

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОСТИ

Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория теоретической физики

Коваль Е.А.,
Коваль О.А.,
д.ф.-м.н. Мележик В.С.

План



- постановка задачи двумерного (2D) квантового рассеяния
- алгоритм численного решения
- диполь-дипольное рассеяние
- результаты
- заключение

Постановка задачи 2D рассеяния

- Создание вычислительного алгоритма для решения задачи рассеяния квантовой частицы на *анизотропных потенциалах общего вида*
- Проверка согласованности численных результатов с известными аналитическими. В частности, сравнение численных результатов с известной асимптотикой амплитуды рассеяния
 - в пределе низких энергий
 - для бесконечно высокого потенциального барьера

Постановка задачи 2D рассеяния

- Двумерное уравнение Шредингера:

$$\begin{cases} H(\rho, \phi)\Psi(\rho, \phi) = E\Psi(\rho, \phi) \\ \Psi(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} e^{iq\rho \cos(\phi)} + f(q, \phi) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}} \end{cases}$$

- с гамильтонианом

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

Алгоритм численного решения

- Сведение уравнения в частных производных к дифференциально-разностному уравнению:
 - Введем базис Фурье-функций:

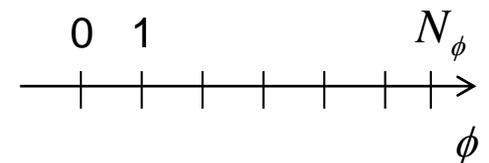
$$H_0(\phi)\xi_m(\phi) = -m^2\xi_m(\phi) \equiv \varepsilon_m\xi_m(\phi); \quad H_0(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial\phi^2};$$

- Аппроксимация по ϕ :

$$\Psi(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{j'=0}^{N_\phi} \sum_{m=-N_\phi/2}^{N_\phi/2} \xi_m(\phi) \xi_{mj'}^{-1} \Psi_{j'}(\rho)$$

$$\Psi(\rho, \phi_j) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \Psi_j(\rho);$$

$$\xi_{jm} = \xi_m(\phi_j) \rightarrow \exp(im\phi_j)$$



Алгоритм численного решения

- В результате получаем систему дифференциально-разностных уравнений:

$$\frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_j \sum_m \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} + \frac{\varepsilon_m}{\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(\rho, \phi_i)) \right] \Psi_j(\rho) \xi_m(\phi_i) \xi_{mj}^{-1} = 0$$

В векторном виде:

$$\frac{d^2 \Psi_i(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{1}{4\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(\rho, \phi_i)) \right] \Psi_i(\rho) + \frac{1}{\rho^2} \sum_{j=0}^{N_\phi} \left(\sum_{m=-\frac{N_\phi}{2}}^{\frac{N_\phi}{2}} \varepsilon_m \xi_m(\phi_i) \xi_{mj}^{-1} \right) \Psi_j(\rho) = 0$$

Алгоритм численного решения

□ Граничные условия:

- 1. Левое граничное условие для радиальных компонент в.ф.

$$\Psi_i(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \sqrt{\rho}$$

- 2. Правое граничное условие

$$\Psi(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} e^{iq\rho \cos(\phi)} + f(q, \phi) \frac{1}{\sqrt{-i\rho}} e^{iq\rho} \quad (*)$$

- С учетом аппроксимации по ϕ правое граничное условие получаем при сравнении разложения волновой функции с (*):

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

где $J_m(z)$ - функция Бесселя

Алгоритм численного решения

- 2. Конечно-разностная аппроксимация
- Получаем задачу рассеяния в виде:

$$\rho^2 \frac{d^2 \vec{\Psi}(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{1}{4} I + 2\rho^2 (E \cdot I - U(\rho)) \right] \vec{\Psi}(\rho) + \zeta \cdot \vec{\Psi}(\rho) = 0$$

$$\vec{\Psi} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \sqrt{\rho}$$

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

- где $\zeta = \zeta_{ij} = \sum_m \varepsilon_m \xi_{im} \xi_{mj}^{-1}$

Алгоритм численного решения

□ Семиточечная аппроксимация

$$\frac{d^2}{d\rho^2} \vec{\Psi}_k = \frac{2\vec{\Psi}^{k-3} - 27\vec{\Psi}^{k-2} + 270\vec{\Psi}^{k-1} - 490\vec{\Psi}^k + 270\vec{\Psi}^{k+1} - 27\vec{\Psi}^{k+2} + 2\vec{\Psi}^{k+3}}{180h^2}$$

□ Конечно-разностная СЛАУ

$$\begin{aligned} & 2\rho^2\vec{\Psi}^{k-3} - 27\rho^2\vec{\Psi}^{k-2} + 270\rho^2\vec{\Psi}^{k-1} + \\ & + \left[-490\rho^2 + 65h^2 + 360h^2\rho^2(E - U(\rho, \phi)) + 180h^2\zeta \right] \vec{\Psi}^k + \\ & + 270\rho^2\vec{\Psi}^{k+1} - 27\rho^2\vec{\Psi}^{k+2} + 2\rho^2\vec{\Psi}^{k+3} = 0 \quad \text{где } k = 0, \dots, N \end{aligned}$$

Алгоритм численного решения

□ 3. Метод решения полученной блочной СЛАУ

$$A_k \vec{\Psi}^{k-3} + B_k \vec{\Psi}^{k-2} + C_k \vec{\Psi}^{k-1} + D_k \vec{\Psi}^k + E_k \vec{\Psi}^{k+1} + F_k \vec{\Psi}^{k+2} + G_k \vec{\Psi}^{k+3} = H_k$$

где $k=0, \dots, N$

- Граничные условия также приводятся к вышеприведенному виду с помощью записи в двух соседних точках и исключения неизвестного вектора:

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\rho_{N-1}}} \sum_{j=0}^N \xi_{mj}^{-1} \Psi_j(\rho_{N-1}) = i^m J_m(q\rho_{N-1}) \sqrt{2\pi} + \frac{f_m^{(m)}}{\sqrt{-i\rho_{N-1}}} e^{iq\rho_{N-1}} \\ \frac{1}{\sqrt{\rho_N}} \sum_{j=0}^N \xi_{mj}^{-1} \Psi_j(\rho_N) = i^m J_m(q\rho_N) \sqrt{2\pi} + \frac{f_m^{(m)}}{\sqrt{-i\rho_N}} e^{iq\rho_N} \end{cases}$$

Алгоритм численного решения

$$D_1 \vec{\Psi}^1 + E_1 \vec{\Psi}^2 = 0$$

$$D_2 \vec{\Psi}^2 + E_2 \vec{\Psi}^3 = 0$$

$$D_3 \vec{\Psi}^3 + E_3 \vec{\Psi}^4 = 0$$

$$A_4 \vec{\Psi}^1 + B_4 \vec{\Psi}^2 + C_4 \vec{\Psi}^3 + D_4 \vec{\Psi}^4 + E_4 \vec{\Psi}^5 + F_4 \vec{\Psi}^6 + G_4 \vec{\Psi}^7 = 0$$

