

レーザー冷却に対するモンテカルロ法による冷却効果の推定

岸本研究室 伊藤 勝造

研究背景

レーザー冷却では、手法それぞれの実験条件によって、冷却限界温度などの制約が存在し、1つの実験条件だけで反跳限界温度に迫る様な極低温まで原子を冷却する事ができない。そのため、一般的には、実験条件を時間的に切り替えて極低温原子群を生成する。この様に極低温原子群が生成されるが、背景に存在する高速な原子との衝突など、環境的な加熱要因により、原子群は極低温状態を長時間保つ事ができない。実験系全体の平衡状態として極低温原子群が生成可能ならば、永続的に極低温原子群を存在させられる。しかし、時間的に実験条件を替える必要がある、一般的なレーザー冷却手法での実現は難しい。そこで、我々は以上の困難に対し、自由に運動する原子が、複数の実験条件が異なる領域を持つ空間を通過する際に、各領域で適宜冷却されて極低温に至る、時間的な実験条件の切り替えが、空間的な実験条件の変化、に置き換えられる冷却方法の実現を計画している。

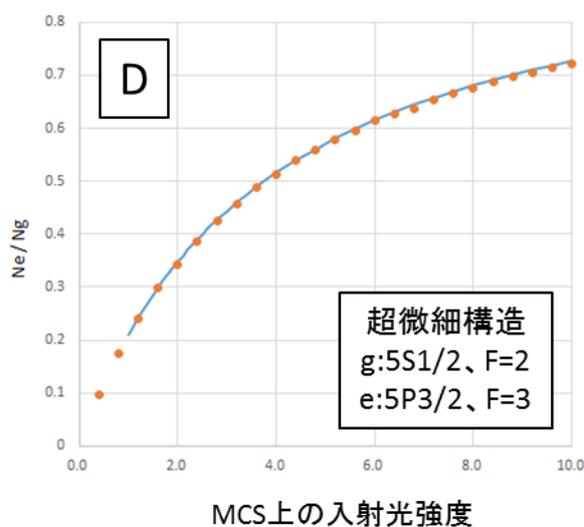
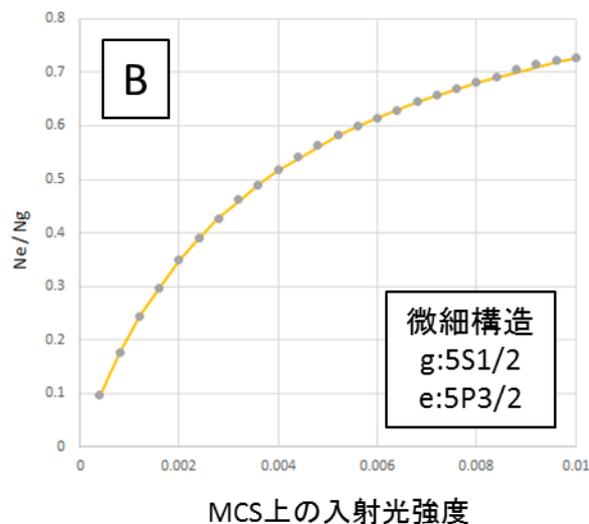
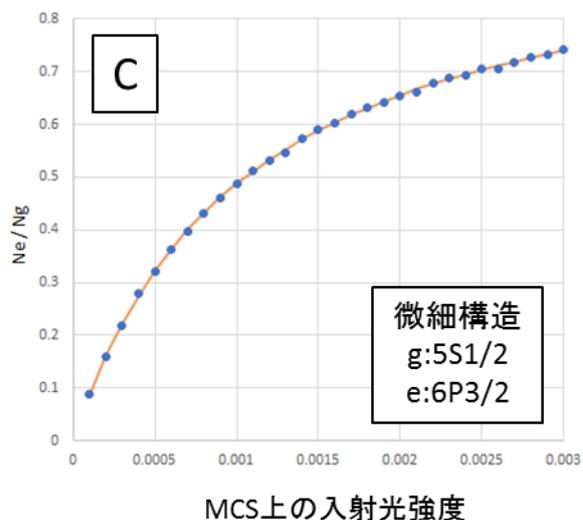
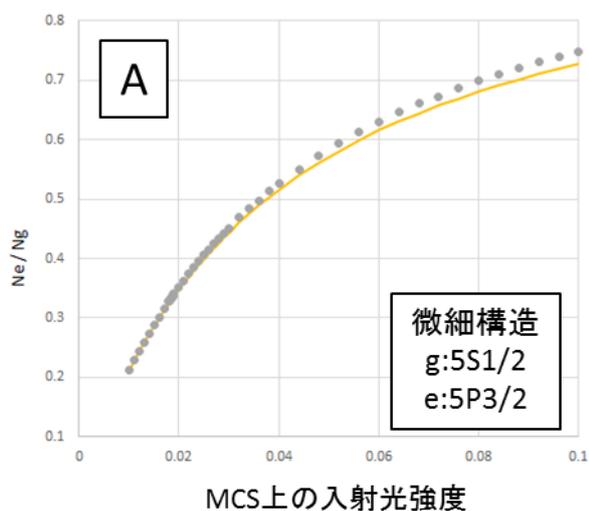
我々の計画するレーザー冷却の場合、原子位置により受ける冷却効果は異なる。その為、自由に動きまわる原子の位置に依存した冷却効果を反映させた上で、系全体の冷却効果を推定する必要がある。しかし、多数の原子の運動と複数の実験条件を考慮した、厳密に量子的な冷却効果の推定は、我々の計算機資源的に不可能である。そこで、我々は、レーザー冷却の多くの場面で、冷却対象である原子群が、原子間相互作用を無視できる希薄気体で、かつ原子密度から決まる平均原子間距離に比べて熱的ドブロイ波長が十分短く、原子を孤立した粒子と見なす事ができる点、また、粒子視された原子は、原子と光の相互作用（励起、誘導放出、自然放出）による速度と位置の変化を古典的に追跡可能である、と言う点に注目した。以上の点を踏まえると、原子が粒子視可能な範囲ならば、原子の速度変化をモンテカルロ法の適用で確率的に再現して、原子個々の時々刻々の位置を追跡し、位置に依存した冷却効果を与える事が可能と考えられる。つまり、レーザー冷却の多くの場面で、我々の計画する系に対し、量子論的に厳密な議論をせずに、追跡した系を分析して冷却効果の推定が可能となる。我々は、以上の考えに基づきモンテカルロシミュレーションプログラム (MCS) の開発を開始した。本稿では、開発した MCS プログラムの実装の信頼性、冷却効果の再現性と物理的有意性について報告する。

