

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ АТМОСФЕРЫ ИМ. А.М. ОБУХОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Доловова Оксана Александровна

**Рассеяние и связанные состояния в малочастичных
планарных дипольных квантовых системах**

1.3.3. Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
Горбунов Михаил Евгеньевич

Москва – 2022

Оглавление

Введение	4
Обзор литературы	13
Глава 1. Энергии связи квантового диполя в плоскости	19
1.1. Введение	19
1.2. Численный алгоритм решения краевой задачи Штурма-Лиувилля для поиска связанных состояний планарных квантовых систем двух частиц	24
1.3. Связанные состояния и плотности вероятностей низколежащих связанных состояний	28
1.4. Выводы к главе 1	31
Глава 2. Рассеяние в малочастичных планарных дипольных квантовых системах	42
2.1. Введение	42
2.2. Рассеяние двух произвольно направленных диполей в двумерном пространстве	42
2.3. Критический (магический) угол	48
2.4. Приближение Борна	51
2.5. Эйкональное приближение	55
2.6. Выводы к главе 2	56
Глава 3. Влияние короткодействующего взаимодействия	57
3.1. Введение	57
3.2. Рассеяние идентичных бозонных и фермионных диполей	59
3.3. Энергетические зависимости сечения рассеяния бозонных и фермионных диполей	67

3.4. Угловые распределения дифференциальных сечений рассеяния . . .	80
3.5. Выводы к главе 3	81
Заключение	86
Список публикаций по теме диссертации	88
Список цитируемой литературы	89

Введение

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 как теоретиков [1—7], так и экспериментаторов [1, 8—11]. К таким эффектам относятся: анизотропная сверхтекучесть [12], экзотические «самостабилизирующиеся» квантовые капли [13, 14] и состояния со свойствами сверхтекучего твердого тела [15, 16]. Анизотропные свойства диполь-дипольного взаимодействия приводят к проявлениям квантового хаоса в ультрахолодном дипольном рассеянии [17—19]. Получены ультрахолодные газы полярных молекул [20] и магнитных атомов [21]. Оптические ловушки с планарной геометрией являются перспективным кандидатом для стабилизации и удержания дипольных газов и контроля 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 [22]. Столкновения молекул в слое дископодобной ловушки моделируются двумерной динамикой молекул [8, 23]. 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 [24, 25]. Для создания малочастичной системы с временем жизни, достаточным для организации квантовых вычислений, необходимы теоретические оценки по определению условий стабильности дина-

мических дипольных систем. Исследование диполь-дипольного взаимодействия в применении к квантовым вычислениям является в настоящее время актуальной задачей [24, 26, 27]. Проведение экспериментов требует дальнейшего анализа влияния короткодействующего взаимодействия на дипольное рассеяние в плоскости [9, 28]. Известные результаты, описывающие резонансы в зависимостях сечения рассеяния от радиуса короткодействующего взаимодействия для трехмерного пространства [29], полученные с помощью численного решения уравнения Шрёдингера в адиабатическом представлении, неприменимы к описанию дипольного рассеяния в плоскости. В работах [23, 28] 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 [30, 31].
- 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 различных 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 [30, 31]. 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 широко-

го 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 короткодействующего 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 дальное действие позволит решить [24, 32] 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 отличие 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 отечественных и международных конференциях:

1. Международная конференция «Перспективная элементная база микро- и наноэлектроники с использованием современных достижений теоретической физики», 2020 (МГОУ, г. Москва)
2. 13th European Conference on Atoms Molecules and Photons (ECAMP'13), 2019 (Университет Флоренции, г. Флоренция, Италия)

3. 23-я международная научная конференция (ОМУС-2019), 2019 (Объединенный институт ядерных исследований(ОИЯИ), г. Дубна)
4. 29th International Crimean Conference "Microwave & Telecommunication Technology" (CriMiCo'2019), 2019 (СевГУ, г. Севастополь)
5. 61-я всероссийская научная конференция МФТИ, 2018 (МФТИ, г. Долгопрудный)
6. 22-я международная научная конференция (ОМУС-2018), 2018 (ОИЯИ, г. Дубна)
7. 25-я международная конференция «Математика. Компьютер. Образование», 2018 (ОИЯИ, г. Дубна)
8. Международная конференция «Физические свойства материалов и дисперсных сред для элементов информационных систем, наноэлектронных приборов и экологичных технологий», 2017 (МГОУ, г. Москва)
9. IV International Conference On Quantum Technologies ICQT'2017, 2017 (Российский квантовый центр, г. Москва, Россия)
10. IRTG: Ultracold few- and many-body systems, Freiburg University, 2016 (Фрайбургский университет, г. Миттельвир, Франция)
11. XIX Международная научная конференция (ОМУС-2015), 2015 (ОИЯИ, г. Дубна)
12. 12-я курчатовская молодежная научная школа-конференция, 2014 (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва)
13. Международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (МРАМCS-2014), 2014 (ОИЯИ, г. Дубна)

14. XVIII Международная научная конференция (ОМУС-2014), 2014 (ОИЯИ, г. Дубна)
15. 11-я Курчатовская молодежная научная школа-конференция, 2013 (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва)
16. Международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСР'2013), 2013 (ОИЯИ, г. Дубна)
17. Всероссийская конференция с международным участием «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем», 2012 (РУДН, г. Москва)
18. Международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (МРАМС-2012), 2012 (ОИЯИ, г. Дубна)
19. XVI Международная конференция молодых ученых и специалистов ОИЯИ, 2012 (ОИЯИ, г. Дубна)
20. 54-я научная конференция МФТИ научно-исследовательских работ студентов и аспирантов, 2011 (МФТИ, г. Долгопрудный),
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 в 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.

Обзор литературы

Исследованиям системы с дипольным межчастичным взаимодействием способствовали открытия, ставшие ключевыми для экспериментов с захватом и охлаждением атомов и молекул в лазерных и магнитных полях и отмеченные Нобелевскими премиями 1997 г. (Стивен Чу, Клод Коэн-Таннуджи и Уильям Филлипс «За создание методов охлаждения и удержания атомов с помощью лазерного света»), 2012 г. (Серж Арош и Дэвид Уайнленд «За создание прорывных технологий манипулирования квантовыми системами, которые сделали возможными измерение отдельных квантовых систем и управление ими») и 2018 г. (Артур Эшкин «За изобретение оптического пинцета и его применение в биологических системах») годов. Технологии охлаждения нейтральных атомов развиваются уже в течение нескольких десятилетий. В экспериментах, проведенных в Институте спектроскопии АН СССР в 1981 г., температура вдоль одного из направлений движения атомов была снижена до 1.5 К; в 1984 г. достигнуто охлаждение по двум направлениям до температур 3.5 К. Охлаждение до 240 мК впервые выполнено в AT&T Bell Laboratories (США) в 1985 г.. В 1995 г. при охлаждении атомов рубидия до температуры 170 нК было достигнуто состояние Бозе-Эйнштейновской конденсации. Минимальная температура, достигнутая при помощи лазерного охлаждения в сочетании с методикой выпаривания в магнитной ловушке, составляет 350 пК [33]. В недавних экспериментах в Институте прикладной физики РАН (ИПФ РАН), проведенных группой А.В.Турлапова, впервые получен двумерный вырожденный ферми-газ в магнитооптической ловушке при температуре 150 мК, величине внешнего магнитного поля 1020 Гс (длина рассеяния равна $-3950a_0$, где $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м – радиус Бора), расстоянии между слоями 5, 3 мкм, характерных размерах области удержания 80 мкм и максимальном значении плотности двумерного газа 6 атомов на квадратный микрон.

Созданные технологии позволяют охлаждать атомы до сверхнизких темпе-

ратур с помощью доплеровского (до мК) и «сизифова» охлаждения (до нК) и удерживать такой ультрахолодный газ в узлах стоячей волны лазерного излучения в оптических ловушках. В магнито-оптических ловушках для удержания атомов дополнительно используется неоднородное магнитное поле.

Дипольное взаимодействие существенно отличается как от кулоновского взаимодействия зарядов, так и от взаимодействия нейтральных атомов [34, 35]: 1) оно является сильно анизотропным: его сила и знак зависят от взаимного расположения и ориентации диполей; 2) оно является дальнедействующим, убывающим на бесконечности как $1/\rho^3$, где ρ – расстояние между частицами. В экспериментах величина дипольного момента может быть как постоянной, так и изменяемой с помощью внешних полей [34], в частности, вращающегося магнитного поля [36, 37].

Холодные газы, включая полярные молекулы, обладающие значительным дипольным моментом, в оптических ловушках или решетках являются удобным объектом для исследований. В отличие от твердотельных материалов, в газах можно достичь значительно меньшего содержания примесей, их можно охлаждать до температур порядка нК, легче изменять и контролировать плотность и количество частиц. Определенные конфигурации оптических ловушек позволяют исключать движение частиц вдоль некоторых измерений, уменьшая количество пространственных степеней свободы до двух или одной. Контроль силы и знака взаимодействия позволяет экспериментаторам использовать квантовые газы для воспроизведения эффектов, предсказываемых теоретическими моделями конденсированных сред, непосредственное экспериментальное изучение которых невозможно.

В системах с дипольным взаимодействием, благодаря его нецентральному и дальнедействующему характеру, возможно получение новых квантовых фаз [38, 39], особенно актуальных для геометрий пониженной размерности, создаваемых с помощью оптических решеток. Первые экспериментальные исследования дипольного взаимодействия в холодных газах, выполненные группой Т.Пфау, позволили

получить Бозе-Эйнштейновский конденсат (БЭК) атомов ^{52}Cr [40]. Хром обладает достаточно большим дипольным моментом, равным $6 \mu_B$ ($\mu_B = e\hbar/2m_e = 927.40 \times 10^{-26}$ Дж/Тл – магнетон Бора), что в 6 раз больше, чем характерный дипольный момент атомов щелочных металлов. Для ослабления изотропного короткодействующего взаимодействия использовался механизм резонансов Фэшбаха, что позволило исследовать динамику расширения газа БЭК, характерную для доминирующего анизотропного взаимодействия [40]. Примером недавно открытой экзотической квантовой фазы являются обнаруженные в 2016 году группой Т. Пфау «самостабилизирующиеся» квантовые капли в холодном дипольном Бозе-газе ^{164}Dy (дипольный момент $\sim 9.93\mu_B$) в одномерной оптической решетке [13], считавшиеся нестабильными системами с малыми временами жизни из-за притягивающего характера взаимодействия. Экспериментаторы достигли значительных успехов в получении холодных газов полярных молекул [9, 20, 41] и магнитных атомов [13, 14, 21, 42].

Взаимодействие между магнитными дипольными моментами атомов слабее, чем между электрическими дипольными моментами полярных молекул. Например, при характерном электрическом дипольном моменте полярной молекулы порядка 1 Д ($1\text{Д} \approx 3.34 \times 10^{-30}$ Кл·м) и характерном магнитном моменте атомов порядка $1 \mu_B$ величина взаимодействия между полярными молекулами на четыре порядка больше, чем взаимодействие между двумя атомами с магнитными дипольными моментами. Гораздо большими электрическими дипольными моментами $\sim 10^3$ Д обладают ридберговские атомы, однако характерные времена их жизни сильно ограничены. Далее под дипольным моментом подразумевается электрический дипольный момент, если не указано иное.

В экспериментах с дипольными газами в трехмерном пространстве, удерживаемых в магнитооптических ловушках, имеется пока нерешенная проблема коллапсирования из-за притягивающего взаимодействия типа «голова-к-хвосту» [41]. Из-за притяжения диполей при их выстраивании «голова-к-хвосту» в трехмерных дипольных газах происходит сжатие газа вдоль одного направления с последую-

щим увеличением скорости частиц и вылетом большого числа частиц из области удержания оптических ловушек. Указанная проблема отсутствует для одномерной и квази-двумерной геометрии у дипольных газов [1, 42, 43]. Оптические и магнитооптические ловушки с планарной геометрией являются перспективным кандидатом для стабилизации и удержания дипольных газов и контролирования их свойств, поскольку диполь-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, 7, 8] с помощью внешнего статического или зависящего от времени поля [22]. Столкновения молекул в слое дископодобной ловушки моделируются двумерной динамикой молекул [8, 23, 28, 44—47]. Это указывает на *актуальность* задачи изучения одномерных и двумерных дипольных газов.

Из-за низких температур, малых размеров ячеек оптических решеток классическая динамика плохо описывает поведение дипольных газов, в том числе процессы двухчастичного рассеяния. Ввиду идентичности сталкивающихся полярных молекул необходим непосредственный учет свойств статистики при столкновениях частиц бозонов и частиц фермионов, не имеющей аналога в описании классической динамики. Разработанные ранее аналитические оценки для описания квантовых эффектов при столкновениях холодных атомов, основанные на применении потенциалов нулевого радиуса, плохо применимы для описания дипольных газов ввиду нецентральности и дальнего действия дипольного взаимодействия [7]. Развитие экспериментальных методик в настоящее время демонстрирует значительный прогресс. Тем не менее, актуальной остается задача дальнейшей разработки квантовых теоретических моделей дипольных газов, в том числе малой размерности. Поскольку в большинстве случаев уравнения моделей не имеют аналитических решений, необходимо развивать методы численных расчетов [20, 41, 48].

Для решения этой задачи в настоящей диссертации мы построили теоретическую модель рассеяния и связанных состояний в дипольных газах, необходимую

для проведения дальнейших экспериментов.

В последние годы возрос интерес к созданию масштабируемого квантового компьютера. Принцип квантовых вычислений состоит в организации хранения информации и вычислений с помощью квантовых объектов, называемых квантовыми битами, или кубитами. Пространство возможных состояний кубитов является суперпозицией как минимум двух базисных состояний. Прогресс в экспериментальных методиках получения систем с контролируруемыми свойствами и возможность контроля свойств отдельных частиц сделал возможным создание кубитов на основе ультрахолодных атомов и полярных молекул, обладающих большим дипольным моментом, в оптических решетках [49].

Для полноценного использования нецентральности дипольного взаимодействия в малоразмерных (одномерных/двумерных) геометриях используется внешнее поляризующее поле, направленное под углом к оси/плоскости движения частиц. При малых углах наклона диполей относительно нормали к области движения взаимодействие слабо отличается от чисто отталкивательного дипольного потенциала, но при увеличении углов наклона для рассеяния поляризованных [23] и неполяризованных диполей [47] наблюдаются отчетливые резонансные структуры в сечениях рассеяния, что в эксперименте приводит к потерям частиц из области удержания оптических ловушек и малому времени жизни таких систем.

Дипольные газы по сравнению с ультрахолодными нейтральными атомами позволяют достичь большей масштабируемости благодаря дальнему действию диполь-дипольного взаимодействия. Для создания кубита требуются теоретические расчеты, учитывающие анизотропность диполь-дипольного взаимодействия и влияния диполей друг на друга [24]. В [27] рассматривается практическая осуществимость использования электрического диполь-дипольного взаимодействия между полярными молекулами в ловушке в качестве элементов логики квантового компьютера в отсутствие внешнего статического поляризующего поля. Это указывает на актуальность разработки теоретического анализа малочастичных систем с диполь-дипольным взаимодействием.

С экспериментальной точки зрения контроль короткодействующей части взаимодействия диполей возможен с помощью внешних полей и резонансов Фешбаха [7, 42]. Имеется ряд принципиальных отличий свойств дипольного рассеяния в плоскости от свойств трехмерного рассеяния, например, расходимость s -волны в низкоэнергетическом пределе и существование слабосвязанного состояния для любого притягивающего потенциала [50].

В отличие от большого количества работ, рассматривающих рассеяние *сонаправленных* диполей [7, 23, 28, 29, 51—53] мы анализируем рассеяние *произвольно направленных* диполей в плоскости.

Анизотропные столкновения двух дипольных Бозе-Эйнштейновских конденсатов [54] или столкновения медленных полярных молекул, приготовленных в «криофуге» («cryofuge») [55], позволяют экспериментально исследовать двухчастичные дифференциальные сечения рассеяния. Сталкивающиеся диполи имеют различные ориентации дипольных моментов, если дипольные Бозе-Эйнштейновские конденсаты получены с помощью различно направленных внешних электрических полей. В настоящей диссертации обнаружена сильная угловая зависимость дифференциальных сечений в резонансных и нерезонансных точках при рассеянии диполей не только в случае ферми-газов, но, что важно, и бозе-газов, в плоскости. *Поэтому полученные в диссертации результаты представляют несомненный научный интерес, как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения.* Разработка теоретического описания планарных систем двухатомных полярных молекул важна, в частности, для прикладной задачи создания кубитов на их основе.

Глава 1

Энергии связи квантового диполя в плоскости

1.1. Введение

Физика дипольных систем активно развивалась последние годы [3, 43, 56, 57]. Были экспериментально получены ультрахолодные газы [43, 56], в том числе с диполь-дипольным взаимодействием [43], в квази-двумерных геометриях диско-подобных ловушек, движение частиц в которых близко к планарному. Дипольное взаимодействие имеет дальнедействующий и анизотропный характер, что влияет на свойства системы, как это было показано в исследованиях ультрахолодных атомов и полярных молекул в квази-двумерных и трёхмерных геометриях оптических ловушек [7], атомов Ридберга во внешних полях [58], экзотических стабильных конфигураций в ультрахолодных газах [13], и нематических жидких кристаллов во внешних магнитных полях [59].

Целью настоящего раздела является численный анализ уровней энергии связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя [30, 31]. Это позволяет также моделировать взаимодействие электрона с деформацией дислокации, ориентированной вдоль оси Z , в твердом теле. Мы исследуем нецентральный потенциал диполя, образованного двумя близкими бесконечными прямыми, с равными и противоположными линейными плотностями зарядов [30]:

$$V_p(\rho, \phi) = p \frac{\cos(\phi)}{\rho}, \quad (1.1)$$

где ρ and ϕ – полярные координаты, определенные в плоскости XY , p – дипольный момент. Форма потенциала (1.1) представлена на рисунке 1.1.

Для решения двумерного уравнения Шрёдингера с анизотропным потенциалом, в частности (1.1), в котором переменные не разделяются, необходимы численные алгоритмы без дополнительных аппроксимаций, таких как учёт анизотропной части потенциала по теории возмущений или пренебрежение вкладом высших

парциальных волн при низких энергиях столкновений. В ряде работ использованы аналитические и численные методы, развитые для анализа радиальных уравнений в рамках различных приближений (например, метод асимптотических итераций [60], квазиклассическое приближение [61], метод фазовых функций [62]). Нами предложен численный алгоритм решения двумерного уравнения Шрёдингера [30] для точечной частицы массы в поле диполя:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V_p(\rho, \phi) \right] \Psi(\rho, \phi) = E \Psi(\rho, \phi). \quad (1.2)$$

В единицах длины $L = \hbar^2/2mp$ и энергии $E_p = 2mp^2/\hbar^2$ ($\epsilon \equiv E/E_p$) двумерное уравнение Шрёдингера с потенциалом (1.1) может быть записано в безразмерном виде::

$$\left[-\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\cos(\phi)}{\rho} \right] \Psi(\rho, \phi) = \epsilon \Psi(\rho, \phi). \quad (1.3)$$

Потенциал инвариантен при отражении относительно оси X :

$V_p(\rho, \phi) = V_p(\rho, -\phi)$, и, благодаря этой симметрии потенциала, связанные состояния являются либо четными $\Psi(\rho, \phi) = \Psi(\rho, -\phi)$ либо нечетными ($\Psi(\rho, \phi) = -\Psi(\rho, -\phi)$). Потенциал, показанный на рисунке 1.1, для $p > 0$ является притягивающим (состояния разрешены) в области $x < 0$.

Обзор различных подходов к решению задачи на связанные состояния квантового двумерного диполя приведен в работе [30]. Начальная оценка Ландауэра энергии основного состояния ($E = -0.102E_p$) [63] была получена с использованием вариационного подхода. Приближения, полученные с помощью вариационных методов, заведомо превышают истинное значение, поэтому чем ниже получаемое значение энергии, тем оно точнее [30]. Другими авторами были выполнены расчёты значения энергии основного состояния в вариационном подходе с выбором различных базисных функций [64—68].

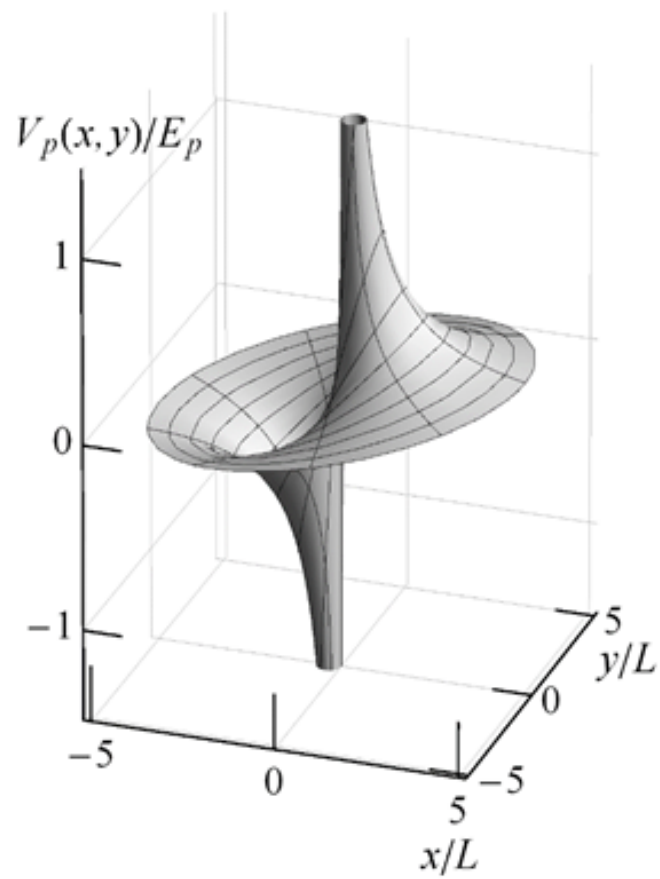


Рисунок 1.1. Поверхность потенциальной энергии $V_p(x, y)$ (1.1) (в единицах $E_p = 2mp^2/\hbar^2$) как функция координат x, y (в единицах $L = \hbar^2/2mp$).

