

Моделирование связанных состояний квантовых систем в двумерной геометрии атомных ловушек

О. А. Коваль, Е. А. Коваль

** Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

В работе представлено численное моделирование связанных состояний двухчастичных квантовых систем в двумерной геометрии оптических ловушек. Исследована зависимость энергий связанных состояний системы от длины рассеяния, а также сходимость полученных численных результатов к аналитическому решению, найденному в работе [Two Cold Atoms in a Harmonic Trap / T. Busch, B.-G. Englert, K. Rzazewski, M. Wilkens // *Foundation of Physics.* — 1998. — Vol. 28, No 4. — Pp. 549–559] в приближении потенциала нулевого радиуса для межатомного взаимодействия.

Ключевые слова: моделирование связанных состояний, ультрахолодные атомы, 2D геометрия, оптические ловушки.

1. Введение

В работе численно исследуется спектр двухчастичных квантовых систем в двумерной (2D) геометрии атомных ловушек, актуальной задачи физики ультрахолодных атомов. Двумерная геометрия вносит ряд существенных особенностей как в задачу на собственные значения, так и в задачу рассеяния по сравнению с классической теорией в трёхмерном пространстве, в частности, длина рассеяния

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{2}{k} \exp\left(\frac{\pi}{2} \operatorname{ctg}(\delta_0) - \gamma\right)$$

всегда положительна в таких системах. Нами построена вычислительная схема для исследования квантовой задачи двух тел, допускающей отделение центра масс, в 2D геометрии. Продемонстрировано хорошее согласие численных расчётов с аналитическими результатами работ [1–3], полученными в приближении потенциала нулевого радиуса для межатомного взаимодействия.

2. Зависимость спектра двухчастичной системы от длины рассеяния в 2D геометрии

В модели одномерной атомной ловушки, когда движение вдоль третьей переменной «заморожено», парные столкновения после отделения движения центра масс можно описать двумя переменными (ρ, φ) . В предыдущих работах взаимодействие моделировалось потенциалом нулевого радиуса вида $V(\rho) = V_0 \delta(\rho)$ [1–3], где $\delta(\rho)$ — дельта-функция Дирака. Здесь мы выходим за рамки этого приближения, используя потенциал:

$$V(\rho) = \begin{cases} V_0, & \rho \leq \rho_0, \\ 0, & \rho > \rho_0, \end{cases} \quad (1)$$

где V_0 — глубина потенциала, ρ_0 — ширина потенциала.

Задача о нахождении спектра системы с аксиально-симметричным потенциалом (1) заключается в решении стационарного двумерного уравнения Шрёдингера для задачи на связанные состояния и для задачи рассеяния.

В полярной системе координат стационарное уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$T(\rho, \varphi)\Psi(\rho, \varphi) + [V(\rho) + V_{ho}(\rho)]\Psi(\rho, \varphi) = E\Psi(\rho, \varphi), \quad (2)$$

где $T(\rho, \varphi)$ — оператор кинетической энергии частиц, $V_{ho}(\rho) = \frac{\mu\omega^2\rho^2}{2}$ — потенциал гармонического осциллятора, аппроксимирующий взаимодействие частиц с ловушкой, E — энергия относительного движения частиц, а μ — приведённая масса.

Аксиальная симметрия потенциала взаимодействия (1) допускает разделение переменных ρ и φ . После разложения по парциальным волнам в 2D [4]

$$\Psi(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \Psi_m(\rho) e^{im\phi}, \quad (3)$$

где $\varphi \in [0, 2\pi]$, исходное уравнение (2) распадается на радиальные уравнения (здесь и далее используется система единиц $\hbar = \mu = 1$)

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} + \left[2E - 2V(\rho) - 2V_{ho}(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \right) \Psi_m(\rho) = 0 \quad (4)$$

для компонент $\Psi_m(\rho)$. Далее мы анализируем случай $m = 0$, соответствующий s -волне.

2.1. Задача на связанные состояния двух частиц в 2D геометрии

Доопределив уравнение (4) нулевыми граничными условиями при $\rho \rightarrow 0, \infty$ для радиальной компоненты $\Psi_0(\rho)$, приходим к задаче на собственные значения

$$\begin{cases} \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \Psi_0(\rho) + \left[\frac{1}{4} + 2\rho^2(E - V_{ho}(\rho) - V(\rho)) \right] \Psi_0(\rho) = 0, \\ \Psi_0(0) = \Psi_0(\infty) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Решение задачи (5) в двумерном пространстве имеет отличительные особенности по сравнению с задачей на собственные функции в трёхмерном пространстве, в частности, *существование уровня для сколь угодно малого притягивающего потенциала* [4]. Заметим, что значение энергии этого уровня оказывается экспоненциально малым по сравнению с глубиной ямы.

