

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KATEDRA OPTIKY

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Adiabatický transport atomů v optických mřížkách



Vedoucí diplomové práce:
Prof. RNDr. Tomáš Opatrný, Dr.
Rok odevzdání: 2010

Vypracoval:
Miroslav Gajdacz
OFMF, III. ročník

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem vytvořil tuto bakalářskou práci samostatně za vedení prof. RNDr. Tomáše Opatrného, Dr. a že jsem v seznamu literatury uvedl všechny zdroje použité při zpracování práce.

V Olomouci dne 12. května 2010

Poděkování

Rád bych na tomto místě vyjádřil svůj dík prof. RNDr. Tomáši Opatrnému, Dr. nejen za odborné rady, konstruktivní kritiku a konzistentní vedení mé práce, ale především za to, že mě uvedl do světa vědeckého výzkumu a svým příkladem inspiroval k další práci.

Můj dík si zaslouží i Kunal K. Das PhD z Kutztown University of Pennsylvania v USA, jenž s námi spolupracuje na problému adiabatického transportu atomů v optických mřížkách.

Chtěl bych rovněž poděkovat svým rodičům za to, že mě po všech stránkách podporují v získávání vzdělání.

Obsah

1	Cíle práce	4
2	Motivace a uvedení do tématiky	5
2.1	Metody transportu atomu v potenciálových jámách	5
2.1.1	Nadiabatický transport	6
2.1.2	Adiabatický transport	6
2.1.3	Transport atomu mezi nesousedícími jámami	8
2.2	STIRAP	8
2.3	CTAP v trojjámě s bariérami ve tvaru deltafunkcí	10
3	Optické mřížky	12
3.1	Model jednodimenzionální optické mřížky s trojjámovou strukturou	14
4	CTAP v potenciálu složeném z harmonických funkcí	17
4.1	Stacionární Schrödingerova rovnice	17
4.1.1	Lokalizovaný stav	17
4.2	Diferenciální reparametrizace	18
4.3	Podmínky pro CTAP	20
4.4	Protokol CTAP	22
4.5	Volba optimálních vlastností transportu	22
4.5.1	Populace v centrální jámě	23
4.5.2	Tunelování	23
4.5.3	Doba transportu	23
4.5.4	Robustnost	23
4.6	Mapování vlastností transportu v symetrickém potenciálu	24
5	Časová simulace CTAP	28
5.1	Časová Schrödingerova rovnice	28
5.2	Adiabaticita transferu	29
5.3	Velmi pomalý transfer	30
5.4	Středně rychlý transfer	33
5.5	Velmi rychlý transfer	36
5.6	Robustnost transferu	37
6	Závěr	42
7	Dotatky	43
7.1	Numerické řešení stacionární Schrödingerovy rovnice	43
7.2	Algoritmus pro hledání extrémů funkce	44
7.3	Numerická diferenciální reparametrizace	45
7.4	Metoda SSFM a časová Schrödingerova rovnice	47
7.5	Odhad frekvence vlastních kmitů atomu v potenciálu optické mřížky	48

1 Cíle práce

Tato práce má za úkol představit výsledky mého výzkumu v oblasti adiabatického transportu atomů v optických mřížkách. Zaměřil jsem se na proces zvaný CTAP (coherent tunneling via adiabatic passage), při němž dochází k transportu atomu mezi nesousedícími jámami, i když je populace v intermediální jámě po celou dobu transportu velmi nízká. Proces CTAP v potenciálu optické mřížky s periodickou trojjámovou strukturou je realizován jako transport mezi první a třetí jámou.

Primárním cílem práce bylo najít předpis pro časový průběh parametrů (amplitud a fází jednotlivých harmonických složek potenciálu), jenž by uskutečnil CTAP v co nejkratším čase, s minimální populací v intermediální jámě, nízkým tunelováním do sousedních trojjam a zároveň s dostatečnou robustností vůči šumu v parametrech optické mřížky.

Pro dosažení hlavního cíle bylo zapotřebí řešit stacionární a později i časovou Schrödingerovu rovnici, což však pro obecný potenciál složený ze sinusoid nejsou úlohy analyticky řešitelné. Proto jsem si jako dílčí cíle vytkl

1. sestavit program pro hledání předpisu pro CTAP na bázi numerického řešení stacionární Schrödingerovy rovnice,
2. ověřit a kvantitativně vyhodnotit efektivitu transportu numerickým řešením časové Schrödingerovy rovnice pomocí dalšího programu.

2 Motivace a uvedení do tématiky

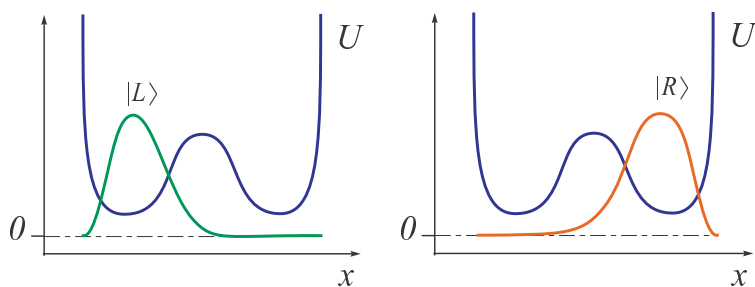
Současné trendy vývoje v oblastech výpočetní a měřicí techniky směřují k zmenšování prostorových a časových škál, na nichž probíhají fyzikální procesy tvořící jádro těchto systémů. Postupně se tak dostáváme na úroveň, kdy musíme uvažovat jednotlivé atomy látky, a kde popis z hlediska newtonovské fyziky zcela selhává. Tady pak přichází ke slovu fyzika kvantová se svým pravděpodobnostním popisem fyzikálních systémů.

Na úrovni kvantové fyziky často probíhají procesy, jež se mohou jevit kontra-intuitivní. Jedním z nich je i tzv. kvantové tunelování, kdy pohybující se částice může s nenulovou pravděpodobností projít potenciálovou bariérou, jejíž maximum má větší potenciální energii, než je celková energie částice. V jámovitém potenciálu pak může docházet k pronikání populace do sousedních jam—neboli k tunelování—i v případě, kdy se potenciál v čase nemění. Naopak vhodnou manipulací potenciálu v čase můžeme dosáhnout cíleného transportu částice nejen do sousedních jam.

Využití těchto jevů může být například v oblasti kvantové informace, nebo při zkoumání vzájemné interakce atomů mezi sebou, či jejich interakce s vnějšími poli.

2.1 Metody transportu atomu v potenciálových jámách

Představme si jednoduchý kvantový experiment. Mějme nekonečně hlubokou, jednorozměrnou potenciálovou jámu konečné šířky. Její dno můžeme rozdělit nějakou bariérou konečných rozměrů na dvě stejné části. Předpokládejme dále, že můžeme nezávisle regulovat hloubku těchto dvou nově vzniklých jam. Pro zjednodušený popis tohoto systému uijeme báze lokalizovaných stavů, jež budeme značit $|L\rangle$ resp. $|R\rangle$ pro levou resp. pravou jámu.



Obrázek 1: Schématické znázornění vlnových funkcí lokalizovaných stavů $|L\rangle$ a $|R\rangle$ v potenciálové dvojjamě.

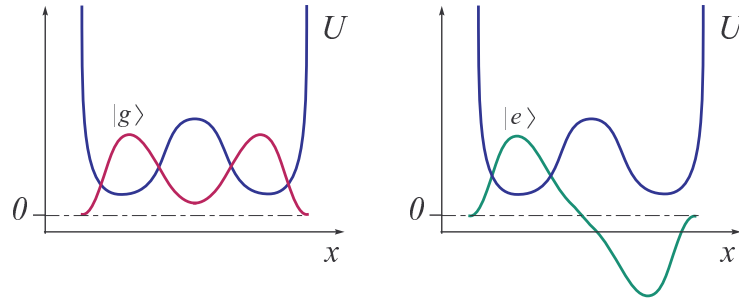
Umístíme-li například do levé jámy částici, máme na výběr ze dvou principiálně odlišných způsobů, jak ji přetransportovat do druhé jámy, a to adiabaticky a neadiabaticky.

2.1.1 Neadiabatický transport

Neadiabatický transport by mohl vypadat třeba tak, že bychom dvojjámu učinili *symetrickou* vzhledem k středové bariéře (nastavením stejné hloubky jam). Stav $|L\rangle$ by se tak stal sudou superpozicí vlastních stavů dvojjámy

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle), \quad |e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle). \quad (1)$$

Tyto stavy mají sice odlišnou energii, ale díky symetrii potenciálu prakticky stejnou hustotou



Obrázek 2: Schématické znázornění vlnových funkcí vlastních stavů symetrické dvojjámy $|g\rangle$ a $|e\rangle$.

pravděpodobnosti. Stavy $|L\rangle$ a $|R\rangle$ můžeme v této bázi zapsat ve tvaru

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle), \quad |R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle - |e\rangle). \quad (2)$$

Nemění-li se hamiltonián systému v čase, pak se každý vlastní stav vyvíjí jako

$$|\psi_j(t)\rangle = e^{-iE_j t/\hbar} |\psi_j(0)\rangle, \quad j = e, g. \quad (3)$$

Stačí tedy pouze počkat, až se fázový rozdíl, s nimž jsou superponovány stavy $|g\rangle$ a $|e\rangle$, změní z 0 na π . K tomu dojde za čas $t = \pi\hbar/(E_e - E_g)$ a tehdy nalezneme částici v pravé jamě, tedy ve stavu $|R\rangle$.

Problém s tímto druhem transportu však je, že musíme mít relativně přesné načasování a přesně symetrický potenciál, aby byl podíl přenesené populace co největší. Navíc pak po dokončení transportu musíme urychleně provést izolaci jam, například zvednutím bariéry nebo dna levé jámy tak, aby nedošlo k pohybu zpět.

2.1.2 Adiabatický transport

Naproti tomu adiabatický transport nám umožňuje mít kontrolu nad stavem systému v každém okamžiku. Ze standardní formulace *adiabatického teorému* [1, 2, 3] vyplývá, že systém připravený ve vlastním stavu okamžitého časově závislého hamiltoniánu zůstane blízko okamžitého

vlastního stavu, pokud se hamiltonián systému mění dostatečně pomalu. Podmínka adiabatického vývoje systému připraveného v určitém vlastním stavu $|\psi_d\rangle$ se často kvantifikuje pomocí faktoru *neadiabaticity* [2, 4] definovaného jako

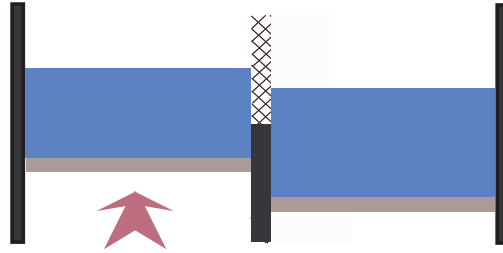
$$\mathcal{A}(\psi_i, \psi_d) \equiv \frac{\hbar \langle \psi_i | \frac{\partial H}{\partial t} | \psi_d \rangle}{|\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \langle \psi_d | H | \psi_d \rangle|^2}, \quad (4)$$

přičemž se za adiabatický považuje proces splňující $|\mathcal{A}|^2 \ll 1$ pro všechna $i \neq d$. Tato podmínka zaručuje, že se stav systému mění téměř jako vlastní stav hamiltoniánu.

Máme-li tedy na začátku částici lokalizovanou v levé jámě, musíme zajistit, aby to byl vlastní stav systému, v našem případě stav základní $|g\rangle = |L\rangle$. Toto bude zajištěno, bude-li dno levé jámy dostatečně nízko vzhledem k pravé jámě. Je-li výška bariéry vhodně zvolena, můžeme uskutečnit adiabatický transport pouze variací hloubek jam a to tak, že budeme postupně srovnávat úrovně jam a základní stav tak začne pomalu pronikat i do sousední jámy. V momentě, kdy bude potenciál symetrický, bude rozložení pravděpodobnosti mezi $|L\rangle$ a $|R\rangle$ rovnoměrné a systém bude ve stavu $|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle)$. Pokračujeme ve variaci tak, aby se dno pravé jámy dostalo níže nežli dno jámy levé, docílíme toho, že se základní stav lokalizuje v pravé jámě.

Výhodami tohoto postupu jsou jednak nižší požadavky na přesnost parametrů potenciálu, teoreticky stoprocentní účinnost a v určitém rozmezí laditelná doba transportu. Naopak nevýhodou může být relativně delší trvání transportu.

Tento typ transportu by se obrazně dal přirovnat k přelévání kapaliny v nádobě se dvěma vertikálně pohybujícími se písty, jenž jsou odděleny pórovitou přepážkou. Místo podmínky adia-



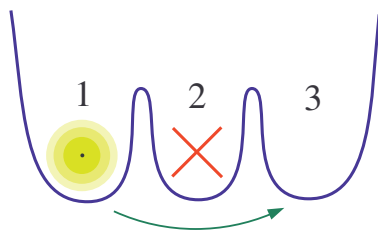
Obrázek 3: Schéma nádoby s písty oddělenými pórovitou přepážkou.

baticity zde můžeme požadovat minimální disipaci energie. Vlivem pronikání kapaliny z oblasti s vyšším tlakem (vyšší úroveň hladiny; komora vlevo) do oblasti s nižším tlakem (nižší úroveň hladiny; komora vpravo) dochází k přeměně mechanické energie na teplo. Pokud budeme s písty pohybovat velmi pomalu, bude rozdíl hladin malý a tudíž i malá disipace energie. Naopak při rychlém pohybu je potřeba ke zvýšení toku kapaliny větší rozdíl tlaků a dochází tak k větším nevratným energetickým ztrátám.

Adiabaticita je tedy jakousi analogií vratnosti. Při nedostatečně adiabatickém ději dochází ke ztrátám populace do ostatních vlastních stavů systému, tedy k jakési disipaci populace. Musíme však stále pamatovat na to, že z fyzikálního hlediska se jedná o zcela odlišné procesy. Při časovém vývoji vlnové funkce nedochází k disipaci energie.

2.1.3 Transport atomu mezi nesousedícími jámami

Rozšířme nyní náš ilustrativní jednorozměrný model o další jámu. Kromě transportu mezi sousedními jámami se nyní můžeme pokusit o velmi zvláštní, přímý adiabatický transport atomu mezi jámami 1 a 3, aniž by se částice nějak výrazně vyskytla v jámě prostřední.



Obrázek 4: Schéma transportu atomu mezi nesousedícími jámami.

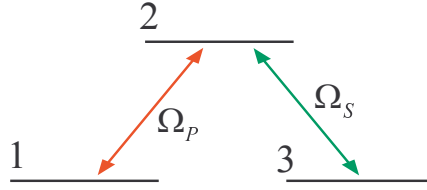
Z hlediska klasické fyziky se takovýto počín může jevit absurdní. Dá se to přirovnat k přemístění pevného, nedělitelného tělesa mezi dvěma místnostmi spojenými chodbou, aniž by se toto těleso kdy vyskytlo v chodbě. Pouhou manipulací s dveřmi a podlahou kolem se postupně začne ztrácet v jedné místnosti a objevovat v druhé. Ze zkušenosti víme, že na makroskopické úrovni je něco takového nemožné.

Prakticky by takovýto transport mohl být velmi užitečný. Nabízí se v případech, kdy se chceme vyhnout prostřední jámě třeba proto, že se tam nachází jiná částice (chceme-li například zabránit změně vnitřního stavu transportovaného atomu nebo vytvoření chemické vazby).

Věnujme se nejdříve jednoduchému trojhladinovému systému.

2.2 STIRAP

Poslední dobou se těší pozornosti mnoha teoretických i experimentálních fyziků proces zvaný STIRAP (Stimulated Raman adiabatic passage)[5, 6]. Pro názornost se zde omezíme pouze na jeho zjednodušenou verzi. Jedná se v podstatě o metodu řízeného přechodu atomu mezi elektronovými metastabilními stavy $|1\rangle$ a $|3\rangle$, aniž by se atom ocitl v nestabilním stavu $|2\rangle$, z něhož velmi rychle samovolně přechází do nějakého nežádoucího stavu mimo uvažovaný systém. Tyto stavy tvoří řetězec v tom smyslu, že atom může přejít ze stavu $|1\rangle$ do $|3\rangle$ pouze prostřednictvím interakce se dvěma fotony (například absorpce levotočivého a emise pravotočivého fotonu), kdy mezičlánkem v tomto procesu je stav $|2\rangle$.



Obrázek 5: Schéma energetických hladin systému v němž může probíhat STIRAP.

Pro jednoduchost předpokládejme, že stavy $|1\rangle$ a $|3\rangle$ mají stejnou energii a dále neuvažujeme rozladění čerpacích laserů. Ve vhodné zvolené bázi pak můžeme hamiltonián systému¹ zapsat jako

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \Omega_P^* & 0 \\ \Omega_P & 0 & \Omega_S \\ 0 & \Omega_S^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

kde $\Omega_P = \frac{-eE_{0P}}{\hbar} \langle 2 | \hat{\mathbf{r}} \cdot \epsilon_P | 1 \rangle$, $\Omega_S = \frac{-eE_{0S}}{\hbar} \langle 2 | \hat{\mathbf{r}} \cdot \epsilon_S | 3 \rangle$, E_{0P} resp. E_{0S} je amplituda elektrické intenzity a ϵ_P resp. ϵ_S je jednotkový vektor ve směru polarizace čerpacího a resp. stokesovského laseru, jenž indukuje stimulovanou absorpci resp. emisi fotonu o frekvenci odpovídající rezonanční frekvenci atomu. Energie vlastních stavů tohoto hamiltoniánu jsou $E_{1,3} = \mp \sqrt{|\Omega_P|^2 + |\Omega_S|^2}$ a $E_2 = 0$.