「遷移」実装の検証

原子と光の相互作用では、先に強調した速度変化と同時に、より基本的な原子の内部状態の変化（遷移）が存在する。多数の原子はそれぞれ、光との相互作用を繰り返してエネルギー準位を変え、各準位にある原子数（原子数分布）は時々刻々変化する。MCS にはまず、この「遷移」を実装した。数値計算は、コードにバグが含まれていない事が前提になるので、

まずコードの信頼性を検証した。原理的に、モンテカルロ法の結果は、十分な試行回数があれば解析解に一致する。これを利用して、レート方程式により求められる解析的な原子数分布と、MCS 結果の原子数分布を比較しながら、バグの有無を調べた。レート方程式は、各準位のそれぞれの項に適宜、励起、誘導放出、自然放出のレート、自然放出の際の可能な緩和先の中、どこに緩和するかを表す確率（分枝比）を設定し、平衡状態での原子数分布を、Mathematica を用いて解析的に求めた。同時に、同じ設定値で MCS による原子数分布を求めた。対象原子は、 ^{87}Rb 原子で、原子構造のレベルデータ、分枝比算出の元となる A 係数のラインデータはそれぞれ NIST[1]と Kurucz[2]のデータベースを参照した。

図1 レート方程式との比較(実線:解析解、●:MCS結果)



