

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Simulacija evaporativnega hlajenja atomov

Zaključna naloga pri predmetu Modelska analiza 2

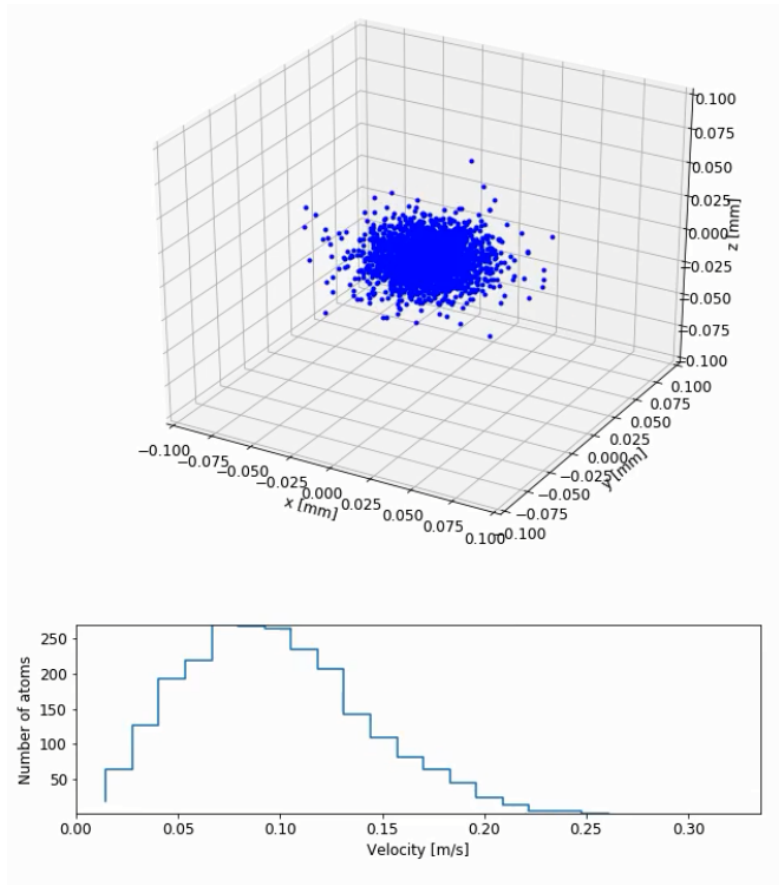
Jure Brence

Vpisna št.: 28162023

Predavatelj: prof. dr. Simon Širca

Asistent: doc. dr. Simon Čopar

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani
20.8.2017



Slika 1: Tridimenzionalni prikaz simuliranega cezijevega plina, ujetega v optični pasti in v procesu ohlajanja z izparevanjem. Spodaj porazdelitev velikosti hitrosti, ki ustreza Maxwell-Boltzmannovi statistiki.

Vsebina

1	Naloga	2
2	Teoretični uvod	2
2.1	Hladni atomi in Bose-Einsteinova kondenzacija	2
2.2	Hlajenje z evaporacijo	2
2.3	Optična past in magnetna levitacija	2
3	Simulacija	3
3.1	Diskretizacija časa in prostora	4
3.2	Zunanji potencial	4
3.3	Dvodelni trki	4
3.4	Izgube atomov	5
3.5	Začetni pogoji	6
3.6	Opazljivke	6
4	Rezultati	6
4.1	Gibanje v zunanjem potencialu	6
4.2	Termalizacija	8
4.3	Primerjava z eksperimentom - termično širjenje oblaka	9
4.4	Primerjava z eksperimentom - evaporativno hlajenje	10
5	Zaključek	13

1 Naloga

Namen naloge je razviti in implementirati simulacijo evaporativnega hlajenja atomov cezija s temperature nekaj mikrokkelvinov na nekaj nanokelvinov. Atome obravnavamo kot klasične delce in spremljamo njihovo gibanje v časovno odvisnem zunanem potencialu. Ključnega pomena so trki med atomi, ki jih obravnavamo stohastično.

Gre za direktno simulacijo Monte Carlo (DSMC), ki jo je v knjigi *Molecular Gas Dynamics* opisal G. A. Bird [8]. Kasneje je bila prilagojena za simuliranje hladnih atomov v optičnih pasteh [5, 7].

Glavna metoda evaluacije je primerjava rezultatov z eksperimenti laboratorija Ultracool na odseku F5 Instituta Jožef Stefan. Obravnavamo pa tudi nekaj posebnih primerov, za katere znamo teoretično napovedati obnašanje ali rezultate.

Simulacijo sem programiral v Pythonu, dokler nisem spoznal, da je zadeva enostavno prepočasna in ne omogoča simuliranja zadostnega števila atomov. Po prehodu na C++ je simulacija hitrejša približno petnajstkrat.

2 Teoretični uvod

2.1 Hladni atomi in Bose-Einsteinova kondenzacija

Eksperimenti z ultra hladnimi atomi so zelo privlačno orodje za osnovne raziskave na področju kvantne fizike in fizike trdne snovi. Pri tem raziskovalci pogosto želijo doseči Bose-Einsteinov kondenzat (BEC) - kolektivno stanje snovi, ko so vsi atomi v najnižjem kvantnem stanju. Fazni prehod se zgodi pri ohlajanju redkega plina na zelo nizke temperature, reda nekaj deset nanokelvinov. Eksperimentalno je bil prvi BEC ustvarjen leta 1995 z rubidijem, pri cezijev BEC pa leta 2002.

Postopek ohlajanja plina na ultra nizke temperature v splošnem temelji na dva fizikalnih principih: laserskem hlajenju in hlajenju z izparevanjem. V tipičnem cezijevem eksperimentu se atome v vakuumskem sistemu najprej upočasnijo in ujame s pomočjo laserske svetlobe in magnetooptične pasti. Tedaj je v pasti ujetih nekaj sto milijonov atomov pri temperaturi nekaj sto mikrokkelvinov. Naslednji korak je uporaba Ramanskih prehodov za zbiranje atomov v dobro definirano nizkoležeče energijsko stanje, pri čemer se atomi ohladijo na nekaj mikrokkelvinov. Za zadnji korak se nekaj sto tisoč atomov z izredno močnimi laserji ujame v dipolno optično past. Z evaporativnim hlajenjem atomov se doseže območje nanokelvinov, kar je dovolj za kondenzacijo [1].

2.2 Hlajenje z evaporacijo

Atomi, ujeti v optični pasti se ohlajajo, ko nekateri atomi uspejo zbežati iz potencialne jame pasti. Večjo verjetnost za pobeg imajo hitrejši atomi, njihov odhod pa zniža povprečen kvadrat hitrosti ansabla, torej zniža temperaturo. Z drugimi besedami, pobežli atomi odnašajo velik delež kinetične energije iz oblaka atomov. Temu procesu pravimo spontana ali naravna evaporacija.

