

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПАКЕТОВ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ

В. Л. Дербов¹, Н. И. Тепер²¹*Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,
83, ул. Астраханская, Саратов, 410026, Россия*²*Саратовский государственный социально-экономический университет,
89, ул. Радищева, Саратов, 410003, Россия
E-mail: teper@rambler.ru*

Представлены результаты численного моделирования лазерного возбуждения ридберговских состояний с целью формирования локализованных волновых пакетов. Рассмотрено действие на атом линейно и циркулярно поляризованного поля с различной зависимостью огибающей от времени. Проанализированы форма и свойства результирующего пакета, составленного из собственных состояний с низким значением орбитального и магнитного квантовых чисел. Полученные результаты согласуются с результатами других авторов. Ил. 3. Библиогр.: 14 назв.

Ключевые слова: водородоподобный атом, ридберговские состояния, волновой пакет, лазерное возбуждение, когерентное состояние, ионизация.

Когерентное состояние электрона в атоме водорода представляет собой волновой пакет, для которого произведение неопределенностей координаты и импульса имеет минимальное значение, движущийся вдоль классической кеплеровской орбиты на большом удалении от ядра. Согласно принципу соответствия, такое состояние является классическим пределом атома. Динамика такого волнового пакета обнаруживает и классические, и квантовые свойства. Хорошим приближением для такого пакета является суперпозиция собственных состояний невозмущенного атома водорода с большими значениями главного квантового числа. При таком условии одноэлектронные высоковозбужденные состояния более сложных атомов (ридберговские состояния) почти не отличаются от состояний водородоподобного атома.

Долгоживущие волновые пакеты, локализованные по трем изменениям, могут быть использованы для решения различных научных задач: изучения принципа для атома в классическом пределе; получение атомов в состояниях, устойчивых к ионизации сильными электромагнитными полями [1], а также в состояниях с большим дипольным моментом. Результаты изучения динамики таких пакетов могут служить для установления связей между орбитами классически хаотических систем и движением квантового волнового пакета, для исследования орбит многоэлектронных волновых пакетов в сложных атомах [2], сжатия электромагнитного поля в резонаторе [3], управления поведением ридберговского электрона [4].

В настоящее время разработано несколько способов экспериментального получения ридберговских пакетов в атомах, им посвящено также значительное число теоретических работ [5]. Технология их получения включает, как правило,

два последовательных этапа. На первом этапе формируется так называемое циркулярное состояние – ридберговское состояние с максимальным значением орбитального момента и его проекции. Переход из основного состояния в циркулярное обеспечивается лазерным возбуждением, при этом предварительно низкочастотное или постоянное электрическое поле применяется, чтобы «одеть» атом, затем лазер настраивается точно к определенному «одетому» состоянию, которое эволюционирует в циркулярное состояние, если «одевающее» поле отключается адиабатически [6-7]. Более эффективным для этой цели является метод скрещенных полей [8]. В результате заселяется ридберговское состояние с $|m| = n - 1$. В таком состоянии пространственное распределение электронной плотности имеет вид кольца, при этом отсутствует локализация по азимутальному углу. На следующем этапе короткий сильный электрический или электромагнитный импульс используется для формирования суперпозиции циркулярных состояний [2]. Подобная методика позволяет создавать волновые пакеты, движущиеся вдоль эллиптических орбит с различным эксцентриситетом [9]. Радиально локализованный волновой пакет может быть получен путем возбуждения атома с переходом в ридберговские состояния коротким оптическим импульсом [10-13].

Нами проведено численное моделирование возбуждения атома водорода из основного состояния в ридберговские при помощи стационарного или импульсного лазерного излучения с линейной и круговой поляризацией. Рассчитана временная динамика заселенностей ридберговских состояний. Результаты носят предварительный характер, поскольку в модели не учтены переходы в непрерывный спектр и процессы релаксации.

1. Возбуждение ридберговских состояний стационарным линейно поляризованным полем. Как указывалось выше, частично локализованный волновой пакет может быть сформирован путем когерентного возбуждения атомов из основного состояния в ридберговские коротким оптическим импульсом [10-13]. Поскольку при дипольных переходах справедливо правило отбора $\Delta L = \pm 1$, такой пакет неизбежно представляет собой суперпозицию ридберговских состояний с низкими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел. Как показано в работах [10-13], он локализован по радиальной переменной и совершает осцилляции между классическими поворотными точками. Для моделирования динамики формирования подобных пакетов под действием лазерного поля используем численное решение уравнений для амплитуд вероятности заселения соответствующих ридберговских состояний.

