arXiv:2601.17236v1 [physics.atom-ph] 23 Jan 2026

一种快速且准确的布拉格原子干涉仪模拟方法

Jack Roth[a]、Andrew Christensen[a]、Madeline Bernstein[a]、Yuno Iwasaki[a]、Holger Mueller[a]

[a]加利福尼亚大学伯克利分校物理系，美国加利福尼亚州 *94720*

摘要

原子干涉仪应用广泛，从实地测量重力和重力梯度，到在实验室开展基础物理学测试。提高干涉仪灵敏度的一种方法是采用大动量转移方法（如布拉格衍射），增大干涉仪臂之间的动量差。然而，布拉格衍射会在累积的干涉仪相位中引入难以表征的系统效应。

布拉格原子干涉仪可由一维含时薛定谔方程（1D-TDSE）描述。本文表明，对于布拉格衍射情形，一维含时薛定谔方程这一偏微分方程可分解为若干组常微分方程，从而可以采用自适应步长龙格－库塔方法。我们比较了该方法与分步法和克兰克-尼科尔森方法的收敛性，并介绍了一种利用查找表进一步加快计算的方法。

关键词： 原子干涉测量、布拉格衍射、分步法、Crank–Nicolson方法

1. 引言

在原子干涉测量中，布拉格分束器通过施加布拉格衍射，将原子波函数分成动量态的叠加态。布拉格衍射通过随时间脉冲式地开启和

电子邮箱： jack_roth@berkeley.edu (Jack Roth)

关闭正弦势来实现，使原子波函数与该势发生散射，形成由整数个 h/ℓ 间隔开的动量态的 50-50 叠加态，其中 ℓ 是该势的空间周期。这一过程由一维含时薛定谔方程（一维含时薛定谔方程）描述。对于进行精密测量的原子干涉仪而言，充分理解这一散射过程引起的任何系统效应至关重要。

一种值得关注的系统效应源于这样一个事实：粒子初始动量的细微差异可能导致散射效率出现显著差异，甚至可能使波函数散射到不需要的动量态中。在实际实验中，原子波函数具有非零动量宽度，因此这种效应会在波函数各处有所不同。通过求解一维含时薛定谔方程偏微分方程 [1] ，可以模拟这些动力学过程，但计算代价高昂。

本文针对正弦势，提出一种快速且精确的 一维含时薛定谔方程偏微分方程（PDE）积分方法。该方法利用了正弦势在动量空间中具有狄拉克δ函数形式这一事实，从而将一维含时薛定谔方程转化为若干组常微分方程（ODE）。因此，只需分别求解每组常微分方程，即可构造出完整偏微分方程问题的解。该方法适用于任意初始波函数。对于某些问题，我们的方法比此前用于处理此类或类似问题的分步法 [1] 和克兰克-尼科尔森 [2] 方法效率更高。该方法还可与查找表配合使用，以缩短计算时间。我们将推导这一简洁的方法，将其精度与分步法和克兰克-尼科尔森方法进行比较，并举例说明如何利用该方法表征一种系统效应。

2. 方法

2.1. 推导

我们的目标是求解波函数 $|\psi\rangle$ 在描述布拉格衍射的哈密顿量所对应的薛定谔方程下的时间演化：

$$\begin{aligned}\hat{H} =& \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\frac{\Omega_{\text{eff}}(t)}{2}\cos^2(k\hat{x} - \delta t/2),\\ =& \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hbar\frac{\Omega_{\text{eff}}(t)}{8}[\exp(i(2k\hat{x} - \delta t)) + \exp(-i(2k\hat{x} - \delta t)) + 2],\end{aligned} \tag{1}$$

其中 $\Omega_{\text{eff}}(t)$ 是时间的函数。该哈密顿量的推导见 [3]。要在位置空间中求解 $|\psi\rangle$ 在此哈密顿量下的演化，可以采用分步法或 Crank–Nicolson 方法（见第 3 节）。然而，这些方法没有利用这样一个事实：在动量空间中，势是一个狄拉克δ函数，它以 $2\hbar k$ 的离散区间耦合动量态。

为利用这一性质，我们将 $\langle p|$ 作用于薛定谔方程的左侧，并注意到 $\langle p|\exp(\pm i2\hat{k}x)|\psi\rangle = \phi(p \mp 2\hbar k)$ 和 $i\hbar \langle p|_{\,\mathrm{d}\,\mathrm{d}t}\,|\psi\rangle = i\hbar\dot{\phi}(p)$（这些恒等式的推导见附录 C），得到：

$$
\begin{aligned}
i\hbar\dot{\phi}(p) =& \frac{p^2}{2m}\phi(p) \\
&+ \hbar\frac{\Omega_{\text{eff}}(t)}{8}[\phi(p-2\hbar k)\exp(-i\delta t) + \phi(p+2\hbar k)\exp(i\delta t) + 2\phi(p)],
\end{aligned}
\tag{2}
$$

其中 $\phi(p)$ 是动量空间波函数。

从物理上看，如果势由失谐交流斯塔克位移形成，我们可以将耦合动量态之间的间隔 $2\hbar k$ 归因于失谐光子散射后传递给原子的动量；该光子先被原子“吸收”，然后又被“发射”。在此处使用的模型中，电磁场是经典的；不存在光子。由于经典电磁场由具有单一空间频率的正弦势描述，动量态只能以这一确切频率的间隔发生耦合。

为了体现这种耦合的离散特性（并使方程（2）更易于用常微分方程求解器求解），我们定义一组离散的动量态 $\phi_{n,\,s} = \phi(2\hbar kn + \hbar ks/S)$。根据这一设定，$s$ 的值决定了某个态在动量空间中距离 $2\hbar k$ 的整数倍有多远，而 n 则大致决定了某个态距离零动量有多少个 $2\hbar k$。注意，我们将强制规定 $n \in \mathbb{Z}$、$S \in \mathbb{Z}$，$S > 0$ 和 $s \in [-S, -S+1, \ldots, S-2, S-1]$。在 $S \to \infty$ 的极限下，ϕ_n 的这一定义 $_{,\,s}$ 会变为连续，并涵盖所有动量。第 2.2 节给出了选择 N 和 S 的经验方法。图（1）展示了这种离散化的图示。

