

Elemente de teoria ciocnirilor la energii joase

Pană Gabriel Tiberiu

26.06.2019

1 Introducere

2 Elemente de teoria ciocnirilor

- Ciocniri în mecanica clasică
- Ecuația Schrödinger.
- Secțiunea de împrăștiere. Limita de energii joase

3 Rezultate numerice

- Lungimea de împrăștiere pentru potențiale simple
- Potențial aproximat pentru atomi de Cs

4 Concluzii

5 Bibliografie

Importanța ciocnirilor la energii joase

- studiul răcirii gazelor prin evaporare în capcane magnetice
- manipularea optică a proceselor de răcire (cu laseri)
- măsurarea cu precizie a parametrilor atomici și moleculari
- studiul coerențelor materie-undă ce apar la energii joase
- statistica condensatelor cuantice formați din atomi ce interacționează slab

Scopul lucrării: Căutam să demonstrăm că ciocnirile la energii joase pot fi descrise printr-un unic parametru: lungimea de împrăștiere. Ne propunem să calculăm acest parametru pentru câteva potențiale simple, apoi vom aplica algoritmul și pentru un potențial de interacție aproximat pentru ciocnirile atomilor de Cesium.

Ciocniri în mecanica clasică I

Într-un experiment de împrăștiere, se observă ciocniri între un fascicul de particule incidente și un material țintă.

Numărul de particule împrăștiate dN într-un element de unghi solid $d\Omega$ este proporțional cu o cantitate care joacă un rol central în fizica împrăștiilor: secțiunea diferențială de împrăștiere:

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN(\theta, \varphi)}{d\Omega} \quad (1)$$

unde J_{inc} este fluxul incident de particule și σ reprezintă secțiunea totală de împrăștiere.

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi \quad (2)$$

Este important să distingem cele două sisteme de referință la care ne raportăm când efectuăm un experiment de împrăștiere: sistemul laboratorului (SL) și sistemul centrului de masă (SCM).

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{SL} = \frac{\left(1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \frac{m_1}{m_2} \cos \theta \right)^{3/2}}{1 + \frac{m_1}{m_2} \cos \theta} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{SCM} \quad (3)$$

Cazuri limită:

- a) $m_2 \gg m_1$ sau $\frac{m_1}{m_2} \rightarrow 0$ rezultatele în SL și SCM sunt identice $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{SL} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{SCM}$ deoarece $\theta_1 = \theta$
- b) $m_2 = m_1$ atunci $\tan \theta_1 = \tan \frac{\theta}{2}$ sau $\theta_1 = \frac{\theta}{2}$ rezultând

$$\boxed{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{SL} = 4 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{SCM} \cos \frac{\theta}{2}} \quad (4)$$

Ecuatia Schrödinger I

Considerăm împrăștierea a două particule non-relativiste, fără spin, de mase m_1, m_2 sau analog, împrăștierea unei particule de masă redusă μ pe un potențial central. Problema împrăștierii a două particule se reduce la rezolvarea ecuației Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Presupunând că potențialul are raza de acțiune finită și că funcția de undă ce descrie împrăștierea este o superpoziție a unei plane incidente și a unei sferice împrăștiate putem scrie:

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) + \phi_{sc}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

$$\phi_{inc}(\mathbf{r}) = Ae^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} \quad \phi_{sc}(\mathbf{r}) = Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ik \cdot \mathbf{r}}}{r} \quad (7)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = A \left[e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ik \cdot \mathbf{r}}}{r} \right] \quad (8)$$

unde $f(\theta, \varphi)$ reprezintă amplitudinea de împrăștiere.

Amplitudinea de împrăștiere I

Căutăm conexiunea dintre amplitudinea de împrăștiere și secțiunea diferențială de împrăștiere. Introducem densitățile de flux:

$$J_{inc} = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{\mu} \quad (9)$$

$$J_{sc} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 = \frac{k}{k_0} \frac{J_{inc}}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (10)$$

Numărul de particule împrăștiate:

$$dN(\theta, \varphi) = J_{sc} r^2 d\Omega \quad (11)$$

Folosind acest rezultat și definiția secțiunii diferențiale obținem:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} J_{sc} r^2 = \frac{k}{k_0} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (12)$$

În cazul împrăștiilor elastice $k = k_0$, deci obținem:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (13)$$

Amplitudinea de împrăștiere II

În cele ce urmează arătăm că amplitudinea de împrăștiere poate fi obținută dintr-o formă asimptotică a soluției ecuației Schrödinger.

