

第二章 アルカリ原子気体のボース凝縮の基本的性質

2.1 ボース凝縮の発生条件

体積 V の箱型ポテンシャルに閉じ込められた N 個の理想（相互作用のない）ボース気体は、以下の条件を満たすとき最低エネルギー状態の粒子数がマクロな数になるボース・アインシュタイン凝縮を起こす[2]（付録 A.3）：

$$n\lambda_{\text{dB}}^3 \geq \zeta(3/2) = 2.612\dots \quad (2.1)$$

ここで、 $n \equiv N/V$ は原子密度、 $\lambda_{\text{dB}} \equiv h/\sqrt{2\pi mk_{\text{B}}T}$ は**熱的ド・ブローイ波長*** (thermal de Broglie wave length)、 $\zeta(\alpha) \equiv \sum_{s=1}^{\infty} 1/s^\alpha$ はリーマンのツェータ関数である。 $n\lambda_{\text{dB}}^3 \equiv \rho_{\text{ps}}$ は**位相空間密度**と呼ばれ、一量子状態あたりの平均的粒子数を表す**。熱的ド・ブローイ波長は、原子の波動関数（波束）の幅を表すので、式 (2.1) のボース凝縮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」と言うことができる。

条件式 (2.1) を温度について書き直すと、

$$T \leq \frac{h^2}{2\pi mk_{\text{B}}} \left(\frac{N}{2.612\dots V} \right)^{2/3} \equiv T_{\text{c}} \quad (2.2)$$

となる。 T_{c} は**アインシュタイン凝縮温度**、または単に**転移温度**と呼ばれる。この転移温度を用いて、ボース凝縮した粒子数 N_0 の温度依存性を表すと、

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_{\text{c}}} \right)^{3/2} \right] \quad (2.3)$$

となる。

* 分母の $\sqrt{2\pi mk_{\text{B}}T}$ (h はプランク定数、 m は原子の質量、 k_{B} はボルツマン定数、 T は原子集団の温度) は、系の運動量の揺らぎ Δp を表しているの、ハイゼンベルグの不確定性関係 $\Delta x \Delta p = h$ より、 λ_{dB} は位置の揺らぎ、つまり波束の幅を表す。

** $\lambda_{\text{dB}}^3 = h^3 / \Delta p^3$ であるから、 $\rho_{\text{ps}} = N / (V \Delta p^3 / h^3)$ となる。 $V \Delta p^3$ 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。よって、 ρ_{ps} は一状態あたりに存在する平均粒子数を表す。

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 3 次元調和ポテンシャルに閉じ込められた状態にある：

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (2.4)$$

このときの理想ボース気体におけるボース凝縮の発生条件は

$$N \left(\frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B T} \right)^3 \geq \zeta(3) = 1.202\dots \quad \text{ただし, } \bar{\omega} \equiv (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3} \quad (2.5)$$

となる[30] (付録 A.4). 式 (2.5) の最左辺は、一量子状態あたりの平均的粒子数を表している. これを温度に関して書き直すと

$$T \leq \frac{\hbar \bar{\omega}}{k_B} \left(\frac{N}{1.202} \right)^{1/3} \equiv T_c \quad (2.6)$$

となる*. ボース凝縮した粒子数 N_0 の温度依存性を表すと、

$$N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \quad (2.7)$$

となる. このように、箱型の場合の式 (2.3) と異なる T 依存性を持つ (図 2.1).

ボース粒子系がボース凝縮を起こしているときのノーマル成分 (ボース凝縮体以外の粒子) のピーク密度は、ポテンシャルの形状に依らず

$$n_{\text{peak}} \lambda_{\text{dB}}^3 = \zeta(3/2) = 2.612\dots \quad (2.8)$$

で与えられる[30] (付録 B.3). この式は、箱型ポテンシャルにおけるボース凝縮の条件式 (2.1) の、任意のポテンシャルへの一般化と考えることができる.

* 実際のアルカリ原子気体のボース凝縮では、原子数が有限である効果と、原子間相互作用の効果で、転移温度 T_c は理想気体と比べ数%程度低くなる傾向がある[28].

