

冪型斥力ポテンシャルのモデルとボーズ・アインシュタイン凝縮体の有効相互作用

大田 彰^{*1,†}・坂口 英継^{*2}

(平成23年12月12日 受理)

Model of Power-law Repulsive Potential and Effective Interaction of Bose-Einstein Condensates

Akira OHTA , Hidetsugu SAKAGUCHI

[†]E-mail of corresponding author: ohata@photon.jst.go.jp

Bose-Einstein condensation was realized in dilute gases of Alkali metals and Hydrogen atoms. The scattering length can take a positive or negative value by a subtle change of parameters even if the atomic interaction is always the attractive Van der Waals potential. The scattering length determines the effective interaction in BECs, i.e., the effective interaction is attractive (repulsive) when the scattering length is negative (positive). In this paper, we propose a model system in which the atomic interaction potential obeys a repulsive power law in the long range, and obtain the expression of the scattering length of this model analytically.

Key words: *Bose-Einstein condensation, Power-law repulsive potential, Repulsive atomic interaction, Scattering length,*

1. 緒言

著者等はボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) 研究の一環で、希薄気体状粒子集団内の相互作用ポテンシャルが正になるような系の有無とその振る舞いに興味を惹かれ本研究に取り組んだ。1995年にWieman, Cornell, Ketterleの実験によって⁸⁷Rb希薄気体でBECが実現して以来、今日までに多くのアルカリ金属原子および水素原子でBECが創り出されている。これらに共通するのは原子間相互作用のポテンシャル U が $U(r)=-ar^{-6}(a>0)$ の形をしている点である。ファンデアワールス・ポテンシャル (VWP) と呼ばれる負のポテンシャルで、これら原子をその電荷配置から電気双極子とみなすことで導かれる。この双極子の対が形成する相互作用場 V は、それが無いとした時のハミルトニアン H_0 に対する摂動として扱われる。 $V=\beta r^{-3}$ の形であり、 β は双極子ベクトルの各成分の奇関数になる。

相互作用対象の2原子を重心座標系で見た時の2原子波動関数を1原子波動関数の直積で近似し、さらに対象がBECであることから1原子波動関数を基底状態と見て各位置座標に関する球対称と仮定すると、 V の1次摂動エネルギーは β が奇関数であることから自動的に0になる。

従って発生するエネルギーの大部分は基底状態に対する2次摂動による寄与であり、これは式の上で分母にくるエネルギー準位差の項が $E_0-E_n<0$ であることから、上記のように

$$U(r)\propto-(\beta r^{-3})^2\alpha-ar^{-6}(a>0) \text{ となる。}$$

BECの研究はグロス・ピタエフスキー方程式をベースに行われるのが普通である。この式はハミルトニアンに原子間相互作用のエネルギーに相当する非線型項 $U_0|\Psi|^2$ を含む。 U_0 は有効相互作用と呼ばれ、一般的には定数 $4\pi\hbar^2a/m$ を当てることが多い。ここに m は換算質量、 a は散乱長である。定数である U_0 は散乱をボルン近似で扱った時の第1近似として得られる。散乱長 a は散乱後の波動関数が無限遠で(規格化定数を除き)概ね次の式で表されることに由来する。

$$\Psi(r) \rightarrow 1 - \frac{a}{r} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (1)$$

*1 量子プロセス理工学専攻博士課程
(現在 (独) 科学技術振興機構)

*2 量子プロセス理工学専攻

$U(r)$ がVWPのように負の場合には、 a は正にも負にもなり得る。 $U(r)=-ar^{-n}(a>0, n>2)$ に対して、適当な仮定の下に得られた解析的な式が次のように報告されている¹⁾。

$$a = r_0 \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \left(\frac{1}{n-2}\right)^{\frac{2}{n-2}} \left(\sin \frac{\pi}{n-2}\right) \left[\cot \frac{\pi}{n-2} - \tan \left\{ z_c - \frac{n\pi}{4(n-2)} \right\} \right] \quad (2)$$