2.2. Задача рассеяния атома на силовом центре в 2D геометрии

Доопределив уравнение (4) соответствующими граничными условиями при $\rho \rightarrow 0, \infty$, приходим к задаче рассеяния

$$\begin{cases} \frac{d^2}{d\rho^2} \Psi_0(\rho) + \left(k^2 - \left[2V(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \right] \right) \Psi_0(\rho) = 0, \\ \Psi_0(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \sqrt{\rho}, \\ \Psi_0(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \cos(\delta_0) \left[\sqrt{k\rho} J_0(k\rho) - \text{tg}(\delta_0) \sqrt{k\rho} N_0(k\rho) \right], \end{cases} \quad (6)$$

где $k = \sqrt{2E}$ — импульс, J_0 и N_0 — функции Бесселя и Неймана нулевого порядка, δ_0 — фаза рассеяния s -волны.

В отсутствии потенциала $\delta_0 = 0$ решением уравнения (6) является функция $\sqrt{\rho} J_0(k\rho)$.

Зависимость длины рассеяния от параметров внешнего потенциала определяется с помощью выражения [5]:

$$\operatorname{ctg}(\delta_0) = \frac{2}{\pi} \left(\ln \left(\frac{ka}{2} \right) + \gamma \right) + O(k^2), \quad (7)$$

которое имеет место при $k \rightarrow 0$, $\gamma \approx 0.5772156649$ — константа Эйлера.

Из соотношения (7) следует выражение для длины рассеяния a через фазу s -волны δ_0 :

$$a = \frac{2}{k} \exp \left(\frac{\pi}{2} \operatorname{ctg}(\delta_0) - \gamma \right). \quad (8)$$

2.3. Разностная схема для нахождения уровней энергии связанных состояний атомов и решения задачи рассеяния в двумерном пространстве

Для решения задачи Штурма-Лиувилля (5) и задачи рассеяния (6) использовалась семиточечная конечно-разностная схема для производной второго порядка на равномерной сетке узлов $\left\{ \rho_k = \rho_0 + kh, h = \frac{\rho_{\max} - \rho_0}{N}, k = 0, 1, 2, \dots, N-1 \right\}$, $\{ \Psi^k = \Psi(\rho_k) \}$:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} \Psi^k = \frac{2\Psi^{k-3} - 27\Psi^{k-2} + 270\Psi^{k-1} - 490\Psi^k + 270\Psi^{k+1} - 27\Psi^{k+2} + 2\Psi^{k+3}}{180h^2} + O(h^6). \quad (9)$$

В результате такой аппроксимации задачи (5) и (6) сводятся к алгебраическим уравнениям вида

$$a_k \Psi^{k-3} + b_k \Psi^{k-2} + c_k \Psi^{k-1} + (d_k + 2\rho_k^2 E) \Psi^k + e_k \Psi^{k+1} + f_k \Psi^{k+2} + g_k \Psi^{k+3} = h_k, \quad (10)$$

с числовыми коэффициентами $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k, h_k$. Правое граничное условие может быть записано в виде (10) как в случае задачи на собственные значения, так и в случае задачи рассеяния. В случае задачи рассеяния неизвестная функция δ_0 исключается из граничных условий путём использования асимптотики $\Psi_0(\rho \rightarrow \infty)$ в двух конечных точках ρ_{N-1} и ρ_N [6]. Задача на собственные значения (10) относительно E решалась методом обратных итераций со сдвигом, а задача рассеяния (10) при заданной энергии столкновения E — методом прогонки.

3. Обсуждение результатов

Поставленная задача была решена для суперпозиции потенциала (1) и гармонического осциллятора, изображённого на рис. 1. Нами была рассмотрена узкая (ширина потенциальной ямы $\rho_0 = 0, 5$) и глубокая (глубина $V_0 = -200$) потенциальная яма, моделирующая при $\rho_0 \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$ потенциал нулевого радиуса $V_0 \delta(\rho)$, рассмотренный в работе [3]. Расчёты были проведены при $\rho_N = 60$ и $q = 0, 01$ на сгущающихся сетках $N \rightarrow \infty$ по радиальной переменной.

Разработанная вычислительная схема была успешно применена для вычисления зависимости спектра энергий связанных состояний двух ультрахолодных атомов в двумерной геометрии оптической ловушки от длины рассеяния, алгоритм был протестирован с использованием метода семиточечной прогонки, применяемого для решения краевой задачи (10). Метод семиточечной прогонки позволяет хранить матрицу системы линейных алгебраических уравнений в компактном

виде и находить её численное решение за малое, по сравнению с другими численными методами решения системы линейных алгебраических уравнений, число операций.

