

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
им. Н. Н. БОГОЛЮБОВА

На правах рукописи

Ишмухамедов Ильяс Сапабекович

**Динамика двухатомных систем в одномерных
ангармонических ловушках**

Специальность: 01.04.02 — Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Дубна — 2021

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
им. Н. Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: **Мележик Владимир Степанович**
доктор физико-математических наук,
профессор

С электронной версией диссертации можно ознакомиться на официальном сайте Объединенного института ядерных исследований в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» по адресу: (<https://dissertations.jinr.ru/ru/Dissertations/CalendarThesisDefenses>). С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке ОИЯИ (г. Дубна, Московская область, ул. Жолио-Кюри, д. 6).

Ученый секретарь диссертационного совета
(технический секретарь),
кандидат физико-математических наук

Ю. М. Быстрицкий

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Актуальным направлением современной физики являются ультрахолодные атомы и молекулы в связи с открывающимися здесь уникальными экспериментальными возможностями и новыми интересными приложениями [1]. В частности, обнаруженные недавно [2] геометрические резонансы [3] в ультрахолодном газе цезиевых атомов позволяют управлять межатомным взаимодействием в условиях внешнего запирающего оптического потенциала. В теоретических моделях геометрических резонансов [3], как правило, используется гармоническое приближение для описания взаимодействия плененных атомов с оптической ловушкой. Однако количественное описание и планирование экспериментов по их исследованию потребовали выхода за рамки этого приближения [3]. В частности, уже для интерпретации результатов эксперимента [2] возникла необходимость учета ангармонических эффектов во взаимодействии атомов с удерживающей ловушкой [4, 5].

Если ангармоническими поправками в условиях эксперимента [2] пренебречь нельзя, то эффективный одномерный псевдопотенциал $g_{1D}(a_{\perp}/a_s)\delta(z)$ является хорошим приближением в этой задаче, поскольку размер оптической ловушки в поперечном направлении (x,y) намного меньше ее размера в продольном (z) [6]. Это приближение позволяет значительно упростить расчеты, которые, тем не менее, удовлетворительно согласуются с экспериментом. Особый интерес представляет область вблизи геометрического резонанса, где эффективная одномерная константа связи $g_{1D}(a_{\perp}/a_s)$, определяемая атомной длиной рассеяния в свободном пространстве a_s и поперечным размером оптической ловушки a_{\perp} , сингулярна $g_{1D}(a_{\perp}/a_s) \rightarrow \pm\infty$ [3]. В одномерной геометрии возникают и другие эффекты при двухчастичных столкновениях [7, 8]. Так, одной из актуальных задач здесь является количественное описание туннелирования атомов из одномерной ловушки через ее стенки, аппроксимируемые потенциалом ангармонического осциллятора. Как известно, задача квантового туннелирования возникает при описании и других квантовых процессов, в частности, сверхпроводимости и сверхтекучести [9, 10, 11], реакций деления и синтеза в ядерной физике [12].

Несмотря на многочисленные работы по квантовому туннелированию, начиная с классической работы Г.А. Гамова по альфа-распаду ядер, до конца неисследованным остается влияние парного взаимодействия в начальном состоянии двухчастичной квантовой системы на процесс ее распада через ограничивающий потенциальный барьер. Так, для описания распада взаимодействующей пары частиц в стандартном квазиклассическом приближении Вентцеля-Краммерса-Бриллюена требуется учет дополнительных поправок. Анализ распада усложняется при увеличении

интенсивности парного взаимодействия [13, 14]. Разработано два подхода для решения этого класса задач. Первый подход состоит в решении стационарного уравнения Шредингера с граничным условием содержащим расходящуюся волну на бесконечности. Для примера, упомянем работы [15, 16, 17], в которых используется базис, включающий резонансные состояния. Более естественным, однако, на наш взгляд, является второй подход, исходящий из решения нестационарного уравнения Шредингера. В нем наглядно прослеживается временная динамика плотности распределения квантовых частиц и их туннелирование через потенциальный барьер. Подобный анализ применялся в работах [18, 19].

Неизученной оставалась до недавнего времени задача о туннелировании пары взаимодействующих частиц из их возбужденных состояний через удерживающие потенциальные барьеры ангармонической формы. В диссертации предложена и разработана теоретическая модель, позволяющая исследовать распад двухчастичных квантовых систем как из их основных, так и возбужденных состояниях с учетом междоучастичных взаимодействий и ангармонических слагаемых в запирающем потенциальном барьере. Эта работа актуальна также в связи экспериментальными исследованиями в Гайдельбергском университете [20, 21, 22], где удалось создать квазиодномерные оптические ловушки, удерживающие заданное число атомов в заданном квантовом состоянии. Эти исследования открывают возможность экспериментального конструирования малочастичных квантовых систем в ограниченной геометрии оптических ловушек и проверки теоретических моделей, описывающих туннелирование квантовых частиц через стенки запирающих ловушек [13, 14, 18].

Цели диссертационной работы

Главная цель диссертационной работы - создание и апробация простой, но перспективной модели, предназначенной для теоретического анализа процессов туннелирования и девозбуждения двухатомной системы в одномерной ангармонической ловушке оптического типа. В рамках модели:

- вычислить **спектр** связанных состояний двухатомной одномерной системы, плененной в ангармонической ловушке, в зависимости от эффективной константы связи межатомного взаимодействия и формы ловушки;
- рассчитать **скорости туннелирования и девозбуждения** данной системы в зависимости от эффективной константы связи межатомного взаимодействия, формы ловушки и заселенности начальных состояний.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Создан программный пакет для численного решения стационарного двухчастичного уравнения Шредингера, описывающего два взаимодействующих атома, плененных в одномерной ангармонической ловушке.

Полученные решения этого уравнения (уровни энергии и волновые функции связанных состояний системы) использовались в качестве начальных условий при интегрировании нестационарного уравнения Шредингера, описывающего туннелирование и девозбуждение двухатомной системы, плененной в одномерной ангармонической ловушке;

2. Рассчитана зависимость эффективной константы связи контактно-го взаимодействия от параметров гауссового потенциала, моделирующего межатомное взаимодействие;

3. Разработана вычислительная схема для численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера, описывающего динамику туннелирования двух взаимодействующих атомов через стенки одномерной ангармонической ловушки;

4. Разработанные вычислительные схемы были протестированы на примерах с известными решениями. Для стационарного уравнения проведено сравнение с известными точными решениями для двумерного гармонического осциллятора. Для нестационарного уравнения Шредингера проведено сравнение с расчетами других авторов скоростей туннелирования из основного состояния одномерного ангармонического потенциала, аппроксимирующего атомную ловушку в Гайдельбергском университете [20, 21, 22].

Научная новизна

Впервые решена задача о туннелировании двух взаимодействующих атомов из возбужденных состояний удерживающих их одномерных ангармонических ловушек с фиксированными экспериментальными параметрами [2, 20, 21, 22]. В итоге, впервые вычислены скорости туннелирования и девозбуждения, временные зависимости заселенностей начальных состояний, плотности потока вероятности и среднее число частиц, а также спектр энергии связанных состояний в таких двухатомных системах в зависимости от межатомного взаимодействия. Кроме того, впервые выявлены условия для последовательного и парного туннелирования одномерной двухатомной системы через стенки запирающей ловушки ангармонической формы.

