

Johannes Gutenberg-Universität Mainz
Institut für Physik - Arbeitsgruppe QUANTUM

Diplomarbeit

Optimierung von Transport und Zustandsmanipulation kalter Ionen in segmentierten Ionenfallen

Henning Alexander Fürst

6. Februar 2014

1. Gutachter: Prof. Dr. Ferdinand Schmidt-Kaler
2. Gutachter: Juniorprof. Dr. Matteo Rizzi



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

Abstract

Fast transport of trapped ions is one of the basic requirements for the realization of a scalable ion based quantum computer. Using a segmented, microfabricated Paul trap, ground state cooled ions are shuttled between memory zones and processing zones, where the manipulation and readout of the quantum information is done. To achieve maximum performance, the shuttling has to be fast while avoiding significant excitation. Transport times being in the order of a trapping period therefore require a tailored design of optimal transport sequences, defining a specific control problem. Time dependent segment voltages suitable for the transport process can be found either numerically using optimal control theory or analytically by means of forcing the ion to follow a desired trajectory.

We therefore investigate in the applicability and performance of different control methods for state preserving ion transport with segmented ion traps. A numerical optimization method along with a propagator was implemented for classical trajectory control. The behavior of the minimal transport time for limited control voltages was analyzed. Using a comparable analytic solution, the temporal course of the ramps could be explained. The validity check of the classical solutions in the quantum regime requires a propagator being capable to transport the wavefunction over a distance of more than 10^4 times its size. Thus, an efficient propagator using a co-moving frame in phase space was developed. Wavepacket squeezing appeared to be the only observable quantum effect for the used trap geometry. It could be avoided for a large range of trapping parameters using an invariant-based approach. A general criterion for the requirement of a full quantum mechanical treatment of the control problem was found. Only if the wavefunction's width becomes comparable to the size of the electrodes, the effect of anharmonicities has to be taken into account. At these scales, a numerical implementation of the quantum control algorithm shows reasonable convergence. Specifically utilizing anharmonicities the creation of a Fock state could be optimized employing optical potentials for realistic parameters.

The developed numerical framework could be used as a basis for other ion trap based optimization, e.g. the optimization and stability analysis of splitting processes, where a two ion crystal is split or the extraction of an ion for implantation into a solid state as it is already performed experimentally in our group.

Zusammenfassung

Der schnelle Transport gefangener Ionen ist eine der Voraussetzungen zur Realisierung eines ionenbasierten Quantencomputers. Mit Hilfe einer segmentierten Paul-Falle werden Ionen im Bewegungsgrundzustand zwischen Speicherzonen und Prozessorzonen transportiert, in denen Präparation und Auslese der Quanteninformation ausgeführt wird. Um die Höchstgeschwindigkeit des Quantenprozessors zu erreichen, müssen Ionen schnell und ohne signifikante Anregung transportiert werden können. Transportzeiten in der Größenordnung der Schwingungsdauer erfordern die zielgerichtete Konstruktion geeigneter Sequenzen. Zeitabhängige Segmentspannungen, die der Problemstellung genügen, können durch numerische Optimierung oder analytisch durch Ausgleichen der Trägheitskräfte auf das Ion gefunden werden.

Die vorliegende Arbeit beleuchtet die Anwendbarkeit verschiedener Methoden zur Kontrolle des zustandserhaltenden Transports von Ionen in segmentierten Ionenfallen. Es wurde ein Verfahren zur numerischen Optimierung zusammen mit einem Propagator zur klassischen Kontrolle der Ionenbewegung implementiert. Das Verhalten der minimalen Transportzeit im Fall limitierter Segmentspannungen wurde untersucht. Mit Hilfe der analytischen Lösung für ein vergleichbares Modellsystem konnte der Verlauf erklärt werden. Zur quantenmechanischen Verifikation wurde ein Propagator weiterentwickelt, der es erlaubt Wellenfunktionen über mehr als das 10^4 Fache ihrer Ausdehnung hinweg zu transportieren. Einzig das Quetschen der Wellenfunktion wurde als auftretender Quanteneffekt für die verwendete Fallengeometrie beobachtet. Dieser konnte durch Implementieren einer invariantenbasierten Lösung für einen großen Parameterbereich unterdrückt werden. Ein generelles Kriterium zur Notwendigkeit der quantenmechanischen Beschreibung wurde erarbeitet. Erst auf Skalen, auf denen die Breite der Wellenfunktion vergleichbar mit der Ausdehnung der Fallenelektroden ist, spielen anharmonische Effekte eine Rolle. Die quantenmechanische Optimierung lieferte hier gute Ergebnisse. Durch gezieltes Ausnutzen von Anharmonizitäten konnte das Erzeugen eines Fock-Zustandes mittels optischer Potentiale für realistische Parameter optimiert werden.

Die implementierten Verfahren bieten den Ausgangspunkt zur weiteren Optimierung von Prozessen in Ionenfallen, z. B. der Trennung von Zwei-Ionen-Kristallen oder der Extraktion eines Ions zur Implantation in einen Festkörper, wie es bereits experimentell in unserer Arbeitsgruppe durchgeführt wird.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Gefangene Teilchen in linearen Ionenfallen	4
1.2. Transport von Ionen in linearen Paul-Fallen	6
1.3. Wahl der Transportspannungen	8
1.4. Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik	10
2. Klassische Lösungen des Transportproblems	15
2.1. Zur Lösung der Bewegungsgleichung	16
2.2. Test des klassischen Propagators	17
2.3. Geometrische Kontrolltheorie	19
2.4. Numerische Optimierung mittels des Krotov-Verfahrens	21
2.5. Anwendung auf das Transportproblem	28
3. Quantenmechanische Verifikation der klassischen Lösungen	37
3.1. Propagation von Wellenfunktionen	38
3.1.1. Mitbewegtes Bezugssystem	38
3.1.2. Chebychev-Propagator	40
3.1.3. Bestimmung des Spektralradius	43
3.2. Test des quantenmechanischen Propagators	44
3.3. Gültigkeit der klassischen Lösung	47
3.4. Stabilität der klassisch optimierten Lösungen	50
4. Invariantenbasierte Lösung	53
4.1. Lewis-Riesenfeld Theorie der dynamischen Invarianten	54
4.2. Invariantenbasierter Transport	57
4.3. Ergebnisse	59
4.4. Stabilität	62
5. Quantenmechanische Optimierung	65
5.1. Test der Optimierung mit mitbewegten Bezugssystem	66
5.2. Anwendung auf das Transportproblem	68
6. Optische Potentiale zur Quantenmechanischen Zustandskontrolle	73

6.1. Erzeugen einer Stehwellen-Struktur entlang der Fallenachse	73
6.2. Parametrisierung des Lichtpotentials	75
6.3. Erzeugen einer Fock-Anregung	76
6.4. Stabilität der Lösung	79
6.5. Technische Realisierbarkeit der Lösung	80
7. Ausblick	83
Literaturverzeichnis	91
A. Anhang	93
A.1. Konvergenz des Krotov-Verfahrens	93
A.2. Laufzeitoptimierung am Beispiel des quantenmechanischen Propagators	95
A.3. Veröffentlichung	99

1

Einleitung

Es existieren zwei wesentliche Motivationen zur Entwicklung von Quantencomputern. Zum einen führt die immer weiter fortschreitende Miniaturisierung von klassischen Halbleiterbauelementen unweigerlich zum strukturellen Limit weniger bis einzelner Atome, sodass Quanteneffekte das Verhalten zukünftiger Bauelemente dominieren werden. Zum anderen stellt sich die Frage, ob intrinsische Eigenschaften von Materie und deren fundamentale Wechselwirkungen zur Informationsverarbeitung genutzt werden können.

Ionenbasierte Quantenprozessorarchitekturen nach den Vorschlägen von Kielpinski et al. [KMW02] stellen einen vielversprechenden Ansatz zur Realisierung eines skalierbaren Quantencomputers dar. Segmentierte, lineare Ionenfallen werden hier in Prozessorzonen, in denen Ionen als Quantenbits präpariert und ausgelesen werden können und Speicherzonen, in denen präparierte Quantenbits gespeichert werden, unterteilt. Durch Anlegen zeitabhängiger Segmentspannungen können Ionen zwischen den Regionen hin und her transportiert und legen dabei Strecken von einigen hundert Mikrometern zurück. Um größtmögliche Rechenleistung zu erzielen, muss allerdings gewährleistet sein, dass dies auf möglichst kurzen Zeitskalen geschieht, ohne dass der zuvor präparierte Quantenzustand des Ions durch den Transport zerstört oder in unvorhersehbarem Maß beeinflusst wird. Ebenso müssen die Transportzeiten typische Dekohärenzzeiten der präparierten Quantenzustände um Größenordnungen unterschreiten, da

sonst Transport und Speicherung hinfällig ist. Die Dekohärenzzeiten für ionenbasierte Quantenbits liegen typischerweise im Bereich von 100 Millisekunden bis zu einer Sekunde [RLR⁺04, BKRB08, MKV⁺09, MSB⁺11], limitiert durch die Lebensdauer der verwendeten elektronischen Zustände, sodass Transportzeiten im Bereich von Mikrosekunden angestrebt werden, was ebenso in der Größenordnung der Schwingungsperioden der Ionen liegt.

Für hinreichend langsame Transporte kann das Ion dem Potentialminimum instantan folgen, sodass es zu einer vernachlässigbaren Anregungsenergie kommt. Man spricht dann vom *adiabatischen* Regime. Typischerweise ist hier die Transportzeit wesentlich größer als die axiale Schwingungsperiode des Ions. Derartige Transporte konnten im Jahr durch Rowe et al. [RBKD⁺02] erstmals experimentell durchgeführt werden. Durch Verringern der Transportzeit in den Bereich weniger Fallenperioden kann das Ion dem Potentialminimum nicht mehr folgen, sodass es in der Regel zu kohärenten Anregungen kommt. Eine geschickte Wahl der Segmentspannungen während des Transports lässt allerdings auch auf diesen Skalen Transportzeiten zu, in denen der finale Bewegungszustand keine signifikante Anregung erfährt. Diese nichtadiabatischen Transporte konnten erstmals in unserer Arbeitsgruppe durch Walther et al. [WZR⁺12] und ebenso in Boulder durch Bowler et al. [BGL⁺12] experimentell demonstriert werden. Dabei ist es Mitarbeitern unserer Arbeitsgruppe gelungen, Ionen in der fünffachen Schwingungsdauer ($\approx 3.6 \mu\text{s}$) über eine Strecke von $280 \mu\text{m}$ zu transportieren, ohne dass deren finale Anregungsenergie dabei 0.2 Phononen übersteigt. Es stellt sich hier die Frage, wodurch die generellen Geschwindigkeitslimitierungen des Verfahrens gegeben sind und ob ein mögliches Auftreten von Quanteneffekten zusätzliche Maßnahmen zu deren Vermeidung erfordert.

Das Berechnen von Zustandserhaltenden, beliebig kurzen Transportsequenzen lässt sich dabei durch verschiedene Ansätze realisieren. Eine Möglichkeit ist durch die Anwendung numerischer Optimierungsalgorithmen gegeben. Sie erfordern stets das Lösen der Bewegungsgleichung für eine initiale Transportsequenz. Die Optimierung dieser Sequenz erfolgt dann schrittweise durch eine vorgegebene Vorschrift, bis die gewünschte Zielenergie erreicht ist. Für den klassischen Fall wurde dies in [SPSSK06] durchgeführt. Das Auftreten signifikanter quantenmechanischer Effekte wurde dort für Transportzeiten unterhalb einer Fallenperiode vorhergesagt, was die Anwendung quantenmechanischer Kontrolltheorien [SKT93, ZBR98, RNK12] erfordern würde. Diese konnten in der Vergangenheit bereits häufig genutzt werden um bestehende Verfahren zur Manipula-

tion von Quantensystemen im Hinblick auf Zeit, Stabilität gegenüber experimentellen Fluktuationen oder bestimmten Einschränkungen zu optimieren [MMGC10, VTK⁺12]. Die quantenmechanische Transportoptimierung von Atomen in optischen Dipolfallen wurde in [CHJ⁺00, DCCA⁺08, MJKC09] diskutiert und stellt eine vielversprechende Basis für die Anwendung auf Ionentransporte dar. Eine weitere Möglichkeit quantenmechanisch gültige Transportsequenzen zu finden, die eine finale Anregung vermeiden, bietet die Anwendung invariantenbasierter Methoden [CTS⁺11, TInC⁺11]. Diese erlauben die analytische Berechnung des Transportpotentials durch Vorgabe einer Sollbahn des Ions, lassen aber wenig Spielraum für experimentelle Einschränkungen zu, sodass durch die explizite Implementierung mittels zeitabhängiger Segmentspannungen das Auftreten von Quanteneffekten nicht ausgeschlossen werden können.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Programm zur Generierung der optimalen Transportrampen entwickelt, was auf Basis der klassischen Bewegungsgleichung die zum Transport notwendigen Elektrodenspannungen numerisch optimiert. Das Programm bietet zudem die Möglichkeit die Spannungen auf ein experimentell realisierbares Maximum zu begrenzen, was eine Untersuchung der minimal möglichen Transportzeit für das Spannungslimit ermöglicht. Ebenso lassen sich mit dem Programm die invariantenbasierten Transportspannungen unter Vorgabe einer Sollbahn berechnen. Um die quantenmechanische Gültigkeit der Sequenzen zu überprüfen, ist es notwendig die Schrödingergleichung über die Distanz der Transportstecke ($\approx 280 \mu\text{m}$) zu lösen, die üblicherweise um einen Faktor 10^4 höher ist als die Ausdehnung der Wellenfunktion ($2\sigma_0 \approx 28 \text{ nm}$) selbst, worin der wesentliche Unterschied zur Simulation gefangener Atome in Dipolpotentialen besteht. Dazu wurde eine bestehende Idee eines sich mit der Wellenfunktion mitbewegenden Phasenraums weiterentwickelt und für das Transportproblem angepasst, um eine effiziente Propagation zu ermöglichen. Im Rahmen eines dreimonatigen Aufenthaltes in der Arbeitsgruppe Koch¹, wurden zahlreiche Verbesserungen der Implementierung des Propagators in deren Numerikbibliothek QDYN implementiert. Dadurch konnte die Dauer einer einzelnen Propagation von mehreren Stunden in den Bereich von einigen Sekunden bis Minuten reduziert werden. Für eine quantenmechanische Behandlung des Kontrollproblems war es zudem notwendig, die korrekte Implementierung des mitbewegten Gitters in den Optimieralgorithmus sicherzustellen. Mit Hilfe des damit zur Verfügung stehenden, numerischen Rahmens konnte das Auftreten von Quanteneffekten für kurze Transportzeiten bei Verwendung der ver-

¹ Prof. Dr. Christiane Koch, Heinrich-Plett-Straße 40, 34132 Kassel,
www.uni-kassel.de/fb10/institute/physik/forschungsgruppen/quantendynamik-und-kontrolle

schiedenen Methoden untersucht werden. Ebenso wurde der Zusammenhang zwischen maximal zur Verfügung stehender Spannung gegenüber der minimal möglichen Transportzeit sowie die Stabilität der Lösungen studiert. Die Anwendbarkeit der quantenmechanischen Optimierung auf das Transportproblem wurde diskutiert und eine weitere Anwendungsmöglichkeit des quantenmechanischen Optimierers zur Erzeugung eines angeregten Fock-Zustandes beschrieben.

Im Folgenden werden zunächst die notwendigen theoretischen Grundlagen zur linearen Paul-Falle und deren Erweiterung durch Segmentierung sowie die quantenmechanische Betrachtung eines darin gefangenen, geladenen Teilchens vorgestellt, die als Basis für die klassische und quantenmechanische Behandlung des Transportproblems dienen. Kapitel 2 beinhaltet die mathematischen Grundlagen zur numerischen Optimierung und beleuchtet die klassisch optimierten Lösungen für begrenzte Segmentspannungen. In Kapitel 3 wird der quantenmechanische Propagator vorgestellt und die Gültigkeit und Stabilität der klassisch optimierten Lösung diskutiert. Die alternative Lösung durch den invariantenbasierten Ansatz wird in Kapitel 4 eingeführt und deren Implementierung mit der klassischen Lösung verglichen. Kapitel 5 beleuchtet die Anwendbarkeit der quantenmechanischen Optimierung auf den Ionentransport und Kapitel 6 beschäftigt sich mit einer weiteren möglichen Anwendung der Optimierung für gefangene Ionen, dem Erzeugen von Fock-Zuständen durch ein zusätzliches Lichtpotential innerhalb der Falle.

1.1. Gefangene Teilchen in linearen Ionenfallen

Um geladene Teilchen lokalisiert zu fangen, wird eine rücktreibende Kraft $\mathbf{F} \propto -\mathbf{r}^n$ mit $n > 0$ in allen Raumdimensionen benötigt. Im Falle eines harmonischen Einschlusses am Ort $\mathbf{r} = (x, y, z) = 0$ bedeutet das für das Potential

$$\Phi(\mathbf{r}) \propto a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2 \quad (1.1)$$

Mit der Laplace-Gleichung der klassischen Elektrodynamik $\Delta\Phi = 0$ folgt für die Koeffizienten $a_x + a_y + a_z = 0$, sodass mindestens einer der Koeffizienten ein negatives Vorzeichen tragen muss, was zu einer repulsiven Kraft in der zugehörigen Raumrichtung führt. Damit ist klar, dass ein harmonischer, elektrostatischer Einschluss des Ions nicht gewährleistet werden kann. Durch Einführen eines mit der Radiofrequenz (RF) ω_{RF}

zeitlich oszillierenden Quadrupolpotentialterms, kann periodisch das repulsive, elektrostatische Potential ausgeglichen werden. Aufgrund ihrer Trägheit erfahren Ionen dann bei geeigneter Wahl der Parameter im zeitlichen Mittel ein attraktives, ponderomotives Potential und werden entlang der Knotenlinie des RF-Quadrupolpotentials gefangen. Das Konzept wird nach seinem Erfinder Wolfgang Paul als Paul-Falle bezeichnet. Der erweiterte Potential-Ansatz dazu lautet

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{U_{\text{DC}}}{2} (a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2) + \frac{U_{\text{RF}}}{2} \cos(\omega_{\text{RF}} t) (b_x x^2 + b_y y^2 + b_z z^2), \quad (1.2)$$

Für eine lineare Paul-Falle wählt man typischerweise [LBMW03]

$$a_x + a_y = -a_z \quad \text{und} \quad b_x = -b_y, \quad b_z = 0, \quad (1.3)$$

sodass die Laplace-Gleichung erfüllt ist und die RF-Knotenlinie entlang der z -Richtung liegt. Für $a_z < 0$ bedeutet dies einen elektrostatischen Einschluss in z -Richtung, falls $U_{\text{DC}} < 0$ für ein positiv geladenes Ion. Da $b_z = 0$ gewählt wurde, hat das zeitabhängige Quadrupol-Potential nur einen Einfluss auf die Bewegung in der x - y -Ebene, sodass die Bewegung entlang der z -Achse von der radialen Bewegung entkoppelt ist und sich als eindimensionales Problem beschreiben lässt. Dadurch wird insbesondere eine quantenmechanische Betrachtung stark erleichtert. Die klassische Bewegungsgleichung des Problems lässt sich für ein geladenes Teilchen der Masse m und Ladung Ze mit $Z \in \mathbb{Z}$ und der Elementarladung e für alle drei Raumdimensionen in geschlossener Form durch die *Mathieu-Differenzialgleichung* angeben [LBMW03]. Ihre Lösung erfolgt üblicherweise mit dem Ansatz einer Fourier-Entwicklung. Für die spezielle Wahl der Parameter (Gleichung 1.3) ist die Lösung der axialen Bewegungsgleichung $\ddot{z} = -Ze \frac{\partial \Phi}{\partial z}$ durch die harmonische Bewegung

$$z(t) = z_0 \cos(\omega_z t - \varphi_0), \quad (1.4)$$

mit $\omega_z = \sqrt{ZeU_{\text{DC}}a_z/m}$ und den Parametern φ_0 und z_0 , die durch das Anfangswertproblem festgelegt sind, gegeben. Die axiale Fallenfrequenz hängt demnach nur von dem für das Ion spezifischen Ladung-zu-Masse-Verhältnis, der Krümmung des Potentials a_z und der angelegten Spannung U_{DC} ab.

Die in unseren Experimenten verwendete [SPZSK08, WZR⁺12] Ionenfalle ist in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt. Die segmentierte Struktur ermöglicht es, durch Anlegen von negativen Spannungen an einem der gegenüberliegenden DC-Elektrodenpaare

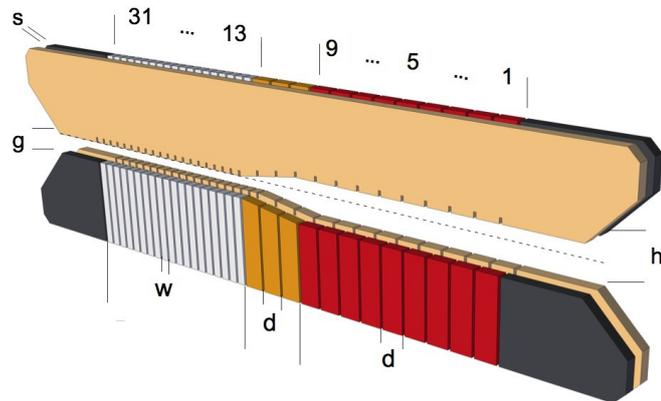


Abbildung 1.1.: Schematische Darstellung einer modernen, segmentierten Ionenfalle. Drei Teilbereiche sind durch die unterschiedlichen Breiten der DC-Segmente $d = 250 \mu\text{m}$ (rot, orange), $w = 100 \mu\text{m}$ (weiß) und Abstände $h = 500 \mu\text{m}$ und $g = 250 \mu\text{m}$ gekennzeichnet. Die DC-Elektroden sind mit Schlitzen von $30 \mu\text{m}$ voneinander separiert. Der radiale Einschluss wird durch die davon um $s = 125 \mu\text{m}$ separierten, unsegmentierten RF-Elektroden (gelb) gewährleistet. Ihre Stirnflächen sind aus Symmetriegründen im gleichen Abstand wie die DC-Elektroden geschlitzt. Die schwarzen Elektroden bilden die Masse der Falle (Abbildung aus [SPZSK08]).

entlang der Fallenachse ein attraktives Potential zu erzeugen, was im Bereich seines Minimums in guter Näherung von harmonischer Gestalt ist, sodass ein darin gefangenes Ion für Auslenkungen in der Größenordnung einiger Mikrometer gut durch einen harmonischen Oszillator beschrieben werden kann. Für eine typische Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ zum Fangen eines $^{40}\text{Ca}^+$ Ions mit Hilfe von Segment 5 wird beispielsweise eine Spannung von etwa -5.59 V benötigt.

1.2. Transport von Ionen in linearen Paul-Fallen

Durch die Segmentierung bildet jedes Elektrodenpaar für sich zusammen mit den RF-Elektroden eine Paul-Falle. Das Beschalten weiterer Segmente mit zeitabhängigen Spannungen bewirkt durch Überlagern der jeweiligen Potentiale, dass sich der Ort des resultierenden Potentialminimums verschiebt. Dadurch wird ein Transport des gefangenen Ions entlang der Fallenachse, die von nun an mit x bezeichnet wird, ermöglicht. Das

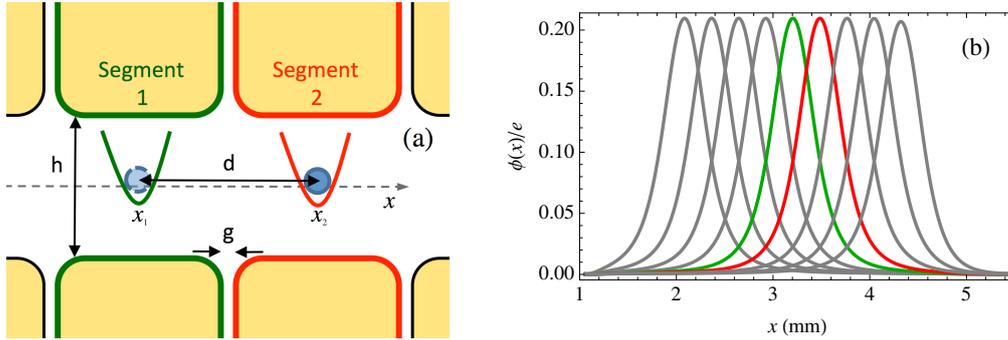


Abbildung 1.2.: (a) Symbolische Darstellung des Ionentransports entlang der x -Achse in einer segmentierten Ionenfalle. Die RF-Elektroden sind nicht abgebildet. (b) Axiale Elektrodenpotentiale für eine Gleichspannung von einem Volt an je einem Paar gegenüberliegender DC-Elektroden, während die anderen auf Masse liegen. Die Potentiale (von links nach rechts) entsprechen denen der Segmente 1-9 der in Abb. 1.1 dargestellte Mikrofalle. Für die numerischen Berechnungen zum Transport wurden nur die Potentiale von Segment 5 (grün) und 6 (rot) verwendet.

resultierende, axiale Potential lässt sich ausdrücken durch

$$V(x, t) = \sum_{i=1}^N U_i(t) \phi_i(x), \quad (1.5)$$

mit den zeitabhängigen Segmentspannungen $U_i(t)$ und den elektrostatischen Potentialen $\phi_i(x)$ der jeweiligen Segmente. Diese wurden mit dem Programm `bemsolver` [SPM⁺10], einer numerischen Bibliothek, die eine schnelle Multipol-Methode zur Lösung der elektrostatischen Feldgleichungen nutzt, für die Fallengeometrie in Abbildung 1.1 berechnet und sind in Abbildung 1.2 dargestellt. Durch Vorgabe der gewünschten Fallenfrequenz und Position des Potentialminimums lassen sich die benötigten Transportspannungen berechnen, was in Kapitel 1.3 erläutert wird. Im einfachsten Fall betrachtet man den Transport vom Zentrum eines zum nächsten Potentials, wie er in [WZR⁺12] experimentell realisiert wurde. Für die hier durchgeführten numerischen Berechnungen wurden stets die Potentiale von Segment 5 und Segment 6 verwendet, sodass man eine Transportstrecke von $d \approx 280 \mu\text{m}$ erhält. Im Folgenden werden die beiden verwendeten Segmente aus Konsistenzgründen mit 1 (entspricht Segment 5) und 2 (entspricht Segment 6) bezeichnet. Um erhöhten numerischen Aufwand zu vermeiden und stetige Ableitungen zu erhalten, wurden die Potentiale auf äquidistanten Gitterpunkten im Abstand von $1 \mu\text{m}$ bestimmt und anschließend rationale Funktionen $f_{n,m}(x)$ an die Werte

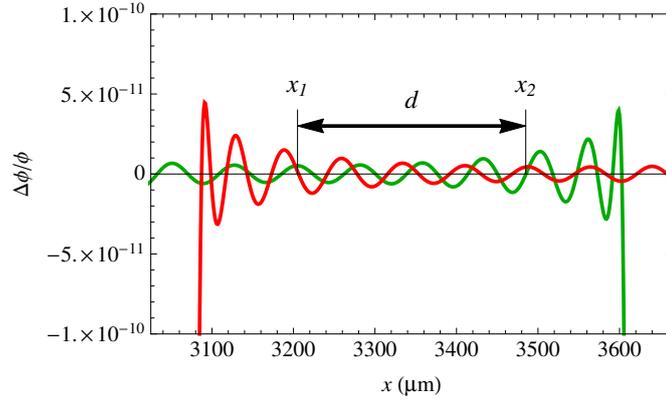


Abbildung 1.3.: Relative Abweichung $\Delta\phi/\phi$ zwischen rationalem Fit 13. Ordnung und den mit Hilfe des Programms *bemsolver* berechneten Potentialen für Segment 5 (grün) und 6 (rot) der Mikrofalle (Abb. 1.1).

angepasst:

$$f_{n,m}(x) = \frac{\sum_{j=0}^n a_j x^j}{\sum_{i=0}^m b_i x^i} = \frac{u_n(x)}{v_m(x)}, \quad (1.6)$$

$$f'_{n,m}(x) = \frac{u'_n(x) \cdot v_m(x) - u_n(x) \cdot v'_m(x)}{(v_m(x))^2}, \quad (1.7)$$

$$f''_{n,m}(x) = \frac{2u_n(x)v'_m(x)^2 + v_m(x)^2 u''_n(x) - v_m(x)(2u'_n(x)v'_m(x) + u_n(x)v''_m(x))}{v_m(x)^3}. \quad (1.8)$$

Durch geeignete Wahl des Fit-Bereichs und Anzahl der Koeffizienten lässt sich die relative Abweichung der Fit-Funktion zum Potential gering halten. Typischerweise genügen 28 Koeffizienten (mit $m = n = 13$) um die relativen Abweichungen der Anpassung zum berechneten Potential auf dem gesamten für den Transport relevanten Bereich zwischen den Maxima der Potentiale bei $x_1 = 3205 \mu\text{m}$ und $x_2 = 3485 \mu\text{m}$ auf unter $5 \cdot 10^{-11}$ zu halten, wie in Abbildung 1.3 dargestellt. Der Fit wurde in einem Bereich $\pm 400 \mu\text{m}$ um das Maximum des jeweiligen Potentials durchgeführt, sodass die relativen Abweichungen an den Randstellen des Anpassungsbereichs abrupt zunehmen.

1.3. Wahl der Transportspannungen

Jegliche numerische Optimierung, egal ob quantenmechanisch oder klassisch, benötigt zunächst als Ausgangspunkt initiale Kontrollparameter. Für viele Optimierungsprobleme, insbesondere wenn gradientenbasierte Verfahren zur Optimierung benutzt werden,

ist es zudem von entscheidender Bedeutung, dass diese Parameter physikalisch motiviert sind und den zu optimierenden Prozess bereits relativ gut beschreiben [KPKMS04]. Im Fall des Iontentransports wird daher verlangt, dass das Ion möglichst glatt von Position x_1 nach x_2 transportiert wird. Dazu wird das Potential durch den Ort des Minimums $\alpha(t)$ und dessen Fallenfrequenz ω parametrisiert. Diese ist gegeben durch die zweite Ableitung des Potentials an dieser Stelle,

$$m\omega^2 = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right|_{x=\alpha(t)} = V''(\alpha(t), t) = \sum_{i=1}^n \phi_i''(\alpha(t)) U_i(t). \quad (1.9)$$

Damit zu Beginn und Ende des Transports nur jeweils eines der beiden Segmente beschaltet ist, muss $\alpha(0) = x_1$ und $\alpha(T) = x_2$ gelten. Um ein glattes Beschleunigen und Abbremsen zu gewährleisten, kann zusätzlich gefordert werden, dass die ersten beiden Ableitungen verschwinden, sprich $\dot{\alpha}(0) = \dot{\alpha}(T) = \ddot{\alpha}(0) = \ddot{\alpha}(T) = 0$. Eine Möglichkeit, diese vier Randbedingungen zu erfüllen, ergibt sich durch einen Polynomansatz sechster Ordnung,

$$\alpha(t) = x_1 + d(10s^3 - 15s^4 + 6s^6), \quad (1.10)$$

mit der dimensionslosen Zeit $s = t/T$ und der Transportstrecke $d = x_2 - x_1$.

Um die initialen Segmentspannungen $U_i^0(t)$ zu erhalten, wird verlangt, dass der Ort des Potentialminimums durch $\alpha(t)$ vorgegeben ist, sodass die erste Ortsableitung des Potentials bei $\alpha(t)$ verschwindet. Bei einem adiabatischen Transportprozess, d. h. einem Prozess bei dem die Transportzeit T wesentlich größer ist als die Fallenperiode $T_{\text{ax}} = 2\pi/\omega$, kann davon ausgegangen werden, dass das Ion dem Minimum folgen wird und damit stets der dortigen Fallenfrequenz unterliegt. Um ein Quetschen der Wellenfunktion, wie es in Kapitel 1.4 beschrieben wird, zu vermeiden, kann als zusätzliche Bedingung die Fallenfrequenz an der Stelle $\alpha(t)$ konstant gehalten werden,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=\alpha(t)} &= \phi_1'(\alpha(t)) U_1^0(t) + \phi_2'(\alpha(t)) U_2^0(t) \stackrel{!}{=} 0, \\ \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right|_{x=\alpha(t)} &= \phi_1''(\alpha(t)) U_1^0(t) + \phi_2''(\alpha(t)) U_2^0(t) \stackrel{!}{=} m\omega^2. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Diese beiden Gleichungen können eindeutig gelöst werden, falls

$$\phi_2''(\alpha(t)) \phi_1'(\alpha(t)) - \phi_2'(\alpha(t)) \phi_1''(\alpha(t)) \neq 0. \quad (1.12)$$

Für die vorliegenden Potentiale ist dies entlang $\alpha(t)$ stets erfüllt, sodass die initialen Transportspannungen,

$$U_i^0(t) = \frac{(-1)^i m \omega^2 \phi_j'(\alpha(t))}{\phi_2''(\alpha(t)) \phi_1'(\alpha(t)) - \phi_2'(\alpha(t)) \phi_1''(\alpha(t))}, \quad i, j \in \{1, 2\}, \quad j \neq i, \quad (1.13)$$

die für eine vorgegebene Transportfunktion $\alpha(t)$ und bekannte Elektrodenpotentiale $\phi_i(x)$ exakt bestimmt werden können und den Ausgangspunkt der numerischen Optimierung bilden.

Sollen mehr als zwei Elektroden zum Transport verwendet werden, gibt es für das Gleichungssystem (entsprechend Gl. 1.13) keine eindeutige Lösung mehr. Mögliche Lösungen liefert eine Singulärwertzerlegung oder eine *Tikhonov-Regularisierung* [SPM⁺10]. Bei der letzteren Methode wird die Unterbestimmtheit des Gleichungssystems ausgenutzt, um auf die experimentelle Einschränkung begrenzter Segmentspannungen einzugehen.

Um zu verstehen, warum es wichtig ist die Fallenfrequenz während des Transportes konstant zu halten und welche Effekte das Auslenken des Ions aus dem Potentialminimum auf dessen Wellenfunktion hat, ist es notwendig die quantenmechanische Dynamik des nahezu harmonisch eingeschlossenen Ions zu kennen. Im Folgenden Kapitel wird daher die quantenmechanische Beschreibung des harmonischen Oszillators und dessen Verhalten bei einer veränderten Fallenfrequenz und kohärenter Auslenkung eingeführt.

1.4. Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik

Neben dem Wasserstoffatom zählt der harmonische Oszillator zu den wenigen Systemen, zu denen eine analytische Lösung der Schrödingergleichung existiert. Da sich die vorliegenden Elektrodenpotentiale aus Abbildung 1.2(b) am Ort ihres Maximums in guter Näherung in quadratischer Ordnung entwickeln lassen, sind die dort liegenden Zustände niedrigster Energien in erster Näherung durch die des harmonischen Oszillators gegeben. Dabei variiert die tatsächliche Fallenfrequenz der vorliegenden Potentiale

$$\omega(x) = \sqrt{\frac{\sum_i U_i \phi_i''(x)}{m}}, \quad (1.14)$$

für ein gefangenes $^{40}\text{Ca}^+$ Ion der Masse m und den Segmentspannungen U_i auf einem Bereich von $\pm 7\mu\text{m}$ um das resultierende Potentialminimum um weniger als 0.1%, was die harmonische Näherung insbesondere für den gaußförmigen Grundzustand rechtfertigt. Dieser weist bei einer Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3\text{MHz}$ eine Breite von nur $\sigma_0 = \sqrt{\hbar/m\omega} = 14\text{nm}$ auf, wie man aus der Lösung der Schrödingergleichung erhält.

Der Hamiltonoperator \hat{H} eines gefangenen Ions ist in harmonischer Näherung gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{x}}^2 \quad (1.15)$$

$$= \hbar\omega \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right), \quad (1.16)$$

mit dem Vernichtungsoperator

$$\hat{\mathbf{a}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{\mathbf{x}} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{\mathbf{p}} \quad (1.17)$$

und dem Erzeugeroperator $\hat{\mathbf{a}}^\dagger = (\hat{\mathbf{a}})^\dagger$. Mit Hilfe der Kommutatorrelation $[\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar$ folgt leicht $[\hat{\mathbf{a}}^\dagger, \hat{\mathbf{a}}] = -1$, sodass für eine beliebige Lösung $|\Psi\rangle$ der stationären Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \hbar\omega \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) |\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (1.18)$$

mit Energie E , der Zustand $\hat{\mathbf{a}}^\dagger |\Psi\rangle$ ebenfalls eine Lösung mit Energie $E + \hbar\omega$ ist. Gleiches gilt für $\hat{\mathbf{a}} |\Psi\rangle$, was als Energie $E - \hbar\omega$ liefert. Da die Energie nach unten durch $E_{\text{klass}} = 0$ beschränkt ist, muss es einen Zustand $|\Psi_0\rangle$ geben für den $\hat{\mathbf{a}} |\Psi_0\rangle = 0$ gilt. Damit folgt als Energie des Grundzustandes

$$\hat{H}|\Psi_0\rangle = \hbar\omega \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) |\Psi_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |\Psi_0\rangle. \quad (1.19)$$

Übliche axiale Bewegungsenergien für gefangene Ionen liegen also im Bereich einiger Nanoelektronenvolt, was Temperaturen von Mikrokkelvin entspricht. Für alle weiteren Zustände Ψ_n die durch mehrmaliges Anwenden von $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ erzeugt werden können, erhält man

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |\Psi_n\rangle, \quad |\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \right)^n |\Psi_0\rangle. \quad (1.20)$$

1. Einleitung

Der Faktor $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ resultiert dabei aus der Normierung $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$. Oft schreibt man Statt $|\Psi_n\rangle$ einfach $|n\rangle$ mit $n \in \mathbb{N}_0$. Die zugehörigen Ortswellenfunktionen lassen sich analytisch bestimmen zu

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}, \quad (1.21)$$

mit den Hermite-Polynomen

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right), \quad (1.22)$$

sodass der energetische Grundzustand $|0\rangle$ (auch Vakuum-Zustand) wie oben beschrieben durch eine Gaussfunktion mit Breite $\sigma_0 = \sqrt{2} \Delta x = \sqrt{\hbar/m\omega}$ gegeben ist. Die Orts-Impuls-Unschärfe dieses Zustandes ist kleiner als die aller anderen Eigenzustände und erfüllt das Heisenberg-Limit $\Delta x \Delta p = \hbar/2$. Ebenfalls gilt dies für die Klasse der *kohärenten* Zustände, die durch Auslenken des Grundzustandes $|0\rangle$ aus dem Potentialminimum entstehen. Sie sind Eigenzustände des Operators \hat{a} und werden üblicherweise nach dessen komplexem Eigenwert α benannt

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle. \quad (1.23)$$

In der Fock-Basis können sie durch

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} |n\rangle \quad (1.24)$$

dargestellt werden. Die Energie eines solchen Zustandes ist gegeben durch

$$\langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = E = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (1.25)$$

Bemerkenswerterweise folgen die Orts- und Impulserwartungswerte eines solchen Zustandes den klassischen Phasenraum-Trajektorien des harmonischen Oszillators, was bedeutet, dass $\hbar\omega |\alpha|^2$ der Energie der klassischen Auslenkung entspricht. Ein solcher Zustand lässt sich erzeugen, in dem das Minimum des Potentials schnell gegenüber dem Ion verschoben wird, was zu einer Auslenkung führt und mit der beschriebenen Mikrofalle durch unsere Arbeitsgruppe demonstriert werden konnte [ZRW⁺13]. Maximal wurden Werte von $|\alpha| \approx 2.8$ beobachtet, was einer klassischen Auslenkung von $\Delta x_{\max} \approx 54 \text{ nm}$ aus dem Fallenzentrum entspricht. Die vorliegende Situation ist da-

bei der bei einem langsamen Transport sehr ähnlich. Dabei wird der Zustand kaum aus dem relativ zum sich bewegenden Minimum des Potentials ausgelenkt, sodass die Fallenfrequenz in guter Näherung noch mit der am Potentialminimum übereinstimmt. Nach Abschluss der Sequenz wird der transportierte Zustand folglich wie ein kohärenter Zustand schwingen. Sind die Auslenkungen während des Transports allerdings zu hoch, gerät das Ion in Bereiche in denen die Krümmung des Potentials stärker von der harmonischen Näherung abweicht, was nach Gleichung 1.14 zu einer lokalen Änderung der Fallenfrequenz führt.

Der Einfluss dieser Änderung lässt sich leicht durch Betrachten einer weiteren Klasse von Zuständen minimaler Unschärfe, die aus dem Grundzustand hervorgehen, erklären. Man nennt diese die *gequetschten* Vakuum-Zustände (engl. squeezed vacuum states). Sie lassen sich leicht darstellen, in dem die Wellenfunktion $\psi_0(x)$ mit einem Faktor $\lambda > 0$ skaliert wird:

$$\psi_\lambda(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\lambda\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\lambda\hbar}x^2}. \quad (1.26)$$

Es folgt dann $\Delta x = \sqrt{\hbar\lambda/2m\omega}$ und aufgrund des Heisenberg-Limits direkt die Impulsunschärfe $\Delta p = \hbar/2\Delta x = \sqrt{m\hbar\omega/2\lambda}$. Der so erzeugte Zustand ist Grundzustand für ein Potential mit abweichender Fallenfrequenz $\omega_{\text{sq}} = \omega/\lambda$, was im Umkehrschluss bedeutet, dass ein gequetschter Zustand leicht durch schnelle Änderung der Fallenfrequenz aus dem Grundzustand erzeugt werden kann. Für den propagierten Zustand

$$\psi_\lambda(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi_\lambda(x) \quad (1.27)$$

lässt sich zeigen, dass das Unschärfeprodukt eines um λ gequetschten Zustandes zeitlich mit der vierfachen Fallenfrequenz oszilliert [KSVG13],

$$\Delta x(t)\Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \left(\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2\lambda}\right)\sin(2\omega t)\right)^2}, \quad (1.28)$$

wobei die Extremwerte durch

$$\frac{\hbar}{2} \leq \Delta x(t)\Delta p(t) \leq \frac{1 + \lambda^2}{2\lambda} \frac{\hbar}{2} \quad (1.29)$$

gegeben sind. Anhand dieser charakteristischen Signatur lässt sich ein solcher Zustand in einer Simulation leicht identifizieren. Gemessen wurden gequetschte Zustände an

1. Einleitung

gefangenen Ionen bereits 1995 in Boulder [MMK⁺96] an einem ${}^9\text{Be}^+$ Ion für $\lambda \approx 40$. Die maximale Breite der gequetschten Wellenfunktion wurde dabei also um einen Faktor $\sqrt{40} \approx 6$ erhöht.

