

Paul 阱中一维两离子系统的能带结构*

邬云文¹⁾²⁾ 海文华^{1)†} 蔡丽华¹⁾

1) 湖南师范大学物理系, 长沙 410081)

2) 湖南吉首大学物理系, 吉首 416000)

(2005 年 6 月 21 日收到, 2005 年 6 月 26 日收到修改稿)

利用熟知的级数截断方法, 设计数值程序计算了线形 Paul 阱中库仑关联的两离子系统 Schrödinger 方程的精确解, 得到接近目前离子阱实验能够实现的阱频下系统分立的运动态波函数和能谱, 它们对应于阱频值的一个无穷可数的点集. 在该点集内两相邻点之间连续变化阱频, 由量子微扰法得到以精确分立谱为基础的能带结构, 包括较宽的能隙和较窄的带宽. 能带结构的存在将影响以该系统为基础的量子逻辑操作和激光边带冷却等问题, 应该在实验研究中加以考虑.

关键词: Paul 阱, 两离子, 能带结构, 量子逻辑操作

PACC: 0545, 3280

1. 引 言

近年来, 离子阱已被广泛应用于科学技术研究的各个领域. 人们以离子阱为工具, 在量子态的性质、量子逻辑操作、量子信息和原子频标等方面进行了大量的研究工作^[1-4]. Cirac, Poyatos 和 Zoller 曾提出利用冷离子或热离子实现量子逻辑门的理论方案^[5, 6], Monroe, King 及其研究组成员设计实验对理论方案进行了验证^[7, 8]. 囚禁离子运动态的经典和量子混沌特征也曾受到人们普遍关注^[9]. 利用 Paul 囚禁离子系统研究带电粒子的输运和关联性质, 是一个有趣而重要的问题^[10]. 虽然已有不少文献对多离子体系的动力学特征进行了深入的研究^[11], 但包含库仑关联的两离子系统是理论研究的基础, 仍有进一步研究的必要. 考虑一维 Paul 囚禁两离子系统的 Schrödinger 方程, 应该包含谐振子势和库仑势. 在热离子假定下, Poyatos 等采用在经典定态解(一个平衡常数)附近展开库仑势的方法^[6], 将库仑势转化为谐振子势. 该近似方法虽然简化了问题, 但不能适用于冷离子系统. 同时考虑谐振子势和库仑势, Feng 和 Duan 等人得出某些无穷级数解^[12, 13]. 在以冷离子系统为基础的量子计算实验中, 需要将运动

初态制备为基态^[8, 14]. 为了精确地确定并分析基态, 寻求系统精确的能量本征态是一个很重要的问题. 作者之一及其研究小组曾利用级数截断方法给出了两离子运动态 Schrödinger 方程精确解的有限级数形式^[15], 得到用量子数 l 标记的分立的运动态波函数和能谱, 并计算出 $l = 7$ 以下的展开系数 C_l 和相关物理量, 发现与实验相符合的物理量对应于较大的量子数. 寻求大量子数情形的精确本征态, 是实验上感兴趣的一个工作.

本文中, 我们运用熟知的级数截断方法, 设计数值程序计算出量子数 $l = 100$ 时系统的精确本征态和本征能量, 对应的多个离散频率值接近目前离子阱实验能够实现的量级^[16, 17]. 在两相邻频率值之间连续变化阱频, 我们用量子微扰法得到以精确分立谱为基础的能带结构, 包括较窄的带宽和较宽的能隙. 能带结构的存在将影响以该系统为基础的量子逻辑操作和激光边带冷却制备基态等问题, 值得在实验研究中加以考虑.

2. 精确的本征态

考虑两个离子组成的 Poyatos-Cirac-Zoller 量子门系统, 两离子囚禁在一个线性阱中^[6, 15]. 在势近

* 国家自然科学基金(批准号: 10275023, 10575034)和波谱与原子分子物理国家重点实验室基金(批准号: T152504)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: adeve@public.cs.hn.cn

似下,该系统是一个谐振-库仑势系统.设两离子具有相同的质量 m ,沿坐标轴 x 方向运动,第 i 个粒子的坐标为 x_i ($x_2 > x_1$),谐振频率为 ν ,则系统的 Hamiltonian 为

$$H = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}m\nu^2(x_1^2 + x_2^2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(x_2 - x_1)}. \quad (1)$$

