

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI
BOLOGNA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Augusto Righi”
Corso di Laurea in Fisica

**Simulazione numerica
dell'intrappolamento ottico di atomi
freddi**

Relatore:
Prof. Francesco Minardi

Presentata da:
Giorgio Piazza

Anno Accademico 2025/2026

Sommario

Questo lavoro di tesi analizza l'intrappolamento di atomi neutri tramite trappole di dipolo ottico e, attraverso una simulazione fornisce delle stime sulle frazioni di atomi che possono essere catturati. Nel primo capitolo si introduce la fisica delle trappole ottiche partendo dal modello di un oscillatore armonico classico ed estendendo la trattazione prima ad un atomo a due livelli quantistico e infine ad un atomo a più livelli. Nel secondo capitolo, si discute dell'algoritmo Velocity Verlet, che permette di studiare la dinamica atomica e successivamente viene sviluppato in Python un programma che attraverso questo algoritmo permette di simulare la dinamica atomica e stimare la frazione di atomi che viene intrappolata. Nel terzo capitolo si analizzano i risultati delle simulazioni al variare di alcuni parametri come la temperatura degli atomi, il passo temporale, la potenza del laser e la distanza del centro del campione di atomi dalla punta della fibra.

Indice

Sommario	3
1 Trappole di dipolo ottico per atomi neutri	7
1.1 Potenziale di dipolo ottico	8
1.2 Atomi a più livelli	11
2 Simulazione atomica	15
2.1 Algoritmi per la simulazione della dinamica molecolare	15
2.1.1 Implementazione del programma per la simulazione atomica	19
3 Analisi risultati	25
3.1 Traiettoria di un atomo che attraversa la fibra ottica	25
3.2 Calcolo degli errori sulle posizioni al variare del passo temporale	31
3.3 Calcolo della frazione di atomi catturati al variare del passo tem- porale	32
3.4 Frazione di atomi catturati al variare della temperatura	35
3.5 Frazioni di atomi catturati al variare della potenza del laser . .	35
3.6 Frazione di atomi catturati variando l'altezza del centro del cam- pione	36
4 Conclusioni	39

Capitolo 1

Trappole di dipolo ottico per atomi neutri

In questo capitolo, verrà illustrata la fisica dei dipoli ottici, la bibliografia di riferimento è [4].

L'intrappolamento di particelle sia cariche che neutre è un processo fondamentale per molteplici ricerche scientifiche e applicazioni tecnologiche. Le particelle cariche possono essere intrappolate efficacemente attraverso l'interazione Coulombiana, naturalmente per gli atomi ciò non è possibile, tuttavia anche per gli atomi neutri è possibile ottenere ensemble di atomi con temperature nell'ordine dei microKelvin, con l'ausilio di potenziali meno intensi rispetto all'interazione Coulombiana. Trappole per atomi neutri possono essere costruite attraverso 3 differenti interazioni ognuna con i propri punti di forza e le proprie debolezze:

- *trappole a pressione di radiazione*: possono raggiungere profondità di qualche Kelvin e permettono di intrappolare anche particelle di gas termici, l'ensemble può essere raffreddato fino a circa $10 \mu\text{K}$, tuttavia la densità raggiungibile è limitata e la dinamica interna è fortemente perturbata da processi di risonanza
- *trappole magnetiche*: sono basate su forze di dipolo magnetico dipendenti dallo stato della particella, ciò pone restrizioni per esperimenti che si concentrano sulla dinamica interna delle particelle, tuttavia questo tipo di trappola può raggiungere profondità fino a 100 mK e trova applicazione per lo studio dei condensati di Bose-Einstein e per il raffreddamento evaporativo.
- *trappole di dipolo ottico*: si basano sull'interazione del dipolo elettrico con luce a frequenza lontana dalle risonanze, possono raggiungere profondità nell'ordine di 1 mK , l'intrappolamento può essere indipendente dallo stato elettronico, possono intrappolare atomi anche per molti secondi e possono avere molte geometrie differenti.

All'interno di questa tesi verrà approfondito quest'ultimo tipo di intrappolamento.

La forza di dipolo ottico come meccanismo di confinamento in trappole di dipolo ottico per atomi neutri è stata presa in considerazione in letteratura già dagli anni 60. Il primo che riuscì a dimostrare la forza di dipolo ottico per atomi neutri fu Bjorkholm (1978) concentrando un fascio atomico mediante un fascio laser focalizzato [1], tuttavia fu solo nel 1986 che Chu *et al.* riuscirono a realizzare la prima trappola ottica per atomi neutri sfruttando questa forza [2]. Con l'avanzamento tecnologico nel raffreddamento laser e nell'intrappolamento, oggi è possibile ottenere campioni di atomi più freddi e più densi. Si procede quindi a discutere le basi fisiche dell'interazione di dipolo.

1.1 Potenziale di dipolo ottico

Introduciamo i concetti base dell'intrappolamento atomico in potenziali di dipolo ottico derivanti dall'interazione di luce a frequenze lontane dalle risonanze; in questo caso l'eccitazione ottica è molto bassa e la forza dovuta allo scattering è trascurabile se comparata alla forza di dipolo. In prima istanza consideriamo l'atomo come un oscillatore armonico classico o quantistico derivandone le principali equazioni per l'interazione di dipolo ottico e successivamente tratteremo il caso reale di atomi a più livelli, in particolare di atomi alcalini. Deriviamo le equazioni base per il potenziale di dipolo ottico e il tasso di scattering per un semplice oscillatore soggetto a un campo di radiazione classica. Quando un atomo viene posto in corrispondenza di luce laser, il campo elettrico \mathbf{E} induce nell'atomo un momento di dipolo \mathbf{p} che oscilla con una frequenza ω . Utilizzando la notazione complessa $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}\tilde{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + \text{c.c.}$ e $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}\tilde{p}(\mathbf{r}) \exp(i\omega t) + \text{c.c.}$ con $\hat{\mathbf{e}}$ è il vettore unitario di polarizzazione, \tilde{p} è l'ampiezza del momento di dipolo elettrico collegata all'ampiezza del campo elettrico \tilde{E} dalla relazione

$$\tilde{p} = \alpha \tilde{E} \quad (1.1)$$

Dove α è la polarizzabilità che dipende dalla frequenza principale ω .

Il potenziale d'interazione indotto dal momento di dipolo \mathbf{p} nel campo \mathbf{E} è dato da:

$$U_{dip} = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{p} \mathbf{E} \rangle = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I \quad (1.2)$$

Cioè la media temporale, l'intensità del campo è $I = 2\epsilon_0 c |\tilde{E}|^2$ e il fattore $\frac{1}{2}$ tiene conto del fatto che il momento di dipolo è indotto, non è permanente. Quindi l'energia potenziale di un atomo nel campo è proporzionale all'intensità I e alla parte reale della polarizzabilità α . La forza di dipolo che ne consegue sarà il gradiente del potenziale cambiato di segno

$$\mathbf{F}_{dip}(\mathbf{r}) = -\nabla U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

Forza conservativa proporzionale al gradiente di intensità del campo, la potenza assorbita dal campo e riemessa come radiazione di dipolo vale

$$P_{abs} = \langle \dot{\mathbf{p}} \mathbf{E} \rangle = 2\omega \text{Im}(\tilde{p} \tilde{E}^*) = \frac{\omega}{\epsilon_0 c} \text{Im}(\alpha) I \quad (1.4)$$

l'assorbimento deriva dalla parte immaginaria della polarizzabilità che descrive la componente fuori fase dell'oscillazione del dipolo. Considerando la luce come un flusso di fotoni $\hbar\omega$, la potenza assorbita è interpretabile in termini di scattering di fotoni come cicli in cui i fotoni vengono assorbiti e successivamente vengono emesse tramite emissione spontanea, in questi termini il rate di scattering vale

$$\Gamma_{sc}(r) = \frac{P_{abs}}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\epsilon_0 c} \text{Im}(\alpha) I(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

In questo modo abbiamo espresso le 2 grandezze più importanti per una trappola di dipolo in termini dell'intensità di campo dipendente dalla posizione $I(\mathbf{r})$ e la polarizzabilità $\alpha(\omega)$. Per calcolare la polarizzabilità α , consideriamo un oscillatore classico. Per questo modello basilare, un elettrone di massa m_e e carica elementare e è collegato elasticamente al nucleo e l'autovalore della frequenza vale ω_0 , corrispondente alla frequenza di transizione ottica. L'elettrone subisce un'accelerazione ed emette radiazione secondo la formula di Larmor. È perciò possibile calcolare la polarizzabilità dall'integrazione dell'equazione del moto

$$\ddot{x} + \Gamma_\omega \dot{x} + \omega_0^2 x = -eE(t)/m_e \quad (1.6)$$

perciò la polarizzabilità risulta

$$\alpha = \frac{e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_\omega} \quad (1.7)$$

con

$$\Gamma_\omega = \frac{e^2 \omega^2}{6\pi\epsilon_0 m_e c^3} \quad (1.8)$$

tasso di dumping classico dovuto alla perdita di energia radiativa. Sostituendo e^2/m_e con $6\pi\epsilon_0 c^3 \Gamma_\omega/\omega^2$ e introducendo il tasso di dumping risonante $\Gamma = \Gamma_{\omega_0} = (\omega_0/\omega)^2 \Gamma_\omega$ inseriamo l'Eq 1.7 e otteniamo la forma

$$\alpha = 6\pi\epsilon_0 c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\omega^3/\omega_0^2)\Gamma} \quad (1.9)$$

Invece per un approccio semi-classico la polarizzabilità atomica può essere calcolata considerando l'atomo come un sistema a 2 livelli quantistico interagente con un campo di radiazione classica. Con questo approccio si scopre che gli effetti di saturazione possono essere trascurati e l'approccio semi-classico porta allo stesso risultato di quello classico con una modifica: il tasso di damping Γ , che corrisponde al tasso di decadimento spontaneo del livello eccitato, non può più essere calcolato a partire dalla formula di Larmor ma è calcolato a partire dall'elemento di matrice di dipolo tra lo stato fondamentale e lo stato eccitato

$$\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle e | \mu | g \rangle|^2 \quad (1.10)$$

Per molti atomi con una transizione di dipolo intensa a partire dallo stato fondamentale, la formula classica Eq. 1.8 fornisce una buona approssimazione del tasso di decadimento spontaneo. Per la linea D degli atomi alcalini come Na, K, Rb, Cs il risultato classico è in linea con il tasso di decadimento entro qualche punto percentuale.

