

用遗传算法研究一维光晶格中 玻色凝聚气体基态波函数*

徐志君[†] 聂青苗 李鹏华

(浙江工业大学应用物理系, 杭州 310032)

(2008 年 8 月 28 日收到, 2008 年 10 月 22 日收到修改稿)

以 Gross-Pitaevski(G-P)平均场能量泛函为目标函数, 运用遗传算法研究一维光晶格系统中玻色凝聚气体的基态性质, 提出了求解系统波函数的一种新方法. 通过优化计算, 对当前常用的托马斯-费米近似和高斯近似模型进行修正和讨论, 并给出最优基态波函数.

关键词: 玻色凝聚气体, 遗传算法, 波函数

PACC: 0365, 0530J, 4250

1. 引 言

相向传播的一对激光束的干涉在空间能形成周期性的激光场强分布, 通过与原子的偶极相互作用, 产生一种控制原子质心运动的周期性的势场. 这种由激光束干涉而形成的原子偶极势场被称作光晶格(optical lattice)^[1]. 超冷原子在这种周期性势场中的运动与电子在固体晶格场中的运动有非常相似的特征. 在此意义上, 光晶格中的超冷凝聚原子也为研究一些类似固体的物理现象提供了理想的工具^[2-4]. 2002 年德国 Munich 研究小组正是从这种相似性出发, 通过控制光晶格势阱的深度, 实现了超冷原子玻色凝聚气体从超流状态向 Mott 绝缘状态的量子相变^[5]. 这样的量子相变现象不仅具有重大的理论研究价值, 而且为玻色凝聚原子的实际应用提供了新的途径. 自此, 利用光晶格控制超冷原子的研究取得了突破性的进展, 玻色凝聚气体在光晶格中的宏观量子行为的研究也成为物理学界重点关注的问题之一. 其中基态波函数的求解对探索玻色凝聚气体的一系列宏观量子现象极为重要. 目前, 对一维光晶格中的玻色凝聚气体的研究, 通常采用托马斯-费米近似和高斯近似模型求得基态波函数^[6-12], 或者直接运用数值方法求解^[13]. 本文拟将遗传算法(genetic algorithm, GA)^[14]引入玻色凝聚气体的研究之中, 以

新的方式求解光晶格中玻色凝聚气体的最优基态波函数.

遗传算法是近年来发展起来的一种全局优化方法, 具有全局搜索(可避免落入“局部最优”)、可同时确定多个最佳参数、思想新颖以及计算机程序简单等优点, 它特别适合对于“正过程”已经明了和已经成熟了的研究领域. 由于玻色凝聚气体在光晶格中形成的物理过程已经清楚, 因此, 把由磁阱(magnetic trap)和光晶格构成的组合势(compiled potential)中的玻色凝聚气体作为一个整体, 采用遗传算法, 以系统能量最小为优化的目标函数, 在全局范围内寻找系统密度分布的最优参数组合, 从而得到最优波函数. 作为一种新方法的引入和使用, 仍是有意义的工作.

2. 组合势中玻色凝聚气体的能量泛函和目标函数

束缚于磁阱和一维光晶格的组合势中的玻色凝聚气体, 当系统温度下降到玻色-爱因斯坦凝聚临界温度 T_c 以下时, 其宏观波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 满足的平均场 G-P 方程为^[15]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_\perp^2 r_\perp^2) \right] \Psi$$

* 浙江省教育厅科研基金重点项目(批准号 20070296)资助的课题.

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

$$+ V_{\text{opt}} + g |\Psi|^2 \Psi, \quad (1)$$

其中 ω_x 和 ω_{\perp} 分别表示轴向和径向磁阱谐振角频率, 实验上常选择 $\omega_{\perp} \gg \omega_x$, 即“雪茄形”磁阱(cigar shaped trap). $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ 为耦合常数, a 为原子的 s 波散射波长, m 为原子质量. $V_{\text{opt}} = U_0 \sin^2(\pi x/d)$ 为叠加在磁阱轴向的一维光晶格势, 由波长为 λ 的相向传播的一对激光束叠加形成, 其中 $d = \lambda/2$ 为光晶格的空间周期, 光晶格势阱强度 U_0 由入射的激光束强度决定, 通常以原子反冲能 $E_r = \hbar^2 k_L^2/2m$ 为单位来表示, 即 $U_0 = sE_r$, s 为表征光晶格势阱深度的一个无量纲参数, 实验上可方便地进行调节.

