Известия НАН Армении, Физика, т.39, №3, с.139-146 (2004)

УДК 535.016

ПЕРЕХОД ЛАНДАУ–ЗИНЕРА В ФОТОАССОЦИАЦИИ ХОЛОДНЫХ АТОМОВ

А.М. ИШХАНЯН

Инженерный центр НАН Армении

(Поступила в редакцию 5 января 2004 г.)

Изучена нелинейная задача Ландау–Зинера для двухмодовой фотоассоциации холодных атомов. С использованием эквивалентного нелинейного интегрального уравнения Вольтерра для вероятности молекулярного состояния построено первое приближение к решению задачи и выведено приближенное выражение для конечной вероятности перехода в молекулярное состояние в пределе сильной связи.

Система нелинейных полуклассических уравнений, описывающих временную эволюцию атомарного и молекулярного состояний в процессе двухмодовой фотоассоциации атомарного Бозе–Эйнштейновского конденсата в поле квазирезонансного лазерного излучения в приближении вращающейся волны имеет вид [1]:

$$i\frac{da_1}{dt}=U(t)e^{-i\delta(t)}\overline{a}_1 a_2, \quad i\frac{da_2}{dt}=\frac{U(t)}{2}e^{i\delta(t)}a_1 a_1, \tag{1}$$

где a_1 и a_2 являются амплитудами, соответственно, атомарного и молекулярного состояний, $U=U(t)$ – частота Раби, а $\delta=\delta(t)$ – функция модуляции расстройки частоты.

Ранее нами было показано, что для моделей с постоянной амплитудой поля $(U=U_0=\mathrm{const})$ данная система при начальном условии $a_2(-\infty)=0$ эквивалентна следующему нелинейному уравнению Вольтерра для вероятности молекулярного состояния $p=|a_2|^2$ [2]:

$$p(t)=\frac{U_0^2}{2}\int_{-\infty}^{t}K(t,x)(1-8p(x)+12p^2(x))dx, \tag{2}$$

где *ядро* $K(t,x)$ задается формулой

$$K(t,x)=\left(C_\delta(t)-C_\delta(x)\right)\cos\left(\delta(x)\right)+\left(S_\delta(t)-S_\delta(x)\right)\sin\left(\delta(x)\right) \tag{3}$$

с функциями C_δ и S_δ, определяемыми как

$$C_\delta(t)=\int_{-\infty}^{t}\cos\left(\delta(x)\right)dx, \quad S_\delta(t)=\int_{-\infty}^{t}\sin\left(\delta(x)\right)dx. \tag{4}$$

Данное уравнение позволяет в случае малых U_0^2 построить решение задачи в виде равномерно сходящегося ряда, используя последовательные приближения Пикара [3]. Противоположный же предел сильного взаимодействия невозможно трактовать подобным образом. В предыдушей работе [4] мы исследовали этот предел с помощью некоторого предельного нелинейного уравнения первой степени. В настоящей работе мы покажем, что более углубленное рассмотрение режима сильного взаимодействия может быть проведено на основе (точного) интегрального уравнения Вольтерра (2). Ниже мы приводим подобную трактовку, которая к тому же примечательна и тем, что дает обоснование применению предельного уравнения, использованного нами ранее. Хотя мы ограничиваемся здесь лишь рассмотрением модели Ландау–Зинера, представленный подход является общим и с небольшими изменениями может быть применен и в случае других аналогичных моделей пересечения термов.

В модели Ландау–Зинера амплитуда поля постоянна, а расстройка частоты линейно пересекает ноль: $U = U_0 = \text{const}$, $\delta_t = 2\delta_0 t$. Уравнение (2) можно переписать в виде интегрального уравнения второго рода

$$p(t) = \frac{\lambda}{4} f(t) - 4\lambda \int_{-\infty}^{t} K(t,x)\left(p(x) - \frac{3}{2} p^2(x)\right) dx, \qquad (5)$$

где $\lambda = U_0^2 / \delta_0$ – параметр Ландау–Зинера, а *вынуждающая* функция $f(t)$ имеет вид

$$f(t) = \frac{\pi}{2\delta_0}\left\{\left[\frac{1}{2} + C\left(\sqrt{\frac{2\delta_0}{\pi}}t\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{2} + S\left(\sqrt{\frac{2\delta_0}{\pi}}t\right)\right]^2\right\}, \qquad (6)$$

где C и S являются функциями Френеля [5].

