

レーザー冷却における無限測度の役割

慶應義塾大学大学院理工学研究科 秋元琢磨

Takuma Akimoto

Graduate School of Science and Technology, Keio University

概要

レーザー冷却のモデルとして、不均一性を持つランダムウォークを考え、その不変測度に無限測度が現れることを示す。また、その役割について議論する。無限測度を持つエルゴード的な力学系では、通常のエルゴード的な力学系とは異なり、長時間平均量が一定値ではなく、分布として収束することが知られている（分布極限定理）。レーザー冷却のランダムウォークモデルでは、突発的に低温状態から非低温状態への遷移が起こる。この突発的な遷移の回数に関して、系の不変測度が無限測度となると、分布極限定理が成立することを示す。これらの結果は、冷却において、無限測度系が持つ非定常な性質は、冷却を促進することを意味している。

1 Introduction

平衡統計力学では、全ての粒子の位置、運動量の情報により系の状態（微視的な状態）が特徴付けられる。そして、温度、圧力や体積などの巨視的な状態は、微視的な状態によるなんらかの結果と解釈することができる。例えば、巨視的な観測量は、微視的な状態から一意に決まる関数（観測関数）の観測時間内での時間平均の結果とすることは物理的に妥当である。平衡状態では、巨視的な状態を決める観測量は平衡値の周りで揺らいでいるので、この前提に立てば、平衡状態では、微視的な観測関数の時間平均が一定値の周りで揺らいでいることを意味する。換言すれば、平衡状態は、微視的な状態だけでは議論することができず、微視的な観測関数の観測時間内での揺らぎによって特徴付けられる。このことを極限を用いて表現すれば、観測量 $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ が平衡状態にあるとは、ほとんど全ての微視的な状態 $x_0 \in X$ に対して、

$$\frac{1}{t} \int_0^t f(x_t) dt \rightarrow \langle f \rangle_{eq} \quad (t \rightarrow \infty) \quad (1)$$

が成立すると考えることができる。ここで、 $\langle f \rangle_{eq}$ は、初期点 x_0 に依存しない定数である。もし周りの環境と一切の熱・粒子のやり取りがない孤立系を考えるならば、この系は力学系となる。力学系では、「長時間平均が一定値（空間平均）に一致する」という性質 (1) はエルゴード性と言われている。実際に、エルゴード的な力学系では、力学系の不変測度 μ が確率測度となるならば、性質 (1) は、不変測度を用いて、

$$\frac{1}{t} \int_0^t f(x_t) dt \rightarrow \int_X f(x) d\mu \quad (t \rightarrow \infty) \quad (2)$$

となり、系の平衡状態を適切に表現できる。

一方、不変測度が規格化できない、所謂、無限測度の場合には、長時間平均は上のようにはならず、分布として収束することがわかってきている [1]。具体的には、離散力学系 $T: X \rightarrow X$

において、不変測度に関して可積分関数¹である観測関数 f に対して、ほとんど全ての初期アンサンブル²に対して、

$$\frac{1}{a_t} \sum_{k=0}^{t-1} f(x_k) \Rightarrow M_\alpha \quad (t \rightarrow \infty) \quad (3)$$

となるような数列 a_t が存在する [1, 2]. ここで、 $\Rightarrow$ は法則収束を意味する。また、 M_α は、指数 α の Mittag-Leffler 分布³を分布関数に持つ時間 t には依存しない確率変数である。また、観測関数が可積分関数でないときには、分布極限定理は、観測関数の性質に強く依存し、極限分布が Mittag-Leffler 分布とは異なることもわかってきている [3, 4, 5].

近年、このような長時間平均の分布としての収束が、物理や生物の実験でも観測され始め、大きな注目を集めている。例えば、細胞内輸送現象において、生きている細胞内の mRNA の拡散 [6] や細胞膜上でのたんぱく質の拡散 [7] において、1 分子測定により得られた時系列を用いて定義される長時間平均で定義された平均 2 乗変位、

$$\overline{\delta^2}(\Delta; t) \equiv \frac{1}{t - \Delta} \int_0^{t-\Delta} (\mathbf{r}_{t'+\Delta} - \mathbf{r}_{t'})^2 dt', \quad (4)$$

