На правах рукописи

# Доловова Оксана Александровна

# Рассеяние и связанные состояния в малочастичных планарных дипольных квантовых системах

1.3.3. Теоретическая физика

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2023

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики атмосферы им. А.М. Обухова Российской академии наук.

## Научный руководитель:

**Горбунов Михаил Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, заведующий Лабораторией турбулентности и распространения волн федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики атмосферы им. А.М. Обухова Российской академии наук.

## Официальные оппоненты:

**Алтайский Михаил Викторович**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник 51-го отдела федерального государственного бюджетного учреждения науки Института космических исследований Российской академии наук.

Морозов Андрей Алексеевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории методов математической физики и теории информации федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем передачи информации имени А.А.Харкевича Российской академии наук.

## Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова».

Защита состоится «2» марта 2023 г. в 17.00 часов на заседании объединенного совета по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук 99.2.018.02, созданного на базе Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена и Национального исследовательского университета ИТМО, по адресу: 191186, Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, 48, корп. 3, ауд. 52.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена (191186, Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, 48, корп. 5) и на сайте университета по адресу: https://disser.herzen.spb.ru/Preview/ Karta/karta\_000000889.html.

Автореферат разослан «\_\_\_\_» декабря 2022 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

## Общая характеристика работы

#### Актуальность темы исследования.

Рассматриваемый в диссертационной работе круг вопросов относится к квантовой теории рассеяния.

В последние годы, благодаря большому количеству предсказанных и экспериментально обнаруженных новых квантовых эффектов, системы с дипольным межчастичным взаимодействием привлекают повышенный интерес теоретических [1, 2] и экспериментальных [3, 4] групп. К таким эффектам относятся: анизотропная сверхтекучесть [5], экзотические «самостабилизирующиеся» квантовые капли [6, 7] и состояния со свойствами сверхтекучего твердого тела [8]. Получены ультрахолодные газы полярных молекул [9] и магнитных атомов [10]. Оптические ловушки с планарной геометрией являются перспективным кандидатом для стабилизации и удержания дипольных газов и контролирования их свойств, поскольку дипольное взаимодействие является изотропным и отталкивательным в случае поляризации молекул вдоль оси перпендикулярной плоскости их движения, а наклон оси поляризации приводит к контролируемой анизотропии взаимодействия [1] с помощью внешнего статического или зависящего от времени поля [11]. Столкновения молекул в слое дископодобной ловушки моделируются двумерной динамикой молекул [12, 13]. Это указывает на актуальность задачи изучения двумерных дипольных газов.

Исследования взаимодействия дипольных двухатомных молекул в плоскости актуальны в том числе благодаря возможному использованию их в качестве кубитов для квантовых компьютеров [14]. Для создания малочастичной системы с временем жизни, достаточным для организации квантовых вычислений, необходимы теоретические оценки по определению условий стабильности динамических дипольных систем. Исследование диполь-дипольного взаимодействия в применении к квантовым вычислениям является в настоящее время актуальной задачей [15]. Проведение экспериментов требует дальнейшего анализа влияния короткодействующего взаимодействия на дипольное рассеяние в плоскости [3]. Известные результаты, описывающие резонансы в зависимостях сечения рассеяния от радиуса короткодействующего взаимодействия для трехмерного пространства [16], полученные с помощью численного решения уравнения Шрёдингера в адиабатическом представлении, неприменимы к описанию дипольного рассеяния в плоскости. В работах [13, 17] изучались зависимости сечения двумерного дипольного рассеяния при фиксированном значении радиуса короткодействующего потенциала. Оценка влияния короткодействующего взаимодействия на процессы дипольного рассеяния в плоскости при различных ориентациях дипольных моментов является нерешенной, а потому актуальной физической задачей.

Цели и задачи диссертационной работы. Целью диссертационной работы является изучение рассеяния и связанных состояний в малочастичных планарных дипольных квантовых системах. Исходя из этого, были поставлены следующие задачи:

- Решение задачи рассеяния в малочастичных планарных дипольных квантовых системах с помощью численного моделирования. Проверка результатов, полученных с помощью созданного программного пакета.
- Решение двумерной проблемы связанных состояний квантовой частицы в поле квантового диполя с помощью численного моделирования. Улучшение точности по сравнению с результатами других авторов.
- Изучение возникновения областей притягивающего потенциала дипольного взаимодействия при варьировании радиуса короткодействующего взаимодействия в виде потенциальной стенки и более реалистичного потенциала Леннарда–Джонса и ориентации дипольных моментов. Описание связи параметров потенциальной стенки и потенциала Леннарда–Джонса для сравнения получаемых результатов. Выявление зависимости критического (магического) угла от взаимной ориентации произвольно направленных диполей.
- Сравнение результатов анализа рассеяния, полученных с помощью борновского приближения, обобщенного на случай рассеяния произвольно направленных диполей в плоскости, и эйконального приближения с полученными численными результатами. Определение областей применимости этих аналитических приближений.
- Исследование свойств сечения диполь-дипольного рассеяния при столкновениях различимых и идентичных частиц, а именно: изучение возникающих резонансов в зависимостях бозонных и фермионных сечений от радиуса короткодействующего взаимодействия при низких энергиях столкновений, их связь с критическим (магическим) углом наклона диполей. Изучение зависимости полного и дифференциального сечений от направлений дипольных моментов.
- Расчет энергетических зависимостей сечения дипольного рассеяния бозонов и фермионов в плоскости для различных значениях радиуса короткодействующего взаимодействия и для некоторых взаимных ориентаций дипольных моментов. Анализ полученных зависимостей в резонансном и нерезонансном случаях, сравнение с известными результатами для трехмерного дипольного рассеяния.
- Анализ влияния короткодействующего взаимодействия на дипольное рассеяние в плоскости для больших значений энергии столкновений. Изучение зависимостей сечения дипольного рассеяния от направлений дипольных моментов при некоторых значениях радиуса короткодействующего взаимодействия при больших значениях энергии столкновений.

#### Научная новизна.

Научная новизна полученных в диссертационной работе результатов определяется тем, что впервые исследована зависимость сечения диполь-дипольного рассеяния в плоскости от радиуса короткодействующего взаимодействия для произвольной ориентации дипольных моментов сталкивающихся частиц.

Определена зависимость критического (магического) угла наклона одного из диполей как функция направления второго диполя для случая произвольной ориентации диполей, движущихся в плоскости.

Впервые показано, что сечение дипольного рассеяния бозонов (фермионов) в плоскости, в отсутствие резонансов, растет (убывает) с уменьшением энергии в отличие от трехмерного случая, где сечение дипольного рассеяния бозонов (фермионов) имеет форму плато в низкоэнергетическом пределе. Показано, что взаимная ориентация диполей сильно влияет на форму энергетических зависимостей сечения рассеяния, которые начинают осциллировать с увеличением угла наклона диполей к плоскости рассеяния, в отличие от трехмерного рассеяния.

Задача о квантовой частице, движущейся в плоскости в поле квантового диполя, изучалась другими авторами в вариационном подходе [18, 19]. Вариационные методы основаны на выборе множества шаблонных функций и минимизации энергии состояний по их параметрам. Принципиальным ограничением этих методов является то, что получаемые уровни всегда превышают истинное значение, а их ошибки невозможно оценить. В ходе выполненных нами расчетов впервые вычислены энергии низколежащих уровней с относительной точностью, составившей десять в минус шестой степени.