Нетрудно видеть, что в случае сильной связи, когда $\lambda >> 1$, вынуждающая функция $f(t)$, заданная формулой (6), не может быть использована в качестве приемлемого начального приближения для практических расчетов, используя последовательные приближения Пикара, поскольку в этом случае $p_0(+\infty) = \lambda f(+\infty)/4 = \lambda\pi/4 >> 1$. По этой причине следует искать другие подходы. Рассмотрим преобразование интегрального уравнения (2), используя подстановку $p = p_0 + u$ с некоторой определяемой впоследствии функцией $p_0(t)$. Для функции $u(t)$ имеем следующее интегральное уравнение:

$$u(t) = f_0(t) - 4\lambda \int_{-\infty}^{t} K(t,x)\left[\left(1 - 3p_0(x)\right)u(x) - \frac{3}{2}u^2(x)\right] dx \qquad (7)$$

с вынуждающей функцией $f_0(t)$, определяемой как

$$f_0(t) = -p_0 + \frac{\lambda}{2}\int_{-\infty}^{t} K(t,x)(1 - 8p_0(x) + 12p_0^2(x))dx. \qquad (8)$$

Понятно, что чем лучше приближение $p_0(t)$, тем меньшим окажется $f_0(t)$ [f_0 будет тождественным нулем в случае, если p_0 является точным решением уравнения (2)]. Можно легко проверить, что функция $f_0(t)$ подчиняется следующему линейному неоднородному дифференциальному уравнению:

$$f_0''' - \frac{f_0''}{t} + 4t^2 f_0' = -\left\{ p_0''' - \frac{p_0''}{t} + 4\left[t^2 + \lambda(1-3p_0)\right] p_0 + \frac{\lambda}{2t}\left(1 - 8p_0 + 12p_0^2\right)\right\}. \quad (9)$$

Заметим, что однородная часть этого уравнения не зависит от λ. Значит, для получения по возможности малого решения мы потребуем, чтобы слагаемые, пропорциональные λ, и член $4t^2 p_0'$, который не ограничен на бесконечном временном интервале, взаимно уничтожались в неоднородной части, которая взята в фигурные скобки. Это даст для $p_0(t)$ *предельное* нелинейное уравнение первого порядка, использованное в [4]:

$$4\left[t^2 + \lambda(1-3p_0)\right] p_0' + \frac{\lambda}{2t}\left(1 - 8p_0 + 12p_0^2\right) = 0. \quad (10)$$

(Здесь следует обратить внимание на то, что данный выбор p_0 не является единственно возможным. В действительности, к полученному уравнению можно добавить произвольные слагаемые порядка $o(\lambda)$ и меньше, скажем, к примеру, порядка $1/\lambda$ без изменения ведущего асимптотического члена.)

Как уже отмечалось в работе [4], уравнение (10) имеет ряд независимых решений, среди которых присутствуют тривиальные $p_0 = 1/2, 1/6$ и ряд нетривиальных. Для построения подходящего начального приближения можно скомбинировать эти частные решения. В результате получаем

$$p_0(t) = \frac{1}{6} + \frac{2t}{9\lambda}\left(t + \sqrt{t^2 + \frac{3\lambda}{2}}\right), \quad t < \sqrt{\frac{\lambda}{2}}, \quad (11)$$

$$p_0(t) = \frac{1}{2}, \quad t > \sqrt{\frac{\lambda}{2}}. \quad (12)$$

Это довольно хорошее, применимое почти повсюду приближение (исключением является точка $t = \sqrt{\lambda/2}$, в которой мы сталкиваемся с разрывом производных). Действительно, уравнение (9) теперь принимает вид

$$f_0''' - \frac{f_0''}{t} + 4t^2 f_0' = -\left\{ p_0''' - \frac{p_0''}{t}\right\}. \quad (13)$$

