

A Splitting Finite Difference Method for Simulating the Dynamics of Mixture of Bose-Fermi Gas at Zero Temperature

Zhihong Zhang, Wen Gao, Weimin Wang

School of Statistics and Mathematics, Yunnan University of Finance and Economics, Kunming Yunnan
Email: 593540283@qq.com

Received: Apr. 11th, 2018; accepted: Apr. 21st, 2018; published: Apr. 28th, 2018

Abstract

In this paper, based on the numerical solutions of coupled Gross-Pitaevskii equations, we investigate the dynamics of Bose-Fermi mixtures at zero temperature. Firstly, to simplify the numerical computation, we reformulate the equations into three-dimensional dimensionless ones, which are also further reduced to two-dimensional ones and one-dimensional ones. Secondly, to compute the numerical solutions, we present a high-efficiency method for the equations, the time-splitting difference method. We have proved that the method is unconditionally stable and keeps well the related conservation laws. Lastly we apply the method into studying the dynamics of Bose-Fermi mixtures.

Keywords

Coupled Gross-Pitaevskii Equations, Bose-Fermi Mixtures, Numerical Simulation, Time-Splitting Finite Difference Method

模拟Bose-Fermi混合气体在绝对零度温度下动力学的一种时间分裂有限差分法

张志红, 高文, 王伟民

云南财经大学统计与数学学院, 云南 昆明
Email: 593540283@qq.com

收稿日期: 2018年4月11日; 录用日期: 2018年4月21日; 发布日期: 2018年4月28日

摘要

在耦合Gross-Pitaevskii方程组数值解的基础上, 我们探讨在绝对零度下Bose-Fermi混合物的动力学规

律。为了计算简便,我们首先把最初的耦合Gross-Pitaevskii方程组转化为无量纲形式方程组,然后把无量纲三维形式方程组简化成二维形式再进一步简化为一维形式,并证明了与耦合Gross-Pitaevskii方程组相关的守恒律——模量守恒以及能量守恒。其次,为了探讨Bose-Fermi混合物的动力学规律,我们提出了一种高效的数值方法——时间分裂差分法来求解耦合Gross-Pitaevskii方程组。并证明了该数值方法具有无条件稳定性以及保持耦合Gross-Pitaevskii方程组守恒律等优点。最后利用该方法来数值模拟Bose-Fermi混合物的动力学规律。

关键词

Gross-Pitaevskii方程组, Bose-Fermi混合气体, 数值模拟, 时间分裂有限差分法

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在绝对零度条件下, Bose-Fermi 混合气体最近受到了物理学界的大量关注, 这是因为在绝对零度条件下 Bose 气体表现出明显的性质, 而 Fermi 气体的性质却很难描述。最近的物理实验发现: 在绝对零度下, Bose 气体与 Fermi 气体可混合在一起。这种实验的最新发现也许为专家学者研究 Fermi 气体的性质创造了有利条件[1] [2] [3]。事实上, 在平均场理论下, 人们可以把 Bose 气体与 Fermi 气体分别用两个波函数来描述, 而这两个波函数分别满足相耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组[4] [5]。通过理论分析求出耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组的解, 可以为我们研究 Bose-Fermi 气体混合物的性质奠定基础, 也可间接得到 Fermi 气体的性质。

玻色-爱因斯坦凝聚在物理界的研究成果已经带动超冷退化量子费米气体领域的研究突飞猛进, 费米子气体是普通物质的基本构建板块, 它也必将受到实验的关注。最近的一个实验进展表明可利用超冷玻色子冷却混合费米子来创造一个堕落的费米子系统。试图吸收和冷却玻色子和费米子混合物的几个成功实验也被报道。量子简并气体首次实现了玻色⁷Li 原子和费米⁶Li 原子的混合[3] [6]。最近, 实验更多倾注于冷却不同原子元素的混合物, 即²³Na 和⁶Li [7]以及⁸⁷Rb 和⁴⁰K [8] [9] [10] [11]在超低温情况下的实验取得成功。这些超冷 Bose-Fermi 混合物直接提供了研究量子费米子气体的一种可能性, 并且也可将其视作用来生产退化单组自旋极化费米子气体[1] [12]的有效工具。

众多理论, 包括密度泛函理论、Bogoliubov 近似值理论以及 Hartree Fock 理论都曾被提出来研究 Bose-Fermi 混合物的基态性质。然而, 在零度条件下对这些 Bose-Fermi 混合物的理论研究最大程度上依赖于平均场理论。该理论非常成功的描述了玻色子冷凝物。在绝对零度的平均场模型中, 针对具有退化非超流体费米子气体的 Bose-Fermi 混合气体, 研究耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组[13] [14] [15] [16] [17]的数值解是探讨动力学规律的有效途径。

本文探讨在绝对零度下 Bose-Fermi 混合物的动力学规律。基于平均场理论, 玻色子和费米子的混合物满足耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组。因此求出耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的数值解至关重要。就我们所知, W. Bao 和 H. Wang [18] [19] [20]相继对玻色-爱因斯坦凝聚态动力学设计了高效的数值方法, 其计算结果达到高谱精度, 并且对旋转玻色-爱因斯坦凝聚态的地面、对称和中心涡流状态进行了研究。在 2007 年, 他们还对自旋 1 玻色-爱因斯坦凝聚态动力学采取了一种质量和磁化的保守和能量递减数值

