

Gross-Pitaevskii jednadžba za Bose-Einsteinov kondenzat

Gabričević, Josip

Undergraduate thesis / Završni rad

2018

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, University of Split, Faculty of science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:166:442842>

Rights / Prava: [In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-25**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Science](#)



UNIVERSITY OF SPLIT



DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJ

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet

**Gross – Pitaevskii jednadžba za Bose-
Einsteinov kondenzat**

Završni rad

Josip Gabričević

Split, rujan 2018.

Zahvaljujem prof. dr. sc. Leandri Vranješ Markić na svesrdnoj pomoći i strpljenju pri pisanju ovog rada.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Gross – Pitaevskii jednadžba za Bose – Einsteinov kondenzat

Josip Gabričević

Sveučilišni preddiplomski studij Fizika

Sažetak:

Bose – Einsteinova kondenzacija jedan je od fenomena u fizici koji se postiže na ultraniskim temperaturama. Od otkrića ove pojave pa do danas uspješno je kondenziran veliki broj različitih atoma, a u budućnosti je cilj proširiti tu grupu i na molekule. Model za opisivanje Bose – Einsteinove kondenzacije zove se Gross – Pitaevskii jednadžba. U ovom radu, ona je numerički riješena za poseban slučaj kondenzata u sferno simetričnoj zamci u programskom jeziku C. Profil gustoće kondenzata ovisi o interakciji među česticama. Ukoliko broj bozona poraste iznad kritične vrijednosti, kondenzat s privlačnim interakcijama među česticama postane nestabilan i dogodi se kolaps.

Ključne riječi: Bose – Einsteinov kondenzat, Gross – Pitaevskii jednadžba, RK4 metoda, eksplicitna metoda, kolaps

Rad sadrži: 26 stranica, 10 slika, 0 tablica, 9 literaturnih navoda. Izvornik je na hrvatskom jeziku

Mentor: prof. dr. sc. Leandra Vranješ Markić

Ocjenjivači: prof. dr. sc. Leandra Vranješ Markić
doc. dr. sc. Petar Stipanović
Viktor Cikojević, mag. phys.

Rad prihvaćen: 18. rujna 2018.

Rad je pohranjen u knjižnici Prirodoslovno – matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Gross – Pitaevskii equation for Bose – Einstein condensate

Josip Gabričević

University undergraduate study programme Physics

Abstract:

Bose – Einstein condensation is one of the phenomena in physics which can be achieved at ultralow temperatures. Since discovery of this phenomenon, large number of different atoms has been successfully condensed. Goal for the future is to expand this group on molecules too. Model used to describe Bose – Einstein condensation is called Gross – Pitaevskii equation. In this thesis, it is solved for special case of condensate in spherically symmetrical trap in programming language C. The condensate density profile depends on the interaction between particles. If number of bosons goes over critical value, the condensate with attractive interactions between particles becomes unstable and collapse happens.

Keywords: Bose – Einstein condensate, Gross – Pitaevskii equation, RK4 method, explicit method, collapse

Thesis consists of: 26 pages, 10 figures, 0 tables, 9 references. Original language: Croatian

Supervisor: Prof. Dr. Leandra Vranješ Markić

Reviewers: Prof. Dr. Leandra Vranješ Markić
Assist. Prof. Dr. Petar Stipanović
Viktor Cikojević, MSc. Phys.

Thesis accepted: September 18, 2018.

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Bose – Einsteinova kondenzacija	2
2.1	Što je BEC i kako do njega doći?	2
2.2	Eksperimentalno do BEC i rezultat	5
3	Gross – Pitaevskii jednadžba	7
4	Numeričke metode	10
5	Rezultati	15
6	Zaključak	22
7	Literatura	23
8	Dodatak	24

1 Uvod

Znanost je oduvijek za cilj sebi postavljala rušenje postojećih ograničenja i ispitivanje istih. Uvijek je prisutna ta znatiželja u ljudima, posebno znanstvenicima, koja nas tjera na pothvate kojima ćemo se približiti spomenutim ograničenjima što je više moguće. Jedno od takvih postoji i u pojmu temperature. Naravno, riječ je o apsolutnoj nuli. Unatoč tome što se ista ne može postići, javljaju se vrlo zanimljive pojave kada smo joj dovoljno blizu.

Jedna od takvih pojava je i Bose – Einsteinova kondenzacija (BEC), za koju mnogi tvrde da je novo stanje materije. Tu imamo makroskopski velik broj bozona od kojih se svi ponašaju na isti način, odnosno, svi su opisani jednom jedinom valnom funkcijom. Model kojim navedeno stanje opisujemo zove se Gross – Pitaevskii jednadžba (GPE). Postizanje kondenzata i ispitivanje njegovih svojstava od velike je važnosti jer može dovesti do boljeg uvida u ponašanje čestica u sustavima s jako visokim vrijednostima temperature i tlaka. Ovakvi uvjeti vladaju u jezgrama neutronske zvijezde. Njihova masa približna je masi Sunca, ali radijus im je svega oko 10 km. Iz ovoga slijedi da su mnogo gušće od Sunca, a tako gusta materija ne može se proizvesti laboratorijski. Isto tako, Bose – Einsteinov kondenzat može se povezati i sa supravodljivošću. To je pojava nestanka električnog otpora u pojedinim tvarima, koja se događa na vrlo niskim temperaturama.

U ovom radu bit će opisana Bose-Einsteinova kondenzacija te kako se postiže u plinovima ultrahladnih atoma. Također će se opisati Gross – Pitaevskii jednadžba koja nam omogućuje teorijski opis kondenzata slabo interagirajućih atoma. Jednadžbu ćemo riješiti za slučaj jednokomponentnog plina u harmoničkoj zamci. Opisat ćemo korištene metode te diskutirati dobivene rezultate.

2 Bose – Einsteinova kondenzacija

2.1 Što je BEC i kako do njega doći?

Obzirom na spin, čestice dijelimo na bozone i fermione, pri čemu bozoni imaju cjelobrojan, a fermioni polucjelobrojan spin. Spin možemo shvatiti kao jednu od karakteristika koja česticama definira ponašanje, kao što su to i masa ili naboj. U fizikalnom smislu, to znači da niti dva fermiona ne mogu nikako biti u istom stanju, a pogotovo više njih. S druge strane, za cjelobrojan spin, broj bozona u istom stanju je proizvoljan.

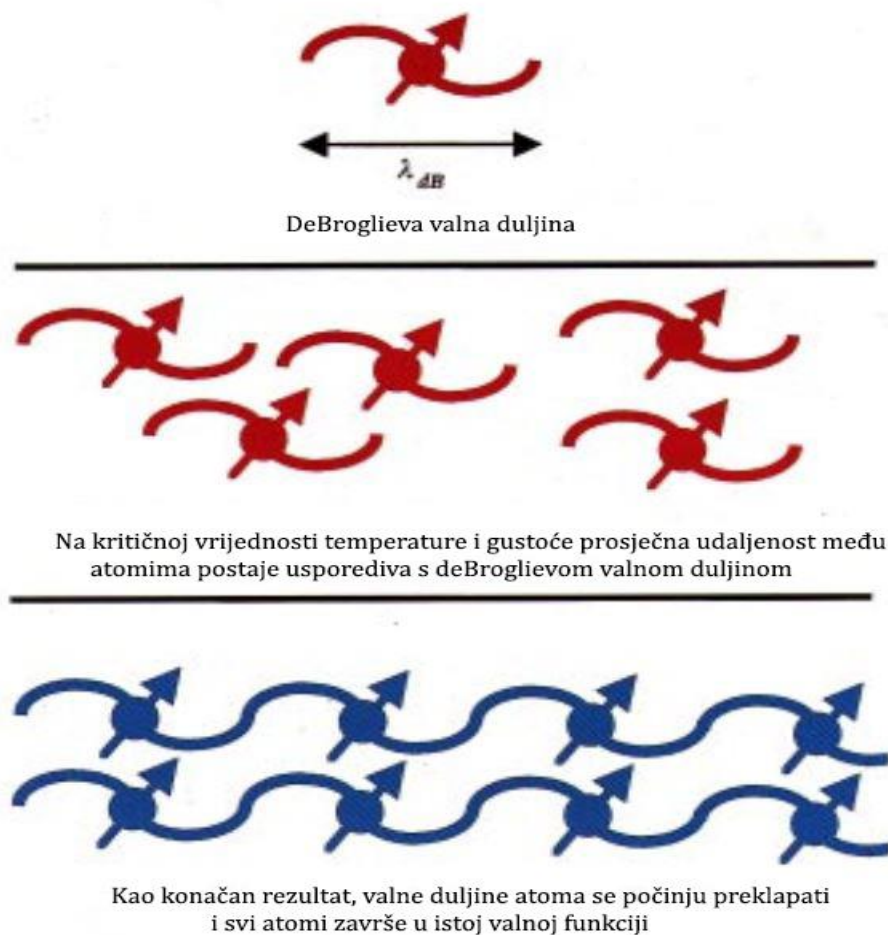
Broj bozona u termalnoj ravnoteži u pojedinom kvantnom stanju dan je Bose-Einsteinovom distribucijom

$$n_i = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} - 1} \quad (2.1)$$

pri čemu je n_i prosječan broj čestica na energijskoj razini ε_i , T je temperatura, k Boltzmannova konstanta, a μ kemijski potencijal, odnosno, energija potrebna da česticu dodamo u sustav.

Pri temperaturama koje su dosta daleko od apsolutne nule, npr. sobna temperatura, bozoni su raspoređeni nasumično po svim energijskim stanjima. Postupnim spuštanjem temperature, de Broglieva valna duljina (koja proizlazi iz valno – čestičnog dualizma) se povećava. Nakon određenog vremena, valne duljine bozona se počinju preklapati i nakon kritične temperature nastupi BEC. Ono što se dogodi je da veliki postotak ukupnog broja bozona pada u osnovno stanje i svi se ponašaju isto, kao što je prikazano na *slici 1*. Važno je napomenuti da se ovo događa kada je gustoća faznog prostora približno jednaka Planckovoj konstanti h i da sve opisujemo za plin identičnih bozona.

