



Nieliniowe równanie Schrödingera w pułapce harmonicznej

Iwo Białynicki-Birula and Tomasz Sowiński[†]
Centrum Fizyki Teoretycznej, Polska Akademia Nauk
[†] tomsow@cft.edu.pl

Streszczenie

Przedyskutowaliśmy wpływ nieliniowego równania Schrödingera na dynamikę kwantowej cząstki w obracającej się pułapce harmonicznej. W odróżnieniu od równania Grossa-Pitayevskiego w naszym równaniu występuje nieliniowość logarytmiczna, co znacznie upraszcza rachunki. Okazuje się, że w obecności nieliniowości równanie może mieć dwa, a nawet trzy niezależne współistniejące rozwiązania. Zmienia się również struktura warunków stabilności układu.

Wstęp

Nieliniowe równanie Schrödingera pojawiło się w mechanice kwantowej w dwóch kontekstach. Po pierwsze nieliniowość wprowadzono do równania Schrödingera, aby znaleźć doświadczalnie sprawdzalne ewentualne odstępstwa mechaniki kwantowej od jej liniowego charakteru. Po drugie jako sposób przybliżonego rozwiązywania skomplikowanych problemów metodą potencjału efektywnego.

W latach '70 rozważano [2] logarytmiczne równanie Schrödingera postaci ($\hbar = 1$ i $m = 1$):

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}, t) - b \log(|\psi(\mathbf{r}, t)|^2/a^3)\right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

Parametr b jest miarą oddziaływania nieliniowego (dodatnie b oznacza przyciąganie). Parametr a uzgadnia jednostki i nie ma fizycznego znaczenia. Można zatem położyć $a = 1$.

Sformułowanie naszego problemu

Zadaniem jakie sobie postawiliśmy było zbadanie wpływu nieliniowego charakteru mechaniki kwantowej (abstrahując od jego pochodzenia) na dynamikę cząstki w obracającej się pułapce harmonicznej. Równanie Schrödingera ma wtedy postać:

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}(t)\cdot\mathbf{r} - b \log(|\psi(\mathbf{r}, t)|^2)\right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

gdzie opisująca pułapkę macierz $\hat{V}(t)$ jest symetryczna i zależna od czasu. Aby uprościć rozważania przechodzimy do układu obracającego się, w którym macierz \hat{V} nie zależy od czasu. Taki układ jest nieinercyjny, zatem do hamiltonianu dodajemy człon opisujący siłę bezwładności $\Omega \cdot \mathbf{M}$, gdzie Ω jest wektorem prędkości kątowej pułapki, a $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ jest momentem pędu cząstki. Równanie Schrödingera ma postać:

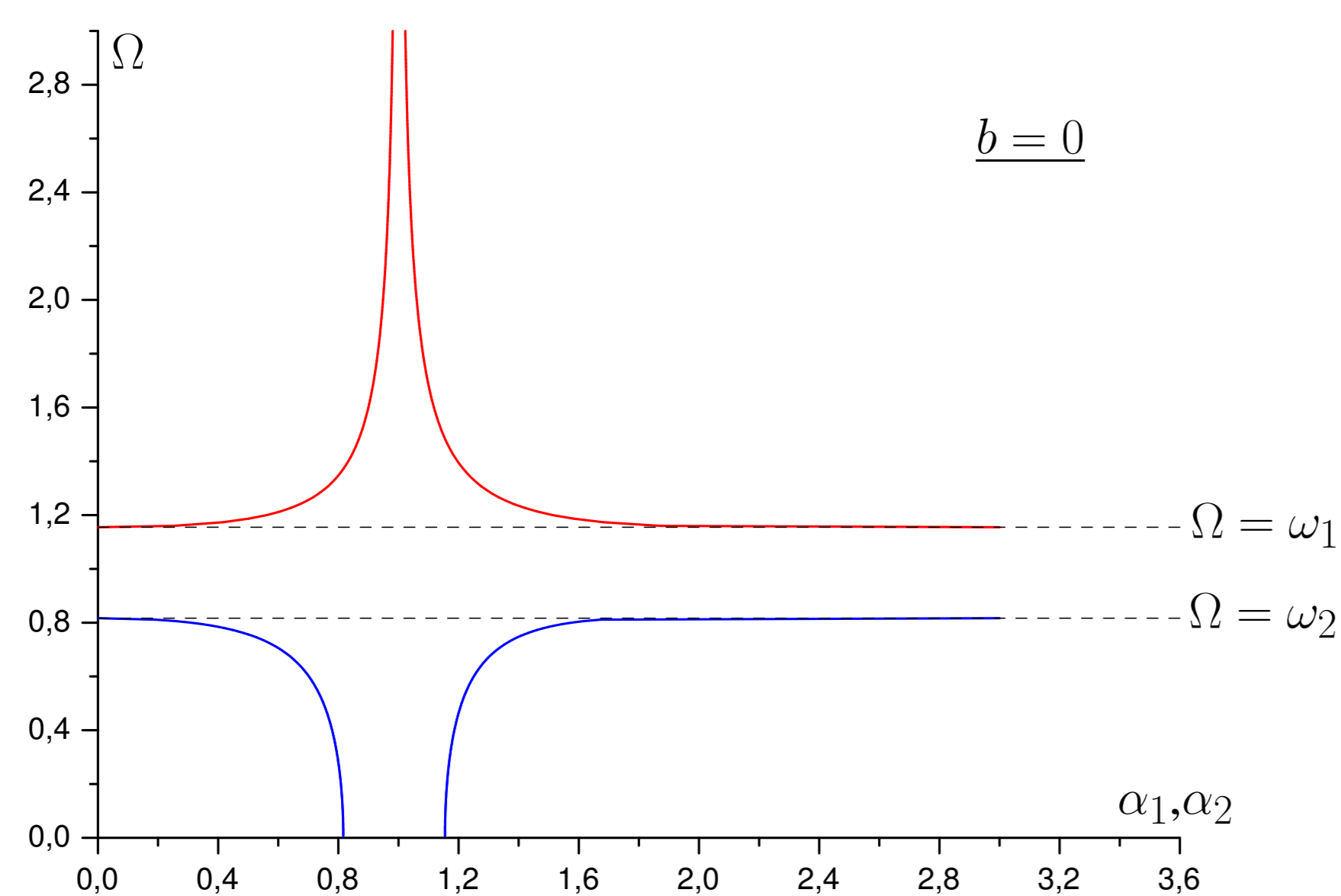
$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r} - \Omega \cdot \mathbf{M} - b \log(|\psi(\mathbf{r}, t)|^2)\right) \psi(\mathbf{r}, t)$$

Rozwiązania Gaussowskie

Rozwiązań tego równania poszukujemy w postaci *gaussonu* - gaussowskiej paczki scentrowanej wokół $\xi(t)$ i pędzie środka masy $\pi(t)$:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = N(t)e^{i\phi(t)} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{r} - \xi(t))\cdot\hat{K}(t)\cdot(\mathbf{r} - \xi(t)) + i\pi(t)\cdot\mathbf{r}\right)$$

Zespolona i symetryczna macierz $\hat{K}(t)$ opisuje kształt paczki. Dwie rzeczywiste funkcje $N(t)$ oraz $\phi(t)$ definiują stałą normalizacyjną funkcji falowej. Rozwiązanie uznajemy za stabilne, gdy część rzeczywista macierzy \hat{K} jest dodatnio-określona. Z nieliniowego równania



Rysunek 1: Wykres przedstawia zależność parametrów α_1 i α_2 w zależności od prędkości kątowej pułapki Ω przy braku członu nieliniowego. Dla każdej wartości Ω z obszaru stabilności istnieje dokładnie jedno rozwiązanie stacjonarne opisane parametrami α_1 i α_2 .

