

ボース・アインシュタイン凝縮  
—蒸発冷却—

理学部 物理学科  
陶山優月

## 概要

本文では蒸発冷却法について概説し、後半では冷却過程で起こる蒸発以外の粒子の損失機構を考察する。

## 目次

<b>1</b>	<b>序論</b>	<b>2</b>
1.1	ボース・アインシュタイン凝縮とは	2
1.2	BEC の条件	2
1.3	歴史	5
<b>2</b>	<b>BEC の実現法</b>	<b>6</b>
2.1	冷却方法	6
2.1.1	レーザー冷却	6
2.1.2	蒸発冷却	7
2.2	トラップ方法	7
2.2.1	磁気トラップ	7
2.2.2	光学トラップ	8
2.2.3	磁気光学トラップ	9
<b>3</b>	<b>蒸発冷却</b>	<b>10</b>
3.1	原理	10
3.2	簡単なモデル	11
3.3	実験例	13
<b>4</b>	<b>原子間の相互作用</b>	<b>16</b>
4.1	散乱の一般論	16
4.2	有効相互作用	19
4.3	非弾性衝突	22
4.3.1	スピン交換過程	24
4.3.2	双極子過程	26
4.3.3	三体過程	28
<b>5</b>	<b>まとめ</b>	<b>30</b>
<b>A</b>	<b>アルカリ原子の超微細構造とゼーマン分裂</b>	<b>31</b>
A.1	アルカリ原子の超微細構造	31
A.2	超微細構造の結合定数	31
A.3	超微細構造のゼーマン分裂	33

# 1 序論

## 1.1 ボース・アインシュタイン凝縮とは

ボース・アインシュタイン統計に従う粒子(ボソン)は、一つの状態に何個でも粒子を詰めることができるので、ある温度以下になると巨視的な数の粒子が最低エネルギー状態を占める。この現象をボース・アインシュタイン凝縮(BEC)という。これは今から80年以上前にインドの物理学者ボース(S.N.Bose,1894~1974)とアインシュタイン(A.Einstein,1879~1955)によって理論的に導かれた。

ボース・アインシュタイン凝縮は相互作用を必要としない凝縮である。純粋に原子気体の量子統計性のみによって凝縮が起こる。室温付近では原子の熱的ドブロイ波長が短いため、各原子は「粒子」として互いに独立に振舞う。温度を下げて行くと、熱的ドブロイ波長が次第に長くなり、やがて平均原子間距離と同程度になる。波動関数が重なり合い、ボソンならば全体の波動関数は量子統計性の要請より対称でなければならないので、すべての原子が基底状態に集まり凝縮が起こる。

## 1.2 BECの条件

この節では数式を使ってボース・アインシュタイン凝縮を記述する。

相互作用をしない理想ボース粒子系を考える。系の1粒子シュレディンガー方程式の定常解を $\phi_i(\mathbf{r})$ とし、その固有エネルギーを $\epsilon_i$ とする。系の全エネルギーは

$$E = \sum_{i=0}^{\infty} n_i \epsilon_i \quad (1.1)$$

で、 $n_i$ は1粒子状態 $\phi_i(\mathbf{r})$ を占める粒子数である。全粒子数は

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} n_i \quad (1.2)$$

である。大分配関数は

$$\begin{aligned} Z_G &= \sum_{n_0=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots e^{-\beta \sum_i (\epsilon_i - \mu) n_i} \\ &= \prod_{i=0}^{\infty} \left( \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i} \right) \\ &= \prod_{i=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}} \end{aligned} \quad (1.3)$$

である。全粒子数の期待値は

$$\langle N \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} \ln Z_G = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} = \sum_i \langle n_i \rangle \quad (1.4)$$

であり、 $\langle n_i \rangle = f(\epsilon_i)$  はボース・アインシュタイン分布関数である。粒子数  $n_i$  は正でなければならないので  $\mu \leq 0$  となる。系が十分大きければエネルギー分布は連続であると思わせるので

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad (1.5)$$

となる。ここで  $D(\epsilon)$  は系の状態密度である。

状態密度はボース粒子を閉じ込めているポテンシャルの形による。3次元箱型ポテンシャルなら状態密度は

$$D(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad (1.6)$$

である。異方的調和ポテンシャル

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \quad (1.7)$$

ならば、状態密度は

$$D(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \quad (1.8)$$

である。一般に状態密度はエネルギーのべき乗で書けるので

$$D(\epsilon) = C_\alpha \epsilon^{\alpha-1} \quad (1.9)$$

と書けて、 $C_\alpha$  は定数である。3次元箱型ポテンシャルなら  $\alpha = 3/2$  であり、異方的調和ポテンシャルなら  $\alpha = 3$  である。 $\alpha$  は古典的な自由度の数の半分である。

励起状態の粒子数は

$$N_{\text{ex}} = \int_0^\infty D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad (1.10)$$

である。この値は  $\mu = 0$  のとき最大になる。転移温度  $T_c$  は全粒子数が励起状態にあるという条件から決まる。よって

$$N = N_{\text{ex}}(T_c, \mu = 0) = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{e^{\epsilon/k_B T_c} - 1} \quad (1.11)$$

である。 $e^{\epsilon/k_B T_c} = x$  と変数変換すると

$$N = C_\alpha (k_B T_c)^\alpha \int_0^\infty dx \frac{x^{\alpha-1}}{e^x - 1} = C_\alpha \Gamma(\alpha) \zeta(\alpha) (k_B T_c)^\alpha \quad (1.12)$$

となる。ここで  $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-x}$ ,  $\zeta(\alpha) = \sum_{n=1}^\infty n^{-\alpha}$  を用いた。転移温度  $T_c$  は

$$T_c = \frac{N^{1/\alpha}}{k_B [C_\alpha \Gamma(\alpha) \zeta(\alpha)]^{1/\alpha}} \quad (1.13)$$

である。3次元箱型ポテンシャルの場合、 $\alpha = 3/2$  なので  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$  を代入すると

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[ \frac{n}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \quad (1.14)$$

となる。また、異方的調和ポテンシャルならば  $\Gamma(3) = 2$  より、

$$T_c = \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} \left[ \frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \quad (1.15)$$

である。ここで  $\bar{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$  である。それぞれの場合の粒子数と温度の関係を図1に示す。

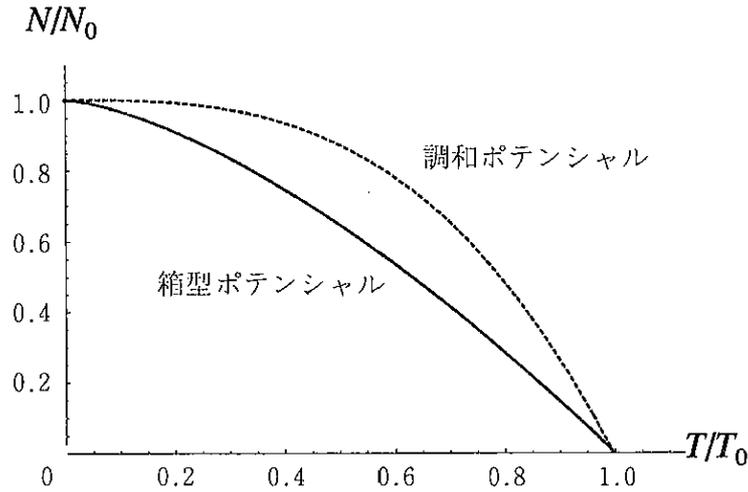


図 1: ボース・アインシュタイン凝縮相にある粒子数の温度依存性

位相空間密度  $\varpi$  を導入すると便利である。これは、熱的ドブロイ波長の体積中の粒子数として定義される。熱的ドブロイ波長は

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \quad (1.16)$$

であるので、 $\varpi$  は

$$\varpi = n\lambda_T = n \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} \quad (1.17)$$

である。すると、BEC が起こる条件は

$$\varpi = \zeta(3/2) \approx 2.612 \quad (1.18)$$

となる。

### 1.3 歴史

量子現象が巨視的に現れるという点で、ボース・アインシュタイン凝縮は大変興味深い現象である。また、BECが観測できれば量子力学の理論の正しさの検証にもなる。それ故、実際にボース・アインシュタイン凝縮体を作ることはとても有益である。

凝縮系でのボース・アインシュタイン凝縮は観測されていたが、気体でのBECは長い間実現できなかった。それは、物質を極低温まで冷やすと必ず液体か固体になってしまうからである。希薄気体のBECは1995年になってようやく実現した。この背後にはレーザー冷却法の発展や磁気トラップなどのトラップ方法の開発があった。1997年度のノーベル物理学賞は、中性原子の冷却と捕獲のメカニズムの理解と実験技術の開発に大きく貢献した3人に与えられた。そして、2001年には最初にBECを実現した3氏　コーネル (E.Cornell)、ワイマン (C.Wieman)、ケターレ (W.Ketterle)　にノーベル物理学賞が与えられた。

希薄原子気体のBECは、1995年に $^{87}\text{Rb}$ 、 $^{23}\text{Na}$ 、 $^7\text{Li}$ について成功し、1998年に水素原子、2001年に準安定 $^4\text{He}$ の凝縮が実現した。その後、 $^{41}\text{K}$ 、 $^{85}\text{Rb}$ などのBECも相次いで実現している。

## 2 BECの実現法

ボース・アインシュタイン凝縮を実現するためには、式(1.17)を見ると分かるように、温度を下げるか原子密度を上げる必要がある。しかしながら、中性原子気体は液化や固化を防ぐため希薄でなければならない。実際の実験では、ボース・アインシュタイン凝縮した原子雲の中心の粒子密度は大体  $10^{13} - 10^{15} \text{cm}^{-3}$  である。これに対し、室温の大気圧下での空気分子密度は約  $10^{19} \text{cm}^{-3}$  であり、液体や固体の原子密度は  $10^{22} \text{cm}^{-3}$  であるので、ボース・アインシュタイン凝縮した気体が如何に低密度であるかが分かる。このような低密度の系でBECを観測するためには温度は  $10^{-5} \text{K}$  以下である必要がある。

如何にして原子気体を極低温に冷やすかが焦点になる。それを成功に導いたのがレーザー冷却である。しかし、レーザー冷却法だけでは凝縮に十分な高密度と温度を作り出すことはできない。そこで、冷却の最終段階では蒸発冷却法が使われる。

原子気体を冷却する際、原子を捕獲することが重要である。レーザー冷却の場合、原子に働く重力を打ち消す必要がある。重力が働くと原子はレーザーが当たる場所から離れてしまうからである。一方蒸発冷却では、系の平均エネルギーより高いエネルギーを持つ原子を追い出すことにより系全体のエネルギーを下げるので、原子をトラップする必要がある。

