

Исследование условий пересечения квазиэнергетических уровней в четырехуровневой системе

С.Арушанян, А.Меликян, С.Саакян

Ранее было показано, что при учете только дипольных переходов пересечение квазиэнергетических уровней в системе возможно лишь в том случае, если какие-либо переходы образуют замкнутый цикл [1]. Отсюда следовало, что для анализа условий пересечения необходимо рассматривать систему, в которой имеются как минимум четыре уровня. В настоящей работе показано, что можно однозначно указать, какие именно квазиэнергетические уровни пересекаются при данных значениях параметров атомной системы и поля излучения, не решая алгебраического уравнения четвертой степени. При этом оказалось, что наиболее подходящей системой для реализации пересечения является группа уровней $^5S_{1/2}$, $^5P_{1/2}$, $^5P_{3/2}$ и $^5D_{3/2}$ атома рубидия. Проведенное вычисление значений интенсивности и частоты лазерного поля, при которых имеет место пересечение в этой системе, показывает, что они легко достижимы. Оказалось, что в данной системе пересекаются квазиэнергетические уровни, соответствующие возбужденным атомным уровням.

Ключевые слова: пересечение квазиэнергетических уровней, четырехуровневая система.

1. Введение

Известно, что характеристики переходов между состояниями квантовой системы зависят от параметров излучения: длительности импульсов, отстройки несущей частоты от частот переходов, ширины спектра излучения и др. Наиболее подробно изучено взаимодействие лазерного излучения с двухуровневой системой. Если частота излучения близка к частотам переходов между несколькими уровнями, то двухуровневое приближение, вообще говоря, несправедливо. При адиабатическом изменении параметров излучения или параметров квантовой системы в некоторых случаях можно ограничиться нахождением квазиэнергетических состояний системы. Однако если условие адиабатичности выполняется не на всем протяжении рассматриваемого процесса взаимодействия, то необходимо учитывать также неадиабатические переходы [2, 3], которые в то же время можно использовать для селективного заселения уровней или переноса населенности между уровнями (см., напр., [4]).

В работе [1] определены схемы тех переходов в квантовой системе, которые допускают пересечение квазиэнергетических уровней под влиянием внешнего поля. Цель настоящей работы – нахождение алгоритма идентификации пересекающихся квазиэнергетических уровней в четырехуровневой системе с дипольными переходами под действием одного лазерного поля.

2. Определение параметров, при которых имеет место пересечение уровней

Понятие квазиэнергетических состояний квантовой системы во внешнем периодическом поле впервые было введено в работах [5, 6]. Эти состояния появляются при условии, что спектральная ширина излучения (а также ширины атомных уровней) много меньше расстройек резонанса. Амплитуда напряженности поля волны при этом считается адиабатической функцией времени, поэтому атомные состояния без поля плавно переходят в квазиэнергетические состояния.

Согласно теореме Неймана – Вигнера [7, 8], совпадения собственных значений симметричной матрицы можно добиться изменением, вообще говоря, хотя бы двух параметров. Выберем в качестве этих параметров частоту и амплитуду напряженности поля волны.

Следуя работе [4], покажем, что пересечение уровней возможно в том случае, когда переходы под влиянием внешнего возмущения образуют замкнутый цикл. Простейшей системой с дипольными переходами, удовлетворяющей этому условию, является четырехуровневая система (см. рис.1).

Следуя Борну и Фоку [9] и исходя из того, что решения стационарного уравнения Шредингера $H(s)\Psi_n(s) = \hbar\omega(s) \times \Psi_n(s)$ (здесь $s = t/T$, T – характерное время изменения гамильтониана) известны в каждый момент времени, которое рассматривается как параметр, решение нестационарного уравнения Шредингера с адиабатическим гамильтонианом $H(t)$ ищем в виде суперпозиции «мгновенных» собственных функций.

