



## 粒子と波 (10 点)

粒子が波としても表現でき、また逆に波が粒子としても表現できるという波と粒子の二重性は、量子力学の中心的な概念の一つである。この問題では、この概念と少しの基本的な仮定に基づき、ミクロな世界の二つの異なるタイプの粒子 (フェルミオンとボソン) を対象とした量子現象を調べる。

### Part A. 箱の中の量子力学的な粒子 (1.4 点)

一次元井戸型ポテンシャル中の質量  $m$  の粒子の運動を考える。ポテンシャルエネルギー  $V(x)$  は以下のよう  
に与えられる。

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L; \\ \infty, & x < 0 \text{ or } x > L. \end{cases} \quad (1)$$

このようなポテンシャル中で古典的な粒子が任意の運動エネルギーを持つことができる一方で、量子力学的な粒子は正の離散的なエネルギー準位しか持つことができない。そのような状態のときには、粒子は壁で節を持つド・ブロイ定常波として表現することができる。

- A.1** 井戸内の量子力学的な粒子の取りうる最小エネルギー  $E_{\min}$  を求めよ。答えは  $m, L$  およびプランク定数  $h$  で表すこと。 0.4pt

粒子が最小エネルギーにある状態は基底状態と呼ばれ、それ以外の全ての状態は励起状態と呼ばれる。全ての可能なエネルギー状態をエネルギーが小さい順に並べていき、各エネルギーを  $E_n$  のように番号づけする。基底状態のエネルギーは  $E_1$  となる。

- A.2** エネルギー  $E_n$  の表式を求めよ (ここで  $n = 1, 2, 3, \dots$  である)。 0.6pt

- A.3** 粒子はある状態から別の状態へと瞬間的に遷移することがあるが、このような遷移はそれらの状態間のエネルギー差に対応するエネルギーを持った光子の放出または吸収によってのみ起こる。最初の励起状態 ( $E_2$ ) から基底状態 ( $E_1$ ) へ粒子が遷移した際に放出される光子の波長  $\lambda_{21}$  を求めよ。 0.4pt

### Part B. 分子の光学的性質 (2.1 点)

この Part では、シアニン Cy5 分子 (色素分子として広く用いられている。図 1a) の光学的性質について調べる。その光学的な性質は、主には単結合と二重結合が交互に並んだ炭素主鎖 (図 1b) によって決定され、一方で分子末端の環やラジカル R の影響は非常に小さい。主鎖内の各 C 原子が持つ 4 つの価電子 (および N 原子の持つ価電子たち) のうち各々 3 つは化学結合を形成する一方で、残りの価電子たちは”シェア”されて主鎖全体を動くことができる。そのような各電子のポテンシャルエネルギーは、図 1c に波打った細線で表されており、谷の部分は C 原子や N 原子に対応している。