この章では、いくつかの冷却方法とトラップ方法を簡単に紹介する。

### 2.1 冷却方法

#### 2.1.1 レーザー冷却

レーザー光とはモードがそろった光子の集まりのことである。単色性、指向性、収束性などに優れている。光の強度は極めて強いので、「レーザーで物を焼く」という加熱のイメージが強い。このレーザーでどうして原子を冷やすことが出来るのだろうかと思ふか不思議に思ふかもしれない。その原理は以下の通りである。

原子に対向してレーザー光を照射すると、原子は光子を吸収してわずかに減速する。その後、原子は自然放出によって光子を出す。その確立は等方的なので、放出時の運動量変化の平均はゼロとなる。すなわち、この吸収放出過程を繰り返せば原子は運動量を失い続けるので減速される。温度は速度の二乗に比例するので、つまり原子は冷却される。

実際には、原子の共鳴周波数より少し低い周波数のレーザーを用いる。原子の運動方向に平行に正負両方向からレーザー光を当てる。対向する方向から来るレーザーは、原子から見るとドップラー効果により周波数が高くなり、共鳴周波数に近づく。したがってこの方向の光子の吸収確率が上がる。反対に、原子にとって、原子と同じ方向に動くレーザーは周波数が実際のより低くなるので光子の吸収確

率も下がる。つまり、原子は同じ方向に運動するレーザーよりも対向するレーザーの光子をより多く吸収しその反跳で冷却される。これを「ドップラー冷却」という。実験では6方向からレーザーを照射するのでどの方向に動いている原子も冷却される。

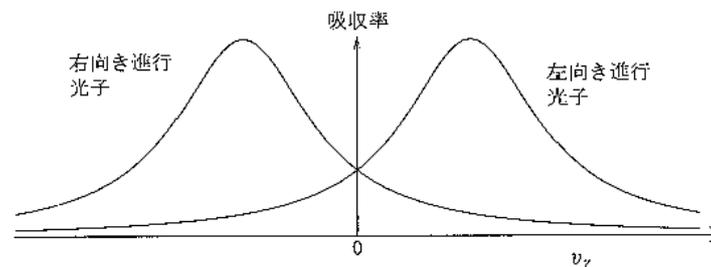


図 2: 2つの赤色離調レーザーからの光子の吸収率を原子速度の関数として示した。

### 2.1.2 蒸発冷却

レーザー冷却だけではボース・アインシュタイン凝縮の実現は不可能である。なぜなら、隣の原子が放出した光子を再吸収することにより原子間斥力が働くため密度を高くすることは出来ない。そこで、実験の最終段階として蒸発冷却が用いられる。

蒸発冷却の原理は、熱いお湯が冷めるのと同じである。運動エネルギーの高い水分子ほど高い確率で蒸発し、残りの分子は弾性衝突を繰り返すことにより低い熱平衡状態に達することが出来る。原子はトラップされているとして、トラップの側面の高いところに「穴」を作り、穴の位置に等しいエネルギーの原子を逃がして、系全体のエネルギーを下げる。

3章で蒸発冷却について述べる。

## 2.2 トラップ方法

### 2.2.1 磁気トラップ

磁気トラップは中性原子のゼーマン効果を利用する。磁場の極小点のみ作ることが出来るので、低磁場シーカー（負の磁気モーメントを持つ状態）のみトラップされ得る。

磁場配置として、磁場の極小値がゼロになる簡単なものは四重極磁場である。これは、一对の反対向きのヘルムホルツコイルを用いて作られる。極小点近傍では磁場は距離に対し線形である。四重極トラップの重大な欠陥はゼロ点付近に穴が開いてしまうことである。原子は運動をしているので、時間変動する磁場を感じて

別の状態へ遷移する可能性がある。もし低磁場シーカーの原子が高磁場シーカーの状態に遷移すればトラップから弾き出される。これを回避する方法がいくつか考え出されてきた。一つは、振動するバイアス磁場を印加して穴の位置を移動させる方法である（TOPトラップ）。もう一つは、磁場のゼロ点領域にレーザーを照射して光子と原子の反発で原子を穴から遠ざけるものである。また、別の方法として極小値がゼロではない磁場配置を考えて、穴自体を無くしてしまうものもある（ヨッフエ・プリチャードトラップや四つ葉トラップ）。

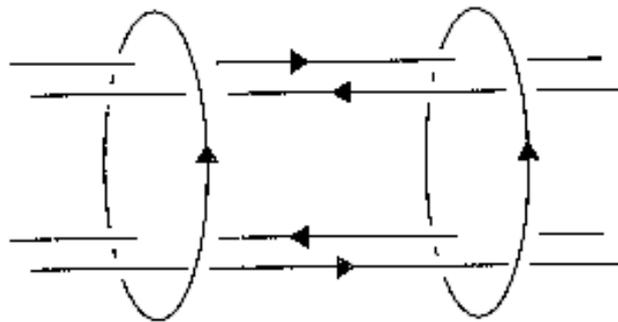


図 3: 磁場に対してヨッフエ・プリチャード配置を作り出す電流

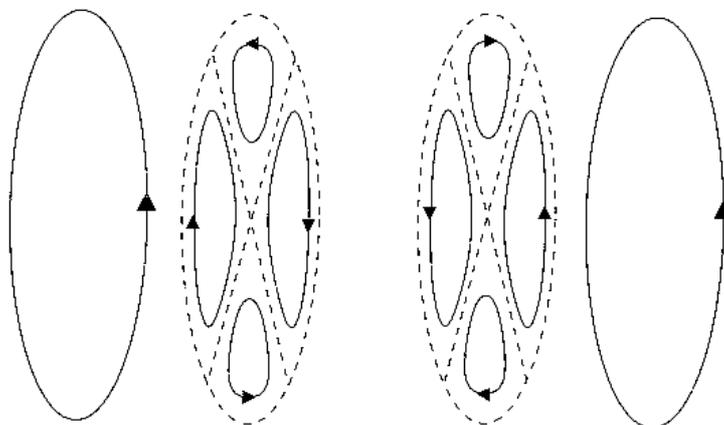


図 4: 四つ葉トラップでの電流の模式

### 2.2.2 光学トラップ

光学トラップは、レーザー場中で原子が受ける双極子力を利用している。外部の振動電場（レーザー場）により、原子に電気双極子モーメントが誘起される。そして、この誘起双極子が電場内に置かれているときに働く力が双極子力である。双

極子力の向きは共鳴周波数の前後で変わる。レーザー周波数が共鳴周波数よりも低い場合（赤方離調）原子はレーザー強度の強くなる方向に力を受け、逆の場合（青方離調）は弱くなる方向に力を受ける。

レーザーを集光すると空間的に強度が最大になる輻射場を作ることができる。光の周波数を赤方離調すると、原子は空間的に極小を持つポテンシャルを感じるのので、原子を閉じ込めることができる。

光学トラップの利点は、基底状態のアルカリ原子が感じるポテンシャルが磁気副準位によらないことである。この点は、原子の磁気副準位を利用する磁気トラップと対称的である。

### 2.2.3 磁気光学トラップ

磁気光学トラップ (MOT) は磁場と輻射をうまく組み合わせたトラップである。円偏光したレーザーを用いるのがポイントである。右向きビーム ( $\sigma_+$ ) は原子の磁気量子数を 1 増やす。反対に、左向きビーム ( $\sigma_-$ ) は磁気量子数を 1 減らす。例えば、全角運動量がゼロの基底状態の原子を考える。 $\sigma_+$  は原子を  $m = +1$  状態に励起させ、 $\sigma_-$  は  $m = -1$  状態に励起させる。レーザー周波数を赤方離調させて原子の運動方向 ( $z$  軸) に対し正負両方向から照射する。 $z = 0$  では 2 つのレーザー光の吸収率が等しい。原子が  $z > 0$  の方へ動くと、向かってくる  $\sigma_-$  光子の吸収率が増加し、反対の  $\sigma_+$  光子の吸収率は減少する。従って原子に対して原点へ向かう復元力が働く。同様の議論が  $z < 0$  に対しても成り立つ。6 方向からレーザー光をかければ原子はトラップされる。

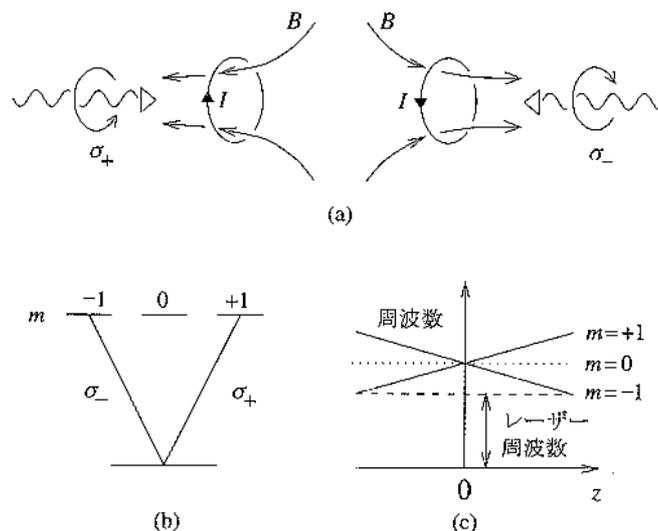


図 5: (a) 磁気光学トラップ、(b) 問題にする遷移、(c) 空間変化する磁場の原子遷移への影響

### 3 蒸発冷却

蒸発冷却は H.F.Hess によって提案された [5]。彼の提案ではスピン分極水素を磁気トラップに閉じ込めて、蒸発冷却と磁気圧縮を同時に行なうことで、温度が  $30\mu\text{K}$  密度が  $10^{-14}\text{cm}^{-3}$  の状態まで到達できる。この章では簡単なモデルを考えて蒸発冷却の温度低下と粒子数減少との関係性を評価する。最後に蒸発冷却を用いた実験を紹介する。

#### 3.1 原理

前章で述べたように、蒸発冷却はエネルギーの高い粒子を系から逃がすことにより系全体のエネルギーを下げる。実験では磁気トラップにラジオ周波数 (rf) の輻射を当ててトラップの側面に「穴」を開ける。rf 波は原子スピンの向きを変えるので、低磁場シーカーは高磁場シーカーに変わりトラップされ得なくなる。

