

卒論

ドップラー冷却とボース・アインシュタイン凝縮

池田貴志

2008.02.04

概要

本文ではボース・アインシュタイン凝縮した理想気体の性質と、実際の実験でアルカリ原子気体を転移温度まで冷却する際に重要になってくるドップラー冷却方について論じる。ボース凝縮態については転移温度、比熱の変化などを求め、ドップラー冷却については冷却原理、到達できる最低温度を求める。またその準備としてレーザーと原子の相互作用についての考察していく。

Contents

1	イントロダクション	3
1.1	歴史的背景	3
1.2	レーザー冷却	4
2	理想 Bose 気体	5
2.1	絶対零度の性質	5
2.2	有限温度での性質	5
2.3	Bose-Einstein 凝縮 (BEC)	8
2.4	3次元調和ポテンシャル中での Bose-Einstein 凝縮	9
2.5	半古典近似による理想 Bose 気体の密度分布	11
2.6	理想 Bose 気体の比熱	14
3	1 電子原子の性質	19
3.1	スピン軌道相互作用	19
3.2	微細構造 (fine structure)	20
3.3	超微細構造 (hyperfine structure)	23
3.4	超微細構造のゼーマン分裂	26
3.5	電場への応答	29
3.6	エネルギースケール	36
3.7	粒子による自然放出	36
4	原子の捕捉と冷却	39
4.1	原子へのレーザー光の影響	39
4.2	レーザーが原子に及ぼす力	42
4.3	ドップラー冷却	45

5 まとめ

49

- 1 イントロダクション
- 2 理想 Bose 気体
- 3 原子の補足と冷却
- 4 まとめ

1 イントロダクション

1.1 歴史的背景

1924年6月、アインシュタイン (A. Einstein) はインドの物理学者ボース (S. N. Bose) から一編の論文「プランクの法則と光量子仮説」を受け取った。その論文は、光を粒とみなし、この粒同士には区別がないと仮定して統計をとると、プランクの輻射公式が導ける、というものであった。その論文で採用された統計のとり方 今日ではボース・アインシュタイン統計と呼ばれる。その重要性に気付いたアインシュタインは、その論文をドイツ語に翻訳し、ボース単名で *Zeitschrift für Physik* に投稿した (この論文は同年の夏に出版された)。そしてアインシュタインは、このボースのアイデアを原子系に適用してみた。つまり箱の中に閉じ込められた原子のとり得る状態を離散化し、そこにボース統計を適応した。その結果、最低エネルギー準位を占める粒子数が、ある温度以下で巨視的な大きさになる現象 - ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC: Bose-Einstein condensation) - が起こることを予言した。しかし、このアインシュタインの予言は単なる数学上のもので、現実には起こることはないと思われていた。このアインシュタインの予言を復活させたのは、理論物理学者のロンドン (F. London) であった。1927年、液体ヘリウムが 2.17K で比熱が発散する 2 次相転移 (転移) を起こすことが見出され、1937年には、この 転移温度以下では粘性がゼロに近くなる超流動現象がカピッツァ (P. L Kapitza) によって発見された。1938年、ロンドンは、それまで謎であったこれらの特異な現象は、ヘリウム原子のボース・アインシュタイン凝縮によるものであると説明した。実際、液体ヘリウムをボース気体とみなしアインシュタインの予想するボース凝縮転移温度を計算すると、転移温度 2.17K に近い 3.13K と計算される。また、1911年にオネス (H. K. Onnes) により、水銀において初めて発見された超伝導現象は、46年後の1957年、バーディーン (J. Bardeen)、クーパー (L. N. Cooper)、シュリーファー (J.R. Schrieffer) により、格子振動を仲立ちとする引力相互作用によって対をなした電子 (クーパー対) のボース・アインシュタイン凝縮として説明された (BCS 理論)。その後、超伝導と同じ微視的機構で液体ヘリウム 3 も超流動になることが理論的に予測され、1972年、実際に数 mK の温度領域で超流動状態へ相転移することが確認された。1993年には半導体 (Cu₂O) 中の励起子においてボース・アインシュタイン凝縮の証拠が見いだされた。しかし、これらのボース粒子 - ヘリウム原子、クーパー対、および励起子 - では粒子間の相互作用が大きく、その諸特性を理論計算と比較することは一般に困難である。実際、1986年に発見された酸化物高温超伝導体における超伝導性の発現機構は、未だ完全には解明されていない。それ故、粒子間相互作用の小さい原子気体系でのボース・アインシュタイン凝縮の実現は、多くの物理学者にとって長年の夢であった。

1.2 レーザー冷却

レーザー光が原子に及ぼす力を用いて気体原子を冷却または捕獲する技術は、1980年代に飛躍的に発展し、超精密分光、原子時計、原子波光学など様々な分野の発展に大きく貢献してきた¹⁾。1995年には、このレーザー冷却技術の一つの集大成として、気体原子のボース・アインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein condensation, 以下 BEC) が実現された。BEC は、原子間相互作用が制御できる理想的な量子凝縮系として、またはコヒーレンスの良い物質波として、理論と実験を問わず多くの研究者の興味を引き続け、現在では原子物理学、凝縮系物理学、量子光学などを取り込む大きなサブフィールドを形成している。ちなみに、レーザー冷却とボース凝縮の分野で、最近 10 年間に総計 6 名のノーベル物理学賞受賞者が輩出されており、この分野が物理学全体に与えているインパクトの大きさをうかがうことができる。本文ではボース・アインシュタイン凝縮した理想ボース気体の特徴、さらに、冷却技術にはレーザーと原子の相互作用が使われていることから、原子の超微細構造など、原子核の特徴についても議論する。

2 理想 Bose 気体

2.1 絶対零度の性質

スピン 0 の基底状態は N 個すべての粒子が最低エネルギー状態をもつ 1 粒子状態に入った状態であり、理想気体の場合、最低の 1 粒子エネルギーは $k = 0, \epsilon = 0$ 。そこで、

$$\mu(T = 0) = 0 \quad (1)$$

とする。Bose 分布関数は

$$f(\epsilon) = \begin{cases} N(\epsilon = 0) \\ 0(\epsilon > 0) \end{cases} \quad (2)$$

となる。

2.2 有限温度での性質

体積 V の計の全粒子数を N とすると、

$$N = \sum_i f(\epsilon_i) \quad (3)$$

である。ここで、1 粒子エネルギーが ϵ と $\epsilon + d\epsilon$ の間にある系の 1 粒子状態の数として状態密度 $D(\epsilon)$ を導入し (3) の和を積分に置き換え、

$$N \rightarrow \int f(\epsilon) D(\epsilon) d(\epsilon) \quad (4)$$

としたいところである。このとき、3次元理想気体では、

$$D(\epsilon) = \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sqrt{\epsilon} \quad (5)$$

であるから、

$$\begin{aligned}
 N &= \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} - 1} d\epsilon \\
 &= \frac{(mk_B T)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} V \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\alpha} - 1} dx
 \end{aligned} \tag{6}$$

となる。ただし、1行目から2行目に移るときに $x \equiv \epsilon/k_B T$ 、 $\alpha \equiv \mu/k_B T$ とした。

ここで、

$$\frac{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}{(mk_B T)^{3/2}} \frac{N}{V} = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\alpha} - 1} dx \equiv I(\alpha) \tag{7}$$

とすると、 $I(\alpha)$ は $\alpha < 0$ の領域で定義された α の増加関数であり、 $I(\alpha)$ は $\alpha = 0$ で最大値

$$I(0) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\alpha} - 1} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \simeq \frac{\sqrt{\pi}}{2} \times 2.612\dots \tag{8}$$

をとる。低温極限 $T \rightarrow 0$ をとると、

$$\frac{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}{(mk_B T)^{3/2}} \frac{N}{V} > I(0) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \tag{9}$$

となり、(7) を満たす α が存在しなくなる。これは、臨界温度 T_c を超える低温で基底状態にマクロな粒子数の粒子が落ち込む影響である。この臨界温度 T_c は(9) より、

$$T < T_c \equiv \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[\frac{N}{\zeta(3/2)V} \right]^{2/3} \tag{10}$$

と見積もられる。

T_c 以下では、基底状態の粒子数 N_0 を入れて、

$$N = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} - 1} d\epsilon + N_0 \quad (11)$$

とする。ここで、 N_0 は

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\mu\beta} - 1} \sim \frac{1}{-\mu\beta} = -\frac{k_B T}{\mu} \quad (12)$$

だが、 $T < T_c$ では N_0 がマクロな数となるため

$$\mu = -\frac{k_B T}{N_0} \quad (13)$$

より $\mu = 0$ である。したがって、励起状態の粒子数を N_{ex} とすると、

$$\begin{aligned} N_0 &= N - N_{ex} \\ &= N - \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\epsilon\beta} - 1} d\epsilon \\ &= N \left[1 - \frac{V}{N} \frac{(mk_B T)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} I(0) \right] \\ &= N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

を得る。温度の上昇とともに N_0 の値は減少し、 $T = T_c$ で 0 になる、あるいはより正確にはオーダー 1 のミクロな数になる。

2.3 Bose-Einstein 凝縮 (BEC)

結局理想 Bose 気体では高温から温度を下げていくと、ある特定の温度 T_c で運動量空間における粒子数がエネルギー最低の 1 粒子状態に凝縮し始めることになる。このような Bose 粒子系で見られる運動量空間における凝縮現象を Bose-Einstein 凝縮と呼ぶ。転移温度の式 (10) より、 $n \equiv N/V$ は原子密度であるから、

$$n\lambda_{dB}^3 \geq \zeta(3/2) = 2.612 \dots \quad (15)$$

のとき B.E.C. が起きることが分かる。 $\lambda_{dB} \equiv h/\sqrt{2\pi mk_B T}$ は熱的 de Broglie 波長であり、分母の $\sqrt{2\pi mk_B T}$ は系の運動量の揺らぎ Δp を表しているの、Heisenberg の不確定性関係 $\Delta x \Delta p = h$ より、 λ_{dB} は位置の揺らぎ、つまり波束の幅を表す。また、 $n\lambda_{dB}^3 \equiv \rho_{ps}$ は $\lambda_{dB}^3 = h^3/\Delta p^3$ であるので $\rho_{ps} = N/(V\Delta p^3/h^3)$ 。 $V\Delta p^3$ は位相空間上で粒子が分布している範囲、 $V\Delta p^3/h^3$ はその範囲に存在している状態の数であるので、 ρ_{ps} は一量子状態あたりの平均粒子数を表し、位相空間密度と呼ばれる。よって、(15) の Bose-Einstein 凝縮の発生条件を定性的に表現するならば、「個々の原子の波動関数が互いに重なり合うとき」ということができる。

$T < T_c$ で系の全エネルギーを計算する。このとき、粒子数の計算の際と異なり、 $T < T_c$ でも $\epsilon = 0$ の状態からの寄与は 0 である。よって、

$$\begin{aligned} E &= \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{e^{\epsilon\beta} - 1} d\epsilon \\ &= \frac{3}{2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} V(k_B T)^{5/2} \end{aligned} \quad (16)$$

を得る。ここで、1 行目から 2 行目への計算で、積分公式

$$\int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \quad (17)$$

を用いた。これより、定積比熱は

$$C_v = \frac{15}{4}\zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} V k_B^{5/2} T^{3/2} \quad (18)$$

となる。 $T = T_c$ で C_v に不連続性が見られ、これが相転移であることを示している。これは、Bose 粒子系特有の性質で、古典的な理想気体、フェルミ粒子系では出現しない。

