Письма в ЖЭТФ, том 92, вып. 7, с. 490 – 494

Особенности стимулированной атомно-молекулярной конверсии с образованием гетероядерных молекул в условиях бозе-эйнштейновской конденсации

П. И. Хаджи, А. П. Зинган

Приднестровский государственный университет им. Т.Г. Шевченко, 3300 Тирасполь, Молдова

Институт прикладной физики АНМ, Кишинев, Молдова

Поступила в редакцию 24 августа 2010 г.

Изучена динамика стимулированной рамановской атомно-молекулярной конверсии в бозе-эйнштейновском конденсате, которая состоит в периодическом связывании двух различных бозе-атомов в гетеромолекулу и распада молекулы на два атома. Показано, что период и амплитуда колебаний плотности молекул существенно зависят от начальных плотностей частиц и начальной разности фаз.

В последние годы достигнут существенный прогресс в экспериментальном и теоретическом исследованиях свойств бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) атомов. Особый интерес в настоящее время вызывает исследование динамики связанных атомно-молекулярных конденсатов в условиях резонанса Фешбаха либо стимулированного рамановского связывания двух атомов в молекулу. В [1] показано, что такого рода процессы могут привести к принципиально новой химии, к так называемой когерентной суперхимии, в рамках которой возможно стимулирование химических реакций. Атомно-молекулярная конверсия, рассматриваемая как простейший параметрический, трехволновой процесс, сводится к периодическому связыванию пары атомов в молекулу и наоборот. Теория рамановского параметрического процесса с участием двух лазерных импульсов как единого (одноступенчатого) процесса в приближении среднего поля была предложена в [2, 3]. В этих работах изучен процесс конверсии двух одинаковых атомов в гомоядерную молекулу в присутствии двух импульсов резонансного лазерного излучения. Было показано, что имеют место как периодический, так и апериодический режимы конверсии, причем особенности временной эволюции системы существенно определяются начальными плотностями частиц. В [4] теоретически был изучен двухступенчатый процесс конверсии двух различных бозе-атомов в гетероядерную молекулу под действием двух импульсов лазерного излучения. По-видимому, этот процесс также можно рассматривать как единый, поскольку общий уровень возбужденной молекулы оказывается незаселенным.

К настоящему времени наблюдалось связывание атомов в гомоядерные молекулы K_2 [5], Li_2 [6], Cs_2 [7], Na_2 [8], Rb_2 [9]. Большим успехом является наблюдение не только гомоядерных молекул, но также и гетероядерных, состоящих из двух различных атомов. При этом наблюдалась атомно-молекулярная конверсия в ферми-ферми, бозе-бозе и ферми-бозе смесях атомов с образованием гетероядерных молекул $^{6}Li^{40}K$ [10], $^{6}Li^{23}Na$ [11], $^{7}Li^{133}Cs$ [12], $^{23}Na^{133}Cs$ [13], $^{83}Rb^{133}Cs$ [14], $^{39}K^{85}Rb$ [15], $^{40}K^{87}Rb$ [16], $^{41}K^{87}Rb$ [17]. Большинство экспериментов было нацелено на обнаружение двухатомных гомоядерных либо гетероядерных молекул. Однако совсем недавно наблюдались гомоядерный тетрамер Cs_4 [18] и трехатомная гетероядерная молекула $^{87}Rb^{40}K^{6}Li$ [19]. Это обстоятельство свидетельствует о возможности образования и более сложных молекул в условиях бозе-конденсации.

Цель данной работы состоит в исследовании особенностей стимулированной рамановской атомно-молекулярной конверсии с образованием гетероядерной молекулы как единого, одноступенчатого процесса. Пусть два различных бозе-конденсированных атома a_1 и a_2 с энергиями $\hbar\omega_{01}$ и $\hbar\omega_{02}$ переходят в основное состояние гетероядерной молекулы b с энергией $\hbar\Omega_0$ через возбужденное состояние молекулы E_u, одновременно поглощая и излучая кванты света c_1 и c_2 с энергиями $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$, соответственно (рис.1). Изучаемый процесс можно представить в виде реакции $a_1 + a_2 + c_1 \leftrightarrow b + c_2$, где a_1 и a_2 представляют два различных атома, например, ^{41}K и ^{87}Rb, а b – гетероядерную молекулу $^{41}K^{87}Rb$. Что касается промежуточного, возбужденного молекулярного состояния с энергией E_u, то его можно исключить из рассмотрения, используя принцип адиабатического следования [20]. Отметим, что рассматриваемый процесс, в сущности, есть процесс оптической

