# 1. Einführung

Die Dynamik quantenmechanischer Systeme lassen sich meistens nicht effizient mit einem Rechner simulieren. Diese Simulationen zeigen typischerweise ein exponentiell höheren Bedarf an Resourcen verglichen mit dem zu simulierenden System. (Feynman, 1982) deutete darauf hin, dass wenn es so aufwendig ist ein Viel-Teilchen Interferenz Experiment zu simulieren, umgekehrt dieses Experiment aufzubauen und das Ergebnis zu messen, äquivalent zu einer komplexen Rechnung sein müsste.

Die theoretischen Grundlagen für einen universellen Quantenrechner wurden von Deutsch (1985) gelegt. In einem klassischen Rechner wird die Information in Bits gespeichert. Diese Bits können entweder 0 oder 1 sein. Dies läßt sich auf ein quantenmechanisches Zwei-Zustands System (Quantenbit) aus  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  übertragen . Im Gegensatz zum klassischen Bit kann das Quantenbit auch in kohärenten Überlagerungszuständen der Eigenzustände existieren. Das bedeutet, das Quantenbit kann die beiden Werte 0 und 1 simultan annehmen z. B. als  $1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ . Damit läßt sich in einem Quantenbit doppelt so viel Information speichern, wie in einem klassischen Bit und in einem Register aus N Quantenbits entsprechend  $2^N$ -mal so viel. Wendet man nun auf ein Quanten-Register einen Quanten-Algorithmus an, lassen sich somit in einem Schritt  $2^N$ -Werte verarbeiten.

Bei einer Messungen erhält man eine Projektion des Zustandes auf die Messbasis. Ist nach der Berechnung im Ausgaberegister ein Quantenbit z.B. im Zustand  $1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ , erhält man bei einer Messung zufällig als Wert die 0 oder die 1. Deshalb sollte ein Quantenalgorithmus so aufgebaut sein, dass das Ergebnis einer Berechnung bei einer Projektion auf die Messbasis eindeutig ist. Diese notwendige Eigenschaft eines Quantenalgorithmus wird als Interferenzfähigkeit bezeichnet.

Ein klassischer Algorithmus besteht in der Regel aus einer mehreren einfacheren Operationen. Es stellt die Frage ob es einen minimalen Satz an elementaren Operationen gibt, mit denen jeder beliebige Algorithmus zusammengestellt werden kann. Ein möglicher minmaler Satz besteht aus einem NOT-Gatter, welches ein Bit invertiert, und dem XOR-Gatter, welches nur dann 1 ausgibt wenn seine beiden Eingänge verschieden sind. Kann man deren Realisierung demonstrieren ist man prinzipiell in der Lage jeden Rechner zu konstruieren. Quantenalgorithmen lassen sich ebenfalls aus einem minimalen Satz zusammenstellen (di Vincenzo, 1995). Ein möglicher minimaler Satz besteht aus einem Ein-Qubit Gatter, welches beliebige unitäre Transformationen auf einem einzelnen Quantenbit ausführen kann, und einem Zwei-Qubit Gatter, welches das erste Quantenbit in Abhängigkeit des zweiten Quantenbits invertiert.

#### 1. Einführung

Ein erstes Beispiel für eine Quantenalgorithmus stellten Deutsch und Jozsa (1992) vor. Die Aufgabenstellung für den Algorithmus ist herauszufinden, ob bei einem Münzwurf anständig gespielt oder betrogen wird, indem eine Münze mit zwei gleichen Seiten benutzt wird. Ein klassischer Algorithmus muss nacheinander beide Seiten betrachten. An einen Quantenalgorithmus wird auf einmal ein Überlagerungszustand übergeben werden, der eine eindeutige Information über beide Seiten enthält. Über ein geschicktes Inferferenzexperiment transformiert der Quantenalgorithmus den Überlagerungszustand in  $|0\rangle$  oder  $|1\rangle$ , je nach vorliegender Münze. Dieser Quantenalgorithmus benötigt somit einen Schritte weniger als sein klassisches Pendant.