Nás zajímá právě stav s prostřední energií často označovaný jako *temný stav*² neboli *dark state*

$$|d\rangle = \frac{\Omega_S |1\rangle - \Omega_P |3\rangle}{\sqrt{\Omega_P^2 + \Omega_S^2}}, \quad (6)$$

jenž nám umožní provést adiabatický transport populace ze stavu $|1\rangle$ do $|3\rangle$ bez výskytu ve stavu $|2\rangle$. Dosáhneme toho tak, že nejdříve zapneme pouze čerpání Ω_S mezi stavy $|2\rangle$ a $|3\rangle$. Tím se atom ve stavu $|1\rangle$ stotožní se stavem $|d\rangle$. Následně budeme adiabaticky zapínat laser Ω_P , přičemž atom bude přecházet do liché superpozice stavů $|1\rangle$ a $|3\rangle$. Pak už jen stačí pomalu vypnout laser Ω_S a atom se přesune do stavu $|3\rangle$.

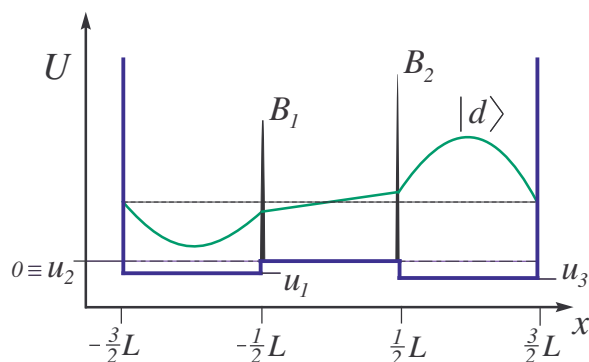
Experimentálně se STIRAP implementuje například průletem atomu skrze dva částečně překrývající se laserové svazky [7]. Prostorová nehomogenita intenzity svazků působí na pohybující se atom jako variace intenzity čerpacích laserů. I když se tepelné atomy pohybují běžně rychlostmi kolem 800m/s a šířka laserového svazku při těchto experimentech je řádově ve zlomcích centimetru, přesto je tento proces dostatečně pomalý na to, aby probíhal adiabaticky.

¹Odvození analogického hamiltoniánu pro dvouhladinový systém je provedeno podrobněji v kapitole *Optické mřížky*.

²Své jméno získal díky nulové interakci s optickým polem.

2.3 CTAP v trojjámě s bariérami ve tvaru deltafunkcí

Prostorová analogie STIRAPu, proces transportu fyzikálních částic mezi nesousedícími potenciálovými jámami, dostal svou vlastní odbornou zkratku CTAP (Coherent tunneling via adiabatic passage). Byl teoreticky zkoumán v různých systémech jako elektrony v kvantových tečkách, Bose-Einsteinův kondenzát, či supravodiče. Zde se omezíme na model popsany v článku [4], jenž poskytuje jednoduché analytické vztahy mezi parametry potenciálu pro CTAP v obdélníkové trojjámě s bariérami ve tvaru delta funkcí. Shrňme si stručně poznatky k nimž dospěli jeho autoři.



Obrázek 6: Temný stav v trojjámě

Trojjáma je popsatelná čtyřmi parametry: výška první a druhé bariéry $B_{1,2}$ a hloubka první a třetí jámy $u_{1,3}$ (hloubka prostřední jámy u_2 byla zvolena jako referenční hladina energie). Potenciál pak můžeme zapsat ve tvaru

$$V(x) = B_1 \delta\left(x + \frac{L}{2}\right) + B_2 \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) + \begin{cases} \infty, & x \leq -\frac{3}{2}L \\ u_1, & x \in \left(-\frac{3}{2}L, -\frac{1}{2}L\right) \\ 0, & x \in \left(-\frac{1}{2}L, +\frac{1}{2}L\right) \\ u_3, & x \in \left(+\frac{1}{2}L, +\frac{3}{2}L\right) \\ \infty, & \frac{3}{2}L \leq x \end{cases}, \quad (7)$$

kde L je šířka jedné jámy.

Hledáme předpis pro časový průběh parametrů potenciálu. Jelikož je adiabatický proces reverzibilní, dostaneme při časovém invertování předpisu zpětný transport atomu z třetí do první jámy a musí tedy nutně existovat předpis, jenž je symetrický v čase vzhledem k momentu, kdy je stejná pravděpodobnost nalezení atomu v první a třetí jámě. To nutně nastane, když budou bariéry stejně vysoké a jámy stejně hluboké, neboli potenciál bude symetrický vzhledem ke středu trojjámy. Takovýto potenciál budeme dále označovat stručně *symetrický*.

CTAP je proces adiabatický (systém je po celou dobu ve vlastním stavu okamžitého hamiltoniánu), potřebujeme proto najít vlastní stav systému, jenž má zanedbatelnou populaci v

prostřední jámě. K tomu se hodí první excitovaný stav $|d\rangle$, jenž je v symetrickém potenciálu lichou funkcí vzhledem ke středu trojjámy a má v tomto bodě uzel. Ukazuje se, že požadavek na minimální populaci v prostřední jámě je ekvivalentní požadavku, aby se uzel vlnové funkce *temného stavu* $|d\rangle$ nacházel ve středu centrální jámy po celou dobu transportu.

Dalším požadavkem přirozeně je, aby proces proběhl v co nejkratším čase. Přípustná rychlost variace parametrů potenciálu je dána amplitudou neadiabaticity (4). Pro jednoduchost stačí uvažovat přechod temného stavu pouze do energeticky nejbližších stavů, tedy stavu základního $|g\rangle$ (ground) a druhého excitovaného $|e\rangle$, neboť kvantitativně klesá neadiabaticita $\mathcal{A}$ nepřímou úměrou se druhou mocninou rozdílu energií $E_d - E_i$. V dobrém přiblížení dosáhneme maximální adiabaticity, budeme-li požadovat $E_d - E_g = E_e - E_d$.

Z analytického řešení vyplývá, že pro naplnění dvou výše zmíněných podmínek, je třeba dna jam svázat nepřímou úměrou s výškami protilehlých bariér a sice

$$u_1 \propto -1/B_2, \quad u_3 \propto -1/B_1. \quad (8)$$

Nyní se uplatní analogie se STIRAPem, neboť dva zbylé parametry ve tvaru $1/B_{1,2}$ můžeme považovat za čerpání mezi lokalizovanými stavy $[|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle]$ a $[|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle]$. Předpis pro CTAP v trojjámě pak můžeme rozdělit na tyto fáze

1. Obě bariéry zvednuty ($1/B_{1,2} \rightarrow 0$); populace lokalizována v první jámě.
2. Rychlé snížení B_2 na vhodnou hodnotu; populace stále jen v první jámě.
3. Adiabatické snížení B_1 na hodnotu B_2 ; symetrické rozložení populace.
4. Adiabatické zvýšení B_2 na počáteční hodnotu; populace přemístěna do třetí jámy.
5. Rychlé zvýšení B_1 na počáteční hodnotu; populace zůstala ve třetí jámě.

Nastínili jsme, co je potřeba k tomu, aby proces CTAP proběhl v trojjámě s bariérami ve tvaru deltafunkcí. V experimentální praxi je však nekonečně hluboká jáma nerealizovatelná, stejně jako nekonečně tenké bariéry. Odvozené analytické vztahy sice dávají dobré výsledky i pro úzké bariéry konečné šířky, nelze je však aplikovat na obecnější potenciál, kdy jsou bariéry zhruba stejné šířky jako je šířka jam a navíc nemají žádné „ostré hrany“.

V takovém případě je situace poněkud složitější a jen těžko bychom hledali analytické řešení třeba pro potenciál složený z harmonických funkcí, který je navíc periodický a musíme uvažovat tunelování do sousedních trojjam. Jelikož však právě v takovémto potenciálu může CTAP nejslibněji nalézt praktickou aplikaci, budeme se v dalších kapitolách zabývat numerickým řešením CTAP v jednodimenzionálním potenciálu tvořeném třemi harmonickými složkami, jenž se dá experimentálně realizovat například pomocí optické mřížky.

3 Optické mřížky

Popíšeme si nyní jakým způsobem vzniká potenciál pro atomy nacházející se v poli stojaté elektromagnetické vlny tvořené protichůdnými laserovými svazky, jemuž se říká *optická mřížka* [6, 8].

Mějme dvouhladinový atom³ s vlastními stavy $|g\rangle$ a $|e\rangle$, jež se liší o energii $\hbar\omega_a$. Po umístění atomu v elektrickém poli, přičteme v prvním přiblížení k původnímu neporušenému hamiltoniánu matici tvaru

$$H'_{ij} = \langle i | -e\vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \vec{r} | j \rangle, \quad (9)$$

představující potenciální energii elektronu, kde $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}) \cos(\omega t)$ je intenzita elektrického pole a $\vec{r}$ je průvodič elektronu. V oblasti, kde má vlnová funkce elektronu nezanedbatelnou hustotu pravděpodobnosti, můžeme považovat elektrické pole za homogenní a vytknout $-e\vec{E}(\vec{r}, t)$ před integrál.

Jelikož má každý z neporušených stavů $|g\rangle$ a $|e\rangle$ nulový dipólový moment, zůstanou nenulové pouze nediagonální elementy matice (9) a pro celkový hamiltonián systému pak můžeme psát

$$H = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega^* \cos(\omega t) \\ \Omega \cos(\omega t) & \omega_a \end{pmatrix}, \quad (10)$$

kde $|\Omega|$ je Rabiho frekvence a Ω je definován předpisem

$$\Omega \equiv \frac{-eE_0}{\hbar} \langle e | \hat{z} | g \rangle, \quad (11)$$

z je složka průvodiče elektronu ve směru elektrického pole, $-e$ jeho náboj a E_0 amplituda elektrické intenzity.

Dosazením obecného stavu ve tvaru $|\psi\rangle = \alpha(t) |g\rangle + \beta(t)e^{-i\omega_a t} |e\rangle$ do časové Schrödingerovy rovnice získáme rovnice pro komplexní koeficienty α a β

$$i\hbar \frac{d\alpha}{dt} = \hbar\Omega^* \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{-i\omega_a t} \beta, \quad (12)$$

$$i\hbar \frac{d\beta}{dt} = \hbar\Omega \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) e^{i\omega_a t} \alpha, \quad (13)$$

kde jsme funkci $\cos(\omega t)$ zapsali pomocí exponenciálních funkcí.

Užitím aproximace rotující vlny tzv. RWA (rotating wave approximation) [6, 9] můžeme nahradit rychle oscilující členy tvaru $e^{\pm i(\omega + \omega_a)t}$ jedničkou, neboť způsobují pouze vysokofrekvenční

³Uvažujeme pouze přechod jehož rezonanční frekvence je blízká frekvenci laseru.

oscilace pravděpodobnosti s velmi malou amplitudou. Pro další zjednodušení zavedeme označení $\delta = \omega - \omega_a$ a užijeme substituce $\beta = e^{-i\delta t} \tilde{\beta}$. Upravené rovnice pak můžeme psát ve tvaru

$$i\hbar \frac{d\alpha}{dt} = \frac{\hbar\Omega^*}{2} \tilde{\beta}, \quad (14)$$

$$i\hbar \frac{d\tilde{\beta}}{dt} = \frac{\hbar\Omega}{2} \alpha - \hbar\delta \tilde{\beta}, \quad (15)$$

a jim odpovídající hamiltonián zapíšeme jako

$$\tilde{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega^* \\ \Omega & -2\delta \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Vlastní energie nového hamiltoniánu jsou

$$E_{1,2} = \frac{\hbar}{2} (-\delta \pm \sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}). \quad (17)$$

Atom v excitovaném stavu velice rychle přejde do stavu základního v důsledku spontánní emise. Výměna hybnosti s emitovaným fotonem může způsobit prostorovou excitaci atomu v optické mřížce a tím i změnu jeho vlnové funkce. Předpokládejme proto, že se atom nachází v základním stavu. Pro snížení efektu excitace (a následné spontánní emise) budeme požadovat, aby bylo rozladění δ dostatečně velké oproti $\frac{\Delta E}{\hbar}$, kde ΔE je spektrální šířka energetické čáry excitovaného stavu.

Zároveň můžeme požadovat $\delta^2 \gg |\Omega|^2$. Vztah (17) pak lze aproximovat jako

$$E_{1,2} = \frac{\hbar}{2} \left[-\delta \pm |\delta| \left(1 + \frac{|\Omega|^2}{2\delta^2} \right) \right]. \quad (18)$$

Aby v případě identicky nulového čerpání Ω byla energie základního stavu (element $\tilde{H}_{11}$ matice (16)) rovna nule nezávisle na znaménku rozladění, dosadíme $+\delta$ za $\pm|\delta|$ do vztahu (18) a získáme tak posunutí energie základního stavu ve tvaru

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar|\Omega|^2}{4\delta}. \quad (19)$$

U stojaté vlny je amplituda kmitů elektrické intenzity—a prostřednictvím rovnice (11) i Rabiho frekvence—prostorově nehomogenní, avšak časově stálá. Atom má vždy tendenci zaujímat stav s nejnižší energií. Pro případ $\delta < 0$, kdy je mřížka rozladěna „do červena“, budou atomy přitahovány do míst s větší amplitudou kmitů, neboť vlivem záporného posuvu tam má jejich základní stav menší energii. Naopak pro $\delta > 0$, tedy rozladění „do modra“, se budou atomy

kmitnám vyhýbat a budou taženy k uzlům stojaté vlny. Jelikož je tato síla konzervativní (nedochází k disipaci energie vlivem spontánní emise), můžeme jí přiřadit potenciál, v našem případě úměrný $|\Omega|^2$ neboli intenzitě světla.

Nejjednodušší optická mřížka vznikne superpozicí dvou protiběžných rovinných vln

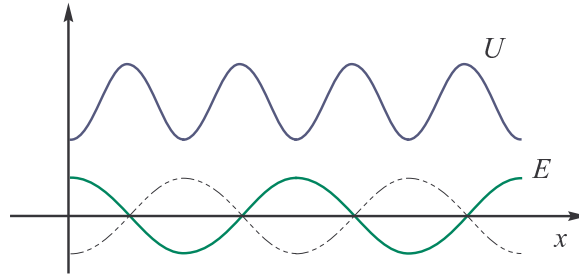
$$\vec{E}_{1,2}(x, t) = \vec{E} e^{i(\pm kx - \omega t)}, \quad (20)$$

$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 = 2\vec{E} \cos(kx) e^{-i\omega t} \quad (21)$$

tvořících stojatou vlnu, kde intenzitu světla a potažmo i výsledný potenciál pro mřížku rozladěnou „do červena“ spočteme jako

$$U \propto -I = -c\epsilon_0 |\vec{E}|^2 = -c\epsilon_0 |E|^2 2[1 + \cos(2kx)]. \quad (22)$$

Všimněme si zdvojení prostorové frekvence oproti vlnočtu světla.



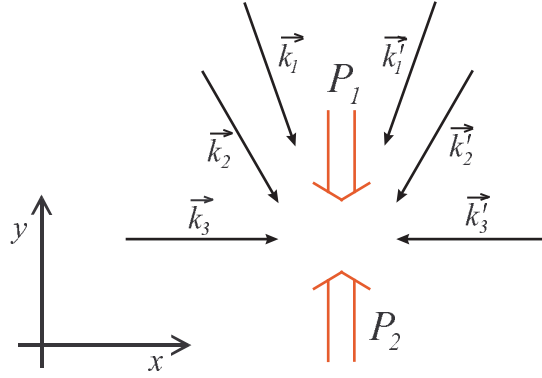
Obrázek 7: Schéma potenciálu „do červena“ rozladěné optické mřížky. Potenciál je úměrný záporně vzaté druhé mocnině amplitudy elektrické intenzity.

3.1 Model jednodimenzionální optické mřížky s trojjámovou strukturou

Ukážeme si nyní jednu z možností, jak vytvořit jednodimenzionální optickou mřížku s periodickou trojjámovou strukturou. K tomu budeme potřebovat tři harmonické komponenty s vlnovou délkou λ , 2λ a 3λ ve směru osy x . Na každou stojatou vlnu je potřeba dvou laserových svazků, celkem tedy šest. Budeme je aproximovat rovinnými vlnami s vlnovými vektory $\vec{k}_{1,2,3}$ a $\vec{k}'_{1,2,3}$ ležícími v rovině xy . Výsledné elektromagnetické pole můžeme zapsat jako

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^3 \vec{E}_j e^{i(\vec{k}_j \vec{r} - \omega_j t + \phi_j)} + \sum_{j=1}^3 \vec{E}_j e^{i(\vec{k}'_j \vec{r} - \omega_j t)}, \quad (23)$$

kde jsme užili předpokladu pro frekvence sdružených svazků $\omega'_j = \omega_j$ a pro jejich amplitudy elektrické intenzity požadujeme $\vec{E}'_j = \vec{E}_j$. Laditelné fázové posunutí ϕ_j je zavedeno pouze u „nečárkovaných“ svazků. Aby bylo splněno $(\vec{E}'_j \perp \vec{k}'_j) \wedge (\vec{E}_j \perp \vec{k}_j) \wedge (\vec{E}'_j = \vec{E}_j)$, musí být $\vec{E}_1$ a $\vec{E}_2$



Obrázek 8: Schéma vlnových vektorů laserového pole tvořícího jednodimenzionální optickou mřížku

kolmé k rovině xy , jak plyne z obrázku 8. Polarizace $\vec{E}_3$ není v tomto smyslu omezena.

