排斥作用 $a_s > 0$, 吸引作用 $a_s < 0$)和势阱的强弱等有关. 对比基态的 G-P 方程, 方程(7)多出一离心势能项. 当 $\kappa \neq 0$ 时, 由于离心势能的存在而迫使 $\psi(\mathbf{r})$ 值在 z 轴处趋向零, 也就是凝聚原子将被推离 z 轴, 形成环状原子云.

在不考虑原子间相互作用的理想条件下, 方程(8)回到轴对称谐振势阱中的定态薛定谔方程. 在此条件下, 涡旋态的归一化函数 $\psi(\mathbf{r})$ 具有如下形式:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^{1/4}}{\pi^{3/4} \Gamma(1+\kappa)} r_{\perp}^{\kappa} \times \exp\left[-\frac{1}{2}(r_{\perp}^2 + \sqrt{\lambda}z^2)\right], \quad (9)$$

其中 $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} u^{z-1} e^{-u} du$ ($\text{Re}z > 0$) 为伽马函数. 把方程(9)代入(7)式, 得到玻色凝聚原子的平均能量(在此条件下亦即化学势)为 $\epsilon^{\kappa} = \mu^{\kappa} = 1 + \lambda/2 + \kappa$. 当 $\kappa = 0$ 时, 由方程(9)和(5)即可得到不考虑相互作用时的基态波函数, 即高斯函数

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^{1/4}}{\pi^{3/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}(r_{\perp}^2 + \sqrt{\lambda}z^2)\right], \quad (10)$$

它是方程(9)的一个特例. 对应的玻色凝聚原子平均基态能量为 $\epsilon^0 = \mu^0 = 1 + \lambda/2$.

然而, 玻色凝聚系统虽然是一个弱相互作用系统, 但当凝聚原子数 N 增加时, 原子间的相互作用将改变玻色凝聚原子云的密度分布, 波函数将偏离方程(9)的形式. 由于方程(8)中相互作用项是非线性的, 当前还没有给出一般条件下方程(8)的普遍解析表达式. 本文在分析无相互作用理想玻色凝聚气体波函数的基础上, 选择适当的含待定参数的尝试函数, 并由方程(7)求出 G-P 能量泛函的解析表达式, 然后运用变分的方法确定待定的最优参数值, 从而构造出玻色凝聚气体的波函数.

设尝试函数 $\psi(\mathbf{r})$ 仍然具有方程(9)的形式, 但考虑相互作用后, 表征凝聚原子云径向和轴向尺度的谐振特征长度 a_{\perp} 和 a_z 将是相互作用参数 γ 的函数. 为此我们把高斯函数中的径向和轴向谐振特征参量作为待定参数. 在进行上述无量纲变换的条件下, 其尝试的变分函数可表示为

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^{1/4}}{k_{\perp} \sqrt{k_z \pi^{3/2} \Gamma(1+\kappa)}} \left(\frac{r_{\perp}}{k_{\perp}}\right)^{\kappa}$$

$$\times \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r_{\perp}}{k_{\perp}}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{\lambda}z}{k_z}\right)^2\right], \quad (11)$$

其中 k_{\perp} 和 k_z 为待定的无量纲参数,表示由于相互作用而使凝聚原子云在径向和轴向尺度的改变.将方程(11)代入方程(7)得到凝聚系统原子的平均能量泛函为

$$\epsilon^{\kappa} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{1}{k_{\perp}^2} + k_{\perp}^2 \right) (1 + \kappa) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{k_z^2} + k_z^2 \right) + \frac{\sqrt{2\lambda}\gamma\Gamma(\kappa + 1/2)}{\pi k_{\perp}^2 k_z \Gamma(1 + \kappa)} \right]. \quad (12)$$