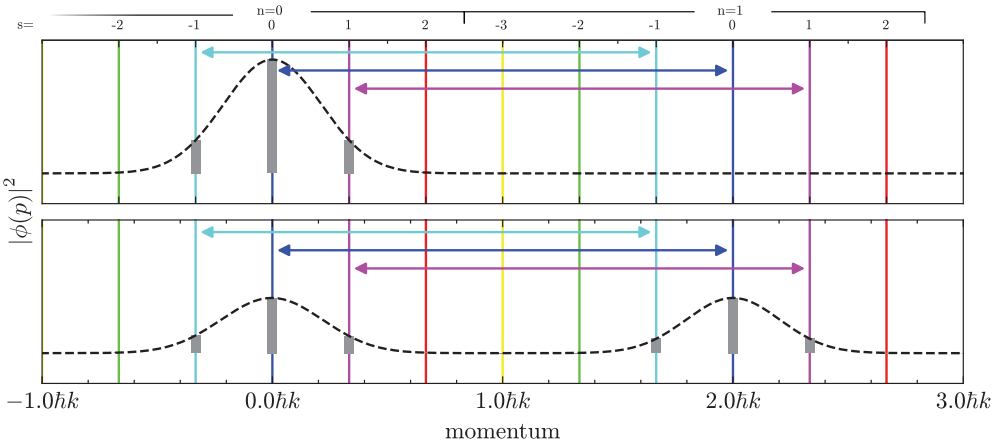

图1：在设置 $\phi_{n,s} = \phi(2\hbar k n + \hbar k s/S)$ 时所使用的离散化方案，适用于 $S = 3$ 的情况。上图展示了初始动量空间波函数，下图展示了经过一阶布拉格脉冲后的同一波函数。每个离散点均用一条竖线表示。对于 n 的每个取值，在 $n2\hbar k - \hbar k$ 和 $n2\hbar k + \hbar k$ 之间都有一个区间，其中包含 6 个离散点。每个点处的 s 值显示在上方的坐标轴上。每个区间对应的 n 值也显示在上方的坐标轴上。每支箭头的长度均为 $2\hbar k$，表示动量空间中彼此耦合的离散点（耦合的离散点颜色相同）。为简明起见，这里只显示了三支箭头，但实际上，每个离散点都有两支朝相反方向的箭头从其出发，因为它与另外两个动量态耦合。请注意，耦合态具有相同的 s 值，但 n 值不同。灰色条形表示归属于每个特定离散态的布居。

将此离散化应用于方程（2），可得

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\phi}_{n,s} =& \hbar\omega_{\mathrm{r}}(2n + s/S)^2\phi_{n,s} \\ &+ \hbar\frac{\Omega_{\mathrm{eff}}(t)}{8}[\phi_{n-1,s}\exp(-i\delta t) + \phi_{n+1,s}\exp(i\delta t) + 2\phi_{n,s}], \end{aligned} \tag{3}$$

其中，$\omega_{\mathrm{r}} = \hbar k^2/2m$ 是反冲频率。可以看到，n 的相邻取值彼此耦合。还可以看到，对于 s 的每个取值，都有一组唯一的常微分方程。在位置空间中原本是偏微分方程的方程，现在变成了动量空间中的常微分方程。

图（1）表明，s可能存在振幅很小或为零的取值。这些 s 取值可以从计算中移除，从而截断需要求解的常微分方程数量。对于动量展宽远小于 $2\hbar k$的初始波函数，这种做法可以提升计算速度，但会牺牲精度。

要计算任意初始动量空间波函数 $\phi(p)$的演化，只需将 $\phi(p)$离散化为$\phi_{n,s}$ 并求解每个 s取值对应的常微分方程组。可以使用离散傅里叶变换，将位置空间波函数表示在离散化的动量基中：

$$\phi_j = \frac{1}{L}\sum_{\ell=0}^{L}\psi_\ell \exp(-i2\pi j\ell/2L),$$

其中 $\psi_\ell = \psi(\ell\delta_x + x_0)$（$x_0$ 是某个整体平移量），而 L 是位置空间中的离散点数。由此得到的 ϕ_j 通过$j = 2Sn + s$映射到$\phi_{n,s}$。

在实际应用中，n 必须有界。下文中我们将假设空间经过截断，因此仅考虑 n的 N 个取值。

2.2. N 和 S的选择

为了求解某个态 $|\psi\rangle$ 的演化（其中位置空间和动量空间波函数分别为 $\psi = \langle x|\psi\rangle$ 和 $\phi = \langle p|\psi\rangle$），我们必须选择 N 和 S 的值，使计算满足所需的空间范围、动量范围、空间分辨率和动量分辨率。

首先注意，在动量空间中，网格间距为 $\hbar k/S$，模拟的总范围为 $2\hbar kN$。因此，在位置空间中，网格间距为 $1/Nk$，模拟的总范围为 S/k。

考虑一个波函数，它在位置空间中的特征分辨率为 δ_x ，在动量空间中的特征分辨率为 δ_p ，并在空间范围为 Δ_x 、动量范围为 Δ_p的原子干涉仪中传播。对于这样的干涉仪，必须满足以下不等式：

$$\begin{aligned}\delta_p &\gtrsim \hbar k/S,\\ \delta_x &\gtrsim 1/Nk,\\ \Delta_p &\lesssim 2\hbar k N,\\ \Delta_x &\lesssim S/k.\end{aligned}$$

因此， N 和 S 的合理取值为 $N \gtrsim \max(1/k\delta_x,\ \Delta_p/2\hbar k)$和$S \gtrsim \max(\hbar k/\delta_p,\ \Delta_x k)$。

3. 与其他方法的比较

为了评估本文所述方法的性能，我们将模拟一种用于测量反冲频率的干涉仪构型——Ramsey-Borde 干涉仪。我们将把该方法的性能与分步法和 Crank–Nicolson方法进行比较，这两种方法都可用于求解一维含时薛定谔方程偏微分方程。分步法和 Crank–Nicolson方法的设计目标都是处理任意势，而非纯正弦势。

Ramsey-Borde 干涉仪累积的相位为 $\theta = 8Tn_{\mathrm{Bragg}}^2\omega_{\mathrm{r}} - Tn_{\mathrm{Bragg}}\omega_{\mathrm{m}}$ [4]，其中 T 是布拉格分束器 [5, 3]之间的时间， n_{Bragg}是布拉格阶数，$\omega_{\mathrm{r}} = \hbar k^2/2m$是反冲频率， ω_{m} 是前两个与后两个布拉格脉冲之间双光子失谐 δ 的变化量（即前两个布拉格脉冲的双光子失谐为 δ，后两个布拉格脉冲的双光子失谐为 $\delta - \omega_{\mathrm{m}}$）。