Поскольку функция p_0, задаваемая выражением (11), зависит от переменной $t/\sqrt{\lambda}$, а правая часть уравнения (13) содержит только производные p_0 второго и третьего порядков, то ясно, что неоднородная часть полученного уравнения имеет порядок (как минимум) $1/\lambda$. Важно, что этот член ограничен везде, за исключением начала координат. Следовательно, решение уравнения (13) также имеет порядок $1/\lambda$. Значит, решение (11)-(12) обеспечивает довольно хорошую вынуждающую функцию для решения интегрального уравнения для функции первого приближения $u(t)$ – уравнения (7) – последовательными приближениями Пикара [ср. с вынуждающей функцией $p_0 = \lambda f(t)/4$ уравнения (5), которая порядка λ]. Однако здесь мы сталкиваемся с другой проблемой, состоящей в том, что, хотя общее решение однородной части уравнения (13) и находится легко, поскольку это – уравнение S- и C-функций Френеля, частное решение этого уравнения для предельной функции (11) не может быть записано в аналитическом виде. Возможным способом преодоления этой трудности является обращение к дифференциальному уравнению для p:

$$p''' - \frac{p''}{t} + 4\left[t^2 + \lambda(1-3p)\right]p + \frac{\lambda}{2t}(1 - 8p + 12p^2) = 0\,. \qquad (14)$$

Доказав, что предельная функция (11) является хорошим начальным приближением, мы можем линеаризировать это уравнение, применив ту же замену $p = p_0 + u$. В итоге, пренебрегая (малыми) нелинейными членами, получаем линейное уравнение:

$$u_{ttt} - \frac{1}{t}u_{tt} + 4\left[t^2 + \lambda(1-3p_0)\right]u_t - \frac{4\lambda}{t}(1 - 3p_0 + 3p_{0t}t)u + \left(p_{0ttt} - \frac{1}{t}p_{0tt}\right) = 0\,. \quad (15)$$

Решение этого уравнения в области $t > \sqrt{\lambda/2}$ получается путем преобразования его заменой $u = 1/2 - \nu$ в уравнение для линейной задачи Ландау–Зинера с параметром λ, замененным на $-\lambda/2$. Однако, точное решение для области $t < \sqrt{\lambda/2}$ неизвестно. Поэтому обратимся к асимптотическим методам.

Отметим, что в области $0 \le t \le \sqrt{\lambda/2}$ мы встречаем сразу несколько трудностей. В первую очередь, как сразу видно из уравнения (14), это – сингулярность в точке $t = 0$. Именно этой особенностью обусловлен неадиабатический переход в квантовой системе, управляемой исходными уравнениями (1). Во-вторых, в окрестности точки $t = \sqrt{\lambda/2}$ необходимо использовать отдельное приближение нулевого порядка. Кроме того, следует заметить также, что точка $t = \sqrt{\lambda/2}$ является поворотной для линеаризированного уравнения (15), поскольку в этой точке исчезает член $t^2 + \lambda(1-3p_0)$. В линейном случае именно эта поворотная точка ответственна за установление осцилляционного режима в области $t > \sqrt{\lambda/2}$ после неосцилляционной предыстории при $t < \sqrt{\lambda/2}$. Однако в рассматриваемом нелинейном случае из-за нелинейных членов уравнения (14) роль этой поворотной точки в значительной мере меняется. Как следствие, развитие процессов в окрестности критической точки происходит более сложным образом и переход между осцилляционным и неосцилляционным режимами становится более резким.

И все же, мы покажем сейчас, что для всей области изменения времени $-\infty < t < \sqrt{\lambda/2} + \sqrt{1/\lambda}$, включающей окрестности наиболее важных точек $t = 0$ и $t = \sqrt{\lambda/2}$, можно построить *единое*, равномерно сходящееся приближение.