...

$$A_{N-3} \vec{\Psi}^{N-6} + B_{N-3} \vec{\Psi}^{N-5} + C_{N-3} \vec{\Psi}^{N-4} + D_{N-3} \vec{\Psi}^{N-3} + E_{N-3} \vec{\Psi}^{N-2} + F_{N-3} \vec{\Psi}^{N-1} + G_{N-3} \vec{\Psi}^N = 0$$

$$C_{N-2} \vec{\Psi}^{N-3} + D_{N-2} \vec{\Psi}^{N-2} = \vec{H}_{N-2}$$

$$C_{N-1} \vec{\Psi}^{N-2} + D_{N-1} \vec{\Psi}^{N-1} = \vec{H}_{N-1}$$

$$C_N \vec{\Psi}^{N-1} + D_N \vec{\Psi}^N = \vec{H}_N$$

Алгоритм численного решения

- Решаем полученную СЛАУ с помощью модификации метода матричной прогонки для семидиагональной матрицы:

- метод состоит в применении рекуррентного соотношения:

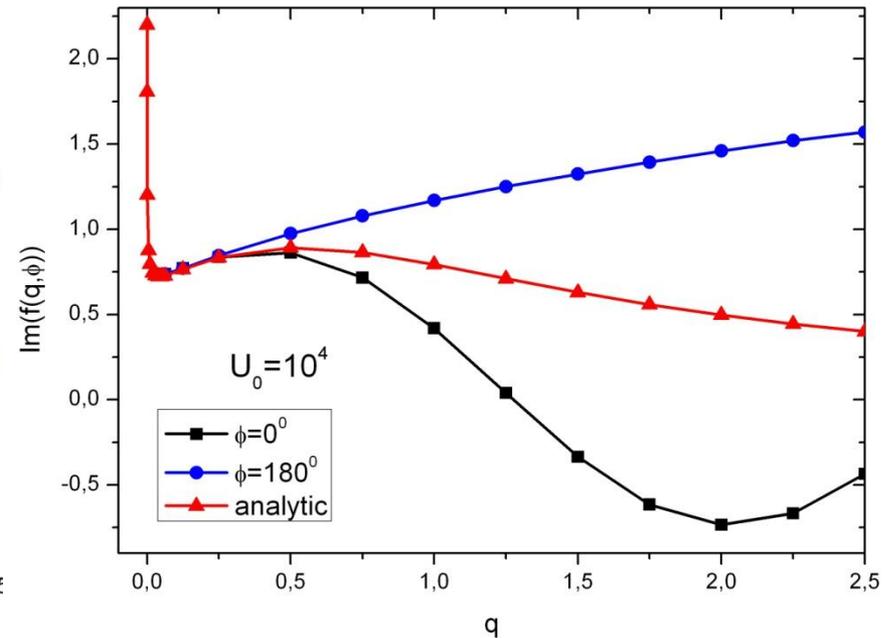
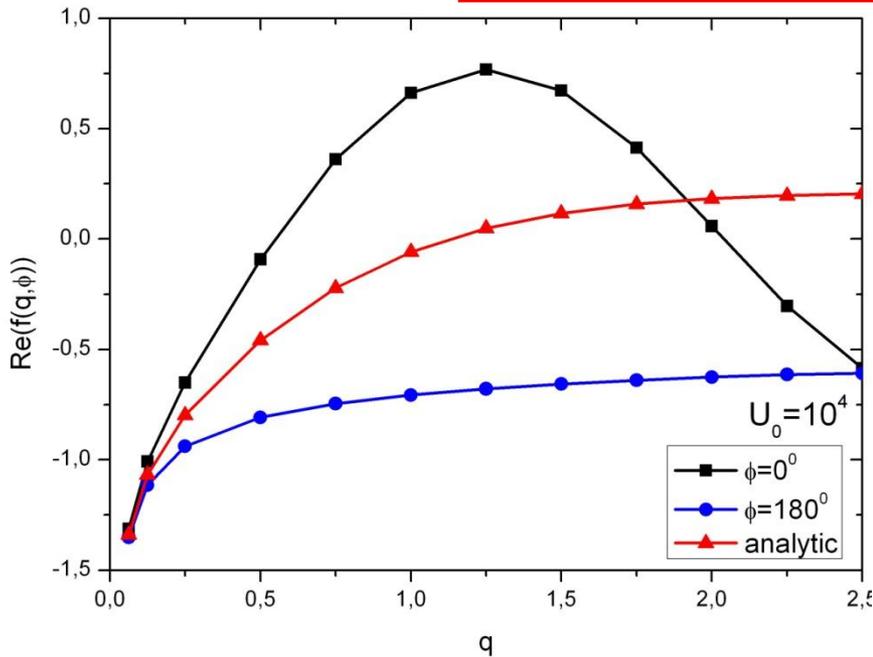
$$\vec{u}_k = p_{k+1}\vec{u}_{k+1} + q_{k+1}\vec{u}_{k+2} + s_{k+1}\vec{u}_{k+3} + r_{k+1}$$

- где p_k, q_k, s_k, r_k — матрицы $[N_\phi + 1] \times [N_\phi + 1]$
 $k = 1, \dots, N$

Результаты

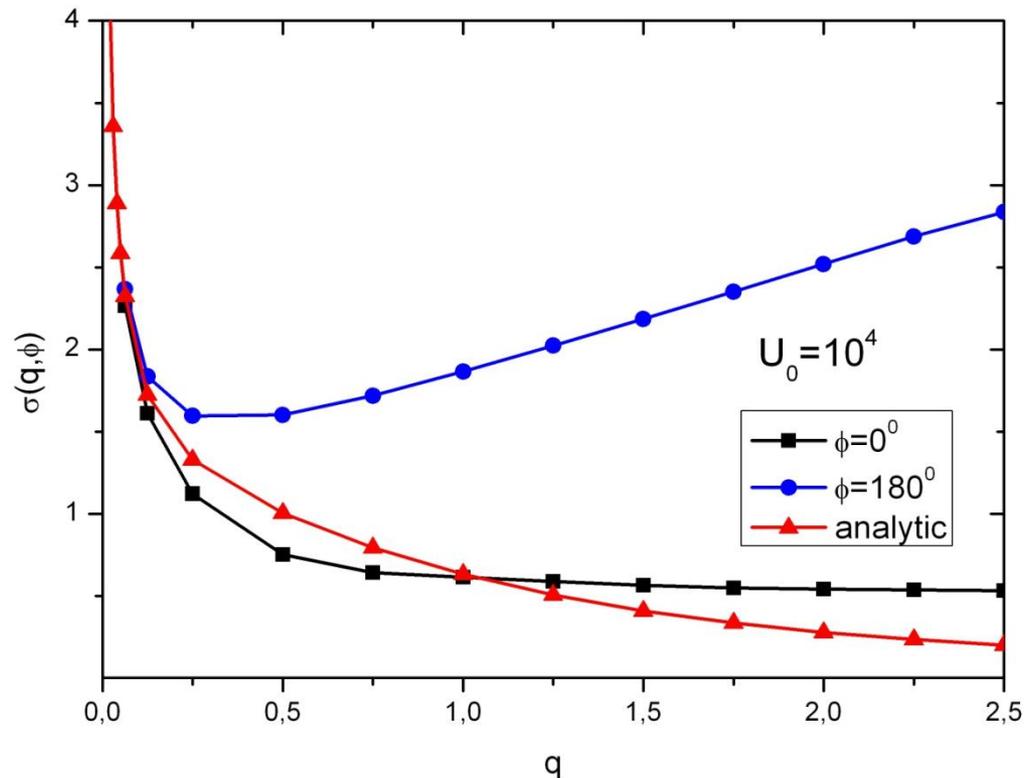
$$U(\rho, \phi) = \begin{cases} U_0, & \rho \leq \rho_0(\phi) \\ 0, & \rho > \rho_0(\phi) \end{cases} \quad \longrightarrow \quad U(\rho, \phi) = \begin{cases} U_0, & \rho \leq \rho_{HW} \\ 0, & \rho > \rho_{HW} \end{cases}$$

