### Doktori disszertáció

Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar Fizika Doktori Iskola

Kárpáti Attila

# Konstruktív dekoherencia kvantumrendszerekben

témavezető: Dr. Ádám Péter

a fizika tudomány kandidátusa MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Intézet

konzultáns: **Dr. Kis Zsolt**, Ph.D. MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet



Pécsi Tudományegyetem Pécs, 2009

### Tartalomjegyzék

#### Bevezetés

1.	Elméleti háttérismeretek					
	1.1.	Nyílt kvantumrendszerek Markov-közelítésben: a sűrűségoperátor és				
		a kvan	tumtrajektória módszerek	1		
		1.1.1.	A sűrűségoperátor	2		
		1.1.2.	A sűrűségoperátor módszer	3		
		1.1.3.	Kvantumtrajektória módszerek	10		
		1.1.4.	A kvantumugrások módszere	11		
	1.2.	Adiaba	atikus és nemadiabatikus átmenetek	14		
		1.2.1.	A Landau-Zener modell	15		
		1.2.2.	Az adiabatikus közelítés	17		
2. Az inkoherens folyamatok és a dekoherencia konstruktív felhasz-						
	nálási módjai					
	2.1. Kvantuminterferencia létrehozása sztochasztikus ütközési folyama-					
		tokkal		21		
		2.1.1.	A modell	23		
		2.1.2.	Az időfejlődés numerikus szimulációja	27		
		2.1.3.	A spektrum számítása kvantum trajektória módszerrel $.\ .\ .$	28		
		2.1.4.	A rezonancia-fluoreszcencia spektrum analitikus meghatározása	33		

	2.1.5.	Az időbeli fáziskorreláció vizsgálata	40		
	2.1.6.	A kvantuminterferencia kialakulása	45		
2.2.	2.2. Koherens szuperpozíció állapotok tervezése a dekoherencia káros				
	tásaite	ól mentesen	46		
	2.2.1.	Az alkalmazott modell és a sötét állapotok meghatározása $% \left( {{{\rm{Az}}} \right)$ .	50		
	2.2.2.	Adiabatikus populáció-átvitel	59		
	2.2.3.	Az elérhető végállapotok halmaza	66		
2.3.	Tiszta és kevert állapotok tervezése degenerált alapállapotban $\ .$ .				
	2.3.1.	A választott modellrendszer	74		
	2.3.2.	Az állapottervezési eljárás	77		
	2.3.3.	A relaxáció hatása	79		
	2.3.4.	Az optimális impulzus sorozat	82		
Összefoglalás					
Summary (angol nyelvű összefoglalás)					
Publikációk jegyzéke					
Köszönetnyilvánítás					
Irodalomjegyzék					

#### Bevezetés

Az információfeldolgozás területén a kvantuminformáció-elmélet a klasszikus rendszerekkel megvalósítható eszközökhöz képest lényeges előrelépést ígér. Gyakorlati alkalmazásban a biztonságos adattovábbítás már elérhetővé vált, azonban a klasszikus algoritmusok lépésszámát jelentősen csökkentő kvantumalgoritmusok megvalósítása igazán áttörést jelentő számítási lépésszám mellett még nem készült el. Megjegyzendő, hogy az adattovábbítás ekvivalens léptékben biztonságossá tehető kvantumrendszerek használata nélkül is. A kvantumos információtárolás alapvetően különbözik a klasszikustól. A tárolt információ nem másolható, csak közelítőleg, emiatt egy bizonyos fizikai rendszer teljes kvantumállapotát mérésekkel feltérképezni általában nem lehetséges, csak egy sokaságon végzett méressorozattal tehető meg. Az információ átvitele egy másik kvantumrendszerbe viszont lehetséges kvantumállapot-teleportáció segítségével. A klasszikus digitális számítógépben minden művelet után az igaz és hamis logikai értéket reprezentáló jelszinthez igazítják az eredményt, így érve el, hogy nagy számú információfeldolgozó egységen áthaladva is teljes biztonsággal kezelhetőek az adatok. Hasonló jellegű hibajavítás a kvantuminformatikában nem lehetséges, mert az a kvantuminformáció elvesztéséhez vezetne, és ilyen szempontból a kvantumszámítógép inkább az analóg számítógéppel rokon, mint a klasszikus digitális számítógéppel.

A kétréses kísérletben az interferencia megszűnése a dekoherencia egyik első megfigyelt hatása [1]. A dekoherencia modern fogalma először a kvantum-klasszikus átmenet kapcsán, a mérési folyamat és az állapotbeugrás értelmezésének témakörében merült fel [2, 3], majd Zurek cikkei nyomán került ismét az érdeklődés középpontjába a témakör [4, 5]. A dekoherencia önmagában nem magyarázza az állapotbeugrás jelenségét, azonban szerepe a kvantumos korrelációk megszűnésében jól kimutatható, például a *discord* mennyiségen keresztül [6].

A kvantumalgoritmusok nagy bitszámú megvalósítása elé elsősorban a dekoherencia jelensége gördít akadályt. A dekoherencia a kvantumrendszer és a környezete közötti kölcsönhatás által kijelöl egy állapotrendszert, és a hatása abban nyilvánul meg, hogy a kvantumállapotot ezen állapotok keverékébe juttatja. A kvantumalgoritmusok helyes működéséhez azonban szuperpozíció állapotokra van szükség. A dekoherencia hatásának csökkentésére számos módszert dolgoztak ki. Egyik a klasszikus bitátfordulási hibákra kidolgozott hibajavító kóddal rokon eljárás alkalmazása. E módszerben egy kiválasztott lineáris altérből való kilépést méréssel detektáljuk, és a mérés eredményétől függően egy unitér transzformációval az állapotot visszatranszformáljuk a jó altérbe. Az altér megválasztása akkor jó, ha a dekoherencia folyamatok mind kivezetnek belőle, így hatásuk mérhetővé és javíthatóvá válik. Egy másik módszer a dekoherencia-mentes alterek használata a számítások elvégzéséhez. Ez olyan alteret jelent, amely a rendszer leírására alkalmazott modell keretein belül további dekoherencia-folyamatban nem vesz részt, azaz amennyiben a kvantumrendszer állapota itt található, egyik környezeti kölcsönhatás sem változtatja azt meg. Nem elhanyagolható a műveletvégzés pontatlanságának járuléka sem. Az ilyen jellegű hibák, amennyiben a végállapotot a számításhoz használt altéren belül állítják elő pontatlanul, nehezen detektálhatók és javíthatók, és a számítások során a hatásuk kumulálódik. Emiatt igen lényeges a nagy pontosságú, külső körülményektől független műveletvégző egységek kifejlesztése. A probléma egy lehetséges megkerülése a kvantumkapu-mentes adiabatikus kvantumszámítógép-modell használata, mely műveletvégző egységeket nem tartalmaz. Hasonlóképpen, adiabatikus folyamatokkal, például az adiabatikus populáció transzferrel rokon eljárásokkal nagy pontosságú, robusztus műveletvégzés érhető el. Általánosságban elmondható, hogy a kvantuminformatika gyakorlati alkalmazásához kapcsolódó problémák megoldása nem egyszerű feladat. A kutatások egyik tárgya találni olyan fizikai rendszereket, amelyekben a dekoherencia hatása elegendően kicsivé tehető, és egyúttal a realizált kvantumbitek száma is nagy. Emellett a dekoherencia hatásainak kivédéséhez, a kvantumbitek stabilitásának megőrzéséhez vezető új eljárások kifejlesztése is aktív kutatás tárgyát képezi.

A dolgozatban dokumentált kutatómunka célkitűzése olyan alkalmazások felkutatása, amelyekben a dekoherencia jelenségét okozó relaxációs folyamatok nem csupán destruktív hatásúak, hanem valamilyen pozitív hozadékuk is van, vagy káros hatásaik nagyon jól elkerülhetőek. Célunk bemutatni, hogy az inkoherens folyamatok kombinálása koherens kölcsönhatásokkal lehetővé teszi, hogy

- az inkoherens folyamatok káros hatása kiküszöbölhető legyen,
- meglepő módon rendezettséget, időbeli koherenciát, kvantuminterferenciát hozzanak létre az inkoherens folyamatok,
- valamint hasznos célokat is szolgáljanak az állapotok kvantumos tulajdonságainak megőrzése mellett.

A disszertáció első fejezetében áttekintjük a nyílt kvantumrendszerek elméletét, amely a használt vizsgálati módszerek alapját képezi, és betekintést adunk az adiabatikus folyamatok elméletébe az adiabatikusság feltételének meghatározásán keresztül. A második fejezetben a saját eredményeket ismertetjük. Ez három alfejezetre tagolódik, kissé eltérő témakörökhöz kapcsolódva, ezért az irodalmi áttekintés az egyes alfejezetek elején történik, és nem egy külön fejezetben. Ismertetjük az adott témakörben publikált korábbi eredményeket, valamint az elért új tudományos eredményeket, és bemutatjuk ezek kapcsolatát.

### 1. fejezet

### Elméleti háttérismeretek

### 1.1. Nyílt kvantumrendszerek Markov-közelítésben: a sűrűségoperátor és a kvantumtrajektória módszerek

A kvantummechanikai rendszerek többségének viselkedését csak úgy érthetjük meg, ha figyelembe vesszük, hogy környezetükkel kölcsönhatásban állnak. Valójában a legtöbb kvantummechanikai rendszer kölcsönhat a környezetével, a zárt kvantummechanikai rendszer fogalma általában csak közelítés, ezért a nyílt rendszerek leírása a kvantummechanika igen fontos problémája [7–12]. A fizika minden területén, a szilárdtestfizikától a kvantumoptikán át a kozmológiáig, ahol kvantumrendszerekkel foglalkoznak, számos probléma nyílt rendszerek tárgyalásához kötődik. Nyílt kvantumrendszerek tárgyalására számos módszert, eljárást dolgoztak ki, több áttekintő munka foglalkozik kizárólag ezzel a kérdéssel [13, 14]. Ebben az alfejezetben a sűrűségoperátor módszert és a kvantumtrajektória módszerek alapjait, legfontosabb fogalmait kívánjuk bemutatni.

#### 1.1.1. A sűrűségoperátor

Zárt kvantumrendszek tiszta állapotait Hilbert-térben értelmezett vektorokkal, az ún. állapotvektorokkal írhatjuk le. Nyílt kvantumrendszerek leírásához bevezetjük a sűrűségoperátort. Tegyük fel, hogy a kvantumrendszer állapotát nem ismerjük tökéletesen, csak azt tudjuk, hogy a  $|\psi_i\rangle$  állapotok valamelyikében van, az *i*-edikben  $p_i$  valószínűséggel. A sűrűségoperátort a következőképpen definiáljuk:

$$\boldsymbol{\varrho} = \sum_{i} p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| . \qquad (1.1)$$

A definícióból egyszerűen beláthatjuk, hogy a sűrűségoperátor hermitikus, pozitív szemidefinit operátor, melynek nyoma 1 (Tr  $\boldsymbol{\varrho} = 1$ ). A sűrűségoperátor segítségével a kvantummechanika valamennyi állapotvektorokkal megfogalmazott posztulátumát, tételét újrafogalmazhatjuk. Így például a Schrödinger-egyenlet a

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \left[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{\varrho}\right] \tag{1.2}$$

alakot ölti, amelyet Liouville–Neumann-egyenletnek is szokás nevezni. Tetszőleges A hermitikus operátor átlagértéke pedig az

$$\langle \boldsymbol{A} \rangle = \operatorname{Tr}(\boldsymbol{\varrho} \boldsymbol{A})$$
 (1.3)

képletből számolható. A sűrűségoperátoros leírás magában foglalja az állapotvektoros leírást is. Ha egy rendszer állapotát a  $|\varphi\rangle$  állapotvektorral leírhatjuk, akkor azt mondjuk, hogy a rendszer tiszta állapotban van. Az ennek megfelelő sűrűségoperátor

$$\boldsymbol{\varrho} = |\varphi\rangle\langle\varphi| \ . \tag{1.4}$$

Tiszta állapotban  $\boldsymbol{\varrho}^2 = \boldsymbol{\varrho}$ . Ha a rendszer sűrűségoperátora nem írható az (1.4)-es alakba, akkor azt mondjuk, hogy a rendszer kevert állapotban van. Ekkor Tr $\boldsymbol{\varrho}^2 < 1$ . Egy tetszőleges rendszer valamely részrendszere általában kevert állapotban van. Ez még akkor is igaz lehet, ha az egész rendszer zárt, és tiszta állapotban van. Az *A* részrendszer állapotát megkapjuk, ha a kiegészítő *B* rendszerre kiátlagolunk, azaz a teljes rendszer sűrűségoperátorának *B* rendszerre vonatkozó részleges nyomát vesszük:

$$\boldsymbol{\varrho}_A = \operatorname{Tr}_B \, \boldsymbol{\varrho}_{AB}. \tag{1.5}$$

Bizonyítható, hogy az így kapott  $\boldsymbol{\varrho}_A$  sűrűségoperátor teljes leírását adja az A részrendszernek, valamennyi A-n elvégezhető mérés esetén a helyes mérési statisztikát adja az (1.3)-as képlet szerint.

#### 1.1.2. A sűrűségoperátor módszer

Egy nyílt S kvantumrendszer kölcsönhatásban áll környezetével, amelyet általánosan egy R kvantumrendszernek tekintünk. Az R rendszer többnyire nagy, így a zártnak tekinthető teljes SR rendszer állapotát nem tudjuk, illetve nem is akarjuk meghatározni. Ha kezdetben függetlennek is tekintjük a két rendszert, a kölcsönhatás következménye általában az S rendszer csillapodása, energiájának disszipációja. Természetesen a környezet visszahat az S rendszerre, ami annak fejlődésében zajként jelentkezik. Tapasztalat szerint, a természetes környezeti rendszerek jelentős része igen sok szabadsági fokú "hőtartálynak" (reservoir) tekinthető, a disszipáció irreverzibilis. Így nem tapasztaljuk, hogy a kölcsönhatás következtében energia áramolna vissza a rendszerbe, ami például két csatolt oszcillátor esetén bekövetkezne. Ha az időfejlődés olyan jellegű, hogy a t időpontbeli állapotváltozást a rendszer t-ben vett állapota önmagában meghatározza, más szóval a rendszernek nincs memóriája a csillapodási folyamatban, akkor az ilyen nyílt rendszereket markovi rendszereknek nevezzük. A továbbiakban ilyen rendszerek tárgyalására kidolgozott módszereket ismertetünk. Elsőként a sűrűségoperátor-módszert mutatjuk be [7–11].

Tegyük fel, hogy az S rendszer és az R környezet állapotát a  $\boldsymbol{\varrho}_{SR}$  sűrűségoperátor írja le. Mi az S rendszer fejlődésére vagyunk kíváncsiak, ezért a redukált sűrűségoperátornak, azaz a

$$\boldsymbol{\varrho}_S = \operatorname{Tr}_R \, \boldsymbol{\varrho}_{SR} \tag{1.6}$$

operátornak a változását leíró egyenletet keressük. A teljes rendszer sűrűségoperátorának fejlődését kölcsönhatási képben a

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}_{SR}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ \mathcal{V}(t), \boldsymbol{\varrho}_{SR}(t) \right]$$
(1.7)

egyenletből kaphatjuk meg, ahol  $\mathcal{V}(t)$  a rendszer és környezete kölcsönhatását leíró operátor. Ezt az egyenletet formálisan integrálva, majd visszahelyettesítve a

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}_{SR}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ \mathcal{V}(t), \boldsymbol{\varrho}_{SR}(t_0) \right] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t \left[ \mathcal{V}(t), \left[ \mathcal{V}(t'), \boldsymbol{\varrho}_{SR}(t') \right] \right] \mathrm{d}t'$$
(1.8)

összefüggést kapjuk. Feltételezzük, hogy kezdetben a két rendszer nem korrelált, és hogy a környezeti rendszer olyan nagy, hogy egyensúlyi állapotát a kölcsönhatás nem befolyásolja, továbbá, hogy a kölcsönhatás gyenge. Ekkor az (1.8) egyenlet megoldását a

$$\boldsymbol{\varrho}_{SR}(t) = \boldsymbol{\varrho}_S(t) \otimes \boldsymbol{\varrho}_R(t_0) + \boldsymbol{\varrho}_k(t)$$
(1.9)

alakban kereshetjük, ahol  $\boldsymbol{\varrho}_k(t) \mathcal{V}(t)$ -ben magasabb rendű tagokat tartalmaz és előírjuk, hogy  $\operatorname{Tr}_R[\boldsymbol{\varrho}_k(t))] = 0$ . Az (1.9)-es egyenletet visszahelyettesítjük (1.8)-ba és a  $\mathcal{V}$ -ben másodrendűnél magasabb tagokat elhanyagoljuk (Born-közelítés):

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}_{S}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \operatorname{Tr}_{R} \left[ \mathcal{V}(t), \boldsymbol{\varrho}_{S}(t_{0}) \otimes \boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0}) \right] - \frac{1}{\hbar^{2}} \operatorname{Tr}_{R} \int_{t_{0}}^{t} \left[ \mathcal{V}(t), \left[ \mathcal{V}(t'), \boldsymbol{\varrho}_{S}(t') \otimes \boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0}) \right] \right] \mathrm{d}t'$$

$$(1.10)$$

Feltételezzük, hogy az integrálban  $\boldsymbol{\varrho}_{S}(t') \boldsymbol{\varrho}_{S}(t)$ -vel helyettesíthető. A korábbiakban elmondottak szerint ez felel meg annak, hogy a rendszernek nincs memóriája. Ez a Markov-közelítés. Így végül a

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}_{S}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \operatorname{Tr}_{R} \left[ \mathcal{V}(t), \boldsymbol{\varrho}_{S}(t_{0}) \otimes \boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0}) \right] - \frac{1}{\hbar^{2}} \operatorname{Tr}_{R} \int_{t_{0}}^{t} \left[ \mathcal{V}(t), \left[ \mathcal{V}(t'), \boldsymbol{\varrho}_{S}(t) \otimes \boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0}) \right] \right] \mathrm{d}t$$

$$(1.11)$$

kifejezéshez jutunk, amelyet a rendszer Born–Markov-közelítésben érvényes mászteregyenletének nevezünk. A Markov-közelítés mélyebb megértése érdekében vizsgáljuk meg a Born-közelítésben kapott (1.10)-es egyenletet egy általános kölcsönhatást feltételezve. Tegyük fel, hogy  $\mathcal{V}(t)$  a következő alakú:

$$\mathcal{V}(t) = \hbar \sum_{i} \boldsymbol{S}_{i}(t) \boldsymbol{R}_{i}(t), \qquad (1.12)$$

ahol  $S_i$  az S rendszeren ható,  $R_i$  a környezeten ható operátorok. Ezt az (1.10)-es egyenletbe helyettesítve olyan kifejezést kapunk, amelyben a környezet különböző korrelációs függvényei, így például

$$\langle \boldsymbol{R}_{i}(t)\boldsymbol{R}_{j}(t')\rangle = \operatorname{Tr}_{R}\left[\boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0})\boldsymbol{R}_{i}(t)\boldsymbol{R}_{j}(t')\right],$$
 (1.13)

$$\langle \mathbf{R}_{j}(t')\mathbf{R}_{i}(t)\rangle = \operatorname{Tr}_{R}\left[\boldsymbol{\varrho}_{R}(t_{0})\mathbf{R}_{j}(t')\mathbf{R}_{i}(t)\right]$$
 (1.14)

alakú korrelációs függvények lépnek fel. Az (1.10)-es egyenletben akkor helyettesíthető  $\boldsymbol{\varrho}(t') \boldsymbol{\varrho}(t)$ -vel, ha a korrelációs függvények gyorsan lecsengenek azon az időskálán, amelyen a rendszer  $\boldsymbol{\varrho}_S(t)$  redukált sűrűségoperátora változik. Ideális esetben

$$\langle \mathbf{R}_i(t)\mathbf{R}_j(t')\rangle \propto \delta(t-t').$$
 (1.15)

Egy nagy, sok szabadsági fokú, termikus egyensúlyban lévő környezeti rendszer a vizsgált rendszer által okozott kisebb változásokat várhatóan nem őrzi meg olyan

hosszan, hogy ez a rendszer későbbi fejlődését szignifikánsan befolyásolja. Ezért ilyen környezeti rendszerekre a Markov-közelítés várhatóan helyes eredményre vezet.

A továbbiakban a környezeti rendszerre egy általánosan használt modellt választunk, a környezetet kvantumos harmonikus oszcillátorok halmazának tekintjük. Ez helyesen írja le például a vákuum sugárzási terét, de reprezentálhat fononmódusokat is egy szilárdtestben. Rendszerünk legyen egy kétszintű atom. Ekkor kölcsönhatási képben és forgóhullámú közelítésben

$$\mathcal{V}(t) = \hbar \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \left[ \boldsymbol{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_{-} e^{-i(\omega - \nu_{\mathbf{k}})t} + \boldsymbol{b}_{\mathbf{k}} \sigma_{+} e^{i(\omega - \nu_{\mathbf{k}})t} \right], \qquad (1.16)$$

ahol  $\boldsymbol{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \boldsymbol{b}_{\mathbf{k}}$  a harmonikus oszcillátorok keltő és eltüntető operátorai,  $\boldsymbol{\sigma}_{+} = |e\rangle\langle g|$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_{-} = |g\rangle\langle e|$  az atomi léptető operátorok,  $g_{\mathbf{k}}$ -k a csatolási állandók,  $|g\rangle$  és  $|e\rangle$  az atom alap, illetve gerjesztett állapota,  $\hbar\omega$  a közöttük lévő energiakülönbség, valamint  $\nu_{k}$ a k-adik módus körfrekvenciája.

 $\mathcal{V}(t)$ -t az (1.11)-es egyenletbe behelyettesítve és megfelelően nagy környezeti rendszert feltételezve a hullámszám-vektor szerinti összegzést integrálással helyettesíthetjük. A környezet kezdőállapotának ismeretében az integrálokat elvégezhetjük. Például, ha a környezet korrelálatlan termikus egyensúlyi állapotban van, azaz

$$\boldsymbol{\varrho}_{R} = \prod_{\mathbf{k}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\nu_{\mathbf{k}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \right] \exp\left(-\frac{\hbar\nu_{\mathbf{k}}\boldsymbol{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\boldsymbol{b}_{\mathbf{k}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right), \qquad (1.17)$$

a következő egyenletet kapjuk az atom redukált sűrűségoperátorára:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}_{\mathrm{atom}}(t)}{\mathrm{d}t} = -\bar{n}_t \frac{\Gamma}{2} \left[\boldsymbol{\sigma}_{-} \boldsymbol{\sigma}_{+} \boldsymbol{\varrho}_{\mathrm{atom}}(t) - \boldsymbol{\sigma}_{+} \boldsymbol{\varrho}_{\mathrm{atom}}(t) \boldsymbol{\sigma}_{-}\right] - (\bar{n}_t + 1) \frac{\Gamma}{2} \left[\boldsymbol{\sigma}_{+} \boldsymbol{\sigma}_{-} \boldsymbol{\varrho}_{\mathrm{atom}}(t) - \boldsymbol{\sigma}_{-} \boldsymbol{\varrho}_{\mathrm{atom}}(t) \boldsymbol{\sigma}_{+}\right] + h.c.,$$
(1.18)

ahol a  $\Gamma$ atomi bomlási állandó értéke

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{4\omega^3 d_{eg}^2}{3\hbar c^3},\tag{1.19}$$

amely megegyezik a spontán emisszió Weisskopf–Wigner-elméletéből kapottal, és

$$\bar{n}_t = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\rm B}T}\right) - 1} \tag{1.20}$$

az atomi átmeneti frekvenciának megfelelő módusban az átlagos fotonszám a termikus állapotban. Az (1.18)-as egyenlet a spontán emisszióval termikus egyensúlyi állapotban lévő környezetbe bomló kétszintű atom mászter-egyenlete Markovközelítésben. Megjegyezzük, hogy a vázolt levezetéshez teljesen hasonló módon kapható meg a csillapodó harmonikus oszcillátor mászter-egyenlete is, amely például leírja egy rezonátor módus csillapodását a rezonátor tükrein keresztül. Az eredmény:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}(t)}{\mathrm{d}t} = -\bar{n}_t \frac{\gamma}{2} \left[ \boldsymbol{a} \boldsymbol{a}^{\dagger} \boldsymbol{\varrho}(t) - 2\boldsymbol{a}^{\dagger} \boldsymbol{\varrho}(t) \boldsymbol{a} + \boldsymbol{\varrho}(t) \boldsymbol{a} \boldsymbol{a}^{\dagger} \right] - (\bar{n}_t + 1) \frac{\gamma}{2} \left[ \boldsymbol{a}^{\dagger} \boldsymbol{a} \boldsymbol{\varrho}(t) - 2\boldsymbol{a} \boldsymbol{\varrho}(t) \boldsymbol{a}^{\dagger} + \boldsymbol{\varrho}(t) \boldsymbol{a}^{\dagger} \boldsymbol{a} \right].$$
(1.21)

A mászter-egyenlet alacsony dimenziós rendszerek esetén többnyire analitikusan is megoldható. Így az (1.18)-as egyenlet megoldása nulla hőmérsékleten ( $\bar{n}_t = 0$ ) a következő:

$$r_x = r_x(0)e^{-\Gamma t},$$
 (1.22)

$$r_y = r_y(0)e^{-\Gamma t},$$
 (1.23)

$$r_z = r_z(0)e^{-2\Gamma t} + 1 - e^{-2\Gamma t}, \qquad (1.24)$$

ahol  $r_x, r_y, r_z$  a kétszintű atom sűrűség<br/>operátorának Bloch-reprezentációjában szereplő  $\vec{r}$  vektor komponensei. Ebben a reprezentációban a sűrűség<br/>operátor

$$\boldsymbol{\varrho}_{\text{atom}} = \frac{I + \vec{r}\vec{\boldsymbol{\sigma}}}{2},\tag{1.25}$$

ahol  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  a Pauli-mátrixokból képzett vektor.

A megoldás ismeretében tetszőleges fizikai mennyiség átlagértékének időfejlődése megkapható. A kvantumregressziós formulák segítségével a kétidős korrelációs függvényeket is kiszámíthatjuk [7]. Így a spontán emissziós sugárzás spektruma is számítható:

$$S(\omega) \propto \int_0^T \mathrm{d}t \int_0^T \mathrm{d}t' e^{i\omega(t-t')} \left\langle \boldsymbol{\sigma}_+(t) \boldsymbol{\sigma}_-(t') \right\rangle.$$
(1.26)

Az eredmény $T\gg 1/\Gamma$ időre:

$$S(\omega) \propto \frac{1}{(\Gamma/2)^2 + (\omega - \omega_A)^2},$$
(1.27)

amely az ismert Lorentz-görbét adja.

Csillapodó harmonikus oszcillátor esetén célszerű a sűrűségoperátort valamely kvázivalószínűség-eloszlás függvényével reprezentálnunk. Például a Glauber-féle *P*reprezentáció:

$$\boldsymbol{\varrho}(t) = \int P(\alpha, \alpha^*, t) |\alpha\rangle \langle \alpha| \, \mathrm{d}^2 \alpha, \qquad (1.28)$$

ahol  $|\alpha\rangle$  koherens állapotokat jelöl. Ennek segítségével az (1.21)-es egyenletből a

$$\dot{P} = \frac{\gamma}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \alpha P \right) + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \left( \alpha^* P \right) + \gamma \bar{n}_t \frac{\partial^2 P}{\partial \alpha \ \partial \alpha^*}$$
(1.29)

Fokker–Planck-egyenletet kapjuk. Az egyenlet megoldása koherens kezdőállapot, azaz

$$P(\alpha, \alpha^*, 0) = \delta^{(2)}(\alpha - \alpha_0) \tag{1.30}$$

esetén

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \frac{1}{\pi D(t)} \exp\left[-\frac{|\alpha - \alpha_0 U(t)|^2}{D(t)}\right],$$
(1.31)

ahol

$$D(t) = \bar{n}_t (1 - e^{-\gamma t})$$
 és  $\alpha_0 U(t) = \alpha_0 e^{-\gamma t/2 - i\omega t}$ . (1.32)

Ez a fázissíkon a D(t) diszperzió által megadott módon szélesedő, spirál pályán az origóba tartó Gauss-harangnak felel meg. Az eredmény megfelel a fluktuációdisszipáció tételnek. A csillapodás során a rendszer energiája disszipálódik, amely folyamat együtt jár a hőtartályból származó zajjal, fluktuációkkal. Nulla hőmérsékleten, azaz  $\bar{n}_t = 0$  esetén  $P(\alpha, \alpha^*, t) = \delta^{(2)}(\alpha - \alpha_0 U(t))$ , tehát a koherens állapot koherens marad a disszipáció során.