显然,若方程(11)和(12)中的 $\kappa = 0$,则可得到对应的基态波函数和能量泛函.将方程(12)对变分参数 k_{\perp} 和 k_z 求极值,得到关于 k_{\perp} 和 k_z 的方程组

$$\begin{cases} (1 + \kappa) \left(1 - k_{\perp}^4 \right) k_z + \frac{\sqrt{2\lambda}\gamma\Gamma(\kappa + 1/2)}{\pi\Gamma(\kappa + 1)} = 0, \\ (k_z^4 - 1) k_{\perp}^2 - \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \frac{\gamma\Gamma(\kappa + 1/2)}{\pi\Gamma(\kappa + 1)} k_z = 0. \end{cases} \quad (13)$$

在给定参数 γ 值的条件下,数值求解方程组(13),可得到变分参数 k_{\perp} 和 k_z 的值.但数值计算表明,这一尝试函数只有在 $\gamma \ll 1$ (或凝聚原子数 N 值较小)时,才与 Dalfovo 等^[21]直接的数值计算结果相符(详

见下面的结果分析).说明这一尝试函数是方程(8)在相互作用参数 γ 很小时的一个近似解,表明相互作用不仅使凝聚原子云在轴向和径向的尺度大小发生变化,而且还使方程(11)中的指数函数偏离了高斯函数的“平方”分布形式,同样,相互作用也将对涡旋环绕数 κ 产生影响.为此,我们假设尝试变分函数具有如下的形式:

$$\psi(\mathbf{r}) = A \left(\frac{r_{\perp}}{k_{\perp}} \right)^{\chi} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r_{\perp}}{k_{\perp}}\right)^{\alpha_{\perp}} - \frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{\lambda}z}{k_z}\right)^{\alpha_z}\right], \quad (14)$$

这里引入 5 个无量纲的待定参量 $\alpha_{\perp}, \alpha_z, k_{\perp}, k_z$ 和 χ ,其中 k_{\perp} 和 k_z 的意义同前,而指数函数中的参量 α_i ($i = \perp, z$) 和参量 χ 又可表示为 $\alpha_i = 2 + \Delta_i$ 和 $\chi = \kappa + \Delta_{\kappa}$,其中 Δ_i 表示由于原子间的相互作用以及玻色凝聚系统旋转而引起原子云分布对高斯函数“平方”分布的偏离;而 Δ_{κ} 表示由于相互作用对涡旋环绕数 κ 的修正.方程(14)的归一化常数 $A =$

$$\frac{\sqrt{\alpha_{\perp} \alpha_z} \lambda^{1/4}}{2k_{\perp} \sqrt{\pi k_z \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp}) \Gamma(\alpha_z)}}.$$

将方程(14)式代入方程(7)得到凝聚系统原子平均能量泛函为

$$\epsilon^{\kappa} = \frac{1}{8} \left[\frac{\alpha_z^2 \lambda \Gamma(2 - 1/\alpha_z)}{k_z^2 \Gamma(1/\alpha_z)} + \frac{4\kappa^2 \Gamma(2\chi/\alpha_{\perp}) + 4k_{\perp}^4 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})}{k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})} + \frac{\alpha_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})}{k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})} + \frac{4k_z^2 \lambda \Gamma(3/\alpha_z)}{\Gamma(1/\alpha_z)} + \frac{2^{[2-(2+4\chi)\alpha_{\perp}-1/\alpha_z]} \gamma \sqrt{\lambda} \alpha_z \alpha_{\perp} \Gamma[(2+4\chi)\alpha_{\perp}]}{k_{\perp}^2 k_z \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp}) \Gamma(1/\alpha_z)} - \frac{2\alpha_{\perp} \chi \Gamma(1 + 2\chi/\alpha_{\perp})}{k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})} \right]. \quad (15)$$

对给定的参数 γ (或凝聚原子数 N) 值,方程(15)是一个关于待定参数 $\alpha_{\perp}, \alpha_z, k_{\perp}, k_z$ 和 χ 的多元函数.多元函数的极值问题,运用现有的多种数值求解法(如最速下降法、牛顿法、遗传寻优算法等),可很容易地确定当凝聚原子平均能量 ϵ^{κ} 取极小时,待定参

量 $\alpha_{\perp}, \alpha_z, k_{\perp}, k_z$ 和 χ 的最优值,从而得到尝试函数 $\psi(\mathbf{r})$ 的解析表达式.

