

冷原子在静电势阱中的量子力学效应^{*}

罗有华¹⁾ 黄 整²⁾ 王育竹¹⁾

¹⁾中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

²⁾西南交通大学应用物理系, 成都 610031)

(2001 年 8 月 17 日收到, 2002 年 2 月 6 日收到修改稿)

用四个点电荷构造一个简单、新颖的静电势阱, 并基于含时薛定谔方程和有限差分时间域方法, 研究冷原子在该势阱中的量子力学效应. 以中性铷原子为例, 给出了原子和静电场系统的含时波函数, 基态本征能量和本征波函数. 结果表明, 在这样的静电势阱中, 囚禁中性冷原子是完全可能的. 所得结果对实验上构造类似的静电势阱捕获中性冷原子有重要指导意义.

关键词: 冷原子, 静电势阱, 量子力学效应

PACC: 3280P, 0375, 5258Q, 0365G

1. 引 言

由于中性原子与静电场或磁场的相互作用比较弱, 因此, 用静电磁场陷阱捕获中性原子比起离子来困难得多^[1]. 然而, 最近十多年, 由于激光冷却技术的发展^[2-4], 获得超冷原子气体已成为现实. 这时, 我们有可能用静电场或静磁场陷阱来捕获中性原子. 到目前为止, 国际上只有奥地利 Schmiedmayer 小组系统地研究了一根带静电荷或通有电流的金属线与中性原子的相互作用问题^[5-10]. 他们的工作表明, 如果金属线通有电流, 则原子可以被囚禁在 r^{-1} 形式的磁场的二维陷阱中, 如果是带静电荷的金属线, 则由于相互作用势的 r^{-2} 形式, 稳定的陷阱不可能存在. 同时还表明, 在静电场陷阱中, 中性原子可以被囚禁在场强最大的区域, 即所谓的强场寻找态. 基于中性原子与静电场相互作用的陷阱总是强场寻找态陷阱. 在这样的陷阱中, 能量守恒禁止两体自旋反过程的发生. 在现有的玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) 实验中, 由于原子处于弱场寻找态, 容易发生自旋反转改变能态, 原子将逸出势阱而逃离. 因此实验中需要采用一些特殊措施来堵塞“漏洞”以保证 BEC 的形成. 如果我们在上述静电场陷阱中做 BEC 实验, 则由于没有所谓的“漏洞”存在, 常规 BEC 实

验中的一些特殊措施将取消, 从而有可能简化 BEC 实验, 这对探讨玻色-爱因斯坦凝聚体的潜在用途有重要科学意义. 另一方面, 按照需求移动单个原子是量子工程师们一直梦寐以求的能力. 但是直到最近, 德国科学家才将冷的铯原子从一个磁光陷阱中装载到一个驻波光学陷阱中. 通过控制驻波的运动, 从而发明了一种以“传送带”或“弹弓”方式输送单个原子的技术^[11]. 如果我们能在静电势阱中控制和操纵中性原子, 按照需求移动单个原子的能力则有可能达到. 这个时候人们就可以把这些原子用在单原子微波激射器上, 或者作为量子计算所必需的纠缠原子.

本文将提出一个简单、新颖的静电原子势阱, 并采用有限差分时间域 (FDTD) 方法使含时薛定谔方程离散化, 从而研究冷原子在静电势阱中的量子力学效应. 在提出理论方法之前, 先简单介绍 FDTD 方法对其他物理问题的应用情况. FDTD 方法最先是 Yee 提出的, 并用它来解决电磁场中的计算问题^[12]. 后来 Choi 等使用矩形谐振腔作为例子, 讨论 FDTD 方法对三维本征值问题的应用. 他们的结果清楚地展示了 FDTD 方法对这类问题的精确性和方便性^[13]. 最近, 黄整等将 FDTD 方法应用于双原子分子振动能级的量子力学计算, 获得了令人满意的结果^[14]. 这些工作表明, FDTD 方法用于求解含时薛定谔方程也应该是方便的、可靠的.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10174086)资助的课题.

