

## ОПИСАНИЕ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ АТОМОВ В ОДНОМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКИ С РЕАЛИСТИЧЕСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*И. С. Ишимухамедов, Д. С. Валиолда, С. А. Жаугашева*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алма-Ата, Казахстан

В работе выполнен расчет энергии основного состояния двух атомов в одномерной геометрии гармонической оптической ловушки. Получена зависимость энергии от одномерной длины рассеяния, отвечающей различным интенсивностям потенциала межатомного взаимодействия  $V_{\text{int}}(x) = V_0 \exp\{-2cx^2\}$ . Расчет произведен численным и аналитическим методами. В качестве аналитического метода выбран метод осцилляторного представления (ОП), успешно применяемый для расчета связанных состояний различных малочастичных систем. Основными результатами данной работы являются: 1) численное исследование области применимости в этой задаче использованного ранее приближения потенциала нулевого радиуса; 2) исследование границы применимости метода ОП для потенциала  $V(x) = V_{\text{conf}}(x) + V_{\text{int}}(x) = x^2/2 + V_0 \exp\{-2cx^2\}$ .

We compute the ground state energy of two atoms in a one-dimensional geometry of a harmonic optical trap. We obtain a dependence of the energy on a one-dimensional scattering length, which corresponds to various strengths of the interaction potential  $V_{\text{int}}(x) = V_0 \exp\{-2cx^2\}$ . The calculation is performed by numerical and analytical methods. For the analytical method we choose the oscillator representation method (OR), which has been successfully applied to computations of bound states of various few-body systems. The main results of this paper are: 1) the numerical investigation of the validity range of the previously used pseudopotential method; 2) the investigation of the validity range of the OR for the potential  $V(x) = V_{\text{conf}}(x) + V_{\text{int}}(x) = x^2/2 + V_0 \exp\{-2cx^2\}$ .

PACS: 03.65.-w

### ВВЕДЕНИЕ

Исследования ультрахолодных атомов представляют интерес в связи с уникальной возможностью моделировать и управлять такими физическими явлениями, как сверхпроводимость, сверхтекучесть [1], химические реакции с образованием молекул, применимых для элементов квантового компьютера [1, 2], а также кварк-глюонная плазма, возникшая в первые моменты Большого взрыва [1, 3]. В этих экспериментах атомы находятся в условиях ограниченной геометрии, возникающей в результате взаимодействия атомов с внешним оптическим потенциалом [4, 5]. Примерами служат квазиодномерная

и квазидвумерная геометрии оптических ловушек [6]. В первом случае (соответствующем сигарообразному виду ловушки) мы имеем практически свободное движение атомов вдоль одной из осей, а их поперечное движение ограничено и квантовано. Во втором случае (в случае ловушки в форме «блина») квантованным является движение по одной из переменных.

Оптическая ловушка представляет собой стоячую оптическую волну, которую в нулевом приближении можно описать гармоническим потенциалом. В различных экспериментах с ультрахолодными атомами были обнаружены резонансы, которые противоречат теории, основанной на гармоническом приближении для потенциала ловушки [7]. Авторы [7] утверждают, что подобное отклонение теории от эксперимента обусловлено ангармоническими поправками. Однако вычисления ангармонических поправок, выполненные в данной работе, в первом порядке теории возмущений нельзя признать удовлетворительными [8].

Данная статья представляет собой первый шаг на пути описания ангармонизма вне рамок теории возмущений, где мы вычисляем энергии основного состояния атомов в одномерном случае, т. е., когда потенциал межатомного взаимодействия и потенциал ловушки являются одномерными, последний аппроксимируется параболической функцией. Подобный расчет для случая межатомного взаимодействия вида дельта-функции (псевдопотенциал нулевого радиуса) был проведен в [9]. Наш случай отличается тем, что мы используем реалистический потенциал Гаусса. Обнаружено заметное отклонение от результата [9] (рис. 2, 4). Отметим также расчет спектра для реалистического трехмерного потенциала межатомного взаимодействия и двумерного осцилляторного потенциала ловушки в [10], где было получено отклонение от результата, полученного в псевдопотенциальном подходе.