在质心坐标和相对坐标下,令

$$\begin{aligned} x_c &= \frac{x_1 + x_2}{2}, \\ p_c &= m_c \dot{x}_c, m_c = 2m, \\ r &= x_2 - x_1, \\ p_r &= m_r \dot{r}, \\ m_r &= \frac{m}{2}. \end{aligned} \quad (2)$$

取分离变量形式的波函数和能量

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_c(x_c)\Psi_r(r), \\ E &= E_c + E_r, \end{aligned} \quad (3)$$

则质心运动和相对运动的 Schrödinger 方程分别为

$$\begin{aligned} H_c \psi_c &= -\frac{\hbar^2}{2m_c} \frac{d^2 \psi_c}{dx_c^2} + \frac{1}{2}m_c \nu^2 x_c^2 \psi_c \\ &= E_c \psi_c, \end{aligned} \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} H_r \psi_r &= -\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2 \psi_r}{dr^2} + \frac{1}{2}m_r \nu^2 r^2 \psi_r \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi_r = E_r \psi_r. \end{aligned} \quad (4b)$$

(4a) 式为质心运动的 Schrödinger 方程,它描述一个标准的一维谐振运动,令

$$\alpha_c = \left(\frac{m_c \nu}{\hbar}\right)^{1/2}, \quad (5)$$

代入(4a),可得质心波函数和能量表达式为^[15]

$$\psi_c = \psi_{cn} = B_n H_n(\alpha_c x_c) \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_c^2 x_c^2\right), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} E_c = E_{cn} &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\nu, \\ n &= 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (7)$$

(6) 式中的 B_n 是一个常量, $H_n(\alpha_c x_c)$ 是 Hermitian 多项式.将(6)式与(7)式代入(3)式,考虑波函数的

归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{nc}^* \psi_{nc} dx_c = 1$ 可得

$$B_n = \left(\frac{\alpha_c}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2}. \quad (8)$$

(4b) 式是描述相对运动的 Schrödinger 方程,已知它有截断级数解,并且阱频与截断常数 l 有关.令 $\nu = \nu_l$ 及常量

$$\alpha_{rl} = \left(\frac{m\nu_l}{2\hbar}\right)^{1/2} = \frac{1}{2}\alpha_c, \quad (9)$$

$$\sigma_l = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2m}{\hbar^3 \nu_l}\right)^{1/2}, \quad (10)$$

则(4b)式的精确解为^[15]

$$\begin{aligned} \psi_r &= \psi_{rl}^{(0)} = A_{rl} \sum_{i=0}^l C_i (\alpha_{rl} r)^{i+1} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_{rl}^2 r^2\right), \\ l &= 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (11a)$$

$$\begin{aligned} E_r &= E_{rl}^{(0)} = \left(l + \frac{3}{2}\right)\hbar\nu_l, \\ l &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (11b)$$

其中整数 $l+1$ 为截断后(11a)式级数的项数,展开系数满足方程^[15]

$$\begin{aligned} -\sigma_l C_l + 2C_{l-1} &= 0 \quad (l = 1, 2, 3, \dots), \quad (12a) \\ (l-j)(l-j+1)C_{l-j} - \sigma_l C_{l-j-1} \\ + \alpha(j+2)C_{l-j-2} &= 0, \\ (l = 1, 2, 3, \dots; j = 0, 1, 2, \dots, l-1), \end{aligned} \quad (12b)$$

式中 l 为相对运动量子数.由(12b)式出发,令

$$C_j = \alpha[j] \sigma_l = \alpha[-2],$$

利用 Mathematica 程序

Table[(l-j)(l-j+1)α[l-j]-α[-2]α[l-j-1]+α(j+2)α[l-j-2]=0,{j,-1,l-1}], 可得 l 个方程.将它们与方程 $C[-1] = \alpha[l+1] = 0$ 和(12a)式联立,使用 Mathematica 的 NSolve 命令,可解出对于任意 l 的所有展开系数 $C_j = \alpha[j]$ 和常数 $\sigma_l = \alpha[-2]$.当相对运动量子数取 $l = 100$ 时,可求得多组不同的展开系数和 σ_l 值,其中与 σ_{100} 的最大值 $\sigma_{100,1} = 1110.13$ 对应的一组 101 个展开系数见表 1.由(10)式可见,最大 σ_{100} 值对应于最小的阱频 ν_{100} .

将表 1 中的系数 C_i 代入相对波函数的归一化条件

$$\int_0^{\infty} |A_{rl}|^2 \left| \sum_{i=0}^l C_i (\alpha_{rl} r)^{i+1} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_{rl}^2 r^2\right) \right|^2 dr = 1, \quad (13)$$

数值计算得相对运动归一化常数 $A_{r,100} = 3.965 \times 10^{-7} \sqrt{\alpha_{r,100}}$.