方法进行计算[21]。在本文中，我们首先将 Gross-Pitaevskii 方程组无量纲化，接着将无量纲方程组三维形式转化到二维形式再到一维形式进行求解，使得计算简便，该方法具有省人力、省时间、节约成本等优点。同时在时间方向采取时间分裂法来求解耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组，该数值方法的主要思想是先将耦合 Gross-Pitaevskii 方程组分成两部分来求解：一部分是线性微分方程组，另一部分是非线性微分方程组。线性微分方程组在空间上可利用中心差分法来离散，时间方向上利用 Crank-Nicolson 方法来离散，非线性微分方程组则可直接求解。这不仅使计算过程简便，而且计算结果具有无条件稳定性和守恒性等优点，还可通过数值有效模拟 Bose-Fermi 混合物的动力学规律。

本文的结构安排如下：首先，为了数值计算方便，在第二节中，我们把最初耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组化为无量纲形式，接着把该无量纲的三维形式方程组简化成二维形式，最后再把二维形式简化一维形式。在第三节中，以一维为例，我们在理论上推导证明了与耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组相关的守恒律：模量守恒以及能量守恒。在第四节中，为了计算 Bose-Fermi 混合物的动力学规律，我们提出了一种有效的的时间分裂差分法来求解耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组。该数值方法具有无条件稳定性以及保持耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的守恒律等优点。在第五节中，我们利用该方法来数值模拟 Bose-Fermi 混合物的动力学规律。并通过数值实验证明了该数值方法具有无条件稳定性以及保持耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的守恒律等优点。第六节给出本文的总结。

2. 耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组

Bose-Fermi 混合气体在绝对零度下的动力学模型是下面相耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组[8] [5] [13]:

$$\begin{cases} ih \frac{\partial}{\partial t} \varphi_B = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_B} + V_B(X) + g_{BB} |\varphi_B|^2 + g_{BF} |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} ih \frac{\partial}{\partial t} \varphi_F = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{6m_F} + V_F(X) + g_{BF} |\varphi_B|^2 + A |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \end{cases} \quad (2.2)$$

这里 $X \in R^3$ 。其中 \hbar 是普朗克常数[22]， $A = \frac{\hbar^2 (6\pi^2)^{2/3}}{2m_F}$ ， $g_{BB} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B}$ 是玻色子与玻色子之间的相互作用力， $g_{BF} = \frac{2\pi\hbar^2 a_{BF}}{m_R}$ 是玻色子与费米子之间的相互作用力，并且

$$m_R = \frac{m_B m_F}{m_B + m_F}; \quad V_F(X) = \frac{1}{2} m_F \omega_F^2 (r_x^2 x^2 + r_y^2 y^2 + r_z^2 z^2);$$

$$V_B(X) = \frac{1}{2} m_B \omega_B^2 (r_x^2 x^2 + r_y^2 y^2 + r_z^2 z^2).$$

而 Bose-Fermi 混合气体具有能量形式为:

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2 |\nabla \varphi_B|^2}{2m_B} + V_B |\varphi_B|^2 + \frac{1}{2} g_{BB} |\varphi_B|^4 \right) dx$$

$$+ \int \left(\frac{\hbar^2 |\nabla \varphi_F|^2}{6m_F} + V_F |\varphi_F|^2 + \frac{3}{5} A |\varphi_F|^{10/3} \right) dx \quad (2.3)$$

$$+ g_{BF} \int |\varphi_F|^2 |\varphi_B|^2 dx$$

2.1. 三维无量纲耦合 Gross-Pitaevskii 方程组

首先我们把方程组(2.1)~(2.2)化为无量纲[23]形式的 Gross-Pitaevskii 方程组，接下来我们把三维的无

量纲方程组依次降低为二维形式以及一维形式的方程组。为此，引入参数：

$$\tilde{t} = w_B t, \tilde{X} = \frac{X}{b_0}, \tilde{\varphi}_B(\tilde{X}, \tilde{t}) = \frac{b_0^{3/2}}{\sqrt{N_F}} \varphi_B(X, t), \tilde{\varphi}_F(\tilde{X}, \tilde{t}) = \frac{b_0^{3/2}}{\sqrt{N_F}} \varphi_F(X, t). \quad (2.4)$$

然后，再将上式代入方程组(2.1)~(2.2)中，对(2.1)式两边同乘 $\frac{1}{m_B w_B^2 (N_B b_0)^{1/2}}$ ，方程(2.2)两边同乘

$\frac{1}{m_B w_B^2 (N_F b_0)^{1/2}}$ ，然后消除所有的“~”符号，我们得到下列三维无量纲耦合 Gross-Pitaevskii 方程组：

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_B = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_B(X) + \beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} N_F |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \quad (2.5)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_F = \left(-\frac{\nabla^2}{6\lambda} + V_F(X) + \beta_{12} N_B |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \quad (2.6)$$

