

s 波散射作用下的原子-分子系统的量子动力学

王璞玉 杨国建

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

摘要 研究自旋相反的两成份费米原子-分子耦合系统中, 背景粒子 s 波散射对分子形成与分解的影响。这种粒子间的相互作用在以分子形式存在为主的演化阶段影响明显, 其中排斥势散射有利于分子的形成。分子场在系统演化过程中会出现亚泊松(Sub-Poisson)统计分布。

关键词 量子光学; 玻色分子; 费米原子; s 波散射; 亚泊松统计分布

中图分类号 O431.2 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20092912.3536

Quantum Dynamics of Atom-Molecule System Affected by s-Wave Scattering

Wang Puyu Yang Guojian

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

Abstract The influence of the s-wave scattering of background particles on the association or disassociation of molecules in a system composing of two species Fermi atoms with opposite spin and molecules is studied. This influence becomes evidence in the period of evolution when most of the particles in the system are molecules, where the scattering with repulsive potential is propitious to the formation of molecules. Sub-Poisson statistical distribution of the molecule field is observed.

Key words quantum optics; Boson molecules; Fermi atoms; s-wave scattering; sub-Poisson distribution

1 引 言

自 1995 年玻色爱因斯坦凝聚(BEC)首次在实验上成功以来^[1], 超冷粒子成为人们研究的热点^[2], 相关研究也从单纯的玻色原子系统扩展到费米原子系统以及玻色-费米混合原子系统^[3,4]。2003 年 Jin 等^[5]在实验上率先实现了由量子简并费米气体⁴⁰K 转换成超冷分子, 又为超冷粒子系统的研究增添了新的内容。由超冷原子气体实现超冷分子气体^[6]主要有两个途径: 磁场 Feshbach 共振^[7]和光缔合^[8,9]。磁场 Feshbach 共振的原理是通过调节磁场使得入射到其内的两个粒子的总能量与束缚态能量非常接近以至于相等, 这样在这个较小的区域内就可以有效地改变粒子间的散射长度。研究表明超冷费米原子和超冷玻色原子在 Feshbach 共振附近都表现出

不同的特性^[10]。光缔合的物理机制是利用一对基态的超冷原子吸收一个光子形成一个激发态的分子^[11,12]。通过光缔合方法实现的分子内核在长程相互作用范围内, 并且其动能远小于振动或转动的能级分裂。近年来人们对超冷分子进行了很多有意义的研究^[13~16]。

在超冷状态下, 粒子碰撞表现为 s 波散射。在以往超冷原子形成分子的讨论中, 背景原子间 s 波散射由于远小于 Feshbach 共振散射通常被忽略。近年来由于超冷技术的发展, 超冷原子气体的密度越来越高, 以至于背景原子间的散射对系统的影响不可忽略。本文研究自旋相反的两成份费米原子-分子耦合系统中包括分子在内的背景粒子间的 s 波散射对原子和分子两种粒子相互转化动力学过程的影响。

收稿日期: 2009-01-19; **收到修改稿日期**: 2009-03-23

基金项目: 国家自然科学基金(10674018)资助课题。

作者简介: 王璞玉(1981—), 女, 博士研究生, 主要从事量子光学方面的研究。E-mail: puyu1005@163.com

导师简介: 杨国建(1957—), 男, 博士, 教授, 主要从事量子光学和原子光学方面的研究。E-mail: yanggj@bnu.edu.cn

2 模型与分析

考虑自旋相反的两成份费米原子转换成分子的过程。假设费米气体被由激光形成的光阱所约束,相对于原子的跃迁频率,激光的失谐量非常大,以至于由于自旋差异所造成的自旋相反的两成份费米原

子在阱中感受到的约束势的差异可以忽略。因温度极低,原子之间以及所形成分子之间的相互作用表现为 s 波散射。这个原子-分子耦合系统的哈密顿 (Hamiltonian) 可以表示为^[11]