Для достижения этой цели рассмотрим следующую факторизацию уравнения для $u(t)$:

$$\left(\frac{d}{dt}-\frac{1}{t}\right)\left(u''+4\left[t^2+\lambda(1-3p_0)\right]u+p_0''-6\lambda u^2\right)-4tu=0. \qquad (16)$$

Далее заметим, что в области $0<t<\sqrt{\lambda/2}$ функцию $p_0(t)$ можно приближенно представить в виде

$$p_0=\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}+\frac{t}{\sqrt{2\lambda}}+\frac{t^2}{\lambda}\right)+\ldots, \qquad (17)$$

так что $4[t^2+\lambda(1-3p_0)]\approx 2\lambda(1-t/\sqrt{\lambda/2})$ и $p_0''\approx 2/(3\lambda)=\text{const}$. При этом сразу видно, что, если u становится порядка $1/\lambda$, то член $-6\lambda u^2$ становится того же порядка, что и p_0'', т.е. $\sim 1/\lambda$, в то время как последний член остается малым при $t\le\sqrt{\lambda/2}$. Следовательно, в дифференциальном уравнении (16) пренебрежем на время последним членом, понижая таким путем порядок уравнения, а нелинейный член $-6\lambda u^2$ далее будем рассматривать как возмущение. Прямым способом выполнения этой процедуры является замена u^2 на постоянную, которая может быть подобрана впоследствии при подстановке полученного в итоге решения в уравнение (13) для вынуждающей силы $f(t)$, с последующим требованием, чтобы неоднородный член оказался порядка $o(1/\lambda)$, устраняя таким образом члены порядка $1/\lambda$. Заметим, что в ходе последнего действия мы фактически принимаем во внимание также и член $-4tu$, которым мы временно пренебрегли на ранней стадии. Как явствует из изложенного, описанная техника является определенной разновидностью метода растянутых параметров [6] (мы изменяем постоянную $2/(3\lambda)$, порожденную членом p_0''), которая, помимо учета нелинейности, очевидно, правильно учитывает и все другие существенные особенности точного исходного уравнения (14), такие как сингулярность в начале координат, поворотная точка при $t=\sqrt{\lambda/2}$ и все члены с производными.

Таким образом, пренебрегая членом $-4tu$ и заменяя $p_0''-6\lambda u^2$ на постоянную, скажем на B, мы легко интегрируем уравнение (16) один раз и получаем *неоднородное* уравнение Эйри [5]

$$u''+2\lambda(1-t/\sqrt{\lambda/2})u+B+C_0t=0, \quad C_0=\text{const}. \qquad (18)$$

Общее решение этого уравнения выписывается сразу:

$$u_{t\le\sqrt{\lambda/2}}=\frac{C_0}{2\sqrt{2\lambda}}+A_1\mathrm{Ai}(\tau)+A_2\mathrm{Bi}(\tau)+u_0(\tau), \quad \tau=\lambda^{1/6}(\sqrt{2}t-\sqrt{\lambda}), \qquad (19)$$

$$u_0=\frac{(B+C_0\sqrt{\lambda/2})\tau^2}{4\lambda^{1/3}}\times \qquad (20)$$

$$\times[{}_0F_1(;2/3;\tau^3/9)\,{}_1F_2(2/3;4/3,5/3;\tau^3/9)-2\,{}_0F_1(;4/3;\tau^3/9)\,{}_1F_2(1/3;2/3,4/3;\tau^3/9)],$$

где Ai и Bi являются функциями Эйри. Подставляя это решение в уравнение (13) и зануляя члены порядка $1/\lambda$, получаем

$$B = \frac{2/9}{\lambda} + \frac{\ln(\lambda)}{\lambda^2}, \quad C_0 = \frac{1}{\lambda} - \frac{\sqrt{3}\ln(\lambda)}{\lambda^2} \tag{21}$$

и далее из начальных условий находим постоянные $A_{1,2}$ [заметим, что для $\vartheta \gg 1$ имеем $A_1 \approx 0$, а постоянная A_2 определяется из уравнения $u_{t\le\sqrt{\lambda/2}}(0) = -2/(9\lambda^2) + 1/(6\lambda^3)$].

Это исключительно хорошее приближение. Формулы (19-21) обеспечивают для интегрального уравнения (7) вынуждающую функцию $f(t)$ порядка $1/\lambda^2$ во всем диапазоне $t \le \sqrt{\lambda/2}$ даже для $\lambda \approx 1$. Это дает хорошее приближение первого порядка для всей области $t \in (-\infty, \sqrt{\lambda/2})$ и для всех $\lambda \ge 1$ (относительная ошибка повсюду порядка 10^{-3} или меньше).

