

分子動力学法を用いた レーザー冷却イオンのクーロン結晶構造解析

神山秀

2017年2月28日

1 序論

イオントラップとは、荷電粒子を空間中に捕獲することができる装置である。世界で初めて作られたイオントラップは、1923年にE.H.Kingdonによって製作されたキングドントラップである。そして、1936年にはF.M.Penningにより静電場と静磁場を利用するペニングトラップ、1953年にはW.Paulにより高周波(RF)電場と直流(DC)電場を利用するポールトラップが開発された。そして、このイオントラップにより捕獲されたイオンに、共鳴周波数からわずかに低いレーザー光を照射し、イオンの運動を抑制することで冷却を行う、レーザー冷却という手法が考案された。これにより、イオンを周波数標準として使用する研究や量子計算の研究といった量子力学的な分野の研究に多大な影響を与えた。

本研究では、イオントラップ中のイオンがどのような振る舞いをするかをシミュレーションするプログラムを作成することを目的としている。特に、3粒子以上の多粒子系については厳密に計算することができないことが知られており、多粒子系の粒子の振る舞いを知るためには数値計算によって運動を解析する必要がある。

2 実験装置

2.1 数値計算

イオントラップ中のイオンには、ポテンシャルによるトラップ力(F_{trap})、イオン同士の相互作用によるクーロン力(F_{coulomb})、レーザー冷却による運動量変化(F_{laser})の三つの力がはたらいている。

$$F = F_{\text{trap}} + F_{\text{coulomb}} - F_{\text{laser}} \quad (1)$$

この三つの力から求められる運動方程式を解くことで粒子の位置をシミュレートすることができる。

2.1.1 差分方程式

運動方程式は、時間微分によって構成された微分方程式である。微分方程式をプログラミングで計算するには差分方程式による近似を利用する。まず、運動方程式は以下のような式で表される。

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F \quad (2)$$

微分の公式より、上式を書き換えると

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) + x(t - \Delta t) - 2x(t)}{\Delta t^2} = F \quad (3)$$

このときの Δt が運動方程式の差分に相当する。

2.1.2 微分方程式の精度

運動方程式では時間を差分として計算を行い、その時間の刻み方によって計算の精度が左右される。もしも時間の刻み幅を十分小さくできていない場合、実際の現象とは異なるシミュレーション結果となってしまうことがある。例として、イオントラップ内にイオンを二つ導入した場合の一次元でのシミュレーション結果を挙げる。

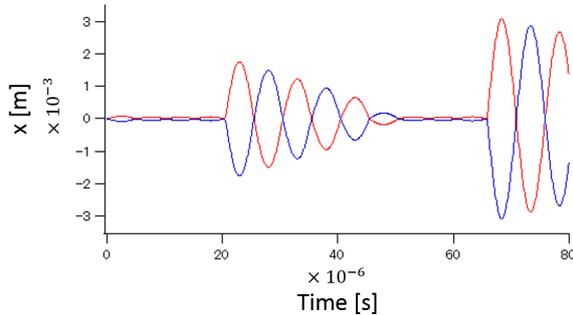


図1 刻み幅が 10^{-7} s のとき

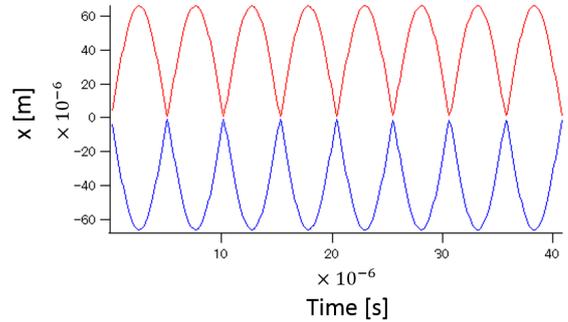


図2 刻み幅が 10^{-10} s のとき

上図において、赤と青の線はそれぞれの粒子に対応しており、横軸は時間、縦軸は粒子の位置を表している。二つの粒子はイオントラップ内部を振動しながら存在し、お互いが接近すると、クーロン力の影響により、ある地点で反発する。この反発する瞬間が時間の刻み幅よりも内側で発生してしまう場合、反発の瞬間が先延ばしになり、本来反発するよりも粒子同士が接近してしまった状態で反発が発生する。すると、通常よりも強力なクーロン力が発生し、シミュレーションの精度は低くなってしまふ。現在のプログラムでは、時間の刻み幅は 0.1ns になっている。

2.1.3 レーザー冷却の適用方法

レーザー冷却の式には、自然放出確率の要素 (A_{21}) と吸収確率の要素 ($\frac{|\Omega|^2/4}{(\Delta - \vec{k} \cdot \vec{v} + \dots)}$) といった確率的な要素が存在し、実際のイオンの運動に影響を与える要素は $\hbar\vec{k}$ のみである。したがって、プログラム内で運動方程式の数式によって直接的に処理されるのは、 $\hbar\vec{k}$ のみであり、残りの確率的な要素は if 文による条件分岐を利用して再現される。

$$F_{\text{laser}} = A_{21} \frac{|\Omega|^2/4}{(\Delta - \vec{k} \cdot \vec{v})^2 + (A_{21}/2)^2 + |\Omega|^2/2} \hbar\vec{k} \quad (4)$$