В работе [30] показано, что вариационный подход с использованием базиса собственных функций «двумерного атома водорода» плохо подходит для вычисления энергий низколежащих состояний. Кроме этого, отсутствуют оценки точности получаемых значений по сравнению с применением методов конечно-разностной дискретизации двумерного уравнения Шрёдингера на сетках по пространственным координатам. Дискретизация по пространственным координатам и применение численных методов диагонализации матриц, в частности, метода сопряжённых градиентов, алгоритма Якоби-Дэвидсона и алгоритма Арнольди-Ланцоша, позволило получить значение энергии основного состояния ($E = -0.139E_p$) с точностью в 2% (изменения в 3-ей значащей цифре), что являлось наилучшим значением по сравнению с предыдущими работами других авторов (см. таблицу 1.1).

Улучшение приближенных значений энергий низколежащих уровней в вариационном подходе было получено в недавней работе [31], где показано, что вариационный метод Релея-Ритца быстрее сходится по числу базисных функций при разложении по двумерным аналогам орбиталей слейтеровского типа, чем по волновым функциям «двумерного атома водорода». Использование полного базиса и метода полиномиальных ортогональных проекций уменьшает необходимое для сходимости число вариационных параметров [69].

Однако приближенные значения энергий собственных состояний, в том числе полученных при помощи оптимизационной процедуры Релея-Ритца, не имеют независимой оценки точности [31, 69]. Получить ее можно только по отношению к точным аналитическим решениям или к численным расчетам другими методами с известной оценкой точности [70].

Таблица 1.1. Обзор приближений значения энергии основного состояния квантовой частицы в поле диполя в плоскости [30]. Значения энергии E в единицах E_p .

Статья	Значение энергии основного состояния
Ландауэра (1954) [63]	−0,102
Эмтаж (1967) [64]	−0,117
Набутовский и Шапиро (1977) [65]	−0,1014
Слюсарев и Чишко (1984) [66]	−0,1111
Дубровский (1977) [67]	−0,1196
Фарвак и Франсуа (2001) [68]	−0,1113
Дорсей и Тонер [30]	−0,1199
Дасбисвас и соавторы (2010) [30]	−0,139

1.2. Численный алгоритм 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.

Для построения численного алгоритма решения двумерного уравнения 1.3 с произвольным анизотропным потенциалом мы используем сеточное представление дискретной переменной (Discrete Variable Representation, “DVR”) [71—77]. В этом представлении матрица потенциальной энергии диагональна, а матрица кинетической энергии разрежена. Разреженной будет и матрица гамильтониана, поэтому методы итерационной линейной алгебры будут эффективны при больших размерностях [78].

Для представления волновой функции на равномерной разностной сетке $\phi_j = 2\pi j/(2M + 1)$, где $j = 0, 1, \dots, 2M$ по угловой переменной ϕ мы используем базис собственных функций

$$\xi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\phi-\pi)} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad (1.4)$$

оператора $h^{(0)}(\phi) = \partial^2/\partial\phi^2$. Размерность базиса равна количеству точек разностной сетки, что позволяет определить квадратную матрицу $\xi_{jm} = \xi_m(\phi_j)$ размером $(2M + 1) \times (2M + 1)$. С помощью соотношения полноты Фурье базиса

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \xi_m(\phi_k) \xi_m^*(\phi_j) = \delta(\phi_k - \phi_j), \quad (1.5)$$

которое на разностной сетке принимает вид:

$$\sum_{m=-M}^M \xi_{km} \xi_{jm}^* = \frac{2M + 1}{2\pi} \delta_{kj}, \quad (1.6)$$

элементы обратной матрицы ξ_{mj}^{-1} могут быть получены в явном виде:

$$\xi_{mj}^{-1} = \frac{2\pi}{2M+1} \xi_{jm}^* = \frac{\sqrt{2\pi}}{2M+1} e^{-im(\phi_j - \pi)}. \quad (1.7)$$

Волновая функция ищется в виде Фурье-интерполяции ее радиальных сечений

$$\psi_j(\rho) = \sqrt{\rho} \Psi(\rho, \phi_j). \quad (1.8)$$

по углу:

$$\Psi(\rho, \phi) \approx \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho). \quad (1.9)$$

Преимуществом представления (1.9) по сравнению с вариационным методом и разложением по парциальным волнам является наличие оценки погрешности аппроксимации [47, 79]:

$$\delta\Psi_M = \left| \Psi(\rho, \phi) - \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho) \right| < \text{const} \times \frac{\ln M}{M^k}, \quad (1.10)$$

где k – число непрерывных и ограниченных производных по ϕ . Быстрая скорость сходимости по числу точек сетки $2M+1$ по угловой переменной для потенциала (1.1) продемонстрирована в таблице 1.4. Использование разложения по парциальным волнам для сильно анизотропных потенциалов неэффективно из-за необходимости большого числа базисных функций [80]. Для вариационного подхода [30, 31] получаемые значения энергии являются оценкой сверху точного значения энергии системы и отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения [81].

В представлении (1.9) уравнение Шрёдингера (1.3) преобразуется в систему $(2M+1)$ связанных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_j(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \psi_j(\rho) + \sum_{j'=0}^{2M} V_{jj'} \psi_{j'}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'=0}^{2M} h_{jj'}^{(0)} \psi_{j'}(\rho) = \epsilon \psi_j(\rho), \quad (1.11)$$

где матрица потенциала, не содержащего операторов интегрирования или дифференцирования, диагональна и состоит из его значений в узлах сетки по угловой

переменной:

$$V_{jj'}(\rho) = V(\rho, \phi_j)\delta_{jj'}, \quad (1.12)$$

Матрица операторного потенциала включает конечно-разностную аппроксимацию операторов, и потому недиагональна.

Недиагональная матрица оператора $h^{(0)}$ определяется следующим образом:

$$h_{jj'}^{(0)} = - \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (1.13)$$

Для нахождения связанных состояний планарной квантовой системы двух частиц необходимо найти собственные функции $\Psi(\rho, \phi)$ и их уровни энергии E из уравнения Шрёдингера (1.3) в его сеточном представлении (1.11), дополненного граничными условиями. Граничное условие в нуле состоит в конечности волновой функции:

$$\Psi(\rho, \phi_j) = \frac{\psi_j(\rho)}{\sqrt{\rho}} \rightarrow \text{const}, \quad (1.14)$$

откуда следует:

$$\psi_j(\rho = 0) = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, 2M). \quad (1.15)$$

Граничное условие на бесконечности состоит в стремлении волновой функции к нулю:

$$\psi_j(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (j = 0, 1, \dots, 2M). \quad (1.16)$$

Для решения задачи на собственные значения (1.11),(1.15),(1.16) вводится неравномерная сетка по радиальной переменной ρ (по аналогии с квазиравномерными сетками [82]): $\rho_j = \rho_N t_j^2$, $(j = 1, 2, \dots, N)$, узлы на которой определяются отображением $\rho_j \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$ на равномерную сетку $t_j \in [0, 1]$. Максимальный радиус сетки для потенциала (1.1), требующийся для расчёта энергий низколежащих связанных состояний, составил $\rho_N = 300$.

Для дискретизации используется семиточечная конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности для второй производной. На равномерной сетке узлов $s_k = kh$ с шагом h для дискретных выборок решения $\psi^k = \psi(s_k)$ она

имеет вид [83]:

$$\left. \frac{d^2\psi(s)}{ds^2} \right|_{s=s_k} = \frac{1}{180h^2} (2\psi^{k-3} - 27\psi^{k-2} + 270\psi^{k-1} - 490\psi^k + 270\psi^{k+1} - 27\psi^{k+2} + 2\psi^{k+3}) + O(h^6). \quad (1.17)$$

В результате система связанных дифференциальных уравнений (1.11) сводится к системе алгебраических уравнений

$$a_k\psi^{k-3} + b_k\psi^{k-2} + c_k\psi^{k-1} + (d_k + EI)\psi^k + e_k\psi^{k+1} + f_k\psi^{k+2} + g_k\psi^{k+3} = h_k, \quad (1.18)$$

где матрицы $a_k, b_k, c_k, e_k, f_k, g_k, h_k$ диагональны, I – единичная матрица, и матрица d_k , включающая матрицу $h^{(0)}$ недиагональна.

Собственные значения и соответствующие собственные векторы получаемой матрицы гамильтониана определяются численно с помощью метода обратных итераций со сдвигом [84]. Возникающая на каждой итерации алгебраическая задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [85] для блок-диагональной матрицы. Численный алгоритм обеспечивает быструю сходимость: в среднем требуется около 10 обратных итераций.

Для контроля погрешности результатов используется основанное на идее экстраполяции Ричардсона [84] последовательное кратное (в два раза) увеличение количества точек по разностным сеткам по радиальной и угловой переменным с контролем увеличения числа сохраняющихся знаков в результатах. Нами получено сохранение восьми значащих цифр при кратном увеличении числа точек, что позволяет с уверенностью говорить о достижении точности 10^{-6} .

Для верификации порядка точности используемой схемы воспользуемся известным правилом Рунге. При использовании вычислительной схемы порядка точности k соотношение значения истинного решения \tilde{E} и приближенного значения $E(h)$, где h – это шаг сетки, при последовательном кратном (в два раза) уменьше-

нии шага сетки имеет вид:

$$\begin{aligned}
 E &= \tilde{E} + O(h^k), \\
 E(h) &= \tilde{E} + Ah^k, \\
 E(h/2) &= \tilde{E} + Ah^k \frac{1}{2^k}, \\
 E(h/4) &= \tilde{E} + Ah^k \frac{1}{4^k}.
 \end{aligned}
 \tag{1.19}$$

Таким образом приближенные результаты, вычисленные на разностных сетках отличающихся числом узлов в два раза, позволяют верифицировать порядок точности вычислительной схемы k :

$$\frac{E(h) - E(h/2)}{E(h/2) - E(h/4)} = 2^k.
 \tag{1.20}$$

В Таблице 1.5 представлены значения 3-го возбужденного состояния двумерного осциллятора для последовательно сгущаемых сеток с числом точек по радиальной переменной 140, 280 и 560. Соответствующий коэффициент Рунге (1.20) для полученных результатов равен $63,43 \approx 64 = 2^6$, что подтверждает 6-ой порядок точности используемой нами вычислительной схемы.

1.3. Связанные состояния и плотности вероятностей

НИЗКОЛЕЖАЩИХ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Как отмечалось выше, для вариационного метода нет оценки точности результатов, которая зависит от выбора формы пробной функции. Используемая нами вычислительная схема расчёта уровней энергии точечной частицы в поле анизотропного двумерного дипольного потенциала (1.1) и собственных функций низколежащих связанных состояний позволяет не только получить такую оценку, но также улучшить точность результатов других авторов [30, 31, 69]. В таблице 1.2 приведено сравнение вычисленных с точностью до шести значащих цифр уровней энергий ϵ_n пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих *чётных* связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ других авторов [30, 31], а в таблице 1.3 –

сравнение вычисленных с точностью до шести значащих цифр уровней энергий ϵ_n пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ других авторов [31, 69]. В работах [30, 31] использовались вариационные методы с разложением волновой функции по собственным функциям «двумерного атома водорода» [30] и по функциям слейтеровского типа [31]; в работе [69] – метод проекций волновой функции на ортогональные полиномы (“orthogonal polynomial projection quantization”).

В таблицах 1.2 и 1.3 продемонстрированы хорошее согласие с результатами работ [30, 31, 69] и достаточная применимость как используемого нами численного алгоритма, так и вариационных методик для оценки основного и первых возбужденных состояний для описания структуры планарных систем с нецентральными потенциалами.

Преимуществом используемого численного алгоритма также является возможность решения задачи на связанные состояния в виде краевой задачи Штурма–Лиувилля, с другими краевыми условиями на бесконечности.

В таблице 1.4 представлены значения зависимости уровней энергий ϵ_n (в единицах E_p) пяти ($n = 1 - 5$) низколежащих четных связанных состояний от числа точек M разностной сетки ϕ_j . Значения подтверждают быструю сходимость по сетке по угловой переменной ($M \approx 20$ – достаточно для точности до шести значащих цифр).

На рисунках 1.2 - 1.4 приведены пространственные распределения плотности вероятности вычисленных пяти низколежащих *чётных* связанных состояний $n = 1, 2, \dots, 5$, а на рисунках 1.5 - 1.7 – *нечётных* связанных состояний $n = 1, 2, \dots, 5$. График распределений $n = 5$ чётного (Рисунок 1.4) и нечётного (Рисунок 1.7) возбужденных состояний существенно отличается от состояний $n < 5$: вместо дальнейшего появления дополнительных областей вдоль оси X распределения разделяются на дополнительные области по оси Y . Изменение формы распределения объясняется компенсацией сужения плотности распределения состояний ($n = 5$) по оси X растяжением вдоль оси Y и более компактными простран-

ственными размерами всего распределения в целом, по сравнению с распределениями $n = 4$ чётного и нечётного возбужденных состояний. Качественно оно объяснимо 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 ($\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$).

1.4. Выводы к главе 1

В данной главе исследованы энергетические уровни связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя. Для этого применен численный алгоритм решения двумерного уравнения Шрёдингера. Алгоритм использует дискретизацию по угловой координате и Фурье-интерполяцию радиальных компонент волновой функции. Это сводит решение двумерного уравнения Шрёдингера к краевой задаче Штурма–Лиувилля для системы одномерных дифференциальных уравнений. Для поиска собственных значений матрицы, получаемой при конечно-разностной аппроксимации производных, применён метод обратных итераций со сдвигом. Определены значения уровней энергии и соответствующие им собственные волновые функции квантовой частицы в поле двумерного диполя. Продемонстрировано согласие полученных результатов с результатами недавних работ других авторов [30, 31, 69]. Оценки погрешности вычисленных другими авторами значений энергии низколежащих состояний не были известны из-за ограничения вариационных подходов. В нашей работе использованы методы с известной оценкой ошибки аппроксимации, что позволило оценить относительную погрешность энергии низколежащих связанных состояний, составившую 10^{-6} . Рассчитаны плотности вероятности распределений волновых функций низколежащих состояний, соответствующие вычисленным энергиям. Результаты опубликованы в работах [A2, A5, A8].

Таблица 1.2. Сравнение вычисленных нами значений энергий ϵ_n пяти (в ед. E_p) низколежащих *четных* связанных состояний (3-й столбец) с результатами других авторов, полученных с использованием вариационных методов над двумерными кулоновскими собственными функциями [30] и над функцией Слейтера [31].

n	$ \epsilon_n $ [30]	$ \epsilon_n $ [31]	$ \epsilon_n $
1	0.0970	0.137741	0.137748
2	0.0328	0.041152	0.041158
3	0.0221	0.019967	0.019973
4	0.0167	0.011852	0.011858
5	0.0119	0.009747	0.009747

Таблица 1.3. Сравнение вычисленных нами значений уровней энергий ϵ_n (в ед. E_p) пяти низлежащих *нечётных* связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ других авторов, полученных с использованием вариационных методов над функцией Слейтера [31] и метода проекций волновой функции на ортогональные полиномы [69].

n	$ \epsilon_n $ [31]	$ \epsilon_n $ [69]	$ \epsilon_n $
1	0.0232932	0.0232932	0.0232932
2	0.0125862	0.0125863	0.0125862
3	0.0079918	0.0079919	0.0079919
4	0.0055643	0.0055644	0.0055644
5	0.0053312	0.0053312	0.0053312

Таблица 1.4. Зависимость энергий связи ϵ_n (в единицах E_p) пяти низколежащих четных связанных состояний от числа точек M сетки по угловой переменной .

M	$ \epsilon_n $				
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
6	0.137671	0.040562	0.019291	0.011255	0.008853
8	0.137747	0.041110	0.019845	0.011702	0.008571
10	0.137748	0.041156	0.019957	0.011825	0.009115
20	0.137748	0.041159	0.019974	0.011859	0.009747
40	0.137748	0.041159	0.019974	0.011859	0.009747

Таблица 1.5. Требуемая для вычисления коэффициента Рунге зависимость значений энергии двумерного гармонического осциллятора от числа точек N сетки по радиальной переменной на последовательности сгущающихся вдвое разностей сетке по радиальной переменной при фиксированных остальных параметрах. Коэффициент Рунге по нижеприведенным данным составляет $63,43 \approx 64 = 2^6$, что подтверждает 6-ой порядок точности используемой нами вычислительной схемы.

N	$E/\hbar\omega$
140	2,999999997616
280	2,999999999963
560	3,000000000000

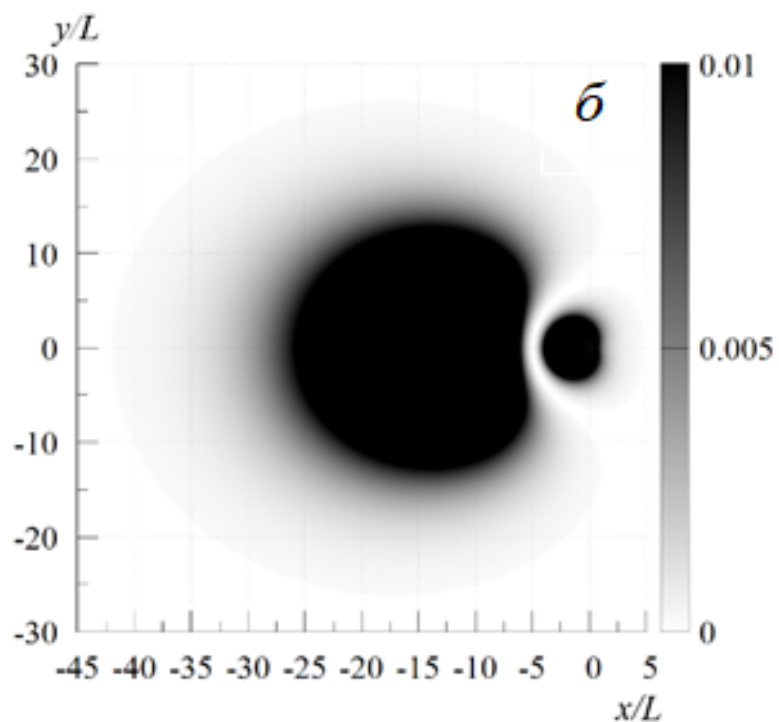
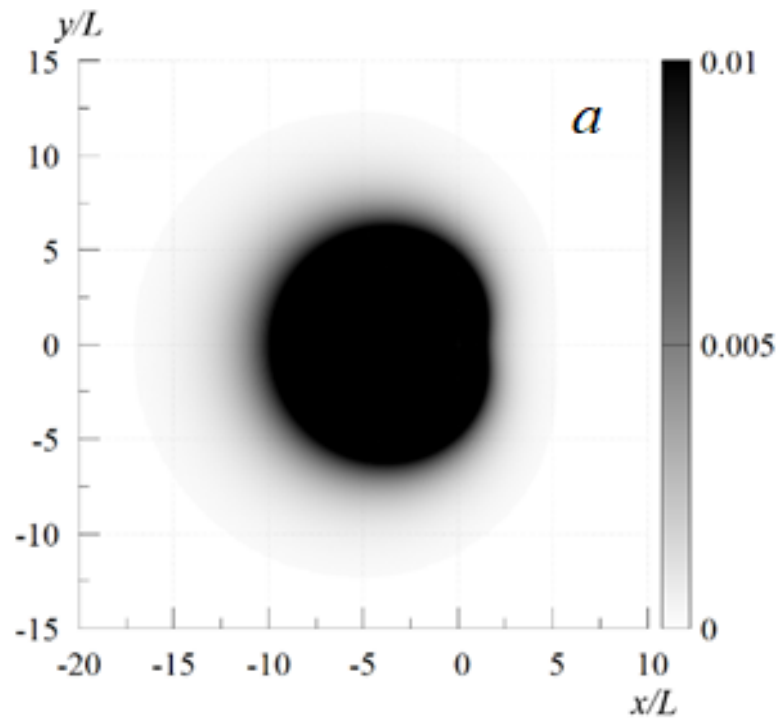


Рисунок 1.2. Пространственные распределения плотностей вероятности низколежащих *чётных* связанных состояний $n = 1(a)$, $2(б)$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