Große Aufmerksamkeit bekam der Quantenalgorithmus von Shor (1994) zur Faktorisierung ganzer Zahlen. Für dieses Problem wächst der Aufwand an Resourcen des besten bisher bekannten klassischen Algorithmus exponentiell mit der Anzahl der Stellen der Zahl (Lenstra und Lenstra, 1993). Dieser Quantenalgorithmus skaliert jedoch nur polynomial. Dieser Quantenalgorithmus wie auch der von Simon (1994) basieren auf der Fähigkeit eines Quantencomputers effizient die Periodizität einer periodischen Funktion zu ermitteln. Ein weiterer bemerkenswerter Quantenalgorithmus durchsucht unsortierte Listen und skaliert mit deren Länge langsamer als ein klassischer Suchalgorithmus (Grover, 1997).

Auch zu einer Reihe physikalischer Fragestellungen wurden effiziente Quantenalgorithmen gefunden. Ein interessantes Beispiel ist der Quantenalgorithmus von (Abrams und Lloyd, 1999). Sie bestimmen mit einem polynomial skalierenden Quantenalgorithmus die Eigenwerte und Eigenfunktionen eines lokalen Hamiltonoperators mit Hilfe einer diskreten Fouriertransformation. Interessante Probleme in der Chemie und Physik lassen sich mit 50 bis 100 Quantenbits lösen.

Eine Studie über die Machbarkeit eines Quantenrechners ist nur durch den Aufbau eines Solchen möglich. Die Anforderungen an das physikalische System sind (di Vincenzo, 2000):

- Man benötigt charakterisierte Quantenbits, das bedeutet man versteht die Dynamik einzelner Quantenbits und die Kopplungsmechanismen der Quantenbits untereinander.
- Die benötigten physikalischen Resourcen dürfen nicht mit der Anzahl der Quantenbits exponentiell anwachsen.
- Das System muss sich in einem Zustand initialisieren lassen. Wie bei einem klassischen Rechner, sollen zu Beginn einer Rechnung die Register in einem bekannten Zustand sein.
- Die Kohärenzzeiten von Überlagerungszuständen müssen lang gegenüber der Dauer quantenlogischer Operationen sein. Mechanismen zur Fehlerkorrektur erlauben endliche Kohärenzeiten um beliebig viele Operationen ausführen zu können.

- Es wird ein universaler Satz an Quantengattern benötigt.
- Jedes Quantenbit muss individuell auslesbar sein.

Gershenfeld und Chuang (1997) schlugen vor die Anregung des Kernspins in Molekülen zu nutzen. Die Quantenbits bestehen aus je zwei Kernspinzuständen der einzelnen Atome. Über die chemische Bindung der Atome in einem Molekül ergibt sich eine Kopplung zweier Quantenbits und dies kann für eine Zwei-QuBit Operation genutzt werden. Die kohärente Anregung und Detektion des Kernspins erfolgt mit den aus der Kernspinresonanz-Spektroskopie bekannten Techniken (Ernst, Bodenhausen und Wokaun, 1987). Die ersten elementaren Gatter eines Quantenrechner wurde auf diese Weise von Jones und Mosca (1998) experimentell realisiert. Der größte bisher realisierte Quantenrechner mit 7 Quantenbits basiert ebenfalls auf dieser Technik (Vandersypen, Steffen, Breyta, Yannoni, Sherwood und Chuang, 2001). Diese Experimente werden an großen Ensembles von Molekülen durchgeführt. Aus thermodynamischen Gründen ist keine Präparation aller Moleküle in den selben Ausgangszustand möglich. Dies führt mit steigender Zahl an Quantenbits zu einem exponentiell abnehmenden Signal-zu-Rausch Verhältnis und begrenzt somit die maximale Zahl an Quantenbits (Warren, 1997).

Cirac und Zoller (1995) schlugen erstmals einen experimentellen Aufbau von Quantengattern mittels Ionen vor. Die Ionen lassen sich in geeigneten elektrodynamischen Wechselfeldern lokalisieren und in einer Reihe anordnen (Raizen, Gilligan, Berquist, Itano und Wineland, 1992). Die einzelnen Quantenbits bestehen aus zwei internen Zuständen mit kleiner longitudionaler Relaxationsrate, z. B. aus dem Grundzustand und einem metastabilen angeregten elektronischen Zustand. Mit Hilfe von fokusierten Lichtfeldern lassen sich die Ionen individuell auf diesem Übergang kohärent anregen und damit eine unitäre Operation auf dem Quantenbit ausführen.