2.4 3次元調和ポテンシャル中での Bose-Einstein 凝縮

実際のアルカリ原子 BEC の実験では、原子集団は箱型ポテンシャルではなく、以下のような非等方的調和ポテンシャルに閉じ込められた状態にある。

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (19)$$

この系の固有状態のエネルギー準位 $\epsilon(n_x, n_y, n_z)$ は

$$\epsilon(n_x, n_y, n_z) = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z \quad (n_x, n_y, n_z = 0, 1, \dots) \quad (20)$$

である。エネルギーがある値 ϵ 以下の固有状態の数 $N(\epsilon)$ は、 ϵ がエネルギー固有値の間隔 $\hbar\omega_i (i = x, y, z)$ に比べ十分大きなとき n_i を連続変数とみなし、さらに零点振動 $\epsilon = \hbar(\omega_x + \omega_y + \omega_z)/2$ を無視することができる。したがって、三つの変数 $\epsilon_i = \omega_i n_i$ で定義された座標系を導入する。このとき、一定のエネルギー (20) の表面は $\epsilon = \epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z$ の平面である。 $N(\epsilon)$ はこの平面で仕切られた部分の体積に比例する。即ち、

$$N(\epsilon) = \frac{1}{\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \int_0^\epsilon d\epsilon_x \int_0^{\epsilon - \epsilon_x} d\epsilon_y \int_0^{\epsilon - \epsilon_x - \epsilon_y} d\epsilon_z = \frac{\epsilon^3}{6\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \quad (21)$$

である。よって状態密度 $D(\epsilon)$ は $D(\epsilon) = dN/d\epsilon$ より、

$$D(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \quad (22)$$

となる。後の議論は、箱型ポテンシャルの場合と全く同様に進めることができる。

この系が Bose 凝縮しているとき、励起状態の粒子数 N_{ex} は

$$N_{ex} = \int_0^\infty D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{2\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon \quad (23)$$

と表せる。(23)の積分は

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon &= \frac{1}{\beta^3} \sum_{s=1}^\infty \int_0^\infty x^2 e^{-sx} dx = \frac{2}{\beta^3} \sum_{s=1}^\infty \frac{1}{s^3} \\ &= \frac{2}{\beta^3} \zeta(3) = \frac{2}{\beta^3} \times 1.202 \dots\end{aligned}\quad (24)$$

と計算でき、

$$N_{ex} = \frac{k_B^3 T^3}{\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \zeta(3) \quad (25)$$

となる。Bose凝縮体ができる条件は $N > N_{ex}$ であるから

$$N > \frac{k_B^3 T^3}{\hbar^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \zeta(3) = \left(\frac{k_B T}{\hbar \bar{\omega}} \right)^3 \zeta(3) \quad (26)$$

ここで $\bar{\omega} \equiv (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ と定義した。これを温度に関する条件として表現すると、

$$T < \frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \equiv T_c \quad (27)$$

となる。また、Bose凝縮体の粒子数の温度依存性は、

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \quad (28)$$

となる。このように、3次元調和ポテンシャルの場合は箱型ポテンシャルの場合と異なる T 依存性を持つ。

2.5 半古典近似による理想 Bose 気体の密度分布

ミリケルビン程度の温度に冷却した原子運には典型的には $10^4 \sim 10^7$ 程度の原子が含まれている。このように粒子数が少なく、準安定であり、系は分から秒程度の寿命しか持たない。したがって、低温物理の通常の方法が適用できないので、計測できる物理量が限られる。計測できる物理量の中に密度分布がある。観測する方法として、吸収イメージング法と移送対比イメージング法があるが、吸収イメージング法は比較的容易に行えるために BEC の観測には広く用いられている。

外部ポテンシャル $V_{trap}(\mathbf{r})$ に閉じ込められた理想 Bose 気体の空間密度分布 $n(\mathbf{r})$ は、この系の一粒子固有状態 (つまり一粒子シュレーディンガー方程式の解) $|\phi_\nu\rangle$ の位置波動関数 $\phi_\nu(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \phi_\nu \rangle$ を用いて

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} f_{\nu} |\phi_{\nu}(\mathbf{r})|^2 \quad (29)$$

と表される。ここで、

$$f_{\nu} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\nu}-\mu)/k_B T} - 1} \quad (30)$$

は Bose 分布関数で、エネルギーが ϵ_{ν} の一粒子状態 $|\phi_{\nu}\rangle$ に存在する平均粒子数を表す。しかし、(29) は、すべての一粒子固有状態をシュレーディンガー方程式より解く必要があり、実用的ではない。そこで、系の固有状態に Bose 分布を適用するのではなく、一粒子の位相空間 $(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ 上の体積要素 $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ 中の平均粒子数を $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})d\mathbf{r}d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ と表し、これが気体全体の局所的な性質であるとみなす。このとき、平衡状態の分布関数は

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p})-\mu)/k_B T} - 1} \quad (31)$$

$$\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (32)$$

である。ここで、粒子のエネルギーは \mathbf{r} での古典的な自由粒子のエネルギーを用いる。位相空間上の単位体積あたりに存在する粒子数 $n(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ は

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p})d\mathbf{r}d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3}{d\mathbf{r}d\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{(\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{p})-\mu)/k_B T} - 1} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \quad (33)$$

であり、空間密度分布 $n(\mathbf{r})$ は (33) を全運動量空間にわたって積分することにより得られる。

$$n(\mathbf{r}) = \int n(\mathbf{r}, \mathbf{p})d\mathbf{p} = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{p^2}{e^{(p^2/2m+V(\mathbf{r})-\mu)/k_B T} - 1} dp \quad (34)$$

ここで、変数変換 $x = p^2/2mk_B T$ を導入すると、

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda_{dB}^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x+(V(\mathbf{r})-\mu)/k_B T} - 1} dx \\ &= \frac{1}{\lambda_{dB}^3} \sum_{s=1}^\infty \frac{(e^{-(V(\mathbf{r})-\mu)/k_B T})^s}{s^{3/2}} \\ &= \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(e^{-(V(\mathbf{r})-\mu)/k_B T}) \end{aligned} \quad (35)$$

となる。ここで、 $\lambda_{dB} \equiv h/\sqrt{2\pi mk_B T}$ は熱的 de.Broglie 波長である。 $g_n(z) = \sum_{s=1}^\infty z^s / s^n$ は Bose 関数と呼ばれている。

また、運動量分布 $n(\mathbf{p})$ は (33) を全位置空間にわたって積分することにより得られる。

$$n(\mathbf{p}) = \int n(\mathbf{r}, \mathbf{p})d\mathbf{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{1}{e^{(p^2/2m+V(\mathbf{r})-\mu)/k_B T} - 1} d\mathbf{r} \quad (36)$$

ここで、ポテンシャルの形状として3次元調和ポテンシャル $V(\mathbf{r}) = m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)/2$ を考える。変数変換 $X = \omega_x x, Y = \omega_y y, Z = \omega_z z, R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$ を導入すると、

$$\begin{aligned} n(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \iiint \frac{1}{e^{(p^2/2m+m(X^2+Y^2+Z^2)/2-\mu)/k_B T} - 1} dX dY dZ \\ &= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 \omega_x \omega_y \omega_z} \int_0^\infty \frac{R^2}{e^{(p^2/2m+mR^2/2-\mu)/k_B T} - 1} dR \end{aligned} \quad (37)$$

ここでさらに変数変換 $x = mR^2/2k_B T$ を導入すると

$$\begin{aligned}
 n(\mathbf{p}) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda_{dB}^3 m^3 \bar{\omega}^3} \int_0^\infty \frac{1}{e^{x+(p^2/2m-\mu)/k_B T} - 1} dx \\
 &= \frac{1}{\lambda_{dB}^3 m^3 \bar{\omega}^3} \sum_{s=1}^\infty \frac{(e^{-(p^2/2m-\mu)/k_B T})^s}{s^{3/2}} \\
 &= \frac{1}{\lambda_{dB}^3 m^3 \bar{\omega}^3} g_{3/2}(e^{-(p^2/2m-\mu)/k_B T}) \quad (38)
 \end{aligned}$$

となる。ここで $\bar{\omega} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ である。

系の温度が転移温 T_c 度以下になり、最低エネルギー状態の粒子数 N_0 がマクロな数になっている (Bose 凝縮を起こしている) とき、 $\mu = 0$ となり、空間密度分布は

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(e^{-V(\mathbf{r})/k_B T}) \quad (39)$$

となる。特に、ポテンシャルの極小点、つまり空間密度のピーク位置では $V(\mathbf{r}) = 0$ であるので、

$$n_{peak} = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(1) = \frac{1}{\lambda_{dB}^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (40)$$

となる。このことから、Bose 凝縮が起きる条件は、ポテンシャルの形状によらず空間密度のピーク位置での位相空間密度 $\rho_{ps,peak} \equiv n_{peak} \lambda_{dB}^3$ が $\zeta(3/2) = 2.612$ になるとき、ということが出来る。このことは、箱型ポテンシャルにおける Bose 凝縮発生の条件 (2.15) を確かに再現している。図 2 . 1 に化学ポテンシャルが調和ポテンシャルの最小に等しいときの励起粒子の密度を $1/\lambda_T^3$ の単位で示した。比較のために古典ボルツマン分布の結果も同じ化学ポテンシャル μ の値に対して示した。

3次元調和ポテンシャル中の N 粒子系が、マクスウェル・ボルツマン統計に従うとしたときの空間密度分布 $n_{MB}(\mathbf{r})$ は、

$$n_{MB}(\mathbf{r}) = N \omega_x \omega_y \omega_z \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)/2k_B T} \quad (41)$$

である。特に、温度が転移温度 $T_c = \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} \left(\frac{N}{1.202} \right)$ (27) のときのピーク密度を求めてみると、

$$n_{MB}(0) = N\omega_x\omega_y\omega_z \left(\frac{m}{2\pi k_B T_c} \right)^{3/2} = \frac{\zeta(3)}{\lambda_{dB}^3} \quad (42)$$

これは、Bose-Einstein 統計を用いたときに得られるピーク密度の値 (40) の 46 % である。つまり、マクスウェル・ボルツマン分布は、ピーク密度を実際より小さく計算してしまう。逆に言えば、Bose-Einstein 統計は、粒子を最低エネルギー状態の周りに局在させようとする傾向がある。同じような傾向は、運動量分布にも表れる。

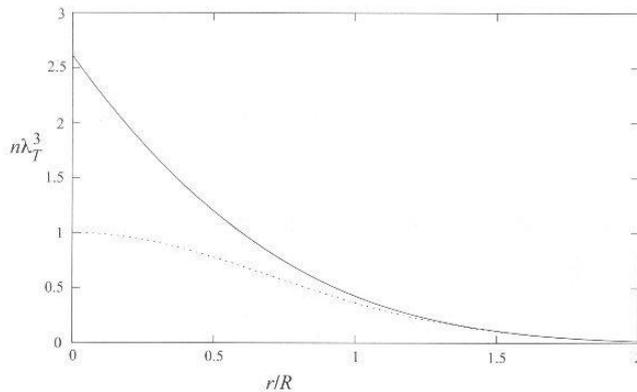


図 2 . 1 : 等方的トラップ $V(r) = m\omega_0^2 r^2/2$ で $R = (2k_B T/m\omega_0^2)^{1/2}$ のときの非凝縮粒子の空間分布。点線は () の初項に対するガウス分布である。

