

Симметрия и квантовый контроль динамики ридберговских атомов

А.В. Горохов¹, А.К. Крюков¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Рассчитаны вероятности переходов между высоковозбужденными ридберговскими состояниями атомов в электромагнитных ловушках под воздействием внешних электромагнитных полей. При расчете внутриатомных переходов использованы метод групп динамической симметрии водородоподобного атома и техника атомных когерентных состояний. Проведено качественное сравнение с результатами недавних экспериментальных работ. Обсуждены проблемы когерентного квантового контроля квантовой динамики атомов в резонаторах и некоторые применения в квантовой информатике.

1. Введение

Квантовая оптика и квантовая информатика в настоящее время активно развиваются и во многом исследования уже перешли на инженерный уровень по созданию устройств, работающих на основе квантовых принципов. Разработаны уникальные измерительные средства, позволяющие оперировать с одним или несколькими атомами и фотонами. Появились принципиально новые объекты исследования, такие как квантовые точки в полупроводниках, оптомеханические устройства и искусственные атомы, создаваемые при помощи джозефсоновских колец физики сверхпроводников. Продолжается также исследование и традиционных для квантовой оптики объектов, таких как ридберговские атомы [1-3], возбужденные на очень высокие уровни n в высокодобротных резонаторах. При высоких n валентные электроны имеют энергии связи, которые уменьшаются как $1/n^2$, а радиус Боровской орбиты возрастает как n^2 [4]. Ридберговские состояния атомов и ионов являются очень удобными для наблюдения квантовых эффектов взаимодействия атома с фотонами [5]. Это связано с тем, что, ридберговские состояния очень хорошо связываются с полем излучения, поскольку амплитуды переходов между соседними уровнями возрастают как n^4 . Переходы между уровнями с соседними $n > 30$ оказываются в миллиметровом диапазоне длин волн, так что резонаторы с модами малого порядка могут быть сделаны достаточно большими, обеспечивая соответствующие времена взаимодействия.

Внутренние электроны находятся под воздействием сильного электростатического поля ядра E_0 , и внешние поля для них мало существенны. На ридберговский электрон действует сильно ослабленное поле ядра $\sim E_0/n^4$, потому внешние поля могут кардинально изменить его состояние. Именно это было использовано в недавних экспериментах по созданию одноатомных мазеров [5]. Уникальные свойства ридберговских состояний позволяют

использовать для описания их взаимодействия с внешним полем модель водородоподобных атомов и применить известную для атома водорода группу симметрии $SO(4)$, которую открыли более 80 лет назад В.А. Фок и V. Bargmann (см., например, [6]). Мы покажем, что при расчете переходов между ридберговскими состояниями без изменения n эта группа выступает как группа динамической симметрии гамильтониана в картине взаимодействия.

Под группой динамической симметрии гамильтониана квантовой системы понимают группу, унитарное неприводимое представление которой действует в гильбертовом пространстве всех состояний системы [7]. При этом гамильтониан \hat{H} предполагается представимым в виде операторнозначной функции генераторов представления группы G :

$$\hat{H} = f(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_r), \quad (1)$$

где самосопряженные операторы $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_r$ образуют базис алгебры Ли r -параметрической группы G :

$$[\hat{A}_\alpha, \hat{A}_\beta] = i C_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \hat{A}_\gamma. \quad (2)$$

Здесь $C_{\alpha\beta}^\gamma$ - структурные постоянные группы G , $\alpha, \beta, \gamma = 1, \dots, r$. В случае линейной функции f задача о квантовой динамике в принципе является точно решаемой [8,9], однако в более общем случае функция f может представлять полиномиальную зависимость от генераторов $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_r$.

Квантовая оптика и квантовая информатика являются естественной областью применения метода динамических групп. Одной из основных задач здесь является описание взаимодействия внешнего поля с веществом. Если поле излучения является высокомонохроматическим, то существенными в атоме (атомах) являются переходы между двумя уровнями, которые попадают в резонанс с полем излучения, при условии, что все остальные переходы далеки от резонанса. В этом случае атом можно рассматривать как двухуровневую систему. Группа динамической симметрии такой системы - группа $SU(2)$. В многоуровневом случае такой динамической группой является $SU(N)$, где N - число уровней. Для квантовой системы с линейным по генераторам динамической группы гамильтонианом оператор эволюции сводится к оператору представления группы G :