Število pobežlih atomov na časovno enoto tekom naravne evaporacije eksponentno upada. Da s hlajenjem nadaljujemo, moramo omogočiti pobeg tudi počasnejšim atomov z metodo prisilne evaporacije. Najpogosteje se to doseže s postopnim nižanjem globine pasti, kar v praksi pomeni nižanje moči laserskih žarkov, ki tvorijo optično past.

Pogost pristop k evaporativnemu hlajenju cezija je uporaba dveh optičnih pastih. Ena je zelo široka in plitka in služi kot "rezervoar" atomov. Druga, "dimple" past, je zelo ozka in globoka. Po Ramanovem ohlajanju se atome najprej naloži v rezervoar, nato pa postopno še v dimple, kar oblak močno zgosti. Postopek evaporacije poteka v ozki pasti [3, 4]. Sam postopek nalaganja ni trivialen in je vir precejšnjih izgub in gretja atomov. V trenutni fazi sem simulacijo omejil na atome v dimple pasti. Kasneje je namen simulirati še nalaganje iz rezervoarja v dimple.

2.3 Optična past in magnetna levitacija

Optična past deluje podobno kot znana optična pinceta. Električno polje \vec{E} laserskega žarka v atomu inducira dipolni moment $\epsilon_0\chi_a\vec{E}$. Interakcijska energija tega dipola se zapiše kot $U = \frac{1}{2}\epsilon_0\chi_a E^2$ in je torej sorazmerna z intenziteto svetlobe na mestu atoma. Dipolna sila vleče atom na mesto najvišje intenzitete.

Intenziteta ima v žarku gaussovski profil. Po krajši izpeljavi dobimo pospešek atoma cezija zaradi sile dveh prekrizanih žarkov na atom:

$$a_x = -4A \frac{P_1(t)}{w_1^4} x(t) e^{-2 \frac{x(t)^2 + z(t)^2}{w_1^2}},$$

$$a_y = -4A \frac{P_2(t)}{w_2^4} y(t) e^{-2 \frac{y(t)^2 + z(t)^2}{w_2^2}},$$

$$a_z = -4Az(t) \left(\frac{P_1(t)}{w_1^4} e^{-2 \frac{x(t)^2 + z(t)^2}{w_1^2}} + \frac{P_2(t)}{w_2^4} e^{-2 \frac{y(t)^2 + z(t)^2}{w_2^2}} \right),$$

kjer so x, y, z koordinate atoma, $P_1(t), P_2(t)$ in w_1, w_2 moči in premera laserskih žarkov, konstanta $A = \frac{3c^2\Gamma}{m\omega_0^3} \left(\frac{1}{\omega+\omega_0} - \frac{1}{\omega-\omega_0} \right)$ pa združuje maso atoma cezija m , frekvenco laserskih žarkov (1064 nm), efektivno frekvenco atomskega prehoda ω_0 in efektivno spektralno širino prehoda Γ [4].

Drug izvor zunanje sile na atome je nehomogeno magnetno polje. Cezijevi atomi so namreč dovolj težki, da sila gravitacije prevlada nad dipolno silo optične pasti. Zato potrebujemo dodatno silo v navpični smeri, ki jo dosežemo s kvadrupolnim magnetnim poljem. Tega se ustvari s parom tuljav v anti-Helmholtzovi konfiguraciji. Takšno polje ima v okolici centra simetrane tuljav konstanten gradient jakosti polja. Ker imamo atome spinsko polarizirane v stanju $F = 3, m_F = +3$, deluje na njih sila $F_z = \mu_B m_F g \frac{\partial B}{\partial z}$ [4]. Žal nam pa Maxwellove enačbe ($\nabla \vec{B} = 0$) povedo, da ne moremo imeti gradienta polja v z smeri, brez da bi imeli tudi gradient v smereh x in y . Sili, ki posledično nastane, pravimo “anti-trapping” sila. Zanj je značilno, da atome potiska radialno navzven v ravnini $x - y$, sorazmerna pa je z lateralno oddaljenostjo od centra tuljav. Vpliv te sile se da zmanjšati z dovolj velikim homogenim poljem v z -smeri, ki ga dosežemo z dodatnim parom tuljav v Helmholtzovi konfiguraciji [4]. Končen izraz za pospešek zaradi magnetnega polja zapišemo:

$$a_x = \frac{3}{16} \frac{\mu_B}{mB} \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^2 (x - x_B),$$

$$a_y = \frac{3}{16} \frac{\mu_B}{mB} \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^2 (y - y_B),$$

$$a_z = \frac{3}{4} \mu_B \frac{\partial B}{\partial z} - g,$$

kjer so x, y, z koordinate atoma, μ_B Bohrov magneton, m masa cezija, g gravitacijski pospešek, B jakost polja na mestu atoma in x_B, y_B, z_B koordinate centra simetrane tuljav, kar ustreza minimumu jakosti magnetnega polja. V idealnem primeru se minimum magnetnega polja ujema s centrom optične pasti, v praksi pa imamo pogosto do 100 μm razlike.

3 Simulacija

V simulaciji spremljamo nekaj sto tisoč atomov. Da pridobimo na hitrosti računanja, uvedemo koncept superatomov. Vsak superatom predstavlja M atomov. Skupno število simuliranih superatomov poimenujmo N_S , skupno število atomov pa N , kjer velja $N = \sum_j^{N_S} M_j$. V tipični simulaciji spremljamo 1000 superatomov, ki v začetku vsak vsebuje 300 atomov, torej je $N_S = 10^3$ in $N = 3 \times 10^5$. Velikost superatomov se spremlja za vsak superatom posebej in se zmanjšuje z eno- in trodelčnimi izgubami.

Kinematiko superatomov med trki simuliramo direktno, trke pa obravnavamo stohastično. Namesto, da bi za vsak par atomov preverjali ali se v resnici sipata, obravnavamo le trke med superatomimi, ki so v isti prostorski celici. Za naključno izbran par superatomov izračunamo sipalni presek in verjetnost za trk. Z žrebanjem se odločimo, ali se trk zgodi, nato pa sipanje obravnavamo kot popolnoma elastični trk. Velikost superatomov je relevantna pri računanju verjetnosti za trk ter pri računanju izgub.

En časovni korak v simulaciji je sestavljen iz:

1. Izgube zaradi interakcije z ozadjem.

2. Propagacija superatomov: $\vec{r}_j(t) \rightarrow \vec{r}_j(t + dt)$.
3. Pospešek zaradi zunanjšega potenciala $\vec{v}_j(t) \rightarrow \vec{v}_j(t + dt)$.
4. Določanje, v katero celico pade superatom.
5. Poračun dvodelčnih trkov v zasedenih celicah. $\vec{v}_i, \vec{v}_j \rightarrow \vec{v}'_i, \vec{v}'_j$.
6. Izgube zaradi trodelčnih interakcij.
7. Izgube zaradi superatomov izven mej prostora ali pa poračun odbojev na meji.