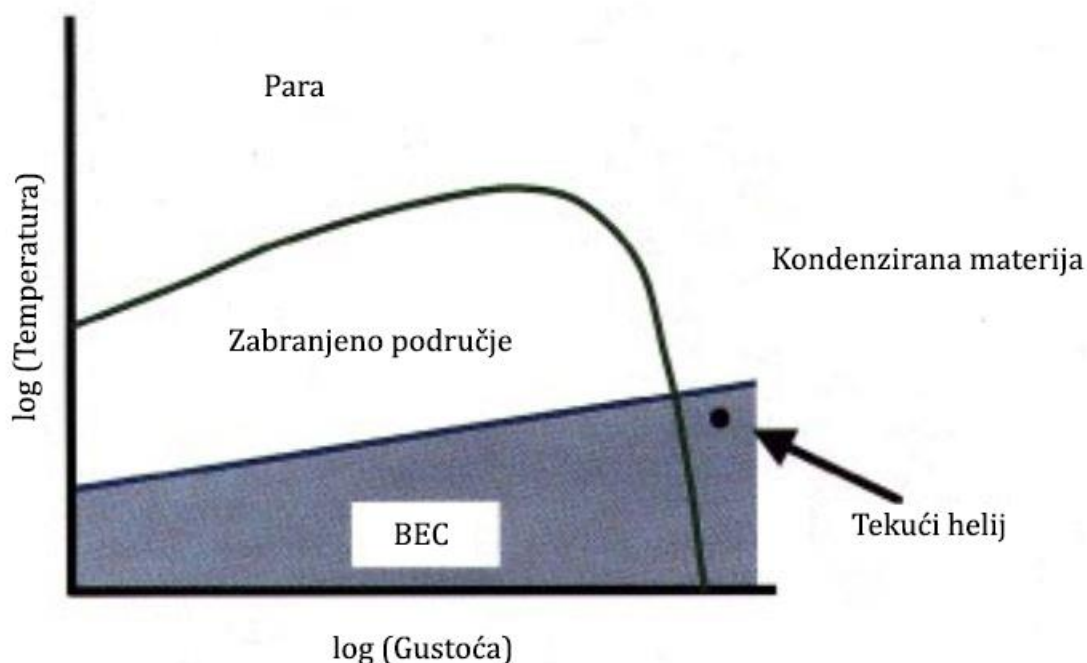
Sudeći prema svemu što je do sada rečeno moglo bi se pomisliti da je poprilično jednostavno dobiti BEC. Naravno, situacija je puno kompliciranija od toga. Znanstvenicima je trebalo oko 70 godina da navedeno stanje postignu za bozonski plin, nakon što su ga Bose i Einstein predvidjeli davne 1924. godine. Znanstvenici koji su to uspjeli napraviti po prvi put u povijesti bili su Carl Wieman i Eric Cornell sa sveučilišta u Koloradu. Oni su pokus izveli na plinu rubidija [1]. Također, treba spomenuti i Wolfganga Ketterlea sa MIT-a koji je BEC postigao radeći s atomima natrija [2].



Slika 1. Bose – Einsteinova kondenzacija nastaje kada prosječna udaljenost među atomima postane usporediva s deBroglievom valnom duljinom. Kao posljedica toga, valne duljine se počinju preklapati i svi atomi se nađu u istom stanju koje je opisano samo jednom valnom funkcijom. (slika preuzeta s *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* [1]).

Sada ćemo proći kroz metode kojima se BEC realizirao i probleme na koje su nailazili svi koji su pokušavali. Da bismo vidjeli prvu poteškoću, pogledajmo *sliku 2* na kojoj je prikazan univerzalni fazni dijagram materije. Pri niskim vrijednostima temperature, u uvjetima termalne ravnoteže, tvari su općenito u krutom stanju izuzev tekućeg helija koji je tekućina. Pri visokim temperaturama vlada plinovito stanje. Na dijagramu postoji dio koji se zove zabranjeno područje i ograničeno je zelenom linijom. Zabranjeno područje značajno je jer unutar njega tvari ne mogu postojati u uvjetima termalne ravnoteže, a da bismo postigli BEC moramo kroz njega proći. Ipak, postoji odgovor za savladavanje ove prepreke i on leži u metastabilnim stanjima. To su stanja koja odgovaraju lokalnim minimumima Gibbsove slobodne energije i prema njima treba jako oprezno postupati da sustav ne bi prešao u ravnotežno stanje, koje odgovara apsolutnom minimumu Gibbsove slobodne energije. Primjer ovakvog slučaja je plin na sobnoj temperaturi u jako čistom sustavu. Zatim, taj plin polako hladimo i možemo ući ispod

temperature ukapljivanja, ali još uvijek imamo plin, a ne tekućinu. No, ako barem malo onečistimo sustav, formiraju se kapljice i metastabilno stanje iščezne. Onečišćenjem sustava dodali smo centre ukapljivanja i zato je bilo moguće formiranje tekućine. Prelazak u ravnotežno stanje može se dogoditi i ako gustoća nije dovoljno niska jer se pri sudaru od tri tijela formira molekula i pokrene se lančana reakcija čime se opet naruši metastabilno stanje. Za BEC na niskim gustoćama potrebne su i niske temperature, kao što vidimo iz priloženog dijagrama.



Slika 2. Fazni dijagram obične materije (slika preuzeta s *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* [1])

Prvi od postupaka koji se koristio da bi se postigle dovoljno niske temperature zove se lasersko hlađenje bozonskog plina. Zamislimo plin u centru kocke i iz središta svake stranice ispucamo lasersku zraku u plin. Kako je laser usmjeren gibanje fotona, a oni uz energiju prenose i impuls, dogodi se da fotoni usporavaju atome koji se gibaju prema njima. Naime, atom koji apsorbira foton osjeti promjenu u količini gibanja. Ukoliko je vektor količine gibanja fotona usmjeren suprotno vektoru količine gibanja atoma, brzina atoma se smanji, odnosno, on se uspori. Ako su količine gibanja u istom smjeru, nema značajnog ubrzanja. To se postiže primjenom Dopplerovog pomaka. Vjerojatnost apsorpiranja fotona ovisi o frekvenciji lasera i to na način da povećanjem frekvencije vjerojatnost apsorpcije raste dok ne postigne svoj maksimum i zatim opada. Frekvenciju lasera postavimo otprilike na polovinu intervala između nule i maksimuma vjerojatnosti apsorpcije. Foton koji se giba prema atomu, a čiji je vektor količine gibanja suprotan vektoru količine gibanja atoma, prividno ima veću frekvenciju tj. vjerojatnost apsorpcije bliža je maksimumu. S druge strane, foton kojem vektor količine gibanja gleda u istom smjeru kao i onaj od atoma, prividno ima manju frekvenciju, odnosno,

vjerojatnost apsorpcije bliža je nuli. Tako se postigne da atomi više usporavaju nego što ubrzavaju. Kako laser udara u plin sa svih strana, gdje god da atom plina krene, naći će se foton koji će ga usporiti. Ovom metodom plin se može ohladiti do temperature od $10\mu\text{K}$, pri čemu gustoća bude oko 10^{11} atoma po centimetru kubnom. Ako se ovaj broj izrazi preko Planckove konstante, dobije se da je gustoća faznog prostora $10^{-5} h$. Ono što sprječava daljnje snižavanje temperature je Brownovo gibanje. To je oblik gibanja koji se javlja zbog nasumičnog udaranja okolnih molekula u tijelo koje se promatra. U ovom slučaju promatra se plin bozona, a udaraju ga fotoni.

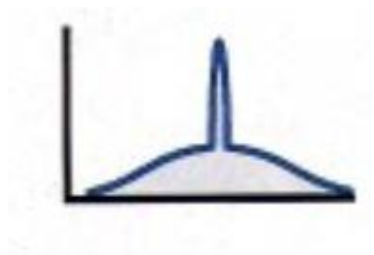
Stoga se prelazi na hlađenje isparavanjem. Isparavanje je pojava gdje čestice koje imaju dovoljno veliku energiju spontano napuštaju sustav i tako se srednja energija svih ostalih čestica smanjuje tj. sustav se hladi. Znači, treba nam nekakav oblik vanjskog potencijala kojeg će atomi s viškom energije moći napustiti. To se postiže nehomogenim magnetskim poljem i upravo to je razlog zašto su alkalijski atomi najelegantiniji za ovakve pokuse. Imaju jedan nespareni elektron i zbog toga je ukupni magnetski moment cijelog atoma jednak spinskom magnetskom momentu slobodnog elektrona. Drugim riječima, ako je magnetski moment atoma antiparalelan magnetskom polju, atom teži u lokalni minimum vanjskog potencijala. Tijekom vremena manipulira se vanjskim potencijalom i to na način da mu se smanjuje jedan rub i u konačnici ostaju samo najhladniji atomi. Istovremeno, povećava se gustoća jer preostali bozoni nemaju dovoljno energije za izlazak iz vanjskog potencijala. Ovim načinom može se postići temperatura prijelaza plina u Bose – Einsteinov kondenzat i ona iznosi oko 100 nK . Na toj vrijednosti gustoća iznosi približno 10^{12} atoma po centimetru kubnom, a spustimo li se ispod navedene temperature, gustoća naglo poraste na otprilike 10^{14} atoma po centimetru kubnom i formira se kondenzat.

2.2 Eksperimentalno do BEC i rezultat

Nakon što su opisani postupci koji su primjenjivi kod ovog problema, kratko ćemo opisati kako je eksperiment proveden i način na koji se plin promatrao. Krenulo se od odabira magnetske zamke koja ima paraboličan oblik. Zatim se prešlo na prvi oblik hlađenja, odnosno laser, i nastavilo do granice do koje se moglo stići. Dosegnuvši limit lasera, pokrenula se prethodno postavljena zamka te se prešlo na postupak hlađenja isparavanjem. Primijenjene su istodobno dvije tehnike. Korišteno je magnetsko polje koje oscilira radio – frekvencijama i inicira promjene u spinu. Na taj način pomoglo se vrućim atomima da napuste zamku jer se promjenom spina potaknulo udaljavanje od minimuma vanjskog potencijala. Uz to, tijekom vremena smanjivala se frekvencija, što je omogućilo dublji ulazak u atomski oblak tj. bliže minimumu potencijala. Kao posljedica ova dva postupka dobivena je željena temperatura.

Postavlja se pitanje kako je uopće opažen taj plin i kako se moglo znati da se nalazio na željenoj temperaturi. Naime, nije postojao uređaj kojim bi se ona jednostavno mogla očitati, pa je stoga iskorišten laser da bi se izvukle informacije o temperaturi. Pustila se laserska zraka

kroz atomski oblak i, kao posljedica raspršenja svjetlosti, dobila se slika na zaslonu, pri čemu je veća sjena značila gušći oblak. Obzirom da je potencijal kojim su atomi držani bio poznat, a plin dobra aproksimacija idealnog, onda je veličina oblaka dala informaciju o temperaturi i gustoći. Ukoliko se širina oblaka smanji 10 puta, onda je temperatura 100 puta manja. Ako uz to sjena ostane jednako tamna, onda se gustoća povećala 10 puta. Za konačan rezultat dobije se distribucija atoma po položaju takva da je velika većina nagomilana u centru oblaka i taj dio zove se Bose – Einsteinov kondenzat. Udaljavanjem od središta događa se prijelaz u termalni dio oblaka gdje su atomi koji ne sudjeluju u kondenzaciji, *Slika 3*.