Именно поэтому рассмотрим N -уровневую систему в поле резонансной линейно поляризованной волны с адиабатически изменяющейся амплитудой. Поле будем описывать классическим вектором напряженности

С.Арушанян, А.Меликян. Российско-Армянский (Славянский) государственный университет, Армения, 0051 Ереван, ул. Овсепя Эмина, 123; e-mail: katilina71@mail.ru, amelikyan@hotmail.com
С.Саакян. Государственный инженерный университет Армении, Армения, 0009 Ереван, ул. Теряна, 105; e-mail: samsah56@yahoo.com

Поступила в редакцию 25 февраля 2010, после доработки – 19 января 2011 г.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(s) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t) + \text{компл. сопр.} \quad (1)$$

Волновая функция системы определяется из уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (H_0 + H_{\text{int}})\Phi, \quad (2)$$

где H_0 – гамильтониан невозмущенной системы, а взаимодействие H_{int} в дипольном приближении имеет следующий вид:

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} E_{x,y}(s) (\mathbf{e}_{x,y} \hat{\mathbf{d}}) \exp(-i\omega t) + \text{компл. сопр.} \quad (3)$$

Взяв за начало отсчета энергию низшего уровня, условие резонансности сформулируем следующим образом: для каждого m -го уровня существует целое число k_m , такое, что выполняется условие $\varepsilon_m = \omega_m - k_m \omega \ll \omega$, где ε_m – отстройка m -го уровня, а ω_m – частоты соответствующих переходов. Волновая функция

$$\Phi = \sum_m c_m(t) \varphi_m \exp(-ik_m \omega t), \quad (4)$$

где φ_m – собственные функции гамильтониана H_0 .

Подставив (4) в уравнение Шредингера (2) и учтя ортонормированность функций φ_m для коэффициентов $c_m(t)$, получим систему дифференциальных уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} = \hbar \varepsilon_m c_m + \sum_n c_n \{ V_{mn} \exp[i\omega(k_m - k_n - 1)t] + V_{mn}^* \exp[i\omega(k_m - k_n + 1)t] \}. \quad (5)$$

Используя резонансное приближение (опустив быстроосциллирующие члены), с учетом линейной поляризации поля волны (V_{mn} можно считать действительными) окончательно для амплитуд c_m получим следующую систему уравнений:

$$i\hbar \frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n c_n (V_{mn} + \hbar \varepsilon_m \delta_{mn}). \quad (6)$$

Здесь δ_{mn} – символ Кронекера.

Введя одностолбцовую матрицу \hat{c} с элементами c_1, c_2, \dots, c_N , а также матрицу \hat{W} с элементами $W_{mn} = V_{mn}(s) + \varepsilon_m \delta_{mn}$, уравнение (6) можно записать в матричной форме:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} = \hat{W}(s) \hat{c}. \quad (7)$$

Видно, что уравнение (7) формально совпадает с уравнением Шредингера с адиабатически изменяющимся гамильтонианом. Как уже указывалось нами при решении уравнения Шредингера с таким гамильтонианом, величина s рассматривается как параметр, и находятся «мгновенные» собственные функции и собственные значения.

Это приближение называют также приближением адиабатического слежения. Подстановкой $\hat{c}(t) = \hat{b}(t) \times \exp(-i\lambda t)$ приведем (7) к стационарному виду:

$$\sum_n [\hbar(\lambda - \varepsilon_m) \delta_{mn} - V_{mn}] b_n = 0. \quad (8)$$

Здесь λ – квазиэнергия [5, 6], а ее значения определяются из условия нетривиальности решений матричного уравнения (8) для b_n . Условие нетривиальности означает, что детерминант $D = \|\hbar(\lambda - \varepsilon_m) \delta_{mn} - V_{mn}\|$ должен быть равным нулю. Это уравнение степени N по λ имеет, вообще говоря, N различных вещественных корней. Пересечение двух квазиуровней означает, что кратность одного из корней уравнения $D(\lambda) = 0$ равна двум. В случае существования двукратного корня уравнения $D(\lambda) = 0$ ранг матрицы снижается на два при $\lambda = \lambda_{\text{cross}}$. Другими словами, при $\lambda = \lambda_{\text{cross}}$ обращаются в нуль все первые миноры детерминанта $D(\lambda)$.