Prinzipiell wird bei einem Ionentransport in einem näherungsweise harmonischen Potential, wie es in Kapitel 1.1 beschrieben wurde, sowohl ein Quetschen, als auch ein Auslenken des Ionen-Zustandes vorkommen. Falls die anharmonischen Beiträge über die Ausdehnung der Wellenfunktion signifikant werden, sodass verschiedene Bereiche der Wellenfunktion unterschiedliche Fallenfrequenzen erfahren, sind hingegen dispersive Effekte zu erwarten [AP91], sodass sich die Gestalt der Wellenfunktion von den gequetschten und kohärenten Zuständen unterscheiden wird.

2

Klassische Lösungen des Transportproblems

Aufgrund der weitestgehend harmonischen Potentiale, die zum Transport des Ions verwendet werden und der verglichen zur Transportstrecke $d \approx 280 \mu\text{m}$ sehr geringen Ausdehnung σ_0 der Grundzustandswellenfunktion im Bereich von $10 - 20 \text{ nm}$, wird erwartet dass Quanteneffekte eine eher untergeordnete Rolle bei der Lösung des Transportproblems spielen werden. Da sich Orts- und Impulserwartungswert eines kohärent ausgeleiteten Zustandes wie die Trajektorie des klassischen Teilchens verhalten, erscheint es zunächst sinnvoll, diese mit vergleichsweise geringen numerischen Aufwand klassisch zu berechnen und die Transportspannungen auf einen energieneutralen Transport hin zu optimieren, um das Resultat als Ausgangspunkt zur Bestimmung auftretender Quanteneffekte und gegebenenfalls zur weiteren quantenmechanischen Optimierung zu verwenden. Im diesem Kapitel wird daher eine Methode zur klassischen Propagation vorgestellt und deren Implementierung getestet. Zur Optimierung des Transportproblems wird ein numerisches Verfahren verwendet, was ebenso für den quantenmechanischen Fall angewandt werden kann. Durch die experimentelle Limitierung der Segmentspannungen ist eine minimale Transportzeit definiert, deren Skalierungsverhalten sich analytisch erklären lässt. Dazu wird eine Methode zur geometrischen Optimierung vorgestellt, deren Anwendung auch das Verhalten der Spannungen nahe der minimalen Transportzeit erklärt. Durch dieses Verfahren wird ebenso eine Untergrenze für einen Transport ohne auftretende Quanteneffekte berechnet.

2.1. Zur Lösung der Bewegungsgleichung

Bei der klassischen Bewegungsgleichung $\ddot{x}(t) = F(t, x(t), \dot{x}(t))/m$ handelt es sich um eine eindimensionale Differentialgleichung zweiter Ordnung. Um sie auf ein System erster Ordnung zu reduzieren, wird die Identität $\dot{x} = v$ ausgenutzt, sodass gilt:

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ \dot{v}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v(t) \\ F(t, x(t), v(t))/m \end{pmatrix} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)). \quad (2.1)$$

Der intuitivste Ansatz, eine Differentialgleichung dieser Art numerisch zu lösen, ist das Euler-Verfahren. Zur Lösung wird die Definition der Ableitung ausgenutzt:

$$\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = \dot{\mathbf{y}}(t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathbf{y}(t+h) - \mathbf{y}(t)}{h} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad (2.2)$$

sodass unter Vernachlässigung des Limes die Propagationsvorschrift folgt

$$\mathbf{y}(t+h) = \mathbf{y}(t) + h \dot{\mathbf{y}}(t). \quad (2.3)$$

Hierbei beginnt man mit der Propagation natürlich am gegebenen Anfangswertproblem der Differentialgleichung. Zwar liefert das Verfahren für hinreichend kleine Werte von h im Verhältnis zur Gesamtpropagationszeit brauchbare Ergebnisse, jedoch ist es nicht numerisch stabil. Es existieren wesentlich genauere Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen erster Ordnung, deren numerischer Mehraufwand sich in ihrer erhöhten Präzision und Stabilität rechtfertigt [SPM⁺10]. Eine mögliche Wahl, stellt der *Runge-Kutta* Algorithmus dar. Im Unterschied zur Propagationsvorschrift des Euler-Verfahrens in Gleichung 2.3, wird anstelle von $\dot{\mathbf{y}}(t)$ eine gemittelte Steigung zur Berechnung des Funktionswertes $\mathbf{y}(t+h)$ verwendet:

$$\mathbf{y}(t+h) = \mathbf{y}(t) + h \sum_{j=1}^s b_j \mathbf{k}_j. \quad (2.4)$$

Die Summanden \mathbf{k}_j sind dabei nichts anderes, als durch die Differentialgleichung gegebenen Steigungen der Funktion $\mathbf{y}(t)$, ausgewertet an verschiedenen Hilfsstellen zwischen t und $t+h$:

$$\mathbf{k}_j = \mathbf{f} \left(t_n + hc_j, \mathbf{y}_n + h \sum_{l=1}^s a_{jl} \mathbf{k}_l \right). \quad (2.5)$$

Im Fall $a_{jl} = 0$ für $l \geq j$, heißt das Verfahren explizit. Die Implementation ist dann vergleichsweise leicht, da die \mathbf{k}_j direkt nacheinander berechnet werden können.

Zur klassischen Propagation wurde ein expliziter *Dormand-Prince* Runge-Kutta Algorithmus der Ordnung $s = 5$ in Fortran programmiert. Die Koeffizienten a_{jl} , b_j und c_j lassen sich in *Butcher-Tableaux* nachlesen [SPM⁺10]. Der Vorteil des verwendeten Verfahrens ist, dass sich aufgrund identischer Koeffizienten problemlos die vierte Ordnung mitberechnen lässt. Aus der Differenz der Propagationen in vierter und fünfter Ordnung kann schließlich eine Abschätzung des Propagationsfehlers je Zeitschritt erfolgen.

2.2. Test des klassischen Propagators

Um die richtige Implementierung des verwendeten Runge-Kutta Verfahrens zu überprüfen, wurde die Genauigkeit des Propagators überprüft. Hierbei ist es von großem Vorteil, wenn die Differentialgleichung eine bekannte, analytische Lösung besitzt, mit der das numerische Resultat verglichen werden kann. Es wurde daher zum Testen des Propagators das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (2.6)$$

verwendet, sodass die Lösung der Bewegungsgleichung als einfache harmonische Schwingung gegeben ist:

$$x(t) = x(0) \cos(\omega t) + \frac{v(0)}{\omega} \sin(\omega t), \quad (2.7)$$

$$v(t) = v(0) \cos(\omega t) - x(0)\omega \sin(\omega t), \quad (2.8)$$

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2x(0)^2 + \frac{1}{2}mv(0)^2. \quad (2.9)$$

Die für das Transportproblem relevanten Größenordnungen sind durch die mittlere Geschwindigkeit $\bar{v} \approx d/T$ und die mittlere Beschleunigung $\bar{a} \approx \Delta x/T^2$ gegeben. Um ähnliche Bedingungen für das harmonische Modell zu erhalten, wurde $v(0) = 0$ gesetzt, sodass für die dort auftretende Maximalgeschwindigkeit v_{\max} und Maximalbeschleuni-

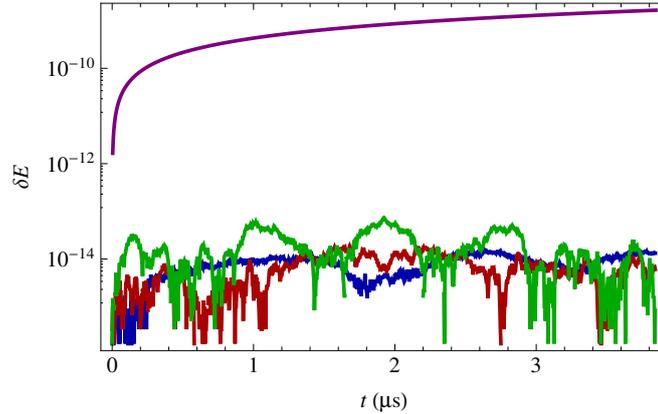


Abbildung 2.1.: Relative Energie-Abweichung von numerischer Propagation zum analytischen Ergebnis aus Gleichung 2.9 für 10^3 (violett), 10^4 (blau), 10^5 (rot) und 10^6 (grün) Zeitschritte.

gung a_{\max} nach Gleichung 2.8

$$v_{\max} = \omega x(0) = \frac{2\pi}{T_{\text{per}}} x(0), \quad (2.10)$$

$$a_{\max} = \omega^2 x(0) = \left(\frac{2\pi}{T_{\text{per}}} \right)^2 x(0) \quad (2.11)$$

gilt. Da insbesondere kurze Transportzeiten im Bereich $T \approx T_{\text{per}}/2$ angestrebt werden, wurde $x(0) \approx d/\pi$ gewählt, um ähnliche Geschwindigkeiten in Modell und Transportproblem zu erreichen. Die dann im Modell auftretende Beschleunigung ist um den Faktor π höher, als \bar{a} . Mit $d = 280 \mu\text{m}$ erhält man als Startbedingung $x(0) = 90 \mu\text{m}$ und $v(0) = 0$. Die Propagation wurde mit diesen Parametern für verschiedene Zeit-Diskretisierungen von $n_t = 10^3$ bis 10^6 Zeitschritten und einer Propagationszeit von vier Schwingungsperioden mit $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ durchgeführt. Die relativen Abweichungen von Energie, Ort und Geschwindigkeit des propagierten Teilchens zum theoretischen Verlauf aus den Gleichungen 2.7-2.9 wurden gemäß

$$\delta E = \frac{|E_{\text{prop}}(t) - E|}{E}, \quad \delta x = \frac{|x_{\text{prop}}(t) - x(t)|}{x(0)}, \quad \delta v = \frac{|v_{\text{prop}}(t) - v(t)|}{\omega x(0)}, \quad (2.12)$$

bestimmt und miteinander verglichen. Die Resultate sind in Abbildung 2.1-2.2 dargestellt. Für $n_t = 10^3$ (violett) ist der relative Fehler der Energie noch zunehmend, liegt aber im betrachteten Bereich bereits unter 10^{-9} . Für $n_t = 10^4$ (blau) liegt δE bereits im Bereich von 10^{-14} . Weiteres Erhöhen der Zeitschritte auf $n_t = 10^5$ (rot) und $n_t = 10^6$

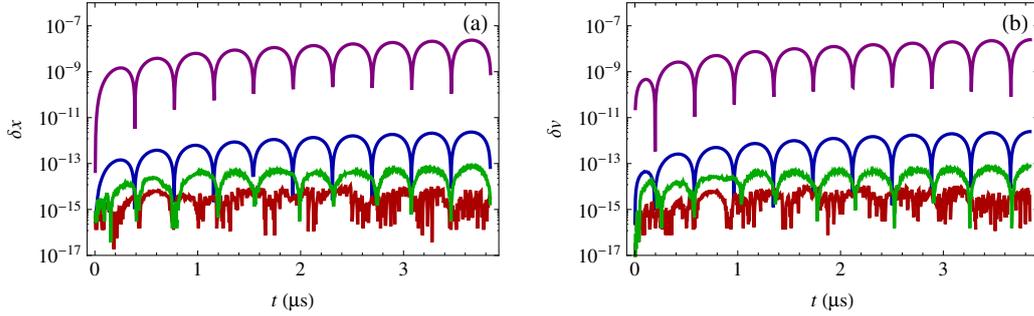


Abbildung 2.2.: Relative Orts- (a) und Geschwindigkeits-Abweichung (b) von numerischer Propagation zum analytischen Ergebnis aus Gleichung 2.7 bzw. 2.8 für 10^3 (violett), 10^4 (blau), 10^5 (rot) und 10^6 (grün) Zeitschritte.

(grün) liefert hier keine Steigerung der Genauigkeit. Ein ähnliches Verhalten zeigt sich im Verhalten von relativem Orts- und Geschwindigkeitsfehler (siehe Abbildung 2.2). Während sich für $n_t = 10^3$ (violett) der Fehler im Bereich 10^{-9} befindet, liegt er für $n_t = 10^4$ (blau) bereits um 10^{-12} . Für höhere Zeitdiskretisierungen ist deutlich die numerische Limitierung in Größenordnung der Maschinengenauigkeit (10^{-15}) zu erkennen. Damit ist die korrekte Implementierung des Propagators gezeigt. Für die betrachteten Parameter wird eine Zeitdiskretisierung von $n_t = 10^4$ bis 10^5 als ausreichend genau angesehen.

2.3. Geometrische Kontrolltheorie

In aller Regel existiert für die vorliegenden Potentiale keine analytische Lösung der Bewegungsgleichung, sodass man zur Optimierung des Transportproblems auf den vorgestellten Propagator angewiesen ist. Als eine erste Abschätzung können die Potentiale jedoch mit einem einfachen harmonischen Modell beschrieben werden. Die potentielle Energie einer solchen Modellfalle mit zwei Segmenten ist durch

$$V(x, t) = -u_1(t) \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x - x_1)^2 - u_2(t) \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x - x_2)^2, \quad (2.13)$$

gegeben. Die dimensionslosen Kontrollparameter $u_i(t)$ übernehmen hier die Rolle der Spannungen, sodass sich die Fallenfrequenz durch $\omega^2(t) = -\omega_0^2(u_1(t) + u_2(t))$ angeben lässt. In diesem Fall lässt sich das klassische Kontrollproblem durch die Anwendung von Pontryagins Maximum Prinzip [P⁺62, CTS⁺11] analytisch lösen. Im Gegensatz

2. Klassische Lösungen des Transportproblems

zu numerischen Optimierungsverfahren garantiert Pontryagins Prinzip, dass sich das Resultat immer um ein globales Minimum handelt.

Allgemein wird dazu das Funktional

$$J[\mathbf{u}] = \int_0^T g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) dt, \quad (2.14)$$

unter der Nebenbedingung, dass die Bewegungsgleichung $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ erfüllt ist, minimiert. Dabei beschreibt der Term $g(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ intermediär auftretende Kosten. In Fall des betrachteten Transportproblems ist $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ und $\mathbf{y} = (x, v)$. Das Optimierungsproblem ist damit formal äquivalent zum Hamiltonschen Prinzip der klassischen Mechanik, bei der das Wirkungsfunktional minimiert wird. Die zur ‘Lagrangefunktion’ $g(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ gehörige Hamiltonfunktion ist dann gegeben durch

$$H_c(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = p_0 g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) + \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{y}} \quad (2.15)$$

mit der zu \mathbf{y} kanonisch konjugierten Variable \mathbf{p}

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{y}}, \quad (2.16)$$

und der dimensionsabsorbierenden Konstante $p_0 < 0$. Pontryagins Prinzip sagt aus, dass H_c für die optimale Wahl von $\mathbf{u}(t)$ maximal wird.

Ziel ist es möglichst schnelle, d. h. kurze Transporte zu erzeugen, also die Transportzeit zu minimieren. Es wird daher

$$J[\mathbf{u}] = \int_0^{T_{\min}} dt = T_{\min}, \quad (2.17)$$

gesetzt, was lediglich von der Transportzeit T_{\min} selbst abhängig ist. Es ist also $g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = 1$. Mit der klassischen Bewegungsgleichung $\dot{\mathbf{y}} = (v, -\partial_x V)$, lässt sich die Hamiltonfunktion schreiben als

$$H_c(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = p_0 + p_1 v + p_2 (u_1 \cdot (x - x_1) + u_2 \cdot (x - x_2)) \omega_0^2. \quad (2.18)$$

Eine Beschränkung der Kontrollparameter $|u_i(t)| < u_{\max}$ entspricht dem experimentellen Fall beschränkter Segmentspannungen. Aufgrund der Linearität von H_c in u_i und

$x_1 \leq x \leq x_2$ wird H_c maximal durch die Wahl

$$u_1(t) = -u_2(t) = \text{sign}(p_2)u_{\max}. \quad (2.19)$$

Aus Gleichung 2.16 folgt dann

$$\dot{p}_1 = p_2\omega_0^2(u_1 + u_2) = 0 \quad (2.20)$$

$$\dot{p}_2 = -p_1. \quad (2.21)$$

Die einzig sinnvolle Wahl ist $p_2(0) > 0$ da sonst nach Gleichung 2.19 zum Zeitpunkt $t = 0$ an der zweiten Elektrode eine positive Spannung anliegt, was zu einem repulsiven Potential führt. Die Bewegungsgleichung für den konjugierten Zustand lautet also

$$\dot{p}_1 = 0 \Rightarrow p_1(t) = c_1 \quad (2.22)$$

$$\dot{p}_2 = -p_1 \Rightarrow p_2(t) = p_2(0) - c_1 t. \quad (2.23)$$

Wird die auftretende Konstante c_1 negativ gewählt, so wechselt p_2 sein Vorzeichen nicht, was bedeutet, dass das Ion kontinuierlich beschleunigt und nicht bei x_2 zur Ruhe kommt. Für $c_1 > 0$ existiert hingegen ein festgelegter Zeitpunkt, an dem p_2 sein Vorzeichen wechselt und es zu einem Umschalten der Spannungen bei $t_{\text{sw}} = p_2(0)/c_1$ kommt. Die optimale Lösung beinhaltet also einen einzigen intermediären Schaltprozess. Sie wird in Kapitel 2.5 analysiert und mit der klassischen Optimierung verglichen.

2.4. Numerische Optimierung mittels des Krotov-Verfahrens

Eine mögliche Variante zur numerischen Optimierung des Transports ist das *Krotov-Verfahren* [KK99]. Aufgrund der weitestgehend analogen Vorgehensweise bei einer quantenmechanischen (qm.) Behandlung, wird diese ebenfalls in diesem Kapitel miteinbezogen und an relevanten Stellen die Unterschiede zur klassischen (kl.) Betrachtung aufgezeigt. Die Herleitung orientiert sich dabei an [KPKMS04].

Ziel der Transportoptimierung ist es, einen möglichst kurzen, zustandserhaltenden Transport zu gewährleisten. Theoretisch erlaubt das vorgestellte Verfahren jedoch auch, dass sich Anfangs- und Endzustand nicht entsprechen, was beispielsweise gezielte Anregungen ermöglicht. Zudem beschränkt sich das vorgestellte Verfahren nicht auf Transporte,

sondern generell auf physikalische Prozesse, bei denen die Bewegungsgleichungen linear in den Kontrollparametern sind.

Zur Herleitung wird zunächst eine Funktion $\phi(t)$ definiert, die die Bahn des Ions vollständig beschreibt. Im klassischen Fall ist das die Trajektorie $\phi(t) = (x(t), v(t))$, also eine zweidimensionale, reelwertige Funktion. Im quantenmechanischen Fall ist $\phi(t) = |\psi(t)\rangle$ die komplexwertige Wellenfunktion des Teilchens, deren Dimension zunächst als unendlich angenommen wird¹. Weiter benötigt man die zu $\phi(t)$ gehörende Bewegungsgleichung, die noch von den Kontrollparametern $\{u_i(t)\}$ (entsprechend den Elektrodenspannungen $U_i(t)$, im Folgenden im Vektor $\epsilon(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots)$ zusammengefasst) und t selbst abhängen kann. Diese sind gegeben durch

$$\dot{\phi}(t) = f(t, \phi(t), \epsilon(t)) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ \dot{v}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v(t) \\ F(t, x(t), v(t), \epsilon(t))/m \end{pmatrix} & \text{kl.} \\ \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t, \epsilon(t)) |\psi(t)\rangle & \text{qm.} \end{cases} \quad (2.24)$$

d. h. der Newtonschen- beziehungsweise der Schrödingergleichung. Man definiert sich nun ein Funktional J , dessen Minimierung die Lösung des Optimierungsproblems ist:

$$J[t, \phi(t), \epsilon(t)] = J_1 + J_2, \quad (2.25)$$

wobei J_1 den propagierten Zustand $\phi(T)$ mit dem gewünschten Ziel-Zustand ϕ_T vergleicht². Falls diese sich entsprechen, wird J_1 minimal und die Lösung der Bewegungsgleichung mit $\epsilon(t)$ liefert den gewünschten Zielzustand. Für die beiden betrachteten Fälle bietet sich die Wahl

$$J_1 = \begin{cases} (E(T) - E_T)^2 & \text{kl.} \\ 1 - |\langle \psi_T | \psi(T) \rangle|^2 & \text{qm.} \end{cases} \quad (2.26)$$

an. Klassisch wird also die Energie des Propagierten Zustandes mit der gewünschten Zielenergie E_T verglichen. Quantenmechanisch verwendet man den Überlapp von gewünschtem Ziel-Zustand $|\psi_T\rangle$ mit dem vorwärts propagiertem Zustand $|\psi(T)\rangle$. Ist dieser maximal, wird J_1 folglich minimal. Das zweite Funktional J_2 dient dazu, laufende

¹ Bei der numerischen Implementierung wird die Wellenfunktion auf endlich vielen Orts-Gitterpunkte (r_1, \dots, r_n) repräsentiert, man kann sich $|\psi(t)\rangle$ an dieser Stelle also auch als n-dimensionale, komplexwertige Funktion vorstellen.

² Der Index T steht hier und im Folgenden für ‘Target’ und ist nicht mit dem Zielzeitpunkt T zu verwechseln.

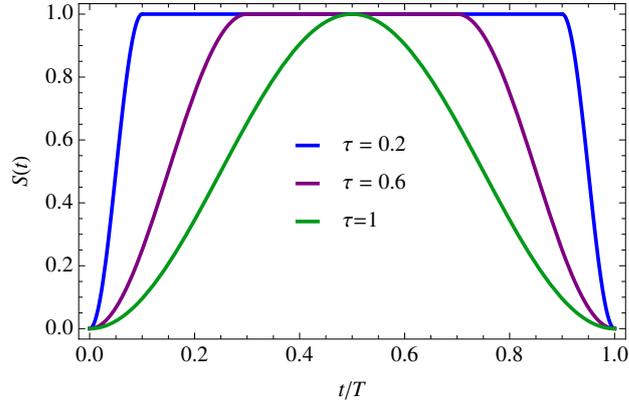


Abbildung 2.3.: Modellierungsfunktion $S(t)$ aus Gleichung 2.28 für unterschiedlich steile Flanken charakterisiert durch τ .

Kosten zum Funktional hinzuzufügen. Typischerweise ist

$$J_2 = \int_0^T \frac{\lambda_a}{S(t)} |\epsilon(t) - \epsilon^0(t)|^2 dt = \int_0^T g_a(t) dt. \quad (2.27)$$

Dabei ist λ_a ein positiver Gewichtungsfaktor und $S(t) \geq 0$ eine Funktion mit $S(0) = S(T) = 0$, um eine Abweichung von $\epsilon(t)$ zu Referenzparametern $\epsilon^0(t)$ zu unterdrücken, da sonst das Integral divergiert. Eine mögliche, hier verwendete Wahl ist in Abbildung 2.3 dargestellt und durch

$$S(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau T}\right) & 0 < t \leq \frac{\tau T}{2} \\ 1 & \frac{\tau T}{2} < t \leq T - \frac{\tau T}{2} \\ \sin^2\left(\frac{\pi(t-T)}{2\tau T}\right) & T - \frac{\tau T}{2} < t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases}, \quad 0 < \tau \leq 1 \quad (2.28)$$

gegeben. Der Parameter τ beschreibt dabei den Prozentsatz der Gesamtzeit T , in der die Funktion $S(t)$ ansteigt und abfällt. Weiter bestraft das Funktional J_2 Kontrollparameter $\epsilon(t)$, die stark von $\epsilon^0(t)$ abweichen und unterdrückt damit große Optimierungsschritte. Da $\phi(t)$ über die Bewegungsgleichung implizit von $\epsilon(t)$ abhängt, ist es streng genommen nicht legitim diese als voneinander unabhängige Argumente von J zu betrachten. Um dies zu umgehen, werden die folgenden Hilfs-Funktionale definiert, in denen $\phi(t)$ und

2. Klassische Lösungen des Transportproblems

$\epsilon(t)$ nicht über die Bewegungsgleichung aneinander gekoppelt sind:

$$L = G(\phi(T)) - \Phi(0, \phi(0)) - \int_0^T R(t, \phi(t), \epsilon(t)) dt \quad (2.29)$$

$$G = J_1(\phi(T)) + \Phi(T, \phi(T)) \quad (2.30)$$

$$R = -g_a(t) + \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} f + f^\dagger \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger}. \quad (2.31)$$

Dabei ist $\Phi(t, \phi(t))$ eine bisher beliebige, skalare Funktion. Die Funktionen $\phi(t)$ und $\phi(t)^\dagger = (\phi(t)^*)^T$ werden als voneinander unabhängig angesehen. Offenbar gilt für ein *physikalisches*, d. h. die Bewegungsgleichung erfüllendes Paar $(\phi(t), \epsilon(t))$:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^*} \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \quad (2.32)$$

$$= \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi^\dagger}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} \quad (2.33)$$

$$= \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} f + f^\dagger \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger}. \quad (2.34)$$

Setzt man dieses Resultat in die obigen Gleichungen 2.29-2.31 ein, folgt mit dem Hauptsatz der Integralrechnung $L = J$. Die Minimierung von L ist also für physikalische Paare $(\phi(t), \epsilon(t))$ äquivalent zur Minimierung von J . Die Idee ist nun, eine Funktion $\Phi(t, \phi(t))$ so zu wählen, dass L für ein bestimmtes Paar $(\phi^n(t), \epsilon^n(t))$ zunächst maximal ist³. Dies ist sofort erfüllt, wenn sowohl G , als auch $(-R)$ unter dieser Wahl maximal sind. Eine notwendige Bedingung hierfür ist zunächst das Verschwinden der ersten Ableitungen:

$$\left. \frac{\partial G}{\partial \phi(T)} \right|_n = 0, \quad \left. \frac{\partial G}{\partial \phi(T)^\dagger} \right|_n = 0, \quad (2.35)$$

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \phi} \right|_n = 0, \quad \left. \frac{\partial R}{\partial \phi^\dagger} \right|_n = 0. \quad (2.36)$$

Die Ableitungen sind jeweils auszuwerten für $(\phi^n(t), \epsilon^n(t))$, was mit der Notation $|_n$ abgekürzt wird. Aus der zweiten Bedingung für R folgt durch explizites Ableiten:

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial \phi^\dagger} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) \Big|_n + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \phi^\dagger} \right) \Big|_n + \left(\frac{\partial f^\dagger}{\partial \phi^\dagger} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} \right) \Big|_n + \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi \partial \phi^\dagger} f \right) \Big|_n + \left(f^\dagger \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^{\dagger 2}} \right) \Big|_n. \quad (2.37)$$

³ Die hier und im Folgenden auftauchenden hochgestellten Indizes (0, n , $n+1$, $n-1$, usw.) nummerieren den Iterationsschritt und sind nicht mit Exponenten oder Ableitungen zu verwechseln.

Durch Benutzen der Identität für physikalische Paare

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^\dagger \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi^\dagger}{\partial t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^{\dagger 2}} \quad (2.38)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^\dagger \phi} f + f^\dagger \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^{\dagger 2}}, \quad (2.39)$$

folgt durch Einsetzen in Gleichung 2.37

$$0 = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \phi^\dagger} \right) \Big|_n + \left(\frac{\partial f^\dagger}{\partial \phi^\dagger} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} \right) \Big|_n + \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} \right) \Big|_n. \quad (2.40)$$

Da f nicht explizit von ϕ^\dagger abhängt, verschwindet der erste Term. Mit der Definition

$$\chi(t) := \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^\dagger} \Big|_n, \quad \chi(t)^\dagger := \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \Big|_n, \quad (2.41)$$

lässt sich Gleichung 2.40 auch wie folgt schreiben:

$$\dot{\chi}(t) = - \frac{\partial f^\dagger}{\partial \phi^\dagger} \Big|_n \chi(t) = \begin{cases} - \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_n \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \chi(t) & \text{kl.} \\ - \frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger \Big|_n \chi(t) & \text{qm.} \end{cases} \quad (2.42)$$

Man erhält also eine Bewegungsgleichung für die Funktion $\chi(t)$. Um diese zu lösen, benötigt man auch hier Anfangsbedingungen, die sich aus den Extremalbedingungen von G (Gleichung 2.35) herleiten lassen:

$$0 = \frac{\partial G}{\partial \phi(T)^\dagger} \Big|_n = \frac{\partial J_1}{\partial \phi(T)^\dagger} \Big|_n + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi(T)^\dagger} \Big|_n \quad (2.43)$$

$$= \frac{\partial J_1}{\partial \phi(T)^\dagger} \Big|_n + \chi(T). \quad (2.44)$$

Es folgt als Anfangsbedingung für $\chi(T)$:

$$\chi(T) = - \frac{\partial J_1}{\partial \phi(T)^\dagger} \Big|_n = \begin{cases} -2(E^n(T) - E_T) \begin{pmatrix} m\omega^2(x^n(T) - x_T) \\ mv^n(T) \end{pmatrix} & \text{kl.} \\ |\psi_T\rangle \langle \psi_T | \psi^n(T) \rangle & \text{qm.} \end{cases} \quad (2.45)$$

Dabei wurde als klassische Energie die spezielle Wahl $E(T) = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} m\omega^2(x - x_T)^2$ getroffen, was voraussetzt, dass das Potential zum Zeitpunkt T hinreichend harmonisch ist und sich sein Minimum am Punkt x_T befindet. Mit dem so bestimmten $\chi(t)$ lässt

2. Klassische Lösungen des Transportproblems

sich schließlich das Funktional $\Phi(t, \phi(t))$ in erster Ordnung in $\phi(t)$ konstruieren:

$$\Phi(t, \phi(t)) = \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \phi(t) + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi^*} \phi(t)^* + \mathcal{O}(2) \quad (2.46)$$

$$= \chi(t)^\dagger \phi(t) + \phi(t)^\dagger \chi(t) + \mathcal{O}(2) \quad (2.47)$$

$$= \Phi^{(1)}(t, \phi(t)) + \mathcal{O}(2). \quad (2.48)$$

Es ist damit sichergestellt, dass L unter dem physikalischen Paar $(\phi^n(t), \epsilon^n(t))$ nach Konstruktion eines geeigneten $\Phi(t, \phi(t))$ extremal ist. Genau genommen müssen noch die zweiten Ableitungen von L betrachtet werden, um zu zeigen, dass es sich bei der Extremstelle auch tatsächlich um ein Maximum handelt und L durch jegliche Änderungen von $\phi(t)$ verringert wird. Der Beweis für den quantenmechanischen Fall ist im Anhang A.1 skizziert. Um monotone Konvergenz im klassischen Fall zu zeigen, ist eine Entwicklung von $\Phi(t, \phi)$ in zweiter Ordnung von ϕ notwendig, was ausführlich in [RNK12] dargestellt wird. Um von dem jetzigen Punkt aus ein optimales Paar $(\phi^{n+1}(t), \epsilon^{n+1}(t))$ zu erhalten, wird verlangt, dass R unter der Wahl des neuen ϵ^{n+1} maximal wird und damit zur Verringerung von L führt. Dazu wird die folgende Extremalbedingung betrachtet:

$$\left. \frac{\partial R}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} = 0. \quad (2.49)$$

In erster Ordnung erhält man:

$$0 = - \left. \frac{\partial g_a}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} + \left. \left(\frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial t} \right) \right|_{n+1} + \left. \left(\frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \right|_{n+1} + \left. \left(\frac{\partial f^\dagger}{\partial \epsilon} \frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial \phi^\dagger} \right) \right|_{n+1} \quad (2.50)$$

$$= - \left. \frac{\partial g_a}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} + \left. \left(\frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial t} \right) \right|_{n+1} + \left. \left(\chi(t)^\dagger \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \right|_{n+1} + \left. \left(\frac{\partial f^\dagger}{\partial \epsilon} \chi(t) \right) \right|_{n+1}. \quad (2.51)$$

Da $\Phi^{(1)}(t, \phi(t))$ nicht explizit von $\epsilon(t)$ abhängt, verschwindet der zweite Term. Die Ableitungen von f und g_a nach den Kontroll-Spannungen lassen sich explizit bestimmen:

$$0 = - \left. \frac{\partial g_a}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} + \chi(t)^\dagger \left. \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} + \left. \frac{\partial f^\dagger}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} \chi(t) \quad (2.52)$$

$$= - \left. \frac{\partial g_a}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} + 2 \operatorname{Re} \left(\chi(t) \left. \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} \right) \quad (2.53)$$

$$= -2 \frac{\lambda_a}{S(t)} (\epsilon^{n+1}(t) - \epsilon^0(t)) + 2 \operatorname{Re} \left(\chi(t) \left. \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right|_{n+1} \right). \quad (2.54)$$

Aufgelöst nach $\epsilon^{n+1}(t)$ folgt die Update-Gleichung:

$$\epsilon^{n+1}(t) = \epsilon^0(t) + \frac{S(t)}{\lambda_a} \begin{cases} \chi_2(t) \frac{\partial F}{\partial \epsilon} \Big|_{n+1} & \text{kl.} \\ \text{Im} \left(\chi(t)^\dagger \frac{\partial H}{\partial \epsilon} \Big|_{n+1} \phi^{n+1}(t) \right) & \text{qm. .} \end{cases} \quad (2.55)$$

Üblicherweise wird als Referenzparameter $\epsilon^0(t)$ stets der der vorherigen Iteration $\epsilon^n(t)$ verwendet. Im Fall, dass \hat{H} beziehungsweise F nichtlinear vom Kontrollparameter $\epsilon^{n+1}(t)$ abhängt, ist eine Lösung von Gleichung 2.55 nicht ohne Weiteres möglich. Für den vorliegenden Fall des Transportproblems ist dies jedoch nicht der Fall. Die rechte Seite von Gleichung 2.55 hängt dennoch implizit vom Kontrollparameter $\epsilon^{n+1}(t)$ ab, da dort die mit dieser Kontrolle propagierten Zustände auftauchen. An dieser Stelle wird die zur numerischen Lösung notwendige Zeitdiskretisierung ausgenutzt. Zum Zeitpunkt $t = 0$ soll der aktualisierte Kontrollparameter mit dem alten übereinstimmen, es gilt somit

$$\epsilon^{n+1}(0) = \epsilon^n(0). \quad (2.56)$$

Nun wird das Teilchen mittels dieser Spannungen einen kleinen Zeitschritt dt vorwärts propagiert, sodass man $x^{n+1}(dt)$ erhält und damit $\epsilon^{n+1}(dt)$ bestimmen kann. Diese Prozedur führt man fort, bis $\epsilon^{n+1}(t)$ für alle Zeitschritte bekannt ist. Für ein hinreichend kleines dt liefert dieser Trick in der Regel gute Ergebnisse, eine monotone Konvergenz des Verfahrens ist jedoch nur für kontinuierliche Zeiten garantiert.

Das Grundlegende, mathematische Konzept des Verfahrens lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Starte mit einem Paar $(\phi^n(t), \epsilon^n(t))$, was die Bewegungsgleichungen erfüllt.
- Konstruiere den Hilfszustand $\chi(t)$, sodass ein Maximum von L unter der Wahl von $\phi^n(t)$ garantiert ist.
- Maximiere R mittels einem neuen $\epsilon^{n+1}(t)$. Das daraus resultierende $\phi^{n+1}(t)$ liefert dann garantiert ein verringertes L und damit ein verringertes J .
- Wiederhole die vorhergehenden Schritte bis zum gewünschten Wert von J_1 .

Die numerische Implementierung ist dann klar vorgegeben und lässt sich ebenfalls in vier Schritte fassen

- Erzeuge einen initialen Kontrollparameter $\epsilon^0(t)$ und propagiere $\phi(0)$ mit diesem gemäß Gleichung 2.24 vorwärts.

- Bestimme $\chi(T)$ nach Gleichung 2.45 und propagiere es gemäß Gleichung 2.42 rückwärts.
- Erzeuge den optimierten Kontrollparameter $\epsilon^{n+1}(t)$ nach Gleichung 2.55 durch gleichzeitiges Vorwärtspropagieren von $\phi(t)$.
- Bestimme J_1 und wiederhole die letzten beiden Schritte so lange, bis J_1 den gewünschten Wert erreicht hat.

Im weiteren Verlauf von Kapitel 2 wird sich auf die klassische Betrachtung beschränkt. Die Anwendung der quantenmechanischen Optimierung wird in Kapitel 6 diskutiert.

2.5. Anwendung auf das Transportproblem

Das in Abschnitt 2.4 vorgestellte Verfahren wurde zusammen mit dem klassischen Propagator aus Kapitel 2.1 in einem in Fortran geschriebenen Programm implementiert und auf das Transportproblem, was in Kapitel 1.2 dargestellt wurde, angewendet. Dazu wurden die Potentiale der DC-Elektrodenpaare 5 und 6 aus Abbildung 1.1 verwendet. Wie gehabt werden diese aus Konsistenzgründen mit 1 und 2 nummeriert. Die Optimierung startet dann zunächst mit der Berechnung der initialen Transportspannungen $U_i^0(t)$ für die in Gleichung 1.10 definierte Transportfunktion $\alpha(t)$. Als Masse wird die des $^{40}\text{Ca}^+$ -Ions angenommen, da sich dies aufgrund seiner elektronischen Energieniveaus als Kandidat für ein Quantenbit eignet [NRL⁺00] und bereits in der vorgestellten Falle Experimente zu schnellem Ionentransport durchgeführt wurden [WZR⁺12].

Das Ion startet im klassischen Grundzustand mit $E(0) = 0$. Es befindet sich also zu Beginn des Transports ruhend im Minimum x_1 des Potentials $\phi_1(t)$. Im Allgemeinen wird es nach der Propagation mit den $U_i^0(t)$ zum Endzeitpunkt T eine von null verschiedene Energie $E(T)$ aufweisen, sodass eine Optimierung nötig ist.

Die Konvergenz des Algorithmus hängt dann stark von der Wahl des Skalierungsparameters λ_a aus Gleichung 2.55 ab. Für zu große Werte werden die Optimierungsschritte je Iteration möglicherweise kleiner als die Maschinengenauigkeit. Um dies zu vermeiden, kann λ_a in jedem Iterationsschritt um einen Faktor p_{dec} verringert werden. Dies verhindert ebenfalls eine sich kontinuierlich verlangsamende Konvergenz. Für zu kleine Werte von λ_a kann es hingegen zum Konvergenzverlust kommen. Daher wird stets das Ergebnis der vorherigen Propagation gespeichert und der Optimierungsschritt mit einem um

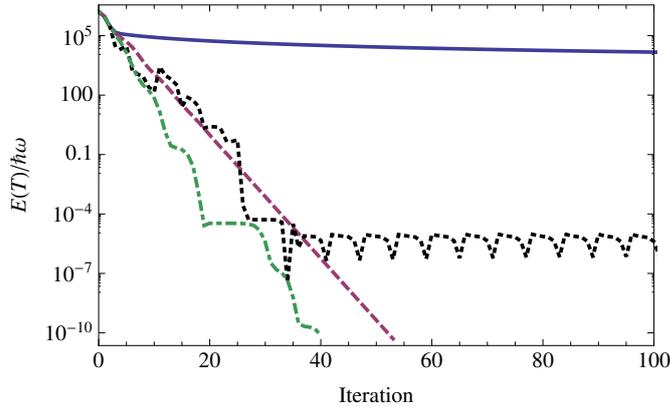


Abbildung 2.4.: Illustration der Konvergenz im Fall der klassischen Optimierung. Aufgetragen ist die zu minimierende Energie $E(T)$ in Abhängigkeit der Zahl der Iterationsschritte für $p_{\text{dec}} = 1$ (blau), 0.49 (violett), 0.33 (grün) und 0.10 (schwarz).

den Faktor p_{inc} erhöhten λ_a erneut durchgeführt bis Konvergenz eintritt. Dabei ist es möglich, dass sich die Lösung in einem lokalen Minimum der Optimierungslandschaft befindet, was durch weiteres verringern der Optimierungsschritte nicht mehr verlassen werden kann. In diesem Fall bricht der Algorithmus bei einem fest eingestellten Wert von λ_a^{max} die Optimierung ab. Die wesentlichen Schritte sind im Folgenden zusammengefasst:

- Optimierte $U_i^{n-1}(t)$ mit λ_a^n und speichere sowohl $U_i^{n-1}(t)$, als auch $U_i^n(t)$.
- Falls $E^n(T) \geq E^{n-1}(T)$ setze $\lambda_a^n = \lambda_a^{n-1} \cdot p_{\text{inc}}$. Falls $\lambda_a^n < \lambda_a^{\text{max}}$ wiederhole die Optimierung, ansonsten brich sie ab.
- Falls $E^n(T) < E^{n-1}(T)$ setze $\lambda_a^{n+1} = \lambda_a^n \cdot p_{\text{dec}}$ und fahre mit dem nächsten Optimierungsschritt fort. Die Spannungen $U_i^{n-1}(t)$ werden nicht mehr benötigt und können überschrieben werden.