Az eddig elmondottakat általános módon a következőképpen foglalhatjuk össze. Feltételezve, hogy a nyílt kvantumrendszer és környezete kezdetben teljesen korrelálatlan állapotban van, a rendszer redukált sűrűségoperátorának időfejlődése a következő alakú:

$$\boldsymbol{\varrho}(t) = T(t, t_0)\boldsymbol{\varrho}(t_0), \qquad (1.33)$$

ahol T egy teljesen pozitív lineáris leképezés. Az időfejlődést a mászter-egyenlet határozza meg:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathcal{L}(t, t_0)\boldsymbol{\varrho}(t), \qquad (1.34)$$

ahol  $\mathcal{L}$  a Liouville-féle szuperoperátor. Markovi rendszer esetén ez az egyenlet mindig felírható általánosan az ún. Lindblad-alakban [15]. Schrödinger képben:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varrho}(t)}{\mathrm{d}t} = i\left[\boldsymbol{\varrho}(t),\boldsymbol{H}\right] + \sum_{m=0}^{M} \left(\boldsymbol{L}_{m}\boldsymbol{\varrho}(t)\boldsymbol{L}_{m}^{\dagger} - \frac{1}{2}\boldsymbol{L}_{m}^{\dagger}\boldsymbol{L}_{m}\boldsymbol{\varrho}(t) - \frac{1}{2}\boldsymbol{\varrho}(t)\boldsymbol{L}_{m}^{\dagger}\boldsymbol{L}_{m}\right). \quad (1.35)$$

N dimenziós rendszer esetén  $M < N^2$ . Az  $L_m$  Lindblad-operátorok az egyes disszipációs folyamatokat jellemzik. Az egyenletet analitikusan vagy numerikusan oldhatjuk meg.

Megemlítjük, hogy gyakran hasznos az időfejlesztő operátor ún. Kraus-operátor reprezentációját vennünk:

$$T(t,t_0)\boldsymbol{\varrho}(t_0) = \sum_{l=0}^{L} \boldsymbol{K}_l(t)\boldsymbol{\varrho}(t_0)\boldsymbol{K}_l^{\dagger}(t), \text{ abol } \sum_{l=0}^{L} \boldsymbol{K}_l^{\dagger}(t)\boldsymbol{K}_l(t) = \mathbf{1}, \qquad (1.36)$$

valamint  $L < N^2$ . Az utóbbi operátorösszeg a sűrűségoperátor nyomának megőrzését biztosítja. Ezt a reprezentációt a kvantuminformatikában előszeretettel használjuk [12, 16]. Markovi rendszerek esetén a Lindblad-alakban írt mászter-egyenlet és a Kraus-operátor reprezentáció kölcsönösen megfeleltethető egymásnak [17]. Például a bemutatott spontán emisszióval bomló kétszintű atom esetén az atomi bázisban, nulla hőmérsékleten:

$$\boldsymbol{K}_{0}(t) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1 - \Gamma'} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{K}_{1}(t) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\Gamma'} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad (1.37)$$

ahol  $\Gamma' = 1 - \exp(-2\Gamma t)$ . Érdemes megemlíteni, hogy napjaink egy fontos kutatási témája a kvantumfolyamat-tomográfia [18–21]. Ennek célja, hogy hatékony módszereket dolgozzon ki nyílt rendszerek időfejlesztő operátorának vagy mászteregyenletének meghatározására, a redukált sűrűségoperátor időfejlődésének kísérletileg ismert adataiból. Így meghatározhatók a különböző disszipációs csatornák, amelyek egy kvantumrendszer gyakorlati felhasználását akadályozhatják.

#### 1.1.3. Kvantumtrajektória módszerek

A sűrűségoperátort lehetséges hullámfüggvények sokaságával jellemezni oly módon, hogy az egyes hullámfüggvényekre vetítő projektorok átlaga kiadja magát a sűrűségoperátort [22–31]:

$$\boldsymbol{\varrho} = M\left(|\psi^{(k)}\rangle\langle\psi^{(k)}|\right),\tag{1.38}$$

ahol M() jelöli az átlagképzést. A különböző kvantumtrajektória módszerekben eltérő módon fejlődő sokaságokat választanak a sűrűségoperátor közelítő előállítására. Közös vonás bennük, hogy a hullámfüggvények időfejlődése egymástól független módon zajlik úgy, hogy az átlagukból képzett sűrűségoperátor kielégítse a mászter-egyenletet. A sokaság egy bizonyos elemének időfejlődését nevezzük kvantumtrajektóriának.

A kvantumtrajektóriákkal történő leírásmód fizikai háttere az, hogy a disszipatív folyamatokat az egyes trajektóriákon a Schrödinger-egyenlettől eltérő időfejlődéssel vesszük figyelembe. A disszipatív időfejlődést a trajektóriák által megadott egyedi sűrűségoperátorok átlagolásával reprodukáljuk. A kvantumugrások módszerében szemléletesen mutatkozik meg ez a leírásmód, itt a Schrödinger-egyenlettől való eltérés pillanatszerű ugrásokban mutatkozik meg, amelyek a trajektóriákon végrehajtott mérések hatásaként értelmezhetőek.

#### 1.1.4. A kvantumugrások módszere

Tekintsünk egy markovi nyílt kvantumrendszert, amelynek időfejlődését az (1.35)ös Lindblad-alakban felírt mászter-egyenlet határozza meg. Ekkor a disszipációs csatornákat az  $L_j$  Lindblad-operátorok írják le. A disszipációt, például bomlási folyamatok esetében egy foton emisszióját, mérési eseménynek tekintjük. Egy ilyen esemény hatására egy kvantumtrajektórián ugrásszerű változás következik be:

$$|\psi^{(k)}(t)\rangle \Rightarrow \boldsymbol{L}_j|\psi^{(k)}(t)\rangle.$$
 (1.39)

Egy-egy ilyen esemény bekövetkezésének időpontját véletlenszerűen választjuk meg, mintha a környezet folyamatos mérést végezne a rendszeren, és az esemény bekövetkezésének időpontjában történne a megfigyelés. Amennyiben esemény nem következik be, az is hatással van a kvantumtrajektóriákra, mivel folyamatosan nő az esemény jövőbeli bekövetkezésének valószínűsége.

A kvantumugrások módszerében (Quantum Jump Method) az esemény bekövetkezésének valószínűsége a hullámfüggvény normájában van elkódolva. Minél kisebb a norma, annál nagyobb a kvantumugrás valószínűsége. Az ugrások között a norma folyamatosan csökken. Képezzük a következő nemhermitikus effektív Hamiltonoperátort:

$$\boldsymbol{H}_{\text{eff}} = \boldsymbol{H} - \frac{1}{2}i\hbar \sum_{j} \boldsymbol{L}_{j}^{\dagger}\boldsymbol{L}_{j}. \qquad (1.40)$$

Választunk egy dt időlépést. Minden időléptetés előtt eldöntjük, hogy lesz-e ugrás az adott lépésben. Kiszámítjuk a

$$dp_j = dt \langle \psi^{(k)}(t) | \boldsymbol{L}_j^{\dagger} \boldsymbol{L}_j | \psi^{(k)}(t) \rangle$$
(1.41)

mennyiségeket minden egyes trajektóriára. A trajektóriák számát a továbbiakban *K*-val jelöljük. Választunk egy 0 és 1 közötti  $\varepsilon$  véletlen számot. Ha  $\sum_j dp_j < \varepsilon \langle \psi^{(k)}(t) | \psi^{(k)}(t) \rangle$ , akkor nem történik ugrás, és

$$|\psi^{(k)}(t+\mathrm{d}t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}\,\mathrm{d}t\right)|\psi^{(k)}(t)\rangle. \tag{1.42}$$

Ellenkező esetben viszont a  $[0, \sum_j dp_j]$  intervallumban választunk még egy véletlen  $\mu$  számot, amely meghatározza, milyen indexű disszipációs folyamat fogja a kvantumugrást elvégezni a  $\psi^{(k)}(t)$  állapoton. j legyen a legkisebb index, amire  $\sum_{m=1}^{j} dp_m \ge \mu$ , és

$$|\psi^{(k)}(t+\mathrm{d}t)\rangle = c\mathbf{L}_j|\psi^{(k)}(t)\rangle,\tag{1.43}$$

ahol c egy valós normálási tényező, ami úgy van megválasztva, hogy  $|\psi^{(k)}(t+dt)\rangle$  normája 1 legyen.

A kvantumtrajektóriák által meghatározott sűrűségoperátort a normált hullámfüggvényekből képzett projektorok átlagaként lehet kifejezni:

$$\boldsymbol{\varrho}(t) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \frac{|\psi^{(k)}(t)\rangle \langle \psi^{(k)}(t)|}{\langle \psi^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle}.$$
(1.44)

Megmutatjuk, hogy az így végzett szimulációs eljárás megfelelően kicsi időlépés

és megfelelően nagy kvantumtrajektória szám esetén ekvivalens a mászter-egyenlet megoldásával. A sűrűségoperátor valószínűségi értelmezése szerint az egyes döntési lehetőségeket figyelembe lehet venni a következőképp:

$$\boldsymbol{\varrho}(t+\mathrm{d}t) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} P_{\mathrm{nincs}}^{(k)} \frac{\left(1-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}\,\mathrm{d}t\right)|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle\psi^{(k)}(t)|\left(1+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}^{\dagger}\,\mathrm{d}t\right)}{\langle\psi^{(k)}(t)|\left(1+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}^{\dagger}\,\mathrm{d}t\right)\left(1-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}\,\mathrm{d}t\right)|\psi^{(k)}(t)\rangle} + \frac{1}{K} \sum_{k=1,j}^{K} P_{j,\mathrm{van}}^{(k)} \frac{\boldsymbol{L}_{j}|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle\psi^{(k)}(t)|\boldsymbol{L}_{j}^{\dagger}}{\langle\psi^{(k)}(t)|\boldsymbol{L}_{j}^{\dagger}\boldsymbol{L}_{j}|\psi^{(k)}(t)\rangle}, \qquad (1.45)$$

ahol  $P_{\text{nincs}}^{(k)}$  annak a valószínűsége, hogy a k-adik trajektória időfejlődésében nincs ugrás,  $P_{j,\text{van}}^{(k)}$  pedig annak a valószínűsége, hogy a *j*-edik disszipációs csatorna által meghatározott ugrás történik:

$$P_{j,\text{van}}^{(k)} = \mathrm{d}t \frac{\langle \psi^{(k)}(t) | \boldsymbol{L}_{j}^{\dagger} \boldsymbol{L}_{j} | \psi^{(k)}(t) \rangle}{\langle \psi^{(k)}(t) | \psi^{(k)}(t) \rangle}, \quad P_{\text{nincs}}^{(k)} = 1 - \sum_{j} P_{j,\text{van}}^{(k)}.$$
(1.46)

Ahhoz, hogy ez a leírásmód helyes legyen, nem feltétlenül szükséges, hogy a kvantumtrajektóriák jól lefedjék a teljes állapotteret. A gyakori döntések miatt viszonylag kevés trajektóriával is jó közelítését kapjuk a sűrűségoperátornak. Az időlépés nem csökkenthető akármilyen mértékben. A mászter-egyenlet levezetése során feltételeztük, hogy a környezetnek nincs memóriája, azaz a környezetre jellemző korrelációs idő lényegesen rövidebb, mint a vizsgált rendszerben végbemenő folyamatok jellemző ideje. Az időlépést emiatt a környezet korrelációs idejénél nagyobbnak kell választanunk.

Az (1.45)-ös egyenletben az időlépés második hatványát tartalmazó tagokat elhagyva, és a valószínűségek kifejezését, valamint  $H_{\text{eff}}$  definícióját az első tag nevezőjébe beírva kapjuk a következő egyenletet:

$$\varrho(t+dt) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \left\{ \frac{|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle\psi^{(k)}(t)|}{\langle\psi^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle} + \frac{i}{\hbar} \frac{|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle|\psi^{(k)}(t)|}{\langle\psi^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle} \boldsymbol{H}_{\text{eff}}^{\dagger} dt - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{H}_{\text{eff}} dt \frac{|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle|\psi^{(k)}(t)|}{\langle\psi^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle} + \sum_{j} dt \boldsymbol{L}_{j} \frac{|\psi^{(k)}(t)\rangle\langle\psi^{(k)}(t)|}{\langle\psi^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle} \boldsymbol{L}_{j}^{\dagger} \right\}.$$
(1.47)

A sűrűségoperátor (1.44)-es kifejezését és az effektív Hamilton-operátor (1.40)-es definícióját beírva látható, hogy visszakaptuk az (1.35)-ös mászter-egyenletet.

Kétszintű atom spontán emissziójának leírásakor azt kapjuk, hogy a fotonok emissziója pontosan egybeesik azzal az eseménnyel, amikor a kvantumugrások módszerében ugrás történik. Így a kvantumugrások módszere több, mint egy számítási módszer – egy trajektóriát végigkövetve megadja a környezet által az atomon végzett "mérési eseményeket" is, betekintést nyújtva a rendszer viselkedésébe a mászteregyenleten túl.

#### 1.2. Adiabatikus és nemadiabatikus átmenetek

A disszertáció 2.2-es alfejezetében atomi rendszerekben külső lézertér által szabályozott adiabatikus folyamatokról esik majd szó. A tárgyalás során sor kerül majd az adiabatikus időfejlődés feltételeinek meghatározására, és ennek kapcsán az alább ismertetett, az adiabatikus átmeneteket bemutató rövid bevezetés hasznos lehet. A 2.3-as fejezetben alkalmazott folyamatok kifejezetten nem adiabatikus lefolyásúak, disszipációval járnak, így ott a lézerparaméterek változtatása szükségszerűen nemadiabatikus módon történik. A változtatás sebességére vonatkozóan hasonló eljárással kaphatunk feltételeket, mint a 2.2-es alfejezetben a folyamatok adiabatikus lefolyására. A továbbiakban ismertetjük a nevezetes Landau-Zener modellt, amely rávilágít arra, hogy egy speciális időfüggő problémában min múlik a folyamat adiabatikus volta. Majd egy, általánosabb folyamatok esetén is alkalmazható adiabatikussági feltételt mutatunk be.

#### 1.2.1. A Landau-Zener modell

A Landau-Zener modell keretében egy olyan kétszintű atomi rendszer időfejlődését vizsgáljuk, amely egy időfüggő

$$\boldsymbol{H}(t) = \begin{bmatrix} E_1(t) & V \\ V^* & E_2(t) \end{bmatrix}$$
(1.48)

Hamilton-operátorral modellezhető. A Hamilton-operátor mátrixát az aszimptotikus sajátállapotok  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  bázisában írtuk fel. A kifejezésben  $E_1(t)$  és  $E_2(t)$  a két perturbálatlan állapot pillanatnyi energiája, és V egy állandó perturbáció. Az állapotvektor  $|\Psi\rangle(t) = A(t)|1\rangle + B(t)|2\rangle$  paraméterezésével a Schrödinger-egyenlet a

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}A(t)\\B(t)\end{bmatrix} = \boldsymbol{H}(t)\begin{bmatrix}A(t)\\B(t)\end{bmatrix}$$
(1.49)

alakba írható, és a

$$-\frac{i}{\hbar}\dot{A}(t) = E_1(t)A(t) + VB(t), \qquad (1.50a)$$

$$-\frac{i}{\hbar}\dot{B}(t) = E_2(t)B(t) + V^*A(t)$$
(1.50b)

csatolt differenciálegyenlet-rendszerré alakítható. A csatolás másodrendű egyenletté alakítva, az egyenletrendszer tagjait kétszer egymásba helyettesítve feloldható:

$$\ddot{A}(t) - \frac{i}{\hbar} \left( E_1(t) - E_2(t) \right) \dot{A}(t) + |V|^2 A(t) = 0, \qquad (1.51a)$$

$$\ddot{B}(t) + \frac{i}{\hbar} \left( E_1(t) - E_2(t) \right) \dot{B}(t) + |V|^2 B(t) = 0.$$
(1.51b)

Az (1.51b) egyenlet megoldását keressük a  $t = +\infty$  értéknél a  $B(-\infty) = 1$  kezdőfeltétel mellett. Az 1.1. ábrán a pillanatnyi sajátállapotok energiáit  $F_1(t)$  és  $F_2(t)$  jelöli, és különbségüket közel állándónak tekinthetjük abban az intervallumban, ahol az  $E_1(t)$  és  $E_2(t)$  energiaszintek kereszteződnek, azaz ahol  $|E_1(t) - E_2(t)| < \min_t |F_1(t) - F_2(t)|$ .



1.1. ábra. A modellrendszer pillanatnyi  $(F_{1,2}(t))$  és perturbálatlan  $(E_{1,2}(t))$  energiaszintjei. A perturbálatlan energiaszintek különbségének időfüggése a modellben lineáris, és a kereszteződés környékén a pillanatnyi energiaszintek különbsége konstans.

Az  $E_1(t) - E_2(t) = \alpha t$  választással, ahol  $\alpha$  konstans, a végállapot közelítések nélkül megadható [32, 33]. A modellt először Landau alkalmazta és perturbációszámítással kapott közelítő eredményt [34]. Tőle függetlenül Zener ugyanebben a modellben egzakt megoldást adott a végállapotra vonatkozóan [32]. E célból az

$$\ddot{B}(t) + \frac{i}{\hbar} \alpha t \dot{B}(t) + |V|^2 B(t) = 0.$$
(1.52)

egyenletet Weber-egyenletté transzformálta, melynek aszimptotikus ( $t = +\infty$ ) megoldásai ismertek, és a végállapotot szolgáltatták:

$$B(+\infty) = \exp(-\pi\omega_{12}\tau_d), \qquad (1.53)$$

ahol $\omega_{12}=|V|/\hbar$ a rendszerre jellemző karakterisztikus frekvencia, és $\tau_d=|V|/\alpha$ a kölcsönhatás időtartama.

Az egzakt megoldással kapott

$$P_{\rm na} = \exp(-2\pi\omega_{12}\tau_d) \tag{1.54}$$

Landau-Zener formula annak valószínűségét adja meg, hogy a folyamat során átmenet történik a pillanatnyi adiabatikus állapotok között. A képletben szereplő  $\omega_{12}$  és  $\tau_d$  paraméterek megfelelő megválasztásával elérhető, hogy  $P_{\rm na}$  kicsi legyen, és a rendszer a pillanatnyi adiabatikus állapotokat végigkövesse, átmenet közöttük ne történjen, és végeredményben az aszimptotikus állapotok közötti  $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$  átmenet bekövetkezzen. Ehhez az energiaszintek lassú változása és megfelelően erős kölcsönhatás szükséges ( $|V|^2 \gg \hbar \alpha$ ).

#### 1.2.2. Az adiabatikus közelítés

Tekintsük egy klasszikus koherens lézertérrel kölcsönható kétállapotú atom modelljét forgóhullámú közelítésben, időfüggő elhangolással és Rabi-frekvenciával. Az időfejlődést leíró Schrödinger-egyenletet a  $|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$  atomi bázisban írjuk fel:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \boldsymbol{H}(t) \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{H}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\Delta(t) & \Omega(t) \\ \Omega(t) & \Delta(t) \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

ahol  $\Omega(t)$  az átmenethez tartozó Rabi-frekvencia, és  $\Delta(t)$  az elhangolás a pontos rezonanciához képest. Az egyenletet felírhatjuk a pillanatnyi sajátállapotok bázisában is, melyek kifejezése

$$|\psi_{-}(t)\rangle = \cos\theta(t)|1\rangle - \sin\theta(t)|2\rangle,$$
 (1.56a)

$$|\psi_{+}(t)\rangle = \sin\theta(t)|1\rangle + \cos\theta(t)|2\rangle,$$
 (1.56b)

ahol $\tan 2\theta(t)=\Omega(t)/\Delta(t).$ Az állapotkhoz tartozó sajátenergiák

$$\varepsilon_{\pm}(t) = \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta(t)^2 + \Omega(t)^2}.$$
(1.57)

Az időfüggő bázisra az

$$\boldsymbol{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos\theta(t) & -\sin\theta(t) \\ \sin\theta(t) & \cos\theta(t) \end{pmatrix}$$
(1.58)

unitér transzformációval térhetünk át:

$$\boldsymbol{b}(t) = \boldsymbol{U}(t)^{-1}\boldsymbol{c}(t), \qquad (1.59)$$

ahol  $\boldsymbol{b}(t)$  és  $\boldsymbol{c}(t)$  az állapotvektort jelöli az adiabatikus, illetve az atomi bázisban. A Schrödinger-egyenletet az új, adiabatikus bázisban is felírhatjuk,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\boldsymbol{U}(t)^{-1}\boldsymbol{c}(t)\right) = \left(i\hbar\frac{\partial\boldsymbol{U}(t)^{-1}}{\partial t}\boldsymbol{U}(t) + \boldsymbol{U}(t)^{-1}\boldsymbol{H}(t)\boldsymbol{U}(t)\right)\boldsymbol{b}(t).$$
(1.60)

Adiabatikus közelítésben az unitér transzformáció időbeli deriváltját a fenti egyenletben elhanyagoljuk. A közelítés alkalmazhatóságának feltételét megkaphatjuk az adiabatikus bázisbeli Schrödinger-egyenletet komponensenként kiírva:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}b_1(t)\\b_2(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varepsilon_-(t) & -i\hbar\dot{\theta}(t)\\i\hbar\dot{\theta}(t) & \varepsilon_+(t)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1(t)\\b_2(t)\end{pmatrix},\qquad(1.61)$$

ahol az adiabatikus közelítés során csak a diagonális elemeket tartjuk meg. Ez a közelítés akkor jogos, ha

$$|\langle \dot{\psi}_{+}(t)|\psi_{-}(t)\rangle| = |\dot{\theta}(t)| \ll |\varepsilon_{+}(t) - \varepsilon_{-}(t)|/\hbar, \qquad (1.62)$$

vagyis az adiabatikus bázis változása lényegesen lassabb, mint az adiabatikus állapotok energiakülönbsége.

Kapcsolódva a Landau-Zener modellhez, az ott szereplő  $|F_1(t) - F_2(t)|$ , az adiabatikus sajátenergiák különbségét leíró mennyiség felel meg  $|\varepsilon_+(t) - \varepsilon_-(t)|$ -nek. A többi paraméter megfeleltetése  $\Omega(t)$ -t a kölcsönhatás ideje alatt közel állandónak,  $\Delta(t)$ -t időarányosnak választva tehető meg. Ekkor  $\Delta(t) = \alpha t$ ,  $\Omega(t) = V$ ,  $|\varepsilon_+(t) - \varepsilon_-(t)| \approx V$ , és

$$\dot{\theta}(t) \approx -\frac{\alpha \Omega(t)}{\Delta(t)^2 + \Omega(t)^2} \approx -\alpha/V.$$
 (1.63)

Az adiabatikusság (1.62) feltételébe behelyettesítve ezeket a közelítő értékeket, az  $\alpha/V \ll V/\hbar$  kifejezést kapjuk, amely megegyezik a Landau-Zener modellből kapott eredménnyel.

### 2. fejezet

## Az inkoherens folyamatok és a dekoherencia konstruktív felhasználási módjai

Ebben a fejezetben saját eredményeinket ismertetjük. A fejezet három alfejezetre tagolódik, melyek mind egy kicsit más témakörben érintik a dekoherencia fogalmát. A 2.1-es alfejezetben egy olyan jelenséget vizsgálunk, ahol a kvantuminterferencia csak megfelelően erős inkoherens folyamatok mellett jelenik meg. Meglepő módon az önmagában csak dekoherenciát okozó folyamat koherens gerjesztés jelenléte mellett interferencia-effektust idéz elő. Ennek okait és mechanizmusát vizsgáljuk. A 2.2es alfejezetben keressük annak lehetőségét, hogy disszipatív folyamatok – például spontán emisszió – jelenléte mellett is hatékony állapottervezést végezhessünk, és megmutatjuk, hogy kvantuminterferencia jelensége folytán a koherens gerjesztések relatív fázisai is szerepet játszanak a végállapot kialakításában. A 2.3-as alfejezetben azt vizsgáljuk, hogy a dekoherencia felhasználásával egy többdimenziós sötét altérbe relaxáló rendszer esetén a sötét altér koherens gerjesztéssel történő ugrásszerű változtatásaival lehetséges-e robusztus állapottervezést végezni, milyen célállapotok érhetőek el, és hogyan viszonyul ez a módszer az adiabatikus állapottervezési folyamatokhoz.

### 2.1. Kvantuminterferencia létrehozása sztochasztikus ütközési folyamatokkal

A kvantuminterferencia az egyik legérdekesebb kvantumjelenség. Az elmúlt évtizedekben számos olyan, a fény-atom kölcsönhatással kapcsolatos jelenséget jósoltak meg és kísérletileg is ellenőriztek, amelyek a kvantuminterferencia jelenségével magyarázhatóak [35]. Jellemző példák az abszorpció [36–40] és a spontán emisszió [41–44] csökkentése és teljes kioltása, valamint éles rezonanciák a fluoreszcencia spektrumban [45, 46]. A kvantuminterferencia létrejötte annak köszönhető, hogy ugyanaz az átmenet többféle úton is végbemehet a rendszerben, és ezek az átmeneti csatornák más-más fázistolást eredményeznek. Ahhoz, hogy ténylegesen létre is jöjjön az interferencia, szükséges, hogy megfelelően stabil időbeli korreláció jelenjen meg a rendszerben. Bár figyeltek meg interferencia-effektusokat kétszintű rendszerekben, melyek két fénynyalábbal hatottak kölcsön [47], de ott a jelenség interpretációja nem a kvantuminterferenciához kötődik. Hasonló, kvantuminterferenciával magyarázható eredmény nem volt ismert a szakirodalomban, ezt a megközelítést korábban kizárólag legalább háromszintű atomi rendszerekben alkalmazták.

Általában elmondható, hogy a különböző inkoherens perturbációk az interferáló átmeneti csatornákban részt vevő atomi szintek közötti fáziskorrelációt elrontják, és a koherens gerjesztések okozta kvantuminterferencia eltűnik. Azonban, speciális feltételek teljesülése esetén lehetséges, hogy az inkoherens folyamatok koherens gerjesztéssel kombinálva kvantuminterferenciához vezessenek. Az inkoherens, például ütközési folyamatok megteremtik a feltételét az interferenciának, a vizsgált rendszerekben az interferencia-jelenségek csak megfelelően erős inkoherens folyamatok esetén jelentkeznek. Erre a lehetőségre példa egymással ütköző háromszintű atomok rendszere, ahol az ütközések hatására a fluoreszcencia spektrumban a nyomás növelésével új rezonanciák jelennek meg. A jelenséget négyhullám-keverés jelében figyelték meg [48, 49].

Koherensen gerjesztett kétszintű ütköző atomok rendszerében a fluoreszcencia spektrumot vizsgálva anomális rezonanciákat találtak, amint az ütközési ráta meghaladta a Rabi-frekvenciát [50]. A kísérletben bárium atmok $6s^{2\,1}S_0$ - $6s6p^1P_1$ 535, 5 nm-es átmenetét gerjesztették, 10 ns hosszú, 5 GHz sávszélességű lézerimpulzusokkal. Az impulzusok energiáját 10 és 800  $\mu$ J között változtatták. A báriumatomokat argon gázzal elegyítve szabályozták az ütközési rátát 1 és 10 GHz között, a nyomást 1-10 torr értéktartományban változtatva. A spektrumban a nyomás-kiszélesedett háttéren egy keskeny, az ütközések hatására nem szélesedő bemélyedést figyeltek meg. A jelenség egy intuitív, kvalitatív magyarázatául a koherens kölcsönhatás által felöltöztetett állapotrendszer különböző szintjei közötti átmeneti csatornák interferenciáját adták meg. Az említett munkában megjósolták, hogy ezek az effektusok akkor is megfigyelhetők, ha az atomok ütközésének hatását egy nem monokromatikus gerjesztő lézer okozta fázisdiffúzióra cseréljük, mivel a két rendszer hasonló modellel írható le, és elméleti számítások is megerősítették [51]. Mindkét esetben a spektrumban megjelenő keskeny vonal megfigyelhetőségének feltétele az, hogy az inkoherens kölcsönhatás erősebb legyen, mint a Rabi-oszcillációkat okozó koherens gerjesztés. E két példa felveti azt a kérdést, hogy milyen módon hozhat létre egy sztochasztikus zajjal járó folyamat elegendően hosszú időbeli korrelációkat ahhoz, hogy kétszintű atomi rendszerekben kvantuminterferenciát figyelhessünk meg.