С помощью метода, основанного на анализе ранга детерминанта $D(\lambda)$, на примере четырехуровневого атома покажем, как можно определить условия пересечения квазиуровней, а также попытаемся ответить на вопрос о том, какие именно уровни пересекаются. Для этого рассмотрим четырехуровневую систему, изображенную ниже на рис.1.

Детерминант такой системы имеет вид

$$D(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda & -V_{12} & 0 & -V_{14} \\ -V_{21} & \lambda - \varepsilon_2 & -V_{23} & 0 \\ 0 & -V_{32} & \lambda - \varepsilon_3 & -V_{34} \\ -V_{41} & 0 & -V_{43} & \lambda - \varepsilon_4 \end{vmatrix}. \quad (9)$$

Здесь мы считаем матричные элементы действительными величинами, имея в виду линейную поляризацию внешнего поля излучения.

Прежде всего определим минимальное число миноров, из равенства нулю которых будет следовать, что все остальные миноры обращаются в нуль. В силу симметричности матрицы следует рассматривать только 10 из 16 миноров. Рассмотрим миноры диагональных элементов и элементов, находящихся выше диагонали. Возьмем, к примеру, миноры элементов последнего столбца. Используя свойство детерминантов, состоящее в том, что $\sum_n a_{nj} A_{ni} = 0$ при $i \neq j$ (A_{ni} – алгебраические дополнения элементов a_{ni}), получим, что линейно независимы три минора последнего столбца, т.е., к примеру, из условия $M_{44} = M_{34} = M_{24} = 0$ следует, что $M_{14} = 0$. Продолжая это рассуждение, видим, что из третьего столбца линейно независимы два минора, из второго – один, а миноры первого столбца автоматически оказываются равными нулю. Таким образом, мы приходим к заключению, что для равенства нулю всех главных миноров симметричной матрицы достаточно приравнять нулю шесть миноров из 16.

Рассматриваемая матрица, кроме симметричности, обладает еще одним свойством, из-за которого число линейно независимых миноров уменьшается, а именно: в каждом столбце и в каждой строке имеется элемент, равный нулю. Продолжив рассуждение, мы приходим к выводу, что из последнего столбца достаточно приравнять нулю два минора, а из третьего столбца – один, и тогда все остальные миноры тоже окажутся равными нулю.

Пусть приравнены нулю миноры $M_{13} = M_{23} = M_{24}$. Тогда для искомого величин интенсивности, квазиэнергии и частоты пересечения получим:

$$E_{\text{cross}}^2 = \frac{\lambda(\lambda - \varepsilon_4) d_{32} \hbar^2}{d_{41}(d_{12} d_{34} - d_{32} d_{41})}, \quad (10)$$

$$\lambda_{\text{cross}} = \frac{d_{12}d_{41}}{d_{12}d_{41} + d_{23}d_{34}}(\omega_3 - 2\omega_{\text{cross}}), \quad (11)$$

$$\omega_{\text{cross}} = \frac{d_{12}d_{41}\omega_3}{d_{12}d_{41} - d_{32}d_{34}} - \frac{(d_{12}d_{41} + d_{32}d_{43})(d_{12}d_{32}\omega_4 + d_{14}d_{34}\omega_2)}{(d_{12}d_{41} - d_{32}d_{34})(d_{12}d_{32} + d_{14}d_{34})}. \quad (12)$$

Заметим, что выражения (10), (11), (12) зависят от знаков d_{ij} . Если система такова, что вычисления по формулам (10)–(12) дают $E_{\text{cross}}^2 > 0$ и $\omega_{\text{cross}} > 0$, то для такой системы пересечение квазиэнергий возможно. Кроме того, чтобы исходное резонансное приближение не нарушалось, должны выполняться условия малости по сравнению с атомными полями, а также малости отстроек резонанса по сравнению с ω_{cross} .

Из условия равенства нулю миноров M_{13}, M_{23}, M_{24} следует равенство нулю всех остальных миноров матрицы (9). Верно и обратное: если приравнять нулю другие три минора, то миноры M_{13}, M_{23}, M_{24} также будут равны нулю, следовательно, условия (10)–(12) являются единственными условиями, при которых пересечение квазиуровней возможно. Другими словами, в четырехуровневой системе может произойти лишь одно пересечение квазиуровней.