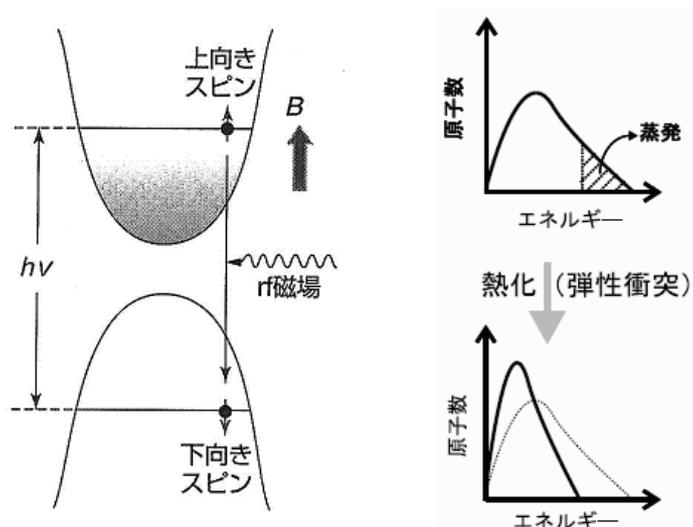


図 6: 蒸発冷却の原理。rf 磁場を照射すると、スピン反転した原子はトラップから追い出される。その後、熱平衡状態に戻ると、系全体の温度は前よりも下がっている。

簡単な例として平均エネルギー  $\bar{\epsilon}$  を持つ原子気体を考える。蒸発粒子の平均エネルギーを  $(1 + \beta)\bar{\epsilon}$  とし粒子数変化を  $dN$  とすると、蒸発粒子によって取り去られるエネルギーは  $(1 + \beta)\bar{\epsilon}dN$  である。粒子数損失に対しては  $dN$  は負である。エネルギー保存則からトラップに留まっている粒子のエネルギーは  $E + (1 + \beta)\bar{\epsilon}dN$  であり、粒子数は  $N + dN$  である。蒸発後のトラップ中の原子当たりの平均エネルギーは

$$\bar{\epsilon} + d\bar{\epsilon} = \frac{E + (1 + \beta)\bar{\epsilon}dN}{N + dN} \quad (3.1)$$

すなわち

$$\frac{d \ln \bar{\epsilon}}{d \ln N} = \beta \quad (3.2)$$

である。つまり、トラップ中の気体当たりの平均エネルギーは粒子数の冪で減少する。平均エネルギーは  $k_B T$  のオーダーである (比例係数はトラップポテンシャルに依存する)。従って

$$\frac{d \ln T}{d \ln N} = \beta \quad (3.3)$$

を得る。この結果は、蒸発粒子のエネルギーが高いほど ( $\beta$  が大きいほど)、粒子数の損失に対して温度は急激に低下することを表している。

しかし、エネルギー閾値  $\epsilon_{ev}$  をあまり高く設定することは出来ない。なぜなら、蒸発効率は弾性衝突の割合に依存し、エネルギー閾値が高い程そこに散乱される確率が低くなり、蒸発効率が下がるからである。閾値は蒸発粒子当たりの最大冷却を達成できるように選ばなければならない。

### 3.2 簡単なモデル

以上は蒸発による損失のみを考えた場合の議論であった。実際は残りの粒子を冷却しないで粒子が失われる別の機構が存在する。その一つは、外部気体原子との衝突である。第二に、2つの原子が衝突して別の超微細状態へ散乱される非弾性衝突がある。4章で詳しく述べるが、2体相互作用の主要部  $S_1 \cdot S_2$  を通して起こる遷移がある。この過程の損失率はあまりに大きいので、実験ではこの過程で崩壊しない状態を用いる。例えば、二重分極状態  $|F = I + 1/2, m_F = F\rangle$  や正の核磁気モーメントを持つ原子なら最大限伸びた状態  $|F = I - 1/2, m_F = -F\rangle$  である。しかし、これらの状態でも電子スピン間の磁気双極子 - 双極子相互作用を通して非弾性散乱される。水素原子のボース・アインシュタイン凝縮の実験では  $H \uparrow$  が磁気トラップに捕獲されるが、次節で述べるように双極子損失は原子損失や加熱の主な機構となる。アルカリ原子の実験では、双極子損失はそれほど重要ではなくて、2原子分子形成が損失の主な機構になる。2つの原子は直接分子を作ることには出来ない。しかし、三体衝突において第3の原子が束縛エネルギーをもらうことで分子形成が起こる。

どちらの機構が重要であるかにより損失率は異なる形で密度に依る。外部気体原子による散乱では、冷却される原子の密度には依らずに背後にある気体の密度に比例する。双極子損失では  $n$  に比例し3体損失では  $n^2$  に比例する。

簡単なモデルを使って蒸発で到達できる冷却を評価する。粒子が蒸発によってトラップから除かれる割合を

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{ev} = -\frac{N}{\tau_{ev}} \quad (3.4)$$

とし、他のプロセスによる粒子損失の割合を

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{loss}} = -\frac{N}{\tau_{\text{loss}}} \quad (3.5)$$

とする。 $\tau_{\text{ev}}$  と  $\tau_{\text{loss}}$  はこの2つのタイプの機構の崩壊時間である。蒸発以外のプロセスによって失われる粒子の平均エネルギーは気体の粒子の平均エネルギーに等しいと仮定し、非弾性プロセスによる気体の加熱を無視すると、蒸発による粒子の損失のみがトラップ中の粒子の平均エネルギーを変える。蒸発による粒子損失の割合は

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{ev}} / \left( \left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{ev}} + \left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{loss}} \right) = \frac{1/\tau_{\text{ev}}}{1/\tau_{\text{ev}} + 1/\tau_{\text{loss}}} = \frac{\tau_{\text{loss}}}{\tau_{\text{loss}} + \tau_{\text{ev}}} \quad (3.6)$$

である。従って温度変化はこれに式 (3.3) をかけることで得られる。すなわち

$$\frac{d \ln T}{d \ln N} = \beta \frac{\tau_{\text{loss}}}{\tau_{\text{loss}} + \tau_{\text{ev}}} \equiv \beta' \quad (3.7)$$

である。

$dN$  が一定の時の  $dT$  が最大となるような蒸発粒子の平均エネルギーを見積もる。蒸発過程をモデル化するために、ある閾値  $\epsilon_{\text{ev}}$  より大きなエネルギーを持った原子は系から失われると仮定する。蒸発率は原子が  $\epsilon_{\text{ev}}$  より高いエネルギー状態へ散乱される割合に等しい。そうした割合は詳細釣り合いの原理を用いて計算することができる。熱平衡の状態では高エネルギー状態へ移行する割合は高エネルギー状態にある粒子が別の状態へ散乱される割合と同じである。 $\epsilon_{\text{ev}}$  より高いエネルギーを持つ原子が平衡気体において衝突する割合は

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{coll}} = \int d\mathbf{r} \int_{\epsilon_p > \epsilon_{\text{ev}}} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}'} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \mathbf{v}_{\mathbf{p}'}| \sigma \quad (3.8)$$

である。 $\sigma$  は全散乱断面積で、粒子の運動量に依存しないと仮定する。分布関数  $f_{\mathbf{p}}$  は古典的マックスウェル・ボルツマン則

$$f_{\mathbf{p}} = e^{-(p^2/2m + V - \mu)/k_B T} \quad (3.9)$$

で与えられる。 $\epsilon_{\text{ev}} \gg kT$  では速度差を  $v_p$  で置き換えられる。 $\mathbf{p}'$  について積分すると、ある点での粒子の全密度が得られる。 $\epsilon_{\text{ev}} \gg k_B T$  の時の主要項は

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{ev}} = -\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{coll}} = -N n(0) \sigma \bar{v} \left( \frac{\epsilon_{\text{ev}}}{k_B T} \right) e^{-\epsilon_{\text{ev}}/k_B T} \quad (3.10)$$

である。 $n(0)$  は  $V = 0$  であるトラップ中心での粒子密度である。 $\bar{v}$  は

$$\bar{v} = \frac{\int_0^\infty dv v^3 \exp(-mv^2/2k_B T)}{\int_0^\infty dv v^2 \exp(-mv^2/2k_B T)} = \left( \frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{1/2} \quad (3.11)$$

で与えられる平均熱速度である。ここで弾性衝突に対する衝突時間  $\tau_{\text{el}}$  を導入する。

$$\frac{1}{\tau_{\text{el}}} = n(0)\sigma\bar{v}_{\text{rel}} \quad (3.12)$$

で定義される。 $\bar{v}_{\text{rel}} = \sqrt{2}\bar{v}$  は気体の平均相対速度である。以上の式を組み合わせると蒸発の崩壊時間は

$$\frac{1}{\tau_{\text{ev}}} = \frac{1}{\tau_{\text{el}}} \left( \frac{\epsilon_{\text{ev}}}{\sqrt{2}k_{\text{B}}T} \right) e^{-\epsilon_{\text{ev}}/k_{\text{B}}T} \quad (3.13)$$

で与えられる。

(3.13) を (3.7) に代入すると

$$\frac{d \ln T}{d \ln N} = \beta \left( 1 + \frac{\tau_{\text{el}}}{\tau_{\text{loss}}} \frac{\sqrt{2}k_{\text{B}}T}{\epsilon_{\text{ev}}} e^{\epsilon_{\text{ev}}/k_{\text{B}}T} \right)^{-1} \quad (3.14)$$

が得られる。エネルギーが  $k_{\text{B}}T$  に比べて大きい時、1 粒子状態の占有数は急激に小さくなるので、蒸発粒子の大多数は  $\epsilon_{\text{ev}}$  に近いエネルギーを持つ。よって、良い近似で  $(1 + \beta)\bar{\epsilon}$  を  $\epsilon_{\text{ev}}$  で置き換えることができる。(3.14) は

$$\frac{d \ln T}{d \ln N} = \left( \frac{\epsilon_{\text{ev}}}{\bar{\epsilon}} - 1 \right) \left( 1 + \frac{\tau_{\text{el}}}{\tau_{\text{loss}}} \frac{\sqrt{2}k_{\text{B}}T}{\epsilon_{\text{ev}}} e^{\epsilon_{\text{ev}}/k_{\text{B}}T} \right)^{-1} \quad (3.15)$$

となる。この関数は、 $\epsilon_{\text{ev}} > \bar{\epsilon}$  になると増加するが、蒸発率と損失率が同程度になると減少する。最適な閾値を求めるには、(3.15) を最大にする  $\epsilon_{\text{ev}}$  を求めればよい。対数的精度で  $\epsilon_{\text{ev}} \sim k_{\text{B}}T \ln(\tau_{\text{loss}}/\tau_{\text{el}})$  である。