这里 $X = (x, y, z) \in R^3$ ，其中：

$$V_B(X) = \frac{1}{2}(r_x^2 x^2 + r_y^2 y^2 + r_z^2 z^2), \quad V_F(X) = \frac{\lambda}{2}(r_x^2 x^2 + r_y^2 y^2 + r_z^2 z^2);$$

$$\beta_{11} = \frac{4\pi a_{BB} N_B}{b_0}, \quad \beta_{12} = \frac{2\pi a_{BF}(\lambda+1)}{b_0 \lambda}, \quad \lambda = \frac{m_F}{m_B}, \quad \beta_{22} = \frac{(6\pi^2 N_F)^{2/3}}{2\lambda}.$$

将 φ_B 和 φ_F 两个波类函数规范为：

$$\int |\varphi_B(x, t)|^2 dx = 1, \int |\varphi_F(x, t)|^2 dx = 1 \quad (2.7)$$

每个粒子的无量纲能量(总的粒子数 $N = N_B + N_F$)为：

$$E = E(\varphi_B, \varphi_F) = \int \left(\frac{|\nabla \varphi_B|^2}{2} + V_B |\varphi_B|^2 + \frac{1}{2} \beta_{11} |\varphi_B|^4 \right) dx \cdot N_B / N$$

$$+ \int \left(\frac{|\nabla \varphi_F|^2}{6\lambda} + V_F |\varphi_F|^2 + \frac{3}{5} \beta_{22} |\varphi_F|^{10/3} \right) dx \cdot N_F / N \quad (2.8)$$

$$+ \beta_{12} \int |\varphi_F|^2 |\varphi_B|^2 dx \cdot (N_B N_F) / N$$

2.2. 将三维无量纲方程式降低为二维无量纲方程式

三维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组(2.5)~(2.6)可以近似地转化为二维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组。假设 $\varphi_k(x, y, z, t) = \varphi_k(x, y, t) \phi_{ho}(z) (k = B, F)$ ，其中 $\phi_{ho}(z) = \frac{r_z^{1/4}}{\pi^{1/4}} e^{-r_z z^2/2}$ ，我们可以得到下述的二维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组：

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_B = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_B(X) + \beta_{11}^{2d} |\varphi_B|^2 + \beta_{12}^{2d} N_F |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \quad (2.9)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_F = \left(-\frac{\nabla^2}{6\lambda} + V_F(X) + \beta_{12}^{2d} N_B |\varphi_B|^2 + \beta_{22}^{2d} |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \quad (2.10)$$

这里 $X = (x, y) \in R^2$ ，其中 $\beta_{jk}^{2d} \approx \sqrt{\frac{r_z}{2\pi}} \beta_{jk} (j=1, k=1, 2)$ ， $\beta_{22}^{2d} \approx \frac{\sqrt{3} r_z^{1/3}}{\sqrt{5\pi}} \beta_{22}$ 。

2.3. 将二维无量纲方程依次降低为一维无量纲方程

二维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组(2.5)~(2.6)也可以近似地转化为为一维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组。

假设 $\varphi_K(x, y, z, t) = \varphi_K(x, t)\phi_{ho}(y, z) (k = B, F)$, 其中 $\phi_{ho}(y, z) = \frac{(r_y r_z)^{1/4}}{\pi^{1/2}} e^{-(r_y y^2 + r_z z^2)/2}$, 我们可以得到下述一维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_B = \left(-\frac{\partial^2}{2\partial x^2} + V_B(X) + \beta_{11}^{1d} |\varphi_B|^2 + \beta_{12}^{1d} N_F |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \tag{2.11}$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_F = \left(-\frac{\partial^2}{6\lambda \partial x^2} + V_F(X) + \beta_{12}^{1d} N_B |\varphi_B|^2 + \beta_{22}^{1d} |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \tag{2.12}$$

这里 $X \in \mathbb{R}$, 其中 $\beta_{jk}^{1d} \approx \sqrt{\frac{r_y r_z}{2\pi}} \beta_{jk} (j=1, k=1, 2)$, $\beta_{22}^{1d} \approx \frac{3(r_y r_z)^{1/3}}{5\pi^{2/3}} \beta_{22}$ 。

因为耦合 Gross-Pitaevskii 方程组(2.5)~(2.6)、(2.9)~(2.10)、(2.11)~(2.12)都很相似, 我们用一个单独的方程组来表示它们:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_B = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_B(X) + \beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} N_F |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \tag{2.13}$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_F = \left(-\frac{\nabla^2}{6\lambda} + V_F(X) + \beta_{12} N_B |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \tag{2.14}$$

这里 $X \in \mathbb{R}^3$ 。

3. 与 Gross-Pitaevskii 方程组(2.13)~(2.14)相关的守恒律

在本节里, 我们证明与耦合 Gross-Pitaevskii 方程组相关的守恒律: 模量守恒以及能量守恒。这里仅讨论一维形式的 Gross-Pitaevskii 方程组(2.13)~(2.14), 其余维方程组模型守恒律推导证明类似。

考虑一维情形:

$$i \partial_t \varphi_B = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B + V_B(x) \varphi_B + \left(\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2 \right) \varphi_B \tag{3.1}$$

$$i \partial_t \varphi_F = -\frac{1}{6\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F + V_F(x) \varphi_F + \left(\beta_{21} |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3} \right) \varphi_F \tag{3.2}$$

这里 $\varphi_B = \varphi_B(x, t), \varphi_F = \varphi_F(x, t), \lambda = 0.8573$, 通常方程组(3.1)~(3.2)的边界条件为: $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} |\varphi_B(x, t)|^2 = 0, \lim_{|x| \rightarrow +\infty} |\varphi_F(x, t)|^2 = 0$ 。

