

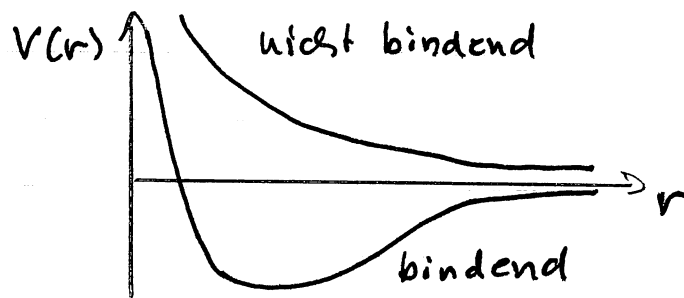
4. Kollisionen in ultrakalten atomaren Gasen

(A) Streuung neutraler Atome

Wenn sich zwei neutrale Atome annähern kommt es zu einer Wechselwirkung der Valenzelektronen mit dem anderen Atom. Dies führt im Schwerpunktsystem zu einem Wechselwirkungspotential (in Born-Oppenheimer Näherung)

$$(68) \quad V_{ij}(\vec{r}) = E_{\text{elektron}}^{ij}(\vec{r})$$

wobei i und j die elektronischen Zustände der Atome spezifizieren.



Für Streuprozesse ist oft nur das asymptotische Verhalten der Potentiale wichtig:

$$(69) \quad V(r) \xrightarrow{\text{große } r} \sum_n \frac{C_n}{r^n}$$

$n=6$	van-der Waals	s-s
$n=5$	Quadrupol-Quadrupol	p-p
$n=3$	Dipol-Dipol	s-p

Betrachten stationäre Schrödingergleichung für
 2-Teilchenwellenfunktion im Schwerpunkts $\vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$
 Relativkoordinate $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ ($m_1 = m_2 = m$)

$$(70) \quad \varphi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{R}) \varphi(\vec{r})$$

Sind die Streupartner identische Teilchen muß
 gelten:

Bosonen: $\varphi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$

$$(71) \quad \Rightarrow \quad \varphi(\vec{r}) = \varphi(-\vec{r})$$

Fermionen: $\varphi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\varphi_{12}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$

$$(72) \quad \Rightarrow \quad \varphi(\vec{r}) = -\varphi(-\vec{r})$$

stationäre Schrödingergleichung für $\varphi(\vec{r})$

$$(73) \quad (\Delta + k^2) \varphi_k(\vec{r}) = \frac{2m^*}{\hbar^2} V(\vec{r}) \varphi_k(\vec{r})$$

mit Energie $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, $m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Mit Hilfe der Greenschen Funktion der Helmholtzgleichung

$$(74) \quad (\Delta + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$(75) \quad G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

kann (73) in eine Integralgleichung überführt werden

$$(76) \quad \varphi_k(\vec{r}) = \varphi_k^0(\vec{r}) - \frac{2m^*}{4\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \varphi_k(\vec{r}')$$

Hat das Potential $V(\vec{r}')$ nur einen endlichen Wirkungsbereich, kann man folgende Näherung verwenden:

$$(77) \quad |\vec{r}-\vec{r}'| = r - \vec{r}' \cdot \hat{n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \quad \hat{n} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$$

$$(78) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\varphi_k(\vec{r}) = \varphi_k^0(\vec{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\hat{n}) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right)}_{r \rightarrow \infty}$$

wobei die sog. Streuamplituden $f_k(\hat{n})$ die Form haben:

$$(79) \quad f_k(\hat{n}) = -\frac{2m^*}{4\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}' e^{-ik\hat{n} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi_k(\vec{r}')$$

Für φ_k^0 setzen wir ebene Wellen an

$$(80) \quad \varphi_k^0(\vec{r}) = \frac{1}{2} (e^{ikz} \pm e^{-ikz}) \quad \begin{array}{l} + \text{ Bosonen} \\ - \text{ Fermionen} \end{array}$$