Um das Verhalten des beschriebenen Algorithmus zu demonstrieren, wurde das Ion bei einer Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ in $1.0 \mu\text{s}$ in 10^3 Zeitschritten von Segment 1 zu Segment 2 transportiert und als Startwert $\lambda_a = 10^4$ gesetzt. Als Modellierungsfunktion wurde $S(t)$ aus Gleichung 2.28 mit $\tau = 0.2$ verwendet. Die erreichte Zielenergie $E(T)$ in Abhängigkeit der Zahl benötigter Iterationsschritte ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Während für ein konstantes λ_a ein Sinken von $E(T)$ kaum zu beobachten ist (blau), führt ein Faktor $p_{\text{dec}} = 0.49$ zu rapider Konvergenz (violett). Bei weiterem

Verringern von p_{dec} auf 0.33 (grün) lassen sich bereits Instabilitäten der Konvergenz erkennen. Im Fall $p_{\text{dec}} = 0.10$ (schwarz) versucht der Algorithmus einen Konvergenzverlust zu vermeiden. Aufgrund eines zu kleinen Wertes von p_{dec} kommt es allerdings wieder und wieder dazu. In den folgenden klassischen Optimierungen wurde daher stets $p_{\text{dec}} = 0.98$, $p_{\text{inc}} = 100$ und $\lambda_a^{\text{max}} = 10^{10}$ verwendet. Die dadurch gegebenenfalls erhöhte Rechenzeit rechtfertigt sich im stabileren Konvergenzverhalten des Algorithmus, der es dann ermöglicht für beliebig kurze Transportzeiten optimale Transportspannungen zu finden. Experimentell sind die Segmentspannungen $U_i(t)$ in ihrer Amplitude stets durch eine Maximalspannung U_{max} begrenzt, was die minimale Transportzeit T_{min} für einen energieneutralen Transport aufgrund der endlichen Maximalbeschleunigung limitiert. Typischerweise sind stabilisierte Spannungen von ± 10 V möglich, was durch die Entwicklung besserer Netzteile noch zu steigern ist. Für den Fall, dass die optimierten Spannungen $U_i(t)$ das vorgegebene Limit zu einem Zeitpunkt t_{lim} überschreiten sollten, muss ihr Wert an dieser Stelle auf

$$U_i(t_{\text{lim}}) = \text{sign}(U_i(t_{\text{lim}})) \cdot U_{\text{max}} \quad (2.57)$$

gesetzt werden. Um herauszufinden, wie sich die minimale Transportzeit T_{min} in Abhängigkeit von U_{max} verhält, wurde T_{min} als die kürzeste Zeit, bei der die Zielenergie $E(T)$ noch unter $0.01 \hbar\omega$ optimiert werden kann, definiert. Wie auch beim Test des Propagators, wurde die Fallenfrequenz zu $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz gewählt, was einem typischen, experimentellen Wert für das verwendete Fallenmodell entspricht. Die initialen Transportspannungen $U_i(t)$ wurden für ein U_{max} zwischen 10 – 150 V und T zwischen 10 – 300 ns optimiert. Für jeden Transport wurden 10^4 Propagationsschritte verwendet. Die Ergebnisse der Optimierung sind den Abbildungen 2.5-2.6 dargestellt. Abbildung 2.5(a) zeigt die resultierende Energie $E(T)$ durch klassische Propagation von $U_i^0(t)$ (schwarz) und den zu jedem Zeitpunkt optimierten Spannungen $U_i^{\text{opt}}(t)$ (blau) bei $U_{\text{max}} = 10$ V. Die Optimierung wurde bei einer Energie kleiner als $10^{-7} \hbar\omega$ abgebrochen, um unnötigen Rechenaufwand zu vermeiden. Deutlich erkennbar sind scharfe Minima für die Propagation der $U_i^0(t)$ (schwarz). Sie liegen im Abstand einer Fallenperiode $T_{\text{per}} = \frac{2\pi}{\omega} \approx 0.769 \mu\text{s}$ und führen zu einer minimalen Transportzeit von $T_{\text{min}}^0 = 1.391 \mu\text{s}$. Die Propagation der optimierten Spannungen hingegen ergibt $T_{\text{min}}^{\text{opt}}(10 \text{ V}) = 0.284 \mu\text{s}$. Durch Erhöhen von U_{max} kann T_{min} noch gesenkt werden, wie in Abbildung 2.6(b) dargestellt. Die dort auftretenden Spitzen sind dem empfindlichen Konvergenzverhalten im Bereich von T_{min} geschuldet. Prinzipiell lassen sie sich durch weiteres Anpassen der Parameter λ_a , p_{inc} und p_{dec} verringern. Abbildung 2.6(a) zeigt das Verhalten von $T_{\text{min}}^{\text{opt}}$

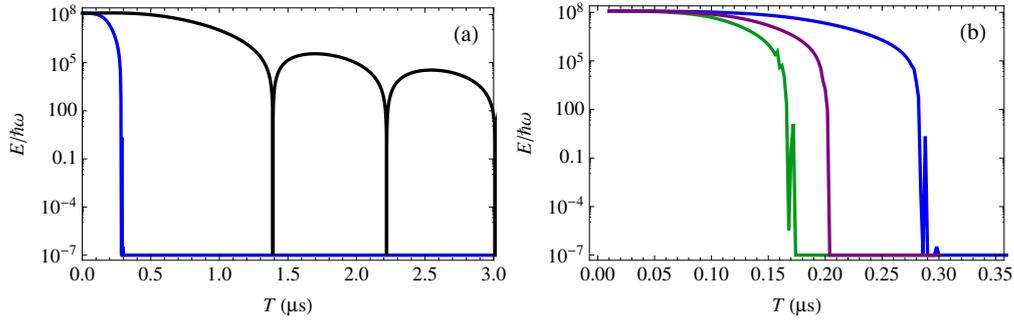


Abbildung 2.5.: Energie $E(T)$ aufgetragen gegen die Transportzeit T für die klassische Propagation verschiedener Spannungsrampen. (a) Verringerung der Energie $E(T)$ durch optimierte Spannungsrampen (blau) mit einer Maximalspannung von $U_{\max} = 10$ V gegenüber den initialen Transportspannungen $U_i^0(t)$ (schwarz). (b) Resultate der Optimierung für Maximalspannungen von $U_{\max} = 10$ V (blau), 20 V (violett) und 30 V (grün).

in Abhängigkeit von U_{\max} . Die Fehler $\Delta T_{\min}^{\text{opt}} = 4$ ns wurden aufgrund des instabilen Konvergenzverhaltens des Algorithmus im Bereich von der minimalen Transportzeit gewählt. Ebenfalls dargestellt ist eine den Werten angepasste Funktion der Form

$$T_{\min}^{\text{opt}}(U_{\max}) = a \left(\frac{U_{\max}}{1\text{V}} \right)^{-b}. \quad (2.58)$$

Die Anpassung der Parameter a und b mittels dem *Mathematica*-Modul *Nonlinear-ModelFit* liefert $a = 0.880(15) \mu\text{s}$ und $b = 0.487(5)$, was den Verlauf der Werte sehr gut wiedergibt. Die optimierten, nach Gleichung 2.57 bei $U_{\max} = 10$ V abgeschnittenen Spannungsrampen für die linke Elektrode sind für verschiedene Transportzeiten in Abbildung 2.6 dargestellt. Für $T = 280$ ns (violett), was leicht unterhalb von $T_{\min}(10\text{V}) = 284$ ns liegt, folgt die Spannung einem *bang-bang*-Verlauf [CTS⁺11]: Sie wird instantan vom initialen Wert bei $t = 0$ auf U_{\max} angehoben um maximale Beschleunigung zu gewährleisten. Nach etwa der Hälfte der Transportzeit wird das Ion dann durch Umschalten auf $-U_{\max}$ so gut wie möglich gebremst. Der entsprechende Verlauf der rechten Elektrode ist dabei zeitlich invertiert um ebenso zunächst maximal beschleunigend und dann abbremsend auf das Ion zu wirken.

Im Folgenden wird gezeigt, dass sich die bang-bang-Gestalt der Spannungen und der auftretende Exponent b analytisch herleiten lässt, wenn man von ideal harmonischen Potentialen ausgeht. Dazu wird Pontryagins Maximumsprinzip verwendet, wie es in Kapitel 2.3 vorgestellt wurde. Mit Hilfe von Gleichung 2.19 und 2.23 erhält man die

2. Klassische Lösungen des Transportproblems

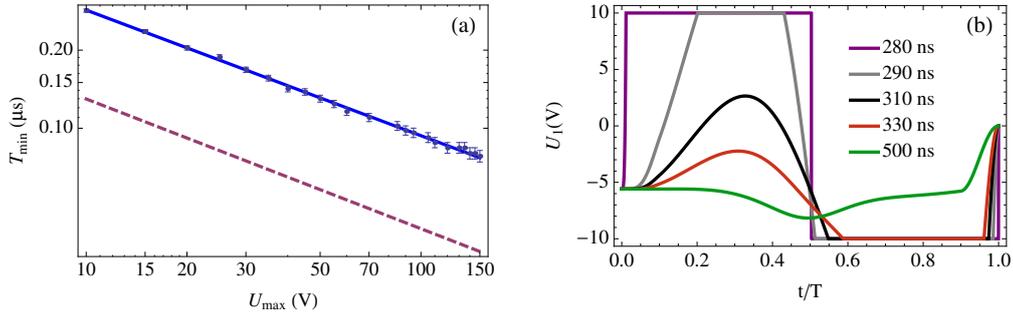


Abbildung 2.6.: (a) Minimale Transportzeit T_{\min}^{opt} aufgetragen gegen die maximal zulässige Elektrodenspannung U_{\max} als Resultat der klassischen Optimierung (blaue Punkte) zusammen mit einer angepassten Kurve nach Gleichung 2.58 (blau). Ebenfalls dargestellt ist das durch geometrische Kontrolltheorie bestimmte Resultat für vollkommen harmonische Potentiale nach Gleichung 2.61 (violett) mit $T_{\min} \propto 1/\sqrt{U_{\max}}$. (b) Optimierte Spannungen $U_1^{\text{opt}}(t)$ der linken Elektrode für $U_{\max} = 10$ V.

Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} = \omega_0^2 u_{\max} \cdot \begin{cases} d, & t < t_{\text{sw}} \\ -d, & t > t_{\text{sw}} \end{cases}, \quad (2.59)$$

mit der Schaltzeit t_{sw} , zu der die Spannungen umgeschaltet werden. Integration unter Beachtung der für den zustandserhaltenden Transport notwendigen Bedingungen $\dot{x}(0) = 0 = \dot{x}(T_{\min})$ und $x(0) = x_1$, $x(T) = x_2$ liefert direkt

$$x(t) = \begin{cases} x_1 + u_{\max} d \omega_0^2 t^2, & 0 \leq t \leq t_{\text{sw}} \\ x_1 + d - u_{\max} d \omega_0^2 (t - T_{\min})^2, & t_{\text{sw}} \leq t \leq T_{\min} \end{cases}. \quad (2.60)$$

Die Lösung und das Verfahren ist in Abbildung 2.7(a) illustriert. Durch Ausnutzen der Stetigkeit in den Punkten $x(t_{\text{sw}})$ und $\dot{x}(t_{\text{sw}})$ lassen sich sowohl die Schaltzeit t_{sw} als auch die minimale Transportzeit T_{\min} bestimmen. Man erhält

$$t_{\text{sw}} = \frac{T_{\min}}{2}, \quad T_{\min} = \frac{\sqrt{2}}{\omega_0} \sqrt{\frac{1}{u_{\max}}}. \quad (2.61)$$

Offenbar skaliert also die minimale Transportzeit mit $u_{\max}^{-1/2}$, was den Verlauf der numerisch erhaltenen Lösungen aus Abbildung 2.6(a) erklärt. Für eine Fallenfrequenz von $\omega_0 = 2\pi \cdot 0.55$ MHz, was einer Spannung von einem Volt im Fall der für die Optimie-

rung verwendeten Fallengeometrie entspricht, erhält man als Vorfaktor $\frac{\sqrt{2}}{\omega_0} = 0.41 \mu\text{s}$, was um mehr als einen Faktor zwei kleiner ist, als das Resultat der numerischen Optimierung $a = 0.880(15) \mu\text{s}$ unter Verwendung realistischer Potentiale. Der Unterschied liegt darin begründet, dass im Falle der theoretischen, harmonischen Potentiale beim Beschleunigungs- und Abbremsvorgang eine räumlich konstante Kraft (d. h. ein lineares Potential, siehe Abb. 2.7(a)) auf das Ion wirkt. Für realistische Potentiale hingegen ist die Kraft, die eine Elektrode auf das Ion ausüben kann durchschnittlich geringer, wenn es sich bei der benachbarten Elektrode befindet. Dies liegt an der Abweichung der Potentiale zu idealen Parabeln und ist auf Abschirmeffekte zurückzuführen.

Für die analytischen Lösungen und die Lösungen durch Optimierung ist insbesondere nicht mehr gewährleistet, dass die Fallenfrequenz während des Transports konstant bleibt, was eine Überprüfung der quantenmechanischen Gültigkeit erfordert und in Kapitel 3.1 erfolgt. Im Fall harmonischer Potentiale wie in Abbildung 2.7(a) illustriert, ist die Fallenfrequenz während des Transports sogar gleich null, sodass sich das quantenmechanische Wellenpaket des Ions während des Transports stark aufweiten wird. Um dies zu verhindern, muss die Fallenfrequenz während des Transports auf ihrem initialen Wert festgehalten werden. Auch dann lässt sich für das harmonische Modell eine analytische Lösung finden. Man verwendet dazu in Pontryagins Prinzip anstelle von Gleichung 2.17 als zu minimierendes Funktional

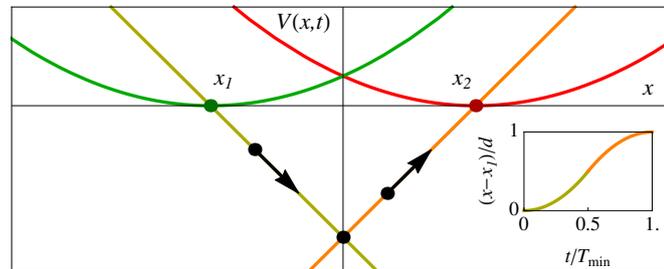
$$J[\mathbf{u}] = \int_0^{T_{\min}^{\text{qm}}} (1 + |u_1 + u_2 + u_{\max}|) dt, \quad (2.62)$$

wobei der erste Teil des Integrals wie gehabt der Minimierung der Transportzeit dient. Der zweite Teil hingegen sorgt nun dafür, dass die resultierende Fallenfrequenz ω gegeben durch $\omega^2 = -(u_1(t) + u_2(t))\omega_0^2$ niemals größer wird als die maximale Fallenfrequenz $\omega_{\max} = \sqrt{u_{\max}}\omega_0$, die ein einzelnes Segment aufbringen kann. Da $u_{\max} > 0$ muss die Summe $u_1 + u_2$ negativ sein um einen Einschluss des Ions zu gewährleisten. Die resultierende Hamiltonfunktion ist dann nach Gleichung 2.15 gegeben durch

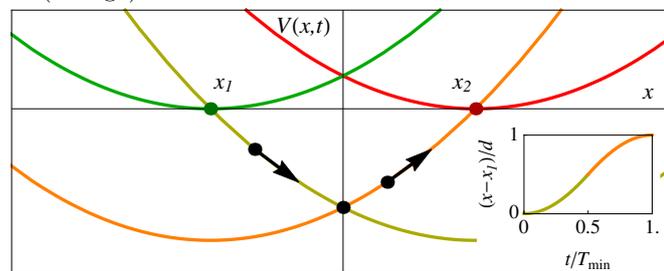
$$H_c(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = p_0 (1 + |u_1 + u_2 + u_{\max}|) + p_1 v \quad (2.63)$$

$$+ p_2 (u_1 \cdot (x - x_1) + u_2 \cdot (x - x_2)) \omega_0^2. \quad (2.64)$$

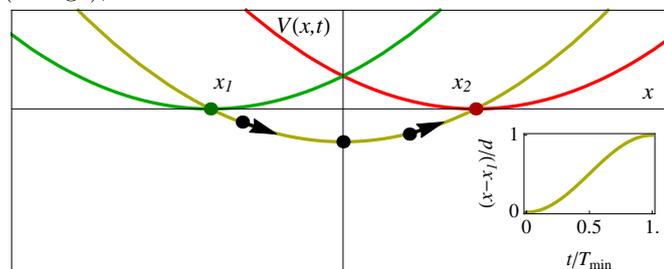
Da p_0 beliebig negativ gewählt werden kann, muss $u_1 = -u_2 - u_{\max}$ erfüllt werden. Die



- (a) Schnellstmöglicher Transport. Für $u_1 = u_{\max} = -u_2$ erhält man ein lineares Potential (gelb), was das Ion beschleunigt und nach halber Strecke durch Umschalten der Spannungen wieder abbremst (orange).



- (b) Schnellstmöglicher Transport bei konstanter Fallenfrequenz. Für $u_1 = 0$ und $u_2 = -u_{\max}$ wird das Ion beschleunigt (gelb). Nach halber Strecke werden auch hier die Spannungen umgeschaltet (orange), um das Ion abzubremsen.



- (c) Transport bei konstanter Fallenfrequenz nach [ALKH13]. Durch Anlegen von $u_1 = u_2 = -u_{\max}$ führt das Ion eine halbe Oszillation aus (gelb) und kommt schließlich am Punkt x_2 wieder zur Ruhe, wo es durch das Finale Potential aufgefangen wird (rot).

Abbildung 2.7.: Illustration verschiedener bang-bang Lösungen des Transportproblems in harmonischen Potentialen von x_1 (grün) nach x_2 (rot) bei begrenzten Spannungen. Jeweils eingefügt ist die zugehörige Trajektorie nach den Gleichungen 2.60(a), 2.68(b) und 2.75(c).

Maximierung der verbleibenden Hamiltonfunktion liefert dann die Vorschrift

$$x_1 \leq x \leq x_1 + \frac{d}{2} : \begin{cases} u_1 = 0 \\ u_2 = -\text{sign}(p_2)u_{\max} \end{cases} \quad (2.65)$$

$$x_1 + \frac{d}{2} < x \leq x_2 : \begin{cases} u_1 = \text{sign}(p_2)u_{\max} \\ u_2 = 0 \end{cases} . \quad (2.66)$$

Eine explizite Berechnung von \mathbf{p} ist hier nicht notwendig. Dadurch dass das Ion in gleicher Weise beschleunigt, wie abgebremst wird, folgen automatisch die Bedingungen $x(t_{\text{sw}}) = x_1 + d/2$ und $t_{\text{sw}} = T_{\min}^{\text{qm}}/2$ an die Schaltzeit. Als Bewegungsgleichung erhält man

$$\ddot{x} = -\omega_0^2 u_{\max} \begin{cases} (x - x_2) & 0 \leq t \leq t_{\text{sw}} , \\ (x - x_1) & t_{\text{sw}} < t \leq T_{\min}^{\text{qm}} , \end{cases} \quad (2.67)$$

deren Lösung mit $x(0) = x_1$, $x(T_{\min}^{\text{qm}}) = x_2$ und $\dot{x}(0) = \dot{x}(T_{\min}^{\text{qm}}) = 0$ durch

$$x(t) = \begin{cases} x_2 - d \cos(\omega_{\max} t) & 0 \leq t \leq t_{\text{sw}} , \\ x_1 + d \cos(\omega_{\max}(t - T_{\min}^{\text{qm}})) & t_{\text{sw}} < t \leq T_{\min}^{\text{qm}} , \end{cases} \quad (2.68)$$

gegeben ist. Aus der Stetigkeit im Punkt $x(t_{\text{sw}})$ und $\dot{x}(t_{\text{sw}})$ folgt als minimale Transportzeit

$$T_{\min}^{\text{qm}} = \frac{2\pi}{3\omega_0} \frac{1}{\sqrt{u_{\max}}} , \quad (2.69)$$

für einen Transport, bei dem die Fallenfrequenz stets konstant auf ω_{\max} gehalten wird. Die Lösung und das Verfahren sind in Abbildung 2.7(b) illustriert. Um ein Quetschen des Zustands im Phasenraum zu vermeiden, muss dieser als Grundzustand zur Frequenz ω_{\max} initialisiert werden. Damit wurde gezeigt, dass ein Transport für harmonische Potentiale unter der Bedingung konstanter Fallenfrequenz mindestens um den Faktor

$$T_{\min}^{\text{qm}}/T_{\min} = \frac{2\pi/3}{\sqrt{2}} \approx 1.48 \quad (2.70)$$

langsamer sein muss als die schnellste klassische Lösung. Die Durchführbarkeit eines solchen bang-bang-Transportes mit realistischen Fallenpotentialen wurde in [ALKH13] diskutiert. Die dort verwendete Spannungssequenz unterscheidet sich jedoch von der schnellstmöglichen Lösung. Dabei wurde die zu schaltende Spannungsdifferenz halbiert

und verhindert, dass während des Transports geschaltet werden muss:

$$u_1(0) = u_2(T) = u_{\max}, \quad (2.71)$$

$$u_1(T) = u_2(0) = 0, \quad (2.72)$$

$$u_i(t) = -\frac{1}{2}u_{\max}, \quad 0 < t < T. \quad (2.73)$$

Das Ion startet also auch hier bereits im Grundzustand maximaler Fallenfrequenz ω_{\max} . Nach Umschalten der Spannungen befindet sich das Potentialminimum genau zwischen x_1 und x_2 , sodass das Ion nach einer halben Fallenperiode am Punkt x_2 zur Ruhe kommt. Die minimale Transportzeit ist also durch

$$T_{\min}^{\text{bb}} = \frac{\pi}{\omega_0} \frac{1}{\sqrt{u_{\max}}} \quad (2.74)$$

gegeben und damit um einen Faktor $T_{\min}^{\text{bb}}/T_{\min} = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \approx 2.22$ langsamer als die rein klassische Lösung. Das Verfahren nach [ALKH13] sowie die resultierende Trajektorie

$$x(t) = x_2 - \frac{d}{2} (1 + \cos(\omega_{\max}t)) \quad (2.75)$$

ist in Abbildung 2.7(c) dargestellt.

Sowohl die Genauigkeit als auch die Konvergenz des klassischen Algorithmus liefert zufriedenstellende Resultate. Es wurden die minimal erreichbaren Transportzeiten T_{\min} bei vorgegebenen Maximalspannungen U_{\max} bestimmt und die Gestalt der erhaltenen Lösungen mit einfachen, analytischen Lösungen verglichen. Es zeigt sich, dass die numerische Optimierung in der Lage ist, die schnellstmöglichen Lösungen für die zugrundeliegende Fallengeometrie zu finden und sich die minimale Transportzeit proportional zu $1/U_{\max}^{1/2}$ verhält. Aus den analytischen Rechnungen für harmonische Modellpotentiale folgt jedoch auch, dass eine Lösung die Quanteneffekte vermeidet, bei vorgegebener Maximalspannung mindestens um einen Faktor $\sqrt{2}\pi/3 \approx 1.48$ langsamer sein muss, als die schnellste, klassisch gültige Lösung. Die Resultate der Optimierung können folglich nicht der schnellstmöglichen, quantenmechanisch gültigen Lösung entsprechen, was im Folgenden Kapitel verifiziert wird.

3

Quantenmechanische Verifikation der klassischen Lösungen

Um die Gültigkeit der klassischen Lösungsansätze zu diskutieren und gegebenenfalls quantenmechanisch gültige Lösungen zu finden, ist es notwendig, das Ion als Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ zu beschreiben. Die Dynamik der Wellenfunktion ist dann gegeben durch die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}(x, t) \Psi(x, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, t) \right) \Psi(x, t), \quad (3.1)$$

deren Lösung verglichen mit der klassischen Propagation einen erheblichen numerischen Mehraufwand erfordert. Im Gegensatz zur Berechnung der klassischen, zweidimensionalen Phasenraumtrajektorie $(x(t), v(t))$, muss die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion $\Psi(x, t)$, repräsentiert durch n_r komplexe, zeitabhängige Amplituden betrachtet werden. Der theoretische Mehraufwand durch Integration von Gleichung 3.1 skaliert also mit mindestens mit der Zahl der Gitterpunkte n_r , die typischerweise in der Größenordnung von 100-1000 liegt. Ebenso erfordert die korrekte Anwendung des Hamiltonoperators je Zeitschritt mindestens zwei Fourier-Transformationen der Wellenfunktion, was den numerischen Aufwand zusätzlich erhöht. Im Hinblick auf eine zusätzliche quantenme-

chanische Optimierung ist ein schneller Propagator daher unbedingt notwendig, um möglichst viele Optimierungsschritte in kurzer Zeit berechnen zu können.

In diesem Kapitel wird daher zunächst eine effiziente Methode zur numerischen Lösung von Gleichung 3.1 vorgestellt und damit die Gültigkeit der klassischen Resultate aus Kapitel 2 überprüft.

3.1. Propagation von Wellenfunktionen

Einer der wesentlichen Bestandteile dieser Arbeit war es, einen bestehenden Propagator zur Lösung von Gleichung 3.1 für das Transportproblem zu optimieren. Typischerweise ist die Transportstrecke d hierbei um einen Faktor 10^4 größer als die Ausdehnung der Grundzustands-Wellenfunktion. Bei einem mittleren Impuls des Ions von $\bar{p} = md/T$ führt dies zu einem Gesamt-Phasenraumvolumen von $d \cdot \bar{p} \approx 10^7 h$. Die üblichen Lösungsverfahren [Kos88, Kos94] stoßen hier an ihre Grenzen, da zu deren Anwendung die Wellenfunktion auf einem feinen, ortsfesten Gitter definiert wird, was die gesamte Transportstrecke abdeckt. Dieses muss fein genug sein, um den Impuls der Wellenfunktion, charakterisiert durch Oszillationen von Real- und Imaginärteil, auflösen zu können. Für realistische Parameter würden sich dann $10^5 - 10^6$ Gitterpunkte ergeben, was enormen numerischen Aufwand zur Propagation zur Folge hätte. Um die Anzahl der notwendigen Punkte drastisch reduzieren zu können, wird daher ausgenutzt, dass die Wellenfunktion stark lokalisiert bleibt und ein sich mitbewegendes Gitter im Phasenraum definiert.

3.1.1. Mitbewegtes Bezugssystem

Um die Wellenfunktion zu propagieren, wird diese zum Zeitpunkt $t = 0$ auf einem Ortsgitter mit konstanter Schrittweite dr auf n_r Gitterpunkten von r_1 bis r_{n_r} initialisiert. Man kann daher die numerische Wellenfunktion als n_r -dimensionalen Vektor $\Psi_i(t)$ und das Potential als Diagonalmatrix $V_i(t)$ auffassen, sodass sich dessen Anwendung als einfache Matrixmultiplikation schreiben lässt. Aus der Fourier-Theorie folgt für den Impulsraum

$$p_{\max} = \frac{\hbar\pi}{dr}, \quad dp = \frac{2p_{\max}}{n_r} \approx \frac{2\pi\hbar}{r_{n_r} - r_0} \quad (3.2)$$

für geradzahliges n_r . Das dazugehörige Gitter ist definiert auf den Punkten

$$-p_{\max}, -p_{\max} + dp, \dots, 0, dp, \dots, p_{\max} - dp. \quad (3.3)$$

Zwischen den äquivalenten Darstellungen der Wellenfunktion in Orts- und Impulsraum kann numerisch mittels einer schnellen Fourier-Transformation (engl. fast Fourier Transform, FFT) gewechselt werden, was das Anwenden von kinetischem Operator $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ und Impulsoperator \hat{p} stark vereinfacht. Im Ortsraum würde deren Anwendung numerisches Differenzieren erfordern, sodass eine unnötig hohe Ortsauflösung notwendig wäre, um Diskretisierungsfehler zu vermeiden [SPM⁺10]. Stattdessen sind \hat{T} und \hat{p} im Impulsraum diagonal, sodass sich deren Wirkung auf die Wellenfunktion ebenfalls auf eine Matrixmultiplikation zurückführen lässt.

Die Wellenfunktion $\Psi_i(0)$ wird nun einen Zeitschritt dt vorwärts propagiert und deren Ortserwartungswert berechnet:

$$\langle x(dt) \rangle = \sum_{i=1}^{n_r} \Psi_i^*(dt) r_i \Psi_i(dt) dr. \quad (3.4)$$

Anschließend wird geprüft, ob sich die Wellenfunktion signifikant innerhalb des Gitters bewegt hat,

$$\bar{x} = \langle x(dt) \rangle - \frac{r_{n_r} - r_0}{2}. \quad (3.5)$$

Falls $|\bar{x}| \geq dr$, wird das Ortsgitter um das nächstliegende ganzzahlige Vielfache von dr verschoben und damit die Wellenfunktion neu zentriert. Das Verschieben erfolgt durch Hinzufügen neuer Gitterpunkte auf der die Wellenfunktion den Wert 0 annimmt. Gleichzeitig wird die gleiche Zahl von Punkten auf der anderen Seite des Gitters entfernt. Dabei wird in jedem Schritt sichergestellt, dass die Wellenfunktion am Rand des Gitters keine signifikanten Amplituden aufweist, da diese sonst beim Verschieben möglicherweise verloren gehen könnten. Die Prozedur wird in jedem Propagationsschritt ausgeführt, sodass sich das Ortsgitter stets mit dem Zentrum der Wellenfunktion mitbewegt. Analog wird vor jedem Schritt der Impulserwartungswert $\langle p \rangle$ berechnet und in einer Variable $\bar{p} \rightarrow \bar{p} + \langle p \rangle$ gespeichert, die zu Beginn der Propagation auf 0 initialisiert wurde. Durch Multiplikation der Wellenfunktion mit dem Phasenfaktor

$$\Psi_i \rightarrow e^{-i\langle p \rangle r_i / \hbar} \Psi_i \quad (3.6)$$

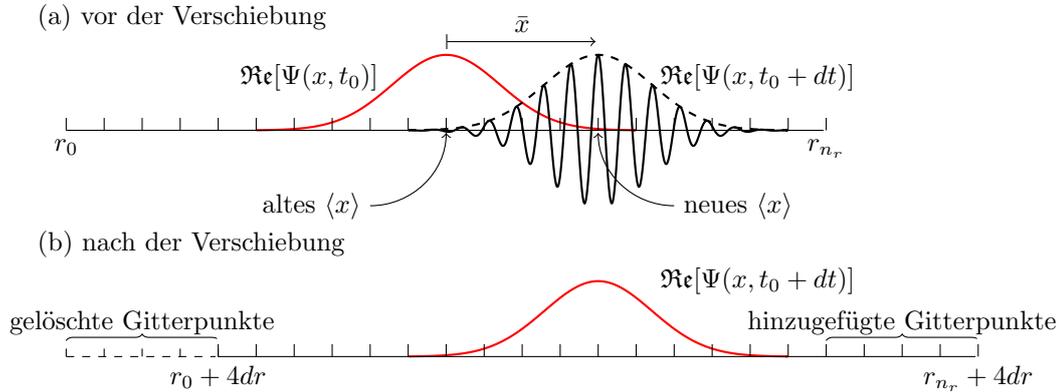


Abbildung 3.1.: Veranschaulichung des mitbewegten Gitters. Die Wellenfunktion $\Psi(x, t_0)$ (rot) wird einen Zeitschritt dt propagiert. Aus der dargestellten Propagation resultiert eine Verschiebung $\bar{x} \approx 4dr$ sowie einen Impuls $\langle p \rangle(t_0 + dt)$, der sich in den Oszillationen der Wellenfunktion $\Psi(x, t_0 + dt)$ widerspiegelt (a). Das Ortsgitter wird nun um $4dr$ verschoben und der Impulserwartungswert $\langle p(t_0 + dt) \rangle$ durch Multiplikation der Wellenfunktion mit dem Phasenfaktor $e^{-i\langle p \rangle x / \hbar}$ auf Null gesetzt, sodass die resultierende Wellenfunktion keine Oszillationen mehr aufweist (b). (Abbildung aus [FGP⁺13])

werden schnelle Oszillationen der Wellenfunktion vermieden, sie beinhaltet nun nur noch ihren Relativ-, nicht mehr ihren Schwerpunktsimpuls \bar{p} . Beim darauffolgenden Propagationsschritt muss daher der kinetische Operator \hat{T} um \bar{p} verschoben werden, $\hat{T}(\hat{p}) \rightarrow \hat{T}(\hat{p} + \bar{p})$, was gleichbedeutend mit einer Verschiebung des Impulsgitters ist. Die Kombination dieser beiden Methoden erlaubt es, dass bereits 100-1000 Gitterpunkte zur Propagation der Wellenfunktion ausreichend sind. Typischerweise genügt es dann die Breite $r_{n_r} - r_0$ auf das 10-100-fache der Breite der Wellenfunktion zu setzen, wenn die Zeitdiskretisierung hinreichend fein ist, um ein Herauslaufen der Wellenfunktion aus dem Gitter während eines Propagationsschrittes zu verhindern. Die Funktionsweise des beschriebenen Algorithmus zum mitbewegten Bezugssystem ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

3.1.2. Chebychev-Propagator

Im Gegensatz zur Lösung der klassischen Bewegungsgleichung 2.1 mittels eines numerischen Integrators, lässt sich die Lösung der Schrödingergleichung 3.1 im Falle zeitunabhängiger Hamiltonoperatoren \hat{H} elegant mit Hilfe des unitären Zeitentwicklungsoper-

rators $\hat{U}(t, t_0)$ angeben:

$$\Psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0)\Psi(x, t_0), \quad \hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \cdot (t - t_0)\right), \quad (3.7)$$

Da eine numerische Implementierung ohnehin eine Zeitdiskretisierung des Hamiltonoperators verlangt, wird dieser als stückweise konstant angenommen, sodass für endliche Zeitschritte dt folgt:

$$\Psi(x, t_0 + dt) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\left(t_0 + \frac{dt}{2}\right)dt\right)\Psi(x, t_0), \quad (3.8)$$

$$\hat{H}(t) \approx \hat{H}\left(t_0 + \frac{dt}{2}\right), \quad t \in [t_0, t_0 + dt]. \quad (3.9)$$

Durch eine Reihenentwicklung der Exponentialfunktion lässt sich der Ausdruck numerisch auswerten [Kos88, Kos94]. Die am schnellsten konvergierende, polynomielle Reihenentwicklung ist gegeben durch die Wahl der *Tschebyschow-Polynome*¹ $T_n(x)$ als Basisfunktionen [TEK84]. Sie sind definiert als Lösung der Differentialgleichung

$$(1 - x^2) T_n''(x) - xT_n'(x) + n^2T_n(x) = 0, \quad (3.10)$$

$$T_n(1) = 1, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.11)$$

und können durch die Rekursionsbedingung

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = x, \quad (3.12)$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

berechnet werden, was für eine numerische Implementierung von Vorteil ist. Im Intervall $x \in [-1, 1]$ bilden die Polynome T_n ein orthogonales Funktionensystem bezüglich des gewichteten Skalarproduktes

$$\langle T_n | T_m \rangle = \int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{2} (\delta_{mn} + \delta_{m0}\delta_{n0}), \quad (3.13)$$

¹ nach П. Л. Чебышев, engl. Transkription oft Chebyshev.

3. Quantenmechanische Verifikation der klassischen Lösungen

was die Entwicklung von Funktionen $f(x)$ im diesem Intervall ermöglicht:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x). \quad (3.14)$$

Es ist daher notwendig den Hamiltonoperator \hat{H} so zu reskalieren, dass seine Eigenwerte im Bereich $[-1,1]$ liegen:

$$\hat{H}_{\text{norm}} = 2 \frac{\hat{H} - V_{\min} \mathbb{1}}{\Delta E} - \mathbb{1}. \quad (3.15)$$

Die dabei auftretenden Größen $\Delta E = E_{\max} - E_{\min}$ beschreiben den Spektralradius des Hamiltonoperators, also den Energiebereich, in dem die unskalierten Eigenwerte liegen. Sie müssen in jedem Propagationsschritt neu berechnet werden, worauf in Kapitel 3.1.3 eingegangen wird. Als Entwicklung des Propagators folgt dann [TEK84]

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \left(t_0 + \frac{dt}{2}\right) dt\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\Delta E}{2} + E_{\min}\right) dt\right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(H_{\text{norm}}), \quad (3.16)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$a_0 = J_0\left(\frac{\Delta E dt}{2\hbar}\right), \quad (3.17)$$

$$a_n = 2(-i)^n J_n\left(\frac{\Delta E dt}{2\hbar}\right), \quad (3.18)$$

die aus der Orthogonalitätsbedingung (Gleichung 3.13) gewonnen werden können. Die auftauchenden Besselfunktionen erster Ordnung $J_n(x)$ bieten die besondere Eigenschaft, dass sie für $n > x$ exponentiell abfallen. Die maximale Anzahl an zu berechnenden Koeffizienten n_{\max} lässt sich durch die Maschinengenauigkeit ϵ bestimmen:

$$|a_n| \leq \epsilon \Rightarrow n_{\max} = n. \quad (3.19)$$

Da a_0 und $T_n(x)$ von der Größenordnung eins sind, setzt man $\epsilon = 10^{-15}$, sodass die Addition weiterer Terme keinen signifikanten Einfluss mehr auf das Ergebnis der Summe hat, da die Anzahl der numerisch darstellbaren Nachkommastellen auf 15 begrenzt ist². Die Anwendung des Propagators beschränkt sich also im Wesentlichen auf eine vielfache

² Oft wird die ϵ als die Zahl definiert, für die die numerische Addition $1 + \epsilon = 1$ liefert. Bei Verwendung von Variablen doppelter Genauigkeit gilt dann nach dem IEEE-754 Standard $\epsilon \approx 2.22 \cdot 10^{-16}$.

Anwendung von \hat{H} auf Ψ . Aufgrund der Rekursionsbeziehung (Gleichung 3.12) ist die Zahl der Anwendungen direkt durch n_{\max} gegeben, was wiederum von $\Delta E dt$ abhängig ist.

3.1.3. Bestimmung des Spektralradius

Zur Anwendung des Chebychev-Propagators ist es von zentraler Bedeutung, den Spektralradius ΔE und den minimalen Eigenwert E_{\min} von \hat{H} in jedem Propagationsschritt zu bestimmen und bei Veränderung die Entwicklungskoeffizienten a_n aus Gleichung 3.17 neu zu berechnen. Es wurde daher eine Methode entwickelt, die diese Größen möglichst schnell abschätzt und durch geringes Überschätzen sicherstellt, dass auch in den darauffolgenden Propagationsschritten der mit den überschätzten Werten reskalierte Hamiltonoperator \hat{H}_{norm} Eigenwerte zwischen -1 und 1 aufweist. Dazu wählt man für die potentielle Energie

$$V_{\min}^{\text{neu}} = \min_{i \in [1, n_r]} (V(r_i)) , \quad (3.20)$$

$$V_{\max}^{\text{neu}} = \max_{i \in [1, n_r]} (V(r_i)) . \quad (3.21)$$

Die kinetische Energie ist begrenzt durch die minimal und maximal zulässigen Werte der Impulse im mitbewegten Gitterfenster

$$T_{\min}^{\text{neu}} = \frac{\bar{p}^2}{2m} , \quad (3.22)$$

$$T_{\max}^{\text{neu}} = \frac{(p_{\max} + \bar{p})^2}{2m} , \quad (3.23)$$

mit p_{\max} aus Gleichung 3.2 und dem Schwerpunktsimpuls \bar{p} , um den der Impulsoperator \hat{p} verschoben ist. Man setzt nun

$$E_{\min} = T_{\min}^{\text{neu}} + V_{\min}^{\text{neu}} , \quad (3.24)$$

$$E_{\max}^{\text{neu}} = T_{\max}^{\text{neu}} + V_{\max}^{\text{neu}} , \quad (3.25)$$

$$\Delta E^{\text{neu}} = E_{\max}^{\text{neu}} - E_{\min} \quad (3.26)$$

und vergleicht ΔE^{neu} mit ΔE aus dem vorherigen Propagationsschritt. Falls $\Delta E^{\text{neu}} > \Delta E$ müssen die Entwicklungskoeffizienten a_n neu bestimmt werden. Um dies in den darauffolgenden Propagationsschritten zu verhindern und damit Rechenzeit zu sparen,

wird nun der Spektralradius leicht überschätzt:

$$E_{\min} \rightarrow E_{\min} - \frac{\Delta E^{\text{neu}}}{2}, \quad (3.27)$$

$$\Delta E = 2\Delta E^{\text{neu}}. \quad (3.28)$$

Dadurch wird erreicht, dass die Zahl der Neuberechnungen der Koeffizienten a_n weitestgehend unabhängig von der Zahl der Zeitschritte ist und lediglich von der Dynamik des Systems abhängt. Der Überschätzungsfaktor 2 ist dabei ein Erfahrungswert. Zu hohe Faktoren sorgen dafür, dass die Anzahl der Koeffizienten n_{\max} viel höher wird als benötigt und damit die Zahl der Anwendungen des Hamiltonoperators steigt, was wiederum Rechenzeit kostet. Dies ist auch der Fall, wenn der Spektralradius während der Propagation wieder stark abnimmt. Daher werden falls $\Delta E^{\text{neu}} < \frac{\Delta E}{2}$ ebenfalls die Koeffizienten a_n mit $\Delta E = \Delta E^{\text{neu}}$ neu berechnet. An diesem Punkt wird erneut deutlich, warum ein mitbewegtes Gitter im Phasenraum zur Propagation eines realistischen Ionentransports zwingend notwendig ist. Die Zahl n_{\max} der benötigten Entwicklungskoeffizienten und damit der Anwendungen des Hamiltonoperators hängt über den Spektralradius ΔE direkt von der Variation des Potentials innerhalb des Gitters und dem maximal darstellbaren Impuls ab. Auf einem um $10^2 - 10^3$ mal breiteren, festen Gitter führt dies also nicht nur zu einer drastischen Erhöhung von ΔE und damit n_{\max} . Damit die Wellenfunktion darstellbar bleibt, muss die Zahl der Gitterpunkte und damit die Dimension von \hat{H} um einen noch größeren Faktor erhöht werden, sodass die Rechenzeit zu dessen Anwendung zusätzlich steigt.