接下来讨论与耦合 Gross-Pitaevskii 方程组(3.1)~(3.2)有相关的守恒律: 模量守恒以及能量守恒。

我们对方程组(3.1)~(3.2)中相关模量 $N_B(t), N_F(t)$ 的定义分别如下:

$$N_B(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_B(x, t)|^2 dx \tag{3.3}$$

$$N_F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_F(x, t)|^2 dx \tag{3.4}$$

以及能量的定义如下:

$$E := E(\varphi_B, \varphi_F) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} \left| \frac{\partial}{\partial x} \varphi_B \right|^2 + V_B |\varphi_B|^2 + \frac{1}{2} \left(\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2 \right) |\varphi_B|^2 + \frac{1}{6\lambda} \left| \frac{\partial}{\partial x} \varphi_F \right|^2 + V_F |\varphi_F|^2 + \frac{1}{2} \left(\beta_{21} |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3} \right) |\varphi_F|^2 \right] dx \tag{3.5}$$

接下来证明: $\frac{dN_B}{dt} = 0, \frac{dN_F}{dt} = 0$ 以及 $\frac{dE}{dt} = 0$,

事实上:

$$\begin{aligned} 1) \quad \frac{dN_B}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \partial t |\varphi_B|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \partial t (\varphi_B, \overline{\varphi_B}) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (\overline{\varphi_B} \cdot \partial t \varphi_B + \varphi_B \cdot \partial t \overline{\varphi_B}) dx \end{aligned}$$

对(3.1)式两边同乘 $\overline{\varphi_B}$, 得到

$$i\overline{\varphi_B} \partial t \varphi_B = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \varphi_B + V_B(x) \overline{\varphi_B} \varphi_B + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) \overline{\varphi_B} \varphi_B \quad (3.6)$$

对(3.1)式两边同时取共轭, 得到

$$-i\partial t \overline{\varphi_B} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} + V_B(x) \overline{\varphi_B} + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) \overline{\varphi_B} \quad (3.7)$$

然后在(3.7)式两边同乘 φ_B , 有

$$-i\varphi_B \partial t \overline{\varphi_B} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B + V_B(x) \overline{\varphi_B} \varphi_B + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) \overline{\varphi_B} \varphi_B \quad (3.8)$$

用(3.6)~(3.8)式得:

$$i\overline{\varphi_B} \cdot \partial t \varphi_B + i\varphi_B \cdot \partial t \overline{\varphi_B} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B}$$

即

$$\overline{\varphi_B} \cdot \partial t \varphi_B + \varphi_B \cdot \partial t \overline{\varphi_B} = \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B}$$

由上式可得:

$$\begin{aligned} \frac{dN_B}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B - \frac{i}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B} \right] dx \\ &= \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B} \right] dx \\ &= \frac{i}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_B} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \varphi_B dx \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_B \cdot \frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_B} dx \right] \\ &= \frac{i}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_B} \right) \varphi_B \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi_B \right) \overline{\varphi_B} \Big|_{-\infty}^{+\infty} \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

又因为 $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \varphi_B(x, t) = 0$, 故 $\frac{dN_B}{dt} = 0$, 则 N_B 是一个与时间 t 无关的常数, 不随时间变化而变化。

同理

$$2) \frac{dN_F}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \partial t |\varphi_F|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \partial t (\varphi_F, \overline{\varphi_F}) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (\overline{\varphi_F} \cdot \partial t \varphi_F + \varphi_F \cdot \partial t \overline{\varphi_F}) dx$$

接着, 在(3.2)式两边同乘 $\overline{\varphi_F}$, 则

$$i\overline{\varphi_F} \partial t \varphi_F = -\frac{1}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} + V_F(x) \varphi_F \overline{\varphi_F} + (\beta_{21} |\varphi_F|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3}) \varphi_F \overline{\varphi_F} \quad (3.10)$$

再对(3.2)式两边同时取共轭:

$$-i\partial t \overline{\varphi_F} = -\frac{1}{6\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} + V_F(x) \overline{\varphi_F} + (\beta_{21} |\varphi_F|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3}) \overline{\varphi_F} \quad (3.11)$$

在上式两边同乘 φ_F , 得

$$-i\varphi_F \partial t \overline{\varphi_F} = -\frac{1}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F + V_F(x) \overline{\varphi_F} \varphi_F + (\beta_{21} |\varphi_F|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^{4/3}) \overline{\varphi_F} \varphi_F \quad (3.12)$$

由(3.10)~(3.12)式得:

$$i\overline{\varphi_F} \cdot \partial t \varphi_F + i\varphi_F \cdot \partial t \overline{\varphi_F} = -\frac{1}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} + \frac{1}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F$$

即

$$\overline{\varphi_F} \cdot \partial t \varphi_F + \varphi_F \cdot \partial t \overline{\varphi_F} = \frac{i}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} - \frac{i}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F$$

由上式可得:

$$\begin{aligned} \frac{dN_F}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{i}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} - \frac{i}{6\lambda} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F \right] dx \\ &= \frac{i}{6\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F \right] dx \\ &= \frac{i}{6\lambda} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_F} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \varphi_F dx \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \varphi_F \cdot \frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_F} dx \right] \\ &= \frac{i}{6\lambda} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \varphi_F \right) \overline{\varphi_F} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\varphi_F} \right) \varphi_F \Big|_{-\infty}^{+\infty} \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