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



Результаты

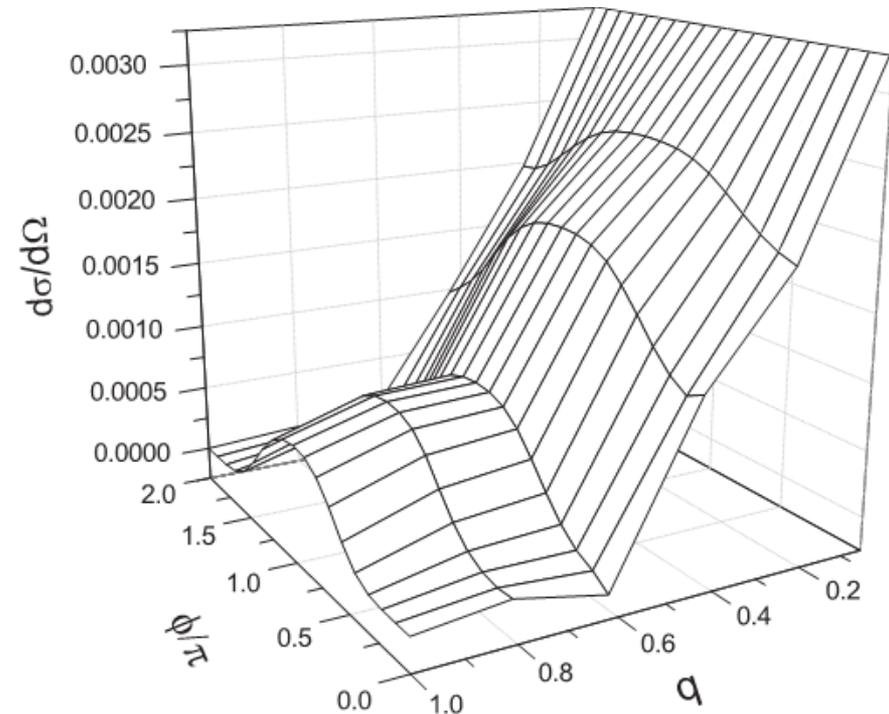
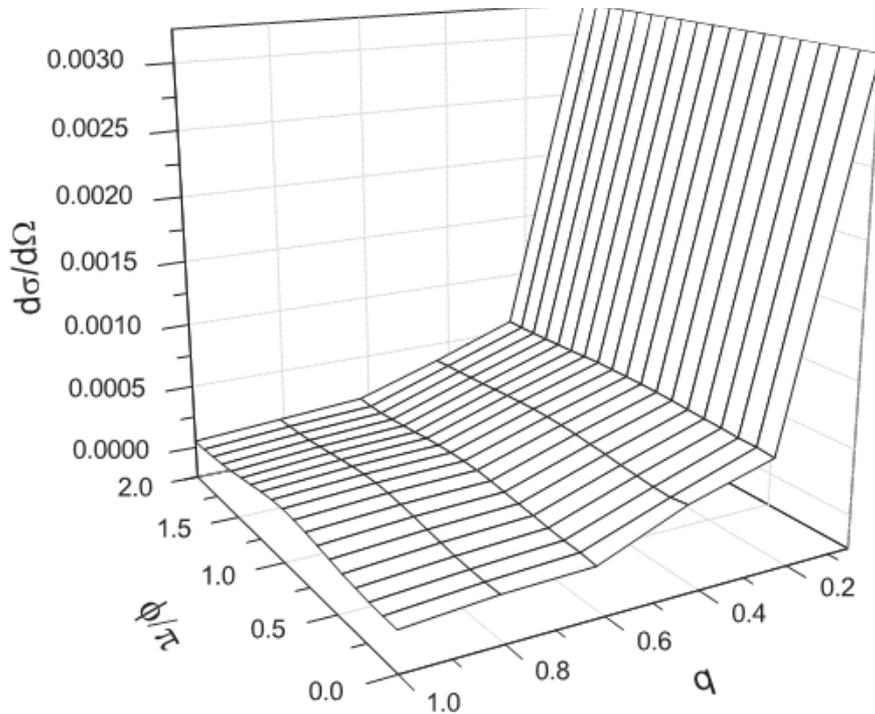
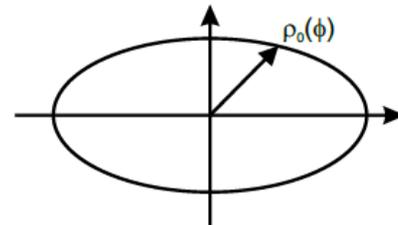
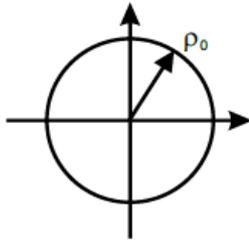
- Отличительной особенностью 2D рассеяния является *расходимость сечения рассеяния в низкоэнергетическом пределе*:



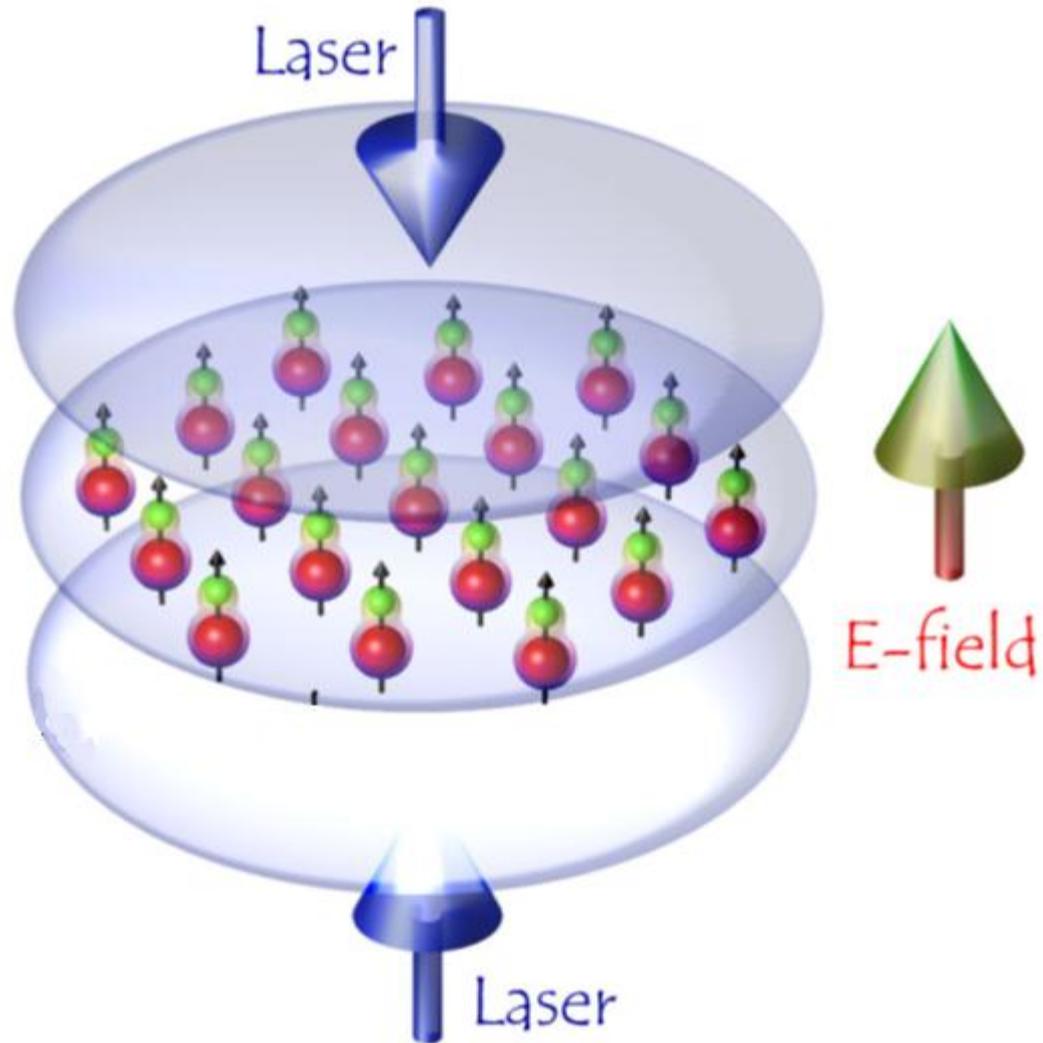
Анизотропные взаимодействия

□

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



Диполь-дипольное взаимодействие



Дипольное взаимодействие

- Примером физического анизотропного взаимодействия является *диполь-дипольное взаимодействие*, которое моделирует столкновения полярных молекул в оптической ловушке.
- Для произвольно ориентированных диполей потенциал взаимодействия записывается в следующем виде:

$$V_{\vec{d}_1\vec{d}_2} = \frac{(\vec{d}_1\vec{d}_2) - 3(\vec{d}_1\vec{e}_r)(\vec{e}_r\vec{d}_2)}{\rho^3}, \quad (*)$$

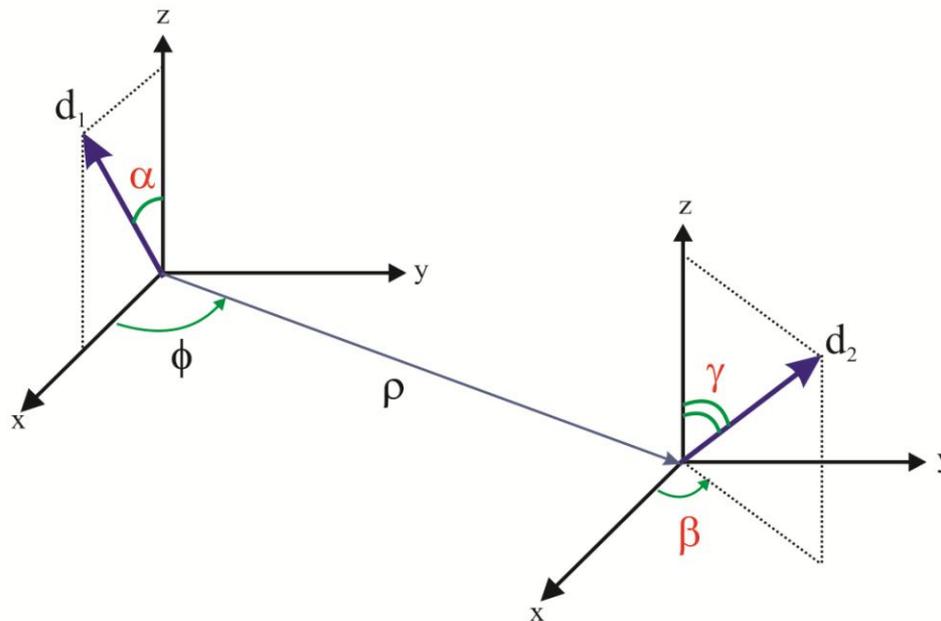
где \vec{d}_1, \vec{d}_2 – дипольные моменты, $(\vec{d}_i\vec{e}_r), i=1,2$ – их проекции на единичный вектор \vec{e}_r вдоль оси столкновения.

Дипольное взаимодействие

Выражение (*) может быть записано в общем виде

$$V(\rho, \phi, \alpha, \beta, \gamma) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - 3 \sin(\alpha) \cos(\phi) (\sin(\gamma) \cos(\beta) \cos(\phi) + \sin(\gamma) \sin(\beta) \sin(\phi))],$$

где углы α , β , γ определяются согласно схеме:



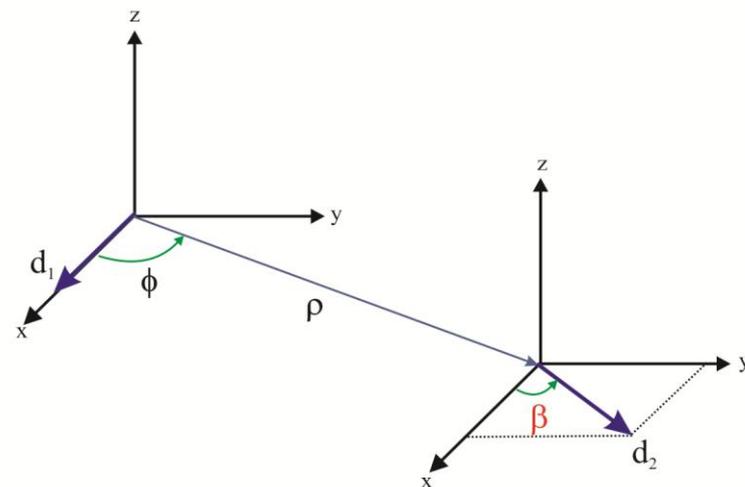
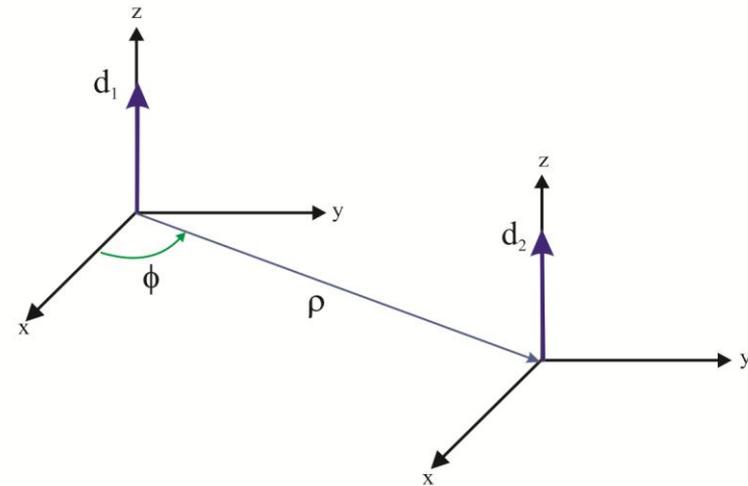
Дипольное взаимодействие

Для случая, когда поляризация молекул ортогональна плоскости движения ($\alpha = \beta = \gamma = 0$) взаимодействие становится полностью отталкивающим и изотропным:

$$V(\rho) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3}.$$

Для диполей, ориентированных в плоскости ($\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}$), возникает анизотропия и потенциал взаимодействия представим в виде:

$$V(\rho, \phi, \beta) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\cos(\beta) - 3 \cos(\phi) \cos(\phi - \beta)].$$



Дипольное взаимодействие

Частный случай, когда оси поляризации двух диполей сонаправлены и угол наклона к оси Z равен α ($\gamma = \alpha; \beta = 0$), а короткодействующее взаимодействие моделируется потенциалом бесконечно высокого барьера в нуле шириной $\rho_0/D = 0.1$:

$$V(\rho, \phi, \alpha) = V_{HW}(\rho) + \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [1 - 3 \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi)],$$

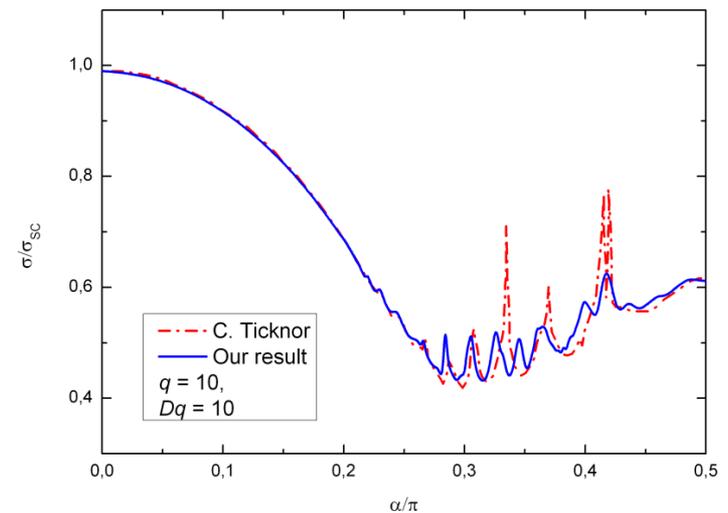
был рассмотрен в работе С. Ticknor [Phys.Rev. A84, 032702 (2011)].

Достигнуто хорошее согласие наших численных результатов с результатами С. Ticknor, что иллюстрирует следующий рисунок.

$$D = \mu d^2 / \hbar^2; d_1 = d_2 = d; \sigma_{SC} = \frac{4}{q} \sqrt{\pi D q}$$

Расчеты проведены для следующих параметров:

$$N = 120000; N_\phi = 80; \rho_{\min} = 10^{-10}; \rho_{\max} = 60; q = 10; N_{\phi_q} = 100$$

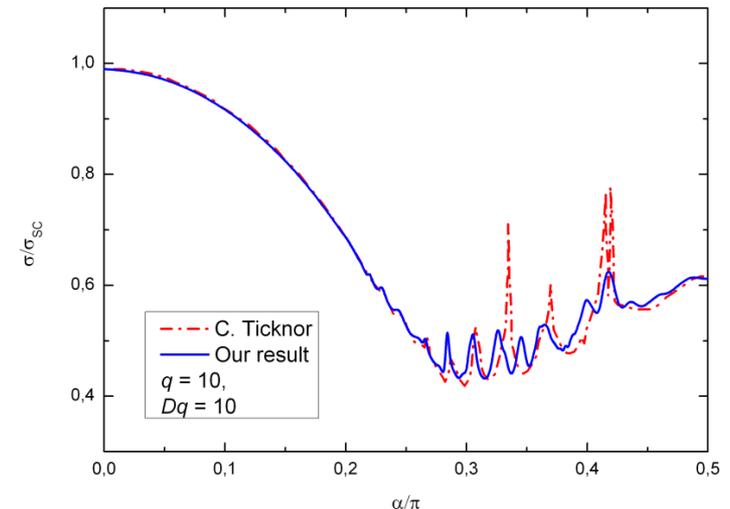
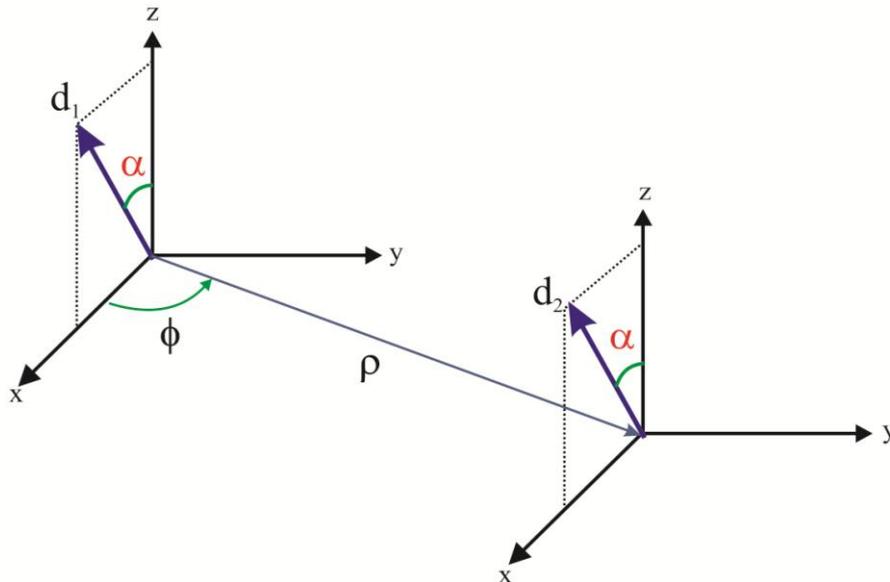


Дипольное взаимодействие

Частный случай, когда оси поляризации двух диполей сонаправлены и угол наклона к оси Z равен α ($\gamma = \alpha; \beta = 0$), а короткодействующее взаимодействие моделируется потенциалом бесконечно высокого барьера в нуле шириной $\rho_0/D = 0.1$:

$$V(\rho, \phi, \alpha) = V_{HW}(\rho) + \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [1 - 3 \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi)],$$

был рассмотрен в работе С. Ticknor [Phys.Rev. A84, 032702 (2011)].