Abychom získali jednodimenzionální mřížku ve směru x , je potřeba ve zbývajících dvou rozměrech y a z zavést tuhé příčné omezení pomocí další optické nebo magnetické pasti (na obrázku 8 je omezení ve směru y znázorněno šipkami P_1 a P_2). Pro jednoduchost předpokládejme, že je toto omezení zavedeno radiálně kolem osy x . Ve vztahu (23) pak můžeme položit $\vec{r} = \vec{e}_x x$. Dále nechť pro komponenty vlnových vektorů ve směru osy x platí $k'_{xj} = -k_{xj}$. Vztah (23) pak můžeme upravit do tvaru

$$\vec{E}(x, t) = \sum_{j=1}^3 2\vec{E}_j \cos(k_{xj}x + \frac{\phi_j}{2}) e^{-i(\omega_j t - \frac{\phi_j}{2})}. \quad (24)$$

Intenzitu světla spočteme jako

$$I = c\epsilon_0 \vec{E} \cdot \vec{E}^* = c\epsilon_0 \left[\sum_{j=1}^3 4E_j^2 \cos^2(k_{xj}x + \frac{\phi_j}{2}) + K(t) \right], \quad (25)$$

kde $K(t)$ je křížový člen tvaru

$$K(t) = \sum_{m>n} 8\vec{E}_m \cdot \vec{E}_n \cos(k_{xm}x + \frac{\phi_m}{2}) \cos(k_{xn}x + \frac{\phi_n}{2}) \cos \left[(\omega_n - \omega_m)t + \frac{\phi_m - \phi_n}{2} \right]. \quad (26)$$

K vytvoření mřížky můžeme užít jednoho laserového zdroje, jehož světlo rozložíme na více svazků. Pomocí akusto-optických modulátorů můžeme pozměnit frekvence ω_j tak, aby bylo $\omega_n - \omega_m$ dostatečně velké oproti frekvenci vlastních kmitů atomu v jámě optické mřížky. Vlivem časového středování se pak křížový člen (26) vynuluje.

Frekvence optických laserů je zhruba 10^{14}Hz a typická frekvence vlastních kmitů atomu pro uvažovanou optickou mřížku⁴ je řádově 100kHz . Vidíme tedy, že k zavedení nekoherence mezi

⁴Odhad frekvence vlastních kmitů atomu pro parametry užití mřížky je proveden v příloze 7.5.

komponentami mřížky postačí frekvenční rozdíl řádově v desítkách MHz, přičemž se vlnová délka světla změní jen nepatrně.

Z předchozího víme, že v režimu slabého čerpání je potenciál tvořený optickou mřížkou úměrný intenzitě světla. Užitím vztahu (25) a úpravou tak můžeme psát

$$U(x) = A \sum_{j=1}^3 2E_j^2 [1 + \cos(2k_{xj}x + \phi_j)], \quad (27)$$

kde A je konstanta úměrnosti daná vlastnostmi konkrétního druhu atomů. Všimněme si, že vlivem umocnění elektrické intenzity na druhou je prostorová perioda harmonických komponent potenciálu poloviční oproti vlnové délce světla.

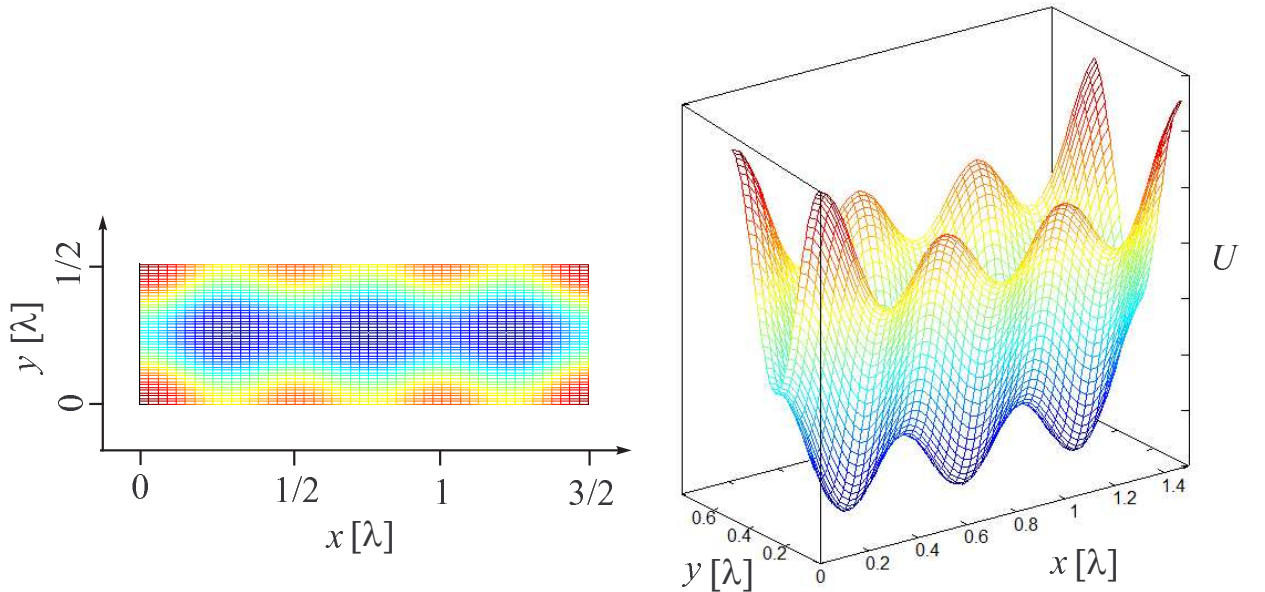
Vhodným nasměrováním svazků můžeme docílit

$$3k_{1x} = 2k_{2x} = k_{3x} = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (28)$$

kde λ je vlnová délka užitého laseru. Uvážíme-li, že potenciál je dán až na aditivní konstantu a vztáhneme-li fázová posunutí ϕ_j ke komponentě k_{3x} ($\phi_3 = 0$), dostaneme finální tvar potenciálu

$$U(x) = A_1 \cos\left(\frac{4\pi x}{3\lambda} + \phi_1\right) + A_2 \cos\left(\frac{4\pi x}{2\lambda} + \phi_2\right) + A_3 \cos\left(\frac{4\pi x}{\lambda}\right) \quad (29)$$

s pěti nezávislými parametry v podobě tří amplitud $A_{1,2,3}$ a dvou fázových posunutí $\phi_{1,2}$. Perioda tohoto potenciálu je $L = \frac{3}{2}\lambda$.



Obrázek 9: Schématické znázornění průběhu potenciálu ve směrech x a y

4 CTAP v potenciálu složeném z harmonických funkcí

Úkolem této kapitoly je vyložit numerické metody hledání předpisu pro parametry potenciálu složeného ze tří harmonických funkcí pro CTAP mezi první a třetí jámou.

4.1 Stacionární Schrödingerova rovnice

Numerické řešení Schrödingerovy rovnice můžeme zjednodušit vhodnou volbou jednotek. Začneme jednodimenzionálním hamiltoniánem v polohové reprezentaci

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad (30)$$

ježž vydělíme *energií zpětného rázu*⁵ $E_R \equiv \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m\lambda^2}$ (recoil energy) [6], kde m je hmotnost atomu a λ je vlnová délka světla. Po úpravě můžeme psát

$$\frac{H}{E_R} = -\frac{\lambda^2}{4\pi^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{U(x)}{E_R}. \quad (31)$$

Zvolíme-li jednotky polohy a energie položením $\lambda = 1$ a $E_R = 1$, můžeme hamiltonián (30) psát ve tvaru

$$H = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (32)$$

Vlastními stavy periodického potenciálu jsou *Blochovy funkce* [10] tvaru

$$\psi_{n,q}(x) = F_{n,q}(x)e^{iqx}, \quad q \in \left(-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}\right), \quad F_{n,q}(x) = F_{n,q}(x+L). \quad (33)$$

Užitím okrajových podmínek

$$\psi_{n,q}(0) = \psi_{n,q}(L)e^{-iqL} \quad (34)$$

při řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$H\psi_{n,q}(x) = E_{n,q}\psi_{n,q}(x) \quad (35)$$

na intervalu $(0, L)$ si tak můžeme zvolit, kterému vlnovému číslu q daná řešení přísluší.

4.1.1 Lokalizovaný stav

Chceme navrhnout proces CTAP tak, aby fungoval i pro mřížku obsahující jediný atom s veškerou populací v oblasti jedné trojjámy. Takový stav je přibližně popsán *Wannierovou funkcí*

⁵Přírůstek kinetické energie atomu po absorbování jednoho fotonu elektromagnetického pole optické mřížky.

[10], jenž je superpozicí všech Blochových stavů

$$\phi(x) = w_n(x - x_0) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{-iqx_0} \psi_{n,q}(x) dq, \quad (36)$$

kde n určuje, o který Blochův pás se jedná a x_0 vyjadřuje polohu lokalizovaného stavu (střed trojjámy).

Mění-li se hamiltonián systému dostatečně pomalu, přičemž jeho okamžité vlastní stavy jsou $\psi_{n,q}(x, t)$, platí podle adiabatického teorému ze sekce 2.1.2 pro časový vývoj stavu (36) přibližně

$$\phi(x, t) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{-iqx_0} e^{-i\omega_q t} \psi_{n,q}(x, t) dq. \quad (37)$$

Tato aproximace zanedbává přechod systému do stavů v ostatních Blochových pásích a také sprášení mezi jednotlivými ortogonálními stavy uvažovaného pásu.

Pro jednoduchost můžeme uvažovat linearizované disperzní relace tvaru $\omega_q = \frac{L}{\hbar\pi} \Delta E_{B,n} |q|$, kde $\Delta E_{B,n}$ je šířka n -tého Blochova pásu.

Jelikož mají Blochovy stavy různou energii, mění se v čase komplexní fáze každého z nich jinou rychlostí a dochází tak i ke změně jejich superpozice. Navenek se změna superpozice projeví jako pronikání populace do sousedních trojjam. Tento jev je analogický rozplývání vlnového klubka volné částice.

Jako zjednodušená míra rychlosti tunelování ven z trojjámy nám tedy dobře poslouží šířka Blochova pásu $\Delta E_{B,n}$ určující koeficient závislosti energie Blochových stavů na vlnovém čísle q . Takovýto ukazatel je velmi užitečný pro vyhodnocení rychlosti tunelování ven z trojjámy na bázi řešení stacionární Schrödingerovy rovnice. Definujme šířku Blochova pásu temného stavu

$$\Delta E_{B,d} \equiv E_{d,0} - E_{d,\frac{\pi}{L}}, \quad (38)$$

kde $E_{d,0}$ resp. $E_{d,\frac{\pi}{L}}$ odpovídá energii vlastních stavů z rovnice (35) pro okrajové podmínky $q = 0$ resp. $q = \frac{\pi}{L}$.

Numerické řešení problému (35) spočívá v nalezení vlastních čísel a vlastních vektorů matice řádu $N \times N$, kde N je počet bodů dělení intervalu, na němž rovnici řešíme. Použitý algoritmus je podrobněji popsán v příloze 7.1.

4.2 Diferenciální reparametrizace

Z důvodů čistě praktických je vhodné seřadit parametry potenciálu (29) ze sekce 3.1 do jediného pětirozměrného vektoru P_i , kde první tři složky reprezentují amplitudy $A_{1,2,3}$ a zbylé

dvě náleží fázovým posunutím $\phi_{1,2}$. V této parametrizaci, již v dalším budeme říkat *přirozená*, můžeme potenciál (29) vyjádřit jako

$$U(x) = A \{ P_1 \cos(2\pi [\frac{2}{3}x + P_4]) + P_2 \cos(2\pi [x + P_5]) + P_3 \cos(4\pi x) \}, \quad (39)$$

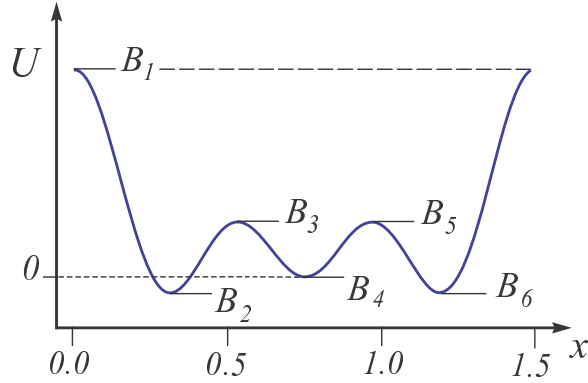
kde x je měřeno v jednotkách λ a A je vhodná škálovací konstanta zvolená tak, aby se hodnoty parametrů $P_{1,2,3}$ pohybovaly kolem jednotky (podobně jako parametry $P_{4,5}$).

Příklad výsledné topologie potenciálu je na obrázku 10, kdy bylo zvoleno $P_{1,2,3} = 1$ a $P_{4,5} = 0$. Můžeme vidět jasnou jámovitou strukturu.

Později ukážeme, že proces CTAP v potenciálu složeného z harmonických funkcí je v mnohém podobný případu s bariérami ve tvaru delta funkcí, jenž byl popsán v sekci 2.3. Abychom mohli přizpůsobit protokol CTAP i pro náš případ, zavedeme parametrizaci pomocí hloubek jam a výšek bariér.

Odvodit analytické převodní vztahy mezi přirozenou parametrizací a polohou extrémů potenciálu je sice principiálně možné, z praktického hlediska však nevhodné. Mnohem lepších výsledků dosáhneme užitím numerické diferenciální transformace.

Místo pěti parametrů P_i můžeme zavést jiných pět navzájem nezávislých parametrů B_j jednoznačně určujících tvar potenciálu. Zvolíme-li hloubku prostřední jámy B_4 jako nulovou hladinu potenciálu, můžeme vzhledem k ní zadefinovat zbylé hloubky jam $B_{2,6}$ a výšky bariér $B_{1,3,5}$. Novou parametrizaci $B_j, j \neq 4$ dále budeme značit krátce B_j .



Obrázek 10: Parametrizace potenciálu pomocí výšek bariér, x je uvedeno v jednotkách λ .

Nalezení extrémů dané funkce potenciálu pomocí numerických metod je poměrně rychlé⁶. Pokud pro všechny hodnoty parametrů P_i , které dají vzniknout trojjámě, dokážeme najít hodnoty

$$B_j = B_j(P_i), \quad (40)$$

⁶Užitý algoritmus je popsán v příloze 7.2.

můžeme tuto operaci chápat jako transformaci od P_i k B_j .

Uvažujme systém v obecném bodě P_i^1 jemuž přísluší bod B_j^1 v „duálním“ prostoru B_j . Chceme systém dostat do nedalekého bodu B_j^2 vzdáleného o vektor $\delta B_j = B_j^2 - B_j^1$. Otázka zní, jakou variaci $\delta P_i = P_i^2 - P_i^1$ v prostoru přirozené parametrizace musíme vykonat, aby se systém posunul do bodu B_j^2 ?

Numerickou diferenciací⁷ operace (40) v bodě P_i^1 získáme Jakobiho matici $J_{ji} = \frac{\partial B_j}{\partial P_i}$. V lineárním přiblížení můžeme psát

$$\delta B_j = \sum_i \frac{\partial B_j}{\partial P_i} \delta P_i = \sum_i J_{ji} \delta P_i, \quad (41)$$

což je numericky snadno řešitelná nehomogenní soustava lineárních rovnic pro neznámý vektor δP_i .

Je-li v daném bodě lineární aproximace dostatečně platná, dostaneme se aplikací vypočtené variace δP_i do blízkosti bodu B_j^2 . Nyní zjistíme, zda nám tato přesnost vyhovuje, nebo je třeba celý proces zopakovat. K tomu potřebujeme mít nějak definovanou normu vektoru v prostoru B_j , například jako velikost největší komponenty. Jelikož jsme nyní blíž, bude lineární aproximace mnohem přesnější a bude každým dalším opakováním zrychlovat konvergenci až na hranici dosažitelné přesnosti.

Ve svém algoritmu (viz. v příloha 7.3) pozoruji zpřesnění zhruba o dva až tři řády s každým krokem, přičemž k dosažení požadované přesnosti je potřeba asi tří opakování.

Získali jsme tak způsob, jak manipulovat přímo s jednotlivými výškami bariér a hloubkami jam. Chceme-li například zvednout hraniční bariéru B_1 o hodnotu ΔB_1 , rozdělíme toto posunutí na n dílků velikosti dB (dostatečně malých pro platnost lineárního přiblížení) a aplikujeme n -krát výše popsanou proceduru na variaci $\delta B_j = (dB, 0, 0, 0, 0)$. V každém kroku musíme nově spočítat Jakobián a vyřešit rovnici (41). Výstupem z tohoto procesu bude záznam hodnot parametrů P_i v jednotlivých bodech trajektorie uložený v datovém poli, který nám říká, jak je potřeba manipulovat s fyzikálními parametry mřížky, abychom dosáhli požadované změny potenciálu.

Výše popsaným postupem lze zavést i mnohem obecnější parametrizace zakládající se například na zvolených attributech vlastních stavů daného potenciálu (v dalším tak budeme často činit).