Bár a rezonancia-fluoreszcencia spektrum jól számolható a mászter-egyenlet alapján, a kvantumtrajektória-módszerek részletesebb betekintést nyújthatnak a végbemenő fizikai folyamatokba, és hatékony sztochasztikus leírásmódját adják kvantumos folyamatoknak [13, 28, 52–55], amellett, hogy a Lindblad-formában írt mászter-egyenletekkel ekvivalens időfejlődést írnak elő [15, 56–58]. Az egyes kvantumtrajektóriák időfejlődése a kvantumugrások módszerét alkalmazva tekinthető úgy, mint a megfigyelt események – például ütközések – hatása által módosított szabad állapotfejlődés. Ez az interpretáció lehetővé teszi, hogy a rendszerben jelentkező fáziskorrelációkat a kvantumtrajektóriák segítségével megfigyelhessük.

A továbbiakban a sztochasztikus zajjal perturbált, koherensen gerjesztett kétszintű atomi rendszer egy modelljét állítjuk fel. Majd meghatározzuk a rezonanciafluoreszcencia spektrumot analitikusan, és kvantumtrajektória módszert használva numerikusan is. Végül egy-egy trajektóriát vizsgálva az időbeli fáziskorreláció és a spektrumban látható bemélyedés szoros kapcsolatát mutatjuk meg, alátámasztva az [50]-es publikációban adott kvalitatív értelmezést.

#### 2.1.1. A modell

A jelenséget hűen reprodukáló lehető legegyszerűbb modellt választjuk. Az ütközések modellezésére az  $\omega_a$ -val jelölt atomi átmeneti frekvenciában megjelenő, normális eloszlást követő  $\delta\omega_a(t)$  zaj szolgál. Ez a leírásmód jól modellezi a rugalmas, fázistolással leírható ütközési folyamatokat.

A modellünkben a koherens gerjesztéssel erősen kölcsönható kétállapotú atomi rendszer Hamilton-operátora a kölcsönhatási képben a következő alakú:

$$H_{AL} = \hbar(\omega_a(t) - \omega_L)S^z + \frac{1}{2}\hbar\Omega(S^- + S^+), \qquad (2.1)$$

ahol  $\omega_a(t) = \omega_a + \delta \omega_a(t)$  a perturbált, fluktuáló átmeneti frekvencia,  $\omega_L$  a gerjesztő lézer frekvenciája, és  $\Omega$  a Rabi-frekvencia. A lézer fotonszámstatisztikájának relatív szórásától függ az, hogy az egyetlen Rabi-frekvenciával történő leírás mennyire pontos. Részletesebben kifejtve látható, hogy több, csak kicsit eltérő Rabi-frekvencia jelenik meg a rendszerben, ha a lézert kvantummechanikailag írjuk le. A modell egyszerűsítése céljából először klasszikus leírásmódot használunk, majd a fejezet végén a 2.1.6 szakaszban áttérünk kvantált modellre. Az  $S^z$ ,  $S^+$ ,  $S^-$  atomi operátorok az  $|e\rangle$ ,  $|g\rangle$  alapállapot–gerjesztett állapot bázisban értendők, mátrixuk ebben a bázisban

$$S^{z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ S^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \ S^{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (2.2)

A normális eloszlású  $\delta \omega_a(t)$  zaj erősségét a  $\Gamma$  számmal jellemezhetjük, amelyet a

$$\langle \delta \omega_a(t) \delta \omega_a(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t - t') \tag{2.3}$$

egyenlettel definiálunk. Amennyiben a zajt az atomok közötti ütközésnek tulajdonítjuk, a  $\Gamma$  mennyiség fizikai jelentése az ütközési gyakoriság. Ugyanez a modell leírja kétszintű atomok kölcsönhatását fáziszajjal rendelkező lézerfénnyel, amennyiben a fázis driftjét elhanyagoljuk [51]. Ebben az esetben a  $\Gamma$  mennyiség a lézer vonalszélességét jelenti.

A (2.1) Hamilton-operátorral rendelkező rendszer időfejlődését az alábbi mászteregyenlettel írhatjuk le:

$$\dot{\rho} = \frac{1}{i\hbar} [\langle H_{AL} \rangle, \rho] + L\rho, \qquad (2.4)$$

ahol

$$L\rho = (L\rho)_{\rm sp} + (L\rho)_{\rm st}, \qquad (2.5a)$$

$$(L\rho)_{\rm sp} = \gamma \left( -\frac{1}{2} (S^+ S^- \rho + \rho S^+ S^-) + S^- \rho S^+ \right),$$
 (2.5b)

$$(L\rho)_{\rm st} = 4\Gamma \Big( -\frac{1}{2} (S^z S^z \rho + \rho S^z S^z) + S^z \rho S^z \Big),$$
 (2.5c)

 $\langle H_{AL} \rangle$  az atomi Hamilton-operátor időátlaga, és  $\gamma$  az atom természetes vonalszélessége. Az átlagolás során az  $\omega_a(t)$  átmeneti frekvencia időfüggő része,  $\delta \omega_a(t)$  eltűnik,

és időfüggetlen mászter-egyenletet kapunk.

Az erős koherens kölcsönhatás miatt érdemes bevezetni a felöltöztetett állapotokat, melyek diagonalizálják az átlagos atomi Hamilton-operátort,  $\langle H_{AL} \rangle$ -t:

$$|1\rangle = \cos\Theta|g\rangle + \sin\Theta|e\rangle,$$
 (2.6a)

$$|2\rangle = -\sin\Theta|g\rangle + \cos\Theta|e\rangle,$$
 (2.6b)

ahol

$$\Theta = -\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{\Omega}{\Delta}\right),\,$$

és  $\Delta=\omega_a-\omega_L$ a lézer elhangolása az egzakt rezonanciától. A felöltöztetett bázisban a $\langle H_{AL}\rangle$ operátort a

$$\langle H_{AL} \rangle = E_1 |1\rangle \langle 1| + E_2 |2\rangle \langle 2|, \qquad (2.7)$$

alakban írhatjuk, ahol a felöltöztetett állapotok energiaszintjei

$$E_{1,2} = \mp \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}$$

értéket veszik fel. Azt, hogy a felöltöztetett állapotokon mi módon hat az inkoherens perturbáció, a (2.5c) egyenletben szereplő hozzá tartozó tag Lindblad-operátorával,  $2\sqrt{\Gamma}S^z$ -vel hattatva kaphatjuk meg. Elhangolás-mentes esetben ez az operátor a felöltöztetett állapotok között generál átmeneteket:

$$2\sqrt{\Gamma}S^{z}|1\rangle = \sqrt{\Gamma}|2\rangle, \qquad (2.8a)$$

$$2\sqrt{\Gamma}S^{z}|2\rangle = \sqrt{\Gamma}|1\rangle.$$
 (2.8b)

Ahhoz, hogy az általános esetben is lássuk, milyen módon hat a zaj, az időfüggő  $H_{AL}$  Hamilton-operátor által generált Schrödinger-egyenletet a felöltöztetett állapotbázisban kifejtett Langevin-egyenletté transzformáljuk. Ennek során óvatosan

kell eljárnunk, mivel az időfüggést a $\Theta$  paraméter is tartalmazza, és az állapotbázis is időfüggővé válik,

$$|1,t\rangle \approx |1\rangle - \frac{1}{2} \frac{\Omega}{\Delta^2 + \Omega^2} \delta\omega_a(t)|2\rangle,$$
 (2.9a)

$$|2,t\rangle \approx |2\rangle + \frac{1}{2} \frac{\Omega}{\Delta^2 + \Omega^2} \delta\omega_a(t)|1\rangle,$$
 (2.9b)

 $\delta \omega_a(t)$ -ben első rendig. A $H_{AL}$ Hamilton-operátor diagonális a fenti időfüggő bázisban, így

$$H_{AL} = E_{1}|1,t\rangle\langle 1,t| + E_{2}|2,t\rangle\langle 2,t| \approx$$

$$\approx E_{1}|1\rangle\langle 1| + E_{2}|2\rangle\langle 2| +$$

$$+\delta\omega_{a}(t)\frac{1}{2}\frac{E_{1}\Omega}{\Delta^{2} + \Omega^{2}}(-|1\rangle\langle 2| - |2\rangle\langle 1|) +$$

$$+\delta\omega_{a}(t)\frac{1}{2}\frac{E_{2}\Omega}{\Delta^{2} + \Omega^{2}}(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) =$$

$$= \langle H_{AL}\rangle - \hbar\delta\omega_{a}(t)\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^{2} + \Delta^{2}}}(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|).$$
(2.10)

Ez a kifejezés is azt mutatja, hogy a sztochasztikus zaj átmeneteket generál az  $|1\rangle$ és  $|2\rangle$ felöltöztetett állapotok között.

A mászter-egyenletet is felírhatjuk az  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  állapotokból álló bázisban

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\rho_{z} = -\left(2\frac{\Gamma'\Omega^{2}}{\Omega^{2}+\Delta^{2}}+\gamma\right)\rho_{z} + \\
+2\frac{\Gamma'\Delta\Omega}{\Omega^{2}+\Delta^{2}}(\rho_{21}+\rho_{12})+\gamma\frac{\Delta}{\sqrt{\Omega^{2}+\Delta^{2}}}, \quad (2.11a)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\rho_{12} = \frac{\Gamma'\Omega\Delta}{\Omega^{2}+\Delta^{2}}\rho_{z} + \frac{\frac{1}{2}\gamma\Omega}{\sqrt{\Omega^{2}+\Delta^{2}}} - \\
-\left(2\Gamma'\frac{\Delta^{2}}{\Omega^{2}+\Delta^{2}}+i\sqrt{\Omega^{2}+\Delta^{2}}+\gamma\right)\rho_{12} - \\
-\Gamma'\frac{\Omega^{2}}{\Omega^{2}+\Delta^{2}}(\rho_{12}-\rho_{21}), \quad (2.11b)$$

ahol  $\rho_z = \rho_{11} - \rho_{22}, \, \Gamma' = \Gamma - \gamma/4, \, \text{és } \rho_{11}, \, \rho_{12}, \, \rho_{21}, \, \rho_{22}$  a sűrűség<br/>operátor mátrixelemei

a felöltöztetett bázisban. A  $\rho_{21}$  mátrixelem a  $\rho_{12}$  komplex konjugáltja, mivel  $\rho$ szükségszerűen hermitikus, így a rá vonatkozó egyenletet nem írtuk ki. Rezonáns gerjesztés, azaz  $\Delta = 0$  esetén a sztochasztikus zaj az  $|1\rangle$  és  $|2\rangle$  állapotokat csatolja, és megnöveli a relaxáció sebességét a spin z komponensében. Ebben az esetben a felöltöztetett bázis függetlenné válik a Rabi-frekvenciától, és a (2.11a) egyenlet függetlenné válik a (2.11b) egyenlettől. Az általános, nemrezonáns esetben viszont az egyenletek csatoltsága megmarad.

#### 2.1.2. Az időfejlődés numerikus szimulációja

A vizsgált koherensen gerjesztett, sztochasztikus perturbációnak kitett kétszintű atomi rendszerben a kvantuminterferencia hatásai megfigyelhetők a rezonanciafluoreszcencia spektrumban [50, 51]. A rezonancia-fluoreszcencia jelensége leírható az atom megfelelő felöltöztetett állapotai közötti átmenetekkel. Amennyiben a spektrumban megfigyelhető típusos jelenségek oka valóban kvantuminterferenciára vezethető vissza, szükséges, hogy az interferáló átmeneti csatornákban résztvevő felöltöztetett állapotok között időbeli fáziskorreláció létezzen.

A kvantumrendszerben megjelenő időbeli korrelációk elemzéséhez kifejezetten előnyösek a kvantumtrajektória módszerek. E módszerek közös tulajdonsága, hogy tiszta állapotok rendszerének nyomonkövetésével írják le az időfejlődést. Az állapotrendszer egy elemének sorsvonalát nevezik kvantumtrajektóriának. A kvantumugrások módszerében, egy bizonyos elemet tekintve, az inkoherens kölcsönhatás ugrásszerű állapotváltozást okoz, hasonlóan mintha mérés történne. Ez interpretálható úgy is, mintha a sokatomos rendszerből egy atomot kiválasztva követnénk annak sorsát, és például amikor spontán emisszió történik, egy kvantumugrást látunk. A sejtésünk az, hogy amennyiben a kvantumugrások sokasodnak, a trajektória hajlamos lesz hosszabb ideig valamelyik bázisállapot közelében tartózkodni. Ebben az interpretációban egy bizonyos kvantumtrajektóriát tekintve a rendszerben megjelenő időbeli fáziskorreláció mértéke meghatározható.

Az [52]-es hivatkozásban ismertetett kvantumtrajektória módszert alkalmazzuk a vizsgált rendszer időfejlődésének leírására. A trajektóriák a (2.7) Hamiltonoperátorral megadott Schrödinger-egyenlet szerint fejlődnek, megszakítva az inkoherens hatások – a sztochasztikus zaj és a spontán emisszió – által okozott mérésszerű ugrásokkal. Megfelelő számú trajektória átlagolásából a sűrűségoperátor meghatározható, és ez a (2.4) mászter-egyenletet kielégíti.

A szimuláció pontosságát két tényező befolyásolja. Egyrészt az alkalmazott  $\Delta t$ véges időlépés hossza, másrészt a trajektóriák N száma. A  $\Delta t$  időlépés jóval rövidebb kell legyen, mint a rendszerben megjelenő folyamatok karakterisztikus ideje. N elegendően nagy kell legyen ahhoz, hogy egy adott amplitúdójú sztochasztikus zaj mellett megfelelően zajmentes átlagokat kapjunk a sűrűségoperátorra. Az általunk végzett szimulációkban N értéke 5 × 10<sup>5</sup> volt.

#### 2.1.3. A spektrum számítása kvantumtrajektória módszerrel

A célból, hogy megbizonyosodjunk az alkalmazott szimulációs módszer helyességéről, a fluoreszcencia spektrumot numerikusan is meghatároztuk. Az ebben az alfejezetben ismertetett módszer [V] tulajdonképpen az időfejlesztő operátort határozza meg kvantumtrajektória módszerrel, és ebből számítjuk ki a rezonanciafluoreszcencia spektrumot.

Dipólközelítésben az  $S(\omega)$ -val jelölt rezonancia-fluoreszcencia spektrum az alábbi kétidős korrelációs függvény valós részeként számítható, tetszőleges kezdőfeltétel mellett:

$$\Gamma_1^N(\omega) = \lim_{t \to \infty} \int_0^\infty \exp(-i\omega\tau) \langle S^+(t+\tau)S^-(t) \rangle \, d\tau.$$
 (2.12)

A korrelációs függvény ismeretében a spektrum kiszámítható az

$$S(\omega) = \operatorname{Re} \Gamma_1^N(\omega) \tag{2.13}$$

módon, ahol  $\omega$  a kibocsátott fény elhangolása az  $\omega_L$  lézerfrekvenciához képest.

A spektrum numerikus meghatározására az irodalomban különböző módszereket találhatunk [52, 56, 57, 59, 60]. Az [56]-os hivatkozásban ismertetett módszer nem csak az atomot szimulálja, hanem a kvantált elektromágneses teret is. Esetünkben a gerjesztő tér klasszikusnak tekinthető, így ez túlzottan bonyolulttá tenné a számításokat. Az [59]-es és a [60]-as publikációk könnyen számítható módszert adnak kétidős korrelációs függvények meghatározására, azonban spektrumszámításkor először egy meglehetősen hosszú ideig tartó relaxációt kell alkalmazásukkor végrehajtani, és ez jelentősen csökkenti a pontosságot. Esetünkben a spektrumban megfigyelhető keskeny struktúrák miatt ez különösen hosszú idő lenne. Az [52]es hivatkozásban ismertetett módszer kizárólag az atomi rendszert szimulálja, és a kétidős korrelációs függvény Fourier-transzformáltjából számítja a rezonanciafluoreszcencia spektrumot. E módszer hátránya ugyanaz, mint az előbbié, először egy közelítőleg egyensúlyi állapotot kell elérni, és a spektrumszámítás csak ezután kezdődhet. Továbbá a [60]-as hivatkozásban e módszer elvi okokra visszavezethető pontatlanságát is kimutatták. Az általunk vizsgált esetben, ahol a zaj nagy és a rendszerben várhatóan hosszú idejű korrelációk figyelhetők, az eddigiektől eltérő numerikus spektrumszámítási módszerre volt szükség. Az alábbiakban ismertetjük az e célra kifejlesztett módszert, amellyel a spektrumszámításhoz szükséges kétidős várható értékek nagy pontossággal kiszámíthatóak az atomi rendszerre vonatkozó szimulációkból [V].

Tekintsünk először egy, a gerjesztő lézerfénnyel kölcsönható kétszintű atomi rendszert! Az atommal kölcsönható fénymódust is kvantummechanikai modellel írjuk le. Az atom-lézer rendszer állapota a  $\rho(t)$  sűrűségoperátorral jellemezhető Schrödinger képben. Egy, ugyancsak Schrödinger-képben értelmezett, csak az atomon ható A operátor várható értékét az U(t) unitér időfejlesztő operátor segítségével kifejezhetjük a

$$\operatorname{Tr}(A\rho(t)) = \operatorname{Tr}(AU(t)\rho(0)U^{\dagger}(t)) =$$
$$= \operatorname{Tr}(U^{\dagger}(t)AU(t)\rho(0)) = \operatorname{Tr}(A(t)\rho(0)),$$

módon, ahol A(t) az A operátor Heisenberg-képben. Bevezethetünk egy A'(t) operátort, amely csak az atomi rendszeren hat, és teljesíti a

$$\operatorname{Tr}(A\rho(t)) = \operatorname{Tr}_A(A\rho_A(t)) = \operatorname{Tr}_A(A'(t)\rho_A(0)), \qquad (2.14)$$

összefüggést, ahol  $\rho_A(t) = \text{Tr}_L(\rho(t))$  az atom redukált sűrűségoperátora. Az A'(t) operátor implicit módon függ a gerjesztő lézertér állapotától is. A (2.14) egyenletet különböző kezdeti  $\rho(0)$  sűrűségoperátorokra fogjuk a továbbiakban alkalmazni, azonos lézertér-állapot mellett. A kezdeti állapotok megválasztása szükségszerűen olyan, például direktszorzat alakú, hogy az A'(t) atomi operátor minden esetben ugyanaz lehessen.

Kiválaszthatunk egy, az atomi részrendszerre ható operátorok körében bázist alkotó tiszta állapot rendszert, és a hozzájuk tartozó  $R_i(0)$  sűrűségoperátorokat, ahol esetünkben az *i* index 4 lehetséges értéket vehet fel. Segítségükkel bármely, csak az atomon ható X operátor felírható az

$$X = \sum_{i} x_i R_i(0) \tag{2.15}$$
alakban, ahol az  $x_i$ -k komplex számok, és kifejezhetők az

$$x_{i} = \sum_{j} (T^{-1})_{ij} \operatorname{Tr} \left( X R_{j}(0) \right)$$
(2.16)

alakban, ahol  $T_{ij} = \text{Tr}(R_i(0)R_j(0))$ . A *T* mátrix invertálhatósága következik abból, hogy az  $R_i(0)$  operátorok teljes bázist alkotnak és lineárisan függetlenek. A (2.14), (2.15) és (2.16) egyenleteket felhasználva az A'(t) operátort kifejezhetjük a kiválasztott sűrűségoperátor-bázis elemek időfejlődésével az

$$A'(t) = \sum_{ik} (T^{-1})_{jk} \operatorname{Tr} \left( R_k(t) R_i(0) \right) \lambda_i(0) R_j(0)$$
(2.17)

módon, ahol a  $\lambda_i(0)$  együtthatók a (2.16) egyenlet segítségével az A operátorból kiszámíthatók, mint

$$\lambda_i(0) = (T^{-1})_{ij} \operatorname{Tr} \left( A R_j(0) \right).$$

Az A'(t) operátor helyére a (2.17) kifejezést írva a (2.14) egyenlet teljesül bármilyen, az  $R_i(0)$  bázis időfejlesztésekor feltételezett lézertérrel egyező kezdőállapotú  $\rho(0)$ sűrűségoperátorra, azaz

$$\operatorname{Tr}(A(t)\rho(0)) = \operatorname{Tr}_A(A'(t)\rho_A(0)).$$
(2.18)

Amennyiben adott egy B(t), kölcsönhatási képben értelmezett operátor, amely a t = 0 időpontban csak az atomi rendszeren hat, a  $B(0)\rho(0)$  szorzatra is alkalmazhatjuk a fenti kifejezést, hiszen az atom-lézer térben a  $B(0)\rho(0)$  operátor felírható a  $\rho(0)$  kezdeti állapottal egyező lézerterű sűrűségoperátorok komplex lineáris kombinációjaként, így

$$Tr(A(t)B(0)\rho(0)) = Tr(A'(t)B(0)\rho_A(0)).$$
(2.19)

A Tr $(A(t)B(t')\rho(0))$  alakú kétidős korrelációs függvények számításához a nyomképzés ciklikus tulajdonságát felhasználva a

$$Tr(A(t)B(t')\rho(0)) = Tr(A(t)U(-t')B(0)U(t')U(-t') \cdot \cdot \rho(t')U(t')) = Tr(U(t')A(t)U(-t')B(0)\rho(t')) =$$
  
= Tr(A(t - t')B(0)\rho(t')) =  
= Tr(AA'(t - t')B(0)\rho\_A(t')), (2.20)

kifejezést kapjuk, ahol $\rho_A(t')$ az atomi részrendszer sűrűség<br/>operátora Schrödinger-képben at'időpontban.

A kapott általános kifejezéseket alkalmazzuk az  $S^+$  és  $S^-$  atomi operátorokra. A fluoreszcencia-spektrumhoz szükséges kétidős korrelációs függvény kiszámításához a  $Tr(S^+(t+\tau)S^-(t)\rho(0))$  várható érték meghatározása szükséges. A (2.20) kifejezést felhasználva azt kapjuk, hogy

$$\lim_{t \to \infty} \operatorname{Tr} \left( S^+(t+\tau) S^-(t) \rho(0) \right) = \lim_{t \to \infty} \operatorname{Tr} \left( S^+(\tau) \cdot S^-(0) \rho(t) \right) = \operatorname{Tr}_A \left( S^{+\prime}(\tau) S^-(0) \rho_A(\infty) \right).$$
(2.21)

A korrelációs függvény ezen alakja már alkalmas arra, hogy közvetlenül a kvantumtrajektóriák alapján kiszámítsuk.

A célból, hogy az  $S^{+\prime}(\tau)$  operátort a numerikus szimulációkból megkapjuk, a (2.15) operátorkifejtéshez megfelelő sűrűségoperátor bázist választottunk, és ezekkel, mint kezdeti állapotokkal egymástól független kvantumtrajektória-szimulációkat indítottunk. A felöltöztetett  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  bázisban a választott sűrűségoperátorok mátrixa az alábbi volt:

$$R_{1}(0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad R_{3}(0) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{bmatrix},$$
$$R_{2}(0) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad R_{4}(0) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}. \qquad (2.22)$$

A szimuláció minden egyes időlépésében kiszámítottuk az  $S^{+'}(\tau)$  operátort ugyanebben a bázisban. Miután a szimulációval végeztünk, és az időparaméter elérte az előre rögzített végső T értékét, a (2.12) egyenletben szereplő korrelációs függvényt kiszámítottuk a

$$\Gamma_1^N(\omega) = \sum_{\tau=0}^T \exp(-i\omega\tau) \operatorname{Tr} \left( S^{+\prime}(\tau) S^{-}(0) \overline{\rho(T)} \right) \Delta t$$
(2.23)

kifejezés által megadott módon, a szimuláció során eltárolt  $S^{+'}(\tau)$  mátrixokat felhasználva. Az összegzés az összes 0 és T közötti időlépésre történt. A kifejezésben  $\overline{\rho(T)}$  a relaxált végállapot jó közelítése, amelyet az  $R_i(T)$  sűrűségoperátorok átlagaként kaptunk.

Az ismertetett módszer előnye, hogy a spektrum nagy pontossággal meghatározható kizárólag az atomi részrendszert szimulálva, kezdeti egyensúlyi állapot elérése nélkül.

## 2.1.4. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum analitikus meghatározása

A mászter-egyenlet alapján a rezonancia-fluoreszcencia spektrum analitikusan is meghatározható. Ez lehetőséget ad a  $\Gamma$ ,  $\Omega$ ,  $\gamma$ ,  $\Delta$  paraméterek érdekes, azaz kvantuminterferenciára utaló spektrumot adó tartományainak gyors meghatározására, és a numerikus spektrummal való összevetés során annak bizonyítására, hogy maga a szimulációs módszer jól működik, és az előző pontban bevezetett spektrumszámítási módszer helyes.

A Bloch-vektor  $\langle S^z(t) \rangle$ ,  $\langle S^+(t) \rangle$ ,  $\langle S^-(t) \rangle$  komponenseinek időfejlődését a (2.4) mászter-egyenlet alapján meghatározva a kvantum-regressziós tételt használjuk a rezonancia-fluoreszcencia spektrum (2.13) kifejezésében szereplő (2.12) kétidős várható érték kiszámítására. A kvantum-regressziós tétel segítségével a kétidős várható érték egyidős várható értékek függvényeként írható fel [61].

A Bloch-egyenletek a vizsgált rendszer esetében az

$$\begin{split} \langle S^{z}(t) \rangle &= -\gamma \langle S^{z}(t) \rangle + \frac{1}{2} i \Omega(\langle S^{-}(t) \rangle - \langle S^{+}(t) \rangle) - \frac{1}{2} \gamma \\ \langle S^{+}(t) \rangle &= -i \Omega \langle S^{z}(t) \rangle + (-i\Delta - 2\Gamma - \frac{1}{2}\gamma) \langle S^{+}(t) \rangle, \\ \langle S^{-}(t) \rangle &= -i \Omega \langle S^{z}(t) \rangle + (-i\Delta - 2\Gamma - \frac{1}{2}\gamma) \langle S^{-}(t) \rangle \end{split}$$

formát öltik. Számításaink során megkaptuk a keresett várható érték kifejezését,

$$\Gamma_{1}^{N}(\omega) = \frac{i\Omega(i\omega - i\Delta + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)\left(-\frac{1}{2}K_{3} - K_{1}K_{3}\right)}{(i\omega + \gamma)\left((i\omega + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^{2} + \Delta^{2}\right) + \Omega^{2}(i\omega + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)} + (2.24)$$

$$\frac{\left(\frac{1}{2}\Omega^{2} + (i\omega + \gamma)(i\omega - i\Delta + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)\right)\left(\frac{1}{2} + K_{1} - K_{2}K_{3}\right) + \frac{1}{2}\Omega^{2}\left(-K_{3}K_{3}\right)}{(i\omega + \gamma)\left((i\omega + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^{2} + \Delta^{2}\right) + \Omega^{2}(i\omega + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)}$$

ahol

$$K_{1} = \frac{\frac{1}{2}\gamma \left( (2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^{2} + \Delta^{2} \right)}{\gamma \left( (2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^{2} + \Delta^{2} \right) + \Omega^{2} (2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)}, \qquad (2.25a)$$

$$K_2 = \frac{\frac{1}{2}\gamma i\Omega \left(i\Delta - 2\Gamma - \frac{1}{2}\gamma\right)}{\gamma \left((2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^2 + \Delta^2\right) + \Omega^2 (2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)},$$
(2.25b)

$$K_3 = \frac{\frac{1}{2}\gamma i\Omega \left(i\Delta + 2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma\right)}{\gamma \left((2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)^2 + \Delta^2\right) + \Omega^2 (2\Gamma + \frac{1}{2}\gamma)}.$$
 (2.25c)

Az elhangolásmentes speciális esetben, a  $\Delta$  = 0 paraméter-értéknél a korrelációs

függvény egyszerűbb alakot vesz fel,

$$\Gamma_{1}^{N}(\omega)\Big|_{\Delta=0} = \frac{1}{\left(\omega - 2i(\Gamma + \frac{1}{4}\gamma)\right)\left(i\alpha^{2}(2\omega^{2} - 4i\omega\Gamma'' - \alpha^{2})\right)} \left[(4\Gamma + \gamma) \qquad (2.26)\right]$$
$$\left((\alpha^{2} + \gamma^{2})\Omega^{2} - 2\Omega^{4} - \alpha^{4}\right) - 2\Omega^{6} + \omega^{2}(2\alpha^{4} - 2\Omega^{2}(\alpha^{2} + \gamma^{2}))\right]$$
$$+i\omega\left((3\gamma + 4\Gamma'')\Omega^{2}\alpha^{2} - 4\Gamma''\alpha^{4} - 2\gamma(2\Omega^{2} - \gamma^{2})\Omega^{2}\right),$$

ahol

$$\alpha^2 = \gamma^2 + 4\Gamma\gamma + \Omega^2, \quad \Gamma'' = \Gamma' + \gamma, \quad \Gamma' = \Gamma - \frac{1}{4}\gamma.$$
 (2.27)

Ahhoz, hogy jobban lássuk a korrelációs függvény struktúráját, és a paraméterektől való függését, a (2.26) kifejezést három részre bontjuk,

$$\Gamma_1^N(\omega)|_{\Delta=0} = \frac{A_+}{\omega - s_+} + \frac{A_-}{\omega - s_-} + \frac{A_0}{\omega - s_0},$$
(2.28)

ahol

$$s_{\pm} = i\Gamma'' \pm i\sqrt{\Gamma'^2 - \Omega^2}, \qquad (2.29a)$$

$$s_{0} = 2i\Gamma' + i\gamma, \qquad (2.29b)$$

$$A_{\pm} = i\Omega^{2} \frac{\frac{1}{2}\alpha^{2} + 3\Gamma'\gamma}{2i\alpha^{2}(s_{+} - s_{-})(is_{-} + \gamma)} - i\Omega^{2} \frac{-4\gamma^{2}\Gamma''(\Gamma + \frac{1}{4}\gamma) \pm i\gamma\alpha^{2}(s_{+} - s_{-})}{2i(s_{+} - s_{-})\alpha^{4}(is_{-} + \gamma)},$$

$$A_{0} = -i\frac{\Omega^{2} + (4\Gamma + \gamma)\gamma}{2\alpha^{2}}.$$

A  $\Gamma' < \Omega$ esetben a rezonancia-fluoreszcencia spektrum kifejezése, továbbra is az

elhangolásmentes speciális esetnél maradva,

$$S(\omega) = \frac{A_0 s_0}{\omega^2 + |s_0|^2} + \frac{\text{Re}A_+ \omega - \text{Re}(A_+ s_+^*)}{(\omega + \sqrt{\Omega^2 - \Gamma'^2}) + {\Gamma''^2}} + \frac{\text{Re}A_- \omega - \text{Re}(A_- s_-^*)}{(\omega - \sqrt{\Omega^2 - {\Gamma'}^2}) + {\Gamma''^2}},$$
(2.30)

ami azt mutatja, hogy az atomi rezonancia frekvenciánál megfigyelhető csúcshoz képest két, szimmetrikusan eltolt Lorentz-függvény adódik hozzá a spektrumhoz. Ez a három csúcs alkotja a Mollow-tripletet [62], és mindhárom az inkoherens perturbáció növelésével kiszélesedik.

