

平成 27 年度 博士学位論文

スピン自由度を持つ超流動流の
動的不安定性に関する理論的研究

東北大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻

浅岡 類

Theoretical study of dynamical instability in a superfluid flow with spin degrees of freedom

Ultracold atoms in an optical lattice, which is an artificial lattice constructed by interference between counter laser beams, permit one to simulate various quantum phenomena experimentally. By operating the potential depth of an optical lattice, phenomena in strongly correlated systems can be observed including the superfluid-Mott insulator transition. Especially, non-equilibrium phenomena in strongly correlated systems, which is difficult to be observed in usual solid state systems, have been vigorously studied using ultracold atoms in optical lattices because of the development of experimental techniques.

In the development of these studies of non-equilibrium systems, the observation of dynamical instability of a superfluid flow in the lattice system has caught much attention. The dynamical instability is induced by the interplay between the lattice periodicity and nonlinearity due to the inter-particle interactions in the Bose-Einstein condensate. When the system becomes dynamically unstable, the energy of an excited mode has an imaginary part. Therefore, an arbitrary small density fluctuation in a uniform superfluid flow grows exponentially in time, resulting in a drastic decay of the original flow. These features are in contrast with the well-known Landau instability, which is the energetic instability caused by decaying from the initial metastable state. Dynamical instability itself is widely seen in various non-linear systems governed by classical fluid mechanics. However, using ultracold atoms, one can now advance the study of superfluid instabilities to the next stage, namely dynamical instability in systems with internal degrees of freedom. In particular, it has been known that bosons with spin degrees of freedom exhibit rich physics in an optical lattice.

Under the above background, this study focuses on the influence of spin degrees of freedom on the dynamical instability of a superfluid flow. In this study, the dynamical instability of spin-1 superfluid flow in an optical lattice is analyzed. Spin-1 is the most fundamental freedom in the spin degrees of freedom of bosons. It is known that diverse static quantum phases appear in strongly correlated systems with spin degrees of freedom of $S=1$. However, the role of spin degrees of freedom on non-equilibrium phenomena in those systems is still poorly understood. Revealing this, therefore,

helps us understand quantum dynamics of the spinor Bose-Einstein condensate in an optical lattice.

Calculations of this study are based on the $S=1$ Bose-Hubbard model, which is the model properly capturing spin-1 bosons in an optical lattice. Dynamics of the $S=1$ system is analyzed by the equation of motion of spin-1 bosons obtained by the dynamical Gutzwiller approximation modified in accordance with the $S=1$ system, which can describe dynamics of systems over various interaction strengths.

The main results of this study are as follows.

(1) Analysis of collective excitations associated with the dynamical instability

First, collective excitations associated with the dynamical instability in a spinless system was analyzed for clearly understanding of the dynamics of superfluid flow. It is experimentally known that density modulations is accompanied by the decay of superfluid flow caused by the dynamical instability. However, the feature of this density modulation had not been revealed regardless of the presence or absence of the spin degrees of freedom. The numerical simulations based on the dynamical Gutzwiller approximation elucidate that the principal mode of the density modulation highly depends on the interaction strength and the momentum acceleration rate of superfluid flow. These features are consistent with the stability phase diagram calculated on the basis of the Bogoliubov theory.

(2) Analysis of the dynamical instability of a spin-1 superfluid flow in an optical lattice This study focuses on the effect of spin interaction on the dynamical instability according to the following two interests. First, whether does the parity about the average number of particles per site found in the superfluid-Mott insulator transition also appear in the dynamical phase diagram or not? Second, how do spin mixing processes among spin components in spin-1 superfluid flows affect the dynamical instability? Time evolutional calculations based on the $S=1$ dynamical Gutzwiller approximation revealed that a spin-1 superfluid flow decays at a different critical momentum from the spinless model when the spin-independent interaction strength is the same, which is due to spin-dependent interactions. Furthermore, the phase diagrams about the critical velocity of the dynamical instability are obtained in the spinless and the $S=1$ Bose-Hubbard models. With a ferromagnetic interaction in the case of $S=1$, the phase diagram of the spin-polarized $S = 1$ Bose-Hubbard model becomes essentially the same as the diagram of the spinless Bose-Hubbard model because the spin degrees

of freedom are frozen without the spin mixing processes. In this case the spin effect only provides the deviation of the value of the spin-independent interaction practically. On the other hand, with an antiferromagnetic interaction, the dynamical phase diagrams of the $S = 1$ Bose-Hubbard model differ fundamentally from the spinless model and shed light on the influence of the spin mixing process between the $S = 1$ bosons. This effect depends on the parity of the average particle numbers per site; comparing with the spinless system, the critical velocity becomes smaller for odd number, and larger for even number.

目次

第 1 章 序論	1
1.1 研究背景	1
1.2 研究目的	3
1.3 本論文の構成	3
第 2 章 理論的背景と関連実験	4
2.1 Bose-Einstein 凝縮と超流動	4
2.1.1 理想気体の Bose-Einstein 凝縮	4
2.1.2 Bose-Einstein 凝縮と超流動の関係	7
2.1.3 光格子中の超流動	26
2.2 超流動流の不安定性	35
2.2.1 エネルギー散逸を伴う不安定性	36
2.2.2 動的不安定性	41
2.3 スピン自由度と冷却原子気体	49
2.3.1 $S = 1$ のスピン自由度を持つ Bose 原子とその相互作用	50
2.3.2 光格子中の $S = 1$ Bose 系	53
2.3.3 $S = 1$ のスピン自由度を持つ冷却原子気体のダイナミクス	57
第 3 章 光格子中を流れる超流動流の崩壊と集団励起	59
3.1 問題提起と研究目的	59
3.2 計算手法	59
3.2.1 Bose-Hubbard モデル	59
3.2.2 Gutzwiller 近似と運動方程式	60
3.2.3 強相関領域における線形安定性解析	61
3.2.4 状況設定	64
3.2.5 重要な物理量	65
3.3 結果と考察	67
3.3.1 崩壊時のダイナミクス	67
3.3.2 崩壊に伴う集団励起現象	68
3.3.3 線形安定性解析による密度変調の理解	69

