

旋波近似下光场与原子电四极矩的相互作用对原子基态的修正

纪晨晨 胡 洁

(首都师范大学物理系,北京 100048)

摘 要

光场与原子的相互作用是量子光学研究的最主要问题之一,处理光场和物质的相互作用可以在不同的理论框架中进行.本文依照半经典理论对该问题进行研究,考虑了一个金属碱原子与振荡光场的谐振耦合在旋波近似下的结果,研究并对比了不同原子序数的碱金属原子的电偶极项和电四极项与光场相互作用对原子基态的影响.

关键词:旋波近似,电偶极,电四极,振荡光场.

中图分类号:O413.1

0 引 言

由电场的多级展开理论,刚性多极子在外电场中的势能为^[1]

$$U = Q\varphi_{\text{外}}(0) + \vec{P} \cdot (\nabla\varphi_{\text{外}})_0 + \frac{1}{6} \vec{D} : (\nabla\nabla\varphi_{\text{外}})_0 + \dots, \quad (1)$$

其中等号右边第一项是电量为 Q 的点电荷的势能,第二项 $U_d = -\vec{P} \cdot \vec{E}_{\text{外}}$ 代表电偶极矩为 \vec{P} 的偶极子的势能,第三项 $U_q = -\frac{1}{6} \vec{D} : \nabla\nabla\vec{E}_{\text{外}}$ 代表电四极矩为 \vec{D} 的四极子的势能,它与外场的变化率有关,由于微观粒子尺度较小,外电场在这范围内缓变的条件常能成立,因此能用点电荷和偶极子的势能来代表整个系统的势能,当电四极势较大时,则需要考虑电四极项的影响.中性原子或分子的总电量为零,它在外电场中的势能可用偶极子和电四极子的势能来代表.

1 电偶极项对原子基态影响

1.1 光与物质耦合

由于磁场相互作用比电场相互作用弱很多,因此这里只考虑电场作用.电子处于固定轨道,只有吸收或放出光子,才会改变状态,故认为电子分布不

变^[2].中性原子或分子与光的相互作用常常用偶极相互作用来描述,电偶极哈密顿量为

$$\hat{H}_d = \vec{d} \cdot \vec{E}(t) = \sum_{j=x,y,z} d_j E_j^0 \cos(\phi_j - \omega t), \quad (2)$$

其中 $\vec{d} = -e \sum_{\gamma} \vec{r}_{\gamma}$ 是第 γ 个电子的位矢,选取与原子核相对静止的参考系,原子核位于原点, ϕ_j 指相位,可依赖于 x, y, z , (2) 式第二项的负号已被吸收到相位中^[3].本节考虑到二阶微扰,研究上述偶极相互作用对原子基态的影响,这里的原子基态指的是在确定的主量子数下的最低能级,已在图 1 中画出.

图 1 表示碱金属原子中的基态 S 电子轨道和带有激发能 E_e 的激发 P 轨道间的最低能量电偶极跃迁,即单电子激发.

图 1 中所示的 $(n)S$ 态是在确定的主量子数 n 下的最低能级,即本文中的原子基态,考虑光与原子耦合后,该基态能级将发生变化,这个能级移动就是本文给出的光与原子耦合项引起的能量修正.

电子轨道角动量 \hat{L}^2 有本征态 $\{|l=0, m_l=0\rangle, |l=1, m_l=0, \pm 1\rangle\}$, \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 对应的本征值分别为 $\hbar^2 l(l+1)$ 和 $\hbar m_l$, 沿着量子化 z 轴的电子自旋角动量本征态为 $\{|s=1/2, m_s=\pm 1/2\rangle\}$. 同理,原子核自旋 \hat{I} 规定了本征态 $\{|i, m_i=-i, \dots, i\rangle\}$ ^[2]. 在碱金属原子中,有三个激发态能量标度:基态激发能 E_e , 精细结构常数 Δ_{FS} (总角动量 $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$), 以及特有的超精细结构常数 Δ_{HFS} (总角动量 $\hat{F} = \hat{L} + \hat{S} +$

