

外场形式对超冷原子-多聚物分子转化效率的影响*

赵岫鸟 孙建安 豆福全†

(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料实验室, 兰州 730070)

(2014年4月24日收到; 2014年6月27日收到修改稿)

通过改变激光场 Rabi 频率和原子-多聚物分子耦合强度, 探索了外场形式对超冷原子-多聚物分子转化效率的影响. 首先通过定义时间指数, 对文献所给出的外场做出改进, 讨论了时间指数对转化效率的影响; 然后选取一种更优化的外场形式, 其具有很好的参数鲁棒性, 该外场作用下的绝热过程几乎不存在振荡, 其绝热保真度接近于 1, 系统误差较小, 可以稳定、高效地实现超冷原子-多聚物分子的转化.

关键词: 超冷多聚物分子, 转化效率, 外场形式, 绝热保真度

PACS: 03.75.-b, 05.30.Jp, 67.85.-d

DOI: 10.7498/aps.63.220302

1 引言

超冷多聚物分子的形成在研究超冷化学和超化学^[1]、高精分子谱^[2]、分子物质波^[3]等方面有很重要的理论价值, 并且在量子计算、原子钟等领域有着广泛的应用前景, 因此超冷原子-多聚物分子的转化一直是冷原子分子物理领域备受关注的研究课题^[4]. 人们借助广义的受激拉曼绝热通道技术 (STIPAR)^[5,6], 获得了较为有效的超冷原子-分子转化方案^[7,8]. STIRAP 技术的成功依赖于相干布居俘获态^[9-12] (CPT 态, 即暗态) 的存在, 在暗态上的绝热演化能有效地抑制激发态上粒子数的自发辐射, 使得原子能以很高的转化效率形成多聚物分子. 目前超冷原子-分子的转化已从起初的双原子分子^[13-16]、三原子分子聚合^[17] 拓展到 N 体多原子分子的聚合^[18,19], 在先前研究所给出的外场形式下, 可以稳定地产生超冷双原子、三原子分子, 且转化效率较高, 然而在实现五聚物或 N 聚物分子时, 转化效率还不是很理想, 绝热过程中存在明显的振荡区间^[18,19]. 为了减小绝热过程中出现的不稳定区域, 提高最终的转化效率, 本文以五聚

物分子为例, 首先将文献^[18, 19]所给出的外场引入指数项, 讨论其对转化效率的影响; 接着选取一种更优化的外场形式, 很大程度上减小了振荡的宽度且使绝热保真度更接近于 1, 从而提高了超冷原子-多聚物分子的转化效率以及转化过程的稳定性.

2 模型与绝热保真度

2.1 同核系统与异核系统

原子首先通过 Efimov 共振^[20,21] 缔合成处于激发态的多原子分子 A_{N-1} ; 然后将 A_{N-1} 和另一个原子 A 或 B 通过光缔合形成同核多聚物分子 A_N 或异核多聚物分子 $A_{N-1}B$. 我们考虑以上两种情况, 定义原子与多聚物分子之间的耦合强度为 λ' , 相应的失谐量为 δ , 光缔合的激光 Rabi 频率为 Ω' , 相应的失谐量为 Δ . 则在相互作用绘景下, 系统的哈密顿量可表示为

$$\hat{H} = -\hbar \int d\mathbf{r} \left\{ \sum_{i,j} \chi'_{i,j} \hat{\psi}_i^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_j^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_j(\mathbf{r}) \hat{\psi}_i(\mathbf{r}) + \delta \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_m(\mathbf{r}) + \lambda' \{ \hat{\psi}_m^\dagger(\mathbf{r}) [\hat{\psi}_a(\mathbf{r})]^{(N-1)} + \text{H.c.} \} + (\Delta + \delta) \hat{\psi}_p^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_p(\mathbf{r}) \right.$$

* 国家自然科学基金 (批准号: 11365020) 和甘肃省高等学校基本科研业务费项目资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: doufq@nwnu.edu.cn

$$- \Omega' [\hat{\psi}_p^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_m(\mathbf{r}) \hat{\psi}_k(\mathbf{r}) + \text{H.c.}] \}, \quad (1)$$

