

# Динамика стимулированной рамановской атомно-молекулярной конверсии в бозе-эйнштейновском конденсате

П. И. Хаджи<sup>1)</sup>, Д. В. Ткаченко

Институт прикладной физики АН Республики Молдова, MD 2800 Кишинев, Молдова

Приднестровский государственный университет, кафедра Нелинейной оптики и квантовой радиофизики  
MD 3300 Тирасполь, Молдова

Поступила в редакцию 20 декабря 2005 г.

Исследована временная эволюция плотности взаимодействующих атомов, молекул и фотонов в процессе стимулированной конверсии. Показано, что процесс попарного связывания атомов в молекулы может быть как периодическим, так и аperiodическим. Период осцилляций реакции существенно определяется начальными плотностями частиц и начальной разностью фаз.

PACS: 42.50.Rh, 67.40.–w

В последние годы достигнут существенный прогресс в экспериментальном и теоретическом исследовании физических свойств бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) атомов в магнитных ловушках и динамики БЭК в двухмных ловушках. Особый интерес вызывает также исследование динамики связанных атомно-молекулярных конденсатов в условиях проявления резонанса Фешбаха либо в условиях, когда атомно-молекулярная конверсия сопровождается рамановским переходом с участием двух импульсов электромагнитного излучения. В [1] показано, что такого рода процессы могут привести к принципиально новой химии, к так называемой “суперхимии”, в которой возможно сильное когерентное стимулирование химических реакций. Рамановская атомно-молекулярная конверсия может оказаться доминирующей нелинейностью и может привести к новым химическим реакциям при сверхнизких температурах. В ряде работ [1–7] предложена теория фотоассоциации БЭК, которая в конечном счете сводится к теории атомно-молекулярной конверсии. При этом роль оптических импульсов, обеспечивающих рамановский переход, сводится к зависящим от интенсивностей полей нелинейным коэффициентам в гамильтониане взаимодействия, то есть, по сути дела, используется приближение заданного поля оптических импульсов. Однако фотоны обоих импульсов также могут стимулировать протекание химических реакций, и поэтому их роль может оказаться гораздо более важной и разнообразной. В [1] показано, что простая атомно-молекулярная конверсия либо индуцированная рамановским переходом атомно-

молекулярная конверсия сводятся к периодическому процессу связывания двух атомов в молекулу и наоборот, причем скорость этих превращений определяется плотностью исходных атомов. На самом деле ситуация более сложная.

Интерес представляет рассмотрение динамики атомно-молекулярных БЭК без использования приближения заданного поля импульсов, считая рамановский процесс связывания двух атомов в молекулу единым процессом. Ниже представлены результаты исследования этого процесса. Показано, что плотности исходных атомов, молекул и фотонов существенно влияют на скорость протекания процесса и указано, что реакции могут быть как периодическими, так и аperiodическими во времени. Кроме того, отмечена существенная роль разности фаз исходных компонентов реакции. Макроскопическая когерентность бозе-конденсата атомов, молекул и фотонов обоих импульсов предопределяет квантовую интерференцию всех компонентов реакции и, соответственно, значимость фазовых соотношений.

Предположим, что два одинаковых свободных бозе-конденсированных атома с нулевой кинетической энергией (нулевая температура) и полной энергией  $E_i = 2\hbar\omega_{01}$  переходят в молекулярное состояние с энергией  $E_m = \hbar\omega_{02}$  через возбужденное состояние  $E_v$ , поглощая и излучая кванты света с энергиями  $\hbar\omega_1$  и  $\hbar\omega_2$ , соответственно (рис.1). Что касается промежуточного, возбужденного уровня с энергией  $E_v$ , то он рассматривается как виртуальный. Вообще говоря, его можно исключить, используя принцип адиабатического следования [2]. Мы предлагаем модельный гамильтониан взаимодействия  $H_{int}$ , который описывает процесс индуцированной рама-