3.1 Diskretizacija časa in prostora

Simulacija poteka v diskretnih časovnih korakih tipične dolžine $dt = 50 \mu\text{s}$. Vsakemu superatomu pripada pozicija \vec{r} in hitrost \vec{v} , povezana z zvezo $\vec{r}(t + dt) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)dt$. Prostor diskretiziramo v N_c^3 kubične celice z volumnom $V_c = h^3$ in indeksi (i, j, k) s povezavo $x = ih, y = jh, z = kh$. Celoten prostor je omejen na kocko tipične dimenzije $100 \mu\text{m}$. Superatomi, ki dosežejo mejo, so izgubljeni in odstranjeni iz simulacije, ali pa se od roba elastično odbijejo, odvisno od eksperimenta, ki ga simuliramo.

Časovni korak mora biti dovolj kratek, da je $v \times dt$ superatomov veliko manjši od dimenzije optične pasti, ter krajši od povprečnega časa med dvodelčnimi trki. Drugemu pogoju ni težko zadostiti, saj simuliramo redke plin - najvišja številska gostota je tipično reda 10^{12} 1/m^3 . Postopek hlajenja z evaporacijo traja od dve do pet sekund, torej je pri $dt = 50 \mu\text{s}$ potrebno v simulaciji izvesti od štirideset tisoč do sto tisoč časovnih korakov. Za izbiro velikosti celic je ključnega pomena tipično število superatomov na celico. Zagotoviti želimo dovolj majhne celice, da so atomi v celici prostorsko blizu in so trki med njimi smiselni. Hkrati pa morajo biti celice dovolj velike, da ni večina superatomov samih v celicah, kar bi trke onemogočilo. Empirično se je za najboljše izkazalo med $30 \times 30 \times 30$ in $50 \times 50 \times 50$ celic.

3.2 Zunanji potencial

Pri simulaciji hlajenja z evaporacijo sta prisotna dva zunanja potenciala. Prvega ustvarjata prekrizana laserska žarka optične pasti, drugega pa kvadrupolno magnetno polje, s katerimi atome levitiramo. Povezava med potencialom U in silo \vec{F} je znana zveza $\vec{F} = -\nabla U$. Numerično računanje gradienta seveda ni potrebno, saj ga znamo za dana potenciala izračunati analitično in v simulaciji direktno računati s pospeškom $\vec{v}_j(t + dt) = \vec{v}_j(t) + \vec{a}_j(t)dt$.

3.3 Dvodelčni trki

Približki pri obravnavi trkov dveh atomov dajo simulaciji Monte-Carlo značaj. Obravnava trkov je nujno potrebna, saj je to mehanizem, ki omogoča termalizacijo oblaka. Kinetična teorija plinov nam pove, da je porazdelitev velikosti hitrosti atomov v termičnem ravnovesju Maxwell-Boltzmannova. Če ima plin drugačno porazdelitev, trki poskrbijo, da po določenem času preide v Maxwell-Boltzmannovo. Pri evaporativnem hlajenju iz pasti bežijo atomi z visoko hitrostjo, ki torej pripadajo repu porazdelitve. Za učinkovito hlajenje je ključno, da se globina pasti manjša dovolj počasi, da uspejo trki držati plin v termičnem ravnovesju.

V simulaciji se omejimo na obravnavo trkov znotraj posamezne celice, ki vsebuje n_S superatomov. Izmed $n_S(n_S - 1)/2$ možnih parov superatomov naključno izberemo $n_S/2$ parov, tako da ima vsak superatom točno eno priložnost za trk, razen če je v celici neparno število atomov. Ta približek utemeljimo z prej omenjenim pogojem, da je teoretičen povprečen čas med trki daljši od časovnega koraka dt . Fizikalno torej ne bi bilo pravilno, če bi en atom lahko v enem koraku trčil večkrat. Verjetnost za trk izbranega para superatomov z indeksoma j in k in velikostima M_j in M_k je

$$P = 1 - (1 - p)^{M_j M_k},$$

kjer je p verjetnost za trk specifičnega atoma iz j -tega superatoma s specifičnim atomom iz k -tega superatoma. Z drugimi besedami, P je verjetnost, da pri trku dveh superatomov trči vsaj en par

vsebovanih atomov. Verjetnost p je določena z razmerjem relativnega volumna, ki ga v času dt opišeta superatoma, in volumnom celice:

$$p = \frac{\sigma v_r dt}{V_c},$$

kjer je σ sipalni presek, $v_r = |\vec{v}_j - \vec{v}_k|$ velikost relativne hitrosti superatomov in V_c volumen celice. Sipalni presek se računa po enačbi

$$\sigma = \frac{8\pi a^2}{1 + k_r^2 a^2},$$

kjer je $k_r = \frac{m}{\hbar} v_r$ relativni de-Brogliejev vektor, a pa sipalna dolžina. Ta je v primeru cezija zaradi pojava Feschbachovih resonanc odvisna od magnetnega polja po empirični zvezi

$$a(B) = 100.42 \text{ nm} \left(1 - \frac{30.56 \text{ G}}{13.46 \text{ G} + B}\right).$$

Trk izbranih superatomov se torej zgodi, če je izžrebano naključno število manjše od P :

$$\xi < P; \quad \xi \in U(0, 1).$$

Sipanje obravnavamo popolnoma elastično, torej kot trk dveh biljardnih krogel. V tem modelu velja ohranitev skupne gibalne količine in skupne kinetične energije. Rešitev problema je

$$\begin{aligned} m\Delta\vec{v}_1 &= -\vec{p}, & m\Delta\vec{v}_2 &= \vec{p}, \\ \vec{p} &= -n_{21}(n_{21}(\vec{v}_2 - \vec{v}_1))m, \\ n_{21} &= \frac{r_2 - r_1}{|r_2 - r_1|}. \end{aligned}$$

Na tem mestu je potreben razmislek. Zgoraj zapisana rešitev problema klasične mehanike velja za kroglji s trajektorijama, ki dejansko trčita. V našem primeru to skoraj nikoli ni res, saj smo izbrali naključna superatoma in se odločili ali trčita, brez upoštevanja njunih dejanskih pozicij in trajektorij. Zveznica med superatomoma n_{21} , ki nastopa v rešitvi, je torej v našem primeru nesmiselna. Edino zagotovilo je, da razdalja med superatomoma ne more biti večja od dimenzije celice.