其中, $\hat{\psi}_i(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}_i^\dagger(\mathbf{r})$ 分别为湮灭和产生算符; $\chi'_{i,j}$ 为各态的相互作用, 下标的 i, j 分别代表 k, m, p 态, 即原子态、聚合过程中间态和目标态; 在同核系统中 $\hat{\psi}_k(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_a(\mathbf{r})$, 异核系统中 $\hat{\psi}_k(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_b(\mathbf{r})$. 平均场近似下, 用序参数场中的 c -数 $\sqrt{n}\psi_i$ 和 $\sqrt{n}\psi_i^*$ 替换原先的场算符 $\hat{\psi}_i(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}_i^\dagger(\mathbf{r})$ (其中 n 为总粒子数密度), 即可得到一组描述系统运动演化的方程, 在同核系统中, 原子态的波函数满足

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_a}{dt} = & 2i \sum_j \chi_{aj} |\psi_j|^2 \psi_a + (N-1) i \lambda \psi_m \psi_a^{*N-2} \\ & - i \Omega \psi_p \psi_m^*; \end{aligned} \quad (2)$$

在异核系统中, 原子态的波函数满足

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_a}{dt} = & 2i \sum_j \chi_{aj} |\psi_j|^2 \psi_a + (N-1) i \lambda \psi_m \psi_a^{*N-2}, \\ \frac{d\psi_b}{dt} = & 2i \sum_j \chi_{bj} |\psi_j|^2 \psi_b - i \Omega \psi_p \psi_m^*; \end{aligned} \quad (3)$$

两种系统中, 中间态和目标态的波函数均满足

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_m}{dt} = & 2i \sum_j \chi_{mj} |\psi_j|^2 \psi_m + (i\delta - \gamma) \psi_m \\ & + i \lambda \psi_a^{N-1} - i \Omega \psi_p \psi_k^*, \\ \frac{d\psi_p}{dt} = & 2i \sum_j \chi_{pj} |\psi_j|^2 \psi_p + i(\Delta + \delta) \psi_p \\ & - i \Omega \psi_m \psi_k; \end{aligned} \quad (4)$$

其中, 正比于 γ 的项是用来模拟中间态上的粒子损失, $\chi_{ij} = n\chi'_{ij}$, $\lambda = n^{\frac{N}{2}-1}\lambda'$, $\Omega = \sqrt{n}\Omega'$. 为了得到 CPT 态形式的定态解, 令中间态上无分子俘获, 即 $|\psi_m^0| = 0$. 我们忽略中间分子态上粒子数的损失, 取 $\gamma = 0$. 各态满足新的归一化条件: 在同核系统中 $|\psi_a^0|^2 + (N-1)|\psi_m^0|^2 + N|\psi_p^0|^2 = 1$, 而在异核系统中 $|\psi_a^0|^2 + |\psi_b^0|^2 + (N-1)|\psi_m^0|^2 + N|\psi_p^0|^2 = 1$. 通过合理的稳态变换, 并引入原子的化学势 μ_a 和 μ_b , 求解薛定谔方程, 可以得到一组 CPT 解所满足的代数方程, 求解该方程即可得到系统的定态解、相应的原子化学势和双光子共振条件^[18,19].

2.2 CPT 态的绝热保真度

为了得到较高的转化效率, 我们希望整个演化过程中, CPT 态上的真实演化态能够在每个瞬时均与理论的 CPT 态绝热演化保持一致, 因此人们

引入了绝热保真度的概念^[14,22]. 然而, 由于超冷原子-多聚物分子转化系统中, 系统的哈密顿量不再具有 $U(1)$ 不变性, 所以不能用传统的保真度概念来进行描述, 需要重新定义绝热保真度的概念^[18,19]. 由于系统的哈密顿量满足 $U(\phi)$ 不变性, 故保真度的形式可定义为 $F^{\text{ap}}(t) = |\langle \overline{\psi(t)} | \overline{\psi_{\text{CPT}}(t)} \rangle|^2$, 其中 $|\psi(t)\rangle$ 是系统薛定谔方程的精确解, 而 $|\overline{\psi(t)}\rangle$ 和 $|\overline{\psi_{\text{CPT}}(t)}\rangle$ 表示 $|\psi(t)\rangle$ 和 CPT 态重新尺度化的波函数, 它们分别为

