

# 冷却原子系を用いた量子シミュレーション実験

中島秀太

## 概要

冷却原子系はその高い制御性からいわゆる「量子シミュレータ」の有力な候補であり、近年その制御性の向上とともに、物性物理分野だけでなく非平衡系物理や量子情報分野にもインパクトを与えるような研究が次々と行われている。この講義ノートでは、冷却原子系を用いた量子シミュレーション実験の「ツール」として使われる物理、「Feshbach 共鳴」「光格子」「Rydberg 原子」を主に取り上げて説明する。「Feshbach 共鳴」は冷却原子系において原子間相互作用 ( $s$  波散乱長) の制御を可能にする現象で、冷却原子系を用いて量子多体系を研究する上で重要なツールとなる。また「光格子」と呼ばれる、レーザー光の定在波による周期ポテンシャルを冷却原子系に構築することで、冷却原子系に格子構造やそれに由来するバンド構造を導入でき、固体物理で研究される Hubbard モデルのような系の量子シミュレーションが可能になる。「Rydberg 原子」は主量子数  $n$  が非常に大きい軌道に励起された電子をもつ励起状態原子で、これを用いた量子シミュレーション・量子コンピュータ研究が近年急速に進展しているところである。これらの物理の理解を通じて、冷却原子系を用いた量子シミュレーションとは何か、何ができるのか、を理解してもらいたい。

## 1 はじめに:量子シミュレーションとは？

### 1.1 歴史的背景

量子シミュレーション、すなわち「量子系を使って量子系のふるまいを計算をする」というアイデアが明確に言及されたのは、1981 年の “1st conference on Physics and Computation” での R. P. Feynman による基調講演 [1] だろう。この講演において Feynman は、量子系の確率分布は古典系では再現できないこと、古典計算機で手に負えない量子系の計算でも (別の) 「量子系」を使えば<sup>\*1</sup>計算しうることを議論している。この講演は

...I'm not happy with all the analyses that go with just the classical theory, because nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy. Thank you.[1]

---

\*1 ある物理系を理解するのに、別の物理系 (の考え方) を使う、というのは Feynman の十八番のような気がする。「本当にわかった」と思うのは、物事に二通り以上の説明ができた時だ」と言っていたそうで、例えば、The Feynman Lectures on Physics, vol. 2 にも “Electrostatic Analogs” という章があり、色々な物理系の問題を静電気の問題と対応させて考える話が載っている。

と締めくくられており、まさに近年の量子コンピュータ・量子シミュレーション研究の根幹を示したものと言えるだろう\*2。なお Feynman はこの講演で、量子系をシミュレートする量子系である “quantum computer\*3” として、「ボソン場をシミュレートするための格子スピン模型のスピン波」など、いくつかの例を挙げた上で、“I therefore believe it’s true that with a suitable class of quantum machines you could imitate any quantum system, including the physical world.”[1] と述べているが、より一般的な議論は、後年 S. Lloyd [2] によりなされており、(局所的に相互作用する)量子系は“量子コンピュータ”(量子系)を使って計算することができる、ということが分かっている。

## 1.2 量子シミュレータ

量子シミュレーションに利用する量子系を**量子シミュレータ**と呼ぶ。ある量子系 A を別の量子系 B でシミュレートしようとする場合、当然のことながら量子系 B は量子系 A よりも実験的に取り扱いがしやすく、かつ量子系 A に対応させられるようにパラメータを調整できる必要がある。近年の量子制御技術の発展により、このような制御性の良い、言い換えれば「プログラミング可能な」量子系が実現できるようになり、量子シミュレーションの研究が急速に進展している。量子シミュレータのプラットフォームとして利用可能な制御性の良い量子系は、量子コンピュータのプラットフォームともなりうるため、量子コンピュータ技術の発展は量子シミュレーション技術の発展と表裏一体である。このような量子シミュレータとなる量子系としては、超伝導量子回路やイオン、NMR など多くの候補があるが [3]、その筆頭\*4が本稿で扱う冷却原子系である。

## 2 冷却原子系

### 2.1 冷却原子系とは

**冷却原子系**というのは、大雑把に言えば「レーザー冷却技術により超高真空中に実現された極低温かつ希薄な原子気体」のことである。ドップラー冷却法に始まり、磁気光学トラップや蒸発冷却など、希薄原子気体を量子縮退領域まで冷却するレーザー冷却技術そのものも非常に面白い物理であるが、本稿ではその詳細には立ち入らない。レーザー冷却技術に興味がある場合は文献 [4]などを参照してほしい。ここでは冷却原子系に関する典型的な値を示し、従来の固体物理が対象にしていた電子系とどのくらいオーダーが異なるかを見てみよう。表 1 の最右列が冷却原子系の物性にまつわる物理量について典型的な値を列挙したものである。まず「極低温 (ultracold)」というほどであるからその温度は当然に低く、典型的なバルクの量子縮退領域の実験では数 10 nK 程度の温度

\*2 コンピュータの「量子版」、すなわち「量子コンピュータ」の源流となる「量子チューリングマシン」についての D. Deutsch の論文が 1985 年、実際に量子コンピュータが古典コンピュータよりも早く計算できる例である Deutsch-Jozsa のアルゴリズムが 1992 年であるから、Feynman の目の付け所はさすがである。

\*3 この Feynman の講演の中に、実際 “quantum computer” という語が出てきている。そのため、(Deutsch ではなく) Feynman を量子コンピュータの提唱者として言及する場合もある。

\*4 誇張ではなく、上記レビュー論文 [3] の “Physical Realizations” の章でも冷却原子が最初に取り上げられている。

	電子系	冷却原子系
典型的な到達温度	~ 1 mK (希釈冷凍機)	~ 10 nK
数密度	~ $10^{23} \text{ cm}^{-3}$	~ $10^{13} \text{ cm}^{-3}$
質量	$m_e \sim 10^{-30} \text{ kg}$	$10^4 \sim 10^5 m_e$
スピン	$\frac{1}{2}$	整数 (0, 1, 2, ...), 半整数 ( $\frac{1}{2}, \dots, \frac{5}{2}, \dots, \frac{9}{2}, \dots$ )
統計性	Fermi	Fermi, Bose, 混合系
格子定数	~ 数 Å (1 Å = 0.1 nm)	~ 数 100 nm (光格子)

表 1 電子系と冷却電子系との比較

が日常的に得られている。さらに冷却に特化すれば、1 nK の Bose-Einstein 凝縮 (BEC) [5] や、数 10 pK オーダーのスピン温度 [6] も確認されている。また原子数密度は  $\sim 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  と非常に小さい。0 °C・1 気圧の理想気体の場合の数密度が  $\sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  であることを考えれば、冷却原子系がどれほど希薄か分かるだろう。この希薄さゆえに、冷却原子系は大気中では実現できず、超高真空環境下 ( $10^{-11} \sim 10^{-12} \text{ Torr}$ ) に用意する必要がある。また系を構成する粒子が電子から原子に変わるので、その質量やスピン、統計性も電子系からは大きく変わる。さらに光格子を導入することで、この系に格子構造 (バンド構造) を導入することが可能となる。これらの性質は冷却原子系を量子シミュレータとして利用する際の大きなメリットになる一方、デメリットになることもある。次節でそれを詳しく見ていこう。

## 2.2 冷却原子系のメリットとデメリット

表 1 に並べた電子系の物理量の典型的な値とも比較しながら、冷却原子系のメリット (得意なこと) とデメリット (不得意なこと) を見ていこう。まず上述のように冷却原子系の温度自体が大変低い。このおかげで相互作用が  $s$  波散乱長のみで特徴付けられるようになり、次章に述べる Feshbach 共鳴を用いて原子間の相互作用を制御することが可能になる。量子多体系の量子シミュレーションを実現するにあたりこれは非常に大きなメリットとなる。一方、温度自体が低いことは、必ずしも冷却原子系が“量子多体系として”低温であることを意味しない。量子多体系にとって重要であるのは、その温度がその系の典型的な温度、例えばフェルミ温度や転移温度に比べて高いか低いかであり、実は冷却原子系はこの意味ではそれほど極低温であるとは言えない。表 1 にあるように冷却原子系の数密度  $n$  は  $\sim 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  で、典型的な金属中の電子数密度よりも 10 桁も小さい。また質量も電子の  $10^4 \sim 10^5$  倍もあるので、例えば (3 次元、スピン 1/2 の) フェルミ温度  $T_F = (\hbar^2/2mk_B)(3\pi^2n)^{2/3}$  も  $1 \mu\text{K} \sim 100 \text{ nK}$  程度という小さな値になり、実験で通常到達できる温度 ( $\sim 10 \text{ nK}$ ) はフェルミ温度の 1% 程度となってしまふ。金属電子系のフェルミ温度が  $10^4 \sim 10^5 \text{ K}$  のオーダーで、室温 ( $T = 300 \text{ K}$ ) でも  $T/T_F \sim 10^{-3}$  であることと比較すれば、冷却原子系が逆に“低温”になれずに苦しんでいるという話が理解できるだろう。一方、相互作用自体を

制御することで、より高い  $T/T_F$  でも顕著な量子現象を見ることもできる（後述）。また光格子中で冷却原子系のエントロピーを系の外周部に集め、系の中心部では低エントロピー状態を実現し、より低温の量子相を実現・観測した実験 [7] も出てきている。

また冷却原子系に対して**光格子**と呼ばれるレーザーの定在波により形成された周期ポテンシャルを導入することができる。この光格子の「格子定数」は使用するレーザーの波長の半分程度であり、金属結晶の格子定数と比べて3桁ほど大きく、1格子サイトレベルでの分解能を持つ光学観測が可能となる。上述のようにフェルミエネルギー自体が小さく、格子間をホッピングする時間もミリ秒のオーダーとなり、実時間での**量子ダイナミクス**観測が電子系と比較して圧倒的に容易になる。量子多体系を量子シミュレーションにより「理解する」という観点からは、量子ダイナミクスの実空間・実時間観測が可能となるというのは（温度を下げる問題はあるにしろ）大きな利点だろう。

またこの光格子の“結晶構造”は、固体系と異なり不純物や格子欠陥がなく、格子形状（正方格子、三角格子、カゴメ格子 etc.）や次元性なども外部から照射するレーザー光線の配置やパワー等を変えるだけで変更が可能である。金属電子系で（他のパラメータについては維持したまま）格子形状を変えるということは容易ではないので、これも大きなメリットである\*5。

さらに電子系との大きな違いとして、スピンおよび統計性が電子のもの（スピン 1/2、フェルミ統計）に限られないという点が挙げられる。冷却原子系のスピン（擬スピン）は、通常は超微細スピン\*6  $F$  のことで、例えば、最初に実現された  $^{87}\text{Rb}$  原子の希薄原子気体 BEC は、 $F = 2$ 、磁気副準位  $m_F = 2$  の（1成分）ボース粒子系である。また光トラップであれば磁気副準位に依らずに原子をつかまえることが可能であり、多成分スピン系が実現できる。特に、Yb 原子や Sr 原子のような最外殻に電子を2個持つアルカリ土類様原子の場合は、基底状態は最外殻に電子性スピンがなく核スピンの自由度のみとなり、 $SU(N)$  ( $N \geq 2$ ) 対称性を持つ多成分フェルミ系が実現できる\*7。これらは、（電子系に限らない）新しい物性物理を開拓するという点で大きなメリットである。

表1からは直接見えてこないメリット・デメリットとしては、前述のように冷却原子系が超高真空環境に保持されているということが挙げられる。これは、この冷却原子系が非常に良い孤立量子系であるという意味では大きなメリットである一方、孤立しているが故に、例えば（原子を捨てずに）エントロピーを外部環境に捨てるのが難しく、さらなる冷却を困難にする原因ともなっている。また固体電子系における「4端子法」のように、外部から端子を付けて電流を流すというようなことも当然難しく、物理量の測定は基本的には冷却原子の密度分布や原子数の測定に帰着させる必要がある。ただし、「飛行時間法」という冷却原子をトラップから解放してから撮像する方法を用いると、運動量空間分布が実空間の密度分布に変換されて吸収イメージ像として一度に取得でき、運動量空間での様子をより直接的に観測できるといったメリットもある。量子現象を（マクロな）実空間のイメージ像として直接的に見ることができるということは、冷却原子系実験の大きな魅力でもある。