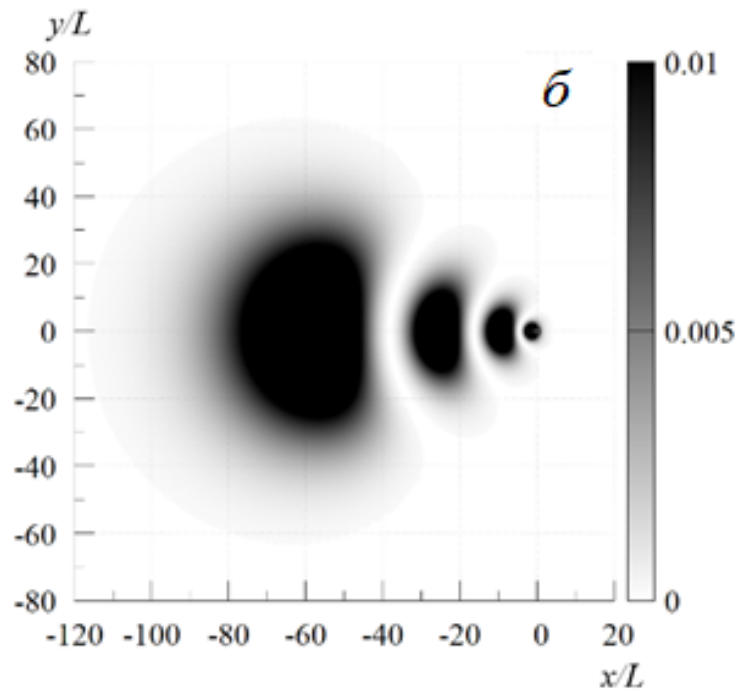
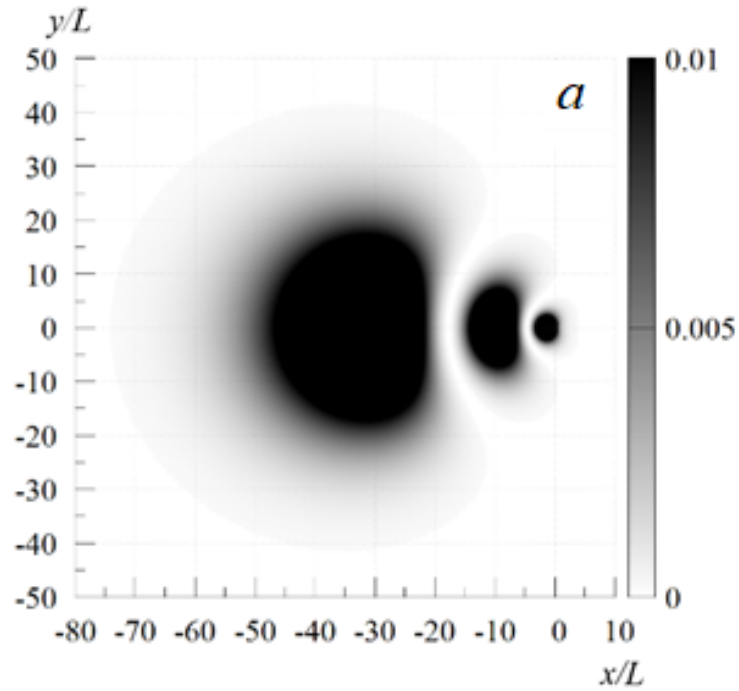


Рисунок 1.3. Пространственные распределения плотностей вероятности низколежащих *чётных* связанных состояний $n = 3(a)$, $4(b)$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

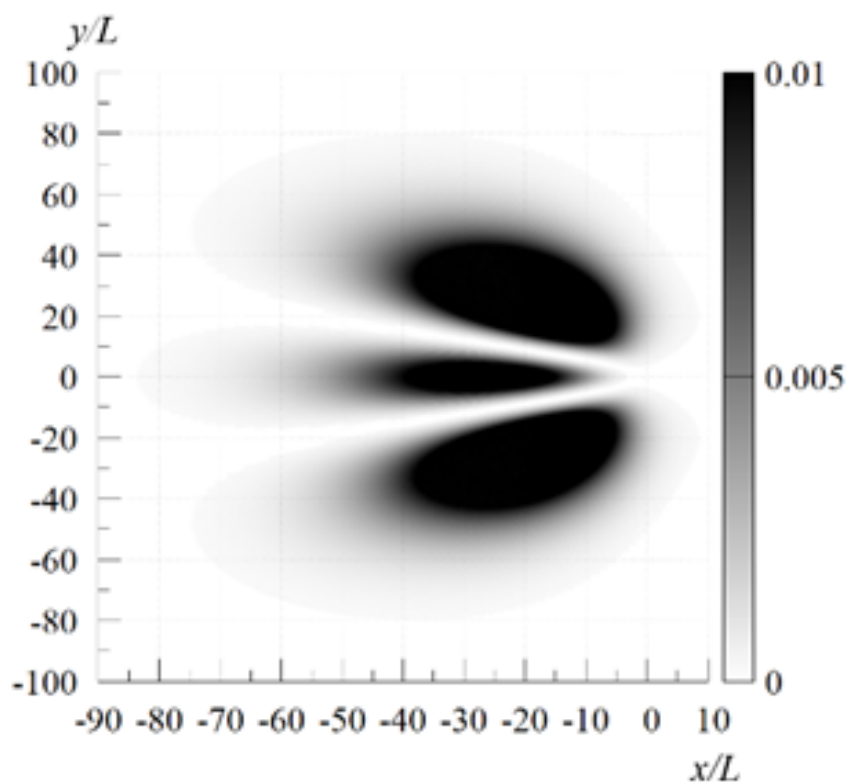


Рисунок 1.4. Пространственное распределение плотности вероятности пятого низлежащего *чётно*го связанного состояния $n = 5$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

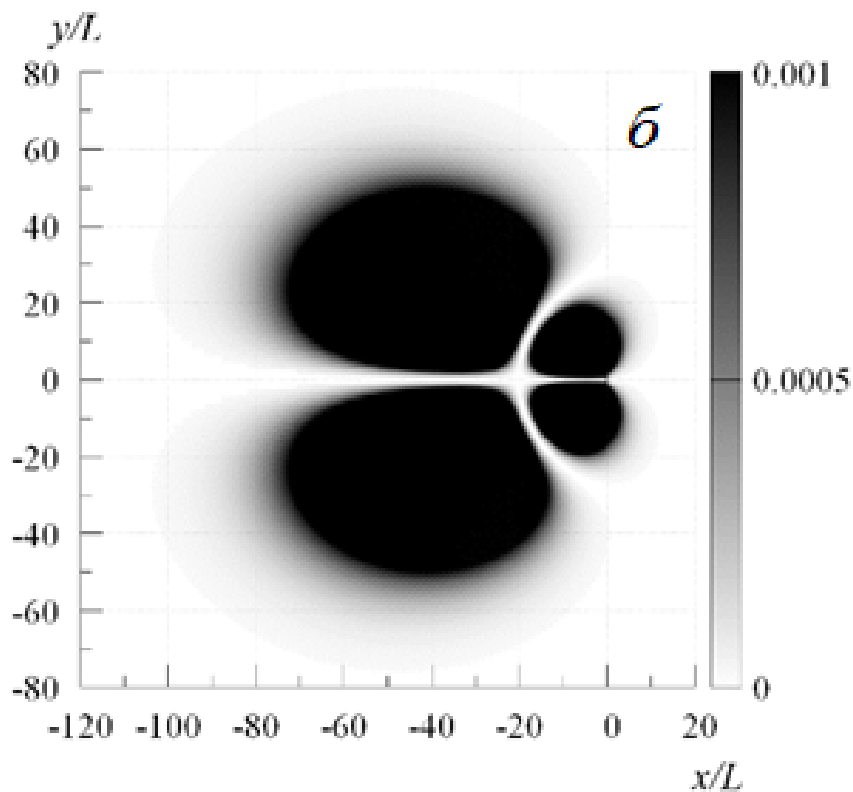
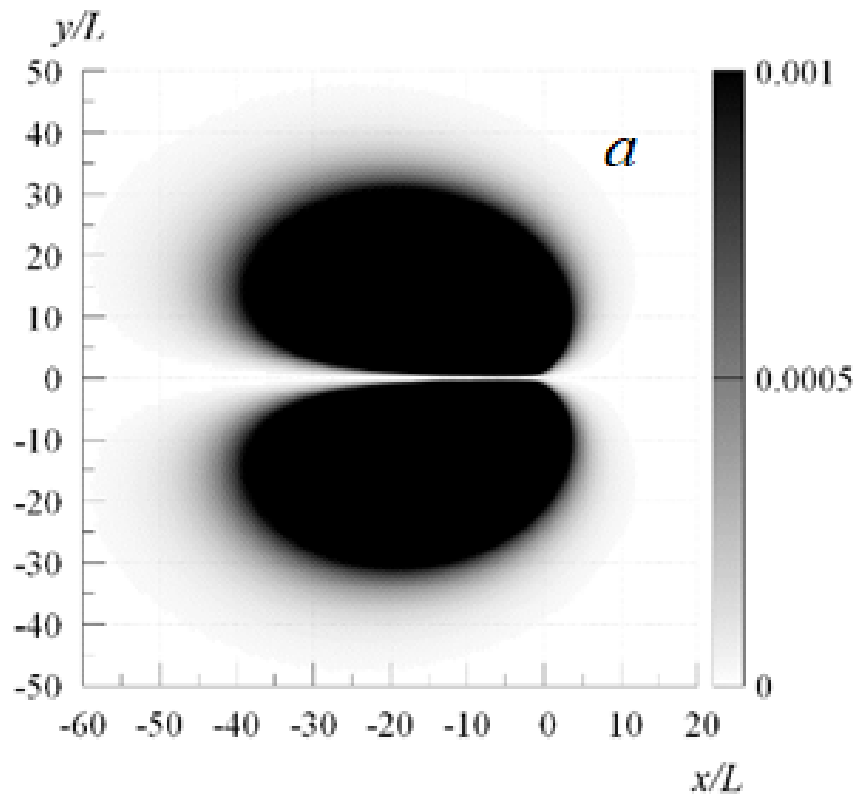


Рисунок 1.5. Пространственные распределения плотностей вероятности низколежащих *нечётных* связанных состояний $n = 1(a)$, $2(b)$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

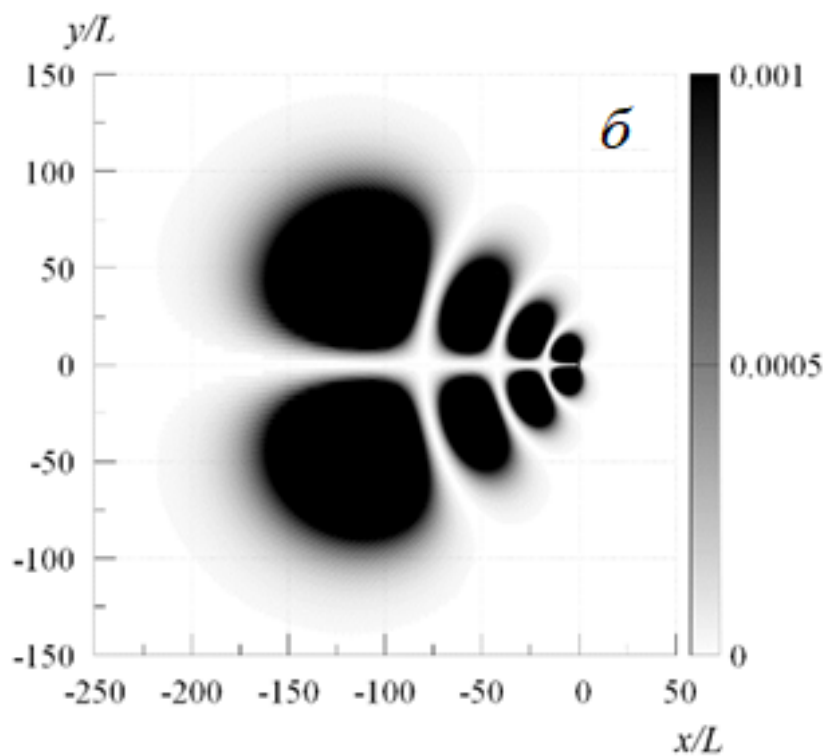
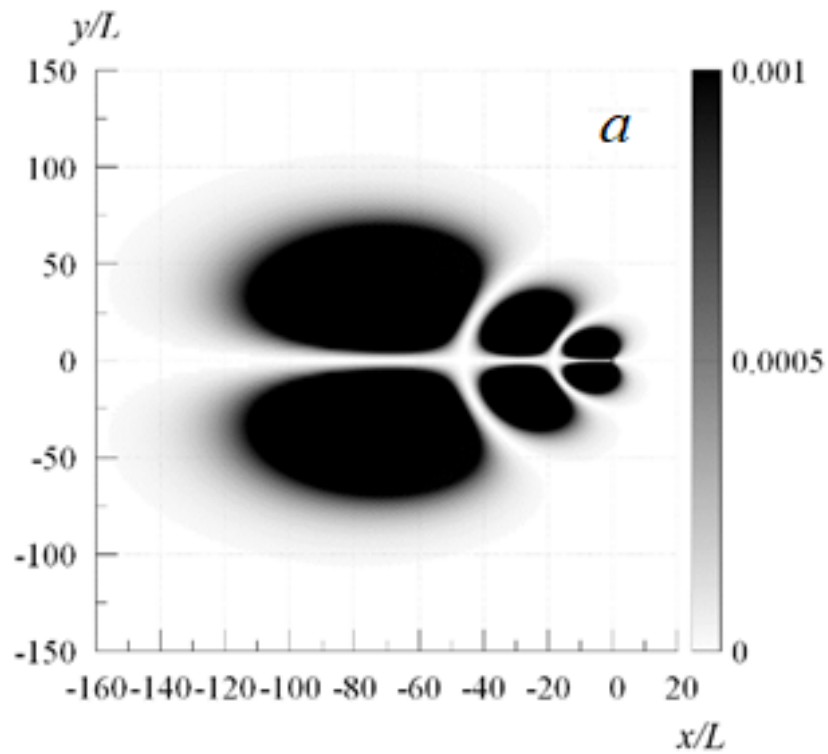


Рисунок 1.6. Пространственные распределения плотностей вероятности низколежащих *нечётных* связанных состояний $n = 3(a)$, $4(b)$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

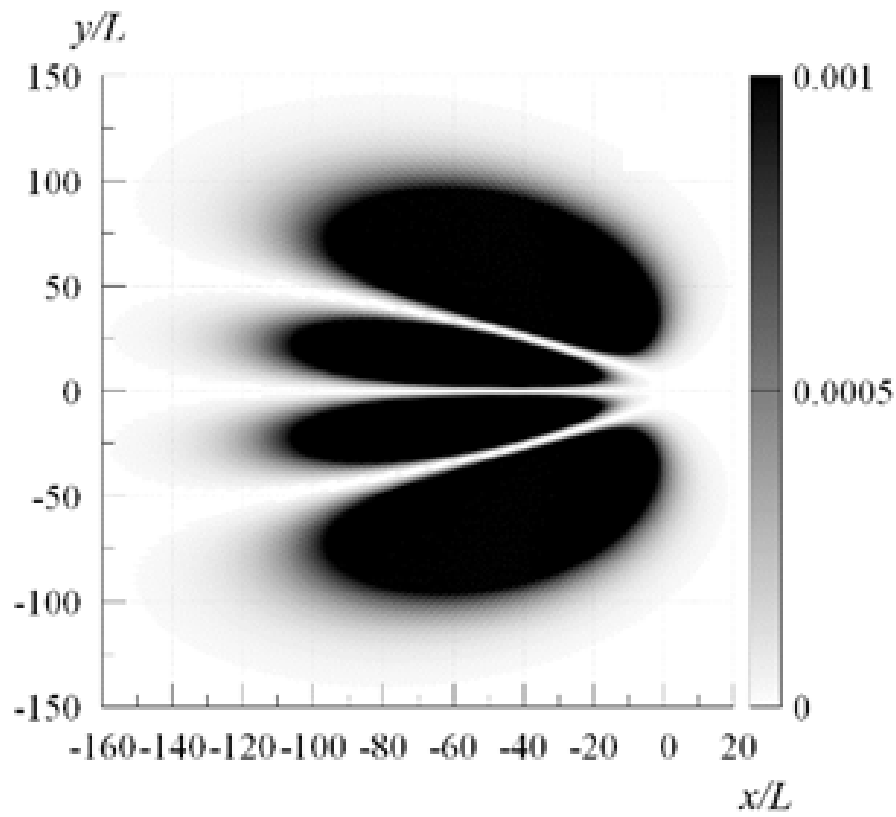


Рисунок 1.7. Пространственное распределение плотности вероятности пятого низколежащего нечётного связанного состояния $n = 5$. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности. $L = \hbar^2/2mp$ – характерный линейный масштаб задачи.

Глава 2

Рассеяние в малочастичных планарных дипольных квантовых системах

2.1. Введение

В последние годы планарные системы с анизотропным взаимодействием привлекают все больший интерес со стороны международных исследовательских групп. В частности, активно исследуются газ дипольных атомов или ультрахолодных полярных молекул в квазидвумерной геометрии магнитооптических ловушек [86] и дипольных ридберговских атомов [87]. Помимо газа полярных молекул дальнедействующее дипольное взаимодействие возникает в газе двумерных дипольных экситонов в двумерной квантовой яме полупроводниковых гетероструктур. В последнее время также интенсивно изучается динамика газа экситонов [88—90] и его Бозе-Энштейновская конденсация [91].

Диполь-дипольные взаимодействия являются дальнедействующими и сильно анизотропными, что приводит к возможности создания экзотических дальнедействующих квантовых систем дипольных газов [3, 92]. В частности, исследована анизотропная сверхтекучесть [23], двумерные дипольные фермионы [93] и дипольные комплексы нескольких тел [94].

2.2. Рассеяние двух произвольно направленных диполей в двумерном пространстве

В подразделе 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 (ρ, ϕ) :

$$H(\rho, \phi)\Psi(\rho, \phi) = E\Psi(\rho, \phi) \quad (2.1)$$

с граничным условием в асимптотическом пределе $\rho \rightarrow \infty$

$$\Psi(\rho, \phi) \rightarrow e^{iq\rho} + f(q, \phi, \phi_q) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}} \quad (2.2)$$

и гамильтонианом системы:

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

Параметры искомого 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 \mathbf{q}/q падающей волны (определяемом углом ϕ_q) и углом рассеяния ϕ . Здесь μ — приведенная масса системы. Варьирование направления падающей волны производится эквивалентным преобразованием анизотропного потенциала взаимодействия $U(\rho, \phi) \rightarrow U(\rho, \phi + \phi_q)$.

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

$$U(\rho, \phi) = V_{SR}(\rho) + V_{dd}(\rho, \phi), \quad (2.3)$$

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

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

$$V_{dd}(\rho, \mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2) = \frac{1}{\rho^3} \left((\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2) - 3 \frac{(\mathbf{d}_1 \boldsymbol{\rho})(\mathbf{d}_2 \boldsymbol{\rho})}{\rho^2} \right), \quad (2.4)$$

где \mathbf{d}_i ($i = 1, 2$) — дипольные моменты, $(\mathbf{d}_i \boldsymbol{\rho})/\rho$ — их проекции на линию, соединяющую их центры масс. В полярных координатах выражение (2.4) представимо в виде:

$$V_{dd}(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - 3 \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\phi) \cos(\phi - \beta)], \quad (2.5)$$

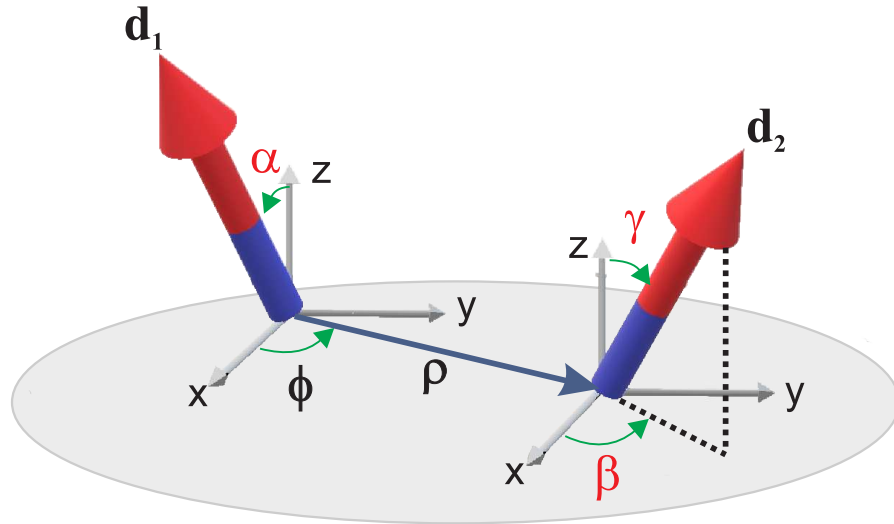


Рисунок 2.1. Схема взаимного расположения двух произвольно ориентированных диполей d_1 и d_2 в плоскости XY .

где углы α и γ определяют наклон диполей по отношению к оси Z и угол β определяет пространственную ориентацию плоскостей Zd_1 и Zd_2 . Схема взаимного расположения произвольно направленных диполей представлена на рисунке 2.1.

В данной работе мы используем два типа потенциалов, аппроксимирующих отталкивательное короткодействующее взаимодействие $V_{SR}(\rho)$: бесконечно высокая потенциальная стенка [23, 29, 52] шириной ρ_{SR} (чтобы волновая функция была равна нулю при ρ_{SR}):

$$V_{SR}(\rho) = \begin{cases} \infty, & \rho \leq \rho_{SR} \\ 0, & \rho > \rho_{SR} \end{cases}, \quad (2.6)$$

и реалистический потенциал Леннарда-Джонса [53, 57]

$$V_{SR}(\rho) = \frac{C_{12}}{\rho^{12}} - \frac{C_6}{\rho^6}. \quad (2.7)$$

Фиксированное значение параметра C_6 потенциала Леннарда-Джонса бра-лось для полярных молекул, например, $C_6 = 1.5 \times 10^6$ а.е. для $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$ [57, 95]. Дипольная длина $D = \mu d^2 / \hbar^2$ ($D \approx 182554$ а.е. для $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$) 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 $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$) [57] и потенциал

Леннарда-Джонса эффективно используется в качестве отталкивательного потенциала диполь-дипольного взаимодействия. Увеличение C_{12} при фиксированном C_6 ведет к усилению короткодействующей части потенциала $U(\rho, \phi)$, т.е. для изменения параметра ρ_{SR} мы варьируем параметр C_{12} .