### 3.3 実験例

蒸発冷却を用いてボース・アインシュタイン凝縮に成功した例として、スピン分極水素の実験を紹介する。その前に、水素の冷却法としてレーザー冷却が有効ではないことを強調しておく。水素の共鳴線はライマン線（波長は 122nm）で、これと同程度の波長を持つレーザーはない。例え存在したとしても、レーザー冷却で到達できる温度は特に低い訳ではない。ドップラー過程で考えると、冷却限界温度は  $\hbar\Gamma/2k_{\text{B}}$  であるが、水素は遷移が高周波数なので冷却できる最低温度を決める励起状態の線幅  $\Gamma$  が大きい。またシジフォス過程で考えても、水素原子の質量が軽い反跳温度  $(\hbar q)^2/2mk_{\text{B}}$  が高い。

水素の基底状態は四つの超微細状態を持つ。（詳しくは付録 A を参照。）磁場中ではゼーマン効果により超微細状態のエネルギーが分裂する。水素原子のエネルギーを磁場の関数として図に示す。

便宜上四つの状態をエネルギーが増加する順に  $a, b, c, d$  と名付ける。図からもわかるように、状態  $a, b$  が高磁場シーカーで、状態  $c, d$  が低磁場シーカーである。初

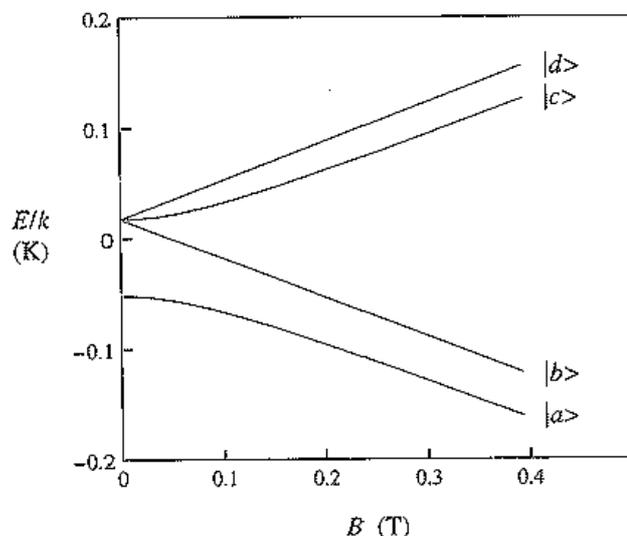


図 7: 磁場の関数としての水素原子の基底状態多重項のエネルギー

期の実験では強い磁場勾配を印加し、スピン分極水素を寒剤で冷やされた表面に押し付けることで冷却を行っていた。スピン分極状態として水素原子の最低スピン状態 ( $H\downarrow$ ) が採用された。(図の  $a, b$  に対応する。) この方法では、表面と水素との相互作用のために到達できる密度に限界があった。その後、MIT グループは原子を磁氣的に捕獲する技術を発展させた。前章で述べたように、磁場の極大を作るのは不可能なので、電子スピンが磁場と平行な状態 ( $H\uparrow$ ) のみがトラップされ得る。(図の  $c, d$  に対応する。)

実験はヨッフエ・プリチャード型の磁気トラップを用いて行なう。それを冷凍機で冷やした容器に入れる。隣接したセル内で水素原子を rf 磁場で分解する。そのセルの磁場は実験セルより高くする。すると低磁場シーキング状態  $c, d$  のみが実験セルに追い込まれ、そこで磁氣的にトラップされる。水素気体の熱を実験セルの冷たい壁へ輸送する媒質としてヘリウム気体を使う。ヘリウム原子は磁気双極子モーメントを持たないので磁場に影響されない。トラップ中の水素気体が冷却された後、実験セルの壁を 80mK 以下の温度に冷やすことによってヘリウム気体を取り除く。この状態で蒸発冷却を行なう。

状態  $d$  は次章で述べるように原子衝突の影響を比較的受けない。しかし、状態  $c$  はスピン交換衝突  $c + c \rightarrow d + b$  によって非弾性散乱される。この過程で  $b$  原子が作られる。これは高磁場シーカーなのでトラップから出てしまう。従って  $d$  原子のみがトラップに残る。

水素原子の散乱長はアルカリ原子に比べて 1 桁から 2 桁小さい。従って十分早く蒸発を達成するためにはアルカリ原子の実験よりも高密度が必要である。しかし、冷凍機を用いるので MOT の場合よりも多くの原子をトラップに用意できるため、これはあまり問題にならない。

スピン分極水素のボース・アインシュタイン凝縮は  $T = 50\mu\text{K}$ 、 $n = 1.8 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  で実現した。この温度はアルカリ原子の実験より高い。それは水素の軽い原子質量と高い密度のおかげである。凝縮相の長さは  $5\text{mm}$  で半径は  $15\mu\text{m}$  である。

## 4 原子間の相互作用

前章で述べたように、蒸発冷却において原子間の非弾性衝突がトラップ原子損失の主な機構となる。この章では原子間の散乱について考察する。

### 4.1 散乱の一般論

ここでは低エネルギー散乱の散乱長を導入し、断面積の表式を求める。質量  $m_1$  と  $m_2$  の2粒子の散乱を考える。粒子の内部自由度はなく、2粒子は区別できると仮定する。区別できない場合を後で議論する。粒子の運動は重心運動と相対運動に分けることができる。重心運動の波動関数は平面波であるが、相対運動の波動関数は換算質量  $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  の粒子が従うシュレディンガー方程式を満たす。以下では相対運動のみに注目する。

波動関数を入射波と散乱波の和として書くと

$$\psi = e^{ikz} + \psi_{sc}(\mathbf{r}) \quad (4.1)$$

になる。ただし、波の流れの密度が粒子の速度  $v$  に等しくなるように規格化を選ぶことにする。ここで入射波の相対速度を  $z$  方向に選ぶ。原子間隔が大きいところでは  $\psi_{sc}$  は外向きの球面波  $f(\mathbf{k}) \exp(ikr)/r$  である。 $f(\mathbf{k})$  は散乱振幅と呼ばれる。 $\mathbf{k}$  は散乱波の波数ベクトルである。散乱振幅は散乱角  $\theta$  (原子の散乱前後での相対運動量の方向のなす角) の関数であるとする、 $r$  が大きい所で

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.2)$$

である。状態のエネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \quad (4.3)$$

で与えられる。

入射波の流入量は  $v$  であり、散乱波が単位時間当たり微小面積  $dS = r^2 d\Omega$  から出る量は  $v|f|^2 r^{-2} dS = v|f|^2 d\Omega$  である。2つの量の比は

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (4.4)$$

である。この量は面積の次元を持っていて、断面積と呼ばれる。全散乱断面積は

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |f(\theta)|^2 \quad (4.5)$$

となる。

中心力ポテンシャル  $U(r)$  における散乱を記述するシュレディンガー方程式の解は、入射粒子の方向である  $z$  軸に関して軸対称でなければならない。従って波動関数はルジャンドル多項式  $P_l(\cos \theta)$  を用いて

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r) \quad (4.6)$$

と展開できる。動径波動関数  $R_{kl}$  は

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} U(r) \right] R_{kl}(r) = 0 \quad (4.7)$$

を満たす。  $r \rightarrow \infty$  に対し

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\simeq \frac{a_1(2l+1)!!}{r k^{l+1}} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) + \frac{a_2 k^l}{r(2l-1)!!} \cos\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) \\ &= \text{const} \cdot \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l) \end{aligned} \quad (4.8)$$

で与えられる。  $\delta_l$  は位相シフトである。(4.6) と (4.8) より

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{1}{2ikr} [(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)}] P_l(\cos \theta) \quad (4.9)$$

一方、平面波  $\exp(ikz)$  をルジャンドル多項式で展開すると

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (4.10)$$

十分遠方では

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\simeq \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{kr} \sin(kr - \frac{\pi}{2}l) P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [(-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}] P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (4.11)$$

となる。これを (4.2) に代入すると

$$\psi = \left[ \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) + f(\theta) \right] e^{ikr} + \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^{l+1} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{-ikr} \quad (4.12)$$

である。(4.9) と (4.12) の内向き波  $\exp(-ikr)$  部分を比べると  $A_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l}$  を得る。一方、外向き波  $\exp(ikr)$  部分を比べると

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (4.13)$$

が得られる。全散乱断面積は (4.13) を (4.5) に代入すると

$$\begin{aligned}\sigma &= 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2 \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 \sin^2\delta_l \int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_l^2(\cos\theta)\end{aligned}$$

$\int d(\cos\theta) P_l^2(\cos\theta) = 2/(2l+1)$  より

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l \quad (4.14)$$

となる。

非常に低いエネルギーでは s 波散乱を考えれば十分である。この極限では  $f(\theta)$  は一定値に近づく。これを  $-a$  とする。よって (4.2) は

$$\psi = 1 - \frac{a}{r} \quad (4.15)$$

となる。 $a$  は散乱長と呼ばれ、相互作用の強さを特徴づける量である。以下、散乱長と位相シフトの関係を調べる。

低エネルギー衝突では  $l=0$  の項が主要である (s 波散乱)。 (4.13) で  $l=0$  とおくと、 $f \simeq \delta_0/k$  となる。もし、遠方での漸近的な低エネルギー解を

$$R_0 \simeq c_1 \frac{\sin kr}{kr} + c_2 \frac{\cos kr}{r} \quad (4.16)$$

と書くと、 $k \rightarrow 0$  の位相シフトは  $\delta_0 \simeq \tan\delta_0 = kc_2/c_1$  で与えられる。遠方で  $f(\theta) = -a$  としたので、

$$\delta_0 = -ka \quad (4.17)$$

となる。散乱長は漸近解 (4.16) の係数によって決まる。すなわち

$$a = -\frac{c_2}{c_1} \Big|_{k \rightarrow 0} \quad (4.18)$$

である。この極限では  $\sigma$  は  $a$  だけで決まる。すなわち、

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \delta_0^2 = 4\pi a^2 \quad (4.19)$$

である。

今までは粒子の区別ができる場合を考えてきた。次は同一粒子の散乱を考える。ただし内部状態は同じであるとする。考えている粒子がボソンである場合、波動関数は 2 粒子の入れ換えに対し対称でなければならない。フェルミオンなら波動

関数は2粒子の入れ換えに対し反対称になる。2粒子の座標の変換は相対座標の符号変化に対応する。つまり、 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  或いは  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$  に対応する。(4.2)に対応する対称化波動関数は