3.4	まとめ	75
第 4 章	光格子中におけるスピン 1 の自由度を持つ超流動流の動的不安定性	76
4.1	問題提起と研究目的	76
4.2	計算手法	77
4.2.1	$S=1$ Bose-Hubbard モデル	77
4.2.2	Gutzwiller 近似と運動方程式	77
4.2.3	状況設定と重要な物理量	79
4.3	結果	79
4.3.1	崩壊のダイナミクスとスピンの挙動	79
4.3.2	動的不安定性に関する相図	81
4.3.3	動的崩壊に伴う密度変調と磁場の印加に対する応答	88
4.4	まとめ	91
第 5 章	結論と今後の研究課題	93
5.1	結論	93
5.2	今後の研究課題	94
	参考文献	95
	謝辞	101

第 1 章 序論

1.1 研究背景

超流動に関する研究の歴史は長く、水銀における超伝導の発見（1911 年）、液体ヘリウムにおける超流動の発見（1938 年）以降、基礎的なメカニズムの理解、新しい性質の発見、応用への可能性の探索など様々な方面から研究が行われている。超流動は本来我々が生活する上では気づかないようなミクロの世界での粒子の性質が、温度を下げることによって我々が認識できる巨視的な現象として現れたものである。超流動は量子効果によって生じるものであるため、我々が認識している古典物理では理解しがたい新奇な性質を持ち、我々の生活向上に新たな可能性をもたらしている。

超流動の名前の由来ともなっている摩擦なしの流れは超流動の最も重要な性質であるが、この流れにも臨界速度が存在することが知られており、臨界速度以上の速度では超流動流は減衰してしまう。超流動の臨界速度は負の励起エネルギーを持った集団励起や渦の発生により引き起こされる。負の励起エネルギーを持つ集団励起による臨界速度はランダウの臨界速度と呼ばれ、超流動体中に密度ゆらぎを運ぶフォノン^{*1}や回転運動量を運ぶロトンと呼ばれる励起が存在できる最小の超流動速度である。それに対して渦の発生による臨界速度はファインマンの臨界速度と呼ばれる。したがって、超流動の臨界速度を考えるには、超流動体が流れているダイナミカルな状況での超流動の励起の発生を理解することが不可欠となる。

超流動の臨界速度に関する実験は主に液体ヘリウム 4 を用いて行われ [1, 2, 3, 4]、超流動の減衰時に生じるフォノン [5]、ロトン [6]、渦糸 [7] の研究が進められた。これらの現象は理論的に予言されていたが [8, 9, 10]、液体ヘリウムは密度が高く粒子間相互作用の強い系であり、理論と実験の定量的な比較は困難な部分が多かった。そこで注目されたのが、冷却原子気体の Bose-Einstein 凝縮である。冷却原子気体は 1995 年にボース原子のルビジウム [11]、ナトリウム [12]、リチウム [13] において実験的に実現された。冷却原子気体は、不純物のないクリーンな系であり、かつ Feshbach 共鳴 [14] を利用した粒子間相互作用操作や time of flight 法による運動量分布の観測が可能であることから、極めて高度な操作性と精密な観測性を持ち合わせている。そのため、それまで凝縮物理での観測が困難であった現象がクリアに観測され、新奇な現象も様々確認されてきた。特に、渦糸格

^{*1} 結晶における格子振動とは異なるものである。

子の実現 [15] 等によりその超流動性が確認されてから、上に述べた超流動の臨界速度に関する実験も非常に多く行われた。

冷却原子系では、対向するレーザー光によって作られる光格子と呼ばれる周期ポテンシャル中での物性研究も盛んに行われている。光格子冷却原子系では、量子相転移現象の観測として非常に注目された超流動-Mott 絶縁体転移 [22] を始めとする静的なものから、Bloch 振動 [17] や Landau-Zener [18] といった動的なものまで多くの興味深い現象が観測されている。今挙げた現象は凝縮体の非線形性、つまり粒子間相互作用が不可欠な要素となり発現したものである。非線形性は非線形光学などにも表れてくる性質であり、それらとの類似性という意味でも光格子中の凝縮体の研究は注目されている。また光格子冷却原子系は、主にバンド構造の特徴が現れるという意味で結晶中の電子が示す性質の再現ができる部分と、原子気体としてボース原子を用いることで Pauli の排他律によって制限される電子系では見られないボース系特有の性質が観測できる 2 面性を持つという意味でも非常に面白い。このような光格子冷却原子系では、その周期性から超流動流の不安定性にも大きな影響を及ぼす。特に顕著な影響は、上で述べた Landau 不安定性などの他に、動的不安定性と呼ばれる、エネルギーは保存したまま系の状態が時間とともに急激に変化することで超流動性が失われていく不安定性が生じることである。動的不安定性は散逸のほとんどない系でなければ他の不安定性の存在に隠されて観測が困難であるため、孤立系である冷却原子系の登場により理解が大きく進んだ。動的不安定性は基本的には古典流体などにも見られる古典的流体力学的不安定性であり、非線形効果が弱い状況では古典的な運動方程式でも理解される現象である。しかし、光格子ポテンシャルが深い強相関係では超流動-Mott 絶縁体転移の量子相転移に代表されるように量子効果が非常に重要となるため、動的不安定性にも量子効果が効いてくることになる。先行研究ではこれらの問題提起の下、強相関係での動的不安定性に関する研究が、理論・実験共に進められた。

一方で、冷却原子系ではその観測性の高さからスピン自由度を持つ冷却原子気体の研究も数多く行われている。スピン自由度は言うまでもなく物性物理において最も重要な自由度の 1 つである。電子が持つスピン $\frac{1}{2}$ の自由度により発現する現象は数えきれないほど存在するが、ボース粒子の持つ整数スピンも、Pauli の排他律が存在しないことも相まって多彩な量子相を発現させることが知られている。特に、超流動-Mott 絶縁体転移においてスピン自由度を持つ場合の相図がスピンレスの場合の相図と大きく異なることは注目された。また、スピン自由度を持つ超流動体のダイナミクスに関する研究も数多く行われ [19]、特に、スピントリップによりスピンの S_z 成分が混ざり合うスピンミキシングと呼ばれる現象は超流動体のコヒーレントなスピンドイナミクスとして注目され、スピン大きさが 1 や 2 の系で実験・理論ともに活発に研究されている。それに対して、光格子中にお

けるダイナミクスは実験も発展していなかったことから研究は極めて少なかった。しかしごく最近、光格子中のスピン 1 凝縮体のダイナミクスに関する実験が行われ [20]、光格子ポテンシャルの深さがスピンのダイナミクスに大きく影響することなどがわかったため、今後光格子中のダイナミクスに関する研究も大きく進展すると考えられる。