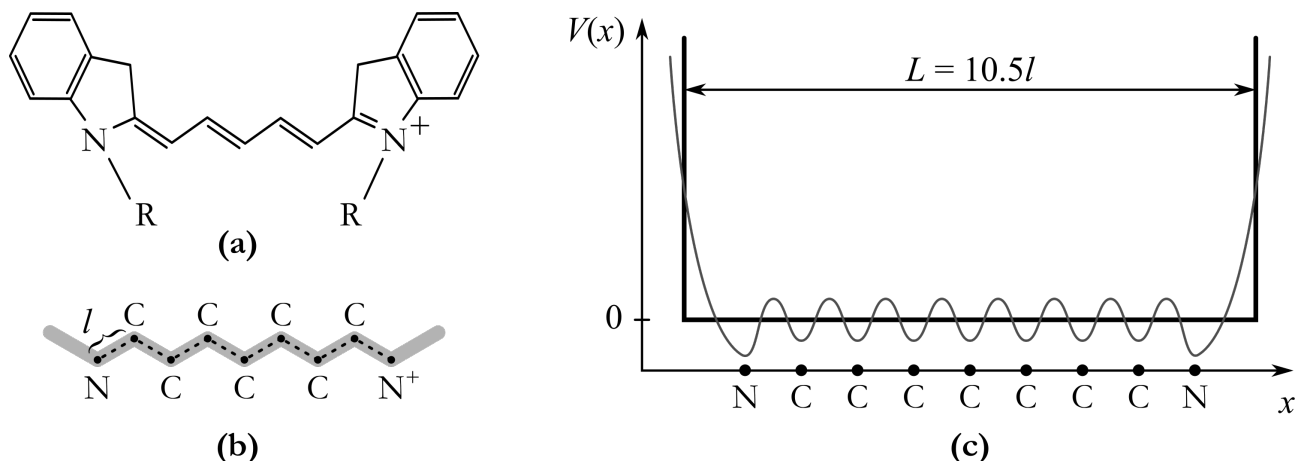


図 1. (a) シアニン Cy5 分子の化学的な構造 (簡単のため水素原子は省略している. また R はラジカルを表す.) (b) Cy5 分子の主鎖. 平均原子間距離は  $l$ . (c) 主鎖に沿った電子のポテンシャルエネルギー (細線) および式 (1) で与えられる階段関数による近似 (太線).

簡単のため, このポテンシャルエネルギーを式 (1) で与えられる単純な関数で近似することにする. ただし, 幅は  $L = 10.5l$  (図 1c の太線を見よ), ここで  $l = 140$  pm は平均原子間距離 (図 1b も参考にせよ). その結果, Part A で議論した井戸型ポテンシャルの中を動く, 10 個の電子 (7 個は C 原子, 2 個は N 原子, そして 1 個は  $N^+$  イオンから.) から成る”電子気体”の描像が得られる. ここからの計算では, これらの電子間の相互作用は無視できるものとする. ただし, 電子はフェルミオンであり, パウリの排他原理に従うということは考慮する必要がある. また, その他の電子の影響および原子核の運動による影響は無視する.

**B.1** 電子系が最初その基底状態にあったとして, Cy5 分子に吸収されうる光子のうち最も長い波長  $\lambda$  を求めよ. 答えは  $l$  および物理定数, また単なる数の係数を用いて表せ. さらに計算により数値も求めよ. 0.8pt

**B.2** これとは異なる色素分子である Cy3 も似たような構造を持つが, その主鎖は炭素原子 2 つ分短くなっている. その吸収波長は Cy5 分子に比べて青方, 赤方のどちらにシフトするか. また波長のシフトの大きさ  $\Delta\lambda$  の数値を求めよ. ただし, 二つの炭素原子を取り除くことによる影響は主鎖の長さが原子間距離二つ分だけ短くなるのみであり, 分子の形は変えないものとしてよい. 0.4pt

励起状態にある分子は, 光子を放出して基底状態に自発的に遷移しうる. そのような事象が起きる平均的な割合  $K$  (すなわち, 時間  $dt$  あたりの, 励起状態にある分子の相対的な減少を  $dN/N$  としたときの  $K = \frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$ ) は, 以下の量で決定される. すなわち, 放出光子の波長  $\lambda$ , 遷移双極子モーメント  $d$  (電気素量を  $e$  として  $d \approx el$  のオーダーで表される), 真空の誘電率  $\epsilon_0$ , そしてプランク定数  $h$  を用いて決定される.

**B.3** 次元解析により, 自発的な光子放出の割合の表式を  $\epsilon_0, h, \lambda$ , および  $d$  を用いて決定せよ. ただし, その数値的な係数については  $k = \frac{16}{3}\pi^3$  と与えられる. 0.7pt

**B.4** Cy5 分子においては,  $d \approx 2.4 el$  である. 励起状態のうち最もエネルギーの低い状態にある Cy5 分子の平均蛍光寿命  $\tau_{\text{Cy5}}$  を求めよ. ここで, この平均蛍光寿命は基底状態への放出遷移の時間あたりの割合の逆数として与えられる. 0.2pt



### Part C. ボース・アインシュタイン凝縮 (1.5 点)

ここでは、ボース粒子の集団的な振る舞いを考察する。Part A, Part B の内容とは直接的な関係はない。

ボソンは、パウリの排他原理には従わず、低温や高密度では、ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) と呼ばれる劇的な現象を起こす。これは、多数の同一粒子が単一の粒子状態に入り、あたかも 1 つの波のように振る舞うことを特徴とする、興味深い集団的量子状態への相転移である。この相転移は、通常、一定数の粒子を臨界温度以下に冷却することで得られる。原理的には、温度を固定したまま密度を臨界値以上にするだけでも相転移を引き起こすことができる。

まず、転移時の温度と密度の関係を調べよう。すぐ明らかになるように、臨界温度は、単純な観点から導き出すことができる。ボース・アインシュタイン凝縮は、粒子の二乗平均速度に対応するド・ブロイ波長が気体中の粒子間の平均距離と等しいときに起こるということである。