#### Теоретическая и практическая значимость.

Теоретическая значимость выполненного в диссертации исследования свойств системы взаимодействующих диполей заключается в том, что получены характеристики рассеяния произвольно ориентированных бозонов и фермионов, которые являются универсальными. Они могут быть пересчитаны для параметров широкого класса полярных молекул и атомов с большим дипольным моментом. Полученные в диссертационной работе результаты закладывают основу для численного решения широкого класса задач, включающих: задачи трех и более тел; задачи на связанные состояния или рассеяние с временной зависимостью потенциала конфайнмента или амплитуды внешнего поля; задачи туннелирования частиц в оптических решетках.

Практическая значимость результатов диссертационной работы состоит в возможности их применения для стабилизации дипольных газов в двумерной геометрии оптической ловушки, открывающей путь к созданию кубитов на основе таких систем. Резонансы упругого рассеяния являются одной из причин потерь частиц из ловушек в экспериментах. В диссертации выявлены условия отсутствия резонансов сечения упругого рассеяния. В частности, с помощью численных расчетов получены значения радиуса короткодействущего взаимодействия, для которых отсутствуют резонансы и теоретически определен критический (магический) угол наклона одного диполя как функция направления второго диполя, при превышении которого появляются резонансы.

Ожидается, что присущее дипольному взаимодействию дальнодействие

позволит решить [20, 21] ряд проблем реализации масштабируемого квантового компьютера. Полученные в диссертации результаты позволят улучшить стабилизацию и контроль холодных дипольных газов в оптических решетках и помогут в создании кубитов на основе полярных молекул.

#### Положения, выносимые на защиту:

- Найдены условия возникновения резонансов в зависимости сечения дипольного рассеяния в плоскости от радиуса короткодействующего взаимодействия произвольно ориентированных диполей. Определен критический (магический) угол для произвольно направленных диполей.
- Показано, что сечение дипольного рассеяния бозонов (фермионов) возрастает (убывает) с уменьшением энергии в двумерном случае в отличии от трехмерного случая. Найдено влияние взаимной ориентации диполей на энергетические распределения сечения рассеяния.
- Продемонстрировано возникновение осцилляций в зависимости сечения дипольного рассеяния в плоскости от угла наклона диполей для больших энергий при различных значениях радиуса короткодействующего взаимодействия.
- Получены пороговые значения радиуса короткодействующего взаимодействия, определяющие отсутствие осцилляций в зависимостях сечения рассеяния от угла наклона диполей. Выявлен нецентральный характер угловых распределений дифференциальных сечений дипольного рассеяния бозонов и фермионов вдали от резонансов.
- Получены значения энергии низколежащих уровней в проблеме связанных состояний квантовой частицы в поле квантового диполя в плоскости и оценена их погрешность.

#### Апробация результатов.

Основные результаты диссертации доложены на 20 отечественных и международных конференциях: Международная конференция «Перспективная элементная база микро- и наноэлектроники с использованием современных достижений теоретической физики», г. Москва, 2020 г., 2017 г.; 13th European Conference on Atoms Molecules and Photons (ECAMP'13), г. Флоренция, Италия, 2019 г., 29th International Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology" (CriMiCo'2019), г. Севастополь, 2019 г.; 61-я, 54-я всероссийская научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, Московская область, 2018 г., 2011 г.; Международная научная конференция ОМУС-2019, ОМУС-2018, ОМУС-2015, ОМУС-2014, ОМУС-2012, г. Дубна, Московская область, 2019 г., 2018 г., 2015 г., 2014 г., 2012 г.; 25-я международная конференция «Математика. Компьютер. Образование», г. Дубна, Московская область, 2018 г.; IV International Conference On Quantum Technologies ICQT'2017, г. Москва, 2017 г.; IRTG: Ultracold few- and many-body systems, Freiburg University, г. Миттельвир, Франция, 2016 г.; 12-я, 11-я курчатовская молодежная научная школа-конференция, г. Москва, 2014 г., 2013 г.; Международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (MPAMCS-2014), (MPAMCS-2012), г. Дубна, Московская область, 2014 г., 2012 г.; Международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика» (MMCP'2013), г. Дубна, Московская область, 2013 г.; Всероссийская конференция с международным участием «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем», г. Москва, 2012 г., а также на научных семинарах Отдела динамики атмосферы ИФА им. А.М. Обухова РАН, кафедры теоретической физики РГПУ им. А.И. Герцена, лаборатории квантовой оптики СПбГУ, кафедры теоретической физики МГОУ.

#### Публикации.

По материалам диссертационной работы подготовлено 9 публикаций: 4 в реферируемых журналах, входящих в списки Web of Science и Scopus, [A1, A4–A6], 2 в российских научных реферируемых журналах из списка ВАК РФ по специальности «Теоретическая физика» для публикации основных результатов диссертаций [A2, A3] и 3 в сборниках трудов конференций [A7–A9].

#### Личный вклад автора.

Личный вклад соискателя в результаты и основные положения, выносимые на защиту, является определяющим. Автор принимал непосредственное участие разработке вычислительных схем и их реализации в компьютерных кодах, в получении, анализе и апробации результатов на международных конференциях, в подготовке текстов статей.

#### Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации составляет 100 страниц, включая 28 рисунков и 5 таблиц. Библиография содержит 106 наименований.

# Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показаны теоретическая и практическая значимости полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе «Энергии связи квантового диполя в плоскости» численно исследованы энергетические уровни связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя. Для этого применен численный алгоритм с Фурье-интерполяцией волновой функции по угловой переменной. Определены значения уровней энергии и соответствующие им собственные волновые функции квантовой частицы в поле двумерного диполя. Использованы методы с известной оценкой ошибки аппроксимации, что позволило оценить относительную погрешность энергии низколежащих связанных состояний, составившую 10<sup>-6</sup>. Рассчитаны плотности вероятности распределений волновых функций низколежащих состояний, соответствующие вычисленным энергиям. Результаты первой главы опубликованы в работах [A2, A5, A8].

В разделе 1.1 проведен анализ работ и численных методов, использованных для расчетов низколежащих уровней энергии связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя. Другими авторами были выполнены расчеты значения энергии основного состояния с помощью вариационного подхода с выбором различных базисных функций [22–26]. Ранее полученные с помощью вариационных методов приближенные значения энергий собственных состояний не имеют независимой оценки точности [19, 27]. Получить ее можно только по отношению к точным аналитическим решениям или к численным расчетам другими методами с известной оценкой точности [28]. Исследовано двумерное уравнение Шрёдингера для точечной частицы в поле диполя с нецентральным потенциалом диполя. В разделе 1.2 описан численный алгоритм для решения краевой задачи Штурма-Лиувилля для поиска связанных состояний планарных квантовых систем двух частиц. Для решения двумерного уравнения Шрёдингера нами предложена вычислительная схема, основанная на методе обратных итераций со сдвигом и модификации метода представления дискретной переменной. Погрешность вычислений определяется шагом разностных сеток. Преимуществом использованного представления по сравнению с вариационным методом и разложением по парциальным волнам является наличие оценки погрешности аппроксимации [29]. Продемонстрирована быстрая сходимость по числу точек сетки по угловой переменной для исследуемого потенциала. Использование разложения по парциальным волнам для сильно анизотропных потенциалов неэффективно из-за необходимости большого числа базисных функций [30]. Для вариационного подхода [18, 19] получаемые значения энергии являются оценкой сверху точного значения энергии системы и отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения [31]. Для контроля погрешности результатов используется экстраполяция Ричардсона [32]: мы последовательно удваиваем количества точек для разностных сеток по радиальной и угловой переменным, контролируя число сохраняющихся знаков в результатах. В наших расчетах сохранялись восемь значащих цифр, что говорит о точности порядка 10<sup>-6</sup>. Вычислены значения энергии 3-го возбужденного состояния двумерного осциллятора для последовательно сгущаемых сеток с числом точек по радиальной переменной 140, 280 и 560. Коэффициент Рунге равен  $63, 43 \approx 64 = 2^6$ , что подтверждает 6-ой порядок точности вычислительной схемы.

