

## ДВУХАТОМНАЯ СИСТЕМА В ОДНОМЕРНОЙ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР

*И. С. Ишмухамедов<sup>1</sup>, Д. Т. Азнабаев, С. А. Жаугашева*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна  
Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алма-Ата, Казахстан

Численно исследуется двумерное стационарное уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1) + V(x_2) + g\delta(x_1 - x_2) \right\} \Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2),$$

описывающее двухатомную систему в оптической ловушке, где  $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ ,  $V(x_i) = V_0 \sin^2(k_x x_i)$  — потенциал взаимодействия атомов с ловушкой и  $g\delta(x_1 - x_2)$  — потенциал межатомного взаимодействия. Ранее аналогичная задача решалась аналитически в приближении гармонического взаимодействия  $V_h(x_i) = (1/2)m\omega x_i^2$  с ловушкой, приводящей к разделению переменных центра масс  $y = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}$  и относительного движения  $x = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}$ . Ангармонизм ловушки нарушает такое разделение переменных, и тем самым задача значительно усложняется. В предыдущих работах ангармонизм ловушки  $V_a = V - V_h$  учитывался по теории возмущений. В нашей работе сдвиги уровней двухатомной системы вычислены вне рамок теории возмущений для различных параметров межатомного взаимодействия  $g$ . Полученные результаты сравниваются с расчетами, выполненными в рамках теории возмущений.

We numerically investigate the following two-body stationary Schrödinger equation:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1) + V(x_2) + g\delta(x_1 - x_2) \right\} \Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2),$$

where  $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ , the potential  $V(x_i) = V_0 \sin^2(k_x x_i)$  describes an interaction of atoms with a trap and  $g\delta(x_1 - x_2)$  is the interatomic potential. Previously a similar problem has been solved analytically for the harmonic interaction  $V_h(x_i) = (1/2)m\omega x_i^2$  with the trap that leads to the separation of the center-of-mass  $y = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}$  and the relative motion  $x = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}$  coordinates. An anharmonicity of the trap couples these motions and therefore the problem becomes significantly complicated. In previous works the anharmonicity of the trap  $V_a = V - V_h$  is taken into account in the framework of perturbation theory. In this work energy level shifts of a two-body atomic system are calculated beyond perturbation theory for various parameters of the interatomic interaction  $g$ . The obtained results are then compared to those computed within perturbation theory.

PACS: 03.65.-w

---

<sup>1</sup>E-mail: ishmukh@theor.jinr.ru

## ВВЕДЕНИЕ

Возможность охлаждения атомов до очень низких температур сделала эту область физики одной из наиболее интенсивно развивающихся в настоящее время. В условиях эксперимента стало доступным управление межатомным взаимодействием практически в любых диапазонах значений константы связи, а также создание оптических ловушек с заданным числом плененных в них атомов, находящихся в определенных спиновых состояниях [1, 2]. Все это позволяет моделировать такие явления, как сверхтекучесть и газ Тонкса–Жирардо; создавать кристаллические структуры с заданным числом и типом атомов, не содержащих посторонних примесей; моделировать элементы квантового компьютера [1, 2].

Тип геометрии оптической ловушки определяет класс исследуемых моделей. Оптическая ловушка создается различным числом пучков лазеров, причем, варьируя как число пучков, так и их взаимную ориентацию, можно создавать весьма широкий выбор ловушек различной формы. Наиболее распространенными в настоящее время являются ловушки с квазиодномерной и квазидвумерной геометрией [3], в которых движение атомов только по одной или двум переменным является свободным. Это открывает возможность исследования квантовых систем пониженной размерности.

В известной работе [4] по описанию спектра атомов в оптической ловушке ее форма аппроксимировалась параболической функцией. Такое гармоническое приближение для потенциала ловушки во многих случаях оказывается оправданным, что часто позволяет решать задачу аналитически [4, 5].

В недавнем эксперименте [3] были обнаружены резонансы, исследование которых потребовало выхода за рамки гармонического приближения. Частичное объяснение результатов этого эксперимента удалось получить с помощью учета так называемых ангармонических поправок к гармонической аппроксимации потенциала ловушки [6, 7]. Учет ангармонических поправок в [6, 7] был выполнен в первом порядке теории возмущений. Сложность расчета спектра в случае ангармонического потенциала состоит в том, что переменные движения центра масс и относительного движения уже не разделяются и понизить размерность уравнения, как в случае гармонической ловушки, не удастся.

В данной работе численно исследуется двухчастичная квантовая система одномерной ангармонической ловушки. Ангармонические поправки учитываются вне рамок теории возмущений в отсутствие разделения движения центра масс и относительного движения. Также вычислен спектр для точного потенциала ловушки, который в одномерном случае имеет вид  $V(x) = V_0 \sin^2 \left( \frac{2\pi}{\lambda_x} x \right)$ . Полученные результаты сравниваются с первым порядком теории возмущений для оценки ее применимости.