<sup>1)</sup>e-mail: tdsu4@idknet.com

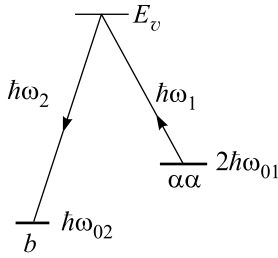


Рис.1. Схема процесса индуцированной рамановской атомно-молекулярной конверсии. Уровень  $\alpha\alpha$  соответствует энергии двух свободных атомов, уровень  $b$  – энергии свободной молекулы

новской атомно-молекулярной конверсии как единый процесс:

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

где  $\hat{\sigma}$  и  $\hat{b}$  – бозонные операторы уничтожения атомного и молекулярного состояний, соответственно,  $\hat{c}_1$  и  $\hat{c}_2$  – операторы уничтожения фотонов с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , а  $g$  – константа взаимодействия. В сущности, мы предлагаем общий (единый) тип нелинейности, который может приводить к образованию молекулярного бозе-конденсата через стимулированную двумя рамановскими импульсами эмиссию молекулярных бозонов из атомного бозе-конденсата. Простоты ради, мы здесь не учитываем упругие межатомные, межмолекулярные и атомно-молекулярные взаимодействия, так как они не являются принципиальными для выяснения особенностей индуцированной атомно-молекулярной конверсии, тем более что при одинаковых константах этих взаимодействий их влияние на эволюцию системы точно компенсируется (мгновенное нелинейное смещение собственных частот молекулы и пары атомов оказывается одинаковым). Считаем, что все атомы и молекулы находятся в одной и той же ловушке.

Как и в [1–7], используем приближение среднего поля (mean field approximation). В этом приближении гейзенберговские уравнения движения для операторов  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$ ,  $\hat{c}_1$  и  $\hat{c}_2$  превращаются в уравнения для амплитуд материальных,  $\alpha$ ,  $b$  и электромагнитных,  $c_1$  и  $c_2$ , полей, которые являются средними значениями соответствующих операторов, причем постулируется факторизация среднего от произведения нескольких операторов в произведение соответствующих амплитуд. Тогда в приближении среднего поля получаем следующую систему нелинейных уравнений для амплитуд  $\alpha$ ,  $b$ ,  $c_1$  и  $c_2$ :

$$\begin{aligned} i\dot{\alpha} &= \omega_{01}\alpha + 2g\alpha^*bc_1^*c_2, \\ i\dot{b} &= \omega_{02}b + 2g\alpha b c_1 c_2^*, \\ i\dot{c}_1 &= \omega_1 c_1 + 2g\alpha^* \alpha^* b c_2^*, \\ i\dot{c}_2 &= \omega_2 c_2 + 2g\alpha \alpha b^* c_1. \end{aligned} \quad (2)$$

Эту систему уравнений необходимо дополнить начальными условиями:  $\alpha|_{t=0} = \alpha_0 e^{i\varphi_0}$ ,  $b|_{t=0} = b_0 e^{i\psi_0}$ ,  $c_1|_{t=0} = c_{10} e^{i\psi_{10}}$ ,  $c_2|_{t=0} = c_{20} e^{i\psi_{20}}$ , где каждая из переменных характеризуется своей начальной амплитудой и фазой.

Из (1) и (2) видно, что стимулированная рамановская атомно-молекулярная конверсия в конденсате является существенно нелинейной по амплитудам как материального, так и электромагнитного полей. Вводя в рассмотрение плотности частиц  $n = |\alpha|^2$ ,  $N = |b|^2$ ,  $f_1 = |c_1|^2$ ,  $f_2 = |c_2|^2$  и две компоненты “поляризации”  $Q = i(\alpha\alpha b^+ c_1 c_2^+ - \alpha^+ \alpha^+ b c_1^+ c_2)$  и  $R = \alpha\alpha b^+ c_1 c_2^+ + \alpha^+ \alpha^+ b c_1^+ c_2$  и используя (2), приходим к следующей системе нелинейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{n} &= 2gQ, \quad \dot{N} = -gQ, \quad \dot{f}_1 = gQ, \quad \dot{f}_2 = -gQ, \\ \dot{Q} &= \Delta R + 2gn[(4N - n)f_1 f_2 + Nn(f_2 - f_1)], \\ \dot{R} &= -\Delta Q, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\Delta = 2\omega_{01} - \omega_{02} + \omega_1 - \omega_2$  – расстройка резонанса. Из (3) легко получить следующие интегралы движения:

$$n + 2N = n_0 + 2N_0, \quad f_1 + N = f_{10} + N_0, \quad f_2 - N = f_{20} - N_0, \quad (4)$$

$$R = \frac{\Delta}{g}(N - N_0) + 2n_0 \sqrt{N_0 f_{10} f_{20}} \cos \theta_0, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} Q^2 &= - \left[ \frac{\Delta}{g}(N - N_0) - 2n_0 \sqrt{N_0 f_{10} f_{20}} \cos \theta_0 \right]^2 + \\ &+ 4N(n_0 + 2N_0 - 2N)^2(N_0 + f_{10} - N)(f_{20} - N_0 + N), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $n_0 = |\alpha_0|^2$ ,  $N_0 = |b_0|^2$ ,  $f_{10} = |c_{10}|^2$ ,  $f_{20} = |c_{20}|^2$  – плотности частиц в начальный момент времени, а  $\theta_0 = \psi_0 - 2\varphi_0 + \psi_{20} - \psi_{10}$  – начальная разность фаз амплитуд материальных и электромагнитных полей. Используя уравнение  $\dot{N} = -gQ$  из (3) и выражение для  $Q(N)$  из (6), можно получить окончательно формальное решение в квадратурах в виде гиперэллиптического интеграла для плотности молекул  $N(t)$ :

$$\int_{N_0}^N dN \cdot [Q(N)]^{-1} = \pm gt. \quad (7)$$

Изучим временную эволюцию системы для случая точного резонанса  $\Delta = 0$ , когда разность энергий

двухатомного и молекулярного состояний  $\hbar(2\omega_{01} - \omega_{02})$  точно равна разности энергий обоих фотонов  $\hbar(\omega_2 - \omega_1)$ . Кроме того, положим  $N_0 = 0$ , то есть считаем, что в начальный момент молекулы отсутствуют в системе. Из (6) и (7) следует, что если  $N_0 = 0$  и, кроме того,  $f_{20} = 0$ , то эволюция системы отсутствует, то есть в любой момент времени  $N = 0$ ,  $f_2 = 0$ , а  $n = n_0$ ,  $f_1 = f_{10}$ . Таким образом, процесс индуцированной рамановской атомно-молекулярной конверсии невозможен, если в начальный момент одновременно отсутствуют молекулы и фотоны  $f_2$ , являющиеся продуктами реакции. Для того чтобы реакция превращения начала осуществляться, необходимо “выпрыгнуть” в систему какое-то количество фотонов конечного состояния ( $f_{20} \neq 0$ ). Как видно из (1) и (2), это обстоятельство обусловлено сложным индуцированием процесса.

Пусть теперь  $f_{10} \neq 0$ ,  $f_{20} \neq 0$ ,  $n_0 \neq 0$ , а  $N_0 = 0$ . Тогда из (6) и (7) видно, что временная эволюция функции  $N(t)$  будет периодической либо аperiodической в зависимости от соотношения между величинами  $n_0$  и  $f_{10}$ . Если  $f_{10} < n_0/2$ , то  $N(t)$  будет периодической функцией от времени, изменяющейся от нуля до  $f_{10}$ , тогда как при  $f_{10} \geq n_0/2$  функция  $N(t)$  будет аperiodической, монотонно растущей во времени, асимптотически приближающейся к значению  $n_0/2$ . Проще всего в этом можно убедиться, рассматривая предел заданной плотности фотонов  $f_2$ , то есть считая  $f_{20} \gg \max(f_{10}, n_0/2)$ . Тогда при  $f_{10} \leq n_0/2$

$$N = f_{10} \frac{\sin^2(g\sqrt{n_0, f_{20}}(n_0 - 2f_{10})t)}{1 - 2f_{10}/n_0 \cos^2(g\sqrt{n_0, f_{20}}(n_0 - 2f_{10})t)}, \quad (8)$$

