

MASTER

Resonantie gedrag van ultrakoude 39K atomen in een statische magnetische trap

Tempelaars, J.G.C.

Award date:
1996

[Link to publication](#)

Disclaimer

This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

Technische Universiteit Eindhoven
Faculteit der Technische Natuurkunde
Vakgroep Theoretische Natuurkunde

**Resonantie gedrag van
ultrakoude ^{39}K atomen
in een statische magnetische trap**

J.G.C. Tempelaars

4 juli 1996

Verslag van een afstudeerwerk in de werkgroep Atoomfysica en Quantumelektronica.
Begeleiding: Prof. Dr. B.J. Verhaar en Dr. A.J. Moerdijk.

Samenvatting

Met de realisatie van Bose-Einstein condensatie (BEC) in de zomer van 1995 treedt het vakgebied dat zich bezighoudt met het wandvrij opsluiten en afkoelen van atomaire gasen een nieuw tijdperk binnen. Om BEC te kunnen waarnemen sluit men atomen op in een magnetische valkuil en koelt de atomen tot zeer lage temperaturen (in de orde van nanoKelvins). Er zijn een aantal voorwaarden waaraan voldaan moet worden wil zich een (stabiel) Bose condensaat kunnen vormen. Eén van de voorwaarden waaraan voldaan moet worden is dat de zogenaamde verstrooiingslengte, een parameter waarmee men elastische twee-deeltjes botsingen in het lage temperatuur gebied kan beschrijven, positief moet zijn. Dit afstudeerwerk, verricht binnen de werkgroep Atoomfysica en Quantumelektronica van de vakgroep Theoretische Natuurkunde, heeft betrekking op het gedrag van botsende ultrakoude ^{39}K atomen in een statische magnetische trap. We hebben met name gekeken naar de bovenste toestand van het onderste hyperfijn manifold (de $f = 1$, $m_f = -1$ toestand). Dit omdat deze toestand experimenteel zeer geschikt is voor BEC experimenten. In het verleden is in onze groep aangetoond dat de verstrooiingslengte van deze toestand voor een willekeurig alkali-atoom als functie van het magneetveld resonantiegedrag vertoont. Deze resonanties worden Feshbach resonanties genoemd. Dit biedt de mogelijkheid om de waarde van de verstrooiingslengte te variëren en zelfs van teken te laten veranderen, en daardoor de eigenschappen van het Bose condensaat fundamenteel te wijzigen. Om de posities van deze resonanties te kunnen voorspellen moet men beschikken over voldoende nauwkeurige potentialen. Uit experimentele gegevens hebben we de potentialen voor ^{39}K geconstrueerd. Met deze potentialen hebben we onder andere via gekoppelde kanalen berekeningen de lokaties en de breedten van de verschillende resonanties weten te bepalen. Door de grote onzekerheden in de potentialen hebben we geen nauwkeurige uitspraak kunnen doen over de preciese lokaties van de resonanties. We kunnen echter wel met zekerheid zeggen dat de verstrooiingslengte van de beschouwde hyperfijn toestand groot en positief is en dat er zich geen resonanties bevinden in het laagveld zoekende gedeelte van de bovenste toestand van het onderste hyperfijn manifold.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	4
1.1	Koude atomen	4
1.2	De verstrooiingslengte	5
1.3	De statische magnetische trap	6
2	Feshbach theorie	9
2.1	Resonanties	10
2.2	Gemodificeerde Feshbach theorie	13
2.3	De verstrooiingslengte als functie van het magneetveld	15
3	De Hamiltoniaan van het verstrooiingsprobleem	17
3.1	De interne Hamiltoniaan	18
3.2	Energieniveaus van een ^{39}K - ^{39}K systeem	20
4	Bepaling van de singlet en triplet potentialen	23
4.1	De interatomaire potentialen	23
4.1.1	Uitbreiding voor kleine atoom afstanden	24
4.1.2	Uitbreiding voor grote atoom afstanden	24
4.2	Inverse Storingsrekening Analyses	25
4.3	Onzekerheden in de potentialen	28
5	Bepaling van de plaats van de resonanties	33
5.1	Verwachte resonanties	33
5.2	Vergelijking van de lokaties met gekoppelde kanalen berekeningen	35
6	Resonantie breedte	40
6.1	Breedte van de ^{39}K singlet resonantie	40
6.2	Breedte van de overige resonanties	44
7	Conclusies	45

A	Belangrijke constanten voor ^{39}K	46
B	De hyperfijn eigentoestanden	47
	B.1 Het 2×2 eigenwaarden probleem	47
	B.2 De interne eigentoestanden	47
C	De RKR-potentialen	55
	C.1 De RKR-singlet potentiaal	55
	C.2 De RKR-triplet potentiaal	55
D	Twee-atoom basis transformatie	56
E	Spin matrix elementen	59

Hoofdstuk 1

Inleiding

Dit verslag betreft een afstudeeronderzoek verricht bij de vakgroep Theoretische Natuurkunde, binnen de werkgroep Atoomfysica en Quantumelektronica. Deze werkgroep verricht fundamenteel onderzoek op het gebied van koude atomen. Het doel van dit afstudeerwerk is eigenschappen te voorspellen van de botsingen van ultrakoude ^{39}K atomen in een statische magnetische trap. In dit eerste hoofdstuk worden eerst enkele algemene aspecten genoemd met betrekking tot de fysica van koude atomen.

1.1 Koude atomen

De laatste twee decennia heeft er een snelle ontwikkeling plaatsgevonden op het gebied van het wandvrij opsluiten en het koelen van neutrale atomaire gassen m.b.v. lasers. De temperaturen die nu gerealiseerd kunnen worden liggen in het micro-Kelvingebied of daaronder.

Een belangrijk doel dat de koude-atoomfysici zich vanaf het begin hebben gesteld is het realiseren van Bose-Einstein condensatie (BEC). Men spreekt van BEC als er sprake is van een macroscopische populatie van de grondtoestand bij een eindige temperatuur T , d.w.z. een temperatuur waarbij $k_B T$ niet te verwaarlozen is ten opzichte van het energieverval tussen de laagste twee 1-deeltjes-eigentoestanden van het systeem. Een voorbeeld van een gebied in de natuurkunde waarbij BEC een belangrijke rol speelt is superfluïde helium dat volgens de theorie een Bose-Einstein-condensaat is. De sterke wisselwerking in vloeibaar helium maakte een dergelijk systeem ongeschikt voor het bestuderen van BEC, dit in tegenstelling tot een gaswolk van koude atomen waarin de interactie tussen de deeltjes zwak is. Verder onderzoek naar de eigenschappen van een dergelijk condensaat biedt wellicht de mogelijkheid voor een beter begrip van supergeleiding en superfluiditeit van complexere systemen.

Voor het bereiken van BEC in een zwak wisselend gas van atomen met massa m moet

de thermische de Broglie-golflengte

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (1.1)$$

dezelfde orde van grootte hebben als de gemiddelde afstand tussen de atomen. Dit betekent dat er niet alleen een lage temperatuur nodig is maar ook een hoge dichtheid. Deze combinatie bleek moeilijk realiseerbaar, maar afgelopen jaar heeft men BEC kunnen observeren in gassen van ^{87}Rb [1], ^7Li [2] en ^{23}Na atomen [3]. Deze successen zijn het gevolg van een nieuwe koeltechniek namelijk rf geïnduceerde afdampkoeling [4] waarmee veel lagere temperaturen bereikt kunnen worden.

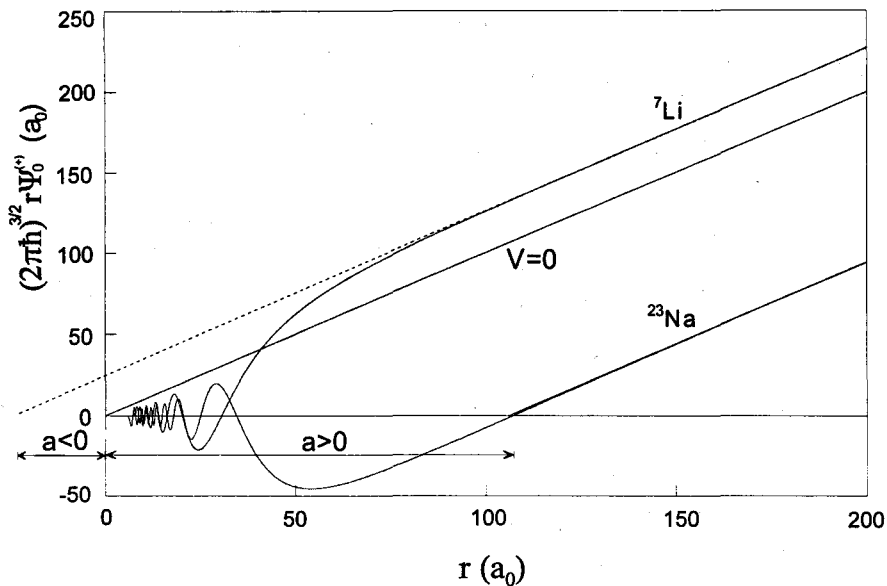
De in dit verslag beschreven theorie heeft betrekking op dergelijke experimenten waarbij in een magneetveld getrapte en gekoelde atomen bij zeer lage temperaturen (μK gebied en lager) bestudeerd worden. Het is daarom mogelijk botsingen te bestuderen waarbij λ_D groter is dan de dracht van de interatomaire interactie. Hierbij spelen quantummechanische effecten een belangrijke rol.

Een belangrijke parameter bij botsingen tussen ultra koude atomen is de verstrooiingslengte a . Deze dient positief te zijn voor het verkrijgen van een stabiel Bose-Einstein condensaat. Het blijkt dat zich voor bepaalde waarden van het magneetveld resonanties voordoen in de verstrooiingslengte. Dit biedt de mogelijkheid het teken van de verstrooiingslengte te veranderen en tevens groot en positief te maken, een conditie voor efficiënte afdampkoeling. Tevens zijn de resonanties interessant omdat ze zeer lokaal de structuur van de twee-atoom correlatiefunctie kunnen veranderen met totaal verschillende eigentstanden als gevolg.

1.2 De verstrooiingslengte

Op de tijdschaal van twee deeltjes botsingen kunnen alle eigenschappen van een verdund ultra koud gas uitgedrukt worden in één enkele (continue) grootheid, de verstrooiingslengte a , een karakteristieke parameter voor de interactie tussen twee atomen bij lage botsings energie. Zowel in 3D als in 2D verstrooiings situaties, kan a gedefinieerd worden als de door de potentiaal veroorzaakte radiale verplaatsing van de radiale botsings golffunctie buiten het gebied van interactie. Dit is schematisch weergegeven in figuur 1.1.

De verstrooiingslengte kan op verschillende manieren bepaald worden. Wanneer de interactie potentiaal nauwkeurig genoeg bekend is uit ab-initio berekeningen zoals voor H, kan deze bepaald worden uit een lage energie continuüm golffunctie, in de vorm van een radiale integraal of uit de asymptotische faseverschuiving (zie figuur 1.1). Voor zwaardere atomen dan H is de potentiaal in het algemeen niet zo nauwkeurig bekend. Het is echter noodzakelijk de potentiaal zo goed mogelijk te bepalen daar de verstrooiingslengte extreem gevoelig is voor kleine details in de potentiaal. Kleine variaties in de potentiaal kunnen de verstrooiingslengte over de hele reële as laten variëren. Door uit experimentele gebonden-toestands spectra bepaalde grootheden te extrapoleren tot het continuüm, kan



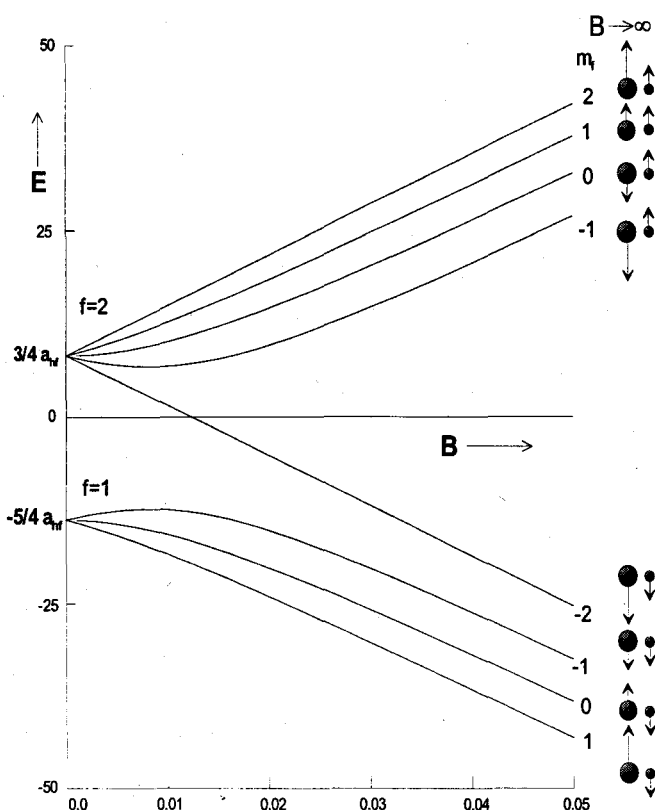
Figuur 1.1: Lage energie verstrooiings toestanden voor de ${}^7\text{Li}$ en ${}^{23}\text{Na}$ triplet interactie. De verstrooiingslengte kan gevonden worden door de golf functies voor grote afstand te extrapoleren naar de r -as of door de golf functie voor grote afstand te vergelijken met de situatie zonder interactie ($V = 0$).

de verstrooiingslengte redelijk nauwkeurig worden bepaald. Dit is in onze groep met succes gedaan voor ${}^7\text{Li}$ en ${}^{23}\text{Na}$ [5]. Hierbij werd gebruik gemaakt van de energie afstanden tussen de hoogste aangeslagen twee-deeltjes toestanden.

Voor zwaardere atomen wordt het ontbreken van informatie over de potentialen te belangrijk. Er bestaat echter een andere methode, fotoassociatie [6], waarbij men de grondtoestands golf functie bepaalt uit de absorptie waarschijnlijkheid van laserlicht. Een laatste methode voor het bepalen van a maakt gebruik van de observatie van verschuivingen in de Bohrfrequenties voor hyperfijnovergangen. Deze methode is voorgesteld en toegepast in het geval van de atomaire Cs fontein [7]. Deze verschuivingen geven indirecte informatie over de potentiaal en kunnen gebruikt worden om grootheden belangrijk voor ultra koude botsingen zoals de verstrooiingslengte af te leiden. Hoe de potentialen voor ons geval van ${}^{39}\text{K}$ zijn bepaald staat beschreven in hoofdstuk 3.

1.3 De statische magnetische trap

Het bereiken van BEC in alkali gassen is mede te danken aan het wandvrij opsluiten van de gassen in een magnetische trap. Het principe van de magnetische trap ligt in het creëren



Figuur 1.2: Hyperfijn en Zeeman opsplitsing voor de $4S_{1/2}$ -grondtoestand van ^{39}K als functie van het magneetveld. Energie in miliKelvin, magneetveld in Tesla. De grote bollen geven de kern weer en de kleine bolletjes het buitenste elektron.

van een lokale potentiaal put door de energie onder invloed van een inhomogeen magneetveld te verplaatsen. Dit principe wordt geïllustreerd aan de hand van het hyperfijn diagram van ^{39}K in de grondtoestand, weergegeven in figuur 1.2. Onder invloed van de hyperfijn interactie splitst de elektronische grondtoestand ($4S_{1/2}$ voor K) in twee niveaus, met $f = i \pm \frac{1}{2}$; overeenkomend met de totale spinvector $\vec{f} = \vec{i} + \vec{s}$, met \vec{i} de nucleaire en \vec{s} de elektronspin. We gebruiken in het vervolg gewone letters voor één-atoom quantumgetallen en hoofdletters voor twee-atoom quantumgetallen. De Zeeman interactie zorgt voor verdere opsplitsing in toestanden die voor een willekeurige veldsterkte weergegeven worden door $|f, m_f\rangle$. Er bestaan twee soorten toestanden: toestanden met afnemende energie en toestanden met toenemende energie voor toenemend magnetisch veld. Dit worden hoogveld zoekende respectievelijk laagveld zoekende toestanden genoemd.

In principe geeft opslag in een trap van de laagste toestand de voorkeur omdat alle processen die overgangen veroorzaken endotherm zijn. Het probleem is echter dat er in de

vrije ruimte geen maximum bestaat in een statisch magneetveld zodat het onmogelijk is deze toestand te gebruiken om atomen te trappen. De enige toestanden die in aanmerking komen voor het trappen van atomen zijn de bovenste van beide hyperfijn manifolds. De andere toestanden hebben, tengevolge van zogenaamde interatomaire exchange interactie, een relatief korte levensduur en zijn daardoor niet te gebruiken voor trapping. Merk op dat de exchange interactie, welke evenredig is met het verschil $V_S - V_T$ van de singlet ($S = 0$) en triplet ($S = 1$) interacties, de totale M_F behoudt.

Er bestaat een verschil tussen de bovengenoemde twee hoogste toestanden. De hoogste toestand van het bovenste manifold wordt de dubbel gepolariseerde toestand genoemd; dit omdat de nucleaire en elektronspin maximaal dezelfde kant opwijzen (zie figuur). Dit heeft tot gevolg dat de spinstructuur niet verandert onder invloed van het magneetveld. Dit is zeker niet het geval bij de hoogste toestand van het onderste manifold. Het zijn deze veranderingen van de spinstructuur die, voor bepaalde waarden van het magneetveld, resonantiegedrag kunnen veroorzaken tijdens botsingen van atomen.

Hoofdstuk 2

Feshbach theorie

Koude botsingen worden doorgaans beschreven met behulp van de gekoppelde kanalen methode [8, 9]. De effectieve totale Hamiltoniaan van het systeem wordt daarbij geschreven als de som van een deel H_0 , met eigentoestanden $|\{\alpha\beta\}\rangle$ (de zogenaamde kanalen) welke asymptotisch overgaan in een produkt van gesymmetriseerde één-atoom interne toestanden $|\alpha\rangle$ en $|\beta\rangle$, en een interactie deel V dat de kanalen koppelt. Door de totale verstrooiings toestand Ψ te ontwikkelen in deze basis met \vec{r} -afhankelijke coëfficiënten:

$$\Psi = \sum_{\{\alpha\beta\}} \psi_{\{\alpha\beta\}}(\vec{r}) |\{\alpha\beta\}\rangle$$

en deze te substitueren in de Schrödinger vergelijking, vinden we een set van gekoppelde differentiaal vergelijkingen voor de relatieve bewegings golffuncties $\psi_{\{\alpha\beta\}}(\vec{r})$, een gekoppelde-kanalen probleem. De extreem lage snelheden, karakteristiek voor koude botsingen, maken het mogelijk om ons te beperken tot die set van gekoppelde kanalen die betrekking hebben op de elektronische grondtoestand, terwijl de relatieve beweging beperkt blijft tot de partiële golven met de laagste l .