Статья построена следующим образом. В разд. 1 обсуждается постановка задачи, а также методы решения уравнения Шредингера с ангармоническим потенциалом — численный метод и построение ряда теории возмущений по ангармонической поправке. В разд. 2 представлено численное решение одномерного уравнения Шредингера с ангармоническим потенциалом ловушки, а также приводится сравнение с первым порядком теории возмущений. В заключении обсуждаются полученные результаты.

## 1. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ

Рассмотрим одномерный случай двухчастичного гамильтониана:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1) + V(x_2) + g\delta(x_1 - x_2), \quad (1.1)$$

где  $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ ,  $V(x_i) = V_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{\lambda_x} x_i\right)$ ,  $i = 1, 2$ , — точный потенциал оптической ловушки, а  $g\delta(x_1 - x_2)$  имеет смысл потенциала межатомного взаимодействия. Константа связи  $g = -2/a$  имеет простую зависимость от одномерной длины рассеяния  $a$ . Будем искать только симметричные решения задачи относительно замены  $x_1 \leftrightarrow \pm x_2$ .

Представим потенциал ловушки с учетом первого неисчезающего ангармонического члена [7]:

$$V_{\text{acir}}(x) = \omega\hbar \left( \frac{1}{2} \frac{x^2}{\ell^2} + \alpha \frac{x^4}{\ell^4} \right), \quad (1.2)$$

где

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \alpha = -\frac{8\pi^2\hbar}{12\lambda_x^2 m\omega}, \quad \omega = \frac{2\pi}{\lambda_x} \sqrt{\frac{2|V_0|}{m}} \quad (1.3)$$

и  $\alpha$  — параметр ангармонизма ловушки. С учетом введенных параметров  $\alpha$  и  $\omega$  перепишем точный потенциал ловушки в виде

$$V(x) = V_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{\lambda_x} x\right) = -\frac{\omega\hbar}{12\alpha} \sin^2\left(\sqrt{-6\alpha} \frac{x}{\ell}\right). \quad (1.4)$$

Перейдем к переменным относительного движения и движения центра масс, сохраняющим кинетическую часть в гамильтониане симметричной [4]:

$$\begin{cases} y = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \\ x = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}. \end{cases} \quad (1.5)$$

Задачу будем решать в единицах, в которых единицы длины и энергии задаются как  $\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  и  $\hbar\omega$ . В этих переменных гамильтониан (1.1) выглядит так:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + W(x, y) + \frac{g}{\sqrt{2}} \delta(x). \quad (1.6)$$

В случае учета лишь первого неисчезающего ангармонического члена потенциал  $W(x, y)$  имеет вид

$$\mathcal{V}(x, y) = \frac{1}{2}[y^2 + x^2 + \alpha(x^4 + y^4 + 6x^2y^2)], \quad (1.7)$$

а в общем случае он равен

$$\mathcal{W}(x, y) = -\frac{1}{12\alpha} [\sin^2(\sqrt{-3\alpha}(y-x)) + \sin^2(\sqrt{-3\alpha}(y+x))]. \quad (1.8)$$

**1.1. Численный метод.** Рассмотрим форму потенциалов (1.7) и (1.8) при  $\alpha = -0,03025$ <sup>1</sup> (рис. 1).

Оба потенциала имеют конечную высоту барьера, что приводит к уширению уровней энергии. Этот эффект нами не рассматривается. Для этого в максимуме потенциального барьера ставится бесконечная непроницаемая стенка. При этом для различных  $\alpha$  положение стенки варьируется. Область, в которой сосредоточен потенциал, для простоты выбираем в виде круга радиуса  $r$ .

На рис. 2 иллюстрируется изменение потенциала (1.7) при изменении границы  $x^2 + y^2 < r^2$  для  $\alpha = -0,03025$ .

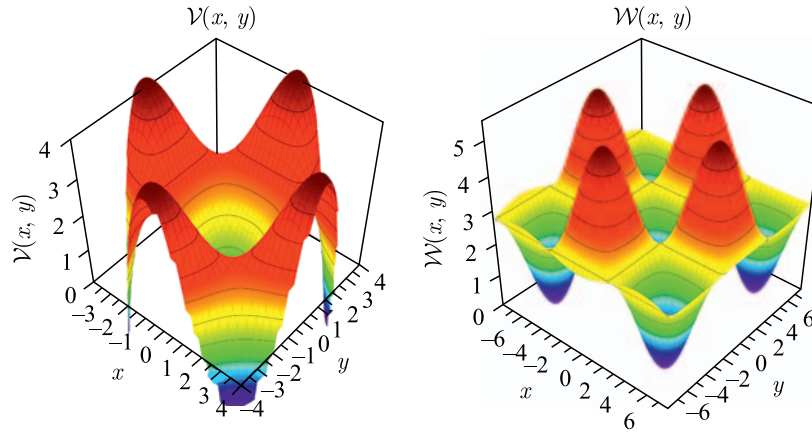


Рис. 1. Графики потенциалов (1.7) и (1.8)

