

Rydberg Atom

橋本 亮太
03RP027

埼玉大学理学部物理学科

平成 19 年 1 月 31 日

概要

リュードベリ原子と呼ばれる主量子数 n の大きな原子がある。本文ではこの原子の基本的な性質や電磁場との相互作用について調べ、その特徴について述べた。またダークマターの候補であり、相互作用が小さいために検出が非常に困難な粒子アクシオンの探索に、このリュードベリ原子が使えることを示した。

目次

1	序章	
2	外場中のリュードベリ原子	
2.1	電場中での振舞い
3	外場中のリュードベリ原子	
3.1	電場中での振舞い
3.2	磁場中での振舞い
4	生成法	
5	アクシオン探索	
5.1	エネルギー準位の交差
5.2	アクシオン探索
6	まとめ	
A	アインシュタインの自然放出係数	

1 序章

我々は1 mくらいの巨視的尺度の中で生活している。ニュートン力学（古典力学）により記述される巨視的な世界である。一方、原子や分子の世界は 10^{-10} m くらいの微視的な世界で、非相対論的な量子力学によって記述される。さらに長さの尺度を小さく、エネルギーの尺度を大きくすれば、原子核や素粒子の世界に至る。本文で対象とするのは、巨視的な古典的世界と微視的な量子力学的世界の間の領域における物理現象である。

通常どんな原子や分子でも、その中の電子の1つを主量子数 n の大きい原子軌道に励起すれば水素型の励起状態となる。この状態を、最初に研究したリュードベリ (J.R.Rydberg) の名をとって“リュードベリ状態”といい、その状態にある原子を“リュードベリ原子”という。水素原子の理論的結果から明らかのように、その軌道半径は n^2 に比例して非常に大きい [1-2]。これが膨張した原子の正体である。この原子は原子の世界での最も簡単な系でありながら、通常の原子や分子に比べて長さ、時間、エネルギーの尺度について通常の原子・分子の世界のそれから大きくかけ離れた興味ある性質を示す。

この励起状態の存在自体は理論的には以前から知られていたが、その種々の性質が実験的に検証されたのは最近になってからである。というのは、例えば電子を衝撃させてリュードベリ原子を作ろうとすると、その電子ビームのエネルギーの不均一さが原子のエネルギー準位間隔に比べてはるかに大きく、量子状態をはっきり指定してリュードベリ原子を作ることができないといった、技術的な困難があったからである。しかし1970年代後半に入って、レーザー高分解能分光の進歩、特に波長可変の色素レーザーが手に入るようになってからこの励起原子を特定の量子状態に選択的に励起することが可能となり、実験的研究が急速に進歩した。

歴史的に見ればこのリュードベリ原子は、ボーア (Bohr) により前期量子論から量子力学が完成する際に重要な役割を果たした系であり、巨視的な古典力学的世界と微視的な量子力学的世界の接点となっている。

先に述べたように、リュードベリ原子は通常の原子とは異なる挙動を示す。この原子の性質、電磁場との相互作用、およびその応用については、次章以降で述べることとする。

2 基本的性質

通常の原子と比べたときのリュードベリ原子の主な特徴として、次の4つのことが挙げられる。

- 原子半径が大きい
- 束縛エネルギーが小さい
- エネルギー準位間隔が小さい
- 寿命が長い

これらはどれもリュードベリ原子の基本的かつ重要な性質である。

(1) 原子半径

先にも述べたように、リュードベリ原子は水素型の原子と見なすことができる。なぜなら主量子数 n の大きい電子 (リュードベリ電子) から見れば、遠く離れた原子核とその周りを回る電子は一つにまとまって見えるので、結局中心に $+1$ の電荷があるのと同じことだからである。

$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \quad (1)$$

というハミルトニアンを持つ水素原子を考える。ここで、 p 、 m_e 、 e はそれぞれ電子の運動量、質量、電荷で、 r はポテンシャルの中心と電子との距離である。質量は、リュードベリ電子の質量 (m_e) に対して原子核とその周りの電子の質量の和 (m_s) がはるかに大きいので、換算質量 μ を

$$\mu = \frac{m_e m_s}{m_e + m_s} \sim m_e \quad (2)$$

として用いた。以下、添字の e は省略する。このとき Kramers の漸化式

$$\left(\frac{k+1}{n^2}\right) \langle r^k \rangle - (2k+1)a_0 \langle r^{k-1} \rangle + \frac{k}{4} [(2l+1)^2 - k^2] a_0^2 \langle r^{k-2} \rangle = 0 \quad (3)$$

が成り立つ [1]。ここで a_0 は Bohr 半径で、 k は $k > -(2l+1)$ を満たす。 l は軌道角運動量子数 ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$) である。この式を用いると r の期待値は

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{a_0}{2} \{3n^2 - l(l+1)\} \\ &= \begin{cases} \frac{3}{2}n^2 a_0 & (l=0) \\ n^2 a_0 & (l=n-1) \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

となる。よって、リュードベリ原子の半径は n^2 に比例して大きくなるのが分かる。 $l \sim n-1$ として実際に値を入れてみたものが表 1 である。 $n = 732$ ということとても大きなリュードベ

リ原子は、実際に宇宙で観測されている。この表を見ると、リュードベリ原子が通常の原子に比べて驚くほど大きいスケールを持っていることが分かる。

表1 リュードベリ原子の基本的性質

	n	1	50	732
原子半径 r_n	$n^2 a_0$	$5.3 \times 10^{-11} m (= a_0)$	$1.3 \times 10^{-7} m$	$2.8 \times 10^{-5} m$
束縛エネルギー $ E_n $	R/n^2	$13.6 eV (= R)$	$5.5 meV$	$0.025 meV$
エネルギー準位間隔 ΔE_n	$2R/n^3$	-	$0.22 meV$	$6,9 \times 10^{-5} meV$

(2) 束縛エネルギー

束縛エネルギーとは、互いに引き合う複数の要素からなる系において、その系が一箇所に寄り集まって存在する状態と、粒子がばらばらに存在する状態との間でのポテンシャルエネルギーの差のことである。束縛エネルギーが大きいほどその結合は強固で安定であると言い、エネルギー準位、または結合エネルギーと呼ぶこともある。

量子力学でよく知られているように [1-2]、水素原子の束縛エネルギーは

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \quad (5)$$

である。ここで、 $a_0 = \hbar^2 / m e^2$ を用いて (5) 式を書き換えると

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2} \quad (6)$$

となる。 $R = \hbar^2 / 2ma_0^2$ はリュードベリ定数で、 $R = 2.18 \times 10^{-10} J = 13.6 eV$ である。(6) 式に $n = 1$ を代入すれば、よく知られた水素原子の基底状態の束縛エネルギー $E_1 = -13.6 eV$ になる。

この式の n 依存性を見ると、 n^2 に比例して減少していくことが分かる。したがって n が大きなリュードベリ状態では束縛エネルギーはとても小さくなる。

(3) エネルギー準位間隔

束縛エネルギーが小さいので、隣り合うエネルギー準位の間隔も当然小さくなる。量子数が n 、 $n + 1$ の状態の、それぞれの束縛エネルギーの差を ΔE_n とすると