結果は図1のB,C,Dの様に、微細構造までを考慮した場合、超微細構造までを考慮した場合で、各構造レベルで良い一致を示した。磁気副準位レベルについては、考慮すべき準位

が多くレート方程式の立式が煩雑な為、今回は行わなかった。なお、以上は MCS の時間ステップが 0.1ns の場合で、当初検証を行った時間ステップ 1ns の場合、図 1 A の様な不一致が見られた。1ns の場合、構造レベルによらず、MCS 上の入射光強度が大きいほど解析解からの乖離も大きくなった。また、コーディングミスが露見しやすい多準位系では、逆に乖離が小さかった。一般に、入射光強度が大きいほど、励起準位にある原子が誘導放出される確率が増え、自然放出機会が減る、また、中間準位が多い場合は自然放出機会が増える、と言う事実ある。この点から、時間ステップ 1ns での不一致は、モンテカルロ法で解を求める為に十分な試行回数を得られず、自然放出の再現性が悪くなり、解析解との乖離が増大したと考えられる。一方、0.1ns では十分な試行回数を得られ、解析解と良く一致したと考えられる。また今回の系では、励起状態寿命の時間スケールが 30ns 程度なので、その点でも妥当な結果と言える。以上の結果より、遷移の MCS 実装に明白なバグは含まれて無いと判断した。

「遷移強度」実装の検証

遷移強度は遷移する準位間の双極子モーメントの大きさに由来し、遷移のし易さを表す。遷移の検証では、遷移強度は無視したが、本来は遷移強度によって同じ入射光強度でも遷移のし易さは遷移毎に変化する。実装としては、既知の A 係数から、微細構造レベルの双極子モーメントを求め、その値を元に、超微細構造、磁気副準位と順次より細かな構造の双極子モーメントを算出した[3]。遷移強度に関するコードの信頼性は、参考文献[3][4]で示されている飽和強度の再現性によって検証した。また、独自に計算した多準位系における予想飽和強度の再現性も補足的に確認した。本稿での飽和強度は、平衡状態で、狙った遷移の励起準位に全原子数の 4 分の 1 が、存在する場合の入射光強度である。なお、MCS 上の入射光強度と文献値は直接比較できないため、円偏光の飽和強度に対する比を求め、その比の一致の程度を検証した。対象は同じく ^{87}Rb 原子で、表 1 は、 $5S_{1/2} - 5P_{3/2}$ 遷移における偏光毎の飽和強度比の比較で、表 2 は、 $5S_{1/2} - 5P_{3/2}$ 遷移と、 $5S_{1/2} - 6P_{3/2}$ 遷移の飽和強度比の比較である。

表 1 の比は誤差 1.6%と、良い再現を示し、明白な実装ミスはないと判断した。また仮に、比が実際の強度を反映するとした場合、1.6%の強度誤差は実験的に許容可能であり、将来的な MCS の実用性に影響は少ないと判断した。表 2 の比は 10.7%の誤差があるが、これは本来 Optical Bloch 方程式を元に求めるべき理論値を、レート方程式から求めた事に起因

表1 偏光毎の飽和強度の比較

偏光	飽和強度 (文献値)	飽和強度比	MCS 上の強度比
σ^{\pm} [3]	1.669 mW/cm ²	1.00	1.00
Π [3]	2.503 mW/cm ²	1.50	1.50
iso [3]	3.577 mW/cm ²	2.14	2.15
Π [4]	3.053 mW/cm ²	1.82	1.85

する誤差だと思われる。この点から、この値は参考値として検証には用いなかった。以上の結果から遷移強度の実装も問題が無いと判断した。以降では、原子と光の相互作用による、原子の速度変化を実装した後の、MCSによるレーザー冷却の再現性検証になる。

表2 多準位系の飽和強度の比較

遷移	飽和強度 (計算値)	飽和強度比	MCS 上の強度比
$5S_{1/2} - 5P_{3/2}$	1.64 mW/cm ²	1.00	1.00
$5S_{1/2} - 6P_{3/2}$	36.3 mW/cm ²	22.13	24.5