表 1 与最大 σ_{100} 对应的相对运动波函数的展开系数

i	C_i										
0	1.0×10^{-27}	1	5.55×10^{-25}	2	1.03×10^{-22}	3	9.49×10^{-21}	4	5.26×10^{-19}	5	1.94×10^{-17}
6	5.10×10^{-16}	7	1.00×10^{-14}	8	1.54×10^{-13}	9	1.87×10^{-12}	10	1.87×10^{-11}	11	1.54×10^{-10}
12	1.08×10^{-9}	13	6.41×10^{-9}	14	3.30×10^{-8}	15	1.48×10^{-7}	16	5.83×10^{-7}	17	2.03×10^{-6}
18	6.31×10^{-6}	19	1.76×10^{-5}	20	4.39×10^{-5}	21	9.94×10^{-5}	22	2.04×10^{-4}	23	3.82×10^{-4}
24	6.54×10^{-4}	25	1.03×10^{-4}	26	1.48×10^{-3}	27	1.97×10^{-3}	28	2.43×10^{-3}	29	2.77×10^{-3}
30	2.93×10^{-3}	31	2.88×10^{-3}	32	2.64×10^{-3}	33	2.26×10^{-3}	34	1.80×10^{-3}	35	1.35×10^{-4}
36	9.45×10^{-4}	37	6.22×10^{-4}	38	3.84×10^{-4}	39	2.23×10^{-4}	40	1.22×10^{-4}	41	6.28×10^{-5}
42	3.05×10^{-5}	43	1.40×10^{-5}	44	6.05×10^{-6}	45	2.47×10^{-6}	46	9.58×10^{-7}	47	3.51×10^{-7}
48	1.22×10^{-7}	49	4.00×10^{-7}	50	1.24×10^{-8}	51	3.66×10^{-9}	52	1.02×10^{-9}	53	2.72×10^{-10}
54	6.85×10^{-11}	55	1.64×10^{-11}	56	3.73×10^{-12}	57	8.06×10^{-13}	58	1.66×10^{-13}	59	3.23×10^{-14}
60	6.01×10^{-15}	61	1.06×10^{-15}	62	1.79×10^{-16}	63	2.87×10^{-17}	64	4.39×10^{-18}	65	6.41×10^{-19}
66	8.95×10^{-20}	67	1.19×10^{-21}	68	1.53×10^{-21}	69	1.89×10^{-22}	70	2.24×10^{-23}	71	2.58×10^{-24}
72	2.89×10^{-25}	73	3.17×10^{-26}	74	3.42×10^{-27}	75	3.66×10^{-28}	76	3.90×10^{-29}	77	4.17×10^{-30}
78	4.47×10^{-31}	79	4.82×10^{-32}	80	5.22×10^{-33}	81	5.67×10^{-34}	82	6.20×10^{-35}	83	6.76×10^{-36}
84	7.36×10^{-37}	85	8.13×10^{-38}	86	8.78×10^{-39}	87	1.00×10^{-40}	88	1.06×10^{-41}	89	1.12×10^{-42}
90	1.19×10^{-43}	91	1.39×10^{-43}	92	1.75×10^{-44}	93	1.68×10^{-45}	94	1.40×10^{-46}	95	1.42×10^{-47}
96	2.67×10^{-48}	97	2.58×10^{-49}	98	7.47×10^{-50}	99	2.31×10^{-51}	100	3.76×10^{-52}		

3. 精确的离散谱

当相对量子数 $l = 100$ 时,由(12a)式和(12b)两式出发,数值计算可得一系列离散的 σ_{100} 值,包括复值解、零解和负值解.在以下的表述中,我们用 σ_{lk} 表示对于同一个 l 的第 k 个 σ_l 值.根据(10)式所表示的 $\sigma_{100,k}$ 的物理意义, $\sigma_{100,k}$ 应为实数,故应舍去复值解.又因两个电子的相互作用为非零斥力,故零解和 σ_{lk} 为负的解应舍去.根据(10)式和(11b)式,有

$$\sigma_{lk} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2m}{\hbar^3 \nu_{lk}} \right)^{1/2},$$

$$E_{rlk}^{(0)} = \left(l + \frac{3}{2} \right) \hbar \nu_{lk}.$$

由 $l = 100$ 时计算所得 σ_{lk} 的值,代入上述公式可求出对应的频率 ν_{lk} 和相对能量 $E_{rlk}^{(0)}$. 当上式中质量取自由电子质量时,所得结果见表 2,其中频率按大小顺序排列.与最大值 $\sigma_{100,1} = 1110.13$ 对应的阱频为 6.68×10^{10} Hz,接近实验中能实现的量级.如果取囚禁粒子为两 Be 离子,则表 2 中所有的阱频将增加两个数量级,达到 THz 量级.表 2 中不同频率 ν 对应于