Мы используем как численный, так и аналитический подход к решению поставленной задачи. Численный расчет включает в себя расчет зависимости обратной длины рассеяния от параметров потенциала взаимодействия. Расчет энергии производится с использованием конечно-разностной аппроксимации второго порядка и метода обратной итерации. Аналитический подход расчета энергии осуществляется методом осцилляторного представления (ОП). Метод ОП основан на идеях и методах скалярной квантовой теории поля, и его эффективность продемонстрирована при расчете связанных состояний различных малочастичных систем [8].

Статья построена следующим образом: в разд. 1 приведены результаты расчетов зависимости обратной длины рассеяния от параметров потенциала взаимодействия и зависимости энергии основного состояния от обратной длины рассеяния. Полученные результаты сравниваются с расчетом, выполненным в псевдопотенциальном подходе [9]; в разд. 2 изложен формализм метода ОП применительно к данной задаче. Исследована область применения метода как функция параметров потенциала взаимодействия; в заключении обсуждаются полученные результаты.

## 1. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Целью работы является исследование зависимости энергии основного уровня  $E$  и соответствующей волновой функции (ВФ)  $\Psi$  двух бозонных атомов, плененных в одномерной гармонической ловушке, от интенсивности межатомного взаимодействия. Эта

задача сводится к решению одномерного уравнения Шредингера (УШ):

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} + V_0 \exp \{-2cx^2\} \right\} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1)$$

с нулевыми граничными условиями  $\Psi(|x| \rightarrow \infty) \rightarrow 0$  для ВФ относительного движения атомов в гармоническом потенциале  $V_{\text{conf}}(x) = x^2/2$ . Мы используем осцилляторную систему единиц, в которой энергии измеряются в единицах  $\hbar\omega$ , а длины в единицах  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Межатомное взаимодействие моделировалось двухпараметрическим гауссовым потенциалом  $V_{\text{int}}(x) = V_0 \exp \{-2cx^2\}$ <sup>1</sup>, в котором параметр  $V_0$  задает глубину, а  $c$  определяет ширину потенциала. Мы исследовали зависимость  $E$  и  $\Psi(x)$  от обратной длины рассеяния  $a_{1D}^{-1}(V_0)$  на одномерном гауссовом потенциале  $V_0 \exp \{-2cx^2\}$  в отсутствие удерживающего потенциала ловушки  $V_{\text{conf}}$ . Вначале была рассчитана зависимость  $a_{1D}^{-1}(V_0)$  при численном решении УШ (1) для случая  $V_{\text{conf}} = 0$  для состояния непрерывного спектра  $E > 0$  с граничным условием для ВФ:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \Psi(x) \sim \cos(k|x| + \delta(k)), \quad (2)$$

где  $k = \sqrt{2E}$ , а  $\delta(k)$  — фаза рассеяния. При этом одномерная длина рассеяния определяется как

$$a_{1D} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\text{ctg}(\delta(k))}{k}. \quad (3)$$

Рассчитанная зависимость  $a_{1D}^{-1}(V_0)$  при различных параметрах  $c$  потенциала взаимодействия представлена на рис. 1. Аналогичный расчет трехмерной длины рассеяния на короткодействующем потенциале был проведен в [11].

Для численного решения задачи на собственные значения (1) использовался метод обратной итерации. Для аппроксимации производных, входящих в УШ (1), были использованы конечно-разностные аппроксимации второго порядка точности, обеспечивающие погрешность порядка  $h^2$ , где  $h$  есть шаг разностной сетки. Результаты расчета приведены на рис. 2–6, где также представлены рассчитанные волновые функции. Основные результаты настоящей работы — на рис. 2, 4.

Из графика (рис. 2) видно, что при одновременном сужении и углублении ( $c, V_0 \rightarrow \infty$ ) потенциала взаимодействия двух атомов, т. е. при переходе к короткодействующему взаимодействию в представленном на графике диапазоне  $1/a_{1D}$ , мы получаем сходящийся результат<sup>2</sup>. При сравнении этого результата с результатом [9] мы обнаруживаем несоответствие кривых, которое растет в области положительных значений  $1/a_{1D}$ . В пределе  $c \rightarrow \infty$  гауссов потенциал качественно стремится к потенциалу (псевдопотенциалу) нулевого радиуса, использованному в [9]. Из общих соображений, однако, ясно, что атомы обладают структурой, поэтому потенциал должен иметь конечный радиус действия.

