

振幅変調された光格子中の  
冷却原子のダイナミクス

山越 智健

電気通信大学 大学院 情報理工学研究科

博士（理学）の学位申請論文

2015年12月



振幅変調された光格子中の  
冷却原子のダイナミクス

博士論文審査委員会

主査	渡中	辺川	信賢	一樹	教授
委員	斎森	藤下	弘亨	樹紀	教授
委員	伏	屋	雄	紀	教授
委員					准教授
委員					准教授



著作権所有者

山越 智健

2015 年



# 論文の英文要旨

T I T L E	Dynamics of ultracold atoms in the amplitude-modulated optical lattice
N A M E	Tomotake Yamakoshi

A great deal of experimental and theoretical investigations on ultracold atoms has been done since the experimental realization of the atomic Bose-Einstein condensation (BEC) in 1995. Recently, ultracold atoms trapped in a parabolic lattice have gathered attention because the system is thought to relate to studies of quantum information. One of the interesting research subjects is a coherent manipulation of wave packets with an amplitude modulation of the optical lattice.

In 2012, the Arlt group at Aarhus university succeeded in coherent production of (the) localized states with BEC in a parabolic lattice experimentally[1]. However, there is no theoretical investigation which describes such manipulations. We thus study theoretically the dynamics of non-interacting Bosonic atoms in the amplitude-modulated 1-dimensional parabolic lattice in the limit of zero temperature. This thesis focuses on coherent productions of excited wave packets with the amplitude modulation and dephasing of the wave packets under the influence of the parabolic lattice. One feature of this thesis is that, to study the dynamics, we use a massive numerical simulation with  $2^{16}$  basis functions.

This thesis is constructed as follows. Chapter 1 introduces the overview of the thesis. Chapter 2 introduces some historical background of BEC experiments. Chapter 3 reviews theoretical description of single-particle states in the periodic potential. Chapter 4 introduces the experimental procedure at Aarhus[1]. Chapter 5 analyzes the excited wave packet production process. We show that the excitation process is described by the multi-level Rabi oscillations, and demonstrate how to optimize the excitation process. Chapter 6 analyzes the free propagation of the excited wave packets with a classical model. We demonstrate that classical trajectories describe the motion of the excited wave packets well. The wave packets reveal higher order Bloch oscillations. The parabolic potential causes the transition between two neighboring bands(Landau-Zener transition) and the transition rate depends on the position of the wave packet unlike the case of the linear potential. We show that this effect causes the wave packet to collapse rather than to induce natural dephasing when the parameters are the same as the Aarhus experiment[1]. Chapter 7 concludes the thesis.

[1] J. F. Sherson *et. al.*, *New J. Phys.* 14, 083013 (2012); P. L. Pedersen *et. al.*, *Phys. Rev. A.* 88, 023620 (2013)





# 論文の和文要旨

論文題目	振幅変調された光格子中の冷却原子のダイナミクス
氏名	山越 智健

レーザー冷却技術の発達により中性原子気体を極低温領域( $\sim 10^{-9}\text{K}$ )まで冷却する事が可能となった。原子がボーズ・アインシュタイン統計に従う場合、この温度領域では巨視的な量子オブジェクトであるボーズ・アインシュタイン凝縮体(BEC)が現れる。1995年に原子気体BECの実験的生成が成功して以来、極低温原子に関する様々な研究が実験・理論ともに行われてきた。近年特に興味を持たれている分野は、光格子と呼ばれるレーザー光によって作られる周期ポテンシャル中の冷却原子気体の振舞いと量子操作である。

光格子中の冷却原子系で興味深い研究対象の一つは、特定の格子サイトに局在した固有状態の出現である。このような空間的局在状態は、調和トラップ等の冷却原子集団全体を閉じ込める外部トラップと光格子の複合ポテンシャル中で現れる。この状態に関する研究は2004年にフェルミ原子系で観測実験が行われ、局在状態の操作を用いた応用について示唆された[1]。実験的に大きな進展を遂げたのは2012年および2013年にAarhus大学のArltらのグループによって行われたボーズ原子系の実験である[2]。

この実験では、まず光格子によるポテンシャルエネルギーの大きさを変調すること(光格子振幅変調)によって励起波束を生成する。そして励起波束が十分伝搬した後、局在固有関数に脱励起させることによって、コヒーレントな局在波束を生成する[2]。また光格子振幅変調の過程や励起波束の運動はコヒーレント操作の重要なツールであることに加えて、再帰現象に関連しているため、そのダイナミクス自体が興味深い研究対象である。しかしながら、光格子振幅変調による励起過程、生成された励起波束のダイナミクスの理論的解析は十分

行われてこなかった。そこで本研究では光格子中のボーズ粒子を対象とし、それらのプロセスがどのように記述されるかを調べるために理論研究を行った。

実験によると励起された波束はBECと強く相互作用しないことが報告されているので、本論文では1次元で、原子間相互作用がない系(理想ボーズ気体)を扱う。初期状態の温度は絶対零度であることを仮定した。本論文中で用いるパラメーターは主に実験[2]と同様とした。本論文の構成は以下の通りである。

第1章では本研究の背景となる実験および理論の概要である。

第2章ではBECについての簡単なレビューと、その研究の歴史的背景について説明する。

第3章では周期ポテンシャル系における基礎的な事項と本論文で用いる数学的表記について説明する。この章では主に周期ポテンシャル系の特徴であるバンド構造(バンド指数、擬運動量によって指定されるブロッホ状態)、周期ポテンシャルに線形外場が加わった場合の粒子のダイナミクス、また外場が調和ポテンシャルの場合の1粒子固有状態の三つの事項について説明する。

第4章ではArltらの実験手法[2]について、具体的なパラメーターを用いてレビューを行う。特に研究の主題となる光格子振幅変調による励起波束の生成効率および励起波束の自由時間発展について実験結果の概要を説明する。

第5章では光格子振幅変調による励起波束の生成過程について、数値シミュレーションと光格子振幅変調を摂動論的に取り扱うモデル計算による結果を対比しながら説明する。ここで振幅変調による励起過程は、異なるバンドに属する同じ擬運動量を持つブロッホ状態間のラビ振動によって理解されることを示す。さらに典型的な実験パラメーター領域では、多準位の励起が引き起こされることを示す。またこれらの事実を利用して、振幅変調のタイミングと変調周波数をコントロールすることにより、特定のエネルギー状態への高効率な励起が可能であることを示す。

第6章では振幅変調によって生成された励起波束の自由時間発展を、数値シミュレーションと古典モデルによる解析を基に説明する。特にバンドギャップが現れるバンド境界では二つの過程が同時に起こる。一つはBragg反射と呼ばれるバンド境界から同一バンドの異なるバンド境界への遷移(intraband遷移)であり、もう一つはLandau-Zener遷移と呼ばれる隣接バンド間の遷移(interband遷移)である。古典モデルを用いる事によって、励起波束の運動がBragg反射によって誘起される位置および擬運動量空間における振動(Bloch振動)であることが分かる。またLandau-Zener遷移過程について、線形外場における遷移確率の公式を拡張して、調和トラップ系へと適用した。結果として調和トラップ系におけるLandau-Zener遷移確率の公式は線形外場の場合と異なり、励起波束の位置に依存することを示した。

第7章で本論文の総括をする。

[1] H. Ott *et. al.*, Phys. Rev. Lett. 93, 120407(2004); L. Viverit, C. Menotti, T. Calarco, and A. Smerzi, Phys. Rev. Lett. 93, 110401(2004)

[2] J. F. Sherson *et. al.*, New J. Phys. 14, 083013 (2012); P. L. Pedersen *et. al.*, Phys. Rev. A. 88, 023620 (2013)

## 目次

1	イントロダクション	1
2	ボーズ・アインシュタイン凝縮体	5
2.1	ボーズ粒子と凝縮体	5
2.2	歴史的背景	7
2.3	光格子と BEC	8
2.4	理想ボーズ気体	9
2.5	原子間相互作用	12
3	周期ポテンシャル系の基礎物理	15
3.1	1次元周期ポテンシャル中の固有関数と固有エネルギー	16
3.2	線形ポテンシャルによって誘起されるダイナミクス	24
3.3	調和ポテンシャルを含んだ場合の固有関数	27
4	光格子振幅変調を用いた局在波束の生成	37
4.1	Aarhus グループの実験	38
5	光格子振幅変調による励起過程の理論的解析	43
5.1	single-Q Rabi 模型:調和トラップによるダイナミクスを無視した模型	43
5.2	単一周波数の光格子振幅変調による励起:励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差に近い場合	48
5.3	単一周波数の光格子振幅変調による励起:励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差の半分に近い場合	53
5.4	二つの周波数からなる光格子振幅変調による励起	63
6	光格子 + 調和トラップ中の励起波束の自由時間発展	67
6.1	励起波束ダイナミクスの古典的描像	67
6.2	位相空間上での励起波束の軌跡	70
6.3	調和トラップ中でのランダウツェナー遷移	73
7	結論	78
付録 A	ラビ振動と光格子	84
A.1	ラビ振動	84
A.2	光格子	86

---

付録 B	数値計算手法	88
B.1	Fourier Grid Hamiltonian 法 . . . . .	88
B.2	波動関数の時間発展 . . . . .	90
付録 C	光格子振幅変調による長周期の回帰現象	93

図目次

1.1 (a) 光格子中の冷却原子気体の振る舞いと (b) 結晶中の電子の振る舞いの概念図. 赤は原子, および電子が感じる周期的なポテンシャルを示している. これらの二つの系の間にはアナロジーが成立する. . . . . 2

1.2 光格子と調和トラップの複合系によって作られるポテンシャル (b) の概念図. (a) 並んだ量子井戸としてみればジョセフソンジャンクションのアレーとして, (c) 単一の光格子サイトのみ注目すると量子ビットとして見立てることができる. . . . . 2

1.3 (a) 光格子と調和トラップにロードされた BEC の概念図. この状態に対してコヒーレントな操作を行うことによって, (b) 任意の状態をコヒーレントに生成する事が目標となる. . . . . 3

2.1 箱の中の気体ボーズ原子集団. (a) 室温程度では粒子的な振る舞い. (b) 冷却をすすめマイクロケルビン程度に到達すると, 波動性が現れる. (c) 絶対零度では, すべての原子が同じ量子状態を占める. この時原子集団は一つの巨大な物質波として振る舞い, BEC と呼ばれる. . . . . 6

2.2 レーザーによって作られる光格子ポテンシャルの概念図. 矢印は入射するレーザーを表している. (a) 二方向から入射するレーザーによる, 1次元光格子ポテンシャル. (b) 三方向から入射するレーザーによる, 平面的な六角光格子ポテンシャル. . . . . 10

2.3 (a) 二つの異なる超微細構造状態における, 核間距離を変数としたポテンシャル曲線. 磁場  $B$  が共鳴磁場  $B_0$  と異なる場合には, 赤線で書かれたポテンシャルの解離閾値と青線で書かれたポテンシャル中の束縛状態のエネルギーは離れている. (b) 磁場  $B$  が共鳴点にある場合. この場合, 解離閾値と束縛状態は共鳴状態にあり, 状態  $\uparrow\uparrow$  から  $\uparrow\downarrow$  の束縛状態へと遷移する事が出来る. この効果は有効的に散乱長を増大させる. (c) 磁場と散乱長の関係. 共鳴点近傍で散乱長は磁場に強く依存して変化し, 共鳴点では  $\pm\infty$  に発散する. . . . . 14

3.1 光格子振幅  $s = 2, 8, 16, 40$  でのバンド構造. 横軸は還元ゾーン形式での擬運動量, 縦軸はエネルギー. . . . . 18

3.2 擬運動量  $q = 0$  におけるバンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  でのフーリエ展開係数  $C_B^n(K, 0)$ . 横軸は逆格子ベクトル  $K$ , 縦軸はフーリエ展開係数. 結果は式 (29) に従い, 調和振動子の解で表現される. . . . . 19

3.3 基底バンド  $n = 0$  における  $q = 0, q = 0.4, q = 0.8$  および  $q = 1.0$  でのフーリエ展開係数  $C_B^0(K, q)$ . . . . . 20

3.4	擬運動量 $q = 0.4$ におけるバンドインデックス $n = 0, 1, 2, 3$ でのフーリエ展開係数 $C_B^n(K, 0)$ . . . . .	20
3.5	基底バンド $n = 0$ における擬運動量 $q = 0, 0.4, 0.8, 1.0$ でのプロッホ関数 $\phi_q^n(y)$ . 横軸は位置 $y$ , 縦軸はプロッホ関数. 上図は実数, 下図は虚数部を表示している. 図中の緑の点線は包絡線 $e^{iqy}$ に対応している. . . . .	21
3.6	単一トラップポテンシャル中の固有関数. (a) トラップポテンシャル.(b) 固有関数. 光格子振幅 $s = 16$ の場合, 束縛状態の数は 3 である. . . . .	23
3.7	擬運動量 $q = 0$ におけるバンドインデックス $n = 0, 1, 2, 3$ でのプロッホ関数 $\phi_q^n(y)$ . 横軸は位置 $y$ , 縦軸はプロッホ関数. . . . .	23
3.8	擬運動量 $q = 0.4$ におけるバンドインデックス $n = 0, 1$ でのプロッホ関数 $\phi_q^n(y)$ の比較. 横軸は位置 $y$ , 縦軸はプロッホ関数. (a),(c) はそれぞれの実数部,(b),(d) はそれぞれの虚数部. . . . .	24
3.9	1次元周期ポテンシャルに線形ポテンシャルが加わった場合のガウス波束の運動の概念図. 基底バンド, 擬運動量 $q = 0$ を中心としたガウス波束を初期条件とする. (a),(c) では原子集団 (青いガウス波束) の運動を擬運動量空間で,(b) では原子集団 (青い丸) の運動を位相空間で表示している. (a) 波束は線形ポテンシャルの影響を受け, 擬運動量 $q = -1$ の方向へと加速される. バンド境界では (b) ブラッグ反射によって同じバンドに留まる, もしくは (c) ランダウツェナー遷移によって異なるバンドへと遷移する. . . . .	27
3.10	1次元周期ポテンシャルに線形ポテンシャルが加わった場合のガウス波束の運動. 基底バンド, 擬運動量 $q = 0$ を中心としたガウス波束を初期条件とした場合の数値シミュレーションの結果. ここで時刻 $t$ は周期 $2/\alpha$ で, 位置 $y$ は $2J/\alpha$ でスケールしている. (a) 線形ポテンシャルの強さ $\alpha = 0.01$ の場合. ブラッグ反射が支配的であり, 周期 $2/\alpha$ で基底バンドを運動している. (b) 線形ポテンシャルの強さ $\alpha = 1$ の場合. ランダウツェナー遷移が支配的であり, 波束が基底バンドと第 1 バンドの境界に到達したとき遷移が起こる. . . . .	28
3.11	(a) 光格子 + 調和トラップ系の位置空間での固有関数の確率密度 $ \chi_k(y) ^2$ . 横軸は位置, 縦軸は固有エネルギーであり, 濃い赤の部分は存在確率密度が高い部分に, 白い部分は低い部分に対応している. ただし確率密度はログスケールでプロットしてある. (b) 対応するバンド構造. . . . .	30
3.12	フォック状態の基底関数の概念図. 3 格子に制約した場合, 基底関数は (a) $j = -1$ ,(b) $j = 0$ ,(c) $j = 1$ にそれぞれ 1 粒子がある状態に対応する. . . . .	30

3.13	二重井戸型ポテンシャルの固有関数. ここではサイトインデックスが 0,1 に固定した. (a),(c) はポテンシャルの形状,(b),(d) はそれぞれの固有関数を示している. (a) の場合は調和トラップ項 $\nu = 0$ , (c) の場合は $\nu = 0.1$ とした. . . . .	32
3.14	基底, 第 1 励起, 第 2 励起, 第 3 励起状態の固有関数. . . . .	33
3.15	調和トラップ中心以外に局在する固有関数 (第 215 および 216 励起状態) の例. (a) と (c) は局在した位置近傍,(b) は全体を俯瞰した図. . . . .	33
3.16	低エネルギー側の光格子 + 調和トラップ系の固有状態. 固有エネルギー 0 から 0.2 までの (a) 位置空間および (b) 擬運動量空間での密度分布 $ \chi ^2$ . 擬運動量は拡張ゾーン形式で表示している. 対応する擬運動量空間の分布は基底バンド $n = 0$ 成分のみを含む. . . . .	34
3.17	低エネルギー側の光格子 + 調和トラップ系の固有状態. 固有エネルギー 6.6(第 1 バンドの最低エネルギー) から 7.9(第 2 バンドの最低エネルギー) までの位置空間および擬運動量空間での密度分布を示している. 図 3.16 は基底バンドの成分のみが含まれているが,6.6 から 7.9 のエネルギー領域では, 基底バンドと第 1 バンドの成分が含まれている. 赤矢印で示した, サイトインデックス $\pm 100$ 付近に局在している固有状態は, 基底バンドの成分によって構成されている. 第 1 バンドの最低エネルギーよりも高いエネルギー領域では, 固有状態を一つのバンドインデックスで対応付けて考える事が出来なくなる. . . . .	35
3.18	1123 番目の固有状態. 固有エネルギーは 19.40. それぞれ (a) 固有状態の全体像, (b) サイトインデックス $j = -123$ での固有関数, (c) サイトインデックス $j = 0$ での固有関数を示している. (b) では固有状態の節は二つ, つまり第 2 バンドのワニエ関数で表現されるが,(c) では三つ, 第 3 バンドのワニエ関数で表現される. これらの関数の境界はサイトインデックス $\pm 100$ 付近,(a) において固有関数の急激な減少が現れる点に対応している. . . . .	36
4.1	光格子振幅変調による励起過程の概念図. (a) 拡張ゾーン形式による表現. (b) 還元ゾーン形式による表現. . . . .	40

4.2	<p>光格子振幅変調による局在状態生成の概念図. 上向き (赤), 下向き (黄色) の矢印はそれぞれ光格子振幅変調による励起, 脱励起プロセス. 青矢印は, 光格子振幅変調がない場合での自由時間発展. (a) 位置座標で表示した固有関数での表現. この場合自由時間発展は等エネルギーでのプロセス. (b) エネルギーバンド図での表現. 自由時間発展は, 調和トラップによるエネルギー項と擬運動量によるエネルギー項の間でエネルギーのやり取りがあるため, バンドを沿って移動する. (c) 位相空間での表現. 図中の黒い線は等エネルギー面を表示しており, 自由時間発展では粒子はこの等エネルギー面を運動する. また基底状態は位相空間の中心に存在している. . .</p>	41
5.1	<p>基底状態の擬運動量分布. 赤は近似式, 緑は数値シミュレーションによる結果. . . . .</p>	44
5.2	<p>光格子振幅 <math>s = 16</math>, 光格子振幅変調の強さ <math>\epsilon_0 = 0.165</math> の場合でのラビ周波数. . . . .</p>	45
5.3	<p>ラビ模型によって計算された, 励起エネルギー <math>E_\omega=11.35</math> におけるバンドポピュレーションの励起時間依存性. 基底, 第 2, 第 4 バンド間でラビ振動が起きている. また励起エネルギーのサイクルは <math>T = 2\pi/E_\omega = 0.032ms</math>, 第 3 バンドのポピュレーションはおよそ 13 サイクルで最大値に到達する. . . . .</p>	46
5.4	<p>ラビ模型によって計算された, 励起エネルギー <math>E_\omega=11.35</math> における擬運動量分布の励起時間依存性. (a),(b),(c),(d) はそれぞれ第 4, 第 3, 第 2, そして基底バンドの擬運動量分布. 赤は高い密度に, 青は低い密度に対応している. . . . .</p>	47
5.5	<p>単一周波数・励起エネルギーが基底-第 4 バンド間のエネルギー差に近い場合での第 4 バンド励起のダイアグラム. . . . .</p>	48
5.6	<p>単一周波数, 直接第 4 バンドへの励起する周波数での励起時間の関数で見たバンドポピュレーション. . . . .</p>	49
5.7	<p>一定時間励起したのちの第 3 および第 4 バンドの擬運動量分布. 励起時間は励起周波数 20 サイクルに固定. サイクルは <math>T = 2\pi/E_\omega</math> で計算される. 励起エネルギーに対応して擬運動量分布のピーク位置が異なる. . .</p>	50
5.8	<p>第 3 バンドおよび第 4 バンドの境界付近での擬運動量分布の時間発展. 励起エネルギーは <math>E_\omega=21.96</math>, 横軸は励起時間. (a):数値シミュレーションによる結果. 励起されたコンポーネントは, 調和トラップの影響により小さい擬運動量の方向へと移動していく. ある時間で励起コンポーネントは第 4 バンドと第 3 バンドの境界へと到達し,LZ 遷移が起こる. (b):single-Q ラビ模型による結果. 模型による計算では調和トラップによる影響が含まれていないため, ある特定の擬運動量に密度が集中する. . .</p>	51



5.9	第3バンドおよび第4バンドの境界付近での擬運動量分布の時間発展. 励起エネルギーは $E_\omega=20.50$ , 横軸は励起時間. (a):数値シミュレーションによる結果. 図 5.8(a) と同様に調和トラップの影響により小さい擬運動量の方向へと移動していく. (b):single-Q ラビ模型による結果. . . . .	52
5.10	単一周波数, 励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差の半分に近い場合に第4バンドへと励起する際のダイアグラム. . . . .	53
5.11	単一周波数,2 倍の励起エネルギーで第4バンドへ励起する場合. バンドポピュレーションの励起時間依存性. . . . .	54
5.12	バンドポピュレーションと励起時間の関係. 励起エネルギー $E_\omega=10.25$ と 11.35 の比較. (a) 励起エネルギーのダイアグラム. (b) 第2バンド,(c) 第3バンドおよび (d) 第4バンドのポピュレーション. . . . .	56
5.13	第2バンド, 擬運動量分布の時間依存性. (a) 数値シミュレーションと (b) ラビ模型の結果の比較. 励起周波数は $E_\omega=11.35$ . . . . .	57
5.14	バンドポピュレーションと励起時間の関係. 数値シミュレーションとラビ模型の結果の比較. 励起周波数は $E_\omega=11.35$ . (a) 第2バンド,(b) 第3バンドおよび (c) 第4バンドのポピュレーション. $t=1.2\text{ms}$ で模型と数値シミュレーションの結果にずれが現れる. 第3バンド (b) ではバンドポピュレーションは上昇し, 第4バンドでは減少する. この事実は第4バンドから第3バンドへのポピュレーションの流入を意味している. . . . .	58
5.15	第4バンド, 擬運動量分布の時間依存性. (a) 数値シミュレーションと (b) ラビ模型の結果の比較. 励起周波数は $E_\omega=11.35$ . . . . .	58
5.16	バンドポピュレーションと励起時間の関係. 数値シミュレーションとラビ模型の結果の比較. 励起周波数は $E_\omega=10.98$ と 12.08. 10.98 の場合の (a) 第3バンドおよび (b) 第4バンドポピュレーションの時間変化. 12.08 の場合の (c) 第3バンドおよび (c) 第4バンドポピュレーションの時間変化. . . . .	59
5.17	励起エネルギー $E_\omega=10.25$ での (a) 第3バンドおよび (b) 第1バンドの擬運動量分布. 第3バンドへと励起されたコンポーネントは, 調和トラップにより減速される. 特定の擬運動量に到達したとき, 第1バンドとのカップリングが起こり, 第3バンドから第1バンドへとポピュレーションの遷移が始まる. その後第1バンドへと移動したコンポーネントは引き続き減速され, 再び共鳴擬運動量まで戻ってきたときに第3バンドへと遷移する. . . . .	60

5.18	励起時間 $t = 7.20(0.42ms)$ 後の第 3 および第 4 バンドの擬運動量分布. 励起エネルギー $E_\omega=11.35$ および $22.70$ の比較. (a),(b)11.35 の場合では, 基底バンドから第 2 バンドへの励起が非常に強く起こるために,22.70 と比べた場合, 基底バンドのポピュレーションに大きな差異が現れる. (c)11.35 の場合, 第 2 バンドの励起を介して第 4 バンドへの励起が起こっている. (d) 同様に $22.70$ の場合においても 2 倍の励起エネルギーが与えられる事によって第 6 バンドへと励起が起こっている. . . . .	61
5.19	励起波束ポピュレーションの励起周波数依存性. 励起時間 $0.5ms$ に固定している. 線は模型計算の結果, 紫の点は実験値, 水色の点は数値シミュレーションの結果. 模型計算では, 三種類の調和トラップ周波数で計算を行った. . . . .	62
5.20	(a) 二種類の励起エネルギーによる励起過程のダイアグラム. 二つ目の励起周波数は $E_\omega=9.15$ . (b),(c),(d) はそれぞれ基底, 第 2, 第 3 バンドでのバンドポピュレーションの励起時間依存性. 青は二種類の周波数での励起, 緑は $E_\omega=11.35$ のみで励起した場合. (b),(c) に注目すると $E_\omega=9.15$ は基底と第 2 バンドのエネルギー差よりも小さいために, このバンド間での大きなポピュレーションの移動が抑制される. (d) では, 励起エネルギーを変えた途端に第 3 バンドへの強い励起が起こり始めている. . . .	64
5.21	同じ共鳴擬運動量を持つ励起エネルギーの場合で擬運動量空間分布励起エネルギーは $11.35$ と $9.15$ の組み合わせと,10.25 単体. それぞれの時刻は $t=0.89ms,0.80ms$ . . . . .	64
5.22	(a) 二種類の励起エネルギーによる励起過程のダイアグラム. 二つ目の励起周波数は $E_\omega=10.25$ . (b),(c),(d) はそれぞれ基底, 第 2, 第 4 バンドでのバンドポピュレーションの励起時間依存性. 青は二種類の周波数での励起, 緑は $E_\omega=11.35$ のみで励起した場合. 基本的な挙動は図.5.20 と同じだが, 第 2 と第 4 バンド間でのポピュレーション振動が起こる. . . . .	65
5.23	同じ共鳴擬運動量を持つ励起エネルギーの場合で擬運動量空間分布. 励起エネルギーは $11.35$ と $10.25$ の組み合わせと,10.80 単体. それぞれの時刻は $t=0.94ms,0.73ms$ . . . . .	66
6.1	光格子振幅 $s = 16$ における拡張ゾーン形式で表示されたバンド構造. . .	68
6.2	位相空間で見た場合の第 4 バンドへと励起された波束の運動. . . . .	69
6.3	第 3 バンドに励起された波束の自由時間発展. $0-30ms$ 間の (A) 位置空間,(B) 擬運動量空間での波束の自由時間発展. $0-6ms$ 間の (C) 位置空間,(D) 擬運動量空間での波束の自由時間発展. ただし時刻 $t=0$ は光格子振幅変調 (励起プロセス) が終わった時刻に取っている. . . . .	71
6.4	第 4 バンドに励起された波束の自由時間発展. 表示の方法は図 6.3 と同様.	72
6.5	励起エネルギーを変えた場合の自由時間発展. . . . .	74

6.6	波束の最高到達距離 $y_{max}$ と励起エネルギーの関係. 曲線”ciritial-1”は $\Delta_{23}$ もしくは $\Delta_{24}$ から見積もられた値. 曲線”ciritial-2”は $\Delta_{03}$ もしくは $\Delta_{04}$ から見積もられた値. 点は数値シミュレーションから見積もられた値. 紫色の点は実験値. 曲線”harmonic”は式.(63) の値. . . . .	75
6.7	励起エネルギー $E_\omega = 11.35$ での励起波束の分裂. (a) 位置空間,(b) 擬運動量空間での時間発展. バンド境界に到達する時刻で波束は二つ (赤矢印, 黒矢印) に分裂する. (c) 第 3, 第 4 バンドポピュレーションの時間変化. 臨界時間 $\tau_c=1.1\text{ms}$ で第 4 バンドから第 3 バンドへとポピュレーションが流入している. . . . .	76
6.8	バンド境界での位置座標 $y$ に対する LZ 遷移確率. . . . .	77
付録 A.1	基底状態 (赤の実線) と励起状態 (緑の点線) のポピュレーションの時間変動. (a) 離調 $\Delta = 0$ の場合と (b) 離調 $\Delta = 0.5$ の場合. . . . .	85
付録 A.2	基底状態 (赤の実線) と励起状態 (緑の点線) のポピュレーションの時間変動. (a) ラビ周波数 $\Omega_{R1} = 1, \Omega_{R2} = 1.1$ , 離調 $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$ の場合と (b) ラビ周波数 $\Omega_{R1} = \Omega_{R2} = 1$ , 離調 $\Delta_1 = 0, \Delta_2 = 0.5$ の場合. どちらの場合においても一般化ラビ周波数 $\Omega_1, \Omega_2$ が異なるために, バンドポピュレーション $B_g, B_e$ 間で振動が起こる. . . . .	86
付録 C.1	励起エネルギー $E_\omega = 9.52, 10.25, 11.35$ の場合での相関関数の絶対値の 2 乗. 9.52 の場合では擬運動量共鳴点がないために, 1 割程度の励起しか起こらない. 10.25 の場合では, $t=25\text{ms}$ 付近で 80% のコンポーネントが基底状態へと戻ってくる. また 11.35 の場合では, 基底-第 3 バンド間のラビ振動により, この時間スケールで強い回帰現象は現れない. . . . .	94
付録 C.2	励起エネルギー $E_\omega=10.25$ の場合での位置空間での分布. (a) は全バンドのコンポーネント. それぞれ (b) 基底バンド,(c) 第 1 バンド,(d) 第 3 バンドのコンポーネントのみを取り出して表示している. . . . .	95
付録 C.3	励起エネルギー $E_\omega=10.25$ の場合での擬運動量空間での分布. それぞれ (a) 第 3 バンド (b) 第 2 バンド,(c) 第 1 バンド,(d) 基底バンドのコンポーネントを表示している. . . . .	96

## 表目次

1	Aarhus 大学 [17, 69] および Hamburg 大学 [19] の実験パラメーター. 数値計算に必要な変換後のパラメーターも同時に表記した. Hamburg の実験では, 格子振幅, 調和トラップの周波数を変化させているため, 代表的なものをここに記した. . . . .	29
2	励起エネルギーが $E_\omega = 20.50, 21.24, 21.96, 22.70$ の場合での共鳴擬運動量 $q_c$ . 擬運動量は拡張ゾーン形式で与えられている. 基底バンドで対応する共鳴擬運動量は, 励起先のバンドが奇数と偶数の場合で計算方法が異なることに注意 (式 (27)). これ以降では基底バンド等での対応する擬運動量については表示しない. . . . .	50
3	励起エネルギー $E_\omega = 10.25, 10.98, 11.35, 12.08$ に対応する共鳴擬運動量. $10.25, 10.98$ の場合では励起エネルギーが基底と第 2 バンド間のエネルギー差よりも低いために, $\Delta_{02} = 0$ が存在しない. $\Delta_{03}$ と $\Delta_{04}$ は 2 倍の励起エネルギーが与えられる過程を仮定しており, $\Delta_{nm}(q, \omega) = (E_q^m - E_q^n) - 2E_\omega$ によって計算される. . . . .	55
4	励起エネルギー $E_\omega = 10.98, 11.35, 12.08$ に対する初期擬運動量 $q_i$ と臨界時間 $\tau_c$ . . . . .	57
5	固有状態のエネルギー . . . . .	90

## 1 イントロダクション

1995年に原子気体によるボーズ・アインシュタイン凝縮体 (Bose-Einstein condensation, BEC) が実験的に生成 [1] されて以来, 実験理論ともに極低温冷却気体に関する多くの研究 [2, 3, 4] がなされてきた. BEC は無数の原子が同一の量子状態を取る状態であり, ひとつの巨大な物質波として振る舞う. BEC はそれ自体を閉じ込めるトラップポテンシャルによってその形状を変えるが, 実験的には  $10^{-6}\text{m}$  [5] と原子のサイズと比べて非常に大きな量子的性質をもつ物質である. 加えて  $10^{-3}\text{s}$  と非常に長いコヒーレンス時間 [5] を持つ. またこの凝縮体は運動量空間において非常に小さい領域に分布するので, 運動量空間における測定を行った場合に非常に高い分解能を有することになる. これらの性質から BEC は非常に密度 (輝度) が高い物質波源であるといえる. さらに 2003 年にはフェルミオン極低温冷却原子気体の実験的生成の成功 [6] により, ボゾンのみならずフェルミオンの研究も現在までに多くなされている.

特に注目されている分野の一つに, 光格子と呼ばれるレーザーによって作られた周期ポテンシャル中での冷却原子気体の振る舞い [2] がある. 特に光格子は周期ポテンシャルであるために物性論とのアナロジーが成立する (図 1.1). しかしながら, 二つの系の間にはさまざまな違いが存在する. 光格子によって作られる周期ポテンシャルはレーザーパラメータを操作することにより, 格子定数や格子振幅を自由に変化させることができる. 現実の結晶系においてはこのような操作は容易ではない. また光格子系は格子欠損のない理想的な状態を生成する事ができる. 最近では多様な形の光格子が実験的に実現しており, 例えばグラフェンのような 2 次元六角格子構造などの新奇な系の研究が目まぐるしく起こっている [7]. それに加えて, 光格子はレーザーの位相変調 [8], 振幅変調 [9] を行うことでポテンシャルを時間的に変化させることが可能である. この手法を用いて冷却原子の重心運動の操作が可能となる. 更に観測技術においても, 結晶中の電子の場合と比べて光格子系には優位な点がある. 特に擬運動量状態の観測においては, 格子振幅を断熱的に下げた後に, 飛行時間測定法 (Time of flight 法) による測定を行う, バンドマッピング [10, 11] とよばれる手法が非常に強力である. 加えて, ファラデー回転を利用した原子集団の位置をトラップ中で測定する手法も確立されている [5]. 結晶系の場合には角度分解光電子分光などにより電子状態を観測することになるが, 測定のために X 線光源等を必要とする上, この手法では位置の情報を測定する事は難しい.

近年では光格子とゆるい調和トラップによる複合ポテンシャル中の冷却原子 [12, 13] のダイナミクスが注目を集めている. この系の最大の特徴として調和トラップ中心以外に密度が局在する固有状態 [14] が存在することが挙げられる. 本論文ではこのような固有状態を空間的局在状態と呼称する. このような空間的局在状態の組み合わせは, 一つの光格子サイトに注目してみれば量子ビット (q-bit) に, 多数の光格子サイトにわたってみれば並んだジョセフソンジャンクション (Josephson Junction) として見立てることができ

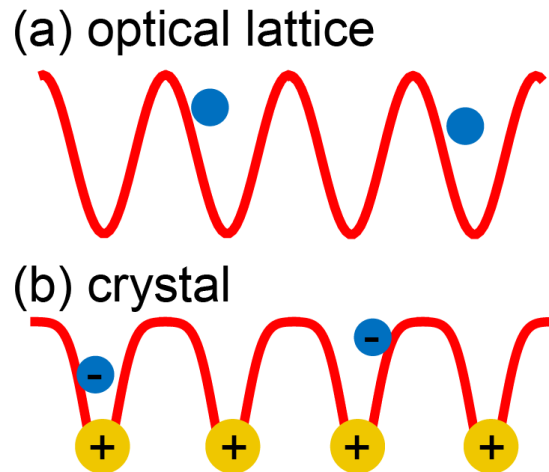


図 1.1 (a) 光格子中の冷却原子気体の振る舞いと (b) 結晶中の電子の振る舞いの概念図. 赤は原子, および電子が感じる周期的なポテンシャルを示している. これらの二つの系の間にはアナロジーが成立する.

る (図 1.2). さらに近年では単一光格子サイトの原子状態を操作する実験が成功しており [15], この空間的局在状態と組み合わせる事により, 量子シミュレーションにおける新奇現象の研究が可能になると考えられている. 特にこの系における研究の最大の目標の一つは, 原子を特定の光格子サイトに任意の個数ロードする等の精密なコントロールである. そのため, このような量子状態をどのように操作するかといった研究が現在までに多数行われてきた. パウリの排他律がある偏極フェルミオン系においては, 一つの光格子サイトに一つの原子をロードする事が可能であり, 2004 年に実現している [16]. ボゾン系の場合では, 基底状態を用意したのちにコヒーレントな操作を用いる必要がある. コヒーレント操作による任意の空間的局在状態の組み合わせを生成することは (図 1.3), 一つの研究課題となっている.

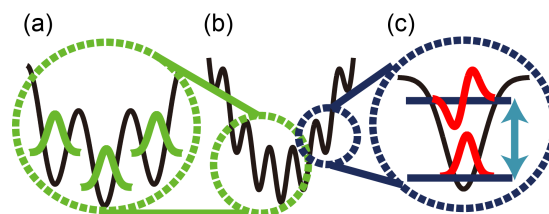


図 1.2 光格子と調和トラップの複合系によって作られるポテンシャル (b) の概念図. (a) 並んだ量子井戸としてみればジョセフソンジャンクションのアレーとして, (c) 単一の光格子サイトのみ注目すると量子ビットとして見立てることができる.

2012-2013 年に Aarhus 大学で行われた BEC を用いた実験 [17] では, 任意の局在波束をコヒーレントに生成する事を目標として, 局在固有状態の生成が実現している. この実験ではまず用意した BEC に対して, 光格子振幅変調によって励起波束を生成する. その

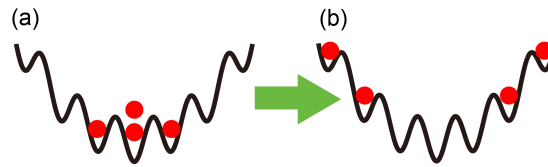


図 1.3 (a) 光格子と調和トラップにロードされた BEC の概念図. この状態に対してコヒーレントな操作を行うことによって, (b) 任意の状態をコヒーレントに生成する事が目標となる.

後, 励起波束が十分に調和トラップ中心から離れた時刻において再び光格子振幅変調を行うことにより, 局在固有状態の重ね合わせによって作られる波束を生成している. この手法は量子光学などの分野における”Pump-Dump”法と見る事が可能であるが, 現在までに詳細な理論的解析は行われていない. 本論文では光格子振幅変調による励起過程および励起波束のダイナミクスについて, シュレディンガー方程式の数値シミュレーションをもとに理論的解析を行う. 特に本論文で用いた数値シミュレーションは, およそ 6 万個という多数の基底を用いた最初の大規模計算である. ここでは Aarhus 大学の実験に合わせて, 1 次元かつ原子間相互作用がないボゾン系について A.) 光格子振幅変調による励起過程, B.) 励起波束の自由時間発展の二つを考察した.

光格子振幅変調による励起波束生成の過程は, 物性物理学の言葉を用いるならバンド間励起に相当する. この励起過程は波動関数を周期ポテンシャル系の固有関数であるブロッホ関数 [18] で展開すると, バンド図中では遷移の前後で擬運動量が変化しない垂直遷移であるという事実が得られる. この事実を用いて, ”single-Q Rabi 模型”と呼ばれる模型を構築し実験結果の解析を行った. さらに励起波束の波形制御, 特に特定のバンドのポピュレーションの最適化について考えた. 数値シミュレーション, および模型計算の結果は実験結果を定性的に説明すると共に, 励起波束生成の制御法に対する指針を与える事を示した.

励起波束は, 光格子によって生成されるバンド構造に従い, 調和トラップポテンシャルによって運動が誘起される. 対応する古典ハミルトニアンは通常の調和トラップ系と異なるため, 波束は等時性を保持しない. そのため励起波束がどのように運動し, 拡散するかを知ることは, 後のコヒーレント操作において重要な情報を与える. Aarhus 大学と同様に, フェルミオンを用いた実験が Hambrug 大学のグループ [19] によって行われた. フェルミオン系における励起波束の時間発展は, 単一バンド近似を用いた古典的描像を用いることで調べられている. この単一バンド近似は隣接するバンド間のエネルギーギャップ (バンドギャップ) が巨大な極限で良い近似となる. しかしながら Aarhus 大学の実験パラメータではこの近似は適切ではない. そのため本論文では古典的描像を多バンドに拡張して, 励起波束の運動について解析を行った. ここで特に重要な現象はバンド境界で起こる特殊な振る舞いである. ひとつは同一のバンド内で異なるバンド境界へと遷移するブラッグ反射 (Bragg reflection), もうひとつは異なるバンドへと遷移するランダウ・ツェナー遷移

(Landa-Zener transition, LZ 遷移)[20] である。外力が線形である場合,LZ 遷移による振る舞いはよく知られており,LZ 遷移は冷却原子系において波束のスプリッターとして用いられている。しかしながら調和トラップのような二次の場合については知られていない。本論文では LZ 遷移の公式を二次の場合へと拡張し,LZ 遷移確率が位置に依存する関数である事を示した。また数値シミュレーションおよび拡張された古典模型によって,バンドギャップがどのように励起波束に影響するかを調べた。古典模型による解析が実験結果を定量的に説明可能である事,またバンドギャップが波束を強く拡散させる事を示した。

本論文の構成は以下のとおりである。第 2 章では,BEC についての歴史的な背景と性質についてレビューする。第 3 章では,周期ポテンシャル系での物理の基礎について考察するとともに,本論文における数式の表現について示す。特に周期ポテンシャルと線形外場による複合ポテンシャル中の原子の運動,および周期ポテンシャル調和ポテンシャル中の原子の固有状態について示す。第 4 章では,Aarhus 大学での実験について述べ,本論文で考察する詳細な内容を明らかにする。第 5 章では,光格子振幅変調による励起過程について数値シミュレーションと考案した模型を比較しながら考察する。第 6 章では,光格子振幅変調によって生成された励起波束の自由時間発展について,対応する古典模型によって解析する。ここでは主にバンドギャップによって引き起こされる,ブラッグ反射と LZ 遷移について考察する。最後に第 7 章で結論を述べる。



## 2 ボーズ・アインシュタイン凝縮体

この章ではボーズ・アインシュタイン凝縮体 (BEC) についての歴史的なレビューと共に、性質について簡単に紹介する。第 2.1 節では中性原子気体 BEC について、第 2.2 節では BEC の歴史的背景、第 2.3 節では光格子についての特色、第 2.4 節では調和トラップ中の理想ボーズ気体について、第 2.5 節では原子間相互作用について紹介する。ここでの議論は主に参考文献 [3, 21, 22] を参考にしている。

### 2.1 ボーズ粒子と凝縮体

量子力学において粒子は二つの種類に大別される。半整数のスピンをもつフェルミオン (フェルミ粒子) と、整数のスピンをもつボゾン (ボーズ粒子) である。フェルミオンにはスピン  $1/2$  を持つ電子、中性子、陽子などがあり、これらの粒子はフェルミ・ディラック (Fermi-Dirac) 統計分布に従う。フェルミオンの最大の特徴は、同一粒子が同じ量子状態を占有する事が出来ないというパウリの排他律という原理に従う。一方でボーズ粒子はパウリの排他律に従わない。ボゾンにはスピン  $0$  の  $\pi$  中間子、スピン  $1$  の光子などがある。また近年発見されたヒッグス粒子はスピン  $0$  のボゾンであり、これらの粒子はボーズ・アインシュタイン (Bose-Einstein) 統計分布に従う。原子は電子・陽子・中性子の複合粒子であり、同様に全角運動量が半整数の場合はフェルミオン、全角運動量が整数の場合はボゾンである。例としてアルカリ原子について考えてみる。原子において全角運動量  $F$  は全電子スピン  $S$ 、全軌道角運動量  $L$ 、核スピン  $I$  の和で書かれる。アルカリ原子の場合には全軌道角運動量  $L = 0$  であり、最外殻の電子スピン  $\pm 1/2$  と核スピン  $I$  の和で全角運動量  $F$  は記述される。例えば、 $^{39}\text{K}$  は陽子 19 個、中性子 20 個を持ち、核スピンは  $I = 3/2$  である、全角運動量は  $F = 3/2 \pm 1/2$ 、つまりボゾンである。一方で  $^{40}\text{K}$  は陽子 19 個、中性子 21 個を持ち、核スピンは  $I = 4$  であるために、フェルミオンとなる。

しかしながら中性原子気体は室温・大気圧中では前述した統計的性質よりも、古典的統計であるマックスウェル・ボルツマン (Maxwell-Boltzmann) 統計分布に従う。量子統計的性質が現れるのは、量子縮退領域とよばれる極低温の状態のときである。量子縮退領域においてボーズ粒子は、通常の気体状態に加えて BEC と呼ばれる状態が現れる。このマックスウェル・ボルツマン統計分布に従う状態から量子統計に従う領域への移行は、多くの場合図 2.1 のように説明される。図 2.1(a) は温度の高い領域であり、原子気体は粒子の集団として振る舞い、ビリヤードボールに例えられる。温度が下がっていくと図 2.1(b), 原子は粒子的な性質に加えて波動的な性質が顕著に現れてくる。この波動的性質は、熱的ド・ブローイ (de Broglie) 波長

$$\lambda_D = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad (1)$$

とよばれる量によって定義される。ここで  $h$  はプランク定数、 $m$  は粒子の質量、 $k_B$  はボル

ツマン定数,  $T$  は温度である. しかしながら (b) の温度領域 (典型的には  $\mu\text{K}$  のオーダー) では原子間隔よりも熱的ド・ブロイ波長が短いために, お互いに及ぼしあう影響は少ない. さらに冷却をすすめて温度を下げると (典型的には  $\text{nK}$  のオーダー), (c) のように熱的ド・ブロイ波長が原子間隔よりもはるかに大きくなり, 中性原子集団は一つの巨大な物質波として振る舞う. これが中性原子の BEC である.

