

文章编号:1004-4213(2010)03-0543-4

# 原子相干对光缔合形成分子的影响\*

王璞玉,杨国建<sup>†</sup>

(北京师范大学 物理系,北京 100875)

**摘 要:**用量子统计方法,讨论了原子相干对超冷两态原子经光缔合形成超冷分子的影响.结果表明,在原子相干的作用下,光缔合形成的分子数随时间做近周期减幅振荡.原子相干对光缔合过程的暂态阶段影响强烈,而分子始终保持 sub-Poisson 统计分布.

**关键词:**超冷原子;光缔合;原子相干;分子转换率;二阶相关函数

**中图分类号:**O431.2

**文献标识码:**A

**doi:**10.3788/gzxb20103903.0543

## 0 引言

在过去的 10 多年中,超冷原子领域里的研究取得了很大的进展,物质波放大<sup>[1-3]</sup>、物质波的孤立子<sup>[4-5]</sup>和涡流<sup>[6]</sup>、光晶格中超冷原子的量子相变<sup>[7]</sup>、超冷原子超精细结构高分辨率光谱<sup>[8]</sup>以及超冷原子中的慢光效应和量子信息存储等新的研究成果不断出现.像原子一样,分子也是许多物质形态中构成物质的基本单元,因此,人们对超冷分子在生活中的潜在应用进行大量的探索研究.最近,相关的研究引起人们的关注.自然,获得超冷分子是人们首先要解决的问题.与原子不同,即使是最简单的双原子分子,其能级结构也比原子复杂得多,因此很难像原子那样寻找出一个合适的封闭二、三能级分子系统以备制备超冷分子之用,另辟它径是必须的.目前,通常用两种方法来获得低温分子,一种是利用缓冲气体技术和 Stark 电场减速技术直接冷却分子;另外一种是通过光缔合技术<sup>[9-10]</sup>或磁场扫描 Feshbach 共振技术<sup>[11]</sup>让超冷原子直接结合获得相应温度的分子.显然,后一种方法是获得超冷分子的更为有效途径.例如,人们已经用光缔合技术成功的制备出温度在 10 nK 左右的基态分子,该温度下分子的动能远小于其振动或转动的能级间距.现在已有许多关于玻色原子形成分子<sup>[12-15]</sup>以及费米原子配对形成玻色分子<sup>[16-17]</sup>的研究报道.

由原子通过光缔合或磁场扫描 Feshbach 共振途径形成分子的状态与形成分子之前原子的状态有直接的关系,在超冷情况下,描述这些状态的内外自由度变量均应是量子化的.另一方面,叠加原理是量子力学最重要的原理之一,它是微观量子系统出

现各色各样奇妙物理现象的根本原因.已有关于处在叠加态超冷原子凝聚体性质的研究报道,它指出当叠加态是由具有大小相等方向相反本征值的两个动量本征态构成时,原子凝聚体内会形成密度光栅,从而导致体内出现非线性物质波混频现象<sup>[18]</sup>.本文讨论当初始时刻超冷原子是制备在与上述相同的动量本征态的叠加态时,光缔合形成超冷分子时的情况,着重分析初态原子相干对分子形成以及分子场统计分布的影响.

## 1 模型与计算

本文所要讨论的超冷分子产生系统可以简单描述如下.当具有两个动量本征态的超冷原子通过光缔合方法形成分子时,一般情况下可以用如下哈密顿量来描述

$$\hat{H} = \sum_{k,k'=\pm q_0/2} [\theta_{kk'} \hat{b}_{k+k'}^\dagger \hat{b}_{k+k'} + g_{kk'} (\hat{b}_{k+k'}^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{k'} + \hat{b}_{k+k'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'}^\dagger)] \quad (1)$$

这里下标  $k(k')$  是原子动量本征态指标,  $\hat{b}_{k+k'}^\dagger, \hat{b}_{k+k'}$  和  $\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k$  分别是分子和原子的产生和湮灭算符,满足玻色对易关系  $[\hat{b}_{k+k'}^\dagger, \hat{b}_{k+k'+k''}^\dagger] = \delta_{k+k',k'+k''}$  和  $[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$ ,  $\theta_{kk'}$  是原子与分子间的失谐,  $g_{kk'}$  则是原子-分子耦合常量.另外,本文已经假设原子总是处在内部能级的基态,且原子之间无碰撞相互作用.因分子能量越低越稳定,形成的可能性越大,所以仅需考虑动量相反的两个原子形成分子的过程,这样哈密顿量式(1)可以简化为

$$\hat{H} = \theta \hat{b}^\dagger \hat{b} + g (\hat{b}^\dagger \hat{a}_{q_0/2} \hat{a}_{-q_0/2} + \hat{b} \hat{a}_{q_0/2}^\dagger \hat{a}_{-q_0/2}^\dagger) \quad (2)$$