В разделе 1.3 приведено сравнение вычисленных с точностью до шести значащих цифр уровней энергий  $\epsilon_n$  пяти (n = 1 - 5) низколежащих чётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ других авторов [18, 19] и сравнение вычисленных с точностью до шести значащих цифр уровней энергий  $\epsilon_n$  пяти (n = 1 - 5) низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ других авторов [19, 27]. Приведены пространственные распределения плотности вероятности вычисленных пяти низколежащих чётных связанных состояний n = 1, 2...5 и нечётных связанных состояний n = 1, 2...5. Распределения чётного и нечётного возбужденных состояний при n = 5 отличаются от n < 5. При росте n от 1 до 4 у распределения появляются дополнительные области, отделенные приближенно вертикальной границей, а при n = 5 распределение распадается на несколько горизонтальных областей. Качественно это можно проиллюстрировать на примере связанных состояний точечной частицы в поле двумерного анизотропного  $\omega_x \neq \omega_y$  гармонического осциллятора (полная энергия которого  $E = \hbar\omega_x(n_x + 1) + \hbar\omega_y(n_y + 1)$ ). Накопление квантов возбуждения происходит по переменной x пока выполняется условие  $\hbar\omega_x(n_x+1) < \hbar\omega_y$ , после чего энергия увеличивается за счёт возбуждения по оси Y с изменением формы распределения и накопление продолжается по переменной x ( $\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$ ).

Во второй главе «Рассеяние в малочастичных планарных дипольных квантовых системах» представлено теоретическое описание рассеяния произвольно направленных диполей в двух пространственных измерениях. Для моделирования короткодействующего взаимодействия рассмотрены два вида потенциалов: потенциал бесконечно высокой потенциальной стенки и более реалистичный потенциал Леннарда–Джонса. Сильная анизотропия потенциала характеризуется дипольным взаимодействием. Разработан численный алгоритм решения задачи рассеяния произвольно направленных диполей. Выявлена зависимость критического (магического) угла от направлений диполей. Построено обобщение борновского приближения на случай рассеяния произвольно направленных диполей в плоскости, записано эйкональное приближение для случая высоких энергий. Определены их области применимости. Результаты второй главы опубликованы в работах [А1, А4, А6, А7, А8, А9].

В разделе 2.1 приведен краткий обзор по исследованиям дипольных планарных систем с нецентральным взаимодействием. В разделе 2.2 представлено теоретическое описание столкновений полярных молекул в слое одномерной оптической ловушки, моделируемых задачей диполь-дипольного рассеяния в двух пространственных измерениях. Квантовое рассеяние в плоскости описывается двумерным уравнением Шрёдингера в полярных координатах в дипольных единицах длины D и энергии  $E_D$ :  $D = \mu d^2/\hbar^2$ ,

 $E_D = \hbar^6 / \mu^3 d^4$ . Для полярной молекулы <sup>23</sup> $Na^{87}Rb$  дипольный момент составляет d = 1.35 a.e. [33], и  $E_D = 2.996 \times 10^{-16}$  a.e..

Параметры искомых волновой функции  $\Psi(\rho, \phi)$  и амплитуды рассеяния  $f(q, \phi, \phi_q)$  определяются относительным импульсом q, определяемым энергией столкновения  $E(q = \sqrt{2\mu E}/\hbar)$ , направлением q/q падающей волны (определяемом углом  $\phi_q$ ) и углом рассеяния  $\phi$ . Здесь  $\mu$  — приведенная масса системы. Варырование направления падающей волны производится эквивалентным преобразованием анизотропного потенциала взаимодействия  $U(\rho, \phi) \to U(\rho, \phi + \phi_q)$ .

Потенциал взаимодействия  $U(\rho, \phi)$  представляется в виде

$$U(\rho,\phi) = V_{SR}(\rho) + V_{dd}(\rho,\phi), \qquad (1)$$

где  $V_{SR}(\rho)$  – потенциал короткодействующего взаимодействия, и  $V_{dd}(\rho, \phi)$  – потенциал дальнодействующего диполь-дипольного взаимодействия.

Потенциал взаимодействия двух произвольно направленных диполей  $V_{dd}(\rho, \phi)$  в плоскости равен:

$$V_{dd}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2) = \frac{1}{\rho^3} \left( (\boldsymbol{d}_1 \boldsymbol{d}_2) - 3 \frac{(\boldsymbol{d}_1 \boldsymbol{\rho})(\boldsymbol{d}_2 \boldsymbol{\rho})}{\rho^2} \right),$$
(2)

где  $d_i(i = 1, 2)$  – дипольные моменты,  $(d_i \rho) / \rho$  – их проекции на линию, соединяющую их центры масс. В полярных координатах выражение (2) представимо в виде:

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

где углы  $\alpha$  и  $\gamma$  определяют наклон диполей по отношению к оси Z и угол  $\beta$  определяет пространственную ориентацию плоскостей  $Zd_1$  и  $Zd_2$ . Схема взаимного расположения произвольно направленных диполей представлена на рисунке 1.



Рис. 1. Схема взаимного расположения двух произвольно ориентированных диполей **d**<sub>1</sub> и **d**<sub>2</sub> в плоскости XY.



Рис. 2. Зависимость критического угла наклона  $\alpha_c(\beta, \gamma)$  диполя  $\mathbf{d_1}$  от угла вращения  $\beta$  и от угла наклона  $\gamma$  диполя  $\mathbf{d_2}$  (Рисунок1). На врезке отображена зависимость (13) критического угла  $\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha)$ (в град.) от угла  $\beta$  (в град.) для случая одинаковых углов наклона двух диполей ( $\gamma = \alpha$ ).

В данной работе мы используем два типа потенциалов, аппроксимирующих отталкивательное короткодействующее взаимодействие  $V_{SR}(\rho)$ : бесконечно высокая потенциальная стенка [13, 16, 34] шириной  $\rho_{SR}$  (чтобы волновая функция была равна нулю при  $\rho_{SR}$ ):

$$V_{SR}(\rho) = \begin{cases} \infty, \ \rho \leqslant \rho_{SR} \\ 0, \ \rho > \rho_{SR} \end{cases}, \tag{4}$$

и реалистический потенциал Леннарда–Джонса [35, 36] в дипольных единицах:

$$V_{SR}(\rho) = \frac{1}{E_D} \left( \frac{C_{12}}{\rho^{12}} - \frac{C_6}{\rho^6} \right).$$
 (5)

Значение параметра  $C_6$  потенциала Леннарда–Джонса фиксировано для полярных молекул, например,  $C_6 = 1.5 \times 10^6$  а.е. для  ${}^{23}Na^{87}Rb$  [33, 35]. Дипольная длина  $D = \mu d^2/\hbar^2$  ( $D \approx 182554$  а.е. для  ${}^{23}Na^{87}Rb$ ) для полярных молекул гораздо больше, чем характерная длина Ван-Дер-Ваальса  $R_6 = (2\mu C_6/\hbar^2)^{1/4}$ ( $\mu = 100167$  а.е.;  $R_6 \approx 740$  а.е. для  ${}^{23}Na^{87}Rb$ ) [35], и потенциал Леннарда–Джонса эффективно используется в качестве отталкивательного потенциала дипольдипольного взаимодействия. Увеличение  $C_{12}$  при фиксированном  $C_6$  ведет к усилению короткодействующей части потенциала  $U(\rho, \phi)$ .