已知波函数,可以方便地求得玻色凝聚原子的平均动能 $\epsilon_{\text{kin}}^{\kappa}$,谐振势能 $\epsilon_{\text{ho}}^{\kappa}$,原子间的相互作用能 $\epsilon_{\text{int}}^{\kappa}$ 和离心势能 $\epsilon_{\text{cen}}^{\kappa}$ 的解析表达式

$$\epsilon_{\text{kin}}^{\kappa} = \frac{1}{8} \left[\frac{\alpha_z^2 \lambda \Gamma(2 - 1/\alpha_z)}{k_z^2 \Gamma(1/\alpha_z)} + \frac{\alpha_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp}) - 2\alpha_{\perp} \chi \Gamma(1 + 2\chi/\alpha_{\perp})}{k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})} \right], \quad (16)$$

$$\epsilon_{\text{ho}}^{\kappa} = \frac{1}{2} \left[\frac{k_z^2 \lambda \Gamma(3/\alpha_z)}{\Gamma(1/\alpha_z)} + \frac{k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})}{\Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})} \right], \quad (17)$$

$$\epsilon_{\text{int}}^{\kappa} = \frac{2^{-[1+(2+4\chi)\alpha_{\perp}+1/\alpha_z]} \gamma \sqrt{\lambda} \alpha_z \alpha_{\perp} \Gamma[(2+4\chi)\alpha_{\perp}]}{k_{\perp}^2 k_z \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp}) \Gamma(1/\alpha_z)}, \quad (18)$$

$$\epsilon_{\text{cen}}^{\kappa} = \frac{\kappa^2 \Gamma(2\chi/\alpha_{\perp})}{2k_{\perp}^2 \Gamma(\chi + 1) \Gamma(\alpha_{\perp})}. \quad (19)$$

同样,在实验研究中具有重要测量意义的表征原子云速度分布各向异性的轴向和径向尺度比也容易求得

$$\sqrt{\frac{p_z^2}{p_x^2}} = \sqrt{\frac{x^2}{z^2}} = \frac{k_{\perp}}{k_z} \sqrt{\frac{\lambda \Gamma[\chi(2 + \chi)\alpha_{\perp}] \Gamma(1/\alpha_z)}{2 \Gamma[\chi(1 + \chi)\alpha_{\perp}] \Gamma(3/\alpha_z)}} \quad (20)$$

另一个有重要意义的物理量是形成涡旋态的临界角速度 Ω_c . 在求得涡旋态和基态的能量后,产生涡旋态的临界角速度也非常易于计算^[21], 即

$$\Omega_c = \kappa^{-1}(\epsilon^{\kappa} - \epsilon^0), \quad (21)$$

这里角速度以 ω_{\perp} 为单位, ϵ^0 为凝聚体基态能量. 基态波函数和基态能量可以看成是单涡旋态的一个特例, 即令 $\chi = 0$ 和 $\kappa = 0$, 上述方程 (14) — (20) 均过渡到基态解. 显然, 对无相互作用的理想玻色凝聚气体, $\Omega_c = 1$, 即在此条件下临界角速度就是谐振势阱的径向角频率.

3. 计算实例

为了便于与直接的数值解进行比较, 采用文献 [21] 的参数, 即以 ⁸⁷Rb 原子为计算实例, 谐振势阱参数 $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp} = \sqrt{8}$, $a_{\perp} = 1.222 \times 10^{-4}$ cm, 散射长度与谐振长度比率 $a_s/a_{\perp} = 4.33 \times 10^{-3}$. 在下文的计算中, 取涡旋环绕数 $\kappa = 1$. 对不同的凝聚原子数 N (即相互作用强度参数 $\gamma = Na_s/a_{\perp}$ 为一定值), 运用