Теоретическая и практическая значимость

Исследовательской группой в Гайдельберге (Германия) экспериментально изучаются квантовые системы из взаимодействующих атомов лития-6 в квазиодномерной геометрии оптических ловушек ангармонической формы. Для анализа результатов этих экспериментов [21, 22] использовался развитый в диссертации подход. Он может быть обобщен для анализа и более сложных задач туннелирования: например, для описания распада трехчастичных квантовых систем [23], для задач учитывающих спин частиц [24], а также для задач с более сложной геометрией удерживающих ловушек [25].

Совсем недавно результаты, полученные в диссертации, были использованы в эксперименте в Массачусетском технологическом институте

(США) [26] по исследованию возможности создания управляемого квантового регистра из пар фермионных атомов, плененных в квазиодномерных ангармонических ловушках.

Основные результаты диссертационной работы, выносимые на защиту:

1. Создана и апробирована перспективная реалистическая модель для теоретического анализа процессов туннелирования и девозбуждения двухатомной системы в оптической одномерной ангармонической ловушке. Результаты, полученные в рамках этой модели, согласуются с экспериментальными данными по туннелированию ультрахолодных атомов лития-6 и могут использоваться для интерпретации других процессов квантового туннелирования.

2. На основе предложенной модели создан и реализован метод расчета волновых функций и энергий связанных состояний двухчастичной квантовой системы в одномерной ангармонической ловушке и скоростей туннелирования этих состояний через стенки ловушки.

3. Впервые решена задача о туннелировании для системы двух взаимодействующих квантовых частиц из ее низколежащих возбужденных состояний.

4. Вычислены скорости туннелирования и девозбуждения системы двух взаимодействующих атомов из ее низколежащих состояний в зависимости от величины константы связи межчастичного взаимодействия и формы ловушки. Получено хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными по скоростям распада основного состояния двухатомной системы в ловушках того же типа.

5. Показано, что доминирующим механизмом туннелирования в рассмотренных случаях является последовательное туннелирование атомов из ловушки. Более того, определены условия перехода к механизму одновременного туннелирования пары атомов.

Апробация работы

Результаты диссертации докладывались на следующих **семинарах и конференциях**:

1. Семинар сектора “Малочастичные системы”, ЛТФ, Дубна, (2013), *Описание ультрахолодных атомов в одномерной геометрии гармонической ловушки с реалистическим взаимодействием*;

2. Семинар сектора “Малочастичные системы”, ЛТФ, Дубна, (2014), *Ангармонические эффекты в спектре двухатомной системы в одномерной оптической ловушке*;

3. Семинар сектора “Малочастичные системы”, ЛТФ, Дубна, (2016), *Tunneling of two bosonic atoms from a one-dimensional anharmonic trap*;

4. The International Workshop on Few-Body Systems, FBS-Dubna-2016, Dubna, *Two atomic tunneling dynamics in a waveguide-like trap*;

5. The International Conference “Mathematical Modeling and Computational Physics, 2017” (ММСП2017), Dubna, *Finite-difference splitting scheme for three-dimensional schroedinger equation, describing tunneling from anharmonic atomic traps*;

6. The XXI International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2017), Dubna, *Tunneling of two bosonic atoms from a one-dimensional anharmonic trap*;

7. Семинар сектора “Малочастичные системы”, ЛТФ, Дубна, (2018), *Tunneling of two interacting fermions*;

8. The XXIII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2019), Dubna, *Tunneling of two interacting atoms from excited states*;

9. Семинар Научного отдела теории атомного ядра, ЛТФ ОИЯИ, Дубна, (2019), *Теоретическое исследование двухатомных одномерных систем в ангармонических ловушках*;

10. Семинар сектора “Малочастичные системы”, ЛТФ, Дубна, (2021), *Динамика двухатомных систем в одномерных ангармонических ловушках*.

Степень достоверности

Используемые в диссертации подходы и методы являются апробированными методами интегрирования стационарных и нестационарных уравнений Шредингера применительно к задачам атомной и ядерной физики. В диссертации приводится подробная библиография по использованным методам. Надежность разработанных в диссертации вычислительных схем обеспечивалась сравнением расчетов с результатами экспериментов и имеющимися альтернативными расчетами модельных задач.

Публикации

Результаты диссертации были опубликованы в 5 рецензируемых журналах:

1. И.С. Ишмухамедов, Д.С. Валиолда и С.А. Жаугашева, *Описание ультрахолодных атомов в одномерной геометрии гармонической ловушки с реалистическим взаимодействием*, Письма в ЭЧАЯ, **11**, №3(187), 390-400, (2014);

2. И.С. Ишмухамедов, Д.Т. Азнабаев и С.А. Жаугашева, *Двухатомная система в одномерной ангармонической ловушке. Энергетический спектр*, Письма в ЭЧАЯ, **12**, №5(196), 1052-1065, (2015);

3. I. S. Ishmukhamedov and V.S. Melezhik, *Tunneling of two bosonic atoms from a one-dimensional anharmonic trap*, Physical Review A, **95**, 062701, (2017);

4. I. S. Ishmukhamedov, A. S. Ishmukhamedov and V.S. Melezhik, *Numerical Solution of the Time Dependent 3D Schrodinger Equation Describing Tunneling of Atoms from Anharmonic Traps*, EPJ Web of Conferences, **173**, 03011, (2018);

5. I. S. Ishmukhamedov and A. S. Ishmukhamedov, *Tunneling of two interacting atoms from excited states*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **109**, 24-29, (2019).

Личный вклад автора

Автор диссертации принимал участие в постановке задач диссертации, разработке алгоритмов вычислительных схем и программного пакета для реализаций их решений, анализе результатов и написании статей. Вклад соискателя в результаты диссертации является определяющим.

Структура диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации состоит из 81 страницы, из которых 72 страницы текста и 38 рисунков. Библиография занимает 6 страниц и содержит 63 ссылки.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследования, описываются последние достижения в решении задач туннелирования малочастичных квантовых систем в оптических ловушках, а также формулируются основные положения диссертации выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию численных методов, используемых в диссертации для вычисления спектров связанных состояний одномерных двухатомных систем в ангармонических ловушках и динамики их распада. Предложенный метод вычисления спектра энергий связанных состояний основан на аппроксимации производных по пространственным переменным конечными разностями высокого порядка и использовании метода обратной итерации для вычисления энергии связи и соответствующей волновой функции. Рассчитанные волновые функции связанных состояний одномерной двухатомной системы использовались в качестве начальных условий для решения нестационарного уравнения Шредингера, описывающего распад системы через стенки запирающей ловушки.

Для решения нестационарного уравнения Шредингера оператор эволюции аппроксимировался по схеме расщепления [27], где действие оператора кинетической энергии на волновую функцию аппроксимировалось схемой Кранка-Николсона. Точность решения нестационарного уравнения Шредингера исследовалась на примере задачи на связанные состояния в двумерном гармоническом осцилляторе.