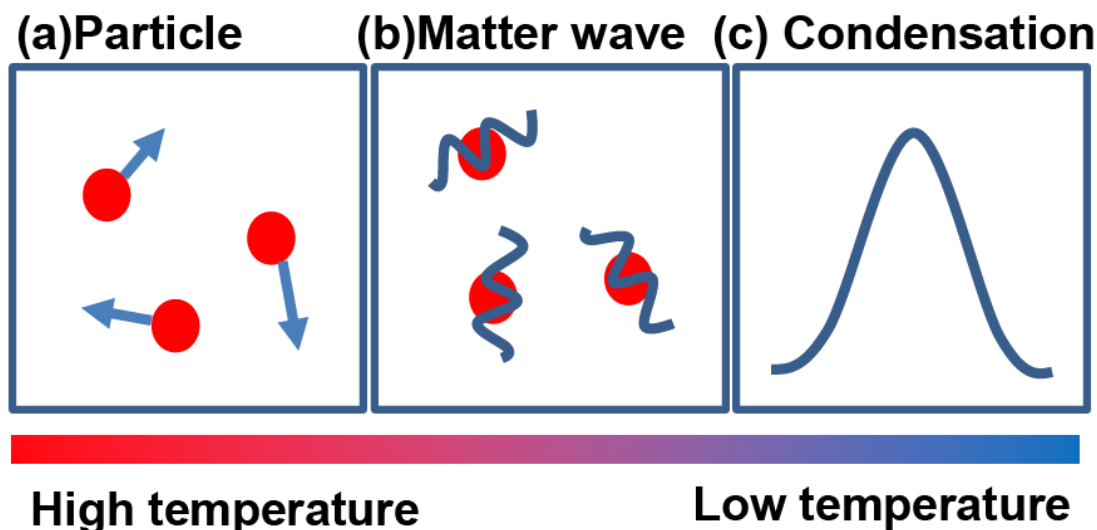


図 2.1 箱の中の気体ボーズ原子集団. (a) 室温程度では粒子的な振る舞い. (b) 冷却をすすめてマイクロケルビン程度に到達すると, 波動性が現れる. (c) 絶対零度では, すべての原子が同じ量子状態を占める. この時原子集団は一つの巨大な物質波として振る舞い, BEC と呼ばれる.

今まで実験的に生成されてきた中性原子 BEC の典型的な粒子数は  $10^4$ - $10^7$  程度であり, その密度は  $10^{13}$ - $10^{15}(\text{cm}^{-3})$  程度である. この密度は, 大気中の分子密度  $10^{19}(\text{cm}^{-3})$  や液体や固体の原子密度のオーダー  $10^{22}(\text{cm}^{-3})$  に比して非常に小さい値である. この事実から希薄原子気体と呼ばれることもある. また希薄であるために原子間相互作用が低く, 理想ボーズ気体 (原子間相互作用のない 1 粒子状態) もしくは, 原子系におけるハートリー・フォック (Hartree-Fock) 近似と同様の平均場の理論で取り扱う事が可能になるという側面もある. 加えて, 後述する外場によって誘起されるファノ・フェッシュバッハ (Fano-Feshbach) 共鳴によって中性原子間の原子間相互作用定数を操作する事が可能であり, 理想気体から強相関の領域まで幅広い領域の実験を行うことができる.

中性原子 BEC は通常, 光や磁場で生成されたトラップ中に作られ, 数 ~ 数百 Hz の調和型トラップにローディングされていることが多い. BEC はトラップの基底状態に対応しており, 対応する基底状態の波動関数サイズは  $\sim \mu\text{m}$  と量子オブジェクトとして非常に大きなサイズである. この大きさは CCD カメラで観測可能なサイズであり, BEC にレーザー光を照射し, その影を観測することで位置の情報を得ることができる. 一方で BEC をトラップから解放し, その後の広がり方を観測する, いわゆる飛行時間測定法 (Time of

flight, TOF) によって運動量の情報を得ることも出来る。特に運動量空間で BEC の広がり是非常に狭く、輝度の高い物質波源であると表現される。この事実は、例えば運動量空間における原子波干渉計において非常に高いコントラストが得られることを意味している。

また実験的に BEC は周囲の環境と非常に弱く結合しており、BEC が持つコヒーレンス時間が非常に長いという事実もある。コヒーレンスを乱す原因として、原子間相互作用そのものを除くと、残留物による衝突や、周囲の熱輻射による励起など周囲の環境による影響がある。しかしながらコヒーレンス時間は典型的に  $\sim \mu\text{s}$  よりも長く、長時間の観測時間が必要な計測において非常に有利に働く。

外場による操作が可能であること、空間・運動量・時間における高い観測性があるため、1995 年の中性原子 BEC の実験的生成 [1] 以降、様々な応用の研究がなされてきた。応用分野は多岐にわたっており、干渉計による物理量の精密測定や量子情報処理、宇宙物理学など幅広い。その中でも近年、特に注目を浴びている分野は光格子とよばれる人工的な周期ポテンシャルを組み合わせた系である。この系は、周期ポテンシャル中を運動する粒子についての問題であるため、物性物理学とのアナロジーが成立する。物性物理学の分野においては、現在ディラック・コーンとよばれる特殊なバンド構造を持つ、グラフェンやトポロジカル絶縁体などに注目が集まっている。中性原子 BEC と光格子の組み合わせにおいても同様の系について実験・理論の両面から様々な研究が行われており、近年では BEC による六角格子系ディラックコーンの干渉法による観測が実験的に成功している。

## 2.2 歴史的背景

この節では、冷却原子気体 BEC の歴史的背景を述べる。この節の内容は文献 [21]Section.1, および文献 [3]Section.21.1 の要約となっている。BEC の理論的な予測は 1924 年-1925 年において Satyendra Nath Bose [23] と Albert Einstein [24] の両名によって行われた。Bose によって光子の統計について研究されたのち、Einstein によって質量を持つ相互作用しないボーズ粒子 (理想ボーズ粒子) についての研究が行われた。Einstein の研究で特に重要な帰結は、ある臨界温度以下においては、有限の数の粒子が一粒子状態の最低エネルギー (基底状態) を占めるというものである。その後 1938 年に Fritz Wolfgang London により、BEC と  $^4\text{He}$  超流動との関係性が示唆された [25]。しかしながら  $^4\text{He}$  超流動は原子間の相互作用が強く、一粒子基底状態の占有率は低いために BEC の実験的な観測は困難であった。本質的には非常に低い温度においては気体ではなく、液体もしくは固体となるために相互作用が大きくなることによる。1959 年には Charles Hecht によって、スピン偏極した水素が弱く相互作用するボーズ気体の候補であることが [26] 示された。Hecht の論文は 1976 年に William Stwalley および Lewis Nosanow らによって液体相を持たないために、低温においてもスピン偏極した水素は弱く相互作用する気体として存在する事 [27] が確かめられた。また同時に水素の質量が軽いために転移温度が想定よりも高い事、また BEC のみならず超流動としての振る舞いを見せる事が示された。この研

究結果は MIT の Daniel Kleppner, Thomas Greytak らや, アムステルダム大学の Issac Silvera, Jook Walraven らの水素 BEC 生成実験を始動させるきっかけとなった。

一方で同時期には中性原子, 特にアルカリ原子のレーザー冷却に関する研究が行われていた。1975 年に Hänsch, Schawlow [28] らによって対向するレーザーによる原子減速のアイデアが提示された。この手法はドップラー効果を基にしているためにドップラー冷却法と呼ばれている。しかしながらこの手法による冷却限界は原子の励起状態の寿命 (線幅) によって決まり, Letkhov らによってルビジウムでは  $140\mu\text{K}$ , ナトリウムでは  $240\mu\text{K}$  と見積もられた [29]。この温度は臨界温度よりもはるかに高く, さらなる冷却手法が必要とされた。臨界温度以下に到達する方法として, シシュホス冷却 [30] や, 速度選択コヒーレントポピュレーショントラッピング [31] 等が提案され, 実験的に成功を収めてきた。これらのレーザー冷却の手法は基底状態と励起状態の準位間に共鳴するレーザー光を用いて行われる。しかしながら水素の Lyman  $\alpha$  線は  $121.6\text{nm}$  であるため, 実験的に容易ではない。

この困難は 1986 年に Harald Hess によって提案された蒸発冷却 [32] と呼ばれる手法によって解決された。この方法はトラップ中で行われるもので, 原子間の衝突に起因する冷却方法である。例としてトラップされている二原子の衝突について考える。はじめ原子はトラップされているためにトラップポテンシャルの高さ  $s$  よりも低いエネルギー  $E_{i1}, E_{i2}$  を持っている。衝突によって原子間でエネルギーのやりとりが起こり最終的にエネルギーがそれぞれ  $E_{f1}, E_{f2}$  となったと仮定する (ただしエネルギー保存則により  $E_{i1} + E_{i2} = E_{f1} + E_{f2}$ )。この時, 仮に  $E_{f2}$  がトラップポテンシャルの高さ  $s$  よりも高いエネルギーであったとすると, 片方の原子はトラップから抜け出してもう一方の原子は初期よりも低いエネルギーを持つことになる。トラップポテンシャルを低くしていく事により, 原子の持ちうる最大のエネルギーを制限する事が可能となる。この方法では原子のロスは免れないが量子縮退領域まで原子を冷却できるために, 水素原子のみならず原子冷却の最終プロセスとして用いられている。

このような種々の困難を乗り越えて 1995 年には JILA の Eric Cornell, Carl Wieman らのグループによって  $^{87}\text{Rb}$ , MIT の Wolfgang Ketterle のグループによって  $^{23}\text{Na}$  の原子気体 BEC が実験的に観測された [1]。また 1998 年には磁気トラップ中の蒸発冷却を用いて, MIT のグループが水素原子の BEC を実験的に観測 [33] している。以降, 冷却原子 BEC は世界各地様々な研究室で生成され, その応用分野が研究されている。特に近年では光格子とよばれる周期ポテンシャル中の極低温冷却原子気体に注目が集まっている。

## 2.3 光格子と BEC

光格子系の冷却原子について先駆的な研究は 1990 年代の初頭に Gilbert Grynberg らのグループ [34] と William Phillips のグループ [35] によって行われた。この実験ではトラップされた冷却原子集団に対して対向する二つのレーザーによって定在波を当てるといふものである。原子集団は位置に依存するレーザー光の振幅によって受けるエネルギー

のシフトが異なるため、定在波が原子の重心運動に対して周期的なポテンシャルを与える。この光格子による周期ポテンシャル系は物性物理学、つまり結晶とのアナロジーが存在するが、相違する点もある。一つには、周期ポテンシャルそのものが原子間の相互作用（結晶では電子と原子核の相互作用）ではなく、光と原子の内部状態との相互作用が作る、原子の重心運動への有効的なポテンシャルであること、また結晶間隔はオングストローム ( $10^{-10}\text{m}$ ) オーダーであるのに対して、光格子はマイクロメートルオーダーである。さらに光格子は対向するレーザーによって生成されるためにレーザーのパラメーターや光学素子の配置を変えることによって、ポテンシャルの形状を多様に変化させることができる (図 2.2)。

特にレーザーのパラメーターを変化させることによってポテンシャル形状を変えられるという事実は、応用面において多くの利点がある。例えば、光格子振幅が低い場合に実現する超流動状態から高い状態に実現するモット絶縁体への相転移は、レーザー強度を変化させることによって可能となる。以下には種々のパラメーターによるポテンシャルの変化について、その特徴を示す。1:次元性を変化させることができる。1次元の光格子の場合では、二つの対向するレーザーによって作られるポテンシャルから光格子が作られる。自然な拡張として、1次元光格子に直交する方向に対向するレーザー光を入れる事によって、2次元また3次元の光格子を生成する事が出来る。光格子のほかにトラップを加えることにより、低次元かつ周期的なポテンシャルが実現できる。2:幾何学的構造を変化させることができる。入射するレーザーの相対的な角度や、位相を変えることによって、様々な幾何学的構造のポテンシャルを生成する事が出来る。この事実は1993年にまず六角格子の生成について試され [36]、その後1996年 [37]、1998年 [38] に種々の幾何学的構造について実験が行われた。現在では Anti-dot 格子や Lieb 格子などの実験的生成が成功している。このような系と原子の内部自由度の操作の組み合わせは、通常の結晶中で現れない新奇量子相を実現するものとして期待されている。3:周期ポテンシャルを時間に依存する形で変化させることができる。対向するレーザーの、それぞれの位相を変化させることによってある一定の速度で移動する（もしくは時間に依存して速度が変化する）周期ポテンシャルを形成することが可能である。レーザー位相のみならず光格子振幅、つまりレーザー強度を時間変調することや、レーザーの波長を変調する事によって、原子集団の重心運動を制御する事が可能となる。このような量子操作によって原子集団の動的局在 [39, 40] などの興味深い観測がなされている。

## 2.4 理想ボーズ気体

この節では調和トラップに閉じ込められた理想ボーズ気体について簡単な議論を行う。より詳細な議論については [21] 等を参考のこと。

ここではトラップ周波数  $\omega$  をもつ、3次元の等方的な調和振動子トラップ  $V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$  について考察する。温度  $T$ 、全粒子数を  $N$ 、化学ポテンシャルを  $\mu$ 、

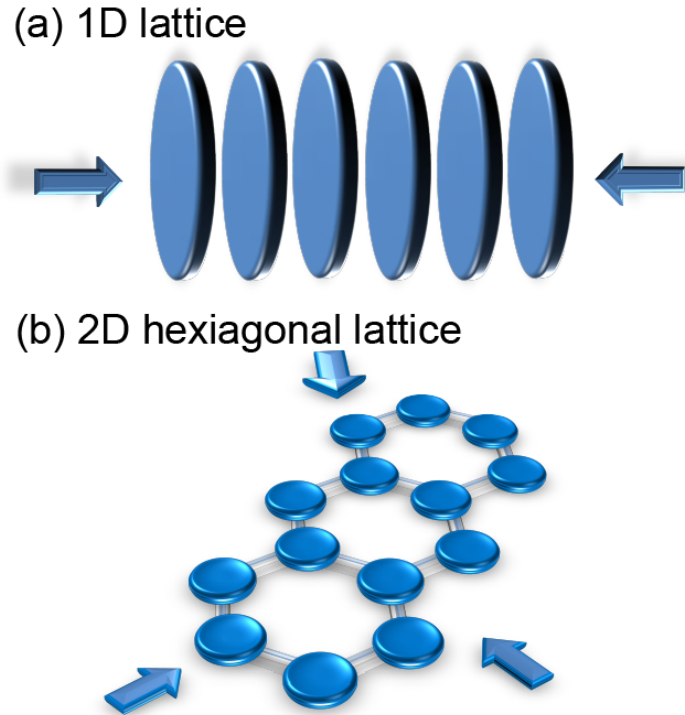


図 2.2 レーザーによって作られる光格子ポテンシャルの概念図. 矢印は入射するレーザーを表している. (a) 二方向から入射するレーザーによる, 1次元光格子ポテンシャル. (b) 三方向から入射するレーザーによる, 平面的な六角光格子ポテンシャル.

ボーズ原子の質量を  $m$  とする. 熱力学的に平衡にあるボーズ粒子はボーズ・アインシュタイン統計分布

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] - 1} \quad (2)$$

に従う. このとき, 原子の持つエネルギー  $\epsilon$  は調和トラップの固有エネルギー  $\epsilon = (n_x + n_y + n_z + 3/2) \times \hbar\omega$  で与えられ, 零点振動をエネルギーの基準点にとると,

$$\epsilon = (n_x + n_y + n_z) \times \hbar\omega \quad (3)$$

となる. ここで  $n_x, n_y, n_z$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向の量子数である. ある温度  $T$  における, 粒子数  $N$  と化学ポテンシャル  $\mu$  の関係は, 分布関数  $f(\epsilon)$  と状態密度  $D(\epsilon)$  を用いて,

$$N - \int_0^{\infty} D(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon = 0 \quad (4)$$

で与えられる. 状態密度  $D(\epsilon)$  はエネルギー  $\epsilon$  から  $\epsilon + \Delta\epsilon$  における状態数を  $\Delta\epsilon$  で割ったものとなる.  $n_x + n_y + n_z = n$  と置いた場合,  $\epsilon$  の代わりに  $n$  の表現で表すと状態密度は, 量子数  $n$  から  $n + \Delta n$  における状態数を考えることになるので,

$${}_{n+2}C_2 dn = D(\epsilon)d\epsilon \quad (5)$$

となり,

$$D(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3} \quad (6)$$

となる. ここで粒子数  $N$  が十分大きい場合には  $\epsilon$  に比例する項と定数の項は寄与が小さいものとして無視した. これらの方程式から熱力学量など種々の関数が決定されることになる.

ここでボゾン系における最も大きな特徴は, 臨界温度  $T_c$  以下では基底状態を占有する原子数  $N_0$  が励起状態にある原子数  $N_T$  と同程度のマクロな量になることである. 基底状態の成分は BEC と呼ばれる. この BEC の特徴的な量について議論を行う. ボゾンは一つの 1 粒子状態を何個でも占有する事が可能であるから,  $T = 0$  で実現する基底状態はすべての粒子が最も低いエネルギー状態を占めている. 化学ポテンシャル  $\mu$  は粒子数  $N$  の系に対して, 粒子をさらに一つ加える場合に必要なエネルギーとなるので,  $T = 0$  では  $\mu = 0$  でなくてはならない. ここから基底原子数  $N_0$  がマクロになる臨界温度  $T_c$  以上と以下で化学ポテンシャルの温度変化は異なる事が期待される. 実際に臨界温度  $T_c$  以下では化学ポテンシャル  $\mu = 0$  となる. よってここでは, 化学ポテンシャルがゼロとなる温度を計算する. 全粒子数は積分

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{e^{\epsilon/k_B T_c} - 1} d\epsilon \\ &= \frac{(k_B T_c)^3}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty \frac{x^2}{e^x - 1} dx \\ &= \frac{(k_B T_c)^3}{2(\hbar\omega)^3} \Gamma(3)\zeta(3) \end{aligned} \quad (7)$$

で与えられるため,  $\mu = 0$  となる温度は

$$k_B T_c \simeq 0.94 \hbar\omega N^{1/3} \quad (8)$$

で与えられる. ここで  $\Gamma$  と  $\zeta$  はそれぞれガンマ関数, ゼータ関数である. 典型的なパラメータとして,  $2\pi \times 100 \text{ Hz}$  のトラップに  $10^5$  個の粒子がある場合では, 臨界温度  $T_c \sim 200 \text{ nK}$  となる. この温度は前述したドップラー冷却限界と比べて非常に低いため, サブドップラー冷却や蒸発冷却などの手法が必要であると言える.

次にこの凝縮体のスケールについて議論する. 1次元調和振動子の固有状態はガウシアンとエルミート多項式  $H_n$  の積,

$$\phi_n(x) = A_n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (9)$$

で表される. ここで  $A_n$  は  $n$  番目の固有状態の規格化定数である. 3次元調和振動子の解はそれぞれの方向の固有状態の積で表される. 凝縮体は全方向において基底状態であるので, 基底状態  $\phi_0(\vec{r})$  は, ( $\vec{r}$  は動径ベクトル)

$$\phi_0(\vec{r}) \propto \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \quad (10)$$

と表される. この凝縮体の波動関数をフーリエ変換すると, 運動量空間  $\vec{p}$  での波動関数,

$$\phi_0(\vec{p}) \propto \exp\left(-\frac{\vec{p}^2}{m\omega\hbar}\right) \quad (11)$$

が得られる. この結果から位置空間での分散  $\sigma_r = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , 運動量空間での分散  $\sigma_p = \sqrt{m\omega\hbar/2}$  となる. 熱的ドブロイ波長と位置空間での分散の比は  $\lambda_D/\sigma_r = \sqrt{2\pi\hbar\omega/k_B T}$  と表される. 先ほどと同様のパラメーターを用いると, 臨界温度では  $\sim 0.15$  と波動関数の広がり と熱的ドブロイ波長が匹敵するほど大きくなっていることが分かる. 本節の議論においては, 原子はお互いに影響を及ぼしあわない一粒子の問題として取り扱った. 本論文においては同様の取扱いを行うが, 一般的に原子間相互作用が含まれることにより様々な現象が引き起こされることが分かっている. この原子間相互作用の取扱いについて次節で簡単に触れる.

## 2.5 原子間相互作用

極低温領域において, 中性原子気体の相互作用は主にファンデルワールス (Van der Waals) 相互作用である. この相互作用は電気的雙極子-雙極子相互作用によるもので, 原子間距離の 6 乗に反比例する. また低温であるために原子の持つ運動エネルギーはほぼゼロであると見れる. このとき二体間の衝突は運動エネルギーゼロの極限で用いられるゼロエネルギー散乱の理論によって記述可能であり, 散乱長  $a$  とよばれるパラメーターで記述される. この散乱長  $a$  は二体間の相互作用の到達距離と見ることが可能であり, アルカリ原子においては数 nm のオーダーである. 一方で極低温領域にある希薄な中性原子ガスでは, 原子間隔はおおよそ  $\sim 100\text{nm}$  のオーダーとなっている. この条件下では二体の散乱問題についての知識が希薄な原子ガスの性質をよく表すことが知られている. この節では, 原子間相互作用がある場合の調和トラップ中 BEC について簡単に触れる.

運動量空間で低エネルギーの二体間有効相互作用は  $g = 4\pi\hbar a/m$  と表示される. 位置空間においては, 位置  $\vec{r}$  にある粒子と位置  $\vec{r}'$  にある粒子の有効ポテンシャルがデルタ関数型 (接触型)  $U\delta(\vec{r} - \vec{r}')$  となる. アルカリ原子においては散乱長  $a$  は理想ボーズ気体の位置空間での分散  $\sigma_r$  に比べて非常に小さいため, デルタ関数型のポテンシャルは意味のある近似だといえる. 本来であれば多粒子系について考え, それぞれの有効相互作用について考える必要があるが, 粒子数  $N$  が非常に大きい極限においては多体の効果を 1 粒子問題へと帰着させた平均場の考え方が有効である. この平均場の取扱いは原子分子物理学において, 多電子系の波動関数を近似的に求めるためのハートリー近似 (またはハートリー・フォック近似) と同質の近似である. 導出の詳細については省くが, 平均場近似の基で BEC が従う方程式である時間に依存しない Gross-Pitaevskii 方程式 (GP 方程式, グロス・ピタエフスキー方程式) は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) + g|\psi(\vec{r})|^2 \right\} \psi(\vec{r}) = \mu\psi(\vec{r}) \quad (12)$$



と表される. ここで,  $V(\vec{r})$  はトラップポテンシャル,  $\mu$  は化学ポテンシャル,  $\psi(\vec{r})$  は凝縮体の波動関数である. 波動関数は全粒子数  $N = \int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$  で規格化されている. ここで注意すべき点は, 通常シュレディンガー方程式と異なり固有値にエネルギーではなく, 化学ポテンシャルが現れる点である.

次に調和トラップ中にある BEC の解, すなわち GP 方程式の解について考える. ここでは全粒子数  $N$  が非常に大きい場合について, 簡単に解を求め得る近似として Thomas-Fermi 近似 (TF 近似, トーマス・フェルミ近似) を用いる. TF 近似下では相互作用が斥力であり, 相互作用項が運動エネルギーに対して十分に大きいという仮定を行う. この仮定の基では運動エネルギーを無視し, 運動エネルギーのない GP 方程式から, 凝縮体の波動関数は

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\mu - V(\vec{r})}{g}} \quad (13)$$

で与えられる. ただし  $\mu - V(\vec{r}) < 0$  となる領域では波動関数は 0 であり, 境界は  $R = 2\mu m \omega^2$  で与えられる. この境界値は  $R$  は相互作用がある凝縮体の大きさと言える. さらにこの凝縮体の大きさ  $R$  は規格化条件から計算する事が可能であり,

$$R = 15^{1/5} \left( \frac{Na}{\sigma_r} \right)^{1/5} \sigma_r \quad (14)$$

となる. この結果は粒子数  $N$  もしくは散乱長  $a$  が大きくなると, 凝縮体は空間的に大きくなるという事を示している. 典型的な実験パラメーターでは, 大きさ  $R$  は  $\sigma_r$  よりも大きくなる. またこの状態は系の基底状態であるため, 不確定性原理を満たさなければならない. TF 近似においては運動量の広がりをゼロとしたが, 実際には凝縮体の大きさが大きくなると, 運動量空間での広がりは小さくなる.

このように凝縮体のパラメーターを変更するには, トラップポテンシャル  $\omega$ , 粒子数  $N$ , 散乱長  $a$  を変更すればよい事が分かる. これらの量はすべて実験的に可変であるが, 冷却原子系の最大の特徴の一つは散乱長  $a$  を幅広いレンジで変化させ得るということである. これは磁場を用いたファノ・フェッシュバツハ共鳴 (もしくはフェッシュバツハ共鳴と呼ばれる) によって実現される. 次にこの特徴について大まかな議論を行う. 低エネルギーの二体間有効相互作用を求める上では, 衝突は単一チャンネル, つまり原子間衝突の際に超微細構造状態が変化しないという仮定を組み込んでいた. しかし衝突の前後でスピンの変化する過程, すなわち多チャンネルの問題となることもある. このような条件は, ある超微細構造状態で表現される原子ペアの相対運動のエネルギーが, 異なる超微細構造状態で表される束縛状態と近いエネルギーを持つ場合に成立する (図 2.3(a),(b)). 図中では, 超微細構造状態を  $|\uparrow\uparrow\rangle$  と  $|\uparrow\downarrow\rangle$  で表示している. この条件は, 磁場によって束縛状態と散乱状態のエネルギー差を相対的に変化させる事によって実現する. 二次の摂動論の結果から散乱長の磁場  $B$  による依存性 [21] は,

$$a(B) = a_{bg} \left( 1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right) \quad (15)$$

で与えられる. ここで  $\delta$  は共鳴幅,  $B_0$  は共鳴磁場,  $a_{bg}$  は共鳴磁場から十分遠い磁場での散乱長である. 例えば, K-Rb の実験 [41] では  $^{40}\text{K}|F = 9/2, m_F = -9/2\rangle$  と  $^{87}\text{Rb}|F = 1, m_F = 1\rangle$  が用いられており, 共鳴磁場から十分遠い磁場での散乱長  $a_{bg} = -185a_0$ , 共鳴点での磁場  $B_0 = 546.8\text{G}$ , 共鳴の幅  $\Delta = -3.6\text{G}$  である. (ここで  $a_0$  はボーア半径, また幅は通常の場合と異なり負の値を取り得る.) 磁場に対する散乱長の依存性は Inouye らによって 1998 年に初めて観測され [42], このブレイクスルーをきっかけにファノ・フェッシュバツハ共鳴の非常に多くの実験が現在までに行われてきた. また 2003 年にはファノ・フェッシュバツハ共鳴の共鳴磁場を通過するように磁場を掃引することで, 極低温分子を生成 [43, 44] することに成功しており, 現在も様々な研究が行われている [45, 46, 47]. 極低温領域におけるファノ・フェッシュバツハ共鳴については, 参考文献 [48, 49] 等が詳しい.

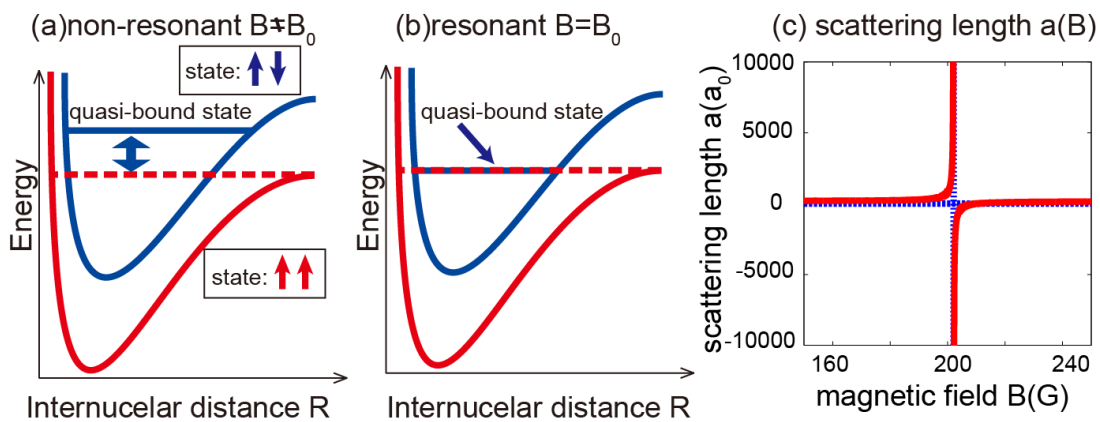


図 2.3 (a) 二つの異なる超微細構造状態における, 核間距離を変数としたポテンシャル曲線. 磁場  $B$  が共鳴磁場  $B_0$  と異なる場合には, 赤線で書かれたポテンシャルの解離閾値と青線で書かれたポテンシャル中の束縛状態のエネルギーは離れている. (b) 磁場  $B$  が共鳴点にある場合. この場合, 解離閾値と束縛状態は共鳴状態にあり, 状態  $\uparrow\uparrow$  から  $\uparrow\downarrow$  の束縛状態へと遷移する事が出来る. この効果は有効的に散乱長を増大させる. (c) 磁場と散乱長の関係. 共鳴点近傍で散乱長は磁場に強く依存して変化し, 共鳴点では  $\pm\infty$  に発散する.

このように凝縮体の相互作用項を変更する事により, 理想ボーズ気体から強相関の領域まで幅広い領域で研究が可能である. この特性は単一成分の凝縮体のみならず, 多成分凝縮体の量子相の研究など, より複雑な系の研究が可能であることを示している. またここでは議論は行わなかったが, 同様にして相互作用項は凝縮体の動力学にも影響を与える. 近年では相互作用が生み出す非線形項  $g$  を積極的に利用する研究 [50] もおこなわれており, また回転系の BEC では量子渦 [51] の発生など興味深いトピックも多く確認されている. 動力学についても, 参考文献 [3, 21] 等を参考にしてほしい.

### 3 周期ポテンシャル系の基礎物理

この章では周期ポテンシャルに閉じ込められた粒子がどのような振舞をするか考察すると共に、本論文で用いる議論の基礎について紹介する。ここで考える粒子は相互作用しない中性原子、また一粒子の問題について考える。この章の目的は周期ポテンシャルである光格子と調和トラップによる複合ポテンシャルに束縛された原子の固有状態についての定性的な理解である。

まずは考えるべきハミルトニアンを設定する。一次元において光格子と調和トラップの複合ポテンシャルによるハミルトニアンは  $V_0$  を光格子の高さ、反跳運動量  $k_r = 2\pi/\lambda, \omega_0$  を調和トラップの周波数として

$$H_{\text{pt}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_r x) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (16)$$

と書かれる。ここで  $\hbar, \lambda, m$  はそれぞれプランク定数、光格子の波長、粒子の質量である。また時間依存する波動関数  $\psi(x, t')$  に対するシュレディンガー方程式は、

$$i\hbar \frac{d}{dt'} \psi(x, t') = H_{\text{pt}} \psi(x, t') \quad (17)$$

で与えられる。本論文では式を簡潔にするため、位置座標  $y = k_r x$ 、格子振幅 (格子の高さ)  $s = V_0/E_r$ 、調和トラップパラメーター  $\nu = m\omega_0^2/2E_r k_r^2$  としてスケールしなおされたハミルトニアン

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + s \sin^2(y) + \nu y^2, \quad (18)$$

そして時間依存する波動関数  $\psi(y, t)$  に対するシュレディンガー方程式は、

$$i \frac{d}{dt} \psi(y, t) = H \psi(y, t) \quad (19)$$

とスケールする。

以下本論文の数式はことわりがない限り、反跳エネルギー  $E_r = \hbar^2 k_r^2/2m$ 、反跳運動量  $k_r = 2\pi/\lambda$ 、格子定数  $a = 2/\lambda$ 、スケールされた時間  $t = E_r t'/\hbar$  をそれぞれ、エネルギー、運動量 (擬運動量)、長さ、時間のスケールにとる。また図中では主に、反跳エネルギー  $E_r$ 、格子定数 (格子サイト数, lattice site)、反跳運動量  $k_r$ 、ミリ秒を単位としている。実験との対応を考えて kHz や  $\mu\text{m}$  など適宜用いる。

光格子と調和トラップの複合ポテンシャル中の冷却原子のダイナミクスを考える上でまず初めに、第 3.1 節では、調和トラップのない場合のハミルトニアン

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + s \sin^2(y), \quad (20)$$

における 1 粒子状態の固有エネルギー、固有関数について議論を行う。ここで得られるブロッホ状態とよばれる固有状態による展開を以降の解析で用いる。

続いて第 3.2 節では、外場として線形ポテンシャルが加わった場合の一粒子ダイナミクスについて考察を行う。ここでの議論は主に、粒子がバンドギャップとよばれるエネルギーの不連続点に到達した場合に起こる現象について定性的に説明する。この現象は周期ポテンシャル系で特に重要なものであり、以降の議論の中では外場として調和トラップが加わった場合との対比に用いる。またダイナミクスについて量子力学系から古典系への対応付けについて説明する。第 6 章では特に古典系での議論をもとに解析を行う。

その後第 3.3 節では、調和トラップを含んだハミルトニアンに対して、固有エネルギーおよび固有関数の性質について静的な場合での考察を行う。主に強束縛領域とよばれる領域、つまり考えるエネルギーが光格子振幅  $s$  よりも十分に低い領域について議論を行う。このような領域ではハバード模型とよばれる方法によって良く固有状態の性質が理解できる。また同時に高いエネルギー領域ではこの模型による理解が成立しなくなることについても議論する。このような固有状態の情報は、後にダイナミクスを議論する上で直観的な理解を与える。

### 3.1 1次元周期ポテンシャル中の固有関数と固有エネルギー

この節では主に周期ポテンシャル中の 1 粒子固有値問題について考察する。主な参考文献は [18, 52, 53] である。周期ポテンシャル中の相互作用のない 1 粒子状態の解はブロッホ (Bloch) の定理によって説明される。1 次元周期ポテンシャル  $V(y) = V(y + a)$  を考えた時、シュレディンガー方程式の解は

$$\psi_k(y) = \exp(iky)u_k(y), \quad (21)$$

を満たさなければいけないと言うものである。ここで  $a$  はポテンシャルの周期 (格子定数) である。また  $u_k(y)$  はポテンシャルと同様の周期をもつ関数であり、 $k$  は波数ベクトルである。このように平面波と周期関数の積で描かれる 1 粒子波動関数はブロッホ関数とよばれる。

以下では、1 次元系  $\sin^2$  型の周期ポテンシャルについてブロッホ関数およびエネルギーがどのようになるかを調べる。文献 [18] などの議論では、周期ポテンシャルの持つ運動量  $k_r = 2\pi/\lambda$  を単位としてフーリエ変換した形のハミルトニアンを考えることが多い。ここでも同様にしてブロッホ関数を求めることとする。 $n$  をバンドインデックス、 $q$  を擬運動量、 $K \in \mathbb{Z}$  を逆格子ベクトルの係数としたとき、ブロッホ関数  $\phi_q^n(y)$  はフーリエ係数  $C_B^n(K, q)$  を用いて、

$$\phi_q^n(y) = e^{iqy} \sum_K C_B^n(K, q) e^{2iKy}, \quad (22)$$

と書くことができる。ここで擬運動量  $q$  は反跳運動量  $k_r$  で正規化されている。周期ポテンシャルのフーリエ展開

$$s \sin^2(y) = s/2 - s(e^{2iy} + e^{-2iy})/4, \quad (23)$$

および式 (22) を用いると、ハミルトニアン  $H_0$  に対する時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$H_0 \phi_q^n(y) = E_q^n \phi_q^n(y), \quad (24)$$

は無限次元の  $K$  に対する漸化式

$$(q+2K)^2 C_B^n(K, q) - s C_B^n(K-1, q)/4 - s C_B^n(K+1, q)/4 = (E_q^n - s/2) C_B^n(K, q), \quad (25)$$

で書き換えられる。ここで  $E_q^n$  は第  $n$  バンド、擬運動量  $q$  の場合の固有エネルギーである。この固有値問題を解くことにより擬運動量と固有エネルギーの関係、いわゆるバンド分散が得られる。また式 (20) は固有関数を  $F$  とおいて、

$$\frac{d^2 F}{dy^2} + (a - 2b \cos(2y)) F = 0, \quad (26)$$

と変形することによってマシュー (Mathieu) 方程式の標準形へと帰着する。ここでそれぞれ  $a = E_q^n - s/2, b = s/4$  である。そのため解析解はマシュー方程式によって与えられるが、マシュー方程式の解については [55] を参考のこと。ここではこの漸化式 (25) について、逆格子ベクトルのインデックス  $K$  を有限の値で打ち切り、数値的に解いた結果について解析する。

まずエネルギーについて考察する。図 3.1 は格子振幅  $s$  を変化させた場合のバンド構造を、還元ゾーン形式 (擬運動量  $q$  を  $-1$  から  $1$  までに制限した形式) で表現している。ここで注意すべきことは、拡張ゾーン形式と擬運動量  $q$  の表示が異なる点である。バンドインデックス  $n$  が偶数の場合、還元ゾーン形式で擬運動量は拡張ゾーン形式の擬運動量から  $n$  を差し引いたもの (足したもの) になるが、奇数の場合は

$$q = \begin{cases} n - q' & (q' < 0) \\ q' - n & (q' > 0) \end{cases} \quad (27)$$

となる。ここで  $q$  と  $q'$  は還元ゾーンおよび拡張ゾーンでの擬運動量の表示である。本論文では、以下還元ゾーン、拡張ゾーンでの表示を場合によって使い分ける。

ここでは還元ゾーン形式でバンド構造を考察する (図 3.1)。まず格子振幅が低い  $s = 2$  の場合をみるとバンド構造は、擬運動量とエネルギーは自由な粒子の分散関係  $E = q^2$  に近い。しかしながら格子振幅が大きくなるにつれて自由粒子の分散関係と異なった概形になっていくことが分かる。例えば  $s = 40$  の場合においては、エネルギーは擬運動量に対してほぼ平坦な形で現れる。さらに特徴的な部分は擬運動量が  $q = 1$  もしくは  $q = -1$  でエネルギーにギャップが現れることである。これはバンドギャップと呼ばれ、ブロッホ関数のフーリエ展開成分の縮退が解けるために起こる現象である。格子振幅  $s$  とバンドギャップの関係を調べるために、フーリエ成分が二成分のみ現れる (ここでは逆格子ベクトルが  $K = 0, -1$  のみ) 場合、つまり式 (25) の二元連立一次方程式の解を考える。擬運動量  $q = 1$  の場合を考えると、この連立方程式は  $e^{iy}$  と  $e^{-iy}$  が周期ポテンシャルによってど

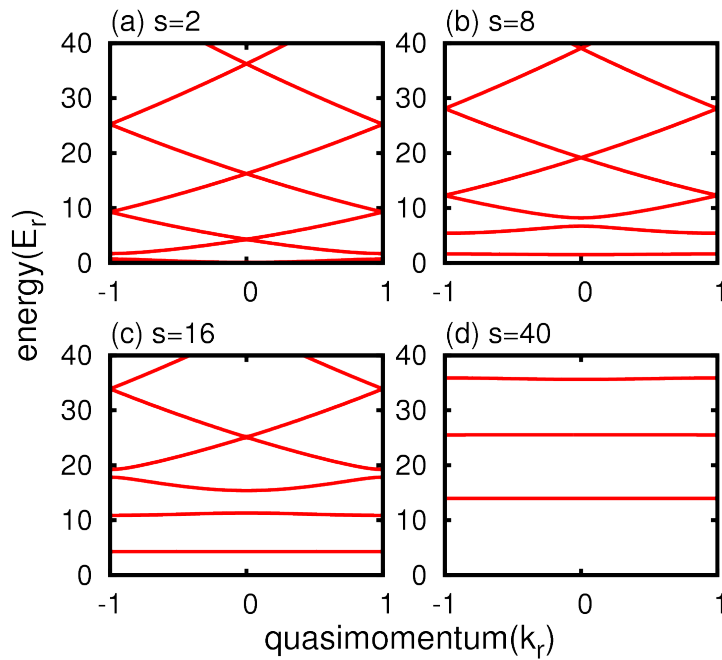


図 3.1 光格子振幅  $s = 2, 8, 16, 40$  でのバンド構造. 横軸は還元ゾーン形式での擬運動量, 縦軸はエネルギー.