不同的能量 E ,如图 1 中细虚线所示,它们近似成线性关系.为了进行比较,同理计算出 $l = 80$ 和 $l = 50$ 时囚禁电子的频率和相对能量(见表 3 和表 4),相应的能量-频率关系分别如图 1 中的实线和粗虚线所示,它们也近似成线性关系.显然,表 3 和表 4 中的阱频值太大,目前实验难以实现.若以 Be 离子质量取代电子质量,对于表 3 和表 4 中的 σ 值(10)式给出的阱频将比表 3 和表 4 中的数值还要大两个数量级.

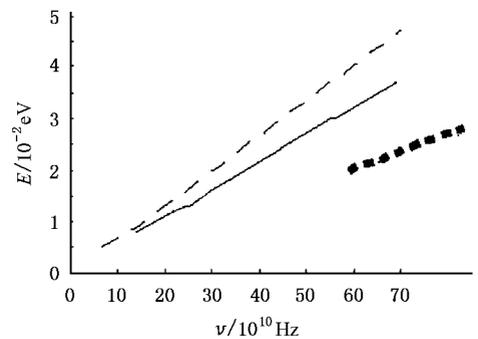


图 1 细虚线表示 $l = 100$ 时频率-能量图,实线表示 $l = 80$ 时频率-能量图,粗虚线表示 $l = 50$ 时频率-能量图.图像近似为三条直线,表明对于同一 l ,频率与能量成线性变化.

表 2 $l = 100$ 时的频率和能量值

序号 k	$\sigma_{100, k}$	$\nu_{100, k}/\text{Hz}$	$E_{100, k}^{(0)}/\text{eV}$	序号 k	$\sigma_{100, k}$	$\nu_{100, k}/\text{Hz}$	$E_{100, k}^{(0)}/\text{eV}$
1	1110.1	6.68×10^{10}	4.47×10^{-3}	14	188.6	2.31×10^{12}	1.55×10^{-1}
2	1090.3	6.92×10^{10}	4.63×10^{-3}	15	170.2	2.84×10^{12}	1.90×10^{-1}
3	774.9	1.37×10^{11}	9.17×10^{-3}	16	152.2	3.55×10^{12}	2.38×10^{-1}
4	460.0	3.89×10^{11}	2.60×10^{-2}	17	134.6	4.54×10^{12}	3.04×10^{-1}
5	343.7	6.96×10^{11}	4.66×10^{-2}	18	117.4	5.97×10^{12}	3.99×10^{-1}
6	342.8	7.00×10^{11}	4.68×10^{-2}	19	100.7	8.11×10^{12}	5.43×10^{-1}
7	341.3	7.06×10^{11}	4.73×10^{-2}	20	84.5	1.15×10^{13}	7.72×10^{-1}
8	304.5	8.88×10^{11}	5.94×10^{-2}	21	68.8	1.74×10^{13}	1.16
9	286.3	1.00×10^{12}	6.72×10^{-2}	22	53.7	2.86×10^{13}	1.91
10	265.7	1.17×10^{12}	7.80×10^{-2}	23	39.2	5.36×10^{13}	3.59
11	246.0	1.36×10^{12}	9.10×10^{-2}	24	25.4	1.27×10^{14}	8.52
12	226.5	1.60×10^{12}	1.07×10^{-1}	25	12.4	5.33×10^{14}	35.7
13	207.4	1.91×10^{12}	1.28×10^{-1}				