Для сравнения результатов для двух типов потенциалов необходимо выразить радиус короткодействующего взаимодействия ρ_{SR} через параметры C_6, C_{12} потенциала Леннарда-Джонса.

В случае использования потенциала Леннарда-Джонса мы определяем ρ_{SR} 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, ρ_{SR} определяется из условия $C_{12}/\rho^{12} + V_{dd}(\rho, \beta/2) = 0$, откуда следует соотношение для зависимости ρ_{SR} от C_{12} и углов α, β, γ :

$$\rho_{SR} = \left[\frac{C_{12}}{\sin(\alpha) \sin(\gamma) \frac{3+\cos(\beta)}{2} - \cos(\alpha) \cos(\gamma)} \right]^{1/9}. \quad (2.8)$$

Для потенциальной стенки (2.6) уравнение (2.1) с потенциалом (2.3) в дипольных единицах длины D и энергии E_D :

$$D = \frac{\mu d^2}{\hbar^2}, \quad E_D = \frac{\hbar^6}{\mu^3 d^4},$$

может быть записано в безразмерном виде:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + U(\rho, \phi) \right] \Psi = E \Psi \quad (2.9)$$

Для полярной молекулы $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$ дипольный момент составляет $d = 1.35$ а.е. [95], и $E_D = 2.996 \times 10^{-16}$ а.е.. В случае выбора в качестве V_{SR} потенциальной стенки, вычисляемые характеристики рассеяния являются универсальными в значении, что они могут быть пересчитаны для параметров конкретной системы [96].

При использовании потенциала Леннарда-Джонса характеристики рассеяния зависят от отношения параметров потенциалов Леннарда-Джонса и дипольного взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса в дипольных единицах принимает вид:

$$V_{SR}(\rho) = \frac{1}{E_D} \left(\frac{C_{12}}{\rho^{12}} - \frac{C_6}{\rho^6} \right). \quad (2.10)$$

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

$$\frac{d\sigma(q, \phi, \phi_q)}{d\Omega} = |f(q, \phi, \phi_q)|^2, \quad (2.11)$$

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

$$\Psi(\rho, \phi) \rightarrow e^{iq\rho} + \epsilon e^{-iq\rho} + f(\phi) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}} \quad (2.12)$$

и дифференциальных сечений:

$$\frac{d\sigma(\phi)}{d\Omega} = |f(\phi, \phi_q)|^2 = |f(\phi) + \epsilon f(|180^\circ - \phi|)|^2. \quad (2.13)$$

Из определений (2.11) и (2.13) 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 $\phi + \phi_q = 90^\circ$:

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

Полное сечение рассеяния выражается через рассчитываемую амплитуду рассеяния усреднением по направлению падающей волны ϕ_q и интегрированием по углу рассеяния ϕ :

$$\sigma(q) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\phi_q d\phi \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} |f(q, \phi, \phi_q)|^2 d\phi_q d\phi, \quad (2.14)$$

где $d\Omega = d\phi d\phi_q$, а угол ϕ_q определяет направление \mathbf{q}/q падающей волны.

Для решения задачи (2.1)–(2.2), с потенциалом взаимодействия (2.3) применен численный алгоритм, основанный на методе представления дискретной переменной, выберем собственные функции

$$\xi_m(\phi) = \frac{e^{im(\phi-\pi)}}{\sqrt{2\pi}} = \frac{(-1)^m e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.15)$$

оператора $h^{(0)} = \partial^2/\partial\phi^2$ как Фурье-базис для угловой сетки представления искомой волновой функции $\Psi(\rho, \phi)$. Введем равномерную сетку $\phi_j = 2\pi j/(2M+1)$, где $j = 0, 1, \dots, 2M$, по переменным ϕ и ϕ_q и будем искать волновую функцию в виде Фурье-интерполяции:

$$\begin{aligned} \Psi(\rho, \phi) &\approx \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho) = \\ &= \frac{1}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} e^{im(\phi-\phi_j)} \psi_j(\rho), \end{aligned} \quad (2.16)$$

где $\xi_{mj}^{-1} = 2\pi \xi_{jm}^*/(2M+1) = \sqrt{2\pi} e^{-im(\phi_j-\pi)}/(2M+1)$ — квадратная матрица размером $(2M+1) \times (2M+1)$, обратная к матрице $\xi_{jm} = \xi_m(\phi_j)$, определенной на сетке по угловой переменной $\phi_j = 2\pi j/(2M+1)$, где $j = 0, 1, \dots, 2M$. В точках угловой переменной ϕ_j волновая функция $\Psi(\rho, \phi_j)$ имеет вид $\Psi(\rho, \phi_j) \approx \psi_j(\rho)/\sqrt{\rho}$.

Данное разложение сводит уравнение Шрёдингера (2.1) к системе $2M+1$ связанных обычных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_j(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - U(\rho, \phi_j) + \frac{\hbar^2}{8\mu\rho^2} \right) \psi_j(\rho) - \\ - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'} \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1} \psi_{j'}(\rho) = 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

с краевым условием в нуле $\psi_j(\rho \rightarrow 0) \rightarrow \text{const} \times \sqrt{\rho}$ ($j = 0, 1, \dots, 2M$) и граничным условием задачи рассеяния в асимптотической области $\rho \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{2M} \sum_{m=-M}^M e^{im(\phi-\phi_j)} \psi_j(\rho) = \\ = e^{iq\rho \cos(\phi)} + f(q, \phi, \phi_q) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Для дискретизации использован метод семиточечной конечно-разностной аппроксимации шестого порядка точности для производных первой и второй степени. Полученная на каждой итерации матричная задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки для ленточной матрицы.

В качестве разностной сетки $\{\rho_k\}$ ($k = 0, 1, \dots, N$) по радиальной переменной применена неравномерная сетка, выбранная по аналогии с квазиравномерными сетками [82]:

$$\rho_k = \rho_0 + (\rho_N - \rho_0)t_k^2, \quad (2.19)$$

$$t_k = k/N; t_k \in [0, 1]. \quad (2.20)$$

Это существенно уменьшило требуемое количество точек разностной сетки N по радиальной переменной, увеличило скорость сходимости и значительно сократило вычислительные затраты.

Любое локальное взаимодействие в этом представлении диагонально. После конечно-разностной аппроксимации краевой задачи (2.17 - 2.18) полученная блочная матрица может быть сохранена в упакованной форме, что позволяет оптимально использовать вычислительные ресурсы. Полученная алгебраическая система эффективно решается быстрым неявным матричным алгоритмом, основанным на идее алгоритма блочной прогонки.

2.3. Критический (магический) угол

Диполь-дипольное взаимодействие (2.5) меняется от полностью отталкивающего для двух диполей направленных перпендикулярно плоскости движения XU 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 γ и угол вращения β между плоскостями Zd_1 и Zd_2), рассмотрим изменение диполь-дипольного потенциала при изменении угла наклона α диполя \mathbf{d}_1 .

Рассмотрим изменение потенциала V_{dd} диполь-дипольного взаимодействия при увеличении угла наклона α диполя \mathbf{d}_1 , относительно направления диполя \mathbf{d}_2 : угла наклона γ и угла вращения β между плоскостями Zd_1 и Zd_2 (см. рисунок 2.1).

Области притягивающего дипольного взаимодействия возникают около точек ϕ' , определяемых соотношением: $\partial V_{dd}(\rho, \phi)/\partial \phi|_{\phi=\phi'} = 0$. Критический угол наклона $\alpha_c(\beta, \gamma)$ определяется как угол α (см. рисунок 2.1), при превышении которого значения потенциала становятся отрицательными в точках ϕ' : $V_{dd}(\rho, \phi = \phi') < 0$. Таким образом, условие:

$$V_{dd}(\rho, \phi = \phi') = 0, \quad (2.21)$$

определяет зависимость критического угла наклона $\alpha = \alpha_c(\beta, \gamma)$ диполя \mathbf{d}_1 от угла вращения β и угла наклона γ диполя \mathbf{d}_2 :

$$\alpha_c(\beta, \gamma) = \arctan \left(\frac{2 \cot(\gamma)}{3 + \cos(\beta)} \right), \quad (2.22)$$

представленная на рисунке 2.2. Критический угол наклона $\alpha_c(\beta, \gamma)$ увеличивается при $\beta \rightarrow 180^\circ$ (например, при $\gamma = 45^\circ$ угол α_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 2.2 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 β имеет вид:

$$\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha) = \arctan \sqrt{\frac{2}{3 + \cos(\beta)}}, \quad (2.23)$$

(см. врезку на рисунке 2.2). При одинаковом направлении моментов диполей $\gamma = \alpha$; $\beta = 0^\circ$ формула (2.23) 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 [23, 36, 97]. Максимальное значение критического угла $\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha)$ равно 45° и достигается при $\beta = 180^\circ$.

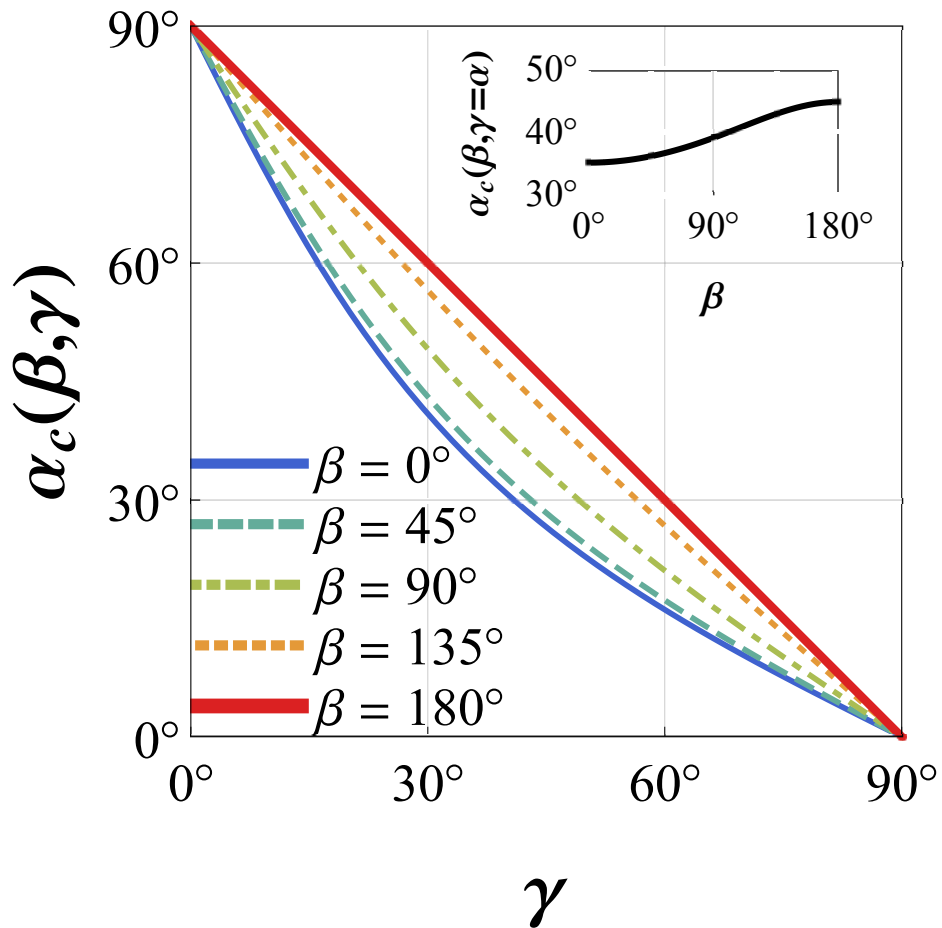


Рисунок 2.2. Зависимость критического угла наклона $\alpha_c(\beta, \gamma)$ диполя \mathbf{d}_1 от угла вращения β и от угла наклона γ диполя \mathbf{d}_2 (см. схему на рисунке 2.1). На врезке отображена зависимость (2.23) критического угла наклона $\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha)$ (в град.) от угла вращения β (в град.) для случая одинаковых углов наклона двух диполей ($\gamma = \alpha$).

2.4. Приближение Борна

Для оценки амплитуды рассеяния ультрахолодных диполей при малых значениях величины дипольных моментов авторами статей [23, 28, 51, 98—100] применялось приближение Борна [101]. В работах [23, 28, 51, 98—100] получено согласие с расчетами с помощью метода сильной связи каналов вдали от резонансов рассеяния. Но вблизи резонансов условия применимости приближения Борна полностью не выполняются и сечение рассеяния необходимо вычислять численно [102].

Матричные элементы потенциала (2.5) в базисе Фурье $\{\exp(im\phi)\}$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle m|V_{dd}(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma)|m'\rangle = 2\pi \left[\left(\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) \right) \delta_{m,m'} - \right. \\ \left. - \frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \left(\exp(-i\beta) \delta_{m,m'-2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \exp(i\beta) \delta_{m,m'+2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Соответственно, обобщение борновского приближения [23] на случай произвольно ориентированных диполей имеет вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{BA}^{m \rightarrow m} / D &= \frac{4Dq}{(m^2 - \frac{1}{4})^2} \left[\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \right. \\ &\quad \left. + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - \frac{3}{2} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) \right]^2, \\ \sigma_{BA}^{\pm 1 \rightarrow \mp 1} / D &= \frac{4Dq}{(m^2 - \frac{1}{4})^2} \left[\frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \right]^2, \\ \sigma_{BA}^{m \rightarrow m+2} / D &= \frac{4Dq}{[(m + \frac{1}{2})(m + \frac{3}{2})]^2} \left[\frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \right]^2. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Полное сечение σ_{BA} для случая рассеяния *фермионов* получается из уравнения (2.25) путем суммирования вкладов по *нечетным* m . Таким образом, выраже-

ние для полного сечения рассеяния сонаправленных диполей, полученное в работе К. Тикнора [23] в приближении Борна для дальнедействующей части потенциала (2.5), обобщено на случай *произвольно ориентированных* диполей (*идентичных фермионов*):

$$\sigma_{BA}/D = 8Dq \left[\pi(\pi - 2) \left(\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - \frac{3}{2} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) \right)^2 + \left(\pi(\pi + 2) + \frac{32}{9} - \frac{63520}{3969} \right) \left(\frac{3}{4} \sin(\alpha) \sin(\gamma) \right)^2 \right] \quad (2.26)$$

Зависимость (2.26) сечения в приближении Борна от угла наклона α (при $\alpha = \gamma$) и угла вращения β проиллюстрирована на рисунке 2.3.

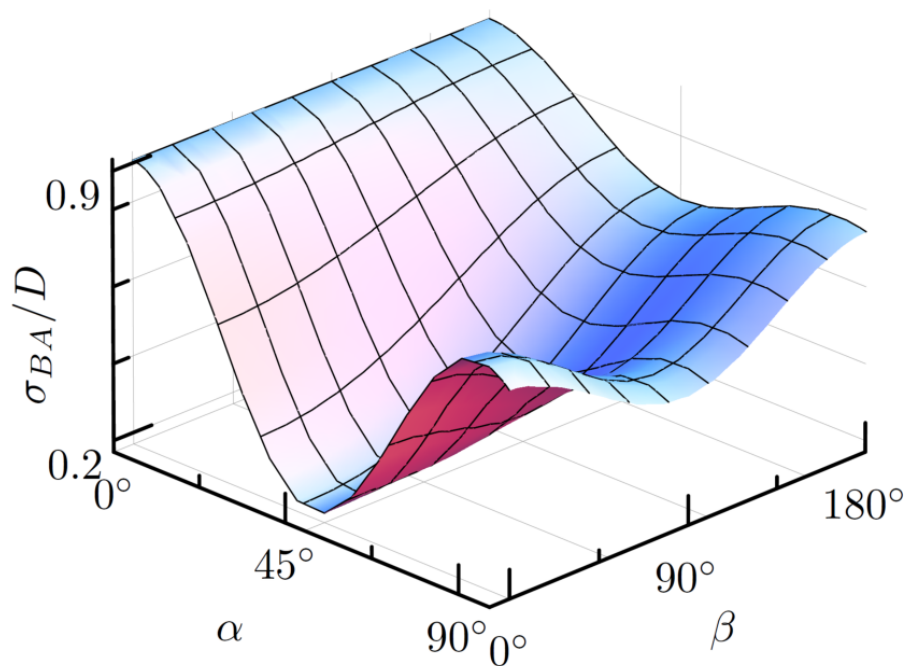


Рисунок 2.3. Зависимость полного сечения дипольного рассеяния идентичных фермионов от угла наклона α (при $\alpha = \gamma$) и угла вращения β , полученная в приближении Борна (2.26).

Как видно из рисунков 3.3- 3.4, значение сечения σ_F для фермионов, полученное в приближении Борна, обозначенное зеленой линией, близко к вычисленным значениям $\sigma_F(\rho_{SR})$ вдали от резонансов, но оно хуже подходит в случае плотной резонансной структуры зависимости $\sigma_F(\rho_{SR})$. Приближение Борна предсказывает одинаковые значения сечения рассеяния для $\beta = 0^\circ$ и $\beta = 180^\circ$ при $\alpha = 90^\circ$. Исходя из рисунка 2.3, можно ожидать, что сечение рассеяния должно меньше зависеть от угла наклона α при $\beta \rightarrow 180^\circ$ и что сечение должно быть сравнимым с его значением в случае $\alpha = 0^\circ$, что подтверждается только для $\alpha < \alpha_c$. Таким образом, результаты расчетов показывают, что условием применимости приближения Борна (Рисунок 2.3) к двумерному дипольному рассеянию фермионов являются конфигурации направлений дипольных моментов, при которых угол наклона диполей меньше, чем критический угол $\alpha < \alpha_c$, и потенциал диполь-дипольного взаимодействия не поддерживает связанных состояний.

К рассеянию идентичных бозонов или различных частиц приближение Борна неприменимо ввиду отсутствия барьера для s -волны и расходимости ее вклада в борновское приближение в области действия короткодействующего потенциала. Расходимость может быть устранена использованием для приближения Борна потенциала нулевого радиуса с множителем эффективной «силы взаимодействия» [51], но ввиду необходимости непосредственного численного решения двумерного уравнения Шрёдингера для вычисления эффективной «силы взаимодействия» это имеет смысл только для дальнейших многочастичных расчетов. Поэтому борновское приближение мы применяем только к рассеянию идентичных фермионов.

Значения $\sigma_F(E)$, полученные в приближении Борна, обозначенные зеленым пунктиром на рисунках ??, 3.8, в низкоэнергетическом пределе находятся в хорошем согласии с нерезонансными зависимостями $\sigma_F(E)$ для рассеяния фермионов. Отметим, что для резонансных кривых такого согласия не наблюдается.

2.5. Эйкональное приближение

В пределе высоких энергий $E \gg E_D$ для оценки сечения рассеяния применимо полуклассическое эйкональное приближение [23, 103]:

$$\sigma_{Eik}(E)/D = \frac{4\sqrt{\pi}}{(2E/E_D)^{1/4}}. \quad (2.27)$$

Для $E > 50E_D$ зависимости сечения рассеяния в плоскости от энергии бозонов $\sigma_B(E)$ и энергии фермионов $\sigma_F(E)$ осциллируют вокруг зависимости сечения рассеяния в плоскости, полученной в приближении эйконала $\sigma_{Eik}(E)$, обозначенной серой пунктирной линией на рисунках 3.7, 3.8. Значения сечения дипольного рассеяния, полученные в эйкональном приближении находятся в хорошем согласии с представленными на рисунках 3.5- 3.8 полученными численно значениями сечения дипольного рассеяния σ_B и σ_F , соответствующими отсутствию резонансов, при $E > 50E_D$. Это объясняется следующим образом: чем больше парциальных волн вовлекается в рассеяния с увеличением энергии столкновения, тем больше сечение рассеяния приближается к полуклассическим оценкам. Однако, полученные численно значения сечения дипольного рассеяния бозонов и фермионов, соответствующие наличию резонансов, сильно отличаются от σ_{Eik} , что свидетельствует о сильном влиянии s - и p -волн на рассеяние диполей даже для высоких энергий $E \gg E_D$.

2.6. Выводы к главе 2

В разделе развито теоретическое описание рассеяния произвольно направленных диполей в двух пространственных измерениях. Рассмотрено короткодействующее взаимодействие в виде бесконечно высокой потенциальной стенки и более реалистичного потенциала Леннарда-Джонса с учетом сильно анизотропной природы дипольного взаимодействия. 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 главы опубликованы в работах [A1, A4, A6, A7, A8, A9].

Глава 3

Влияние короткодействующего взаимодействия

3.1. Введение

В последние годы планарные системы с анизотропным взаимодействием привлекают повышенный интерес [7, 9, 10]. Одной из таких систем является газ полярных двухатомных молекул в квазидвумерной геометрии одномерных оптических ловушек. Дипольный момент молекул является либо постоянным, либо индуцируемым внешним магнитным или электрическим полем, позволяющим изменять направление и величину дипольного момента (вплоть до 10 Д), а также поляризовать молекулы. Диполь-дипольные взаимодействия являются дальнодействующими и сильно анизотропными, что делает возможным создание экзотических сильно-коррелированных квантовых систем с дипольными газами [3, 4]. В частности, привлекают внимание анизотропная сверхтекучесть [23], двумерные дипольные фермионы [93] и дипольные комплексы нескольких частиц [94].