$$|\overline{\psi(t)}\rangle = \left(\frac{\psi_a^N}{|\psi_a|^{N-1}}, \sqrt{N-1} \frac{\psi_a \psi_m}{|\psi_a|}, \sqrt{N} \psi_p \right)^T \quad (\text{同核系统}), \quad (5)$$

$$|\overline{\psi(t)}\rangle = \left(\frac{\psi_a^{N-1} \psi_b}{|\psi_a|^{N-2} |\psi_b|}, \frac{\psi_a^{N-1} \psi_b}{|\psi_a|^{N-1}}, \sqrt{N-1} \frac{\psi_b \psi_m}{|\psi_b|}, \sqrt{N} \psi_p \right)^T \quad (\text{异核系统}). \quad (6)$$

我们可以利用绝热保真度来研究整个系统的绝热演化, 如果系统能绝热地跟随 CPT 态演化, 绝热保真度的值应该保持为 1. 而演化结束时保真度的值定义为最终绝热保真度 (F_f^{ap}), 它可以用来描述超冷多聚物分子的转化效率, F_f^{ap} 越接近 1, 系统的转化效率越高.

3 外场扫描形式对转化效率的影响

我们以五聚物分子为例, 通过改变外场形式, 来探索其对多聚物分子转化效率的影响.

3.1 原有外场形式的改进与讨论

在文献^[18, 19]中规定 λ 为不变量, 而 Rabi 频率取为 $\Omega = \Omega_0 \text{sech} \frac{t}{\tau}$, 这里的 Ω_0 和 τ 分别是指脉冲强度和脉冲宽度, 均取为常数. 我们对这种 Rabi 频率随时间的变化形式做出如下改进:

$$\Omega = \Omega_0 \text{sech} \left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha, \quad (7)$$

其中, α 定义为时间指数.

在数值计算中, 我们取外场参数取 $\Omega_0 = 50$, $\tau = 20$, $\delta = -2$, 粒子间相互作用 $\chi_{aa} = 0.182\lambda$, $\chi_{bb} = 0.074\lambda$, 取 $\frac{1}{\lambda}$ 为时间的单位, 其余各量均以 λ 为单位^[18]. 当时间指数 α 小于 1 时, 系统的绝热保真度 F^{ap} 和系统误差 (即绝热保真度与理想值 1 的差值) $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化关系如图 1 所示. 可以