Рассмотрено решение одномерной задачи рассеяния для пары одинаковых квантовых частиц в пределе низких энергий. Рассчитана зависимость длины рассеяния от параметров потенциала взаимодействия между частицами, который аппроксимировался функцией Гаусса.

Во **второй главе** решена задача о распаде системы двух одинаковых атомов в одномерной геометрии. Предполагалось, что атомы взаимодействуют друг с другом и при этом пленены в ангармонической ловушке. Основная цель заключалась в вычислении скоростей туннелирования и девозбуждения данной системы из низших возбужденных состояний в зависимости от константы связи межатомного взаимодействия, которая довольно просто связана с длиной рассеяния. Гамильтониан такой задачи [28, 29]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_{\text{trap}}(x_1) + V_{\text{trap}}(x_2) + V_{\text{int}}(x_1 - x_2), \quad (1)$$

где m - массы атомов, которые взаимодействуют друг с другом посредством потенциала $V_{\text{int}}(x_1 - x_2)$, $V_{\text{trap}}(x_i)$ - потенциал взаимодействия ловушки с i -м атомом.

Потенциал V_{trap} выбирался в виде потенциала оптической решетки

$$V_{\text{trap}}(x) = V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right), \quad (2)$$

с одним минимумом (Рис. 1), где V_0 - глубина потенциала, а λ - период решетки. Для удобства вводился параметр ангармоничности α , характеризующий степень отклонения потенциала решетки (2) от потенциала гармонического осциллятора. Для этого V_{trap} разлагался в ряд по параметру $\frac{2\pi}{\lambda} x$ до первого ангармонического члена по x включительно [5]

$$V_{\text{trap}}(x) = V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \approx \omega \hbar \left(\frac{1}{2} \frac{x^2}{\ell^2} + \alpha \frac{x^4}{\ell^4} \right), \quad \alpha = -\frac{8\pi^2 \hbar}{12\lambda^2 m \omega}, \quad (3)$$

где $\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ - осцилляторная единица длины, $\omega = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{2|V_0|}{m}}$ - частота оптической ловушки. Значения параметров $\omega = 2\pi \times 14.5$ кГц, $\lambda = 1.06449 \times 10^{-4}$ см были взяты близкими к эксперименту [2], в котором исследовались плененные в оптической ловушке атомы цезия-133, для возможного сравнения результатов модели с экспериментальными данными. Для этих значений, параметр ангармоничности равен $\alpha = -0.0304552$.

В эксперименте [2] размер оптической ловушки в продольном направлении значительно превышал размер в поперечном направлении. В этом случае, эффективная геометрия двухчастичной системы близка к одномерной модели [6], т.е. к случаю рассматриваемому в диссертации.

Взаимодействие между частицами аппроксимировалось гауссовым потенциалом

$$V_{\text{int}}(x_1 - x_2) = -V_G \exp \left\{ -\frac{(x_1 - x_2)^2}{2r_0^2} \right\}. \quad (4)$$

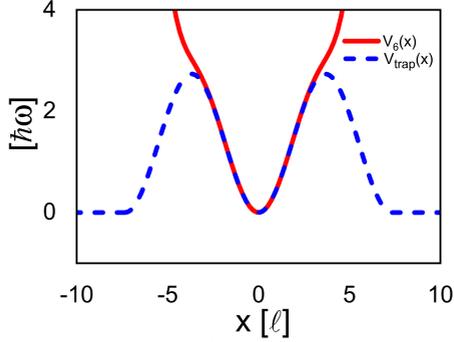


Рис. 1 — Потенциал ловушки $V_{\text{trap}}(x)$ и запирающий потенциал $V_6(x)$, использованный при вычислении волновой функции начального состояния.

Его параметры, V_G и r_0 , определяют глубину и эффективный радиус межатомного взаимодействия. В экспериментах с ультрахолодными плененными атомами эффективный радиус взаимодействия существенно меньше размеров ловушки, что обусловило выбор значения r_0 в виде $r_0 = 0.1\ell$ [18, 30, 31, 32].

Наиболее универсальным параметром, характеризующим взаимодействие атомов при низких энергиях одномерного рассеяния является одномерная длина рассеяния a_{1D} [33]. Для того, чтобы найти зависимость одномерной длины рассеяния a_{1D} от параметров потенциала (4) мы решили численно задачу рассеяния

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{int}}(r) \right] \psi_{\text{sc}}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \psi_{\text{sc}}(r) \quad (5)$$

с граничными условиями

$$\psi_{\text{sc}}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \pm\infty} \cos(k|r| + \delta(k)) \quad (6)$$

на бесконечности. Здесь $r = x_1 - x_2$ - относительная координата, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ - волновое число, $\mu = m/2$ - приведенная масса системы и $\delta(k)$ - фаза рассеяния определяющая при $k \rightarrow 0$ длину рассеяния $a_{1D} = \cot(\delta(k))/k$. Была рассчитана зависимость от параметра V_G эффективной константой связи g_{1D} (Рис. 2)

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}}, \quad (7)$$

контактного взаимодействия $g_{1D}\delta(r)$ [3, 34], в которой по определению

$$a_{1D} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\cot(\delta(k))}{k}. \quad (8)$$

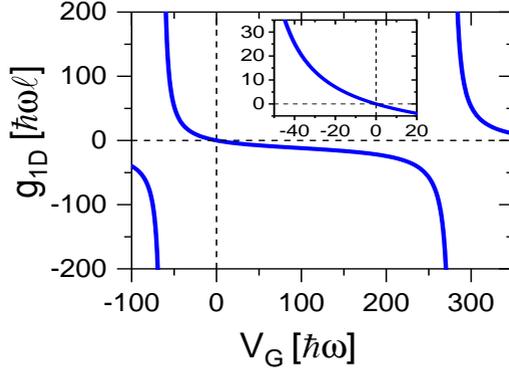


Рис. 2 — Зависимость константы связи контактного взаимодействия g_{1D} от глубины V_G потенциала межатомного взаимодействия (4) при фиксированном радиусе взаимодействия $r_0 = 0.1\ell$.

Во вставке на Рис. 2 показана область значений g_{1D} , которую мы использовали в дальнейших расчетах. Отметим, что положительные значения g_{1D} соответствуют отталкиванию между частицами, а отрицательные значения - притяжению.

Скорость распада двухатомной системы, плененной в одномерной ловушке, рассчитывалась путем решения двухчастичного нестационарного уравнения Шредингера. Решение реализуется поэтапно. Первый этап заключается в нахождении начального условия для нестационарного уравнения Шредингера. Второй этап состоит в интегрировании нестационарного уравнения Шредингера с заданным начальным условием.

При расчете начального условия, т.е. вычислении начальной волновой функции мы заменили в исходном гамильтониане потенциал ловушки $V_{\text{trap}}(x)$ потенциалом $V_6(x)$ (Рис. 1), в котором имеется запирающая стенка, препятствующая распаду системы. При такой аппроксимации исходного потенциала ловушки, волновые функции рассчитываемых связанных состояний приближенно совпадают с волновыми функциями резонансных состояний в начальный момент времени [35]. Выбранная форма запирающего потенциала $V_6(x)$ также хорошо описывает спектр связанных состояний в потенциале оптической решетки [36].

