

RESONANCIA FESHBACH EN LA COLISIÓN DE ÁTOMOS DE HIDRÓGENO

Beatriz E. Londoño, Jorge E. Mahecha
Grupo de Física Atómica y Molecular
Instituto de Física
Universidad de Antioquia, AA 1226

RESUMEN

Se implementa un modelo para la colisión resonante de dos átomos de hidrógeno, donde el hamiltoniano total del sistema consta de tres términos: interno, externo y acople. La parte interna depende de las coordenadas espaciales de los electrones, de las coordenadas angulares de los núcleos y de los spines de los electrones y de los núcleos. La parte externa depende sólo de la distancia entre los núcleos. El término de acople está definido por las interacciones entre los dos átomos, de tipo central y de dipolo magnético. Se aplica un modelo de dos canales para calcular la posición y el ancho de la resonancia Feshbach para diversos valores de campo magnético externo. Este trabajo es relevante en el análisis de la asociación adiabática de átomos ultrafríos por interacción con un campo magnético externo y en la formación de un condensado de Bose-Einstein de moléculas.

Palabras claves: Resonancia Feshbach, Canales, Colisión.

ABSTRACT

A model is implemented for the resonant collision of two hydrogen atoms, where the full Hamiltonian of the system consists of three terms: internal, external and coupling. The internal part depends on the space coordinates of the electrons, on the angular coordinates of the nuclei and on the electronic and nuclear spins. The external part depends only on the distance between the nuclei. The coupling term is defined by the interactions between the two atoms, of central and magnetic dipole types. The two-channel model is applied to calculate the position and the width of the Feshbach resonance for different values of the external magnetic field. This work is relevant in the analysis of the adiabatic association of ultracold atoms by interacting with a magnetic external field and in the formation of a Bose-Einstein condensate of molecules.

Keywords: Feshbach resonance, Channels, Collision.

1. Introducción

Las colisiones entre dos átomos alcalinos pueden ser fuertemente afectadas por la presencia de un campo magnético externo. Para ciertos valores del campo ocurren resonancias Feshbach, lo cual permite controlar las interacciones entre los átomos. En un gas atómico cerca de una resonancia Feshbach la energía de dos átomos en colisión, en el canal abierto, está muy cerca a un valor de energía de un estado ligado, en un canal cerrado, que puede ser un estado molecular. Los canales están acoplados por la interacción de intercambio. Los dos átomos que entran en colisión en el canal abierto tienen un estado hiperfino diferente al del estado ligado en el canal cerrado. Como resultado de esta diferencia los dos canales tienen un corrimiento Zeeman diferente en el campo magnético, logrando que la diferencia de energía entre el estado ligado y el umbral del continuo de los dos átomos sea experimentalmente ajustable por manipulación de un campo magnético. Como consecuencia la longitud de scattering así como la magnitud y signo de las interacciones atómicas es ajustable a cualquier valor deseable. Con este grado de libertad experimental es posible estudiar nuevos regímenes interesantes en la física de muchos cuerpos de gases atómicos ultrafríos. Por ejemplo se ha podido controlar la transición entre los regímenes BCS y BEC [1].

2. Potencial singlete y triplete

El potencial de interacción efectivo entre dos átomos alcalinos en colisión depende del electrón de valencia. Si forman un singlete, los electrones tienen permitido estar en el mismo orbital, para el caso triplete esto está prohibido, por tanto el potencial singlete es más hondo que el potencial triplete. Aunque las condiciones experimentales de la colisión de átomos alcalinos y de átomos de hidrógeno son muy diferentes, su descripción teórica es muy similar. En la figura 2 se observan los potenciales singlete y triplete para la molécula de hidrógeno. Se utilizó un potencial tipo Morse, ecuación (1) para ajustar dichas curvas de potencial con los parámetros dados en [4]. Se ajustó la curva para campo $B = 0 \text{ a.u.}$, ya que se observa como el campo afecta dichas curvas de potencial considerablemente sólo para valores muy altos de campo, $B > 1 \text{ a.u.}$

$$u(r) = \epsilon \left[e^{-2\frac{\epsilon}{\sigma}(r-r_0)} - 2e^{-\frac{\epsilon}{\sigma}(r-r_0)} \right]. \quad (1)$$

Este potencial tiene sólo tres parámetros independientes, puesto que $r_0/\sigma = 1 + \ln 2/c$.

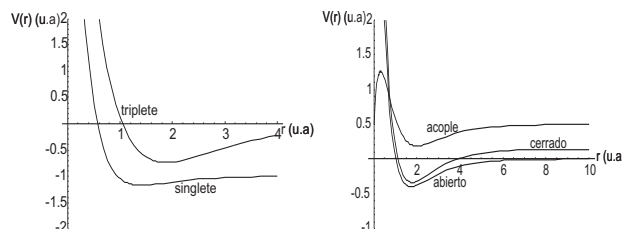


Figura 1: Potenciales singlete y triplete para el estado $^1\Sigma_g$ de la molécula H_2 , para $B = 0$. Potencial de canal abierto, cerrado y acopla, para $B = 0,1 T$ en la colisión de dos átomos de hidrógeno.