В недавнем эксперименте [5] была реализована одномерная геометрия в сигарообразном трехмерном потенциале с отношением продольной частоты к поперечной  $\omega_{\parallel}/\omega_{\perp} \approx 1 : 10$ . Авторы исследуют систему двух фермионов с противоположно направленными

<sup>1</sup> Коэффициент 2 в экспоненте выбран из соображения удобства.

<sup>2</sup> В данном диапазоне  $1/a_{1D}$  различие между  $c = 100$  и  $c = 1000$  едва заметно.

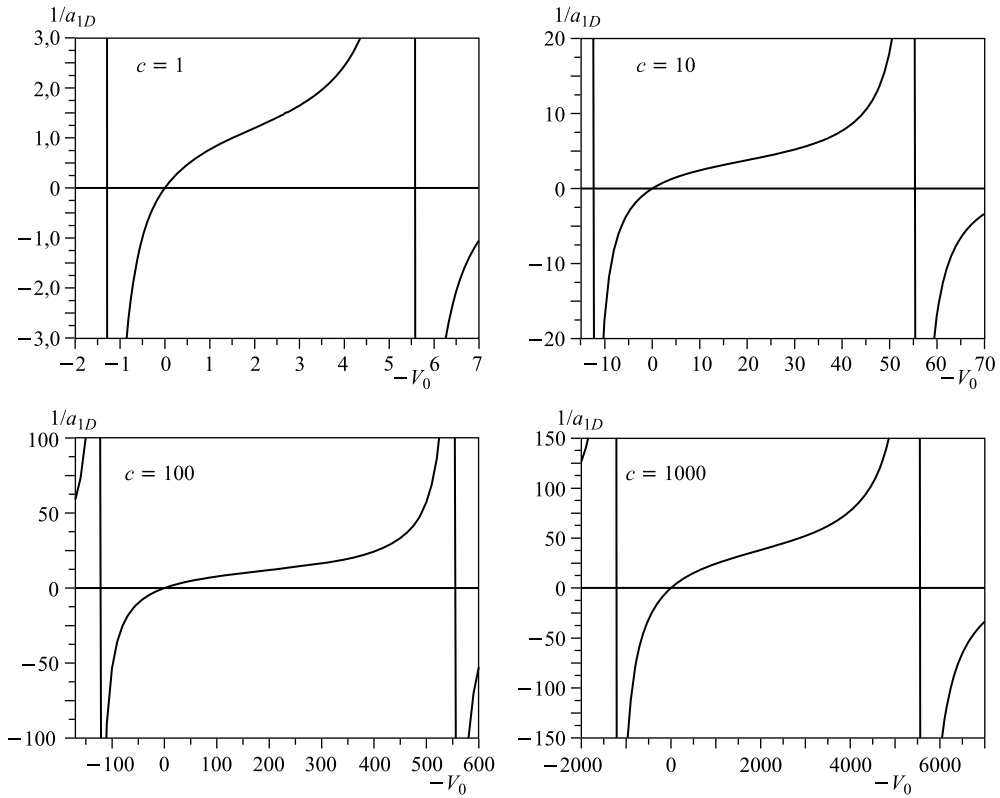


Рис. 1. Зависимость обратной длины рассеяния  $a_{1D}^{-1}$  от глубины  $V_0$  потенциальной ямы  $V(x) = V_0 \exp\{-2cx^2\}$  и параметра  $c$

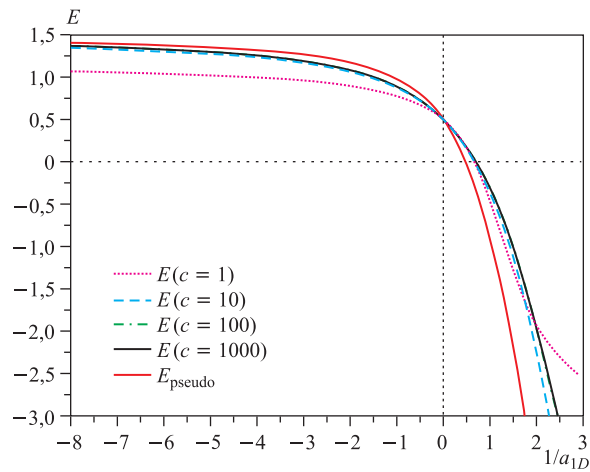


Рис. 2. Энергия основного состояния при различных  $c$ ;  $E_{\text{pseudo}}$  — энергия в случае контактного взаимодействия вида дельта-функции, рассчитанная в [9]