1.2 研究目的

以上の背景の下、本研究ではスピン自由度が超流動流の光格子中での動的不安定性に与える影響を明らかにすることを目的とする。この目的は量子力学的自由度であるスピン自由度が、基本的に古典的な流体力学的不安定性である動的不安定性にどのような影響を及ぼすかという問題に注目したものである。本研究は大きく 2 段階に分かれており、まずスピン自由度がない場合にも十分に明らかになっていない、動的不安定性に伴う密度変調のメカニズムとその性質を明らかにする。次に、スピン自由度を導入した場合に超流動流の臨界運動量がどのように変化し、スピンのダイナミクスがどう影響を与えているかを明らかにする。さらに詳しい研究目的については各章の研究目的で詳細に述べる。

1.3 本論文の構成

本論文は、本研究を理解するための基礎的内容をまとめた第 2 章、超流動流の動的崩壊に伴う密度変調に関する研究をまとめた第 3 章、スピン自由度を持つ超流動流の動的不安定性に関する研究についてまとめた第 4 章、結論と今後の研究課題が第 5 章となっている。第 2 章では主に Bose-Einstein 凝縮と超流動性について議論したあと、光格子中の超流動の基本的な性質を示す。さらに、本研究の主題である超流動流の不安定性を先行研究とともに議論し、最後にスピン自由度を持つ超流動体の静的、動的な性質を先行研究とともに示す。第 3 章では、スピン自由度を持つ超流動流の不安定性を扱う前に、動的不安定性に関して多くの情報を含む密度変調のメカニズムとその性質を議論する。そして第 4 章でスピン自由度を導入した場合に超流動流の臨界運動量がどのように変化するなど、スピン自由度が動的不安定性に与える影響を議論する。

第 2 章 理論的背景と関連実験

2.1 Bose-Einstein 凝縮と超流動

超流動が生じる原因は Bose-Einstein 凝縮と粒子間相互作用であることがわかっている。そこで、超流動の現象の本質を理解するために、まず粒子間相互作用がない場合の Bose-Einstein 凝縮について述べる。実際には粒子間相互作用がなければ Bose-Einstein 凝縮を起こしても超流動にならないが、2.1.1 項で一番シンプルな場合の Bose-Einstein 凝縮を理解し、2.1.2 項で相互作用によって Bose-Einstein 凝縮と超流動がどのようにつながっていくかを考えていく。また、本研究では、主に 2 次元の超流動を扱うが、Bose-Einstein 凝縮や超流動が起こるかどうかは本来系の次元性に大きく影響を受ける。そのため、本研究では次元性をテーマとしていないものの、想定している系の有効性なども考慮できるように Bose-Einstein 凝縮や超流動の原理を次元性とともを紹介する。

2.1.1 理想気体の Bose-Einstein 凝縮

この項ではまず理想気体の Bose-Einstein 凝縮を 3 次元と 2 次元以下の低次元に分けて考える。

3 次元理想 Bose 気体

相互作用をしない質量 m の Bose 気体を考える。今、体積 V の空間に閉じ込められた N_{tot} 個の Bose 粒子が温度 T の熱浴に接して平衡状態にある。Bose 粒子のスピンは考えないこととする。この理想 Bose 気体の Bose 分布関数は

$$g(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1} \quad (2.1)$$

と与えられる。 ϵ 、 μ 、 k_B はそれぞれ 1 粒子のエネルギー、化学ポテンシャル、ボルツマン定数である。また、3 次元では状態密度が $D(\epsilon) = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\sqrt{\epsilon}$ であるので、

$$N_{tot} = N_0 + \int_0^\infty D(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon = N_0 + \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1} d\epsilon \quad (2.2)$$

となる。ここで、状態数を用いた数え上げから状態密度を用いた積分に直す際に、積分では $\epsilon = 0$ からの寄与が抜け落ちてしまうため、 $\epsilon = 0$ にある粒子数のみ別扱いに N_0 と

した。 $\epsilon = 0$ からの寄与とは、離散化されたエネルギーに対する状態数を状態密度では平均化していることから、状態数を用いた数え上げにおいては最低エネルギー（3次元の箱では $\epsilon_m = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ 、 L は系の1辺の長さ）の状態にある粒子数に対応する。励起粒子数 $N_{tot} - N_0$ は μ を決めれば決定する。いま、ボース分布関数がどのような ϵ に対しても正であるという条件より $\mu \leq 0$ 、 $T \rightarrow 0$ のとき $\epsilon = 0$ の状態にすべての粒子が入る基底状態になるという条件から、 $e^{-\frac{\mu}{k_B T}} \rightarrow 1 + \frac{1}{N_{tot}}$ 、つまり $\mu \rightarrow 0$ が必要条件となる。以上から、 μ の値が無視できるほど小さい低温では、

$$N_{tot} - N_0 = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\epsilon/k_B T} - 1} d\epsilon \equiv N_{tot} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.3)$$

$$T_c \equiv \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N_{tot}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.4)$$

となる。 $\zeta(x)$ はツェータ関数である。したがって、 $\epsilon = 0$ の状態に入る粒子数は

$$N_0 = N_{tot} \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (2.5)$$

と決まる。この表式より、3次元理想ボース気体では、温度を下げていくと $T = T_c$ から $\epsilon = 0$ の状態に粒子が入り始め、 $T \geq T_c$ の低温では $\epsilon = 0$ の状態になる粒子数が温度の冪で急激に増加することがわかる。このように、低温で最低エネルギー状態に多数の粒子数が落ち込む現象を Bose-Einstein 凝縮と呼び、 T_c がその転移温度となっている。

低温では、粒子の熱的ド・ブロイ波長 $\lambda_D = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}}$ （ h はプランク定数）が大きくなり波動性が強くなるため、それぞれの粒子の量子力学的性質が顕著に現れるようになっているが、さらに $T \leq T_c$ では多くの粒子が同じ量子状態をとっているために波動関数がコヒーレントに重なり、系全体が1つの波動関数で表せるようになる。つまり、系全体が1つの粒子のように振る舞うこととなる。この現象の重要な点は、その1粒子が量子力学的性質を顕著に示すことと、そのサイズが我々が日常で目にできるマクロなスケールになっていることである。これらの利点から、我々が日常で認識できるレベルで量子力学的な性質を利用するために Bose-Einstein 凝縮が極めて重要な現象であることがわかる。

