

Naším úkolem je numerické řešení Grossovy-Pitaevského rovnice, která přibližně popisuje kondenzát slabě interagujících atomů v harmonické pasti. Pro účely numerického řešení si ji zapíšeme v bezrozměrných veličinách a navíc budeme určovat pouze základní stav, který je sféricky symetrický:¹

$$\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 + 8\pi A|\phi(\xi)|^2 \right] u(\xi) = \tilde{\mu}u(\xi), \quad (1)$$

kde $\xi = r/a_{HO}$, $A = N\frac{a}{a_{HO}}$ je parametr charakterizující poměr odpudivé interakční a kinetické energie,

$\tilde{\phi}(\xi) = \frac{\phi}{\sqrt{Na_{HO}^3}} = \frac{u(\xi)}{\xi}$, $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{1/2\hbar\omega_{HO}}$ a $a_{HO} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{HO}}}$ je charakteristická délka.

Jedná se o numerické řešení okrajové úlohy, vzhledem k tomu, že operátor závisí na hustotě atomů a hustota atomů přirozeně závisí na jejich vlnové funkci, jedná se o selfkonzistentní problém, nemůžeme tudíž použít připravené rutiny pro řešení okrajových problémů. V našem řešení použijeme diskrétní množinu hodnot ξ , derivaci v rovnici převedeme na diferenci a následně iterativně dopočítáváme hodnotu potenciálu $V = 8\pi A|\tilde{\phi}(\xi)|^2$.

Pro převedení derivace na diferenci využijeme aproximativního vztahu: $-\frac{d^2u}{d\xi^2} \approx (2u_j - u_{j+1} - u_{j-1}) \frac{1}{(\xi_{\max}/n)^2}$. Využitím tohoto vztahu se problém změní na problém diagonalizace tridiagonální matice, která má na diagonále hodnoty: $\frac{2}{(\xi_{\max}/n)^2} + \xi^2 + A|\phi(\xi)|^2$ a pod a nad diagonálou $\frac{-1}{(\xi_{\max}/n)^2}$. Vlnová funkce je poté obsažena ve vektoru příslušícímu nejnižší vlastní hodnotě. Při každé iteraci je nutné normovat vlnovou funkci, aby stále platilo, že:

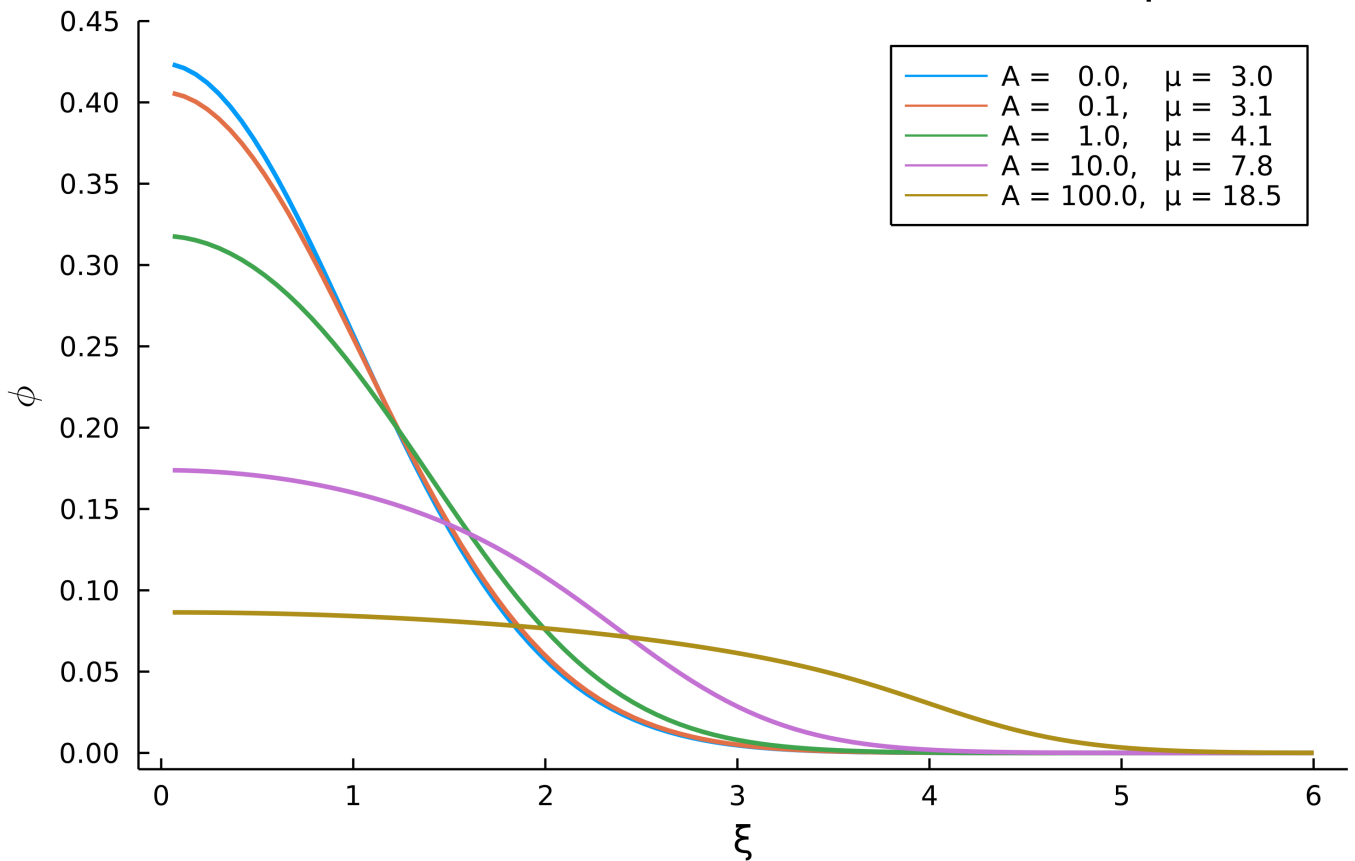
$$1 = \int \tilde{\phi}^2(\xi) d^3\xi = \int \frac{u^2}{\xi^2} 4\pi\xi^2 d\xi \approx \sum u^2 4\pi \frac{\xi_{\max}}{n}. \quad (2)$$

Pro velké hodnoty A je nutné stabilizovat iterační postup tlumením změn potenciálu podle předpisu:
 $V^{(n+1)} = (1 - \lambda)V^{(n)} + \lambda A(\tilde{\phi}^{(n)})^2$.

Z výsledného grafu je zřejmé, že jak se zvětšuje odpudivá interakční energie oproti kinetické energii, tak je obláček kondenzátu rozprostřenější v prostoru. Zároveň roste i hodnota chemického potenciálu - bude těžší atomy přidat do kondenzátu, tedy silnější odpudivá interakce způsobí větší energii systému, jak jsme obecně zvyklí.

¹Detaily úpravy jsou uvedené v zadání.

Numerical solution of Gross-Pitaevskii equation



Ukázka řešení v jazyce Julia pomocí balíčku LinearAlgebra

```
1 using LinearAlgebra
2
3 n=100
4 ξmax=6
5 ξ=Array(LinRange(6/n, ξmax, n))
6 DiffFact=(ξmax/n)^2
7 NormFact=4*π*ξmax/n
8 λ=1/12
9 dlu=-ones(n-1)/DiffFact
10
11 Alist=[0, .1, 1, 10, 100]
12 for A ∈ Alist
13     u=ones(n)
14     φ=u./ξ
15     φ/=sqrt(sum(u.^2 .*NormFact))
16     V=zeros(n)
17     for i=1:250
18         φlast=φ
19
20         DiaEle = (ξ.^2 .+ V .+ (2/DiffFact))
21         operator=Matrix(Tridiagonal(dlu, DiaEle, dlu))
22         eig=eigen(operator)
23         u=eig.vectors[:, 1]
24         global μ=eig.values[1]
25
26         φ=u./ξ
27         φ/=sqrt(sum(u.^2 .*NormFact))
28         V=(1-λ).*V+λ*A .*abs2.(φ)*8*π
29     end
30 end
```