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.20)$$

である。従って微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (4.21)$$

である。+の方はボソンを表し、-はフェルミオンを表している。

全断面積は微分断面積を全ての終状態について積分することで得られる。波動関数の対称性のため、 $\theta, \varphi$  方向へ散乱される状態と  $\pi - \theta, \pi + \varphi$  へ散乱される状態は同一である。数え過ぎを防ぐため、全立体角の半分だけを積分する。例えば、領域  $0 \leq \theta \leq \pi/2, 0 \leq \varphi \leq \pi$  を積分する。全断面積はボソンならば  $\sigma = 8\pi a^2$ 、フェルミオンならば0となる。

## 4.2 有効相互作用

原子間の短距離相関の詳しい計算を避けるために有効相互作用という概念を導入する。これは、長波長低エネルギー系の自由度間の相互作用を記述する。ただし、短波長の自由度間の相互作用を通しての結合を考慮されているという条件の下での話である。短波長の自由度は「積分された」というふうに理解できる。

再び2体散乱を考える。運動量空間で議論する必要があるので座標空間の波動関数(4.1)をフーリエ変換する。

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{k}') &= \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} + \psi_{sc}(\mathbf{k}') \\ &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \psi_{sc}(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (4.22)$$

になる。フーリエ変換をブラケット表示で書くと

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \quad (4.23)$$

となる。これはシュレディンガー方程式

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{m} + U \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (4.24)$$

をみたす。両辺左から  $\langle \mathbf{k}' |$  を掛けると

$$\langle \mathbf{k}' | \left( E - \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right) |\psi\rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \psi \rangle \quad (4.25)$$

となり、(4.22) を代入すると

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \right) \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}) = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}'') \quad (4.26)$$

を得る。ここで、粒子は同じ質量の場合を考えるので  $m = 2m_r$  を用いた。また、 $\hbar^2 k^2/m (= E)$  は固有エネルギーであり、 $U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') = U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'')$  は元の原子 - 原子相互作用のフーリエ変換である。散乱波は

$$\psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}') = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} + i\delta \right)^{-1} \left( U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}'') \right) \quad (4.27)$$

である。無限小の虚数  $+i\delta$  を入れたのは、フーリエ逆変換をしたときに外向き波になるようにするためである。この方程式は

$$\psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}') = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \hbar^2 k^2/m) \quad (4.28)$$

の形に書ける。ここで、 $T$  行列を導入する。それは

$$U|\psi_{\text{sc}}\rangle = T|\psi_{\text{in}}\rangle \quad (4.29)$$

で定義されている。散乱波はリップマン・シュウィンガー方程式

$$|\psi_{\text{sc}}\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\delta} U |\psi_{\text{sc}}\rangle \quad (4.30)$$

を満たしている。両辺に  $U$  を作用させて (4.29) を使うと

$$T|\psi_{\text{in}}\rangle = U|\psi_{\text{in}}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\delta} UT|\psi_{\text{in}}\rangle \quad (4.31)$$

となり、さらに  $\langle \mathbf{k}' |$  を掛けて

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \left( E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E) \quad (4.32)$$

が得られる。ただし、 $T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | T | \psi_{\text{in}} \rangle$  である。

遠方でのゼロエネルギー ( $E = k = 0$ ) の散乱波は (4.28) から計算できる。

$$\int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}}{k'^2} = \frac{1}{4\pi r} \quad (4.33)$$

を使うと、

$$\psi_{\text{sc}}(r) = -\frac{mT(0, 0; 0)}{4\pi\hbar^2 r} \quad (4.34)$$

となる。ただし  $k'$  は  $1/r$  のオーダーなので、 $T$  行列中の  $k'$  をゼロとした。この式は (4.15) と同一視できるので、

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} T(0, 0; 0) \quad (4.35)$$

もしくは

$$T(0, 0; 0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (4.36)$$

が得られる。これは  $T$  行列が散乱長と関係していることを意味する。散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}') \quad (4.37)$$

なので、一般には散乱振幅と  $T$  行列の関係は

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E = \hbar^2 k^2/m) \quad (4.38)$$

である。

ボルン近似を行なうということは、(4.37) において  $\psi_{\text{sc}}$  を  $\psi_{\text{in}}$  で置き換えることである。これはつまり相互作用ポテンシャル  $U$  を  $T$  行列で置き換えることであり、またリップマン・シュウィンガー方程式の右辺の第一項のみを考慮することに相当する。この場合、散乱長は

$$a_{\text{born}} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} U(0) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) \quad (4.39)$$

となる。これは  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 0$  に相当する。 $T$  行列は有効相互作用と見なすことができる。

別の観点から考察する。リップマン・シュウィンガー方程式の中間状態を2つに分ける。カットオフ値を  $\epsilon_c = \hbar^2 k_c^2/m$  とする。(4.32) の高エネルギー部分の和は

$$\tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'', k'' > k_c} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \left( E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} \tilde{U}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E) \quad (4.40)$$

であり、低エネルギーについての和は

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = \tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'', k'' < k_c} \tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''; E) \left( E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E) \quad (4.41)$$

である。 $\epsilon_c$  より大きいエネルギーの中間状態が陽に現れない散乱問題において (4.41) は正確な式となる。

$k_c \rightarrow 0$  のとき、有効相互作用  $\tilde{U}$  は  $T$  行列に帰着する。これは長波長励起間の相互作用を記述する。

$$\tilde{U}(0, 0; 0)|_{k_c \rightarrow 0} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \equiv U_0 \quad (4.42)$$

と書ける。 $k_c \rightarrow \infty$  のとき、有効相互作用  $\tilde{U}$  は元の相互作用  $U$  になる。つまり、どんな自由度も積分されなかったことに相当する。

### 4.3 非弾性衝突

衝突粒子の内部状態の変化を伴う衝突を非弾性衝突と言う。原子は核スピンや原子スピンに起因する内部自由度を持っている。これらは超微細分裂やゼーマン分裂を引き起こす。基底状態のアルカリ原子の核スピンを  $I$  とすると、核スピン状態の総数は  $2I + 1$  である。電子スピンは  $1/2$  なので電子スピン状態の総数は  $2$  である。従って基底状態の  $2$  つのアルカリ原子の超微細状態の総数は  $[2(2I + 1)]^2$  である。各原子の超微細状態を  $\alpha, \beta$  で区別すると、初期状態  $|\alpha\beta\rangle$  にある  $2$  つの原子は原子 - 原子相互作用によって状態  $|\alpha'\beta'\rangle$  へ散乱される。

原子間に相互作用がない時、全ハミルトニアンは

$$H_{\text{total}} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + H_{\text{hf}} + H_{\text{Zeeman}} \quad (4.43)$$

となる。ここで、 $\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}$ 、 $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r}$  は  $2$  原子の重心運動と相対運動の運動エネルギーのハミルトニアンであり、 $H_{\text{hf}}$ 、 $H_{\text{Zeeman}}$  は超微細相互作用とゼーマン・エネルギーのハミルトニアンである。重心系で見れば相対運動のハミルトニアンは

$$H_{\text{rel}} = H_0 + U \quad (4.44)$$

であり、ここで

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + H_{\text{spin}}(1) + H_{\text{spin}}(2) \quad (4.45)$$

である。 $H_{\text{spin}}$  は  $A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + C J_z + D I_z$  である。 $H_0$  の固有状態は  $|\alpha\beta, \mathbf{k}\rangle$  となる。もしスピン・ハミルトニアンの固有値が

$$H_{\text{spin}}|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad (4.46)$$

ならば、 $H_0$  の固有エネルギーは

$$E_{\alpha\beta}(k_{\alpha\beta}) = \frac{\hbar^2 k_{\alpha\beta}^2}{2m_r} + \epsilon_\alpha + \epsilon_\beta \quad (4.47)$$

となる。

波動関数の漸近形を一般化して、内部状態を考慮した散乱振幅を導入する。漸近形は

$$\psi = e^{i\mathbf{k}_{\alpha\beta}\cdot\mathbf{r}}|\alpha\beta\rangle + \sum_{\alpha',\beta'} f_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}(k_{\alpha\beta}, k'_{\alpha'\beta'}) \frac{e^{ik'_{\alpha'\beta'}r}}{r} |\alpha'\beta'\rangle \quad (4.48)$$

である。 $\hbar\mathbf{k}_{\alpha\beta}$  は入射状態の相対運動量である。入射チャンネルと出射チャンネルが異なれば、 $\epsilon_{\alpha} \neq \epsilon_{\alpha'}, \epsilon_{\beta} \neq \epsilon_{\beta'}, \hbar\mathbf{k}_{\alpha\beta} \neq \hbar\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}$  となる。全エネルギーは保存するので  $E = E_{\alpha\beta}(k_{\alpha\beta}) = E_{\alpha'\beta'}(k'_{\alpha'\beta'})$  であり、

$$\frac{\hbar^2 k_{\alpha'\beta'}^2}{2m_r} = \frac{\hbar^2 k_{\alpha\beta}^2}{2m_r} + \epsilon_{\alpha} + \epsilon_{\beta} - \epsilon_{\alpha'} - \epsilon_{\beta'} \quad (4.49)$$

である。もし  $k_{\alpha'\beta'}^2 \leq 0$  ならば、チャンネルは閉じているという。 $H_0$  の期待値が

$$E_{\text{th}}(\alpha'\beta') = \epsilon_{\alpha'} + \epsilon_{\beta'} \quad (4.50)$$

となる  $E_{\text{th}}$  より小さければ、チャンネル  $\alpha'\beta'$  は閉じている。このような項は式(4.48)の和から除く。

多くの場合、散乱振幅  $f$  よりも  $T$  行列で考える方が便利である。 $T$  行列はリップマン・シュウィンガー方程式で定義される。形式的には

$$T = U + UG_0T \quad (4.51)$$

と書く。相互作用がない場合、 $G_0$  (プロパゲーター) は

$$G_0 = (E - H_0 + i\delta)^{-1} \quad (4.52)$$

である。よって、(4.38) を拡張して

$$f_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}(k_{\alpha\beta}, k'_{\alpha'\beta'}) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \langle \alpha'\beta' | T(k'_{\alpha'\beta'}, k_{\alpha\beta}; E) | \alpha\beta \rangle \quad (4.53)$$

を得る。

遷移の起こる頻度は散乱振幅から計算できる。体積  $V$  中で、状態  $\alpha, \beta$  の2つの原子が  $\alpha', \beta'$  へ散乱される頻度を  $\mathcal{K}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}/V$  とする。ここで