Slika 3. Skica prostorne raspodjele atoma u oblaku kada se postigne BEC (slika preuzeta s *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* [1])

3 Gross – Pitaevskii jednadžba

Bose-Einsteinovi kondenzati koji su opaženi u prethodno opisanim eksperimentima su zarobljeni, rijetki i slabo interagirajući sustavi bozona, na koje je primjenjiva teorija srednjeg polja. Za predviđanje njihovih svojstava potreban je prikladan fizikalni model. Gross – Pitaevskii jednadžba pokazala se jako pouzdanom za opisivanje brojnih svojstava kondenzata. Poznato nam je da u kvantnom svijetu veliku većinu problema rješavamo Schrödingerovom jednadžbom, pa se može javiti pitanje koja je veza sa GPE. Odgovor je da se GPE uz određene aproksimacije izvodi iz mnogočestične Schrödingerove jednadžbe. Kako je taj izvod presložen za ovaj rad, ovdje ćemo samo naznačiti ključne korake u izvodu te se usmjeriti na njeno numeričko rješavanje.

Ako imamo sustav od N bozona koji međusobno interagiraju, to možemo opisati funkcijom $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$, pri čemu se $\vec{r}_i$ odnosi na položaj i -tog bozona, dok je t , naravno, vrijeme. Schrödingerova jednadžba ima slijedeći oblik:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \dots + \nabla_N^2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \right] \Psi \quad (3.1)$$

gdje ∇_i označava gradijent, tj. parcijalnu derivaciju po svim koordinatama, s obzirom na i -ti bozon, a V je potencijal. Vidimo da ovakav oblik uopće ne izgleda pogodno za rješavanje pa ga stoga transformiramo. Pritom uvažavamo da čestice interagiraju dvočestičnim interakcijama i da se radi o rijetkom plinu. Analitičkim putem [3] dođe se do puno elegantnijeg oblika za GPE:

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}, t) + g|\phi(\vec{r}, t)|^2 \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (3.2)$$

koji izgledom podsjeća na nelinernu Schrödingerovu jednadžbu zbog člana $g|\phi(\vec{r}, t)|^2 \phi(\vec{r}, t)$.

U prikazanom izgledu jednadžbe lako se primijete neke očite razlike u usporedbi s početnom. Za početak, umjesto Ψ u oznaci valne funkcije sada imamo ϕ . Navedena promjena proizlazi iz toga što se pri analitičkom rješavanju početne jednadžbe javi potreba za uvođenjem Boseovih operatora polja [3]. Početni operator polja $\hat{\Psi}$ pridružen je funkciji Ψ . Kasnije se pokaže da se on može raspisati kao superpozicija dva doprinosa od kojih jedan opisuje kondenzat, a drugi opisuje termalni plin. Operator za kondenzat je $\hat{\phi}$, a njemu pridružena valna funkcija je ϕ . Iz ovoga vidimo da gore prikazana jednadžba vrijedi samo za čisti kondenzat bez termalnog dijela. V_{ext} je vanjski potencijal zamke. Dakle, to je ono što mi sustavu namećemo i što direktno možemo kontrolirati. Još samo ostaje objasniti što je što je faktor g . On nam govori o interakciji među bozonima u atomskom oblaku i stoga kažemo da je g efektivna jakost interakcije atoma. Ukoliko je g manji od nule interakcije su privlačne, ako je veći od nule onda su odbojne, a ako je pak točno jednak nuli onda to implicira da interakcija nema. Pogledamo li *sliku 4* bit će nam jasnije kako to utječe na oblik osnovnog stanja BEC-a. Uzmimo slučaj bez interakcija kao onaj

u odnosu na kojeg ćemo promatrati preostala dva. Uočimo da je riječ o Gaussijanu. Povećanjem g -a profil gustoće postaje širi i maksimum mu se spušta. Možemo reći da se oblak „razmazuje“ po prostoru, a to i očekujemo jer pozitivan g implicira odbojnu silu. S druge strane, za negativan g imamo sužavanje profila gustoće i povećanje maksimalne vrijednosti. Razlog tome su privlačne sile koje bozone nastoje držati što je moguće bliže, a to znači da im je gustoća veća nego kada interakcije nema. Formula kojom je g opisan glasi

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (3.3)$$

pri čemu je $\hbar$ reducirana Planckova konstanta, a je duljina raspršenja, a m je masa. Kako su u navedenom izrazu sve konstante osim duljine raspršenja, upravo o njoj ovisi predznak i iznos efektivne jakosti interakcije. Ukoliko želimo pronaći stacionarna rješenja za GPE, trebamo iz nje eliminirati vremensku ovisnost, a to možemo napraviti na slijedeći način:

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi_0(\vec{r})e^{-i\mu t/\hbar} \quad (3.4)$$

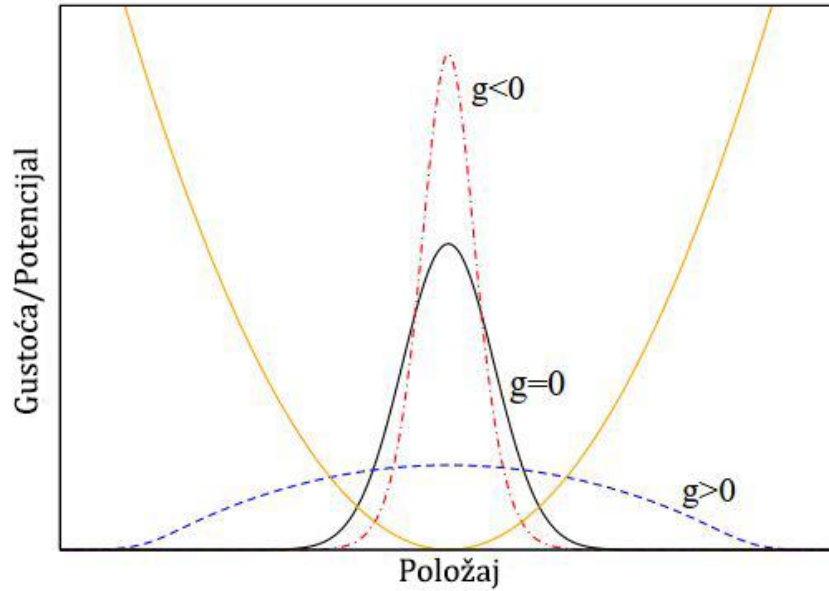
Ovdje je μ kemijski potencijal, odnosno, energija koja je potrebna za dodati jednu česticu u kondenzat. Odgovarajuća vremenski neovisna GPE glasi:

$$\mu\phi_0(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + g|\phi_0(\vec{r})|^2 \right] \phi_0(\vec{r}) \quad (3.5)$$

U ovakvom obliku jednadžbe možemo za $g > 0$ primijeniti nešto što se zove Thomas – Fermijeva aproksimacija. Ono što radimo je da zanemarimo kinetičku energiju jer uzimamo da je energija interakcije mnogo veća od kinetičke, pa se ova upravo zbog toga smije zanemariti. Primjenom navedenog uvjeta, osnovno je stanje aproksimirano izrazom

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \sqrt{\mu - V_{ext}(\vec{r})/g}, & \text{za } \mu \geq V_{ext}(\vec{r}) \\ 0, & \text{inače} \end{cases} \quad (3.6)$$

Oblik ovakvog rješenja inverzna je parabola, koja je dobra aproksimacija svugdje osim vrlo blizu osi apscisa. Naime, u tom dijelu stvarno ponašanje funkcije je kao kod Gaussijana, pa se stoga javi blago odstupanje. Razlog ovome je što u rubnim dijelovima kondenzata doprinos kinetičke energije nije zanemariv. Za $g < 0$ isto imamo određena ograničenja koja trebamo prokomentirati. Ovdje ne možemo zanemariti kinetičku energiju jer ona drži kondenzat stabilnim i to samo dok je broj bozona ispod kritične vrijednosti. Čim se naruši taj uvjet, dogodi se kolaps BEC-a, no o tome ćemo detaljnije u petom poglavlju. Dakle, kada promatramo slučajeve pozitivnog g -a, nemamo nametnutih ograničenja, a Thomas – Fermi aproksimaciju možemo koristiti da vidimo slaže li se s njom numeričko rješenje. S druge strane, radeći s negativnim g , trebamo biti dosta oprezni.



Slika 4. Prikaz ovisnosti oblika osnovnog stanja GPE o faktoru g u slučaju harmonijskog potencijala (slika preuzeta s *Two – Component Bose – Einstein condensates: Equilibria and Dynamics at zero temperature and beyond*, by Robert William Pattinson)

Da bi numeričko rješavanje bilo što zgodnije i pouzdanije, jednađbu treba još malo srediti. Problem s kojim se susrećemo u trenutnom obliku GPE su jako maleni brojevi koji mogu vrlo lako izazvati neočekivano ponašanje programa, ali i nepreciznosti u konačnom rezultatu. Stoga prelazimo na bezdimenzionalnu jednađbu koristeći jedinice harmonijskog oscilatora. Uvođenje ovih jedinica vrlo je dobro rješenje zato jer je vanjski potencijal također harmonijski. Veličine poprima oblik

$$\tilde{t} = t\bar{\omega}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{l}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{l}, \quad \tilde{z} = \frac{z}{l} \quad (3.7)$$

gdje tilda označava da je ta veličina izgubila dimenziju, l je duljina harmonijskog oscilatora i vrijedi $l = \sqrt{\hbar/m\bar{\omega}}$, a $\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$, pri čemu ω_i označava frekvenciju oscilatora u i -toj koordinati. Nakon kraćeg računa GPE poprimi oblik

$$i \frac{\partial \tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left[-\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}_{ext}(\tilde{\mathbf{r}}) + \tilde{g} |\tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})|^2 \right] \tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \quad (3.8)$$

koji je jako pogodan za numeričke metode koje će biti objašnjenje u idućem poglavlju. Vrijedi da je

$$\tilde{V}_{ext}(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2\bar{\omega}^2} (\omega_x^2 \tilde{x}^2 + \omega_y^2 \tilde{y}^2 + \omega_z^2 \tilde{z}^2), \quad a \quad \tilde{g} = \frac{g}{\hbar\bar{\omega}l^3} \quad (3.9)$$

