物性研究　89－5（2008－2）

修士論文（2006年度）

平衡理論を用いたフェッシュバッハ分子の生成効率*

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻
渡部昌平 †

目 次

1　序論 687
1.1　実験の現状 687
1.2　理論背景 689
1.2.1　縮退フェルミ原子気体の断熱的相図 689
1.2.2　フェッシュバッハ分子の生成効率 690
1.3　概要 692

2　散乱理論 693
2.1　T行列 と散乱断面積 693
2.2　1チャンネルの散乱理論 693
2.3　部分波展開と低エネルギー散乱 696
2.4　チャンネル間の遷移 699
2.5　2チャンネルの散乱理論 701

3　非対角長距離秩序 706
3.1　ボソンの非対角長距離秩序 706
3.2　フェルミオンの非対角長距離秩序 707

4　フェッシュバッハ共鳴を有する縮退フェルミ原子気体の断熱的相図 710
4.1　序論 710
4.2　平衡状態の理論 711
4.3　断熱的相図 714
4.4　分子の生成効率 717

*この論文は、東京大学に提出した修士論文「Conversion Efficiencies of Feshbach Molecules with Equilibrium Theory」を、本誌に掲載するために和訳・再編したものである。

†e-mail:watabe@vortex.c.u-tokyo.ac.jp

5 異核フェッシュバッハ分子の生成効率 718
5.1 序論 718
5.2 平衡状態の理論 719
5.3 ボース原子の “多数の成分”、それと異なるボース原子の “少数の成分”、
それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体 722
5.4 ボース原子の “多数の成分”、フェルミ原子の “少数の成分”、
それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体 726
5.5 フェルミ原子の “多数の成分”、ボース原子の “少数の成分”、
それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体 728
5.6 フェルミ原子の “多数の成分”、それと異なるフェルミ原子の “少数の成分”、
それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体 731
5.7 生成効率を与える公式 732

6 結論 737

1 序論

1.1 実験の現状

1995年に^{7}Li、^{23}Na、^{87}Rbといったアルカリ原子気体のBose-Einstein凝縮(BEC)が実現されたのを機に、極低温原子気体の研究は目覚ましく進展している [1, 2, 3]。このBECの実現は、磁気トラップ、レーザー冷却、蒸発冷却といった実験技術を組み合わせることでなされた。2004年には、光学トラップの技術とフェッシュバッハ共鳴のメカニズムを用いることで、フェルミオンの対凝縮が観測されている [4, 5, 6, 7]。

極低温原子気体では、s波散乱長で特徴づけられる低エネルギー散乱が、気体の性質に重要な役割を果たす。このため、磁場によってs波散乱長を制御できるフェッシュバッハ共鳴は注目を集めている。

フェッシュバッハ共鳴は、入射チャンネルでの入射エネルギーと、入射チャンネルとは別のチャンネルの束縛エネルギーが近づいたときに生じる。束縛状態を持ったこのチャンネルと入射チャンネルは、超微細相互作用によってお互いに遷移する。かける磁場を変えれば、両チャンネルでスピン状態が異なるため、Zeeman効果によって、入射チャンネルにおける連続スペクトルの最低エネルギーと、束縛状態のエネルギーが相対的に変更される。この束縛状態が散乱過程の中間状態になるとき、入射チャンネルにおけるs波散乱長aは、

$$a = a_{\mathrm{bg}} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right) \tag{1}$$

で与えられる。ここで、Bは磁場、B_0は共鳴磁場、ΔBは共鳴幅、a_{bg}は束縛状態を中間状態に介さないときのs波散乱長である。このような磁場に依存する散乱長の振る舞いは、Inouyeたちによって1998年に観測されている [8]。図1は、2003年に測定された、^{40}Kにおける散乱長の磁場依存性である [9]。

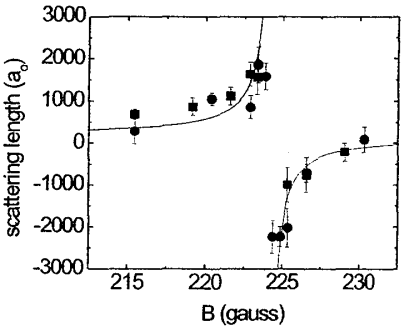

図 1: フェッシュバッハ共鳴の共鳴磁場近傍における、散乱長と磁場の関係。(Regal *et al.*, 2003) [9]。

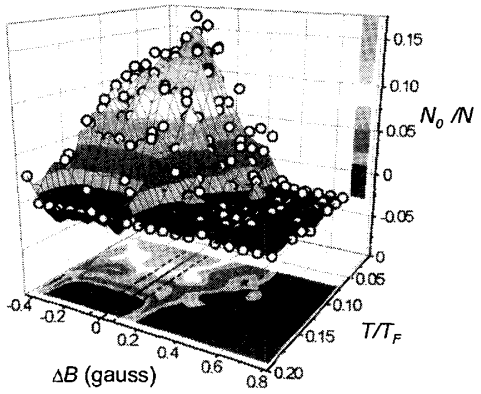

図 2: 磁場と共鳴磁場との差 ΔB と温度 T/T_F の関数としてプロットした、フェルミ原子気体の対凝縮している割合 N_0/N。(Regal *et al.*, 2004) [4]。

希薄原子気体の有効相互作用は s 波散乱長で表されるので、この系の有効相互作用は、引力から斥力まで磁場によって制御できる。特に、引力の強さを磁場によって変化させることで、フェルミ原子気体における Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS) 超流動から BEC へのクロスオーバーが 2004 年に実現された (図 2) [4, 6]。

BCS-BEC クロスオーバーの実現だけでなく、極低温原子気体における分子生成にも多大な情熱が注がれてきた。まず、光会合を用いた極低温の分子生成が、1998 年に実現した [10]。さらに、2003 年には、フェッシュバッハ共鳴の共鳴磁場を通過するように磁場をスイープすることで、寿命の長い分子を極低温で生成することに成功している [11, 12]。

分子の生成効率は、磁場のスイープ速度で決まる。生成される分子の割合は、スイープの速さが遅くなるにつれ、ある値に飽和していくことが分かった [11, 12, 13]。Hodby たちは、生成効率に飽和をもたらすようなゆっくりとしたスイープを用いて、ボース原子 ^{85}Rb とフェルミ原子 ^{40}K それぞれの気体で、同核フェッシュバッハ分子の生成効率を測定した (図 3)[13]。彼らは、ゆっくりしたスイープを用いても分子の生成効率が 100%に到達しないこと、また生成効率が位相空間密度のピークの単調関数になることを見いだした。

極低温の異核二原子分子の気体は、電気双極子モーメントを用いた量子コンピュータのアイディアを実現する系として、期待が寄せられている [14]。現在、その実現に向けた基礎実験が行われている。まず、ボース原子 ^{23}Na とフェルミ原子 ^{6}Li [15]、ボース原子 ^{87}Rb とフェルミ原子 ^{40}K [16]、ボース原子 ^{87}Rb とボース原子 ^{85}Rb [17] といった異種原子間で、フェッシュバッハ共鳴が観測された。また、^{87}Rb 原子と ^{85}Rb 原子で粒子数が異なる混合気体について、異核フェッシュバッハ分子の生成効率が測定された [17]。さらに、3 次元の光学格子中での異核二原子分子の生成が、rf 会合とフェッシュバッハ共鳴を併用することで実現している [18]。

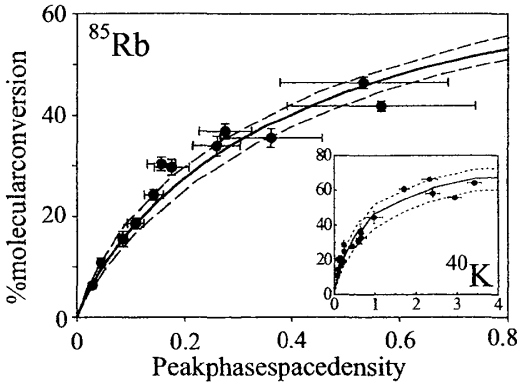

図 3: 位相空間密度のピークの関数としてみた ^{85}Rb と ^{40}K それぞれの分子の生成効率。点が実験データである。実線は SPSS モデルで得られる曲線。破線で挟まれた領域は、SPSS モデルにおけるフィッティングパラメータの取り得る範囲に対応する。(Hodby *et al.*, 2005) [13].

1.2 理論背景

1.2.1 縮退フェルミ原子気体の断熱的相図

前節で述べたように、フェッシュバッハ共鳴を用いて有効相互作用が制御される縮退フェルミ原子気体が実現された。この系では特に、フェルミ原子の BCS 超流動から二原子分子の BEC へのクロスオーバーに焦点があてられている [4, 5, 6, 7, 19, 20, 21, 22]。いくつかの論文で、フェッシュバッハ共鳴のプロセスを表す共鳴相互作用を取り入れた、フェルミオン-ボソン混合気体の相図が報告されている [19, 20, 21]。これらの相図は、磁場 B、あるいはそれに依存するパラメータと温度 T の関数として描かれている。しかし、Regal たち [4] や Zwierlein ら [6] による実験では、共鳴磁場近傍で対凝縮の割合を測定する前に、それよりもはるかに強い磁場中で初期温度 T_{i} を測定している。このため、初期温度の関数として報告された実験データとこれらの理論結果を関係づけることは困難である。

実験結果と理論を比べるには、初期温度が測定された強い磁場から共鳴磁場近傍まで磁場 B がスイープされるとき、系が B-T 平面上をどのように辿るかを理解する必要がある。実験では、遅いスイープ速度が用いられている。このため、スイープしている間では、原子と分子がトラップ中を十分に運動し、衝突することが可能である [4]。そのため、スイープ中も時々刻々、熱平衡と化学平衡に緩和していると仮定するのが、このプロセスの理想的な扱いである。スイープの過程で平衡状態が成り立つとき、エントロピーは保存されるので、このスイープのプロセスは断熱過程であると考えられる。上記の議論により、系はスイープを通して、B-T 平面上を等しいエントロピーをたどるように横断する。このエントロピーの値は試料が用意された初期状態、例えば初期温度 T_{i} を指定すれば決定される。スイープが断熱的だと想定することで、Williams たちは、ディチューニング δ と初期温度 T_{i} の関数として、フェルミ原子とボソン分子の理想混合気体の相図を描いた [23]。ここでディチューニング δ は、磁場 B によって制御されるパラメータであり、原子とフェッシュバッハ分子のエネルギー差を表す。これは、原子とフェッシュバッハ分子

が異なった磁気モーメントを持っていて、線形なZeemanシフトを生じるために現れる。

これと本質的に同じであるが、逆の発想を用いることで、Chenたち [24] は温度計のアイディアを提案した。この温度計は、スイープする前の初期温度から、断熱的な磁場のスイープを経て最終的に系がたどり着くであろう実際の温度を見積るものである。同様の考えがHuたち [25] やCarrら [26] によって提案されている。

Chenたちは、温度計を提案したときの枠組みをもとにして、超流動に参加している粒子数の割合を、Williamsたちと同様に初期状態と関連づけてプロットしている [27]。断熱過程を考慮した超流動相と常流動相の相境界は、実験 [4] とよく一致する。しかし、実験 [4, 6] の結果には、対凝縮の割合がプロットされている。凝縮している粒子数の定義と超流動に参加している粒子数の定義は異なる。本研究では、重心の運動量がゼロである分子とクーパー対からなる対凝縮の割合について研究した。

1.2.2　フェッシュバッハ分子の生成効率

磁場をゆっくりとスイープすることで、フェッシュバッハ共鳴を用いた分子生成が実現した [13]。この分子の生成効率を説明する理論モデルが、Hodbyたちにより提案された [13]。彼らによって提案された生成効率の原理は、位相空間密度と断熱過程との関係に注目したものである。彼らの確率位相空間サンプリング (SPSS) モデルは、位相空間上で十分に近い原子のペアのみが、断熱過程を通して分子を形成するというものである。この理論モデルの背景には、磁場を断熱的にスイープし共鳴磁場を通過するとき、位相空間上での状態の占有は変わらずに、原子のペアを記述する波動関数が分子の波動関数へ滑らかに移り変わるという考えがある。彼らは、一つのフィッティングパラメータγを導入し、モンテカルロシミュレーションをもちいることで、このペア形成のモデルが実験結果を再現するかについて検証した。フィッティングパラメータγは、分子形成を許す位相空間上の原子間距離に関するパラメータである。このシミュレーションの結果は、分子の生成効率が位相空間密度のピークの単調関数であることを示し、実験データとよく一致している [13]。

Williamsたちは、現象論的なSPSSモデルを理解するために、Keldyshの非平衡Green関数論から得られるボルツマン方程式を基にしたアプローチを提案した [28]。このアプローチは、スイープの間に何回も衝突が生じるようなときに有効である。ボルツマン方程式からは、自己エネルギーによるエネルギーシフトを無視した場合、負のディチューニング$\delta < 0$で、分子の生成反応、あるいはその逆の解離反応が停止するという結論が導かれる [28, 29]。つまり、$\delta > 0$のときのみ、二つの原子が分子になり、分子が二つの原子に解離することができる。この結論は、分子の生成と解離における運動量とエネルギーの保存則から得られる。

この帰結から、次に述べる分子生成のメカニズムが提案された [28]。原子のみが用意されているような、共鳴点から遠く離れた正のディチューニングが、スタート地点であるとする。ディチューニングδが下げられるにつれ、$\delta > 0$の領域ではフェッシュバッハ分子の生成と解離が繰り返される。ディチューニングが$\delta = 0$を通過し、負になったとき、分子の生成反応と解離反応は停止し、分子数は飽和する。多くの実験で、磁場に対する分子数の飽和が観測されている (図 4:左図) [4, 6, 11, 12, 13, 17, 30]。

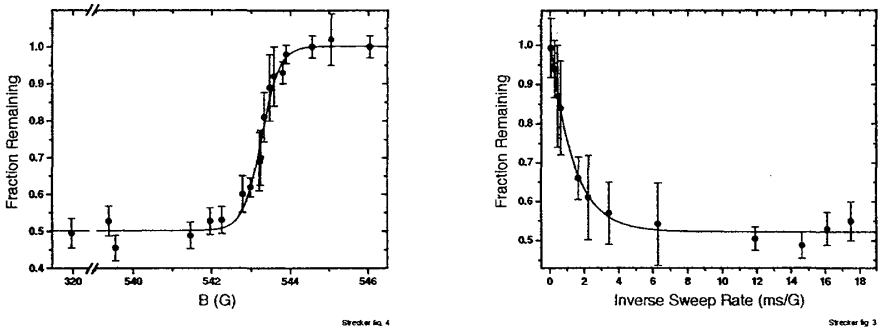

図 4: 分子にならずに原子のまま残存する割合の終磁場依存性（左図）。分子にならずに原子のまま残存する割合のスイープ速度の逆数依存性（右図）。(Strecker *et al.*, 2003) [12].

一方で、スイープ速度に対して、分子を形成せずに残存する原子の割合が測定されている (図 4:右図) [11, 12, 13] 。これにより、スイープ速度が遅くなるにつれ、生成される分子数が飽和することが分かった。ボルツマン方程式によって Williams たちが得たもう一つの結論は、分子の割合が飽和するようなスイープ速度を用いた場合、原子と分子との間に化学平衡と熱平衡がもたらされるというものである [29]。したがって、分子数が飽和する速度でのスイープ過程は、エントロピーを保存する断熱過程と見なすことができる。

以上のことから、断熱的なスイープを用いたときの生成効率が、$\delta = 0$ での分子数で決定されること、またそれらがエントロピーで関係づけられる初期状態の物理量の関数として与えられること、この 2 点を分子の生成効率を与える原理として Williams たちは提案した [28]。この解析には、フィッティングパラメータを必要としない。この原理に従って、Williams たちは、初期状態における位相空間密度のピークの関数として生成効率をプロットした [28]。理想混合気体を用いたにも関わらず、実験 [13] と定性的に一致する結果を、彼らは得た。

この原理は超流動の転移温度よりも高い領域で導かれたが、運動量とエネルギーの保存則を基にしているので、一般的である。したがって、温度によらずにこの原理を適用し、初期温度の関数として生成効率を解析することもできる。第 4 章では、平均場近似の範囲内で共鳴相互作用を取り入れた時の分子の生成効率を、初期温度の関数として求めた [31]。

また、Williams たちは、初期状態における位相空間密度のピークと生成効率との関係式を、古典気体の描像が成り立つ領域で提示した [28]。この関係式は実験結果 [13] を定性的に再現し、SPSS モデルの結果を支持した。

最近になり、ボース原子 ^{87}Rb とボース原子 ^{85}Rb の混合原子気体を用いて、異核フェッシュバッハ分子の断熱的な生成効率が測定された (図 5) [17]。SPSS モデルは、この実験結果を再現している。

この実験に触発され、本研究では、Williams たちによって提案された原理 [28] が、この異核フェッシュバッハ分子の生成効率を説明できるかを議論し、第 5 章にまとめた。また、この他の量子統計性をもつ原子の混合気体についても、断熱的な磁場のスイープを用いたときの異核フェッシュバッハ分子の生成効率を求めた。

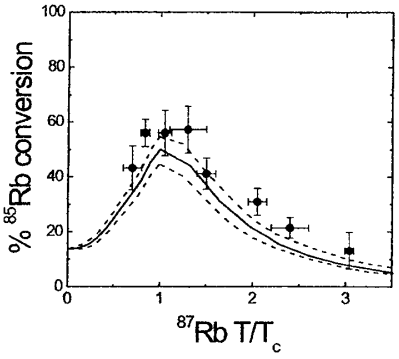

図 5: ^{87}Rb 原子と ^{85}Rb 原子の混合気体における、異核フェッシュバッハ分子の生成効率。点は実験データである。実線は、SPSS モデルで得られた曲線である。破線で挟まれた領域は、SPSS モデルにおけるフィッティングパラメータの取り得る範囲に対応する。(Papp and Wieman, 2006) [17]

1.3　概要

この論文は、第 2 章と第 3 章のレビューと、第 4 章と第 5 章の研究のまとめの二部からなる。

第 2 章では、フェッシュバッハ共鳴について取り扱う。まず 1 チャンネルの散乱理論と中心力を有する散乱問題を解析する。その後、チャンネル間の遷移を引き起こすメカニズムについて議論する。この章の最後に、簡単な 2 チャンネルの散乱問題を用いてフェッシュバッハ共鳴による s 波散乱長の磁場依存性を解析する。

第 3 章では、非対角長距離秩序 (ODLRO) についてレビューする。ここでの議論は、次の章で展開されるフェルミオンの対凝縮の実験 [4, 6] の解析に生かされる。

第 4 章では、フェルミ原子とボソン分子の間で共鳴相互作用を有する、調和ポテンシャルに閉じ込められたフェルミ原子気体について、対凝縮を中心に議論する。このフェルミオンの対凝縮は、凝縮している分子とクーパー対から構成される。このとき、温度 T ではなく、初期温度 T_{i} の関数とみることではじめて、理論と実験を比較することが可能になる。この 2 つの温度を関係づけるアイディアの鍵となるのは、断熱過程でのエントロピー保存である。本研究を通して、BCS-BEC クロスオーバーの実験結果と理論研究との関係が理解される。本章ではさらに、Williams たちの研究 [28] を平均場近似を用いて拡張し、各スピン成分の粒子数が等しいフェルミ原子気体におけるフェッシュバッハ分子の生成効率を、初期温度の関数として解析した。

第 5 章では、各成分で粒子数が異なる二成分混合原子気体を用意したとき、断熱的に磁場をスイープすることで生成される異核フェッシュバッハ分子の生成効率を解析する。調和ポテンシャル中の理想気体の結果は、最も単純な扱いにも関わらず、フィッティングパラメータを用いずに Wieman のグループの実験結果 [17] を再現する。また、初期状態の位相空間密度のピークと、異核フェッシュバッハ分子の生成効率との関係式を導出する。本研究により、最大生成効率は原子の量子統計性に依存することを解明した。

2 散乱理論

この章では、フェッシュバッハ共鳴をレビューする。まず、散乱行列(T行列)を導入し、単一チャンネルの散乱問題を取り扱う。次に、中心力を有する系をもとに、低エネルギー散乱について議論する。チャンネル間の遷移をもたらすメカニズムをみた後、2チャンネルでの散乱問題を用いて、フェッシュバッハ共鳴によるs波散乱長の磁場依存性を議論する。参考文献は、文献 [32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40] である。

2.1 T行列 と散乱断面積

まずはじめに、散乱問題で基本となるT行列$T(\beta,\alpha)$を導入する。ある状態αからある状態βへの弾性散乱を想定する。このとき、単位時間あたりの遷移確率$w_{\alpha\to\beta}$は、T行列$T(\beta,\alpha)$を用いて、

$$w_{\alpha\to\beta} \equiv \frac{2\pi}{\hbar}|T(\beta,\alpha)|^2\rho(E_\beta)_{E_\beta=E_\alpha} \tag{2}$$

と定義される。弾性散乱を考えているので、エネルギーの保存$E_\alpha = E_\beta$が成り立つ。ここで、$\rho(E_\beta)$はエネルギーE_βでの状態密度である。

興味ある簡素な例は、自由粒子として入射するときの弾性散乱である。この場合、状態密度$\rho(E_{\mathbf{k}})$は立体角$d\Omega$を用いて、

$$\rho(E_{\mathbf{k}}) = \frac{m_{\mathrm{r}}k}{(2\pi)^3\hbar^2}d\Omega \tag{3}$$

で与えられる。ここで、$E_{\mathbf{k}}$は運動エネルギー$E_{\mathbf{k}} = \hbar^2k^2/(2m_{\mathrm{r}})$であり、$m_{\mathrm{r}}$は衝突する2粒子の換算質量である。この散乱過程の散乱断面積$d\sigma_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'}$は、単位時間あたりの遷移確率$w_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'}$と入射する粒子の流れ密度$j_{\mathbf{k}} = \hbar k/m_{\mathrm{r}}$の比で表され、

$$d\sigma_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'} = \frac{w_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'}}{j_{\mathbf{k}}} = \frac{m_{\mathrm{r}}^2}{(2\pi\hbar)^2}|T(\mathbf{k}',\mathbf{k})|^2_{k=k'}d\Omega \tag{4}$$

となる。

2.2 1チャンネルの散乱理論

フェッシュバッハ共鳴は、2チャンネルの散乱問題を扱うことで、その本質が理解できる。ここではその入り口として、単一チャンネルを用いた散乱理論を取り扱い、T行列と散乱振幅の関係をみる。

