Paul 阱中共面两离子系统的能量本征态*

邬云文* 海文华

(湖南吉首大学物理系,吉首 416000) (湖南师范大学物理系,长沙 410081) (2005 年 8 月 9 日收到 2005 年 10 月 24 日收到修改稿)

通过对 Paul 阱中共面两离子体系的研究,考虑共面两离子在 Paul 阱中库仑关联,得到了两离子系统 Schrödinger 方程的精确解,据方程的精确解,分析了质心能级简并情况,计算了两离子的平衡距离和低能级的几个态函数,设 计程序作出了质心径向概率分布图.

关键词:Paul 阱,两离子,共面,量子逻辑操作 PACC:0545,3280

1.引 言

近年来,离子阱技术已被广泛应用于量子态的 性质、量子逻辑操作、量子信息和原子频标等方面的 研究工作中^[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],也使得我们对 Paul 阱中离子运动的量子力学问题更有兴趣.

利用 Paul 阱囚禁离子系统研究带电粒子的输运和关联性质^[10],是一个有趣而重要的问题.当不止一个离子被囚禁在离子阱中时,由于离子间库仑势的存在,其哈密顿量是非线性的,即使在赝势模型下也是如此.何明等对共面三离子的单体密度和形体密度进行了深入的研究^[11],还有不少文献对多离子体系的动力学特征进行了研究^[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.对于两离子共线系统的 Schrödinger 方程,应该包含谐振子赝势和库仑势.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].

本文考虑 Paul 阱中囚禁的两离子系统,如果阱 的参数满足一定的关系,离子可能被囚禁在 x-y 平 面上,构造两离子共面模型.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.本文对 Paul 阱中共面的两离子体系进行了研 究 推证了共面 Paul 阱中库仑关联的两离子系统 Schrödinger 方程的精确解,根椐方程的精确解,我们 分析了质心的能级简并情况,计算了两离子的平衡 距离和低能级的几个态,设计程序作出了质心径向 概率分布.该系统的本征态和本征能量影响以该系 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^[15,16].

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 Paul 阱中的一个平面 上^[6,17-19].在赝势近似下,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_0 ,每个离子所 带电量 e,第 *i* 个粒子的坐标为(x_i , y_i),即 $r_i = x_i e_x$ + $y_i e_y$,外加射频场频率 ν (谐振频率),则系统的

† E-mail:wuyw_jd@163.com

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10275023,10575034),波谱与原子分子物理国家重点实验室(批准号:T152504)和湖南省自然科学基金(批准 号 03,JJY6015)资助的课题.

Hamiltonian 量为

$$H = \sum_{i=1}^{2} \left[-\frac{\hbar^{2}}{2M_{0}} (p_{xi}^{2} + p_{yi}^{2}) + \frac{1}{2} M_{0} \nu^{2} (x_{i}^{2} + y_{i}^{2}) \right] + \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0} + r_{2} - r_{1}}.$$
 (1)

考虑质心坐标 $r_c = \frac{r_1 + r_2}{2}$ 和相对坐标 $r = r_2 - r_1$,则

$$\mathbf{r}_{c} = \frac{x_{1} + x_{2}}{2} \mathbf{e}_{x} + \frac{y_{1} + y_{2}}{2} \mathbf{e}_{y} ,$$

$$M_{c} = 2M_{0} ,$$

$$\mathbf{p}_{c} = M_{c} \mathbf{\dot{r}}_{c} = \mathbf{p}_{1} + \mathbf{p}_{2} ,$$

$$\mathbf{r} = (x_{2} - x_{1}) \mathbf{e}_{x} + (y_{2} - y_{1}) \mathbf{e}_{y} ,$$

$$\mu_{c} = \frac{M_{0}}{2} ,$$

$$\mathbf{p}_{r} = \mu \mathbf{\dot{r}} = \frac{1}{2} (\mathbf{p}_{2} - \mathbf{p}_{1}) ,$$
(2)

 e_x 和 e_y 是坐标 x 轴和 y 轴方向的单位矢. 取分离变 量形式的波函数和能量

 $\Psi = \Psi_{c}(r_{c})\Psi_{r}(r)$, $E = E_{c} + E_{r}$, (3) E_{c} 是两离子质心运动能量, E_{r} 是两离子相对运动能 量.则质心运动和相对运动的 Schrödinger 方程分别为

$$H_{c}\psi_{c} = -\frac{\hbar^{2}}{2M_{c}}\nabla_{r_{c}}^{2}\psi_{c} + \frac{1}{2}M_{c}\nu^{2}r_{c}^{2}\psi_{c}$$
$$= E_{c}\psi_{c}, \qquad (4a)$$
$$H_{r}\psi_{r} = -\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla_{r}^{2}\psi_{r} + \frac{1}{2}\mu\nu^{2}r^{2}\psi_{r}$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \psi_r = E_r \psi_r. \qquad (4b)$$