4 Numeričke metode

U prethodnom poglavlju opisana je i dana GPE u tri dimenzije preko komponenti $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$, pa prije nego krenemo na numeričke metode koje će biti potrebne za riješiti istu, vrijedi napomenuti da će u ovom radu radi sferno simetričnog potencijala zamke biti priloženo rješavanje problema u sfernom sustavu, gdje radimo s radijusom $\tilde{r}$ za kojeg vrijedi $\tilde{r}^2 = \tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2$. Isto tako, uzimamo da je kondenzat sastavljen samo od jedne komponente. Dakle, rješavamo problem čistog kondenzata u sfernom koordinatnom sustavu. GPE ostaje ista, samo što je moramo prilagoditi za navedeni problem i nakon što to provedemo ona poprimi oblik

$$i \frac{\partial \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right) + \tilde{V}_{ext}(\tilde{r}) + \tilde{g} |\tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})|^2 \right] \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t}) \quad (4.1)$$

pri čemu, uz odabir izotropnog harmonijskog oscilatora, za vanjski potencijal vrijedi slijedeća jednačnja

$$\tilde{V}_{ext}(\tilde{r}) = \frac{\tilde{r}^2}{2} \quad (4.2)$$

Iz priloženog vidimo da se GPE dosta pojednostavljuje što se tiče operatora laplasijana i oblika vanjskog potencijala, koji sada ovise samo o jednoj varijabli. Bezdimenzionalnost jednačnje još je uvijek prisutna u problemu tako da možemo krenuti na rješavanje istog.

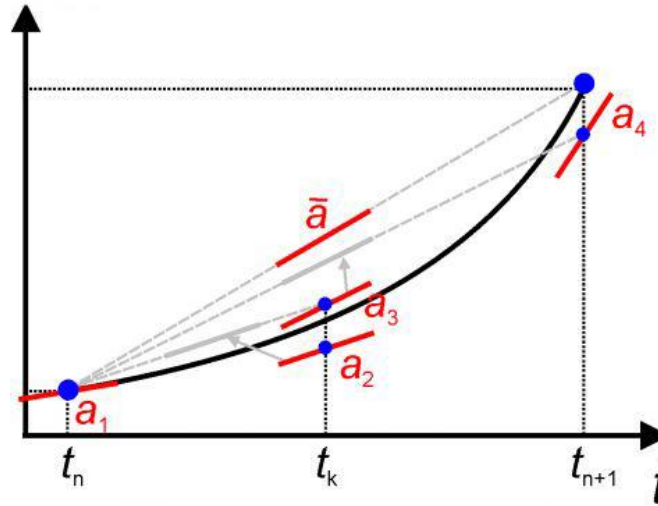
Numeričke metode koje su potrebne zovu se Runge – Kutta i eksplicitna metoda. Runge – Kutta ima dvije izvedbe, RK2 i RK4. Nama je zanimljiva RK4 zbog toga što je puno preciznija. Pomoću navedene metode realiziramo propagaciju u vremenu. Diskretiziramo vremensku os, a do sljedeće vremenske točke dolazimo računanjem prema izrazu

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h \quad (4.3)$$

pri čemu su k -ovi nagibi pravaca i računamo ih prema izrazima

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, y_n) \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}hk_2\right) \\ k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Vidimo da je potrebno računati nagibe pravaca k_i u četiri različite točke, da bismo u konačnici preko njih dobili traženu vrijednost, *slika 5*.



Slika 5. Slikoviti prikaz rada RK4 metode gdje su nagibi pravaca označeni s a_i (slika preuzeta s *Matematičke metode fizike III, PMF Split*)

Prvi korak je računanje nagiba k_1 u točki iz koje krećemo, s koordinatama t_n i y_n . Nakon toga, preko k_1 , računamo k_2 u trenutku $t_{n+1/2}$. Izračunati k_2 onda koristimo za računanje k_3 u istom tom trenutku. To nas vodi do računanja k_4 , uz pomoć k_3 , u vremenskoj točki t_{n+1} . Kombinacijom sva četiri nagiba dobijemo vrijednost u točki s prostornom koordinatom y_{n+1} .

Pri rješavanju GPE pojavljuje se parcijalna derivacija po položaju koja će malo zakomplicirati cijelu situaciju. To nas vodi do sljedeće metode koja nam omogućuje rješavanje spomenute parcijalne derivacije. Naravno, radi se o eksplicitnoj metodi. U ovom slučaju koristimo prostornu mrežu koju podijelimo na jednake intervale. Da bismo izračunali drugu derivaciju u nekoj točki, moramo koristiti točku prije nje, nju samu i točku nakon. To se najbolje vidi iz priložene formule, koja slijedi iz Taylorovog razvoja u red

$$\frac{d^2 u_i}{dr^2} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta r^2} \quad (4.5)$$

pri čemu je Δr prostorni korak, a u_i vrijednost funkcije u i -toj točki. Drugim riječima, da bismo mogli računati derivaciju moramo poznavati vrijednost funkcije u svakoj od točaka na prostornoj mreži. Uz ovaj, imamo još jedan član s parcijalnom derivacijom i njega računamo po izrazu koji također slijedi iz Taylorovog razvoja u red

$$\frac{du_i}{dr} = \frac{-u_{i-1} + u_{i+1}}{2\Delta r} \quad (4.6)$$

Nakon što znamo osnovne metode i princip na kojem se temelje, možemo krenuti na njihovu kombinaciju i implementaciju u sam program, no prije toga treba razriješiti problem početnih uvjeta, rubnih uvjeta i imaginarne jedinice. Početni uvjeti su bitni za cijelu priču jer nam daju vrijednosti funkcije u svakoj točki na prostornoj mreži u početnom trenutku. Isto tako, bitni su zbog eksplicitne metode koja zahtijeva da su vrijednosti u svim točkama poznate. Najzgodniji

oblik funkcije koja će opisivati početni trenutak je Gaussijan oblika e^{-sr^2} , pri čemu je s proizvoljna pozitivna konstanta kojom reguliramo širinu navedene funkcije. Rubni uvjeti, s druge strane, odnose se na vrijednosti valne funkcije na rubu prostorne mreže. Naime, zahtijevamo da u zadnjoj točki vrijednost funkcije bude jednaka nuli. U početnoj točki gdje vrijedi $r = 0$ imamo drugi problem. Ako pogledamo GPE, vidimo da se uz izraz koji sadrži derivaciju prvog reda radijus javlja u nazivniku. Kako funkcija u $r = 0$ ima maksimalnu vrijednost, zahtijevamo da je spomenuta derivacija također jednaka nuli. Malo se matematički poigramo s izrazima u Laplasianu [4] i dobijemo da za tu točku vrijedi

$$\frac{d^2 u_i}{dr^2} = \frac{2(u_1 - u_0)}{\Delta r^2} \quad \text{za } r = 0 \quad (4.7)$$

Još je samo ostao problem imaginarne jedinice. To poprilično elegantno riješimo prijelazom na propagaciju u imaginarnom vremenu. Realizacija ovoga postigne se uvođenjem supstitucije gdje umjesto dt pišemo $-idt$. Na taj način se i pokрати a GPE postane

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \tilde{V}_{ext}(\tilde{r}) - \tilde{g} |\tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})|^2 \right] \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t}) \quad (4.8)$$

Ono što očekujemo dobiti je da sustav nakon svakog koraka teži prema osnovnom stanju i kada ga jednom postigne da se u njemu zadržava daljnjom propagacijom vremena. Da bi to bilo uspješno ostvareno, nakon svakog pomaka u vremenu moramo renormirati valnu funkciju na uvijek isti broj čestica. Drugim riječima, treba postići da vrijedi izraz

$$N = \int 4\pi |\tilde{\phi}|^2 \tilde{r}^2 d\tilde{r} \quad (4.9)$$

Ako na ovaj način normiramo funkciju i malo sredimo izraz za efektivnu jakost interakcije preko formula (3.3) i (3.9) dobijemo da vrijedi $\tilde{g} = 4\pi\tilde{a}$, a onda je konačan oblik GPE-a

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \tilde{V}_{ext}(\tilde{r}) - 4\pi\tilde{a} |\tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})|^2 \right] \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t}) \quad (4.10)$$

pri čemu je $\tilde{a}$ duljina raspršenja prikazana u jedinicama harmonijskog oscilatora.

Za normiranje koristimo trapeznu formulu za računanje integrala

$$\int_a^b f(r) dr = \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{i=1}^{N-1} f(idr) + \frac{1}{2} f(b) \right) dr \quad (4.11)$$

pri čemu vrijedi $N = (b - a)/dr$. Dakle, sumiramo vrijednosti funkcije u svakoj od točaka koje dobijemo pomičući se po prostornoj mreži za prostorni korak dr i na kraju tome pridodamo polovinu zbroja vrijednosti funkcije u rubnim točkama intervala, te sve pomnožimo prostornim korakom. Unutar programa, računanje integrala provodi se nakon svakog koraka i zatim slijedi normiranje. Implementacija normiranja najbolje se može vidjeti iz priloženog pseudokoda

//početak normiranja

vrijednost r-a postavlja se na nulu

vrijednost integrala postavlja se na polovinu zbroja vrijednosti funkcije u rubovima intervala

for (brojač = 1; brojač < ukupni broj točaka; brojač ++)

{vrijednost r-a povećamo za dr

vrijednost integrala povećamo za vrijednost funkcije u novoj točki }

vrijednost integrala množimo prostornim korakom

if (vrijednost integrala != zadani broj čestica)

dijelimo broj čestica vrijednošću integrala, korjenujemo te spremimo u varijablu (alfa)

for (brojač = 0; brojač ≤ ukupni broj točaka; brojač ++)

sve vrijednosti funkcije množimo varijablom alfa

//kraj normiranja

Nakon što postavimo početne uvjete i normiramo funkciju, prelazimo na RK4 metodu. Da bi se bolje razumio njen princip rada pogledajmo slijedeći pseudokod

//početak RK4 metode

tražena i pomoćna funkcija prethodno su deklarirani kao nizovi

for (brojač = 1; brojač ≤ ukupni broj vremenskih trenutaka; brojač++)

{vrijednost r-a postavlja se na nulu

vrijednost tražene funkcije u zadnjoj točki intervala postavlja se na nulu

vrijednost pomoćne funkcije u zadnjoj točki intervala postavlja se na nulu

for (brojač = 0; brojač < ukupni broj točaka; brojač ++)