4.3 Podmínky pro CTAP

Na bázi analytického řešení jsme v sekci 2.3 určili *podmínky pro CTAP* v pravoúhlých jámách s bariérami ve tvaru deltafunkcí zaručující dostatečnou adiabaticitu a minimální populaci v

⁷Provedeno podrobně v příloze 7.3.

centrální jámě. Jak se dále přesvědčíme, můžeme tyto podmínky úspěšně aplikovat i v potenciálu složeném z harmonických funkcí. Je to jednak požadavek, aby energie temného stavu E_d byla co nejdál od energií sousedních stavů E_g a E_e , jenž se dá zapsat jako

$$D^2E \equiv E_e - 2E_d + E_g = 0 \quad (42)$$

a podmínka, aby se uzel vlnové funkce temného stavu $|d\rangle$ nacházel ve středu centrální jámy

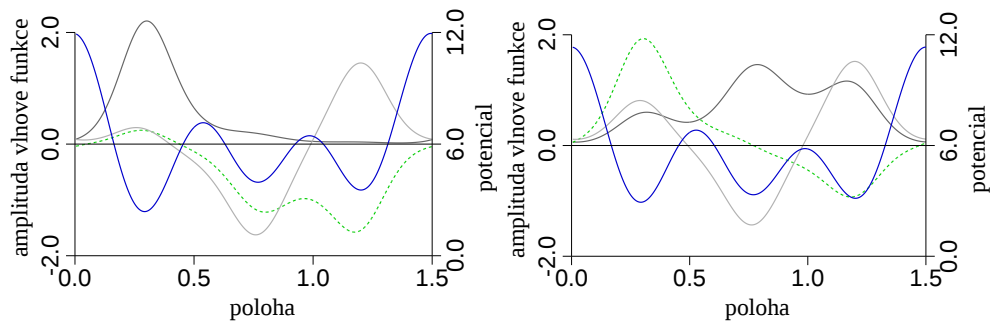
$$\langle x_0 | d \rangle \equiv \psi_d(x_0) = 0, \quad (43)$$

kde x_0 je poloha středu centrální jámy. Pokud je šířka Blochova pásu temného stavu $\Delta E_{B,d}$ definovaná v sekci 4.1.1 dostatečně malá, nezáleží na tom, pro který konkrétní vlastní stav $\psi_{d,q}(x)$ z rovnice (35) budeme podmínky (42) a (43) vyhodnocovat.

Abychom získali CTAP, musíme se vzdát dvou stupňů volnosti a tedy i dvou parametrů. Které to budou, je v podstatě libovolné, dá se však předpokládat, že všechny volby nejsou stejně dobré. Vyberme proto takové, na jejichž variaci bude energie a uzel temného stavu dobře reagovat.

Při analytickém řešení bylo k naplnění podmínek pro CTAP využito vazeb mezi hloubkou okrajové jámy a výškou nesousedící bariéry, takže chceme-li si ponechat výšky bariér jakožto analogii sprážením mezi sousedícími jámami, nezbyvá než se vzdát hloubek okrajových jam $B_{2,6}$, místo nichž zavedeme nové parametry D^2E a $\langle x_0 | d \rangle$ z podmínek (42) a (43). S těmito parametry sice rovněž můžeme hýbat, ale pro dosažení CTAP je položíme rovny nule v průběhu celého transportu.

K zavedení nových parametrů lze použít diferenciální reparametrizaci popsanou v sekci 4.2, přičemž se k parametrizaci $\{B_1, B_3, B_5, D^2E, \langle x_0 | d \rangle\}$ lze dostat buď od B_j nebo přímo od přirozené parametrizace P_i .

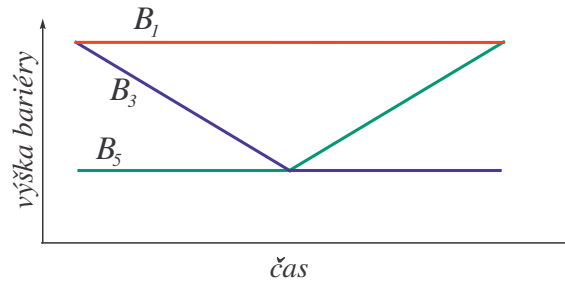


Obrázek 11: Vlastní stavy: vlevo obecný potenciál s náhodně zvolenými parametry $B_{2,6}$, vpravo po aplikování podmínek pro CTAP. Temný stav je znázorněn zelenou čárkovanou čarou, stav základní resp. excitovaný je znázorněn tlustou resp. tenkou šedou čarou. Poloha je v jednotkách λ . Amplituda vlnové funkce je v $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$. Potenciál je znázorněn modrou čarou a jeho osa je cejchovaná v jednotkách energie zpětného rázu.

4.4 Protokol CTAP

Aplikací podmínek (42) a (43) se sníží celkový počet stupňů volnosti na tři. V parametrizaci B_j je můžeme kvantifikovat pomocí $B_{1,3,5}$ neboli výšek bariér. Považujeme-li B_1 za hraniční bariéru vymezující oblast trojjámy (v důsledku periodicity je hraniční bariéra vlevo i vpravo stejně vysoká), pak B_3 a B_5 představují bariéry sprážení jam. Výška hraniční bariéry B_1 ovlivňuje především rychlost tunelování ven z trojjámy a pokud ji vhodně zvolíme, můžeme ji během transportu pro jednoduchost ponechat konstantní.

Na první pohled se nabízí schéma transportu odvozené z analytického řešení CTAP v sekci 2.3, jenž je znázorněno na obrázku 12.



Obrázek 12: Zjednodušený časový průběh výšek bariér.

1. B_3 přejde plynule z hodnoty B_1 na hodnotu B_5 ; populace se přemístí z první jámy do symetrického rozložení pravděpodobnosti.
2. B_5 přejde z hodnoty B_3 na B_1 ; populace se přemístí do třetí jámy.

4.5 Volba optimálních vlastností transportu

Čtyři nejdůležitější vlastnosti transportu jsou:

1. *populace v centrální jámě*; maximální hodnota populace, jenž se vyskytne v prostřední jámě (snažíme se ji držet na co nejmenší hodnotě),
2. *tunelování ven z trojjámy*; celkové množství nevratně ztracené populace, která se dostane do sousedních trojjam během celého transportu (snažíme se omezit na minimum),
3. *doba transportu*; adiabaticita stanovuje horní mez pro rychlost variace potenciálu a tedy i celkové trvání transportu (snažíme se dosáhnout co nejkratší doby),
4. *robustnost*; odolnost vůči šumu v přirozených parametrech potenciálu, jenž vzniká oscilacemi komponent experimentální aparatury užívané k vytvoření optické mřížky.

4.5.1 Populace v centrální jámě

Populaci v centrální jámě v daném bodě transportu můžeme přibližně kvantifikovat z řešení stacionární Schrödingerovy rovnice, a to integrací hustoty pravděpodobnosti temného stavu mezi vrcholky bariér B_3 a B_5 . Definujeme

$$\alpha_C \equiv \int_{\text{pos}(B_3)}^{\text{pos}(B_5)} |\psi_d(x)|^2 dx, \quad (44)$$

kde $\text{pos}(B_j)$ jsou souřadnice vrcholků bariér.

Tato úloha není triviální, protože se horizontální poloha extrémů obecně mění v závislosti na fázi transportu. Tuto informaci však můžeme výhodně získat z algoritmu pro hledání extrémů funkce (viz. příloha 7.2).

Každý transport musí projít fází symetrického potenciálu, kdy jsou B_3 a B_5 stejně vysoké a právě tehdy je populace v centrální jámě největší.

4.5.2 Tunelování

Jak bylo vysvětleno v sekci 4.1, můžeme tunelování ven přibližně kvantifikovat pomocí šířky Blochova pásu temného stavu $\Delta E_{B,d}$. Rychlost tunelování ven je závislá především na výšce hraniční bariéry B_1 a v průběhu transportu je řádově stálá. Při bližším pohledu však zjistíme, že nabývá svého maxima rovněž v symetrickém potenciálu.

4.5.3 Doba transportu

K vyjádření adiabaticity bychom sice v principu mohli použít faktor neadiabaticity (4) definovaný v sekci 2.1.2, ale nepochybně bychom měli problémy jej nějak konzistentně vyjádřit ze statického řešení, neznáme-li časovou derivaci hamiltoniánu (neznáme délku daného transportu). K přibližnému vyjádření neadiabaticity nám postačí vzít pouze jmenovatel tohoto zlomku a definovat faktor

$$\frac{1}{(\Delta E)^2} \equiv \frac{1}{\min(E_e - E_d, E_d - E_g)^2}. \quad (45)$$

Podobně jako populace v centrální jámě, nabývá i tento parametr svého maxima právě v symetrickém potenciálu a pokud je $D^2 E = 0$ pak platí $\Delta E = E_e - E_d = E_d - E_g$.

4.5.4 Robustnost

Šum se často modeluje jako složení širokého spektra frekvencí⁸. Aplikací šumu do přirozených parametrů potenciálu vznikají oscilace hamiltoniánu vyvolávající neadiabatické pronikání

⁸Podrobněji se budeme otázkou šumu zabývat v kapitole o časové simulaci Schrödingerovy rovnice.

populace z temného stavu do stavů sousedních. Robustnost tudíž roste zároveň s adiabaticitou. Navíc pak může být celý transport rychlejší, takže šum působí kratší dobu.

Volba parametrů vedoucí k pomalejšímu tunelování (vyšší bariéra B_1) má za následek snížení robustnosti vůči šumu. Tvar dna trojjámy je pak velice citlivý i na malé změny ve vzájemném fázovém posunutí harmonických složek potenciálu. Ke kvantifikování lability CTAP vůči šumu v přirozených parametrech mřížky můžeme využít definice faktoru neadiabaticity (4), kde však nebudeme dělat parciální derivaci hamiltoniánu podle času, nýbrž podle jednoho z parametrů P_i . Definujme tedy *průměrnou neadiabaticitu vlivem šumu v i -tém přirozeném parametru* jako

$$\beta_i = \frac{1}{2} \sum_{j=e,g} \left| \frac{\left\langle \psi_j \left| \frac{\partial U}{\partial P_i} \right| \psi_d \right\rangle}{(E_j - E_d)^2} \right|, \quad (46)$$

kde jsme uvažili, že na parametrech mřížky závisí pouze potenciálová část hamiltoniánu a volbou jednotek v sekci 4.1 je $\hbar = 1$.

4.6 Mapování vlastností transportu v symetrickém potenciálu

Z předchozího je zřejmé, že pro prvotní nastavení vlastností transportu postačí vyhodnotit statické řešení v symetrickém potenciálu. V onom momentě jsou bariéry B_3 a B_5 stejně vysoké, přičemž jak jejich skutečná výška, tak i výška bariéry B_1 jsou volnými parametry. K optimalizaci máme čtyři vlastnosti, a přitom nám zbyly jen dva stupně volnosti, takže se musíme uchýlit k nalezení kompromisu.

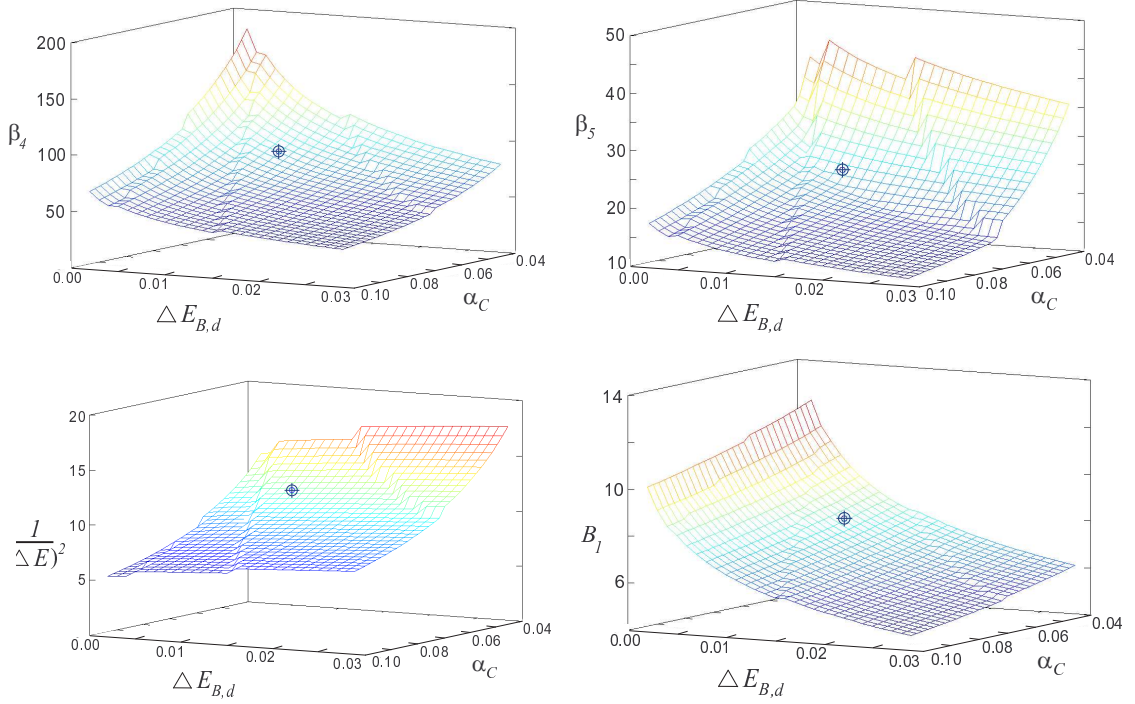
Jako volné parametry v symetrickém potenciálu si místo výšek bariér můžeme zvolit dva kvantifikátory vlastností transportu z předchozí sekce. Nejjednodušší z hlediska implementace je vzít populaci v centrální jámě α_C a šířku Blochova pásu $\Delta E_{B,d}$. Ve skutečnosti má symetrický potenciál tři stupně volnosti, protože jediný požadavek na to, aby vznikl, je $P_{4,5} = 0$, takže nám zůstanou ještě tři amplitudy $P_{1,2,3}$. Nesmíme však zapomínat na splnění podmínek pro CTAP ze sekce 4.3. Podmínka na uzel temného stavu je v symetrickém potenciálu splněna automaticky, ale na udržení energie temného stavu uprostřed mezi energiemi sousedních stavů musíme použít jeden stupeň volnosti.

Parametrizaci $\{\alpha_C, \Delta E_{B,d}, D^2 E, P_4, P_5\}$ můžeme zavést pomocí diferenciální reparametrizace definované v sekci 4.2. Z výše zmíněných důvodů však položíme

$$D^2 E = 0, \quad P_4 = 0, \quad P_5 = 0. \quad (47)$$

Nyní můžeme vytvářet trojrozměrné grafy závislosti různých vlastností transportu na parametrech α_C a $\Delta E_{B,d}$. K tomu užijeme mapovací algoritmus, který projde s určitou hustotou bodů

obdélníkovou oblast v prostoru $\{\alpha_C, \Delta E_{B,d}\}$ o zadaných mezích, přičemž budeme v každém bodě zaznamenávat do datového souboru ostatní relevantní parametry a vlastnosti transferu. Pro $\Delta E_{B,d}$ byl zvolen interval hodnot $(0,002; 0,03)E_R$ a 29 bodů dělení. Interval hodnot pro α_C byl zvolen jako $(0,04; 0,10)$ a byl rozdělen na 31 bodů.



Obrázek 13: Závislost lability β_4 , β_5 , faktoru neadiabaticity $\frac{1}{(\Delta E)^2}$ a výšky hraniční bariéry B_1 na šířce Blochova pásu temného stavu $\Delta E_{B,d}$ a populaci v centrální jámě α_C za podmínky symetrického potenciálu a $D^2E = 0$. Energie je v jednotkách energie zpětného rázu E_R a populace v centrální jámě je udána ve zlomcích jedničky. Vlastnosti transportu zvolené pro vytvoření časové simulace jsou označeny modrou značkou.

Je zajímavé, že se zužující se šířkou Blochova pásu $\Delta E_{B,d}$ dochází k mírnému zlepšení adiabaticity (poklesu $\frac{1}{(\Delta E)^2}$). To je způsobeno zužující se šířkou dna trojjámy, což zvedá rozestupy mezi energiemi vlastních stavů. K zužování dna trojjámy dochází díky zvedající se hraniční bariéře B_1 , jejíž výška úzce souvisí se šířkou Blochova pásu, jak je vidět z obrázku 13. Se zvyšováním bariéry B_1 totiž dochází i ke zvětšení její prostorové šířky a jelikož je celková délka trojjámy konstantní, zůstane méně prostoru na vytvoření dna trojjámy.

Pro vytvoření předpisu pro CTAP byl vybrán bod s vlastnostmi

$$\alpha_C = 0,057; \quad \Delta E_{B,d} = 0,0096E_R; \quad \Delta E = 0,29E_R. \quad (48)$$

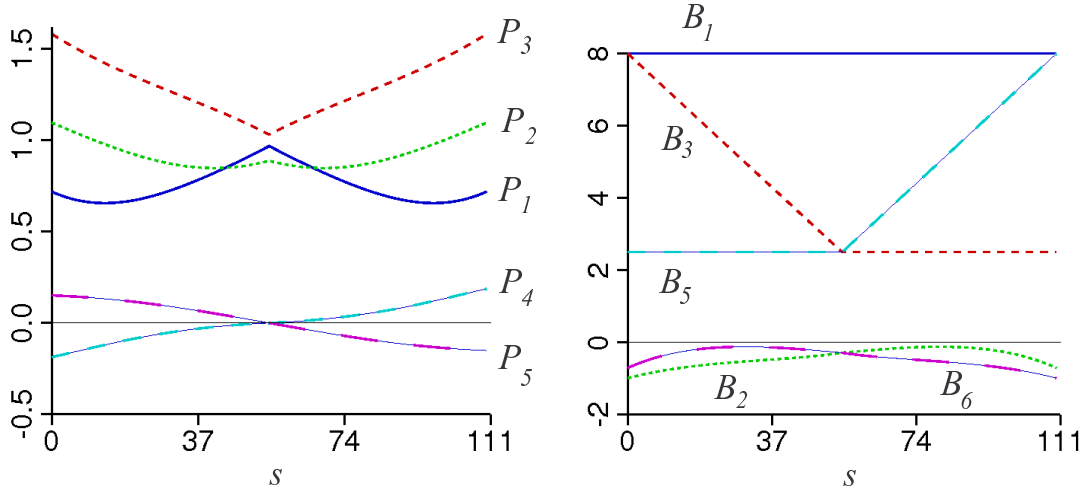
Z obrázků 13 vyplývá, že nebýt požadavku na robustnost ve formě β_4 a β_5 (robustnost vůči fázovému posunutí), mohli bychom víc snížit populaci v centrální jámě i tunelování ven a přitom si udržet rozumnou adiabaticitu. Je zajímavé, že v symetrickém potenciálu jsou faktory

$\beta_{1,2,3}$ (labilita vůči šumu v amplitudových parametrech) prakticky rovny nule, jak ukázal náš numerický experiment, který vracel tyto hodnoty řádově jako 10^{-14} . Pro hlubší studium vlivu šumu na CTAP by bylo vhodné vyhodnotit parametry β_i podél celého transportu.