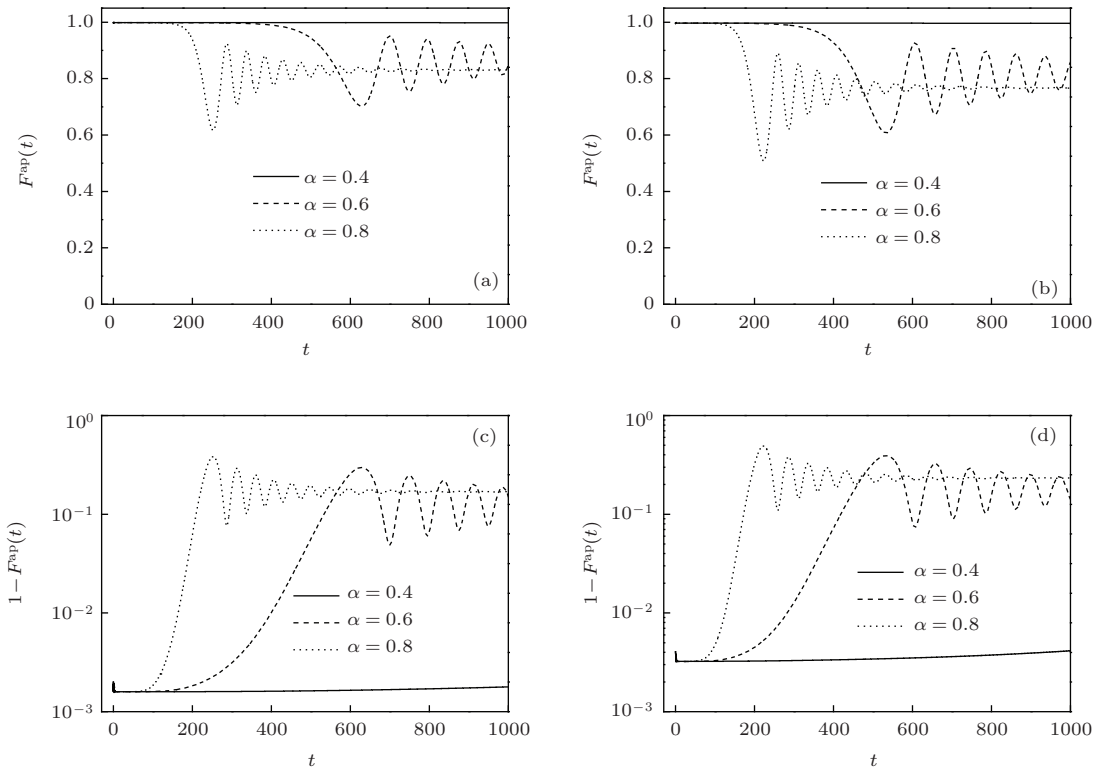


图1 (a) 同核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (b) 异核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (c) 同核系统中 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化; (d) 异核系统中 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化

看出, 不论同核系统还是异核系统, 在时间指数的取值较小时, 演化过程在本文所取的时间内只出现了一个窗口, 该窗口中绝热保真度非常接近于 1, 系统的误差较小. 当 $\alpha = 0.6$ 时, F^{ap} 和 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间变化的图像在该段时间内均出现了第二个窗口——振荡窗口, 系统在该窗口的绝热过程变得不稳定, 绝热保真度在降到最小值之后开始随时间振荡, 振荡幅度也随时间逐渐减小. 当时间指数 $\alpha \geq 1$ 时, 系统的绝热保真度 F^{ap} 和与理想值的误差 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化关系如图 2 所示. 可以看到, 绝热保真度在振荡区间出现的最小值变小, 绝热保真度的振荡幅度随着时间减小并渐渐趋于稳定, 系统的误差变化也趋于一个定值, 转化过程趋于相对稳定的状态. 系统的绝热保真度在所考察的时间段内出现了第三个窗口——稳定窗口, 且随着 α 取值的进一步增大, 绝热保真度的振荡窗口变小, 能更早地到达稳定窗口. 与此同时, 系统趋于稳定后的最终绝热保真度的值也在减小, 系统误差较大. 故随着 α 取值增大, 系统能更快达到稳定, 但最终绝热保真度变低, 从而使系统的转化效率有所降低. 值得注意的是, 完整的绝热演化过程中, 三个窗口是不可避免的, 但根据时间指数的选取, 三

个窗口的宽度会发生改变. 进一步研究发现, 该外场中时间指数的变化对绝热保真度有很大的影响. 时间指数 α 的取值小于 1 时, 对绝热保真度的振荡起到了有效的延缓作用, 其值越小, 振荡窗口出现得越晚. 绝热保真度在起初一段时间里保持与理想值 1 的高度接近, 但随着时间的增加, 振荡仍然会出现, 且振荡窗口的宽度变大. 随着 α 的减小, 系统稳定后的最终绝热保真度增大, 系统能更加高效地进行超冷原子-多聚物分子转化, 但需要较长的时间达到稳定. 而当 α 取值大于 1 时, 随着 α 的增加, 振荡窗口的宽度变小, 绝热保真度更早地到达稳定窗口, 但是系统的最终绝热保真度也同时会随着时间指数 α 的增大而变小, 从而导致转化效率的降低.

图 3 给出了不同时间指数下目标态布居数随时间的变化情况, 进一步验证了以上结论.