这里分子算符、原子-分子间的失谐量以及耦合常量的下标均已被省略,因为它们不再随原子动量取值的变化而改变.显然,所形成的分子处在零动量状态,它们形成分子玻色爱因斯坦凝聚体(Bose-

\* 国家自然科学基金(10674018)资助

<sup>†</sup> Tel: 010-58808027

Email: yanggj@bnu.edu.cn

收稿日期: 2009-04-03

修回日期: 2009-06-11

Einstein Condensation, BEC). 初态原子的制备非常关键. 为得到所需要的处于动量叠加态的超冷原子, 可以先取一个由  $N$  个玻色原子组成的弱相互作用理想 BEC, 其状态是  $[\hat{a}_0^\dagger]^N |0\rangle / \sqrt{N!}$ , 接着用一束光子动量为  $q_0$  的“50/50”布拉格光脉冲作用到它上面, 当选取布拉格脉冲的动量  $q_0$  远大于凝聚体动量弥散宽度时, 就可以使得其中每一个原子处于动量为  $\pm q_0/2$  的叠加态上, 而整个凝聚体的状态则变成<sup>[11]</sup>

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N N!}} (\hat{a}_{q_0/2}^\dagger + \hat{a}_{-q_0/2}^\dagger)^N |0\rangle \quad (3)$$

式中  $|0\rangle$  是真空态. 引入总粒子数算符  $\hat{N} \equiv 2\hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{a}_{q_0/2}^\dagger\hat{a}_{q_0/2} + \hat{a}_{-q_0/2}^\dagger\hat{a}_{-q_0/2}$ , 显然有关系  $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$ , 所以总粒子数是系统的守恒量.

用 Fock 态方法来表示叠加态式(3)很方便. 在 Fock 态表象中, 式(3)转变成

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \sum_{i=0}^N \sqrt{\frac{N! i!}{(N-i)!}} |(N-i)_{q_0/2}, (i)_{-q_0/2}\rangle \quad (4)$$

式中  $|(N-i)_{q_0/2}, (i)_{-q_0/2}\rangle$  表示  $N-i$  个原子处在动量本征态  $|q_0/2\rangle$  上, 另有  $i$  个原子处在  $|-q_0/2\rangle$  上.

在哈密顿量式(2)的作用下, 有分子缔合而成, 原子-分子耦合系统在任意时刻  $t$  所处状态可以由原子-分子联合随机分布波函数用  $|\Psi_n\rangle$  来描述

$$|\Psi_n(t)\rangle = \sum_{m=0}^{\min(N-m, m)} \sum_{n=0}^{\min(N-m, m)} C_{m,n}(t) |n, (N-m-n)_{q_0/2}, (m-n)_{-q_0/2}\rangle \quad (5)$$

式中  $C_{m,n}(t)$  表示系统内有  $n$  个零动量分子、 $N-m-n$  个动量为  $q_0/2$  的原子和  $m-n$  个动量为  $-q_0/2$  原子的几率幅度. 显然, 要得到超冷分子, 动量态  $|q_0/2\rangle$  和  $|-q_0/2\rangle$  上事先至少各有一个原子存在. 另外, 每个态上的原子数从 0 到  $N$  之间任意可选, 所能形成的最大分子数是由  $N-m+n$  和  $m-n$  的最小值来决定的. 若以式(5)的形式来表示系统初态, 可以得到

$$|\Psi_0(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^N}} \sum_{i=0}^N \sqrt{\frac{N! i!}{(N-i)!}} |(N-i)_{q_0/2}, (i)_{-q_0/2}\rangle \quad (6)$$

考虑  $\theta = 0$  的单光子共振情况, 将式(5)带入 Schrödinger 方程  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_n\rangle = \hat{H} |\Psi_n\rangle$ , 可以得到几率幅度  $C_{m,n}(t)$  所满足的演化方程

$$i\dot{C}_{m,n}(t) = g \sqrt{n(N-m-n+1)(m-n+1)} \cdot C_{m,n-1}(t) + g \sqrt{(n+1)(N-m-n)(m-n)} \cdot C_{m,n+1}(t) \quad (7)$$

方程(7)是一个迭代微分方程组, 其维数由  $m$  和  $n$  两个参量决定, 对于任意给定的  $m$ , 它为  $\min(N-m, m)+1$ .