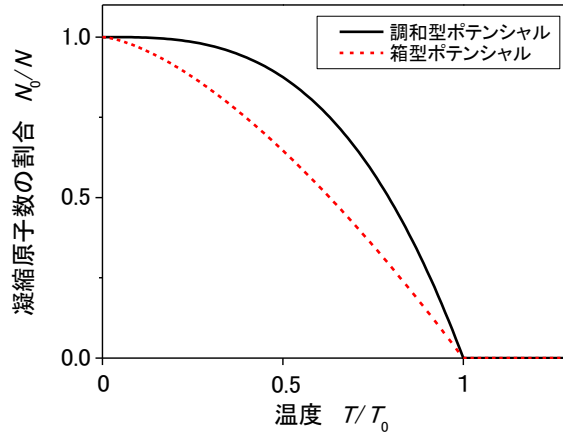


図 2.1 調和型ポテンシャル（実線）および箱型ポテンシャル（破線）に閉じ込められた原子集団における凝縮原子数の割合の温度依存性．転移温度での凝縮原子数の立ち上りは，調和型の方が箱型より急になる．これは，調和型の場合，温度が下がり運動量分布幅が狭くなるにつれて，原子集団の空間分布幅も同時に狭くなることによる．

2.2 ボース凝縮体の波動関数

外部ポテンシャル $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ に閉じ込められ，任意の二粒子間に相互作用ポテンシャル $U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ が働くボース粒子系のハミルトニアンは，第二量子化法を用いると以下のように与えられる（付録 C.3）：

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'). \quad (2.9)$$

ここで，

$$\hat{\Psi}^{(\dagger)}(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \phi_i^{(*)}(\mathbf{r}) \hat{a}_i^{(\dagger)} \quad (2.10)$$

は，位置 \mathbf{r} にボース粒子を消滅（生成）する場の演算子である（ $\phi_i(\mathbf{r})$ は系の 1 粒子波動関数， $\hat{a}_i^{(\dagger)}$ はその状態の消滅（生成）演算子）．場の演算子の時間発展は，ハイゼンベルグの運動方程式 $i\hbar \partial_t \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}]$ より，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (2.11)$$

に従う（付録 C.4）．

二粒子間相互作用ポテンシャル $U(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ の具体的な形は、一般に知ることは難しい。しかし、熱的ド・ブロイ波長が相互作用の到達距離に比べ十分長くなるほど原子集団の温度が十分低いとすると*、原子系の密度揺らぎは、相互作用の到達距離の範囲でほとんど変化しないので、相互作用ポテンシャル $U(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ を以下のようにデルタ関数で近似できる：

$$U(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) = U_0 \delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \quad \text{ただし, } U_0 = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) . \quad (2.12)$$

また、このときの粒子間の衝突は S 波散乱が支配的になり（付録 D.3）、S 波散乱の散乱長 a と U_0 の間に以下の関係が成立する（付録 D.4）：

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} . \quad (2.13)$$

今、ボース粒子系がボース・アインシュタイン凝縮を起こしているとする。このとき、ボゴリューホフによる平均場理論（mean-field theory）[23]では、場の演算子を以下のように分解する：

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) + \hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t) \quad \text{ただし, } \Phi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (2.14)$$

$\Phi(\mathbf{r}, t)$ は場の演算子の期待値であるから c 数の関数で、**ボース凝縮体の波動関数**、または**オーダーパラメーター**と呼ばれる。 $\hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t)$ は量子的または熱的揺らぎを表す演算子で、定義より $\langle \hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$ である。式(2.12)、(2.14)を式(2.11)に代入して期待値をとると、 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ に関する波動方程式が得られる：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}, t) . \quad (2.15)$$

これは**非線型シュレーディンガー方程式**、または**グロス・ピタエフスキー方程式**と呼ばれる[24,25]。二粒子間相互作用による項 $U_0 |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ は**平均場エネルギー**と呼ばれる。この項がなければ、式(2.15)は一粒子のシュレーディンガー方程式に帰着する。

式(2.15)の解として、定常状態 $\Phi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\mu t/\hbar) \Phi(\mathbf{r})$ を考える。これを式(2.15)