3.2 更优化的外场形式

这里我们选取一种更优化的外场形式, 规定 Ω 不变, 而原子-多聚物分子耦合强度 λ 的形式为

$$\lambda = \lambda_0 \cosh \frac{t}{\tau}. \quad (8)$$

人们已经发现该外场能高效地转化超冷三原子分子^[17], 在这种外场形式下, 时间以 λ_0 为单位. 目标

态布居数与暗态解随时间的变化如图 4 所示, 数值计算中取 $\Omega=50$, $\tau = 20$. 通过布居数 $|\psi_p|^2$ 和 CPT 态的解析解随时间的变化图像可以看出, 布居数动力学和预言的 CPT 态解析解差别很小, 系统在观察时间内已经到达稳定窗口. 绝热保真度 F^{ap} 和系统误差 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间变化的图像如图 5 所示. 可以发现, 在这种新的外场扫描形式下, 绝热保真度始终稳定在一个非常接近于 1 的数值, 系统的误差较小. 整个转化过程几乎不存在振荡窗口, 从而保证该过程中系统能较理想地跟随 CPT 态绝热演化, 实现很高的转化效率. 与之前的外场扫描形式相

比, 该外场既能长时间保证转化过程的稳定, 又能得到非常理想的转化效率, 从而可以实现稳定且高效的超冷原子-多聚物分子转化.

为讨论该外场形式转化效率的参数鲁棒性, 我们定义 $\Delta\tau_0 = \tau - \tau_0$, 数值计算了系统的最终绝热保真度 F_f^{ap} 随 $\Delta\tau_0/\tau_0$ 的变化情况, 如图 6 所示, 计算中取 $\tau_0 = 20$. 不难发现, 随着 τ 取值的变化, 系统的最终绝热保真度几乎保持不变. 所以该外场参数对系统的转化效率影响较小, 具有很好的参数鲁棒性. 进一步研究同样发现, 对多聚物分子的情况, 该外场同样能稳定、高效地实现分子的转化.

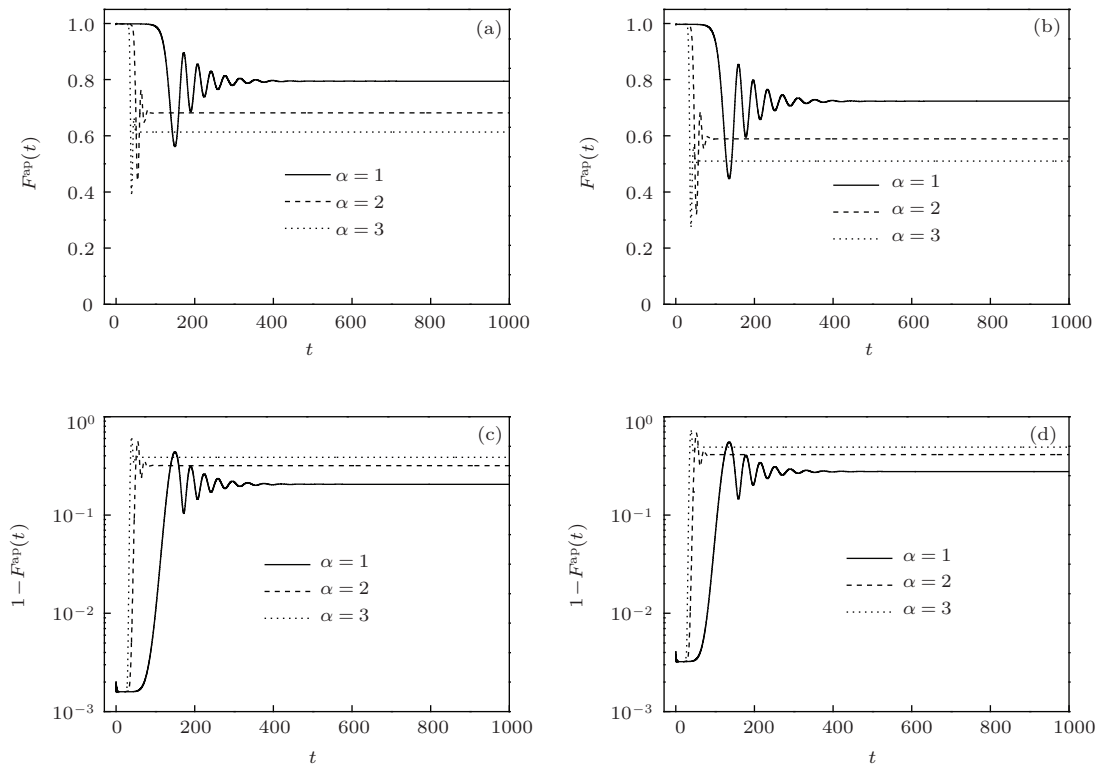


图 2 (a) 同核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (b) 异核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (c) 同核系统中 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化; (d) 异核系统中 $1 - F^{\text{ap}}$ 随时间的变化