最速下降法数值计算能量泛函 ϵ^{κ} 取极小时待定参数的最优值. 图 1 是方程 (11) 中二个最优化参数 k_{\perp} 和 k_z 值与凝聚原子数 N 之间的关系. 我们将基态的优化参数 (k_{\perp}^0 和 k_z^0) 和 $\kappa = 1$ 的涡旋态的优化参数 (k_{\perp}^{κ} 和 k_z^{κ}) 在同一图表中画出. 玻色凝聚气体的旋转对轴向凝聚原子云的尺度几乎没有影响, 而在径向, 由于旋转凝聚原子云被推离旋转轴, 在接近旋转轴处, 原云密度趋近于零, 因此表征径向密度分布尺度的 k_{\perp}^{κ} 值小于基态时的 k_{\perp}^0 值. 图 2 显示了方程 (14) 中 5 个参量最优值 $\Delta_i, k_i (i = \perp, z)$ 和 Δ_{χ} 与凝聚原

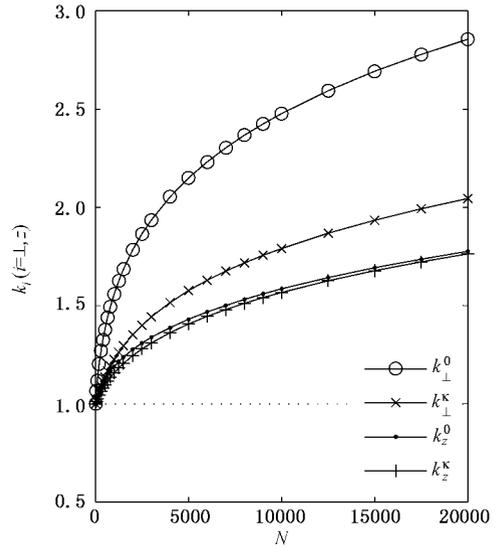


图 1 两参量优化值 $k_i (i = \perp, z)$ 与凝聚原子数之间的关系. 点线为不考虑相互作用的理想条件下的 $k_i (i = \perp, z)$ 值与凝聚原子数间的关系

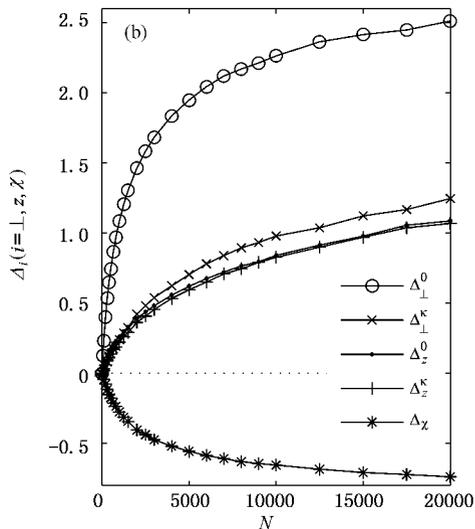
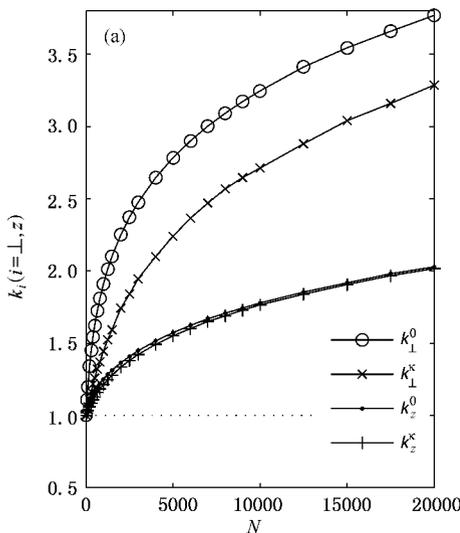


图 2 五参量优化值与凝聚原子数的关系 (a) 尝试函数的轴向和径向尺度参量随凝聚原子数的变化 (b) 为参量 Δ_{\perp}, Δ_z 和 Δ_{χ} 随凝聚原子数的变化. 点线对应于不考虑相互作用的理想条件下的 $k_i, \Delta_i (i = \perp, z)$ 和 Δ_{χ} 值与凝聚原子数之间的关系