针对 ω_{m} 的多个取值进行模拟，因此在输出布居中观察到条纹。通过将条纹拟合为正弦曲线，确定每个模拟干涉仪的相位 θ 。这一过程如图（2）所示。有关模拟干涉仪的更多详情，请参见附录B。

使用本文介绍的方法模拟该干涉仪时，采用 DOP853 自适应步长积分器 [6, 7] 求解公式（3），相对容差和绝对容差分别为 10^{-10}，最大步长为 $\Delta t = 0.1\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$、$S = 60$ 和 $N = 60$。分步法和 Crank–Nicolson 方法采用空间步长 $0.018\,k^{-1}$ ，并使用多个不同的时间步长。

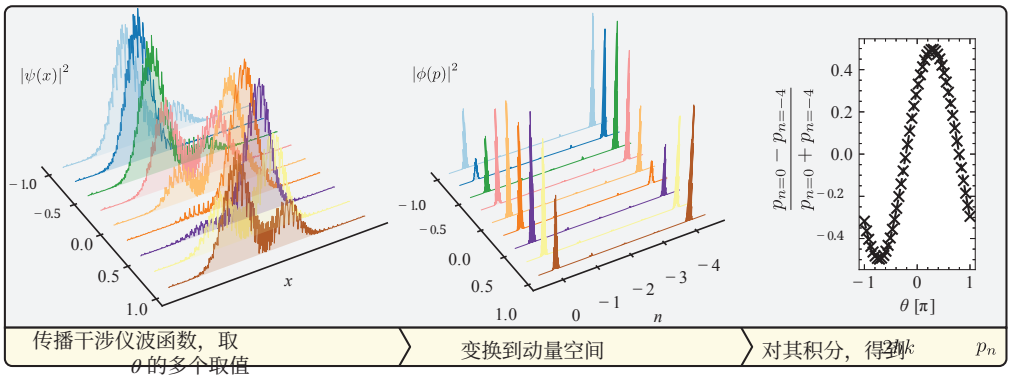

图 2：比较分步法、克兰克-尼科尔森方法与本文所述方法的过程。每种方法均用于模拟由布拉格分束器组成的完整 Ramsey-Borde 干涉仪。针对多种 ω_{m} 值进行模拟，其中 ω_{m} 设为 $\omega_{\mathrm{m}} = 8n_{\mathrm{Bragg}}\omega_{\mathrm{r}} - \theta/Tn$，并对 θ 取 50 个值，这些值从 $-\pi$ 到 π等间距分布。由此可追踪完整条纹范围内的干涉仪相位。随后对输出波函数 $\psi(x)$进行傅里叶变换，得到动量空间波函数 $\phi(p)$，再对 $2\hbar k$ 积分以求得 $p_n = |\phi_n|^2 = \int_{2\hbar k}^{2\hbar k(n+1/2)} {}_{(n-1/2)}\ \phi(p')^*\phi(p')\mathrm{d}p$。通过 $(p_{n_{\mathrm{initial}}} - p_{n_{\mathrm{final}}})/(p_{n_{\mathrm{initial}}} + p_{n_{\mathrm{final}}})$计算每个输出端口的布居比，并将其拟合为正弦曲线，以确定模拟干涉仪的相位 θ。该相位与目标相位之间的差异源于寄生动量态等系统效应。这些图使用本文所述方法，通过 $n_{\mathrm{Bragg}} = 4$ 生成。

图（3）显示了本文所述方法与分步法和克兰克-尼科尔森方法模拟得到的相位之间差值的绝对值。步长约为 $\Delta t = 10^{-5}\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$ 时，分步法收敛至本文所述方法的结果，差值约为 10^{-9}rad。在 AMD 3990X 上，当步长小于 $\Delta t = 10^{-3}\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$ 时，本文所述方法比 Split-step 方法更快。有关分步法的更多信息，请参见附录 E。

从图（3）可以看出，Crank–Nicolson方法的结果并未收敛至我们的方法所得结果。将 Crank–Nicolson方法的空间网格间距从 $0.018k^{-1}$ 减小到 $0.011k^{-1}$ 后，在步长小于 $\Delta t = 3\times10^{-3}\,\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$ 时，两者的一致性提高至约 10^{-3}rad，这表明 Crank–Nicolson方法的精度受空间网格间距限制。受可用计算资源限制，无法进一步减小空间网格间距。由此可见，如果必须使用位置空间求解器，则分步法优于 Crank–Nicolson方法。有关 Crank–Nicolson方法的更多信息，请参见附录 F。

我们的方法之所以具有更快且更准确的性能，可归因于其能够使用自适应步长（即在可能时采用较大的 Δt，在必要时采用较小的 Δt），以及该方法的更高阶数。尽管本文介绍的方法在较高精度要求下优于分步法，但需要注意的是，分步法能够处理驻波偏离完美正弦曲线的情况。这类情况对于原子干涉仪同样十分重要，因此在为具体问题选择求解器时，应考虑这一差异。

关于其他几种一维含时薛定谔方程数值技术的详细比较，参见 [8]。

4. 干涉仪中原子云的研究

现在我们考虑一个问题：用前面介绍的分步法和 Crank–Nicolson方法无法处理该问题，即模拟原子云穿过原子干涉仪传播的过程。这个问题对于理解与寄生动量态和原子波函数的动量宽度有关的系统效应至关重要。为了比使用分步法和 Crank–Nicolson方法大幅提升速度，我们将采用附录 D 中介绍的查找表。分步法和 Crank–Nicholson方法都无法使用这种查找表。

