

啁啾微波场中里德伯锂原子的相干激发与控制*

蒋利娟¹⁾²⁾ 张现周^{1)†} 贾光瑞¹⁾ 张永慧¹⁾ 夏立华¹⁾

1) (河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

2) (新乡学院物理与电子工程系, 新乡 453003)

(2012年4月2日收到; 2012年8月5日收到修改稿)

运用含时多态展开方法和 B-样条函数研究了微波场中里德伯锂原子高激发态的性质, 得到锂原子量子态 $n = 70-75, l = 0-5$ 的能量, 并分析了里德伯锂原子高激发态 $n = 70-75, l = 0-5$ 在微波场中的跃迁几率. 结果表明: 通过优化微波场参数可以实现量子系统从初始态到目标态的完全跃迁, 且在跃迁过程中, 每个 l 态都起至关重要的作用.

关键词: 里德伯锂原子, B-样条函数, 布居跃迁

PACS: 31.10.+z, 32.80.Ec

DOI: 10.7498/aps.62.013101

1 引言

有效控制原子从一个量子态到另一个量子态的布居数迁移和相干态囚禁, 对设计和控制化学反应过程及产物、原子光学和量子光学中特定量子态的制备、相干操控等具有重要意义^[1-8]. 绝热快速通道 (adiabatic rapid passage) 方法是布居数从一个量子态到另一个量子态迁移的最有效方法, 该方法可以实现布居数在多态系统中的完全跃迁. 近 10 年来, 该方法受到了国内外原子分子物理和光物理学家的广泛关注, 并取得了一些很好的研究成果^[9-11]. 目前, 在实验上实现布居数完全迁移的绝热快速通道方法主要有两种: 受激拉曼绝热通道 (stimulated Raman adiabatic passage, STIRAP) 方法和啁啾拉曼绝热通道 (Raman chirped adiabatic passage, RCAP) 方法. STIRAP 方法适合于 Λ 系统中布居数的迁移; RCAP 方法多用于布居数在阶梯形能级系统中的逐级迁移. 最近, 美国 Gallagher 实验组^[12] 用微波脉冲, 通过相邻两能级间的频率共振将布居数从锂原子 $n = 70$ 逐级完全迁移到 $n = 79$ 态, 并用啁啾频率与主量子数对应的多普勒频率相匹配的绝热通道模型对实验结果进行了定性分析

和解释. 2006 年, 他们又将此方法进一步推广, 用单个多光子绝热快速通道实现了布居数从低里德伯主量子态到高里德伯主量子态的直接完全相干迁移^[13]. 2009 年, 他们分别从 X, Y 方向上加微波脉冲, 使锂原子形成非扩散波包囚禁在圆形状态^[14]. 随着激光技术不断发展和成熟, 用激光脉冲和微波脉冲控制量子态间的布居数跃迁与囚禁, 成为化学反应动力学过程和原子分子进行相干操纵和控制的重要手段.

与实验相比, 关于这方面的理论研究还相当薄弱. 虽然用啁啾频率与主量子数对应的多普勒频率相匹配的绝热通道粗糙模型对实验结果能给出定性的解释, 但是每个主量子数 n , 对应有 n 个 ($l = n - 1, n - 2, \dots, 0$) 量子态, 而该模型中却不含量子数, 实验结果到底与角量子数是否有关仍是值得研究的问题. 现有的其他理论和方法基本上还停留在两态或三态旋转波近似的水平, 可靠的高精度理论计算鲜见报道. 实验中可以制备两个态, 其他态的作用和影响则自动包含在实验结果之中. 理论上要想得到精确可靠的两态跃迁结果, 必须考虑其他态尤其是临近态对所研究态的作用, 用两态或者三态近似模型显然是太粗糙了. 最近,

* 国家自然科学基金 (批准号: 10774039)、河南省自然科学基金 (批准号: 2010A140006, 2011A140009) 和河南省基础与前沿技术研究计划项目 (批准号: 112300410025) 资助的课题.

† 通讯作者, E-mail: xz-zhang@henannu.edu.cn

Zhang 等^[4]用含时多态展开方法研究计算了里德伯钾原子在频率调制场中的激发,得到与实验^[12]一致的结果,并用量子理论解释了实验现象.

