

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 20 日現在

機関番号：34315

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2010～2012

課題番号：22540414

研究課題名（和文）双極子分子を含む極低温原子気体における原子分子凝縮体の生成と崩壊

研究課題名（英文）Formations and Destructions of atomic and molecular condensates in ultracold atomic gas

研究代表者

藪 博之（YABU HIROYUKI）

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号：60202371

研究成果の概要（和文）：

異なる量子統計性をもつボース原子とフェルミ原子の極低温混合気体においてフェルミ分子の分子生成がある場合を考え、フェルミ原子または分子が異方的な双極子相互作用をする場合に、混合気体の相構造を計算、分子結合エネルギーや相互作用による変化を明らかにする。双極子相互作用は原子または分子の配向により引力相互作用となり、混合気体の不安定性を生じる。この不安定性条件を分子生成がある場合に求め、それが混合気体の相構造に与える影響を明らかにする。混合気体に関連した派生的研究を行う。

研究成果の概要（英文）：

We study molecular formations in the ultracold atomic-gas mixtures of bosonic and fermionic atoms with anisotropic dipolar interactions between the fermionic atoms and/or molecules, and clarifies the change of their phase structures for the molecular binding energies and interaction strengths. Especially the dipolar interactions act as attractive ones and make the mixtures unstable. We calculate the instability conditions in the case of the mixtures with molecular formations and make clear the effect for the phase structures of it. We also make some related researches on the bose-fermi mixtures.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	900,000	270,000	1,170,000
2011年度	800,000	240,000	1,040,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
総計	2,300,000	690,000	2,990,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、原子・分子・量子エレクトロニクス

キーワード：量子エレクトロニクス、量子多体系、原子気体、双極子分子、相転移、ボース・アインシュタイン凝縮

1. 研究開始当初の背景

(1) ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) やフェルミ縮退の成功以来、極低温原子気体の研究は量子エレクトロニクス・有限量子多体論の新しい発展をもたらしている。近年、2個の原子の束縛状態である分子を気体中で生成することが可能となり、分子の量子凝縮

状態や縮退状態の研究が盛んに行われるようになってきている。

(2) 最近では、 ^{40}K - ^{87}Rb など 100debye 程度の大きな電気双極子モーメントを持つ異核分子の双極フェルミ気体の実現され、大きい磁気双極子モーメントを持つ ^{52}Cr の BEC とならん

で、注目を集めている。この分子は双極子間相互作用によって相互作用する。双極子間相互作用は異方性をもつテンソルであり、また重力のような長距離力であるという特色をもつ。このような双極フェルミ気体は通常のフェルミ気体とは異なる相構造や安定性をもつことがこれまでの研究で明らかになりつつある。

(3)我々は、これまで科学研究費補助金による研究においてボース粒子とフェルミ粒子の混合極低温気体の熱的性質、相構造、集団運動について研究を行ってきた。特に平成14-16年および平成17-19年の科学研究費補助金による研究では、量子相関を取り入れた準化学平衡理論を用いて極低温混合原子気体の分子生成過程を研究した。これは、量子統計性や相互作用の効果を取り入れた原子分子の化学ポテンシャルを求め、生成解離平衡状態を平衡条件を解いて決定するものである。この方法は、原子が強く相互作用する場合に良い近似であり、フェルミ原子(FF)混合気体やボース原子(BB), ボース・フェルミ(BF)混合気体にも適用できる長所をもつ。我々はこの方法を定式化、(BB, FF, BF)混合気体における原子分子平衡状態の構造、原子分子のBECが起こる条件を相互作用が無い場合および異方性の無い相互作用がある場合には平均場近似を用いて明らかにしてきた。そして、例えば、ボース・フェルミ混合凝縮体における原子分子平衡状態では、ボース原子がBECを起こすことによる運動エネルギーの減少と分子相におけるフェルミ分子の結合エネルギーによるポテンシャルエネルギーの減少からくる両相の競合が起こり、そのバランスで相構造が決まる。これは古典統計に従う粒子には見られない、量子相関の分子生成への現れである。

