

## ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОСТИ

*Е. А. Коваль*<sup>а, б, 1</sup>, *О. А. Коваль*<sup>а, 2</sup>, *В. С. Мележик*<sup>а, б, 3</sup>

<sup>а</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>б</sup> Международный университет природы, общества и человека «Дубна», Дубна, Россия

Разработан алгоритм для численного решения квантовой задачи рассеяния на плоскости. Получено хорошее согласие численных расчетов с известной асимптотикой амплитуды рассеяния в низкоэнергетическом приближении для кругового бесконечно сильного отталкивающего потенциала. Анализ результатов численных расчетов показал, что дифференциальное сечение слабо зависит от угла рассеяния в низкоэнергетическом пределе для финитных потенциалов и анизотропия потенциала порождает угловые особенности в дифференциальных сечениях: при определенных углах сечения имеют ярко выраженные экстремумы.

The algorithm for integration of the two-dimensional (2D) quantum scattering problem is developed. This approach was applied for investigation of anisotropy effects in 2D scattering. We have obtained good agreement of the numerical results with known asymptotics in a low-energy limit. It was found that the differential cross section depends weakly on the scattering angle in the low-energy limit for finite potentials, and the anisotropy of the potential causes angular features of the differential cross sections: at certain angles they have pronounced peaks.

PACS: 34.50.-s; 34.50.Cx

### ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является численное решение задачи о двумерном (2D) рассеянии квантовых частиц с учетом анизотропии их взаимодействия. Двумерная задача рассеяния возникает, в частности, при описании столкновений ультрахолодных атомов и молекул в оптической ловушке, где движение частиц «заморожено» вдоль одного направления и их динамика ограничена движением в плоскости [1–5].

Особый интерес представляет учет анизотропии во взаимодействии между атомами и полярными молекулами с большими дипольными моментами в связи с возможностью моделирования сильнокоррелированных квантовых систем, что было продемонстрировано в недавних экспериментах с ультрахолодными полярными молекулами LiCs и LiK [6, 7].

---

<sup>1</sup>E-mail: e-cov@yandex.ru

<sup>2</sup>E-mail: kov.oksana20@gmail.com

<sup>3</sup>E-mail: melezhik@theor.jinr.ru

## 1. КВАНТОВАЯ ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОСТИ

Задача состоит в численном решении двумерного уравнения Шредингера в полярных координатах  $(\rho, \phi)$  со специальной асимптотикой для  $\psi(\rho, \phi)$  в пределе  $\rho \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} H(\rho, \phi)\psi(\rho, \phi) &= E\psi(\rho, \phi), \\ \psi(\rho, \phi) &\rightarrow e^{i(q\rho)} + f(q, \phi) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где гамильтониан  $H(\rho, \phi)$  имеет вид

$$H(\rho, \phi) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} H_0(\phi) \right) + U(\rho, \phi). \quad (2)$$

Здесь  $q = \sqrt{2\mu E}/\hbar$  обозначает относительный импульс частиц,  $E$  — энергию столкновения,  $\mu$  — приведенную массу,  $\phi$  есть угол рассеяния и  $H_0(\phi) = \partial^2/\partial\phi^2$ . Задача заключается в нахождении амплитуды рассеяния  $f(q, \phi)$  [8] при заданном  $q$ . В общем случае 2D-потенциал взаимодействия  $U(\rho, \phi)$  зависит от угла  $\phi$  и, как следствие, от направления распространения падающей волны, которое определяется углом  $\phi_{\text{in}}$  между относительным импульсом частиц  $\mathbf{q}$  и осью  $X$ . Координатная система всегда может быть повернута таким образом, чтобы падающая волна распространялась вдоль оси  $X$ , при этом потенциал взаимодействия трансформируется следующим образом:  $U(\rho, \phi) \rightarrow U(\rho, \phi + \phi_{\text{in}})$ .

Для решения задачи (1), (2) был использован метод, предложенный в работе [9]. В этом подходе волновая функция  $\psi(\rho, \phi)$  ищется в виде разложения

$$\psi(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{N_b} \sum_{m=-N_b/2}^{N_b/2} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \Psi_j(\rho) \quad (3)$$

по базису  $\xi_m(\phi)$  собственных функций оператора  $H_0(\phi)$ , заданных на разностной сетке узлов  $\phi_j = \frac{2\pi j}{N_b + 1}$  ( $j = 0, 1, \dots, N_b$ ) по угловой переменной  $\phi \in [0, 2\pi]$ :

$$\xi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\phi-\pi)} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad (4)$$

$$H_0(\phi)\xi_m(\phi) = \varepsilon_m \xi_m(\phi), \quad (5)$$

где  $\varepsilon_m = -m^2$ . Набор  $\xi_m(\phi)$  образует квадратную матрицу  $\xi_{jm} \equiv \xi_m(\phi_j)$  ( $m = -N_b/2, -N_b/2 + 1, \dots, N_b/2$ ). Коэффициент  $\xi_{mj}^{-1}$  в (3) обозначает обратную матрицу к  $\xi_{jm}$ .