2. 理论方法

冷原子在静电陷阱中的动力学行为可以用含时薛定谔方程描述,即

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(x, y, z)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (1)$$

式中

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

在方程(1)中,冷原子波函数应具有复数形式.假设 $\psi = a + ib$, 我们可以重写方程(1)为

$$\frac{\partial(a + ib)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2(a - b) - \frac{1}{\hbar}V(x, y, z)(a - b). \quad (2)$$

方程(2)等号两边实数和虚数部分分别对应于两个实微分方程

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2 b + \frac{1}{\hbar}V(x, y, z)b, \quad (3)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2 a - \frac{1}{\hbar}V(x, y, z)a. \quad (4)$$

用 FDTD 方法对薛定谔方程中空间和时间变量离散化,于是方程(3)和(4)可以近似写为

$$a^{n+1}(i, j, k) = a^n(i, j, k) - \frac{s\hbar}{2\mu}[b^n(i+1, j, k) + b^n(i, j+1, k) + b^n(i, j, k+1) + b^n(i-1, j, k) + b^n(i, j-1, k) + b^n(i, j, k-1) - 6b^n(i, j, k)] + \frac{s(\Delta l)^2}{\hbar}V(i, j, k)b^n(i, j, k), \quad (5)$$

$$b^{n+1}(i, j, k) = b^n(i, j, k) + \frac{s\hbar}{2\mu}[a^n(i+1, j, k) + a^n(i, j+1, k) + a^n(i, j, k+1) + a^n(i-1, j, k) + a^n(i, j-1, k) + a^n(i, j, k-1) - 6a^n(i, j, k)] - \frac{s(\Delta l)^2}{\hbar}V(i, j, k)a^n(i, j, k), \quad (6)$$

式中 i, j, k 和 n 分别代表空间坐标 x, y, z 和时间坐标 t 的节点.令 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta l$ 为空间增量, Δt 为时间增量, $s = \Delta t(\Delta l)^{-2}$.冷原子在进入势场之前其波函数可以用平面波来描述,亦即给出了 a 和 b 的初始值.这样,通过对(5)和(6)式的迭代,可得到包含变量 x, y, z 和 t 的波函数 $\psi(x, y, z, t)$.

3. 势能函数

我们假设四个点电荷置于正方形的四个顶角处,正方形边长为 $\sqrt{2}a$,其中 $a = 0.15\text{mm}$.每个点电荷所带电量为 $1.0 \times 10^{-11}\text{C}$.在图1中,我们画出了四个点电荷在正方形的近表面处产生的电场分布.显然,在正方形的中心处场强为零.

在三维直角坐标系 $o-xyz$ 中,如果该正方形置于 xoy 平面,且正方形的中心为坐标原点,则在 $z = 0.16\text{mm}$ 处场强出现极大值,这正是我们感兴趣的地方.值得注意的是,场强的最大值应在点电荷上.冷原子有可能被吸附在点电荷上,在一个实际的实验中,这种情况的发生显然是不利的,必须采取一些措施来克服它.实际上,这涉及到静电势阱中冷原子寿命的问题,目前的工作暂不考虑这个问题.另外,我

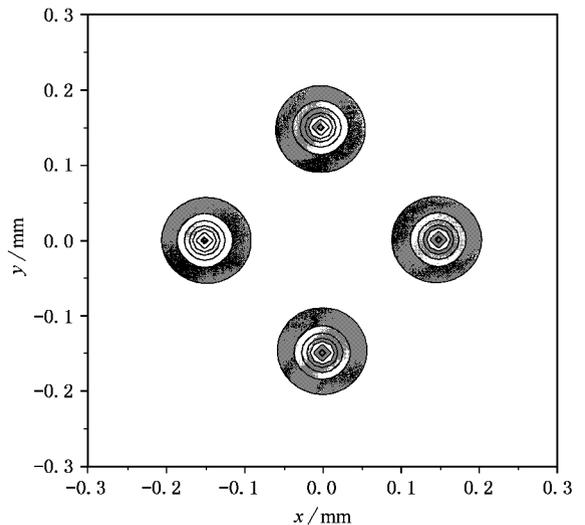


图1 四个点电荷在正方形的近表面处产生的电场分布

们也不考虑重力场对冷原子的影响,因为静电场较之冷原子与重力场的相互作用大两个数量级,其效应可以忽略不计.

