大阪市大レーザー・原子核合同ミーティング

原子間相互作用、散乱チャンネル、フェッシュバッハ共鳴



2021/06/28

興味

実験や計算が非常に難しい量子系を冷却原子実験で解き明かしたい







(2020/2/17に搬入)



(現状)



(制御・観測システム)



(レーザー冷却光源)



(真空チャンバー)



(レーザー冷却) (2021/6/15) <u>N = 1.0 × 10⁸, T = 0.94</u> mK

蒸発冷却で量子の世界へ

蒸発冷却



<u> 光トラップの準備</u>



<u>光トラップの準備</u>









<u>冷却原子系の豊富な自由度</u>



<u>6Li原子の内部構造</u>



磁場中の⁰Li原子



<u>二原子分子:Born-Oppenheimer近似</u> ($\hbar = m_e = e = 1$)

<u>二原子分子:Born-Oppenheimer近似</u> ($\hbar = m_e = e = 1$)

$$\grave{c} \grave{b} \wr \square, \quad H_n = -\frac{1}{2\mu} \nabla^2(r,\theta,\phi) = -\frac{1}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{R}^2}{2\mu r^2}$$

より原子核の波動関数を半径方向と角度方向で変数分離する

$$\psi_n(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r} \psi_{\nu N}(r) \psi^{\Lambda}_{N,M_N}(\theta,\phi)$$

ここで原子核の回転は電子軌道と結合するためにRは良い量子数ではない。 いい量子数は、電子軌道の分子軸への射影 Λ 、分子の全軌道角運動量Nとその量子化軸への射影 M_N である。 $\psi^{\Lambda}_{N,M_N}(\theta,\phi)$ は Λ,N,M_N を満たす原子核の回転状態を意味している。 これより以下のような近似波動関数を考える

Born-Oppenheimer波動関数 : $\Psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \mathbf{x}) = \psi_n(r, \theta, \phi)\psi_e(r, \mathbf{x}) = \frac{1}{r}\psi_{\nu N}(r) \cdot \psi^{\Lambda}_{N, M_N}(\theta, \phi) \cdot \psi_e(r, \mathbf{x})$

これを代入してBorn-Oppenheimer近似すると、妥協して解きたいたい1次元S.E.は以下のものになる

$$\left(-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{N(N+1)}{2\mu r^2} + E_e(r)\right)\psi_{vN}(r) = E\psi_{vN}(r)$$

ここで、 E_e(r)は核間距離rが固定されている時の電子の固有状態であり、ポテンシャルエネルギー曲線と呼ぶ。

 $H_e\psi_e(r, \mathbf{x}) = E_e(r)\psi_e(r, \mathbf{x})$

メモ:近似の中身

<u>同種アルカリ原子間(ここではLi原子間)の相互作用(分子ポテンシャル)</u>



[Jasik and Sienkiewicz, Chemical Physics 323 (2006) 563–573]

基底状態

電子雲が重なり始める距離



基底状態

電子雲が重なり始める距離



励起状態



共鳴双極子相互作用



FIG. 1. Orientations of dipole moments of atoms in mixed S-P states, undergoing a resonant interaction, and classification of the resulting molecular states.

Dashevskaya, Canadian Journal of Physics 47.12 (1969): 1237-1248.



Dispersion coefficients (atomic unit)

	С3	C6	C8
$^{3}\Sigma_{u}^{+}$, $^{1}\Sigma_{g}^{+}$	-11.002125	2076.19	991104
$^{1}\Sigma_{u}^{+}, ^{3}\Sigma_{g}^{+}$	11.002125	2076.19	274137
$^{1}\Pi_{g}$, $^{3}\Pi_{u}$	5.501062	1407.20	48566.9
$^{3}\Pi_{g}$, $^{1}\Pi_{u}$	-5.501062	1407.20	103053

Li-Yan Tang, Zong-Chao Yan, Ting-Yun Shi, and James F. Babb Phys. Rev. A **79**, 062712 (2009)



Monika Musiał and Stanisław A. Kucharski,



Fig. 5.4: Attractive Rb_2 molecular states assymptoting to the 5s + 5p atomic states for Hund's case C angular-momentum coupling. These potentials are calculated using the Movre-Pichler model [61].

Canadian Journal of Physics

Published by The NATIONAL RESEARCH COUNCIL OF CANADA

VOLUME 47

JUNE 15, 1969

NUMBER 12

Theory of excitation transfer in collisions between alkali atoms. I. Identical partners



 S:全電子スピン
 Λ:電子軌道の分子軸への射影 (Λ=1,2,3→Σ,Π,Δ)
 g,u:電子の原点対称性
 +,-:分子軸を通る面での電軌道の 面対称性





 $\Omega_{g,u}^{+,-}$

Je=L+S:電子の全角運動量 Ω: Jeの分子軸への射影 g,u:電子の原点対称性 +,-:分子軸を通る面での全電子 波動関数の面対称性

※核スピンまで含めるともう少し複雑

<u>同種アルカリ原子間(ここではLi原子)の相互作用(分子ポテンシャル)</u>



残念ながら第一原理計算で全ての相互作用を含む計算は実現 できていない。精度も不十分。

例えば左図のポテンシャルを種に、摂動的に相互作用を加え て計算し、実験データに合うように微調整するのが主な手法

$$H = H_{\text{Diag}} + H_{\text{SO}} + H_{\text{R}} + H_{\text{HF}} + H_{\text{B}}$$

フェッシュバッハ共鳴のToy model

結合2チャンネルモデル



 $V_T(r)$

詳細は、Duine and Stoof, Physics Reports 396.3 (2004): 115-195.