のように結合しているかという問題に帰着する. (ここでの議論の詳細は [56] を参考のこと.) この場合, 式 (25) は連立方程式,

$$\begin{cases} q^2 C_B(0, q) - s C_B(-1, q)/4 & = \epsilon C_B(0, q) \\ (q-2)^2 C_B(-1, q) - s C_B(0, q)/4 & = \epsilon C_B(-1, q) \end{cases} \quad (28)$$

となる. ただし式 (25) 中の右辺にあらわれる  $(E_q^n - s/2)$  を  $\epsilon$  と書いた. この  $\epsilon$  は固有エネルギーに対応する. バンド境界  $q = 1$  の場合,  $\epsilon = q^2 \pm s/4 = 1 \pm s/4$  となり, エネルギーは二つに分裂することになる. またこの式から格子振幅  $s$  が大きくなるにつれてバンドギャップが大きくなるのが分かる. この現象はもちろんトンネル効果に起因するものであるが, 後述する外力が作用する場合には, 二原子分子の問題などで現れる擬交差と対応付けると考えやすい. この部分については次節において考察する. 次にバンドギャップとバンドインデックス  $n$  の関係に注目する. バンドインデックスが上昇するにつれてバンドギャップが小さくなるのが分かる. これは固有エネルギーが上昇するにつれて, 周期ポテンシャルが粒子に及ぼす影響が少なくなるためである. 特に格子振幅より固有エネルギーが高い領域  $E > s$  では分散関係は徐々に自由粒子の場合と同様の概形をもち, バンドギャップは  $E < s$  の場合に比べて非常に小さくなる.

次に系の固有関数について考察するため, フーリエ展開係数について考える. 式 (25) が  $q = 0$  のとき, 逆格子ベクトルの係数  $K$  が十分に大きい場合 ( $s \gg 1$ ) では,  $K$  の関数として  $C_B^n(K+1, 0) + C_B^n(K-1, 0) = 2C_B^n(K, 0) + C_B^{n''}(K, 0)$  と近似が可能となる. ここ

で右辺にあらわれる  $C_B^{n''}(K, 0)$  は係数  $C_B^n(K, 0)$  の  $K$  による二階偏微分をあらわしている。そのため式 (25) は

$$K^2 C_B^n(K, 0) - s C_B^{n''}(K, 0)/4 = E_q^n C_B^n(K, 0), \quad (29)$$

となり、質量が  $2/s$ 、ばね定数が 2 の調和振動子の方程式へと帰着する。例として  $s = 16$  の場合について  $C_B^n(K, 0)$  を  $K$  の関数としてプロットすると、図 3.2 となり、それぞれ調和振動子の解であるエルミート (Hermite) 多項式とガウシアン積で表現されることが分かる。ただし一般の擬運動量  $q$  の場合この近似は破綻する。バンドインデックス  $n = 0$  の場合の数値計算の結果を図 3.3 に示す。また擬運動量  $q$  が 0 でない場合、フーリエ展開係数  $C_B^n(K, q)$  は変調された調和振動子の解となっていることが分かる。図 3.4 には擬運動量  $q = 0.4$  の場合のフーリエ展開係数をバンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  の場合について示した。バンドインデックスが 0 でない場合も同様になっていることが分かる。さらに  $q = 0$  のときにみられた偶奇性はこの場合満たされていない。このフーリエ展開係数  $C_B^n(K, q)$  は、光格子振幅変調を周期ポテンシャル系への摂動項として導入する場合に、ブロッホ状態間の結合項としてあらわれる。光格子振幅変調の振る舞いについては、第 5 章で考察する。

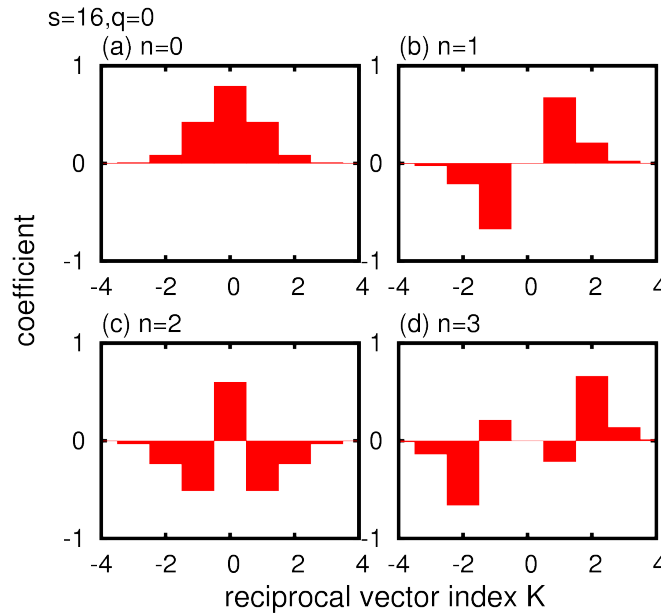


図 3.2 擬運動量  $q = 0$  におけるバンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  でのフーリエ展開係数  $C_B^n(K, 0)$ . 横軸は逆格子ベクトル  $K$ , 縦軸はフーリエ展開係数. 結果は式 (29) に従い、調和振動子の解で表現される。

次にブロッホ関数 (固有関数) を考察する。ブロッホ関数は得られたフーリエ展開係数  $C_B^n(K, q)$  を用いて、式 (22) で表現される。図 3.5 では、図 3.3 と同様に基底バンド  $n = 0$  で擬運動量  $q$  を変化させたの場合について結果を示した。このとき、ブロッホ関数のフー

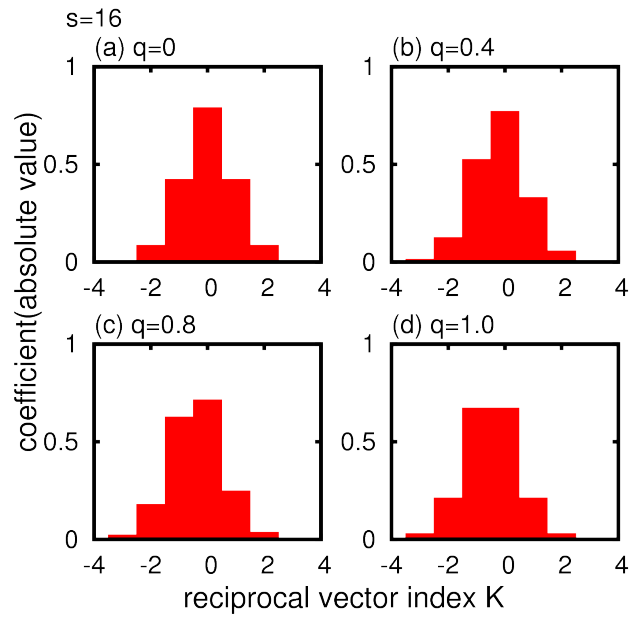


図 3.3 基底バンド  $n = 0$  における  $q = 0, q = 0.4, q = 0.8$  および  $q = 1.0$  でのフーリエ展開係数  $C_B^0(K, q)$ .

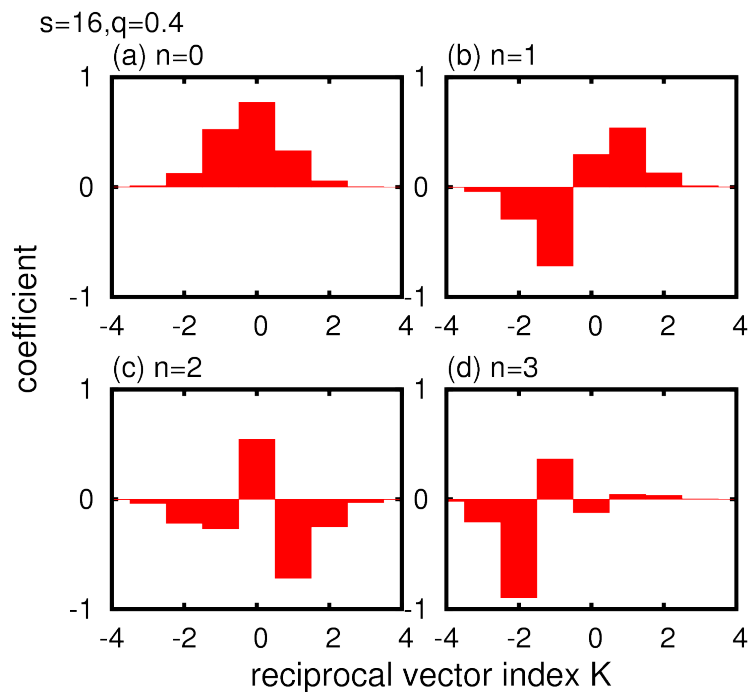


図 3.4 擬運動量  $q = 0.4$  におけるバンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  でのフーリエ展開係数  $C_B^n(K, 0)$ .



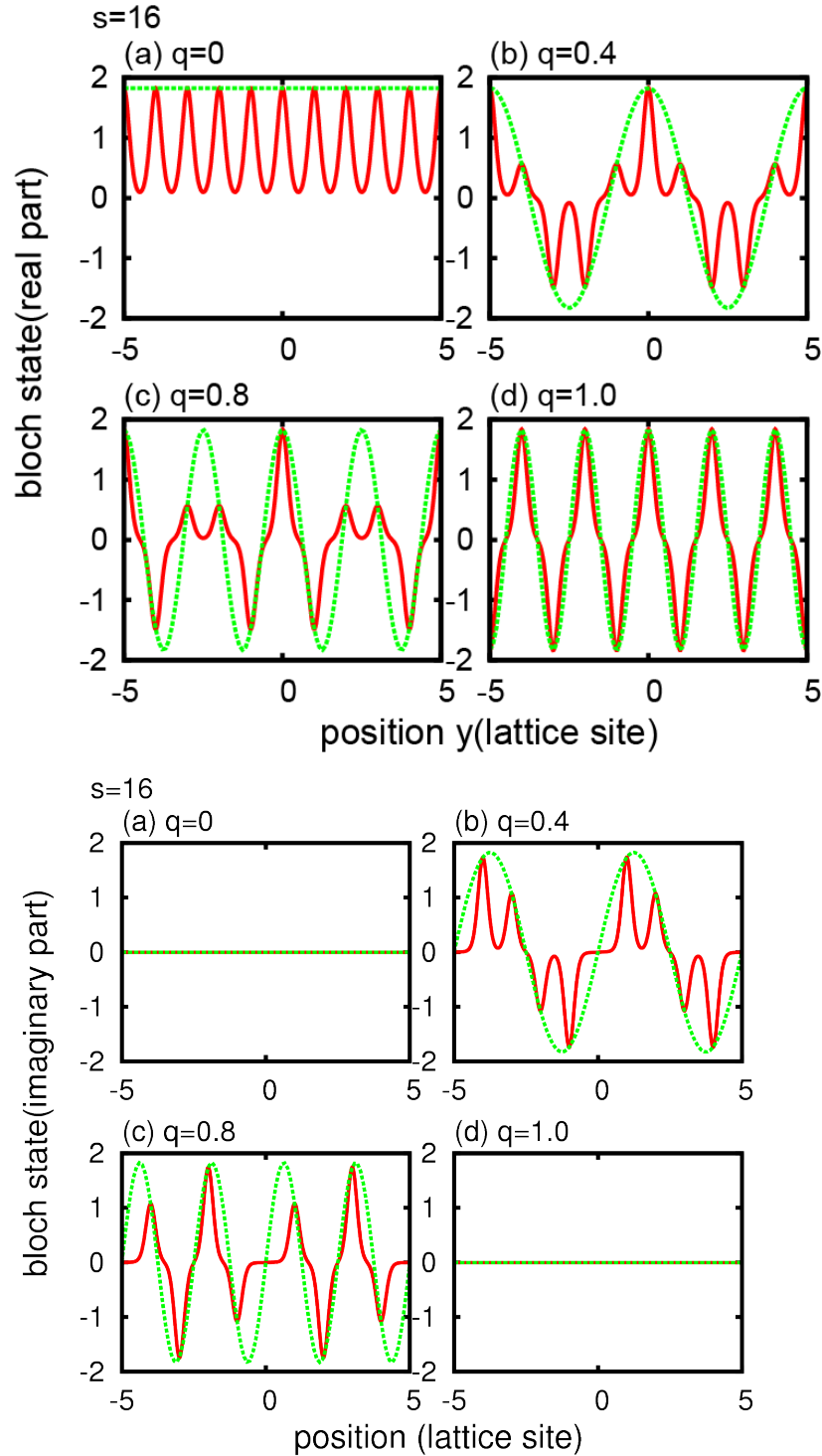


図 3.5 基底バンド  $n = 0$  における擬運動量  $q = 0, 0.4, 0.8, 1.0$  でのブロッホ関数  $\phi_q^n(y)$ . 横軸は位置  $y$ , 縦軸はブロッホ関数. 上図は実数, 下図は虚数部を表示している. 図中の緑の点線は包絡線  $e^{iqy}$  に対応している.

リエ展開成分の部分  $\sum_K C_B^n(K, q)e^{2iKy}$  は, 単一トラップ中の波動関数の重ね合わせで表現される. たとえば, サイト番号  $j = 0, y = 0$  を中心とした単一トラップポテンシャル (こ

ここでサイト番号  $j \in \mathbb{Z}$  と定義する) は

$$V(y) = \begin{cases} s \sin^2(y) & (|y| < \pi) \\ s & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (30)$$

であらわされる. この場合には, 固有関数および固有エネルギーは井戸型ポテンシャルの結果と似た傾向を示す (図 3.6). このように空間で局在した状態を表現する場合に有用なのは, ワニエ (Wannier) 関数である. 格子振幅  $s$  が十分大きい時 ( $s \gg 1$ ) に基底バンド (第 0 バンド, バンドインデックス  $n = 0$ ) のエネルギーは近似的に

$$E_q^0 = \sqrt{s} - 2J \cos(\pi q) \quad (31)$$

で与えられることが知られている [57]. このような状況は強束縛 (tight-binding) の領域と呼ばれる. ここで  $J$  はホッピングパラメーターと呼ばれる量であり, 基底バンドのエネルギーとホッピングパラメーターの間には  $J = (E_1^1 - E_0^1)/4$  の関係が与えられる. ホッピングパラメーターは強束縛の条件下 (格子高さが十分大きい場合には) で近似的に  $J = \frac{4}{\sqrt{\pi}} s^{3/4} e^{-2\sqrt{s}}$  で与えられる [58]. この基底バンドのホッピングパラメーターは擬運動量空間で局在しているブロッホ関数よりも, 実空間で局在しているワニエ関数での表現の場合に重要な役割を果たす. ワニエ関数はサイト番号  $j$  を用いて,

$$w_j^n(y) = \sum_q e^{-iq\pi j} \phi_q^n(y), \quad (32)$$

逆の関係は

$$\phi_q^n(y) = \sum_j e^{iq\pi j} w_j^n(y), \quad (33)$$

の形で与えられる. 強束縛の条件下ではこのワニエ関数が単一トラップポテンシャルの解で近似可能である. ブロッホ関数 (図 3.5) へと戻ると, このような近似で表されるフーリエ展開成分が包絡線  $e^{iqy}$  によって変調されている関数であることがわかる (式 (22) を参照). 擬運動量  $q = 0$  の場合では, 包絡線  $e^{iqy} = 1$  となっているので実数部分のみがあらわれる. 図 3.7 では, 図 3.2 と同様に擬運動量  $q = 0$  で, バンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  の場合を表示している. 擬運動量を  $q = 0$  に固定した場合, バンドインデックス  $n$  を変更すると, 単一トラップポテンシャルの解が変化する. 単一トラップポテンシャルの解は, バンドインデックス  $n$  と同じノード数を持つため, このような形になる. 同様にして  $q = 0.4$  の場合 (図 3.8), バンドインデックス  $n = 0$  の場合とバンドインデックス  $n = 1$  の場合を比較する. それぞれのブロッホ関数は, 偶数 (奇数) バンドで実数部が偶関数 (奇関数), 虚数部が奇関数 (偶関数) になっている. そのため, 擬運動量  $q = 0$  の場合で見たような対称性は現れない (同様に  $q = -1, +1$  も例外である).

ここで少しワニエ関数について補足する. ホッピングパラメーターはこのワニエ関数を用いて  $J = -\int w_{j+1}^0(y) H_0 w_j^0(y) dy$  で与えられる. すなわちあるサイト  $j$  から  $j+1$  へのトンネル効果の強さを表現する量である. この量は  $j$  から  $j+1$  つまり, 最隣接のみのト

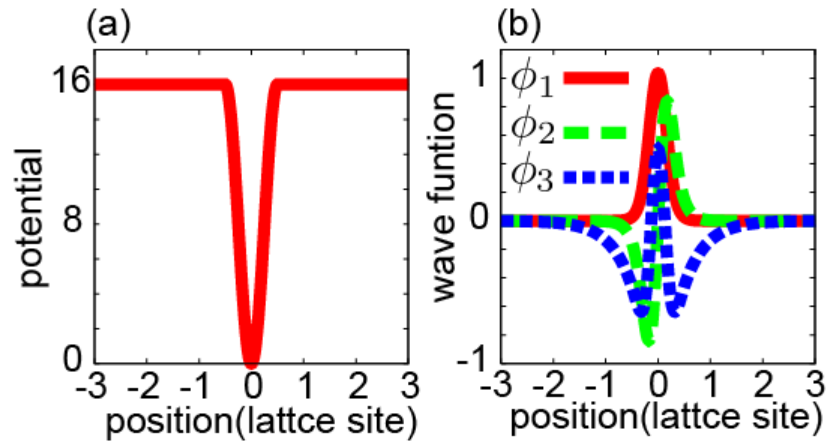


図 3.6 単一トラップポテンシャル中の固有関数. (a) トラップポテンシャル.(b) 固有関数. 光格子振幅  $s = 16$  の場合, 束縛状態の数は 3 である.

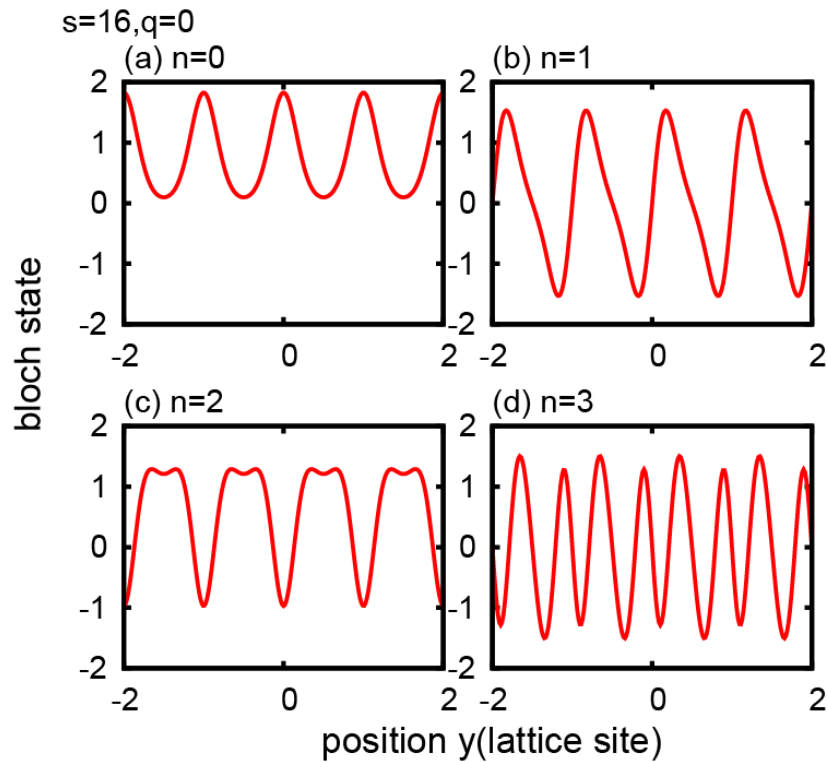


図 3.7 擬運動量  $q = 0$  におけるバンドインデックス  $n = 0, 1, 2, 3$  でのブロッホ関数  $\phi_q^n(y)$ . 横軸は位置  $y$ , 縦軸はブロッホ関数.

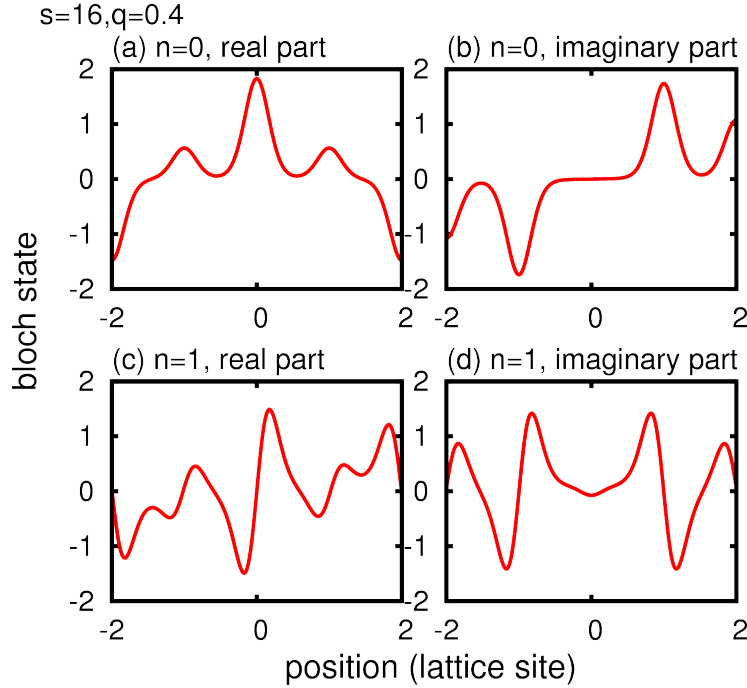


図 3.8 擬運動量  $q = 0.4$  におけるバンドインデックス  $n = 0, 1$  でのブロッホ関数  $\phi_q^n(y)$  の比較. 横軸は位置  $y$ , 縦軸はブロッホ関数. (a),(c) はそれぞれの実数部,(b),(d) はそれぞれの虚数部.

ンネル効果を表現したものであり, この項のみを取り扱う近似は最隣接 (nearest-neighbor) 近似と呼ばれる. この近似は最隣接のみならず, 第二, 第三隣接と高次の項を含むことにより, 近似の精度を増すことが出来る. ホッピングパラメータはワニエ関数の重なり合いにより計算されるため高次の項は基底よりも高いバンドにおいて重要な役割を果たす. 本論文ではこれ以上の議論は行わない. このワニエ関数による表現の有用性は調和ポテンシャルを含んだ場合でさらに考察する.

### 3.2 線形ポテンシャルによって誘起されるダイナミクス

周期ポテンシャルを含む系で非常に特徴的なダイナミクスはブロッホ振動 (Bloch oscillation, BO) とランダウ・ツェナー遷移 (Landau-Zener transition, LZ)[20] と呼ばれる二つの現象である. 1 次元の周期ポテンシャルに線形のポテンシャルが加わった場合を考える. この状況は冷却原子系では光格子ポテンシャルの方向が重力方向と同一の場合であり (ここではどちらも  $y$  方向), 固体中の電子の場合ではイオンとのクーロン力によって作られる周期ポテンシャルに加えて, 結晶の端点に電圧が加えられたような場合に対応する. この場合のハミルトニアンは,

$$H_l = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + s \sin^2(y) + \alpha y, \quad (34)$$

と表され,  $\alpha$  は重力 (もしくは電圧) の強さを表す量である. ここではこのハミルトニアンに従って時間依存するシュレディンガー方程式

$$i \frac{d}{dt} \psi = H_l \psi, \quad (35)$$

の解について古典模型の結果を中心に説明する.

このハミルトニアン  $H_l$  の最初の二項は  $H_0$  (式 (20)) と等しく, 固有エネルギー  $E_q^n$  を持つ. 量子力学的には, この最後の項  $\alpha y$  はプロッホ状態 (もしくはワニエ状態) の結合項 (摂動項) として現れる. ここではまず, 摂動項は異なるバンド間のプロッホ状態を結びつけない (単一バンド近似) という仮定のもと, また擬運動量  $q$  が連続 (サイトインデックス  $j$  も連続, つまり位置  $y$  と等価になる) であるという極限をとって古典的なハミルトニアンを導出する. 時間に依存する波動関数はプロッホ関数での表示  $\psi = \sum_{n,q} C_B(n,q) \phi_q^n$  もしくはワニエ関数での表示  $\psi = \sum_{n,j} C_w(n,j) w_j^n$  と表すことができる. そのためハミルトニアンの期待値は,

$$\begin{aligned} \langle \psi | H_l | \psi \rangle &= \sum_{n,q,n',q'} \left\langle C_B(n,q) \psi_q^n \left| H_0 \right| C_B(n',q') \psi_{q'}^{n'} \right\rangle + \sum_{n,j,n',j'} \left\langle C_w(n,j) w_j^n \left| \alpha y \right| C_w(n',j') w_{j'}^{n'} \right\rangle \\ &= \sum_{n,q} |C_B(n,q)|^2 E_q^n + \sum_{n,j} |C_w(n,j)|^2 \alpha j \end{aligned} \quad (36)$$

となる. 第 1 項は擬運動量のエネルギー, 第 2 項は線形ポテンシャルによるエネルギーを表している. ここで特定のバンド  $n$  に存在する, 位置  $y$ , 擬運動量  $q$  で指定される古典的な粒子の極限をとる. 第 2 項のエネルギーはバンドインデックス  $n$  に非依存であり, サイトインデックス  $j$  を位置座標  $y$  と置き換えることが可能であるので, 古典的な粒子に対するハミルトニアンは

$$H_c = E_q^n + \alpha y, \quad (37)$$

と近似することができる [59]. よって古典的なダイナミクスの方程式は

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= \left( \frac{\partial E_q^n}{\partial q} \right), \\ \dot{q}(t) &= -\alpha. \end{aligned} \quad (38)$$

となる.

この古典的な方程式を用いて, 周期ポテンシャルと線形ポテンシャルの複合系のダイナミクスについて考察する. 初期条件として, 擬運動量空間において擬運動量  $q = 0$  を中心としたガウス波束, かつ座標空間で中心が  $y = 0$  の場合を仮定する (図 3.9 (a)). 初めに  $(y, q) = (0, 0)$  の中心にいたガウス波束は, 線形ポテンシャルの影響を受けてバンド境界  $q = -1$  の方向へと加速される. バンド境界では, 線形ポテンシャルの強さ  $\alpha$  および, バンドギャップ  $\delta_n$  (バンドギャップも反跳エネルギー  $E_r$  によってスケールされている) によって二種類の場合が考えられる. バンドギャップ (または格子振幅) を固定した場合には線形ポテンシャルの強さ  $\alpha$  のみについて考えればよい.

まず線形ポテンシャル  $\alpha$  が小さい場合を考える。バンド境界では波束の持つ波数はちょうど光格子の波数の整数倍となる。この条件はブラッグ反射の条件を満たすものである。よってバンド境界にたどり着いた波束は、異なるバンド境界へと反射される (図 3.9 (b))。擬運動量空間では、擬運動量  $q = -1$  から  $q = 1$  への遷移に対応するものである。その後も波束は線形ポテンシャルの影響を受け続け、やがては初期の擬運動量  $q = 0$  の状態へと帰ってくる。初期条件として時刻  $t = 0$  で位置、擬運動量がそれぞれ  $(y(0), q(0))$  で表される基底バンドのみを運動する粒子を仮定すると、式 (38) の解は

$$\begin{aligned} y(t) &= y(0) - \frac{2J}{\alpha} \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}t\right) \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}t + \pi q(0)\right), \\ q(t) &= q(0) - \alpha t \end{aligned} \quad (39)$$

と表される。ただし分散関係は式 (31) の近似を用いた。位置座標  $y$  に注目してみると振動する解になっている。この現象は以降も繰り返され、位置空間・擬運動量空間どちらにおいても振動構造となって現れる (図 3.10 (a))。特に擬運動量空間での振動はその概形からのこぎり波型 (Sawtooth wave) の振動とよばれる。これがブロッホ振動と呼ばれるものである。特徴的な量はブロッホ振動の周期  $\omega_B = \alpha/2$  である。このブロッホ振動は一般的な固体中では非常に早い振動であり、また不純物散乱によって阻害されてしまうために観測は難しい。しかしながら、人工超格子中での電子や [60]、光格子中の極低温原子 [75, 61] において観測されている。例えば重力加速度  $g$  が加わった場合、ブロッホ振動の周波数は SI 単位系で  $\omega_B = \frac{mga}{2\pi\hbar}$  と与えられる。光格子中の極低温原子を用いたブロッホ振動の周波数から重力加速度を求める実験が行われており、2004 年の実験では 4 ケタ [64]、2011 年の実験では 7 ケタ [65] の精度が確認されている。

次に線形ポテンシャル  $\alpha$  が大きい場合を考える。バンド境界は、下準位のバンドと上準位のバンドの擬交差になっている (図 3.9(c)、ここで波束は初期状態として基底バンドにいたために、最初に通過するのは基底バンドと第 1 バンド間の擬交差となる)。このような擬交差では下準位から上準位 (もしくは上準位から下準位) への遷移が存在する。原子分子物理学では、このような状態が分子構造において超微細構造準位間で現れることがよく知られている。そしてこのような擬交差は前期解離過程等で観測される現象であり、遷移確率は古典的にランダウツェナー遷移確率として計算される。特筆すべき点として、原子-原子間衝突などにみられる超微細構造準位間での擬交差は座標空間において現れるが [62, 63]、周期ポテンシャル中では擬運動量空間で現れることである。しかしながら、LZ 遷移確率の計算手法は周期ポテンシャル系においてもそのまま適用可能であり、上準位のバンドインデックスが  $n$  の場合その確率は

$$P_{LZ}(n, a) = \exp\left(-\frac{a_c(n)}{|a|}\right) = \exp\left(-\frac{\delta_n^2}{4n|\alpha|}\right) \quad (40)$$

で与えられる [4]。ここで  $a_c(n)$  と  $a$  はおのおのランダウツェナー臨界加速度と原子が受ける加速度であり、線形ポテンシャルの場合は加速度一定となる。またランダウツェナー

臨界加速度はバンドインデックス  $n$  に依存し、第  $n$  バンドと第  $(n - 1)$  バンドのバンドギャップ  $\delta_n$  の関数である。この LZ 遷移確率が 0 とみなせない場合においては、擬運動量空間ではブラッグ反射による振動構造と同時に異なるバンドインデックスへの遷移が確認できる (図 3.10 (b)). 座標空間においては、上準位へと励起した成分は加速を受け続け、線形ポテンシャルが低い方向へと流され続ける。式 (40) でみたように LZ 遷移確率は線形ポテンシャルの強さおよび、バンドギャップを変更することによって、調整が可能である。極低温原子を用いた実験では、このような性質を用いて波束の分割 [66] や、特定の速度成分のみを反射する速度フィルターとしての利用が示唆されている。

これらの事実は、極低温原子系の波束操作においてブラッグ反射と LZ 遷移がそれぞれミラー、可変ビームスプリッターと言った光学素子と同様の役割を果たす事を意味している。そのため冷却原子波束の精密制御を用いた応用には欠かせない重要な技術であると考えられている。

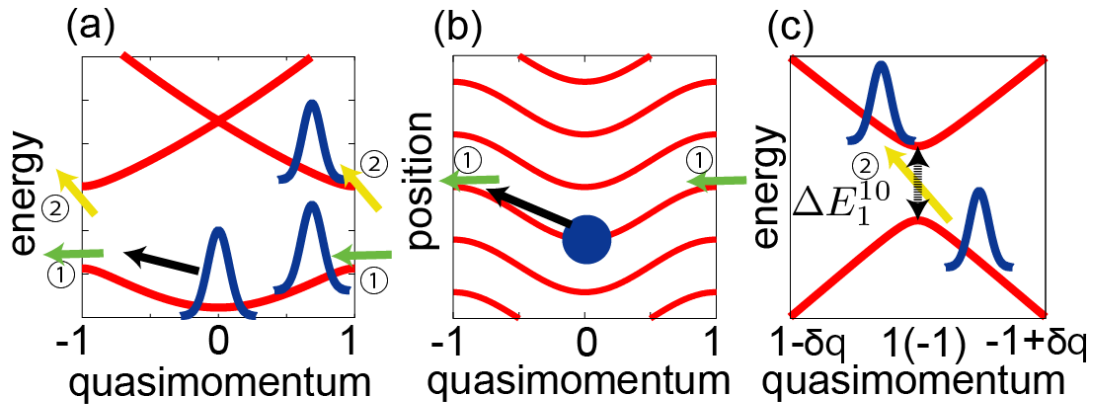


図 3.9 1次元周期ポテンシャルに線形ポテンシャルが加わった場合のガウス波束の運動の概念図。基底バンド、擬運動量  $q = 0$  を中心としたガウス波束を初期条件とする。(a),(c) では原子集団 (青いガウス波束) の運動を擬運動量空間で、(b) では原子集団 (青い丸) の運動を位相空間で表示している。(a) 波束は線形ポテンシャルの影響を受け、擬運動量  $q = -1$  の方向へと加速される。バンド境界では (b) ブラッグ反射によって同じバンドに留まる、もしくは (c) ランダウツェナー遷移によって異なるバンドへと遷移する。

### 3.3 調和ポテンシャルを含んだ場合の固有関数

この節では、周期ポテンシャルと調和トラップの組み合わせが作る静的な 1 粒子固有関数について議論する。極低温原子系の実験においては、ある特定の超微細構造準位を持つ原子が、電場もしくは磁場による調和トラップおよび光格子へと閉じ込められている系に相当する。このような複合系の理論的な考察は、一つの光格子サイトに一つの原子を欠損なく充填する手法の研究 [16] に端を発し、現在までに様々な理論研究が行われている。特

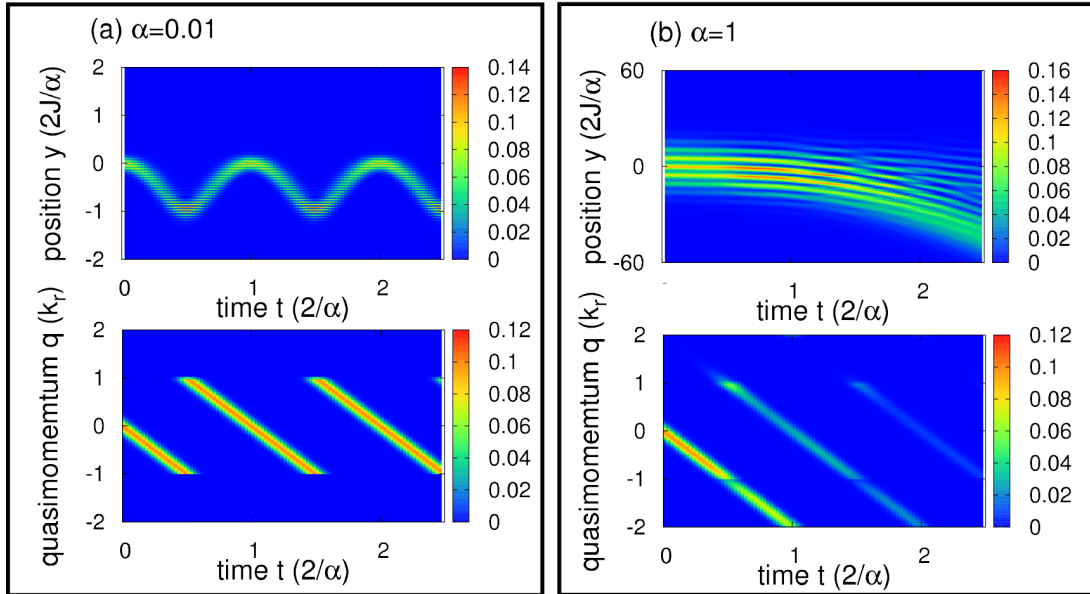


図 3.10 1次元周期ポテンシャルに線形ポテンシャルが加わった場合のガウス波束の運動. 基底バンド, 擬運動量  $q = 0$  を中心としたガウス波束を初期条件とした場合の数値シミュレーションの結果. ここで時刻  $t$  は周期  $2/\alpha$  で, 位置  $y$  は  $2J/\alpha$  でスケールしている. (a) 線形ポテンシャルの強さ  $\alpha = 0.01$  の場合. ブラッグ反射が支配的であり, 周期  $2/\alpha$  で基底バンドを運動している. (b) 線形ポテンシャルの強さ  $\alpha = 1$  の場合. ランダウツェナー遷移が支配的であり, 波束が基底バンドと第1バンドの境界に到達したとき遷移が起こる.

に, 参考文献 [14, 54, 67] では低エネルギー領域 (強束縛近似が良く成り立つ領域) の詳細な研究が行われている. (より具体的な内容については参考文献を参照のこと.) 本論文における研究では空間分布および擬運動量状態へのマップを基に解析する. この解析のために固有状態の詳細な情報を必要としない. しかしながらダイナミクスの出発点である基底状態および, 固有関数の情報は本論文の議論を行う上で非常に有用なものである.

調和ポテンシャルを含んだ場合のハミルトニアン  $H$  は, 式 (18) で与えられるここで  $\nu = m\omega_0^2/2E_r k_r^2$  は調和トラップの強さである. ここでは Aarhus 大学で行われた実験のパラメーターを用いて, ハミルトニアン  $H$  に対する時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$H\chi_k = E_k\chi_k, \quad (41)$$

の固有関数  $\chi_k$  と固有エネルギー  $E_k$  について考察する. 本論文の主な研究対象である光格子振幅変調による励起波束生成の実験は, Hamburg 大学においてもフェルミ原子を用いて行われている [19]. Aarhus 大学の実験パラメーターと Hambrug 大学の実験パラメーターは同程度のオーダーであり (表 1, 数値計算のために換算されたパラメーターも同時に表示している. ただし Hamburg のグループでは  $\omega_0$  と  $s$  について変化させた場合の実験について行っているため代表的なものを表示している.), 本論文での議論はそのまま



Hamburg 大学の実験へと適用可能である。また固有関数を求める数値計算の手法として Fourier Grid Hamiltonian 法を用いた [68]。詳細は付録 B を参考のこと。

表 1 Aarhus 大学 [17, 69] および Hamburg 大学 [19] の実験パラメーター。数値計算に必要な変換後のパラメーターも同時に表記した。Hamburg の実験では、格子振幅、調和トラップの周波数を変化させているため、代表的なものをここに記した。

Experimental parameters(Aarhus)				Converted parameters		
$\lambda$	$m$ ( $^{87}\text{Rb}$ )	$\omega_0$	$E_r$	$s$	$\nu$	$J$
914 nm	$1.44 \times 10^{-25}$ kg	$40.6 \times 2\pi\text{Hz}$	$1.81 \times 10^{-30}$ J	$16 E_r$	$5.51 \times 10^{-5} E_r$	$6.06 \times 10^{-3} E_r$
Experimental parameters(Hamburg)				Converted parameters		
$\lambda$	$m$ ( $^{40}\text{K}$ )	$\omega_0$	$E_r$	$s$	$\nu$	$J$
1030 nm	$6.64 \times 10^{-26}$ kg	$50.0 \times 2\pi\text{Hz}$	$3.12 \times 10^{-30}$ J	$10 E_r$	$2.83 \times 10^{-5} E_r$	$2.27 \times 10^{-2} E_r$

図 3.11(a) は光格子 + 調和トラップの空間での固有関数の存在確率密度を固有エネルギーの関数として表示したものである。濃い赤の部分は存在確率密度が高い部分に、白い部分は低い部分に対応している。位置  $y = 0$  は調和トラップ中心であり、基底状態に近いエネルギー状態はこのトラップ中心に集中している。固有エネルギーが高くなると、トラップ中心に存在確率密度はなくなり (バンド構造のエネルギーギャップ、禁制帯領域に相当する)、トラップ中心以外に局在した状態が現れる。しかしさらにエネルギーが高くなると、再びトラップ中心に固有関数が現れはじめる。位置  $y = 0$  に焦点を当てると、存在確率密度は調和トラップが無い場合のバンド構造に対応していることが見て取れる (図 3.11(b))。

複合ポテンシャル系の先行研究 [14, 54, 67] においては強束縛近似、単一バンド近似を適用したハバード模型での表現を用いて低エネルギーでの固有関数および固有エネルギーの考察を行っている。ここでも先行研究に倣って、低エネルギー側での構造を見る。先行研究と同様に強束縛近似と単一バンド近似を適用すると、第二量子化表示を用いた基底バンドに対するハミルトニアンは

$$H_{\text{TB}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) + \nu \pi^2 \sum_j j^2 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (42)$$

で表される。 $\hat{a}_j^\dagger$  ( $\hat{a}_j$ ) は生成 (消滅) 演算子、右辺最後の項は調和トラップ項 (オンサイト項) であり、 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  ( $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i$ ) 項は  $i$  サイトと  $j$  サイト間のトンネリング (ホッピング項) を表している。ここでは再隣接近似を適用し、サイト  $j$  からはサイト  $j+1$  もしくは  $j-1$  のみにしかトンネルしない場合に制限する。一粒子状態の場合の展開基底は、光格子サイトを  $-j_{\text{max}}$  番目から  $j_{\text{max}}$  番目までに制限すると、

$$\begin{cases} |1\rangle_{-j_{\text{max}}} |0\rangle_{-j_{\text{max}}+1} \cdots |0\rangle_{j_{\text{max}}-1} |0\rangle_{j_{\text{max}}} \\ |0\rangle_{-j_{\text{max}}} |1\rangle_{-j_{\text{max}}+1} \cdots |0\rangle_{j_{\text{max}}-1} |0\rangle_{j_{\text{max}}} \\ \vdots \\ |0\rangle_{-j_{\text{max}}} |0\rangle_{-j_{\text{max}}+1} \cdots |0\rangle_{j_{\text{max}}-1} |1\rangle_{j_{\text{max}}} \end{cases} \quad (43)$$

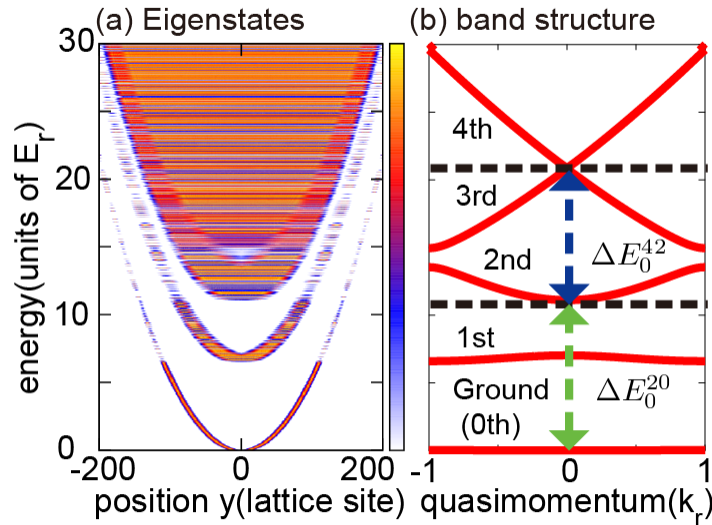


図 3.11 (a) 光格子 + 調和トラップ系の位置空間での固有関数の確率密度  $|\chi_k(y)|^2$ . 横軸は位置, 縦軸は固有エネルギーであり, 濃い赤の部分は存在確率密度が高い部分に, 白い部分は低い部分に対応している. ただし確率密度はログスケールでプロットしてある. (b) 対応するバンド構造.