Una differenza significativa tra l'oscillatore classico e quello quantistico è la possibilità che si verifichi il fenomeno della saturazione. A intensità troppo alte il livello eccitato diventa densamente popolato e l'equazione 1.7 non è più valida. Tuttavia per una trappola di dipolo nel caso far-detuned siamo interessati a sistemi con una saturazione molto bassa e con scattering rate molto più bassi rispetto al tasso di emissione spontaneo, cioè $\Gamma_{sc} \ll \Gamma$, perciò nel nostro caso l'equazione 1.7 è un'ottima approssimazione anche per un oscillatore armonico quantistico

A partire dall'espressione per la polarizzabilità ricavata nel caso dell'oscillatore atomico, possiamo ricavare le seguenti equazioni per il potenziale di dipolo e per il tasso di scattering trascurando l'effetto della saturazione:

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

e

$$\Gamma_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^3 \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right)^2 I(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

Queste equazioni generali sono valide per qualsiasi frequenza ω e mostrano 2 effetti di risonanza, il primo è quello considerato di solito per $\omega = \omega_0$, mentre il secondo è il cosiddetto termine di risonanza contro-rotante a $\omega = -\omega_0$. Nella maggior parte degli esperimenti i laser sono regolati con una frequenza ω vicina a quella di risonanza ω_0 , in modo che $\Delta = \omega - \omega_0$ soddisfi la relazione $|\Delta| \ll \omega_0$. In questo regime il termine di contro-rotazione può essere trascurato e si può approssimare $\omega/\omega_0 \approx 1$

In questo caso, di interesse pratico, le espressioni generali per il potenziale di dipolo e il tasso di scattering si possono semplificare in:

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(\mathbf{r}) \quad (1.13)$$

$$\Gamma_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\Delta} \right)^2 I(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

Queste due equazioni permettono di comprendere la fisica base dell'intrapolamento di dipolo con laser far-detuned. Ovviamente una relazione semplice che sussiste tra il tasso di scattering e il potenziale di dipolo è la seguente:

$$\hbar\Gamma_{sc} = \frac{\Gamma}{\Delta} U_{dip} \quad (1.15)$$

Questa equazione mette in luce due regimi essenziali per le trappole di dipolo:

- **red detuning** per $\Delta < 0$, il potenziale di dipolo è negativo e l'interazione attrae gli atomi verso il campo, i minimi del potenziale giacciono nei punti di massima intensità
- **blue detuning** per $\Delta > 0$, l'interazione del dipolo con il campo respinge gli atomi al di fuori del campo stesso e i minimi del potenziale corrispondono a punti in cui l'intensità è massima

Nell'ambito di questa tesi siamo interessati al red detuning in quanto all'interno dell'esperimento attraverso la radiazione uscente da fibra ottica cava verranno intrappolati atomi di rubidio all'interno della stessa.

1.2 Atomi a più livelli

Negli atomi usati per esperimenti di intrappolamento di dipolo, le transizioni elettroniche hanno strutture complesse, perciò il potenziale di dipolo dipende dal sottostato dell'atomo, complicando la trattazione precedente e portando a effetti emergenti. Rimanendo all'interno del modello dell'oscillatore precedente, gli atomi a più livelli possono essere descritti attraverso polarizzabilità dipendenti dallo stato.

L'effetto di un laser far-detuned sugli stati dell'atomo può essere descritto come una perturbazione del secondo ordine del campo elettrico. Dalla teoria generale delle perturbazioni al secondo ordine indipendenti dal tempo per stati non degeneri, per una interazione \mathcal{H}_1 avremo uno spostamento dell'energia dello stato i -esimo, con energia imperturbata \mathcal{E}_i pari a:

$$\Delta E_i = \sum_{j \neq i} \frac{|\langle j | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_j} \quad (1.16)$$

Per un atomo che interagisce con luce laser, l'Hamiltoniana varrà $\mathcal{H}_1 = -\hat{\mu}\mathbf{E}$ con $\hat{\mu} = -e\mathbf{r}$ operatore di dipolo elettrico. Per valori rilevanti di \mathcal{E}_i , bisogna considerare il sistema composto da atomo e campo, il cosiddetto *stato vestito*. nel ground state l'atomo ha energia nulla, mentre il campo apporta un contributo energetico di $n\hbar\omega$, quindi l'energia totale per un atomo imperturbato nel ground state sarà $\mathcal{E}_i = n\hbar\omega$. Quando un atomo assorbendo un fotone si eccita possiede un'energia interna pari a $\hbar\omega_0$ e il campo porta un apporto pari a $\hbar(n-1)\omega$, quindi l'energia complessiva sarà $\mathcal{E}_j = \hbar\omega_0 + \hbar(n-1)\omega$, perciò il denominatore dell'equazione 1.16 diventa $\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_j = \hbar\Delta_{ij}$. Per un atomo a 2 livelli l'Hamiltoniana di interazione vale $\mathcal{H}_1 = -\mu E$ e l'equazione 1.16 si semplifica in:

$$\Delta E = \pm \frac{|\langle e | \mu | g \rangle|^2}{\Delta} |E|^2 = \pm \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I \quad (1.17)$$

dove il segno più rappresenta il ground state e il segno meno lo stato eccitato. abbiamo usato la relazione $I = 2\epsilon_0 c |\tilde{E}|^2$ e l'equazione 1.10 per il tasso di decadimento. questo risultato ottenuto applicando la teoria perturbativa rivela un fatto importante: lo shift indotto sul ground state tramite laser corrisponde

al potenziale di dipolo per un atomo a due livelli^{1.13}, mentre lo stato eccitato ha uno shift opposto. nel caso di bassa saturazione, gli atomi giacciono per la maggior parte nel ground state, perciò possiamo interpretare lo shift del ground state come il potenziale rilevante per gli atomi in movimento.

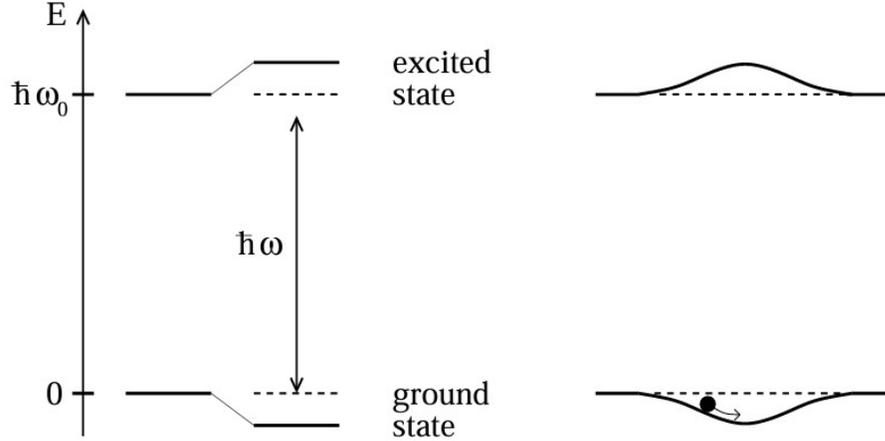


Figura 1.1: Shift per un atomo a 2 livelli, a sinistra la luce red-detuned abbassa il livello energetico sul ground state e lo alza sul livello eccitato della stessa quantità, a destra un non omogeneo come un fascio laser gaussiano produce una barriera di potenziale in cui l'atomo può essere intrappolato.

Applicando l'equazione dello shift energetico 1.16 al modello a più livelli con una sottostruttura delle transizioni bisogna conoscere l'elemento della matrice di dipolo $\mu_{ij} = \langle e_i | \mu | g_i \rangle$ tra gli stati elettronici $|g_i\rangle$ e gli stati eccitati $|e_j\rangle$. È noto dalla fisica atomica che l'elemento di matrice $\mu_{ij} = c_{ij} \|\mu\|$ può essere scritto come il prodotto di un elemento della matrice ridotta $\|\mu\|$ e un coefficiente di transizione reale c_{ij} . Ora possiamo scrivere lo shift del ground state nella forma:

$$\Delta E_i = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_o^3} I \times \sum_j \frac{c_{ij}^2}{\Delta_{ij}} \quad (1.18)$$

con la sommatoria su tutti gli stati elettronici eccitati $|e_j\rangle$. Ciò significa che per calcolare il potenziale di dipolo dipendente dallo stato del ground state $U_{dip,i} = \Delta \mathcal{E}_i$ bisogna sommare i contributi di tutti gli stati eccitati accoppiati tenendo conto di c_{ij} e Δ_{ij} .