Последним шагом теперь является вычисление конечной вероятности перехода при $t \to +\infty$. С помощью формул (19-21) получаем, что максимальное значение $p(t)$ достигается примерно в точке $t_m = \sqrt{\lambda/2} + \sqrt{1/\lambda}$, а начальные условия для решения, верного для области $t \ge t_m$, в этой точке будут задаваться в виде

$$u(t_m) = -\frac{1}{12\lambda}, \quad u'(t_m) = 0, \quad u''(t_m) = -\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2}{\lambda}}. \tag{22}$$

Процедура сшивки довольно громоздка. Для облегчения этой процедуры удобно выделить фундаментальное решение, которое *неосцилляционно* в области $t > \sqrt{\lambda/2}$. Это *особое* решение выражается через решение линейной задачи Ландау–Зинера, имеющее параметр $-\lambda/2$ вместо λ и аргумент $-t$ вместо t:

$$y_1(t) = \frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, -t). \tag{23}$$

Нетрудно понять, что данное решение играет особую роль, поскольку только одно это решение может быть самостоятельно использовано в качестве подходящего начального приближения. Далее выберем в качестве двух других фундаментальных решений задачи следующие функции:

$$y_2(t) = \left(\frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, +t)\right) \Bigg/ \left(-\frac{1}{2} + e^{\pi\lambda/2}\right), \tag{24}$$

$$y_3(t) = u_3 \Bigg/ \left[\frac{\pi e^{\pi\lambda/4}}{2} \operatorname{Im}\left(\frac{(-1)^{1/4}}{\Gamma(1/2 - i\pi\lambda/4)\Gamma(1 + i\pi\lambda/4)}\right)\right], \tag{25}$$

$$u_3 = t \operatorname{Im}[{}_1F_1(i\lambda/8; 1/2; i\delta_0 t^2)\, {}_1F_1(1/2 - i\lambda/8; 3/2; -i\delta_0 t^2)]. \tag{26}$$

Отметим, что выбранные функции y_2 и y_3 нормированы на единицу при $t \to +\infty$.

Таким образом, решение задачи в области $t > \sqrt{\lambda/2}$ может быть переписано в виде

$$p_{t>\sqrt{\lambda/2}} = \frac{1}{2} + C_1\left(\frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, -t)\right) + C_2 y_2 + C_3 y_3 . \qquad (27)$$

Теперь, из последних двух условий сшивки этого решения с $p_0 + u_{t\le\sqrt{\lambda/2}}$ следует, что должно иметь место соотношение

$$C_2 + C_3 = 0 . \qquad (28)$$

Это условие указывает на то, что в конечную вероятность перехода вносит вклад только неосцилляционное решение y_1 – при этом y_2 и y_3 задают только постепенно исчезающие осцилляции вокруг y_1.

Далее, уравнение для определения коэффициента C_1 решения (27) в явном виде записывается как

$$\frac{1}{2} + C_1\left(\frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, -t = -\sqrt{\lambda/2})\right) = \frac{1}{2} + \left(\frac{C_0}{2\sqrt{2}\lambda} + A_1 \mathrm{Ai}(0) + A_2 \mathrm{Bi}(0)\right), \qquad (29)$$

откуда следует

$$C_1 = \left(\frac{C_0}{2\sqrt{2}\lambda} + \frac{A_1/\sqrt{3} + A_2}{3^{1/6}\Gamma(2/3)}\right) \Big/ \left(\frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, -t = -\sqrt{\lambda/2})\right). \qquad (30)$$

Поскольку $y_1(t \to +\infty) = 1/2$, то мы в конечном итоге приходим к следующему принципиальному результату:

$$p(+\infty) = \frac{1}{2} + \frac{C_1}{2} . \qquad (31)$$

Это выражение является искомой формулой конечной вероятности перехода. Как показывает проверка, данная формула определяет вероятность перехода с относительной ошибкой меньше, чем 10^{-2} для всех $\lambda \ge 1$. При достаточно больших λ ($\lambda \ge 4$) формулы в значительной степени упрощаются, поскольку тогда $A_1 \approx 0$, и A_2 задается в явном виде:

$$A_2 = \frac{1}{\mathrm{Bi}(-\lambda^{2/3})}\left(-\frac{2}{9\lambda^2} - \frac{C_0}{2\sqrt{2}\lambda} - \lambda\frac{(B + C_0\sqrt{\lambda/2})}{4} \times \right.$$
$$\left. \times\left[{}_0F_1\left(;\frac{2}{3};\frac{-\lambda^2}{9}\right){}_1F_2\left(\frac{2}{3};\frac{4}{3},\frac{5}{3};\frac{-\lambda^2}{9}\right) - 2\,{}_0F_1\left(;\frac{4}{3};\frac{-\lambda^2}{9}\right){}_1F_2\left(\frac{1}{3};\frac{2}{3},\frac{4}{3};\frac{-\lambda^2}{9}\right)\right]\right). \qquad (32)$$

Переходя теперь к асимптотам вовлеченных гипергеометрических функций, используя стандартные разложения [5], получаем, что ведущие члены вовлеченных в решение выражений имеют следующие порядки:

$$\left(\frac{C_0}{2\sqrt{2}\lambda} + \frac{A_1/\sqrt{3} + A_2}{3^{1/6}\Gamma(2/3)}\right) \sim -\frac{1}{2\lambda}, \quad \left(\frac{1}{2} - p_{LZ}(-\lambda/2, -t = -\sqrt{\lambda/2})\right) \sim \frac{3\pi}{8}, \qquad (33)$$

так что (31) принимает вид

$$p(+\infty) \approx \frac{1}{2} - \frac{2}{3\pi\lambda}. \tag{34}$$

Таким образом, мы получили интересный результат: конечная вероятность перехода в молекулярное состояние в пределе сильной связи в ведущем порядке обратно пропорциональна параметру Ландау–Зинера. Заметим в заключение, что данная формула описывает монотонно растущую зависимость от λ, в то время как более точные формулы (30-31) показывают, что в зависимости конечной вероятности перехода от параметра Ландау–Зинера в действительности присутствуют малые осцилляции.

Работа выполнена при поддержке грантов Фонда Гражданских Исследований и Разработок США No. NFSAT PH 100-02 и PA No. 0591-2002.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M.Kostrun, M.Mackie, R. Cote,** and **J. Javanainen.** Phys. Rev. A, **62**, 063616 (2000); **M.Mackie** and **J.Javanainen**. Phys. Rev. A, **60**, 3174 (1999).
2. **А.М.Ишханян, Г.П.Черников**. Известия НАН Армении, Физика, **39**, 3 (2004).
3. **F.G.Tricomi**. Integral Equations. New York, Dover Publications, 1985; **R.K.Miller.** Nonlinear Volterra Integral Equations. New York, Benjamin, 1971.
4. **А.М.Ишханян**. Известия НАН Армении, Физика, **39**, 71 (2004).
5. **M.Abramowitz** and **I.A.Stegun**. Handbook of Mathematical Functions. New York, Dover, 1965.
6. **A.H.Nayfeh**. Perturbation Methods. New York, Wiley-Interscience, 1985.

ԼԱՆԴԱՈՒ–ՁԵՆԵՐՅԱՆ ԱՆՑՈՒՄԸ ՍԱՌՆ ԱՏՈՄՆԵՐԻ ՖՈՏՈԱՍՈՑԻԱՑԻԱՅՈՒՄ

Ա.Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Ուսումնասիրված է Լանդաու–Ձեների ոչ-գծային խնդիրը սառն ատոմների երկմոդ ֆոտոասոցիացիայի համար: Օգտագործելով մի համարժեք Վոլտերրայի ոչ-գծային ինտեգրալ հավասարում մոլեկուլային վիճակի հավանականության համար, կառուցված է խնդրի լուծման առաջին մոտավորությունը եւ արտածված է մոտավոր արտահայտություն մոլեկուլային վիճակի անցման վերջնական հավանականության համար ուժեղ կապի սահմանում:

LANDAU–ZENER TRANSITION IN THE PHOTOASSOCIATION OF COLD ATOMS

A.M. ISHKHANYAN

The nonlinear Landau–Zener problem for the two-mode photoassociation of cold atoms is studied. Using an equivalent nonlinear Volterra integral equation for the molecular state probability, the first-order approximation to the solution of the problem is constructed and an approximate expression for the final transition probability to the molecular state is derived for the strong coupling limit.