質量m_1と質量m_2を持った、区別できる二つの粒子の弾性散乱を考える。この衝突を通して粒子の内部状態は変わらないとする。

二体問題は、重心運動と相対運動に分離できる。相対運動の波動関数$|\Psi\rangle$は、換算質量$m_{\mathrm{r}} \equiv m_1m_2/(m_1+m_2)$を有するシュレーディンガー方程式、

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{5}$$

の解である。ここで、相対座標系でのハミルトニアン $\hat{H}$ は、相対座標での運動エネルギー項 $\hat{H}_0 = -\hbar^2\nabla^2/(2m_{\rm r})$ と、中心力の相互作用ポテンシャル $\hat{V}$ の和、

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{6}$$

であるとする。$\hat{V}$ は、$\mathbf{r}$ を相対座標とするとき、$\hat{V}|\mathbf{r}\rangle = V(r)|\mathbf{r}\rangle$ をみたす。ポテンシャル $V(r)$ は球対称で、中心から遠く離れた場所 $|\mathbf{r}| \to \infty$ では $V(\mathbf{r}) \to 0$ になるとする。

以上より、式 (5) は、

$$(E - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = \hat{V}|\Psi\rangle \tag{7}$$

と書き表せる。散乱の中心よりはるか遠方では、式 (5) の解は、入射波である平面波と散乱された波である球面波の和になる。そこで、入射波の役割を果たす平面波が解であるようなシュレーディンガー方程式

$$(E - \hat{H}_0)|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = 0 \tag{8}$$

を導入する。ここで、固有関数 $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ は、座標表示で $\langle\mathbf{r}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ であり、固有値 E は $E = \hbar^2k^2/(2m_{\rm r})$ である。ここで、二つのグリーン関数、

$$\hat{G}_0(z) \equiv \frac{1}{z - \hat{H}_0}, \qquad \hat{G}(z) \equiv \frac{1}{z - \hat{H}} \tag{9}$$

を導入する。式 (7) の一般解は、

$$|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle = |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle + \hat{G}_0(E \pm i\varepsilon)\hat{V}|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle \tag{10}$$

で与えられる。添字 "+" の場合は、球面波の部分が散乱の中心から去っていく解を表し、添字 "−" の場合は、球面波の部分が散乱の中心に集まってくる解を表す。

この一般解を、平面波の状態 $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ のみで表すと、式 (10) から形式的に、

$$|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{1 - \hat{G}_0(E \pm i\varepsilon)\hat{V}}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \tag{11}$$

となる。相互作用のないグリーン関数 $\hat{G}_0$ は、ダイソン方程式により完全なグリーン関数 $\hat{G}$ と

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0 + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z) \tag{12}$$

の関係がある。このダイソン方程式より、$1 + \hat{G}(z)\hat{V} = 1/[1 - \hat{G}_0(z)\hat{V}]$ が得られる。したがって、非散乱状態 $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ と、完全なグリーン関数 $\hat{G}$ を用いて、固有状態 $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ は、

$$|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle = |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle + \hat{G}(E \pm i\varepsilon)\hat{V}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \tag{13}$$

と表せる。

次に、式 (10) に戻って、波動関数の漸近形を調べる。座標表示での波動関数は、

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}|\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}\rangle \\ &= \langle \mathbf{r}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle + + \int d\mathbf{r}'\langle \mathbf{r}|\hat{G}_0(E\pm i\varepsilon)|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|\hat{V}|\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}\rangle \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d\mathbf{r} G_0^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm}(\mathbf{r}') \end{aligned} \tag{14}$$

で与えられる。座標空間でのグリーン関数は適当な積分を行うことで、

$$G_0^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \equiv \langle \mathbf{r}|\hat{G}_0^{\pm}(E\pm i\varepsilon)|\mathbf{r}'\rangle = \frac{2m_{\mathrm{r}}}{\hbar^2}\left[-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right] \tag{15}$$

となる。いま興味があるのは、散乱状態の漸近的な振る舞いである。グリーン関数は、条件 $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ のもと、

$$G_0^{\pm}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx -\frac{2m_{\mathrm{r}}}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ikr}}{r}e^{\mp i\mathbf{k}_{\mathrm{r}}\cdot\mathbf{r}'} \tag{16}$$

で表される。ただし、$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r - \mathbf{e}_{\mathrm{r}}\cdot\mathbf{r}' + \mathcal{O}\left(\frac{r'}{r}\right)$ を用いた。ここで、動径方向のベクトル $\mathbf{e}_{\mathrm{r}}$ を $\mathbf{e}_{\mathrm{r}} \equiv \mathbf{r}/r$ と定義し、波数ベクトル $\mathbf{k}_{\mathrm{r}}$ を $\mathbf{k}_{\mathrm{r}} \equiv k\mathbf{e}_{\mathrm{r}}$ と定義した。したがって、波動関数の漸近形は、入射する平面波と散乱される球面波との重ね合わせで表現でき、

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}}) \tag{17}$$

となる。このとき、散乱振幅 $f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}})$ は、

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}}) \equiv -\left[\frac{m_{\mathrm{r}}}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{r}}\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\Psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}')\right] = -\frac{m_{\mathrm{r}}}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_{\mathbf{k}_{\mathrm{r}}}|\hat{V}|\Psi_{\mathbf{k}}^{+}\rangle \tag{18}$$

で与えられる。

式 (17) によると、散乱された粒子の動径方向の流れ密度は、散乱の中心から遠く離れたところで、

$$j_{\mathrm{r}} = \frac{i\hbar}{2m_{\mathrm{r}}}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial r} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) \underset{r\to\infty}{\to} \frac{\hbar k}{m_{\mathrm{r}}r^2}|f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}})|^2 \tag{19}$$

となる。単位時間あたり単位立体角に散乱される粒子の数は、$dN = j_{\mathrm{r}}r^2 d\Omega$ で与えられる。これを入射する粒子の流れ密度 $j_0 = \hbar k/m_{\mathrm{r}}$ で割ることで、散乱断面積 $d\sigma$ として、

$$d\sigma = \frac{dN}{j_0} = |f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}})|^2 d\Omega \tag{20}$$

を得る。式 (4) と式 (20) を比較して、T 行列と散乱振幅との間の関係

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}_{\mathrm{r}}) = -\frac{m_{\mathrm{r}}}{2\pi\hbar^2}T(\mathbf{k}_{\mathrm{r}},\mathbf{k}) \tag{21}$$

が得られる。式 (4) と式 (20) を比べただけでは、絶対値付きの関係しか分からないが、ここでは通常の解析で出てくる符号を採用した。

式 (18) と式 (21) によると、T 行列は

$$T(\mathbf{k}_{\mathrm{r}},\mathbf{k}) = \langle\varphi_{\mathbf{k}_{\mathrm{r}}}|\hat{V}|\Psi_{\mathbf{k}}^{+}\rangle \tag{22}$$

となることがわかる。

2.3　部分波展開と低エネルギー散乱

部分波展開を用いて、低エネルギー散乱を特徴づける s 波散乱長と T 行列の関係をみる。

本節では、相対運動を記述するシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\rm r}}\nabla^2+V(r)\right]\Psi(\mathbf{r})=\left[\frac{\hat{p}_{\rm r}^2}{2m_{\rm r}}+\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2m_{\rm r}r^2}+V(r)\right]\Psi(\mathbf{r})=E\Psi(\mathbf{r}) \tag{23}$$

からスタートする。ここで、$\hat{p}_{\rm r}$ は動径方向の運動量の演算子、

$$\hat{p}_{\rm r}=\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \tag{24}$$

である。また、$\hat{\mathbf{L}}$ は軌道角運動量の演算子である。ポテンシャル $V(r)$ は球対称であるとし、このポテンシャルの有効な距離を R とする。したがって、ポテンシャル $V(r)$ は、$r\gg R$ の領域で $V(r)=0$ を満たす。

ポテンシャルが球対称であるため、シュレーディンガー方程式の解は、粒子の入射する方向に軸対称である。このとき、ラゲール多項式 $P_l(\cos\theta)$ を用いて、波動関数を

$$\Psi_k(\mathbf{r})=\sum_{l=0}^{\infty}R_{k,l}(r)P_l(\cos\theta) \tag{25}$$

と部分波展開することができる。l 番目のラゲール多項式 $P_l(\cos\theta)$ は、

$$\hat{\mathbf{L}}^2P_l(\cos\theta)=l(l+1)\hbar^2P_l(\cos\theta) \tag{26}$$

を満たす $\hat{\mathbf{L}}^2$ の固有関数である。

これらを用いることで、動径方向の波動関数 $R_{k,l}(r)$ を与える方程式

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{k,l}(r)+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{k,l}(r)+\left[k^2-\frac{2m_{\rm r}}{\hbar^2}V(r)\right]R_{k,l}(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R_{k,l}(r)=0 \tag{27}$$

が得られる。ただし、$k^2=2m_{\rm r}E/\hbar^2$ である。

散乱の中心から遠く離れた $r\gg R$ ではこの方程式は、

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{k,l}(r)+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{k,l}(r)+k^2R_{k,l}(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R_{k,l}(r)=0 \tag{28}$$

になる。この形の方程式では、球ベッセル関数 $j_k(kr)$ と球ノイマン関数 $n_k(kr)$ が二つの独立な解として知られている。二つの関数の漸近形は、

$$j_l(x)\to\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{l\pi}{2}\right),\qquad n_l(x)\to-\frac{1}{x}\cos\left(x-\frac{l\pi}{2}\right),\qquad \text{ただし}\quad x\gg1 \tag{29}$$

である。x が小さいところでは、近似的に、

$$j_l(x)\to\frac{x^l}{(2l+1)!!},\qquad n_l(x)\to-\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}},\qquad \text{ただし}\quad x\ll1 \tag{30}$$

である。

したがって、$r \gg R$での動径方向の波動関数は、球ベッセル関数と球ノイマン関数の重ね合わせ

$$R_{k,l}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \tag{31}$$

になる。ここで、A_lとB_lは、今議論した$r \gg R$での解とポテンシャルの影響を強く受ける領域$r \ll R$での解とを、滑らかにつなぐことで決定される。従って、$r \gg R$での解の係数A_lとB_lをみることで、散乱ポテンシャル$V(r)$がどんなものであるかを知ることができる。

動径方向の波動関数の漸近形は、

$$R_{k,l}(r) \to \frac{C_l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \tag{32}$$

で与えられる。ただし、

$$C_l \equiv \sqrt{A_l^2 + B_l^2}, \quad \tan\delta_l = -\frac{B_l}{A_l} \tag{33}$$

とした。位相δ_lは、位相のずれと呼ばれる。この位相のずれをみれば、散乱ポテンシャル$V(r)$の役割がわかる。

式 (17) によると、波動関数の漸近的な振る舞いは、

$$\Psi(r) \to e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{34}$$

である。したがって、式 (32) から、散乱の中心に向かう球面波 e^{-ikr}/r の部分を消去する必要がある。平面波を部分波展開すると、

$$e^{ikr\cos\theta} = \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}\right] \tag{35}$$

になるので、係数として$C_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$を選べば、散乱の中心に向かう球面波が消える。

以上のことを考慮すると、位相のずれを用いた散乱振幅は、

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)(e^{2i\delta_l} - 1) \tag{36}$$

$$\equiv \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l(\theta)P_l(\cos\theta) \tag{37}$$

となる。ただし、部分散乱振幅$f_l(\theta)$を、

$$f_l(\theta) \equiv \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} \tag{38}$$

と定義した。

低エネルギー散乱かつ散乱の中心から遠いという条件 $kR \ll kr \ll 1$ のもとでは、動径方向の波動関数は、

$$R_{k,l}(r) = A_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} - B_l \frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}} \tag{39}$$

と近似される。

一方、低エネルギー散乱 $E \to 0$ を考え、散乱の中心から遠い $r \gg R$ の領域を考えると、動径方向の波動関数を与える方程式は、

$$\frac{d^2}{dr^2}R_{k,l}(r) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_{k,l}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R_{k,l} = 0 \tag{40}$$

となる。この解は、球面調和関数を用いずに容易に見つけることができて、

$$R_{k,l}(r) = c_1 r^l + c_2 r^{-(l+1)} \tag{41}$$

になる。ここで、係数 c_1 と c_2 が波数 k に依存しないという点が重要である。

式 (39) と式 (41) を比較することによって、係数が

$$A_l = c_1 \frac{(2l+1)!!}{k^l}, \qquad B_l = -c_2 \frac{k^{l+1}}{(2l-1)!!} \tag{42}$$

と関係づけられる。したがって、位相のずれは、

$$\tan\delta_l = \frac{c_2}{c_1}\frac{k^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!} \tag{43}$$

となる。低エネルギーの散乱を想定し、$k \to 0$ とするとき、s 波以外の位相のずれ $\delta_{l\neq 0}$ はほとんど無視できる。このとき、s 波散乱の位相のずれは、

$$\delta_0 = \frac{c_2}{c_1}k \tag{44}$$

で与えられる。s 波散乱長 a は、s 波の位相のずれ δ_0 を用いて、

$$k\cot\delta_0 \equiv -\frac{1}{a} \tag{45}$$

で定義される。$k \to 0$ の低エネルギー散乱では、

$$-\frac{1}{a} \approx \frac{k}{\delta_0} = \frac{c_2}{c_1} \tag{46}$$

が成り立ち、s 波散乱長は波数に依存しないことが分かる。

これらの結果から、低エネルギー散乱での散乱振幅 $f(\theta)$ は、s 波散乱長 a を用いて、

$$f(\theta) \approx f_0(\theta)P_0(\cos\theta) = \frac{e^{i\delta_0}\sin\delta_0}{k} \approx -a \tag{47}$$

となることが分かる。したがって、式 (21) と式 (47) から s 波散乱長は T 行列を用いて

$$a = -f(\theta) = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2}T(\mathbf{0},\mathbf{0}) \tag{48}$$

となる。このことから、低エネルギーの散乱では、散乱振幅が散乱される方向 "θ" に依存しないことが分かる。

同種粒子間の散乱を考えるとき、微分散乱断面積は、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \tag{49}$$

で与えられる。ただし、符号 "+" はボソンを、符号 "−" はフェルミオンを表す。同種のフェルミオンが散乱する場合、散乱振幅は方向 "θ" に依存しないので、微分散乱断面積がゼロになる。一方で、散乱する2粒子が同種のボソンのときは、全散乱断面積 σ が、

$$\sigma = 8\pi a^2 \tag{50}$$

で与えられる。

蒸発冷却はレーザー冷却と異なり、希薄な原子気体を量子縮退する温度領域まで冷却することが可能である。弾性散乱は、蒸発冷却で基本的な役割を果たす。同じ内部状態をもった単一種のフェルミ原子気体では、低エネルギー散乱で散乱断面積が消えてしまうために、蒸発冷却がうまくいかない。このことは、異なった種類の原子気体を混合することによって回避される。

2.4 チャンネル間の遷移

この節では、チャンネル間の遷移をもたらす機構について解説する。このチャンネル間の遷移が、フェッシュバッハ共鳴では重要になる。

1つの原子に注目したとき、ハミルトニアンのスピンに依存する部分は、磁場に依る部分と超微細相互作用の部分で構成され、

$$\hat{H}_j^{\rm int} = \left(\frac{a_{\rm hf}}{\hbar^2}\right) \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \hat{\mathbf{i}}_j + \mathbf{B} \cdot \frac{2\mu_{\rm e}\hat{\mathbf{s}}_j - \mu_{\rm N}\hat{\mathbf{i}}_j}{\hbar} \tag{51}$$

と表せる。ただし、添字 j は、いま注目している原子のラベルである。$\hat{\mathbf{s}}_j$ と $\hat{\mathbf{i}}_j$ は、電子スピンと核スピンである。超微細相互作用を特徴づける定数 $a_{\rm hf}$ は、原子の種類に依存する。磁場は $\mathbf{B}$ で表した。$\mu_{\rm e}$ と $\mu_{\rm N}$ は、電子と核の磁気モーメントである。磁気モーメントには $\mu_{\rm e} \gg \mu_{\rm N}$ の関係がある。

電子スピンと核スピンを合わせた原子の全スピン $\mathbf{f} = \mathbf{s} + \mathbf{i}$ の大きさを f、そのスピンを量子化軸へ射影したものを m_f とする。磁場がかかっていない $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ のとき、よい量子数は f と m_f である。

一方で、極端に大きすぎる磁場がかかった $B \gg a_{\rm hf}/(\mu_{\rm e}\hbar)$ の場合は、超微細相互作用を摂動とみなせるので、よい量子数は m_s と m_i になる。ここで、m_s と m_i は電子と核のスピンを磁場へ射影したものである。

これらの中間ぐらいの磁場 $B \simeq a_{\rm hf}/(\mu_{\rm e}\hbar)$ がかかっているとき、よい量子数は m_f である。超微細相互作用は、

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{i}} = \hat{s}_z\hat{i}_z + \frac{1}{2}(\hat{s}_+\hat{i}_- + \hat{s}_-\hat{i}_+) \tag{52}$$

から分かるように、スピンの昇降演算子を含んでいる。このため、全スピンの磁場への射影 $m_f = m_s + m_i$ が保存するような重ね合わせの状態

$$C_{-\frac{1}{2}} \left| m_s = -\frac{1}{2}; m_i = m_f + \frac{1}{2} \right\rangle + C_{\frac{1}{2}} \left| m_s = \frac{1}{2}; m_i = m_f - \frac{1}{2} \right\rangle \tag{53}$$

がよい状態になる。

二つの原子に注目した場合、ハミルトニアンのスピンに依存する部分は、

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\rm int} &= \hat{H}_{\rm int,1} + \hat{H}_{\rm int,2} \\ &= \left(\frac{a_{\rm hf}}{\hbar^2} \right) (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{i}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2 \cdot \hat{\mathbf{i}}_2) + \mathbf{B} \cdot \frac{2\mu_{\rm e}\hat{\mathbf{S}} - \mu_{\rm N}\hat{\mathbf{I}}}{\hbar} \\ &\equiv \hat{H}_{\rm hf} + \hat{H}_z(\mathbf{B}) \end{aligned} \tag{54}$$

で与えられる。ここで、$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ と $\hat{\mathbf{I}} = \hat{\mathbf{i}}_1 + \hat{\mathbf{i}}_2$ は電子と核の全スピンである。ここでは、状態 $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ の二原子の散乱を想定する。この散乱の入射チャンネルを $|\{\alpha\beta\}\rangle$ で表すことにする。状態 $|\{\alpha\beta\}\rangle$ は、状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ の重ね合わせで表現される。S と I は電子と核それぞれの全スピンの大きさで、M_S と M_I はそれらを磁場へ射影したものである。

運動エネルギーの項を除いた2原子のハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \hat{H}_{\rm hf} + \hat{H}_z(\mathbf{B}) + \hat{V}_{\rm C}(r) \tag{55}$$

である。$V_{\rm C}$ は、衝突する2原子の中心力の相互作用で、原子間距離 r に依存する。中心力の相互作用 $V_{\rm C}$ は、直接相互作用と交換相互作用からなる。つまり、一重項と三重項の相互作用からなり、式(52)に似た $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$ という形を持つ。$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$ は、ある電子のスピンを上向きから下向きに、もうひとつのスピンを下向きから上向きに変えるものである。従って、電子の全スピンの磁場への射影 M_s は保存され、状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ は $V_{\rm C}$ のよい状態になっている。

この他の相互作用として、s 波を d 波に変える弱いスピン-スピン双極子相互作用が挙げられる。スピン-スピン双極子相互作用は、トラップされたフェッシュバッハ分子の自発的な崩壊に影響を与える [39, 40]。しかし、この相互作用の大きさは、直接相互作用と交換相互作用の大きさよりも通常小さい。このためにスピン-スピン双極子相互作用は無視した。

状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ は $\hat{H}_z$ の固有状態でもあるので、状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ はハミルトニアン $\hat{H}_z(\mathbf{B}) + \hat{V}_{\rm C}(r)$ の固有状態である。一方、状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ は超微細相互作用 $\hat{H}_{\rm hf}$ の固有状態ではない。しかし、超微細相互作用は $M_S + M_I$ を保存する。フェッシュバッハ共鳴が通常起きるようなやや強い磁場中では、ハミルトニアン $\hat{H}_z(\mathbf{B}) + \hat{V}_{\rm C}(r)$ と比較して、超微細相互作用 $\hat{H}_{\rm hf}$ は摂動とみなせる。したがって、入射チャンネルの状態 $|\{\alpha\beta\}\rangle$ として状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ はよい状態になる。

入射チャンネルとしてある状態 $|S, M_S; I, M_I\rangle$ を考えたとき、この状態は、超微細相互作用 $\hat{H}_{\rm hf}$ によって、$M_S + M_I = M'_S + M'_I$ を満たす他の状態 $|S, M'_S; I, M'_I\rangle$ に遷移しうる。連続スペクトルを持った入射チャンネル $|S, M_S; I, M_I\rangle$ の入射エネルギーが、超微細相互

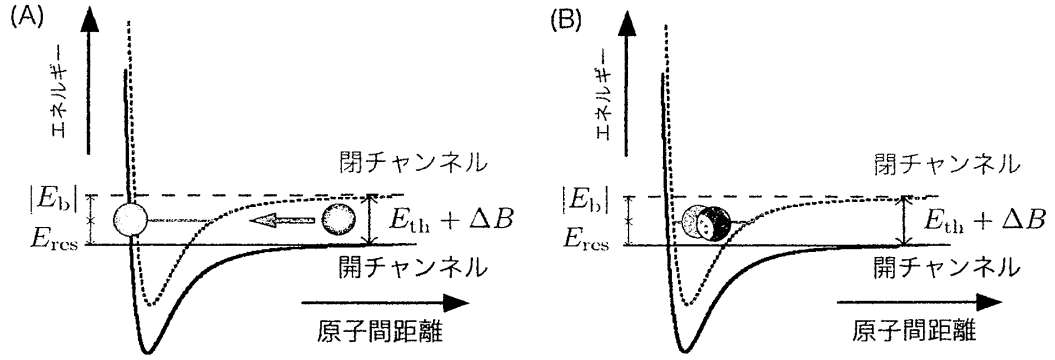

図 6: フェッシュバッハ共鳴の概念的描像。(A) 閉チャンネルの束縛エネルギー $E_{\rm res}$ に近い入射エネルギーをもって、開チャンネルの2原子が衝突しようとする。(B) エネルギーの保存則から、原子間距離の小さいところでのみ、閉チャンネルに遷移しうる。

作用により遷移した状態 $|S, M_S'; I, M_I'\rangle$ での束縛エネルギーに近いとき、フェッシュバッハ共鳴が生じる。

低エネルギー散乱を考えたとき、この束縛状態への遷移は、エネルギー保存則のため、原子間距離が小さい領域でしか許されない。このため、この束縛状態を有するチャンネルは、閉チャンネル (closed channel) と呼ばれる。一方で、入射するチャンネルは、至る所で許されるので、開チャンネル (open channel) と呼ばれる (図 6)。