Passiamo ora a trattare nello specifico gli atomi alcalini, largamente utilizzati in esperimenti di raffreddamento e intrappolamento tramite laser. Sulla base dell'equazione 1.18 si può calcolare il potenziale del ground state con momento angolare totale F e numero quantico magnetico m_f , valido sia per polarizzazioni lineari che per polarizzazioni circolari finché il detuning ottico rimane più grande

dello splitting iperfine dello stato eccitato Δ'_{HFS} :

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3} \left(\frac{2 + \mathcal{P}g_F m_f}{\Delta_{2,F}} + \frac{1 - \mathcal{P}g_F m_f}{\Delta_{1,F}} \right) I(\mathbf{r}) \quad (1.19)$$

con g_F fattore di Landè e \mathcal{P} che caratterizza la polarizzazione del laser ($\mathcal{P} = 0, \pm 1$ rispettivamente per laser polarizzati linearmente e con polarizzazione circolare σ^\pm). il detuning $\Delta_{2,F}$ e $\Delta_{1,F}$ si riferiscono allo splitting energetico tra il ground state $^2S_{1/2}$ e il centro dello split iperfine $^2P_{3/2}$ e $^2P_{1/2}$ rispettivamente, inoltre i due termini tra parentesi rappresentano i contributi delle linee D_2 e D_1 sul potenziale di dipolo. In prima istanza consideriamo il di detuning molto maggiori dello splitting dovuto alla struttura fine, in questo caso possiamo assolutamente trascurare lo splitting dovuto alla struttura iperfine. Introduciamo un detuning Δ rispetto al centro della doppia linea D, possiamo espandere l'equazione 1.19 in termini del parametro Δ'_{FS}/Δ :

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3 \Delta} \left(1 + \frac{1}{3} \mathcal{P}g_F m_F \Delta'_{FS} \right) I(\mathbf{r}) \quad (1.20)$$

Da questa equazione notiamo che il termine di ordine zero restituisce l'equazione trovata per un atomo a due livelli 1.13, mentre il termine di ordine uno ci restituisce una dipendenza piccola dalla polarizzazione \mathcal{P} e dal sottostato magnetico m_F . La dominanza del termine del potenziale a due livelli può essere spiegata dal fatto che, se la struttura fine fosse distinguibile, il termine di detuning rappresenterebbe il termine con contributo maggiore nell'Hamiltoniana e la sottostruttura potrebbe essere ignorata nel primo step perturbativo, riducendo la transizione a una semplice transizione $s \rightarrow p$. Questa transizione si comporta come un atomo a due livelli con la massima intensità a qualsiasi polarizzazione laser e lo shift sul ground state risulta quindi uguale a quello di un atomo a 2 livelli. Questo singolo ground state si accoppia con lo spin nucleare e elettronico nello stesso modo che avrebbe fatto nel caso non ci fosse stato il laser. Quindi in questo caso tutti i sottostati iperfini e magnetici acquisiscono direttamente lo shift dello stato atomico iniziale s . Nel caso più generale in cui la struttura fine è indistinguibile ma quella iperfine è distinguibile, possiamo trascurare l'accoppiamento con lo spin nucleare e considerare l'accoppiamento spin orbita. Possiamo considerare l'interazione con il campo generato dal laser nella configurazione del momento angolare elettronico delle due linee D, $J = \frac{1}{2} \rightarrow J' = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. In questo caso possiamo prima calcolare lo shift dei due ground state $m_j = \pm \frac{1}{2}$ e poi considerare il loro accoppiamento con lo spin nucleare. In questo caso è necessario distinguere tra luce polarizzata linearmente e luce polarizzata circolarmente: per la polarizzazione circolare σ^\pm il laser induce degenerazione sui due sottolivelli del ground state elettronico $^2S_{1/2}$ complicando la situazione. Questa degenerazione può essere interpretata come un campo magnetico apparente [3], questa interpretazione ci permette di capire come la degenerazione m_j influenza i livelli di F, m_F con l'accoppiamento con lo spin nucleare. La teoria dell'effetto Zeeman lineare in un campo magnetico debole prevede che per l'accoppiamento dello spin nucleare con la sottostruttura magnetica, bisogna sostituire $g_j m_j$ con

$g_F m_F$ dove indichiamo con g_j e g_F i fattori di Landè. Tornando al caso di interesse degli atomi alcalini: $g_j = 2$ e $m_j = \frac{1}{2} g_F m_F$, quindi le linee saranno $\frac{1}{3}(2 \pm g_F m_F)$ per la linea D_2 e $\frac{1}{3}(1 \mp g_F m_F)$ per la linea D_1 .

Passiamo ora a calcolare il tasso di scattering Γ_{sc} per un atomo a più livelli. Per polarizzazioni lineari si ha $\Delta \gg \Delta'_{HFS}$ e quindi si ottiene

$$\Gamma_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{\pi c^2 \Gamma^2}{2 \hbar \omega_0^3} \left(\frac{2}{\Delta_{2,F}^2} + \frac{1}{\Delta_{1,F}^2} \right) I(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

Questa equazione è indipendente da m_F ma è dipendente dagli stati iperfini F. Per stati polarizzati linearmente le pompe ottiche tendono a popolare in maniera uniforme i diversi livelli di m_F , causando una perdita di polarizzazione, e se il detuning è più grande rispetto allo splitting dovuto alla struttura iperfine tutti i sottostati F, m_F sono equamente popolati. Per polarizzazioni circolari l'effetto Zeeman diventa significativo e dipende dal regime di detuning. Ciò ci suggerisce che per trappole per atomi alcalini a più livelli, la scelta più conveniente sia quella di utilizzare laser polarizzati linearmente perché i sottolivelli m_f per un qualsiasi ground state iperfino F sono equispaziati.

Capitolo 2

Simulazione atomica

In questo capitolo si procede prima a discutere l'algoritmo utilizzato per la simulazione della dinamica atomica e successivamente si discuterà dell'implementazione in Python del programma per la simulazione con le conseguenti scelte implementative.

2.1 Algoritmi per la simulazione della dinamica molecolare

La dinamica molecolare (molecular dynamics) è un insieme di tecniche di simulazione al computer che permette di fare simulazioni che richiedono l'integrazione delle equazioni del moto di Newton a partire da condizioni iniziali definite; le applicazioni più comuni della dinamica molecolare comprendono la simulazione del moto di atomi in un fluido o l'evoluzione di una galassia. L'oggetto della simulazione di questa tesi è un campione di atomi di rubidio raffreddato attraverso una trappola magneto-ottica e attratto da un potenziale.

Introduciamo ora un algoritmo chiamato *leapfrog* [5] di grande interesse per la nostra simulazione per via della sua semplicità e per la sua proprietà di conservare l'energia totale del sistema anche dopo molte iterazioni. Le equazioni del moto in una dimensione sono:

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (2.1)$$

$$m \frac{dv}{dt} = F(x) = -\frac{dU(x)}{dx} \quad (2.2)$$

con $F(x)$ forza che subisce la particella in x e $U(x)$ il potenziale. In prima battuta possiamo discretizzare l'equazione 2.1 con:

$$x_1 = x_0 + hv_0 \quad (2.3)$$

con h intervallo temporale tra due passi successivi. Una approssimazione migliore di quest'ultima si può ottenere sostituendo v_0 con la velocità a metà

intervallo, cioè:

$$x_1 = x_0 + hv_{1/2} \quad (2.4)$$

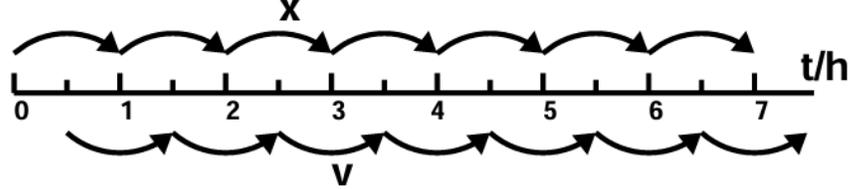


Figura 2.1: Rappresentazione dei passi in cui vengono calcolate le posizioni e le velocità per l'algoritmo leapfrog

Ovviamente non sappiamo quanto vale $v_{1/2}$, però ci occuperemo successivamente su come ricavare $v_{1/2}$, quindi procediamo a discretizzare anche la velocità:

$$v_{3/2} = v_{1/2} + h * a(X_1) \quad (2.5)$$

Dal momento che conosciamo x_1 possiamo ricavare $v_{3/2}$, dalla quale possiamo ricavare x_2 e così via ...

La formula generale per l'algoritmo *leapfrog* è la seguente:

$$x_{n+1} = x_n + hv_n + (h^2/2)a_n \quad (2.6)$$

$$v_{n+1/2} = v_n + (h/2)a_n \quad (2.7)$$

Passiamo quindi a stimare il valore di $v_{1/2}$, fondamentale per il calcolo della dinamica molecolare. Dal momento che conosciamo sia x_0 che v_0 l'approssimazione più semplice che possiamo fare è la seguente:

$$v_{1/2} = v_0 + \frac{h}{2}F(x_0) \quad (2.8)$$

questa approssimazione è meno precisa rispetto a quelle di punto medio nell'equazione 2.7, tuttavia viene applicata solo una volta quindi non inficia la precisione della simulazione. Abbiamo ottenuto quindi il cosiddetto algoritmo *velocity Verlet*

$$v_{1/2} = v_n + \frac{h}{2}F(x_n) \quad (2.9)$$

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1/2} \quad (2.10)$$

$$v_{n+1} = v_{n+1/2} + \frac{h}{2}F(x_{n+1}) \quad (2.11)$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$; le equazioni 2.9 sono equivalenti a quelle dell'algoritmo leapfrog 2.6 con l'aggiunta del calcolo della velocità in $v_{1/2}$ e del fatto che posizione

e velocità vengono calcolate nello stesso momento. Procediamo a elencare tre proprietà fondamentali dell'algoritmo velocity Verlet, l'invarianza per inversioni temporali, la conservazione del momento angolare e la conservazione delle aree (simplettismo). Come è ben noto le equazioni del moto di Newton sono invarianti per inversioni temporali, ciò significa che se prendiamo la traiettoria di una particella da x_i, t_i con velocità v_i , fino a x_f, t_f con velocità v_f e consideriamo la traiettoria opposta che parte da x_f, t_f con velocità opposta $-v_f$, al tempo t_f avremo che la particella si troverà in x_i con una velocità $-v_i$. Si può dimostrare semplicemente che le equazioni 2.9 l'invarianza per l'inversione temporale. Osserviamo che il velocity Verlet conserva anche esattamente il momento angolare, infine notiamo che è simplettico, cioè preserva le aree. Consideriamo una piccola regione rettangolare di area dA nello spazio delle fasi (X, P) . Siano $(x, p), (x + dx, p), (x + dx, p + dp), (x, p + dp)$ 4 possibili coordinate al tempo t , etichettate con i numeri 1,2,3,4. Al tempo t' le coordinate dei 4 punti sono cambiate e ora formano i vertici di un parallelogramma generico di area dA' . Il teorema di Liouville ci dice che le aree sono uguali

$$dA' = dA \quad (2.12)$$

quindi (x, p) diventa al tempo t' (x', p') per ognuno dei quattro punti. Si ha che il risultato dell'integrazione delle leggi di Newton per un tempo finito è rappresentabile come una mappa che preserva le aree. Per questo motivo è desiderabile che un'approssimazione numerica preservi anche questa proprietà.