表 3 $l = 80$ 时的频率和能量值

序号 k	$\sigma_{80, k}$	$\nu_{80, k}/\text{Hz}$	$E_{80, k}^{(0)}/\text{eV}$	序号 k	$\sigma_{80, k}$	$\nu_{80, k}/\text{Hz}$	$E_{80, k}^{(0)}/\text{eV}$
1	797.5	1.29×10^{11}	6.95×10^{-3}	17	231.5	1.53×10^{12}	8.25×10^{-2}
2	767.4	1.39×10^{11}	0.75×10^{-2}	18	213.0	1.81×10^{12}	9.75×10^{-2}
3	615.2	2.17×10^{11}	1.16×10^{-2}	19	194.8	2.17×10^{12}	1.16×10^{-1}
4	583.1	2.41×10^{11}	1.30×10^{-2}	20	177.0	2.63×10^{12}	1.41×10^{-1}
5	578.0	2.46×10^{11}	1.32×10^{-2}	21	159.6	3.23×10^{12}	1.71×10^{-1}
6	556.5	2.66×10^{11}	1.43×10^{-2}	22	142.6	4.05×10^{12}	2.17×10^{-1}
7	520.8	3.03×10^{11}	1.63×10^{-2}	23	126.0	5.18×10^{12}	2.79×10^{-1}
8	390.2	5.40×10^{11}	2.90×10^{-2}	24	109.8	6.83×10^{12}	3.67×10^{-1}
9	387.0	5.49×10^{11}	2.95×10^{-2}	25	94.0	9.30×10^{12}	5.00×10^{-1}
10	382.2	5.63×10^{11}	3.02×10^{-2}	26	78.8	1.32×10^{13}	7.12×10^{-1}
11	346.2	6.86×10^{11}	3.69×10^{-2}	27	64.1	2.01×10^{13}	1.08
12	330.2	7.55×10^{11}	4.06×10^{-2}	28	49.9	3.30×10^{13}	1.78
13	308.5	8.64×10^{11}	4.65×10^{-2}	29	36.4	6.22×10^{13}	3.34
14	289.1	9.84×10^{11}	5.29×10^{-2}	30	23.6	1.48×10^{14}	7.97
15	269.5	1.13×10^{12}	6.09×10^{-2}	31	11.5	6.24×10^{14}	33.5
16	250.3	1.31×10^{12}	7.05×10^{-2}				

表 2、表 3 与表 4 列出了由精确公式求出的阱频和能量, 这是一系列离散的值. 而在实际的实验中, 对外场频率的调节是可以连续进行的. 对于这些离散

值以外的阱频值, 应该可以连续变化. 下节我们将以精确解为基础, 考虑阱频偏离这些离散值时对精确解的一级微扰修正, 从而得到相对运动的能带结构.

表 4 $l = 50$ 时的频率和能量值

序号 k	$\sigma_{50,k}$	$\nu_{50,k}/\text{Hz}$	$E_{50,k}^{(0)}/\text{eV}$	序号 k	$\sigma_{50,k}$	$\nu_{50,k}/\text{Hz}$	$E_{50,k}^{(0)}/\text{eV}$
1	392.2	5.35×10^{11}	1.82×10^{-2}	13	172.6	2.76×10^{12}	9.38×10^{-2}
2	372.2	5.94×10^{11}	2.02×10^{-2}	14	156.4	3.36×10^{12}	1.14×10^{-1}
3	352.5	6.62×10^{11}	2.25×10^{-2}	15	110.5	6.73×10^{13}	2.29×10^{-1}
4	333.1	7.42×10^{11}	2.52×10^{-2}	16	96.1	8.91×10^{12}	3.03×10^{-1}
5	313.9	8.35×10^{11}	2.83×10^{-2}	17	82.1	1.22×10^{13}	4.15×10^{-1}
6	295.1	9.45×10^{11}	3.21×10^{-2}	18	68.5	1.75×10^{13}	5.95×10^{-1}
7	276.6	1.08×10^{12}	3.65×10^{-2}	19	55.5	2.67×10^{13}	9.06×10^{-1}
8	258.4	1.23×10^{12}	4.18×10^{-2}	20	43.1	4.43×10^{13}	1.50
9	240.6	1.42×10^{12}	4.83×10^{-2}	21	40.7	4.96×10^{13}	1.68
10	223.0	1.65×10^{12}	5.62×10^{-2}	22	31.3	8.41×10^{13}	2.86
11	205.8	1.94×10^{12}	6.59×10^{-2}	23	20.1	2.02×10^{14}	6.87
12	189.0	2.30×10^{12}	7.82×10^{-2}	24	9.79	8.59×10^{14}	29.2

4. 近似的能带结构

我们已经得到系统的一系列精确解,它们对应于阱频值的一个无穷可数的点集.考虑在该点集内两相邻点 ν_{lk} 和 $\nu_{l,k+1}$ 之间连续变化阱频,即取频率为 $\nu = \nu_{lk} + \Delta\nu \leq \nu_{l,k+1}$,代入(4b)式,略去二阶小量($\Delta\nu$)项得

