

## 超冷钠原子弹性散射特性的精确计算\*

张计才<sup>1)†</sup> 朱遵略<sup>1)</sup> 孙金锋<sup>1)2)</sup>

1) (河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

2) (洛阳师范学院物理与电子信息学院, 洛阳 471022)

(2012年4月10日收到; 2012年8月3日收到修改稿)

基于精确的原子之间相互作用势, 系统研究了钠原子在超冷温度下的弹性散射特性, 精确计算了钠原子间碰撞时的 s 波散射长度、有效力程、p 波散射长度以及束缚态数目等散射参数. 超冷温度下单重态和三重态原子间的弹性散射截面主要为 s 波贡献, 随着碰撞能量的增加散射截面有丰富的形状共振出现, 计算发现单重态和三重态散射截面分别存在显著的 f 波和 i 波形状共振. 应用简并内态近似方法获得了超精细态相互作用时的 s 波散射长度, 所得结果与精确值比较符合.

关键词: 散射参数, 弹性散射截面, 简并内态近似

PACS: 34.10.+x, 34.20.cf, 34.50.Cx

DOI: 10.7498/aps.62.013401

## 1 引言

在过去的三十多年里, 随着激光冷却和囚禁中性原子技术的飞速进步, 冷原子物理学得到了极大的发展, 已成为现代物理学最活跃的研究领域之一. 冷和超冷原子碰撞因在产生玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose Einstein condensate, BEC) 和简并费米气体 (degenerate Fermi gas, DFG), 以及形成同核和异核超冷碱金属二聚物和双组分玻色-爱因斯坦凝聚 (two Bose-Einstein condensates, TBEC) 等冷原子物理研究领域起着较为关键的作用, 在理论和实验上均引起了广泛的研究兴趣<sup>[1,2]</sup>. 此外, 低温原子碰撞本质上是一个量子现象, 其本身就是一个很有趣的研究课题<sup>[3]</sup>. 一般情况下, 冷碰撞指的是碰撞能量 ( $E/k_B$ ) 在  $1\ \mu\text{K}$ — $1\ \text{mK}$  区域, 而超冷碰撞为碰撞能量小于  $1\ \mu\text{K}$  的区域. 超冷温度下, 碰撞粒子能量不足以克服角动量的离心势垒, 各向异性的高阶分波散射全部消失, 只剩下 s 分波散射. 对于  $\text{Na}_2$  其 d 波势垒在原子间距为  $75\ \text{a.u.}$  达到最大势垒高度  $E/k_B \approx 5.3\ \text{mK}$ , 也即当碰撞能量高于这个温度时才会发生 d 波散射, 该温度远高于原

子在磁光阱 (magneto-optical trap, MOT) 中的温度 ( $\sim 500\ \mu\text{K}$ ). 对于 p 波最高势垒能量约为  $1\ \text{mK}$ , 尽管该温度仍远高于产生玻色凝聚的临界温度, 但原子在磁光阱中和实施蒸发冷却时会有贡献. 所以对于冷原子实验, 仅考虑 s 和 p 波已经足够, 超冷温度下原子之间的弹性散射主要由 s 波散射长度 ( $a_s$ )、有效力程 ( $r_e$ ) 和 p 波散射长度 ( $a_p$ ) 来表征, 更高角动量的贡献可以忽略. 例如, s 波散射长度的正负决定着玻色凝聚体的稳定性, 对于同种玻色原子, 如果  $a_s > 0$  表明形成的凝聚体是稳定的, 反之  $a_s < 0$  容易造成凝聚粒子间相互吸引而产生三体复合, 就不可能形成稳定的凝聚体, 此时在捕获阱中仅有限数目的原子处于凝聚状态<sup>[4]</sup>. 对这些散射参数, 尤其是 s 波散射长度, 已进行了大量的实验研究和理论计算<sup>[1,5,6]</sup>.

