

序列脉冲激光作用下双能级系统的移位

谭维翰 栾绍金

(中国科学院上海光机所)

提要: 本文采取旋波近似,分析了序列脉冲激光作用下的双能级系统。通过解析与数值计算,给出了能态的稳定区图、波函数和能级移位。

Energy level shift in two-level systems induced by a laser pulse train

Tan Weihan, Luan Shaojin

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

Abstract: Two-level systems under the action of a laser pulse train are studied by rotating-wave approximation. By analytical and numerical calculations, stable region diagram of the energy state, wave functions and energy level shift are obtained.

一、引 言

在光场的作用下,原子和分子系统的能级会发生微小的移位。在半经典理论中,这种现象被称为交流 Stark 效应。文献[1~3]对连续外场作用下能级移位进行了研究。激光技术的进展,已经能够进行能级移位的精密测量。实验表明:当激光场较弱时,普通微扰论所得出的结果与实验相符^[4],但是当激光场较强时能级移位和光强的关系比二阶微扰论所预言的线性关系偏差很大^[5]。

在分析激光与原子或分子体系相互作用时,常常采用双能级系统作为物理模型^[6,7],许多文献分析了连续单色光场作用下的双能级系统,给出了近似解析解^[8,9]和数值解^[10,11]。

由于微微秒脉冲技术的进展,使得有条

件进行研究在序列脉冲激光作用下原子的能级移位。它与连续单色光场作用的移位相比有很大的差异,并表现出固体能带结构的特点。

二、旋波近似解

W. R. Salzman 通过数值计算总结出一个公式^[10],可以证明这个公式就是旋波近似的结果。根据文献[6],双能级原子的波函数可以写为:

$$\psi(r, t) = c_1(t)\psi_1^0(r, t) + c_2(t)\psi_2^0(r, t) \quad (1)$$

其中 $\psi_1^0(r, t)$ 和 $\psi_2^0(r, t)$ 为不存在外场时电子处于下、上能级的波函数。在恒定振幅的单色光

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \cos \omega t$$

收稿日期: 1981年5月15日。

作用下,由 Schrödinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}_0 \psi + \hat{V} \psi \quad (2)$$

可得系数所满足的方程为:

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} c_1 = V_{12} \cos \omega t e^{-i\omega_0 t} c_2 \\ i \frac{\partial}{\partial t} c_2 = V_{12}^* \cos \omega t e^{i\omega_0 t} c_1 \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\omega_0 = (E_2 - E_1)/\hbar$, $V_{12} = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{D}_{12}/\hbar$, \mathbf{D}_{12} 为原子能级间的座标矩阵元。

对方程(3)做旋波近似得:

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} c_1 = \frac{1}{2} V_{12} e^{-i(\omega_0 - \omega)t} c_2 \\ i \frac{\partial}{\partial t} c_2 = \frac{1}{2} V_{12}^* e^{i(\omega_0 - \omega)t} c_1 \end{cases} \quad (4)$$

利用初始条件

$$c_1(0) = 1, c_2(0) = 0 \quad (5)$$

解方程(4)得 ($V_{12}^2 = |V_{12}|^2$):

$$\begin{cases} c_1 = e^{\frac{i}{2}(\omega_0 - \omega)t} \left[\cos \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2} t - \frac{i(\omega_0 - \omega)}{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2}} \times \sin \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2} t \right] \\ c_2 = e^{-\frac{i}{2}(\omega_0 - \omega)t} \frac{V_{12}}{i \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2}} \times \sin \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2} t \end{cases} \quad (6)$$

由(6)式即可得 W. R. Salzman 所总结的公式:

$$\begin{aligned} |c_2(t)|^2 &= \frac{V_{12}^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2} \\ &\times \sin^2 \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + V_{12}^2} t \end{aligned} \quad (7)$$

现在考虑在序列脉冲激光作用下的双能级系统。我们取定入射光振幅调制函数 $F(t)$ 为:

$$F(t) = \exp\{-\alpha^2 \sin^2 \Delta \omega t\} \quad (8)$$

将相互作用哈密顿量表示为

$$V = e \mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{e}_0 F(t) \cos \omega t \quad (9)$$

便得:

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} c_1 = \frac{1}{2} V_{12} F(t) e^{-i(\omega_0 - \omega)t} c_2 \\ i \frac{\partial}{\partial t} c_2 = \frac{1}{2} V_{12}^* F(t) e^{i(\omega_0 - \omega)t} c_1 \end{cases} \quad (10)$$

为了数值计算的方便,我们把方程(10)换成无量纲参数,即作变换:

$$t \rightarrow \omega_0 t, \quad \omega \rightarrow \frac{\omega}{\omega_0}, \quad \Delta \omega \rightarrow \frac{\Delta \omega}{\omega_0}, \quad V_{12} \rightarrow \frac{V_{12}}{\omega_0} \quad (11)$$

于是从方程(10)可以导出:

$$\begin{cases} \left\{ \frac{d^2}{dt^2} + i(1-\omega) \frac{d}{dt} - \frac{d \ln F}{dt} \frac{d}{dt} + \frac{1}{4} V_{12}^2 F^2(t) \right\} c_1(t) = 0 \\ \left\{ \frac{d^2}{dt^2} - i(1-\omega) \frac{d}{dt} - \frac{d \ln F}{dt} \frac{d}{dt} + \frac{1}{4} V_{12}^2 F^2(t) \right\} c_2(t) = 0 \end{cases} \quad (12)$$

我们从方程(12)求解高能态系数 $c_2(t)$ 。

令

$$c_2(t) = G(t) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int \left[-i(1-\omega) - \frac{d \ln F}{dt} \right] dt \right\} \quad (13)$$

则有:

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{d^2}{dt^2} - \frac{1}{4} \left[-i(1-\omega) - \frac{d \ln F}{dt} \right]^2 \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \frac{d^2 \ln F}{dt^2} + \frac{1}{4} V_{12}^2 F^2 \right\} G(t) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

注意到

$$\begin{aligned} F^2(t) &= e^{-\alpha^2} e^{\alpha^2 \cos 2\Delta \omega t} \\ &= e^{-\alpha^2} I_0(\alpha^2) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\alpha^2} I_n(\alpha^2) \cos 2n\Delta \omega t \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $I_n(x)$ 为虚宗量 Bessel 函数,则方程(14)化为 Hill 方程形式^[12]:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2 G}{dz^2} + [\theta_0 + (\theta_1 e^{i2z} + \theta_{-1} e^{-i2z}) \\ &+ (\theta_2 + \theta_{-2}) \cos 4z + (\theta_3 + \theta_{-3}) \cos 6z \\ &+ \dots + (\theta_{+n} + \theta_{-n}) \cos 2nz + \dots] G = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

在方程(16)中:

$$\begin{aligned}
 z &= \Delta\omega t, \\
 \theta_0 &= \frac{1}{4} \left(\frac{V_{12}}{\Delta\omega} \right)^2 e^{-a^2} I_0(a^2) - \frac{1}{8} a^4 \\
 &\quad + \frac{1}{4} \left(\frac{1-\omega}{\Delta\omega} \right)^2 \quad (17) \\
 \theta_1 &= \frac{1}{4} \left(\frac{V_{12}}{\Delta\omega} \right)^2 e^{-a^2} I_1(a^2) - \frac{1}{2} a^2 \\
 &\quad + \frac{1}{4} \left(\frac{1-\omega}{\Delta\omega} \right)^2 a^2 \\
 \theta_{-1} &= \frac{1}{4} \left(\frac{V_{12}}{\Delta\omega} \right)^2 e^{-a^2} I_1(a^2) - \frac{1}{2} a^2 \\
 &\quad - \frac{1}{4} \left(\frac{1-\omega}{\Delta\omega} \right)^2 a^2 \\
 \theta_2 &= \theta_{-2} = \frac{1}{4} \left(\frac{V_{12}}{\Delta\omega} \right)^2 e^{-a^2} I_2(a^2) \\
 &\quad + \frac{1}{16} a^4
 \end{aligned}$$

$$\theta_n = \theta_{-n} = \frac{1}{4} \left(\frac{V_{12}}{\Delta\omega} \right)^2 e^{-a^2} I_n(a^2) \quad (n=3, 4, 5, \dots)$$