Вычисленные уровни основного и двух низших возбужденных состояний представлены на Рис. 3. Верхняя и нижняя “ветви” возбужденных уровней соответствуют двукратно возбужденным состояниям по относительной координате или координате центра масс. В точке $g_{1D} = 0$ происходит квазипересечение верхней и нижней ветвей возбужденных уровней (Рис. 3). При $\alpha = 0$ квазипересечение отсутствует и уровни пересекаются в этой точке. Это обусловлено тем, что при $g_{1D} = 0$ эти два уровня

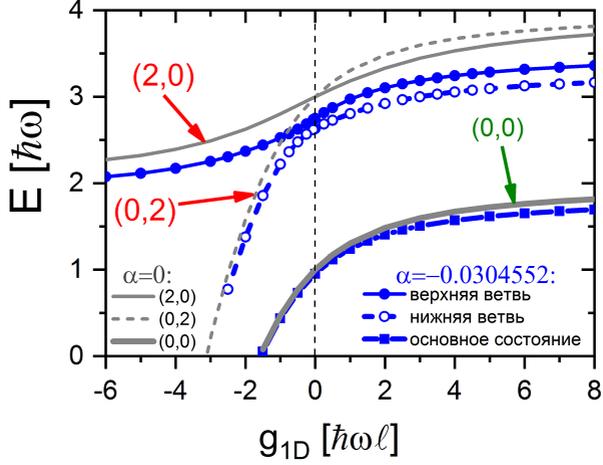


Рис. 3 — Зависимость энергии уровней гамильтониана (1) с запирающим потенциалом $V_{\text{trap}}(x) = V_6(x)$ от константы связи g_{1D} . Представлены случаи, когда параметр ангармоничности ловушки - $\alpha = -0.0304552$ (синие [темные] линии) и $\alpha = 0$ (серые [светлые] линии). Для случая $\alpha = 0$ состояния обозначены двумя квантовыми числами (n, N) , где n - квантовое число относительного движения, а N - движения центра масс атомной пары. В случае $\alpha \neq 0$ эти состояния перестраиваются при изменении знака g_{1D} : квантовые числа N и n заменяются друг другом.

относятся к вырожденному состоянию спектра двумерного гармонического осциллятора. Ангармонические поправки в потенциале $V_6(x)$ нарушают вращательную симметрию и снимают данное вырождение [37]. При этом двукратно возбужденные состояния - $(2, 0)$ и $(0, 2)$, где индексы - это число узлов по относительной координате и координате центра масс соответственно - перестраиваются при изменении знака g_{1D} . Например, состояние $(2, 0)$ переходит в состояние $(0, 2)$ при изменении отрицательных значений g_{1D} на положительные. При этом состояние $(0, 2)$ “перестраивается” в состояние $(2, 0)$.

Для вычисления параметров резонансных состояний внутри ловушки необходимо исследовать расходящуюся волну за пределами потенциала ловушки. Для этого в исходный гамильтониан (1) вводится комплексная поглощающая добавка $iW(x)$ на границах области допустимых значений переменных x_1 и x_2 [38]:

$$H_{\text{cap}}(x_1, x_2) = H(x_1, x_2) + iW(x_1) + iW(x_2). \quad (9)$$

Мнимая добавка $iW(x)$ в гамильтониане (9) необходима для подавления отражения волнового пакета от границ области допустимых значений переменных x_1 и x_2 при численном интегрировании нестационарного уравнения

Шредингера. Формальное решение нестационарного уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, x_2, t) = H_{\text{cap}} \psi(x_1, x_2, t) \quad (10)$$

для временного интервала Δt имеет вид

$$\psi(x_1, x_2, t + \Delta t) = \exp \left\{ -i \frac{H_{\text{cap}} \Delta t}{\hbar} \right\} \psi(x_1, x_2, t). \quad (11)$$

В результате введения комплексного потенциала $iW(x)$ по каждой переменной решение (11) модифицируется к виду

$$\psi(x_1, x_2, t + \Delta t) = \exp \left\{ -i \frac{H \Delta t}{\hbar} + \frac{W(x_1) + W(x_2)}{\hbar} \Delta t \right\} \psi(x_1, x_2, t). \quad (12)$$

Следовательно, для поглощения волнового пакета на границе области необходимо, чтобы потенциал $W(x)$ был отрицательным. Мы использовали функцию $W(x)$ апробированную в работе [38]:

$$W(x) = w_c(|x| - x_c)^2 \theta(|x| - x_c), \quad (13)$$

где выбор $w_c < 0$ и x_c не существен. В расчетах использовались $x_c = 10\ell$ и $w_c = -0.1\hbar\omega\ell^{-2}$ из области значений w_c и x_c , где их небольшое изменение не влияет на конечные результаты. График потенциала $W(x)$ показан на Рис. 4.

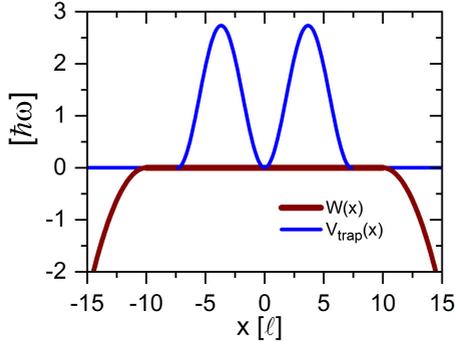


Рис. 4 — Потенциал поглощения $W(x)$ и потенциал ловушки $V_{\text{trap}}(x)$.

Скорость распада γ резонансного рассеяния состояния (n, N) извлекалась из временной зависимости вероятности

$$P(t) = \iint_{\Omega} dx_1 dx_2 |\psi(x_1, x_2, t)|^2 \quad (14)$$

нахождения двух атомов в области интегрирования $\Omega = \{x_1, x_2\}$, которая убывает экспоненциально со временем $P(t) \sim \exp\{-\gamma t\}$. Область интегрирования в (14) была выбрана в виде: $\Omega = \{|x_1| \leq 20\ell, |x_2| \leq 20\ell\}$. Из предположения об экспоненциальном распаде функции $P(t)$ следует формула

$$\gamma(t) = -\frac{1}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} \quad (15)$$

для определения скорости туннелирования γ . Рассчитанная скорость распада $\gamma(t)$ (15) осциллирует в начальной стадии распада, а затем стремится к постоянной величине (Рис. 5). Последнее обстоятельство подтверждает предположение об экспоненциальном распаде $P(t) \sim \exp\{-\gamma t\}$:

$$\gamma(t) \rightarrow \gamma = \text{const} \quad \text{при} \quad t \gg 1 \text{ мс.} \quad (16)$$