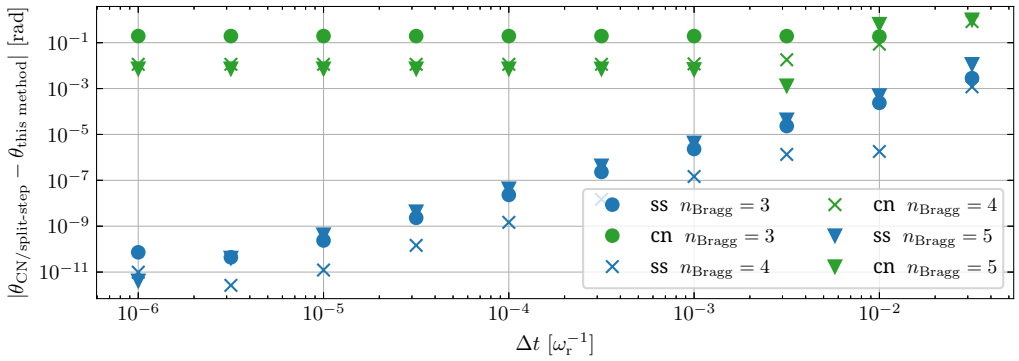

图 3：比较了采用本文所述方法、分步法（ss）和 Crank–Nicolson 方法（cn）计算得到的 Ramsey-Borde 干涉仪相位。干涉仪参数见正文。

图（4）显示了完整 Ramsey-Borde 干涉仪中布居随时间和位置的变化。图中可以看到从不完美的布拉格分束脉冲中逸出的“寄生”动量态。这些状态可能会使不同输出动量态中的布居测量产生偏差（从而改变测得的相位）；如果它们与另一个波包在空间上重叠，甚至可能在最后一个干涉仪脉冲期间发生干涉。

如前所述，另一种系统效应与原子波函数的动量宽度有关。布拉格分束器的共振条件仅对单一动量成立。由于波函数在动量空间具有一定宽度，因此不可能使整个波函数都与布拉格分束器共振。这可能导致额外的系统效应。

在真实实验中，驱动布拉格衍射的正弦势通常由一束与电偶极跃迁共振失谐的驻波激光束产生。驻波激光束的束腰有限，因此云团中不同位置的原子会经历不同的光束强度，进而经历不同的势振幅。光束中的空间噪声会导致势振幅进一步呈现空间依赖性。云团中的原子还具有横向于驻波方向的速度分布。沿驻波方向的原子速度分布由云团中原子波函数的动量宽度决定。为通过模拟捕捉这些效应，必须针对一组原子位置和横向速度求解一维含时薛定谔方程，使其反映

云团中的分布。

我们在图（5）中展示了本次模拟的结果。对于完整的原子云和单个原子，我们比较了动量空间波函数宽度对测得的干涉仪相位和对比度的影响。为研究寄生动量态对最终干涉仪相位的影响，可以在每个布拉格脉冲之后于动量空间应用一个“掩模”，从模拟中移除不需要的动量态。比较“加掩模”和“未加掩模”的干涉仪模拟结果，可以了解干涉仪相位中有多少是由寄生干涉仪造成的。

从这些结果可以立即看出，在所有情况下，动量空间波函数宽度都会产生影响，幅度达数十毫弧度。现有的原子干涉测量实验以这一精度水平为目标，因此会受到该效应的影响 [9, 10, 11]。这一效应对于旨在测量引力波的原子干涉仪也可能很重要 [12]。

先前的研究考察了波函数动量宽度的影响，但未能捕捉寄生干涉仪的影响 [13]。第 5 节讨论了这些研究的局限性。分步法和克兰克-尼科尔森模拟尚未用于模拟原子云，因为这些方法速度太慢。据我们所知，此前尚未研究过具有横向速度的原子云中波函数动量宽度以及寄生干涉仪的影响。我们的方法显著提升了运算速度，因此能够模拟干涉仪中的原子系综，并将这些效应纳入考虑。该方法为长基线布拉格原子干涉测量的快速模拟开辟了道路。

5. 波包的空间分离

考察本文介绍的模拟方法如何捕捉波包分离的物理过程，会很有启发性。真实的布拉格原子干涉仪工作在所谓的准布拉格区制 [5, 14]。在此区制下，描述每个原子的波包动量宽度远小于布拉格衍射过程的带宽，这意味着分束器动力学可用平面波动量态很好地描述。经过布拉格分束器后，原子波包由衍射动量态和未衍射动量态叠加而成。经过足够长的时间，这些