(4)大きい双極子モーメントを持つ分子の極低温原子気体は、双極子相互作用によるテンソル力による相互作用をするという点でこれまでの原子気体とは異なる性質をもっている。テンソル力は分子の空間・運動量空間における配位により斥力や引力になる相互作用である。実験が行われている外部電場により双極子モーメントを電場方向に配向した極低温気体においては、電場方向に配向した分子間は引力となり、垂直方向では斥力となる。このような特質をもつ双極子フェルミ分子を含む混合気体における分子生成は、フェルミ分布の異方性からくる双極フェルミ分子の化学ポテンシャルの減少により、混合気体の相図が大きく変化することや分子生成あるいは解離により双極子フェルミ分子密度が増大することによる不安定相など新しい相の出現、などこれまでにない現象が

現れることが期待される。双極分子を含む極低温混合気体の分子生成の実験的研究はこれから進展することが予想されるため、先行的な理論的研究により一般的な性質を明らかにしておくことは重要である。

本研究開始時において関連する研究の背景はこのような状況であった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、双極子フェルミ分子を含む複数の原子種から成り立つ混合原子気体を考え、双極子フェルミ分子を含む混合気体において分子生成が起こるとき、混合気体がボース・アインシュタイン凝縮など、どのような相構造を示すのかを我々が開発してきた準化学平衡の方法を用いて明らかにし、また混合気体相の双極子間相互作用による不安定相およびその構造を明らかにすることである。より具体的には以下の主題について、新しい理論的手法および計算法の確立およびそれを用いて双極子フェルミ分子を含む混合気体において分子生成の概観を明らかにすることであった。

(1)ボース粒子とフェルミ粒子混合気体における分子生成過程 ($B+F \rightarrow M$) を考え、2種類のフェルミ粒子 (原子 F と分子 M) が存在し、その一方あるいは両方が双極子フェルミ分子の場合を考える。双極子フェルミ分子を含む混合原子気体に対して分子生成過程の準化学平衡理論を拡張し、それを解くことにより、BF過程でボース原子のBECや双極子フェルミ分子の不安定相がどのように現れるかを明らかにする。また、それらの相が温度やテンソル力強度により、どのように変化するかを明らかにする。

(2)上記の目的のために必要な双極子相互作用の効果を含む双極子フェルミ気体の化学ポテンシャルや不安定相を求めるための条件式を、特に有限温度の場合に明らかにする。

(3)分子間に双極子相互作用によるテンソル力以外の短距離斥力がある場合を考え、不安定相で双極子フェルミ分子が崩壊した場合に高密度でどのような状態になるかを明らかにする。

(4)上記の理論的研究に基づき、ボース・フェルミ混合原子気体の応用的研究を行い実験の新しい提案を行う。

本研究は極低温混合原子気体の分子生成において、双極子フェルミ分子のもつ異方性のある双極子相互作用が量子統計性と相まっ

てどのような効果をおよぼすかを明らかにするという点が特色であり、これまでの分子生成研究にはない新しい点である。この研究により得られる成果は、先行的理論研究として新たな極低温分子生成実験の理論的基盤を与えるものである。

3. 研究の方法

(1) 温度ゼロおよび有限温度の場合における双極子フェルミ分子の化学ポテンシャルを求める。これを計算する方法として、宮川等によって開発された Thomas-Fermi 近似を用いる方法 (Phys. Rev. A77, 061603(R) (2008)) および西村 (研究分担者) によって初められた平均場近似 (Hartree-Fock 近似) による自己無同着な計算法があり、分子生成を伴わない双極子フェルミ気体への適用においては両者は、ほぼ同じ結果を与えることが知られている。分子生成を含む本研究に用いるためには、両方の方法を用いる事とし、有限温度の場合を含めて双極子フェルミ分子の化学ポテンシャルを計算するための理論計算および計算機プログラムの開発を行った。