收稿日期:2017-03-03

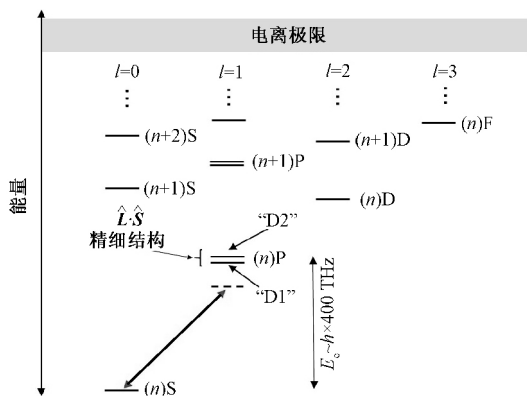


图1 典型的碱金属原子能级结构图,主要的能级跃迁在图中用粗线标注出,该跃迁是由大失谐耦合激光导致的,大小约为 $h \times 400 \text{ THz}$,图中也画出了远小于它的精细结构 Δ_{FS} [2]

\hat{I}). 在任何已知的碱金属原子中,上述参数的大小顺序都为 $E_e \gg \Delta_{FS} \gg \Delta_{HFS}$. 在实验中,激发态的失谐一般要比 Δ_{HFS} 大的多. 因此,为了分析远共振光场对基态原子的影响,需要在电子激发态能级结构上加入 $\hat{L} \cdot \hat{S}$ 精细结构修正项,激发态的超精细结构在这里暂不纳入考虑 [3].

原子哈密顿量如下

$$\hat{H}_{at} = E_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{\hbar} \hat{L} \cdot \hat{S}, \quad (3)$$

其中 E_e 指的是激发态 $(n)P$ 的激发能,这里取基态 $(n)S$ 能级为零点, \hat{P}_e 是投影到电子激发态的投影算符,投影算符 $\hat{P}_g = 1 - \frac{\hat{L}^2}{2\hbar^2}$, 投影到电子基态 $(n)S$ 轨道,对应 $l = 0$; 投影算符 $\hat{P}_e = \frac{\hat{L}^2}{2\hbar^2}$, 投影到电子激发态 $(n)P$ 轨道,对应 $l = 1$, 在这里仅涉及这两个态.

故系统的总哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_{at} + \hat{H}_d. \quad (4)$$

1.2 旋波近似

本文关注的失谐光场与共振区相差不远,有 $|E_e - \hbar\omega| \ll E_e$. 在这个情况中,常通过如下的么正变换形式,将原子激发态矢 $|e\rangle$ 转换到旋转坐标系 $|e'\rangle = e^{i\omega t} |e\rangle$

$$\hat{U}_{rot}(t) = e^{-i\omega t \hat{P}_e} \equiv \hat{P}_g + \hat{P}_e e^{-i\omega t}. \quad (5)$$

经转换后的态矢是 $|\psi'\rangle = \hat{U}_{rot}^\dagger(t) |\psi\rangle$, 算符 $\hat{A}' = \hat{U}_{rot}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}_{rot}(t)$, 且有 $\hat{P}_e' = \hat{P}_e, \hat{U}_{rot}^\dagger(t) = e^{i\omega t \hat{P}_e} = \hat{U}_{rot}^{-1}(t)$. 在此含时的旋转坐标系中,电偶极部分哈密顿量转变为

$$\hat{H}'_d = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_d \hat{U}(t)$$

$$= (\hat{P}_g + \hat{P}_e e^{i\omega t}) \hat{d}_j E_j^0 \cos(\phi_j - \omega t) (\hat{P}_g + \hat{P}_e e^{-i\omega t}) \approx \frac{1}{2} (E_j^* \hat{P}_g \hat{d}_j \hat{P}_e + E_j \hat{P}_e \hat{d}_j \hat{P}_g). \quad (6)$$

在上式中我们引入了复合电场 $E_j = E_j^0 e^{i\phi_j}$, 因为振荡项不改变低频行为,故可用旋波近似法 (rotating wave approximation) 将上式中的振荡频率为 ω 和 2ω 的项去除,从而得到不含时的固定相位的电偶极哈密顿量.

旋波近似后,原子部分哈密顿量为

$$\hat{H}'_{at} = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_{at} \hat{U}(t) = E_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (7)$$

由于么正变换的矩阵含时,为了保持薛定谔方程的不变性,还需在总的哈密顿量中加入一项 $-\hbar\omega \hat{P}_e$.