A Rabi-frekvenciánál erősebb sztochasztikus zaj,  $\Gamma' > \Omega$  esetén mindhárom Lorentz-függvény közepe a zérus frekvenciánál található, amely az  $\omega_L$  lézerfrekvenciának felel meg. Azonban az egyik Lorentz-függvénynek negatív az együtthatója, és ez a spektrumban egy bemélyedést okoz:

$$S(\omega) = \frac{A_+ s_+}{\omega^2 + |s_+|^2} + \frac{A_- s_-}{\omega^2 + |s_-|^2} + \frac{A_0 s_0}{\omega^2 + |s_0|^2},$$
(2.31)

ahol  $A_+s_+$  és  $A_0s_0$  mindig pozitívak, ám  $A_-s_-$  negatív. A bemélyedés szélessége nem nő az inkoherens perturbáció növelésével, annak növelésével a természetes vonalszélességhez közelít.

A továbbiakban a numerikusan és analitikusan kapott spektrumokat vetjük össze. A 2.1-es ábrán a rezonancia-fluoreszcencia spektrumot láthatjuk a rezonáns  $(\Delta = 0)$  esetben, erős gerjesztés  $(\Omega \gg \gamma)$ , alacsony zajamplitúdó mellett  $(\Omega > \Gamma)$ . A spektrum a Mollow-triplettől annyiban tér el, hogy a középső csúcs kisebb, és kiszélesedett. A zaj további növelésével, amint  $\Gamma$  eléri  $\Omega$  értékét, a középső csúcs eltűnik, és egy két csúcsú grafikont láthatunk a 2.2-es ábrán, egy meglehetősen széles bemélyedéssel középen. Erős zaj esetén a bemélyedés nagyon keskennyé válik, ahogy az a 2.3-as ábrán látható. A bemélyedés szélessége a (2.29a) egyenletben



2.1. ábra. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum kis zajamplitúdó, erős koherens gerjesztés mellett ( $\Gamma/\Omega = 0.2, \ \gamma/\Omega = 0.05$ ) az elhangolásmentes ( $\Delta = 0$ ) esetben.



2.2. ábra. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum a Rabi-frekvenciával összemérhető zajamplitúdó, erős koherens gerjesztés mellett ( $\Gamma/\Omega = 1.1$ ,  $\gamma/\Omega = 0.05$ ) az elhangolásmentes ( $\Delta = 0$ ) esetben.



2.3. ábra. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum nagy zaj, erős koherens gerjesztés mellett ( $\Gamma/\Omega = 6$ ,  $\gamma/\Omega = 0.05$ ) az elhangolásmentes ( $\Delta = 0$ ) esetben. A spektrum közepén egy vonalszélességgel összemérhetően keskeny bemélyedés jelenik meg.

szereplő  $|s_-|$  paraméter értékével jellemezhető, és ennek értéke a  $\gamma$  természetes vonalszélességét közelíti a  $\Gamma' \gg \Omega$  esetben, ahogy az a 2.4-es ábrán látható. Nagy elhangolás ( $\Delta \gg \Omega$ ) és kis zaj ( $\Gamma \ll \Omega$ ) esetén egy Fano-szerű struktúrát láthatunk a spektrum közepén (2.5-ös ábra). Tovább növelve a zaj amplitúdóját a középen megjelenő csúcs aszimmetrikus Fano-profillá alakul [63], egy keskeny bemélyedéssé a spektrum sztochasztikus zaj által kiszélesedett oldalán, és egy keskeny csúccsá a másik oldalon, közvetlenül a bemélyedés mellett (2.6-os ábra).

A rezonancia-fluoreszcencia spektrumra vonatkozó numerikus és analitikus eredmények igen jó egyezést mutatnak széles paramétertartományban. Ez azt mutatja, hogy a kifejlesztett spektrumszámítási módszer helyes és pontos, továbbá a numerikus szimuláció során ténylegesen az analitikus számítások alapjául szolgáló (2.4)-es mászter-egyenletnek megfelelően fejlődnek a kvantumtrajektóriák.



2.4. ábra. Az elhangolásmentes esetben megfigyelhető, a spektrum közepén megjelenő bemélyedés szélessége, azaz az  $|s_-|$  kifejezés értéke erős gerjesztés ( $\gamma/\Omega = 0.05$ ) esetén, a zajamplitúdó függvényében. Erős zaj esetén a bemélyedés szélessége megközelíti a természetes vonalszélességet,  $\gamma$ -t.



2.5. ábra. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum kis sztochasztikus zaj, erős gerjesztés és nagy elhangolás mellett ( $\Gamma/\Omega = 0.2, \gamma/\Omega = 0.05, \Delta/\Omega = 3$ ). Egy Fano-szerű struktúra látható a lézerfrekvencia értékénél.



2.6. ábra. A rezonancia-fluoreszcencia spektrum nagy zaj, erős gerjesztő lézertér és nagy elhangolás mellett ( $\Gamma/\Omega = 3$ ,  $\gamma/\Omega = 0.05$ ,  $\Delta/\Omega = 3$ ). A lézerfrekvencia értékénél egy aszimmetrikus Fano-profil látható.

### 2.1.5. Az időbeli fáziskorreláció vizsgálata

A spektrum közepén megfigyelhető keskeny bemélyedés és az aszimmetrikus Fanoprofil kvantuminterferencia megjelenésére utalnak. Ennek előfeltétele, hogy elegendő hosszú ideig fennálló fázis-korrelációk jöjjenek létre a különböző, egymással interferáló átmeneti csatornák által összekötött állapotok között. A 2.1.1 bekezdésben láthattuk, hogy a sztochasztikus zaj a felöltöztetett állapotok között generál átmeneteket. Érdemes megvizsgálni, hogy ez a csatolás okoz-e fáziskorrelációt e két állapot között.

Amennyiben az atom a $|\Phi\rangle$ tiszta állapotban található, definiálhatjuk a $\Delta\phi$ fáziskülönbséget a

$$|\Phi\rangle = a_1 e^{i\phi_1} |1\rangle + a_2 e^{i\phi_2} |2\rangle, \qquad \Delta\phi = \phi_2 - \phi_1 \tag{2.32}$$

módon, ahol az  $|1\rangle$  és  $|2\rangle$  felöltöztetett állapotokat a (2.6a) és (2.6b) egyenletekkel

határozzuk meg. A kvantumugrások módszere szerint végzett szimuláció során egy trajektória időfejlődését nyomon követve kiszámíthatjuk a fáziskülönbséget. Zajmentes esetben a Rabi-oszcillációból eredően a fáziskülönbség állandóan változik a  $\Delta \phi(t) = (E_2 - E_1)t$  kifejezésnek megfelelően, fázisstabilizáció nem történik. Kis zaj esetén a Rabi-oszcillációkat ritkán szakítják meg a zajjal összefüggő események, így a fáziskülönbséget az idő függvényében ábrázolva nem látható struktúra a grafikonon (2.7a ábra). A zajamplitúdót növelve a fáziskülönbség időben egyenletes eloszlása megváltozik, és időről időre az állapot hosszabb ideig a 0 és  $\pi$  fáziskülönbségek környékén tartózkodik (2.7b ábra). Nagy zaj esetén, ahogy az a (2.7c) ábrán látható, a fáziskülönbség változó ideig a 0 vagy  $\pi$  érték környékén található, és ezen időszakok alatt a Rabi-oszcillációk hatását elnyomja a zaj okozta stabilizáció, fázisátfordulás nem történik.

Ahhoz, hogy a fenti kvalitatív megfigyeléseket kvantitatív módon is megfogalmazhassuk, bevezetjük a fáziskülönbség koszinuszának időbeli korrelációs függvényét, a

$$C_{\cos}(\tau) = c \int_{t=0}^{T} (\cos \Delta \phi (t+\tau) - \overline{\cos \Delta \phi}) \times (\cos \Delta \phi (t) - \overline{\cos \Delta \phi}) dt$$
(2.33)

definícióval, ahol  $\overline{\cos \Delta \phi}$  a fáziskülönbség koszinuszának átlagértéke a teljes szimulált időintervallum alatt, és c egy normálási együttható, amelyet a  $C_{\cos}(0) = 1$ feltétellel rögzítünk. A fáziskülönbség szinuszára vonatkozó korrelációs függvényt hasonlóan képezhetjük.

A  $C_{cos}(\tau)$  függvény menete a 2.8-as ábrán látható ugyanazon paraméterértékek mellett, amelyekkel a 2.7-es ábra grafikonjai készültek. Látható, hogy alacsony zaj mellett a Rabi-oszcilláció időtartama alatt fennálló korrelációk dominálnak. A zajt növelve ennek többszörösére nő a korrelációs idő. Ez alátámasztja a fáziskor-



2.7. ábra. A felöltöztetett állapotok közötti fáziskülönbség erős rezonáns gerjesztés ( $\Delta = 0, \gamma/\Omega = 0.05$ ) esetén. Az *a* ábrán kis zaj mellett ( $\Gamma/\Omega = 0.2$ ); a *b* ábrán a Rabi-frekvenciával összemérhető zajamplitúdónál ( $\Gamma/\Omega = 1.1$ ); a *c* ábrán nagy zaj esetén ( $\Gamma/\Omega = 5$ ) látható a fáziskülönbség időfüggése. A trajektória kezdeti állapota az  $|e\rangle$  gerjesztett állapot volt a szimulációk során.



2.8. ábra. A  $\cos \Delta \phi(t)$  korrelációs függvény alacsony, közepes és nagy zajamplitúdó mellett, a rezonáns esetben ( $\Gamma/\Omega \in \{0.2, 1.1, 5\}, \Delta = 0, \gamma/\Omega = 0.05$ ).

relációk kialakulását kvantitatívan is. A fáziskülönbségek szinuszának korrelációs függvényét vizsgálva (2.9-es ábra) azt látjuk, hogy a zaj növelésével a kezdetben Rabi-oszcilláció időtartamú korrelációk is megszűnnek, és sin  $\Delta \phi(t)$  teljesen korrelálatlanná válik, amit a  $C_{\rm sin}(\tau)$  függvény  $\Gamma \gg \Omega$  esetben Dirac-deltához közelítő formája mutat. Végeredményben a fáziskülönbség a 0 és  $\pi$  értékek valamelyike környezetében stabilizálódik a Rabi-oszcillációnál jóval hosszabb ideig, és ezen értékek körül  $\pi/2$  intervallumban ingadozik.

Kimutatható, hogy a  $C_{\cos}(\tau)$  korrelációs függvény félértékszélessége és a rezonancia-fluoreszcencia spektrumban megfigyelhető keskeny bemélyedés szélessége, azaz az  $|s_-|$  kifejezés értéke a (2.29a) egyenletben, szoros kapcsolatban vannak. E két mennyiséget különböző paraméter értékek mellett ábrázoltuk a 2.10-es ábrán. Ez a szoros kapcsolat az időbeli korrelációk hossza és a spektrum alakja között bizonyítja, hogy a keskeny vonalszélességet a rendszerben jelentkező hosszútávú időbeli korrelációk megjelenése teszi lehetővé, és kvantuminterferencia kialakulásához biztosítja az elegendően stabil fáziskülönbséget.



2.9. ábra. A sin  $\Delta \phi(t)$  korrelációs függvény alacsony, közepes és nagy zajamplitúdó mellett, a rezonáns esetben ( $\Gamma/\Omega \in \{0.2, 1.1, 5\}, \Delta = 0, \gamma/\Omega = 0.05$ ). Látható, hogy a sin  $\Delta \phi(t)$  érték korrelálatlanná válik a zajamplitúdó növelésével.



2.10. ábra. A  $C_{\rm cos}(\tau)$  korrelációs függvény félértékszélessége, mint az analitikusan számított spektrumközepi bemélyedés szélességének függvénye. Az utóbbi reciproka,  $1/|s_-|$  szerepel a vízszintes tengelyen, a Rabi-frekvenciával dimenziótlanná tett egységekben.

### 2.1.6. A kvantuminterferencia kialakulása

Az interferencia kialakulásának alábbi interpretációját az [50]-es publikációban ismertették először, és az általunk végzett munka a folyamat mélyebb megértésére és az interpretáció jogosságának igazolására irányult. A [64]-es hivatkozásban hasonló interferenciajelenségről számolnak be a  $\Gamma < \Omega$  esetben, a Mollow-triplet komponensei közötti intenzitás korrelációk vizsgálatakor.

A gerjesztő koherens lézerfényt is kvantált módon leírva minden egyes fotonszámállapothoz tartozik egy Rabi-frekvencia, és az atomi felöltöztetett állapotok egy állapotpárokból álló rendszert alkotnak. A különböző fotonszámhoz tartozó felöltöztetett állapotok között a lézer generál átmeneteket, az azonos fotonszámúak között pedig a sztochasztikus zaj. Ezt szemlélteti a 2.11-es ábra. A (2.8)-as és a (2.10)-es



2.11. ábra. A kvantált gerjesztő lézer esetén kialakuló különböző fotonszámhoz tartozó felöltöztetett állapotok, és átmenetek. A szaggatott vonallal jelölt átmeneti csatornák az atom és a lézer kölcsönhatását szemléltetik, a dupla nyilak a sztochasztikus zaj hatására végbemenő átmeneteket jelöli.

egyenletek szerint a zajjal kapcsolatos, a kvantumtrajektóriákon mérésként értelmezhető folyamat átmeneteket kelt az  $|1, n\rangle$  és  $|2, n\rangle$  felöltöztetett állapotok között. Láthattuk a 2.1.5 pontban, hogy abban a paramétertartományban, ahol a zaj dominál a Rabi-oszcilláció felett ( $\Gamma > \Omega$ ), fázisstabilizáció történik, a fáziskülönbség az azonos fotonszámhoz tartozó felöltöztetett állapotok között a Rabi-oszcillációhoz képest hosszú ideig stabillá válik a sűrűn bekövetkező zajesemények miatt. Továbbá láthattuk, hogy a spektrum kvantuminterferenciához köthető része az elhangolástól függetlenül mindig a gerjesztő lézer frekvenciájánál található, a Rabi-frekvencia változása nem befolyásolja a helyzetét, így a fotonszámtól függetlenül azonos az átmenet során emittált vagy abszorbeált foton frekvenciája. A lehetséges átmeneti csatornák közül két interferáló pár választható ki, az  $(|1,n\rangle \rightarrow |2,n-1\rangle \rightarrow |1,n-1\rangle$ és  $|1,n\rangle \rightarrow |2,n\rangle \rightarrow |1,n-1\rangle$ ), valamint a  $(|2,n\rangle \rightarrow |1,n\rangle \rightarrow |2,n-1\rangle$  és  $|2,n\rangle \rightarrow |1,n-1\rangle \rightarrow |2,n-1\rangle$ ) átmenetek interferálnak, mivel csak az ütközéses és a fotonemisszióval járó kölcsönhatás sorrendjében különböznek. Ezen átmeneti csatornák által kibocsátott fotonok megkülönböztethetetlenek, így interferenciájuk lehetséges. Az  $|1,n\rangle \rightarrow |2,n\rangle$  és a  $|2,n-1\rangle \rightarrow |1,n-1\rangle$  ütközéses átmenet abban különbözik, hogy ellentétes irányban tolja el az állapot fázisát, és ez destruktív interferenciára vezet, ezért látható a spektrumban egy bemélyedés. A rendszerben jelenlévő más átmeneti csatornák által emittált fotonok megkülönböztethetők, így azok interferenciája nem lehetséges.

Ezen alfejezet leglényegesebb eredménye, hogy egy kvantitatív modellen keresztül bemutattuk, miként alakulhat ki kvantuminterferencia az inkoherens, alapvetően dekoherenciát okozó folyamatok által, amennyiben koherens gerjesztés is jelen van a rendszerben. Az inkoherens ütközések hatására létrejövő fázisstabilizációt később mások is kimutatták [65], illetve hasonló modellt alkalmaztak az interferencia leírására [66]. Bose-Einstein kondenzátumokban is találtak hasonló, az inkoherens hatások miatt lehetővé váló kvantuminterferencia effektusokat [67].

# 2.2. Koherens szuperpozíció állapotok tervezése a dekoherencia káros hatásaitól mentesen

Az előző, 2.1-es alfejezetben láthattuk, hogy az általában dekoherenciához vezető inkoherens folyamatok hozzájárulhatnak kvantumjelenségek előidézéséhez, kvantuminterferenciához. Azonban az inkoherens folyamatok hatása a legtöbb esetben a kvantumállapot kvantumos tulajdonságainak megszűnéséhez, a szuperpozíció keverékké válásához vezet. Ebben a alfejezetben egy példán keresztül megmutatjuk, hogy a dekoherencia-mentes alterek felhasználásával miként preparálhatunk tetszőleges szuperpozíciót egy háromdimenziós altérben, így elkerülve a rendszerben jelen lévő dekoherenciát okozó folyamatokat. A kulcs ehhez a külső kölcsönhatással változtatható dekoherencia-mentes altér, amelyben a rendszer állapota tartózkodik a teljes folyamat alatt.

Az időfüggő problémák egy lényeges altípusa az ún. szintkeresztezési problémák, melyek során a csatolási paraméterek folytonosan változnak, és a pillanatnyi sajátállapotok egy időintervallumban közel degenerálttá válnak, energiaszintjeik egymást jól megközelítik. Az ilyen jellegű folyamatok leírására kifejlesztett nevezetes Landau-Zener modellt [32, 34] több más, kétszintű rendszerekben alkalmazható modell követte [68–71]. E modelleket számos esetben alkalmazták az atom- és molekuláris fizikában, egy áttekintő cikk a [72]-es hivatkozásban található. Az 1.2.1-es alfejezetben részletesen bemutatott Landau-Zener modellben a kölcsönhatás megszünteti a perturbálatlan rendszerben fellépő degenerációt, és lehetővé teszi az átmenetet a két különböző sajátállapot között. Elegendően lassú paraméterváltozás esetén az eredetileg kereszteződő energiaszintekhez tartozó sajátállapotok között hirtelen ugrás nélkül, adiabatikus módon megy végbe az átmenet.

Az összes adiabatikus átmenetet megvalósító kvantumrendszer közös tulajdonsága, hogy a Hamilton-operátoruk időfüggő. A pillanatnyi sajátállapotok egy bázist alkotnak, amely adiabatikusan változik a folyamat során. Feltesszük, hogy kezdetben a rendszer valamelyik adiabatikus sajátállapotában található. Az adiabatikus átmenet során a cél az, hogy a kölcsönhatás által a rendszer egy másik adiabatikus végállapotba kerüljön. Amennyiben a kölcsönhatás paraméterei elegendően lassan változnak, a rendszer állapotvektora követi az adiabatikus sajátállapotot, és a végállapotba történő átmenet folyamatos. Ekkor a folyamat adiabatikus volta biztosítja, hogy a csatolási paraméterektől és a pontos időzítéstől nagymértékben független lesz az átmenet. Az ideális adiabatikus átmenet határesetében más sajátállapotok nem vesznek részt a folyamatban, egyáltalán nem populálódnak a folyamat során. A modellekben alkalmazott nemadiabatikus korrekciók ezeket az állapotokat is figyelembe veszik. A közel disszipációmentes időfejlődést ekkor az biztosítja, hogy a kiszemelt sajátállapotok és a többi sajátállapot közötti nemadiabatikus csatolás erősségét a két sajátállapotrendszer energiakülönbségénél lényegesen kisebb értéken tartják.

A 90-es években egy ígéretes adiabatikus populáció-átvitel technikát fejlesztettek ki, ez a stimulált adiabatikus Raman-átmenetek (STIRAP, stimulated Raman adiabatic passage) módszere. Ez hatékony populáció-átvitelt tesz lehetővé háromszintű rendszerekben [73]. Továbbá, ez a módszer arra is alkalmas, hogy koherens szuperpozíció állapotokat hozzon létre, és azokat manipulálja. Az eredeti STIRAP sémát használták koherens szuperpozíciók keltésére három- és négyszintű rendszerekben [74–79], és N-komponensű maximálisan koherens (ahol minden komponens azonos együtthatóval szerepel) szuperpozíció állapotok előállítására [80]. A négyszintű rendszerben alkalmazott STIRAP folyamat alkalmazható kvantumbit forgatására [81] és sűrűségoperátor komponenseinek mérésére [82].

A [83, 84]-es hivatkozásokban a STIRAP elvét alkalmazzák N-szintű koherens szuperpozíció állapotok előállítására. Az alkalmazott modell érdekessége, hogy a Hamilton-operátor zérus altere egynél több dimenziós, és az ebben az altérben található állapotok időfejlődését lényegesen befolyásolja a közöttük fennálló diabatikus csatolás, bár továbbra is elkülönülnek a nemzérus sajátértékhez tartozó sajátállapotoktól, amennyiben az időfejlődés adiabatikusan zajlik. Az előírt végállapot eléréséhez a kölcsönhatás paramétereinek időfüggését optimális módon választották meg [83], és megmutatták, hogy a folyamat a zérus sajátértékű altérben folyik. Egy későbbi munkában speciális impulzusalak választás mellett egy ötszintű atomi rendszer időfejlődésének analitikus kifejezését is megadták [84].

A STIRAP sémát atomokban és molekulákban megvalósítva azt találjuk, hogy a J momentumhoz tartozó energiaszintek mágneses alnívókra hasadnak szét, és ezek kölcsönhatása az alkalmazott koherens lézerterekkel meglehetősen bonyolult csatolást eredményez [85–87]. A hivatkozott munkákban megmutatták, hogy egy jól definiált kezdeti állapot esetén egy bizonyos, de tetszőlegesen megválasztható mágneses alnívóra vihető át a populáció.

Egy másik gyakorlati probléma a több, vagy akár folytonosan sok közbenső állapot létezése a kiinduló és a végállapot között [88–95]. A [88]-as hivatkozásban a folytonosan sok közbenső állapotot egyenközű diszkrét energiaszintek sokaságával modellezték, amelyek mindegyike külön csatolódott a kezdeti- és végállapot nívóihoz. Később kiderült, hogy ez a modell nem írja le megfelelően a folytonos esetet, és egy pontosabb modellt vezettek be [89]. A diszkrét esetet a [90]-es munkában elemezték részletesen. A [91–95]-ös publikációkban megmutatták, hogy a folytonos közbenső állapothalmazon keresztül is lehetséges a hatékony populáció-átvitel.

A következő pontban bevezetünk egy modellt, amelynek keretén belül vizsgáljuk az állapottervezés lehetőségét, és meghatározzuk az adiabatikus időfejlődés feltételeit. Majd, ezek teljesülése mellett, az alkalmazott lézerek paramétereinek függvényében meghatározzuk a végállapotot, és bebizonyítjuk, hogy azt előre tetszőlegesen megválaszthatjuk. Végül numerikus szimulációk során ellenőrizzük az időfejlődés adiabatikus voltát.

## 2.2.1. Az alkalmazott modell és a sötét állapotok meghatározása

Az általunk vizsgált többszintű atomi rendszerben STIRAP-szerű eljárást alkalmazunk a J=0 impulzusmomentumú kezdeti állapotból a J=1-es közbenső állapotokon keresztül a populáció J=2-es impulzusmomentumú mágneses alnívókra juttatására. A kidolgozott séma előnye a korábbi módszerekhez [76, 77] képest, hogy a gerjesztő lézerek rögzített elliptikus polarizációja miatt könnyebben realizálhatónak tűnik, mint a kétkomponensű szuperpozíciókat három különböző impulzussal előállító tripod konfiguráció, csak két impulzust használ három helyett, és nem csak két komponensű szuperpozíciók állíthatók elő vele, hanem tetszőleges háromkomponensűek. A kidolgozott módszer legfontosabb tulajdonsága, hogy a korábbi sémákkal ellentétben az egyes alnívók egyenkénti címzése nem szükséges, ugyanahhoz a célállapot-halmazhoz több kölcsönhatási út vezet, és ezek interferálnak. Az interferencia eredményeképp a gerjesztő lézerek relatív fázisa is szerepet kap a végállapot kialakításában. Az elliptikus polarizációk és a relatív fázis változtatásával a J=2 impulzus<br/>momentumhoz tartozó háromdimenziós altérben pontosan tervezhető a célállapot. A dekoherenciához vezető folyamatok a teljes kölcsönhatás során igen kis mértékben módosítják a rendszer állapotát, ezt a későbbiekben kvantitatívan is vizsgáljuk.

A vizsgált rendszer energiaszintjeinek diagramja a 2.12-es ábrán látható. Az energiaszintek elrendezése a görög  $\Lambda$  betűre emlékeztet, emiatt az ilyen rendszerek elnevezése  $\Lambda$ -típusú rendszer. A teljes atomi nívórendszer egy kölcsönható, hat szintből álló részrendszerét vizsgáljuk, mely a J=0, 1, és 2 impulzusmomentumú állapotok mágneses alnívóiból áll. Kezdetben a rendszer a J=0 alapállapotban található. Célunk az állapot átvitele a J=2-es állapot m=-2, 0, 2-es mágneses alnívóinak előírt szuperpozíciójába. Ennek eléréséhez egy STIRAP-szerű, populáció-



2.12. ábra. A vizsgált hatszintű A-rendszer. A  $|2,\pm1\rangle$  és  $|1,0\rangle$  szintek nem csatolódnak a többi szinthez, külön részrendszert alkotnak, és a kezdeti állapot választása folytán nem populálódnak a folyamat során. A többi nívó alkotja a vizsgált rendszert. A J=0 és J=2 szintek a J=1 szinteken keresztül csatolódnak a pumpa (p) és Stokes (S) lézerimpulzusok segítségével, azok jobbra illetve balra körkörösen polarizált (+/-) komponenseivel. Az egyes átmeneteknek megfelelő Rabi-frekvenciákat  $\Omega_{s\pm}$ -al és  $\Omega_{p\pm}$ -al jelöltük. Az impulzusokat kétfotonos rezonancia mellett alkalmazzuk, megengedve a J=1 szinten egy  $\Delta$  elhangolást. A kezdeti állapotban a teljes populáció a  $|0,0\rangle$  szinten található.

átvitelt végrehajtó folyamatot tervezünk. Két lézerimpulzussal hattatjuk kölcsön az atomot, mindkettő jobbra és balra körkörösen polarizált komponenseket is tartalmaz. A kölcsönhatáshoz tartozó, időfüggő Rabi-frekvenciákat az  $\Omega_{S\pm}$ ,  $\Omega_{p\pm}$  betűkkel jelöljük. Az S és p indexek a "Stokes" és "pumpa" impulzusoknak felelnek meg, ezek elnevezése történeti okokra vezethető vissza. A + és — indexek a jobbra és balra körkörösen polarizált komponenseket különböztetik meg. Ebben a kölcsönhatási elrendezésben kizárólag az m=-2, 0, 2 alnívók töltődhetnek be a végállapotban. A többi mágneses alnívó bekapcsolásához a kölcsönhatásba  $\pi$  polarizációjú gerjesztő lézerre is szükség lenne, ezt az esetet a disszertációban nem vizsgáljuk. A vázolt kölcsönhatás és nívórendszer megvalósítható neon atomokban [87]. A lézerek frekvenciáját, fázisát és polarizációját a kölcsönhatás során rögzített értéken tartjuk, kizárólag az amplitúdójuk változik.