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar\omega_k}{2} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma} + \sum_k \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hbar g_{k+k'} \left(\sum_{k,k'} \hat{a}_{k+k'}^\dagger \hat{c}_{k\downarrow} \hat{c}_{k'\uparrow} + H. c. \right) + \frac{(1+\delta_{ij})}{2} \sum_{i,j,k,k'} \frac{U_{ij}}{2V} \hat{p}_{i,k\downarrow}^\dagger \hat{p}_{j,k'\uparrow}^\dagger \hat{p}_{j,k'\uparrow} \hat{p}_{i,k\downarrow}, \quad (1)$$

式中 $\mathbf{k}(\mathbf{k}')$ 为粒子的动量指标参数, $\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{k,\sigma}$ 和 $\hat{a}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{a}_{k,\sigma}$ 分别是费米原子和玻色分子的产生和湮灭算符, 满足相应的费米(玻色)对易关系, 算子 $\hat{p}_{ik\sigma}$ ($i = 1, 2$) 是算子 $\hat{c}_{k,\sigma}$ 和 $\hat{a}_{k,\sigma}$ 的缩写, 代表 $\hat{p}_{1k\sigma} = \hat{c}_{k,\sigma}$ 和 $\hat{p}_{2k\sigma} = \hat{a}_{k,\sigma}$ 。显然, 第一项和第二项分别描述原子的动能和分子的失谐能; 第三项反映了原子对转换为分子所需的能量, 其中参数 $g_{k+k'}$ 为原子对与分子之间的耦合强度; 第四项反映了粒子之间的 s 波散射相互作用, $U_{ij} = 4\pi\hbar^2 a_{ij} / \mu_{ij}$ 是粒子间的散射相互作用势, a_{ij} 是粒子背景散射长度, μ_{ij} 为粒子约化质量, V 为量子化体积。

实验表明自旋与动量均相反但绝对值相等的原子对容易形成分子, 此时分子能量最低, 处在零动量

的分子 BEC 状态, 所以只需考虑这部分原子对在分子形成过程中的作用。另外, 在现有的实验条件下, 原子的费米能级远小于 Feshbach 共振宽度, 也小于原子对-分子的耦合频率, 前者意味着原子对-分子的耦合参数可以认为是一个与动量指标 $\mathbf{k}(\mathbf{k}')$ 无关的常数 ($g_{k+k'} = g$), 后者则表明原子动能随 $\mathbf{k}(\mathbf{k}')$ 的变化对分子形成过程的影响可以忽略。再者, 假设初始时刻只有原子存在, 而原子对-分子相互作用时间足够短以至于形成的分子少到分子与分子之间、甚至原子与分子之间的散射相互作用可以忽略, 在这种情况下只需考虑原子之间的背景散射。在旋波近似和原子对与分子共振耦合条件下, 哈密顿量(1)式可简化成

$$\hat{p}\hat{H} = \sum_k \frac{U_0}{2V} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-k\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + \hbar g \left(\sum_k \hat{a}_0^\dagger \hat{c}_{k\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow} + H. c. \right), \quad (2)$$

这里已定义 $U_{11} = U_0$ 。因为没有其它损耗因素存在, 总原子数 $2N = \sum_k (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} + 2a_0^\dagger a_0)$ 是一守恒量。

原子对-分子耦合系统态的一般形式可以表示为

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\min\{N,M\}} \sum_{\{n_k\}} C_{N-n,n_1,\dots,n_M}(t) |N-n, n_1, \dots, n_M\rangle, \quad (3)$$