а при  $f_{10} \geq n_0/2$

$$N = \frac{n_0}{2} \frac{\text{sh}^2(g\sqrt{n_0, f_{20}}(2f_{10} - n_0)t)}{\text{ch}^2(g\sqrt{n_0, f_{20}}(2f_{10} - n_0)t) - n_0/2f_{10}}. \quad (9)$$

Отсюда видно, что в рассматриваемом пределе заданной плотности фотонов  $f_{20}$  скорость протекания реакции определяется всеми плотностями ( $n_0$ ,  $f_{10}$ ,  $f_{20}$ ), тогда как амплитуда изменения функции  $N(t)$  определяется меньшей из двух величин:  $f_{10}$  и  $n_0/2$ . Это обусловлено тем, что каждый фотон частоты  $\omega_1$  вместе с одной парой бозе-конденсированных атомов участвуют в образовании одной молекулы (и одного фотона частоты  $\omega_2$ ). Поэтому максимальная плотность образующихся молекул определяется той из двух величин  $f_{10}$  и  $n_0/2$ , которая исчерпывается раньше, то есть меньшей из них. При  $f_{10} < n_0/2$  реакция индуцированного превращения бозе-конденсированных атомов в молекулы является периодической во времени с периодом

$$T = \pi/(g\sqrt{n_0 f_{20}(n_0 - 2f_{10})}). \quad (10)$$

Период колебаний реакции монотонно растет с ростом  $f_{10}$ , обращаясь в бесконечность при  $f_{10} = n_0/2$ . Если плотность исходных фотонов очень мала ( $f_{10} \ll n_0/2$ ), то тогда  $N \approx f_{10} \sin^2(gn_0\sqrt{f_{20}}t)$ , то есть имеют место малоамплитудные колебания плотности молекул с минимальным периодом  $T_0 = \pi/gn_0\sqrt{f_{20}}$ .

На рис.2 представлена временная эволюция плотности молекул при различных значениях параметра

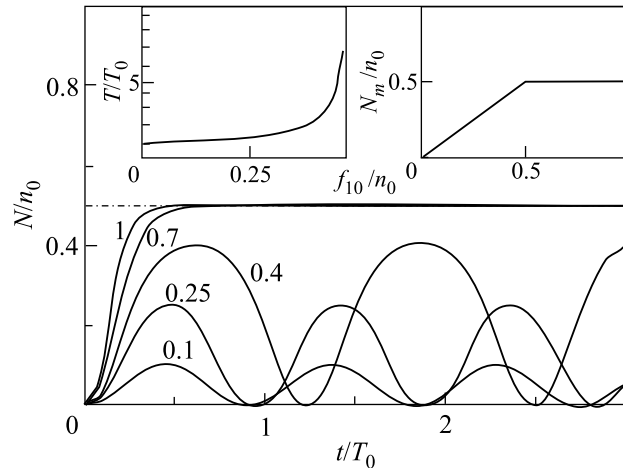


Рис.2. Зависимость плотности молекул  $N/n_0$  от нормированного времени  $t/T_0$  при различных значениях параметра, указанных около кривых. На вставках представлены зависимости нормированных периодов  $T/T_0$  и амплитуды колебаний  $N_m/n_0$  плотности молекул от величины  $f_{10}/n_0$

ра  $2f_{10}/n_0$ , а также зависимость периода колебаний  $T/T_0$  от величины параметра. Видно, что с ростом этого параметра растут амплитуда и период колебаний. При  $2f_{10}/n_0 > 1$  процесс индуцированного связывания двух бозе-конденсированных атомов в молекулу является необратимым во времени.