\*5 ただし、固体電子系の精密制御も進んでおり、例えば STM を用いて原子を並べ、電子系に対する Lieb 型格子を作成しその物性を実際に見る実験 (M. R. Slot *et al.*, Nat. Phys. (2017)) なども行なわれているようである。

\*6 超微細スピン  $F$  は、原子の核スピン  $I$  と電子性スピン  $J$  の合成スピン  $F = I + J$  で定義される。

\*7 例えば、核スピン  $I = 5/2$  を持つ  $^{173}\text{Yb}$  原子の場合は  $SU(6)$  対称性を持つフェルミ系が実現できる。

### 3 Feshbach 共鳴

冷却原子系の非常に大きな特長として、Feshbach 共鳴と呼ばれる現象を用いて原子間の相互作用を制御出来ることが挙げられる。ここではそのエッセンスを述べよう。

#### 3.1 低エネルギー散乱と s 波散乱長

そもそも原子間の相互作用とはどのようなものだろうか？ おおもとはもちろん電磁相互作用であるが、(Born-Oppenheimer 近似の下では) 2 原子間の相互作用は 2 原子間の距離  $r$  にのみ依存する相互作用ポテンシャル  $V(r)$  で記述される。多くの場合この  $V(r)$  は Lennard-Jones ポテンシャル

$$V(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}}. \tag{3.1}$$

として良く近似できる。第 1 項は遠距離での 2 次の双極子-双極子相互作用による van der Waals 引力、第 2 項は近距離での斥力である (図 2 も参照)。これはポテンシャルの形は複雑ではあるが、ただの中心力ポテンシャルによる散乱問題であり、考えるべき 2 原子の相対運動に対する Schrödinger 方程式は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + V(r) - \epsilon_k \right) \psi(\mathbf{r}) = 0. \tag{3.2}$$

となる。ここで  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  は 2 原子の相対座標で、 $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  は還元質量 (同種原子間の散乱であれば  $m_r = m/2$ ) である。また、 $\epsilon_k = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_r$  は相対運動のエネルギーで、 $\epsilon_k > 0$  なら散乱状態、 $\epsilon_k < 0$  なら束縛状態に対応する。ポテンシャル  $V(r)$  の有効距離  $r_0$  よりも十分遠方では、散乱波動関数  $\psi(\mathbf{r})$  は

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \tag{3.3}$$

と書ける。ここで  $\mathbf{k}$  は入射の平面波の波数、 $f(k, \theta)$  は散乱振幅で、 $\theta$  は  $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  がなす角である。

冷却原子同士の散乱 (衝突) は非常に低温 (低エネルギー) で起きるので「部分波展開」が上手く使える。ただここでは部分波展開についての詳細は復習せず、低エネルギー散乱での主要項が何であり、冷却原子系の場合には確かに低エネルギー散乱となっていることを確認するのみにしよう。

図 1 のように原子 1 が作る有効半径  $r_0$  を持つ中心力ポテ

ンシャルに、原子 2 が衝突係数  $b$  で運動量  $p = \hbar k$  を持って衝突する条件を考えよう。この時、ポテンシャル中心から見た入射原子の軌道角運動量は  $L = pb = \hbar kb$  で与えられる。ここで実際に散乱過程が起きる (入射原子がこのポテンシャルの効果を感じる) には、衝突係数  $b$  が有効半径  $r_0$  の内側に入る、すなわち  $b < r_0$  である必要がある。一方、量子力学においては軌道角運

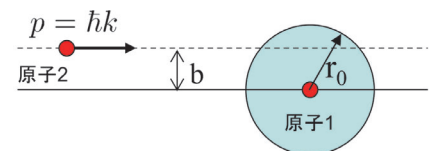


図 1 低エネルギー散乱.

動量は量子化され  $L = \hbar l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) となることから、散乱過程が起こる条件はまとめて  $kr_0 > l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) となる。低エネルギー散乱、すなわち  $k$  が小さい場合を考えると、 $k$  が十分小さく  $kr_0 \ll 1$  であれば、散乱が起きる条件を満たす  $l$  は  $l = 0$  のみとなり、 $s$  波散乱のみが許されることになる。言い換えれば、入射の波数  $k$  がポテンシャルの有効距離の逆数に比べて十分小さければ、 $s$  波散乱のみが重要となる。実際の冷却  ${}^6\text{Li}$  原子系の場合について具体的にみると、 $r_0 = (mC_6/\hbar^2)^{1/4} \sim 60 a_0$  (ただし、 $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  は Bohr 半径)、温度が  $1 \mu\text{K}$  の時の波数の逆数が  $k^{-1} \sim 5000a_0$  となっており、確かに  $s$  波散乱のみ考えれば問題ないことが分かる。

部分波展開の方法は散乱振幅  $f(k, \theta)$  を軌道角運動量  $l$  により

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (3.4)$$

と展開する方法であったが、上述のように  $l = 0$  の項のみ考慮すれば、散乱振幅  $f(k, \theta)$  および散乱断面積  $\sigma$  は

$$f(k, \theta) = \frac{e^{2i\delta_0(k)} - 1}{2ik} = -\frac{1}{-k \cot \delta_0(k) + ik}, \quad (3.5)$$

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k), \quad (3.6)$$

となる。ここで  $\delta_0(k)$  は  $s$  波散乱位相である。この  $\delta_0(k)$  を用いると、低エネルギー極限  $k \rightarrow 0$  での  $s$  波の散乱波動関数は

$$\psi_0(r) \propto 1 + \frac{\tan \delta_0(k \rightarrow 0)}{kr} = 1 - \frac{a}{r}. \quad (3.7)$$

となる。ここで  $a$  は **s 波散乱長** と呼ばれる物理量で

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \tan \delta_0(k)/k. \quad (3.8)$$

で定義される。詳細は適当な量子力学の教科書を参照してもらおうとして、 $a > 0$  は斥力、 $a < 0$  は引力に対応している\*8。また散乱断面積も  $\sigma \rightarrow 4\pi a^2$  となり、結局、極低温の原子間の相互作用(散乱)は、 $s$  波散乱長  $a$  という 1 パラメータで全て記述できるということになる。つまり元のポテンシャル  $V(r)$  の詳細な情報は不要となり、原子間の散乱過程は散乱長  $a$  のみで決まる有効ポテンシャル

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r} \delta(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (3.9)$$

で記述すれば良くなる。この有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  は擬ポテンシャルと呼ばれる。この擬ポテンシャルが散乱長や波動関数の境界条件などを正しく与えることは、例えば参考文献 [8] を見てもらいたい。 $\frac{\partial}{\partial r} r$  の部分は波動関数に  $1/r$  の発散がある場合にはそれを取り除く働きをするが、そのような発散がなければ  $\frac{\partial}{\partial r} r$  は無視できる。原子間の相互作用はデルタ関数型の「接触相互作用」とみなせ、2 原子が近づいて接触すれば散乱長  $a$  に比例する相互作用エネルギーが生じることになる。

\*8 動径方向の波動関数を考えると、 $\delta_0(k) < 0$  は位相の「押し出し」(斥力)、 $\delta_0(k) > 0$  は位相の「引き込み」(引力)に対応することが分かる。

### 3.2 磁場 Feshbach 共鳴

上述のように、極低温の原子間相互作用は  $s$  波散乱長  $a$  という 1 パラメータのみで記述できる。したがって、この  $a$  を制御することができれば原子間の相互作用を制御できるということになる。もちろん元の原子間ポテンシャル  $V(r)$  のみを見ている限りは決まった散乱長  $a$  が出るだけであるが、例えば、原子が入射して散乱されるまでに 2 次摂動的に結合できるような中間状態が存在し、そこで追加の位相シフトを受けるような過程があるならば、それは有効的な  $s$  波散乱位相の変化すなわち  $s$  波散乱長  $a$  の変化となるだろう。実は冷却原子系では **Feshbach 共鳴** [9] と呼ばれる現象を用いることでこうしたことが可能となる。以下で、アルカリ原子の場合を例にこの Feshbach 共鳴の概略を述べよう。

Li や Rb などのアルカリ原子の最外殻は軌道角運動量  $L = 0$  の軌道に電子が 1 個入っているため電子性スピン  $J = S = 1/2$  を持つ。このようなアルカリ原子 2 個が互いに近づく時に感じるポテンシャルは、この 2 原子の電子性スピンの合計が一重項 (singlet) 状態 ( $S = 0$ ) か三重項 (triplet) 状態 ( $S = 1$ ) かで形が異なり\*<sup>9</sup>、通常、一重項状態を組む場合の van der Waals ポテンシャルは深くなり、三重項状態を組む場合のポテンシャルは浅くなる (図 2 参照)。いま始状態として 2 原子が偏極している (両方の原子の電子性スピンが同じ方向を向いている) 状況を考えよう。この時、2 原子の最外殻電子の合成スピンは三重項状態になっているので、2 原子は三重項状態に対する浅いポテンシャルにより散乱される。2 原子が互いに近づいてまた離れるという散乱過程を考えると、この 2 原子の全角運動量は保存されるべきであるから、三重項で近づいたものは三重項のまま散乱されるはずである。しかし、2 原子の距離が非常に近づいた時、実は 2 次摂動的な中間状態としては一重項状態ポテンシャルにある束縛準位と結合しうる\*<sup>10</sup>。この結合の強さを  $g$  とすれば、2 原子間の相互作用エネルギー  $U$  は 2 次摂動により

$$U \rightarrow U + \frac{g^2}{E_{\text{th}} - E_{\text{res}}} \quad (3.11)$$

と変化するだろう [8]。ただし、 $E_{\text{th}}$  は散乱状態のエネルギー、 $E_{\text{res}}$  は 2 次的に結合する一重項状態ポテンシャルに存在する束縛準位のエネルギーである。もしも  $E_{\text{th}}$  と  $E_{\text{res}}$  の値が近づけば、相互作用エネルギーは共鳴的に大きく変化する。これが Feshbach 共鳴と呼ばれる現象である。

アルカリ原子の Feshbach 共鳴が面白いのは、(3.11) 式のエネルギー分母 ( $E_{\text{th}} - E_{\text{res}}$ ) を磁場により制御出来る点にある。つまり、三重項状態は電子性スピンを持つため、散乱状態のエネルギー  $E_{\text{th}}$  は (波数  $k$  はそのまま\*<sup>11</sup>) 磁場により Zeeman シフトするが、一重項状態ポテンシャルに

\*<sup>9</sup> これは水素分子  $\text{H}_2$  の場合の結合性軌道と反結合性軌道の話に近い。

\*<sup>10</sup> これは、原子の超微細結合  $A\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$  に由来する。実際、2 原子それぞれの超微細結合項  $H_{\text{hf}}$  を合わせると

$$H_{\text{hf},1} + H_{\text{hf},2} = A(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{I}_1 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{I}_2) = \frac{A}{2}\mathbf{S} \cdot (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2) + \frac{A}{2}(\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2) \cdot (\mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_2) = V_{\text{hf}}^+ + V_{\text{hf}}^-, \quad (3.10)$$

となり、 $V_{\text{hf}}^- = \frac{A}{2}(\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2) \cdot (\mathbf{I}_1 - \mathbf{I}_2)$  の項は合成電子スピンを保存せず、一重項状態と三重項状態を結びつけることが分かる。

\*<sup>11</sup> 例えば、原子核物理などでこの Feshbach 共鳴を観測する場合は、入射の運動エネルギー  $E_{\text{th}}$  の方を変えるのが普

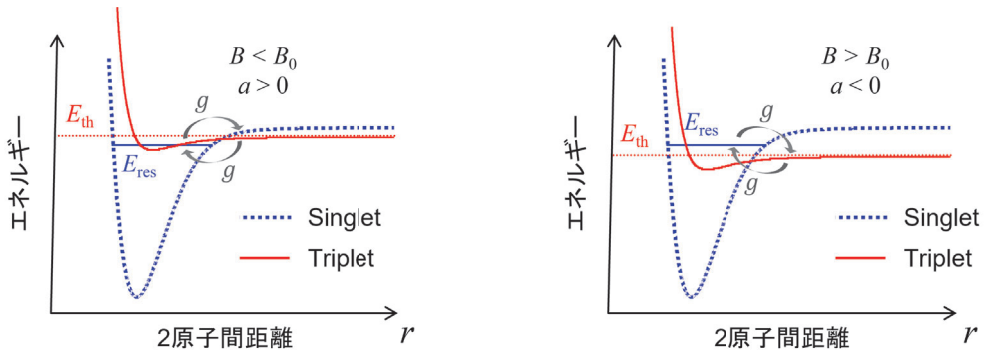


図2 磁場 Feshbach 共鳴. 三重項状態のポテンシャル (triplet, 赤実線) での散乱状態のエネルギー  $E_{\text{th}}$  と、一重項状態のポテンシャル (singlet, 青点線) の束縛状態のエネルギー  $E_{\text{res}}$  は、磁気モーメントの違いに由来して磁場依存性に違いがあるため、外部磁場の大きさを変えることにより  $E_{\text{th}}$  と  $E_{\text{res}}$  の大小関係が変わる.  $E_{\text{th}} > E_{\text{res}}$  では散乱長は正 (斥力),  $E_{\text{th}} < E_{\text{res}}$  では散乱長は負 (引力) となる.