作为除 Li 外具有最简单原子结构的碱金属原子, 钠是较早实现原子玻色-爱因斯坦凝聚<sup>[7]</sup>和超冷分子的元素<sup>[8]</sup>, 所以对冷和超冷钠原子碰撞在实验和理论上引起了重视<sup>[9-13]</sup>. Côté 和 Dalgarno<sup>[9]</sup>等利用 Zemke 和 Stwalley<sup>[10]</sup> 构建的势能曲线计算获得钠原子的 s 波散射长度、有效力程等散射参数, 因为在超冷温度下原子间的碰撞特性极其敏感

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11274097) 和河南省教育厅自然科学基金 (批准号: 2011A140017) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: jicaiz@gmail.com

地依赖于原子之间的相互作用势, 这些参数误差较大. 随着实验上获取分子势能数据精度的提高, 文献 [11,12] 进一步研究了超冷钠原子的散射特性. 近来, Knoop 等 [13] 基于高精度的分子光谱实验构建了更为精确的分子势能曲线, 但仅给出了 s 波散射长度的值, 未进行系统的碰撞研究. 随着对超冷同核碱金属系统研究的进一步深入, 非常需要对冷碰撞性质进行系统的研究. 本文基于文献 [13] 构建的精确的单重态和三重态 Na<sub>2</sub> 分子势能曲线, 系统研究 Na 原子在冷和超冷温度下的弹性散射特性, 精确计算 s 波散射长度、有效力程、p 波散射长度和束缚态数目等散射参数, 以及冷和超冷温度下的单重态和三重态弹性散射截面. 文献 [14] 利用简并内态近似 [15] 分别计算 K-Cs 原子处在超精细态时的 s 波散射长度, 得到了较好的结果. 本文也利用简并内态近似计算了 Na-Na 处在实验上感兴趣的超精细态的 s 波散射长度. 文中除非特别指出, 均使用原子单位.

## 2 冷原子弹性散射理论

在质心坐标系下, 两个钠原子之间的碰撞满足薛定谔方程

$$\left[ \frac{d^2}{dR^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{R^2} - U(R) \right] u_l(R) = 0, \quad (1)$$

其中波数  $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$ ,  $\mu$  是约化质量,  $U(R) = 2\mu V(r)/\hbar^2$ , 式中  $V(R)$  为两个钠原子间的相互作用势. 当  $R \rightarrow \infty$ , 该方程的解近似为

$$u_l(R) \simeq A_l [j_l(kR) - \tan \delta_{1l}(kR)], \quad (2)$$

式中  $A_l$  为归一化常数,  $j_l(x)$  和  $n_l(x)$  分别是球 Bessel 函数和球 Neumann 函数;  $\delta_{1l}$  是 l 分波的弹性散射相移, 可由下式求出 [16]

$$\tan \delta_{1l} = \frac{K j_l(kR_a) - j_l(kR_b)}{K n_l(kR_a) - n_l(kR_b)}, \quad (3)$$

其中,  $R_a, R_b$  为渐进区域相邻的两点;  $K = R_a u_l(R_b)/R_b u_l(R_a)$ . 两个处于基态的自旋单重态  $X^1\Sigma_g^+$  和自旋三重态  $a^3\Sigma_u^+$  的原子间相互作用势分别用  $V_S$  和  $V_T$  表示. 单重态和三重态弹性散射截面可表示为

$$\sigma_{el}^{S/T} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_{1l}^{S/T}, \quad (4)$$

其中  $\delta_1^S$  和  $\delta_1^T$  分别表示单重态和三重态 1 分波弹性散射相移. 在低能极限下, s 波散射相移  $\delta_s$  和 p 波

散射相移  $\delta_p$  满足 [17]

$$a_l = \left( -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_l}{k^{2l+1}} \right)^{(1/3)^l}, \quad (5)$$

式中  $l=0$  和  $l=1$  分别对应于 s 波散射长度  $a_s$  和 p 波散射长度  $a_p$ . 有效力程可由下式计算 [18]

$$r_e = C\bar{a} \left[ 1 - 2\frac{\bar{a}}{a} + 2\left(\frac{\bar{a}}{a}\right)^2 \right], \quad (6)$$

其中,

$$C = \frac{1}{3} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{3}{4}\right)^{-2} \approx 2.9203$$

和对钠原子平均散射长度

$$\bar{a} = 2^{\frac{3}{4}} (\mu C_6)^{\frac{1}{4}} \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) / \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \approx 42.98 \text{ a.u.}$$