2.5 2チャンネルの散乱理論

2つのチャンネルを有する散乱理論を用いて、フェッシュバッハ共鳴による s 波散乱長の磁場依存性を議論する。ここでは、入射エネルギー程度の束縛エネルギーを持つ閉チャンネルの束縛状態が、ちょうど1つだけ存在すると仮定する。このとき、有効的に共鳴する準位が一つだけの簡素な散乱問題に帰着される。

2つのチャンネルを有し、2粒子の相対運動を記述する定常状態でのシュレーディンガー方程式は、

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_{\rm op} & \hat{W}_{\rm op:cl} \\ \hat{W}_{\rm cl:op} & \hat{H}_{\rm cl} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\phi_{\rm op}\rangle \\ |\phi_{\rm cl}\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\phi_{\rm op}\rangle \\ |\phi_{\rm cl}\rangle \end{pmatrix} \tag{56}$$

である。対角成分 $\hat{H}_{\rm op}$ と $\hat{H}_{\rm cl}$ は、両チャンネル間で結合がないときの開チャンネルと閉チャンネルのハミルトニアンである。それぞれのチャンネルのハミルトニアンは、運動エネルギーの部分とポテンシャルの部分の和

$$\hat{H}_{\rm op} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_{\rm r}} + V_{\rm op}(\hat{\mathbf{r}}); \qquad \hat{H}_{\rm cl} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_{\rm r}} + V_{\rm cl}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{57}$$

からなる。ここで、$m_{\rm r}$ は換算質量で、ポテンシャルは $V_{\rm op}(\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{r}\rangle = V_{\rm op}(r)|\mathbf{r}\rangle$ と $V_{\rm cl}(\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{r}\rangle = V_{\rm cl}(r)|\mathbf{r}\rangle$ である。エネルギーの基準として、磁場の強さによらず、開チャンネルの連続ス

ペクトルの最低エネルギーを選ぶ。従って、磁場 B の依存性は、閉チャンネルのポテンシャル $V_{\rm cl}(r,B)$ にのみ現れる。

開チャンネルのポテンシャル $V_{\rm op}(r)$ は、原子間距離が十分大きいところ $r\to\infty$ で消える。このポテンシャル $V_{\rm op}(r)$ の簡単な例は、Lennard-Jones 型のポンシャル

$$V_{\rm op}(r)=-4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right] \tag{58}$$

である。ここで、パラメータ ε と σ は、ポテンシャルの深さと形状を特徴づける定数である。

閉チャンネルのポテンシャル $V_{\rm cl}(r,B)$ は、開チャンネルと閉チャンネルとの間の磁気モーメントの差 $\Delta\mu$ の為に、開チャンネルのポテンシャル $V_{\rm op}(r)$ と同じ形状を保ちながらシフトする。ゼロ磁場での開チャンネルと閉チャンネルの連続スペクトルの最低エネルギーの差を $E_{\rm th}$ と表し、Zeeman 効果による両チャンネルのエネルギーシフトの差を $\Delta\mu B$ で表すことにする。このとき、閉チャンネルのポテンシャル $V_{\rm cl}(r,B)$ は、

$$V_{\rm cl}(r,B)=V_{\rm op}(r)+E_{\rm th}+\Delta\mu B \tag{59}$$

で与えられる。

非対角成分 $\hat{W}_{\rm cl:op}$ と $\hat{W}_{\rm op:cl}$ は、開チャンネルから閉チャンネルへ、閉チャンネルから開チャンネルへといった、超微細相互作用による2つのチャンネル間の遷移をもたらす。これら二つの過程は、同じ確率でおこると考えられるので、$\hat{W}^\dagger_{\rm cl:op}=\hat{W}_{\rm op:cl}$ である。

連立した定常状態のシュレディンガー方程式 (56) を改めて書き下すと、

$$\begin{cases}(E-\hat{H}_{\rm op})|\Psi_{\rm op}\rangle &= \hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm cl}\rangle\\ (E-\hat{H}_{\rm cl})|\Psi_{\rm cl}\rangle &= \hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op}\rangle\end{cases} \tag{60}$$

になる。2つのチャンネル間で結合がないときのグリーン関数を

$$\hat{G}_{\rm op}(z)\equiv\frac{1}{z-\hat{H}_{\rm op}},\qquad \hat{G}_{\rm cl}(z)\equiv\frac{1}{z-\hat{H}_{\rm cl}} \tag{61}$$

と定義する。ここで、z は、エネルギーの次元をもつ複素数の変数である。

閉チャンネルの状態は、束縛状態と連続スペクトルを伴う散乱状態の両状態からなる。したがって、閉チャンネルのグリーン関数 $\hat{G}_{\rm cl}(z)$ は、

$$\hat{G}_{\rm cl}(z) = \sum_i\frac{|\Psi_{{\rm cl},i}\rangle\langle\Psi_{{\rm cl},i}|}{z-\varepsilon_i}+\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{|\Psi_{{\rm cl},\mathbf{k}}\rangle\langle\Psi_{{\rm cl},\mathbf{k}}|}{z-\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tag{62}$$

になる。考察の対象としている低エネルギー散乱では、開チャンネルにおける入射エネルギーが、閉チャンネルにおけるどの連続スペクトルのエネルギーよりも低くなっている。したがって、閉チャンネルの状態はポテンシャル $V_{\rm cl}(r,B)$ で閉じ込められた束縛状態のみである。前にも述べたように、単純化のため、開チャンネルでの入射状態と共鳴する閉チャンネルの束縛状態は、ただ一つであるとする。このときの束縛状態を $|\Psi_{\rm res}\rangle$ と表し、

その状態のエネルギーを $E_{\rm res}$ とする。いま、この束縛エネルギー $E_{\rm res}$ と入射エネルギー E がほぼ等しく、$E \simeq E_{\rm res}$ となる状況を考えているので、グリーン関数は近似的に、

$$\hat{G}_{\rm cl}(E) \approx \frac{|\Psi_{\rm res}\rangle\langle\Psi_{\rm res}|}{E - E_{\rm res}} \tag{63}$$

と表せる。

式 (60) の第二式より、閉チャンネルの状態は、

$$|\Psi_{\rm cl,\mathbf{k}}\rangle = \hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \tag{64}$$

になる。

閉チャンネルとの結合を考えない開チャンネルだけでの散乱状態 $|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle$ は、2.2 節で議論した。この状態は、開チャンネルのハミルトニアン $\hat{H}_{\rm op}$ の固有状態であり、

$$\hat{H}_{\rm op}|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm r}}|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle \tag{65}$$

を満たす。また、式 (13) により平面波を表す状態 $|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle$ を用いて、

$$|\Psi^{\pm}_{\mathbf{k}}\rangle = |\varphi_{\mathbf{k}}\rangle + \hat{G}_{\rm op}(E \pm i\varepsilon)\hat{V}_{\rm op}|\varphi_{\mathbf{k}}\rangle \tag{66}$$

と記述できる。

これより、閉チャンネルとの結合も考慮した場合、連続スペクトルをもつ開チャンネルの散乱状態は、

$$\begin{aligned} |\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle &= |\Psi^{+}_{\mathbf{k}}\rangle + \hat{G}_{\rm op}(E + i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm cl,\mathbf{k}}\rangle \\ &= |\Psi^{+}_{\mathbf{k}}\rangle + \hat{G}_{\rm op}(E + i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \end{aligned} \tag{67}$$

となる。最後の等式で、式 (64) を用いた。

式 (64) の束縛状態を用いることで、式 (60) の第一式を、開チャンネルの状態 $|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle$ の方程式

$$(E - \hat{H}_{\rm eff})|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle = 0 \tag{68}$$

と書き換えることができる。ここで、有効ハミルトニアン $\hat{H}_{\rm eff}$ を

$$\hat{H}_{\rm eff} \equiv \hat{H}_{\rm op} + \hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op} \tag{69}$$

$$\equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_{\rm r}} + \hat{V}_{\rm eff} \tag{70}$$

と定義する。有効ポテンシャル $\hat{V}_{\rm eff}$ の定義は、

$$\hat{V}_{\rm eff} \equiv \hat{V}_{\rm op} + \hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op} \tag{71}$$

である。

式 (22) の関係を基に、2チャンネルモデルでのT行列 $T(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ が評価できる。それは、

$$\begin{aligned} T(\mathbf{k}',\mathbf{k}) &= \langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm eff}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \\ &= \langle\varphi_{\mathbf{k}'}|(\hat{V}_{\rm op}+\hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op})\left[|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle+\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle\right] \\ &= \langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm op}|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle+\left[\langle\varphi_{\mathbf{k}'}|+\langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm op}\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\right]\hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \\ &= \langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm op}|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle+\langle\Psi^-_{\mathbf{k}'}|\hat{W}_{\rm op:cl}\hat{G}_{\rm cl}(E)\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \end{aligned} \tag{72}$$

となる。最後の等式では、$\langle\varphi_{\mathbf{k}'}|+\langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm op}\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\equiv\langle\Psi^-_{\mathbf{k}'}|$ を用いた。閉チャンネルとの結合を無視した場合、開チャンネルにおける散乱過程のT行列は、$T_{\rm bg}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\equiv\langle\varphi_{\mathbf{k}'}|\hat{V}_{\rm op}|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle$ で定義できる。式 (63) を用いると、T行列は、

$$T(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \approx T_{\rm bg}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\frac{\langle\Psi^-_{\mathbf{k}'}|\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle}{E-E_{\rm res}} \tag{73}$$

になる。

式 (60) の第二式に、共鳴束縛状態 $\langle\Psi_{\rm res}|$ を左からかけることで、関係式

$$(E-E_{\rm res})\langle\Psi_{\rm res}|\Psi_{\rm cl,\mathbf{k}}\rangle=\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle \tag{74}$$

を得る。これより、重なり因子 $A_{\rm res}\equiv\langle\Psi_{\rm res}|\Psi_{\rm cl,\mathbf{k}}\rangle$ として、

$$A_{\rm res}\equiv\langle\Psi_{\rm res}|\Psi_{\rm cl,\mathbf{k}}\rangle=\frac{\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle}{E-E_{\rm res}} \tag{75}$$

を得る。式(63)、式 (67)、式 (75) から、開チャンネルで連続スペクトルをもつ状態 $|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle$ は、

$$\begin{aligned} |\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle &= |\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle+\frac{\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\rm op,\mathbf{k}}\rangle}{E-E_{\rm res}} \\ &= |\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle+\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle A_{\rm res} \end{aligned} \tag{76}$$

になる。式 (76) に、$\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}$ を左からかけることで、$|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle$ を用いて表した重なり因子

$$A_{\rm res}=\frac{\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle}{E-E_{\rm res}-\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle} \tag{77}$$

が得られる。式 (73) のT行列と、式 (75)、式 (77) の重なり因子より、T行列は

$$\begin{aligned} T(\mathbf{k}',\mathbf{k}) &\approx T_{\rm bg}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\langle\Psi^-_{\mathbf{k}'}|\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle A_{\rm res} \\ &= T_{\rm bg}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\frac{\langle\Psi^-_{\mathbf{k}'}|\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi^+_{\mathbf{k}}\rangle}{E-E_{\rm res}-\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}\hat{G}_{\rm op}(E+i\varepsilon)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle} \end{aligned} \tag{78}$$

で与えられる。

2.2節で見たように、T行列と散乱振幅の関係は、

$$f(\theta) = -\frac{m_{\rm r}}{2\pi\hbar^2}T(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \tag{79}$$

である。特に、2.3節で見たように、低エネルギー散乱の場合、散乱振幅とs波散乱長aとの間には次の関係

$$f(\theta) = -a \tag{80}$$

が成り立つ。式(78)、式(79)、式(80)から、低エネルギー散乱を想定し、$|\mathbf{k}| \to \mathbf{0}$、$|\mathbf{k}'| \to \mathbf{0}$としたときの$s$波散乱長$a$を求めると、

$$a = a_{\rm bg} - \frac{\frac{m_{\rm r}}{2\pi\hbar^2}|\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\mathbf{0}}^{+}\rangle|^2}{E_{\rm res} + \langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}\hat{G}_{\rm op}(0)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle} \tag{81}$$

となる。ここで、$a_{\rm bg}$はチャンネル間で遷移がない場合のs波散乱長で、$a_{\rm bg} \equiv m_{\rm r}T_{\rm bg}(\mathbf{0},\mathbf{0})/(2\pi\hbar^2)$で定義される。$|\mathbf{k}| \to 0$のときの状態$|\Psi_{\mathbf{0}}^{+}\rangle$と状態$|\Psi_{\mathbf{0}}^{-}\rangle$の違いは無視した。

磁場がかかってないとき、閉チャンネルの束縛エネルギー$E_{\rm res}$は、$E_{\rm res}(B=0) = E_{\rm th} + E_{\rm b}$で与えられる。$E_{\rm b}$は、閉チャンネルにおける連続スペクトルの最低エネルギーから見た、束縛エネルギーである。閉チャンネルの束縛エネルギーは、両チャンネルにおける磁気モーメントの差の為に、磁場によって、

$$E_{\rm res} = E_{\rm th} + E_{\rm b} + \Delta\mu B \tag{82}$$

のようにコントロールされる（図6)。

開チャンネルにおける連続スペクトルの最低エネルギーと、閉チャンネルでの束縛エネルギーが一致する磁場$B_{\rm res}$は、

$$E_{\rm res}(B_{\rm res}) = E_{\rm th} + E_{\rm b} + \Delta\mu B_{\rm res} = 0 \tag{83}$$

で決まる。式(82)と式(83)より、束縛状態のエネルギーは、

$$E_{\rm res} = \Delta\mu(B - B_{\rm res}) \tag{84}$$

である。

従って、s波散乱長は、

$$a = a_{\rm bg} - \frac{\frac{m_{\rm r}}{2\pi\hbar^2}|\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\mathbf{0}}^{+}\rangle|^2}{\Delta\mu(B - B_{\rm res}) + \langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}\hat{G}_{\rm op}(0)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle} \tag{85}$$

で与えられる。共鳴の幅を

$$\Delta B \equiv \frac{m_{\rm r}}{2\pi\hbar^2 a_{\rm bg}\Delta\mu}|\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}|\Psi_{\mathbf{0}}^{+}\rangle|^2 \tag{86}$$

と定義し、観測可能な共鳴磁場を

$$B_0 = B_{\rm res} - \frac{1}{\Delta\mu}\langle\Psi_{\rm res}|\hat{W}_{\rm cl:op}\hat{G}_{\rm op}(0)\hat{W}_{\rm op:cl}|\Psi_{\rm res}\rangle \tag{87}$$

と定義することで、フェッシュバッハ共鳴により増強されたs波散乱長aを求めることができる。それは、

$$a = a_{\rm bg}\left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0}\right) \tag{88}$$

となる。

以上より、s波散乱長は、フェッシュバッハ共鳴の機構を用いることによって、磁場で制御できる。この振る舞いは、実験でも観測されている[8]。

3　非対角長距離秩序

次の第4章では、磁場を断熱的にスイープしたときのフェルミオンの対凝縮の割合を議論する。クーパーペアになることで対凝縮するこの対の数は、2体の密度行列の最大固有値として定義される。この最大固有値と非対角長距離秩序 (ODLRO) には密接な関係がある。本章ではまず最初に、ボソンの場合についての非対角長距離秩序を簡潔にレビューする。次にフェルミオンでの非対角長距離秩序についてまとめる。参考文献は、文献 [32, 33, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47] である。

3.1　ボソンの非対角長距離秩序

一体の密度行列は、

$$\rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \equiv \langle \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{\Phi}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{89}$$

で定義される。ただし、$Z \equiv \mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\}$ を分配関数とし、$\langle\cdots\rangle \equiv Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\cdots\}$ とする。一様な気体では、並進対称性により、運動量がよい量子数になる。このとき場の演算子は、$\hat{\Phi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{b}_{\mathbf{k}}/\sqrt{V}$ である。従って、一体の密度行列は、

$$\rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{\langle \hat{b}_{\mathbf{0}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{0}}\rangle}{V} + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}\rangle e^{-\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \tag{90}$$

で与えられる。ここで、$\langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q}}\rangle = \langle \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}\rangle \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$ を用いた。式 (90) の右辺では、第二項が $|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2| \to \infty$ のとき消える。それは、$\mathbf{k}$ の和をとると激しく振動し、総和として相殺するからである。結果として、一体の密度行列は、

$$\lim_{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\to\infty} \rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{N_0}{V} \tag{91}$$

になる。ここで、N_0 は、運動量がゼロの状態を占有している粒子数で、$N_0 \equiv \langle \hat{b}_{\mathbf{0}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{0}}\rangle$ で定義される。N_0 は、BEC が生じているときのみ、全粒子数 N のオーダーになる。以上より、ボソンにおける一体の密度行列は、BEC が生じているとき、長距離 $|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2| \to \infty$ でゼロにならない。このことから、非対角長距離秩序（ODLRO）が生じることが分かる。

スペクトル分解をしたとき、オーダーが $\mathcal{O}(N)$ になる一体の密度行列の最大固有値がただ一つ存在すると仮定する。このとき、密度行列は、

$$\lim_{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\to\infty} \rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = N_{\mathrm{c}}\phi^*(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2) \tag{92}$$

と書ける。N_{c} は最大固有値で、$\phi(\mathbf{r})$ は規格化された固有関数である。他の固有値はオーダーが1程度である。$\langle\hat{\Phi}(\mathbf{r})\rangle \equiv \sqrt{N_{\mathrm{c}}}\phi(\mathbf{r})$ とおいたとき、一体の密度行列は、

$$\lim_{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\to\infty} \rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \langle\hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\rangle\langle\hat{\Phi}(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{93}$$

となり、式(92) を満たす。$\langle\hat{\Phi}(\mathbf{r})\rangle \equiv \Phi(\mathbf{r})$ は、秩序パラメータである。BECが生じているときは、秩序パラメータの値はゼロにならない。式 (91)、式(92)、式(93) によると、一様系の場合、次の関係

$$\Phi(\mathbf{r}) \equiv \langle\hat{\Phi}(\mathbf{r})\rangle = \sqrt{N_{\mathrm{c}}}\phi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{N_0}{V}} \tag{94}$$

が得られる。最大固有値 N_{c} が、凝縮した粒子数 N_0 と一致し、

$$N_{\mathrm{c}} = N_0 = \int d\mathbf{r}|\Phi(\mathbf{r})|^2 \tag{95}$$

になることがわかる。

3.2 フェルミオンの非対角長距離秩序

フェルミオンの場合、一体の密度行列は長距離 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \to \infty$ のときゼロになる。これは、ボソンの場合、一つの量子状態を巨視的な数の粒子で占有できるが、フェルミオンでは、パウリの排他率のため各状態を一個づつでしか占有できないからである。一様な理想フェルミ気体では、絶対零度での一体の密度行列が、

$$\begin{aligned}\rho_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) &= \langle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2)\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \\ &= \frac{1}{2\pi^2}\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|^3}[\sin(k_{\mathrm{F}}|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|) - k_{\mathrm{F}}|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\cos(k_{\mathrm{F}}|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)]\end{aligned} \tag{96}$$

で与えられる [42]。ここで k_{F} は、フェルミ波数である。フェルミオンにおける一体の密度行列は、$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \to \infty$ のとき、上式から $\rho(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \to 0$ と分かるので、非対角長距離秩序を持ち合わせない。

次に、2体の密度行列についてみることにする。上向きと下向きの擬スピンをもつ2成分のフェルミ気体を想定する。このとき、2体の密度行列は、

$$\rho_2(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2';\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \equiv \langle\hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}_1')\hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}_2')\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1)\rangle \tag{97}$$

で定義される。一様系での2体の密度行列は、

$$\rho_2(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2';\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}_1',\mathbf{k}_2',\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\langle\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}\rangle e^{-i\mathbf{k}_1'\cdot\mathbf{r}_1'}e^{-i\mathbf{k}_2'\cdot\mathbf{r}_2'}e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2}e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1} \tag{98}$$

である。

運動量演算子 $\hat{\mathbf{P}}$ を、$\hat{\mathbf{P}} \equiv \sum_{\mathbf{k}}\hbar\mathbf{k}(\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}} + \hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}})$ と定義する。$\hat{\mathbf{P}}$ と $\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}$ の交換関係に対する統計平均を求めると、

$$\begin{aligned}\langle[\hat{\mathbf{P}},\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}]\rangle &= Z^{-1}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}(\hat{\mathbf{P}}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1})\right\} \\ &\quad - Z^{-1}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}(\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2'}^\dagger\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}\hat{\mathbf{P}})\right\} \\ &= 0\end{aligned} \tag{99}$$

となる。最後の等式では、一様な気体であることからくる関係 $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$ を用いた。

一方、計算してみると分かるが、$\hat{\mathbf{P}}$ と $\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}$ の交換関係は、

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}] = \hbar(\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1} \tag{100}$$

で与えられる。

式 (99) と式 (100) より、関係式

$$\hbar(\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}\rangle = 0 \tag{101}$$

を得る。したがって、$\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}$ の統計平均は、

$$\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}\rangle = \langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'_1}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,\mathbf{k}'_2}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\uparrow,\mathbf{k}_1}\rangle\delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2=\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} \tag{102}$$

になる。

結果として、２体の密度行列は、

$$\rho_2(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''}\left\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\uparrow,-\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\right\rangle \tag{103}$$

$$\times e^{i\mathbf{k}\cdot(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2}-\frac{\mathbf{r}'_1+\mathbf{r}'_2}{2})}e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}'_1-\mathbf{r}'_2)}e^{i\mathbf{k}''\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \tag{104}$$

で与えられる。

C. N. Yang は論文 [41] で、２体の密度行列が消えない３つの場合

$$\text{(a)} \qquad \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1 \quad \text{かつ} \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2; \tag{105}$$

$$\text{(b)} \qquad \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_2 \quad \text{かつ} \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_1; \tag{106}$$

$$\text{(c)} \qquad \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2, \quad \text{かつ} \quad |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \to \infty \tag{107}$$

をとりあげている。非対角長距離秩序を与えるのが、場合 (c) である。この場合 (c) について、フェルミオンの対によって非対角長距離秩序が生じることを、ボソンの場合のアナロジーを用いて確認する。そのために、

$$\mathbf{R} \equiv \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{s} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{R}' \equiv \frac{\mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}'_2}{2}, \quad \mathbf{s}' \equiv \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2 \tag{108}$$