В

6Liの電子基底状態の場合

6×5=30個のs波散乱チャンネル

基底状態の⁶Li原子の電子スピンと核スピン

$$\longrightarrow s = \frac{1}{2}, i = 1$$

磁場中の超微細構造は m_s, m_i)基底で、





 $|m_s, m_i\rangle$ 基底



 $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ • • •

量子化軸方向の全角運動量

1粒子の場合

2粒子の場合

 $m_f = m_s + m_i$

 $m_{F,|1\rangle} = 1/2$

 $m_{F,|2\rangle} = -1/2$

 $m_{F,|3\rangle} = -3/2$

 $m_{F,|4\rangle} = -1/2$

 $m_{F,|5\rangle} = 1/2$

 $m_{F,|6\rangle} = 3/2$

 $m_F = m_{f_1} + m_{f_2} = m_{s_1} + m_{i_1} + m_{s_2} + m_{i_2}$



Ab initio calculation by M. Lysebo and L. Veseth Phys. Rev. A **79**, 062704 (2009)

実際に解く問題

2原子ハミルトニアン:
$$H = -\frac{1}{2\mu}\nabla^2 + H_{ev}(r, x) + H_{hf}(r, x) + H_{SS}(r, x) + H_Z(r, x) + H_{rot}(r, x)$$

S.E.: $H\Psi(r, x) = E\Psi(r, x)$
2原子波動関数: $\Psi(r, x) = \sum_b \frac{1}{r} \psi_b(r) \frac{\phi_b(r, x)}{kc^2 (r, x)}$
基応2原子波動関数
左から $\phi_a^*(r, x)$ を作用させて内部状態の変数で積分
 $-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2 \psi_a(r)}{dr^2} + \frac{l_a(l_a+1)}{2\mu r^2} \psi_a(r) + \sum_b [V_{ab}^{ev} + V_{ab}^{hf} + V_{ab}^{SS} + V_{ab}^Z + V_{ab}^{rot}]\psi_b(r) = E\psi_a(r)$
これを解きたい

境界条件: $\begin{cases} \psi_a(0) = 0\\ \psi_a(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} \sum_b \phi_b(r, x) \frac{1}{\sqrt{k_b}} [j_b(k_b r) \delta_{ab} + g_b(k_b r) \frac{K_{ba}}{\overline{\rho} \overline{\kappa} \overline{\rho} \overline{\eta}}] & k_b \equiv \sqrt{2\mu(E - E_b)} \end{cases}$

散乱行列、位相シフト、散乱長: $S = \frac{I + iK_{00}}{I - iK_{00}}$, $S_{aa} = \exp(2i\delta_l)$, $a_s = -\lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_{l=0}(k)}{k}$, $V_p = -\lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_{l=1}(k)}{k^3}$

Ab initio calculation by M. Lysebo and L. Veseth Phys. Rev. A **79**, 062704 (2009)

短距離と長距離の良い基底

1. Long-range basis: FF-coupled states

Total atomic angular momentum : $\mathbf{F}_a = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2$

$$|(F_1F_2)F_aM_{F_a}\rangle = \sum_{M_{F_1},M_{F_2}} \langle F_1M_{F_1}F_2M_{F_2}|F_aM_{F_a}\rangle |F_1M_{F_1}\rangle |F_2M_{F_2}\rangle$$

Total angular momentum : $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{a} + \mathbf{I}$

relative motion of the two atoms

$$|(F_a l)FM_F\rangle = \sum_{M_{F_a},m_l} \langle F_a M_{F_a} lm_l | FM_F \rangle | F_a M_{F_a} \rangle | lm_l \rangle$$

2. Short-range basis: Molecular Hund's case (a) states -

 $\left|q\Lambda S\Sigma\Omega_{I_{1}}\Omega_{I_{2}}F\Omega_{F}M_{F}\right\rangle = \left|q\Lambda S\Sigma\right\rangle\left|\Omega_{I_{1}}\Omega_{I_{2}}\right\rangle\left|F\Omega_{F}M_{F}\right\rangle$

 $\Omega_F = \Sigma + \Lambda + \Omega_{I_1} + \Omega_{I_2}$

Ab initio calculation by M. Lysebo and L. Veseth Phys. Rev. A **79**, 062704 (2009)

実際の計算は全ての距離において短距離基底で計算

基底間のユニタリー変換

$\langle qS\Sigma\Omega_{I_1}\Omega_{I_2}FM_F\Omega_F|qF_1F_2F_alFM_F\rangle$

$$= (-1)^{f} \sum_{\substack{M_{F_{a}},m_{l} \\ M_{F_{1}},M_{F_{2}} \\ M_{F_{1}},M_{F_{2}} \\ M_{I_{1}},M_{I_{2}} \\ M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ M_{I_{2}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{2}} \\ M_{I_{1}} \\ M_{I_{2}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ -M_{I_{2}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ -M_{I_{2}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1} \\ -M_{I_{1}} \\ -M_{I_{1}} \\ -M$$

Ab initio calculation by M. Lysebo and L. Veseth Phys. Rev. A **79**, 062704 (2009)

