

УДК 539.182+539.184

ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ РАДИАЛЬНО-УГЛОВОЙ СТРУКТУРЫ РИДБЕРГОВСКОГО ВОЛНОВОГО ПАКЕТА В РЕЗОНАНСНОМ СВЧ ПОЛЕ

П.А. Волков, М.А. Ефремов, М.В. Федоров

Аннотация

В работе обсуждается весьма интересный эксперимент (Н. Maeda, T.F. Gallagher, PRL 92, 133004 (2004)), в котором измерялась вероятность ионизации ридбергских атомов, возбуждаемых резонансным СВЧ полем и ионизуемых коротким полупериодным импульсом, как функция времени воздействия СВЧ поля до момента включения полупериодного импульса. Интерпретация авторов основана на идее о движении локализованного волнового пакета в фазе с полем. Решая начальную задачу, мы даем альтернативную интерпретацию экспериментальным данным и показываем, что их нельзя объяснить локализацией волнового пакета. Адекватной моделью является модель возбуждения состояний резонансных ридберговских уровней с большими значениями углового момента и связанная с этим модуляция углового и радиального движения электрона в атоме.

Введение

Нерасплывающиеся волновые пакеты привлекают пристальное внимание начиная с первых дней квантовой механики. Понятие о волновых пакетах применительно к квантовой механике было введено в физику одним из ее основателей – Э. Шредингером в 1926 г. [1]. Ключевым и неотъемлемым свойством таких суперпозиций является локализация в координатном или в импульсном пространстве волновой функции описываемой частицы. Основываясь на факте стабильности частиц (в частности, электрона в атоме), Шредингер стремился к тому, чтобы отвечающие частицам волновые пакеты (или «группы волн») были бы нерасплывающимися, и эту идею ему удалось реализовать на примере линейного гармонического осциллятора. Построенный волновой пакет был устойчив, т. е. не расплывался с течением времени. Другим примером может служить движущийся по циркулярной орбите так называемый «тройной» ридберговский электронный волновой пакет, формируемый полем круговой поляризации [2, 3]. Нерасплывающиеся ридберговские волновые пакеты возникают также за счет рамановского переселения уровней в режиме интерференционной стабилизации [4]. Наконец, в атомной оптике можно также создавать узкие и нерасплывающиеся волновые пакеты по переменной центра-масс атомов, рассеивающихся полем резонансной стоячей световой волны [5–8].

Согласно идее Маеда и Галлагера [9], еще один способ формирования узкого и нерасплывающегося электронного волнового пакета – это возбуждение ридберговского атома резонансным СВЧ полем. В их эксперименте [9] атомы Li тремя последовательными импульсами лазера на красителях длительностью по 5 нс каждый возбуждались по цепочке $2s \mapsto 2p \mapsto 3s \mapsto 72p$, и ширина возбуждающего импульса была такова, что селективно заселялся только один ридберговский

уровень $72p$. После этого включалось линейно-поляризованное резонансное СВЧ поле с напряженностью электрического поля $\varepsilon_0 = 1$ В/см и угловой частотой $\omega = 2\pi \times 17.258$ ГГц. Частота СВЧ поля подбиралась в резонансе с частотой, соответствующей переходу $n = 72 \mapsto 73$, $\omega = E_{73} - E_{72} = \omega_K$, где $E_n \approx -1/2n^2$ а.е. есть энергия n -го уровня водородоподобного атома, $\omega_K = 1/n^3$ – классическая кеплеровская частота. Ниже везде, где мы будем использовать атомные единицы, мы будем опускать «а.е.». Период $T_K = 2\pi/\omega_K$, соответствующий кеплеровской частоте ω_K на уровне $n = 72$, равен 57 пс. По прошествии времени t_0 после включения СВЧ поля атомы ионизировались суб-пикосекундным полупериодным импульсом (half-cycle pulse, НСР). Вероятность ионизации как функция задержки t_0 являлась периодической функцией с периодом, равным периоду осцилляций СВЧ поля (кеплеровскому периоду T_K). Такая зависимость наблюдалась более 900 нс, что соответствует более $15\,000 T_K$ [9].