(2) 前項で述べた双極子フェルミ分子の化学ポテンシャルを用いて準化学平衡の方法によりボース・フェルミ混合気体の相構造を解く計算機プログラムを開発し、それを実行することにより、双極子フェルミ分子を含む混合気体の分子生成における相構造を数値的に解明し、結果に対する理論的考察を行った。

(3) 双極子フェルミ気体の特色として、密度が大きくなった場合に双極子が配向し、フェルミ面の変形が生じ、気体が不安定化するという現象が存在する。これにより、双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体の場合には場合にはボース粒子のボース・アインシュタイン凝縮相とフェルミ原子または分子の不安定相との二種類の層構造をもつことになる。我々は双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体においてフェルミ原子または分子が不安定化する条件を圧縮率から計算し、前項の結果において不安定相の存在と構造を明らかにした。

(4) 双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体の性質を解明するための準備的研究として、実際に実験が行われるトラップされた系におけるボース・フェルミ混合気体の安定性や集団運動モードの研究を変形したトラップやトーラス型トラップにおいて行った。

4. 研究成果

(1) 温度ゼロおよび有限温度の場合における双極子フェルミ分子の化学ポテンシャルを求める方法を Thomas-Fermi 近似の方法および Hartree-Fock 近似による自己無同着理論的で定式化し、数値的に計算する計算機プログラムを作成した。これを用いた分子生成を伴う相構造の予備的な計算結果を日本物理学会の講演で報告を行った (学会発表⑧⑩)。

(2) 前項で求めた双極子フェルミ分子の化学ポテンシャルを用いて、双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体の分子生成を計算する計算機プログラムを作成し、混合気体の相構造が分子の結合エネルギーおよび双極子相互作用の大きさによってどのようにかわるか数値的に調べ、その構造を明らかにした。結果を、これまでの我々の研究で求められていた S 波相互作用により相互作用するボース・フェルミ混合気体の分子生成と比較を行った。双極子相互作用による場合と S 波相互作用の場合は定性的には同じ傾向を示し、双極子相互作用が大きいと有効的に引力として作用するために、分子の結合エネルギーが小さい場合に存在する原子分子混合相の領域が小さくなり、臨界的な大きさでその領域に準安定相が現れることを確認した。定量的には、相互作用の違いのため相構造に変化が現れることを確認した。この結果を日本物理学会の講演で報告を行った (学会発表①④⑥)。

(3) 双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体において双極子フェルミ分子が双極子相互作用による異法的な性質により不安定化する条件をボース・フェルミ混合気体の圧縮率が負になる条件から求めた。その結果から前項の相図において不安定になる領域を数値的に計算する計算機プログラムを開発し、不安定領域が相構造のどの領域に現れるかを数値的に求めた。ボース・フェルミ混合気体の場合にはフェルミ原子およびフェルミ原子のいずれかあるいは両方が双極子フェルミ粒子の場合が存在し、そのすべての場合に対して不安定領域を求めた。不安定化は基本的には双極子フェルミ気体の密度が大きくなる所で生じるため、不安定領域は結合エネルギーが小さくフェルミ粒子の密度がボース粒子より多い相 (フェルミ原子が不安定化) および結合エネルギーが大きい領域 (フェルミ分子が不安定化) の両側から現れ、双極子相互作用の大きさが大きくなるに連れて不安定領域の相図に占める割合が大きくなることが確認された。この結果を日本物理学会の講演で報告を行った (学会発表①④⑥)。また、前項の結果と合わせて結果を整理した論文を現在作成中である。

双極子フェルミ分子を含むボース・フェルミ混合気体の分子生成の相構造および不安定性を明らかにしたのは本研究が最初であり、今後さらに詳細な研究の発展が期待されるとともに、結果の実験的な検証が行われるものと考えられる。