低次元理想 Bose 気体

次に、1、2次元の低次元系における理想 Bose 気体の性質を考える。例えば面積が S の

2次元系において、粒子数の条件式から化学ポテンシャルを求めると、

$$\begin{aligned} N_{tot} &= \sum_i \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1} = \frac{2\pi S k}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_B T} - 1} dp \\ &= -\frac{S m k_B T}{2\pi\hbar^2} \log(1 - e^{-|\mu|/k_B T}) \end{aligned} \quad (2.6)$$

より、

$$\mu = k_B T \log(1 - e^{-T_D/T}) \quad (2.7)$$

$$T_D = \frac{2\pi\hbar^2 N_{tot}}{m k_B S} \quad (2.8)$$

となる。 T_D は熱的ド・ブROI波長と平均粒子間距離が同じオーダーになり粒子の波動関数が重なり合い始める温度である。 $T \ll T_D$ の低温では $\mu \simeq -k_B T e^{-T_D/T}$ とできて μ は0に近づくが、サイズの比較的大きな系では最低準位のエネルギー $\frac{2\hbar^2 \pi^2}{m S}$ は極めて小さいために、最低エネルギー準位の粒子数は $N_0 = \frac{1}{e^{(\frac{2\hbar^2 \pi^2}{m S} - \mu)/k_B T} - 1} \simeq k_B T / |\mu| \simeq e^{T_D/T}$ とできる。このとき、 $N_0 \sim N_{tot}$ になる温度は

$$T_c = T_D / \log N_{tot} \quad (2.9)$$

であり、密度一定で系のサイズを無限大にした熱力学極限では $T_c \rightarrow 0$ となってしまう。そのため、2次元では Bose-Einstein 凝縮は起こらない。1次元では、化学ポテンシャルが2次元よりも小さくなってしまうため、さらに凝縮が起こりづらくなる、つまり2次元と同様に Bose-Einstein 凝縮が起こらないことがわかる。

しかし、冷却原子気体では異方的なトラップを用いることで実験的に1、2次元の低次元 Bose-Einstein 凝縮を実現できる。例えば1次元的な $\omega_3 \ll \omega_1, \omega_2$ の異方的調和トラップを考えると、振動数の大きい方向の粒子の運動は制限され最低エネルギー状態のみとる。このとき、先ほどと同様に化学ポテンシャルを計算すると、

$$N_{tot} = \sum_i \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1} = -\frac{k_B T}{\hbar \omega_3} \log(1 - e^{-|\mu|/k_B T}) \quad (2.10)$$

$$\mu = k_B T \log(1 - e^{-T_D/T}) \quad (2.11)$$

$$T_D = \frac{\hbar \omega_3 N_{tot}}{k_B} \quad (2.12)$$

となり、ここから T_c を計算すれば、

$$T_c = \frac{\hbar \omega_3}{k_B} \frac{N_{tot}}{\log(N_{tot})} \quad (2.13)$$

となる。これは、トラップの形状を一定にしたまま粒子数を増やしていけば1次元でも Bose-Einstein 凝縮が起こる可能性があることを示唆している。

2.1.2 Bose-Einstein 凝縮と超流動の関係

前項で述べたように、Bose-Einstein 凝縮と超流動は必要十分の関係ではなく、粒子間相互作用がその間をつなぐ重要なファクターとなる。超流動ヘリウム 4 の超流動も粒子間相互作用が非常に強く働いている系であり、理想気体を考えるだけだと実際の超流動を十分に理解するには至らない。そこでこの項では、粒子間相互作用により Bose-Einstein 凝縮と超流動がどのようにつながるかを考える。ここでも前項と同様に次元性を考慮する。Bose-Einstein 凝縮と超流動の関係については未だ明確な理解が得られておらず議論が続いている部分であるため、本論文ではその動向をできるだけ簡潔にまとめる。

3 次元理想 Bose 気体

まず相互作用がない場合にボース・アインシュタイン凝縮体が超流動性を持たないことを示す。超流動は Bose-Einstein 凝縮体が運動したときに摩擦の摂動によりその運動が乱されるかを表した性質であり、あくまで動的な性質である。そのため、Bose-Einstein 凝縮と超流動を結び付けるには、静的な状況と動的な状況を比較する必要がある。今までに 3 次元理想 Bose 気体では Bose-Einstein 凝縮が起こることは示してきたので、ここではその気体が摂動のある状況で運動した場合の性質を考える [8]。いま、質量 M をもった管

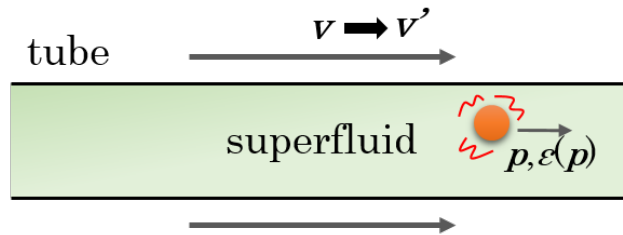


図 2.1 管の中を流れる超流動体と発生した励起

の中に基底状態にある一様な超流動体が存在するとし、管が速度 \mathbf{v} で動いている状況を考える（図 2.1）。この系では管と超流動体しか考えていないため、この状況は超流動流が流れている状況と同等である。そこに、流れ方向に沿った運動量 \mathbf{p} 、エネルギー $\epsilon(\mathbf{p})$ を持つ励起が発生し、反作用の力で管は速度が \mathbf{v}' に変化したとする。すると運動量保存則と

エネルギー保存則

$$M\mathbf{v}' + \mathbf{p} = M\mathbf{v} \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{2}M\mathbf{v}'^2 + \epsilon(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}M\mathbf{v}^2 \quad (2.15)$$

から

$$\epsilon(\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} = 0 \quad (2.16)$$

が導かれる。いま M が十分大きいとすると第 3 項を無視することができて、

$$\epsilon(\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.17)$$

となり、この条件を満たすとき励起が発生し得るので、系で発生しうる何かしらの励起が起きる最低の速度は

$$|\mathbf{v}|_{\min} = \left(\frac{\epsilon(\mathbf{p})}{|\mathbf{p}|} \right)_{\min} \quad (2.18)$$

である。式 (2.18) の右辺は位相速度の最小値であり、つまり励起の分散関係において、原点と分散曲線の 1 点をつないだときに最小となる傾きである。したがって、自由粒子の分散関係のように原点での傾きが 0 であると、どのような \mathbf{v} でも壁からの摂動により励起が発生し得る。これは理想ボース気体において、エネルギーの高い準安定な流れを持った状態が、流れの小さい真の安定状態へ励起を放出しながら遷移していくことを表しており、つまり理想 Bose 気体では安定した超流動状態は存在できないことがわかる。このような超流動流の不安定性は Landau 不安定性と呼ばれ、2.2 節でさらに詳しくその機構を扱う。