2.6 理想 Bose 気体の比熱

3次元調和ポテンシャル中の理想 Bose 気体の性質をもう一度まとめておく。

2.4 節で励起状態の粒子数を求めた際、転移点 T_c 以下の温度で化学ポテンシャル μ はゼロであるとしたが、厳密には限りなくゼロに近いということである。ここでは、厳密に μ の効果も考慮して粒子数を求めてみる。

$$\begin{aligned} N &= N_0 + N_{ex} \\ &= \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} + \frac{1}{2\hbar^3\omega_x\omega_y\omega_z} \int_0^\infty \frac{\epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^{\beta\mu}}{1 - e^{\beta\mu}} + \frac{(k_B T)^3}{2\hbar^3 \bar{\omega}^3} \int_0^\infty \frac{x^2}{e^x e^{-\beta\mu} - 1} dx \\
&= \frac{e^{\beta\mu}}{1 - e^{\beta\mu}} + \frac{(k_B T)^3}{2\hbar^3 \bar{\omega}^3} \Gamma(3) \phi(3, e^{\beta\mu}) \tag{43}
\end{aligned}$$

ここで $\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt$ は Γ 関数、 $\phi(z, s) \equiv \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty \frac{st^{z-1}}{e^t - s} dt$ は Appell の関数である。また、転移温度の定義 (27) より、

$$T_c \equiv \frac{1}{k_B} \left(\frac{2\hbar^3 \bar{\omega}^3 N}{\Gamma(3)\zeta(3)} \right)^{1/3} \tag{44}$$

$$\Leftrightarrow N = \frac{1}{2\hbar^3 \bar{\omega}^3} \Gamma(3)\zeta(3) (k_B T)^3 \tag{45}$$

T_c は粒子数 N 、振動数 $\bar{\omega}$ の関数である。(43) を (45) で割ると、

$$1 = \frac{1}{N} \frac{e^{\beta\mu}}{1 - e^{\beta\mu}} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \frac{\phi(3, e^{\beta\mu})}{\zeta(3)} \tag{46}$$

(46) を μ について解けば、化学ポテンシャル μ を温度、粒子数、振動数の関数として表すことができるはずである。 $e^{\beta\mu} = s$ とおくと、

$$1 = \frac{1}{N} \frac{s}{1 - s} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \frac{\phi(3, s)}{\zeta(3)} \tag{47}$$

$T < T_c$ では $\mu \doteq 0$ 、 $T > T_c$ では $\mu < 0$ なので、 $0 \leq S < 1$ を考えればよい。右辺第一項は s が 1 に非常に近い場合 ($1 - s \sim \mathcal{O}(1/N)$) を除くと、 $1/N$ の効果により無視できる。一方、右辺第二項は有限であり、

$$0 \leq \frac{\phi(3, s)}{\zeta(3)} \leq 1 \tag{48}$$

より0から $(T/T_c)^3$ まで単調に増加する。温度でいうと、 $T/T_c > 1 + \mathcal{O}(1/N)$ ($T > T_c$) の場合には (47) の解である s は $s < 1 - \mathcal{O}(1/N)$ となるので、高温では右辺第一項からの寄与を無視することができ、

$$1 = \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{\phi(3, e^{\beta\mu})}{\zeta(3)} \quad (T > T_c) \quad (49)$$

という式を解けばよいことになる。

次に、内部エネルギーを求める。

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2\hbar^3\bar{\omega}^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^3}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon \\ &= \frac{(k_B T)^4}{2\hbar^3\bar{\omega}^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x e^{-\beta\mu} - 1} dx \\ &= \frac{(k_B T)^4}{2\hbar^3\bar{\omega}^3} \Gamma(4) \phi(4, e^{\beta\mu}) \end{aligned} \quad (50)$$

ここで、(50) を転移温度 T_c の定義式 (45) で割ると、

$$\frac{E}{N} = \frac{(2\hbar^3\bar{\omega}^3)^{-1} (k_B T)^4 \Gamma(4) \phi(4, e^{\beta\mu})}{(2\hbar^3\bar{\omega}^3)^{-1} (k_B T)^3 \Gamma(3) \zeta(3)} \quad (51)$$

$$\Leftrightarrow E = 3Nk_B \frac{T^4}{T_c^3} \frac{\phi(4, e^{\beta\mu})}{\zeta(3)} \quad (52)$$

これより、 $C_v = \partial E / \partial T$ から比熱を求める。

$$\begin{aligned} C_v &= 3Nk_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{1}{\zeta(3)} \left[4\phi(4, e^{\beta\mu}) + T \frac{\partial}{\partial T} \phi(4, e^{\beta\mu}) \right] \\ &= 3Nk_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{1}{\zeta(3)} \left[4\phi(4, e^{\beta\mu}) + \phi(3, e^{\beta\mu}) T \left(\frac{\partial \beta\mu(T, N, \bar{\omega})}{\partial T} \right) \right] \end{aligned} \quad (53)$$

ここで、一行目から二行目への計算で Appell の関数の性質

$$\frac{\partial \phi(z, s)}{\partial s} = \begin{cases} \frac{1}{s} \phi(z-1, s) (Re(z) > 1) \\ \frac{1}{1-s} (z=1) \end{cases} \quad (54)$$

を用いた。 $T < T_c$ の場合、 $\beta\mu = 0$ より、

$$C_v = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{4\phi(4, 1)}{\zeta(3)} \quad (55)$$

$$= 12Nk_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} (T < T_c) \quad (56)$$

$T > T_c$ の場合は、化学ポテンシャルを決める式 (49) より、

$$\phi(3, e^{\beta\mu}) = \zeta(3) \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 (T > T_c) \quad (57)$$

であるので、この式を $\bar{\omega}$ 、 N を一定にして温度 T で微分すると、

$$\phi(3, e^{\beta\mu}) \left(\frac{\partial \beta\mu(T, N, \bar{\omega})}{\partial T} \right)_{N, \bar{\omega}} = \zeta(3) T_c^3 (-3) T^{-4} \quad (58)$$

$$\Leftrightarrow T \left(\frac{\partial \beta\mu(T, N, \bar{\omega})}{\partial T} \right)_{N, \bar{\omega}} = -3\zeta(3) \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \frac{1}{\phi(2, e^{\beta\mu})} (T > T_c) \quad (59)$$

が得られる。この結果を (53) に代入すると、

$$\begin{aligned} C_v &= 3Nk_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{1}{\zeta(3)} \left[4\phi(4, e^{\beta\mu}) - 3\zeta(3) \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \frac{\phi(3, e^{\beta\mu})}{\phi(2, e^{\beta\mu})} \right] \\ &= 3Nk_B \left[\left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{4\phi(4, e^{\beta\mu})}{\zeta(3)} - \frac{3\phi(3, e^{\beta\mu})}{\phi(2, e^{\beta\mu})} \right] (T > T_c) \end{aligned} \quad (60)$$

が得られる。ここで得られた C_v の T_c 近傍の振る舞いは (60) を $T \rightarrow T_c (\beta\mu \rightarrow 0)$ へと近づけていけば分かる。

$$C_v \rightarrow 3Nk_B \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \frac{4\zeta(4)}{\zeta(3)} - \frac{3\zeta(3)}{\zeta(2)} \right] \quad (61)$$

となり、

$$\Delta C_v = -9 \frac{3\zeta(3)}{\zeta(2)} Nk_B \approx -6.58 Nk_B \quad (62)$$

の比熱の飛びが見られる (図 2 . 2)。

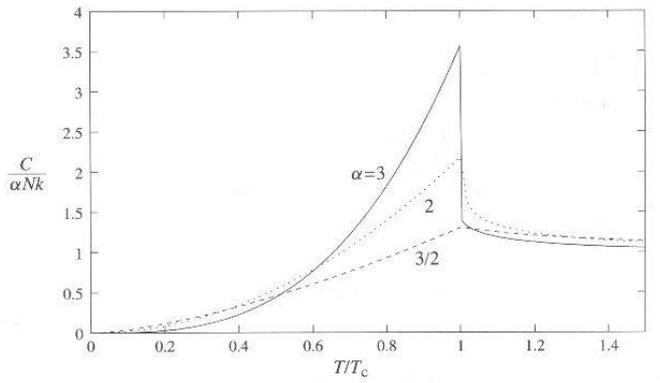


図 2 . 2 : $\alpha = 3$ のラインが調和ポテンシャルの比熱。 $\alpha = 3/2$ は箱型ポテンシャルで比熱にとびは見られない。

3 1 電子原子の性質

1 電子原子 (アルカリ原子) は閉殻の外側に 1 個の価電子を持つ。閉殻は非常に安定なので、アルカリ原子は、球対象で遮蔽された Coulomb ポテンシャル $V_c(r)$ のなかを 1 個の電子が運動するという模型を使って、きわめてよい近似で扱える。

3.1 スピン軌道相互作用

原子核の基本的な性質として、偶数のフェルミオンから構成される原子はボソンとして振舞うというものがある。中性原子は電子と陽子を同数含むので、中性子の数 N が偶数なら原子はボソンである。よって、アルカリ金属原子は奇数個の陽子を持つので、ボソンであるには N が偶数であり、質量数 A が奇数でなくてはならない。核子間の対相互作用のため、2 個の同種核子は角運動量がゼロの対になったほうがエネルギー的に低くなる。その結果、陽子と中性子がともに偶数の原子核の基底状態のスピン (全角運動量) J は $J = 0$ になる。 $A = Z + N$ が奇数の原子核の基底状態のスピンは、対を組めなかった 1 つの核子の角運動量で与えられる。価電子の受ける中心力ポテンシャル $V_c(r)$ は、もはや純粹の Coulomb 型ではない。閉核をなす電子全体の L も S もゼロであるから、原子の角運動量は価電子によって決まることになる。

負に帯電した内殻の電子に遮蔽された原子核の静電ポテンシャルを $\Phi(r)$ とすると、価電子の受ける中心力ポテンシャルは、

$$V_c(r) = e\Phi(r) \quad (63)$$

となる。価電子のスピンと $V_c(r)$ との相互作用は、このポテンシャルによる電子の軌道運動に由来するので、スピン軌道 ($L - S$) 相互作用と呼ばれる。この相互作用の存在は、定性的には次のように理解できる。いま、価電子が電荷 $|e|Z$ の原子核に対して止まっているとすれば、中心力ポテンシャル $V_c(r)$ のために電場

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{e}\nabla V_c(r) \quad (64)$$

を受ける。しかし、この電子が原子核に対して速度 v で動いている場合、この電子とともに動いている座標系から見れば、原子核は $-v$ の速度で動いているので、電子の位置に、

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \quad (65)$$

の磁場をつくる。この磁場は電子のスピン、より厳密には、電子の磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu} = (1.0011596 \dots) \times \frac{e}{mc} \mathbf{S} \simeq \frac{e}{mc} \mathbf{S} \quad (66)$$

と相互作用するので、軌道電子のスピンと磁場 (3) との相互作用エネルギーは、

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} &= \frac{e\mathbf{S}}{mc} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right) \\ &= -\frac{e\mathbf{S}}{m^2c^2} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla\Phi(r)) = \frac{e\mathbf{S}}{m^2c^2} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d\Phi(r)}{dr} \\ &= \frac{1}{m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c(r)}{dr} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) \end{aligned} \quad (67)$$

となる。この式は符号は正しいが大きさは因子 2 だけ大きすぎるのが分かる (これを Thomas 因子と呼ぶ)。このくいちがいを正しく量子力学的に説明するには、Dirac 方程式を使って相対論的にあつかわねばならないが、ここでは現象論的に (5) を 2 で割って

$$\hat{V}_{LS} = \frac{1}{2m^2c^2} \left[\frac{1}{r} \frac{dV_c(r)}{dr} \right] \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (68)$$

ととることとする。

3.2 微細構造 (fine structure)