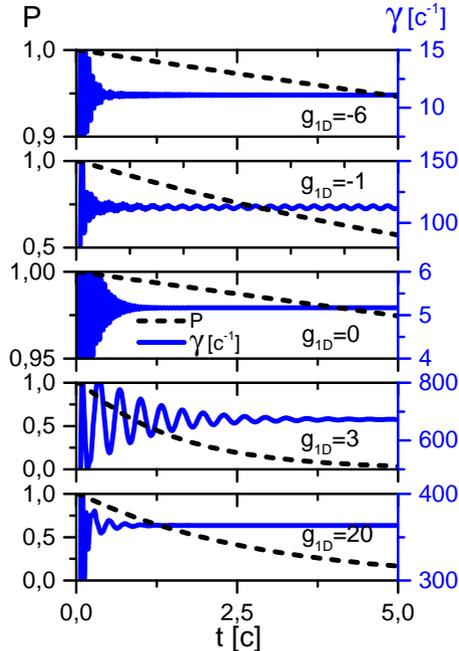


Рис. 5 — Полная вероятность $P(t)$ (пунктирные кривые, левая шкала) (14) и скорость распада $\gamma(t)$ (сплошные кривые, правая шкала) (15) для различных значений константы связи g_{1D} [в единицах $\hbar\omega\ell$]

Вычисленные скорости распада из верхней и нижней ветвей возбужденных состояний имеют немонотонную и монотонную зависимости от

константы связи g_{1D} соответственно (Рис. 6). В обоих случаях использовался один и тот же гамильтониан, но разные начальные волновые функции. Следовательно причиной различий в поведении γ является различие форм начальных волновых функций, а именно, сложной зависимостью плотности распределения атомов в начальном состоянии верхней ветви от константы связи g_{1D} : при увеличении g_{1D} максимумы распределения плотности вероятности атомов перемещаются в сторону запирающего барьера, а затем удаляются. При приближении максимумов плотности вероятности к границе ловушки атомы быстрее покидают ловушку.

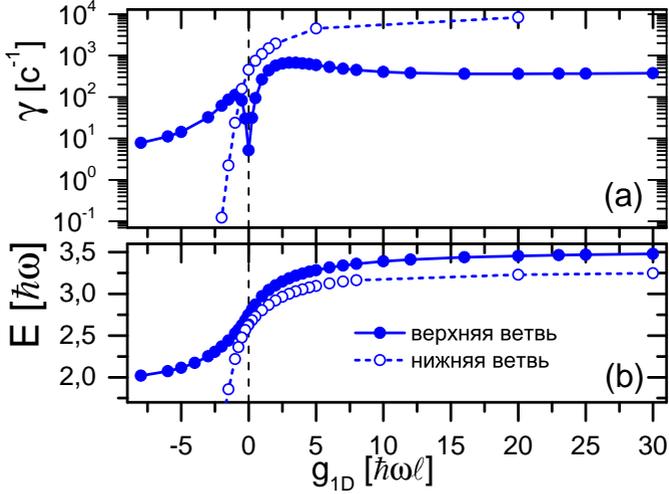


Рис. 6 — (a) Зависимость скорости распада γ от константы связи g_{1D} верхней и нижней ветвей возбужденных состояний. (b) Уровни энергии начальных состояний в зависимости от g_{1D} .

В работе также исследовалась временная динамика плотности потока вероятности из различных начальных состояний. Рассчитанное распределение вектора плотности потока вероятности

$$j_k(x_1, x_2, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \right), \quad k = 1, 2, \quad (17)$$

из верхней ветви возбужденных состояний для трех значений константы связи (Рис. 7) имеет сложную картину. Общим для всех случаев является доминирующее направление плотности потока вероятности $\mathbf{j}(x_1, x_2, t)$ вдоль осей x_1 и x_2 . Этим направлениям отвечает последовательный одночастичный распад.

Распад нижней ветви возбужденных уровней происходит более сложно: девозбуждение этого состояния конкурирует с туннелированием через

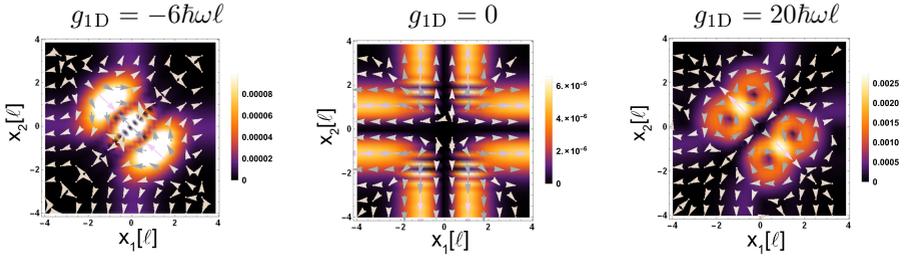


Рис. 7 — Распределение плотности потока вероятности (17): модуль $|\mathbf{j}(x_1, x_2, t)|$ (представлен в легенде в единицах ω/ℓ) и его направление (в произвольных единицах) для различных значений константы связи g_{1D} , вычисленные в момент времени $t = 120\omega^{-1} \approx 1.32$ мс.

стенку ловушки (Рис. 8). Действительно, временная зависимость вычисленных заселенностей

$$\begin{aligned}
 P_U(t) &= |\langle \psi(t) | \psi^{(U)} \rangle|^2, \\
 P_L(t) &= |\langle \psi(t) | \psi^{(L)} \rangle|^2, \\
 P_G(t) &= |\langle \psi(t) | \psi^{(G)} \rangle|^2
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

показывает, что в процессе распада в основном заселяются уровни верхней ветви возбужденных состояний и основного состояния. В формулах (18) $\psi^{(U)}(x_1, x_2)$, $\psi^{(L)}(x_1, x_2)$ и $\psi^{(G)}(x_1, x_2)$ - волновые функции верхней и нижней ветвей возбужденных начальных состояний и основного начального состояния соответственно. Каждому такому состоянию соответствует своя скорость распада γ , что на Рис. 8 демонстрируется изменением наклона графика вероятности $P(t)$.

В **третьей главе** исследуется распад системы из двух атомов лития-6, рассмотренной в эксперименте исследовательской группы в Гайдельберге [20, 21, 22]. Уникальность эксперимента состоит в том, что в нем впервые удалось локализовать два атома в потенциале ловушки. В эксперименте измерялась скорость туннелирования двухатомной системы через стенки барьера данной оптической ловушки в зависимости от константы связи межатомного взаимодействия. Проведенный ранее теоретический анализ, квазиклассическим методом Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна, как для расчета уровней энергии, так и для вычисления скоростей распада не согласуется с экспериментальными результатами [13, 14, 18]. В этом подходе нельзя учесть взаимодействие между частицами. Наша модель устраняет отмеченный недостаток и позволяет рассчитать зависимости начальных состояний и скоростей распада от константы связи межатомного взаимодействия. Мы можем исследовать связь скорости распада с начальной заселенностью.