Конечное состояние атома представим в виде суперпозиции стационарных состояний

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{nlm} C_{nlm}(t) \psi_{nlm} \exp(-i\omega_n t) = \\ &= \sum_{nlm} C_{nlm}(t) \psi_{nlm} \exp(it/2n^2), \end{aligned} \quad (1)$$

где ω_n - энергия возбужденного уровня в единицах частоты; ψ_{nlm} - собственные функции атома водорода. Всюду используются атомные единицы.

Уравнения для амплитуд C_{nlm} вероятности заселения состояний получаются путем стандартного перехода к матричной форме в нестационарном уравнении Шредингера и имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} C_{nlm}(t) &= -i \sum_k C_{n'l'm'}(t) \times \\ &\times \langle \psi_{n'l'm'} | V | \psi_{nlm} \rangle e^{-i(\omega_n - \omega_n) t} \end{aligned} \quad (2)$$

В дипольном приближении

$$V = -e\vec{E}(t) \cdot \vec{r}, \quad (3)$$

где \vec{E} - вектор напряженности электрического поля; e - заряд электрона, \vec{r} - его радиус-вектор. Для применимости дипольного приближения требуется малость размеров атома по сравнению с длиной волны излучения. Для ридберговских состояний это условие может нарушаться, поэтому применимость дипольного приближения требует отдельного анализа. Считая, что поле \vec{E} не зависит от координат и линейно поляризовано вдоль оси z , ненулевые матричные элементы возмущения можно представить в виде [14]

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n'l'm'} | V | \psi_{nlm} \rangle &= -eE \langle \psi_{n'l'm'} | z | \psi_{nlm} \rangle = \\ &= -eE z_{nlm}^{n'l+1m}, \\ z_{nlm}^{n'l+1m} &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(l+3)(l+1)}} R_{nl}^{n'l+1}, \end{aligned} \quad (4)$$

причем для переходов из основного состояния водорода $R_{n'l}^{n'l+1} \equiv R_{10}^{n'l}$ имеет простое выражение [14]

$$R_{10}^{n'l} = \frac{2^8 n^7 (l-1)^{2n-5}}{(l+1)^{2n+5}}.$$

Рассмотрим монохроматическое поле

$$E = E_0 \cos \omega t. \quad (5)$$

Уравнения (2) решались численно. Динамика заселенностей энергетических уровней $|C_{nlm}|^2$ под действием линейно поляризованного монохроматического поля представлена на рис. 1.

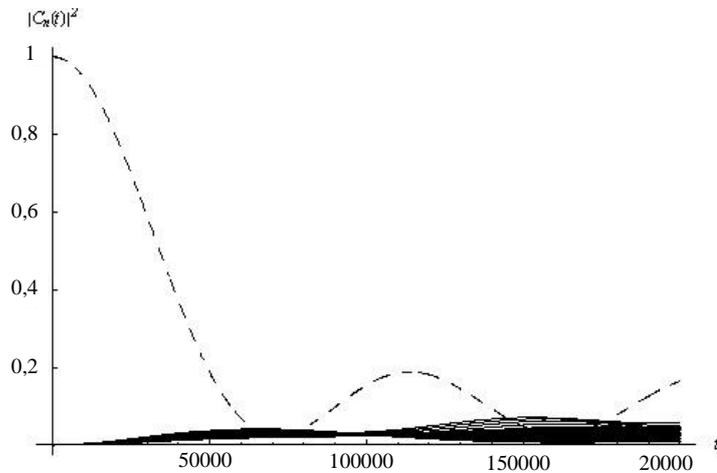


Рис. 1. Динамика заселенностей ридберговских состояний под действием линейно поляризованного стационарного электромагнитного поля. Заселенность основного состояния выделена прерывистой линией

Амплитуда поля E_0 равна 0,005 а. е. Частота поля ω бралась равной частоте перехода из основного состояния в состояние с $n = 84$. В момент включения поля атомы находятся в основном состоянии с $n = 1, l = 0, m = 0$. По правилам отбора во взаимодействии могут участвовать состояния с любыми n ; практические расчеты показали, что для достижения графической точности достаточно включить в уравнения (2) состояния с $n = 69 \div 99, l = 1, m = 0$. Расчет приводит к осцилляциям заселенностей, напоминающим осцилляции Раби в двухуровневой системе (рис. 1). После завершения переходного процесса эти осцилляции приобретают стационарный характер. Одновременно возбуждается значительное число ридберговских состояний.

Заметим, что наибольшее число атомов (примерно 4%) переходит не в ближайшее к резонансу состояние с $n = 84$, как можно было бы ожидать, а в состояние с $n = 74$ и соседние с ним состояния с $n = 73$ (3,87%) и с $n = 75$ (3,88%). Это можно объяснить большими значениями матричных элементов дипольного момента для указанных переходов. Полученные результаты имеют смысл на отрезках времени, малых по сравнению с типичными временами релаксации в системе, например, радиационным временем жизни в очень разреженном газе или столкновительным временем жизни в газе при умеренных давлениях.