$$z_c = \frac{2}{n-2} \left(\frac{r_0}{r_c}\right)^{\frac{n-2}{2}} \quad (3)$$

ここに、 r_c はポテンシャル $U(r)$ に課せられた条件に関するもので、 $U(r)=-ar^{-n}$ がそのまま成り立つのは $r>r_c$ の範囲であって、 $r\leq r_c$ では $U(r)\rightarrow\infty$ になるとするものである。これは $r=r_c$ に剛体の壁があることを意味する。互いの粒子がそれ以上近づけない限界で、古典的な粒子固有の大きさのイメージである。(2)式右辺のtan項の引数中の z_c の値の違いで a の符号が劇的に変化することが分かる。 U_0 は a に比例し、 $a>0$ なら斥力、 $a<0$ なら引力の相互作用になる。実験で求められた a の値が水素および多くのアルカリ金属原子について報告されており、それらが参考文献2)にまとめて転載されている。同じ元素でも同位体間で a の値が異なり、また、2原子の最外殻電子のスピンの互いに一重項状態の場合と三重項状態の場合とで符号が変わる等のパラエティーが見てとれる。(2)式および(3)式上では、これらの物理状態の違いは r_0 及び r_c の違いとなって現れる。(2)式は定性的ながら測定結果をよく説明していると言える。

このように、これまでのBEC研究は原子間相互作用ポテンシャル $U(r)$ が負の対象に関するものが圧倒的に多く、 $U(r)$ が正になる系に関するものは極めて少ないように見受けられる。実験研究が第1族原子中心であったことと無関係ではないであろう。ただ、これら以外でBECが実現している原子は皆無というわけではない。⁴Heの超流動がそうである。構成原子の一部がBECになっているとされ、超流動状態にある原子間には強い斥力が働いていることが知られている。⁴Heの電子配置、とりわけ最外殻はアルカリ金属や水素と異なる。とすれば、相互作用が同じ斥力でもその元にあるポテンシャルは形が違っているかもしれない。ひょっとしたら $U(r)>0$ になっているのではないか？ こうした疑問が生じて不思議ではない。これが本研究の発端である。具体的には次の点に注力した。すなわち、適当な斥力ポテンシャルのモデルを設定し、それに対する散乱長 a の表現式を解析的に導き出すことである。これについて一応の結果を得たので以下に報告する。

2. 散乱長の解析

対象とする斥力ポテンシャルのモデルをVWPとの対比から冪型とし、 $U(r)=ar^{-n}(a>0)$ と設定する。 n の値が2を境にして、 $n>2$, $n<2$, $n=0$ のケースで結果が異なるので、これら3つのケースに分けて解析する。(実は、このような違いはポテンシャルが冪型であれば負の場合も同様である)。

2.1 $n>2$ のケース

以下の計算は(2)式を導いた論文1)を参考に行っている。出発点となる式は相互作用する2粒子の重心座標系におけるシュレーディンガー方程式である。

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right\} \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (4)$$

ここに、 $E=\hbar^2k^2/2m$ である。BECを想定しているので、これら2粒子には外部からトラップ・ポテンシャルが印加されているが、相互作用の効果が顕在化する距離では2粒子に作用するポテンシャルはほぼ同程度と見なせるので、重心系の式では除外しても差し支えない。演算子を極座標で表記し分離定数に $l(l+1)$ を用いると、 $\Psi(\mathbf{r})$ は動径成分 $R_l(r)$ と角度成分 $K(\theta, \varphi)$ に分離できる。 $K(\theta, \varphi)$ は良く知られた球面調和関数で表される。 l は0または正の整数で物理的には方位量子数である。BECではほとんどの粒子は基底状態にあるので運動エネルギーは本来小さく、また相互作用はs波散乱が中心と考えられる。従って、 $k=0$, $l=0$ と置くことができる。この時の動径関数を $R_0(r)=R(r)$ とおき、さらに $\chi(r)=rR(r)$ と変換して、 $U(r)=ar^{-n}$ を代入すると(4)式は次のように簡略化される。

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} - \frac{2ma}{\hbar^2 r^n} \chi(r) = 0 \quad (5)$$

ここで、 $U(r)$ に一つの条件を仮定する。(3)式の r_c を設定したのと同じ条件を想定し、式 $U(r)=ar^{-n}$ がそのまま成り立つのは $r>r_c$ の範囲であり、 $r\leq r_c$ では $U(r)\rightarrow\infty$ になるとするものである。これにより波動関数は $\chi(r_c)=0$ でなければならない。以下、この境界条件の下に(5)式を解く。次に示す r_0 を用いて $x=r/r_0$ とおき(5)式を無次元化する。

$$r_0 = \left(\frac{2ma}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{n-2}} \quad (6)$$

$$\chi''(x) - x^{-n}\chi(x) = 0 \quad (7)$$

次に(7)式をなんとかWell-knownな微分方程式に変換することを考える。具体的には、 $\chi=x^\beta f(y)$, $y=x^\nu$ とにおいて、 β , ν を然るべく選ぶことを試みる。これらが都合よく決まるという保証は先験的には無いが、方