Ist $V(\vec{r}) = V(r)$, d.h. ist V sphärisch symmetrisch gilt $f_k(\hat{n}) = f_k(\vartheta)$ mit $\vartheta \notin (\vec{r}, \vec{e}_z)$. Dann können wir den Ansatz machen

$$(81) \quad \varphi_k(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} R_{k,2l}(r) P_{2l}(\cos\theta) & \text{Bose} \\ \sum_{l=0}^{\infty} c_{(2l+1)} R_{k,2l+1}(r) P_{2l+1}(\cos\theta) & \text{Fermi} \end{cases}$$

Die R_{kl} erfüllen die DGL

$$(82) \quad \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2m^* V(r)}{\hbar^2} \right] R_{kl}(r) = 0$$

Falls $V(r)$ schneller als $\frac{1}{r}$ für $r \rightarrow \infty$ abfällt, haben die Lösungen von (82) die asymptotische Form

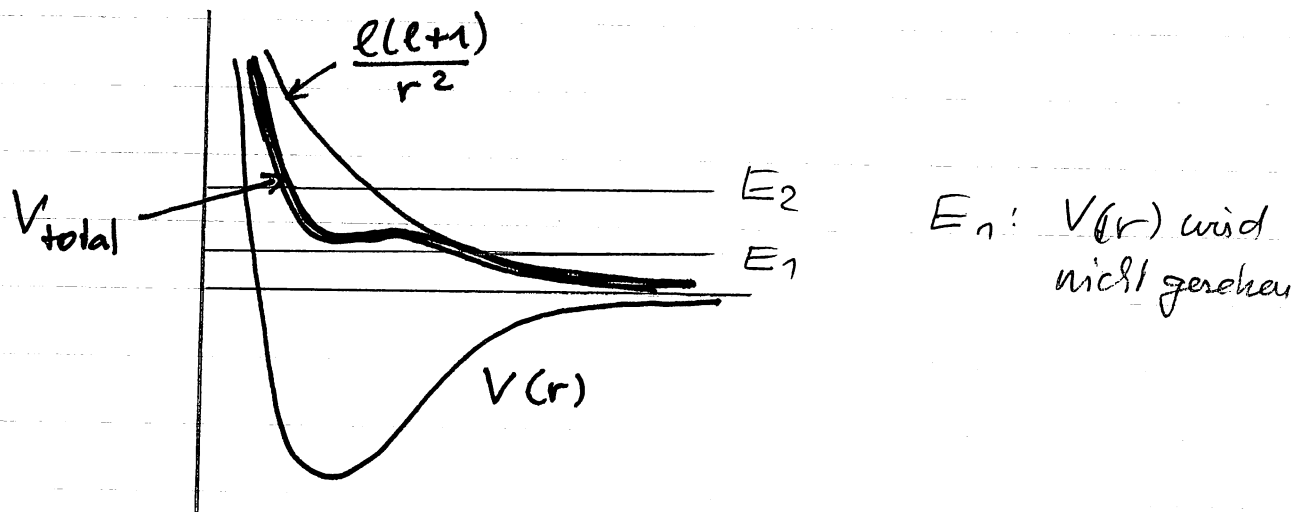
$$(83) \quad R_{kl}(r) = \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{kl}\right)$$

Die δ_{kl} heißen Streuphasen. Aus (81) (83) und (78) folgt für die Streuamplituden:

$$(84) \quad f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_{kl}} \sin(\delta_{kl}) P_l(\cos\theta)$$

Aus (82) ist ersichtlich, daß bei der Streuung der l -ten Partialwelle neben dem Streupotential $V(r)$ immer noch eine Zentrifugalbarriere $l(l+1)/r^2$ auftritt.