3.2. Test des quantenmechanischen Propagators

Die Funktion des Propagators wurde analog zu Kapitel 2.2 mittels eines kohärent ausgelenkten Grundzustandes in einem harmonischen Potential überprüft. Dazu wurden die gleichen Parameter wie im klassischen Test verwendet. Es wurde also ein kohärenter Zustand $|\alpha(0)\rangle$ mit der Auslenkung $\langle x_0 \rangle = 90 \mu\text{m}$ und Breite $\sigma_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ im Zentralpotential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3.29)$$

initialisiert. Als Masse wurde die von $^{40}\text{Ca}^+$ verwendet. Für eine quantenmechanisch korrekte Funktionsweise des Propagators muss zusätzlich zur Erhaltung der Energie und

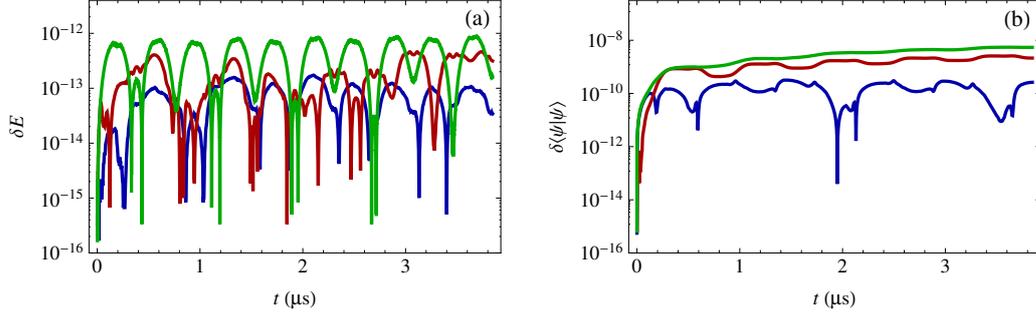


Abbildung 3.2.: Relative Energie-Abweichung (a) des Resultats aus der numerischen Propagation zum analytischen Ergebnis aus Gleichung 2.9 und Fehler der quadrierten Norm (b) nach Gl. 3.30 für 10^4 (blau), 10^5 (rot) und 10^6 (grün) Zeitschritte.

den korrekten Schwerpunktsbewegungen noch die Norm des Zustandes $|\langle\alpha(t)|\alpha(t)\rangle|^2$ erhalten sein. Daher wird ebenfalls die relative Abweichung

$$\delta\langle\alpha|\alpha\rangle = |\langle\alpha|\alpha\rangle - 1| \quad (3.30)$$

betrachtet. Für einen kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$ gilt zudem nach einer Periode $T_{\text{per}} = 2\pi/\omega$ für den gemäß Gleichung 3.7 zeitentwickelten Zustand

$$\begin{aligned} |\alpha(T_{\text{per}})\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})T_{\text{per}}} |\alpha(0)\rangle \\ &= e^{-i\pi} e^{-i2\pi\hat{N}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} e^{\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)} |m\rangle \\ &= e^{-i\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} e^{\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right)} e^{-i2\pi m} |m\rangle \\ &= -1 |\alpha(0)\rangle, \end{aligned} \quad (3.31)$$

wobei die Definition des Besetzungszahloperators $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ mit $\hat{N}|m\rangle = m|m\rangle$ benutzt wurde. Mit dem vorliegenden Modellpotential ist es daher insbesondere möglich auch die korrekte Propagation der Phase zu überprüfen. Die relativen Abweichungen zur analytischen Lösung sind für $n_t = 10^4$ bis 10^6 Zeitschritte in den Abbildungen 3.2-3.3 dargestellt. Für die Propagation von $n_t = 10^6$ (grün) und 10^5 (rot) Zeitschritten genügt ein Gitter mit 128 Punkten auf $0.4 \mu\text{m}$ Breite. Für die Wahl $n_t = 10^4$ (blau) musste ein breiteres Gitter verwendet werden, da es aufgrund der stärkeren mittleren Beschleunigung je Propagationsschritt leichter vorkommen kann, dass die Wellenfunktion zu nah

3. Quantenmechanische Verifikation der klassischen Lösungen

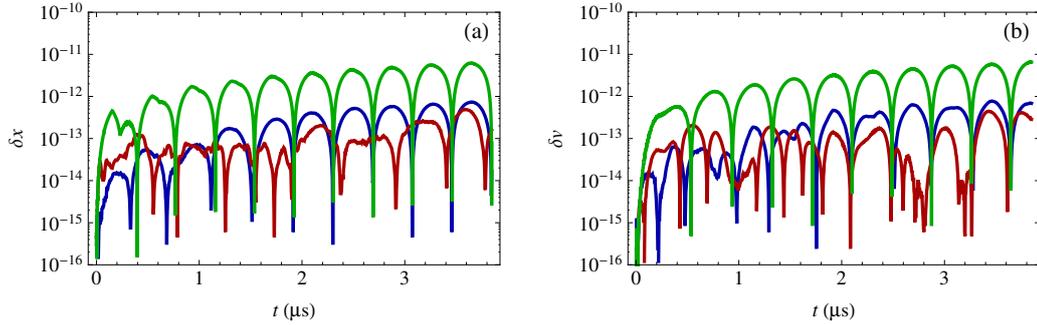


Abbildung 3.3.: Relative Abweichung des Orts- (a) und Geschwindigkeits-Erwartungswertes (b) aus der numerischen Propagation zum analytischen Ergebnis aus Gleichung 2.7 bzw. 2.8 für 10^4 (blau), 10^5 (rot) und 10^6 (grün) Zeitschritte.

an den Rand des Gitterfensters gerät. Es wurden deshalb für diesen Fall zur Propagation 1024 Gitterpunkte auf $1.6 \mu\text{m}$ Breite verwendet. Im Vergleich zum klassischen Propagator zeigen die Resultate zunächst ein verblüffendes Verhalten auf. Die Propagationmethode mit der feinsten Zeitdiskretisierung (grün) liefert bei allen betrachteten Abweichungen die schlechtesten Werte. Dies ist in der Akkumulation numerischer Additionsfehler begründet. Für eine feinere Zeitdiskretisierung wird das Gitter öfter um eine kleinere Zahl von Gitterpunkten beziehungsweise Impulse verschoben. Verglichen mit der nächstgrößeren Diskretisierung ($n_t = 10^5$, rot), sind die je Propagationsschritt hinzugewonnenen Impulse $\langle p \rangle$ etwa um einen Faktor zehn kleiner. Bei der numerischen Addition zum Schwerpunktsimpuls \bar{p} nach Kapitel 3.1.1, kann also im Mittel eine signifikante Stelle weniger berücksichtigt werden, was die um eine Zehnerpotenz höhere relative Abweichung von Orts- und Impulserwartungswert erklärt. Für die beiden größeren Diskretisierungen (rot, blau) sind die Ergebnisse sehr zufriedenstellend. Der relative Phasenfehler $\delta\varphi(n_t) = |\varphi(n_t) - \pi|/\pi$ beträgt für die drei betrachteten Zeitdiskretisierungen

$$\delta\varphi(10^4) = 1.55 \cdot 10^{-8}, \quad \delta\varphi(10^5) = 5.27 \cdot 10^{-8}, \quad \delta\varphi(10^6) = 2.80 \cdot 10^{-7}. \quad (3.32)$$

Auch hier spiegelt sich die etwas geringere Genauigkeit der zeitlich am feinsten aufgelösten Methode wider. Man kann daher davon ausgehen, dass die Zahl der benötigten Zeitschritte zur quantenmechanischen Behandlung des Transportproblems im Bereich von 10^4 bis 10^6 eine ausreichende Genauigkeit des Propagators liefert und das mitbewegte Bezugssystem korrekt implementiert ist. Allgemein empfiehlt es sich zur Anwendung

des Propagators zu überprüfen, wie stark das Ergebnis von der Wahl der Zeitdiskretisierung und der Auflösung und Größe des Gitters abhängt, wenn kein analytisches Resultat zum Vergleich vorliegt.

3.3. Gültigkeit der klassischen Lösung

Mittels der vorgestellten Propagationmethode ist es nun möglich zu überprüfen, ob die durch klassische Optimierung in Kapitel 2.5 erhaltenen Resultate auch im Quantenregime noch gute Ergebnisse liefern, da diese weder Quetsch-Effekte noch anharmonische Dispersion der Wellenfunktion berücksichtigen. Dazu wird die zu propagierende Wellenfunktion $|\psi(0)\rangle$ als Grundzustand $|0\rangle$ des Potentials zum Zeitpunkt $t = 0$ initialisiert. Die Energie der propagierten Wellenfunktion $|\psi(T)\rangle$ sollte dann im Fall eines energie-neutralen Transports die des Grundzustandes $|\psi_T\rangle = |0\rangle$ zum Zeitpunkt $t = T$ nicht überschreiten. Als Maß für die Güte des Transports kann der Überlapp mit der Zielwellenfunktion $\mathfrak{F} = |\langle\psi(T)|\psi_T\rangle|^2$ verwendet werden. Um das Ergebnis mit dem Resultat der klassischen Propagation vergleichen zu können, ist es praktischer, die Energiedifferenz

$$E^{\text{qm}}(T) = \langle\psi(T)|\hat{H}(T)|\psi(T)\rangle - \langle\psi_T|\hat{H}(T)|\psi_T\rangle \quad (3.33)$$

zu betrachten. Diese ist dann ein direktes Maß für die zusätzliche quantenmechanische Anregung durch den Transport mittels der klassisch optimierten Spannungen. Zur Propagation wurden $n_t = 10^5$ Zeitschritte und ein mitbewegtes Gitter mit $n_r = 128$ Gitterpunkten auf einer Breite von $0.4\ \mu\text{m}$ verwendet. Die Propagation einer einzelnen Transportrampe ist damit auf einem modernen Computer in unter 10 Sekunden³ möglich.

Die Resultate der Propagation der initialen Startspannungen $U_i^0(t)$ und der klassisch optimierten Transportspannungen für $U_{\text{max}} = 10\ \text{V}$ aus Kapitel 2.5 sind in Abbildung 3.4 dargestellt. Die Propagation der klassisch optimierten Spannungsrampen (rot) zeigt eine klare Abweichung vom klassischen Verhalten (hellblau). Für $T \geq 2.5\ \mu\text{s}$ dominiert numerisches Rauschen. Nähe dem klassischen Limit ist ein rapider Anstieg der

³ Es wurde hier ein Computer mit AMD Opteron 2435 Prozessor mit einer Taktfrequenz von 2.6 GHz und der Intel Fortran Compiler `ifort 12.1.1.256` zum kompilieren und Ausführen des Propagators verwendet. Jegliche Angaben zur Rechenzeit sind nur als grobe Richtlinie zu verstehen, da sie stark von der Compilerversion und von den verfügbaren Befehlssätzen des Prozessors abhängen. Ein Beispiel zur Laufzeitoptimierung durch *Profiling* ist im Anhang A.2 dargestellt.

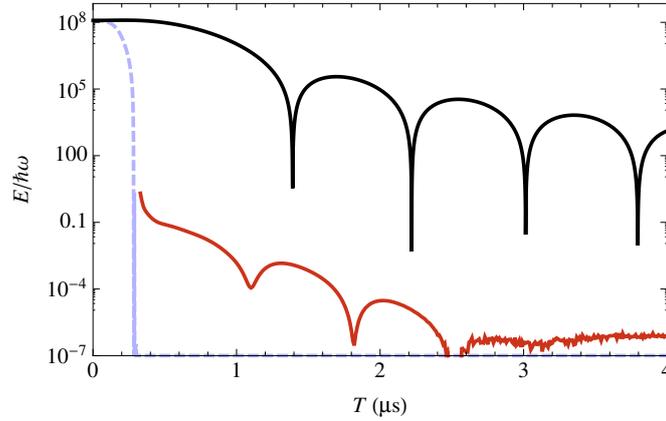


Abbildung 3.4.: Energie des quantenmechanisch Propagierten Grundzustandes mittels initialer Startspannungen $U_i^0(t)$ (schwarz) und der klassisch optimierten Spannungsrampen (rot) für den Fall $U_{\max} = 10$ V. Zum Vergleich ist ebenfalls das durch klassische Propagation der optimierten Spannungen erhaltene Resultat aus Kapitel 2.5 abgebildet (hellblau).

Energie zu beobachten, allerdings existieren dazwischen auch Minima, bei denen sich die quantenmechanischen Effekte gerade kompensieren. Diese sind ausschließlich auf ein Quetschen der Wellenfunktion aufgrund variierender Fallenfrequenzen zurückzuführen, was sich leicht durch weiteres propagieren der Wellenfunktion im finalen Potential $V(T)$ überprüfen lässt. Für einen gequetschten Grundzustand gilt nach Gleichung 1.28, dass das Unschärfeprodukt $\Delta x(t)\Delta p(t)$ mit der vierfachen Fallenfrequenz zwischen der minimalen Unschärfe $\frac{\hbar}{2}$ und $\frac{1+\lambda^2}{2\lambda}\frac{\hbar}{2}$ oszilliert, was in Abbildung 3.5 exemplarisch für $T = 350$ ns dargestellt ist. Für sehr kleine Transportzeiten nahe des klassischen Limits wird die Wellenfunktion derart stark gequetscht, dass zur Propagation wesentlich breitere aber auch feinere Gitter notwendig sind, um die Relativimpulse der Wellenfunktion auflösen zu können. Eine propagierte Wellenfunktion nahe des klassischen Limits ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Offenbar ist $\psi(x, T)$ wesentlich breiter als die Zielwellenfunktion $\psi_T(x)$. Ebenso sind die durch das Quetschen hervorgerufenen Relativimpulse als symmetrische Oszillationen auf dem Realteil vom $\psi(x, T)$ zu erkennen. Dies bedeutet insbesondere, dass kein Einfluss von Anharmonizitäten der Potentiale auf die Wellenfunktion beobachtet werden kann. Es wird erwartet, dass dies erst eine Rolle spielt, falls die Breite der Wellenfunktion in der gleichen Größenordnung wie die Ausdehnung d der Segmentelektroden ist, sodass sich die Wellenfunktion über Bereiche erstreckt, die signifikant von der einer harmonischen Näherung abweichen. Im Fall von Ionentransporten spielt dieser Effekt also keine Rolle für den betrachteten Parameterbereich.

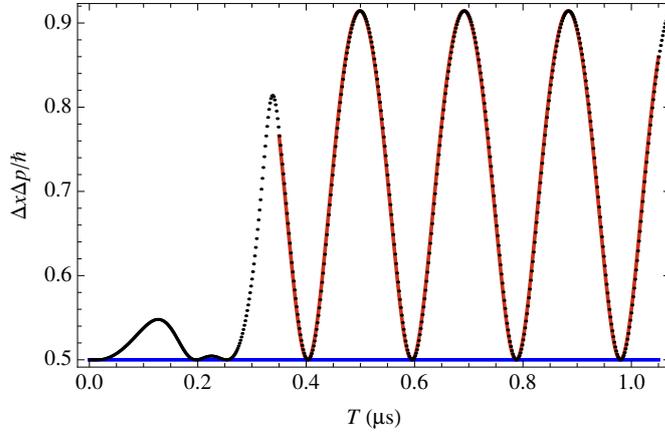


Abbildung 3.5.: Zeitentwicklung des Unschärfeprodukts für einen klassisch optimierten Transport mit $T = 350$ ns und $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz (schwarz). Ein Fit nach Gleichung 1.28 im Bereich für $t \geq T$ ergibt $\omega^{\text{fit}} = \omega \cdot (1.000000(1))$ und $\lambda^{\text{fit}} = 3.360000(8)$ (rot). Ebenfalls eingezeichnet ist die minimale Unschärfe $\frac{\hbar}{2}$ (blau).

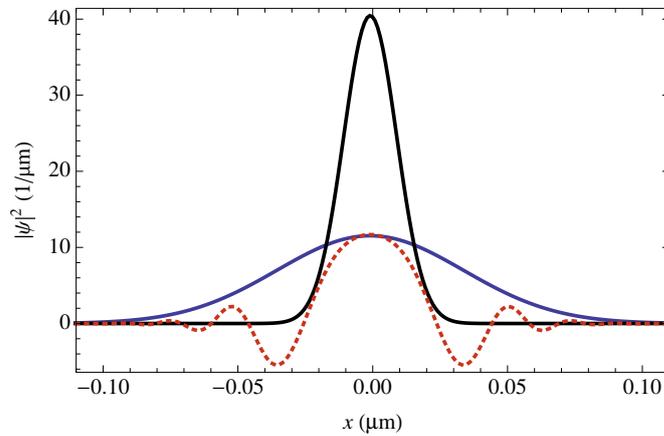


Abbildung 3.6.: Wellenfunktion $|\psi(x, T)|^2$ für einen klassisch optimierten Transport mit $T = 320$ ns, $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz und $U_{\text{max}} = 10$ V (blau) und die dazugehörige Zielwellenfunktion $|\psi_T(x)|^2$ (schwarz). Ebenso abgebildet ist der skalierte Realteil $\Re(\psi(x, T))$ (rot).

Die Propagation der initialen Transportspannungen $U_i^0(t)$ (Abb. 3.4 schwarz) liefert nahezu exakt den gleichen Verlauf, wie im klassischen Fall. Absolute und relative Abweichung

$$\Delta E_{\text{abs}} = E^{\text{qm}}(T) - E^{\text{kl}}(T), \quad (3.34)$$

$$\delta E = \frac{|E^{\text{qm}}(T) - E^{\text{kl}}(T)|}{E^{\text{kl}}(T)} \quad (3.35)$$

zur Energie aus der klassischen Propagation sind in Abbildung 3.7 dargestellt. Die relative Abweichung ist stets kleiner als $\Delta E_{\text{abs}}^{\text{max}} = 0.339$ Phononen und resultiert hauptsächlich aus den beiden verschiedenen numerischen Propagationsverfahren, weniger aus Quanten-Effekten. Dies wird insbesondere deutlich, da ΔE_{abs} sein Vorzeichen bei den Energieminima wechselt (blau: negatives Vorzeichen, grün: positives Vorzeichen), ein Quetschen der Wellenfunktion aber stets zu einem positivem Vorzeichen führen müsste. An den Positionen der Energieminima ist ΔE_{abs} hingegen deutlich geringer. Dieses Verhalten lässt sich leicht anhand einer Beispielrechnung erklären. Aufgrund der sehr starken Auslenkung im Phasenraum bei Punkten hoher Energie, hat die kleinste Abweichung von Impuls- und Ortserwartungswert zum klassischen Pendant vergleichsweise hohe Auswirkungen auf die absolute Abweichung ΔE_{abs} . Für den Fall $T = 130$ ns liefert die klassische Propagation beispielsweise eine finale Auslenkung von $x(T) - x_2 \approx 247 \mu\text{m}$ aus dem Potentialminimum x_2 . Die potentielle Energie dazu ist in harmonischer Näherung durch $V(T) \approx \frac{1}{2}m\omega^2(x(T) - x_2)^2$ gegeben. Falls der Ortserwartungswert des propagierten Wellenpaketes um nur 0.3 pm vom klassischen Wert $x(T)$ abweicht, ist die resultierende Änderung der potentiellen Energie bereits größer als $\Delta E_{\text{abs}}^{\text{max}} = 0.339 \hbar\omega$. Die relative Abweichung δE (Abbildung 3.7 rot) ist hingegen fast überall kleiner als 10^{-6} , lediglich an den Stellen minimaler Energie $E(T)$ liegt sie zwischen 10^{-3} und 10^{-2} , was darauf zurückzuführen ist, dass aufgrund der sehr geringen klassischen Energie $E^{\text{kl}}(T)$ in Gleichung 3.35 durch sehr kleine Zahlen geteilt wird. Damit ist sichergestellt, dass quantenmechanischer und klassischer Propagator für die verwendeten Parameter vergleichbare Ergebnisse liefern.

3.4. Stabilität der klassisch optimierten Lösungen

Es hat sich gezeigt [WZR⁺12], dass eine experimentelle Realisierung von schnellen Transporten zwar möglich ist, man jedoch ohne optimierte Lösungen auf die Lage der

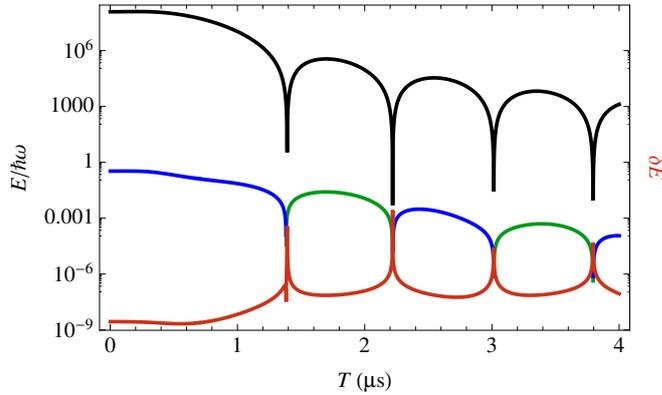


Abbildung 3.7.: Endenergie $E(T)$ (schwarz) und Abweichungen ΔE_{abs} (blau negativ, grün positiv), δE (rot) zwischen quantenmechanischer und klassischer Propagation der initialen Startspannungen $U_i^0(t)$ für $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz.

Energieminima, die die initialen Transportspannungen liefern, angewiesen ist. Die finale Energie nach dem Transport $E(T)$ hängt insbesondere in diesen Punkten sehr stark von der Transportzeit ab, wie beispielsweise in Abbildung 3.7 (schwarz) gezeigt. Bereits eine kleine Fluktuation in der Transportzeit T führt zu einer großen Veränderung der Energie $E(T)$ und damit des Überlapps mit dem Zielzustand. Es wurde daher überprüft, ob die klassisch optimierten Spannungsrampen bei geringer Variation δt der Transportzeit zu einer Verbreiterung des resultierenden Energieminimums führen können. Dazu wurde ein T gewählt, für das die klassische Lösung nur zu geringen quantenmechanischen Effekten führt. Um eine möglichst große Abweichung von den initialen Transportspannungen $U_i^0(t)$ zu erreichen und dennoch in der Nähe bisher experimentell realisierbarer Zeitskalen zu bleiben, wurde die Stelle $T = 3.351 \mu\text{s}$ bei einer Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz gewählt. Die Energie, die man durch Propagation der $U_i^0(t)$ erreicht, ist hier gerade maximal, sodass eine hohe Energiekorrektur durch die Optimierung notwendig ist. Das Resultat der Stabilitätsanalyse ist in Abbildung 3.8(a) dargestellt. Der Überlapp der propagierten Wellenfunktion mit dem Zielzustand (rot) ist auf einem Bereich von $\delta t_{\text{opt}} = 54.5$ ns höher als 95%. Verglichen mit der Stabilität der initialen Transportspannungen (schwarz) bei $T = 3.705 \mu\text{s}$ von $\delta t_4 = 1.9$ ns ergibt sich also eine Verbesserung um etwa einen Faktor 28. Die stabilen Bereiche des ersten bis dritten Energieminimums, die sich durch Propagation von $U_i^0(t)$ ergeben, sind noch schmaler und daher nicht dargestellt. Die Breiten sind $\delta t_1 = 0.1$ ns, $\delta t_2 = 0.4$ ns und $\delta t_3 = 1.0$ ns und nehmen folglich mit der Ordnung des Minimums zu.

3. Quantenmechanische Verifikation der klassischen Lösungen

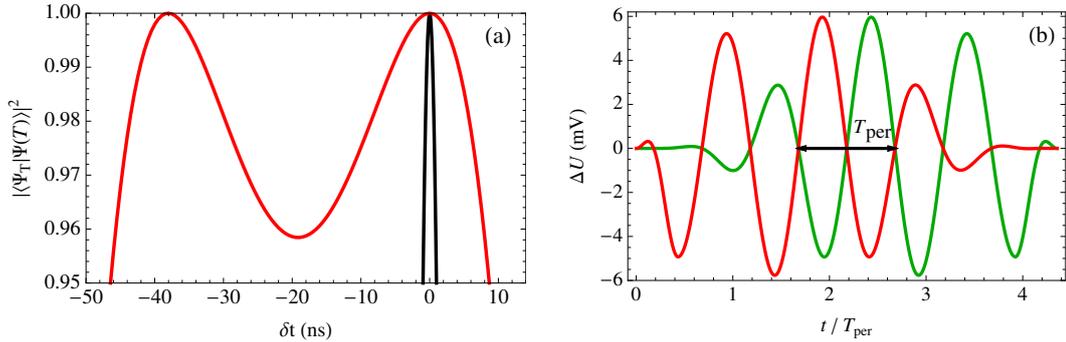


Abbildung 3.8.: Stabilität des Überlapps von propagierter und Zielwellenfunktion gegenüber Fluktuationen der Transportzeit (a) für klassisch optimierte Spannungen bei $T = 3.351 \mu\text{s}$ (rot) und initiale Spannungen für $T = 3.795 \mu\text{s}$ (schwarz). (b) Spannungsdifferenzen $\Delta U_i = U_i^{\text{opt}} - U_i^0$ zwischen optimierten und initialen Spannungen bei $T = 3.351 \mu\text{s}$ für linkes (grün) und rechtes Segment (rot).

Offenbar ist die klassische Optimierung also in der Lage die Stabilität des Transports gegenüber Fluktuationen der Transportzeit wesentlich zu erhöhen. Die Abweichungen der optimierten Spannungen $U_i^{\text{opt}}(t)$ von ihren Startwerten $U_i^0(t)$ sind dabei für die betrachtete Transportzeit $T = 3.351 \mu\text{s}$ äußerst gering und liegen im Bereich einiger Millivolt, wie in Abbildung 3.8(b) dargestellt. Man erkennt dort gut die Wirkweise der Optimierung. Beim Beschleunigen wird die Spannung des rechten Segments (rot) zunächst nach unten korrigiert, um der Trägheit des Teilchens entgegenzuwirken. Im mitbewegten Bezugssystem des Fallenpotentials oszilliert das Teilchen dann mit der Fallenfrequenz hin und her, was durch den Algorithmus ausgeglichen wird, in dem periodische Kicks an den Elektroden erfolgen, die der Auslenkung des Teilchens entgegenwirken. Aufgrund der geringen Korrekturspannungen stellt die Implementierung der optimierten Spannungsrampen eine große Herausforderung an den Experimentator und die verwendete Elektronik dar. Man wird sich dem Spannungsverlauf aufgrund der notwendigen Filterelektronik nur nähern können, sodass die Lage des Energieminimums vermutlich stark von der theoretischen Vorhersage abweichen wird. Dennoch zeigt das Resultat der Optimierung deutlich, dass durch geschickte Wahl der Transportspannungen ein enormer Stabilitätsgewinn des Verfahrens erreicht werden kann.

4

Invariantenbasierte Lösung

Die Resultate der klassischen Optimierung haben gezeigt, dass es mit vergleichsweise geringem numerischen Aufwand möglich ist, theoretisch beliebig kurze Transporte zu realisieren, insofern genügend hohe Transportspannungen bereitgestellt werden können. Die quantenmechanische Gültigkeit ist im bisher experimentell realisierten Bereich im vertretbaren Rahmen. Für kürzere Transportzeiten tritt jedoch ein Quetschen der Wellenfunktion auf. Dies lässt sich vermeiden, wenn die Fallenfrequenz am Ort des Ions konstant gehalten wird, ist aber in der klassischen Optimierung nicht berücksichtigt worden. Eine elegante Lösung dieses Problems für nahezu beliebige Potentialformen, dessen Implementierung und Test für das Transportproblem wird im Folgenden dargestellt. Anschaulich wird durch die vorgestellte Methode zu jedem Zeitpunkt die Trägheitskraft des Ions ausgeglichen, sodass es einer vorgegebenen Trajektorie ohne Abweichung folgt. Die Implementierung kann dabei aufgrund der geringen Ausdehnung der Wellenfunktion ausschließlich durch Anlegen zusätzlicher Ausgleichsspannungen an den verwendeten Elektroden erfolgen, sodass die Skalierbarkeit weiterhin gewährleistet bleibt.

4.1. Lewis-Riesenfeld Theorie der dynamischen Invarianten

Zur quantenmechanischen Beschreibung eines zeitabhängigen Problems entwickelten H. R. Lewis und W. B. Riesenfeld eine Theorie, die Dynamik des Systems mit Hilfe von Invarianten der Bewegung und deren Eigenzuständen beschreibt [LR69]. Das Verfahren ermöglicht es, die Zeitabhängigkeit so zu gestalten, dass Hamiltonoperator und Invariante gemeinsame Eigenzustände zu Beginn und Ende der Dynamik besitzen, was sie insbesondere für den zustandserhaltenden Transport interessant macht. Für ein zeitabhängiges Problem, beschrieben durch den Hamiltonoperator $\hat{H}(t)$ und die Wellenfunktion $|\Psi(t)\rangle$, wird eine Invariante $\hat{I}(t)$ charakterisiert durch

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{I}(t) | \Psi(t) \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{I}(t), \hat{H}(t)] = 0. \quad (4.1)$$

Durch eine formale Reihenentwicklung

$$\hat{I}(\hat{x}, \hat{p}, t) = \sum_{n=0}^N \hat{p}^n f_n(\hat{x}, t) \quad (4.2)$$

mit differenzierbaren, reellwertigen Funktionen $f_n(\hat{x}, t)$, lassen sich Invarianten finden, die zu einer ganzen Klasse von Hamiltonoperatoren passen. Die Herleitung orientiert sich dabei an [LL82]. Aus der Invarianten-Bedingung 4.1 erhält man

$$0 = \frac{d\hat{I}}{dt} = \sum_{n=0}^N \hat{p}^n \frac{\partial f_n}{\partial t} + \sum_{n=0}^N \left[\hat{p}^n f_n(\hat{x}, t), \hat{H}(t) \right] \quad (4.3)$$

$$= \sum_{n=0}^N \left(\hat{p}^n \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 f_n}{\partial \hat{x}^2} \right) + \frac{\hat{p}^{n+1}}{m} \frac{\partial f_n}{\partial \hat{x}} - n \hat{p}^{n-1} \frac{\partial V}{\partial \hat{x}} f_n(\hat{x}, t) \right), \quad (4.4)$$

mit $\hat{H}(t) = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x}, t)$. Durch Sortieren der Terme in Ordnungen von \hat{p}^n und auf Null setzen der Koeffizienten folgen $N + 2$ gekoppelte Differentialgleichungen für die Funktionen $f_n(\hat{x}, t)$:

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 f_n}{\partial \hat{x}^2} + \frac{1}{m} \frac{\partial f_{n-1}}{\partial \hat{x}} - (n+1) \frac{\partial V}{\partial \hat{x}} f_{n+1}(\hat{x}, t) = 0. \quad (4.5)$$

Da alle auftretenden Funktionen und damit ihre Ableitungen reellwertig sind, müssen die auftauchenden imaginären Terme verschwinden, d. h. $\frac{\partial^2 f_n}{\partial \hat{x}^2} = 0$. Im Folgenden wird gezeigt, dass für das Transportproblem der Fall $N = 2$ vollkommen ausreichend ist.

Auswerten von Gleichung 4.5 liefert

$$\frac{1}{m} \frac{\partial f_2}{\partial \hat{x}} = 0 \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial f_1}{\partial \hat{x}} = 0 \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \hat{x}} - 2 \frac{\partial V}{\partial \hat{x}} f_2(\hat{x}, t) = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} - \frac{\partial V}{\partial \hat{x}} f_1(\hat{x}, t) = 0. \quad (4.9)$$

Aus Gleichung 4.6 folgt, dass f_2 durch eine rein zeitabhängige Funktion gegeben ist. Es wird daher $f_2(t) = 2a(t)$ gesetzt, woraus nach Gleichung 4.7 $f_1(\hat{x}, t) = b(t) - 2\dot{a}(t)m\hat{x}$ folgt. Dabei sind $a(t)$ und $b(t)$ beliebige differenzierbare und reellwertige Funktionen. Es gilt also nach Gleichung 4.8 für das Potential

$$V(\hat{x}, t) = g(t) + \frac{1}{4a(t)} \left(\dot{b}(t)\hat{x} - m\ddot{a}(t)\hat{x}^2 + \frac{1}{m}f_0(\hat{x}, t) \right), \quad (4.10)$$

wobei $g(t)$ eine beliebige Funktion ist. Durch Einsetzen in Gleichung 4.9 lässt sich formal der verbleibende Koeffizient $f_0(\hat{x}, t)$ der Invarianten bestimmen. Aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen folgt die allgemeine Lösung

$$f_0(\hat{x}, t) = G \left(\frac{\hat{x}}{\sqrt{ma(t)}} + \frac{1}{4} \int_0^t \frac{b(t')}{(ma(t'))^{3/2}} dt \right) + \frac{1}{2a(t)} \left(\dot{a}(t)m\hat{x} - \frac{b(t)}{2} \right)^2. \quad (4.11)$$

Hierbei ist G eine beliebige Funktion, von der nur ihre Abhängigkeit vorgegeben ist. Durch Definition der Hilfsfunktionen

$$\rho(t) := 2\sqrt{ma(t)}, \quad U(r) := G(2r) - \frac{1}{2}m\Omega_0^2 r^2, \quad \alpha(t) := -\rho(t) \frac{1}{8} \int_0^t \frac{b(t')}{(ma(t'))^{3/2}} dt, \quad (4.12)$$

mit der reellen Konstante Ω_0 , lässt sich die Invariante durch

$$\hat{I}(t) = \frac{1}{2m} [\rho(\hat{p} - m\dot{\alpha}) - m\dot{\rho}(\hat{x} - \alpha)]^2 + \frac{1}{2}m\Omega_0^2 \left(\frac{\hat{x} - \alpha}{\rho} \right)^2 + U \left(\frac{\hat{x} - \alpha}{\rho} \right) \quad (4.13)$$

ausdrücken. Für das zugehörige Potential folgt als wichtiges Resultat

$$V(\hat{x}, t) = -F(t)\hat{x} + \frac{m}{2}\Omega^2(t)\hat{x}^2 + \frac{1}{\rho^2(t)}U \left(\frac{\hat{x} - \alpha(t)}{\rho(t)} \right) \quad (4.14)$$

4. Invariantenbasierte Lösung

wobei F , Ω , ρ und α durch

$$\ddot{\rho}(t) + \Omega^2(t)\rho(t) = \frac{\Omega_0^2}{\rho^3(t)}, \quad (4.15)$$

$$\ddot{\alpha}(t) + \Omega^2(t)\alpha(t) = F(t)/m, \quad (4.16)$$

gegeben sind. Die Funktion $g(t)$ wurde dabei so gewählt, dass alle rein zeitabhängigen Terme verschwinden. Bisher ist jedoch noch nichts über die zur Invarianten $\hat{I}(t)$ gehörenden Eigenzustände $|\psi_n(t)\rangle$ bekannt, die für den zustandserhaltenden Transport von essentieller Bedeutung sind. Da $\hat{I}(t)$ ein hermitescher Operator ist, bilden seine Eigenzustände eine vollständige Basis, sodass sich jede beliebige Wellenfunktion gemäß

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{i\beta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle \quad (4.17)$$

entwickeln lässt. Dabei können nach [LR69] die Koeffizienten c_n zeitunabhängig gewählt werden, wenn die Phasenfunktionen $\beta_n(t)$ die Gleichung

$$\hbar \frac{d\beta_n}{dt} = \langle \psi_n(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(t) | \psi_n(t) \rangle \quad (4.18)$$

erfüllen, was leicht ersichtlich ist, wenn man Gleichung 4.17 in die Schrödingergleichung einsetzt. Durch Lösen des Eigenwertproblems

$$\hat{I}(t) |\psi_n(t)\rangle = \lambda_n |\psi_n(t)\rangle \quad (4.19)$$

lassen sich schließlich nach [DL84] die Eigenfunktionen zu

$$\psi_n(x, t) = e^{\frac{im}{\hbar} [\dot{\rho}x^2/2\rho + (\dot{\alpha}\rho - \alpha\dot{\rho})x/\rho]} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \phi_n \left(\frac{x - \alpha}{\rho} \right) \quad (4.20)$$

bestimmen, wobei die Hilfswellenfunktion ϕ_n die Gleichung

$$\hat{H}_q(t)\phi_n(q) := \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} m \Omega_0^2 q^2 + U(q) \right] \phi_n(q) = \lambda_n \phi_n(q), \quad q = \frac{x - \alpha}{\rho} \quad (4.21)$$

erfüllen muss. Für die Phasen folgt durch Einsetzen von Gleichung 4.20 in 4.18 und Integration nach der Zeit

$$\beta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{\lambda_n}{\rho^2} + \frac{m(\dot{\alpha}\rho - \alpha\dot{\rho})^2}{2\rho^2} \right) dt'. \quad (4.22)$$

Um einen zustandserhaltenden Transport zu gewährleisten, müssen die Eigenfunktionen von $\hat{I}(t)$ und $\hat{H}(t)$ an Anfangs- und Endzeitpunkt übereinstimmen. Dies lässt sich durch die spezielle Wahl $\dot{\alpha}(0) = \dot{\alpha}(T) = \ddot{\alpha}(0) = \ddot{\alpha}(T) = 0$ und $\rho(t) = 1$ erreichen, was zu einer verschwindenden Phase der $\psi_n(t)$ (Gl. 4.20) und $\hat{H}(t) = \hat{H}_q(t)$ (Gl. 4.21) führt.

4.2. Invariantenbasierter Transport

Im Fall des in Kapitel 1.2 vorgestellten Transportproblems wird $\Omega(t) = \Omega_0 = 0$ und $\rho(t) = 1$ gesetzt. Weiter wird $\alpha(t)$ mit der Transportfunktion aus Gleichung 1.10 identifiziert, mit der sich das Minimum des Fallenpotentials bewegt. Dies erlaubt die direkte Bestimmung von $F(t)$ nach Gleichung 4.16,

$$F(t) = m\ddot{\alpha}(t), \quad (4.23)$$

was anschaulich bedeutet, dass $F(t)$ zu jedem Zeitpunkt der Beschleunigung des Fallenzentrums entgegenwirkt, d. h. die Trägheitskraft des Ions ausgleicht und es auf die Sollbahn $\alpha(t)$ zwingt. Es wird nun $U(x - \alpha(t))$ mit dem berechneten Transportpotential (Gleichungen 1.5 und 1.13) identifiziert, sodass für das resultierende Potential

$$V(x, t) = -m\ddot{\alpha}(t) + \phi_1(x)U_1^0(t) + \phi_2(x)U_2^0(t), \quad (4.24)$$

folgt. Hier und im Folgenden werden wieder die Elektrodenpotentiale und Kontrollspannungen mit den Buchstaben ϕ und U bezeichnet. Das so bestimmte Potential ermöglicht einen quantenmechanisch vollständig gültigen, zustandserhaltenden Transport unter der Annahme, dass die ortsunabhängige, kompensierende Kraft $F(t)$ ohne weiteres experimentell realisierbar ist. Ohne den experimentellen Aufbau wesentlich zu ändern, ist dies nicht möglich, jedoch lässt sich die Kraft in erster Näherung gut durch Anlegen von zusätzlichen Elektrodenspannungen δU_i darstellen. Man setzt dazu

$$F(t) = m\alpha(t) = -\phi_1'(\alpha(t))\delta U_1(t) - \phi_2'(\alpha(t))\delta U_2(t), \quad (4.25)$$

sodass auf der Sollbahn $\alpha(t)$ stets die richtige Kraft aufgebracht wird. Gleichung 4.25 ist zunächst unterbestimmt. Durch Singulärwertzerlegung folgt als mögliche Lösung

$$\delta U_i = -\frac{\phi_i'(\alpha(t))m\ddot{\alpha}(t)}{\phi_1'(\alpha(t))^2 + \phi_2'(\alpha(t))^2}. \quad (4.26)$$

4. Invariantenbasierte Lösung

Das tatsächliche Potential ist dann gegeben durch

$$V_I(x, t) = \phi_1(x)(U_1^0(t) + \delta(U_1(t))) + \phi_2(x)(U_2^0(t) + \delta U_2(t)), \quad (4.27)$$

was im Allgemeinen auch zu einer anderen als der ursprünglich gewünschten Fallenfrequenz ω auf der Sollbahn des Ions führt,

$$m\omega_c(t)^2 = \sum_{i=1}^2 \phi_i''(\alpha(t))(U_i^0(t) + \delta U_i(t)) = m(\omega^2 + \delta\omega(t)^2), \quad (4.28)$$

wobei $\delta\omega(t)^2$ die Änderung der Fallenfrequenz durch die Zusatzspannungen δU_i beschreibt. Man kann daher die Unterbestimmtheit von Gleichung 4.25 ausnutzen und

$$m\delta\omega(t)^2 = \sum_{i=1}^2 \phi_i''(\alpha(t))\delta U_i(t) = 0 \quad (4.29)$$

setzen. Damit ist sichergestellt, dass das Ion der Sollbahn $\alpha(t)$ folgt und die Fallenfrequenz dort strikt konstant gehalten wird, sodass die Wellenfunktion in harmonischer Näherung keinem Quetschen unterliegt. Alle weiteren Quanteneffekte die aus dieser Lösung resultieren müssen folglich durch anharmonische Beiträge hervorgerufen werden, die dafür sorgen, dass Anteile der Wellenfunktion abseits der Sollbahn einer lokal veränderten Fallenfrequenz unterliegen. Die Gleichungen 4.25 und 4.29 lassen sich nun eindeutig lösen und führen zu

$$\delta U_i(t) = \frac{\ddot{\alpha}(t) (-1)^i m \phi_j''(\alpha(t))}{\phi_2''(\alpha(t))\phi_1'(\alpha(t)) - \phi_2'(\alpha(t))\phi_1''(\alpha(t))}, \quad i, j \in \{1, 2\}, \quad j \neq i. \quad (4.30)$$

Es fällt auf, dass die Gleichungen 4.26 und 4.30 im Wesentlichen von der Fallengeometrie abhängig sind und die Dauer des Transports T nur als Skalenparameter über $\ddot{\alpha}(t) = \alpha''(s)/T^2$ mit einfließen. Zum Transport des Ions entlang der Sollbahn $\alpha(t)$ müssen nun lediglich die korrigierten Spannungsrampen $U_i(t) = U_i^0(t) + \delta U_i(t)$ berechnet werden. Da alle dazu benötigten Funktionen aufgrund der rationalen Potential-Fits (gemäß den Gleichungen 1.6-1.8) analytisch vorliegen und keinerlei Propagation notwendig ist, ist die Rechenzeit zur Bestimmung der optimalen Spannungen verglichen zur klassischen Optimierung drastisch reduziert.