Авторы работы [9] объясняют наблюдаемую зависимость формированием волнового пакета, локализованного как в радиальном, так и в угловом направлении, который под действием СВЧ поля осциллирует вдоль направления его поляризации по классической кеплеровской орбите. Ионизирующий импульс (НСР) не является лазерным импульсом, и на временах взаимодействия с атомом интеграл от напряженности электрического поля отличен от нуля, $\int \varepsilon_{НСР}(t) dt \neq 0$. Благодаря этому за время взаимодействия с полем электрону передается отличный от нуля импульс $\Delta \mathbf{p}_{НСР} = ec \int \varepsilon_{НСР}(t) dt$, который может быть сонаправлен с импульсом электрона, и, следовательно, энергия электрона увеличивается, что приводит к увеличению вероятности ионизации атома; а может быть противонаправлен, что дает уменьшение вероятности ионизации.

1. Постановка и решение начальной задачи

По нашему мнению, такого рода качественные объяснения не описывают реальную картину взаимодействия ридберговского атома с резонансным СВЧ полем. Как хорошо известно, для формирования волнового пакета, локализованного в радиальном направлении, необходимо заселить не один или два, а много ($\Delta n \gg 1$, где Δn – ширина полосы заселения) ридберговских уровней с различными главными квантовыми числами n . Однако в эксперименте [9] напряженность СВЧ поля была слишком мала, чтобы в условиях резонанса преодолеть ангармонизм ридберговских уровней и заселить много уровней по n . По этой причине говорить о том, что волновой пакет является локализованным в радиальном направлении, не приходится. Этот же вывод прямо следует из оценок в квазиклассическом приближении. Действительно, для ридберговского волнового пакета в рамках квазиклассического приближения ширина волнового пакета $\Delta r \sim n^2/\Delta n$ и среднее значения радиуса $\langle r \rangle \sim n^2$. Отсюда следует, что при $\Delta n \sim 1 \div 2$ (именно такая оценка и дана авторами эксперимента [9]) $\Delta r \sim \langle r \rangle$, то есть радиальное распределение не локализовано, и основанную на этом качественную интерпретацию экспериментальных данных приходится отклонить.

Для объяснения полученных результатов [9] мы подробно изучили динамику заселения резонансных уровней и решили начальную задачу, что позволило исследовать как радиальную, так и угловую структуры ридберговского электронного волнового пакета. Показано, что за модуляцию по времени вероятности ионизации с периодом T_K , скорее всего, отвечает угловое распределение, а не радиальное.

Для решения нестационарного уравнения Шредингера разложим волновую функцию электрона в полярных координатах $\Psi(r, \theta, t)$ в ряд по стационарным

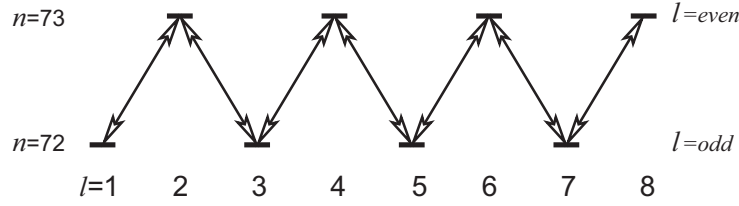


Рис. 1. Общий вид схемы перезаселения ридберговских уровней в СВЧ поле

собственным функциям гамильтониана атома в отсутствии СВЧ поля

$$\psi_{n,l,m_l=0}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos\theta) R_{n,l}(r), \quad (1)$$

где $P_l(\cos\theta)$ – полиномы Лежандра, θ – угол между радиус-вектором электрона \mathbf{r} и направлением напряженности электрического СВЧ поля ε_0 , $R_{n,l}(r)$ – радиальная часть волновой функции, а l и m_l – орбитальный момент и его проекция на направление поляризации СВЧ поля соответственно. В условиях эксперимента (слабое СВЧ поле и резонанс) в атоме заселяются только два соседних по n , $\Delta n = 1$, и вырожденных по l уровни (см. рис. 1).