Wanneer van de totale energie E de beschikbare asymptotische relatieve kinetische energie in een kanaal positief is, noemt men dit kanaal open. Als dit niet het geval is noemt men het kanaal gesloten. Men noemt E de drempel energie wanneer er bij die waarde een bepaald kanaal geopend wordt. De koppeling tussen de open en gesloten subruimten in de Hilbert ruimte is essentieel voor het bestaan van Feshbach resonanties. In het vervolg zijn we geïnteresseerd in het gedrag van Feshbach resonanties bij koude botsingen.

2.1 Resonanties

Een interessant aspect van een systeem van getrapte botsende atomen is de lokatie van resonanties, gebieden in het spectrum waar de verstrooiings cross-sectie snel varieert (als functie van de kinetische energie of, zoals hier, als functie van het magneetveld). Twee soorten resonanties spelen een belangrijke rol bij botsingen: vorm of potentiaal resonanties en Feshbach resonanties. De eerste soort ontstaat wanneer een potentiaal barrière een quasi gebonden toestand creëert in het continuüm die na verloop van tijd vervalt in een vrije toestand. Een Feshbach resonantie, de belangrijkste voor dit verslag, ontstaat wanneer de energie van gebonden toestanden behorende bij een gesloten kanalen-subruimte overeenkomt met de energie van een open kanaal en er een koppeling ontstaat tussen beide zodat tijdelijke overgangen mogelijk zijn tijdens de botsing.

Een verstrooiingstoestand, als resultaat van een botsing tussen twee atomen in een gegeven kanaal i , kan asymptotisch geschreven worden als:

$$\Psi = \Psi_i + \sum S_{ji} \Psi_j$$

met Ψ_i de inkomende golf en Ψ_j de resulterende uitgaande golf in kanaal j . De Feshbach theorie van de resonanties beschrijft een manier om het S -matrix element S_{ji} te berekenen voor de overgang van een open kanaal i naar een ander open kanaal j in de buurt van een resonantie.

De totale Hilbert ruimte, die de plaats en spin vrijheidsgraden beschrijft, wordt in de Feshbach theorie verdeeld in een gesloten kanalen deelruimte \mathcal{Q} , die de gesloten kanalen bevat, en een open kanalen deelruimte \mathcal{P} , die de open kanalen bevat. Feshbach resonanties ontstaan wanneer er tijdens de botsing overgangen plaatsvinden van \mathcal{P} naar \mathcal{Q} en weer terug naar \mathcal{P} . We introduceren de projectie operatoren P en Q , welke de totale golffunctie Ψ op de \mathcal{P} respectievelijk de \mathcal{Q} ruimte projecteren:

$$\begin{aligned} P\Psi &= \Psi_P, \\ Q\Psi &= \Psi_Q, \end{aligned}$$

zodat voor de totale golffunctie geldt:

$$\Psi = \Psi_P + \Psi_Q.$$

Definiëren we verder $H_{PP} \equiv PHP$ en $H_{QQ} \equiv QHQ$ als die delen van de total Hamiltoniaan die alleen binnen de \mathcal{P} respectievelijk de \mathcal{Q} ruimte werken en $H_{PQ} \equiv PHQ$ en $H_{QP} \equiv QHP$ als de koppelingen tussen de ruimten dan splitst de totale Schrödinger vergelijking van het systeem, $(H - E)\Psi = 0$, in twee gekoppelde vergelijkingen:

$$(E - H_{PP})\Psi_P = H_{PQ}\Psi_Q, \tag{2.1}$$

$$(E - H_{QQ})\Psi_Q = H_{QP}\Psi_P. \tag{2.2}$$

Vergelijking 2.2 wordt formeel opgelost door gebruik te maken van de Greense operator $\frac{1}{E-H_{QQ}}$:

$$\Psi_Q = \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP} \Psi_P. \quad (2.3)$$

Substitueren we dit in 2.1 dan krijgen we

$$(E - H_{eff}) \Psi_P = 0, \quad (2.4)$$

met

$$H_{eff} = H_{PP} + H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP}. \quad (2.5)$$

De tweede term in de effectieve Hamiltoniaan kan geïnterpreteerd worden als een tijdelijke overgang van de \mathcal{P} naar de \mathcal{Q} ruimte, propagatie in \mathcal{Q} ruimte en terugval naar de \mathcal{P} ruimte. Merk op dat door de keuze van de gesloten-kanalen ruimte \mathcal{Q} de energie E gelegen is in het discrete spectrum gebied van H_{QQ} .

De volgende stap is het ontwikkelen van de Greense operator in discrete eigentoestanden en (energie genormeerde) continue eigentoestanden van H_{QQ} :

$$\frac{1}{E - H_{QQ}} = \sum_m \frac{|\phi_m\rangle\langle\phi_m|}{E - \epsilon_m} + \int d\epsilon \frac{|\phi(\epsilon)\rangle\langle\phi(\epsilon)|}{E - \epsilon}, \quad (2.6)$$

waarin de gebonden toestand $|\phi_m\rangle$ genormeed is op 1 en de continuum toestand $|\phi(\epsilon)\rangle$ "energie-genormeed" is, d.w.z. $\langle\phi(\epsilon')|\phi(\epsilon)\rangle = \delta(\epsilon' - \epsilon)$. Wanneer de totale energie E dicht genoeg bij de energie ϵ_0 van een discreet gebonden toestand ligt kunnen we de overige termen verwaarlozen en reduceert 2.4 tot

$$(E - H_{PP}) \Psi_P = \frac{H_{PQ} |\phi_B\rangle\langle\phi_B| H_{QP} |\Psi_P\rangle}{E - \epsilon_0}. \quad (2.7)$$

Wanneer we het rechterlid beschouwen als inhomogene term vinden we als algemene oplossing:

$$|\Psi_P\rangle = |\Psi_i^+\rangle + \frac{1}{E^+ - H_{PP}} \frac{H_{PQ} |\phi_B\rangle\langle\phi_B| H_{QP} |\Psi_P\rangle}{E - \epsilon_0}, \quad (2.8)$$

met $|\Psi_i^+\rangle$ de energie-genormeerde eigentoestand bij energie E van H_{PP} met een inkomende golf in kanaal i . De index bij $E^+ = E + i\eta$ ($\eta \downarrow 0$) is nodig omdat E samenvalt met een continue eigenwaarde van H_{PP} . Als we op $(E^+ - H_{PP})^{-1}$ op dezelfde manier de volledigheds relatie toepassen als in 2.6 moeten we afspreken langs welke kant van de pool de integratie moet lopen.

We kunnen $|\Psi_P\rangle$ vinden door 2.8 te vermenigvuldigen met $\langle\phi_B|H_{QP}$:

$$\langle\phi_B|H_{QP}|\Psi_P\rangle = \langle\phi_B|H_{QP}|\Psi_i^+\rangle + \langle\phi_B|H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} \frac{|\phi_B\rangle\langle\phi_B| H_{QP} |\Psi_P\rangle}{E - \epsilon_0},$$

zodat

$$\frac{\langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_P \rangle}{E - \epsilon_0} = \frac{\langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_i^+ \rangle}{E - \epsilon_0 - \langle \phi_B | H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} | \phi_B \rangle}.$$

Substitutie van de laatste uitdrukking in 2.8 levert:

$$|\Psi_P\rangle = |\Psi_i^+\rangle + \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} |\phi_B\rangle \frac{\langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_i^+ \rangle}{E - \epsilon_0 - \langle \phi_B | H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} | \phi_B \rangle}. \quad (2.9)$$

Vermenigvuldigen we de tweede term in 2.9 met de impuls eigentoestand $\langle \vec{p}' |$, dan vinden we (met gebruikmaking van $\langle \vec{p}' | \frac{1}{E^+ - H_{PP}} = \langle \Psi_j^- |$) een uitdrukking van de vorm:

$$\frac{\langle \Psi_j^- | H_{PQ} | \phi_B \rangle \langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_i^+ \rangle}{E - \epsilon_0 - \langle \phi_B | H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} | \phi_B \rangle}.$$

Hierin herkennen we de uitdrukking voor de T -matrix welke volgens de volgende relatie aan de S -matrix gerelateerd is [10]:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) T \delta(\vec{p}' - \vec{p}).$$

Gebruikmakend van deze laatste uitdrukking vinden we uiteindelijk voor de amplitude S_{ji} voor de overgang naar kanaal j

$$S_{ji} = S_{ji}^0 - 2\pi i \frac{\langle \Psi_j^- | H_{PQ} | \phi_B \rangle \langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_i^+ \rangle}{E - \epsilon_0 - \langle \phi_B | H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} | \phi_B \rangle}. \quad (2.10)$$

We zien dat de amplitude van een uitgaande golf in kanaal j naast een directe term S_{ji}^0 ten gevolge van koppeling binnen de ruimte \mathcal{P} , een term bevat die volgt uit de koppeling tussen de inkomende golf in kanaal i en een gebonden toestand in de ruimte \mathcal{Q} , gevolgd door koppeling van deze toestand met kanaal j .

Het matrixelement in de noemer van de laatste uitdrukking schrijven we als volgt:

$$\langle \phi_B | H_{QP} \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ} | \phi_B \rangle = \Delta - \frac{i}{2} \Gamma,$$

met Γ de breedte van de resonantie en Δ de verschuiving van de resonantie energie ten opzichte van de energie van de gebonden toestand in het gesloten kanaal. Voor de Greense operator geldt:

$$\frac{1}{E^+ - H_{PP}} = \lim_{\eta \downarrow 0} \sum_{\alpha} \int d\epsilon_{\alpha} \frac{|\Psi_{\epsilon\alpha}^+\rangle \langle \Psi_{\epsilon\alpha}^+|}{E + i\eta - \epsilon_{\alpha}},$$

waarin α de quantumgetallen voorstellen die naast ϵ nodig zijn om de toestand te beschrijven. We vinden zo:

$$\Delta - \frac{i}{2} \Gamma = \lim_{\eta \downarrow 0} \sum_{\alpha} \int d\epsilon_{\alpha} \frac{\langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_{\epsilon\alpha}^+ \rangle \langle \Psi_{\epsilon\alpha}^+ | H_{PQ} | \phi_B \rangle}{E + i\eta - \epsilon_{\alpha}}.$$

En met behulp van de relatie [11]:

$$\lim_{\eta \downarrow 0} \frac{1}{E + i\eta - \epsilon_\alpha} = \frac{\mathcal{P}}{E - \epsilon_\alpha} - i\pi\delta(E - \epsilon_\alpha),$$

waarin \mathcal{P} aangeeft dat de hoofdwaaarde van de integraal genomen moet worden, vinden we zo:

$$\Delta = \sum_\alpha \mathcal{P} \int d\epsilon_\alpha \frac{\langle \phi_B | H_{QP} | \Psi_{\epsilon_\alpha}^+ \rangle \langle \Psi_{\epsilon_\alpha}^+ | H_{PQ} | \phi_B \rangle}{E - \epsilon_\alpha}, \quad (2.11)$$

$$\Gamma = 2\pi |\langle \phi_B | H_{PQ} | \Psi_E^+ \rangle|^2. \quad (2.12)$$

Wanneer we maar één open kanaal i hebben vinden we uiteindelijk voor 2.10 de volgende uitdrukking:

$$S_{ii} = S_{ii}^0 \left(1 - \frac{i\Gamma}{E - \epsilon_0 - \Delta + \frac{i}{2}\Gamma} \right), \quad (2.13)$$

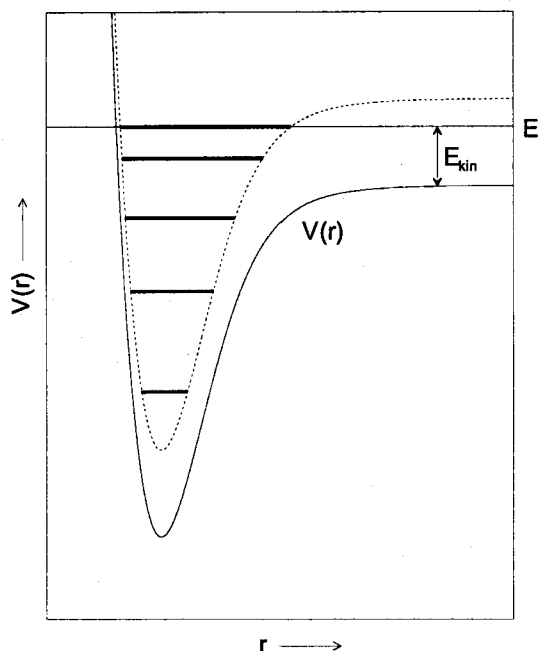
met $\Gamma = 2\pi |\langle \phi_B | H_{PQ} | \Psi_i^+ \rangle|^2$ de breedte van de resonantie. Merk op dat de uitdrukking (2.11) voor de niveau verschuiving lijkt op een uitdrukking voor de tweede-orde energie verschuiving in tijdonafhankelijke storingsrekening en de uitdrukking (2.12) voor de niveau breedte op een eerste-orde uitdrukking voor een overgangs waarschijnlijkheid in tijdafhankelijke storingsrekening.

2.2 Gemodificeerde Feshbach theorie

In het geval van ultra koude botsingen tussen alkali atomen in de grondtoestand bepalen de één-atoom hyperfijn en Zeeman interactie de drempel energie van de verschillende kanalen bij een bepaald magneetveld en daarmee dus de open en gesloten kanalen subruimten. De Coulomb interactie, in het bijzonder het exchange gedeelte daarvan gelijk aan het verschil tussen de singlet en triplet interactie, bepaalt de koppelingen H_{PQ} en H_{QP} tussen de open kanalen en een quasi gebonden gesloten kanalen toestand. Figuur 2.1 geeft schematisch de energie relatie weer tussen de \mathcal{P} en \mathcal{Q} ruimten in geval van Feshbach resonantie.

In het voorgaande hebben we de formele versie van de Feshbach theorie laten zien waarbij de \mathcal{P} en \mathcal{Q} subruimten worden gedefinieerd in termen van sommen van de interne atomaire Hamiltonianen. Als gevolg hiervan bevat de koppelingsterm H_{PQ} geen Zeeman of hyperfijn gedeelte maar is evenredig met $V_S - V_T$. We hoeven daarom niet te verwachten dat H_{PQ} een kleine storing voorstelt. In de sterke B-veld limiet, een goede benadering in de later te bekijken situaties, kan een alternatieve versie van de Feshbach theorie geformuleerd worden waarin H_{PQ} een andere betekenis heeft. In deze gemodificeerde Feshbach theorie wordt H_{PQ} effectief gelijkgesteld aan het $(\vec{s}_1 - \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 - \vec{i}_2)$ gedeelte van de hyperfijn interactie, genoteerd als V_-^{hf} (zie hoofdstuk 3, formule 3.6).

We merken op dat voor sterke velden V_-^{hf} te verwaarlozen is voor grote atomaire afstanden, S, M_S, I, M_I zijn dan bij benadering de goede quantumgetallen. V_-^{hf} speelt echter een



Figuur 2.1: Koppeling tussen een verstrooiings toestand en een gebonden toestand in een gesloten kanaal. De atomen naderen elkaar met totale energie E op de potentiaal curve $V(r)$ van het open kanaal. Bij bepaalde kinetische energie komt de totale energie overeen met die van een gebonden toestand (dikke lijn) in de gesloten kanaal potentiaal (stippel lijn).

belangrijke rol in het radiale gebied waar het exchange gedeelte van de Coulomb interactie van dezelfde orde van grootte is als de hyperfijn interactie. We kunnen V_-^{hf} verwaarlozen voorbij een bepaalde straal r_d [12]. In dat geval hebben de spin toestanden in een kanaal vaste S, M_S, I, M_I en commuteren de projectie operatoren P en Q met het Coulomb gedeelte van de interatomaire interactie zodat H_{PQ} effectief gelijk is aan V_-^{hf} in plaats van gelijk aan $\frac{1}{2}(V_S - V_T)(P_S - P_T)$. Dit heeft als voordeel dat H_{PQ} gezien kan worden als een kleine storing, met als gevolg dat de verschuiving van de resonantie Δ klein verondersteld kan worden zodat de positie van de resonanties dicht bij de eigenwaarde van $|\phi_B\rangle$ in de geïsoleerde Q ruimte zal liggen. Hieruit volgt verder dat de uitdrukking voor de breedte van de resonanties reduceert tot

$$\Gamma = 2\pi |\langle \phi_0 | V_-^{hf} | \Psi_i^+ \rangle|^2 \quad (2.14)$$

waarin hetzij $|\phi_0\rangle$ een zuivere singlet toestand is en $|\Psi_i^+\rangle$ een zuivere triplet toestand, of omgekeerd. Merk op dat V_-^{hf} antisymmetrisch is in de elektronspin operatoren van de atomen en dus $S = 0$ met $S = 1$ koppelt.

2.3 De verstrooiingslengte als functie van het magneetveld

We passen nu het voorgaande toe op ultra lage botsings energieën. De situatie met één open kanaal (formule 2.13), drempel energie E_{th} en botsings energie $E_i = E - E_{th}$ is het meest interessant. Bij lage E_i is het overgebleven s -golf gedeelte van Ψ_i^+ evenredig met $\sqrt{k_i} \sim E_i^{1/4}$ in het beperkte r gebied van de exchange interactie [10]. Als gevolg daarvan reduceert formule 2.13, met de achtergrond amplitude uitgedrukt in termen van de verstrooiingslengte a_0 , $S_{ii}^0 = e^{-2ik_i a_0}$, tot

$$S_{ii} = e^{-2ik_i a_0} \left(1 - \frac{2iCk_i}{iCk_i - \epsilon_{res}} \right), \quad (2.15)$$

met $C > 0$ en $\epsilon_{res} = \epsilon_0 + \Delta(E_i = 0) - E_{th}(B)$ de relatieve positie van de resonantie t.o.v. de drempel. Schrijven we de rechterkant als $e^{-2ik_i a}$ dan vinden we voor de totale verstrooiingslengte $a(B)$ inclusief de resonantie

$$a(B) = a_0 - \frac{C}{\epsilon_{res}}, \quad (2.16)$$

waarin a_0 en C nauwelijks van B afhangen. In de praktijk draagt het resonantie gedeelte aan $a(B)$ alleen bij voor B waarden dichtbij de waarde B_0 waar de resonantie de drempel passeert. Daarom is het nodig de B afhankelijkheid van ϵ_{res} in beschouwing te nemen.