В квази-двумерной геометрии, в отличие от трехмерной геометрии, нестабильность дипольных газов из-за притяжения диполей «голова-к-хвосту» естественным образом устраняется. Одномерные ловушки являются перспективным кандидатом для стабилизации, удержания и контролирования свойств дипольных газов, поскольку в случае поляризации молекул вдоль оси перпендикулярной плоскости их движения дипольное взаимодействие становится полностью изотропным и отталкивательным, а наклон оси поляризации позволяет контролировать анизотропию взаимодействия. Столкновения молекул в одномерных оптических ловушках, где движение вдоль третьей координаты заморожено, моделируются двумерной динамикой молекул; взаимодействие (отталкивание) на малых расстояниях — бесконечно высоким потенциальным барьером шириной ρ_{SR} (радиус короткодействующего взаимодействия) [23, 28, 29, 47, 52], а на достаточном удалении друг

от друга — диполь-дипольным взаимодействием [92].

Исследования взаимодействий дипольных двухатомных молекул актуальны также благодаря возможному использованию их в качестве кубитов для схем квантового компьютера [24, 26].

Кроме систем полярных молекул или атомов в оптических ловушках, далекодействующие дипольные взаимодействия возникают в квазидвумерном газе дипольных экситонов в полупроводниковых гетероструктурах с пространственно разделенными электрон-дырочными слоями [88, 90, 104].

Проблема создания долгоживущих дипольных газов с контролируемыми свойствами до сих пор не решена. Исследование причин малого времени их жизни является одной из целей данного исследования.

В недавних экспериментах по созданию ультрахолодного газа дипольных молекул $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$ [9, 41] наблюдались быстрые потери молекул из области удержания ловушки (время жизни 200 msec [41]), указывающие на наличие других механизмов потерь. В другом эксперименте [42] с газом атомов ^{52}Cr в двумерной геометрии оптических ловушек времена жизни достигали всего 10 мс. Одной из возможных причин является возникновение резонансов, индуцируемых короткодействующим взаимодействием, что требует исследование его влияния на сечение рассеяния [9]. С экспериментальной точки зрения контроль короткодействующей части взаимодействия возможен с помощью внешних полей и резонансов Фешбаха [42].

Исследование двухчастичных процессов рассеяния является необходимым шагом для анализа многочастичных дипольных систем в оптических ловушках и актуально в вопросе определения условий стабилизации систем с притягивающим диполь-дипольным взаимодействием. *Целью раздела* является изучение влияния короткодействующего взаимодействия и индуцируемых им резонансов на рассеяние диполей в плоскости при различных взаимных ориентациях их дипольных моментов, моделирующее взаимодействие полярных двухатомных молекул в одномерных оптических ловушках. В работах [23, 47] изучались зависимости сече-

ния рассеяния от взаимной ориентации двух диполей при строго фиксированном выбранном значении радиуса короткодействующего потенциала. В работе М. Кавагнеро [29], исследуются сечения рассеяния диполей при различных значениях радиуса короткодействующего взаимодействия, однако работа [29] выполнена для трехмерного пространства. Для двумерного пространства зависимости сечения диполь-дипольного рассеяния от радиуса короткодействующего взаимодействия при различных ориентациях дипольных моментов не исследовались, и данная работа восполняет этот пробел.

3.2. Рассеяние идентичных бозонных и фермионных диполей

Для случая диполей, поляризованных вдоль оси перпендикулярной плоскости движения частиц, исследуемого в работах [28, 44, 105], потенциал взаимодействия диполей является изотропным и полностью отталкивающим ρ^{-3} , что в пределе $\rho_{SR}/D \ll 1$ приводит к режиму “универсального дипольного рассеяния” [28], когда сечение рассеяния не зависит от короткодействующего взаимодействия.

Независимость сечения рассеяния от короткодействующего потенциала сохраняется, когда отсутствуют области, где потенциал является притягивающим, т.е. при угле наклона одного из диполей меньше критического $\alpha_c(\beta, \gamma)$ (2.22).

При увеличении угла наклона диполей относительно нормали к плоскости движения появляются области притягивающего потенциала, что приводит к сильной зависимости сечения рассеяния от радиуса ρ_{SR} потенциала короткодействующего взаимодействия.

Нами численно рассчитаны полные сечения рассеяния $\sigma(\rho_{SR})$ как функции радиуса короткодействующего взаимодействия ρ_{SR} при энергии столкновения $E = 5 \times 10^{-4} E_D$. Такое значение энергии выбрано для расчетов, поскольку максимальные сечения столкновения диполей получаются при малых энергиях столкновений, и оно достижимо в экспериментах. Полученные результаты для рассеяния идентичных бозонов и идентичных фермионов проиллюстрированы на

рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 соответственно.

На рисунках 3.1, 3.2 представлена зависимость полного сечения дипольного рассеяния *идентичных бозонов* от радиуса короткодействующего потенциала ρ_{SR} при столкновениях двух *сонаправленных* $\beta = 0^\circ$ (рисунок 3.1) и *разнонаправленных* $\beta = 180^\circ$ (рисунок 3.2) диполей (при $\alpha = \gamma$), наклоненных под углом $\alpha = 45^\circ$ (a), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости $\alpha = 90^\circ$ (b). Результаты для потенциала в виде потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, для потенциала в виде потенциала Леннарда-Джонса — синей сплошной линией.

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 рисунке 3.1(a). С увеличением углов наклона от $\alpha = 45^\circ$ до 90° количество резонансов в зависимости полного сечения рассеяния от ρ_{SR} увеличивается в 4 раза. Вычисленная зависимость $\sigma_B(\rho_{SR})$ для двух диполей, ориентированных в плоскости рассеяния XY ($\alpha = 90^\circ$), представлена на рисунке 3.1(b). Из анализа рисунка 3.1, 3.2 следует, что при уменьшении ρ_{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 рисунке 3.2(a). Так, при повороте вектора дипольного момента \mathbf{d}_2 относительно оси Z при $\beta \rightarrow 180^\circ$ сужается область, где потенциал является притягивающим, и количество резонансов уменьшается до их исчезновения при $\beta \rightarrow 180^\circ$ в рассчитанной зависимости полного сечения рассеяния от ρ_{SR} , представленной на рисунке 3.2(a) при $\alpha = 45^\circ$ ($\alpha = \gamma$). Резонансы присутствуют и для противоположно направленных диполей ($\beta = 180^\circ$), лежащих в плоскости рассеяния при $\alpha \rightarrow 90^\circ$ ($\alpha = \gamma, \alpha > \alpha_c$), приведенном на рисунке 3.2(b). Увеличение угла наклона α, γ диполей и возникновение областей с

притягивающим дипольным потенциалом приводит к сильной зависимости сечения рассеяния диполей от радиуса короткодействующего взаимодействия ρ_{SR} .

Случай рассеяния различных частиц в низкоэнергетическом пределе исследован отдельно и полученные данные почти полностью повторяют зависимость сечения при рассеянии идентичных бозонов из-за вклада s -волны, растущего с уменьшением энергии, но в абсолютных значениях отличающихся множителем 4.

Как показали наши расчеты, при малых энергиях рассеяние фермионов существенно отличается от рассеяния бозонов. Согласно закону Вигнера [106] ожидается наблюдается подавление рассеяния идентичных фермионов по сравнению с рассеянием бозонов. Вычисленная зависимость полного сечения дипольного рассеяния *идентичных фермионов* от ρ_{SR} представлена на рисунках 3.3, 3.4 для равных углов $\alpha = \gamma$ диполей, наклоненных под углом 45° в случае сонаправленных $\beta = 0^\circ$ (рисунок 3.3 (a)) и разнонаправленных $\beta = 180^\circ$ (рисунок 3.4 (i)) конфигураций, а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости рассеяния $\alpha = 90^\circ$ для параллельных $\beta = 0^\circ$ (рисунок 3.3 (b)) и антипараллельных $\beta = 180^\circ$ (рисунок 3.4 (b)) дипольных моментов. Сравнительный анализ рисунков 3.1, 3.2 и рисунков 3.3, 3.4 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 рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 синей сплошной линией. Потенциал Леннарда-Джонса моделирует короткодействующее отталкивание лучше и точнее, чем потенциальная стенка, благодаря корреляции между фазами различных парциальных волн на малых расстояниях, которые смещают узкие резонансы в высших парциальных волнах, как видно на рисунках 3.1, 3.2. Однако структура резонансов качественно остается такой же, как при использовании потенциальной стенки, поскольку они обусловлены доминированием s -волны (p -волны) в рассеянии бозонов (фермионов).

Анализ результатов проведенных расчетов подтверждает сильную зависимость полного сечения (2.14) от радиуса сечения короткодействующего взаимодействия ρ_{SR} для пороговых энергий диполь-дипольных столкновений. Когда ось поляризации направлена вдоль оси Z , диполь-дипольное взаимодействие является изотропным и отталкивающим, резонансы не возникают, поскольку отталкивающее дипольное взаимодействие предотвращает приближение частиц на малые расстояния.

Резкое увеличение полного сечения рассеяния возникает из-за резонанса s -волны при появлении нового связанного состояния, возникающего при изменении внешних параметров системы как результат взаимодействия изотропного короткодействующего (2.6) и анизотропного дальнодействующего (2.4) потенциалов.

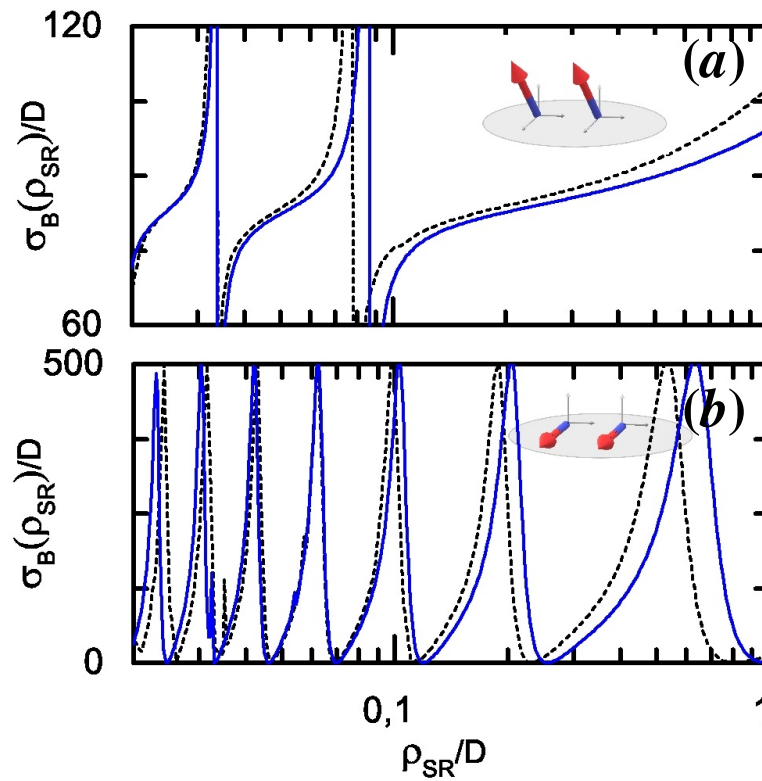


Рисунок 3.1. Зависимость полного сечения дипольного низкоэнергетического рассеяния (2.14) *идентичных бозонов* σ_B от радиуса короткодействующего потенциала ρ_{SR} при столкновениях двух **сонаправленных** $\beta = 0^\circ$ диполей (при $\alpha = \gamma$), наклоненных под углом $\alpha = 45^\circ$ (a), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости $\alpha = 90^\circ$ (b). Результаты, полученные при использовании потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, потенциала Леннарда-Джонса — синей сплошной линией.

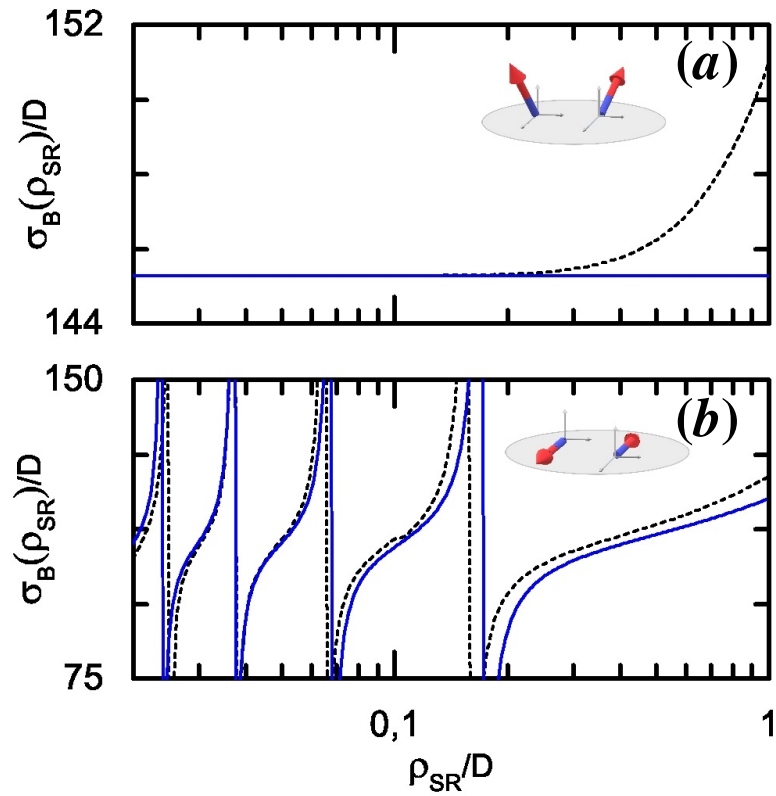


Рисунок 3.2. Зависимость полного сечения дипольного низкоэнергетического рассеяния (2.14) *идентичных бозонов* σ_B от радиуса короткодействующего потенциала ρ_{SR} при столкновениях двух **разнонаправленных** $\beta = 180^\circ$ диполей (при $\alpha = \gamma$), наклоненных под углом $\alpha = 45^\circ$ (a), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости $\alpha = 90^\circ$ (b). Результаты, полученные при использовании потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, потенциала Леннарда-Джонса — синей сплошной линией.

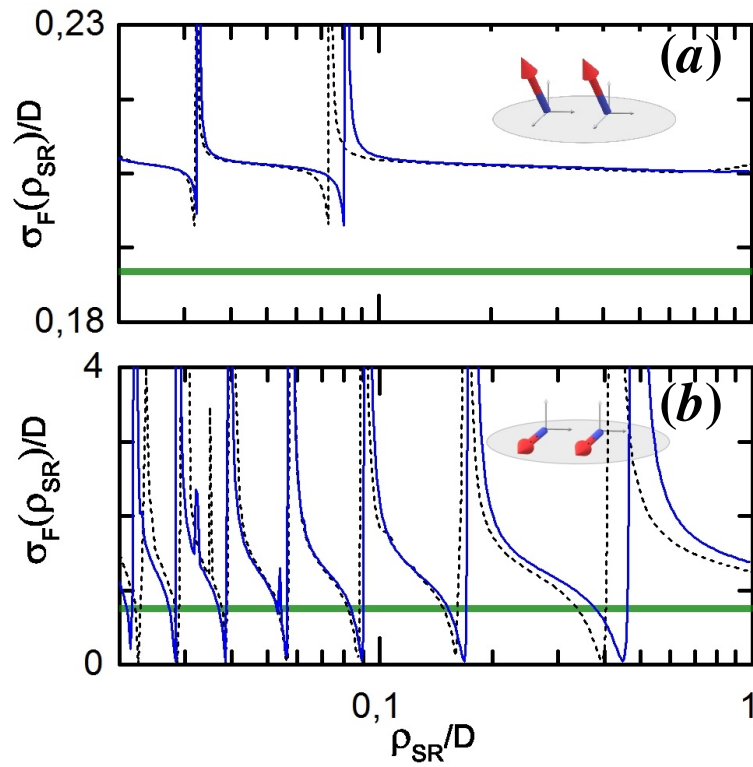


Рисунок 3.3. Зависимость полного сечения дипольного рассеяния (2.14) *идентичных фермионов* σ_F от радиуса короткодействующего потенциала ρ_{SR} при столкновениях двух **сонаправленных** $\beta = 0^\circ$ диполей (при $\alpha = \gamma$), наклоненных под углом $\alpha = \gamma = 45^\circ$ (a), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости $\alpha = \gamma = 90^\circ$ (b). Результаты для потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, для потенциала Леннарда-Джонса — синей сплошной линией. Результаты, полученные с использованием приближения Борна, обозначены сплошной зеленой линией.

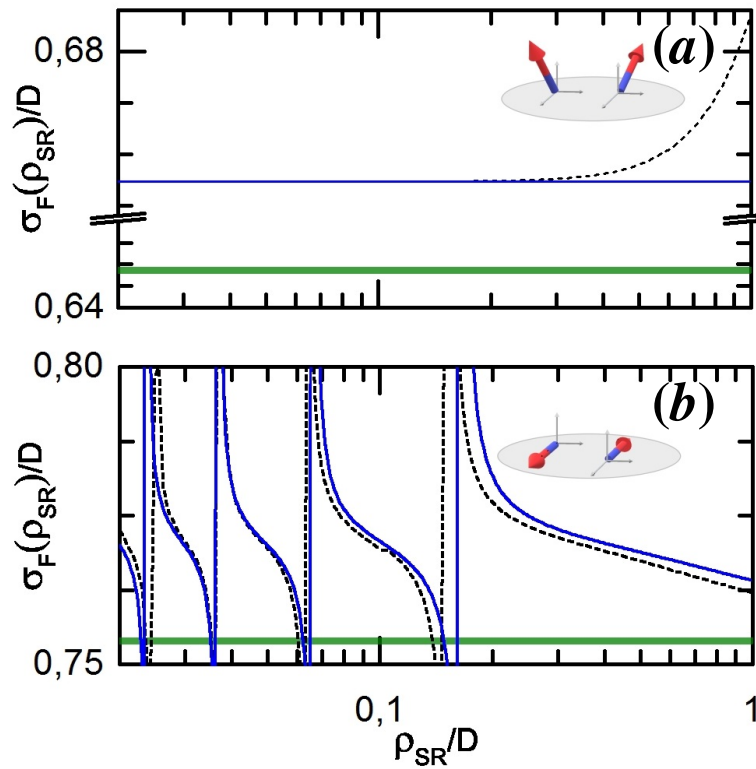


Рисунок 3.4. Зависимость полного сечения дипольного рассеяния (2.14) *идентичных фермионов* σ_F от радиуса короткодействующего потенциала ρ_{SR} при столкновениях двух **разнонаправленных** $\beta = 180^\circ$ диполей (при $\alpha = \gamma$), наклоненных под углом $\alpha = \gamma = 45^\circ$ (a), а также для предельного случая двух диполей, лежащих в плоскости $\alpha = \gamma = 90^\circ$ (b). Результаты для потенциальной стенки обозначены черной пунктирной линией, для потенциала Леннарда-Джонса — синей сплошной линией. Результаты, полученные с использованием приближения Борна, обозначены сплошной зеленой линией.

3.3. Энергетические зависимости сечения рассеяния бозонных и фермионных диполей

Ранее энергетические зависимости сечения дипольного рассеяния в плоскости исследовались для изотропного отталкивательного дипольного потенциала [28]. Здесь мы представляем результаты расчетов энергетических зависимостей для анизотропного потенциала дипольного взаимодействия V_{dd} . Нами рассчитаны энергетические зависимости полного сечения рассеяния, проиллюстрированные на рисунках 3.5 - 3.8, для идентичных бозонов $\sigma_B(E)$ ($\alpha = 45^\circ$ (Рисунок 3.5), 90° (Рисунок 3.6)) и для идентичных фермионов $\sigma_F(E)$ ($\alpha = 45^\circ$ (Рисунок 3.7), 90° (Рисунок 3.8)) для сонаправленных конфигураций диполей $\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$. Для этих взаимных ориентаций диполей угол наклона превышает критический $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c = 35.3^\circ$). Кривые соответствующие резонансным точкам на рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 обозначены красной сплошной линией, нерезонансные кривые — синей пунктирной линией; приближение Борна — зеленой точечной линией, приближение эйконала — серой пунктирной линией.

Анализ зависимостей $\sigma_B(E)$, $\sigma_F(E)$ показывает, что в низкоэнергетическом пределе сечения рассеяния для резонансных кривых как минимум на порядок больше значений сечения для нерезонансных кривых. При рассеянии идентичных бозонов в пределе $E \rightarrow 0$ сечение растет как в случае наличия, так и в случае отсутствия резонансов по ρ_{SR} из-за расходимости вклада s -волны в двумерном пространстве [50]. Необходимо отметить, что вблизи резонансов значения сечений на порядок больше. При рассеянии идентичных фермионов резонансные кривые сечения $\sigma_F(E)$ в низкоэнергетическом пределе демонстрируют колоколообразную форму, в отличие от монотонно убывающих нерезонансных кривых. Эти пики смещаются в сторону меньших энергий с ростом значения их максимумов при увеличении ρ_{SR} . Резонансы для фермионов являются более узкими, в сравнении с бозонами из-за наличия потенциальных барьеров для высших парциальных волн, подавляющих сечение в пределе низких энергий.

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 [29] или рисунок 1 в [96]).

Мы также показали, что взаимная ориентация диполей сильно влияет на вид энергетических зависимостей. Таким образом, при увеличении угла α от 45° до 90° (см. рисунки 3.5- 3.8) резонансная и нерезонансная зависимости $\sigma_B(E)$, $\sigma_F(E)$ начинают осциллировать, в отличие от трехмерного дипольного рассеяния [29, 96], где осцилляций нет.