で表される.  $|1\rangle_j$  ( $|0\rangle_j$ ) は  $j$  番目のサイトに 1 個 (0 個) の粒子があるというフォック状態 (Fock state, 個数表示) である. 例として  $j_{max} = 1$ , つまり 3 格子のみを考える場合の展開基底の概念図を例示している. この基底関数は先に説明したワニエ関数 (式 (32)) を用いると,  $\{w_{-j_{max}}, w_{-j_{max}+1}, \dots, w_{j_{max}-1}, w_{j_{max}}\}$  に対応している. またサイトインデックスを省略して, 単純に  $|10 \cdot \cdot 00\rangle, |01 \cdot \cdot 00\rangle, \dots, |00 \cdot \cdot 10\rangle, |00 \cdot \cdot 01\rangle$  などと表記されることも多い.

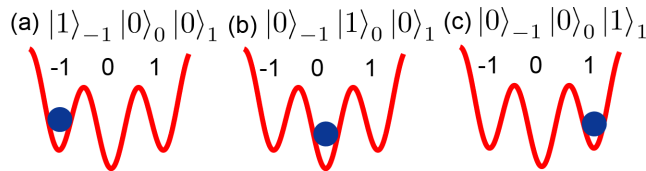


図 3.12 フォック状態の基底関数の概念図. 3 格子に制約した場合, 基底関数は (a)  $j = -1$ , (b)  $j = 0$ , (c)  $j = 1$  にそれぞれ 1 粒子がある状態に対応する.

まずはこのハミルトニアンによって与えられる固有状態について簡単な考察をする. このハミルトニアンはジョセフソン素子のアレーとして見るができる. 例えば, 隣接している二項のみ (いわゆる二重井戸型ポテンシャルの場合, ここではサイトインデックス

$j, j+1$  のみ考慮する) を取り出してみると, ハミルトニアンは

$$H_{JJ} = -J(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j) + \nu\pi^2 j^2 \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \nu\pi^2 (j+1)^2 \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_{j+1} \quad (44)$$

となり, 基底関数は  $|1\rangle_j |0\rangle_{j+1}$  と  $|0\rangle_j |1\rangle_{j+1}$  の二つ, もしくはワニエ関数による表示では  $w_j^0$  と  $w_{j+1}^0$  である. このハミルトニアンとフォック状態による基底を用いて, トンネル項が主な場合, 調和ポテンシャル項が主な場合の二つの極限について考察する.

まずトンネル項が主な場合, 条件として  $\nu \ll J$  もしくは  $|j| \ll \frac{J}{2\pi^2\nu}$  について考える (図.3.13(a),(b), ここでは  $j = 0$  に設定している). この場合では式 (44) の右辺第二項は無視する事が出来る. この条件は, 同じ深さの井戸型ポテンシャルが並んでいる状況と同じであり, それぞれの井戸の基底エネルギーは縮退しているため, トンネルリング項  $J$  がある場合には, 二つの状態に分裂する. それぞれの状態はワニエ関数の表示を用いて, エネルギー  $-J$  (基底状態) に対応する  $\phi_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(w_j^0 + w_{j+1}^0)$  と, エネルギー  $+J$  (励起状態) に対応する  $\phi_e = \frac{1}{\sqrt{2}}(w_j^0 - w_{j+1}^0)$  と表現される. これは初期状態にそれぞれのサイトインデックス  $j, j+1$  の間でポピュレーションの差があった場合, ポピュレーションの移動 (ポピュレーションカレント) が発生することを意味している. それぞれのサイトのポピュレーションの時間変化について, ワニエ関数による表現と固有状態による表現を用いて考察する. ここでそれぞれのサイトのポピュレーションを  $P_j, P_{j+1}$  ( $P_j + P_{j+1} = 1, P_j, P_{j+1}$  はそれぞれ実数にとる) と定義し, 基底状態と励起状態のポピュレーションをそれぞれ  $P_e, P_g$  ( $P_e + P_g = 1, P_e, P_g$  はそれぞれ実数にとる) と定義する. この系において時間に依存する波動関数は, 固有状態の表現を用いて  $\psi(t) = \sqrt{P_g(t=0)}e^{-iJt}\phi_g + \sqrt{P_e(t=0)}e^{iJt}\phi_e$  で表される. つまり, 固有状態による表示においては  $P_g, P_e$  は時間変化が起こらない. しかしこの固有状態による表示からワニエ関数による表示へと移ると, サイトインデックス  $j$  のポピュレーションは  $\frac{1}{2} + \sqrt{P_e P_g} \sin 2Jt$  となる. つまり初期状態として基底状態, 励起状態どちらか一方でない場合 ( $P_e$  もしくは  $P_g$  が時刻  $t = 0$  でゼロでない場合), ポピュレーションが振動数  $2J$  で振動する. このような振動は, 弱く結合した超伝導体間に電圧をかけた場合にある周波数で振動電流が発生する現象, ジョセフソン振動との類似性から同じ術後を用いている. ここで仔細は省くが, 参考文献 [3] においては, 原子間相互作用, そして位相差が存在する場合についても考察している.

次に調和ポテンシャル項が主な場合, 条件として  $\nu \gg J$  もしくは  $|j| \gg \frac{J}{2\pi^2\nu}$  について考える (図 3.13(c),(d)). この場合では式 (44) の右辺第一項は無視する事が出来る. この条件は深さの異なる井戸型ポテンシャルが並んでいる状況であり, それぞれの井戸の基底エネルギーは縮退していない. 同様にして, サイトインデックス  $j, j+1$  のワニエ関数について考えると, それぞれ固有エネルギー  $\nu\pi^2 j^2$  に対応する  $\phi_g = w_j^0(y)$ , 固有エネルギー  $\nu\pi^2 (j+1)^2$  に対応する  $\phi_e = w_{j+1}^0(y)$  の固有状態で表現される. つまりこの二つのワニエ関数の間にカップリングが存在せず, それぞれの空間的局在状態が固有関数となる. これが後述する空間的局在状態の物理的な起源となっている.

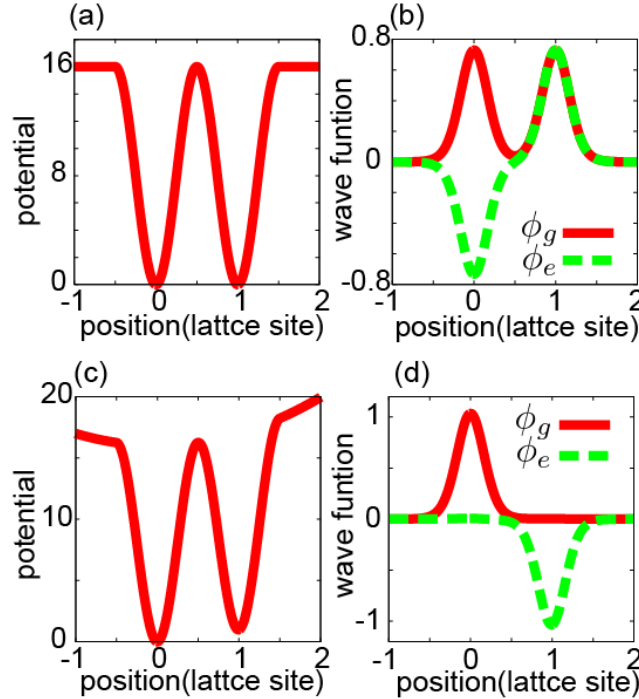


図 3.13 二重井戸型ポテンシャルの固有関数. ここではサイトインデックスが 0,1 に固定した. (a),(c) はポテンシャルの形状,(b),(d) はそれぞれの固有関数を示している. (a) の場合は調和トラップ項  $\nu = 0$ , (c) の場合は  $\nu = 0.1$  とした.

ここで元のハミルトニアン式 (42) に戻って固有エネルギー、固有状態の議論へと移る. このハミルトニアンに対しても式 (29) と同様の近似が適用できる. 結果としてこのハミルトニアンが与える固有エネルギーは近似的に

$$E_k \simeq -2J + 2\sqrt{\nu\pi^2}J(k + 1/2), \quad (45)$$

であり, 固有関数  $\chi_k(y)$  は基底バンドのワニエ関数  $w_j^0(y)$  を用いて,

$$\chi_k(y) \simeq N_k \sum_j e^{-\zeta_j^2/2} H_k(\zeta_j) w_j^0(y), \quad (46)$$

で与えられる. ここで  $N_k$  は規格化定数,  $\zeta_j = j(J/\nu\pi^2)^{1/4}$ ,  $H_k$  は  $k$  番目のエルミート多項式である [67]. 図 3.14 は基底から第 3 励起状態までの固有関数を示している. 式 (46) に従ってワニエ関数がガウシアンとエルミート多項式の積で表される包絡線に沿って表されている.

この固有エネルギーと固有関数の近似表現は, 固有エネルギーが基底バンドの最大エネルギー  $E_1^0 = 2.42 \times 10^{-2}$  を越えたところで崩れ始める. これよりも高いエネルギー領域では, 調和トラップ中心に振幅を持たない, 調和トラップ中心以外に局在する固有関数が現れる. この領域では, 式 (42) 中の再隣接項間でのトンネリングは無視できる. 図 3.15 では調和トラップ中心以外に局在する固有関数の例 (第 216 および 215 励起状態) を示している. それぞれ (a) 全体図,(b) 位置  $y = -110$  付近での固有関数,(c) 位置  $y = +110$  付近

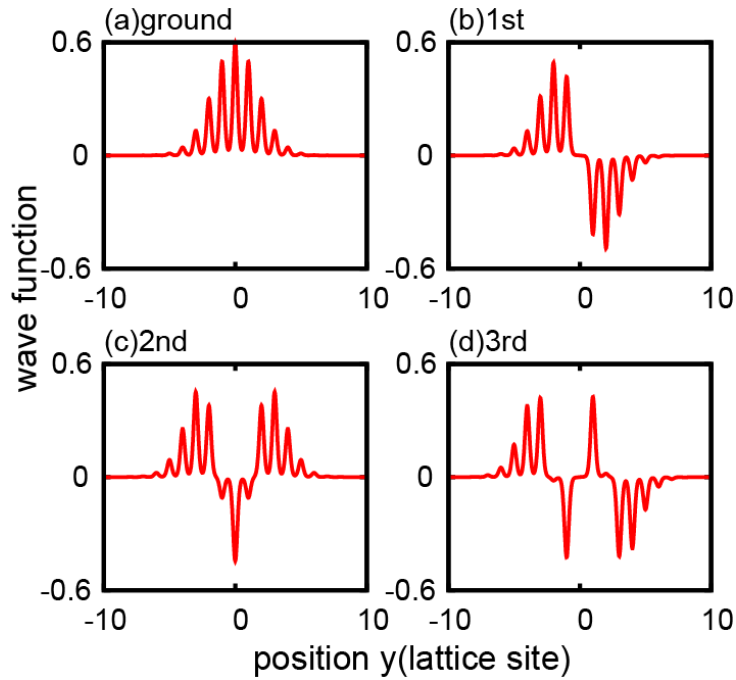


図 3.14 基底, 第 1 励起, 第 2 励起, 第 3 励起状態の固有関数.

での固有関数を表している. この状態はある特定の位置  $y' = 108$ (lattice site) 近辺のワニエ状態および位置  $-y' = -108$ (lattice site) 近辺のワニエ状態によって構成される状態がほぼ縮退した形で表れている. (本論文で行った数値計算上ではこの差異は区別できない. 詳細な議論は付録 B を参照.) 近似を用いたハバード模型 (式 (42)) を用いると, このエネルギー領域では特定のサイトインデックス  $j$  と  $-j$  のエネルギーは近似的に  $\nu\pi^2 j^2$  で表され, エネルギーが縮退しているため, 固有状態はペアで現れる (図 3.15).

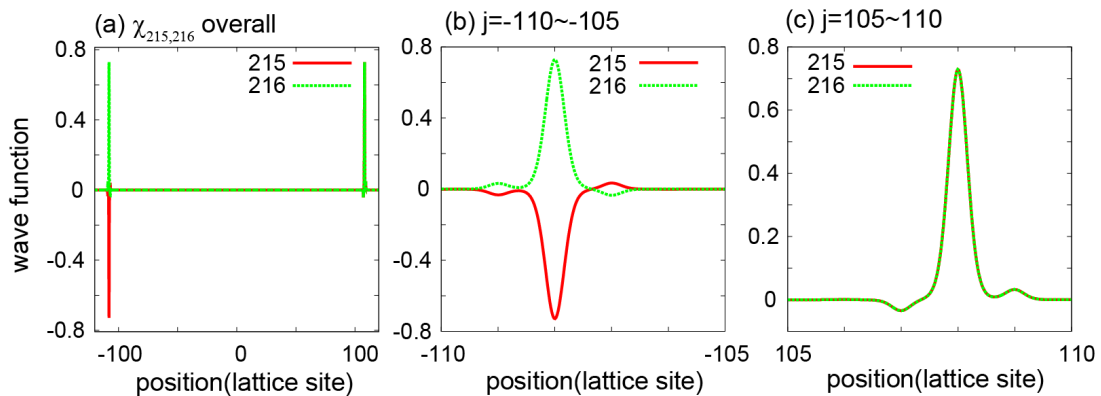


図 3.15 調和トラップ中心以外に局在する固有関数 (第 215 および 216 励起状態) の例. (a) と (c) は局在した位置近傍, (b) は全体を俯瞰した図.

このような構造は固有エネルギーが第一バンドの最低エネルギー  $E_1^1 = 6.6$  に等しくなるまで現れる. エネルギーが第 1 バンドの底に到達したとき, 基底バンドと同様に調和ト

ラップ中心に局在した固有関数が現れる。この領域での固有関数は基底バンドと異なり、第1励起バンドのワニエ関数  $w_j^1(y)$  で構成されている。確認のためにはこれらの固有関数がどのバンドインデックスのプロッホ関数を含んでいるかを見る必要がある。固有関数 (図 3.16, および 3.17(a)) に対して擬運動量分布 (図 3.16, および 3.17(b)) をプロットした。擬運動量は拡張ゾーン形式で表示している。それぞれ, 図 3.16 は固有エネルギーが 0 から 0.2 までの固有関数の密度分布, 図 3.17 は固有エネルギーが 6.6 から 7.9 までの固有関数の密度分布である。赤は密度の高い部分, 青は密度の低い部分に対応している。基底状態に近いエネルギー領域 ((a),(c)) では, 固有関数は基底バンドの固有状態のみ含んでいる。また基底バンドに対応するエネルギー領域では擬運動量分布もまたバンド構造と似た構造を持って現れる。基底バンドのエネルギーよりも高い領域では, 固有関数はワニエ関数に対応するために, 擬運動量分布は擬運動量  $-1$  から  $1$  の全体に分布している。固有エネルギーが第1バンドの底から上の領域 (図 3.17, エネルギーが 6.6 以上) では, トラップ中心に現れる固有関数は擬運動量が  $q = -2$  から  $-1$  と  $1$  から  $2$  の間に分布する。また位置  $y = 100$  (もしくは  $-100$ ) 近辺に現れる, 成分は基底バンドに対応するものであり, 図 3.17(b) 中の擬運動量  $q = -1$  から  $1$  の成分に対応する。

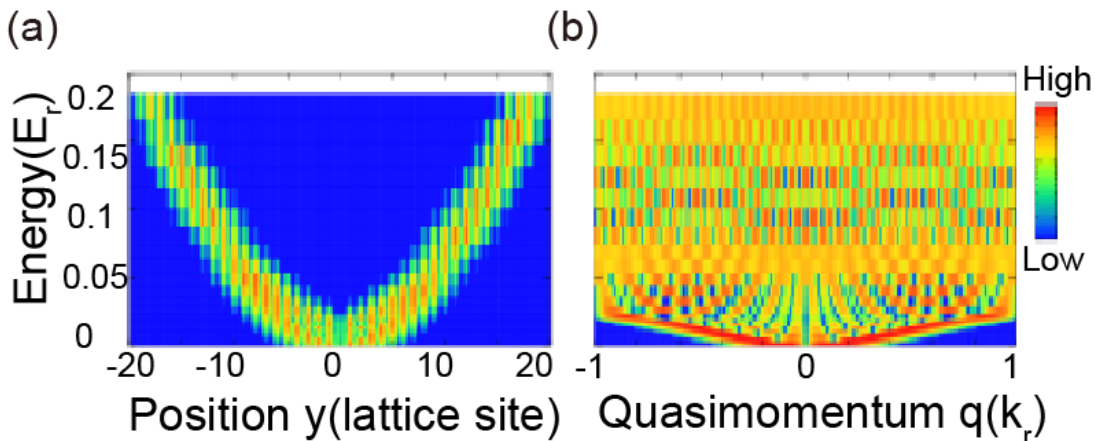


図 3.16 低エネルギー側の光格子 + 調和トラップ系の固有状態。固有エネルギー 0 から 0.2 までの (a) 位置空間および (b) 擬運動量空間での密度分布  $|\chi|^2$ 。擬運動量は拡張ゾーン形式で表示している。対応する擬運動量空間の分布は基底バンド  $n = 0$  成分のみを含む。

固有状態はこのような構造が繰り返し現れる。強束縛模型と単一バンド近似を基に, 固有状態を考察してきたが, この模型は基底バンドの成分のみが含まれる領域のみで有効である。なぜならば格子振幅と比べて高いエネルギー領域においては, 強束縛の条件が満たされなくなるためである。また同時に, 固有関数をプロッホ状態で展開すれば様々なバンドの成分が含まれるため, 単一バンド近似も有効でなくなる。図 3.18 には光格子振幅  $s = 16$  よりも高いエネルギーである固有エネルギー 19.40 をもつ第 1123 番目の固有状態を表示している。この固有状態は第 2 バンドの固有状態と第 3 バンドの固有状態の混合状

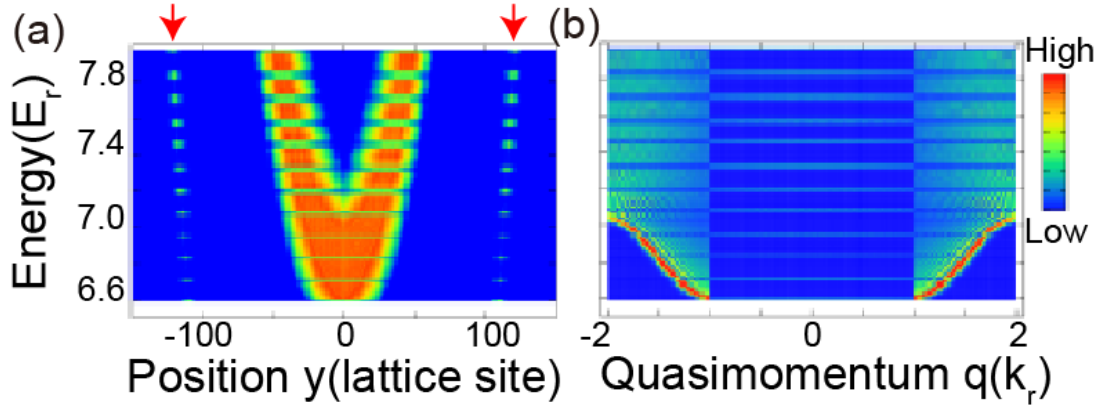


図 3.17 低エネルギー側の光格子 + 調和トラップ系の固有状態. 固有エネルギー 6.6(第 1 バンドの最低エネルギー) から 7.9(第 2 バンドの最低エネルギー) までの位置空間および擬運動量空間での密度分布を示している. 図 3.16 は基底バンドの成分のみが含まれているが, 6.6 から 7.9 のエネルギー領域では, 基底バンドと第 1 バンドの成分が含まれている. 赤矢印で示した, サイトインデックス  $\pm 100$  付近に局在している固有状態は, 基底バンドの成分によって構成されている. 第 1 バンドの最低エネルギーよりも高いエネルギー領域では, 固有状態を一つのバンドインデックスで対応付けて考える事が出来なくなる.

態である. 波動関数全体を見ると, 位置が  $\pm 100$  格子サイトの付近で振幅が小さくなっており, この付近が第 3 バンドの成分と第 2 バンドの成分の境界になっている. 図 3.18(b) はサイトインデックス  $j = -123$  を拡大したものである.  $j = -123$  の単一サイトで波動関数の節の数 (ゼロ点を横切る回数) は二つであり, 波動関数は第 2 バンドのワニエ関数で表現されることがわかる. 図 3.18(c) はサイトインデックス  $j = 0$  を拡大したものであり, (b) 波動関数は第 3 バンドのワニエ関数で表現される. 高エネルギー領域ではこのような複数のバンドの成分が含まれた固有状態が出現するため, ダイナミクスは単一バンド近似で表現不可能となる.

この後の議論において, 固有関数の解析は重要な情報を与える. 特に系の基底状態は調和トラップの中心に局在している. また調和トラップ中心付近では, (調和トラップが均一であると見た場合に) 周期ポテンシャルによって与えられるバンド構造と同じエネルギー構造を持つことが分かる. この事実は時間に依存する問題へと拡張された場合においても, 波動関数が調和トラップ中心にいる限りにおいては調和トラップは均一であると考えてよいことを示している. 第 5 章では光格子振幅変調による励起過程を考えるが, この事実に基づいて調和トラップがダイナミクスに与える影響を含まない模型を用いて議論を展開する.

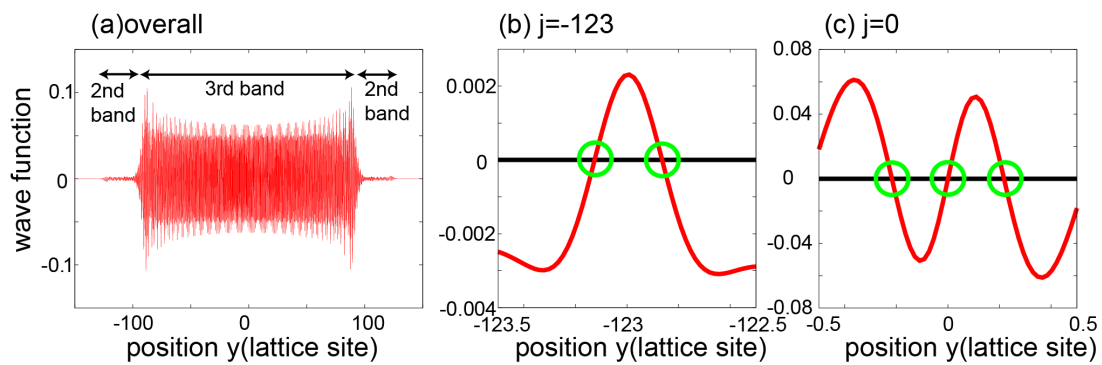


図 3.18 1123 番目の固有状態. 固有エネルギーは 19.40. それぞれ (a) 固有状態の全体像, (b) サイトインデックス  $j = -123$  での固有関数, (c) サイトインデックス  $j = 0$  での固有関数を示している. (b) では固有状態の節は二つ, つまり第 2 バンドのワニエ関数で表現されるが, (c) では三つ, 第 3 バンドのワニエ関数で表現される. これらの関数の境界はサイトインデックス  $\pm 100$  付近, (a) において固有関数の急激な減少が現れる点に対応している.



## 4 光格子振幅変調を用いた局在波束の生成

極低温冷却原子の実験的生成, 特にボーズ・アインシュタイン凝縮体 (BEC) の生成以降, 基礎および応用について様々な研究が実験理論の両面から行われてきた. 近年では特に光格子によって生成される周期トラップ系との組み合わせによって, 物性のシミュレーションや量子デバイスへの応用へと向けた研究が行われている. このような応用について多く研究が成されている理由として, 電子単体と異なり原子は多くの自由度を持ち, かつ状態の精密な操作が可能であることが挙げられる. 自由度には電子状態などの内部の自由度と原子の重心運動が存在する. 内部の自由度については, レーザー光の照射による電子励起や高周波 (rf, radio frequency) による超微細構造状態の変化等が挙げられる. 特に重要な点は, Fano-Feshbach 共鳴によって原子間の相互作用の強さを操作可能な事である. 相互作用を操作する事で, 極低温原子対から極低温分子を生成したり, また相互作用がゼロの系が実験的に実現可能である. 重心運動の操作については, トラップ全体をゆする, 瞬時に切り替える等の操作で, 重心運動量を変化させることができる. 光格子中の冷却原子系では, 代表的なものとして光格子位相変調そして光格子振幅変調の二種類が挙げられる. 位相変調は実験においては (たとえば式 (42)) ホッピングパラメーター  $J$  を時間変化させるものとして用いられている. 一方振幅変調は異なるバンド間での結合, つまりバンド間遷移を誘起するものとしての利用が多い. BEC の実験的生成後すぐに, 光格子によって周期トラップ系への極低温ボーズ原子をローディングする試みが行われた. このようにして光格子振幅変調による励起過程の基礎研究が開始された.

近年では振幅変調によるバンド間遷移を用いた実験が Hamburg 大学 [19, 70] のグループと Aarhus 大学 [17, 69] のグループで行われた. Hamburg 大学ではフェルミオンの  $^{40}\text{K}$  が Aarhus 大学ではボゾンの  $^{87}\text{Rb}$  が用いられた. 各々, 振幅変調によって励起された原子集団のダイナミクスについて実験的観測を行っている. Aarhus 大学の実験では, 振幅変調後に波束の移動を待ち, その後再び振幅変調を用い, 脱励起過程を起こさせて, 空間的局在状態の生成に成功している. このような局在状態は, 量子レジスタリングへの応用が示唆されて [16] あり, 量子情報への応用上重要な存在であると考えられている. 近年ではバンドマッピングによる擬運動量状態観測手法の精度向上や (<http://photon.physnet.uni-hamburg.de/en/ilp/hemmerich/>), ファラデー回転を用いた座標空間での In-situ イメージング法の確立など, 実験手法の向上もあり高い分解能での観測が容易となった. しかしながら理論面での研究は未だに少ない.

このような周期ポテンシャル系の理論研究においては, 多くの場合について非常に有用な強束縛モデルによる考察が多くなされてきた. しかし Aarhus グループの実験においては, 光格子振幅変調で作り出す励起波束は強束縛近似が適用不可能な領域にある. そこで本論文では, 光格子振幅変調が作り出す励起波束のダイナミクスについて, 数値シミュレーションを用いた理論的解析を行う. 本論文では, 基底 6 万個を用いた数値シミュレーションを

用いており,このような大規模な数値シミュレーションによる解析は初の試みである. 振幅変調による励起過程と励起後(振幅変調のない)の波束のダイナミクスの二つに分けて考察する. まず初めに実験の概略を説明したのち,励起過程,励起波束の運動の理論的解析を説明する.

#### 4.1 Aarhus グループの実験

Aarhus グループの実験ではまず初めに調和トラップに  $^{87}\text{Rb}$  の BEC を生成したのち,1次元光格子振幅を BEC に熱を与えないように徐々に掃引(断熱的掃引)して初期状態を用意する. 最初に用意された BEC の原子数はおよそ  $10^5$  個であり,原子はすべて  $5^2S_{1/2}|F=2, m_F=2\rangle$  状態に揃っている. 用意された磁気調和トラップは  $\omega_a = 2\pi \times 12.2 \text{ Hz}$ ,  $\omega_r = 2\pi \times 40.6 \text{ Hz}$  であり,光格子の波長は 914 nm である. ここで光格子は磁気調和トラップの動径方向を向いている. 光格子は断熱的に掃引されているため,初期状態の BEC は光格子 + 調和トラップの基底状態にあることが期待される. このような初期状態に対して,光格子振幅変調を行って励起波束を生成する. このときの光格子方向の1次元ハミルトニアンは通常単位系で,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_r x) [1 + \epsilon_0 \cos(\omega' t')] + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (47)$$

と与えられる. ここで  $m$  は原子の質量  $V_0$  は光格子の高さ,  $\omega_0$  は調和トラップの周波数,  $\omega'$  は光格子振幅変調の周波数,  $\epsilon_0$  は振幅変調の強度である. 前章と同様にここでも,スケールの変換,位置座標  $y = k_r x$ , 時間  $t = t' E_r / \hbar$ , 格子高さ  $s = V_0 / E_r$ , 調和トラップパラメーター  $\nu = m \omega_0^2 / 2 E_r k_r^2$ , 振幅変調の励起エネルギー  $E_\omega = \hbar \omega' / E_r$  を用いて,

$$H(t) = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + s \sin^2(y) [1 + \epsilon_0 \cos(E_\omega t)] + \nu y^2 = H_0 + s \sin^2(y) \epsilon_0 \cos(E_\omega t) + \nu y^2, \quad (48)$$

と表現されるハミルトニアンについて考える. 問題は時刻  $t = 0$  での波動関数  $\Psi(y, 0)$  が時間依存シュレディンガー方程式

$$i \frac{d}{dt} \Psi(y, t) = H(t) \Psi(y, t) \quad (49)$$

に従って時間発展した場合の時刻  $t$  での波動関数を求めることにある.

まずは光格子振幅変調による原子の重心運動の励起過程について考察する. 図 4.2 中の赤線(垂直の破線)は励起プロセスを示している. 実験ではエネルギー差の半分に相当する励起周波数を用いて,基底状態から第4バンドの最低エネルギー付近へと励起を行っている. 光格子振幅変調がエネルギーバンド図内で垂直である理由は摂動論によって考察できる. この系の時間に依存する波動関数はブロッホ状態による展開を用いて

$$\Psi(y, t) = \sum_{n,q} C_Q^n(q, t) \phi_q^n(y), \quad (50)$$

と表示できる. この表示において光格子振幅変調は異なるブロッホ状態間の結合項を与えることとなる. 調和トラップはゆるやかに変化するので局所的に一定とみて, ハミルトニアンを  $H = H_0 + H' = H_0 + \epsilon_0 s \sin^2(y) \cos(E_\omega t)$  と表現しなおす. ここで, 無摂動ハミルトニアンは  $H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial y^2} + s \sin^2(y)$  (式(20)) であるから,  $s \sin^2(y) = H_0 + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  となる. この関係式を用いると摂動項は  $H' = \epsilon_0 \left\{ H_0 + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} \cos(E_\omega t)$  と表現される. これを基に時間依存項  $\cos(E_\omega t)$  を除いた異なるブロッホ状態間の結合項を計算すると

$$\begin{aligned}
\Omega_{nm}(q, q') &= \epsilon_0 s \langle \phi_{q'}^m | \sin^2(y) | \phi_q^n \rangle \\
&= \epsilon_0 \langle \phi_{q'}^m | \left\{ H_0 + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} | \phi_q^n \rangle \\
&= \epsilon_0 \langle \phi_{q'}^m | \frac{\partial^2}{\partial y^2} | \phi_q^n \rangle \\
&= \epsilon_0 \left[ \sum_{K'} C_B^m(K', q') (q + 2K)^2 \sum_K C_B^n(K, q) \right] \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\{q-q'+2K-2K'\}y} dy \\
&= \epsilon_0 \left[ \sum_K C_B^m(K, q) C_B^n(K, q) (q + 2K)^2 \right] \delta_{q, q'} \quad (51)
\end{aligned}$$

となる. ここで  $\delta$  はクロネッカーのデルタである. (これは回転波近似を適用した場合に相当する. 詳しくは Appendix) この項  $\Omega_{nm} (n \neq m)$  は異なるバンドインデックスをもつバンド間で, 同一の擬運動量  $q$  のブロッホ状態を結びつけるが, 異なる擬運動量状態を結びつけない. つまりエネルギーバンド図において垂直遷移のみが許される. この事実はブロッホ状態および摂動項  $\sin^2(y)$  の対称性から説明する事が出来る. 摂動項は式 (23) のように  $e^{\pm 2iy}$  で表される. つまり摂動項は擬運動量が  $\pm 2$  異なる状態を結びつけることを意味している. 拡張ゾーン形式で見た場合 (図 4.1(a)), 基底バンドにある特定の擬運動量  $q$  の状態は, 遷移先のバンドインデックスが奇数の場合  $-q$  へ, 偶数の場合  $q$  へと遷移させることを示している. 擬運動量は周期的であるため, 高いバンドインデックスにおいてもこの議論は有効である. この拡張ゾーン形式の表現を還元ゾーン形式の表現へと移すと (図 4.1(b)), これは垂直遷移のみが許されていることに対応する. またバンドインデックスの組が偶数と奇数の組であっても  $\Omega_{nm}$  は 0 にならない. 何故ならば, 図 3.5 でみたとおり, ブロッホ関数は  $e^{iqy}$  の包絡線を持ち, 偶関数と奇関数の重ね合わせで表現されるためである. ただし例外は  $q = 0, \pm 1$  である. ブロッホ関数の詳細な議論については, 第 3 章を参照のこと. この項は原子や分子の二準位模型などで現れるラビ周波数に相当するものである. Aarhus 大学の実験では励起波束の原子数 (ポピュレーション) を位置座標で測定している. 参考文献 [17] によるとおおよそ 10% 程度のポピュレーションを持つ波束が生成されている. このポピュレーションは励起エネルギー  $E_\omega$  および励起時間に依存する. 実験ではおおよそ 0.5ms の励起時間でポピュレーションが飽和する事が示されている. また

飽和時間 0.5ms で固定し, 励起周波数を変更した場合の励起波束のポピュレーションについて議論している. しかしながらこのような励起過程について, 理論的に詳細な議論はなされていない. そのため次の章ではこのラビ周波数を用いたモデルと数値シミュレーションを用いて, 励起波束のポピュレーションの操作について考察する.

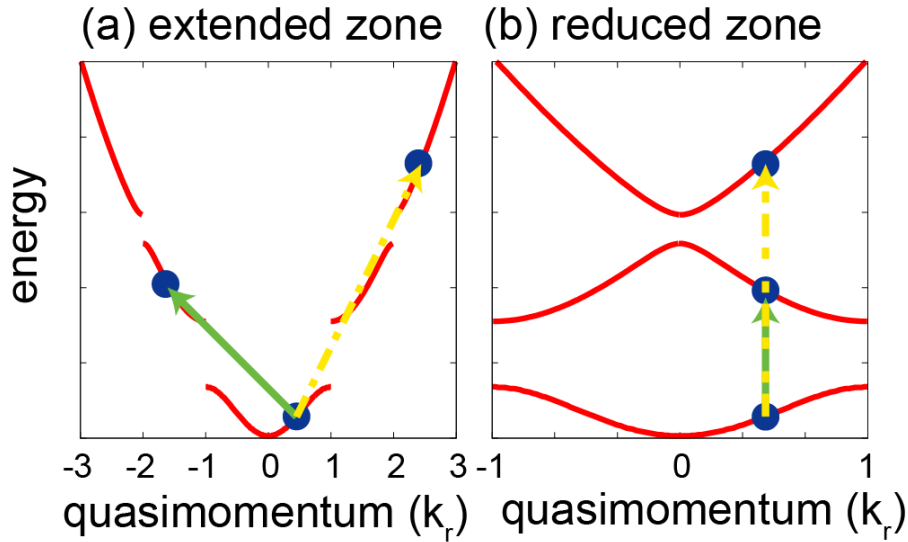


図 4.1 光格子振幅変調による励起過程の概念図. (a) 拡張ゾーン形式による表現. (b) 還元ゾーン形式による表現.

次に光格子振幅変調をとめ, 励起波束の自由時間発展を行う. 解くべき時間依存シュレディンガー方程式は, 式 (49) 中のハミルトニアン  $H(t)$  が式 (18) のハミルトニアンに変更されたものである. 図 4.2 中の青線が対応するプロセスである. 光格子振幅変調がない場合, 古典的なハミルトニアンは

$$H(y, q) = E_q^n + \nu y^2. \quad (52)$$

で与えられる. この古典的なハミルトニアンは式 (37) を求めた場合と同じ手法で求められる. 図 4.2(c) であられる黒線はこのハミルトニアンの, 位相空間上での等エネルギー線である. 自由時間発展は, 古典的にはこのハミルトニアンに従い, 等エネルギー線を時計回りになぞっていく. エネルギーバンド図 (b) においては, バンド曲線にそって運動することになる.

この古典ハミルトニアンから, 位相空間上では二つのモードが存在する事が分かる. 閉じた輪になっている状態, ダイポールモードと擬運動量の端点で反射されて振動するプロッホモードである. プロッホモードはトラップ中心  $y = 0$  を横切ることはない, つまりこの状態がトラップ中心以外に局在するモードである. Aarhus 大学の実験では, 第 4 バンドの最低エネルギーに近い状態へと励起が行われた. 図 3.17 でみたように, 波束が基底以外のバンドインデックスのプロッホ状態を含む場合には, 単一バンド近似を用いた解析では不十分である. 特に第 4 バンドと第 3 バンドのバンド境界ではバンドギャップが存在

しており,ここでの LZ 遷移確率を求める必要がある. 実験では,LZ 遷移確率は 100% であるという考察を行っているが,実際に LZ 遷移確率がどのようなパラメーター依存性を持っているかは不明である. 第 6 章では,バンドギャップによる効果を含めて古典ハミルトニアンを拡張し,励起波束の自由時間発展について古典模型との対応を見つつ,LZ 遷移の過程を詳細に調べる.

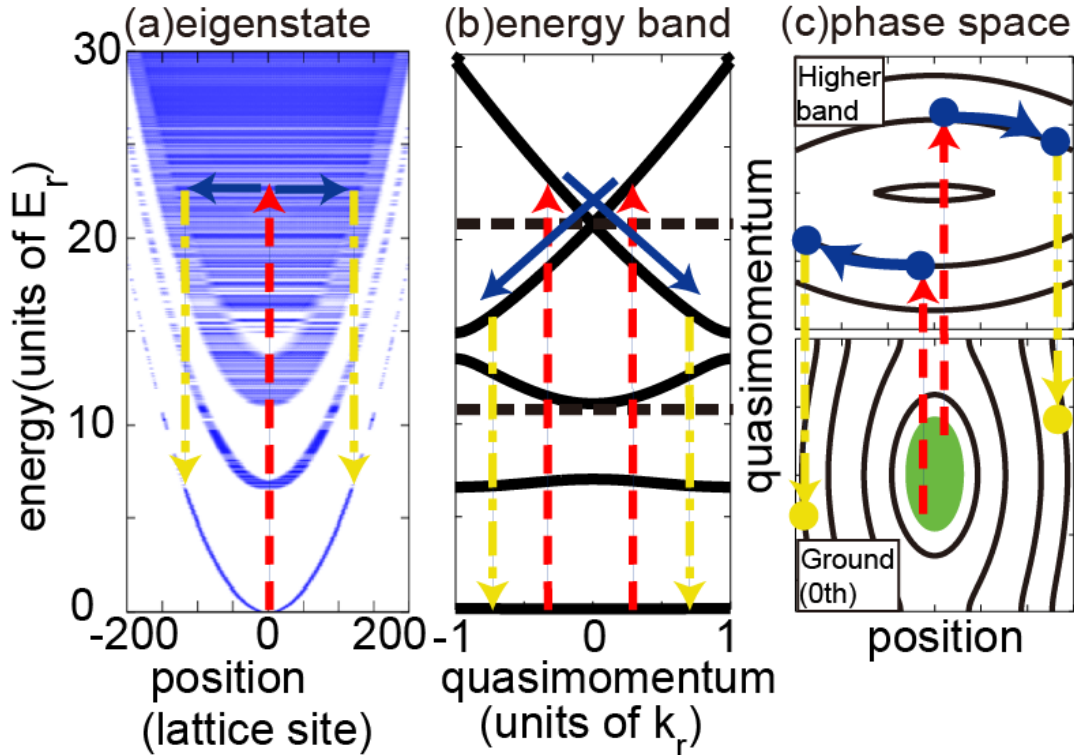


図 4.2 光格子振幅変調による局在状態生成の概念図. 上向き (赤), 下向き (黄色) の矢印はそれぞれ光格子振幅変調による励起, 脱励起プロセス. 青矢印は, 光格子振幅変調がない場合での自由時間発展. (a) 位置座標で表示した固有関数での表現. この場合自由時間発展は等エネルギーでのプロセス. (b) エネルギーバンド図での表現. 自由時間発展は, 調和トラップによるエネルギー項と擬運動量によるエネルギー項の間でエネルギーのやり取りがあるため, バンドを沿って移動する. (c) 位相空間での表現. 図中の黒い線は等エネルギー面を表示しており, 自由時間発展では粒子はこの等エネルギー面を運動する. また基底状態は位相空間の中心に存在している.