本文运用 B-样条函数^[15-19]和单电子原子模型势^[20],计算自由锂原子 $n = 70-75$, $l = 0-5$ 的能级值,然后用含时多态展开方法研究锂原子 n, l 态在啁啾微波场中的激发跃迁,得到高激发态 $n = 75-70$ 以及 l 态的布居数迁移.结果表明:含时多态展开方法和 B-样条函数是处理锂原子在微波场中问题的一种有效方法,通过优化微波场参数可以实现量子系统从初始态到目标态的完全跃迁.在跃迁过程中,每个 l 态都起至关重要的作用.

2 理论方法

处于微弱线性微波场中的碱金属原子,采用一维原子模型,系统的哈密顿量为(无特殊说明,文中采用原子单位)

$$H = H_0 + zE(t), \quad (1)$$

式中 $E(t) = E_0 f(t) \cos[\omega(t)t]$ 为微波场,且 $f(t) = \sin^2 \frac{\pi t}{mT}$, 其中 E_0 为微波脉冲峰值振幅, m 是脉冲形状参数, T 为脉冲半宽度; $\omega(t) = \omega_0 + \beta t$, ω_0 为脉冲中心频率, β 为啁啾率, $H_0 = p^2/2 + V(z)$ 是忽略原子自旋-轨道相互作用的零场哈密顿量,定态薛定谔方程为

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E \psi(r). \quad (2)$$

H_0 中的 $V(z)$ 是碱金属原子价电子感受到原子实的势,采用 Schweizer 和 Faßbinder^[20] 给出的碱金属原子模型势:

$$V = -\frac{1}{z} [\tilde{Z} + (Z - \tilde{Z}) \exp(-a_1 z) + a_2 z \exp(-a_3 z)], \quad (3)$$

对于锂原子, $Z = 3$, $\tilde{Z} = 1$, $a_1 = 3.395$, $a_2 = 3.212$, $a_3 = 3.207$.

根据零场下势的中心对称性,零场下锂原子的波函数为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (4)$$

其中 n, l, m 分别为主量子数、角量子数和磁量子数, $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 是球谐函数, $U_{nl}(r)$ 是径向波函数. 径向波函数 $U_{nl}(r)$ 是径向约化薛定谔方程的解:

$$\left[-\frac{d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] U_{nl}(r) = E_{nl} U_{nl}(r). \quad (5)$$

以 B-样条函数^[15-19]为基函数,径向波函数 $U_{nl}(r)$ 可展开为

$$U_{nl}(r) = \sum_{i=1}^N c_i B_{i,k}(r), \quad (6)$$

$B_{i,k}(r)$ 是第 i 个 k 阶 B-样条函数. 将 (3) 和 (6) 两式代入 (5) 式可得到一个矩阵方程:

$$H_l C = E S C, \quad (7)$$

其中 S 是重叠矩阵. 径向波函数 $U_{nl}(r)$ 的数值解以及能量本征值 E_{nl} 通过对角化程序解得.

当锂原子处于沿 z 轴方向的微波场中,由 (1) 式定义的哈密顿量的本征值和本征函数以零场波函数作为基矢求出. 则系统的薛定谔方程为

$$i \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(r, t), \quad (8)$$

其中 $\psi(r, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k e^{-iE_k t}$ 为锂原子自由哈密顿的定态波函数. 则锂原子任一量子态的跃迁几率,可以用下面公式表示:

$$P_k = |a_k|^2. \quad (9)$$

表 1 零场下里德伯锂原子 $n = 70, \dots, 75$ 态的能级值 (单位: Hartree)

n/l	0	1	2	3	4	5
70	-0.000103216	-0.000102181	-0.000102044	-0.000102041	-0.000102041	-0.000102041
71	-0.000100312	-0.000099321	-0.000099189	-0.000099187	-0.000099187	-0.000099187
72	-0.000097530	-0.000096580	-0.000096453	-0.000096451	-0.000096451	-0.000096451
73	-0.000094862	-0.000093950	-0.000093829	-0.000093826	-0.000093826	-0.000093826
74	-0.000092301	-0.000091427	-0.000091310	-0.000091308	-0.000091308	-0.000091308
75	-0.000089844	-0.000089003	-0.000088891	-0.000088889	-0.000088889	-0.000088889