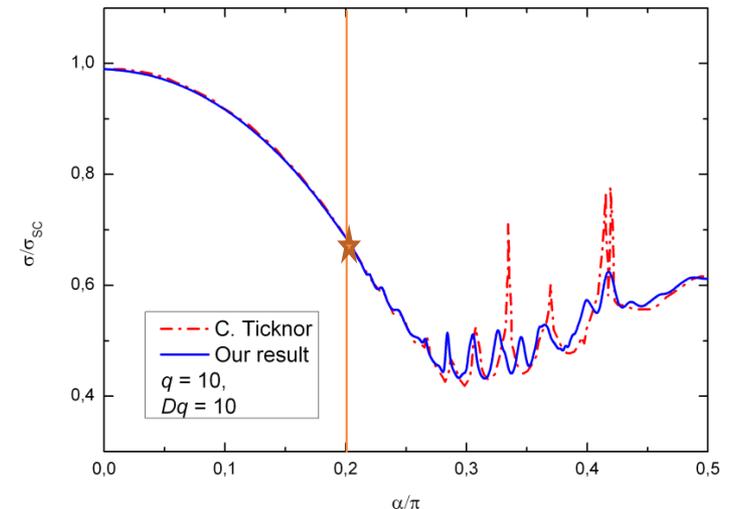
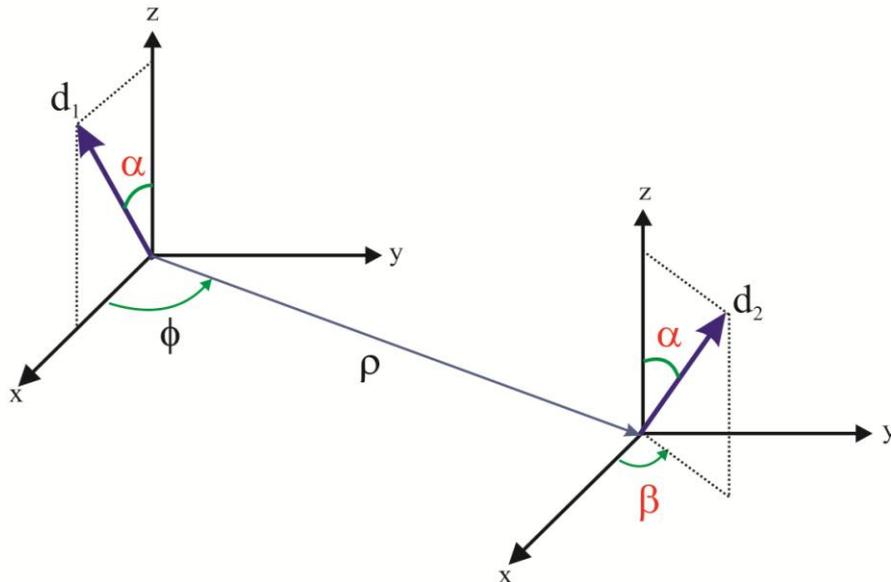


Дипольное взаимодействие

Частный случай, когда оси поляризации двух диполей сонаправлены и угол наклона к оси Z равен α ($\gamma = \alpha; \beta = 0$), а короткодействующее взаимодействие моделируется потенциалом бесконечно высокого барьера в нуле шириной $\rho_0/D = 0.1$:

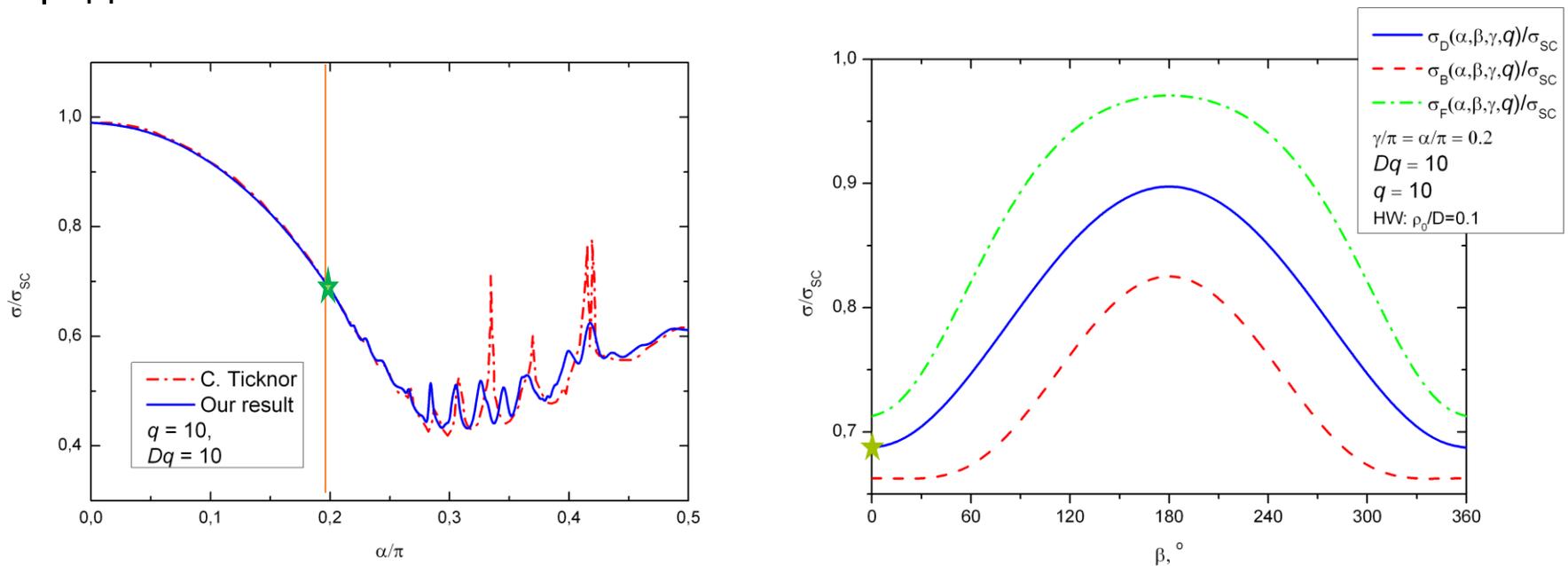
$$V(\rho, \phi, \alpha) = V_{HW}(\rho) + \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [1 - 3 \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi)],$$

был рассмотрен в работе С. Ticknor [Phys.Rev. A84, 032702 (2011)].



