

啁啾微波场中里德伯钠原子高激发态的布居跃迁*

蒋利娟¹⁾²⁾ 张现周^{1)†} 马欢强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) (新乡学院物理系, 新乡 453003)

(2011年4月18日收到; 2011年6月4日收到修改稿)

采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研究微波场中钠原子里德伯高激发态的性质, 得到钠原子的能级结构及在微波场中的布居数迁移, 实现对量子态的操纵与控制. 结果表明: 含时多态展开方法结合 B 样条函数和单电子原子模型势是有效研究微波场中碱金属原子性质的一种方法; 选择合适的啁啾率、振幅等参数, 可以实现布居数在量子态之间的完全迁移和量子态囚禁.

关键词: 里德伯钠原子, 能级, B 样条函数, 布居跃迁

PACS: 31.10.+z, 32.80.Ec

1 引言

有效控制原子量子态间的布居数跃迁和相干态囚禁, 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殊量子态的制备、量子态的相干操控等具有重要意义^[1,2]. 在原子光学和干涉测量中, 原子束的相干操纵过程已成功地应用了相干态囚禁的布居数和动量的转移. 近十几年来, 随着激光技术的发展, 原子量子态的相干控制已成为热点, 特别是里德伯原子的外场效应已得到深入研究^[3-8]. 实验上, Gallagher 组^[9]研究了里德伯钾原子在静电场、微波场和射频场中的 21s 和 19f 两态之间的跃迁, 并发现了许多有趣的现象. 后来利用微弱的极化微波场与 Rydberg 锂原子的价电子形成非扩散波包, 锁住 Rydberg 电子, 以实现控制其量子态跃迁的目的. 并且还通过“锁相运动”, 利用绝热通道相干操纵里德伯锂原子的价电子, 使其从 $n = 70$ 态逐渐跃迁到 $n = 80$ 态, 结果表明, 布居数跃迁对激光脉冲形状、强度、啁啾率等参数非常敏感, 并给出了半经典解释^[10,11]. 理论上, Zhang 等^[4,12]提出一种求解碱金属原子在一般外场中含时薛定谔方程的多态展开方法, 并用该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^[9]符合很好的理论结果, 并用量子理论解释

了上述有趣实验现象.

本文利用 B 样条函数^[2,7,13-17]和单电子原子模型势^[18], 求解钠原子的定态薛定谔方程, 计算出自由钠原子的能级结构及波函数, 并以零场波函数作为基矢, 采用含时多态展开方法研究钠原子处于微弱啁啾微波场下的激发跃迁, 得到高激发态 $n = 70-74$ 的布居数迁移, 分析了啁啾率和振幅对里德伯钠原子布居跃迁的影响. 结果表明, 只要选择合适的啁啾率和振幅等参数, 就可以实现布居数在量子态间的完全跃迁, 并进行了有益的讨论.

2 理论方法

处于微弱线性啁啾微波场中的碱金属原子, 在非相对论下, 忽略轨道和自旋的耦合, 采用一维原子模型, 系统的哈密顿量可以写成 (除特别说明外, 文中均采用原子单位)

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

式中 $H_0 = p^2/2 + V(z)$ 是忽略原子自旋 - 轨道相互作用的零场哈密顿量, $E(t) = A(t) \cos(\omega(t)t)$ 为微波场, 且 $A(t) = A_0 \exp(-mt^2)$, 其中 A_0 为激光脉冲峰值振幅, m 是激光脉冲形状参数, 且 $m = 2.4 \times 10^{-9}$, $\omega(t) = \omega_0 - \beta t$, ω_0 为激光

* 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 和 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.

† E-mail: xz-zhang@henannu.edu.cn

脉冲的中心频率, β 为频率啁啾率, H_0 中的 $V(z)$ 是碱金属原子价电子感受到原子实的势. 当 $V(z)$ 已知时, 可以通过适当数值方法, 求解碱金属原子零场下的定态薛定谔方程, 获得 H_0 的本征值和本征矢, 然后再以 H_0 的本征矢为基矢, 利用多态展开方法就可得到 H 的本征值和本征矢.