在任意时刻  $t$ , 系统内形成的分子数可以通过几率幅度  $C_{m,n}(t)$  以如式(8)所示方式表达

$$\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle = \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^{\min(N-m, m)} n |C_{m,n}(t)|^2 \quad (8)$$

为了方便起见, 本文引入参量  $f_M$  来描述系统中分子的转换率.  $f_M$  定义为

$$f_M = 2\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle / N \quad (9)$$

## 2 数值分析

图 1 给出分子转换率  $f_M$  在初始条件(6)下的数值模拟结果, 它展示了初始原子数不同情况下分子-原子之间转换率随时间变化的关系, 其中  $N=50$  (虚线),  $N=100$  (实线),  $N=200$  (点线), 时间  $\tau = \sqrt{2N}gt$ . 由于通过光缔合途径形成的分子并不全都稳定, 所以随着时间的变化, 有些分子会迅速分解成原子, 然后又重新缔合成分子. 在演化初期, 系统就是以这种缔合—分解—再缔合—再分解的方式演化, 分子转换率曲线振荡变化. 可以清楚地看到在第一个振荡最大值处, 缔合形成的分子数达到极大值, 远远超过此时与其共存的原子数. 但随着时间的增加, 其振荡幅度不断减小, 呈现出逐渐趋近于一个固定值的趋势. 分子转化率的这种渐进行为在数学上可以大致理解如下: 在渡过演化初始阶段后, 系统内已有相当多的分子 ( $n \gg 1$ ), 相应于这些较大  $n$  值的几率幅度  $C_{m,n}$  对平均分子数  $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$  贡献大. 这时式(7)等号右边两个几率幅度下标中所含的整数 1 可略去不计, 耦合微分方程组变成了各组份互不关联的一阶齐次微分方程的集合. 这个结果意味着在渡过演化初始阶段后, 系统的不同分子数状态演化互不关联, 并且每个分子数状态中分子形成的几率不再随时间变化. 从图中还可以明显地看到, 对于不同

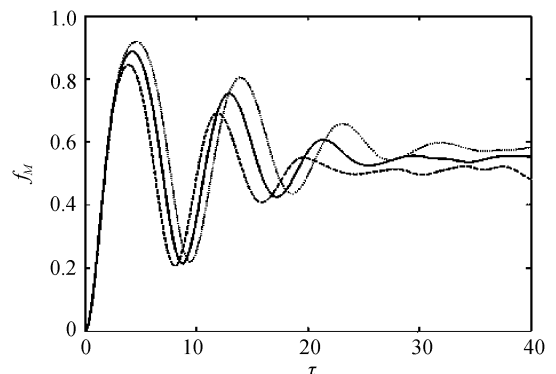


图 1 不同初始原子数时,  $f_M$  随时间变化曲线  
Fig. 1  $f_M$  changes with time for different initial atoms number

初始原子数  $N$  的情况,分子的最大转换率随着  $N$  的增大而增大,且转换率曲线振荡周期也略有增加.

为理解初态原子相干对分子形成的影响,图 2 展示了式(6)初始原子处于动量叠加态(实线)和等量原子处在动量本征态  $|\pm q_0/2\rangle$  ( $|\Psi_0(t=0)\rangle = \sqrt{\frac{2}{N!}}|0, (N/2)_{q_0/2}, (N/2)_{-q_0/2}\rangle$ ) (虚线)时分子形成情况. 两种情况中总原子数均为  $N=20$ . 容易看到它们的分子-原子之间转换时间相关行为有较大差别. 相对于后者,前者呈现出一种比较有规律的减幅振荡趋势,且最大分子转换率略低、出现的时间也略有延迟. 但是,正如前面所分析的那样,经过长时间的演化以后,两种情况下的分子转换率近似地趋于同一个数值. 初始原子数相同但所处状态不同,之所以能在演化初期造成分子形成规律如此大的差别,是由于系统初态中存在的原子相干效应所致. 从物理上看,可能的原因是原子相干导致了凝聚体内原子密度光栅的形成,该密度光栅会对分子甚至原子本身产生散射作用,从而影响光缔合形成分子的效果. 系统初态中存在的原子相干效应由式(6)中由  $i \neq N/2$  的那些项所描述(若不考虑归一化,等量原子处在两个动量本征态  $|\pm q_0/2\rangle$  上所对应的系统初态其实是式(6)中  $i$  仅取  $i=N/2$  的特例). 数值模拟显示当渡过暂态过程以后,两种初始条件下的分子转换率趋于一个同样的值,这表明原子相干对分子转化率的影响随着演化的进行逐渐被抹平.