3 结果与讨论

选择锂原子高激发态 $n = 70$ 到 $n = 75$ 态, 运用 B-样条技术和单电子原子模型势, 计算零场下锂原子里德伯态 $n = 70-75$, $l = 0-5$ 的能级值列于表 1 中, 研究计算锂原子在频率啁啾微波场中每个 l 态以及沿着 $75 \rightarrow 74 \rightarrow 73 \rightarrow 72 \rightarrow 71 \rightarrow 70$ 路径的布居数迁移特性. 为了表示每个态的跃迁, 我们首先把初始态布居在 $n = 75$ 态上, 外加线性啁啾微波场为 $E(t) = E_0 f(t) \cos[\omega(t)t]$, 其中 E_0 为微波场振幅, $f(t) = \sin^2 \frac{\pi t}{mT}$, $\omega(t) = \omega_0 + \beta t$, 经优化选取参数: $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns, $n = 75$, l 态跃迁几率随时间的演化如图 1—5 所示. 当满足共振条件时, 图 1 表明 $n = 75$ 态上的布居数向 $n = 74$ 态上进行了跃迁, 所以布居数减少; 图 2 表明, $n = 74$, $l = 5$ 态上约 84.2% 的布居经过震荡后进行了跃迁, $l = 3$ 态上约 11% 的布居经过震荡后进行了跃迁; 图 3 和图 4 表明当满足共振条件时, $n = 74$ 态上的布居向 $n = 73$ 态上进行了跃迁, 图 3 表明 $n = 74$ 态上的布居数减少, 图 4 表明 $n = 73$, $l = 2, 4$ 态的跃迁, $l = 4$ 态上约 71.5% 的布居经过震荡后进行了跃迁, $l = 2$ 态上约 22.4% 的布居进行了跃迁; 图 5 表明, 当满足共振条件时, $n = 73$ 态上的布居数向 $n = 72$ 态上进行了跃迁. 从以上可以看到, 每个 l 态在跃迁中都起至关重要的作用, 因此, 在跃迁过程中, 我们要考虑每个 l 态的影响. 然后我们计算锂原子从 $n = 75$ 态到 $n = 70$ 态的布居跃迁特性, 在跃迁过程中, 我们考虑了每个 n 的 $l = 0-5$ 态及其相互作用, 跃迁几率随时间的演化规律如图 6 所示. 在图 6 中, 初始时刻, 锂原子布居在 $n = 75$ 态上, 外加线性啁啾微波场的参数 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 保持不变, 计算锂原子在频率啁啾微波场中沿着 $75 \rightarrow 74 \rightarrow 73 \rightarrow 72 \rightarrow 71 \rightarrow 70$ 路径的跃迁几率. 图 6 表明, 大约有 95.3% 的布居数由初始态 $n = 75$ 经振荡后跃迁到 $n = 74$ 态, 94.4% 的布居数由 $n = 74$ 态跃迁到 $n = 73$ 态, 89.9% 的布居数由 $n = 73$ 态跃迁到 $n = 72$ 态, 89.8% 的布居数由 $n = 72$ 态跃迁到 $n = 71$ 态, 经这 6 个连续的绝热快速通道后, 最终 83.2% 的布居数由 $n = 71$ 态跃迁到目标态 $n = 70$ 上. 图中出现的锂原子布居上的微小振荡,

是由微波场引起的微小拉比振荡^[4].

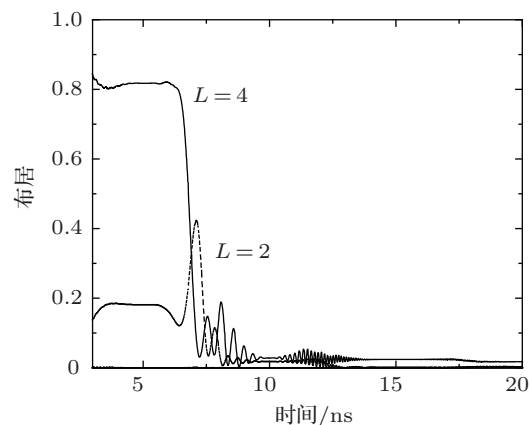


图 1 在微波场 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 下, $n = 75$, $l = 2, 4$ 态的布居动力学过程