Per verificare che anche il nostro algoritmo sia simplettico dobbiamo verificare che valga 2.12, con $dA = dx dp$ e

$$dA' = |de_1^{\vec{}} \times de_2^{\vec{}}| \quad (2.13)$$

con $de_1^{\vec{}}$ e $e_2^{\vec{}}$ vettori che descrivono due lati successivi del parallelogramma. Possiamo descrivere $de_1^{\vec{}}$ e $e_2^{\vec{}}$ in funzione di x' e p' nel seguente modo

$$de_1^{\vec{}} = \left(\frac{\partial x'}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial p'}{\partial x} \hat{p} \right) dx \quad (2.14)$$

e analogamente:

$$de_2^{\vec{}} = \left(\frac{\partial x'}{\partial p} \hat{x} + \frac{\partial p'}{\partial p} \hat{p} \right) dp \quad (2.15)$$

Possiamo rappresentare il prodotto 2.13 come il determinante della matrice J :

$$dA' = \det[J] dA \quad (2.16)$$

con J Jacobiano della trasformazione

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x'}{\partial x} & \frac{\partial x'}{\partial p} \\ \frac{\partial p'}{\partial x} & \frac{\partial p'}{\partial p} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Se un algoritmo è simplettico vale $\det[J] = 1$. Per dimostrare che l'algoritmo in esame 2.9 rispetti questa proprietà prendiamo ognuno dei 3 passi singolarmente;

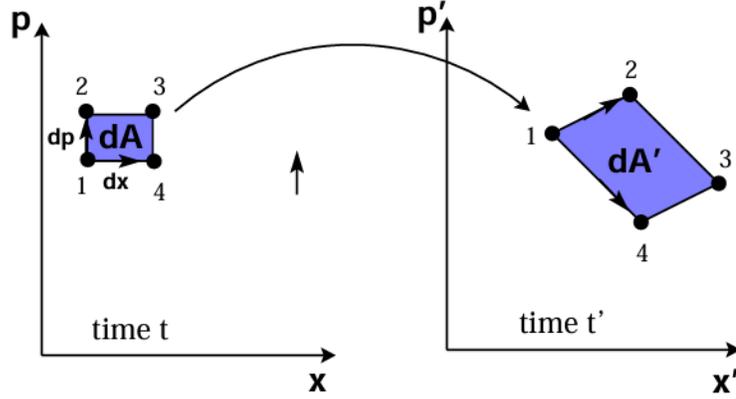


Figura 2.2: La figura mostra come l'integrazione delle equazioni di Newton per un tempo finito possa essere considerata come una mappa nello spazio di fase (cioè nello spazio x - p). Ogni punto nella figura a sinistra, che corrisponde al tempo t , viene mappato in un punto corrispondente nella figura a destra, che corrisponde a un tempo successivo t' . L'area di una regione a sinistra, come il rettangolo formato dai punti 1-4, è uguale all'area della regione corrispondente a destra, quindi la dinamica newtoniana dà origine a una mappa che preserva l'area.

partendo dal primo abbiamo (x_0, v_0) e $(x_0 + \delta x_0, v_0 + \delta v_0)$ al tempo iniziale e:

$$v_{1/2} + \delta v_{1/2} = v_0 + \delta v_0 + \frac{h}{2}F(x_0 + \delta x_0), \quad v_{1/2} = v_0 + \frac{h}{2}F(x_0) \quad (2.18)$$

possiamo scrivere il risultato in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta v_{1/2} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta v_0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

con

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2}F''(x_0) & 1 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

analogamente per il secondo e il terzo passo dell'algoritmo abbiamo:

$$\begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \delta v_{1/2} \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta v_{1/2} \end{pmatrix}; \quad (2.21)$$

$$C \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta v_{1/2} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \delta v_{1/2} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

con

$$B = \begin{pmatrix} 1 & h \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2}F'(x_1) & 1 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

quindi

$$\begin{pmatrix} \delta x_1 \\ \delta v_1 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta v_0 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

con J dato dal prodotto matriciale

$$J = CBA. \quad (2.26)$$

perciò

$$\det[J] = \det[C] \det[B] \det[A] = 1 \quad (2.27)$$

Il vantaggio degli algoritmi simplettici è che possiedono stabilità globale, poiché l'area viene preservata i valori dell'energia saranno costanti nel tempo.

2.1.1 Implementazione del programma per la simulazione atomica

In questa sezione si procederà a illustrare il programma in Python per la simulazione atomica e spiegarne le scelte implementative e le funzionalità. Incominciamo importando le librerie necessarie per il programma:

```
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
```

NumPy e math forniscono gli strumenti per un'efficiente manipolazione e calcolo sui dati numerici, mentre Matplotlib permette di visualizzare i dati con grafici gradevoli. In particolare NumPy è estremamente utile all'interno di questo programma perché permette di creare e manipolare array di grande dimensione in maniera efficiente e veloce, infatti le operazioni su array di NumPy sono implementate all'interno della libreria in C, rendendole più veloci rispetto alle operazioni sugli array nativi di Python. Procediamo a definire i parametri e le costanti utili all'interno del programma:

```
#Trap
lambda_b = 1064E-9
P_b = 2
R_trap = 30E-6
w0 = 19E-6

#Atoms
N = 10000
```

```

T_a = 15E-6
X0 = [0, 0, 0.01]
sigma_uniform = np.array([1,1,1]) * 200E-6
X_min = X0 - sigma_uniform
X_max = X0 + sigma_uniform

#Simulation parameters
h =1E-5
H = 0.08

#Costants
c = 299792458
kB = 1.38064852E-23
m_Rb = 87*1.66053904E-27
g =9.81

#Derived quantities
z0 = math.pi * w0**2/lambda_b
a = -2.155E-36

```

Per quanto riguarda i parametri riferiti alla trappola λ_b è la lunghezza d'onda del laser posto all'uscita della fibra ottica, P_b è la potenza in W dello laser, w_0 è il raggio gaussiano del fascio sulla punta della fibra, infine R_{trap} è il raggio della fibra ottica. Proseguendo, descriviamo i parametri che concernono gli atomi: N rappresenta il numero di atomi di rubidio da simulare, T_a è la temperatura del campione di atomi, X_0 è il centro del campione e σ uniform è la larghezza 3-D del campione da simulare, perciò tutti gli atomi simulati si troveranno compresi tra X_{min} e X_{max} ; h rappresenta il passo temporale tra due iterazioni successive e H la durata totale, in secondi, della simulazione. Infine, z_0 è la distanza a cui il raggio del laser aumenta di un fattore radice di 2 e a rappresenta la polarizzabilità in $\frac{J}{W/m^2}$.

Successivamente si procede a generare N atomi con le rispettive posizioni X e velocità V . Le posizioni degli atomi all'interno della trappola magnetottica sono distribuiti secondo una distribuzione normale con centro X_0 e una deviazione standard di 3mm, tuttavia per questa simulazione abbiamo deciso di simulare solo gli atomi entro $200 \mu\text{m}$ da X_0 perché gli atomi al di fuori di questo cubo sentono una forza troppo debole per essere intrappolati all'interno della fibra. Le velocità sono generate attraverso una distribuzione normale con media 0 e deviazione standard $\sqrt{k_B T_a / m_{Rb}}$

```

#Atoms generation
X = np.random.uniform(low= X_min, high=X_max, size=(N, 3))
x_points = X[:, 0]
y_points = X[:, 1]
z_points = X[:, 2]

```

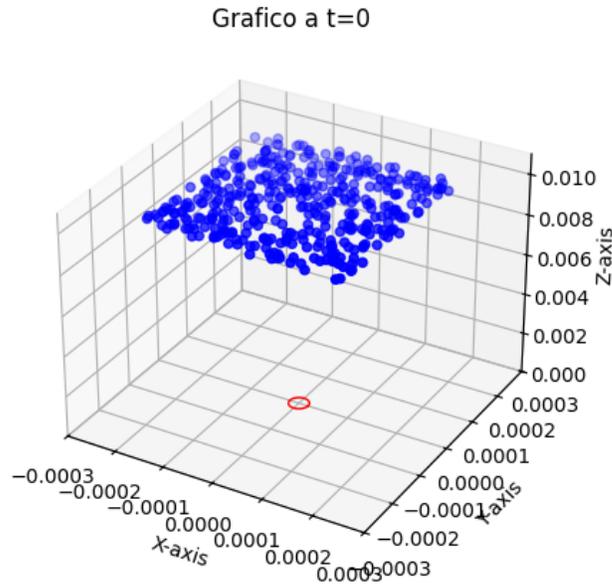


Figura 2.3: Rappresentazione grafica per $t = 0s$ del campione di atomi simulato nel programma e della fibra ottica

```
V=np.random.normal(loc=0,scale=np.sqrt(kB*T_a/m_Rb),size=(N,3))
x_velocity = V[:, 0]
y_velocity = V[:, 1]
z_velocity = V[:, 2]
```