光格子振幅変調により生成された励起波束はダイポールモード中に存在している. そのため波束が望ましい擬運動量状態に来たとき, 再び光格子振幅変調を行って局在状態へと脱励起を行う (図 4.2 中の黄線). このようなプロセスで初期原子数に対して, おおよそ 10% 程度の原子を局在状態へアクセスする事が実験的に実現している. また二回目の光格子振幅変調によって再び励起する事により, より高いエネルギー状態への遷移も実現している. しかしながらこのようなプロセスの理論的研究はない. このような系を用いた応用を考える上では, 特定のバンドへの励起の最適化, および自由時間発展において波束がど

のように拡散していくかを調べることは非常に有用な事である。本論文では Aarhus 大学の実験に倣い, 第 4 バンド最低エネルギー付近への励起の最適化およびその後の自由時間発展, 特にバンドギャップによる影響がどのように現れるかを調べる。

## 5 光格子振幅変調による励起過程の理論的解析

ここでは光格子振幅変調がどのような励起もしくは脱励起過程をもたらすか、そして結果としてどのような励起波束が得られるかについて考察する。以降のパラメータは Aarhus 大学グループの実験論文 [17] と同様のもの (表 1) を用いる。通常ボーズ・アインシュタイン凝縮体 (BEC) を理論的に取り扱う場合、原子間相互作用を平均場の形 (非線形項) で取り入れた Gross-Pitaevskii 方程式 [21] が用いられる。しかしながら実験では、原子間相互作用は非常に弱く影響がないと報告されている。また光格子は 1 次元方向のみであるため、非線形項のない 1 次元の 1 粒子問題として取り扱う。本論文で設定した問題についての理論研究はまだ存在しないため、線形の問題を取り扱う事は、今後の研究における非線形項を含む問題の取扱いなどに重要な役割を果たす。

調和トラップのない場合の極低温原子の光格子振幅変調についての基礎的な実験、および理論的な考察 [9, 71] は既に行われている。異なるバンド間のプロッホ状態間でラビ振動が起こっているという事が確認された。ここでも同様にラビ振動 (付録 A を参照) を基礎とした模型計算と直接的に求めた数値計算の結果を比較しながら考察を行っていく。現在までの研究と大きく異なる点は、ラビ振動が二準位間ではなく多準位にわたるという事である。結果として、多準位のラビ振動が様々な状態を実現すると同時に、励起周波数の組み合わせが特定の状態の励起過程を増強する事実が得られる。ここではまず初めに考案した "single-Q Rabi 模型" (以降ではラビ模型と表記する) について説明し、その後単一周波数の励起過程および、二つの異なる周波数での励起過程について考察を行う。

### 5.1 single-Q Rabi 模型:調和トラップによるダイナミクスを無視した模型

前章での取り扱いと同様に、調和トラップによって誘起される原子のダイナミクスへの影響を無視し、光格子振幅変調を摂動項として取り扱う。式 (51) では結果として異なる擬運動量状態間の結合項は現れない事がわかった。ここでは波動関数をプロッホ関数で展開し、それらの係数が時間に依存するという仮定で模型を構築する。時間依存する波動関数は、

$$\psi(y, t) = \sum_{n, q} C_Q^n(q, t) \phi_q^n(y) e^{-iE_\omega t} \quad (53)$$

で与えられる。初期条件として系の基底状態をとる。基底状態の波動関数は調和トラップ中心に局在しており、擬運動量空間でも基底バンドの擬運動量  $q = 0$  を中心に局在している。最低エネルギー状態である基底状態は強束縛近似が非常に良く適用可能であり、空間 (ワニエ関数) の表現を変換して

$$\chi_0(y) \cong \frac{1}{4\sqrt{\pi\alpha}} \sum_q e^{-q^2/2\alpha} \phi_q^0(y) \quad (54)$$

で与えられる. よって初期条件は  $C_Q^0(q, 0) = Ae^{-q^2/2\alpha}$  であり, 他の係数を 0 にとる. ここで規格化定数  $A$  は  $A = 1/\sqrt{\sum_q |e^{-q^2/2\alpha}|}$  である. この条件は  $\pi^2 J/\nu \gg 1$  のもとにおいて適用可能であり, Aarhus 大学および Hamburg 大学の両実験においてこの条件を満たしている. 図 5.1 は直接数値シミュレーション (対角化, 付録 B を参照) によって得られた結果と, 近似式の結果を比較している. パラメーターは  $s = 16, \nu = 5.51 \times 10^{-5}, J = 6.06 \times 10^{-3}$  である. このパラメーター領域では, 近似式は非常に良い結果を与える.

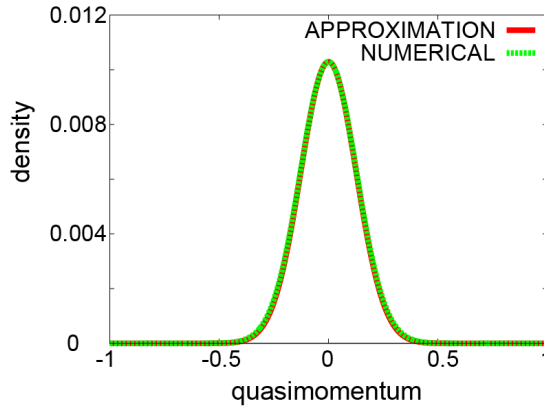


図 5.1 基底状態の擬運動量分布. 赤は近似式, 緑は数値シミュレーションによる結果.

ここでは実験と同様に第 4 バンドの底付近に励起する場合を考え, 第 5 バンド以上の成分については無視した. まずはエネルギー的にどのような励起エネルギーの場合にどのバンドの成分を考慮する必要があるかを考える. 基底, 第 4 バンド間のエネルギー差が励起エネルギーと近い場合, 必要なエネルギーは 20.93(57.2kHz) である. この場合, 考慮する必要があるバンドは基底, 第 3, 第 4 バンドである. 実験ではこのエネルギーのおよそ半分に近い励起エネルギーで第 4 バンドへ励起するプロセスを行っている. この場合第 2 バンドを経由して (実励起が伴うかは別として) 励起していると考えられる. そのため, このケースではこれらの基底, 第 2, 第 3, 第 4 バンドを考慮する必要がある.

これらのエネルギーダイアグラムと, 同一の擬運動量状態のみが結合されることを考慮すると, 回転波近似のもとで係数の時間発展は,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_Q^0(q, t) \\ C_Q^3(q, t) \\ C_Q^4(q, t) \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_{03} & \Omega_{04} \\ \Omega_{03} & -2\Delta_{03} & 0 \\ \Omega_{04} & 0 & -2\Delta_{04} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_Q^0(q, t) \\ C_Q^3(q, t) \\ C_Q^4(q, t) \end{pmatrix}, \quad (55)$$

もしくは,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C_Q^0(q, t) \\ C_Q^2(q, t) \\ C_Q^3(q, t) \\ C_Q^4(q, t) \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 2\Delta_{02} & \Omega_{02} & 0 & 0 \\ \Omega_{02} & 0 & \Omega_{23} & \Omega_{24} \\ 0 & \Omega_{23} & -2\Delta_{23} & 0 \\ 0 & \Omega_{24} & 0 & -2\Delta_{24} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_Q^0(q, t) \\ C_Q^2(q, t) \\ C_Q^3(q, t) \\ C_Q^4(q, t) \end{pmatrix}, \quad (56)$$

で与えられる. ここでラビ周波数は式 (51) で, 離調は

$$\Delta_{nm}(q, \omega) = (E_q^m - E_q^n) - E_\omega \quad (57)$$



で与えられる. ただし式 (56) では, エネルギーのゼロ点を基底状態ではなく第 2 バンドのブロッホ状態にして考えている.

次にラビ周波数について考察する. ラビ周波数はポピュレーション振動において, ポピュレーションの移動速度および最大値を与える量である. ラビ周波数はブロッホ状態のフーリエ展開係数に依存するため, 光格子振幅  $s$  に大きく依存する. 図 5.2 は擬運動量の関数でみたラビ周波数である. それぞれカップルしているバンドインデックス  $nm$  間のラビ周波数を表している. 実際には初期条件が擬運動量  $q = 0$  に局在しているため,  $q = 0$  まわりでの特徴が強く反映される. 非常に強い特徴は  $q = 0$  でバンドインデックスの組み合わせが偶数と奇数の場合においてラビ周波数が 0 になることである. 図 3.7 でみたように  $q = 0$  でブロッホ関数は, バンドインデックスが偶数 (奇数) の場合は偶関数 (奇関数) となる. そのため,  $q = 0$  ではこのような特徴が現れる. また  $s = 16$  の場合では, 基底バンド-第 2 バンド ( $\Omega_{02}$ ) に比べて基底-3,4 ( $\Omega_{03}, \Omega_{04}$ ) は小さい周波数となっている. よって第 2 バンドへの励起過程に比べて, 第 3, 第 4 バンドへの励起過程は比較的遅いプロセスが起こることが分かる. 実際の系では調和トラップの影響により異なる擬運動量状態間でのカップリングが存在する. このカップリングによって波束は時間とともに拡散していくこととなる. よって現実の系において, 位置空間および擬運動量状態で密度の高い波束を生成する場合にはラビ周波数を考慮する必要がある. また, ここで特筆すべき点はラビ周波数の値が無次元量 1 に近いオーダーとなっている事である. これは摂動論で通常取り扱われる領域とは大きく異なっており, 励起のサイクルが 10 から 20 程度で 100% の励起が達成される.

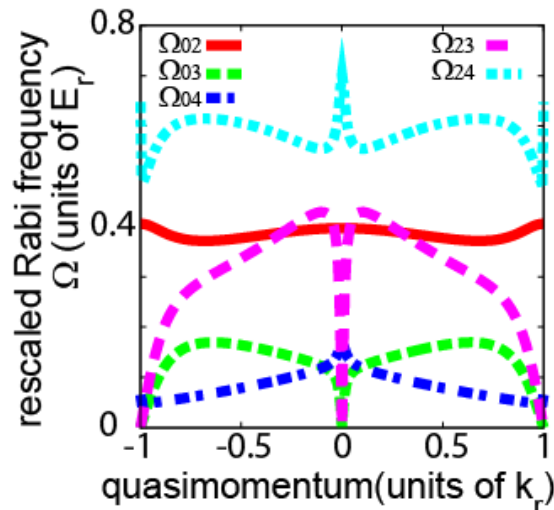


図 5.2 光格子振幅  $s = 16$ , 光格子振幅変調の強さ  $\epsilon_0 = 0.165$  の場合でのラビ周波数.

この模型で得られる一つの指標はバンドポピュレーション  $B_n(t) = \sum_q |C_Q^n(q, t)|^2$  であり, 擬運動量分布を特定のバンドインデックス  $n$  で積分したものに相当する. 例として図 5.3 に  $E_\omega = 11.35$  (実験で用いられたパラメーター) の結果について示す. 励起エネル

ギ-  $E_\omega = 11.35$  では, 基底バンドのコンポーネントは, 励起周波数  $E_\omega$  によって第 2 バンド, そして二倍の励起周波数  $2E_\omega$  によって第 4 バンドと結合している. 第 2 バンドへの励起があるためこの計算では, 式.(56) を用いた. 図の赤, 緑, 青, 紫の線はそれぞれ基底, 第 2, 第 3, 第 4 バンドのポピュレーションを示している. 結果としてダイアグラムで期待されるように基底, 第 2, 第 4 バンドでラビ振動がみられ, 第 3 バンドへの励起はほとんど起こっていない事が分かる. また時間の経過とともに, 第 2 バンドおよび第 4 バンドのピーク値は減少していく. これは複数のラビ周波数があるためにデフエーシングが起こる事に起因している.

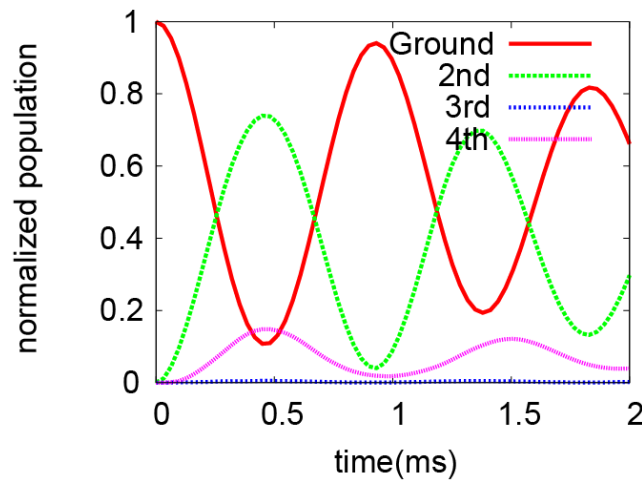


図 5.3 ラビ模型によって計算された, 励起エネルギー  $E_\omega=11.35$  におけるバンドポピュレーションの励起時間依存性. 基底, 第 2, 第 4 バンド間でラビ振動が起きている. また励起エネルギーのサイクルは  $T = 2\pi/E_\omega = 0.032ms$ , 第 3 バンドのポピュレーションはおよそ 13 サイクルで最大値に到達する.

また擬運動量空間での密度分布  $|C_Q^n(q, t)|^2$  を図 5.4 に示した. ここでは擬運動量分布は拡張ゾーン形式で表示されている. また初期条件が擬運動量空間で対称であるため擬運動量分布は常に対称である. そのためこれ以降においても擬運動量分布は擬運動量  $q$  が正の部分のみを表示することとする. 図 5.3 でみたラビ振動のピークに対応して, 擬運動量空間でも周期的な構造が現れる. どのバンドにおいても擬運動量が高い状態のポピュレーションの移動は擬運動量が低い状態においても遅れて起きている. これはそれぞれのブロッホ状態間でラビ周波数が異なるために起こる現象である. この効果に起因して, 図 5.3 に現れる, バンドポピュレーションの最大値 (もしくは最小値) の緩和が起こる.

この擬運動量空間での分布から位置座標の分布へと変換することができる (式 (32)). しかしながら座標空間での分布では波束がどのバンドに存在しているかを区別することが出来ない. そのため励起プロセスの考察においては, バンドポピュレーションと擬運動量分布を中心に議論を展開する.

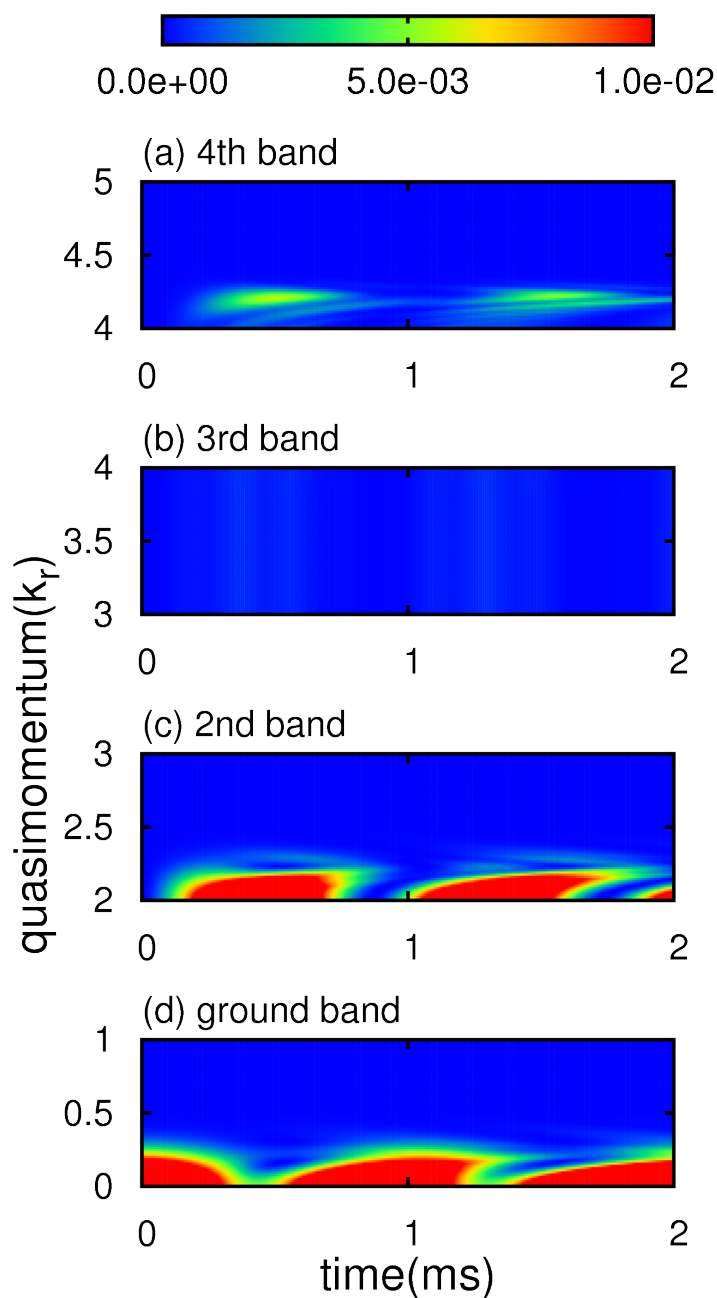


図 5.4 ラビ模型によって計算された, 励起エネルギー  $E_\omega=11.35$  における擬運動量分布の励起時間依存性. (a),(b),(c),(d) はそれぞれ第 4, 第 3, 第 2, そして基底バンドの擬運動量分布. 赤は高い密度に, 青は低い密度に対応している.

## 5.2 単一周波数の光格子振幅変調による励起:励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差に近い場合

まずは単一周波数による励起プロセスについて考察する. この節では励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差に近い場合の第4バンドへの励起について考察する. 図5.5にダイアグラムを示す. 基底バンドと第4バンドの擬運動量  $q = 0$  でのエネルギー差は  $20.93(57.2\text{kHz})$  である.

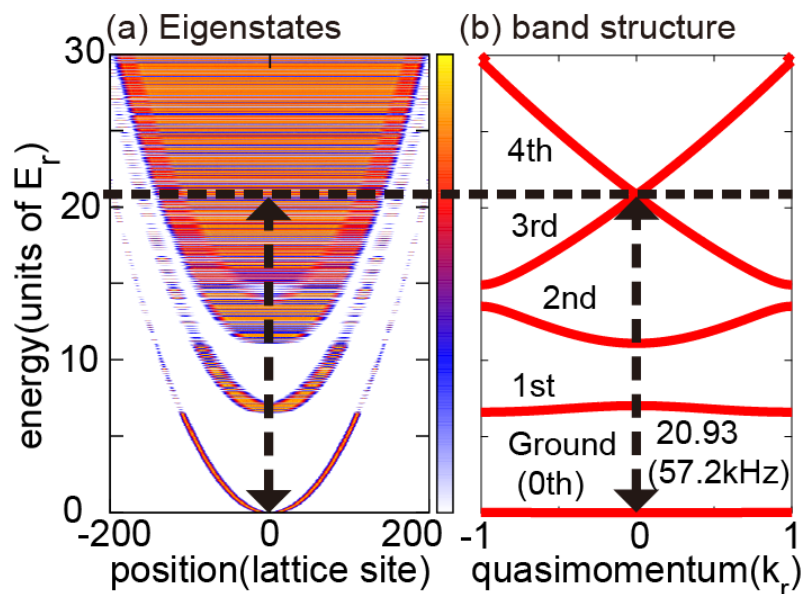


図 5.5 単一周波数・励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差に近い場合での第4バンド励起のダイアグラム.

まずはじめにバンドポピュレーションを励起時間の関数としてみていく. 図5.6は(a)20.50,(b)21.24,(c)21.96,(d)22.70の4つのケースの結果である. 与えられたエネルギーに対してどのバンドへ励起されるかは離調(式(57))を計算することで判別できる. 表2は与えられたエネルギーに対してちょうど離調が0となる共鳴擬運動量  $q_c$ , つまり共鳴点を表示している.  $q_c$ は  $\Delta_{03}(q_c) = 0, \Delta_{04}(q_c) = 0$  によって計算される. 図5.6に戻ると,(a)の場合においては第3バンドへの励起が主として起こり,(b),(c)の場合では第4バンドへと励起される.(d)の場合は共鳴点  $q = 0.24$  における初期状態の密度が低いために励起ポピュレーションは非常に低くなる. 実験的には擬運動量空間での分布を確認することによって共鳴点を確認することが出来る. 図5.7はある特定の時間での励起コンポーネ

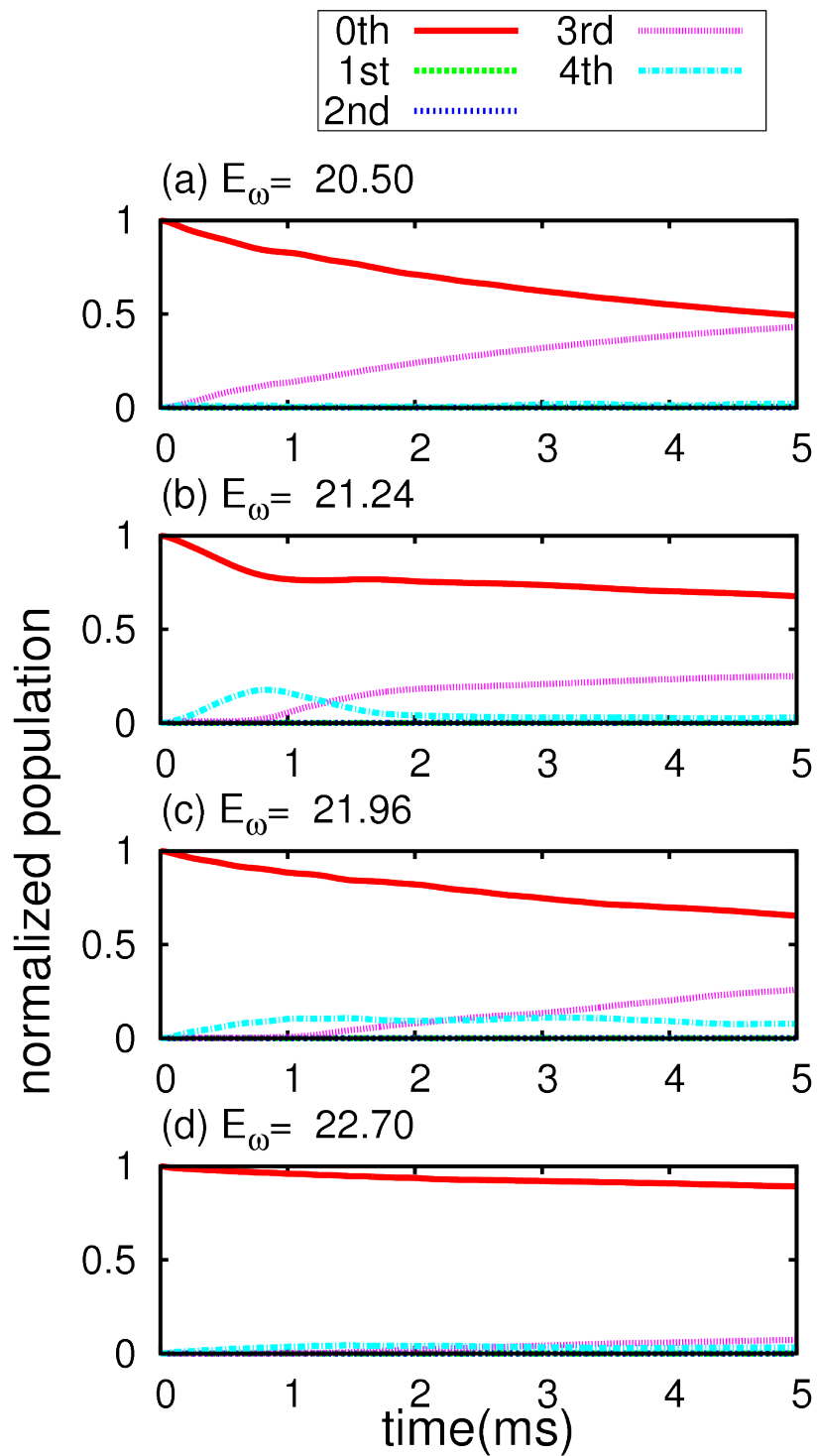


図 5.6 単一周波数, 直接第 4 バンドへの励起する周波数での励起時間の関数で見たバンドポピュレーション.

ントの擬運動量空間分布である。励起エネルギーが大きくなるにつれてピーク位置が高い擬運動量の方向へ移動していることがわかる。またピークの密度は励起エネルギー 21.24 の場合が最も高く、それから離れるにつれて低くなる。これは初期状態が擬運動量空間において  $q = 0$  を中心としたガウス関数であることが反映されている。ピーク位置は調和トラップの影響により表 2 で示された共鳴擬運動量よりも低い方向で表れている。

表 2 励起エネルギーが  $E_\omega = 20.50, 21.24, 21.96, 22.70$  の場合での共鳴擬運動量  $q_c$ 。擬運動量は拡張ゾーン形式で与えられている。基底バンドで対応する共鳴擬運動量は、励起先のバンドが奇数と偶数の場合で計算方法が異なることに注意 (式 (27))。これ以降では基底バンド等での対応する擬運動量については表示しない。

frequency	20.50	21.24	21.96	22.70
$\Delta_{03}$ or $\Delta_{04}$	3.96	4.05	4.11	4.24
$q_c$ @ ground	0.04	0.05	0.11	0.24

$E_\omega = 20.50$	— (solid red)	$E_\omega = 21.96$	⋯⋯⋯ (dotted blue)
$E_\omega = 21.24$	⋯⋯⋯ (dotted green)	$E_\omega = 22.70$	⋯⋯⋯ (dotted magenta)

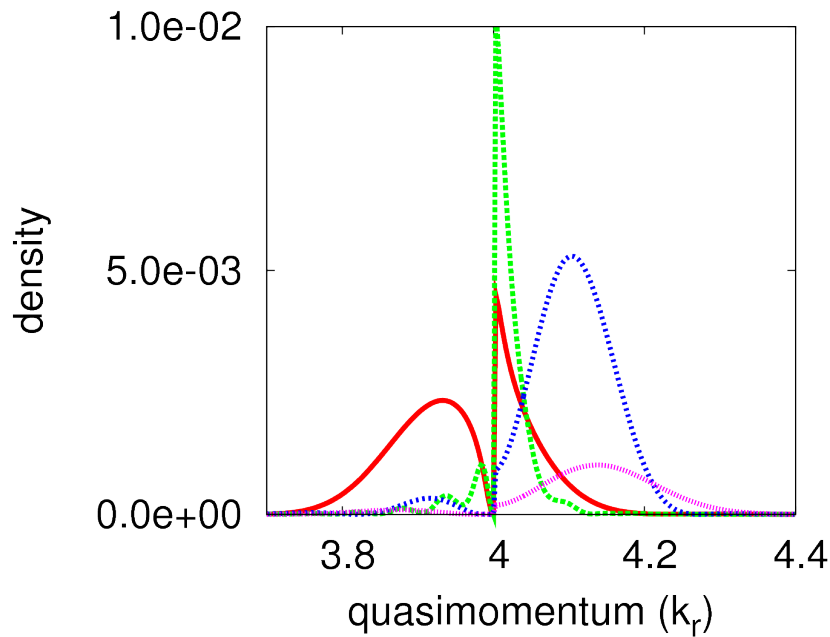


図 5.7 一定時間励起したのちの第 3 および第 4 バンドの擬運動量分布。励起時間は励起周波数 20 サイクルに固定。サイクルは  $T = 2\pi/E_\omega$  で計算される。励起エネルギーに対応して擬運動量分布のピーク位置が異なる。

再び図 5.6 へと戻ると、(b) および (c) の場合では第 4 バンドへの励起に続き第 3 バンドのポピュレーションが増加していることが分かる。これは第 4 バンドへと励起された成分

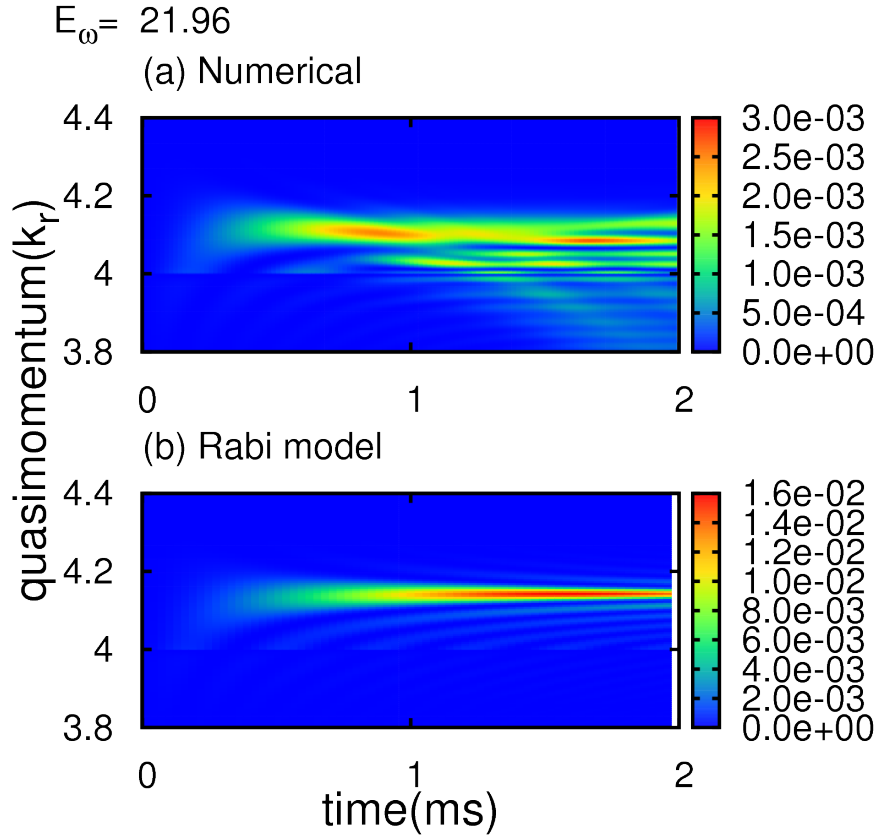


図 5.8 第 3 バンドおよび第 4 バンドの境界付近での擬運動量分布の時間発展. 励起エネルギーは  $E_\omega=21.96$ , 横軸は励起時間. (a):数値シミュレーションによる結果. 励起されたコンポーネントは, 調和トラップの影響により小さい擬運動量の方向へと移動していく. ある時間で励起コンポーネントは第 4 バンドと第 3 バンドの境界へと到達し,LZ 遷移が起こる. (b):single-Q ラビ模型による結果. 模型による計算では調和トラップによる影響が含まれていないため, ある特定の擬運動量に密度が集中する.

が調和トラップの効果によって第 3 バンドへと流入している (LZ 遷移, この過程については次章で考察する.) ことが原因である. この現象は擬運動量分布を励起時間の関数で見た場合に明確に確認できる. 図 5.8 は励起エネルギーが 21.96 の場合の結果である. (a) は数値シミュレーション, (b) はラビ模型による結果である. 数値シミュレーションでは時間の経過につれて, ピーク位置が徐々に低い擬運動量の方向へ移動していることがわかる. そして 1.2ms 付近で第 4 バンドと第 3 バンドの境界を越えて, 第 3 バンドへとポピュレーションが流入している. 模型計算では調和トラップの影響がないためにピーク的位置に変化はない. 同様にして図 5.9 に励起エネルギーが 20.50 の場合の結果について示す. この場合も同様に数値シミュレーションでは調和トラップの影響によりピークは低い擬運動量へと移動していく. これに伴って, 波束が低い擬運動量へと移動していくために共鳴点から外れる. その結果として, 第 3 バンドの成分は時間の経過とともに増加していく (図 5.6(a)).

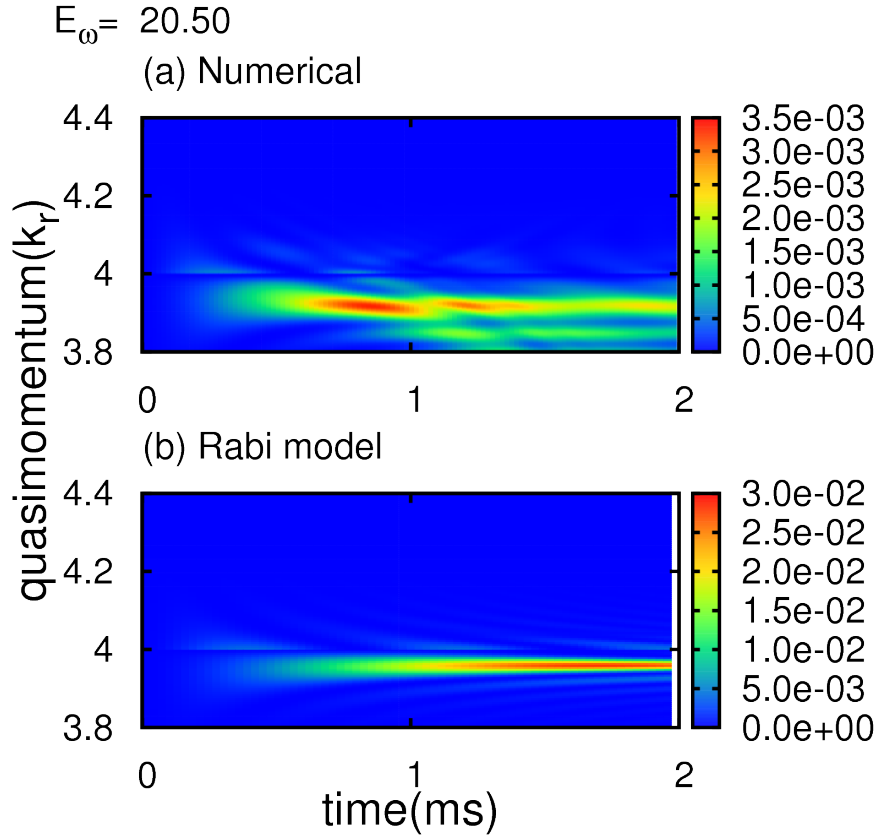


図 5.9 第3バンドおよび第4バンドの境界付近での擬運動量分布の時間発展. 励起エネルギーは  $E_\omega=20.50$ , 横軸は励起時間. (a):数値シミュレーションによる結果. 図 5.8(a) と同様に調和トラップの影響により小さい擬運動量の方向へと移動していく. (b):single-Q ラビ模型による結果.

結果として第4バンドもしくは第3バンドへの励起過程では, 基底バンドからのポピュレーションの移動速度と調和トラップによる拡散が同程度のスケールで起こることが分かった. そのためにラビ振動のような構造は明確に表れない. Aarhus グループの実験では, ここで考察した半分程度のエネルギーによる励起を行っており, 励起コンポーネントは 0.5ms 程度で飽和するということが示されている. 次に Aarhus 大学のグループと同様のエネルギー領域での励起過程について考察し, この節の結果と比較する.



### 5.3 単一周波数の光格子振幅変調による励起:励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差の半分に近い場合

この項では Aarhus 大学グループの実験と同様に励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差の半分に近い場合を考察する. ダイアグラムは図 5.10 に示した. 基底と第4バンドの擬運動量  $q = 0$  でのエネルギー差は 20.93 であるため, その半分のエネルギーは 10.47 である. また基底と第2バンド, 第2バンドと第4バンドの擬運動量  $q = 0$  でのエネルギー差はそれぞれ,  $\Delta_{02}(q = 0) = 11.11(30.4\text{kHz})$ ,  $\Delta_{24}(q = 0) = 9.82(26.8\text{kHz})$  である.

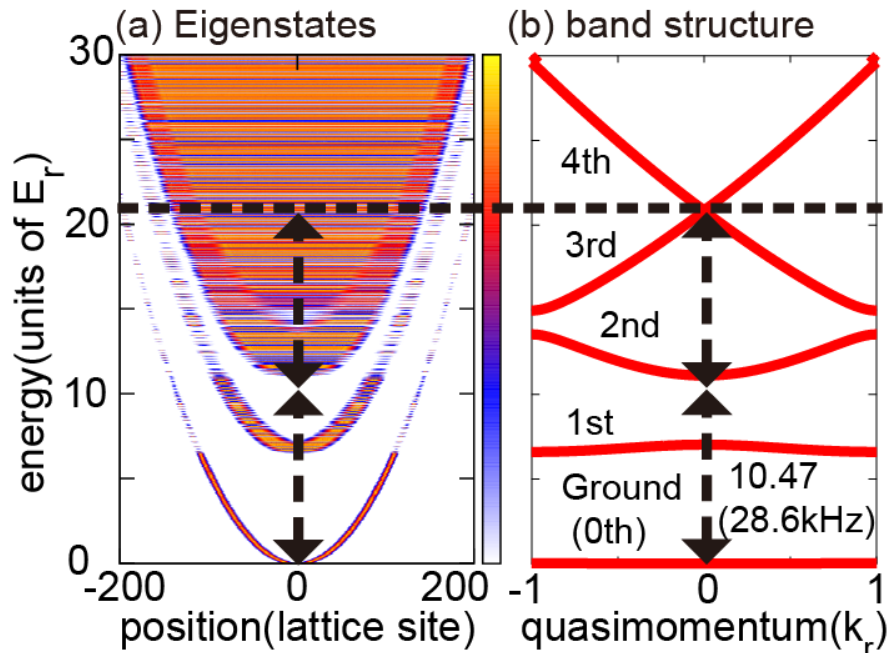


図 5.10 単一周波数, 励起エネルギーが基底-第4バンド間のエネルギー差の半分に近い場合に第4バンドへと励起する際のダイアグラム.

前項と同様にまずバンドポピュレーションの時間依存性をみる. 図 5.11 は (a)10.25, (b)10.98, (c)11.35, (d)12.08 の4つのケースの結果である. 図 5.6 と異なり, ラビ振動の構造がはっきりと確認できる. 今回の励起エネルギーの条件下では, 励起エネルギーの二倍で直接基底と第3もしくは第4バンドがカップルしている場合, そして基底バンドから第2バンドへと一度励起されてから第2バンドから第3, 第4バンドへと励起さ

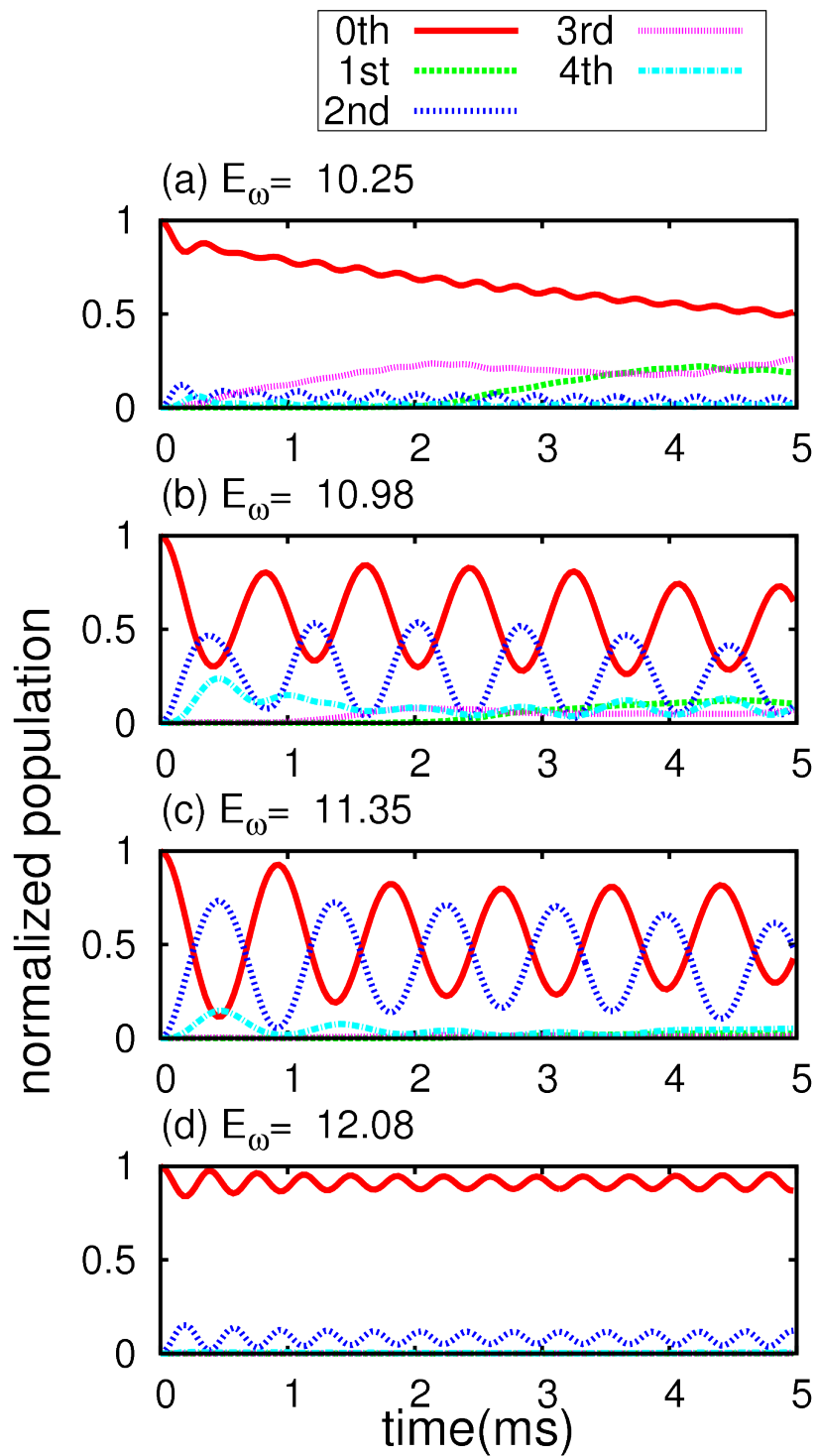


図 5.11 単一周波数, 2 倍の励起エネルギーで第 4 バンドへ励起する場合. バンドポピュレーションの励起時間依存性.