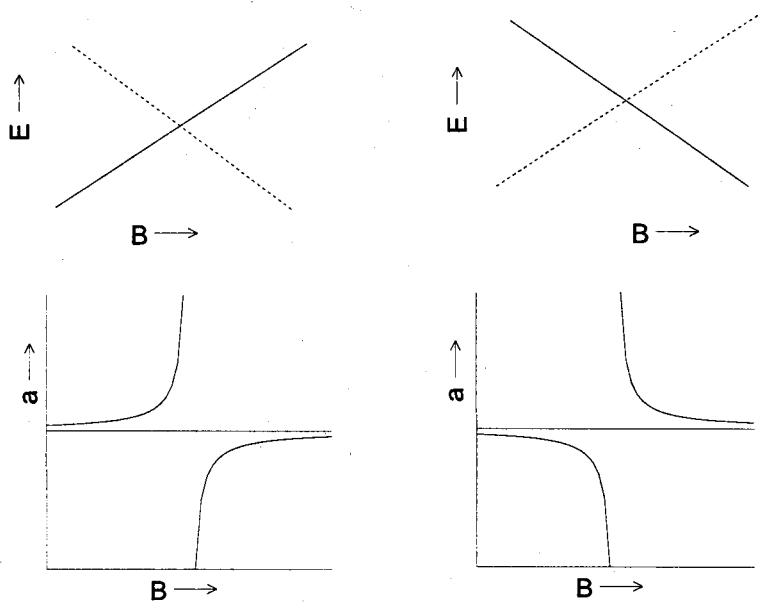
Via de relatie voor de energie van een magnetische dipool in een magneetveld, $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, vinden we voor $\epsilon_{res}(B)$ in eerste orde:

$$\epsilon_{res}(B) = [2\mu_i(B_0) - \mu_0(B_0)](B - B_0), \quad (2.17)$$

met $\mu_i(B)$ het magnetisch moment voor de ingangs hyperfijn toestand van één atoom en $\mu_0(B)$ het magnetisch moment van de resonantie toestand van de twee atomen. We vinden zo uiteindelijk de volgende relatie voor de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld:

$$a(B) = a_0 - \frac{C}{2\mu_i(B_0) - \mu_0(B_0)} \frac{1}{B - B_0}. \quad (2.18)$$

Figuur 2.2 illustreert het verloop van a als functie van het B -veld voor een positief respectievelijk negatief verschil tussen de magnetische momenten.



Figuur 2.2: De twee bovenste figuren geven de energie van de twee-atoom resonantie toestand en de drempel als functie van het B veld weer: de linker figuur in het geval van een negatief magnetisch moment van de gebonden toestand en een positief één-atoom magnetisch moment van de ingang hyperfijn toestand (getrokken respectievelijk gestippelde lijn); de rechter figuur vice versa. In de onderste figuren staat het overeenkomende gedrag van de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld weergegeven. De eerste situatie komt overeen met atomen in de hoogste toestand van het onderste hyperfijn manifold voor sterke magneetvelden ($> a_{hf}/\mu_B$). De tweede situatie verwijst naar atomen in de hoogste toestand van het onderste hyperfijn manifold voor een laag magneetveld.

Hoofdstuk 3

De Hamiltoniaan van het verstrooiingsprobleem

De effectieve Hamiltoniaan van een twee-deeltjes systeem is van de vorm:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \sum_{i=1}^2 H_i^{int} + V^c + V^d, \quad (3.1)$$

waarin H_i^{int} de interne energie van de afzonderlijke atomen weergeeft, V^c de centrale (Coulomb) interactie en V^d de magnetische dipool interactie. Effectief betekent hier dat wij de beschrijving niet geven met een exacte uitdrukking, maar met een uitdrukking waarvan gebleken is [13] dat hij voor ons doel voldoende nauwkeurige uitkomsten geeft.

De centrale interactie hangt alleen van $|\vec{r}|$ af en behoudt daardoor het baanimpulsmoment l en de totale spin F ($\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$, met \vec{S} de totale elektronspin en \vec{I} de totale kernspin), alsmede hun projecties m_l en M_F . V^c behoudt ook \vec{S} en \vec{I} afzonderlijk en kan uitgeschreven worden in een singlet en een triplet term:

$$V^c = P_S V_S + P_T V_T, \quad (3.2)$$

met V_S en V_T de singlet en triplet potentialen en P_S en P_T de projectie operatoren op de singlet en triplet twee-deeltjes ruimte.

De dipool interactie is echter niet invariant onder onafhankelijke rotaties van ruimtelijke en spinvrijheidsgraden omdat V^d afhankelijk is van de relatieve oriëntatie van ruimtelijke baan- en spinvrijheidsgraden en kan daardoor l , m_l , F en M_F veranderen. Omdat de dipool interactie veel zwakker is dan de centrale interactie en omdat we hier niet geïnteresseerd zijn in dipoolverval zullen we deze term in het vervolg verwaarlozen.

3.1 De interne Hamiltoniaan

De interne Hamiltoniaan van een enkel atoom is gelijk aan de som van de hyperfijn en Zeeman interactie:

$$H^{int} = \frac{a_{hf}}{\hbar^2} \vec{s} \cdot \vec{i} + (\gamma_e s_z - \gamma_n i_z) B_z, \quad (3.3)$$

met a_{hf} de hyperfijnconstante, \vec{s} de elektronspin en \vec{i} de kernspin. Waarden van de hyperfijnconstante en de gyromagnetische verhoudingen γ_e en γ_n worden voor ^{39}K in appendix A gegeven.

De eerste term van de interne Hamiltoniaan is een inproduct en als zodanig invariant onder gelijktijdige rotatie van \vec{s} en \vec{i} . De totale spin $\vec{f} = \vec{s} + \vec{i}$ van het atoom blijft dus behouden. Dit komt overeen met de quantumgetallen f en m_f . De Zeeman term is invariant onder afzonderlijke rotaties van elektron- en kernspin om de richting van het magneetveld zodat de projectie van \vec{f} op de z-as behouden blijft. Voor de interne Hamiltoniaan is $m_f = m_s + m_i$ dus een goed quantumgetal.

Voor ^{39}K met kernspin $i = \frac{3}{2}$ zullen we de eigentoestanden van de interne Hamiltoniaan uitrekenen in de $\{|sm_s im_i\rangle\}$ -basis wat we afkorten tot $\{|m_s m_i\rangle\}$. Gerangschikt naar m_f geeft dat:

$$\left\{ \begin{array}{ll} m_f = 2 & |\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ m_f = 1 & |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle, \quad |-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ m_f = 0 & |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle, \quad |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ m_f = -1 & |-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle, \quad |\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\rangle \\ m_f = -2 & |-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\rangle \end{array} \right. \quad (3.4)$$

De symmetrie eigenschappen zorgen er voor dat het 8-dimensionale eigenwaarden probleem opgesplitst kan worden in drie 2-dimensionale en twee 1-dimensionale problemen. Voor de berekening van de eigenwaarden en eigentoestanden verwijzen we naar appendix B.

Genummerd naar oplopende energie zijn de energie-eigenwaarden:

Quantumgetallen voor $B \rightarrow 0$

f	m_f	energie-eigenwaarden	$B \rightarrow 0$
2	2	$E_8 = \frac{3}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - 3\gamma_N)$	$\frac{3}{4}a_{hf}$
2	1	$E_7 = -\frac{a_{hf}}{4} - \gamma_N \hbar B + \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1}$	$\frac{3}{4}a_{hf}$
2	0	$E_6 = -\frac{a_{hf}}{4} + \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0}$	$\frac{3}{4}a_{hf}$
2	-1	$E_5 = -\frac{a_{hf}}{4} + \gamma_N \hbar B + \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_{-1}}$	$\frac{3}{4}a_{hf}$
2	-2	$E_4 = \frac{3}{4}a_{hf} - \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - 3\gamma_N)$	$\frac{3}{4}a_{hf}$
1	-1	$E_3 = -\frac{a_{hf}}{4} + \gamma_N \hbar B - \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_{-1}}$	$-\frac{5}{4}a_{hf}$
1	0	$E_2 = -\frac{a_{hf}}{4} - \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0}$	$-\frac{5}{4}a_{hf}$
1	1	$E_1 = -\frac{a_{hf}}{4} - \gamma_N \hbar B - \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1}$	$-\frac{5}{4}a_{hf}$

met de menghoeken ($0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$) gegeven door:

$$\tan 2\theta_1 = \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)}$$

$$\tan 2\theta_0 = \frac{2a_{hf}}{\hbar B(\gamma_e + \gamma_N)}$$

$$\tan 2\theta_{-1} = \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{-a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)}$$

De energieniveaus van de acht hyperfijn toestanden zijn als functie van het magneetveld weergegeven in figuur 1.2.

Zoals de symmetrie beschouwing al aangaf zijn voor $B = 0$ de vectoren $|f, m_f\rangle$ de eigentoestanden van H^{int} . Voor zeer sterke magneetvelden is de hyperfijn energie als kleine storing op de Zeeman energie te zien. Het resultaat is dat de eigentoestanden convergeren naar $|m_s, m_i\rangle$. In dit verband is een magneetveld sterk te noemen wanneer $B \gg \frac{a_{hf}}{\hbar\gamma_e}$.

In het vervolg zijn we geïnteresseerd in de gebonden en verstrooiings toestanden van een ^{39}K - ^{39}K systeem. Voor de laatst genoemde toestanden kan de centrale interactie asymptotisch verwaarloosd worden zodat het twee-deeltjes systeem beschreven kan worden door de eigentoestanden van de atomen afzonderlijk. De verstrooiings toestanden (de kanalen) worden daardoor asymptotisch weergegeven als: $|\{f_1 m_{f_1}, f_2 m_{f_2}\}^\pm\rangle$, met een $+$ voor een symmetrische en een $-$ voor een anti-symmetrische spintoestand, afhankelijk van de waarde van het baanimpulsmoment l en het soort atomen (bosonen of fermionen). Voor kleine r waarden is het gebruikelijk een basis te kiezen die rekening houdt met het feit dat voor kleine r de centrale interactie veel sterker is dan de hyperfijn of Zeeman interactie. Afhankelijk van de sterkte van het magnetveld kiezen we $|(SI)FM_F\rangle$ of $|SM_SIM_I\rangle$ als basis om de energie van de hoogste gebonden toestanden te berekenen.

3.2 Energieniveaus van een ^{39}K - ^{39}K systeem

We gaan nu de energie van de hoogste gebonden singlet ($S = 0$) en triplet ($S = 1$) grondtoestanden berekenen. We verwaarlozen in de totale Hamiltoniaan de zwakke dipool interactie en voor de hyperfijn en Zeeman interactie vinden we:

$$\sum_{i=1}^2 H_i^{int} = \frac{a_{hf}}{\hbar^2} (\vec{s}_1 \cdot \vec{i}_1 + \vec{s}_2 \cdot \vec{i}_2) + (\gamma_e S_z - \gamma_N I_z) B_z. \quad (3.5)$$

Verwaarlozen we het mengen van de verschillende (SI) combinaties gegeven door het $(\vec{s}_1 - \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 - \vec{i}_2)$ gedeelte van de totale hyperfijn interactie:

$$\begin{aligned} \frac{a_{hf}}{\hbar^2} (\vec{s}_1 \cdot \vec{i}_1 + \vec{s}_2 \cdot \vec{i}_2) &= \frac{a_{hf}}{2\hbar^2} (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 + \vec{i}_2) \\ &\quad + \frac{a_{hf}}{2\hbar^2} (\vec{s}_1 - \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 - \vec{i}_2) \\ &\equiv V_+^{hf} + V_-^{hf}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

dan worden de toestanden in de $B = 0$ limiet gekarakteriseerd door de totale spin en spinprojectie quantumgetallen F en M_F ; we noteren de toestanden als $|\nu l(SI)FM_F\rangle$. Deze benadering is juist behalve voor erg dicht bij elkaar liggende singlet en triplet toestanden (afstand van de orde a_{hf}). Merk op dat $\vec{s}_1 - \vec{s}_2$ de symmetrische (triplet) en antisymmetrische (singlet) elektronische spintoestanden koppelt.

Wanneer er een magnetveld aangelegd wordt zullen de gebonden toestanden, tengevolge van het verschil in de elektronische en nucleaire gyromagnetische verhouding, mengsels zijn van verschillende $|(SI)FM_F\rangle$ toestanden met verschillende F . Voor sterke magnetvelden gaat iedere eigentoestand over in een toestand die gedefinieerd is door de totale elektronspin (S en M_S) en de totale kernspin (I en M_I), zodat dit in de limiet goede quantumgetallen zijn. De gebonden toestanden worden daarom in de sterke-veld limiet genoteerd als $|\nu lSM_SIM_I\rangle$.

We illustreren het bovenstaande door te kijken naar twee ^{39}K atomen in de $|f = 1, m_f = -1\rangle$ toestand. We hebben in dit geval twee bosonen in dezelfde spin toestand wat vereist dat l even moet zijn om een symmetrische totale golffunctie te krijgen. In alle gevallen vereisen symmetrie overwegingen dat de som $l + I + S$ even is. Dit geldt zowel voor bosonen als voor fermionen. Dit is als volgt in te zien. De permutatie symmetrie van de elektronische spintoestanden wordt gegeven door $(-1)^{1-S}$, die van de nucleaire spintoestanden door $(-1)^{2i-I}$ en die van de baantoestand door $(-1)^l$. De eis is dus dat $l + S + I - (2i + 1)$ even moet zijn voor bosonen ($i = \text{halfallig}$) en oneven voor fermionen ($i = \text{heeltallig}$). Uit de bovenstaande eis van even l volgt dus dat voor ^{39}K $S + I$ even moet zijn. We hebben met (behouden) totale spin-projectie $M_F = -2$, dus $F \geq 2$, de volgende mogelijk heden:

$$\begin{aligned} S = 0 &\rightarrow I = 2 \rightarrow F = 2, \\ S = 1 &\rightarrow \begin{cases} I = 1 \rightarrow F = 2, \\ I = 3 \rightarrow F = 2, 3, 4. \end{cases} \end{aligned}$$

We kunnen de structuur van deze vier triplet en enkele singlet toestand, zowel in de zwakke- als sterke-veld limiet, gemakkelijk afleiden wanneer we de eerder genoemde benadering wat betreft de hyperfijn interactie maken: $V^{hf} = V_+^{hf} = \frac{a_{hf}}{2\hbar^2} \vec{S} \cdot \vec{I}$. Kennelijk behoudt deze term S, I, F, M_F . Omdat hetzelfde geldt voor het Coulomb gedeelte van de interatomaire interactie, betekent dit dat dit de juiste set quantumgetallen is in de zwakke-veld limiet. Zoals boven vermeld behoudt het magneetveld F niet. Wel echter S, M_S, I, M_I . Dit is dus de juiste set quantumgetallen in de sterke-veld limiet. We concluderen dus dat we de tweedeeltjes toestanden in de $\vec{S} \cdot \vec{I}$ benadering kunnen vinden in termen van ontkoppelde baan- en spintoestanden. Het baanprobleem leidt tot een set van eigentoestanden in een pure singlet of triplet potentiaal. Voor het spinprobleem vinden we voor de extreme veldsterkte limieten de volgende eigentoestanden:

Zwak B veld		Sterk B veld
$ (SI)FM_F\rangle$		$ SM_SIM_I\rangle$
$ (02)2 - 2\rangle$	\rightarrow	$ 002 - 2\rangle$
$ (11)2 - 2\rangle$	\rightarrow	$ 1 - 11 - 1\rangle$
$\left\{ \begin{array}{l} (13)2 - 2\rangle \\ (13)3 - 2\rangle \\ (13)4 - 2\rangle \end{array} \right.$	\rightarrow	$\left\{ \begin{array}{l} 1 - 13 - 1\rangle \\ 103 - 2\rangle \\ 113 - 3\rangle \end{array} \right.$

Voor tussenliggende veldsterkten zijn de eigentoestanden superposities. Zie figuur 5.1 voor een concreet voorbeeld.

We kunnen de hyperfijn term V_+^{hf} schrijven als:

$$V_+^{hf} = \frac{a_{hf}}{2\hbar^2} \vec{S} \cdot \vec{I} = \frac{a_{hf}}{4\hbar^2} (\vec{F}^2 - \vec{I}^2 - \vec{S}^2) \quad (3.7)$$

zodat we voor de singlet eigenwaarden vinden:

$$\langle (02)2 - 2 | H^{int} | (02)2 - 2 \rangle = 2\gamma_N \hbar B. \quad (3.8)$$

Voor de niet gekoppelde triplet toestand vinden we:

$$\langle (11)2 - 2 | H^{int} | (11)2 - 2 \rangle = \frac{a_{hf}}{2} - (\gamma_e - \gamma_N)\hbar B. \quad (3.9)$$

Voor de drie gekoppelde triplet toestanden schrijven we de interne Hamiltoniaan in de $|(SI)FM_F\rangle$ basis als:

$$H^{int} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar B}{3}(2\gamma_e + 8\gamma_N) - 2a_{hf} & \sqrt{\frac{20}{63}}(\gamma_e + \gamma_N)\hbar B & 0 \\ \sqrt{\frac{20}{63}}(\gamma_e + \gamma_N)\hbar B & -\frac{\hbar B}{6}(\gamma_e - 9\gamma_N) - \frac{1}{2}a_{hf} & \sqrt{\frac{9}{28}}(\gamma_e + \gamma_N)\hbar B \\ 0 & \sqrt{\frac{9}{28}}(\gamma_e + \gamma_N)\hbar B & -\frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - 3\gamma_N) + \frac{3}{2}a_{hf} \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

Diagonalisatie van deze matrix geeft de energieniveaus van de subruimte gevormd door de drie gekoppelde triplet toestanden. Voor elke baaneigentoestand ontstaat er dus een multiplet van spin niveaus. Om de baaneigentoestanden te vinden moeten we de eigentoe-standen van het Coulomb gedeelte van de totale Hamiltoniaan bepalen. Hiervoor hebben we de singlet en triplet potentialen nodig. Hoe deze bepaald zijn staat beschreven in hoofdstuk 4.

Hoofdstuk 4

Bepaling van de singlet en triplet potentialen

De singlet en triplet potentialen die we in onze berekeningen gebruiken zijn combinaties van analytische uitdrukkingen voor kleine en grote afstanden en experimentele data voor de tussen liggende punten. De experimentele potentialen zijn uit spectroscopisch bepaalde rotatie-vibratie niveaus berekend volgens de Rydberg-Klein-Rees (RKR)-methode [14]. Voor de singlet potentiaal hebben we de experimentele data van Amiot et al. [15, 16] gebruikt, voor de triplet potentiaal die van Li et al. [17] en Zemke et al. [18].

Daar we geïnteresseerd zijn in het resonantie gedrag van botsende atomen is het van belang de potentialen voor grote atomaire afstanden nauwkeurig te kennen. We zagen reeds in hoofdstuk 2 dat het hyperfijn gedeelte van de totale Hamiltoniaan van belang is bij resonanties. Het is dus noodzakelijk een goede beschrijving van de potentialen te hebben in het gebied waar het verschil tussen de singlet en triplet potentialen van de orde van de hyperfijnopsplitsing is. In dit hoofdstuk wordt beschreven hoe we een zo nauwkeurig mogelijke uitdrukkingen gevonden hebben voor de singlet en triplet potentialen.

4.1 De interatomaire potentialen

Uit spectroscopisch bepaalde gegevens van energie niveaus wordt in de literatuur via de RKR-methode een potentiaal bepaald. Deze potentiaal is dan beperkt tot het radiale gebied tussen de klassieke omkeerpunten van het hoogste meegenomen rotatie-vibratie niveau. Voor de karakteristieken van de singlet en triplet RKR-potentialen van ^{39}K wordt verwezen naar appendix C.