ある束縛準位のエネルギー  $E_{\text{res}}$  は磁場をかけてもほとんど変化しない。つまり、外部磁場を変化させることで  $(E_{\text{th}} - E_{\text{res}})$  の値を制御できる。 $(E_{\text{th}} - E_{\text{res}})$  がある特定の磁場  $B = B_0$  でゼロになるとすれば、この  $B_0$  の周りで  $(E_{\text{th}} - E_{\text{res}})$  は

$$E_{\text{th}} - E_{\text{res}} \simeq (\mu_{\text{res}} - \mu_1 - \mu_2)(B - B_0) = \Delta\mu(B - B_0), \quad (3.12)$$

のように書ける。ここで  $\mu_1$  と  $\mu_2$  は三重項状態にある原子 1 と原子 2 の磁気モーメント、 $\mu_{\text{res}}$  は一重項状態ポテンシャルにある束縛準位 (分子状態) の磁気モーメントである。上の議論では「相互作用エネルギー」という言い方をしたが、より正確には散乱理論を適用して、散乱長  $a$  について

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m_r}a = \frac{2\pi\hbar^2}{m_r}a_{\text{bg}} + \frac{|\langle\psi_{\text{res}}|H_{QP}|\psi_0\rangle|^2}{E_{\text{th}} - E_{\text{res}}}. \quad (3.13)$$

という式が得られる [10]。  $H_{QP}$  は入射の散乱状態  $|\psi_0\rangle$  と、共鳴的に結合する中間状態の束縛準位  $|\psi_{\text{res}}\rangle$  との結合を与えるハミルトニアンである。  $a_{\text{bg}}$  は Feshbach 共鳴点からは十分離れたところでの散乱長で、背景散乱長 (background scattering length) と呼ばれる。この (3.13) 式から分かるように、結合する束縛準位のエネルギー  $E_{\text{res}}$  が  $E_{\text{th}}$  よりも大きければ引力 ( $a < 0$ ) となり、  $E_{\text{th}}$  よりも小さければ斥力 ( $a > 0$ ) となる (図 2)。これを、上の (3.12) 式のように共鳴磁場の周りでこの形式に書き直すと、冷却原子系の Feshbach 共鳴の説明でよく見かける表式

$$a = a_{\text{bg}} \left( 1 + \frac{\Delta B}{B - B_0} \right), \quad (3.14)$$

が得られる。ただし、磁場 Feshbach 共鳴の幅  $\Delta B$  は

$$\Delta B = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{|\langle\psi_{\text{res}}|H_{QP}|\psi_0\rangle|^2}{a_{\text{bg}}\Delta\mu}. \quad (3.15)$$

通だろう。



で与えられる [10]。こうして磁場により  $s$  波相互作用を引力 ( $a > 0$ ) から斥力 ( $a < 0$ ) まで共鳴的に大きく値を変えて制御することが可能になる。

なお Yb 原子や Sr 原子のように最外殻に 2 個電子を持つアルカリ土類様原子では、基底状態では最外殻電子 2 個が一重項対を組み原子が電子性スピンを持たない。そのため、2 原子間のポテンシャルは一重項状態に相当するものしか存在せず基底状態では磁場 Feshbach 共鳴を利用できないが、光を用いた Feshbach 共鳴が実現されている [11]。

以上の議論をまとめると、結局、冷却原子系の文献で見かける「冷却原子系では相互作用を制御することができる」という言葉の意味は「低エネルギー散乱極限の  $s$  波散乱長を制御できる」ということであり、それほど突飛な話でもないことが分かるだろう。このように書くと、物性物理的にはあまり面白味がないように感じるかもしれないが、実は  $s$  波散乱が (3.9) 式のように点接触型の相互作用として書けることから、 $s$  波相互作用が制御出来ることは固体物理学で出てくる **Hubbard 模型** という格子モデルにおける「同一格子点上の相互作用 (オンサイト相互作用)」を制御できることを意味する。Hubbard 模型は固体電子系の良い近似モデルであり、その相互作用項を自在に制御出来るということは量子シミュレータとしての応用に大いに役立つことが分かるだろう\*12。ただし、スピン模型で出てくるような「最近接相互作用」は直接は出てこないため\*13、そのような物理系の量子シミュレーションを冷却原子系で実現したい場合は、より遠距離型の相互作用をもつ磁気モーメントの大きな原子や極性分子、Rydberg 原子などを用いる必要がある。

また、Er 原子や Cr 原子など、大きな磁気双極子モーメントを持つ原子の場合、より長距離まで届く磁気双極子-双極子相互作用 ( $\sim r^{-3}$ ) も原子間相互作用に効いてくる。この時は、 $d$  波などより高次の散乱波動関数の効果も現れるが、あくまで高次の効果であるので密度を高めるなどしないと極低温では本来は大きな効果として見ることは難しい。しかし、 $s$  波散乱長を Feshbach 共鳴でゼロにしてやると、 $d$  波が散乱において主要項となり、 $d$  波散乱に由来した BEC の崩壊 [12] などが観測出来るようになる。

### 3.3 Feshbach 共鳴の応用

Hubbard 模型の量子シミュレーションについては後述することにして、ここでは冷却原子系の Feshbach 共鳴の制御により初めて研究が可能になった物理について紹介する。一つは BEC-BCS クロスオーバー\*14である。元々は A. J. Leggett が  $^3\text{He}$  の超流動と、2 原子分子の BEC を統一的に扱おうと 1980 年代に考えた理論 [13] であったが、冷却原子系の実現により、一つの物理系で相互作用のみを連続的に変えて研究することが可能になった [14]。特に面白いのは散乱長  $a$  が非常

\*12 ただし、相互作用の大きさがバンドギャップを超えると単一バンドモデルが破綻し、かつ閉じ込め誘起 Feshbach 共鳴という現象も起きて話が複雑になるため、光格子中の冷却原子系を Hubbard 模型の量子シミュレータとして使用する場合はそれほど極端な範囲で相互作用をふることはない

\*13 トンネリングが小さい領域の Hubbard 模型は、2 次摂動の結果、有効ハミルトニアンがハイゼンベルグ型の最近接相互作用を持つモデルになり、その相互作用は制御できる。

\*14 余談だが、研究のバックグラウンドが冷却原子実験の研究者は「BEC-BCS クロスオーバー」と、物性理論系の研究者は「BCS-BEC クロスオーバー」と呼ぶことが多い気がする。

に大きい ( $k_F a \gg 1$ ) 領域 (ユニタリ領域) で、 $(k_F a)^{-1} \rightarrow 0$  (ユニタリ極限) では、BCS 超流動転移温度  $T_c$  がフェルミ温度を  $T_F$  として  $T_c = 0.17T_F$  となることが冷却原子系の実験で確認されている [15]。冷却原子系はフェルミ温度自体小さいのでこの転移温度そのものも数 10 nK のオーダーではあるが、この現象をフェルミ温度が  $10^4$  K オーダーの金属電子系で考えれば、その転移温度は  $10^3$  K のオーダーとなり、室温をはるかに超えるものとなる。つまり、BCS 理論そのものには室温超伝導を禁止するような物理は何もない、ということが冷却原子系の実験から納得できるだろう\*<sup>15</sup>。もう一つは Efimov 状態の観測である。Efimov 状態は共鳴的に  $s$  波散乱する 3 体系における 3 体束縛状態で、元々は原子核理論家の V. Efimov により原子核物理において 1970 年代に予言されたものであったが、原子核物理の方ではずっと観測されておらず、冷却 Cs 原子系において初めて実験的な間接証拠が観測 [16] され、以降、冷却原子系において束縛エネルギーの測定など多くの実験がなされている [17]\*<sup>16</sup>。

Feshbach 共鳴による相互作用の制御技術は、今後も冷却原子系を量子多体系の量子シミュレーターとして利用する、あるいは言い方を変えれば人工量子物質として研究する際の大きなアドバンテージになると考えられる。

---

\*<sup>15</sup> 金属電子系でこのユニタリ領域を実現することはまず無理であろうが、実は近い状況が「中性子星」の表面では起きているという話がある。つまり、中性子星の温度は  $10^5 \sim 10^7$  K にも達するとされるが、一方で密度も極端に高いためそのフェルミ温度はさらに数桁大きく、また中性子間の  $s$  波散乱長が有効ポテンシャル長よりもそれなりに長い状況であるため、ユニタリ極限に近い BCS 超流動になっていると考えられている。

\*<sup>16</sup> 冷却原子系を用いた量子シミュレーションの「評価軸」としては、

- 理論的・数値計算的には難しくはないが、その概念を実際の物理系で実現することに意義がある研究 (例: Haldane 模型の実現 [18])
- 数値計算的に難しく、量子シミュレーションをすることに意義がある研究 (例: 量子系の非平衡ダイナミクス、格子ゲージ理論 etc.)