Spomnimo pa se, da trke potrebujemo le za delovanje termalizacije. Fizikalna pravilnost trajektorij po trku ni pomembna, zanima nas le izmenjava energije. Porazdelitev sipalnega kota je izotropna, kar pomeni, da dobimo enake rezultate, če zveznico med atomoma naključno izžrebamo, saj delujemo v velikem ansamblu. Ker med pozicijami superatomov znotraj celice ni nobene povezave, je žrebanje ekvivalentno računanju z dejansko zveznico superatomov. Naša obravnava dvodelčnih interakcij v resnici ni nič drugega kot naključno mešanje komponent hitrosti med superatomoma, ki ohranja skupno gibalno količino in kinetično energijo, kar je točno to, kar je potrebno za termalizacijo.

3.4 Izgube atomov

Atomi se iz optične pasti izgubljajo iz treh razlogov. Prvi je, da enostavno uspejo pobegniti iz pasti. Za tega poskrbi že propagacija superatomov. Drug razlog je interakcija atomov v pasti z ozadjem neohlajenih atomov, ki jih vakuumske črpalke niso uspele odstraniti iz komore. Tem izgubam pravimo tudi enodelčne izgube, saj so sorazmerne s številom atomov v pasti. Koefficient izgub določimo eksperimentalno iz življenskega časa dipolne pasti, ki v našem primeru ustreza karakterističnemu času 17s. V enem časovnem koraku se torej izgubi

$$\Delta N = N \frac{dt}{17 \text{ s}}$$

atomov. Te izgube obravnavamo na nivoju celotne simulacije in jih naključno porazdelimo med superatomi. Tretji izvor izgub so trodelčne interakcije med atomi. Pri postopku hlajenja z evaporacijo poskušamo oblak atomov ne le ohladiti, temveč tudi čim bolj zgostiti, saj nas tudi to vodi bližje kondenzaciji. Glavna omejitev pri tem pa trodelčne izgube, ki so sorazmerne z številsko gostoto atomov na tretjo potenco. V simulaciji trodelčne izgube obravnavamo za vsako celico posebej. V enem časovnem koraku se v specifični celici izgubi

$$\Delta N = K_3(a) \left(\frac{n}{V_c}\right)^3 dt,$$

kjer je n število atomov v celici, K_3 pa je koeficient trodelčnih izgub [7] in je sorazmeren s sipalno dolžino na četrto potenco, torej je močno odvisen od magnetnega polja, ki ga lahko natančno nadzorujemo. Te izgube enakomerno porazdelimo med superatomi znotraj celice.

3.5 Začetni pogoji

Atomi v optični pasti v termičnem ravnovesju imajo gaussovsko prostorsko porazdelitev številske gostote. Takšno porazdelitev vzamemo tudi za začetno stanje v simulaciji. Središče oblaka se ujema s središčem optične pasti. Začetna hitrostna porazdelitev je Maxwell-Boltzmannova. Da se pokazati, da če v vsaki od treh dimenzij postavimo gaussovsko porazdelitev hitrosti, se velikost celotne hitrosti sešteje v Maxwell-Boltzmannovo porazdelitev. Začetne hitrosti superatomov torej žrebamo po zvezi

$$v_i(t=0) = \xi \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}}; \quad \xi \in N(0, 1); \quad i \in \{x, y, z\},$$

kjer je T_0 izbrana začetna temperatura oblaka.

3.6 Opazljivke

Pri polni simulaciji ohlajanja z evaporacijo sta najbolj zanimivi opazljivki število atomov v pasti in temperatura oblaka. To sta tudi količini, ki ju pri eksperimentu najpogosteje opazujemo. Temperaturo oblaka lahko v vsakem trenutku izračunamo po definiciji iz kinetične teorije plinov, saj točno poznamo hitrost vsakega atoma:

$$T(t) = \langle |\vec{v}(t)|^2 \rangle \frac{m}{3k_B}.$$

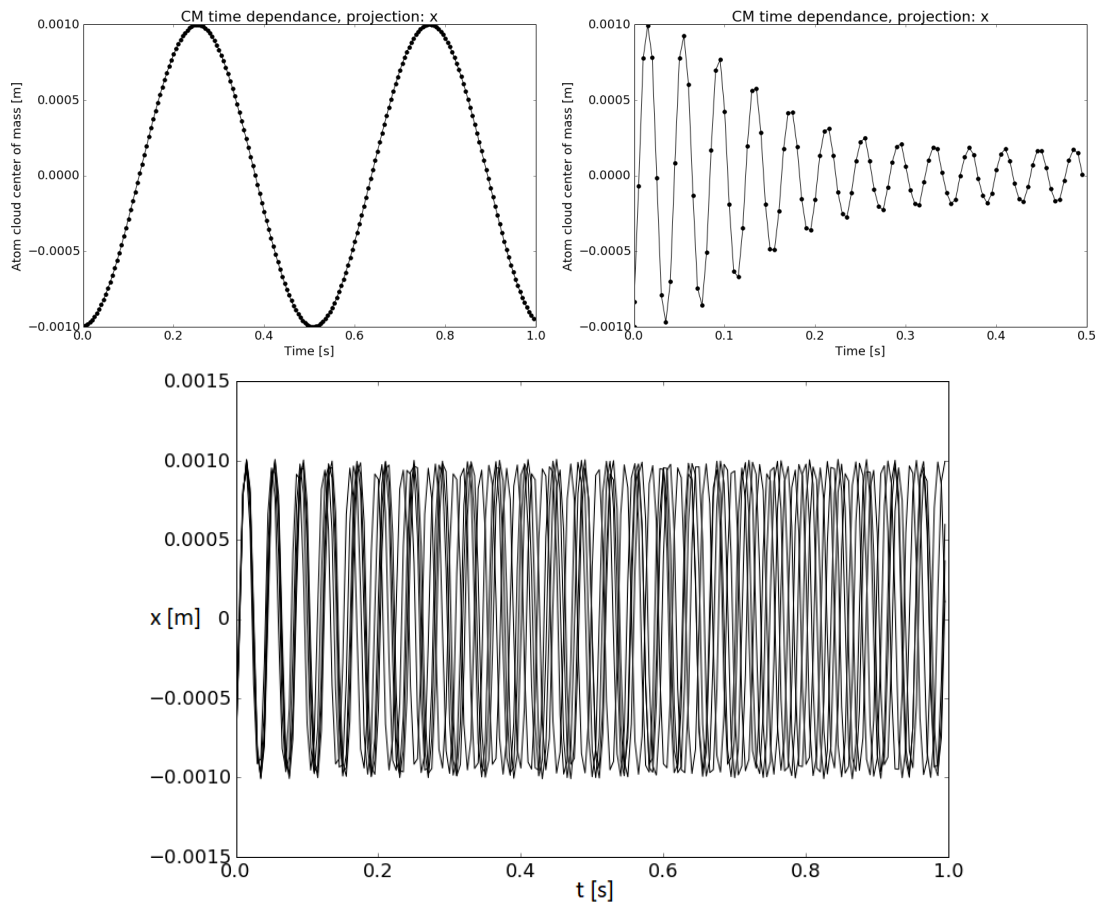
Ostale zanimive količine so še število dvodelčnih trkov na atom, širina oblaka atomov, prispevki različnih virov izgub ter 3D animacija gibanja atomov.

