

令和 5 年 4 月 30 日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K14389

研究課題名（和文）Rydberg原子系で実現する高次元、高スピン系における非平衡ダイナミクスの研究

研究課題名（英文）Study of nonequilibrium dynamics in higher dimensional and higher spin systems in Rydberg atoms

研究代表者

國見 昌哉（Kunimi, Masaya）

東京理科大学・理学部第一部物理学科・助教

研究者番号：00844820

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では近年注目されているRydberg原子を用いた量子シミュレーターや冷却原子系の非平衡ダイナミクスについての理論研究を行った。まずはRydberg原子系を念頭に置いた量子スピン系に対する近似手法の性能評価と、実際の実験系への適用を行った。また、光格子中の1次元Bose気体の非エルゴードダイナミクスの性質を明らかにした。さらに、Dzyaloshinskii-Moriya型相互作用を有する量子スピン系をRydberg原子で実現する方法の提案を行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今後も発展が予想されるRydberg原子を用いた量子シミュレーターで観測が期待される非平衡現象の研究や、いままで実現していなかったDzyaloshinskii-Moriya型の相互作用系を実験的に作成するための提案を行なった。特に後者は量子カイラル磁性体という固体系では簡単に研究できない領域へアプローチできるため学術的に意義が大きい。本研究により量子カイラル磁性の量子シミュレーションという新しい可能性を開けたと考えている。

研究成果の概要（英文）：In this research project, we have done theoretical studies on quantum simulators using Rydberg atoms, which have attracted much attention in recent years and non-equilibrium dynamics in the cold atoms. First, we have evaluated the performance of approximation methods for quantum spin systems with Rydberg atoms, and applied them to actual experimental systems. Then, we have analyzed the properties of the nonergodic dynamics of one-dimensional Bose gases in optical lattices. Moreover, we have proposed a method to realize a quantum spin system with Dzyaloshinskii-Moriya type interaction in Rydberg atoms.

研究分野：原子分子光物理、物性物理、統計物理

キーワード：Rydberg原子 量子シミュレーター 冷却原子 量子スピン系 非平衡ダイナミクス

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

近年、量子技術の発展に伴い、冷却中性原子をはじめとした様々な量子系で、量子シミュレーションが盛んに行われている。量子シミュレーションとは、Feynman が提唱した概念で、制御性の高い人工量子系(量子シミュレーター)を作成しそこで超伝導や磁性に代表される量子多体問題を"解く"というものである。そのなかでも近年 Rydberg 原子(アルカリ原子やアルカリ土類様原子の最外殻電子を高い主量子数の状態に励起したものを)を構成要素とした量子シミュレーターの研究が盛んに行われている。Rydberg 原子間には高い主量子数に起因した大きい双極子モーメントを起源とする双極子-双極子相互作用が働く。そのため、原子間に長距離相互作用が働く。用いる Rydberg 原子のエネルギー準位や原子の位置を適切に制御することにより、良質な量子スピン系の量子シミュレーターが実現可能である。典型的な量子スピン系である、Ising 模型、XY 模型、XXZ 模型が実際に実験的に実現している。また、ハミルトニアンを作成するだけでなく、さまざまな現象を量子シミュレーターで観測されている。例えば、Rydberg 原子の量子シミュレーションをきっかけにした量子多体傷跡状態(Quantum many-body scar states)という熱平衡化を阻害するメカニズムの発見や [H. Bernien, et al., Nature 551, 579 (2017).], トポロジカル相において見られる端状態の明瞭な観測 [S. de Léséleuc, et al., Science 365, 775 (2019).]などが行われている。そのほかにもさまざまな量子多体系の実験が可能であり、Rydberg 原子を用いた量子シミュレーターの発展が期待されている。

2. 研究の目的

Rydberg 原子系の量子シミュレーターで実現する量子スピン系を念頭に置き、量子多体現象、特に非平衡ダイナミクスの研究を行う。Rydberg 原子系では実時間、実空間のダイナミクスが観測可能であることを利用し、新しい非平衡現象の解明を目指す。また、いままでに実現していないハミルトニアンを Rydberg 原子の量子シミュレーターで実現するための提案を行う。これにより、Rydberg 原子を用いた量子シミュレーターの可能性を広げることが研究目的である。