が遅い拡散 [平均 2 乗変位が線形より遅く増大: $\overline{\delta^2}(\Delta; t) \sim D_\alpha t^\alpha$ ($\alpha < 1$)] を示すだけでなく、その拡散係数 D_α が実験毎そして分子によって大きく異なる事が発見されてきている。また、光を照射し続けて、量子ドットの発光を観察する物性の実験では、各量子ドットが時間的に間欠的に発光強度を変え、その観測時間内での発光強度の時間平均が大きく揺らぐことがわかってきている [8]. 他にも、液晶乱流における界面成長においても長時間平均の分布がデルタ関数には収束せず、有限の分散を持ったものに収束することが確認されている。

このような長時間平均の分布極限法則は、確率モデルでは、連続時間ランダムウォーク (Continuous time random walk; CTRW)、トラップモデルや stored-energy-driven Lévy flight などの異常拡散を生み出すモデルに対して、解析的に示されている [9, 10, 11, 12]. また、2 状態の確率過程においても、ある状態の占有時間の割合が、分布として収束することも示されている [13]. これらのモデルは、上で挙げた細胞内における異常拡散や量子ドットの発光現象と関係していると考えられている。そして、無限測度を持つ 1 次元の写像力学系とも密接に関係しており、無限測度エルゴード理論は、長時間平均の本質的な揺らぎを理解する上で重要な役割を果たしていると考えられている [4, 14, 15]. 本論文では、長時間平均量が本質的に揺らぐ新しい現象として、レーザー冷却を考え、そこに無限測度が現れることを示す。そして、低温状態からの脱出において、Mittag-Leffler 分布が現れることを明らかにする。

2 Model

究極的には、物質をどこまで冷やすことができるのか? という問いは、単に科学としてだけでなく、工学への応用においても重要な問題である。レーザー冷却は、極低温まで冷やすのに使われる実験的手法の一つである。従来の手法では、レーザーによるランダムな放射による運動量空間上のランダムウォークとドップラー効果による摩擦を用いて、冷却している [16]. この手法を運動量空間上のランダムウォークで考えれば、運動量ゼロの向きへバイアスがかかっ

¹ $\int_X |f| d\mu < \infty$.

² 例えば、 $\int_X f(x_0) \rho(x_0) dx_0 = \infty$ となるような初期密度 $\rho(x_0)$ は除く。

³ 指数 α の Mittag-Leffler 分布は、ラプラス変換が $\langle e^{-zM_\alpha} \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1+\alpha)^k (-z)^k}{\Gamma(1+k\alpha)}$ となる分布関数である。

たランダムウォークとなる。しかし、ランダムウォークでは、ランダムウォーカーのランダムな揺動が残るため、ある温度より下げることは難しい。レーザー冷却における低温の下限に関する問題は、意外にも、摩擦なしのランダムウォークを考えることにより、解消することができる [17]。具体的には、運動量空間上のランダムウォークにおいて、原点 ($p = 0$) に近ければ近いほど拡散性 (ランダムウォーカーのジャンプの大きさ、または、ジャンプする確率) をゼロにするような位置依存型ランダムウォークを考えれば、バイアスがないにもかかわらず、原点へ近づいていくことを示すことができる⁴。そして、このような位置 (運動量) 依存型のランダムウォークは実験的に構築することができる。

ここで扱うモデルは、両端に反射壁がある ($p_{\max} > 0$ と $-p_{\max}$ に反射壁がある) 1次元の運動量空間上のランダムウォークである。 $[-p_{\max}, -p_0] \cup (p_0, p_{\max}]$ の領域では、ランダムウォーカーは一定の時間 τ_0 毎に等確率で右または左に δ だけジャンプする (運動量には依存しない)。ここで、 p_0 は正の定数である。一方、 $[-p_0, p_0]$ の領域では、次にジャンプするまでの待ち時間は、

$$\tau(p) = \tau_0 \left(\frac{p_0}{|p|} \right)^\alpha \quad (5)$$

のように運動量に依存する ($\alpha > 0$) [17, 18]。運動量が小さければ小さい程、待ち時間は長くなる。つまり、拡散性は小さくなる。ここで、ランダムウォーカーが原点付近に一様分布でジャンプすると仮定する。つまり、原点付近へジャンプ位置の確率密度関数は、 $\rho(p) = 1/(2p_1)$ ($p_1 < p_0$) とする。すると、待ち時間が x 以下となる確率は、

$$\Pr\{\tau \leq x\} = \Pr\left\{|p| \geq \left(\frac{\tau_0}{x}\right)^{\frac{1}{\alpha}} p_0\right\} = \frac{2p_1 - 2p_0(\tau_0/x)^{\frac{1}{\alpha}}}{2p_1} \quad (6)$$