3. Идентификация пересекающихся уровней

При адиабатическом включении внешнего поля каждый атомный уровень переходит в соответствующий квазиэнергетический, поэтому можно сказать, что имеет место взаимно однозначное соответствие между атомными и квазиэнергетическими уровнями. С точки зрения нелинейной спектроскопии желательно заранее знать, каким именно атомным уровням соответствуют пересекающиеся квазиэнергетические уровни. Для ответа на этот вопрос рассмотрим уравнение $D(\lambda) = 0$. Зависимость ветвей квазиэнергии от напряженности поля дается формулами для корней уравнения четвертой степени. Однако, как видно из самого уравнения, обратная зависимость, т. е. зависимость интенсивности от квазиэнергии, получается в результате решения биквадратного уравнения, что гораздо удобнее и не накладывает никаких ограничений на рассмотрение. Биквадратное уравнение имеет вид

$$aE^4 + bE^2 + c = 0, \quad (13)$$

где коэффициенты a, b, c являются функциями λ и параметров задачи:

$$a = (d_{41}d_{21} - d_{23}d_{43})^2, \quad (14)$$

$$b = \lambda(\lambda - \varepsilon_2)d_{43}^2 - \lambda(\lambda - \varepsilon_4)d_{23}^2 + (\lambda - \varepsilon_4)(\lambda - \varepsilon_3)d_{12}^2 - (\lambda - \varepsilon_2)(\lambda - \varepsilon_3)d_{41}^2, \quad (15)$$

$$c = \lambda(\lambda - \varepsilon_2)(\lambda - \varepsilon_3)(\lambda - \varepsilon_4). \quad (16)$$

Уравнение (13) имеет относительно $E^2 = I$ два решения:

$$I_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (17)$$

т. е. имеются две ветви зависимости интенсивности от λ . Для каждого значения интенсивности имеются четыре значения квазиэнергии, причем при $I = 0$ квазиэнергии совпадают с отстройками ε_i , а при возрастании интенсивности они двигаются по ветвям $I(\lambda)$. Для выяснения траекторий уровней можно рассмотреть асимптоты I при $\lambda \rightarrow \infty$:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} I_{1,2} = \frac{\lambda^2(d_{12}^2 + d_{14}^2 + d_{23}^2 + d_{43}^2 \pm \sqrt{G})}{2a}. \quad (18)$$

Здесь

$$G = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{b^2 - 4ac}{\lambda^2},$$

причем необходимо, чтобы соблюдалось условие $d_{12}^2 + d_{14}^2 + d_{23}^2 + d_{43}^2 > \sqrt{G}$. Однако ввиду большого числа параметров удобнее сразу построить графики для двух ветвей (17) при $\omega \delta = \omega_{\text{cross}}$, откуда и будет получен ответ на вопрос, какие именно уровни пересекаются.

4. Конкретный пример – атом рубидия

Теперь используем полученные результаты для исследования атома рубидия Rb_{37}^{85} . Возьмем систему уровней, удовлетворяющих условию цикличности, а именно уровни, схема которых изображена на рис. 1. Здесь все состояния вырождены, причем основное состояние, орбитальный момент которого равен нулю, – двукратно. Полагаем, что внешнее поле излучения поляризовано линейно. Тогда, согласно правилам отбора в дипольном приближении, поле связывает подуровни, соответствующие нулевому значению проекции орбитального момента и одному и тому же значению проекции спина. В результате из всей системы четырех вырожденных уровней выделяются две независимые подсистемы взаимодействующих подуровней – по четыре подуровня в каждой подсистеме, поскольку основное состояние вырождено двукратно. Как видно из рис. 1, энергии уровней следующие (энергия уровня $5s$ взята за начало отсчета): $5p_{1/2} - \omega_2 = 12578 \text{ см}^{-1}$, $5p_{3/2} - \omega_4 = 12816 \text{ см}^{-1}$ и $5d_{3/2} - \omega_3 = 25700 \text{ см}^{-1}$.