3. 研究の方法

非平衡量子多体ダイナミクスの研究を主として行うため、よく用いられる平均場近似では不十分な結果しか得られないことが予想される。そのために平均場近似を超えた記述が可能な方法を用いる。その一つが準古典近似法の一つである discrete truncated Wigner 近似(DTWA)法である。この近似法は、系の時間発展は平均場近似で計算するが、その初期条件に対応する Wigner 関数に従ってランダムにサンプリングするという手法である。比較的簡単に実装可能な数値計算手法であるが、高次元系や長距離相互作用系では良い近似を与えることが知られている。

加えて考えるハミルトニアンをそのまま数値的に対角化する厳密対角化法も用いる。この手法は小さな系にしか適用できないものの、あらゆる物理量が計算可能である。特に熱平衡化の研究で用いる。

また、より大きな系に対しては行列積状態(matrix product state, MPS)を用いた数値計算アルゴリズムである time-evolving block decimation (TEBD)法や密度行列くり込み群法(density-matrix renormalization group, DMRG)を用いて多体の基底状態や非平衡状態の解析を行う。

4. 研究成果

(1)DTWA 法の性能評価

DTWAは実時間ダイナミクスを計算できる手法であり、大きなシステムサイズ、高次元、長距離相互作用を取り扱うことのできる手法である。これらは長距離相互作用を有するRydbergに対しても有効な近似法の一つと考えられる。しかしながら、近似が有効な時間スケールが一般に短い(スピン間相互作用の大きさと同程度のオーダーの時間)という問題、およびこの時間スケールの具体的な評価は困難であるという問題がある。そのため、DTWAを使用する際に注意が必要である。

本研究では、DTWAの近似の性能評価をいくつかのスピン模型、空間次元、相互作用のレンジを系統的に変化させることでおこなった。この評価を行うためにバイアスの少ない量と考えられるレニーエンタングルメントエントロピーをDTWA法の枠内で評価する方法の開発を行なった。

具体的な評価方法はBBGKY階層方程式を用いて、DTWAの高次補正を計算し、1次近似との差を比較することで近似の妥当な時間スケールを評価する方法である。典型的なスピン模型であるIsing、XY、Heisenberg模型に対しこの手法を適用し、リーズナブルな結果を得た。本研究結果はPhysical Review Research誌で出版された。

(2) Rydberg原子系を用いたRamsey干渉実験に対する数値シミュレーション

分子科学研究所大森グループのRydberg原子系を用いたRamsey干渉実験を説明するために、DTWAを用いた数値シミュレーションを行った。この実験では縦磁場Ising模型が実現している。数値計算の結果、DTWAでは実験結果のうち短時間領域(相互作用の時間スケールと同程度の領域)のみを再現できることがわかった。この結果は、この系ではDTWAでは取り込められていない量子的なゆらぎが重要であることを示している。

(3) トラップポテンシャル中1次元光子中 Bose 気体の非エルゴードダイナミクス

実際の実験を念頭に置き、放物型のトラップポテンシャルを有する1次元Bose-Hubbard模型の非エルゴード的ダイナミクス(熱平衡化が時間発展後も起きない)の研究を行った。先行研究により、Bose-Hubbard模型では強相関領域(オンサイト相互作用とホッピングエネルギーの比 U/J が大きい領域)ときに非エルゴード的になることが知られていた。しかしながら、先行研究では一様系での計算しかなく、実際の実験では不可欠な放物型のトラップポテンシャルを考慮に入れたものがなかった。本研究では、初期状態として1サイトおきに粒子が2個0個と入れ替わる $|\dots 0202\dots\rangle$ という状態を考え、実際の実験に近いパラメータを設定し、厳密対角化計算、およびMPSを用いた数値計算により時間発展の計算を行った。その結果、トラップポテンシャルが存在しても非エルゴード的ダイナミクスが現れる、むしろトラップポテンシャルの存在が非エルゴード性を促進するということを示した。また、この状況下でのBose-Hubbard模型に対する有効模型を摂動論で導出し、それが非一様な相互作用及び磁場下のスピン1/2 XXZ模型になることを示した。そしてそれをもとになぜこの系で非エルゴード的ダイナミクスが現れるかを議論した。本研究結果はPhysical Review A誌で出版された。