れる二つのパスが存在する。そのため共鳴周波数はそれぞれ二つのパスに対応するものが現れる。(b),(c) の場合では励起エネルギーが基底と第 2 バンドのエネルギー差に非常に近いために、ポピュレーションは第 2 バンドへと多く移動する。第 3 バンドの上端への励起と第 4 バンドの下端への励起について詳細をみるために、励起エネルギーが 10.25 と 11.35 の場合について比較する。図 5.12 にバンドポピュレーションの時間依存性を示した。(b),(c),(d) はそれぞれ第 2, 第 3, 第 4 バンドのポピュレーションである。11.35 の場合に特徴的な部分は、70% 程度のバンドポピュレーションが基底と第 2 バンド間で行き来ことである。これは基底-第 2 バンド間のラビ振動が顕著に表れていることを示す。また第 2 バンドに励起されたポピュレーションが比較的短時間 (1ms 程度) で拡散しない事にも起因している。

表 3 励起エネルギー  $E_\omega=10.25,10.98,11.35,12.08$  に対応する共鳴擬運動量。10.25,10.98 の場合では励起エネルギーが基底と第 2 バンド間のエネルギー差よりも低いために、 $\Delta_{02} = 0$  が存在しない。 $\Delta_{03}$  と  $\Delta_{04}$  は 2 倍の励起エネルギーが与えられる過程を仮定しており、 $\Delta_{nm}(q, \omega) = (E_q^m - E_q^n) - 2E_\omega$  によって計算される。

frequency	10.25	10.98	11.35	12.08
$\Delta_{02}$	None	None	2.26	2.54
$\Delta_{23}$ or $\Delta_{24}$	4.07	4.14	4.23	4.35
$\Delta_{03}$ or $\Delta_{04}$	3.96	4.14	4.24	4.41

数値シミュレーションで得られた擬運動量分布をラビ模型で得られたものと比較した場合 (図 5.13), 第 3 もしくは第 4 バンドに励起されたものと異なり、大きく概形に変化は見られない。これは第 2 バンドのコンポーネントがバンドの底に励起され、第 2-第 1 バンド間のギャップが大きいために LZ 遷移がおこらず、結果としてバンドの底に局在するためである。図 5.12(c) では、前項と同様に調和トラップの効果により第 3 バンドのポピュレーションが励起時間に応じて上昇する。また (d) でも前項と同様にもっとも高いピークが最初にあらわれ、その後ピークは減少していく。励起エネルギーが 11.35 の場合にバンドポピュレーションの時間変化を模型計算と比べると (図 5.14), 1.2ms で第 4 バンドから第 3 バンドへのポピュレーションの流入が差異となって現れる。対応する擬運動量空間分布は図 5.13 に示した。差異が現れる時刻は、励起されたコンポーネントが第 4 バンド境界  $q_b = 4$  に到達する時間に対応する。この時刻は古典的な計算により推定することが出来る。励起されたコンポーネントに対する古典的ハミルトニアンは、式 (52) で与えられる。よってダイナミクスは、

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= \left( \frac{\partial E_q^n}{\partial q} \right), \\ \dot{q}(t) &= -2\nu y. \end{aligned} \quad (58)$$

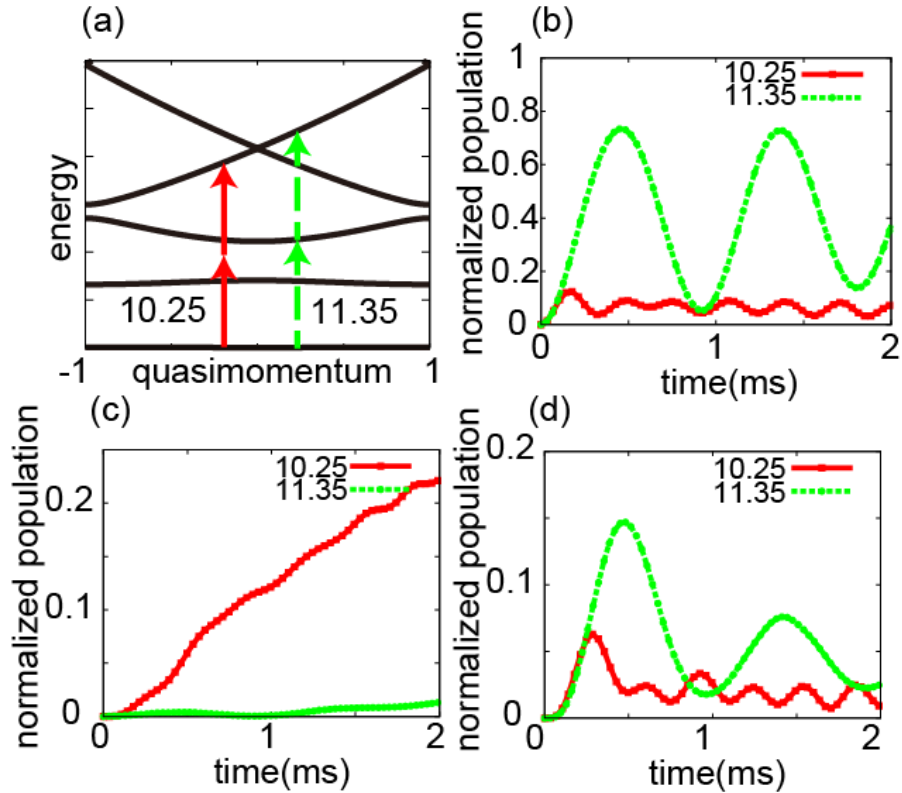


図 5.12 バンドポピュレーションと励起時間の関係. 励起エネルギー  $E_\omega = 10.25$  と  $11.35$  の比較. (a) 励起エネルギーのダイアグラム. (b) 第2バンド, (c) 第3バンドおよび (d) 第4バンドのポピュレーション.

によって計算される. 初期条件として,  $(y(t=0), q(t=0)) = (0, q_i)$  を仮定すると, バンド境界  $q_b = 4$  に到達する臨界時間  $\tau_c$  は,

$$\tau_c(q_i) = \frac{1}{2\sqrt{\nu}} \int_{q_b}^{q_i} \frac{1}{\sqrt{E_{q_i}^n - E_q^n}} dq \quad (59)$$

で与えられる. 初期擬運動量として共鳴擬運動量を選ぶと臨界時間は各励起エネルギーに対して表 4 のようになる. 図 5.16 は  $E_\omega = 10.98, 12.08$  の場合の第3および第4バンドのポピュレーションを表示している. 現在の条件下では式 (59) による推定は模型計算と数値計算に明確な差が現れるタイムスケールを与える. この事実から, 臨界時間より短い時間の励起は, 位置空間および擬運動量空間において局在した波束が生成されていると言える.

図 5.11(a) に戻ると, 2ms 以降では第3バンドポピュレーションが減少し, 模型計算で含まれていない第1バンドポピュレーションの上昇がみられる. これは調和トラップの影響によって減速された第3バンドのコンポーネントが, 第1バンドとカップルするために起こる現象である. 図 5.17 では第3バンドと第1バンドの擬運動量分布の励起時間依存性を示した. この現象は, 励起エネルギーが第3バンドと第1バンドのエネルギー差に近い状態でないと起こらない. そのため, 前節ではこのような現象はみられない. また更に長

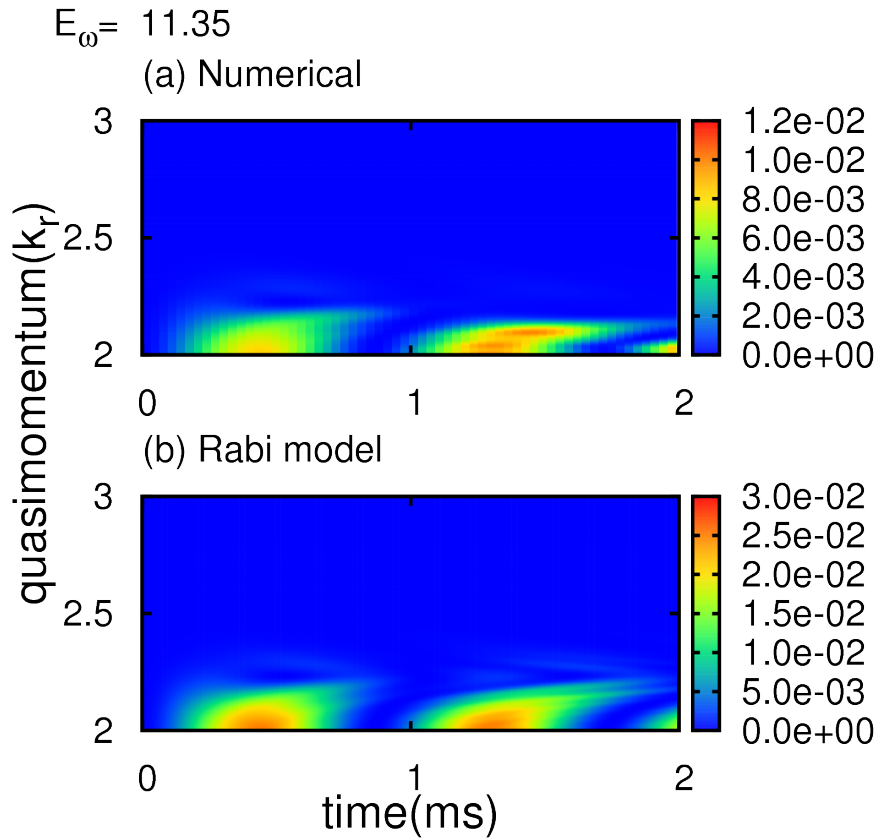


図 5.13 第 2 バンド, 擬運動量分布の時間依存性. (a) 数値シミュレーションと (b) ラビ模型の結果の比較. 励起周波数は  $E_\omega = 11.35$ .

時間の励起プロセスを見ると, この状態を通して基底状態へとポピュレーションが戻っていく様子が見られる. この長時間のプロセスについては付録 C で考察する.

表 4 励起エネルギー  $E_\omega = 10.98, 11.35, 12.08$  に対する初期擬運動量  $q_i$  と臨界時間  $\tau_c$ .

	$q_i(k_r)$	$\tau_c(\text{ms})$
10.98	4.14	0.8
11.35	4.23	1.2
12.08	4.35	1.4

次の議論へと移る前に, ここで前節で考察した,  $E_\omega = 22.70$  と  $11.35$  の場合について比較する. 図 5.18 は時刻  $t = 7.20$  での擬運動量分布を表示している.  $22.70$  の場合では第 2 バンドへの励起が起こらないために, (b) に分布は現れない. 擬運動量  $q = 4$  付近の分布を見た場合, それぞれの場合でピーク位置は同じだが,  $22.70$  の場合と比べて  $11.35$  の場合ではピーク密度は 6 倍程度になる. これは第 2 バンドを介したポピュレーションの移動が非常に早いことを示している.

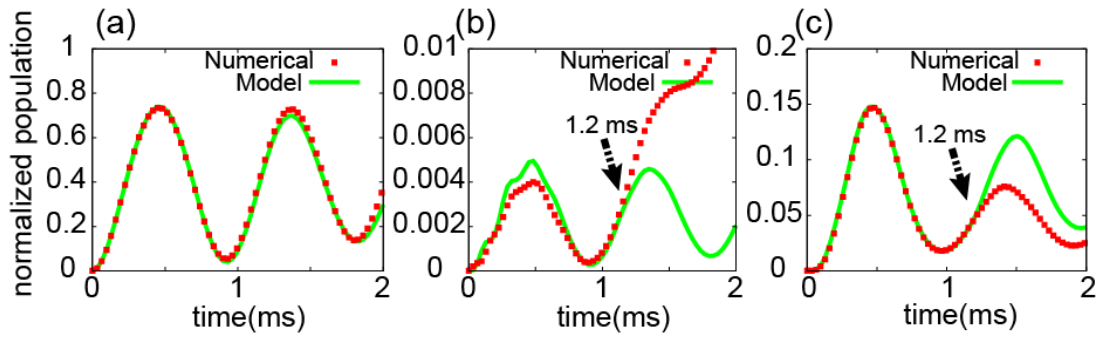


図 5.14 バンドポピュレーションと励起時間の関係. 数値シミュレーションとラビ模型の結果の比較. 励起周波数は  $E_\omega=11.35$ . (a) 第2バンド, (b) 第3バンドおよび (c) 第4バンドのポピュレーション.  $t=1.2\text{ms}$  で模型と数値シミュレーションの結果にずれが現れる. 第3バンド (b) ではバンドポピュレーションは上昇し, 第4バンドでは減少する. この事実は第4バンドから第3バンドへのポピュレーションの流入を意味している.

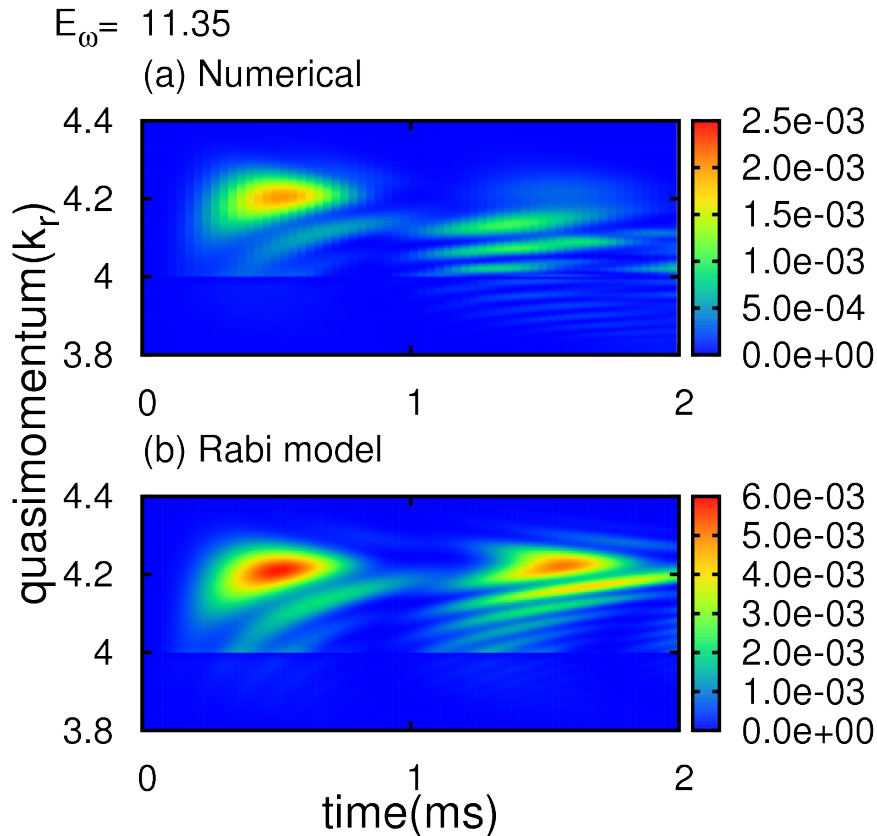


図 5.15 第4バンド, 擬運動量分布の時間依存性. (a) 数値シミュレーションと (b) ラビ模型の結果の比較. 励起周波数は  $E_\omega=11.35$ .

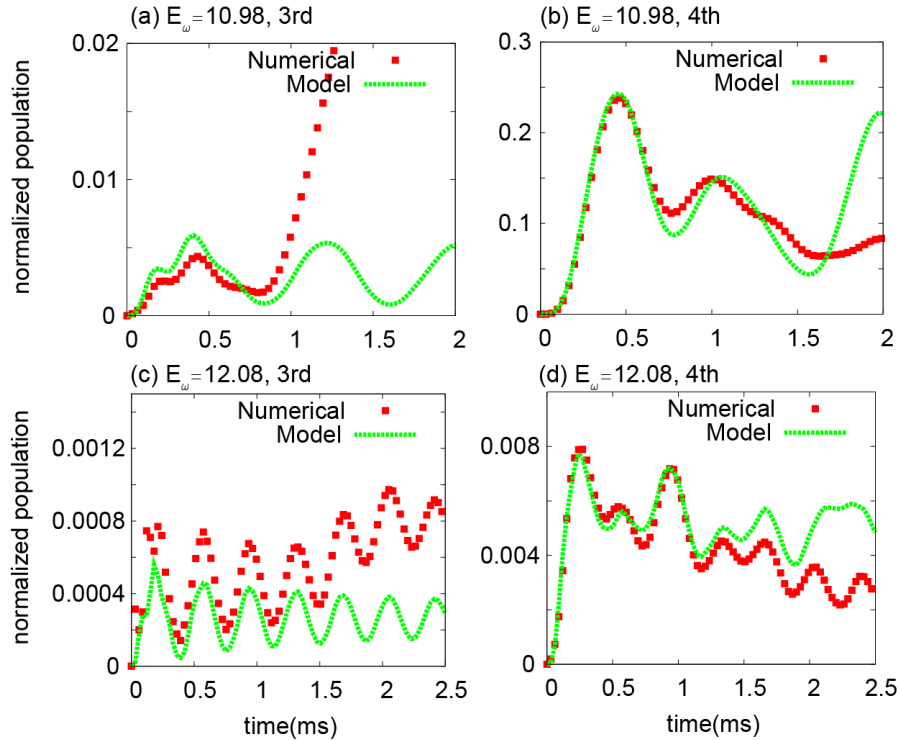


図 5.16 バンドポピュレーションと励起時間の関係. 数値シミュレーションとラビ模型の結果の比較. 励起周波数は  $E_\omega = 10.98$  と  $12.08$ .  $10.98$  の場合の (a) 第 3 バンドおよび (b) 第 4 バンドポピュレーションの時間変化.  $12.08$  の場合の (c) 第 3 バンドおよび (d) 第 4 バンドポピュレーションの時間変化.

この節では単一励起周波数, 励起エネルギーが基底-第 4 バンド間のエネルギー差の半分の場合について理論的考察を行った. この場合であってもバンド間のカップリングが強い場合には, 特定のバンドへの高い遷移率を示すことが分かった. また考案したラビ模型と古典ハミルトニアンによって, 短時間での遷移レートおよび模型の臨界時間について推定可能であることを示した. 特に基底バンドと第 2 バンド間でのラビ振動が大きな特徴である. 次の節ではこの事実を利用して, 第 2 バンドから第 4 バンドへの励起を高効率に行うことによって更なる励起効率の向上について考える.

ここで実験結果との比較を行う. 実験では  $500\mu\text{s}$  の光格子振幅変調を行い, その後励起波束のポピュレーションを位置空間で観測している [17]. 文献 [17](Fig.2) では励起周波数を変化させて, 波束のポピュレーションをプロットしている.  $500\mu\text{s}$  の光格子振幅変調においては, ラビ模型は数値シミュレーションを良く再現できる. そのためラビ模型による結果を図 5.19 にプロットした. (比較として数値シミュレーションの結果も表示している.) 励起波束は第 3 および第 4 バンドのコンポーネントから成っている. そのため, 模型計算の結果は第 3, 第 4 バンドポピュレーションの総和をプロットしている. また縦軸は実験で用いられる原子数  $1 \times 10^5$  を規格化して 1 としたポピュレーションである. そして横軸は周波数を kHz でプロットしている. 大まかな傾向として, 模型計算と実験結果ともに

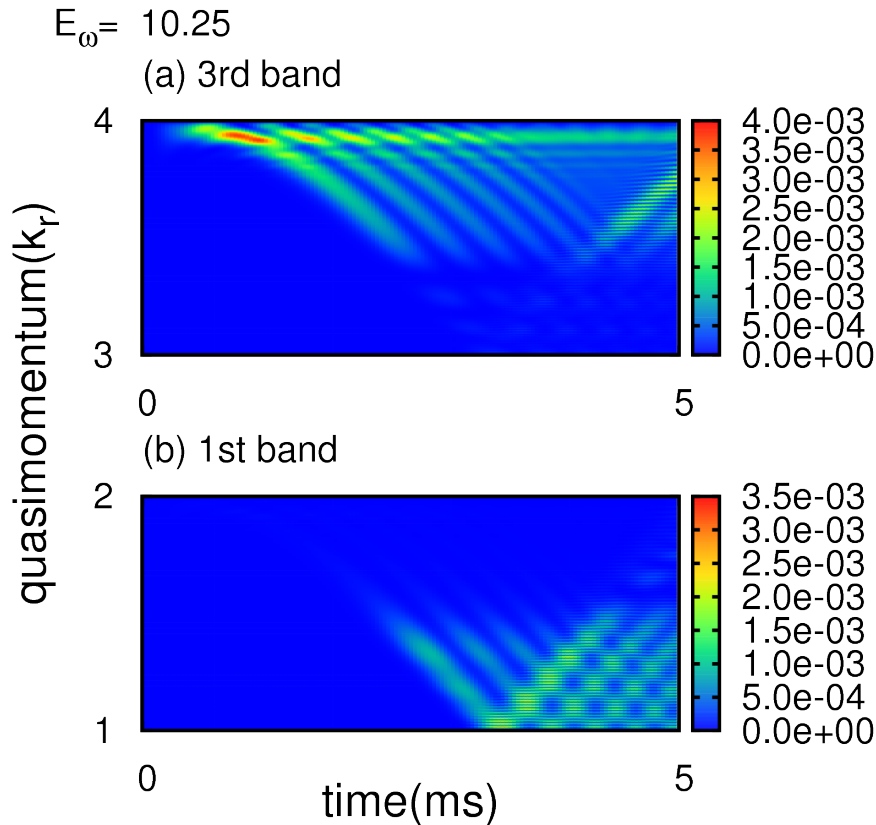


図 5.17 励起エネルギー  $E_\omega=10.25$  での (a) 第 3 バンドおよび (b) 第 1 バンドの擬運動量分布. 第 3 バンドへと励起されたコンポーネントは, 調和トラップにより減速される. 特定の擬運動量に到達したとき, 第 1 バンドとのカップリングが起こり, 第 3 バンドから第 1 バンドへとポピュレーションの遷移が始まる. その後第 1 バンドへと移動したコンポーネントは引き続き減速され, 再び共鳴擬運動量まで戻ってきたときに第 3 バンドへと遷移する.

31kHz を中心として広がった分布となっている. しかしポピュレーションと幅は一致しない. これは, 実験において初期擬運動量分布が, 仮定したパラメーターによって与えられる基底状態よりも広がっている事が想定される. これを確かめるために, トラップ周波数を変更した模型計算の結果も同時に示している. 式 (54) から調和トラップの強さ  $\nu$  が強いほど擬運動量分布は広がっている. しかし, 実験値のおよそ 3 倍である  $\nu = 16 \times 10^{-5}$  の場合においても結果は一致しない. よって原因としては, 初期分布が熱によって広がっていることが想定される. 実験においては, 光格子をローディングする際に熱が加えられた可能性がある.



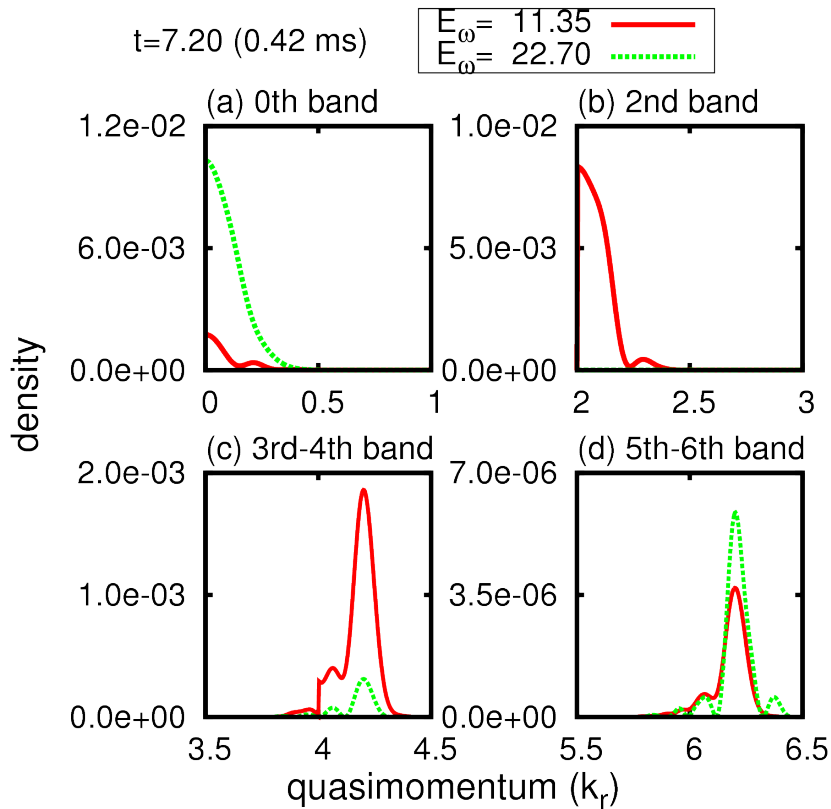


図 5.18 励起時間  $t = 7.20(0.42ms)$  後の第3および第4バンドの擬運動量分布. 励起エネルギー  $E_\omega = 11.35$  および  $22.70$  の比較. (a),(b)  $11.35$  の場合では, 基底バンドから第2バンドへの励起が非常に強く起こるために,  $22.70$  と比べた場合, 基底バンドのポピュレーションに大きな差異が現れる. (c)  $11.35$  の場合, 第2バンドの励起を介して第4バンドへの励起が起こっている. (d) 同様に  $22.70$  の場合においても2倍の励起エネルギーが与えられる事によって第6バンドへと励起が起こっている.

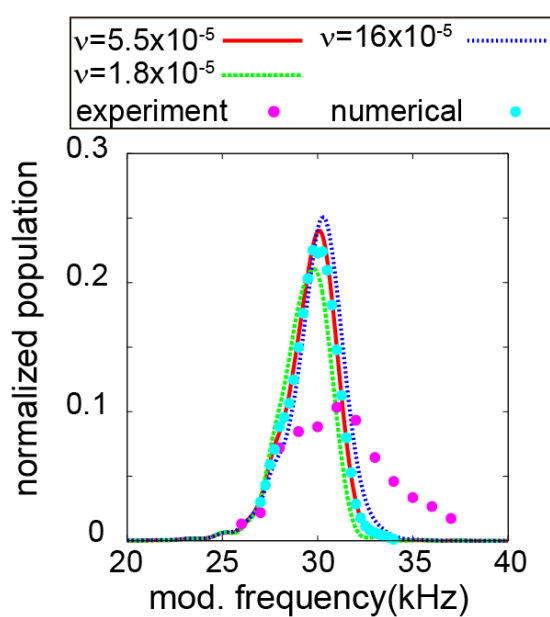


図 5.19 励起波束ポピュレーションの励起周波数依存性. 励起時間 0.5ms に固定している. 線は模型計算の結果, 紫の点は実験値, 水色の点は数値シミュレーションの結果. 模型計算では, 三種類の調和トラップ周波数で計算を行った.

#### 5.4 二つの周波数からなる光格子振幅変調による励起

前節までに示した通り, 光格子 + 調和トラップ系における光格子振幅変調による励起過程は, プロホ状態間のラビ振動と調和トラップの効果による拡散の組み合わせによって記述されることがわかった. ここでは第 4 バンドへの励起を最適化する方法について考察する. 前項で基底と第 2 バンド間の励起過程が長時間安定であり, 非常に高い効率を示すことを確認した. ここでは第 2 バンドへと励起された成分に対して異なる励起エネルギーで振幅変調をかけることによって, 第 4 バンドへの励起最適化を目指す. 基底と第 2 バンド間の擬運動量  $q = 0$  でのエネルギー差に比べて, 第 2, 第 4 バンド間のエネルギー差の方が小さい. そのため, 基底から第 2 バンドへの励起に用いたエネルギーよりも低いエネルギーによる励起は, 基底と第 2 バンド間のカップリングを小さくすると同時に高効率な第 4 バンドへの励起が期待される. この過程について, 数値シミュレーションおよび模型計算による考察を行う.

最初に与える励起エネルギーは  $E_\omega = 11.35$  を選ぶ (図 5.11 を参照). 次に与える二つ目の励起エネルギーを変化させた場合にどのように励起プロセスが起こるかについて考察する.

まずは励起エネルギーが第 2, 第 4 バンドの擬運動量  $q = 0$  のエネルギー差よりも低い場合, つまり第 3 バンドの上端への励起を考える. 二つ目の励起エネルギーとして  $E_\omega = 9.15$  を選び, 励起時間  $t = 0.45(\text{ms})$  で励起エネルギーを  $E_\omega = 11.35$  から  $9.15$  へと変化させる. それぞれのバンドでのポピュレーションの時間変化を図 5.20 に示した. 励起エネルギー  $11.35$  のみの励起では, 第 3 バンドへのポピュレーションの移動は起こらない. しかし  $9.15$  へと励起エネルギーを変えると, 第 2 バンドから第 3 バンドへの励起が起こり始める. また  $9.15$  という励起エネルギーは基底と第 2 バンド間のエネルギー差よりも低いために, このカップリングは非常に起こりにくくなる. ここでは前節で解析を行った単一周波数・励起エネルギーが基底-第 4 バンドのエネルギー差の半分に近い場合での励起過程と結果を比べてみる.  $E_\omega = 9.15$  では, 第 2-第 3 バンド間での共鳴擬運動量は,  $q_c = 3.93$  である. ここで比較を行うものは励起エネルギー  $10.25$  の場合に設定する. このエネルギーは今考えている過程  $11.35 + 9.15$  のちょうど半分のエネルギーである. 図 5.21 は  $11.35 + 9.15$  と  $10.25$  の場合の第 3 バンドの上端へと励起された成分の擬運動量空間分布を表示している. それぞれの時刻は,  $t = 0.80\text{ms}$ ,  $t = 0.89\text{ms}$  であり, 擬運動量空間でのピーク密度が最大となる時刻を取っている. 励起エネルギー  $11.35 + 9.15$  の場合では擬運動量  $q = 3.9$  付近でのピーク密度が  $10.25$  の場合と比べておよそ 2 倍程度に増加している事が見て取れる. また  $10.25$  の場合では現れない擬運動量  $q = 4.1$  付近でのピークは, 最初に行った  $11.35$  による励起によるものである. この結果から単一の擬運動量状態をもつ波束の形成を行いたい場合には, この方法は不向きである. しかしながら特定の擬運動量状態を高い密度での励起を行いたい場合には, 一考の価値がある.

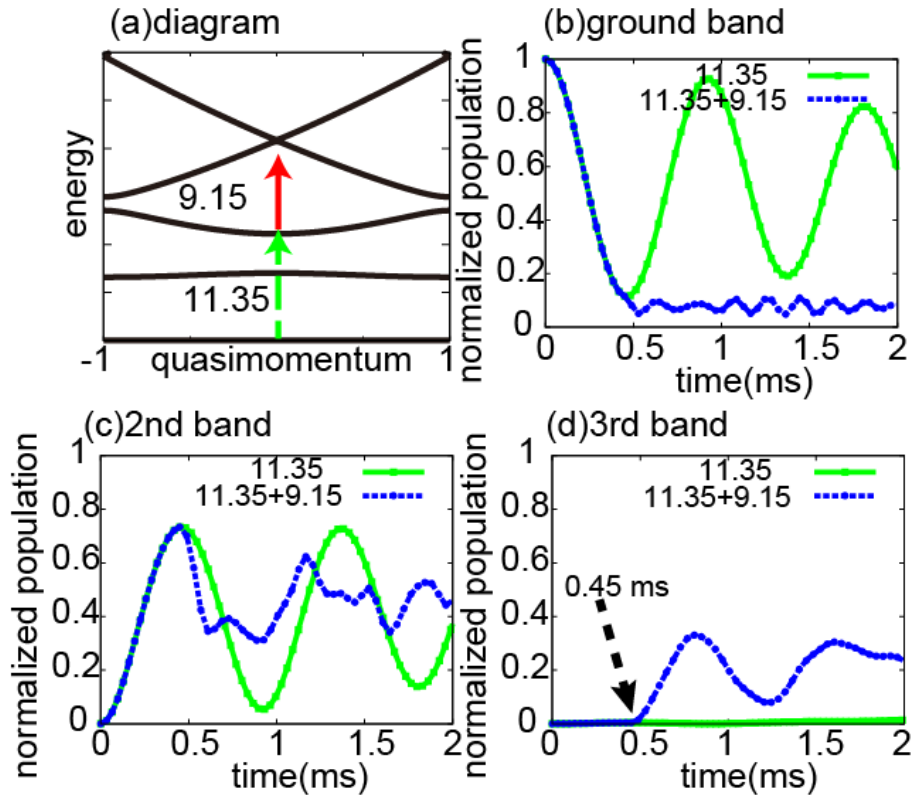


図 5.20 (a) 二種類の励起エネルギーによる励起過程のダイアグラム. 二つ目の励起周波数は  $E_\omega = 9.15$ . (b), (c), (d) はそれぞれ基底, 第 2, 第 3 バンドでのバンドポピュレーションの励起時間依存性. 青は二種類の周波数での励起, 緑は  $E_\omega = 11.35$  のみで励起した場合. (b), (c) に注目すると  $E_\omega = 9.15$  は基底と第 2 バンドのエネルギー差よりも小さいために, このバンド間での大きなポピュレーションの移動が抑制される. (d) では, 励起エネルギーを変えた途端に第 3 バンドへの強い励起が起り始めている.

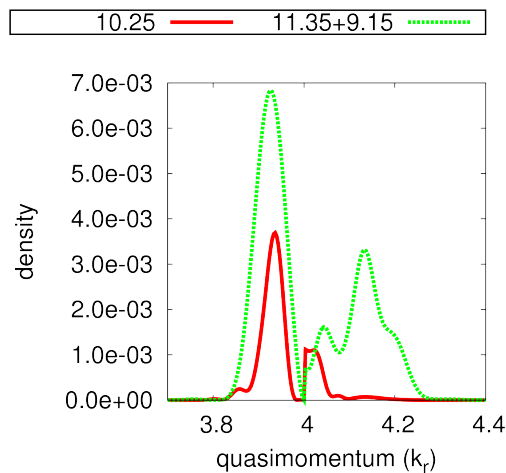


図 5.21 同じ共鳴擬運動量を持つ励起エネルギーの場合で擬運動量空間分布励起エネルギーは 11.35 と 9.15 の組み合わせと, 10.25 単体. それぞれの時刻は  $t = 0.89 \text{ ms}, 0.80 \text{ ms}$ .

次に励起エネルギーが第2バンドと第4バンドの擬運動量  $q = 0$  でのエネルギー差よりも高い場合, つまり第4バンドの下端,  $q = 0$  近傍への励起を考察する. 二つ目のパルスの励起エネルギーは,  $E_\omega = 10.25$  である. 図 5.22 にそれぞれのバンドのポピュレーションの時間変化を示した. 第4バンドのポピュレーション (d) を見ると 11.35 単一周波数の励起の場合と異なり, 70% 程度とポピュレーションが大きく移動する. 図 5.21 と同様に擬運動量分布を確認する. 比較する励起エネルギーは  $(11.35 + 10.25)/2 = 10.80$  である. 図 5.23 はそれぞれの励起プロセスで擬運動量ピーク密度が最大となる時刻での擬運動量密度分布である. それぞれの時刻は,  $t = 0.94\text{ms}, 0.73\text{ms}$  である. 図 5.21 の場合と異なり, ピーク密度の大きな改善は見られない. しかしながら擬運動量密度分布の幅は広くなり, 多くのポピュレーションが含まれている. 実験的な観点から言えば観測が非常に容易になる. またこの後に再び光格子振幅変調による励起もしくは脱励起を行って, 特定のバンドへの遷移を行う場合には, 単一周波数の場合と比較して高いポピュレーションの移動が容易に可能となる.

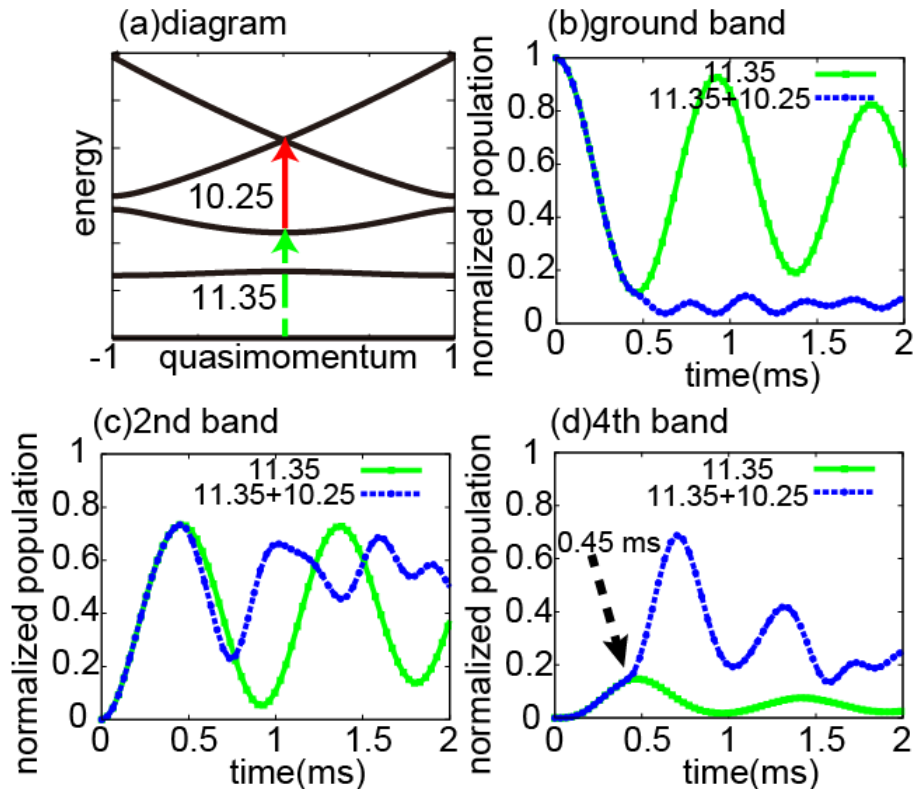


図 5.22 (a) 二種類の励起エネルギーによる励起過程のダイアグラム. 二つ目の励起周波数は  $E_\omega = 10.25$ . (b),(c),(d) はそれぞれ基底, 第2, 第4バンドでのバンドポピュレーションの励起時間依存性. 青は二種類の周波数での励起, 緑は  $E_\omega = 11.35$  のみで励起した場合. 基本的な挙動は図.5.20 と同じだが, 第2と第4バンド間でのポピュレーション振動が起こる.

この節では二種類の励起エネルギーの光格子振幅変調によってどのような励起が誘起されるかを考察した. バンドポピュレーションと擬運動量分布を指標として, 励起エネル

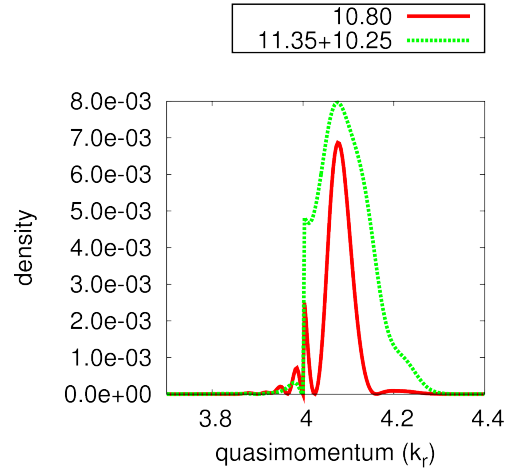


図 5.23 同じ共鳴擬運動量を持つ励起エネルギーの場合で擬運動量空間分布. 励起エネルギーは 11.35 と 10.25 の組み合わせと, 10.80 単体. それぞれの時刻は  $t=0.94\text{ms}, 0.73\text{ms}$ .

ギーを変化させた場合の依存性を示した. Aarhus 大学グループおよび Hamburg 大学グループの実験で使われているパラメーター領域において, 特定のバンドへ原子を遷移させること, および擬運動量空間における任意波束成形について, 調和トラップのないエネルギーバンドダイアグラムおよびブロッホ状態間のラビ振動が有益な情報を与えることを示している. 特に短い励起時間においては, 厳密なシミュレーションなしに簡易な”single-Q Rabi 模型”によってポピュレーションの移動や波形を予測する事が可能である.

しかしながら, 長時間のダイナミクスでは調和トラップによる加速 (および減速) による影響を無視することはできない. 特にエネルギーバンド構造は擬運動量の端点でバンドギャップを持ち, それによって引き起こされる LZ 遷移が複雑なダイナミクスを引き起こすことが知られている. そのため次の章では励起された波束の長時間でのダイナミクス, 特にバンドギャップによる影響について光格子振幅変調が存在しない場合について調べる. 光格子振幅変調がない場合ではバンド間の結合項は調和トラップの項のみによるため, バンド端点でのダイナミクスを観測することに適しているためである.

## 6 光格子 + 調和トラップ中の励起波束の自由時間発展

この章では励起波束に焦点を当て、調和トラップと周期ポテンシャルが作るエネルギーバンド構造による励起波束の運動について考察する。光格子振幅変調がない場合、系のダイナミクスは非常に単純な形で与えられる。時間に依存する波動関数を系の固有状態  $\chi_k(y)$  (式 (41)) の重ね合わせで表現すると、

$$\psi(y, t) = \sum_k C_k(t) \chi_k(y) \quad (60)$$

となる。このとき係数  $C_k(t)$  の時間発展は系の固有エネルギー  $E_k$  を (このエネルギーは反跳エネルギー  $E_r$  によってスケールされている) 用いて、

$$C_k(t) = C_k(t=0) e^{-iE_k t}, \quad (61)$$

で与えられる。このように非常に単純な形をしているにもかかわらず、特に波束がバンド端点に到達したときブラッグ反射とランダウツェナー (LZ) 遷移が同時に起こるために非常に複雑な運動となる。LZ 遷移は第  $n$  バンドと第  $(n-1)$  バンド間のバンドギャップの大きさ  $\delta_n$  に大きく依存する。 $\delta_n$  が非常に大きな場合では、LZ 遷移確率が 0 に近づきブラッグ反射のみが起こる。逆に  $\delta_n$  が非常に小さい場合では、LZ 遷移確率は 1 に近づき、LZ 遷移のみが起こる。ここで知りたい情報は、 $\delta_n$  が中間の場合において LZ 遷移確率がどのように与えられるか、またそれによって引き起こされるダイナミクスがどのようなものである。ここでは、今までと同様に Aarhus 大学グループと同じパラメーターを用いて第 4 と第 3 バンド間においてどのようなダイナミクスが起こるかを調べる。

まずはバンドギャップがどのようになっているかを再確認する。図 6.1 は拡張ゾーン形式で表示されたバンド構造である。ここまでの議論において第 3-第 2 バンド間での LZ 遷移はほとんど起こらないことが確認されている。これはここでのエネルギーギャップが非常に大きいためブラッグ反射のみが起こる極限だと考えることが出来る。また前節では第 4-第 3 バンド間では有限の LZ 遷移によって励起波束の流入を確認した。つまり、第 4 バンドもしくは第 3 バンドへ励起されたコンポーネントは、エネルギー保存則により、第 4 バンドと第 3 バンドに閉じ込められることになる。よってここでは第 4 バンドもしくは第 3 バンドに励起された波束について考察する。

### 6.1 励起波束ダイナミクスの古典的描像

この節では、第 4 バンドもしくは第 3 バンドへと励起された波束の運動について、古典的なハミルトニアンを用いてどのように表現されるかを調べる。式 (52) および式 (58) によって与えられる位相空間上での運動を図 6.2 に示した。ここでは第 3, 第 4 バンドのみに焦点を当てているために、それ以外の擬運動量は表示していない。位置空間では調和ト

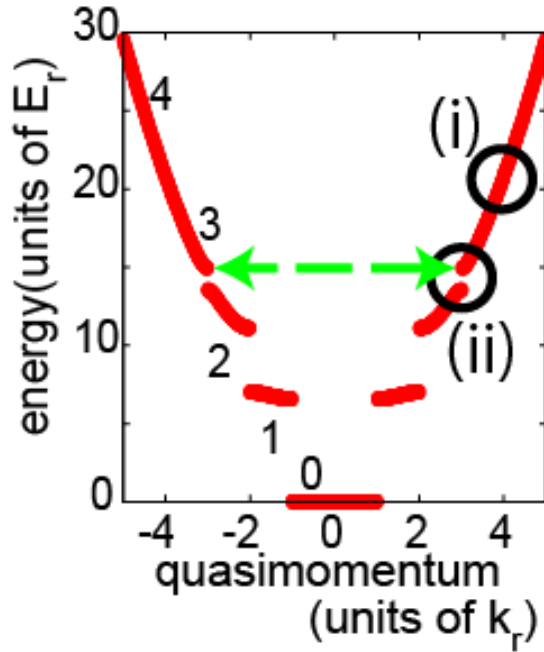


図 6.1 光格子振幅  $s = 16$  における拡張ゾーン形式で表示されたバンド構造.