Gribakin 和 Flambaum [19] 应用半经典量子理论给出了 s 波的半经典相位  $\Phi$  与势所支持的束缚态数目的关系

$$N = \left[ \frac{\Phi}{\pi} - \frac{5}{8} \right] + 1, \quad (7)$$

在半经典转折点  $R_0$  处  $V(R_0) = 0$ , 半经典相位  $\Phi$  从半经典转折点  $R_0$  到无穷远的积分计算求出

$$\Phi = \int_{R_0}^{\infty} \sqrt{-2\mu V(R)} dR.$$

## 3 势能曲线

钠原子具有碱金属原子中除 Li 原子之外的最简单的电子结构, 对其原子间相互作用势的研究, 在实验和理论方面都做了大量工作 [9-13]. 在超冷温度下, 碰撞能量非常低, 原子间散射特性极其敏感地依赖于它们之间的相互作用势, 因此计算散射参数时需要非常精确的原子间相互作用势. 对于除了 H, Li 等核外电子结构较为简单的原子间相互作用势的计算比较精确外, 第一原理计算所得的作用势能其精确度还不能用于冷原子碰撞的精确计算. 所以本文采用 Knoop 等 [13] 利用费希巴赫和光缔合光谱技术精确获得的 Na<sub>2</sub> 分子单重态和三重态的相互作用势能曲线. 在两原子相互作用的中程区 ( $R_i \leq R \leq R_a$ ), 原子间的相互作用势可展开为解析函数的形式

$$V(R) = \sum_{i=0}^{i=n} a_i \left( \frac{R - R_m}{R + bR_m} \right)^i, \quad (8)$$

式中  $a_i, b,$  和  $R_m$  为待定参数. 对于  $R \leq R_i$ ,  $V(R) = A + B/R^n$ ,  $R \geq R_a$ ,  $V(R)_{LR} = U_{\infty} - C_6/R^6 -$

$C_8/R^8 - C_{10}/R^{10} \pm E_{\text{exch}}$ , 式中交换相互作用势  $E_{\text{exch}} = A_{\text{ex}} R^\gamma \exp(-\beta R)$ , 对于单重态取“-”号, 三重态取“+”号. 所用的参数和常数均在文献 [14] 中给出, 相应的  $\text{Na}_2$  分子单重态和三重态的势能曲线见图 1.

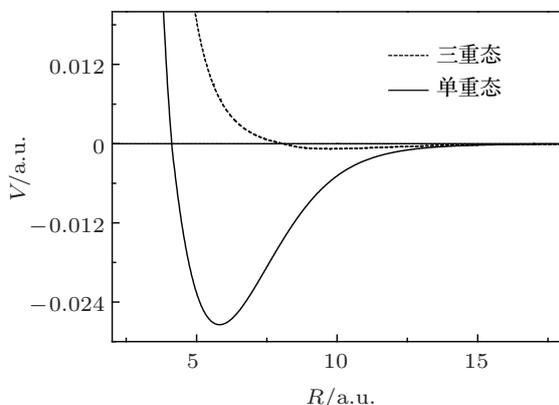


图 1  $\text{Na}_2$  单重态和三重态势能曲线

## 4 计算结果与讨论

### 4.1 散射参数

因为原子质量对精确计算散射常数非常重要 [20], 本文计算时采用最新的原子质量推荐值 [21]. 应用构建精确的钠原子间相互作用势和最新的原子质量, 通过 Numerov 数值积分薛定谔方程至原子间距离为 5000 a.u. 处, 从而获得单重态和三重态相互作用时的 s 波以及 p 波散射相移, 结果见表 1. 从表 1 可以看出, 随着波数加倍, s 波相移也近似加倍, 但 p 波相移则近似增加 8 倍, 这个结果与 (5) 式预测的一致. 考虑到步长误差以及截断误差, 通过应用 Richardson 外推和一阶长程修正 [22] 从而得到精确的 s 波和 p 波散射长度. 本文计算的 s 波散射长度的结果与文献 [13] 完全一致, 但与文献 [12] 有些差别. 由于应用了更精确的作用势, 所以本文的结果更为精确. 在此基础上根据 (6) 式易求得有效力程的值, 结果见表 2.