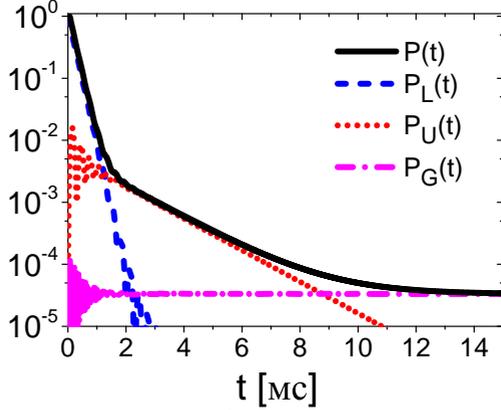


Рис. 8 — Распад нижней ветви возбужденного состояния $(2,0)$ с девозбуждением при $g_{1D} = 5\hbar\omega\ell$. $P_U(t)$, $P_L(t)$ и $P_G(t)$ вероятности - заселенности в зависимости от времени верхней и нижней ветвей возбужденных состояний и основного состояния соответственно. $P(t)$ - полная вероятность нахождения двухатомной системы в одном из перечисленных трех связанных состояний (14).

Форма ловушки используемая в экспериментах [20, 21, 22] имеет вид (Рис. 9)

$$V_{\text{trap}}(x) = pV_0 \left[1 - \frac{1}{(x/x_R)^2 + 1} \right] - \mu_B \mathcal{C}x, \quad (19)$$

где μ_B - магнетон Бора, $x_R = 8.548\ell$ ($\ell = \sqrt{\hbar/m\omega}$) - длина Рэля, $V_0 = 56.16\hbar\omega$ - максимальная глубина оптической ловушки, p - параметр, задающий глубину ловушки, $\mathcal{C} = 1894.18$ Гс/м, $\omega = 2\pi \times 1234$ Гц - частота оптической ловушки. Второй член в сумме (19) обусловлен линейным по x внешним магнитным полем, которое использовалось для управления скоростью туннелирования атомов из ловушки.

Проведенный в главе 3 анализ туннелирования [39] данной системы существенно расширяет диапазон предыдущих исследований [13, 14, 15, 18, 20, 21, 22] и включает в себя распад из более высоких возбужденных состояний. Так, нами рассмотрен распад двух ветвей возбужденных состояний для широкого диапазона константы связи межатомного взаимодействия. Для этого мы выбирали значение $p = 0.75$, чтобы в потенциале ловушки $V_{\text{trap}}(x)$ помещались первые два нижних возбужденных состояния.

При вычислении волновых функций начальных состояний к потенциалу ловушки (19) добавлялась запирающая стенка (Рис. 9). В подобном потенциале, как уже отмечалось во второй главе, волновые функции приближенно совпадают с волновыми функциями резонансных состояний.

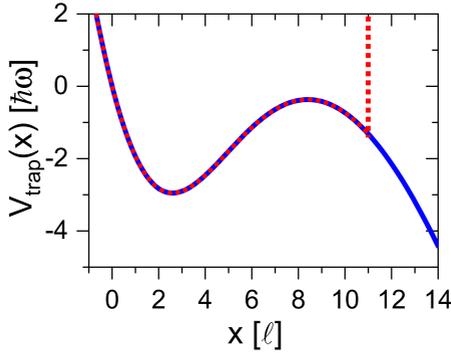


Рис. 9 — Потенциал ловушки использованный в экспериментах [20, 21, 22] (сплошная кривая). Запирающий потенциал (пунктирная кривая) используемый в нашей модели для вычисления параметров начальных состояний. Параметр глубины ловушки $p = 0.75$.

Спектр уровней энергии представлен на Рис. 10. В этом спектре также имеется квазипересечение двух ветвей возбужденных уровней энергии при $g_{1D} = 0$.

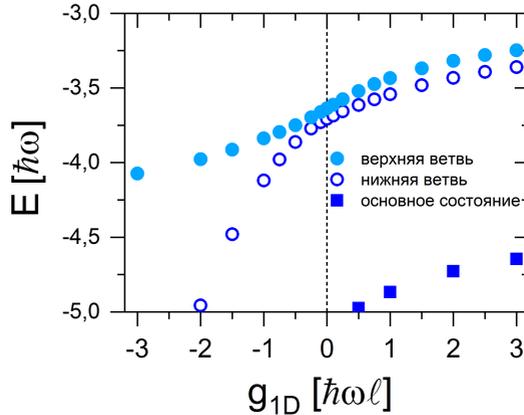


Рис. 10 — Зависимость уровней энергии от константы связи g_{1D} в случае потенциала V_{trap} (19) с запирающей стенкой.

Зависимость скоростей распада двух ветвей возбужденных состояний представлена на Рис. 11. Как видно из Рис. 11, здесь возникает немонотонная зависимость распада верхней ветви возбужденных состояний от константы связи g_{1D} , которая, как уже было отмечено во второй главе, обусловлена сложной зависимостью плотности распределения атомов в начальном состоянии от константы g_{1D} .

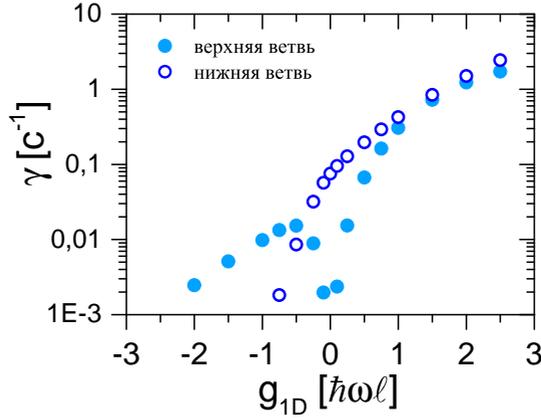


Рис. 11 — Зависимость скоростей распада двух ветвей возбужденных состояний от константы связи g_{1D} .

Для распада верхней ветви возбужденных состояний исследована временная зависимость среднего числа частиц в ловушке

$$\bar{N}(t) = 2P_2(t) + P_1(t), \quad (20)$$

где $P_2(t)$ - вероятность обнаружить две частицы в ловушке, а $P_1(t)$ - вероятность обнаружить одну. Данные вероятности вычисляются интегрированием плотности вероятности $|\psi(x_1, x_2, t)|^2$ по областям R_2 и R_1 , которые соответствуют вероятностям $P_2(t)$ и $P_1(t)$ (Рис. 12)

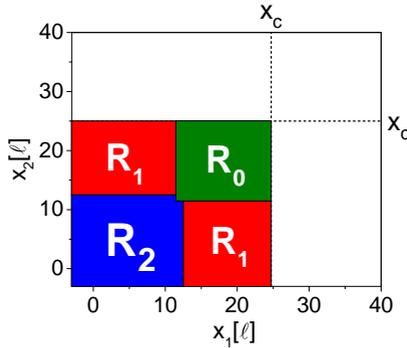


Рис. 12 — Разбиение пространственной области x_1 и x_2 на подобласти. Здесь $x_c = 25\ell$ - значение параметра для комплексного потенциала $W(x)$ (13).

Вычисленная зависимость $\bar{N}(t)$ среднего числа частиц в ловушке (Рис. 13) при распаде верхней ветви возбужденных состояний показывает,

что ловушку, в рассматриваемом временном интервале, покидает только одна частица.