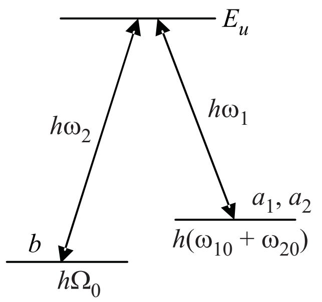

Рис.1. Энергетическая схема и квантовые переходы в трехуровневой Λ-схеме

рамановской нутации в условиях атомно-молекулярной конверсии, состоящей в периодическом изменении плотностей бозе-конденсированных атомов и молекул под действием двух когерентных рамановских импульсов резонансного лазерного излучения и в периодическом усилении одного из импульсов и ослаблении другого. Результаты работ [21 – 23] указывают на то, что населенность промежуточного уровня с энергией E_u исчезающее мала. Это дает возможность описывать рассматриваемый процесс стимулированной рамановской атомно-молекулярной конверсии как одноступенчатый (единый) процесс. В этом случае можно обобщить гамильтониан взаимодействия H_{int} из [2, 3], описывающий единый процесс индуцированной атомно-молекулярной конверсии, и представить его в виде

$$H_{\text{int}} = \hbar g(\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+\hat{b}\hat{c}_1^+\hat{c}_2 + \hat{a}_1\hat{a}_2\hat{b}^+\hat{c}_1\hat{c}_2^+), \tag{1}$$

где $\hat{a}_1$, $\hat{a}_2$ и $\hat{b}$ – бозонные операторы уничтожения атомных и молекулярных состояний, соответственно, $\hat{c}_1$ и $\hat{c}_2$ – операторы уничтожения фотонов, а g – константа взаимодействия. Используя (1), легко получить систему гайзенберговских уравнений для операторов $\hat{a}_{1,2}$, $\hat{b}$, $\hat{c}_{1,2}$. Усредняя эту систему уравнений и используя приближение среднего поля (mean field approximation) [2, 3], можно получить систему нелинейных уравнений для амплитуд (параметров порядка) материального, $\langle\hat{a}_{1,2}\rangle = a_{1,2}$, $\langle\hat{b}\rangle = b$, и электромагнитного, $\langle\hat{c}_{1,2}\rangle = c_{1,2}$ полей:

$$\begin{gathered} i\dot{a}_k = \omega_{0k}a_k + ga_{3-k}^*bc_k^*c_{3-k}, \\ i\dot{b} = \Omega_0 b + ga_1a_2c_1c_2^*, \\ i\dot{c}_k = \omega_k c_k + ga_k^*a_{3-k}^*bc_{3-k} \quad (k=1,2). \end{gathered} \tag{2}$$

Вводя в рассмотрение плотности частиц $n_{1,2} = |a_{1,2}|^2$, $N = |b|^2$, $f_{1,2} = |c_{1,2}|^2$ и соответствующие им фазы

$$a_k = \sqrt{n_k}e^{i\varphi_k},\ b = \sqrt{N}e^{i\psi},\ c_k = \sqrt{f_k}e^{i\psi_k}\ (k=1,2), \tag{3}$$

из (2) легко получить четыре независимых интеграла движения для плотностей частиц:

$$\begin{gathered} n_1 + N = n_{10} + N_0, \quad n_2 + N = n_{20} + N_0, \\ f_1 + N = f_{10} + N_0, \quad f_2 - N = f_{20} - N_0 \end{gathered} \tag{4}$$

и свести всю систему уравнений (2) к одному нелинейному дифференциальному уравнению для плотности молекул N:

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= \pm 2g\{N(N_0+n_{10}-N)\times \\ &\times(N_0+n_{20}-N)(N_0+f_{10}-N)(N-N_0+f_{20})- \\ &-\left[\frac{\Delta}{2g}(N-N_0)+\sqrt{N_0n_{10}n_{20}f_{10}f_{20}}\cos\theta_0\right]^2\Big\}^{1/2}, \end{aligned} \tag{5}$$