の 2 軸があるように思われる。冷却原子系を用いた BEC-BCS クロスオーバーや Efimov 状態の観測は前者の良い例であろう。

## 4 光格子

冷却原子系に対して、レーザー光の定在波により構築される周期ポテンシャル=光格子を導入することで、冷却原子系に対して格子構造（バンド構造）を導入することができる。ここでは光格子ポテンシャルの物理と光格子の導入が可能にする Hubbard 模型の量子シミュレーションの概略を述べる。

### 4.1 光双極子トラップ

十分に低温の原子であれば、レンズで絞ったレーザー光線で捕捉することができる。これを**光双極子トラップ（光トラップ）**と呼ぶ。この原理を理解するためにまず静電場  $\mathcal{E}$  中に置かれた中性原子がどのようなエネルギー変化を受けるかを考えよう。水素様原子の基底状態を考えると、原子は全体では電氣的に中性で、かつ最外殻電子は  $S$  軌道で等方的なため電気双極子モーメントも持たず、一見すると電場とは相互作用しないように思える。しかし、電場を印加すると電子雲が変形して原子は（電場が弱い範囲では）電場  $\mathcal{E}$  に比例する電気双極子モーメント  $\langle \mathbf{d} \rangle = \alpha \mathcal{E}$  を持つようになる。ここで  $\alpha$  は分極率、また電気双極子モーメント  $\mathbf{d}$  は原子核からみた電子の位置座標  $\mathbf{r}_i$  を用いて  $\mathbf{d} = -e \sum_j \mathbf{r}_j$  で与えられる。電気双極子モーメント  $\mathbf{d}$  は電場と  $H' = -\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}$  のように相互作用するので、元々は電氣的に中性であった原子も電場と相互作用するようになる。言い換えれば、中性原子は電場とは直接に（一次で）は相互作用しないが、二次では相互作用するということになる。この過程で原子が受けるエネルギーシフト  $\Delta E$  は、電場の微小変化  $d\mathcal{E}$  に対する原子のエネルギー変化  $dE = \langle \mathbf{d} \rangle \cdot d\mathcal{E}$  を積分して

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 \quad (4.1)$$

となる。基底状態  $|g\rangle$  にいる原子の分極率  $\alpha$  の量子力学的な表式は、このエネルギー変化（Stark シフト）を相互作用ハミルトニアン  $H'$  に対する 2 次摂動として

$$\Delta E = -\sum_e \frac{|\langle e|H'|g\rangle|^2}{E_e - E_g} = -\sum_e \frac{|\langle e|\mathbf{d} \cdot \hat{\epsilon}|g\rangle|^2}{E_e - E_g} \mathcal{E}^2 \quad (4.2)$$

と計算し比較すればよい（ただし  $\hat{\epsilon}$  は偏光方向の単位ベクトル）。基底状態  $|g\rangle$  に対する二次摂動は必ずエネルギーを下げるので、静電場に対する基底状態の分極率  $\alpha$  は正になる。

ここまでは静電場を考えたが、ここからは光、すなわち時間的に振動する電場  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}e^{-i\omega t} + \mathcal{E}^*e^{i\omega t}$  に対して原子のエネルギーがどう変化するかを考える。振動する電場の場合、分極率  $\alpha$  は振動数  $\omega$  に依存し、基底状態においてすら  $\alpha(\omega) > 0$  とは限らなくなる。振動する電場によるエネルギー変化は分極率  $\alpha(\omega)$  を用いて

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha(\omega) \langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \quad (4.3)$$

と表される。ただし  $\langle \dots \rangle_t$  は時間平均である。(4.2) 式を時間変化する電場の場合に拡張して  $\alpha(\omega)$  を量子力学的に求めると、

$$\alpha(\omega) = - \sum_e \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2} \quad (4.4)$$

が得られる [10]。光の周波数が特定の準位間の遷移周波数  $E_e - E_g = \hbar\omega_0$  に近く、それ以外の遷移からは非常に遠い場合は、

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\hbar} \frac{2\omega_0 |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}} | g \rangle|^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \approx \frac{|\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}} | g \rangle|^2}{\omega_0 - \omega} \quad (4.5)$$

となる。光トラップに使うレーザーの周波数  $\omega$  が遷移の周波数  $\omega_0$  よりも小さければ  $\alpha > 0$  となり、光電場が強いところほど原子のエネルギーが下がる。光強度  $I(\mathbf{r}) \propto \mathcal{E}(\mathbf{r})^2$  であるから、結局、光が強いところほど原子のエネルギーが下がることになり、原子に対する有効ポテンシャル（光双極子ポテンシャル）

$$U(\mathbf{r}) = - \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}) \quad (4.6)$$

を得る [19]。ただし、 $\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^2} |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}} | g \rangle|^2$  はこの 2 準位間の自然線幅である。ビーム径が  $\omega_0$  の TEM00 ガウシアンビームでは、動径方向（光の進行方向と直交する方向）の光強度分布が  $I(r) = I_0 e^{-2r^2/\omega_0^2}$  で与えられ、ビーム中心 ( $r = 0$ ) に行くほど強度が上がるので、 $\omega < \omega_0$ （赤方離調）であれば原子はビーム中心に捕捉される（図 3(a)）。特に図 3(c) のようにビームをレンズで収束させると、軸方向に対しても強度勾配が出来て原子を 3 次元的にトラップできるようになる\*17。反対に、光トラップに使うレーザーの周波数が  $\omega > \omega_0$ （青方離調）である場合  $\alpha < 0$  となるため、ビーム中心に行くほど原子のエネルギーが上がり（図 3(b)）、原子はビームから逃げトラップとしては使えない。しかし、ラゲールガウスビームと呼ばれるビーム断面がドーナツ型のレーザーを用いれば、ドーナツの穴の部分に原子を捕捉することが可能である。

なお (4.5) 式は、次のような振動子モデルで定性的に理解できる。原子中の電子を、周波数  $\omega_0$  で  $x$  軸上を運動する調和振動子と考える。この系に周波数  $\omega$  で振動する電場  $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}e^{i\omega t}$  をかけた場合の電子の運動方程式は

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = - \frac{e}{m_e} \mathcal{E} e^{i\omega t} \quad (4.7)$$

で与えられる。ただし  $m_e$  は電子の質量である。定常状態の解は  $x(t) = x(\omega)e^{i\omega t}$  の形になるから、これを (4.7) 式に代入して

$$x(\omega) = - \frac{e\mathcal{E}}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (4.8)$$

\*17 絞ったビームの光強度が強いところに原子（誘電体）を捕まえることができる、というのは生物物理などの分野の人にとっては「光ピンセット」と言えば分かるかもしれない。ビームを非常に細く絞れば、原子 1 個のみを捕まえて操作する、ということも可能である。これは後述する最近の光ピンセット列による Rydberg 量子コンピュータにおいても重要な技術である。

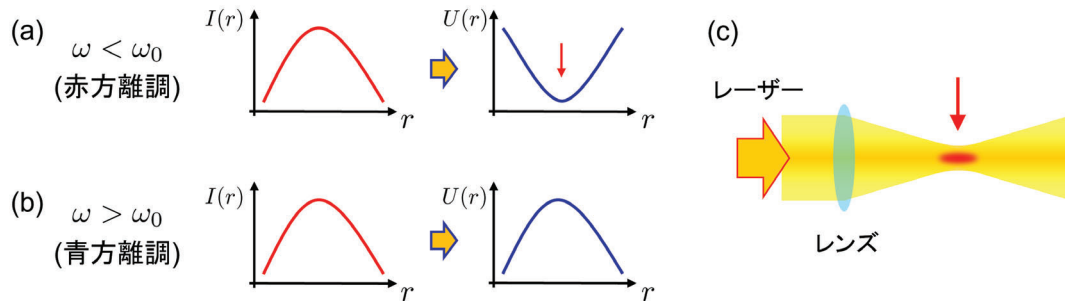


図3 光双極子トラップ. (a) 光双極子トラップに使用するレーザー周波数  $\omega$  が原子の遷移周波数  $\omega_0$  よりも小さい場合 (赤方離調). 光強度  $I(r)$  の極大点が光双極子ポテンシャル  $U(r)$  の極小点となり, ここに原子が捕捉 (トラップ) される. (b) 青方離調 ( $\omega > \omega_0$ ) の場合. (c) ガウシアンビームをレンズで集光した光トラップ.

を得る. この調和振動子の原点に原子核があると考え、この系の電気双極子モーメントは  $d = -ex(\omega)$  で与えられ、 $d = \alpha\mathcal{E}$  の関係から

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2)} \tag{4.9}$$

を得る. これは (4.5) 式と同じ周波数依存性になっており、レーザーの周波数  $\omega$  が原子の遷移周波数  $\omega_0$  よりも小さければ、電子はレーザー電場と同位相で振動してエネルギーが下がる、レーザーの周波数  $\omega$  が原子の遷移周波数  $\omega_0$  より大きい場合は、電子はレーザー電場と逆位相で振動してエネルギーが上がる、と理解することができる。

なお上の振動子モデルからも想像できるように、レーザー光の周波数が遷移周波数に近いほど「共振」し、分極率が大きくなる、つまりポテンシャルがより深くなる。しかし、その一方で、上の議論では考慮されていない、原子によるレーザー光の吸収放出 (光散乱) 過程も増える。この光散乱レート  $\Gamma_{\text{scat}}$  は上の調和振動子モデルに減衰項  $-\Gamma\dot{x}$  を入れたモデルから

$$\Gamma_{\text{scat}} = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^3 \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega}\right)^2 I(r) \tag{4.10}$$

と導出することができる [19]。光双極子ポテンシャル (4.6) 式と比較すると、共鳴近傍 ( $\omega \approx \omega_0$ ) でポテンシャル深さはおよそレーザー離調  $\delta = \omega - \omega_0$  の1次で発散するのに対して、光散乱レートは2次で発散する。つまり、光トラップに使用するレーザーの周波数を原子の遷移周波数に近づけると、ポテンシャルが深くなるメリットよりも、光散乱レートが大きくなるデメリットの方が顕著になる。そのため、光トラップには原子の遷移周波数から周波数が大きく離れたレーザーを使用することが多く、そのような光トラップを特に FORT (Far-off-resonant trap) と呼ぶことがある。

## 4.2 光格子ポテンシャル

(4.3) 式のように、原子が感じるポテンシャルは光強度の時間平均に比例する。今、 $x$  方向に進行するレーザー (平面波) を図 4(a) のように鏡で反射すると、入射波  $\mathcal{E}_0 \cos(kx - \omega t)$  と反射波

$\mathcal{E}_0 \cos(-kx - \omega t)$ <sup>\*18</sup>の作る光電場は、

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \cos(kx - \omega t) + \mathcal{E}_0 \cos(-kx - \omega t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(kx) \cos(\omega t) \quad (4.11)$$

となる。これはレーザー光の作る定在波である。(4.3)式にあるように、エネルギーシフトすなわち光トラップポテンシャルは電場の二乗の時間平均

$$\langle \mathcal{E}(x, t)^2 \rangle_t = 4\mathcal{E}_0^2 \cos^2(kx) \int_0^{2\pi/\omega} dt \cos^2(\omega t) = 2\mathcal{E}_0^2 \cos^2(kx) = \mathcal{E}_0^2 (\cos(2kx) + 1) \quad (4.12)$$

に比例するから、結局、

$$V(x) = V_0 \cos^2(kx) \quad (4.13)$$

という cos 型の周期ポテンシャルが実現される。ここで  $V_0$  は光格子深さと呼ばれる量で、光格子レーザーの光強度に比例し、レーザーのパワーを変えることで制御できる。これが光格子ポテンシャルであり、冷却原子系に対して周期構造（結晶構造）を導入することが可能となる。なお(4.12)式から分かるように、打ち返し光で実現された光格子ポテンシャルの場合、その格子定数  $a$  は光格子に使用されるレーザーの波長  $\lambda = 2\pi/k$  の半分  $a = \pi/k = \lambda/2$  である。光格子を構築するレーザー光は、光トラップと同様にガウシアンビームを使用することが多く、1本のガウシアンビームを打ち返してできるポテンシャルは、定在波による波数方向の周期ポテンシャルと、ガウシアンビームの動径方向の強度分布に由来する動径方向のゆるい閉じ込めが合わさったような形、すなわちパンケーキ型のトラップ（2次元系）が1次元方向に周期的にならんだような構造となる（図4(c)左）。

また、 $x$ 方向に進行するレーザーと $y$ 方向に進行するレーザーを同時に入れ、それぞれを鏡で打ち返して光格子を作る場合、 $x$ 方向のレーザー光と $y$ 方向のレーザー光の周波数が等しい（同じレーザーを分割して使用する）時には $x$ と $y$ の両者が干渉しうが、 $x$ 方向のレーザーと $y$ 方向のレーザーでレーザー光の偏光を直交させる、あるいは音響光学素子（AOM）などを用いて $x$ 方向と $y$ 方向のレーザーの周波数を適当に（例えば100MHz程度）ずらすことで $x$ と $y$ の干渉項の影響をなくすことが出来る。この場合、合計の光格子ポテンシャルは単純に

$$V(\mathbf{x}) = V_{0x} \cos^2(kx) + V_{0y} \cos^2(ky) \quad (4.14)$$

のようになる<sup>\*19</sup>。ガウシアンビームに由来するゆるい閉じ込めも考慮すると、全体のポテンシャルとしては葉巻型のトラップ（1次元系）が2次元方向に周期的に並んだような構造になる（図4(c)中央）。同様に、3方向からレーザーを入れることで3次元正方格子ポテンシャル

$$V(\mathbf{x}) = V_{0x} \cos^2(kx) + V_{0y} \cos^2(ky) + V_{0z} \cos^2(kz) \quad (4.15)$$