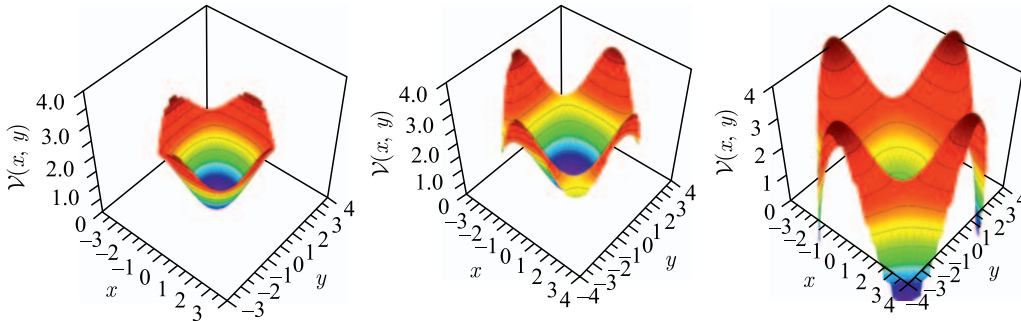


Рис. 2. Потенциал  $V(x, y)$ , заданный в области  $x^2 + y^2 < r^2$ . Здесь представлены три случая:  $r = 2,7, 3,5, 4,5$

Оптическая ловушка, как правило, содержит несколько потенциальных ям, однако нашей целью является вычисление стационарных уровней в пределах одной ямы. Из графиков на рис. 2 видно, что при значениях  $r$ , превышающих  $r = 2,7$ , потенциал начинает

<sup>1</sup>Это значение равно значению  $\alpha$  из эксперимента [3], однако применено к нашему случаю одномерной геометрии.

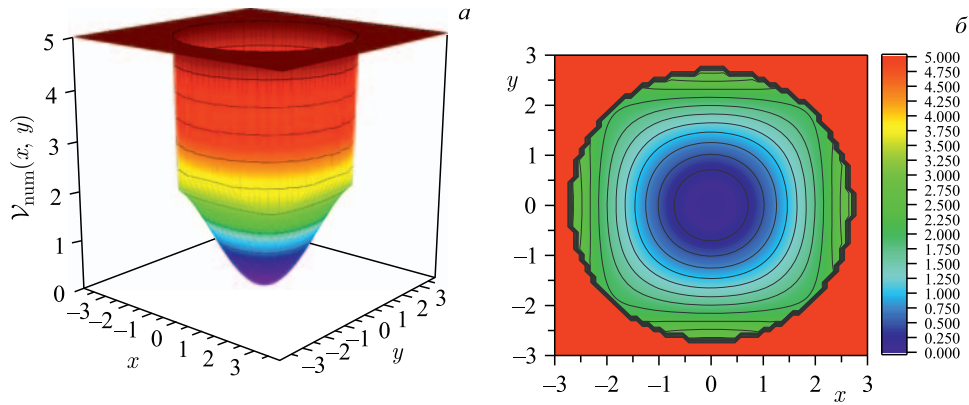


Рис. 3. Потенциал со стенкой  $\mathcal{V}_{\text{num}}(x, y)$ <sup>1</sup>, используемый при численном расчете спектра гамильтониана (1.6)

уменьшаться, что отвечает заданию непроницаемой стенки в максимуме потенциального барьера. С заданной таким образом стенкой потенциал при  $r = 2,7$  и  $\alpha = -0,03025$  приведен на рис. 3.

Так, в численных расчетах вместо потенциала (1.7) мы имеем дело с потенциалом

$$\mathcal{V}_{\text{num}}(x, y) = \begin{cases} \mathcal{V}(x, y), & x^2 + y^2 < r^2, \\ 10^{10}, & x^2 + y^2 \geq r^2. \end{cases} \quad (1.9)$$

То же для потенциала (1.8), который мы обозначим  $\mathcal{W}_{\text{num}}(x, y)$ . Результаты представлены в таблице.

**Границы потенциалов  $\mathcal{V}_{\text{num}}(x, y)$  и  $\mathcal{W}_{\text{num}}(x, y)$**

$\alpha$	$r$	
	$\mathcal{V}_{\text{num}}(x, y)$	$\mathcal{W}_{\text{num}}(x, y)$
-0,03025	2,7	3,3
-0,06	2	2,4

Опишем вычислительную схему для решения двумерного уравнения Шредингера:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + W(x, y) + \frac{g}{\sqrt{2}} \delta(x) \right\} \psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (1.10)$$

Мы будем использовать конечно-разностную аппроксимацию производных, входящих в уравнение (1.10), причем для переменной  $y$  аппроксимация будет шестого порядка

<sup>1</sup>Неровности на краю потенциала на рис. б обусловлены тем, что отображено относительно небольшое число точек.