Вследствие правил отбора для линейно-поляризованного поля, $\Delta l = \pm 1$ и $\Delta m_l = 0$, волновую функцию $\Psi(r, \theta, t)$ можно записать в виде (здесь $n = 72$)

$$\Psi(r, \theta, t) = e^{-iE_{n+1}t} \left\{ e^{i\omega t} \sum_{\text{odd } l} C_l(t) \psi_{n,l}(r, \theta) + \sum_{\text{even } l} D_l(t) \psi_{n+1,l}(r, \theta) \right\}, \quad (2)$$

где C_l и D_l – амплитуды вероятности найти атом в состояниях $|n = 72, l >$ и $|n = 73, l >$ соответственно. Вводя безразмерное время $\tau = [n(n+1)\varepsilon_0/2]t$, в приближении вращающейся волны приводим уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(r, \theta, t)$ (2) к системе уравнений обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned} i \frac{\partial C_l}{\partial \tau} &= -V_l^- D_{l-1} - V_{l+1}^+ D_{l+1} \\ i \frac{\partial D_l}{\partial \tau} &= -V_l^+ C_{l-1} - V_{l+1}^- C_{l+1}, \end{aligned} \quad (3)$$

где V_l^+ и V_l^- – безразмерные дипольные матричные элементы, вычисленные Буревой [10] в квазиклассическом приближении:

$$V_l^\pm = \frac{l}{\sqrt{4l^2 - 1}} \left[J_1'(\epsilon_l) \pm J_1(\epsilon_l) \sqrt{\epsilon_l^{-2} - 1} \right]. \quad (4)$$

Здесь $J_1(z)$, $J_1'(z) \equiv dJ_1(z)/dz$ – обыкновенная функция Бесселя первого рода и ее производная, а $\epsilon_l = \sqrt{1 - l^2/n(n+1)}$ при $l \geq 1$. Система уравнений (3) записана в приближении точного резонанса, $\omega = E_{73} - E_{72}$. Более того, для простоты мы пренебрегаем квантовым дефектом уровней атома Li и полагаем, что уровни энергии являются чисто водородными, $E_n = -1/(2n^2)$. Начальное условие для системы уравнений (3) в условиях эксперимента принимает вид

$$C_l(t = \tau = 0) = \delta_{l,1}, \quad D_l(t = \tau = 0) = 0. \quad (5)$$

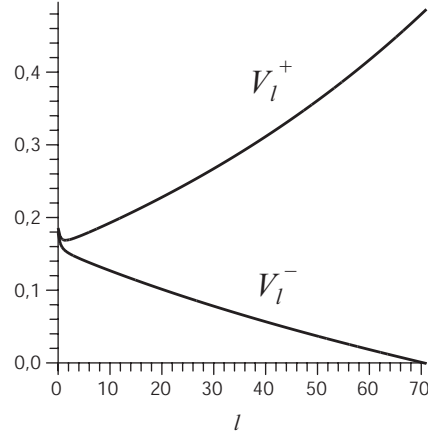


Рис. 2. Зависимость матричных элементов перехода V_l^+ и V_l^- (4) от значений орбитального момента l

Зависимости матричных элементов перехода V_l^+ и V_l^- как функции орбитального момента l представлены на рис. 2. Хорошо видно, что практически при всех l : $V_l^+ \geq V_l^-$, то есть выполняется правило Бете для кулоновских дипольных матричных элементов: при изменении главного квантового числа n орбитальный момент l изменяется с подавляющей вероятностью в ту же сторону, что и n .