を作ることも可能である（図4(c)右）。

<sup>\*18</sup> 実際には、鏡の位置で変わる相対位相が付くが、説明に本質的ではないので省略した

<sup>\*19</sup> 干渉項を利用する場合、 $x$ と $y$ の相対位相の安定化など技術的に難しくなる一方で、この干渉項の自由度を利用して、より多様な光格子系を作ることも可能である [20]。

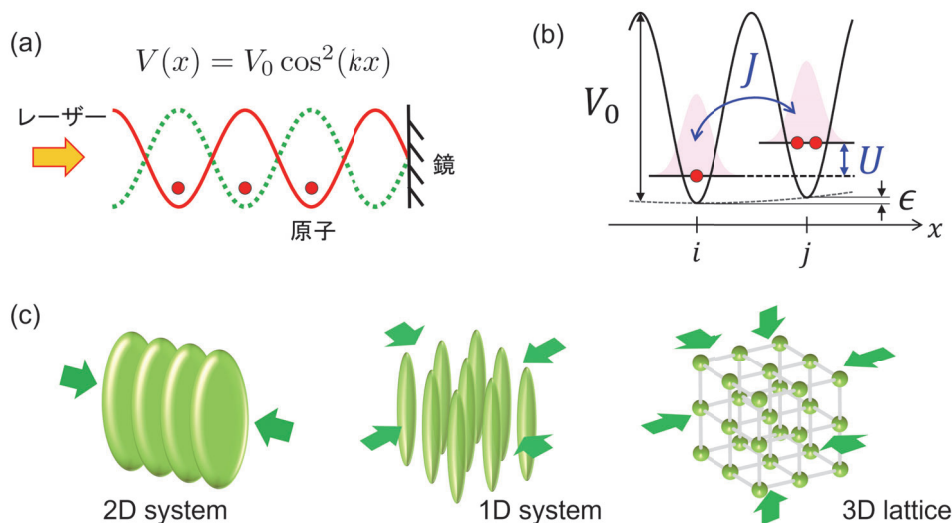


図4 光格子. (a) レーザーの定在波が作る1軸光格子ポテンシャル. (b) Bose-Hubbard 模型の概念図. (c) 2次元系(左), 1次元系(中央), 3次元系(右)を実現する光格子レーザーの配置.

2.2節でも触れたように、このレーザー光の定在波で実現される光格子ポテンシャルは、不純物や格子欠陥がなく、さらにその深さをレーザー光の強度で容易に変更できる。また、光格子レーザーを重ねる角度や位相を調整することで、三角格子やハニカム格子、また、異なる波長の光格子レーザーを重ねることで、超格子やカゴメ格子、準周期格子を作ることにも出来る。このように冷却原子系に多様な光格子構造を実現できるということは、冷却原子系に多様なバンド構造を導入できるということであるが、光格子ポテンシャルを断熱的に下げるバンドマッピング [21] と呼ばれる手法を用いると、波数空間でのバンド構造内の原子占有分布を、飛行時間法により実空間分布として確認することが出来る。

### 4.3 Hubbard 模型

光格子ポテンシャルの深さを十分深く<sup>\*20</sup>すると、この系は強束縛近似、すなわち、原子が基本的には光格子ポテンシャルの格子点（レーザーの定在波の腹）の付近に局在しており、原子はこの格子点間を離散的にホッピングしているという描像が使えるようになる。このような場合、周期ポテンシャル中全体で平面波的に広がっている Bloch 関数よりも、格子点に局在している **Wannier 関数**で系を記述した方が見通しが良い。格子点  $\mathbf{x}_j$  に局在する Wannier 関数  $w_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)$  は Bloch

<sup>\*20</sup> 光格子の深さは、反跳エネルギー  $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  という単位で表されることが多い。ここで  $m$  は原子の質量、 $k = 2\pi/\lambda$  は光格子レーザーの波数である。なお、光格子の格子定数  $a = \lambda/a$  を用いて  $E_R = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$  と定義することも多い。

関数を用いて以下のように定義される。

$$w_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \Theta^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \phi_{\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad (4.16)$$

意味である。ここで  $n$  はバンド指標、 $\phi_{\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{x})$  は結晶運動量  $\mathbf{q}$  に対する Bloch 関数である ( $\Theta$  は規格化定数)。以下では、文献 [22] に沿って、光格子中のボース粒子系を強束縛近似のもとで記述することを考えよう。 $s$  波相互作用 (散乱長  $a$ ) で 2 体相互作用するボース粒子系のハミルトニアンをボソン場の演算子  $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$  で表すと

$$H_{\text{full}} = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + V_T(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (4.17)$$

となる。第 1 項の積分は 1 体の演算子の項で、 $V_0(\mathbf{x})$  は光格子ポテンシャル、 $V_T(\mathbf{x})$  は原子を捕まえる光双極子トラップなどに由来する緩い閉じ込めポテンシャルである。第 2 項は 2 体の相互作用の項で、 $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  は 2 原子間の相互作用強さである。第 2 項が 2 体の相互作用項であるにも関わらず、積分座標が  $\mathbf{x}$  のみであるのは、前述のように相互作用がデルタ関数型だからである。今、原子は光格子の底 (基底バンド) にいるとして、ボソン場の演算子を基底バンドに対する Wannier 関数で

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{b}_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (4.18)$$

と展開しよう。ただし、 $\hat{b}_i$  は格子点  $\mathbf{x}_i$  にいるボース原子の消滅演算子である。(4.18) 式を (4.17) 式に代入すれば  $H_{\text{full}} = -\sum_{i,j} J_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} U_{ijkl} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l$  となるのが分かる。ただし、

$$J_{ij} = -\int dx w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(\mathbf{x}) + V_T(\mathbf{x}) \right) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (4.19)$$

および

$$U_{ijkl} = g \int dx w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) \quad (4.20)$$

である。光格子が十分深い状況では、Wannier 関数は格子点に局在し、かつ異なる格子点に属する Wannier 関数は基底として直交していることを考えると、異なる格子点を含む (オフサイトの) 相互作用  $U_{ijkl}$  と、1 サイトよりも離れたところの運動エネルギー項 (トンネリング)  $J_{ij}$  は、オンサイトの相互作用  $U_{0000} \equiv U$  と、最近接トンネリング  $J_{01} \equiv J$  と比較して無視できる。以上より、正方格子中の **Bose-Hubbard 模型** のハミルトニアン

$$H_{\text{BH}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j + \sum_j \epsilon_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j. \quad (4.21)$$

を得る。ただし  $\langle i,j \rangle$  は最近接ペアに対する和で、第 1 項は格子点  $i$  から  $j$  へのトンネリング、第 2 項は  $s$  波相互作用によるオンサイト相互作用、 $\epsilon_j = V_T(\mathbf{x}_j)$  は光格子以外のポテンシャルによるゆるい閉じ込めの効果を表す (図 4(b))。なお、十分深い ( $V_0 \gg E_R$ ) 光格子では、であれば、 $U, J$  は  $E_R$  で規格化した光格子深さを  $s = V/E_R$  として、近似的に  $U/E_R \propto s^{3/4}$ 、 $J/E_R \propto s^{3/4} e^{-2\sqrt{s}}$



という依存性を持ち [23]、光格子深さを変えることで  $U/J$  を広い範囲で制御することが可能である。

また個数演算子  $\hat{n}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$  を導入するともう少し物理的な意味が分かりやすくなり、(4.21) 式は

$$H_{\text{BH}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) + \sum_j \epsilon_j \hat{n}_j \quad (4.22)$$

となる。オンサイト相互作用の項は  $\frac{n(n-1)}{2}$  に比例する形をしているが、これは 1 サイトに  $n$  個の原子がいる場合、 ${}_n C_2$  通り、2 原子間の接触があることに対応する。

光格子に導入する原子が (2 成分) フェルミ粒子系の場合は、Fermi-Hubbard 模型で記述され、

$$H_{\text{FH}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \sum_{j,\sigma} \epsilon_{j,\sigma} \hat{n}_{j,\sigma} \quad (4.23)$$

となる。ここで  $\sigma$  はスピン自由度で、 $\hat{c}_{i,\sigma}$  は格子点  $\mathbf{x}_i$  にいるスピン  $\sigma$  をもつフェルミ粒子の消滅演算子、である。フェルミ統計性から、(単一バンド中では) 同じ格子点にはアップスピンとダウンスピンそれぞれ 1 個ずつしか入れず、オンサイト相互作用はそれを反映した形になっている (フェルミオンの生成消滅演算子の交換関係から  $\hat{n}_{j\sigma}$  は 0 または 1 のみ)。この Fermi-Hubbard 模型は固体物理学でも重要なモデルであり、同じ軌道上に 2 電子が来ると 2 電子がクーロン斥力により強く反発しあうような強相関電子系、具体的には、銅酸化物高温超伝導体や磁性の理論研究などでも使われる。

Hubbard 模型はあくまでも強束縛近似という近似の入ったモデルではあるが、(特にフェルミ系については) 簡単に解けるものではない。ここで Hubbard 模型のハミルトニアンをながめてみよう。議論を分かりやすくするために、格子点の数と原子数が同じ、いわゆる half filling の場合\*21 を考える。Hubbard ハミルトニアンの第 1 項は格子点間のホッピングを表すが、この項は原子が 2 サイト間に広がる方が、すなわち「波」として系全体に広がった方がエネルギーが下がる効果を表す。一方、第 2 項は同じ格子点に原子 (の波動関数) が 2 個以上くるとエネルギーが上がる、すなわち、原子は「粒子」として各格子点に 1 個ずつ局在する方がエネルギーが下がる効果を表す。つまり、このモデルは原子の波動性と粒子性が競合するモデルになっており [24]、それゆえに見た目以上に計算が難しいモデルとなっている。

Bose-Hubbard 模型の場合、この波動性と粒子性の競合が、超流動-Mott 絶縁体相転移と呼ばれる面白い量子相転移現象を引き起こす。通常の有限温度の相転移では、温度というパラメータを変えた場合に、熱ゆらぎと秩序が競合する結果として相転移が起こる。一方、量子相転移の場合はハミルトニアン中のパラメータを変えることで、量子ゆらぎと秩序が競合する結果として (ゼロ温度においても) 相転移が起こる [25]。Bose-Hubbard 模型のハミルトニアン (4.21) 式の場合、(閉じ

\*21 ボース系では格子点の数と原子数が同じでなぜ “half” なんだと変に思うかもしれないが、2 成分フェルミ系の場合であれば、各格子点にアップスピンとダウンスピンが 1 個ずつ入った場合が full filling で、格子点と原子数が同じで各格子点にどちらか一方のスピンの原子しか入らない状況が half filling であり、名称通りの状況になる。

込めポテンシャルの項は一旦無視すると<sup>\*22)</sup> トンネリング  $J$  とオンサイト相互作用  $U$  の比  $U/J$  が系の性質を決めており、 $U/J$  が小さい時は原子がサイト間に広がり、各サイトの原子数が量子的にゆらいでいる超流動相となるが、 $U/J$  が大きくなると、原子は各格子点に局在し、各サイトの原子数が確定した Mott 絶縁体相<sup>\*23)</sup>へと相転移する。なお、見方を変えて、超流動相では系全体がコヒーレントに「位相」がそろっていて、Mott 絶縁体相では各サイトにいる原子の位相がランダムにゆらいでいる、ということもできる。つまり、この量子相転移は「粒子数ゆらぎ」と「位相ゆらぎ」の競合が引き起こす量子相転移と見ることもできる。これはまさに波動性と粒子性の競合と言えるだろう。平均場近似で  $n = 1$  の Mott 絶縁体への相転移点  $(U/J)_c$  を求めると、隣接格子点の数を  $z$  として  $(U/J)_c = 5.8z$  となる [26]。実際に、2003 年には 3 次元光格子中の冷却 Rb 原子系に対し、光格子の深さを変えることで  $U/J$  の値を変化させて、この超流動-Mott 絶縁体転移が観測されている [27]。3 次元の Bose-Hubbard 模型の超流動-Mott 絶縁体相転移は、平均場理論でもそこそこの良い近似を与えるので、数値計算の困難さの意味ではこの実験に「量子シミュレーション」としての面白さはあまりないが、冷却原子系を用いた Hubbard 模型の量子シミュレーションの可能性を示した点でこの実験は非常に重要であり、この超流動-Mott 絶縁体相転移の観測は、物性物理分野の理論研究者を冷却原子系の研究に引き込んだ大きなきっかけとなった。<sup>\*24)</sup>