4 Rezultati

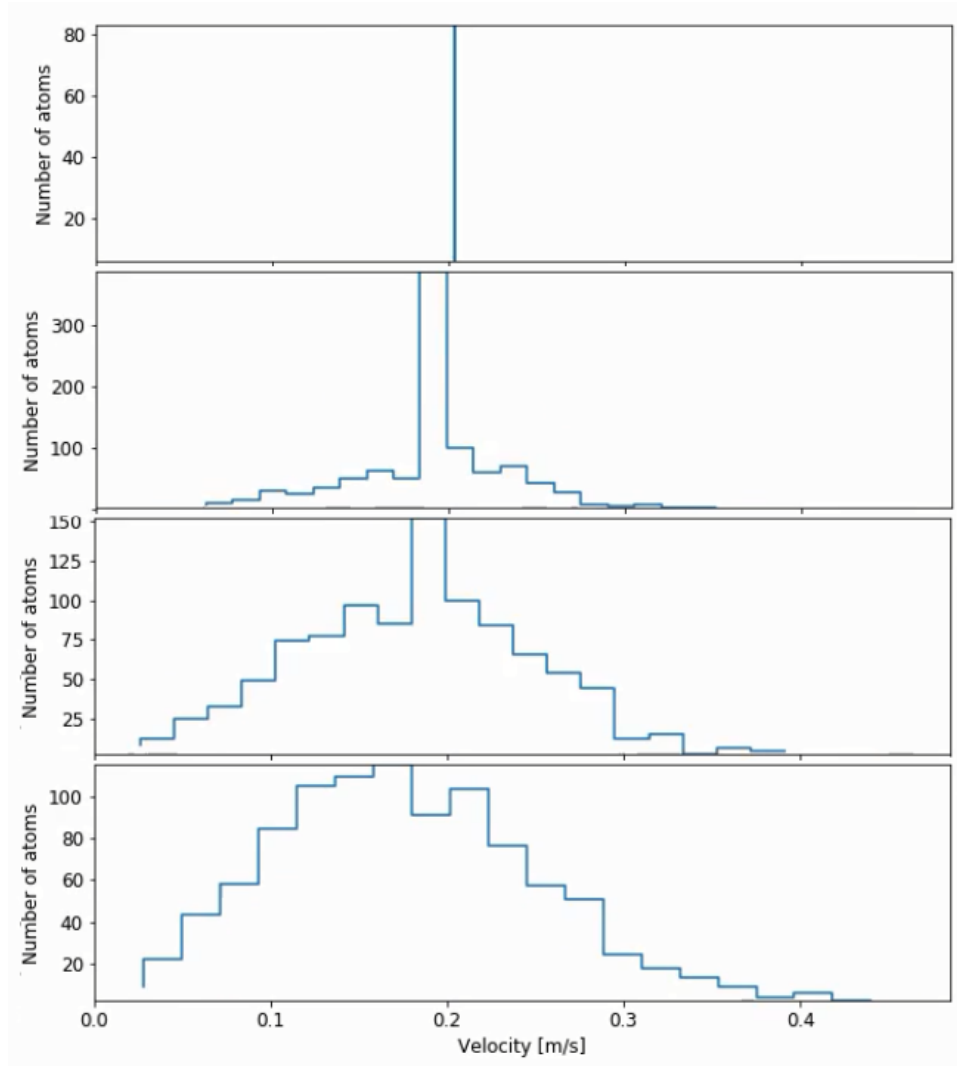
Preden se lotimo evaluacije celotne simulacije, si je smiselno ogledati nekaj testov posameznih komponent modela.

4.1 Gibanje v zunanjem potencialu

Eden najenostavnejših testov je opazovanje gibanja oblaka atomov v zunanjem potencialu. Vključeni koraki simulacije: propagacija atomov, pospešek zaradi zunanjega potenciala. Oblak atomov najprej postavimo v harmonični potencial ter ga izmaknemo iz centra potenciala v smeri osi x . Opazujemo gibanje težišča atomov v tej smeri. Dobimo pričakovano harmonično nihanje, na sliki 2 levo zgoraj. Sedaj pa postavimo atome v optično past, ki ima Gaussov profil. Rezultat vidimo na sliki 2 desno zgoraj: nihanje težišča se hitro izniha. Slika 2 spodaj nam razloži zakaj. V optični pasti nihanje ni harmonično. V začetku atomi še nihajo v fazi, ta koherenca pa se s časom izgublja. Tudi to je pričakovano obnašanje za nihanje v neharmonični pasti.



Slika 2: Levo zgoraj: gibanje težišča oblaka atomov v harmonični pasti. Desno zgoraj: gibanje težišča oblaka atomov pasti z gaussovskim profilom. Spodaj: trajektorije petih atomov v gaussovski pasti, ki so gibanje začeli blizu skupaj.



Slika 3: Časovni razvoj porazdelitve velikosti hitrosti oblaka atomov v škatli.