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} &= v_{\alpha\beta} \int d\Omega \frac{d\sigma_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}}{d\Omega} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} N_{\alpha'\beta'}(E) \int \frac{d\Omega}{4\pi} |\langle \alpha'\beta' | T(k'_{\alpha'\beta'}, k_{\alpha\beta}; E) | \alpha\beta \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.54)$$

であり、

$$N_{\alpha'\beta'}(E) = \frac{m_r^2 v_{\alpha'\beta'}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (4.55)$$

はエネルギー当たり、体積当たりの相対運動の終状態の密度である。 $v'_{\alpha'\beta'}$  は終状態の相対速度で

$$v'_{\alpha'\beta'} = \frac{\hbar k'_{\alpha'\beta'}}{m_r} = \left[ \frac{2(E - \epsilon_{\alpha'} - \epsilon_{\beta'})}{m_r} \right]^{1/2} \quad (4.56)$$

である。ボルン近似では  $T$  行列を相互作用  $U$  に置き換えることができる。よって

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} = \frac{2\pi}{\hbar} N_{\alpha'\beta'}(E) \int \frac{d\Omega}{4\pi} |\langle \alpha'\beta' | U | \alpha\beta \rangle|^2 \quad (4.57)$$

となる。

量子縮退が無視できるほど高温の気体では、散乱過程の全確率は各粒子の確率 (4.54) に内部状態  $\alpha, \beta$  の原子の分布関数を掛けて、粒子の運動量について積分することで得られる。よって、原子密度の変化率に対する方程式は

$$\frac{dn_{\alpha}}{dt} = \frac{dn_{\beta}}{dt} = -\frac{dn_{\alpha'}}{dt} = -\frac{dn_{\beta'}}{dt} = -K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} n_{\alpha} n_{\beta} \quad (4.58)$$

である。縮退の効果が重要な時は、統計因子を終状態に対して考慮する必要がある。ボソンなら誘導放出、フェルミオンならパウリブロッッキングを考えに入れなければならない。

衝突係数  $K$  は温度に依存し

$$K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} = \overline{\mathcal{K}_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|\langle \alpha'\beta' | T | \alpha\beta \rangle|^2 N_{\alpha'\beta'}(E)} = \overline{\sigma_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}(E) v_{\alpha\beta}} \quad (4.59)$$

で定義される。横棒は衝突粒子の始状態相対速度  $v$  の分布と終状態相対運動量の角度の平均を表す。 $K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'}$  は体積を時間で割った次元を持つので、衝突によって状態  $\alpha$  の原子が失われる時間は  $\tau_{\alpha} = 1/K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} n_{\beta}$  である。

#### 4.3.1 スピン交換過程

近距離での 2 原子の主な相互作用はスピン交換相互作用である。ポテンシャルはスピン一重項と三重項で形が異なる。相互作用は電子スピン演算子  $S_1, S_2$  の結合  $S_1 \cdot S_2$  を用いて表すことができる。全スピン演算子を  $S = S_1 + S_2$  とすると、 $S_1 \cdot S_2$  は量子数  $S, S_1, S_2$  で書ける。

$$\begin{aligned} S_1 \cdot S_2 &= \frac{1}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2) \\ &= \frac{1}{2}[S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)] \end{aligned}$$

電子スピンは  $1/2$  なので

$$= \frac{1}{2} \left[ S(S+1) - \frac{3}{2} \right] \quad (4.60)$$

となる。 $S = 0, 1$  なので、 $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  は  $-3/4$  (一重項)  $\wedge$   $1/4$  (三重項) である。結果として相互作用は

$$U^c = U_s \mathcal{P}_0 + U_t \mathcal{P}_1 = \frac{U_s + 3U_t}{4} + (U_t - U_s) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (4.61)$$

の形に書ける。ここで  $U_s, U_t$  はそれぞれ 2 電子一重項と三重項のポテンシャルである。また、 $\mathcal{P}_0, \mathcal{P}_1$  はそれぞれ一重項と三重項の射影演算子で、 $\mathcal{P}_0 = 1/4 - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \mathcal{P}_1 = 3/4 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  である。(4.61) は座標の回転に対して不変なので、軌道角運動量が保存される。また、ポテンシャルは電子スピン空間の回転に対しても不変なので、全スピン角運動量も保存される。

スピン交換過程の頻度を評価する。相互作用の形は (4.61) である。散乱過程での超微細、磁気双極子 - 双極子相互作用を無視すると、スピン自由度に関する有効相互作用は

$$\begin{aligned} U_{\text{ex}}(\mathbf{r}) &= (U_t(\mathbf{r}) - U_s(\mathbf{r})) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ &= \frac{4\pi\hbar^2(a_t - a_s)}{m} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.62)$$

と書ける。ただし、ここでは 2 原子の質量は同じとする。つまり  $m_r = m/2$  である。上の式を導くのに  $U_t - U_s$  を対応する擬ポテンシャルの差で置き換えた。擬ポテンシャルは

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (4.63)$$

である。ただし  $U_0 = \tilde{U}_t(0, 0; 0)|_{k_c \rightarrow 0} = T(0, 0; 0)$  で、 $k_c$  はあるカットオフ値であるとする。

$T$  行列の行列要素は

$$\langle \alpha' \beta' | T | \alpha \beta \rangle = \frac{4\pi\hbar^2(a_t - a_s)}{m} \langle \alpha' \beta' | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 | \alpha \beta \rangle \quad (4.64)$$

で得られる。ゼロ運動エネルギーの入射原子に対して、衝突係数 (4.59) は

$$K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} = 4\pi(a_t - a_s)^2 v'_{\alpha'\beta'} |\langle \alpha' \beta' | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 | \alpha \beta \rangle|^2 \quad (4.65)$$

である。

水素では散乱長の差は  $a_0$  のオーダーである。スピン行列要素が 1 のオーダーならば衝突係数は約  $10^{-13} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$  のオーダーである。アルカリ原子では散乱長の差が大きいため、衝突係数は約  $10^{-11} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$  のオーダーである。実験での典型的な原子密度は  $10^{13} \text{cm}^{-3}$  なので、衝突係数の評価によれば、原子の寿命は一秒の何分の一である。

### 4.3.2 双極子過程

角運動量の選択則のため、ある種の遷移はスピン交換相互作用によって禁止される。その場合は磁気双極子 - 双極子相互作用が重要になる。例えば、二重分極状態  $|F = I + 1/2, m_F = F\rangle$  はスピン交換過程によって別の超微細状態に移ることはない。なぜなら、 $|F = I + 1/2, m_F = F\rangle$  は  $m_F = I + 1/2$  である他の状態を持たないからである。実験的に重要なもう一つの状態は最大限伸びた状態で、核磁気モーメントが正なら  $|F = I - 1/2, m_F = -F\rangle$  である。  $m_F = -I + 1/2$  となるのは  $(m_I = -I, m_S = 1/2)$  スピン上向きと  $(m_I = -I + 1, m_S = -1/2)$  スピン下向きの2つがある。従って、この状態にある2つの原子は電子スピン三重項でもあり、一重項でもある。  $m_F = -I + 1/2$  である別の状態は  $|F = I + 1/2, m_F = -I + 1/2\rangle$  であるが、この状態のエネルギーは元の状態より上にある。もし  $k_B T < E_{\text{hf}}$  ならば、上への遷移は抑制される。つまり、実験の条件下では最大限伸びた状態もスピン交換過程を通して遷移しない。しかし、二重分極状態も最大限伸びた状態も磁気双極子 - 双極子相互作用によって別の超微細状態に散乱される。双極子過程の散乱確率はスピン交換過程に比べて  $10^{-2} - 10^{-4}$  程度少ない。

相互作用の形は

$$U_{\text{md}} = \frac{\mu_0(2\mu_B)^2}{4\pi r^3} [\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - 3(\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})] \quad (4.66)$$

で与えられる。これは核スピンとは無関係で、座標空間と電子スピン空間の同時回転の下で不変である。従って全角運動量は保存される。しかし、軌道角運動量と電子スピン角運動量は別々には保存しない。  $U_{\text{md}}$  は階数2の球テンソルとして変換するので

$$U_{\text{md}} = - \left( \frac{24}{5\pi} \right)^{1/2} \frac{\mu_0 \mu_B^2}{r^3} \sum_{\mu=-2}^2 Y_{2\mu}^*(\hat{\mathbf{r}}) \Sigma_{2,\mu} \quad (4.67)$$

の形に書ける。ここで、  $Y_{2\mu}^*(\hat{\mathbf{r}})$  は球面調和関数である。  $\Sigma_{2,\mu}$  は2つのスピン演算子からなる階数2の球テンソルで、その成分は

$$\begin{aligned} \Sigma_{2,0} &= -\sqrt{\frac{3}{2}}(S_{1z}S_{2z} - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2/3), \\ \Sigma_{2,\pm 1} &= \pm \frac{1}{2}(S_{1z}S_{2\pm} + S_{1\pm}S_{2z}), \\ \Sigma_{2,\pm 2} &= -\frac{1}{2}S_{1\pm}S_{2\pm} \end{aligned} \quad (4.68)$$

である。この相互作用によって軌道角運動量の量子数  $l$  が  $-2, 0, +2$  だけ変化するような遷移のみが可能になる。s 波状態の2つの入射粒子が d 波状態へ散乱される。

ボルン近似を用いて相対運動量がゼロの2つの入射原子の磁気双極子 - 双極子過程の頻度を評価する。(4.59) の  $T$  行列を (4.66) の行列要素で置き換える。ただし、行列要素は相対運動量ゼロの始状態と相対運動量  $\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}$  の終状態で挟まれてい

る。 $\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}$  は (4.56) で定義されたもので、 $k'^2_{\alpha'\beta'} = 2m(E - \epsilon_{\alpha'} - \epsilon_{\beta'})/\hbar^2$  である。入射粒子の相対運動量がゼロより、衝突係数は

$$K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} = \frac{m^2}{4\pi\hbar^2} \overline{|\langle \alpha'\beta' | U_{\text{md}}(\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}, 0) | \alpha\beta \rangle|^2} v'_{\alpha'\beta'} \quad (4.69)$$

となる。横棒は終状態の相対運動量の方角についての平均を表す。ゼロ運動量の始状態の波動関数は 1 であり、終状態の波動関数は  $\exp(i\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'} \cdot \mathbf{r})$  である。(4.66) の行列要素は

$$\begin{aligned} U_{\text{md}}(\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}, 0) &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'} \cdot \mathbf{r}} U_{\text{md}}(\mathbf{r}) \cdot 1 \\ &= \int d\mathbf{r} \left( U_{\text{md}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'} \cdot \mathbf{r}} \right)^* \\ &= \int d\mathbf{r} U_{\text{md}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.70)$$