$L - S$ 相互作用項なしの 1 電子原子のハミルトニアンは、

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_c(r) = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V_c(r) \quad (69)$$

であるから、 H_0 の固有関数は、球面調和関数と動径波動関数の積として書ける。いま、 $L - S$ 項 (6) を次のように加え、1 次の摂動としてあつかう。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{LS} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V_c(r) + f(r)\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (70)$$

$\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$ は \hat{H}_0 だけでなく $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{LS}$ とも可換であるゆえに、 \hat{H} の近似的波動関数 $|nlj\rangle$ は座標表示で

$$\phi_{nlj} = R_{nl}(r)\mathcal{Y}_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m} \quad (71)$$

のように書ける。(9) は \hat{V}_{LS} 項を対角化するから、1 次のエネルギーのずれを得るには、単に (9) での期待値をとればよい。

$$\begin{aligned} E_{nlj} - E_n &= \langle nlj | \hat{V}_{LS} | nlj \rangle \\ &= \langle f(r) \rangle_{nl} \langle lj | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | lj \rangle \end{aligned} \quad (72)$$

ここで、(6) を用いると、

$$\begin{aligned} \langle f(r) \rangle_{nl} &= \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c(r)}{dr} \right\rangle_{nl} \\ &= \frac{1}{2m^2c^2} \int_0^\infty R_{nl}^*(r) \frac{1}{r} \frac{dV_c(r)}{dr} R_{nl}(r) r^2 dr \quad (3.11) \end{aligned} \quad (73)$$

を得る。一方、 $l > 0$ の場合は、

$$\begin{aligned} \langle lj | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | lj \rangle &= \frac{1}{2} \langle lj | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) | lj \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 \\ &= \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} l(j = l + \frac{1}{2}) \\ -\frac{\hbar^2}{2} (l+1)(j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \end{aligned} \quad (74)$$

となる。(10)(11)(12) はランデの間隔則と呼ばれている。このように $L - S$ 相互作用を取り入れると、与えられた l のエネルギー状態は、 $j = l \pm 1/2$ の 2 重項に分かれる。これをエネルギー準位の微細構造という。

水素原子の $n = 2$ 、 $l = 1$ の状態について微細構造分裂の大きさの程度を評価してみる。(10)、(12) より

$$\begin{aligned}\Delta E \equiv E_{21\frac{3}{2}} - E_{21\frac{1}{2}} &= \langle f(r) \rangle_{21} \left\{ \langle 1\frac{3}{2} | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | 1\frac{3}{2} \rangle - \langle 1\frac{1}{2} | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | 1\frac{1}{2} \rangle \right\} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2} \langle f(r) \rangle_{21}\end{aligned}\quad (75)$$

$$\begin{aligned}\langle f(r) \rangle_{21} &= \frac{1}{2m^2c^2} \int_0^\infty R_{21}^*(r) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(-\frac{e^2}{r} \right) R_{21}(r) r^2 dr \\ &= \frac{e^2}{2m^2c^2} \int_0^\infty R_{21}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{21}(r) r^2 dr\end{aligned}$$

$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$ ($a_0 = \hbar^2/m_e e^2$: ボーア半径) を用いて計算すると、

$$\int_0^\infty R_{21}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{21}(r) r^2 dr = \left(\frac{1}{2a_0} \right)^3 \frac{1}{3}$$

$$\therefore \langle f(r) \rangle_{21} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^3 \frac{1}{3}\quad (76)$$

これより

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{32m^2c^2} \frac{e^2}{a_0^3}\quad (77)$$

$n = 2$ のとき、束縛状態のエネルギー $E_2 = -e^2/8a_0$ より、

$$\frac{\Delta E}{|E_2|} = \frac{\hbar^2}{32m^2c^2} \frac{e^2}{a_0^3} \cdot \frac{8a_0}{e^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{137} \right)^2 \\
&= 0.0000133 \sim 10^{-5}
\end{aligned} \tag{78}$$

となる。このように、 $e^2/\hbar c (\simeq 1/137)$ を用いて微細構造分裂が e^2/a_0 の程度の Balmer 分裂と比較して説明された。

3.3 超微細構造 (hyperfine structure)

これまで、原子核の場は中心対称な場であるとみなして微細構造を議論してきた。しかし、多くの原子核は固有の磁気モーメントを持っている。それが電子の磁気モーメントと相互作用をして縮退していたエネルギー準位をさらに分裂させる。この原子核の磁気モーメントに起因する準位の分裂は、スピン軌道相互作用で起こされた分裂 (微細構造) に比べてはるかに小さいので、超微細構造と呼ばれている。核スピンを I 、電子スピンを S とすると、この相互作用は

$$\hat{H}_{hfs} = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} + B \frac{6(\mathbf{I} \cdot \mathbf{S})^2 + 3\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} - 2I(I+1)S(S+1)}{2I(I-1)2S(S-1)} \tag{79}$$

と書ける。 A は磁気双極子結合定数、 B は電気四重極子結合定数である。 $S_{1/2}$ 状態の場合、 $B = 0$ である。ここで、 I と S を結合した全角運動量演算子 $F = I + S$ と、その固有状態 $|F, m_F\rangle$ ($F = |I - S|, \dots, I + S, m_F = -F, \dots, 0, \dots, F$) を考えると、状態 $|F, m_F\rangle$ の相互作用エネルギーは

$$\begin{aligned}
H_{hfs} &= \langle F, m_F | \hat{H}_{hfs} | F, m_F \rangle = A \cdot \frac{1}{2} (\|\mathbf{I} + \mathbf{S}\|^2 - \|\mathbf{I}\|^2 - \|\mathbf{S}\|^2) \\
&= A \cdot \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)]
\end{aligned} \tag{80}$$

と表される。基底状態のアルカリ原子・水素原子は電子の軌道角運動量はゼロなので、 $S = 1/2$ である。よって、 $F = I + 1/2$ と $F = I - 1/2$ の準位の分裂は

$$\Delta E_{hfs} = H_{hfs}(F = I + 1/2) - H_{hfs}(F = I - 1/2)$$

$$= \left(I + \frac{1}{2} \right) A \quad (81)$$

となる。超微細相互作用は核からの多重極モーメントと電子との相互作用が主であり、原子核に近いところにあるS軌道上の電子がとりわけ大きな寄与をする。このことから、S軌道上の電子との超微細相互作用について分裂するエネルギー差を求めてみる。電子の運動に伴う定常電流 j により原点に生じる磁束密度 B は

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{j}}{||\mathbf{r}||^2} dV \quad (82)$$

である。ただし、 \mathbf{n} は r 方向への単位ベクトルである。 \mathbf{j} は電子の波動関数に対する電子密度演算子と考えられ、

$$\mathbf{j} = -2\mu_B \cdot \nabla \times (|\psi|^2 \mathbf{S}) \quad (83)$$

であらわされる。 $\mu_B = e\hbar/2m_e$ は電子の磁気モーメントの大きさである。ここで ψ の球対称性を用いると

$$\mathbf{j} = -2\mu_B \left(\frac{d|\psi|^2}{dr} \mathbf{n} \times \mathbf{j} + |\psi|^2 \cdot \nabla \times \mathbf{j} \right) = -2\mu_B \frac{d|\psi|^2}{dr} (\mathbf{n} \times \mathbf{j}) \quad (84)$$

となるので、

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= -\frac{2\mu_B\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{j})}{||\mathbf{r}||^2} \frac{d|\psi|^2}{dr} r^2 \sin\theta dr \sin\theta \\ &= -\frac{2\mu_B\mu_0}{4\pi} \int \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{j}) \sin\theta \sin\theta \int_0^\infty \frac{d|\psi|^2}{dr} dr \\ &= -\frac{2\mu_B\mu_0}{4\pi} \cdot \left(-\frac{8\pi}{3} \mathbf{j} \right) \cdot (-|\psi(0)|^2) \end{aligned} \quad (85)$$

となる。よって、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}_{hfs} &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu\mu_B |\psi(0)|^2 \frac{\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}}{I} \left(\boldsymbol{\mu} = \frac{\mu}{I} \mathbf{I} \right) \quad (86) \\ &= A \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \end{aligned}$$

よって

$$A = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu\mu_B |\psi(0)|^2 \frac{1}{I} \quad (87)$$

となり、

$$\Delta E_{hfs} = \left(I + \frac{1}{2} \right) A = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu\mu_B \frac{I + \frac{1}{2}}{I} |\psi(0)|^2 \quad (88)$$

が得られる。では、水素原子の超微細相互作用を計算してみる。水素原子の場合、 μ は陽子の磁気モーメント $\mu_p \approx 2.793\mu_N$ (μ_N は核子の磁気モーメント)、また、

$$\begin{aligned} \psi_{n00} &= R_{n0}(0) Y_0^0 \\ &= - \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-1)!}{2n(n!)^3} \right]^{\frac{1}{2}} L_n^1(0) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ &= - \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2n(n!)}} \cdot (-n)(n!) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (89) \end{aligned}$$

であるゆえ、

$$|\psi(0)|^2 = 1/\pi a_0^3 \quad (90)$$

よってこれらを (26) に代入すると、

$$\Delta E_{hfs} = \frac{32}{3} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_B \mu_p}{a_0^3} \sim 9.418 J \quad (91)$$

$E = h\nu$ から振動数では $1420 MHz$ 、波長では $21.09 cm$ となり、実験値と 1% 以内で一致している。不一致の主な原因は換算質量効果と電子の g 因子に対する輻射補正 $g = 2(1 + \alpha_{fs}/2\pi)$ にある。 $\alpha_{fs} = e^2/\hbar c$ は超微細構造定数である。多電子原子の場合、電子間相互作用が無視できるとすると、電子の動きは水素様になり、水素の考察から、 $\Delta E_{hfs} \propto (Z/n)^3$ となる。しかし、閉殻の電子は核の電荷を遮蔽するので ΔE_{hfs} は若干小さくなる。

3.4 超微細構造のゼーマン分裂

z 方向の磁場 $B = (0, 0, B_z)$ が存在する場合の超微細ハミルトニアンは、 S が良い量子数である場合 (ゼーマンエネルギーが微細構造のエネルギー間隔に比べ小さい場合)

$$\hat{H}_{hfs} = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + \mu_B (g_S S_z + g_I I_z) B_z \quad (92)$$

と表される。ここで g_I は核スピン I の g 因子で g_S は電子系の全スピン S の g 因子である。 $S_{1/2}$ 状態なら $g_S = 2$ 、 $P_{3/2}$ 状態なら $g_S = 4/3$ である。ゼーマンエネルギー項の存在により \hat{H}_{hfs} はもはや F と交換しないので、 F の固有状態 $|F, m_F\rangle$ は \hat{H}_{hfs} の固有状態ではない。 \hat{H}_{hfs} の固有状態を求めるには I と S の固有状態の直積 $|I, m_I\rangle \otimes |J, m_J\rangle$ を基底にして \hat{H}_{hfs} を再び対角化しなくてはならない。昇降演算子 $I_{\pm} = I_x \pm iI_y$ 、 $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ を用いると、 $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} = (I_+ S_- + I_- S_+)/2 + I_z S_z$ と表せるので、 \hat{H}_{hfs} は $m_F = m_I + m_S$ の値を変えない。よって、対角化は $m_F = m_I + m_S$ が同じ状態間で行えばよい。