Předpis pro CTAP je v podstatě křivka v pětirozměrném prostoru parametrů P_i . Abychom ji určili, musíme najít dostatečné množství N *primárních bodů*, které na ní leží vhodně rozmístěny. Vše potřebné k tomu už máme zadefinováno, takže stačí jen upřesnit, že vlastnostem (48) odpovídají počáteční hodnoty $B_1 = 8, 0$ a $B_5 = 2, 5$ v protokolu pro CTAP popsáném v sekci 4.4. Připomeňme, že užijeme parametrizace $\{B_1, B_3, B_5, D^2E, \langle x_0|d\rangle\}$ a položíme $D^2E = 0$ a $\langle x_0|d\rangle = 0$.

První fázi hledání předpisu začínáme z pozice $(B_1, B_3, B_5) = (8, 0; 8, 0; 2, 5)$ a volíme krok $\delta B_j = (0; -0, 1; 0)$, což nám vygeneruje 56 bodů, než se dostaneme do pozice symetrického potenciálu $(B_1, B_3, B_5) = (8, 0; 2, 5; 2, 5)$. Druhá fáze transferu s krokem $\delta B_j = (0; 0; +0, 1)$ nám vygeneruje dalších 55 bodů—celkem tedy $N = 111$ —a posune nás do koncového bodu $(B_1, B_3, B_5) = (8, 0; 2, 5; 8, 0)$. Množinu bodů křivky pak doplníme o všechny body ležící na lineárních spojnicích primárně spočtených bodů.

Pro další úvahy bude výhodné zavést na takto získané křivce *poziční parametrizaci* pomocí spojitého parametru s , jehož hodnota v případě celočíselnosti odpovídá pořadí primárního bodu křivky. Konkrétně pro náš případ je $s \in \langle 1, 111 \rangle$. Výsledná trajektorie v prostorech P_i a B_j je znázorněna na obrázku 14.



Obrázek 14: Předpis pro CTAP v prostorech P_i a B_j v závislosti na pozičním parametru s .

Vysvětlíme stručně chování parametrů P_i . Na začátku je fáze P_4 (posunutí první komponenty potenciálu s nejdelší prostorovou periodou) rovna zhruba $-1/6$. To znamená, že střed široké jámy, kterou do tvaru potenciálu vnáší první harmonická, je posunut doprava zhruba na x -ovou

pozici vrcholku bariéry B_5 , kde dává vzniknout jakési dvojjámě. Naopak počáteční kladná fáze P_5 (posunutí druhé harmonické doleva) způsobuje prohloubení první jámy vlivem konstruktivního složení druhé a třetí harmonické v tomto místě. Co se amplitud týče, je třetí harmonická na začátku nejsilnější, aby i při výrazném fázovém posunutí ostatních komponent byla zachována trojjámovitá struktura.

Jak se během transportu fázová posunutí monotónně přibližují k nule, může být amplituda třetí harmonické oslabena a naopak amplituda první harmonické zesílena, tak aby vznikla široká jáma se slabou modulací dna do podoby trojjámy, tedy s nízkými bariérami B_3 a B_5 . Druhá polovina předpisu pro CTAP pokračuje vzhledem k symetrii zrcadlově resp. středově symetricky pro amplitudy resp. fázová posunutí. Křivky $P_{1,2,3}$ resp. $P_{4,5}$ jsou tedy sudou resp. lichou funkcí vzhledem k pozici symetrického potenciálu. To se dá využít ke zrychlení hledání předpisu pro parametry, neboť nám stačí numericky nalézt jen polovinu předpisu a zbytek doplnit ze symetrie.

5 Časová simulace CTAP

V této kapitole vyložíme princip numerického výpočtu časové Schrödingerovy rovnice. Úkolem je spočítat časový vývoj temného stavu během variace parametrů P_i podle předpisu pro CTAP získaného v předchozí kapitole. Budeme se snažit zejména o stanovení časové škály potřebné pro uskutečnění transportu a ověření robustnosti transferu vůči šumu v parametrech P_i .

5.1 Časová Schrödingerova rovnice

Pro odvození bezrozměrné časové Schrödingerovy rovnice můžeme použít hamiltonián (32) ze sekce 4.1, kde jsme položili $E_R = 1$ a $\lambda = 1$. Časovou rovnici pak můžeme psát ve tvaru

$$i \frac{\hbar}{E_R} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi. \quad (49)$$

Nyní můžeme položit $\hbar = 1$ a tím zvolit $\frac{\hbar}{E_R}$ jednotkou času⁹. Finální tvar časové Schrödingerovy rovnice pro numerickou simulaci pak můžeme rozepsat jako

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{4\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right] \psi. \quad (50)$$

Stabilní a rychlé řešení této rovnice můžeme získat pomocí metody rozděleného kroku SSFM (Split Step Fourier Method) [11]. Vývoj vlnové funkce za krátký časový interval dt získáme složením částečného řešení v polohové reprezentaci pouze pro potenciálovou část hamiltoniánu a částečného řešení v hybnostní reprezentaci odpovídající kinetické části hamiltoniánu.

Pro potenciálovou část můžeme psát

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = U(x, t) \psi. \quad (51)$$

Řešení rovnice této je zřejmé

$$\psi(x, t) = e^{-iU(x,t)t} \psi(x, 0). \quad (52)$$

Pro nalezení řešení kinetické části

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (53)$$

můžeme vlnovou funkci na intervalu $(0, L)$ rozvinout v exponenciální Fourierovu řadu

$$\psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n(t) e^{i2\pi n \frac{x}{L}} \quad (54)$$

⁹Pro Ti:sapphire laser s vlnovou délkou 810nm a atomy rubidia ^{87}Rb je $\frac{\hbar}{E_R} \approx 4,55 \cdot 10^{-5}\text{s}$.

s komplexními koeficienty

$$c_n(t) = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i2\pi n \frac{x}{L}} \psi(x, t) dx. \quad (55)$$

Dosazením vlnové funkce (54) do rovnice (53) a porovnáním odpovídajících si koeficientů rozvoje dostaneme rovnice

$$\frac{dc_n}{dt} = -i \frac{n^2}{L^2} c_n, \quad (56)$$

jejichž řešení jsou

$$c_n(t) = e^{-i \frac{n^2}{L^2} t} c_n(0). \quad (57)$$

Vývoj stavu (54) v čase je pak dán jako

$$\psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i \frac{n^2}{L^2} t} c_n(0) e^{i2\pi n \frac{x}{L}}. \quad (58)$$

Kinetická a potenciálová část hamiltoniánu spolu obecně nekomutují, avšak pro malé hodnoty dt je chyba, které se v tomto časovém kroku dopouštíme, řádu dt^2 .

Stav systému za krátký časový okamžik tak můžeme získat složením potenciální a kinetické části

$$\psi(x, t + dt) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n \frac{x}{L}} e^{-i \frac{n^2}{L^2} dt} \int_0^L e^{-i2\pi n \frac{x'}{L}} e^{-iU(x', t)dt} \psi(x', t) dx'. \quad (59)$$

Slovně by se tato operace dala popsat takto. Vynásobíme vlnovou funkci v každém bodě faktorem odpovídajícím vývoji podle potenciální energie v tomto bodě za čas dt . Provedeme Fourierovu transformaci. Vynásobíme každou hybnostní komponentu faktorem odpovídajícím vývoji podle kinetické energie této komponenty za čas dt a provedeme zpětnou Fourierovu transformaci.

Implementace algoritmu SSFM užitého k výpočtu časové evoluce systému je podrobněji popsána v příloze 7.4.

5.2 Adiabaticita transferu

Finální předpis pro CTAP získaný v předchozí kapitole, byl pořízen pro lineární variaci výšek bariér. Nyní určíme rychlost s jakou má být tento předpis probíhán—funkci $s = s(t)$ —tak, aby bylo dosaženo optimální doby transferu, minimální ztráty populace z temného stavu, nízké populace v centrální jámě a zároveň minimálního tunelování ten z trojjámy.

Předefinujme faktor neadiabaticity $\mathcal{A}$ ze sekce 2.1.2 pro náš konkrétní případ systému v temném stavu $|d\rangle$ a volbu $\hbar = 1$ jako

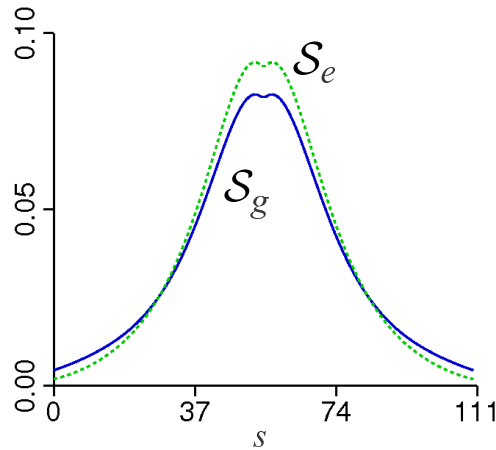
$$\mathcal{A}_j \equiv \frac{|\langle j | \frac{\partial H}{\partial t} | d \rangle|}{(E_j - E_d)^2} = \frac{\left| \left\langle j \left| \frac{\partial U(x, s)}{\partial s} \right| d \right\rangle \right|}{(E_j - E_d)^2} \frac{ds}{dt} \equiv \mathcal{S}_j \frac{ds}{dt}, \quad j = g, e, \quad (60)$$

přičemž jsme vzali v úvahu, že se v čase mění pouze potenciálová část hamiltoniánu a vzdali jsme se informace obsažené v komplexní fázi čitatele. První zlomek v předposledním součinu výrazu (60) je vlastností předpisu pro CTAP nezávislou na volbě konkrétního dynamického průběhu $s = s(t)$ a proto jsme jej dodefinovali jako *faktor neadiabaticity předpisu pro CTAP* $\mathcal{S}_j$. V dobrém přiblížení jej můžeme vyčíslit pro body nacházející se uprostřed mezi primárními body cesty a to integrací¹⁰

$$\mathcal{S}_j(n + 1/2) = \frac{1}{(E_j - E_d)^2} \left| \int_0^L \psi_j^*(x, n + 1/2) [U(x, n + 1) - U(x, n)] \psi_d(x, n + 1/2) dx \right|, \quad (61)$$

kde využijeme znalost stacionárních řešení Schrödingerovy rovnice $\psi_i(x, s)$ a jejich energií $E_i(s)$ pro body $s = n + 1/2$, $n = 1, 2, \dots, N - 1$.

Výsledné křivky faktoru adiabaticity předpisu pro CTAP—pro základní stav $\mathcal{S}_g$ a pro excitovaný stav $\mathcal{S}_e$ —jsou znázorněny na obrázku 15. Jelikož jsou si průběhy faktorů $\mathcal{S}_g$ a $\mathcal{S}_e$ velmi



Obrázek 15: Průběh faktorů adiabaticity $\mathcal{S}_g$ a $\mathcal{S}_e$ v závislosti na pozičním parametru s .

podobné, můžeme z toho zpětně usoudit, že požadavek dostatečné adiabaticity CTAP implementovaný v sekci 2.3 skrze $E_e - E_d = E_d - E_g$ —potažmo $D^2E = 0$ —vskutku dobře splnil svou roli nastavení srovnatelné neadiabaticity temného stavu vůči základnímu a excitovanému stavu.

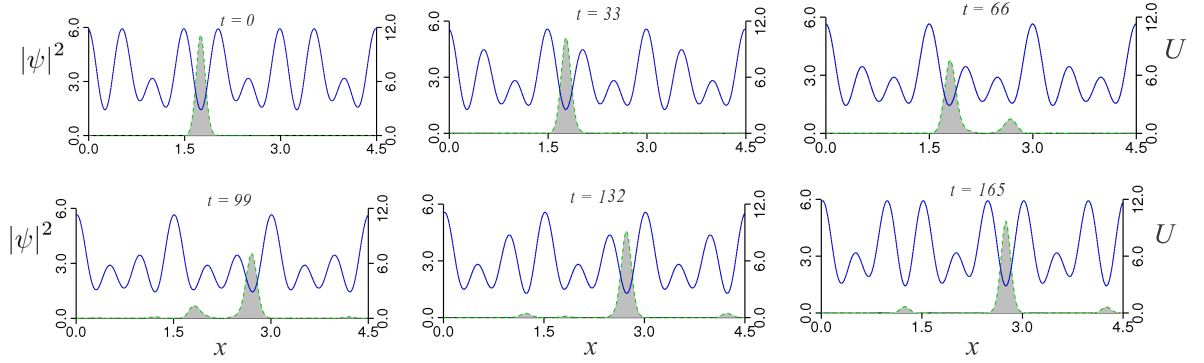
5.3 Velmi pomalý transfer

Ověříme si nyní, zda při limitně nekonečně pomalém transferu je naplněn adiabatický teorém vyslovený v sekci 2.1.2 a sice, že se stav systému vyvíjí jako okamžitý vlastní stav hamiltoniánu. Pochopitelně musíme simulaci provést v konečném byť dlouhém čase. Při tomto experimentu

¹⁰Pro $dU = U(x, n + 1) - U(x, n)$ je $ds = 1$.

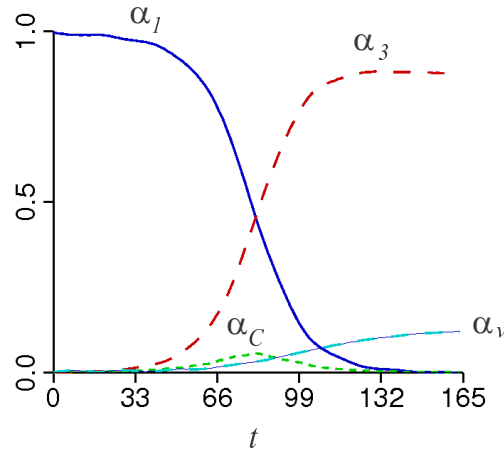
budeme zároveň pozorovat tunelování ven z trojjámy, takže použijeme model s třemi trojjámami, přičemž na začátku vložíme lokalizovaný stav pouze do první jámy prostřední trojjámy.

Pro jednoduchost nyní položíme s lineární funkcí času, a speciálně $\frac{ds}{dt} = \frac{2}{3} = \text{konst.}$ (ve zvolených jednotkách času). Celková doba transportu je $T = 165 \frac{\hbar}{E_R}$. Rozložení hustoty pravděpodobnosti ve vyvíjejícím se potenciálu je nasnímáno v rovnoměrně rozmístěných časových okamžicích na obrázku 16.



Obrázek 16: Transport hustoty pravděpodobnosti v jámách.

Můžeme pozorovat, že vlivem tunelování došlo k proniknutí části populace ven z prostřední trojjámy, vždy však jen do třetí jámy každé z trojjam, což odpovídá skutečnosti, že stav systému je superpozicí Blochových stavů z jednoho pásu, jež mají za základ velmi podobnou periodickou funkci.



Obrázek 17: Časový vývoj populace v jednotlivých jámách prostřední trojjámy ($\alpha_1, \alpha_C, \alpha_3$) a průběh celkové populace mimo prostřední trojjámu α_v .

Šířce Blochova pásu v symetrickém potenciálu $\Delta E_{B,d} = 0,0096 E_R$ odpovídá časová škála $\frac{\hbar}{\Delta E_{B,d}} \approx 104 \frac{\hbar}{E_R}$. Vezmeme-li v úvahu, že kolem symetrického potenciálu se systém nachází jen asi $1/3$ doby transportu a zbylé $2/3$ času je šířka Blochova pásu až o řád menší, můžeme vysvětlit,

proč se za dobu $165 \frac{\hbar}{E_R}$ ztratilo asi jen 12% populace. Vliv fáze transportu na rychlost tunelování ven z trojjámy je dobře patrný i z proměnlivé strmosti křivky *populace mimo primární trojjámu* α_v znázorněné na obrázku 17. U okrajových poloh se tato křivka téměř přimyká k horizontálnímu směru, avšak v půli transferu výrazně roste.

Populace v centrální jámě vystoupala nejvýše na $\alpha_C = 0,0569$, což je sice hodnota jakou jsme očekávali na bázi řešení stacionární Schrödingerovy rovnice, jedná se však spíše o náhodu. Vzhledem ke skutečnosti, že ve fázi symetrického potenciálu už bylo zhruba 6% populace mimo primární trojjámu, měla by tato hodnota být kolem $5,4\% = (1 - 0,06) \cdot 5,7\%$. Přesto se však jedná jen o nepatrný nárůst α_C .