又因为 $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} \varphi_F(x, t) = 0$, 故 $\frac{dN_F}{dt} = 0$, 则 N_F 是一个与时间 t 无关的常数, 它不随时间变化而变化。

同理可证明得到 $\frac{dE}{dt} = 0$, 故 $E(\varphi_B, \varphi_F)$ 也是一个与时间 t 无关的常数。

4. 求解 Gross-Pitaevskii 方程组(2.11)~(2.12)的

一种数值解法——时间分裂差分法

为了计算 Bose-Fermi 混合物的动力学规律, 下面我们提出一种有效的的时间分裂差分法来求解耦合

Gross-Pitaevskii 方程组。该数值方法的主要思想是先将耦合 Gross-Pitaevskii 方程组分成两部分来求解：一部分是线性微分方程组，另一部分是非线性微分方程组。线性微分方程组在空间上可利用中心差分法来离散，时间方向上利用 Crank-Nicolson 方法来离散。非线性微分方程组可直接求解。该数值方法具有无条件稳定性以及保持耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的守恒律等优点。下面求解一维耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组：

在实际计算中我们设定 $x \in [-a, a], t \in [0, T]$ ，并取均匀节点： $x_j = -a + jh (j = 0, 1, 2, \dots, M), h = \frac{2a}{M}$ ，

$t_n = n\Delta t (n = 0, 1, 2, \dots, N)$ ，初始条件为： $\varphi_B(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ ， $\varphi_F(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ 。

则在时间段 $[t_n, t_{n+1}]$ 内我们分别求解非线性微分方程组：

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi_B = V_B(x) \varphi_B + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) \varphi_B \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi_F = V_F(x) \varphi_F + (\beta_{12} |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^4) \varphi_F \end{cases} \quad (4.2)$$

和线性微分方程组：

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi_B = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi_F = -\frac{1}{6\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F \end{cases} \quad (4.4)$$

非线性微分方程组(4.1)~(4.2)可直接求解。也就是对(4.1)式两边同乘 $\overline{\varphi_B}$ 得：

$$\overline{\varphi_B} i\partial_t \varphi_B = \left[V_B(x) \varphi_B + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) \varphi_B \right] \overline{\varphi_B}$$

即

$$\overline{\varphi_B} i\partial_t \varphi_B = V_B(x) |\varphi_B|^2 + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) |\varphi_B|^2 \quad (4.5)$$

对上式两边分别求共轭得到：

$$\varphi_B (-i) \partial_t \overline{\varphi_B} = V_B(x) |\varphi_B|^2 + (\beta_{11} |\varphi_B|^2 + \beta_{12} |\varphi_F|^2) |\varphi_B|^2 \quad (4.6)$$

由(4.5)~(4.6)式得：

$$\overline{\varphi_B} i\partial_t \varphi_B + \varphi_B i\partial_t \overline{\varphi_B} = \partial_t (\varphi_B \cdot \overline{\varphi_B}) = \partial_t |\varphi_B|^2 = 0 \quad (4.7)$$

同理，对(4.2)式两边同乘 $\overline{\varphi_F}$ 得：

$$\overline{\varphi_F} i\partial_t \varphi_F = \overline{\varphi_F} \left[V_F(x) \varphi_F + (\beta_{12} |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^4) \varphi_F \right] \quad (4.8)$$

在上式两边求共轭：

$$\varphi_F (-i) \partial_t \overline{\varphi_F} = V_F(x) |\varphi_F|^2 + (\beta_{12} |\varphi_B|^2 + \beta_{22} |\varphi_F|^4) |\varphi_F|^2 \quad (4.9)$$

由(4.8)~(4.9)得：

$$\overline{\varphi_F} i\partial_t \varphi_F + \varphi_F i\partial_t \overline{\varphi_F} = \partial_t (\varphi_F \cdot \overline{\varphi_F}) = \partial_t |\varphi_F|^2 = 0 \quad (4.10)$$

对 $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 可求(4.1)式的数值解：

$$\partial t \varphi_B(x, t_n) = -i \left[V_B(x) + \left(\beta_{11} |\varphi_B(x, t_n)|^2 + \beta_{12} |\varphi_F(x, t_n)|^2 \right) \right] \varphi_B(x, t_n)$$

不妨令

$$c = -i \left[V_B(x) + \left(\beta_{11} |\varphi_B(x, t_n)|^2 + \beta_{12} |\varphi_F(x, t_n)|^2 \right) \right]$$

则

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_B(x, t_n)}{\partial t} &= c \cdot \varphi_B(x, t_n) \Rightarrow \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \varphi_B}{\varphi_B} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} c dt \\ \Rightarrow \ln \varphi_B|_{t_n}^{t_{n+1}} &= c \cdot \Delta t \Rightarrow \ln \varphi_B(x, t_{n+1}) - \ln \varphi_B(x, t_n) = c \cdot \Delta t \end{aligned}$$