2. Возбуждение ридберговских состояний импульсом с круговой поляризацией. Рассмотрим возбуждение атома коротким лазерным импульсом гауссовой формы:

$$E_0 = E_0(t) = A \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{b^2}\right), \quad (7)$$

где A – максимальное значение поля; b – ширина импульса; t_0 – его центр.

Пусть теперь поле имеет круговую поляризацию, тогда при возбуждении атома магнитное квантовое число увеличивается на единицу для правой и уменьшается для левой поляризации. Рассмотрим случай правой поляризации, когда разрешены переходы из основного состояния с $n = 1, l = 0, m = 0$ в состояния с любым $n, l = 1, m = 1$. В численном расчете брались значения $n = 69 \div 99$.

При круговой поляризации необходимые ненулевые матричные элементы координат определяются выражением [14]

$$\langle l+1, m+1 | y | l, m \rangle = \sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(l+3)(l+1)}} R_{nl}^{n'l'+1}.$$

Проведенные расчеты позволили подобрать такие параметры импульса, при которых происходит почти полное опустошение основного состояния, и практически все атомы переходят в ридберговские состояния. Пример такой ситуации при $A = 0,16$ а. е., $b = 800000$ а. е. показан на рис. 2. После окончания действия импульса в каждом из 31 учитываемых возбужденных состояний находится от 2 до 5% общего числа атомов.

С помощью выражения (1) и рассчитанных коэффициентов C_n построим распределение плотности вероятности в пространстве. На рис. 3 такое распределение изображено в плоскости $z = 0$ при $t = 2100$ а. е. Видна локализация электрона по радиальной переменной и отсутствие локализации по азимутальному углу.

Выводы. Сформировавшийся в результате действия поля волновой пакет достаточно хорошо локализован по радиальной переменной и практически не локализован по угловой.

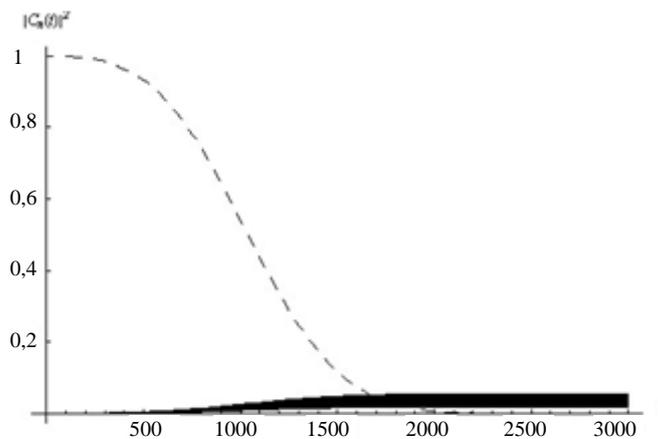


Рис. 2. Динамика заселенностей ридберговских состояний под действием циркулярно поляризованного импульса электромагнитного поля. Заселенность основного состояния выделена прерывистой линией

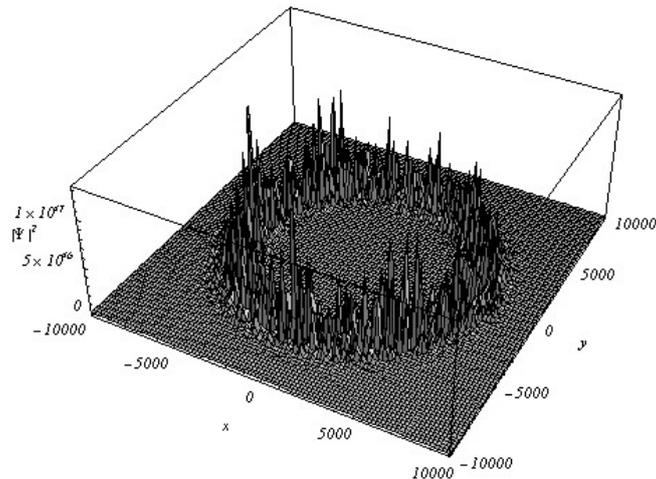


Рис. 3. Распределение плотности вероятности волнового пакета, сформированного импульсом с круговой поляризацией

Это объясняется низким значением орбитального и магнитного квантовых чисел у возбуждаемых по рассматриваемой схеме собственных состояний, входящих в суперпозицию. Для хорошей локализации волнового пакета в пространстве необходимо, чтобы значения квантовых чисел во всех степенях свободы были максимально большими.