точности, а для  $x$  — второго. В результате уравнение (1.10) принимает вид

$$-\frac{1}{2h^2}\widehat{\psi}(x-h) + \left( -\frac{1}{2}\widehat{D}_y + \widehat{W}(x) + \frac{g\widehat{I}}{\sqrt{2}}\delta(x) + \frac{\widehat{I}}{h^2} \right) \widehat{\psi}(x) - \frac{1}{2h^2}\widehat{\psi}(x+h) = E\widehat{\psi}(x). \quad (1.11)$$

Здесь

$$\widehat{D}_y = \frac{1}{180h_y^2} \begin{pmatrix} -490 & 270 & -27 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 270 & -490 & 270 & -27 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -27 & 270 & -490 & 270 & -27 & 2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 270 & -490 \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

— матрица, соответствующая семиточечной аппроксимации производной второго порядка по  $y$ ;

$$\widehat{\psi}(x) = \begin{pmatrix} \psi(x, y_1) \\ \psi(x, y_2) \\ \psi(x, y_3) \\ \vdots \\ \psi(x, y_{N_y-1}) \\ \psi(x, y_{N_y}) \end{pmatrix}; \quad (1.13)$$

$$\widehat{W}(x) = \begin{pmatrix} W(x, y_1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & W(x, y_2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & W(x, y_3) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & W(x, y_{N_y}) \end{pmatrix}; \quad (1.14)$$

$h$  — шаг по координате  $x$ ;  $h_y$  — шаг по координате  $y$ ;  $N_y$  — число точек сетки по переменной  $y$ ;  $\widehat{I}$  — единичная матрица.

Оценка точности численного расчета, связанного с величиной шага  $h$  и  $h_y$ , дает погрешности, равные долям процента, что вполне достаточно для наших расчетов.

Для учета вклада от дельта-функции проинтегрируем уравнение (1.10)<sup>1</sup> по переменной  $x$  от  $-h/2$  до  $h/2$  и получившееся уравнение преобразуем таким образом, чтобы точность производных по  $x$  была порядка  $h^2$ . Опуская детали вычислений, мы получим краевое условие в точке  $x = 0$  в виде

$$\widehat{C}\widehat{\psi}(-h) + \widehat{B}\widehat{\psi}(0) + \widehat{C}\widehat{\psi}(h) = E\frac{h}{12}\widehat{\psi}(-h) + E\frac{5h}{12}\widehat{\psi}(0) + E\frac{h}{12}\widehat{\psi}(h), \quad (1.15)$$

<sup>1</sup>Идея такого учета дельта-функции в численной схеме предложена С. И. Виницким и В. И. Коробовым.

где

$$\widehat{C} = -\frac{\widehat{I}}{2h} - \frac{h}{24}\widehat{D}_y + \frac{h \cdot \widehat{W}(h/2)}{12}, \quad (1.16)$$

$$\widehat{B} = \frac{\widehat{I}}{h} - \frac{5h}{12}\widehat{D}_y + \frac{h}{6}(\widehat{W}(h/2) + 4\widehat{W}(0)) + \frac{g\widehat{I}}{\sqrt{2}}. \quad (1.17)$$

Во всей остальной области мы имеем уравнение

$$-\frac{1}{2h^2}\widehat{\psi}(x-h) + \left(-\frac{1}{2}\widehat{D}_y + \widehat{W}(x) + \frac{\widehat{I}}{h^2}\right)\widehat{\psi}(x) - \frac{1}{2h^2}\widehat{\psi}(x+h) = E\widehat{\psi}(x). \quad (1.18)$$

Таким образом, (1.15) и (1.18) представляют собой матричное уравнение на собственные значения:

$$\mathbf{A}\widehat{\psi} = E\mathbf{B}\widehat{\psi}, \quad (1.19)$$

где (для наглядности приведем матрицы для сетки размерностью  $5 \times 5$ ):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \widehat{B}(x_1) & \widehat{C} & 0 & 0 & 0 \\ \widehat{C} & \widehat{B}(x_2) & \widehat{C} & 0 & 0 \\ 0 & \widehat{C} & \widehat{B} & \widehat{C} & 0 \\ 0 & 0 & \widehat{C} & \widehat{B}(x_4) & \widehat{C} \\ 0 & 0 & 0 & \widehat{C} & \widehat{B}(x_5) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \widehat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \widehat{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h}{12}\widehat{I} & \frac{5h}{12}\widehat{I} & \frac{h}{12}\widehat{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \widehat{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \widehat{I} \end{pmatrix}, \quad \widehat{\varphi} = \begin{pmatrix} \widehat{\varphi}_1 \\ \widehat{\varphi}_2 \\ \widehat{\varphi}_3 \\ \widehat{\varphi}_4 \\ \widehat{\varphi}_5 \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$\widehat{B}(x_i) = -\frac{1}{2}\widehat{D}_y + \widehat{W}(x_i) + \frac{\widehat{I}}{h^2}, \quad (1.20)$$

$$\widehat{C} = -\frac{\widehat{I}}{2h^2}, \quad (1.21)$$

размерности каждой из матриц «с шапкой» определяются числом точек сетки по переменной  $y$ , как в (1.13) и (1.14).

Задача (1.19) решалась методом обратной итерации. Схема решения выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} (\mathbf{A} - E_0\mathbf{B})\widehat{\varphi}^{(k)} = \mathbf{B}\widehat{\varphi}^{(k-1)}, \\ E = E_0 + \frac{1}{(\widehat{\varphi}^{(k)}, \widehat{\varphi}^{(k-1)})}, \end{cases} \quad k = \overline{1, k_{\max}}, \quad (1.22)$$

$$\widehat{\psi}(x) = \widehat{\varphi}^{(k_{\max})}, \quad (1.23)$$

где  $E_0$  — начальное приближение энергии уровня;  $\hat{\varphi}^{(0)}$  — начальный вектор, а вычисляемый вектор  $\hat{\varphi}^{(k)}$  нормируется на каждой итерации.