で与えられる重心座標 $\mathbf{R}$、$\mathbf{R}'$ と相対座標 $\mathbf{s}$、$\mathbf{s}'$ を導入する。このとき、２体の密度行列は

$$\rho_2(\mathbf{R}', \mathbf{s}'; \mathbf{R}, \mathbf{s}) = \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''}\left\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\uparrow,-\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\right\rangle \tag{109}$$

$$\times e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{s}'}e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{s}} \tag{110}$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}\left\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,-\mathbf{k}'}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}''}\hat{a}_{\uparrow,-\mathbf{k}''}\right\rangle e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{s}'}e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{s}} \tag{111}$$

$$+\frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}(\neq\mathbf{0}),\mathbf{k}',\mathbf{k}''}\left\langle\hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\hat{a}_{\uparrow,-\mathbf{k}''+\frac{\mathbf{k}}{2}}\right\rangle \tag{112}$$

$$\times e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{s}'}e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{s}} \tag{113}$$

になる。

1体の密度行列は、ある状態で位置$\mathbf{r}_2$にいる粒子を1個消し、位置$\mathbf{r}_1$に1個粒子を生成したとき、系が初めの状態にどれだけ留まっているかを表す確率振幅になっている [42]。非対角長距離秩序が存在することは、長距離$|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|\to\infty$のとき、この確率振幅がゼロにならないことを意味する。

そこで、フェルミオンの2体の密度行列を、ある状態で重心の位置が$\mathbf{R}$のペアを一個消して、ペアを一個、重心の位置が$\mathbf{R}'$になるように生成したとき、初めの状態にどれだけ留まっているかを表す確率振幅と解釈する。このとき、非対角長距離秩序が存在することは、ペアを消滅させたときの対の重心の位置$\mathbf{R}$と、ペアを生成させるときの対の重心の位置$\mathbf{R}'$が遠く離れて、$|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|\to\infty$であっても、確率振幅がゼロにならないことを意味する。このときの2体の密度行列は、

$$\rho_2(\mathbf{R}',\mathbf{s}';\mathbf{R},\mathbf{s}) \quad \overrightarrow{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|\to\infty} \quad \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}''}\left\langle \hat{a}^\dagger_{\uparrow,\mathbf{k}'}\hat{a}^\dagger_{\downarrow,-\mathbf{k}'}\hat{a}_{\downarrow,\mathbf{k}''}\hat{a}_{\uparrow,-\mathbf{k}''}\right\rangle e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{s}'}e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{s}} \tag{114}$$

で表される。

スペクトル分解をしたとき、オーダーが$\mathcal{O}(N)$になる2体の密度行列の最大固有値がただ一つあると仮定する。このとき、密度行列は

$$\lim_{\substack{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1'|\to\infty\\(\mathbf{r}_1\approx\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1'\approx\mathbf{r}_2')}}\rho_2(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2';\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=N_{\mathrm{c}}\varphi^*(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2')\varphi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \tag{115}$$

と書き表せる。ここで、N_{c}はオーダーNの最大固有値で、$\varphi(\mathbf{r},\mathbf{r}')$は$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\to\infty$でゼロになる規格化された固有関数とする。ボソンの場合のアナロジーによって、二体の密度行列は、

$$\lim_{\substack{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1'|\to\infty\\(\mathbf{r}_1\approx\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1'\approx\mathbf{r}_2')}}\rho_2(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2';\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\langle\hat{\Psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}_1')\hat{\Psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}_2')\rangle\langle\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{116}$$

となる。ただし、$\langle\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_2)\rangle\equiv\sqrt{N_{\mathrm{c}}}\varphi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$とした。

したがって、このときの最大固有値は、

$$N_{\mathrm{c}}=\int d\mathbf{r}_1\int d\mathbf{r}_2|\langle\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_2)\rangle|^2 \tag{117}$$

となることがわかる。ボソンの場合のアナロジーによって、オーダーが$\mathcal{O}(N)$の最大固有値N_{c}を、凝縮したクーパー対の粒子数N_{p}と見なす。

一様系では、クーパー対の波動関数$\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$は、

$$\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \equiv \langle\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_2)\rangle \tag{118}$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\langle\hat{a}_{\downarrow\mathbf{k}}\hat{a}_{\uparrow-\mathbf{k}}\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \tag{119}$$

となる。このとき、凝縮したクーパー対の数は、

$$\begin{aligned} N_{\mathrm{p}} &\equiv \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{s} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{s}} \langle \hat{a}_{\downarrow\mathbf{q}} \hat{a}_{\uparrow-\mathbf{q}} \rangle^{\dagger} \langle \hat{a}_{\downarrow\mathbf{k}} \hat{a}_{\uparrow-\mathbf{k}} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} |\langle \hat{a}_{\downarrow\mathbf{k}} \hat{a}_{\uparrow-\mathbf{k}} \rangle|^2 \end{aligned} \tag{120}$$

で与えられる。波数空間でのクーパ対の波動関数は、$\Phi(\mathbf{k}) \equiv \langle \hat{a}_{\downarrow\mathbf{k}} \hat{a}_{\uparrow-\mathbf{k}} \rangle$ となる。したがって、凝縮したクーパー対の数は、$N_{\mathrm{p}} = \sum_{\mathbf{k}} |\Phi(\mathbf{k})|^2$ で与えられる。BCS の平均場理論で用いられる通常の Bogoliubov 変換を用いて [45]、クーパー対の波動関数を求めると、

$$\Phi(\mathbf{k}) = -\frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \tag{121}$$

となる。したがって、凝縮したクーパー対の数は、

$$N_{\mathrm{p}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Delta|^2}{4E_{\mathbf{k}}^2} \tanh^2 \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \tag{122}$$

$$= V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\Delta|^2}{4E_{\mathbf{k}}^2} \tanh^2 \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \tag{123}$$

で与えられる。絶対零度で、上式は解析的に積分が実行でき [46, 47]、

$$N_{\mathrm{p}} = \frac{V}{8\pi} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} |\Delta|^{3/2} \sqrt{\frac{\mu}{|\Delta|} + \sqrt{1 + \left(\frac{\mu}{|\Delta|}\right)^2}} \tag{124}$$

となる。

次の章では、この凝縮したクーパー対の数を用いて、磁場を断熱的にスイープした時のフェルミオンの対凝縮の割合を解析する。

4　フェッシュバッハ共鳴を有する縮退フェルミ原子気体の断熱的相図

4.1　序論

フェッシュバッハ共鳴を用いることで、相互作用を制御できる量子縮退したフェルミ系を実験対象として扱うことが可能になった。フェルミ原子の BCS 超流動から二原子分子の Bose-Einstein 凝縮へのクロスオーバーに焦点を当てた研究は、この系に対する研究の主流の一つをなしている。 [4, 5, 6, 7, 19, 20, 21, 22]。

この章では、Williams たちによって得られた、フェルミ原子とボース分子の理想混合気体における断熱的相図 [23] を、平均場近似の範囲内で共鳴相互作用を取り入れること

によって拡張する。調和トラップの効果は、局所密度近似 (LDA) を用いて導入する。共鳴相互作用を取り入れることで、論文 [23] では無視されていたBCS超流動についても記述できるようになる。

具体的には、温度Tとディチューニングδの関数としてエントロピーを求め、δ-T平面上に等エントロピー曲線を描く。この等エントロピー曲線は、ディチューニングδの断熱的な変化に伴って系がδ-T平面上を横断するときの経路とみなせる。この経路をもとに、ディチューニングδと、磁場をスイープする前の原子気体における初期温度$T_{\rm i}$の関数として、対凝縮の割合を決定する。この章での解析によって、断熱的な磁場のスイープを用いたBCS-BECクロスオーバーの実験に対する直感的な理解が得られる。

断熱的な磁場のスイープを用いたときの分子の生成効率も、本研究の研究対象である。磁場を断熱的にスイープするとき、生成効率は位相空間密度のピークの単調関数になることが実験によりわかった [13]。ここでは、理想気体を用いた分子の生成効率の計算 [28] を、共鳴相互作用の効果が平均場近似の範囲内で入った場合に拡張する。

4.2 平衡状態の理論

取り扱うハミルトニアンは、ボソンと二成分のフェルミオンが結合したモデル [20, 45, 48]、

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d\mathbf{r}[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})H_{\rm a}(\mathbf{r})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) + \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r})H_{\rm m}(\mathbf{r})\hat{\phi}(\mathbf{r})] \\ &\quad +\kappa\int d\mathbf{r}[\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r})\hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}) + \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\hat{\phi}(\mathbf{r})] \end{aligned} \tag{125}$$

である。ここで、添字σが繰り返されるときは、擬スピン$\sigma = \{\uparrow,\downarrow\}$についての和を表す。フェルミ原子とボソン分子の場の演算子は、それぞれ$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$と$\hat{\phi}(\mathbf{r})$で書かれ、フェルミオンの反交換関係とボソンの交換関係を満たす。原子と分子の一粒子ハミルトニアンはそれぞれ、$H_{\rm a}(\mathbf{r}) = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V_{\rm a}(\mathbf{r})$と$H_{\rm m}(\mathbf{r}) = -(\hbar^2/2M)\nabla^2 + V_{\rm m}(\mathbf{r}) + \delta$で与えられる。ここで、原子の質量は$m$、分子の質量は$M = 2m$である。フェルミ原子の感じるポテンシャル$V_{\rm a}(\mathbf{r})$は、擬スピンの状態によらず同じであるとし、トラップの形状は調和ポテンシャル$V_{\rm a}(\mathbf{r}) = m\omega_0^2 r^2/2$であるとする。一方で、分子の感じるポテンシャル$V_{\rm m}(\mathbf{r})$は、$V_{\rm m}(\mathbf{r}) = M\omega_0^2 r^2/2$であるとする。この仮定は、光学双極子トラップを用いた実験 [49] で成立している。原子と分子の最も低い一粒子エネルギーの差は、ディチューニング$\delta(B)$で表され、外部磁場Bで調節することができる。これは、原子と分子が異なった磁気モーメントを持っていて、線形のZeemanシフトを生じるためである。通常、エネルギーの基準には、磁場の強さによらず、原子の一粒子状態の最低エネルギーが選ばれる。擬スピンの状態が異なる二つのフェルミ原子は、結合定数がκである共鳴相互作用を通して、ボース分子になる。同様に、ボース分子はこの共鳴相互作用を通して、フェルミ原子に解離する。ここでは、単純な原子間の相互作用は無視した。これは、原子間の有効相互作用をみたとき、共鳴相互作用からの寄与$-\kappa^2/\delta$が、共鳴近傍で重要となるからである。

全粒子数が保存するという拘束条件を課すために、化学ポテンシャルμを導入し、グランドカノニカルハミルトニアン$\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{H} - \mu\hat{N}$を取り扱うことにする。ただし、全粒子

数の演算子は、$\hat{N} \equiv \int d\mathbf{r}[\sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) + 2\hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\phi}(\mathbf{r})]$ と定義する。最後の項の因子２は、分子が２個の原子から構成されていることを反映している。この取り扱いは、原子と分子の間で化学平衡を仮定していることになる [23, 29]。

超流動相では、ボース分子の場の演算子を二つの部分

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\mathbf{r}) &= \langle \hat{\phi}(\mathbf{r}) \rangle + \tilde{\phi}(\mathbf{r}) \\ &= \Phi(\mathbf{r}) + \tilde{\phi}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{126}$$

に分けられる。ここで、$\Phi(\mathbf{r})$ はオーダーパラメータで、分子の凝縮している波動関数を表す。$\tilde{\phi}(\mathbf{r})$ は非凝縮成分を表す。平均場近似の枠内では、ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ はBCS型のハミルトニアン [45] となる。それは、

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \int d\mathbf{r}\{\Phi^{*}(\mathbf{r})[H_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}) - 2\mu]\Phi(\mathbf{r})\} + \int d\mathbf{r}\{\tilde{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})[H_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}) - 2\mu]\tilde{\phi}(\mathbf{r})\} \qquad (127) \\ &\quad + \int d\mathbf{r}\{\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})[H_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) - \mu]\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})\} + \kappa \int d\mathbf{r}[\Phi^{*}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}) + \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

である。平均場近似のため、ここでは $\tilde{\phi}^{\dagger}\hat{\psi}_{\downarrow}\hat{\psi}_{\uparrow}$ といった揺らぎの項は無視している。二次形式であるこのタイプのハミルトニアンは、標準的なボゴリウボフ変換によって対角化できる。

系の熱力学を議論するために、グランドカノニカルポテンシャル Ω を求める。調和トラップには空間的に緩やかに変化するものを考える。このとき、局所密度近似を用いることによって、調和トラップの効果を取り入れることができる [19]。具体的には、一様系で計算されたグランドカノニカルポテンシャル Ω の化学ポテンシャル μ を、$\mu(\mathbf{r}) = \mu - V_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})$ に置き換えればよい。

調和トラップの効果を取り入れたグランドカノニカルポテンシャル Ω は、

$$\Omega = \int d\mathbf{r} \left([\delta - 2\mu(\mathbf{r})]|\Phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{\beta} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi^3)} \ln\{1 - e^{-\beta[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{m})} + \delta - 2\mu(\mathbf{r})]}\} \right. \tag{128}$$

$$\left. + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi^3)} \left\{ [\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{a})} - \mu(\mathbf{r}) - E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] - \frac{2}{\beta} \ln\left[1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}\right] \right\} \right) \tag{129}$$

で与えられる。ここで、$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{m})} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2M$ は分子の運動エネルギー、$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{a})} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ は原子の運動エネルギーである。また、$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ であって、T は温度を、k_{B} はボルツマン定数を表す。LDAを用いたときの準粒子の励起エネルギーは、$E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sqrt{[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\mathrm{a})} - \mu(\mathbf{r})]^2 + |\Delta(\mathbf{r})|^2}$ である。ここで、ギャップエネルギーは、$|\Delta(\mathbf{r})| = \kappa|\Phi(\mathbf{r})|$ である。原子と分子が熱平衡状態で、原子の温度と分子の温度が等しいと仮定した [23, 29]。

LDAを用いたときのギャップ方程式は、$\delta\Omega/\delta|\Phi(\mathbf{r})| = 0$ から得られ、

$$\delta - \mu(\mathbf{r}) = \frac{\kappa^2}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} \tanh\left[\frac{\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{2}\right] \tag{130}$$

となる。一方で、全粒子数 $N_{\rm tot}$ は $N_{\rm tot} = -\partial\Omega/\partial\mu$ から得られ、

$$\begin{aligned} N_{\rm tot} &= 2\int d\mathbf{r}|\Phi(\mathbf{r})|^2 + 2\int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} f_{\rm B}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm m)};\mathbf{r}) \\ &\quad + \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left[1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm a)} - \mu(\mathbf{r})}{E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} + 2\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm a)} - \mu(\mathbf{r})}{E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} f_{\rm F}(E_{\mathbf{k}};\mathbf{r})\right] \end{aligned} \tag{131}$$

となる。ここで、ボソンとフェルミオンの分布関数を、それぞれ $f_{\rm B}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm m)};\mathbf{r})$ と $f_{\rm F}(E_{\mathbf{k}};\mathbf{r})$ で書き表すことにする。これらは、$f_{\rm B}(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm m)};\mathbf{r}) = 1/(\exp\{\beta[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\rm m)} + \delta - 2\mu(\mathbf{r})]\} - 1)$ と $f_{\rm F}(E_{\mathbf{k}};\mathbf{r}) = 1/\{\exp[\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] + 1\}$ で与えられる。式 (131) の右辺において、第一項は、凝縮した分子数の 2 倍、$2N_{\rm mc}$ を表す。第二項は、凝縮していない分子数の 2 倍、$2\tilde{N}_{\rm m}$ である。最後の項は、原子数 $N_{\rm a}$ である。従って、式 (131) は、

$$\begin{aligned} N_{\rm tot} &= 2N_{\rm m} + N_{\rm a} \\ &= 2N_{\rm mc} + 2\tilde{N}_{\rm m} + N_{\rm a} \end{aligned} \tag{132}$$

と表せる。

次に、凝縮したペアの数 $N_{\rm c}$ を考える。このペアの数は、凝縮している分子数 $N_{\rm mc}$ とクーパ対の数 $N_{\rm p}$ の和で定義され、

$$\begin{aligned} N_{\rm c} &\equiv N_{\rm mc} + N_{\rm p} \\ &= \int d\mathbf{r}|\Phi(\mathbf{r})|^2 + \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\langle\hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{r}_2)\rangle|^2 \end{aligned} \tag{133}$$

である。式 (133) の第二項は、第 3 章で議論した、2 体の密度行列の最大固有値である [41]。平均場近似の範囲内では、クーパー対の数の表現式が得られていて、

$$N_{\rm p} = \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left\{\frac{|\Delta(\mathbf{r})|^2}{4E_{\mathbf{k}}^2(\mathbf{r})}\tanh^2\left[\frac{\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{2}\right]\right\} \tag{134}$$

である [47, 50]。

式 (130) と式 (131) を連立させることで、ある温度 T とあるディチューニング δ における、化学ポテンシャル μ とギャップ $|\Delta(\mathbf{r})|$ を求めることができる。この論文では、結合定数 α を $\alpha \equiv \sqrt{\rho}\kappa = 0.4\varepsilon_{\rm F}$ とする。ただし、ρ は密度のピークで、$\varepsilon_{\rm F}$ は気体がフェルミ原子のみからなる時のフェルミエネルギーである。それぞれ、$\rho = (2m\varepsilon_{\rm F})^{\frac{3}{2}}/(3\pi^2\hbar^3)$ と $\varepsilon_{\rm F} = (3N_{\rm tot})^{\frac{1}{3}}\hbar\omega_0$ で与えられる。この値、$\alpha = 0.4\varepsilon_{\rm F}$ は、フェッシュバッハ共鳴の共鳴幅が狭い場合に対応したものである。この弱い結合定数の時は、平均場近似が許される。この結合定数の値は、実験におけるフェッシュバッハ共鳴の共鳴幅が広い状況には対応していない。しかし、論文 [51] で述べられているように (4.3 節でも議論するように)、フェッシュバッハ共鳴の共鳴幅が広いか狭いかは、これから議論する δ-T 平面上にプロットした対凝縮の割合には、定性的な違いを与えない。式 (130) での積分の発散をさけるため、ガウシアンカットオフ $\exp\{-[\varepsilon/(2\varepsilon_{\rm F})]^2\}$ を課す。このカットオフの幅はフェルミエネルギーと同じオーダーにした [19]。

4.3　断熱的相図

最初に実験 [4, 6] の手順について述べ、次に理論の概念について簡単にふれる。これらの実験では、まず、共鳴磁場よりも遥かに強い磁場をかけることで、分子のない二成分の極低温フェルミ原子気体を用意する。この有効相互作用が弱い領域で、タイムオブフライトによるフェルミ原子気体の温度が測定される。強い磁場のかかった、分子のないフェルミ原子気体からスタートして、トラップ中で原子や分子が十分衝突することを許しながら、共鳴磁場近傍までゆっくりと磁場を低くする。この過程で、気体は衝突を通して、時々刻々平衡状態に緩和しているものと仮定する [23]。これは、熱や粒子を外界とやり取りせず、熱平衡と化学平衡を満たしながら磁場を変化させていると考えているからである。したがって、このプロセスは断熱過程とみなせる。このとき、系は等エントロピー曲線に沿って、δ-T 平面上を横切る。

系の全エントロピー $S_{\rm tot}$ は、原子のエントロピー $S_{\rm a}$ と分子のエントロピー $S_{\rm m}$ の和である。ここで、$S_{\rm a}$ と $S_{\rm m}$ は、

$$S_{\rm a} = 2k_{\rm B}\int\frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left\{\frac{\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}+1}+\ln\left[1+e^{-\beta E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}\right]\right\} \tag{135}$$

$$S_{\rm m} = k_{\rm B}\int\frac{d\mathbf{r}d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(\frac{\beta[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(M)}+\delta-2\mu(\mathbf{r})]}{e^{\beta[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(M)}+\delta-2\mu(\mathbf{r})]}-1}-\ln\left\{1-e^{-\beta[\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(M)}+\delta-2\mu(\mathbf{r})]}\right\}\right) \tag{136}$$

で与えられる。

等エントロピー曲線を示す前に、図 7 に、ディチューニング δ と温度 T ではられる δ-T 平面に対して、凝縮している分子の割合 $\eta_{\rm mc}=2N_{\rm mc}/N_{\rm tot}$（左図）と、凝縮したクーパー対の割合 $\eta_{\rm p}=2N_{\rm p}/N_{\rm tot}$（右図）を示す。図 7 の右図から、$\delta>0$ の BCS 領域では、低温でクーパー対の数がピークを持つことがわかる。しかし、凝縮した分子も含む対凝縮の割合に対しては、このクーパー対の数の寄与はとても小さい。これは、結合定数が弱く、フェッシュバッハ共鳴の共鳴幅が狭い系を扱っているからである。

強結合で、フェッシュバッハ共鳴の共鳴幅が広い場合は、フェルミオンの対凝縮に対する、クーパー対の数の寄与は大きくなる。このときは、1 チャンネルモデルが、共鳴近傍での系をうまく記述する [52]。しかし、ディチューニング δ の代わりに、$(k_{\rm F}a_s)^{-1}$ の関数として結合定数の異なる二つの系の相図を描いた場合、これらの相図はほとんど同じになる [51]。($k_{\rm F}$ はフェルミ波数で、a_s は s 波散乱長である。) また、開チャンネルでのクーパー対の数と閉チャンネルでの分子数の和である全ボソン数は、二つの異なった結合定数の場合でも、ほとんど同じである [51]。したがって、この章で導く弱結合での結論は、共鳴幅が広い場合の定性的な議論においても有効である。

図 8 の左図は、δ-T 平面上に示した等エントロピー曲線である。ディチューニング δ の大きいところから、ディチューニング δ を断熱的に下げたとき、この曲線に沿って系が δ-T 平面上を横断する。このとき、等エントロピー曲線の温度が上昇する理由は次の 3 つである。まず、原子のペアが分子になるため、系の自由度が減少する。次に、凝縮した分子はエントロピーに寄与しない。最後に、クーパー対の存在がエントロピーを抑制する。以上の理由から、断熱過程でエントロピーを保存するために温度が上昇する。