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= E_{n+1} - E_n \\ &= -\frac{R}{(n+1)^2} + \frac{R}{n^2} \\ &= \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} R \end{aligned} \quad (7)$$

これを、リュードベリ状態なので $n \gg 1$ とすると

$$\Delta E_n = \frac{2R}{n^3} \quad (8)$$

となる。よってエネルギー準位間隔は、 n が大きくなるにしたがって n^3 の割合で急速に小さくなる。

(4) 寿命

状態 $\{n, l\}$ から状態 $\{n', l'\}$ へ遷移することを考える。状態 $\{n, l\}$ にある原子数を N_n とすると、単位時間に放出されるエネルギー $h\nu_{n'l',nl}$ の光子の数は $N_n A_{n'l',nl}$ と書ける。 A は時間の逆数の次元を持ち、この特定の遷移に固有な定数で、アインシュタインの自然放出係数（または A 係数）と呼ばれる。

A 係数は

$$A_{n'l',nl} = \frac{4\omega_{n'l',nl}^3}{3\hbar c^3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{l}{2l+1} |\langle n'l'|r|nl \rangle|^2 \quad (9)$$

と書ける（付録A参照）。ここで $|\langle n'l'|r|nl \rangle|$ は初めのリュードベリ状態と崩壊後の状態の間の半径 r の行列要素で、 ω は $\omega_{n'l',nl} = (E_{n'l'} - E_{nl})/\hbar$ である。すると、状態 $\{n, l\}$ の放射の寿命 τ_{nl} は全崩壊率の逆数で書けるので

$$\tau_{nl} = \left[\sum_{n',l'} A_{n'l',nl} \right]^{-1} \quad (10)$$

となる。

まず $l \ll n$ のときを考える。終状態の量子数を n' とすると、このとき生じる遷移は $n' \ll n$ となり、十分低い状態への遷移が主なものとなる。(9) 式の $\omega_{n'l',nl}$ は

$$\omega_{n'l',nl} = \frac{(E_{n'l'} - E_{nl})}{\hbar} = -\frac{R}{n'^2} \quad (11)$$

より n によらない定数であるので、 A 係数は行列要素のみに依存する。この行列要素の n 依存性は、リュードベリ定数の波動関数の規格化定数の n 依存性 $n^{-3/2}$ から生じる。

よって全体としての n 依存性は n^{-3} となるので、 $l \ll n$ のときの寿命は

$$\tau_{nl} \propto n^3 \quad (12)$$

となる。

次に $l \sim n$ のときを考える。このとき許される遷移は $\{n, l = n-1\} \rightarrow \{n-1, l = n-2\}$ のみで、他の状態との間の行列要素は 0 になる。よって $\omega_{n'l',nl}$ の n 依存性は (8) 式より n^{-3} である。また、行列要素は状態 n と $n-1$ の原子の大きさを表しているので、その n 依存性は (4) 式より n^2 である。

よって全体としての n 依存性は n^{-5} となるので、 $l \sim n$ のときの寿命は

$$\tau_{nl} \propto n^5 \quad (13)$$

となる。このように、リュードベリ原子の放射の寿命も主量子数 n についてのスケーリング則になっている。

3 外場中のリュードベリ原子

今まではリュードベリ原子が他から相互作用を受けていない場合を考えてきた。しかし表 1 から分かるように、リュードベリ原子の束縛エネルギーは $13.6/n^2 eV$ なので、 n が増大するにつれて急速に減少し、わずかな外場にも大きな影響を受ける。

3.1 電場中での振舞い

水素原子に電場 F をかけた場合を考える。電子の電荷を $-e (e > 0)$ とすると、電子の受けるクーロン力は

$$\mathbf{F}_{coul} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{-e \cdot e \cdot \mathbf{r}}{r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \mathbf{r} \quad (14)$$

となる。一方、電場による電気力は

$$\mathbf{F}_{el} = -e\mathbf{F} \quad (15)$$

なので、この二つの大きさが等しくなる条件、つまり $F_{coul} = F_{el}$ より臨界電場 F_{cr} は

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} &= eF \\ \Leftrightarrow F &= \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} \\ &= \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} \frac{1}{n^4} \\ &= \frac{F_0}{n^4} \equiv F_{cr} \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、リュードベリ原子の半径 $r = n^2 a_0$ を用いた。 $F_0 = e/4\pi\epsilon_0 a_0^2$ ($= 5.14 \times 10^{11} V/m$) は式の形を見れば分かるように、基底状態における Bohr 軌道上 ($r = a_0$) で電子が感じる電場である。よって (16) 式より、臨界電場 F_{cr} は n が増大すると急激に減少する。つまり n が大きいところでは小さい電場でも電気力がクーロン力と同じくらいになるので、電場による影響が無視できなくなってしまうのである。

次に、電子に作用するポテンシャルを考える。電場の方向を z 軸にとると、ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eFz \quad (17)$$

と書ける。この電場をかけたリュードベリ原子について、まずは古典力学的に考えてみる。

[古典力学的考察]

簡単のために z 軸方向の一次元問題として考えると、(17) 式のポテンシャルは次の図 1 のようになる。

図 1 電場があるときの水素原子のポテンシャル

ポテンシャルが極大 ($V = V_{max}$) になる点 ($z = z_{max}$) を考えると

$$\frac{d}{dz}V(z) = \frac{d}{dz}\left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eFz\right) = 0$$

より

$$z_{max} = \left(\frac{e}{4\pi\epsilon_0 F}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

このときポテンシャルは

$$\begin{aligned} V_{max} &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{z_{max}} - eFz_{max} \\ &= -2e\left(\frac{eF}{4\pi\epsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (19)$$

よって、束縛エネルギー $|E_n|$ ($|E_n| = 13.6/n^2 eV$) の束縛状態において、 $|E_n| < |V_{max}|$ ならイオン化 (電離) が起こり、 $|E_n| > |V_{max}|$ ならイオン化は起こらない。イオン化に対する古典的臨界電場 F_{ion}^{cl} は $|E_n| = |V_{max}|$ より

$$F_{ion}^{cl} = 2e\left(\frac{R^2}{4e^2 n^4}\right)\left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e}\right) \quad (20)$$

ここで、 $R = \hbar^2/2ma_0^2$ 、 $F_0 = e/4\pi\epsilon_0 a_0^2$ を用いて整理すると

$$F_{ion}^{cl} = \frac{F_0}{16n^4} = \frac{3.21 \times 10^{10}}{n^4} V/m \quad (21)$$

となる。したがって、電場の大きさが F_{ion}^{cl} より大きくなると $|E_n| < |V_{max}|$ となりイオン化が起こる。

仮に主量子数が $n = 100$ だとすると、古典的臨界電場は $F_{ion}^{cl} = 300V/m$ 程度になる。実際、実験室では $1 \times 10^4 V/m$ 程度の電場を作るのは容易であるので、簡単にイオン化させることができる。また、2章でも述べたように、宇宙には $n = 732$ 程度のリュードベリ原子が存在することも確認されていて、このときの古典的臨界電場は $F_{ion}^{cl} = 0.1V/m$ 程度になり、わずかな電場でもイオン化が起こることになる。以上が電場をかけたリュードベリ原子の古典力学的な振る舞いである。