Искомая волновая функция  $\hat{\psi}(x)$  уравнения (1.11) и соответствующая энергия уровня  $E$  находятся в конце итерационного процесса  $k_{\max}$ .

**1.2. Теория возмущений.** Вычислим также первый порядок теории возмущений для уравнения (1.10) с потенциалом (1.7). В качестве возмущения возьмем потенциал

$$H_I = \frac{\alpha}{2}(x^4 + y^4 + 6x^2y^2), \quad (1.24)$$

а невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$H_0 = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{g}{\sqrt{2}}\delta(x) + \frac{1}{2}(y^2 + x^2). \quad (1.25)$$

В результате мы получим уравнение

$$(H_0 + H_I)\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (1.26)$$

Выделенный таким образом невозмущенный гамильтониан  $H_0$  допускает разделение переменных, и уравнение

$$H_0\psi_{nN}^{(0)}(x, y) = E_{nN}^{(0)}\psi_{nN}^{(0)}(x, y) \quad (1.27)$$

решается аналитически. Уравнение относительного движения

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{\sqrt{2}}\delta(x)\right)\chi_n(x) = \varepsilon_n\chi_n(x) \quad (1.28)$$

имеет решения, полученные в работах [4, 8]. Собственные энергии  $\varepsilon_n$  находятся при решении уравнения

$$2\frac{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon_n}{2} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\varepsilon_n}{2} + \frac{1}{4}\right)} + \frac{g}{\sqrt{2}} = 0, \quad (1.29)$$

а соответствующие волновые функции имеют вид

$$\chi_n(x) = \mathcal{N}_n e^{-x^2/2} U\left(\frac{1}{4} - \frac{\varepsilon_n}{2}, \frac{1}{2}, x^2\right), \quad n = 0, 2, 4, \dots, \quad (1.30)$$

где  $U(a, b, z)$  — функции Куммера, а  $\mathcal{N}_n$  — нормировочная константа. Уравнение, описывающее движение центра масс,

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}y^2\right)\varphi_N(y) = \mathcal{E}_N\varphi_N(y) \quad (1.31)$$

имеет стандартные решения для одномерного гармонического осциллятора:  $\mathcal{E}_N = N + (1/2)$ .



Теперь, чтобы вычислить энергию с учетом первого порядка теории возмущений, используем формулу

$$E_{nN} = \varepsilon_n + \mathcal{E}_N + \langle n, N | H_I | n, N \rangle = \varepsilon_n + \mathcal{E}_N + \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \chi_n^2(x) \varphi_N^2(y) \frac{\alpha}{2} (x^4 + y^4 + 6x^2y^2). \quad (1.32)$$

Опуская детали вычислений, для состояний с  $N = 0$  получаем

$$E_{n0} = \frac{1}{2} + \varepsilon_n + \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_n^2(x) x^2 (3 + x^2) + \frac{3\alpha}{8}. \quad (1.33)$$

Для состояний с  $N = 2$  имеем

$$E_{n2} = \frac{5}{2} + \varepsilon_n + \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_n^2(x) x^2 (15 + x^2) + \frac{39\alpha}{8}. \quad (1.34)$$

## 2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

**2.1. Одномерная задача.** Сначала исследуем спектр более простого (одномерного) гамильтониана

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \lambda x^4 + \kappa \delta(x) \quad (2.1)$$

по схеме, изложенной выше. Здесь  $x \in \mathbb{R}$ , а  $\lambda$  и  $\kappa$  — некоторые параметры; в точке максимума  $x_{\max} = \pm \frac{1}{2\sqrt{|\lambda|}}$  потенциального барьера  $\frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4$  при  $\lambda < 0$  ставится бесконечная стенка.

Как и в двумерном случае (см. ниже), оценим первый порядок теории возмущений для задачи (2.1). Здесь поправка к энергии имеет более простой вид и энергия в первом порядке теории возмущений определяется как

$$E^{\text{th}} = \varepsilon_n + \lambda \langle n | x^4 | n \rangle = \varepsilon_n + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_n^2(x) x^4, \quad (2.2)$$

где  $\varepsilon_n$  и  $\chi_n(x)$  определяются из (1.29) и (1.30), где в (1.29) нужно использовать параметр  $\kappa$  вместо параметра  $g/\sqrt{2}$ .

В эксперименте [2] была реализована квазиодномерная геометрия, где также оценивалась формула из работы [4]. Исследование в [2] проводилось в области значений  $-0,4 \lesssim -1/\kappa \lesssim 0,4$  для основного состояния и первого четного возбужденного состояния  $n = 2$ . К решениям для этих состояний мы добавили результаты для второго четного возбужденного состояния  $n = 4$ . Область отрицательных значений  $-1/\kappa$  соответствует состояниям  $n = 0$  и  $n = 2$ , а область положительных значений  $-1/\kappa$  — состояниям  $n = 2$  и  $n = 4$ . Результаты представлены на рис. 4.