显然直接求解方程(1)得到基态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是困难的. 但对于在超流条件下的玻色凝聚气体, 组合势中各子凝聚原子云具有相同的化学势 μ . 此时, 通常的处理方法是将组合势中玻色凝聚气体的基态波函数表示为

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k \phi_k(x, r_{\perp}) e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (2)$$

其中 k 表示沿 x 方向第 k 个光晶格子. 将波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 代入方程(1), 得到第 k 个子凝聚原子云波函数 ϕ_k 满足的方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2) + U_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) + g |\phi_k|^2 \right] \phi_k = \mu \phi_k. \quad (3)$$

方程(3)由于存在非线性项, 通常采用数值求解和近似求解. 对“雪茄形”磁阱, 用分离变量的方法, 引入有效化学势的概念, 从径向和轴向分别进行近似求解^[6-8]. 在径向运用托马斯-费米近似模型, 求得光晶格中玻色凝聚气体原子数分布规律, 即占据中心光晶格($k=0$)的凝聚原子数 N_0 与占据第 k 个光晶格的凝聚原子数 N_k 之比为

$$\frac{N_k}{N_0} = \left(1 - \frac{k^2}{k_m^2}\right)^2, \quad (4)$$

式中的 k_m 值由归一化条件 $\sum_{k=-k_m}^{k_m} N_k = N$ (N 为系统的总原子数)来确定. 显然, 系统的光晶格总数为 $2k_m + 1$.

在轴向, 由方程(3)可知组合势在 $x_k = kd$ 处形成局域极小, 如果进一步将光晶格势用简谐势来近似, 即在 $x_k = kd$ 处对光晶格势 V_{opt} 进行泰勒级数展开, 近似到平方项, 则可得到光晶格势的简谐势展开的表达式

$$V_{\text{opt}} \approx \frac{1}{2} m\bar{\omega}^2 (x - kd)^2, \quad (5)$$

其中等效角频率 $\bar{\omega} = 2\sqrt{s}E_r/\hbar$. 对典型的实验, 一般有 $\bar{\omega} \gg \omega_x$. 因此, 如果不考虑原子间的相互作用, 则每个光晶格中的子凝聚气体沿轴向的密度分布可用高斯函数来描述, 其高斯宽度 $l_k = \sqrt{\hbar/m\bar{\omega}} = d(\pi s^{1/4})$. 由此可得第 k 个光晶格中子凝聚气体的基态波函数

$$\phi_k(x, r_{\perp}) = A'_n \sqrt{N_0} \left(1 - \frac{k^2}{k_m^2}\right) \phi_k(r_{\perp}) \times \exp\left[-\frac{(x - kd)^2}{2l_k^2}\right], \quad (6)$$

其中 A'_n 为归一化常数, 将径向的波函数 $\phi_k(r_{\perp})$ 归一化, 可得一维系统第 k 个光晶格中的玻色凝聚气体基态波函数

$$\phi_k(x) = A_n \sqrt{N_0} \left(1 - \frac{k^2}{k_m^2}\right) \times \exp\left[-\frac{(x - kd)^2}{2l_k^2}\right]. \quad (7)$$