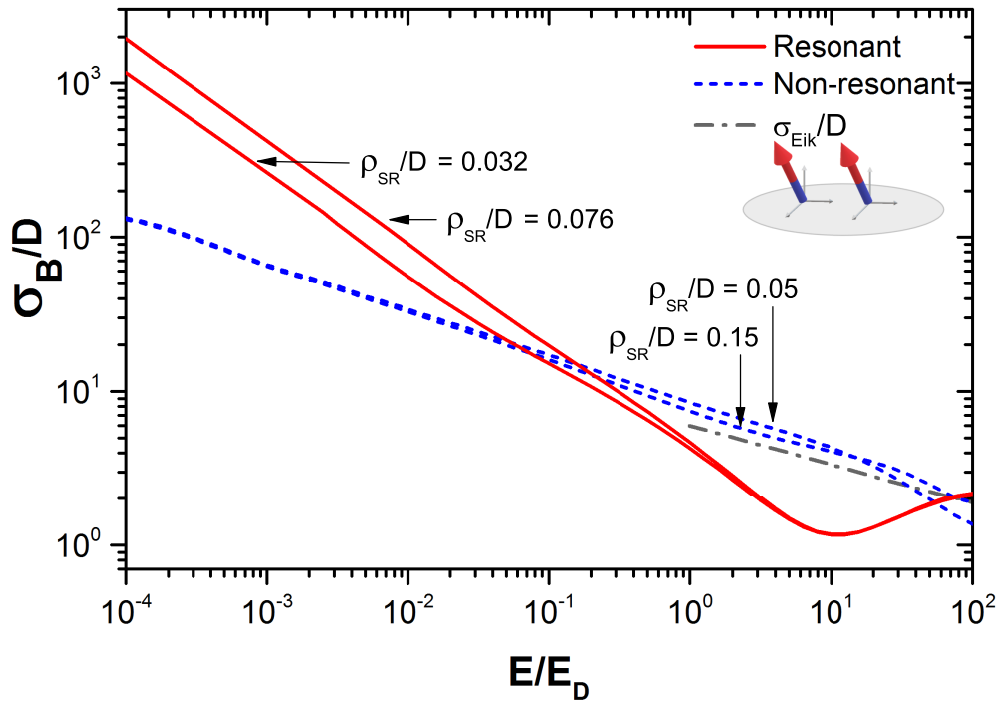


Рисунок 3.5. Энергетические зависимости полного сечения рассеяния для случая *идентичных бозонов* $\sigma_B(E)$ $\alpha = 45^\circ$ при сонаправленной ориентации диполей $\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$. Угол наклона превышает критический угол $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c = 35.3^\circ$) для таких взаимных ориентаций диполей. Кривые, соответствующие резонансным точкам на рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4, показаны красной сплошной линией, нерезонансные кривые — синей пунктирной линией; приближение эйконала — серой пунктирной линией.

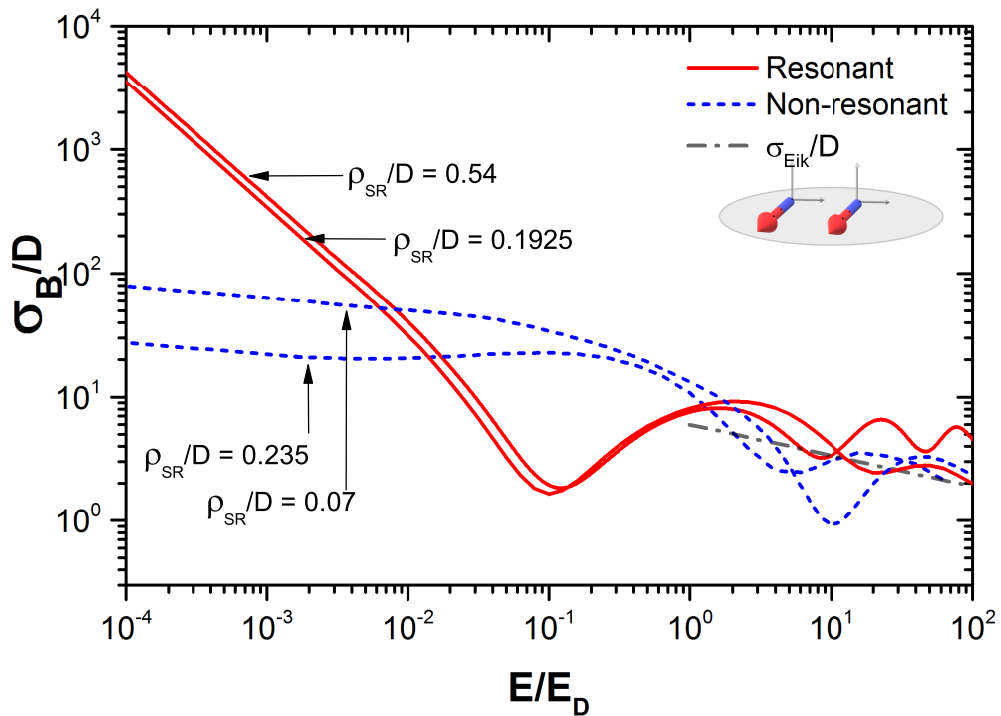


Рисунок 3.6. Энергетические зависимости полного сечения рассеяния для случая идентичных бозонов $\sigma_B(E)$ ($\alpha = 90^\circ$) при сонаправленной ориентации диполей $\beta = 0^\circ; \alpha = \gamma$. Угол наклона превышает критический угол $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c = 35.3^\circ$) для таких взаимных ориентаций диполей. Кривые, соответствующие резонансным точкам на рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 показаны красной сплошной линией, нерезонансные кривые — синей пунктирной линией; приближение эйконала — серой пунктирной линией.

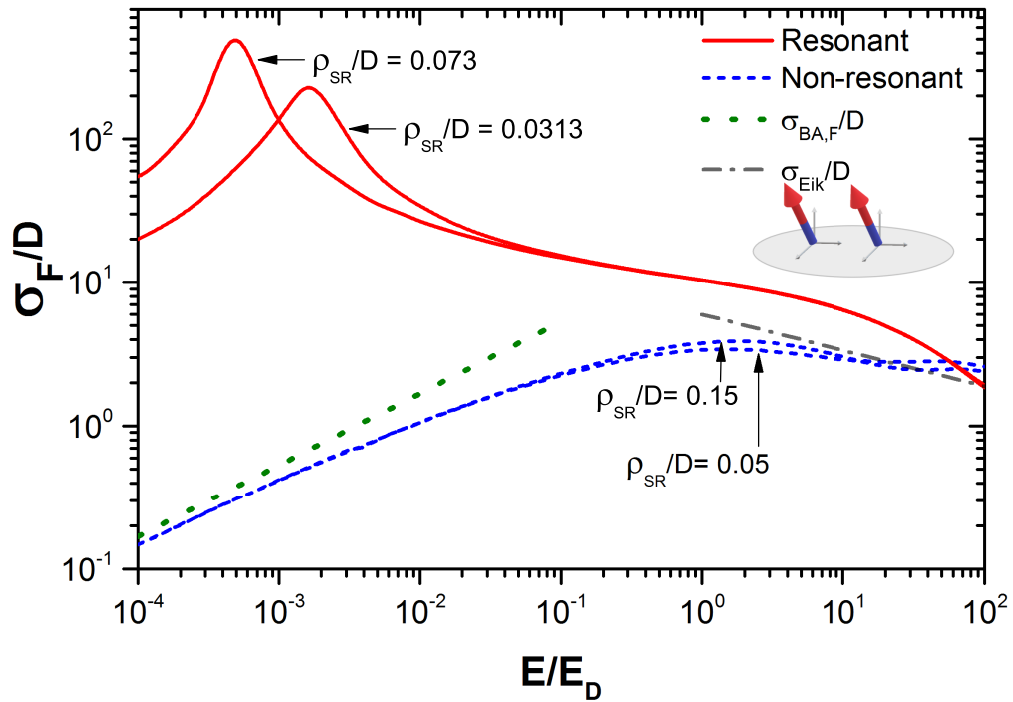


Рисунок 3.7. Энергетические зависимости полного сечения рассеяния для случая идентичных фермионов $\sigma_F(E)$ ($\alpha = 45^\circ$) при сонаправленной ориентации диполей $\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$. Угол наклона превышает критический угол $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c = 35.3^\circ$) для таких взаимных ориентаций диполей. Кривые, соответствующие резонансным точкам на рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 показаны красной сплошной линией, нерезонансные кривые — синей пунктирной линией; приближение Борна — зеленой точечной линией, приближение эйконала — серой пунктирной линией.

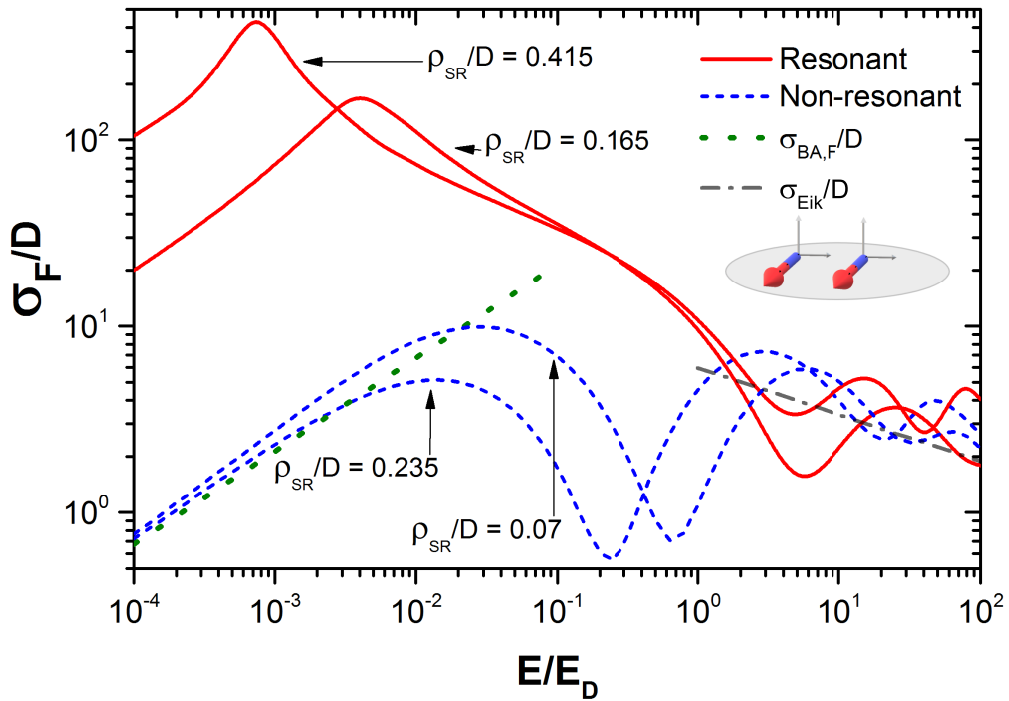


Рисунок 3.8. Энергетические зависимости полного сечения рассеяния для случая идентичных фермионов $\sigma_F(E)$ ($\alpha = 90^\circ$) при сонаправленной ориентации диполей $\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$. Угол наклона превышает критический угол $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c = 35.3^\circ$) для таких взаимных ориентаций диполей. Кривые, соответствующие резонансным точкам на рисунках 3.1, 3.2 и рисунках 3.3, 3.4 показаны красной сплошной линией, нерезонансные кривые — синей пунктирной линией; приближение Борна — зеленой точечной линией, приближение эйконала — серой пунктирной линией.

3.3.1. Влияние короткодействующего взаимодействия на зависимость сечения высокоэнергетического рассеяния произвольно ориентированных диполей в плоскости

В данном подразделе проанализировано влияние короткодействующего взаимодействия на полное сечение рассеяния в плоскости для больших энергий дипольных столкновений ($E = 50E_D$), изучавшихся в работах [23, 47] при фиксированном значении ρ_{SR} . Рассчитанные зависимости полного сечения от угла наклона α диполей (при $\alpha = \gamma$), для различных значений ρ_{SR} и угла вращения β представлены на рисунках 3.9-3.11 для случая дипольного рассеяния бозонов в плоскости и на рисунках 3.12-3.14 для случая дипольного рассеяния фермионов в плоскости. Анализ графиков показывает наличие “пороговых” значений $\rho_{SR}/D = 0.3$, ниже

которых в зависимостях $\sigma_B(\alpha)$, $\sigma_F(\alpha)$ возникают сильные осцилляции с увеличением числа резонансов. С увеличением угла вращения $\beta \rightarrow 180^\circ$ количество и магнитуа осцилляций $\sigma_B(\alpha)$, $\sigma_F(\alpha)$ уменьшается. Заметим, что при угле наклона α меньшем критического угла $\alpha_c(\beta, \gamma = \alpha)$ (2.23) и $\rho_{SR}/D < 0.1$ осцилляции и резонансы в зависимостях $\sigma_B(\alpha)$, $\sigma_F(\alpha)$ полностью отсутствуют. То есть, *короткодействующее взаимодействие не влияет на процессы рассеяния до тех пор пока угол наклона α меньше критического и короткодействующее взаимодействие не доминирует* ($\rho_{SR}/D < 1$). При $\rho_{SR}/D \gg 1$ диполь-дипольное взаимодействие может рассматриваться в качестве возмущения к изотропной отталкивательной части и этот режим предполагается исследовать в будущей работе. При угле наклона α больше критического α_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 α значений критического угла α_c проиллюстрировано на рисунках 3.9-3.11 для случая дипольного рассеяния бозонов в плоскости и на рисунках 3.12-3.14 для случая дипольного рассеяния фермионов в плоскости в диапазоне значений $\rho_{SR}/D \leq 0.1$, когда и дипольное и короткодействующее взаимодействия вносят вклад в рассеяние (на рисунке 3.9 и рисунке 3.12 $\alpha_c = 35.3^\circ$, на рисунке 3.10 и рисунке 3.13 – $\alpha_c = 39.2^\circ$, на рисунке 3.11 и рисунке 3.14 – $\alpha_c = 45^\circ$).

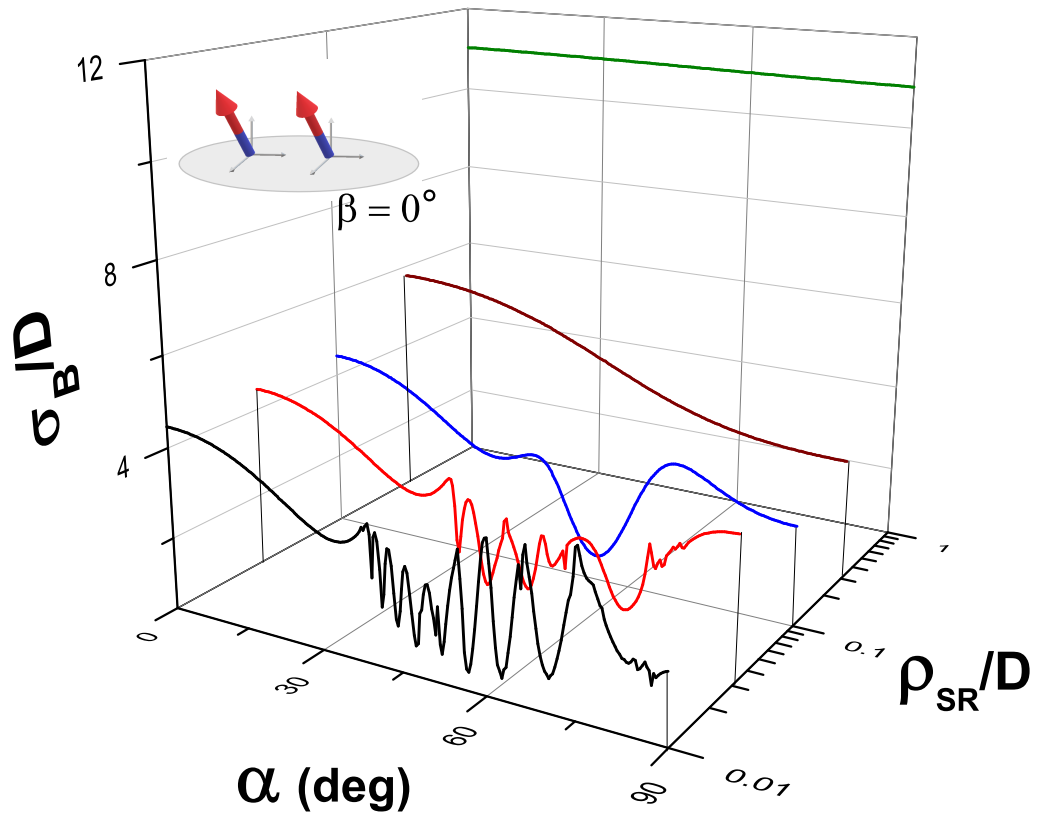


Рисунок 3.9. Зависимость полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **бозонов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 0^\circ$. Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 35.3^\circ$ и $\gamma = \alpha$.

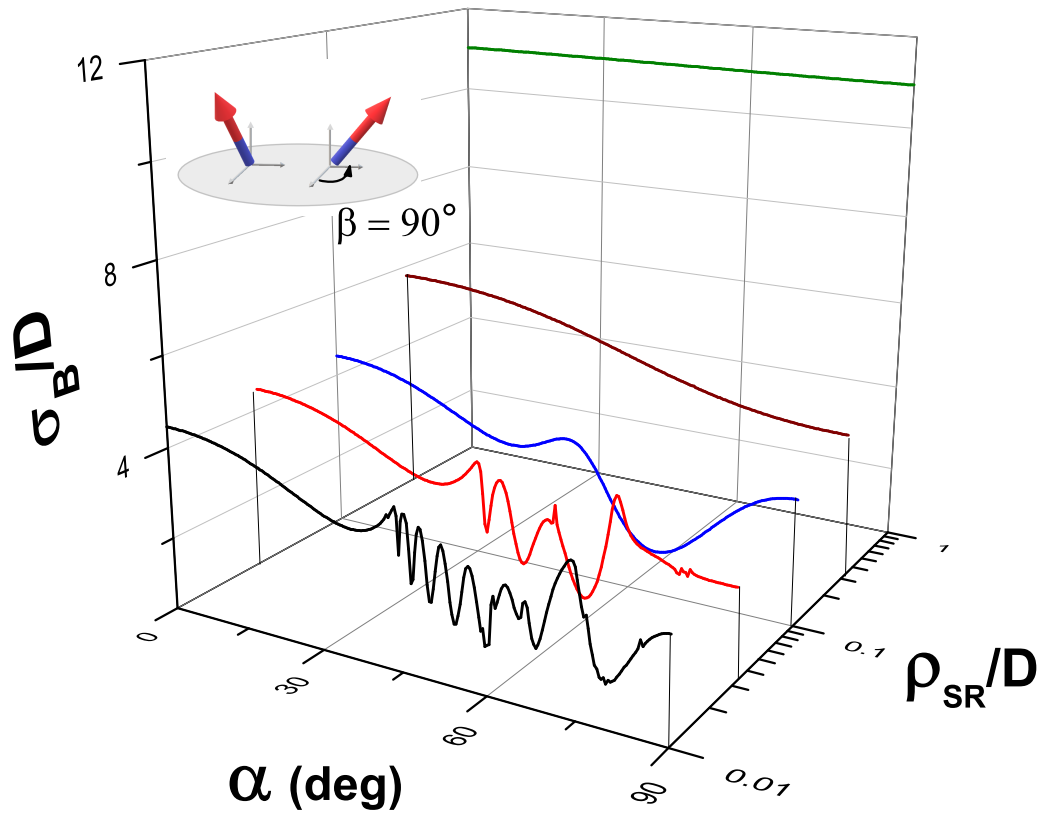


Рисунок 3.10. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **бозонов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 90^\circ$. Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 39.2^\circ$ и $\gamma = \alpha$.

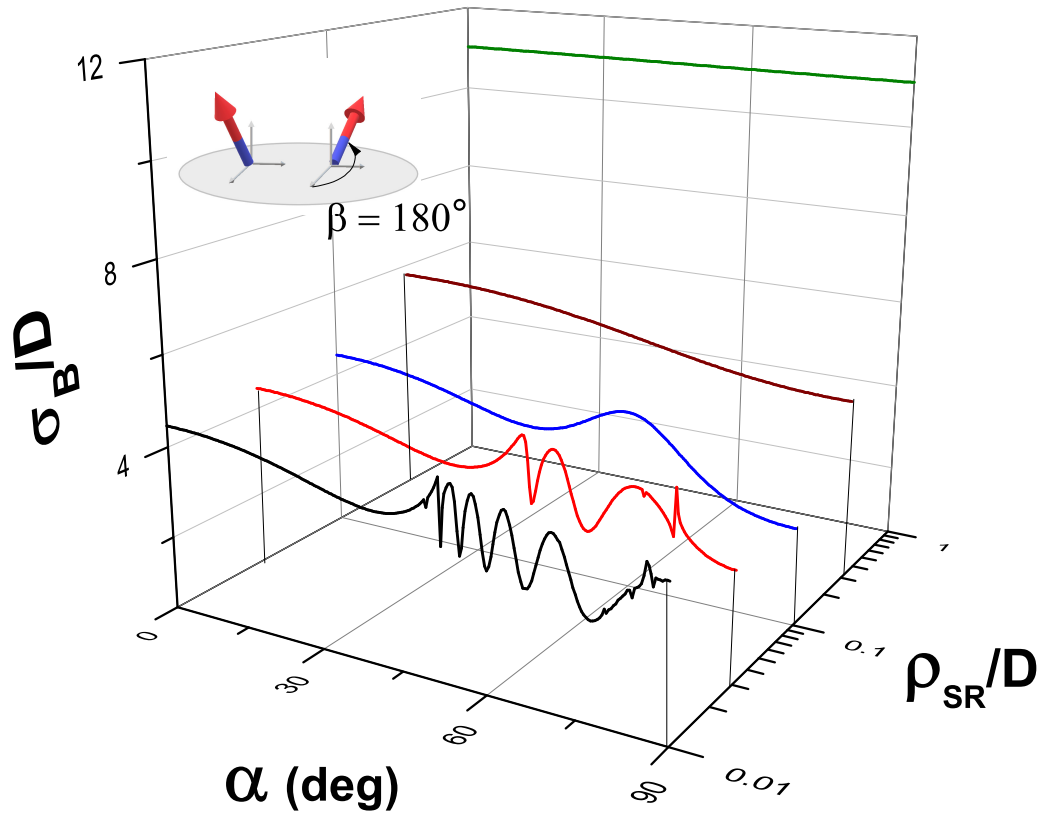


Рисунок 3.11. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **бозонов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 180^\circ$. Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 45^\circ$ для $\beta = 180^\circ$ соответственно и $\gamma = \alpha$.