При  $\lambda = \pm 0,025$ , для низших состояний, обнаруживается хорошее согласие численного решения и решения, полученного методом теории возмущений. При  $\lambda = -0,05$

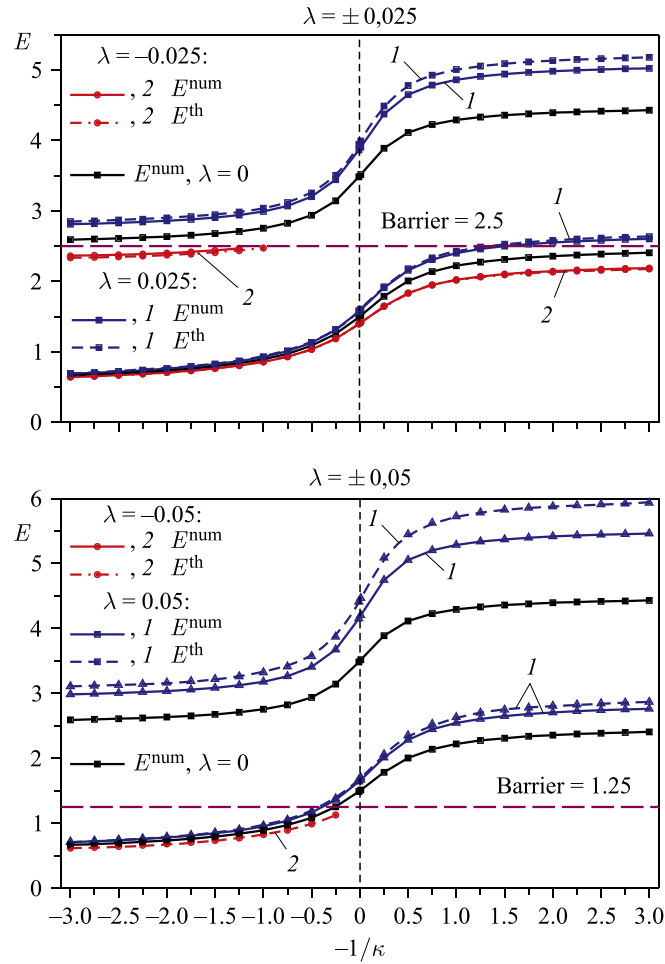


Рис. 4 (цветной в электронной версии). Энергетический спектр гамильтониана (2.1). Сплошные линии относятся к численному расчету спектра, штриховые — к расчету по теории возмущений по формуле (2.2). Синие кривые (1) относятся к  $\lambda > 0$ , красные (2) — к  $\lambda < 0$ . Линия с названием «барьер» указывает границу энергии, выше которой энергия уровня начинает превышать потенциальный барьер  $(1/2)x^2 + \lambda x^4$

значительное отклонение двух решений (кривая численного решения практически сливается с решением при  $\lambda = 0$ ) можно объяснить тем, что уровень энергии приближается к вершине потенциального барьера  $(1/2)x^2 + \lambda x^4$ , где начинает сильно проявляться наличие бесконечной стенки.

**2.2. Двумерная задача.** На рис. 5 представлены результаты решения уравнения (1.10), полученные двумя методами — численным, с потенциалами  $\mathcal{V}_{\text{num}}(x, y)$  и  $\mathcal{W}_{\text{num}}(x, y)$ , а также по теории возмущений с потенциалом (1.7). На этом же графике приведены результаты расчетов для случая двумерной гармонической ловушки, т. е. решения уравнения (1.10) при  $\alpha = 0$ . Рассчитанные спектры представлены в зависимости от обратной длины рассеяния  $1/a$ .