である。これはスピン変数についての演算子である。平面波は球面波

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.71)$$

で表すことができる。 $j_l$  は球ベッセル関数であり、 $\hat{\mathbf{k}}$  は  $\mathbf{k}$  方向の単位ベクトルである。(4.67) を使うと

$$U_{\text{md}}(\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}, 0) = \left( \frac{24}{5\pi} \right)^{1/2} \mu_0 \mu_B^2 \left( \int d\mathbf{r} \frac{j_2(k'_{\alpha'\beta'} r)}{r^3} \right) \sum_{\mu=-2}^2 Y_{2\mu}^*(\hat{\mathbf{k}}'_{\alpha'\beta'}) \Sigma_{2,\mu} \quad (4.72)$$

を得る。ここで球面調和関数の直交性

$$\int Y_{2\mu}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) d\Omega = \delta_{2l} \delta_{\mu m} \quad (4.73)$$

を使った。球ベッセル関数を含む積分は

$$j_l(x) = (-1)^l x^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} \quad (4.74)$$

を用いると

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \frac{j_2(k'_{\alpha'\beta'} r)}{r^3} &= \int d\Omega \int r^2 dr \frac{j_2(k'_{\alpha'\beta'} r)}{r^3} \\ &= 4\pi \int dr \frac{j_2(k'_{\alpha'\beta'} r)}{r} \\ &= 4\pi \int dx \frac{1}{x} (-1)^2 x^2 \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 \frac{\sin x}{x} \\ &= 4\pi \left[ \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \frac{\sin x}{x} \right]_0^\infty \\ &= 4\pi \left[ -\frac{1}{x} j_1(x) \right]_0^\infty \end{aligned} \quad (4.75)$$

となる。ここで、球ベッセル関数の漸近形

$$x \rightarrow 0 \quad j_n(x) \sim \frac{x^n}{(2n+1)!!} \quad (4.76)$$

より、(4.75) は  $4\pi/3$  となる。よって行列要素は

$$U_{\text{md}}(\mathbf{k}'_{\alpha'\beta'}, 0) = 4\pi^2 \left( \frac{8}{15\pi} \right)^{1/2} \frac{\hbar^2 r_e}{m_e} \sum_{\mu=-2}^2 Y_{2\mu}^*(\hat{\mathbf{k}}'_{\alpha'\beta'}) \Sigma_{2,\mu} \quad (4.77)$$

である。ただし  $\mu_0 \mu_B^2 = \pi \hbar^2 r_e / m_e$  である。ここで  $r_e = e_0^2 / m_e c^2 = \alpha_{\text{fs}}^2 a_0$  は古典電子半径である。(  $e_0 = e^2 / 4\pi \epsilon_0$ 、 $a_0 = \hbar^2 / m_e e_0^2$  はボーア半径であり、 $\alpha_{\text{fs}} = e_0^2 / \hbar c$  は微細構造定数である。) 相互作用の主要部が有効相互作用  $4\pi \hbar^2 a / m$  に似た形になるように長さ  $r_e$  を導入した。この結果は相互作用が終状態の相対運動量の大きさ  $k'$  に依存しないことを示している。

双極子過程の衝突係数は (4.77) を (4.59) に代入することで得られる。

$$K_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} = \frac{8\pi}{15} \left( \frac{m r_e}{m_e} \right)^2 v'_{\alpha'\beta'} \sum_{\mu} |\langle \alpha'\beta' | \Sigma_{2,\mu} | \alpha\beta \rangle|^2 \quad (4.78)$$

となる。

スピン交換過程と磁気双極子 - 双極子過程の遷移確率の大きさを比べる。ポテンシャルの行列要素の大きさの比は

$$\left| \frac{U_{\text{md}}}{U_{\text{ex}}} \right| \sim A \frac{m_p}{m_e} \alpha_{\text{fs}}^2 \frac{a_0}{|a_t - a_s|} \approx \frac{A}{10} \frac{a_0}{|a_t - a_s|} \quad (4.79)$$

である。ただし、スピン演算子の部分は無視した。水素では  $|a_t - a_s| \sim a_0$  なので、この比は  $10^{-1}$  のオーダーである。アルカリ原子では、散乱長が  $100a_0$  のオーダーなので、比は  $10^{-1}$  から  $10^{-2}$  のオーダーである。従って、双極子過程はスピン交換過程に比べて  $10^{-2}$  から  $10^{-4}$  程度少ない。

### 4.3.3 三体過程

これまでは2体反応のみを考えてきた。前章で述べたように、アルカリ原子の場合分子形成が重要な損失機構になる。三体衝突の反応率は

$$\frac{dn}{dt} = -Ln^3 \quad (4.80)$$

で与えられる。 $L$  は衝突係数で、 $n$  は原子密度である。3つの原子が互いに近づく確率は  $n^3$  のように変化するので、反応は  $n$  の3乗に比例する。アルカリ原子についての  $L$  の値は Moerdijk 達 [6] によって計算されていて、 ${}^7\text{Li}$  は  $2.6 \times 10^{-28} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$  で、 ${}^{23}\text{Na}$  は  $2.0 \times 10^{-28} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$ 、 ${}^{87}\text{Rb}$  は  $4 \times 10^{-30} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$  である。

アルカリ原子の三体過程の反応率の大きさを定性的に評価する。三体衝突が起こるためには、3つの原子が体積  $r_0^3$  に入っている必要がある。ここで  $r_0$  は2体相互作用が顕著に現れる距離である。体積  $r_0^3$  内に原子を見出す確率は  $nr_0^3$  のオーダーである。3体衝突と2体衝突の位相空間の差を無視すれば、3体過程の反応率は大雑把に言って2体過程のと同じ因子で与えられる。従って、3体過程の衝突係数は  $L \sim Kr_0^3$  である。つまり、2体過程が起きている場所に三つ目の原子が存在する確率が3体過程の反応確率である。ただし、全ての反応はスピン交換過程を通して起こると仮定する。アルカリ原子に対し  $r_0 \sim 10^2 a_0$ 、そして  $K \sim 10^{-11} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$  なので、 $L \sim 10^{-30} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$  である。水素ではこの過程の反応はとても小さく  $L \sim 10^{-38} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$  である。これは弱い相互作用ポテンシャルのためである。結果として、三体過程はアルカリ原子の場合は大事だが、水素にとってはそれほど深刻な問題ではない。

## 5 まとめ

本文では希薄気体のボース・アインシュタイン凝縮の実現に役立った冷却法と捕獲法について概説した。それぞれの方法の特徴を表 5.1 にまとめる。特に、冷却の最終段階で用いられる蒸発冷却法について簡単なモデルを使って考察した。

表 5.1: 様々な冷却法・捕獲法

	冷却	捕獲	適用可能な原子	冷却限界温度	達成された温度
ドップラー冷却	○	×	すべて	$T = \hbar\Gamma/2k_B$	200 $\mu$ K(Na) 140 $\mu$ K(Rb)
シジフォス冷却	○	×	$F_g < F_e$ $F_g \neq 0$	$T = (\hbar q)^2/2mk_B$	10 $\mu$ K (Na) 5 $\mu$ K(Rb)
磁気トラップ	×	○	すべて	—	—
光学トラップ	×	○	すべて	—	—
磁気光学トラップ	○	○	$F_g < F_e$	—	40 $\mu$ K(Na)
蒸発冷却	○	×	すべて	—	50 $\mu$ K(H $\uparrow$ )

後半では非弾性衝突による粒子の損失を考察した。考えられうる過程とその衝突係数を表 5.2 にまとめる。この考察より、実験で使われる試料を限定することができる。実際、スピン分極水素の実験では、散乱断面積の最も大きい過程を通して崩壊しない超微細状態が使われて、ようやく BEC が実現できた。

表 5.2: 衝突係数

	スピン交換過程 ( $\text{cm}^3\text{s}^{-1}$ )	双極子過程 ( $\text{cm}^3\text{s}^{-1}$ )	三体過程 ( $\text{cm}^6\text{s}^{-1}$ )
水素	$10^{-13}$	$10^{-15}$	$10^{-38}$
アルカリ原子	$10^{-11}$	$10^{-13} - 10^{-15}$	$10^{-30}$

ボース・アインシュタイン凝縮した原子の最も大きな特徴は全ての原子が同じ量子状態にあるということである。これがボース・アインシュタイン凝縮体の利用価値の一つでもある。これを利用した原子波レーザーや原子線ホログラフィーの研究が進んでいる。また、中性原子気体のボース・アインシュタイン凝縮だけでなく、ボソンであれば  $\pi$  中間子などのボース・アインシュタイン凝縮も原理的には可能である。もし中間子のボース・アインシュタイン凝縮が実現できれば、それは素粒子実験の分野に大きく貢献できることが期待される。

## A アルカリ原子の超微細構造とゼーマン分裂

### A.1 アルカリ原子の超微細構造

電子と核スピンとの相互作用によって生じるエネルギー準位の分裂のことを原子準位の超微細構造と言う。外部磁場がないとき、結合のハミルトニアンを

$$H_{\text{hf}} = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} \quad (\text{A.1})$$

で表せる。ここで  $A$  は結合定数であり、 $\mathbf{I}$  と  $\mathbf{J}$  は核スピンと電子角運動量の演算子である。全角運動量演算子を

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J} \quad (\text{A.2})$$

と書く。両辺 2 乗して  $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$  を量子数  $I, J, F$  で表すと

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \quad (\text{A.3})$$

となる。

アルカリ原子の場合、一つの電子が最外殻に入り、残りの電子は内側の殻で閉殻になっている。そのため、原子構造は単純で一電子の状態のみを考えればよい。電子が基底状態のとき ( $L = 0$ ) 軌道角運動量を持たないので角運動量演算子はスピン演算子と等しい。つまり、 $J = S$  となり、 $S = 1/2$  である。角運動量の合成則より  $F$  が取れる値は  $I + 1/2$  と  $I - 1/2$  の 2 つだけである。2 つの超微細準位のエネルギー差は

$$\Delta E_{\text{hf}} = h\nu_{\text{hf}} = \left( I + \frac{1}{2} \right) A \quad (\text{A.4})$$

である。超微細分裂の測定値を表 A.1 に示す。

### A.2 超微細構造の結合定数

結合定数  $A$  の表式を求める [2, 7]。磁気モーメントを持つ粒子と磁場の相互作用ハミルトニアンは

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{A.5})$$

のように書ける。電子と核の相互作用は、電子が座標原点に作る磁場と核の磁気モーメントの相互作用として考えることができる。磁気モーメントに対応する量子力学的演算子はスピン演算子に平行であるので