{poziva se funkcija koja računa nagib pravca za trenutnu točku u trenutku t

vrijednost nagiba sprema se u varijablu (sk)

računa se vrijednost pomoćne funkcije za trenutnu točku

r povećamo za dr}

vrijednost r-a postavimo na nulu

for (brojač = 0; brojač < ukupni broj točaka; brojač ++)

{poziva se funkcija koja računa nagib pravca za trenutnu točku u trenutku t+dt/2

vrijednost nagiba dodaje se varijabli sk

računa se vrijednost pomoćne funkcije za trenutnu točku

r povećamo za dr}

vrijednost r-a postavimo na nulu

for (brojač = 0; brojač < ukupni broj točaka; brojač ++)

{poziva se funkcija koja računa nagib pravca za trenutnu točku u trenutku t

vrijednost nagiba sprema se u varijablu (sk)

računa se vrijednost pomoćne funkcije za trenutnu točku

r povećamo za dr}

```
vrijednost r-a postavimo na nulu
vremenski trenutak t povećamo za vremenski korak dt
for (brojač = 0; brojač < ukupni broj točaka; brojač ++)  
    {poziva se funkcija koja računa nagib pravca za trenutnu točku u trenutku t  
    vrijednost nagiba sprema se u varijablu (sk)  
    računa se vrijednost tražene funkcije za trenutnu točku  
    r povećamo za dr}  
provedemo normiranje  
vrijednost r-a postavimo na nulu  
for (brojač = 0; brojač ≤ ukupni broj točaka; brojač ++)  
    upišemo r-ove i odgovarajuće vrijednosti tražene funkcije u datoteku  
}  
  
//kraj RK4 metode  
  
Još je korisno pokazati princip rada funkcije koja računa nagib pravca u svakoj od točaka  
prostorne mreže. Ona kao ulazne parametre prima vremenski trenutak, niz, varijablu r,  
vrijednost brojača i prostorni korak. Njen pseudokod vrlo je jednostavan.  
  
//tijelo funkcije za računanje nagiba pravca  
  
deklaracija varijabli (rez i laplasijan) u koje ćemo spremiti konačan rezultat odnosno vrijednosti  
derivacija  
if( vrijednost r-a != 0)  
    računamo laplasijan kombinacijom funkcija za računanje prve i druge derivacije  
else  
    laplasijan računamo preko funkcije za računanje derivacije u nuli  
izračunamo varijablu rez po odgovarajućoj formuli  
return rez  
  
//kraj funkcije
```

5 Rezultati

U ovom ćemo poglavlju promotriti oblik tražene funkcije za različite vrijednosti početnih uvjeta i vidjeti na koji način svaki od njih utječe na konačno rješenje.

Kao prvo, pokazat ćemo funkcioniranje algoritma. Za odabranu jakost interakcije potrebno je odabrati vrijednost vremenskog i prostornog koraka, broja vremenskih koraka, kao i početne uvjete. Vremenski i prostorni korak ne određujemo direktno, nego ih automatski računamo nakon odabira broja vremenskih trenutaka i ukupnog broja točaka prostorne mreže. Formule preko kojih ih dobijemo su

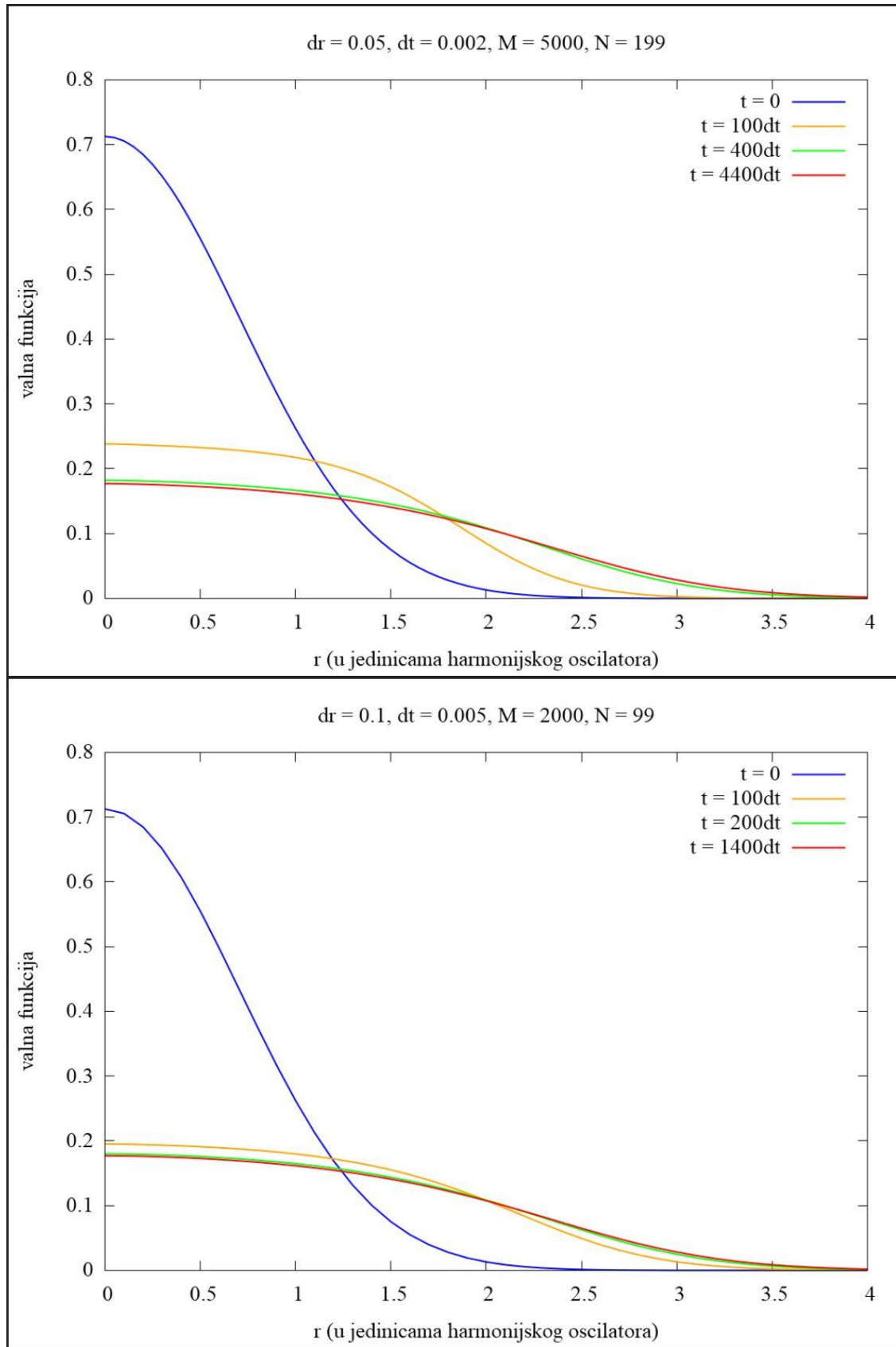
$$dr = \frac{L}{N+1} \quad dt = \frac{t(\text{ukupno})}{M} \quad (5.1)$$

pri čemu je L duljina prostorne mreže, $N+1$ je ukupan broj točaka u prostoru, a M je ukupan broj vremenskih trenutaka. Da bi program ispravno funkcionirao nužno je da bude zadovoljen uvjet