令 $\hat{H}' = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} - \hbar\omega \hat{P}_e = \hat{H}'_{at} + \hat{H}'_d$, 其中

$$\hat{H}'_{at} = \Delta_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S} = \Delta_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{2\hbar^2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2), \quad (8)$$

这里失谐能 $\Delta_e = E_e - \hbar\omega$ 替代了 E_e .

1.3 有效原子基态哈密顿量

将激发态的项绝热消除,只考虑基态组,旋波近似后的电偶极项 \hat{H}'_d 的影响体现在其二阶微扰上,其有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{eff} = -\hat{P}_g \hat{H}'_d \hat{H}'_{at}^{-1} \hat{H}'_d \hat{P}_g = -\frac{1}{4} E_i^* \hat{P}_g \hat{d}_i \hat{P}_e \hat{H}'_{at}^{-1} E_j \hat{P}_e \hat{d}_j \hat{P}_g, \quad (9)$$

这里我们引入二阶笛卡尔张量算符 $\hat{D}_{ij} = \hat{P}_g \hat{d}_i \hat{P}_e \hat{H}'_{at}^{-1} \hat{P}_e \hat{d}_j \hat{P}_g \equiv \hat{P}_g \hat{d}_i \hat{H}'_{at}^{-1} \hat{d}_j \hat{P}_g$, 上式省略了激发态投影算符 \hat{P}_e , 因为原子基态的电偶极矩为 0, 所以 $\hat{P}_g \hat{d}_i \hat{P}_g = 0$ [2].

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{1}{4} E_i^* \hat{D}_{ij} E_j. \quad (10)$$

接下来讨论两种情形 [2]:

1.3.1 无精细结构情形

若考虑 $\Delta_{FS} = 0$, 那么激发态简并,可完全忽略电子自旋和轨道的耦合作用,则有

$$\hat{H}'_{at} = \Delta_e \hat{P}_e, \quad (11)$$

$$\hat{D}_{ij} = \hat{P}_g \hat{d}_i (\Delta_e \hat{P}_e)^{-1} \hat{d}_j \hat{P}_g = \frac{1}{\Delta_e} \hat{P}_g \hat{d}_i \hat{d}_j \hat{P}_g. \quad (12)$$

引入旋转么正算符 $\hat{R}(\vec{\theta}) = e^{-i\vec{L} \cdot \vec{\theta} / \hbar}$, 由于基态 S 态对应 $l = 0$, 所以 $\hat{L}_x \hat{P}_g = 0$, 因此 $\hat{R}(\vec{\theta}) \hat{D}_{ij} \hat{R}^\dagger(\vec{\theta}) = \hat{D}_{ij}$, 即说明 \hat{D}_{ij} 在旋转变换下是一个标量, 则有

$$\hat{D}_{ij} \propto \delta_{ij}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned}\hat{D}_{ij} &= \frac{1}{3}\delta_{ij}\text{Tr}\hat{D}_{ij} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\hat{D}_{ii} \\ &= \frac{1}{3\Delta_e}\hat{P}_g\hat{d}_i\hat{P}_e\hat{P}_e\hat{d}_i\hat{P}_g\delta_{ij} = \frac{1}{3\Delta_e}|\hat{P}_g\hat{d}_i\hat{P}_e|^2\delta_{ij},\end{aligned}\quad (14)$$

将 \hat{D}_{ij} 代入有效哈密顿量,得到

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= -\frac{1}{12\Delta_e}|\hat{P}_g\hat{d}_i\hat{P}_e|^2E_j^*E_j \\ &= -\frac{1}{12\Delta_e}|\hat{P}_g\hat{d}_i\hat{P}_e|^2|\vec{E}|^2.\end{aligned}\quad (15)$$

电偶极对原子基态二级修正为

$$\begin{aligned}E_{\text{eff}}^d &= \langle g|\hat{H}_{\text{eff}}|g\rangle \\ &= -\frac{1}{12\Delta_e}|\langle l=0|\vec{d}|l'=1\rangle|^2|\vec{E}|^2.\end{aligned}\quad (16)$$

运用氢原子波函数 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 进行计算,将角度部分积分,得

$$E_{\text{eff}}^d = -\frac{e^2}{12\Delta_e}\left|\int_0^\infty R_{n1}R_{n0}r^3 dr\right|^2|\vec{E}|^2.\quad (17)$$

现在令(16)式中的 $-\frac{1}{12\Delta_e}|\langle l=0|\vec{d}|l'=1\rangle|^2 = u_s$,则有效哈密顿量变为

$$\hat{H}_{\text{eff}} = u_s|\vec{E}|^2,\quad (18)$$

上式称为标量光偏移^[21].