**C.1** 熱平衡状態にある  $^{87}\text{Rb}$  原子の理想気体を考えよう。原子の典型的な運動量  $p$  と典型的なド・ブロイ波長  $\lambda_{\text{dB}}$  を、原子の質量  $m$ 、温度  $T$ 、及び適切な物理定数を用いて表せ。 0.4pt

**C.2** 気体中の原子間平均距離  $l$  を粒子密度  $n$  の関数として表せ。その結果を用いて転移温度  $T_c$  を原子質量、粒子密度、及び物理定数を用いて表せ。 0.5pt

実験室で BEC を実現するためには、実験家たちは気体を  $T_c = 100 \text{ nK}$  という極低温まで冷却しなければならない。

**C.3** BEC 転移がこのような温度で生ずるとき、Rb 気体の粒子密度  $n_c$  はどのような値をとるであろうか。比較のために、理想気体が標準的な温度と圧力、すなわち、 $T_0 = 300 \text{ K}$  および  $p_0 = 10^5 \text{ Pa}$  の時の通常の粒子密度  $n_0$  を求めよ。通常の粒子密度は BEC 転移点における粒子密度  $n_c$  の何倍ほどに大きくなるだろうか。この通常の気体も原子質量単位で  $87m_{\text{amu}}$  をもっているとして答えよ。 0.6pt

### Part D. 3-ビーム光格子 (5 点)

ボース・アインシュタイン凝縮体が初めて実現されたのは 1995 年のことであったが、それ以来、実験的な研究はさまざまな方向に枝分かれして発展している。この Part では、いくつかのコヒーレントなレーザービームを干渉させることによって作られる空間的に周期的なポテンシャル中に凝縮体をおくという、非常に実り多いアイデアについて調べる。この系は干渉パターンが周期的であることから、光格子と呼ばれている。光格子の中を移動する原子に対するポテンシャルエネルギー  $V(\vec{r})$  は、光の局所的な強度に比例するので、計算では次のように仮定することができる。

$$V(\vec{r}) = -\alpha \langle |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 \rangle. \quad (2)$$

ここで、 $\alpha$  は正の定数であり、角括弧は急速に振動する項を除去する時間平均を示す。i 番目のレーザーで発生する電場は次のように表される。

$$\vec{E}_i = E_{0,i} \vec{\varepsilon}_i \cos(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega t), \quad (3)$$

ここで振幅は  $E_{0,i}$ 、波数ベクトルは  $\vec{k}_i$ 、そして分極の単位ベクトルは  $\vec{\varepsilon}_i$  である。

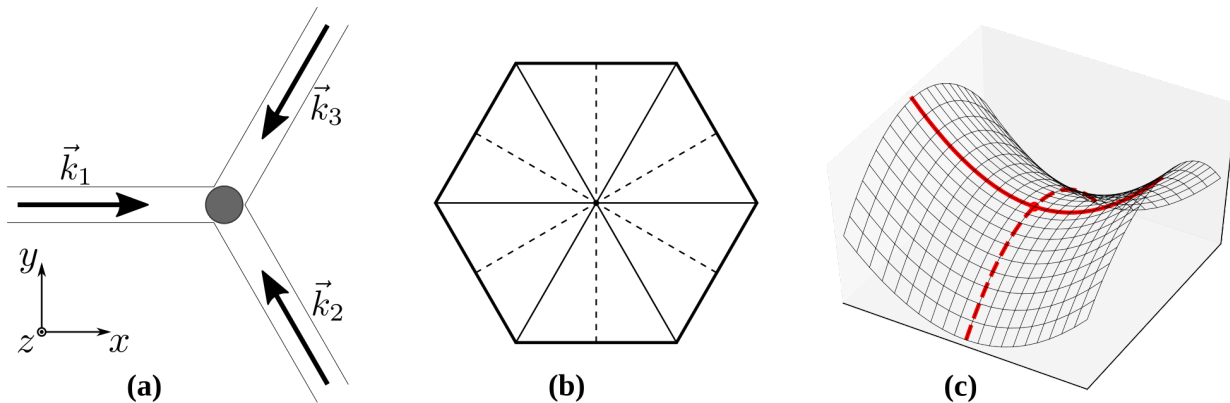


図 2.(a) 3-ビーム光格子: 波数  $\vec{k}_{1,2,3}$  をもつ 3 つの平面波が灰色で示された円内で交差して干渉を起こす. (b) 正六角形の対称性: 実線と破線は 2 組の対称軸を示す. (c) 鞍点: 曲面上で直交する方向の傾きがすべてゼロになる点で, プロットされた関数の極値ではない点. 実線で示された軌跡に沿って進むと, 見かけ上の最小値に遭遇する. 真の最小値と鞍点 (図示) を区別するには, 直角方向 (破線) の追加分析が必要である.