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2 \psi_r}{dr^2} + \left(E_r - \frac{1}{2} m_r \nu_{lk}^2 r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi_r = H_{lk}^{(1)} \psi_r, \quad (15a)$$

$$H_{lk}^{(1)} = m_r \nu_{lk} \Delta\nu r^2. \quad (15b)$$

由于 $0 < \Delta\nu \ll \nu_{lk}$,可把 $H_{lk}^{(1)}$ 看作一级微扰,由量子微扰法可以得到以精确分立谱为标记的能带结构.为此,先对波函数和能量作 Rayleigh-Schrödinger 微扰展开

$$\begin{aligned} \psi_r &= \psi_{rlk} = \psi_{rlk}^{(0)} + \psi_{rlk}^{(1)}, \\ E_r &= E_{rlk} = E_{rlk}^{(0)} + E_{rlk}^{(1)}, \end{aligned} \quad (16)$$

式中 $\psi_{rlk}^{(0)}$ 与 $E_{rlk}^{(0)}$ 是相对运动零级 Schrödinger 方程的解,满足不考虑一级微扰($H_{lk}^{(1)} = 0$)的齐次方程(15a)及(4b)式.因此,它的精确解就是(11a)式和(11b)式给出的波函数和能量(即零级解). $\psi_{rlk}^{(1)}$ 与 $E_{rlk}^{(1)}$ 则是对零级解的一级微扰修正.根据最近提出的量子微扰方法^[18,19],设齐次方程(15a)的另一线性无关解为

$$\tilde{\psi}_{rlk}^{(0)} = \psi_{rlk}^{(0)} \int_0^\infty (\psi_{rlk}^{(0)})^{-2} dr, \quad (17)$$

则有一级微扰修正的通解表达式^[18,19]

$$\begin{aligned} \psi_{rlk}^{(1)} &= 2\tilde{\psi}_{rlk}^{(0)} \int_0^\infty \psi_{rlk}^{(0)} \epsilon_{rlk}^{(1)} dr \\ &\quad - 2\psi_{rlk}^{(0)} \int_0^\infty \tilde{\psi}_{rlk}^{(0)} \epsilon_{rlk}^{(1)} dr, \\ \epsilon_{rlk}^{(1)} &= H_{lk}^{(1)} \psi_{rlk}^{(0)} - E_{rlk}^{(1)} \psi_{rlk}^{(0)}. \end{aligned} \quad (18)$$

将(16)(17)(18)三式代入(3)式,得到系统在两相邻频率点 ν_{lk} 和 $\nu_{l,k+1}$ 之间的本征态

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_{nlk} = \psi_{cn} \psi_{rlk} = \psi_{cn} (\psi_{rlk}^{(0)} + \psi_{rlk}^{(1)}) \\ &= \psi_{cn} \psi_{rlk}^{(0)} + \psi_{cn} \psi_{rlk}^{(1)} \\ &= \psi_{cn} \psi_{rlk}^{(0)} + \psi_{cn} \left(2\tilde{\psi}_{rlk}^{(0)} \int_0^\infty \psi_{rlk}^{(0)} \epsilon_{rlk}^{(1)} dr \right. \\ &\quad \left. - 2\psi_{rlk}^{(0)} \int_0^\infty \tilde{\psi}_{rlk}^{(0)} \epsilon_{rlk}^{(1)} dr \right). \end{aligned} \quad (19)$$

将(7)(11b)(16)式代入(3)式,得到系统在两相邻频率点 ν_{lk} 和 $\nu_{l,k+1}$ 之间的总能量

$$\begin{aligned} E &= E_{nlk} = E_{cn} + E_{rlk} = E_{cn} + E_{rlk}^{(0)} + E_{rlk}^{(1)} \\ &= (n + l + 2)\hbar\nu_{lk} + E_{rlk}^{(1)}. \end{aligned} \quad (20)$$

(19)和(20)式中的 $\psi_{rlk}^{(0)}$ 与 $E_{rlk}^{(0)}$ 的表达式分别见(11a)式与(6)式,一级能量修正为

$$\begin{aligned} E_{rlk}^{(1)} &= \int_0^\infty \psi_{rlk}^{(0)*} H_{lk}^{(1)} \psi_{rlk}^{(0)} dr \\ &= \left(m_r \nu_{lk} \int_0^\infty \psi_{rlk}^{(0)*} r^2 \psi_{rlk}^{(0)} dr \right) \Delta\nu. \end{aligned} \quad (21)$$