所以 $\varphi_B(x, t_{n+1}) = \varphi_B(x, t_n) \cdot e^{c \cdot \Delta t}$ 。

同理当 $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 时, 可求(4.2)式的数值解:

$$\partial t \varphi_F(x, t_n) = -i \left[V_F(x) + \left(\beta_{12} |\varphi_B(x, t_n)|^2 + \beta_{22} |\varphi_F(x, t_n)|^{\frac{4}{3}} \right) \right] \varphi_F(x, t_n)$$

不妨令

$$c' = -i \left[V_F(x) + \left(\beta_{12} |\varphi_B(x, t_n)|^2 + \beta_{22} |\varphi_F(x, t_n)|^{\frac{4}{3}} \right) \right]$$

则

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_F(x, t_n)}{\partial t} &= c' \cdot \varphi_F(x, t_n) \Rightarrow \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \varphi_F}{\varphi_F} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} c' dt \\ \ln \varphi_F|_{t_n}^{t_{n+1}} &= c' \cdot \Delta t \Rightarrow \ln \varphi_F(x, t_{n+1}) - \ln \varphi_F(x, t_n) = c' \cdot \Delta t \end{aligned}$$

因此, $\varphi_F(x, t_{n+1}) = \varphi_F(x, t_n) \cdot e^{c' \cdot \Delta t}$ 。

故在节点 (x_j, t_n) 处, 有

$$\begin{aligned} \varphi_B(x_j, t_{n+1}) &= \varphi_B(x_j, t_n) \cdot e^{c \cdot \Delta t} \\ \varphi_F(x_j, t_{n+1}) &= \varphi_F(x_j, t_n) \cdot e^{c' \cdot \Delta t} \\ j &= 0, 1, 2, \dots, M \end{aligned}$$

对线性微分方程组(4.3)~(4.4), 我们在空间上可利用中心差分法来离散, 时间方向上利用 Crank-Nicolson 方法来离散。事实上:

由(4.3)式可知:

$$i \frac{\partial \varphi_B}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B \Rightarrow \frac{\partial \varphi_B}{\partial t} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_B$$

记 $(\varphi_B)_j^n \approx \varphi_B(x_j, t_n)$ 对所有 $j = 0, 1, 2, \dots, M; n = 0, 1, 2, \dots, N$ 都成立。

也就是

$$\begin{aligned} \frac{(\varphi_B)_j^{n+1} - (\varphi_B)_j^n}{\Delta t} &= \frac{i}{4} \cdot \frac{(\varphi_B)_{j+1}^{n+1} - 2(\varphi_B)_j^{n+1} + (\varphi_B)_{j-1}^{n+1}}{h^2} \\ &= \frac{i}{4} \cdot \frac{(\varphi_B)_{j+1}^n - 2(\varphi_B)_j^n + (\varphi_B)_{j-1}^n}{h^2} \end{aligned}$$

对所有的 $j=1,2,\dots,M-1$ 都成立。

同理，由(4.4)式可知：

$$\frac{\partial \varphi_F}{\partial t} = \frac{i}{6\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_F$$

记 $(\varphi_F)_j^n \approx \varphi_F(x_j, t_n)$ 对所有 $j=0,1,2,\dots,M; n=0,1,2,\dots,N$ 都成立。

也就是

$$\begin{aligned} \frac{(\varphi_F)_j^{n+1} - (\varphi_F)_j^n}{\Delta t} &= \frac{i}{12\lambda} \cdot \frac{(\varphi_F)_{j+1}^{n+1} - 2(\varphi_F)_j^{n+1} + (\varphi_F)_{j-1}^{n+1}}{h^2} \\ &= \frac{i}{12\lambda} \cdot \frac{(\varphi_F)_{j+1}^n - 2(\varphi_F)_j^n + (\varphi_F)_{j-1}^n}{h^2} \end{aligned}$$

对所有的 $j=1,2,\dots,M-1$ 都成立。在第五节中，我们将采用该方法对具体的实例进行数值计算和模拟。

5. 数值计算结果

根据初始条件： $\varphi_B(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$, $\varphi_F(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$, $x \in [a, b]$ 。边界条件：

$\varphi_B(a, t) = \varphi_B(b, t) = 0$, $\varphi_F(a, t) = \varphi_F(b, t) = 0$ ，可求一维耦合 Gross-Pitaevskii 方程组(2.11)~(2.12)的数值计算结果。通过 Fortran 程序计算、Matlab 软件画图可得 $E(t)$ 、 $N_B(t)$ 、 $N_F(t)$ 与时间 t 的关系图(如图 1 所示)，以及 $|\varphi_B(x, t)|$ 、 $|\varphi_F(x, t)|$ 与 x, t 的关系图(如图 2、图 3 所示)。

从图 1 中，我们可以看出模量 $N_B(t)$ 、 $N_F(t)$ 和能量 $E(t)$ 不随时间的改变而改变。说明本文提出的数值方法可保持耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的守恒律——模量守恒与能量守恒。从图 2 与图 3 中，我们可以看出描述 Bose 子与 Fermi 子的密度函数 $|\varphi_B(x, t)|$ 、 $|\varphi_F(x, t)|$ 随着时间变化的规律。