Hill 方程(16)具有 Floquet 解:

$$G(z) = e^{i\nu z} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n e^{i2nz} \quad (18)$$

将(18)代入方程(16)得系数之间的联立方程

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} B_{nm} b_m = 0 \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (19)$$

其中:

$$\begin{cases} B_{nn} = 1 \\ B_{nm} = \frac{\theta_{n-m}}{\theta_0 - (\nu + 2n)^2} \quad m \neq n \end{cases} \quad (20)$$

无穷元联立方程(19)有解的充分和必要

条件是 $\text{Det} |B_{nm}| = 0$

把它写开就是:

$$\Delta(\nu) = \begin{vmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 1 & \frac{\theta_1}{\theta_0 - (\nu - 4)^2} & \frac{\theta_2}{\theta_0 - (\nu - 4)^2} & \frac{\theta_3}{\theta_0 - (\nu - 4)^2} & \frac{\theta_4}{\theta_0 - (\nu - 4)^2} & \dots \\ \dots & \frac{\theta_{-1}}{\theta_0 - (\nu - 2)^2} & 1 & \frac{\theta_1}{\theta_0 - (\nu - 2)^2} & \frac{\theta_2}{\theta_0 - (\nu - 2)^2} & \frac{\theta_3}{\theta_0 - (\nu - 2)^2} & \dots \\ \dots & \frac{\theta_{-2}}{\theta_0 - \nu^2} & \frac{\theta_{-1}}{\theta_0 - \nu^2} & 1 & \frac{\theta_1}{\theta_0 - \nu^2} & \frac{\theta_2}{\theta_0 - \nu^2} & \dots \\ \dots & \frac{\theta_{-3}}{\theta_0 - (\nu + 2)^2} & \frac{\theta_{-2}}{\theta_0 - (\nu + 2)^2} & \frac{\theta_{-1}}{\theta_0 - (\nu + 2)^2} & 1 & \frac{\theta_1}{\theta_0 - (\nu + 2)^2} & \dots \\ \dots & \frac{\theta_{-4}}{\theta_0 - (\nu + 4)^2} & \frac{\theta_{-3}}{\theta_0 - (\nu + 4)^2} & \frac{\theta_{-2}}{\theta_0 - (\nu + 4)^2} & \frac{\theta_{-1}}{\theta_0 - (\nu + 4)^2} & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0 \quad (21)$$

方程(21)决定了 Floquet 解的特征指标 ν 。由(21)式可以看出, $\Delta(\nu)$ 是周期为 2 的偶函数, 而且除了 $\nu = \pm\sqrt{\theta_0} - 2n$ ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) 这些点之外绝对而且一致收敛。根据文献[12], $\Delta(\nu)$ 可记为:

$$\Delta(\nu) = 1 + k \left[\text{ctg} \frac{\pi}{2} (\nu - \sqrt{\theta_0}) - \text{ctg} \frac{\pi}{2} (\nu + \sqrt{\theta_0}) \right],$$

令 $\nu=0$, 得 $k = [1 - \Delta(0)] / 2 \text{ctg} \frac{\pi}{2} \sqrt{\theta_0}$, 所以方程(21)给出了决定特征指标的公式:

$$\sin^2 \left(\frac{\nu\pi}{2} \right) = \Delta(0) \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\theta_0}}{2} \pi \right) \quad (22)$$

我们通过数值计算, 给出了 $\Delta(\nu)$ 随 ν 变化的曲线和 $\Delta(0) \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\theta_0}}{2} \pi \right)$ 随参数 $\frac{V_{12}}{\Delta\omega}$ 的变化曲线。 $\Delta(\nu)$ 为无穷行列式, 但实际数值计算只能取有限阶行列式。为了减小用有限阶行列式代替无穷阶行列式的误差, 我们取分母为最小的一行作为中心行。

图 1 为 $\Delta(\nu)$ 随 ν 变化曲线。在 $\nu=16$ 到 $\nu=18$ 这一个周期里, $\Delta(\nu)$ 有两个极点: $\sqrt{\theta_0} = 16.25$ 和 $2 \times 17 - \sqrt{\theta_0} = 17.75$ 。