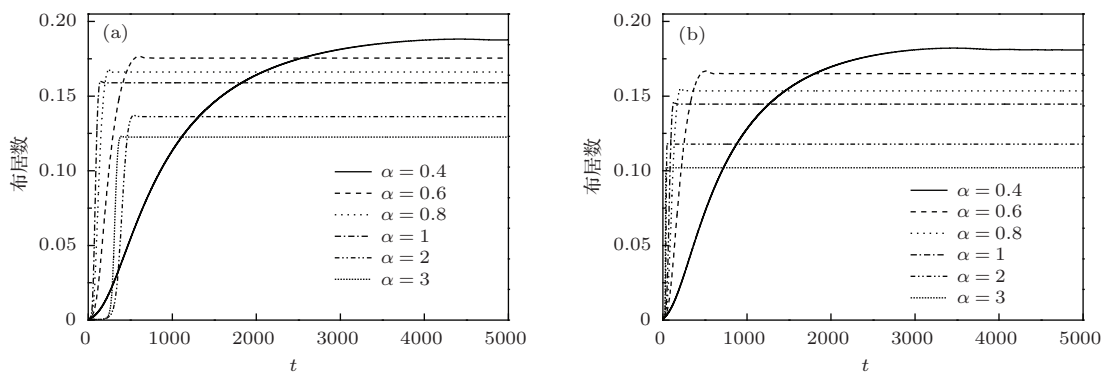


图 3 (a) 同核系统中不同时间指数取值下的目标态布居数 $|\psi_p|^2$ 随时间的变化; (b) 异核系统中不同时间指数取值下的目标态布居数 $|\psi_p|^2$ 随时间的变化

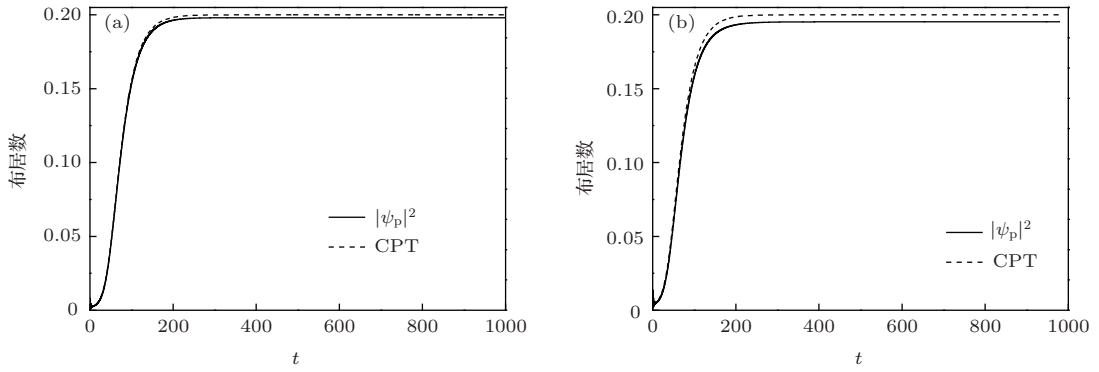


图4 (a) 同核系统中布居数 $|\psi_p|^2$ 和 CPT 态的解析解随时间的变化; (b) 异核系统中布居数 $|\psi_p|^2$ 和 CPT 态的解析解随时间的变化