*相互作用の到達距離の目安である S 波散乱長は、Rb 原子の場合 5.8 nm である[64]。一方、ボース凝縮体のサイズ（ド・ブロイ波長）は $10 \mu\text{m} \sim 100 \mu\text{m}$ である。よって、この仮定はボース凝縮において十分成り立っている。

に代入すると、時間に依存しないグロス・ピタエフスキー方程式が得られる：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = \mu \Phi(\mathbf{r}) . \quad (2.17)$$

μ はボース凝縮体の化学ポテンシャルである．特に系の温度がゼロで、全ての粒子がボース凝縮しているとする、ボース凝縮体の密度分布 $|\Phi(\mathbf{r})|^2$ を全空間にわたって積分したものは、全粒子数 N になる：

$$\int |\Phi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = N . \quad (2.18)$$

^{87}Rb や ^{23}Na は散乱長 a が正、つまり $U_0 > 0$ であり*、粒子数 N が十分大きいとき（およそ $N > 10^4$ のとき）、平均場エネルギー $U_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2$ が運動エネルギーに比べて十分大きくなる．このとき、時間に依存しないグロス・ピタエフスキー方程式 (2.17) から、運動エネルギーの項を無視する**トーマス・フェルミ近似**ができる：

$$\left[V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + U_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = \mu \Phi(\mathbf{r}) . \quad (2.19)$$

実際の実験で生成されるボース凝縮体の粒子数 ($N = 10^5 \sim 10^6$) では、この近似はよく成り立っている．このときのボース凝縮体の密度分布 $n_{\text{TF}}(\mathbf{r})$ は、

$$n_{\text{TF}}(\mathbf{r}) = |\Phi(\mathbf{r})|^2 = \begin{cases} \frac{\mu - V_{\text{trap}}(\mathbf{r})}{U_0} & (\mu - V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) \geq 0) \\ 0 & (\mu - V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) < 0) \end{cases} \quad (2.20)$$

となる．これはちょうどポテンシャルを $V_{\text{trap}}(\mathbf{r}) = \mu$ で折り返した型をしている (図 2.2)．具体的に、 $V_{\text{trap}}(\mathbf{r})$ として式 (2.4) の非等方的三次元調和ポテンシャルを考えると、

*このとき、原子間には斥力相互作用が働く． ^7Li の場合は $a < 0$ であり、引力相互作用が働く

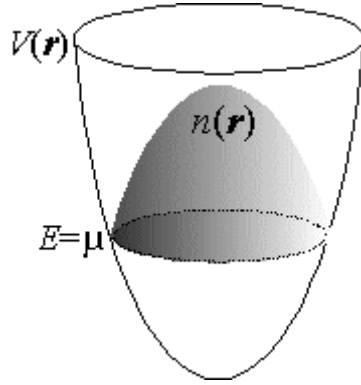


図 2.2 トーマス・フェルミ近似におけるボース凝縮体の密度分布. トラップポテンシャル $V(\mathbf{r})$ を $E=\mu$ (μ は凝縮体の化学エネルギー) の高さで反転させた形をしている.

$$n_{\text{TF}}(\mathbf{r}) = \frac{\mu}{U_0} \left[1 - \left(\frac{x^2}{d_x^2} + \frac{y^2}{d_y^2} + \frac{z^2}{d_z^2} \right) \right] \quad \text{ただし, } d_\nu = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_\nu^2}} \quad (\nu = x, y, z) \quad (2.21)$$

となる. $|\Phi(\mathbf{r})|^2$ の規格化条件 (2.18) と, U_0 の具体形 (2.13) より, 化学ポテンシャル μ と, ピーク密度 $n_0 \equiv n_{\text{TF}}(\mathbf{0})$ は,

$$\mu = \frac{1}{2} \hbar \bar{\omega} \left(15Na \sqrt{\frac{m\bar{\omega}}{\hbar}} \right)^{2/5} = 1.48 \left(Na \hbar^2 \bar{\omega}^3 m^{1/2} \right)^{2/5}, \quad (2.22)$$

$$n_0 = \frac{\mu}{U_0} = 0.118 \left(N_0 m^3 \bar{\omega}^3 / \hbar^3 a^{3/2} \right)^{2/5} \quad (2.23)$$

と表せる.