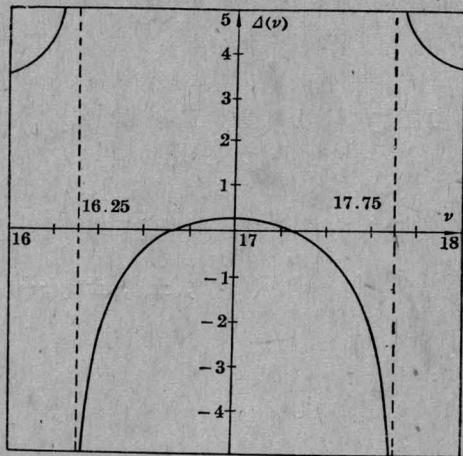


图 1

$a^2=5; \omega=1; V=0.001; \Delta\omega=1.2 \times 10^{-5}; \sqrt{\theta_0}=16.25$

图 2 为 $\Delta(0) \sin^2\left(\frac{\sqrt{\theta_0}}{2}\pi\right)$ 随因子 $\frac{V_{12}}{\Delta\omega}$ 的增大而准周期地变化。在每一个准周期里，其峰顶出现了略大于 1 的部份，谷底出现了略小于 0 的部份。

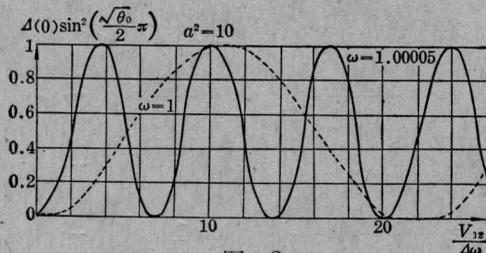


图 2

三、能态的稳定与不稳定

由 (22) 式可知，只有当

$$0 \leq \Delta(0) \sin^2\left(\frac{\sqrt{\theta_0}}{2}\pi\right) \leq 1 \text{ 时，才有}$$

实数的特征指标，否则 ν 为虚数。对应方程 (16) 具有不稳解，这种不稳定是由于序列脉冲的调制作用所引起的。我们通过数值计算，对这种调制不稳定进行了研究。

图 3 给出了共振时在 $\theta_1 - \theta_0$ 平面上的不稳定区图 (图中划线部份为不稳定区，下同)。当 Hill 方程只保留前两项时，即化为 Mathieu 方程。文献 [12] 给出了 Mathieu

方程的不稳定区图，与图 3 比较，可以看出不稳定区发生了很大的畸变。但是当 θ_1 接近于零时，二者的不稳定区结构相符。

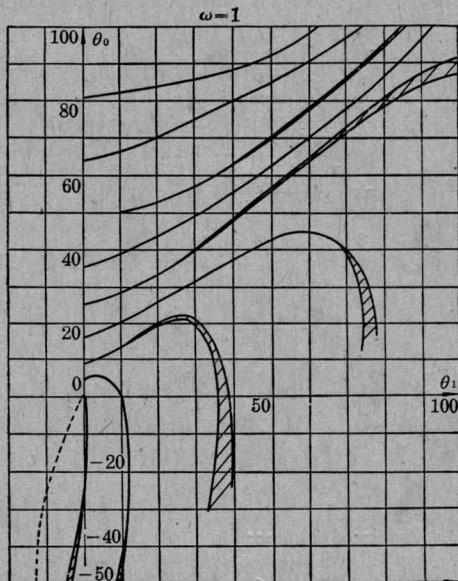


图 3

图 4 给出了共振时在 $a - \frac{V_{12}}{\Delta\omega}$ 平面上的不稳定区图，它与图 3 是根据相同的数据绘制的。由图 4 可以看出，随着脉冲宽度的减小，即随着 a^2 的增大，以及随着参数 $\frac{V}{\Delta\omega}$ 的增大，不稳定带变宽。

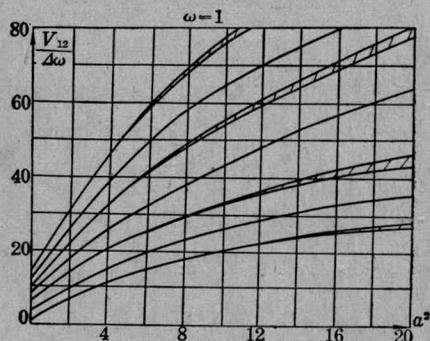


图 4

图 5 为近共振 ($\omega=1.00005$) 时在 $a - \frac{V_{12}}{\Delta\omega}$ 平面上的不稳定区图。与图 4 相比，可以看出不稳带变窄了，随脉宽参数 a^2 增加的