方程(7)是在托马斯-费米近似和高斯近似条件下得到的. 运用托马斯-费米近似模型忽略了 G-P 方程中的动能项, 而高斯近似则把光晶格势用谐振势来近似, 且不计凝聚原子间相互作用. 托马斯-费米近似模型对处理谐振磁阱中的玻色凝聚气体问题是比较成功的, 因为当凝聚气体原子数足够多时, 原子间的相互作用将使凝聚原子云团膨胀, 根据测不准原理, 此时系统动能将减少, 而系统的谐振势能以及相互作用能将增加, 两者相比系统动能可以忽略不计, 因此托马斯-费米近似模型能较好地描述谐振磁阱中凝聚气体密度分布的特征. 但对光晶格系统中的玻色凝聚气体, 由于每个光晶格中原子数相对较少(一般在 10^3 量级以内, 而磁阱中的凝聚原子数可达 10^5 量级), 因此将托马斯-费米近似模型运用到光晶格系统中会引起大的偏差. 另外, 轴向凝聚气体密度分布用高斯函数来近似也需要修正. 因此, 在方程(7)的基础上, 我们对一维光晶格中的波函数作一般假设, 即

$$\Psi(x, t) = A_n \sqrt{N_0} \sum_{k=-k_m}^{k_m} \left(1 - \frac{k^2}{k_m^2}\right)^{\alpha} \times \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - kd}{\sigma_k}\right)^2\right] \times \exp(-i\mu t/\hbar), \quad (8)$$

这里引入的待定参数 α 为对托马斯-费米近似模

型的修正系数,而 σ_k 和 β 为对高斯近似模型的修正系数,其中 β 为对高斯分布函数中“平方”因子的修正, σ_k 为对高斯宽度的修正.为便于下面的计算,方程(8)已作了 $x = x/d, l_k = \sigma_k d$ 的变换.

在已知波函数的条件下,系统的能量泛函为

$$E = \int dr \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right], \quad (9)$$

对一维光晶格中的玻色凝聚气体,可仅考虑轴向的波函数对系统能量泛函的影响,而将径向波函数归一化,则有

$$E = \int dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(x, t)|^2 + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 |\Psi(x, t)|^2 + s E_r \sin^2\left(\frac{\pi x}{d}\right) |\Psi(x, t)|^2 + \frac{g'}{2} |\Psi(x, t)|^4 \right], \quad (10)$$

其中 $g' = 4\pi\kappa\hbar^2/m$, 而 $\kappa = a/2\pi l_r$ 为一维 s 波散射长度, $l_r = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$ 为径向谐振长度.方程(10)中第一项为玻色凝聚气体的动能 E_p , 第二项为谐振子囚禁势能 E_{ho} , 第三项为光晶格势 E_{opt} , 第四项为非线性相互作用平均场能 E_{no} . 本文将方程(10)作为寻优的目标函数,用遗传算法求得最佳参数 α, σ_k 和 β ,从而由方程(8)得到最优波函数.

3. 基态波函数的最优解

将遗传算法用于组合势中基态波函数相关参数的确定,要把遗传算法独立编成一个主程序,有关光晶格系统中的能量泛函(即目标函数)编成一个子程序.在子程序中,对主程序传送过来的各条染色体作二→十进制解码,计算目标函数,并将其函数值返回给主程序.表1为本文遗传算法所采用的数据.