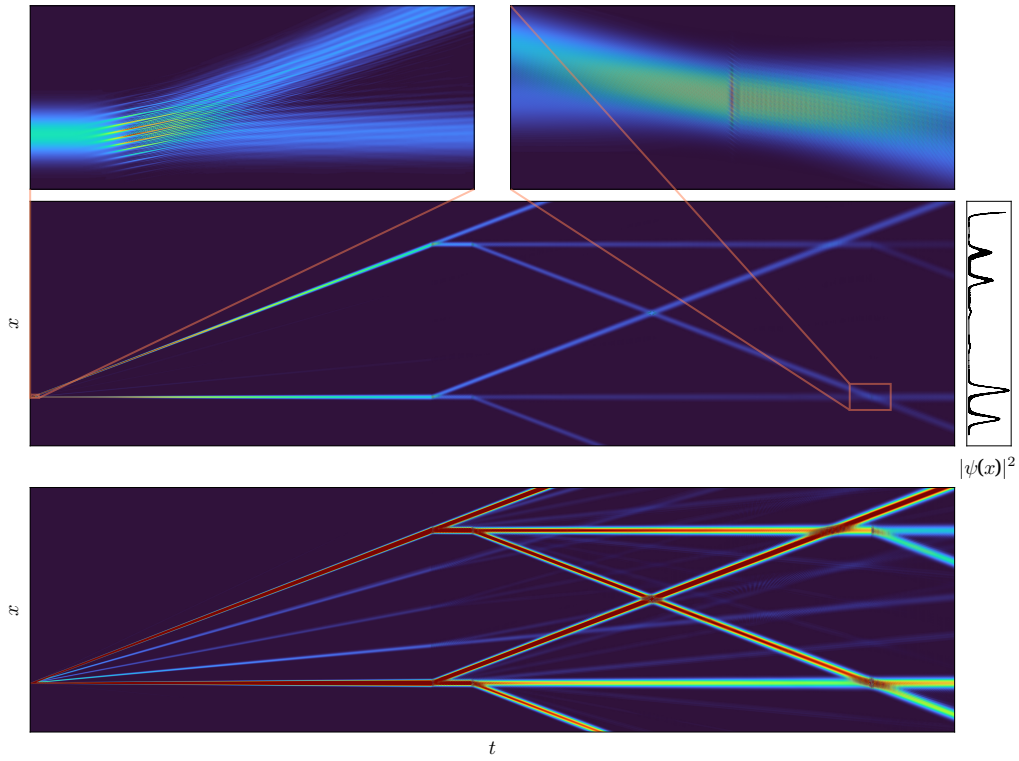

图 4：由四阶布拉格脉冲组成的 Ramsey-Borde 干涉仪模拟。所示热图为 $|\psi(x,\ t)|^2$。布拉格脉冲在时间上呈高斯分布，$\sigma = 0.26\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$，前两个和最后两个布拉格脉冲之间的时间间隔为 $T = 259.62\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$，第二个和第三个布拉格脉冲之间的时间间隔为 $T' = 25.96\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$；初始波包为最小不确定度高斯波包，$\sigma_p = 0.1\hbar k$。对于铯原子，这些数值对应的布拉格脉冲为 $\sigma = 20\,\mu$ 秒，$T = 20$ 毫秒和 $T' = 2$ 毫秒，速度展宽为十分之一反冲速度。插图显示了第一个和最后一个布拉格脉冲。底部图中的数据与中间图相同，但降低了最大颜色值，以便更清楚地显示寄生干涉仪。右上角插图所示区域是左上角插图的 8 倍。在此模拟中，$S = 3041$和 $N = 15$。在 AMD 3990X 的单核上，不使用查找表计算最终波函数需要 2500 秒。

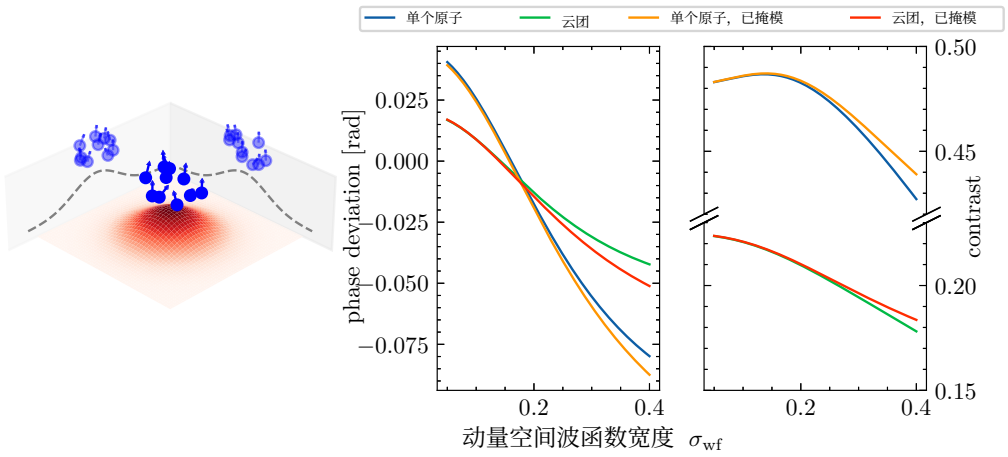

图5：左： 该图示意了云团中的原子由于其横向位置分布，会经历一系列不同的势深。原子以实心蓝色圆表示。由原子向外指的箭头表示原子速度，该速度既可以包含竖直分量，也可以包含横向分量。XZ平面和YZ平面显示了原子的投影（略微透明的蓝色圆），以及表示其速度的箭头。要传播这些原子的波函数，需要针对原子轨迹上每一点所经历的势深，求解布拉格衍射哈密顿量。右： 这些图展示了由四阶布拉格脉冲组成的Ramsey-Borde 干涉仪的模拟相位偏差和对比度，其中 $\sigma = 0.26\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$, $T = 64.9\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$, $T' = 64.9\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$, $S = 1102$,$N = 9$、$\Omega_{\mathrm{eff},\ 0} = 20\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$, $\sigma_{\mathrm{cloud}} = 1.5$ 毫米，以及 $\sigma_{v_T,\ \text{云团}} = 3.5$ 毫米/秒。对于铯原子，这些数值对应于布拉格脉冲，其参数为 $\sigma = 20\,\mu$秒、$T = 5$毫秒和$T' = 5$ 毫秒。云团模拟中采样了1000个原子。相位偏差和对比度曲线采用与图（2）中所述相同的过程生成。每个模拟干涉仪均经过调节，使累积的Ramsey-Borde 干涉仪相位为零。“已掩模”的含义在正文中有所描述。在 AMD 3990X 上使用单个核心时，采用查找表方法模拟云团中每个原子的完整干涉仪需要 0.6 秒。生成上述图像耗时35小时，期间使用了多个核心，并且需要模拟800,000个单次干涉仪。

各态在空间上分离，不再发生空间重叠。这一点在图（4）中十分明显，其中插图显示，波包覆盖了布拉格衍射势的许多空间周期，但经过足够长时间的自由演化后实现了空间分离。

如果我们只考虑 $s = 0$，那么模拟描述的就是真正的平面波，其空间范围是无限的，因此不会发生空间分离。要纳入波包分离的物理过程，就必须加入 s 的其他取值。对于完整的 Ramsey-Borde 干涉仪，如果忽略波包分离并将波包近似为平面波，那么在第二个分束器脉冲之后，不同动量态之间可以实现干涉。如果存在空间分离，这一点便无法实现。要研究真实的布拉格干涉仪，我们必须考虑这种空间分离。

以往的研究通常将波函数表示为平面波[5, 15, 13, 14]。这些研究通过追踪每个波包在布拉格分束器之间的经典运动，并针对每组在空间上重叠的波包分别模拟布拉格分束器过程，从而纳入空间分离。我们将这种方法称为“量子-经典混合方法”。混合方法通常不考虑寄生干涉仪，因为这需要仔细核算许多经典轨迹。

在混合方法中，通过以各种初始动量多次重复模拟，来研究非零动量宽度的影响。实际上，本文提出的方法正是如此：针对不同的 s 值模拟平面波动量态，然后据此重建完整的干涉仪输出。由此得出的结论或许令人意外：如果混合方法之后会对动量态分布进行平均，就无需手动追踪不同动量态之间的分离，因为这种平均会自动捕捉空间分离的影响。

6. 结论

总之，我们介绍了一种能够快速、准确地传播长基线布拉格原子干涉仪波函数的方法。该技术适用于研究即将开展的长基线实验中的系统效应，例如引力波探测器 [12]或精细结构常数测量 [9, 10, 11]。该方法的计算成本低于分步法和Crank–Nicolson方法。我们