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{T}(g(t, t_0)), \quad (3)$$

где $g(t, t_0)$ - траектория в группе G , а начальный элемент $g(t_0, t_0) = e$ - единичному элементу группы. Оператор $\hat{T}(g(t, t_0))$ можно, в принципе, найти точно, используя технику распутывания операторных экспонент [8]. Знание группы динамической симметрии и построение с ее помощью системы теоретико-групповых когерентных состояний (КС) позволяет сформулировать проблему квантового когерентного управления динамикой переходов, отыскивая в группе G такую траекторию $g(t, t_0)$, которая будет приводить к генерации некоторого заданного конечного состояния с максимально возможной вероятностью. Напомним [9], что когерентное состояние для представлений группы G определяется формулой

$$|CS\rangle \equiv |Z\rangle = \hat{T}(g_Z)|\Psi_0\rangle, \quad (4)$$

где g_Z - элемент группы G , отвечающий точке однородного пространства G/G_0 , т.е. представитель класса смежности $g_Z G_0$ в G , а G_0 - подгруппа группы G , (с точностью до фазового множителя), оставляющая инвариантным вектор $|\Psi_0\rangle$. $Z = (z^1, \dots, z^n)$ - локальные комплексные координаты, параметризующие КС. Это позволяет естественно ввести симплектическую структуру на однородном пространстве группы G (пространстве

комплексных параметров КС), превратив его в фазовое пространство классического аналога исследуемой квантовой задачи и использовать методы, разработанные в классической механике. Подстановка $|\Psi(t)\rangle = e^{i\chi(t)} |Z(t)\rangle$ во временное уравнение Шредингера приводит к поиску траектории в пространстве КС. Уравнения, определяющие траектории, имеют гамильтонов вид на пространстве Кэлера G/G_0 . Задача квантового управления сводится тогда к известной задаче отыскания оптимальной траектории на однородном пространстве группы Ли G .

2. Водородоподобный атом во внешних электромагнитных полях

Рассмотрим водородоподобный атом, находящийся в классическом электромагнитном поле. Его гамильтониан запишем в виде суммы гамильтониана свободного атома и гамильтониана взаимодействия:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t), \quad (5)$$

где $\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2} - \frac{Z_A e_0^2}{r}$ и $\hat{H}_I = -\hat{d} \cdot \vec{E}(t)$. Здесь $\hat{P} = -i\nabla$ - оператор импульса, r - расстояние между электроном и ядром, Z_A - заряд ядра, экранированный внутренней электронной оболочкой, e_0 - элементарный заряд и $\vec{E}(t)$ - напряжённость электрического поля. Мы используем систему единиц, в которой $\hbar = \mu = c = 1$ (μ - приведённая масса).

Хорошо известно, что группой симметрии водородоподобного атома является группа четырехмерных вращений $SO(4)$. Её генераторами являются оператор углового момента \hat{L} и оператор Рунге – Ленца \hat{A} , которые коммутируют с гамильтонианом \hat{H}_0 , и алгебра коммутационных соотношений которых имеет вид:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{L}_k, [\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{A}_k, [\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -2i\hat{H}_0 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, i, j, k = 1, 2, 3; \quad (6)$$

здесь ϵ_{ijk} - тензор Леви-Чивита.

Далее рассмотрим связанные состояния ридберговского электрона и введем операторы $\hat{J}^{(1)}, \hat{J}^{(2)}$, связанные с оператором углового момента \hat{L} и $\hat{N} = \frac{1}{\sqrt{-2\hat{H}_0}} \hat{A}$ следующим образом

[6, 11]: $\hat{J}^{(1,2)} = \frac{1}{2}(\hat{L} \pm \hat{N})$. Операторы при разных верхних индексах коммутируют, а при

одинаковых три проекции оператора $\hat{J}^{(\sigma)}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям алгебры Ли группы $SU(2)$, что соответствует локальному изоморфизму группы $SO(4)$ прямому произведению двух групп $SU(2)$. Фиксированному значению главного квантового числа n соответствует унитарное неприводимое представление $\hat{T}^{(J_1, J_2)}$, где $J_1 = J_2 = (n-1)/2$.

Известно [6], что в подпространстве состояний с фиксированным n оператор дипольного момента пропорционален оператору \hat{N} . Используя этот факт, гамильтониан взаимодействия, который в данном приближении коммутирует с гамильтонианом атома \hat{H}_0 , можно представить в виде

$$\hat{H}_I(t) = \bar{\omega}^{(1)}(t) \hat{J}^{(1)} + \bar{\omega}^{(2)}(t) \hat{J}^{(2)} = \hat{H}_I^{(1)}(t) + \hat{H}_I^{(2)}(t), \quad (7)$$

где $\bar{\omega}^{(1)}(t) = -\bar{\omega}^{(2)}(t) = -\frac{2n}{3Z_A} \vec{E}(t)$, а $\hat{H}_I^{(1,2)}(t) = \bar{\omega}^{(1,2)}(t) \hat{J}^{(1,2)}$.