Силы осцилляторов переходов, определяемые как $f_{ij} = 2m\omega_{ij}|d_{ij}|^2/\hbar^2$ (значения взяты из [10]) таковы:

$$f_{12} = 0.32, \quad f_{13} = 0.67, \quad f_{24} = 0.0425, \quad f_{34} = 0.0043;$$

отсюда находим значения матричных элементов.

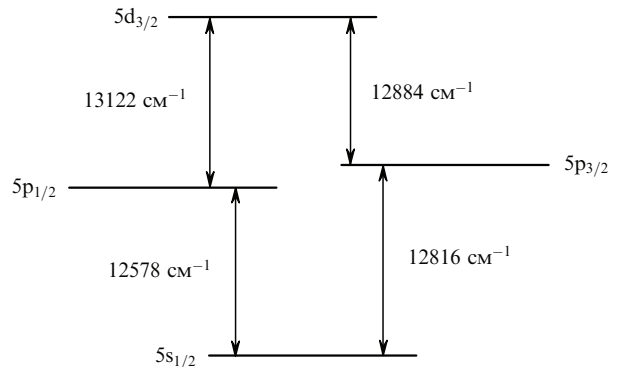
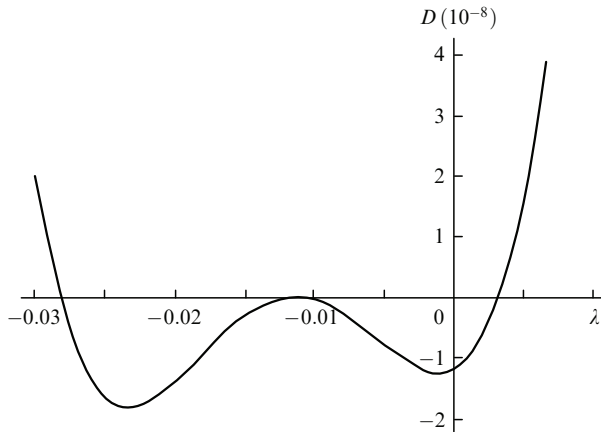
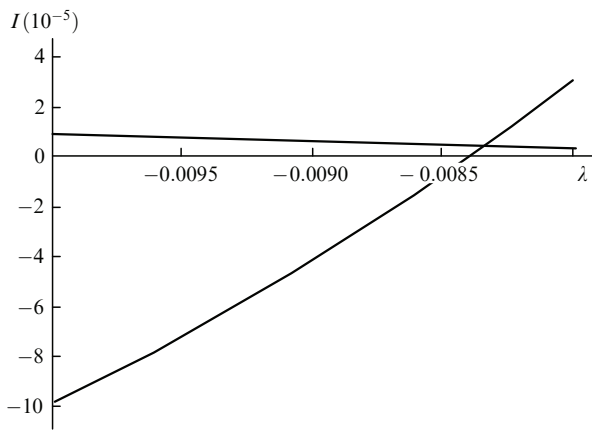


Рис. 1. Схема переходов в атоме рубидия.

Рис.2. Зависимость D от λ (см. текст).Рис.3. Зависимости I от λ при $\omega = \omega_{\text{cross}}$.

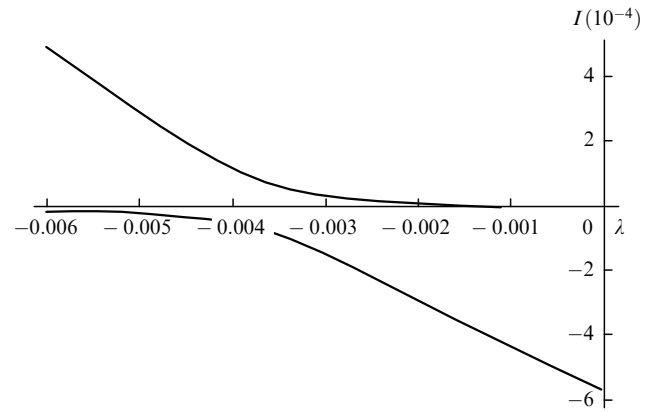
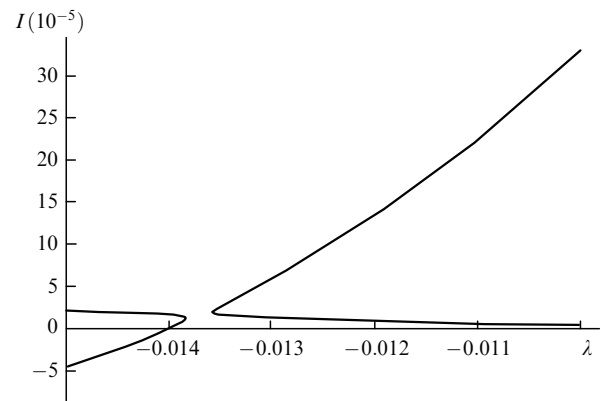
Подставив эти данные в (12), получим $\omega_{\text{cross}} = 2.32226 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$. Затем это значение подставляем в (11), откуда находим $\lambda_{\text{cross}} = -2.66885 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$. Наконец, подставив ω_{cross} и λ_{cross} в (10), получим $E_{\text{cross}} = 2.39 \times 10^5 \text{ В/см}$.