核スピン $3/2$ の場合を考える。このとき、 $m_I = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ 、 $m_S = 1/2, -1/2$ で 8 個の状態 $|m_I, m_S\rangle$ がつくれる。 $|3/2, 1/2\rangle$ の状態 ($m_F = 2$) と $|-3/2, -1/2\rangle$ の状態 ($m_F = -2$) からは 1×1 行列がつくれ、エネルギー固有値は

$$E \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right) = \frac{3}{4} A + \frac{1}{2} g_S B_z + \frac{3}{2} g_I B_z$$

$$E \left(-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right) = \frac{3}{4} A - \frac{1}{2} g_S B_z - \frac{3}{2} g_I B_z$$

である。これらは磁場の一次関数である。 $|3/2, -1/2\rangle$ と $|1/2, 1/2\rangle$ の状態 ($m_F = 1$) からは 2×2 行列がつくれ、エネルギー固有値は

$$E = -\frac{A}{4} + g_I B_z \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A + g_S B_z - g_I B_z)^2}$$

である。 $|-3/2, 1/2\rangle$ と $|-1/2, -1/2\rangle$ の状態 ($m_F = -1$) では

$$E = -\frac{A}{4} - g_I B_z \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A - g_S B_z + g_I B_z)^2}$$

となる。さらに、 $|1/2, -1/2\rangle$ と $|-1/2, 1/2\rangle$ の状態 ($m_F = 0$) では

$$E = -\frac{A}{4} \pm \sqrt{A^2 + \frac{1}{4}(g_S B_z - g_I B_z)^2}$$

である。行列の対角化で得られた固有値を図 3 . 1 に描いた。 g_I は核種に依存するが、 10^{-3} のオーダーで、通常無視できる。従って、 g_I をゼロとおき、 $g_S = 2\mu_B$ とする。無次元の磁場 b を任意の核スピンに対して

$$b = \frac{g_S B_z}{A} = \frac{(2I + 1)\mu_B B}{\Delta E_{hfs}} \quad (93)$$

とおくと、エネルギー順位は $m_F = \pm 2$ に対しては

$$E = A \left(\frac{3}{4} + \frac{b}{2} \right)$$

$$E = A \left(\frac{3}{4} - \frac{b}{2} \right)$$

$m_F = \pm 1$ に対しては

$$E = A \left(-\frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}(1 + b)^2} \right)$$

$$E = A \left(-\frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}(1 - b)^2} \right)$$

$m_F = 0$ に対しては

$$E = A \left(-\frac{1}{4} \pm \sqrt{1 + \frac{b^2}{4}} \right)$$

で与えられる。高磁場 $b \gg 1$ ではこれらの式はすべて $\pm Ab/2 = \pm g_S B_z/2$ という電子スピンに関係した項が主な寄与となる。

アルカリ原子に対する多くの実験は弱い磁場でなされ、ゼーマン効果は超微細分裂に比べ比較的小さい。 b を微小として1次の項までで近似すると、

$$E \left(\pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right) = A \left(\frac{4}{3} \pm \frac{b}{2} \right)$$

$$E(m_I + m_J = +1) = A \left[-\frac{1}{4} \pm \left(1 + \frac{1}{4}b \right) \right]$$

$$E(m_I + m_J = -1) = A \left[-\frac{1}{4} \pm \left(1 + \frac{1}{4}b \right) \right]$$

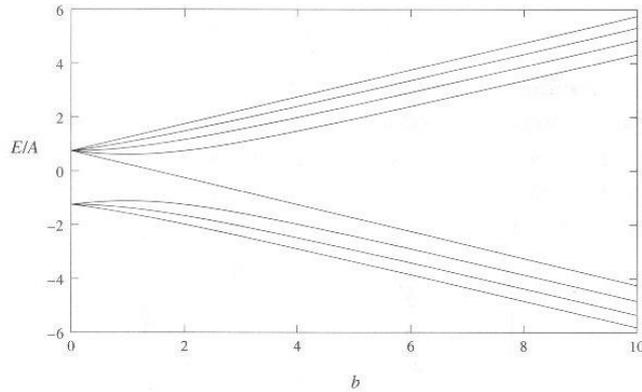
$$E(m_I + m_J = 0) = A \left(-\frac{1}{4} \pm 1 \right)$$

となる。 $b = 0$ の場合が $E(F)$ であることを考えると、これらの式はすべて

$$\begin{aligned} E(m_I + m_J = m_F) &= E(F) \pm \frac{m_F b}{4} \\ &= E(F) \pm \frac{m_F}{4} \cdot \frac{4\mu_B}{\Delta E_{hfs}} B \end{aligned} \quad (94)$$

と書ける。実験的には、二重分極状態 (Doubly polarized state) $|m_I = I, m_J = 1/2\rangle$ が重要である。これは核と電子のスピンが磁場の方向にもっとも大きな値を持つ状態である。核スピン $3/2$ では $|m_I = 3/2, m_J = 1/2\rangle$ であり、 $F = 2$ 、 $m_F = 2$ である。また、ゼロ磁場において $F = I - 1/2$ 、 $m_F = -(I - 1/2)$ に対応する最大限伸びた状態 (Maximally stretched state) も重要で、核スピン

$3/2$ では $F = 1$ 、 $m_F = -1$ である。これらの状態は負の磁気モーメントを持



ち、磁場に捕獲され得る。

図 3 . 1 : 磁場中の $I = 3/2$ 、 $A > 0$ のアルカリ原子の超微細準位エネルギー。エネルギーは $A = \Delta E_{hfs}/2$ を単位として図る。無次元の磁場 $b = 4\mu_B B/\Delta E_{hfs}$ である。

3.5 電場への応答

冷却した希薄気体をレーザーによる強力な電場中に閉じ込める際に、電気双極子モーメントが誘起され、エネルギー順位が変化する。これを評価するために、分極率を見積もる。

静的な場の場合、簡単な考察として、外部電場の強度が原子の電場 $\mathcal{E} \sim e/(4\pi\epsilon_0 a_0^2)$ 程度とすると、電子の位置は原子のサイズ $\sim a_0$ くらい移動する。分極率 α は電気双極子モーメントの期待値 $\langle d \rangle$ と

$$\langle d \rangle = \alpha \mathcal{E} \quad (95)$$

にしたがって関係付けられている。よって、

$$e \cdot a_0 = \alpha \cdot \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2}$$

$$\Leftrightarrow \alpha \sim 4\pi\epsilon_0 a_0^3 \quad (96)$$

となる。一般的には分極率はテンソルであるが、S 状態にあるアルカリ原子や水素の基底状態は電場の方向に依存せず、球対称となるのでスカラーでよい。さらに

$$\tilde{\alpha} = \frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0} \quad (97)$$

と定義する。

電場中の原子のエネルギーは定性的に摂動論を用いて評価できる。電場の中の電子のポテンシャルエネルギーは $e\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}$ と表される。よって、原子と電場の相互作用ハミルトニアンは上式を全電子について和をとり、電気双極子モーメントを用いて表すと

$$H' = -\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \quad (98)$$

と表される。ここで、原子上の電子の電気双極子モーメントは

$$\mathbf{d} = -e \sum_j \mathbf{r}_j \quad (99)$$

で、 \mathbf{r}_j は原子核から見た電子の位置演算子である。基底状態に対して、

$$\Delta E^{(1)} = \langle 0|H'|0\rangle = e \sum_j \langle 0|\mathbf{r}_j|0\rangle \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}} \quad (100)$$

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_N \frac{|\langle n|H'|0\rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (101)$$

となるが、 \mathbf{r}_j はパリティが奇の演算子であるため対象性から、原子の双極子モーメントは場がないときはゼロである。したがってエネルギーの一次摂動も消える。電場の冪でエネルギーを展開したとき、最初にゼロでない項が現れるのは二次摂動項である。(39)の分母は基底状態に対して正なので基底状態エネルギーへの二次摂動の寄与は負である。分極率を用いてエネルギーを表すと、

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha\boldsymbol{\mathcal{E}}^2 \quad (102)$$

となるので (39) 式と比べると、

$$\alpha = \frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \mathcal{E}^2} = \sum_n \frac{2|\langle n|d_i|0\rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (103)$$

が分かる。ここで電場を i 方向にとった。

水素について分極率は厳密に計算でき、 $\tilde{\alpha} = 9a_0^3/2$ となる。これは上の定性的な見積もりとも、実験とも一致する。アルカリ原子の分極率は水素の 30 ~ 90 倍大きい。これは、振動子強度の概念を通して簡単に理解できる。準位 k から準位 l への遷移の振動子強度

$$f_{kl}^i = \frac{2m(E_k - E_l)}{e^2 \hbar^2} |\langle k|d_i|l\rangle|^2 \quad (104)$$

を双極子モーメントの i 成分に対して定義する。基底状態の原子の分極率は

$$\begin{aligned} \alpha &= 4\pi\epsilon_0 \tilde{\alpha} = \frac{\hbar^2 e^2}{m_e} \sum_n \frac{f_{n0}^i}{(E_n - E_0)^2} \\ \Leftrightarrow \tilde{\alpha} &= \sum_n \frac{f_{n0}^i}{(E_n - E_0)^2} \end{aligned} \quad (105)$$

と書ける。 Z 個の電子を持つ原子では、ある準位から他のすべての準位への遷移の振動子強度の総和は Z であるという総和則

$$\sum_n f_{n0} = Z \quad (106)$$

が成り立つ。これは、以下のようにして証明される。

いま、電場が x の方向を向いているとする。すると、 i 番目の電子の位置と j 番目の電子の運動量の間の変換関係

$$[x_i, p_{xj}] = i\hbar\delta_{ij} \quad (107)$$

より、交換関係

$$[p_{xi}^2, x_i] = -2i\hbar p_{xi} \quad (108)$$

$$[H, \Sigma_i x_i] = -\frac{i\hbar}{m} \sum_i p_{xi} \quad (109)$$

が成り立つ。これより

$$\begin{aligned} \langle k | \Sigma_i p_{xi} | l \rangle &= \frac{im}{\hbar} \langle k | H \Sigma_i x_i - \Sigma_i x_i H | l \rangle \\ &= \frac{im}{\hbar} \sum_q \{ \langle k | H | q \rangle \langle q | \Sigma_i x_i | l \rangle - \langle k | \Sigma_i x_i | q \rangle \langle q | H | l \rangle \} \\ &= \frac{im}{\hbar} \hbar (E_k - E_l) \langle k | \Sigma_i x_i | l \rangle \end{aligned} \quad (110)$$

が得られる。これと、交換関係

$$[\Sigma_i p_{xi}, \Sigma_i x_i] = -i\hbar Z \quad (111)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \langle l | \Sigma_i p_{xi}, \Sigma_i x_i | l \rangle &= \sum_k \{ \langle l | \Sigma_i p_{xi} | k \rangle \langle k | \Sigma_i x_i | l \rangle - \langle l | \Sigma_i x_i | k \rangle \langle k | \Sigma_i p_{xi} | l \rangle \} \\ &= -i \frac{2m}{\hbar} \sum_k \hbar (E_k - E_l) |\langle k | \Sigma_i x_i | l \rangle|^2 = -i\hbar Z \end{aligned} \quad (112)$$

が得られる。したがって、

$$\frac{2m}{e^2 \hbar} \sum_k (E_k - E_l) |\langle k | d_i | l \rangle|^2 = Z \quad (113)$$

あるいは

$$\sum_k f_{kl} = Z \quad (114)$$

が得られた。

アルカリでは分極率への主な寄与は価電子からほとんどであるので、価電子状態は核子とコアの電子の静電ポテンシャル中を運動する単一の電子状態とみなせる。加えて、価電子の振動子強度の大部分はスペクトルの光学部分の共鳴線 (resonance line) の中にあり、共鳴線以外の遷移をすべて無視できるとすると、 $\sum_n f_{n0} = f_{res \rightarrow 0} = 1$ より、

$$\tilde{\alpha} \approx 1/(\Delta E_{res})^2 \quad (115)$$

となる。ここで ΔE_{res} は原子単位 ($e_0^2/a_0 \approx 27.2eV$) で測られた共鳴線とのエネルギー差である。

原子	(3.45)	実測
<i>H</i>	7.1	4.5
<i>Li</i>	217	164
<i>Na</i>	167	163
<i>K</i>	284	294
<i>Rb</i>	297	320