Решая систему (3) численно, мы получим функции $C_l(t)$ и $D_l(t)$, определяющие зависящую от времени плотность вероятности обнаружить ридберговский электрон в окрестности точки (r, θ)

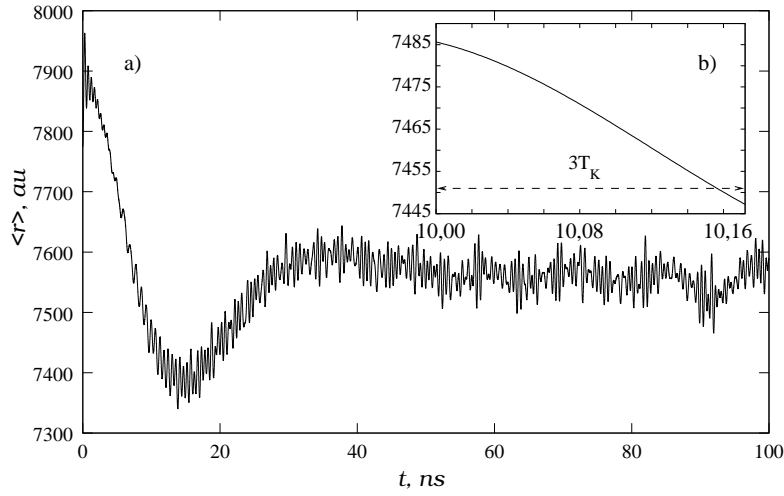
$$\begin{aligned} \rho(r, \theta, t) = |\Psi(r, \theta, t)|^2 = & \left| \sum_{\text{odd } l} C_l(t) P_l(\cos \theta) R_{n,l}(r) \right|^2 + \\ & + \left| \sum_{\text{even } l} D_l(t) P_l(\cos \theta) R_{n+1,l}(r) \right|^2 + \\ & + \left\{ e^{i\omega t} \sum_{\substack{\text{odd } l \\ \text{even } l'}} C_l(t) D_{l'}^*(t) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) R_{n,l}(r) R_{n+1,l'}(r) + c.c. \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Отметим, что частота осцилляций $\omega = \omega_K$ входит только в перекрестное слагаемое, $\propto \sum CD^* + c.c.$. Выделим из радиально-углового распределения плотности вероятности $\rho(r, \theta, t)$ функцию распределения по модулю радиус-вектора электрона $\rho(r, t)$. Для этого проинтегрируем $\rho(r, \theta, t)$ по θ (по элементу подпространства $\sin \theta d\theta$). В перекрестное слагаемое входят произведения полиномов Лежандра $P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta)$ с $l \neq l'$, и в силу свойства ортогональности

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \delta_{l,l'}$$

при интегрировании по θ оно пропадает. В результате этого распределение $\rho(r, t)$ не содержит слагаемых, осциллирующих с частотой осцилляций СВЧ поля ω , и имеет вид

$$\rho(r, t) = \sum_{\text{odd } l} |C_l|^2 R_{72,l}^2(r) + \sum_{\text{even } l} |D_l|^2 R_{73,l}^2(r). \quad (7)$$


 Рис. 3. Зависимость $\langle r \rangle$ от времени

По найденной функции распределения (7) вычислено зависящее от времени среднее значение модуля радиус-вектора $\langle r(t) \rangle = \int_0^{\infty} r^3 dr \rho(r, t)$. Зависимость $\langle r(t) \rangle$ представлена на рис. 3. Несмотря на осцилляции среднего значения модуля радиус-вектора (рис. 3, a), видно, что на временных масштабах порядка кеплеровского периода $T_K = 2\pi/\omega_K$, осцилляции отсутствуют (см. рис. 3, b).