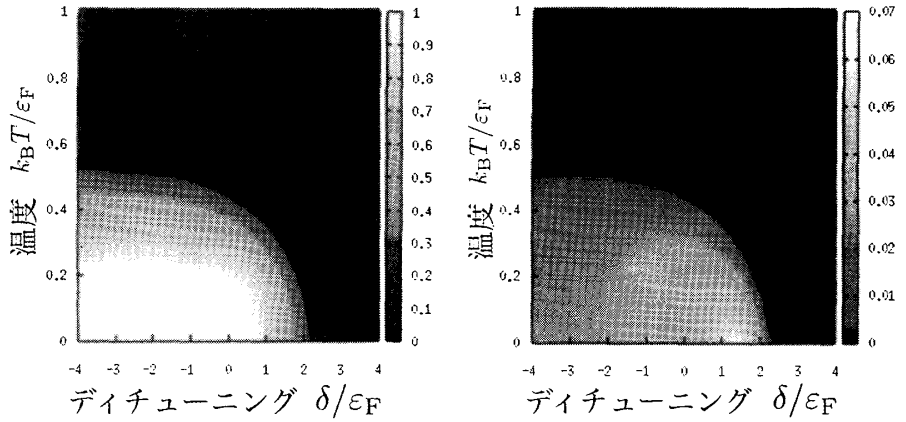

図 7: δ-T 平面上にプロットした凝縮した分子の割合 η_{mc}（左図）。δ-T 平面上にプロットした凝縮したクーパー対の割合 η_p（右図）。左図と右図でカラースケールが違うことに注意。結合定数 α を $\alpha = 0.4\varepsilon_F$ とした。

Williams たちは、理想混合気体を用いて、初期状態が原子気体、終状態が分子気体であると仮定したときの、初期温度 T_i と終温度 T_f の関係を導いた [23]。その関係は低温極限 $T/T_F \ll 1$ で、

$$\frac{T_f}{T_F} = \left[\frac{\pi^2}{12\zeta(4)}\right]^{1/3} \left(\frac{T_i}{T_F}\right)^{1/3} \tag{137}$$

となり、高温極限 $T/T_F \gg 1$ では、

$$\frac{T_f}{T_F} = 6^{1/3}e^{4/3} \left(\frac{T_i}{T_F}\right)^2 \tag{138}$$

となる。これらの関係は、フェルミ原子のみからなる気体での初期エントロピーと、ボース分子のみからなる気体の終エントロピーを等しいとおくことで得られる。同様の式が、Carr たちの論文 [53] で提示されている。彼らはその論文で、分子気体を用意し、磁場を断熱的に強くすることで、フェルミ原子気体をさらに冷却するアイディアを提案している。

本研究の計算で得られた終温度 T_f と初期温度 T_i の関係を、図 8 の右図に示した。ここでは、BEC 領域に対応する異なる 2 つのディチューニングを終状態に考えた。実線は、ディチューニングが $\delta = -100\varepsilon_F$ での数値計算の結果である。点線は、ディチューニングが $\delta = -4\varepsilon_F$ での数値計算の結果である。破線は、理想気体での高温極限を、一点鎖線は理想気体での低温極限を表す。低温での近似式（一点鎖線）は、数値計算の両曲線とも一致する。高温での近似式（破線）は、$\delta = -4\varepsilon_F$ での数値解（点線）とは一致しない。$\delta = -4\varepsilon_F$ では、温度が十分高くない領域でもフェルミ原子が存在する。このため、フェルミ原子気体のみで構成される初期状態のエントロピーと、ボース分子気体のみで構成される終状態のエントロピーを等しいとおく仮定が成立しなくなる。一方で、$\delta = -100\varepsilon_F$ での数値解（実線）は、スイープ後に原子がいくらか残っているような高い初期温度の領域を除いて、高温極限での式（破線）と一致する。

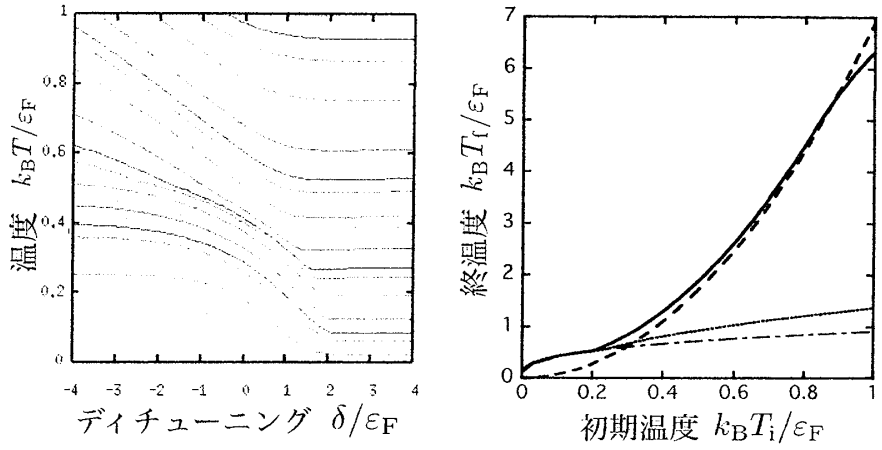

図 8: δ-T 平面上にプロットした等エントロピー曲線（左図）。終温度の初期温度依存性（右図）。左図では、それぞれの曲線を、ディチューニング δ の断熱的な変化に伴って、系が δ-T 平面上を横断するときの軌跡とみなす。右図では、終状態のディチューニング δ として、BEC 領域の $\delta/\varepsilon_F = -100$(実線) と $\delta/\varepsilon_F = -4$ (点線) を用いた。破線と一点鎖線は、高温極限と低温極限を表す。両図とも、結合定数 α を $\alpha = 0.4\varepsilon_F$ とした。

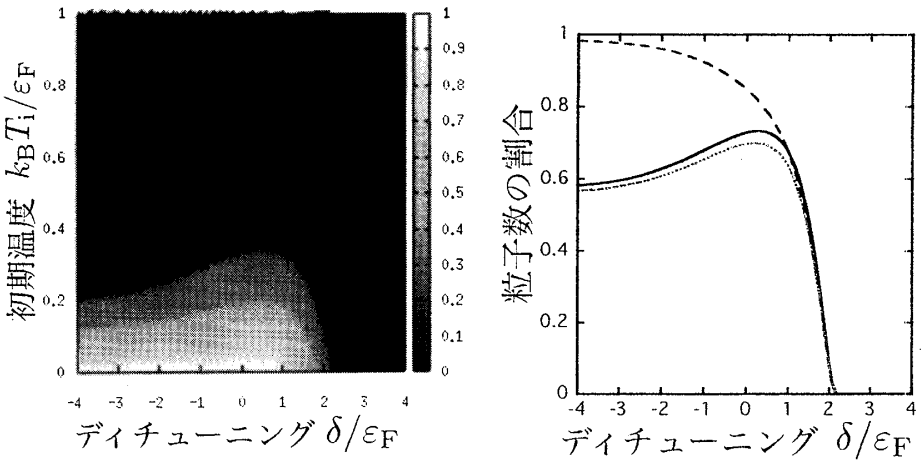

図 9: ディチューニング δ と初期温度 "T_i" ではられる δ-T_i 平面上にプロットした、フェルミオンの対凝縮の割合 $\eta_c = \eta_{mc} + \eta_p$（左図）。初期温度が $T_i = 0.08T_F$ であるときの、フェルミオンの対凝縮の割合 η_c（実線）、凝縮した分子の割合 η_{mc}（点線）、分子の割合 η_m（破線）を、ディチューニング δ の関数としてプロットした（右図）。両図とも、結合定数 α を $\alpha = 0.4\varepsilon_F$ としている。

図 9 の左図は、実験 [4, 6] で得られた結果と同様の描き方でプロットした、対凝縮の割合 $\eta_c = 2N_c/N_{tot}$ を表している。つまり、初期温度 T_i とディチューニング δ の関数として対凝縮の割合をプロットしている。初期温度 T_i は、あるディチューニング δ とある温度 T での全エントロピーと、初期エントロピーが等しい条件 $S_{tot}(\delta, T) = S_i(T_i)$ を課すことで得られる。図 7 をみると、BEC 領域である $\delta = -4\varepsilon_F$ では、転移温度が $T_c \simeq 0.53T_F$ だと分かる。一方、図 9 の左図をみると、初期温度で換算された転移温度が、同じ $\delta = -4\varepsilon_F$ で、$T_{i,c} \simeq 0.21T_F$ になっている。この振る舞いは、理想気体を用いた Williams たちの結果 [23] と矛盾しない。彼らの結果は、$\delta = -4\varepsilon_F$ で、転移温度が $T_c \simeq 0.51T_F$ であり、このときの初期温度換算された転移温度は $T_{i,c} \simeq 0.21T_F$ になっている。初期温度で換算されたこれらの転移温度 $T_{i,c}$ は、実験で測定された BEC 領域の転移温度 [4, 6] と同程度である。

図 9 の右図では、初期温度が $T_i = 0.08T_F$ であるときの、フェルミオンの対凝縮の割合（実線）、凝縮している分子の割合（点線）、全分子の割合（破線）を、ディチューニング δ の関数としてプロットしている。ディチューニング δ が下がるにつれ、フェルミオンの対凝縮している割合は増加する。しかし、$\delta = 0$ の近傍でピークを持った後に、減少する。この振る舞いは、実験 [4, 6] と一致する。Williams たちは、理想混合気体で同じような結果を導いているが、彼らは、凝縮した粒子数を分子数で規格化をしている [23]。

4.4 分子の生成効率

フェルミ原子 ^{40}K を用いて分子の生成効率を測定した実験 [13] によると、スイープ速度の逆数が $640\mu s/G$ から $2900\mu s/G$ の間では、生成効率がスイープ速度によらなくなる。したがって、このスイープ速度の領域で行われる磁場のスイープは、断熱過程であると考えられる [13]。

ここでは、Williams たちによって提案された、分子の生成効率を与える原理が、共鳴相互作用を取り入れても成立すると仮定する。したがって、$\delta = 0$ での分子の割合 $\eta_m(\delta = 0)$ を、初期温度 T_i の関数としてプロットすることで、分子の生成効率が分かる。ここで、η_m は全粒子数に対する分子の割合 $2N_m/N_{tot}$ である。

図 10 の左図が、この結果である。^{40}K のフェッシュバッハ共鳴の共鳴幅は広いことが知られている [13]。平均場近似は、共鳴幅が狭いときのみしか適応できないが、図 10 の左図から、共鳴相互作用の定性的な効果をみることができる。点線は平均場近似のモデルからの結果で、一点鎖線がフェルミ原子とボース分子の理想混合気体の結果である。点は Hodby たちの実験データ [13] を表し、実線が彼らのシミュレーション (SPSS モデル) の結果である。点線で挟まれた領域は、SPSS モデルにおけるフィッティングパラメータのとり得る範囲に対応する。すで述べたように、我々が用いた弱い結合定数は実験のものと一致しないので、理論と実験の比較は定性的にしかできない。それにもかかわらず、我々の計算結果は実験結果の傾向と定性的によく一致する。

$\delta = 0$ での転移温度 T_c は $0.45T_F$ で、これに対応する初期温度換算された転移温度 $T_{i,c}$ は $T_{i,c} \approx 0.36T_F$ である。$T_{i,c}$ より高い初期温度になると、我々の結果は理想混合気体の生成効率の結果に一致する。これは、平均場近似の範囲内で解析したためである。参考とし

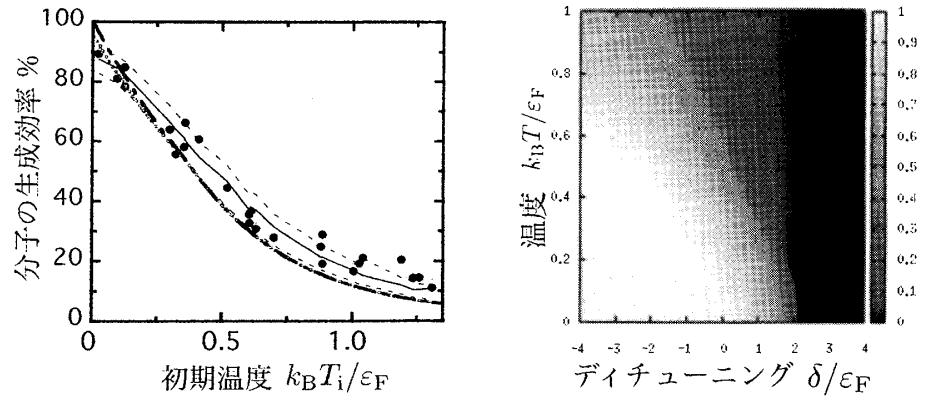

図 10: 分子の生成効率を初期温度の関数としてプロットした（左図）。点線は、平均場近似を用いた結果で、一点鎖線は理想混合気体の結果である。点は Hodby たちによる実験データである [13]。実線は SPSS モデルの結果、破線で挟まれた領域は、SPSS モデルのフィッティングパラメータのとり得る範囲に対応する。分子の割合 η_m を、δ-T 平面上にプロットした（右図）。$\delta = 0$ での分子の割合 η_m と、各温度に対応する初期温度を用いて、左図の生成効率が得られた。結合定数 α は、$\alpha = 0.4\varepsilon_F$ である。

て、δ-T 平面上にプロットした分子の割合 η_m を、図 10 の右図に掲げておく。$\delta = 0$ における温度と分子の割合の関係を、断熱過程に基づいて換算される初期温度の関数として読み替えることで、図 10 の左図は得られた。

共鳴相互作用は、初期温度が低いほど重要になってくる。理想混合気体では、初期温度が $T_i \to 0$ で、分子の生成効率が 100%になる。一方で、$T_i \to 0$ での実験結果は 100%よりも低い。平均場近似を用いたモデルでの生成効率は、$T_i \to 0$ で 100%よりも低く見積もられる。これは、共鳴相互作用が分子の生成効率を抑制するからである。

5　異核フェッシュバッハ分子の生成効率

5.1　序論

この章では、Williams たちによって提案された原理 [28] を基に、異核フェッシュバッハ分子の生成効率を調べる。この原理は、SPSS モデルと異なり、フィッティングパラメータを用いずに、生成効率を見積もることができる優れたモデルである。その結果、Wieman のグループによる実験結果 [17] と、定性的に一致する結果が得られた。

本研究では、原子が持っている量子統計性の全ての組み合わせに対して、異核分子の生成効率を調べた。さらに、初期状態における位相空間密度のピークと、異核フェシュバッハ分子の生成効率との関係式を導出した。

以下に、今回調べた理想混合気体の系をまとめる。

$$\begin{cases} (1) & \mathrm{B}_{>} + \mathrm{B}_{<} \leftrightarrow \mathrm{B}_{\mathrm{m}}, \\ (2) & \mathrm{B}_{>} + \mathrm{F}_{<} \leftrightarrow \mathrm{F}_{\mathrm{m}}, \\ (3) & \mathrm{F}_{>} + \mathrm{B}_{<} \leftrightarrow \mathrm{F}_{\mathrm{m}}, \\ (4) & \mathrm{F}_{>} + \mathrm{F}_{<} \leftrightarrow \mathrm{B}_{\mathrm{m}}. \end{cases} \tag{139}$$

“B” と “F” は、ボソンとフェルミオンの量子統計性を表す。添字 “$_{>}$” は分子がない初期状態において原子数が過半数を超える”多数の成分”を、添字 “$_{<}$” は同じく初期状態で、原子数が過半数以下である”少数の成分”を表す。添字 “$_{\mathrm{m}}$” は異核分子の成分を表す。

Williams たちは、SPSS モデルの背景にある理論を解明するために、新たな原理を提案した。しかし、本研究によって、この原理が導く異核フェッシュバッハ分子の生成効率の結果と、現象論的な SPSS モデルが導く結果は、量子統計性が現れる低温領域で全く異なることが分かった。SPSS モデルは、これまでの実験結果を再現してきた。しかし、本来別々の位相空間上に配置されるべき異なった種類の原子を、同じ位相空間上に配置して計算するので、SPSS モデルには問題があると考えられる。

5.2 平衡状態の理論

この章では、原子数が異なる二成分の原子気体があり、それら異種原子の間で異核分子が生じるような理想混合気体を取り扱う。

“多数の成分” と “少数の成分” の原子数を $N_{>}$ と $N_{<}$ で表し、異核フェッシュバッハ分子の分子数を N_{m} で表す。これらの系が満たすべき拘束条件は次の二つである。第一の拘束条件は、全粒子数が保存する条件

$$N_{\mathrm{tot}} = N_{>} + N_{<} + 2N_{\mathrm{m}} \tag{140}$$

である。第二の拘束条件は、比

$$\frac{N_{<} + N_{m}}{N_{>} + N_{\mathrm{m}}} = \alpha \tag{141}$$

の保存である。ここで、α は分子のない初期状態における各成分の原子数 $N_{<,\mathrm{ini}}$ と $N_{>,\mathrm{ini}}$ の比、$N_{<,\mathrm{ini}}/N_{>,\mathrm{ini}} \equiv \alpha$ で決定される。“多数の成分” と “少数の成分” という設定から、$\alpha \leq 1$ である。第二の拘束条件は、

$$N_{<} - \alpha N_{>} + (1-\alpha) N_{\mathrm{m}} = 0 \tag{142}$$

と表現される。

この二つの拘束条件を課すために、ラグランジュの未定乗数 μ_1 と μ_2 を導入する。グランドカノニカルハミルトニアンから熱力学ポテンシャルを導出することにより、2つの拘束条件を表す式が得られる。粒子数保存の式は、

$$N_{\mathrm{tot}} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_i^{>}} z_{>}^{-1} \mp 1} + \sum_j \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_j^{<}} z_{<}^{-1} \mp 1} + 2\sum_k \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k^{\mathrm{m}}} z_{\mathrm{m}}^{-1} \mp 1} \tag{143}$$

の形に、第二の拘束条件を表す式は、

$$0 = \sum_j \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_j^<} z_<^{-1} \mp 1} - \alpha \sum_i \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_i^>} z_>^{-1} \mp 1} + (1-\alpha) \sum_k \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k^{\mathrm{m}}} z_{\mathrm{m}}^{-1} \mp 1} \tag{144}$$

の形になる。$\varepsilon_i^>$、$\varepsilon_j^<$、$\varepsilon_k^{\mathrm{m}}$ は、各成分の一粒子エネルギーである。β は $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ で、k_{B} と T はボルツマン定数と温度である。上の符号 "−" はボソンの場合、下の符号 "+" はフェルミオンの場合である。各成分のフガシティーはそれぞれ、

$$z_> \equiv e^{(\mu_1 - \alpha\mu_2)/k_{\mathrm{B}}T}, \quad z_< \equiv e^{(\mu_1+\mu_2)/k_{\mathrm{B}}T}, \quad z_{\mathrm{m}} \equiv e^{[2\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2 - \delta]/k_{\mathrm{B}}T} \tag{145}$$

で定義される。異核フェッシュバッハ分子の一粒子状態の最低エネルギーは、原子の一粒子状態の最低エネルギーに対して、磁場を変化させることで相対的に変更できる。この相対的なエネルギー差をディチューニング δ で表す。各成分のフガシティーは、

$$z_> z_< = z_{\mathrm{m}} e^{\delta/k_{\mathrm{B}}T} \tag{146}$$

の関係を常に満たす。$\delta = 0$ での関係 $z_> z_< = z_{\mathrm{m}}$ は、生成効率を考察する上で有用である。

本章では、非等方的な調和ポテンシャルに閉じ込められた気体を考えることにする。また、原子と分子のトラップ振動数が同じであるとする[1]。各軸に対するトラップの振動数を、それぞれ ω_x、ω_y、ω_z で表す。調和振動子型のポテンシャルにトラップされた系の状態密度は、$\rho(\varepsilon) = \varepsilon^2/[2(\hbar\bar{\omega})^3]$ で与えられる。ただし、$\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$ である。

ボソンの非凝縮粒子数 $\tilde{N}_{\mathrm{B}}$ とフェルミオンの粒子数 N_{F} は、ボース積分 $\mathcal{G}_n(z)$ とフェルミ積分 $\mathcal{F}_n(z)$ を用いて、

$$\tilde{N}_{\mathrm{B}} = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{G}_3(z), \qquad N_{\mathrm{F}} = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{F}_3(z) \tag{147}$$

で与えられる。z はフガシティーである。ボース積分とフェルミ積分は、

$$\mathcal{G}_n(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}dx}{z^{-1}e^x - 1}, \qquad \mathcal{F}_n(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}dx}{z^{-1}e^x + 1} \tag{148}$$

で定義される。ここで、$\Gamma(n)$ はガンマ関数である。ボース積分は、$z = 1$ のとき、リーマン・ゼータ関数 $\zeta(n)$ になる。つまり、$\mathcal{G}_n(z=1) = \zeta(n)$ である。

凝縮していない成分が寄与するボソンのエントロピー $\tilde{S}_{\mathrm{B}}$ と、フェルミオンのエントロピー S_{F} はそれぞれ、

$$\tilde{S}_{\mathrm{B}}(z) = k_{\mathrm{B}}\tilde{N}_{\mathrm{B}} \left[4\frac{\mathcal{G}_4(z)}{\mathcal{G}_3(z)} - \ln z\right], \qquad S_{\mathrm{F}}(z) = k_{\mathrm{B}}N_{\mathrm{F}} \left[4\frac{\mathcal{F}_4(z)}{\mathcal{F}_3(z)} - \ln z\right] \tag{149}$$

である。これらのエントロピーは、低温極限において、

$$\tilde{S}_{\mathrm{B}} = 4k_{\mathrm{B}} \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \zeta(4), \qquad S_{\mathrm{F}} = k_{\mathrm{B}}\pi^2 \left(\frac{N_{\mathrm{F}}^2}{6}\right)^{1/3} \frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}} \tag{150}$$

[1] この修士論文では、各成分のトラップ振動数が等しい場合を扱った。この場合の議論は、同位体からなる異核フェッシュバッハ分子に対してのみ、有効である。各成分でトラップ振動数が異なる一般的な場合の議論は、現在論文にまとめ、投稿準備中である。

となる。

初期状態では、分子が存在しない気体を想定している。先に挙げた2つの拘束条件をみたす初期状態の原子数はそれぞれ、

$$N_{>,\mathrm{ini}} = \frac{1}{1+\alpha} N_{\mathrm{tot}}, \qquad N_{<,\mathrm{ini}} = \frac{\alpha}{1+\alpha} N_{\mathrm{tot}} \tag{151}$$

である。

Williamsたちにより提案されたフェッシュバッハ分子の生成効率の原理 [28] にもとづき、生成効率 χ_0 を

$$\chi_0 = \frac{N_{\mathrm{m}}(\delta=0)}{N_{<,\mathrm{ini}}} = \frac{N_{\mathrm{m}}(\delta=0)}{N_{\mathrm{tot}}} \frac{1+\alpha}{\alpha} \tag{152}$$