#### 4.4 光格子中の冷却原子系を用いた量子シミュレーション

光格子中の冷却原子系での超流動-Mott 絶縁体転移の観測以降、光格子中の冷却原子系を用いた量子シミュレーションの実験は数多く行なわれている。実験例については適当なレビュー論文 [21, 28, 29] を参照して欲しい。2 節で述べた温度の問題があるため、フェルミ原子の光格子系よりもボース原子の光格子系の実験が先行している<sup>\*25)</sup>状況ではあるが、固体電子系、特に磁性や銅酸化物高温超伝導体の量子シミュレーション、と言う意味ではより低温での Fermi-Hubbard 模型の実験が興味を持たれており、より低温を実現する工夫が続けられている。最近では、デジタルマイクロミラーデバイス (DMD) と呼ばれる光学素子を用いて任意の光ポテンシャルを光格子系に追加する方法で、外縁部に熱浴領域を作り、そこにエントロピーを逃がすことで中心付近については Fermi-Hubbard 系でも反強磁性相転移温度以下の冷却が実現している [7]<sup>\*26)</sup>。

また光格子系はその作り方を見れば分かるように、その格子間隔は光の波長程度 (~数 100 nm) である。例えば、銅の FCC 構造の格子定数は  $3.61 \text{ \AA} = 0.361 \text{ nm}$  であり、これを格子間隔レベル

<sup>\*22)</sup> この系の化学ポテンシャルを  $\mu$  とすると、この閉じ込めポテンシャルの項は  $\sum_i (\epsilon_i - \mu)$  となり、局所的に化学ポテンシャルが変わっている系とみなすことができる (局所密度近似)。この効果は Mott シェル [] のような面白い構造を作る一方で、冷却原子系で一樣系の研究をすることを難しくしている。ただし、後述するように最近では DMD など閉じ込め効果を補正するようなポテンシャルを導入して一樣系を作る研究も進んでいる。

<sup>\*23)</sup> 原子が格子点に局在して「流れることが出来ない」ので、絶縁体である。

<sup>\*24)</sup> 2021 年 7 月末時点での論文 [27] の Google Scholar 引用件数は 7000 を超えている。

<sup>\*25)</sup> フェルミ原子系では温度  $T/T_F$  が下がるほど Pauli blocking の効果で蒸発冷却が効きにくくなる問題がある一方、ボース原子系の場合は温度が有限でも BEC 転移温度以下では大部分の原子が凝縮体となっているため、色々な現象が有限温度でも見やすい場合が多いという事情もある。

<sup>\*26)</sup> ただし、銅酸化物高温超伝導体との対応で期待されている  $d$  波超伝導転移温度以下の冷却はもうしばらくかかりそうである。

の分解能で観測しようと思えば光学顕微鏡では不可能で、走査型トンネル顕微鏡などが必要となるが、光格子であればギリギリ頑張れば格子間隔レベルの分解能での光学観測が可能となる。このような単一格子点を識別可能な高分解能観測は「量子気体顕微鏡 (quantum gas microscope)」と呼ばれ、最初の単一格子点観測 [30, 31] 以降、冷却原子系を用いた量子シミュレーションの大きな売りとなっている [28, 29]。量子気体顕微鏡系において、Leib-Robinson 限界の観測 [32]、反強磁性秩序の実空間観測 [7] や、エンタングルメント・エントロピーの直接観測 [33] など物理的にインパクトのある実験が次々となされており、今後はさらに物性物理と統計物理、量子情報の境界領域での量子シミュレーション実験も進むと期待される。

## 5 Rydberg 原子

近年の冷却原子系を用いた量子シミュレーションおよび量子コンピュータにおいて、「Rydberg 原子」を用いた実験が急速にその存在感を増している。ここでは主に Rydberg 原子がどのようなものか、どういう点が面白いのかについてそのエッセンスを述べる。

### 5.1 Rydberg 原子の性質

Rydberg 原子とは端的に言えば「主量子数  $n$  が非常に大きい励起状態 (Rydberg 状態) にある原子」である<sup>\*27</sup>。主量子数  $n$  が大きい状態、すなわちより高エネルギーの準位に励起された原子ならば、非常に不安定ですぐに光子を自然放出して基底状態に落ちてしまいそうに思えるが、実は  $n$  が大きくなるほど自然放出の寿命が伸びることが知られている [34, 35]。この主量子数  $n$  が大きい状態の方が自然放出の寿命が延びる事情を説明する前に、そもそも自然放出とはどのように起こるかを考えよう。一番簡単な水素原子を例に考える<sup>\*28</sup>。「電子」と「陽子 (水素原子核)」の 2 体問題のハミルトニアン

$$\hat{H}_{\text{atom}} = -\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \nabla_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \quad (5.1)$$

に対する (相対座標の) シュレディンガー方程式を解けば、量子力学の講義でおなじみの、主量子数  $n$ 、軌道角運動量  $l$ 、磁気量子数  $m$  でラベル付けされた水素原子のエネルギー固有状態  $|n, l, m\rangle$  が出てくる。基底状態は  $|1, 0, 0\rangle$  である。さて、始状態として  $n = 2$  の  $P$  状態に励起された状態  $|2, 1, 1\rangle$  を考えよう。この励起状態を始状態として、そのまま水素原子のハミルトニアンにより時間発展させても、エネルギー固有状態であるため位相因子が付く以外は変化しない、すなわち、励起状態は励起状態のままという答えになってしまう。しかしこれは事実ではなく、実際、真空中で  $2P$  状態に励起された水素原子は自然放出寿命  $\tau \sim 1$  ns 程度で基底状態 ( $1S$ ) に緩和する。

<sup>\*27</sup> J. Rydberg がそれまで知られていた水素原子のスペクトルのバルマー系列などを、 $n, m$  が大きな状態まで一般化して統一的に説明した、ということでこういった主量子数の大きな状態を「Rydberg 状態」と言うようである

<sup>\*28</sup> 後述するように Rydberg 原子の最外殻電子は原子核からはるか離れたところを回っているため、この Rydberg 原子の最外殻電子から見れば、事実上、原子核 (+他の電子) はある有効電荷をもつ水素原子核のように見える。

重要なのは「真空中の」ということであり、真空中には他の原子や分子は存在しないが「真空場（電磁場）」が存在している。つまり、実際の真空中の水素原子の時間発展は、水素原子のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{atom}}$  だけでなく、真空場を与えるハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{rad}}$  と原子と真空場の相互作用ハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{int}}$  を加えた合成系のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{atom}} + \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{int}}$  で記述される。つまり、「水素原子の固有状態」と上で書いていた  $\hat{H}_{\text{atom}}$  の固有状態  $|n, l, m\rangle$  はもはや系全体のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{tot}}$  の固有状態ではないため、適切な計算を行なうと、励起状態  $|2, 1, 1\rangle$  の存在確率が指数関数的に減衰していくことが示せる。真空場のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{rad}}$ 、 $\hat{H}_{\text{int}}$  や計算の詳細は適当な原子物理学の教科書を見るか、「Weisskopf-Wigner 理論」などの語で検索してもらうことにして、結論だけ述べると、ある励起状態  $|e\rangle$  にある原子が別の状態  $|g\rangle$  に自然放出（電気双極子放射）して遷移するレート  $\Gamma$  は

$$\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^2} |e|\mathbf{d}\cdot\hat{\epsilon}|g\rangle|^2 \quad (5.2)$$

で与えられる。ここで  $\omega_0$  は考えている 2 準位間のエネルギー差である。つまり遷移強度  $|e|\mathbf{d}\cdot\hat{\epsilon}|g\rangle$  が同じ場合、2 準位間のエネルギー差  $\omega_0$  が大きいほど、その 3 乗に比例して自然放出レートが大きくなる。逆に言えば、エネルギー差が小さい 2 準位間の自然放出レートは小さくなる、すなわち励起状態にいる寿命は長くなる。水素原子の場合、主量子数  $n$  のエネルギー準位  $E_n$  は

$$E_n = -\frac{hcR_\infty}{n^2} \quad (\text{但し、} R_\infty = \frac{m_e e^4}{8ch^3\epsilon_0^2} \text{ は Rydberg 定数}) \quad (5.3)$$

で与えられることを思い出せば<sup>\*29</sup>、例えば、 $n = 61$  から  $n = 60$  への自然放出による緩和は、 $n = 2$  から  $n = 1$  への自然放出による緩和よりもずっと起こりにくいと分かるだろう。一方、主量子数が大きく異なる 2 状態間 ( $n - n' \gg 1$ ) の遷移の場合、主量子数すなわち動径方向波動関数に対して異なる  $n, n'$  間の遷移行列要素を計算するのは単純ではないが、主量子数  $n$  が動径方向波動関数の節の数と対応をもつことを考えれば、主量子数  $n$  が大きく異なる 2 状態間では、その重なり積分である  $\langle n'|\mathbf{d}\cdot\hat{\epsilon}|n\rangle$  も非常に小さくなるのが直感的にも分かるだろう。これらの効果を合わせると、Rydberg 状態の自然放出寿命は主量子数  $n$  に対しておよそ  $n^3$  で長くなる<sup>\*30\*31</sup>。例えば、Rb 原子の  $D_2$  線の自然放出寿命はおよそ  $\sim 26$  ns であるが、 $n \approx 50$  の Rb 原子の Rydberg 状態の寿命は典型的には  $\sim 100$   $\mu\text{s}$  のオーダーにもなる [35]。

<sup>\*29</sup> 一般のアルカリ原子に対しては、エネルギー準位は現象論的に

$$E_n = -\frac{hcR_\infty}{(n - \delta_l)^2}$$

の形で表される [34]。ここで  $\delta_l$  は quantum defect（量子欠陥）と呼ばれる、内殻電子が及ぼすクーロン力による補正である。

<sup>\*30</sup> 一般のアルカリ原子に対しては、上記の quantum defect  $\delta_l$  の補正が入った  $n^* = n - \delta_l$  を用いて  $n^{*3}$  となる。以下の議論でも主量子数についてのスケージングの表記で現れる  $n$  には同様に補正が必要となるが、簡単のため省略する。

<sup>\*31</sup> Rydberg 状態の中でも、circular state と呼ばれる与えられた主量子数  $n$  に対して最大の磁気量子数を持つ状態 ( $|m| = l = n - 1$ ) の場合は、双極子遷移の選択則から自然放出して遷移する先が主に  $n - 1, l = n - 2$  の状態に制限されるため、寿命は  $n^5$  に比例する [36]

さて、単に励起状態の寿命が長いからというだけで Rydberg 状態に原子を励起したいわけではない。Rydberg 状態を利用する最大の利点は、Rydberg 原子間の双極子・双極子相互作用を使うという点にある。エネルギー準位が  $n^{-2}$  に比例して小さくなっていくことから、主量子数が大きくなるにつれて、励起電子は原子核（と、最外殻以外の電子）が作るクローンポテンシャルに対して非常にゆるく束縛されるようになる。実際、水素様原子の場合、原子核と電子の距離（半径） $r$  の期待値は主量子数  $n$  に対して  $\langle r \rangle \propto n^2$  となり [34]、Rydberg 状態の最外殻電子は、原子核（と、最外殻以外の電子）からはるか離れたところ<sup>\*32</sup>を運動している。さて、原子核と電子が平均的には距離  $\langle r \rangle$  だけ離れていると考え、原子は電気双極子モーメント  $d = e \langle r \rangle$  を持ちそうである。しかし、ここで注意すべきは  $\langle r \rangle$  はあくまでも距離の期待値であるということである。光双極子トラップのところでも述べたように、電場がない状態では原子は特別な方向を持たず、ベクトルである電気双極子モーメント  $\mathbf{d} = e \langle \mathbf{r} \rangle$  の期待値もゼロである。そのため、ナイーブに考えると、原子間距離  $R = |\mathbf{R}|$  だけ離れた Rydberg 原子 2 個（それぞれを原子 1、原子 2 とする）の間に働く電気双極子・双極子相互作用

$$V_{dd} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2}{R^3} - 3 \frac{(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5} \right] \quad (5.4)$$