子数 N 的关系. 图 3(a) 表明了径向和轴向尺度参量与凝聚原子数 N 的关系, 其变化趋势与上述两参量情况类似. 图 3(b) 则是参量 Δ_{\perp} , Δ_z 和 Δ_{χ} 与凝聚原子数间的关系. 在轴向, 涡旋态参量 Δ_z^{κ} 与基态参量 Δ_z^0 相比几乎没有变化, 而在径向, 由于凝聚体的旋转, 使得表征对高斯函数“平方”分布偏离的参数 Δ_{\perp}^{κ} 与基态参数 Δ_{\perp}^0 值差异显著. 随着凝聚原子数 N 的增加, 相互作用增强, 对涡旋环绕数 κ 值的修正也增加. 当凝聚原子数趋向于零, 即相互作用参量 $\gamma \rightarrow 0$ 时, Δ_{\perp} , Δ_z 和 Δ_{χ} 均趋向于零, 而 k_{\perp} 和 k_z 趋向 1, 即方程 (14) 自然过渡到无相互作用的理想情况.

为了与文献 [21] 的数值计算结果进行比较, 我们选择几个不同凝聚原子数 N 所对应的优化参数值, 并将基态波函数沿 x 轴和 z 轴的分布用图 3 表示出来. 结果表明, 在相互作用参数 $\gamma \ll 1$ 时, 两参数优化波函数是很好的近似. 但随着 γ 值的增加, 这一波函数就越来越偏离精确的数值解(空心圆点数值), 而四参量优化的基态波函数(对于基态, 有 $\chi = 0, \kappa = 0$, 故只有 4 个优化参量)与精确的数值解吻合相当好.

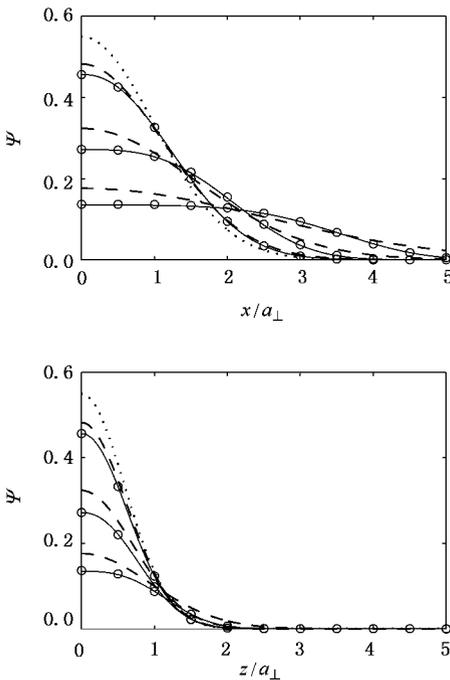


图 3 不同凝聚原子数的基态波函数比较. 点线为不考虑相互作用时的基态波函数; 虚线为两参量优化条件下的波函数; 实线为四参量(对于基态, 有 $\chi = 0, \kappa = 0$)优化波函数. 空心圆点的数据来自于文献 [21] 图 1. 从上至下, 依次对应于凝聚原子数 $N = 0, 100, 1000, 10000$.

对涡旋态的尝试函数 $\psi(r)$, 为了能与现有的直接数值解的波函数 [26] 进行比较, 运用该文献 [26] 的参数值(球对称谐振势阱, $a_{\perp} = 0.791 \mu\text{m}, \gamma = 72.3$), 并求出凝聚原子数 $N = 10000$ 时的 $\alpha_{\perp}, \alpha_z, k_{\perp}, k_z$ 和 χ 值, 绘出波函数的比较结果, 如图 4 所示. 图中的空心圆点数据来源于文献 [26] 图 31. 结果表明, 本文尝试的涡旋态波函数也与直接的数值计算基本相符.