Необходимо отметить предварительный характер проведенных расчетов. В их основе лежит ряд достаточно грубых допущений, отказ от которых будет частью наших дальнейших исследований. Наиболее важным является включение в расчет непрерывного спектра атома. Предварительные оценки показали, что в континуум при рассмотренных условиях могут переходить десятки процентов общего числа атомов. Учет релаксационных процессов позволит корректно рассматривать действие стационарных полей и длинных импульсов. Представляет интерес также рассчитать динамику заселенностей при модуляции поля с частотой, близкой к частоте классического движения по кеплеровской орбите. В этих условиях можно рассчитывать на азимутальную локализацию пакета.

Работа выполнена в рамках Аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 гг.)», код проекта РНП.2.1.1.4473 «Мезооптика».

1. *De Boer M. P., Hoogenraad J. H., Vrijen R. B. et al.* Indications of high-intensity adiabatic stabilization in neon // *Phys. Rev. Lett.* - 1993. - **71**, N20. - P.3263-3266.
2. *Gaeta Z. D., Noel M. W. and Stroud C. R.* Excitation of the classical-limit state of an atom // *Phys. Rev. Lett.* - 1994. - **73**, N5. - P.636-639.
3. *Kochanski P., Bialynicka-Birula Z. and Bialynicki-Birula I.* Squeezing of electromagnetic field in a cavity by electrons in Trojan state // *Phys. Rev. A.* - 2001. - **63**, N1 - P.013811.

4. *Shapiro E. A., Kalinski M. and Eberly J. H.* Non-circular Trojan-like wavepackets: quantum theory and application to quantum control // *J. Phys. B.* - 2000. - **33**, - P.3079-3091.
5. *Gaeta Z. D. and Stroud C. R.* Classical and quantum-mechanical dynamics of quasiclassical state of the hydrogen atom // *Phys. Rev. A.* - 1990. - **42**, N11. - P.6308-6313.
6. *Hulet G. and Kleppner D.* Rydberg atom in "circular" states // *Phys. Rev. Lett.* - 1983. - **51**, N16. - P.1430-1433.
7. *Cheng C. H., Lee C. Y. and Gallagher T. F.* Production of circular Rydberg states with circularly polarized microwave fields // *Phys. Rev. Lett.* - 1994. - **73**, N23. - P.3078-3081.
8. *Hare J., Gross M. and Goy P.* Circular Atoms Prepared by a New Method of Crossed Electric and Magnetic Fields // *Phys. Rev. Lett.* - 1988. - **61**, N17. - P.1938-1941.
9. *Bromage J. and Stroud C. R.* Excitation of a Three-Dimensionally Localized Atomic Electron Wave Packet // *Phys. Rev. Lett.* - 1999. - **83**, N24. - P.4963-4966.
10. *Alber G., Ritsch H. and Zoller P.* Generation and detection of Rydberg wave packets by short laser pulses // *Phys. Rev. A.* - 1986. - **34**, N2. - P.1058-1064.
11. *Parker J. and Strong C. R.* Coherence and Decay of Rydberg Wave Packets // *Phys. Rev. Lett.* - 1986. - **56**, N7. - P.716-719.
12. *Wolde A. and et al.* Observation of Radially Localized Atomic Electron Wave Packets // *Phys. Rev. Lett.* - 1988. - **61**, N18. - P.2099-2101.
13. *Noordam L. D., Duncan D. I. and Gallagher T. F.* Ramsey fringes in atomic Rydberg wave packets // *Phys. Rev. A.* - 1992. - **45**, N7. - P.4734-4737.
14. *Бете Г., Солнцев Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. - М.: Физматгиз, 1960. - 652 с.

RESEARCH OF THE LOCALIZED WAVE PACKETS OF RYDBERG ATOMS

V. L. Derbov, N. I. Teper

We present the results of numerical modeling of rydberg states laser excitation for localized wave packets forming. The action of linear and circularly polarized fields on atom was considered for different shape of pulse envelope. The form and properties of obtained packet, constructed from eigenstates with low values of orbital and magnetic quantum numbers, were analyzed. Takes place well agreements between our results and the results obtained other authors.

Key words: hydrogen-like atom, rydberg conditions, wave packet, laser stimulation, coherent condition, ionization.

ДОСЛІДЖЕННЯ ЛОКАЛІЗОВАНИХ ПАКЕТІВ РІДБЕРГІВСЬКИХ АТОМІВ

В. Л. Дербов, Н. І. Тепер

Подано результати чисельного моделювання лазерного збудження рідбергівських станів з ціллю формування локалізованих пакетів. Розглянута дія на атом лінійно і циркулярно поляризованого поля з різною залежністю обвідної від

часу. Проаналізовані форма і властивості результуючого пакету, який складено із власних станів з низьким значенням орбітального та магнітного квантових чисел. Отримані результати узгоджуються з результатами інших авторів.

Ключові слова: воднеподібний атом, рідбергівський стан, хвильовий пакет, лазерне збудження, когерентний стан, іонізація.

Рукопись поступила 17 января 2007 г.