[量子力学的考察]

量子力学的には (17) 式のポテンシャル中のシュレディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eFz\right)\psi = E\psi \quad (22)$$

を解けばよい。ここで ψ は波動関数、 E はエネルギー固有値である。 $F = 0$ なら一般的な水素原子の問題であり、そのエネルギー固有値、固有関数はよく知られている [1]。この場合 $E < 0$ は束縛状態を表し、エネルギー固有値は (6) 式のような離散的な値をとる。一方、 $E > 0$ はイオン化の状態を表し、エネルギーは連続スペクトルになる。

さて $F \neq 0$ のときであるが、この場合は F がどんなに小さくてもイオン化は起こり得る。なぜなら $F \rightarrow \infty$ ではエネルギー E がどんなに小さくても $E > V$ となり、その結果トンネル効果によってイオン化することが可能だからである。よってエネルギーのスペクトルは連続的になる。シュレディンガー方程式 (22) は放物線座標

$$\begin{cases} \xi = r + z \\ \eta = r - z \\ \varphi = \tan^{-1} \frac{y}{x} \end{cases} \quad (23)$$

を用いると変数分離が可能であり、数値的には任意の精度で解くことができる。ここで、 $\xi, \eta \geq 0$ 、 $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ である。これを逆に解くと

$$\begin{cases} x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi \\ y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi \\ z = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \\ r = \frac{1}{2}(\xi + \eta) \end{cases} \quad (24)$$

また、放物線座標でのラプラシアンは

$$\Delta = \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (25)$$

よって、これらを用いて (22) 式を書き換える。簡単のため原子単位 ($m_e = e = \hbar = 1$) を用いると

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} - Fz\right)\psi = E\psi \\
\iff & \left[-\frac{1}{2}\left\{\frac{4}{\xi+\eta}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{4}{\xi+\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} - \frac{2}{\xi+\eta} - F\frac{1}{2}(\xi-\eta)\right]\psi = E\psi \\
\iff & \frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \left(\frac{1}{4\xi} + \frac{1}{4\eta}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \left[1 + \frac{1}{4}F(\xi^2 - \eta^2) + \frac{1}{2}E(\xi + \eta)\right]\psi = 0 \quad (26)
\end{aligned}$$

ここで固有関数 ψ の形を

$$\psi = f_1(\xi)f_2(\eta)e^{im\varphi} \quad (27)$$

とおく。 m は磁気量子数である。すると (26) 式は

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)f_2e^{im\varphi} + \frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)f_1e^{im\varphi} - \left(\frac{1}{4\xi} + \frac{1}{4\eta}\right)m^2f_1f_2e^{im\varphi} \\
& + \left[1 + \frac{1}{4}F(\xi^2 - \eta^2) + \frac{1}{2}E(\xi + \eta)\right]f_1f_2e^{im\varphi} = 0 \quad (28)
\end{aligned}$$

となる。両辺を (27) 式で割って整理すると

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{f_1}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right) - \frac{1}{4\xi}m^2 + 1 + \frac{1}{4}F\xi^2 + \frac{1}{2}E\xi \\
& = -\left[\frac{1}{f_2}\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right) - \frac{1}{4\eta}m^2 - \frac{1}{4}F\eta^2 + \frac{1}{2}E\eta\right] \quad (29)
\end{aligned}$$

この式を見ると左辺は ξ のみ、右辺は η のみに関係しているため、両辺ともある定数に等しくならなければならない。その定数を Z_2 とおくと次の 2 つの微分方程式が得られる。

$$\begin{cases} \frac{1}{f_1}\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right) - \frac{1}{4\xi}m^2 + 1 + \frac{1}{4}F\xi^2 + \frac{1}{2}E\xi = Z_2 \\ -\left[\frac{1}{f_2}\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right) - \frac{1}{4\eta}m^2 - \frac{1}{4}F\eta^2 + \frac{1}{2}E\eta\right] = Z_2 \end{cases} \quad (30)$$

これを $Z_1 + Z_2 = 1$ とおいて整理すると

$$\begin{cases} \frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right) + \left[\frac{1}{2}E\xi - \frac{1}{4\xi}m^2 + \frac{1}{4}F\xi^2\right]f_1 = -Z_1f_1 \\ \frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right) + \left[\frac{1}{2}E\eta - \frac{1}{4\eta}m^2 - \frac{1}{4}F\eta^2\right]f_2 = -Z_2f_2 \end{cases} \quad (31)$$

したがって、(22) 式のシュレディンガー方程式を解くことは上の微分方程式を解くことに帰着する。

まず $F = 0$ の場合について解く。(31) 上式より

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right) + \left[\frac{1}{2}E\xi - \frac{1}{4\xi}m^2\right]f_1 = -Z_1f_1 \quad (32)$$

ここで $\xi, \eta, E (< 0)$ の代わりに

$$\begin{cases} n = \frac{1}{\sqrt{-2E}} \\ \rho_1 = \xi\sqrt{-2E} = \frac{\xi}{n} \\ \rho_2 = \frac{\eta}{n} \end{cases} \quad (33)$$

という量を導入すると、 f_1 に対する方程式は

$$\frac{d^2 f_1}{d\rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1} \frac{df_1}{d\rho_1} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{1}{\rho_1} \left(\frac{|m|+1}{2} + n_1\right) - \frac{m^2}{4\rho_1^2}\right] f_1 = 0 \quad (34)$$

となる。 f_2 についても同様の方程式を得る。ここで

$$\begin{cases} n_1 = -\frac{|m|+1}{2} + nZ_1 \\ n_2 = -\frac{|m|+1}{2} + nZ_2 \end{cases} \quad (35)$$

を導入した。大きい ρ_1 のところで f_1 は $e^{-\rho_1/2}$ のように振る舞い、小さい ρ_1 のところで $\rho_1^{|m|/2}$ のように振舞うので、(34) 式の解を

$$f_1(\rho_1) = e^{-\rho_1/2} \rho_1^{|m|/2} \omega_1(\rho_1) \quad (36)$$

という形に求める (f_2 に対しても同様)。 (36) 式を (34) 式に代入して整理すると

$$\rho_1 \frac{d^2}{d\rho_1^2} \omega_1 + (|m|+1-\rho_1) \frac{d}{d\rho_1} \omega_1 + n_1 \omega_1 = 0 \quad (37)$$