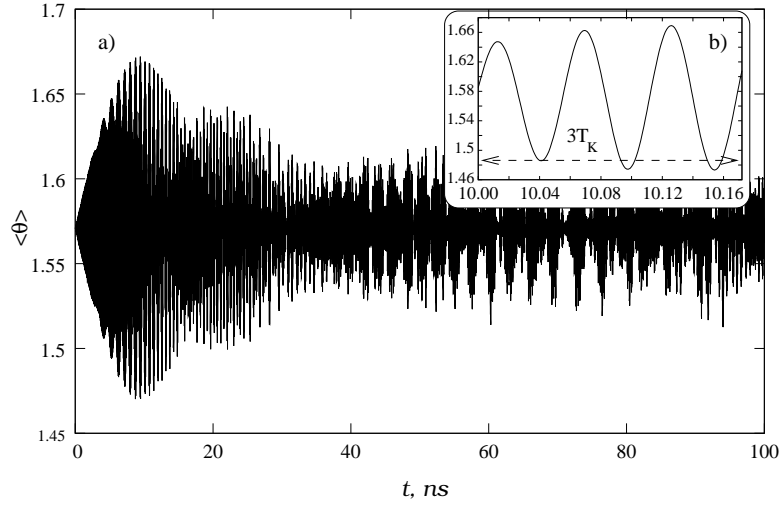
Теперь рассмотрим детально угловое распределение электрона. В противоположность полиномам Лежандра, функции $R_{n,l}$ не являются ортогональными по l

$$Q_{n,l;n',l'} = \int_0^{\infty} r^2 dr R_{n,l}(r) R_{n',l'}(r) \neq \delta_{l,l'}.$$

Поэтому в угловом распределении $\rho(\theta, t)$, которое определяется интегрированием $\rho(r, \theta, t)$ по r (по элементу подпространства $r^2 dr$), слагаемые, осциллирующие с частотой ω сохраняются

$$\begin{aligned} \rho(\theta, t) = & \sum_{\text{odd } l, l'} C_l(t) C_{l'}^*(t) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) Q_{72, l; 72, l'} + \\ & + \sum_{\text{odd } l, l'} D_l(t) D_{l'}^*(t) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) Q_{73, l; 73, l'} \times \\ & \times \left\{ e^{i\omega t} \sum_{\substack{\text{odd } l \\ \text{even } l'}} C_l(t) D_{l'}^*(t) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) Q_{72, l; 73, l'} + c.c. \right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

Интегралы от радиальных волновых функций $Q_{n,l;n',l'}$ были вычислены численно, что позволило найти функцию распределения $\rho(\theta, t)$ (8). В противоположность среднему значению модуля радиус-вектора $\langle r(t) \rangle$ (см. рис. 3) средний угол $\langle \theta \rangle(t) = \int_0^{\pi} \theta \sin \theta d\theta \rho(\theta, t)$ как функция времени содержит осцилляции с кеплеровской частотой, (рис. 4, b). Таким образом, осцилляции с кеплеровской частотой присутствуют только в угловом распределении электрона (проинтегрированном

Рис. 4. Зависимость $\langle \theta \rangle$ от времени

по r) и, как мы полагаем, проявляются при ионизации атома коротким полупериодным импульсом (НСР).

Заключение

Остановимся кратко на полученных результатах. Во-первых, простой анализ экспериментальных условий [9] показал, что при взаимодействии ридбергского атома с резонансным СВЧ полем не происходит формирования долгоживущего электронного волнового пакета, локализованного по радиальной переменной. Основным процессом, происходящим в не слишком сильном резонансном поле, является не заселение ридбергских уровней с различными значениями главного квантового числа n , а миграция населенности по вырожденным подуровням $E_{n,l}$ двух резонансных ридбергских уровней с $n = 72$ и 73 . Такой процесс не может быть описан в терминах состояний Флоке одномерного атома. При учете вырождения по l число близких уровней Флоке становится столь большим (порядка 140), что использование Флоке состояний становится практически бессмысленным. Поэтому наше описание основано на прямом численном решении начальной задачи. Показано, что именно заселение уровней с достаточно большими значениями углового момента l ответственно за модуляцию как углового, так и радиального движений электрона в атоме во внешнем резонансном СВЧ поле. Показано также, что в пределе очень сильного ионизирующего полупериодного импульса модуляция вероятности ионизации с частотой поля определяется, в первую очередь, модуляцией углового движения ридбергского электрона.