3. Resonancia Feshbach

El principio básico de las Resonancias Feshbach es que dos partículas que colisionan con un cierto valor de energía pueden acoplarse resonantemente para formar a un estado ligado [3]. Para gases ultrafríos, este proceso de colisión se da a energías de scattering muy bajas, por tanto se consideran sólo ondas tipo s .

La colisión entre dos átomos de hidrógeno es un problema de 4 partículas de spin $1/2$. La gran diferencia entre la masa de los electrones y los protones permite una separación adiabática de los movimientos electrónico y nuclear. El movimiento nuclear se describe usando sólo la coordenada relativa r y su interacción por medio de un potencial efectivo dado por los electrones.

El hamiltoniano total de los dos átomos en el sistema de centro de masa es

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + H_1^{int} + H_2^{int} + V = H_0 + V, \quad (2)$$

donde \mathbf{p} es el momento relativo y μ es la masa reducida. V representa las interacciones efectivas entre los átomos, la cual depende del spin electrónico y de la coordenada relativa r y toma valores despreciables a partir de cierto valor de r .

El potencial V en el hamiltoniano (2) puede separarse como $V = V^c + V^d$. La interacción magnética dipolar, V^d , corresponde a la interacción de los spines electrónicos y nucleares de los dos átomos. La interacción electrostática V^c entre los átomos depende del spin total de los electrones. V^c tiene la expresión $V^c = V_S(r)\mathcal{P}^{(0)} + V_T(r)\mathcal{P}^{(1)}$, donde $\mathcal{P}^{(S)}$ son operadores de proyección sobre los subespacios singlete y triplete y $V_S(r)$, $V_T(r)$ son respectivamente los potenciales singlete y triplete de la sección 2. En este modelo se desprecia V^d .

El spin nuclear \mathbf{I} interactúa con el spin electrónico \mathbf{S} via interacción hiperfina, $a_{hf}\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$. Esta interacción es del orden de magnitud de la constante de estructura hiperfina a_{hf} y acopla los estados singlete y triplete. En este modelo simple de dos canales [2] la ecuación de Schrödinger es,

$$\begin{bmatrix} -\frac{\nabla^2}{2\mu} + V_T(r) - E & V_{hf} \\ V_{hf} & -\frac{\nabla^2}{2\mu} + \Delta\mu B + V_S(r) - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_T(r) \\ \psi_S(r) \end{bmatrix} = 0, \quad (3)$$

$V_T(r)$ y $V_S(r)$ son los potenciales de interacción entre los átomos cuando los electrones están en estados $|T\rangle$ y $|S\rangle$ respectivamente, $V_{hf} \sim a_{hf}$ y $\Delta\mu B$ es la diferencia de energía entre el estado singlete y triplete debida a la interacción con el campo magnético B , en el límite asintótico. Para discutir las propiedades de scattering de los átomos, se debe diagonalizar el hamiltoniano para r grandes, es decir los dos átomos separados, así se determinan los canales entrantes, como superposición de los canales singlete y triplete. La energía cinética es diagonal en el espacio interno de los átomos, se resuelve el problema de autovalores para la matriz $\begin{pmatrix} 0 & V_{hf} \\ V_{hf} & \Delta\mu B \end{pmatrix}$, los autovalores son: $\epsilon_{\pm} = (B\Delta\mu \pm (4V_{hf}^2 + B^2\Delta\mu^2)^{1/2})/2$. Utilizando el cambio de variable $\tan\theta = -2V_{hf}/(\Delta\mu B)$, la anterior matriz es diagonalizada por una matriz que depende de θ . El modelo de dos canales acoplados queda descrito por una ecuación análoga a (3). Las funciones de onda de canal son combinación lineal de $\psi_T(r)$ y $\psi_S(r)$, con coeficientes que dependen de θ . Los potenciales de canal abierto $V_{\uparrow\uparrow}$, cerrado $V_{\downarrow\downarrow}$ y acople $V_{\uparrow\downarrow}$, en la gráfica 2 igualmente son combinación lineal de V_T y V_S con coeficientes que dependen de θ . Una resonancia ocurre cerca a una energía en la cual se da un estado ligado en el canal cerrado. Se resuelve el problema ligado para $V_{\downarrow\downarrow}$, usando el método de los elementos finitos, se hallan las funciones de onda ligadas $\phi_0(r)$ y se escoge aquella cuya energía E_0 es cercana al umbral de canal abierto, es decir a cero. Con este valor de energía, E_0 se resuelve la ecuación diferencial de canal abierto para obtener dos soluciones, una regular ϕ_{reg} y una irregular ϕ_{irr} , con las cuales se construye la función de Green (G).