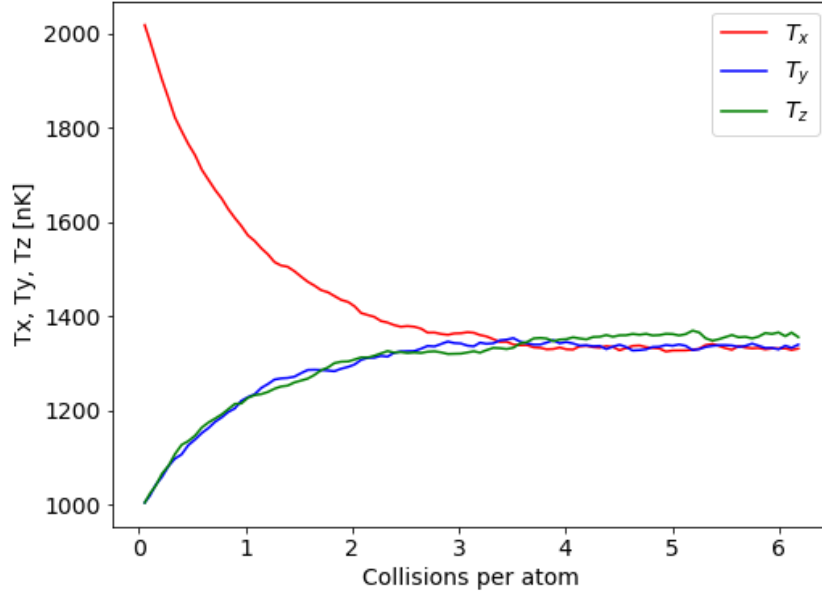
4.2 Termalizacija

Termalizacija je ključna komponenta hlajenja z evaporacijo, zanjo pa poskrbijo dvodelčne interakcije med atomi. Za testiranje pravilnosti si pogledjmo dva poskusa. Oblak atomov postavimo v škatlo, od katere se atomi odbijajo popolnoma elastično. Vse zunanje potenciale izklopimo. Vključena koraka simulacije sta propagacija atomov in dvodelčni trki. Začnimo z zelo neravnesno hitrostno porazdelitvijo, denimo delta funkcijo v velikosti hitrosti (smer še vedno žrebamo) in opazujemo, kaj se dogaja s porazdelitvijo hitrosti. Pričakujemo, da se bo porazdelitev prelevila v Maxwell-Boltzmannovo. Slika 4 prikazuje časovni razvoj porazdelitve velikosti hitrosti. Po nekaj sto milisekundah porazdelitev res preide v ravnovesno.

Vidimo, da termalizacija deluje, sedaj pa želimo preveriti še hitrost termalizacije. Tukaj dejanski čas, ki ga sistem potrebuje za doseg ravnovesnega stanja, ni bistvena količina. Čas termalizacije je namreč odvisen od števila trkov na časovno enoto, to pa je odvisno od gostote in temperature oblaka. Najbolj informativna neodvisna spremenljivka je kumulativno število trkov na atom. Z meritvami je bilo ugotovljeno, da je za zadostno termalizacijo v povprečju potrebnih 2.7 trkov na atom [6].

To lahko preverimo s poskusom, kot je zamišljen v delu [5]. Tokrat začnemo z Maxwell-Boltzmannovo porazdelitvijo hitrosti, s tem da je temperatura v eni dimenziji višja kot v ostalih dveh:

$$v_x(t=0) = \xi_1 \sqrt{2 \mu\text{K} \frac{k_B}{m}}; \quad \xi_1 \in N(0, 1);$$



Slika 4: Časovni razvoj temperature v različnih smereh v odvisnosti od števila trkov na atom. Začetno stanje z višjo temperaturo v smeri osi x .

$$v_y(t=0) = \xi_2 \sqrt{1 \mu\text{K} \frac{k_B}{m}}; \quad \xi_2 \in N(0, 1);$$

$$v_z(t=0) = \xi_3 \sqrt{1 \mu\text{K} \frac{k_B}{m}}; \quad \xi_3 \in N(0, 1);$$

To stanje je neravnovesno, sistem želi doseči enako temperaturo v vseh treh dimenzijah. Ko se atomi sipajo, prihaja do med-dimenzionalnega mešanja hitrosti, kar eventuelno izenači temperature. Slika 4 prikazuje opisan poskus. Zdi se, da je termalizacija v simulaciji kar blizu navedenim 2.7 trkom na atom. Pri večjih časih se zdi, da T_z prevlada nad ostalima temperaturama, a gre le za naključne fluktuacije, ki izginejo z večjim številom atomov v simulaciji.

4.3 Primerjava z eksperimentom - termično širjenje oblaka

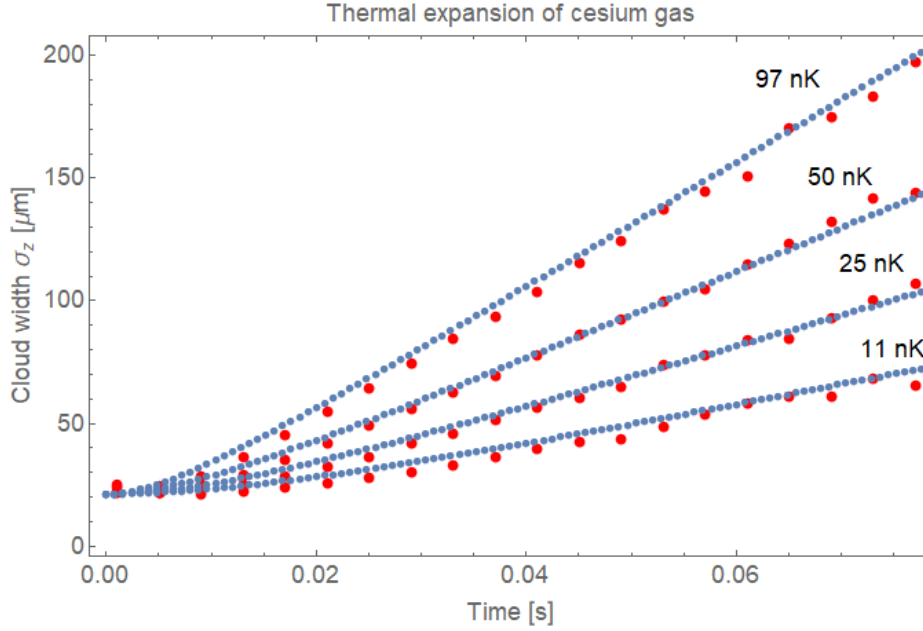
Glavni cilj razvoja simulacije hlajenja je teoretična podpora zaključkov eksperimentov in možnosti optimizacije eksperimentalnih parametrov na simulaciji. V ta namen je nujno, da se rezultati simulacije dobro ujemajo z rezultati eksperimenta. Simulacijo bomo primerjali z eksperimenti laboratorija Ultracool na Institutu Jožef Stefan.

Oblak atomov v praznem prostoru se s časom širi, saj hitrosti posameznih atomov kažejo v različne smeri. Prostorska porazdelitev ostaja ves čas gaussovska, hitrost širjenja oblaka pa je odvisna od temperature atomov. Ta lastnost se v eksperimentalnem delu izkorišča kot glavna metoda merjenja temperature. Časovna odvisnost širine oblaka σ se zapiše kot:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sigma_0^2 + \frac{k_B T}{m} t^2},$$

kjer je σ_0 začetna širina, k_B Boltzmannova konstanta, T temperatura oblaka in m masa atoma [4]. Pri temperaturah pod $1 \mu\text{K}$ se oblak širi dovolj počasi, da bi v realnem eksperimentu zaradi gravitacije padel izven vidnega območja kamere. Da se temu izognemo, je oblak potrebno levitirati, kar pa s sabo prinese antitrapping silo. Ker je ta sila odvisna od lege posameznega atoma, prinese dodatno širjenje oblaka v $x - y$ ravnini. Zgornja zveza pa še vedno velja za širino v smeri z .