A Rabi-frekvenciákat dipólközelítésben a gerjesztő klasszikus lézertér amplitú-

dója, irányultsága, valamint az átmenet dipólmomentuma határozza meg [96].

$$\Omega_{i\to f} = \frac{1}{\hbar} \langle \phi_f | d\boldsymbol{E} | \phi_i \rangle = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2j_i + 1}{2j_f + 1}} \langle j_f, 0 | j_i, 1, 0, 0 \rangle \int_0^\infty r^3 \mathrm{d}r R^*_{n_f j_f} R_{n_i j_i} \qquad (2.34)$$

$$\left(\mathcal{E}_{\pi}\langle j_f, m_f | j_i, 1, m_i, 0 \rangle + \mathcal{E}_{+}\langle j_f, m_f | j_i, 1, m_i, 1 \rangle + \right)$$

$$(2.35)$$

$$\mathcal{E}_{-}\langle j_f, m_f | j_i, 1, m_i, -1 \rangle \bigg), \tag{2.36}$$

ahol  $R_{n_f j_f}$  a  $n_f$ ,  $j_f$ ,  $m_f$  kvantumszámokhoz tartozó hullámfüggvény radiális része, hasonlóan  $R_{n_i j_i}$  az  $n_i$ ,  $j_i$ ,  $m_i$  kvantumszámokhoz tartozik,  $\mathcal{E}_{\pi}$ ,  $\mathcal{E}_{+}$ ,  $\mathcal{E}_{-}$  a lézertér különböző polarizációjú, pozitív frekvenciájú komponenseinek amplitúdója, és *e* az elemi töltés. A mágneses kvantumszámoktól függő részt különválasztjuk, a célból, hogy a különböző átmenetekhez tartozó Rabi-frekvenciák arányát megkapjuk. Az arányok meghatározása esetünkben a Stokes-impulzusoknál lényeges, mert ott ugyanahhoz a lézertér komponenshez az  $m_i$  kvantumszámtól függően két különböző Rabi-frekvencia tartozik. A Stokes impulzus esetén

$$\Omega_{S+} = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2 \cdot 2 + 1}{2 \cdot 1 + 1}} \langle 1, 0 | 2, 1, 0, 0 \rangle \int_0^\infty r^3 \mathrm{d}r R^*_{n_f, 2} R_{n_i, 1} \mathcal{E}_{S+}, \qquad (2.37a)$$

$$\zeta_{m_f}^{m_f-1} = \Omega_{S+}(2, m_f - 1; 1, m_f) / \Omega_{S+} = \langle 1, m_f | 2, 1, m_f - 1, 1 \rangle, \qquad (2.37b)$$

$$\Omega_{S-} = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2 \cdot 2 + 1}{2 \cdot 1 + 1}} \langle 1, 0 | 2, 1, 0, 0 \rangle \int_0^\infty r^3 \mathrm{d}r R^*_{n_f, 2} R_{n_i, 1} \mathcal{E}_{S-}, \qquad (2.37c)$$

$$\zeta_{m_f}^{m_f+1} = \Omega_{S-}(2, m_f+1; 1, m_f) / \Omega_{S-} = \langle 1, m_f | 2, 1, m_f+1, -1 \rangle, \qquad (2.37d)$$

és hasonlóan a pumpa impulzus esetén

$$\Omega_{p+} = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2 \cdot 0 + 1}{2 \cdot 1 + 1}} \langle 1, 0 | 0, 1, 0, 0 \rangle \int_0^\infty r^3 \mathrm{d}r R^*_{n_f, 1} R_{n_i, 0} \mathcal{E}_{p+}, \qquad (2.38a)$$

$$\xi_0^1 = \Omega_{p+}(0,0;1,1) / \Omega_{p+} = \langle 1,1|0,1,0,1\rangle, \qquad (2.38b)$$

$$\Omega_{p-} = \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2 \cdot 0 + 1}{2 \cdot 1 + 1}} \langle 1, 0 | 0, 1, 0, 0 \rangle \int_0^\infty r^3 \mathrm{d}r R^*_{n_f, 1} R_{n_i, 0} \mathcal{E}_{p-}, \qquad (2.38c)$$

$$\xi_0^{-1} = \Omega_{p+}(0,0;1,-1)/\Omega_{p+} = \langle 1,-1|0,1,0,-1\rangle.$$
(2.38d)

A  $|0;0\rangle \leftrightarrow |1;\pm1\rangle$  átmenetek Rabi-frekvenciáit az  $\Omega_p(0,0;1,\pm1) = \xi_0^{\pm 1}\Omega_{p\pm}$  kifejezés adja meg. Esetünkben az együtthatók értéke  $\xi_0^{+1} = \xi_0^{-1} = 1$ . A jobbra körkörösen polarizált Stokes impulzus az  $|1;-1\rangle \leftrightarrow |2;-2\rangle$  és az  $|1;+1\rangle \leftrightarrow |2;0\rangle$  csatolásokat hozza létre. A Rabi-frekvenciák értéke  $\Omega_{S+}(2,-2;1,-1)$  és  $\Omega_{S+}(2,0;1,+1)$ . Hasonlóan a balra körkörösen polarizált komponenshez az  $|1;-1\rangle \leftrightarrow |2;0\rangle$  és  $|1;+1\rangle \leftrightarrow$  $|2;+2\rangle$  csatolások tartoznak, és a megfelelő Rabi-frekvenciák  $\Omega_{S-}(2,0;1,-1)$  és  $\Omega_{S-}(2,+2;1,+1)$ . A Rabi-frekvenciák arányát meghatározó együtthatók értékei a (2.37)-es egyenletekben  $\zeta_{-1}^{-2} = \zeta_1^2 = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}$  és  $\zeta_{-1}^0 = \zeta_1^0 = \frac{1}{\sqrt{10}}$ . Összegezve, a Rabi-frekvenciákat az alábbi módon paraméterezhetjük:

$$\Omega_{p+}(0,0;1,-1) = A \exp i\varphi_A,$$
  

$$\Omega_{p-}(0,0;1,+1) = B \exp i\varphi_B,$$
  

$$\Omega_{S+}(2,-2;1,-1) = q C \exp i\varphi_C,$$
  

$$\Omega_{S+}(2,0;1,+1) = C \exp i\varphi_C,$$
  

$$\Omega_{S-}(2,0;1,-1) = D \exp i\varphi_D,$$
  

$$\Omega_{S-}(2,+2;1,+1) = q D \exp i\varphi_D,$$

ahol  $q = \sqrt{6}$ . A  $\varphi_X$  fázisok (X = A, B, C, D) időfüggetlenek, az amplitúdó A, B, C, D időfüggő burkológörbéi valós nemnegatív értékűek. A lézerimpulzusok elhangolását a pontos rezonanciától  $\Delta$  mértékben megengedjük, de megköveteljük, hogy a kétfotonos rezonancia feltétele teljesüljön. A kölcsönhatást leíró Hamiltonoperátor a  $\{|0,0\rangle, |1,-1\rangle, |1,+1\rangle, |2,-2\rangle, |2,0\rangle, |2,+2\rangle\}$  bázisban az alábbi alakban írható:

$$H = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & Ae^{i\varphi_A} & Be^{i\varphi_B} & 0 & 0 & 0 \\ Ae^{-i\varphi_A} & \Delta & 0 & qCe^{i\varphi_C} & De^{i\varphi_D} & 0 \\ Be^{-i\varphi_B} & 0 & \Delta & 0 & Ce^{i\varphi_C} & qDe^{i\varphi_D} \\ 0 & qCe^{-i\varphi_C} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & De^{-i\varphi_D} & Ce^{-i\varphi_C} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & qDe^{-i\varphi_D} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} .$$
(2.39)

Az állapot időfejlődését a Schrödinger-egyenlet határozza meg,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle.$$
 (2.40)

A STIRAP folyamatokban a Hilbert teret sötét és világos alterekre lehet bontani, attól függően, hogy történik-e az altérbeli sajátállapotokból fotonemisszióval vagy abszorpcióval járó átmenet. Az alterek az időfüggő Hamilton-operátor pillanatnyi sajátállapotaiból állnak. A sötét állapotokhoz a zérus sajátérték tartozik, és nincs átfedésük a gerjesztett (J=1) állapotokkal [35]. A világos állapotok nemzérus sajátértékhez tartozó sajátállapotok, és van átfedésük a gerjesztett állapotokkal. Az adiabatikus időfejlődés határesetében a kezdetben sötét állapotban lévő rendszer a folyamat során nem lép ki a sötét altérből. A továbbiakban a Hamilton-operátor 2.39 kifejezését vizsgáljuk. Először a Hilbert-tér sötét és világos altereit határozzuk meg. Egy  $U_1$ , az abszolút fázisokat tartalmazó diagonális unitér transzformációval a Hamilton-operátorban az egymástól független fázisok száma egyre csökkenthető:

$$H_{1} = U_{1}HU_{1}^{\dagger} = \frac{1}{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & A & Be^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ A & \Delta & 0 & qC & D & 0 \\ Be^{-i\varphi} & 0 & \Delta & 0 & C & qD \\ 0 & qC & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D & C & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & qD & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
(2.41)

ahol

$$U_{1} = \operatorname{diag}\left[e^{-i(\varphi_{A}+\varphi_{C})}, e^{-i\varphi_{C}}, e^{i(\varphi_{D}-2\varphi_{C})}, 1, e^{i(\varphi_{D}-\varphi_{C})}, e^{i(2\varphi_{D}-2\varphi_{C})}\right], \qquad (2.42)$$

és az egyetlen megmaradó fáziskombináció

$$\varphi = \varphi_B - \varphi_A + \varphi_C - \varphi_D \,. \tag{2.43}$$

A későbbiekben látni fogjuk, hogy ez a fázisfaktor lényeges, befolyásolja a végállapot betöltöttségi szintjeit.

A következő lépés egy olyan időfüggő unitér transzformáció megtalálása, amely egy olyan új bázist definiál, ahol a sötét és világos alterek elkülönülnek. Jacobiforgatások és diagonális unitér transzformációk jól megválasztott egymásutánját hattatva egy olyan  $\tilde{H}_1$  Hamilton-operátort kapunk, amelynek két sora és két oszlopa csak 0 elemeket tartalmaz:

$$\tilde{H}_1 = U H_1 U^{\dagger} , \qquad (2.44)$$

ahol

$$U = U_4 U_3 U_2, (2.45)$$

$$U_{2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{y}{qx} & \frac{yk}{x} & -\frac{yk^{2}}{qx} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{y^{2}k}{qx} & \frac{1}{x} & \frac{y^{2}k^{3}}{qx} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{yk^{2}}{q} & 0 & -\frac{y}{q} \end{bmatrix}, \qquad (2.46)$$

$$U_3 = \text{diag}[\exp i\xi, 1, 1, 1, \exp i\zeta, 1], \qquad (2.47)$$

$$U_{4} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\sin \beta \sin \alpha & 0 & 0 & 0 & \cos \beta & \sin \beta \cos \alpha \\ -\cos \beta \sin \alpha & 0 & 0 & 0 & -\sin \beta & \cos \beta \cos \alpha \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

ahol az alábbi jelöléseket használtuk:

$$k = C/D, \qquad (2.49a)$$

$$x = \sqrt{k^4 + k^2 q^2 + 1} / \sqrt{k^4 + 1}, \qquad (2.49b)$$

$$y = -q/\sqrt{k^4 + 1}, \qquad (2.49c)$$

$$\tan \alpha = \frac{(k^4 + 1)yD}{\sqrt{A^2k^2 + B^2 - 2ABk\cos\varphi}},$$
 (2.49d)

$$\tan \beta = -\frac{y}{x} \cos \alpha \sqrt{\frac{A^2 + B^2 k^6 + 2ABk^3 \cos \varphi}{A^2 k^2 + B^2 - 2ABk \cos \varphi}}, \qquad (2.49e)$$

$$\xi = \arctan\left(\frac{B\sin\varphi}{Ak - B\cos\varphi}\right), \qquad (2.49f)$$

$$\zeta = \xi + \arctan\left(\frac{Bk^3 \sin\varphi}{A + Bk^3 \cos\varphi}\right).$$
 (2.49g)

A  $\tilde{H}_1$  mátrix két zérus sora és oszlopa azt jelentik, hogy az U transzformáció két sötét állapotot generál. Az elsőt az  $U_2$  transzformáció negyedik sora adja meg,

$$|D_{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{C^{4} + D^{4} + q^{2}C^{2}D^{2}}} \begin{bmatrix} 0\\ 0\\ 0\\ D^{2}\\ -qCD\\ C^{2} \end{bmatrix}.$$
 (2.50)

A  $|D_1\rangle$  állapot által kifeszített egydimenziós alteret az  $U_3$  és  $U_4$  transzformációk nem változtatják meg, és ez az állapot a J=2 impulzusmomentumú mágneses alnívók szuperpozíciójából áll. Az U transzformáció hatodik sora adja meg a második sötét

állapotot,

$$|D_2\rangle = \begin{bmatrix} -\cos\beta\sin\alpha\exp{i\xi} & 0 \\ 0 & 0 \\ -\frac{y^2k}{qx}\sin\beta\exp{i\zeta} + \frac{yk^2}{q}\cos\beta\cos\alpha \\ -\frac{1}{x}\sin\beta\exp{i\zeta} & -\frac{1}{y}\cos\beta\cos\alpha \end{bmatrix}.$$
 (2.51)

A  $|D_1\rangle$  és  $|D_2\rangle$  zérus sajátértékhez tartozó állapotok valóban sötét állapotok, mivel nincs komponensük a gerjesztett J=1 állapotok között.

Ahhoz, hogy a sötét és világos alterek elemzését teljessé tegyük, szükséges lenne a  $\tilde{H}_1$  Hamilton-operátor diagonalizálása, így megkapnánk a világos állapotok kifejezését is. Ez azonban meglehetősen bonyolult képletekhez vezet, esetünkben elegendő azt megmutatni, hogy  $\tilde{H}_1$  nemzérus 4 × 4-es blokkjának sajátértékei 0tól különbözőek, és a hozzájuk tartozó sajátállapotok világos állapotok. A világos altérhez tartozó sajátértékeket analitikusan meghatározhatjuk,

$$\varepsilon_{1\dots4}/\hbar = \frac{1}{2}\Delta \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{A^2 + B^2 + (1+q^2)(C^2 + D^2) + \frac{1}{2}\Delta^2 \pm \sqrt{w}}, \text{ ahol} \qquad (2.52)$$
$$w = 8BACD\cos\phi + (C^2 + D^2)^2 + (2q^4 - 2q^2)(C^2 - D^2)^2 + (A^2 + B^2)^2$$

$$+2(1-q^2)(C^2B^2 - A^2C^2 + A^2D^2 - B^2D^2), (2.54)$$

és ezek láthatóan 0-tól különbözőek. Hasonlóan a sajátvektorok komponensei is kiszámíthatóak, és ezt megtéve ellenőriztük, hogy speciálisan választott amplitúdóértékektől eltekintve a J=1 szintek valóban populáltak. Összefoglalva kijelenthetjük, hogy a vizsgált rendszernek két, a (2.50) és a (2.51) egyenletekkel megadott sötét, és négy világos állapota van. A sötét altér degenerált, így gondosan kell eljárni az időfejlődés meghatározása során [76, 83, 84]. A degenerált sötét állapottér esetében általában a sötét állapotokat csatoló nemadiabatikus csatolások jelennek meg, erre a következő, 2.2.2-es pontban részletesen kitérünk. A (2.40)-es Schrödinger-egyenletet a (2.42)-es és a (2.45)-ös kifejezésekkel megadott  $U_1$  és U transzformációkkal időfüggő bázisba transzformálhatjuk az (1.60)-as egyenlethez hasonlóan,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}\rangle = \tilde{H}|\tilde{\psi}\rangle, \qquad (2.55)$$

az alábbi összefüggések által:

$$\begin{aligned} &|\tilde{\psi}\rangle &= UU_1 |\psi\rangle, \\ &\tilde{H} &= \tilde{H}_1 + i\hbar \dot{U} U^{\dagger}, \end{aligned}$$
(2.56)

ahol  $H_1$  definícióját a (2.44)-es kifejezés adja. Ebben a formában a sötét és világos alterek különválnak. Mivel a célunk egy STIRAP-szerű populáció-átviteli módszer kifejlesztése, a továbbiakban a sötét állapottérre koncentrálunk. A világos állapotok kifejezésére akkor lehet szükség, ha a sötét és világos állapotok közötti csatolást vizsgáljuk, az adiabatikusság feltételének meghatározása céljából.

#### 2.2.2. Adiabatikus populáció-átvitel

Egy további megkötést teszünk, a pumpa- és Stokes-impulzus polarizációját konstansnak választjuk, rögzítjük az A: B és C: D arányokat. Ez a megkötés egyrészt megkönnyíti a fizikai megvalósítást, másrészt a számításokat is egyszerűsíti. Ekkor a (2.49a) egyenlettel definiált k paraméter időfüggetlenné válik, emiatt a  $|D_1\rangle$  sötét állapot konstans lesz. A sötét állapotok nem keverednek, mivel  $\langle D_2 | \dot{D}_1 \rangle = 0$ , így a  $\tilde{H}$  Hamilton-operátor mátrixa a sötét állapotok alterében egy 2 × 2-es nullmátrix.

A  $|D_2\rangle$  sötét állapotnak mind a J=0, mint a J=2 impulzusmomentumú mágne-

ses alnívókon van betöltöttsége, így ezt az állapotot választjuk a populáció-átvitel végrehajtására. A  $|D_1\rangle$  állapot nem vesz részt a tervezett folyamatban. Kezdetben a rendszer a  $|0;0\rangle$  állapotban található, így a kölcsönhatás kezdetén a  $|D_2\rangle$  állapotnak ezzel egybe kell esnie, ami a $C^2+D^2\gg A^2+B^2$ feltétellel fejezhető ki, azaz a C és D impulzusnak előbb kell érkeznie, mint az A-nak és B-nek. Bár a világos állapotok alakját explicit módon nem adtuk meg, biztosak lehetünk benne, hogy a kezdeti állapotban nincs járulékuk, mivel tudjuk, hogy merőlegesek a sötét állapotokra, és  $|D_2\rangle$  megegyezik kezdetben a  $|0;0\rangle$  állapottal, így a  $|0;0\rangle$  kezdeti állapotban a világos altérnek nem lehet járuléka. Ezzel beláttuk, hogy a kezdeti állapot a sötét altérben található. Ez a STIRAP folyamat véghezvitelének egy szükséges feltétele. Célul tűztük ki, hogy a rendszer végállapota a J=2, m=-2, 0, +2 szintek szuperpozíciója legyen. A  $|D_2\rangle$  sötét állapotnak emiatt a kölcsönhatás után a  $|0;0\rangle$ szinten betöltetlennek kell lennie. Ehhez elégséges, ha $C^2+D^2\ll A^2+B^2$ teljesül, azaz a C és D impulzus előbb cseng le, mint az A és B. Az impulzusamplitúdókra kapott fenti megkötésekből következően sikeres populáció-átvitelt a pumpa és Stokes impulzusok szokásoshoz képest fordított sorrendjével érhetünk el, hasonlóan az eredeti STIRAP eljáráshoz, azaz ha a Stokes impulzus megelőzi a pumpát.

Következő lépésként a [86]-os hivatkozásban szereplő, az adiabatikus populációátvitel sikeres végrehajtására vonatkozó feltételek teljesülését vizsgáljuk meg. Az első követelmény az, hogy kezdetben, kikapcsolt pumpa impulzus mellett a rendszer állapota egyezzen meg az egyik sötét állapottal. A második követelmény, hogy egészen a pumpa impulzus bekapcsolásáig maradjon is ebben az állapotban. E két kitétel teljesül, ahogy korábban láttuk, a  $|D_2\rangle$  sötét állapot megfelelő. A harmadik követelmény, hogy kikapcsolt Stokes impulzus mellett a rendszer végállapota egybeessen valamelyik sötét állapottal. Ez esetünkben így van, a  $|D_2\rangle$  állapot a végállapottal egyezik meg ekkor. A negyedik követelmény, hogy az átmenet adiabatikusan történjen. Degenerált sötét altér esetén ezen kívül szükséges az is, hogy a populáció-átvitelhez használt sötét állapotok folytonosan összekapcsolhatóak legyenek a kölcsönhatás során. Mivel esetünkben a sötét állapottér elemei nem keverednek, és csak a  $|D_2\rangle$  sötét állapotot használjuk, ez a feltétel teljesül. A továbbiakban az adiabatikusság teljesülését vizsgáljuk.

A vizsgált hat szintű rendszer úgy is tekinthető, mint négy csatolt háromszintű rendszer: az A = 0 és C = 0 esetben a B és D impulzusok egy háromszintű STIRAP folyamatot keltenek a  $|0;0\rangle$ ,  $|1;+1\rangle$  és  $|2;0\rangle$  szintek között. Az A = 0 és D = 0esetben a B és C impulzusokhoz rendelhető egy háromszintű STIRAP a  $|0;0\rangle$ ,  $|1;+1\rangle$  és  $|2;+2\rangle$  szintek részvételével. A B = 0, C = 0 és B = 0, D = 0 esetek hasonlóak. Az A, B, C, D amplitúdó burkoló függvények alábbi paraméterezése kiemeli ezt az értelmezést:

$$A = R_p \cos \eta, \tag{2.57a}$$

$$B = R_p \sin \eta, \qquad (2.57b)$$

$$C = \frac{R_s}{\sqrt{1+q^2}} \cos\nu, \qquad (2.57c)$$

$$D = \frac{R_s}{\sqrt{1+q^2}} \sin \nu, \qquad (2.57d)$$

ahol az  $\eta$  és  $\nu$  konstans szögparaméterek a  $[0, \pi/2]$  intervallumba esnek, és az egyes lézerimpulzusok polarizációját határozzák meg. Az  $R_p$ ,  $R_s$  burkolók időfüggőek. Amennyiben  $\eta$  és  $\nu$  értékei a 0,  $\pi/2$  halmazból veszik fel értéküket, a hatszintű rendszer egy háromszintű  $\Lambda$  rendszerre egyszerűsödik. Tetszőleges szögparaméterek esetén csatolás létesül a négy háromszintű STIRAP-folyamat között.

Ha az időfejlődés adiabatikus, akkor a sötét és világos állapotok nem keverednek egymással a kölcsönhatás ideje alatt [76, 83, 84]. Emiatt, ha kezdetben a rendszer sötét állapotban volt, abban is marad, és a  $|1,\pm1\rangle$  gerjesztett állapotok csak minimális mértékben töltődnek be a folyamat során. Amennyiben az  $\eta$ ,  $\nu$  paraméterek a 0,  $\pi/2$  értékeket veszik fel, az adiabatikusság feltétele egyszerű, ugyanaz, mint a háromszintű STIRAP esetén:

$$\left| \dot{\vartheta} \frac{\sin^2 \varrho}{\cos \varrho} \right| \ll \frac{1}{2} \Omega, \qquad \left| \dot{\vartheta} \frac{\cos^2 \varrho}{\sin \varrho} \right| \ll \frac{1}{2} \Omega,$$
 (2.58)

ahol  $\Omega = \sqrt{\Omega_p^2 + \kappa^2 \Omega_S^2}$ , tan  $\vartheta = \Omega_p / \kappa \Omega_S$ , ( $\kappa = 1, q$ ), és tan  $2\varrho = \Omega / \Delta$ . E feltételek akkor teljesülnek, ha nagy és hosszú impulzusamplitúdókat használunk, és azok folytonosan változnak, és a pumpa és a Stokes impulzusoknak megfelelően hosszú ideig közösen jelen kell lenniük, biztosítva a  $\vartheta$  paraméter lassú változását. A hatszintű rendszer teljes elemzéséhez a  $|B_l\rangle$ ,  $l = 1 \dots 4$  világos állapotok explicit kifejezésére lenne szükség, ezek a (2.41) Hamilton-operátor nemzérus sajátértékeihez tartozó sajátvektorok. Segítségükkel az adiabatikusság feltétele az (1.62)-es egyenlet alapján a

$$|\langle D_2 | \dot{B}_l \rangle| \ll |\varepsilon_l - \varepsilon_0|/\hbar, \qquad l = 1...4$$
(2.59)

alakban írható, ahol  $\varepsilon_l$  a  $|B_l\rangle$  állapothoz tartozó sajátenergia, a (2.52) képletek szerint, és  $\varepsilon_0 = 0$ , amely a  $|D_2\rangle$  sötét állapothoz tartozik. E négy egyenlet az impulzus burkológörbéjére vonatkozóan a szükséges és elégséges feltételét adja az adiabatikusságnak. Bár a  $|B_l\rangle$  világos állapotok analitikus kifejezését nem adtuk meg, ezek az egyenletek az adiabatikusság mértékének numerikus ellenőrzésére jól használhatóak, és a továbbiakban bemutatott numerikus szimulációk során ezt meg is tettük.

Az alapján, hogy az adiabatikusság mértéke a világos állapotokban jelentkező betöltöttség hiányával jellemezhető, azt gondolhatnánk, hogy ha önmagában a négy csatolt STIRAP folyamat egyike sem populálná a világos állapotokat, akkor bárhogyan is csatoljuk őket, a kapott csatolt folyamat sem lesz erre képes, és az is adiabatikusan fog viselkedni. Ez az adiabatikusság egy elégséges feltétele, melyet numerikus szimulációkkal ellenőriztünk.



2.13. ábra. A betöltöttségek numerikus számításokkal kapott időfüggése, Gaussgörbe burkolójú impulzusok, rezonáns gerjesztés ( $\Delta = 0$ ) esetén. Az impulzusalakok a következők voltak:  $R_p = 10 \exp[-((t - 1.6)/2.8)^2]$ ,  $R_S = 10\sqrt{1 + q^2} \exp[-((t + 1.6)/2.8)^2]$ ; a polarizációt jellemző szögértékek  $\eta = 0.5$ ,  $\nu = 1.04$  voltak; a relatív fázist  $\varphi = 3.34$ -nek választottuk. Az időt – a Rabi-frekvenciákhoz hasonlóan – dimenziótlan egységekben ábrázoltuk.

A 2.13 és a 2.14 ábrákon a betöltöttségek időfejlődését ábrázoltuk két paraméterhalmaz esetén, amelyek kizárólag a  $\varphi$  relatív fázisban különböznek. A szimulációt az időfüggő Schrödinger-egyenlet negyedrendű Runge-Kutta módszerrel végzett numerikus integrálásával végeztük. A végállapot populációi,  $f_1$ -el,  $f_2$ -vel és  $f_3$ -al jelölve az ábrán, különböznek a két esetben. A relatív fázisnak a végállapotbeli szintek betöltöttségét is módosító hatása van. Ezt a fázisfüggő jelenséget az azonos szintre populációt átvivő csatolt háromszintű STIRAP folyamatok kvantuminterferenciájaként értelmezhetjük.

Az adiabatikusság feltételét a két előző példában használt paraméterek mellett a (2.59) kifejezések kiszámításával ellenőriztük. Az eredmények a 2.15-ös ábrán láthatóak. Azokban a tartományokban, ahol kölcsönhatás történik, azaz a pumpa és Stokes impulzusok együttesen jelen vannak, az adiabatikusság feltételei na-



2.14. ábra. A betöltöttségek numerikus számításokkal kapott időfüggése, más paraméterekkel rendelkező Gauss-görbe burkolójú impulzusok esetén. Az impulzusok burkolója megegyezik a 2.13-as ábrán láthatóval, kivéve azt, hogy itt  $\varphi = 4.74$ .

gyon jól teljesülnek. Az adiabatikus folyamattól való eltérést a vizsgált hatszintű STIRAP-folyamatban mérhetjük másképp is. A folyamat során a világos altérbe kerülő populáció maximuma jól jellemzi, mekkora része az állapotnak az, ami dekoherencia folyamatokban részt vehet, és fotonemisszióhoz vezethet. A két, példának választott esetben ez a szám 0.014 és 0.011 volt. E kis értékek azt mutatják, hogy a sötét és világos alterek keveredése elhanyagolható, így az időfejlődés adiabatikus módon zajlik. Definiálhatjuk a populáció-átvitel hatásfokát is, mint a végállapot átfedését a J=2-es mágneses alnívókkal. Ez az érték a bemutatott két folyamat esetén 99.98%, illetve 99.97% volt. Összességében kijelenthetjük, hogy ténylegesen végrehajtható nemtriviális, azaz háromszintű esetre nem visszavezethető STIRAP folyamat a vizsgált hatszintű rendszerben.