ラップによって位置の二乗の項になっている. 固有エネルギーが光格子振幅 ( $s=16$ ) をこえているが, 周期ポテンシャルの影響を受け擬運動量の分散関係は単純な  $q^2$  で与えられる量ではない. そのために位相空間上での等エネルギー面は調和振動子の場合 (位置, および運動量がともに二乗に比例する) と異なる. 結果として等時性はなく, この位相空間上で運動する波束は拡散し, 拡散の度合いは擬運動量空間でみたエネルギーの関数が 2 乗の関数からどの程度離れているかで変化する. この系で非常に特徴的な現象は, バンド端に到達した場合にブラッグ反射によって同一バンド内の異なる端点へと移動するか, LZ 遷移によって異なるバンドの同一端点へと移動するかといった分岐が起こる事である. この位相空間上においては, 第 4 バンドの端点  $q_b=4$  もしくは  $-4$  において発生する. このとき, LZ 遷移によって異なるバンドへと遷移する確率 (LZ 遷移確率)  $P_t(n, y)$  を古典的に求めると,

$$P_t(n, y) = \exp\left(-\frac{a_c(n)}{a(y)}\right) = \exp\left(-\frac{\pi\delta_n^2}{16n\nu|y|}\right) \quad (62)$$

となる. ここで  $a_c(n)$ ,  $a(y)$ ,  $\delta_n$  はそれぞれ, LZ 臨界加速度, 加速度, 第  $n$  バンドと第  $(n-1)$  バンド間のエネルギーギャップである. ここで LZ 臨界加速度は線形の場合の式.(40) と同様のものである. 式.(40) と比べた場合の変化は, 与えられる加速度は位置  $y$  に依存する事である. これは加速度が調和トラップを位置について微分したものに对应するためである. Aarhus 大学の実験と同じパラメーターでの第 4-第 3 バンド間の LZ 遷移レートを図 6.2(c) に示した. この図から第 4 バンドへと励起された波束の LZ 遷移率は 0 の極限にも 1 の極限にも到達しない事が分かる. また同様に第 3, 第 2 バンド間の LZ 遷移を考えた場合, バンドギャップは非常に大きい. 図 6.2 から典型的には位置  $y = 300$  で LZ 遷移が起



こるため,LZ 遷移確率は  $P_t(n, y) = 6 \times 10^{-4}$  と非常に小さく無視できる量であることが分かる.

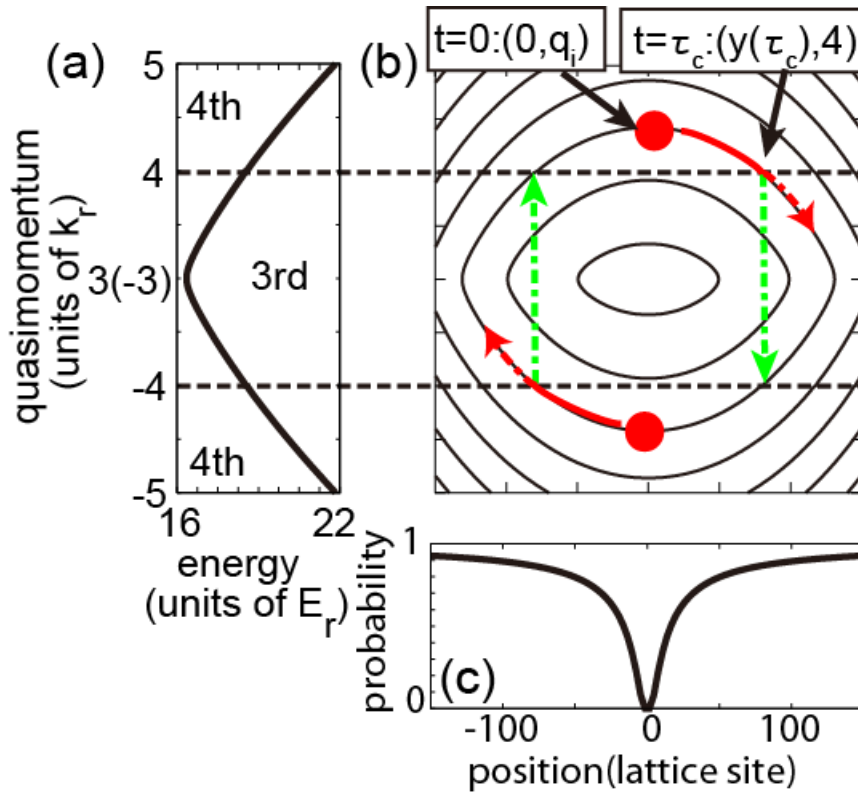


図 6.2 位相空間で見た場合の第 4 バンドへと励起された波束の運動.

第 4 バンドよりも高いエネルギーを持つ波束の運動を考える上で, 第 4-第 3 バンド間の遷移は避けて通る事が出来ない. 何故ならば, 励起された波束の位相空間上での軌跡は, かならず第 4-第 3 バンドのバンドギャップを通るためである. また励起のエネルギーが高ければ高いほど, 励起波束は位置空間および擬運動量空間において広範囲に到達することが可能となり, この後行う操作の幅が増えることになる. しかしながら高いエネルギーによる励起においても長時間の時間発展を考える場合においてはバンドギャップの影響を無視する事はできない. よってこのようなバンドギャップによる影響の考察は, 光格子 + 調和トラップ系において非常に重要な情報を与える. 波束の操作という視点から言えば, 完全なブラッグ反射はミラーとして,LZ 遷移はスプリッターとして働くと言える. そのため, 波束のミラーやスプリッターの素子としての性質を調べるという点でも非常に有益な情報を与える.

次節においては数値シミュレーション, 位置空間および擬運動量空間での波束の時間発展と古典的描像との対比を見る. そしてこの結果から, 波束が描く軌跡, 到達可能な領域, また安定性について議論する. その後, 励起波束のバンドギャップでの振る舞いについて詳細に議論する.

## 6.2 位相空間上での励起波束の軌跡

この節では、第 4 バンドおよび第 3 バンドに励起された波束の自由時間発展によって得られる軌跡について議論する。第 3 バンドへと励起された波束は第 4 第 3 バンド間のバンドギャップを通らないために、励起波束は長時間安定したブロッホ振動が位置空間および擬運動量空間で見ることができる。しかしながら第 4 バンドへと励起された波束はバンドギャップによる LZ 遷移によって、バンドギャップを通過するたびに波束は分裂する。そのため波束のポピュレーションは徐々に減衰し、自然なディフェージングによる拡散よりも早く波束は崩壊することになる。このような現象について、数値シミュレーションを基に議論する。

まずは第 3 バンドに励起された波束について議論する。励起エネルギーは  $E_\omega = 11.35 + 9.15$  を選び、励起時間は擬運動量空間でのピークが最大となる時間を選んだ。初期の擬運動量  $q = 4$  周辺での擬運動量分布は図 5.21 に表示してある。この状態を初期条件として、式 (61) を用いて時間発展を行った。結果は図 6.3 に表示した。励起に用いたパラメーターは、励起エネルギー  $E_\omega = 11.35 + 9.15$ 、励起時間はそれぞれ、0.45ms と 0.36ms。図中の時刻  $t = 0$  は自由時間発展の開始の時刻 (励起過程の終了時刻) である。(A),(B) は 0-30ms 間の長時間の自由時間発展での位置空間確率密度分布と擬運動量確率密度分布、(C),(D) は 0-6ms 間の短時間の場合である。ここでは第 3 バンド、第 4 バンドの励起波束のみに注目するため、また擬運動量空間での時間発展は常に対称的であるため、擬運動量空間は  $q = 2.8$  から 4.4 までのみを表示している。まず短時間の自由時間発展についてみる ((C),(D))。この図で表示している黒い線は初期条件を  $(y(t=0), q(t=0)) = (y_i, q_c)$  として古典運動方程式 (式 (58)) を解いたものである。初期の擬運動量はラビ模型で与えられる共鳴擬運動量  $q_c$  であり、位置  $y_i$  は共鳴擬運動量と時間の積の半分で与えられる。励起波束密度の高い部分は位置空間において対称的に広がっていく (位置空間においては黄色い部分)。これは光格子振幅変調による励起が、擬運動量空間で対称に起こる事に起因している。また擬運動量分布で波束は調和トラップによって擬運動量の小さい方向へとシフト (減速) していく (擬運動量空間においては赤い部分)。擬運動量が第 3 バンドと第 2 バンドの境界  $q = 3$  に到達したときブラッグ反射が起こり、擬運動量  $q = -3$  へと移動する (擬運動量  $q = -3$  の成分は  $q = 3$  へ)。そのため位置空間では、波束の運動が今まで進んでいた方向から逆方向へと変わる。その後、擬運動量空間で波束は擬運動量の大きい方向へとシフト (加速) される。そして擬運動量が初期擬運動量  $q(t=0)$  と一致したとき、波束は再び減速されはじめる。(正確には初期の位置空間で与えられるポテンシャルのエネルギー  $\nu y(t=0)^2$  によって頂点の擬運動量はシフトを受ける。しかしながら現在のパラメーターでは小さい補正である。) 位置空間で見た場合では、トラップ中心、つまり位置  $y = 0$  で擬運動量は減速されはじめる。位相空間上では、この一連の運動が二回おこり、再び初期の点へと戻ってくる。この周期構造がバンドインデックスが高い場合でのブロッホ

振動である。長時間の自由時間発展をみても ((A),(B)), この構造は安定にあらわれる。つまり波束は非調和性 (擬運動量が  $q^2$  で与えられない) によるディフェージングが顕著になる時間まで安定な構造を保つ。

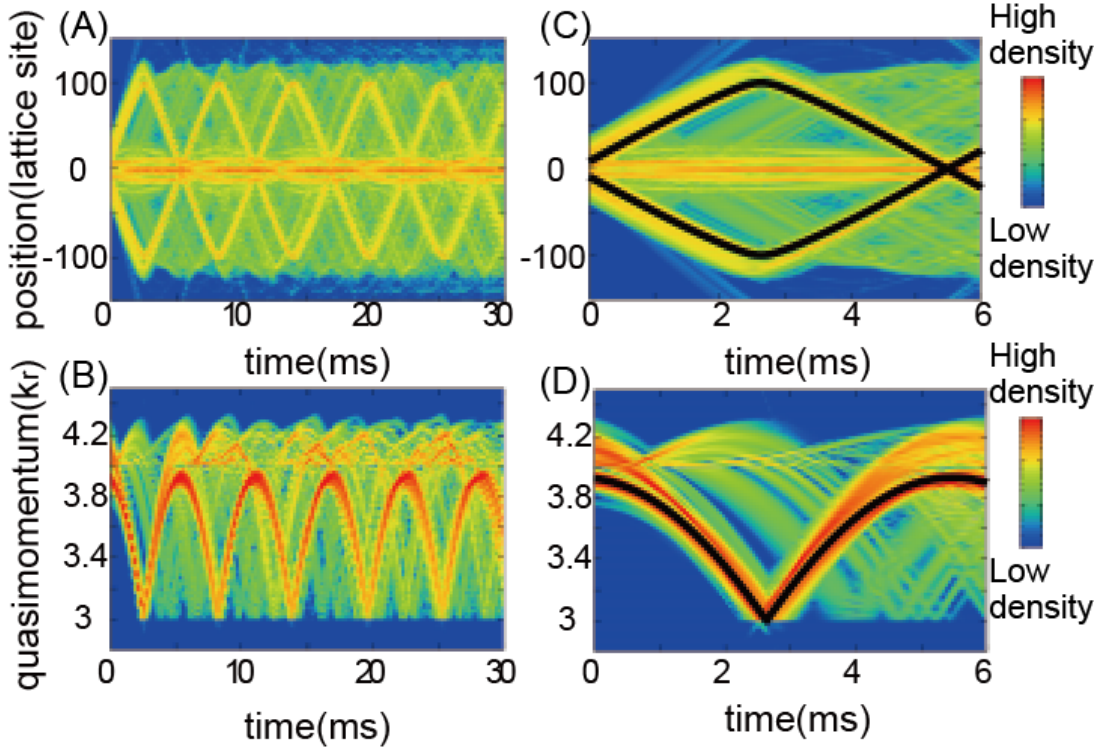


図 6.3 第 3 バンドに励起された波束の自由時間発展. 0-30ms 間の (A) 位置空間,(B) 擬運動量空間での波束の自由時間発展. 0-6ms 間の (C) 位置空間,(D) 擬運動量空間での波束の自由時間発展. ただし時刻  $t=0$  は光格子振幅変調 (励起プロセス) が終わった時刻に取っている.

次に第 4 バンドに励起された波束について議論する。励起エネルギーは  $E_\omega = 11.35 + 10.25$  を選び, 第 3 バンドの励起と同様に励起時間は擬運動量空間でのピークが最大となる時間を選んだ。初期の擬運動量  $q = 4$  周辺での擬運動量分布は図 5.23 に表示してある。自由時間発展の結果は図 6.4 に表示した。励起に用いたパラメータは, 励起エネルギー  $E_\omega = 11.35 + 10.25$ , 励起時間はそれぞれ, 0.45ms と 0.28ms. 表示の方法は図 6.3 と同様である。(C),(D) で表示されている黒線 (実線), 紫線 (点線) は古典軌道を示している。この場合で初期状態の擬運動量空間でのピークは  $q = 4.07$ . そのため, 擬運動量空間で励起波束はすぐに第 4-第 3 バンドの境界  $q_b = 4$  に到達し, LZ 遷移による波束の分裂が起こる。短時間の自由時間発展の結果 ((C),(D)) で表示してある, 黒線は LZ 遷移によりバンドギャップを越えたコンポーネント, 紫線 (点線) はブラッグ反射によって反射された成分の古典的な軌道を示している。擬運動量空間で, 反射された成分は擬運動量の符号を変え  $q = 4$  から  $q = -4$  へと移動する (もしくは  $q = -4$  から  $q = 4$  へ)。これは位置空間では進行方向が反転する事を意味する。結果として波束がバンド境界を通るた

び、一定の量の成分が反射を受けるために、長時間の自由時間発展は非常に複雑な運動をみせる。これは古典ハミルトニアンが持つ非調和性によるディフェージングよりも非常に早く、波束の周期運動を利用するものには向かない。しかしながらこのような分裂は調和トラップの強さ  $\nu$  や分裂が起こる位置  $y$  を変更する事によって操作可能である。そのためこの性質は波束に対する可変スプリッターとして扱うことができる。

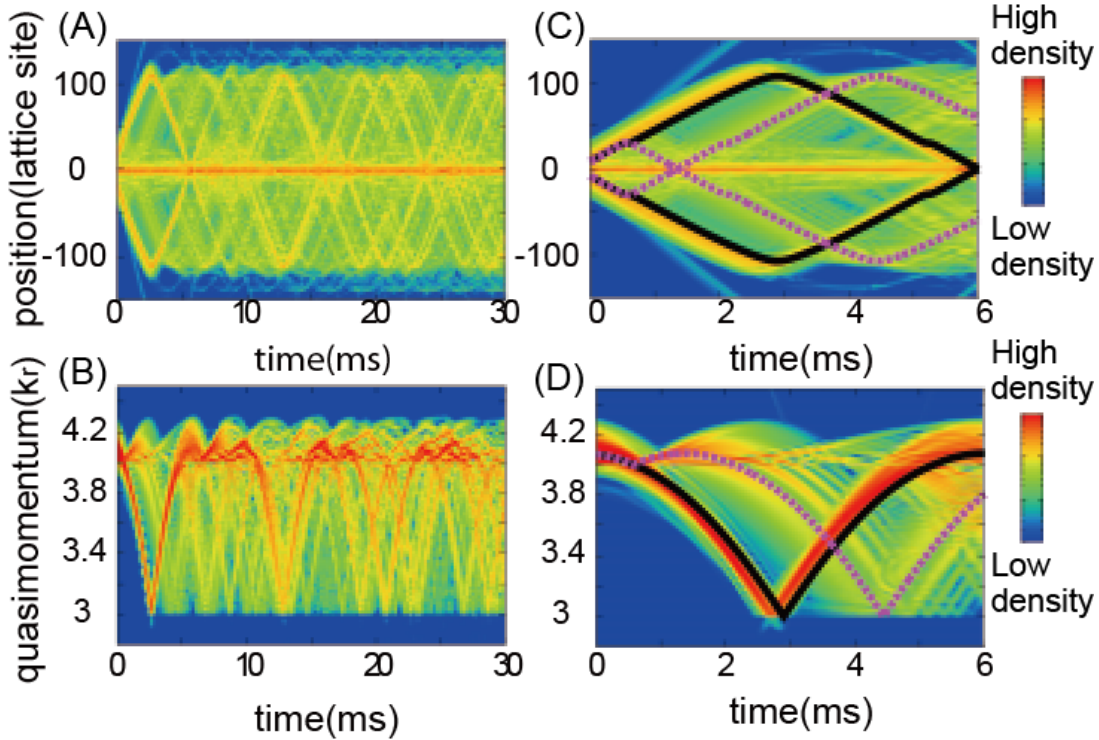


図 6.4 第 4 バンドに励起された波束の自由時間発展. 表示の方法は図 6.3 と同様.

上記のように古典ハミルトニアンの計算によって、軌跡を求めることが可能であり、波束の自由時間発展が解析可能である。Aarhus 大学の実験では、波束の最大到達距離を励起エネルギーの関数としてプロットしている ([17], Fig.4). 同様のシミュレーションを行うことで実験との比較が可能である。図.6.5 は励起エネルギー  $E_\omega = 9.52(26\text{kHz}), 10.25(28\text{kHz}), 11.35(31\text{kHz}), 12.45(34\text{kHz})$  の 4 つの場合について、自由時間発展を位置空間で表示したものである。それぞれの励起時間は、擬運動量空間でピークが最大となる時刻に設定した。またここでは第 3-第 2 バンド境界で反射される位置座標  $y$  の近傍を、マイクロメートルの表示で示した。文献 [17] ではエネルギー保存則  $2E_\omega = E_3^3 + \nu y^2$  を用いて最大到達距離を

$$y_{max} = \sqrt{\frac{2E_\omega - E_3^3}{\nu}} \quad (63)$$

で見積もっている ([17] とはスケールが異なっていることに注意). 実験では浮遊磁場や重力の影響によって調和トラップに加えて、3 次の項  $\xi y^3$  が存在していることが確認されて

いる。そのため、実際には  $E_3^3$  に補正項を加えた形で見積もりを行っている。実験結果は、式 (63) で見積もられたものとおおよそ一致している。

対してここでは、単純なエネルギー保存則の代わりに共鳴擬運動量  $q_c$  によって与えられるエネルギーを用いる。第節で考察した通り、励起周波数が基底-第 4 バンドの半分程度の場合、共鳴擬運動量は二つ現れる (表.3)。この共鳴擬運動量によって与えられるエネルギー  $E_{q_c}^n$  を式 (63) の  $2E_\omega$  に代入して、

$$y_{max} = \sqrt{\frac{E_{q_c}^n - E_3^3}{\nu}} \quad (64)$$

を得る。よってこの式からは、二つの共鳴擬運動量に対応する曲線が得られる (図 6.6)。数値シミュレーションから得られた見積もりと比較すると、この結果はおおよそ曲線”critical-1”に従っているように見える。しかしながら、表 3 内で現れる二つの共鳴擬運動量は近い値を取っており、明確に区別できるものではないと考えられる。この二つの理論曲線が明確に区別可能なパラメーター領域であれば、この最高到達距離を観測する事によってそれぞれの共鳴擬運動量状態を調べることが可能である。

実験においては 3 次の項  $\xi y^3$  があるため、単純な比較はできないが、数値シミュレーションの結果から見積もったものと比べると、図 6.6 のようになっている。ただし励起エネルギー  $E_w = 12.45(34\text{kHz})$  の場合には波束のポピュレーションが非常に低く、観測可能な量であるとは考えにくいため、数値シミュレーションの結果は表示していない。この差異は、実験においては何らかの理由によって初期状態の擬運動量分布が広がっているためだと推測される (詳細は図 6.2)。現在用いているパラメーターでは、式 (63) と曲線”critical-2”はほぼ一致している。しかしながら実験値は前後  $3\mu\text{m}$  程度のエラーバーがあり、この比較からは定量的な議論はできない。

この節では、波束の自由時間発展について数値シミュレーションを基に解析を行った。励起された波束は、調和トラップの影響を受け加速 (減速) されるが大きなバンドギャップに到達したとき、ブラッグ反射が起こり、結果としてプロッホ振動が起こる事を位置空間、擬運動量空間で確認した。また波束がもつ初期擬運動量に依存して、LZ 遷移の効果によって波束の安定性が大きく変わる事を示した。ここでは LZ 遷移確率について定量的な議論はしなかった。しかしながら、LZ 遷移確率は波束のスプリッターとして見た場合にどのような性能を持っているかを知るうえで非常に重要な知見を与える。次の節では LZ 遷移確率について議論を行う。

### 6.3 調和トラップ中でのランダウツェナー遷移

今までの議論で示したように、調和トラップ中のランダウツェナー遷移確率は外力として線形のポテンシャルが加わっている場合と大きく異なる。最も大きな差異は、式 (62) で表されるように LZ 遷移確率が位置の関数となっていることである。前節でみたように、

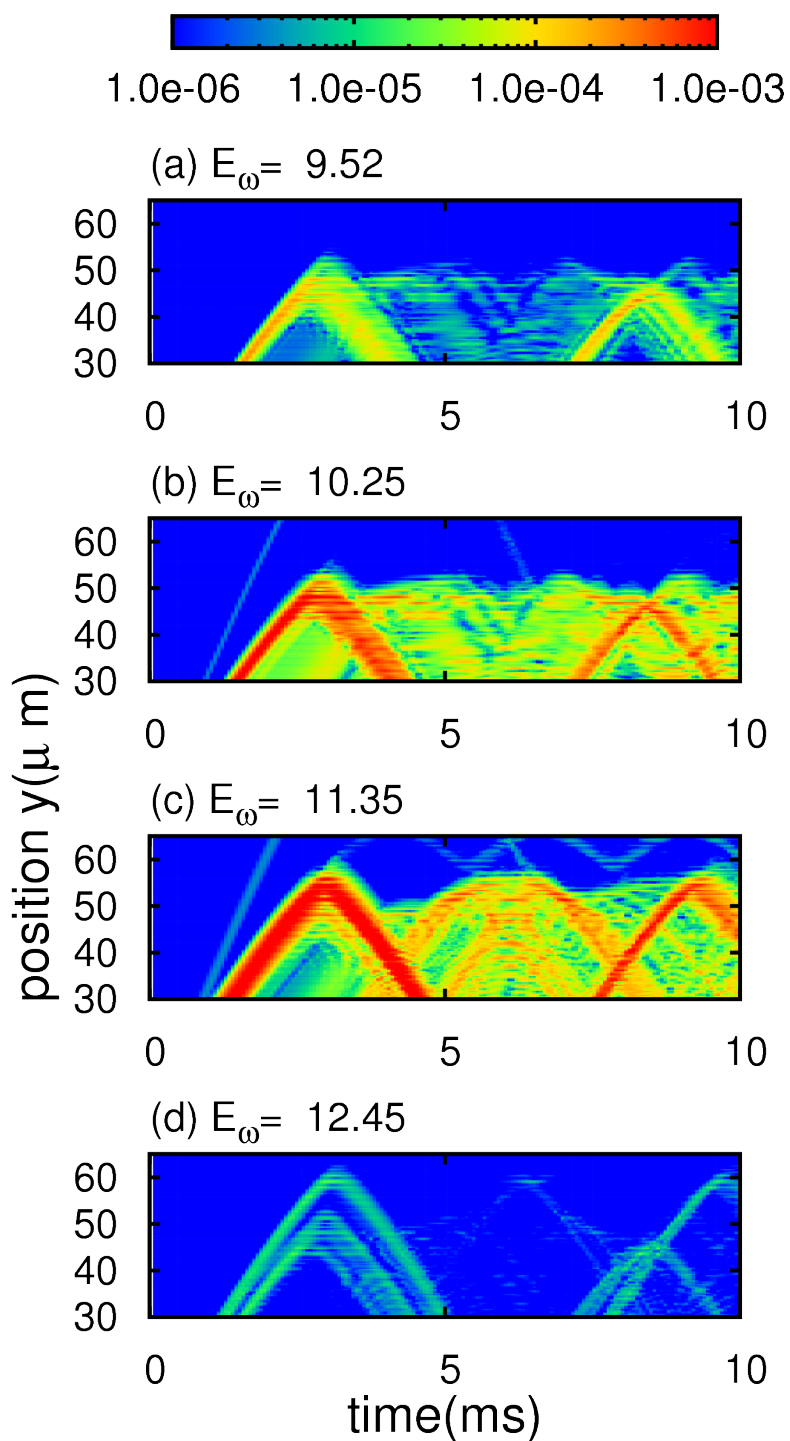


図 6.5 励起エネルギーを変えた場合の自由時間発展.

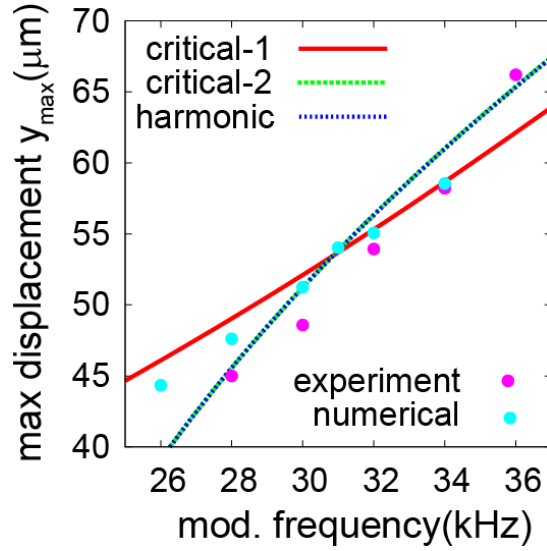


図 6.6 波束の最高到達距離  $y_{max}$  と励起エネルギーの関係. 曲線”critical-1”は  $\Delta_{23}$  もしくは  $\Delta_{24}$  から見積もられた値. 曲線”critical-2”は  $\Delta_{03}$  もしくは  $\Delta_{04}$  から見積もられた値. 点は数値シミュレーションから見積もられた値. 紫色の点は実験値. 曲線”harmonic”は式.(63) の値.

位置空間, 擬運動量空間ともに波束の分裂という形でランダウツェナー遷移が起きていることは確認できる. ここではバンドポピュレーション, つまり擬運動量空間分布を特定のバンドで積分した形で評価し, 式 (62) と比較する. 実験で観測する事を踏まえて, 光格子振幅変調による励起を用いて作られた励起波束に対して評価を行う.

まずは例として励起エネルギー  $E_\omega = 11.35$  の場合について考察する. 図 6.7 は励起波束の分裂と, バンドポピュレーションを時間の関数として表示したものである. ここでは, 励起された波動関数から第 3 および第 4 バンドの成分のみを取り出して, 自由時間発展したものを示している.  $E_\omega = 11.35$  の場合, 共鳴擬運動量は  $q_c = 4.23$  である. 励起波束が第 4-第 3 バンドの境界  $q_b$  に到達する時間は, 式 (59) によって臨界時間  $\tau_c$  はおよそ 1.1ms と計算される. (c) バンドポピュレーションから, この時刻で第 4 バンドから第 3 バンドへと急激なポピュレーションの流入があることが見て取れる. このとき初期状態とバンド境界での擬運動量エネルギー項の差分  $E_{q_i}^n - E_{q_b}^n$  は, 調和トラップ項によって与えられるエネルギーへと変換されている. そのためバンド境界に到達した時点での位置は近似的に

$$y(\tau_c) = \sqrt{\frac{E_{q_i}^n - E_{q_b}^n}{\nu}}. \quad (65)$$

で与えられる. この場合では,  $y(\tau_c) = 177$  (格子サイト番号では 56 に対応する) と与えられる. (a) 位置座標, および (b) 擬運動量空間でそれぞれ良い近似を与えている. さらに式 (62) からはこの状況での LZ 遷移確率が計算できる. バンドギャップ  $\delta_n = 0.2$  として確率は 0.82 と与えられる. (c) バンドポピュレーションから読み取れる遷移確率 (初期のポ

ピュレーションと LZ 遷移後のポピュレーションの比率によって計算) は, おおよそ 0.78 である. 波束はピーク擬運動量を中心として非対称に広がっており, 正確に推定する事は難しいが, 式 (62) とおおよそ前後 10% 程度の相対誤差で見積もることができる.

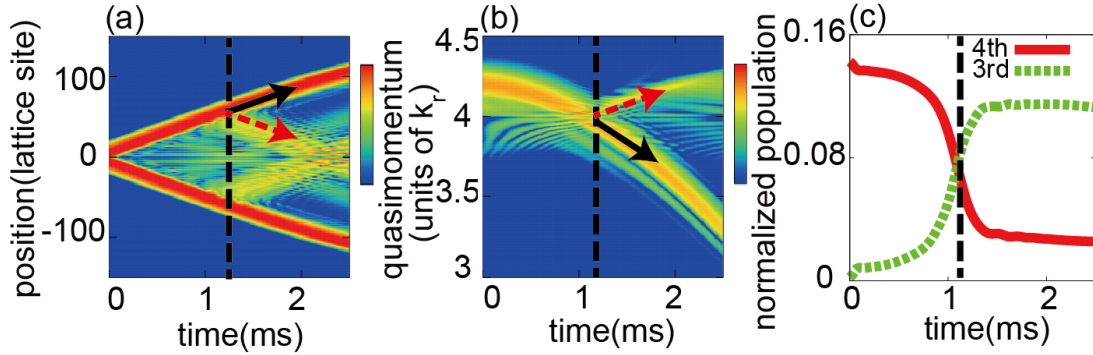


図 6.7 励起エネルギー  $E_\omega = 11.35$  での励起波束の分裂. (a) 位置空間, (b) 擬運動量空間での時間発展. バンド境界に到達する時刻で波束は二つ (赤矢印, 黒矢印) に分裂する. (c) 第 3, 第 4 バンドポピュレーションの時間変化. 臨界時間  $\tau_c = 1.1\text{ms}$  で第 4 バンドから第 3 バンドへとポピュレーションが流入している.

励起エネルギー, つまり波束がバンド境界に到達したときの位置座標  $y$  を変化させた場合に, LZ 遷移確率をみると図 6.8 となる. ここではバンド境界での位置  $y$  を見積もるために, 式 (58) を初期条件  $(y(t=0), q(t=0)) = (y_i, q_c)$  のもとで解いたものである. 初期の位置  $y_i$  は前節と同様に共鳴擬運動量と励起時間の積の半分で与えた. 位置  $y$  の関数として LZ 遷移確率の変化は, この範囲において式 (62) とおおよそ一致する.

この節では, 実験と同様に光格子振幅変調による励起を用いて作った励起波束の LZ 遷移確率について数値シミュレーションと古典的な解析を行った. LZ 遷移確率は式 (59), (62), (65) の組み合わせによって見積もることが可能であると示した. ここでは励起エネルギーを変化させた場合について考察した. 励起波束のダイナミクスは位置空間, 擬運動量空間ともに実験で観測可能であり, 適切なパラメーターを選べば直接観測可能のパラメーターである. また実際に変える事の出来るパラメーターは励起エネルギーのみではなく, 調和トラップの強さ, 定常状態での光格子振幅も変えることができる. 励起エネルギーは定常状態での光格子振幅で決定される. そのため調和トラップの強さを変化させた場合にどのような変化があらわれるのかを見るのが, 波束のスプリッターとしての性能を測る実験として好ましいと思われる.



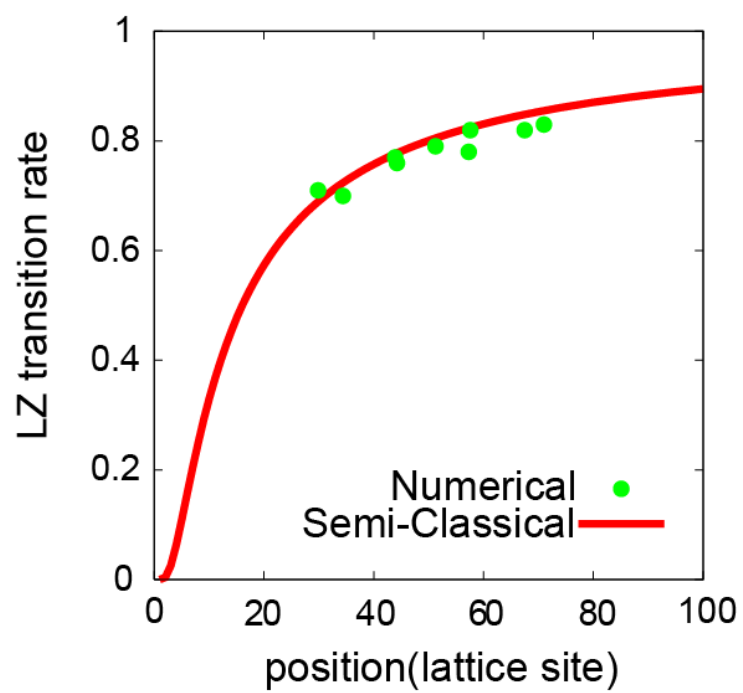


図 6.8 バンド境界での位置座標  $y$  に対する LZ 遷移確率.

## 7 結論

本論文では光格子と調和トラップの複合ポテンシャル中の冷却原子のダイナミクスについて研究を行った。特に光格子振幅変調による励起プロセスおよび励起によって作られた波束について数値シミュレーションと模型を用いた一粒子問題について考察した。

光格子振幅変調による励起過程は、調和トラップの影響が少ない短時間においては、ブロッホ状態間のラビ振動として取り扱えることを示した。また実験で用いられている光格子振幅変調の強さは、非常に強く二光子による励起が強く反映される領域であることも示した。光格子によって作られる周期系は通常、物性論としての側面が強く現れ、強束縛模型などが良い近似であるとされている。しかしながら現在考えているパラメータ領域では、強束縛模型の適用が難しく、むしろ量子光学的な側面が強く表れていると言える。これに基づいて、二種類の励起エネルギーによるポピュレーションの移動過程について考察を行った。結果として、ラビ振動が  $\pi/2$  パルスとなる時刻を適切に選ぶと、ポピュレーションの移動が最適化可能であることも示した。これは既に用いられている実験技術で可能なものであり、数値計算および模型による解析から励起波束の任意波束形成に必要な実験パラメータを導くことが期待できる。

光格子振幅変調のない自由時間発展においては、光格子のつくるバンドギャップによる影響を調べた。この系では、一般に良く取り扱われる線形の外力と異なって、外部ポテンシャルが調和トラップであるために、位置座標に依存するランダウツェナー遷移があらわれる事を示した。ランダウツェナー遷移確率は、光格子振幅および調和トラップパラメータを固定した場合に、励起エネルギーに依存する。この依存性について古典ハミルトニアンと二次のポテンシャル系に拡張されたランダウツェナー公式から、遷移確率が求められることを示した。ランダウツェナー遷移はパラメータを変化させることによって、コントロールする事が可能である。そのためこの系におけるランダウツェナー遷移は、可変スプリッターとして応用可能であることを示唆している。

本論文においては、原子間相互作用のない模型について考察したが、原子がボーズアインシュタイン凝縮体を形成していれば原子間相互作用の影響を考慮する必要がある。平均場近似においては原子間相互作用は波動関数の 2 乗に比例する非線形項として表現される。この問題は様々な取り組みが行われており [72, 73], 周期ポテンシャル系ではバンド境界でループ構造 [74] とよばれる特殊な構造が現れる事が知られている。ループ構造はバンド境界におけるダイナミクスの描像を変化させることが知られており、外力が線形の場合においては実験 [61, 75]・理論 [76] 共に調べられている。しかしながら調和トラップによってどのような影響が与えられるかは不明であり、興味深い点である。実験への正確なフィードバックを与える上で、原子間相互作用による影響以外にも考慮しなければならない点がある。一つはトラップの非調和性である。非調和性は重力による影響や実験的に生成している磁場の不安定性などによって誘起される。実際の実験 [17] においても 3 次の項

として現れる事が確認されている。この効果は系の対称性を崩すと共に波束のコヒーレンス時間へと影響を与えると推測される。もう一つは原子の温度である。本論文においては、用意された原子は純粋なボーズアインシュタイン凝縮体、つまり絶対零度であると仮定している。しかしながら、実験的には絶対零度は到達不可能であり、仮に熱分布を無視できるような状態であっても、光格子をロードする課程で励起の発生が避けられない問題であると考えられる。温度が有限の場合においても原子間相互作用が無視できる領域であれば、ボーズ・アインシュタイン分布の重みを用いて数値計算することによって実験と比較可能である。しかしながら、有限温度かつ原子間相互作用が無視できない場合においては計算量が非常に大きく、難しい問題である。実際に実験と比べる上では上記のような課題が残されているが、このような課題に対して本論文の研究は重要な出発点を与える。

さらに重要な点として、この研究は原子間相互作用が無視できる領域で偏極フェルミオンの系にも適用可能である。(N 個の粒子におけるスレーター行列式の時間発展を個々の一粒子問題として取り扱う、つまりハートリー積として取り扱う場合において。) この場合の理論的解析 [77] は既に行われており、実験 [70] との定性的な一致を見せている。特筆すべき点はボゾン系では現れない、ホール状態のダイナミクスが観測される点である。本論文の研究は、フェルミオン系でのホール状態のコヒーレント操作についても多くの議論が可能であり、新奇ダイナミクス研究の橋頭保となる。

また現時点において、六角格子 [7] や Lieb 格子 [78] などのより複雑な周期系でのダイナミクスが実験的に観測されている。そのような系において、光格子振幅変調による操作は未だに報告されていない。任意波束形成という観点では、光格子振幅変調は光格子位相変調と共に特に重要なコヒーレント操作である。複雑な周期系と光格子振幅変調の組み合わせが生む、新たなコヒーレントダイナミクスについての議論の出発点として本研究は重要な役割を担うと期待される。

## 参考文献

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269** 198(1995); K. B. Davis *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969(1995); C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687(1995)
- [2] O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2008)
- [3] C. Cohen-Tannoudji and D. Guery-odelin, "Advances In Atomic Physics: An Overview", World Scientific Pub Co Inc(2011)
- [4] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885(2008)
- [5] M. Gajdacz *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **84**, 083105(2013)
- [6] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 040403(2004)
- [7] L. Duca, T. Li *et al.*, *SCIENCE*, VOL 347, ISSUE 6219, pp288(2015)
- [8] M. Ayub, K. Naseer, and F. Saif, *Eur. Phys. J. D* **64**, 491-498 (2011)
- [9] J. H. Denschlag *et al.*, *J. Phys. B.* **35**, 3095(2002)
- [10] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160405(2001)
- [11] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 080403(2005)
- [12] M. Ben Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, and C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4508(1996)
- [13] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Science* **282**, 1686(1998)
- [14] C. Hooley and J. Quintanilla, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 080404(2004)
- [15] C. Weitenberg *et al.*, *Nature* **471**, 319 (2011).
- [16] L. Viverit, C. Menotti, T. Calarco, and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 110401 (2004)
- [17] P. L. Pedersen *et al.*, *Phys. Rev. A.* **88**, 023620 (2013).
- [18] チャールズ・キッテル, 固体物理学入門第8版, 丸善 (2005)
- [19] J. Heinze *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 085302(2013)
- [20] F. Bloch, *Z. Phys* **52**, 555(1928); C. Zener, *Proc. R. Soc. A.* **145**, 523(1934)
- [21] C. J. Pethick and H. Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge: Cambridge University Press(2002)
- [22] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307(2001)
- [23] S.N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178(1924)
- [24] A. Einstein, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematische Klasse*, p261(1924); p.3(1925)

- [25] F. London, *Nature*, **141**, 643 (1938); *Phys. Rev.* **54**, 947(1938)
- [26] C. E. Hecht, *Physica*, **25**, 1159(1959)
- [27] W. C. Stwalley and L. H. Nonsanow, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 910(1976)
- [28] T. W. Hansch and A. Schawlow, *Opt. Commun.* **13**, 68(1975)
- [29] V. S. Letokhov et al., *Opt. Commun.* **19**, 72(1976)
- [30] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, *J. Opt. Soc. Am. B* **6** 2023(1989)
- [31] A. Aspect et. al., *Phys. Rev. Lett.* **61**, 826(1998); A. Aspect et. al., *J. Opt. Soc. Am. B* **6** 2112(1989)
- [32] H. F. Hess., *Phys. Rev. B* **34**, 3476(1986)
- [33] D. G. Fried et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3811(1998)
- [34] P. Verker et al., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3861(1992)
- [35] P. S. Jessen et al., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 49(1992)
- [36] G. Grynberg, B. Lounis, P. Verker, J.-Y. Courtois and C. Salmon, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2249(1993)
- [37] P. S. Jessen and I. H. Deutsch, *Opt. Phys.* **37**, 95(1996)
- [38] D. R. Meacher, *Cotemp. Phys.* **39**, 329(1998)
- [39] F. L. Moore et. al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2974(1994)
- [40] J. Ringot, P. Szriftgister, J. C. Garreau and D. Delande, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2741(2000)
- [41] E. Hodby et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 120402(2005)
- [42] S Inouye et al., *Nature* **392**, 12(1998)
- [43] C. A. Regal et al., *Nature* **424**, 47(2003)
- [44] K. E. Strecker, G. B. Partridge and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 080406(2003)
- [45] Shohei WATABE and Testuro Nikuni., *Phys. Rev. A* **77**, 013616(2008)
- [46] K.-K. Ni et al., *Nature* **464**, 1324(2010)
- [47] T. Yamakoshi et. al., *Phys. Rev. A* **87**, 053604 (2013)
- [48] T. Köhler et al, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1311(2006)
- [49] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225(2010)
- [50] Y. P. Huang and M. G. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 250406(2008)
- [51] 坪田 誠/西森 拓 著, 中村 勝弘 編, ”量子渦のダイナミクス/砂丘と風紋の動力学”, 培風館 (2008)
- [52] H. イバツハ, H. リュート, 固体物理学 新世紀物質科学への基礎, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1998)
- [53] A. M. Rey, ”Ultracold bosonic atoms in optical lattices”, Ph.d. thesis, University of Maryland(2004)