ここでの課題は, 同じ強度の 3 本のコヒーレント・レーザー・ビームを干渉させることによって生じる三角形の光格子を調べることである. 典型的なセットアップを図 2a に示す. ここでは, 3 本のビームはすべて  $z$  方向に偏光しており,  $xy$  平面を伝搬し,  $120^\circ$  の等角度で交差している.  $x$  軸の方向を波数ベクトル  $\vec{k}_1$  に平行に選ぼう.

**D.1** 式 (2) と式 (3) を用いて, ポテンシャルエネルギー  $V(\vec{r})$  を位置  $\vec{r} = (x, y)$  の関数として求めよ. 1.4pt  
ヒント: この結果は, 定数項と, 引数  $\vec{b}_i \cdot \vec{r}$  をもつ 3 つの余弦関数の和としてきれいに表現できる. 結果をこの形式で書き, ベクトル  $\vec{b}_i$  を特定せよ.

**D.2** 結果として得られたポテンシャルエネルギーは, 6 回の回転対称軸を持っている. 0.5pt  
つまり, ポテンシャルの分布は, 原点の周りで  $60^\circ$  の倍数の回転に対して不変である. これが本当であることを証明する簡単な議論をせよ.

以上の対称性の観察により, 2 次元のポテンシャル分布の解析が簡単になった. 図 2b に示すように, 正六角形には, 対向する頂点同士を結ぶ対称線 (実線) と対向する辺の midpoint 同士を結ぶ対称線 (破線) がある. そのため, 2 次元のポテンシャル分布図を作成して検討する必要はなく, 対称線に沿った座標軸  $x$  及び  $y$  に注目することで, 多くの知見を得ることができる.

**D.3** 座標軸に沿ったポテンシャル  $V(\vec{r})$  の振る舞いを導き出せ. すなわち, 関数  $V_X(x) \equiv V(x, 0)$  および  $V_Y(y) \equiv V(0, y)$  を決定せよ.  $V_X(x)$  および  $V_Y(y)$  を各々単一の引数の関数として扱い, それら各々の極値を与える点を求めよ. これらの関数は周期的であるので, 周期的に繰り返される最小値と最大値の各族から代表的なものを 1 つだけリストにいれること. 1.2pt

我々は, いわゆる格子点の位置を決定することに関心がある. 完全な 2 次元ポテンシャル  $V(\vec{r})$  の最小値を与える点が格子点である. 求められた単一引数関数  $V_X$  および  $V_Y$  の極小値は極小値の可能性はあるが, 鞍点を排除するためにはまだチェックが必要である. 図 2c に示すように, 一本の線に沿って調べると, 鞍点が極小のように見えるが実際には極小ではない.



- D.4** 前問の結果を検討して，光学格子の実際の最小点を決定せよ．原点に最も近い（ただし一致しない）等価な最小点をすべて特定せよ．最も近い最小点の間の距離  $a$ ，すなわち光格子の格子定数はいくらか？ 答えをレーザーの波長  $\lambda_{\text{las}}$  で表せ． 0.8pt

超低温の原子は電荷をもたないため，2つ以上の原子が光学格子の同じ場所を占める場合にのみ，その相互作用が重要になると考えられている．しかし，実験家たちは，長距離の原子間相互作用を維持するような設定を模索することもできる．その方法として，物理的に大きく，誇張された特性をもつ「リュードベリ原子」を作ることが考えられる．リュードベリ原子とは，外殻電子が主量子数  $n$  の非常に大きな状態に励起された原子のことである．リュードベリ原子の大きさは，軌道角運動量が  $n\hbar$  になるような電子の古典的円軌道の半径としてよい．ここに  $\hbar$  はディラック定数である．

- D.5** Rb リュードベリ原子の半径がレーザー光の波長  $\lambda_{\text{las}} = 380\text{nm}$  に匹敵する場合の  $n$  の値を計算せよ．答えを  $\lambda_{\text{las}}$  と物理定数とで表し，その数値も求めよ． 1.1pt