表1 本文遗传算法中的数据

初始染色体数	循环工作染色体数	交配比较点	突变概率	循环代数	每个基因字节数
400	200	0.9	0.02	30—150	12

3.1. 子凝聚体高斯宽度修正系数 σ_k 与光晶格子数 k 的相关性

对于排斥相互作用,引用文献[6]的实验参数,即玻色凝聚气体为⁸⁷Rb原子,其质量 $m = 87 \times 1.67$

$\times 10^{-27}$ kg, s 波散射长度 $a = 5.77 \times 10^{-9}$ m, 谐振势阱的角频率 $\omega_x = 2\pi \times 9$ Hz 和 $\omega_\perp = 2\pi \times 92$ Hz, 产生光晶格的激光波长 $\lambda = 795 \times 10^{-9}$ m. 运用上述参数,先设定参数 $\alpha = 1$ 和 $\beta = 2$, 研究高斯宽度修正系数 σ_k 随光晶格子数 k 的变化关系.为减少计算量,并不失一般性,取 $k_m = 15(2k_m + 1 = 31)$, 则待优化求解的参数多达 31 个.考虑到光晶格及磁阱分布的对称性,待优化参数可简化到 16 个.由于待优化参数较多,要经过 150 代的循环,系统能量泛函收敛于最小值.结果如图 1 所示.计算表明,各子凝聚体的高斯宽度修正系数 σ_k 与 k 基本无关,特别是当光晶格势阱较深($s > 1, \bar{\omega}/\omega_x > 10^3$)时,轴向磁阱势对光晶格中各子凝聚体的影响可以忽略,其宽度修正系数 σ_k 均收敛于同一个值.如当 $s = 5$ 时, $\sigma_k = 0.2563$, 这一优化结果与文献[6]直接数值计算结果一致.随着光晶格势阱强度降低,等效角频率 $\bar{\omega}$ 减小, σ_k 随 k 略有增大,磁阱对光晶格势阱的影响有所显现.当前典型实验均采用轴向弱磁阱势和较强光晶格势的组合势来“晶化”玻色凝聚气体.因而,一般可以不考虑各子凝聚体高斯宽度的极小差异,这也是当前许多研究文献[5-12]均不考虑这一差异的原因,而且把这种晶化的玻色凝聚气体系统类比为光栅来处理.

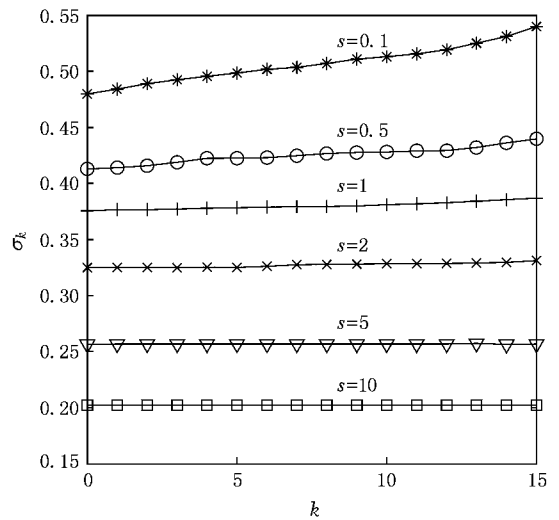


图1 光晶格中子凝聚体高斯宽度修正系数 σ_k 与光晶格子数 k 的关系

3.2. 设 $\sigma_k = \sigma$ (与 k 无关), 确定参数 α, β 和 σ

由上述分析知,在弱磁阱条件下, σ_k 与 k 相关性极小,可认为光晶格中的各子凝聚体的高斯宽度

修正系数 σ_k 相等, 设均为 σ , 则待优化的参数有三个, 即 α , β 和 σ . 经过 30 代的循环计算后, 系统能量收敛于最小.

3.2.1. 高斯近似的修正

考虑到相互作用后, 轴向凝聚体的分布偏离高斯分布, 但优化计算表明, 对高斯分布函数中“平方”因子的偏离极小, 优化参数 β 值与 2 的偏差不超过 10^{-4} , 这与计算精度相当, 而且与表征光晶格势阱强度的因子 s 以及表征各子凝聚体中的凝聚原子数的参数 N_0 无关. 而高斯宽度修正系数 σ 不仅偏离了理论计算结果 $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}/d = 1/(\pi s^{1/4})$, 而且与 N_0 也存在一定的相关性, 如图 2 所示. 与理论计算结果出现较大偏离的主要原因是将光晶格势近似为简谐势所引起的, 因此将光晶格势用简谐势来近似会引起较大的计算误差, 应该进行修正; 另外, 当 N_0 增加时, 在相同光晶格势阱强度的条件下, σ 值略有增加, 这主要是随着凝聚原子数的增加, 原子间相互作用势能增大, 凝聚原子云团膨胀所致. 可见, 对高斯分布近似的修正, 只需要对高斯宽度进行修正, 而高斯函数中的“平方”因子是很好的解析表述.