De RKR-potentialen op zich zijn nog niet voldoende voor onze berekeningen omdat ze maar een beperkt radieel gebied omvatten. We hebben voor onze berekeningen in principe potentialen nodig vanaf $r = 0$ tot in het oneindige. De RKR-potentialen moeten dus, zowel voor kleine als voor grote atoom afstanden, op een geschikte manier worden uitgebreid.

4.1.1 Uitbreiding voor kleine atoom afstanden

We hebben zowel van de singlet als de triplet RKR-potentiaal de binnenste omkeerpunten gefit met een exponentiële functie van de vorm:

$$Be^{-br}. \quad (4.1)$$

Hiermee hebben we de potentialen voor kleine atoom afstanden geëxtrapoleerd tot boven de drempel van het continuüm.

De precieze vorm van de extrapolatie functies waarmee we de potentialen voor kleine atoom afstanden uitbreiden is niet belangrijk omdat de atomen elkaar niet dicht zullen naderen bij de lage temperaturen die wij beschouwen. Met andere woorden de golf functie heeft voor kleine atoomafstanden een kleine waarde. Veel belangrijker is de extrapolatie voor grote atoom afstanden omdat de waarde van de golf functie voor grote atoom afstanden, m.a.w. de kans om de atomen daar te vinden, wel groot is.

4.1.2 Uitbreiding voor grote atoom afstanden

De grondtoestand van K_2 dissocieert in twee grondtoestands $4S_{1/2}$ atomen. Voor grote atoom afstanden kan de potentiële energie geschreven worden als de som van een Coulomb (of dispersie) gedeelte $V^c(r)$ en een exchange gedeelte $V^e(r)$:

$$V_S(r) = V^c(r) - (-1)^S V^e(r), \quad (4.2)$$

met $S = 0$ voor de singlet en $S = 1$ voor de triplet potentiaal.

Het Coulomb gedeelte schrijven we als een ontwikkeling in geïnduceerde multipool wisselwerkingen:

$$V^c(r) = - \sum_{n=3}^{\infty} \frac{C_{2n}}{r^{2n}}. \quad (4.3)$$

Het exchange gedeelte V^e , veroorzaakt door overlap van de elektronenwolken voor kleinere atoom afstanden, wordt geschreven als:

$$V^e(r) = Ae^{-ar}. \quad (4.4)$$

Volgens Zemke et al. [18] mogen we de singlet potentiaal vanaf $r = 19 a_0$ en de triplet potentiaal vanaf $r = 20 a_0$ benaderen door deze analytische uitdrukkingen. De RKR-singlet potentiaal gegeven door Amiot et al. [15, 16] loopt door tot $29.1 a_0$. We schrijven daarom de staart van de singlet potentiaal vanaf $30 a_0$ als:

$$V_s(r) = -\frac{C_6}{r^6} - \frac{C_8}{r^8} - \frac{C_{10}}{r^{10}} - Ae^{-ar}. \quad (4.5)$$

De RKR-triplet potentiaal gegeven door Li et al. en Zemke et al. [17, 18] loopt door tot $19.9 a_0$. We schrijven daarom de staart van de triplet potentiaal vanaf $20 a_0$ als:

$$V_t(r) = -\frac{C_6}{r^6} - \frac{C_8}{r^8} - \frac{C_{10}}{r^{10}} + Ae^{-ar}. \quad (4.6)$$

Merk op dat $V_s(r)$ en $V_t(r)$ uitdrukkingen zijn ten op zichte van het continuüm.

Voor de dispersie coëfficiënten C_6 , C_8 en C_{10} en de coëfficiënten A en a nemen we de waarden gegeven door Amiot et al. [16]. Dit omdat Amiot et al. de K_2 singlet grondtoestands potentiaal tot ver in de analytische staart hebben weten te bepalen. Hierbij dient opgemerkt te worden dat de waarden van de dispersie coëfficiënten gegeven door Amiot sterk afwijken van die van Marinescu et al. [19]: de waarde van C_6 gegeven door Amiot ligt bijvoorbeeld 5% lager dan die gegeven door Marinescu. Ook Zemke et al. [18] adviseren in hun artikel de waarden van Marinescu. We hebben echter toch de waarden van Amiot et al. genomen omdat we ook de experimenteel bepaalde RKR-curve gegeven door Amiot et al. gebruikt hebben. Amiot et al. geven de volgende waarden voor de dispersie coëfficiënten:

$$\begin{aligned}C_6 &= 3617.6376 \text{ a.u. } a_0^6 \\C_8 &= 515423.8 \text{ a.u. } a_0^8 \\C_{10} &= 4.8626 \times 10^7 \text{ a.u. } a_0^{10}\end{aligned}$$

Voor de coëfficiënten A en a geven Amiot et al.:

$$\begin{aligned}A &= 22.1665 \text{ a.u.} \\a &= 0.794375 a_0^{-1}\end{aligned}$$

De singlet en triplet potentiaal van ^{39}K zijn nu als volgt geconstrueerd.

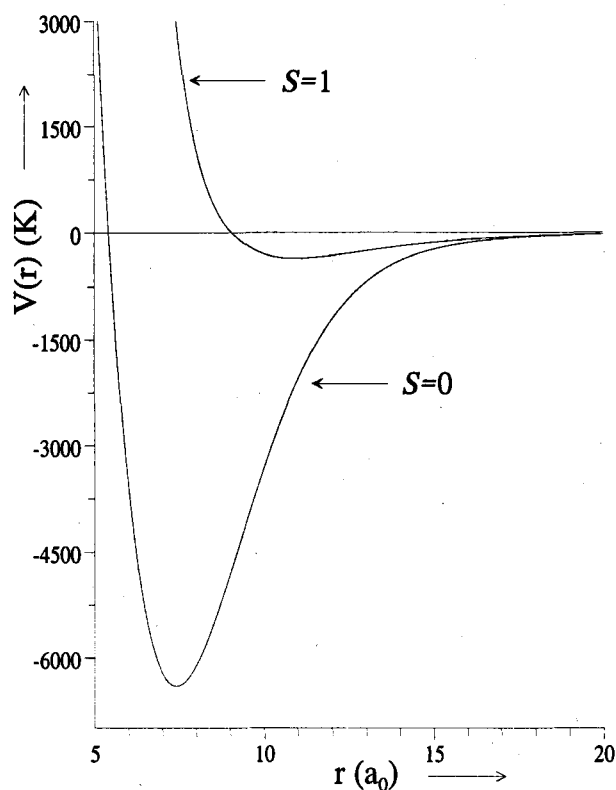
Voor de singlet potentiaal hebben we een spline fit getrokken door de RKR-potentiaal gegeven door Amiot et al. [15, 16]. Deze RKR-potentiaal hebben we voor kleine r -waarden geëxtrapoleerd met een exponentieële fit van de vorm gegeven door 4.1. Vanaf $30 a_0$ hebben we de potentiaal analytisch voortgezet met een uitdrukking van de vorm 4.5. Daarbij hebben we de coëfficiënten gegeven door Amiot et al. [16] gebruikt.

Voor de triplet potentiaal hebben we een spline fit getrokken door de RKR-potentiaal gegeven in [17, 18]. Deze hebben we voor kleine r -waarden geëxtrapoleerd met een exponentieële fit van de vorm gegeven door 4.1. Voor grote r -waarden, vanaf $20 a_0$ hebben we de RKR-potentiaal aangesloten op een analytische uitdrukking van de vorm 4.6. In figuur 4.1 zijn de singlet én triplet potentialen weergegeven.

Voor de singlet potentiaal waren er voldoende meetwaarden om het binnengebied van de potentiaal te verbeteren met behulp van Inverse Storingsrekening. Hoe dit is gedaan staat beschreven in de volgende paragraaf.

4.2 Inverse Storingsrekening Analyses

Om het middenstuk van de potentialen nauwkeuriger te bepalen kan gebruik gemaakt worden van de zogenaamde IPA (Inverse Perturbation Analysis) methode [20]. Hieronder



Figuur 4.1: K_2 singlet ($S = 0$) en triplet ($S = 1$) grondtoestands potentialen.

wordt deze methode geschetst die gebruikt is om het binnengebied van de ^{39}K singlet potentiaal te verbeteren.

In het ideale geval is de potentiaal, $V(r)$, exact bekend en geeft de Schrödinger vergelijking,

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \right) \Psi_{vl} = E_{vl} \Psi_{vl}, \quad (4.7)$$

de exacte rotatie-vibratie eigenfuncties Ψ_{vl} en (experimentele) eigenwaarden E_{vl} . In de niet-ideale situatie beschikken we over een potentiaal $V^0(r)$ en vinden

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V^0(r) \right) \Psi_{vl}^0 = E_{vl}^0 \Psi_{vl}^0. \quad (4.8)$$

Deze start-potentiaal $V^0(r)$ heeft een r -afhankelijke correctie $\Delta V(r)$ nodig om de juiste eigentoestanden en eigenwaarden te vinden. Wanneer we deze correctie schrijven als een som van geschikt gekozen basis functies $f_i(r)$,

$$\Delta V(r) = \sum_i c_i f_i(r), \quad (4.9)$$

en eerste orde storingsrekening toepassen, dan vinden we $\Delta E_{vl} = \langle \Psi_{vl}^0 | \Delta V | \Psi_{vl}^0 \rangle$ en komen we uit op een lineair kleinste kwadraten probleem met

$$\chi^2 = \sum_{vl} \left(\frac{\Delta E_{vl} - \sum_i c_i \langle \Psi_{vl}^0 | f_i | \Psi_{vl}^0 \rangle}{\sigma_{vl}} \right)^2, \quad (4.10)$$

waarin $\Delta E_{vl} = E_{vl} - E_{vl}^0$. Met de correcties die als oplossing uit het kleinste kwadraten probleem volgen wordt een nieuwe potentiaal $V^1(r) = V^0(r) + \Delta V(r)$ geconstrueerd en de hele procedure wordt herhaald totdat deze convergeert.

In de praktijk worden verschillende basis functies gekozen. Kosman en Hinze gebruikten een set van Legendre polynomen $P_i(x)$ [20], waarin x lineair loopt van -1 tot $+1$ in het radiale interval waar men de potentiaal wil verbeteren. Dit heeft als nadeel dat er grote oscillaties ontstaan buiten het r -gebied waar men de potentiaal wil corrigeren. Een betere keuze is die van Vidal en Scheingraber [21]:

$$\Delta V(r) = \sum_i c_i P_i(x) e^{-x^{2n}}, \quad (4.11)$$

met x een geschaalde straal en n tussen 1 en 5: $1 \leq n \leq 5$.

Het is belangrijk hoe x van r afhangt. Wanneer we x lineair als functie van r kiezen, zodat $x = -1$ voor $r = r_{min}$ en $x = 1$ voor $r = r_{max}$, met r_{min} en r_{max} het binnenste respectievelijk het buitenste omkeerpunt van de hoogste gemeten gebonden toestand, wordt er teveel gecorrigeerd in het buitengebied van de potentiaal omdat daar de onzekerheden in de potentiaal veel kleiner zijn. Vidal en Scheingraber verbeterden dit door de volgende relatie tussen r en x te kiezen:

$$x = \frac{(r - r_e)(r_{max} - r_{min})}{(r_{max} + r_{min})(r_e + r) - 2r_{max}r_{min} - 2r_e r}, \quad (4.12)$$

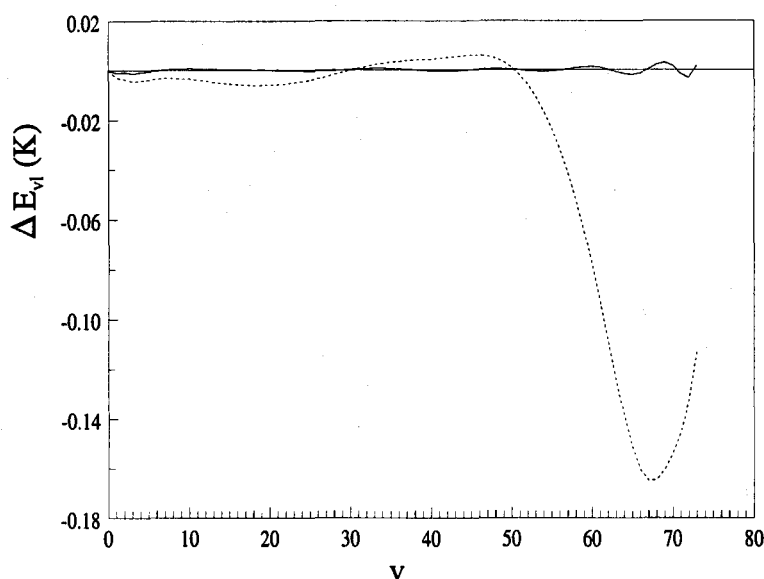
waarin r_e de afstand is waar de potentiaal het diepst is (de evenwichts-afstand).

We kunnen de hierboven beschreven IPA methode niet toepassen in een r -interval waar de analytische uitdrukking van de staart geldig is daar de gekozen correctie functies de uitdrukking voor de staart drastisch kunnen wijzigen. We moeten r_{max} dus zo kiezen dat deze dicht tegen of net in het gebied ligt waar de staart geldig is.

De energie niveaus van de ^{39}K grondtoestands singlet potentiaal zijn bepaald tot vibratie quantumgetal $v = 81$ wat correspondeert met een buitenste omkeer punt dat ligt bij $r = 29.1 a_0$. Dit punt ligt ver in de "analytische staart" van de singlet potentiaal. Er is IPA toegepast op het binnengebied van de singlet potentiaal tussen $r_{min} = 3 a_0$ en $r_{max} = 22 a_0$. Daarbij is gewerkt met nog een ander type basisfuncties:

$$\Delta V(r) = \sum_i c_i P_i(x) e^{-\alpha x^2}, \quad (4.13)$$

met α tussen $10 \leq \alpha \leq 15$ om te voorkomen dat er in $r = r_{max}$ een sprong optreedt in de potentiaal. In figuur 4.2 is het effect van de hierboven beschreven IPA methode te zien.



Figuur 4.2: Verschil tussen experimentele en theoretische energie eigenwaarden voor de ^{39}K grondtoestands singlet potentiaal, voor IPA (gestippelde lijn) en na IPA (getrokken lijn). Hier is $\Delta E_{vl} = (E_{vl} - E_{09})^{th} - (E_{vl} - E_{09})^{exp}$.

In de figuur staan de verschillen tussen de experimenteel en theoretisch bepaalde energie eigenwaarden als functie van het vibratie quantumgetal v uit. Merk op dat het laagste gemeten rotatie-vibratie niveau ($v = 0, l = 9$) als referentie genomen is.

We zien dat we het binnengebied van de potentiaal met behulp van de IPA methode drastisch kunnen verbeteren. Het r -gebied waarop we IPA toegepast hebben is voor ons doel echter minder interessant daar pas vanaf $25 a_0$ de hyperfijn interactie van belang wordt. We zouden eigenlijk een methode moeten toepassen waarmee we de experimenteel bepaalde punten die in de staart van de singlet potentiaal liggen kunnen fitten zonder de analytische uitdrukking drastisch te veranderen. We zullen in de volgende paragraaf eerst de onzekerheden in de potentialen bepalen en kijken wat het effect van die onzekerheden is op de verstrooiingslengte. Hierbij is wel de potentiaal in het binnengebied van belang voorzover we daarmee de afgeleiden van de fase ϕ naar E en $l(l+1)$ kunnen vastleggen.

4.3 Onzekerheden in de potentialen

We kunnen de grondtoestands golffunctie in de WKB-benadering schrijven als:

$$\Psi(r) = A \frac{\sin(\phi + \phi_0)}{\sqrt{k}}, \quad (4.14)$$

met A een normerings constante, $k = k(r) = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}]}$ het lokale golfgetal en $\phi(r) = \int_{r_0}^r k(r)dr$, de geaccumuleerde fase bij interatomaire afstand r . Deze WKB-benadering is geldig in het radiale gebied waar de potentiaal weinig varieert over de lokale golflengte van de grondtoestands golf functie. De geaccumuleerde fase kan berekend worden uit de waarde van de golf functie en zijn afgeleide naar r :

$$\phi = \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{\Psi'}{\Psi} \cdot \frac{1}{k} + \frac{k'}{2k^2}\right). \quad (4.15)$$

Deze formule kan gebruikt worden om de afhankelijkheid van de fase van het rotatie quantumgetal l en de energie E te bepalen. Een goede benadering voor de afhankelijkheid van de fase van l en E is [22]:

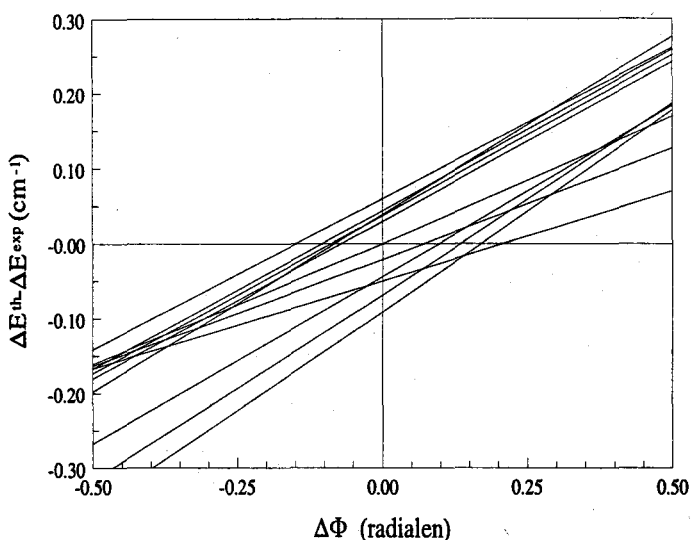
$$\phi(E, l) = \phi(0, 0) + l(l+1)\phi'_l + E\phi'_E, \quad (4.16)$$

met $\phi'_l \equiv \left(\frac{\partial\phi}{\partial(l(l+1))}\right)|_{E=0}$ en $\phi'_E \equiv \left(\frac{\partial\phi}{\partial E}\right)|_{l=0}$.

Het idee van deze fase-methode is dat we aannemen dat er een zodanig punt $r = r_0$ is te vinden dat de potentiaal voor $r > r_0$ (het zogenaamde buitengebied) redelijk goed bekend is in termen van de dispersie coëfficiënten C_6, C_8, \dots , terwijl we de potentiaal links van r_0 (het binnengebied) niet hoeven te kennen als in r_0 nog maar de WKB benadering geldt. We kunnen dan de keuze voor ϕ in r_0 als randvoorwaarde beschouwen. De bedoeling van deze fase-aanpak is dat we de keuze voor de fase ϕ in het meest "rechtse" punt waar de WKB benadering nog geldig is, als randvoorwaarde beschouwen voor de radiale Schrödinger-vergelijking voor $r > r_0$. We hoeven ons dan geen zorgen te maken over de afwijkingen van de potentiaal in het binnengebied. In het kleine E en l gebied dat voor koude botsingen en voor de beschouwde discrete niveaus van belang is zou men de lineaire termen in 4.16 kunnen verwaarlozen.