где N_0, n_{10}, n_{20}, f_{10}, f_{20} и ψ_0, φ_{10}, φ_{20}, ψ_{10}, ψ_{20} – начальные плотности частиц и соответствующие им начальные фазы, $\theta_0 = \psi_0 + \psi_{20} - \psi_{10} - \varphi_{10} - \varphi_{20}$ – начальная разность фаз, $\Delta = \omega_{01} + \omega_{02} - \Omega + \omega_1 - \omega_2$ – расстройка резонанса. Общее решение уравнения (5) формально можно представить в квадратурах в виде обобщенного, гиперэллиптического интеграла, который не выражается через известные функции. Поэтому дальнейшее рассмотрение можно провести с использованием численных методов. Из (5) видно, что особенности динамики системы существенно определяются начальными плотностями частиц, начальной разностью фаз и расстройкой резонанса. Изучим далее особенности эволюции системы только для случая точного резонанса, полагая в (5) $\Delta = 0$. Тогда легко видеть, что если начальная плотность хотя бы одной из компонент равна нулю, то эволюция системы не зависит от начальной разности фаз. Кроме того, система не эволюционирует, если одновременно две какие-либо из начальных плотностей частиц равны нулю.

Рассмотрим особенности эволюции сначала при начальной разности фаз $\theta_0 = \pi/2$. Из (5) следует, что в этом случае возможна как периодическая, так и апериодическая эволюция системы в зависимости от соотношений между начальными плотностями частиц. В общем случае, если $N_0 \neq f_{20}$ и $n_{10} \neq n_{20} \neq f_{10}$, то эволюция системы является периодической и период колебаний существенно определяется начальными плотностями.

Представим основные результаты сначала для случая $f_{20} > N_0$. Период колебаний T определяется выражением

$$T = \frac{1}{2g}\int\limits_0^{N_0+n_m}\frac{1}{\sqrt{N(N_0+n_{10}-N)(N_0+n_{20}-N)}}\times$$

$$\frac{1}{\sqrt{(N_0+f_{10}-N)(N-N_0+f_{20})}}dN, \qquad (6)$$

где

$$n_m = \min(n_{10}, n_{20}, f_{10}), \qquad (7)$$

то есть n_m наименьшая из трех начальных плотностей, содержащихся в скобках под знаком функции min. При этом амплитуда колебаний A равна $A = N_0 + n_m$.

Таким образом, при любом изменении отношения между начальными плотностями n_{10}, n_{20} и f_{10} наименьшая из них определяет амплитуду колебаний. Если же окажется, что наименьшая из трех плотностей (например, n_{10}) равна средней из них (например, n_{20}), то есть они упорядочены так, что $n_{10} = n_{20} < f_{10}$, то период колебаний T обращается в бесконечность (рис.2). Это означает, что при

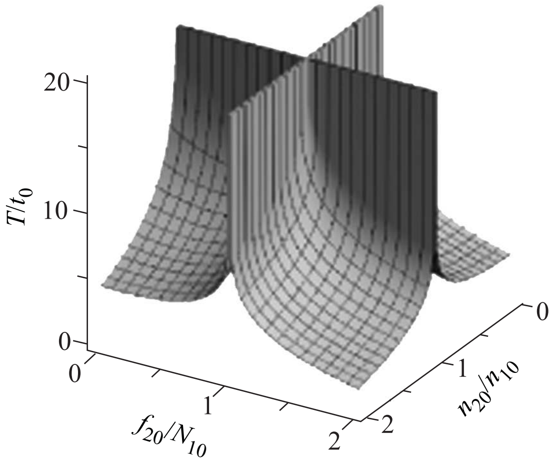

Рис.2. Зависимость периода колебаний плотности молекул от параметров f_{20}/N_0 и n_{10}/n_{20} при $f_{10}/N_0 = 80$, $n_{10}/N_0 = 2$