这个结果只能在可妥当的忽略精细结构时才能成立,比如当 $\Delta_e = E_e - \hbar\omega \gg \Delta_{\text{FS}}$ 时,这就是一个好的零级近似.该标量光移是一个与光极化无关的势,只与光振幅相关,对红失谐 $\Delta_e > 0$ 的光是吸引势.这是中性原子感受到的电场造成的势场.

没有精细结构耦合的帮助,激光无法改变碱金属原子基态的自旋,这是因为激光只能改变角动量,而碱金属原子基态自旋不包含任何角动量成分.这种情形下激光造成了一个标量势,这个势只依赖于激光的总强度,而不依赖于激光的极化方向(偏振),这就是激光俘获和光晶格的基本原理^[2]. Δ_e 依赖于光频率,由于多普勒效应,它也就依赖于原子速度,这就是激光冷却的基础.

标量势依赖于失谐 $\frac{1}{\Delta_e}$,自发辐射的热化是 $\frac{\Gamma}{\Delta_e}$, Γ 是激发态线宽^[4],因此,实验上为了减少热化,经典工作在大失谐区域.

1.3.2 有限精细结构情形

精细结构包括自旋轨道耦合作用以及与电子自旋无关的相对论修正部分,氢原子的相对论效应比较显著,尤其是其 S 能级,碱金属原子能级的精细结构没有计入这部分效应^[5].

考虑自旋轨道耦合作用后,对应 $l=1$ 的激发态会劈裂成 $|j, m_j\rangle$,它用总角动量 $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ 的量子数 j 和 m_j 表示 $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$,相应精细结构劈裂的失谐能

$\Delta_{1/2}$ 和 $\Delta_{3/2}$ 由 $\hat{H}'_{\text{at}}|j, m_j\rangle = \Delta_j|j, m_j\rangle$ 得到,有 $\Delta_{1/2} = v_e - \Delta_{\text{FS}}, \Delta_{3/2} = v_e + \frac{\Delta_{\text{FS}}}{2}$.

现在考虑 \hat{H}'_{d} 对基态的二阶微扰,有效哈密顿量:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{4}\sum_{i,j,k,x,y,z}E_i^*\hat{D}_{ij}E_j,\quad (19)$$

$$\hat{H}'_{\text{at}} = \frac{1}{\Delta_e}\hat{P}_e - \frac{1}{\Delta_e^2}\frac{\Delta_{\text{FS}}}{\hbar^2}\hat{L}\cdot\hat{S}.\quad (20)$$

由于 $[\hat{L}_i, \hat{d}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{d}_k$ ^[6],则

$$\begin{aligned}\hat{D}_{ij} &= \frac{1}{\Delta_e}\hat{P}_g\hat{d}_i\hat{P}_e\hat{d}_j\hat{P}_g - \frac{1}{\Delta_e^2}\frac{\Delta_{\text{FS}}}{\hbar^2}i\hbar\hat{S}_l\varepsilon_{ilm}\hat{P}_g\hat{d}_m\hat{d}_j\hat{P}_g \\ &= -4u_s\delta_{ij} - i\chi\hbar\varepsilon_{ilm}\hat{S}_l\hat{D}_{mj},\end{aligned}\quad (21)$$

其中 $u_s = -\frac{1}{12\Delta_e}|\langle l=0|\vec{d}|l'=1\rangle|^2\chi = \frac{\Delta_{\text{FS}}}{\Delta_e\hbar^2}$.可见 \hat{D}_{ij} 的第二项比第一项小,大约为 $\frac{\Delta_{\text{FS}}}{\Delta_e\hbar^2} \sim$

$\frac{(10^{10} \sim 10^{12})}{10^{14}}$ 的大小关系,因此

$$\begin{aligned}\hat{D}_{ij} &\approx -4u_s\delta_{ij} - i\chi\hbar\varepsilon_{ilm}\hat{S}_l(-4u_s\delta_{mj}) \\ &= -4u_s(\delta_{ij} + i\chi\hbar\varepsilon_{ijl}\hat{S}_l).\end{aligned}\quad (22)$$