Een andere in de praktijk succesvolle aanpak is de lineaire termen mee te nemen, maar ze wel te laten volgen uit de potentiaal in het binnengebied. Ze hangen namelijk minder gevoelig van die potentiaal af dan de fase zelf [5]. Het is daarbij toch wel van belang om voor de berekening van ϕ'_l en ϕ'_E de best mogelijke potentiaal links van r_0 te kiezen. We kiezen in feite de in het voorgaande via de IPA-methode verkregen potentiaal. Nog een andere mogelijkheid is om de coëfficiënten van de lineaire termen net als $\phi(0, 0)$ zelf te fitten aan de gemeten energie niveaus. Door de Schrödinger vergelijking voor $r > r_0$ op te lossen met de fase $\phi(E, l)$ als randvoorwaarde berekenen we theoretische energie niveaus. De precieze straal waar de fase-veranderingen $\Delta\phi_S$ en $\Delta\phi_T$ feitelijk worden aangebracht, doet er niet toe, zolang het maar in het WKB gebied gebeurt. In de praktijk gebeurt het in het diepste punt van de singlet- respectievelijk de triplet potentiaal. Wel is belangrijk dat er een punt r_0 bestaat dat aan de bovenstaande condities voldoet.

Volgens de WKB benadering (4.14) heeft een fase-verandering die in een willekeurig punt in het WKB gebied wordt aangebracht, hetzelfde effect als eenzelfde fase-verandering in r_0 . Om een idee te krijgen van de afwijkingen in de potentialen kijken we naar de afwijking in de fase $\phi(0, 0)$ die nodig is om het verschil tussen de afstanden van opeenvolgende experimenteel en theoretisch bepaalde energie niveaus nul te maken.



Figuur 4.3: Verschil tussen experimentele en theoretische energie verschillen voor de ^{39}K singlet potentiaal als functie van $\Delta\phi$. De $(v+1, l) - (v, l)$ combinaties zijn van boven naar beneden bij $\Delta\phi = 0.5$: $(76,34)-(75,34)$, $(78,18)-(77,18)$, $(77,18)-(76,18)$, $(77,14)-(76,14)$, $(77,6)-(76,6)$, $(75,34)-(74,34)$, $(76,14)-(75,14)$, $(75,14)-(74,14)$, $(79,18)-(78,18)$, $(80,18)-(79,18)$ en $(81,18)-(80,18)$.

In figuur 4.3 en 4.4 zien we het verschil tussen de experimentele en theoretische energieverschillen voor de hoogste gemeten rotatie-vibratie niveaus, voor respectievelijk de singlet en de triplet potentiaal. Uit deze figuren vinden we voor de singlet- en tripletfasecorrecties de volgende intervallen (in radialen):

$$-0.15 < \Delta\phi_{S=0} < 0.21, \quad -0.15 < \Delta\phi_{S=1} < 0.37$$

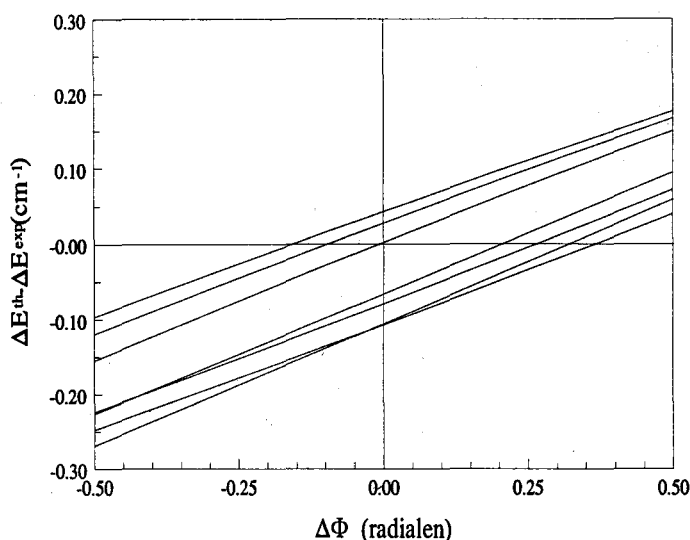
Duidelijk is te zien dat het singlet interval klein is ten opzichte van π . Het triplet interval is iets groter maar toch nog steeds een redelijk kleine fractie van π . Een vergelijking met π ligt voor de hand omdat $\Delta\phi = \pi$ overeenkomt met een extra knoop in de radiale golf functie, dat wil zeggen dat karakteriseert de maximale onzekerheid, ook in de verstrooiingslengte.

Zoals boven opgemerkt kunnen we de gevonden $\Delta\phi_S$ en $\Delta\phi_T$ meteen extrapoleren naar de lage positieve energieën van koude botsingen. Dit op basis van de overweging dat het atomaire systeem voor $r \leq r_0$ nog niet weet of het gebonden is of niet. Door het oplossen van de Schrödinger vergelijking voor lage $E > 0$ en $l = 0$ vinden we voor grote r een radiale golf functie van de vorm [11, 5]

$$R_{l=0}(r) = A \sin(kr + \delta_{l=0}) \quad (4.17)$$

met

$$\delta_{l=0}(k) \underset{k \rightarrow 0}{\sim} -ka \quad (4.18)$$

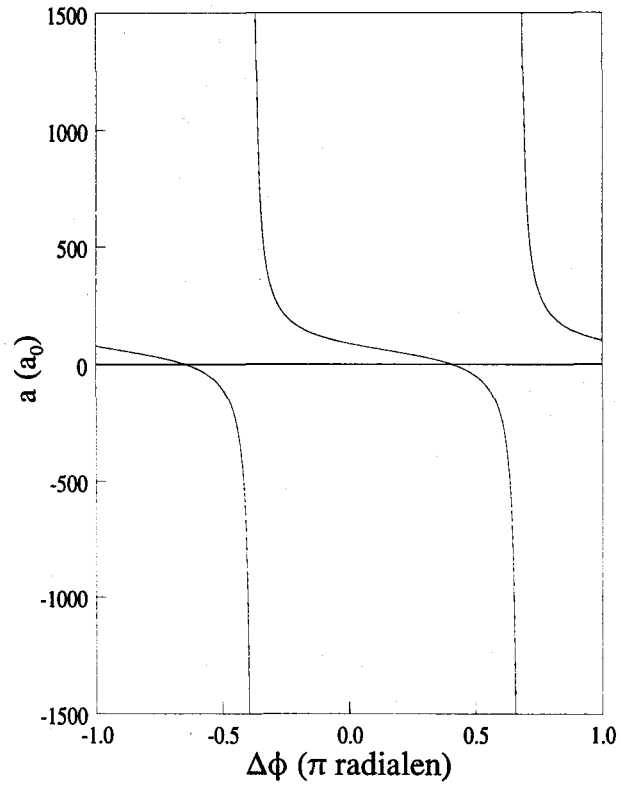


Figuur 4.4: Verschil tussen experimentele en theoretische energie verschillen voor de ^{39}K triplet potentiaal als functie van $\Delta\phi$. De $(v+1, l) - (v, l)$ combinaties zijn van boven naar beneden bij $\Delta\phi = 0.5$: $(17,30)-(16,30)$, $(17,32)-(16,32)$, $(17,34)-(16,34)$, $(15,30)-(14,30)$, $(16,30)-(15,30)$, $(15,34)-(14,34)$ en $(16,34)-(15,34)$.

waarin a de verstrooiingslengte voorstelt. We hebben in paragraaf 1.2 reeds gezien dat dit een cruciale grootheid is voor koude botsingen. We vinden, overeenkomend met de intervallen $\Delta\phi_S$ en $\Delta\phi_T$, de volgende intervallen voor de singlet respectievelijk de triplet verstrooiingslengte:

$$+202 < a_S < +1613 a_0, \quad +65 < a_T < +101 a_0$$

In figuur 4.5 is de relatie tussen de triplet verstrooiingslengte en de extra fasecorrecties $\Delta\phi$ weergegeven. In hoofdstuk 5 zullen we zien wat de invloed van de onzekerheden in de potentialen is op de ligging van de resonanties.



Figuur 4.5: Waarde van de verstrooiingslengte a als functie van $\Delta\phi$ voor de $^{39}\text{K}_2$ triplet toestand. Waar de verstrooiingslengte plotseling van $-\infty$ naar ∞ gaat raakt er een extra toestand gebonden.

Hoofdstuk 5

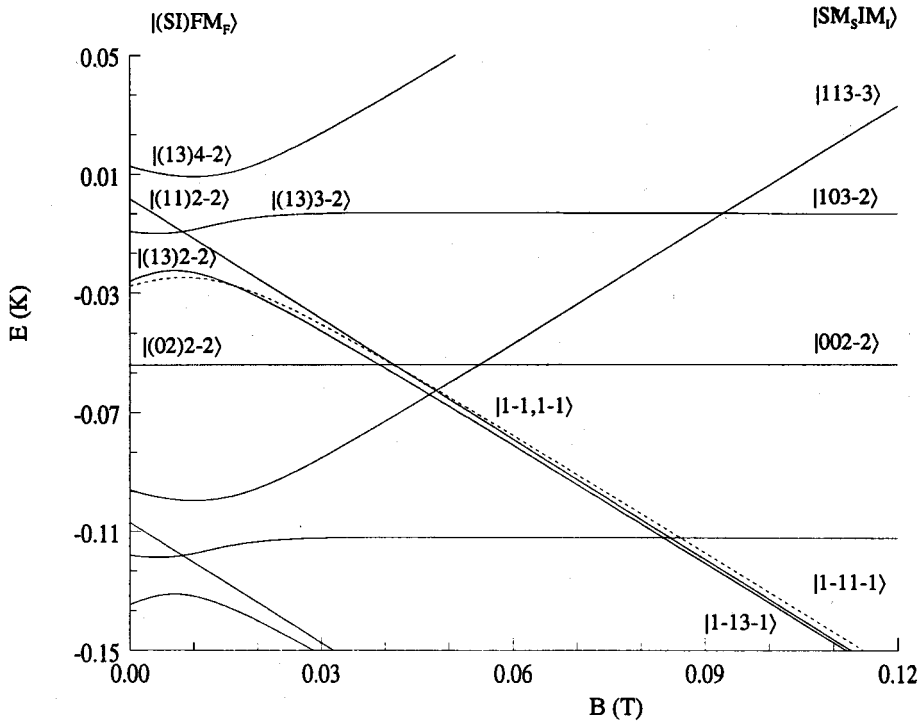
Bepaling van de plaats van de resonanties

We zijn geïnteresseerd in de resonantie gedrag van ultrakoude kalium atomen. We zijn met name benieuwd of er zich resonanties voordoen in het laagveld zoekende gedeelte van de bovenste toestand van het onderste manifold in het hyperfijn diagram van ^{39}K . We kunnen de lokaties van de resonanties op twee manieren bepalen. Enerzijds door een gebonden toestands diagram als functie van het magneetveld te construeren en aan de hand van het gedrag van de toestanden uitspraken te doen over de lokaties van eventuele resonanties. Anderzijds kunnen we de lokatie van de resonanties direct bepalen door het gekoppelde kanalen botsings probleem numeriek op te lossen. De resultaten van beide methoden worden in dit hoofdstuk behandeld.

5.1 Verwachte resonanties

Voor de twee hoogste $l = 0$ triplet toestanden ($v = 25$ en $v = 26$) en de hoogste $l = 0$ singlet toestand ($v = 84$) zijn de gebonden niveaus berekend als functie van B op de manier aangegeven in hoofdstuk 3. Het resultaat staat in figuur 5.1. In de figuur is ook de drempel energie van het $|1 - 1, 1 - 1\rangle$ botsings kanaal weergegeven (stippellijn): de som van de energieën van de twee betrokken één-atoom hyperfijn niveaus (zie figuur 1.2). De triplet $v = 26$ toestanden en de singlet $v = 84$ toestand zijn zowel in de $|SI\rangle FM_F$ als in de $|SM_S IM_I\rangle$ -basis aangegeven, die van toepassing zijn respectievelijk voor kleine B en grote B . Voor velden daartussen in zijn de feitelijke toestanden te schrijven als superposities van de ene basis of als superposities van de andere basis. Er dient opgemerkt te worden dat het toestandsdiagram van de eerste orde is dat wil zeggen dat de koppeling tussen de verschillende toestanden verwaarloosd is.

We verwachten resonanties waar de gebonden toestanden de drempel energie van het $|1 - 1, 1 - 1\rangle$ botsings kanaal passeren. Dit is in figuur 5.1 niet duidelijk te zien. Voor de duidelijkheid zijn in figuur 5.2 de triplet toestanden die resonanties kunnen veroorzaken apart weergegeven met hun onzekerheden tengevolge van de onzekerheid in de triplet po-



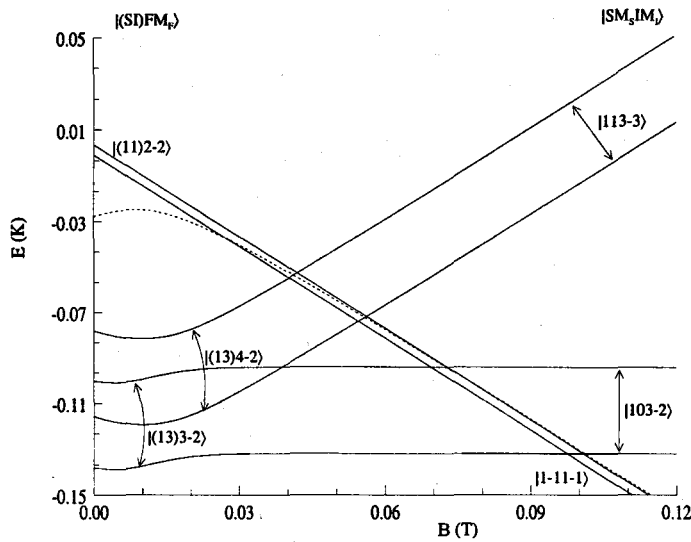
Figuur 5.1: Energie van de singlet ($S = 0$) $v = 84$, $l = 0$ en triplet ($S = 1$) $v = 25, 26$, $l = 0$ gebonden toestanden als functie van het magneteveld. Bij $B = 0$ is de triplet toestand ten gevolge van de hyperfijn interactie ontaard. De gestippelde lijn stelt de drempel energie van het $|1 - 1, 1 - 1\rangle$ botsingskanaal voor. Een resonantie doet zich voor wanneer deze lijn een gebonden toestandslijn doorsnijdt.

tentiaal. In figuur 5.1 zien we dat de $v = 26$ triplet toestand $|(13)2 - 2\rangle$ de drempel energie zou moeten passeren. Deze toestand zal echter voordat hij de drempel passeert koppelen met de $v = 26$ $|(11)2 - 2\rangle$ en $v = 84$ $|(02)2 - 2\rangle$ toestand en de drempel vermoedelijk niet passeren.

In figuur 5.2 zien we dat we ruwweg resonanties kunnen verwachten bij de volgende magnetevelden:

$$\begin{aligned}
 |(11)2 - 2\rangle &: 0.027 \text{ T} < B_{\text{res}} < 0.077 \text{ T} \\
 |(13)4 - 2\rangle &: 0.041 \text{ T} < B_{\text{res}} < 0.056 \text{ T} \\
 |(13)3 - 2\rangle &: 0.073 \text{ T} < B_{\text{res}} < 0.101 \text{ T}
 \end{aligned}$$

In figuur 5.3 is de $v = 84$ singlet toestand apart weergegeven met de onzekerheden ten gevolge van de onzekerheid in de singlet potentiaal. In deze figuur zien we dat we in het



Figuur 5.2: De minimale en maximale energieën van de $l = 0$, $v = 25, 26$ triplet toestanden. De stippellijn geeft de drempel energie weer van het $|1 - 1, 1 - 1\rangle$ botsings kanaal.

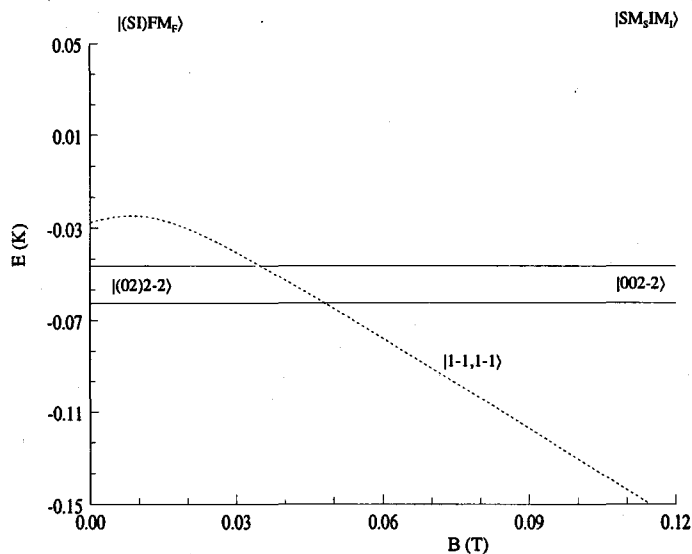
volgende B -veld interval een singlet resonantie kunnen verwachten:

$$|(02)2 - 2\rangle : 0.035 \text{ T} < B_{\text{res}} < 0.049 \text{ T}$$

We zien dat de onzekerheden in de singlet en triplet potentiaal aanzienlijke onzekerheden geven in de lokaties van de resonanties. In de volgende paragraaf zullen we de lokaties vergelijken met een gekoppelde kanalen berekening.

5.2 Vergelijking van de lokaties met gekoppelde kanalen berekeningen

Een resolute manier om de exacte lokatie van de resonanties te vinden is de gekoppelde kanalen vergelijking numeriek op te lossen. Het resultaat hiervan wordt weergegeven in de vorm van S -matrix elementen. Snelle variaties in een S -matrix element wijzen op een resonantie. Met één enkel kanaal open kan het S -matrix element, zoals we in hoofdstuk 2 zagen, voor lage energie geschreven worden als e^{-2ika} , met a de verstrooiingslengte. Figuur 5.4 laat de waarde van de verstrooiingslengte zien voor de botsing van twee ^{39}K atomen in de $|f = 1, m_f = -1\rangle$ toestand die volgt uit een gekoppelde kanalen berekening. We zien in deze figuur vier resonanties. De vraag is met welke toestanden weergegeven in

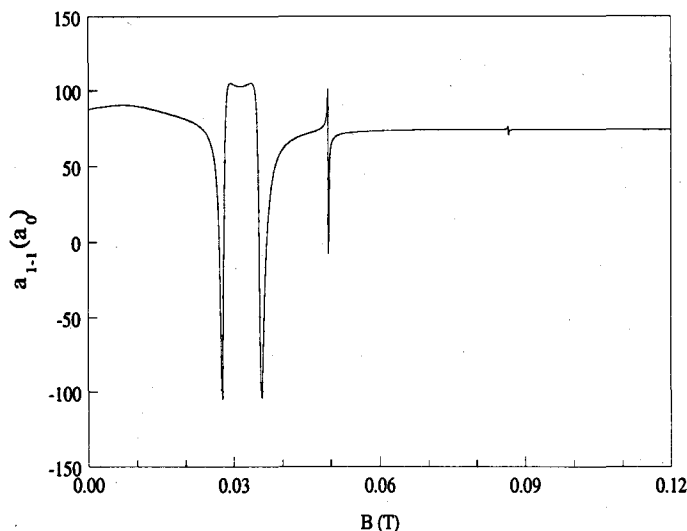


Figuur 5.3: De minimale en maximale energie van de $l = 0$, $v = 84$ singlet toestand. De stippellijn geeft de drempel energie weer van het $|1 - 1, 1 - 1\rangle$ botsings kanaal.

figuur 5.1 de resonanties overeen komen. Eerder is al opgemerkt dat de toestands diagrammen weergegeven in de vorige paragraaf van de eerste orde zijn. Dat wil zeggen dat niet meegenomen is dat wanneer de toestanden elkaar dicht naderen ze elkaar via de hyperfijn interactie kunnen gaan beïnvloeden, m.a.w. dat de toestanden elkaar kunnen "afstoten". Het is daarom niet makkelijk te zeggen met welke toestanden de resonanties in figuur 5.4 overeen komen.