ゼーマン冷却再現性によるMCSの検証

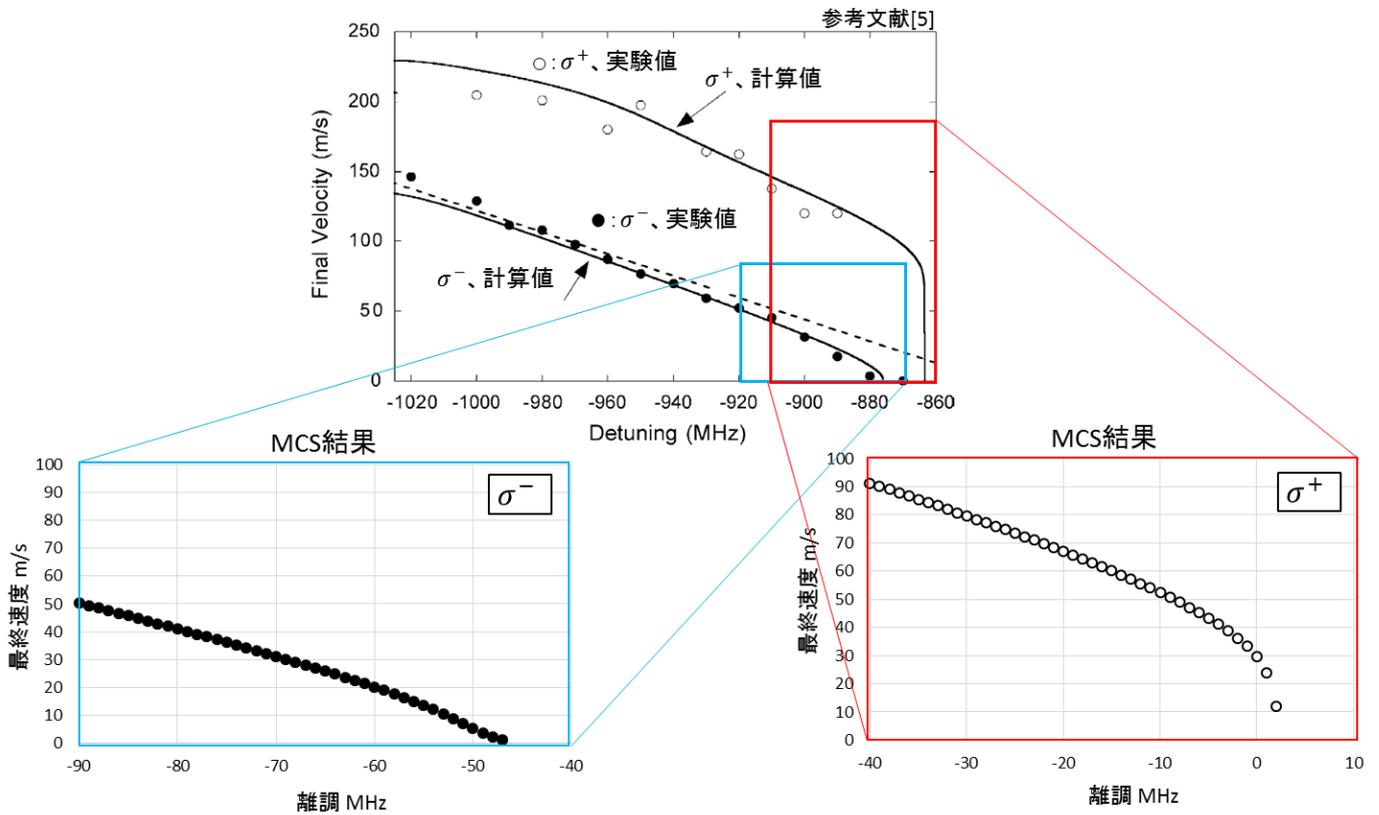
ここまでの検証は、比較元になる解析解が存在し、MCS結果と解析解の一致確認による検証が可能であった。しかし、冷却効果の検証においては、自明な解析解は存在しない。存在するのは、あくまで物理モデルが導く解析解や実際の実験データである。従って、この先の検証では単なる数値の一致確認では不十分で、レーザー冷却における物理を把握した上で、物理法則自体の再現性を、MCS結果から間接的に判断する必要がある。