спинами в потенциале, созданном оптической дипольной ловушкой и градиентом магнитного поля. Полученную зависимость энергии от магнитного поля авторы сравнивают с результатом [9], поскольку в таком потенциале основное состояние может быть хорошо описано одномерным гармоническим приближением ловушки [5]. Область исследования находится в районе точки перехода от основного ко второму возбужденному состоянию, что соответствует значению энергии 1,5. Диапазон обратной длины рассеяния, в котором проводится эксперимент, для основного состояния начинается приблизительно со значения  $-2,03$ :  $(1/a_{1D}) \lesssim -2,03$ ; для второго возбужденного состояния:  $(1/a_{1D}) \gtrsim 2,03$ .

## 2. МЕТОД ОСЦИЛЛЯТОРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ (ОП)

Приступим к решению уравнения Шредингера (1) с помощью метода ОП. Этот подход основан на методах и идеях скалярной квантовой теории поля. Полное описание метода изложено в [8]. Преимущество метода состоит в том, что полученный в его рамках ряд теории возмущений для широкого класса потенциалов очень быстро сходится. Предполагается, что основное состояние гамильтониана связанной системы в нулевом приближении описывается осцилляторной волновой функцией с некоторой эффективной частотой  $\Omega$ . Частота  $\Omega$  определяется таким образом, чтобы она учла основной квантовый вклад от потенциала, допускающего связанное состояние. Для этого в исходном гамильтониане выделяется осцилляторная часть с неизвестной пока частотой  $\Omega$ , а канонические переменные, координату и импульс представляют через операторы рождения  $a^+$  и уничтожения  $a$ , а затем упорядочивают их в нормальной форме. Далее требуется, чтобы в преобразованном таким образом гамильтониане отсутствовали слагаемые линейные и квадратичные по каноническим переменным. Это условие определяет  $\Omega$ -частоту осциллятора и называется *условием осцилляторного представления*. Таким образом, полученный ряд теории возмущений эффективно суммируется.

Пусть в одномерном пространстве  $\mathbb{R}^1$  задан гамильтониан системы вида

$$H = \frac{p^2}{2} + W(x^2), \quad (4)$$

где, в нашем конкретном случае,

$$W(x^2) = \frac{x^2}{2} + V_0 \exp \{-2cx^2\} \quad (5)$$

есть потенциальная энергия. Выделяем чисто осцилляторную часть:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \Omega^2 x^2) + \left[ W(x^2) - \frac{\Omega^2}{2} x^2 \right], \quad (6)$$

где  $\Omega$  является пока произвольным положительным параметром. Канонические переменные  $x, p$  представим через операторы рождения и уничтожения:

$$x = \frac{a + a^+}{\sqrt{2\Omega}}, \quad p = \sqrt{\frac{\Omega}{2}} \frac{a - a^+}{i}. \quad (7)$$

Далее подставляем выражения для канонических переменных  $x$  и  $p$  в (6) и производим упорядочение по операторам рождения и уничтожения. Тогда потенциал, представленный в нормальной форме, принимает вид (см. детали в [8]):

$$W(x^2) = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{dk}{2\pi} \right) \tilde{W}(k^2) e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{dk}{2\pi} \right) \tilde{W}(k^2) \exp \left\{ -\frac{k^2}{4\Omega} \right\} : \exp \{ ikx \} :, \quad (8)$$

где  $: * :$  есть символ нормального упорядочения и

$$\tilde{W}(k^2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\rho W(\rho^2) e^{ik\rho}. \quad (9)$$

Используя эти соотношения, перепишем гамильтониан (6) в виде (см. детали в [8]):

$$H = H_0 + H_I + \varepsilon_0(\Omega), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \Omega(a^+ a), \\ H_I &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{dk}{2\pi} \right) \tilde{W}(k^2) \exp \left\{ -\frac{k^2}{4\Omega} \right\} : e_2^{ikx} :, \\ \varepsilon_0(\Omega) &= \frac{\Omega}{4} + \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{dk}{2\pi} \right) \tilde{W}(k^2) \exp \left\{ -\frac{k^2}{4\Omega} \right\}, \\ e_2^z &= e^z - 1 - z - \frac{z^2}{2}, \end{aligned}$$