Schrödingera wynika, że taka funkcja falowa jest jego rozwiązaniem jeśli spełnione są następujące równania:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \hat{B}(t)\hat{A}(t) + \hat{A}(t)\hat{B}(t) - [\hat{\Omega}, \hat{A}(t)], \quad (3a)$$

$$\frac{d\hat{B}(t)}{dt} = \hat{B}(t)^2 - \hat{A}(t)^2 + \hat{V} + 2b\hat{A}(t) - [\hat{\Omega}, \hat{B}(t)], \quad (3b)$$

$$\frac{d\xi(t)}{dt} = \pi(t) - \Omega \times \xi(t), \quad (3c)$$

$$\frac{d\pi(t)}{dt} = -\hat{V}\cdot\xi(t) - \Omega \times \pi(t), \quad (3d)$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{1}{2}\text{Tr}\{\hat{B}(t)\}N(t), \quad (3e)$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{1}{2}\left(\text{Tr}\{\hat{A}(t)\} + \pi(t)\cdot\pi(t) - \xi(t)\cdot\hat{V}\cdot\xi(t)\right), \quad (3f)$$

Antysymetryczna macierz $\hat{\Omega}$ zdefiniowana jest przez wektor prędkości kątowej $\Omega_{ij} = \epsilon_{ijk}\Omega^k$. Natomiast symetryczne macierze \hat{A} i \hat{B} są odpowiednio częścią rzeczywistą i urojoną macierzy \hat{K} .

Należy zauważyć, że dynamika środka masy (równania (3c) i (3d)) odseparowuje się od reszty równań i jest zgodna z klasycznymi równaniami ruchu. Ogólniejsze twierdzenie ([5] oraz [3]) mówi, że taka separacja zachodzi zawsze dla potencjału harmonicznego dowolnie zależnego od czasu.

Rozwiązania stacjonarne w dwóch wymiarach

W doświadczeniach z BEC obrót pułapki odbywa się najczęściej wokół jednej z jej osi głównych. W takim przypadku ruch w kierunku tej osi odseparowuje się i pozostajemy z problemem dwuwymiarowym.

Jak wynika z równań ruchu (3) rozwiązanie stacjonarne (nieewoluujące w czasie) opisane jest przez gausson, dla którego $\xi(t) = 0$, $\pi(t) = 0$. Zatem nasz stan stacjonarny jest całkowicie opisany przez dwie dwuwymiarowe i rzeczywiste macierze \hat{A} i \hat{B} , które w tym przypadku nie zależą od czasu. Spełniają one następujące równania macierzowe:

$$0 = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} - [\hat{\Omega}, \hat{A}] \quad (4a)$$

$$0 = \hat{B}^2 - \hat{A}^2 + \hat{V} + 2b\hat{A} - [\hat{\Omega}, \hat{B}] \quad (4b)$$

Nie zmniejszając ogólności rozważań upraszczamy nasze rachunki przechodząc do układu odniesienia, w którym macierz potencjału jest diagonalna $\hat{V} = \text{Diag}(V_x, V_y)$, a jej parametry spełniają warunek $V_x < V_y$. Jak wynika z równania (3e) macierz \hat{B} musi być bezśladowa. Macierzy \hat{A} i \hat{B} szukamy w postaci:

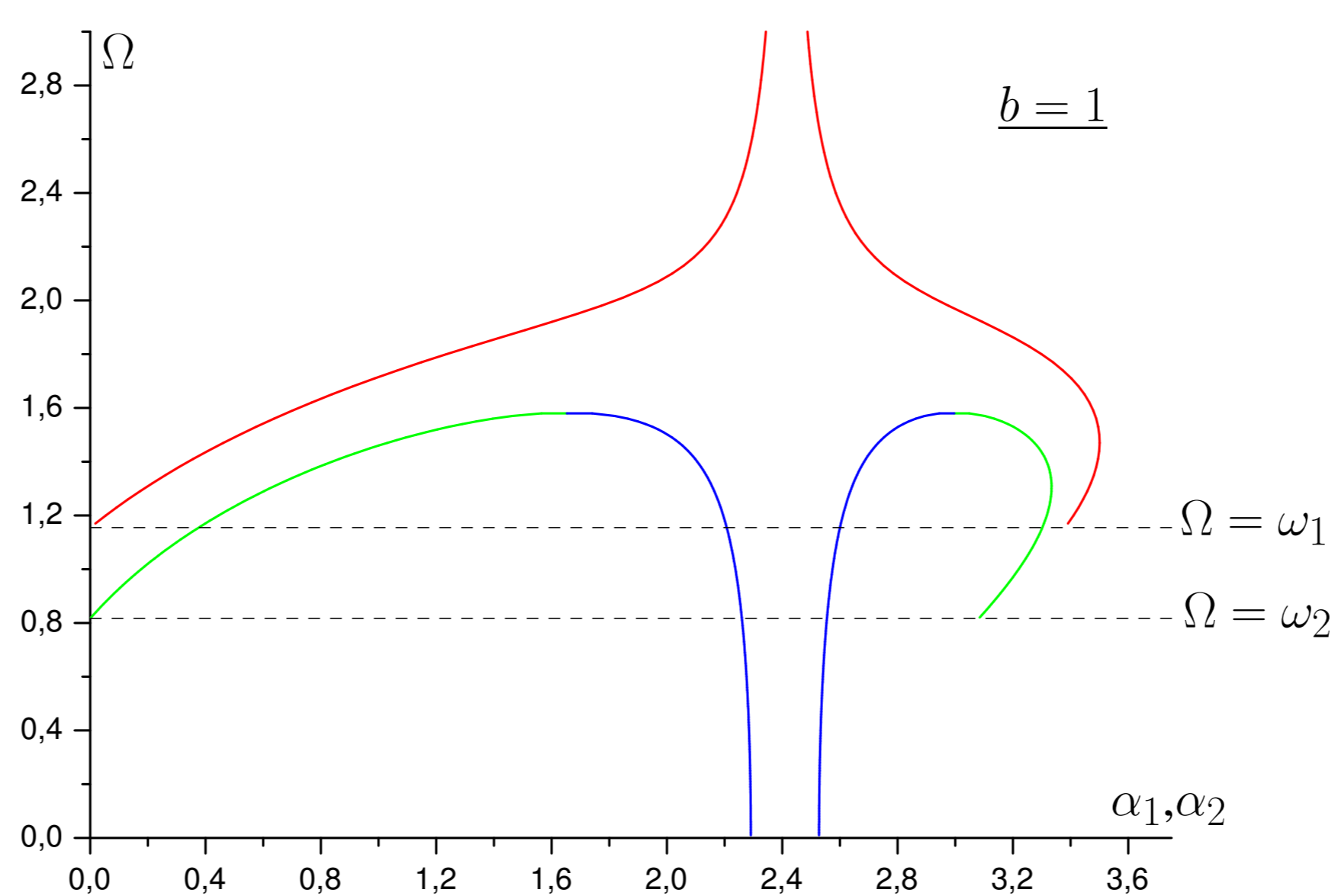
$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha \\ \alpha & \alpha_2 \end{pmatrix} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta \\ \beta & -\beta_1 \end{pmatrix}$$

Z równań (4) wynika, że $\alpha = 0$ i $\beta_1 = 0$. I pozostaje do rozwiązania układ trzech równań:

$$(\alpha_1 + \alpha_2)\beta - (\alpha_1 - \alpha_2)\Omega = 0, \quad (5a)$$

$$\beta^2 - \alpha_1^2 + V_x + 2b\alpha_1 + 2\beta\Omega = 0, \quad (5b)$$

$$\beta^2 - \alpha_2^2 + V_y + 2b\alpha_2 - 2\beta\Omega = 0. \quad (5c)$$



Rysunek 2: Wykres przedstawia zależność parametrów α_1 i α_2 w przypadku przyciągającego oddziaływania nieliniowego. Dla odpowiednio silnego oddziaływania (ten przypadek) zawsze istnieją stabilne rozwiązania. Dla małych i dużych prędkości kątowych istnieje tylko jedno rozwiązanie stacjonarne, ale dla pośrednich istnieją dwa, a nawet trzy współistniejące rozwiązania. Odpowiednie pary parametrów α oznaczone są tym samym kolorem.

Z równania (5a) natychmiast wynika, że gdy pułapka się nie obraca ($\Omega = 0$) parametr β znika i dostajemy jedno fizycznie dopuszczalne rozwiązanie:

$$\alpha_1 = b + \sqrt{b^2 + V_x} \quad (6a)$$

$$\alpha_2 = b + \sqrt{b^2 + V_y} \quad (6b)$$

$$\beta = 0 \quad (6c)$$

W przypadku braku obrotu nieliniowość zmienia zatem tylko rozmiar gaussonu. Warto zauważyć, że nawet dla ujemnych b (oddziaływanie odpychające) rozwiązanie zawsze istnieje.