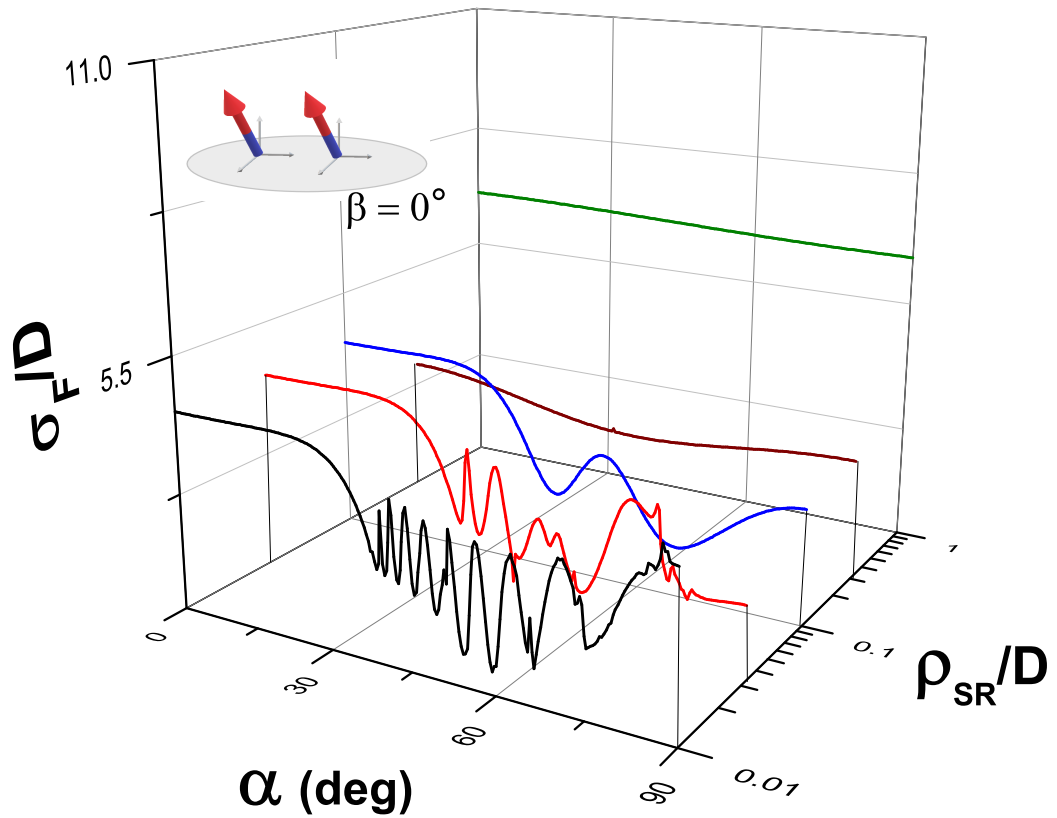


Рисунок 3.12. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **фермионов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 0^\circ$. Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 35.3^\circ$ и $\gamma = \alpha$.

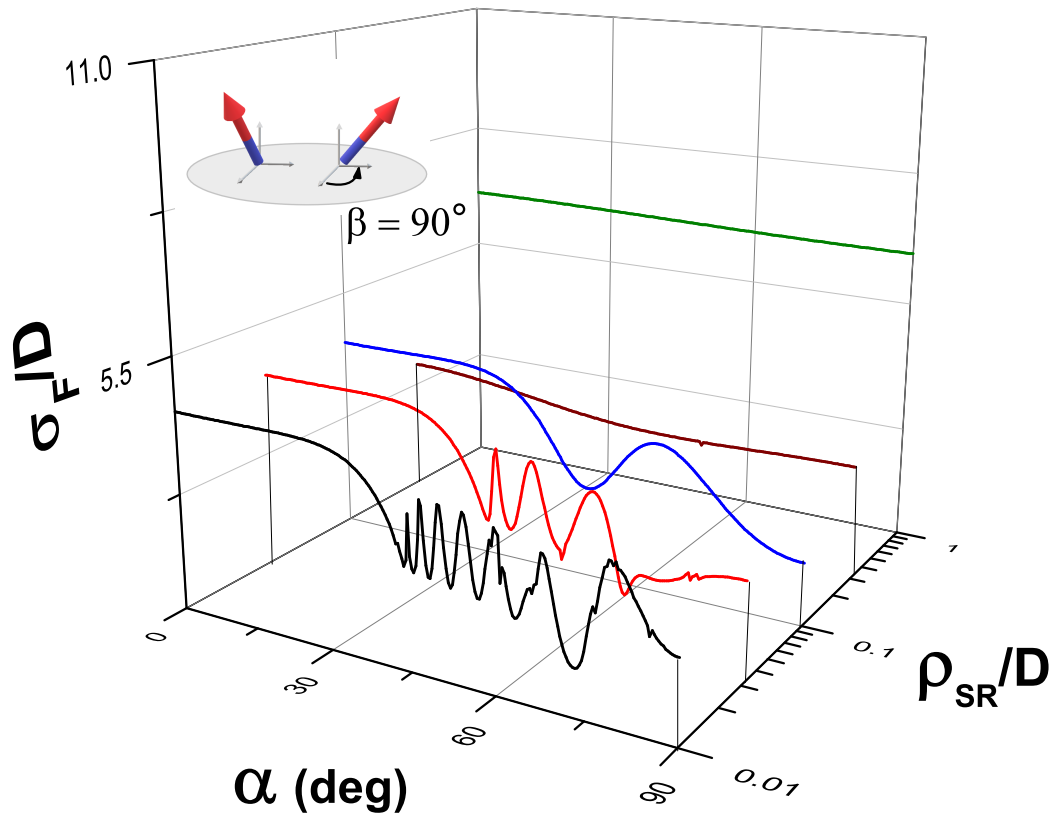


Рисунок 3.13. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **фермионов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 90^\circ$). Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 39.2^\circ$ и $\gamma = \alpha$.

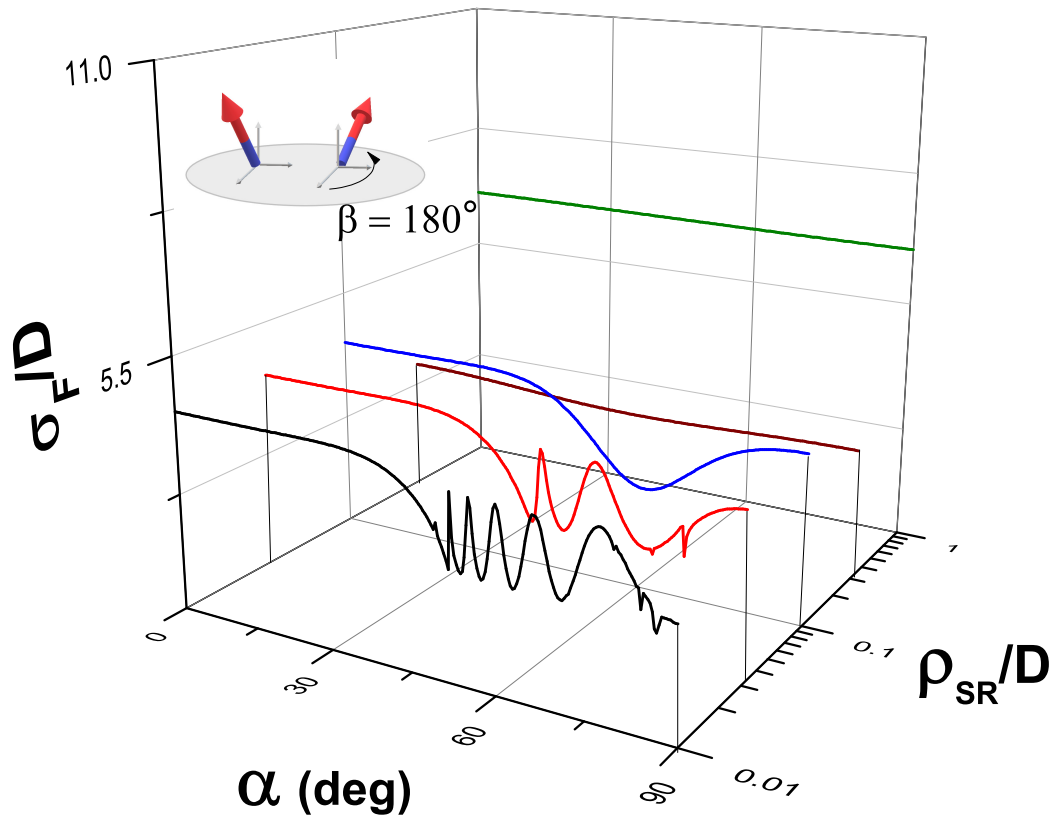


Рисунок 3.14. Зависимости полного сечения рассеяния от угла наклона диполей α (по отношению к нормали к плоскости рассеяния XY) для случая одинаковых углов наклона $\alpha = \gamma$ при различных значениях ρ_{SR} при рассеянии идентичных **фермионов**, где угол поворота плоскости диполя Zd_2 относительно плоскости диполя Zd_1 $\beta = 180^\circ$. Критический угол равен $\alpha_c(\beta, \gamma) = 45^\circ$ и $\gamma = \alpha$.

3.4. Угловые распределения дифференциальных сечений рассеяния

В ходе расчетов определено, что угловые распределения дифференциальных сечений $d\sigma/d\Omega$ дипольного рассеяния сильно зависят от значения радиуса короткодействующего взаимодействия ρ_{SR} . Дифференциальные сечения для дипольного рассеяния бозонов для резонансного случая представлены на рисунке 3.15 для значений $\rho_{SR}/D = 0.076, 0.056$ и для нерезонансного случая представлены на рисунке 3.16 в точках $\rho_{SR}/D = 0.077, 0.23$. На рисунках 3.15-3.16 Q_X^B и Q_Y^B обозначают $d\sigma_B/d\Omega \cos(\phi)$ и $d\sigma_B/d\Omega \sin(\phi)$ соответственно.

Для бозонов угловые распределения дифференциальных сечений рассеяния демонстрируют круговую форму в резонансных точках ρ_{SR} как для $\alpha = 45^\circ$ так и для $\alpha = 90^\circ$, что свидетельствует о доминировании s -волны в возникновении резонансов. При углах наклона диполей, больших критического угла, угловые распределения $d\sigma/d\Omega$ имеют измененную резонансную форму в точках минимума $\sigma(\rho_{SR})$, что продемонстрировано на рисунке 3.16(a) для $\alpha = 45^\circ$. Для углов наклона $\alpha = 90^\circ$ (Рисунки 3.15(b), 3.16(b)) угловые распределения $d\sigma/d\Omega$ сильно анизотропны в точках минимума зависимости $\sigma_B(\rho_{SR})$ полного сечения рассеяния, что свидетельствует о том, что s -волновой вклад подавлен и в рассеянии доминируют высшие парциальные волны. Это позволяет сделать вывод о том, что в отличие от центральных потенциалов, двумерное низкоэнергетическое дипольное рассеяние в отсутствие резонансов сильно анизотропно и на его свойства существенно влияют радиус короткодействующего взаимодействия, а также взаимная ориентация диполей.

Угловые распределения дифференциальных сечений $d\sigma/d\Omega$ дипольного рассеяния фермионов всегда анизотропны. Как показано на рисунке 3.17 для $\rho_{SR}/D = 0.073, 0.415$ соответственно, их форма почти одинакова для $\alpha = 45^\circ$ (a) и 90° (b) в положениях резонансов индуцированных короткодействующим взаимодействием, в то время как в нерезонансных точках ρ_{SR} дифференциальные сечения $d\sigma/d\Omega$

изменяются при увеличении α , что проиллюстрировано на рисунках 3.18(a, b) для $\rho_{SR}/D = 0.25, 0.39$ соответственно. На рисунках 3.17- 3.18 Q_X^B и Q_Y^B обозначают $d\sigma_B/d\Omega \cos(\phi)$ и $d\sigma_B/d\Omega \sin(\phi)$ соответственно.

Угловые распределения диполь-дипольного рассеяния в плоскости существенно отличаются от угловых распределений дифференциальных сечений трехмерного дипольного рассеяния [100]. Дипольные фермионы могут рассеиваться сильнее, чем дипольные бозоны в трехмерном случае [100], тогда как в двумерном случае сечение дипольного рассеяния фермионов на несколько порядков меньше сечения рассеяния бозонов при низких энергиях.

Зависимости дифференциального сечения двумерного рассеяния бозонов и фермионов также различаются от угла падения ϕ_q . В отличие от трехмерного дипольного рассеяния [100], рассеяние бозонов в плоскости не зависит от угла падения ϕ_q в резонансных точках, хотя оно может сильно зависеть от угла падения в нерезонансных точках. Рассеяние фермионов в плоскости всегда зависит от угла падения ϕ_q .

3.5. Выводы к главе 3

Раздел посвящен численному исследованию влияния короткодействующего взаимодействия на квантовое рассеяние двух произвольно направленных диполей в двумерном пространстве. Исследованы столкновения двух ультрахолодных полярных молекул в двух пространственных измерениях. Используемый алгоритм позволяет количественно анализировать рассеяние двух произвольно направленных диполей с учетом сильно анизотропной природы дипольного взаимодействия. Для малых энергий столкновений обнаружена сильная зависимость полного сечения рассеяния от короткодействующего взаимодействия. Определены 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. 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 главы опубликованы в работах [A1, A3, A4, A6, A7].

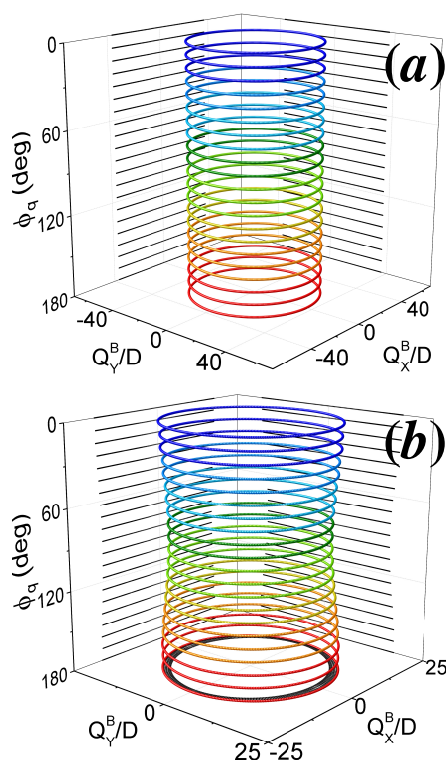


Рисунок 3.15. Зависимости дифференциального сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от угла рассеяния ϕ для различных значений угла падения ϕ_q , изменяющегося вдоль оси Z , для **резонансного** дипольного рассеяния **бозонов**. Здесь $Q_X^B = d\sigma_B/d\Omega \cos(\phi)$ и $Q_Y^B = d\sigma_B/d\Omega \sin(\phi)$. Данные на графиках для наглядности представлены в виде слоев. Кривые представлены для углов наклона $\alpha = 45^\circ$ (a) и 90° (b) для двух сонаправленных ($\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$) диполей.

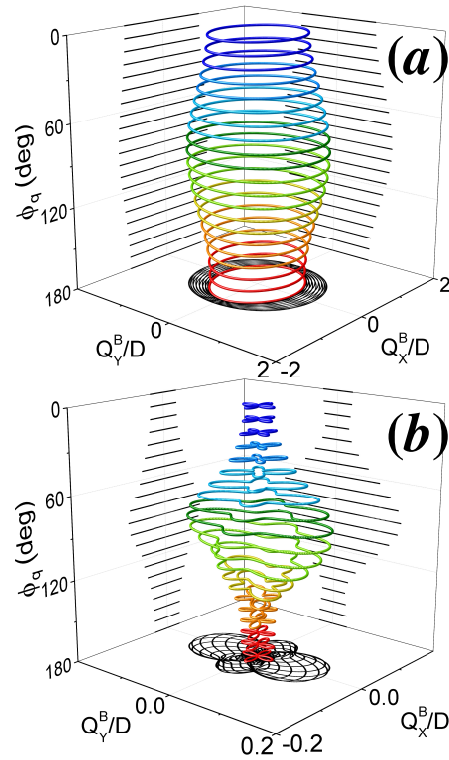


Рисунок 3.16. Зависимости дифференциального сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от угла рассеяния ϕ для различных значений угла падения ϕ_q , изменяющегося вдоль оси Z , для **нерезонансного** дипольного рассеяния **бозонов**. Здесь $Q_X^B = d\sigma_B/d\Omega \cos(\phi)$ и $Q_Y^B = d\sigma_B/d\Omega \sin(\phi)$. Данные на графиках для наглядности представлены в виде слоев. Кривые представлены для углов наклона $\alpha = 45^\circ$ (a) и 90° (b) для двух сонаправленных ($\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$) диполей.

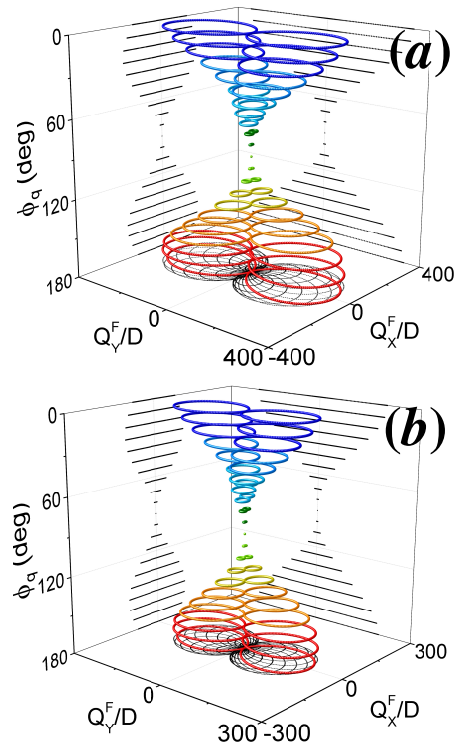


Рисунок 3.17. Зависимости дифференциального сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от угла рассеяния ϕ для различных значений угла падения ϕ_q , изменяющегося вдоль оси Z , для **резонансного** дипольного рассеяния **фермионов**. Здесь $Q_X^F = d\sigma_F/d\Omega \cos(\phi)$ и $Q_Y^F = d\sigma_F/d\Omega \sin(\phi)$. Данные на графиках для наглядности представлены в виде слоев. Кривые представлены для углов наклона $\alpha = 45^\circ$ (a) и 90° (b) для двух сонаправленных ($\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$) диполей.

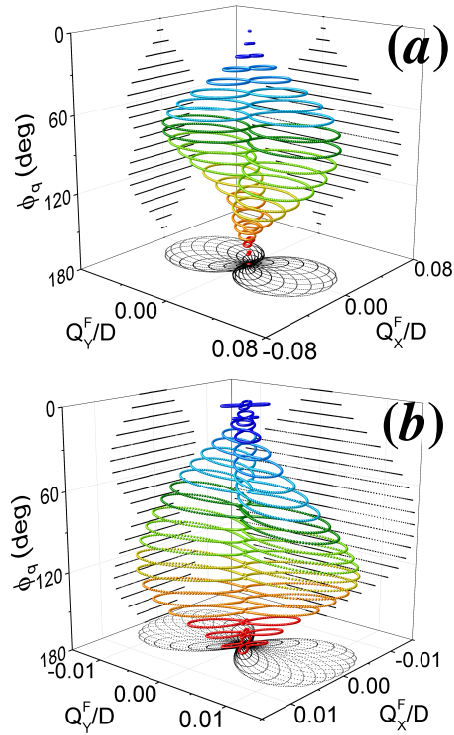


Рисунок 3.18. Зависимости дифференциального сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от угла рассеяния ϕ для различных значений угла падения ϕ_q , изменяющегося вдоль оси Z , для **нерезонансного** дипольного рассеяния **фермионов**. Здесь $Q_X^F = d\sigma_F/d\Omega \cos(\phi)$ и $Q_Y^F = d\sigma_F/d\Omega \sin(\phi)$. Данные на графиках для наглядности представлены в виде слоев. Кривые представлены для углов наклона $\alpha = 45^\circ$ (a) и 90° (b) для двух сонаправленных ($\beta = 0^\circ$; $\alpha = \gamma$) диполей.