приближении n_{10} к n_{20} период колебаний монотонно растет и периодический режим эволюции трансформируется в апериодический (рис.2, 3). При этом само направление апериодического изменения функции $N(t)$ определяется знаком производной в начальный момент времени $dN/dt|_{t=0} \equiv \dot{N}_0$. Если $\dot{N}_0 > 0$, то плотность молекул монотонно растет, асимптотически приближаясь к значению $N_0 + n_m$. Если же $\dot{N}_0 < 0$, то вначале плотность молекул $N(t)$ монотонно убывает, в некоторый момент времени обращается в нуль, затем монотонно растет, асимптотически стремясь к величине $N_0 + n_m$. Таким образом, при $n_{10} = n_{20}$ вне зависимости от знака $\dot{N}_0$ функция $N(t)$ на больших временах асимптотически стремится к предельному значению $N_0 + n_m$. Это обусловлено тем, что процесс превращения атомов в молекулы индуцируется как фотонами обоих импульсов, так и самими атомами. Иными словами, скорость изменения плотности молекул определяется начальными плотностями частиц. В случае, если $n_{10} = n_{20}$, то по мере превращения атомов в молекулы плотность атомов уменьшается, процесс индуцирования реакции ухудшается и прекращает действовать при $n_{10} = n_{20}$, когда все атомы превращаются в молекулы. Обратный процесс, то есть распад молекулы на атомы, не идет, так как атомов уже нет и процесс индуцирования атомами отсутствует. Если же $n_{10} \neq n_{20}$, то при полном превращении атомов первого сорта в молекулы процесс остается индуцируемым атомами за счет оставшихся $n_{20} - n_{10}$ атомов второго сорта, как это следует из (2).

Из рис.2 и 3 видно, что при $n_{10} \neq n_{20}$имеет место осциллирующий режим атомно-молекулярной конверсии. При этом амплитуда колебаний и плотности молекул монотонно растет от нуля до $N_0 + n_{10}$ с ростом отношения n_{10}/n_{20} от нуля до единицы и сохраняется равной $N_0 + n_{10}$ при $n_{10}/n_{20} > 1$ (рис.3). Это обстоятельство не зависит от направления начального изменения плотности молекул (рис.3).

Если имеет место соотношение $n_{10} < n_{20} = f_{10}$, то реакция по-прежнему является периодической, причем амплитуда колебаний A по-прежнему равна $N_0 + n_m$. При этом период колебаний плотности молекул изменяется непрерывно при изменении f_{10} в области $f_{10} \geq n_{20}$.

Отметим, что при прочих равных условиях решения уравнения (5) со знаками (+) и (−) отличаются друг от друга постоянной фазой, определяемой начальными плотностями частиц.

Пусть теперь $f_{20} = N_0$. В этом случае имеет место только апериодический режим эволюции при любом соотношении между n_{10}, n_{20} и f_{10} и период колебаний обращается в бесконечность (рис.2). Если $n_{10} < n_{20} \leq f_{10}$, то решение со знаком (+) сначала монотонно растет, в некоторый момент времени достигает максимально возможного значения $N_0 + n_{10}$, затем монотонно убывает до нуля, тогда как решение со знаком (−) монотонно убывает от N_0 до нуля. Следовательно, оба решения обращаются в нуль на больших временах, то есть все исходные молекулы диссоциируют на атомы. Если же $n_{10} = n_{20} \leq f_{10}$, то эволюция по-прежнему апериодическая, но решение со знаком (+) монотонно растет от N_0 до $N_0 + n_{10}$, а решение со знаком (−) монотонно убывает от N_0 до нуля. Таким образом, в зависимости от направления начальной скорости изменения плотности молекул в этом случае возможны либо полная диссоциация исходных молекул либо полное связывание всех исходных атомов в молекулы.

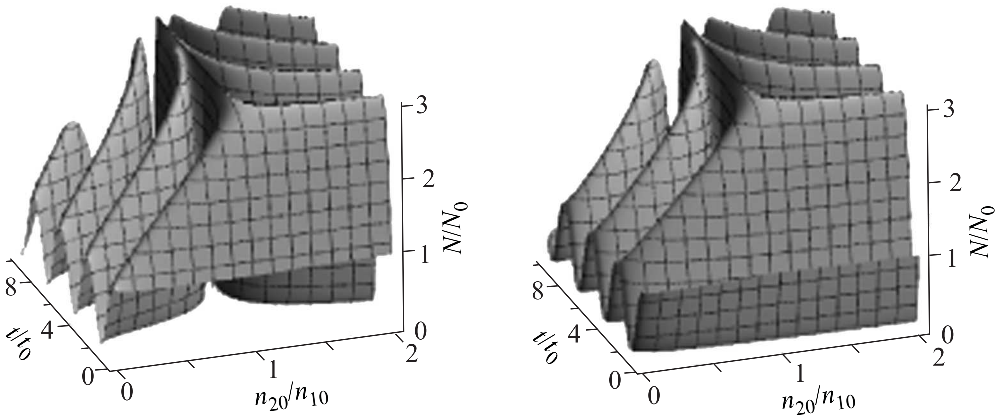

Рис.3. Временная эволюция нормированной плотности молекул N/N_0 в зависимости от значений параметра n_{20}/n_{10} при $f_{10}/N_0 = f_{20}/N_0 = 50$, $n_{10}/N_0 = 2$, для решений со знаком (+) и (−), соответственно