ゼーマン冷却は、オープンから飛び出す、一方向に運動する原子群（原子ビーム）をゼーマンコイルに通し、その原子ビームに冷却光を対向入射して冷却する手法である。ゼーマンコイルの発する磁場は、原子速度より生じるドップラー効果を相殺するゼーマンシフトを発生するように設計され、原理的にゼーマンコイルを通過中の原子は常に冷却光との共鳴を維持する。そうして、原子は、対向する光子の吸収を繰り返し極低温まで冷却される。以上のゼーマン冷却だが、実際の実験ではコイルから漏れる残余磁場の影響により、冷却光の偏光 (σ^+ と σ^-) による顕著な冷却効果の違いが存在する[5]。本稿では、この偏光によるゼーマン冷却効果の違いを含めた冷却の再現性からMCSの検証を行った。検証では、原子の速度変化のみならず、位置変化、位置による磁場とゼーマンシフトなど多くの追加実装が不可欠である。しかし、ゼーマン冷却では、対向する光子の吸収のみが冷却に寄与し、原理の検証としては単純で扱いやすい。また、冷却効果の評価をゼーマンコイルから飛び出し、それ以上冷却されない原子の速度（最終速度）で行う事により、多数の原子集団の時間発展を追う必要が無く、短い計算時間で検証が可能である。以上の点から、本稿では1原子の最終速度に対するゼーマン冷却の効果検証を行った。

図2上は参考文献[5]のFIG.10の抜粋だが、偏光による冷却効果の差は、最終速度の離調依存性に見られる。 σ^- の場合、速度0m/s付近まで、離調依存の線形性が良い。一方、 σ^+ の場合、100m/s付近で線形性が無くなり、原子をあまり減速できていない。MCSによる再現を見ると、 σ^- の場合（図2左下）、参考文献と同様に速度0m/s付近まで良い線形性を維持し、その傾きもほぼ一致している。 σ^+ の場合（図2右下）も傾きは一致する。一方、最終速度の下限は50m/sほど差があるが、参考文献[5]に提示されている、より一般的な σ^+ の場合の理論値との比較では、最終速度の下限も一致する事を確認している。この点から以上の不一致は、ゼーマン冷却のコイル長、入射光強度などの各種実験条件の相違に起因すると考

えられる。以上の結果より、各種追加実装の信頼性を確認し、MCS が一定の物理的再現性を持つ事を確認できた。

図2 MCSによるゼーマン冷却の再現性検証



ドップラー冷却再現性によるMCSの検証

ゼーマン冷却は、運動方向の定まった原子を冷却する、一般性を欠く冷却方法だった。一方、ドップラー冷却は任意の方向に運動する原子の冷却を目的とする、一般的な冷却法である。1次元的に考えると、ドップラー冷却では、冷却光を負に離調し、対向する光子の吸収確率を、原子と同方向に運動する光子の吸収確率より大きくし、対向する光子を選択的に吸収させて冷却を実現する。また、上記の冷却効果と加熱効果（励起と自然放出の等方的ランダム性に起因する原子群の速度分散の増加）が平衡する時、この冷却法の冷却限界温度になると考えられる[6]。1次元の場合、図3の理論曲線の表式で、遷移によって決まる自然幅 Γ と、負離調 δ に依存する。なお、一般的にドップラー冷却限界温度とは、先の表式の極小値 ($\Gamma/2\delta = 1$ の時) における冷却限界温度の事で、負離調を最適化した場合である。