Перепишем гамильтониан с использованием понижающих и повышающих операторов $\hat{J}_{\pm}^{(1,2)} = \hat{J}_x^{(1,2)} \pm i\hat{J}_y^{(1,2)}$:

$$\hat{H}_I^{(1,2)}(t) = \omega_z^{(1,2)}(t)\hat{J}_z^{(1,2)} + b^{(1,2)}(t)\hat{J}_+^{(1,2)} + \overline{b^{(1,2)}}(t)\hat{J}_-^{(1,2)}, \quad (8)$$

где $b^{(1,2)}(t) = \frac{1}{2}(\omega_x^{(1,2)} - i\omega_y^{(1,2)})$.

Будем искать оператор эволюции в виде оператора представления группы $SO(4) = SO(3) \times SO(3) \approx SU(2) \times SU(2)$:

$$\hat{U}_I(t) = \hat{U}^{(1)}(t) \otimes \hat{U}^{(2)}(t), \quad t_0 = 0, \quad (9)$$

где

$$U^{(1,2)}(t) = e^{-i\psi_{1,2}(t)\hat{J}_z^{(1,2)}} e^{-i\theta_{1,2}(t)\hat{J}_y^{(1,2)}} e^{-i\phi_{1,2}(t)\hat{J}_z^{(1,2)}} = e^{\alpha_{1,2}(t)\hat{J}_+^{(1,2)}} e^{\beta_{1,2}(t)\hat{J}_z^{(1,2)}} e^{\gamma_{1,2}(t)\hat{J}_-^{(1,2)}},$$

Здесь ψ, θ, ϕ углы Эйлера, а параметры α, β, γ связаны с ними формулами:

$$\alpha = -\text{tg} \frac{\theta}{2} e^{-i\psi}, \quad \beta = -2 \ln \cos \frac{\theta}{2} - i(\phi + \psi), \quad \gamma = \text{tg} \frac{\theta}{2} e^{-i\phi}. \quad (10)$$

В последних выражениях индекс $\sigma = 1, 2$ у переменных опущен, чтобы упростить запись.

Подставляя оператор эволюции в нестационарное уравнение Шредингера, получаем систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, которые определяют классическую динамику на группе $SO(4)$:

$$\begin{cases} i(\dot{\alpha} - \alpha\dot{\beta} - \alpha^2 e^{-\beta}\dot{\gamma}) = b(t), \\ i(\dot{\beta} + 2\alpha e^{-\beta}\dot{\gamma}) = \omega_z(t), \\ i e^{-\beta}\dot{\gamma} = \overline{b}(t); \\ \alpha(0) = \beta(0) = \gamma(0) = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Численно решая (11) для двух значений индекса $\sigma = 1, 2$ можно определить вероятности переходов после вычисления матричных элементов оператора эволюции, которые сводятся к произведению двух D-функций Вигнера для двух $(2J+1)$ – мерных представлений группы $SU(2)$, указанных формулой (9).

Для когерентного состояния группы $SU(2) \times SU(2)$, определенного формулой

$$|Z\rangle = |z_1\rangle \otimes |z_2\rangle, \quad |z_\sigma\rangle = (1 + |z_\sigma|^2)^{-J/2} \exp(z_\sigma \hat{J}_+^{(\sigma)}) |J, -J\rangle, \quad (12)$$

получаем уравнения Риккати:

$$i \dot{z}_\sigma = b^{(\sigma)}(t) + \omega_z^{(\sigma)}(t) z_\sigma - \overline{b}^{(\sigma)}(t) z_\sigma^2, \quad \sigma = 1, 2. \quad (13)$$

Последние уравнения определяют классическую динамику на объединении однородных пространств $SU(2)/U(1)$, каждое из которых при отображении $z = -\text{tg} \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}$ является сферой

Блоха. В результате оптимальные траектории в задаче квантового управления можно искать на двух сферах Блоха.