变化也平坦了。

图 6 给出了不稳带随频率的变化曲线。当激光峰值强度 ε_0 、脉宽参数 a^2 及调制频率 $\Delta\omega$ 相同时，不稳带随频率偏离共振而变窄、下降。

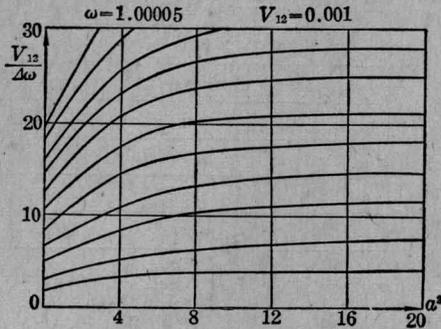


图 5

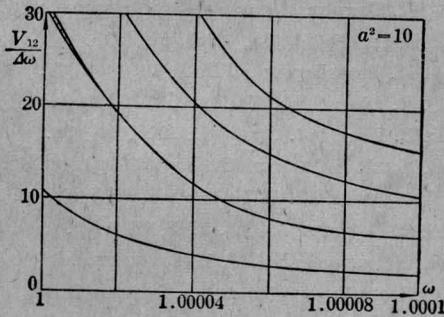


图 6

四、波函数和能级移位

对于稳定区，即当参数 ω 、 $\Delta\omega$ 、 a 、 V 使得条件 $0 \leq \Delta(0) \sin^2\left(\frac{\sqrt{\theta_0}}{2} \pi\right) \leq 1$ 成立时，可由 (22) 式求得特征指标 $\pm\nu$ 。于是可得两个线性无关的特解

$$G_1(z) = e^{i\nu z} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n e^{i2nz} \quad (24)$$

$$G_2(z) = e^{-i\nu z} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b'_n e^{-i2nz} \quad (25)$$

系数 b_n 由方程 (19) 决定。将 $G_2(z)$ 代入方程 (16) 可得

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} B'_{nm} b'_m = 0 \quad (n=0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

$$\text{其中} \quad \begin{cases} B'_{nm} = 1 \\ B'_{nm} = \frac{\theta_{m-n}}{\theta_0 - (\nu + 2n)^2} \end{cases}$$

当 $m-n \neq \pm 1$ 时， $\theta_{m-n} = \theta_{n-m}$ 。当 $m-n = \pm 1$ 时，对于激光频率与原子能级间的跃迁频率共振的情形，即 $\omega = 1$ 时，仍有 $\theta_1 = \theta_{-1}$ 。而在近共振的情形，即 ω 很接近 1 时，有 $\theta_1 \approx \theta_{-1}$ （下列计算实例中 $\frac{\theta_1 - \theta_{-1}}{\theta_1} \approx 3.1\%$ ）。这样便有 $B'_{nm} = B_{nm}$ ， $b'_n = b_n$ 。所以由方程 (16) 的通解

$$G(z) = AG_1(z) + BG_2(z) \quad (26)$$

得

$$\begin{aligned} c_2(t) = & e^{-\frac{i}{2}(\omega - \omega_0)t} e^{-\frac{a^2}{2} \sin^2 \Delta\omega t} \\ & \times \left[A \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n e^{i(2n+\nu)\Delta\omega t} \right. \\ & \left. + B \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n e^{-i(2n+\nu)\Delta\omega t} \right] \quad (27) \end{aligned}$$

待定因子 A 、 B 由初始条件 $c_1(0) = 1$ ， $c_2(0) = 0$ 即

$$c_2(0) = 0, \quad \frac{d}{dt} c_2(0) = -\frac{i}{2} V_{12} \quad (28)$$

确定为

$$A = -B = -\frac{V_{12}}{4 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (2n+\nu) \Delta\omega b_n} \quad (29)$$