Заключение

Приведем основные результаты диссертации. В работе 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 [30, 31, 69], для которых отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные расчёты с помощью предложенного алгоритма с известной оценкой точности восполняют этот пробел. В диссертации численно исследовано влияние короткодействующего взаимодействия на резонансы при двумерном анизотропном дипольном рассеянии. Потенциал короткодействующего взаимодействия диполей аппроксимирован двумя способами: потенциальной стенкой шириной ρ_{SR} и более реалистическим потенциалом Леннарда-Джонса, а на достаточном удалении друг от друга — диполь-дипольным взаимодействием. Сравнение данных сечения дипольного рассеяния, полученных с использованием двух разных потенциалов для полярных молекул: потенциальной стенки и более реалистическим потенциалом Леннарда-Джонса позволяет сделать вывод о хорошем согласии и о сходстве не только формы структуры резонансов, но и значений величины сечения. Это свидетельствует о хорошей применимости потенциала стенки в сравнении с более точным и более реалистическим потенциалом Леннарда-Джонса. Результат точных численных расчетов полного сечения рассеяния хорошо согласуется с оценочными результатами, полученными в приближении Борна и эйконала. В работе 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. 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. 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. В отличие от 3D дипольного рассеяния, где сечения рассеяния фермионов гораздо больше, чем для бозонов [100], определено, что в случае рассеяния в плоскости сечения рассеяния фермионов значительно (на два порядка) меньше, чем для бозонов при низких энергиях столкновений. Сечения дипольного рассеяния в плоскости фермионов при высоких энергиях столкновения ($Dq > 10$) одного порядка с сечениями рассеяния бозонов. Таким образом, как следует из полученных данных, угловые распределения двумерного дипольного рассеяния значительно отличаются от угловых распределений дифференциального сечения рассеяния для трехмерного дипольного рассеяния [100]. Дипольные фермионы сильнее рассеиваются чем дипольные бозоны в трехмерном случае [100], в то время как в планарном случае сечения дипольного рассеяния фермионов на несколько порядков величины меньше, чем сечение рассеяния бозонов при малых энергиях столкновения. Зависимости дифференциального сечения рассеяния от направления падающей волны также различаются. В отличие от 3D дипольного рассеяния [100], рассеяние бозонов в плоскости не зависит от угла падения ϕ_q в резонансных точках, в то время как оно может сильно зависеть от угла падения ϕ_q в нерезонансных точках. Рассеяние фермионов в плоскости всегда

зависит от угла ϕ_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 по теме диссертации

- A1. *Koval E. A., Koval O. A.* Aspects of arbitrarily oriented dipoles scattering in a plane: Short-range interaction influence // *Physical Review A*. — 2020. — Vol. 102, no. 4. — P. 042815-1–042815-11. — (WoS, Scopus).
- A2. *Горбунов М. Е., Доловова О. А.* Системы двухатомных полярных молекул в одномерной геометрии оптических и магнито-оптических ловушек // *Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика*. — 2021. — № 4. — С. 86—95. — (ВАК).
- A3. *Коваль О. А., Коваль Е. А.* Численный анализ энергетических уровней квантовой частицы в поле двумерного диполя // *Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика*. — 2020. — № 3. — С. 23—37. — (ВАК).
- A4. *Koval E. A., Koval O. A.* Energetic dependencies of total cross section of quantum anisotropic scattering in two dimensions // *AIP Conference Proceedings*. — 2019. — Vol. 2163, no. 1. — P. 090009-1–090009-4. — (WoS, Scopus).
- A5. *Koval E. A., Koval O. A.* Short Range Interaction Impact on Two Dimensional Dipolar Scattering // *European Physical Journal Web of Conferences*. — 2018. — Vol. 173. — P. 06008-1–06008-4. — (WoS, Scopus).
- A6. *Koval E. A., Koval O. A.* Binding energies of quantum dipole in plane // *European Physical Journal Web of Conferences*. — 2019. — Vol. 201. — P. 09008-1–09008-5. — (WoS).

- A7. Коваль О. А., Коваль Е. А. Энергетические зависимости полного сечения резонансного и нерезонансного двумерного квантового диполь-дипольного рассеяния // 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.
- A8. Коваль Е. А., Коваль О. А. Алгоритм поиска резонансов двумерной двухчастичной системы с анизотропным взаимодействием // 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.
- A9. Коваль О. А., Коваль Е. А. Двухканальная задача рассеяния для исследования индуцированных конфайнментом резонансов // 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., Rey A. M., Ye J.* Cold molecules: Progress in quantum engineering of chemistry and quantum matter // *Science*. — 2017. — Vol. 357, no. 6355. — P. 1002–1010.
2. Cold polar molecules in two-dimensional traps: Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases / A. Micheli [et al.] // *Physical Review A*. — 2007. — Vol. 76, no. 4. — P. 043604-1–043604-25.
3. *Baranov M. A.* Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases // *Phys. Rep.* — 2008. — Vol. 464. — P. 71–111.

4. *Bloch I., Dalibard J., Zwirger W.* Many-body physics with ultracold gases // *Reviews of modern physics*. — 2008. — Vol. 80, no. 3. — P. 885–964.
5. *Micheli A., Brennen G., Zoller P.* A toolbox for lattice-spin models with polar molecules // *Nature Physics*. — 2006. — Vol. 2, no. 5. — P. 341–347.
6. *Condensed matter theory of dipolar quantum gases / M. A. Baranov [et al.] // Chemical Reviews*. — 2012. — Vol. 112, no. 9. — P. 5012–5061.
7. *The physics of dipolar bosonic quantum gases / T. Lahaye [et al.] // Rep. Prog. Phys.* — 2009. — Vol. 72. — P. 126401-1–126401-46.
8. *Controlling the quantum stereodynamics of ultracold bimolecular reactions / M. De Miranda [et al.] // Nature Physics*. — 2011. — Vol. 7, no. 6. — P. 502–507.
9. *Collisions of ultracold $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$ molecules with controlled chemical reactivities / X. Ye [et al.] // Science advances*. — 2018. — Vol. 4, no. 1. — eaaq0083-1–eaaq0083-6.
10. *Górecki W., Rzażewski K.* Electric dipoles vs. magnetic dipoles-For two molecules in a harmonic trap // *EPL (Europhysics Letters)*. — 2017. — Vol. 118, no. 6. — P. 66002-1–66002-7.
11. *Reaching Fermi degeneracy via universal dipolar scattering / K. Aikawa [et al.] // Physical review letters*. — 2014. — Vol. 112, no. 1. — P. 010404-1–010404-4.
12. *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.
13. *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.
14. *Self-bound droplets of a dilute magnetic quantum liquid / M. Schmitt [et al.] // Nature*. — 2016. — Vol. 539, no. 7628. — P. 259–262.

15. 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.
16. Observation of a dipolar quantum gas with metastable supersolid properties / L. Tanzi [et al.] // *Physical review letters*. — 2019. — Vol. 122, no. 13. — P. 130405-1–130405-6.
17. Quantum chaos in ultracold collisions of gas-phase erbium atoms / A. Frisch [et al.] // *Nature*. — 2014. — Vol. 507, no. 7493. — P. 475–479.
18. Emergence of chaotic scattering in ultracold Er and Dy / T. Maier [et al.] // *Physical Review X*. — 2015. — Vol. 5, no. 4. — P. 041029-1–041029-13.
19. *Yang B., Pérez-Rios J., Robicheaux F.* Classical fractals and quantum chaos in ultracold dipolar collisions // *Physical review letters*. — 2017. — Vol. 118, no. 15. — P. 154101-1–154101-5.
20. 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.
21. 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.
22. Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse / T. Koch [et al.] // *Nature physics*. — 2008. — Vol. 4, no. 3. — P. 218–222.
23. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering with a tilt // *Physical Review A*. — 2011. — Vol. 84, no. 3. — P. 032702.
24. *DeMille D.* Quantum computation with trapped polar molecules // *Physical Review Letters*. — 2002. — Vol. 88, no. 6. — P. 067901-1–067901-4.
25. *Ni K.-K., Rosenband T., Grimes D. D.* Dipolar exchange quantum logic gate with polar molecules // *Chemical science*. — 2018. — Vol. 9, no. 33. — P. 6830–6838.

26. *Ni K.-K., Rosenband T., Grimes D. D.* Dipolar Exchange Quantum Logic Gate with Polar Molecules // arXiv:1805.10930. — 2018. — 4 p.
27. *Hudson E. R., Campbell W. C.* Dipolar quantum logic for freely rotating trapped molecular ions // *Physical Review A*. — 2018. — Vol. 98, no. 4. — P. 040302-1–040302-5.
28. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering // *Physical Review A*. — 2009. — Vol. 80, no. 5. — P. 052702-1–052702-4.
29. *Roudnev V., Cavagnero M.* Resonance phenomena in ultracold dipole–dipole scattering // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2009. — Vol. 42, no. 4. — P. 044017-1–044017-9.
30. 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.
31. *Amore P., Fernández F. M.* Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2012. — Vol. 45, no. 23. — P. 235004-1–235004-6.
32. *Ni K.-K., Rosenband T., Grimes D. D.* Dipolar exchange quantum logic gate with polar molecules // *Chemical science*. — 2018. — Vol. 9, no. 33. — P. 6830–6838.
33. Spin gradient demagnetization cooling of ultracold atoms / P. Medley [et al.] // *Physical review letters*. — 2011. — Vol. 106, no. 19. — P. 195301-1–195301-4.
34. Strongly correlated 2D quantum phases with cold polar molecules: controlling the shape of the interaction potential / H. P. Büchler [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2007. — Vol. 98, no. 6. — P. 060404-1–060404-4.
35. New frontiers for quantum gases of polar molecules / S. A. Moses [et al.] // *Nature Physics*. — 2017. — Vol. 13, no. 1. — P. 13–20.

36. *Giovanazzi S., Görlitz A., Pfau T.* Tuning the dipolar interaction in quantum gases // *Physical review letters*. — 2002. — Vol. 89, no. 13. — P. 130401-1–130401-4.
37. Tuning the dipole-dipole interaction in a quantum gas with a rotating magnetic field / Y. Tang [et al.] // *Physical review letters*. — 2018. — Vol. 120, no. 23. — P. 230401.
38. Interlayer superfluidity in bilayer systems of fermionic polar molecules / A. Pikovski [et al.] // *Physical review letters*. — 2010. — Vol. 105, no. 21. — P. 215302-1–215302-4.
39. Clustered Wigner-crystal phases of cold polar molecules in arrays of one-dimensional tubes / M. Knap [et al.] // *Physical Review B*. — 2012. — Vol. 86, no. 6. — P. 064501-1–064501-5.
40. Observation of dipole-dipole interaction in a degenerate quantum gas / J. Stuhler [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2005. — Vol. 95, no. 15. — P. 150406-1–150406-4.
41. Creation of an Ultracold Gas of Ground-State Dipolar Na 23 Rb 87 Molecules / M. Guo [et al.] // *Physical review letters*. — 2016. — Vol. 116, no. 20. — P. 205303-1–205303-5.
42. Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse / T. Koch [et al.] // *Nature physics*. — 2008. — Vol. 4, no. 3. — P. 218–222.
43. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime / K.-K. Ni [et al.] // *Nature*. — 2010. — Vol. 464, no. 7293. — P. 1324–1328.
44. *Ticknor C., Wilson R. M., Bohn J. L.* Anisotropic superfluidity in a dipolar Bose gas // *Physical review letters*. — 2011. — Vol. 106, no. 6. — P. 065301-1–065301-4.

45. Model independence in two dimensions and polarized cold dipolar molecules / A. Volosniev [et al.] // *Physical review letters*. — 2011. — Vol. 106, no. 25. — P. 250401-1–250401-4.
46. *Rosenkranz M., Bao W.* Scattering and bound states in two-dimensional anisotropic potentials // *Physical Review A*. — 2011. — Vol. 84, no. 5. — P. 050701-1–050701-5.
47. *Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S.* Anisotropic quantum scattering in two dimensions // *Physical Review A*. — 2014. — Vol. 89, no. 5. — P. 052710-1–052710-9.
48. *Gorbunov M. E., Koval O. A., et.al.* Method of spherical phase screens for the modeling of propagation of diverging beams in inhomogeneous media // *ITM Web Conf.* — 2019. — Vol. 30. — P. 15027-1–15027-8.
49. Quantum logic gates in optical lattices / G. K. Brennen [et al.] // *Physical Review Letters*. — 1999. — Vol. 82, no. 5. — P. 1060–1063.
50. *Simon B.* The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two dimensions // *Annals of Physics*. — 1976. — Vol. 97, no. 2. — P. 279–288.
51. Dipolar Bose-Einstein condensates with dipole-dependent scattering length / S. Ronen [et al.] // *Physical Review A*. — 2006. — Vol. 74, no. 3. — P. 033611-1–033611-11.
52. *Kanjilal K., Blume D.* Coupled-channel pseudopotential description of the Feshbach resonance in two dimensions // *Physical Review A*. — 2006. — Vol. 73, no. 6. — P. 060701-1–060701-4.
53. 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.

54. Anisotropic collisions of dipolar Bose–Einstein condensates in the universal regime / N. Q. Burdick [et al.] // *New Journal of Physics*. — 2016. — Vol. 18, no. 11. — P. 113004-1–113004-10.
55. A cryofuge for cold-collision experiments with slow polar molecules / X. Wu [et al.] // *Science*. — 2017. — Vol. 358, no. 6363. — P. 645–648.
56. *Martinyanov K., Makhalov V., Turlapov A.* Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms // *Physical review letters*. — 2010. — Vol. 105, no. 3. — P. 030404-1–030404-4.
57. 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.
58. *Browaeys A., Barredo D., Lahaye T.* Experimental investigations of dipole–dipole interactions between a few Rydberg atoms // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2016. — Vol. 49, no. 15. — P. 152001.
59. Parameters of LC molecules’ movement measured by dielectric spectroscopy in wide temperature range / D. Chausov [et al.] // *Opto-Electronics Review*. — 2018. — Vol. 26, no. 1. — P. 44–49.
60. *Ciftci H., Hall R. L., Saad N.* Asymptotic iteration method for eigenvalue problems // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 2003. — Vol. 36, no. 47. — P. 11807–11816.
61. *Landau L. D., Lifshitz E. M.* Quantum mechanics: Non-Relativistic Theory Vol. 3, 3rd ed. — Oxford : Pergamon Press, 1977. – 691 p.
62. *Babikov V. V.* Metod fazovykh funkcij v kvantovoj mekhanike. 2-e izd., ispr. i dop. — Moskva : Nauka, 1976. – 224 p.
63. *Landauer R.* Bound States in dislocations // *Physical Review*. — 1954. — Vol. 94, no. 5. — P. 1386–1388.
64. *Emtage P.* Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators // *Physical Review*. — 1967. — Vol. 163, no. 3. — P. 865–872.

65. *Nabutovskii V., Shapiro B.* Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation // JETP Lett., — 1977. — Vol. 26, no. 9. — P. 473–475.
66. *Slyusarev V.* Electron Localized States at an Edge Dislocation in a Metal // Fiz. Met. Metalloved. — 1984. — Vol. 58, no. 5. — P. 877–883.
67. *Dubrovskii I.* A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal // Low Temperature Physics. — 1997. — Vol. 23, no. 12. — P. 976–979.
68. *Farvacque J.-L., Francois P.* Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors // Physica Status Solidi (b). — 2001. — Vol. 223, no. 3. — P. 635–648.
69. *Handy C., Vrinceanu D.* Rapidly converging bound state eigenenergies for the two dimensional quantum dipole // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2013. — Vol. 46, no. 11. — P. 115002-1–115002-8.
70. *Desaix M., Anderson D., Lisak M.* Accuracy of an approximate variational solution procedure for the nonlinear Schrödinger equation // Physical review A. — 1989. — Vol. 40, no. 5. — P. 2441–2445.
71. *Harris D. O., Engerholm G. G., Gwinn W. D.* Calculation of Matrix Elements for One-Dimensional Quantum-Mechanical Problems and the Application to Anharmonic Oscillators // The Journal of Chemical Physics. — 1965. — Vol. 43, no. 5. — P. 1515–1517.
72. *Dickinson A., Certain P.* Calculation of Matrix Elements for One-Dimensional Quantum-Mechanical Problems // The Journal of Chemical Physics. — 1968. — Vol. 49, no. 9. — P. 4209–4211.
73. *Light J., Hamilton I., Lill J.* Generalized discrete variable approximation in quantum mechanics // The Journal of chemical physics. — 1985. — Vol. 82, no. 3. — P. 1400–1409.

74. *Jang H. W., Light J. C.* Finite range scattering wave function method for scattering and resonance lifetimes // *The Journal of chemical physics*. — 1993. — Vol. 99, no. 2. — P. 1057–1069.
75. *Colbert D. T., Miller W. H.* A novel discrete variable representation for quantum mechanical reactive scattering via the S-matrix Kohn method // *The Journal of chemical physics*. — 1992. — Vol. 96, no. 3. — P. 1982–1991.
76. *Groenenboom G. C., Colbert D. T.* Combining the discrete variable representation with the S-matrix Kohn method for quantum reactive scattering // *The Journal of chemical physics*. — 1993. — Vol. 99, no. 12. — P. 9681–9696.
77. *Thompson W. H., Karlsson H. O., Miller W. H.* Theoretical calculation of photodetachment intensities for H₃O⁻ // *The Journal of chemical physics*. — 1996. — Vol. 105, no. 13. — P. 5387–5396.
78. *Melezhik V. S.* New method for solving multidimensional scattering problem // *Journal of Computational Physics*. — 1991. — Vol. 92, no. 1. — P. 67–81.
79. *Kolmogorov A. N.* Zur Grossenordnung des Restgliedes Fourierschen Reihen differenzierbarer Funktionen // *Mathematische Annalen*. — 1935. — Vol. 36. — P. 521–526.
80. *Ołdziejewski R., Jachymski K.* Erratum: Properties of strongly dipolar Bose gases beyond the Born approximation [*Phys. Rev. A* 94, 063638 (2016)] // *Phys. Rev. A*. — 2017. — Apr. — Vol. 95, issue 4. — P. 049901-1–049901-7.
81. *Davydov A. S.* *Kvantovaya mekhanika*. — Ripol Klassik, 1968. — 699 p.
82. *Vychisleniya na kvaziravnomernykh setkakh / N. N. Kalitkin [и др.]*. — М.: Fizmatlit, 2005. — 221 p.
83. *Abramowitz M., Stegun A. I.* *Handbook of Mathematical Functions*. — Washington: U.S. National Bureau of Standards, 1965. — 470 p.
84. *Kalitkin N. N.* *CHislennyye metody*. 2 izd. — BKHV-Peterburg, 2011. — 592 p.

85. Calculus of variations / I. M. Gelfand, R. A. Silverman, [et al.]. — Courier Corporation, 2000. — 241 p.
86. Quantum-state controlled chemical reactions of ultracold potassium-rubidium molecules / S. Ospelkaus [et al.] // *Science*. — 2010. — Vol. 327, no. 5967. — P. 853–857.
87. Spectroscopic Observation of Resonant Electric Dipole-Dipole Interactions between Cold Rydberg Atoms / K. Afrousheh [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Nov. — Vol. 93, issue 23. — P. 233001-1–233001-4.
88. *Rapaport R., Chen G., Simon S. H.* Nonlinear dynamics of a dense two-dimensional dipolar exciton gas // *Physical Review B*. — 2006. — Vol. 73, no. 3. — P. 033319-1–033319-4.
89. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V., Larionov A. V.* Long-range coherence of interacting Bose gas of dipolar excitons // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2007. — Vol. 19, no. 29. — P. 295209-1–295209-22.
90. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V.* Collective state of the Bose gas of interacting dipolar excitons // *Journal of applied physics*. — 2007. — Vol. 101, no. 8. — P. 081708-1–081708-5.
91. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V.* Bose-Einstein condensation of dipolar excitons in double and single quantum wells // *Physica Status Solidi (C)*. — 2008. — Vol. 5, no. 7. — P. 2379–2386.
92. *Wang Y., Julienne P., Greene C. H.* Few-body physics of ultracold atoms and molecules with long-range interactions // *Annual Review of Cold Atoms and Molecules*. — World Scientific, 2015. — Chap. 2. P. 77–134.
93. *Bruun G. M., Taylor E.* Quantum phases of a two-dimensional dipolar fermi gas // *Physical review letters*. — 2008. — Vol. 101, no. 24. — P. 245301-1–245301-4.

94. *Cremon J. C., Bruun G. M., Reimann S. M.* Tunable Wigner states with dipolar atoms and molecules // *Physical review letters*. — 2010. — Vol. 105, no. 25. — P. 255301-1–255301-4.
95. *González-Martinez M. L., Bohn J. L., Quéméner G.* Adimensional theory of shielding in ultracold collisions of dipolar rotors // *Physical Review A*. — 2017. — Vol. 96, no. 3. — P. 032718-1–032718-12.
96. *Bohn J., Cavagnero M., Ticknor C.* Quasi-universal dipolar scattering in cold and ultracold gases // *New Journal of Physics*. — 2009. — Vol. 11, no. 5. — P. 055039-1–055039-18.
97. 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.
98. *Ołdziejewski R., Jachymski K.* Properties of strongly dipolar Bose gases beyond the Born approximation // *Physical Review A*. — 2016. — Vol. 94, no. 6. — P. 063638-1 –063638-7.
99. *Kanjilal K., Blume D.* Low-energy resonances and bound states of aligned bosonic and fermionic dipoles // *Physical Review A*. — 2008. — Vol. 78, no. 4. — P. 040703-1 –040703-4.
100. *Bohn J. L., Jin D. S.* Differential scattering and rethermalization in ultracold dipolar gases // *Physical Review A*. — 2014. — Vol. 89, no. 2. — P. 022702-1 – 022702-9.
101. *Lapidus I. R.* Quantum-mechanical scattering in two dimensions // *American Journal of Physics*. — 1982. — Vol. 50, no. 1. — P. 45–47.
102. *Sakurai J. J., Napolitano J.* *Modern Quantum Mechanics*. — 2nd ed. — Cambridge University Press, 2017. — 570 p.
103. *Adhikari S. K., Hussein M. S.* Semiclassical scattering in two dimensions // *American Journal of Physics*. — 2008. — Vol. 76, no. 12. — P. 1108–1113.

104. Evidence for a Bose-Einstein condensate of excitons / M. Alloing [et al.] // EPL (Europhysics Letters). — 2014. — Vol. 107, no. 1. — P. 10012.
105. *Ticknor C.* Quasi-two-dimensional dipolar scattering // Physical Review A. — 2010. — Vol. 81, no. 4. — P. 042708-1–042708-6.
106. 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.