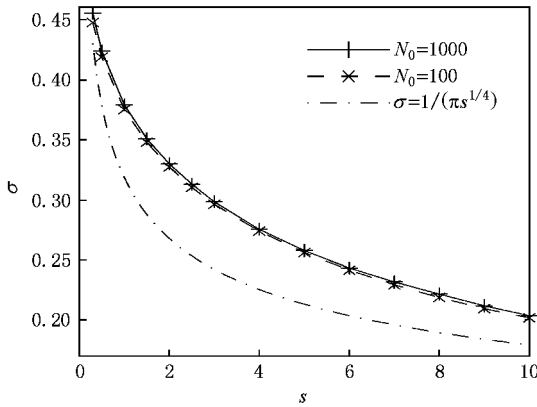


图 2 光晶格中子凝聚体高斯宽度修正系数 σ 与光晶格势阱强度因子 s 以及子凝聚原子数 N_0 的关系(点虚线是理论近似结果, 即 $\sigma = 1/(\pi s^{1/4})$); 虚线为 $N_0 = 100$ 时 σ 与 s 间的关系, 实线为 $N_0 = 1000$ 时 σ 与 s 间的关系; “+”和“x”为优化计算值)

3.2.2. 托马斯-费米近似模型的修正

根据托马斯-费米近似模型可以得到子凝聚体原子数在光晶格中分布的解析规律, 如方程(4). 但优化计算表明, 这一规律不仅需要修正, 而且要根据 s 以及 N_0 的不同给出不同的修正值. 图 3 是 $N_0 = 500$, $s = 1, 5$ 和 10 时优化得到的各子凝聚原子数在光晶格中的分布情况. 计算表明, 当 s 较小时, 如

$s = 1$, 优化修正系数 α 偏离托马斯-费米近似模型 18%, 但随着光晶格势阱强度的增加, 这种偏离程度愈来愈大, 当 $s = 10$ 时, 偏差已达 80%. 造成这一偏差的主要原因是托马斯-费米近似模型没有考虑处于超流态的玻色凝聚气体在各光晶格势阱间所具有的隧穿效应, 而这一效应受到光晶格势阱强度的显著影响, 因此产生了很大的偏差. 图 4 是在不同光晶格势阱强度的条件下托马斯-费米近似模型修正值 α 与 N_0 的关系. 计算表明, 当光晶格势阱的强度一定时, N_0 取值不同, 修正值 α 也不一样, 这说明原子间相互作用的强弱对光晶格中凝聚原子数的分布规律也有影响, 从而导致修正值 α 与 N_0 相关. 由此可见, 将托马斯-费米近似模型运用到光晶格系统中, 给出的波函数是比较粗糙的. 通过本文引入的遗传算法进行优化计算, 根据具体的实验条件对原近似波函数作出相应的修正, 可以得到系统最优的波函数.

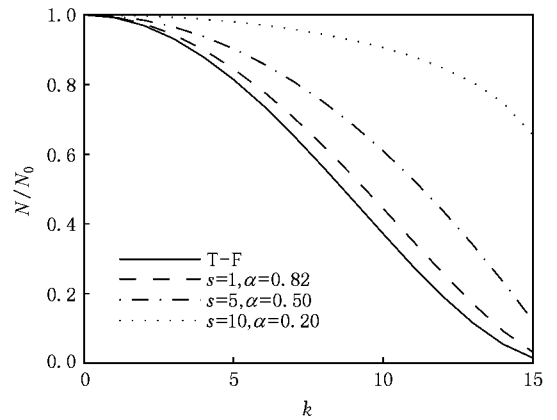


图 3 当光晶格势阱深度不同时, 组合势中各子凝聚原子数在光晶格中的分布(实线是托马斯-费米近似模型的结果)

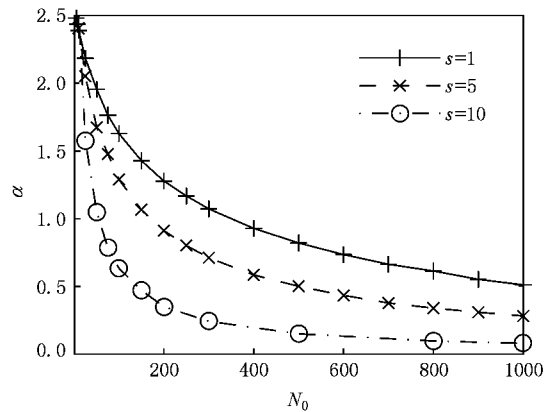


图 4 当光晶格势阱深度不同时, 修正系数 α 与子凝聚原子数 N_0 之间的关系(“+”; “x”和“o”为优化计算值)