となる。したがって、待ち時間の確率密度関数は、

$$P(x) = \frac{\tau_1^{1/\alpha}}{\alpha} x^{-1-1/\alpha} \quad (x \geq \tau_1) \quad (7)$$

となる。ここで、 $\tau_1 = \tau_0(p_0/p_1)^\alpha$ である。 $\alpha \geq 1$ のとき、平均トラップ時間は発散する。一方、両端に反射壁があるため、原点付近への再帰時間の平均は有限である。原点付近のトラップ時間の平均値は発散するため、時間が経つと、原点付近に集まると予想される。実際に、図 1 に示しているように、 $\alpha \geq 1$ では、密度は原点に集まっていく。

時刻 t での密度を $P(p, t)$ とする。原点付近でのマスター方程式は、

$$P(p, t + dt)dp - P(p, t)dp = \int_t^{t+dt} \varepsilon'_t dt' dp - P(p, t)dp \frac{\int_{t-\tau(p)}^{t-\tau(p)+dt} \varepsilon'_t dt'}{\int_{t-\tau(p)}^t \varepsilon'_t dt'} \quad (8)$$

となる。ここで、 ε_t は p に依存しないとした。さらに、 ε_t は $[t, t + dt)$ で一定であるとする、

$$\frac{\partial}{\partial t} P(p, t) = \varepsilon_t - \frac{P(p, t)}{\tau(p)} \quad (9)$$

となる。したがって、不変分布 (定常分布) は、

$$P_{st}(p) = \varepsilon \tau(p) \propto p^{-\alpha}. \quad (10)$$

⁴最も単純な例としては、確率 $p = 1/2$ で $x_{n+1} = Ax_n$ 、確率 $p = 1/2$ で $x_{n+1} = x/A$ で動く位置依存型ランダムウォークである。実際に、 $z_n = \ln|x_n|$ とすれば、 $z_{n+1} = z_n + \ln A$ ($p = 1/2$)、 $z_{n+1} = z_n - \ln A$ ($p = 1/2$) となり、 z_n は、通常のランダムウォークとなる。したがって、 $z = a$ (> 0) に反射壁を置けば、 z_n の分布は、 $[-\infty, a)$ で一様分布となり、 z_n は、負の方向に広がっていく。つまり、 x_n は原点に近づいていく。

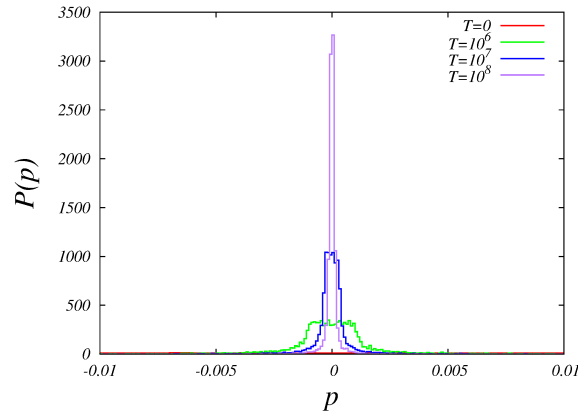


図 1: 密度の時間発展 ($\alpha = 2$) . 時間と共に原点へ集まっていく.

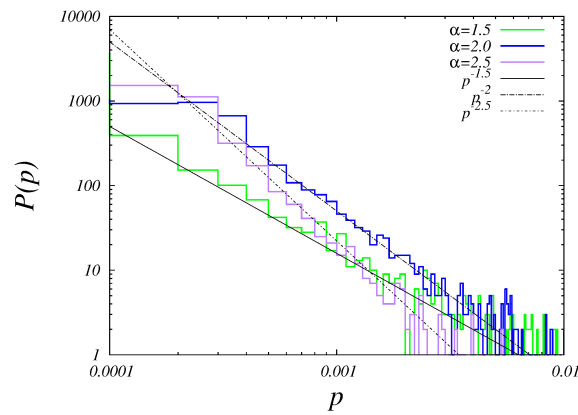


図 2: 原点付近での密度 ($\alpha = 1.5, 2, 2.5$) . 点線は理論的に得られた指数を用いてフィットさせている.