式中 M 为原子可占用的动量状态数, $N-n$ 为所形成的分子数, $\{n_k\}$ 为给定 $N-n$ 条件下原子对按动量状态的一套填布数, 其填充方式共有 $C_M^n = \frac{M!}{n!(M-n)!}$ 种, 而 $C_{N-n,n_1,n_2,\dots,n_M}(t)$ 则是系统处在与 $\{n_k\}$ 相对应填布状态且有 $N-n$ 分子形成时的几率幅度。受泡利不相容原理的限制, 显然有 $n_k = 0, 1$, 其中 $n_k = 1$ 意味着一对原子填充在动量为 \mathbf{k} 和 $-\mathbf{k}$ 的状态上, 并且有 $\sum_{k=1}^M n_k = n$ 。

通过薛定谔方程 $i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$, 可以得到几率幅度 $C_{N-n,n_1,n_2,\dots,n_M}(t)$ 所满足的演化方程:

$$i\dot{C}_{N-n,n_1,\dots,n_M}(t) = g \left[\sqrt{N-n+1} \sum_{k=1}^M \delta_{n_k,1} C_{N-(n-1),n_1,\dots,(n_k-1),\dots,n_M}(t) + \sqrt{N-n} \sum_{k=1}^M \delta_{n_k,0} C_{N-(n+1),n_1,\dots,(n_k+1),\dots,n_M}(t) \right] + \frac{U_0}{2V} \sum_{k=1}^M \delta_{n_k,1} C_{N-n,n_1,\dots,n_M}(t), \quad (4)$$

这里 $n = 0, \dots, \min\{N, M\}$ 。当取 $U_0 = 0$ 时, (4) 式描述了不计背景原子散射时的情况^[15]。实际上 (4) 式描述的是一个 $\sum_{n=0}^M C_M^n$ 维的耦合常微分方程组。例如, 当 $N = M$ 时, 维数为 2^N 。显然, 对该方程的讨论会因为系统所含粒子数增大而受到限制。不过, 它可以通过如下物理考虑而被简化。对于这一给定的原子对数 n , 若忽略因这 n 个原子对在 M 个动量

状态上各种可能的分布所对应的能量差别, 则系统相应于不同原子对填布数 $\{n_k\}$ 的几率幅度应相等, 因此, 共有 C_N^n 种方式可以以相同的概率形成 $N - n$ 个分子。我们定义 C_{N-n} 为形成这 $N - n$ 个分子的总几率幅度, 则相应于一种分布 $\{n_k\}$ 的几率幅度为 $C_{N-n} / \sqrt{C_M^n}$, 显然有 $C_{N-n} / \sqrt{C_M^n} = C_{N-n, n_1, n_2, \dots, n_M}$ 。再根据 (4) 式可以得到:

$$\frac{i\dot{C}_{N-n}}{\sqrt{C_M^n}} = g \left[\frac{\sqrt{N-n+1} n C_{N-n+1}}{\sqrt{C_M^{n+1}}} + \frac{\sqrt{N-n}(M-n) C_{N-n-1}}{\sqrt{C_M^{n-1}}} \right] + n \frac{U_0}{2V} \frac{C_{N-n}}{\sqrt{C_M^n}}, \quad (5)$$

令 $C_{N-n} \equiv C_n$, (5) 式可以简化为

$$i\dot{C}_n = g \left[\sqrt{N-n+1} \sqrt{(M-n+1)n} C_{n-1} + \sqrt{N-n} \sqrt{(M-n)(n+1)} C_{n+1} \right] + n \frac{U_0}{2V} C_n, \quad (6)$$

(6) 式是一个 $N + 1$ 维的耦合常微分方程组, 将通过它观察分子的形成过程以及分子所满足的统计规律。

在任意时刻 t , 系统中形成的分子数可以表示为

$$\langle a_0^\dagger a_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\min\{N, M\}} \sum_{\langle n_k \rangle} |C_{N-n, n_1, \dots, n_M}(t)|^2 (N-n) = \sum_{n=0}^{\min\{N, M\}} C_M^n |C_n(t)|^2 (N-n). \quad (7)$$