Ist $V(r)$ räumlich beschränkt gibt es für Stoßpartner einer bestimmten Energie $\hbar^2 k^2 / 2m^*$ immer ein maximales $l = l_{\max}$ für welches die Teilchen überhaupt noch in den Bereich von $V(r)$ vordringen können:



Für Atome mit sehr geringer mittlerer kinetischer Energie (geringe Temperatur) ist oft nur Streuung der niedrigsten Partialwellen relevant;

Bosonen: $\ell=0$ s-Wellenstreuung
Fermionen: $\ell=1$ p-Wellenstreuung

Diese Eigenschaft ultrakalter Atome werden wir jetzt ausnutzen um das tatsächliche Streupotential $V(\vec{r})$ durch ein Pseudopotential zu ersetzen, welches dieselbe Streuphase $\sigma_{\ell=0}$ (Bosonen) liefert.

(B) s-Wellenstreuung und Pseudopotential

Gründe für die Einführung eines Pseudopotentials:

(i) Die exakte Form von $V(r)$ ist schwer zu berechnen und schwer zu messen

(ii) Die Existenz gebundener Zustände von $V(r)$ führt dazu, daß ein Bosekondensat nur metastabil ist. Eine Theorie die $V(r)$ voll mitnimmt würde als Grundzustand Moleküle und nicht ein BEC liefern.

(iii) Wegen der gebundenen Zustände kann $V(r)$ nicht störungstheoretisch behandelt werden.

Das Streuverhalten bei kleinen Energien ist durch die Streuamplitude $f(k)$ bei $k \rightarrow 0$ bestimmt.
Der Grenzwert

$$(85) \quad a = - \lim_{k \rightarrow 0} f(k) = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{e^{i\delta_0} \sin \delta_0}{k}$$

definiert die s-Wellenstreuungslänge, die nur für unterscheidbare oder bosonische Streupartner von Null verschieden ist. Für identische Fermionen gilt

$$(86) \quad a_{\text{Fermi}} \equiv 0$$

D.h. im Limes $k \rightarrow 0$ gilt

$$(87) \quad \varphi(\vec{r}) = \varphi^0(\vec{r}) - \frac{a e^{ikr}}{r}$$

Nun wollen wir das exakte Streupotential durch ein effektives Potential ersetzen, welches auf dieselbe s-Wellenstreuungslänge führt. Der einfachste Ansatz

hierzu ist (siehe z.B. Huang "Statistical Mechanics")

$$(88) \quad \boxed{\begin{aligned} V_g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= g \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \frac{\partial}{\partial r} r \\ &= g \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[1 + r \frac{\partial}{\partial r} \right] \end{aligned}}$$

wobei

$$(89) \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{2m^*} a$$

gilt. Der Ableitungsterm hat den Effekt einer Regularisierung. Anwendung von V_g auf $\varphi(\vec{r})$ aus (87) liefert z.B.

$$(90) \quad V_g \varphi(\vec{r}) = g \delta(\vec{r}) \varphi_{\text{reg}}(\vec{r})$$

wobei $\varphi(\vec{r}) = \varphi_{\text{reg}}(\vec{r}) + \frac{A}{r}$, denn

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{A}{r} \right) \Big|_{r=0} = 0$$

und

$$r \frac{\partial}{\partial r} \varphi_{\text{reg}}(\vec{r}) \Big|_{r=0} = 0$$

d.h.

$$(91) \quad \frac{\partial}{\partial r} r \varphi(\vec{r}) \Big|_{r=0} = \varphi_{\text{reg}}(\vec{r}) \Big|_{r=0}$$

Man sieht sofort, daß das Pseudopotential V_g auf die Integralgleichung der Streuung (siehe Gl. (76))

• führt

$$(92) \quad \varphi_k = \varphi_k^0 - \frac{2m^2}{4\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} g \delta(\vec{r}-\vec{r}') \frac{\partial}{\partial r} r \varphi_k$$

$$= \varphi_k^0 - \frac{e^{ikr}}{r} a \left(\frac{\partial}{\partial r} r \varphi_k \right) \Big|_{r=0}$$

mit

$$(93) \quad a(k) \equiv a \left(\frac{\partial}{\partial r} r \varphi_k \right) \Big|_{r=0}$$

hat man

$$(94) \quad \varphi_k = \varphi_k^0 - a(k) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Einsetzen von (94) in (93) und $\varphi_k^0(\vec{r}) = \cos kr$
 $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} r \varphi_k \Big|_{r=0} &= \frac{\partial}{\partial r} r \cos kr \Big|_{r=0} - a(k) ik \\ &= 1 - ik a(k) \end{aligned}$$

D.h.

$$a(k) = a (1 - ik a(k))$$

(95)

$$a(k) = \frac{a}{1 + ika}$$

Im Grenzfall $k \rightarrow 0$ hat das Pseudopotential also dieselbe Streulösung φ_k wie das tatsächliche Potential.