法としてはよく用いられる方法である。本ケースでは、 $\beta=1/2$, $\gamma=(2-n)/2$ と選ぶとうまく既知方程式に変換できることが導かれる。

これらを用いて更に $y=(n-2)z/2$ と変数変換し、 $f(y)=h(z)$ とおくと、(7)式は $h(z)$ に関する微分方程式として次のように書き換えられる。

$$\frac{d^2h(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \cdot \frac{dh(z)}{dz} + \left\{ -1 - \frac{1}{(n-2)^2 z^2} \right\} h(z) = 0$$

この式は因子 $1/(n-2)$ の部分を変 v と表記したものが有名で、変形ベッセル方程式と呼ばれる。解 $h(z)$ は変形ベッセル関数 $I_\nu(z)$ とそれを用いた関数 $K_\nu(z)$ との線型結合で表される。

$$I_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k}$$

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin \nu \pi} \{ I_{-\nu}(z) - I_\nu(z) \}$$

従って、本ケースの解は A , B を定数として

$$h(z) = A I_{\frac{1}{n-2}}(z) + B K_{\frac{1}{n-2}}(z) \quad (8)$$

となり、元の $R(r)$ に戻すと次の式が得られる。

$$R(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\frac{1}{2}} h(z) \quad (9)$$

$$z = \frac{2}{n-2} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{\frac{n-2}{2}} \quad (10)$$

この式に $r=r_c$ を代入すると $R(r_c)=0$ であるから A と B の比が決まる。 z が大きい範囲(即ち $r \ll r_0$)では $I_\nu(z)$, $K_\nu(z)$ はそれぞれ次の漸近形で近似できる。一般に $r_c \ll r_0$ であるから、比 A/B はこれらの漸近形で表すのが妥当である。

$$I_\nu(z) \approx \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}}, \quad K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$$

$$\frac{A}{B} \approx -\sqrt{\frac{\pi}{2z_c}} e^{-z_c} \left(\frac{e^{z_c}}{\sqrt{2\pi z_c}}\right)^{-1} = -\pi e^{-2z_c}$$

一方、 z が小さい範囲(即ち $r \gg r_0$)では、 $I_\nu(z)$, $K_\nu(z)$ は無級数の初項で近似できるので次のように書ける。

$$I_\nu(z) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu$$

$$K_\nu(z) \approx \frac{\pi}{2 \sin \nu \pi} \left\{ \frac{1}{\Gamma(-\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu} - \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \right\}$$

よって、 $r \rightarrow \infty$ の領域では波動関数の動径成分は $R(r) \approx c(1-a/r)$ と表され、 a は次のようになる。(cは定数)

$$a = r_0 \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \left(\frac{1}{n-2}\right)^{\frac{2}{n-2}} \left(1 + 2e^{-2z_c} \sin \frac{\pi}{n-2}\right) \quad (11)$$

ここに、 z_c の表式は(3)式に等しい。以上の結果はまさに緒言に述べた(1)式の描像に他ならない。そして、この(11)式が $n > 2$ のケースの求める散乱長である。この散乱長は z_c の値に関わらず常に正に保たれる。すなわち(ここで得られた結果によれば)、相互作用ポテンシャルが正ならば粒子間相互作用は必ず斥力であり、引力になることはない。これは実際にアルカリ金属や水素原子で実現しているBECとは異なる特徴と言える。

2.2 $n < 2$ のケース

$n < 2$ の場合は変数 z の表式が本質的に変化する。特に重要なのは(10)式の分子の r と r_0 が入れ替わることである。

$$z = \frac{-2}{2-n} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{\frac{2-n}{2}} = \frac{-2}{2-n} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\frac{2-n}{2}} \quad (12)$$

これにより、波動関数の r が小さい範囲での近似形と r が大きい範囲での近似形が $n > 2$ のケースと逆になる。解の基本となる変形ベッセル関数も $\nu=1/(2-n)$ として表記されるものになる。変数 z は(12)式に示されているように負の数になるが、変形ベッセル関数は複素関数として定義されているので特に問題はない。途中の計算は z が正の数の場合と同じように進めることができる。波動関数は(8)式と同様の形式で次のように表される。

$$h(z) = A_2 I_{\frac{1}{2-n}}(z) + B_2 K_{\frac{1}{2-n}}(z) \quad (13)$$

$$K_{\frac{1}{2-n}}(z) = \frac{\pi}{2 \sin \frac{\pi}{2-n}} \left\{ I_{-\frac{1}{2-n}}(z) - I_{\frac{1}{2-n}}(z) \right\}$$