我们由 (26) 式来求序列脉冲激光作用下的能级移位。为此令

$$\begin{aligned} & \exp\{R(\Delta\omega t) + i\phi(\Delta\omega t)\} \\ & = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n e^{i2n\Delta\omega t} \quad (30) \end{aligned}$$

因此可以求得

$$\begin{aligned} & R(\Delta\omega t) \\ & = \frac{1}{2} \ln \left[\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} b_n b_l \cos 2(n-l)\Delta\omega t \right] \\ & \phi(\Delta\omega t) \\ & = \text{arc tg} \left[\frac{\sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n \sin 2n\Delta\omega t}{\sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n \cos 2n\Delta\omega t} \right] \quad (31) \end{aligned}$$

所以最后有

$$c_2(t) = 2iA \exp \left\{ -\frac{\alpha^2}{2} \sin^2 \Delta\omega t + R(\Delta\omega t) \right\} \times e^{-\frac{i}{2}(\omega_0 - \omega)t} \sin \left[\int_0^t \left(\nu \Delta\omega + \frac{d\phi}{dt} \right) dt \right] \quad (32)$$

因子 $\exp\{R(\Delta\omega t)\}$ 构成了对调制函数 $F(t)$ 的修正, 而能级移位则由虚数幂因子确定:

$$\frac{\Delta E(t)}{\hbar} = \frac{\omega - \omega_0}{2} \pm \left[\nu \Delta\omega + \frac{d\phi}{dt} \right] \quad (33)$$

其中

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} b_n b_l (2n\Delta\omega) \cos 2(n+l)\Delta\omega t}{\left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n \cos 2n\Delta\omega t \right)^2 + \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} b_n \sin 2n\Delta\omega t \right)^2}$$

我们通过数值计算, 给出了共振 ($\omega=1$) 和近共振时 ($\omega=1.00001$) 电子处于上能级的几率 $|c_2(t)|^2$ (图7)、能级移位随时间的

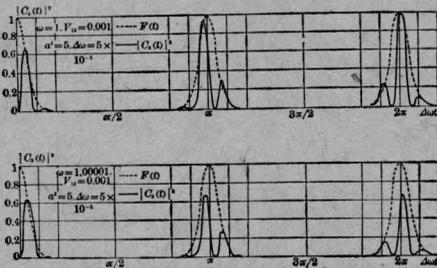


图 7

变化曲线(图8)。图8的能级移位是相对参量 $\left(\delta\omega = \frac{\Delta E(t)}{\hbar\omega_0} \right)$ 。

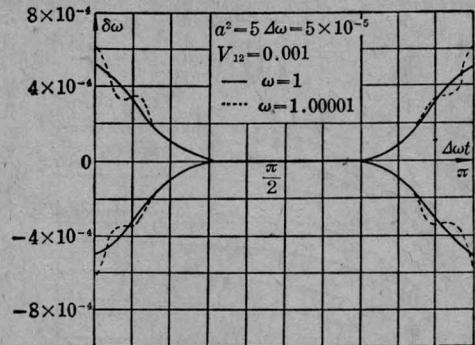


图 8

参 考 文 献

- [1] C. H. Townes; *Microwave Spectroscopy*, p. 273.
- [2] 谭维翰; 《物理学报》, 1965, **21**, 1829.
- [3] A. M. Бонч-Бруевич; *УСПХ*, 1967, **93**, 71.
- [4] P. F. Liao; *Phys. Rev. Lett.*, 1975, **34**, 1.
- [5] P. F. Liao; *Opt. Commun.*, 1976, **16**, 392.
- [6] R. Loudon; *Quantum Theory of Light*, p. 42.
- [7] M. Sargent, W. E. Lamb; *Laser Physics*, p. 18.
- [8] A. O. Меликян; *ЖЭТФ*, 1975, **68**, 1229.
- [9] Н.Е. Невеский; *ЖЭТФ*, 1978, **74**, 1569.
- [10] W. R. Salzman; *Phys. Rev. Lett.*, 1971, **26**, 220.
- [11] J. V. Moloney; *Phys. Rev. Lett.*, 1974, **49A**, 207.
- [12] 王竹溪; 《特殊函数概论》, 科学出版社, 1979年出版, p. 681.