В пределе заданной плотности фотонов обеих полей ( $f_{10}, f_{20} \gg n_0/2$ ) имеет место только аperiodический режим связывания двух атомов в молекулу:

$$N = \frac{n_0}{2} \text{th}^2(g\sqrt{2n_0 f_{10} f_{20}}t), \quad (11)$$

тогда как в обратном пределе заданной плотности атомов ( $n_0 \gg f_{10}, f_{20}$ ) имеет место периодический режим превращений:

$$N = \frac{f_{10} f_{20}}{f_{10} + f_{20}} \frac{\text{sn}^2(gn_0\sqrt{f_{10} + f_{20}}t)}{\text{dn}^2(gn_0\sqrt{f_{10} + f_{20}}t)}, \quad (12)$$

где  $\text{sn}(x)$  и  $\text{dn}(x)$  – эллиптические функции Якоби [8] с модулем  $k = \sqrt{f_{10}/(f_{10} + f_{20})}$ . Период колебаний  $T$  при этом определяется выражением

$$T = 2K(k)/(gn_0\sqrt{f_{10} + f_{20}}), \quad (13)$$

где  $K(k)$  – полный эллиптический интеграл первого рода с модулем  $k$ . Из (13) видно, что период колебаний функции  $N(t)$  сначала быстро возрастает, достигает максимума при  $f_{10}/f_{20} \approx 0.11$ , а затем монотонно убывает (рис.3).

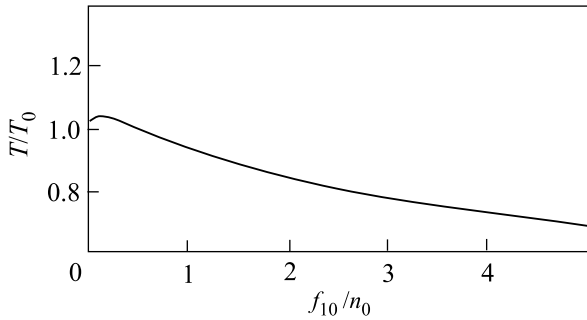


Рис.3. Зависимость нормированного периода колебаний плотности молекул от отношения  $f_{10}/f_{20}$  в пределе заданной плотности атомов

Наконец, в пределе заданной плотности фотонов  $f_1$  с частотой  $\omega_1$  ( $f_{10} \gg f_{20}$ ,  $n_0/2$ ) имеет место только аперидический, необратимый режим превращения атомов в молекулы вне зависимости от соотношения плотностей  $f_{20}$  и  $n_0$ : все атомы превращаются в молекулы, чем процесс и завершается. Решение для  $N(t)$  в этом случае определяется выражением

$$\frac{\frac{1}{2}n_0 f_{20} + N(n_0 + f_{20}) + \sqrt{n_0(n_0 + 2f_{20})} \sqrt{N(N + f_{20})}}{f_{20}(n_0/2 - N)} = \exp(2g \sqrt{n_0 f_{10}(n_0 + 2f_{20})} t). \quad (14)$$

При приближении  $N$  к значению  $n_0/2$  изменение функции  $N(t)$  существенно замедляется: для изменения плотности молекул на бесконечно малую величину  $\Delta N \rightarrow 0$  вблизи  $N \leq n_0/2$  требуется бесконечно большое время. Эта особенность обусловлена тем, что связываются в молекулу пара одинаковых атомов, а не различных.

Отметим роль расстройки резонанса. Из (6) видно, что при отличной от нуля расстройке резонанса  $\Delta$  возможно изменение амплитуд и частот колебаний функции  $N(t)$  и, что более важно, ограничение или полное устранение аперидических режимов временной эволюции. Например, в пределе  $f_{10} \gg f_{20}$ ,  $n_0/2$  при  $\Delta \neq 0$  имеет место периодический режим эволюции, причем частота колебаний растет с ростом  $|\Delta|$ , а максимальное число образующихся молекул меньше половины числа исходных атомов:  $N_{\max} < n_0/2$ .