对于给定的离子质量和量子数,该式中括号内的量

是一个常数.当质量取自由电子质量,量子数取 $l = 100$ 时,我们取表 2 中两相邻频率点 $\nu_{100,1} = 6.68 \times 10^{10}$ Hz 和 $\nu_{100,2} = 6.92 \times 10^{10}$ Hz 作为例子,对应的两相邻能量为 $E_{r100,1}^{(0)} = 4.47 \times 10^{-3}$ eV 和 $E_{r100,2}^{(0)} = 4.63 \times 10^{-3}$ eV.考虑到在这两个能量之间的离子趋于低能态 $\psi_{r100,1}^{(0)}$,我们将它作为零级解代入(21)式(利用表 1 中的系数),得

$$E_{r100,1}^{(1)} = 2.37553 \times 10^{-14} \Delta\nu (\text{eV} \cdot \text{s}) \quad (22)$$

这里 $0 \leq \Delta\nu \leq (6.92 - 6.68) \times 10^{10} = 0.24 \times 10^{10}$ Hz, 即一级修正能量在零和

$$\max\{E_{r100,1}^{(1)}\} = 2.37553 \times 10^{-14} \times 0.24 \times 10^{10} \\ = 0.57 \times 10^{-4} (\text{eV}) \quad (23)$$

之间连续变化.这个连续变化的能量修正构成表 2 中两相邻能量 $E_{r100,1}^{(0)} = 4.47 \times 10^{-3}$ (eV) 和 $E_{r100,2}^{(0)} = 4.63 \times 10^{-3}$ (eV) 之间的能带,带宽即为 $\max\{E_{r100,1}^{(1)}\} = 0.57 \times 10^{-4}$ (eV). 由于 $E_{r100,1}^{(0)} + \max\{E_{r100,1}^{(1)}\} < E_{r100,2}^{(0)}$, 在这两个相邻能量之间存在能隙,其宽度为

$$\Delta E = E_{r100,2}^{(0)} - E_{r100,1}^{(0)} - \max\{E_{r100,1}^{(1)}\} \\ = 0.103 \times 10^{-3} (\text{eV}). \quad (24)$$

显然,该能隙宽度大于(23)式中的带宽,约为后者的 1.8 倍.

(20)式中的质心能量 E_{cm} 不影响能带宽度,即对于给定的量子数 n ,质心能量随频率连续变化.因此,由相对能量形成的能带和能隙即为系统总能量的能带和能隙.按照上述方法,我们可以得到以精确的离散谱为基础的所有能带和能隙,他们形成系统

的能带结构.

5. 结论与讨论

考虑囚禁在 Paul 阱中的两离子 Poyatos-Cirac-Zoller 量子门系统中的库仑关联,利用已知的级数截断方法,我们设计新的数值程序计算了系统 Schrödinger 方程的精确解,得到接近目前离子阱实验能够实现的阱频下系统分立的高激发运动态波函数和能谱,它们对应于阱频值的一个无穷可数的点集.由于阱频可以在该点集内两相邻点之间连续变化,我们以精确分立谱为基础,利用量子微扰法得到与两相邻点之间的阱频相应的微扰解,包括对精确本征态和本征能量的一级修正.精确的点谱和在一定间隔内连续变化的能量修正形成系统的能带结构,包括较宽的能隙和较窄的带宽.

已知囚禁离子系统是量子计算机物理实现的基础系统之一,而在以冷离子系统为基础的量子计算实验中,需要将运动初态冷却到基态^[8,14].能带结构的存在将影响以该系统为基础的量子逻辑操作和激光边带冷却等问题,值得在实验研究中加以考虑.

此外,我们的研究结果显示,随着量子数 l 的增大,与精确解相应的阱频值逐渐减小.对于 10^8 Hz 的阱频,相应的囚禁 Be 离子系统精确解的量子数 l 估计为 120 以上.应用本文提出的分析和数值方法,容易求得不同量子数 l 对应的精确解.