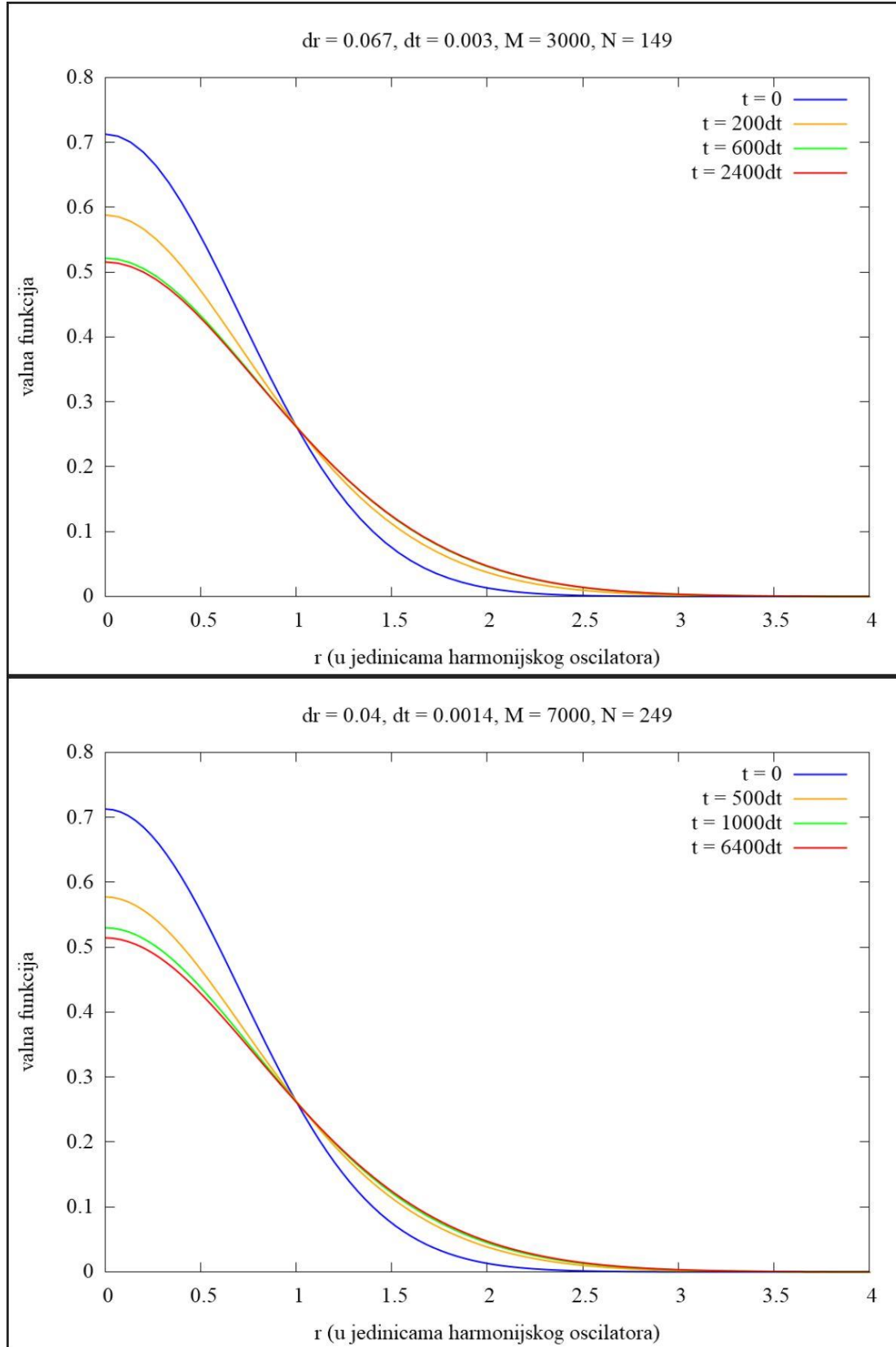
$$dr^2 \geq dt \quad (5.2)$$

Osim uvjeta (5.2), važno je da ukupno vrijeme i duljina prostorne mreže budu dovoljno veliki da funkcija može iskonvergirati. Ukoliko su ovi zahtjevi ispunjeni, konačan oblik valne funkcije bit će osnovno stanje koje ne ovisi o iznosu vremenskog i prostornog koraka, kao ni o broju vremenskih trenutaka, *slika 5, slika 6*. Treba napomenuti da su na svim grafovima vrijednosti valne funkcije crtane tako da su prethodno pomnožene faktorom $1/\sqrt{N}$ da bi se lakše mogli uspoređivati rezultati s različitim brojem čestica, ali i s onima iz literature [5]. Isto tako, radijus r prikazan je u jedinicama harmonijskog oscilatora, a valna funkcija je bezdimenzionalna. Vidimo da, neovisno o iznosu vremenskog i prostornog koraka, funkcija iskonvergira u osnovno stanje nakon dovoljno vremena. Širina Gaussijana postavljena je na jedinicu u sva četiri slučaja, a broj čestica iznosi 1000. Kod odbojnih interakcija umnžak $N|\tilde{a}|$ iznosi 10, a kod privlačnih 0.3. Sada smo pokazali da funkcija iskonvergira neovisno o vremenskim i prostornim parametrima. U svim ostalim slučajevima, zbog što veće preciznosti, broj točaka u prostoru iznositi će 300, a broj vremenskih trenutaka 10000. Iz toga slijedi da je $dr = 0.03$, a $dt = 0.001$. Trenutak u kojem prikazujemo osnovno stanje uznosi $9980dt$, što se pokazalo dovoljnim za sve slučajeve

Pošto smo se uvjerali da kod funkcionira ispravno, možemo prijeći na diskusiju ostalih parametara o kojima bi moglo ovisiti konačno rješenje. Pokazat ćemo propagaciju početnog Gaussijana u vremenu do osnovnog stanja. Zatim ćemo promotriti ovisnost valne funkcije o interakcijama koje u sustavu vladaju, te proučiti važnost faktora $N|\tilde{a}|$. Isto tako, treba analizirati utječe li širina početne funkcije na oblik konačnog rješenja. Kao posljednji slučaj bit će prikazan kolaps koji se javlja kada određeni uvjeti nisu zadovoljeni i kada GPE prestane vrijediti.

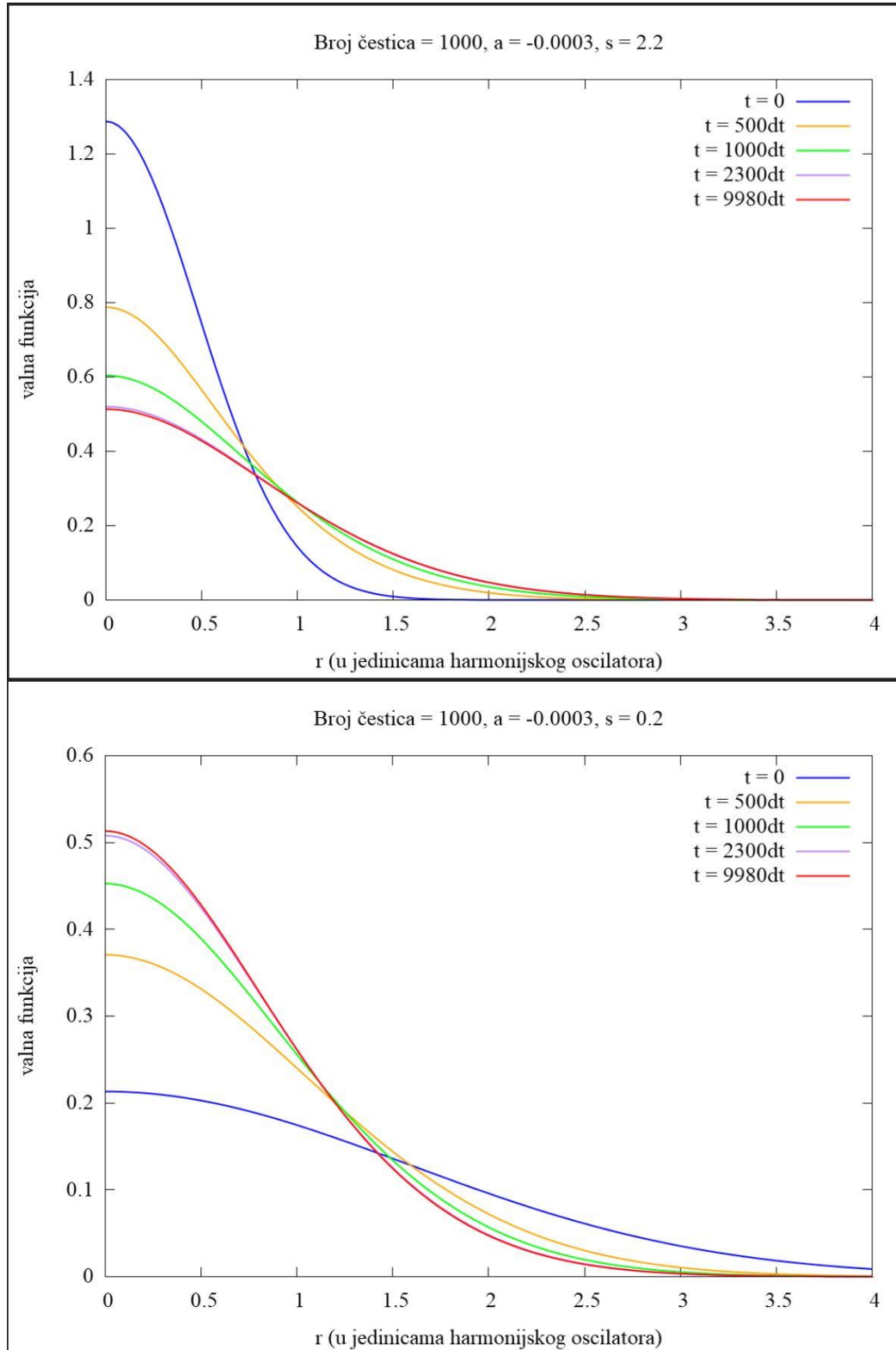


Slika 5. Prikaz vremenske propagacije valne funkcije za različite vrijednosti vremenskih i prostornih koraka za odbojne interakcije među bozonima



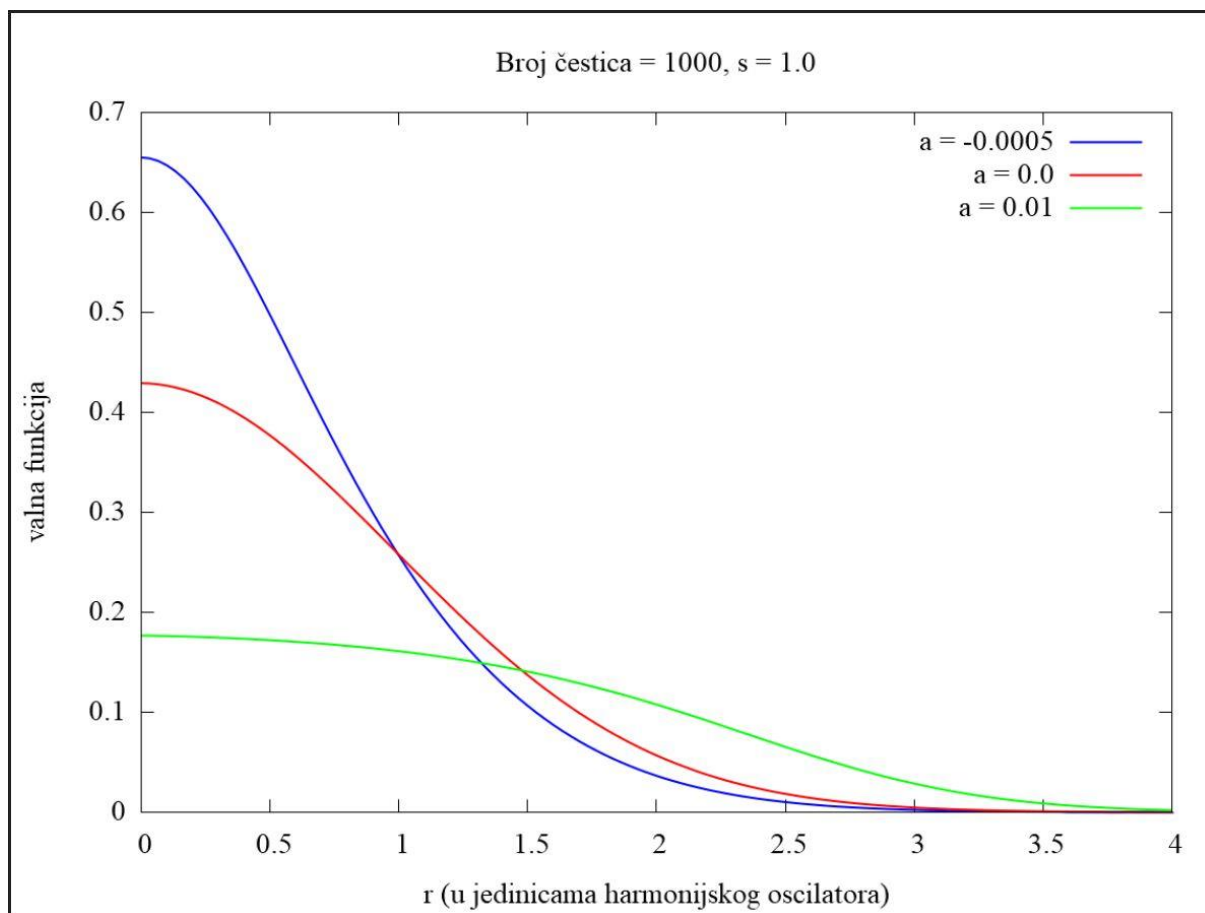
Slika 6. Prikaz vremenske propagacije valne funkcije za različite vrijednosti vremenskih i prostornih koraka za privlačne interakcije među bozonima

Kao što je već spomenuto, na prethodnim grafovima širina početne funkcije postavljena je na jedinicu. Na idućim grafovima prikazana je vremenska evolucija valne funkcije uz različite vrijednosti širine Gaussijana, *slika 7*. Vidimo da, unatoč značajnoj razlici u izgledu početne funkcije, osnovno stanje poprimi isti oblik.