现设想有一个中性原子在四个点电荷产生的电场中运动.中性原子与静电场的相互作用势由下式给出^[2]:

$$V(x, y, z) = -\frac{1}{2} \alpha |E|^2, \quad (7)$$

式中 α 代表原子的偶极极化率, E 为外电场大小. 以铷原子为例, $\alpha = 47.3 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$. 在 $z = 0.16 \text{ mm}$ 处 相互作用势 $V(x, y, z)$ 作为 x 和 y 的函数画于图 2 中. 在上面所描述的条件下, 势能极小值为 10 mK . 对于多普勒冷却的中性原子来说, 这样的势阱是足够深的.

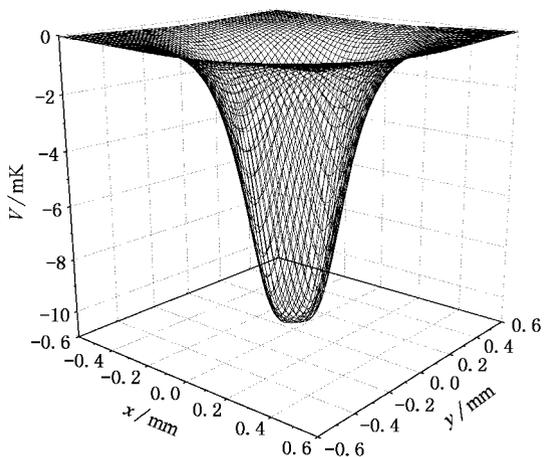


图 2 在 $z = 0.16 \text{ mm}$ 处 相互作用势 $V(x, y, z)$ 随 x 和 y 的变化

4. 数值结果与讨论

x, y 和 z 三个方向网格间隔取为相等, 即 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta l = 0.04 \text{ mm}$. x 和 y 的变化区间为 $-0.6 \leq I_x, I_y \leq 0.6$; z 的变化区间为 $:0 \leq I_z \leq 1.2$. $s = 0.001 \text{ s} \cdot \text{mm}^{-2}$. 以上参量的选取, 主要基于下面几点考虑. 第一, 为求得基态波函数, 网格间隔需要选取得足够小; 第二, 由于只能在 x, y 和 z 的有限区间内进行数值计算, 因而需要在计算区间的端点处作截断处理. 即认为在所选取的区间端点处中性原子所感受到的势场近似为零, 这时, 原子的束缚态波函数亦可近似为零. 第三, 需要满足本征波函数的性质. 全部计算对于 $30 \times 30 \times 30$ 的网格执行 16000 个时间步长. 在图 3 中我们展示了铷原子在位置 $(0, 0, 0.16)$ 处波函数 ψ 随时间 $t (t = n\Delta t)$ 的演化关系. 可以看出, 中性铷原子的状态时域函数为近似的简谐振动. 这表明, 中性铷原子在四个点电荷产生的静电场中存在稳定束缚态. 因此实验上我们可以使用类似的静电场来捕获中性冷原子, 从而实现冷原子的控制和操纵.