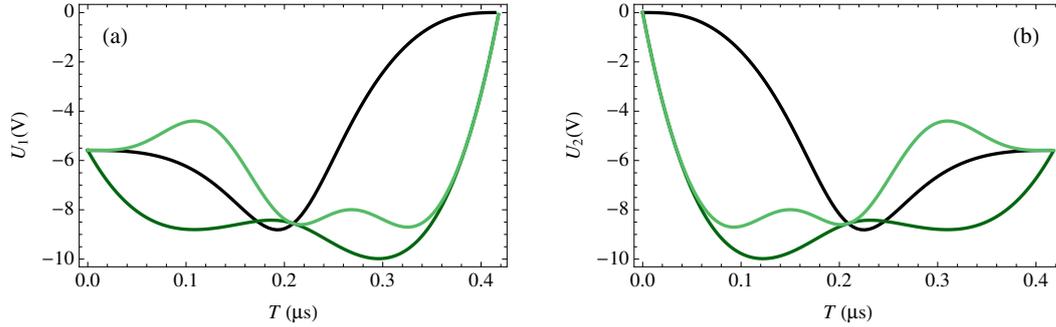


Abbildung 4.1.: Transportspannungen der jeweiligen Elektrodenpaare bei einer Transportzeit von 418 ns nach Gleichung 4.26 (hellgrün) und für eine konstante Fallenfrequenz am Ort des Ions nach Gleichung 4.30 (dunkelgrün). Ebenso abgebildet sind die ursprünglichen Transportspannungen $U_i^0(t)$.

4.3. Ergebnisse

Die invariantenbasierte Lösung des Transportproblems wurde mit Hilfe der in Kapitel 3.1 vorgestellten Propagationsmethode auf ihre quantenmechanische Gültigkeit untersucht. Dazu wurden jeweils die aus den Gleichungen 4.26 bzw. 4.30 berechneten Kompensationsspannungen mit der Transportfunktion $\alpha(t)$ aus Gleichung 1.10 verwendet. Die daraus resultierenden Transportspannungen sind exemplarisch in Abbildung 4.1 dargestellt. Die geforderte Randbedingung $\ddot{\alpha}(0) = \ddot{\alpha}(t) = 0$ sorgt dafür, dass die Kompensationsspannung an diesen Stellen verschwindet, sodass Anfangs- und Endzustand nicht durch die Methode verändert werden. Die resultierenden Segmentspannungen sind in beiden Fällen nahezu Symmetrisch gegenüber Zeitinversion, was wiederum aus der Ähnlichkeit der Potentiale folgt.

Ebenso wie im klassischen Verfahren wurde die minimal mögliche Transportzeit des Verfahrens für eine vorgegebene Maximalspannung bestimmt. Dazu wurde $T_{\min}^{\text{inv}}(U_{\max})$ als die Zeit angenommen, bei der die nach Gleichung 4.26 bzw. 4.30 berechneten Transportspannungen $U_i(t) = U_i^0(t) + \delta U_i(t)$ das gegebene Spannungslimit U_{\max} nicht überschreiten. Die resultierenden Abhängigkeiten für die beiden Ansätze sind in Abbildung 4.2 gezeigt. Für hohe Transportzeiten dominiert der Anteil $U_i^0(t) \propto \omega^2$ gegenüber den Kompensationsspannungen $\delta U_i(t) \propto \ddot{\alpha}(t) = \alpha''(s)/T^2$ in $U_i(t)$, sodass die beiden grünen Kurven einen Knick bei niedrigen Spannungen aufweisen. Im Grenzfall verschwindender Fallenfrequenz $\omega = U_i^0(t) = 0$ (gestrichelte Linien) liefern die beiden Kompensationsmethoden den gleichen Zusammenhang $T_{\min}(t) \propto U_{\max}^{-1/2}$ wie in der durch die klassische Optimierung erhaltenen Resultate (blau) auf. Bei hohen Werten von U_{\max} ist der

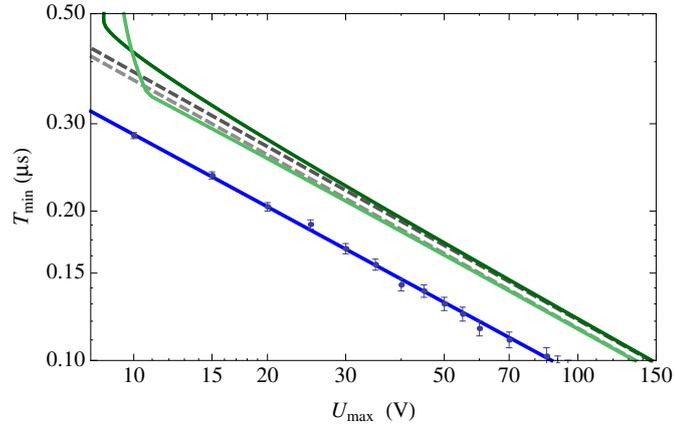


Abbildung 4.2.: Verhalten von minimaler Transportzeit T_{\min} gegen eine experimentelle Spannungslimitierung U_{\max} für die Invariantenmethode mit konstanter Fallenfrequenz $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz (dunkelgrün) nach Gleichung 4.26 und mit intermediär abweichender Frequenz (hellgrün) 4.30. Ebenfalls gezeigt ist das aus der klassischen Optimierung erhaltene Resultat (blau) aus Kapitel 2.5.

Einfluss von $U_i^0(t)$ derart gering, dass dieses Skalierungsgesetz auch im Fall endlicher Fallenfrequenzen gilt.

Die resultierenden Zielenergien $E(T)$ für eine maximal zulässige Elektrodenspannung von $U_{\max} = 10$ V sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Für die einfache Lösung aus Gleichung 4.26 ähnelt der Verlauf der Energien im Wesentlichen denen der numerisch optimierten Lösung. Er lässt sich ebenso auf Quetsch-Effekte der Wellenfunktion durch eine zeitabhängige Fallenfrequenz nach Gleichung 4.28 zurückführen. Eine deutliche Verbesserung demgegenüber zeigt die Alternativlösung aus Gl. 4.30. Bei der minimalen Transportzeit $T_{\min}^{\text{inv}}(10 \text{ V}) = 418$ ns ist diese in der Lage, die Energie gegenüber der klassisch optimierten Lösung um sechs Größenordnungen zu reduzieren. Der Überlapp der propagierten Wellenfunktionen mit dem Zielzustand wird mit einer Abweichung von weniger als 10^{-9} erreicht. Es zeigt sich also, dass die bei der klassischen Optimierung auftretenden Quetsch-Effekte vollständig vermieden werden können. Ebenso scheinen Anharmonizitäten des Potentials keine Rolle zu spielen, da sie bei der Implementierung der kompensierenden Kraft durch Anlegen von zusätzlichen Spannungen an die Elektroden nicht berücksichtigt werden und dennoch keinen merklichen Einfluss auf den Transportprozess haben. Für die quantenmechanisch gültige Lösung (Abbildung 4.2

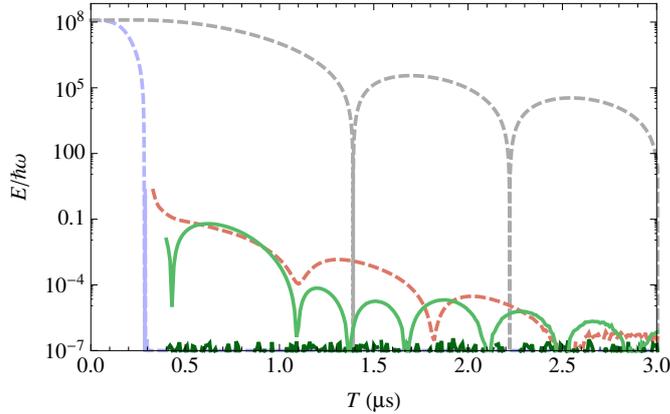


Abbildung 4.3.: Energie des Ions nach dem Transport mit Spannungsrampen, die mit der Invariantenmethode generiert wurden. Die Lösung nach Gleichung 4.26 (hellgrün) liefert ein mit der numerischen Optimierung (rot) vergleichbares Resultat. Bei Vermeidung einer variierenden Fallenfrequenz am Ort des Ions nach Gleichung 4.30, ist die resultierende Energie im Bereich des numerischen Fehlers 10^{-7} (dunkelgrün). Ebenfalls gezeigt sind die Resultate der geratene Transportspannungen (grau) sowie die klassischen Resultate der optimierten Lösung aus Kapitel 2.5 (hellblau).

dunkelgrün) folgt durch Anpassung mittels Gleichung 2.58

$$T_{\min} = 1.268(3) \mu\text{s} \left(\frac{U_{\max}}{1\text{V}} \right)^{-0.510(1)}. \quad (4.31)$$

Damit ist die quantenmechanisch gültige Methode im Mittel um einen Faktor 1.44 langsamer als die schnellste klassische Lösung aus Kapitel 2.5. Eine weitere Verkürzung der minimalen Transportzeiten kann durch die Wahl modifizierter Transportfunktionen $\alpha(t)$ erreicht werden. Durch Miteinbeziehen höherer Polynomordnungen bei der Entwicklung von $\alpha(t)$ können die Kompensationsspannungen $\delta U_i(t)$ nach Gleichung 4.30 gezielt reduziert werden. Falls der dort auftauchende Geometriefaktor

$$G_{\text{F}}(x) = \frac{m\phi_j''(x)}{\phi_2''(x)\phi_1'(x) - \phi_2'(x)\phi_1''(x)} \quad (4.32)$$

am Ort $x = \alpha(t)$ Vergleichsweise hoch ist, muss dort die Beschleunigung $\ddot{\alpha}(t)$ gezielt verringert werden, um zu verhindern, dass $\delta U_i(t)$ die zulässige Maximalspannung U_{\max} überschreitet.

An diesem Punkt lässt sich festhalten, dass der schnellste quantenmechanisch gültige Transport langsamer sein muss als die Resultate der klassischen Optimierung, da

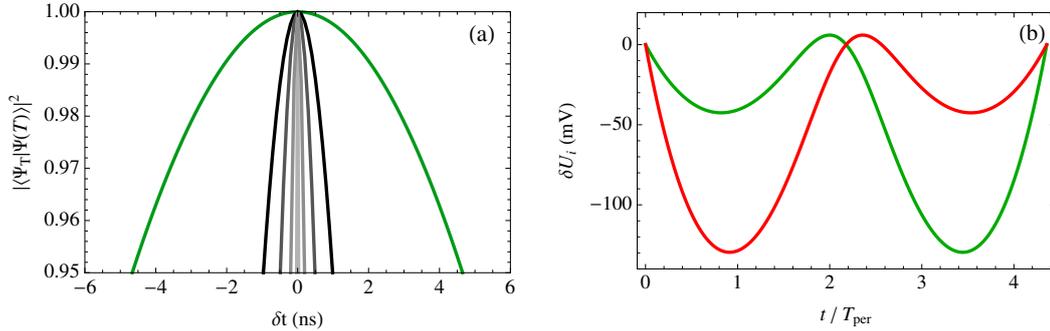


Abbildung 4.4.: Stabilität des Überlapps von propagierter und Zielwellenfunktion gegenüber Fluktuationen der Transportzeit (a) für invariantenbasierte Spannungen bei $T = 3.351 \mu\text{s}$ (rot) und initiale Spannungen für $T = 1.391 \mu\text{s}$, $T = 2.220 \mu\text{s}$, $T = 3.014 \mu\text{s}$ und $T = 3.795 \mu\text{s}$ (hellgrau bis schwarz). (b) Korrekturspannungen $\delta U_i(t)$ zu den initialen Spannungen bei $T = 3.351 \mu\text{s}$ für linkes (grün) und rechtes Segment (rot).

die bang-bang Lösung nach Pontryagins Maximums Prinzip schon die schnellstmögliche Lösung für begrenzte Spannungen darstellt, allerdings keine quantenmechanische Gültigkeit besitzt. Die Korrektur der auftretenden Quetscheffekte erfordert zusätzliche Spannungen, sodass die schnellste, quantenmechanisch gültige Lösung zwischen der blauen und dunkelgrünen Line in Abbildung 4.2 liegen wird.

4.4. Stabilität

Ebenso wie im Fall der klassischen Optimierung (Kapitel 3.4 wurde das Verhalten des Überlapps gegenüber kleinen Variationen δt der Transportzeit T für den invariantenbasierten Transport untersucht. Auch hier kommt es für die bereits in der Optimierung betrachtete Transportzeit $T = 3.351 \mu\text{s}$ bei einer Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ zu einer deutlichen Steigerung der Stabilität. Das Resultat der Stabilitätsanalyse ist in Abbildung 4.4(a) dargestellt. Der Überlapp der propagierten Wellenfunktion mit dem Zielzustand (grün) ist auf einem Bereich von $\delta t_{\text{inv}} = 9.3 \text{ ns}$ höher als 95%. Ebenfalls dargestellt ist die Stabilität bei Verwendung der initialen Transportspannungen $U_i^0(t)$ für das erste bis vierte (hellgrau bis schwarz) Energieminimum. Auch hier zeigt sich deutlich, dass die Wahl der Transportspannungen einen bedeutenden Einfluss auf die Stabilität des Verfahrens haben kann. Die Spannungskorrekturen δU_i , die sich für den betrachteten Zeitpunkt aus der Invariantenmethode nach Gleichung 4.30 ergeben, sind

in Abbildung 4.4(b) dargestellt. Im Gegensatz zur klassischen Optimierung sind die Korrekturspannungen allerdings wesentlich größer und weisen aufgrund der fundamental anderen Funktionsweise der Invariantenmethode weitaus weniger oszillatorisches Verhalten auf, was eine mögliche Experimentelle Implementierung realistischer erscheinen lässt.

5

Quantenmechanische Optimierung

Es hat sich gezeigt, dass sich die invariantenbasierte Lösung des Transportproblems sehr gut eignet, um für die vorliegenden Potentialformen geeignete Transportspannungen für einen zustandserhaltenden Transport zu generieren, obwohl die theoretisch rein zeitabhängige Kompensationskraft durch die Implementierung mittels zusätzlicher Elektroden spannung eine Ortsabhängigkeit erhält. Aufgrund der geringen Ausdehnung der Wellenfunktion σ_0 ist der Einfluss von diesen lokalen Anharmonizitäten des Potentials vernachlässigbar klein. Erst wenn sich die Dynamik über stark anharmonische oder anharmonisch fluktuierende Bereiche des Potentials erstreckt, wird ein dispersiver Effekt auf die Wellenfunktion erwartet. Im Fall von gefangenen Ionen bedeutet das, dass die Ausdehnung der Fallenpotentiale und damit der Segmentelektroden in der gleichen Größenordnung wie die Ausdehnung der Wellenfunktion liegt. Ebenso ist zu erwarten, dass in diesem Regime Anharmonizitäten zur gezielten Anregung von Fock-Zuständen genutzt werden können. Für aktuelle Ionenfallen bietet sich diese Möglichkeit aufgrund deren noch vergleichsweise großen Elektrodenstrukturen nicht. Aktuelle Fortschritte im Bereich der Materialwissenschaften und Oberflächenbehandlung [DGB⁺13, HCW⁺12] versprechen jedoch das Minimieren von Störeffekten [HLBH11] bei einer weiteren Miniaturisierung und könnten in naher Zukunft in dieses Regime führen.

In diesem Kapitel wird daher die Möglichkeit einer direkten, quantenmechanischen Optimierung des Transportproblems und die Limitierung der Invariantenmethode diskutiert. Dazu ist es nötig zunächst die korrekte Funktionsweise der numerischen Optimierung unter Verwendung des mitbewegten Bezugssystems zu überprüfen.

5.1. Test der Optimierung mit mitbewegten Bezugssystem

Um eine korrekte Implementierung des mitbewegten Gitters in den Optimierungsalgorithmus zu testen, muss dieser das gleiche Ergebnis liefern wie eine Optimierung ohne das mitbewegte Gitter. Da im Fall des Ionentransports aus numerischen Gründen das bewegte Bezugssystem verwendet werden muss, kann ein Test nur in einem Regime durchgeführt werden, in dem die Verwendung eines festen Gitters ebenfalls möglich ist. Die Optimierung wurde daher in einem miniaturisierten, unrealistischen Modellsystem durchgeführt, was lediglich zum Testen der korrekten Implementierung dient. Für den Test wurden atomare Einheiten (a.u.¹) und ein Modellpotential der Form

$$V(x, t) = \sum_{i=1}^5 u_i(t) \frac{1}{2} m \omega^2 (x - x_i)^2 \quad (5.1)$$

mit äquidistanten Potentialminima $x_1 = 0$ bis $x_5 = 10$ und den dimensionslosen Spannungen $u_i(t)$ verwendet und das Ion von x_1 bis x_5 in $T = 10$ transportiert. Die Wellenfunktion $\Psi(x, 0)$ wurde als Grundzustand des Potentials mit $\omega = 1$, $m = 1$ und $u_1 = 1$, $u_i = 0$, $i \geq 2$ initialisiert, die Zielwellenfunktion $\Psi_T(x)$ entsprechend als Grundzustand des Potentials mit $u_5 = 1$, $u_i = 0$, $i \leq 4$, sodass deren Breiten jeweils durch $\sigma_0 = 1$ a.u. gegeben sind. Der Transport entspricht also dem eines Elektrons über eine Strecke von zehn mal dem Bohrschen Radius a_0 in $T \approx 0.24$ fs in einem Potential mit Grundzustandsenergie von $\hbar\omega/2 = 13.6$ eV. Für das mitbewegte Bezugssystem wurde ein Gitter der Breite $\Delta r = 20$ mit 128 Gitterpunkten verwendet. Das entsprechende statische Gitter wurde für eine Breite von $\Delta r \approx 30.08$ auf 192 Gitterpunkten initialisiert, wie in Abbildung 5.1 illustriert. Als initiale Optimierungsparameter wurden gaußförmige Spannungen $u_i^0(t)$ in Zeitschritten von $dt = 0.01$ vorgegeben, die in Abbildung 5.2(a) dargestellt sind. Sie liefern bei initialer Propagation eine Fidelität von $\mathfrak{F} = |\langle \Psi_T | \Psi(T) \rangle|^2 \approx 0.11$.

¹ Für atomare Einheiten wird die Elementarladung e , das Plancksche Wirkungsquantum \hbar , der Bohrsche Radius a_0 , die Elektronenmasse m_e und damit auch die Hartree-Energie $E_h = \hbar^2/(m_e a_0^2) = 1$ gesetzt, sodass Ladungen in Einheiten von e , Zeiten in \hbar/E_h , Längen in a_0 und Energien in E_h angegeben werden.

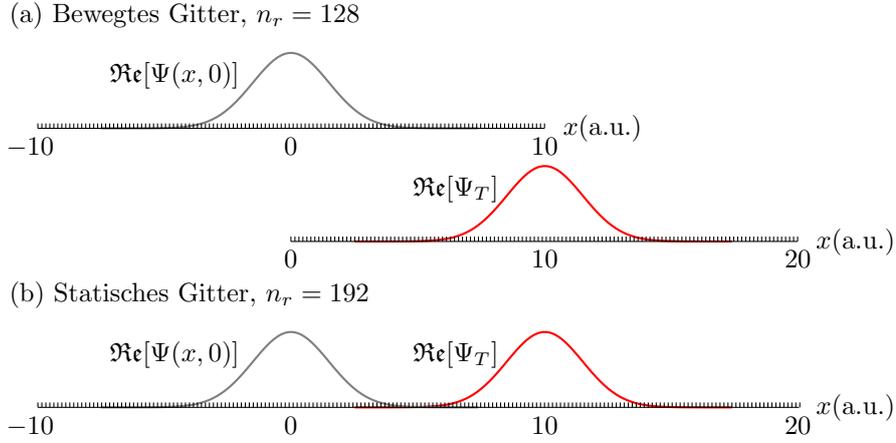


Abbildung 5.1.: Wahl der Gitter zum Test des Optimierungsalgorithmus für das Mitbewegte Bezugssystem. Die Gitter wurden so gewählt, dass sowohl die Position als auch der Abstand dr der Gitterpunkte übereinstimmt.

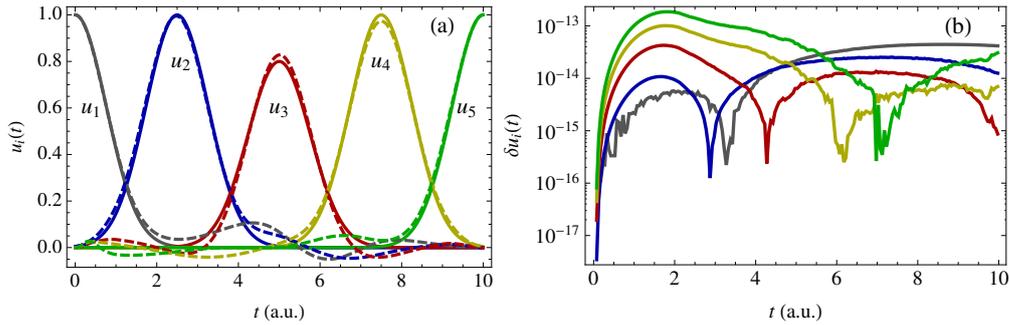


Abbildung 5.2.: (a) Initiale (durchgezogene Linien) und optimierte Spannungen nach 50 Iterationen (gestrichelte Linien). (b) Abweichungen der Spannungen nach der Optimierung mit statischem und beweglichem Gitter.

Durch Optimierung mit konstantem Skalierungsparameter $\lambda_a = 10^2$ und der Modellierungsfunktion $S(t)$ aus Gleichung 2.28 mit $\tau = 0.2$ folgen nach 50 Iterationen die Optimierte Spannungen $u_i^{50}(t)$, die ebenfalls in Abbildung 5.2(a) (gestrichelt) abgebildet sind. Die Differenz $\delta u_i(t)$ der Spannungen aus der Optimierung mit statischem zur Optimierung mit mitbewegtem Gitter (Abbildung 5.2(b)) liegt für das betrachtete Beispiel unter 10^{-12} . Der Algorithmus ist also sowohl für das mitbewegte, als auch für das statische Gitter in der Lage, optimale Lösungen zu finden, die gut miteinander übereinstimmen.

5.2. Anwendung auf das Transportproblem

Während der klassische Algorithmus für nahezu beliebige initiale Spannungen $U_i^0(t)$ konvergiert, erfordert eine quantenmechanische Optimierung zumindest einen geringen initialen Überlapp der propagierten Wellenfunktion $\Psi(x, T)$ mit dem Zielzustand $\Psi_T(x)$, wie anhand von Gleichung 2.45 leicht ersichtlich ist. Falls sich nicht einmal die Ortsgitter der beiden Wellenfunktionen überlappen, verschwindet der Hilfszustand $\chi(T)$, sodass keine Rückwärtspropagation von $\chi(t)$, geschweige denn eine Optimierung der Spannungen nach Gleichung 2.55 möglich ist. Um die Optimierbarkeit des Problems zu studieren, ist es insbesondere notwendig, dass die verwendeten initialen Spannungsrampen nicht schon zu einem perfekten Überlapp führen. Daher sind die Lösungen der Invariantenmethode nicht als Ausgangspunkt geeignet. Stattdessen können die Spannungsrampen der klassischen Optimierung als Ausgangspunkt dienen, da sie für sehr kurze Transportspannungen deutliche Quetsch-Effekte hervorgerufen haben. Im Hinblick auf eine Miniaturisierung der Fallenpotentiale wird der dimensionslose Skalenparameter $\xi = \sigma_0/d$ als Verhältnis aus Breite der Wellenfunktion zu charakteristischer Breite der Elektrodenstrukturen eingeführt. Dieser lässt sich leicht über die Fallenfrequenz ω skalieren, sodass es für eine Analyse des Konvergenzverhaltens in Abhängigkeit der Systemgröße ξ nicht notwendig ist, die vorliegenden Elektrodenpotentiale umzuskalieren. Für eine gleichbleibende Trägheit des Schwerpunktes muss dann allerdings das Produkt aus Fallenfrequenz und Transportzeit konstant gehalten werden. Zur Analyse der quantenmechanischen Optimierbarkeit wurde zunächst $T = 300$ ns und $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz gewählt. Um ξ über $\sigma_0 \propto \omega^{-\frac{1}{2}}$ variieren zu können, wurde wie folgt skaliert:

$$\omega_j = \omega \cdot 10^{-j}, \quad T_j = T \cdot 10^j, \quad (5.2)$$

$$j \in \{0.0, 0.1, \dots, 5.9, 6.0\}. \quad (5.3)$$

Die mit diesen Parametern durch klassische Optimierung auf 10^5 Zeitschritten bestimmten Transportspannungen wurden als Basis für weitere quantenmechanische Optimierung verwendet. Die Spannungen wurden dabei nicht nach oben durch ein U_{\max} beschränkt, um die Konvergenz des Algorithmus nicht zu gefährden. Als Modellierungsfunktion der Spannungsupdates wurde $S(t)$ aus Gleichung 2.28 mit $\tau = 0.01$ verwendet, um in einem möglichst großen Zeitbereich eine Variation der Spannungen zuzulassen. Die Wellenfunktionen wurden auf Gittern zu je 128 Punkten initialisiert und dessen Breite mit abnehmender Fallenfrequenz und damit zunehmender Breite der Grundzu-

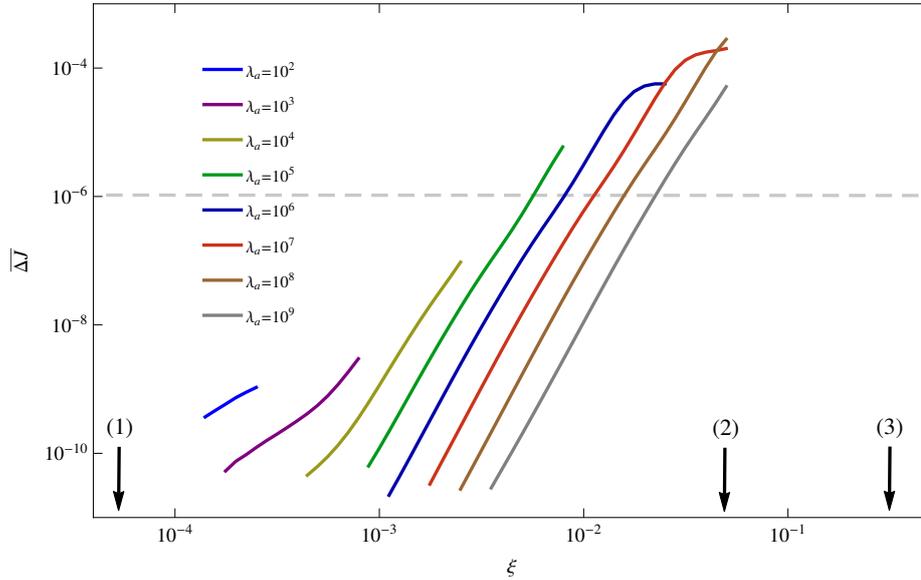


Abbildung 5.3.: Durchschnittliche Konvergenz $\overline{\Delta J}$ des zu optimierenden Funktionals J , gemittelt über 100 Iterationen aufgetragen gegen die relative Größe der Wellenfunktion ξ für verschiedene Werte des Skalierungsfaktors λ_α . (1) Parameterbereich aktueller Fallentechnologien, (2) Bereich in dem die quantenmechanische Optimierung gut funktioniert, (3) Bereich in dem die quantenmechanische Optimierung unabdingbar wird, da die Invariantenmethode versagt.

standswellenfunktion mitskaliert, um die Darstellbarkeit weiter zu gewährleisten. Die Resultate der Optimierungen sind in Abbildung 5.3 dargestellt. Es wurde dazu die mittlere Konvergenz $\overline{\Delta J}$ über 100 Iterationen berechnet und für verschiedene Werte des Skalierungsparameters λ_α gegen die Systemgröße ξ aufgetragen. Die Kurven sind nach unten beschränkt, da der Algorithmus dort aufgrund von Updates in Größenordnung der Maschinengenauigkeit nur numerisch fluktuierende Werte für ΔJ liefert. Werte von $\overline{\Delta J} < 10^{-6}$ (graue Linie) beschreiben unzureichende Konvergenz, die eine erhebliche Zahl von Iterationen und damit Propagationen erfordert, um das Optimierungsziel zu erreichen. Bei einer Propagationszeit von etwa einer Minute läge die Rechenzeit hier schnell in der Größenordnung von einem Jahr. Durch Verringern von λ_α lässt sich zumindest im Bereich von $\xi = 10^{-3}$ - 10^{-2} die Konvergenz steigern. Nach oben sind die Kurven allerdings durch numerische Instabilitäten des Algorithmus beschränkt, sodass sich im Bereich aktueller Fallenpotentiale (1) für die verwendeten Parameter keine Konvergenz einstellt. Die aktualisierten Spannungen, die der Algorithmus in diesem Fall berechnet,

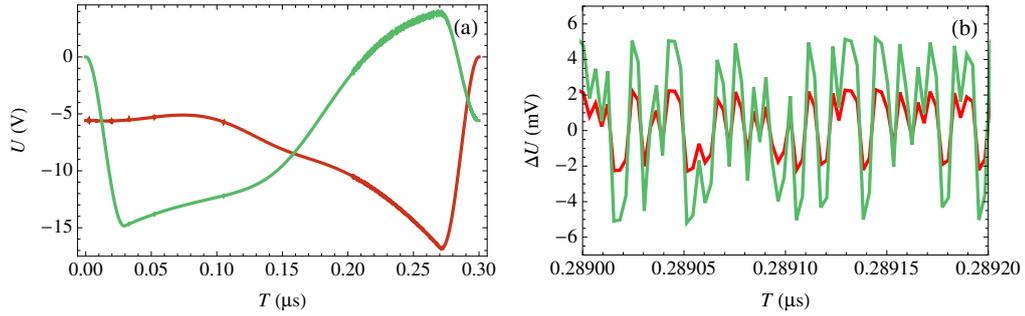


Abbildung 5.4.: Auftretendes Rauschen der Spannungen nach einem quantenmechanischen Optimierungsschritt gemäß Gleichung 2.55 für einen Transport mit $T = 300$ ns und $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz. (a) Sowohl die Spannungen des linken (rot) als auch des rechten Segments (grün) zeigen ein aufgeprägtes Rauschen. (b) Ausschnitt der Differenz ΔU zu den klassisch optimierten Spannungen, die zur initialen Propagation dienen. Man erkennt ein deutliches Rauschen im mV-Bereich, auf der Zeitskala eines Zeitschrittes dt .

sind stets von starkem Rauschen geprägt, wie in Abbildung 5.4 exemplarisch gezeigt ist.

Begründet ist dies in der numerischen Berechnung der Spannungsupdates nach Gleichung 2.55: Wird das Update durch ein zu geringen Wert von λ_a im Zeitschritt t_j zu groß gewählt, ist der Einfluss auf die damit propagierte Wellenfunktion $|\Psi(t_j + dt)\rangle$ im nächsten Zeitschritt zu stark. Als Konsequenz ist wird die neue Spannungsänderung dies versuchen auszugleichen, sodass sich ein Rauschen auf der Skala eines Zeitschrittes dt aufbaut und insgesamt zum Konvergenzverlust führt. Um dies zu vermeiden und dennoch das vorgestellte Optimierungsverfahren auf realistischen Skalen verwenden zu können, existieren zwei Ansätze. Eine Möglichkeit ist es, die Spannungsupdates künstlich durch ein sehr hohes λ_a zu beschränken, was die Zahl der nötigen Iterationen aufgrund der geringen Konvergenz in die Höhe treibt und damit utopische Zahlen von Iterationen erfordert, wie man aus Abbildung 5.3 entnehmen kann. Im Fall (1) sind die Spannungsupdates pro Zeitschritt dann jedoch unterhalb der Maschinengenauigkeit, sodass dennoch keine Konvergenz eintritt. Eine dazu äquivalente Möglichkeit ist es, die Zeitdiskretisierung zu verfeinern. Durch kleinere Zeitschritte sinken ebenso die Auswirkungen auf Ort und Impuls durch das Spannungsupdate nach einem Zeitschritt. Eine Erhöhung der Zeitschritte erfordert allerdings dazu proportional mehr Speicherplatz um die Spannungen und Hilfszustände zu speichern. Ebenso steigt die Zahl der notwendigen Propagationsschritte an, sodass kein nennenswerter Zeitvorteil entsteht.

Sind wie im Fall (1) die Spannungsupdates unterhalb der Maschinengenauigkeit, ist zudem ebenso keine Konvergenz zu beobachten.

Erfreulicherweise zeigt sich jedoch, dass die Anwendung der Invariantenmethode nach Gleichung 4.30 sogar noch für $\xi = 2 \cdot 10^{-2}$ (Pfeil (2) in Abbildung 5.3) gut funktioniert. Erst wenn die Wellenfunktion in der Größenordnung des Elektrodenabstandes liegt, kommt es zum Scheitern, da die implementierte Kompensationskraft (Glei-

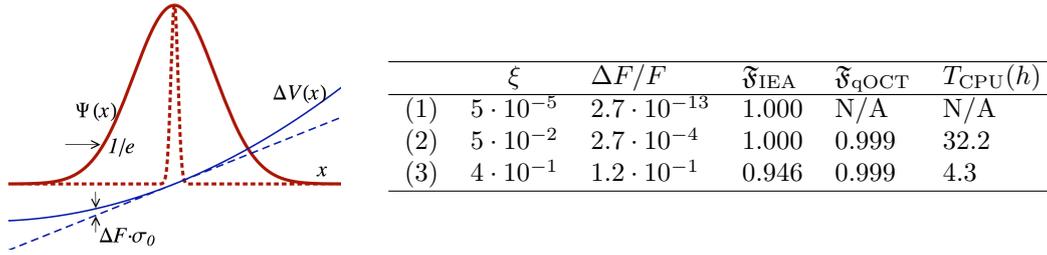


Abbildung 5.5.: Nichtlineare Effekte, die eine Anwendung der quantenmechanischen Optimierung im Fall (3) für $\xi = 4 \cdot 10^{-1}$ erforderlich machen. Die Konvergenz in diesem Regime ist verglichen mit (1) und (2) sehr gut und führt zu einer handhabbaren Rechenzeit $T_{\text{CPU}} = 4.3$ h

chung 4.25) über den Bereich der Wellenfunktion nicht mehr konstant sein kann, wie in Abbildung 5.5 dargestellt. Die Inhomogenität der Kompensationskraft $\Delta F = \sum_i [\phi'_i(\alpha(t) + \sigma_0) - \phi'_i(\alpha(t) - \sigma_0)] \delta U_i(t)$ über den Bereich der Wellenfunktion wird durch Nichtlinearitäten des zusätzlichen Potentials $\Delta V = \sum_i \phi_i(x) \delta U_i(t)$ verursacht, mit dem die Kraft nach 4.25 implementiert wurde. Die relative Inhomogenität $\Delta F/F$ wurde für den Zeitpunkt angegeben, an dem die Beschleunigung $\ddot{\alpha}(t)$ und damit die Kompensation maximal ist. Für große Wellenfunktionen ist $\Delta F/F$ im Bereich einiger Prozent, was zum Auftreten signifikanter, anharmonischer Effekte führt. Die Fidelität $\mathfrak{F} = |\langle \Psi(T) | \Psi_T \rangle|^2$ ist für $\xi = 0.4$ (Pfeil (3) in Abbildung 5.3) bei Anwendung der Invariantenmethode nur noch bei 94.5 % während durch quantenmechanische Optimierung nach wenigen Stunden Rechenzeit $\mathfrak{F}_{\text{qOCT}} = 99.9\%$ erreicht werden konnte. Die Rechenzeit T_{CPU} , die zur Optimierung benötigt wurde, konnte aufgrund der weniger instabilen Numerik in Fall (3) leicht um einen Faktor 8 im Vergleich zu (2) reduziert werden.

Die quantenmechanische Optimierung des Transportproblems hat gezeigt, dass die numerischen Methoden bei momentan verwendeten Fallengeometrien an ihre Grenzen stoßen, was Speicherbedarf und Rechenzeit betrifft. So ist es für aktuelle Ionenfallen momentan nicht möglich aber aufgrund der Invariantenbasierten Lösung auch nicht

5. Quantenmechanische Optimierung

nötig quantenmechanisch gültige Kontrollsequenzen für Transportzeiten unterhalb der Fallenfrequenz aus der Optimierung zu erhalten. Erst durch drastisches reduzieren der Größe des Potentials verglichen zur Transportstrecke wird die vollkommen quantenmechanische Optimierung notwendig und anwendbar, sodass für jede denkbare Skala eine Möglichkeit zum Finden optimaler Lösungen gegeben ist.

6

Optische Potentiale zur Quantenmechanischen Zustandskontrolle

Potentiale, die auch bei Verwendung aktueller Ionenfallen über die Ausdehnung der Wellenfunktion signifikante Anharmonizitäten zeigen, lassen sich durch beispielsweise durch optische Stehwellen erzeugen. Im Folgenden wird die Realisierbarkeit einer Fock-Anregung durch reine Kontrolle von Phase und Amplitude eines solchen Lichtpotentials untersucht.

6.1. Erzeugen einer Stehwellen-Struktur entlang der Fallenachse

Üblicherweise verwendet man optische Potentiale zum Fangen neutraler Atome in Dipolfallen [GWO00]. Die Wellenlängen des verwendeten Lichts müssen dabei gegenüber den elektronischen Übergängen des Atoms beziehungsweise des Ions verstimmt sein, um eine resonante Lichtstreuung zu vermeiden. Um eine stehende Welle entlang der Fallenachse zu erzeugen, werden zwei Laser der Wellenlänge $\lambda_L = 2\pi c/\omega_L$ im Winkel von 45° zur Fallenachse überlagert, wie in Abbildung 6.1 schematisch dargestellt. Die Wellenlän-

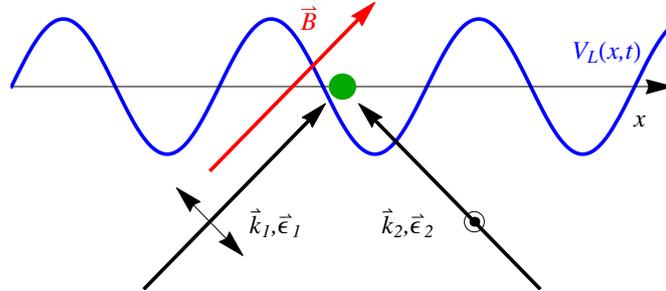


Abbildung 6.1.: Schematischer Aufbau zum Erzeugen eines Lichtpotentials $V_L(x, t)$ (blau) entlang der Fallenachse. Durch Anlegen des Magnetfelds (rot) wird die Quantisierungsachse vorgegeben. Die beiden Laserstrahlen (schwarz) mit Wellenvektoren \vec{k}_1 und \vec{k}_2 werden jeweils im Winkel von 45° eingestrahlt. Beide Strahlen sind senkrecht zum Magnetfeld polarisiert, der Polarisationsvektor \vec{e}_1 liegt dabei parallel zur $\vec{x} - \vec{B}$ -Ebene, \vec{e}_2 senkrecht dazu.

ge wird dabei gegenüber dem $4^2S_{1/2}$ nach $4^2P_{1/2}$ Übergang bei 396.8 nm [Jam98] um die Frequenz Δ_R rot verstimmt. Durch Anlegen eines Magnetfeldes parallel zum Wellenvektor \vec{k}_1 wird die Quantisierungsachse vorgegeben und der elektronische Grundzustand $4^2S_{1/2}$ des verwendeten $^{40}\text{Ca}^+$ -Ions in die Spin-Untersubzustände $|m_j = 1/2\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|m_j = -1/2\rangle = |\downarrow\rangle$ Zeeman-aufgespalten. Für das dargestellte Szenario ergibt sich dann ein spinabhängiges Potential der Form (nach [Pos10], Gleichung 8.5)

$$V_L(x, t) = A \cos(\Delta k(x - x_1) - \varphi) \hat{\sigma}_z, \quad (6.1)$$

mit Amplitude A , der relativen Phasendifferenz der beiden Laserstrahlen φ und dem resultierenden Wellenvektor

$$\Delta k = |\vec{k}| / \cos(45^\circ) = \sqrt{2} \frac{2\pi}{\lambda_L} = \frac{2\pi}{\lambda_c}. \quad (6.2)$$

Die Spinabhängigkeit wird dabei durch die Pauli-Matrix $\sigma_z = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ beschrieben. Für die Amplitude A folgt nach [Pos10] (Gleichungen 2.21-2.22, 8.6)

$$A = \frac{\pi c^2 \Gamma}{2 \omega_{\text{ge}}^3 \Delta_R} I, \quad (6.3)$$

mit der Übergangsfrequenz $\omega_{ge} = 2\pi \cdot 755 \text{ GHz}$ und der natürlichen Linienbreite $\Gamma = 2\pi \cdot 21 \text{ MHz}$ des elektronischen Übergangs vom Grundzustand $4^2S_{1/2}$ zum $4^2P_{1/2}$ Zustand des $^{40}\text{Ca}^+$ Ions [Jam98]. Die Amplitude des Potentials lässt sich also direkt über die Verstimmung Δ_R und die Intensität I der eingestrahlten Laser steuern. Wird die Intensität und hoch oder die Verstimmung zu gering gewählt, kommt es zur Streuung von Photonen, die zum Umklappen des Spins und damit zu einem Vorzeichenwechsel des Potentials führen. Die Streurrate errechnet sich nach [Pos10] (Gleichung 6.1) zu

$$R = \frac{\Gamma A}{3\hbar\Delta_R}, \quad (6.4)$$

und hängt damit direkt vom Verhältnis aus Amplitude A und Verstimmung Δ_R ab. Um das Potential aus Gleichung 6.1 mit Hilfe zeitabhängiger Amplituden und Phasen zur Zustandsmanipulation nutzen zu können, ist es aber nicht nur notwendig die Streuraten durch kleine Amplituden und hohe Verstimmungen gering zu halten. Es muss ebenso gewährleistet sein, dass die beiden Laserstrahlen zueinander Phasenstabil sind, was hohe Anforderungen an die interferometrische Stabilität des Aufbaus stellt. Aktuelle Experimente haben gezeigt [WPSSK12], dass sich Stehwellen erzeugen lassen, deren relative Phase über Sekunden stabil bleibt. Sie ist jedoch zu Beginn einer Messung durch die auftretenden Drifts unbekannt, sodass Messungen zu deren Kalibrierung auf wesentlich kürzeren Zeitskalen erfolgen müssen.