を得る。これは合流型超幾何関数の方程式である [15]。よって、有限性の条件を満足する解は

$$\omega_1 = G(-n_1, |m|+1, \rho_1) \quad (38)$$

である。ここで n_1 は負でない整数でなければならない。したがって (36) 式は

$$f_1 = e^{-\rho_1/2} \rho_1^{|m|/2} G(-n_1, |m|+1, \rho_1) \quad (39)$$

f_2 についても同様にして

$$f_2 = e^{-\rho_2/2} \rho_2^{|m|/2} G(-n_2, |m|+1, \rho_2) \quad (40)$$

ゆえに、シュレディンガー方程式の解は (27)、(39)、(40) 式を用いて

$$\psi_{n_1 n_2 m} = f_1 f_2 e^{im\varphi} \quad (41)$$

となる。離散スペクトルの各定常状態は三つの整数、 n_1 、 n_2 、 m によって指定される。 n_1 、 n_2 は放物量子数と呼ばれる。主量子数 n に対しては $Z_1 + Z_2 = 1$ と (35) 式より

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \quad (42)$$

が得られる。以上が電場がかかっていないときに対する量子力学的考察である。

次に、 $F \neq 0$ の場合について摂動論で考える。まず (35) 上式より

$$Z_1^{(0)} = \left(n_1 + \frac{|m|+1}{2}\right) \frac{1}{n} = \left(n_1 + \frac{|m|+1}{2}\right) \epsilon \quad (43)$$

ここで、 $1/n = \sqrt{-2E} = \epsilon$ とおいた。また、固有関数 f_1 は

$$\begin{aligned} f_1 &= e^{-\rho_1/2} \rho_1^{|m|/2} F(-n_1, |m|+1, \rho_1) \\ &= e^{-\xi/2n} \left(\frac{\xi}{n}\right)^{|m|/2} \frac{|m|! n_1!}{(-1)^{|m|} [(n_1 + |m|)!]^2} L_{n_1+|m|}^{|m|} \left(\frac{\xi}{n}\right) \end{aligned} \quad (44)$$

と書ける。 $L_p^q(x)$ はラゲールの陪多項式で、ここではラゲールの陪多項式と合流型超幾何関数の関係式

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{(n!)^2}{k!(n-k)!} F(-n+k, k+1, x) \quad (45)$$

を用いた [15]。これを利用して F が 0 でないときの Z_1 の補正を F についての一次まで求めると

$$\begin{aligned} Z_1^{(1)} &= \int_0^\infty \left(\frac{1}{4} F \xi^2\right) f_1^2 d\xi \\ &= \frac{1}{4} F \frac{1}{\epsilon^2} (6n_1^2 + 6n_1|m| + m^2 + 6n_1 + 3|m| + 2) \end{aligned} \quad (46)$$

同様に計算すると

$$Z_2^{(0)} = \left(n_2 + \frac{|m|+1}{2}\right) \epsilon \quad (47)$$

$$Z_2^{(1)} = -\frac{1}{4} F \frac{1}{\epsilon^2} (6n_2^2 + 6n_2|m| + m^2 + 6n_2 + 3|m| + 2) \quad (48)$$

したがって

$$\begin{aligned} Z &= Z^{(0)} + Z^{(1)} \\ &= (Z_1^{(0)} + Z_2^{(0)}) + (Z_1^{(1)} + Z_2^{(1)}) \\ &= \epsilon n + \frac{3}{2} \frac{F}{\epsilon^2} (n_1 - n_2) n \end{aligned} \quad (49)$$

を得る。ここで $n_1 + n_2 + |m| + 1 = n$ を用いた。よって (49) 式を ϵ について解くと、 F の 1 次の項まででは

$$\epsilon = \frac{1}{n} - \frac{3}{2} F n^2 (n_1 - n_2) \quad (50)$$

となる。したがって、エネルギー準位 E は F の 1 次の項までで

$$E = -\frac{1}{2} \epsilon^2 = -\frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2} F n (n_1 - n_2) \quad (51)$$

となる。

右辺の第2項は1次シュタルク効果と呼ばれる。シュタルク効果とは、電場によりエネルギー準位が変化し、そのためスペクトル線が分裂する現象のことである(図2)。これは、電場のために原子内のクーロン力の持つ球対称性が破れ電場方向の軸対称性が現れるため、角運動量の大きさ J は保存量にならず、この軸方向の成分 J_3 のみが保存量となり、したがって異なる J_3 の値を持つ状態が異なるエネルギーを持つために起こる。(51)式を見ると確かに F をかけることによって E が変化していることが分かる。なお、基底状態では $n = 1$ より $n_1 = n_2 = |m| = 0$ なので1次シュタルク効果は存在しない。

図2 $Li (m = 0)$ の $n = 15$ 近傍のシュタルク効果

同様に2次シュタルク効果の項を求めるには2次摂動論を用いて $Z^{(2)}$ を求め、(51)式に加えればよい。

2次の摂動論よると $Z_1^{(2)}$ は

$$Z_1^{(2)} = \frac{F^2}{16} \sum_{n'_1 \neq n_1} \frac{|(\xi^2)_{n_1 n'_1}|^2}{Z_1^{(0)}(n_1) - Z_1^{(0)}(n'_1)} \quad (52)$$

と書ける。分母に表れる差は

$$Z_1^{(0)}(n_1) - Z_1^{(0)}(n'_1) = \epsilon(n_1 - n'_1) \quad (53)$$

に等しい。

また、分子の行列要素 $|(\xi^2)_{n_1 n_1'}|^2$ の中で 0 でないのは

$$(\xi^2)_{n_1, n_1-1} = (\xi^2)_{n_1-1, n_1} = -\frac{2}{\epsilon^2} (2n_1 + |m|) \sqrt{n_1(n_1 + |m|)} \quad (54)$$

$$(\xi^2)_{n_1, n_1-2} = (\xi^2)_{n_1-2, n_1} = \frac{1}{\epsilon^2} \sqrt{n_1(n_1-1)(n_1+|m|)(n_1+|m|-1)} \quad (55)$$

だけである。よって計算の結果、次式が得られる。

$$Z_1^{(2)} = -\frac{F^2}{16\epsilon^2} (|m| + 2n_1 + 1) [4m^2 + 17(2|m|n_1 + 2n_1^2 + |m| + 2n_1) + 18] \quad (56)$$

同様に計算すれば、 $Z_2^{(2)}$ は (56) 式の n_1 を n_2 で置き換えたものになる。そして、得られた式を合わせて関係式 $Z_1 + Z_2 = 1$ に代入すると、次の方程式が得られる。

$$\epsilon n - \frac{F^2 n}{16\epsilon^5} [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] + \frac{3}{2} F \frac{n}{\epsilon^2} (n_1 - n_2) = 1 \quad (57)$$

これを逐次近似で解くと、 F の 2 次までのエネルギー準位 E は

$$E = -\frac{1}{2}\epsilon^2 = -\frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2}Fn(n_1 - n_2) - \frac{1}{16}F^2n^4[17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] \quad (58)$$

となる。右辺第 3 項が 2 次シュタルク効果である。これは常に負になっているということに注意する。つまり 2 次のシュタルク効果による項は常にエネルギーを下方に変移するのである。また、2 次の効果は 1 次までとは違って磁気量子数 m によることが分かる。すなわち電場をかけるとエネルギー準位の m についての縮退がとれ、準位が分裂する。後に述べるが、未知の粒子の探索にこの現象を応用されている。