- [1] Kreuter A, Becher C, Lancaster G P T *et al* 2005 *Phys. Rev. Lett.* **71** 032504
- [2] Barwood G P, Huang G, Klein H A, Gill P, Clarke R B M 1999 *Phys. Rev. A* **59** R3178
- [3] DeVoe R G 1998 *Phys. Rev. A* **58** 910
- [4] Wu Y, Yang X 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3086
Feng M, Wang X G 2002 *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **4** 283
Feng M, Hai W, Zhu X, Gao K, Shi L 2000 *Chin. Phys.* **9** 250
Fang M F, Liu X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2363 (in Chinese) [方卯发、刘翔 2001 物理学报 **50** 2363]
- [5] Cirac J I, Zoller P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4091
- [6] Poyatos J F, Cirac J I, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1322
- [7] Monroe C, Meekhof D M, King B E, Jefferts S R, Itano W M, Wineland D J 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4011

- Monroe C, Meekhof D M, King B E, Itano W M, Wineland D J 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4714
- [8] King B E, Wood C S, Myatt C J *et al* 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1525
- [9] Hoffnagle J, DeVoe R G, Reyna L, Brewer R G 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 255
Hai W H, Duan Y W, Zhu X W *et al* 1998 *J. Phys. A* **31** 2991
Hai W H, Duan Y W, Zhu X W *et al* 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2117 (in Chinese) [海文华、段宜武、朱熙文等 1997 物理学报 **46** 2117]
Hai W H, Feng M, Zhu X W, Shi L, Gao K L, Fang X M 1999 *J. Phys. A* **32** 8265
Li F, Hai W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1309 (in Chinese) [李飞、海文华 2004 物理学报 **53** 1309]
Li F, Hai W, Chong G, Xie Q 2004 *Commun. Theor. Phys.* **42** 599

- [10] Gilson E , Davidson R C , Efthimion P C , Majeski R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 155002
- [11] Shi L , Duan Y W , Feng M , Zhu X W , Fang X M 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1248 (in Chinese) [施 磊、段宜武、冯 芒、朱熙文、方细明 1998 物理学报 **47** 1248]
Gao K L , Yan M , Luo X L , Zhu X W , Huang G L , Li J M , Shi L 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 43 (in Chinese) [高克林、颜 旻、罗学立、朱熙文、黄贵龙、李交美、施 磊 1995 物理学报 **44** 43]
Hai W , Huang S , Gao K 2003 *J. Phys.* B **36** 3055
Hai W , Fang X , Li F 2004 *Phys. Stat. Solidi (b)* **241** 339
- [12] Feng M , Feng X , Duan Y , Zhu X , Shi L 1998 *Phys. Lett. A* **244** 18
- [13] Duan Y , Shi L , Feng M *et al* 1998 *Chin. Phys. Lett.* **15** 568
- [14] Diedrich F , Bergquist J C , Itano W M , Wineland D J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 403
James D F V 1998 *Appl. Phys.* B **66** 181
- [15] Hai W , Feng M , Zhu X *et al* 2000 *Inter. J. Theor. Phys.* **39** 1
- [16] Leibfried D , Blatt R , Monroe C , Wineland D 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 281
- [17] Turchette Q A , Kielpinski D , King B E *et al* 2000 *Phys. Rev. A* **61** 063418
- [18] Hai W , Feng M , Zhu X *et al* 2000 *Phys. Rev. A* **61** 052105
- [19] Hai W A *Quantum Perturbation Method Without Divergences* , In : 2004 Notes of Quantum Mechanics , Ed : Wang W , Ke S , Liu Q *et al* (Beijing Science Press) , 31 - 45 (in Chinese) [海文华 , 一种没有发散的量子微扰方法 , in : 王文正、柯善哲、刘全慧等主编 , 量子力学朝花夕拾 , 北京 科学出版社 , 2004 , 31 - 45]

Energy band structure of two ions in a one-dimensional Paul trap^{*}

Wu Yun-Wen^{1,2)} Hai Wen-Hua^{1)†} Cai Li-Hua¹⁾

1) *Department of Physics , Hunan Normal University , Changsha 410081 , China*

2) *Department of Physics , Jishou University , Jishou 416000 , China*

(Received 21 June 2005 ; revised manuscript received 26 June 2005)

Abstract

Making use of the well-known truncated-series method , we give a numerical program to calculate the exact solutions of two Coulomb-correlated ions confined in a linear Paul trap . The discrete motion state functions and energy spectra are obtained for the trap frequencies approaching the experimentally realizable limiting values , which correspond to a denumerable infinite point-set of the frequencies . Continuously varying the trap frequency between two neighboring points of the denumerable infinite set , from the quantum perturbation technique we find the energy-band structure based on the exact discrete spectra in which the bands are narrower and the gaps wider . The band structure can influence the laser cooling of Paul trapped ions and the quantum logic operation based on the system that should be considered in the corresponding experiments thereby .

Keywords : Paul trap , two ions , band structure , quantum logic operation

PACC : 0545 , 3280

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10275023 , 10575034) and by the Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics of China (Grant No. T152504) .

† Corresponding author . E-mail : adeve@public.cs.hn.cn