相互作用する 3 次元 Bose 気体

次に、相互作用する 3 次元 Bose 気体についても超流動の安定性を議論していく。ここでは、平均場近似的な手法である Bogoliubov 近似を用いた微視的理論から、相互作用が入ることによって励起スペクトルがどのように変化するかを示す [27, 28]。

いま絶対零度において、体積 V の空間にある相互作用する一様ボース気体を考える。s 波散乱のみを考慮した粒子間相互作用を含むハミルトニアンは Bose 粒子に対する場の演算子を用いて

$$\mathcal{H} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

と表される。ここで、 U_0 は s 波散乱の相互作用を表し、

$$U_0 = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \quad (2.20)$$

である。また、 a_s は s 波散乱の散乱長、 m は粒子の質量、 $\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m}$ である。ここにフーリエ変換

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{V^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \hat{b}_{\mathbf{p}} \quad (2.21)$$

を施すと、

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} + \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}} b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}} \quad (2.22)$$

のようにハミルトニアンが運動量表示される。ここで $b_{\mathbf{p}}$ は運動量 \mathbf{p} をもつボソンの消滅演算子である。演算子を表すハットは省略した。式 (2.22) において、演算子を基底状態 $b_{\mathbf{p}=\mathbf{0}} \equiv b_0$ と基底状態からの励起 $b_{\mathbf{p} \neq \mathbf{0}}$ とに分けて考える。ハミルトニアン第 1 項目は $\epsilon_0 = 0$ と $\langle b_0^\dagger b_{\mathbf{p}} \rangle = 0$ などから

$$\sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{0}} \epsilon_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} \quad (2.23)$$

となり、第 2 項目は励起が微小である、つまり $b_{\mathbf{p}}$ 、 $b_{\mathbf{p}}^\dagger$ の 3 次以上の項を無視すると

$$\begin{aligned} & \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}} (b_0^\dagger + b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger)(b_0^\dagger + b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger)(b_0 + b_{\mathbf{p}'})(b_0 + b_{\mathbf{p}}) \\ &= N_0^2 + N_0(b_{\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} + b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} + b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger) \end{aligned} \quad (2.24)$$

となる。ここでは熱力学極限を考え $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ の点に凝縮している粒子数 N_0 は十分に大きいとし、

$$b_0^\dagger |N_0\rangle = \sqrt{N_0+1} |N_0+1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle, \quad b_0 |N_0\rangle = \sqrt{N_0} |N_0-1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \quad (2.25)$$

のように Bose 粒子の生成消滅演算子を $b_0^\dagger \approx b_0 \approx \sqrt{N_0}$ と置き換えた。これは生成消滅演算子の揺らぎを無視しているので平均場近似に対応する。さらに運動量保存を考慮し $\mathbf{q} = 0$ 、 $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$ とすれば

$$\frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}} b_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}} = \frac{N_0^2 U_0}{2V} + 2n_0 U_0 \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{0}} (b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} + b_{-\mathbf{p}}^\dagger b_{-\mathbf{p}}) + n_0 U_0 \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{0}} (b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{-\mathbf{p}}^\dagger + b_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}}) \quad (2.26)$$

となる。ここで $n_0 = N_0/V$ は凝縮している粒子の粒子密度である。最終的にハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{N_0^2 U_0}{2V} + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\epsilon_{\mathbf{p}} + 2n_0 U_0) b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}} + n_0 U_0 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{-\mathbf{p}}^\dagger + b_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}}) \quad (2.27)$$

と導かれる。ただし $\sum_{\mathbf{p}}$ の和では、 $(\mathbf{p}, -\mathbf{p})$ を1セットとしてカウントする。

このハミルトニアンは Bogoliubov 変換を用いることで対角化できる。Bogoliubov 変換

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{p}} &= u_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}}^\dagger \\ b_{-\mathbf{p}} &= u_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}}^\dagger \end{aligned} \quad (2.28)$$

をハミルトニアンに施すと

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{N_0^2 U_0}{2V} + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\alpha_{\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{\mathbf{p}} + \alpha_{-\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{p}}) [(\epsilon_{\mathbf{p}} + 2n_0 U_0)(u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2) + n_0 U_0(-2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}})] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\alpha_{\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{p}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}}) [(\epsilon_{\mathbf{p}} + 2n_0 U_0)(-2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}) + n_0 U_0(u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2)] \end{aligned} \quad (2.29)$$

となる。ここで $u_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}}$ はボソンの交換関係を満たすように

$$u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2 = 1 \quad (2.30)$$

の関係を満たす。式 (2.50) のハミルトニアンが対角化されるための条件は

$$(\epsilon_{\mathbf{p}} + 2n_0 U_0)(-2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}}) + n_0 U_0(u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2) = 0 \quad (2.31)$$

であるので、結局ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{N_0^2 U_0}{2V} + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} E_{\mathbf{p}} (\alpha_{\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{\mathbf{p}} + \alpha_{-\mathbf{p}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{p}}) \quad (2.32)$$

と対角化される。これにより励起のエネルギー固有値は

$$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{p}}(\epsilon_{\mathbf{p}} + 2n_0 U_0)} \quad (2.33)$$

となる。粒子間相互作用がない場合には励起エネルギーは自由粒子と同じ形になるのは明らかで、超流動は励起に対して不安定である。それに対して、粒子間相互作用が入った場合には

$$\frac{E_{\mathbf{p}}}{|\mathbf{p}|} = \sqrt{\frac{1}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0 U_0 \right)} \quad (2.34)$$

であり、これを最小にする $|\mathbf{p}| = 0$ の場合も位相速度は $\frac{n_0 U_0}{m}$ の有限な値が残る。以上から、相互作用する Bose-Einstein 凝縮体は $\frac{n_0 U_0}{m}$ 以下の位相速度では Landau 不安定性により超流動が壊されないで安定に存在できることがわかる。これは粒子間相互作用強度が大きくなると長波長の集団励起が生じにくくなることに起因する。ちなみに長波長領域では分散は線形になっているため集団励起はフォノンである。ここまでの議論により、少なくとも Landau 不安定性に対しては粒子間相互作用が超流動性を守る役割を果たすことが理解できる。ただし注意すべきは、超流動性は Landau 不安定性のみで議論されるわけではないことである。超流動状態を壊す要因としては後に示す渦などの動的な不安定性もあり、相互作用と超流動性の関係はそこからさらに詳しく議論される必要がある。そのため、様々な不安定性に対する超流動性を統一的に議論できるような超流動に関する量やオーダーパラメータが存在すると便利であり、かつ励起や動的な性質を大きく変化させる次元性も議論しやすくなる。以降の項では、一般的に用いられる超流動のオーダーパラメータを紹介していく。