为方便我们通过分子与原子数的比例系数 $f_M (f_M = 2\langle a_0^\dagger a_0 \rangle / (N-1))$ 来讨论问题。

图 1 是根据 (7) 式数值模拟结果, 其中 $\tau (\tau = \sqrt{2Ng}t)$ 是经过标度变换过的无量纲时间, $U_0/V = \pm 0.0005g$, $f_M = -1$ 和 $f_M = 1$ 分别反映系统只有原子对和只有分子存在时的两种极端情况。初始时刻费米原子对均匀填充在费米面以下的状态上, 且满足关系 $N = M$ 。图 1 显示原子对形成分子和分子又分解成原子对随时间变化的过程, 它大致依原子对-分子-原子对交替的曲线振荡运动方式变化, 但幅度逐渐减小。另外, 随着初始原子对数目的增加, 代表最大分子(原子对)数目的波峰(波谷)再次出现的时间略有后移。曲线在时间尺度上的展宽是因为对于系统中不同原子对数 n 的状态, 相应状态下分子形成的时间不同

所造成。此特点也可以根据 (6) 式所代表的依赖于整数 n 的离散系统的动力演化特征加以理解。图 1 中实线显示了当原子之间相互独立 ($a = 0$) 时的情况。若原子之间存在排斥性散射作用 ($a > 0$, 见图中的虚线), 波峰(波谷)出现的时间位置与原子之间无散射时的情况基本一样, 但曲线相应的振荡幅度不减反而有所增加, 表示形成的最大分子数有所增加。并且随着初始原子对数目的增加, 这一效应就越明显。若原子之间存在吸引散射作用 ($a < 0$), 情况正好相反(见图 1 中的点线), 此时原子对会以更大的概率存在于系统中。更多的数值计算表明, 散射势的强弱变化不改变排斥(吸引)散射作用有利于(不利于)分子的形成结论, 而只使相应效应的强度发生变化。上述分子形成的过程对散射效应的依赖在数学上归结于 (6)

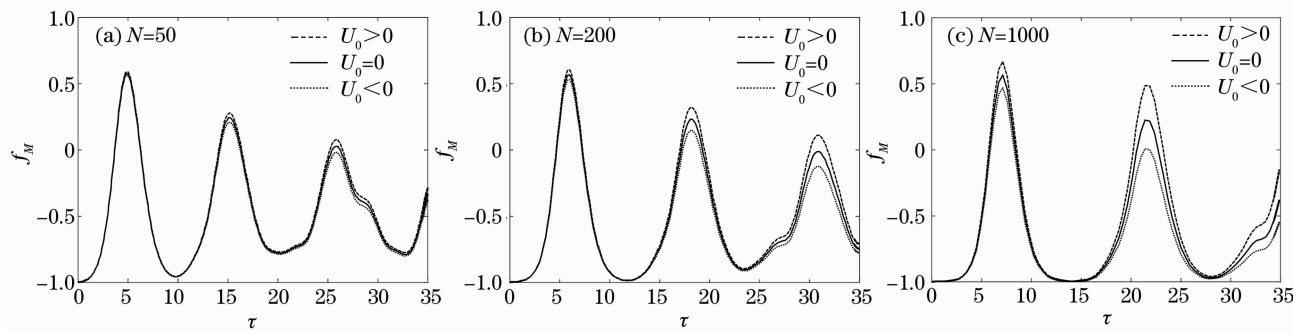


图 1 f_M 随时间 τ 的演化曲线 1

Fig. 1 Evolution curves 1 of f_M with rescaled time τ

式等号右边最后一项的存在,其系数 $nU_0/2V$ 代表分子形成的增益($a > 0$)或衰减($a < 0$),它与系统中原子对的个数 n 成正比。有趣的是原子对的散射作用只在分子形成的那段时间才突显起来。图 1 所展示的具有排斥或吸引性质的背景粒子 s 波散射,在实验上可以通过调整磁场 Feshbach 共振人为实现。例如,当用磁场进行 Feshbach 共振扫描时,在共振左边,散射势为排斥性的,自旋相反的费米原子配对,并当原子对的大小相对于粒子间的平均间距小得多时就形成了分子;在共振右边,散射势则为吸引性的,原子对中的两个原子因相互吸引而形成较为稳定的库帕对,其大小大于粒子间的平均间距。