2.15. ábra. A 2.13-as ábrán látható folyamat impulzusainak burkológörbéje látható a felső ábrán, és a pillanatnyi adiabatikusság mértéke az alsó ábrán, a négy világos állapotra kiszámítva. Az ábrázolt mennyiség az  $|\varepsilon_l - \varepsilon_0|/|\langle D_2|\dot{B}_l\rangle|$  arány, l = 1...4. Mivel a sajátállapotok és a kiszámított mátrixelemek páronként egyeznek, ezért csak két görbe látható. Az időt és frekvenciát dimenziótlan egységekben ábrázoltuk.

### 2.2.3. Az elérhető végállapotok halmaza

A rendszer végállapotát az adiabatikus határesetben meghatározhatjuk a (2.42)-es és a (2.45)-ös egyenletekkel definiált U és  $U_1$  unitér transzformációk segítségével. A  $|\psi_i\rangle$  kezdeti és  $|\psi_f\rangle$  végállapotot összekapcsoló kifejezés

$$|\psi_f\rangle = U_1^{\dagger} U_f^{\dagger} U_i U_1 |\psi_i\rangle, \qquad (2.60)$$

feltéve, hogy a  $|\psi_i\rangle$  kezdeti állapot a sötét altérben található. Esetünkben  $|\psi_i\rangle = |0;0\rangle$ , ezt behelyettesítve kapjuk a végállapot kifejezését,

$$|\psi_f\rangle = \begin{bmatrix} 0\\ 0\\ (-\frac{y^2k}{qx}\sin\beta e^{-i\zeta} + \frac{yk^2}{q}\cos\beta)e^{-i(\varphi_A + \varphi_C - \xi)}\\ \frac{1}{x}\sin\beta e^{-i(\varphi_A + \varphi_D - \xi)}\\ (-\frac{y^2k^3}{qx}\sin\beta e^{-i\zeta} - \frac{y}{q}\cos\beta)e^{-i(\varphi_A - \varphi_C + 2\varphi_D - \xi)} \end{bmatrix}, \quad (2.61)$$

ahol a  $k, x, y, \beta, \zeta$  és  $\xi$  változók értékét a (2.49)-es egyenletek határozzák meg.  $|\psi_f\rangle$  nem függ az impulzusok alakjától vagy amplitúdójától. Ez mutatja, hogy a kifejlesztett módszer ezen kísérleti paraméterek kis fluktuációival, pontatlanságával szemben robusztus, egészen addig, amíg az adiabatikusság feltételei fennállnak. Az is kitűnik, hogy az alkalmazott impulzusok relatív fázisviszonyai nem csak a végállapotban keletkező szuperpozíció komponenseinek fázisát határozzák meg, hanem beleszólnak az egyes mágneses alnívók betöltöttségi szintjeibe is.

Ahhoz, hogy e módszert a J=2 impulzusmomentumú, m=-2, 0, 2 mágneses kvantumszámú állapotok tetszőleges szuperpozíciójának előállítására használhassuk, még meg kell mutatnunk, hogy minden ilyen végállapot elérhető. Tegyük fel,
hogy az előírt végállapot alakja

$$|\psi_c\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & c_1 e^{i\varphi_1} & c_2 e^{i\varphi_2} & c_3 e^{i\varphi_3} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}},$$
 (2.62)

és találtunk egy impulzusparaméter halmazt, ahol a fázisok értéke  $\varphi_A = 0$ ,  $\varphi_B = \varphi$ ,  $\varphi_C = 0$ ,  $\varphi_D = 0$ , és a végállapot betöltöttségi szintjei a célállapotéval megegyeznek, valamint teljesül a

$$\varphi_1 + \varphi_3 - 2\varphi_2 \equiv \arg |\psi_f\rangle_4 + \arg |\psi_f\rangle_6 - 2\arg |\psi_f\rangle_5 \mod 2\pi \tag{2.63}$$

összefüggés. Ekkor az impulzusok fázisait megfelelően megváltoztatva a

$$\varphi_A = \arg |\psi_f\rangle_5 - \varphi_2, \qquad (2.64a)$$

$$\varphi_B = \varphi + \arg |\psi_f\rangle_6 - \varphi_3,$$
 (2.64b)

$$\varphi_C = \arg |\psi_f\rangle_5 - \arg |\psi_f\rangle_6 + \varphi_3 - \varphi_2, \qquad (2.64c)$$

$$\varphi_D = 0, \qquad (2.64d)$$

módon elérhetjük, hogy a végállapot egybeessen az előírt célállapottal. A (2.43)as egyenlettel definiált  $\varphi$  fázis invariáns ezzel a transzformációval szemben, így a betöltöttségi szinteket a fázisok fenti módosítása nem változtatja meg. Így ahhoz, hogy eldöntsük, hogy minden (2.62) alakú célállapot elérhető-e, elegendő azt megvizsgálni, hogy az összes lehetséges ( $c_1, c_2, c_3$ ) betöltöttségi szint és a

$$\delta = \varphi_1 + \varphi_3 - 2\varphi_2 \mod 2\pi \tag{2.65}$$

paraméter tetszőleges értéke elérhető-e olyan impulzusokkal, amelyek fázisaira  $\varphi_A = \varphi_C = \varphi_D = 0$  teljesül.

A  $(c_1, c_2, c_3)$  amplitúdók kielégítik a  $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1$  normálási feltételt. Ez a

számhármas egy nyolcadgömb felületének feleltethető meg, mivel mindhárom szám nemnegatív. A felszíni pontokat a  $\theta \in [0, \pi/2]$  és  $\chi \in [0, \pi/2]$  szögekkel paraméterezhetjük, így

$$c_1 = \cos\theta, \qquad (2.66a)$$

$$c_2 = \sin\theta\cos\chi, \qquad (2.66b)$$

$$c_3 = \sin\theta \sin\chi \,. \tag{2.66c}$$

Amennyiben rögzítjük az  $R_p$  és  $R_S$  burkológörbéket oly módon, hogy az adiabatikusság feltétele teljesüljön, három szabadon változtatható paraméter marad: az  $\eta$  és  $\nu$  polarizációk, illetve az impulzus-fázisok  $\varphi$  kombinációja. Az elérendő végállapot a  $(\theta, \chi, \delta)$  számhármassal jellemezhető. A populáció-átviteli folyamat az  $(\eta, \nu, \varphi)$  ponthármast a  $(\theta, \chi, \delta)$  értékekhez rendeli. Amennyiben a hozzárendelt pontok kitöltik a  $[0 \dots \pi/2, 0 \dots \pi/2, 0 \dots 2\pi]$  téglatestet, elmondhatjuk, hogy az összes lehetséges célállapot elérhető megfelelően választott  $(\eta, \nu, \varphi)$  paraméterekkel, majd elvégezve a (2.64) transzformációt az impulzusok fázisán.

Az  $\eta$ ,  $\nu$  és  $\varphi$  paramétereket 0.022 lépésközzel végigpásztázva a teljes tartományukban elvégeztük a populáció-átvitel szimulációját az időfüggő Schrödingeregyenlet numerikus integrálásával. A pumpa és Stokes impulzusok burkolóját az  $R_p = 15 \exp[-((t - 1.8)/2.82)^2]$  és  $R_S = 15\sqrt{1 + q^2} \exp[-((t + 1.8)/2.82)^2]$  függvények szerint választottuk meg. Ez a választás teljesíti az adiabatikusságra a (2.58)as egyenlettel megadott szükséges feltételt a négy  $\eta, \nu = 0, \pi/2$  polarizáció kombináció esetén. A végállapotot jellemző ( $\theta, \chi, \delta$ ) pontok által kitöltött térrészt a  $\delta$ paraméter szerint 0.1 széles szeletekre vágtuk, és minden szeletre külön ellenőriztük, hogy teljesen ki van-e töltve pontokkal. Néhány szelet a 2.16, 2.17, 2.18, 2.19, 2.20 és 2.21-es ábrákon látható. Kitöltöttségük teljes és közel egyenletes. A végrehajtott numerikus ellenőrzés alapján kijelenthetjük, hogy a teljes célállapot-tartomány az



2.16. ábra. Ezen, és a további 5 ábrán az elérhető végállapotok halmazát ábrázoltuk. Az összes lehetséges állapot halmaza egy téglatest, melynek pontjait a  $(\theta, \chi, \delta)$ paraméterek jellemzik. Az ábrán látható pontok egy-egy elérhető állapotot jelölnek. Egy ábrán a téglatest egy szeletét ábrázoljuk csak, itt a  $\delta = 0.30 \pm 0.05$  paraméterű szelet látható. Az ábrázolt pontok a (2.40)-es Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásaihoz tartoznak, rögzített impulzusalak mellett, különböző polarizáció és fázisértékeknél. Az ábrázolás célja, hogy numerikus bizonyítását adjuk annak, hogy tetszőleges végállapot elérhető, azaz a teljes téglatest térfogatot kitöltik az ábrázolt pontok.



2.17. ábra. A 2.16 ábrához hasonló végállapot tartomány, amely a  $\delta=2.4\pm0.05$  paraméterértékhez tartozik.



2.18. ábra. A $\delta=3.2\pm0.05$ értékhez tartozó szelet.



2.19. ábra. A 2.18 ábrával egyező szelet, azonban numerikus helyett analitikus módon számítva a (2.61)-es egyenlet alapján, kisebb lépésközzel.



2.20. ábra. A $\delta=4.5\pm0.05$ értékhez tartozó numerikusan számított végállapot tartomány.



2.21. ábra. A $\delta=6.00\pm0.05$ értékhez tartozó numerikusan számított végállapot tartomány.

ismertetett populáció-átviteli folyamattal elérhető.

A teljes paramétertartományon futtatott numerikus szimulációkat arra is felhasználtuk, hogy a numerikus és analitikus eredményeket összehasonlítsuk. Ez alkalmas az adiabatikusság feltételének ellenőrzésére, mivel az analitikus eredmények az adiabatikus határesetben igazak. A végállapotot jellemző ( $\theta, \chi, \delta$ ) paraméterekben mért eltérés minden esetben kicsi volt, 1% alatti, mutatva, hogy az alkalmazott  $R_p$  és  $R_S$  burkológörbék jó közelítéssel adiabatikus folyamatot valósítanak meg tetszőleges polarizáció és fázisértékek mellett. Az adiabatikusság egy másik mérőszáma a világos állapotokban mért maximális betöltöttség a folyamat során. Ez minden esetben igen alacsony volt, 0.006 alatti. Emellett a (2.59) feltétel teljesülését is ellenőriztük.

Összegezve, a négy különböző háromszintű A-részrendszerben végbemenő STI-RAP folyamatra külön-külön megadott adiabatikussági feltétel valóban elégséges volt ahhoz, hogy a csatolt folyamatok is adiabatikusan menjenek végbe, így a részfolyamatok adiabatikussága egy elégséges feltételt ad. A numerikus és analitikus eredmények felhasználásával bebizonyítottuk, hogy az összes lehetséges célállapot elérhető az ismertetett STIRAP-szerű populáció-átviteli módszerrel, és az időfejlődés adiabatikus módon zajlik.

Az ismertetett eredmények bekerültek összefoglaló jellegű cikkek hivatkozáslistájába [97, 98], és talán ennek is köszönhetően számos későbbi munka alapjául szolgálhattak [99–107]. Az eredmények általánosításáról, alkalmazásáról nagyobb rendszerekben további közlemények születtek [X, XI].

## 2.3. Tiszta és kevert állapotok tervezése degenerált alapállapotban

Atomi rendszerek degenerált, vagy közel degenerált állapotai lehetővé teszik nagyobb dimenziós kvantumrendszerek állapotainak vizsgálatát. Degeneráltság nélkül ugyanekkora rendszer manipulálásához sok különböző frekvenciájú kölcsönható lézerre lenne szükség. Az atomi állapot manipulálása és tervezése koherens lézerek felhasználásával aktívan kutatott terület [108]. Több részterületen történt előrehaladás. A számos adiabatikus állapotátviteli módszer közül az egyik legismertebb az előző fejezetben is használt stimulált Raman-átmeneteket használó módszer (STIRAP). Alkalmazhatóságának korlátot szab az, hogy megfelelően erős lézerimpulzusokat igényel [72, 109]. Egy másik részterület a koherens kontroll, amely különböző, egymással interferáló kölcsönhatási utakat használ arra, hogy a degenerált nívókon a kívánt célállapotot előállítsa [110]. Ezt a technikát a STIRAP módszerrel ötvözve, a STIRAP folyamat során használt impulzusok alakjának optimális megválasztásával tetszőleges szuperpozíció állapotok közötti átmenetet valósítottak meg a nemdegenerált [111] és degenerált [112, 113] esetekben. Az említett eljárások nagy jelentőséggel bírnak a kvantuminformáció feldolgozás (QIP, Quantum Information Processing) témakörén belül, mint a kvantumszámítások megvalósítása, kvantumkriptográfia és teleportáció [12]. Általában kevert állapotokat a koherens szuperpozíciókat előállító állapottervező eljárásokkal nem lehetséges tervezni. Viszont számos kvantuminformatikai probléma kapcsán felmerül az igény, hogy a kvantumrendszer nem csak tiszta, hanem kevert állapotait is nagy pontossággal megtervezzék [114–116].

Az optikai pumpálással történő állapottervezés [117] során a végállapot független a rendszer kezdeti állapotától, azonban e módszer hatékonysága alacsony [118]. Másrészt, a koherens állapottervezési módszerekben a végállapot függ a kezdeti álla-



2.22. ábra. A bemutatott állapottervezési módszerhez használt rendszer állapotainak diagramja, a csatolások feltüntetésével. A  $\gamma_{in}$ ,  $\gamma_{ext}$  és  $R_p$ -vel jelölt kölcsönhatások inkoherens relaxációs és pumpálási folyamatokat írnak le.

pottól, viszont a hatékonyság nagy, jó közelítéssel a teljes kezdeti populáció a végállapotba kerül [72, 73]. Az általunk kidolgozott állapottervezési módszer kombinálja az optikai pumpálást és a koherens gerjesztést, mindkettő előnyös tulajdonságait felhasználja, és lehetővé teszi nem csupán tiszta, hanem kevert állapotok tervezését is. A módszer, hasonlóan az adiabatikus populáció átvitelhez, nem érzékeny a koherens lézerimpulzusok jelalakjának kis fluktuációira és időzítésére. Az optikai pumpáláshoz hasonlóan a végállapot nem függ a kezdeti állapottól. Jellemző tulajdonságai továbbá, hogy az állapotot egy dekoherencia-mentes altérben állítja elő, valamint – ellentétben az adiabatikus folyamatokkal – a gerjesztő lézerek amplitúdója nem kell, hogy nagy legyen, az közel tetszőlegesen megválasztható.

### 2.3.1. A választott modellrendszer

Az ismertetésre kerülő állapottervezési módszer degenerált alapállapottal rendelkező, Λ konfigurációjú kvantumrendszerekben alkalmazható, ahol a dekoherenciamentes sötét altér többdimenziós. A legkisebb ilyen rendszer három degenerált alapállapottal rendelkezik, és egy gerjesztett állapottal, melyek elliptikusan polarizált lézerimpulzusokkal hatnak kölcsön. Az állapotszintek diagramja a 2.22 ábrán látható. Az alacsonyabb energiájú állapotok J=1 impulzusmomentummal rendelkeznek, és a  $|g_q\rangle$ ,  $(q = -, \pi, +)$ -al jelölt mágneses alnívókat a  $\sigma_{\pm}$  és  $\pi$  polarizációjú lézerimpulzusok csatolják a J=0 impulzusmomentumú,  $|e\rangle$ -vel jelölt gerjesztett állapothoz. A koherens gerjesztő lézer három polarizációs komponensére a  $\mathcal{E}_q$  jelölést vezetjük be. A  $(q = -, +, \pi)$  komponensek rendre a  $\sigma_-, \sigma_+$  körkörös polarizációt (ekkor az elektromágneses tér a kvantálási tengelyre merőleges síkban forog), és a kvantálási tengellyel párhuzamos polarizációjú komponenst jelölik. Mindhárom komponens időfüggését azonosnak választjuk, de relatív amplitúdójuk és fázisuk különböző lehet,

$$\mathcal{E}_{-}(t) = \mathcal{E}(t) e^{i\xi} e^{i\mu_{-}} \sin\theta \sin\varphi, \qquad (2.67a)$$

$$\mathcal{E}_{\pi}(t) = \mathcal{E}(t)e^{i\xi}\cos\theta,$$
 (2.67b)

$$\mathcal{E}_{+}(t) = \mathcal{E}(t) e^{i\xi} e^{i\mu_{+}} \sin\theta \cos\varphi, \qquad (2.67c)$$

ahol a  $\theta$ ,  $\varphi$  paraméterek az impulzusok polarizációját írják le, és  $\xi$  az impulzus abszolút fázisa. A  $\sigma_+$  és  $\sigma_-$  komponensek  $\pi$  komponenshez képest vett relatív fázisát a  $\mu_+$  és  $\mu_-$  számokkal jelöljük. Az  $|e\rangle$  gerjesztett állapot a  $\gamma_{\rm in}$  rátával az alapállapotokba relaxál, és  $\gamma_{\rm ext}$  mértékben a modellben figyelembe nem vett állapotokba. Amennyiben külső állapotokba szóródás történik, azaz a  $\gamma_{\rm ext} > 0$  esetben egy pumpálási folyamatot is bekapcsolunk, amely az  $R_p$  rátával jellemzett mértékben a gerjesztett állapot betöltöttségét növeli, így kompenzálva a kiszóródást. A rendszer időfejlődését Born-Markov, majd forgóhullámú (RW) közelítést alkalmazva a koherens lézerekkel való kölcsönhatás leírásakor, az inkoherens folyamatokat is figyelembe véve egy mászter-egyenlettel adjuk meg,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\widehat{\varrho} = \frac{1}{i\hbar}[\widehat{H},\widehat{\varrho}] 
+ \frac{\gamma_{\mathrm{in}}}{2} \sum_{l=-,\pi,+} 2\widehat{L}_l \widehat{\varrho}\widehat{L}_l^{\dagger} - \widehat{L}_l^{\dagger}\widehat{L}_l \widehat{\varrho} - \widehat{\varrho}\widehat{L}_l^{\dagger}\widehat{L}_l 
- \frac{\gamma_{\mathrm{ext}}}{2}\widehat{L}_e\widehat{\varrho} - \frac{\gamma_{\mathrm{ext}}}{2}\widehat{\varrho}\widehat{L}_e + R_p(1 - \mathrm{Tr}\left\{\widehat{\varrho}\right\})\widehat{L}_e,$$
(2.68)

ahol a $\widehat{H}$ Hamilton-operátor alakja

$$\widehat{H} = \frac{\hbar}{2} (\Omega_{-}|g_{-}\rangle\langle e| + \Omega_{\pi}|g_{\pi}\rangle\langle e| + \Omega_{+}|g_{+}\rangle\langle e| + \text{h.c.}) 
+ \hbar\Delta|e\rangle\langle e|,$$
(2.69)

és a különböző Rabi-frekvenciák kifejezése az átmenetek Clebsch-Gordan együtthatóit figyelembe véve

$$\Omega_{-} = \frac{1}{3} \Omega e^{i\xi} e^{i\mu_{-}} \sin\theta \sin\varphi, \qquad (2.70a)$$

$$\Omega_{\pi} = -\frac{1}{3}\Omega e^{i\xi}\cos\theta, \qquad (2.70b)$$

$$\Omega_{+} = \frac{1}{3} \Omega e^{i\xi} e^{i\mu_{+}} \sin\theta \cos\varphi, \qquad (2.70c)$$

ahol $\hbar\Omega=d_{ge}\mathcal{E},$ a léptető<br/>operátorokat az

$$\widehat{L}_{q} = \frac{1}{\sqrt{3}} |g_{q}\rangle \langle e|,$$
$$\widehat{L}_{e} = |e\rangle \langle e|$$

kifejezések adják meg, és  $d_{ge}$ az alap- és gerjesztett állapot közötti átmenet dipólmomentuma. Hasonlóan a STIRAP folyamatokhoz, megengedünk egy $\Delta$ elhangolást az egyfotonos rezonanciától, de a kétfotonos rezonanciát megköveteljük. A modell  $\widehat{H}$  Hamilton-operátora két, a gerjesztő lézerekhez nem csatolt energia-sajátállapottal rendelkezik [119], melyekre a  $|\Phi_D^{(l)}\rangle$  jelölést vezetjük be, az *l* index 1 és 2 értékei mellett. Ezen állapotok a csatolás hiánya miatt szükségszerűen a Hamilton-operátor 0 sajátértékéhez tartoznak, és könnyen meghatározhatóak:

$$|\Phi_D^{(l)}\rangle = \sum_{q=-,\pi,+} n_q^{(l)} |g_q\rangle, \quad l = 1, 2,$$
 (2.71)

ahol az $\boldsymbol{n}^{(l)}$ egységvektorok alakja

$$\boldsymbol{n}^{(1)} = [e^{i\mu_{-}}\cos\theta\sin\varphi, \sin\theta, e^{i\mu_{+}}\cos\theta\cos\varphi]^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{n}^{(2)} = [-e^{-i\mu_{+}}\cos\varphi, 0, e^{-i\mu_{-}}\sin\varphi]^{\mathrm{T}},$$

és a gerjesztő tér  $\mu_{\pm}$ ,  $\varphi$ ,  $\theta$  paramétereit a (2.67)-es kifejezés adja meg. A  $|\Phi_D^{(l)}\rangle$ állapotok sötét állapotok, mivel nincs komponensük a gerjesztett állapotszinten [35]. A Hamilton-operátor másik két sajátállapota nemzérus sajátértékhez tartozik, és ezek az állapotok rendelkeznek betöltöttséggel a gerjesztett szinten is, azaz világos állapotok.

### 2.3.2. Az állapottervezési eljárás

Tegyük fel, hogy kezdetben a rendszer egy olyan  $\hat{\rho}_{in}$  sűrűségoperátorral jellemzett állapotban található, amely az alapállapot-szinteken helyezkedik el, ahonnan a relaxációs folyamatok már nem visznek ki. A gerjesztő koherens lézerek folyamatosan Rabi-oszcillációval átmeneteket generálnak az alap- és gerjesztett szintek között, és a gerjesztett szintről spontán emisszióval inkoherens módon az alapállapotba kerül a rendszer, vagy kiszóródik külső szintekre. Az inkoherens és koherens folyamatok együttes jelenléte végül azt eredményezi, hogy a sötét állapotok egyre nagyobb mértékben betöltődnek, annak ellenére, hogy a gerjesztő lézerek nem csatolják őket az  $|e\rangle$  állapothoz. Amennyiben nincs külső állapotokba szóródás ( $\gamma_{ext} = 0$ ), vagy a kiszóródást pumpálással kompenzáljuk ( $\gamma_{\text{ext}} > 0, R_p > 0$ ), a rendszer egy idő után a sötét állapotok keverékébe relaxál,

$$\widehat{\varrho}_{\text{out}} = p^{(1)} |\Phi_D^{(1)}\rangle \langle \Phi_D^{(1)}| + p^{(2)} |\Phi_D^{(2)}\rangle \langle \Phi_D^{(2)}|, \qquad (2.72)$$

ahol a  $p^{(l)}$  együtthatók az alkalmazott impulzusoktól és a kezdeti állapottól is függenek. Fontos, hogy a végállapot nem függ az impulzusok amplitúdójától, csak a gerjesztő lézer polarizációjától és az  $\mathcal{E}_q$  komponensek relatív fázisától, a sötét állapotok kifejezésén keresztül.

Az alapállapot három<br/>dimenziós terében a sötét altérre merőleges  $|\Phi^{(\perp)}\rangle$ állapot<br/>ot a

$$|\Phi^{(\perp)}\rangle = e^{i\mu_{-}}\sin\theta\sin\varphi |g_{-}\rangle - \cos\theta |g_{\pi}\rangle + e^{i\mu_{+}}\sin\theta\cos\varphi |g_{+}\rangle$$

formában adhatjuk meg. Ez a vektor tetszőleges irányultságot felvehet egy fázisfaktor erejéig. Így a rá merőleges kétdimenziós altér is tetszőleges irányultságot felvehet. Ezért tetszőleges előírt kétdimenziós, a  $|\psi_1\rangle$  és  $|\psi_2\rangle$  állapotok által kifeszített lineáris altérhez megválaszthatjuk úgy a lézerek paramétereit, hogy a  $|\Phi^{(\perp)}\rangle$ állapot az előírt altérre merőleges legyen, és a  $|\psi_1\rangle$  és  $|\psi_2\rangle$  állapotok a sötét altérbe kerüljenek. Emiatt nem kizárt, hogy létezik olyan lézerimpulzus sorozat, ami tetszőleges kezdeti állapotot az előírt célállapotba visz, amennyiben a célállapot

$$\widehat{\varrho}_{\rm f} = p_{\rm f}^{(1)} |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + p_{\rm f}^{(2)} |\psi_2\rangle \langle \psi_2|, \qquad (2.73)$$

alakú. A  $\hat{\varrho}_{\rm f}$  állapot lehet egy tiszta állapot, amennyiben a  $p_{\rm f}^{(l)}$  együtthatók valamelyike zérus, vagy lehet kevert állapot, ha a  $p_{\rm f}^{(l)}$ -ek egyike sem 0. Az állapottervezési módszer kidolgozásához a következő lépés annak meghatározása, hogy egy  $\hat{\varrho}_{\rm in}$  kezdeti állapot a lézerimpulzusok egy adott beállítása esetén hogyan változik meg. Ezután meghatározhatjuk azt az impulzussorozatot, amely a (2.73)-as képlettel megadott célállapotba viszi a rendszert.

A továbbiakban a  $\hat{\rho}$  sűrűség<br/>operátorok lineáris terének elemeit vektorokkal reprezentáljuk, és<br/> r-rel jelöljük. A vektor komponensei

$$r_{4(i-1)+j} = (\widehat{\varrho})_{i,j}, \qquad (2.74)$$

ahol  $(\hat{\varrho})_{i,j}$  jelöli a sűrűség<br/>operátor mátrixelemeit a  $\{|g_{-}\rangle, |g_{\pi}\rangle, |g_{+}\rangle, |e\rangle\}$  bázisban. A vektorok skaláris szorzatát a

$$(\boldsymbol{r}^{(1)}|\boldsymbol{r}^{(2)}) = \sum_{s} \left(r_{s}^{(1)}\right)^{*} r_{s}^{(2)} = \operatorname{Tr}\left\{\widehat{\varrho}^{(1)}\widehat{\varrho}^{(2)}\right\}$$
(2.75)

módon definiáljuk. Ebben a reprezentációban a mászter-egyenlet alakja

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{d}, \qquad (2.76)$$

ahol az M mátrix a mászter-egyenlet lineáris részét írja le, a d vektor pedig az  $R_p \hat{L}_e$ inkoherens pumpálási kölcsönhatás járuléka. A már korábban is említett kiszóródásmentes és a kiszóródást visszapumpálással kompenzáló esetet külön elemezzük.