の期待値もゼロになるように思える。実は 1 次摂動ではその通りであるが、2 次摂動まで考えると双極子-双極子相互作用の効果が出てくる。すなわち、エネルギーシフト

$$\Delta E \propto V_{dd}^2 \propto -\frac{C_6}{R^6} \quad (5.5)$$

が生じる<sup>\*33</sup>。これは  $\mathbf{d}_i$  そのものではなく、 $d_i^2$  が効くので、 $e \langle r \rangle$  が大きくなれば当然この効果も大きくなる。 $V_{dd}^2 \sim d^4 \sim r^4 \sim n^8$  であり、さらに、この二次摂動に寄与するエネルギー準位とのエネルギー差（エネルギー分母）が  $\sim n^{-3}$  でスケールするので、この van der Waals 係数  $C_6$  は主量子数  $n$  に対しておよそ  $n^{11}$  という非常に大きな冪で大きくなる<sup>\*34</sup>。これにより、例えば、5  $\mu\text{m}$  程度離れた  $n \approx 50$  の Rydberg 原子間で  $V/h \gtrsim 1$  MHz もの相互作用が生じる（ただし、 $h$  はプランク定数）[35]。s 波による接触相互作用の場合は、仮に 2 原子が光格子の同一サイトにいたとしても、たかだか  $\sim\text{kHz}$  程度の相互作用で、隣接する格子点（距離としては  $\sim 500$  nm 程度）にいる原子との相互作用（最近接相互作用）に至ってはほぼゼロであるから、この Rydberg 原子間の遠距離相互作用が、最近接相互作用や次近接相互作用を持つイジング模型などより広範な格子モデルの量子シミュレーションにとって非常に有用となることが分かるだろう。

<sup>\*32</sup>  $n = 1$  の時がボーア半径  $a_0$  程度であるから、 $n \approx 50$  であれば数百 nm のオーダーになる

<sup>\*33</sup> この話は Rydberg 原子に限らず、基底状態の中性原子に対しても成立するものであり、これが 3.1 節で「遠距離での 2 次の双極子-双極子相互作用による van der Waals 引力」と書かれていたものの正体である。摂動論を用いて van der Waals 引力  $V(R) \propto C_6/R^6$  を求める問題は、例えばランダウの「量子力学」にも載っているので、興味がある人は演習問題を解いてみてほしい。

<sup>\*34</sup>  $\langle r \rangle$  の期待値を用いたこの説明は直感的ではあるが少々不正確である。主量子数  $n$  の 2 個の Rydberg 原子の状態が、主量子数  $(n - 1)$  でパリティが異なる状態と  $V_{dd}$  で結合し、この状態との双極子モーメントがやはり  $n^2$  でスケールする、という方が実際の計算に沿った説明である。

なお、これほど大きな相互作用（エネルギーシフト）が生じると、レーザー光による励起に対して **Rydberg ブロッキング** という現象が起きる。これは Rydberg 原子を用いた量子情報処理にも重要な現象であるが、ここでは用語と最近の参考文献 [35, 36, 37] を出すにとどめる。

## 5.2 Rydberg 原子アレイ

近年、量子シミュレータ、さらには量子コンピュータの新しいプラットフォームとして注目されているのが、この Rydberg 原子を細く絞った光ピンセット (optical tweezer) で捕捉し、それを複数並べた Rydberg 原子アレイ<sup>\*35</sup>とよばれる物理系である [35, 38, 39, 40]。

Rydberg 原子アレイでは、まず自在に動かすことが可能な、細く絞った光双極子トラップビーム＝光ピンセットビームを複数用意する。この光ピンセットビームはレーザー冷却された原子をつかまえることができるほど十分深く<sup>\*36</sup>、トラップ領域に冷却原子が来れば 1 本の光ピンセットビームに対して 1 個、原子を捕まえることができる<sup>\*37</sup>。図 5(a) は、そのようにして複数の光ピンセットビームに捕捉された Rb 原子の発光イメージである。図 5 では光ピンセットビームは誌面垂直に入っており、図中の黒い点の 1 個 1 個が、1 個の Rb 原子（からの発光）に対応している。光ピンセットビーム自体は、図 5(b) を見ても分かるように、正方格子状に配置されているのだが、全てのビームに原子が入ることはなく、確率的にしか入らない<sup>\*38</sup>。このままでは「量子ビット」の配置に欠損があることになり、量子シミュレータとしても量子コンピュータとしても使用できない。しかし、近年、図 5(a) のような発光イメージを取得後、画像解析の結果をもとに原子の入った光ピンセットビーム位置を「再配置」して、欠損がない原子列を用意する手法が開発され [38, 39]、望みの初期状態を実現することが可能になった<sup>\*39</sup>。さらに、図 5(c) のように、正方格子以外にも原子を配置することも可能である。この系を「イジング模型」の量子シミュレータに利用すると考えれば、配置を正方格子から三角格子に変更できるという自由度は非常に有用となる。

この Rydberg 原子アレイを、量子コンピュータとして利用する場合、このようにして用意した原子アレイに対して、原子 1 個を 1 つの量子ビットとみなし、量子情報処理を行なう。原子のどの内部状態を量子ビットの  $|0\rangle, |1\rangle$  に対応させるかは実験系により異なるが、例えば Rb 原子の

\*35 初期の実験では、「アレイ (列)」というだけあって 1 次元に Rydberg 原子が並んだ系の実験であったが、近年は、図 5 にもあるように 2 次元に並べた実験も行なわれるようになってきている。

\*36 光格子の場合は、光格子ポテンシャルを導入するため、蒸発冷却を行なって量子縮退領域まで冷却する必要があったが、Rydberg 原子アレイではビームが細い分ポテンシャルが深く、蒸発冷却 (~ 10 sec) 前の原子を捕まえて実験が可能のため、実験サイクルがかなり速くなる。

\*37 より正確に言えば、この光ピンセットビームに複数の原子が入ったとしても、光誘起衝突とよばれる現象で最終的には 1 個または 0 個の原子しか残らない。原子が確率的にしか入らないのは、1). 光ピンセットビームのトラップ範囲内に原子がない、2). 光ピンセット内に偶数個の原子がいて光誘起衝突で 0 個までになってしまう、ことが主原因である。

\*38 図 5(a) では 129 個の原子が確認できるが、元のビームの本数は図 5(b) にあるように  $15 \times 15 = 225$  であるので、およそ 6 割弱の確率でトラップされていることになる。

\*39 もちろん、最初に (確率的に) 光双極子トラップビームに捕捉された Rb 原子の数以上の原子列を用意することは出来ない。例えば、図 5(a) では、数えると 129 個の原子が確認できるが、これで図 5(b) のような  $15 \times 15$  の原子列を準備することは出来ず、例えば再配置により、 $11 \times 11 = 121$  個の原子列を作る、というようなことになる。なお、余計な原子数を減らすには、例えば、光双極子トラップビームを個別に OFF するといった方法がある。

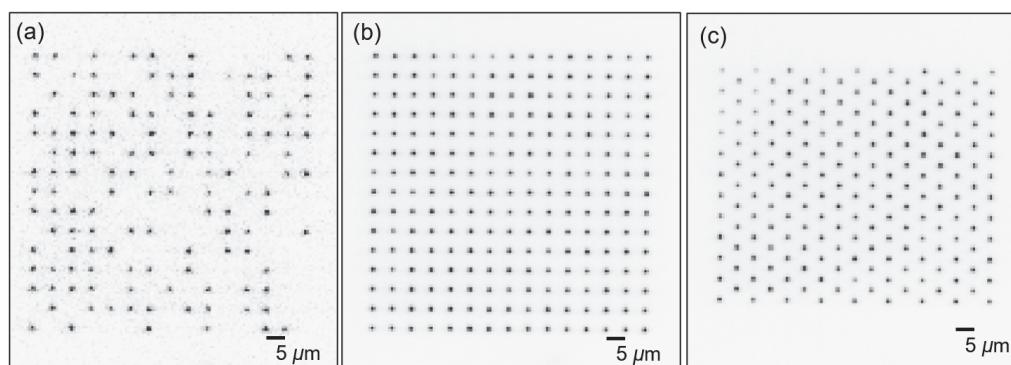


図5 光ピンセットで真空中に並べられた Rb 原子の発光イメージ. (a) シングルショット画像 (正方格子), (b) 積算画像 (正方格子), (c) 積算画像 (三角格子). (分子科学研究所 大森研究室 富田隆文氏 提供).

Rydberg 状態を用いた量子ゲート操作の実験 [41] では、Rb 原子の基底状態の超微細スピン状態  $|F = 1, m_F = 0\rangle$  と  $|F = 2, m_F = 0\rangle$  をそれぞれ量子ビットの  $|0\rangle, |1\rangle$  に対応させている。1 量子ビットゲートは基本的にはラマン遷移などを用いて Rabi 振動させれば実装できる。図 5 中にも表記されているように、原子間の距離は  $\sim 5 \mu\text{m}$  と光格子の格子定数よりも 1 桁程度大きく、原子 1 個のみを区別して照射し個別に Rabi 振動させるレーザー光を用意することが可能である。一方、隣接する 2 原子間の 2 量子ビットゲートは、この 2 つの Rydberg 原子間の van der Waals 相互作用を利用する。具体的に、Rydberg 原子間の相互作用 (Rydberg ブロッキング) を用いて 2 量子ビットゲートを実装する方法については、レビュー論文 [35, 36, 37, 42] や最近の日本語解説記事 [43] を参考にしてほしい。

量子ビットとして使用する際、量子誤り訂正まで到達していない現状の量子コンピュータデバイス (いわゆる NISQ デバイス) では、量子コンピュータのアルゴリズムの実行はデコヒーレンスとの戦いであり、量子ゲート操作は速い方が良い。上述のように Rydberg 原子間の相互作用が大きいことは、言い換えれば 2 量子ビット操作を速く実行できるということになる。Rb 原子の Rydberg 状態の自然放出寿命は ( $D_2$  遷移に比べれば桁違いに長い) 主量子数が  $n = 50$  の時に  $\sim 100 \mu\text{s}$  とそれほど長くはなく、さらに、研究が先行している Rb 原子の Rydberg 状態は光ピンセットビームで捕まえることができないため<sup>\*40</sup>、Rydberg 状態をゲート操作に使用するタイミングでは光ピンセットビームを切り、Rydberg 原子が光ピンセットの位置から逃げないうちに操作を行なわなければならない。しかし十分早い時間でゲート操作ができるおかげで、Rb 原子の Rydberg 原子アレイの量子コンピュータについて、2 量子ビットゲート (制御位相ゲート) については 0.974、それを用いた 5 組の量子ビット対に対する Bell 状態生成について 0.950 と高いフィデリティ (忠実度) が達成されている [41]。さらに、最近研究が進む Sr や Yb 原子など 2 電子原子系

\*40 アルカリ原子の Rydberg 状態では (ほぼ自由電子とみなせる) 最外殻電子が ponderomotive potential から受ける斥力の効果が大きく、トラップできない。一方、Sr や Yb 原子など 2 電子原子系の Rydberg 状態の場合、最外殻電子以外の部分がアルカリ原子並みの分極率を持つので、トラップ波長を選ぶことで比較的容易にトラップでき [44]、量子ビットのコヒーレンス時間も大幅に改善されると期待される。