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{\mu}{S} \mathbf{S} \quad (\text{A.6})$$

表 A.1: 陽子数  $Z$

同位体	$Z$	$N$	$I$	$\mu/\mu_N$	$\nu_{\text{hf}}(\text{MHz})$
$^1\text{H}$	1	0	1/2	2.793	1420
$^6\text{Li}$	3	3	1	0.822	228
$^7\text{Li}$	3	4	3/2	3.256	804
$^{23}\text{Na}$	11	12	3/2	2.218	1772
$^{39}\text{K}$	19	20	3/2	0.391	462
$^{40}\text{K}$	19	21	4	-1.298	-1286
$^{41}\text{K}$	19	22	3/2	0.215	254
$^{85}\text{Rb}$	37	48	5/2	1.353	3036
$^{87}\text{Rb}$	37	50	3/2	2.751	6835
$^{133}\text{Cs}$	55	78	7/2	2.579	9193

となる。ここで  $\mu$  は核子の磁気モーメントで、核磁子  $\mu_N = e\hbar/2m_p$  のオーダーである。一方、電子が作る磁場は  $\langle \psi(\mathbf{r}) | B | \psi(\mathbf{r}) \rangle$  である。 $B$  は磁気双極子によって作られる磁場で、電磁気学では

$$B(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{1}{r^3} [3(\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{m}] + \frac{8\pi}{3} \mathbf{m} \delta(\mathbf{r}) \right\} \quad (\text{A.7})$$

で与えられる。ここで  $\mathbf{m}$  は磁気双極子モーメントである。量子力学では  $\mathbf{m}$  を演算子に変えて、基底状態の電子なら  $\mathbf{m} = -2\mu_B \mathbf{S}$  である。 $\mu_B = e\hbar/2m_e$  はボーア磁子（電子の磁気モーメントの大きさ）である。 $\hat{\mathbf{r}}$  は  $r$  方向の単位ベクトルである。よって、基底状態の電子が作る磁場は

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu_B \mathbf{S} \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2 \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu_B |\psi(0)|^2 \mathbf{S} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

となる。(A.6) と (A.8) を (A.5) に代入すると

$$H_{\text{hf}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \mu \mu_B |\psi(\mathbf{r})|^2 \frac{\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}}{I} \quad (\text{A.9})$$

となり、結合定数  $A$  は

$$A = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16\pi}{3} \frac{\mu \mu_B}{I} |\psi(0)|^2 \quad (\text{A.10})$$

となる。

### A.3 超微細構造のゼーマン分裂

次に、外部磁場がある場合を考える。ゼーマン効果によって縮退していたエネルギー準位が分裂する。磁場の方向を  $z$  方向とすると、ハミルトニアンは

$$H_{\text{spin}} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + CJ_z + DI_z \quad (\text{A.11})$$

である。ここで

$$C = g\mu_B B \quad (\text{A.12})$$

$$D = -\frac{\mu}{I} B \quad (\text{A.13})$$

である。ただし、電子の軌道角運動量  $L$  をゼロとし、電子のスピンが  $1/2$  であることを使った。  $|C/D| \sim m_p/m_e \approx 2000$  なので、多くの場合  $D$  は無視できる。  $g$  因子を 2 とおく。

核スピンが  $3/2$  の場合を考える。Na、Rb などの原子がこれに当てはまる。  $H_{\text{spin}}$  の固有エネルギーを求める。そのためには 8 個の状態からなる基底  $|m_I, m_J\rangle$  を使ってハミルトニアンを対角化する。昇降演算子  $I_{\pm} = I_x \pm iI_y$ 、  $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$  を使うと

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{1}{2}(I_+J_- + I_-J_+) + I_zJ_z \quad (\text{A.14})$$

と表せる。これからハミルトニアン (A.11) は全角運動量の  $z$  成分を保存することが分かる。

状態  $|3/2, 1/2\rangle$  と  $|-3/2, -1/2\rangle$  は他の状態と混ざらないのでエネルギー固有値が簡単に計算できる。

$$E\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4}A + \frac{1}{2}C + \frac{3}{2}D \quad (\text{A.15})$$

$$E\left(-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4}A - \frac{1}{2}C - \frac{3}{2}D \quad (\text{A.16})$$

である。これらは磁場の一次関数になっている。

全角運動量の  $z$  成分は保存されるので、混ざる状態は  $|m_I, -1/2\rangle$ 、  $|m_I - 1, 1/2\rangle$  のような対である。よって、エネルギーを求めるには  $2 \times 2$  の行列を対角化すればよい。状態  $|3/2, -1/2\rangle$  と  $|1/2, 1/2\rangle$  について、(A.11) の行列要素は

$$\begin{pmatrix} -\frac{3}{4}A - \frac{1}{2}C + \frac{3}{2}D & \frac{\sqrt{3}}{2}A \\ \frac{\sqrt{3}}{2}A & \frac{1}{4}A + \frac{1}{2}C + \frac{1}{2}D \end{pmatrix}$$

となり、固有値は

$$E = -\frac{A}{4} + D \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A + C - D)^2} \quad (\text{A.17})$$

となる。同じことを  $m_I + m_J = -1$  の状態  $|-1/2, -1/2\rangle$  と  $|-3/2, 1/2\rangle$  について行なうと、固有値

$$E = -\frac{A}{4} - D \pm \sqrt{\frac{3}{4}A^2 + \frac{1}{4}(A - C + D)^2} \quad (\text{A.18})$$

を得る。同様に  $m_I + m_J = 0$  の状態  $|1/2, -1/2\rangle$  と  $|-1/2, 1/2\rangle$  に対し、固有値は

$$E = -\frac{A}{4} \pm \sqrt{A^2 + \frac{1}{4}(C - D)^2} \quad (\text{A.19})$$

である。

上で述べた通り、 $D$  は  $C$  に比べて小さいのでその項を無視できる。無次元の磁場  $b$  を

$$b = \frac{C}{A} = \frac{(2I + 1)\mu_B B}{\Delta E_{\text{hf}}} \quad (\text{A.20})$$

と定義すると、核スピン  $3/2$  のアルカリ原子のエネルギー準位のゼーマン分裂を図に示す。

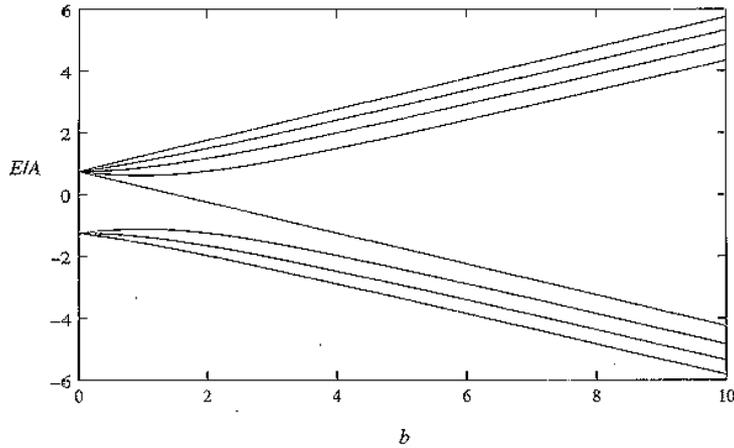


図 8: 磁場中の  $I = 3/2$ 、 $A > 0$  のアルカリ原子の超微細準位エネルギー

水素の核スピンは  $1/2$  である。上と同じようにハミルトニアンを対角化するとエネルギー固有値が得られる。

$$E \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = A \left( \frac{1}{4} + \frac{b}{2} \right), \quad E \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) = A \left( \frac{1}{4} - \frac{b}{2} \right) \quad (\text{A.21})$$

である。 $m_I + m_J = 0$  の状態に対して固有値は

$$E = -A \left( \frac{1}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + b^2} \right) \quad (\text{A.22})$$

である。  $I = 1/2$  なので、無次元磁場は  $b = 2\mu_B B / \Delta E_{\text{hf}}$  となる。これらの固有値に対応した4つの状態を便宜的にエネルギーが増加する順に  $a, b, c, d$  と名付けることにする。それらを基底  $|m_I, m_J\rangle$  で表すと

$$|a\rangle = \cos\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sin\theta \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.23})$$

$$|b\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.24})$$

$$|c\rangle = \cos\theta \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sin\theta \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.25})$$

$$|d\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.26})$$

となる。ここで混合角  $\theta$  は  $\tan 2\theta = 1/b = \Delta E_{\text{hf}} / 2\mu_B B$  である。

## 謝辞

本論文を書くにあたり、多くの方々からご指導、ご協力を承りました。

指導教官である佐藤丈准教授には熱心に指導して頂きました。そして様々なチャンスを下さったことを感謝致しております。また、同研究室の谷井教授にはゼミでお世話になりました。この場を借りてお礼を申し上げます。

この一年間、研究室の方々には学習面や生活面において大変お世話になりました。BECのゼミに参加して頂いた山中氏、野村氏には勉強の上で色々教えて頂きました。PDの小池氏は私が抱いたどんな些細な疑問にも丁寧に答えてくれました。同室の方々にはご不便をお掛けしたこともあったと思いますが、いつも優しく接して頂きました。本当にありがとうございます。

また、共に勉強してきた同期の皆さんにもお礼を述べたいと思います。池田君には卒論のゼミでお世話になりました。心の友である高山さんはいつも相談に乗ってくれて、そして常に励ましてくれました。私がここまで来れたのは、支え合っ  
て来た同期の皆さんのおかげです。

最後に、私の研究生生活を理解し、協力してくれた両親および友人達に心からお礼を申し上げます。

## 参考文献

- [1] 町田一成 訳『ボーズ・アインシュタイン凝縮』吉岡書店, 2005
- [2] ランダウ・リフシッツ『量子力学』東京図書, 1983
- [3] パリティ編集委員会『レーザー冷却がひらく原子波の世界』丸善, 2003
- [4] 久我隆弘『量子光学』朝倉書店, 2003
- [5] H.F.Hess, Phys.Rev.B **34**, 3476 (1986).
- [6] A.J.Moerdijk, H.M.J.M.Boesten, and B.J.Verhaar, Phys.Rev.A **53**, 916 (1996).
- [7] E. Arimond, M. Inguscio, and P. Violino, Rev. Mod. Phys. **49**, 31 (1977).
- [8] C.J.Pethic and H.Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).