Passiamo ora alla simulazione vera e propria della dinamica degli atomi di rubidio. Introduciamo le quantità r^2 , w^2 , K utili per calcolare le forze. r^2 è il quadrato della distanza dell'atomo dall'asse z , w^2 è il quadrato del raggio gaussiano del laser, K è il potenziale. Inizialmente vengono create 2 matrici $N \times 3$ per calcolare le forze nel passo temporale i -esimo e $(i + 1)$ -esimo, inoltre vengono dichiarati anche due array per conservare i dati della posizione e dell'accelerazione per ogni atomo per ogni passo temporale della simulazione. All'interno del ciclo *for*, all'inizio vengono salvati i dati di posizione e velocità e successivamente viene aggiornata la posizione degli atomi in accordo con l'algoritmo velocity verlet 2.9. una volta aggiornata la posizione si passa a calcolare le variabili che saranno necessarie per calcolare le componenti della forza, cioè r^2 , w^2 e K . A questo punto si procede a calcolare le forze dovute al potenziale sui tre assi, a cui si aggiunge la gravità. Per determinare le formule delle forze è stato utilizzato un piccolo script nel linguaggio *Wolfram Mathematica*. Quindi viene aggiornata anche la velocità e si può proseguire alla prossima iterazione

del ciclo.

```

Fn = np.zeros((N, 3))
Fn1 = np.zeros((N, 3))
History_Pos = []
History_Acc = []

#Velocity Verlet
for i in range(int(H/h)):
    History_Pos.append((i * h, X.copy()))
    History_Acc.append((i*h, Fn1[:, :]/m_Rb))

    X += h * V + 0.5 * h**2 *Fn /m_Rb

#Force calculation
r2 = X[:,0]**2 + X[:,1]**2
w2 = w0**2 * (1 + (X[:,2]**2 / z0**2 ))
K = 2* a * P_b / (math.pi * w2) * np.exp(-2 * r2 / w2)

Fn1[:,0]= 4 * K * X[:,0] / (w2)
Fn1[:,1]= 4 * K * X[:,1] / (w2)
Fn1[:,2] =2*K*X[:,2]/(z0**2*(1 + (X[:,2]/z0)**2 ))*(1-2*r2/w2)
Fn1[:,2] -= m_Rb * g

V += 0.5 * h * (Fn1+ Fn) / m_Rb

Fn = Fn1

```

Una volta che è terminata la simulazione è possibile calcolare la frazione di atomi che ha attraversato la punta della fibra:

```

N_Attraversamenti = 0
position_arrays = [snapshot_data[1] for snapshot_data in History_Pos]
my_arr = np.stack(position_arrays)
for i in range(N):
    print(f"{i} / {N}")

    Traiettoria_iesima = my_arr[:, i, :]

    for j in range(int(H/h)):
        radius = (Traiettoria_iesima[j,0]**2 + Traiettoria_iesima[j,1]**2)*

        if Traiettoria_iesima[j,2] <= 0:
            if radius <= R_trap:
                N_Attraversamenti += 1
                break

```

2.1. ALGORITMI PER LA SIMULAZIONE DELLA DINAMICA MOLECOLARE 23

```

else :
    break

```

```

print(N_Attraversamenti)

```

Attraverso un primo ciclo for per ogni atomo si crea un nuovo array che comprende lo storico della posizione solamente dell'atomo i -esimo. Quindi attraverso un altro ciclo for si controlla che la particella non abbia già attraversato il piano $z = 0$, in caso lo abbia fatto si controlla con un if se la particella sia entrata nella fibra oppure no, quindi si passa alla particella successiva. Una volta calcolato il numero di attraversamenti si stampa a schermo la frazione di atomi che ha attraversato la fibra; ciò termina la simulazione della dinamica atomica.

Infine mostriamo il codice che è stato utilizzato nel capitolo 3 per calcolare l'errore sulle posizioni al variare del passo temporale.

```

#Parameters
H = 0.045
h_a=1E-8
h_b=1E-7
X_a = np.array([100E-6,100E-6,0.01])
X_b = np.array([100E-6,100E-6,0.01])
V_a = np.array([-1,-1,-1]) * np.sqrt(kB * T_a / m_Rb)/10
V_b = np.array([-1,-1,-1]) * np.sqrt(kB * T_a / m_Rb)/10
Fn_a = np.zeros(3)
Fn1_a = np.zeros(3)
Fn_b = np.zeros(3)
Fn1_b = np.zeros(3)

#First simulation
for i in range(int(H/h_a)):

    X_a += h_a * V_a + 0.5 * h_a**2 * Fn_a / m_Rb

    # Force calculation
    r2 = X_a[0]**2 + X_a[1]**2
    w2 = w0**2 * (1 + (X_a[2]**2 / z0**2 ))
    K = 2* a * P_b / (math.pi * w2) * np.exp(-2 * r2 / w2)

    Fn1_a[0]= 4 * K * X_a[0] / (w2)
    Fn1_a[1]= 4 * K * X_a[1] / (w2)
    Fn1_a[2] = 2 * K * X_a[2] / (z0**2*(1+(X_a[2]/z0)**2))*(1-2*r2/w2)
    Fn1_a[2] -= m_Rb * g

    V_a += 0.5 * h_a * (Fn1_a+ Fn_a) / m_Rb

```

```

    Fn_a = Fn1_a

#Second simulation
for i in range(int(H/h_b)):

    X_b += h_b * V_b + 0.5 * h_b**2 * Fn_b / mRb

# Force calculation
r2 = X_b[0]**2 + X_b[1]**2
w2 = w0**2 * (1 + (X_b[2]**2 / z0**2 ))
K = 2* a * P_b / (math.pi * w2) * np.exp(-2 * r2 / w2)

Fn1_b[0]= 4 * K * X_b[0] / (w2)
Fn1_b[1]= 4 * K * X_b[1] / (w2)
Fn1_b[2] = 2 * K * X_b[2] / (z0**2*(1+(X_b[2]/z0)**2))*(1-2*r2/w2)
Fn1_b[2] -= mRb * g

V_b += 0.5 * h_b * (Fn1_b+ Fn_b) / mRb

    Fn_b = Fn1_b
print(X_a)
print(X_b)

err_x = ((X_a[0] - X_b[0])**2)**0.5 / np.abs(X_a[0])
err_z = ((X_a[2] - X_b[2])**2)**0.5 / np.abs(X_a[2])
print(err_x)
print(err_z)

```

Questo script esegue 2 simulazioni differenti del velocity Verlet, per un singolo atomo, fissata la posizione iniziale e la velocità iniziale con tutti i parametri uguali ad eccezione del passo temporale tra due iterazioni successive. una volta terminate le simulazioni calcola lo scarto quadratico relativo tra le 2 posizioni finali sia su x che su z .

Capitolo 3

Analisi risultati

In questo capitolo approfondiremo il comportamento degli atomi di rubidio nella simulazione del capitolo precedente. Nella simulazione attraverso il programma Python abbiamo simulato particelle che si trovano a una distanza massima $\sigma_{uniform} = 200\mu\text{m}$ dal centro del campione di atomi X_0 per tutti tre gli assi spaziali secondo una distribuzione di probabilità uniforme. tuttavia nell'esperimento il campione di atomi ha una distribuzione spaziale di tipo gaussiano intorno al centro X_0 con una deviazione standard $\sigma_{gaussiana} = 3\text{ mm}$. Poiché $\sigma_{gaussiana} \gg \sigma_{uniform}$, una distribuzione di probabilità uniforme non è dissimile a una distribuzione di probabilità gaussiana nella stessa regione spaziale, tuttavia per avere una stima delle frazioni di atomi catturati è necessario calcolare la frazione di atomi simulati rispetto al numero totale di atomi della nuvola atomica:

$$\frac{N_{\text{atomi simulati}}}{N_{\text{atomi totale}}} = (2 \times \sigma_{uniform})^3 / (\sigma_{gaussiana} \sqrt{2\pi})^3 = 1.505 \times 10^{-4} \quad (3.1)$$

Per prima cosa verrà analizzato il comportamento degli atomi che vengono intrappolati all'interno della fibra, successivamente calcoleremo l'errore sulle posizioni sull'asse x e sull'asse z al variare del passo temporale h , quindi si conterà la frazione di atomi che attraversano la fibra ottica prima con parametri *standard* e successivamente variando i principali parametri.

3.1 Traiettoria di un atomo che attraversa la fibra ottica

Studiamo il comportamento di un atomo che attraversa la fibra ottica. Il potenziale prodotto dalla fibra ottica è il seguente:

$$U(x, y, z) = \alpha \frac{2P}{\pi w(z)^2} e^{-2 \frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}} \quad (3.2)$$

con il raggio del laser $w(z)$ tale che:

$$w(z)^2 = w_0^2(1 + (z^2/z_0^2)) \quad (3.3)$$

dove P è la potenza in Watt del laser, α la polarizzabilità, $w(z)$ è il raggio del laser e w_0 il raggio del laser in $z = 0$. A causa del potenziale gli atomi sono soggetti alla forza:

$$F(x, y, z) = -\nabla U(x, y, z) \quad (3.4)$$

che vale:

$$F_x = \frac{4Kx}{w(z)^2} \quad (3.5)$$

$$F_y = \frac{4Ky}{w(z)^2} \quad (3.6)$$

$$F_z = \frac{2Kz}{z_0^2(1 + (z^2/z_0^2))} \left(1 - 2\frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}\right) \quad (3.7)$$

con

$$K = \frac{2\alpha P}{\pi w(z)^2} e^{-2\frac{x^2 + y^2}{w(z)^2}} \quad (3.8)$$

Notiamo che dal momento che α è negativa, anche K lo è e quindi la forza lungo gli assi x e y è di tipo attrattivo, inoltre alla forza dovuta al potenziale a F_z bisogna sommare il contributo dovuto alla gravità. Nell'ambito di questa simulazione tutti gli atomi sono ritenuti indipendenti e le interazioni e gli urti tra gli atomi vengono trascurati.