Slika 5 primerja rezultate simulacije z eksperimentom termičnega širjenja oblaka atomov pri štirih različnih temperaturah. Vključeni koraki simulacije so propagacija atomov in dvodelčni trki (rezultati so enaki z in brez trki). Vidimo zelo dobro ujemanje rezultatov z eksperimentalnimi.



Slika 5: Časovni razvoj širine oblaka v z smeri. Rdeča barva označuje eksperimentalne podatke, modra pa rezultate simulacije.

4.4 Primerjava z eksperimentom - evaporativno hlajenje

Končno testirajmo še potek evaporativnega hlajenja atomov v cezijevelem eksperimentu laboratorija Ultracool, pri katerem je bil dosežen Bose-Einsteinov kondenzat s približno deset tisoč atomi.

Vsi parametri v simulaciji, ki opisujejo realne količine, se točno ujemajo z eksperimentalnimi. Pred začetkom hlajenja z evaporacijo je v optični pasti $N_0 = 5 \times 10^5$ atomov pri temperaturi $T_0 = 2.5 \mu\text{K}$. Žarka, ki tvorita optično past, imata premer $w_1 = w_2 = 80 \mu\text{m}$, začetna širina oblaka pa se ujema s širino optične pasti. Prvi laserski žarek ima moč $P_1 = 0.34 \text{ W}$, drugi pa $P_2 = 0.28 \text{ W}$. Minimum magnetnega polja je od središča pasti oddaljen $130 \mu\text{m}$ v smeri osi x in $110 \mu\text{m}$ v smeri osi y . V središču pasti je jakost magnetnega polja $B = 24 \text{ G}$, gradient jakosti magnetnega polja v smeri osi z pa $\frac{\partial B}{\partial z} = 31.14 \text{ G/cm}$. Prisilna evaporacija se izvaja z manjšanjem moči obeh laserskih žarkov po eksponentni funkciji s karakterističnim časom $\tau = 0.75 \text{ s}$.

Parametri simulacije, ki nimajo eksperimentalne ustreznice, so število superatomov $N_S = 1000$ in začetna velikost superatoma $M = 500$. Časovni korak je $50 \mu\text{s}$, prostor je omejen na kocko s stranico dolžine $100 \mu\text{m}$ in razdeljen na $50 \times 50 \times 50$ celic s stranico dolžine $2 \mu\text{m}$. To so parametri, s katerimi lahko uravnavamo simulacijo tako, da najbolje opisuje eksperiment.

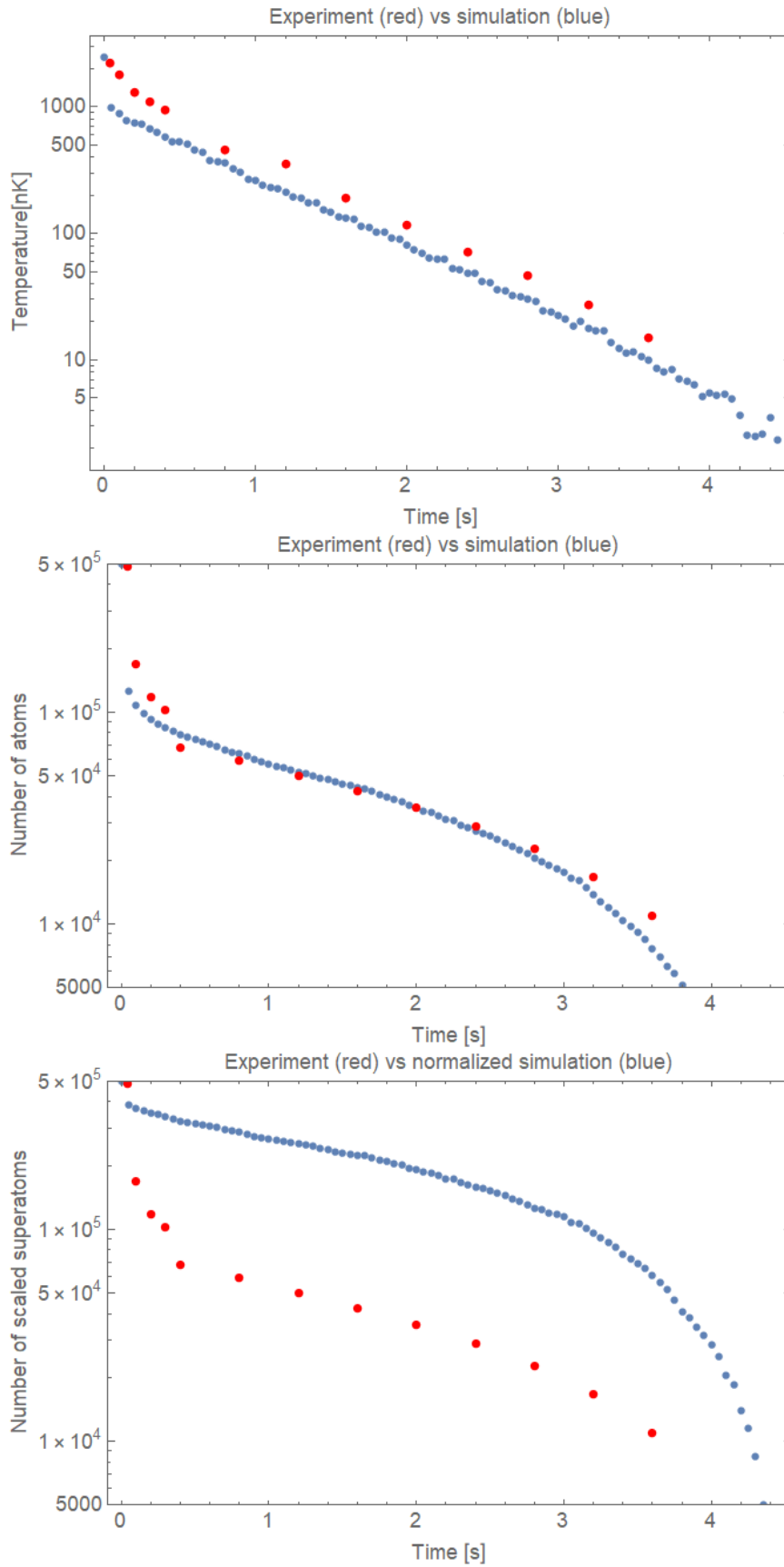
Slika 6 prikazuje primerjavo časovne odvisnosti temperature in števila atomov med simulacijo in eksperimentom. Vidimo, da je ujemanje števila atomov zelo dobro, temperatura pa ni slaba, a ima še manjše odstopanje. V eksperimentu so atomi cezija po dosegu temperature 10 nK prešli v Bose-Einsteinov kondenzat, česar klasična simulacija seveda ne more zajeti. Časovna odvisnost temperature ni preveč vznemirljiva. Temperatura oblaka atomov namreč zgolj tesno sledi eksponentni odvisnosti globine optične pasti, kar nam zagotavlja dovolj hitra termalizacija. Tretji graf na sliki 6 prikazuje časovno odvisnost števila superatomov N_S , pomnoženo s faktorjem $M = 500$, da ga je smiselno risati skupaj z eksperimentalnim številom atomov. Ta odvisnost ni namenjena primerjavi z eksperimentom, nam pa lahko pomaga razumeti nekatere pojave. Zdi se, da bi si bilo zanimivo ogledati tudi časovno odvisnost prostorske porazdelitve atomov. Izkaže se, da je ta ves čas gaussovska s približno konstantno širino. To ni presenetljivo, saj prostorsko porazdelitev atomov določa optična past. Grobo rečeno, višina gaussovke je povezana z globino pasti, širina porazdelitve pa s širino pasti. Ker se širina pasti tekom evaporacije ne spreminja, je konstantna tudi širina porazdelitve.