境界条件の式 $h(z_c)=0$ に z_c ((12)式に $r=r_c$ を代入した式)を代入すると、比 A_2/B_2 が決まる。 $|z| \ll 1$ の範囲での近似形は次のように表されるので、比 A_2/B_2 は以下の(14)式で与えられる。

$$I_{\frac{1}{2-n}}(z) \approx \left\{ 2^{\frac{1}{2-n}} \Gamma\left(\frac{3-n}{2-n}\right) \right\}^{-1} z^{\frac{1}{2-n}}$$

$$I_{-\frac{1}{2-n}}(z) \approx \left\{ 2^{\frac{-1}{2-n}} \Gamma\left(\frac{1-n}{2-n}\right) \right\}^{-1} z^{\frac{-1}{2-n}}$$

$$\frac{A_2}{B_2} \approx \frac{\pi}{2 \sin \frac{\pi}{2-n}} \left\{ 1 - \left(\frac{-1}{2-n}\right)^{\frac{-2}{2-n}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-n}{2-n}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-n}{2-n}\right)} \cdot \frac{r_0}{r_c} \right\}$$

(14)

一方、 $|z|$ が大きい範囲（すなわち r が大きい範囲）での波動関数の近似形は次のようになる。

$$h(z) \approx A_2 \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} + B_2 \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$$

さらにここで、 r が大きい範囲でも尚且つ $|r/r_0| \ll 1$ とみなせるほど r_0 が大きい場合を想定する。これは(6)式の $n < 2$ の場合の定義に照らして $\alpha \ll 1$ であることを意味する。この場合、 $e^{\pm z} \rightarrow (1 \pm z)$ と近似できるので、これを用いると元の波動関数 $R(r)$ は次のようになる。

$$R(r) \approx C_2 \frac{1}{r_0} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{\frac{n}{4}} \left\{ 1 + \left(\frac{2-n}{2}\right) \frac{\pi + (A_2/B_2)}{\pi - (A_2/B_2)} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{1-\frac{n}{2}} \right\}$$

$$C_2 = B_2 \sqrt{\frac{-1}{\pi(2-n)}} \left(\pi - \frac{A_2}{B_2} \right)$$

C_2 は複素数であるが波動関数は元来複素数で表されるものであるから問題ない。 $r_0/r_c \gg 1$ であるから(14)式より $|A_2/B_2| \gg 1$ とみなせる。これにより、

$$R(r) \approx C_2 \frac{1}{r_0} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{\frac{n}{4}} \left\{ 1 - r_0^{1-\frac{n}{2}} \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{r^{1-\frac{n}{2}}} \right\}$$

となり、波動関数としてほぼ(1)式に近い形の式が得られる。散乱長 a は概ね次のように表される。

$$a \approx \left(1 - \frac{n}{2}\right) r_0^{1-\frac{n}{2}} \quad (15)$$

ここに得られた a の値は常に正である。その意味では極く定性的ながら、想定される物理状態に矛盾するものでないことは明らかである。しかし、途中の計算は $\alpha \ll 1$ を要請するものであり、そうした場合にはのみ適用できるものであることに留意しなければならない。

2.3 $n=2$ のケース

$n=2$ の場合は微分方程式(5)の性質が上記2つのケースと著しく異なる。(6)式のように r_0 を定義できないことがそれを示している。しかし、解はすぐ求まる。 b を0或いは1以外の任意の実数として $\chi(r) = r^b$ という単純な形の特解を持つからである。 b の値は2つあり、 $C_3 = 2m\alpha/\hbar^2$ とおくと次のようになる。

$$b_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 + 4C_3}\right)$$

$$b_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 4C_3}\right)$$

よって、解は次のように表される。さらに境界条件 $\chi(r_c) = 0$ より比 A_3/B_3 が決まる。

$$\chi(r) \approx A_3 r^{b_1} + B_3 r^{b_2}$$

$$\frac{A_3}{B_3} = -\frac{r_c^{b_2}}{r_c^{b_1}} = -r_c^{\sqrt{1+4C_3}} \quad (16)$$

ここで、 $n < 2$ のケースと同様、 $\alpha \ll 1$ を要請すると、 $b_1 \approx 0$ 、 $b_2 \approx 1$ と近似できるので、 $\chi(r) \approx A_3 + B_3 r$ となり、

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \approx B_3 \left(1 + \frac{A_3}{B_3} \cdot \frac{1}{r}\right)$$