Procediamo a raffigurare e a descrivere le traiettorie lungo gli assi z e x degli atomi di rubidio attratti dal potenziale:

dalla Figura 3.1 è possibile notare l'atomo a $t = 0$ parte da una posizione vicina al centro della nuvola di atomi $(0, 0, 1)$ cm e successivamente compie un moto che è simile a quello di una parabola; attraversa la fibra a $t \sim 45$ ms. La quasi totalità degli atomi che attraversa la fibra lo fa per $35 \text{ ms} \leq t \leq 55 \text{ ms}$, il tempo in cui l'atomo attraversa la fibra dipende principalmente dalla velocità iniziale lungo la verticale, se a $t = 0$ l'atomo possiede una velocità v_z positiva, l'atomo raggiungerà $z = 0$ più tardi rispetto a un atomo che possiede una v_z iniziale negativa.

3.1. TRAIETTORIA DI UN ATOMO CHE ATTRAVERSA LA FIBRA OTTICA 27

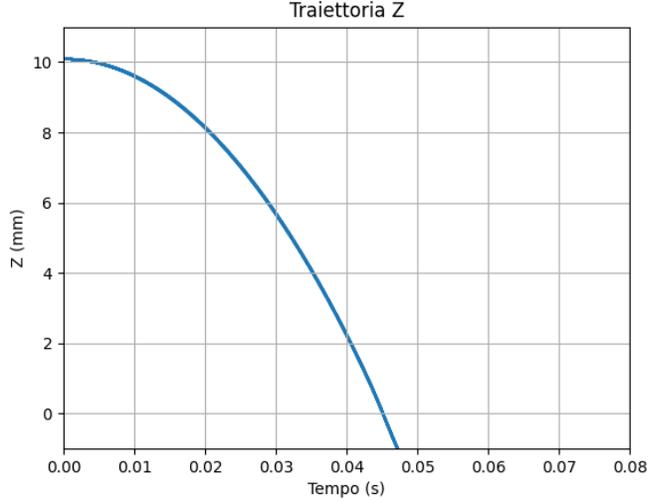


Figura 3.1: Traiettoria lungo l'asse z di un atomo sottoposto al potenziale (Eq. 3.2) e alla gravità, per $z = 0$ si intenda il pavimento della trappola magnetooptica, nonché il piano in cui si trova l'apertura della fibra ottica.

Raffiguriamo nella Figura 3.2 la traiettoria lungo l'asse x dello stesso atomo.

Notiamo che l'atomo parte a $t = 0$ a $x \sim -180 \mu\text{m}$ con una velocità molto bassa, successivamente compie dei movimenti sinusoidali con ampiezze e periodi decrescenti finché non attraversa la fibra a $t \sim 45 \text{ ms}$, dopo aver attraversato la fibra l'atomo rimane confinato vicino al centro della fibra. È fondamentale specificare che nella pratica il comportamento dopo essere entrato nella fibra è totalmente differente da quello che ci aspettiamo di osservare, infatti una volta entrato nella fibra il potenziale come lo abbiamo precedentemente modellato non sarà più valido e ovviamente l'atomo non potrà assumere valori di x maggiori della larghezza della fibra stessa, tuttavia lo scopo di questa simulazione è quello di stimare la frazione di atomi che entrano nella fibra, quindi non è oggetto di questa simulazione cosa avviene successivamente.

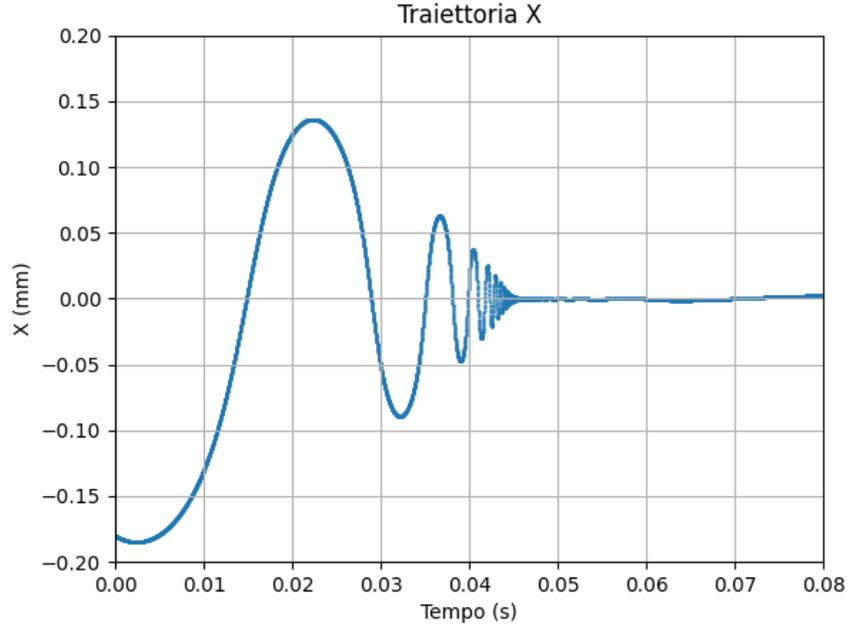


Figura 3.2: Traiettoria lungo l'asse x di un atomo sottoposto al potenziale (Eq. 3.2), per $x = 0$ si intenda il centro della fibra.

Ora mostriamo le accelerazioni che lo stesso atomo subisce lungo gli assi x e z :

Dalla Figura 3.3 notiamo che quando l'atomo è lontano dalla punta della fibra la forza di gravità è molto maggiore di quella dovuta dal potenziale 3.2, quindi $a_z \sim g$, poco prima che l'atomo entri nella fibra, il potenziale 3.2 causa una forza che oscilla molto rapidamente; appena l'atomo attraversa la fibra, questo sente una forza che lo attrae verso la punta della fibra, tuttavia rapidamente mentre l'atomo continua la sua caduta questa forza viene meno e torna a dominare la forza di gravità.

Passiamo infine a commentare l'accelerazione lungo l'asse x dell'atomo preso in esame dalla figura 3.4:

La forza lungo l'asse x tende ad attrarre l'atomo verso $x = 0$ e all'avvicinarsi dell'atomo alla punta della fibra questo viene attratto da una forza estremamente intensa e che varia molto velocemente. Dopo aver attraversato la fibra, la forza si smorza fino a tendere a zero lontano dalla punta della fibra.

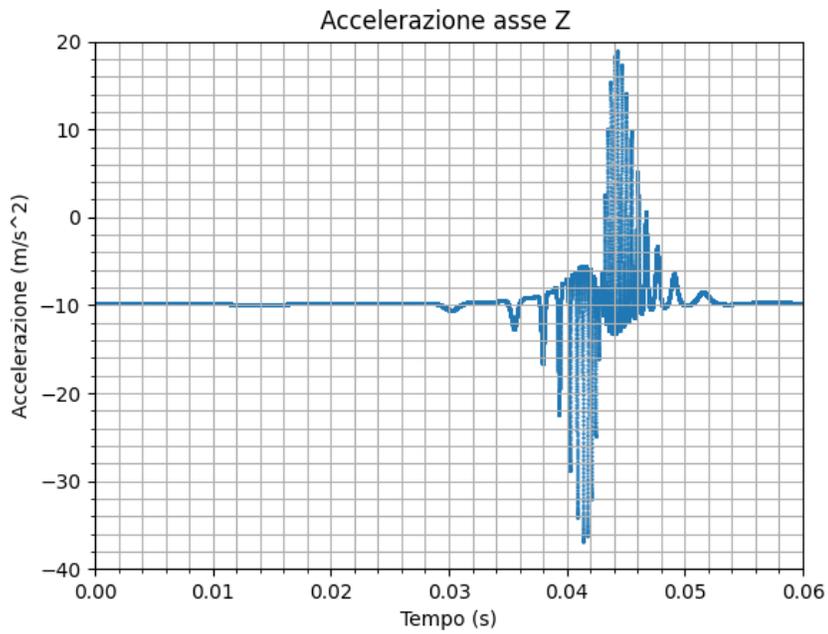


Figura 3.3: Accelerazione lungo z di un atomo di rubidio sottoposto al potenziale (Eq. 3.2) e alla gravità.

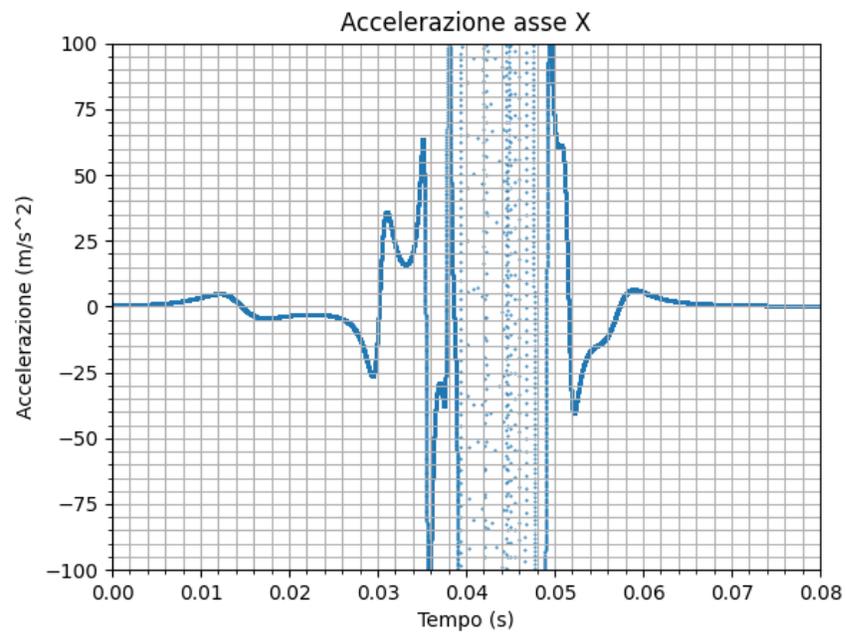


Figura 3.4: Accelerazione lungo x di un atomo di rubidio che attraversa la fibra.