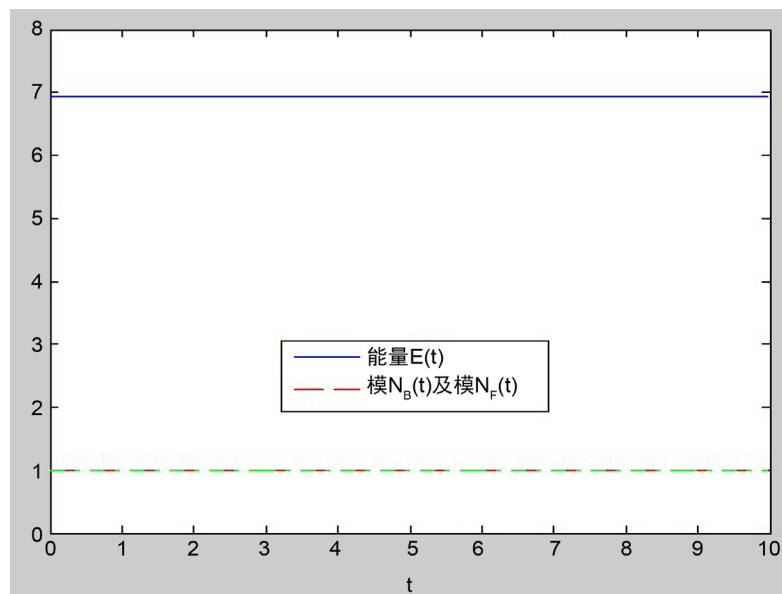


Figure 1. The relationship between $E(t)$, $N_B(t)$, $N_F(t)$ and t

图 1. $E(t)$ 、 $N_B(t)$ 、 $N_F(t)$ 与时间 t 的关系图

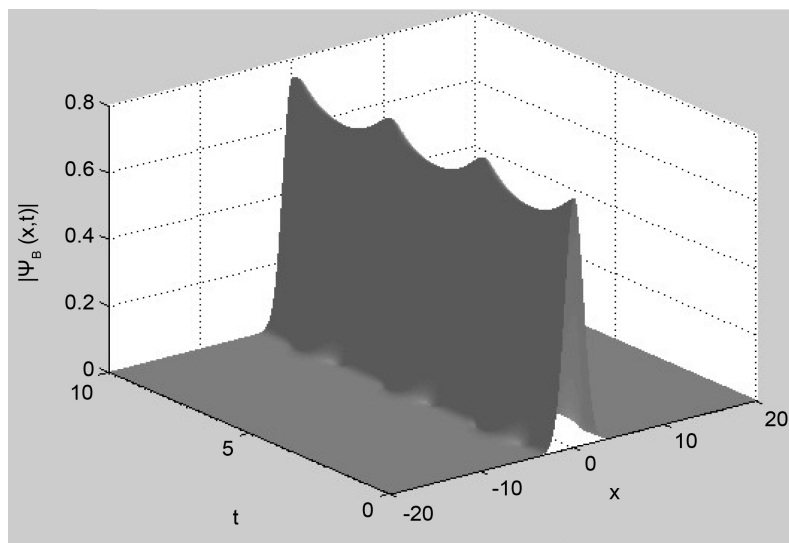


Figure 2. The relationship between $|\varphi_B(x,t)|$ and x, t

图 2. $|\varphi_B(x,t)|$ 与 x, t 的关系图

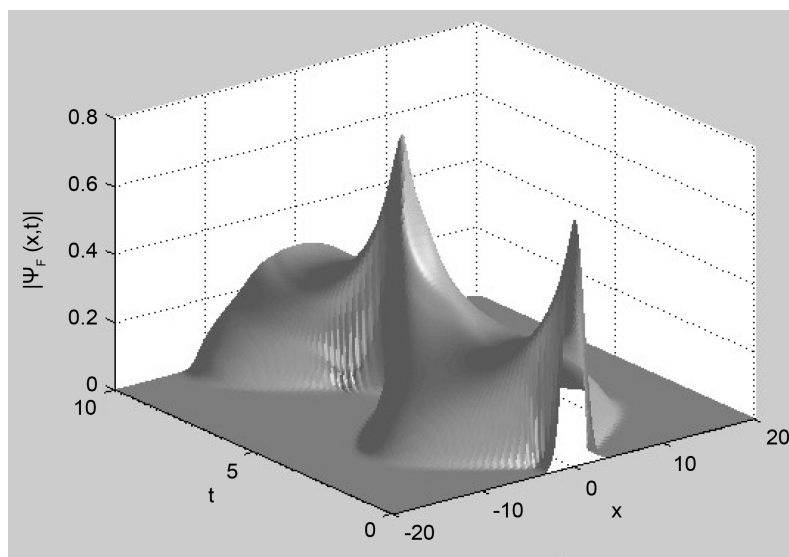


Figure 3. The relationship between $|\varphi_F(x,t)|$ and x, t

图 3. $|\varphi_F(x,t)|$ 与 x, t 的关系图

6. 结论

在绝对零度下 Bose-Fermi 混合物的动力学规律可由耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组来描述。我们为一维耦合的 Gross-Pitaevskii 方程组提出了一种时间分裂有限差分法。在该方程组数值解的基础上，我们探讨了在绝对零度下 Bose-Fermi 混合物的动力学规律，并通过数值模拟证实了该数值方法的无条件稳定性以及保持耦合 Gross-Pitaevskii 方程组的守恒性。

参考文献

- [1] Modugno, G., Roati, G., Riboli, F., *et al.* (2002) Collapse of a Degenerate Fermi Gas. *Science*, **297**, 2240-2243.