а  $\varepsilon_0(\Omega)$  есть энергия основного состояния, или вакуума гамильтониана (6). Уравнение для  $\Omega$ , полученное из условия осцилляторного представления, совпадает с уравнением, определяющим минимум энергии  $\varepsilon_0(\Omega)$  по  $\Omega$  (см. детали в [8]):

$$\frac{\partial \varepsilon_0(\Omega)}{\partial \Omega} = 0. \quad (11)$$

Частота осциллятора  $\Omega$  есть функция исходных параметров потенциала  $W(x^2)$ . Таким образом, для того чтобы вычислить энергию основного состояния  $\varepsilon_0(\Omega)$ , нам необходимо, чтобы для частоты  $\Omega$  выполнялось равенство (11). Используя конкретный вид потенциала  $W(x^2)$ , мы приходим к следующей оптимизационной задаче<sup>1</sup>:

$$\varepsilon_0(\Omega) = \min_{\Omega} \left\{ \frac{\Omega}{4} + \frac{1}{4\Omega} + \frac{V_0}{\sqrt{1 + \frac{2c}{\Omega}}} \right\}, \quad \Omega^2 = 1 - \frac{4cV_0}{\left(1 + \frac{2c}{\Omega}\right)^{3/2}}. \quad (12)$$

<sup>1</sup>Формула (12) выведена Г. В. Ефимовым.

Отметим, что уравнение для  $\Omega$  в (12) имеет один-единственный положительный вещественный корень.

Выделение в исходной задаче гамильтониана взаимодействия  $H_I$  позволяет в рамках теории возмущений (ТВ) вычислять высшие поправки к энергии уровня. Первый порядок ТВ в ОП равен нулю. Второй порядок вычисляется по формуле (см. детали в [8]):

$$\varepsilon_2 = -\langle 0|H_I \frac{1}{H_0} H_I|0\rangle = -\frac{1}{2\Omega} \sum_{n=2}^{\infty} B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + n\right) A_n^2, \quad (13)$$

где

$$|0\rangle = \left(\frac{\Omega}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{\Omega}{2}x^2\right\} \quad (14)$$

волновая функция основного состояния в ОП, а  $\Gamma(x), B(x)$  есть гамма- и бета-функции соответственно,

$$A_n = \frac{V_0}{n!\sqrt{\pi}} \left(\frac{2c}{\Omega}\right)^n \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\left(1 + \frac{2c}{\Omega}\right)^{n+1/2}}. \quad (15)$$

Таким образом, энергия основного состояния исходного гамильтониана (4) вычисляется как

$$E_0 = \varepsilon_0 + \varepsilon_2 + \dots \quad (16)$$

Результаты расчетов методом ОП при различных параметрах потенциала взаимодействия представлены на рис. 3–6. На графиках также приведены кривые, соответствующие второму порядку теории возмущений метода ОП.

На рис. 3 представлены графики с тремя кривыми на каждом. Две кривые соответствуют расчету методом ОП, а третья — расчету численным методом. На первом графике, где три кривые сливаются, наблюдается отличное совпадение двух методов. Из графиков видно, что при отрицательных значениях  $V_0 < 0$  метод ОП начинает отклоняться от численных расчетов при  $c, V_0 \rightarrow \infty$ . Второй порядок ТВ в ОП отклоняется при этих же параметрах потенциала меньше и в области отрицательных  $V_0$  показывает очень хорошую точность. Однако для положительных  $V_0 > 0$  как нулевой, так и второй порядок ТВ метода ОП при  $c, V_0 \rightarrow \infty$  отклоняются от численного расчета значительно.

На рис. 4 расчеты методом ОП сравниваются с численным расчетом и расчетом, проведенным в [9] с использованием псевдопотенциала вида дельта-функции, в зависимости от обратной длины рассеяния.

Причина отклонения метода ОП при различных параметрах потенциала объясняется тем, что в ОП волновая функция в нулевом приближении описывается гауссианом (14). Тем самым отклонение ОП обусловлено отклонением гауссова поведения осцилляторной волновой функции от поведения истинной ВФ, что можно пронаблюдать на рис. 5, 6.