3.2 Calcolo degli errori sulle posizioni al variare del passo temporale

In questa sezione calcoleremo l'errore lungo gli assi x e z variando il passo temporale. Prendiamo a riferimento 2 atomi, il primo che non viene catturato mentre il secondo che viene catturato all'interno della fibra. Fissando la posizione iniziale e la velocità iniziale verrà simulata la dinamica dell'atomo con il programma illustrato nel capitolo precedente per un tempo T^* tale che $z(T^*) \sim -1$ mm e l'errore lungo x e lungo z verrà stimato con le formule:

$$err_x = \frac{\sqrt{(x_8(T^*) - x_i(T^*))^2}}{|x_8(T^*)|} \quad (3.9)$$

$$err_z = \frac{\sqrt{(z_8(T^*) - z_i(T^*))^2}}{|z_8(T^*)|} \quad (3.10)$$

dove x_8 e z_8 sono calcolate fissando $h = 10^{-8}$, mentre x_i e z_i sono calcolate fissando $h = 10^{-i}$ e $i = 3, 4, 5, 6, 7$. Per il primo atomo prendiamo una posizione iniziale di (100 μm , 100 μm , 1 cm) e una velocità iniziale pari di (3.786 mm/s, 3.786 mm/s, 3.786 mm/s) che corrisponde a un decimo della deviazione standard sulla velocità, la durata della simulazione è 50 ms.

passo temporale h	Posizione x finale	Errore asse x
10^{-8}	-2.604E-5	
10^{-7}	-2.731E-5	4.9%
10^{-6}	-2.349E-5	9.7%
10^{-5}	-7.24E-7	97.2%
10^{-4}	+7.23E-10	100%

Tabella 3.1: Errore sulla posizione dell'asse x al variare di h .

A causa della grande instabilità e delle accelerazioni (figura 3.4) estreme che subisce un atomo che viene intrappolato la precisione sulle posizioni sull'asse x è estremamente bassa anche per $h = 10^{-5}$ e persino per $h = 10^{-7}$ abbiamo un errore stimato nell'ordine del 5%; nella prossima sezione controlleremo se questo fatto influenza la frazione di atomi catturati dalla fibra.

passo temporale h	Posizione z finale	Errore asse z
10^{-8}	-2.686E-3	
10^{-7}	-2.685E-3	0.04%
10^{-6}	-2.675E-3	0.4%
10^{-5}	-2.673E-3	0.5%
10^{-4}	-2.787E-3	3.7%
10^{-3}	-2.393E-3	10.9 %

Tabella 3.2: Errore sulla posizione dell'asse z al variare di h .

Notiamo che gli errori sulla posizione sull'asse z sono molto più contenuti rispetto a quello sull'asse x . Questo è dovuto dal fatto che l'atomo lungo l'asse z subisce una forza che cambia meno rapidamente rispetto a quella che subisce lungo l'asse x .

Passiamo ora a calcolare gli errori sulle posizioni lungo gli assi x e z per un atomo che non attraversa la fibra. Fissiamo la posizione iniziale $X_0 = (-200 \mu\text{m}, -200 \mu\text{m}, 9.8 \text{ mm})$ e una velocità iniziale di $V_0 = (1, 1, 1) \cdot 3.786 \text{ cm/s}$ pari alla deviazione standard sulla velocità; la durata della simulazione è di 50 ms.

passo temporale h	Posizione x finale	Errore asse x
10^{-8}	0.001717	
10^{-7}	0.001717	0.00%
10^{-6}	0.001717	0.00%
10^{-5}	0.001717	0.01%
10^{-4}	0.001715	0.13%
10^{-3}	0.001686	1.78%

Tabella 3.3: Errore sulla posizione dell'asse x al variare di h .

passo temporale h	Posizione z finale	Errore asse z
10^{-8}	-5.789E-4	
10^{-7}	-5.788E-4	0.00%
10^{-6}	-5.786E-4	0.04%
10^{-5}	-5.764E-4	0.42%
10^{-4}	-5.544E-4	4.23%
10^{-3}	-2.339E-4	42.32 %

Tabella 3.4: Errore sulla posizione dell'asse z al variare di h

Si può notare che per un atomo che non viene catturato sia gli errori sulla posizione sull'asse x che quelli sulla posizione sull'asse z risultano notevolmente più bassi e che per $h = 10^{-5}$ otteniamo un errore inferiore all'1% su entrambi gli assi.

3.3 Calcolo della frazione di atomi catturati al variare del passo temporale

Procediamo a calcolare la frazione degli atomi simulati che attratti dal potenziale attraversano la fibra variando il passo temporale h ; in particolare siamo interessati al passo temporale più grande che ci fornisca una stima attendibile. Come abbiamo visto in 3.4, gli atomi che vengono intrappolati dal potenziale subiscono accelerazioni estremamente intense che variano molto rapidamente

3.3. CALCOLO DELLA FRAZIONE DI ATOMI CATTURATI AL VARIARE DEL PASSO TEMPORALE 33

nel tempo, quindi ci aspettiamo che passi temporali troppo grandi causino variazioni considerevoli delle velocità che causano una dispersione dal centro della fibra. Fissando i parametri di potenza del laser $P = 2\text{W}$, numero di atomi simulati $N = 10000$, temperatura $T = 15\mu\text{K}$ e il centro del campione di atomi $X_0 = (0, 0, 10)$ mm, calcoliamo il numero di atomi che attraversa la fibra e conseguentemente la relativa frazione per valori di h di 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} , 10^{-7} .

h	Numero attraversamenti	Frazione catturata
10^{-3}	0	0%
10^{-4}	76	0.8%
10^{-5}	1134	11.3%
10^{-6}	1128	11.3%
10^{-7}	1072	10.7%

Tabella 3.5: Frazione di atomi catturati al variare del passo temporale h

Come previsto per valori di h di 10^{-3} e di 10^{-4} la simulazione atomica non è sufficientemente precisa per stimare correttamente la frazione di atomi che entra all'interno della fibra, mentre per valori di h di 10^{-5} o inferiori il numero di atomi che attraversa la fibra risulta stabile anche al diminuire del passo temporale, nonostante come visto nel paragrafo 3.2 per un passo temporale $h = 10^{-5}$ la precisione della posizione sull'asse x fosse molto bassa.

Quindi nelle prossime sezioni per stimare le frazioni degli atomi simulati al variare di temperatura del campione di atomi, della potenza del laser e dell'altezza del centro del campione rispetto alla fibra useremo un valore di h fissato a 10^{-5} .

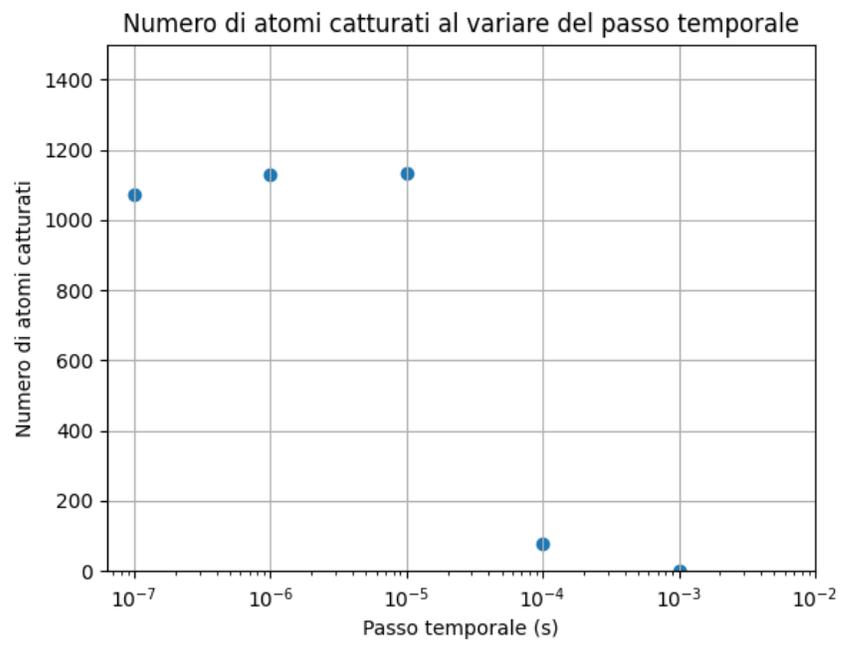


Figura 3.5: Numero di atomi che vengono intrappolati al variare del passo temporale h .

3.4 Frazione di atomi catturati al variare della temperatura

Calcoliamo la frazione di atomi che attraversano la fibra al variare della temperatura del campione di atomi di rubidio. Ci aspettiamo che al diminuire della temperatura aumenti la frazione catturata, infatti gli atomi con velocità più elevate si allontanano velocemente dal potenziale di trappola, che non riesce a catturarli. Simuliamo la dinamica atomica fissando il passo temporale $h = 10^{-5}$, il numero di atomi simulati $N = 10000$, la potenza del laser $P = 2W$, il centro della campione di atomi $X_0 = (0, 0, 10)$ mm e variando la temperatura per valori di 15, 10, 5, 2 e 1 μK .