Wanneer we de onzekerheden in de singlet en triplet potentialen meenemen dan zullen tegenvolge van het verschuiven van de gebonden toestands energieën de resonanties verschuiven. Dit zien we in de figuren 5.5 en 5.6. Figuur 5.5 toont de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld wanneer voor de singlet gebonden toestands energie de maximale waarde en voor de triplet gebonden toestands energie de minimale waarde genomen wordt. Figuur 5.6 toont de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld wanneer zowel voor de singlet als voor de triplet gebonden toestands energie de minimale waarde genomen wordt.

In figuur 5.5 zien we weer vier resonanties waarvan de eerste twee elkaar gedeeltelijk overlappen. Wanneer we nu de ligging van de singlet toestand veranderen door voor de singlet gebonden toestands energie i.p.v. de minimale waarde de maximale waarde te nemen, dan verwachte we dat de singlet resonantie naar rechts zal schuiven. Dit leiden we af uit figuur 5.3 waarin we zien dat de singlet toestand bij de minimale energie de drempel energie bij een hoger B -veld snijdt dan bij de maximale energie. We zien dit ook in figuur 5.6: de tweede resonantie is naar rechts geschoven. De andere resonanties blijven nagenoeg



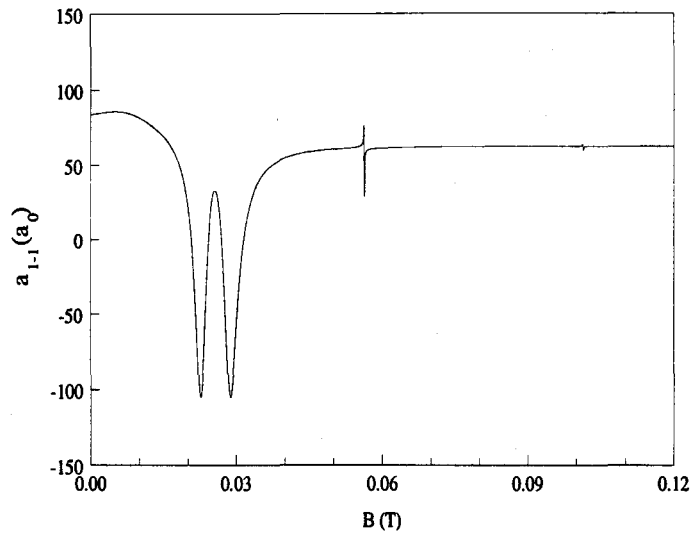
Figuur 5.4: Waarde van de verstrooiingslengte voor de $f = 1$, $m_f = -1$ toestand als functie van het magnetveld.

op hun plaats. We kunnen hieruit concluderen dat de tweede resonantie afkomstig is van de singlet toestand, de overige drie van de triplet toestanden.

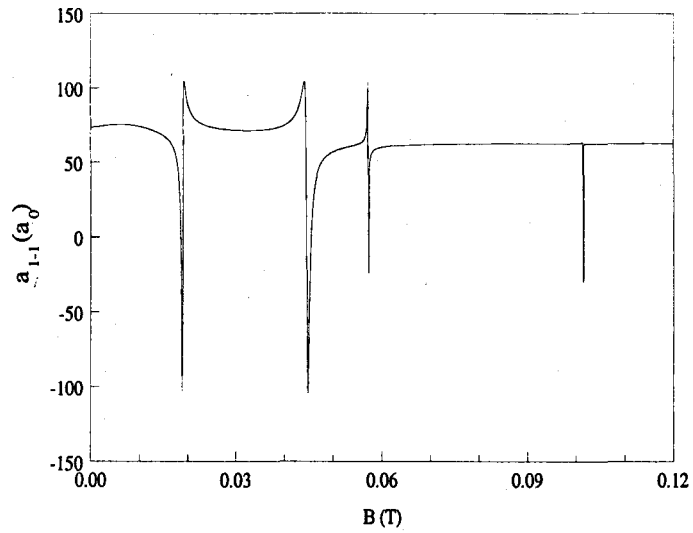
Wanneer we de energie van de singlet toestand veranderen zien we ook dat de twee triplet resonanties die het dichtst bij de singlet resonantie liggen iets verschuiven. Dit wordt veroorzaakt doordat de singlet toestand via de hyperfijn interactie aan de triplet toestanden gekoppeld is. Deze koppeling is, zoals eerder opgemerkt, voor kleine onderlinge energie-afstanden niet te verwaarlozen. De derde triplet resonantie (bij $B \approx 0.1$ T) verschuift niet wanneer we de singlet energie variëren doordat de triplet toestand die deze resonantie veroorzaakt, $|v = 25(13)3 - 2\rangle$, te ver van de singlet toestand af ligt.

We kunnen ook uit iets de vorm van de resonanties afleiden. We zien namelijk dat de eerste resonantie een afwijkende vorm heeft: de verstrooiingslengte wordt eerst groot negatief en daarna groot positief in tegenstelling tot de andere resonanties. We kunnen hieruit concluderen dat de eerste resonantie afkomstig is van een toestand die gebonden raakt bij toenemende B (zie uitleg bij figuur 2.2 in hoofdstuk 2), dus van de $|v = 26(11)2 - 2\rangle$ toestand.

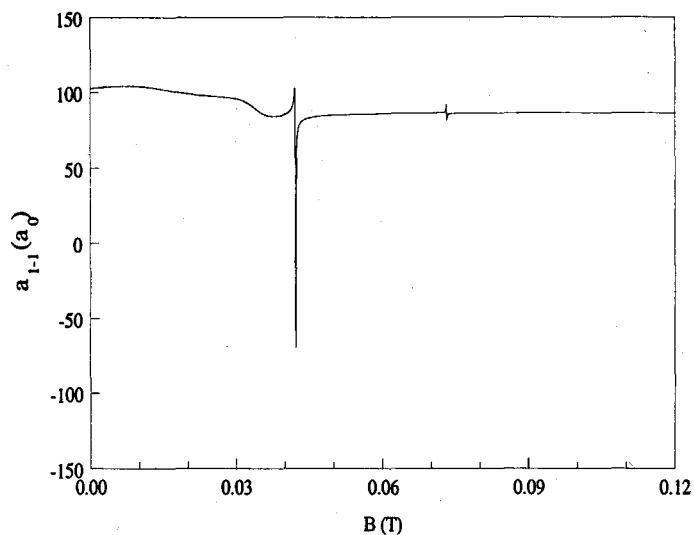
Via de gekoppelde kanalen berekeningen kunnen we de lokaties van de resonanties niet nauwkeurig bepalen omdat de onzekerheden in de triplet en singlet potentialen te groot zijn. In de figuren 5.7 en 5.8 zien we namelijk wanneer we voor de triplet gebonden toestands energie de maximale waarde nemen, dat de resonanties elkaar gaan overlappen. We kunnen daarom geen nauwkeurige uitspraak doen over de lokaties van de resonanties. Wel kunnen we met zekerheid zeggen dat er zich geen resonanties bevinden in het laagveld zoekende gedeelte van de één-atoom $|f = -1, m_f = -1\rangle$ toestand.



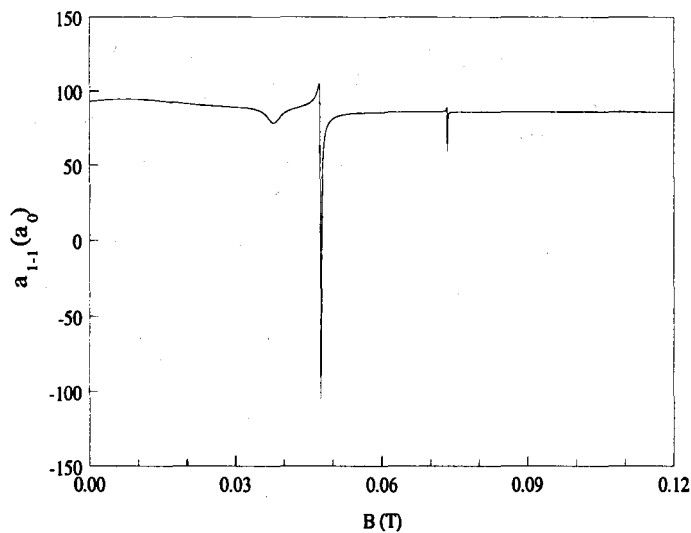
Figuur 5.5: Waarde van de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld met voor de singlet gebonden toestands energie de maximale waarde en voor de triplet gebonden toestands energie de minimale waarde.



Figuur 5.6: Waarde van de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld met voor zowel de singlet gebonden toestands energie als de triplet gebonden toestands energie de minimale waarde.



Figuur 5.7: Waarde van de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld met zowel voor de triplet als voor de singlet gebonden toestands energie de maximale waarde.



Figuur 5.8: Waarde van de verstrooiingslengte als functie van het magneetveld met voor de triplet gebonden toestands energie de maximale waarde en voor de singlet gebonden toestands energie de minimale waarde.

Hoofdstuk 6

Resonantie breedte

In het vorige hoofdstuk hebben we de lokatie van de singlet en triplet resonanties bepaald met de onzekerheid daarin. We gaan ons in dit hoofdstuk bezig houden met hun breedten. We willen de breedten van de resonanties in de sterke-veld limiet verklaren. Dit kan omdat alle resonanties zich in de sterke veld limiet bevinden. In deze limiet kunnen we de in paragraaf 2.2 behandelde Gemodificeerde Feshbach theorie toepassen.

6.1 Breedte van de ^{39}K singlet resonantie

We vonden met behulp van de Gemodificeerde Feshbach theorie in paragraaf 2.2 een uitdrukking (2.14) voor de breedte van de resonanties. Omdat we weten dat de gesloten kanalen gebonden toestand $|\phi_0\rangle$ puur singlet of triplet is, kunnen we zijn golffunctie vinden door numerieke integratie van de Schrödinger vergelijking. Om met behulp van uitdrukking (2.14) de breedte van de resonanties te bepalen moeten we eerst een uitdrukking vinden voor de verstrooiings toestand $|\Psi_i^+\rangle$ in het geval van lage-energie verstrooiing tussen de grondtoestands atomen.

De energie beschikbaar voor twee botsende ^{39}K atomen kan simpel gevonden worden door de twee één-atoom interne energieën op te tellen. De acht één-atoom toestanden worden, zoals weergegeven in hoofdstuk 3, genummerd naar oplopende energie $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |8\rangle$. Asymptotisch kunnen we de interatomaire interactie termen verwaarlozen en wordt het systeem alleen beschreven door de interne toestanden van de twee atomen. Concentreren we ons op een twee-atoom totale spin projectie M_F , dan kunnen we de kanalen beschouwen die daarmee overeenkomen. We schrijven de ge(anti)symmetriseerde twee-atoom hyperfijn basis als volgt:

$$|\{\alpha\beta\}^\pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle|\beta\rangle + (-1)^l|\beta\rangle|\alpha\rangle}{\sqrt{2(1 + \delta_{\alpha\beta})}} \quad (6.1)$$

Omdat ^{39}K een boson is en we s-golf interacties beschouwen vinden we alleen symmetrische spin golffuncties.

We gaan eerst kijken naar de breedte van de singlet resonantie van ^{39}K in de $|f =$

$1, m_f = -1$) toestand. De twee-atoom combinaties die een totaal magnetisch quantumgetal $M_F = -2$ geven vormen een vijf-dimensionale spin subruimte. Deze combinaties zijn $|33\rangle$, $|\{24\}^+\rangle$, $|\{46\}^+\rangle$, $|\{35\}^+\rangle$ en $|55\rangle$. Deze toestanden kunnen uitgedrukt worden in de meer toegankelijke $|SM_S IM_I\rangle$ -basis, zie appendix D.

De $|33\rangle$ toestand beschrijft de twee atomen in de bovenste toestand van het onderste hyperfijn manifold, spin-gepolariseerd met $M_F = -2$. Het mengsel van $|SM_S IM_I\rangle$ toestanden in het ingangs kanaal dat overeenkomt met spintoestand $|33\rangle = |f = 1, m_f = -1, f = 1, m_f = -1\rangle$ is:

$$|33\rangle = \beta_{-1}^2 |113 - 3\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} \alpha_{-1}^2 |1 - 13 - 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} \alpha_{-1}^2 |1 - 11 - 1\rangle + \\ -\alpha_{-1} \beta_{-1} |103 - 2\rangle + \alpha_{-1} \beta_{-1} |002 - 2\rangle, \quad (6.2)$$

met

$$\begin{cases} \alpha_{-1} = \cos \theta_{-1} \\ \beta_{-1} = \sin \theta_{-1} \end{cases} \quad \theta_{-1} = \frac{1}{2} \arctan \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{-a_{hf} + \hbar B (\gamma_e + \gamma_N)}.$$

We kunnen de uitdrukking voor de menghoek θ_{-1} analoog aan B.41 en B.42 voor sterke magneetvelden ontwikkelen. Voor de coëfficiënten α_{-1} en β_{-1} vinden we zo de volgende uitdrukkingen:

$$\alpha_{-1} = \cos \theta_{-1} \approx \cos \left[\frac{1}{2} \epsilon \sqrt{3} (1 + \epsilon) \right],$$

$$\beta_{-1} = \sin \theta_{-1} \approx \sin \left[\frac{1}{2} \epsilon \sqrt{3} (1 + \epsilon) \right],$$

met

$$\epsilon \equiv \frac{a_{hf}}{\hbar B (\gamma_e + \gamma_N)}.$$

Voor sterke magneetvelden vinden we dat $\alpha_{-1} \rightarrow 1$ en $\beta_{-1} \rightarrow 0$. Voor 6.2 vinden we zo de volgende asymptotische uitdrukking:

$$|33\rangle_{as} = \sqrt{\frac{3}{5}} |1 - 13 - 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |1 - 11 - 1\rangle \quad (6.3)$$

We zien dus dat de $|33\rangle$ toestand voor sterke magneetvelden een mengsel is van uitsluitend triplet toestanden. Dit bevestigt de aanname van zuivere triplet of singlet spin-kanaal toestanden in de Gemodificeerde Feshbach theorie (zie paragraaf 2.2).

We concentreren ons nu op de $v = 84$ singlet gebonden toestand van het ^{39}K - ^{39}K systeem bij $B \approx 0.045$ T. De resonantie die deze toestand veroorzaakt zagen we reeds in

figuur 5.6. We bekijken de singlet resonantie met voor zowel de singlet gebonden toestands energie als voor de triplet gebonden toestands energie de minimale waarde (figuur 5.6). Dit omdat de singlet resonantie dan min of meer geïsoleerd is van de twee triplet resonanties (de resonanties overlappen elkaar niet).

Alleen V_-^{hf} koppelt de bovengenoemde triplet toestanden aan de singlet toestand. We vinden daarom de volgende uitdrukking voor de breedte van de singlet resonantie:

$$\Gamma = 2\pi |\langle \phi_{S=0} | V_-^{hf} | \Psi_{S=1}^+ \rangle|^2, \quad (6.4)$$

met $\phi_{S=0}$ de singlet gebonden toestand en $\Psi_{S=1}^+$ de triplet verstrooiings toestand. Werken we het spin matrix element uit, zie appendix E, dan vinden we voor de breedte van de $M_F = -2$ singlet resonantie:

$$\Gamma = 2\pi \frac{3a_{hf}^2}{4} \left(\int d\vec{r} \phi_{S=0}(\vec{r}) \Psi_{S=1}(\vec{r}) \right)^2, \quad (6.5)$$

met $\phi_{S=0}(\vec{r})$ en $\Psi_{S=1}(\vec{r})$ het ruimtelijke deel van de gebonden en verstrooiings golffunctie. Numerieke berekening van de integraal in 6.5 levert de breedte van de resonantie bij de verschillende energieën. In de tabel hieronder worden de op deze manier berekende breedten vergeleken met de breedten gevonden uit gekoppelde kanalen berekeningen.

Energie (μK)	Γ^{Fesh} (mT)	Γ^{cc} (mT)
10	0.2519	0.1851
1	0.08020	0.05869
0.1	0.02538	0.01880

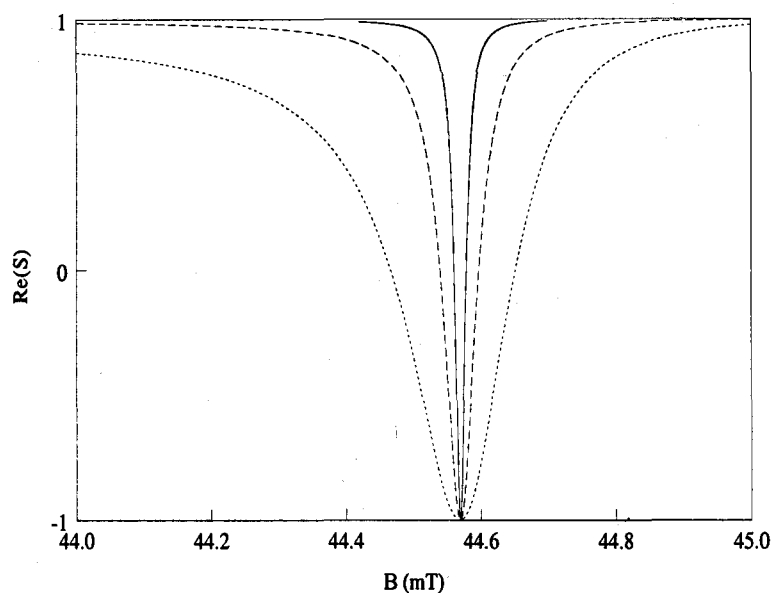
In figuur 6.1 zien we de breedte van de resonantie als functie van de energie.