- <https://doi.org/10.1126/science.1077386>
- [2] Mølmer, K. (1998) Bose Condensates and Fermi Gases at Zero Temperature. *Physical Review Letters*, **80**, 1804-1807. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1804>
- [3] Truscott, A.G., Strecker, K.E., McAlexander, W.I., *et al.* (2001) Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms. *Science*, **291**, 2570-2572. <https://doi.org/10.1126/science.1059318>
- [4] Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W., *et al.* (1996) Dynamical Mean-Field Theory of Strongly Correlated Fermion Systems and the Limit of Infinite Dimensions. *Review of Modern Physics*, **68**, 13. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.13>
- [5] Roth, R. and Feldmeier, H. (2002) Mean-Field Instability of Trapped Dilute Boson-Fermion Mixtures. *Physical Review A*, **65**, 275-280.
- [6] Schreck, F., Khaykovich, L., Corwin, K.L., *et al.* (2001) Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea. *Physical Review Letters*, **87**, 080403.
- [7] Hadzibabic, Z., Stan, C.A., Dieckmann, K., *et al.* (2002) Two-Species Mixture of Quantum Degenerate Bose and Fermi Gases. *Physical Review Letters*, **88**, 160401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.160401>
- [8] Modugno, M., Ferlaino, F., Riboli, F., *et al.* (2012) Mean-Field Analysis of the Stability of a K-Rb Fermi-Bose Mixture. *Physical Review A*, **68**, 043626.
- [9] Goldwin, J., Papp, S.B., Demarco, B., *et al.* (2002) Two-Species Magneto-Optical Trap with ^{40}K , and ^{87}Rb . *Physical Review A*, **65**, 021402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.65.021402>
- [10] Roati, G., Riboli, F., Modugno, G., *et al.* (2002) Fermi-Bose Quantum Degenerate ^{40}K - ^{87}Rb Mixture with Attractive Interaction. *Physical Review Letters*, **89**, 150403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.150403>
- [11] Ospelkaus, C., Ospelkaus, S., Sengstock, K., *et al.* (2006) Interaction-Driven Dynamics of 40K - 87Rb Fermion-Boson Gas Mixtures in the Large-Particle-Number Limit. *Physical Review Letters*, **96**, Article ID: 020401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.020401>
- [12] Roth, R. (2002) Structure and Stability of Trapped Atomic Boson-Fermion Mixtures. *Physical Review A*, **66**, 144-144. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.013614>
- [13] Tsurumi, T. and Wadati, M. (2000) Dynamics of Magnetically Trapped Boson-Fermion Mixtures. *Journal of the Physical Society of Japan*, **69**, 97-103. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.69.97>
- [14] Capuzzi, P., Minguzzi, A. and Tosi, M.P. (2003) Collective Excitations in Trapped Boson-Fermion Mixtures: From Demixing to Collapse. *Physical Review A*, **68**, Article ID: 033605.
- [15] Capuzzi, P., Minguzzi, A. and Tosi, M.P. (2004) Collisional Oscillations of Trapped Boson-Fermion Mixtures in the Approach to the Collapse Instability. *Physical Review A*, **69**, 521-524. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.69.053615>
- [16] Adhikari, S.K. (2004) Mean-Field Description of Dynamical Collapse of a Fermionic Condensate in a Trapped Boson-Fermion Mixture. *Physical Review A*, **70**, 628-628. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.70.043617>
- [17] Adhikari, S.K. and Salasnich, L. (2007) Mixing-Demixing Transition and Collapse of a Vortex State in a Quasi-Two-Dimensional Boson-Fermion Mixture. *Physical Review A*, **75**, 497-500. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.053603>
- [18] Bao, W., Cai, Y. and Wang, H. (2010) Efficient Numerical Methods for Computing Ground States and Dynamics of Dipolar Bose-Einstein Condensates. *Journal of Computational Physics*, **229**, 7874-7892. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.07.001>
- [19] Bao, W. and Wang, H. (2006) An Efficient and Spectrally Accurate Numerical Method for Computing Dynamics of Rotating Bose-Einstein Condensates. *Journal of Computational Physics*, **217**, 612-626. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.01.020>
- [20] Bao, W., Wang, H. and Markowich, P.A. (2005) Ground, Symmetric and Central Vortex States in Rotating Bose-Einstein Condensates. *Communications in Mathematical Sciences*, **3**, 57-88. <https://doi.org/10.4310/CMS.2005.v3.n1.a5>
- [21] Bao, W. and Wang, H. (2007) A Mass and Magnetization Conservative and Energy-Diminishing Numerical Method for Computing Ground State of Spin-1 Bose-Einstein Condensates. *Siam Journal on Numerical Analysis*, **45**, 2177-2200. <https://doi.org/10.1137/070681624>
- [22] 刘云龙, 陆瑞征. 普朗克常数[J]. 自然杂志, 1988(10): 46-50.
- [23] 刘锋, 贾多杰, 李晓礼, 等. 无量纲化的方法[J]. 安顺学院学报, 2008, 10(3): 78-80.

知网检索的两种方式：

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择：[ISSN]，输入期刊 ISSN：2324-7991，即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入，输入文章标题，即可查询

投稿请点击：<http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱：aam@hanspub.org