Наиболее общим является случай, когда все начальные плотности частиц  $N_0$ ,  $n_0$ ,  $f_{10}$  и  $f_{20}$  отличны от нуля. Из (6) видно, что в этом случае возникает дополнительный параметр – начальная разность

фаз  $\Theta_0$ , которая играет чрезвычайно важную роль в эволюции системы. Бифуркационное пространство параметров даже при  $\Delta = 0$  является теперь пятимерным, что существенно затрудняет представление результатов. Отметим, однако, что изменение только лишь начальной разности фаз  $\Theta_0$  при сохранении неизменными величин  $N_0$ ,  $n_0$ ,  $f_{10}$  и  $f_{20}$  также приводит к радикальным изменениям в характере поведения функций  $N(t)$ ,  $n(t)$ ,  $f_1(t)$  и  $f_2(t)$ . Это значит, что подбором начальной фазы  $\Theta_0$  можно управлять временной эволюцией системы. Если, например, рассмотреть случай  $N_0 = f_{20}$ , то из (6) следует, что при  $\Theta_0 = (2k+1)\pi/2$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) функция  $N(t)$  аперидически, необратимо эволюционирует к состоянию  $N = 0$ . Однако даже небольшое отклонение значения начальной фазы  $\Theta_0$  от значения  $(2k+1)\pi/2$  приводит к тому, что функция  $N(t)$  становится периодической, причем период колебаний убывает по мере изменения  $\Theta_0$ , и при  $\Theta_0 = k\pi$  период оказывается минимальным. Отметим здесь, что на исключительную значимость фазы в динамике бозе-конденсированных атомов в двухяном потенциале указывалось ранее в ряде работ [9–13].

Для оценки численных значений частот колебаний необходимо знать величину константы  $g$ . В [1] приведены значения некоторых параметров для атомов и молекул рубидия. Сравнивая гамильтониан (1) с гамильтонианом (2) из [1], для оценки величины константы  $g$  можно получить соотношение  $g = \chi/\hbar f_0$ , где константа  $\chi/\hbar$  в [1] оценивается как  $\sim 7.6 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/2/\text{с}$ . Полагая среднюю плотность фотонов  $f_0 \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , для константы  $g$  получаем оценку:  $g \approx 7.6 \cdot 10^{-18} \text{ м}^9/2/\text{с}$ . Подсчитаем теперь минимальный период колебаний  $T_0$  по формуле  $T_0 = \pi/gn_0\sqrt{f_0}$ . При плотности атомов  $n_0 \approx 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , получаем  $T_0 \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ с}$ , а частота осцилляций оказывается  $\sim 1.5 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ . Этот результат согласуется с результатом численного эксперимента в [1].

Из представленных результатов следует, что возможно существование осцилляций плотности атомного и молекулярного бозе-конденсатов. Существенная зависимость эффекта индуцированной рамановской атомно-молекулярной конверсии от начальной разности фаз свидетельствует о роли когерентности. Отметим, что аналогичная конверсия в термализованной системе атомов не может сопровождаться подобными коллективными осцилляциями из-за отсутствия фазовой когерентности в атомной системе.

1. D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 5029 (2000).

2. M. Koštrun, M. Mackie, R. Côté et al., Phys. Rev. A **62**, 063616 (2000).
3. J. Javanainen and M. Mackie, Phys. Rev. A **59**, R3186 (1999).
4. R. Wynar, R. S. Freeland, D. J. Han et al., Science **287**, 1016 (2000).
5. P. S. Julienne, K. Burnett, Y. B. Band et al., Phys. Rev. A **58**, R797 (1998).
6. C. M. Savage, J. Ruostekoski, and D. F. Walls, Phys. Rev. A **57**, 3805 (1998).
7. J. Ruostekoski and D. F. Walls, Phys. Rev. A **55**, 3625 (1997); A **56**, 2996 (1997).
8. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, М.: Наука, 1971.
9. J. Javanainen, Phys. Rev. Lett. **57**, 3164 (1986).
10. P. Öhberg and S. Stenholm, Phys. Rev. A **59**, 3890 (1999).
11. Л. П. Питаевский, УФН **168**, 641 (1998).
12. A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S. R. Shenoy, Phys. Rev. Lett. **79**, 4950 (1997).
13. S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni et al., Phys. Rev. A **59**, 620 (1999).