Slika 7. Vremenska evolucija valne funkcije ovisno o širini Gaussijana

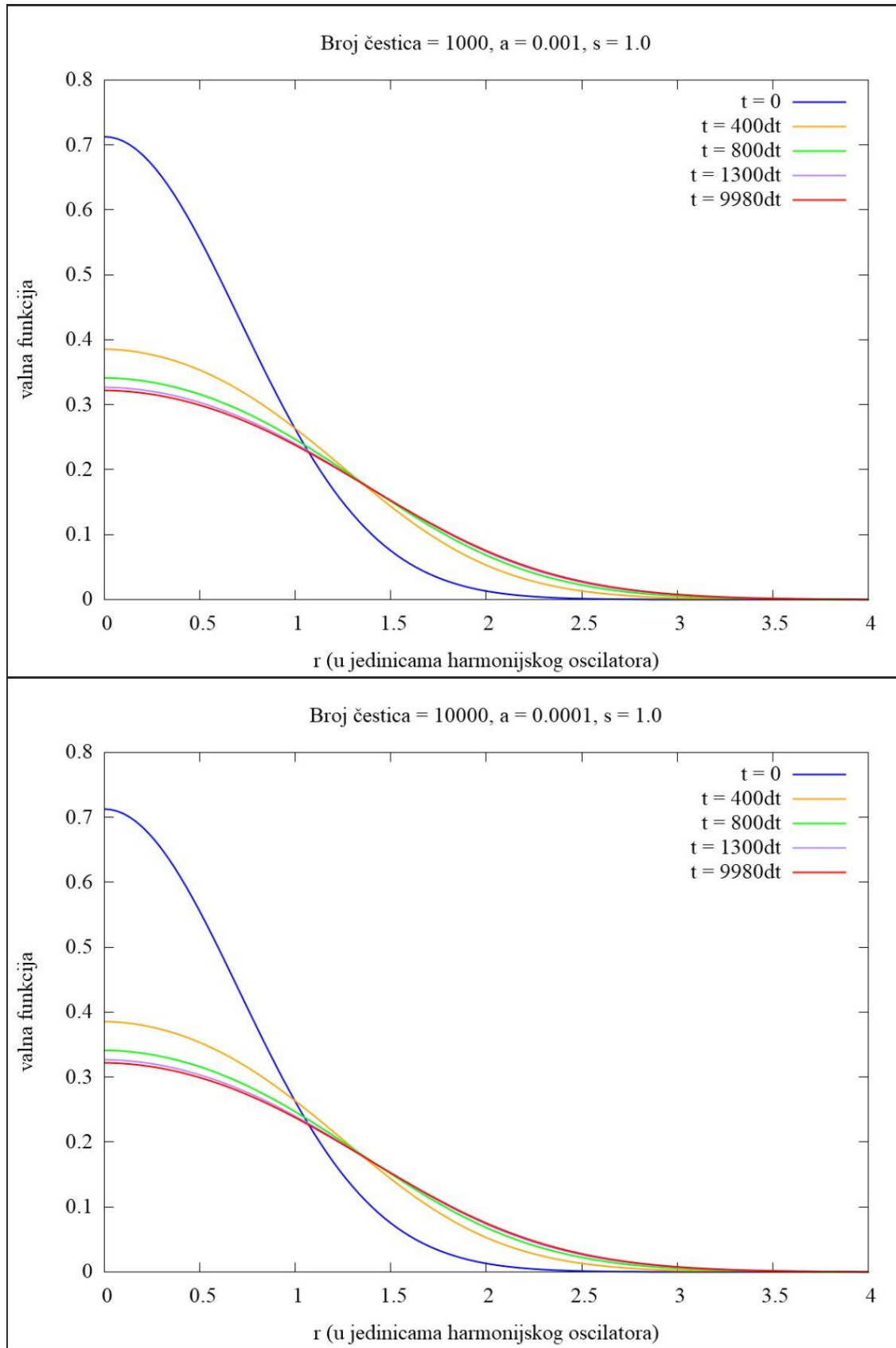
Sada promotrimo ovisnost osnovnog stanja o interakcijama među atomima u sustavu, *slika 8*. Broj čestica opet je postavljen na 1000, a vrijednosti funkcije crtaju se u istom trenutku, ali za tri različite vrijednosti duljine raspršenja. Krenimo od slučaja u kojem je vrijednost spomenutog parametra jednaka nuli. To povlači da i efektivna jakost interakcije iščezava, odnosno, naš sustav sada možemo gledati kao idealni plin.



Slika 8. Ovisnost konačnog oblika valne funkcije o duljini raspršenja

Povećanjem duljine raspršenja raste i $\tilde{g}$, što znači da su sile među atomima odbojne i to rezultira „razmazivanjem“ čestica po prostoru jer ne mogu biti blizu jedna drugoj. Amplituda je manja nego kada interakcija nema. S druge strane, za negativne duljine raspršenja, postižu se privlačne interakcije. Vidimo da se amplituda poveća u odnosu na idealni plin, a sama funkcija se sužava. Pogledamo li vrijednost umnoška $N|\tilde{a}|$ za svaki od ova tri slučaja i usporedimo s literaturom [5], uočavamo da se vrijednosti funkcija poprilično podudaraju. Dakle, zaključak ove priče je da se u prisustvu privlačnih sila čestice nagomilavaju bliže osi ordinata, a u prisustvu odbojnih sila se rašire po prostoru. Navedeno ponašanje je očekivano jer je ovaj slučaj već kratko analiziran u trećem poglavlju.

Spomenuli smo već par puta umnožak $N|\tilde{a}|$, a u nadolazećem primjeru ćemo vidjeti njegovu važnost. Naime, bez obzira na broj čestica i duljinu raspršenja, funkcija zadržava isti oblik dok god je umnožak ova dva faktora stalan, *slika 9*.



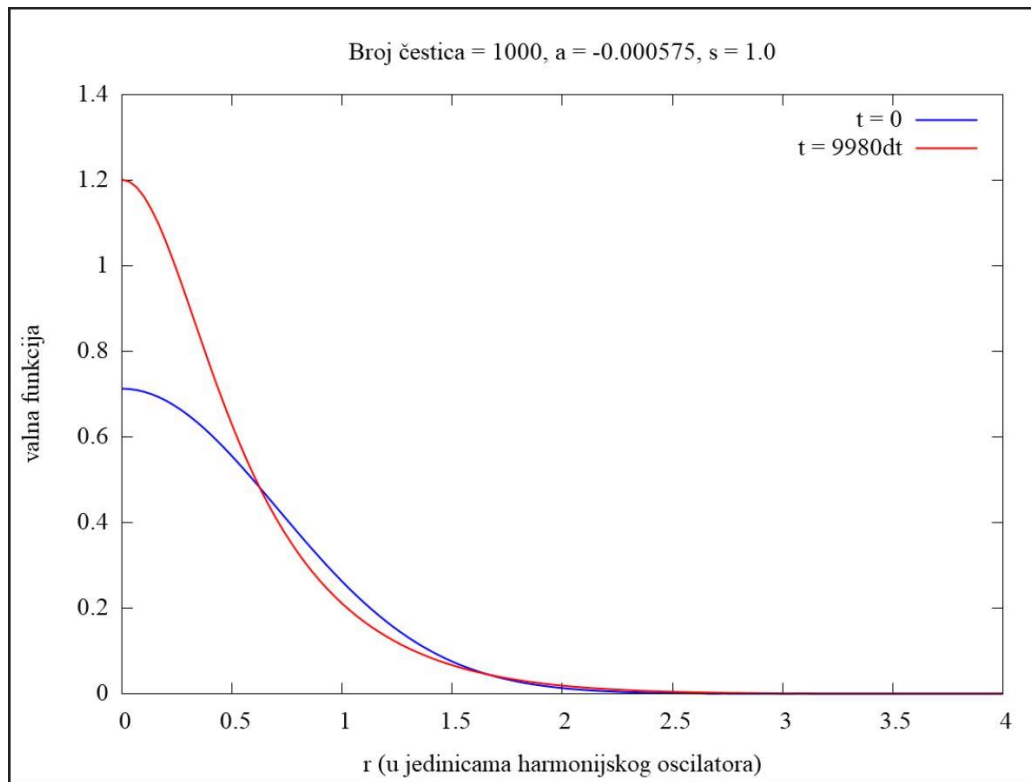
Slika 9. Prikaz valne funkcije u dva slučaja gdje su različiti broj čestica i duljina raspršenja, ali im je umnožak isti

Razlog ovakvom ponašanju leži u univerzalnosti Gross – Pitaevskii jednadžbe koji slijedi iz oblika potencijalne energije. Naime, sjetimo li se izgleda jednadžbe, jedina dva faktora koja se mogu mijenjati su vanjski potencijal i potencijalna energija koja je sadržana u članu

$$4\pi N\tilde{a}|\tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t})|^2 \tilde{\phi}(\tilde{r}, \tilde{t}) \quad (5.3)$$

ukoliko normiramo funkciju na jedinicu. Dakle, dok god se faktor $N|\tilde{a}|$ ne mijenja, potencijalna energija također zadržava konstantnu vrijednost. Kako ne mijenjamo ni vanjski potencijal, onda i valna funkcija ostaje ista.

Još je ostalo samo analizirati jedan poseban slučaj u uvjetima privlačnih interakcija. Riječ je o kolapsu jednadžbe koji se javlja kada vrijednost umnoška broja čestica i apsolutne vrijednosti duljine raspršenja poraste iznad 0.575 [5], *slika 10*. U prisustvu privlačnih interakcija, bozoni se nagomilavaju u središtu plina. Tome se suprostavlja kinetička energija i na taj način drži kondenzat stabilnim. Ukoliko se gustoća bozona u središtu poveća iznad kritične vrijednosti, kinetička energija više nije dovoljna za održavanje stabilnosti sustava i dogodi se kolaps. Uz to, povećanjem gore navedenog umnoška iznad kritične vrijednosti, izgubi se lokalni minimum energije. Obzirom da su svi kondenzati prikazani u ovom radu metastabilni, a metastabilno stanje odgovara lokalnom minimumu energije, onda GPE više nema rješenja. Ova pojava u programu manifestira se kao nemogućnost prikaza iskonvergiranog osnovnog stanja. Oblik valne funkcije onda teži ka delta funkciji.