Рассмотрим, наконец, случай $f_{20} < N_0$. Период колебаний T в этом случае определяется выражением

$$T = \frac{1}{2g}\int\limits_{N_0-f_{20}}^{N_0+n_m} \frac{1}{\sqrt{N(N_0+n_{10}-N)(N_0+n_{20}-N)}}\times$$

$$\times\frac{1}{\sqrt{(N_0+f_{10}-N)(N-N_0+f_{20})}}dN, \qquad (8)$$

где n_m выражается формулой (7), а амплитуда A колебаний теперь равна $A = n_m + f_{20}$.

При $n_{10} < n_{20} \leq f_{10}$ эволюция системы является периодической. Плотность молекул периодически изменяется от $N_0 - f_{20}$ до $N_0 + n_{10}$ с амплитудой $n_{10} + f_{20}$. Период колебаний монотонно растет с ростом n_{10} и при $n_{10} = n_{20}$ он обращается в бесконечность. При $n_{10} > n_{20}$ эволюция системы снова становится периодической, плотность молекул осциллирует с амплитудой $n_{20} + f_{20}$, а период убывает с ростом n_{10} (рис.2). Если же $n_{10} = n_{20}$, то эволюция является апериодической. При этом решение со знаком (+) монотонно растет от N_0, асимптотически приближаясь к значению $N_0 + n_{10}$. Решение со знаком (−) сначала монотонно убывает от N_0, в некоторый момент времени достигает минимальной плотности $N_0 - f_{20}$, затем монотонно растет, асимптотически стремясь к значению $N_0 + n_{10}$.

Пусть теперь $\theta_0 = 0$. В этом случае полностью отсутствуют апериодические режимы эволюции системы, которые имеют место при $\theta_0 = \pi/2$. Однако при $1/N_0 + 1/f_{20} = 1/n_{10} + 1/n_{20} + 1/f_{10}$ возникает новый режим – покой – при отличных от нуля плотностях всех частиц. В этом случае полная энергия эквивалентного нелинейного осциллятора точно равна его минимальной потенциальной энергии при $N = N_0 \neq 0$. Кроме того, совпадают решения со знаками (+) и (−) в (5), так как в начальный момент значение $N = N_0$ располагается только на одном из скатов графика потенциальной энергии.

На рис.4 представлена временная эволюция плотности молекул для случая $\theta_0 = 0$. Видно, что с ростом параметра f_{20}/N_0 амплитуда колебаний сначала монотонно убывает, достигает нуля, а затем растет. Что касается периода колебаний, то он монотонно убывает с ростом параметра f_{20}/N_0.

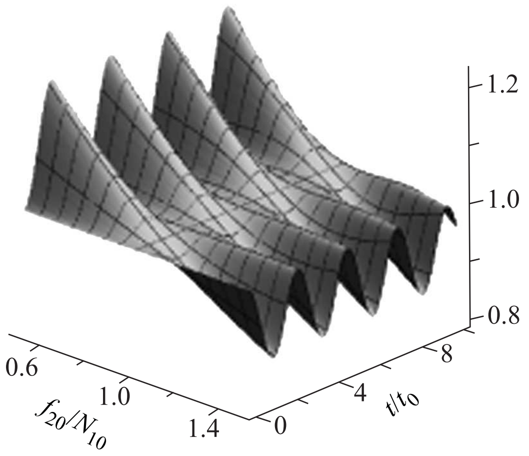

Рис.4. Временна́я эволюция плотности молекул N/N_0 в зависимости от параметра f_{20}/N_0 при $f_{10}/N_0 = 3$, $n_{10}/N_0 = n_{20}/N_0 = 50$

Наконец, приведем результаты расчета динамики системы в зависимости от начальной разности фаз θ_0 при фиксированных начальных плотностях частиц путем численного интегрирования уравнения (5). Из рис.5 видно, что имеет место периодический режим эволюции системы в зависимости от начальной раз-