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Soluția generală a acestei ecuații este o sumă de două componente: o soluție generală a ecuației omogene:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{omog}(\mathbf{r}) = 0 \quad (15)$$

și o soluție particulară pe care o exprimăm cu ajutorul funcției Green. Deci soluția generală este:

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (16)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (17)$$

Amplitudinea de împrăștiere III

Dacă potențialul este destul de slab, el va distorsiona foarte puțin unda incidentă.

Aproximația Born constă în aproximarea undei împrăștiate cu o undă plană. Deci în soluția generală înlocuim pe $\psi(\mathbf{r})$ din integrand cu $\phi(\mathbf{r})$

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{inc}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (18)$$

Privind comportarea asimptotică

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi), (r \rightarrow \infty) \quad (19)$$

Rezultă amplitudinea de împrăștiere

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (20)$$

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr', \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (21)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr' \right|^2 \quad (22)$$

Analiza parțială a undei. Defazaje I

Presupunem că potențialul are simetrie sferică. Momentul cinetic al particulei se conservă după ciocnire. Presupunând unda incidentă în direcția z și $\phi_{inc}(\mathbf{r}) = \exp(ikr \cos \theta)$, o putem exprima ca o superpoziție de stări proprii ale momentului cinetic, fiecare definită de un număr cuantic l :

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (23)$$

unde j_l sunt funcțiile Bessel sferice. Reamintim:

$$\psi(\mathbf{r}) = A \left[e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} \right] \quad (24)$$

Din cele două rezultă:

$$\psi(r, \theta) \simeq \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (25)$$

De asemenea, soluția generală a ecuației Schrödinger pentru potențial cu simetrie sferică:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (26)$$

Forma asimptotică I

Analizăm forma asimptotică a celor două rezultate. Ne interesează în mod deosebit forma asimptotică a funcției radiale R_{kl} descrisă cu ajutorul funcțiilor Bessel

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \quad (27)$$

$$R_{kl}(r) \rightarrow A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (28)$$

Renunțăm la cosinus pentru a satisface condițiile în origine

$$R_{kl}(r) \rightarrow C_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (29)$$

unde $A_l = C_l \cos \delta_l$ și $B_l = -C_l \sin \delta_l$, deci $C_l = \sqrt{A_l^2 + B_l^2}$ și

$$\tan \delta_l = -\frac{B_l}{A_l} \Rightarrow \delta_l = -\tan^{-1} \left(\frac{B_l}{A_l} \right) \quad (30)$$

Defazajul. Conexiunea cu secțiunea diferențială I

Observăm că dacă $\delta_l = 0$, funcția radială $R_{kl}(r)$ este finită în $r = 0$, deci forma asimptotică se reduce doar la $j_l(kr)$. Deci δ_l este un unghi real care dispare pentru orice valoare a lui l în absența potențialului ($V = 0$) și se numește defazaj. Acesta măsoară, la valori mari ale lui r cât de mult diferă R_{kl} față de $j_l(kr)$. Deoarece această diferență apare datorită potențialului $V(r)$, ne așteptăm ca secțiunea de împrăștiere să depindă de δ_l . Folosind forma asimptotică obținută pentru $R_{kl}(r)$, aflăm forma asimptotică pentru $\psi(r, \theta)$:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}, (r \rightarrow \infty) \quad (31)$$

Reamintim:

$$\psi(r, \theta) \simeq \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l + 1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (32)$$

Defazajul. Conexiunea cu secțiunea diferențială II

Utilizând comportarea asimptotică a acestei forme ajungem la valoarea pentru amplitudinea de împrăștiere:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (33)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta), \quad (34)$$

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (35)$$

Limita de energii joase. Lungimea de împrăștiere I

Pentru unda parțială $l = 0$, potențialul din ecuația Schrödinger 1D este chiar potențialul interatomic. Pentru alte unde parțiale, acest potențial este suprapus cu bariera centrifugală $\hbar^2 l(l+1)/2m_r r^2$. În acest caz, particula relativă cu energia E , mult mai mică decât înălțimea barierei rezultate nu "simte" potențialul $V(r)$ și este pur și simplu respinsă de barieră. Așadar ne așteptăm ca împrăștierea cauzată de $V(r)$ să tindă spre zero pentru toate undele parțiale exceptând $l = 0$ la energii destul de joase.

$$\sigma_{l \neq 0}(k) = \frac{8\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \propto k^{4l} \rightarrow 0 \quad \text{când} \quad k \rightarrow 0 \quad (36)$$

Regăsim izotropia pentru împrăștiere la energii joase menționată anterior. Secțiunea diferențială corespunzătoare poate fi scrisă:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_{l=0}(k) = 8\pi a^2 \quad (37)$$

unde lungimea de împrăștiere a se definește:

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (38)$$

Algoritm I

Scriem ecuația Schrödinger radială

$$\chi''(\mathbf{r}) + \left(\frac{2M}{\hbar^2} (E(\mathbf{k}) - V(\mathbf{r})) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi(\mathbf{r}) = 0 \quad (39)$$

pentru $l = 0$, pe care o vom integra folosind condițiile la limită

$$\chi(\epsilon) = \epsilon^{l+1}, \quad \chi'(\epsilon) = (l+1)\epsilon^l \quad (40)$$

pe intervalul $r \in (\epsilon, r_{Max})$, unde ϵ este ales foarte mic, iar r_{Max} este mai mare decât raza de acțiune a potentialului.