由含时波函数可以计算出中性原子在势场中

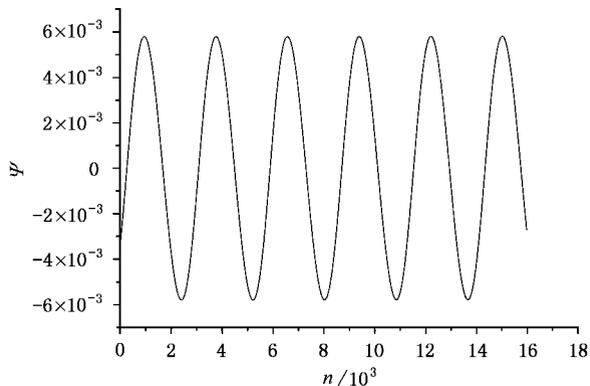


图 3 铷原子在位置 $(0, 0, 0.16)$ 处波函数随 Ψ 时间 t 的变化

的束缚态能量. 为此, 将前面所述的时域函数 $a(x, y, z, t)$ 和 $b(x, y, z, t)$ 作傅里叶变换, 即得到波函数的频域形式 $a(x, y, z, \omega)$ 和 $b(x, y, z, \omega)$. 如果只考虑实数部分, 则傅里叶变换的离散化形式为

$$a(i, j, k, \omega) = \frac{1}{N} \sum_n a^n(i, j, k) \cos[\omega(\Delta t)^2 n], \quad (8)$$

当频率 ω 正好为原子的本征频率时, $a(i, j, k, \omega)$ 将可能出现极大值, 极大的峰值越大, 表示波函数所描写的状态中出现该本征态的概率越高. 在图 4 中, 我们给出了中性铷原子在 $(0, 0, 0.16)$ 处波函数随频率的变化. 显然, 利用由初始波函数得到的时域波函数和傅里叶变换已经可以得到部分束缚态能量, 其中包括基态和多个激发态能级能量. 然而, 要准确的得到中性铷原子的某个本征束缚态能量, 还需要求得对应束缚态的准确的本征波函数. 为此, 将前面得到的束缚态能量再代入傅里叶变换公式, 计算出给定区间内所有节点处的频域波函数, 即为中性铷原子的不含时间本征波函数的数值解形式. 将不含时间的本征波函数的数值解作为初始波函数, 应用

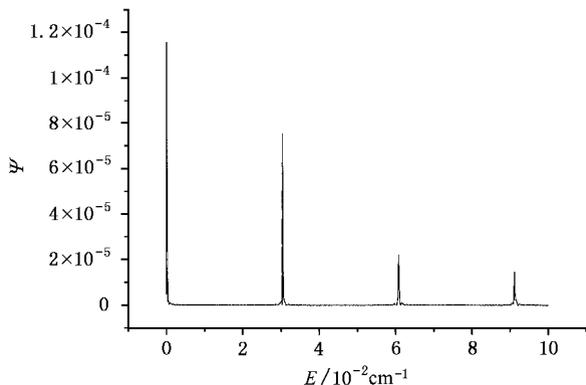


图 4 中性铷原子在位置 $(0, 0, 0.16)$ 处波函数 Ψ 随频率 ω 的变化

FDTD 方法即可获得该本征态更为精确的本征能量. 对于中性铷原子, 我们求得的基态本征能量为 $E_g = 1.55 \times 10^{-8}$ eV. 同时, 在 $z = 0.16$ mm 处我们给出了与基态本征波函数对应的概率密度分布, 如图

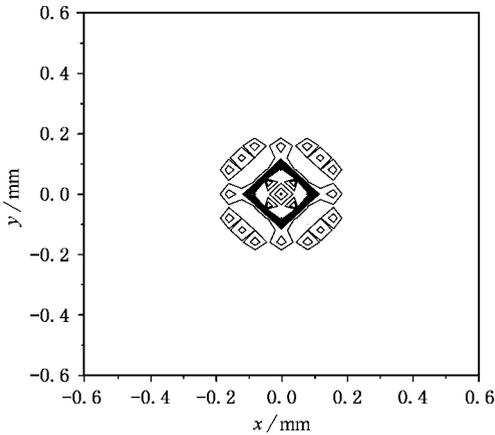


图 5 中性铷原子在基态的概率密度分布

5 所示. 可以看出, 在位置(0,0)及其邻近区域, 中性铷原子出现的概率最大, 即我们在这个位置的邻域捕获到中性铷原子的可能性最大.