2.3 ボース凝縮体の時間発展

調和型の磁気トラップから瞬間的に開放されたボース凝縮体の密度分布は, トーマス・フェルミ近似のもとでは, 図 2.3 のように各方向の幅のみが変化する[49] (付録 E.4) :

$$n_{\text{TF}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu}{U_0} \left[1 - \left(\frac{x^2}{d_x^2(t)} + \frac{y^2}{d_y^2(t)} + \frac{z^2}{d_z^2(t)} \right) \right] \quad (2.24)$$

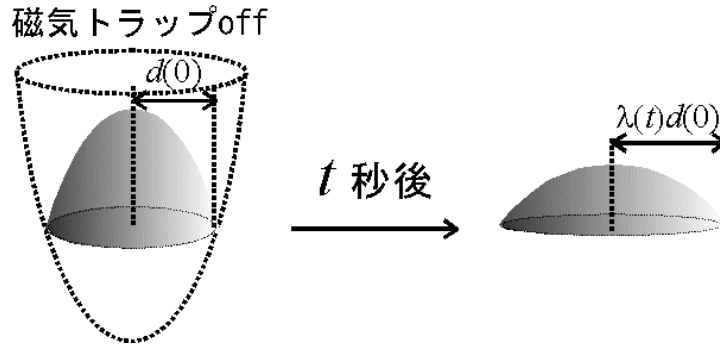


図 2.3 調和型の磁気トラップから開放されたボース凝縮体の時間発展. トーマス・フェルミ近似のもとでは, 各方向の幅のみが変化し, 放物型は維持される.

ただし

$$d_\nu(t) = \lambda_\nu(t)d_\nu(0) = \lambda_\nu(t) \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_\nu^2}} \quad (\nu = x, y, z). \quad (2.25)$$

特に, 非等方性の大きい軸対称ポテンシャル $\omega_x(t) = \omega_y(t) \equiv \omega_\rho(t) \gg \omega_z(t)$ の場合, 各方向の膨張率 $\lambda_z(t)$, $\lambda_\rho(t) \equiv \lambda_x(t) = \lambda_y(t)$ は, 次の微分方程式に従う:

$$\frac{d^2 \lambda_\rho(\tau)}{d\tau^2} = \frac{1}{\lambda_\rho^3 \lambda_z}, \quad \frac{d^2 \lambda_z(\tau)}{d\tau^2} = \frac{\varepsilon^2}{\lambda_\rho^2 \lambda_z^2}. \quad (2.26)$$

ここで $\tau \equiv \omega_\rho t$, $\varepsilon \equiv \omega_z / \omega_\rho \ll 1$ とおいた. 初期条件 $\lambda_\rho(0) = \lambda_z(0) = 1$, $\dot{\lambda}_\rho(0) = \dot{\lambda}_z(0) = 0$ のもとで, ε の 2 次までとる近似では

$$\begin{cases} \lambda_\rho(\tau) = \sqrt{1 + \tau^2} \\ \lambda_z(\tau) = 1 + \varepsilon^2 \left[\tau \arctan \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2} \right] \end{cases} \quad (2.27)$$

となる. よって, アスペクト比の時間発展は

$$\varepsilon_{\text{TF}}(t) \equiv \frac{d_\rho(t)}{d_z(t)} = \varepsilon \frac{\lambda_\rho(t)}{\lambda_z(t)} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \frac{\omega_\rho}{\omega_z} \quad (2.28)$$

となる. これは, 相互作用のない (調和振動子の一粒子基底状態にある) ボース凝縮体を

開放した場合のアスペクト比の時間発展 (付録 E, 式 (E.57))

$$\varepsilon_{\text{HO}}(t) = \sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_\rho}} \sqrt{\frac{1 + \omega_\rho^2 t^2}{1 + \omega_z^2 t^2}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\omega_\rho}{\omega_z}} \quad (2.29)$$

と比べ, 大きく異なる.