### 2.3.3. A relaxáció hatása

#### a) A kiszóródásmentes eset

A  $\gamma_{\text{ext}} = R_p = 0$  paraméterértékek felelnek meg a kiszóródásmentes esetnek. Ekkor a (2.76)-os mászter-egyenlet homogénné válik r-ben, a d vektor nullvektor lesz. Ha elegendő ideig magára hagyjuk a rendszert, relaxációja során jó közelítéssel eléri a végállapotát. A relaxáció folyamatát az M mátrix bal- és jobboldali zérus sajátértékekhez tartozó sajátvektorai segítségével követhetjük nyomon. Ezeket a

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{r}_{\mathrm{R}}^{(k)} = \boldsymbol{0}, \qquad (2.77\mathrm{a})$$

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{L}}^{(k)\,T}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0},\tag{2.77b}$$

$$(\boldsymbol{r}_{\rm L}^{(k)} | \boldsymbol{r}_{\rm R}^{(l)}) = \delta_{kl}$$
(2.77c)

feltételek szabják meg, ahol  $\boldsymbol{r}_{\mathrm{R}}^{(k)}$  jelöli a jobboldali sajátvektorokat,  $\boldsymbol{r}_{\mathrm{L}}^{(k)\,T}$  a baloldaliakat, és  $\delta_{kl}$  a Kronecker-delta. Az  $\boldsymbol{M}$  mátrix bal- és jobboldali 0 sajátértékhez tartozó alterei 4 dimenziósak, és különbözőek. A jobboldali sajátvektorok, mint sűrűségoperátorok a sötét állapotokból épülnek fel,

$$\hat{\varrho}_{\rm R}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\Phi_D^{(1)}\rangle \langle \Phi_D^{(1)}| - |\Phi_D^{(2)}\rangle \langle \Phi_D^{(2)}| \right) , \qquad (2.78a)$$

$$\hat{\varrho}_{\rm R}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\Phi_D^{(1)}\rangle \langle \Phi_D^{(2)}| + |\Phi_D^{(2)}\rangle \langle \Phi_D^{(1)}| \right) , \qquad (2.78b)$$

$$\hat{\varrho}_{\rm R}^{(3)} = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( |\Phi_D^{(2)}\rangle \langle \Phi_D^{(1)}| - |\Phi_D^{(1)}\rangle \langle \Phi_D^{(2)}| \right) , \qquad (2.78c)$$

$$\widehat{\varrho}_{\rm R}^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\Phi_D^{(1)}\rangle \langle \Phi_D^{(1)}| + |\Phi_D^{(2)}\rangle \langle \Phi_D^{(2)}| \right) \,. \tag{2.78d}$$

A baloldali sajátvektorok sűrűségoperátor-formája is megadható. Az első három megegyezik a jobboldali (2.78a)-(2.78c) sűrűségoperátorokkal, míg a negyedik

$$\widehat{\varrho}_{\rm L}^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\widehat{I},\tag{2.79}$$

ahol  $\hat{I}$  a 4 × 4-es egységmátrix. Az időfejlődés során a jobboldali sajátvektorok nem keverednek, így a rendszer végállapota a relaxáció után

$$\boldsymbol{r}_{\text{out}} = \sum_{k=1}^{4} (\boldsymbol{r}_{\text{L}}^{(k)} | \boldsymbol{r}_{\text{in}}) \boldsymbol{r}_{\text{R}}^{(k)}.$$
 (2.80)

A sajátvektorok sűrűség<br/>operátor formáját felhasználva a kiinduló állapot–végállapot transzformációt leír<br/>ó $\mathcal{T}_a$  transzformációt megadhatjuk a

$$\widehat{\varrho}_{\text{out}} = \mathcal{T}_a(\widehat{\varrho}) = \widehat{\varrho}' + \frac{1}{2} (1 - \text{Tr}\left\{\widehat{\varrho}'\right\}) \widehat{P}_D, \qquad (2.81a)$$

$$\widehat{\varrho}' = \widehat{P}_D \widehat{\varrho}_{\rm in} \widehat{P}_D, \qquad (2.81b)$$

$$P_D = \sum_{k=1}^{2} |\Phi_D^{(k)}\rangle \langle \Phi_D^{(k)}|$$
 (2.81c)

formában, ahol  $\widehat{P}_D$  a sötét altérre vetítő projektor.

### b) Relaxáció kiszóródás és pumpálás mellett

Amennyiben külső, a modellben figyelembe nem vett állapotokba is történik spontán emisszió a gerjesztett állapotból, ezt a  $\gamma_{\text{ext}} > 0$  paraméterrel vesszük figyelembe, és az elvesztett populációt a gerjesztett állapotba való visszapumpálással pótoljuk  $(R_p > 0)$  az összes külső állapotból. Az időfejlődést leíró lineáris differenciálegyenlet ekkor a

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}-\widetilde{\boldsymbol{r}}) = \boldsymbol{M}'(\boldsymbol{r}-\widetilde{\boldsymbol{r}})$$
(2.82)

alakú, ahol az  $\widetilde{r}$ egy konstans vektor, ami kielégíti a

$$M'\widetilde{r} = -d \tag{2.83}$$

egyenletet. Az  $\widetilde{r}$ vektorhoz tartozó sűrűség<br/>operátor megadható, mint

$$\widehat{\widetilde{\varrho}} = \sin^2 \varphi |g_+\rangle \langle g_+| + \cos^2 \varphi |g_-\rangle \langle g_-| - \frac{1}{2} (e^{i(\mu_+ - \mu_-)} \sin 2\varphi |g_+\rangle \langle g_-| + \text{h.c.}).$$
(2.84)

Az M' mátrix bal- és jobboldali zérus sajátalterei megegyeznek, és háromdimenziósak. Az  $r^{(i)}$  sajátvektorok teljesítik az

$$\boldsymbol{M}'(\boldsymbol{r}^{(i)} - \widetilde{\boldsymbol{r}}) = \boldsymbol{0} \tag{2.85}$$

egyenletet, és a hozzájuk tartozó sűrűségoperátorokat a (2.78a)–(2.78c) képletek adják meg. A kiszóródásmentes esethez képest eltérő a kezdeti- és végállapot közötti összefüggés:

$$\boldsymbol{r}_{\text{out}} = \widetilde{\boldsymbol{r}} + \sum_{i=1}^{3} (\boldsymbol{r}^{(i)} | \boldsymbol{r}_{\text{in}} - \widetilde{\boldsymbol{r}}) \boldsymbol{r}^{(i)}, \qquad (2.86)$$

ami sűrűségoperátorokkal kiírva

$$\widehat{\varrho}_{\text{out}} = \mathcal{T}_b(\widehat{\varrho}_{\text{in}}) = \widehat{\widetilde{\varrho}} - \widehat{\widetilde{\varrho}}' + \widehat{\varrho_{\text{in}}}' + \frac{1}{2} (1 - \text{Tr}\left\{\widehat{\varrho}_{\text{in}}\right\}) \widehat{P}_D, \qquad (2.87)$$

ahol a vessző a sötét altérbe projektálást jelöli, a (2.81b) képlethez hasonlóan.

### 2.3.4. Az optimális impulzus sorozat

A relaxáció hatását meghatároztuk, és megadtuk a kezdeti és végállapot közötti összefüggést mindkét vizsgált esetben. Feltételeztük, hogy az impulzus elegendő ideig változatlan polarizációval és fázissal fennáll ahhoz, hogy a relaxáció végbemenjen. Egymás után több impulzust alkalmazva azt várjuk, hogy ismeretlen kezdeti állapot esetén a végállapot által elfoglalt térrész egyre szűkül, és végül konvergál az előre rögzített célállapothoz.

A kezdeti  $\hat{\rho}_i$  állapot transzformáltját az egyes impulzusokhoz tartozó, a vizsgált esettől függően a (2.81b) vagy a (2.87) leképezések egymás utáni alkalmazásával kaphatjuk meg,

$$\widehat{\overline{\varrho}}_{\mathrm{f}} = \mathcal{T}^{(N)}(\mathcal{T}^{(N-1)}(\dots\mathcal{T}^{(1)}(\widehat{\rho}_{\mathrm{i}})\dots)), \qquad (2.88)$$

ahol ${\mathcal T}$  a  ${\mathcal T}_a$  és  ${\mathcal T}_b$  transzformációk valamelyike. Az Nlépésszámot megfelelően

megválasztva keressük a relatív impulzusamplitúdók és fázisok egy olyan sorozatát, amely minimalizálja a

$$\mathcal{J}(\{\mathcal{E}\}, \widehat{\varrho}_{\rm in}, \widehat{\varrho}_{\rm f}) = \left(1 - \operatorname{Tr}\{\overline{\widehat{\varrho}}_{\rm f}\widehat{\varrho}_{\rm f}\}\right)^{1/2}, \qquad (2.89)$$

funkcionált. A  $\mathcal{J}(\{\mathcal{E}\}, \hat{\varrho}_{in}, \hat{\varrho}_{f})$  funkcionál megadja a folyamat során kapott végállapot  $(\overline{\varrho}_{f}, (2.88)$ -as képlet) és a (2.73)-as képlettel megadott célul kitűzött végállapot  $(\hat{\varrho}_{f})$  eltérését. Az optimális paramétereket a konjugált gradiens módszer segítségével kerestük meg [120].

A leképezések lineáris voltát felhasználva, amelyet a

$$\mathcal{T}(p_1\widehat{\rho}_1 + p_2\widehat{\rho}_2) = p_1\mathcal{T}(\widehat{\rho}_1) + p_2\mathcal{T}(\widehat{\rho}_2)$$
(2.90)

egyenlet fogalmaz meg a  $p_1+p_2 = 1$  feltétel mellett, elegendő az összes kezdeti kevert és tiszta állapot helyett kizárólag a tiszta kezdeti állapotokat tekinteni konvergencia szempontjából. Célunk az előírt sűrűségoperátor-állapot elérése a kezdeti állapottól független, rögzített impulzussorozat segítségével, bármely kiinduló állapot esetén.

Az ismertetett állapottervezési módszer hatékonyságát egy példán keresztül mutatjuk be. Célállapotnak a

$$\widehat{\overline{\varrho}}_{\rm f} = \frac{1}{3} |\psi_{\rm f}^{(1)}\rangle \langle \psi_{\rm f}^{(1)}| + \frac{2}{3} |\psi_{\rm f}^{(2)}\rangle \langle \psi_{\rm f}^{(2)}|, \qquad (2.91)$$

sűrűségoperátort választjuk, ahol a keverék két komponense a

$$|\psi_{\rm f}^{(1)}\rangle = \begin{bmatrix} \frac{2}{7}e^{i\pi/3} \\ \frac{3}{7}e^{i\pi/5} \\ \frac{6}{7} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{és} \quad |\psi_{\rm f}^{(2)}\rangle = \begin{bmatrix} \frac{3}{5} \\ \frac{4}{5}e^{i\pi/7} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
(2.92)

tiszta állapot. Először a kiszóródásmentes,  $\gamma_{\rm ext}=R_p=0$ esetet vizsgáljuk. A numerikus optimalizáláshoz használt kiinduló tiszta állapotok  $\overline{\mathcal{H}}$  rendszerét a J=1 impulzusmomentumú alapállapotok terének diszkretizálásával kaptuk, elegendő tiszta állapotot választva ahhoz, hogy az optimalizációt a további finomítás már ne befolyásolja lényegesen. Azt találtuk, hogy az előírt állapot nagy pontosságú eléréséhez egy 4 lépéses folyamat elegendő (N = 4). A konjugált gradiens módszer használatával minimalizáltuk a (2.89)-es képlettel megadott  $\mathcal{J}(\{\mathcal{E}\}, \widehat{\varrho}_{in}, \widehat{\varrho}_{f})$  funkcionál  $\overline{\mathcal{H}}$ -n vett maximumát. Az optimalizálás eredménye az  $\{\mathcal{E}\}$  impulzusokat megadó polarizációs szögek és relatív fázisok  $(\varphi^{(l)}, \theta^{(l)}, \mu_{-}^{(l)}, \mu_{+}^{(l)})$  sorozata, ahol  $l = 1, \ldots, 4$ . A kapott impulzussorozat tetszőleges kezdeti állapot esetén a célállapottól számított  $\approx 10^{-5}$ -nél kisebb eltérésű végállapotot eredményezett. A  $\overline{\mathcal{H}}$  tiszta állapothalmaz transzformációi az egyes impulzusok alkalmazása után a 2.23 ábrán láthatóak. Az első transzformáció után a rendszer a kétdimenziós sötét állapottérbe kerül, és a kezdeti állapottól függően a végállapot ekkor még bárhol lehet, ezt mutatja a 2.23a ábrán a gömb teljes felületének kitöltöttsége. A második impulzus hatására egy elnyújtott szivar alakot vesz fel a lehetséges állapotok halmaza. A harmadik lépés egy kis ellipszoidot eredményez, míg a negyedik lépés után az eredmény közel pontszerű, egy kb.  $10^{-5}$  sugarú térrészbe kerül az állapot, függetlenül a kezdeti állapottól.

A kapott optimális impulzussorozatot felhasználva a  $\Omega = 1$ ,  $\gamma_{in} = 1$  paraméterértékek mellett megoldottuk numerikusan a (2.68)-as mászter-egyenletet. Az impulzusok hosszát úgy választottuk meg, hogy a sötét állapottérbe történő relaxáció gyakorlatilag minden impulzus után végbemenjen. A szükséges időt az Mmátrix sajátértékeiből becsülhetjük meg: a legkisebb abszolút értékű valós sajátérték adja a konvergenciához szükséges idő alsó határát. Ez esetünkben  $1/\tau \approx \gamma_{in}/16$ volt. Az impulzusokat  $5\tau$  ( $10\tau$ ) hosszúságúnak választva a (2.89)-es definícióval számolt maximális eltérés  $\approx 10^{-2}$  ( $\approx 3 \times 10^{-4}$ ) volt. Más célállapot választás esetén is konvergenciát találtunk. Általánosságban elmondható, hogy az adott pontosság



2.23. ábra. A kezdeti állapot-halmaz transzformációja az első (a), a második (b), a harmadik (c) és a negyedik (d) impulzus után, az éppen aktuális kétdimenziós sötét állapottér Bloch-gömbjén ábrázolva a kezdetben tiszta állapotok képét. Az x, y, z koordinátákat a  $\hat{\varrho} = \frac{1}{2}(1 + x\hat{\sigma}_x + y\hat{\sigma}_y + z\hat{\sigma}_z)$ összefüggés definiálja, ahol  $\hat{\sigma}_q$  a Pauli mátrixok. Az állapoteloszlás koordinátasíkokra vett vetülete is látható.

eléréséhez szükséges transzformáció lépések száma függ a célállapot tisztaságától. Minél tisztább az állapot (aza<br/>z $p_{\rm f}^{(1)} \ll p_{\rm f}^{(2)}$ vagy $p_{\rm f}^{(1)} \gg p_{\rm f}^{(2)}$ a (2.73)-<br/>as egyenletben), annál több lépés szükséges.

A kiszóródás esetét vizsgálva, 0-nál nagyobb  $\gamma_{\text{ext}}$  és  $R_p$  paraméterek esetén, az optimalizálást a kiszóródásmentes esettel megegyező módon végezhetjük. Ugyanazon célállapot mellett, N = 4 lépéses impulzussorozatnál a numerikus optimalizálás  $\approx 10^{-5}$  nagyságrendű maximális eltérést okozó paramétersort eredményezett. A kezdeti állapothalmaz az egyes impulzusok hatására az előző esethez nagyon hasonló módon változott. A mászter-egyenlet numerikus megoldása során az optimalizált impulzussorozat mellett, az  $\Omega$  Rabi-frekvenciát, a  $\gamma_{\text{in}}$  és  $\gamma_{\text{ext}}$  relaxációs paramétereket, valamint az  $R_p$  pumpálási paramétert egységnyinek választva, azt láttuk, hogy a várakozásnak megfelelően a célállapothoz konvergál a végállapot. Az M' mátrix legkisebb abszolút értékű valós sajátértéke a példában szereplő paraméterek mellett  $1/\tau' \approx \gamma_{\text{in}}/35$  volt, azaz  $\tau'$  a gerjesztett állapot élettartamának 35-szöröse. Az impulzushosszakat  $5\tau'$ -nek választva a (2.89)-es kifejezéssel megadott maximális eltérés  $\approx 10^{-2}$  volt, hasonlóan a kiszóródásmentes esethez. A  $\gamma_{\text{in}}$ ,  $\gamma_{\text{ext}}$ , és  $R_p$  értékek befolyásolják a relaxáció sebességét, az alkalmazandó impulzusok hosszát.

Összegezve, a kidolgozott állapottervezési módszerről megmutattuk, hogy négyállapotú Λ-rendszerben a degenerált alapállapot terében kevert állapotok tervezésére használható. A folyamat alkalmazása után a végállapot a célállapothoz igen közel helyezkedik el, függetlenül attól, hogy a rendszer milyen kezdeti állapotban volt. Bár az állapottervezés nem adiabatikus, az impulzusok alakjára és pontos időzítésére nem érzékeny, e kísérleti paraméterekben jelentkező pontatlanságokkal szemben robusztus. A módszer előnye, hogy az adiabatikus módszerekhez viszonyítva a gerjesztő koherens lézerek amplitúdója szabadabban megválasztható.

A többszörös sötét állapotokkal rendelkező rendszerek kísérleti és elméleti vizsgálata kapcsolódik az ismertetett eredményekhez [121–123]. A javasolt állapottervezési módszer gyakorlati megvalósítására alkalmas rendszerekkel végeznek kísérleteket, így elképzelhető, hogy egyszer sor kerül valós alkalmazására is.

### Vizsgálati módszerek

A disszertációban a dekoherencia jelenségének leírása a nyílt kvantumrendszer fogalmának bevezetésével kezdődik. Egy direktszorzat alakú Hilbert térrel modellezhető, két részre bontható kvantumrendszer egyik részrendszerét vizsgáljuk, és a másik részt a vizsgált rendszer környezetének tekintjük. A környezetről feltételezzük, hogy jóval nagyobb, mint a vizsgált rendszer. Ez a közelítés lehetővé teszi, hogy egyszerűbb egyenletekkel írhassuk le a számunkra érdekes részrendszer időfejlődését. További közelítésként feltételezhető, hogy a környezet nem rendelkezik memóriával, ez a Markov-közelítés, és ekkor az időfejlődést leírhatjuk Lindblad alakra hozott mászter-egyenlettel. Ez az alak megmutatja, melyek azok a kölcsönhatási csatornák, amelyek relaxációt okoznak. Az időfejlődés relaxáció-mentes részét egy Hamilton-operátor határozza meg, relaxáció-mentes esetben a mászter-egyenlet a Schrödinger-egyenletté egyszerűsödik. A relaxációs folyamat általában dekoherenciát okoz, azaz ha a rendszer kezdetben két energia-sajátállapot szuperpozíciójában volt, a relaxáció során ezek keverékébe kerül, és a szuperpozíciós állapothoz rendelhető, csak kvantumrendszerekben megfigyelhető korrelációk megszűnnek. A környezettel való kölcsönhatástól függően a relaxáció végeredménye lehet olyan állapot is, amely a megfigyelt rendszer természetes bázisában szuperponált, így a relaxáció hatása akár a szokásostól ellentétes is lehet.

A nyílt rendszerek leírásának a mászter-egyenlettel ekvivalens módja a kvantum-

trajektóriák módszere, melyek közül a Markov-közelítésben érvényes kvantumugrások módszerét használtuk. Ez a leírásmód szemléletes értelmezését teszi lehetővé a környezettel való kölcsönhatásnak: a kvantumugrás akkor következik be, amikor a környezet mérést hajt végre a vizsgált rendszeren, és ennek során például foton emisszió vagy abszorpció történik. A nyílt rendszerek leírásához használt egyenletek, hasonlóan az időfüggő Schrödinger-egyenletekhez, a kölcsönhatások explicit időfüggése esetén a legtöbb esetben analitikusan nem oldhatók meg, és numerikus módszerek használata válik szükségessé. A mászter-egyenletet egy rögzített bázisban reprezentáltuk, és lineáris differenciálegyenletként írtuk fel, majd negyedrendű Runge-Kutta módszerrel numerikusan integráltuk. Ez a módszer a vizsgált kis dimenziós kvantumrendszerek esetén jól alkalmazható, emiatt a kvantumugrások módszerére ez esetben nem lett volna szükség. Alkalmazását azért választottuk, mert betekintést nyújt egy-egy kiszemelt atom időfejlődésébe. Lehetőséget nyújt egy-egy trajektória fáziskorrelációinak megfigyelésére, és ennek időbeli átlagával jellemeztük a kvantuminterferenciát.

Először a dekoherencia és kvantuminterferencia kérdéskörét vizsgáltuk, egymással ütközéseken keresztül kölcsönható rubídiumatomok rendszerében. A kapcsolódó kísérletben az atomok egy kisnyomású atomfelhőt alkotnak, ahol a felhő sűrűségével és a vákuum mértékével szabályozható az ütközési ráta. Az atomok belső állapotáról rezonancia-fluoreszcencia spektrum mérésével kaptak információt a kísérlet végzői. A megfigyelt spektrumban egy éles bemélyedést tapasztaltak, amint az ütközési ráta meghaladta a Rabi-frekvenciát. A jelenség mélyebb megértése céljából először egy egyszerű modellt használva meghatároztuk a spektrumot analitikusan a kvantum regressziós tétel segítségével. Az ütközéseket az atomi átmeneti frekvenciában megjelenő zajjal modelleztük. A rendszer leírása a felöltöztetett atomi állapotok segítségével történt, mivel ezzel az elhangolás és a koherens gerjesztés hatása egy forgó koordinátarendszerbeli leírásra redukálódik. Ezután a kvantumugrá-

sok módszerét használva kvantumtrajektóriákat szimulálva numerikusan vizsgáltuk egy-egy trajektória időfejlődését. Ez a mászter-egyenlethez képest, mely statisztikus átlagokra vonatkozik, más jellegű, mikroszkópikus értelmezést tesz lehetővé – egy-egy kvantumugrás megfelel az ütközéseknek, míg közöttük az atom a Rabioszcillációnak megfelelően fejlődik. Az időfejlődésben az ütközési ráta növelésével időbeli korrelációkat lehetett megfigyelni. E korrelációk mértékét párhuzamba állítottuk a spektrumban megfigyelhető bemélyedés mértékével, és közöttük egyértelmű összefüggést találtunk. Ennek alapján az időbeli fázisstabilizáció létrejöttével, és a miatta megjelenő kvantuminterferenciával magyaráztuk a spektrumban megfigyelt keskeny bemélyedést.

A továbbiakban stimulált Raman-átmenettel történő adiabatikus populációátvitel (STIRAP) technikáját alkalmaztuk egy hat szintű atomi rendszerre. A dekoherencia jelensége a sötét altér fogalmán keresztül kapcsolódik a témakörhöz. Ez az az állapothalmaz, amelyből a koherens és az inkoherens folyamatok együttés hatására további átmenetek nem történnek. Elnevezése abból származik, hogy az atomi rendszer fotont nem emittál, ha állapota a sötét altérben található. Természetesen a sötét altérbeli állapotok élettartama is véges, mivel a mászter-egyenletben figyelembe vett folyamatok nem írják le teljes mértékben a fizikai rendszert, más átmenetek is előfordulhatnak a valóságban, azonban ezek elhagyhatók amennyiben a sötét altér koherenciaideje jóval meghaladja a STIRAP folyamat végrehajtásának idejét. A sötét altér a koherens gerjesztés paramétereinek változtatásával más és más lehet. A paraméterek változtathatóak olyan módon, hogy a sötét altérbeli állapot adiabatikus átmeneten menjen keresztül, azaz a rendszer a folyamat során végig közelítőleg ebben az altérben maradjon. Ez azonban nem lehetséges teljes mértékben, így lényeges azt vizsgálni, hogy a populáció-átvitel végrehajtása során a dekoherencia milyen mértékben szól bele az állapot időfejlődésébe. A STIRAP technika lényeges ismert tulajdonsága, hogy a dekoherencia káros hatásai nagyrészt

elkerülhetőek. A Schrödinger-egyenlet numerikus szimulációjával határoztuk meg a sötét altérből a nem adiabatikus csatolás miatt kikerült populáció nagyságát. Ha ez a folyamat során végig nagyon alacsony marad, akkor gyakorlatilag nem található populáció abban az altérben, ahonnan a relaxáció kivezethetne. A végállapotot az adiabatikusság feltétele mellett analitikusan is meghatároztuk, és megmutattuk, hogy az elérhető állapotok halmaza lefedi az összes lehetséges szuperpozíciót, amely a populáció-átvitel céljául szolgáló atomi nívókból összeállítható.

Végül egy atomi rendszer degenerált alapállapotában végeztünk állapottervezést. Az alapállapotok különböző polarizációjú koherens lézerimpulzusokkal hatottak kölcsön, és egy gerjesztett állapoton keresztül Raman-átmenetekben vettek részt. Az időfejlődést mászter-egyenlettel írtuk le. Vizsgáltuk azt az esetet is, amikor a gerjesztett állapotból kiszóródás történik, és a kiszóródott populációt egy pumpálási folyamat pótolja. Mindkét esetben meghatároztuk a rendszer aszimptotikus állapotait a mászter-egyenlet időfüggetlen analitikus megoldásaiként, és megadtuk, hogy adott kezdeti állapot esetén mi a végállapot. Az aszimptotikus állapotok szükségszerűen a sötét alterekben találhatók, amelyek a vizsgált rendszerben két dimenziósak. Más és más amplitúdó-arányú és relatív fázisú lézerimpulzusokat használva elérhető, hogy a relaxációs folyamatok után egy széles körből megválasztható előírt állapotba kerüljön a rendszer. Az optimális lézerimpulzus paramétereket numerikusan, konjugált gradiens módszer segítségével kerestük meg az aszimptotikus állapotok alakját felhasználva, majd a kapott lézerimpulzusok hatását a mászter-egyenlet numerikus Runge-Kutta integrálásával ellenőriztük.

### A disszertáció tézisei

1. Koherensen gerjesztett rubídium atomokból álló gázfelhő spektrumában megfigyelt anomális Mollow-spektrum okait elemezve megmutattam, hogy az atomok közötti ütközéseket sztochasztikus kölcsönhatással modellezve, a kölcsönhatás erősségét növelve a megfigyelésekkel egybevágó fluoreszcencia spektrum kapható. A folyamat hátterét részletesebben vizsgálva magyarázatot adtam arra, hogy miként alakíthat ki az atomok közötti gyakori inkoherens ütközési folyamat hosszabb időbeli koherenciát a rendszerben. Bebizonyítottam, hogy ez utóbbi tehető felelőssé a spektrumban megfigyelhető keskeny bemélyedésért. Kifejtettem, hogy a jelenség oka a koherens kölcsönhatás által felöltöztetett állapotrendszerben megjelenő azonos útvonalú kölcsönhatások között fellépő kvantuminterferencia. [I, II].

- 2. Hatékony eljárást javasoltam numerikus, kvantumtrajektóriákon alapuló rezonancia-fluoreszcencia, abszorpciós és emissziós spektrumok számítására. A kifejlesztett módszer a nagy sztochasztikus zajjal, hosszú karakterisztikus idővel jellemezhető kisdimenziós kvantumrendszerek esetén előnyösen alkalmazható [I, V].
- 3. Inkoherens és koherens folyamatokat kombinálva, az adiabatikus populációátvitel technikáját alkalmazva megmutattam, hogy egy hat szintű atom kezdeti alapállapota az atomi rendszerrel kölcsönható koherens gerjesztés paramétereinek változtatásával a három gerjesztett atomi állapot tetszőleges szuperpozíciójába átvihető, a gerjesztés amplitúdójától és időbeli lefolyásától kevéssé függő módon. A gerjesztő lézerek relatív amplitúdója és fázisa is jelentősen befolyásolja a végső állapot populáció eloszlását [III].
- 4. Megvizsgáltam, hogy az előző tézispontban vázolt állapottervezési eljárásban az inkoherens folyamatok, melyek az adiabatikus populáció-átvitel során elkerülhetetlenül szerepet kapnak, milyen feltételek mellett okoznak csupán kis mértékű eltérést a kívánt célállapottól. Megadtam egy, a gerjesztő lézerek amplitúdójára és azok időbeli lefolyására vonatkozó feltételt, mely biztosítja,

hogy ez az eltérés kicsi, és a teljes folyamat közel adiabatikusan zajlik [III].

- 5. Egy 4 szintű, lambda elrendezésű állapotrendszerű, koherens lézerfénnyel kölcsönható atomi rendszerben, figyelembe véve a dekoherencia jelenségét is, meghatároztam az aszimptotikus időfejlődést, valamint a kezdeti és végállapotok közötti összefüggést. Megmutattam, hogy az állapottér egy kétdimenziós alterébe relaxál az állapot, és ez az altér a koherens lézerek relatív amplitúdójának és fázisának változtatásával tetszőlegesen beállítható [IV].
- 6. Többdimenziós, változtatható sötét altérrel rendelkező kvantumrendszerben az alteret ugrásszerűen többször változtatva állapottervezést lehet végezni. Az előző tézispontban említett rendszert példaként vizsgáltam. Mind abban az esetben, amikor külső állapotokba nem történik kiszórás, mind akkor, amikor a kiszóródott populációt pumpálással pótoljuk, megmutattam, hogy kevés számú lépésből nagy pontossággal a kevert és tiszta állapotok széles köre preparálható [IV].

### Következtetések

Egy konkrét kísérletet elemezve megmutattuk, hogy koherens és inkoherens folyamatok együttes jelenléte atomi rendszerekben hozzájárulhat kvantuminterferencia létrejöttéhez, és hogy az inkoherens folyamatok nem csupán arra képesek, hogy a kvantumállapot dekoherenciája folytán a kvantumos tulajdonságok elvesztését okozzák. Együttesen alkalmazva koherens folyamatokkal nem akadályozzák az adiabatikus populáció-átvitelt, valamint robusztus állapottervezésben jutnak szerephez. Az értekezésben vázolt állapottervezési módszerek általánosak, nem csupán atomi rendszerekben, optikai kölcsönhatások mellett alkalmazhatóak, hanem hasonló Hamilton-operátorral és inkoherens csatornákkal modellezhető más rendszerekben is. A kvantuminformatika témakörén belül, bármilyen megvalósítását is tekintjük egy kvantumszámítógépnek, a dekoherencia jelensége az állapotpreparálás, tárolás és műveletvégzés területén megjelenik. Hatása a kvantumalgoritmusok szempontjából káros, és kiküszöbölésére számos sémát fejlesztettek ki, ilyenek például a dekoherencia-mentes (sötét) alterekbeli állapottárolás és az előre meghatározott alterekből való kilépést detektáló és javító kvantumos hibajavítás. Ezen sémák gyakorlati megvalósításához az inkoherens folyamatok jobb megismerése és esetenként konstruktív felhasználása hasznos segítséget nyújthat.