В рассматриваемом случае задача о переходах между уровнями ридберговского атома формально свелась к динамике двух кубитов во внешнем поле. Однако, в отличие от случая кубитов, где представление каждой из групп $SU(2)$ является двумерным, здесь при фиксированном значении σ представление определено унитарной матрицей размерности $(2J+1) \times (2J+1)$. Для фиксированного n число подуровней равно n^2 , поэтому использование ридберговских атомов в качестве объектов для более ёмкого хранения информации в схемах квантовой информатики представляется перспективным.

Приведем пример расчета переходов между ридберговскими состояниями иона рубидия в поле

$$\vec{E} = (E_{\perp} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \cos(\omega t), E_{\perp} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} \sin(\omega t), E_{\parallel}), \quad (14)$$

которое является суперпозицией постоянного однородного электрического поля ловушки E_{\parallel} , направленного вдоль оси z , и поля с циркулярной поляризацией, распространяющегося вдоль оси z и убывающего с течением времени.

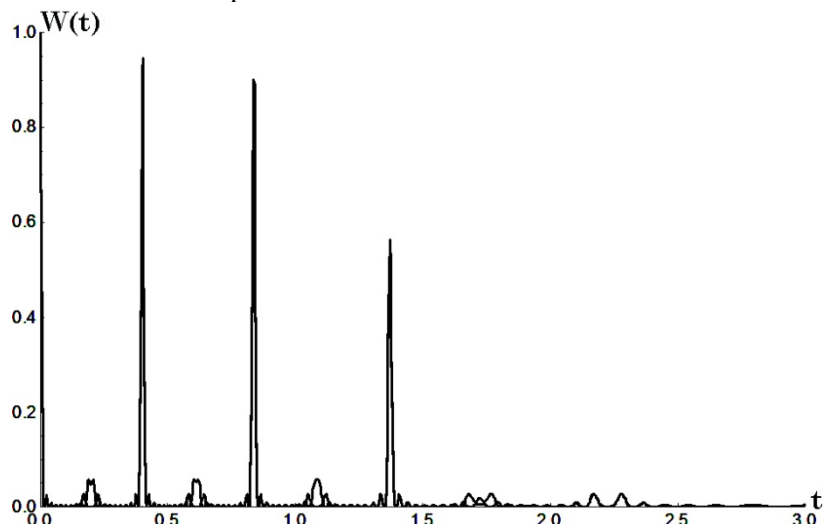


Рисунок 1. Зависимость вероятности перехода $W(t)$ иона рубидия во внешнем поле от времени t из состояния с $n = 21, m_1 = m_2 = 1$ в состояние с $n = 21, m_1 = m_2 = 2$; ($\omega = 1, \tau = 2, E_{\perp} = 1, E_{\parallel} = 0.5$).

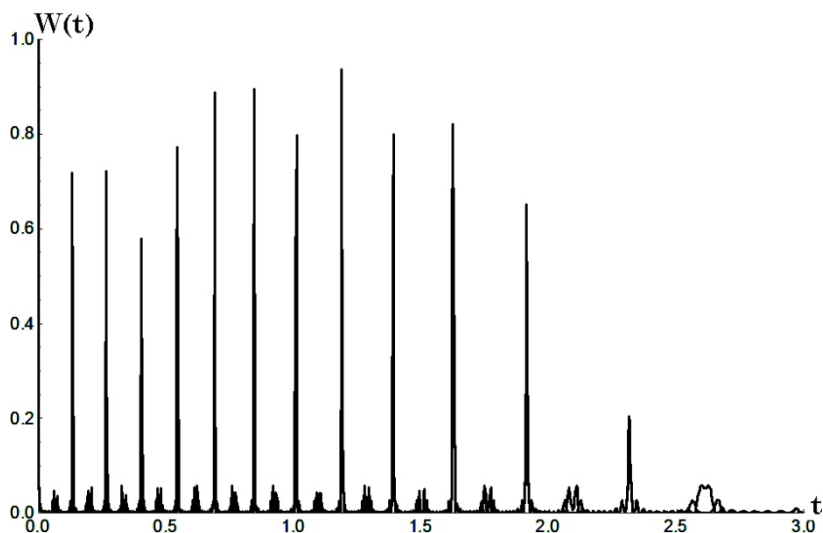


Рисунок 2. Зависимость вероятности перехода $W(t)$ иона рубидия во внешнем поле от времени t из состояния с $n = 21, m_1 = m_2 = 1$ в состояние с $n = 21, m_1 = m_2 = 2$; ($\omega = 1, \tau = 2, E_{\perp} = 1, E_{\parallel} = 1.5$).