Der Impulsübertrag absorbierter und emittierter Photonen auf das Ion läßt sich nutzen um den Bewegungszustand eines Ions kohärent zu manipulieren. Dies läßt sich für Zwei-Quantenbit Operationen nutzten. Die erste Demonstration einer Zwei-Quantenbit Operation mit einem einzelnen Ion gelang Monroe, Meekhof, King, Itano, und Wineland (1995). Die Bewegungszustände können für einen Informationsaustausch zwischen zwei Ionen genutzt werden und werden daher auch als Bus-Quantenbit bezeichnet. Dies ist aufgrund der Coulomb-Abstoßung möglich, wegen der die Bewegung jedes einzelnen Ions einen Einfluss auf die Bewegung der anderen Ionen hat. Die ersten Demonstrationen einer Zwei-Quantenbit Operation mit zwei Ionen gelang Schmidt-Kaler, Häffner, Riebe, Gulde, Lancaster, Deuschle, Becher, Roos, Eschner und Blatt (2003) mit zwei Kalzium-Ionen und Leibfried, DeMarco, Meyer, Lucas, Barrett, Britton, Itano, Jelenkovic, Langer, Rosenband, und Wineland (2003) mit zwei Beryllium-Ionen.

In dieser Arbeit werden erste Voruntersuchung für die Verwendung von Barium-Ionen des Isotops 138 für die Quanteninformationsverarbeitung gemacht. Das langlebige elektronische  $5^2\mathrm{D}_{5/2}$ -Niveau mit einer Lebensdauer von 34,5 s und der Grundzustand  $6^2\mathrm{S}_{1/2}$ 

#### 1. Einführung

lassen sich für ein Quantenbit nutzen. Die Resonanzfrequenzen der Schwingungszustände (Säkularfrequenzen) des Barium-Ions in der verwendeten Paulfalle unterscheiden sich für die Schwingung in radialer und axialer Richtung (Appasamy, 1997). Dies läßt sich nutzen um zwei Bus-Quantenbits zu implementieren (Steinbach, Twamley und Knight, 1997; Wunderlich). Hierbei ist die Motivation eine schnellere Kommunikation zwischen den einzelnen Ionen eines Quantenrechners zu erreichen.

Der Aufbau der Arbeit gestaltet sich folgendermaßen:

- Zuerst wird in Kapitel 2 das für diese Experimente relevante Termschema des Barium-Ions vorgestellt.
- Im nachfolgenden Kapitel wird die Wechselwirkung des Ions mit Lichtfeldern beschrieben. Von besonderem Interesse ist die kohärente Anregung des Quantenbits bestehend aus dem  $6^2\mathrm{S}_{1/2}$  und  $5^2\mathrm{D}_{5/2}$ -Zustand. Es wird gezeigt, dass sich bei permanenter kohärenter Anregung des  $\mathrm{S}_{1/2} \rightleftharpoons \mathrm{D}_{5/2}$ -Übergangs die Besetzung des  $5^2\mathrm{D}_{5/2}$ -Zustandes periodisch ändert (Rabioszillationen). Die Oszillationsfrequenz (Rabifrequenz) hängt von der Stärke der Wechselwirkung zwischen dem anregenden Lichtfeld und dem Ion ab. Anschließend wird Auswirkung der Dämpfung durch Frequenzfluktuationen des anregenden Lichtfeldes und der Spontanemission auf die Rabioszillationen diskutiert.
- In Kapitel 4 wird die Speicherung eines einzelnen Ions in dem elektrodynamischen Wechselfeld einer Paulfalle beschrieben. Das Potential der Falle läßt sich durch ein harmonisches Potential nähern. In diesem schwingt das Ion mit der Säkularfrequenz. Die Schwingung in radialer und axialer Richtung können näherungsweise als entkoppelt betrachtet werden.
- In Kapitel 5 ist beschrieben, dass die Speicherung des Ions in dem harmonischen Fallenpotential zu zusätzliche Resonanzen, den sogenannten Seitenbänder führt. Deren Resonanzfrequenzen unterscheiden sich um ganzzahlige Vielfache der Säkularfrequenz von den Resonanzfrequenzen eines freien Ions (Träger). Die Resonanzen lassen sich mit Hilfe des  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$ -Übergangs spektroskopisch auflösen und individuell anregen.
- Ein direkter Nachweis einer Anregung auf dem  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$ -Übergang ist aufgrund der geringen Streurate nicht möglich. Daher wird nach einem Vorschlag von Dehmelt (1975) die Resonanzfluoreszenz des angeregten  $S_{1/2} \rightleftharpoons P_{1/2}$ -Übergangs beobachtet. Diese erlischt aus, wenn das Ion in den  $5^2D_{5/2}$ -Zustand wechselt und erscheint, wenn das Ion wieder im  $6^2S_{1/2}$ -Zustand ist. In Kapitel 6 wird erläutert, wie sich damit die Anregungswahrscheinlichkeit des  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$ -Übergangs und die Besetzung des  $5^2D_{5/2}$ -Zustandes bestimmen läßt.
- In Kapitel 7 wird erläutert, wie sich der Impulsübertrages bei Absorption eines Photons nutzen läßt um die kinetische Energie des Ions zu reduzieren.
- Das Kapitel 8 stellt den experimentellen Aufbau vor. Besonderes Augenmerk gilt dem optisch parametrischen Oszillator, welcher den Übergang  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$  anregt. Dazu werden sein Aufbau und die Funktionsweise eines optischen parametrischen Oszillator erläutert.

- Die Messergebnisse und ihre Auswertung sind in Kapitel 9 zusammengefaßt. Aus den Anregungsspektren des  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$ -Übergangs lassen sich die Säkularfrequenzen bestimmen. Es wird demonstriert, dass die spektrale Aufspaltung der Säkularfrequenzen sich durch Erhöhen der Amplitude des Wechelspannungsfeldes der Paulfalle vergrößern läßt. Es wird erläutert, wie die Spektren ausgewertet werden um Rückschlüsse auf die kinetische Energie des Ions ziehen zu können. Schließlich werden die Messungen zu den zeitaufgelösten Rabioszillationen vorgestellt.

# 2. Barium-Ion (Ball)

Barium ist ein Erdalkali-Element, dessen natürliche Isotopenverteilung in Tabelle 2.1 zusammengestellt ist. Das mit  $71,1\,\%$  am häufigsten vorkommende Isotop  $138\,$  ( $^{138}$ Ba) wird für die hier vorgestellten Experimente verwendet. Es besitzt keinen Kernspin und somit auch keine Hyperfeinaufspaltung der elektronischen Niveaus.

Seine einfach positiv geladenen Ionen ( $^{138}$ Ba $^+$ ) sind in guter Näherung durch ein einzelnes Valenzelektron und eine abgeschlossene Edelgas-Konfiguration beschreibbar. Die vollständig Konfiguration des Grundzustandes ist [Xe]6s<sup>1</sup>  $^2$ S<sub>1/2</sub>.

## 2.1. Elektronische Zustände

Das für die vorgestellten Experimente relevante Termschema des Barium-Ions ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Die beiden Niveaus  $5^2\mathrm{D}_{3/2}$  und  $5^2\mathrm{D}_{5/2}$  mit Bahndrehimpuls L=2 sind metastabil. Die Übergänge der beiden Niveaus in den Grundzustand  $6^2\mathrm{S}_{1/2}$  sind in niedrigster Multipolordnung elektrische Quadrupol (E2) oder magnetische Oktupol-Übergänge (M3), da letztere um mindestens vier Größenordnungen schwächer als der erstere sind (Sobelmann, 1979), werden im Folgenden diese Übergänge entsprechend als Quadrupolübergänge bezeichnet. Die Lebensdauer des  $5^2\mathrm{D}_{5/2}$ -Zustandes begrenzt durch die Spontanemssion in den Grundzustand ist  $34,5\pm3,5$  s (Madej und Sankey, 1990), die Lebensdauer des  $5^2\mathrm{D}_{3/2}$ -Zustands ist  $79.8\pm4.6$  s (Yu, Nagourney und Dehmelt, 1997).