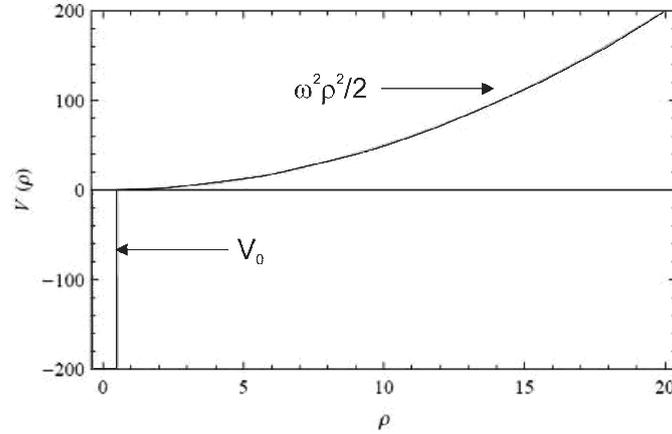


Рис. 1. Эффективный потенциал взаимодействия: ширина потенциальной ямы $\rho_0 = 0.5$, частота гармонического осциллятора $\omega = 1$

На рис. 2 для задачи (6) продемонстрирована сходимость вычислительной схемы в зависимости от числа точек N по сетке радиальной переменной.

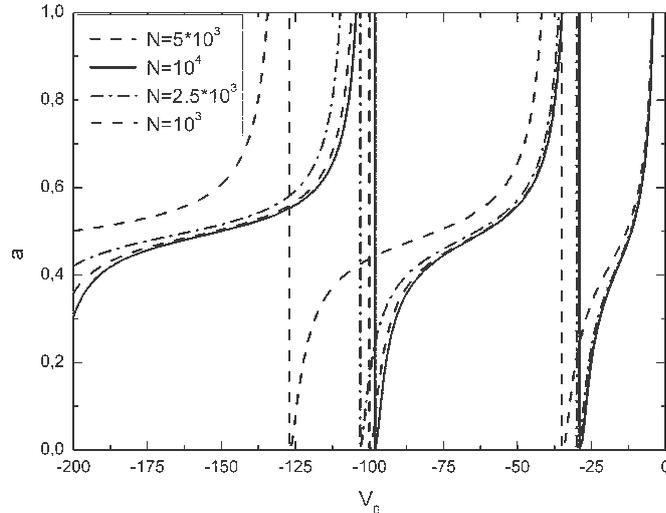


Рис. 2. Сходимость по числу точек $N \rightarrow \infty$ сетки по радиальной переменной для длины рассеяния $a(V_0)$

В итоге, получено хорошее согласие наших численных результатов для энергий уровней с аналитическими решениями [3]. Это согласие иллюстрируется рис. 3. Сплошная «жирная» линия на рис. 3 — рассчитанная зависимость энергии в единицах частоты гармонического осциллятора ω от величины $L \equiv 1/\ln(\frac{1}{2a^2})$, сплошная тонкая линия — аналитическое решение [3], пунктирные линии — асимптоты соответствующих уровней в случае $\omega = 1$. Наблюдаемое расхождение наших результатов с аналитическими обусловлено отличием приближений потенциалом нулевого радиуса и узкой прямоугольной потенциальной ямой конечной ширины и глубины.

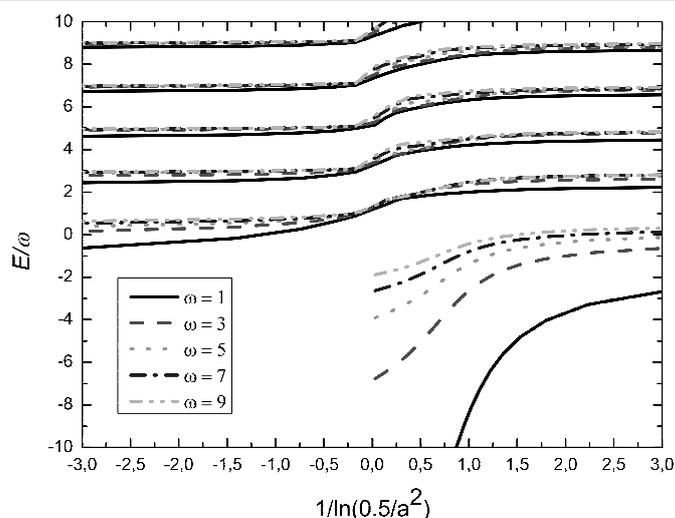


Рис. 3. Численные результаты для энергий уровней

Анализ рис. 2–3 приводит к выводу о том, что данный численный алгоритм успешно применим для моделирования зависимости энергий связанных состояний ультрахолодных атомов от длины рассеяния и глубины V_0 потенциала, и может быть использован и в случае реалистичных потенциалов взаимодействия.