在图 1 波峰处系统内分子所占比例很大,甚至超过原子对的数目。此时,分子之间的碰撞对新分子形成的影响也必须考虑。因已形成的分子温度极低,它们之间的碰撞也可以用 s 波散射来描述,其散射势是原子的两倍^[13]。从数学上看,此时要求(6)式等号右边增加一项 $(N-n)U_0/VC_n$ 。因为总满足 $N \geq n$,所以分子间 s 波散射是否有利于新分子的形成也主要取决于散射长度 a 的性质。图 2 展示初始原子对数为 $N=500$ 、增益散射($a > 0$)时的情况。其中实线、点线和虚线分别代表无任何碰撞($a=0, U_{11}=U_{12}=0$),仅有原子间的 s 波散射($U_{11}/V=0.0005 \text{ g}, U_{22}/V=0$)以及原子-原子和分子-分子 s 波散射均考虑($U_{22}/V=2U_{11}/V=0.001 \text{ g}$)三种情况。容易看到分子形成与分解的时间演化在考虑分子 s 波散射后所展现出来时间特征与仅考虑原子间的 s 波散射时所展现出来的相类似。

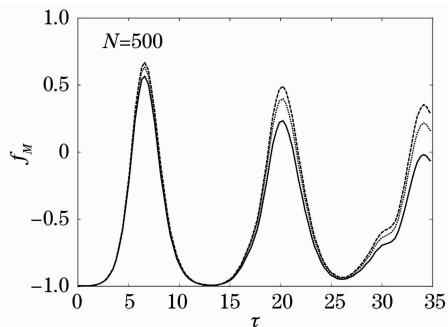


图 2 f_M 随时间 τ 的演化曲线 2

Fig. 2 Evolution curves 2 of f_M with time τ

Mandel Q 参数是分析粒子数场统计分布的重要参数,它定义如下:

$$Q(t) = \frac{\langle \hat{n}(t)^2 \rangle - \langle \hat{n}(t) \rangle^2}{\langle \hat{n}(t) \rangle} - 1. \quad (8)$$

当 $Q(t) = 0$, $Q(t) > 0$ 和 $Q(t) < 0$ 时,该场分别服从泊松(Poisson)、超泊松(super-Poisson)和亚泊松

(sub-Poisson) 统计分布。下面用它来观察所形成的分子场的统计分布性质。图 3 是具体的数值计算的结果,参数的选取以及图 3 中实线、虚线和点线所代表的含义与图 1 的相同。与形成的分子数随时间变化的情况一样,分子场的统计分布也随着时间作振荡变化,并且由原子之间的背景散射所造成影响随着演化也呈逐渐加强的趋势。在演化的绝大多数时间内,分子场处于 $Q(t) > 0$ 的具有经典性质的超泊松统计分布状态,仅当存在 $a > 0$ 的增益散射的条件下、在演化后期的一段时间内,会出现 $Q(t) < 0$ 的具有非经典性质的亚泊松统计分布情况。