2.1 钠原子模型势

当碱金属原子处于高激发态时, 价电子远离原子实, 此时价电子受到的原子核和其他电子对它的作用可以简化为一个模型势. 在本文中, 采用 Schweizer 和 Faßbinder^[18] 给出的碱金属原子模型势, 其形式为

$$V = -\frac{1}{z}[\tilde{Z} + (Z - \tilde{Z}) \exp(-a_1 z) + a_2 z \exp(-a_3 z) + 1], \quad (2)$$

其中 Z 为原子序数; \tilde{Z} 为电离标记, 中性原子为 1, 一次电离原子为 2, 如此类推; a_1, a_2, a_3 为待定参数, 文献 [18] 给出了一些参数取值.

对于钠原子, $Z = 11, a_1 = 7.902, a_2 = 23.51, a_3 = 2.688$, 钠原子的模型势为

$$V(z) = -\frac{1}{z}[(11 - 1) \exp(-7.902z) + 23.51z \exp(-2.688z) + 1]. \quad (3)$$

2.2 B 样条函数

B 样条函数有多种定义方法, 常采用以截尾幂函数的差商来定义规范 B 样条函数. 在原子物理计算中, 为计算简单方便起见, 我们采用作为标准算法的 de Boor 和 Cox^[13] 的递推公式. 这个著名的 de Boor-Cox 递推公式很容易得出 B 样条函数的一些基本性质. 具体定义方法是在闭区间 $[a, b]$ 上选取 $n + k$ 个结点 t_i 组成结点序列 $a = t_1 \leq t_2 \leq t_s \cdots \leq t_{n+k} = b$, 则可定义 B 样条函数如下:

$$B_{i,l}(x) = \begin{cases} 1, & t_i \leq x \leq t_{i+1}, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

$$B_{i,k}(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_{i,k-1}(x) + \frac{t_{i+k} - x}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(x), \quad (4)$$

其中 k 为 B 样条函数的阶, n 为 k 阶 B 样条函数的数目. B 样条函数为分段多项式, 它具有解析函数和数值函数的性质. 在给定的区间内, 任何一个有意义的连续可微函数都可以用该区域内的一组 B 样条函数展开. 当以 B 样条函数为基函数时, 基函数的完备性与所选的节点序列有关, 一般来说, 所选结点序列越密, 函数组就越完备. 本文在计算中, 将 B 样条函数的阶数取为 $k = 12$, 数目 $n = 312$, 结点总数取值的空间范围为 $[r_{\min} = 0, r_{\max} = 40000 \text{ a.u.}]$, 这样可以使计算结果得到优化.

表 1 零场下里德伯钠原子的 s, p 态能级 E^{MP} (单位: hartree)

l/n	20	21	22	23	24
$0(E^{\text{MP}})$	-0.001431097	-0.001289436	-0.001167814	-0.001062621	-0.000971027
$0(E^{\text{MP1}[18]})$	-0.001437608	-0.001295004	-0.001172612	-0.001066785	-0.000974664
$0(E^{\text{QD}[18]})$	-0.001437229	-0.001294679	-0.001172332	-0.001066542	-0.000974452
$1(E^{\text{MP}})$	-0.001364727	-0.001232570	-0.001118720	-0.001019946	-0.000933699
$1(E^{\text{MP1}[18]})$	-0.001364806	-0.001232638	-0.001118779	-0.001019998	-0.000933744
$1(E^{\text{QD}[18]})$	-0.001364191	-0.001232109	-0.001118321	-0.001019598	-0.000933394

2.3 薛定谔方程的求解

含时多态展开方法^[4,12] 主要内容如下:

由于零场下势的中心对称性, 零场下钠原子的波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{U_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (5)$$

其中 n, l, m 分别是主量子数、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. 以 B 样条函数为基函数, 径向波函数 $U_{nl}(r)$

可展开为

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

这里, $B_{i,k}(r)$ 是第 i 个 k 阶 B 样条函数, 将 (3),(6) 两式代入径向薛定谔方程

$$\left[-\frac{d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] U_{nl}(r) = E_{nl} U_{nl}(r), \quad (7)$$

并将其投影到 $B_{i,k}(r)$ 上, 这样对于给定的角动量

量子数 l , 得到一个矩阵方程

$$H_l C = E S C, \quad (8)$$

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

当钠原子处在沿 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可以用零场波函数作为基矢求出. 即系统的薛定谔方程可以写成