検証としては、負離調をパラメータに、 ^{87}Rb 原子1万個に対し、 $5S_{1/2} - 5P_{3/2}$ 遷移でのドップラー冷却を行い、平衡状態での原子群の速度分散を、ガウス分布にフィッティングして原子群の温度を求め、上式の再現性を検証した(図3の実線)。図3の赤丸はその結果である。一見、MCSは負離調依存性を良く再現しているが、詳しく見ると、負離調が小さいほど理論値からの乖離が大きい。また、どの負離調でもMCS結果は、ほぼ一貫して、理論曲

線の高温側に現れる。以上の不一致の原因として、今回は MCS 上の入射光強度を飽和強度の 10 分の 1 に設定して測定したが、この強度が十分小さくなかった、他にも、自然放出の際の速度変化が、実装上期待通りに等方的になっておらず、余計な加熱効果が存在した、などの理由が考えられる。多原子による MCS という計算時間上の問題もあり、現在も原因調査を継続中である。

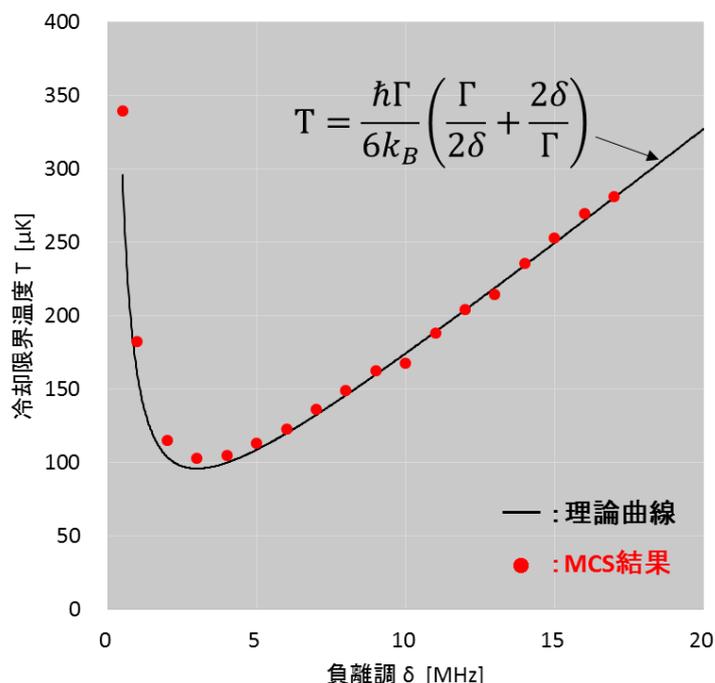
まとめ・展望

我々の計画する、複数の実験条件が並立する実験系に対するレーザー冷却の冷却効果を推定す

る事を目的に MCS プログラムの開発を開始した。プログラム自体の実装の信頼性は、直接的に解析解が得られるレート方程式などから導かれる原子数分布に対する MCS による再現性を利用した。MCS 上の冷却効果については、比較対象たる自明な解析解は無いので、冷却に関する物理を検討し、冷却モデルとの一致、実験結果との一致などを通じて、MCS の一定の物理的有意性を認めた。現在ドップラー冷却による MCS の検証中である。

今後は、最も基本的な冷却・トラップ手法である、磁気光学トラップを実装し、さらに我々の研究室で得られた、 $5S_{1/2} - 6P_{3/2}$ 遷移を用いたレーザー冷却の実験結果の MCS による検証、逆に MCS による冷却効果推定を利用した実験の実行など、双方向かつ実際的に MCS プログラムの開発・検証を進めていく。最終的には MCS が広範なレーザー冷却の冷却効果推定に対するプラットフォームに成長する事を期待する。

図3 MCSによる $5S_{1/2} - 5P_{3/2}$ 遷移でのドップラー冷却の再現性検証



[1] http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html.

[2] <http://www.pmp.uni-hannover.de/cgi-bin/ssi/test/kurucz/sekur.html>.

[3] Daniel Adam Steck, "Rubidium 87 D Line Data."

[4] Bo Gao, Phys. Rev. A **48**, 2443 (1993).

[5] S.K. Mayer, et al., Opt. Commun. **210**, 259 (2002).

[6] Christopher J. Foot, "Atomic Physics", p188-190.