Podrobneje si oglejmo odvisnost števila atomov. V grobem lahko na grafu prepoznamo tri območja. V prvih 200 ms število atomov zelo strmo upada, nato približno 2.5 s upada enakomerno (na logaritmskem grafu), za tem pa se spet strmo povese navzdol. Prvo območje definirajo trodelčne izgube, ki

so sorazmerne številski gostoti na tretjo potenco. V začetku je atomov še veliko, zato so izgube ogromne - v tem delu izgubimo skoraj 90% atomov. To razlago podpira graf števila superatomov. Spomnimo se, da smo trodelčne izgube implementirali tako, da smo jih enakomerno porazdelili med superatome v celici in jim tako zmanjšali velikost. Celoten superatom je izgubljen šele, ko njegova velikost pade pod ena. Če smo v prvem območju izgubili 90% atomov, se je večina superatomov le močno zmanjšala, ni pa padla pod ena. Zato na grafu števila superatomov ne opazimo padca v prvem območju. Po začetnem strmem padcu je številaska gostota dovolj nizka, da so trodelčne izgube majhne.

V drugem območju prevladujejo izgube zaradi toplejših atomov, ki zbežijo iz pasti, ko ta postaja šibkejša. Te izgube so torej zaželjene, saj so bistven del procesa ohlajanja. Tretji del pa je ponovno zanimiv. Do strmega padca pride zaradi učinka magnetne "anti-trapping" sile. Spomnimo se, da gre za silo, ki na atome deluje v ravnini $x - y$ radialno navzven in je sorazmerna z lateralno oddaljenostjo od minimuma magnetnega polja. Večino eksperimenta je dipolna sila optične pasti dovolj močna, da prevlada nad magnetno silo in atome zadrži. Ko pa moč žarkov zmanjšujemo, postaja magnetna sila dovolj velika, da nekatere atome potisne iz pasti. Ta učinek je močnejši, bolj kot ošibimo optično past.

Komentar zahteva še izredno strm padec med prvo in drugo točko simulacije, ki je viden na vseh treh grafih. Tukaj gre za manjšo težavo z začetnim stanjem atomskega oblaka. Rep Maxwell-Boltzmannove porazdelitve se razteza precej daleč in obstajajo atomi, ki imajo že v začetku dovolj energije, da takoj zbežijo iz pasti. Težavo se da odpraviti, če oblak postavimo v past in ga pustimo nekaj časovnih korakov, da se uravnesi, preden začnemo s procesom evaporacije. Druga možnost je bolj natančna nastavitev začetne prostorske porazdelitve oblaka atomov.



Slika 6: Primerjava rezultatov simulacije in eksperimentalne meritve. Prva slika prikazuje časovno odvisnost temperature atomov, druga slika odvisnost skupnega števila atomov, tretja pa časovno odvisnost števila superatomov, pomnoženega s 500. Rdeča barva označuje eksperimentalne podatke, modra pa rezultate simulacije.

5 Zaključek

Na podlagi člankov [5, 7] sem razvil simulacijo atomov v optični pasti in hlajenja z evaporacijo. Rezultati simulacije se zadovoljivo ujema z eksperimentalnimi, potrebnih pa je še nekaj popravkov. Ujemanje bi želel preveriti tudi na širšem naboru začetnih pogojev, kar pa je eksperimentalno precej zamudno.

Naslednji koraki so uporaba simulacije kot podpora eksperimentalnemu delu. Ena možnost je uporaba metod optimizacije na simulaciji, s čimer bi morda lahko izboljšal učinkovitost eksperimentalne postavitve. Trenutno izračun enega postopka evaporacije traja nekaj minut, kar je nekoliko preveč za optimizacijske aplikacije. Tukaj bi pomagala podpora vzporednemu računanju, vsaj na nivoju vzporednega simuliranja za različne parametre.

Dostopnost in transparentnost analiziranja procesov tekom postopka simulirane evaporacije omogoča boljše razumevanje določenih pojavov in lahko privede do izboljšanja in optimizacije postopkov hlajenja.

Uporabna bi bila razširitev obsega simulacije na en korak pred postopkom evaporacije - nalaganje v optično past. Glavna težava pri tem so zelo različne prostorske dimenzije obeh pasti.

Ena prednost simulacije je, da omogoča enostavno dodajanje in prilagajanje zunanjih potencialov. Na primer, trivialno je dodati še eno optično past podobnih dimenzij, kar omogoči opazovanje transportnih pojavov in difuzije hladnih atomov. Morda bi bile zanimive simulacije povsem magnetnih pasti, ali pa gibanje spinsko polariziranih atomov v magnetnih poljih netrivialnih oblik ali geometrij.

Literatura

- [1] Jeglič, Peter. Uvod. <http://ultracool.ijs.si>, 2017.
- [2] Mežnaršič, Tadej. Lasersko hlajenje cezijeveh atomov: magistrsko delo. 2016.
- [3] Foot, Christopher J. Atomic physics. Vol. 7. Oxford University Press, 2005.
- [4] Gustavsson, Mattias. A quantum gas with tunable interactions in an optical lattice. na, 2008.
- [5] Wu, Huang, and Christopher J. Foot. Direct simulation of evaporative cooling. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 29.8 (1996): L321.
- [6] Monroe, C. R., et al. Measurement of Cs-Cs elastic scattering at $T = 30$ uK. *Physical Review Letters* 70.4 (1993): 414.
- [7] Ma, Zhao-Yuan, Christopher J. Foot, and Simon L. Cornish. Optimized evaporative cooling using a dimple potential: an efficient route to Bose-Einstein condensation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 37.15 (2004): 3187.
- [8] Bird, Graeme Austin. Molecular gas dynamics. NASA STI/Recon Technical Report A 76 (1976).