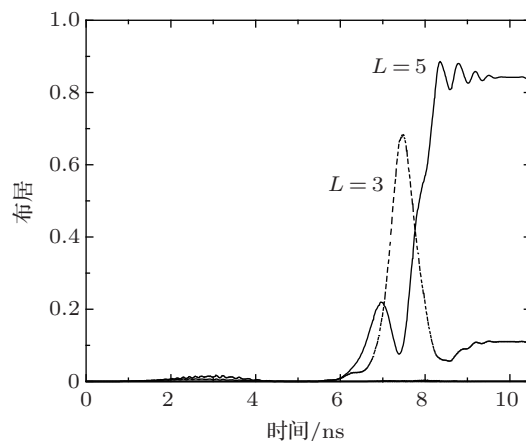


图 2 在微波场 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 下, $n = 74$, $l = 3, 5$ 态的布居数跃迁过程

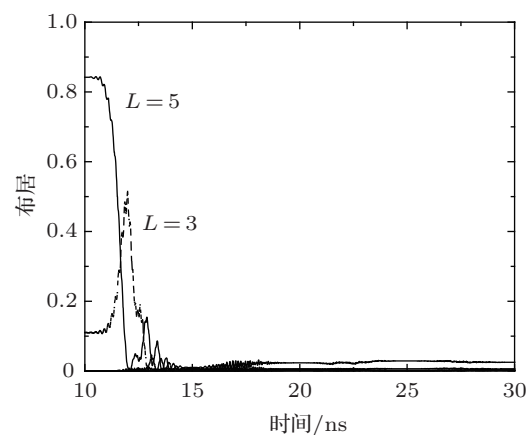


图 3 在微波场 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 下, $n = 74$, $l = 3, 5$ 态的布居数减少过程

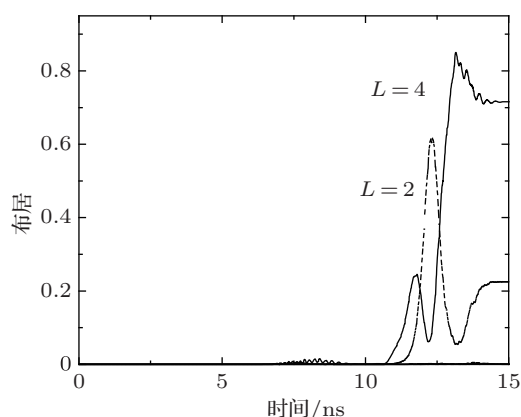


图4 在微波场 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 下, $n = 73$, $l = 2, 4$ 态的布居数跃迁过程

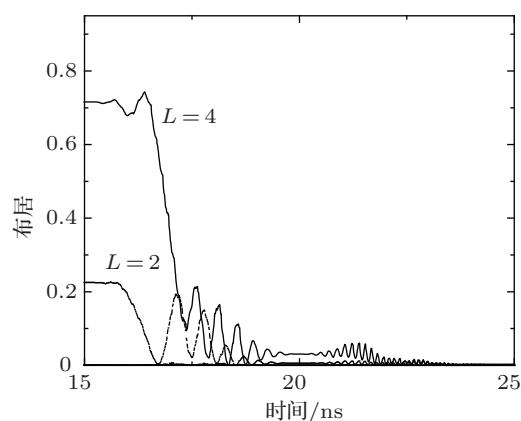


图5 在微波场 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns 下, $n = 73$, $l = 2, 4$ 态的布居数减少过程

由以上分析我们可以得出, 经过优化微波场参

数, 可以实现从初始态到目标态的完全跃迁. 在跃迁过程中, 每个 l 态都起至关重要的作用, 因此, 我们在进行量子态操纵和控制的时候, 要考虑每个态的影响.

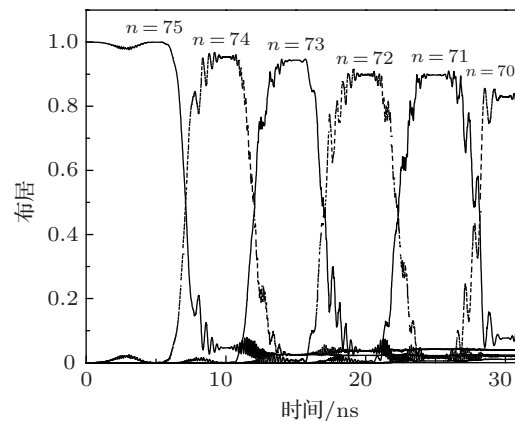


图6 在微波场中 $n = 75 \rightarrow 70$ 态跃迁几率随时间的变化图像 微波场参数为 $E_0 = 0.1$ V/cm, $\omega_0 = 14.93$ GHz, $\beta = 0.0069$ GHz/ns, $m = 0.5$, $T = 100$ ns

4 结论

运用含时多态展开方法, 结合 B- 样条函数和单电子原子模型势, 计算了锂原子零场下的能级值和波函数, 研究了在微波场中的布居数随时间演化的跃迁特性. 研究表明, 含时多态展开方法和 B- 样条函数是处理锂原子在微波场中问题的一种有效方法, 通过优化微波场参数能够操纵和控制量子系统布居数从初始态演化到理想目标态, 且在跃迁过程中, 要考虑每个态的影响.