3.2 磁場中での振舞い

次に、磁場中に水素原子を置いた場合を考える。電場のときと同様に考えて、クーロン力とローレンツ力を比べる。

$$\mathbf{F}_{coul} = \frac{e^2 \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3}: \text{クーロン力} \quad (59)$$

$$\mathbf{F}_B = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}: \text{ローレンツ力} \quad (60)$$

$|\mathbf{F}_{coul}| = |\mathbf{F}_B|$ とすると

$$\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} = evB \quad (61)$$

より

$$\begin{aligned}
B &= \frac{e}{4\pi\epsilon_0 v r^2} \\
&= \frac{B_0}{n^3} = B_{cr} \quad : \text{臨界磁束密度}
\end{aligned} \tag{62}$$

ここで $B_0 = \hbar/ea_0^2$ ($\sim 2.35 \times 10^5 T$) は原子単位での磁束密度の 1 単位である。よって、かけた磁場 B と臨界磁束密度 B_{cr} の比を

$$\eta = \frac{B}{B_{cr}} = \frac{B}{B_0} n^3 \tag{63}$$

とすると、 $\eta > 1$ 、 $\eta < 1$ に従ってそれぞれ強磁場、弱磁場の場合に分類できる。よって、主量子数 n が大きいと $\eta > 1$ の条件を容易に作るができることが分かる。

磁場中の水素原子のハミルトニアンは、陽子の質量を無限大とすると

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \tag{64}$$

と書ける。ここで磁場 \mathbf{B} の方向を z 軸、三次元の円柱座標を ρ, ϕ, z ($r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$)、電子の角運動量の z 成分を l_z 、サイクロトロン周波数を $\omega_c (= eBm)$ とすると、このハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} \omega_c l_z + \frac{e^2 B^2}{8m} \rho^2 \tag{65}$$

となる。右辺の第 1 項、第 2 項は磁場がかかっていないときのハミルトニアン、第 3 項は磁場についての 1 次のゼーマン効果を与える項であり、第 4 項は反磁性項である。

磁場が十分弱く、第 4 項が無視できるとしてエネルギー準位を考える。磁気モーメントを $\vec{\mu}$ とすると磁場中でのエネルギーは

$$-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B \tag{66}$$

(64) 式と対応させると

$$-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m} l_z B \tag{67}$$

l_z の固有値は $m_l \hbar$ (磁気量子数 $m_l = -l, \dots, l$) なので

$$\frac{e}{2m} l_z B = \frac{e \hbar m_l}{2m} B \tag{68}$$

したがってエネルギー固有値は、波動関数を ψ とするとシュレディンガー方程式

$$\begin{aligned}
\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} + \frac{e \hbar m_l}{2m} B \right) \psi &= E \psi \\
\iff (E_n + \frac{e \hbar m_l}{2m} B) \psi &= E \psi
\end{aligned} \tag{69}$$

より

$$E = E_n + \frac{e\hbar m_l}{2m} B \quad (70)$$

となる。ここで $E_n = -R/n^2$ である。このようにリュードベリ原子に磁場をかけると、 $2l + 1$ に縮退していた軌道量子数 l のエネルギー準位は間隔 $e\hbar B/2m$ の等間隔な $2l + 1$ 個の準位に分裂するという、いわゆるゼーマン効果を示す。図3はその概略である。

図3 磁場中のリュードベリ原子のエネルギー準位

4 生成法

リュードベリ原子 (ここでは A^{**} と書く) は次の3つの方法で作られる。

- 電子衝撃 $e + A \rightarrow e + A^{**}$
- 電荷移動 $A^+ + B \rightarrow A^{**} + B^+$
- 光励起 $h\nu + A \rightarrow A^{**}$

まず電子衝撃であるが、これは文字通り電子をぶつけて励起させる方法で、比較的容易で一般的である。しかし、特定の終状態を選択的に生成できないという欠点もある。主量子数 $n = 30 \sim 50$ 程度の励起状態を生成しようとする、エネルギー準位間隔は (8) 式より $\Delta E \simeq 1 \sim 0.2eV$ になる。しかしこの程度の単色性を持った電子ビームを作る技術はまだ確立していない。さらに、入射電子のエネルギーを指定しても、作られるリュードベリ状態は指定されない。なぜならエネルギーが、リュードベリ状態にある励起された電子と内部の電子の間でどのように共有されているかをコントロールする方法がないからである。したがって、 n についてある分布を持ったリュードベリ原子が生成されてしまうのである。

H^+ や He^+ の電荷移動は、リュードベリ原子の速いビームを作るときに使われる方法である。Bayfield と Koch の実験 [3] では、イオン源からの 10Kev の陽子は Xe で満たされた電荷交換 cell を通過する。ここで陽子は速いリュードベリ原子になるのである。しかしこの方法も終状態を選ぶことができない。

一方、光励起による方法は特定の終状態を選択的に励起できる点で、他の方法より優れている。光励起は衝突して励起するのとは基本的に違い、ターゲットの原子に光子が吸収されることによって励起するのである。結果として、吸収される光子のエネルギーを指定すると作られるリュードベリ状態も指定される。初期の段階では電子衝撃と光励起や電荷移動と光励起の組み合わせが行われたが、最近には主にレーザーによる二段励起が使われている。

レーザーには色素レーザーが用いられることが多い。色素レーザーとは色素を発振源にしたレーザーで、色素の種類は豊富なので様々な波長のレーザーが作れるという利点がある。このレーザーで励起する典型的な例としては、 Na の二段階励起がある。基底状態 $3s$ が黄色い色素レーザー光子によって $3p$ 状態に励起され、 $3p$ 状態が青い色素レーザー光子によって ns か nd 状態に励起される。しかしこの方法によると、通常基底状態から出発した場合角運動量 $\Delta l = 1$ およびパリティの選択則のため中間状態 p を経て、終状態は s または d に限られる。

l の大きいリュードベリ原子を作る方法の1つとして、電場とマイクロ波を同時にかけ $|\Delta m| = 1$ の遷移を次々と起こすことにより、 $|\Delta m| = n - 1$ の円軌道状態を作るという方法がある。そうすれば、場のない領域に原子を導いたとき $\{n, l = n - 1, m = n - 1\}$ という円軌道状態にあるリュードベリ原子が得られることになる。後で分かるように、リュードベリ原子を実験に利用する際はどの状態にいるのかが分かっていた方がよいので、この光励起の方法が最もよく使われている。

5 アクシオン探索

リュードベリ原子はエネルギー準位の間隔が小さいので、電場 $F = 0$ で異なる n に属していた準位が、 F を大きくしていくとシュタルク効果で分裂してある点で交差する。しかし単純に交わるのではなく、少し変わった振る舞いをする。このことをうまく利用すると単一光子を効率よく検出にすることができるので、現在リュードベリ原子を用いた様々な実験が考案され、未知の粒子アクシオンの探索にも利用されている。