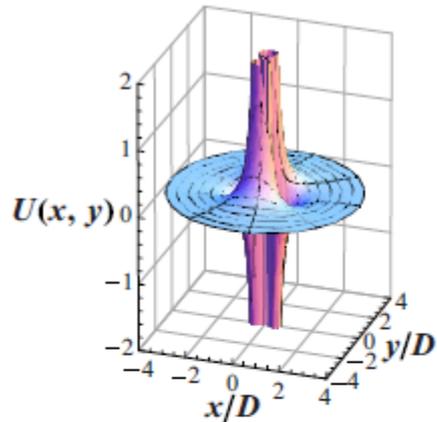
Дипольное взаимодействие

Далее расширим рассмотрение на случай неколлинеарных ориентаций диполей $\gamma = \alpha; \beta \neq 0$. Рассчитанная зависимость полного сечения рассеяния для столкновения фермионов, бозонов и различных частиц от угла представлена ниже:

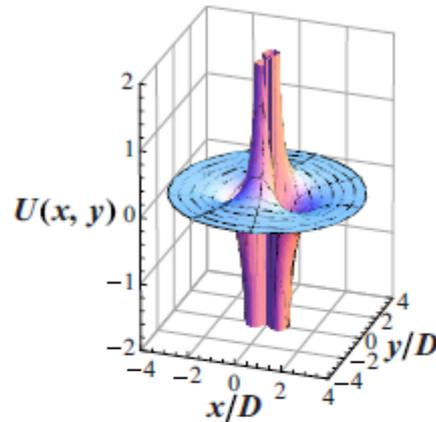


(Звездочкой указана точка $\gamma = \alpha = 0.2\pi; \beta = 0$)