We zien in de tabel dat er een systematische afwijking is tussen de breedten berekend met behulp van de Gemodificeerde Feshbach theorie (Γ^{Fesh}) en de breedten gevonden met gekoppelde kanalen berekeningen (Γ^{cc}). De breedte gevonden met behulp van de Gemodificeerde Feshbach theorie is systematisch groter dan de breedten gevonden met de gekoppelde kanalen methode.

De energie afhankelijkheid in beide gevallen is van de vorm $E^{\frac{1}{2}}$ en wordt veroorzaakt door de verstrooiings golffunctie Ψ . Dit kan afgeleid worden uit het lage-energie gedrag van de vrije gedeelte van de radiale golffunctie [10]

$$\sqrt{k} r j_l(kr) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k}} (kr)^{l+1}. \quad (6.6)$$

Dus de breedte neemt toe met $E^{l+\frac{1}{2}}$ en omdat we s-golf interacties beschouwen, $l = 0$, neemt de breedte in ons geval toe met \sqrt{E} .



Figuur 6.1: Breedte van de singlet resonantie als functie van de energie van het inkomende kanaal. De stippellijn geeft de resonantie aan bij een inkomende energie van $10 \mu\text{K}$ de gestreepte lijn bij een inkomende energie van $1 \mu\text{K}$ en de getrokken lijn bij een energie van $0.1 \mu\text{K}$.

We moeten nog een verklaring vinden voor het verschil in breedten gevonden met de Gemodificeerde Feshbach theorie en met de gekoppelde kanalen methode. Een verklaring is in principe al gevonden in het vorige hoofdstuk. De beschouwde singlet toestand is op het punt waar deze de drempel energie passeert geen zuivere singlet toestand maar een mengsel van de singlet toestand en de dichtst bijgelegen triplet toestanden. Dit verklaart waarom de breedte van de resonantie gevonden met behulp van de Gemodificeerde Feshbach systematisch groter is. We berekenen met de twee methoden namelijk niet hetzelfde. Met behulp van de gekoppelde kanalen methode berekenen we de breedte van de resonantie die overeenkomt met de feitelijke toestand die de drempel passeert. Deze toestand bestaat voor een fractie uit de singlet toestand en voor een fractie uit triplet toestanden. Aangezien triplet resonanties veel smaller zijn dan singlet resonanties, zie volgende paragraaf, vinden we met de gekoppelde kanalen methode een smallere resonantie. Met de Gemodificeerde Feshbach theorie berekenen we alleen de breedte van het singlet deel. Om de beide methoden te kunnen vergelijken zouden we de verhouding singlet/triplet in de toestand die de resonantie veroorzaakt moeten weten. Daarnaast zouden we ook de breedte van de triplet resonanties apart moeten kunnen berekenen. In de volgende paragraaf komen enkele opmerkingen hierover aan de orde.

6.2 Breedte van de overige resonanties

We zagen in figuur 5.6 naast de singlet resonantie ook nog drie triplet resonanties. We zien dat er een behoorlijk breedte verschil is tussen de verschillende resonanties. Smalle resonanties zijn het gevolg van inefficiënte koppeling tussen het ingangs kanaal en een quasi gebonden toestand. Omdat de V_{-}^{hf} -term alleen triplet toestanden met singlet toestanden koppelt en het botsings kanaal in de sterke veld limiet zuiver triplet is, verwachten we voor triplet gebonden toestanden smalle resonanties.

De eerste triplet resonantie, bij $B \approx 0.020$ T, is veel breder dan de twee andere triplet resonanties bij $B \approx 0.056$ T en $B \approx 0.101$ T respectievelijk. De eerste triplet resonantie is vermoedelijk zo breed omdat de toestand die de resonantie veroorzaakt, $|(11)2 - 2\rangle$, de drempel energie onder een kleine hoek snijdt. Daardoor vindt er over een groot B -interval koppeling plaats. Met andere woorden de koppeling tussen het ingangs kanaal en de triplet toestand is efficiënter dan bij de andere twee triplet toestanden. De andere twee triplet resonanties zijn dus veel smaller doordat de koppeling tussen de open en gesloten kanalen minder efficiënt is.

Wat ook een rol speelt is het feit dat de toestanden die de resonanties veroorzaken geen zuivere triplet toestanden zijn. De toestanden bevatten een fractie van de singlet toestand. De grootte van die fractie is afhankelijk van de afstand tussen de verschillende toestanden. Die kunnen we zien in figuur 5.1. We zien dat de afstand van de onderste triplet toestand tot de singlet toestand veel groter is dan de afstand van de andere triplet toestanden tot de singlet toestand. We verwachten daarom dat de fractie van de singlet toestand in de onderste triplet toestand veel kleiner zal zijn dan bij de andere triplet toestanden. Met andere woorden we verwachten dat de resonantie die deze onderste triplet toestand veroorzaakt smaller zal zijn dan de andere triplet resonanties. Dit zien we ook in figuur 5.6, de resonantie bij $B \approx 0.101$ T is veel smaller dan die bij $B \approx 0.056$ T.

Om kwantitatief iets meer over de breedte van de resonanties te kunnen zeggen zouden we de fracties waaruit de toestanden bestaan wanneer ze de drempel passeren moeten bepalen. Dit zou men kunnen doen door een hogere orde toestands diagram te construeren waarin ook de koppeling tussen de singlet en triplet toestand meegenomen wordt.

Hoofdstuk 7

Conclusies

We hebben gekeken naar het gedrag van resonanties in een ultrakoud gas van grond toestands ^{39}K in een magnetische trap. We hebben met name gekeken naar de ($M_F = -2$) twee-atoom toestand gevormd door twee atomen in het bovenste niveau van het onderste hyperfijn manifold. Door de open kanaal energie te vergelijken met de energie van de gebonden gesloten kanaal toestanden, is geprobeerd de magneetveld sterkten te voorspellen waar zich resonanties voordoen. De gevonden lokaties vertonen ten gevolge van de grote onzekerheden in de interatomaire potentialen grote onzekerheden. We kunnen daardoor geen nauwkeurige uitspraak doen over de lokaties van de resonanties. Wel kunnen we met zekerheid zeggen dat er zich geen resonanties bevinden in het laagveld zoekende gedeelte van de bovenste toestand van het onderste hyperfijn manifold.

Door de uitgevoerde gekoppelde kanalen berekeningen te vergelijken met de eerste orde gebonden toestands diagrammen zijn we tot een duidelijk beeld gekomen van het gedrag van de toestanden en de resonanties die de toestanden veroorzaken. We hebben gezien dat hyperfijn menging in het geval van afwezigheid van een magneetveld geen rol speelt. Bij het aanleggen van een magneetveld echter dient wel degelijk rekening gehouden te worden met de koppelingen tussen de verschillende toestanden. We hebben echter alleen gekeken naar eerste orde toestands diagrammen. Daarom hebben we de behandelde Gemodificeerde Feshbach theorie niet kwantitatief kunnen vergelijken met gekoppelde kanalen berekeningen. Het wordt daarom aanbevolen de koppeling tussen de verschillende toestanden in hogere orde te bekijken, met andere woorden voor magneetvelden ongelijk aan nul ook de hyperfijn menging tussen singlet en triplet toestanden in beschouwing te nemen.

Verder dienen, om een nauwkeurigere uitspraak te doen over de lokatie van de resonanties, de singlet en triplet potentiaal nauwkeuriger bepaald te worden. Een methode om dat te doen is beschreven in hoofdstuk 4.

Appendix A

Belangrijke constanten voor ^{39}K

Atoom massa $M=38.963707$ u

Hyperfijn constante $a_{hf}=11.0795$ mK

Kernspin $i = \frac{3}{2}$

Gyromagnetische verhouding van de atomaire elektronen toestand:

$$g_e = 2.00229421$$
$$\gamma_e = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot g_e = 1.76087163 \times 10^{11} \text{ T}^{-1}\text{s}^{-1}$$

Gyromagnetische verhouding van de kern:

$$g_N = -0.00014193489$$
$$\gamma_N = -\frac{\mu_N}{\hbar} \cdot g_N = 1.248189350 \times 10^7 \text{ T}^{-1}\text{s}^{-1}$$

Grondtoestands elektronenconfiguratie $(3s)^2(3p)^6(4s)^1$

Appendix B

De hyperfijn eigentoestanden

B.1 Het 2×2 eigenwaarden probleem

We berekenen de eigentoestanden $|1\rangle$ en $|2\rangle$ van de hermitische operator H door de toestanden uit te drukken in een andere basis $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ waarin H makkelijk is uit te rekenen. De eigenschappen van de eigentoestanden zijn:

$$\begin{aligned}\langle 1|H|1\rangle &= \lambda_1 \\ \langle 2|H|2\rangle &= \lambda_2\end{aligned}\tag{B.1}$$

en H is diagonaal in de basis van eigenvectoren:

$$\begin{aligned}\langle 1|H|2\rangle &= \langle 2|H|1\rangle = 0 \\ \langle 1|1\rangle &= \langle 2|2\rangle = 1\end{aligned}\tag{B.2}$$

Diagonalisatie is te verwezelijken door een unitaire basis transformatie toe te passen op de basis $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ waarin we H uitrekenen:

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |a\rangle \\ |b\rangle \end{pmatrix}\tag{B.3}$$

met $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$. We vinden zo gebruikmakend van $H = H^\dagger$ en B.2:

$$\lambda_1 = \langle 1|H|1\rangle = \frac{1}{2}(H_{aa} + H_{bb}) + \frac{H_{ab}}{\sin 2\theta}\tag{B.4}$$

$$\lambda_2 = \langle 2|H|2\rangle = \frac{1}{2}(H_{aa} + H_{bb}) - \frac{H_{ab}}{\sin 2\theta}\tag{B.5}$$

$$\tan 2\theta = \frac{2H_{ab}}{H_{aa} - H_{bb}}\tag{B.6}$$

B.2 De interne eigentoestanden

De interne Hamiltoniaan 3.3 herschrijven we als:

$$H^{int} = \frac{a_{hf}}{\hbar^2} \vec{S}^e \cdot \vec{S}^N + (\gamma_e S_z^e - \gamma_N S_z^N) B,\tag{B.7}$$

met \vec{S}^e en \vec{S}^N de elektron- respectievelijk de kernspin. We schrijven deze Hamiltoniaan eerst om naar sferische componenten $S_{0,\pm 1}^i$ van de spin operatoren:

$$H = (\gamma_e S_z^e - \gamma_N S_z^N)B + \frac{a_{hf}}{\hbar^2} \sum_{\mu=-1}^1 (-1)^\mu S_\mu^e S_{-\mu}^N \quad (\text{B.8})$$

De sferische componenten zijn als volgt gerelateerd aan de spin ladderoperatoren S_\pm^i :

$$S_{\pm 1}^i = \mp \frac{S_\pm^i}{\sqrt{2}} \quad (\text{B.9})$$

en geven werkend op een impulsmoment eigentoestand $|sm_s\rangle$ het volgende resultaat:

$$\begin{cases} S_{\pm 1}^i |sm_s\rangle = \mp \frac{\hbar}{2} \sqrt{2[s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)]} |sm_s \pm 1\rangle \\ S_0^i |sm_s\rangle = m_s \hbar |sm_s\rangle \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

Voor de Zeeman term in H werkend op een eigentoestand $|sm_s\rangle$ vinden we:

$$\gamma_i S_z^i B |sm_s\rangle = \hbar \gamma_i m_s |sm_s\rangle \quad (\text{B.11})$$

We kunnen nu H^{int} in de $\{|m_s m_N\rangle\}$ -basis uitrekenen en diagonaliseren. Dit doen we hieronder voor de verschillende waarden van m_f .

$m_f = -2$ en $m_f = 2$

Voor $m_f = -2$ en $m_f = 2$ treedt er geen koppeling op zodat de eigentoestanden met bijbehorende eigenwaarden $E_{f m_f}$ meteen bekend zijn:

$$\begin{aligned} m_f = 2 \quad \left| \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \quad E_{22} &= \frac{3}{4} a_{hf} + \frac{\hbar B}{2} (\gamma_e - 3\gamma_N) \\ m_f = -2 \quad \left| -\frac{1}{2} -\frac{3}{2} \right\rangle \quad E_{2-2} &= \frac{3}{4} a_{hf} - \frac{\hbar B}{2} (\gamma_e - 3\gamma_N) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

We gaan nu per m_f waarde het 2-dimensionale eigenwaarden probleem oplossen.

$m_f = 1$

De basistoestanden bij $m_f = 1$ zijn:

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \quad \text{en} \quad \left| -\frac{1}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \quad (\text{B.13})$$

In deze basis is H^{int} :

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4} a_{hf} + \frac{\hbar B}{2} (\gamma_e - \gamma_N) & \frac{1}{2} \sqrt{3} a_{hf} \\ \frac{1}{2} \sqrt{3} a_{hf} & -\frac{3}{4} a_{hf} - \frac{\hbar B}{2} (\gamma_e + 3\gamma_N) \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

We voeren nu de volgende basis transformatie uit:

$$\begin{cases} |\lambda_1\rangle = \cos \theta_1 |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sin \theta_1 |-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ |\lambda_2\rangle = -\sin \theta_1 |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \cos \theta_1 |-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Gebruik makend van de relaties B.4 en B.5 vinden we zo voor de eigenwaarden E_{λ_1} en E_{λ_2} :

$$E_{\lambda_1} = -\frac{a_{hf}}{4} - \hbar B \gamma_N + \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1} \quad (\text{B.16})$$

$$E_{\lambda_2} = -\frac{a_{hf}}{4} - \hbar B \gamma_N - \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1} \quad (\text{B.17})$$

Voor de bijbehorende menghoek θ_1 vinden we m.b.v. B.6 de volgende relatie:

$$\tan 2\theta_1 = \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{a_{hf} + \hbar B (\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.18})$$

$m_f = 0$

De basistoestanden bij $m_f = 0$ zijn:

$$|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \quad \text{en} \quad |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \quad (\text{B.19})$$

In deze basis is H^{int} :

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e + \gamma_N) & a_{hf} \\ a_{hf} & -\frac{1}{4}a_{hf} - \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e + \gamma_N) \end{pmatrix} \quad (\text{B.20})$$

We voeren de volgende basis transformatie uit:

$$\begin{cases} |\lambda_1\rangle = \cos \theta_0 |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sin \theta_0 |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ |\lambda_2\rangle = -\sin \theta_0 |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \cos \theta_0 |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \end{cases} \quad (\text{B.21})$$

Met behulp van de relaties B.4 en B.5 vinden we zo voor de eigenwaarden E_{λ_1} en E_{λ_2} :

$$E_{\lambda_1} = -\frac{a_{hf}}{4} + \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0} \quad (\text{B.22})$$

$$E_{\lambda_2} = -\frac{a_{hf}}{4} - \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0} \quad (\text{B.23})$$

Voor de bijbehorende menghoek θ_0 vinden we m.b.v. B.6 de volgende relatie:

$$\tan 2\theta_0 = \frac{2a_{hf}}{\hbar B (\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.24})$$

$m_f = -1$

De basistoestanden bij $m_f = -1$ zijn:

$$|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\rangle \quad \text{en} \quad |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad (\text{B.25})$$

In deze basis is H^{int} :

$$\begin{pmatrix} -\frac{3}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e + 3\gamma_N) & \frac{1}{2}\sqrt{3}a_{hf} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3}a_{hf} & \frac{1}{4}a_{hf} - \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - \gamma_N) \end{pmatrix} \quad (\text{B.26})$$

We voeren de volgende basis transformatie uit:

$$\begin{cases} |\lambda_1\rangle = \cos \theta_{-1} |\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\rangle + \sin \theta_{-1} |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\lambda_2\rangle = -\sin \theta_{-1} |\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\rangle + \cos \theta_{-1} |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

Met behulp van de relaties B.4 en B.5 vinden we zo voor de eigenwaarden E_{λ_1} en E_{λ_2} :

$$E_{\lambda_1} = -\frac{a_{hf}}{4} + \hbar B \gamma_N + \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_{-1}} \quad (\text{B.28})$$

$$E_{\lambda_2} = -\frac{a_{hf}}{4} + \hbar B \gamma_N - \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_{-1}} \quad (\text{B.29})$$

Voor de bijbehorende menghoek θ_{-1} vinden we m.b.v. B.6 de volgende relatie:

$$\tan 2\theta_{-1} = \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{-a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.30})$$

Limieten voor $B \rightarrow 0$

$m_f = 1$

Via

$$\tan 2\theta_1 = \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.31})$$

vinden we voor $B \rightarrow 0$: $\tan 2\theta_1 \rightarrow \sqrt{3}$ zodat $\theta_1 \rightarrow \frac{\pi}{6}$. Hiermee worden de uitdrukkingen B.16 en B.17 voor de eigenwaarden:

$$\begin{aligned} E_{\lambda_1} &= -\frac{1}{4}a_{hf} + a_{hf} = \frac{3}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |2, 1\rangle \\ E_{\lambda_2} &= -\frac{1}{4}a_{hf} - a_{hf} = -\frac{5}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |1, 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

$m_f = 0$

Via

$$\tan 2\theta_0 = \frac{2a_{hf}}{\hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.33})$$

vinden we voor $B \rightarrow 0$: $\tan 2\theta_0 \rightarrow \infty$ zodat $\theta_0 \rightarrow \frac{\pi}{4}$. Hiermee worden de uitdrukkingen B.22 en B.23 voor de eigenwaarden:

$$\begin{aligned} E_{\lambda_1} &= -\frac{1}{4}a_{hf} + a_{hf} = \frac{3}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |2, 0\rangle \\ E_{\lambda_2} &= -\frac{1}{4}a_{hf} - a_{hf} = -\frac{5}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |1, 0\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

$m_f = -1$

Via

$$\tan 2\theta_{-1} = \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{-a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \quad (\text{B.35})$$

vinden we voor $B \rightarrow 0$: $\tan 2\theta_{-1} \rightarrow -\sqrt{3}$ zodat $\theta_{-1} \rightarrow \frac{\pi}{3}$ ($0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$). Hiermee worden de uitdrukkingen B.28 en B.29 voor de eigenwaarden:

$$\begin{aligned} E_{\lambda_1} &= -\frac{1}{4}a_{hf} - a_{hf} = -\frac{5}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |1, -1\rangle \\ E_{\lambda_2} &= -\frac{1}{4}a_{hf} + a_{hf} = \frac{3}{4}a_{hf} \rightarrow |f, m_f\rangle = |2, -1\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Limieten voor $B \rightarrow \infty$

We kunnen deze limieten op twee manieren uitwerken:

Storingsrekening in de hyperfijn-interactie term

De interne Hamiltoniaan schrijven we als:

$$H^{int} = \frac{a_{hf}}{\hbar^2} \vec{S}^e \cdot \vec{S}^N + (\gamma_e S_z^e - \gamma_N S_z^N) B \equiv H_1 + H_0 \quad (\text{B.37})$$

In de limiet voor $B \rightarrow \infty$ is H_1 een kleine storing op H_0 zodat we storingsrekening kunnen toepassen. Als voorbeeld nemen we de eigenwaarden van H^{int} bij $m_f = 1$. De eigentoe-standen van H_0 zijn: $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ en $|\frac{1}{2}\frac{3}{2}\rangle$. In eerste orde storingsrekening worden de eigenwaarden gelijk aan:

$$\begin{aligned} E_1 &\approx \langle \frac{1}{2}\frac{1}{2} | H^{int} | \frac{1}{2}\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - \gamma_N) \\ E_2 &\approx \langle -\frac{1}{2}\frac{3}{2} | H^{int} | -\frac{1}{2}\frac{3}{2} \rangle = \frac{1}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - \gamma_N) \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

We zien dat voor $B \rightarrow \infty$ de hyperfijn energieën gelijk worden aan de diagonaal elementen van H^{int} .