Pentru $r > r_{Max}$ soluția poate fi scrisă ca o combinație de funcții Bessel sferice:

$$\chi(r_{Max}) = A s_l(r_{Max}) + B c_l(r_{Max}) \quad (41)$$

$$\chi'(r_{Max}) = A s'_l(r_{Max}) + B c'_l(r_{Max}) \quad (42)$$

unde $s_l(r_{Max}) = r_{Max} j_0(kr_{Max})$ și $c_l(r_{Max}) = r_{Max} y_0(kr_{Max})$

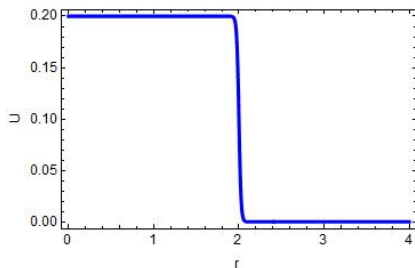
$$\tan \delta_l = -\frac{B}{A} \quad (43)$$

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (44)$$

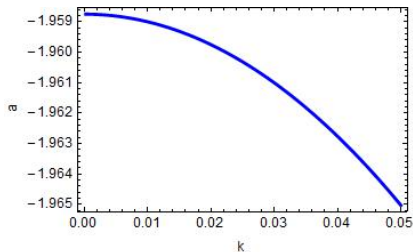
Treapta de potențial I

$$V(r) = V(0) \tanh \frac{r - r_0}{\alpha_0} - V(0) \quad (45)$$

unde α_0 controlează rotunjirea treptei, iar r_0 este raza de acțiune și am ales $M = 10^3$



(a) Potențial Treaptă



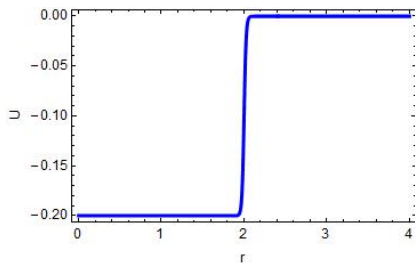
(b) Lungimea de împrăștiere

Figura: Treapta de potențial

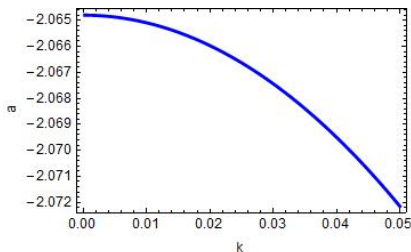
Groapa de potențial I

$$V(r) = -V(0) \tanh \frac{r - r_0}{\alpha_0} + V(0) \quad (46)$$

valorile parametrilor au fost păstrate



(a) Potențial Groapă

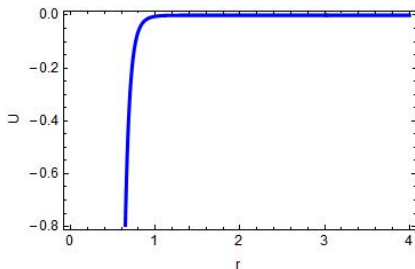


(b) Lungimea de împrăștiere

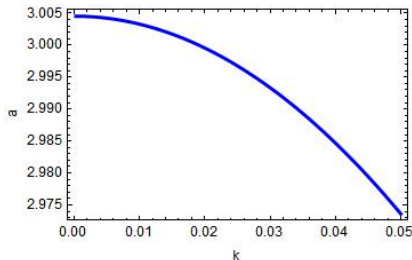
Figura: Groapa de potențial

Potențial de tip Van der Waals I

$$V(r) = V(0) \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right), \quad \text{unde } V(0) = 10^{-6} \quad (47)$$



(a) Potențial de tip Van der Waals



(b) Lungimea de împrăștiere

Figura: Potențial de tip Van der Waals

Potențial aproximat pentru atomi de Cs I

$$V(r) = \frac{1}{2}Br^\alpha e^{-\beta r} - \left(\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \frac{C_{10}}{r^{10}} \right) f_c(r) \quad (48)$$

Primul termen de după egal reprezintă repulsia dintre electronii de valență, iar al doilea reprezintă suma termenilor Van der Waals, înmulțită cu o funcție de cutoff $f_c(r)$, ce are rolul de a anula divergența $1/r^n$ la distanțe mici.