还介绍了一种系统效应：现实原子云穿过原子干涉仪时，其动量空间波函数宽度会产生影响。这种效应与目标精度达到毫弧度级的布拉格原子干涉仪相关。

在布拉格脉冲强度分布固定不变的情况下，可以使用查找表提高计算效率。该方法的主要缺点是无法处理非周期性势能，而这对于理解原子干涉仪中的某些其他系统效应十分重要。不过，在需要关注初始波函数宽度或寄生干涉仪的系统中，该方法有望用于快速模拟。未来的工作可以研究如何将此方法应用于模拟原子干涉仪中的布洛赫振荡 [16]。

致谢

我们感谢 Maximilian Beyer（阿姆斯特丹）提供的宝贵讨论。本研究得到美国能源部科学办公室基础能源科学办公室 [资助，资助编号为 7709509], 劳伦斯伯克利国家实验室 [资助编号为 7793610], 美国国家科学基金会[资助编号为 2208029、2512532 和 3068（后者由罗格斯大学管理）], ，以及美国国家航空航天局[资助编号 SUB00001274/URFAO:GR536596（由罗切斯特大学管理）和 1720410（由喷气推进实验室管理）]。

参考文献

[1]F. Fitzek, J.-N. Siemß, S. Seckmeyer, H. Ahlers, E. M. Rasel, K. Hammerer 和 N. Gaaloul, “弹性散射过程的通用原子干涉仪模拟”, 《科学报告》，第 10 卷，第 1 期，2020 年 12 月。 [在线]。可访问: http://dx.doi.org/10.1038/s41598- 020-78859-1

[2]W. van Dijk 和 F. M. Toyama, 《含时薛定谔方程的精确数值解》, $PhysicalReview\quad E$, 第 75 卷，第 3 期，2007 年 3 月。[在线]。网址: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.75.036707

[3]T. Kovachy、J. M. Hogan、D. M. S. Johnson 和 M. A. Kasevich，《光学晶格作为原子干涉测量的波导和分束器：解析处理及应用方案》，*Physical Review A*，第 82 卷，第 1 期，2010 年 7 月。 [在线]。网址：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.82.013638[4]H. Müller、S.-W. Chiow、Q. Long、C. Vo 和 S. Chu，《一项新的光子反冲实验：迈向精细结构常数的测定》，*AppliedPhysics B*，第 84 卷，第 4 期，第 633–642 页，2006 年 7 月。[在线]。网址：http://dx.doi.org/10.1007/s00340-006-2279-x[5] H. Müller、S.-w. Chiow 和 S. Chu，《拉曼-纳斯区与布拉格区之间的原子波衍射：有效拉比频率、损耗和相移》，*Physical ReviewA*，第 77 卷，第 2 期，2008 年 2 月。 [在线]。网址：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.77.023609[6] P. Virtanen、R. Gommers、T. E. Oliphant、M. Haberland、T. Reddy、D. Cournapeau、E. Burovski、P. Peterson、W. Weckesser、J. Bright、S. J. van der Walt、M. Brett、J. Wilson、K. J. Millman、N. Mayorov、A. R. J. Nelson、E. Jones、R. Kern、E. Larson、C. J. Carey、İ. Polat、Y. Feng、E. W. Moore、J. VanderPlas、D. Laxalde、J. Perktold、R. Cimrman、I. Henriksen、E. A. Quintero、C. R. Harris、A. M. Archibald、A. H. Ribeiro、F. Pedregosa、P. van Mulbregt 和 SciPy 1.0 贡献者，《SciPy 1.0：Python 科学计算的基础算法》，*Nature Methods*，第 17 卷，第 261–272 页，2020 年。[7] S. K. Lam 、 A. Pitrou 和 S. Seibert，《Numba：基于 LLVM 的 Python 即时编译器》，载于高性能计算中的 *LLVM* 编译器基础设施第二届研讨会论文集，LLVM '15 系列。美国纽约：计算机协会，2015 年。 [在线]。网址：https://doi.org/10.1145/2833157.2833162[8]T. Iitaka，《含时薛定谔方程的数值求解》，*Physical Review E*，第 49 卷，第 5 期，第 4684–4690 页，1994 年 5 月。[在线]。网址：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.49.4684

[9] R. H.Parker、C. Yu、W. Zhong、B. Estey 和 H. Müller，"以精细结构常数的测量检验标准模型"，《科学》，第 360 卷，第 6385 期，第 191–195 页，2018 年。 [在线]。可访问：https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aap7706

[10] L. Morel、Z. Yao、P.Cladé 和 S.Guellati-Khélifa，“以 81 万亿分之一的精度测定精细结构常数”，《自然》，第 588 卷，第 7836 期，第 61–65 页，2020 年 12 月。 [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1038/s41586-020-2964-7

[11]X. Fan、T. Myers、B. Sukra 和 G. Gabrielse，“电子磁矩的测量”，《物理评论快报》，第 130 卷，第 7 期，2023 年 2 月。[在线]。网址：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.071801

[12] M. Abe, P. Adamson, M. Borcean, D. Bortoletto, K. Bridges, S. P. Carman, S. Chattopadhyay, J. Coleman, N. M. Curfman, K. DeRose, T. Deshpande, S. Dimopoulos, C. J. Foot, J. C. Frisch, B. E. Garber, S. Geer, V. Gibson, J. Glick, P. W. Graham, S. R. Hahn, R. Harnik, L. Hawkins, S. Hindley, J. M. Hogan, Y. Jiang, M. A. Kasevich, R. J. Kellett, M. Kiburg, T. Kovachy, J. D. Lykken, J. March-Russell, J. Mitchell, M. Murphy, M. Nantel, L. E. Nobrega, R. K. Plunkett, S. Rajendran, J. Rudolph, N. Sachdeva, M. Safdari, J. K. Santucci, A. G. Schwartzman, I. Shipsey, H. Swan, L. R. Valerio, A. Vasonis, Y. Wang, and T. Wilkason, “物质波原子梯度计干涉传感器（magis-100）,”《量子科学与技术》, vol. 6, no. 4, p. 044003, Jul. 2021. [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1088/2058-9565/abf719[13] B. Estey, C. Yu, H. Müller, P.-C. Kuan, and S.-Y. Lan, “抑制衍射相位的高分辨率原子干涉仪,”《物理评论快报》, vol. 115, no. 8, Aug. 2015. [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.083002[14]A. Béguin, T. Rodzinka, J. Vigué, B. Allard, and A. Gauguet, “准布拉格区制中原子干涉仪的表征,”*Physical Review A*, vol. 105, no. 3, Mar. 2022. [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.105.033302[15]T. Kovachy, S.-w. Chiow, and M. A. Kasevich, “绝热快速绝热通过多光子布拉格原子光学,” *PhysicalRe-view A*, vol. 86, no. 1, Jul. 2012. [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.86.011606