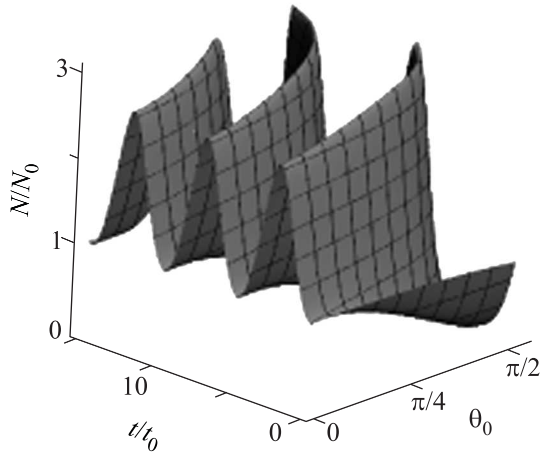

Рис.5. Временная эволюция плотности молекул N/N_0 в зависимости от начальной разности фаз θ_0 при $f_{10}/N_0 = 2$, $f_{20}/N_0 = 1.1$, $n_{10}/N_0 = n_{20}/N_0 = 50$

ности фаз, где период и амплитуда колебаний также зависят от этой величины.

Таким образом, видно, что динамика атомно-молекулярной конверсии существенно определяется не только начальными плотностями частиц, но также и начальной разностью фаз θ_0, что делает возможным фазовый контроль процесса.

В заключение приведем оценку периода колебаний плотности частиц. Сравнивая гамильтониан (1) с гамильтонианом (2) из [24], можно получить соотношение $g = \chi/\hbar\sqrt{f_{10}f_{20}}$, где константа χ из [24] равна $8 \cdot 10^{-7}$ м$^{3/2}$·с$^{-1}$. Полагая плотности частиц порядка 10^{14} см$^{-3}$, для периода колебаний получаем величину порядка 10^{-3}–10^{-4} с.

1. *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications*, Eds. R. V. Krems, W. C. Stwalley, and B. Friedrich, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton, London, New York, 2009.
2. П. И. Хаджи, Д. В. Ткаченко, Письма в ЖЭТФ **83**, 120 (2006); ЖЭТФ **131**, 425 (2007).
3. P. I. Khadzhi and D. V. Tkachenko, J of Nanoelectronics and Optoelectronics **4**, 101 (2009).
4. H. Jing, Y. Deng, and W. Zhang, Phys. Rev. A **80**, 025601 (2009).
5. C. A. Regal, G. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin, Nature **424**, 47 (2003).
6. K. E. Strecker, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **91**, 080406 (2003).
7. J. Herbig, T. Kraemer, M. Mark et al., Science **301**, 1510 (2003).
8. K. B. Devis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
9. Ph. Courteile, R. S. Freeland, D. J. Heinzen et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 69 (1998).
10. A.-C. Voigt, M. Taglieber, L. Costa et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 020405 (2009).
11. C. A. Stan, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 143001 (2004).
12. K.-A. B. Soderberg, N. Gemelke, and C. Chin, New J. Phys. **11**, 055022 (2009).
13. C. Haimberger, J. Kleinert, M. Bhattacharya, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. A **70**, 021402(R) (2004).
14. J. M. Sage, S. Sainis, T. Bergeman, and D. De Mille. Phys. Rev. Lett. **94**, 203001 (2005).
15. J. T. Kim, D. Wang, E. E. Eyler et al., New J. Phys. **11**, 055020 (2009).
16. S. Ospelkaus, A. Pe'er, K.-K. Ni et al., Nature Phys. **4**, 622 (2008).
17. K. Aikawa, D. Akamatsu, J. Kobayashi et al., New J. Phys. **11**, 055035 (2009).
18. C. Chin, T. Kraemer, M. Mark et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 123201 (2005).
19. M. Taglieber, A.-C. Voight, T. Aoki et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 010401 (2008).
20. K. M. Jones, E. Tiesinga, P. D. Lett, and P. S. Julienne, Rev. Mod. Phys. **78**, 483 (2006).
21. M. Koštrun, M. Mackie, R. Cote, and J. Javanainen, Phys. Rev. A **62**, 063616 (2000).
22. L.-H. Lu and Y.-Q. Li, Phys. Rev. A **77**, 053611 (2008).
23. H. Pu, P. Maenner, W. Zhang, and H. Y. Ling, Phys. Rev. Lett. **98**, 050406 (2007).
24. D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond, K. V. Kheruntsyan, Phys. Rev. Lett. **84**, 5029 (2000).