Summary

P.A. Volkov, M.A. Efremov, M.V. Fedorov. Formation dynamics of the radial-angular structure of the Rydberg wave-packet in a resonant microwave field.

We discuss a very interesting experiment by H. Maeda, T.F. Gallagher, PRL 92, 133004 (2004), in which Li Rydberg atoms were exposed to an action of a resonant microwave field (switched-on at $t = 0$). Then, in a varying time t_0 , the atoms were ionized by a strong subpicosecond Half-Cycle Pulse. The probability of ionization w_i was measured in its dependence on t_0 and the function $w_i(t_0)$ was found to be oscillating with the classical Rydberg-atom

Kepler period. The original author's explanation of this effect was based on the assumption that the resonant microwave field provided formation of a localized Rydberg wave packet moving along the classical Kepler trajectory and responsible for the observed periodical dependence of $w_i(t_0)$. We suggest here an alternative interpretation of this result. By solving exactly the initial-value problem for a Rydberg atom in a microwave field we find that such a field does not provide any radial localization of a wave packet. On the other hand, it provides a rather efficient repopulation of the resonant Rydberg levels with high values of the angular momentum quantum number l . Migration of population to high- l states is shown to cause a modulation of both angular and radial motion of a Rydberg electron. Such a periodical modulation of the electron motion is believed to provide a proper explanation of the experimental results by Maeda and Gallagher.

Литература

1. *Schrödinger E.* The constant crossover of micro-to macro mechanics // *Naturwissenschaften*. – 1926. – V. 14. – P. 664–666.
2. *Bialynicki-Birula I., Kalinski M., Eberly J.H.* Lagrange equilibrium points in celestial mechanics and nonspreading wave packets for strongly driven Rydberg electrons // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 73. – P. 1777–1780.
3. *Kalinski M. et al.* Rutherford atom in quantum theory // *Phys. Rev. A*. – 2003. – V. 67. – P. 032503-1–032503-5.
4. *Fedorov M.V., Fedorov S.M.* Stabilization and structure of wave packets in Rydberg atoms ionized by a strong light field // *Opt. Express*. – 1998. – V. 3. – P. 271–279.
5. *Chudesnikov D.O., Yakovlev V.P.* Bragg scattering on complex potentials and formation of supernarrow momentum distributions of atoms in light fields // *Laser Phys.* – 1991. – V. 1, No 1. – P. 110–119.
6. *Oberthaler M.K. et al.* Atom waves in crystals of light // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – V. 77. – P. 4980–4983.
7. *Berry M.V., O'Dell D.H.J.* Diffraction by volume gratings with imaginary potentials // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1998. – V. 31. – P. 2093–2101.
8. *Stutzle R. et al.* Observation of nonspreading wave packets in an imaginary potential // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95. – P. 110405-1–110405-4.
9. *Maeda H., Gallagher T.F.* Nondispersing wave packets // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 133004-1–133004-4.
10. *Буреева Л.А.* О квазиклассическом приближении для сил осцилляторов и эффективных сечений радиационных переходов // *Астроном. журн.* – 1968. – Т. 45. – С. 1215–1221.

Поступила в редакцию
03.02.06

Волков Петр Александрович – аспирант Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН (г. Москва).

E-mail: pvolkov@mics.msu.su

Ефремов Максим Алексеевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН (г. Москва).

E-mail: efremov@ran.gpi.ru

Федоров Михаил Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий теоретическим сектором Отдела мощных лазеров Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН (г. Москва).

E-mail: fedorov@ran.gpi.ru