4. Parámetros de la resonancia

Para un potencial de canal abierto $V_{\uparrow\uparrow}$, se expresa la función de Green como:

$$G(r, r') = -\pi \{ \phi_{reg}(r)\phi_{irr}(r') \} r \leq r', \quad G(r, r') = -\pi \{ \phi_{reg}(r')\phi_{irr}(r) \} r \geq r' \quad (4)$$

Para valores grandes de r se asume que la variable r' es siempre más pequeña que r , dado que $\phi_0(r')$ es una función de onda de estado ligado se tiene que la integral tiende a cero para valores grandes de r' . Entonces en la ecuación de Green (4) sólo importa la segunda expresión para $r' < r$. Se tiene así la siguiente forma asintótica $\phi_1(r) = \phi_{reg}(r) + \tan\delta\phi_{irr}(r)$, $\phi_1(r) = 1/\cos\delta(2\mu/(\pi\hbar^2k))^{1/2}\sin(kr + \delta_{bg} + \delta)$, $r \rightarrow \infty$, el ángulo δ esta dado por:

$$\tan \delta = -\pi \frac{|\langle \phi_0 | V_{\uparrow\downarrow} | \phi_{reg} \rangle|^2}{E - E_0 - \langle \phi_0 | V_{\uparrow\downarrow} \hat{G} V_{\uparrow\downarrow} | \phi_0 \rangle}. \quad (5)$$

El acople entre canales da lugar entonces a un corrimiento adicional de fase δ en la función de onda de canal abierto ϕ_1 , dicho corrimiento caracteriza la resonancia. Se definen las siguientes variables para los elementos de matriz, $\Delta = \langle \phi_0 | V_{\uparrow\downarrow} \hat{G} V_{\uparrow\downarrow} | \phi_0 \rangle$ y $\Gamma = 2\pi |\langle \phi_0 | V_{\uparrow\downarrow} | \phi_{reg} \rangle|^2$. En la ecuación (5) se tiene que ϕ_{reg} y la función de Green dependen de la energía E , pero esta dependencia es poco significativa frente a la estructura de polo que se ve en dicha ecuación, los ceros en el denominador definen la posición de la resonancia, $E_R = E_0 + \Delta$. Para valores cercanos a la energía resonante E_R el corrimiento de fase δ aumenta más o menos un valor de π , una resonancia aislada que se describe por un corrimiento de fase adicional dado por $\delta = -\tan^{-1}(\Gamma/2)/(E - E_R)$ es llamada una resonancia de Breit-Wigner.

Los potenciales de canal $V_{\uparrow\uparrow}$, $V_{\downarrow\downarrow}$ y acople $V_{\uparrow\downarrow}$ dependen de la intensidad de campo magnético B . Se hallan los parámetros de resonancia para varios valores del campo. La longitud de scattering total resultante del acople entre dos canales es:

$$a = a_{bg} + \frac{\frac{m}{2}\Gamma}{E - E_0 - \Delta}. \quad (6)$$

En la longitud de scattering (6) las resonancias aparecen como una singularidad para los valores de energía E que anulan el denominador.

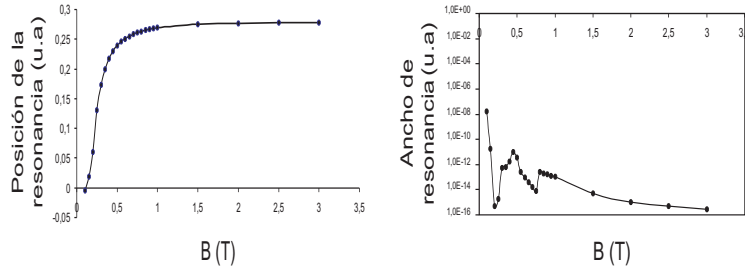


Figura 2: (a) Energía resonante para varios valores de campo magnético. (b) Ancho de resonancia en escala logarítmica para varios valores de campo magnético.

5. Conclusiones

El modelo de dos canales permite entender de una manera simple la formación de un estado molecular por medio de resonancia Feshbach. En las gráficas se observa como la posición de la resonancia tiene una dependencia suave con el campo, mientras que el ancho presentan variaciones fuertes en la región entre $0,1T$ y $1T$. Esto es de esperarse, ya que un estado molecular, es decir un estado resonante de larga vida que corresponde a un ancho pequeño se da solo para unos valores muy precisos de campo magnético. La resonancia en la longitud de scattering se presenta para ciertos valores de energía, y dada la dependencia lineal con el campo magnético, por efecto Zeeman, también se espera que la longitud de scattering presente dichas singularidades para ciertos valores de campo magnético.

Referencias

- [1] F. M. Seenws, P. Pillet. *Adv. At. Mol. Phys.* **47**, (2001) 53.
- [2] R. A. Duine, H. T. C. Stoof. *Phys. Rep.* **396**, (2004) 115.
- [3] H. Feshbach. *Ann. Phys.* **5**, (1958) 357.
- [4] T. Detmer, P. Schmelcher, F. K. Diakonov and L. S. Cederbaum. *Phys. Rev. A.* **56**, (1997) 1825.