Как видно из рис.2, уравнение $D(\lambda) = 0$ имеет четыре корня для всех E , кроме $E = E_{\text{cross}}$. При этом значении напряженности два из четырех корней сливаются, таким образом в точке λ_{cross} зависимость $D(\lambda)$ касается прямой $D(\lambda) = 0$.

Подставив ω_{cross} в формулы для вычисления отстроек до включения поля, получим $\varepsilon_2 = -6.22595 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\varepsilon_3 = -2.68871 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\varepsilon_4 = -1.95455 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$, т.е. $\varepsilon_2 < \varepsilon_3 < \varepsilon_4 < 0$. Соответствующие зависимости для $\omega = \omega_{\text{cross}}$, $\omega < \omega_{\text{cross}}$ и $\omega > \omega_{\text{cross}}$ приведены на рис.3–5. Сравнивая положения квазиэнергий при нулевой интенсивности, т.е. отстроек резонанса, и их положения при включенном поле, находим, что в данной системе пересекаются уровни, соответствующие отстройкам ε_3 и ε_4 . В данном случае эти уровни отвечают возбужденным атомным состояниям, что затрудняет наблюдение неадиабатических переходов между ними.

5. Заключение

В настоящей работе найдены условия, при которых возможно пересечение квазиэнергетических уровней че-

Рис.4. Зависимости I от λ при $\omega < \omega_{\text{cross}}$.Рис.5. Зависимости I от λ при $\omega > \omega_{\text{cross}}$.

тырехуровневого атома, и дан метод идентификации пересекающихся уровней. В качестве конкретного примера рассмотрен атом рубидия, для которого найдены соответствующие частоты и интенсивности волны; показано, что возможно пересечение лишь тех квазиэнергетических уровней, которые формируются из атомных уровней первых возбужденных состояний. В случае большего количества уровней формулы становятся громоздкими, и решение соответствующих уравнений должно производиться численно. Полученные результаты могут использоваться для реализации опытов по переносу населенности между возбужденными уровнями.

1. Меликян А.О., Саакян С.Г. *Препринт ИФИ-76-34* (Аштарак, 1976).
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика* (М.: Наука, 1989, т. III, § 53); Дыхне А.М. *ЖЭТФ*, **41**, 1324 (1961).
3. Лиханский В.В., Напартович А.П. *Квантовая электроника*, **9**, 8 (1982).
4. Lu T., Miao X., Metcalf H. *Phys. Rev. A*, **75**, 063422 (2007).
5. Никишов А.И., Ритус В.И. *ЖЭТФ*, **46**, 776 (1964); Ритус В.И. *ЖЭТФ*, **51**, 1544 (1966).
6. Зельдович Я.Б. *ЖЭТФ*, **51**, 1492 (1966); *УФН*, **110**, 139 (1973).
7. Von Neumann J., Wigner E. *Phys. Z.*, **30**, 467 (1929).
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика*, (М.: Наука, 1974).
9. Born M., Fock V. *Zs. F. Phys.*, **51**, 165 (1928).
10. Радциг А.А., Смирнов Б.М. *Параметры атомов и атомных ионов. Справочник* (М: Энергоатомиздат, 1986).