(4a) 式为质心运动的 Schrödinger 方程,它描述一个标准的各向同性的二维谐振运动.由

 $\nabla_{r_{\rm e}}^2 = \frac{1}{r_{\rm e}} \frac{\partial}{\partial r_{\rm e}} r_{\rm e} \frac{\partial}{\partial r_{\rm e}} + \frac{1}{r_{\rm e}^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} ,$

并令

$$\alpha_{\rm c} = \left(\frac{M\nu}{\hbar}\right)^{1/2} , \qquad (5)$$

代入(4a)式,可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_c}\left(\frac{1}{r_c}\frac{\partial}{\partial r_c}r_c\frac{\partial}{\partial r_c}+\frac{1}{r_c^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)+\frac{1}{2}M_c\nu^2r_c^2\right]\psi_c$$
$$=E_c\psi_c.$$
 (6)

考虑质心波函数可进行变量分离, ϕ_{e} (r_{e} , θ) = $e^{im_{e}\theta}R(r_{e})$ 代入(6)式得

$$\left[\frac{d^{2}}{dr_{e}^{2}} + \frac{1}{r_{e}}\frac{d}{dr_{e}} - \frac{m_{e}^{2}}{r_{e}^{2}} + \left(\frac{2E_{e}M_{e}}{\hbar^{2}} - \alpha_{e}^{4}r_{e}^{2}\right)\right]R(r_{e})$$

$$= 0 \qquad (E > 0), \qquad (7)$$

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left(\frac{2 + m_c + 1}{2} - \xi\right) \frac{du}{d\xi} + \left[\frac{E_c M_c}{2\hbar^2 \alpha_c^2} - \frac{1}{2}(+m + 1)\right] u = 0. \quad (8b)$$

当(8b)式中的系数满足

$$a = \frac{|m_{e}| + 1}{2} - \frac{ME_{e}}{2\hbar^{2}\alpha_{e}^{2}} = -n_{r_{e}}$$

$$(n_{r_{e}} = 0, 1, 2, \dots),$$

$$\gamma = \frac{1}{2}(2 + m_{e} + 1)$$
(8c)

时(8b)式是合流超几何方程.质心波函数和能量表 达式为

$$\psi_{cm}(r_{c},\theta) = A_{cm} e^{im_{c}\theta} r_{c}^{\dagger m_{c}\dagger} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2}\right)$$
$$\times F(-n_{r_{c}},\gamma,\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2}), \qquad (9a)$$

$$E_{c} = E_{cn} = (2n_{r_{c}} + | m_{c} | + 1)\hbar\nu ,$$

$$n_{r} = 0, 1, 2, \dots,$$
(9b)

其中(9a)式中的 m_e 是质心运动的磁量子数(9b) 式中的 n_{r_e} 是质心运动的径向量子数(表示径向波函 数的节点数),且有 $N = 2n_{r_e} + |m_e| = 0, 1, 2, ...;$ $F(-n_{r_e}, \gamma, \alpha_e^2 r_e^2)$ 是合流超几何函数

$$F(a,\gamma,\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2}) = 1 + \frac{a}{\gamma}(\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2})$$

$$+ \frac{a(a+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2}\gamma + \cdots$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_{k}}{k(\gamma)_{k}}(\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2})^{k}.$$
(10)

(4b)式是描述相对运动的 Schrödinger 方程. 令 ν = ν_l = ν_e 及常量

$$\alpha_{rl} = \left(\frac{\mu\nu}{\hbar}\right)^{1/2} = \frac{1}{2}\alpha_{c} ,$$

$$\sigma_{l} = \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}} \left(\frac{\mu}{\hbar^{3}\nu}\right)^{1/2} , \qquad (11)$$

则(4b)式的精确解为^[17]

$$\psi_{r}(r \beta) = \psi_{rm} = A_{rl} e^{im\beta} (\alpha_{rl} r)^{m} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha_{rl}^{2} r^{2}\right) u_{r}$$

 $l = 1, 2, \dots, m = 0, \pm 1, \dots.$ (12a) 令 $\rho = \alpha_{rl}r,$ 由 $\nabla_r^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2}$,并将(12a)和 (11)式代入(4b)式可得 $\frac{d^2 u_r}{d\rho^2} + \left(\frac{2+m+1}{\rho} - 2\rho\right)\frac{du_r}{d\rho} + \left[\frac{2\mu E_r}{\hbar^2 \alpha_{rl}^2} - 2(+m+-1) - \frac{2\sigma}{\rho}\right]u_r = 0. (12b)$ 设 $u_r = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \rho^i$,代入(12b)式得 $\sum_{i=0}^{l} c_i \left\{i \left[i + 2 + m + \right]\rho^{i-2} - 2\sigma \rho^{i-1} + \left(\frac{2E_r}{\hbar\nu} - 2 + m + 2 - 2i\right)\rho^i\right\} = 0. (12c)$