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

其中 $\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k e^{-iE_k t}$ 为钠原子自由哈密顿的定态波函数. 则钠原子 Rydberg 电子的布居运动, 可以用下面公式表示:

$$P_k = |a_k|^2. \quad (10)$$

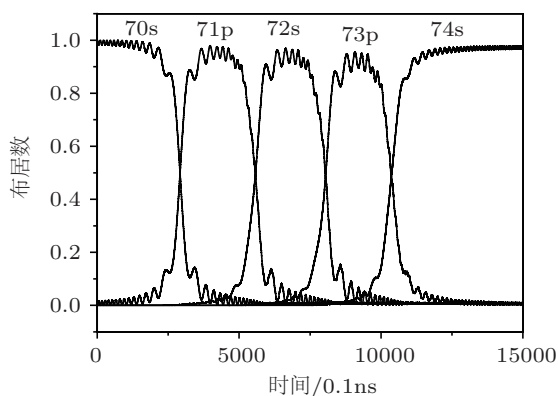


图 1 在振幅 $A_0 = 2.0$ V/cm, 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz, 啁啾率 $\beta = 0.0016$ GHz/ns 的微波脉冲作用下, 钠原子里德伯高激发态 $n = 70-74$ 的布居动力学过程

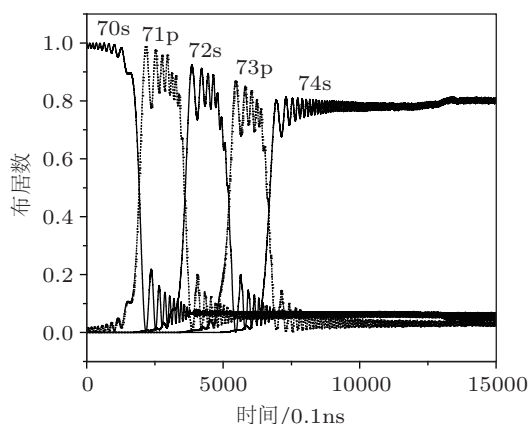


图 2 在振幅 $A_0 = 2.0$ V/cm, 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz, 啁啾率 $\beta = 0.0025$ GHz/ns 的微波脉冲作用下, 钠原子里德伯高激发态 $n = 70-74$ 的布居动力学过程

3 结果与讨论

利用 B 样条技术和单电子原子模型势, 得到零场下钠原子里德伯态的波函数和能级值. 计算的钠

原子 S, P 态部分能级值 (E^{MP}) 列于表 1, 为便于与其他理论结果进行比较, 使计算的结果更具有普遍性, 我们选低激发态 $n=20-24$ 的能级值, 与其他作者 [18] 分别利用模型势方法 (E^{MP1}) 和量子亏损方法 (E^{QD}) 所得的能级值做比较. 从表 1 中可以看到本文计算的 S 态能级的结果与其他模型势方法 (E^{MP1}) 和量子亏损方法 (E^{QD}) 所得到的能级值误差大约为 10^{-6} hartree (1 hartree=27.21 eV), P 态的能级值误差大约为 10^{-7} hartree, 并且计算出来的 P 态能级数值介于模型势方法 (E^{MP1}) 和量子亏损方法 (E^{QD}) 的能级数值之间, 说明用 B 样条函数展开方法得到的零场下的能级值有很高的精度, 这保证了下一步计算啁啾微波场中钠原子的布居跃迁有很好的基矢.

表 2 零场下里德伯钠原子 $n = 70, \dots, 74$ 态的能级值 E^{MP}

(单位: hartree)		
n	$l = 0$	$l = 1$
70	-0.00010596409	-0.00010459165
71	-0.00010294498	-0.00010163058
72	-0.00010005308	-0.00009879351
73	-0.00009728135	-0.00009607360
74	-0.00009462322	-0.00009346448