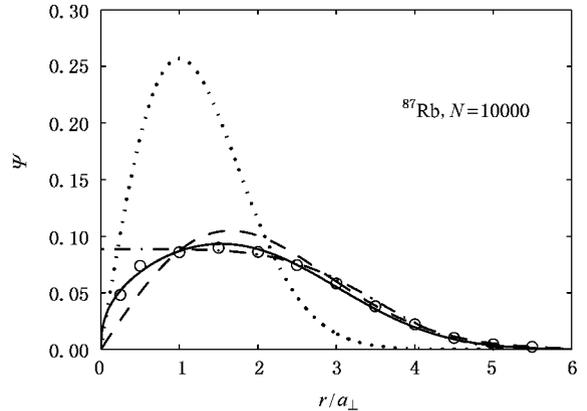


图 4 涡旋态波函数比较. 点线是不考虑相互作用时单涡旋态的波函数, 点虚线为基态波函数, 虚线为两参数优化条件下涡旋态的波函数, 实线为五参量优化的涡旋态波函数, 空心圆点数据来自于文献 [26] 图 31.

已知凝聚体的波函数, 可以方便地得到系统各部分能量. 图 5 是运用文献 [21] 参数得到的凝聚系统各部分平均能量随凝聚原子数的变化关系. 各部分能量满足位力定理, 即对于基态, 有 $2\epsilon_{\text{kin}}^0 - 2\epsilon_{\text{ho}}^0 + 3\epsilon_{\text{int}}^0 = 0$. 对涡旋态, 其位力定理为 $2\epsilon_{\text{kin}}^{\kappa} + 2\epsilon_{\text{cen}}^{\kappa} - 2\epsilon_{\text{ho}}^{\kappa} + 3\epsilon_{\text{int}}^{\kappa} = 0$. 将各部分的能量值代入, 不论涡旋态还是基态, 本文的计算结果与位力定理均严格相符. 由公式 $\mu^{\kappa} = \epsilon_{\text{kin}}^{\kappa} + \epsilon_{\text{ho}}^{\kappa} + \epsilon_{\text{cen}}^{\kappa} + 2\epsilon_{\text{int}}^{\kappa}$ 还可以得到系统的化学势, 在大原子数极限条件下, 化学势随原子数的变化规律与托马斯-费米极限结果相一致.

得到凝聚系统基态和涡旋态能量后, 可以方便地得到涡旋态临界角速度, 其随凝聚原子数 N 的变化规律如图 6 所示, 图中空心圆点数值来源于文献 [21] 图 3. 当凝聚原子数 $N < 5000$ 时, 本文所得到的结果与数值计算一致, 但随着凝聚原子数 N 的增加, 临界角速度开始偏离数值计算结果. 当 $N = 10000$ 时, 偏离的相对误差为 8%.

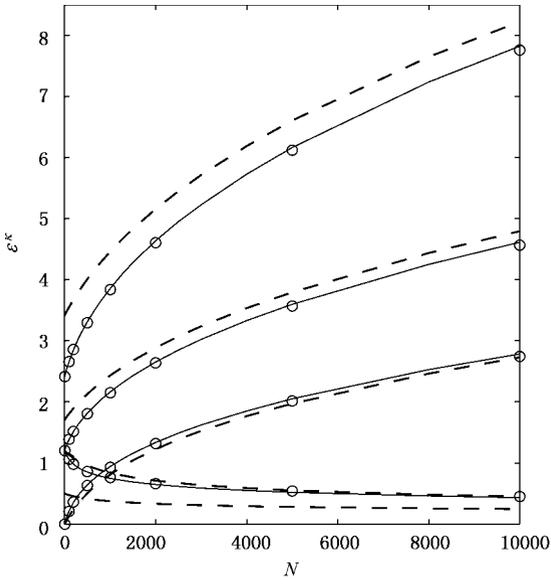


图5 玻色凝聚原子平均能量随原子数 N 的变化关系 实线为系统基态平均能量,虚线为单涡旋态平均能量.从上到下,各曲线依次表示总能量(ϵ^k, ϵ^0)、势能($\epsilon_{ho}^k, \epsilon_{ho}^0$)、相互作用能($\epsilon_{int}^0, \epsilon_{int}^k$)、动能($\epsilon_{kin}^k, \epsilon_{kin}^0$)和离心势能(ϵ_{cen}^k).图中空心圆点的数据(基态)来自于文献[21]表1