したがって上の表から、分極率のアルカリ族に渡っての変化は主要な遷移が共鳴線であるということで簡単に理解することができる。重いアルカリ原子では分極率の実験値は (3.53) の見積もりより大きい (Z が増加するにつれて大きくなる)。これはこの見積もりで無視した内殻電子が分極率に効いてくるからである。アルカリ原子では分極率に共鳴線 ($nP - nS$) の遷移が影響したのに対し、水素は $1S - 2S$ (ライマン線) の遷移が影響する。(53) の見積もりでは分極率は $64/9 \approx 7.1$ であったが、この遷移のエネルギーは $(3/8)e_0^2/a_0$ であり、振動子強度に 1 よりはるかに小さな寄与しか与えない。従って見積もりではこの 60% の大きさとなった。この違いによりアルカリ原子の分極率は水素より大きくなる。

次に時間変化する電場に対するエネルギー変化を考える。電場は i 方向にかかり時間的に $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$ とする。摂動は

$$H' = -d_i \mathcal{E}_0 \cos \omega t = -\frac{d_i \mathcal{E}_0}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (116)$$

で与えられる。 $t = 0$ で $|m_0\rangle$ にあるような状態 $|\psi(t)\rangle$ を $|n(t)\rangle$ で展開すると、

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n |n(t)\rangle \cdot \langle n(t)|\psi(t)\rangle \\ &= \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |n_0\rangle \cdot a_n(t) \\ \therefore \psi &= \sum_n a_n u_n e^{-iE_n t/\hbar} \end{aligned} \quad (117)$$

である。ただし $\psi = \langle x|\psi\rangle$ 、 $u_n = \langle x|n_0\rangle$ である。これを $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = (H_0 + H')|\psi\rangle$ に代入すると

$$\sum_l i\hbar \frac{\partial a_l}{\partial t} e^{-iE_l t/\hbar} |l_0\rangle = \sum_k a_k e^{-iE_k t/\hbar} H' |k_0\rangle \quad (118)$$

となるので、左から適当な $\langle n_0|$ をかければ

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = \sum_k \langle n|H'|k\rangle a_k(t) e^{i(E_n - E_k)t} \quad (119)$$

が得られる。原子は初め非摂動ハミルトニアン H_0 の固有状態 m にあったとし、 $t = 0$ で摂動が入ったとする。 $n \neq m$ の展開係数 a_n は摂動 H' の一次の範囲で (54) を (57) に代入し、右辺の a_k を摂動がないときの δ_{km} で置き換える。その結果

$$a_n^{(1)} = -\frac{1}{2i\hbar} \int_0^t dt' \langle n|d_i \mathcal{E}_0|m\rangle \left[e^{i(\omega_{nm} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{nm} - \omega)t'} \right] \quad (120)$$

が得られる。ここで、 $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ であり、簡単のため、週波数は遷移週波数のどれとも異なると仮定した。時間に関する積分を実行して、 $n \neq m$ に対して

$$a_n^{(1)} = \frac{\langle n|d_i \mathcal{E}_0|m\rangle}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{nm} + \omega)t} - 1}{\omega_{nm} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega)t} - 1}{\omega_{nm} - \omega} \right] \quad (121)$$

を得る。エネルギーのシフトを与えるはじめの状態 a_m を決めるために $a_m = e^{i\phi_m}$ とおく。ここで ϕ_m は複素位相である。(59) を (57) に代入すると、二次摂動の範囲で結果は

$$\hbar \frac{d\phi_m}{dt} = \langle m|d_i|m\rangle \mathcal{E}_0 \cos \omega t + \frac{\mathcal{E}_0^2}{2\hbar} \sum_{n \neq m} |\langle n|d_i|m\rangle|^2 e^{-i\omega_{nm}t} \cos \omega t \left[\frac{e^{i(\omega_{nm}+\omega)t} - 1}{\omega_{nm} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{nm}-\omega)t} - 1}{\omega_{nm} - \omega} \right] \quad (122)$$

となる。(3.60) の右辺で $e^{-i\phi_m}$ を 1 で置き換えた。状態 m はパリティ演算子の固有関数なので、行列要素 $|\langle m|d_i|m\rangle|$ は対象性によってゼロとなる。

エネルギー変化は状態の位相の時間的減少の平均的な割合に \hbar を掛けたものである。したがって時間について (60) を平均して

$$\hbar \left\langle \frac{d\phi_m}{dt} \right\rangle_t = \frac{\mathcal{E}_0^2}{4\hbar} \sum_n \left(\frac{1}{\omega_{nm} + \omega} + \frac{1}{\omega_{nm} - \omega} \right) |\langle n|d_i|m\rangle|^2 \quad (123)$$

を得る。ここで $\langle \dots \rangle_t$ は電場の一周期に渡る平均を表す。原子の基底状態 ($m = 0$) に対して時間平均したエネルギー変化 $\Delta E = -\hbar \left\langle \frac{d\phi_m}{dt} \right\rangle_t$ を静電場の (40) 式に類似の形

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha(\omega) \langle \mathcal{E}(t)^2 \rangle_t \quad (124)$$

に書く。 $\langle \mathcal{E}(t)^2 \rangle_t = \mathcal{E}_0^2/2$ である。周波数に依存した分極率は

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \sum_n |\langle n|d_i|0\rangle|^2 \left(\frac{1}{E_n - E_0 + \hbar\omega} + \frac{1}{E_n - E_0 - \hbar\omega} \right) \\ &= \sum_n \frac{2(E_n - E_0) |\langle n|d_i|0\rangle|^2}{(E_n - E_0)^2 - (\hbar\omega)^2} \end{aligned} \quad (125)$$

あるいは

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_e} \sum_n \frac{f_{n0}^i}{\omega_{n0}^2 - \omega^2} \quad (126)$$

である。 $\omega \rightarrow 0$ の極限で定常的な静電場の場合 (43) と一致する。

3.6 エネルギースケール

4章でトラップと冷却過程の議論に入る前に、以下で特徴的な原子のエネルギースケールを述べておく。 $\mu_B B \gg \mu_N B$ より、外場とスピンの相互作用は無視できる。超微細分裂 ΔE_{hfs} は $B = 0.1T$ でゼーマン・エネルギー $\mu_B B$ と同程度である。レーザー冷却では $\sim eV$ のオーダーのエネルギーで分かれている原子の準位間の遷移を利用する。この共鳴線の分裂は $L-S$ 相互作用によるもので、スピン軌道分裂 ΔE_{LS} は、水素では $\Delta E_{LS} \sim \hbar^2 e_0^2 / m_e^2 c^2 a_0^3 = \alpha_{hfs}^2 e_0^2 / a_0 \sim 10^{-3} eV$ である。ナトリウムでは2重項共鳴線の分裂は $2.1 \times 10^{-3} eV$ である。

3.7 粒子による自然放出

最後に、冷却過程において重要となる原子の、輻射による光子の吸収と誘導放出の確率について考える。励起状態の原子は輻射をして低い状態へと崩壊する。この過程は二次摂動論で原子と量子化された輻射場との相互作用を扱うことで決めることができるが、ここでは別法として、半古典論で電場を古典的に扱う。

まず、原子が光を吸収して準位 m から n に励起する場合を考える。時刻 0 で準位 m にいた原子が光を吸収して時刻 t で準位 n にいる確率は

$$P(t) = \frac{\langle n | d_i \mathcal{E}_0 | m \rangle}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_{nm} - \omega)t} - 1}{\omega_{nm} - \omega} = \frac{|\langle n | d_i \mathcal{E}_0 | m \rangle|^2}{4\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \{(\omega_{nm} - \omega)t/2\}}{(\omega_{nm} - \omega)^2} \quad (127)$$

となるが、この式は $t \rightarrow \infty$ 、つまり平衡状態か、もしくは遷移が起こるだけの十分な時間が存在すると考えると、

$$P(t) \rightarrow \frac{\pi}{2\hbar^2} t |\langle n | d_i \mathcal{E}_0 | m \rangle|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) \quad (128)$$

となるので、時刻 t で励起する確率は

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\pi}{2\hbar^2} |\langle n | d_i \mathcal{E}_0 | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m - \hbar\omega) \quad (129)$$

となる。ここで、系が等方的であるとして、

$$|\langle n | d_i \mathcal{E}_0 | m \rangle|^2 = \mathcal{E}_x^2 \frac{\sum_i |\langle n | d_i | m \rangle|^2}{3} \quad (130)$$

とすると、真空中の光のエネルギー密度 $u_\omega = \frac{\epsilon_0}{2} |\mathcal{E}_x|^2$ を用いて

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar} \frac{\sum_i |\langle n | d_i | m \rangle|^2}{3} \delta(\omega_{nm} - \omega) \cdot u_\omega = B_{mn} u_\omega \quad (131)$$

と書くことができる。ここで B_{mn} はアインシュタインの B 係数である。媒質は温度 T の平衡状態にあり、輻射場との間で平衡が成立しているとする。このとき、準位 n と m にそれぞれ N_n 、 N_m 個の粒子があるとすると、単位時間に起こる遷移の数は

$$R_{m \rightarrow n} = N_m B_{mn} u_{\omega_{nm}} \quad (132)$$

$$R_{n \rightarrow m} = N_n (B_{nm} u_{\omega_{nm}} + A_{nm}) \quad (133)$$

と置くことができる。 A_{nm} はアインシュタインの A 係数で自然放出の確率を表す。平衡であるので、 $R_{n \rightarrow m} = R_{m \rightarrow n}$ であるが、 $N_n = N_m e^{-\hbar\omega_{nm}/k_B T} < N_m$ であることに注意すると

$$u_{\omega_{nm}} = \frac{A_{nm}}{B_{mn} e^{\hbar\omega_{nm}/k_B T} - B_{nm}} \quad (134)$$

が導かれる。 $u_{\omega_{nm}} = u_\omega$ より、 $u_{\omega_{nm}}$ はプランクの公式

$$u_{\omega_{nm}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega_{nm}/k_B T} - 1)} \quad (135)$$

と一致するはずである。これより $B_{nm} = B_{mn}$ および

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \frac{\hbar\omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} B_{nm} \\ &= \frac{3\omega_{nm}^3 \sum_i |\langle n | d_i | m \rangle|^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \end{aligned} \quad (136)$$

となる。この結果は周波数 ω_{nm} で振動していて、強度が $\sum_i |\langle n|d_i|m\rangle|^2$ の平方根に等しい古典的電気双極子の減衰率と同じである。従って励起状態 n の全崩壊率は

$$\Gamma_e = \sum_m A_{nm} \quad (137)$$

で与えられる。和は初めの状態より低いエネルギーを持つすべての状態 m にわたる。

水素の $2P-1S$ 遷移に対して (75) を評価すると、 $\omega_{nm} \approx e_0^2/\hbar a_0$ 、 $|\langle n|d_i|m\rangle| \approx ea_0$ とすると、

$$\Gamma_e \approx \left(\frac{e_0^2}{\hbar c}\right) \frac{e_0^2}{\hbar a_0} \quad (138)$$