で定義する。

この節の終わりに、古典気体の性質について取り上げる。このときは、ボース分布とフェルミ分布の代わりにボルツマン分布を用いる。古典気体で近似するとき、ボース積分とフェルミ積分は、

$$\mathcal{G}_n(z) \approx z, \quad \mathcal{F}_n(z) \approx z \tag{153}$$

と近似される。それぞれの粒子数は、

$$N_> = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 z_>, \quad N_< = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 z_<, \quad N_m = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 z_m \tag{154}$$

で与えれられる。式 (140)、式 (142)、式 (152)、式 (154) より、異核分子の生成効率は温度の関数として、

$$\chi_0 = \frac{1+\alpha}{2\alpha}(1+t^3)\left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2(1+t^3)^2}}\right] \tag{155}$$

で与えられる。ただし、$t \equiv k_{\mathrm{B}}T/(\hbar\bar{\omega}N_{\mathrm{tot}}^{1/3})$ とした。仮に絶対零度まで古典気体のままであるとしたとき、$T \to 0$ における生成効率は100% になる。逆に、高温極限 $k_{\mathrm{B}}T \gg \hbar\bar{\omega}N_{\mathrm{tot}}^{1/3}$ では、生成効率 χ_0 は、$\chi_0 \approx 1/[(1+\alpha)t^3]$ になる。高温で異核分子の数が少ない領域では、異核分子のエントロピーも小さい。このとき、初期温度 T_{ini} と終温度 T_{f} はほとんど等しくなる。結果として、高温極限での異核分子の生成効率 χ_0 は、初期温度 T_{ini} に対して、

$$\chi_0 \approx \frac{1}{(1+\alpha)}\left(\frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B T_{\mathrm{ini}}}\right)^3 N_{\mathrm{tot}} \tag{156}$$

と見積もられる。式 (155) は t に対して単調減少の関数である。したがって、初期温度が高くなるにつれ、生成効率は100% から単調減少する。

5.3　ボース原子の“多数の成分”、それと異なるボース原子の“少数の成分”、それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体

まず、全ての成分がボソンである場合、$\{\mathrm{B}_{>}+\mathrm{B}_{<}\leftrightarrow\mathrm{B}_{\mathrm{m}}\}$ について考える。

この節のみ、Papp たちによる ^{87}Rb 原子と ^{85}Rb 原子を用いた実験 [17] との対応を考え、添字に“>”、“<”ではなく、“87”と“85”を用いる。α の値は、実験データで決まる。Papp たちにより報告された、通常作り出される状況 $N_{85,\mathrm{ini}}=40,000$ と $N_{87,\mathrm{ini}}=300,000$ を想定して [17]、$\alpha=2/15$ を用いることにする。

二つの拘束条件を表す式は、

$$\begin{cases} N_{\mathrm{tot}} &= \left[N_{\mathrm{c}}^{87}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{87})\right]+\left[N_{\mathrm{c}}^{85}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{85})\right] \\ &\qquad +2\left[N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{m}}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{\mathrm{m}})\right], \\ 0 &= \left[N_{\mathrm{c}}^{85}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{85})\right]-\alpha\left[N_{\mathrm{c}}^{87}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{87})\right] \\ &\qquad +(1-\alpha)\left[N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{m}}+\left(\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_{\mathrm{m}})\right] \end{cases}$$

である。N_{c}^{87}、N_{c}^{85}、$N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{m}}$ は、各成分の凝縮している粒子の数である。

ディチューニング δ と温度 T ではられる δ-T 平面において、どのような相が実現するかをフガシティーを基に考える。ここでは、$\delta>0$、$\delta<0$、$\delta=0$ の三つの場合を考えれば十分である。

実験 [17] では、^{87}Rb 原子が“多数の成分”を占める。したがって、^{87}Rb が BEC を起こす転移温度 T_{c}^{87} は、^{85}Rb や異核分子が BEC を起こす転移温度よりも高い。^{87}Rb の BEC が生じる条件は、

$$\mu_1=\alpha\mu_2 \tag{157}$$

である。分布関数は常に正なので、フガシティー z_{85} と z_{m} は、常に 1 よりも小さい。よって、転移温度 T_{c}^{87} 以下で条件は、

$$\begin{cases} \mu_2 & \leq 0 \\ (1+\alpha)\mu_2-\delta & \leq 0 \end{cases} \tag{158}$$

となる。ここで、^{87}Rb の BEC が既に生じているとして、式 (157) の $\mu_1=\alpha\mu_2$ を用いた。T_{c}^{87} 以下では、^{85}Rb、あるいは異核分子の BEC が生じうる。

まず、$\delta>0$ の場合をみる。2 つの不等式 (158) と前提条件 $\delta>0$ より、$\delta-(1+\alpha)\mu_2$ は 0 にならない。したがって、異核分子は凝縮せず、$N_{\mathrm{c}}^{\mathrm{m}}=0$ である。また、$\mu_2=0$ のとき

に ^{85}Rb の BEC が生じる。これは、$\delta > 0$ のため、異核分子の基底状態のエネルギーが、^{85}Rb 原子の基底状態のエネルギーよりも高いからである。^{85}Rb の BEC が生じはじめる転移温度 $T_{\rm c}^{+}$ は、

$$(1+\alpha)\left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm c}^{+}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{\rm m})]-\alpha N_{\rm tot}=0 \tag{159}$$

で決定される。ただし、$z_{\rm m}=\exp[-\delta/(k_{\rm B}T_{\rm c}^{+})]$ である。$T_{\rm c}^{+}$ 以下で、凝縮している各成分の粒子数は、

$$\begin{cases} N_{\rm c}^{87} &= \dfrac{1}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{\rm m})], \\ N_{\rm c}^{85} &= \dfrac{\alpha}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{\rm m})] \end{cases} \tag{160}$$

となる。ただし、$z_{\rm m}=\exp\left[-\delta/(k_{\rm B}T)\right]$ である。

次に、$\delta<0$ の場合をみる。2つの不等式 (158) と前提条件 $\delta<0$ より、μ_2 は 0 にならない。したがって、^{85}Rb は凝縮せず、$N_{\rm c}^{85}=0$ である。また、$\delta=(1+\alpha)\mu_2$ の条件のもと、異核フェッシュバッハ分子の BEC が生じる。これは、$\delta<0$ のため、異核分子の基底状態のエネルギーが、^{85}Rb 原子の基底状態のエネルギーよりも低いからである。^{87}Rb と異核分子の BEC が共存する条件は、$\mu_1+\mu_2=(1+\alpha)\mu_2=\delta$ で与えられる。異核分子の BEC が生じはじめる転移温度 $T_{\rm c}^{-}$ は、

$$(1+\alpha)\left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm c}^{-}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{85})]-\alpha N_{\rm tot}=0 \tag{161}$$

によって決定される。ただし、$z_{85}=\exp\left[\delta/k_{\rm B}T_{\rm c}^{-}\right]$ である。$T_{\rm c}^{-}$ 以下では、凝縮している各成分の粒子数は、

$$\begin{cases} N_{\rm c}^{87} &= \dfrac{1-\alpha}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{85})], \\ N_{\rm c}^{\rm m} &= \dfrac{\alpha}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}[\zeta(3)+\mathcal{G}_3(z_{85})] \end{cases} \tag{162}$$

になる。ただし、$z_{85}=\exp\left[\delta/(k_{\rm B}T)\right]$ である。

最後に、$\delta=0$ の場合をみる。$T_{\rm c}^{87}$ 以下では、^{85}Rb の BEC と異核分子の BEC が、$\mu_1=\mu_2=\delta=0$ のときに生じうる。しかし、この場合、^{87}Rb 原子と ^{85}Rb 原子、さらに異核分子の基底状態のエネルギーが縮退する。このため、それぞれの凝縮している粒子数は決まらない。分かるのは、^{87}Rb が凝縮しているなかで、^{85}Rb の BEC と異核分子の BEC が生じはじめる転移温度 $T_{\rm c}^{0}$ である。それは、

$$k_{\rm B}T_{\rm c}^{0}=\hbar\bar{\omega}\left[\frac{\alpha}{2\zeta(3)(1+\alpha)}N_{\rm tot}\right]^{1/3} \tag{163}$$

で与えられる。^{87}Rb 原子の中で凝縮している粒子数 $N_{\rm c}^{87}$ は、$T=T_{\rm c}^{0}$ のとき、

$$N_{\rm c}^{87}=N_{\rm tot}-4\left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm c}^{0}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{3}\zeta(3) \tag{164}$$

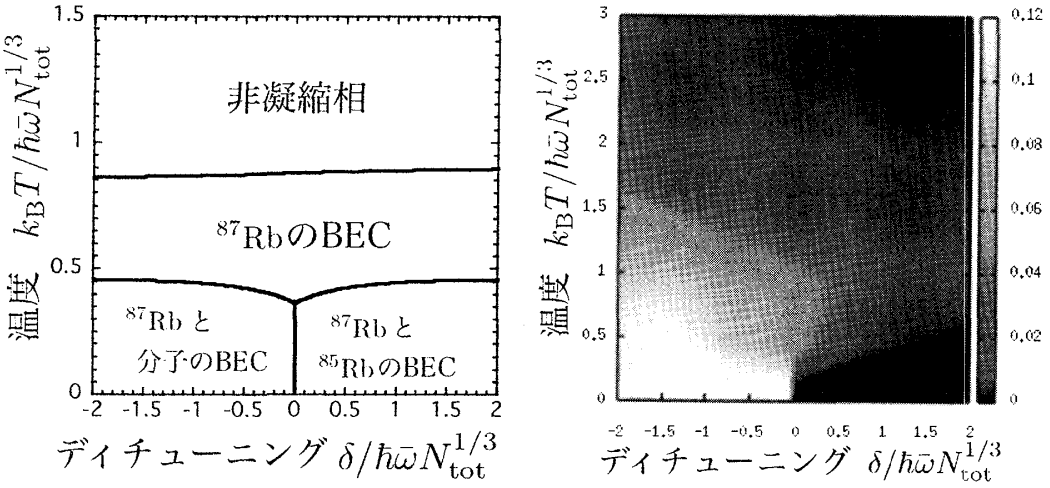

図 11: ^{87}Rb、^{85}Rb、それらの異核分子における BEC の相図（左図）。また、異核分子の割合 $N_{\rm m}/N_{\rm tot}$ を、δ-T 平面上にプロットした（右図）。$\delta=0$ で、凝縮した粒子数が劇的に変化する。ここで、$\alpha=2/15$ とした。

である。

各成分が BEC を起こす転移温度を図 11 の左図に示した。図 11 の右図には、$N_{\rm m}/N_{\rm tot}$ で与えられる異核フェッシュバッハ分子の割合を示した。低温領域をみると、$\delta=0$ を境に分子数が不連続に変化していることが分かる。

フェッシュバッハ分子を生成する手段の一つとして、磁場の断熱的なスイープが用いられる。このスイープ過程を通して、エントロピーは保存される。この系の全エントロピーは、

$$S = \tilde{S}_{\rm B}(z_{87})+\tilde{S}_{\rm B}(z_{85})+\tilde{S}_{\rm B}(z_{\rm m}) \tag{165}$$

である。図 12 には、等エントロピー曲線を示した。断熱的な磁場のスイープを用いたとき、この曲線に沿って、系が δ-T 平面上を横断する。

初期状態は、分子のない、^{87}Rb 原子と ^{85}Rb 原子の混合気体である。この混合気体において、^{87}Rb と ^{85}Rb が凝縮する転移温度はそれぞれ、

$$k_{\rm B}T_{\rm c,ini}^{87}=\hbar\bar{\omega}\left[\frac{N_{87,\rm ini}}{\zeta(3)}\right]^{1/3},\qquad k_{\rm B}T_{\rm c,ini}^{85}=\hbar\bar{\omega}\left[\frac{N_{87,\rm ini}}{\zeta(3)}\right]^{1/3} \tag{166}$$

となる。転移温度の大小関係は、^{87}Rb が “多数の成分” なので、$T_{\rm c,ini}^{87}>T_{\rm c,ini}^{85}$ を満たす。$T_{\rm c,ini}^{85}\le T_{\rm ini}\le T_{\rm c,ini}^{87}$ の初期温度 $T_{\rm ini}$ では、$\mu_1=\alpha\mu_2$ となり、^{87}Rb の BEC のみが生じる。一方で、$0\le T_{\rm ini}\le T_{\rm c,ini}^{85}$ では、$\mu_1=\mu_2=0$ の条件のもと、^{87}Rb と ^{85}Rb の BEC が共存する。この温度領域では、凝縮した粒子数が、

$$\begin{cases} N_{\rm c,ini}^{87} &= \dfrac{1}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T_{\rm ini}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\zeta(3), \\ N_{\rm c,ini}^{85} &= \dfrac{\alpha}{1+\alpha}N_{\rm tot}-\left(\dfrac{k_{\rm B}T_{\rm ini}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\zeta(3) \end{cases} \tag{167}$$

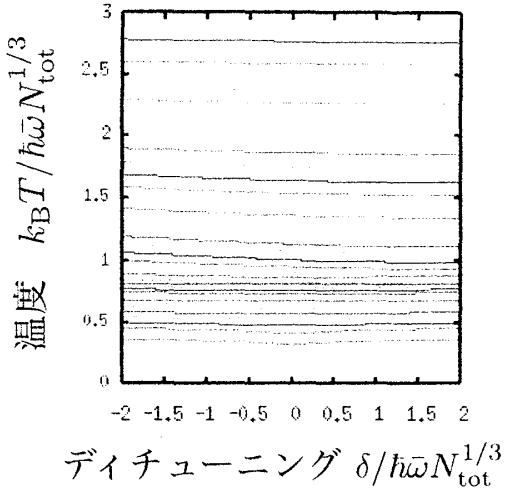

図 12: 等エントロピー曲線。$\alpha = 2/15$ とした。

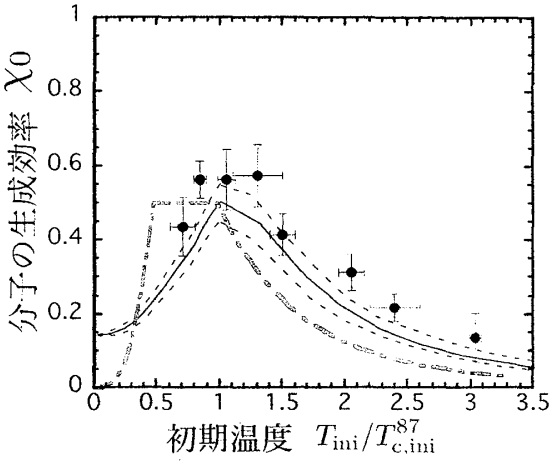

図 13: 生成効率の初期温度依存性。$\alpha = 2/15$ とした。

となる。また、初期状態のエントロピー $S_{\rm ini}$ は、$S_{\rm ini} = \tilde{S}_{\rm B}(z_{87,\rm ini}) + \tilde{S}_{\rm B}(z_{85,\rm ini})$ で与えられる。

$\delta = 0$ では縮退が生じるため、$T_{\rm c}^0$ 以下における各成分の粒子数を決定できない。そのため、この節では $\delta \to 0^+$ での分子数を用いて、異核分子の生成効率を定義する。$\delta = 0$ では、フェッシュバッハ分子の生成速度と崩壊速度はちょうどゼロになる [28]。このため、断熱的な磁場のスイープが $\delta > 0$ からスタートした実験では、上記の定義が理にかなっている。したがって、本節では異核分子の生成効率 χ_0 を、

$$\chi_0 \equiv \frac{N_{\rm m}(\delta \to 0^+)}{N_{85,\rm ini}} = \frac{N_{\rm m}(\delta \to 0^+)}{N_{\rm tot}} \frac{1+\alpha}{\alpha} \tag{168}$$

で定義する。

初期エントロピーと $\delta \to 0^+$ での終エントロピーが等しい条件 $S_{\rm ini}(T_{\rm ini}) = S_{\rm f}(T_{\rm f}, \delta \to 0^+)$ から、初期温度 $T_{\rm ini}$ と終温度 $T_{\rm f}$ の関係が得られる。終温度 $T_{\rm f}$ と初期温度 $T_{\rm ini}$ の関係は、低温極限で、

$$T_{\rm f} = \left(\frac{2}{3}\right)^{1/3} T_{\rm ini} \tag{169}$$

となる。高温極限では、分子数がとても少ないため、全エントロピーに対する分子のエントロピーの寄与は小さい。したがって、$T_{\rm f} \approx T_{\rm ini}$ となる。

以上の議論を基にして得られる、異核分子の生成効率の初期温度依存性を、図 13 に示した。点は、実験データである [17]。一点鎖線が、我々の計算結果である。我々の計算結果は、フィッティングパラメータを用いずに、実験結果の振る舞いをうまく再現している。実線は SPSS モデルの結果で、破線で挟まれた領域は、SPSS モデルにおけるフィッティングパラメータのとり得る範囲に対応する [17]。この SPSS モデルの解析では、“少数成分”である ^{85}Rb に、全温度領域でボルツマン分布を用いている。

実際の実験では、比$T_{\rm ini}/T_{\rm c,ini}^{87}$を変化させるために、$\alpha$の値を若干変えている。しかし、我々の計算結果の定性的な振る舞いは、比αの値を変えても変わらない。特に、^{87}Rbのみが凝縮するときに現れるプラトーは、最大生成効率$\chi_{0,\max}$に対応し、

$$\chi_{0,\max}=\frac{1}{2} \tag{170}$$

となる。この値は、αの値によらない。このプラトーは、実験データでも確認できる。

プラトーが生じている温度領域よりも低温側、すなわち温度とともに生成効率が上昇している領域は、^{87}Rbと^{85}Rbが凝縮している領域である。このときの生成効率χ_0の振る舞いは、初期温度$T_{\rm ini}$で表すと、

$$\chi_0=\left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm f}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\zeta(3)\frac{1}{N_{\rm tot}}\frac{1+\alpha}{\alpha}=\frac{2}{3}\left(\frac{k_{\rm B}T_{\rm ini}}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\zeta(3)\frac{1}{N_{\rm tot}}\frac{1+\alpha}{\alpha} \tag{171}$$

となる。実験で得られた最も低い温度のデータと我々の結果を対応させると、この実験データは^{85}RbのBECのサインと考えられる。我々の計算によると、$T_{\rm ini}\to 0$で、異核フェッシュバッハ分子の生成効率はゼロになる。

SPSSモデルは、位相空間上で近接している原子のペアが、一夫一婦制に従い分子になる、という原理に従っている。SPSSモデルに従うと、^{85}RbがBECを起こし、混合気体が基底状態に向かうとき、生成効率が素早く100%に達することになる[17]。この結果は、我々が得た結果と全く異なるものである。

我々の数値計算の結果は、実験結果[17]を横にシフトしたもののように見える。このシフトの原因は、温度の規格化に用いた$T_{\rm c,ini}^{87}$の違いによると考えられる。ここでは、理想気体の転移温度$T_{\rm c,ini}^{87}$を用いた。“多数の成分”である^{87}Rb原子の原子間相互作用を、平均場の範囲で取り入れた場合、転移温度$T_{\rm c,ini}^{87}$は、理想気体で見積もられるものよりも小さくなる。この転移温度をスケールに用いると、曲線が全体的に右にシフトしたものが得られる。

$\delta=0$でのフガシティーの関係$z_{87}z_{85}=z_{\rm m}$を用いて、^{87}Rbのみが凝縮している領域での生成効率χ_0を解析する。^{87}Rbが凝縮しているので、$z_{87}=1$である。この状況におけるフガシティーの関係は、$z_{85}=z_{\rm m}$となる。したがって、^{85}Rbと異核分子の粒子数はそれぞれ同じ式で書け、粒子数は等しくなる。結果として、生成効率χ_0は50%になる。^{87}Rbのみが凝縮している温度領域ではどこでも、$z_{87}=1$を満たすので、この生成効率50%を保つプラトーが生じる。

5.4 ボース原子の“多数の成分”、フェルミ原子の“少数の成分”、それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体

“多数の成分”がボース原子である2番目の場合、$\{{\rm B}_>+{\rm F}_<\leftrightarrow{\rm F}_{\rm m}\}$を解析する。

各成分の粒子数は、

$$N_>=N_{\rm c}^>+\left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{G}_3(z_>),\quad N_<=\left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{F}_3(z_<),\quad N_{\rm m}=\left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3\mathcal{F}_3(z_{\rm m}) \tag{172}$$

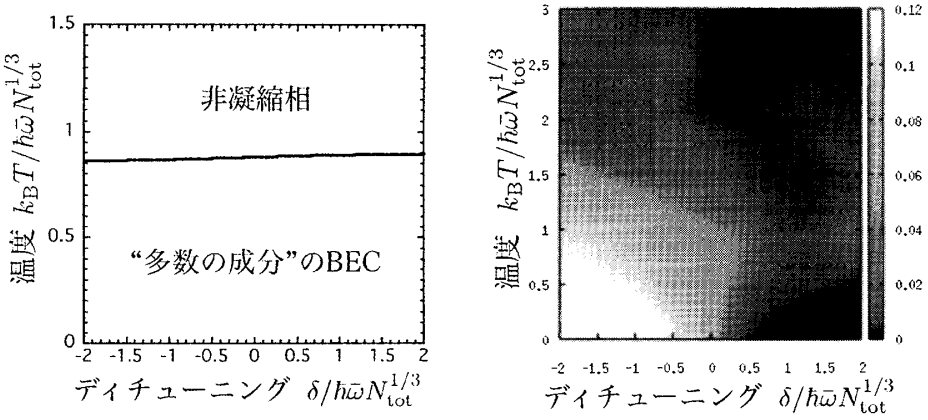

図 14: ボソンである “多数の成分” の転移温度を表した相図（左図）。異核分子の割合 N_m/N_{tot} を、δ-T 平面上に示した（右図)。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

である。$N_c^>$ は、“多数の成分” の中で凝縮している原子の数である。このときの BEC の条件は、$\mu_1 = \alpha\mu_2$ である。

図 14 の左図は、“多数の成分” が凝縮する転移温度を示している。図 14 の右図には、N_m/N_{tot} で与えられる異核分子の割合を、δ-T 平面上に示した。図 15 は、等エントロピー曲線である。断熱的に磁場をスイープしたとき、この曲線に沿って、系が δ-T 平面上を横断する。全エントロピーは、$S = \tilde{S}_B(z_>) + S_F(z_<) + S_F(z_m)$ である。全ての図で、$\alpha = 2/15$ とした。

$\delta = 0$ での転移温度 T_c は、条件 $\mu_1 = \alpha\mu_2$ のもと、

$$k_B T_c = \hbar\bar{\omega}\left[\frac{2-\alpha}{2(1+\alpha)\zeta(3)}N_{tot}\right]^{1/3} \tag{173}$$