が得られる。散乱長 a は(16)式より次のようになる。

$$a = -\frac{A_3}{B_3} \approx r_c > 0 \quad (17)$$

この $n=2$ 及び2.2節の $n < 2$ のケースの結果は既述のように（当該式を記述している単位系での値として） $\alpha \ll 1$ が成り立たなければ有効でない。このことは次のような状況を反映していると思われる。すなわち、例えば斥力のクーロン・ポテンシャルのような強力（ α が大きい）で且つ距離に対する減衰率の小さいポテンシャルの下では、そもそも相互作用する2原子が原子固有の大きさのスケール程度の距離まで近づくことはないということである。従って、こうした場合の解析に r_c という量を持ち込むのは意味がない。しかし、ポテンシャルが極めて微弱であれば r_c がそれなりの意味を持つことは有り得るであろう。以上のような意味で、 $n \leq 2$ のケースに対する本解析は解析自体の適用可能範囲を自ら示すものになっていると言える。但し結果の妥当性如何は別問題と言わなければならない。

3. 考察

負のポテンシャルであるVWPの下でどうして原子間相互作用が斥力になることがあるのかについて少し考えてみる。要因はやはり互いの原子がそれ以上近づくことのできない“コア”の存在であろう。参照した論文1)や本稿ではその半径を r_c という1個の数値で代表させている。そのためポテンシャル曲線の勾配が $r=r_c$ で不連続になっているが、これはあくまで解析を容易にするための近似によるもので、実際はもっと複雑な式ながら滑らかな曲線になっているはずである。模式的に言えば、ある位置で極小値をとり、それ以後では概ね $-ar^{-6}$ ($a > 0$)の関数形であるが、極小値より原点寄りの領域では勾配が逆転して $r \rightarrow 0$ の近傍でポテンシャルが急激に正方向に増大するような曲線であることが推測される。ここで、極小値の位置を便宜的に $r=r_s$ とおくと、VWPは r のマイナス6乗という高次の冪関数であるため、 r_s の近くでは有意義な値を持つが、それから少し遠ざかると急速に0と近似して差し支えない程度の値になってしまう。従って相互作用はかなり近接的である。ちなみにグロス・ピタエフスキー方程式を導いた理論では相互作用は2原子の位置座標 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 のデルタ関数 $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ として扱われている。この近

接型（というより寧ろ接触型と言った方が相応しいような）相互作用のために、2原子がどれくらいの距離まで近づけるかが大きな分岐点になる。 $r=r_s$ 付近までの接近であれば相互作用は引力のままであるが、それを或る程度以上越えて近づくことになれば劇的に斥力に変わってしまうからである。この距離はそれぞれの最外殻電子どうしの相互関係、特にスピン状態にも依存する。一重項状態の方が三重項状態より“親和性”が高いために、より近くまで接近できるであろう。参考論文1)の解析では最外殻電子のスピンは考慮されていないが、結果としてそうした微妙で且つ劇的な変化をもたらすことが、ベッセル関数を用いて得られた波動関数の $r=r_c$ 付近における激しい振動状態に現われている。以上がVWPの下で斥力の相互作用が生じる理由である。

これに対して斥力ポテンシャルの場合は“コア”の存在を含めて r の全域で斥力のみである。従って相互作用は常に斥力であり、引力の相互作用が生じる余地はない。得られた波動関数を見ても変形ベッセル関数は $r=r_c$ 付近で振動することはなく、VWPに対するベッセル関数のような劇的な変化はもたらさない。

4. 結 言

粒子間相互作用ポテンシャルが正のモデルを設定し、それに対する散乱長の表現式を解析的に導いた。散乱長は常に正で負になることはない。

いずれの内容も理論的なもので実験によるものではない。また、設定したモデルもあくまで計算上のもので、実在のどのような原子あるいは分子がそうしたモデルに適合するのかわについては未検討である。散乱長の計算の中で導入した因子 r_c も現時点では数学的パラメータに過ぎず、測定可能な物理量にまで内容を高める研究が残っている。これらは今後の課題としたい。行った解析は半量子力学的であり、且つ計算は初等的である。しかしながら、そうしたレベルではあっても得られた結果は一応物理的検討に値するものと信じる。これらの結果の正否が実験によって検証されることを望むものである。

参 考 文 献

- 1) G.F.Gribakin and V.V.Flambaum, *Phys.Rev.* A48, 546 (1993) .
- 2) C.J.Pethick,H.Smith, "Bose-Einstein condensation in dilute gases", Cambridge university press, (2002) (町田一成訳：“ボーズ・アインシュタイン凝縮”, 吉岡書店 (2005), pp.139-141)