となる。自然放出の確率は原子遷移週波数に $(\alpha_{hfs})^3$ 、即ち 4×10^{-7} のオーダーの因子をかけたものになる。アルカリ原子の共鳴線では可能な終状態としては基底状態のすべての多重項である。従って崩壊確率 (75) を

$$\Gamma_e \approx \frac{2}{3} f_{res} \frac{e_0^2}{\hbar c} \frac{\hbar \omega_{res}^2}{m_e c^2} \quad (139)$$

と書ける。 $\omega_{res} = \Delta E_{res}/\hbar$ は共鳴線周波数であり、 f_{res} は励起状態から基底状態多重項への全振動子強度で 1 に近い。よって、

$$\Gamma_e \approx \frac{2}{3} \frac{e_0^2}{\hbar c} \frac{\hbar \omega_{res}^2}{m_e c^2} \quad (140)$$

となる。ナトリウムの共鳴線では $\omega_{res} = 3.2 \times 10^{15} s^{-1}$ から、崩壊率は $\Gamma_e = 6.4 \times 10^7 s^{-1}$ と評価できる。これは測定値 $\Gamma_e = 6.3 \times 10^7 s^{-1}$ によく合致する。

4 原子の捕捉と冷却

4.1 原子へのレーザー光の影響

原子をトラップしたり冷却したりする際に、輻射場(レーザー)と原子の相互作用を利用する。基底状態を g 、励起状態を e と表すと、静的な電場の下での原子の基底状態エネルギー変化 ΔE_g は(3章 39)より、

$$\Delta E_g = - \sum_e \frac{|\langle e|H'|g\rangle|^2}{E_e - E_g} = -\frac{1}{2}\alpha\mathcal{E}^2 \quad (141)$$

である。ここで、

$$\alpha = \sum_e \frac{|\langle e|\mathbf{d}\cdot\hat{\boldsymbol{\epsilon}}|g\rangle|^2}{E_e - E_g} \quad (142)$$

は原子分極率である。 $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ は電場方向の単位ベクトルである。相互作用は $\langle e|(-\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}})|g\rangle$ と $\langle g|(-\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}})|e\rangle$ でおきる。 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ は電場ベクトルである。

周波数 ω の時間に依存した電場を記述する。電場を $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega e^{-i\omega t} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\omega} e^{i\omega t}$ と書く。ここで、 $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\omega} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega^*$ である。3章では通常の摂動論を用いて、時間変化する電場によるエネルギー変化を計算したが、ここでは図4.1で示されたダイアグラムによる摂動論で導く。エネルギーへの二次の寄与は、図4.1(b)で示されたダイアグラムで表された二つの項の和である。これより、静的な場の式を一般化し、以下のエネルギーシフトを得る。

$$\begin{aligned} \Delta E_g &= \sum_e \langle g|\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega|e\rangle \frac{1}{E_g - E_e + \hbar\omega} \langle e|\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\omega}|g\rangle + \sum_e \langle g|\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\omega}|e\rangle \frac{1}{E_g - E_e - \hbar\omega} \langle e|\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega|g\rangle \\ &= \sum_e |\langle e|\mathbf{d}\cdot\hat{\boldsymbol{\epsilon}}|g\rangle|^2 \left(\frac{1}{E_g - E_e - \hbar\omega} + \frac{1}{E_g - E_e + \hbar\omega} \right) |\boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega|^2 \\ &= -\alpha(\omega)|\boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega|^2 \\ &= -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t)^2\rangle_t \end{aligned} \quad (143)$$

分極率は

$$\begin{aligned}\alpha(\omega) &= \sum_e |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2 \left(\frac{1}{E_e - E_g + \hbar\omega} + \frac{1}{E_e - E_g - \hbar\omega} \right) \\ &= \sum_e \frac{2(E_e - E_g) |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2}{(E_e - E_g)^2 - (\hbar\omega)^2}\end{aligned}\quad (144)$$

で与えられ、これは(3章62)、(3章63)式と一致している。静的な場との違いは中間エネルギー分母が、電場が有限周波数であることにより $\pm\hbar\omega$ だけシフトしていることである。

実験では、輻射の周波数は原子の共鳴周波数に近くしてあるので、共鳴以外では遷移を無視できる。分極の表式では、もっとも小さなエネルギー分母を持つ項だけ考慮すればよい。つまり、

$$\alpha(\omega) \approx \frac{|\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2}{E_e - E_g - \hbar\omega}\quad (145)$$

となる。さらに、原子は光子の自然放出により基底状態に崩壊するので、励起状態には寿命がある。この効果は現象論的に、励起状態のエネルギーに実部とともに虚部を付け加えることで考慮することができる。もし励起状態の振幅が $\exp(-iE_e t/\hbar)$ のように変化するならば、寿命 $2/\Gamma_e$ の振幅の指数的崩壊では、状態のエネルギーへの虚数の寄与は $-i\hbar\Gamma_e/2$ に等しく、分極率は

$$\alpha(\omega) \approx \frac{|\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2}{E_e - i\hbar\Gamma_e/2 - E_g - \hbar\omega}\quad (146)$$

である。輻射場に誘導された励起状態への遷移に伴う基底状態の有限寿命に対応する項として虚部を付け加え、エネルギーシフトは

$$\Delta E_g = V_g - i\hbar\Gamma_g/2\quad (147)$$

と書ける。実部はエネルギー準位のシフトで

$$V_g = -\frac{1}{2}\alpha'(\omega)\langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t\quad (148)$$

である。ここで、

$$\alpha'(\omega) \approx \frac{(E_e - E_g - \hbar\omega)|\langle e|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}}|g\rangle|^2}{(E_e - E_g - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2} \quad (149)$$

は α の実部である。さらに、レーザーの周波数 ω と原子の遷移週波数 $\omega_{eg} = (E_e - E_g)/\hbar$ との差として離調 $\delta = \omega - \omega_{eg}$ を導入すると、エネルギーシフトは

$$V_g = \frac{\hbar\Omega_R^2\delta}{\delta^2 + \Gamma_e^2/4} \quad (150)$$

で与えられる。ここで、 Ω_R は摂動の行列要素 $|\langle e|\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}_\omega|g\rangle|$ の大きさを周波数

$$\Omega_R = |\langle e|\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}_\omega|g\rangle|/\hbar \quad (151)$$

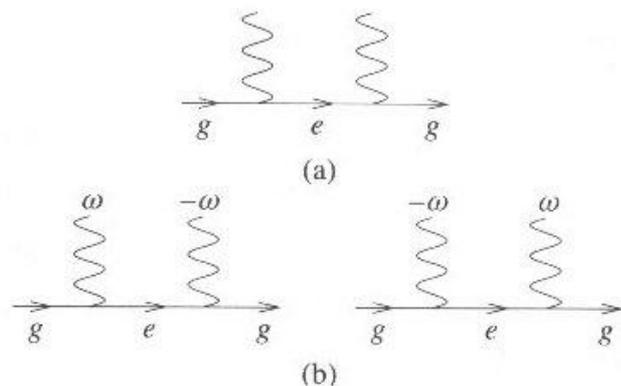
で表したもので、ラビ周波数と呼ばれる。 $\delta > 0$ で青色離調、 $\delta < 0$ で赤色離調という。基底状態から原子の損失の割合は

$$\Gamma_e = -\frac{2}{\hbar}\text{Im}\Delta E_g = \frac{1}{\hbar}\alpha''(\omega)\langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \quad (152)$$

である。ここで

$$\alpha''(\omega) \approx \frac{\hbar\Gamma_e/2}{(E_e - E_g - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2} |\langle e|\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{e}}|g\rangle|^2 \quad (153)$$

は α の虚部である。この摂動の扱いは、ボース・アインシュタイン凝縮の実験の



ように電場が十分弱いときは適切である。

図 4 . 1 : 静電場 (a) と時間変動する場 (b) の下で基底状態の原子エネルギーに対する二次摂動の寄与をダイアグラムで表した。直線は原子に波線は電場との相互作用を表す。

4.2 レーザーが原子に及ぼす力

レーザーが原子に及ぼす力は、大きく 2 つに分けることができる。ひとつは輻射圧と呼ばれ、摩擦力のような力であり、原子をレーザー冷却する際の主役を演じる。もうひとつは双極子力と呼ばれ、こちらは保存力であるため原子を冷却することはできない。しかし、原子を空間的に捕獲できるために、レーザー冷却の際、補助的に使われることがある。

双極子力を定性的に理解するには、図 4 . 2 (a) にしめすような空気中 (屈折率 n_1) にガラス玉 (屈折率 n_2) が浮かんでいるようなモデルを考える。いうまでもなく、ガラス玉が原子に対応する。このとき、ガラス玉に一樣な強度のレーザー光を照射すると、レーザー光はガラス玉によりその進行方向を変える (図 4 . 2 (b))。なお図 4 . 2 (b) では、簡単のためにガラス玉の中心から等しい距離だけ離れた光路のみを描いている。

屈折によりレーザー光の進行方向が変化するという事は、光子運動量の向きが変化することであり、運動量の保存を満足させるためには、その反作用としてガラス玉の運動量に変化しなければならない。即ち、ガラス玉は図 4 . 2 (b) 中の白抜きの矢印のような力 (運動量変化) を受ける。しかし、光の強度が一定であるためその力は互いに相殺し、全体としてはガラス玉はレーザーから力を受けない。図から判断すると、レーザーの進行方向の力が残るが。これは小さいのでここでは考えない。

双極子力が意味を持つのは、図 4 . 2 (c) のように、光の強度が空間的に変化している場合である。図では、ガラス玉の上部のほうが光の強度が

強いとしている。すると、上下の光から受ける力が相殺せず、結果としてガラス玉は上向きの力、即ち光の強度が強くなる方向への力を受けることになる。これは屈折率の関係が $n_1 < n_2$ であることに対応する。即ち、図の屈折率の関係からすると、レーザー光の周波数が原子の共鳴周波数よりも低い領域に対応する。一方、図 4.2 (a) の解釈として、溶液中に浮かんだ中空球と考えても良い。この場合は、屈折率の関係が $n_1 > n_2$ となり、レーザー光の周波数が原子の共鳴周波数よりも高い領域に対応する。そしてこの場合、光の屈折方向は図 4.2 (d) に示される向きとなり、溶液中の中空球は光の強度の弱くなる方向に力を受けることになる。

以上の定性的な双極子力の性質をまとめると、双極子力は光の強度が空間的に変化しているときに働き、原子の共鳴周波数の前後でその向きを変えることになる。たとえば普通のレーザー光は、その光軸上で光の強度が最大であり、軸から離れるにつれて光の強度は弱くなる。従って、レーザーの周波数を原子の共鳴周波数よりも低く設定した場合は、原子は光の強度の強くなる方向、即ち光軸方向に力を受け、逆にレーザー周波数よりも高く設定した場合は、原子は光軸から離れる方向に力を受けることになる。

もし時間平均した電場が位置とともに変化しているとすると、場によるエネルギーのシフトは力

$$\mathbf{F}_{dipole} = -\nabla V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \alpha'(\omega) \nabla \langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \quad (154)$$

をうむ。この式から分かるように、力の大きさは同じ大きさの静電場よりも ω_{eg}/Γ_e のオーダーだけ大きい。この総局視力により、トラップの中心の原子損失を減らしたり、トラップ中心は青色に強く離調したレーザーを通過させることで斥力的な寄与をさせ、スピン反転が起こる危険な磁場領域への侵入を阻止することができた。

共鳴での力の符号の変化は、電場の影響の下で調和ポテンシャル中を運動する電子の古典的描像を用いて理解できる。原子的双極子モーメント $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ の運動方程式は

$$\frac{d^2 \mathbf{d}}{dt^2} + \omega_0^2 \mathbf{d} = \frac{e^2}{m_e} \mathcal{E} \quad (155)$$