になる。$\delta = 0$ で、転移温度 T_c 以下のとき、各成分の粒子数は解析的に求まる。特に、分子の生成効率に重要な異核分子の数 $N_m(\delta = 0)$ は、

$$N_m(\delta = 0) = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)}N_{tot} \tag{174}$$

になる。

図 16 に、生成効率 χ_0 の初期温度依存性を示した。異核分子の生成効率 χ_0 は、“多数の成分” が凝縮する温度領域で、プラトーになる。その値は、

$$\chi_0 = \frac{N_m(\delta = 0)}{N_{tot}}\frac{1+\alpha}{\alpha} = \frac{1}{2} \tag{175}$$

である。図 16 から分かるように、このとき異核分子の生成効率は最大になる。これは初期状態の粒子数の比 α には依存しない。

$\delta = 0$ における各成分のフガシティーの関係 $z_> z_< = z_m$ から、“多数の成分” が凝縮し、$z_> = 1$ になるとき、$z_< = z_m$ が成り立つことが分かる。このため、“多数の成分” が凝縮している領域では、至る所で “少数の成分” の原子数と分子数の比が一定になる。したがって、異核分子の生成効率にプラトーが現れる。

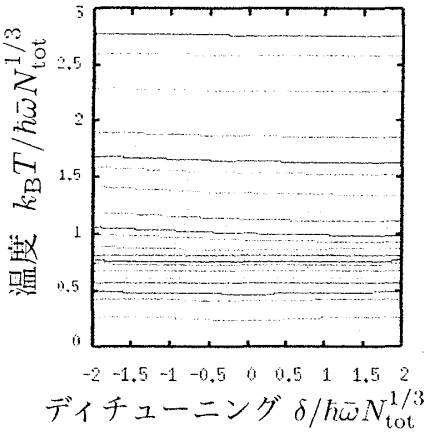

図 15: 等エントロピー曲線。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

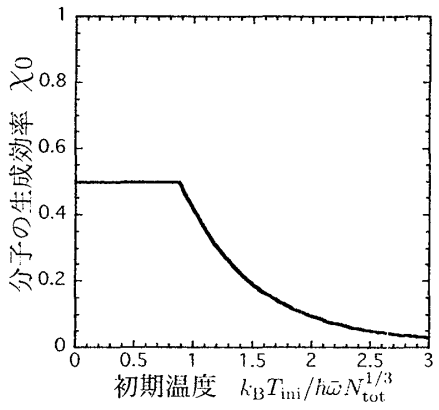

図 16: 生成効率の初期温度依存性。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

SPSS モデルをこの系に適応した場合、上記の結果は期待されない。SPSS モデルでは、位相空間上で近接している原子のペアが、一夫一婦制に従い分子になる。系が基底状態に向うにつれ、ボース原子は位相空間上で凝縮してくる。一方で、フェルミ原子は、パウリの排他律のため、位相空間上で凝縮せず広がったままとなる。このため、原子の各成分は位相空間上でお互いにペアを組む相手を見つけることが困難になる。この結果、SPSS モデルで解析した場合、量子統計性が反映される低温領域では、温度が下がるにしたがって生成効率が減少すると予想される。この定性的な振る舞いは我々の結果と全く異なる。SPSS モデルには、異なった種類の原子を同じ位相空間上に配置して計算していることに問題があると考えられる。

5.5 フェルミ原子の “多数の成分”、ボース原子の “少数の成分”、それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体

“多数の成分” がフェルミオンである、$\{F_> + B_< \leftrightarrow F_m\}$ の場合を解析する。
各成分の粒子数は、

$$N_> = \left(\frac{k_BT}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{F}_3(z_>), \quad N_< = N_c^< + \left(\frac{k_BT}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{G}_3(z_<), \quad N_m = \left(\frac{k_BT}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{F}_3(z_m) \quad (176)$$

で与えられる。$N_c^<$ は、“少数の成分” の中で凝縮している原子の数である。この BEC が生じる条件は、$\mu_1 = -\mu_2$ である。

図 17 の左図は、“少数の成分” のボソンが凝縮する転移温度を表している。図 17 の右図は、異核分子の割合 N_m/N_{tot} を、δ-T 平面上に表している。図 18 では、等エントロピー曲線を示した。断熱的に磁場をスイープしたとき、この曲線に沿って、系が δ-T 平面上を横断する。全エントロピーは、$S = S_F(z_>) + \tilde{S}_B(z_<) + S_F(z_m)$ で与えられる。ここでは全ての図で、$\alpha = 3/4$ を採用した。

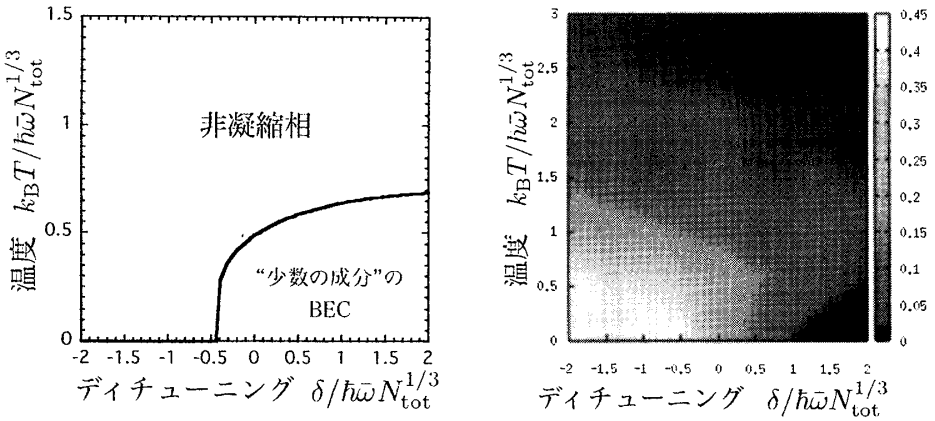

図 17: ボソンの"少数の成分"の転移温度を表した相図（左図）。異核分子の割合 N_m/N_{tot} を、δ-T 平面上にプロットした（右図）。ここで、$\alpha = 3/4$ とした

絶対零度のとき、$\delta > \delta_c$ で"少数の成分"の BEC が生じる。この臨界値 δ_c は、

$$\delta_c = \hbar\bar{\omega}\left(6\frac{1-\alpha}{1+\alpha}N_{tot}\right)^{1/3} - \hbar\bar{\omega}\left(6\frac{\alpha}{1+\alpha}N_{tot}\right)^{1/3} \tag{177}$$

で与えられる。絶対零度かつ $\delta = \delta_c$ では、"少数の成分"の中の凝縮成分および非凝縮成分は存在しない。したがって、$N_<^c = 0$、$\tilde{N}_< = 0$ になる。このため、"少数の成分"の原子が、全て異核分子になる。このとき、"多数の成分"の原子数 $N_>$ と分子数 N_m は、それぞれ $N_> = N_{tot}(1-\alpha)/(1+\alpha)$ と $N_m = N_{tot}\alpha/(1+\alpha)$ で与えられる。

$E_F^>$ と E_F^m を、"多数の成分"のフェルミエネルギーと異核分子のフェルミエネルギーとする。$\delta = \delta_c$ のとき、"多数の成分"のフェルミ面と異核分子のフェルミ面は一致し、$E_F^> = E_F^m + \delta_c$ をみたす。フェルミエネルギーの大小関係は、$\alpha = 1/2$ を境にして変わり、δ_c の符号もこのとき変化する。$\alpha \leq 1/2$ で、δ_c は正になる。このとき、$\delta = 0$ では凝縮せず、$N_<^c = 0$ になる。

$\delta = 0$ で凝縮が起きるかどうかを、$\delta = 0$ での転移温度 T_c を基に議論する。"少数の成分"の BEC の条件は、$\mu_1 = -\mu_2$ である。この条件のもと、$\delta = 0$ での転移温度 T_c を求めると、

$$k_BT_c = \hbar\bar{\omega}\left[\frac{2\alpha-1}{2\zeta(3)(1+\alpha)}N_{tot}\right]^{1/3} \tag{178}$$

となる。もし、初期状態の原子数の比 α が、$\alpha < 1/2$ であるならば、見積もられる転移温度が負になるので、"少数の成分"は $\delta = 0$ で凝縮しない。逆に、$\alpha > 1/2$ の場合、"少数の成分"は $\delta = 0$ で凝縮する。

まず、$\alpha < 1/2$ の場合の生成効率について考える。絶対零度かつ $\delta = 0$ では、"少数の成分"の中に、凝縮成分と非凝縮成分は存在しない。したがって、"少数の成分"の原子が、全て異核分子になっていることがわかる。このとき分子数は、

$$N_m = N_{<,ini} = \frac{\alpha}{1+\alpha}N_{tot} \tag{179}$$

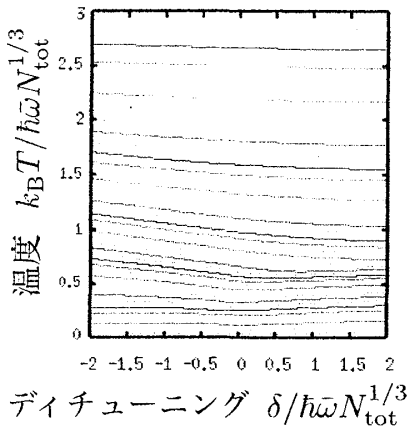

図 18: 等エントロピー曲線。ここで、$\alpha = 3/4$ とした。

である。以上より、$\alpha < 1/2$ の場合、生成効率は絶対零度で 100% に達する。

次に、$\alpha \geq 1/2$ の場合を解析する。$\delta = 0$ かつ $T_{\rm c}$ 以下では、各成分の粒子数を解析的に求めることができる。特に、異核分子の生成効率に効いてくる $\delta = 0$ での分子数 $N_{\rm m}(\delta = 0)$ は、

$$N_{\rm m} = \frac{1}{2(1+\alpha)} N_{\rm tot} \tag{180}$$

で与えられる。したがって、"少数の成分" が凝縮している温度領域では、フェルミオンの分子数が一定となり、生成効率にプラトーが生じることが分かる。

このことはフガシティーの関係からも得られる。転移温度 $T_{\rm c}$ 以下では $z_< = 1$ となり、$\delta = 0$ におけるフガシティーの関係は、$z_> = z_{\rm m}$ になる。よって、$\delta = 0$ かつ $T_{\rm c}$ 以下では、分子数と "多数の成分" の原子数の比が一定になる。結果として、転移温度 $T_{\rm c}$ 以下での生成効率は、

$$\chi_0 = \frac{1}{2\alpha} \tag{181}$$

で与えられる。

図 19 の左図に、生成効率の初期温度依存性を掲げる。実線が、$\alpha = 2/15$ $(< 1/2)$ での生成効率である。破線が、$\alpha = 3/4$ $(> 1/2)$ での生成効率である。点線が、$\alpha = 13/15$ $(> 1/2)$ での生成効率である。図 19 の左図から分かるように、値 $\alpha = 1/2$ を境にして生成効率のふるまいが変化する。

図 19 の右図には、最大生成効率 $\chi_{0,\max}$ の α 依存性を示した。$\alpha = 1/2$ を境にして、最大生成効率 $\chi_{0,\max}$ の振る舞いが変化する。最大生成効率は、初期状態の粒子数の比 α に依存し、50% から 100% までの値をとる。$\alpha > 1/2$ では、プラトーを伴った最大生成効率 $\chi_{0,\max}$ が得られる。その値は、α に依存し、$\chi_{0,\max} = 1/(2\alpha)$ になる。プラトーの出現は、5.4 節で議論された様に、SPSS モデルでは期待されない。

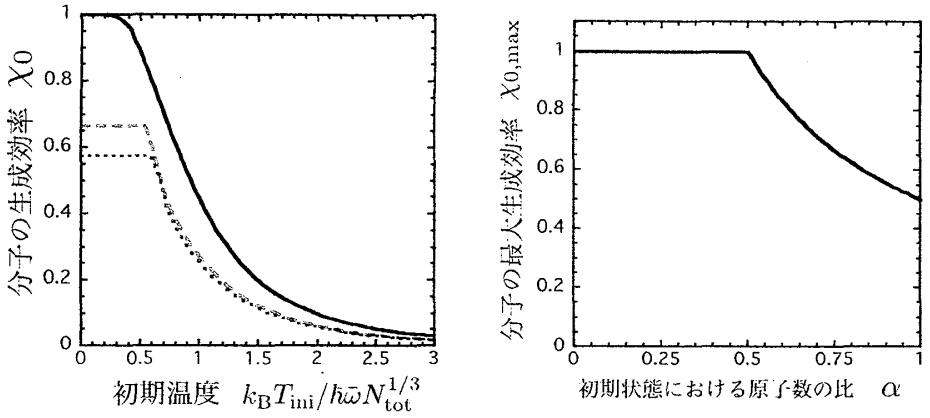

図 19: 異核分子の生成効率の初期温度依存性（左図）。実線が $\alpha = 2/15$、破線が $\alpha = 3/4$、点線が $\alpha = 13/15$ である。また、異核分子の最大生成効率 $\chi_{0,\max}$ を、初期状態の粒子数の比 α の関数としてプロットした（右図）。

5.6 フェルミ原子の “多数の成分”、それと異なるフェルミ原子の “少数の成分”、それらの異核フェッシュバッハ分子からなる混合気体

最後に、“多数の成分” がフェルミオンである 2 つ目の場合、$\{F_> + F_< \leftrightarrow B_m\}$ について解析する。

各成分の粒子数は、

$$N_> = \left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{F}_3(z_>), \quad N_< = \left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{F}_3(z_<), \quad N_m = N_c^m + \left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{G}_3(z_m) \quad (182)$$

である。N_c^m は、凝縮している異核分子の数である。異核分子が BEC をおこす条件は、$2\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2 - \delta = 0$ である。

図 20 の左図に、異核分子が凝縮する転移温度を示した。図 20 の右図は、異核分子の割合 N_m/N_{tot} を、δ-T 平面上に表している。図 21 は、等エントロピー曲線である。断熱的な磁場のスイープを用いたとき、この曲線に沿って、系が δ-T 平面上を横断する。全エントロピーは、$S = S_F(z_>) + S_F(z_<) + \tilde{S}_B(z_m)$ である。全ての図で、$\alpha = 2/15$ を採用した。

絶対零度のとき、$\delta < \delta_c$ で異核分子の BEC が生じる。この臨界値 δ_c は、

$$\delta_c = \hbar\bar{\omega}\left(6\frac{1}{1+\alpha}N_{tot}\right)^{1/3} + \hbar\bar{\omega}\left(6\frac{\alpha}{1+\alpha}N_{tot}\right)^{1/3} \quad (183)$$

で与えられる。絶対零度では、異核分子の非凝縮成分は存在しない。また、絶対零度かつ $\delta = \delta_c$ では、定義より凝縮している異核分子も存在しない。したがって、このときの分子数 N_m はゼロになる。このことから、絶対零度かつ $\delta = \delta_c$ での原子数がそれぞれ、$N_> = N_{>,ini}$ と $N_< = N_{<,ini}$ で与えられる。臨界値 δ_c は、$\delta_c = E_F^> + E_F^<$ とも表される。ここで、$E_F^>$ と $E_F^<$ は、“多数の成分” と “少数の成分” のフェルミエネルギーである。$\delta > 0$ では、異核分子の一粒子状態の最低エネルギーが原子のものより大きい。しかし、フェルミ原子に働くパウリの排他律のため、$0 < \delta < \delta_c$ の領域では、凝縮した異核分子が絶対零度でも安定に存在する。

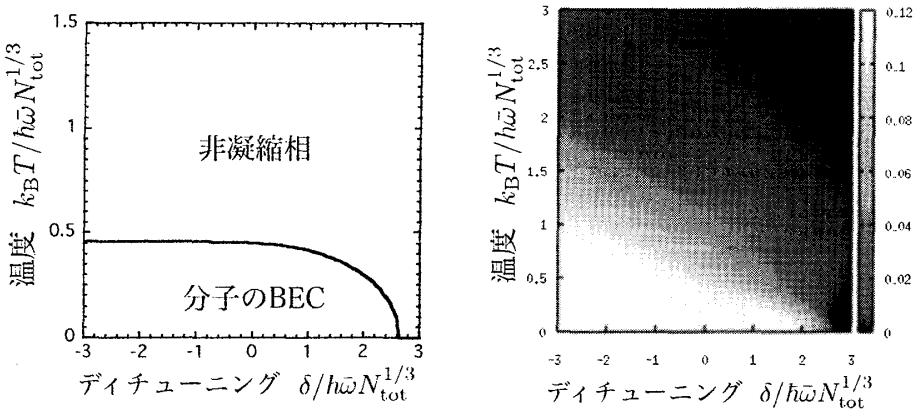

図 20: 異核分子が凝縮する転移温度を表した相図（左図）。異核分子の割合 N_c^m/N_{tot} を、δ-T 平面上にプロットした（右図）。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

$\delta = 0$ で異核分子が凝縮する条件は、$\mu_1 = -(1-\alpha)\mu_2/2$ である。このとき、“多数の成分” と “少数の成分” の化学ポテンシャル $\mu_>$ と $\mu_<$ は、$\mu_> = -(1+\alpha)\mu_2$ と $\mu_< = (1+\alpha)\mu_2$ で与えられる。“多数の成分” はペアを組む “少数の成分” よりも数が多い。したがって、$\alpha = 1$ の場合を除いて、“多数の成分” の中には異核分子にならずに残存した原子が必ず存在する。このため、フェルミオンである “多数の成分” の化学ポテンシャルは、絶対零度のとき正でなければならない。このことから、$\mu_2 \leq 0$ であることが分かる。このとき、“少数の成分” の化学ポテンシャルは負になる。よって、絶対零度かつ $\delta = 0$ では、“少数の成分” の原子は存在せず、全て異核分子になっていることが分かる。このときの分子数 $N_m(\delta = 0)$ は、

$$N_m = N_{<,ini} = \frac{\alpha}{1+\alpha} N_{tot} \tag{184}$$

となる。このことから、最大生成効率 $\chi_{0,max}$ は、絶対零度で 100% になることがわかった。図 22 に、生成効率の初期温度依存性を掲げておく。

5.7　生成効率を与える公式

分子の生成効率は、実験 [13] により、位相空間密度のピークの単調関数で与えられることが分かった。Williams たちは、古典気体の枠内でその関係式を明示的に導出している [28]。この節では、異核フェッシュバッハ分子の生成効率と初期状態の位相空間密度のピークとの関係式を、凝縮が生じない領域で導出する。

“多数の成分” には量子縮退が生じるとし、ボソンあるいはフェルミオンの分布関数を用いる。“少数の成分” と異核分子は、粒子数が少なく低密度のため、de Broglie 波長よりも粒子間距離が大きいとし、量子統計性を無視する。そこで、これらの成分にはボルツマン分布を用いる。このような低密度の場合、フガシティーが小さいのでボース積分とフェルミ積分を、

$$\mathcal{G}_n(z) \approx z, \qquad \mathcal{F}_n(z) \approx z \tag{185}$$

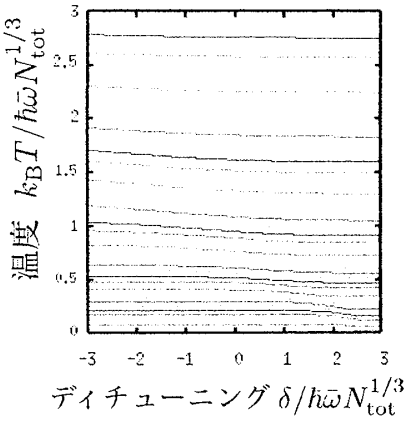

図 21: 等エントロピー曲線。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

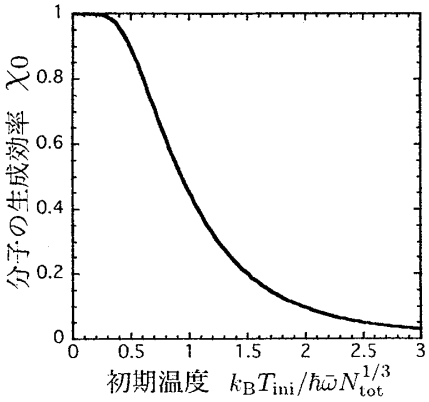

図 22: 生成効率の初期温度依存性。ここで、$\alpha = 2/15$ とした。

と近似することが許される。

まずは、"多数の成分" がボソンの場合を考える。各成分の粒子数は、

$$N_> = \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \mathcal{G}_3(z_>), \quad N_< = \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 z_<, \quad N_{\rm m} = \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 z_{\rm m} \tag{186}$$

で与えられる。このとき、各成分のエントロピーは、

$$\begin{cases} S_> &= k_{\rm B}N_> \left[4\dfrac{\mathcal{G}_4(z_>)}{\mathcal{G}_3(z_>)} - \ln z_>\right], \\ S_< &= k_{\rm B}N_< \left(4 - \ln z_<\right), \\ S_{\rm m} &= k_{\rm B}N_{\rm m}\left(4 - \ln z_{\rm m}\right) \end{cases} \tag{187}$$

になる。

また、分子の生成効率は、

$$\chi_0 = \frac{N_{\rm m}}{N_{\rm tot}}\frac{1+\alpha}{\alpha} = t^3 z_{\rm m}\frac{1+\alpha}{\alpha} \tag{188}$$

で与えられる。ただし、$t \equiv k_{\rm B}T/(\hbar\bar{\omega}N_{\rm tot}^{1/3})$ とした。

式 (186) と粒子数に関する 2 つの拘束条件を用いることで、$z_{\rm m}$、$z_<$、$t^3\mathcal{G}_3(z_>)$ が χ_0 の関数として得られる。それぞれ、

$$\begin{cases} z_{\rm m} &= \dfrac{1}{t^3}\dfrac{\alpha}{1+\alpha}\chi_0, \\ z_< &= \dfrac{1}{t^3}\dfrac{\alpha}{1+\alpha}(1-\chi_0), \\ t^3\mathcal{G}_3(z_{87}) &= \dfrac{\alpha}{1+\alpha}\left(\dfrac{1}{\alpha} - \chi_0\right) \end{cases} \tag{189}$$