[16]P. Cladé, M. Andia, and S. Guellati-Khélifa, “紧束缚极限下提高布洛赫振荡效率,” *Physical Review A*, vol. 95, no. 6, 2017年6月。 [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.95.063604

[17] W. van Dijk, “含时薛定谔方程的数值解”, $American\ JournalofPhysics$, 第91卷, 第10期, 第826–839页, 2023年10月。 [在线]。可访问: http://dx.doi.org/10.1119/5.0159866

[18]W. van Dijk、J. Brown 和 K. Spyksma, “含时薛定谔方程数值解的效率与精度”, $Physical\ Review\ E$, 第84卷, 第5期, 2011年11月。 [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.84.056703

[19]W. van Dijk 和 F. M. Toyama, “带有源项或含时势的薛定谔方程的数值解”, $Physical\ Review\ E$, 第90卷, 第6期, 2014年12月。 [在线]。可访问：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.90.063309

附录 A. 位置空间方法

对薛定谔方程左侧应用 $\langle x|$ ，即可简单地推导出描述位置空间波函数演化的偏微分方程，其中 H 由方程 (1) 给出

$$i\hbar\dot{\psi}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \hbar\frac{\Omega_{\text{eff}}(t)}{2}\cos^2(kx - \delta t/2)\psi(x) \tag{A.1}$$

该偏微分方程可使用分步法 [1] （参见附录 E）或 Crank–Nicolson 方法 [17, 8, 2, 18, 19] （参见附录 F）求解。

附录B. Ramsey-Borde 干涉仪参数选择

在第 3 节讨论的每次模拟中， $T = 10\omega_{\text{r}}^{-1}$和 $T' = 2\omega_{\text{r}}^{-1}$。含时有效拉比频率是一个截断高斯函数，表示为

$$\Omega_{\text{eff}}(t, t_0) = \begin{cases} \Omega_{\text{eff},0}\exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right), & |t - t_0| < 3\sigma \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

初始波函数表示为

$$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_p}}\exp\left(-\frac{(p/\hbar k-2n_0)^2}{4\sigma_p^2}\right)$$

其中 $\sigma_p=0.14$。

我们针对三种布拉格阶数模拟了完整的干涉仪：$n_{\mathrm{Bragg}}=3$，其中 $\sigma=0.4966\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$，且 $\Omega_{\mathrm{eff},\,0}=9$；$n_{\mathrm{Bragg}}=4$，其中 $\sigma=0.224\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$，且 $\Omega_{\mathrm{eff},\,0}=20$；$n_{\mathrm{Bragg}}=5$，其中 $\sigma=0.247\omega_{\mathrm{r}}^{-1}$，且 $\Omega_{\mathrm{eff},\,0}=30$。这些参数是通过对方程（3）进行积分，选取能产生 50-50 分束器的数值而确定的，其中 $s=0$。

双光子失谐量 δ 由耦合状态 $0\hbar k$ 和 $2n_{\mathrm{Bragg}}\hbar k$的布拉格共振条件决定。共振条件为 $\delta=4n_{\mathrm{Bragg}}\omega_{\mathrm{r}}$。该双光子失谐量用于干涉仪中的前两个布拉格脉冲。最后两个布拉格脉冲耦合 $0\hbar k$ 和 $-2n_{\mathrm{Bragg}}\hbar k$，其共振条件为 $-4n_{\mathrm{Bragg}}\omega_{\mathrm{r}}=\delta-\omega_{\mathrm{m}}$，其中 $\omega_{\mathrm{m}}=8n_{\mathrm{Bragg}}\omega_{\mathrm{r}}$。通过确定使方程（D.1）中的指数项为零的 δ 值，可以推导出该共振条件。

附录 C. 矩阵元恒等式

推导以下恒等式时，我们将用到以下关系

$$\begin{gathered}\langle x|\psi\rangle=\psi(x)\qquad\langle p|\psi\rangle=\phi(p)\\ \langle x|p\rangle=\exp(ipx/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}\\ \mathbb{I}=\int_{-\infty}^{\infty}|x'\rangle\langle x'|\,\mathrm{d}x'=\int_{-\infty}^{\infty}|p'\rangle\langle p'|\,\mathrm{d}p'\end{gathered}$$

其中 $|p\rangle$ 表示动量为 p的平面波。

从时间导数项开始

$$\begin{aligned}i\hbar\langle p|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle=&i\hbar\langle p|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbb{I}|\psi\rangle\\ =&i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\langle p|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle\,\mathrm{d}p'=i\hbar\dot{\phi}(p)\end{aligned}$$

$\exp(\pm i2k\hat{x})$ 类型的项计算结果为

$$\begin{aligned}\langle p|\exp(\pm i2k\hat{x})|\psi\rangle &= \langle p|\exp(\pm i2k\hat{x})\mathbb{I}|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|e^{\pm i2k\hat{x}}|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle \,\mathrm{d}p' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(p' - p \pm 2\hbar k)\phi(p') \,\mathrm{d}p' \\ &= \phi(p \mp 2\hbar k) \end{aligned} \tag{C.1}$$

其中在倒数第二步中，我们使用了以下关系

$$\begin{aligned}\langle p|\exp(\pm i2k\hat{x})|p'\rangle &= \langle p|\mathbb{I}\exp(\pm i2k\hat{x})\mathbb{I}|p'\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \langle p|z\rangle \langle z|\exp(\pm i2k\hat{x})|z'\rangle \langle z'|p'\rangle \,\mathrm{d}z' \,\mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ipz/\hbar)\langle z|z'\rangle \exp(\pm i2kz)\exp(ip'z'/\hbar)\,\mathrm{d}z' \,\mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(i(p' - p \pm 2\hbar k)z/\hbar)\,\mathrm{d}z \\ &= \delta(p' - p \pm 2\hbar k) \end{aligned} \tag{C.2}$$