选择钠原子 5 个高激发态 $n = 70$ 到 $n = 74$ 态, 它们的能级数值在表 2 中列出, 研究计算钠原子在频率啁啾微波场中沿着 $70s \rightarrow 71p \rightarrow 72s \rightarrow 73p \rightarrow 74s$ 路径的布居数迁移特性. 假设初始时刻, 钠原子布居在 $n = 70s$ 态上, 外加线性啁啾微波场的振幅 $A_0 = 2.0$ V/cm, 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz 保持恒定, 当取啁啾率 β 分别为 0.0016 GHz/ns, 0.0025 GHz/ns 时, 跃迁概率随时间的演化, 如图 1、图 2 所示. 图 1 表明, 当 $\beta = 0.0016$ GHz/ns 时, 由初始态 $n = 70s$, 经 $n = 71p \rightarrow 72s \rightarrow 73p$ 态, 最终约 97.8% 的布居数跃迁到目标态 $n = 74s$, 并囚禁到这个态上; 图 2 表明, 当保持其他条件不变, 而 $\beta = 0.0025$ GHz/ns 时, 由初始态 $n = 70s$, 大约有 93% 的布居数跃迁到 $n = 71p$, 86% 跃迁到 $n = 72s$ 态, 80% 跃迁到 $n = 73p$ 态, 经这 5 个连续的绝热快速通道后, 最终仅有 78% 的布居数跃迁到目标态 $n = 74s$ 上. 当微波场的振幅 A_0 改变为 1.2 V/cm, 初始频率 ω_0 为 20.8 GHz 和啁啾率 β 为 0.0016 GHz/ns 与图 1 仍然保持一致时, 布居数随时间演化如图 3 所示, 从图 3 中可以看出, 由初始态 $n = 70s$ 大约有 83% 跃迁到 $n = 71p$, 然后有 66% 跃迁到 $n = 72s$ 态, 57% 跃迁到 $n = 73p$ 态, 最终仅有约 50% 的布

居数跃迁到目标态 $n = 74s$ 上. 与图 1 进行比较, 可以看到, 啁啾率保持恒定时, 选取不同的振幅, 跃迁到目标态的概率也大不相同, 最后仅有一半的布居数到达了目标态. 所以, 量子态的相干迁移与控制不仅和微波场的啁啾率有关, 而且和微波场的振幅有关; 只有当振幅和啁啾率选取适当时, 才可以产生从初始态到目标态的完全跃迁, 当振幅和啁啾率选取不适当时, 一部分布居数就会跃迁到其他态上 [19–21].

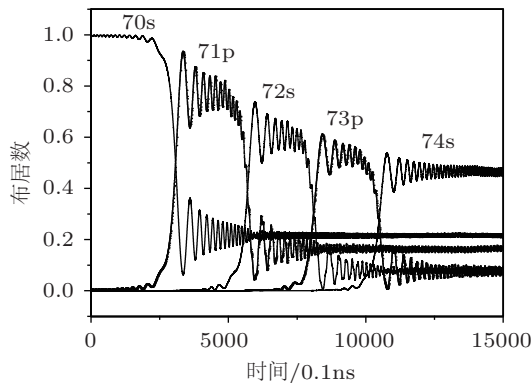


图3 在振幅 $A_0 = 1.2$ V/cm, 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz, 啁啾率 $\beta = 0.0016$ GHz/ns 的微波脉冲作用下, 钠原子里德伯高激发态 $n = 70-74$ 的布居动力学过程

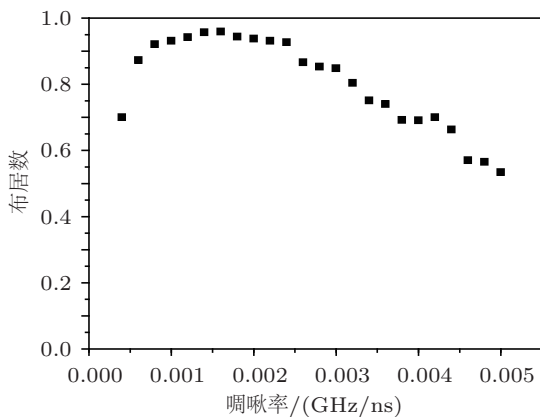


图4 振幅 $A_0 = 2.0$ V/cm, 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz, 啁啾率 β 从 0.0004 GHz/ns 到 0.005 GHz/ns 范围内的钠原子里德伯高激发态 $n = 72s$ 的布居跃迁分布

为了反映布居跃迁与啁啾率和振幅之间的关

系, 我们进一步计算了里德伯钠原子 $n = 72s$ 态的跃迁概率随啁啾率和振幅的变化关系. 在图 4 中, 微波场的振幅 $A_0 = 2.0$ V/cm、初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz 保持不变, 啁啾率从 0.0004 GHz/ns 变化到 0.005 GHz/ns 时布居数跃迁到目标态的变化情况; 图 5 中展示了微波场的初始频率 ω_0 为 20.8 GHz、啁啾率 $\beta = 0.0016$ GHz/ns 保持不变, 振幅 A_0 从 $A_0 = 0.4$ V/cm 变化到 $A_0 = 5.0$ V/cm 时布居数跃迁到目标态的变化情况. 从两个图的结果可以看出, 要使里德伯原子由初始态成功地跃迁到目标态, 需要选择合适的啁啾率与振幅.