非対角長距離秩序とオーダーパラメータ

超流動は Bose-Einstein 凝縮と必要十分の関係では結び付けられないと上に述べてきた。この背景には粒子間相互作用の効果や次元性の効果、さらには非平衡の効果などが存在する。そこで、これらの効果が入ってきても超流動が定義できるオーダーパラメータが必要である。まずは、相互作用が入ってきた場合にも自然と拡張できる非対角長距離秩序を紹介する。[29, 30] 非対角長距離秩序は、量子力学的な位相の長距離秩序と関係づけられ、基本的には Bose-Einstein 凝縮に関係付けられる量である。元々スピンの 2 次元古典 XY 模型で指摘され、その後 2 次元 Bose 液体の超流動転移の文脈でも研究が進められた Brezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移 [31, 32, 33] で知られるように、低次元などの環境では非対角長距離秩序と超流動が対応しないことも知られているものの、超流動性の細かい議論に踏み込まない限りは非対角長距離秩序は超流動を示す指標として有効な量として用いられている。本研究においても非対角長距離秩序に対応したオーダーパラメータを用いて超流動性を判断する。

まず相互作用のない理想 Bose 気体を考えると、非対角長距離秩序は

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \Phi | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | \Phi \rangle \quad (2.35)$$

で表される。ここで、 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$, $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ は Bose 粒子に関する場の生成消滅演算子、 Φ は N 粒子系の状態を表すケットである。 $\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Phi | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | \Phi \rangle$ は 1 粒子密度行列と呼ば

れる。つまりこの量は、ある位置から無限に遠い他の位置に粒子を移動しても系の状態が変化しない確率振幅である。 Ψ が様々な状態 Ψ_n を係数 c_n で重ね合わせた状態であるとすると、1 粒子密度行列は

$$\begin{aligned}\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle \Phi | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | \Phi \rangle \\ &= \sum_{n, n'} c_{n'}^* c_n \langle \Phi_{n'} | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | \Phi_n \rangle \\ &= \sum_n p_n \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | \Phi_n \rangle\end{aligned}\quad (2.36)$$

のように状態 n の起こる確率 p_n で表される。さらにこれを完全性条件 $\sum_m |m\rangle \langle m| = \hat{I}$ を用いて変形していくと

$$\begin{aligned}\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{n, m} p_n \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | m \rangle \langle m | \Phi_n \rangle \\ &= \sum_{n, m} p_n \langle m | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | m \rangle \\ &= \text{Tr} \left[\sum_n p_n | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] \\ &= \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right]\end{aligned}\quad (2.37)$$

のように密度演算子

$$\hat{\rho} \equiv \sum_n p_n | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \quad (2.38)$$

を用いてトレースで表すことができる。

この非対角長距離秩序 Bose-Einstein 凝縮とどのように対応するか見るために、運動量表示に直したときの非対角長距離秩序を示す。1 粒子密度行列中の場の演算子をフーリエ変換すると、

$$\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathbf{q}\mathbf{r}')} \quad (2.39)$$

であるが、系の並進対称性が保たれている場合、つまり系が空間的に一様な場合には

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \quad (2.40)$$

となる。これは、空間的に非一様なポテンシャルが系にかかっていない限り、系の全運動量がハミルトニアンと交換して全運動量が保存することから導かれる。以上から、

$$\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (2.41)$$

の表式が得られる。 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ を無限大に大きくすると、 \mathbf{k} の和の中の \mathbf{k} の関数が激しく振動するため、和における $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ 以外の項は無視できる。結局、

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\rightarrow\infty} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle}{V} \quad (2.42)$$

のように非対角長距離秩序は Bose-Einstein 凝縮している粒子の密度に対応している。

この考え方は相互作用がある場合にも自然と拡張できる [34]。相互作用がない理想 Bose 気体の場合には取りうる状態として 1 粒子のエネルギー準位が想定されたが、相互作用がある場合には新たな同数の準位が生じる。これは密度行列を対角化すれば、

$$\rho = \begin{pmatrix} n_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & n_{\max} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & n_2 & \cdots & 0 \\ & \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & n_s \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

のように密度行列が最大の確率 n_{\max} で現れる状態とその他の s 個の状態の確率で表される。よって、密度演算子 (2.44) は最大出現確率の状態 $|\Psi\rangle$ を用いて

$$\hat{\rho} = n_{\max} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \sum_m n_m |m\rangle\langle m| \quad (2.44)$$

と表される。よって、非対角長距離秩序は

$$\begin{aligned} \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\rightarrow\infty} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] \\ &= n_{\max} \end{aligned} \quad (2.45)$$

となり、相互作用のある場合にある状態に Bose-Einstein 凝縮している粒子の密度に対応付けられる。さらに N 粒子状態に関するトレースを $\text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] \equiv \langle N | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | N \rangle$ と表すことにすると、この間に完全系を挟むことで

$$\langle N | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | N \rangle = \langle N | \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) | N-1 \rangle \langle N-1 | \hat{\Psi}(\mathbf{r}') | N \rangle \quad (2.46)$$

とできる。そのため、超流動のオーダーパラメータとして n_{\max} をとっても良いが、超流動が量子力学的現象であることをあらわにするために

$$\Psi \equiv \langle N-1 | \hat{\Psi}(\mathbf{r}) | N \rangle \quad (2.47)$$

をオーダーパラメータに定めることが多い。本研究でもこの定義をオーダーパラメータとして採用する。ただしここで、式 (2.46) の変形をする際今まで考えてきた N 粒子系の波

動関数を全体の粒子数が揺らいでいるような波動関数に拡張していることを注意しておく。というのは、例えば絶対零度の粒子間相互作用がない場合を考えれば、 N 粒子系の状態は真空状態 $|\text{vac}\rangle$ を用いて

$$|\Psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (a_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^\dagger)^N |\text{vac}\rangle \quad (2.48)$$