この自然放出確率や吸収確率とは、1秒間に何回、自然放出や吸収が発生するかを示しており、これらの積を散乱レート (Scattering rate) と呼ぶ。これらの確率は1秒間の時間スケールに対応しているが、実際のプログラムの計算では 0.1ns のスケールにおいて計算が行われている。そのため、このままの散乱レートを毎回の差分計算に適用してしまうと、本来の散乱レートの 10^{10} 倍の確率で冷却が行われてしまい、実際よりもイオンが冷えすぎてしまうという不具合に繋がる。

そこで、1から散乱レートの 10^{10} 倍までの範囲の数値からランダムに一つの値を決定する乱数を使用し、決定された値が散乱レートの先頭の数値以下であった場合、散乱が起き、イオンが冷却されるようにした。

3 実験結果

3.1 イオンの結晶化

イオンは冷却が進行すると、イオンの運動エネルギーよりもイオン間のクーロンエネルギーのほうが顕著になる。すると、それぞれのイオンが分離し、結晶化することが確認できる。このときのイオンの運動エネルギーとクーロンエネルギーの比として、プラズマ結合パラメーターが定義される。

$$\Gamma = \frac{\text{クーロンエネルギー}}{\text{運動エネルギー}} = \frac{\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 a}}{k_B T} \quad (5)$$

一般に $\Gamma \approx 170$ のときに結晶化することが知られている。[1, 2]

3.2 結晶化のシミュレーション

実際にシミュレーションを使用し、イオントラップに2個、3個、4個のイオンがトラップされていた場合の画像と実際の画像の比較を以下に示す。

トラップ周波数 $(\omega_x, \omega_y, \omega_z) = (1.5\text{MHz}, 1.5\text{MHz}, 780\text{kHz})$

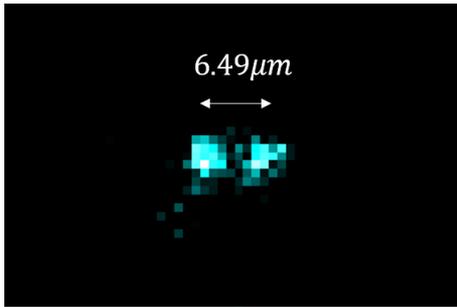


図3 実際のイオンの配置 (2粒子)

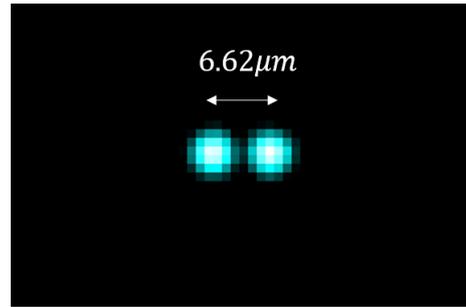


図4 シミュレーション

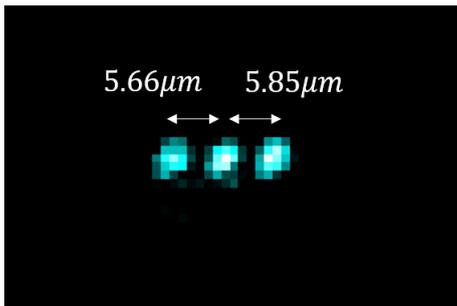


図5 実際のイオンの配置 (3粒子)

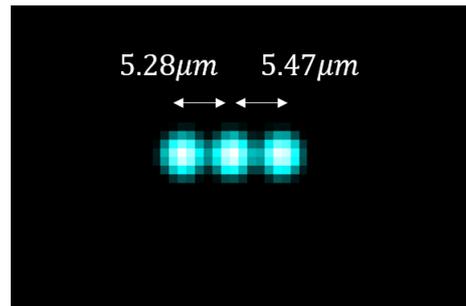


図6 シミュレーション

トラップ周波数 $(\omega_x, \omega_y, \omega_z) = (252\text{kHz}, 252\text{kHz}, 95\text{kHz})$

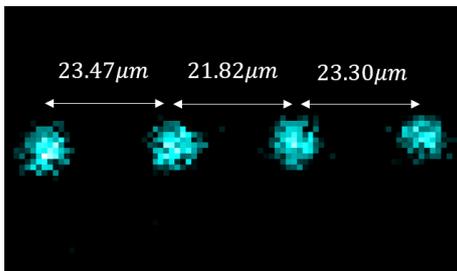


図7 実際のイオンの配置

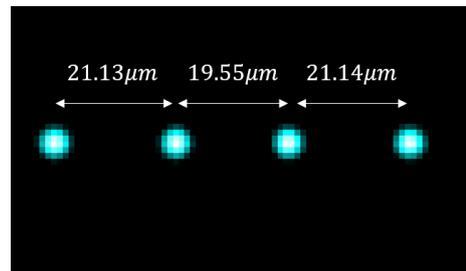


図8 シミュレーション

図中の数字と矢印は、イオン結晶の中心間の距離を示している。以上の結果は、測定誤差の範囲内に収まっているので、作成したシミュレーションは実験を行う上で十分な精度を持っていることが分かる。