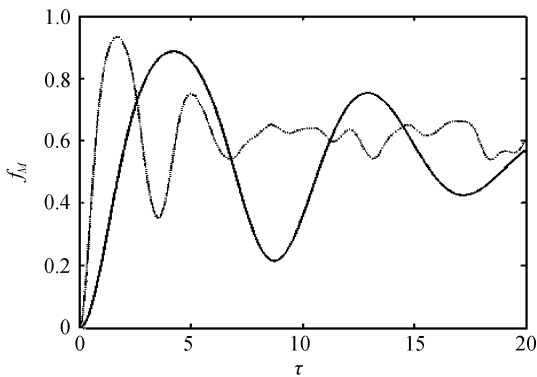


图 2 原子处于不同初态时  $f_M$  随时间变化关系  
Fig. 2  $f_M$  changes with time for different initial atom states

二阶相关函数为

$$g_{ij}^{(2)}(t) = \frac{\langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle - \delta_{ij} \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle}{\langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle} \quad (10)$$

它是一个反映统计分布特性的重要物理量. 当  $i=j$  时,上式表示纯分子的二阶关联函数,当时  $i \neq j$ ,则代表原子与分子间的关联函数.  $g^{(2)}(t) > 1$ 、 $= 1$  和  $< 1$  分别对应于分子的 super-Poisson 分布、Poisson 分布和 sub-Poisson 分布三种情况. 图 3 给出了初始原子处于动量叠加态式(6) (实线)和等量原子处在

动量本征态  $|\pm q_0/2\rangle$  (虚线)时分子二阶关联函数  $g^{(2)}(t)$  随时间变化的曲线,它显示  $g^{(2)}(t)$  也是随时间振荡变化,但与分子转换率  $f_M$  曲线变化方式相反,初始原子相干使得  $g^{(2)}(t)$  曲线变化没有表现出周期性. 很显然,在两种原子初态情况下,  $g^{(2)}(t)$  始终小于 1,表明系统内所形成的分子始终满足 sub-Poisson 统计分布.

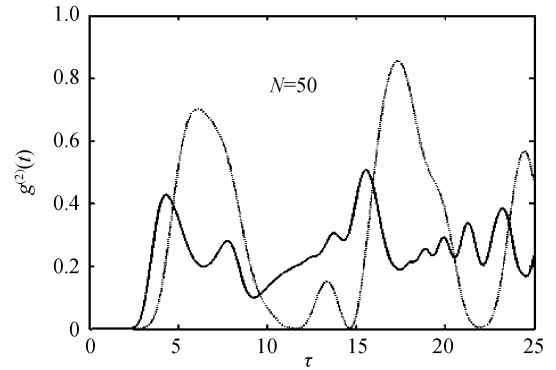


图 3  $g^{(2)}$  随时间变化曲线  
Fig. 3 The curves of  $g^{(2)}$  with rescaled time

### 3 结论

本文讨论了超冷两态原子经光缔合形成分子 BEC 问题,着重分析了原子相干对分子形成的影响. 超冷两态原子可以通过光子动量为  $q_0$  的“50/50”布拉格光脉冲作用在原子 BEC 上面后获得. 结果表明,原子相干对光缔合过程的暂态阶段影响较大,它使得缔合形成的分子数随着时间做近周期性的减幅振荡. 但无论原子相干效应是否存在,在暂态过程以后,分子在系统中所占的比例都近似趋于一个相同的值,说明此光缔合系统对初始原子相干作用没有长期记忆. 在光缔合的过程中,分子始终满足 sub-Poisson 统计分布,原子的初始状态的改变,并未改变演化过程中分子的统计分布情况.