と表されるが、この状態では生成消滅演算子の期待値、つまりオーダーパラメータが 0 になってしまう。オーダーパラメータを用いると数学的にも物理的にも問題の取り扱いが簡単になることが多いので、オーダーパラメータが有限になるように波動関数を拡張したい。そのため、先ほどの N 粒子系の状態を

$$|\Psi_N\rangle = e^{-\frac{N_0}{2}} e^{\sqrt{N_0} a_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^\dagger} |\text{vac}\rangle \quad (2.49)$$

のように拡張すると、オーダーパラメータが

$$\langle \Psi_N | \Psi(\mathbf{r}) | \Psi_N \rangle = \langle \Psi_N | \Psi^\dagger(\mathbf{r}) | \Psi_N \rangle = \sqrt{\frac{N_0}{V}} \quad (2.50)$$

と有限になる [35, 36]。ただし N_0 は凝縮している粒子数である。これは本来粒子数が定まっている系に対して粒子数を揺らがせるというルールを破った行為を犯してしまっている。しかし、粒子数の期待値は N に保たれていること、粒子数の揺らぎは \sqrt{N} のオーダーであるため熱力学極限では無視できることから、基本的性質は守られていると考えられる。このような考えの下、式 (2.46) は変形された。また、このような拡張は粒子間相互作用を摂動的に取り込むためにも有効なものになっている [27]。

オーダーパラメータは Gross-pitaevskii 方程式と呼ばれる運動方程式に従うことも特徴である。いま、式 (2.19) のハミルトニアンから Bose 粒子の消滅演算子に関するハイゼンベルグの運動方程式を求めると、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right) \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.51)$$

となる。さらに $\psi(\mathbf{r}, t)$ について拡張された状態で統計平均を取れば、オーダーパラメータに関する運動方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right) \Psi + \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} |\Psi|^2 \Psi \quad (2.52)$$

が得られる。ただし粒子間相互作用の項において、統計平均からの揺らぎは無視した。この運動方程式は Gross-Pitaevskii (GP) 方程式と呼ばれ、粒子間相互作用が弱い場合には

Bose-Einstein 凝縮体の運動を記述するのに良い近似となる。GP 方程式は Bogoliubov 近似を時間発展にも拡張した場合になっており、GP 方程式でも式 (2.33) のような弱相関の場合のスペクトルを導出できる。

最後に、非対角長距離秩序を持つような状態は位相が長距離に保たれた状態であることに触れておく。位相は粒子数の変化を表す概念であるので、位置と運動量のように粒子数と位相は共役な関係にある。そのため両者の不確定性関係から、粒子数が揺らいでいる非対角長距離秩序を持つような状態は位相が確定している状態であることがいえる。かつ、系の中で粒子の流れがないような状態であれば、位相は確定していてかつ長距離に渡って揃っていることになる。このような位相の秩序状態は、実験的には 2 つの Bose-Einstein 凝縮体の干渉によって確かめられている [37]。

低次元系における超流動

本研究では計算量の関係上 2 次元系を扱うものの、超流動性に関する詳しい議論には踏み込まないので、簡単のため超流動を上記オーダーパラメータで定義する。つまり、超流動の安定性というよりは Bose-Einstein 凝縮体の安定性を考えることになる。しかし、計算の背景や正当性を考える上で重要であるため、本論とは直接には関係はないが、この項で低次元の超流動性について考えていく。ここでは本研究で扱う 2 次元系について、有限温度では Bose-Einstein 凝縮を起こさないにも関わらず、Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移により超流動性を示すことが知られている 2 次元超流動を扱う。この項の流れとしては、まず 2 次元における相関関数の計算を 3 次元の場合と比較し、その後正確な超流動性の議論にはヘリシティモジュラスを用いることが望ましいことを示す。さらに、冷却原子系での超流動の BKT 転移を紹介した後、実際の崩壊の機構を理論的に考察する。

まず、2 次元では熱揺らぎによって Bose-Einstein 凝縮が妨げられ 3 次元の場合のような非対角長距離秩序を持たないことを示す [28, 38]。熱揺らぎが重要になる転移温度近傍を考える場合には、Ginzburg と Landau が現象論的に導入した [39, 40]、超伝導のオーダーパラメータの汎関数として表された自由エネルギーを用いると便利である。超流動の場合にも同様に d 次元の自由エネルギーはオーダーパラメータを用いて

$$F = \int d^d r \left[a |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 + c |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \quad (2.53)$$

と表される。この形式は、

$$F = \int d^d r \left[s_1 |\Psi(\mathbf{r})| + s_2 |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \cdots + s'_1 |\nabla \Psi(\mathbf{r})| + s'_2 |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 + \cdots \right] \quad (2.54)$$

という局所的自由エネルギーと空間的一様性のずれを考慮した部分による一般的な自由エネルギーの展開系において、大局的位相変換 $\Psi \rightarrow \Psi e^{i\phi}$ (群論でいう $U(1)$ 変換) に対してエネルギーは変化しないという要請と、転移点近傍でオーダーパラメータが十分小さいという要請から仮定された形である。比較のためにまず 3 次元の場合にこの自由エネルギーを用いて 1 粒子密度行列を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\mathbf{r})^* \Psi(\mathbf{r}') \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \Psi_{\mathbf{k}}^* \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{\int d\text{Re}[\Psi_{\mathbf{k}}] d\text{Im}[\Psi_{\mathbf{k}}] \Psi_{\mathbf{k}}^* \Psi_{\mathbf{k}} e^{-\frac{F}{k_B T}}}{\int d\text{Re}[\Psi_{\mathbf{k}}] d\text{Im}[\Psi_{\mathbf{k}}] e^{-\frac{F}{k_B T}}} \end{aligned} \quad (2.55)$$

となり、ここに簡単のため $|\Psi|$ の 4 次の項を無視してフーリエ変換された自由エネルギー

$$F = \sum_{\mathbf{k}} (a + ck^2) (\text{Re}[\Psi_{\mathbf{k}}]^2 + \text{Im}[\Psi_{\mathbf{k}}]^2) \quad (2.56)$$

を代入すれば、

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\mathbf{r})^* \Psi(\mathbf{r}') \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{\int ds dt (s^2 + t^2) e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{s^2 + t^2}{k_B T} (a + ck^2)}}{\int ds dt e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{s^2 + t^2}{k_B T} (a + ck^2)}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{-\frac{\partial}{\partial \left(\frac{a + ck^2}{k_B T} \right)} \left(\frac{k_B T}{a + ck^2} \right)}{\frac{k_B T}{a + ck^2}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{k_B T}{a + ck^2} \end{aligned} \quad (2.57)$$