На рис. 5, 6 видно, что отклонение ОП от численного расчета, возникающее в области положительных  $V_0$ , при  $c, V_0 \rightarrow \infty$  соответствует расхождению волновых функций этих двух подходов. Таким образом, можно утверждать, что для данного гамильтониана (1) применимость метода ОП является функцией параметров потенциала взаимодействия.

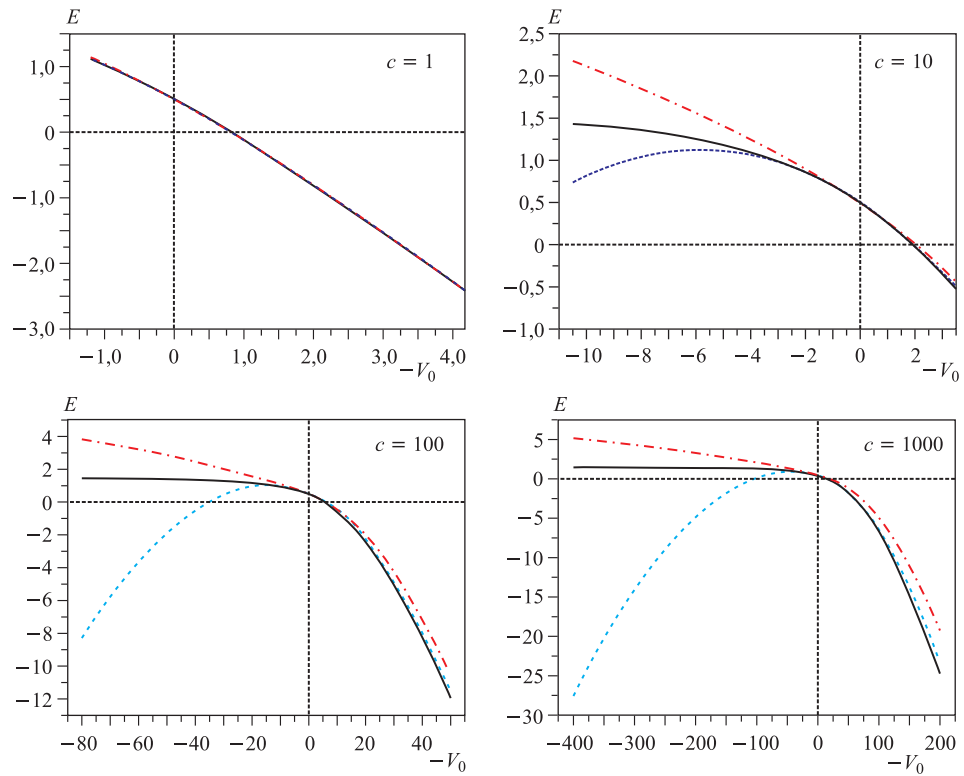


Рис. 3. Границы применимости метода ОП для уравнения (1). Сплошные линии — численный расчет энергии; штрихпунктирные — энергия в нулевом приближении ОП; пунктирные — энергия во втором приближении ОП

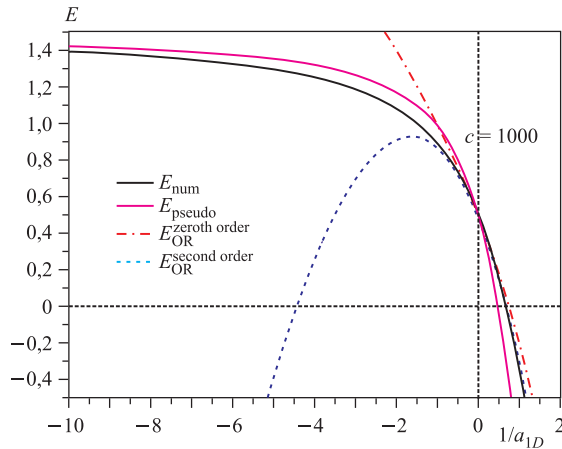


Рис. 4. Сравнение расчетов различными методами;  $E_{\text{num}}$  — численный расчет энергии,  $E_{\text{pseudo}}$  — энергия в случае контактного взаимодействия вида дельта-функции, рассчитанная в [9];  $E_{\text{OR}}^{\text{zeroth order}}$  — энергия в нулевом приближении ОП,  $E_{\text{OR}}^{\text{second order}}$  — энергия во втором приближении ОП