(4) 派生的な結果として、双極子フェルミ気体が自由膨張する場合のダイナミクスについての研究を行い、学会で発表すると共に論文にまとめて発表した(論文⑤⑥、学会発表③⑦⑩)。ボース・フェルミ混合気体の分子生成において Feshbach 共鳴が相構造に及ぼす影響に関する研究を行った(論文③、学会発表⑬⑭⑮)。実際の実験が行われている軸対称トラップ系における Yb 原子のボース・フェルミ混合気体の集団運動の解析を行い実験との比較を行った。結果を論文として発表した(論文①②④、学会発表⑤⑪)。また、近年実験的研究が行われているボース・フェルミ混合気体をトラス型トラップに閉じ込めた場合の基礎的理論研究(学会発表②)を行った。

(5) 我々がこれまでの研究で明らかにしたボース・フェルミ混合気体の基底状態の性質、不安定性、集団運動などの研究成果と本研究の成果をまとめた総合的なレビューを執筆し、原子気体ボース・アインシュタイン凝縮に関する書籍の第10章として出版、発表した(図書①)。これは我々の研究成果をより広い分野の研究者に理解してもらい、さらなる発展を促すものである。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計6件)

① Tomoyuki Maruyama and Hiroyuki Yabu, Longitudinal and transverse breathing oscillations in Bose-Fermi mixtures of Yb atoms at zero temperature in the largely prolate deformed traps, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46 (2013) 055201 (16 pages), 査読有, DOI:10.1088/0953-4075/46/5/055201

② Takushi Nishimura and Tomoyuki Maruyama, Breathing oscillations and quasi-low-dimensional structures of weakly-interacting degenerate Fermi gases in highly-anisotropic traps, J. Phys. Soc. Jap. 81 (2012) 044001 (14 pages), 査読有, DOI:10.1143/JPSJ.81.044001

③ Ryosuke Shibato, Takushi Nishimura, Takayuki Watanabe, and Toru Suzuki, "Phase separation of Bose-Einstein condensates of trapped atoms and molecules with a homonuclear Feshbach resonance", Phys. Rev. A 84 (2011) 043627 (11 pages), DOI:10.1103/PhysRevA.84.043627

④ T. Maruyama and H. Yabu "Breathing oscillations of Bose-Fermi mixtures with Yb atoms in the prolate deformed traps" Laser Physics 20/ 5 (2010) 1169-1179, 査読有, DOI:10.1134/S1054660X10090458

⑤ Takushi Nishimura and Tomoyuki Maruyama, "Quantum dynamics of a dipolar Fermi gas in free expansion", Laser Physics 20/5 (2010) 1177-1181, 査読有, DOI:10.1134/S1054660X10090148

⑥ Takushi Nishimura and Tomoyuki Maruyama, "Free expansion of a weakly-interacting dipolar Fermi gas", J. Phys. Soc. Jap. 79 (2010) 083001, 査読有, DOI:10.1143/JPSJ.79.083001

[学会発表] (計14件)

① 発表者名: 松田裕一, 西村拓史, 藪博之
発表表題: 双極フェルミ分子を含む分子形成における有限温度での化学平衡過程,
学会名: 日本物理学会第68回年次大会
発表年月日: 2013年3月29日
発表場所: 広島大学(広島県)

② 発表者名: 柴藤亮介, 西村拓史,
発表表題: 1次元トラス内におけるボース・フェルミ混合系の動的性質,
学会名: 2012年日本物理学会秋季大会,
発表年月日: 2012年9月18日
発表場所: 横浜国立大学(神奈川県),

③ 発表者名: 西村拓史,
発表表題: 引力型相互作用を有するボース・フェルミ混在気体の動力学,
学会名: 日本物理学会第67回年次大会,
発表年月日: 2012年3月24日
発表場所: 関西学院大学(兵庫県),