Temperatura (μK)	Numero attraversamenti	frazione catturata
15	1152	11.5%
10	1602	16.0%
5	2965	29.7%
2	5098	51.0%
1	6906	69.1%

Tabella 3.6: Frazioni di atomi catturati al variare della temperatura del campione di atomi

Come ci aspettavamo la frazione di atomi che attraversa la fibra varia molto sensibilmente con il variare della temperatura.

3.5 Frazioni di atomi catturati al variare della potenza del laser

Studiamo ora la frazione degli atomi simulati che attraversano la fibra variando la potenza del laser che genera il potenziale che attrae gli atomi. Dalla formula del potenziale 3.2 e delle forze 3.4 sappiamo che questi variano linearmente con la potenza del laser, quindi ci aspettiamo che all'aumentare della potenza del laser aumenti anche la profondità del potenziale e conseguentemente anche la frazione di atomi catturati. Simuliamo un campione di $N = 10000$ atomi a una temperatura di $15\mu K$, centrati in $X_0 = (0, 0, 10)$ mm, con un passo temporale $h = 10^{-5}$ e variamo la potenza del laser per valori di 1 W e 2 W.

Potenza laser (W)	Numero attraversamenti	frazione catturata
1	547	5.5%
2	1124	11.2%

Tabella 3.7: Frazioni di atomi catturati al variare della potenza del laser

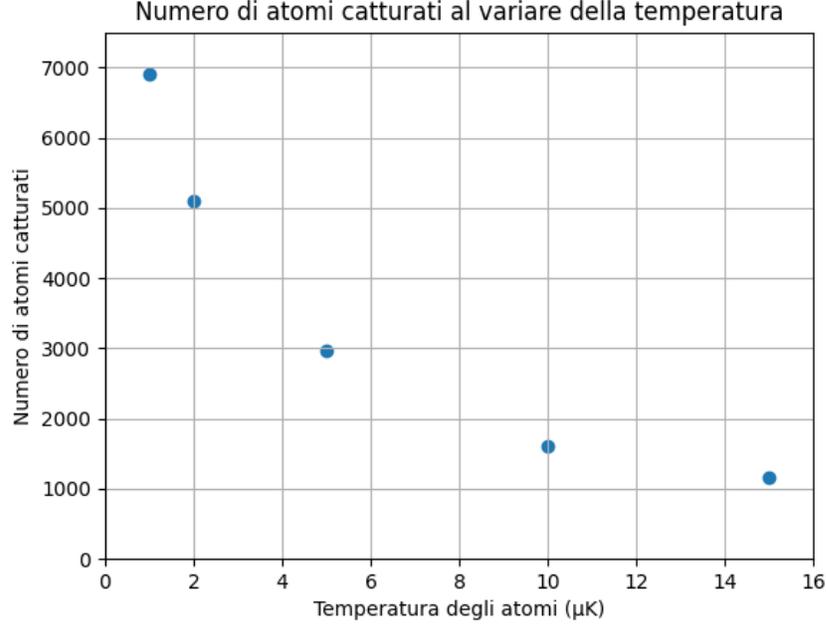


Figura 3.6: Numero di atomi che attraversa la fibra al variare della temperatura degli atomi.

3.6 Frazione di atomi catturati variando l'altezza del centro del campione

La nostra analisi si concentrerà ora sulla frazione di atomi che attraversa la fibra al variare della distanza del campione di atomi dalla punta della fibra. Per la simulazione utilizziamo i seguenti parametri: $N = 10000$ atomi a una temperatura di $15\mu\text{K}$, con un passo temporale $h = 10^{-6}$, la potenza del laser è $P = 2$ W. Variamo l'altezza del centro del campione di atomi tra i valori $Z_0 = 10, 7, 5, 2, 1$ mm.

Z_0 (mm)	Numero attraversamenti	frazione catturata
10	1205	12.1%
7	1184	11.8%
5	1112	11.1%
2	596	6.0%
1	560	5.6%

Tabella 3.8: Frazioni di atomi catturati al variare dell'altezza iniziale del campione di atomi.

3.6. FRAZIONE DI ATOMI CATTURATI VARIANDO L'ALTEZZA DEL CENTRO DEL CAMPIONE 37

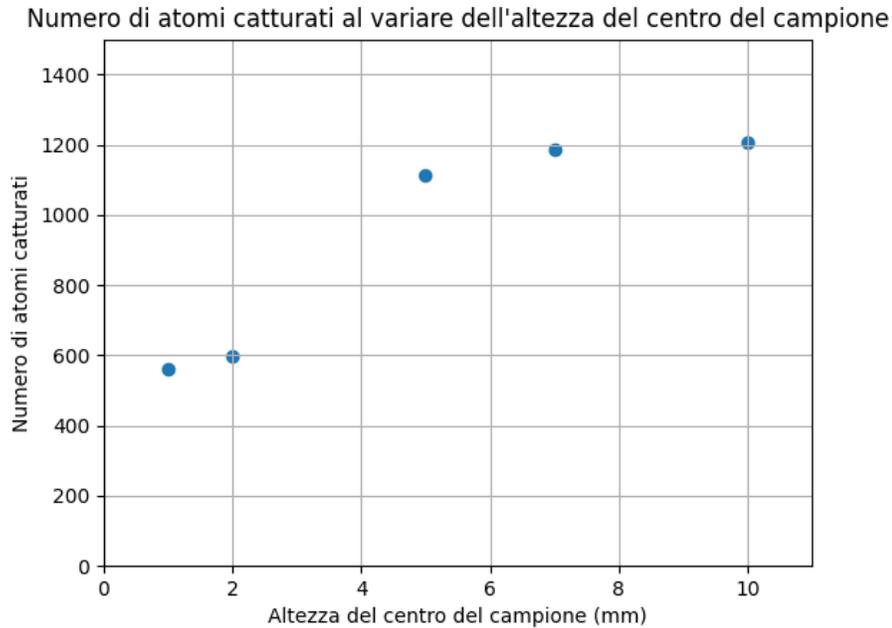


Figura 3.7: Numero di atomi che attraversa la fibra al variare dell'altezza del campione di atomi iniziale.

È possibile notare che per valori di Z_0 di 10 mm, 7 mm e 5 mm la frazione catturata, è circa costante e non si discosta molto dal 11.5% mentre per $Z_0 = 2$ mm e $Z_0 = 1$ mm la frazione catturata diminuisce sensibilmente, ciò è dovuto al fatto che il raggio gaussiano del laser aumenta con l'aumentare della distanza dalla punta della fibra, quindi quando Z_0 è più grande il volume della trappola ottica è maggiore, viceversa per valori di Z_0 minori anche il volume della trappola ottica sarà minore.

Capitolo 4

Conclusioni

Questo lavoro di tesi ha esplorato l'intrappolamento di atomi neutri tramite trappole di dipolo ottico, combinando un'analisi teorica approfondita con una simulazione numerica. Dall'analisi della precisione sulla posizione al variare del passo temporale h è emersa la significativa variazione della precisione sulla posizione dell'asse x per gli atomi intrappolati a causa delle rapide oscillazioni della forza di dipolo in prossimità del centro della trappola, tuttavia ciò non ha compromesso l'affidabilità della stima della frazione di atomi catturati per passi temporali adeguati. Le simulazioni hanno rivelato una forte dipendenza della frazione di atomi catturati dalla temperatura iniziale del campione, con temperature più basse che aumentano notevolmente il numero di atomi che attraversa la fibra. Questo risultato sottolinea l'importanza cruciale del raffreddamento atomico precedente all'intrappolamento. L'aumento della potenza del laser ha, come previsto, aumentato il numero delle catture, confermando che una maggiore intensità del potenziale porta a un aumento dell'intrappolamento. Infine, l'analisi della variazione dell'altezza iniziale del campione suggerisce che per valori troppo bassi di altezza del centro del campione di atomi il numero di attraversamenti diminuisce. I risultati ottenuti, pur essendo basati su un modello che trascura alcune interazioni come gli urti interatomici e le interazioni con le pareti della fibra, offrono preziose indicazioni per la progettazione e la calibrazione di esperimenti reali, tra i quali uno attualmente in corso al Dipartimento di Fisica e Astronomia dell'Università di Bologna.

Bibliografia

- [1] J. E. Bjorkholm et al. “Observation of Focusing of Neutral Atoms by the Dipole Forces of Resonance-Radiation Pressure”. In: *Phys. Rev. Lett.* 41 (20 nov. 1978), pp. 1361–1364. DOI: 10.1103/PhysRevLett.41.1361. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.41.1361>.
- [2] Steven Chu et al. “Experimental Observation of Optically Trapped Atoms”. In: *Phys. Rev. Lett.* 57 (3 lug. 1986), pp. 314–317. DOI: 10.1103/PhysRevLett.57.314. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.57.314>.
- [3] Claude Cohen-Tannoudji e Jacques Dupont-Roc. “Experimental Study of Zeeman Light Shifts in Weak Magnetic Fields”. In: *Phys. Rev. A* 5 (2 feb. 1972), pp. 968–984. DOI: 10.1103/PhysRevA.5.968. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.5.968>.
- [4] Rudolf Grimm, Matthias Weidemüller e Yurii B. Ovchinnikov. *Optical dipole traps for neutral atoms*. 1999. arXiv: physics/9902072 [physics.atom-ph]. URL: <https://arxiv.org/abs/physics/9902072>.
- [5] P. Young. “The leapfrog method and other “ symplectic ” algorithms for integrating Newton ’ s laws of motion”. In: 2013. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:36029703>.