附录 D. 查找表变换

考虑将参考系变换 $\tilde{\phi}_{n,\ s} = \exp(i(2n + s/S)^2\omega_{\mathrm{r}}t)\phi_{n,\ s}$ 应用于公式（3）

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\tilde{\phi}}_{n,s} =& \hbar\frac{\Omega_{\mathrm{eff}}(t)}{8}\Big[\tilde{\phi}_{n-1,s}\exp(i(-4 - 8n + 4s/S)\omega_{\mathrm{r}}t)\exp(-i\delta t) \\ &+\tilde{\phi}_{n+1,s}\exp(i(-4 - 8n - 4s/S)\omega_{\mathrm{r}}t)\exp(i\delta t) + 2\tilde{\phi}_{n,s}\Big] \\ =& \hbar\frac{\Omega_{\mathrm{eff}}(t)}{8}\Big[\tilde{\phi}_{n-1,s}\exp(i(-4 - 8n)\omega_{\mathrm{r}}t)\exp(-i(\delta - 4s\omega_{\mathrm{r}}/S)t) \\ &+\tilde{\phi}_{n+1,s}\exp(i(-4 - 8n)\omega_{\mathrm{r}}t)\exp(i(\delta - 4s\omega_{\mathrm{r}}/S)t) + 2\tilde{\phi}_{n,s}\Big] \end{aligned} \tag{D.1}$$

在此参考系中，现在由 s 表征的动量偏移表现为对双光子失谐的修正，而不再是动能项。当模拟原子云在物质波干涉仪中传播时，此参考系尤其有用，因为可以使用查找表来评估˜对$i\hbar\phi_{n,s}$的解，其中 δ 中的偏移等价于 s 中的偏移。

对于固定的脉冲包络 $\Omega_{\text{eff}}(t)$，我们制作一个查找表，根据 δ 和 $\Omega_{\text{eff}}(t)$ 的振幅来确定$\phi_{n=0,s=0}$ 的演化。通过将 δ 偏移适当的量，我们可以恢复任意 s下$\phi_{n=0,s}$ 的演化。进一步的参考系变换使我们能够恢复任意 n 和任意 s 下的$\phi_{n,s}$ 。这带来了速度提升，使得使用标准硬件模拟一组在干涉仪中传播的原子在计算上变得可行。

很容易生成一张查找表，使其在布居上的吻合度达到 10^{-7} ，与直接积分公式（3）的结果一致。

附录 E. 分步法

分步法基于以下近似

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right) \approx \exp\left(-\frac{iH_x\Delta t}{2\hbar}\right)\exp\left(-\frac{iH_p\Delta t}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{iH_x\Delta t}{2\hbar}\right) \quad \text{(E.1)}$$

将第一个指数项作用于位置空间波函数，并对结果进行快速傅里叶变换（FFT），以获得动量空间波函数。然后将中间的指数项作用于动量空间波函数，接着对结果进行逆快速傅里叶变换，以再次获得位置空间波函数，最后再作用最后一个指数项。

根据 Glauber 定理，我们注意到

$$\exp(A)\exp(B)\exp(A) = \exp(2A + B + [[A, B], A]/4) \quad \text{(E.2)}$$

考虑某个哈密顿量 $H = H_p+H_x$。通常， H_p 在动量空间中更容易传播，而 H_x 在位置空间中更容易传播。对于一个很小的时间步长，态 $|\psi\rangle$ 在该哈密顿量作用下的演化为

$$|\psi(t+\delta t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)|\psi(t)\rangle$$

利用方程(E.2)可以展开指数项。令 $A = -iH_x\delta t/2\hbar$ 和$B = -iH_p\delta t/\hbar$ ，可得

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t + \frac{i}{16\hbar^3}[[H_x, H_p], H_x]\delta t^3\right) = \exp\left(-\frac{iH_x\delta t}{2\hbar}\right)\exp\left(-\frac{iH_p\delta t}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{iH_x\delta t}{2\hbar}\right)$$

当 δt较小时， δt^3 项可以忽略。这就得到方程(E.1)中的分步近似。我们使用 Numba 即时编译器 [7] 在 Python 中实现分步法，以生成高性能代码。

附录 F. Crank–Nicolson方法

一维含时薛定谔方程的 Crank–Nicolson方法可通过用 1,1 阶帕德近似 [8, 18, 19]逼近幺正演化算符推导得出。将其作用于某个初始波函数 $\psi(x,\ t)$，可得

$$\psi(x, t+\Delta t) = U(\Delta t)\psi(x,t) \approx \frac{1 - iH\Delta t/2\hbar}{1 + iH\Delta t/2\hbar}\psi(x,t) = B^{-1}A\psi_j^k$$

其中在最后一步中，我们通过 $\psi_j^k = \psi(j\Delta x,\ k\Delta t)$ 对 $\psi(x,\ t)$ 进行了离散化。使用二阶中心有限差分处理哈密顿量动量项中的 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$，会使 A 和 B 成为三对角矩阵，其分量如下

$$A_{j,j} = \left[1 - iH^k\Delta t/2\hbar\right]_{j,j} = 1 - i\frac{\Delta t}{2}\left(V_j^k + \frac{1}{\Delta x^2}\right) \tag{F.1}$$

$$B_{j,j} = \left[1 + iH^k\Delta t/2\hbar\right]_{j,j} = 1 + i\frac{\Delta t}{2}\left(V_j^k + \frac{1}{\Delta x^2}\right) \tag{F.2}$$

$$A_{j,j-1} = A_{j-1,j} = \left[1 - iH^k\Delta t/2\hbar\right]_{j,j-1} = i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} \tag{F.3}$$

$$B_{j,j-1} = B_{j-1,j} = \left[1 + iH^k\Delta t/2\hbar\right]_{j,j-1} = -i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} \tag{F.4}$$

其中 $H^k = H(k\Delta t)$ 且 $V^k = V(k\Delta t)$。关于高阶克兰克-尼科尔森型程序的讨论，见 [17, 2]。通过使用托马斯三对角矩阵求解算法，单个时间步可在线性时间内完成。

我们使用 Numba 即时编译器 [7] 在 Python 中实现 Crank–Nicolson方法，以生成高性能代码。经测试，Python 的 Crank–Nicolson时间步函数的运行时间与相应的 Fortran 和 C 实现相当（差异在两倍以内）。