- [1] Melinger J S, Gandhi Suketu R, Hariharan A, Tull J X, Warren W S 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 2000
- [2] Zhang X Z, Wu S L, Jiang L J, Ma H Q, Jia G R 2010 *Chin. Phys. B* **19** 083101
- [3] He Y L, Zhou X X, Li Y Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 116 (in Chinese) [何永林, 周效信, 李小勇 2008 物理学报 **57** 116]
- [4] Zhang X Z, Jiang H M, Rao J G, Li B W 2003 *Phys. Rev. A* **68** 025401
- [5] Li X H, Zhang X Z, Zhang R Z, Yang X D 2007 *Chin. Phys. B* **16** 2924
- [6] Meng H Y, Kang S, Shi T Y, Zhan M S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3198 (in Chinese) [孟慧艳, 康帅, 史庭云, 詹明生 2007 物理学报 **56** 3198]
- [7] Zhang X Z, Ren Z Z, Jia G R, Guo X T, Gong W G 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4476
- [8] Michael W N, Griffith W M, Gallagher T F 1998 *Phys. Rev. A* **58** 2265
- [9] Djotyan G P, Bakos J S, Sorlei Z S 2001 *Phys. Rev. A* **70** 063406
- [10] Carrera J J, Chu S I 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 9320
- [11] Murgu E, Ropke F, Djambova S M, Gallagher T F 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 9500
- [12] Maeda H, Norum D V L, Gallagher T F 2005 *Science* **307** 1757
- [13] Maeda H, Gallagher T F 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033410
- [14] Maeda H, Gurian J H, Gallagher T F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 103001
- [15] Deboor C 1978 *A Practical Guide to Splines* (New York: Springer)
- [16] Kang S, Liu Q, Zhong Z X, Zhang X Z, Shi T Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3380 (in Chinese) [康帅, 刘强, 钟振祥, 张现周, 史庭云 2006 物理学报 **55** 3380]
- [17] Liu Q, Kang S, Zhang X Z, Shi T Y 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 458 (in Chinese) [刘强, 康帅, 张现周, 史庭云 2006 原子与分子物理学报 **23** 458]
- [18] Jia G R, Zhang J C, Zhang X Z, Ren Z Z 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 103201
- [19] Zhang Y X, Meng H Y, Shi T Y 2008 *Chin. Phys. B* **17** 140
- [20] Schweizer W, Faßbinder P, Gonzalez F R 1999 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **72** 33

Coherent excitation and control of Rydberg lithium atoms in a chirped microwave field*

Jiang Li-Juan¹⁾²⁾ Zhang Xian-Zhou^{1)†} Jia Guang-Rui¹⁾
Zhang Yong-Hui¹⁾ Xia Li-Hua¹⁾

1) (*Department of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China*)

2) (*Department of Physics and Electronic Engineering, Xinxiang University, Xinxiang 453003, China*)

(Received 2 April 2012; revised manuscript received 5 August 2012)

Abstract

The time-dependent multilevel approach (TDMA) and the B-spline expansion technique are used to study the properties of Rydberg lithium atom. The energy level structures of high excited states $n = 70-75$, $l = 0-5$ and population transfer of lithium atom in a microwave field are studied by numerical calculation. The results show that the coherent control of the population transfer in microwave field from the initial to the target states can be accomplished by optimizing the microwave field parameters. and that each state plays a crucial role in the transition process.

Keywords: Rydberg lithium atom, B-spline technique, population transfer

PACS: 31.10.+z, 32.80.Ee

DOI: 10.7498/aps.62.013101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774039), the Natural Science Foundation of Education Bureau of Henan Province, China (Grant Nos. 2010A140006, 2011A140009) , and the Research Planning Project of Basic and Advanced Technology of Henan Province, China (Grant No. 112300410025).

† Corresponding author. E-mail: xz-zhang@henannu.edu.cn