6.2. Parametrisierung des Lichtpotentials

Um das in Kapitel 2.4 vorgestellte Krotov-Verfahren anwenden zu können, wird zur Auswertung von Gleichung 2.55 verlangt, dass der Hamiltonoperator \hat{H} linear von den Kontrollparametern abhängig ist. Im Fall einer stehenden Lichtwelle, ist jedoch das zusätzliche Lichtpotential nach 6.1 für einen definierten Spinzustand durch

$$\begin{aligned} V_L(x, t) &= A(t) \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_c}(x - x_1) - \varphi(t)\right) \\ &= 2A(t) \left(\cos^2\left(\frac{\pi}{\lambda_c}(x - x_1) - \frac{\varphi(t)}{2}\right) + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (6.5)$$

gegeben. Die positive Amplitude $A(t)$ und die Phase $\varphi(t)$ der Lichtwelle lassen sich also nicht ohne weiteres durch das Krotov-Verfahren kontrollieren. Durch geschicktes

Umformen folgt jedoch die Identität

$$V_L(x, t) = a(t) \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_c}(x - x_1)\right) + b(t) \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_c}(x - x_1)\right), \quad (6.6)$$

mit

$$\begin{aligned} A(t) &= \sqrt{a^2 + b^2}, \\ \varphi(t) &= \left(\frac{\pi}{2} - \text{sign}^+(a) \cos^{-1}\left(\frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}}\right)\right), \end{aligned} \quad (6.7)$$

wobei $\text{sign}^+(a)$ als Signumfunktion mit der zusätzlichen Eigenschaft $\text{sign}^+(0) = 1$ definiert wurde. Durch Anwenden der Additionstheoreme folgt aus Gleichung 6.5 für die Umkehrfunktionen

$$\begin{aligned} a(t) &= A(t) \cos(\varphi(t)), \\ b(t) &= A(t) \sin(\varphi(t)), \end{aligned} \quad (6.8)$$

sodass nach Optimierung der neuen Kontrollparameter $a(t)$ und $b(t)$ die optimale Amplitude und Phase der Lichtwelle berechnet werden kann. Die neuen Kontrollparameter $a(t)$ und $b(t)$ sind also prinzipiell zur Optimierung geeignet.

6.3. Erzeugen einer Fock-Anregung

Zur Optimierung wurde die Wellenfunktion im Grundzustand $|0\rangle$ des statischen Fallenpotentials

$$V(x, 0) = \phi_1(x)U_1(0), \quad U_1(0) = U_1(t) = -5.59 \text{ V} \quad (6.9)$$

initialisiert. Die Spannung entspricht dabei einer Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$. Als Zielzustand wurde der erste angeregte Fock-Zustand $|1\rangle$ gewählt. Aufgrund der Orthogonalität $\langle 0|1\rangle = 0$ ist es nach Gleichung 2.45 notwendig, dass die initialen Parameter $a^0(t)$ und $b^0(t)$ den Grundzustand zumindest ein wenig aus dem Fallenzentrum auslenken, sodass ein geringer initialer Überlapp $\mathfrak{F}(0) = |\langle \Psi^0(T)|1\rangle|^2 > 0$ gewährleistet ist. Es wurde intuitiv

$$a^0(t) = 0, \quad b^0(t) = b_{\max} \exp\left[-\frac{(t - t_b)}{2\sigma_b^2}\right] \quad (6.10)$$

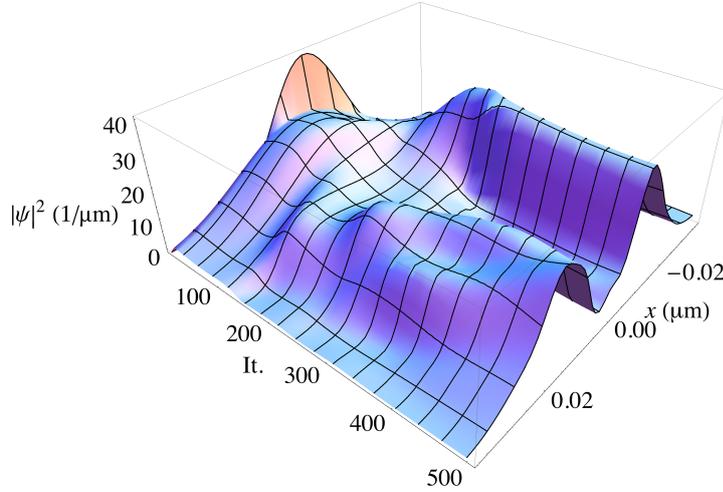


Abbildung 6.2.: Entwicklung der propagierten Wellenfunktion $\Psi(T)$ mit zunehmender Anzahl von Optimierungsschritten (It.)

bei einer Wellenlänge von $\lambda_c = \lambda_L/\sqrt{2} = 280.613 \text{ nm}$ gewählt. Da sich der Grundzustand zu Beginn der Sequenz am Ort $\langle x \rangle = x_1$ befindet, erfährt er nach Gleichung 6.6 durch den mit $b^0(t)$ gepulsten Sinus-Anteil von $V_L(x, t)$ eine Auslenkung in negative x -Richtung. Durch geeignete Wahl der Amplitude b_{\max} und Breite σ_b erfüllt man leicht die Bedingung $\mathfrak{F}(0) > 0$. Dabei ist zu beachten, dass σ_b nicht zu groß gewählt wird und $0 \ll t_b \ll T$, sodass der Puls keine nennenswerten Beiträge zum Potential bei $t = 0$ und $t = T$ liefert. Ansonsten würde die initiale und finale Wellenfunktion durch das Zusätzliche Potential nicht als ungestörter Fock-Zustand initialisiert werden. Für die hier betrachtete Optimierung wurden die Parameter $T = 50 \mu\text{s}$ bei 10^4 Zeitschritten, $b_{\max} = 0.54 \text{ neV}$, $t_b = 900 \text{ ns}$ und $\sigma_b = 127 \text{ ns}$ gewählt, sodass $b^0(T) \ll b^0(0) < 10^{-11} \text{ neV}$, was verglichen mit der Energie des ungestörten Grundzustandes $\hbar\omega/2 = 2.69 \text{ neV}$ zu vernachlässigen ist. Als Ortsgitter wurden 512 Punkte auf einer Breite von $0.8 \mu\text{m}$ verwendet. Der damit erreichte Überlapp erscheint mit $\mathfrak{F} \approx 1.10 \cdot 10^{-3}$ sehr klein. Aufgrund der gutmütigen Konvergenz des Algorithmus im betrachteten Regime ist ein besserer initialer Puls jedoch nicht erforderlich. Die Funktionsweise des Algorithmus ist dabei die Folgende: Zunächst werden $a(t)$ und $b(t)$ so optimiert, dass die propagierte Wellenfunktion mit dem rechten Maximum der Wellenfunktion $|\langle x|1 \rangle|^2$ überlappt. Dies ist bereits nach etwa 10 Iterationsschritten abgeschlossen. Im weiteren Verlauf der Optimierung arbeitet der Algorithmus dann ein zweites Maximum aus der propagierten Wellenfunktion heraus, was in Abbildung 6.2 illustriert ist. Nach etwa 200 Iterationen ist das zweite Maximum bereits gut zu erken-

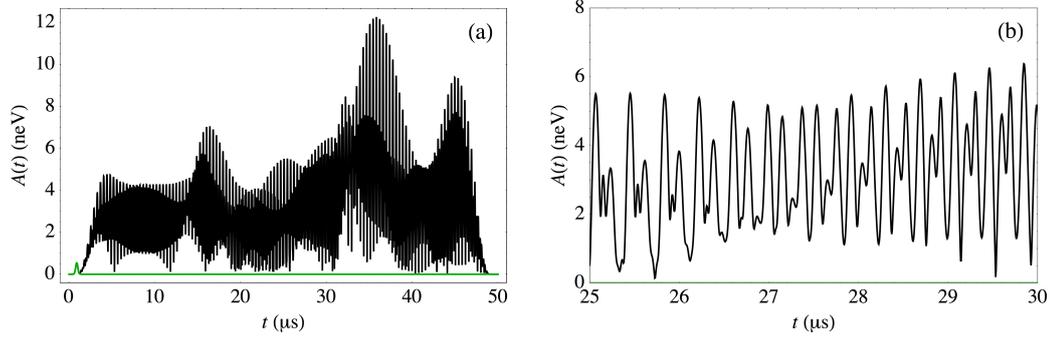


Abbildung 6.3.: Initiale (grün) und optimierte Amplitude $A(t)$ (schwarz) der Stehwelle (a) und Ausschnitt daraus (b).

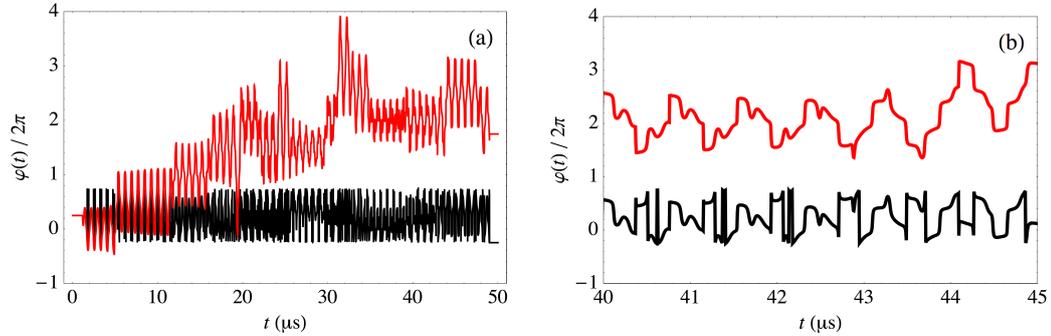


Abbildung 6.4.: Optimierte Phase $\varphi(t)$ (schwarz) der Stehwelle (a) und Ausschnitt daraus (b). Aufgrund der Funktion $\text{sign}^+(a)$ in der Berechnung von $\varphi(t)$ nach Gleichung 6.7 treten Phasensprünge auf, die wegen der 2π -Periodizität der Winkelfunktionen keinerlei physikalische Relevanz haben. Durch Fortsetzen der Phase erhält man den roten Verlauf.

nen, nach 500 Iterationen ist $\mathfrak{F} = 0.942$. Hier sind die Konvergenzschritte nur noch in der Größenordnung $\Delta J \approx 10^{-4} - 10^{-5}$, sodass weitere Verbesserungen der Fidelität nur sehr langsam zu beobachten sind. Nach 1900 Schritten wurde die Optimierung bei $\mathfrak{F} = 0.998$ beendet. Die optimale Amplitude und Phase wurde gemäß Gleichung 6.7 aus den Optimierungsparametern $a(t)$ und $b(t)$ bestimmt und ist in den Abbildungen 6.3-6.4 dargestellt. Durch die verglichen mit der Fallenperiode $T_{\text{per}} = 0.769 \mu\text{s}$ hohe Prozessdauer $T = 50 \mu\text{s}$ treten viele Oszillationen auf, sodass jeweils auch ein Ausschnitt des Verlaufs dargestellt wurde.

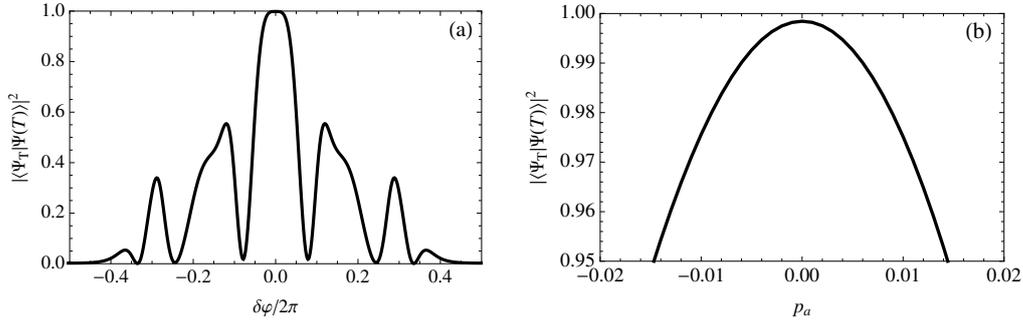


Abbildung 6.5.: Stabilität des quadrierten Überlapps mit dem Zielzustand gegenüber Variationen der Phase $\varphi(t)$ (a) und der Amplitude $A(t)$ (b).

6.4. Stabilität der Lösung

Aufgrund experimentell auftretender Unsicherheiten in der Startphase $\varphi(0)$ wurde das Verhalten der Lösungen gegenüber leichten Variationen untersucht. Dazu wurde zur Propagation der Optimierten Parameter $a(t)$ und $b(t)$ das Argument der beiden Winkelfunktionen aus Gleichung 6.6 jeweils um eine räumliche Phase δx verschoben, was einer Fluktuation der Phase $\delta\varphi = \delta x 2\pi / \lambda_c$ gleichzusetzen ist. Das Resultat der Propagationen ist in Abbildung 6.5 (a) dargestellt. Man erkennt deutlich ein Plateau der Fidelität bei geringen Variationen $\delta\varphi$. Sie bleibt auf einem Bereich von $\delta\varphi = 0.35 = 20.2^\circ$ oberhalb von 95%.

Eine weitere experimentelle Fehlerquelle mag eine zu hohe oder zu geringe Laserleistung sein. Es wurde daher ebenfalls die Stabilität der Lösung gegenüber prozentualen Abweichungen p_A der Amplitude $A(t)$ gemäß

$$A(t) \rightarrow A(t) (1 + p_A) \quad (6.11)$$

betrachtet. Diese ist proportional zur Intensität und damit auch zur eingestrahnten Laserleistung. Zur Implementierung der Abweichung in $A(t)$ wurden die optimierten Kontrollfelder $a(t)$ und $b(t)$ analog zu Gleichung 6.11 mit p_A skaliert. Nach Gleichung 6.7 folgt dann, dass $\varphi(t)$ unverändert bleibt. Der resultierende Verlauf ist in Abbildung 6.5 (b) dargestellt. Für $p_A = \pm 1.45\%$ bleibt die Fidelität höher als 95%, was bedeutet, dass die optimierte Sequenz ebenfalls robust gegenüber kleinen Variationen der Laserleistung ist.

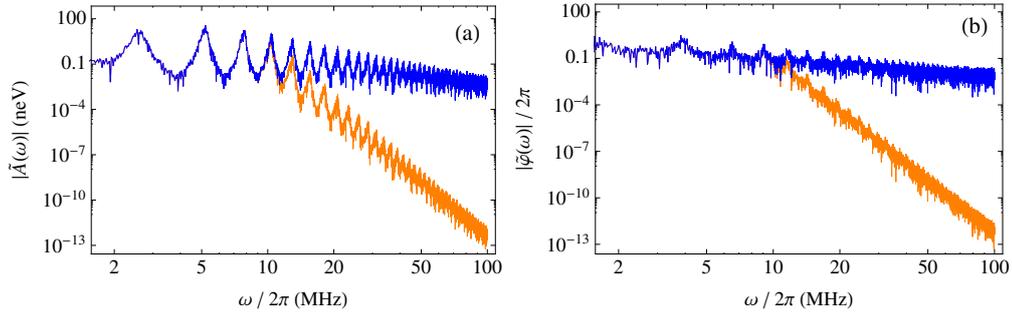


Abbildung 6.6.: Fourier-Spektrum von Amplitude (a) und Phase (b) für die optimierte Lösung aus Abschnitt 6.3 vor (blau) und nach Multiplikation mit der Tiefpass-Funktion (Gleichung 6.12) (orange).

6.5. Technische Realisierbarkeit der Lösung

Zur technischen Realisierung der Lösung muss sowohl Amplitude beider Laserstrahlen aus Abbildung 6.1 als auch deren relative Phase $\varphi(t)$ kontrolliert werden können. Dazu werden in der Regel elektrooptische Modulatoren (EOM) verwendet, die sich im 10 MHz-Bereich ansteuern lassen [Sch14]. Zur Implementierung der optimierten Sequenzen ist es daher notwendig, dass diese nicht auf kürzeren Zeitskalen variieren, als es durch die Bandbreite der EOM vorgegeben ist. Es wurden daher die Fourier-Transformierten $\tilde{A}(\omega)$ und $\tilde{\varphi}(\omega)$ der optimierten Funktionen $A(t)$ und $\varphi(t)$ aus Abschnitt 6.3 berechnet und mit der Übertragungsfunktion eines Tiefpassfilters

$$F(\omega, \omega_g, n) = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_g}\right)^n}} \quad (6.12)$$

multipliziert. Für ein möglichst steiles Abfallen der Übertragungsfunktion oberhalb der Grenzfrequenz ω_g wurde $n = 20$ verwendet. Aus den zurücktransformierten, gefilterten Funktionen $A_{\omega_g}(t)$ und $\varphi_{\omega_g}(t)$ wurden nach Gleichung 6.7 die dazugehörigen Kontrollparameter $a_{\omega_g}(t)$ und $b_{\omega_g}(t)$ bestimmt und erneut propagiert. Die resultierenden Spektren der Amplitude und Phase bei einer Grenzfrequenz von ω_g sind in Abbildung 6.6 dargestellt. Man erkennt insbesondere im Frequenzspektrum der Amplitude periodisch auftretende Maxima, die bei geradzahigen Vielfachen der Fallenfrequenz $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ liegen. Die Wesentlichen Interaktionen des Lichtpotentials mit der Wellenfunktion finden demnach mit diesen Frequenzen statt. Propagation der gefilterten Parameter liefert noch immer eine Fidelität von 88.4%. Senkt man hingegen die

Grenzfrequenz auf $\omega_g = 2\pi \cdot 5 \text{ MHz}$, so sinkt \mathfrak{F} auf 5.7%. Bei einer Grenzfrequenz von $2\pi \cdot 1 \text{ MHz}$ ist schließlich kein nennenswerter Überlapp mehr vorhanden, da der erste Signifikante Beitrag von $\tilde{A}(\omega)$ bei der doppelten Fallenfrequenz liegt. Zur experimentellen Implementierung der optimierten Sequenz sind folglich EOM notwendig, die eine Bandbreite von 10 MHz oder mehr zur Verfügung stellen.

Um die Bandbreite des Verfahrens weiter beschränken zu können und dennoch hohe Fidelitäten zu erzielen, existieren verschiedene Ansätze. Es ist denkbar, den Frequenzfilter stets nach einer bestimmten Zahl von Iterationen Anzuwenden und die Optimierung mit den gefilterten Sequenzen fortzusetzen. Dann ist allerdings keine Konvergenz mehr garantiert und der Algorithmus wird stets erneut hochfrequente Anteile erzeugen, sodass die Zahl der nötigen Iterationen steigt. Um dies zu verhindern, existieren Erweiterungen des vorgestellten Krotov-Verfahrens, deren Anwendungen auf spezielle Quantensysteme bereits vielversprechende Resultate liefern und zur Zeit weiter erprobt werden [RPK13]. Die Erweiterungen basieren auf einer Modifikation der Kostenfunktion $g_a(t)$ aus Gleichung 2.27, die das Auftreten vorher definierter Frequenzbereiche bestraft, allerdings nicht komplett verhindern kann. Die vom Algorithmus berechneten Veränderungen der Kontrollfelder berücksichtigen dies dann bereits per Konstruktion. Ebenso existiert mit dem *CRAB*-Algorithmus ein alternatives Optimierungsverfahren, was eine strikte Vorgabe erlaubter Frequenzen ermöglicht [CCM11] und dessen Implementierung in die verwendete Numerikbibliothek QDYN angestrebt wird.

Eine erfolgreiche Implementierung des Verfahrens erfordert zudem, dass die benötigten Laserleistungen im technisch realisierbaren Rahmen bleiben und während der Sequenz möglichst kein Photon am Ion gestreut wird. Die maximale Intensität ist beim betrachteten Prozess nach Gleichung 6.3 durch die maximal auftretende Amplitude $A(t) < 12 \text{ neV}$ beschränkt. Bei einer Verstimmung von $\Delta_R = 2\pi \cdot 20 \text{ GHz}$ ergibt sich somit $I(t) < 1.41 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$, was bei einem Fokus von $30 \cdot 30 \mu\text{m}^2$ eine maximale Laserleistung von 1.3 mW je Strahl erfordert. Für die Streurrate nach Gleichung 6.4 erhält man $R(t) < 1.0 \text{ kHz}$ sodass während der optimierten Sequenz der Länge $T = 50 \mu\text{s}$ weniger als $2R(t)T < 0.1$ Photonen am Ion gestreut werden. Das vorgestellte Verfahren zur Erzeugung einer Fock-Anregung demonstriert also nicht nur die Möglichkeiten der quantenmechanischen Optimierung, sondern liefert ebenso Ergebnisse, die in experimentell realisierbaren Größenordnungen liegen.

7

Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Möglichkeit und Notwendigkeit einer quantenmechanischen Optimierung von nichtadiabatischen Transporten untersucht. Es hat sich dabei gezeigt, dass sich mit dem verwendeten Verfahren für aktuelle Falltechnologien nur unzureichende Konvergenz einstellt, eine Optimierung aufgrund der hervorragend funktionierenden invariantenbasierten Lösung allerdings auch nicht notwendig ist. Erst im Hinblick auf weiter miniaturisierte Ionenfallen, bei denen die Breite der Wellenfunktion in der Größenordnung des Segmentabstandes liegt, beginnt die Implementierung der Kompensationskraft durch Zusatzspannungen zu scheitern, sodass eine quantenmechanische Optimierung aufgrund der auftretenden Anharmonizitäten notwendig wird. In diesem Fall ist die Konvergenz hinreichend gut, sodass für jede denkbare Skala eine Möglichkeit zum Finden optimaler Lösungen gegeben ist. Durch gezieltes Ausnutzen der Anharmonizitäten von optischen Potentialen konnte auf diesen Skalen mittels der quantenmechanischen Optimierung die Anregung eines höheren Fock-Zustandes des Ions demonstriert werden. Es zeigt sich dabei, dass sich die benötigte Laserleistung, die resultierende Streurate und die notwendigen Bandbreiten zur Kontrolle auf experimentell realisierbaren Skalen bewegen. Um die benötigte Bandbreite weiter einzuschränken ist hier die Erprobung von Erweiterungen [RPK13] des vorgestellten numerischen Optimierungsverfahrens denkbar.

Ebenso wie der zustandserhaltende Transport von Ionen ist auch das nichtadiabatische Trennen von zwei in der gleichen Potentialmulde gefangenen Ionen zur Realisierung skalierbarer Quantencomputer mit segmentierten Ionenfallen von Interesse und Gegenstand aktueller Forschung. So wird das Trennen von Ionen bereits zur Realisierung von deterministischer Quantenteleportation [BCS⁺04] verwendet. Momentan ist es möglich zwei Ionen mit einer finalen Anregungsenergie von zwei Phononen binnen $55 \mu\text{s}$ zu trennen [BGL⁺12]. Der für die vorliegende Arbeit programmierte klassische Propagator und ebenso der Optimierer bietet hier einen möglichen Ausgangspunkt die Stabilität bisher existierender Lösungen zu untersuchen und durch gezielte Optimierung gegebenenfalls robustere und schnellere Lösungen zu erhalten. Ebenfalls wäre es interessant zu untersuchen, ob die vorgestellte Invariantenmethode eine realisierbare Lösung liefern kann. Zur quantenmechanischen Verifizierung sind allerdings größere Änderungen an der bestehenden Numerikbibliothek notwendig, um die Coulomb-Wechselwirkungen der beiden Ionen untereinander simulieren zu können. Dazu muss die Zwei-Teilchen-Wellenfunktion auf einem mitbewegten, zweidimensionalen Ortsgitter definiert werden. Die Zahl der benötigten Gitterpunkte steigt damit von n_r auf n_r^2 , sodass mit einem erheblichen numerischen Mehraufwand, verglichen zur Propagation eines einzelnen Ions zu rechnen ist. Ein erstes, einfaches Modell ließe sich jedoch implementieren, indem das elektrostatische Potential eines der beiden Ionen zuvor am Ort der klassischen Trajektorie des anderen Ions bestimmt wird. Das so berechnete zusätzliche Potential kann dann leicht in der Propagation der Ein-Teilchen-Wellenfunktion berücksichtigt werden.

Eine weitere mögliche Anwendung der klassischen Optimierung bietet die deterministische Extraktion einzelner Ionen, wie es in unserer Arbeitsgruppe zum Implantieren von Stickstoff in Diamant durchgeführt wird [SJF⁺10], um gezielt Defektstrukturen auf Skalen weniger Nanometer zu erzeugen. Die dabei entstehenden *NV-Zentren* gelten ebenso wie gefangene Ionen als vielversprechender Kandidat zur Realisierung skalierbarer Quantencomputer [GDP⁺06]. Die bisher dazu verwendete Ionenfalle bietet aufgrund der vielen vorhandenen Segmente den notwendigen Spielraum um zusätzliche Korrekturspannungen während des Extraktionsprozesses anzulegen und damit Einfluss auf den Fokus des Ionenstrahls zu nehmen. Notwendige Schritte zur Optimierung sind die Implementierung eines klassischen Propagators und die effiziente Modellierung der elektrostatischen Potentiale und deren Ableitungen für alle drei Raumdimensionen um das Problem korrekt behandeln zu können, sowie die Definition eines geeigneten Funktionals zur Minimierung des Fokus.

Literaturverzeichnis

- [ALKH13] ALONSO, J. ; LEUPOLD, F. M. ; KEITCH, B. C. ; HOME, J. P.: Quantum control of the motional states of trapped ions through fast switching of trapping potentials. In: *New J. Phys.* 15 (2013), Nr. 2, S. 023001
- [AP91] AVERBUKH, I. S. ; PEREL'MAN, N. F.: The dynamics of wave packets of highly-excited states of atoms and molecules. In: *Sov. Phys. Usp.* 34 (1991), Nr. 7, S. 572
- [B⁺13] BILGIN, A. u. a.: *GraphViz - Graph Visualization Software*. <http://graphviz.org>. Version: 17. Mai 2013, Abruf: 06.02.2014
- [BCS⁺04] BARRETT, M. D. ; CHIAVERINI, J. ; SCHAETZ, T. ; BRITTON, J. ; ITANO, W. M. ; JOST, J. D. ; KNILL, E. ; LANGER, C. ; LEIBFRIED, D. ; OZERI, R. u. a.: Deterministic quantum teleportation of atomic qubits. In: *Nature* 429 (2004), Nr. 6993, S. 737–739
- [BGL⁺12] BOWLER, R. ; GAEBLER, J. ; LIN, Y. ; TAN, T. R. ; HANNEKE, D. ; JOST, J. D. ; HOME, J. P. ; LEIBFRIED, D. ; WINELAND, D. J.: Coherent Diabatic Ion Transport and Separation in a Multizone Trap Array. In: *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012), S. 080502
- [BKRB08] BENHELM, J. ; KIRCHMAIR, G. ; ROOS, C. F. ; BLATT, R.: Experimental quantum-information processing with $^{43}\text{Ca}^+$ ions. In: *Phys. Rev. A* 77 (2008), Nr. 6, S. 062306
- [CCM11] CANEVA, T. ; CALARCO, T. ; MONTANGERO, S.: Chopped random-basis quantum optimization. In: *Phys. Rev. A* 84 (2011), S. 022326
- [CHJ⁺00] CALARCO, T. ; HINDS, E. A. ; JAKSCH, D. ; SCHMIEDMAYER, J. ; CIRAC, J. I. ; ZOLLER, P.: Quantum gates with neutral atoms: Controlling collisional interactions in time-dependent traps. In: *Phys. Rev. A* 61 (2000), S. 022304

- [CTS⁺11] CHEN, Xi ; TORRONTAGUI, E. ; STEFANATOS, D. ; LI, Jr-Shin ; MUGA, J. G.: Optimal trajectories for efficient atomic transport without final excitation. In: *Phys. Rev. A* 84 (2011), S. 043415
- [DCCA⁺08] DE CHIARA, G. ; CALARCO, T. ; ANDERLINI, M. ; MONTANGERO, S. ; LEE, P. J. ; BROWN, B. L. ; PHILLIPS, W. D. ; PORTO, J. V.: Optimal control of atom transport for quantum gates in optical lattices. In: *Phys. Rev. A* 77 (2008), S. 052333
- [DGB⁺13] DANIILIDIS, N. ; GERGER, S. ; BOLLOTEN, G. ; RAMM, M. ; RANSFORD, A. ; ULIN-AVILA, E. ; TALUKDAR, I. ; HÄFFNER, H.: *Probing surface electric field noise with a single ion*. <http://arxiv.org/abs/1307.7194>. Version: 2013
- [DL84] DHARA, A. K. ; LAWANDE, S. V.: Feynman propagator for time-dependent Lagrangians possessing an invariant quadratic in momentum. In: *J. Phys. A*. 17 (1984), S. 2423
- [FGP⁺13] FÜRST, H. A. ; GOERZ, M. H. ; POSCHINGER, U. G. ; MURPHY, M. ; MONTANGERO, S. ; CALARCO, T. ; SCHMIDT-KALER, F. ; SINGER, K. ; KOCH, C. P.: *Controlling the transport of an ion: Classical and quantum mechanical solutions*. <http://arxiv.org/abs/1312.4156>. Version: 2013
- [Fon13] FONSECA, J.: *Gprof2Dot - Convert profiling output to a dot graph*. <https://code.google.com/p/jrfonseca/wiki/Gprof2Dot>. Version: 17. Mai 2013, Abruf: 06.02.2014
- [GDP⁺06] GAEBEL, T. ; DOMHAN, M. ; POPA, I. ; WITTMANN, C. ; NEUMANN, P. ; JELEZKO, F. ; RABEAU, J. R. ; STAVRIAS, N. ; GREENTREE, A. D. ; PRAYER, S. u. a.: Room-temperature coherent coupling of single spins in diamond. In: *Nature Physics* 2 (2006), Nr. 6, S. 408–413
- [GKM83] GRAHAM, S. L. ; KESSLER, P. B. ; MCKUSICK, M. K.: An execution profiler for modular programs. In: *Software: Practice and Experience* 13 (1983), Nr. 8, S. 671–685
- [GWO00] GRIMM, R. ; WEIDEMÜLLER, M. ; OVCHINNIKOV, Y. B.: Optical Dipole Traps for Neutral Atoms. In: *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* 42 (2000), S. 95

-
- [HCW⁺12] HITE, D. A. ; COLOMBE, Y. ; WILSON, A. C. ; BROWN, K. R. ; WARRING, U. ; JÖRDENS, R. ; JOST, J. D. ; MCKAY, K. S. ; PAPPAS, D. P. ; LEIBFRIED, D. ; WINELAND, D. J.: 100-Fold Reduction of Electric-Field Noise in an Ion Trap Cleaned with *In Situ* Argon-Ion-Beam Bombardment. In: *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012), S. 103001
- [HLBH11] HUGHES, M. D. ; LEKITSCH, B. ; BROERSMA, J. A. ; HENSINGER, W. K.: Microfabricated ion traps. In: *Contemporary Physics* 52 (2011), Nr. 6, S. 505–529
- [Jam98] JAMES, D. F. V.: Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation. In: *Applied Physics B* 66 (1998), Nr. 2, S. 181–190. – ISSN 0946–2171
- [KK99] KONNOV, A. I. ; KROTOV, V. F.: On global methods of successive improvement of controlled processes. In: *Autom. Remote Control* 60 (1999), Nr. 10, S. 1427–1436
- [KMW02] KIELPINSKI, D. ; MONROE, C. ; WINELAND, D. J.: Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer. In: *Nature* 417 (2002), S. 709
- [Kos88] KOSLOFF, R.: Time-Dependent Quantum-Mechanical Methods for Molecular Dynamics. In: *J. Phys. Chem.* 92 (1988), S. 2087–2100
- [Kos94] KOSLOFF, R.: Propagation methods for molecular dynamics. In: *Annu. Rev. Phys. Chem.* 45 (1994), S. 145–178
- [KPKMS04] KOCH, C. P. ; PALAO, J. P. ; KOSLOFF, R. ; MASNOU-SEEUWS, F.: Stabilization of Ultracold Molecules Using Optimal Control Theory. In: *Phys. Rev. A* 70 (2004), S. 013402
- [KSVG13] KRYUCHKOV, S. I. ; SUSLOV, S. K. ; VEGA-GUZMÁN, J. M.: The minimum-uncertainty squeezed states for atoms and photons in a cavity. In: *J. Phys. B* 46 (2013), Nr. 10, S. 104007
- [LBMW03] LEIBFRIED, D. ; BLATT, R. ; MONROE, C. ; WINELAND, D.: Quantum dynamics of single trapped ions. In: *Rev. Mod. Phys.* 75 (2003), S. 281–324

- [LL82] LEWIS, H. R. ; LEACH, P. G. L.: A direct approach to finding exact invariants for one-dimensional time-dependent classical Hamiltonians. In: *J. Math. Phys.* 23 (1982), Nr. 12, S. 2371–2374
- [LR69] LEWIS, H. R. ; RIESENFELD, W. B.: An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator and of a Charged Particle in a Time-Dependent Electromagnetic Field. In: *J. Math. Phys.* 10 (1969), Nr. 8, S. 1458–1473
- [MJKC09] MURPHY, M. ; JIANG, L. ; KHANEJA, N. ; CALARCO, T.: High-fidelity fast quantum transport with imperfect controls. In: *Phys. Rev. A* 79 (2009), S. 020301
- [MKV⁺09] MONZ, T. ; KIM, K. ; VILLAR, A. S. ; SCHINDLER, P. ; CHWALLA, M. ; RIEBE, M. ; ROOS, C. F. ; HÄFFNER, H. ; HÄNSEL, W. ; HENNRICH, M. u. a.: Realization of universal ion-trap quantum computation with decoherence-free qubits. In: *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009), Nr. 20, S. 200503
- [MMGC10] MURPHY, M. ; MONTANGERO, S. ; GIOVANNETTI, V. ; CALARCO, T.: Communication at the quantum speed limit along a spin chain. In: *Phys. Rev. A* 82 (2010), S. 022318
- [MMK⁺96] MEEKHOF, D. M. ; MONROE, C. ; KING, B. E. ; ITANO, W. M. ; WINELAND, D. J.: Generation of nonclassical motional states of a trapped atom. In: *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996), Nr. 11, S. 1796
- [MSB⁺11] MONZ, T. ; SCHINDLER, P. ; BARREIRO, J. T. ; CHWALLA, M. ; NIGG, D. ; COISH, W. A. ; HARLANDER, M. ; HÄNSEL, W. ; HENNRICH, M. ; BLATT, R.: 14-Qubit Entanglement: Creation and Coherence. In: *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011), S. 130506
- [NRL⁺00] NÄGERL, H. C. ; ROOS, Ch. ; LEIBFRIED, D. ; ROHDE, H. ; THALHAMMER, G. ; ESCHNER, J. ; SCHMIDT-KALER, F. ; BLATT, R.: Investigating a qubit candidate: Spectroscopy on the $S_{1/2}$ to $D_{5/2}$ transition of a trapped calcium ion in a linear Paul trap. In: *Phys. Rev. A* 61 (2000), S. 023405
- [P⁺62] PONTRYAGIN, L. S. u. a.: *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. New York : Interscience, 1962

-
- [Pos10] POSCHINGER, U. G.: Quantum Optics Experiments in a Microstructured Ion Trap. In: *Dissertation, Universität Ulm* (2010)
- [RBKD⁺02] ROWE, M. A. ; BEN-KISH, A. ; DEMARCO, B. ; LEIBFRIED, D. ; MEYER, V. ; BEALL, J. ; BRITTON, J. ; HUGHES, J. ; ITANO, W. M. ; JELENKOVIC, B. ; LANGER, C. ; ROSEN BAND, T. ; WINELAND, D. J.: Transport of quantum states and separation of ions in a dual RF ion trap. In: *Quantum Information & Computation* 2 (2002), Nr. 4, S. 257–271
- [RLR⁺04] ROOS, C. F. ; LANCASTER, G. P. T. ; RIEBE, M. ; HÄFFNER, H. ; HÄNSEL, W. ; GULDE, S. ; BECHER, C. ; ESCHNER, J. ; SCHMIDT-KALER, F. ; BLATT, R.: Bell states of atoms with ultralong lifetimes and their tomographic state analysis. In: *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), Nr. 22, S. 220402
- [RNK12] REICH, D. M. ; NDONG, M. ; KOCH, C. P.: Monotonically convergent optimization in quantum control using Krotov’s method. In: *J. Chem. Phys.* 136 (2012), S. 104103
- [RPK13] REICH, D. M. ; PALAO, J. P. ; KOCH, C. P.: Optimal control under spectral constraints: enforcing multi-photon absorption pathways. In: *J. Mod. Opt.* (2013), to appear. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/09500340.2013.844866>
- [Sch14] SCHÄFTER + KICHHOFF GMBH: Fundamentals: Optical Modulators. In: *Fibre Optics Gesamtkatalog* (01-2014), S. S. 52
- [SJF⁺10] SCHNITZLER, W. ; JACOB, G. ; FICKLER, R. ; SCHMIDT-KALER, F. ; SINGER, K.: Focusing a deterministic single-ion beam. In: *New J. Phys.* 12 (2010), S. 065023
- [SKT93] SOMLÓI, J. ; KAZAKOVSKI, V. A. ; TANNOR, D. J.: Controlled dissociation of I₂ via optical transitions between the X and B electronic states. In: *Chem. Phys.* 172 (1993), S. 85–98
- [SPM⁺10] SINGER, K. ; POSCHINGER, U. ; MURPHY, M. ; IVANOV, P. ; ZIESEL, F. ; CALARCO, T. ; SCHMIDT-KALER, F.: Colloquium: Trapped ions as quantum bits: Essential numerical tools. In: *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010), S. 2609

- [SPSSK06] SCHULZ, S. A. ; POSCHINGER, U. G. ; SINGER, K. ; SCHMIDT-KALER, F.: Optimization of segmented linear Paul traps and transport of stored particles. In: *Progress of Physics* 54 (2006), S. 648
- [SPZSK08] SCHULZ, S. A. ; POSCHINGER, U. G. ; ZIESEL, F. ; SCHMIDT-KALER, F.: Sideband cooling and coherent dynamics in a microchip multi-segmented ion trap. In: *New J. Phys.* 10 (2008), S. 045007
- [TAIT10] TOMONO, H. ; AOKI, M. ; IITAKA, T. ; TSUMURAYA, K.: GPU based acceleration of first principles calculation. In: *J. Phys.: Conf. Ser.* 215 (2010), Nr. 1, S. 012121
- [TEK84] TAL-EZER, H. ; KOSLOFF, R.: An Accurate and Efficient Scheme for Propagating the Time Dependent Schrödinger Equation. In: *J. Chem. Phys.* 81 (1984), Nr. 9, S. 3967–3971
- [TInC⁺11] TORRONTGUI, E. ; IBÁÑEZ, S. ; CHEN, Xi ; RUSCHHAUPT, A. ; GUÉRY-ODELIN, D. ; MUGA, J. G.: Fast atomic transport without vibrational heating. In: *Phys. Rev. A* 83 (2011), S. 013415
- [VTK⁺12] VON DEN HOFF, P. ; THALLMAIR, S. ; KOWALEWSKI, M. ; SIEMERING, R. ; DE VIVIE-RIEDLE, R.: Optimal control theory - closing the gap between theory and experiment. In: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14 (2012), S. 14460–14485
- [WPSSK12] WALTHER, A. ; POSCHINGER, U. G. ; SINGER, K. ; SCHMIDT-KALER, F.: Precision measurements in ion traps using slowly moving standing waves. In: *Appl. Phys. B* 107 (2012), S. 1061
- [WZR⁺12] WALTHER, A. ; ZIESEL, F. ; RUSTER, T. ; DAWKINS, S. T. ; HETTRICH, M. ; SINGER, K. ; SCHMIDT-KALER, F. ; POSCHINGER, U.: Controlling Fast Transport of Cold Trapped Ions. In: *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012), S. 080501
- [ZBR98] ZHU, W. ; BOTINA, J. ; RABITZ, H.: Rapidly convergent iteration methods for quantum optimal control of population. In: *J. Chem. Phys.* 108 (1998), Nr. 5, S. 1953–1963

- [ZRW⁺13] ZIESEL, F. ; RUSTER, T. ; WALTHER, A. ; KAUFMANN, H. ; SINGER, K. ; SCHMIDT-KALER, F. ; POSCHINGER, U. G.: Experimental creation and analysis of displaced number states. In: *J. Phys. B* 46 (2013), S. 104008



Anhang

A.1. Konvergenz des Krotov-Verfahrens

Da bei der Herleitung der Update-Gleichung des Krotov-Verfahrens lediglich die ersten Ableitungen der Funktionale betrachtet wurden, ist noch nicht gezeigt, dass L nach Konstruktion des Funktionals Φ ein Maximum bezüglich des Zustandes $\phi^n(t)$ aufweist. Aus Übersichtsgründen wird im Folgenden auf die explizite Angabe der Zeitabhängigkeit der Funktionen ϕ , ϵ und Φ verzichtet. Man betrachtet zunächst die Differenz von L bzw. J zwischen zwei Iterationsschritten:

$$\Delta L = L(\phi^n, \epsilon^n, \Phi) - L(\phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}, \Phi) \quad (\text{A.1})$$

$$= J(\phi^n, \epsilon^n) - J(\phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) \quad (\text{A.2})$$

$$= G(\phi^n) - G(\phi^{n+1}) + \int_0^T (R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) - R(t, \phi^n, \epsilon^n)) dt \quad (\text{A.3})$$

$$= \Delta G + \int_0^T \Delta R dt \stackrel{!}{\geq} 0 \quad (\text{A.4})$$

Falls diese größer als 0 ist, wird also das Funktional L bzw. J durch den Optimierungsschritt verringert. Im quantenmechanischen Fall gestaltet sich der Beweis dazu vergleichsweise simpel. Die hier durchgeführten Rechnungen orientieren sich dabei

an [KPKMS04]. In erster Ordnung lässt sich die erste Differenz mit Gleichung 2.26 und 2.45 schreiben als

$$\begin{aligned} \Delta G &= J_1(|\psi^n(T)\rangle) + \langle \chi(T)|\psi^n(T)\rangle + \langle \psi^n(T)|\chi(T)\rangle \\ &\quad - J_1(|\psi^{n+1}(T)\rangle) - \langle \chi(T)|\psi^{n+1}(T)\rangle - \langle \psi^{n+1}(T)|\chi(T)\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} &= -\langle \psi^n(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^n(T)\rangle + \langle \psi^{n+1}(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^{n+1}(T)\rangle \\ &\quad + \langle \psi^n(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^n(T)\rangle + \langle \psi^n(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^n(T)\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} &\quad - \langle \psi^n(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^{n+1}(T)\rangle - \langle \psi^{n+1}(T)|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\psi^n(T)\rangle \\ &= \langle \Delta\psi|\psi_T\rangle \langle \psi_T|\Delta\psi\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$= |\langle \Delta\psi|\psi_T\rangle|^2 \geq 0. \quad (\text{A.8})$$

Dabei wurde die Abkürzung $|\Delta\psi\rangle = |\psi^{n+1}(T)\rangle - |\psi^n(T)\rangle$ verwendet. Die zweite Differenz ΔR lässt sich geschickt aufspalten in

$$\Delta R = R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) - R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^n) + R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^n) - R(t, \phi^n, \epsilon^n) \quad (\text{A.9})$$

Da $R(t, \phi, \epsilon^n)$ für beliebiges ϕ mit Gleichung 2.42 und 2.48 in erster Ordnung gegeben ist durch

$$R(t, \phi, \epsilon^n) = -g_a(\epsilon) + \frac{\partial \Phi(t, \phi)}{\partial t} + \chi^\dagger f(\phi, \epsilon^n) + f(\phi, \epsilon^n)^\dagger \chi \quad (\text{A.10})$$

$$= -g_a(\epsilon) + \phi^\dagger \dot{\chi} + \dot{\chi}^\dagger \phi + \chi^\dagger f(\phi, \epsilon^n) + f(\phi, \epsilon^n)^\dagger \chi \quad (\text{A.11})$$

$$= -g_a(\epsilon), \quad (\text{A.12})$$

verbleibt

$$\Delta R = R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) - R(t, \phi^{n+1}, \epsilon^n) \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} &= -g_a(\epsilon^{n+1}) + \phi^{n+1\dagger} \dot{\chi} + \dot{\chi}^\dagger \phi^{n+1} + \chi^\dagger f(\phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) + f(\phi^{n+1}, \epsilon^{n+1})^\dagger \chi \\ &\quad + g_a(\epsilon^n) - \phi^{n+1\dagger} \dot{\chi} + \dot{\chi}^\dagger \phi^{n+1} - \chi^\dagger f(\phi^{n+1}, \epsilon^n) - f(\phi^{n+1}, \epsilon^n)^\dagger \chi \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$= -g_a(\epsilon^{n+1}) + g_a(\epsilon^n) + 2 \operatorname{Re} \left(\chi^\dagger f(\phi^{n+1}, \epsilon^{n+1}) \right) - 2 \operatorname{Re} \left(\chi^\dagger f(\phi^{n+1}, \epsilon^n) \right) \quad (\text{A.15})$$

$$= -g_a(\epsilon^{n+1}) + g_a(\epsilon^n) + 2 \operatorname{Re} \left(\chi^\dagger \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \Big|_{n+1} \right) (\epsilon^{n+1} - \epsilon^n) \quad (\text{A.16})$$

$$= -g_a(\epsilon^{n+1}) + g_a(\epsilon^n) + \frac{\partial g_a}{\partial \epsilon} \Big|_{n+1} (\epsilon^{n+1} - \epsilon^n) \stackrel{!}{\geq} 0. \quad (\text{A.17})$$

Dabei wurde im Schritt von Term A.15 zu Term A.16 die Linearität der Bewegungsgleichung in den Kontrollfeldern ausgenutzt sowie die Identität aus Gleichung 2.53 verwendet. Mit der in Gleichung 2.27 getroffenen Wahl von $g_a(\epsilon)$ folgt

$$\Delta R = -g_a(\epsilon^{n+1}) + g_a(\epsilon^n) + 2 \frac{\lambda_a}{S(t)} (\epsilon^{n+1} - \epsilon^n)^2 \quad (\text{A.18})$$

$$= g_a(\epsilon^n) + g_a(\epsilon^{n+1}) > 0, \quad (\text{A.19})$$

womit die Konvergenz des Krotov-Verfahrens für den quantenmechanischen Fall gezeigt ist.