Определим радиус короткодействующего взаимодействия  $\rho_{SR}$  в случае потенциала Леннарда–Джонса через соотношение:  $\rho_{SR} = \min(\rho_0(\phi))$ , где  $\rho_0(\phi)$  положение нуля потенциала  $U(\rho, \phi)$ . С физической точки зрения,  $\min(\rho_0(\phi))$  это минимальное расстояние, которое могут достигнуть молекулы при малой энергии столкновения. Кроме того, для рассматриваемых полярных молекул слагаемое  $-C_6/\rho^6$  мало по сравнению с  $V_{dd}$ . Таким образом,  $\rho_{SR}$  определяется из условия

$$C_{12}/\rho^{12} + V_{dd}(\rho, \beta/2) = 0,$$

откуда следует соотношение для зависимости  $\rho_{SR}$  от  $C_{12}$  и углов  $\alpha, \beta, \gamma$ :

$$\rho_{SR} = \left[\frac{C_{12}}{\sin(\alpha)\sin(\gamma)\frac{3+\cos(\beta)}{2} - \cos(\alpha)\cos(\gamma)}\right]^{1/9}.$$
(6)

В случае потенциала Леннарда–Джонса для изменения  $\rho_{SR}$  мы варьируем параметр  $C_{12}$ .

Дифференциальное сечение рассеяния определяется вычисленной амплитудой рассеяния  $f\left(q,\phi,\phi_q\right)$ 

$$\frac{d\sigma(q,\phi,\phi_q)}{d\Omega} = |f(q,\phi,\phi_q)|^2,\tag{7}$$

где  $d\Omega = d\phi d\phi_q$ . Переход к дипольному рассеянию идентичных бозонов (фермионов) выполняется с учетом симметризации  $\epsilon = +1$  (антисимметризации  $\epsilon = -1$ ) волновой функции:

$$\Psi(\rho,\phi) \to e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho}} + \epsilon \, e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho}} + f(\phi) \frac{e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{-i\boldsymbol{\rho}}} \tag{8}$$

и дифференциальных сечений:

$$\frac{d\sigma(\phi)}{d\Omega} = \left| f(\phi, \phi_q) \right|^2 = \left| f(\phi) + \epsilon f\left( \left| 180^\circ - \phi \right| \right) \right|^2.$$
(9)

Из определений (7) и (9) следует, что в случае бозонов это приводит к увеличению, а в случае для фермионов — к уменьшению сечения рассеяния диполей относительно сечений для различимых частиц для некоторых направлений, например, для  $\phi + \phi_q = 90^\circ$ :

$$\frac{d\sigma_B(\phi + \phi_q)}{d\Omega} = 4 \frac{d\sigma(\phi + \phi_q)}{d\Omega}$$
(для бозонов),  
$$\frac{d\sigma_F(\phi + \phi_q)}{d\Omega} = 0$$
(для фермионов).

Полное сечение рассеяния выражается через рассчитываемую амплитуду рассеяния усреднением по направлению падающей волны  $\phi_q$  и интегрированием по углу рассеяния  $\phi$ :

$$\sigma(q) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\phi_q d\phi \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{2\pi} |f(q,\phi,\phi_q)|^2 d\phi_q d\phi,$$
(10)

где  $d\Omega = d\phi \, d\phi_q$ , а угол  $\phi_q$  определяет направление q/q падающей волны. Для решения задачи с потенциалом взаимодействия (1) применен численный алгоритм, основанный на методе представления дискретной переменной. Выберем собственные функции оператора  $h^{(0)} = \partial^2/\partial\phi^2$  в двумерном уравнении Шрёдингера как Фурье-базис для угловой сетки представления искомой волновой функции  $\Psi(\rho, \phi)$ . Введена равномерная разностная сетка по угловой перменной  $\phi_j$ , где  $j = 0, 1, \ldots, 2M$ , по переменным  $\phi$  и  $\phi_q$  волновая функция вычисляется в виде Фурье-интерполяции. Данное разложение сводит уравнение Шрёдингера к системе 2M + 1 связанных обычных дифференциальных уравнений второго порядка с краевым условием в нуле и граничным условием задачи рассеяния в асимптотической области  $\rho \to \infty$ . Для дискретизации по радиальной переменной использован метод семиточечной конечно-разностной аппроксимации шестого порядка точности для первой и второй производных. Полученная на каждой итерации матричная задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки для ленточной матрицы.

В разделе 2.3 выявлена зависимость критического (магического) угла от направлений диполей. Диполь-дипольное взаимодействие (3) меняется от полно-

стью отталкивающего для двух диполей направленных перпендикулярно плоскости движения XY до притягивающего при увеличении углов наклона дипольных моментов относительно нормали к оси Z. Для анализа диполь-дипольного потенциала, зафиксируем направление диполя  $\mathbf{d_2}$  (угол наклона  $\gamma$  и угол вращения  $\beta$  между плоскостями  $Zd_1$  и  $Zd_2$ ), рассмотрим изменение диполь-дипольного потенциала при изменении угла наклона  $\alpha$  диполя  $\mathbf{d_1}$ .

Рассмотрим изменение потенциала  $V_{dd}$  диполь-дипольного взаимодействия при увеличении угла наклона  $\alpha$  диполя  $\mathbf{d}_1$ , относительно направления диполя  $\mathbf{d}_2$ : угла наклона  $\gamma$  и угла вращения  $\beta$  между плоскостями  $Zd_1$  и  $Zd_2$  (см. рисунок1).

Области притягивающего дипольного взаимодействия возникают около точек  $\phi'$ , определяемых соотношением:  $\partial V_{dd}(\rho, \phi)/\partial \phi|_{\phi=\phi'} = 0$ . Критический угол наклона  $\alpha_c(\beta, \gamma)$  определяется как угол  $\alpha$  (см. рисунок1), при превышении которого значения потенциала становятся отрицательными в точках  $\phi'$ :  $V_{dd}(\rho, \phi = \phi') < 0$ . Таким образом, условие:

$$V_{dd}(\rho, \phi = \phi') = 0, \tag{11}$$

определяет зависимость критического угла наклона  $\alpha = \alpha_c(\beta, \gamma)$  диполя  $\mathbf{d_1}$  от угла вращения  $\beta$  и угла наклона  $\gamma$  диполя  $\mathbf{d_2}$ :

$$\alpha_c(\beta, \gamma) = \arctan\left(\frac{2\cot(\gamma)}{3 + \cos(\beta)}\right),\tag{12}$$

представленная на рисунке 2. Критический угол наклона  $\alpha_c(\beta, \gamma)$  увеличивается ся при  $\beta \to 180^{\circ}$  (например, при  $\gamma = 45^{\circ}$  угол  $\alpha_c$  увеличивается с 26.56° до 45°). При  $\beta = 180^{\circ}$  критический угол наклона определяется из соотношения  $\alpha_c(180^{\circ}, \gamma) = 90^{\circ} - \gamma$ , отмеченного на рисунке 2 сплошной красной линией.