5.1 エネルギー準位の交差

先にも述べたように、電場をかけると準位が交差するようになる。しかし分裂した1つの準位に沿って、 F とともにエネルギーが増加または減少してきた原子が他のエネルギー曲線と交差するところに来たとき、今まで来た曲線の延長方向へ進む続けるか他の曲線に乗り移るかは、交差する曲線によって代表される状態の対称性や電場を強めていく速さによって変わる。

図4 エネルギー準位の交差

水素原子の場合のように、電子の感じる場が純粋にクーロン場であるならば、電子の波動関数は特別な対称性を持ち、曲線が交差しても変化の道筋が折れ曲がることはない。つまり図4の点線に沿って進む。しかし、確かにリュードベリ原子は水素型に近似できるが、実際は原子イオンが内部構造を持っているので、クーロン相互作用のほかに電子交換に由来する短距離型の相互作用ポテンシャルが加わる。その場合電子の波動関数はクーロン関

数からはずれ、交差点の近傍で共通の m を持つ状態が交じり合う。すべての相互作用を取り入れてシュレディンガー方程式を解くと、交差点付近のエネルギー曲線は一般に図4の実線で表されるような、上下に若干離れた2本の曲線になる。このような状況を交差回避、反発交差、または擬交差という。

交差する準位の波動関数をそれぞれ ϕ_1, ϕ_2 とし、クーロン相互作用のほかに加わる短距離型のポテンシャルを V_s とする。このとき、シュレディンガー方程式は

$$H\psi = E\psi \quad (71)$$

ここで

$$H = H_0 + V_s = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eFz + V_s \quad (72)$$

である。交差点近傍では2つの状態 ϕ_1 と ϕ_2 が混ざり合っているので、波動関数は

$$\psi = C_1\phi_1 + C_2\phi_2 \quad (73)$$

と書ける。これをシュレディンガー方程式に代入すると

$$H_0(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) + V_s(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) = E(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) \quad (74)$$

となる。ここで H_0 の固有値を ϵ_i ($i = 1, 2$) とすると、 $H_0\phi_i = \epsilon_i\phi_i$ と書けるので

$$\epsilon_1 C_1 \phi_1 + \epsilon_2 C_2 \phi_2 + V_s(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) = E(C_1\phi_1 + C_2\phi_2) \quad (75)$$

この式に左から ϕ_i^* をかけ、 τ で積分すると

$$\begin{aligned} \epsilon_1 C_1 \int \phi_i^* \phi_1 d\tau + \epsilon_2 C_2 \int \phi_i^* \phi_2 d\tau + C_1 \int \phi_i^* V_s \phi_1 d\tau + C_2 \int \phi_i^* V_s \phi_2 d\tau \\ = EC_1 \int \phi_i^* \phi_1 d\tau + EC_2 \int \phi_i^* \phi_2 d\tau \end{aligned} \quad (76)$$

最後に $\int \phi_i^* \phi_j d\tau = \delta_{ij}$ を用いると、次の2つの方程式が得られる。

$$\begin{cases} \epsilon_1 C_1 + C_1 V_{11} + C_2 V_{12} = EC_1 \\ \epsilon_2 C_2 + C_1 V_{21} + C_2 V_{22} = EC_2 \end{cases} \quad (77)$$

ここで $\int \phi_i^* V_s \phi_j d\tau = V_{ij}$ とおいた。この2つの方程式はまとめて

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & \epsilon_2 + V_{22} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (78)$$

と書ける。これが $C_1 = C_2 = 0$ 以外の解を持つためには

$$\begin{vmatrix} \epsilon_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & \epsilon_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (79)$$

を満たせばよい。これを解くと

$$E_{1,2} = \frac{(\epsilon_1 + V_{11} + \epsilon_2 + V_{22}) \pm \sqrt{\{\epsilon_1 + V_{11} - (\epsilon_2 + V_{22})\}^2 + 4|V_{12}|^2}}{2} \quad (80)$$

が得られる。これは異なる n でのそれぞれのエネルギー準位を表している。

実際に交差するという事は、この2つのエネルギーが等しくなるということであるから、 $\pm\sqrt{\{\epsilon_1 + V_{11} - (\epsilon_2 + V_{22})\}^2 + 4|V_{12}|^2}$ の部分が0にならなければならない。よって

$$\epsilon_1 + V_{11} = \epsilon_2 + V_{22} \text{ かつ } V_{12} = 0 \quad (81)$$

という条件を満たす必要がある。しかし、1つのパラメータ F を変化させることによって2つの条件を同時に満たすことはできない。したがって一般的にエネルギー準位は交差しない。つまり擬交差である。ただし水素原子の場合、短距離型のポテンシャルは $V_s = 0$ なので $V_{12} = 0$ となる。したがってエネルギー準位は実際に交差する。

さて、ここで電場 F を極めてゆっくり変化させていくと、系の状態はこの擬交差を飛び越えることなく1つのつながった曲線に沿って進む。これは量子力学系で広く知られている断熱変化の一例である。しかし有限な速さで F を変えていくと、その速さ、2つの曲線の間隙の大きさ、2つの曲線の傾きの差に応じて、間隙を飛び越えて相手の曲線で表される状態に移ったり移らなかつたりする。上下に分かれた2つの曲線（断熱曲線）の間の遷移を非断熱遷移、または透過遷移という。その確率は Landau と Zener によって定量的に求められた [4]。

まず仮定として $V_{12}, V_{21}, \phi_1, \phi_2$ は時間変化しないとすると、時間を含む波動方程式

$$\left(H - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right) [C_1(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int \epsilon_1 dt} \phi_1 + C_2(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int \epsilon_2 dt} \phi_2] = 0 \quad (82)$$

から連立方程式

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial C_1}{\partial t} = V_{21} e^{-\frac{i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} C_2 \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial C_2}{\partial t} = V_{12} e^{-\frac{i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} C_1 \end{cases} \quad (83)$$

が得られる。 C_2 を消去して C_1 に対する2階の微分方程式を出し、初期条件 $C_1(t = -\infty) = 0$ 、 $|C_2(t = -\infty)| = 1$ の元でこれを解くと

$$|C_2(\infty)|^2 = 1 - |C_1(\infty)|^2 = \exp\left[-\frac{2\pi|V_{12}|^2}{\hbar \frac{d(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{dt}}\right] \quad (84)$$

となる。この量は初め ϕ_1 にあった状態が、交差する点 $F = F_c$ を通過した後も ϕ_1 に残る確率、つまり一方から他方へ遷移する確率を与えている。

$F = F_c$ での電場の変化率をあらわに書けば

$$= \exp\left[-\frac{2\pi|V_{12}(F_c)|^2}{\hbar \left(\frac{dF}{dt}\right)_{|F=F_c} \left(\frac{d(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{dF}\right)_{|F=F_c}}\right] \quad (85)$$