Pro posouzení adiabaticity budeme pozorovat vývoj komponent stavu systému v bázi okamžitých vlastních stavů hamiltoniánu. Abychom nemuseli uvažovat průměty do všech stavů Blochova pásu, jež souvisí spíše s otázkou tunelování ven z trojjámy, budeme projektovat stav systému na vlastní stavy získané řešením stacionární Schrödingerovy rovnice pouze pro jednu trojjámu, kde budeme uvažovat okrajové podmínky¹¹

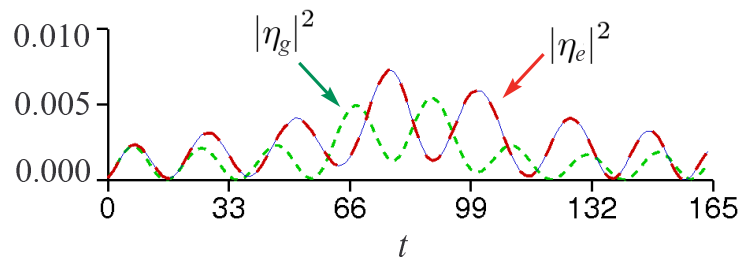
$$\psi(0, t) = 0, \quad \psi(L, t) = 0. \quad (62)$$

Dále zadefinujme označení

$$\eta_i(t) \equiv \int_0^L \psi_i^*(x, s(t)) \psi(x, t) dx, \quad i = e, g, \quad (63)$$

kde ψ_i jsou vlnové funkce okamžitých vlastních stavů hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$ a ψ je vlnová funkce systému získaná časovou evolucí.

Pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|i\rangle$ je $|\eta_i|^2$. Na obrázku 18 vidíme, že maximální



Obrázek 18: Časový časový vývoj pravděpodobnosti nalezení systému v okamžitých vlastních stavech hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$.

pravděpodobnost nalezení systému v jiném než temném stavu je něco přes 0,5%, takže transfer byl velice adiabatický. Stojí za povšimnutí, že k tomuto maximu došlo právě v okolí symetrického

¹¹Numerická implementace řešení úlohy s pevnými konci je vyložena v příloze 7.1.

potenciálu, kdy byla neadiabaticita největší, avšak později se průmět stavu systému do obou uvažovaných komponent zase výrazně zmenšil. To je nejspíš dáno právě symetrií předpisu pro CTAP kolem pozice symetrického potenciálu.

Dále je velice zajímavé, že obě pravděpodobnosti oscilují s podobnou frekvencí $f_g \approx \frac{8}{152}$ a $f_e \approx \frac{7}{152}$ odpovídající energiím $\Delta E'_g = 2\pi\hbar f_g \approx 0,33E_R$ a $\Delta E'_e \approx 0,29E_R$, což je přibližně vzdálenost energie temného stavu od sousedních stavů v symetrickém potenciálu.

5.4 Středně rychlý transfer

Adiabaticita a populace v centrální jámě u předchozího transferu nabývaly téměř optimálních hodnot. Doba transportu však byla příliš dlouhá a došlo i k poměrně výrazné ztrátě populace z primární trojjámy. Dalším krokem je přirozeně zrychlit transfer.

Pomocí faktorů neadiabaticity (60) zadefinujeme okamžitou neadiabaticitu CTAP jako

$$\mathcal{A}_{CTAP} \equiv \max(\mathcal{A}_g, \mathcal{A}_e) = \max(\mathcal{S}_g, \mathcal{S}_e) \frac{ds}{dt}. \quad (64)$$

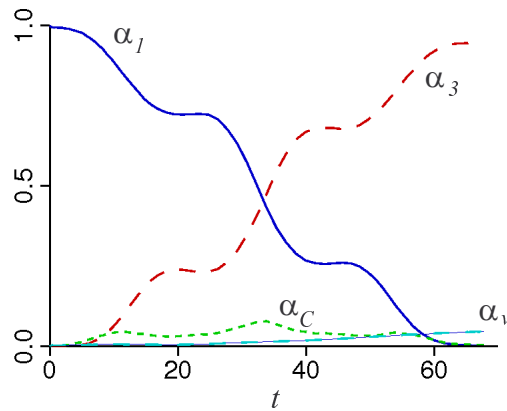
Pro předchozí transfer vystoupal tento faktor nejvýše na hodnotu 0,06, což splňuje podmínku adiabaticity $|\mathcal{A}|^2 \approx 0,0036 \ll 1$. Jeho průměrná hodnota však byla asi poloviční. Postavme tedy

$$\mathcal{A}_{CTAP} = 0,06 = \text{konst.} \quad (65)$$

položením

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\mathcal{A}_{CTAP}}{\max(\mathcal{S}_g, \mathcal{S}_e)}, \quad (66)$$

a pozorujme, jak se zrychlení transferu vlivem nové dynamiky trajektorie v prostoru P_i projeví na vlastnostech CTAP.



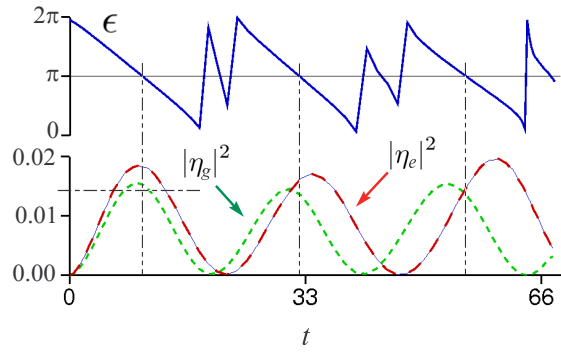
Obrázek 19: Časový vývoj populace v jednotlivých jámách prostřední trojjámy ($\alpha_1, \alpha_C, \alpha_3$) a průběh celkové populace mimo prostřední trojjámu α_v . Celková doba transferu $T = 67,7 \frac{\hbar}{E_R}$.

Celková doba transportu $T = 67,7 \frac{\hbar}{E_R}$ tvoří zhruba $2/5$ trvání předchozího transferu a i ztráta populace z primární trojjámy nyní poklesla zhruba na $2/5$, neboť $\max \alpha_v = 4,7\%$. K zásadní změně však došlo ve vývoji populace uvnitř trojjámy. Neadiabatické oscilace jsou patrné na všech křivkách populací ve vnitřních jámách, přesto však nakonec došlo k úplnému transportu populace do třetí jámy. Populace v centrální jámě dosáhla maximální hodnoty $\alpha_C = 0,0785$.

Ještě než se budeme věnovat popisu průmětu stavu systému do báze okamžitých vlastních stavů, definujme *relativní fázi komponent* $|g\rangle$ a $|e\rangle$ předpisem

$$\epsilon \equiv \text{Arg}(\eta_g^* \eta_e) \quad (67)$$

s oborem hodnot $\epsilon \in (0, 2\pi)$. Na obrázku 20 můžeme nalézt vysvětlení, proč byl transport populace do třetí jámy tak úspěšný.



Obrázek 20: Časový vývoj pravděpodobnosti nalezení systému v okamžitých vlastních stavech hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$ a průběh relativní fáze jim odpovídajících komponent ϵ .

Stejně jako u velmi pomalého transportu i nyní oscilují obě pravděpodobnosti $|\eta_i|^2$ s frekvencí blízkou $\Delta E = 0,29E_R$. Dá se tedy předpokládat, že téměř nulová pravděpodobnost obsazení prvních dvou jam po dokončení transferu je zapříčiněna náhodně úspěšným načasováním daným volbou (65). Další zajímavostí je, že pravděpodobnosti $|\eta_i|^2$ oscilují zhruba jako harmonické funkce s konstantní amplitudou. Ukážeme nyní, jak se tento jev dá vysvětlit na bázi teorie za předpokladu, že faktor adiabaticity (64)—jenž pro úsporu místa budeme nyní značit $\mathcal{A}$ —představuje slabé sprzęžení $|\mathcal{A}|^2 \ll 1$ mezi stavy $[|d\rangle \leftrightarrow |g\rangle]$ a $[|d\rangle \leftrightarrow |e\rangle]$. Tuto skutečnost můžeme vyjádřit pomocí hamiltoniánu v bázi okamžitých vlastních stavů $\{|g\rangle, |d\rangle, |e\rangle\}$ jako

$$H = \Delta E \begin{pmatrix} -1 & \mathcal{A} & 0 \\ \mathcal{A} & 0 & \mathcal{A} \\ 0 & \mathcal{A} & 1 \end{pmatrix}, \quad (68)$$

kde pro jednoduchost předpokládáme konstantní energetickou vzdálenost báзовých stavů ΔE .

Vlastní energie hamiltoniánu (68) jsou

$$E_{1,3} = \pm \sqrt{1 + 2|\mathcal{A}|^2} \Delta E \approx \pm (1 + |\mathcal{A}|^2) \Delta E, \quad E_2 = 0 \quad (69)$$

a jim odpovídající vlastní stavy můžeme psát jako

$$|\psi_1\rangle \approx 1|g\rangle - \mathcal{A}|d\rangle + 0|e\rangle, \quad (70)$$

$$|\psi_2\rangle \approx \mathcal{A}|g\rangle + 1|d\rangle - \mathcal{A}|e\rangle, \quad (71)$$

$$|\psi_3\rangle \approx 0|g\rangle + \mathcal{A}|d\rangle + 1|e\rangle, \quad (72)$$

kde jsme zanedbali výrazy řádu $\mathcal{A}^2$.

V této nové bázi můžeme počáteční stav systému vyjádřit jako

$$|\psi(t=0)\rangle = |d\rangle \approx -\mathcal{A}|\psi_1\rangle + 1|\psi_2\rangle + \mathcal{A}|\psi_3\rangle. \quad (73)$$

Jelikož je $\mathcal{A} = \text{konst.}$, je i hamiltonián (68) v čase stálý a pro časový vývoj stavu systému můžeme psát

$$|\psi(t)\rangle \approx -\mathcal{A}e^{i\frac{\Delta E}{\hbar}t}|\psi_1\rangle + 1|\psi_2\rangle + \mathcal{A}e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}|\psi_3\rangle. \quad (74)$$

Nyní už se můžeme ptát na časový vývoj komponent η_i , neboť

$$\eta_g = \langle g|\psi\rangle \approx \mathcal{A}\left(1 - e^{i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right), \quad (75)$$

$$\eta_e = \langle e|\psi\rangle \approx -\mathcal{A}\left(1 - e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right) \quad (76)$$

a pro pravděpodobnosti nalezení systému ve stavech $|g\rangle$ a $|e\rangle$ platí

$$|\eta_g|^2 \approx |\eta_e|^2 \approx 2\mathcal{A}^2 \left[1 - \cos\left(\frac{\Delta E}{\hbar}t\right)\right]. \quad (77)$$

Byť byla užitá aproximace dosti hrubá, dává velmi uspokojivé vysvětlení chování systému. Maximální hodnota, kterou nabývá výraz (77), je pro náš případ $4\mathcal{A}^2 = 4 \cdot (0,06)^2 = 0,0144$, což zhruba odpovídá numericky spočteným hodnotám. Na obrázku 20 jsme teoretickou hodnotu amplitudy vyznačili vodorovnou čerchovanou čarou.

Pomocí výše odvozeného teoretického popisu se dá lehce vysvětlit i fakt, že v místech kulminace obsazení stavů $|g\rangle$ a $|e\rangle$ je relativní fáze jim odpovídajících komponent právě opačná, neboť

$$\epsilon = \ln\left(\frac{\eta_g^* \eta_e}{|\eta_g^* \eta_e|}\right) = \ln\left[\frac{-\left(1 - e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right)^2}{\left(1 - e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right)\left(1 - e^{i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right)}\right] = -\frac{\Delta E}{\hbar}t. \quad (78)$$

Ze sekce 4.3 a obrázku 11 víme, jak vypadají vlnové funkce okamžitých vlastních stavů $|g\rangle$ a $|e\rangle$. Potkají-li se tyto funkce v opačné fázi, interferují konstruktivně právě v prostřední jámě, což vysvětluje proč se v místech $\frac{\Delta E}{\hbar}t = (2n + 1)\pi$, $n \in \mathbb{N}$ vyskytují maxima na křivce populace v centrální jámě α_C (obrázek 19).

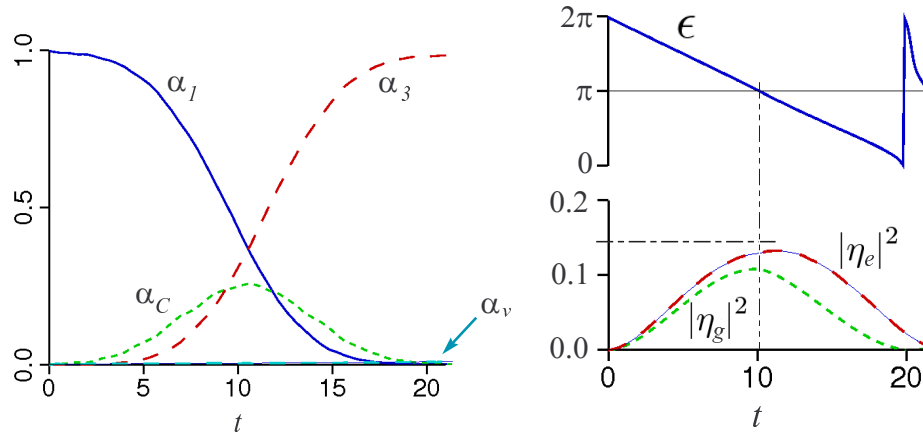
I když při tomto transferu byly neadiabaticitou způsobené oscilace populace v jámách dosti výrazné, nepřekročila pravděpodobnost *nenalezení* systému v temném stavu hodnotu čtyř procent. To ještě stále můžeme posoudit jako adiabatický transfer. Celkově tak máme příklad velice efektivního CTAP.

5.5 Velmi rychlý transfer

Teoreticky odvozený vztah (77) je velmi užitečný při navrhování dynamiky transferu. Můžeme například požadovat, aby v průběhu transferu došlo právě k jednomu kmitu pravděpodobností $|\eta_i|^2$. Doba transportu při konstantní neadiabaticitě pak musí splňovat

$$T' \approx 2\pi \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{2\pi}{0,29} = 21,7 \frac{\hbar}{E_R}. \quad (79)$$

Abychom toho dosáhli, musíme oproti předchozímu transferu zvýšit neadiabaticitu v poměru



Obrázek 21: vlevo: Časový vývoj populace v jednotlivých jámách prostřední trojjámy ($\alpha_1, \alpha_C, \alpha_3$) a průběh celkové populace mimo prostřední trojjámu α_v . Celková doba transferu $T' = 21,35 \frac{\hbar}{E_R}$. vpravo: Časový časový vývoj pravděpodobnosti nalezení systému v okamžitých vlastních stavech hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$ a průběh relativní fáze jim odpovídajících komponent ϵ . Teoretická hodnota (81) je znázorněna vodorovnou čerchovanou čarou.

$$\mathcal{A}' = \mathcal{A} \frac{T}{T'} = 0,06 \cdot \frac{67,7}{21,7} \approx 0,19, \quad (80)$$

což způsobí nárůst maximální pravděpodobnosti obsazení „netemných“ stavů na

$$\max |\eta_g|^2 \approx \max |\eta_e|^2 \approx 4\mathcal{A}'^2 \approx 0,144. \quad (81)$$

Výsledky numerického výpočtu pro takto získané hodnoty jsou prezentovány na obrázku 21.

Takovýto transport už se nedá nazvat adiabatickým. Pravděpodobnost *nenalezení* systému v temném stavu může dosahovat až 25% a úspěšnost transferu je výrazně závislá na správném načasování dynamiky. Navíc se maximální populace v centrální jámě vyhoupla až na $\alpha_C = 0,26$. Na druhou stranu však měl tento proces zanedbatelný únik populace z trojjámy $\max \alpha_v = 0,0114$ a byl velice rychlý, neboť $T' = 21,35 \frac{\hbar}{E_R} \approx 0,98\text{ms}$.

Mohou existovat aplikace, kdy dočasně vysoké obsazení prostřední jámy není na škodu a my potřebujeme rychle a spolehlivě přetransportovat atom o dvě jámy dál. Dále může být velice zajímavé, jak by tento proces ovlivnila přítomnost dalšího atomu v prostřední jámě. Vzhledem k rozsáhlosti problému se však zde těmto otázkám nebudeme věnovat.

5.6 Robustnost transferu

Pokusíme se nyní demonstrovat robustnost transferu, tedy schopnost provést transport populace podle schématu CTAP, i když budou parametry potenciálu v průběhu časové simulace zatíženy určitou hladinou šumu. Šumem rozumíme signál složený z velkého počtu nekoherentních harmonických frekvencí f širokého rozsahu, jež se skládají v superpozici podle váhového faktoru $1/f$. *Hladinou šumu* rozumíme maximální amplitudu kmitů na zadaném časovém intervalu délky T .

K vytvoření šumu můžeme užít generátor náhodných čísel rovnoměrného rozdělení $r \in (0,1)$. Nejdříve vygenerujeme M frekvencí v rozsahu (F_l, F_u) předpisem

$$f_i = F_l + r(F_u - F_l) \quad (82)$$

a jim příslušných M náhodných fází

$$\phi_i = r2\pi. \quad (83)$$

Signál s jednotkovou hladinou šumu pak dostaneme jako

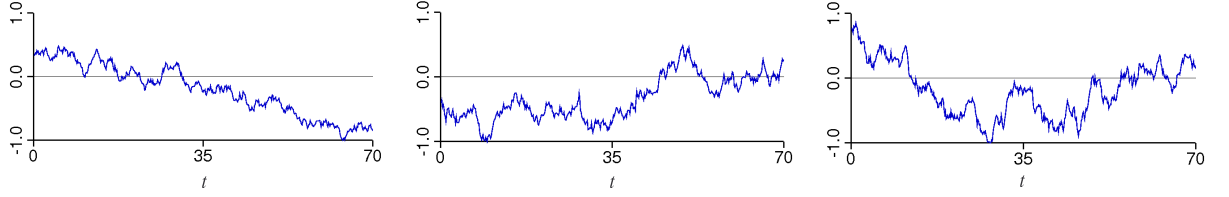
$$\nu(t) = \frac{1}{C} \sum_{i=1}^M \frac{\cos(2\pi f_i t + \phi_i)}{f_i}, \quad C = \max_{t=0}^T \left| \sum_{i=1}^M \frac{\cos(2\pi f_i t + \phi_i)}{f_i} \right|. \quad (84)$$

Několik příkladů jednotkového šumu je uvedeno na obrázku 22.