由(12c)式已知方程(4b)有截断级数解,并且阱频与 截断常数 l 有关.其中整数 l + 1 为截断后(12c)式 中级数的项数 ,令 i = l - j,则展开系数满足方程¹⁷¹

$$(l - j)(l - j + 1 + m +)C_{l-j} - 2\sigma_l C_{l-j-1} + 2(j + 2)C_{l-j-2} = 0$$

(l = 1 2 3 r... ij = 0, 1 2 r..., l - 1)(13a)

即

值为

$$\frac{2E_r}{\hbar\nu} - 2 \mid m \mid -2 - 2l = 0 , \qquad (13b)$$

式中 *1* 为相对运动量子数.相对波函数的归一化 条件

$$\psi(\mathbf{r}_{c},\mathbf{r}) = \psi_{c}\psi_{r}$$

$$= A_{cm}A_{rl}r_{c}^{|m_{c}|}F(-n_{r_{c}},\gamma,\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2})e^{(m_{c}\theta+m\beta)}$$

$$\times \exp\left(-\frac{\alpha_{c}^{2}r_{c}^{2}}{2} - \frac{\alpha_{rl}^{2}r^{2}}{2}\right)(\alpha_{rl}r)^{|m|}$$

$$\times \sum_{i=0}^{\infty}c_{i}(\alpha_{rl}r)^{i}, \qquad (15a)$$

$$E = E_{r} + E_{c} = (2n_{r} + |m_{c}| + l + |m| + 2)\hbar\nu. \qquad (15b)$$

对于共面的两离子系统,当外场作用力和离子 间的库仑作用力达到平衡时,形成最稳定的结构.设 两离子的平衡距离 r_0 ,由方程(4b)知两离子间的相 对势函数 $V_r = \frac{1}{2}\mu v^2 r^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{m^2}{r^2}$.利用 $\frac{dV_r}{dr_0} = 0$, 得平衡距离必须满足

$$r_0 = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \mu \nu^2}\right)^{1/3}.$$
 (16)

(16)式说明 Paul 阱中,由于两离子间的库仑斥 力,这使离子间可分开一个距离,当考虑的两个离子 均为质子时 取ν=10[°]Hz,r₀=2.4μm远大于光波波长, 从而使量子逻辑操作的寻址访问单个离子成为可能.

4. 质心的能谱

(9b) 武表明在外场作用下, 质心运动的能级与 质心运动的径向量子数 n_r 和磁量子数 m_e 的绝对 值有关 $m_c = 0$, ± 1 , ± 2 ,... , ± N , $n_r = 0$, 1 , 2 ,... , $\frac{N}{2}$ 或 $\frac{N-1}{2}$ (N为正整数),能级出现 $f_n = N + 1$ 重简 并 即 f_n 个态所对应的能量都相同 ,存在 N+1 重 能级简并,它说明了 Paul 阱中囚禁的两个离子的质 心运动满足二维各向同性谐振子的 SU, 动力学对 称性.在量子逻辑操作中,主要是对相应的量子态作 幺正变换,当整个离子阱内囚禁的离子被冷却到轴 振荡频率 量子极限 "以下时,囚禁在阱中的所有离 子整体运动(质心运动)被量子化,运动的量子态对 应着质心振动正规模不同程度的激发,一般用声子 数态描述,质心模式的零声子态和一个声子态形成 一个二维的 Hilbert 空间,在离子阱量子计算中称做 第 N+1 个物理量子位,即量子比特的载体是一个 二能级的量子体系,故质心能级简并程度将影响到 以该系统为基础的量子信息处理与量子计算,在实 验中应加以考虑(在表 1 中列出了较低的几条能级 简并度分析情况,并用图1表示质心的能谱).

当 n_{r_e} = 0,1 2 时,由(8)式和(9)式计算得质心 波函数为





表 1	几条低能级质心的能量本征值简并度

N	$E_{\rm c}$	(n _{r_c} ,m _c)	f_n	
0	$\hbar \nu$	(00)	1	
1	$2\hbar\nu$	(0,1)(0,-1)	2	
2	3 ħv	(02)(0,-2)(10)	3	
3	$4\hbar\nu$	(0,3)(0,-3)(1,1)(1,-1)	4	
4	5 ħv	(0 A)(0,-4)(1 2)(1,-2)(2 0)	5	
5	$6\hbar\nu$	(05)(0,-5)(1,-3)(13)(2,1)(2,-1)	6	
6	$7 \hbar \nu$	(0 6)(0,-6)(1 A)(1,-4)(2 2)(2,-2)(3 0)	7	
7	8 ħν	(0,7)(0,-7)(1,5)(1,-5)(2,3)(2,-3)(3,1)(3,-1)	8	

 $|\mathbf{h}|\psi|^2 = \psi|\psi|$ 可作出 $n_{r_a} = 0$,1.2 时径向概率分布(见图 2、图 3 和图 4).