有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{4}E_i^*\hat{D}_{ij}E_j = u_s|\vec{E}|^2 + iu_v(\vec{E}^* \times \vec{E}) \cdot \vec{S},\quad (23)$$

其中 $u_s = -\frac{1}{12\Delta_e}|\langle l=0|\vec{d}|l'=1\rangle|^2$, $u_v = \chi\hbar u_s$

$= \frac{\Delta_{\text{FS}}}{\Delta_e\hbar}u_s$.上式 $u_s|\vec{E}|^2$ 项代表中性原子受到的电场势场的影响,同式(18)相比,式(23)多出的一项 $iu_v(\vec{E}^* \times \vec{E}) \cdot \vec{S}$ 代表中性原子的自旋轨道耦合,是加入精细结构带来的影响,可将其看作人造磁场进行处理^[7-8].

2 电四极项对原子基态影响

2.1 光与物质耦合

上一节中我们讨论了偶极项对碱金属原子基态的影响,但是忽略了电多极矩的影响,现有的涉及光与物质相互作用的研究均只考虑了电偶极项,因此我们想讨论在何情况中,电四极项作为微扰项对基

态会有不可忽略的影响.

我们假设了一个处于基态的碱金属原子,原子

$$\vec{D} = \iiint \rho(r') (3r'r' - r^2 \vec{I}) d\tau' = e \begin{pmatrix} 2d_1^2 - d_2^2 - d_3^2 & 3d_1d_2 & 3d_1d_3 \\ 3d_2d_1 & -d_1^2 + 2d_2^2 - d_3^2 & 3d_2d_3 \\ 3d_3d_1 & 3d_3d_2 & -d_1^2 - d_2^2 + 2d_3^2 \end{pmatrix}. \quad (24)$$

设电场形式为 $\vec{E}(t) = \vec{E}^0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$, 有

$$\vec{\nabla}E = ie^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \begin{pmatrix} k_x E_x^0 & k_x E_y^0 & k_x E_z^0 \\ k_y E_x^0 & k_y E_y^0 & k_y E_z^0 \\ k_z E_x^0 & k_z E_y^0 & k_z E_z^0 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

电四极子在外电场中的势能为

$$U_q = -\frac{1}{6} \vec{D} : \vec{\nabla}E = -\frac{1}{6} \text{Tr}(\vec{D})(\vec{\nabla}E) \\ \equiv i\alpha e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = \alpha [i \cos(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t) - \sin(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)], \quad (26)$$

其中 $\alpha = -\frac{q}{2} [k_x E_x^0 d_1^2 + k_y E_y^0 d_2^2 + k_z E_z^0 d_3^2 + (k_y E_x^0 + k_x E_y^0) d_1 d_2 + (k_z E_x^0 + k_x E_z^0) d_1 d_3 + (k_z E_y^0 + k_y E_z^0) d_2 d_3]$, U_q 为复数形式, 而电四极哈密顿量应取其实际部^[11]. 因此

$$\hat{H}_q = -\alpha \sin(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t) \\ = \frac{i}{2} \alpha (e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r} + i\omega t}). \quad (27)$$

原子哈密顿量为

$$\hat{H}_{at} = E_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{\hbar^2} \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (28)$$

其中 E_e 指的是激发态(n)D 的激发能, 投影算符

$\hat{P}_g = 1 - \frac{\hat{L}^2}{6\hbar^2}$ 投影到电子基态(n)S 轨道, 对应 $l = 0$; 投影算符 $\hat{P}_e = \frac{\hat{L}^2}{6\hbar^2}$ 投影到电子激发态(n)D 轨道, 对应 $l = 2$ 激光的失谐能 Δ_e 为 $\Delta_e = E_e - \hbar\omega$.

2.2 旋波近似

然后同 1.2 中的(6)式处理方式, 对上式进行旋转波近似:

$$\hat{H}'_q = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_q \hat{U}(t) \\ = (\hat{P}_g + \hat{P}_e e^{i\omega t}) \frac{i}{2} \alpha (e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r} + i\omega t}) \cdot \\ (\hat{P}_g + \hat{P}_e e^{-i\omega t}) \\ \approx \frac{i}{2} (-\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}). \quad (29)$$

核位于笛卡尔坐标系原点, 最外层电子的位置为 (d_1, d_2, d_3) . 系统的电四极矩张量为

旋波近似后的原子哈密顿量同(7)式, 为

$$\hat{H}'_{at} = \Delta_e \hat{P}_e + \frac{\Delta_{FS}}{\hbar^2} \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (30)$$

其中 Δ_e 指的是激光的失谐能, 有 $\Delta_e = E_e - \hbar\omega$.