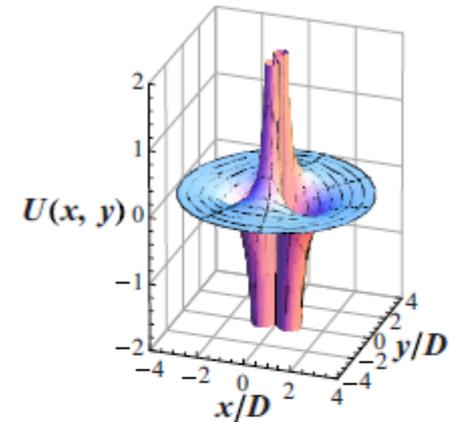
Дипольное взаимодействие



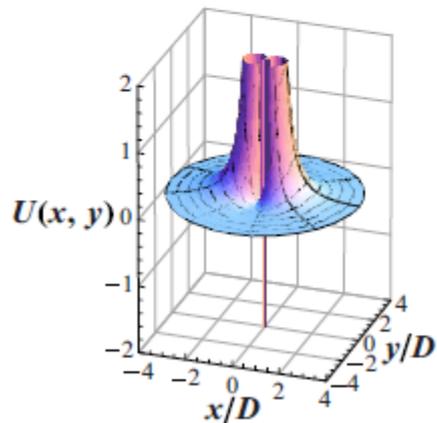
$$\beta = 0, \alpha = 0.25\pi$$



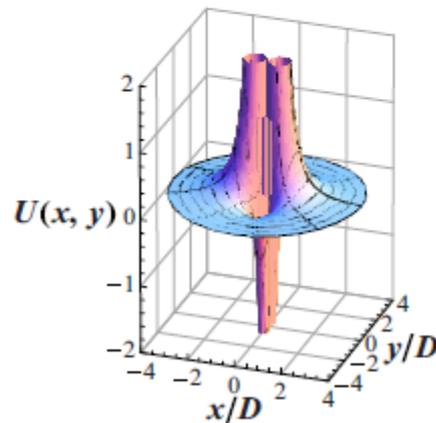
$$\beta = 0, \alpha = 0.35\pi$$



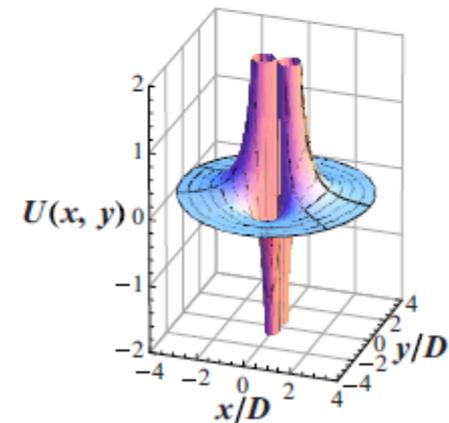
$$\beta = 0, \alpha = 0.5\pi$$



$$\beta = \pi, \alpha = 0.25\pi$$

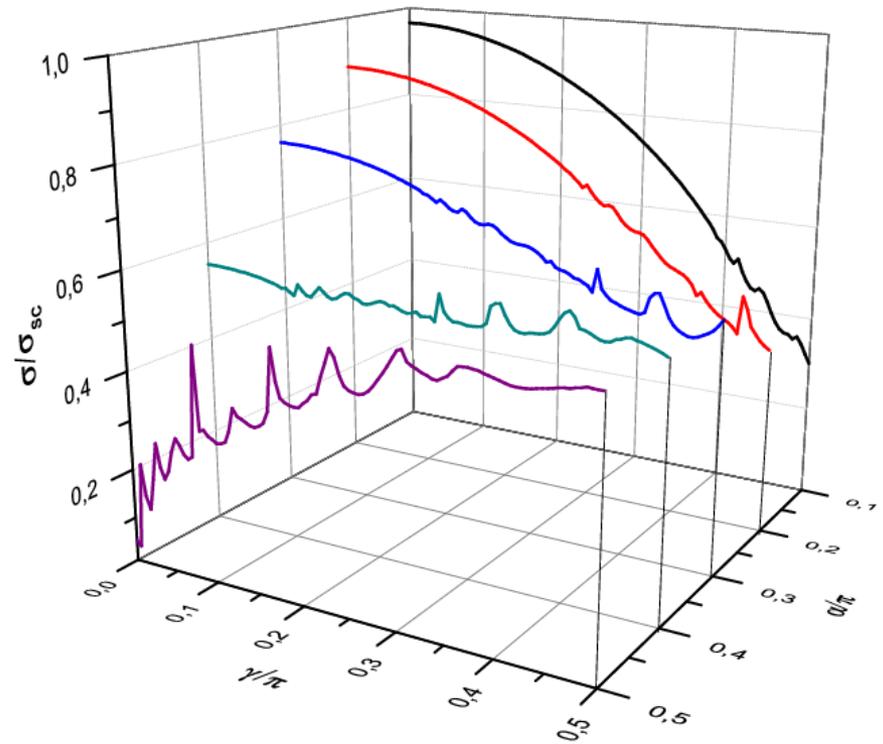
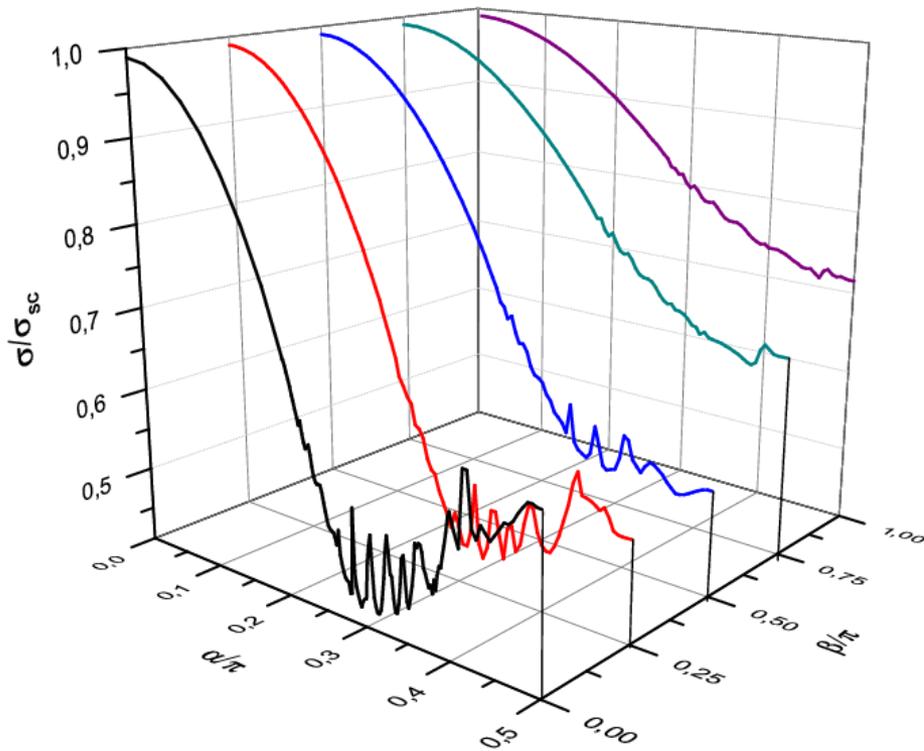


$$\beta = \pi, \alpha = 0.35\pi$$



$$\beta = \pi, \alpha = 0.5\pi$$

Дипольное взаимодействие



Anisotropic quantum scattering in two dimensionsEugene A. Koval,^{1,2,*} Oksana A. Koval,^{1,†} and Vladimir S. Melezhik^{1,2,‡}¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region 141980, Russian Federation*²*Department of Theoretical Physics, Dubna International University for Nature, Society and Man, Dubna,**Moscow Region 141980, Russian Federation*

(Received 15 March 2014; published 15 May 2014)

We study the quantum scattering in two spatial dimensions without the usual partial-wave formalism. The analysis beyond the partial-wave approximation allows a quantitative treatment of the anisotropic scattering with a strong coupling of different angular momenta nonvanishing even at the zero-energy limit. High efficiency of our method is demonstrated for the two-dimensional (2D) scattering on the cylindrical potential with the elliptical base and dipole-dipole collisions in the plane. We reproduce the result for the 2D scattering of polarized dipoles in binary collisions obtained recently by Ticknor [Phys. Rev. A **84**, 032702 (2011)] and explore the 2D collisions of unpolarized dipoles.

DOI: [10.1103/PhysRevA.89.052710](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.052710)

PACS number(s): 34.50.Cx, 31.15.ac, 31.15.xf

I. INTRODUCTION

In recent years, the problem of anisotropic quantum scattering in two spatial dimensions has attracted increasing interest. This is stimulated by the spectacular proposals for prospects to create exotic and highly correlated quantum systems with dipolar gases [1,2]. Particularly, anisotropic superfluidity [3], two-dimensional (2D) dipolar fermions [4], and few-body dipolar complexes [5] have been considered. The recent experimental production of ultracold polar molecules in the confined geometry of optical traps [6–8] has opened up ways to realize these phenomena. Noteworthy also is a rather long history of research of 2D quantum effects in condensed matter physics. One can note superfluid films [9], high-temperature superconductivity [10], 2D materials, such as graphene [11], and even possibilities for topological

anisotropic scatterer. Particularly, it permits the description of the 2D collisions of unpolarized dipoles. Our approach is based on the method suggested in Ref. [21] for the few-dimensional scattering, which was successfully applied to the dipole-dipole scattering induced by an elliptically polarized laser field in the 3D free-space [15].

The key elements of the method are described in Sec. II. In Sec. III, we apply the method to the 2D scattering on the cylindrical potential with the elliptical base and the 2D dipole-dipole scattering of unpolarized dipoles. We reproduce the threshold formula [22,23] for the scattering amplitude on the cylinder potential with the circular base and the results of Refs. [16,17] for the 2D scattering of polarized dipoles. High efficiency of the method has been found in all problems being considered. The last section contains the concluding remarks. Some important details of the computational scheme



Спасибо за внимание

Заключение

- Достоинства алгоритма:
 - Уравнение в частных производных с помощью разложения сводится к блочной СЛАУ
 - Используются *стандартные оптимальные методы* решения СЛАУ, учитывающие блочную структуру матрицы: в частности — Матричная прогонка
 - Блочность матрицы позволяет хранить ее в упакованном виде — *экономное использование ресурсов*
- Эффективный алгоритм решения задачи 2D рассеяния линейно зависящий от увеличения числа узлов по радиальной переменной

Заключение

- Получено полное согласие численных расчетов с известной асимптотикой амплитуды рассеяния в низкоэнергетическом приближении для кругового бесконечно сильного отталкивающего потенциала.
- Вычислено дифференциальное сечение как функция относительного импульса частицы и угла рассеяния.
- Дифференциальное сечение *слабо зависит от угла рассеяния в низкоэнергетическом пределе для финитных потенциалов, но анизотропность потенциала порождает угловые особенности дифференциального сечения: при определенных углах сечение имеет ярко выраженные экстремумы.*

Заключение

- Вычислены зависимости полного сечения рассеяния как функции углов наклона осей поляризации диполей.
- Воспроизведены результаты работы С. Ticknor [Phys.Rev. A84, 032702 (2011)] для поляризованных диполей
- Вычислено полное сечение рассеяния в зависимости от взаимной ориентации диполей на случай неполяризованных диполей.

Заключение

- Представленный алгоритм может быть также применен для решения задач квантового рассеяния, для которых корректна описываемая модель столкновений:
 - численное моделирование процессов рассеяния в двухчастичных системах ультрахолодных атомов в оптических ловушках
 - квантовые столкновения двухатомных молекул с наведенным дипольным моментом.
 - теоретическое исследование столкновения атомов водорода на поверхности жидкого гелия