なので、電場を変化させる速度が速いと遷移する確率は1に近づく。つまり非断熱遷移をするのである。

5.2 アクシオン探索

(1) 実験原理

ダークマターの候補であるアクシオンの探索は、現在の素粒子物理学や宇宙物理学において最も挑戦的な問題の一つである。しかしアクシオンは通常の物質との相互作用が異常に小さいので、検出するのが極端に難しい。そこでいくつかの実験方法が考案されたがその中の一つが、強磁場をかけた共振空洞内でアクシオンをプリマコフ効果によりマイクロ波光子に転換して、その光子を検出するという方法である [11-13]。この方法では、転換光子を効率よく検出するためにリュードベリ原子が用いられる。この実験で用いられる一般的な実験装置を図5に示す。

図5 アクシオン探索の実験装置

まず、強磁場のかかった空洞（転換空洞、図5の下の方）の中でアクシオンが光子に転換される。次にその光子はもう一つの空洞（検出空洞、図5の上の方）に移動し、リュードベリ原子に吸収される。ここで検出空洞には、ゼーマン効果によるエネルギー準位の分裂を避けるために、磁場がまったくかからないようにしてある。また、リュードベリ原子は主量子数 $n \sim 100$ 程度のものを用意する。これは基底状態のアルカリ原子を検出空洞の手

前でレーザーで励起させることによって作る。このリュードベリ原子が転換光子を吸収して主量子数 n から n' に励起され、検出空洞の外に出てくる。そこで電場をかけてシュタルク効果によりエネルギーを分裂させ、選択的フィールドイオン化法によって電離した電子を検出する。これがリュードベリ原子を用いたアクシオン探索実験の大まかな原理である。

(2) 共振空洞

先にも述べたように、共振空洞には転換空洞と検出空洞の2つがある。そもそも何故「共振」と言うかということ、アクシオンから転換した光子を共振させるからである。空洞には、そのサイズに応じた共振周波数というものが決まっています、転換光子の周波数とその整数倍なら光子は空洞内で共振する。転換光子はそのままだと空洞の壁に吸収されたり突き抜れたりして、あっという間に数が減ってしまう。するとリュードベリ原子に吸収される確率が減ってしまうので、共振させることによって空洞内を何往復もさせ、検出効率を上げているのである。ただし、アクシオンの質量は未知なので、空洞の共振周波数をいろいろ変えてみて、一番効率のいい周波数を探さなくてははいけません。そのために空洞には絶縁体の棒が挿入してあり、これを動かすことによって共振周波数を調節することができる。

また、空洞内は $10mK$ 程度にまで冷却して実験を行う。冷却することによって、転換光子の数をバックグラウンドの光子の数に対してずっと少なくすることができるからである。 $10mK$ という温度は、宇宙論からアクシオンの質量を見積もれば空洞内の転換光子の数が分かるので、それがバックグラウンドの光子の数に対してはるかに多くなるように計算して求めたものである。

(3) 選択的フィールドイオン化法

アクシオンから転換した光子を検出するために選択的フィールドイオン化法という方法を使う [3,6-10]。これは先にも述べたように、直接光子を検出するのではなく、光子を一旦リュードベリ原子に吸収させ、励起したところをイオン化させて、電離した電子を検出するという方法である。

具体的には、例えば次頁の図6のような状態を考える。特に注目するのは、電場をかけるとそれに比例してエネルギー準位が分裂していく $n = 110$ と、その上方、下方に位置し、電場をかけると徐々に減衰していく $n = 111p$ 、 $n = 111s$ である。 $n = 110$ の状態は manifold と呼ばれる。manifold とは、一つの n に属するエネルギー準位のグループ (電場がないときは縮退していて、電場に比例してエネルギー準位が分裂する) をまとめて呼ぶ名前である。

まずリュードベリ原子を $n = 111s$ の状態に用意する。次に、光子を吸収することによって $n = 111p$ の状態に励起する。そこで電場をかけると $n = 111p$ の経路に沿ってエネルギー準位が徐々に下がり、manifold の一番上の経路とぶつかる。すると前節でやったように、電場を変える速度が十分遅ければ擬交差を通過して相手の経路、つまり manifold の一番上の経路に移る。その後は電場を急速に変えれば、 $n = 111p$ の経路のままではイオン化できなかったリュードベリ原子をイオン化することができる。これが選択的フィールドイオン化法である。

図6 $n = 110$ 近傍のシュタルク効果によるエネルギー準位の分裂

この方法の優れている点は、どこでどの準位が交差してどこでイオン化するかということが、すべて計算によって分かっているということである。したがって最初にアクシオンの質量を仮定してしまえば、どのくらいまで電場をゆっくりかければいいのか分かる。また、仮定した質量が $n = 111s$ と $n = 111p$ の差に等しくなければならないが、このエネルギー準位間隔も電場で微調整が可能である。あとは仮定を変えて何度も実験をするだけである。

以上のように、リュードベリ原子は単一の光子、特にアクシオンの検出に非常に役に立つのである。

6 まとめ

以上で、主量子数 n の大きな原子であるリュードベリ原子の性質、外場との相互作用やその応用を述べた。その結果、この原子はクーロン力の長距離性に由来して、通常の原子や分子では見られない面白い性質を示し、量子力学的微視的世界と古典力学的巨視的世界の接点に位置していることが分かった。基本的性質は簡単な n のスケーリング則で表すことができ、 n が大きくなればなるほど通常のスケールとはかけ離れていった。例えば、一見すると n が大きい方が不安定で壊れやすいと思われるが、外場の影響がなければ崩壊までの寿命は n とともに急激に長くなった。逆に外場があるときはシュタルク効果やゼーマン効果が生じ、そのことが単一光子の検出、特にアクシオンの探索に非常に大きな役割を果たした。

また、本文では触れられなかったが、他にも多くの応用が考えられている。例えばリュードベリ原子を極低速電子線源として利用しようというものである。現在のところ我々は極低速電子 ($E \sim 10\text{meV}$) をよく制御する実験的方法を持っていない。そこで、リュードベリ原子中の励起電子は非常に遅いほとんど自由な電子とみなせると考えられるから、これを積極的に用いて極低速電子線と原子や分子の相互作用を研究することが可能であると思われる。

他にもカオスと呼ばれる不規則な運動に対してや、量子コンピュータなどにも積極的に応用されている。リュードベリ原子は今後もさらに活躍の場を広げていこうと思う。

A アインシュタインの自然放出係数

状態 n から状態 m へ遷移することを考える。状態 n にある原子数を N_n とすると、単位時間に放出されるエネルギー $h\nu_{nm}$ の光子の数は

$$N_n A_{nm} \quad (86)$$

と書ける。この A_{nm} を、アインシュタインの自然放出係数という。

次に、入射光において、単位体積あたりの振動数が $\nu, \nu + d\nu$ の間にある成分のエネルギーが

$$u(\nu)d\nu \quad (87)$$

であるとする。この分布がいま問題にしている遷移の振動数 ν_{nm} で0でないとき、単位時間内に $m \rightarrow n$ が起こって光子が吸収される数は

$$N_m u(\nu_{nm}) B_{mn} \quad (88)$$

の形に書ける。 B は [体積/エネルギー・時間²] の次元を持つ定数で、アインシュタインの吸収係数と呼ばれる。

最後に原子が励起状態 n にあるとき、それが放出しうる光と同じ振動数 ν_{nm} を含むスペクトル分布を持つ光線が入射するとき、それに誘発されて遷移 $n \rightarrow m$ が起こる。この発光率も入射光の強さを代表する $u(\nu)$ の $\nu = \nu_{nm}$ における値に比例するから

$$N_n u(\nu_{nm}) B_{nm} \quad (89)$$

の形に書ける。この B はアインシュタインの誘導放出係数と呼ばれる。

これらの係数の間の関係式を導くために、閉じた容器に多数の原子を入れ、全体を絶対温度 T に保って熱平衡状態にある場合を考える。統計力学で分かっているように、容器内の原子の内部エネルギー分布はボルツマン分布で表され、各準位にある原子数の比は