4. 结 论

本文将遗传算法引入玻色凝聚气体的研究之中,研究了光晶格中玻色凝聚气体的原子数分布规律和密度分布特点,得到系统最优基态波函数.发展了一种新方法,得出一些有意义的结论.优化计算表明,用高斯函数对各子凝聚体的密度分布进行近似描述,在一维情况下,只要对高斯宽度作出修正,是完全可行的.通过对高斯宽度的修正,既修正了将光晶格势近似为简谐势的误差,又修正了凝聚原子间

的相互作用对高斯分布的影响,而高斯函数的“平方”因子却不用修正.而对托马斯-费米近似模型,由于没有考虑到光晶格势阱的强弱对凝聚原子数分布的影响,以及凝聚原子数的多少对基态波函数的影响,因此,由这一模型得到的波函数是粗糙的,需要根据光晶格势阱深度和表征光晶格中各子凝聚体原子数的参量 N_0 的具体条件,进行优化计算,给出参量 α 的修正值,才能得到光晶格系统最优的波函数.这一优化计算的思想,还可以拓展到二维和三维光晶格系统波函数的研究之中.

-
- [1] Dahan M B, Peik E, Reichel J, Castin Y, Salomon C 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4508
- [2] Cataliotti F S, Burger S, Fort C, Maddaloni P, Minardi F, Trombettoni A, Smerzi A, Inguscio M 2001 *Science* **293** 843
- [3] Anderson B P, Kasevich M A 1998 *Science* **282** 1686
- [4] Orzel C, Tuchman A K, Fenselau M L, Yasuda M, Kasevich M A 2001 *Science* **291** 2386
- [5] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Block I 2002 *Nature* **415** 39
- [6] Pedri P, Pitaevskii L, Stringari S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 220401
- [7] Liu S J, Xiong H W, Xu Z J, Huang G X 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 2083
- [8] Xu Z J, Wang D M, Li Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3076 [in Chinese] 徐志君、王冬梅、李 珍 2007 物理学报 **56** 3076]
- [9] Xiong H W, Liu S J, Huang G X, Xu Z J 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 4863
- [10] Liu W M, Fan W B, Zheng W M, Liang J Q, Chui ST 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 170408
- [11] Xu Z J, Zhang D M 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 2493
- [12] Chen H J, Xue J K 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3962 [in Chinese] 陈海军、薛具奎 2008 物理学报 **57** 3962]
- [13] Adhikari S K 2004 *Nucl. Phys. A* **737** 289
- [14] Goldberg D E 1989 *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning* (New York: Addison Wesley) 1—145
- [15] Gross E P 1963 *J. Math. Phys.* **4** 195

Study of the ground state wave function in optical lattice by using the genetic algorithm^{*}

Xu Zhi-Jun Nie Qing-Miao Li Peng-Hua

(*Department of Applied Physics , Zhejiang University of Technology , Hangzhou 310023 ,China*)

(Received 28 August 2008 ; revised manuscript received 22 October 2008)

Abstract

Taking the gross-pitaevski(G-P) mean-field energy functional of Bose condensed gas as the objective function , we study the properties of Bose condensed gas in 1D optical lattice system by using the genetic algorithm , and present a new method to find the ground-state wave function of the system. Through the optimized computation , the currently commonly used Thomas – Fermi approximation and Gaussian approximation model are revised and discussed , and the optimal ground state wave function is given.

Keywords : Bose condensed gas , genetic algorithm , wave function

PACC : 0365 , 0530J , 4250

^{*} Project supported by the Research Foundation of Education Bureau of Zhejiang Province , China(Grant No.20070296).