Pro další simulace bylo užito rozsahu frekvencí $f \in (F_l, F_u) = (1/400, 10) \frac{E_R}{\hbar}$ a $M = 10000$.

Signál šumu musíme pochopitelně zavést do přirozených parametrů mřížky P_i , neboť tyto reprezentují fyzikální veličiny intenzit laserových svazků a jejich relativních fází. Nyní se projeví účelnost zavedení normalizace k jedničce pro parametry P_i . Hledaný časový průběh šumících parametrů totiž dostaneme jako

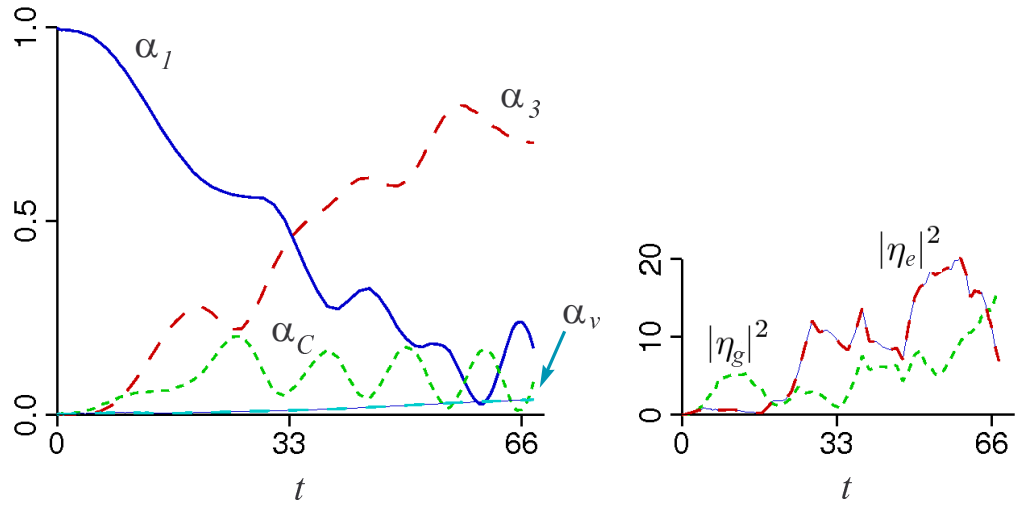
$$P'_i(t) = P_i(s(t)) + w\nu_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, 5 \quad , \quad (85)$$



Obrázek 22: Příklady časového vývoje signálu jednotkového šumu.

kde w je hladina šumu a ν_i jsou různé signály jednotkového šumu.

Příklad vývoje systému pro středně rychlý transfer ze sekce 5.4 po aplikaci jednocentního šumu $w = 0,01$ do všech přirozených parametrů je uveden na obrázku 23. Populace v centrální



Obrázek 23: vlevo: Časový vývoj populace v jednotlivých jámách prostřední trojjámy ($\alpha_1, \alpha_C, \alpha_3$) a průběh celkové populace mimo prostřední trojjámu α_v . Celková doba transferu $T' = 67,7 \frac{\hbar}{E_R}$. vpravo: Časový časový vývoj pravděpodobnosti nalezení systému v okamžitých vlastních stavech hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$.

jámě vykmitla až na hodnotu $\alpha_C = 0,21$ a celkem se po dokončení protokolu transportu našlo jen $\alpha_3 = 0,703$ populace ve třetí jámě. Obsazení temného stavu v tomto momentě bylo asi $\eta_d = 80\%$. I když můžeme říct, že k transportu došlo, ani zdaleka se nejedná o optimální chování, neboť ztráta populace vlivem šumu je mnohem větší než ztráta populace vlivem tunelování ven z trojjámy. Ta činila pouze $\alpha_v = 0,046$. Uveďme ještě, že z mapování symetrického potenciálu v sekci 4.6 můžeme určit lability $\beta_4 = 89,7$ a $\beta_5 = 24,1$.

Pokusme se najít robustnější předpis pro CTAP. K tomu účelu budeme muset slevit z vlastností (48) a vygenerovat nový předpis pro CTAP. Nechť tedy

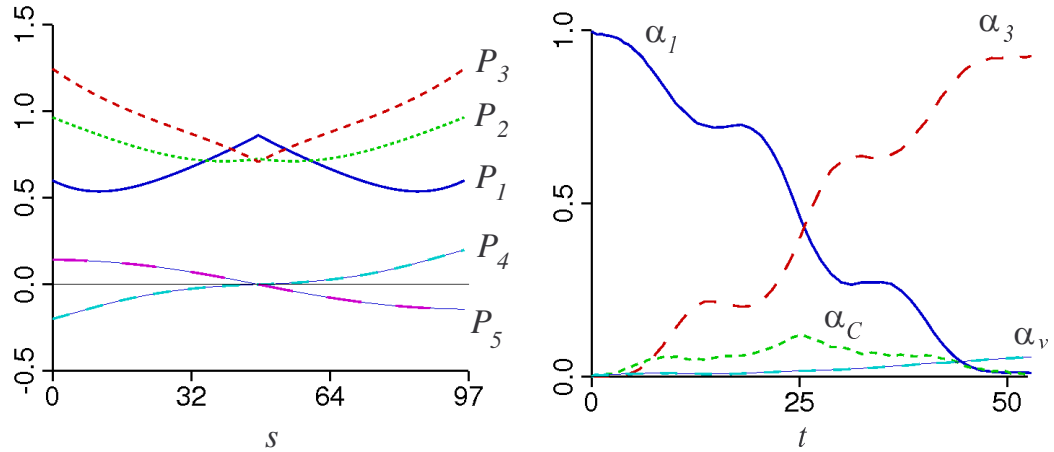
$$\alpha_C = 0,10; \quad \Delta E_{B,d} = 0,0120E_R, \quad (86)$$

z čehož plyne $\Delta E = 0,39E_R$, $\beta_4 = 43,7$ a $\beta_5 = 13,3$. Jelikož jsou nyní lability β_i zhruba

poloviční a z předchozího víme, že pravděpodobnost obsazení „netemných“ stavů roste se druhou mocninou faktoru neadiabaticity, dá se předpokládat, že by vliv šumu stejné magnitudy měl být nyní zhruba čtvrtinový oproti předchozímu transferu. Můžeme si tedy dovolit zdvojnásobit hladinu šumu na $w = 0,02$ a zároveň předpokládat dosažení lepších výsledků.

Počáteční podmínky pro vytvoření předpisu pro CTAP jsou $(B_1, B_3, B_5) = (6, 28; 6, 28; 1, 57)$. Pro srovnání uijeme opět $\mathcal{A}_{CTAP} = 0,06 = \text{konst.}$, z čehož plyne $T = 52,9 \frac{\hbar}{E_R}$.

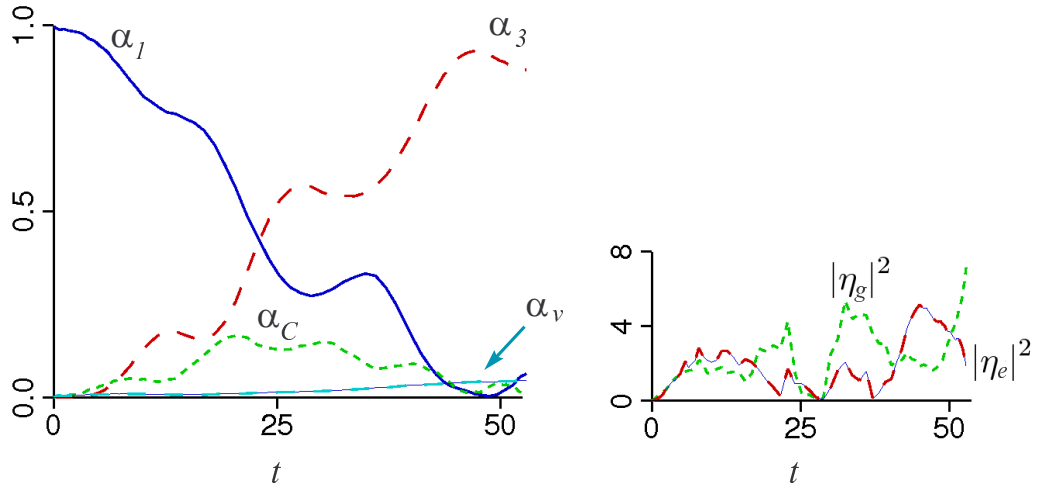
Na obrázku 24 můžeme vidět, že průběh fázových parametrů $P_{4,5}$ je téměř stejný jako u předchozího předpisu a průběh amplitudových parametrů je velice podobný tvarem, avšak došlo k posunutí křivek $P_{1,2,3}$ poněkud níže. Na tomto obrázku dále pro srovnání nabízíme průběh populace v jámách bez přidaného šumu. Maximální hodnota populace v centrální jámě byla $\alpha_C = 0,121$, tedy zhruba dvouprocentní odchylka od statického řešení. Tunelování ven z trojjámy se zastavilo na $\alpha_v = 0,058$ a celkem se po provedení protokolu CTAP do třetí jámy dostalo $\alpha_3 = 0,926$ populace. V prvních dvou jámách tedy zůstalo asi jen 1,6% populace, avšak musíme opět přihlídnout k náhodně dobrému načasování vtom smyslu, že oscilující obsazení netemných komponent bylo po dokončení transportu zhruba v dolní úvratí.



Obrázek 24: vlevo: Křivka předpisu pro CTAP v prostoru P_i . vpravo: Časový vývoj populace v jednotlivých jámách prostřední trojjámy ($\alpha_1, \alpha_C, \alpha_3$) a průběh celkové populace mimo prostřední trojjámu α_v bez přidaného šumu. Celková doba transferu $T = 52,9 \frac{\hbar}{E_R}$.

Na obrázku 25 jsou uvedeny výsledky časového vývoje systému po aplikování dvouprocentního šumu do všech přirozených parametrů. Můžeme pozorovat, že vlivem šumu postupně dochází k nekoherentnímu nárůstu obsazení netemných stavů.

Populace v centrální jámě dosáhla $\alpha_C = 0,167$, takže ke statické populaci a klasickou neadiabaticitou indukované populaci přibýlo ještě 4,6% vlivem šumu. Tunelování ven ve formě konečného $\alpha_v = 0,048$ je nyní přibližně rovno ztrátě populace vlivem šumu do každé z kompo-



Obrázek 25: vlevo: Časový vývoj populace v jámách po aplikování šumu $w = 0,02$. vpravo: Časový časový vývoj pravděpodobnosti nalezení systému v okamžitých vlastních stavech hamiltoniánu $|g\rangle$ a $|e\rangle$.

nent $|g\rangle$ a $|e\rangle$. Populace ve třetí jámě sice vykmitla až na $\alpha_3 = 0,934$, ale nakonec se zastavila na $\alpha_3 = 0,881$. Jsme-li tedy ochotni přijmout vyšší maximální populaci v centrální jámě, můžeme získat i poměrně robustní transfer.

Je potřeba rovněž uvést, že jednoduché normování šumu podle maximální amplitudy kmitu na určitém časovém intervalu s sebou přináší určité komplikace. Náhodná volba frekvencí občas vyústí v nerovnováhu mezi vysokými a nízkými kmitočty v superpozici šumu, což vytváří nerovné podmínky mezi jednotlivými pokusy. Empiricky totiž pozorujeme, že hodnota normovací konstanty šumu C nabývá hodnot zhruba od 400 až do 1800 i pro vysoký počet $M = 10000$ frekvencí.

Chápeme-li šum jako zdroj nekoherentního spřažení mezi stavy vlivem rychlých oscilací hamiltoniánu, je faktor neadiabaticity tomuto jevu příslušný s využitím definice (46) roven

$$\mathcal{A}_{\nu,j} \equiv \beta_j \frac{dP_j}{dt} = \beta_j w \frac{d\nu}{dt} \quad (87)$$

a přitom

$$\frac{d\nu}{dt} = \frac{1}{C} \frac{d}{dt} \left[\sum_{i=1}^M \frac{\cos(2\pi f_i t + \phi_i)}{f_i} \right] = -\frac{1}{C} \sum_{i=1}^M 2\pi \sin(2\pi f_i t + \phi_i). \quad (88)$$

Poslední suma ve výrazu (88) zhruba odpovídá tzv. *náhodné procházce* s počtem M kroků, její absolutní hodnota se pohybuje řádově kolem $\sqrt{M}$ a příliš nezávisí na volbě frekvencí. To, co tedy určuje intenzitu vlivu šumu na proces CTAP, je škálovací konstanta C , a proto bychom ji měli zvolit stejně pro všechny vzorky šumu. My jsme tuto obtíž v prezentovaných příkladech

transportu ošetřili tím, že jsme vybrali transfery s podobnou hodnotou konstanty C pro šum ve fázových parametrech a sice $C \approx 1000$.

Ačkoli jsou prezentované výsledky uspokojivé, nezapomínejme, že byly dány konkrétními vzorky šumu. Pro získání obecné charakteristiky, bychom museli považovat různé transporty za náhodné jevy a užít statistických metod při zpracování velkého počtu pokusů. Nakonec by takto získaná informace nejspíš neměla praktické důsledky, neboť při navrhování konkrétního experimentu může být situace zcela jiná. Amplitudy komponent potenciálu nemusí být zatíženy tak velkým šumem a naopak fázová posunutí mohou být zašuměná více. Navíc i naše zjednodušená definice fázových posunutí komponent potenciálu relativně vůči nejvyšší harmonické může přinést další komplikace.

Záleží na konkrétním návrhu experimentu a popisu vlastností aparatury, abychom mohli na bázi numerického výpočtu říct, jaká budou omezení na efektivitu transferu a jak co nejlépe zvolit vlastnosti transportu diskutované v sekci 4.5.

Úkolem této kapitoly bylo ukázat, že implementace takového experimentu může být v dohledné době reálná, neboť současná experimentální technologie umožňuje udržet nejistotu v nastavení fází laserových svazků právě kolem hodnot jednoho procenta po dobu desítek milisekund a u intenzit těchto svazků se můžeme s přesností posunout ještě o něco dále [12].

6 Závěr

Ukázali jsme, že je možné uskutečnit proces CTAP v periodickém potenciálu složeném ze tří sinusoid celkem s pěti parametry a to v oblasti jedné trojjámy. Navrhli jsme fyzikální model jednorozměrné optické mřížky se třemi harmonickými komponentami a vyložili princip vzniku potenciálu mřížky na bázi interakce atomu s optickým polem.

Dospěli jsme k závěru, že pro dosažení CTAP je potřeba vzdát se dvou stupňů volnosti pro zajištění adiabaticity a minimální populace v centrální jámě. Zbývající stupně volnosti lze různě parametrizovat a izolovat tak bezprostředně některé kvantifikátory různých vlastností transportu jako například šířku Blochova pásu regulující tunelování ven z trojjámy nebo populaci v centrální jámě, jenž úzce souvisí s adiabaticitou.

Předvedli jsme, že pro optimální adiabaticitu v prvním přiblížení postačí uvažovat vzdálenost energií vlastních stavů, a že v určitém rozsahu můžeme chápat neadiabaticitu jako spřažení mezi vlastními stavy systému. Na základě toho předpokladu jsme pak pomocí zjednodušeného teoretického modelu odvodili přibližné analytické vztahy pro vývoj systému v bázi vlastních stavů, jež nám umožňují odhadnout vliv dynamiky předpisu pro CTAP na vývoj obsazení jednotlivých vlastních stavů systému v čase.

Krátce jsme se věnovali i ověření robustnosti transferu, kde se ukázalo, že pro experimentální implementaci hraje klíčovou roli odolnost transferu vůči šumu v parametrech mřížky, zejména pak v relativním fázovém posunutí harmonických komponent. Usoudili jsme, že pro vynesení užitečných kvantitativních závěrů o robustnosti transferu by bylo zapotřebí užití statistických metod pro zpracování výsledků velkého množství simulací. Jelikož je však rozsah, v jakém mohou být primární vlastnosti CTAP nastaveny, velmi veliký, nemá smysl pokoušet se tuto úlohu řešit obecně, dokud nebudou známy bližší požadavky na CTAP dané konkrétní aplikací.

Můžeme říci, že jsme splnili vytčené cíle práce a položili dobrý základ pro výzkum procesu CTAP v reálném trojjámovitém potenciálu.

V navazujícím výzkumu bych se chtěl věnovat otázce interakce transportovaného atomu s atomy jiného druhu, jejichž přítomnost v intermediální jámě může v procesu CTAP fungovat jako zábrana (dojde k zablokování transportu), nebo naopak jako hradlo, které transport umožní. Rád bych se také věnoval zefektivnění procesu tvorby a modifikace programů pro numerické simulace fyzikálních systémů zejména užitím objektově orientovaného programování a dynamického propojení modulů vytvořených v různých programovacích jazycích.

7 Dotatky

Sekce dodatků má za úkol osvětlit numerické metody užité při řešení této práce. Nejprve jsem pracoval s programem Octave. Díky své intuitivní syntaxi, pohodlné vektorové aritmetice a zabudovanému grafickému rozhraní mi tento interpretační jazyk umožnil vyzkoušet velkou spoustu nápadů a nakonec i sestavit algoritmus pro hledání cesty v prostoru parametrů.

Jedna z posledních verzí programu v jazyce Octave/Matlab je přiložená na CD se stručným komentářem v anglickém jazyce.