为了得到原子间相互作用势所支持的束缚态数目, 首先需精确获得半经典相位的信息. 计算时为了尽可能减小计算误差, 半经典相位  $\Phi$  可表示为两部分之和  $\Phi = \Phi_1 + \Phi_2$ . 从半经典转折点  $R_0$  用变步长 Simpson 积分积到截断点  $R_c$  所得半经典相位为  $\Phi_1$ ; 对于  $R > R_c$ , 分子势能可近似表示为  $V(R) = -C_6/R^6$ , 半经典相位  $\Phi_2 = \sqrt{2\mu C_6}/(2R_c^2)$ .

单重态和三重态的半经典相位分别为 208.2868 和 50.1469, 从而可得支持束缚态数目分别为 66 和 16 个, 该结果与实验结果一致.

表 1 钠原子超冷碰撞时的 s 波和 p 波弹性散射相移  $\delta_s$  和  $\delta_p$

单重态			三重态		
$k \times 10^4$	$\delta_s \times 10^3$	$\delta_p \times 10^7$	$k \times 10^4$	$\delta_s \times 10^3$	$\delta_p \times 10^7$
1.0	-1.881	6.118	1.0	-6.430	-1.611
2.0	-3.762	48.168	2.0	-12.86	-12.913
4.0	-7.533	380.298	4.0	-25.723	-103.775
8.0	-15.121	2924.303	8.0	-51.464	-838.947
16.0	-30.635	21577.924	16.0	-103.443	-6804.185

表 2 超冷温度下 Na-Na 原子间弹性碰撞的散射参数

	s 波散射长度		有效	p 波散射	束缚态
			力程	长度	数目
单重态	18.81	19.20(30) <sup>[13]</sup>	861.95	-40.11	66
三重态	64.30	62.51(50) <sup>[13]</sup>	69.83	54.26	16

### 4.2 弹性散射截面

图 2 中实线表示的是通过数值求解得到的随碰撞能量变化的单重态和三重态弹性散射总截面. 当原子间碰撞能量极低时, 弹性散射截面仅有 s 波和 p 波有贡献, 此时弹性散射截面可表示为 [23]

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi a_s^2}{(1 - a_s r_c k^2/2)^2} + \frac{12\pi a_p^6 k^4}{1 + a_p^6 k^6}. \quad (9)$$

图 2 中虚线表示仅有最低两个分波, 也即 s 和 p 波, 对散射有贡献时的散射截面. 对于单重态和三重态, 当碰撞能量分别低于 10  $\mu\text{K}$  和 50  $\mu\text{K}$  时, 主要是 s 波和 p 波对散射截面有贡献, 更高分波对散射截面的贡献基本可以忽略. 因为随着碰撞能量的增加, s 和 p 波对截面的贡献将越来越小, 图中显示不正确的趋势, 所以上式仅在极低碰撞能量下适用. 另外, 从图中可以看出, 随着碰撞能量的增加, 高阶分波对散射截面的贡献变得越来越大, 从而总散射截面逐渐增加. 此时, 散射截面有许多尖锐的峰出现, 该峰是因为碰撞原子对暂时被离心势垒所捕获而形成准束缚态的一种弹性散射共振, 也即势形共振. 势形共振在冷碰撞物理学中非常重要 [24], 因为即使对于最低的非零分波, 碰撞能量一般也低于其所产生的离心势垒的高度. 计算发现单重态和三重态分别发生 f 波和 i 波形状共振, 共振能分别

位于 7.3 mK 和 47.4 mK 附近.

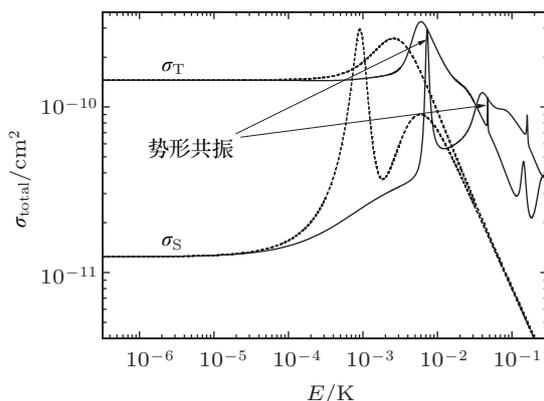


图2 Na-Na 自旋单重态和三重态 s+p 波截面 (虚线) 和总弹性散射截面 (实线)