である。

$\delta = 0$ でのフガシティーの関係 $z_{\rm m} = z_> z_<$ を基にして、“多数の成分” のフガシティー $z_>$ が、χ_0 の関数として得られる。この関係式は、

$$z_> = \frac{z_{\rm m}}{z_<} = \frac{\chi_0}{1-\chi_0} \tag{190}$$

で与えられる。これらの式を用いることで、$\delta = 0$ での終エントロピー $S_{\rm f}$ は、α と χ_0 の関数になり、それは、

$$\begin{aligned} S_{\rm f} &= S_{>,{\rm f}} + S_{m,{\rm f}} + S_{<,{\rm f}} \\ &= k_{\rm B} N_{\rm tot} \left(\frac{4}{1+\alpha} \left[\alpha + (1-\alpha\chi_0) \frac{\mathcal{G}_4\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)}{\mathcal{G}_3\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)} \right] \right. \\ &\quad \left. - \ln \left\{ \left[\frac{\alpha(1-\chi_0)}{1-\alpha\chi_0} \mathcal{G}_3\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right) \right]^{\frac{\alpha}{1+\alpha}} \left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)^{\frac{1}{1+\alpha}} \right\} \right) \end{aligned} \tag{191}$$

となる。

一方で、初期状態の粒子数は、

$$N_{>,{\rm ini}} = \frac{1}{1+\alpha} N_{\rm tot}, \qquad N_{<,{\rm ini}} = \frac{\alpha}{1+\alpha} N_{\rm tot} \tag{192}$$

である。“多数の成分” であるボース原子の位相空間密度のピーク $\rho^>_{\rm pk}$ は、

$$\rho^>_{\rm pk} \equiv \lambda_>^3 n_>(\mathbf{r}=\mathbf{0}) = \mathcal{G}_{3/2}(z_>) \tag{193}$$

で定義される。ただし、$\lambda_>$ は、“多数の成分” の de Broglie 波長、$\lambda_> = [2\pi\hbar/(m_> k_{\rm B} T)]^{1/2}$ である。ここで、“多数の成分” の原子の質量を $m_>$ とした。また、$n_>(\mathbf{r}=\mathbf{0})$ は、トラップの中心における “多数の成分” の密度である。定義式から、$\rho^>_{\rm pk}$ の関数としてフガシティー $z_>$ が得られ、

$$z_> = \mathcal{G}^{-1}_{3/2}(\rho^>_{\rm pk}) \tag{194}$$

となる。初期状態における 2 つ目の拘束条件 $0 = N_{<,{\rm ini}} - \alpha N_{>,{\rm ini}}$ から、初期状態のフガシティー $z_{<,{\rm ini}}$ と $z_{>,{\rm ini}}$ の間に、関係

$$z_{<,{\rm ini}} = \alpha \mathcal{G}_3(z_{>,{\rm ini}}) \tag{195}$$

が成り立つことが分かる。

したがって、初期エントロピー $S_{\rm ini}$ は、初期状態における “多数の成分” の位相空間密度のピーク $\rho^>_{\rm pk,ini}$ と α の関数として得られ、

$$\begin{aligned} S_{\rm ini} &= S_{<,{\rm ini}} + S_{>,{\rm ini}} \\ &= k_{\rm B} N_{\rm tot} \left[4 \frac{1}{1+\alpha} \left\{ \alpha + \frac{\mathcal{G}_4\left[\mathcal{G}^{-1}_{3/2}(\rho^>_{\rm pk,ini})\right]}{\mathcal{G}_3\left[\mathcal{G}^{-1}_{3/2}(\rho^>_{\rm pk,ini})\right]} \right\} \right. \\ &\quad \left. - \ln \left(\left\{ \alpha \mathcal{G}_3 \left[\mathcal{G}^{-1}_{3/2}(\rho^>_{\rm pk,ini})\right] \right\}^{\frac{\alpha}{1+\alpha}} \left[\mathcal{G}^{-1}_{3/2}(\rho^>_{\rm pk,ini})\right]^{\frac{1}{1+\alpha}} \right) \right] \end{aligned} \tag{196}$$

となる。

断熱的に磁場をスイープした時の異核分子の生成効率 χ_0 と、初期状態における“多数の成分”の位相空間密度のピーク $\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}}$ との関係は、$\delta = 0$ におけるエントロピーと初期エントロピーを等しいとおくことで得られる。これらの物理量 χ_0 と $\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}}$ の関係式は、

$$
\begin{aligned}
& 4(1-\alpha\chi_0)\frac{\mathcal{G}_4\left(\dfrac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)}{\mathcal{G}_3\left(\dfrac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)} - \ln\left\{\left[\frac{1-\chi_0}{1-\alpha\chi_0}\mathcal{G}_3\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)\right]^{\alpha}\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right\} \\
= \; & 4\frac{\mathcal{G}_4[\mathcal{G}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})]}{\mathcal{G}_4[\mathcal{G}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})]} - \ln\left(\left\{\mathcal{G}_3\left[\mathcal{G}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})\right]\right\}^{\alpha}\left[\mathcal{G}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})\right]\right) \qquad (197)
\end{aligned}
$$

となっている。

同様の手順を踏むことで、“多数の成分”がフェルミオンである場合の関係式も得られる。この場合、“多数の成分”の位相空間密度のピーク $\rho^{>}_{\mathrm{pk}}$ は、

$$
\rho^{>}_{\mathrm{pk}} = \lambda_{>}^3 n_{>}(\mathbf{r}=\mathbf{0}) = \mathcal{F}_{3/2}(z_{>}) \qquad (198)
$$

で与えられる。ボース積分をフェルミ積分に置き換えることで、“多数の成分”がフェルミ原子の場合の関係式

$$
\begin{aligned}
& 4(1-\alpha\chi_0)\frac{\mathcal{F}_4\left(\dfrac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)}{\mathcal{F}_3\left(\dfrac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)} - \ln\left\{\left[\frac{1-\chi_0}{1-\alpha\chi_0}\mathcal{F}_3\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right)\right]^{\alpha}\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right\} \\
= \; & 4\frac{\mathcal{F}_4[\mathcal{F}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})]}{\mathcal{F}_4[\mathcal{F}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})]} - \ln\left(\left\{\mathcal{F}_3\left[\mathcal{F}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})\right]\right\}^{\alpha}\left[\mathcal{F}_{3/2}^{-1}(\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}})\right]\right) \qquad (199)
\end{aligned}
$$

が得られる。

“多数の成分”がボソンのとき、フガシティー $z_{>}$ は 1 よりも小さくなければならない。この制約と式 (190) だけから、生成効率の上限 $\chi_{0,\max}$ は、

$$
\chi_0 \leq \chi_{0,\max} \equiv 1/2 \qquad (200)
$$

と求まる。この生成効率の最大値 $\chi_{0,\max}$ は、“多数の成分”がボソンである場合を扱った、5.3 節と 5.4 節での結果に一致する。

高温極限での関係式は、“多数の成分”にボルツマン分布を用い、$\mathcal{G}_n(z) \approx z$、あるいは $\mathcal{F}_n(z) \approx z$ と近似することで得られる。したがって、“多数の成分”のフガシティーと位相空間密度のピークはほぼ等しく、

$$
z_{>} \approx \rho_{>} \qquad (201)
$$

となる。古典気体では、異核分子の生成効率 χ_0 と、初期状態における“多数の成分”の位相空間密度のピーク $\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}}$ との関係は、

$$
4\frac{\alpha}{1+\alpha}\chi_0 + \ln\left[\left(\frac{1-\chi_0}{1-\alpha\chi_0}\right)^{\frac{\alpha}{1+\alpha}}\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right] = \ln\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}} \qquad (202)
$$

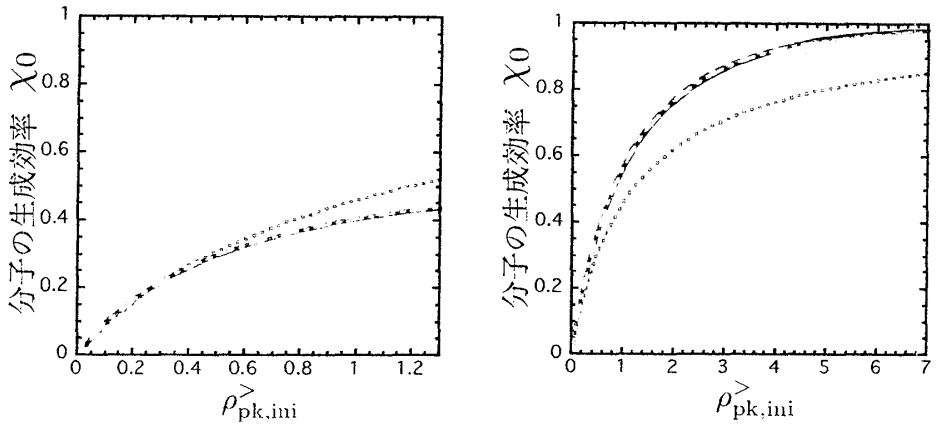

図 23: 異核分子の生成効率 χ_0 を、初期状態における “多数の成分” の位相空間密度のピーク $\rho^{>}_{\rm pk,ini}$ の関数としてプロットした。左図は、“多数の成分” がボース原子の場合である。実線と、破線は、$\{B_> + B_< \leftrightarrow B_{\rm m}\}$ と、$\{B_> + F_< \leftrightarrow F_{\rm m}\}$ の場合の数値計算の結果である。一点鎖線は、式 (197) で与えられる我々の公式の結果であり、実線と破線に一致する。点線は、式 (202) で与えられる古典気体の結果である。右図は、“多数の成分” がフェルミ原子の場合である。実線と破線は、$\{F_> + B_< \leftrightarrow F_{\rm m}\}$ と $\{F_> + F_< \leftrightarrow B_{\rm m}\}$ の場合の数値計算の結果である。一点鎖線は、式 (199) で与えられる我々の公式の結果であり、実線と破線に一致する。点線は、式 (202) で与えられる古典極限の結果である。左右の図では、ともに $\alpha = 2/15$ とした。

となっている。

用意した各成分の原子数が等しい場合を考える。このときの関係式は、Williams たちによって導出された関係式 [28]、

$$\ln \rho^{>}_{\rm pk,ini} \;=\; 2\chi_0 + \ln\left(\frac{\chi_0}{1-\chi_0}\right) \tag{203}$$

に帰着される。

図 23 に、$\rho^{>}_{\rm pk,ini}$ の関数として、異核分子の生成効率 χ_0 を示した。ここでは、$\alpha = 2/15$ を用いている。図 23 の左図は、“多数の成分” がボース原子の場合である。実線は、5.3 節で議論した $\{{\rm B}_> + {\rm B}_< \leftrightarrow {\rm B}_{\rm m}\}$ の場合の数値計算の結果である。破線は、5.4 節で議論した $\{{\rm B}_> + {\rm F}_< \leftrightarrow {\rm F}_{\rm m}\}$ の場合の数値計算の結果である。一点鎖線は、式 (197) で与えられる我々の式の結果である。この一点鎖線による曲線は、実線と破線で表される二つの数値計算の結果とよく一致している。点線は、式 (202) で与えられる古典極限の結果である。$\rho^{>}_{\rm pk,ini}$ が小さい領域で、三つの曲線と一致する。図 23 の右図は、“多数の成分” がフェルミ原子の場合である。実線は、5.5 節で議論した $\{{\rm F}_> + {\rm B}_< \leftrightarrow {\rm F}_{\rm m}\}$ の数値計算の結果である。破線は、5.6 節で議論した $\{{\rm F}_> + {\rm F}_< \leftrightarrow {\rm B}_{\rm m}\}$ の数値計算の結果である。一点鎖線は、式 (199) で与えられる我々の公式の結果である。この一点鎖線による曲線は、実線と破線で表される二つの数値計算の結果とよく一致している。点線は、式 (202) で与えられる古典極限の結果を表している。$\rho^{>}_{\rm pk,ini}$ が小さい領域で、三つの曲線と一致する。

5.5 節で議論したように、$\{{\rm F}_> + {\rm B}_< \leftrightarrow {\rm F}_{\rm m}\}$ の場合は、異核分子の最大生成効率が初期

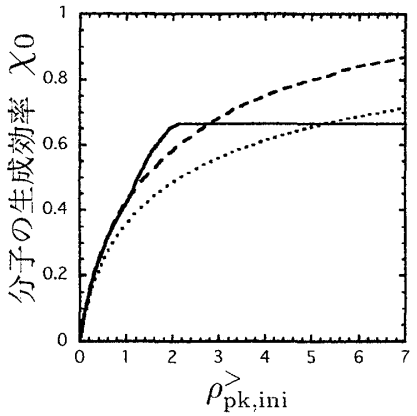

図 24: 場合 $\{F_> + B_< \leftrightarrow F_\mathrm{m}\}$ で、$\alpha = 3/4$ のときの生成効率を、$\rho^{>}_{\mathrm{pk,ini}}$ の関数としてプロットした。実線は、数値計算の結果である。プラトーでは、"少数の成分" が凝縮している。破線は、式 (199) で与えられる我々の式の結果である。点線は、式 (202) で与えられる古典極限の結果である。

状態の原子数の比 α に依存する。そこで、図 23 で用いられた値と異なる α を用いて、場合 $\{\mathrm{F}_> + \mathrm{B}_< \leftrightarrow \mathrm{F_m}\}$ における異核分子の生成効率を調べる。図 24 に、$\alpha = 3/4$ の場合を掲げた。5.5 節で議論したように、$\alpha = 3/4$ では、$\delta = 0$ で "少数の成分" に BEC が生じる。このとき、生成効率にプラトーが生じ、最大生成効率が得られる。実線は、5.5 節で議論した数値計算の結果である。破線は、式 (199) で与えられる我々の式の結果である。点線は、式 (202) で与えられる古典極限での結果である。位相空間密度のピークが小さい領域を除いて、数値計算の結果と式 (199) は一致しない。このズレは、"少数の成分" のもつボース統計性によって生じる。$\alpha = 3/4$ の場合は、$\delta = 0$ で "少数の成分" に BEC が現れることからも、"少数の成分" の量子統計性は無視できない。このため、"少数の成分" が古典気体であるという、式 (199) を導くときに用いた仮定は、位相空間密度のピークが大きい領域で破綻し得る。

6 結論

本研究では、希薄原子気体の実験でよく用いられる磁場の断熱的なスイープに着目し、断熱的相図とフェッシュバッハ分子の生成効率について解析した。

まず、擬スピンを持ったフェルミ原子気体について調べた。ただし、各擬スピンで粒子数が等しい原子気体を想定した。共鳴相互作用を平均場近似の範囲内で取り入れるために、共鳴幅が狭いモデルを採ることにした。共鳴相互作用を取り入れることで、Williams たちの論文 [23, 28] では扱われなかった、クーパー対による BCS 超流動も考慮できる。このクーパー対と、凝縮したボース分子の和として対凝縮を定義し、初期温度の関数としてその振る舞いを解析した。この結果、BEC 領域で、初期温度換算された転移温度 $T_{\mathrm{i,c}}$ は、$T_{\mathrm{i,c}} \simeq 0.21 T_\mathrm{F}$ となった。これは、初期温度換算する前の転移温度よりも、実験結果 [4, 6] に近い値である。また、分子の生成効率を、初期温度の関数として求め、生成効率におけ

る共鳴相互作用の役割を調べた。この計算から、理想気体では100%であった最大生成効率が、共鳴相互作用によって抑制されることが分かった。

本解析には、共鳴幅が狭いモデルを用いた。しかし、ここで得られた結果は、共鳴幅が広い場合の結果と定性的に同じであると考えられる。理論と実験を定量的に比較するには、結合定数の値を実験にあわせ、平均場近似では扱えなかったクーパー対の揺らぎを取り入れる必要がある。また、実験と同様、ディチューニングでなく磁場の関数として、各物理量を見積もる必要もある。

次に、原子数の異なる二成分混合原子気体から、断熱的な磁場のスイープを用いて異核フェシュバッハ分子を作るときの、生成効率について解析した。ここでの解析は、Williamsたちが提案した原理 [28] に基づいている。まず、^{87}Rb原子と^{85}Rb原子の混合気体を用いた実験結果と、定性的に一致する結果を得た。このアプローチはフィッティングパラメータを必要としないので、まだ実験されていない系での異核フェッシュバッハ分子の生成効率を求めることができる。この結果、最大生成効率は、原子のもっている量子統計性に依存することが解明された。また、最大生成効率にプラトーが生じうることも、解析により分かった。分子の生成効率を理論計算から見積もるモデルとして、Hodbyたちによる SPSS モデルと、Williamsたちによるモデルの２つが提案されている。しかし、本研究により、量子縮退が生じる低温領域で、これらのモデルは全く異なる結果を導くことが解明された。SPSS モデルには、本来別々の位相空間上に配置されるべき異なった種類の原子を、同じ位相空間上に配置して計算しているところに問題があると考えられる。

謝辞

指導教官である和達三樹先生には、研究活動全般に渡って、多くの支援と励ましをいただきました。心から感謝いたします。また、先生の指導方針にも、敬服の意を表したいと思います。二国徹郎先生には、本研究において、陰から日向から多くのことをご教授していただきました。Nicolai Nygaard先生には、多くの有益なコメントをしていただきました。James E. Williams博士からは、本研究を進める貴重なきっかけをいただきました。充実した研究活動の機会を与えてくださった先生方に、大変感謝しております。

また、研究室では、樋上さん、内山さん、黒沼さん、飯田さん、茂地さん、坂本さん、加藤さん、土田さん、黒崎くんに、大変お世話になりました。有意義な時間が研究室で過ごせたと思います。ありがとうございます。特に、黒沼さんには、何度も親切に助けていただきました。また、樋上さんには、TA の機会を与えていただき、大変勉強になりました。重ねて、感謝したいと思います。

加藤雄介先生には、研究に対して有益なコメントをいただきました。また、節目節目で大変お世話になり、感謝しています。

宮川さんと小鍋さんには、この分野に関するたくさんの議論を何度もしていただきました。また、二国グループの愉快なみなさんにも大変お世話になり、あわせて感謝の意を表したいと思います。様々な研究が聞けることで、この分野の知見を広げることができています。ありがとうございます。

最後に、支えてくださった家族に心から感謝します。

参考文献

[1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science, **269**, 5221, (1995)

[2] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687, (1995).

[3] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3936, (1995).

[4] C. A. Regal, M. Greiner and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **92**, 040403, (2004).

[5] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm, Phys. Rev. Lett. **92**, 120401, (2004).

[6] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. Raupach, A. J. Kerman, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **92**, 120403, (2004).

[7] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **93**, 050401, (2004).

[8] S. Inouye, K. B. Davis, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, Nature, **392**, 151, (1998).

[9] C. A. Regal, and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **90**, 230404, (2003).

[10] A. Fioretti, D. Comparat, A. Crubellier, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, and P. Pillet, Phys. Rev. Lett. **80**, 4402, (1998).

[11] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin, Nature (London), **424**, 47, (2003).

[12] K. E. Strecker, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **91**, 080406, (2003).

[13] E. Hodby, S. T. Thompson, C. A. Regal, M. Greiner, A. C. Wilson, D. S. Jin, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **94**, 120402, (2005).

[14] D. DeMille, Phys. Rev. Lett. **88**, 067901, (2002).

[15] C. A. Stan, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **93**, 143001, (2004).

[16] S. Inouye, J. Goldwin, M. L. Olsen, C. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **93**, 183201, (2004).

[17] S. B. Papp and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **97**, 180404, (2006).

[18] C. Ospelkaus, S. Ospelkaus, L. Humbert, P. Ernst, K. Sengstock, and K. Bongs, Phys. Rev. Lett. **97**, 120402, (2006).

[19] Y. Ohashi, and A. Griffin, Phys. Rev. A **67**, 033603, (2003).

[20] G. M. Falco, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. Lett. **92**, 130401, (2004).

[21] R. B. Diener, and T. - L. Ho, cond-mat / 0404517.

[22] M. Wadati and T. Iida, Phys. Rev. A **360**, 423, (2007).

[23] J. E. Williams, N. Nygaard, and C. W. Clark, New J. Phys. **6**, 123, (2004).

[24] Q. Chen, J. Stajic, and K. Levin, Phys. Rev. Lett. **95**, 260405, (2005).

[25] H. Hu, X.-J. Liu, and P. Drummond, Phys. Rev. A **73**, 023617, (2006).

[26] L. D. Carr, R. Chiaramonte, and M. J. Holland, Phys. Rev. A **70**, 043609, (2006).

[27] Q. Chen, C. A. Regal, M. Greiner, D. S. Jin, and K. Levin, Phys. Rev. A **73**, 041601, (2006).

[28] J. E. Williams, N. Nygaard, and C. W. Clark, New J. Phys. **8**, 150, (2006).

[29] J. E. Williams, T. Nikuni, N. Nygaard, and C. W. Clark, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, L351, (2004).

[30] C. A. Regal, M. Greiner and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **92**, 083201, (2004).

[31] S. Watabe, T. Nikuni, N. Nygaard, J. E. Williams, and C. W. Clark, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 064003 (2007).

[32] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, (Cambridge, 2002)

[33] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Oxford University Press, 2003)

[34] A. G. Sitenko, (translated and edited by P. J. Shepherd), *Lectures in Scattering Theory*, (Pergamon Press, 1971)

[35] G. M. Falco and H. T. C. Stoof, cond-mat / 0603270.

[36] H. Feshbach, Ann. Phys. (N. Y.) **5**, 257 (1958)

[37] N. Nicolai, B. I. Schneider, and P. S. Julienne, Phys. Rev. A **73**, 042705 (2006).

[38] S. J. J. M. F. Kokkelmans, J. N. Milstein, M. L. Chiofalo, R. Walser, and M. J. Holland, Phys. Rev. A **65**, 053617 (2002)

[39] S. T. Thompson, E. Hodby, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **94**, 020401, (2005).

[40] T. Köhler, K. Goral, and P. S. Julienne, Phys. Rev. Lett. **94**, 020402, (2005).

[41] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).

[42] 上田 正仁, 現代量子物理学 [基礎と応用], (培風館, 2004)

[43] N. Fukushima, Y. Ohashi, E. Taylor, and A. Griffin, cond-mat / 0609445.

[44] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, Phys. Rev. Lett. **95**, 230405 (2005).

[45] Matt Mackie, and Jyrki Piilo, Phys. Rev. Lett. **94**, 060403 (2005).

[46] M. Marini, F. Pistolesi, and G. C. Strinati, Eur. Phys. J. B, **1**, 151, (1998).

[47] L. Salasnich, N. Manini, and A. Parola, Phys. Rev. A **72**, 023621 (2005).

[48] Y. Kawaguchi, and T. Ohmi, cond-mat / 0411018.

[49] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003).

[50] M. H. Szymańska, K. Góral, T. Köhler, and K. Burnett, Phys. Rev. A **72**, 013610 (2005).

[51] Y. Ohashi, and A. Griffin, Phys. Rev. A **72**, 013601 (2005).

[52] Y. Ohashi, and A. Griffin, Phys. Rev. A **72**, 063606 (2005).

[53] L. D. Carr, G. V. Shlyapnikov, and Y. Castin, Phys. Rev. Lett. **92**, 150404 (2004).