5. 结 论

本文提出了一个简单、新颖的静电势阱, 即用四个点电荷产生的静电场来囚禁冷的中性铷原子. 应用有限时域差分方法使含时薛定谔方程离散化, 从而求出了中性铷原子和势场体系的含时波函数, 波函数的频域形式, 即波函数随频率(能量)的变化关系, 以及中性铷原子的基态本征能量和本征波函数. 结果表明, 在这样的静电势阱中, 囚禁中性冷原子是完全可能的. 同时, 我们发现在空间某一个确定的区域捕获到中性冷原子的概率最大. 这说明, 在实验上我们可以构造类似的静电势阱, 控制和操纵中性冷原子, 从而达到按照需求移动单个原子的能力.

- [1] Shen J L , Zhang G C , Dai J H and Zhang H J 2000 *Chin . Phys .* **9** 424
- [2] Chu S 1998 *Rev . Mod . Phys .* **70** 685
Cohen-Tannoudji C N 1998 *Rev . Mod . Phys .* **70** 707
Phillips W D 1998 *Rev . Mod . Phys .* **70** 721
- [3] Hou J D , Li Y M , Yang D H and Wang Y Q 1998 *Acta Phys . Sin .* (Over. Ed.) **7** 881
- [4] Yin J P , Gao W J , Liu N C and Wang Y Q 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 660 (in Chinese) [印建平 等 2001 *物理学报* **50** 660]
- [5] Schmiedmayer J 1995 *Appl . Phys . B* **60** 169
- [6] Denschlag J and Schmiedmayer J 1997 *Europhys . Lett .* **38** 405
- [7] Denschlag J , Umshaus G and Schmiedmayer J 1998 *Phys . Rev . Lett .* **81** 737
- [8] Denschlag J , Cassettari D and Schmiedmayer J 1999 *Phys . Rev . Lett .* **82** 2014
- [9] Denschlag J , Cassettari D , Chenet A , Schneider S and Schmiedmayer J 1999 *Appl . Phys . B* **69** 291
- [10] Cassettari D , Chenet A , Folman R , Haase A , Hessmo B , Krüger P , Maier T , Schneider S , Calarco T and Schmiedmayer J 2000 *Appl . Phys . B* **70** 721
- [11] Kuhr S , Alt W , Schrader D , Müller M , Gomer V and Meschede D 2001 *Science* **293** 278
- [12] Yee K S 1966 *IEEE Trans .* **AP-14** 302
- [13] Choi D H and Hofer W J R 1986 *IEEE Trans .* **MITT-34** 1464
- [14] Huang Z , Chen X M and Zhu Z H 2000 *Chin . J . At . Mol . Phys .* **17** 576 (in Chinese) [黄 整 等 2000 *原子与分子物理学报* **17** 576]

Quantum effects of cold atoms in electrostatic trap^{*}

Luo You-Hua¹⁾ Huang Zheng²⁾ Wang Yu-Zhu¹⁾

¹⁾*Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*

²⁾*Department of Applied Physics, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China*

(Received 17 August 2001; revised manuscript received 6 February 2002)

Abstract

We suggest a novel trap of trapping a neutral atom with static electric field of four point charges, and discuss the quantum effects of the cold neutral atom in the trap. Based on the time-dependent Schrödinger's equation and the finite difference time domain method, for the atom-field system, we obtain the time-dependent wave function, the ground state eigenvalue and eigenfunction. The results show that a stable confinement of an atom in such a trap is possible. This indicates that we can build a similar static well to trap cold neutral atoms experimentally.

Keywords : cold atoms, electrostatic trap, quantum effects

PACC : 3280P, 0375, 5258Q, 0365G

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10174086).