### 4.3 简并内态近似

在磁阱中进行的 BEC 实验, 原子一般被捕获在某一特定的超精细态, 也即弱场搜寻态. 对于处在基态的钠原子, 共有三个弱场搜寻态  $|F=1, m_f=-1\rangle$ ,  $|F=2, m_f=1\rangle$  和  $|F=2, m_f=2\rangle$ , 其中,  $F$  是钠原子的总角量子数,  $m_f$  是磁量子数. 因使用暗磁光阱技术可进一步提高磁光阱内的原子数密度, 但此后原子仅处在超精细态  $|1, -1\rangle$  上. 该精细态是单重态和三重态能级的混合, 在简并内态近似下<sup>[17]</sup>, 此时 s 波散射长度可由把超精细态投影到单重态和三重态来计算

$$a = a_s P_s + a_t P_t \quad (10)$$

式中  $P_s$  和  $P_t$  分别为原子处在单重态和三重态的几率, 可通过计算重偶矩阵获得<sup>[25]</sup>. 应用此近似, 我们计算 Na-Na 原子均处在  $|1, -1\rangle$  超精细态时的 s 波散射长度, 此时  $P_s = 3/16$ ,  $P_t = 13/16$ , 计算得到散射长度为  $55.77a_0$ , 与密偶法计算所得的值<sup>[13]</sup> 相

比误差约为 2.2%, 表明相对于较为复杂而又高耗时的密偶法, 简并内态近似是一种计算散射长度非常方便快捷的方法. 表 3 给出了实验上感兴趣的 s 波散射长度. 从表中结果可以看出, 处在单重态的几率小于三重态的几率, 所以超精细态的 s 波散射长度比较接近于三重态散射长度的值.

表3 Na-Na 处在超精细态  $|F, m_f\rangle$  时 s 波散射长度

$ F, m_f\rangle +  F, m_f\rangle$	$P_s$	$P_t$	$a_s$	文献 [13]
$ 1, 1\rangle +  1, 1\rangle$	3/16	13/16	55.77	54.54(20)
$ 1, 1\rangle +  1, 0\rangle$	1/4	3/4	52.93	54.54(20)
$ 1, 1\rangle +  1, -1\rangle$	5/16	11/16	50.08	50.78(40)
$ 1, 0\rangle +  1, 0\rangle$	1/4	3/4	52.93	52.66(40)
$ 1, 0\rangle +  1, -1\rangle$	1/4	3/4	52.93	54.54(20)
$ 1, -1\rangle +  1, -1\rangle$	3/16	13/16	55.77	54.54(20)

## 5 结论

本文基于精确的钠原子间单重态和三重态相互作用势, 系统研究了钠原子在超冷温度下的弹性碰撞特性. 通过数值积分计算散射相移, 在考虑截断误差和一阶长程修正的基础上, 精确获得了超冷 Na-Na 原子之间碰撞的 s 波散射长度、有效力程、p 波散射长度以及束缚态数目等散射参数. 超冷温度下 Na-Na 原子之间的弹性散射截面主要为 s 波和 p 波贡献, 随着碰撞能量的增加截面有丰富的势形共振出现, 单重态和三重态分别存在 f 波和 i 波势形共振, 能量分别在 7.3 mK 和 47.4 mK. 利用简并内态近似计算了 Na-Na 处在实验上感兴趣的超精细态的 s 波散射长度. 实验上非常关注的是外加磁场时超冷原子气体产生 Feshbach 共振的位置以及共振宽度, 我们下一步将开展相关的研究工作.