である。 \mathbf{r} は電子の座標、 ω_0 波調和運動の周波数である。時間的に $\exp(-i\omega t)$ で振動する電場に対して

$$(-\omega^2 + \omega_0^2) \mathbf{d} = \frac{e^2}{m_e} \mathcal{E} \quad (156)$$

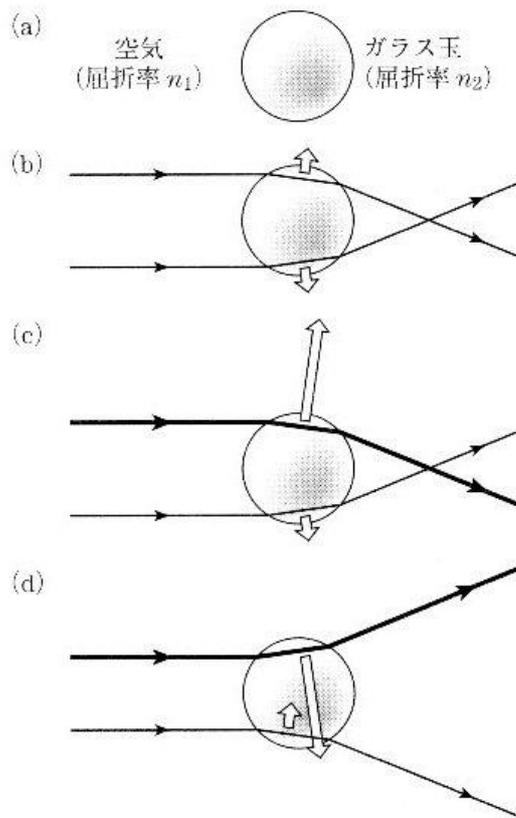
を得る。これから分極率、即ち双極子モーメントを電場で割った量は

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (157)$$

であることが分かる。これは ω_0 を超える周波数 ω に対して負になる。この結果と量子力学の (3章 64) 式を比べると、ひとつの遷移に対して振動子強度が 1 をもつことに対応することが分かる。

輻射圧は、講師の吸収や放出過程で光子の運動量が原子に与えられたり取り去られたりすることによる。基底状態の原子の光子吸収の確率は基底状態の励起確率に等しく、(12) で与えられる。従って、もし輻射場がベクトル q の進行波であるならば、吸収過程による原子へのすべての力は

$$\mathbf{F}_{rad} = \hbar q \Gamma_e \quad (158)$$



である。

図 4 . 2 : 双極子力の直感的な説明。ガラス玉 (原子) により光が屈折し、その反作用としてガラス玉は力を受ける。

4.3 ドップラー冷却

同じ周波数 ω と同じ強度を持つ二つの対向するレーザー光のもとにある原子を考える。このとき、周波数 ω は励起状態 $|e\rangle$ と基底状態 $|g\rangle$ 間の原子遷移週波数 ω_{eg} より少しだけ小さく調整する。レーザー光の向きを z 軸方向と考えて、輻射圧による摩擦力を評価しよう。このとき輻射場は十分に弱く、吸収は摂動論で計算できると仮定する。基底状態からの原子の損失の割合は

$$\Gamma_g = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \Delta E_g = \frac{1}{\hbar} \alpha''(\omega) \langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle_t \quad (159)$$

である。 $\alpha''(\omega)$ は

$$\alpha''(\omega) \approx \frac{\hbar \Gamma_e / 2}{(E_e - E_g - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_e / 2)^2} |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2 \quad (160)$$

である。これらから、ひとつの原子が片方のビームから光子を吸収する変化率が

$$\frac{dN_{ph}}{dt} = CL(\omega) \quad (161)$$

で与えられる。ここで

$$C = \frac{\pi}{\hbar^2} |\langle e | \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}} | g \rangle|^2 \langle \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)^2 \rangle \quad (162)$$

であり、

$$L(\omega) = \frac{\Gamma_e / 2\pi}{(\omega - \omega_{eg})^2 + (\Gamma_e / 2)^2} \quad (163)$$

である。 $L(\omega)$ は ω で積分すると 1 になるように規格化されている。1 つのレーザー光の存在下で基底状態の原子の寿命は $1/CL(\omega)$ である。静止している原子は左右で同じだけ光子を吸収するので、全運動量変化は平均してキャンセルする。では、速度 v_z で右に動く原子ではどうか。原子の静止座標系で右へ動く光子の周波数はドップラー効果により減少する。この周波数は $\omega - v_z q$ で与えられる。 $q = \omega/c$ は光子の波数である。周波数は、静止原子に対するときよりさらに原子共鳴から離れ、その結果、右へ動く光子の吸収率は減少、近似的に

$$\frac{dN_{right}}{dt} = CL(\omega - v_z q) \quad (164)$$

で与えられる。左へ動く光子にとっては話は逆になり、静止座標系で見た光子の周波数は $\omega + v_z q$ に増加し、光子の吸収は増加、

$$\frac{dN_{left}}{dt} = CL(\omega + v_z q) \quad (165)$$

となる。光子の吸収は光子の進行方向に対して原子へ運動量 $\hbar q$ の以降を伴うので、レーザー光による光子の吸収は原子に摩擦力を及ぼす。原子への運動量以降の正味の割合は

$$\frac{dp_z}{dt} = -\gamma v_z \quad (166)$$

で与えられる。摩擦係数 γ は

$$\gamma = \frac{\hbar q C}{v_z} [L(\omega + v_z q) - L(\omega - v_z q)] \simeq 2\hbar q^2 C \frac{dL(\omega)}{d\omega} \quad (167)$$

で定義される。ここで原子は十分にゆっくりと動き、ドップラー・シフトは幅や離調の大きいほうよりも小さいと仮定した。原理的にはこの摩擦力により原子の冷却が可能だが、実験的制約があり、レーザー冷却ができる条件をまとめると次のようになる。

光の吸収・放出(放出)サイクルが早い。

冷却サイクルが閉じている、あるいは少数のレーザーで閉じることができる。

目的とする周波数帯に使いやすいレーザーが存在する。

ここでは、 ^{87}Rb の D_2 線を例にとって考えてみる。冷却サイクルは $5S_{1/2}(F=2) \rightarrow 5P_{3/2}(F'=3)$ の電気双極子許容遷移により形成される。原子による運動量損失率を決める特徴的時間は

$$\frac{1}{\tau_{fric}} = -\frac{1}{p_z} \frac{dp_z}{dt} = \frac{\gamma}{m} \quad (168)$$

で与えられるが、この冷却サイクルの周期はほぼ自然放出の寿命 (約 $100ns$) で、これは の条件を満たしている。この原子の準位には $5P_{3/2}(F' = 3)$ のすぐ近くに超微細構造準位 $5P_{3/2}(F' = 2)$ があり、この準位にもある確率で原子は励起される。 $5P_{3/2}(F' = 2)$ からは $5S_{1/2}(F = 1)$ に落ち込む原子があり、その結果、冷却サイクルは閉じなくなる。この問題は、リポンプ光と呼ばれる $5S_{1/2}(F = 1) \rightarrow 5P_{3/2}(F' = 2)$ 遷移週波数近辺のレーザーを用い、 $5S_{1/2}(F = 1)$ の原子を再び冷却サイクル ($5S_{1/2}(F = 2)$) に戻すことで解決できる (条件)。さらに *Rb* のばあい、冷却工、リポンプ光とも $780nm$ 帯の半導体レーザーあるいはチタンサファイアレーザーにより得ることができるため、 の条件も満たしている。*Rb* で考えてきたが、一般にアルカリ金属原子はレーザー冷却するのに適した系である。

上に記述した状況を実現したとき、期待される最低限し運動エネルギーを評価しよう。原子による光子の吸収もまた、摩擦力を生じ原子を暖める。静止した原子は、どちらのビームからも等しく光子を吸収することが可能で、さらに、吸収の事象は互いに相関していない。よって、原子の運動量はランダム歩行になり、運動量の平均二乗の変化率である拡散係数は

$$\left. \frac{dp_z^2}{dt} \right|_{abs} = 2CL(\omega)(\hbar q)^2 \quad (169)$$

ここで、単位時間に吸収する光子の総数

$$\frac{dN_{ph}}{dt} = 2CL(\omega) \quad (170)$$

である。原子が励起から戻るときの光子の放出もランダム歩行に寄与する。この効果の大きさは、こういった放出パターンの仮定をとるかに依る。一次元的な問題で、光子が常にレーザー光の方向に放出されると仮定すると、原子の運動量に対するステップ幅は $\hbar q$ であり、放出された光子の総数は吸収された数に等しい。このときは運動量の平均二乗の変化率は吸収のときと全く同じなので

$$\left. \frac{dp_z^2}{dt} \right|_{em} = \left. \frac{dp_z^2}{dt} \right|_{abs} \quad (171)$$

である。光子の吸収と放出による全運動量拡散係数 D_p は

$$D_p = \left. \frac{d\overline{p_z^2}}{dt} \right|_{heat} = 4CL(\omega)(\hbar q)^2 \quad (172)$$

である。定常状態での原子の運動エネルギーは (32) と (26) と (28) からきまり、

$$\overline{p_z^2} = \frac{1}{2} D_p \tau_{fric} \quad (173)$$

を得る。これより、平均運動エネルギーと z 方向の原子に関連する温度が導け、

$$m\overline{v_z^2} = k_B T = \hbar L(\omega) \left(\frac{dL(\omega)}{d\omega} \right)^{-1} \quad (174)$$

となる。よって、ドップラー冷却で到達できる最低温度はこの式を ω について最小化すれば得られ、

$$k_B T = \frac{\hbar \Gamma_e}{2} \quad (175)$$

である。光子放出について別の仮定を採用すると、最低温度はこの結果と数因子異なる。また、離調について言うと、最低温度は $\delta = -\Gamma_e/2$ で得られ、これは赤色離調に対応する。上の議論ではひとつの速度成分に対して冷却がどう達成されるかを考えたが、三対の互いに対向するレーザー光を用いると、速度の3成分すべてが冷却される。

例として、ナトリウム原子について、レーザー冷却で達成できる最低温度を評価すると、幅 Γ_e は $480\mu K$ の温度に対応するので、ドップラー冷却で得られる最低温度は約 $280\mu K$ である。

5 まとめ

4章の結果から、このドップラー冷却では、自然放出過程が揺らぎを増大させるために、冷却光の周波数を原子の共鳴周波数に一致させる時計の温度が上昇するという理由から、冷却光の周波数が共鳴周波数よりも $\hbar\Gamma_e/2$ だけ低いばあいに反跳限界温度まで冷却できることが分かった。この反跳限界温度は、*He* で $2.0\mu K$ 、*Na* で $1.2\mu K$ 、*Rb* で $180nK$ である。しかし、実験では反跳限界温度を超える温度まで冷却できるようになっている。今後の課題として、これらの冷却方法や、ボーズ凝縮帯の微視的な理論の研究がある。また、それらを深く理解するために、散乱理論も詳しく取り入れる必要があるだろう。

参考文献

- [1] ペシツク・スミス 共著 町田一成 訳 ボーズ・アインシュタイン凝縮 吉岡書店
- [2] 久我隆弘 レーザー冷却とボーズ凝縮 岩波書店
- [3] 猪木慶治・川合光 量子力学
- [4]<http://maildbs.c.u-tokyo.ac.jp/torii/thesis/doctor/pdf/>
- [5]<http://www.bk.tsukuba.ac.jp/hattori/pdf/>