Również w sytuacji gdy pułapka się obraca, ale równanie jest czysto liniowe ($b = 0$) otrzymujemy jedno rozwiązanie równań (5):

$$\alpha_1 = \frac{\sqrt{V_x + V_y + 2\Omega^2} \pm 2\sqrt{(V_x - \Omega^2)(V_y - \Omega^2)}}{1 + \sqrt{(V_y - \Omega^2)/(V_x - \Omega^2)}}, \quad (7a)$$

$$\alpha_2 = \frac{\sqrt{V_x + V_y + 2\Omega^2} \pm 2\sqrt{(V_x - \Omega^2)(V_y - \Omega^2)}}{1 + \sqrt{(V_x - \Omega^2)/(V_y - \Omega^2)}}, \quad (7b)$$

$$\beta = \Omega \frac{1 - \sqrt{(V_y - \Omega^2)/(V_x - \Omega^2)}}{1 + \sqrt{(V_y - \Omega^2)/(V_x - \Omega^2)}}. \quad (7c)$$

Rozwiązanie to jest jednak dopuszczalne tylko dla $\Omega^2 < V_x$ lub $\Omega^2 > V_y$. Identyczne warunki opisują obszary stabilności ruchu klasycznej i kwantowej cząstki [4] oraz ruchu środka masy dowolnego układu [3]. We wzorach (7) należy wybrać znak $+$ i $-$ odpowiednio w pierwszym i drugim obszarze stabilności.

W sytuacji gdy istnieją równocześnie obrót i człon nieliniowy własności rozwiązań zmieniają się dramatycznie. Najciekawsze jest pojawienie się dodatkowych rozwiązań gaussowskich. W teorii liniowej czysty stan gaussowski jest stanem fundamentalnym i jest jeden! Rozwiązanie równań (5) jest technicznie trudne i rozwiązujemy je numerycznie. Na rysunkach prezentujemy obliczone wartości parametrów α w zależności od prędkości obrotu Ω w trzech przypadkach: braku nieliniowości, nieliniowości przyciągającej i odpychającej. We wszystkich przypadkach ustalone są parametry pułapki na $V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$.

Podsumowanie

Znajomość dokładnej postaci rozwiązania logarytmicznego równania Schrödingera pozwoliła nam zbadać wpływ obrotu i nieliniowości na stabilność rozwiązań. Niespodziewanym rezultatem tych badań jest istnienie dodatkowych, współistniejących rozwiązań gaussowskich oraz zmniejszenie obszaru niestabilności nawet w przypadku oddziaływania odpychającego. Należy jednak podkreślić, że takie zachowanie może być prawdziwe tylko dla tego typu nieliniowości - nieliniowości logarytmicznej.

Literatura

- [1] I. Białynicki-Birula and T. Sowiński, *Solutions of the logarithmic Schrödinger equation in a rotating harmonic trap*, in *Nonlinear Waves: Classical and Quantum Aspects*, F. Kh. Abdullaev and V. V. Konotop (eds.), Kluwer, Amsterdam, 2004, p. 99. ([quant-ph/0310195](#))
- [2] I. Białynicki-Birula and J. Mycielski, *Bull. Acad. Polon. Sci. Cl. III* **23**, 461 (1975).
- [3] I. Białynicki-Birula and Z. Białynicka-Birula, *Phys. Rev. A* **65**, 063606 (2002).

- [4] T. Sowiński and I. Białynicki-Birula, *Harmonic oscillator in a rotating trap: Complete solution in 3D*, (to be published).
- [5] J. J. García-Ripoll, V. M. Pérez-García and V. Vekslerchik, *Bull. Acad. Polon. Sci. Cl. III* **23**, 461 (1975).

Ogólnopolskie Warsztaty Naukowe *Optyka i Informatyka Kwantowa*, Toruń, 20-25.IX.2004

Praca naukowa finansowana ze środków Komitetu Badań Naukowych w latach 2004-2006 jako projekt badawczy.