Для диполей с одинаковым углом наклона  $\gamma = \alpha$ , когда второй диполь вращается вокруг оси Z ( $\beta \neq 0^{\circ}$ ) критический угол наклона как функция угла вращения  $\beta$  имеет вид:

$$\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha) = \arctan \sqrt{\frac{2}{3 + \cos(\beta)}},\tag{13}$$

(см. врезку на рисунке 2). При одинаковом направлении моментов диполей  $\gamma = \alpha; \beta = 0^{\circ}$  формула (13) воспроизводит известное значение критического (магического) угла  $\alpha_c(\beta = 0^{\circ}, \gamma = \alpha) = \arctan(1/\sqrt{2}) \approx 35.27^{\circ}$  или  $90^{\circ} - \alpha_c(\beta = 0^{\circ}, \gamma = \alpha) = 54.73^{\circ}$  (если угол наклона определен по отношению к плоскости XY), упомянутые, например, в работах [13, 37, 38]. Максимальное значение критического угла  $\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha)$  равно 45° и достигается при  $\beta = 180^{\circ}$ . В *разделе 2.4* для оценки амплитуды рассеяния ультрахолодных диполей при малых значениях величины дипольных моментов полное сечение рассеяния сонаправ-

ленных диполей, полученное в работе К. Тикнора [13] в приближении Борна для дальнодействующей части потенциала (3), обобщено на случай *произвольно ориентированных* диполей (*идентичных фермионов*) (14). Вблизи резонансов условия применимости приближения Борна не выполняются и сечение рассеяния необходимо вычислять численно [39].

$$\sigma_{BA}/D = 8Dq \left[ \pi(\pi - 2) \left( \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - \frac{3}{2} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) \right)^2 + \left( \pi(\pi + 2) + \frac{32}{9} - \frac{63520}{3969} \right) \left( \frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \right)^2 \right]$$
(14)

Сечения, полученные в приближении Борна, согласуются с вычисленными значениями  $\sigma_F(\rho_{SR})$  вдали от резонансов (см. рисунок4) и нерезонансными зависимостями  $\sigma_F(E)$  в низкоэнергетическом пределе (см. рисунок 5(*c*,*d*)) для рассеяния фермионов. Отметим, что для резонансных кривых  $\sigma_F(E)$  такого согласия не наблюдается. Результаты расчетов показывают, что условием применимости приближения Борна к двумерному дипольному рассеянию фермионов являются конфигурации направлений дипольных моментов, при которых угол наклона диполей меньше, чем критический угол  $\alpha < \alpha_c$ , когда потенциал диполь-дипольного взаимодействия не поддерживает связанных состояний. К рассеянию идентичных бозонов или различимых частиц приближение Борна неприменимо ввиду отсутствия барьера для *s*-волны и расходимости ее вклада в борновское приближение в области действия короткодействующего потенциала. Поэтому борновское приближение мы применяем только к рассеянию идентичных фермионов. Раздел 2.5 посвящен описанию оценки сечения рассеяния в пределе высоких энергий с помощью полуклассического эйконального приближения [13, 40]:

$$\sigma_{Eik}(E)/D = \frac{4\sqrt{\pi}}{(2E/E_D)^{1/4}}.$$
(15)

В третьей главе «Влияние короткодействующего взаимодействия» приведены результаты численного исследования столкновения двух ультрахолодных полярных молекул в двух пространственных измерениях: влияние короткодействующего взаимодействия на квантовое рассеяние двух произвольно направленных диполей в плоскости; различия вычисленных зависимостей сечения рассеяния при различных углах наклона дипольных моментов относительно нормали к плоскости движения. Проведено теоретическое исследование возникновения резонансов при анизотропном диполь-дипольном рассеянии произвольно направленных идентичных бозонов и фермионов в плоскости. Для малых энергий столкновений обнаружена сильная зависимость полного сечения рассеяния от короткодействующего взаимодействия. Получены зависимости дифференциальных сечений от взаимного расположения двух диполей. Исследованы энергетические зависимости сечения рассеяния в планарной системе двух диполей (для идентичных бозонов и фермионов). Продемонстрировано согласие результатов численных расчетов с оценками, полученными с помощью борновского и эйконального приближений. Результаты третьей главы опубликованы в работах [A1, A3, A4, A6, A7]. В *разделе 3.1* даны краткий обзор работ других авторов и актуальность численного исследования столкновения двух ультрахолодных полярных молекул в двух пространственных измерениях.

В разделе 3.2 впервые численно рассчитана зависимость полного сечения дипольного рассеяния  $\sigma(\rho_{SR})$  разнонаправленных бозонов и фермионов от радиуса короткодействующего взаимодействия  $\rho_{SR}$  в в плоскости. Для расчетов было выбрано значение энергии столкновения  $E = 5 \times 10^{-4} E_D$ , поскольку максимальные сечения столкновения диполей получаются при малых энергиях столкновений. Полученные результаты для рассеяния идентичных бозонов и идентичных фермионов проиллюстрированы на рисунке 3 и рисунке 4 соответственно.

При рассеянии двух сонаправленных диполей ( $\beta = 0^{\circ}$ ;  $\alpha = \gamma$ ) при углах наклона равным  $\alpha = 45^{\circ}$  в зависимости вычисленного полного сечения рассеяния  $\sigma_B(\rho_{SR})$  бозонных диполей наблюдаются отчетливые узкие резонансы, что представлено на рисунке3(а). С увеличением углов наклона от  $\alpha = 45^{\circ}$ до 90° количество резонансов в зависимости полного сечения рассеяния от  $\rho_{SR}$ увеличивается в 4 раза. Вычисленная зависимость  $\sigma_B(\rho_{SR})$  для двух диполей, ориентированных в плоскости рассеяния XY ( $\alpha = 90^{\circ}$ ), представлена на рисунке3(с). Из анализа рисунка3 следует, что при уменьшении  $\rho_{SR}$  ниже пороговых значений  $\rho_{SR}/D = 0.3 - 0.5$  наблюдается появление и увеличение количества резонансов с их одновременным сужением.

При  $\alpha \leq \alpha_c(\beta, \gamma)$  и  $\rho_{SR}/D \ll 1$  сечения рассеяния не зависят от потенциала короткодействующего взаимодействия и резонансы дипольного рассеяния отсутствуют, что проиллюстрировано на рисунке3(b). Так, при повороте вектора дипольного момента  $\mathbf{d}_2$  относительно оси Z при  $\beta \to 180^\circ$  сужается область, где потенциал является притягивающим, и количество резонансов уменьшается до их исчезновения при  $\beta \to 180^\circ$  в рассчитанной зависимости полного сечения рассеяния от  $\rho_{SR}$ , представленной на рисунке3(b) при  $\alpha = 45^{\circ}$  ( $\alpha = \gamma$ ). Резонансы присутствуют и для противоположно направленных диполей ( $\beta = 180^{\circ}$ ), лежащих в плоскости рассеяния при  $\alpha \to 90^\circ$  ( $\alpha = \gamma, \alpha > \alpha_c$ ), приведенном на рисунке3(d).Увеличение угла наклона  $\alpha, \gamma$  диполей и возникновение областей с притягивающим дипольным потенциалом приводит к сильной зависимости сечения рассеяния диполей от радиуса короткодействующего взаимодействия  $\rho_{SR}$ . Как показали наши расчеты, при малых энергиях рассеяние фермионов существенно отличается от рассеяния бозонов. Согласно закону Вигнера [41] ожидаемо наблюдается подавление рассеяния идентичных фермионов по сравнению с рассеянием бозонов. Вычисленная зависимость полного сечения дипольного

рассеяния идентичных фермионов от  $\rho_{SR}$  представлена на рисунке4 для равных углов  $\alpha = \gamma$  диполей, наклоненных под углом 45° в случае сонаправленных  $\beta = 0^{\circ}(a)$  и разнонаправленных  $\beta = 180^{\circ}(b)$  конфигураций, а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости рассеяния  $\alpha = 90^{\circ}$  для параллельных  $\beta = 0^{\circ}(c)$  и антипараллельных  $\beta = 180^{\circ}(d)$  дипольных моментов. Сравнительный анализ рисунка3 и рисунка4 демонстрирует, что в случае столкновений фермионов амплитуды резонансов меньше на два порядка, чем для бозонов при малых энергиях столкновения ( $E = 5 \times 10^{-4} E_D$ ). Зависимости  $\sigma_B(\rho_{SR}), \sigma_F(\rho_{SR})$ , рассчитанные с использованием в качестве  $V_{SR}$  реалистического потенциала Леннарда–Джонса, представлены на рисунке 3 и рисунке 4 синей сплошной линией. Структура резонансов остается качественно такой же, как и при использовании потенциальной стенки, поскольку резонансы обусловлены преобладанием s-волны (p-волны) в рассеянии бозонов (фермионов). Сравнение результатов, полученных с использованием потенциальной стенки и потенциала Леннарда–Джонса, показывает их одинаковую эффективность.