3.2.1 結晶モードの観測

イオンを4個トラップした場合、2種類の結晶化構造が観測された。また、結晶化が不十分な場合は、この二つの構造を時間的に行き来しながら、イオントラップ中に存在することが分かった。以下にシミュレーションの結果を示す。また、このときのトラップ周波数は $(\omega_x, \omega_y, \omega_z) = (1.5\text{MHz}, 1.6\text{MHz}, 780\text{kHz})$ である。

3.2.2 結晶化前

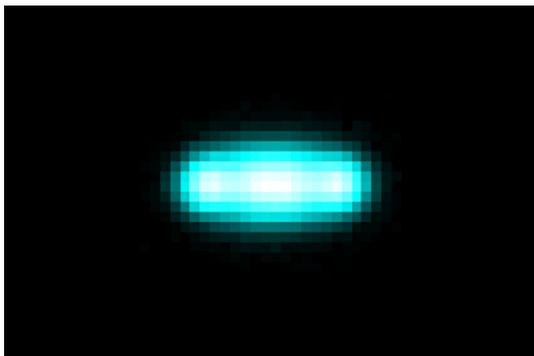


図9 結晶化前のイオン

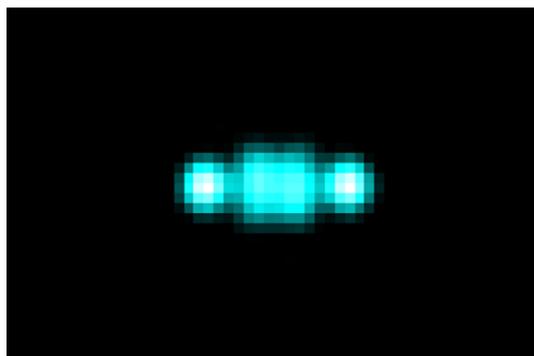


図10 中間状態

116[mK]、 $\Gamma=50.5$ （左図）のとき、イオンは結晶化しておらず、雲のような状態になっていた。19.6[mK]、 $\Gamma=450$ （右図）のとき、部分的に結晶化しているが、安定化する二種類の状態を行き来する様子が見られた。

3.2.3 結晶化

4粒子が完全に結晶化した場合は、以下の2種類の構造に確率的に落ち着くことが確認された。

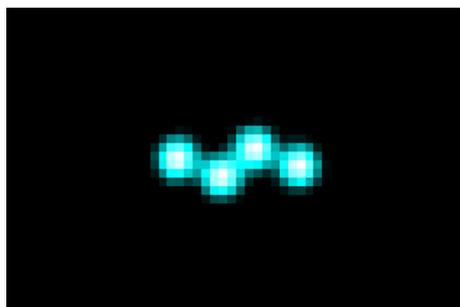


図11 結晶化（モード1）

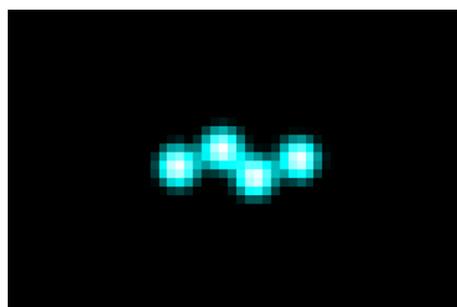


図12 結晶化（モード2）

このとき、3.8[mK]、 $\Gamma=3081$ であり、シミュレーションを複数回繰り返すことで二通りの構造をとることが観測できた。

4 まとめと展望

今回の研究では、イオントラップ中のイオンの状態をシミュレーションするプログラムを作成し、そのプログラムの妥当性の検証を行った。また、シミュレーションを利用して、結晶化前の状態、2つの結晶化モードを行き来する状態、2種類の結晶化構造を観測することができた。今後の展望としては、実験結果とシミュレーション結果の比較から反応後のイオンと反応前のイオンの状態を予測するといった、解析に使用することが考えられる。

参考文献

- [1] 占部伸二, 町田茂, 高柳英明 ”現代物理最前線3” 共立出版株式会社 (2000)
- [2] 荒巻光利, 亀山悟史, 河野明廣 ”RFトラップ中のレーザー冷却” J.Plasma Fusion Res. 85,8(2009)p520-525
- [3] 齋藤了一 ”Li原子-Caイオン混合系を用いた原子とイオンの極低温非弾性散乱評価” 修士論文, 電気通信大学 (2015)
- [4] 「ドップラー冷却について」 <http://hirano1.phys.gakushuin.ac.jp/ito/old/dopppler.html> (2017/01//25 アクセス)