ここで、 $\alpha \geq 1$ のとき、不変分布は原点で規格化できなくなり、定常分布は存在しない（無限測度）。このことは、文献 [18] でも指摘されている。したがって、密度は、図 1 に示しているように、原点に集まるが、その振る舞いは、 $P(p) \propto p^{-\alpha}$ となる（図 2）。

3 Results

本モデルでは、 $\alpha \geq 1$ のとき、密度は、原点（運動量ゼロ）に集まっていくので、原子は時間が経てば経つ程、低温になる（以下、 $\alpha \geq 1$ のときを考える）。しかしながら、ランダムウォークをしながら、原点に行くため、有限の確率で低温状態から抜け出すことになる（図 3）。時間が経てば経つ程、より低温状態（ $|p| < p^*$ となる状態）にいやしくなるため、この低温からの脱出過程は非定常な確率過程となる。ここで、 $|p| < p^*$ となる状態を -1 、 $|p| \geq p^*$ となる状態を $+1$ とする 2 状態の確率過程を考える。 -1 の持続時間分布は、式 (7) で与えられる。 $+1$ の持続時間分布を $p_+(x)$ とする。 $+1$ の持続時間の平均値は有限であることに注意する。 τ_k^-, τ_k^+ をそれぞれ k 番目の $-1, +1$ の持続時間とする。以下、 $t = 0$ で $+1$ の状態であったとする。 $\tau_k \equiv \tau_k^- + \tau_k^+$ と定義すると、 τ_k は独立同一分布であり、分布 $p(x)$ のテイルは、式 (7) で与えられるべき指

数と同じである ($p(x) \propto x^{-1-1/\alpha}$). したがって、更新回数 $N_t = \min\{k; \tau_1 + \dots + \tau_k > t\}$ の分布は、

$$\Pr\{N_t/t^\beta \leq x\} = \Pr\{S_n > t\} = \Pr\left\{S_n > \left(\frac{n}{x}\right)^{1/\beta}\right\} = \Pr\left\{\frac{S_n}{n^{1/\beta}} > x^{-1/\beta}\right\} \quad (11)$$

となる. ここで、 $\beta = 1/\alpha$, $S_n = \tau_1 + \dots + \tau_n$, $n = xt^\beta$ とおいた. 一般化された中心極限定理より [19]、(11) 式の右辺は、

$$\Pr\left\{\frac{S_n}{n^{1/\beta}} > x^{-1/\beta}\right\} \rightarrow G_\alpha(x^{-1/\beta}) \quad (n \rightarrow \infty) \quad (12)$$

となる. $G_\beta(x)$ は安定分布、 $G_\beta(x^{-1/\beta})$ は Mittag-Leffler 分布と呼ばれている. τ_k^+ は有限の期待値を持つので、

$$\frac{\tau_1^+ + \dots + \tau_n^+}{n} \rightarrow \langle \tau^+ \rangle \quad (n \rightarrow \infty) \quad (13)$$

が成立する. したがって、時刻 t までに非低温状態 ($|p| \geq p^*$) にいる時間 $T_t^+ = \tau_1^+ + \dots + \tau_{N_t}^+$ の分布は、

$$\Pr\left\{\frac{T_t^+}{t^\beta} \leq x\right\} = \Pr\left\{\frac{N_t T_t^+}{t^\beta N_t} \leq x\right\} \rightarrow G_\beta(\langle \tau^+ \rangle^{1/\beta} x^{-1/\beta}) \quad (14)$$

となる. つまり、非低温状態にいる時間の割合を t^β で規準化した確率変数は、一定値には収束せず、有限の分散を持つ普遍分布 (Mittag-Leffler 分布) に収束することがわかった. 図 4 は、数値計算の結果であり、理論とよく合っていることがわかる.

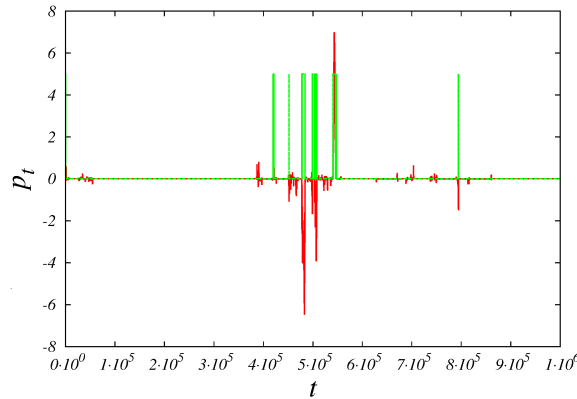


図 3: 運動量の時間発展 ($\alpha = 1.5$). 突発的に低温状態から脱出する. 緑の線は、 $|p_t| > 0.1$ となったときに 5 を取り、それ以外ではゼロとなる関数である.