#### 参考文献

- [1] SCHNEBLE D, TORII Y, BOYD M, *et al.* The onset of matter-wave amplification in a superradiant bose-einstein condensate [J]. *Science*, 2003, **300**(5618): 475-478.
- [2] KETTERLE W, MIESNER H J. Coherence properties of Bose Einstein condensates and atom lasers [J]. *Phys Rev A*, 1997, **56**(4): 3291-293.
- [3] KOZUMA M, SUZUKI Y, TORII Y, *et al.* Phase-coherent amplification of matter waves [J]. *Science*, 1999, **286**(5548): 2309-2312.
- [4] KHAYKOVICH L, SCHRECK F, FERRARI G, *et al.* Formation of a matter-wave bright soliton [J]. *Science*, 2002, **296**(5571): 1290-1293.
- [5] DENSCHLAG J, SIMSARIAN J E, FEDER D L, *et al.* Generating solitons by phase engineering of a Bose-Einstein Condensate [J]. *Science*, 2000, **287**(5450): 97-101.
- [6] MADISON K, CHEVY W, F, WOHLLEBEN W, *et al.* Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate [J]. *Phys Rev Lett*, 2000, **84**(5): 806-809.

- [7] ELENA V G, PIERRE M. Phase conjugation of multicomponent Bose-Einstein condensates[J]. *Phys Rev A*, 1999, **59**(2):1509-1513.
- [8] JI Wei-bang, WANG Gui-ping, WANG Li-rong, *et al.* Experimental study on fluorescence detection of cold Cs atoms using phase-lock detection technology [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(5):969-972.  
冀炜邦, 王贵平, 汪丽蓉, 等. 利用锁相探测技术探测铯原子荧光光谱的实验研究[J]. *光子学报*, 2008, **37**(5):969-972.
- [9] HEISELBERG H. Bosons and fermions near Feshbach resonances[J]. *J Phys B: At Mol Opt Phys*, 2004, **37**:S141-S153.
- [10] FIORETTI A, COMPARAT D, CRUBELLIER A, *et al.* Formation of Cold Cs<sub>2</sub> molecules through photoassociation [J]. *Phys Rev Lett*, 1998, **80**(20):4402-4405.
- [11] MEISER D, MEYSTRE P. Number statistics of molecules formed from ultracold atoms[J]. *Phys Rev Lett*, 2005, **94**(9):093001-093004.
- [12] WEBER C, BARONTINI G, CATANI J, *et al.* Association of ultracold double-species bosonic molecules[J]. *Phys Rev A*, 2008, **78**(R):061601-061604.
- [13] SOURISH B, ERICH J M. Stability of bosonic atomic and molecular condensates near a Feshbach resonance[J]. *Phys Rev A*, 2008, **78**(5):053603-053608.
- [14] CARMICHAEL A, JAVANAINEN J. Mean-field stationary state of a Bose gas at a Feshbach resonance[J]. *Phys Rev A*, 2008, **77**(4):043616-043630.
- [15] JONES K M, TIESINGA E, LETT P D, *et al.* Ultracold photoassociation spectroscopy: Long-range molecules and atomic scattering[J]. *Rev Mod Phys*, 2006, **78**(2):483-535.
- [16] ZWIERLEIN M W, STAN C A, SCHUNCK C H, *et al.* Observation of Bose-Einstein condensation of molecules[J]. *Phys Rev Lett*, 2003, **91**(25):250401-250404.
- [17] GREINER M, REGAL C, JIN D S. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas[J]. *Nature*, 2003, **426**:537-540.
- [18] MOORE M G, MEYSTRE P. Atomic four-wave mixing: Fermions versus Bosons[J]. *Phys Rev Lett*, 2001, **86**(19):4199-4202.

## Atomic Coherence Effect on the Formation of Molecules via Photoassociation

WANG Pu-yu, YANG Guo-jian

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

**Abstract:** The influence of atomic coherence on the formation of a ultracold molecule from ultracold two-state atoms is discussed via photoassociation. By using the method of quantum statistics, it is found that under the action of atomic coherence, the molecular number vibrates with an approximate period and with reduced amplitude. Atomic coherence has a strong influence on the temporary of the whole photoassociation process, but the molecules are always subject to sub-Poisson statistical distribution.

**Key words:** Ultracold atom; Photoassociation; Atomic coherence; Molecule conversion rate; Second order correlation function



**WANG Pu-yu** was born in 1981. She received her Ph. D. degree from Department of Physics, Beijing Normal University in 2009, and her research interests focus on quantum optics.