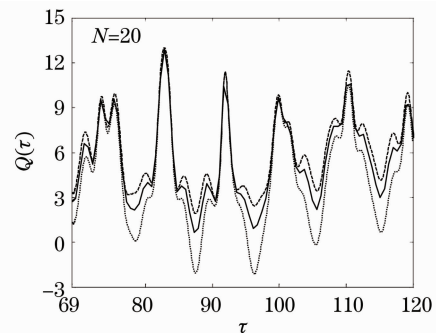


图 3 $Q(t)$ 随时间 τ 的演化曲线

Fig. 3 Evolution curves of the $Q(\tau)$ with time τ

3 结 论

本文根据磁场 Feshbach 共振原理讨论了自旋相反的两成份超冷费米原子气体形成超冷分子气体的问题。基于描述该系统的原子-分子耦合系统哈密顿量,得到了分子场几率幅度所满足的运动方程,具体分析了在短程 s 波散射条件下费米原子对与分子之间相互转化的时间相关行为。结果表明 s 波散射在以分子形式存在为主的演化阶段影响显著,其中排斥势散射有利于分子的形成,吸引势散射的作用则相反,并且这些影响的强烈程度随初始费米原子气体密度的增加而加大。分子场在系统演化过程中会出现亚泊松统计分布。

参 考 文 献

- 1 M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews *et al.*. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor[J]. *Science*, 1995, **269**(5221): 198~201
- 2 Lu Junfa, Lu Heqin, Zhou Qi *et al.*. A novel controllable six-well optical trap for cold atoms or molecules and optical lattice [J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(9): 1816~1823
- 陆俊发,陆荷琴,周琦等.一种新颖的实现冷原子囚禁的可控制光学六阱及其光学晶格[J]. *光学学报*, 2008, **28**(9): 1816~1823

- 3 Ph. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen. Observation of a Feshbach resonance in cold atom scattering [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**(1): 69~72
- 4 L. Viverit, S. Giorgini. Ground-state properties of a dilute Bose-Fermi mixture [J]. *Phys. Rev. A*, 2002, **66**(6): 063604~063613
- 5 Greiner M, Regal C, Jin D. S. Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas [J]. *Nature*, 2003, **426**(6966): 537~540
- 6 Lu Junfa, Ji Xianming, Zhou Qi *et al.*. A novel controllable four-well optical trap for cold atoms or molecules and its two-dimensional optical lattices[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(2): 211~218
陆俊发, 纪宪明, 周琦等. 一种新颖的实现冷原子或冷分子囚禁的可控制光学四阱及其二维光学晶格[J]. *光学学报*, 2008, **28**(2): 211~218
- 7 C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn *et al.*. Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms[J]. *Nature*, 2003, **424**(6944): 47~50
- 8 A. Fioretti, D. Comparat, A. Crubellier *et al.*. Formation of cold Cs₂ molecules through photoassociation [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(20): 4402~4405
- 9 Wang Lirong, Jia Suotang. The formation of ultra-cold molecules via photoassociation and its spectrum measurement [J]. *Acta Quantum Optica Sinica*, 2006, **12**(3): 143~150
汪丽蓉, 贾锁堂. 光缔合产生超冷分子及其光谱测量[J]. *量子光学学报*, 2006, **12**(3): 143~150
- 10 Henning Heiselberg. Bosons and Fermions near Feshbach resonances[J]. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2004, **37**: S141~S153
- 11 Gerhard Rempe, C. C. Lin, *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*[M]. *London: Academic Press*, 2006, (53): 152~186
- 12 H. R. Thorsheim, J. Weiner. Laser-induced photoassociation of ultracold sodium atoms[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2420~2423
- 13 Guang-Ri Jin, Chul Koo Kim, Kyun Nahm. Quantum dynamics and statistical properties of atom-molecule Bose-Einstein condensates [J]. *Phys. Rev. A*, 2005, **72**(4): 045602~045605
- 14 Stephan Dürr, Thomas Volz, Andreas Marte *et al.*. Observation of molecules produced from a Bose-Einstein condensate[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, **92**(2): 020406-1
- 15 Igor Tikhonenkov, Ehoud Pazy, Amichay Vardi. Bose-like quantum dynamics of association in ultracold Fermi gases [J]. *Opt. Commun.*, 2006, **264**(321): 321~325
- 16 D. Meiser, P. Meystre. Molecule formation as a diagnostic tool for second-order correlations of ultracold gases [J]. *Phys. Rev. A*, 2005, **71**(3): 033621-1