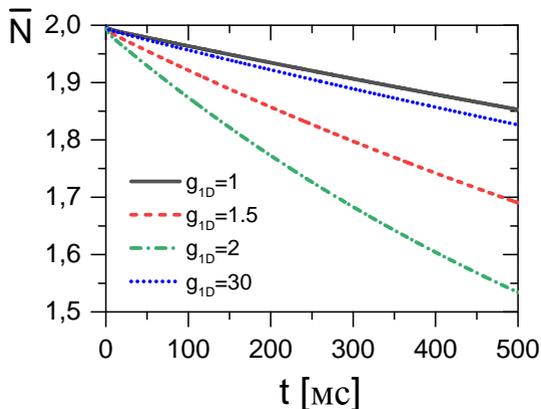


Рис. 13 — Среднее число частиц в ловушке $\bar{N}(t)$ при различных значениях константы связи g_{1D} [в единицах $\hbar\omega\ell$].

Парный распад, т.е. распад при котором две частицы покидают ловушку одновременно, можно стимулировать уменьшая в потенциале отталкивающий барьер выбором параметра $p = 0.68$ (Рис. 14). Сравнение

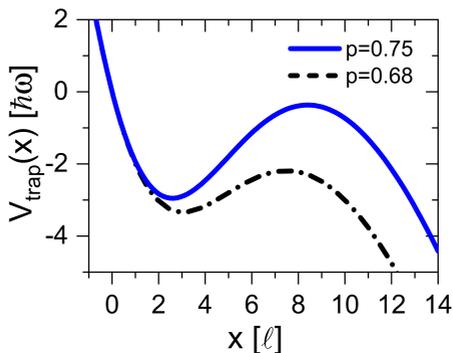


Рис. 14 — Потенциал ловушки (19) при $p = 0.75$ и $p = 0.68$

распределений плотности потока вероятности $\mathbf{j}(x_1, x_2, t)$ (17) показывает, что при меньшей величине барьера потенциала ловушки ($p = 0.68$), для случая притяжения двух атомов, $g_{1D} = -2$, наблюдается парный распад (Рис. 15). Этому соответствует доминирующее направление плотности потока $\mathbf{j}(x_1, x_2, t)$ вдоль оси $x_1 = x_2$. Во всех остальных случаях наблюдается

последовательный процесс распада, которому соответствует направление плотности потока $\mathbf{j}(x_1, x_2, t)$ вдоль осей x_1 и x_2 .

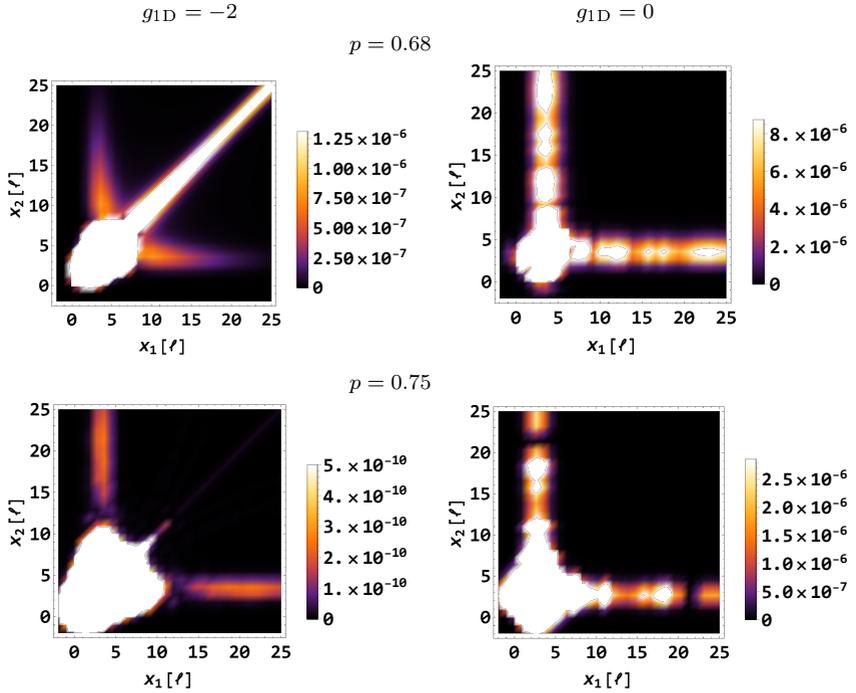


Рис. 15 — Распределение модуля плотности потока вероятности $|\mathbf{j}(x_1, x_2, t)|$.

В диссертации также было проведено сравнение наших расчетов с теоретическими расчетами работы [18] и экспериментальными результатами [21, 22] (таблицы 1 и 2). Второй и третий столбцы в таблицах 1 и 2 относятся ко второму члену в сумме (19) и соответствуют различной величине взаимодействия каждого атома с магнитным полем. Четвертый столбец содержит результаты наших расчетов, пятый столбец - результаты расчетов работы [18], шестой столбец - экспериментальные результаты работ [21, 22]. Результаты наших расчетов хорошо согласуются с теоретическими расчетами [18] и экспериментальными значениями [21, 22]. Несогласие теоретических расчетов с некоторыми экспериментальными результатами вероятно обусловлено тем, что точная форма оптической ловушки содержит также и поперечную часть [18], вклад которой наша модель не учитывает.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Таблица 1 — Скорости распада вычисленных методом, изложенным в диссертации (четвертый столбец), методом работы [18] (пятый столбец), а также полученные в экспериментах [21, 22]. Значение параметра ловушки $p = 0.63536$. Первый столбец - значение константы связи, второй и третий столбцы - значение коэффициента для линейного магнитного поля в (19) для каждого из атомов.

$g_{1D} [\hbar\omega\ell]$	\mathcal{C}_1 [G/m]	\mathcal{C}_2 [G/m]	$\gamma^{\text{our}} [\text{s}^{-1}]$	$\gamma [\text{s}^{-1}]$ [18]	$\gamma^{\text{exp}} [\text{s}^{-1}]$ [21, 22]
0	1881.11	1891.32	57.3	57.0	57.01(3.74)
-0.654	1862.03	1887.93	4.30	4.27	9.70(0.33)
-1.451	1891.38	1891.32	0.368	0.360	2.14(0.19)
-1.797	1888.11	1891.32	0.141	0.137	0.505(0.023)

Таблица 2 — Скорости распада вычисленных методом, изложенным в диссертации (четвертый столбец), методом работы [18] (пятый столбец), а также полученные в экспериментах [21, 22]. Значение параметра ловушки $p = 0.68$. Первый столбец - значение константы связи, второй и третий столбцы - значение коэффициента для линейного магнитного поля в (19) для каждого из атомов.