(4) Dzyaloshinskii-Moriya 型の相互作用を有するスピン模型の Rydberg 原子系での実現方法の提案

Dzyaloshinskii-Moriya(DM)相互作用とは空間反転対称性が破れた結晶中で実現するスピン間相互作用である。これはカイラルソリトン格子やスカーミオンの起源になるなどカイラル磁性を考える上で重要である。本研究ではDM相互作用を有する量子スピン模型をRydberg原子を用いた量子シミュレーターで実現する方法についての提案を行った。具体的にはRydberg原子に対しレーザーを2本照射し、2光子Raman遷移を引き起こすことに加え、ユニタリー変換を利用しスピンの回転座標系でDM相互作用と横磁場を持つ量子スピンハミルトニアンが実現するという方法を提案した。また、この方法を用いるとDM相互作用項と横磁場項のみからなるDH模型と呼ばれる近年物性物理の文脈で提案された模型が実現可能であることを示した。DH模型の解析を行い、量子カイラル磁性体のダイナミクスを計算し、古典系とは顕著に異なる振る舞いをすることを示した。加えて、DH模型では量子多体傷跡状態が出現することを解析的に示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

| | |
|--|-----------------------------|
| 1. 著者名 Kunimi Masaya, Danshita Ippei | 4. 巻 104 |
| 2. 論文標題 Nonergodic dynamics of the one-dimensional Bose-Hubbard model with a trapping potential | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review A | 6. 最初と最後の頁 043322-043322 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.104.043322 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|----------------------------|
| 1. 著者名 Kunimi Masaya, Nagao Kazuma, Goto Shimpei, Danshita Ippei | 4. 巻 3 |
| 2. 論文標題 Performance evaluation of the discrete truncated Wigner approximation for quench dynamics of quantum spin systems with long-range interactions | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review Research | 6. 最初と最後の頁 013060(1-15) |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.3.013060 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である） | 国際共著 該当する |

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 1件/うち国際学会 1件）

| |
|---|
| 1. 発表者名 國見昌哉, 富田隆文, 桂法称, 加藤雄介 |
| 2. 発表標題 Rydberg原子を用いたDzyaloshinskii-Moriya相互作用を有する量子スピン鎖の実現方法の提案 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 國見昌哉, 段下一平 |
| 2. 発表標題 運動量空間のHilbert space fragmentationに由来する永久流状態 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 國見昌哉, 富田隆文, 桂法称, 加藤雄介 |
| 2. 発表標題 Rydberg原子を用いたDzyaloshinskii-Moriya相互作用を有する量子スピン鎖の実現方法の提案と非平衡スピンダイナミクス |
| 3. 学会等名 第4回冷却原子研究会「アトムの会」 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Masaya Kunimi |
| 2. 発表標題 Study of novel quantum many-body phenomena originating from non-ergodicity in isolated quantum systems |
| 3. 学会等名 Second Annual Meeting(Extreme Universe)(招待講演)(国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 金子隆威、國見昌哉、段下一平 |
| 2. 発表標題 強い三体ロス項を持つBose-Hubbard模型における量子多体傷跡状態 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会(オンライン) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 國見昌哉 |
| 2. 発表標題 光格子中の1次元Bose気体の非エルゴード的ダイナミクスに対する閉じ込めポテンシャルの効果 |
| 3. 学会等名 理論研究会：量子多体系の相形成とダイナミクス |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 國見昌哉, 段下一平 |
| 2. 発表標題 トラップポテンシャルを有する1次元Bose-Hubbard模型の非エルゴード的ダイナミクス |
| 3. 学会等名 熱場の量子論とその応用 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 國見昌哉 |
| 2. 発表標題 Truncated Wigner近似を用いたボース気体と量子スピン系の非平衡ダイナミクスの研究 |
| 3. 学会等名 第2回冷却原子研究会「アトムの会」 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 國見昌哉, 段下一平 |
| 2. 発表標題 1次元Bose-Hubbard模型の非エルゴード的ダイナミクスに対する閉じ込めポテンシャルの効果 |
| 3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

| | | | |
|---------|---------------------------|-----------------------|----|
| 6. 研究組織 | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|---------|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 | | | |
|---------|---------|--|--|--|
| ドイツ | ハンブルグ大学 | | | |