Die Anregung des Ions in das  $6^2P_{1/2}$ -Niveau kann auf dem elektrischen dipolerlaubten Übergang aus dem Grundzustand mit einem Lichtfeld der Wellenlänge 493 nm erfolgen, oder aus dem  $5^2D_{3/2}$ -Zustand auf dem ebenfalls dipolerlaubten Übergang mit einer Wellenlänge von 650 nm. Diese drei Niveaus werden im folgenden als  $\Lambda$ -System bezeichnet. Die beobachtete Fluoreszenz bei resonanter Einstrahlung beider Lichtfelder setzt sich anteilig aus beiden Übergänge zusammen. Das Verzweigungsverhältnis der Übergänge

Isotop		$^{130}\mathrm{Ba}$	<sup>132</sup> Ba	$^{134}\mathrm{Ba}$	$^{135}\mathrm{Ba}$	<sup>136</sup> Ba	$^{137}\mathrm{Ba}$	<sup>138</sup> Ba
Häufigkeit	%	0,1	0,1	2,4	6,6	7,8	11,3	71,7
Kernspin	ħ	0	0	0	3/2	0	3/2	0

Tabelle 2.1.: Natürliches Isotopen-Gemisch von Barium; Zu den Isotopen ist der jeweilige Kernspin mit angegeben (Frisch, 1958).

### 2. Barium-Ion (BaII)

 $6^2\mathrm{P}_{1/2} \rightharpoonup 6^2\mathrm{S}_{1/2}$  zu  $6^2\mathrm{P}_{1/2} \rightharpoonup 5^2\mathrm{D}_{3/2}$  ergibt sich aus dem Verhältnis der Einsteinkoeffzienten A für die Spontanemission zu 2,85 : 1. Der Hauptbeitrag zur Fluoreszenz erfolgt somit durch den  $\mathrm{S}_{1/2} \rightleftharpoons \mathrm{P}_{1/2}$ -Übergang.

Auf eine Anregung des  $P_{1/2} \rightleftharpoons D_{3/2}$ -Übergangs kann dennoch nicht verzichtet werden. Nach einem Spontanzerfall aus dem angeregten  $6^2P_{1/2}$ -Zustand in das langlebige  $5^2D_{3/2}$ -Niveau, bliebe die Fluoreszenz trotz eines Lichtfeldes bei 493 nm aus, da nun keine Anregung des Ions mehr in den  $6^2P_{1/2}$ -Zustand erfolgen kann. Die wesentliche Aufgabe des zweiten Lichtfeldes bei 650 nm ist es einen geschlossenen Anregungszyklus zu erreichen. Das heißt, zerfällt das Ion durch Spontanemission aus dem  $P_{1/2}$ -Zustand in den  $5^2D_{3/2}$ -Zustand, regt das Lichtfeld das Ion wieder in den  $6^2P_{1/2}$ -Zustand an.

Die angeregten Zustände mit langer Lebensdauer sind in zweierlei Hinsicht von Interesse.

Da die Spontanemission vernachlässigt werden kann, hängt die Besetzung und die Phase des Zustands nur noch von den eingestrahlten Lichtfeldern ab und kann somit vom Experimentator kontrolliert werden. Dies gilt auch für Überlagerungszustände aus dem angeregten langlebigen Zustand und dem Grundzustand, welcher per se keinem Spontanzerfall unterliegt. Die Realisierung von quantenlogischen Experimente erfordert die Erzeugung beliebiger Überlagerungszustände eines Zwei-Niveau Systems. In dieser

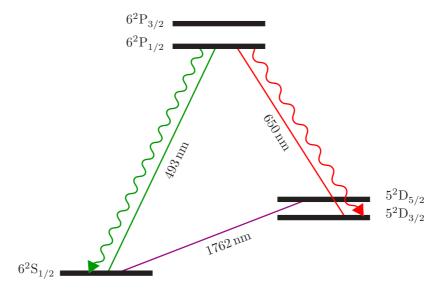


Abbildung 2.1.:

Relevanter Auszug aus dem Termschema des <sup>138</sup>Ba<sup>+</sup>-Ions; Die durchgezogenen Linien deuten die durch Lichtfelder angeregten Übergänge an, die wellenförmigen symbolisieren Übergänge der Fluoreszenz durch Spontanemission. Die Wellenlängen der Lichtfelder für die resonante Anregung der jeweiligen Übergänge sind ebenfalls angegeben.

Lebensdauer $\tau$ (s)
$79.8 \pm 4.6$ $34.5 \pm 3.5$

Tabelle 2.2.:

Lebensdauer der beiden relevanten metastabilen Niveaus des Barium-Ions (Madej und Sankey, 1990; Yu u. a., 1997)

Arbeit wird der Überlagerungszustand

$$|\Psi\rangle = C_{\uparrow} \left| 5^2 D_{5/2} \right\rangle + C_{\downarrow} \left| 6^2 S_{1/2} \right\rangle \tag{2.1}$$

durch Anregung mit Hilfe eines Lichtfeldes bei 1762 nm aus dem  $6^2\mathrm{S}_{1/2}$ -Zustand erfolgen. Die komplexen Koeffizienten  $C_{\uparrow}$  und  $C_{\downarrow}$  erfüllen die Normierungsbedingung  $|C_{\uparrow}|^2 + |C_{\downarrow}|^2 = 1$ .

Das lokalisierte Ion oszilliert in der verwendeten Apparatur mit einer typischen Frequenz von 1 MHz. Diese Bewegung führt zu zusätzlichen charakteristischen Spektrallinien im Abstand von 1 MHz zu den Übergängen eines freien Ions. Durch eine kontrollierte Anregung der zusätzlichen Spektrallinien lässt sich der Bewegungszustand des Ions verändern. Ein weiteres Quantenbit läßt sich z. B. durch zwei Bewegungszustände  $|n\rangle$  und  $|n+1\rangle$  repräsentieren, deren Schwingungsquantenzahl n sich um 1 unterscheidet. Dieses Quantenbit kann zugleich mit dem elektronischen Quantenbit durch die Anregung des Quadrupolübergangs verschränkt werden und ermöglicht so eine bedingte Logik. Cirac und Zoller (1995) schlägt dazu ein Schema für einen Quantenrechner mit einzelnen gespeicherten Ionen unter Ausnützung der Schwingungszustände vor. Der Übergang zwischen dem Grundzustand und  $5^2D_{5/2}$ -Niveau weist eine sehr geringe spektrale Breite auf, bedingt durch die mit der Lebensdauer invers gekoppelte Linienbreite. Die Linienbreite des  $S_{1/2} \rightleftharpoons D_{5/2}$ -Übergangs ist  $4,6\cdot 2\pi$ mHz (vgl. Tab. 2.3). Damit lässt sich die notwendige spektroskopische Auflösung erreichen, im Gegensatz zu den relativ breiteren dipolerlaubten Übergängen  $S_{1/2} \rightleftharpoons P_{1/2}$  (15· $2\pi$ MHz) und  $P_{1/2} \rightleftharpoons D_{3/2}$  (5· $2\pi$ MHz).

# 2.2. Zeeman-Aufspaltung

Im Rahmen der LS-Kopplung ergibt sich der Gesamt-Bahndrehimpuls  $\mathbf{J}$  mit dem Elektronenspin  $\mathbf{S}$  und dem Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  zu  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . Die Entartung der (2J+1) Zeeman-Zustände wird in einem äußeren schwachen Magnetfeld aufgehoben. Die Verschiebung der Niveaus berechnet sich mit der magnetischen Quantenzahl  $m_J$  ( $m_J = -J..J$ ), dem Landé-Faktor  $g_J$  und dem Magnetfeldstärke B zu:

$$\Delta_{Zeeman} = m_J g_J \mu_B B, \tag{2.2}$$