Приведенные расчеты были выполнены для разных значений параметров E_{\parallel} и E_{\perp} . Они выполнялись в безразмерных переменных, частота поля ω была положена равной единице. Видно, что увеличении напряженности продольного поля, зависимость вероятности перехода от времени существенно усложняется. Наглядно видно, что, изменяя параметры внешнего поля, можно существенно изменять характер поведения населенностей атома во времени, управляя

его динамикой. Построенные графики качественно согласуются с результатами экспериментальной работы [1].

3. Заключение

Выполнен расчет вероятности перехода между уровнями энергии для водородоподобного атома, находящегося в классическом электромагнитном поле вида (14).

При проведении моделирования квантового управления динамикой ридберговского атома необходимо отыскивать экстремум функционала, который для каждой из групп SU(2) сводится к минимизации выражения $\sim \int_0^T \vec{\omega}^2(t) dt$, где вектора $\vec{\omega}^{(1,2)}(t)$ определены в формуле (7).

Для того, чтобы выполнить расчет без ограничения на сохранение при переходе главного квантового числа, нужно использованную здесь группу SO(4) обобщить до 15 - параметрической группы SO(4,2) – группы полной динамической симметрии водородоподобного атома. При этом задача существенно усложняется, поскольку теперь гамильтониан взаимодействия не коммутирует с гамильтонианом свободного атома. Кроме того, нужно более точно учесть влияние электронного облака внутренних электронов, который в этой работе был сведен к экранировке заряда ядра. Значение так называемого квантового дефекта, бралось из эксперимента.

4. Литература

- [1] Higgins, G. Single Strontium Rydberg Ion Confined in a Paul Trap / G. Higgins, W. Li, F. Pokorny, Ch. Zhang, F. Kress, Ch. Maier, J. Haag, Q. Bodart, I. Lesanovsky, M. Hennrich // *Phys. Rev. X.* – 2017. – Vol. 7. – P. 021038(1-11). DOI: 10.1103/PhysRevX.7.021038.
- [2] Saffman, M. Quantum computing with atomic qubits and Rydberg interactions: progress and challenges / M. Saffman // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2016. – Vol. 49. – P. 202001(1-24). DOI:10.1088/0953-4075/49/20/202001.
- [3] Yang, B.C. Field ionization of Rydberg atoms in a single-cycle pulse / B.C Yang, F. Robicheaux // *Phys. Rev. A.* – 2015. – Vol. 84. – P. 043407(1-10). DOI: 10.1103/PhysRevA.91.043407.
- [4] Haroche, S. Radiative properties of Rydberg states in resonant cavities / S. Haroche, J.M. Raimond // *Adv. in Atomic and Mol. Phys.* – 1985 – Vol. 20. – P. 347-411.
- [5] Haroche, S. Nobel lecture: Controlling photons in a box and exploring the quantum to classical boundary / S. Haroche / *Rev. of Mod. Phys.* – 2013. – Vol. 85. – P. 1083-1102. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.1083.
- [6] Ландау, Л.Д. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Москва: Физматлит, 2004. – 800 с.
- [7] Wulfman, C.E. *Dynamical Symmetry.* – Singapore: World Scientific Publishing, 2010. – 437 p.
- [8] Gorokhov, A.V. Lie Algebras in Quantum Optics and Molecular Spectroscopy // *Bull. of the Russian Acad. of Sci. Physics.* – 2011. – Vol. 75. – P. 150-156.
- [9] Горохов, А.В. Принципы симметрии и квантовая динамика. – Самара: Изд. «Самарский университет», 2015. – 220 с.
- [10] Shadbolt, P. *Complexity and Control in Quantum Photonics.* – N.Y.: Springer, 2016. – 222 p.
- [11] Биденхарн, Л. Угловой момент в квантовой физике. В 2-х томах / Л. Биденхарн, Дж. Лаук. – М.: Мир, 1984. – 302+343 с.

Symmetry and quantum control of Rydberg atoms dynamics

A.V. Gorokhov¹, A.K. Kryukov¹

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. Transitions probabilities for highly excited Rydberg states of atoms in electromagnetic traps under the influence of an external electromagnetic fields are calculated. The calculation used the method of groups of dynamical symmetry for hydrogen-like atoms and the technique of coherent states for atomic transitions. The calculations are compared with the results of recent experimental works. The problems of coherent controlling the quantum dynamics of atoms in cavities and some applications for quantum informatics are discussed.

Keywords: Rydberg atoms, dynamical symmetry, coherent states, transition probabilities, coherent control.