A.2. Laufzeitoptimierung am Beispiel des quantenmechanischen Propagators

Zur Laufzeitoptimierung des quantenmechanischen Propagators wurde die Möglichkeit des *Profiling* benutzt. Profiling bedeutet, dass analysiert wird, wieviel Zeit ein Programm in den aufgerufenen Routinen verbringt und wie häufig diese aufgerufen werden. Die Methode erlaubt es nicht nur, eine bestehende Programmstruktur besser zu verstehen, sondern auch zu erkennen, wo mögliche Einsparungen durch Optimierung des Quellcodes vorgenommen werden können. Moderne Compiler erlauben dies als Option, sodass keine Änderung durch setzen von Zählern am vorhandenen Quellcode notwendig ist. Im Fall des verwendeten Intel Fortran Compilers `ifort` in Version 12.1.1.256 muss sowohl die Numerikbibliothek QDYN, als auch das eigentliche Programm zum ausführen der Propagation mit den zusätzlichen Parametern `-g -p` kompiliert werden. Wird nun das Programm ausgeführt, legt es eine Datei `gmon.out` an, die sich im gleichen Verzeichnis befindet und die nötigen Informationen enthält. Durch Verwenden des Unix Programms `gprof` [GKM83] kann die Ausgabedatei in ein lesbares Format verwandelt werden. Dazu wird

```
gprof [Programmname] > Ausgabe.txt
```

ausgeführt. Es existieren verschiedene Programme zur Visualisierung der Ausgabedatei, beispielsweise das frei verfügbare Python-Skript `gprof2dot.py` verwendet [Fon13], was einen Graph der Programmaufrufe erzeugt. Dieser liegt als `.dot`-Datei vor und kann

mit dem Unix Programm `dot`, was Teil des ebenfalls frei verfügbaren `GraphViz`-Paketes ist, in ein gerendertes Bild umgewandelt werden [B⁺13]. Es genügt der Aufruf

```
gprof [Programmname] | ./gprof2dot.py | dot -Tpng -o Ausgabe.png
```

welcher die Ausgabe von `gprop` direkt an das Skript `gprof2dot.py` weiterleitet. Dieses wiederum erstellt den Graph und gibt ihn an `dot` weiter, was die gewünschte `Ausgabe.png` erzeugt. Als Beispiel ist das Resultat einer Propagation mit $n_t = 10^5$ Zeitschritten in Abbildung A.1 dargestellt. Die aufgerufenen Routinen werden durch Kästen symbolisiert. Rufen sie weitere Routinen auf, ist dies durch Pfeile zu weiteren Kästen illustriert. Die Zahlen an den Pfeilen stehen für die Anzahl der Aufrufe des jeweilige Zweiges und geben an, wieviel Prozent der Rechenzeit in diesem Zweig verbraucht wurde. Ebenso ist dies innerhalb der Boxen angegeben. Die Prozentsätze in Klammern stehen für den Teil der Rechenzeit der direkt innerhalb der Routine verbraucht wurde. Aufgrund der modularen Struktur der Bibliothek QDYN kann man nun leicht identifizieren, welche Routine signifikant zur Laufzeit beigetragen hat. Im vorgestellten Beispiel erkennt man die erste Verzweigung bei der Routine `qdyn_prop_mod_mp_prop_step_`, die $n_t - 1$ mal zum Ausführen der Propagationsschritte aufgerufen wird. Die Verzweigung resultiert aus dem Berechnen der Potentiale für den aktuellen Zeitschritt über `qdyn_ham_mod_mp_init_ops_` (links) und das explizite Aufrufen des Chebychev-Propagators über `qdyn_cheby_mod_mp_cheby_` (rechts). Man erkennt, dass ein wesentlicher Teil der Rechenzeit im linken Zweig verbraucht wird. Durch Verfolgen der Pfeile landet man bei `qdyn_pot_map_mp_map_pot_`, wo sich das Diagramm erneut in die beiden grünen Pfade aufspaltet. In diesem Beispiel wurden die Potentiale mittels kubischen Splines interpoliert, was anhand der Namen der grünen Routinen zu erahnen ist. Offenbar kostet dies rund 79% der gesamten Rechenzeit, die eigentliche Propagation hingegen nur 16%. Durch Annähern der Potentiale mittels rationaler Funktionen (siehe Gleichungen 1.6-1.8), konnte die Gesamtrechenzeit hier um etwa einen Faktor 4.75 verkürzt werden. Das Resultat für die Propagation mit rationalen Potentialen ist in Abbildung A.2 dargestellt. Man erkennt, dass das Berechnen der Potentiale im Zweig `ham_mod_mp_init_ops_` nur noch etwa 6% der Rechenzeit kostet. Der Algorithmus ist nun zu fast 82% mit der reinen Propagation `qdyn_cheby_mod_mp_cheby_` beschäftigt. Die in diesem Ast aufgerufenen Routinen beinhalten das Berechnen der Chebychev-Koeffizienten, sowie die Anwendung des Hamiltonoperators. Insbesondere kostet das Anwenden des kinetischen Operators durch die nötigen Fourier-Transformationen `zfft_f_` und `zfft_b_` nun fast die Hälfte

A.2. Laufzeitoptimierung am Beispiel des quantenmechanischen Propagators

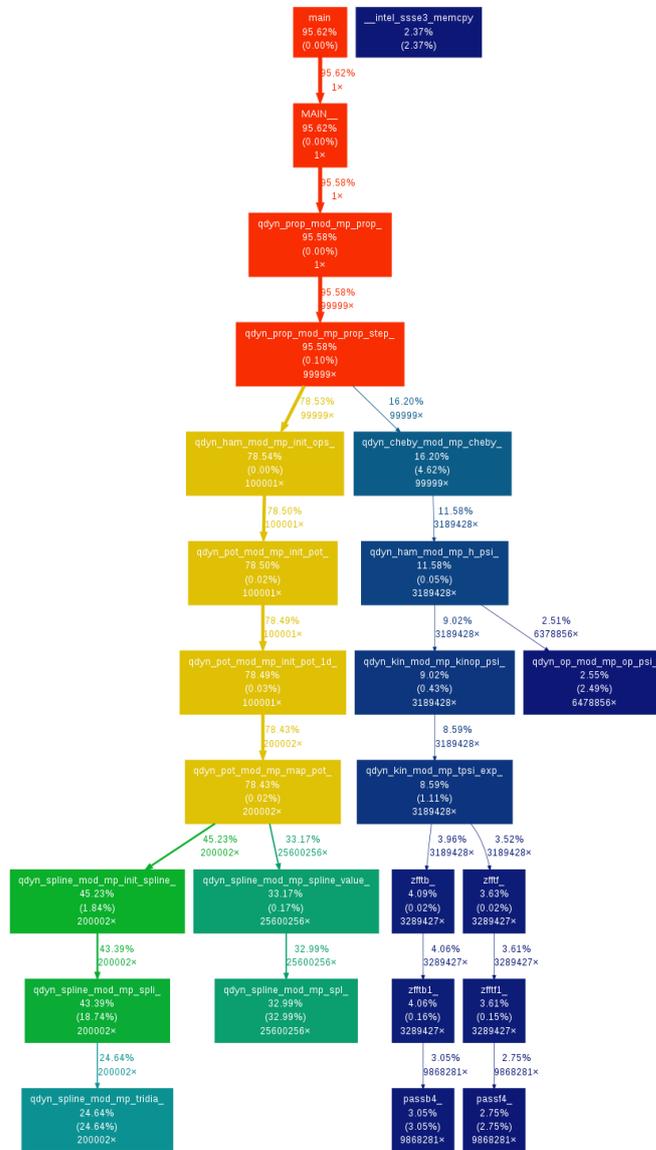


Abbildung A.1.: Visualisierung der Routinenaufrufe bei einer quantenmechanischen Propagation des Ionentransports mit kubisch interpolierten Potentialen. Nicht dargestellt sind Routinen, die weniger als 2% Rechenzeit beanspruchen.

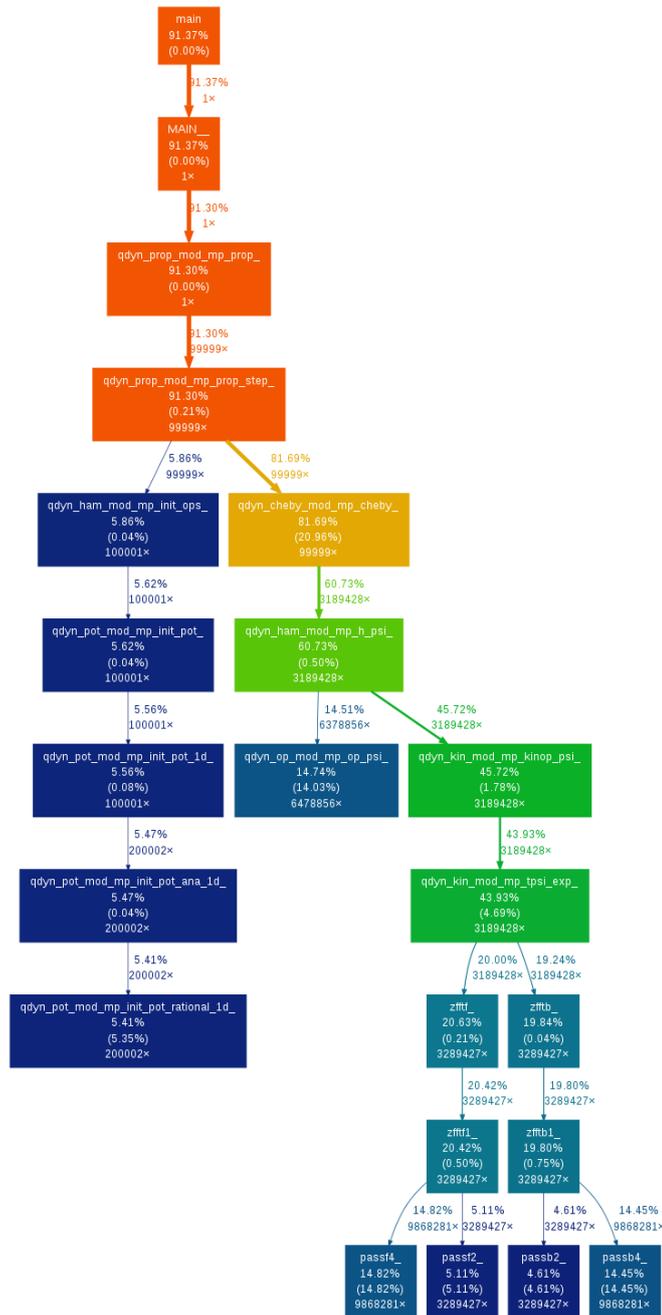


Abbildung A.2.: Visualisierung der Routinenaufrufe bei einer quantenmechanischen Propagation des Ionentransports mit rationalen Potentialen. Nicht dargestellt sind Routinen, die weniger als 2% Rechenzeit beanspruchen.

der Rechenzeit. Mögliche weitere Laufzeitoptimierung könnte hier durch Parallelisierung der Fourier-Transformationen über die Verwendung von Grafikprozessoren erfolgen [TAIT10].

Das vorgestellte Verfahren zeigt exemplarisch das Auftreten unerwarteter Komplikationen bei der effizienten Implementierung einer Idee in eine vorhandene Softwarestruktur. Bei der Verwendung eines statischen Gitters ist es nicht notwendig die elektrostatischen Potentiale ständig neu zu berechnen, sodass die Interpolation kaum zur Laufzeit beiträgt. Erst bei Verwendung des mitbewegten Bezugssystems, wenn in jedem Propagationsschritt der Hamiltonoperator für das aktuelle Gitterfenster berechnet werden muss, macht dies einen signifikanten Anteil der Rechenzeit aus, der ohne die vorgestellte Methode schwer abzuschätzen war. Die Näherung durch Rationale Funktionen liefert hier einen enormen Geschwindigkeitsvorteil.

A.3. Veröffentlichung

Im Rahmen der vorliegenden Diplomarbeit ist die angehängte Veröffentlichung entstanden, die im Dezember 2013 im *New Journal of Physics* eingereicht wurde.

Controlling the transport of an ion: Classical and quantum mechanical solutions

H A Fürst¹, M H Goerz², U G Poschinger¹, M Murphy³, S Montangero³, T Calarco³, F Schmidt-Kaler¹, K Singer¹, C P Koch²

¹QUANTUM, Institut für Physik, Universität Mainz, D-55128 Mainz, Germany

²Theoretische Physik, Universität Kassel, Heinrich-Plett-Straße 40, D-34132 Kassel, Germany

³Institut für Quanteninformationsverarbeitung, Universität Ulm, D-89081 Ulm, Germany

E-mail: christiane.koch@uni-kassel.de

Abstract. We investigate the performance of different control techniques for ion transport in state-of-the-art segmented miniaturized ion traps. We employ numerical optimization of classical trajectories and quantum wavepacket propagation as well as analytical solutions derived from invariant based inverse engineering and geometric optimal control. We find that accurate shuttling can be performed with operation times below the trap oscillation period. The maximum speed is limited by the maximum acceleration that can be exerted on the ion. When using controls obtained from classical dynamics for wavepacket propagation, wavepacket squeezing is the only quantum effect that comes into play for a large range of trapping parameters. We show that this can be corrected by a compensating force derived from invariant based inverse engineering, without a significant increase in the operation time.

PACS numbers: 37.10.Ty,03.67.Lx,02.30.Yy

Submitted to: *New J. Phys.*

1. Introduction

Trapped laser-cooled ions represent a versatile experimental platform offering near-perfect control and tomography of a few body system in the classical and quantum domain [1–4]. The fact that both internal (qubit) and external (normal modes of oscillation) degrees of freedom can be manipulated in the quantum regime allows for many applications in the fields of quantum information processing and quantum simulation [5–7]. Currently, a significant research effort is devoted to scaling these experiments up to larger numbers of qubits. A promising technology to achieve this goal are *microstructured segmented ion traps*, where small ion groups are stored in local potentials and ions are shuttled within the trap by applying suitable voltage ramps to the trap electrodes [8]. In order to enable scalable experiments in the quantum domain, these shuttling operations have to be performed such that the required time is much shorter than the timescales of the relevant decoherence processes. At the same time, one needs to avoid excitation of the ion’s motion after the shuttling operation. These opposing requirements clearly call for the application of advanced control techniques.

Adiabatic ion shuttling operations in a segmented trap have been demonstrated in Ref. [9]. Recent experiments have achieved non adiabatic shuttling of single ions within a few trap oscillation cycles while retaining the quantum ground state of motion [10, 11]. This was made possible by finding ‘sweet spots’ in the shuttling time or removal of the excess energy accumulated during the shuttling by kicks of the trap potential. Given the experimental constraints, it is natural to ask what the speed limitations for the shuttling process are. The impact of quantum effects for fast shuttling operations, i.e., distortions of the wavepacket, also need to be analyzed, and it needs to be assessed whether quantum control techniques [12–14] may be applied to avoid these. Moreover, from a control-theoretical perspective and in view of possible future application in experiment, it is of interest to analyze how optimized voltage ramps can be obtained. Optimal control theory (OCT) combined with classical equations of motion was employed in Ref. [15] to obtain optimized voltage ramps. Quantum effects were predicted not to play a role unless the shuttling takes place on a timescale of a single oscillation period. In Refs. [16, 17], control techniques such as inverse engineering were applied to atomic shuttling problems. The transport of atomic wavepackets in optical dipole potentials was investigated using OCT with quantum mechanical equations of motion [18–20].

The purpose of the present paper is to assess available optimization strategies for the specific problem of transporting a single ion in a microchip ion trap and to utilize them to study the quantum speed limit for this process [21, 22], i.e., to determine the shortest possible time for the transport. Although parameters of the trap architecture of Ref. [23] are used throughout the entire manuscript, we strongly emphasize that the qualitative results we obtain hold over a wide parameter regime. They are thus generally valid for current segmented ion traps, implemented with surface electrode geometry [23, 24] or more traditional multilayer geometry.

The paper is organized as follows. We start by outlining the theoretical framework

in Sec. 2. In particular we review the combination of numerical optimization with classical dynamics in Sec. 2.2 and with wavepacket motion in Sec. 2.3. Analytical solutions to the control problem, obtained from the harmonic approximation of the trapping potential, are presented in Secs. 2.5 and 2.6. Section 3 is devoted to the presentation and discussion of our results. The control solutions for purely classical dynamics of the ion, obtained both numerically and analytically, yield a minimum transport duration as shown in Sec. 3.1. We discuss in Sec. 3.2, how far these solutions correspond to the quantum speed limit. Our results obtained by invariant-based inverse engineering are presented in Sec. 3.3, and we analyze the feasibility of quantum optimal control in Sec. 3.4. Section 4 concludes our paper.

2. Methods for trajectory control and wavepacket propagation

In the following we present the numerical methods we employ to control the transport of a single trapped ion. Besides numerical optimization describing the motion of the ion either with classical mechanics or via wavepacket propagation, we also utilize two analytical methods. This is made possible by the trap geometry which leads to an almost perfectly harmonic trapping potential for the ion at all times.

2.1. Prerequisites

We assume ponderomotive confinement of the ion at the rf-node of a linear segmented Paul trap and a purely electrostatic confinement along the trap axis x , see Fig. 1. This enables us to treat the dynamics only along this dimension. We consider transport of a single ion with mass m between two neighboring electrodes, which give rise to individual potentials centered at x_1 and x_2 . This may be scaled up to N electrodes and longer transports without any loss of generality. The ion motion is controlled by a time-dependent electrostatic potential,

$$V(x, t) = U_1(t)\phi_1(x) + U_2(t)\phi_2(x), \quad (1)$$

with segment voltages $U_i(t)$, and normal electrode potentials on the trap axis, $\phi_i(x)$. They are dimensionless electrostatic potentials obtained with a bias of +1 V at electrode i and the remaining electrodes grounded (see Fig. 1(b)). These potentials are calculated by using a fast multipole boundary element method [25] for the trap geometry used in recent experiments [10] and shown in Fig. 1. In order to speed up numerics and obtain smooth derivatives, we calculate values for $\phi_i(x)$ on a mesh and fit rational functions to the resulting data. The spatial derivatives $\phi'_i(x)$ and $\phi''_i(x)$ are obtained by differentiation of the fit functions. Previous experiments have shown that the calculated potentials allow for the prediction of ion positions and trap frequencies with an accuracy of one per cent [26, 27] which indicates the precision of the microtrap fabrication process. An increase in the precision can be achieved by calibrating the trapping potentials using resolved sideband spectroscopy. This is sufficient to warrant the application of control techniques as studied here. For the geometry of the trap described in Ref. [10], we

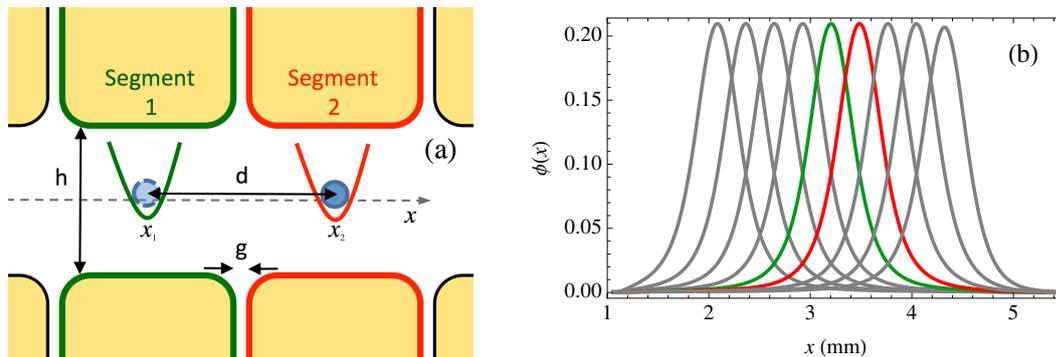


Figure 1. (a) Ion shuttling in a segmented linear trap. The dc electrodes form the axial potential for the ion transport along the x -axis. The rf electrodes for confinement of the ions along the x -axis are not shown. (b) Axial electrode potentials formed by applying a dc voltage to a facing pair of trap segments. For the specific scenario presented in this manuscript, we use $d = 280 \mu\text{m}$, $g = 30 \mu\text{m}$ and $h = 500 \mu\text{m}$. Each potential is generated from a single pair of segments, depicted in red in (a) and biased to 1 V with all the other dc electrodes grounded.

obtain harmonic trap frequencies of about $\omega = 2\pi \cdot 1.3 \text{ MHz}$ with a bias voltage of -7 V at a single trapping segment. The individual segments are spaced $280 \mu\text{m}$ apart. Our goal is to shuttle a single ion along this distance within a time span on the order of the oscillation period by changing the voltages U_1 and U_2 , which are supposed to stay within a predetermined range that is set by experimental constraints. We seek to minimize the amount of motional excitation due to the shuttling process.

2.2. Numerical optimization with classical dynamics

Assuming the ion dynamics to be well described classically, we optimize the time dependent voltages in order to reduce the amount of transferred energy. This corresponds to minimizing the functional J ,

$$J = (E(T) - E_T)^2 + \sum_i \int_0^T \frac{\lambda_a}{S(t)} \Delta U_i(t)^2 dt, \quad (2)$$

i.e., to minimizing the difference between desired energy E_T and the energy $E(T)$ obtained at the final time T . $\Delta U_i(t) = U_i^{n+1}(t) - U_i^n(t)$ is the update of each voltage ramp in an iteration step n , and the second term in Eq. (2) limits the overall change in the integrated voltages during one iteration. The weight λ_a is used to tune the convergence and limit the updates. To suppress updates near $t = 0$ and $t = T$ the shape function $S(t) \geq 0$ is chosen to be zero at these points in time. For a predominantly harmonic axial confinement, the final energy is given by

$$E(T) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(T) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x(T) - x_2)^2. \quad (3)$$

In order to obtain transport without motional excitation, we choose $E_T = 0$. Evaluation of Eq. (3) requires solution of the classical equation of motion. It reads

$$\ddot{x}(t) = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} V(x, t) \Big|_{x=x(t)} = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^2 U_i(t) \phi'_i(x(t)) \quad (4)$$

for a single ion trapped in the potential of Eq. (1) and is solved numerically using a *Dormand-Prince Runge-Kutta* integrator [25]. Employing Krotov's method for optimal control [28] together with the classical equation of motion, Eq. (4), we obtain the following iterative update rule:

$$\Delta U_i(t) = -\frac{S(t)}{\lambda_a} p_2^{(n)}(t) \phi'_i(x^{(n+1)}(t)), \quad (5)$$

where n denotes the previous iteration step. $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ is a costate vector which evolves according to

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = - \begin{pmatrix} \frac{p_2}{m} V''(U_i(t), x(t)) \\ p_1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

with its 'initial' condition defined at the final time T :

$$\mathbf{p}(T) = -2m(E(T) - E_T) \begin{pmatrix} \omega^2(x(T) - x_2) \\ \dot{x}(T) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

The algorithm works by propagating $x(t)$ forward in time, solving Eq. (4) with an initial guess for $U_i(t)$ and iterating the following steps until the desired value of J is achieved:

- (i) Obtain $p(T)$ according to Eq. (7) and propagate $p(t)$ backwards in time using Eq. (7).
- (ii) Update the voltages according to Eq. (5) at each time step while propagating $x(t)$ forward in time with the immediately updated voltages.

The optimization algorithm shows rapid convergence and brings the final excitation energy $E(T)$ as close to zero as desired. An example of an optimized voltage ramp is shown in Fig. 2(a). The voltages obtained are not symmetric under time reversal in contrast to the initial guess. This is rationalized by the voltage updates occurring only during forward propagation which breaks the time reversal symmetry. We find this behavior to be typical for the Krotov algorithm combined with the classical equation of motion.

2.3. Numerical optimization of wavepacket propagation

When quantum effects are expected to influence the transport, the ion has to be described by a wave function $\Psi(x, t)$. The control target is then to perfectly transfer the initial wavefunction, typically the ground state of the trapping potential centered around position x_1 , to a target wavefunction, i.e., the ground state of the trapping potential centered around position x_2 . This is achieved by minimizing the functional

$$J = 1 - \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, T)^* \Psi^{\text{tgt}}(x) dx \right|^2 + \int_0^T \frac{\lambda_a}{S(t)} \sum_i \Delta U_i(t)^2 dt. \quad (8)$$

Here, $\Psi(x, T)$ denotes the wave function of the single ion propagated with the set of voltages $U_i(t)$, and $\Psi^{\text{tgt}}(x)$ is the target wave function. The voltage updates $\Delta U_i(t)$, scaling factor λ_a and shape function $S(t)$ have identical meanings as in Sec. 2.2. $\Psi(x, T)$ is obtained by solving the time-dependent Schrödinger equation (TDSE),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}(t) \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i=1}^N U_i(t) \phi_i(x) \right) \Psi(x, t). \quad (9)$$

As in the classical case, optimization of the transport problem is tackled using Krotov's method [12, 14]. The update equation derived from Eq. (8) is given by

$$\Delta U_i(t) = \frac{S(t)}{\lambda_a} \mathfrak{Jm} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \chi^n(x, t)^* \phi_i(x) \Psi^{n+1}(x, t) dx, \quad (10)$$

with n denoting the iteration step. $\chi(x, t)$ is a costate wave function obeying the TDSE with 'initial' condition

$$\chi(x, T) = \left[\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} (\Psi(x, T))^* \Psi^{\text{tgt}}(x) dx \right] \Psi^{\text{tgt}}(x, T). \quad (11)$$

Optimized voltages $U_i(t)$ are obtained similarly to Sec. 2.2, i.e., one starts with the ground state, propagates $\Psi(x, t)$ forward in time according to Eq. (9), using an initial guess for the voltage ramps, and iterates the following steps until the desired value of J is achieved:

- (i) Compute the costate wave function at the final time T according to Eq. (11) and propagate $\chi(x, t)$ backwards in time, storing $\chi(x, t)$ at each timestep.
- (ii) Update the control voltages according to Eq. (10) using the stored $\chi(x, t)$, while propagating $\Psi(x, t)$ forward using the immediately updated control voltages.

Equations (10) and (11) imply a sufficiently large initial overlap between the wave function, which is forward propagated under the initial guess, and the target state in order to obtain a reasonable voltage update. This emphasizes the need for good initial guess ramps and illustrates the difficulty of the control problem when large phase space volumes need to be covered.

To solve the TDSE numerically, we use the Chebyshev propagator [29] in conjunction with a Fourier grid [30, 31] for efficient and accurate application of the kinetic energy part of the Hamiltonian. Denoting the transport time by T and the inter-electrode spacing by d , the average momentum during the shuttling is given by $\bar{p} = md/T$. Typical values of these parameters yield a phase space volume of $d \cdot \bar{p}/\hbar \approx 10^7$. This requires the numerical integration to be extremely stable. In order to ease the numerical treatment, we can exploit the fact that the wavefunction's spatial extent is much smaller than d and most excess energy occurs in the form of classical oscillations. This allows for propagating the wave function on a small *moving grid* that extends around the instantaneous position and momentum expectation values [25]. The details of our implementation combining the Fourier representation and a moving grid are described in Appendix A.

2.4. Initial guess voltages

Any optimization, no matter whether it employs classical or quantum equations of motion, starts from an initial guess. For many optimization problems, and in particular when using gradient-based methods for optimization, a physically motivated initial guess is crucial for success of the optimization [32]. Here, we design the initial guess for the voltage ramps such that the ion is dragged from position x_1 to x_2 in a smooth fashion. This is achieved as follows: The trapping potential $V(x, t)$ can be described by the position of its local minimum $\alpha(t)$. Obviously, $\alpha(t)$ needs to fulfill the boundary conditions $\alpha(0) = x_1$, $\alpha(T) = x_2$. In order to ensure smooth acceleration and deceleration of the center of the trap, we also demand $\dot{\alpha}(0) = \dot{\alpha}(T) = \ddot{\alpha}(0) = \ddot{\alpha}(T) = 0$. A possible ansatz fulfilling these boundary conditions is given by a polynomial of order 6,

$$\alpha(t) = x_1 + d(10s^3 - 15s^4 + 6s^6), \quad (12)$$

where $d = x_2 - x_1$ denotes the transport distance and $s = t/T$ is a dimensionless time.

To derive initial guess voltages $U_i^0(t)$, we use as a first condition that the local minimum of the potential coincides with $\alpha(t)$. Second, we fix the trap frequency ω to a constant value throughout the whole shuttling process,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=\alpha(t)} &= \phi'_1(\alpha(t))U_1^0(t) + \phi'_2(\alpha(t))U_2^0(t) \stackrel{!}{=} 0, \\ \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right|_{x=\alpha(t)} &= \phi''_1(\alpha(t))U_1^0(t) + \phi''_2(\alpha(t))U_2^0(t) \stackrel{!}{=} m\omega^2. \end{aligned} \quad (13)$$

These equations depend on first and second order spatial derivatives of the electrode potentials. Solving for $U_1^0(t)$, $U_2^0(t)$, we obtain

$$U_i^0(t) = \frac{(-1)^i m\omega^2 \phi'_j(\alpha(t))}{\phi''_2(\alpha(t))\phi'_1(\alpha(t)) - \phi'_2(\alpha(t))\phi''_1(\alpha(t))}, \quad i, j \in \{1, 2\}, \quad j \neq i. \quad (14)$$

An example is shown in Fig. 2. If the electrode potentials have translational symmetry, i.e., $\phi_j(x) = \phi_i(x + d)$, then $U_1^0(t) = U_2^0(T - t)$. This condition is approximately met for sufficiently homogeneous trap architectures.

2.5. Geometric optimal control

Most current ion traps are fairly well described by a simple harmonic model,

$$V(x, t) = -u_1(t)\frac{1}{2}m\omega_0^2(x - x_1)^2 - u_2(t)\frac{1}{2}m\omega_0^2(x - x_2)^2, \quad (15)$$

where ω_0 is the trap frequency and u_i are dimensionless control parameters which correspond to the electrode voltages. Since the equations of motion can be solved analytically, one can also hope to solve the control problem analytically. One option is given by Pontryagin's maximum principle [16, 33] which allows to determine time-optimal controls. Compared to numerical optimization which always yields local optima, Pontryagin's maximum principle guarantees the optimum to be global.

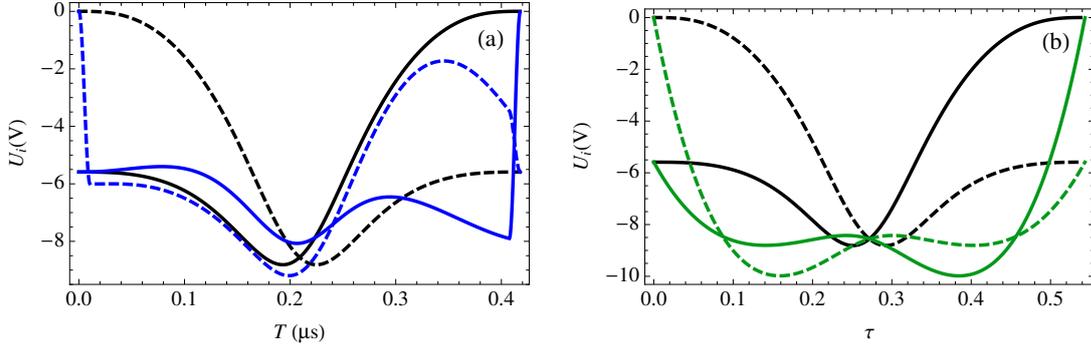


Figure 2. Control voltages applied to electrodes for transporting a $^{40}\text{Ca}^+$ ion from electrode 1 (solid lines) to electrode 2 (dashed lines) within 418 ns for an initial trap frequency of $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz: Initial guess voltage ramps (a and b, black) and ramps obtained by classical optimization (a, blue) and the invariant-based inverse engineering (b, green).

In general, the cost functional,

$$J[\mathbf{u}] = \int_0^T g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) dt, \quad (16)$$

is minimized for the equation of motion $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ and a running cost $g(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ with $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ and $\mathbf{y} = (x, v)$ in our case. The optimization problem is formally equivalent to finding a classical trajectory by the principle of least action. The corresponding classical control Hamiltonian that completely captures the optimization problem is given by

$$H_c(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = p_0 g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{u}) \quad (17)$$

with costate \mathbf{p} , obeying

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{y}}, \quad (18)$$

and $p_0 < 0$ a constant to compensate dimension. Pontryagin's principle states that H_c becomes maximal for the optimal choice of $\mathbf{u}(t)$ [16, 33].

Here we seek to minimize the transport time T . The cost functional then becomes

$$J[\mathbf{u}] = \int_0^{T_{\min}} dt = T_{\min},$$

which is independent of \mathbf{u} itself and leads to $g(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = 1$. Inserting the classical equations of motion $\dot{\mathbf{y}} = (v, -\partial_x V)$, the control Hamiltonian becomes

$$H_c(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = p_0 + p_1 v + p_2 (u_1 \cdot (x - x_1) + u_2 \cdot (x - x_2)) \omega_0^2. \quad (19)$$

We bound u_1 and u_2 by u_{\max} which corresponds to the experimental voltage limit. Since H_c is linear in u_i and $x_1 \leq x \leq x_2$, H_c becomes maximal depending on the sign of p_2 ,

$$u_1(t) = -u_2(t) = \text{sign}(p_2) u_{\max}. \quad (20)$$

Evaluating Eq. (18) for H_c of Eq. (19) leads to

$$\dot{p}_1 = p_2 \omega_0^2 (u_1 - u_2) \quad (21)$$

$$\dot{p}_2 = -p_1. \quad (22)$$

In view of Eq. (20), the only useful choice is $p_2(0) > 0$. Otherwise the second electrode would be biased to a positive voltage, leading to a repulsive instead of an attractive potential acting on the ion. The equations of motion for the costate thus become

$$\dot{p}_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad p_1(t) = c_1 \quad (23)$$

$$\dot{p}_2 = -p_1 \Rightarrow p_2(t) = p_2(0) - c_1 t. \quad (24)$$

For a negative constant c_1 , p_2 is never going to cross zero. This implies that there will not be a switch in voltages leading to continuous acceleration. For positive c_1 there will be a zero crossing at time $t_{\text{sw}} = p_2(0)/c_1$. The optimal solution thus corresponds to a single switch of the voltages. We will analyze this solution and compare it to the solutions obtained by numerical optimization below in Section 3.

2.6. Invariant based inverse engineering

For quantum mechanical equations of motion, geometric optimal control is limited to very simple dynamics such as that of three- or four-level systems, see e.g. Ref. [34]. A second analytical approach that is perfectly adapted to the quantum harmonic oscillator utilizes the Lewis-Riesenfeld theory which introduces dynamical invariants and their eigenstates [35]. This invariant-based inverse engineering approach (IEA) has recently been applied to the transport problem [36, 37]. The basic idea is to compensate the inertial force occurring during the transport sequence. To this end, the potential is written in the following form:

$$V(x, t) = -F(t)x + \frac{m}{2}\Omega^2(t)x^2 + \frac{1}{\rho^2(t)}U\left(\frac{x - \alpha(t)}{\rho(t)}\right). \quad (25)$$

The functions F , Ω , ρ and α have to fulfill constraints,

$$\ddot{\rho}(t) + \Omega^2(t)\rho(t) = \frac{\Omega_0^2}{\rho^3(t)}, \quad (26)$$

$$\ddot{\alpha}(t) + \Omega^2(t)\alpha(t) = F(t)/m, \quad (27)$$

where Ω_0 is a constant and U an arbitrary function. We choose $\Omega(t) = \Omega_0 = 0$, $\rho(t) = 1$, and $\alpha(t)$ to be the transport function of Sec. 2.4. This enables us to deduce the construction rule for $F(t)$, using Eq. (27),

$$\ddot{\alpha}(t) = F(t)/m, \quad (28)$$

such that $F(t)$ compensates the inertial force given by the acceleration of the trap center. For the potential of Eq. (25), the Hermitian operator

$$\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{2m} [\rho(p - m\dot{\alpha}) - m\dot{\rho}(x - \alpha)]^2 + \frac{1}{2}m\Omega_0^2 \left(\frac{x - \alpha}{\rho}\right)^2 + U\left(\frac{x - \alpha}{\rho}\right) \quad (29)$$

fulfills the invariance condition for all conceivable quantum states $|\Psi(t)\rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{\Gamma}(t) | \Psi(t) \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d\hat{\Gamma}}{dt} = \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\Gamma}(t), \hat{H}(t)] = 0 \quad (30)$$

with \hat{H} the Hamiltonian of the ion. The requirement for transporting the initial ground state to the ground state of the trap at the final time corresponds to \hat{H} and $\hat{\Gamma}$ having a common set of eigenfunctions at initial and final time. This is the case for $\dot{\alpha}(0) = \dot{\alpha}(T) = \dot{\rho}(t) = 0$ [36, 38]. We can now identify U in Eq. (25) with the trapping potential of Eq. (1). The additional compensating force is generated using the same trap electrodes by applying an additional voltage δU_i . For a given transport function $\alpha(t)$ we therefore have to solve the underdetermined equation,

$$m\ddot{\alpha}(t) = -\phi'_1(x(t))\delta U_1(t) - \phi'_2(x(t))\delta U_2(t), \quad (31)$$

where $x(t)$ is given by the classical trajectory. Since the ion is forced to follow the center of the trap we can set $x(t) = \alpha(t)$. The compensating force is supposed to be a function of time only, cf. Eq. (28), whereas changing the electrode voltages by δU_i will, via the $\phi_i(x)$, in general yield a position-dependent force. This leads to a modified second derivative of the actual potential:

$$m\omega_c(t)^2 = \sum_{i=1}^2 \phi''_i(\alpha(t))(U_i^0(t) + \delta U_i(t)) = m(\omega^2 + \delta\omega(t)^2), \quad (32)$$

where $\delta\omega(t)^2$ denotes the change in trap frequency due to the compensation voltages δU_i , ω is the initially desired trap frequency, and $U_i^0(t)$ is found in Eq. (14). A time-varying actual frequency $\omega_c(t)$ might lead to wavepacket squeezing. However, since Eq. (31) is underdetermined, we can set $\delta\omega(t)^2 = 0$ leading to $\omega_c(t) = \omega$ as desired. With this condition we can solve Eq. (31) and obtain

$$\delta U_i(t) = \frac{\ddot{\alpha}(t) (-1)^i m \phi''_j(\alpha(t))}{\phi''_2(\alpha(t))\phi'_1(\alpha(t)) - \phi'_2(\alpha(t))\phi''_1(\alpha(t))}, \quad i, j \in \{1, 2\}, \quad j \neq i. \quad (33)$$

Note that Eq. (33) depends only on the trap geometry. The transport duration T enters merely as a scaling parameter via $\ddot{\alpha}(t) = \alpha''(s)/T^2$. An example of a voltage sequence obtained by this method is shown in figure 2(b). The voltage curves are symmetric under time inversion like the guess voltages, that are derived from the same potential functions $\phi_i(x)$.