Slika 10. Prikaz konačnog oblika funkcije za granični slučaj $N_{cr}|\tilde{a}| = 0.575$, nakon čega se dogodi kolaps

6 Zaključak

Za postizanje fenomena poznatog pod nazivom Bose – Einsteinova kondenzacija bili su potrebni deseci godina otkad je prvi put utvrđeno njegovo postojanje. Vidjeli smo cijeli spektar razloga zašto je toliko potrajalo. Općenita priroda tvari koja ne dozvoljava postizanje BEC-a u uvjetima ravnoteže prouzročila je najveće poteškoće i time dala znanstvenicima cijelog svijeta u zadatak smisliti što uspješnije metode da bi ih savladali. No, nije dovoljno samo postići željeni fenomen. Treba imati i model kojim ćemo ga opisati i na taj način predviđati moguće ishode eksperimenata. Tu u igru ulazi jednadžba Gross – Pitaevskii, koja je u ovom radu za jednokomponentni slučaj kondenzata numerički riješena u programskom jeziku C. Pri rješavanju smo koristili dvije metode, RK4 i eksplicitna, od kojih svaka rješava svoj dio jednadžbe. Uz to, trebali smo prijeći u jedinice harmonijskog oscilatora da izbjegnemo ekstremne vrijednosti određenih konstanti. Isto tako, umjesto običnog vremena, sve se odvija u imaginarnom. U rezultatima smo pokazali da u režimu u kojem je GPE valjana rezultati ovise samo o umnošku broja čestica i omjera duljine raspršenja i duljine harmoničkog oscilatora. Unatoč tome što GPE jako dobro opisuje naš problem, njeno je korištenje ograničeno na situacije vrlo rijetkih plinova, za koje je primjenjiva teorija srednjeg polja. U ovom smo radu pokazali jednu situaciju u kojoj dolazimo do trenutka kada metoda više nije primjenjiva. Radi se o kolapsu BEC za slučaj privlačne interakcija kada broj čestica ili apsolutna vrijednost duljine raspršenja postanu preveliki tako da uvjet $N|\tilde{a}| \leq 0.575$ više ne vrijedi. Naime, broj čestica poraste iznad kritične vrijednosti i iščezne lokalni minimum energije, a kao posljedica toga GPE više nema rješenja.

Od prvog uspjeha u postizanju Bose – Einsteinovog kondenzata, ostvaren je veliki napredak. U početku se radilo samo s atomima natrija (^{23}Na), rubidija (^{87}Rb) i litija (^7Li), a do danas je isto postignuto sa cijelim nizom različitih elemenata kao što su ^{39}K , ^{41}K , ^{52}Cr , ^{85}Rb , ^{133}Cs ,... Isto tako, tehnike hlađenja su također usavršene. Isparavanje se provodi u optičkoj zamci formiranoj od laserskih zraka ugljikovog dioksida, koja bozone drži gušćima i stoga se kondenzacija brže postigne. Uz to, razvijaju se nove tehnike hlađenja kojima bi se omogućilo formiranje stabilnih molekula unutar kondenzata sastavljenog od atoma. Koristili bi se sudari atoma koji bi zatim pomoću lasera bili stimulirani u molekule. To bi omogućilo provođenje puno složenijih eksperimenata, kao i istraživanje brojnih fizikalnih pojava.

7 Literatura

- [1] Eric Cornell, *Very Cold Indeed: The Nanokelvin Physics of Bose – Einstein Condensation*, Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology
- [2] Wolfgang Ketterle, URL: <https://www.britannica.com/biography/Wolfgang-Ketterle>
- [3] Robert William Pattinson, *Two-Component Bose-Einstein condensates: Equilibria and dynamics at zero temperature and beyond*, Newcastle University, June 2014.
- [4] *Finite differences in polar coordinates*, URL: <https://homepages.see.leeds.ac.uk/~amt6xw/Distance%20Learning/CFD5030/node10.html>
- [5] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii, Sandro Stringari, *Theory of Bose – Einstein condensation in trapped gases*, Dipartimento di Fisica, Università di Trento and Istituto Nazionale per la Fisica della Materia, I-38050 Povo, Italy
- [6] Sidney Perkowitz, *Bose – Einstein condensate*, URL: <https://www.britannica.com/science/Bose-Einstein-condensate>
- [7] *Bose – Einstein condensate – Coldest Place in the Universe*, URL: <https://www.youtube.com/watch?v=1RpLOKqTcSk>
- [8] James R. Anglin, Wolfgang Ketterle, *Bose – Einstein condensation of atomic gases*, Research Laboratory for Electronics, MIT – Harvard Center for Ultracold Atoms, and Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts 02139, USA
- [9] C. J. Pethick, H. Smith, *Bose – Einstein condensation in dilute gases*, second edition, Cambridge university press

8 Dodatak

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define L 10
#define N 299
#define M 10000
#define s 1.0
#define sc_len -0.0003
#define br_cest 1000.0
#define e 2.7182818285
#define pi 3.141592654

//funkcija za računanje prve derivacije//
double eksplicitna_prva_der(double u[], int i, double dr)
{
    double der;
    der = (-1.*u[i - 1] + u[i + 1]) / (2.*dr);
    return der;
}

//funkcija za računanje druge derivacije//
double eksplicitna_druga_der(double u[], int i, double dr)
{
    double der;
    der = (u[i - 1] - 2. * u[i] + u[i + 1]) / (dr*dr);
    return der;
}

//funkcija za računanje laplasijana u nuli//
double ekspl_nula(double u[], double dr)
{
    double der;
    der = (6.*(u[1] - u[0])) / (dr*dr);
    return der;
}

//funkcija za računanje nagiba pravca//
double funkcija_k(double t, double niz[], double r, int i, double delta_r)
{
    double rez, laplasijan;

    if (r != 0.000000)
        laplasijan = eksplicitna_druga_der(niz, i, delta_r) + (2. /
r)*eksplicitna_prva_der(niz, i, delta_r);

    else
        laplasijan = ekspl_nula(niz, delta_r);

    rez = (0.5*laplasijan - ((r*r) / 2.)*niz[i] - 4.0*pi*sc_len*pow(fabs(niz[i]),
2)*niz[i]);

    return rez;
}

//početna funkcija//
double u_pocetni(double r)
{
    return exp(-s*r*r);
}

int main(void)
```

```
{
    FILE *tok;
    tok = fopen("GPE.txt", "w");

    double r = 0.000000, dr, t = 0.0, tn = 9.5, dt, k[N + 2], sk[N + 2], u[N + 2], yp[N
+ 2], alfa, integral;
    int i, j;

    dr = (double)L / (double)(N + 1);
    dt = (tn - t) / (double)M;

    //rubni uvjet//
    u[N + 1] = 0.0;

    //postavljanje početnih vrijednosti funkcije//
    for (i = 0; i < N + 1; i++)
    {
        u[i] = u_pocetni(r);
        r = r + dr;
    }

    // početak normiranja//
    r = 0.000000;
    integral = (0.5)*(fabs(u[0])*fabs(u[0]) * 0 + fabs(u[N + 1])*fabs(u[N + 1]) * 100 *
4 * pi);

    for (i = 1; i < N + 1; i++)
    {
        r = r + dr;
        integral += fabs(u[i])*fabs(u[i])*r*r * 4 * pi;
    }
    integral = dr*integral;
    if (integral != br_cest)
    {
        alfa = br_cest / integral;
        alfa = sqrt(alfa);
    }

    for (i = 0; i <= N + 1; i++)
    {
        u[i] = u[i] * alfa;
    }
    //kraj normiranja//

    //ispis u datoteku//
    r = 0.000000;
    for (i = 0; i <= N + 1; i++)
    {
        fprintf(tok, "%lf\t%lf\n", r, u[i]);
        r += dr;
    }

    //početak RK4 metode//
    for (j = 1; j <= M; j++)
    {
        r = 0.000000;
        u[N + 1] = 0.0;
        yp[N + 1] = 0.0;

        for (i = 0; i < N + 1; i++)
        {
            k[i] = funkcija_k(t, u, r, i, dr);
            sk[i] = k[i];
            yp[i] = u[i] + k[i] * (dt / 2.);
            r += dr;
        }
    }
}
```

```

    r = 0.000000;
    for (i = 0; i < N + 1; i++)
    {
        k[i] = funkcija_k(t + dt / 2., yp, r, i, dr);
        sk[i] += 2.*k[i];
        yp[i] = u[i] + k[i] * (dt / 2.);
        r += dr;
    }

    r = 0.000000;
    for (i = 0; i < N + 1; i++)
    {
        k[i] = funkcija_k(t + dt / 2., yp, r, i, dr);
        sk[i] += 2.*k[i];
        yp[i] = u[i] + k[i] * dt;
        r += dr;
    }

    t = t + dt;
    r = 0.000000;
    for (i = 0; i < N + 1; i++)
    {
        k[i] = funkcija_k(t, yp, r, i, dr);
        sk[i] += k[i];
        u[i] = u[i] + sk[i] * (dt / 6.);
        r += dr;
    }

    fprintf(tok, "\n\n");

    //pocetak normiranja//
    r = 0.000000;
    integral = (0.5)*(fabs(u[0])*fabs(u[0]) * 0 + fabs(u[N + 1])*fabs(u[N + 1]) *
100 * 4 * pi);
    for (i = 1; i < N + 1; i++)
    {
        r = r + dr;
        integral += fabs(u[i])*fabs(u[i])*r*r * 4 * pi;
    }
    integral = dr*integral;
    if (integral != br_cest)
    {
        alfa = br_cest / integral;
        alfa = sqrt(alfa);
    }

    for (i = 0; i <= N + 1; i++)
    {
        u[i] = u[i] * alfa;
    }
    //kraj normiranja//

    //ispis u datoteku//
    r = 0.000000;
    for (i = 0; i <= N + 1; i++)
    {
        fprintf(tok, "%lf\t%.30lf\n", r, u[i]);
        r += dr;
    }
}
//kraj RK4 metode//

fclose(tok);
return 0;
}

```