- [54] A. M. Rey, G. Pupillo, C. W. Clark, and C. J. Williams, Phys. Rev. A **72**, 033616(2005)
- [55] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables", Dover Publications(1965),(web 版, <http://dlmf.nist.gov/>)
- [56] Neil W. Ashcroft and N.David Mermin, Solid State Physics, Thomson Learning (1976)
- [57] J. Bland and A. R. Kolovsky, Eur. Phys. J. D **41**, vol 2. 331(2006)
- [58] W. Zwerger, J. Opt. B: Quantum Semiclassical Opt **5**, S9(2003)
- [59] A. R. Kolovsky and H. J. Korsch, International Journal of Modern Physics B **Vol. 18**, No. 9, pp.1235-1260(2004)
- [60] T. Dekorsy, R. Ott, H. Kurz, and K. Köhler, Phys. Rev. B **51**, 17275(R)
- [61] M. Cristiani, O. Morsch, J. H. Müller, D. Ciampini, and E. Arimondo, Phys. Rev. A. **65**, 063612(2002)
- [62] ネヴィル・フランシス・モット, ハリー・ステュアート・ウイルソン・マッセ, "衝突の理論", 吉岡書店 (1975)
- [63] 高柳和夫, "原子分子物理学", 朝倉書店 (2000)
- [64] H. Ott, E. de Mirandes, F. Ferlaino, G. Roati, G. Modugno, and M. Inguscio, Laser Physics **Vol.15**, No.1, pp. 82.87(2005)
- [65] N. Poli, F.-Y. Wang, M. G. Tarallo, A. Alberti, M. Prevedelli, and G. M. Tino, Phys. Rev. Lett **106**, 038501 (2011)
- [66] S. J. Park, H. K. Andersen, S. Mai, J. Arlt, and J. F. Sherson, Phys. Rev. A. **85**, 033626 (2012)
- [67] M. Valiente and D. Petrosyan, Eur. Phys. Lett. **83**, 30007(2008)
- [68] C. C. Marston and G. G. Balint-Kurti, J. Chem. Phys. **91**, 3571 (1989); D.J. ターナー (著), 山下晃一 (翻訳), "入門量子ダイナミクス (上) 時間依存の量子力学を中心に", 化学同人 (2011)
- [69] J. F. Sherson *et al.*, New J. Phys. **14**, 083013 (2012)
- [70] J. Heinze *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 135303(2011)
- [71] M. C. Fischer, K. W. Madison, Qian Niu, and M. G. Raizen, Phys. Rev. A. **58**, R2648(1998)
- [72] T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **96**, 040401 (2006)
- [73] Y. Zhang, Z. Liang, and B. Wu, Phys. Rev. A. **80**, 063815 (2009)
- [74] B. Wu and Q. Niu, New J. Phys. **5**, 104 (2003)
- [75] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini, and E. Arimondo, Phys. Rev. Lett. **87**, 140402(2001)

- 
- [76] D. Choi and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **82**, 2022(1999)
- [77] 大古田駿, "光格子振幅変調による極低温フェルミ原子ガスにおけるホールダイナミクス", 電気通信大学大学院修士論文 (2014)
- [78] 一ノ瀬友宏, 小沢秀樹, 田家慎太郎, 中島秀太, 高橋義朗, 口頭発表, 日本物理学会, 23pAG-10(2015)
- [79] B.H. Bransden and C.J. Joachain, "Physics of Atoms and Molecules" (2nd Edition), Addison-Wesley(2003)

## 付録 A ラビ振動と光格子

原子とレーザー光との相互作用は、原子の重心運動および電子励起などの内部自由度の操作を可能とする。ここでは原子を量子論で取扱い、古典的な電場として表現されるレーザー光との相互作用について考え、ラビ振動と光格子ポテンシャルについて説明する。この章の主な参考文献は [3, 79] である。

### A.1 ラビ振動

まずここで考える状況は、2 状態  $|g\rangle$  (基底状態)、 $|e\rangle$  (励起状態) を持つ原子とレーザー光  $E_0 \cos(\omega_L t)$  との相互作用である。原子の固有状態のエネルギーはハミルトニアン  $H_A$  を用いて、それぞれ  $H_A |g\rangle = \hbar\omega_g |g\rangle, H_A |e\rangle = \hbar\omega_e |e\rangle$  と表現されることとする。またエネルギー差を  $\omega_A = (\omega_e - \omega_g)$  と定義する。ここでレーザー光と原子の相互作用はダイポールモーメント  $d$  を用いて、 $dE_0 \cos(\omega_L t)$  であると仮定する。この条件下で、初期条件として原子がすべて基底状態にある場合、レーザー光によってどのような励起過程があらわれるかを考察する。この場合ハミルトニアンは行列、

$$H = \begin{pmatrix} \hbar\omega_g & \langle g|d|e\rangle E_0 \cos(\omega_L t) \\ \langle e|d|g\rangle E_0 \cos(\omega_L t) & \hbar\omega_e \end{pmatrix} \quad (66)$$

となる。基底状態のエネルギー  $\hbar\omega_e$  をゼロ (基準点) にとり、ラビ周波数  $\Omega_R = \Omega_{eg} = \Omega_{ge} = \langle e|d|g\rangle E_0/\hbar$  と定義し (以降、非対角のカップリングを  $D_{eg} = \langle e|d|g\rangle$  と書く)、

$$H_I = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_L \end{pmatrix} \quad (67)$$

を用いて相互作用表示へと移る。相互作用表示のハミルトニアン  $H' = e^{iH_I t/\hbar}(H - H_I)e^{-iH_I t/\hbar}$  は離調  $\Delta = (\omega_A - \omega_L)$  を用いて、

$$H' = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_R(1 + e^{-2i\omega_L t}) \\ \Omega_R(1 + e^{2i\omega_L t}) & 2\Delta \end{pmatrix} \quad (68)$$

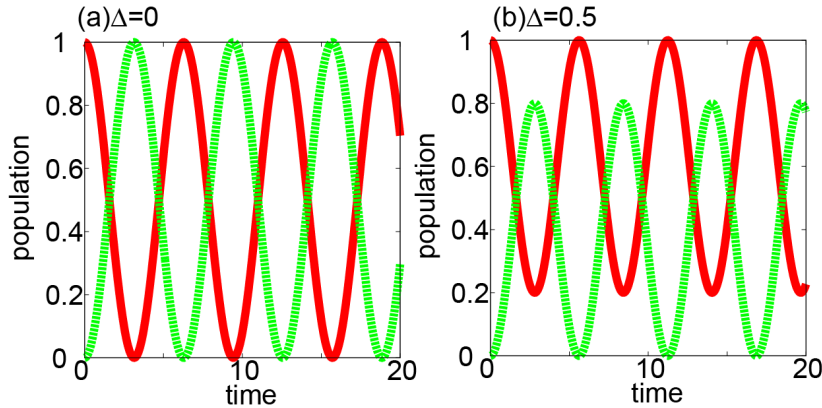
と変換される。ここでは時間に依存する波動関数  $\psi(t) = C_g(t)|g\rangle + C_e(t)|e\rangle$  について、初期状態  $C_g(t) = 1, C_e(t) = 0$  を仮定した場合の時間発展を考える。波動関数の時間発展は  $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H' \psi(t)$  で与えられる。ここで早く振動する項  $e^{\pm 2i\omega_L t}$  を無視する近似 (回転波近似) を用いると、係数  $C_g(t), C_e(t)$  は

$$\begin{cases} |C_g(t)|^2 &= \frac{\Omega_R^2}{\Omega^2} \cos^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \\ |C_e(t)|^2 &= \frac{\Omega_R^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{cases} \quad (69)$$

となる。ここで一般化ラビ周波数  $\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \Omega_R^2}$  である。図付録 A.1 にそれぞれ状態のポピュレーション  $|C_g(t)|^2, |C_e(t)|^2$  を示す。パラメータは、ラビ周波数を  $\Omega_R = 1$  に固



定し, 離調  $\Delta = 0, 0.5$  の場合を示した. 離調  $\Delta = 0$  では基底状態にあったポピュレーションは時刻  $t = \pi$  ですべて励起状態へと遷移し,  $t = 2\pi$  ですべて基底状態へと戻る. しかし離調  $\Delta = 0.5$  の場合では, 最大のポピュレーションは  $\frac{\Omega_R^2}{\Omega^2} = 0.8$  となり, 全て基底状態へと戻る周期も  $t = 2\pi/1.25$  となる. このようなラビ振動の性質は, ポピュレーションのコントロールに用いることができる. この事実を用いて, 第 5 章では特定のバンドへの励起を最大化する試みを行った. 参考文献 [3] では, 励起状態が自然幅を持つ場合についても議論を行っている.



図付録 A.1 基底状態 (赤の実線) と励起状態 (緑の点線) のポピュレーションの時間変動. (a) 離調  $\Delta = 0$  の場合と (b) 離調  $\Delta = 0.5$  の場合.

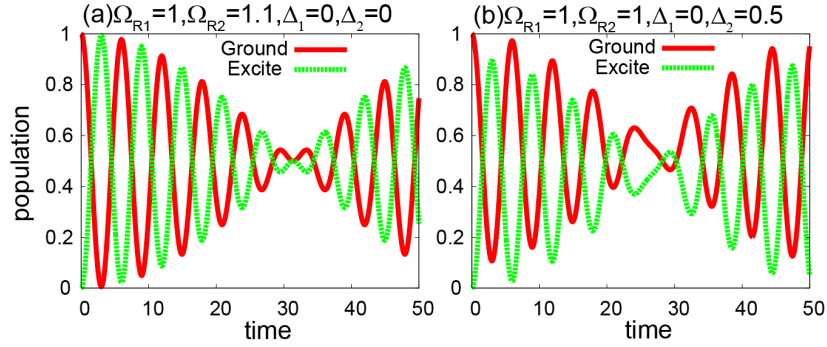
また同時に第 5 章ではバンドポピュレーションがディフェージングによる減衰を示していた. バンドポピュレーションは, 一般化ラビ周波数の異なる複数のラビ振動によって表現されるためである. ここではバンドを構成する要素として, 二つの二準位系について考え (取り得る擬運動量状態が二つの場合に相当する), ディフェージングによる影響を考察する.

ここで考える二つの二準位系はそれぞれ,

$$\begin{cases} |C_{g1}(t)|^2 = \frac{\Omega_{R1}^2}{2\Omega_1^2} \cos^2\left(\frac{\Omega_1 t}{2}\right) \\ |C_{e1}(t)|^2 = \frac{\Omega_{R1}^2}{2\Omega_1^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_1 t}{2}\right) \end{cases} \begin{cases} |C_{g2}(t)|^2 = \frac{\Omega_{R2}^2}{2\Omega_2^2} \cos^2\left(\frac{\Omega_2 t}{2}\right) \\ |C_{e2}(t)|^2 = \frac{\Omega_{R2}^2}{2\Omega_2^2} \sin^2\left(\frac{\Omega_2 t}{2}\right) \end{cases} \quad (70)$$

で表される場合を考える. それぞれの二準位系はポピュレーション 0.5 を基底状態と励起状態の間でやりとりする. ここで基底状態のバンドポピュレーションは  $B_g(t) = |C_{g1}(t)|^2 + |C_{g2}(t)|^2$ ,  $B_e(t) = |C_{e1}(t)|^2 + |C_{e2}(t)|^2$  として表現される. 図付録 A.2 ではディフェージングが起こる二つのケースについて表示した. (a) はそれぞれの離調が同じで, ラビ振動数が異なる場合, (b) はそれぞれのラビ振動数が同じで離調が異なる場合である. どちらの場合においても一般化ラビ振動数は異なる. 例えば (a) の場合において基底バンドポピュレーションは  $(\cos^2(0.5t) + \cos^2(0.55t))/2$  と二つの周波数で表現される. このため基底バンドポピュレーションのピーク値は時間によって変化する. (b) も同

様に一般化周波数が異なるために、ピーク値の振る舞いは (a) と同様である。しかしながら (a) の場合と異なり離調が 0 ではないため、励起バンドポピュレーションの最大値は  $0.5 + 0.4 = 0.9$  となる。このように励起バンドポピュレーションは離調によって最大値が決定される。複数の二準位振動を含んだケースにおいても、ポピュレーションを最大化するためには最適な離調を選ぶ必要がある。



図付録 A.2 基底状態 (赤の実線) と励起状態 (緑の点線) のポピュレーションの時間変動。(a) ラビ周波数  $\Omega_{R1} = 1, \Omega_{R2} = 1.1$ , 離調  $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$  の場合と (b) ラビ周波数  $\Omega_{R1} = \Omega_{R2} = 1$ , 離調  $\Delta_1 = 0, \Delta_2 = 0.5$  の場合。どちらの場合においても一般化ラビ周波数  $\Omega_1, \Omega_2$  が異なるために、バンドポピュレーション  $B_g, B_e$  間で振動が起こる。

## A.2 光格子

ラビ振動はレーザー光のエネルギー  $\hbar\omega_L$  と状態間のエネルギー差  $\hbar\omega_A$  が近い状況での物理である。対して、レーザー光のエネルギーと状態間のエネルギー差が遠い場合では、遷移はなくそれぞれの状態のエネルギーにシフトを与える。ここでは基底状態に与えられるエネルギーシフト  $\hbar\delta_g$  によって作られる光格子ポテンシャルについて考察する。

ここでは二次の摂動論によるエネルギーシフトを考える。ラビ振動の場合と異なり、全ての許された遷移 (非対角のカップリング  $D_{eg} \neq 0$ ) の効果を取り込むと共に、回転波近似によって無視した  $\omega_L + \omega_A$  の項も考慮に入れる。詳細は省くが、二次の摂動論の結果 [79] として、基底状態へのエネルギーのシフト  $\hbar\delta_g$  は、

$$\hbar\delta_g = \frac{1}{4\hbar} \sum_e \left[ \frac{D_{eg}^2 E_0^2}{\omega_L - \omega_A} - \frac{D_{eg}^2 E_0^2}{\omega_L + \omega_A} \right] \quad (71)$$

で与えられる。この方程式は線形応答理論で与えられる原子の動的分極率 (dynamic polarizability)  $\alpha(\omega_L)$  によって、

$$\hbar\delta_g = -\frac{1}{4} \alpha(\omega_L) E_0^2 \quad (72)$$

とも表現される。つまり非共鳴のレーザー光によって与えられるシフトは分極によるエネルギーと言える。また注目すべき点はエネルギーのシフトが電場の強さの 2 乗に比例し

ている点である。空間的に電場の強さが異なる場合には、エネルギーのシフトは空間に依存する事を示している。1次元で対向する二つのレーザー光によって作られる電場、

$$\begin{aligned} E(x, t) &= E_c(e^{ik_1x - i\omega_1t} + e^{-ik_2x + i\omega_2t}) + c.c. \\ &= 4E_c \cos(k(x - vt)) \cos(\omega t/2) \end{aligned} \quad (73)$$

を考える。ここで波数  $k = (k_1 + k_2)/2$ , 周波数  $\omega = (\omega_1 + \omega_2)/2$ , 速度  $v = (\omega_1 - \omega_2)/2k$  である。式 (73) を式 (72) に適用すると、

$$\hbar\delta_g = -4\alpha(\omega/2)E_c^2 \cos^2(k(x - vt)) \quad (74)$$

となる。これはレーザー光との相互作用によって原子が感じるポテンシャルであり、対向するレーザーの周波数が等しい場合には空間に固定された周期ポテンシャルとなる。このようにして作られるポテンシャルは光格子と呼ばれ、レーザー光のパラメーターを変えることにより、様々な操作が可能である。本研究でテーマにしている光格子振幅変調はレーザー強度を時間変調することによって実現している。

## 付録 B 数値計算手法

この章では本論文で用いた数値計算手法について述べる。固有値問題を解く方法として Fourier Grid Hamiltonian 法を、波動関数の時間発展を行う方法として 4 次のルンゲ・クッタ法を採用した。

### B.1 Fourier Grid Hamiltonian 法

本論文では Fourier Grid Hamiltonian 法 (FGH 法) と呼ばれる手法 [68] で式 (41) の固有関数  $\chi_k$  と固有エネルギー  $E_k$  を数値的に求めた。FGH 法では位置空間で等間隔の分点を取り、ハミルトニアン of 行列要素を求めて対角化することにより、固有状態を求めるものである。分点 (固有関数) の数  $N$  は偶数、奇数どちらもとる事ができるが、時間発展の段階で高速フーリエ変換 (FFT) を用いるために、 $N$  は偶数を取った。  $N$  が偶数、奇数でのハミルトニアン行列要素の違いは文献 [68] を参考の事。この手法は周期境界条件を満たしており、ゼロ境界条件の場合においても有効である。今回のケースでは調和トラップ項  $\nu y^2$  が入っているため、無限遠点で波動関数は 0 となる。実際に数値計算は有限サイズであるため、十分遠方で波動関数が 0 と近似できるようなエネルギー領域においてのみ有効である。

求めるべき固有状態の波動関数  $\chi_k(y)$  を位置空間の基底関数  $|y_i\rangle$  で

$$\chi_k(y) = \sum_{i=1}^N C_i^k |y_i\rangle \quad (75)$$

と展開する。この基底関数は位置演算子  $y$  に対して、

$$y |y_i\rangle = y_i |y_i\rangle \quad (76)$$

という固有値を与え、どのようなインデックス  $i$  に対しても  $y_{i+1} - y_i = \Delta y$  を満たす。また周期境界条件が課されるため、 $y_0 = y_N$  でなければならない。位置空間の場合と同様に運動量空間での基底関数も等間隔になっている。運動量での基底関数  $|k_i\rangle$  は運動量演算子  $k$  に対して、

$$k |k_i\rangle = k_i |k_i\rangle \quad (77)$$

を満たし、どのようなインデックス  $i$  に対しても  $k_{i+1} - k_i = \Delta k = \frac{2\pi}{N\Delta y}$  を満たす。また、それぞれの空間での基底関数は

$$\begin{aligned} \langle y_j | y_i \rangle &= \delta(y_j - y_i) \\ \langle k_j | k_i \rangle &= \delta(k_j - k_i) \end{aligned} \quad (78)$$

を満たす。ここで  $\delta$  はクロネッカーのデルタである。これらの位置空間、運動量空間の基底

関数は

$$\langle k_j | y_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik_j y_i} \quad (79)$$

の関係で結びついている。

FGH 法では位置空間での基底関数を用いてハミルトニアン of 行列要素を構成する。今回用いるハミルトニアンは運動量空間で対角表現になっている部分  $T(k) = k^2$  と位置空間で対角表現になっている  $V(y)$  から成っている。よって行列要素は

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle y_j | T(k) + V(y) | y_i \rangle \\ &= \langle y_j | T(k) | y_i \rangle + V(y_i) \delta(y_i - y_j) \end{aligned} \quad (80)$$

と書き表せる。ここで右辺第一項,  $T(k)$  の部分は,

$$\langle y_j | T(k) | y_i \rangle = \sum_l \langle y_j | k_l \rangle T(k_l) \langle k_l | y_i \rangle \quad (81)$$

となっている。右辺の項は解析的に計算可能であり、結果として

$$\langle y_j | T(k) | y_i \rangle = \begin{cases} \frac{1}{3} \left( \frac{N\Delta k}{2} \right)^2 \left( 1 + \frac{2}{N^2} \right) & (i = j) \\ \frac{\Delta k^2}{2} \frac{(-1)^{i-j}}{\sin^2\left(\pi \frac{i-j}{N}\right)} & (i \neq j) \end{cases} \quad (82)$$

が得られる。(ただしこれは固有関数の個数が偶数の場合。) このようにして得られたハミルトニアン of 行列要素を数値的に対角化することにより、固有関数が得られる。ここで得られた固有関数は規格化条件  $\Delta y \sum_{i=1}^N |C_i^k|^2 = 1$  によって規格化されている。

この行列要素は実対称行列であるため、そのような行列を対角化することに最適化されたルーチンを用いる事が望ましい。本論文では lapack(<http://www.netlib.org/lapack/>を参照のこと) のルーチン dsyevd もしくは dspevx を用いた。

最後に本論文で用いたパラメーターについて述べる。本論文では光格子サイト-320 から 320 までを  $N = 2^{16} = 65536$  個の分点で区切って計算を行った。よって位置空間での分解能, 運動量空間での分解能はそれぞれ  $\Delta y = 2 \times 320 \times \pi / 2^{16} = 3.06 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta k = 3.13 \times 10^{-3}$  となる。位置空間では  $\pm 320$  サイトよりも狭い領域で十分に収束する固有状態, また運動量空間では最大値  $N\Delta k = 205$  よりも小さい運動量で十分に収束する固有状態が, 精度よく記述される。しかしエネルギー空間での分解能は  $\Delta k^2 = 9.80 \times 10^{-6}$  となっており, ほぼ縮退した局在状態を見分けることができない。第 3 章において例示した第 214, 215 励起状態の場合 (図 3.15) では, それぞれのエネルギーは小数点 12 桁目で違いが現れる (表 5)。一方で基底と第 1 励起状態は小数点 3 桁目で異なり, 分解可能である。本論文ではこのようなほぼ縮退した状態について議論を行わなかった。しかしこの局在状態を用いた操作について研究する場合には, より高精度な数値シミュレーションが必要となる。

表 5 固有状態のエネルギー

index	energy
0	3.721142553707288
1	3.724380612725982
214	9.908962652224894
215	9.908962652225429

## B.2 波動関数の時間発展

この節では波動関数の時間発展の数値シミュレーション法について説明する。本論文では光格子振幅変調が加わっている場合の波動関数の時間発展 (式 (49)) に以下の方法を用いた。ここでの議論は Otago 大学 R. J. Ballagh 教授の講義ノート (<http://www.physics.otago.ac.nz/research/jackdodd/resources/ResourceFiles/SolvingPDE.pdf>) を基にしている。講義ノートでは GP 方程式 (非線形項を含む場合) の時間発展について詳細な議論を行っている。

一般的な 1 次元時間依存シュレディンガー方程式は

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = D\Psi(x, t) + G\Psi(x, t) \quad (83)$$

に帰着する。ここで  $D = \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ ,  $G = g(\Psi, x, t)$  はそれぞれ運動量項, ポテンシャル項であり,  $\alpha$  は単位系によって変化する運動量項の係数である。ここでは  $D$  についての相互作用描像 (Interaction picture) の波動関数を, 4 次のルンゲ・クッタ法 (Runge-Kutta 法) によって時間発展させる手法を用いた。まず  $D$  についての相互作用描像は, 波動関数を

$$\Psi^I(x, t) = e^{-D(t-\xi)} \Psi(x, t) \quad (84)$$

と書き換えることで得られる。ここで  $\xi$  はシュレディンガー描像 (normal picture ともいう) と相互作用描像のタイムセパレーション項であり, 任意にとることができる。この相互作用描像の波動関数の時間発展は,

$$\frac{\partial \Psi^I(x, t)}{\partial t} = e^{-D(t-\xi)} g(e^{D(t-\xi)} \Psi^I(x, t), x, t) e^{D(t-\xi)} \Psi^I(x, t) \quad (85)$$

$$= f(\Psi^I(x, t), x, t) \quad (86)$$

と与えられる。4 次ルンゲ・クッタ法では, 時刻  $t + \Delta t$  での波動関数は, 時刻  $t$  の波動関数を用いて

$$\Psi^I(x, t + \Delta t) = \Psi^I(x, t) + [k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4]/6 \quad (87)$$

で与えられる。係数  $k$  はそれぞれ、

$$\begin{cases} k_1 &= f(\Psi^I(x,t),x,t) \Delta t \\ k_2 &= f(\Psi^I(x,t)+k_1/2,x,t+\Delta t/2) \Delta t \\ k_3 &= f(\Psi^I(x,t)+k_2/2,x,t+\Delta t/2) \Delta t \\ k_4 &= f(\Psi^I(x,t)+k_3/2,x,t+\Delta t) \Delta t \end{cases} \quad (88)$$

となる。

ここでは  $\xi = t + \Delta t/2$  に固定して、フーリエ変換  $\mathcal{F}$  および逆フーリエ変換  $\mathcal{F}^{-1}$  を用いて時間発展を行う。フーリエ変換は

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[g(\Psi, x, t)\Psi] &= \int_{-\infty}^{\infty} g(\Psi, x, t)\Psi e^{2\pi i f x} dx \\ &= \theta(x, t) \end{aligned}$$

,そして逆フーリエ変換は

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}[\theta(f, t)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \theta(f, t) e^{-2\pi i f x} df \\ &= g(\Psi, x, t)\Psi \end{aligned}$$

の関係がある。数値シミュレーションでは、シュレディンガー描像の波動関数を相互作用描像へと写し、 $\Delta t$  の時間発展を行った後にシュレディンガー描像へと戻る。そのため相互作用描像における  $k_4$  ではなく、シュレディンガー描像での  $k_4$  を用いると、

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{D\Delta t/2}(\Psi^I(x, t) + [k_1 + 2(k_2 + k_3)]/6) + k_4/6 \quad (89)$$

となり、フーリエ変換の回数が削減できるアルゴリズムが得られる。よってここでは、相互作用描像の  $k_1, k_2$  および  $k_3$  とシュレディンガー描像の  $k_4$  を求める。フーリエ変換および逆フーリエ変換の関係を用いると、式 (88) にあらわれる、係数  $k_1, k_2$  および  $k_3$  は

$$\begin{cases} k_1 &= \Delta t \cdot \mathcal{F}^{-1} \left[ \mathcal{F}[g(\Psi, x, t)\Psi] e^{\alpha \frac{\Delta}{2} (-2\pi i f)^2} \right] \\ k_2 &= \Delta t \cdot g(\Psi^I + k_1/2, x, t + \Delta t/2) \cdot (\Psi^I + k_1/2) \\ k_3 &= \Delta t \cdot g(\Psi^I + k_2/2, x, t + \Delta t/2) \cdot (\Psi^I + k_2/2) \end{cases} \quad (90)$$

で与えられる。そしてシュレディンガー描像の  $k_4$  は

$$k_4 = \Delta t \cdot g(e^{-\Delta t/2}(\Psi^I + k_3), x, t + \Delta t) \cdot e^{-\Delta t/2} \cdot (\Psi^I + k_3) \quad (91)$$

となる。

このようにして時刻  $t$  の波動関数から時刻  $t + \Delta t$  の波動関数を得ることができる。実際に計算する際には、高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform, FFT) のアルゴリズムを用いることにより数値計算の高速化が可能である。本論文では、インテル (R) 数値演算ライブラリ (MKL) に含まれる FFT 関数を用いた。ただし FFT を用いる場合、空間の分点の数は  $2^N$  個、 $N$  は正の整数に限定される。

最後に本論文で用いたパラメーターについて述べる。位置空間の分点の数は前節と同様  $2^{16}$  個であり、 $\Delta y = 3.06 \times 10^{-2}$  である。時間発展において重要なパラメーターは、波動関数が持ちうる最大のエネルギー  $E_{max}$ 、時間の刻み幅  $\Delta t$ 、位置空間の刻み幅  $\Delta y$  の関係である。 $\Delta y \cdot E_{max}$ 、 $\Delta t \cdot E_{max}$ 、 $\Delta t / \Delta y$  がそれぞれ 1 よりも小さい必要がある（それぞれ無次元量となっている事に注意）。本論文では、励起波束の持つ最大のエネルギーが  $E_{max} \simeq 25$  程度、また典型的な時間の刻み幅は  $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$  である。それぞれのパラメーターは  $\Delta y \cdot E_{max} = 0.77$ 、 $\Delta t \cdot E_{max} = 0.13$ 、 $\Delta t / \Delta y = 0.16$  となり全て 1 よりも小さい値である。しかしながら、光格子振幅変調によって想定している最大エネルギー  $E_{max} = 25$  よりも高いエネルギー状態へと励起されたコンポーネントも少ないながら（典型的には  $10^{-5}$  程度）存在する。このような励起波束の運動については、時間発展の精度を保証しない。

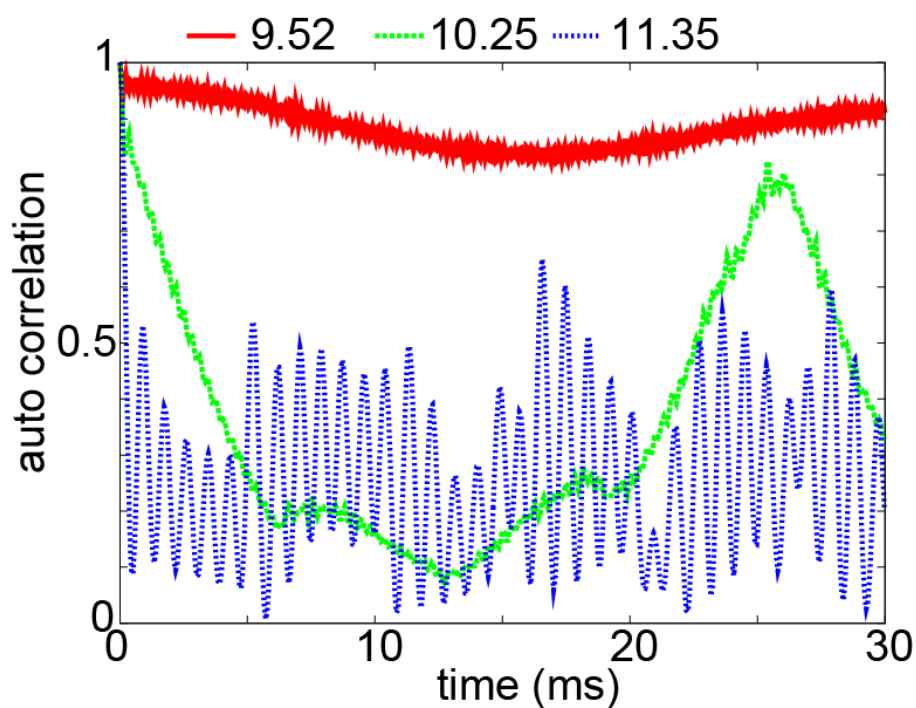


## 付録 C 光格子振幅変調による長周期の回帰現象

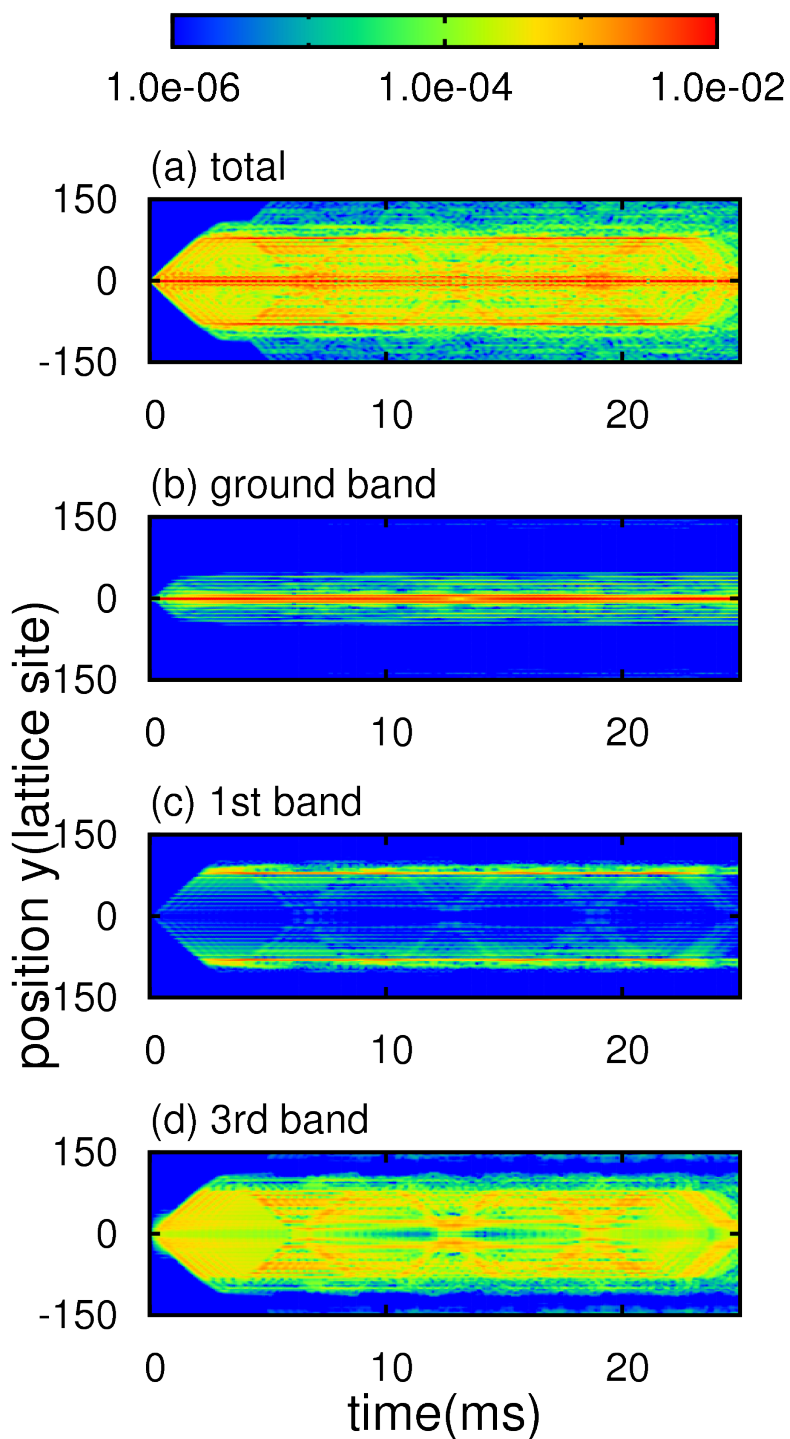
ここでは長時間の励起プロセスによってあらわれる、基底状態の再帰現象について考察する。ここで有用な指標は時刻  $t = 0$  の波動関数との相関関数  $\langle \psi(t=0) | \psi(t) \rangle$  である。図付録 C.1 では長時間 (0-30ms) の励起時間に対する相関関数の絶対値の二乗をプロットしている。励起エネルギー  $E_\omega = 9.54, 10.25, 11.35$  の三つの場合について比較している。 $E_\omega = 9.54$  の場合では、励起されるコンポーネントの量が小さく、 $E_\omega = 9.54$  のような劇的な変化は見られない。対して、 $E_\omega = 10.25$  の場合では、一度 10% まで低下した相関関数の値が 25ms では 80% までに回復する。少し励起エネルギーを上げて基底と第 2 バンドのカップリングが強いエネルギー、 $E_\omega = 11.35$  の場合では、基底と第 2 バンドの間でラビ振動が引き起こされるために、やはり長周期の回帰は現れない。

この  $E_\omega = 10.25$  の場合について考察する。この過程は、第 1, 第 3 バンド間のカップリングを中間状態として起こる現象である。図付録 C.3 では擬運動量空間での分布を表示している。第 3 バンドに励起されたコンポーネントは、調和トラップの効果によって加速 (もしくは減速) され、第 1 バンドとの共鳴擬運動量と一致した場合に遷移が起こる。同様に第 3 バンドと基底バンドとのカップリングも調和トラップによる効果で時間変化する。この励起エネルギーの場合には、ある特定の時間でポピュレーション振動と、これらの運動による周期がマッチするために、大きな回帰現象が生み出される。同様にして、位置空間での分布を見る (図付録 C.2)。位置空間では、最初基底状態にいたコンポーネントは第 3 バンドに励起され、空間的に広がっていく。そしてある時刻で、第 1 バンドの局在状態と共鳴状態になるために、遷移が起こる。局在状態では時間の経過とともに、擬運動量が変化していく。そして擬運動量が共鳴擬運動量に到達したとき、再び第 3 バンドへと励起される。再び励起されたコンポーネントは、擬運動量が逆転しており、トラップ中心へと戻ってくる。トラップ中心では、二光子過程によって第 3 バンドと基底バンド間にカップリングがあるために、脱励起して基底状態へと戻る。このサイクルが長周期の回帰現象を生み出す。

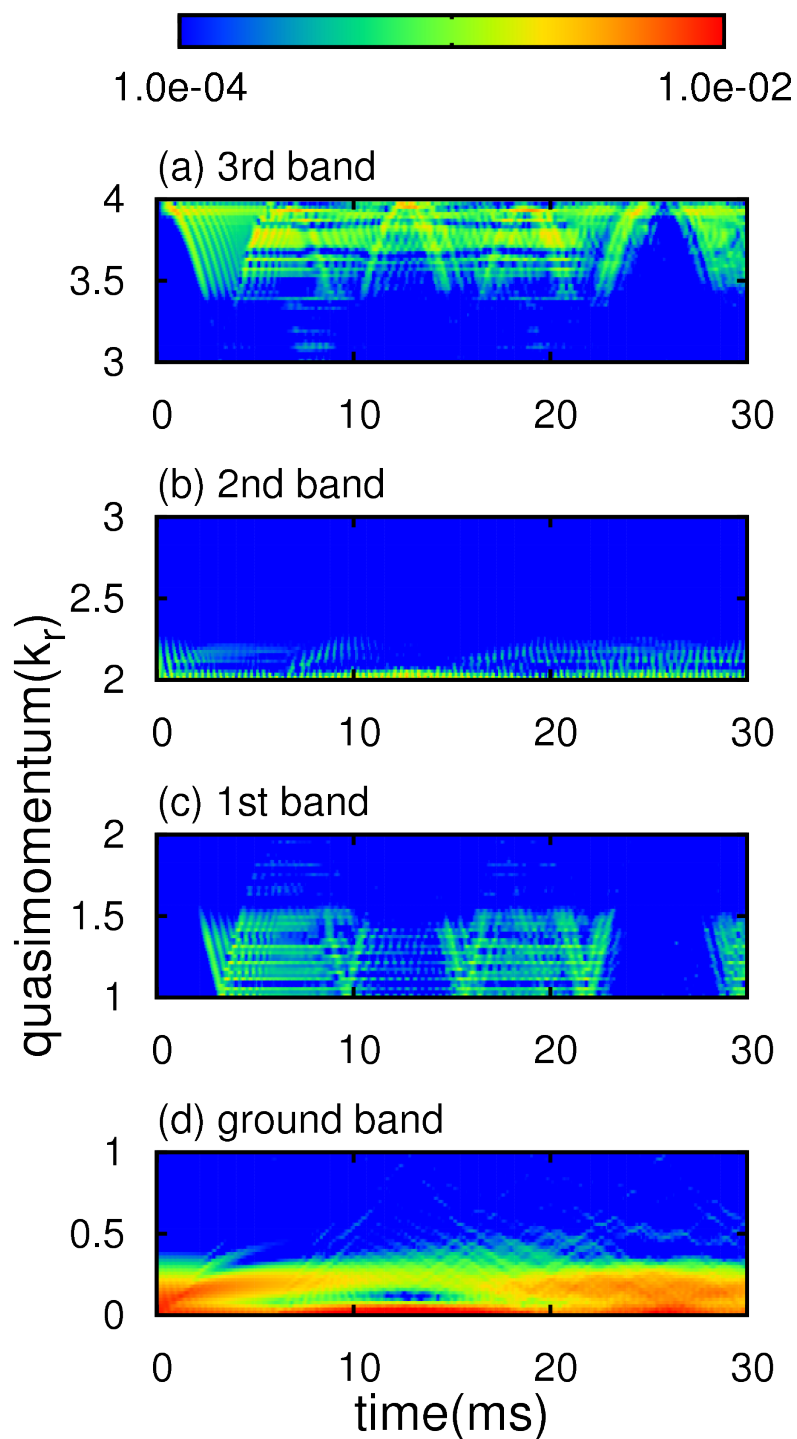
このような回帰現象は光格子位相変調において確認されており、解析が行われている。この例についても、同様の解析が可能であると考えられ、より深い考察が期待される。



図付録 C.1 励起エネルギー  $E_\omega = 9.52, 10.25, 11.35$  の場合での相関関数の絶対値の 2 乗. 9.52 の場合では擬運動量共鳴点がないために, 1 割程度の励起しか起こらない. 10.25 の場合では,  $t=25\text{ms}$  付近で 80% のコンポーネントが基底状態へと戻ってくる. また 11.35 の場合では, 基底-第 3 バンド間のラビ振動により, この時間スケールで強い回帰現象は現れない.



図付録 C.2 励起エネルギー  $E_\omega=10.25$  の場合での位置空間での分布. (a) は全バンドのコンポーネント. それぞれ (b) 基底バンド, (c) 第 1 バンド, (d) 第 3 バンドのコンポーネントのみを取り出して表示している.



図付録 C.3 励起エネルギー  $E_\omega=10.25$  の場合での擬運動量空間での分布. それぞれ (a) 第3バンド (b) 第2バンド, (c) 第1バンド, (d) 基底バンドのコンポーネントを表示している.

## 謝辞

学部生として配属されてから、渡辺信一教授から多くのご指導ご鞭撻を賜りました。国際会議や海外派遣の機会を多く与えていただき、様々な研究者との交流や議論を行う事が出来ました。また研究指導のみではなく、学生生活においても多くのことを相談させていただきました。学生生活を通じて、終始暖かいご助言を頂いたことを感謝申し上げます。また副指導教員であります森下亨准教授には、素晴らしい計算機環境を用意してくださったこと、そして本論文の完成にあたり多くのご指導を賜った事を感謝いたします。そして本論文の審査を担当して頂いた中川賢一教授、斎藤弘樹教授、伏屋雄紀准教授の各先生方にも感謝申し上げます。本論文のテーマである、光格子中の極低温原子系について研究するきっかけを与えてくださった Alexander Itin 氏からは多くのご指導を賜りました。電気通信大学滞在の際やドイツ訪問の際に、多くの議論をさせて頂いた事を感謝いたします。

学生生活では、渡辺・森下研究室の学生、ポスドクの方々に支えていただきました。特に同時期に博士課程を過ごしました、Huang Hsumin(黄 緒明) 氏、Pham Nguyen Thanh Vinh 氏、Trinh Hoai Vinh 氏、大海真貴氏の各位とは研究のみならず、様々な活動から多くの刺激を頂きました。また特に長い時間を同研究室で過ごした相澤真之介氏、山崎聡武氏、伴修氏、大古田駿氏の各位にも格別の感謝を申し上げます。そして秘書の宮前美和子氏には、様々な事務手続きについて教えていただいたこと、特に農工大との合同シンポジウムの際には多くのご協力を頂きました。渡辺・森下研究室関係者の皆様にここに感謝申し上げます。

最後に、学生生活すべてを通して経済的、精神的に支えてくれた両親へ感謝を表します。

## 関連論文の印刷公表の方法および時期

- (1) 全著者名 : Tomotake Yamakoshi and Shinichi Watanabe  
論文題目 : Wave-packet dynamics of noninteracting ultracold bosons in  
an amplitude-modulated parabolic optical lattice  
印刷公表の方法および時期 : Phys. Rev. A **91**, 063614(2015)

## 著者略歴

山越 智健 (やまこし ともたけ)

平成 22 年 3 月 電気通信大学電気通信学部量子物質工学科卒

平成 22 年 4 月 電気通信大学大学院情報理工学研究科  
先進理工学専攻 博士前期課程入学

平成 24 年 3 月 電気通信大学大学院情報理工学研究科  
先進理工学専攻 博士前期課程修了

平成 24 年 4 月 電気通信大学大学院情報理工学研究科  
先進理工学専攻 博士後期課程入学