## Summary

### Overview

Quantum information processing promises several advancements over traditional, classical devices. The secure transmission of information via quantum states is already commercially available. However, the predicted speedup over classical computers have not been realized yet with sufficiently high computational steps and data sizes, where it would matter. Additionally, it has been shown that the transmission of data can be made equivalently secure without the application of quantum systems. The storage of information in a quantum system differs essentially from the classic approach. The information can be only approximately copied, and in general a single quantum system's state can not be completely determined. Transferring the information between parts of a quantum computer is possible, and can be performed by quantum state teleportation. In the classical computer the signal levels assigned to the logical values zero and one undergo frequent thresholding. This error correction process is the key of preserving the integrity of information while millions of logic gates interact with each other. Due to the inherent nature of quantum states a similar thresholding process is not applicable to quantum information processing units. From that viewpoint the quantum computer is more related to analogue computers than the digital ones.

The main reason behind the lack of large-scale quantum algorithm realizations is decoherence. The coupling between a quantum system and its environment defines

a state set of the system, and the interaction drives an originally pure quantum state into the mixture of these states. However, the quantum algorithms are more efficient than their classical counterparts only if the state of the system is in a superposition and interference effects are present. Several methods have been developed for lessening or avoiding the undesired decoherence effects. One kind of error correction protocols is the analogue of the classical bit-flip error correction methods. A linear subspace of the Hilbert spaces is chosen as the error-free set of states, and if the system's state leaves that subspace then the event is detected by a measurement. Based on the measurement results a unitary transformation corrects the bit flip and the system is being brought back into the error-free subspace. A well-chosen subspace is orthogonal to the errors caused by the interaction with the environment. A different method is the application of decoherence-free subspaces for quantum computation. The key is encoding the quantum information in those subspaces that do not undergo decoherence, for example the relevant state transitions are prohibited in the first order. Besides decoherence, the errors caused by inexact quantum operations is also relevant. These errors are not easily detectable or correctable, due to leaving the quantum state in a perfectly valid, slightly perturbed form. By successive application of quantum gates these errors add up, just like in the analogue computer. Therefore it is important to develop high-precision information processing units, working well independently of environmental conditions. For circunventing that problem one approach is the introduction of a quantum computer model without quantum gate, where the quantum state is adiabatically altered by application of slowly changing external fields. Similarly, implementing quantum gates by adiabatic processes, for example by stimulated Raman adiabatic passage (STIRAP) robust gate operations is feasible. In general, solving the problems in

the way of large-scale experimental realization of quantum information processing is not an easy task. Subject of research is developing new methods for preserving

the quantum properties of qubits and manipulating their state, and finding such physical systems where the effects of decoherence can be avoided to large extent, and still many quantum bits can be realized and manipulated.

The research documented in the dissertation aimed at learning more about decoherence effects, and showing applications where the relaxation processes behind those effects are not only destructive of nature, rather provide some gains or at least their negative effects can be avoided. Our objective is to show that the combination of incoherent and coherent interactions allows

- the suppression of negative effects caused by incoherent transition channels,
- appearance of quantum interference when increasing the magnitude of the incoherent interactions,
- applications where the quantum properties of the state are preserved and the relaxation effects are used constructively.

### Methods

The dissertation starts with the introduction of open quantum systems. They can be modeled by a Hilbert space of direct product form. The subject of interest is one, usually the smaller part of the system, the larger part is considered to be the environment of the other subsystem. The assumption about the size of the environment, and the additional condition of lack of memory in the environment allows to perform the Born-Markov approximation, and that greatly simplifies the equations of motion of the smaller subsystem. Then the time evolution can be described by a master equation in Lindblad form. The Lindblad operators show which transition channels are responsible for relaxation in the system. The relaxation-less part of the time evolution is governed by the Hamiltonian, and if the dissipation processes

are negligible the time-evolution equations simplify to a Schrödinger equation. The relaxation processes usually cause decoherence, e.g. if the system initially is in a superposition of pure states the relaxation has the effect of transferring the state into a mixture of pure states, and the originally present interference effects attributed to quantum properties of the system are destroyed. Quantum trajectory methods are equivalent to the master equation in describing the time-evolution of the system. We have used the quantum jump method in Markov approximation. By using that method the time-evolution of individual quantum trajectories receive a physical meaning. A quantum jump occurs when the environment acts as a measuring device on the subsystem under investigation, and the back-action of the measurement is seen as a jump in the state of the quantum trajectory. The equations of motion describing an open quantum system are usually not analytically solvable if the interaction with external forces or the environment is time-dependent, and in these cases numeric methods have to be applied. In the presented work we dealt with small quantum systems, and the direct Runge-Kutta integration of the master equation was feasible. The more scalable quantum trajectory method has been used not for performance reasons, rather to show some insight in the evolution of single atoms and to allow calculation of time-correlation functions for a single trajectory.

First, we have investigated the connection between decoherence and quantum interference, in the system of strongly driven, collisionally perturbed Rb atoms. The atoms formed a small pressure molasses where by varying the pressure and the density of the atom cloud the collision rate was experimentally controllable. The internal state of the atoms was exposed by measuring the resonance fluorescence spectrum. It has been experimentally observed that by increasing the collision rate over the Rabi frequency an unexpectedly sharp dip appeared in the spectrum. For deeper understanding of that phenomenon a simple model has been applied for describing the system, and the resonance fluorescence spectrum has been calculated analytically

by application of the quantum regression theorem. By introducing dressed states of the atom the effects of detuning and the coherent excitation has been described in a rotating frame. Then the quantum jump method has been used to observe the time evolution of individual quantum trajectories, allowing a different perspective than the description with density operators. The quantum jumps could be attributed to collisions between atoms, and between collisions the time-evolution was a simple Rabi-oscillation. By increasing the collision rate time-correlations emerged in the phases of individual quantum trajectories, phase stabilization occurred between the dressed state levels. These correlations could be directly attributed to the occurrence of the narrow dip in the spectrum, the width of the dip and the length of correlations were strongly dependent. Finally we discuss the quantum interference effects that result from the phase stabilization, and show that the dip in the spectrum can be attributed to them.

In the second section the stimulated Raman adiabatic passage (STIRAP) method has been applied to a six-level  $\Lambda$  system. The decoherence effects are suppressed by evolving the system in a dark state throughout the whole process. Dark states are characterized by not emitting or absorbing photons during time evolution. Of course these states do not have infinite lifetime, but if that is much longer than the time to perform the STIRAP process the additional decoherence channels can be discarded from the model. The subspace of dark states can be altered by modifying the properties of the coherent excitation. By slow modification of these properties it is possible to achieve an adiabatic limit where the state of the system follows the instantaneous dark state adiabatically, and within a good approximation it does not participate in photon emission or absorption processes. It is important to check how precisely is that approximation fulfilled during time evolution, and to what level do incoherent processes change the final state. A well-known property of the STIRAP method is that it successfully avoids the negative effects of decoherence.

In our work the numeric integration of the Schrödinger equation has been used to determine the amount of population present in the bright states of the system. These are the states in which decoherence effects can occur. If the population in the bright states remains low throughout the whole process then these effects are guaranteed to be small. We have also calculated the final state analytically in the adiabatic limit. A numeric proof has been provided for being able to reach any prescribed final state adiabatically.

In the third section relaxation effects have been used in combination with coherent excitation for preparing prescribed mixed or pure states in the dark state subspace of a four-level  $\Lambda$  system. In the system considered the three base states interact with coherent laser pulses of different polarization, and participate in Raman transitions through the single excited state. The time-evolution of the system has been described by a master equation. Two cases have been considered, one which assumes that all transitions occur between the four levels, and one where we allow transitions to external levels by photon emission, and compensate for the population loss by a pumping process in the excited state. For both cases the asymptotic states of the system have been determined, together with the input-output relations. The asymptotic states are necessarily in the dark state subspace of the system, which is of dimension two in the system considered. By properly chosen polarization and relative phase of the applied laser pulses it has been possible to reach any twocomponent mixture of pure ground states with good approximation. The optimal pulse sequence parameters have been obtained numerically by the conjugate gradient method, and the obtained optimal pulses have been tested by fourth order Runge-Kutta integration of the master equation.

### Theses

- 1. The anomalous Mollow spectrum of coherently driven, collisionally perturbed Rb atoms has been analyzed. I have shown that modeling the collisional interaction by stochastic interaction, and increasing the stochastic noise the calculated resonance fluorescence spectrum matches the previous experimental observations. By investigating the background of that process I have shown the means by which frequent incoherent interactions are causing long-time phase correlation in the system. I have proven that these long-time phase correlations are responsible for the narrow dip in the spectrum [I, II].
- 2. I have proposed an efficient, precise method for calculating resonance fluorescence, absorption and emission spectra solely based on quantum trajectory simulations of the atomic system emitting the observed photons. The method is especially well applicable for small quantum systems having long characteristic time, and high stochastic noise amplitude [I, V].
- 3. I have shown that in a system, where coherent and incoherent interactions are both present, it is possible to reach any prescribed superposition of the three excited atomic states with high precision, in a robust manner. The applied method is resistant to small changes in the pulse shape or amplitude of the applied coherent excitations. The relative amplitude and phase of the pulses both influence the population in the final state [III].
- 4. I have determined a sufficient condition for the adiabaticity of the state preparation method developed for six-level Λ systems. The condition depends on the amplitude of the applied laser pulses, their timing and displacement. If fulfilled, the whole state preparation process is nearly adiabatic [III].
- 5. I have determined the asymptotic states and the relations between initial and

final states in a 4-level  $\Lambda$  system interacting with coherent laser pulses, taking into account the decoherence effects. I have shown that the relaxation drives the system into a two-dimensional subspace of the ground state space, and it can be adjusted freely by suitably choosing the relative amplitudes and phases of the lasers [IV].

6. In a system with an externally adjustable multidimensional dark state sub-space I developed a state preparation method. The method utilizes successive pulses that change the orientation of the dark state subspace. The method has been applied in a 4-level Λ system. Both in the case of no transitions into external states, and in the case when the population scattered into various external states is compensated by incoherent repumping of the excited state, I have shown that with few steps wide range of mixed and pure states can be prepared precisely [IV].

### Conclusions

We have shown that simultaneous presence of coherent and incoherent interactions can lead to quantum interference, and the incoherent processes are capable more than only to contribute to loss of quantum mechanical features. The incoherent processes when applied together with coherent interactions still do allow adiabatic population transfer to succeed, and can actively participate in robust state preparation. The state preparation methods outlined in the dissertation are general, they can be applied not only to atomic systems interacting with laser light, but to many other systems with similar Hamiltonian and incoherent interaction channels.

In the field of quantum informatics, independent of what kind of quantum computer realization we look at, the effects of decoherence show up during state preparation, information storage and when performing quantum operations. The effects of
decoherence are destructive from the viewpoint of quantum algorithms, and various methods have been developed to overcome the difficulties, for example storing the quantum state in a decoherence-free subspace, or the quantum error correction that is capable of detecting the event of leaving a prescribed subspace by measurement, and performing corrective actions. For realizing these schemes in practice the better understanding of incoherent processes, and their constructive application could be helpful.

# Publikációk jegyzéke

## Kapcsolódó közlemények

- [I] A. Karpati, P. Adam, W. Gawlik, B. Łobodziński, and J. Janszky, Quantumtrajectory approach to stochastically induced quantum-interference effects in coherently driven two-level atoms, Phys. Rev. A 66, 023821 (2002).
- [II] A. Karpati, P. Adam, W. Gawlik, B. Łobodziński, and J. Janszky, Quantumtrajectory approach to stochastically induced quantum-interference, Prog. Phys. 51, 179 (2003).
- [III] A. Karpati and Z. Kis, Adiabatic creation of coherent superposition states via multiple intermediate states, J. Phys. B 36, 905 (2003).
- [IV] A. Karpati, Z. Kis, and P. Adam, Engineering mixed states in a degenerate four-state system, Phys. Rev. Lett. 93, 193003 (2004).
- [V] A. Karpati, P. Adam, and J. Janszky, A method for calculating two-time correlation functions in the quantum trajectory approach, J. Opt. B 6, S79 (2004).

### További közlemények

- [VI] P. Adam, A. Karpati, J. Janszky, S. Szabo, and E. Lugosi, *Relations between input and output states of integrated optical systems*, Laser Phys. 1, 127 (2000).
- [VII] A. Karpati, P. Adam, J. Janszky, M. Bertolotti, and C. Sibilia, Nonclassical light in complex optical systems, J. Opt. B 2, 133 (2000).

- [VIII] S. Szabo, P. Adam, and A. Karpati, Phase optimized light in complex optical systems, Prog. Phys. 49, 1109 (2001).
- [IX] P. Adam, A. Karpati, W. Gawlik, and J. Janszky, Competitive stochastic noises in coherently driven two-level atoms and quantum interference, J. Opt. B 5, S221 (2003).
- [X] Z. Kis, A. Karpati, B.W. Shore, and N.V. Vitanov, Stimulated raman adiabatic passage among degenerate-level manifolds, Phys. Rev. A 70, 053405 (2004).
- [XI] Z. Kis, N.V. Vitanov, A. Karpati, C. Barthel, and K. Bergman, Creation of arbitrary coherent superposition states by stimulated raman adiabatic passage, Phys. Rev. A 72, 033403 (2005).
- [XII] A. Karpati, P. Adam, Z. Kis, and J. Janszky, *Stochastic unraveling of the time*evolution operator of open quantum systems, Eur. Phys. Lett. **75**, 209 (2006).

## Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Ádám Péternek az általa nyújtott szakmai segítséget és támogatást. Köszönettel tartozom Kis Zsoltnak, akivel közösen több érdekes cikken volt szerencsém dolgozni, és eközben sok új szakmai ismerettel lettem gazdagabb. További szerzőtársaimnak, Wojciech Gawliknak, Bogdan Lobodzińskinek és Janszky Józsefnek köszönöm hozzájárulásukat az eredmények kidolgozásához. Kollégáimnak, elsősorban Kiss Tamásnak, Domokos Péternek, Gábris Aurélnek, Koniorczyk Mátyásnak és Kurucz Zoltánnak köszönöm, hogy az évek során tanácsaikkal és kritikáikkal segítettek. Köszönöm Janszky Józsefnek, hogy lehetőséget adott az általa alapított kvantumoptika csoportban dolgozni. Hálával tartozom középiskolai fizikatanáromnak, Horváth Gábornak, hogy szigorú és következetes munkájával elindított a fizikusi pályán.

Végül köszönöm Ádám Péternek, Kis Zsoltnak, Kiss Tamásnak, és Mechler Mátyásnak a disszertáció alapos átnézésébe fektetett munkájukat.

# Irodalomjegyzék

- [1] N.F. Mott, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **126**, 79 (1930).
- [2] H.D. Zeh, Found. Phys. **3**, 69 (1970).
- [3] H.D. Zeh, Found. Phys. **3**, 109 (1973).
- [4] W.H. Zurek, Phys. Rev. D 24, 1516 (1981).
- [5] W.H. Zurek, Phys. Rev. D 26, 1862 (1982).
- [6] H. Ollivier and W.H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 88, 017901 (2001).
- H.J. Carmichael, Master Equations and Fokker-Planck Equations, Statistical Methods in Quantum Optics 1 (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
- [8] C.W. Gardiner, *Quantum Noise* (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- C.W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods, Second Edition (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [10] H.L. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation, Wiley Classics Library (John Wiley & Sons, 1990).
- [11] M.O. Scully and M.S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge, U.K., Cambridge University Press, 1997).

- [12] I.L. Nielsen, M.A.and Chuang, Quantum computation and quantum information (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [13] H.J. Carmichael, An Open Systems Approach to Quantum Optics, vol. M18 of Springer Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1993).
- [14] H-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).
- [15] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. 48, 119 (1976).
- [16] J.K. Asbóth, P. Adam, M. Koniorczyk, and J. Janszky, Eur. Phys. J. D 30, 403 (2004).
- [17] T.F. Havel, J. Math. Phys. 44, 534 (2003).
- [18] J.F. Poyatos, J.I. Cirac, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 78, 390 (1997).
- [19] V. Bužek, Phys. Rev. A 58, 1723 (1998).
- [20] G.M. D'Ariano and P. Lo Presti, Phys. Rev. Lett. 86, 4195 (2001).
- [21] M. Uhlmann, G. Plunien, R. Schützhold, and G. Soff, Phys. Rev. Lett. 93, 193601 (2004).
- [22] L. Diósi, Physics Letters A **112**, 288 (1985).
- [23] L. Diósi, Physics Letters A **114**, 451 (1986).
- [24] L. Diósi, Physics Letters A **129**, 419 (1988).
- [25] L. Diósi, Physics Letters A **132**, 233 (1988).
- [26] L Diosi, J. Phys. A **21**, 2885 (1988).
- [27] J. Dalibard, Y. Castin, and K. Mølmer, Phys. Rev. Lett. 68, 580 (1992).

#### Irodalomjegyzék

- [28] M.B. Plenio and P.L. Knight, Rev. Mod. Phys. 70, 101 (1998).
- [29] N. Gisin and I.C. Percival, J. Phys. A 25, 5677 (1992).
- [30] N. Gisin and I.C. Percival, J. Phys. A 26, 2233 (1993).
- [31] N Gisin and I C Percival, J. Phys. A 26, 2245 (1993).
- [32] C. Zener, Proc. R. Soc. **137**, 696 (1932).
- [33] C. Wittig, J. Phys. Chem. B **109**, 8428 (2005).
- [34] L.D. Landau, Phys. Z. Sow. 2, 46 (1932).
- [35] E. Arimondo, in *Progress in Optics XXXV* (Elsevier, Amsterdam, 1996), vol. 35, pp. 257–354.
- [36] D.A. Cardimona, M.G. Raymer, and C.R. Stroud, J. Phys. B 15, 55 (1982).
- [37] M.O. Scully, S.Y. Zhu, and A. Gavrielides, Phys. Rev. Lett. 62, 2813 (1989).
- [38] S.E. Harris, Phys. Rev. Lett. **62**, 1033 (1989).
- [39] A.H. Toor, S.Y. Zhu, and M.S. Zubairy, Phys. Rev. A 52, 4803 (1995).
- [40] P Zhou and S Swain, Phys. Rev. Lett. **78**, 832 (1997).
- [41] S.Y. Zhu, R.C.F. Chan, and C.P. Lee, Phys. Rev. A 52, 710 (1995).
- [42] S.Y. Zhu, L.M. Narducci, and M.O. Scully, Phys. Rev. A 52, 4791 (1995).
- [43] HR Xia, CY Ye, and SY Zhu, Phys. Rev. Lett. 77, 1032 (1996).
- [44] S.Y. Zhu and M.O. Scully, Phys. Rev. Lett. 76, 388 (1996).
- [45] P Zhou and S Swain, Phys. Rev. Lett. 77, 3995 (1996).
- [46] P Zhou and S Swain, Phys. Rev. A 56, 3011 (1997).

- [47] G. Grynberg and C. Cohen-Tannoudji, Opt. Commun. 96, 150 (1993).
- [48] Y. Prior, A.R. Bogdan, M. Dagenais, and N. Bloembergen, Phys. Rev. Lett. 46, 111 (1981).
- [49] A.D. Wilson-Gordon and H. Friedmann, Opt. Lett. 8, 617 (1983).
- [50] W. Gawlik, B. Łobodziński, and W. Chałupczak, in Frontiers of Quantum Optics and Laser Physics, edited by S.Y. Zhu, M.O. Scully, and M.S. Zubairy (Springer, Berlin, 1999), pp. 184–193.
- [51] Peng Zhou, Mao-Fa Fang, Qing-Ping Zhou, and Gao-Xiang Li, Physics Letters A 251, 199 (1999).
- [52] J. Dalibard, Y. Castin, and K. Mølmer, Phys. Rev. Lett. 68, 580 (1992).
- [53] C.W. Gardiner, A.S. Parkins, and P. Zoller, Phys. Rev. A 46, 4363 (1992).
- [54] R. Dum, P. Zoller, and H. Ritsch, Phys. Rev. A 45, 4879 (1992).
- [55] B.M. Garraway and P.L. Knight, Phys. Rev. A 49, 1266 (1994).
- [56] L. Tian and H.J. Carmichael, Phys. Rev. A 46, R6801 (1992).
- [57] K. Mølmer, Y. Castin, and J. Dalibard, J. Opt. Soc. Am. B 10, 524 (1993).
- [58] S.F. Chien, M.R.B. Wahiddin, and Z. Ficek, Phys. Rev. A 57, 1295 (1998).
- [59] H-P. Breuer, B. Kappler, and F. Petruccione, Phys. Rev. A 56, 2334 (1997).
- [60] H-P. Breuer, B. Kappler, and F. Petruccione, J. Phys. A **31**, L147 (1998).
- [61] G.S. Agarwal, Phys. Rev. A 18, 1490 (1978).
- [62] B.R. Mollow, Phys. Rev. **188**, 1969 (1969).
- [63] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).

- [64] C.A. Schrama, G. Nienhuis, H.A. Dijkerman, C. Steijsiger, and H.G.M. Heideman, Phys. Rev. A 45, 8045 (1992).
- [65] D.F. Walls and G.J. Milburn, in *Quantum Optics* (World Publishing, Beijing, 2004), pp. 210–214.
- [66] Qing Xu, Phys. Rev. A **78** (2008).
- [67] D. Witthaut, F. Trimborn, and S. Wimberger, Phys. Rev. A 79, 033621 (2009).
- [68] N. Rosen and C. Zener, Phys. Rev. 40, 502 (1932).
- [69] Yu N. Demkov and M. Kunike, Vestn. Leningr. Univ. Fiz. Khim. 16, 39 (1969).
- [70] F.T. Hioe, Phys. Rev. A **30**, 2100 (1984).
- [71] K-A. Suominen, B.M. Garraway, and S. Stenholm, Opt. Commun. 82, 260 (1991).
- [72] N.V. Vitanov, T. Halfmann, B.W. Shore, and K. Bergmann, Annu. Rev. Phys. Chem. 52, 763 (2001).
- [73] N.V. Vitanov, M. Fleischauer, B.W. Shore, and K. Bergmann, Adv. At. Mol. Opt. Phys. 46, 55 (2001).
- [74] P. Marte, P. Zoller, and J.L. Hall, Phys. Rev. 44, R4118 (1991).
- [75] M. Weitz, B.C. Young, and S. Chu, Phys. Rev. Lett. 73, 2563 (1994).
- [76] R.G. Unanyan, M. Fleischhauer, B.W. Shore, and K. Bergmann, Opt. Commun. 155, 144 (1998).
- [77] H. Theuer, R.G. Unanyan, C. Habscheid, K. Klein, and K. Bergmann, Opt. Express 4, 77 (1999).
- [78] R.G. Unanyan, B.W. Shore, and K. Bergmann, Phys. Rev. 59, 2910 (1999).

- [79] B.Y. Chang, I.R. Solá, V.S. Malinovsky, and J. Santamaría, Phys. Rev. 64, 033420 (2001).
- [80] R.G. Unanyan, B.W. Shore, and K. Bergmann, Phys. Rev. 63, 043401 (2001).
- [81] Z. Kis and F. Renzoni, Phys. Rev. 65, 032318 (2002).
- [82] Z. Kis and S. Stenholm, Phys. Rev. 64, 065401 (2001).
- [83] Z. Kis and S. Stenholm, J. Mod. Opt. **49**, 111 (2002).
- [84] Z. Kis and S. Stenholm, Phys. Rev. **64**, 063406 (2001).
- [85] B.W. Shore, J. Martin, M.P. Fewell, and K. Bergmann, Phys. Rev. 52, 566 (1995).
- [86] J. Martin, B.W. Shore, and K. Bergmann, Phys. Rev. 52, 583 (1995).
- [87] J. Martin, B.W. Shore, and K. Bergmann, Phys. Rev. 54, 1556 (1996).
- [88] C.E. Carroll and F.T. Hioe, Phys. Rev. Lett. 68, 3523 (1992).
- [89] T. Nakajima, M. Elk, J. Zhang, and P. Lambropoulos, Phys. Rev. 50, R913 (1994).
- [90] N.V. Vitanov and S. Stenholm, Phys. Rev. **60**, 3820 (1999).
- [91] L.P. Yatsenko, R.G. Unanyan, K. Bergmann, T. Halfmann, and B.W. Shore, Opt. Commun. 135, 406 (1997).
- [92] N.V. Vitanov and S. Stenholm, Phys. Rev. 56, 741 (1997).
- [93] E. Paspalakis, M. Protopapas, and P.L. Knight, Opt. Commun. 142, 34 (1997).
- [94] R.G. Unanyan, N.V. Vitanov, and S. Stenholm, Phys. Rev. 57, 462 (1998).

- [95] R.G. Unanyan, N.V. Vitanov, B.W. Shore, and K. Bergmann, Phys. Rev. 61, 043408 (2000).
- [96] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloue, *Quantum Mechanics, vol. 2* (Wiley-Interscience, New York, 2006).
- [97] I. Thanopulos, P. Kral, M. Shapiro, and E. Paspalakis, J. Mod. Opt. 56, 686 (2009).
- [98] I. Thanopulos, P. Kral, M. Shapiro, and E. Paspalakis, J. Mod. Opt. 56, 1 (2009).
- [99] Tian-Min Yan, Yong-Chang Han, Kai-Jun Yuan, and Shu-Lin Cong, Chem. Phys. 348, 39 (2008).
- [100] A. D. Boozer, Phys. Rev. A 77 (2008).
- [101] Frank Vewinger, Manfred Heinz, Bruce W. Shore, and Klaas Bergmann, Phys. Rev. A 75 (2007).
- [102] Christoph A. Marx and Werner Jakubetz, J. Chem. Phys. **125** (2006).
- [103] Ioannis Thanopulos and Moshe Shapiro, J. Chem. Phys. **125** (2006).
- [104] P. A. Ivanov and N. V. Vitanov, Opt. Commun. 264, 368 (2006).
- [105] JB Gong and SA Rice, J. Chem. Phys. **121**, 1364 (2004).
- [106] E Paspalakis and NJ Kylstra, J. Mod. Opt. **51**, 1679 (2004).
- [107] I Thanopulos, P Kral, and M Shapiro, Phys. Rev. Lett. 92 (2004).
- [108] M. Shapiro and P. Brumer, Physics Reports **425**, 195 (2006).
- [109] N.V. Vitanov and S. Stenholm, Phys. Rev. A 56, 1463 (1997).

- [110] M. Shapiro and P. Brumer, *Principles of the Control of Molecular Processes* (Wiley-Interscience, New York, 2003).
- [111] P. Král, Z. Amitay, and M. Shapiro, Phys. Rev. Lett. 89, 063002 (2002).
- [112] I. Thanopulos, P. Král, and M. Shapiro, Phys. Rev. Lett. 92, 113003 (2004).
- [113] J. Gong and S.A. Rice, Phys. Rev. A 69, 063410 (2004).
- [114] R. Somma, G. Ortiz, J.E. Gubernatis, E. Knill, and R. Laflamme, Phys. Rev. A 65, 042323 (2002).
- [115] D. Bacon, A.M. Childs, I.L. Chuang, J. Kempe, D.W. Leung, and X. Zhou, Phys. Rev. A 64, 062302 (2001).
- [116] V.E. Tarasov, J. Phys. A **35**, 5207 (2002).
- [117] A. Kastler, in Nobel Lectures, Physics 1963-1970 (Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1972).
- [118] B.W. Shore, The Theory of Coherent Atomic Excitation (Wiley, New York, 1990).
- [119] J.R. Morris and B.W. Shore, Phys. Rev. A 27, 906 (1983).
- [120] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing (1992).
- [121] Lei Wang, Xiao-Li Song, Ai-Jun Li, Hai-Hua Wang, Xiao-Gang Wei, Zhi-Hui Kang, et al., Opt. Lett. 33, 2380 (2008).
- [122] Wu Jin-Hui, Cui Cui-Li, Ba Nuo, Ma Qi-Rong, and Guo Xiu-Zhen, Chin. Phys. Lett. 24, 428 (2007).
- [123] A Fountoulakis, AF Terzis, and E Paspalakis, Phys. Rev. A 73 (2006).