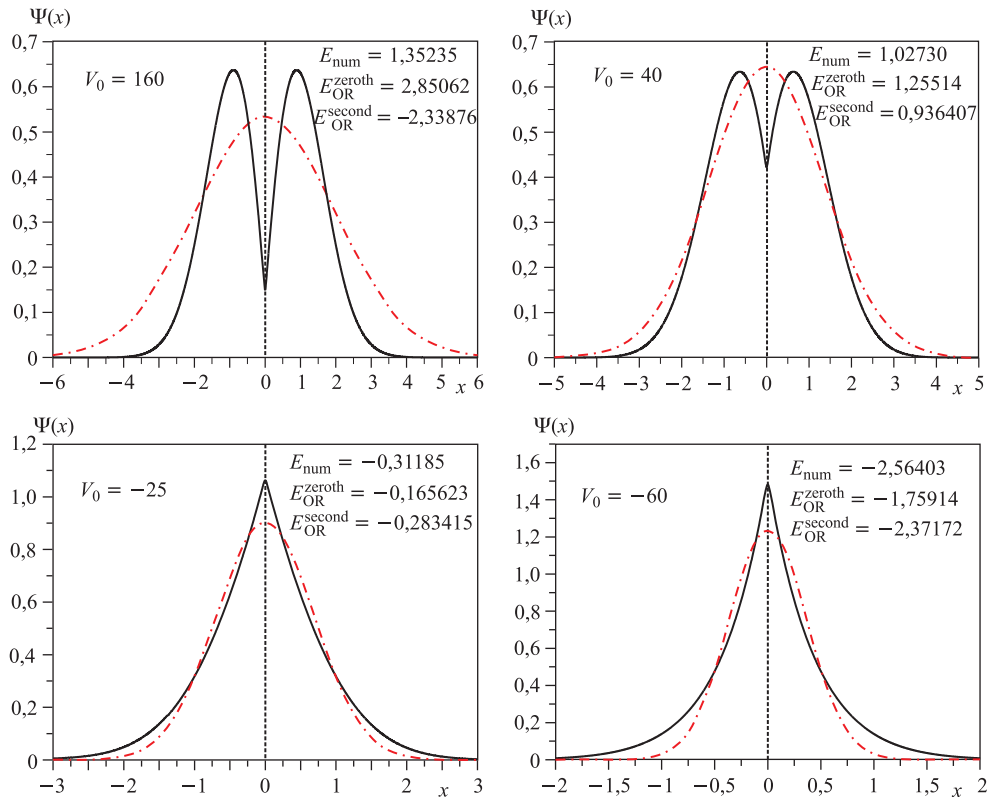


Рис. 5. Сравнение ВФ численного расчета и ВФ метода ОП при различных  $V_0$  для  $c = 1000$ . Сплошные линии — ВФ численного расчета; штрихпунктирные — ВФ нулевого порядка ОП.  $E_{\text{num}}$  — численный расчет энергии;  $E_{\text{OR}}^{\text{zeroth}}$  — энергия в нулевом приближении ОП;  $E_{\text{OR}}^{\text{second}}$  — энергия во втором приближении ОП