Octave bez problému zvládl i řešení časové Schrödingerovy rovnice a umožnil tak ověření adiabaticity a robustnosti transportu. Rozhodl jsem se však vyzkoušet i jiné alternativy a proto jsem sáhl po FORTRANu, nízkoúrovňovém jazyce pro vědecké programování. Komunita vědců je—co se týče programování—poněkud konzervativní, a proto je stále nejvíce knihoven s algoritmy pro obvyklé numerické úlohy napsáno v jazyce FORTRAN77, i když existuje několik novějších verzí. Zvolil jsem taktéž tuto starší variantu.

Jako každý jazyk má FORTRAN své kladné i stinné stránky a jejich výčet z mého pohledu by zde působil přinejmenším subjektivně. Nepochybně však lze říci, že komplikovanější a formálně přísná syntaxe je daní za několikanásobně vyšší výkon.

Na výše zmíněném CD jsou přiloženy i zdrojové kódy mých programů ve FORTRANu a jejich kompilace. Účel těchto dat je však spíše ilustrativní, neboť plnohodnotná obsluha programů vyžaduje zásahy do zdrojového kódu za účelem změny různých parametrů. Cílem práce *nebylo* vytvořit samostatný uživatelsky přátelský program pro demonstraci všech provedených výpočtů, ale pouze výpočty provést a následně prezentovat v textu jejich výsledky.

Zájemci mohou nahlédnout pod pokličku programů, my však zde vyložíme jejich stěžejní principy bez užití konkrétního programovacího jazyka.

7.1 Numerické řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

Princip numerického řešení stacionární Schrödingerovy rovnice spočívá v tom, že vlnovou funkci reprezentujeme zadáním jejich hodnot v konečném počtu N rovnoměrně rozdělených bodů na intervalu, na němž chceme rovnici řešit. Tím dostaneme stav systému jako N -rozměrný vektor s komplexními komponentami.

V této reprezentaci můžeme zapsat operátor potenciální energie jako diagonální matici $N \times N$

$$U = \begin{pmatrix} U(x_1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & U(x_2) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & U(x_{N-1}) & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & U(x_N) \end{pmatrix}, \quad (89)$$

kde $x_1, x_2, \dots, x_N$ jsou x -ové souřadnice bodů v nichž určujeme hodnoty vlnové funkce. Vyjdeme-li z hamiltoniánu (32) zavedeného v sekci 4.1, můžeme operátor kinetické energie sestavit jako

$$T = -\frac{1}{4\pi^2 dx^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & e^{-iqL} \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ e^{iqL} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad (90)$$

kde jsme implementovali okrajové podmínky (34) jako komplexní rohové elementy a dx je vzdálenost bodů na ose x . Pokud bychom chtěli řešit úlohu s pevnými konci, položili bychom rohové elementy rovny nule.

Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice tak můžeme redukovat na hledání vlastních čísel a vlastních vektorů matice celkového hamiltoniánu systému $H = T + U$, což je reprezentováno rovnicí (35). K tomuto účelu můžeme v Octave využít vestavěnou funkci `eig` pro řešení charakteristické rovnice a ve FORTRANu knihovnu LAPACK.

Pro většinu výpočtů bylo zvoleno $N = 300$ bodů na interval délky $1,5\lambda$.

7.2 Algoritmus pro hledání extrémů funkce

Nejprve vytvoříme vektor hodnot potenciálu v několika rovnoměrně rozmístěných bodech

$$u_i = U(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, M \quad . \quad (91)$$

Potom sestavíme vektor diferencí

$$du_i = u_{i+1} - u_i, \quad i = 1, 2, \dots, (M-1) \quad (92)$$

a z něj znaménkový vektor

$$z_i = du_{i+1} \times du_i, \quad i = 1, 2, \dots, (M-2), \quad (93)$$

jenž nabývá záporných hodnot jen v případech, že funkce potenciálu není v bodě x_{i+1} monotónní, tedy pro extrém funkce. Takové body vyhledáme a získáme tak souřadnicové pozice extrémů.

Tato metoda hledání extrémů není pro finální využití dostatečně přesná ani pro velký počet $M = 10000$ bodů, kdy se navíc stává velmi náročnou na výpočetní kapacitu a tudíž pomalou. Užitím malého počtu $M = 100$ bodů však můžeme získat spolehlivý a rychlý způsob hrubého odhadu polohy K extrémů x_{ej} , $j = 1, 2, \dots, K$, jež nutně potřebujeme jako vstup do přesnějšího algoritmu pro hledání extrémů.

Nyní budeme zpřesňovat určení horizontální pozice jednotlivých extrémů. Zvolíme si krok $\Delta x = 10^{-3}\lambda$ a $dx_{ej} = 10^{-6}\lambda$ a určíme diferenci

$$\Delta U_j = U(x_{ej} + \Delta x) - U(x_{ej} - \Delta x). \quad (94)$$

Pokud tato veličina není nulová, znamená to, že x_{ej} není polohou extrému. Diferencujeme proto (94) podle x_{ej} a zjistíme tak v lineárním přiblížení přesnější polohu extrému

$$x'_{ej} = x_{ej} - \Delta U_j \left(\frac{d\Delta U_j}{dx_{ej}} \right)^{-1}. \quad (95)$$

Ve svém algoritmu tento postup opakuji až dokud $\Delta U_j < 10^{-13}E_R$. K tomu dojde velmi rychle protože, čím blíže jsme extrému tím přesnější odhady nám lineární aproximace dává. Většinou postačí tři až čtyři opakování, takže můžeme program ošetřit proti zaseknutí v neúspěchu tím, že smyčku ukončíme chybovým hlášením v případě deseti neúspěšných opakování.

Známe-li polohy extrémů stačí je dosadit do potenciálu a získáme hodnoty extrémů

$$B_j = U(x_{ej}), \quad j = 1, 2, \dots, K, \quad (96)$$

kde $K = 6$ pro případ trojjámovitého potenciálu.

V textu práce jsme definovali extrémy B_j vůči hloubce prostřední jámy B_4 , tedy jako

$$B_j := B_j - B_4. \quad (97)$$

To je ve skutečnosti finální výstup, který v mém programu dává funkce pro hledání extrémů `par2bh`.

7.3 Numerická diferenciální reparametrizace

Ukážeme si nyní převod mezi parametrizacemi P_i a B_j . K tomu využijeme výše popsanou proceduru pro hledání extrémů potenciálu

$$(B_1^n, \dots, B_6^n) = \text{par2bh}[(P_1^n, \dots, P_5^n)], \quad (98)$$

kde horní index n slouží pro zvýraznění faktu, že se jedná o navzájem sdružené body.

Předpokládejme, že známe aktuální hodnoty parametrů $(P_1^1, \dots, P_5^1)$ a požadované hodnoty parametrů $(B_1^2, \dots, B_6^2)$ a chceme sestavit proceduru, která nám na bázi této informace určí požadované hodnoty parametrů

$$(P_1^2, \dots, P_5^2) = \text{bh2par} [(P_1^1, \dots, P_5^1), (B_1^2, \dots, B_6^2)]. \quad (99)$$

Nejdříve zjistíme jak jsou vzdálené bod aktuální a požadovaný v prostoru B_j

$$(\delta B_1, \dots, \delta B_6) = (B_1^2, \dots, B_6^2) - \text{par2bh} [(P_1^1, \dots, P_5^1)] \quad (100)$$

$$|(\delta B_1, \dots, \delta B_6)| \equiv \max(|\delta B_1|, \dots, |\delta B_6|), \quad (101)$$

kde jsme výrazem (101) definovali normu v prostoru B_j . Pokud je hodnota posledního výrazu větší než požadovaná přesnost $\nu = 10^{-14} E_R$, provedeme následující cyklus.

Zavedeme diferenci přirozeného parametru $dP = 10^{-4}$ a zjistíme posunutí

$$\partial_1(B_1, \dots, B_6) \equiv \text{par2bh} [(P_1^1, \dots, P_5^1) + (dP, 0, 0, 0, 0)] - (B_1^1, \dots, B_1^1) \quad (102)$$

postupně pro difference každého parametru P_i . Takto získané vektory transponujeme a sestavíme z nich matici jakobiánu

$$J_{ji} = \frac{\partial B_j}{\partial P_i} \equiv \frac{1}{dP} \begin{pmatrix} \partial_1 B_1 & \partial_2 B_1 & \dots & \partial_5 B_1 \\ \partial_1 B_2 & \partial_2 B_2 & \dots & \partial_5 B_2 \\ \partial_1 B_3 & \partial_2 B_3 & \dots & \partial_5 B_3 \\ \partial_1 B_5 & \partial_2 B_5 & \dots & \partial_5 B_5 \\ \partial_1 B_6 & \partial_2 B_6 & \dots & \partial_5 B_6 \end{pmatrix}, \quad (103)$$

kde jsme vyřadili identicky nulový řádek $(\partial_1 B_4, \partial_2 B_4, \dots, \partial_5 B_4)$ abychom matici (103) učinili čtvercovou.

Vektor posunutí (100) nyní můžeme psát jako superpozici

$$\sum_{i=1}^5 \frac{\partial B_j}{\partial P_i} \delta P_i = \delta B_j, \quad (104)$$

což je soustava lineárních rovnic s pravou stranou $(\delta B_1, \dots, \delta B_6)$ pro neznámý vektor posunutí $(\delta P_1, \dots, \delta P_5)$.

Řešení tohoto problému spočívá v nalezení inverzní matice jakobiánu. Mnoho programovacích prostředí—Octave a FORTRAN nevyjímaje—však disponuje vestavěnými algoritmy nebo přídatnými knihovnami umožňujícími přímo nalezení vektoru $(\delta P_1, \dots, \delta P_5)$. Tím je program učiněn poněkud stručnějším.

Prozatímní hodnoty hledaných přirozených parametrů tak dostaneme jako

$$(P_1'^2, \dots, P_5'^2) = (P_1^1, \dots, P_5^1) + (\delta P_1, \dots, \delta P_5). \quad (105)$$

Nyní ověříme zda

$$|(B_1^2, \dots, B_6^2) - \text{par2bh}[(P_1'^2, \dots, P_5'^2)]| < \nu \quad (106)$$

a pokud ne, položíme

$$(P_1^1, \dots, P_5^1) := (P_1'^2, \dots, P_5'^2) \quad (107)$$

a celý cyklus počínaje operací (102) opakujeme, až dokud nedosáhneme požadované přesnosti. Tehdy můžeme položit

$$(P_1^2, \dots, P_5^2) := (P_1'^2, \dots, P_5'^2) \quad (108)$$

a vrátit řízení z funkce **bh2par** nadřazenému programu.

Totožný algoritmus můžeme užít i k reparametrizaci pomocí jiných okamžitých vlastností potenciálu. K tomu účelu můžeme vytvořit oddělenou funkci, nebo povolit předdefinování vracených hodnot funkce **par2bh** například zavedením globální proměnné, která v sobě nese informaci o požadované variantě parametrizace. Funkce **par2bh** tak může některým vraceným proměnným přiřadit hodnoty jiných veličin než B_j například

$$B_2 := D^2 E, \quad B_6 := \langle x_o | d \rangle, \quad (109)$$

čímž dostaneme parametrizaci $\{B_1, B_3, B_5, D^2 E, \langle x_o | d \rangle\}$.

7.4 Metoda SSFM a časová Schrödingerova rovnice

Zvolme malý časový interval $dt = 10^{-3} \frac{\hbar}{E_R}$. Předpokládejme, že chceme řešit časovou Schrödingerovu rovnici (50) na prostorovém intervalu $(0, L)$, jenž rozdělíme na N bodů

$$x_j = j \frac{L}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, (N-1). \quad (110)$$

Vývoj stavu systému vlivem potenciálové části hamiltoniánu za čas dt v bodech (110) dostaneme jednoduše jako

$$\psi'(x_j, t + dt) = e^{-iU(x_j, t)dt} \psi(x_j, t). \quad (111)$$

Pokud je vlnová funkce zadána v konečně mnoha bodech, můžeme koeficienty Fourierova rozvoje (54) získat jako

$$c_n = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i2\pi n \frac{x_j}{L}} \psi(x_j), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (112)$$

přičemž platí podmínka periodicity

$$c_n = c_{n+N}, \quad (113)$$

jenž plyne z faktu, že v N -rozměrném prostoru existuje právě N báзовých vektorů. Stanovme, že fyzikální smysl mají pouze koeficienty $c_{-N/2}, c_{-N/2+1}, \dots, c_{N/2-2}, c_{N/2-1}$, neboť reprezentují doménu hybnostních komponent centrovanou kolem nuly.

Procedura rychlé Fourierovy transformace FFT vrací jak v Octave/Matlab tak i ve FORTRANu koeficienty (112) seřazené ve vektoru

$$(c_0, \dots, c_{N-1}) = \frac{1}{N} \text{FFT}[(\psi(x_1), \dots, \psi(x_N))]. \quad (114)$$

A bychom nemuseli tyto koeficienty přeskupovat, můžeme si s uvážením vlastnosti (113) vygenerovat vektor kinetické exponenciály ve tvaru

$$K_m \equiv e^{-i \frac{m^2}{L^2} dt}, \quad m = 0, 1, \dots, (N/2 - 1) \quad , \quad (115)$$

$$K_n \equiv e^{-i \frac{(n-N)^2}{L^2} dt}, \quad n = N/2, (N/2 + 1), \dots, (N - 1) \quad . \quad (116)$$

Nejdříve aplikujeme operaci (114) na prozatímní vlnovou funkci (111). Časový vývoj takto získaných prozatímních koeficientů pak dostaneme vynásobením

$$c_j(t + dt) = K_j c_j(t). \quad (117)$$

Nakonec zpětnou Fourierovou transformací získáme složený vývoj stavu systému za čas dt jako

$$\psi(x_j, t + dt) = \text{IFFT}[(c_0(t + dt), \dots, c_{N-1}(t + dt))]. \quad (118)$$

Ze způsobu jakým operujeme s číslem N je patrné, že je to číslo kladné. Pro naše numerické simulace jsme užili $N = 300$ na prostorový interval $L = \frac{3}{2}\lambda$. Pro simulaci třech trojjam tedy bylo potřeba celkem 900 bodů.

7.5 Odhad frekvence vlastních kmitů atomu v potenciálu optické mřížky

Budeme uvažovat jedinou jámu, jenž aproximujeme harmonickým potenciálem

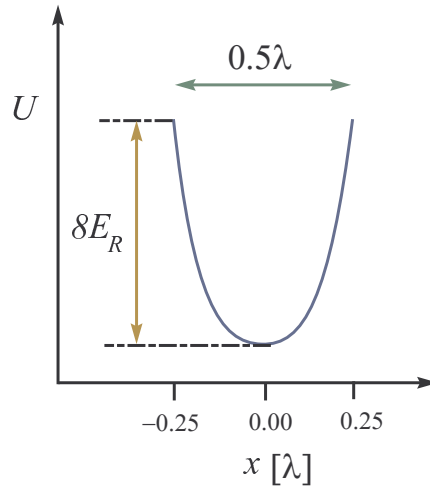
$$U = \frac{1}{2} k x^2, \quad (119)$$

kde k je tzv. konstanta tuhosti. Uvažujme šířku jámy $0,5\lambda$ a hloubku jámy $8E_R$, což zhruba vystihuje užitý model mřížky.

Pro hodnotu potenciálu v bodě $x = 0,25\lambda$ platí $8E_R = \frac{1}{2}k(0,25\lambda)^2$, z čehož můžeme určit konstantu $k = \frac{256E_R}{\lambda^2}$.

Vlastní frekvence harmonického oscilátoru dána jako

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (120)$$



Obrázek 26: Schéma potenciálové jámy a jejich rozměrů.

kde m je hmotnost atomu. Dosazením do tohoto vztahu za k a uvážením definice $E_R \equiv \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m\lambda^2}$ dostaneme

$$\omega = \frac{16\pi\hbar\sqrt{2}}{\lambda^2 m}. \quad (121)$$

Pro vyčíslení této hodnoty uvažujme atomy rubidia ^{87}Rb a vlnovou délku $\lambda = 810\text{nm}$. Výsledná frekvence vlastních kmitů atomu je

$$\omega \approx 79\text{kHz}, \quad (122)$$

což odpovídá našemu tvrzení, že hodnota této veličiny je řádově 100kHz.

Literatura

- [1] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1994, dodatek I.
- [2] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1966, vol. II, kapitola XVII.
- [3] K. Marzlin, B. C. Sanders, *Inconsistency in the Application of the Adiabatic Theorem*, Phys. Rev. Lett. **93**, 160408 (2004).
- [4] T. Opatrný, K. Das, *Conditions for vanishing central-well population in triple-well adiabatic transport*, Phys. Rev. A **79**, 012113 (2009).
- [5] K. Bergmann, H. Theuer, B. Shore, *Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1003 (1998).
- [6] H. J. Metcalf, P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping*, New York: Springer-Verlag, 1997.
- [7] Harold. J. Metcalf, Stony Brook University New York, USA, *privátní sdělení*, Stony Brook NY, 6.2.2010.
- [8] Sebby-Strabley, J. and Anderlini, M. and Jessen, P. S. and Porto, J. V., *Lattice of double wells for manipulating pairs of cold atoms*, Phys. Rev. A **73**, 033605 (2006).
- [9] L. Allen and J.H.Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Dover, New York (1975).
- [10] CH. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, New York: John Wiley & Sons, 1996.
- [11] Wikipedia, *Split-step method*, URL: http://en.wikipedia.org/wiki/Split-step_method, poslední modifikace 24.11.2009.
- [12] Seth Aubin, College of William and Mary Williamsburg, USA, *privátní sdělení*, Reading PA, 12.2.2010.