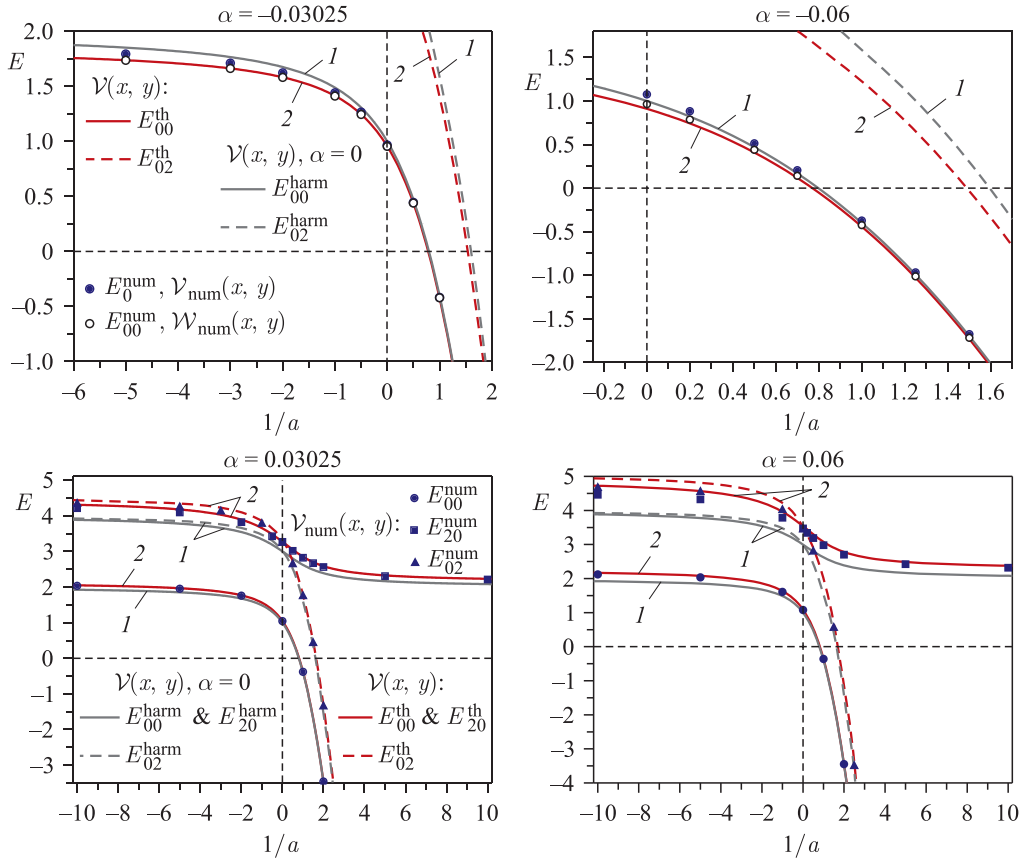


Рис. 5 (цветной в электронной версии). Энергетический спектр гамильтониана (1.6) для трех состояний  $(n = 0, N = 0)$ ,  $(n = 2, N = 0)$  и  $(n = 0, N = 2)$ . Синими (темными) точками показаны численные расчеты для потенциала  $\mathcal{V}_{\text{num}}$ , светлыми кружками — для потенциала  $\mathcal{W}_{\text{num}}$ ; серыми линиями (1) показаны расчеты  $E_{nN}^{(0)}$  из (1.27), красными (2) — решения первого порядка теории возмущений (1.33) и (1.34)

Ограниченность спектров на рис. 5, при  $\alpha = -0,03025$  и  $\alpha = -0,06$ , в отрицательной области  $1/a$  обусловлена тем, что здесь уровни энергии достигают барьера потенциала  $\mathcal{V}(x, y)$ .

Здесь также представлены расчеты при положительных  $\alpha$  для сравнения с теорией возмущений. При отрицательных  $\alpha$  ситуация подобна одномерному случаю, когда разница численного решения и решения по теории возмущений увеличивается, что также можно объяснить приближением энергии уровня, рассчитанной численным методом, к вершине потенциального барьера.

**2.3. Оценка сходимости теории возмущений.** Оценим сходимость теории возмущений по критерию

$$|\mathcal{V}_{mM,nN}| \ll |E_{mM}^{(0)} - E_{nN}^{(0)}|, \tag{2.3}$$

где матричные элементы

$$\mathcal{V}_{mM,nN} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \chi_m(x) \varphi_M(y) H_I \chi_n(x) \varphi_N(y), \quad (2.4)$$

а энергия в нулевом порядке теории возмущений

$$E_{nN}^{(0)} = \varepsilon_n + \mathcal{E}_N. \quad (2.5)$$

Для оценки (2.3) рассмотрим лишь комбинации с двумя четными нижними уровнями. Это даст хотя и не строгий, но более-менее качественный критерий применимости теории. Таким образом, оценим матричные элементы  $\mathcal{V}_{00,20}$ ,  $\mathcal{V}_{00,02}$ ,  $\mathcal{V}_{20,22}$  и  $\mathcal{V}_{02,22}$ :

$$\mathcal{V}_{00,20} = \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_0(x) \chi_2(x) \left( x^4 + 3x^2 + \frac{3}{4} \right), \quad (2.6)$$

$$\mathcal{V}_{00,02} = \frac{3\alpha}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_0^2(x) x^2 + \frac{3\alpha}{2\sqrt{2}}, \quad (2.7)$$

$$\mathcal{V}_{20,22} = \frac{3\alpha}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_2^2(x) x^2 + \frac{3\alpha}{2\sqrt{2}}, \quad (2.8)$$

$$\mathcal{V}_{02,22} = \frac{\alpha}{8} \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_2(x) \chi_0(x) (4x^4 + 60x^2 + 39). \quad (2.9)$$

Для оценки сходимости теории возмущений матричных элементов (2.6)–(2.9) рассмотрим следующие величины:

$$t_1 = \left| \frac{|\mathcal{V}_{00,20}| - |E_{00}^{(0)} - E_{20}^{(0)}|}{\mathcal{V}_{00,20}} \right| \cdot 100, \% \quad (2.10)$$

$$t_2 = \left| \frac{|\mathcal{V}_{00,02}| - |E_{00}^{(0)} - E_{02}^{(0)}|}{\mathcal{V}_{00,02}} \right| \cdot 100, \% \quad (2.11)$$

$$t_3 = \left| \frac{|\mathcal{V}_{20,22}| - |E_{20}^{(0)} - E_{22}^{(0)}|}{\mathcal{V}_{20,22}} \right| \cdot 100, \% \quad (2.12)$$

$$t_4 = \left| \frac{|\mathcal{V}_{02,22}| - |E_{02}^{(0)} - E_{22}^{(0)}|}{\mathcal{V}_{02,22}} \right| \cdot 100, \%. \quad (2.13)$$

Результаты расчетов оценок (2.10)–(2.13), в зависимости от обратной длины рассеяния, характеризующие отклонение от критерия (2.3) величин матричных элементов (2.6)–(2.9), представлены на рис. 6.