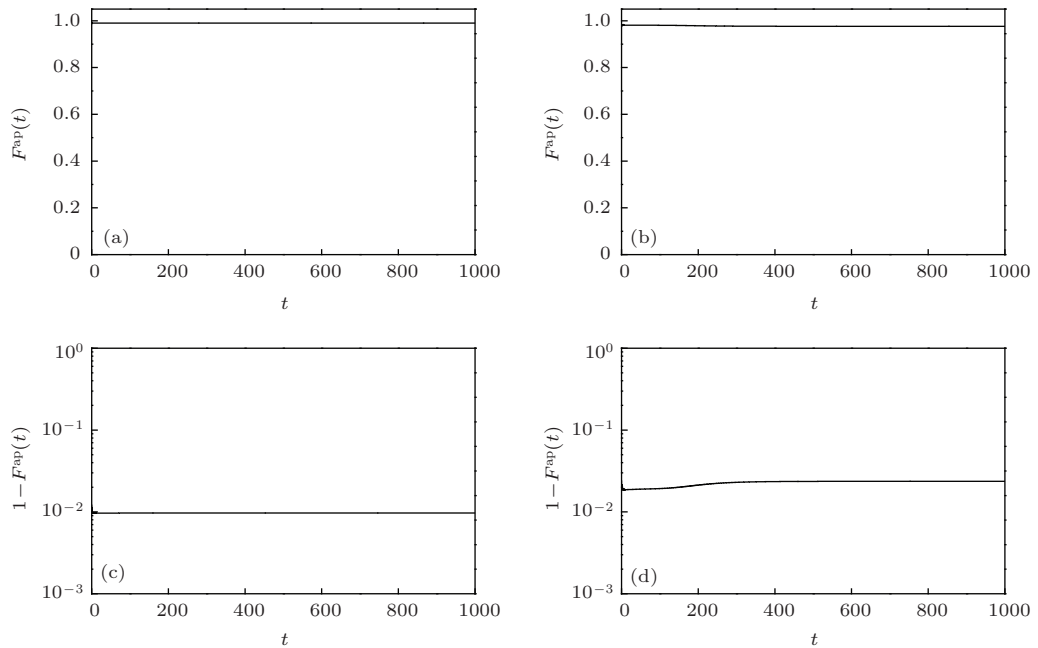


图5 (a) 同核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (b) 异核系统中 F^{ap} 随时间的变化; (c) 同核系统中 $1 - F^{ap}$ 随时间的变化; (d) 异核系统中 $1 - F^{ap}$ 随时间的变化

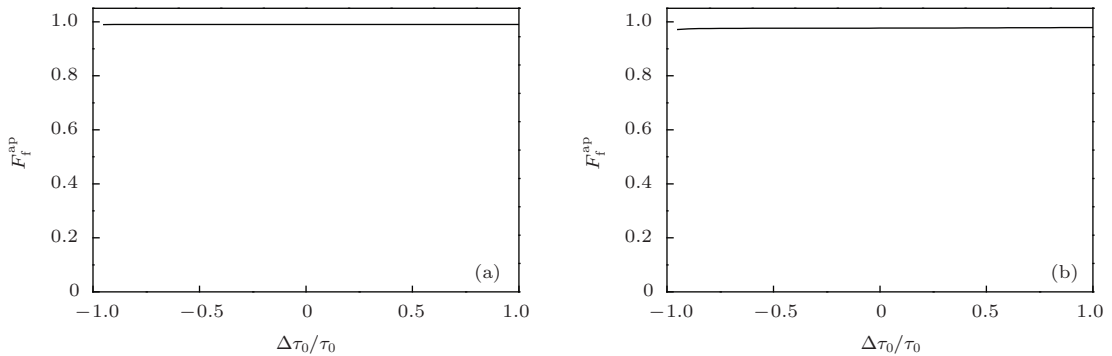


图6 (a) 同核系统中 F_f^{ap} 随 $\Delta\tau_0/\tau_0$ 的变化图像; (b) 异核系统中 F_f^{ap} 随 $\Delta\tau_0/\tau_0$ 的变化图像

4 结 论

本文将文献 [18, 19] 所给出的外场引入指数项并定义为时间指数, 发现时间指数的变化会引起振荡窗口的宽度和最终绝热保真度的变化, 从而影响系统的绝热稳定性和转化效率. 当时间指数取小于 1 的值时, 随着 α 取值的减小, 振荡窗口变大、振荡过程中绝热保真度的最小值变大, 但振荡窗口出现的时间被推迟, 最终绝热保真度接近于 1. 而当时间指数取大于 1 的值时, 随着 α 取值的增大, 振荡窗口的宽度缩小、振荡过程中绝热保真度的最小值变小, 绝热保真度较早地达到稳定窗口, 但是稳定后的最终绝热保真度变小, 时间指数越大最终绝热保真度越低, 系统虽能更早达到稳定, 但转化效率较低. 另外我们选取了一种更优化的外场形式, 在这种外场形式下, 绝热保真度几乎始终趋于稳定, 而且保持在一个非常接近于理想值 1 的值, 系统误差较小. 该外场形式的参数选取对转化效率影响较小, 具有很好的参数鲁棒性, 在这种外场形式下可以实现更为稳定、高效的超冷原子-多聚物分子转化.