2.3 有效原子基态哈密顿量

我们将激发态绝热消除, 只考虑基态组, 电四极项引起的能量修正是对这个态的能级造成的变化. 旋波近似后的电四极矩项 \hat{H}'_q 对激发态的影响体现在二阶微扰上, 其有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{eff} = -\hat{P}_g \hat{H}'_q \hat{H}'_{at}^{-1} \hat{H}'_q \hat{P}_g \\ = -\hat{P}_g \frac{i}{2} (-\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) \cdot \\ \hat{H}'_{at}^{-1} \frac{i}{2} (-\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}) \hat{P}_g \\ = -\frac{1}{4} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e \hat{H}'_{at}^{-1} \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g. \quad (31)$$

接下来讨论几种情形:

2.3.1 无精细结构情形

考虑 $\Delta_{FS} = 0$, 则有

$$\hat{H}'_{at} = \Delta_e \hat{P}_e, \quad (32)$$

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{1}{4} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e (\Delta_e \hat{P}_e)^{-1} \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g \\ = -\frac{1}{4\Delta_e} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g = -\frac{1}{4\Delta_e} |\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e|^2. \quad (33)$$

电四极项对原子基态二级修正为

$$E_{eff}^q = \langle g | \hat{H}_{eff} | g \rangle = -\frac{1}{4\Delta_e} |\langle l = 0 | \hat{\alpha} | l' = 2 \rangle|^2 |E|^2 \\ = -\frac{1}{4\Delta_e} \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2} |\langle l = 0, m = 0 | \hat{\alpha} | l' = 2, m \rangle|^2 |E|^2. \quad (34)$$

运用类氢原子波函数 $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 进行计算, 将角度部分积分, 得

$$E_{eff}^q = -\frac{e^2}{180\Delta_e} \left| \int_0^\infty R_{n2} R_{n0} r^4 dr \right|^2 [(k_x E_x^0)^2 + (k_y E_y^0)^2 + (k_z E_z^0)^2 + \frac{3}{4} (k_y E_x^0 + k_x E_y^0)^2 + \frac{3}{4} (k_z E_x^0 + k_x E_z^0)^2 + \frac{3}{4} (k_z E_y^0 + k_y E_z^0)^2]. \quad (35)$$

接下来我们将电四极和电偶极对原子基态二级修正进行对比,说明在何种情况下可忽略电四极项的影响,以及何时需要将电四极项纳入考虑,在这里通过取近似来大略地比较二者的量级之差.我们将电四极项对原子基态二级修正做如下近似 $E_{\text{eff}}^q \approx E_{\text{eff}}^q = -\frac{e^2}{180\Delta_e'} \left| \int_0^\infty R_{n2}R_{n0}r^4 dr \right|^2 k^2 |\vec{E}|^2$, 则二者对原子基态的二级修正之比可近似的写为

$$r_d^q = \frac{E_{\text{eff}}^q}{E_{\text{eff}}^d} = \frac{-\frac{e^2}{180\Delta_e'} \left| \int_0^\infty R_{n2}R_{n0}r^4 dr \right|^2 k^2 |\vec{E}|^2}{-\frac{e^2}{12\Delta_e} \left| \int_0^\infty R_{n1}R_{n0}r^3 dr \right|^2 |\vec{E}|^2} = \frac{\left| \int_0^\infty R_{n2}R_{n0}r^4 dr \right|^2 k^2}{15 \left| \int_0^\infty R_{n1}R_{n0}r^3 dr \right|^2} \cdot \frac{\Delta_e}{\Delta_e'} \equiv \eta \cdot \frac{\Delta_e}{\Delta_e'} \quad (36)$$

其中 η 取值与主量子数 n 有关,可见 r_d^q 的取值与 n 和 $\frac{\Delta_e}{\Delta_e'}$ 有关,接下来再分两种情况进行讨论

(1) $\Delta_e \ll \Delta_e'$

首先考虑激光波长取为 600 nm,使得 $E_e \approx \hbar\omega$, 则有 $\Delta_e \ll \Delta_e', \frac{\Delta_e}{\Delta_e'} \approx 10^{-3}$, 图 2 为计算机模拟的 η 随 n 变化的示意图.