Mit Hilfe des Pseudopotentials (88) können wir den Hamiltonoperator des schwach wechselwirkenden Gases in s-Wellennäherung schreiben ($m^* = m/2$)

(96)

$$\hat{H} = \int d^3\vec{r} \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}}(\vec{r}) \right] \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \int d^3\vec{r} \, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r})$$

Hierbei ist implizit eine Regularisierung von $\hat{\psi}(\vec{r})$ im Wechselwirkungsterm vorausgesetzt.

Im Folgenden werden wir ein schwach wechselwirkendes Bosegas bzw. Gemische verschiedener Fermigase mit dem Hamiltonian (96) beschreiben.

(96) hat eine $U(1)$ Symmetrie, d.h. $\hat{H}$ ist invariant unter der Transformation

$$(97) \quad \hat{\psi} \rightarrow \hat{\psi} e^{i\phi}$$

Betrachten wir zur Illustration ein 1-dimensionales System und ein harmonisches Fallepotential, so können wir $\hat{\psi}(z)$ nach Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators entwickeln. Dies liefert

$$(98) \quad \hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{k=0}^{\infty} (\hbar \omega_0 k - \mu) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \sum_{k, k', k'', k'''} U_{kk'k''k'''} \hat{a}_k^+ \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_{k''} \hat{a}_{k'''}.$$

wobei ω_0 die Eigenfrequenz der Falle ist und die Grundzustandsenergie Null gesetzt wurde.

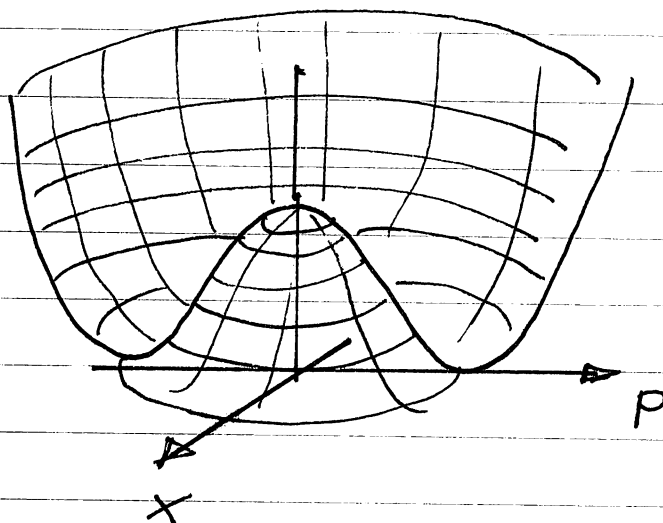
$$(99) \quad U_{kk'k''k'''} \sim a \int dz \phi_k^*(z) \phi_{k'}^*(z) \phi_{k''}(z) \phi_{k'''}(z).$$

Nehmen wir weiterhin zur Vereinfachung an, daß ω_0 so groß ist, daß nur $k=0$ besetzt wird, bekommen wir

$$(100) \quad \hat{H} - \mu \hat{N} = -\mu \hat{a}^+ \hat{a} + U \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}$$

Dies ist gerade ein anharmonischer Oszillator mit negativer Masse falls $\mu > U$

$$(101) \quad \hat{H} - \mu \hat{N} = -(\mu - U) (\hat{x}^2 + \hat{p}^2) + U (\hat{x}^2 + \hat{p}^2)^2$$



Für $\mu > U$ hat der Grundzustand eine endliche Energie aber keine ausgezeichnete Phase im (x, p)