После подстановки разложения в исходное уравнение получаем систему дифференциальных уравнений

$$\rho^2 \frac{d^2 \Psi_k(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{4} \Psi_k(\rho) + \rho^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(\rho, \phi_k)] \Psi_k(\rho) + \sum_j \zeta_{kj} \Psi_j(\rho) = 0, \quad (6)$$

где  $\zeta_{kj} = \sum_{m=-N_b/2}^{N_b/2} \varepsilon_m \xi_m(\phi_k) \xi_{mj}^{-1}$ . Угловая зависимость заключена в структуре матрицы  $\zeta_{kj}$  и диагональной матрицы значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной  $U_{kj}(\rho) = U(\rho, \phi_k) \delta_{kj}$ . В таком подходе связь между уравнениями системы (6)

осуществляется через постоянную матрицу  $\zeta_{kj}$ , не зависящую от радиальной переменной и определяемую значениями базисных функций в узлах сетки по угловой переменной. При использовании разложения (3) устраняется необходимость трудоемкой процедуры вычисления матричных элементов  $U_{kj}(\rho)$  потенциала взаимодействия вследствие диагональности матрицы, что приводит к экономии расчетного времени. Таким образом, вместо традиционного разложения волновой функции по базису, вычисления матричных элементов гамильтониана и решения возникающей системы интегродифференциальных уравнений задача (1), (2) сведена к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений с матрицей коэффициентов специального вида, допускающего построение экономичных схем для ее вычисления.

**1.1. Граничные условия.** Поскольку радиальные компоненты  $\Psi_j$  стремятся к нулю при  $\rho \rightarrow 0$  (так как выражение  $\Psi_j/\sqrt{\rho}$  должно быть конечным в точке  $\rho = 0$ ), левое граничное условие для  $\Psi_j$  можно записать в виде

$$\Psi_j(0) = 0. \quad (7)$$

Используя разложение плоских волн по базису функций Бесселя<sup>1</sup> [8] и разложение амплитуды рассеяния  $f(q, \phi) = \sum_{m'=-\infty}^{\infty} f_{m'} \xi_{m'}(\phi)$  по базису Фурье (4), получаем правое граничное условие при  $\rho \rightarrow \infty$  в виде

$$\frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{N_b} \xi_{mj}^{-1} \Psi_j(\rho) = i^m J_m(q\rho) \sqrt{2\pi} + \frac{f_m}{\sqrt{-i\rho}} e^{iq\rho}. \quad (8)$$

Здесь мы использовали представление (3)  $\Psi(\rho, \phi_j)$  для асимптотики волновой функции  $\psi(\rho, \phi)$  при  $\rho \rightarrow \infty$  на разностной сетке  $\phi_j$ .

**1.2. Конечно-разностная аппроксимация.** В результате семиточечной аппроксимации производных в (6) получаем систему линейных алгебраических уравнений с блочно-диагональной матрицей коэффициентов:

$$A_n \Psi^{n-3} + B_n \Psi^{n-2} + C_n \Psi^{n-1} + D_n \Psi^n + E_n \Psi^{n+1} + F_n \Psi^{n+2} + G_n \Psi^{n+3} = \mathbf{H}_n, \quad (9)$$

где коэффициенты  $A_n, B_n, C_n, D_n, E_n, F_n, G_n$  являются матрицами,  $\mathbf{H}_n$  — векторами,  $N$  — число узловых точек разностной сетки  $\rho_n (n = 0, 1, \dots, N)$  по радиальной переменной. Граничные условия (8) приводятся к виду (9) путем исключения неизвестного вектора  $f_m$  из выражений (8), записанных в двух конечных точках  $\rho_{N-1}, \rho_N$ .

Блочная структура системы (9) имеет важные преимущества. Блочная матрица может быть сохранена в упакованной форме, которая позволяет оптимально использовать ресурсы компьютера, а система (9) может быть эффективно решена модифицированным методом матричной прогонки [11].

---

<sup>1</sup>Функции Бесселя первого рода, их асимптотическое поведение:  $J_m(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} (z/2)^m \frac{1}{\Gamma(m+1)}$ ,  $m \neq -1, -2, -3, \dots$  и  $J_m(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + e^{i|mz|} O(|z|^{-1})$  ( $|\arg(z)| < \pi$ ) [10].