4 Conclusion

本論文では、運動量に依存して待ち時間が決まる運動量空間上のランダムウォークにおいて、不変測度が規格化できない無限測度が現れることを示した. 無限測度系では、密度は、非定常になり、定常分布へ収束せず、発散する点 (ここでは運動量ゼロの原点) へ向かって収束していく. このモデルは、レーザー冷却のモデルとなっており、低温化のメカニズムは、無限測度

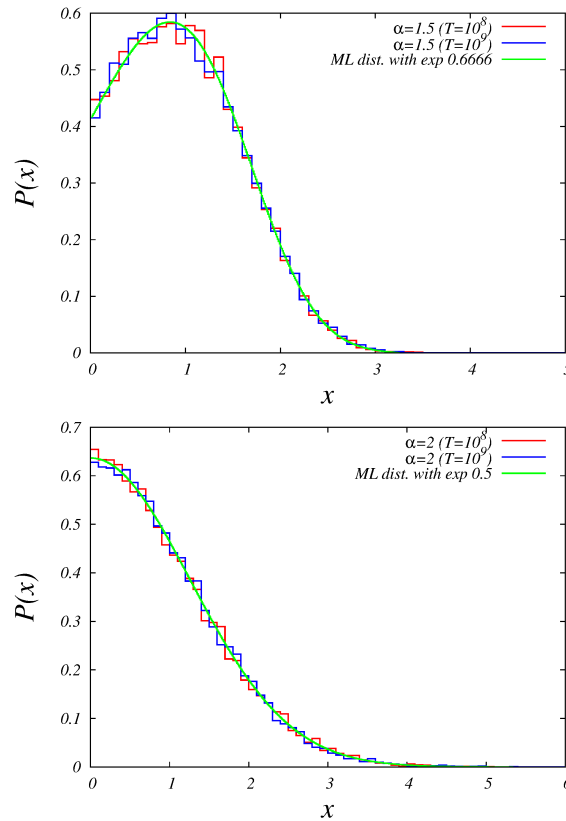


図 4: 非低温状態である時間の規準化された割合の確率密度関数 ($\alpha = 1.5, 2$). 観測時間を変えても、分布の形は変化しない。ただし、平均値が1になるように規準化されている。緑の線は、Mittag-Leffler 分布である。

による、密度の原点への収束であることがわかった。また、このモデルでは、運動量空間上をランダムに動くため、突発的に低温状態から脱出する。時刻 t までの非低温状態の持続時間は、Mittag-Leffler 分布になることも示した。

参考文献

- [1] J. Aaronson, J. D'Analyse Math. **39**, 203 (1981).
- [2] J. Aaronson, *An Introduction to Infinite Ergodic Theory* (American Mathematical Society, Providence, 1997).
- [3] M. Thaler, Ergod. Theory Dyn. Syst. **22**, 1289 (2002).
- [4] T. Akimoto, J. Stat. Phys. **132**, 171 (2008).
- [5] T. Akimoto, S. Shinkai, and Y. Aizawa, arxiv:1310.4055.
- [6] I. Golding and E. C. Cox, Phys. Rev. Lett. **96**, 098102 (2006).

- [7] A. Weigel, B. Simon, M. Tamkun, and D. Krapf, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **108**, 6438 (2011).
- [8] X. Brokmann, J.-P. Hermier, G. Messin, P. Desbiolles, J.-P. Bouchaud, and M. Dahan, Phys. Rev. Lett. **90**, 120601 (2003).
- [9] Y. He, S. Burov, R. Metzler, and E. Barkai, Phys. Rev. Lett. **101**, 058101 (2008).
- [10] T. Miyaguchi and T. Akimoto, Phys. Rev. E **83**, 031926 (2011).
- [11] T. Miyaguchi and T. Akimoto, Phys. Rev. E **87**, 032130 (2013).
- [12] T. Akimoto and T. Miyaguchi, Phys. Rev. E **87**, 062134 (2013).
- [13] C. Godrèche and J. M. Luck, J. Stat. Phys. **104**, 489 (2001).
- [14] T. Akimoto and T. Miyaguchi, Phys. Rev. E **82**, 030102(R) (2010).
- [15] T. Akimoto, Phys. Rev. Lett. **108**, 164101 (2012).
- [16] C. Cohen-Tannoudji and W. D. Phillips, Phys. Today **43**, 33 (1990).
- [17] F. Bardou, J.-P. Bouchaud, A. Aspect, and C. Cohen-Tannoudji, *Levy statistics and laser cooling: how rare events bring atoms to rest* (Cambridge University Press, 2002).
- [18] E. Bertin and F. Bardou, Am. J. Phys. **76**, 630 (2008).
- [19] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, 2nd ed., Vol. 2 (Wiley, New York, 1971).