④ 発表者名: 松田裕一, 西村拓史, 藪博之,
発表表題: 双極フェルミ原子および分子を含むBF混合気体の分子形成における不安定性,
学会名: 日本物理学会第67大会,

発表年月日：2012年3月24日
発表場所：関西学院大学（兵庫県），

⑤ 発表者名：Ryosuke Shibato, Takushi Nishimura, 発表表題：The Many-Body Correlation in the One-Dimensional Bose-Fermi Mixture, 学会名：American Physical Society March Meeting,
表年月日：2012年2月29日
発表場所：Boston (USA)

⑥ 発表者名：藪博之、丸山智幸,
発表表題：極低温ボース・フェルミ混合気体の振動励起状態の時間発展と集団運動（招待講演），学会名：Ultracold Gases: Superfluidity and Strong Correlations (USS-2012), 発表年月日：2012年1月13日
発表場所：東京理科大学森戸記念会館（東京都）

⑦ 発表者名：松田裕一, 西村拓史, 藪博之,
発表表題：双極分子の形成をとまなう化学平衡過程と相の不安定性,
学会名：日本物理学会 2011 年秋季大会,
発表年月日：2011 年 9 月 23 日
発表場所：富山大学（富山県），

⑧ 発表者名：西村拓史, 丸山智幸, 藪博之,
発表表題：極低温原子分子混在気体の動力学,
学会名：日本物理学会 2011 年秋季大会,
発表年月日：2011 年 9 月 23 日
発表場所：富山大学（富山県），

⑨ 発表者名：松田裕一, 西村拓史, 藪博之,
発表表題：双極子間相互作用を含むボースフェルミ混合気体の分子形成過程,
学会名：日本物理学会第 66 回年次大会
発表年月日：2011 年 3 月 25 日
発表場所：新潟大学（新潟県），

⑩ 発表者名：Ryosuke Shibato, Takushi Nishimura, Toru Suzuki, 発表表題：Phase separation of multi-component Bose-Einstein condensations induced by homonuclear Feshbach molecules, 学会名：Conference on research frontiers in ultra-cold atomic and molecular gases,
発表年月日：2011 年 1 月 14 日
発表場所：Goa (India)

⑪ 発表者名：Takushi Nishimura,
発表表題：Free expansion of a polarized dipolar Fermi gas, 学会名：The 11th Asia Pacific Physics Conference (APPC11),
発表年月日：2010 年 11 月 17 日
発表場所：Shanghai (China)

⑫ 発表者名：丸山智幸, 藪博之,
発表表題：TDGP+VUU 方程式による有限温度ボース・フェルミ混合気体での集団運動,
学会名：日本物理学会 2010 年秋季大会
発表年月日：2010 年 9 月 23 日
発表場所：大阪府立大学（大阪府），

⑬ 発表者名：松田裕一, 西村拓史, 藪博之,
発表表題：双極子フェルミ分子を含む化学平衡過程の相構造,
学会名：日本物理学会 2010 年秋季大会
発表年月日：2010 年 9 月 23 日
発表場所：大阪府立大学（大阪府），

⑭ 発表者名：Ryosuke Shibato, Takushi Nishimura, Toru Suzuki, 発表表題：Phase separation of multi-component Bose Einstein condensations induced by homonuclear Feshbach molecules,
学会名：Shell effect and its application,
発表年月日：2010 年 7 月 29 日
発表場所：Erice (Italy)

〔図書〕（計 1 件）

① 著者名：Hiroyuki Yabu, Takahiko Miyakawa,
出版社名：Nova Science,
書名：Bose-Einstein Condensates: Theory, Characteristics, and Current Research (ed. P. E. Mathews,)
発行年：Oct. 2010,
ページ数：233-260 (Ch. 10),

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藪 博之 (YABU HIROYUKI)
立命館大学・理工学部・教授
研究者番号：60202371

(2) 研究分担者

西村 拓史 (NISHIMURA TAKUSHI)
首都大学東京・理工学研究科・研究員
研究者番号：30538351