Funcția de cutoff are forma:

$$f_c(r) = \Theta(r - r_c) + \Theta(r_c - r)e^{-(rc/r-1)^2}, \quad (49)$$

B	α	β	C_6	C_8	C_{10}	r_c
0.0016	5.53	1.072	7020	1.1×10^6	1.7×10^8	23.165

Potențial aproximat pentru atomi de Cs II

Prezența barierei înalte și largi face ca la energii mici propagarea soluției “pe sub barieră” să ducă la pierderea completă a preciziei.

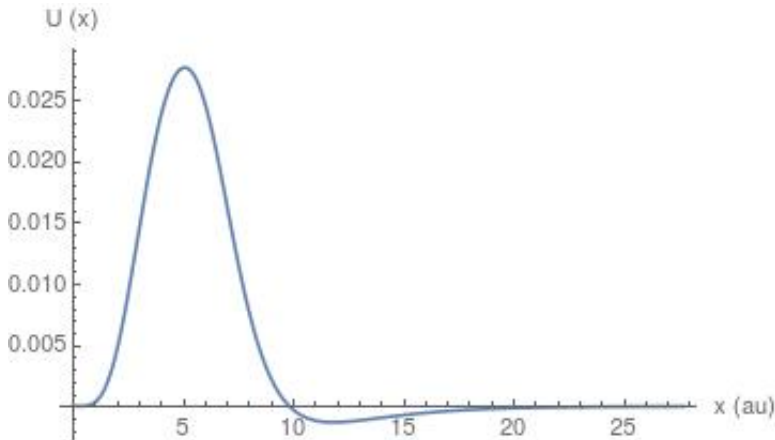


Figura: Potentialul (48)

Potențial aproximat pentru atomi de Cs III

În figură este reprezentată soluția $\chi(r)$ găsită cu Mathematica pentru $k = 0.05$ u.a. Este evident că soluția nu are comportarea corectă la distanțe mari.

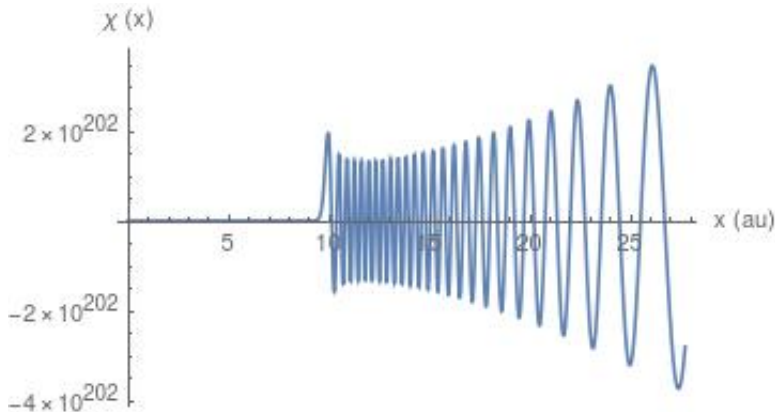


Figura: Soluția $\chi(r)$ pentru potențialul (48)

- Împrăștierea pe potențiale simple, care prin rezolvarea ecuației Schrödinger dau o soluție cu comportament agreabil, poate fi descrisă în limita de energii joase printr-un singur parametru: lungimea de împrăștiere.
- Un potențial mai complex, care are valori mult mai mari decât energia va introduce în soluția ecuației Schrödinger fluctuații prea mari pentru a mai obține un rezultat corect prin metoda demonstrată. În acest caz sunt mai potrivite metode de evaluare a defazajului bazate pe aproximația JWKB sau pe calculul direct al fazei soluției radiale



G. F. Gribakin, V. V. Flambaum, Phys. Rev. A **48**, 546 (1993).



Nouredine Zettili, Quantum Mechanics Concepts and Applications, 2nd ed



Jean Dalibard, Collisional dynamics of ultra-cold atomic gases



Radoslaw Szmytkowski, Analytical calculations of scattering lengths in atomic physics, J. Phys. A: Math. Gen. 28 (1995) 7333-7345



Claude Cohen-Tannoudji. Atom-atom interactions in ultracold gases. DEA. Institut Henri Poincaré, 25 et 27 Avril 2007, 2007. < cel-00346023 >



John Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio, Paul S. Jullienne, Rev. Mod. Phys, Vol 71, No. 1, January 1999



H. Ouerdane, M. Jamieson, D. Vranceanu and M. Cavagnero, J. Phys. B **36**, 4075 (2005).