- [1] Weiner J, Bagnato V S, Zilio S, Julienne P S 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 1
- [2] Chin C, Grimm R, Julienne P S, Tiesinga E 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 125
- [3] Burnett K, Julienne P S, Lett P D, Tiesinga E, Williams C J 2002 *Nature* **416** 225
- [4] Kagan Yu, Shlyapnikov G V, Walraven J T M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2670
- [5] Jeung G H, Hagebaum-Reignier D, Jamieson M J 2010 *J. Phys. B* **43** 235208
- [6] Zhang J C, Zhu Z L, Liu Y F, Sun J F 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 123401

- [7] Davis K B, Mewes M-O, Andrews M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [8] McKenzie C, Denschlag J H, Häffner H, Browaeys A, de Araujo L E E, Fatemi F K, Jones K M, Simsarian J E, Cho D, Simoni A, Tiesinga E, Julienne P S, Helmerson K, Lett P D, Rolston S L, Phillips W D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 120403
- [9] Côté R, Dalgarno A 1995 *Phys. Rev. A* **50** 4827
- [10] Zemke C J, Stwalley W C 1994 *J. Chem. Phys.* **100** 2661
- [11] van Abeelen F A, Verhaar B J 1999 *Phys. Rev. A* **59** 578
- [12] Samuelis C, Tiesinga E, Laue T, Elbs M, Knöckel H, Tiemann E 2000 *Phys. Rev. A* **63** 012710

- [13] Knoop S, Schuster T, Scelle R, Trautmann A, Appmeier J, Oberthaler M K 2011 *Phys. Rev. A* **83** 042704
- [14] Zhang J C, Zhu Z L, Sun J F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 093401 (in Chinese) [张计才, 朱遵略, 孙金锋 2012 物理学报 **61** 093401]
- [15] Dalgarno A, Rudge M R H 1965 *Proc. R. Soc. London Ser. A* **286** 519
- [16] Simos T E 1997 *Computers Chem.* **21** 125
- [17] Mott N F, Massey H S W 1965 *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford: Clarendon)
- [18] Flambaum V V, Gribakin G F, Harabati C 1999 *Phys. Rev. A* **59** 1998
- [19] Gribakin G F, Flambaum V V 1993 *Phys. Rev. A* **48** 546
- [20] Jamieson M J, Zygelman B 2001 *Phys. Rev. A* **64** 032703
- [21] Mount B J, Redshaw M, Myers E G 2010 *Phys. Rev. A* **82** 042513
- [22] Jamieson M J, Sarbazi-Azad H, Ouerdane H, Jeung G-H, Lee Y S, Lee W C 2003 *J. Phys. B* **36** 1085
- [23] Anderlini M, Courtade E, Cristiani M, Cossart D, Ciampini D, Sias C, Morsch O, Arimondo E 2005 *Phys. Rev. A* **71** 061401
- [24] Boesten H M J M, Tsai C C, Verhaar B J, Heinzen D J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 5194
- [25] Weiss S B, Bhattacharya M, Bigelow N P 2003 *Phys. Rev. A* **68** 042708

# Accurate calculation of elastic scattering properties of ultracold sodium atoms\*

Zhang Ji-Cai<sup>1)†</sup> Zhu Zun-Lüe<sup>1)</sup> Sun Jin-Feng<sup>1)2)</sup>

1) (College of Physics and Information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

2) (Department of Physics, Luoyang Normal College, Luoyang 471022, China)

(Received 10 April 2012; revised manuscript received 3 August 2012)

## Abstract

Based on the accurate singlet and triplet state interatomic potentials for Na<sub>2</sub>, a theoretical study of elastic scattering properties of sodium atoms at ultracold temperatures is reported in this paper. The s-wave scattering length, effective range, the p-wave scattering length and the number of bound states are calculated. The singlet and triplet elastic scattering cross section between sodium atoms at ultracold temperatures are dominated by s-wave scattering, and shape resonances occur with collision energy increasing. There exist pronounced f-wave and i-wave shape resonances for the singlet and triplet cross section. In addition, s-wave scattering length is calculated by using the degenerate internet state approximation for selected hyperfine states of sodium atoms. The results are in agreement with calculated values obtained by close-coupling method.

**Keywords:** scattering parameters, elastic scattering cross section, degenerate internet state approximation

**PACS:** 34.10.+x, 34.20.cf, 34.50.Cx

**DOI:** 10.7498/aps.62.013401

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274097) and the Natural Science Foundation of Educational Bureau of Henan Province, China (Grant No. 2011A140017).

† Corresponding author. E-mail: jicaiz@gmail.com