Также была численно исследована зависимость энергии связанных состояний от параметра ловушки – частоты гармонического осциллятора ω . Рассчитанные графики энергий уровней связанных состояний приведены на рис. 4.

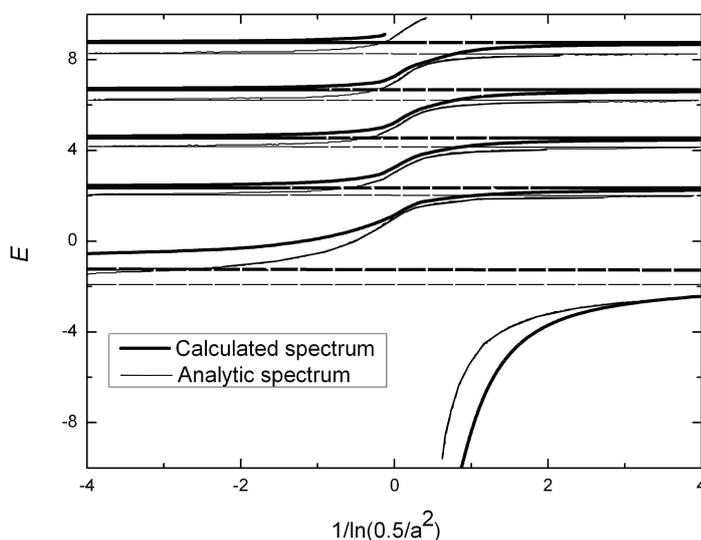


Рис. 4. Графики энергий уровней связанных состояний

Как видно, при увеличении ω энергия основного связанного состояния существенно возрастает, и незначительно увеличиваются энергии возбуждённых состояний. Наблюдаемое отклонение от аналитического решения обусловлено уменьшением

ширины $a_{ho} = \sqrt{\frac{1}{\omega}}$ гармонического потенциала ловушки с увеличением частоты ω .

4. Заключение

Разработана вычислительная схема расчёта зависимости энергий связанных состояний двухчастичной системы ультрахолодных атомов, пленённых в гармонической одномерной ловушке, от длины рассеяния. Получено хорошее согласие численных результатов с аналитическими значениями уровней энергии связанных состояний для потенциала нулевого радиуса, найденными в работе [3], в случае достаточно широкой ловушки ($\omega = 1$). Исследована зависимость энергий связанных состояний от частоты оптической ловушки. Проведённый анализ показывает необходимость знания точного потенциала взаимодействия при уменьшении ширины ловушки, а разработанный алгоритм может быть использован для расчётов с более реалистичными межатомными потенциалами взаимодействия.

Литература

1. *Idziaszek Z., Calarco T.* Analytical Solutions for the Dynamics of Two Trapped Interacting Ultracold Atoms // *Phys. Rev. A.* — 2006. — Vol. 74. — P. 022712.
2. *Bolda B. L., Tiesinga E., Julienne P. S.* Pseudopotential Model of Ultracold Atomic Collisions in Quasi-One- and Two-Dimensional Traps // *Phys. Rev. A.* — 2003. — Vol. 68. — P. 032702.
3. Two Cold Atoms in a Harmonic Trap / Th. Busch, B.-G. Englert, K. Rzazewski, M. Wilkens // *Foundation of Physics.* — 1998. — Vol. 28, No 4. — Pp. 549–559.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Курс теоретической физики. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: Физматлит, 2004. [Landau L. D., Lifshitz E. M. *The Course of Theoretical Physics. Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. Vol. 3.* — Moscow: Fizmatlit, 2004.]
5. Scattering Length and Effective Range in Two Dimensions; Application to Adsorbed Hydrogen Atoms / B. J. Verhaar, J. P. H. W. van de Eijnde, M. A. Voermans, M. M. J. Schaffrath // *J. Phys.* — 1984. — Vol. 17. — Pp. 595–598.
6. *Melezhik V. S.* New Method for Solving Multidimensional Scattering Problem // *J. Comput. Phys.* — 1991. — Vol. 92. — P. 67.

UDC 519.688, 519.632.4 PACS 34.50.-s, 31.15.ac

Modeling of Bound States of Quantum Systems in a Two-Dimensional Geometry of Atomic Traps

O. A. Koval, E. A. Koval

* *The Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

We present numerical modeling of bound states for two-particle quantum systems in two-dimensional geometry of optical traps. We have investigated the dependence of bound states energies on the scattering length as well as the convergence of obtained numerical results to analytical solution from the work [Two Cold Atoms in a Harmonic Trap / T. Busch, B.-G. Englert, K. Rzazewski, M. Wilkens // *Foundation of Physics.* — 1998. — Vol. 28, No 4. — Pp. 549–559.] in zero-range approximation for the interatomic interaction.

Key words and phrases: modeling of the bound states, ultracold atoms, 2D geometry, optical traps.