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} \exp\left(-\frac{h\nu_{nm}}{\kappa T}\right) \quad (90)$$

で与えられる。 $\kappa (= 1.380658 \times 10^{-23} J/K)$ はボルツマン定数である。また g は準位の縮退度である。次に容器内部は Planck の公式

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/\kappa T} - 1} \quad (91)$$

にしたがって様々な振動数の電磁波で満たされている。このとき、各準位にある原子数分布が平衡状態にあるためには、次の関係式が成り立たなければならない。

$$N_n \{A_{nm} + B_{nm}u(\nu_{nm})\} = N_m B_{mn}u(\nu_{nm}) \quad (92)$$

ここで N や u は温度 T によって変わるが、 A や B は定数であることに注意する。そこで振動数 ν_{nm} を固定し、 T を限りなく大きくしたときを考えると (91) 式より u もいくらでも大きくなる。そのとき (92) 式では A を含む項は無視できる。さらに同じ極限で (90) 式から $N_n/N_m \rightarrow g_n/g_m$ となるから

$$g_n B_{nm} = g_m B_{mn} \quad (93)$$

が一般的に成り立たなければならない。そこで関係式を (92) 式に代入し、(90)(91) 式を用いると、 A と B の関係が次のように得られる。

$$A_{nm} = \frac{8\pi h \nu_{nm}^3}{c^3} \frac{g_m}{g_n} B_{mn} \quad (94)$$

(93)(94) 式がアインシュタインが見出した A 、 B の関係式である。

ここで光の吸収率は

$$W(0 \rightarrow n) = \left(\frac{2\pi}{m\omega_{n0}}\right)^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} U(\omega_{n0}) |\langle n | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} | 0 \rangle|^2 \quad (95)$$

で与えられる。これに相当する量を B 係数を用いて書けば $u(\nu_{n0})B_{0n}$ である。そこでこれらを等しいとおき、さらに $U(\omega) = u(\nu)d\nu$ 、 $\omega = 2\pi\nu$ により $U(\omega) = u(\nu)/2\pi$ であるから、 B_{0n} が得られ、一般に B_{mn} に対する公式が以下のように求められる。

$$B_{mn} = \frac{1}{2\pi m \nu_{nm}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{g_m} \sum_i \sum_j |\langle i | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} | j \rangle|^2 \quad (96)$$

ここで i, j はそれぞれ n, m に属する状態の一つを表す。さらに双極子近似

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sim 1 \quad (97)$$

を用いて変形すると

$$\langle i | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \vec{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} | j \rangle \sim \vec{\epsilon} \cdot \langle i | \vec{\nabla} | j \rangle = -\frac{m}{\hbar} \omega_{nm} \vec{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_{ij} \quad (98)$$

と書けるので (96) 式は

$$B_{mn} = \frac{1}{2\pi m \nu_{nm}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{g_m} \sum_i \sum_j \left(\frac{m}{\hbar} \omega_{nm}\right)^2 |\vec{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_{ij}|^2 \quad (99)$$

となる。 $\vec{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_{ij}$ は \mathbf{r} の特定方向 $\vec{\epsilon}$ への射影であるので、向きについて平均をとると

$$|\vec{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_{ij}|^2 \rightarrow \frac{1}{3} |\mathbf{r}_{ij}|^2 \quad (100)$$

したがって最終的に A, B 係数は次のようになる。

$$B_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{3g_m} \sum_i \sum_j |\mathbf{r}_{ij}|^2 \quad (101)$$

$$A_{mn} = \frac{8\pi}{\hbar c^3} \omega_{nm}^3 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{3g_n} \sum_i \sum_j |\mathbf{r}_{ij}|^2 \quad (102)$$

本文では状態はまず n, l, m でラベルするので、縮退は解けて $g_n = 1$ 。さらに Burgess の漸化式 [14]

$$\sum_{m'} |\langle n', l', m' | \mathbf{r} | n, l, m \rangle|^2 = \frac{l}{2l+1} |\langle n', l' | \mathbf{r} | n, l \rangle|^2 \quad (103)$$

を用いれば

$$A_{n'l', nl} = \frac{4\omega_{n'l', nl}^3}{3\hbar c^3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{l}{2l+1} |\langle n'l' | r | nl \rangle|^2 \quad (104)$$

となる。

謝辞

本論文の作成に当たり、指導教官である佐藤丈助教授に、熱心なご指導を承りましたこと心より感謝致します。谷井教授には講義や輪講を通じて大変お世話になりました。この場を借りて、お礼申し上げます。

また、本研究をするに当たってPDの小池氏、下村氏には多くの助言をしていただきました。山中氏、野村氏を初めとする研究室の諸先輩方には、研究はもとより様々な面で大変お世話になりました。ありがとうございます。

そして最後になりますが、ここまで支えてくださった家族や友人たちにも感謝の気持ちを送りたいと思います。

参考文献

- [1] 猪木慶治・河合光, 量子力学, 講談社 (1994)
- [2] ランダウ = リフシッツ, 量子力学 1, 東京図書株式会社 (1983)
- [3] T.F.Gallagher, Rydberg Atoms, Cambridge University Press (1994)
- [4] 高柳和夫, 原子分子物理学, 朝倉書店 (2000)
- [5] 松澤通生, 物理学最前線 24 高リユードベリ原子, 共立出版株式会社 (1989)
- [6] F.Robicheaux, C.Wesdorp, and L.D.Noordam, Phys. Rev. A62, 043404 (2000)
- [7] Y.Kishimoto, M.Tada, K.Koinato, Phys. Lett. A303, 279 (2002)
- [8] M.Tada, Y.Kishimoto, M.Shibata, Phys. Lett. A303, 285 (2002)
- [9] T.Haseyama, K.Kominato, M.Shibata, Phys. Lett. A317, 450 (2003)
- [10] M.Tada, Y.Kishimoto, K.Koinato, Phys. Lett. A349, 488 (2006)
- [11] I.Ogawa, S.Matsuki, K.Yamamoto, Phys. Rev. D53, R1740 (1996)
- [12] S.Matsuki, I.Ogawa, S.Nakamura, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl), 51B, 213 (1996)
- [13] K.Yamamoto, S.Matsuki, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl), 72, 132 (1999)
- [14] A.Burgess, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 118, 477 (1958)
- [15] 小野寺嘉孝, 物理のための応用数学, 裳華房, (1988)