В разделе 3.3 представлены энергетические зависимости сечения дипольного рассеяния в плоскости. Ранее энергетические зависимости сечения исследовались для изотропного отталкивательного дипольного потенциала [17]. Численно рассчитаны энергетические зависимости для нецентрального потенциала дипольного взаимодействия V<sub>dd</sub>. Рассчитаны энергетические зависимости полного сечения рассеяния, проиллюстрированные на рисунке 5 для идентичных бозонов  $\sigma_B(E)$  ( $\alpha = 45^{\circ}(a), 90^{\circ}(b)$ ) и для идентичных фермионов  $\sigma_F(E)$  $(\alpha = 45^{\circ}(c), 90^{\circ}(d))$  для сонаправленных конфигураций диполей  $\beta = 0^{\circ}; \alpha = \gamma$ . Для этих взаимных ориентаций диполей угол наклона превышает критический  $\alpha > \alpha_c$  ( $\alpha_c = 35.3^\circ$ ). Сечение двумерного рассеяния бозонных (фермионных) диполей в отсутствие резонансов увеличивается (уменьшается) в низкоэнергетическом пределе в отличие от трехмерного рассеяния, где сечение в отсутствие резонансов имеет вид плато в низкоэнергетическом пределе как для бозонов, так и для фермионов (см. рисунки 2(a, b) в [16] или рисунок 1 в [42]). Мы также показали, что взаимная ориентация диполей сильно влияет на вид энергетических зависимостей. Таким образом, при увеличении угла  $\alpha$  от 45° до 90° (см. рисунок 5) резонансная и нерезонансная зависимости  $\sigma_B(E), \sigma_F(E)$  начинают осциллировать, в отличие от трехмерного дипольного рассеяния [16, 42], где осцилляций нет.

В разделе 3.4 проанализировано влияние короткодействующего взаимодействия на полное сечение рассеяния в плоскости для больших энергий дипольных столкновений ( $E = 50E_D$ ), изучавшихся в работах [13, 17] при фиксированном значении  $\rho_{SR}$ . Рассчитанные зависимости полного сечения от угла наклона  $\alpha$ диполей (при  $\alpha = \gamma$ ), для различных значений  $\rho_{SR}$  и угла вращения  $\beta$  представлены на рисунке6 для случая дипольного рассеяния бозонов в плоскости и на рисунке7 для случая дипольного рассеяния фермионов в плоскости.



Рис. 3. Зависимость полного сечения дипольного низкоэнергетического рассеяния (10) идентичных бозонов  $\sigma_B$  от радиуса короткодействующего потенциала  $\rho_{SR}$  при столкновениях двух сонаправленных  $\beta = 0^{\circ}$ (a, c) и разнонаправленных  $\beta = 180^{\circ}$  (b, d)диполей (при  $\alpha = \gamma$ ), наклоненных под углом  $\alpha = 45^{\circ}$  (a, b), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости  $\alpha = 90^{\circ}(c, d)$ . Результаты, полученные при использовании потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, потенциала Леннарда–Джонса — синей сплошной линией.



Рис. 4. Зависимость полного сечения дипольного рассеяния (10) идентичных фермионов  $\sigma_F$  от радиуса короткодействующего потенциала  $\rho_{SR}$ . Подпись к графикам (a, b, c, d) и линий полностью совпадает с подписью на рисунке 3. Результаты, полученные с использованием приближения Борна, обозначены сплошной зеленой линией.



Рис. 5. Энергетические зависимости полного сечения рассеяния для случая бозонов  $\sigma_B(E)$ ( $\alpha = 45^{\circ}(a), 90^{\circ}(b)$ ) и фермионов  $\sigma_F(E)$  ( $\alpha = 45^{\circ}(c), 90^{\circ}(d)$ ) при сонаправленной ориентации диполей  $\beta = 0^{\circ}; \alpha = \gamma$ . Угол наклона превышает критический угол  $\alpha > \alpha_c$  ( $\alpha_c = 35.3^{\circ}$ ) для таких взаимных ориентаций диполей. Кривые, соответствующие резонансным точкам на рисунке 3 и рисунке 4, показаны красной сплошной линией, нерезонансные кривые синей пунктирной линией; приближение Борна — зеленой точечной линией, приближение эйконала — серой пунктирной линией.

Короткодействующее взаимодействие не влияет на процессы рассеяния до тех пор пока угол наклона  $\alpha$  меньше критического и короткодействующее взаимодействие не доминирует ( $\rho_{SR}/D < 1$ ). При угле наклона  $\alpha$  больше критического  $\alpha_c$  уменьшение радиуса короткодействующего взаимодействия приводит к возникновению осцилляций и резонансов сечениях рассеяния как для бозонов, так и для фермионов. Возникновение осцилляций и резонансов в сечении строго по достижению угла  $\alpha$  значений критического угла  $\alpha_c$  проиллюстрировано на рисунке6 и рисунке 7 в диапазоне значений  $\rho_{SR}/D \leq 0.1$ , когда и дипольное и короткодействующее взаимодействия вносят вклад в рассеяние (на рисунке6(а) и рисунке 7(а)  $\alpha_c = 35.3^\circ$ , на рисунке6(b) и рисунке 7(b) –  $\alpha_c = 39.2^\circ$ , на рисунке6(c) и рисунке 7(c) –  $\alpha_c = 45^\circ$ ).







Рис. 6. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей  $\alpha$  (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона  $\alpha = \gamma$  при различных значениях  $\rho_{SR}$  при рассеянии идентичных **бозонов** ( $\beta = 0^{\circ}(a), 90^{\circ}(b), 180^{\circ}(c)$ ). Критический угол равен  $\alpha_c(\beta, \gamma) = 35.3^{\circ}, 39.2^{\circ}, 45^{\circ}$  для  $\beta = 0^{\circ}, 90^{\circ}, 180^{\circ}$  соответственно и  $\gamma = \alpha$ .







Рис. 7. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей  $\alpha$  (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона  $\alpha = \gamma$  при различных значениях  $\rho_{SR}$  при рассеянии идентичных фермионов ( $\beta = 0^{\circ}(a), 90^{\circ}(b), 180^{\circ}(c)$ ). Критический угол равен  $\alpha_c(\beta, \gamma) = 35.3^{\circ}, 39.2^{\circ}, 45^{\circ}$ для  $\beta = 0^{\circ}, 90^{\circ}, 180^{\circ}$  соответственно и  $\gamma = \alpha$ .

В разделе 3.5 продемонстрирована сильная зависимость угловых распределений дифференциальных сечений  $d\sigma/d\Omega$  дипольного рассеяния от значения радиуса короткодействующего взаимодействия  $\rho_{SR}$ . Угловые распределения диполь-дипольного рассеяния в плоскости и трехмерного дипольного рассеяния [43] сильно отличаются. Дипольные фермионы могут рассеиваться сильнее, чем дипольные бозоны в трехмерном случае [43], тогда как в двумерном случае сечение дипольного рассеяния фермионов на несколько порядков меньше сечения рассеяния бозонов при низких энергиях. В случаях бозонов и фермионов зависимости дифференциального сечения двумерного рассеяния от угла падения  $\phi_q$  отличаются. В отличие от трехмерного дипольного рассеяния [43], рассеяние бозонов в плоскости не зависит от угла падения  $\phi_q$  в резонансных точках, хотя оно зависит от угла падения в нерезонансных точках. Рассеяние фермионов в плоскости всегда зависит от угла падения  $\phi_q$ .

В Заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

- Исследованы связанные состояния точечной квантовой частицы в поле двумерного диполя с помощью предложенного численного алгоритма, основанного на методе представления дискретной переменной и методе обратных итераций со сдвигом для определения собственных значений матрицы. Анизотропия потенциала взаимодействия частицы с полем двумерного диполя приводит к связи различных парциальных волн и состояний с различным угловым моментом. Рассчитаны энергии и плотности вероятности состояний с улучшением точности и хорошим согласием с результатами работ других авторов [18, 19, 27], для которых отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные расчёты с помощью предложенного алгоритма с известной оценкой точности восполняют этот пробел.
- 2. Вычислены зависимости полного сечения дипольного рассеяния от радиуса короткодействующего взаимодействия. Сделан вывод о хорошей применимости потенциала стенки в сравнении с более реалистическим потенциалом Леннарда-Джонса. Результат точных численных расчетов полного сечения рассеяния хорошо согласуется с оценочными результатами, полученными в приближении Борна и эйконала в низко- и высокоэнергетических пределах.
- 3. Исследованы зависимости сечения дипольного рассеяния в плоскости от радиуса короткодействующего взаимодействия для различных ориентаций дипольных моментов. В низкоэнергетическом и высокоэнергетическом диапазонах энергий столкновений диполей определены "пороговые" значения радиуса короткодействующего взаимодействия (cut-off radius), ниже которых наблюдается возникновение и рост числа резонансов. Обнаружено возникновение и рост числа резонансов при уменьшении радиуса короткодействующего взаимодействия в широком диапазоне энергий

столкновений диполей.

- 4. Определен критический (магический) угол наклона одного из диполей в зависимости от направления второго диполя для произвольно ориентированных диполей. Выявлено, что резонансы возникают только при превышении этого угла (который при одинаковых углах наклона диполей изменяется от  $35.27^{\circ}$  и до  $45^{\circ}$  при вращении одного из диполей). Выявлено, что при дипольном рассеянии идентичных бозонов (фермионов) в плоскости в угловых распределениях дифференциальных сечений в резонансных точках доминирует *s*—волна (*p*—волна), в то время как в нерезонансных точках преобладают высшие парциальные волны и дифференциальные сечения сильно анизотропны.
- 5. Определено отличие сечений дипольного рассеяния бозонов (фермионов) в области малых энергий в двумерном и трехмерном случаях. Показано, что в двумерном случае сечения дипольного рассеяния фермионов при высоких энергиях (Dq > 10) по порядку величины близки к сечениям рассеяния бозонов, в отличие от трехмерного случая, где сечения рассеяния фермионов гораздо больше, чем для бозонов. Таким образом, угловые распределения дифференциального сечения дипольного рассеяния в двумерном случае значительно отличаются от аналогичных распределений в трехмерном случае. Дипольные фермионы сильнее рассеиваются, чем дипольные бозоны в трехмерном случае, в то время как в планарном случае сечения дипольного рассеяния фермионов на несколько порядков величины меньше, чем сечение рассеяния бозонов при малых энергиях столкновения.
- 6. Показано, что рассеяние бозонов в плоскости не зависит от угла падения  $\phi_q$  в резонансных точках, в то время как оно может сильно зависеть от угла падения  $\phi_q$  в нерезонансных точках, что существенно отличается от трехмерного случая. Рассеяние фермионов в плоскости всегда зависит от угла  $\phi_q$ .

Полученные данные о сечениях рассеяния произвольно направленных диполей в плоскости позволяют сделать вывод о *возможности контроля* над возникновением и ростом числа резонансов с помощью изменения радиуса короткодействующего взаимодействия и взаимного расположения диполей.

## Список публикаций автора по теме диссертации

A1. Koval, E. A. Aspects of arbitrarily oriented dipoles scattering in a plane: Short-range interaction influence / E. A. Koval, O. A. Koval // Physical Review A. — 2020. — Vol. 102, no. 4. — P. 042815-1–042815-11. — (Web of Science, Scopus).

- А2. Доловова, О. А. Системы двухатомных полярных молекул в одномерной геометрии оптических и магнито-оптических ловушек / О. А. Доловова, М. Е. Горбунов // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2021. № 4. С. 86—95. (ВАК).
- АЗ. Коваль, О. А. Численный анализ энергетических уровней квантовой частицы в поле двумерного диполя / О. А. Коваль, Е. А. Коваль // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физикаматематика. 2020. № 3. С. 23—37. (ВАК).
- A4. Koval, E. A. Energetic dependencies of total cross section of quantum anisotropic scattering in two dimensions / E. A. Koval, O. A. Koval // AIP Conference Proceedings. 2019. Vol. 2163, no. 1. P. 090009-1–090009-4. (Web of Science, Scopus).
- A5. Koval, E. A. Short Range Interaction Impact on Two Dimensional Dipolar Scattering / E. A. Koval, O. A. Koval // European Physical Journal Web of Conferences. — 2018. — Vol. 173. — P. 06008-1–06008-4. — (Web of Science, Scopus).
- A6. Koval, E. A. Binding energies of quantum dipole in plane / E. A. Koval,
  O. A. Koval // European Physical Journal Web of Conferences. 2019. —
  Vol. 201. P. 09008-1–09008-5. (Web of Science).
- А7. Коваль, О. А. Энергетические зависимости полного сечения резонансного и нерезонансного двумерного квантового диполь-дипольного рассеяния / О. А. Коваль, Е. А. Коваль // Труды 61-й Всероссийской научной конференции МФТИ. Фундаментальная и прикладная физика, Долгопрудный, 19-25 ноября 2018 года / Московский физико-технический институт. Долгопрудный. 2018. С. 87—89.
- А8. Коваль, Е. А. Алгоритм поиска резонансов двумерной двухчастичной системы с анизотропным взаимодействием / Е. А. Коваль, О. А. Коваль // Сборник трудов XIX международной научной конференции молодых ученых и специалистов к 100-летию Ф.Л. Шапиро, Дубна, 16-20 февраля 2015 года / Объединенный институт ядерных исследований. Дубна. 2015. С. 54.
- А9. Коваль, О. А. Двухканальная задача рассеяния для исследования индуцированных конфайнментом резонансов / О. А. Коваль, Е. А. Коваль // Информационно телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем, Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием, Москва, 23-27 апреля 2012 года / Российский университет дружбы народов. – Москва. — 2012. — С. 291— 293.