$g_{1D} [\hbar\omega\ell]$	\mathcal{C}_1 [G/m]	\mathcal{C}_2 [G/m]	$\gamma^{\text{our}} [\text{s}^{-1}]$	$\gamma [\text{s}^{-1}]$ [18]	$\gamma^{\text{exp}} [\text{s}^{-1}]$ [21, 22]
6.15	1883.86	1881.60	4.0	4.2(0.5)	2.9(0.2)
∞	1884.56	1882.47	14	15	12.8(1.2)
-4.42	1885.88	1884.07	79	77	62.8(8.2)
-3.15	1886.57	1884.90	132	130	107(12)

Литература

- [1] C. Chin, R. Grimm, P.S. Julienne and E. Tiesinga, *Feshbach Resonances in Ultracold Gases*, Reviews of Modern Physics **82**, 1225 (2010).
- [2] E. Haller, M. J. Mark, R. Hart, J. G. Danzl, L. Reichsollner, V. Melezhik, P. Schmelcher, and H.-C. Nägerl, *Confinement-induced resonances in low-dimensional quantum systems*, Physical Review Letters **104**, 153203 (2010).
- [3] M. Olshanii, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, Physical Review Letters **81**, 938 (1998).
- [4] S. Sala, P.-I. Schneider, and A. Saenz, *Inelastic Confinement-Induced Resonances in Low-Dimensional Quantum Systems*, Physical Review Letters **109**, 073201 (2012).
- [5] S.-G. Peng, H. Hu, X.-J. Liu and P.D. Drummond, *Confinement-Induced Resonances in Anharmonic Waveguides*, Physical Review A **84**, 043619 (2011).
- [6] Z. Idziaszek and T. Calarco, *Analytical solutions for the dynamics of two trapped interacting ultracold atoms*, Physical Review A, **74**, 022712 (2006).
- [7] M.A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac and M. Rigol, *One dimensional bosons: From condensed matter systems to ultracold gases*, Reviews of Modern Physics **83**, 4, 1405-1466 (2011).
- [8] M. Girardeau, *Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension*, Journal of Mathematical Physics (N.Y.) **1**, 516 (1960).
- [9] A. J. Leggett, *Quantum Liquids* 1st ed. (Oxford University Press, New York, 2006).
- [10] M. Rontani and L. J. Sham, *Novel Superfluids*, Vol. 2 (Oxford University Press, New York, 2013); arXiv:1301.1726.
- [11] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Physical Review **108**, 1175 (1957).
- [12] T. Maruyama, T. Oishi, K. Hagino, and H. Sagawa, *Time-dependent approach to many-particle tunneling in one dimension*, Physical Review C **86**, 044301 (2012).
- [13] M. Rontani, *Tunneling theory of two interacting atoms in a trap*, Physical Review A **108**, 115302 (2012).

- [14] M. Rontani, *Pair tunneling of two atoms out of a trap*, Physical Review A **88**, 043633 (2013).
- [15] R. Lundmark, C. Forssén, and J. Rotureau, *Tunneling theory for tunable open quantum systems of ultracold atoms in one-dimensional traps*, Physical Review A **91**, 041601(R) (2015).
- [16] P. M. Krassovitskiy and F. M. Pen'kov, *Contribution of resonance tunneling of molecule to physical observables*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **47**, 225210 (2014).
- [17] A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, V. L. Derbov, A. Gózdź and P. M. Krassovitskiy, *Metastable states of a composite system tunneling through repulsive barriers*, Theoretical and Mathematical Physics **186**, 21 (2016).
- [18] S. E. Gharashi and D. Blume, *Tunneling dynamics of two interacting one-dimensional particles*, Physical Review A **92**, 033629 (2015).
- [19] A. U. J. Lode, A. I. Streltsov, O. E. Alon, H.-D. Meyer, and L. S. Cederbaum, *Exact Decay and Tunnelling Dynamics of Interacting Few-Boson Systems*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **42**, 044018 (2009).
- [20] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T.B. Ottenstein, A.N. Wenz, S. Jochim, *Deterministic preparation of a tunable few-fermion system*, Science **332**, 336 (2011).
- [21] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, and S. Jochim, *Fermionization of Two Distinguishable Fermions*, Physical Review Letters **108**, 075303 (2012).
- [22] G. Zürn, A. N. Wenz, S. Murmann, A. Bergschneider, T. Lompe, and S. Jochim, *Pairing in Few-Fermion Systems with Attractive Interactions*, Physical Review Letters **111**, 175302 (2013).
- [23] P. M. Preiss, J. H. Becher, R. Klemt, V. Klinkhamer, A. Bergschneider, N. Defenu, and S. Jochim, *High-Contrast Interference of Ultracold Fermions*, Physical Review Letters **122**, 143602 (2019).
- [24] A. Bergschneider, V. M. Klinkhamer, J. H. Becher, R. Klemt, G. Zürn, P. M. Preiss, and S. Jochim, *Spin-resolved single-atom imaging of ^6Li in free space*, Physical Review A **97**, 063613 (2018).
- [25] Q. Guan, V. Klinkhamer, R. Klemt, J. H. Becher, A. Bergschneider, P. M. Preiss, S. Jochim, and D. Blume, *Density Oscillations Induced by Individual Ultracold Two-Body Collisions*, Physical Review Letters **122**, 083401 (2019).

- [26] T. Hartke, B. Oreg, N. Jia, and M. Zwierlein, (2021), arXiv:2103.13992.
- [27] G.I. Marchuk, *Methods of Numerical Mathematics* (Springer-Verlag, New York 1975), Sec. 4.3.3.
- [28] I. S. Ishmukhamedov, D. T. Aznabayev, and S. A. Zhaugasheva, *Two-body atomic system in a one-dimensional anharmonic trap: The energy spectrum*, Physics of Particles and Nuclei Letters **12**, 680 (2015).
- [29] I. S. Ishmukhamedov and V. S. Melezhik, *Tunneling of two bosonic atoms from a one-dimensional anharmonic trap*, Physical Review A **95**, 062701 (2017).
- [30] I. S. Ishmukhamedov, D. S. Valiolda, and S. A. Zhaugasheva, *Description of ultracold atoms in a one-dimensional geometry of a harmonic trap with a realistic interaction*, Physics of Particles and Nuclei Letters **11**, 238 (2014).
- [31] E. Tiesinga, C. J. Williams, F. H. Mies, P. S. Julienne, *Interacting Atoms Under Strong Quantum Confinement*, Physical Review A **61**, 063416 (2000).
- [32] J.P. Kestner, L.M. Duan, *Anharmonicity-induced resonances for ultracold atoms and their detection*, New Journal of Physics, **12** (5), 043619 (2010).
- [33] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, New York, 1987).
- [34] T. Busch, B. Englert, K. Rzazewski, and M. Wilkens, *Two cold atoms in a harmonic trap*, Foundations of Physics **28**, 549 (1998).
- [35] S. A. Gurvitz, P. B. Semmes, W. Nazarewicz, and T. Vertse, *Modified two-potential approach to tunneling problems*, Physical Review A **80**, 042705 (2004).
- [36] S. Grishkevich and A. Saenz, *Theoretical description of two ultracold atoms in a single site of a three-dimensional optical lattice using realistic interatomic interaction potentials*, Physical Review A **80**, 013403 (2009).
- [37] J. P. Dahl and W. P. Schleich, *State operator, constants of the motion, and Wigner functions: The two-dimensional isotropic harmonic oscillator*, Physical Review A **79**, 024101 (2009).
- [38] U. V. Riss and H.-D. Meyer, *Calculation of resonance energies and widths using the complex absorbing potential method*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **26**, 4503 (1993).
- [39] I. S. Ishmukhamedov and A. S. Ishmukhamedov, *Tunneling of two interacting atoms from excited states*, Physica E: Low-dimensional systems and Nanostructures **109**, 24-29 (2019).