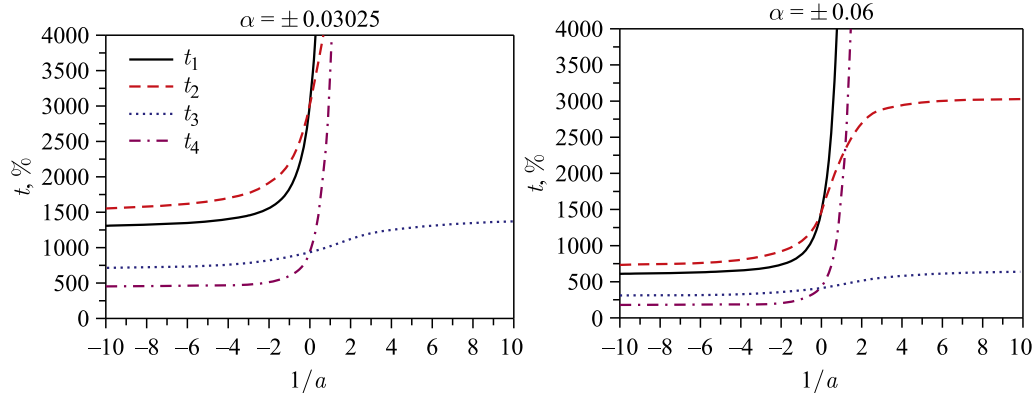


Рис. 6. Оценка области сходимости теории возмущений

Из графиков видно, что при значениях  $\alpha = \pm 0,03025$  величины (2.10)–(2.13) имеют большие значения в сравнении со случаями  $\alpha = \pm 0,06$ , что говорит о приемлемости метода при малых  $\alpha$ . Эта ситуация также наблюдается на рис. 5, где видно хорошее согласие теории возмущений с численным решением при  $\alpha = \pm 0,03025$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вычислены спектры одномерного и двумерного гамильтонианов (1.6) и (2.1). В работе учтен вклад ангармонических поправок к гармонической части потенциала ловушки в спектры систем, описываемых уравнениями (1.6) и (2.1). В случае (1.6) также вычислен спектр для точного потенциала ловушки (1.8).

В обоих случаях, при отрицательных  $\alpha$  и  $\lambda$ , потенциал ловушки имеет конечный барьер. Мы поставили себе цель рассчитать спектр в отсутствие уширения уровней, возникающего за счет конечной ширины барьера, путем добавления бесконечной потенциальной стенки. Наиболее подходящим, на наш взгляд, является расположение стенки в области максимума потенциального барьера.

В случае первого не исчезающего ангармонического члена в потенциале ловушки в (1.6) и (2.1) результат численного расчета мы сравнивали с расчетом, проведенным методом первого порядка теории возмущений. При небольших параметрах ангармонизма  $\alpha$  и  $\lambda$ , для низших состояний, получено хорошее согласие обоих подходов. Для гамильтониана (1.6) также проведена оценка применимости теории возмущений в виде условия (2.3), которая вполне согласуется с результатом, представленным на рис. 5.

Предложенная нами схема по учету вклада ангармонических поправок в спектр стационарных малочастичных квантовых систем позволяет обобщить задачу и на нестационарный случай в отсутствие разделения движений центра масс и относительного движения.

Авторы выражают благодарность В. С. Мележику за предложенные задачу и схему ее решения; В. И. Коробову и С. И. Виницкому — за существенные советы как по задаче, так и по улучшению метода вычисления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Chin C. et al.* Feshbach Resonances in Ultracold Gases // *Rev. Mod. Phys.* 2010. V. 82. P. 1225.
2. *Zürn G. et al.* Fermionization of Two Distinguishable Fermions // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 108. P. 075303.
3. *Haller E. et al.* Confinement-Induced Resonances in Low-Dimensional Quantum Systems // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 153203.
4. *Busch T. et al.* Two Cold Atoms in a Harmonic Trap // *Found. Phys.* 1998. V. 28, No. 4. P. 549.
5. *Olshanii M.* Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 81. P. 938.
6. *Sala S., Schneider P.-I., Saenz A.* Inelastic Confinement-Induced Resonances in Low-Dimensional Quantum Systems // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. P. 073201.
7. *Peng S.-G. et al.* Confinement-Induced Resonances in Anharmonic Waveguides // *Phys. Rev. A.* 2011. V. 84. P. 043619.
8. *Murphy D.S. et al.* Boson Pairs in a One-Dimensional Split Trap // *Phys. Rev. A.* 2007. V. 76. P. 053616.

Получено 15 марта 2015 г.