## Список цитируемой литературы

- 1. Bohn, J. L. Cold molecules: Progress in quantum engineering of chemistry and quantum matter / J. L. Bohn, A. M. Rey, J. Ye // Science. 2017. Vol. 357, no. 6355. P. 1002–1010.
- 2. Condensed matter theory of dipolar quantum gases / M. A. Baranov [et al.] // Chemical Reviews. 2012. Vol. 112, no. 9. P. 5012–5061.
- 3. Collisions of ultracold 23Na87Rb molecules with controlled chemical reactivities / X. Ye [et al.] // Science advances. 2018. Vol. 4, no. 1. eaaq0083-1–eaaq0083-6.
- 4. *Górecki*, *W*. Electric dipoles vs. magnetic dipoles-For two molecules in a harmonic trap / W. Górecki, K. Rzażewski // EPL (Europhysics Letters). 2017. Vol. 118, no. 6. P. 66002-1–66002-7.
- 5. Anisotropic superfluid behavior of a dipolar bose-einstein condensate / M. Wenzel [et al.] // Physical review letters. 2018. Vol. 121, no. 3. P. 030401-1–030401-5.
- 6. Observation of Quantum Droplets in a Strongly Dipolar Bose Gas / I. Ferrier-Barbut [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2016. — Vol. 116, issue 21. — P. 215301-1–215301-6.
- 7. Self-bound droplets of a dilute magnetic quantum liquid / M. Schmitt [et al.] // Nature. 2016. Vol. 539, no. 7628. P. 259–262.
- 8. Long-lived and transient supersolid behaviors in dipolar quantum gases / L. Chomaz [et al.] // Physical Review X. 2019. Vol. 9, no. 2. P. 021012-1–021012-12.
- 9. Dipolar collisions of ultracold ground-state bosonic molecules / M. Guo [et al.] // Physical Review X. 2018. Vol. 8, no. 4. P. 041044-1–041044-8.
- 10. Realization of a strongly interacting fermi gas of dipolar atoms / S. Baier [et al.] // Physical review letters. 2018. Vol. 121, no. 9. P. 093602-1–093602-6.
- 11. Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse / T. Koch [et al.] // Nature physics. 2008. Vol. 4, no. 3. P. 218–222.
- 12. Controlling the quantum stereodynamics of ultracold bimolecular reactions / M. De Miranda [et al.] // Nature Physics. 2011. Vol. 7, no. 6. P. 502–507.
- 13. *Ticknor*, *C*. Two-dimensional dipolar scattering with a tilt / C. Ticknor // Physical Review A. 2011. Vol. 84, no. 3. P. 032702.
- Ni, K.-K. Dipolar exchange quantum logic gate with polar molecules / K.-K. Ni, T. Rosenband, D. D. Grimes // Chemical science. — 2018. — Vol. 9, no. 33. — P. 6830–6838.
- Hudson, E. R. Dipolar quantum logic for freely rotating trapped molecular ions / E. R. Hudson, W. C. Campbell // Physical Review A. — 2018. — Vol. 98, no. 4. — P. 040302-1–040302-5.

- Roudnev, V. Resonance phenomena in ultracold dipole-dipole scattering / V. Roudnev, M. Cavagnero // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2009. — Vol. 42, no. 4. — P. 044017-1-044017-9.
- 17. *Ticknor*, *C.* Two-dimensional dipolar scattering / C. Ticknor // Physical Review A. 2009. Vol. 80, no. 5. P. 052702-1–052702-4.
- Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions / K. Dasbiswas [et al.] // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81, no. 6. — P. 064516-1–064516-6.
- Amore, P. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions / P. Amore, F. M. Fernández // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2012. — Vol. 45, no. 23. — P. 235004-1–235004-6.
- Ni, K.-K. Dipolar exchange quantum logic gate with polar molecules / K.-K. Ni, T. Rosenband, D. D. Grimes // Chemical science. — 2018. — Vol. 9, no. 33. — P. 6830–6838.
- 21. *DeMille*, *D*. Quantum computation with trapped polar molecules / D. De-Mille // Physical Review Letters. — 2002. — Vol. 88, no. 6. — P. 067901-1– 067901-4.
- 22. *Emtage*, *P.* Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators / P. Emtage // Physical Review. — 1967. — Vol. 163, no. 3. — P. 865–872.
- Nabutovskii, V. Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation / V. Nabutovskii, B. Shapiro // JETP Lett., — 1977. — Vol. 26, no. 9. — P. 473–475.
- 24. *Slyusarev*, V. Electron Localized States at an Edge Dislocation in a Metal / V. Slyusarev // Fiz. Met. Metalloved. 1984. Vol. 58, no. 5. P. 877–883.
- 25. *Dubrovskii*, *I*. A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal / I. Dubrovskii // Low Temperature Physics. 1997. Vol. 23, no. 12. P. 976–979.
- 26. *Farvacque*, *J.-L.* Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors / J.-L. Farvacque, P. Francois // Physica Status Solidi (b). — 2001. — Vol. 223, no. 3. — P. 635–648.
- 27. Handy, C. Rapidly converging bound state eigenenergies for the two dimensional quantum dipole / C. Handy, D. Vrinceanu // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2013. Vol. 46, no. 11. P. 115002-1–115002-8.
- Desaix, M. Accuracy of an approximate variational solution procedure for the nonlinear Schrödinger equation / M. Desaix, D. Anderson, M. Lisak // Physical review A. — 1989. — Vol. 40, no. 5. — P. 2441–2445.
- 29. Kolmogorov, A. N. Zur Grossenordnung des restgliedes Fourierschen Reihen differenzierbarer Funktionen / A. N. Kolmogorov // Mathematische Annalen. 1935. Vol. 36. P. 521–526.

- Ołdziejewski, R. Erratum: Properties of strongly dipolar Bose gases beyond the Born approximation [Phys. Rev. A 94, 063638 (2016)] / R. Ołdziejewski, K. Jachymski // Phys. Rev. A. — 2017. — Apr. — Vol. 95, issue 4. — P. 049901-1–049901-7.
- 31. Davydov, A. S. Kvantovaya mekhanika / A. S. Davydov. Ripol Klassik, 1968. 699 p.
- 32. *Kalitkin, H. H.* CHislennye metody. 2 izd. / H. H. Kalitkin. BKHV-Peterburg, 2011. 592 p.
- González-Martinez, M. L. Adimensional theory of shielding in ultracold collisions of dipolar rotors / M. L. González-Martinez, J. L. Bohn, G. Quéméner // Physical Review A. — 2017. — Vol. 96, no. 3. — P. 032718-1– 032718-12.
- Kanjilal, K. Coupled-channel pseudopotential description of the Feshbach resonance in two dimensions / K. Kanjilal, D. Blume // Physical Review A. — 2006. — Vol. 73, no. 6. — P. 060701-1–060701-4.
- 35. Near-threshold bound states of the dipole-dipole interaction / T. Karman [et al.] // Physical Review A. 2018. Vol. 98, no. 6. P. 062502-1–062502-9.
- 36. Resonant control of polar molecules in individual sites of an optical lattice / T. M. Hanna [et al.] // Physical Review A. 2012. Vol. 85, no. 2. P. 022703-1–022703-10.
- 37. Giovanazzi, S. Tuning the dipolar interaction in quantum gases / S. Giovanazzi, A. Görlitz, T. Pfau // Physical review letters. 2002. Vol. 89, no. 13. P. 130401-1–130401-4.
- 38. Microscopic description of anisotropic low-density dipolar Bose gases in two dimensions / A. Macia [et al.] // Physical Review A. — 2011. — Vol. 84, no. 3. — P. 033625-1 –033635-10.
- 39. Sakurai, J. J. Modern Quantum Mechanics / J. J. Sakurai, J. Napolitano. 2nd ed. Cambridge University Press, 2017. 570 p.
- 40. Adhikari, S. K. Semiclassical scattering in two dimensions / S. K. Adhikari, M. S. Hussein // American Journal of Physics. 2008. Vol. 76, no. 12. P. 1108–1113.
- 41. Collisions near threshold in atomic and molecular physics / H. Sadeghpour [et al.] // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2000. — Vol. 33, no. 5. — R93–R140.
- 42. Bohn, J. Quasi-universal dipolar scattering in cold and ultracold gases / J. Bohn, M. Cavagnero, C. Ticknor // New Journal of Physics. 2009. Vol. 11, no. 5. P. 055039-1–055039-18.
- Bohn, J. L. Differential scattering and rethermalization in ultracold dipolar gases / J. L. Bohn, D. S. Jin // Physical Review A. — 2014. — Vol. 89, no. 2. — P. 022702-1 –022702-9.