## 2. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

В качестве примера было рассмотрено применение вычислительной схемы к потенциальному барьеру с контуром основания  $\rho_0(\phi)$ :

$$U(\rho, \phi) = \begin{cases} \infty, & \rho \leq \rho_0(\phi), \\ 0, & \rho > \rho_0(\phi). \end{cases} \quad (10)$$

В низкоэнергетическом пределе  $q \rightarrow 0$  для финитного изотропного потенциала существует параметризация амплитуды рассеяния [2, 8, 12]

$$f(q) \xrightarrow{q \rightarrow 0} -\sqrt{\frac{\pi}{2q}} \frac{1}{\ln \left[ \frac{2}{\exp(\gamma)a_{2D}q} \right] + i\frac{\pi}{2}} \quad (11)$$

через 2D-длину рассеяния  $a_{2D}$ , где  $\gamma \approx 0,5772156649$  — константа Эйлера.

Для бесконечно высокого потенциального барьера (10) с круговым основанием  $\rho_0(\phi) = \rho_0 = \text{const}$  константа  $a_{2D}$  равна  $\rho_0$  [8]. Потенциал такого вида может быть

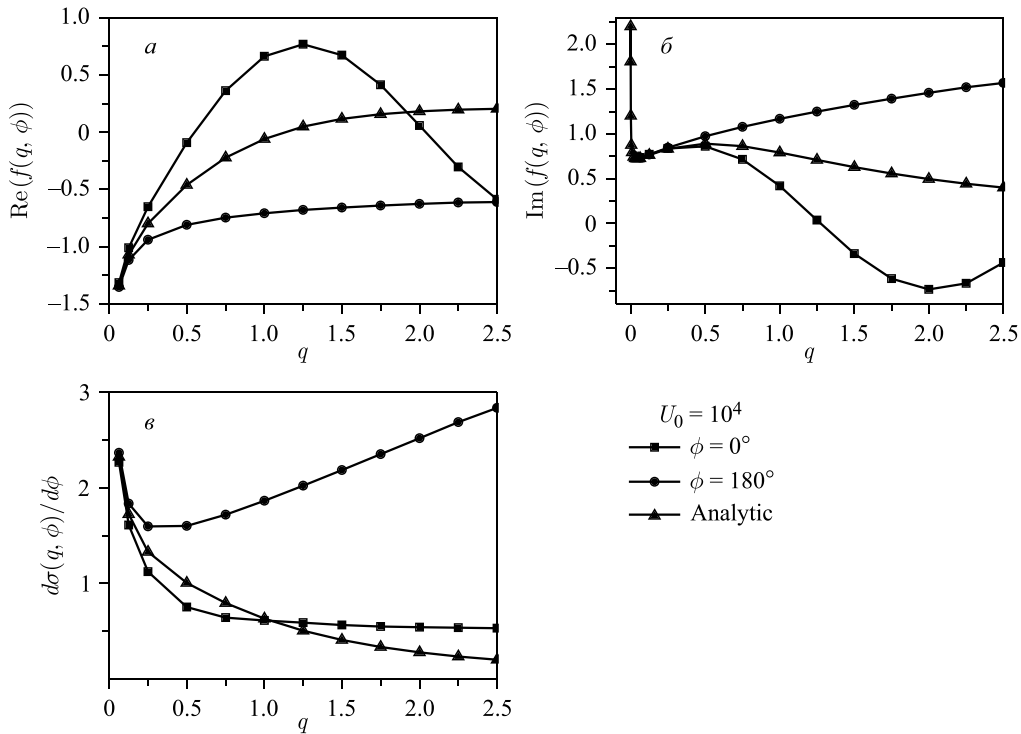


Рис. 1. Зависимость реальной (а) и мнимой (б) частей амплитуды рассеяния и дифференциального сечения рассеяния (в) от относительного импульса для  $\phi_{\text{in}} = 0^\circ$  и  $\rho_0(\phi) = \text{const} = 1$