3. Application and comparison of the control methods

We now apply the control strategies introduced in Sec. 2 to a scenario with the parameters chosen to correspond to a typical experimental setting. The scaling of the classical speed limit is studied for a fixed maximum control voltage range and we show how in the limiting case the *bang-bang* solution is obtained. To verify the validity of the classical solution we are applying the obtained voltage ramps to a quantum mechanical wave packet propagation. Similarly, we use the invariant-based approach and verify the result for a quantum mechanical propagation.

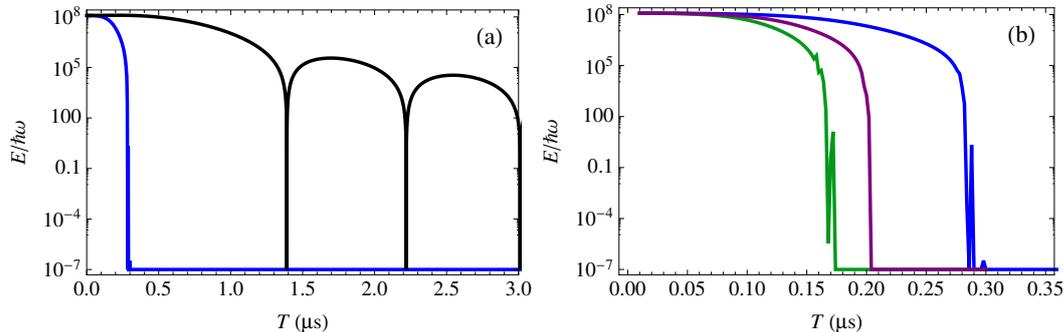


Figure 3. Final energy vs. transport time for different voltage ramps and classical dynamics. (a) shows the improvement over the initial guess (black) by numerical optimization for a maximum voltage of 10 V (blue) and (b) compares the results of numerical optimization for maximum voltages of 10 V (blue), 20 V (purple), and 30 V (green). The spikes in (b) are due to voltage truncation.

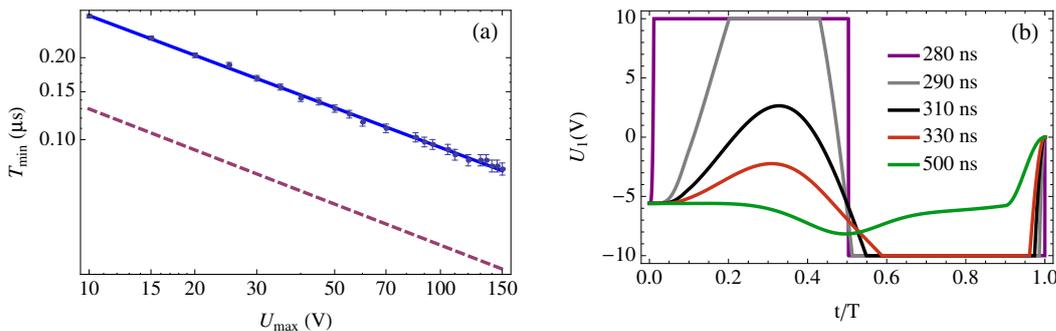


Figure 4. (a) Minimum transport time T_{\min}^{opt} vs. maximum electrode voltage U_{\max} , obtained from numerical optimization of classical transport dynamics (blue dots) along with a fit to Eq. (34). We also indicate the analytic bang-bang result, Eq. (37), derived for idealized, purely harmonic potentials (purple dashed line) being proportional to $1/\sqrt{U_{\max}}$. The slopes of the curves are clearly similar, indicating the negligible impact of anharmonicities on the scaling of T_{\min}^{opt} with U_{\max} . (b) Optimized voltages for the left electrode with $U_{\max} = 10$ V: The shorter the transport time, the more the ramp approaches a square shape. The rectangular bang-bang-like solution is attained at $T = 280$ ns, where the classical control of energy neutral transport breaks down due to an insufficient voltage range.

3.1. Experimental constraints and limits to control for classical ion transport

In any experiment, there is an upper limit to the electrode voltages that can be applied. It is the range of electrode voltages that limits the maximum transport speed. Typically this range is given by ± 10 V for technical reasons. It could be increased by the development of better voltage supplies. We define the minimum possible transport time T_{\min} to be the smallest time T for which less than 0.01 phonons are excited due to the total transport. To examine how T_{\min} scales as a function of the maximum electrode voltages U_{\max} , we have carried out numerical optimization combined with

classical equations of motion. The initial guess voltages, cf. Eqs. (12) and (14), were taken to preserve a constant trap frequency of $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz for a $^{40}\text{Ca}^+$ ion. The transport ramps were optimized for a range of maximum voltages between 10-150 V and transport times between 10 ns and 300 ns with voltages truncated to $\pm U_{\max}$ during the updates. The results are shown in Figs. 3 and 4. Figure 3 depicts the final excitation energy versus transport time, comparing the initial guess (black) to an optimized ramp with $U_{\max} = 10$ V (blue) in Fig. 3(a). For the initial guess, the final energy displays an oscillatory behavior with respect to the trap period ($T_{\text{per}} = 0.769 \mu\text{s}$ for $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz) as it has been experimentally observed in Ref. [10], and an overall decrease of the final energy for longer transport times. The optimized transport with $U_{\max} = 10$ V (blue line in Fig. 3(a)) shows a clear speed up of energy neutral transport: An excitation energy of less than 0.01 phonons is obtained for $T_{\min}^{\text{opt}} = 0.284 \mu\text{s}$ compared to $T_{\min}^{\text{guess}} = 1.391 \mu\text{s}$. The speedup increases with maximum voltage as shown in Fig. 3(b). The variation of T_{\min}^{opt} on U_{\max} is studied in Fig. 4(a). We find a functional dependence of

$$T_{\min}^{\text{opt}}(U_{\max}) \approx a \left(\frac{U_{\max}}{1 \text{ V}} \right)^{-b} \quad (34)$$

with $a = 0.880(15) \mu\text{s}$ and $b = 0.487(5)$. Optimized voltages are shown in Fig. 4(b) for the left electrode with $U_{\max} = 10$ V. As the transport time decreases, the voltage ramp approaches a square shape. A bang-bang-like solution is attained at $T = 280$ ns. However, for such a short transport time, classical control of energy neutral transport breaks down due to an insufficient voltage range and the final excitation amounts to 5703 mean phonons.

In the following we show that for purely harmonic potentials, the exponent b in Eq. (34) is universal, i.e., it does not depend on trap frequency nor ion mass. It is solely determined by the bang-bang like optimized voltage sequences, where instantaneous switching between maximum acceleration and deceleration guarantees shuttling within minimum time. The technical feasibility of bang-bang shuttling is thoroughly analyzed in Ref. [39]. The solution is obtained by the application of Pontryagin's maximum principle [16, 33] as discussed in Sec. 2.5 and assumes instantaneous switches. Employing Eqs. (20) and (24), the equation of motion becomes

$$\ddot{x} = \omega_0^2 u_{\max} \cdot \begin{cases} d, & t < t_{\text{sw}} \\ -d, & t > t_{\text{sw}} \end{cases} \quad (35)$$

This can be integrated to

$$x(t) = \begin{cases} x_1 + u_{\max} d \omega_0^2 t^2, & 0 \leq t \leq t_{\text{sw}} \\ x_1 + d - u_{\max} d \omega_0^2 (t - T_{\min})^2, & t_{\text{sw}} \leq t \leq T_{\min} \end{cases} \quad (36)$$

with the boundary conditions $x(0) = x_1$, $x(T_{\min}) = x_2$ and $\dot{x}(0) = \dot{x}(T_{\min}) = 0$. Using the continuity of \dot{x} and x at $t = t_{\text{sw}}$, we obtain

$$t_{\text{sw}} = \frac{T}{2}, \quad T_{\min} = \frac{\sqrt{2}}{\omega_0} \sqrt{\frac{1}{u_{\max}}} \quad (37)$$

Notably, the minimum transport time is proportional to $u_{\max}^{-1/2}$ which explains the behavior of the numerical data shown in Fig. 4. This scaling law can be understood intuitively by considering that in the bang-bang control approach, the minimum shuttling time is given by the shortest attainable trap period, which scales as $u_{\max}^{-1/2}$. Assuming a trap frequency of $\omega_0 = 2\pi \cdot 0.55$ MHz in Eq. (37), corresponding to a trapping voltage of -1 V for our trap geometry, we find a prefactor $\sqrt{2}/\omega_0 = 0.41\mu\text{s}$. This is smaller than $a = 0.880(15)\mu\text{s}$ obtained by numerical optimization for realistic trap potentials. The difference can be rationalized in terms of the average acceleration provided by the potentials. For realistic trap geometries, the force exerted by the electrodes is inhomogeneous along the transport path. Mutual shielding of the electrodes reduces the electric field feedthrough of an electrode to the neighboring ones. Thus, the magnitude of the accelerating force that a real electrode can exert on the ion when it is located at a neighboring electrode is reduced with respect to a constant force generating harmonic potential with the same trap frequency.

The minimum transport time of $T_{\min}^{\text{opt}} = 0.284\mu\text{s}$ identified here for $U_{\max} = 10$ V, cf. the blue line in Fig. 3(a), is significantly shorter than operation times realized experimentally. For comparison, an ion has recently been shuttled within $3.6\mu\text{s}$, leading to a final excitation of 0.10 ± 0.01 motional quanta [10]. Optimization may not only improve the transport time but also the stability with respect to uncertainties in the time. This is in contrast to the extremely narrow minima of the final excitation energy for the guess voltage ramps shown in black in Fig. 3(a), implying a very high sensitivity to uncertainties in the transport time. For example, for the fourth minimum of the black curve, located at $3.795\mu\text{s}$ and close to the operation time of Ref. [10] (not shown in Fig. 3(a)), final excitation energies of less than 0.1 phonons are observed only within a window of 3 ns. Optimization of the voltage ramps for $T = 3.351\mu\text{s}$ increases the stability against variations in transport time to more than 60 ns.

In conclusion we find that optimizing the classical motion of an ion allows us to identify the minimum operation time for a given maximum voltage and improve the stability with respect to timing uncertainties for longer operation times. The analytical solution derived from Pontryagin's maximum principle is helpful to understand the minimum time control strategy. Numerical optimization accounts for all typical features of realistic voltage ramps. It allows for identifying the minimum transport time, predicting 36.9% of the oscillation period for current maximum voltages and a trap frequency of $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz. This number can be reduced to 12.2% when increasing the maximum voltage by one order of magnitude.

However, these predictions may be rendered invalid by a breakdown of the classical approximation.

3.2. Validity of classical solutions in the quantum regime

We now employ quantum wavepacket dynamics to test the classical solutions, obtained in Sec. 3.1. Provided the trap frequency is constant and the trap is perfectly harmonic,

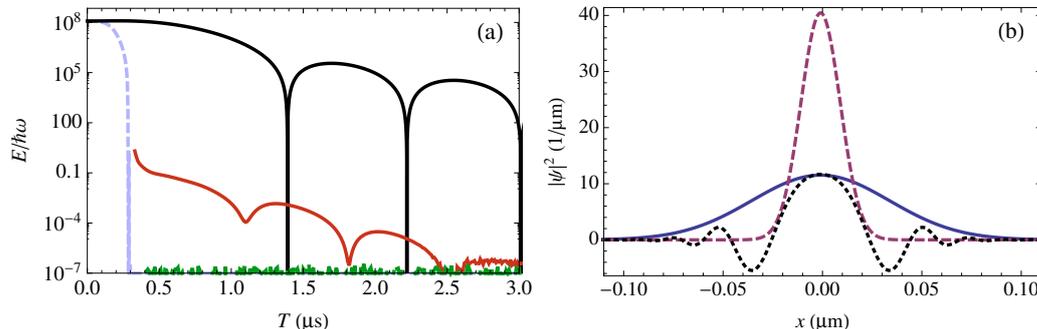


Figure 5. Testing control strategies obtained with classical dynamics for wavepacket motion: (a) Final excitation energy of the ion wavepacket with the initial guess (black) and the optimized voltage ramps with $U_{\text{max}} = 10$ V (red). Also shown is a solution obtained by invariant based inverse engineering for a quantum mechanical harmonic oscillator (green). For comparison, the final excitation energy obtained by solving the classical equation of motion with the optimized ramp is shown in light blue. Note that for the initial guess (black), the relative difference between wavepacket and classical motion is not visible on the scale of the figure (less than 10^{-3}). (b) Final wavefunction $|\Psi(T)|^2$ (blue) for classically optimized transport with $T = 320$ ns and $U_{\text{max}} = 10$ V and target wave function $|\Psi^{\text{tgt}}|^2$ (purple dashed). Also shown is the scaled real part of the final wavefunction $\Re(\Psi(T))$ (black dotted). The clearly visible spread of the wavepacket corresponds to squeezing of the momentum.

the wave function will only be displaced during the transport. For a time-varying trap frequency, however, squeezing may occur [40]. In extreme cases, anharmonicities of the potential might lead to wavepacket dispersion. Since these two effects are not accounted for by numerical optimization of classical dynamics, we discuss in the following at which timescales such genuine quantum effects become significant. To this end, we have employed the optimized voltages shown in Fig. 4(b) in the propagation of a quantum wavepacket. We compare the results of classical and quantum mechanical motion in Fig. 5(a), cf. the red and lightblue lines. A clear deviation is observed. Also, as can be seen Fig. 5(b), the wavefunction fails to reach the target wavefunction for transport times close to the classical limit $T_{\text{min}}^{\text{opt}}$. This is exclusively caused by squeezing and can be verified by inspecting the time evolution of the wavepacket in the final potential: We find the width of the wavepacket to oscillate, indicating a squeezed state. No wavepacket dispersion effects are observed, i.e., the final wavepackets are still minimum uncertainty states, with $\min(\Delta x \cdot \Delta p) = \hbar/2$. This means that no effect of anharmonicities in the potential is observed. An impact of anharmonicities is expected once the size of the wavefunction becomes comparable to segment distance d (see Fig. 1). Then the wavefunction extends over spatial regions in which the potentials deviate substantially from harmonic potentials. For the ion shuttling problem, this effect does not play a role over the relevant parameter regime. The effects of anharmonicities in the quantum regime for trapped ions were thoroughly analyzed in Ref. [41]. Squeezing increases T_{min} from $0.28 \mu\text{s}$ to $0.86 \mu\text{s}$ for the limit of exciting less than 0.01 phonons, see the red curve in Fig. 5(a), i.e., it only triples the minimum transport time. We show that squeezing

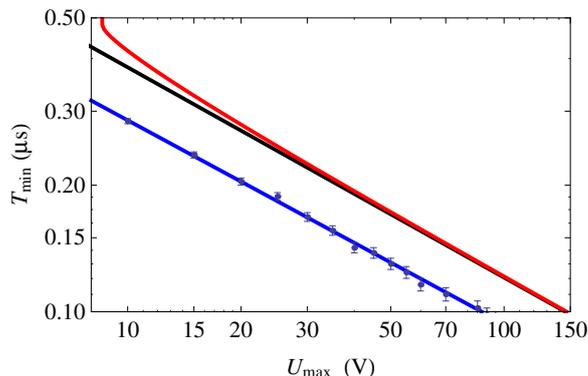


Figure 6. Minimum transport time T_{\min} vs. maximum electrode voltage U_{\max} obtained by the invariant-based inverse engineering approach: The compensating force method for a trap frequency of $\omega = 2\pi \cdot 1.3$ MHz using the transport function of Eq. (12) (red) and for the limiting case of vanishing trap frequency (black). Also shown is the classical result from Fig. 4 (blue).

can be suppressed altogether in the following section.

3.3. Application of a compensating force approach

In the invariant-based IEA, the minimal transport time is determined by the maximum voltages that are required for attaining zero motional excitation. The total voltage that needs to be applied is given by $U_i(t) = U_i^0(t) + \delta U_i(t)$ with $U_i^0(t)$ and $\delta U_i(t)$ found in Eqs. (14) and (33). The maximum of $U_i(t)$, and thus the minimum in T , is strictly related to the acceleration of the ion provided by the transport function $\alpha(t)$, cf. Eq. (33). If the acceleration is too high, the voltages will exceed the feasibility limit U_{\max} . At this point it can also be understood why the acceleration should be zero at the beginning and end of the transport: For $\ddot{\alpha}(0) \neq 0$ a non-vanishing correction voltage $\delta U_i \neq 0$ is obtained from Eq. (33). This implies that the voltages do not match the initial trap conditions, where the ion should be located at the center of the initial potential.

We can derive a transport function $\alpha(t)$ compliant with the boundary conditions using Eq. (12). For this case, Fig. 6 shows the transport time T_{\min}^{IEA} versus the maximum voltage U_{\max} that is applied to the electrodes during the transport sequence. For large transport times, the initial guess voltages $U_i^0(t) \propto \omega^2$ dominate the compensation voltages $\delta U_i(t) \propto \ddot{\alpha}(t) = \alpha''(s)/T^2$. This leads to the bend of the red curve. When the trap frequency ω is lowered, the bend decreases. For the limiting case of no confining potential $\omega = U_i^0(t) = 0$, T_{\min}^{IEA} is solely determined by the compensation voltages. In this case the same scaling of T_{\min}^{IEA} with U_{\max} as for the optimization of classical dynamics is observed, cf. black and blue lines in Fig. 6. For large U_{\max} , this scaling also applies to the case of non-zero trap frequency, cf. red line in Fig. 6.

We have tested the performance of the compensating force by employing it in the time evolution of the wavefunction. It leads to near-perfect overlap with the target state

with an infidelity of less than 10^{-9} . The final excitation energy of the propagated wave function is shown in Fig. 5 (green line) for a maximum voltage of $U_{\max} = 10$ V. For the corresponding minimum transport time, $T_{\min}^{\text{IEA}}(10 \text{ V}) = 418$ ns, a final excitation energy six orders of magnitude below that found by optimization of the classical dynamics is obtained. This demonstrates that the invariant-based IEA is capable of avoiding the wavepacket squeezing that was observed in Sec. 3.2 when employing classically optimized controls in quantum dynamics. It also confirms that anharmonicities do not play a role since these would not be accounted for by the IEA-variant employed here. Note that an adaptation of the invariant-based IEA to anharmonic traps is found in Ref. [37]. Similarly to numerical optimization of classical dynamics, IEA is capable of improving the stability against variations in transport time T . The final excitation energy obtained for $T = 3.351 \mu\text{s}$ stays below 0.1 phonons within a window of more than 13 ns.

A further reduction of the minimum transport time may be achieved due to the freedom of choice in the transport function $\alpha(t)$, by employing higher polynomial orders in order to reduce the compensation voltages $\delta U_i(t)$, cf. Eq. (33). However, the fastest quantum mechanically valid transport has to be slower than the solutions obtained for classical ion motion. This follows from the bang-bang control being the time-optimal solution for a given voltage limit and the IEA solutions requiring additional voltage to compensate the wavepacket squeezing. We can thus conclude that the time-optimal quantum solution will be inbetween the blue and black curves of Fig. 6.

3.4. Feasibility analysis of quantum optimal control

Numerical optimization of the wavepacket motion is expected to become necessary once the dynamics explores spatial regions in which the potential is strongly anharmonic or is subject to strongly anharmonic fluctuations. This can be expected, for example, when the spatial extent of the wavefunction is not too different from that of the trap. Correspondingly, we introduce the parameter $\xi = \sigma_0/d$, which is the wavefunction size normalized to the transport distance. While for current trap architectures, such a scenario is rather unlikely, further miniaturization might lead to this regime. Also, it is currently encountered in the transport of neutral atoms in tailored optical dipole potentials [42, 43].

Gradient-based quantum OCT requires an initial guess voltage that ensures a finite overlap of the propagated wave function $\Psi(T)$ with the target state Ψ^{tgt} , see Eq. (11). Otherwise, the amplitude of the co-state χ vanishes. The overlap can also be analyzed in terms of phase space volume. For a typical ion trap setting with parameters as in Fig. 1, the total covered phase space volume in units of Planck's constant is $m d^2 \omega / 2\pi h \approx 10^7$. This leads to very slow convergence of the optimization algorithm, unless an extremely good initial guess is available.

We utilize the results of the optimization for classical dynamics of Sec. 3.1 as initial guess ramps for optimizing the wavepacket dynamics and investigate the convergence rate as a function of the system dimension, i.e., of ξ . The results are shown in Fig. 7(a),

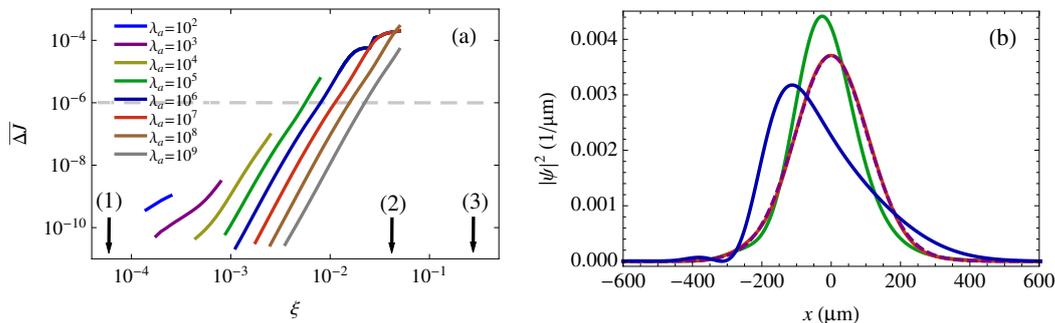


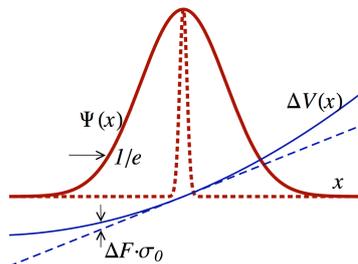
Figure 7. (a) Mean improvement of the optimization functional, $\overline{\Delta J}$ (averaged over 100 iterations), versus relative size of the wavepacket ξ for different optimization weights λ_a , cf. Eq. (10), ranging from $\lambda_a = 10^2$ (leftmost line) to $\lambda_a = 10^9$ (rightmost line) in powers of ten. The arrows indicate: (1) the parameters corresponding to current trap technology, (2) good convergence of quantum OCT with the invariant-based IEA still being valid, (3) fast convergence of quantum OCT with invariant-based IEA starting to fail. (b) Final wavefunction amplitudes for $\xi = 0.4$ (arrow (3) in (a)) and classical optimization (blue, fidelity of 83.8%), IEA (green, 94.6%), quantum OCT (red, fidelity of 99.9%). Also plotted is the target state (purple dashed).

plotting the mean improvement per optimization step, ΔJ , averaged over 100 iterations, versus the scale parameter ξ . We computed the convergence rate $\overline{\Delta J}$ for different, fixed optimization weights λ_a in Eq. (10). The curves in Fig. 7(a) are truncated for large values of $\overline{\Delta J}$, where the algorithm becomes numerically unstable. Values below $\overline{\Delta J} = 10^{-6}$ (dashed grey line in Fig. 7(a)) indicate an insufficient convergence rate for which no significant gain of fidelity is obtained with reasonable computational resources. In this case the potentials are insufficiently anharmonic to provide *quantum* control of the wavefunction.

Numerical optimization of the wavepacket dynamics is applicable and useful for scale parameters of $\xi \approx 0.05$ and larger, indicated by arrows (2) and (3) in Fig. 7(a). Then the wavefunction size becomes comparable to the transport distance, leading for example to a phase space volume of around $10h$ for arrow (2). At this scale the force becomes inhomogeneous across the wavepacket. This leads to a breakdown of the IEA, as illustrated for $\xi = 0.4$ in Figs. 7(b) and 8. The fidelity $\mathfrak{F}_{\text{IEA}}$ for the IEA drops below 94.6%, whereas $\mathfrak{F}_{\text{qOCT}} = 0.999$ is achieved by numerical optimization of the quantum dynamics.

4. Summary and Conclusions

Manipulation of motional degrees of freedom is very widespread in trapped-ion experiments. However, most theoretical calculations involving ion transport over significant distances are based on approximations that in general do not guarantee the level of precision needed for high-fidelity quantum control, especially in view of applications in the context of quantum technologies. As a consequence, before our work



	ξ	$\Delta F/F$	$\mathfrak{F}_{\text{IEA}}$	$\mathfrak{F}_{\text{qOCT}}$	$T_{\text{CPU}}(h)$
(1)	$5.0 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-13}$	1.000	N/A	N/A
(2)	$5.0 \cdot 10^{-2}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	1.000	0.999	32.2
(3)	$4.0 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	0.946	0.999	4.3

Figure 8. Limitation of the compensating force approach. A force inhomogeneity $\Delta F = \sum_i [\phi'_i(\alpha(t) + \sigma_0) - \phi'_i(\alpha(t) - \sigma_0)] \delta U_i(t)$ across the wavefunctions is caused by anharmonicities of the potential $\Delta V = F(t)x$ used to implement the compensating force. The relative spread of the force $\Delta F/F$ across the wavefunction is taken at the point in time, where the acceleration $\ddot{\alpha}(t)$ is maximal. $\Delta F/F$ increases to the range of several percent for large wavefunction extents. This leads to a drop in the fidelity $\mathfrak{F}_{\text{IEA}}$. Also shown is the fidelity $\mathfrak{F}_{\text{qOCT}}$ obtained by optimizing the quantum dynamics. The CPU time T_{CPU} required for optimization could be easily reduced by a factor of 8 in case (3) compared to case (2) due to the better convergence of quantum OCT in this regime.

little was known about how to apply optimal control theory to large-scale manipulation of ion motion in traps, concerning in particular the most efficient simulation and control methods to be employed in different parameter regimes, as well as the level of improvement that optimization could bring.

With this in mind, in the present work we have investigated the applicability of several classical and quantum control techniques for the problem of moving an ion across a trap in a fast and accurate way. When describing the ion dynamics purely classically, numerical optimization yields transport times significantly shorter than a trapping period. The minimum transport duration depends on the maximal electrode voltage that can be applied and was found to scale as $1/\sqrt{U_{\text{max}}}$. The same scaling is observed for time-optimal bang-bang-like solutions that can be derived using Pontryagin's maximum principle and assuming perfectly harmonic traps. Not surprisingly, the classically optimized solutions were found to fail when tested in quantum wavepacket motion for transport durations of about one third of a trapping period. Wavepacket squeezing turns out to be the dominant source of error with the final wavepacket remaining a minimum uncertainty state. Anharmonic effects were found to play no significant role for single-ion shuttling over a wide range of parameters. Wavepacket squeezing can be perfectly compensated by the control strategy obtained with the invariant-based inverse engineering approach. It amounts to applying correction voltages which can be generated by the trapping electrodes and which exert a compensating force on the ion. This is found to be the method of choice for current experimental settings.

Control methods do not only allow to assess the minimum time required for ion transport but can also yield more robust solutions. For transport times that have been used in recent experiments [10], significantly larger than the minimum times identified here, the classical solutions are valid also for the quantum dynamics. In this regime, both

numerical optimization of classical ion motion and the inverse engineering approach yield a significant improvement of stability against uncertainties in transport time. Compared to the initial guess voltages, the time window within which less than 0.1 phonons are excited after transport is increased by a factor of twenty for numerical optimization and a factor of five for the inverse engineering approach.

Further miniaturization is expected to yield trapping potentials where the wavepacket samples regions of space in which the potential, or potential fluctuations, are strongly anharmonic. Also, for large motional excitations recent experiments have shown nonlinear Duffing oscillator behavior [44], nonlinear coupling of modes in linear ion crystals [45, 46] and amplitude dependent modifications of normal modes frequencies and amplitude due to nonlinearities [47]. In these cases, numerical optimization of the ion's quantum dynamics presents itself as a well-adapted and efficient approach capable of providing high-fidelity control solutions.

The results presented in this paper provide us with a systematic recipe, based on a single parameter (the relative wave packet size ξ), to assess which simulation and control methods are best suited in different regimes. We observe a crossover between applicability of the invariant-based IEA, for a very small wavefunction extension, and that of quantum OCT, when the width of the wave function becomes comparable with the extension of the potential. Both methods combined cover the full range of conceivable trap parameters. That is, no matter what are the trapping parameters, control solutions for fast, high-fidelity transport are available. In particular, in the regime $\xi \ll 1$, relevant for ion transport in chip traps, solutions obtained with the inverse engineering approach are fully adequate for the purpose of achieving high-fidelity quantum operations. This provides a major advantage in terms of efficiency over optimization algorithms based on the solution of the Schrödinger equation. The latter in turn becomes indispensable when processes involving motional excitations inside the trap and/or other anharmonic effects are relevant. In this case, the numerical quantum OCT method demonstrated in this paper provides a comprehensive way to deal with the manipulation of the ions' external states.

Acknowledgments

KS, UP, HAF and FSK thank Juan Gonzalo Muga and Mikel Palmero for the discussions about the invariant based approach. HAF thanks Henning Kaufmann for useful contributions to the numerical framework. The Mainz team acknowledges financial support by the Volkswagen-Stiftung, the DFG-Forschergruppe (FOR 1493) and the EU-projects DIAMANT (FP7-ICT), IP-SIQS, the IARPA MQCO project and the MPNS COST Action MP1209. MHG and CPK are grateful to the DAAD for financial support. SM, FSK and TC acknowledge support from EU-projects SIQS, DIAMANT and PICC and from the DFG SFB/TRR21. MHG, SM, TC and CPK enjoyed the hospitality of KITP and acknowledge support in part by the National Science Foundation under Grant No. NSF PHY11-25915.

Table A1. Necessary steps for wavepacket propagation over long distances.

	Mathematical step	Possible implementation
1. Calculate position mean	$\langle x \rangle = \langle \Psi \hat{x} \Psi \rangle$	$\langle x \rangle = \sum_i x_i \Psi_i^* \Psi_i$
2. Transform to momentum space		$\{\Phi_i\} = \mathcal{FF}\mathcal{T}(\{\Psi_i\})$
3. Calculate momentum mean	$\langle p \rangle = \langle \Psi \hat{p} \Psi \rangle$	$\langle p \rangle = \sum_i \hbar k_i \Phi_i^* \Phi_i$
4. Shift position	$ \Psi\rangle \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle x \rangle \hat{p}\right) \Psi\rangle$	$\Phi_i \rightarrow \exp(ik_i \langle x \rangle) \Phi_i$
5. Transform to position space		$\{\Psi_i\} = \mathcal{FF}\mathcal{T}^{-1}(\{\Phi_i\})$
6. Shift momentum	$ \Psi\rangle \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle \hat{x}\right) \Psi\rangle$	$\Psi_i \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x_i\right) \Psi_i$
7. Update classical quantities		$x_{cl+} = \langle x \rangle, p_{cl+} = \langle p \rangle$

Appendix A. Quantum wavepacket propagation with a moving Fourier grid

For transport processes using realistic trap parameters, naive application of the standard Fourier grid method [30, 31] will lead to unfeasible grid sizes. This is due to the transport distance being usually 3 to 5 orders of magnitude larger than the spatial width of the wavepacket and possible acceleration of the wavepacket requiring a sufficiently dense coordinate space grid. To limit the number of grid points, a *moving grid* is introduced. Instead of using a spatial grid that covers the entire transport distance, the grid is defined to only contain the initial wavepacket, in a window between x_{\min} and x_{\max} . The wavepacket $\Psi(x, t_0)$ is now propagated for a single time step to $\Psi(x, t_0 + dt)$. For the propagated wave function, the expectation value

$$\langle x \rangle = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \Psi^*(x, t_0 + dt) x \Psi(x, t_0 + dt) dx \quad (\text{A.1})$$

is calculated, and from that an offset is obtained,

$$\bar{x} = \langle x \rangle - \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2}, \quad (\text{A.2})$$

by which x_{\min} and x_{\max} are shifted. The wavepacket is now moved to the center of the new grid, and the propagation continues to the next time step.

The same idea can also be applied to momentum space. After the propagation step, the expectation value $\langle k \rangle$ is calculated and stored as an offset \bar{k} . The wave function is then shifted in momentum space by this offset, which is achieved by multiplying it by $e^{-i\bar{k}x}$. This cancels out the fast oscillations in $\Psi(x, t_0 + dt)$. When applying the kinetic operator in the next propagation step, the offset has to be taken into account, i.e., the kinetic operator in momentum space becomes $(k + \bar{k})^2/2m$.

The combination of the moving grid in coordinate and momentum space allows to choose the grid window with the mere requirement of being larger than the extension of the wavepacket at any point of the propagation. We find typically 100 grid points to be sufficient to represent the acceleration within a single time step. The procedure is illustrated in Fig. A1 and the steps of the algorithm are summarized in Table A1.

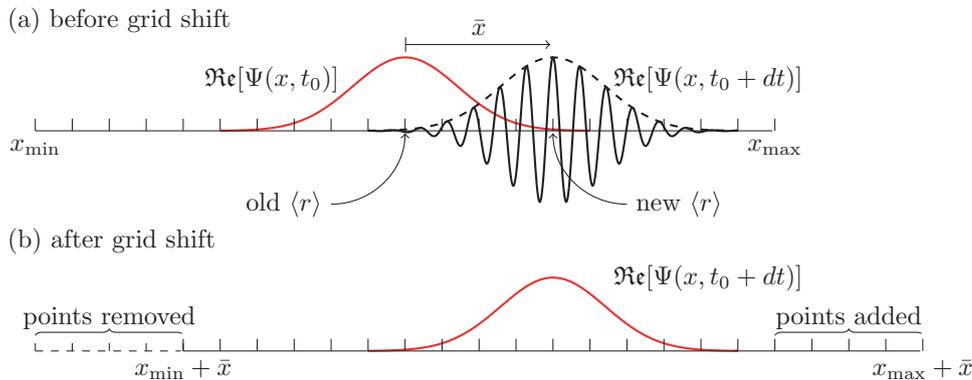


Figure A1. Illustration of the moving grid procedure. The propagation of the wave function $\Psi(x, t_0)$ for a single time step is shown in (a). The resulting wave function has moved in position and has non-zero momentum. After shifting the grid in coordinate and momentum space, the propagated wave function is now centered on the new grid and has zero momentum (b).

References

- [1] Cirac I and Zoller P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4091
- [2] Blatt R and Wineland D 2008 *Nature* **453** 1008
- [3] Wineland D, Monroe C, Itano W, Leibfried D, King B and Meekhof D 1998 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **103** 259
- [4] Casanova J, López C, García-Ripoll J, Roos C and Solano E 2012 *The European Physical Journal D* **66** 1–5 ISSN 1434-6060
- [5] Monz T, Schindler P, Barreiro J T, Chwalla M, Nigg D, Coish W A, Harlander M, Hänsel W, Hennrich M and Blatt R 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106**(13) 130506
- [6] Gerritsma R, Lanyon B P, Kirchmair G, Zähringer F, Hempel C, Casanova J, García-Ripoll J J, Solano E, Blatt R and Roos C F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106**(6) 060503
- [7] Richerme P, Senko C, Korenblit S, Smith J, Lee A, Islam R, Campbell W C and Monroe C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111**(10) 100506
- [8] Kielpinsky D, Monroe C and Wineland D J 2002 *Nature* **417** 709
- [9] Rowe M A, Ben-Kish A, Demarco B, Leibfried D, Meyer V, Beall J, Britton J, Hughes J, Itano W M, Jelenkovic B, Langer C, Rosenband T and Wineland D J 2002 *Quantum Information & Computation* **2** 257–271
- [10] Walther A, Ziesel F, Ruster T, Dawkins S T, Hettrich M, Singer K, Schmidt-Kaler F and Poschinger U 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 080501
- [11] Bowler R, Gaebler J, Lin Y, Tan T R, Hanneke D, Jost J D, Home J P, Leibfried D and Wineland D J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109**(8) 080502
- [12] Somló J, Kazakovski V A and Tannor D J 1993 *Chem. Phys.* **172** 85–98
- [13] Zhu W, Botina J and Rabitz H 1998 *J. Chem. Phys.* **108** 1953–1963
- [14] Reich D M, Ndong M and Koch C P 2012 *J. Chem. Phys.* **136** 104103
- [15] Schulz S A, Poschinger U G, Singer K and Schmidt-Kaler F 2006 *Progress of Physics* **54** 648
- [16] Chen X, Torrontegui E, Stefanatos D, Li J S and Muga J 2011 *Phys. Rev. A* **84** 043415
- [17] Torrontegui E, Ibáñez S, Chen X, Ruschhaupt A, Guéry-Odelin D and Muga J G 2011 *Phys. Rev. A* **83**(1) 013415
- [18] Calarco T, Hinds E A, Jaksch D, Schmiedmayer J, Cirac J I and Zoller P 2000 *Phys. Rev. A* **61**(2) 022304

- [19] De Chiara G, Calarco T, Anderlini M, Montangero S, Lee P J, Brown B L, Phillips W D and Porto J V 2008 *Phys. Rev. A* **77**(5) 052333
- [20] Murphy M, Jiang L, Khaneja N and Calarco T 2009 *Phys. Rev. A* **79**(2) 020301
- [21] Giovannetti V, Lloyd S and Maccone L 2003 *Phys. Rev. A* **67** 052109
- [22] Caneva T, Murphy M, Calarco T, Fazio R, Montangero S, Giovannetti V and Santoro G E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 240501
- [23] Schulz S A, Poschinger U G, Ziesel F and Schmidt-Kaler F 2008 *New Journal of Physics* **10** 045007
- [24] Amini J M, Britton J, Leibfried D and Wineland D J 2011 Microfabricated chip traps for ions *Atom Chips* ed Reichel J and Vuletić V (Wiley-VCH) pp 395–420 arXiv:0812.390
- [25] Singer K, Poschinger U, Murphy M, Ivanov P, Ziesel F, Calarco T and Schmidt-Kaler F 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 2609
- [26] Huber G, Ziesel F, Poschinger U G, Singer K and Schmidt-Kaler F 2010 *Applied Physics B: Lasers and Optics* **100** 725
- [27] Brownnutt M, Harlander M, Hänsel W and Blatt R 2012 *Applied Physics B* **107** 1125–1130
- [28] Konnov A and Krotov V 1999 *Automation and Remote Control* **60** 1427–1436
- [29] Tal-Ezer H and Kosloff R 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 3967–3971
- [30] Kosloff R 1988 *J. Phys. Chem.* **92** 2087–2100
- [31] Kosloff R 1994 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **45** 145–178
- [32] Koch C P, Palao J P, Kosloff R and Masnou-Seeuws F 2004 *Phys. Rev. A* **70** 013402
- [33] Pontryagin L *et al.* 1962 *The Mathematical Theory of Optimal Processes* (New York: Interscience)
- [34] Yuan H, Koch C P, Salamon P and Tannor D J 2012 *Phys. Rev. A* **85** 033417
- [35] Lewis H R and Riesenfeld W B 1969 *Journal of Mathematical Physics* **10** 1458–1473
- [36] Torrontegui E, Ibáñez S, Chen X, Ruschhaupt A, Guéry-Odelin D and Muga J G 2011 *Phys. Rev. A* **83**(1) 013415
- [37] Palmero M, Torrontegui E, Guéry-Odelin D and Muga J G 2013 *Phys. Rev. A* **88**(5) 053423
- [38] Dhara A K and Lawande S V 1984 *J. Phys. A.* **17** 2423
- [39] Alonso J, Leupold F M, Keitch B C and Home J P 2013 *New Journal of Physics* **15** 023001
- [40] Scully M O, Chapin K R, Dorfman K E, Kim M B and Svidzinsky A 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **108** 15097–15100
- [41] Home J, Hanneke D, Jost J, Leibfried D and Wineland D 2011 *New Journal of Physics* **13** 073026
- [42] Ivanov P A, Vitanov N, Singer K and Schmidt-Kaler F 2010 *arXiv:1002.3033*
- [43] Walther A, Poschinger U G, Singer K and Schmidt-Kaler F 2012 *Applied Physics B: Lasers and Optics* **107** 1061
- [44] Akerman N, Kotler S, Glickman Y, Dallal Y, Keselman A and Ozeri R 2010 *Phys. Rev. A* **82**(6) 061402
- [45] Roos C F, Monz T, Kim K, Riebe M, Häffner H, James D F V and Blatt R 2008 *Phys. Rev. A* **77**(4) 040302
- [46] Nie X R, Roos C F and James D F 2009 *Physics Letters A* **373** 422–425
- [47] Home J P, Hanneke D, Jost J D, Leibfried D and Wineland D J 2011 *New Journal of Physics* **13** 073026

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich meine Diplomarbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen oder anderen Quellen entnommen sind, sind als solche eindeutig kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form noch nicht veröffentlicht und noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt worden.

6. Februar 2014

Henning Alexander Fürst