参考文献

- [1] Sabbah H, Biennier L, Sims I R, Georgievskii Y, Klippenstein S J, Smith I W M 2007 *Science* **317** 102
- [2] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Geursen R, Jochim S, Chin C, Denschlag J H, Grimm R, Simoni A, Tiesinga E, Williams C J, Julienne P S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 103201
- [3] Melo C A R S 2008 *Phys. Today* **61** 45
- [4] Chin C, Grimm R, Julienne P, Tiesinga E 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1225
- [5] Ling H Y, Pu H, Seaman B 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 250403
- [6] Jing H, Cheng J, Meystre P 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 133002
- [7] Pu H, Maenner P, Zhang W P, Ling H Y 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 050406
- [8] Meng S Y, Chen X H, Wu W, Fu L B 2014 *Chin. Phys. B* **23** 040306
- [9] Winkler K, Thalhammer G, Theis M, Ritsch H, Grimm R, Denschlag J H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 063202
- [10] Drummond P D, Kheruntsyan K V, Heinzen D J, Wynar R H 2002 *Phys. Rev. A* **65** 063619
- [11] Ivanov P A, Vitanov N V, Bergmann K 2004 *Phys. Rev. A* **70** 063409
- [12] Meng S Y, Wu W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5311 (in Chinese) [孟少英, 吴炜 2009 物理学报 **58** 5311]
- [13] Liu J, Liu B, Fu L B 2008 *Phys. Rev. A* **78** 013618
- [14] Meng S Y, Fu L B, Liu J 2008 *Phys. Rev. A* **78** 053410
- [15] Dou F Q, Li S C 2012 *Eur. Phys. J. B* **85** 185
- [16] Fu L B, Liu J 2010 *Ann. Phys.* **325** 2425
- [17] Meng S Y, Fu L B, Chen J, Liu J 2009 *Phys. Rev. A* **79** 063415
- [18] Dou F Q, Li S C, Cao H, Fu L B 2012 *Phys. Rev. A* **85** 023629
- [19] Dou F Q, Fu L B, Liu J 2013 *Phys. Rev. A* **87** 043631
- [20] Ferlaino F, Knoop S, Berninger M, Harm W, D'Incao J P, Nägerl H C, Grimm R 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 140401
- [21] Hadizadeh M R, Yamashita M T, Tomio L, Delfino A, Frederico T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 135304
- [22] Lu L H, Li Y Q 2008 *Phys. Rev. A* **77** 053611

Effect of external field shape on the ultracold atom-polymer molecule conversion efficiency^{*}

Zhao Xiu-Niao Sun Jian-An Dou Fu-Quan[†]

(College of Physics and Electronic Engineering Northwest Normal University, Laboratory of Atomic Molecular Physics and Functional Material in Gansu province, Lanzhou 730070, China)

(Received 24 April 2014; revised manuscript received 27 June 2014)

Abstract

By changing the Rabi frequency of the photoassociation laser and the atom-polymer coupling strength, we investigate the effect of external field shape on atom-polymer conversion efficiency. First, by defining time-index, the external field shape given in literature is improved. We discuss the influence of time-index on conversion efficiency, and then choose a more optimized external field shape, it has good parameter robustness. Under the action of the external field, the adiabatic process has almost no oscillation, the adiabatic fidelity is close to 1, and the error of the system is less. The ultracold atom-polymer molecules conversion can be realized stably and efficiently.

Keywords: ultracold polymer molecules, conversion efficiency, external field shape, the adiabatic fidelity

PACS: 03.75.-b, 05.30.Jp, 67.85.-d

DOI: [10.7498/aps.63.220302](https://doi.org/10.7498/aps.63.220302)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11365020), and the Fundamental Research Funds for the Higher Education Institutions of Gansu Province of China.

[†] Corresponding author. E-mail: doufq@nwnu.edu.cn