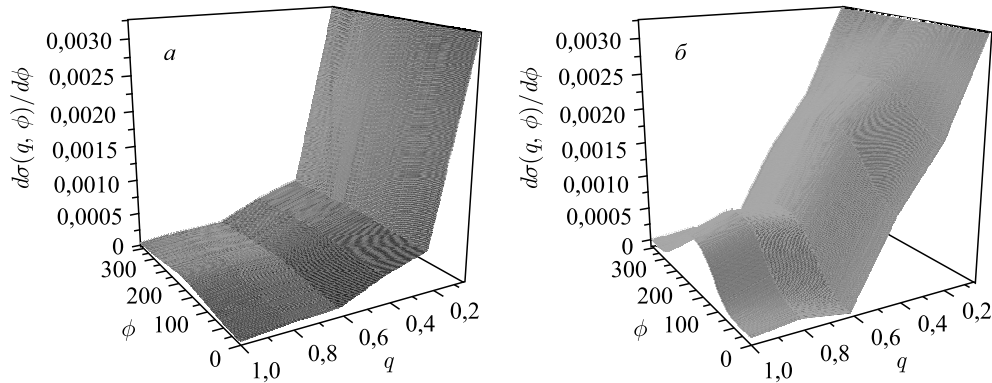


Рис. 2. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от угла рассеяния и относительного импульса для  $\phi_{\text{in}} = 0^\circ$  в случае потенциального барьера  $U_0 = 1000$ : а) с круговым основанием  $\rho_0(\phi) = 1$  и б) с эллиптическим основанием  $\rho_0(\pi/2) = 2$  и  $\rho_0(0) = 1$

аппроксимирован высоким конечным потенциальным барьером:

$$U(\rho, \phi) = \begin{cases} U_0, & \rho \leq \rho_0(\phi), \\ 0, & \rho > \rho_0(\phi) \end{cases} \quad (12)$$

с  $U_0 \rightarrow \infty$ , для которого были проведены вычисления в низкоэнергетическом пределе.

На рис. 1 представлена амплитуда рассеяния, вычисленная для потенциала  $U_0 = 10^4$  и  $\rho_0 = 1$ . Демонстрируется согласие вычисленной амплитуды рассеяния рис. 1, а, б и дифференциального сечения рис. 1, в с аналитической оценкой (11) в низкоэнергетическом пределе.

Для случая *анизотропной* границы барьера  $\rho_0(\phi)$  рассчитанные дифференциальные сечения рассеяния  $\left(\frac{d\sigma(q, \phi)}{d\phi} = |f(q, \phi, \phi_{\text{in}})|^2\right)$  представлены на рис. 2.

Рис. 2 демонстрирует слабую зависимость дифференциального сечения от угла рассеяния в низкоэнергетическом пределе для финитных потенциалов. Анизотропия потенциала взаимодействия порождает угловые особенности в дифференциальных сечениях: при определенных углах появляются ярко выраженные экстремумы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан алгоритм для численного моделирования квантового рассеяния в двумерных системах, например, парных столкновений ультрахолодных атомов в оптических ловушках. Алгоритм не требует вычисления матричных элементов потенциала взаимодействия, в отличие от классических методов разложения по базису, что экономит расчетное время.

Исходная двумерная задача рассеяния сведена к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений 2-го порядка, которая с помощью семиточечной конечно-разностной аппроксимации приводится к системе алгебраических уравнений с

матрицей коэффициентов блочно-диагонального вида. Такая структура матрицы позволяет оптимально использовать вычислительные ресурсы, сохраняя матрицу в упакованной форме, и эффективно применять модификацию метода матричной прогонки для решения краевой задачи.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-02-00351а.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Martinyanov K., Makhalov V., Turlapov A.* Observation of a Two-Dimensional Fermi Gas of Atoms // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 333. P. 105.
2. *Petrov D. S., Shlyapnikov G. V.* Interatomic Collisions in a Tightly Confined Bose Gas // *Phys. Rev. A.* 2001. V. 64. P. 012706.
3. *Inouye S. et al.* Observation of Feshbach Resonances in a Bose–Einstein Condensate // *Nature.* 1998. V. 392. P. 151.
4. *Verhaar B. J. et al.* Scattering Length and Effective Range in Two Dimensions: Application to Adsorbed Hydrogen Atoms // *J. Phys. A.* 1984. V. 17. P. 595.
5. *Ando T., Fowler A. B., Stern F.* Electronic Properties of Two-Dimensional Systems // *Rev. Mod. Phys.* 1982. V. 54. P. 437.
6. *Deiglmayr J. et al.* Formation of Ultracold Polar Molecules in the Rovibrational Ground State // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 101. P. 133004.
7. *Voigt A.-C. et al.* Ultracold Heteronuclear Fermi–Fermi Molecules // *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 102. P. 020405.
8. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Курс теоретической физики: Учеб. пособие: В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е изд., испр. М.: Физматлит, 2004.
9. *Melezhik V. S.* New Method for Solving Multidimensional Scattering Problem // *J. Comp. Phys.* 1991. V. 92. P. 67.
10. *Abramowitz M., Stegun A. I.* Handbook of Mathematical Functions. Washington: U.S. Nat. Bureau of Standards, 1965.
11. *Gelfand I. M., Fomin S. V.* Calculus of Variations. New York: Dover Publ., 1991.
12. *Пунышев В. В.* Рассеяние медленной квантовой частицы аксиально-симметричным короткодействующим потенциалом. Препринт ОИЯИ Р4-2012-119. Дубна, 2012.