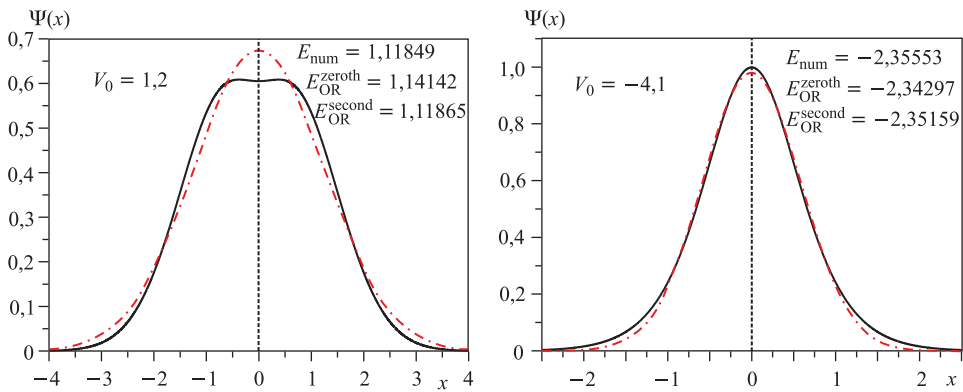


Рис. 6. Сравнение ВФ численного расчета и ВФ метода ОП при различных  $V_0$  для  $c = 1$ . Сплошные линии — ВФ численного расчета; штрихпунктирные — ВФ нулевого порядка ОП.  $E_{\text{num}}$  — численный расчет энергии;  $E_{\text{OR}}^{\text{zeroth}}$  — энергия в нулевом приближении ОП;  $E_{\text{OR}}^{\text{second}}$  — энергия во втором приближении ОП

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была рассчитана энергия основного состояния УШ (1), описывающего двухбозонную связанную систему в одномерной гармонической ловушке, как функция обратной длины рассеяния. Полученная зависимость  $E(a_{1D}^{-1})$  несколько отличается от расчета [9], выполненного в псевдопотенциальном подходе. Наш случай отличается тем, что мы использовали реалистичный потенциал Гаусса, выбор которого является более естественным, так как он учитывает наличие у атомов некой структуры. Также можно заключить, что переход от потенциала конечного радиуса к потенциалу дельта-функции является существенным приближением. Похожее сравнение расчетов, выполненных с трехмерными реалистическим потенциалом и псевдопотенциалом нулевого радиуса, проведено в [10] для двумерной гармонической ловушки.

Определена область применимости метода осцилляторного представления для задачи (1) как функция параметров потенциала взаимодействия. Отклонение метода ОП от численного расчета обусловлено отклонением гауссова поведения осцилляторной ВФ от поведения истинной ВФ. Определение области применимости ОП необходимо при дальнейшем применении метода в случае расчета спектра двухатомной системы в ангармонической ловушке.

Основная сложность при расчете спектра двухатомной системы в ангармонической ловушке связана с тем, что в этом случае разделение переменных относительной координаты и координаты центра масс уже не представляется возможным. Возможность расчета альтернативными методами будет способствовать надежности результатов.

Авторы выражают благодарность В. С. Мележику и Г. В. Ефимову: В. С. Мележику — за постановку задачи, за связанные с ней дискуссии и за проверку правильности ее выполнения; Г. В. Ефимову — за дискуссии, связанные с работой [9], и за применение метода ОП.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chin C. et al.* Feshbach Resonances in Ultracold Gases // *Rev. Mod. Phys.* 2010. V. 82 P. 1225.
2. *Ni K.-K. et al.* Dipolar Collisions of Polar Molecules in the Quantum Regime // *Nature*. 2010. V. 464. P. 1324–1328.
3. *Турлапов А. В.* Экспериментальное исследование ультрахолодного газа ферми-атомов. Дис... д-ра физ.-мат. наук. Нижний Новгород, 2012.
4. *Питаевский Л. П.* Конденсаты Бозе–Эйнштейна в поле лазерного излучения // *УФН*. 2006. Т. 176, № 4. С. 345–364.
5. *Zürn G. et al.* Fermionization of Two Distinguishable Fermions // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 108. P. 075303.
6. *Haller E. et al.* Confinement-Induced Resonances in Low-Dimensional Quantum Systems // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 153203.
7. *Peng S.-G. et al.* Confinement-Induced Resonances in Anharmonic Waveguides // *Phys. Rev. A*. 2011. V. 84. P. 043619.
8. *Dineykhon M. et al.* Oscillator Representation in Quantum Physics // *Lecture Notes in Physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1995. V. 26.
9. *Busch T. et al.* Two Cold Atoms in a Harmonic Trap // *Found. Phys.* 1998. V. 28, No. 4. P. 549.

10. *Bergeman T., Moore M. G., Olshanii M.* Atom–Atom Scattering in the Presence of a Cylindrical Harmonic Potential: Numerical Results and an Extended Analytic Theory // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 163201.
11. *Saeidian S., Melezhik V. S., Schmelcher P.* Multichannel Atomic Scattering and Confinement-Induced Resonances in Waveguides // *Phys. Rev. A.* 2008. V. 77. P. 042721.

Получено 24 июля 2013 г.