图 2 m_c = 0 径向分布概率图(细实线 0s 能级 ,虚线 1s 能级 ,粗 实线 2s 能级)



图 3 $m_c = 1$ 径向分布概率图(细实线 0p 能级 ,虚线 1p 能级 ,粗 实线 2p 能级)



图 4 m_c = 2 径向分布概率图(细实线 0d 能级 ,虚线 1d 能级)相 实线 2d 能级)

5. 结论与讨论

通过对 Paul 阱中共面的两离子体系的研究,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,得 到 两 离 子 系 统 Schrödinger 方程的精确解,据方程的精确解,我们分 析了质心的能级简并情况,得出在外场作用下,质心 运动的能级与质心运动的径向量子数 n_{r_e} 和磁量子 数 m_e 的绝对值有关, $m_e = 0$, ± 1 , ± 2 ,..., $\pm N$, n_{r_e} = 0,1,2,..., $\frac{N}{2}$ 或 $\frac{N-1}{2}$ (N为正整数),出现 $f_n = N$ + 1 个态所对应的能量都相同,即存在 N + 1 重能级 简并,它说明了 Paul 阱中囚禁的两个离子的质心运 动满足二维各向同性谐振子的 SU_2 动力学对称性. 计算了两离子的平衡距离和低能级的几个态,画出 质心能级简并的能谱图,设计程序作出了 $n_{r_e} = 0,1$, 2 质心径向概率分布.

当前在冷阱束缚离子计算机中, N 个离子经激 光冷却后,束缚到一个线性势阱或环形势阱中,以每 个离子自身的两态(内态和外态)作载体.离子受到 势阱束缚势和相互间库仑排斥势的作用,在平衡位 置附近作微小振动,可用简正模描述,量子化后即用 声子描述.其中频率最低的模称为质心模.每个离子 可以用不同的激光束来控制,在激光束的作用下,离 子内态和离子集体振动的元激发-声子发生相互耦 合.通过声子传递相互作用,可实现任意两个比特之 间的异或操作.类似的想法还可以用来实现多比特 的量子逻辑门,但目前只有二比特的量子逻辑门得 到了具体的实验证实.

上述实验说明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]. 能级结构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. [2] Feng M , Luo X L , Zhu X W , Shi L , Yan M 1998 Acta Phys . Sin .
 (Overseas)7 488

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]

- [3] Barwood G P , Huang G , Klein H A , Gill P , Clarke R B M 1999 Phys. Rev. A 59 R3178
- [4] Feng M, Hai W, Zhu X, Gao K, Shi L 2000 China. Phys. 9 250
 Zhou Q P, Fang M F 2004 Chin. Phys. 13 101
 Zhou Q P, Fang M F, Liu X et al 2004 Chin. Phys. 13 105
- [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 H 2004 Acta Phys. Sin. 53 1309(in Chinese)[李

飞、海文华 2004 物理学报 53 1309]

Li F , Hai W H , Chong G , Xie Q 2004 Commou . 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 Physica Status 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, Yan M, Zhu X 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] Leibfried D, Blatt R, Monroe C, Wineland D 2003 Rev. Mod. Phys. 75 281
- [16] Turchette Q A, Kielpinski D, King B E et al 2000 Phys. Rev. A 61 063418
- [17] Hai W, Feng M, Zhu X et al 2000 Inter. J. Theor. Phys. 39 1
- [18] Mischael Martin Nieto and D Rodney Truax 2000 New Journal of Physics 2,18.1—18.9
- [19] Brown L S 1991 Phys. Rev. Lett. 66 527

Energy eigenstates of two ions in a two-dimensional paul trap*

Wu Yun-Wen[†] Hai Wen-Hua

(Department of Physics , Jishou University , Jishou 416000 , China)
(Department of Physics , Hunan Normal University , Changsha 410081 , China)
(Received 9 August 2005 ; revised manuscript received 24 October 2005)

Abstract

Taking into consideration the Coulomb interaction between two ions trapped in the coplanar Paul trap the exact solutions of the Schrödinger equations of the two-ions system are obtained. The energy level degeneracy for center-of mass is obtained using the exact solutions. We also calculate the equilibrium distance of the ions and several state functions of the low energy levels. The radial probability distribution graph for the center of mass is plotted using a computer program.

Keywords : Paul trap , two ions , coplanarity , 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. 1152504), and the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 03, JY6015)

[†] E-mail:wuyw_jd@163.com