の Rydberg 状態を用いた量子ビット操作の実験では、Rydberg 状態への励起に中間状態を介した 2 光子励起ではなく準安定  $^3P_0$  状態からの 1 光子励起を利用することで、中間状態から減衰の影響を減らし、検出効率の補正なしでも 1 量子ビットゲートについては 0.9951、2 量子ビットゲートについては 0.992、それを用いた Bell 状態生成について 0.980 という非常に高いフィデリティが得られており [45]、超伝導量子ビットにせまる勢いである。

Rydberg 原子アレイを量子コンピュータとして使う研究が世界的に発展中であるが<sup>\*41</sup>、この系をプログラマブルな量子シミュレータとして使う研究の方はより進展しており、この系を用いて、イジング模型 [40, 46] やトポロジカル量子相 [47] の量子シミュレーションなど物理的に興味深い成果が多数出てきている。以下では対応が分かりやすいイジング模型の研究について簡単に紹介しよう。Rydberg 原子系をイジング模型にマッピングするために、原子の基底状態  $|g\rangle$  と Rydberg 状態  $|r\rangle$  をそれぞれスピン  $1/2$  のダウン  $|\downarrow\rangle = |g\rangle$  とアップ  $|\uparrow\rangle = |r\rangle$  と読み替える。光ピンセットで並べられた原子列全体が、一様に Rabi 周波数  $\Omega$ 、離調  $\delta$  のレーザー<sup>\*42</sup>によりコヒーレントに<sup>\*43</sup> 駆動されているとすると、(回転座標系で見た) この系のハミルトニアンは

$$H = \frac{\hbar\Omega}{2} \sum_i \sigma_x^i - \hbar\delta \sum_i n_i + \sum_{i<j} V_{ij} n_i n_j, \text{ 但し } V_{ij} = \frac{C_6}{R_{ij}^6}. \quad (5.6)$$

で与えられる。ここで、 $n_i = |r_i\rangle\langle r_i|$  は格子点  $i$  における Rydberg 原子数を与える演算子、 $\sigma_x^i = |r_i\rangle\langle g_i| + |g_i\rangle\langle r_i|$  は  $|g_i\rangle$  と  $|r_i\rangle$  の結合を与える演算子 (パウリ  $X$  行列) である。ここで  $n_i$  はパウリ  $Z$  行列  $\sigma_z^i = |r_i\rangle\langle r_i| - |g_i\rangle\langle g_i|$  を用いて  $n_i = (\sigma_z^i + 1)/2$  と書けるので、(5.6) 式は縦磁場項  $B_{\parallel} \propto -\delta$  と横磁場項  $B_{\perp} \propto \Omega$  の両方を持ち、イジング相互作用  $J_{ij}$  が  $1/R_{ij}^6$  で減衰する量子イジング模型となっていることが分かる。横磁場項を持つ量子イジング模型は、量子相転移を示す最も基本的な系であり [25]、ハミルトニアン (5.6) 式のパラメータにより様々な量子相が出現する。さらに、ハミルトニアンを制御できるということは、この系の量子ダイナミクス、言い換えればユニタリー時間発展  $U = e^{-iHt}$  を制御できるということである。入力量子ビット列を用意して、ユニタリーゲートで時間発展させて、その出力量子ビット列を得る、とみればこれはある種の量子コンピュータである。この入力量子ビット列 (始状態) をも制御して準備できるという点が、この Rydberg 原子アレイ系が「プログラマブルな」量子シミュレータと言われる所以である。例えば、初期状態の秩序相を断熱的に準備してから、瞬間的にハミルトニアンを切り替えて (クエンチさせて) その後の量子 (非平衡) ダイナミクスを量子シミュレートするというのも可能である。実際、断熱的に反強磁性的結晶状態を用意し、その後、ハミルトニアンのパラメータ  $\delta$  を急速にゼロにクエンチさせ横磁場項がもたらす量子ゆらぎにより反強磁性的結晶状態から無秩序状態へと移行する系の非平衡ダイナミクスを観測したところ、Rabi 周波数  $\Omega$  や最近接相互作用  $V_{ij}$  などから予想される時間スケールよりも長い時間、結晶状態のコヒーレントな振動が観測された [40]。その

<sup>\*41</sup> 2021 年 7 月に、Rydberg 原子量子コンピュータの開発を目指すフランスのスタートアップ企業 Pasqal が 2500 万ユーロを調達したというニュースがあった。

<sup>\*42</sup> 可視光域のレーザーで基底状態の原子を直接、Rydberg 状態に励起することは難しいため、2 色のレーザーを用いて 2 光子過程で Rydberg 状態へ励起する。

<sup>\*43</sup> 言うは易しで、実際は上記の Rydberg 励起用のレーザーの位相ノイズを低減するなど色々苦労があるそうだ。



後、PXP モデルと呼ばれるモデルの解析 [48] から理論的にも確認され、量子多体系において、量子多体傷跡状態 (quantum many-body scar state) と呼ばれる熱平衡化しない特殊な初期状態が存在することが認識されるようになった。冷却原子系の実験は孤立量子系の熱化の研究に大きな影響を与えているが、この量子多体傷跡状態の発見・観測は近年のこの分野の大きな成果だろう。

最近では、2次元系で256量子ビットを持つシミュレータも実現されており [46]、今後はさらにシステムサイズや制御性、コヒーレンスが進展し、量子コンピュータと量子シミュレーションの両方で面白い成果が出てくると期待される。

## 6 まとめ

本稿で述べたように、冷却原子系は高い制御性を持っており、多様な量子系の量子シミュレーション研究が次々に行なわれている。一方、近年の IBM や Google が (デジタル) 量子コンピュータの開発を進めているというニュースや Twitter を見ていると、冷却原子系のようなアナログ量子シミュレータの研究はすぐに時代遅れになるように思うかも知れない。しかし、現状で報道等されている量子コンピュータは、量子誤り訂正が実装されていない NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスと呼ばれるものである。量子情報分野で有名な Johh Preskill も最近書いている [49] ように、(現状の量子ビット制御技術では) 量子誤り訂正に必要なオーバーヘッドが大きく、(まともな規模の量子計算を行なうには) 非常に多数の量子ビットが必要になるため、まだしばらくの間は、物理学者が「普遍的」と呼ぶような比較的エラーに対して堅牢な (しかし、古典コンピュータでは計算が難しい) 物理現象の (アナログ) 量子シミュレーション研究が続くと思われる。

本稿で、冷却原子系が、物性・統計・量子情報物理を研究する対象としても、量子情報技術を実装する対象としてもまだまだ面白い、ということが伝われば幸いである。

## 参考文献

- [1] R. P. Feynman, International Journal of Theoretical Physics **21**, 467 (1982).
- [2] S. Lloyd, Science **273**, 1073 (1996).
- [3] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, Rev. Mod. Phys. **86**, 153 (2014).
- [4] H. J. Metcalf and P. Van der Straten, *Laser cooling and trapping* (Springer, 1999).
- [5] R. Olf, F. Fang, G. E. Marti, A. MacRae, and D. M. Stamper-Kurn, Nature Physics **11**, 720 (2015).
- [6] P. Medley, D. M. Weld, H. Miyake, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **106**, 195301 (2011).
- [7] A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, M. F. Parsons, M. Kanász-Nagy, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, D. Greif, and M. Greiner, Nature **545**, 462 (2017).
- [8] M. Ueda, *Fundamentals and new frontiers of Bose-Einstein condensation* (World Scientific, 2010).
- [9] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
- [10] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein condensation in dilute gases* (Cambridge university press, 2008).
- [11] K. Enomoto, K. Kasa, M. Kitagawa, and Y. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **101**, 203201 (2008).
- [12] T. Lahaye, J. Metz, B. Froehlich, T. Koch, M. Meister, A. Griesmaier, T. Pfau, H. Saito, Y. Kawaguchi, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **101**, 080401 (2008).
- [13] A. J. Leggett, Le Journal de Physique Colloques **41**, C7 (1980).
- [14] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [15] M. J. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, and M. W. Zwierlein, Science **335**, 563 (2012).
- [16] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Nägerl, *et al.*, Nature **440**, 315 (2006).
- [17] F. Ferlaino, A. Zenesini, M. Berninger, B. Huang, H.-C. Nägerl, and R. Grimm, Few-Body Systems **51**, 113 (2011).
- [18] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, Nature **515**, 237 (2014).
- [19] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, Advances in atomic, molecular, and optical physics **42**, 95 (2000).
- [20] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger, Nature **483**, 302 (2012).
- [21] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Reviews of modern physics **80**, 885 (2008).
- [22] D. Jaksch and P. Zoller, Annals of physics **315**, 52 (2005).

- [23] W. Zwerger, *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **5**, S9 (2003).
- [24] 田崎晴明, *固体物理* **31**, 173 (1996).
- [25] S. Sachdev, *Quantum phase transitions* (Cambridge university press, 2011).
- [26] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Physical Review Letters* **81**, 3108 (1998).
- [27] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *nature* **415**, 39 (2002).
- [28] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbene, *Nature Physics* **8**, 267 (2012).
- [29] C. Gross and I. Bloch, *Science* **357**, 995 (2017).
- [30] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Foelling, L. Pollet, and M. Greiner, *Science* **329**, 547 (2010).
- [31] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, and S. Kuhr, *Nature* **467**, 68 (2010).
- [32] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres, P. Schauß, T. Fukuhara, C. Gross, I. Bloch, C. Kollath, and S. Kuhr, *Nature* **481**, 484 (2012).
- [33] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, *Nature* **528**, 77 (2015).
- [34] T. F. Gallagher, *Rydberg atoms*, 3 (Cambridge University Press, 2005).
- [35] A. Browaeys and T. Lahaye, *Nature Physics* **16**, 132 (2020).
- [36] X. Wu, X. Liang, Y. Tian, F. Yang, C. Chen, Y.-C. Liu, M. K. Tey, and L. You, *Chinese Physics B* (2020).
- [37] C. S. Adams, J. D. Pritchard, and J. P. Shaffer, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **53**, 012002 (2019).
- [38] M. Endres, H. Bernien, A. Keesling, H. Levine, E. R. Anschuetz, A. Krajenbrink, C. Senko, V. Vuletić, M. Greiner, and M. D. Lukin, *Science* **354**, 1024 (2016).
- [39] D. Barredo, S. De Léséleuc, V. Lienhard, T. Lahaye, and A. Browaeys, *Science* **354**, 1021 (2016).
- [40] H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, *et al.*, *Nature* **551**, 579 (2017).
- [41] H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, T. T. Wang, S. Ebadi, H. Bernien, M. Greiner, V. Vuletić, H. Pichler, *et al.*, *Physical review letters* **123**, 170503 (2019).
- [42] M. Saffman, T. G. Walker, and K. Mølmer, *Reviews of modern physics* **82**, 2313 (2010).
- [43] 武井宣幸, *数理科学* **58**, 60 (2020).
- [44] J. Wilson, S. Saskin, Y. Meng, S. Ma, R. Dilip, A. Burgers, and J. Thompson, *arXiv preprint arXiv:1912.08754* (2019).
- [45] I. S. Madjarov, J. P. Covey, A. L. Shaw, J. Choi, A. Kale, A. Cooper, H. Pichler, V. Schkolnik, J. R. Williams, and M. Endres, *Nature Physics* **16**, 857 (2020).
- [46] S. Ebadi, T. T. Wang, H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, D. Bluvstein,

- R. Samajdar, H. Pichler, W. W. Ho, *et al.*, *Nature* **595**, 227 (2021).
- [47] S. de Léséleuc, V. Lienhard, P. Scholl, D. Barredo, S. Weber, N. Lang, H. P. Büchler, T. Lahaye, and A. Browaeys, *Science* **365**, 775 (2019).
- [48] C. J. Turner, A. A. Michailidis, D. A. Abanin, M. Serbyn, and Z. Papić, *Nature Physics* **14**, 745 (2018).
- [49] J. Preskill, arXiv preprint arXiv:2106.10522 (2021).