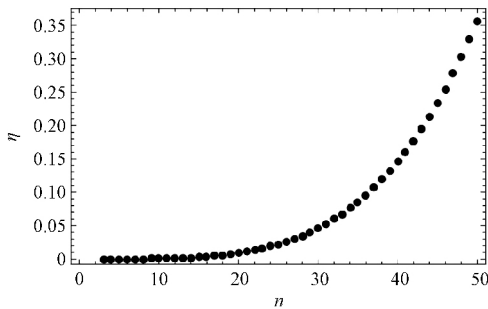


图 2 η 随 n 变化示意图

可见,在这个情况中,电偶极矩对基态的影响远大于电四极矩,因此相对于电偶极矩,电四极矩对基态的影响可忽略不计.

(2) $\Delta_e \gg \Delta_e'$

考虑激光波长取为 300 nm,使得 $E_e' \approx \hbar\omega$, 则有 $\Delta_e \gg \Delta_e', \frac{\Delta_e}{\Delta_e'} \approx 10^3$, 图 3 为该情况下计算机模拟的 η 随 n 变化的示意图.

可见,随着 n 的增大,电四极矩对基态的影响会进一步增大.此时相对于电偶极矩,电四极矩对基态的影响达到了远大于电偶极矩的级别,电偶极矩的

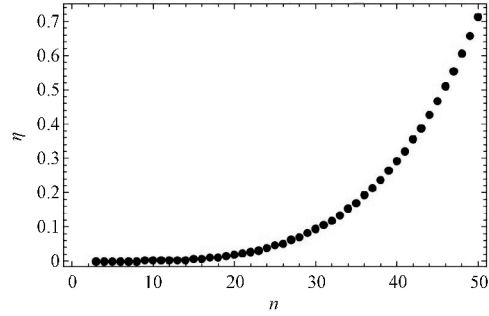


图 3 η 随 n 变化示意图

影响可被忽略.在上一个波长取为 600 nm 的情况下,电偶极矩带来的影响远远超过电四极矩,这和该情况是相反的,也就是说,这两种情况中,电偶极和电四极的影响并不会同时呈现,当一方作用明显时,另一方的效应就被压制.

η 也和波矢 k 有关,它和波长平方成反比,也就是说,减小光场的波长也会使得电四极矩势能项增加.

根据既有的电场理论我们知道,电四极子的势能与外场的变化率有关,也就是说波长相对原子尺寸越小,电四极子势能项越大,对于尺度较小的一般微观粒子,外电场在这范围内缓变的条件常能成立,因此能用点电荷和偶极子的势能来代表整个系统的势能.当涉及到尺度较大的里德堡原子时,波长相对其原子尺度较小,因此它的电四极势较大.这一点和本文计算得到的结论是相吻合的.

2.3.2 有限精细结构情形

现在加入精细结构的影响,对应 $l = 2$ 的激发态会劈裂成 $|j m_j\rangle$, 它被总角动量 $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ 的量子数 j 和 m_j 表示 $j = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$. 相应精细结构劈裂的失谐能 $\Delta_{3/2}$ 和 $\Delta_{5/2}$ 由 $\hat{H}'_{\text{at}} |j m_j\rangle = \Delta_j |j m_j\rangle$ 得到,有 $\Delta_{3/2} = \Delta_e - \frac{3}{2}\Delta_{\text{FS}}, \Delta_{5/2} = \Delta_e + \Delta_{\text{FS}}$.