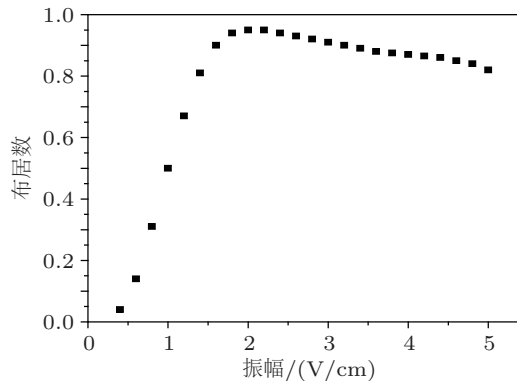


图5 初始频率 $\omega_0 = 20.8$ GHz, 啁啾率 $\beta = 0.0016$ GHz/ns, 振幅 A_0 从 0.4 V/cm 到 5.0 V/cm 范围内的钠原子里德伯高激发态 $n = 72s$ 的布居跃迁分布

4 结论

运用含时多态展开方法, 结合 B 样条函数展开法和单电子原子模型势得到钠原子里德伯态的能级结构, 与其他理论计算结果符合得很好. 在此基础上, 利用一维模型计算了钠原子在微波场中的布居跃迁特性, 得出在频率线性啁啾微波场中, 只要选择合适的啁啾率和振幅等参数, 里德伯钠原子布居数就能成功地跃迁到目标态. 本文研究表明, 含时多态展开方法结合 B 样条函数和单电子原子模型势能很好地处理钠原子在微波场中的问题, 能够人为操纵和控制量子系统沿着特殊的路径演化到最终理想目标态.

- [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.* **16** 2924
- [6] Meng H Y, Kang S, Shi T Y, Zhang M S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3198 (in Chinese) [孟慧艳, 康帅, 史庭云, 詹明 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] Maeda H, Gurian J H, Gallagher T F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 103001
- [9] Michael W N, Griffith W M, Gallagher T F 1998 *Phys. Rev. A* **58** 2265
- [10] Maeda H, Gallagher T F 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033410
- [11] Maeda H, Norum D V L, Gallagher T F 2005 *Science* **307** 1757
- [12] Zhang X Z, Jiang H M, Rao J G, Li B W 2003 *J. Phys. B* **36** 4089
- [13] Deboor C 1978 *A practical guide to splines* (New York: Springer)
- [14] 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]
- [15] 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]
- [16] Jia G R, Zhang J C, Zhang X Z, Ren Z Z 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 103201
- [17] Zhang Y X, Meng H Y, Shi T Y 2008 *Chin. Phys. B* **17** 140
- [18] Schweizer W, Faßbinder P, Gonzalez F R 1999 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **72** 33
- [19] Djotyan G P, Bakos J S, Sorlei Z S 2001 *Phys. Rev. A* **70** 063406
- [20] Jia G R, Zhang X Z, Ren Z Z, Wu S L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5272
- [21] Carrera J J, Chu S I 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 9320

Population transfer of high excited states of Rydberg sodium atoms in a chirped microwave field*

Jiang Li-Juan¹⁾²⁾ Zhang Xian-Zhou^{1)†} Ma Huan-Qiang¹⁾
Jia Guang-Rui¹⁾ Zhang Yong-Hui¹⁾ Xia Li-Hua¹⁾

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

2) (Department of Physics, Xixiang University, Xixiang 453003, China)

(Received 18 April 2011; revised manuscript received 4 June 2011)

Abstract

Using the time-dependent multilevel approach (TDMA) and combining the B-spline expansion technique and the model potential method of atom, the properties of Rydberg sodium atom are investigated. The energy level structure of high excited states and population transfer of sodium atom in a microwave field are studied by numerical calculation, and quantum states are controlled and manipulated by microwave field. The results show that the method we used can be applied to the investigation of the properties of alkali-metal atoms in external field, that the population is very sensitive to the parameters of chirped rate and field amplitude, and that the population can be completely transferred into the target state and trapped there by changing the chirped rate and field amplitude.

Keywords: Rydberg sodium atom, energy levels, B-spline technique, population transfer

PACS: 31.10.+z, 32.80.Ee

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

† E-mail: xz-zhang@henannu.edu.cn