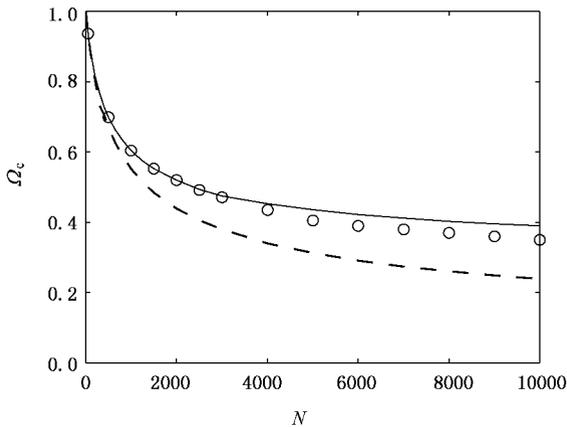


图6 涡旋临界角速度随凝聚原子数的变化关系 虚线是两参数优化所得到的结果,实线为五参量优化得到的结果,而空心圆点数据来自于文献[21]图3

图7表明了轴向和径向尺度比随凝聚原子数的变化关系,图中圆点数值来源于文献[21]表1,可见,基态的轴向和径向尺度比与数值计算相符,而涡旋态的比值大于基态,这表明凝聚体的旋转使凝聚原子云的径向平均尺度减小,而轴向与基态几乎相同。

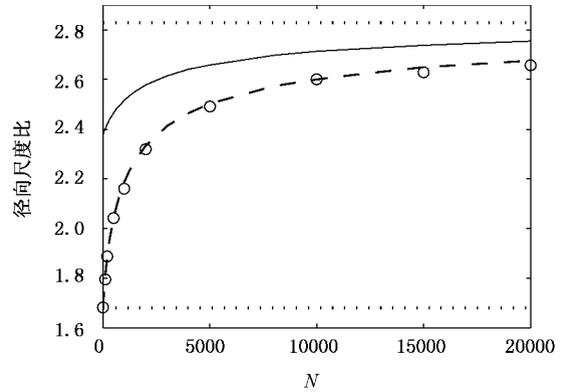


图7 凝聚原子云轴向和径向尺度比随原子数的变化关系 上下点线分别对应于大原子数极限和非相互作用理想极限^[21],实线为涡旋态,虚线为基态,圆点数据(基态)来源于文献[21]表1

4. 结 论

基于 G-P 平均场能量泛函,提出了基态和单涡旋态玻色凝聚气体尝试波函数,并求出能量泛函取极小时尝试波函数中的待定参数值,得到基态和单涡旋态波函数的统一解析表达式,其结果与 Dalfovo 等人直接从 G-P 方程出发,进行数值计算所得到的结果一致.在已求得的波函数的基础上,对玻色凝聚气体的化学势、能量、涡旋临界角速度和凝聚原子云分布的尺度等物理量进行分析和计算.研究表明,本文所发展的这一方法,数学计算简单,对基态,其结果与精确的数值计算符合得相当好,而对涡旋态,在凝聚原子数小于 5000 时($\gamma \approx 22$),所得到到涡旋临界角速度也与数值计算一致,随着凝聚原子数的进一步增加,临界角速度随原子数的变化趋势与数值计算相吻合,但与精确的数值计算相比,结果稍偏大.当 $N = 10000$ 时($\gamma \approx 43$),这种偏差为 8%.因此,在中等相互作用强度和弱相互作用的条件下,本文所发展的方法是可靠的,而且能进行解析处理.基于这一思想,我们可以将其运用到负散射长度的玻色凝聚气体之中,所得到的结果也与数值计算相符.另外,当前作为一种非常有效的研究 BEC 宏观量子性质的光晶格势(optical lattices)中的玻色凝聚气体,外加的光晶格子把磁阱中的 BEC 晶化为许多原子数在 200—2000 左右的子玻色凝聚气体.对这一系统性质的研究,目前通行的做法仍然用托马斯-费米近似模型,由于每个光晶格中原子数较少,用托马斯-费米近似的误差就较大,特别是三维情况.因此,将本文的方法运用这一领域,将是很有意义的。