考虑 H_{q}' 对基态的二阶微扰,有

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= -\frac{1}{4} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e \left(\frac{1}{\Delta_e} \hat{P}_e - \frac{\Delta_{\text{FS}}}{\Delta_e^2 \hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S} \right) \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g \\ &= -\frac{1}{4\Delta_e} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g - \frac{1}{4\Delta_e^2} \frac{\Delta_{\text{FS}}}{\hbar^2} \hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{L} \cdot \hat{S} \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g. \end{aligned} \quad (37)$$

$$\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{L} \cdot \hat{S} = \hat{P}_g \hat{L} \cdot \hat{S} \hat{\alpha} - \hat{P}_g [\hat{L} \cdot \hat{S} \hat{\alpha}] = -\hat{P}_g [\hat{L} \cdot \hat{S} \hat{\alpha}]. \quad (38)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{4\Delta_e} |\hat{P}_g \hat{\alpha} \hat{P}_e|^2 - \frac{3i\hbar}{4\Delta_e^2} \frac{\Delta_{\text{FS}}}{\hbar^2} \hat{P}_g \hat{\beta} \hat{P}_e \hat{\alpha} \hat{P}_g. \quad (39)$$

$$\beta = 2k_x E_x^0 (d_1 d_3 S_2 - d_1 d_2 S_3) + 2k_y E_y^0 (d_1 d_2 S_3 -$$

$$\begin{aligned}
& d_2 d_3 S_1) + 2k_z E_z^0 (d_2 d_3 S_1 - d_1 d_3 S_2) + (k_y E_x^0 + \\
& k_x E_y^0) (d_1^2 S_3 - d_1 d_3 S_1 + d_2 d_3 S_2 - d_2^2 S_3) + \\
& (k_z E_x^0 + k_x E_z^0) (-d_1^2 S_2 + d_1 d_2 S_1 - d_2 d_3 S_3 + \\
& d_3^2 S_2) + (k_z E_y^0 + k_y E_z^0) (d_2^2 S_1 - d_1 d_2 S_2 + \\
& d_1 d_3 S_3 - d_3^2 S_1). \quad (40)
\end{aligned}$$

在加了精细结构的情况中,我们取磁场为0,但是要严格讨论这一项,还需考虑加了磁场的塞曼效应^[9],因此在本文中对加了精细结构的这一项暂不进行详细讨论。

3 结 论

在本文中,我们运用旋波近似等方法,主要研究并对比了不同原子序数的碱金属原子的电偶极项和电四极项与光场相互作用对与原子基态的影响,发现随着主量子数 n 的增大,电偶极矩和电四极矩对基态的影响会随之增大,在光场模长不同的情况下,电偶极和电四极的影响并不会同时呈现,当一方作用明显时,另一方的效应就被压制。此外,减小光的波长也会使得原子电四极势增大。

参 考 文 献

- [1] 俞允强. 电动力学简明教程[M]. 北京:北京大学出版社,2001.
- [2] Goldman N, Juzeliūnas G, Öhberg P, et al. Light-induced gauge fields for ultracold atoms[J]. Reports on Progress in Physics, 2014, 77(12):126401.
- [3] Grimm R, Weidemüller M, Ovchinnikov Y B. Optical dipole traps for neutral atoms[J]. Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics, 2000, 42:95-170.
- [4] Loudon R. The quantum theory of light(3rd Ed)[M]. Oxford:Oxford University Press,2000.
- [5] 黄新民,任亚杰,王剑华. 原子物理学[M]. 北京:科学出版社,2010.
- [6] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum mechanics[M]. London:Pergamon Press,1987.
- [7] Happer W, Mathur B S. Effective operator formalism in optical pumping[J]. Phys Rev, 1967, 163(1):12-25.
- [8] Deutsch I H, Jessen P S. Quantum-state control in optical lattices[J]. Phys Rev A, 1998, 57(3):1972-1986.
- [9] Cui X L, Lian B, Ho T L, et al. Synthetic gauge field with highly magnetic lanthanide atoms[J]. Phys Rev A, 2013, 88(1):011601.

The Corrections to the Atomic Ground State Energy due to the Interaction Between the Atomic Electric Quadrupole and the Optical Field under Rotating Wave Approximation

Ji Chenchen Hu Jie

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048)

Abstract

The interaction between light and matter was one of the most important research topics in quantum optics, which can be studied in different theoretical frameworks. This article was carried out using semiclassical theory, we considered the resonant coupling of an alkali atom in the ground state and an oscillating optical field under rotating wave approximation. The interaction between atomic electric dipole and electric quadrupole with the optical field was analyzed to second order in perturbation theory, respectively, and the corrections to the atomic ground state were compared with different atomic numbers.

Key words: rotating wave approximation, electric dipole, electric quadrupole, oscillating optical field.