De limiet nemen van de energie-uitdrukking

We kunnen ook de limiet van de energie-uitdrukking evalueren, dat wil zeggen:

$$\lim_{B \rightarrow \infty} E_{\lambda_1} = \lim_{B \rightarrow \infty} \left(-\frac{a_{hf}}{4} - \hbar B \gamma_N + \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1} \right) \quad (\text{B.39})$$

met voor de menghoek de relatie:

$$\tan 2\theta_1 = \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{a_{hf} + \hbar B \gamma} \quad (\text{B.40})$$

waarbij we de afkorting $\gamma = \gamma_e + \gamma_N$ hebben ingevoerd. Voor sterke magneetvelden is $\epsilon \equiv a_{hf}/\hbar B \gamma$ een erg klein getal. De uitdrukking voor de menghoek kunnen we dan schrijven als:

$$\tan 2\theta_1 = \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{\hbar B \gamma (\epsilon + 1)} \approx \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{\hbar B \gamma} (1 - \epsilon) = \epsilon \sqrt{3} (1 - \epsilon) \quad (\text{B.41})$$

hetgeen neerkomt op

$$2\theta_1 \approx \epsilon \sqrt{3} (1 - \epsilon) \quad (\text{B.42})$$

De derde term in B.39 levert dan:

$$\begin{aligned} \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{2 \sin 2\theta_1} &\approx \frac{a_{hf} \sqrt{3}}{2 \epsilon \sqrt{3} (1 - \epsilon)} \\ &\approx \frac{a_{hf}}{2 \epsilon} (1 + \epsilon) \\ &= \frac{1}{2} \hbar B \gamma + \frac{a_{hf}}{2} \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

zodat B.39 overgaat in:

$$\begin{aligned} \lim_{B \rightarrow \infty} E_{\lambda_1} &= -\frac{a_{hf}}{4} + \frac{a_{hf}}{2} + \frac{1}{2} \hbar B (\gamma_e + \gamma_N) - \hbar B \gamma_N \\ &= \frac{a_{hf}}{4} + \frac{\hbar B}{2} (\gamma_e - \gamma_N) \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

Samengevat kunnen we de eigtoestanden nummeren naar oplopende energie:

$$\begin{aligned}
 |\alpha\rangle &= && |f, m_f\rangle \\
 |8\rangle &= && \left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle && |2, 2\rangle \\
 |7\rangle &= && \cos \theta_1 \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \sin \theta_1 \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |2, 1\rangle \\
 |6\rangle &= && \cos \theta_0 \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sin \theta_0 \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |2, 0\rangle \\
 |5\rangle &= && \cos \theta_{-1} \left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + \sin \theta_{-1} \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |2, -1\rangle \\
 |4\rangle &= && \left|-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle && |2, -2\rangle \\
 |3\rangle &= && -\sin \theta_{-1} \left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + \cos \theta_{-1} \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |1, -1\rangle \\
 |2\rangle &= && -\sin \theta_0 \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \cos \theta_0 \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |1, 0\rangle \\
 |1\rangle &= && -\sin \theta_1 \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \cos \theta_1 \left|-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle && B \rightarrow 0 \quad |1, 1\rangle
 \end{aligned} \tag{B.45}$$

met de bijbehorende energie eigenwaarden:

$$\begin{aligned}
& B \rightarrow 0 \\
E_8 &= \frac{3}{4}a_{hf} + \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - 3\gamma_N) & \frac{3}{4}a_{hf} \\
E_7 &= -\frac{a_{hf}}{4} - \gamma_N \hbar B + \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2\sin 2\theta_1} & \frac{3}{4}a_{hf} \\
E_6 &= -\frac{a_{hf}}{4} + \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0} & \frac{3}{4}a_{hf} \\
E_5 &= -\frac{a_{hf}}{4} + \gamma_N \hbar B + \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2\sin 2\theta_{-1}} & \frac{3}{4}a_{hf} \\
E_4 &= \frac{3}{4}a_{hf} - \frac{\hbar B}{2}(\gamma_e - 3\gamma_N) & \frac{3}{4}a_{hf} \\
E_3 &= -\frac{a_{hf}}{4} + \gamma_N \hbar B - \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2\sin 2\theta_{-1}} & -\frac{5}{4}a_{hf} \\
E_2 &= -\frac{a_{hf}}{4} - \frac{a_{hf}}{\sin 2\theta_0} & -\frac{5}{4}a_{hf} \\
E_1 &= -\frac{a_{hf}}{4} - \gamma_N \hbar B - \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{2\sin 2\theta_1} & -\frac{5}{4}a_{hf}
\end{aligned} \tag{B.46}$$

en de menghoeken: ($0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$):

$$\begin{aligned}
\tan 2\theta_1 &= \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \\
\tan 2\theta_0 &= \frac{2a_{hf}}{\hbar B(\gamma_e + \gamma_N)} \\
\tan 2\theta_{-1} &= \frac{a_{hf}\sqrt{3}}{-a_{hf} + \hbar B(\gamma_e + \gamma_N)}
\end{aligned} \tag{B.47}$$

Appendix C

De RKR-potentialen

C.1 De RKR-singlet potentiaal

Gebruikt:

$v = 0, \dots, 73$ niveaus uit [15]

$v = 77, \dots, 81$ niveaus uit [16]

42 Dunham coëfficiënten

Omkeerpunten hoogst gelegen nog gemeten niveau:

$r_1 = 5.42 a_0$ (linker omkeerpunt $v = 73$)

$r_2 = 28.78 a_0$ (rechter omkeerpunt $v = 81$)

Diepte en positie van het minimum:

$D_e = 4450.711 \text{ cm}^{-1} = 6403.5 \text{ K}$

$r_e = 7.416 a_0$

C.2 De RKR-triplet potentiaal

Gebruikt: $v = 0 \dots 13$ niveaus uit [17]

$v = 14 \dots 17$ niveaus uit [17, 18]

7 Dunham coëfficiënten

Omkeerpunten hoogst gelegen nog gemeten niveau:

$r_1 = 9.116 a_0$ (linker omkeerpunt $v = 17$)

$r_2 = 19.871 a_0$ (rechter omkeerpunt $v = 17$)

Diepte en positie van het minimum:

$D_e = 252.9 \text{ cm}^{-1} = 363.9 \text{ K}$

$r_e = 10.908 a_0$

Appendix D

Twee-atoom basis transformatie

We schrijven de ge(anti)symmetriseerde twee-atoom hyperfijn basis als volgt:

$$|\{\alpha\beta\}^\pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle|\beta\rangle + (-1)^l|\beta\rangle|\alpha\rangle}{\sqrt{2(1 + \delta_{\alpha\beta})}} \quad (\text{D.1})$$

Om de twee-atoom toestanden te vinden herschrijven we de één-atoom toestanden gevonden in appendix B in de volgende vorm:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |f m_f\rangle = c_1 |m_s m_i\rangle_1 + c_2 |m_s m_i\rangle_2 \\ |1\rangle &= |11\rangle = -\beta_1 |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \alpha_1 |-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ |2\rangle &= |10\rangle = -\beta_0 |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle + \alpha_0 |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ |3\rangle &= |1-1\rangle = -\beta_{-1} |\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\rangle + \alpha_{-1} |-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle \\ |4\rangle &= |2-2\rangle = |-\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\rangle \\ |5\rangle &= |2-1\rangle = \alpha_{-1} |\frac{1}{2} -\frac{3}{2}\rangle + \beta_{-1} |-\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle \\ |6\rangle &= |20\rangle = \alpha_0 |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle + \beta_0 |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ |7\rangle &= |21\rangle = \alpha_1 |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \beta_1 |-\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ |8\rangle &= |22\rangle = |\frac{1}{2} \frac{3}{2}\rangle \end{aligned}$$

met

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \cos \theta_1 & \alpha_0 &= \cos \theta_0 & \alpha_{-1} &= \cos \theta_{-1} \\ \beta_1 &= \sin \theta_1 & \beta_0 &= \sin \theta_0 & \beta_{-1} &= \sin \theta_{-1} \end{aligned}$$

waarin de menghoeken θ_1 , θ_0 en θ_{-1} gegeven worden door de relaties B.18, B.24 en B.30. Een twee-atoom toestand van de vorm $|\alpha\beta\rangle$ kan gevonden worden door het direct produkt

van twee één-atoom toestanden te nemen:

$$|\alpha\beta\rangle = (c_{x1}|m_s m_i\rangle_{x1} + c_{x2}|m_s m_i\rangle_{x2}) \otimes (c_{y1}|m_s m_i\rangle_{y1} + c_{y2}|m_s m_i\rangle_{y2})$$

Kijken we naar een toestand waarvoor geldt dat $M_F = -2$, bijvoorbeeld |35) dan vinden we:

$$\begin{aligned} |35\rangle &= \left(-\beta_{-1}|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\rangle + \alpha_{-1}|-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\right) \otimes \left(\alpha_{-1}|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\rangle + \beta_{-1}|-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\right) \\ &= -\beta_{-1}\alpha_{-1}|S=1, M_S=1\rangle \otimes |m_{i1} = -\frac{3}{2}, m_{i2} = -\frac{3}{2}\rangle + \\ &\quad - \frac{\beta_{-1}^2}{\sqrt{2}}(|S=1, M_S=0\rangle + |S=0, M_S=0\rangle) \otimes |m_{i1} = -\frac{3}{2}, m_{i2} = -\frac{1}{2}\rangle + \\ &\quad + \frac{\alpha_{-1}^2}{\sqrt{2}}(|S=1, M_S=0\rangle - |S=0, M_S=0\rangle) \otimes |m_{i1} = -\frac{1}{2}, m_{i2} = -\frac{3}{2}\rangle + \\ &\quad + \alpha_{-1}\beta_{-1}|S=1, M_S=-1\rangle \otimes |m_{i1} = -\frac{1}{2}, m_{i2} = -\frac{1}{2}\rangle \\ &= -\alpha_{-1}\beta_{-1}|113-3\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-13-1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-11-1\rangle \\ &\quad + \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} + \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|102-2\rangle + \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} - \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|103-2\rangle + \\ &\quad - \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} - \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|002-2\rangle - \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} + \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|003-2\rangle \end{aligned}$$

in de $|SM_SIM_I\rangle$ -basis. Op dezelfde manier vinden we:

$$\begin{aligned} |53\rangle &= \left(\alpha_{-1}|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\rangle + \beta_{-1}|-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\right) \otimes \left(-\beta_{-1}|\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\rangle + \alpha_{-1}|-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\right) \\ &= -\alpha_{-1}\beta_{-1}|113-3\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-13-1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-11-1\rangle \\ &\quad - \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} + \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|102-2\rangle + \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} - \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|103-2\rangle + \\ &\quad - \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} - \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|002-2\rangle + \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} + \frac{\beta_{-1}^2}{2}\right)|003-2\rangle. \end{aligned}$$

Via D.1 vinden we met $l = 0$:

$$\begin{aligned}
| \{35\}^+ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|35\rangle + |53\rangle) = \\
&= -\sqrt{2}\alpha_{-1}\beta_{-1}|113-3\rangle + \sqrt{\frac{6}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-13-1\rangle - \sqrt{\frac{4}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1}|1-11-1\rangle \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{-1}^2 - \beta_{-1}^2)|103-2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{-1}^2 - \beta_{-1}^2)|002-2\rangle
\end{aligned}$$

We zien dat inderdaad door Bose-symmetrie de termen met $l + S + I = \text{oneven}$ weggevallen zijn. Transformeren we op deze manier alle twee-atoom toestanden waarvoor $M_F = -2$ naar de $|SM_SIM_I\rangle$ -basis, dan vinden we:

$$\begin{bmatrix} |33\rangle \\ | \{24\}^+ \rangle \\ | \{46\}^+ \rangle \\ | \{35\}^+ \rangle \\ |55\rangle \end{bmatrix} = \mathbf{A} \cdot \begin{bmatrix} |113-3\rangle \\ |1-13-1\rangle \\ |1-11-1\rangle \\ |103-2\rangle \\ |002-2\rangle \end{bmatrix}$$

met voor de transformatie matrix \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \beta_{-1}^2 & \sqrt{\frac{3}{5}}\alpha_{-1}^2 & -\sqrt{\frac{2}{5}}\alpha_{-1}^2 & -\alpha_{-1}\beta_{-1} & \alpha_{-1}\beta_{-1} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{5}}\alpha_0 & \sqrt{\frac{3}{5}}\alpha_0 & -\frac{\beta_0}{\sqrt{2}} & -\frac{\beta_0}{\sqrt{2}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{5}}\beta_0 & \sqrt{\frac{3}{5}}\beta_0 & \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} & \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} \\ -\sqrt{2}\alpha_{-1}\beta_{-1} & \sqrt{\frac{6}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1} & -\sqrt{\frac{4}{5}}\alpha_{-1}\beta_{-1} & \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{-1}^2 - \beta_{-1}^2) & -\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{-1}^2 - \beta_{-1}^2) \\ \alpha_{-1}^2 & \sqrt{\frac{3}{5}}\beta_{-1}^2 & -\sqrt{\frac{2}{5}}\beta_{-1}^2 & \alpha_{-1}\beta_{-1} & -\alpha_{-1}\beta_{-1} \end{bmatrix}$$

Appendix E

Spin matrix elementen

Voor het uitrekenen van de spin matrix elementen van de exacte hyperfijn interactie $V^{hf} = \frac{a_{hf}}{\hbar^2} (\vec{s}_1 \cdot \vec{i}_1 + \vec{s}_2 \cdot \vec{i}_2)$ is de $|SM_S IM_I\rangle$ -basis niet geschikt. We stappen daarom over op een nieuwe basis: $|m_{s1} m_{i1} m_{s2} m_{i2}\rangle$, waarin de toestanden waarin we geïnteresseerd zijn er als volgt uit zien:

$$|1 - 13 - 1\rangle = \sqrt{\frac{1}{5}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle$$

$$|1 - 11 - 1\rangle = -\sqrt{\frac{2}{5}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\rangle$$

$$|002 - 2\rangle = \frac{1}{2} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{2} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\rangle - \frac{1}{2} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2} |-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\rangle$$

In het $M_F = -2$ spin matrix element $\langle 002 - 2 | V^{hf} (\sqrt{\frac{3}{5}} |1 - 13 - 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |1 - 11 - 1\rangle)$ werken de spin-operatoren met index 1 alleen op de quantumgetallen m_{s1} en m_{i1} en de index 2 operatoren alleen op de quantumgetallen m_{s2} en m_{i2} . Werken we dit uit dan krijgen we uiteindelijk:

$$\langle 002 - 2 | V^{hf} | (\sqrt{\frac{3}{5}} |1 - 13 - 1\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |1 - 11 - 1\rangle) \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} a_{hf} \quad (\text{E.1})$$

Referenties

- [1] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell,
Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor,
Science **269**, 198 (1995).
- [2] C.C. Bradley, C.A. Sacket, J.J. Tollet, and R.G. Hulet,
Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions,
Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [3] K.B. Davis, M.O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn,
and W. Ketterle,
Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms,
Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [4] H.F. Hess,
Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen,
Phys. Rev. B **34**, 3476 (1986).
- [5] A.J. Moerdijk and B.J. Verhaar,
Prospects for Bose condensation in atomic ^7Li and ^{23}Na ,
Phys. Rev. Lett. **73**, 518 (1994).
- [6] H.R. Thorsheim, J. Weiner, and P.S. Julienne,
Laser-Induced Photoassociation of Ultracold Sodium Atoms,
Phys. Rev. Lett. **58**, 2420 (1987).
- [7] B.J. Verhaar, K. Gibble, and S. Chu,
Cold-collision properties derieved from frequency shifts in a cesium fountain,
Phys. Rev. A **48**, R3429 (1993).
- [8] R.M.C. Ahn, J.P.H.W. van den Eijnde, and B.J. Verhaar,
Calculations of nuclear-spin-relaxation rate for spin-polarized atomic hydrogen,
Phys. Rev. B **27**, 5424 (1983).
- [9] H.T.C. Stoof, J.M.V.A. Koelman, and B.J. Verhaar,
Spin-exchange and dipole relaxation rates in atomic hydrogen,
Phys. Rev. B. **38**, 4688 (1988).

- [10] J.R. Taylor,
Scattering theory,
(Wiley, New York, 1972).
- [11] A. Messiah,
Quantum Mechanics,
(North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1970).
- [12] Jos Dohmen,
Resonanties in botsingen tussen spingepolariseerde waterstofatomen,
(Stageverslag, Technische Universiteit Eindhoven, 1987)
- [13] J.P.H.W. van den Eijnde,
Theoretical aspects of the stabilization of atomic hydrogen,
Proefschrift, TH Eindhoven (1984).
- [14] S.J.M. Kuppens,
Botsingsgedrag van koude natrium atomen in een magnetische trap,
(Afstudeerverslag, Technische Universiteit Eindhoven, 1990)
- [15] C. Amiot,
The $X^1\Sigma_g^+$ Electronic State of K_2 ,
J. Mol. Spectrosc. **146**, 370 (1991).
- [16] C. Amiot, J. Vergès, C. Fellows,
The long-range potential of the $K_2 X^1\Sigma_g^+$ ground electronic state up to 15 Å,
J. Chem. Phys. **103** (9), 3350 (1995).
- [17] L. Li, A.M. Lyyra, W.T. Luh, and W.C. Stwalley,
Observation of the $^{39}K_2 a^3\Sigma_u^+$ state by perturbation facilitated optical-optical double resonance resolved fluorescence spectroscopy,
J. Chem. Phys. **93** (12), 8452 (1990).
- [18] W.T. Zemke, C. Tsai, and W.C. Stwalley,
Analysis of Long Range Dispersion and Exchange Interactions Between Two K Atoms,
(Niet gepubliceerd).
- [19] M. Marinescu, H.R. Sadeghpour, and A. Dalgarno,
Dispersion coefficients for alkali-metal dimers,
Phys. Rev. A **49**, 982 (1994)
- [20] W.M. Kosman and J. Hinze,
Inverse Perturbation Analysis: Improving the Accuracy of Potential Energy Curves,
J. Mol. Spectrosc. **56**, 93 (1975).

- [21] C.R. Vidal and H. Scheingraber,
Determination of Diatomic Molecular Constants Using An Inverted Perturbation Approach,
J. Mol. Spectrosc. **65**, 46 (1977).
- [22] H.M.J.M. Boesten,
Proefschrift, TU Eindhoven (verschijnt nov. 1996).