- [1] Anderson M H , Ensher J R , Matthews M R *et al* 1995 *Science* **269** 198
- [2] Davis K B , Mewes M O , Andrews M R *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [3] Bradley C C , Sackett C A , Tollett J J *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687
- [4] Liu W M , Fan W B , Zheng W M *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 170408
- [5] Liu W M , Wu B , Niu Q 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2294
- [6] Wu Y , Yang X X 2003 *Phys. Rev. A* **68** 013608
- [7] Adhikari S K 2004 *Phys. Rev. A* **69** 063613
- [8] Luo X B , Hai W H 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 808
- [9] Huang G X 2004 *Chin. Phys.* **13** 1866
- [10] Xiong H W , Liu S J , Huang G X *et al* 2002 *Phys. Rev. A* **65** 033609
- [11] Xiong H W , Liu S J , Huang G X 2003 *Phys. Rev. A* **67** 055601
- [12] Xu Z J , Li H B , Xin X T *et al* 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1391
- [13] Chen S R , Chen X J 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 882 (in Chinese)
[陈世荣、陈向军 1999 物理学报 **48** 882]
- [14] Liu S J , Xiong H W , Huang G X *et al* 2003 *Phys. Rev. A* **68** 065601
- [15] Yan K Z , Tan W H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1909 (in Chinese)
[闫珂柱、谭维翰 2000 物理学报 **49** 1909]
- [16] Xu Y , Jia D J , Li X G *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2831 (in Chinese)
[徐 岩、贾多杰、李希国等 2004 物理学报 **53** 2831]
- [17] Hu Z F , Du C G , Li S Q 2003 *Chin. Phys.* **12** 708
- [18] Xu Z J , Cheng C , Xiong H W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2835 (in Chinese)
[徐志君、程 成、熊宏伟 2004 物理学报 **53** 2835]
- [19] Holland M J , Cooper J 1996 *Phys. Rev. A* **53** R1954
- [20] Edwards M , Dodd R J , Clark C W *et al* 1996 *Phys. Rev. A* **53** R1950
- [21] Dalfovo F , Stringari S 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2477
- [22] Edwards M , Burnett K 1995 *Phys. Rev. A* **51** 1382
- [23] Baym G , Pethick C 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 6
- [24] Dalfovo F , Pitaevskii , Stringari S 1996 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **101** 537
- [25] Lifshitz E M , Pitaevskii L P 1980 *Statistical Physics* (Oxford : Pergamon) part II
- [26] Dalfovo F , Giorgini S , Pitaevskii L P *et al* 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 463
- [27] Pitaevskii L P 1961 *Sov. Phys. JETP* **13** 451
- [28] Gross E P 1963 *J. Math. Phys.* **4** 195

A solution to the ground and single vortex states of Bose-condensed gas in an axially symmetric harmonic trap^{*}

Xu Zhi-Jun^{1,2)†} Shi Jian-Qing¹⁾ Lin Guo-Cheng¹⁾

¹ *Department of Applied Physics, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310032, China*

² *The State Key Laboratory of Magnetic Resonance & Atomic & Molecular Physics, Wuhan 430071, China*

(Received 18 April 2006 ; revised manuscript received 14 May 2006)

Abstract

For a Bose-condensed gas in an axially symmetric harmonic trap at zero temperature, a new trial wave function of the ground and single vortex states is considered based on the mean-field energy functional and variational method. Once the wave function is known, we can explore the particle-number dependence of relevant quantities, such as energy, chemical potential, aspect ratio of the velocity distribution and critical angular velocity for production of vortices. These results agree well with previous numerical solutions of the G-P equation given by Dalfovo *et al.*

Keywords : Bose-condensed gas, G-P functional, wave function, harmonic trap

PACC : 0365, 0530J, 0260

^{*} Project supported by the State Key Laboratory of Magnetic Resonance & Atomic & Molecular Physics Foundation (Grant No. T152501) and the Foundation of Education Commission of Zhejiang Province, China (Grant No. 20040599).

[†] E-mail : xzj@zjut.edu.cn, xuzhijun@zj165.com