とできる。この和は $k = \pm i\sqrt{\frac{a}{c}}$ に極を持つ複素積分に帰着し、

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{k_B T}{a + ck^2} &= 2\pi \int_0^\infty dk \int_{-\pi}^\pi d\theta k^2 \sin \theta \frac{k_B T}{a + ck^2} e^{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta} \\ &= \frac{2\pi k_B T}{i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k e^{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{a + ck^2} \\ &= 2\pi^2 k_B T \frac{e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi_+}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\xi_+ = \sqrt{\frac{c}{a}} \quad (2.59)$$

となる。積分の際 z 方向を $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ 方向にとった。この形から、3 次元の転移温度以上では 1 粒子相関関数は有限のコヒーレンス長程度で消えてしまうことがわかる。つまり、転移

温度以上で熱揺らぎにより有限のオーダーパラメータを持ったとしても、非対角長距離秩序は存在しないことがわかる。

次に、2次元の場合の計算を行う。オーダーパラメータを

$$\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|e^{i\phi(\mathbf{r})} \quad (2.60)$$

のように振幅と位相に分けて、密度揺らぎと位相の揺らぎをそれぞれ考える。面積 S の2次元系において、あるモード \mathbf{q} に関する密度の揺らぎ $\delta n_{\mathbf{q}}$ に対応する圧縮エネルギーは

$$E_c = \frac{1}{2}U_0S|\delta n_{\mathbf{q}}|^2 \quad (2.61)$$

であるが、これはモード \mathbf{q} に関する全エネルギーから運動エネルギーを差し引いたエネルギー

$$\epsilon_{\mathbf{q}} \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\mathbf{q}}}{k_B T}} - 1} - \frac{1}{2}k_B T \simeq \frac{1}{2}k_B T \quad (\epsilon_{\mathbf{q}} \ll k_B T) \quad (2.62)$$

と等しいので、密度揺らぎは温度に比例した

$$\frac{\langle |\delta n_{\mathbf{q}}|^2 \rangle}{n^2} = \frac{k_B T}{U_0 n^2 S} \quad (2.63)$$

の形になる。これを Bogoliubov 近似で求めた音速 $c_s = \sqrt{\frac{nU_0}{m}}$ で表せば、

$$\frac{\langle |\delta n_{\mathbf{q}}|^2 \rangle}{n^2} = \frac{k_B T}{N m c_s^2} \quad (2.64)$$

となり、結局、各位置での粒子数の分散は

$$\frac{\langle |\delta n(\mathbf{r})|^2 \rangle}{n^2} \simeq \sum_{\mathbf{q}, q < q_{\max}} \frac{k_B T}{N m c_s^2} \quad (2.65)$$

となる。ここで、 q_{\max} は原子間距離の逆数程度のカットオフの波数である。式 (2.65) より、温度が十分に小さければ密度揺らぎは非常に小さいことがわかる。2次元系では、密度揺らぎの大きさが熱的ド・ブロイ波長が平均粒子間距離と同じオーダーになる温度、式 (2.8) を用いておおよそ

$$\frac{\langle |\delta n(\mathbf{r})|^2 \rangle}{n^2} \leq \frac{T}{T_D} \quad (2.66)$$

となることがわかっており、これは BKT 転移する温度程度では非常に小さくなることがわかっている。そのため、2次元では次に示す位相の揺らぎが系の長距離相関を壊す主要な役目をすることになる。

密度揺らぎを無視すると 1 粒子密度行列は、

$$\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle |\Psi(\mathbf{r})|^* |\Psi(\mathbf{r}')| e^{i[\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}')] } \rangle \simeq |\Psi|^2 \langle e^{i[\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}')] } \rangle \quad (2.67)$$

と表される。これは位相の揺らぎに関する自由エネルギー

$$F = c |\Psi| \int d^2 r |\nabla \phi|^2 \quad (2.68)$$

を用いて 3 次元での 1 粒子密度行列の計算と同様に Gauss 積分を行うことで、

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= |\Psi|^2 \exp \left[- \sum_{\mathbf{k}} \frac{k_B T}{2c |\Psi|^2 k^2} \{1 - \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))\} \right] \\ &= |\Psi|^2 \exp \left[- \frac{k_B T}{8\pi^2 c |\Psi|^2} \int dk \frac{1}{k} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \{1 - \cos(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta)\} \right] \end{aligned} \quad (2.69)$$

となる。 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ が十分大きいところでは、 k に関する積分の下限を $\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ 程度にカットオフすることができて、加えて角度に関する積分を $\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \{1 - \cos(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta)\} \simeq 2\pi$ と近似することができるため、最終的に 1 粒子密度行列は

$$\begin{aligned} \rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= |\Psi|^2 \exp \left[- \frac{k_B T}{4\pi c |\Psi|^2} \int_{1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}^{q_{\max}} dk \frac{1}{k} \right] \\ &\propto \exp \left[- \frac{k_B T}{4\pi c |\Psi|^2} \log(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| q_{\max}) \right] \\ &\propto r^{-\eta} \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\eta \equiv \frac{k_B T}{4\pi c |\Psi|^2} \quad (2.71)$$

となる。この形から非対角長距離秩序は存在しないことがわかるが、 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ に関する依存性は指数関数的ではなく冪的と比較的穏やかな減衰になっている。そのため、Bose-Einstein 凝縮のような長距離秩序は存在しないが、一般的な常流動状態とも異なる中間的な秩序が存在していることになる。これは物理的には今までの議論から、局所的な位相の相関が存在すると考えることができる。1 次元についても同様の計算を行うことで 1 粒子密度行列が距離の指数関数で減衰することがわかっており [28]、2 次元の場合のような中間的な秩序は存在しないことがわかっている。

以上のように 2 次元では非対角長距離秩序が存在しないことがわかるが、その代わりに超流動性を議論できる量としてヘリシティモジュラスがある。ヘリシティモジュラスは系の位相に空間的なねじれを加えた時の自由エネルギーの変化量で定義される。つまり、バネの強度と似た、位相のひねりに対する剛性を表す量となっている。ここでは、ヘリシ

ティモジュラスが超流動密度と比例関係にあり、超流動性を確かに捉えている量であることを文献 [41] に基づき示す。

いま、両端に壁のある長さ L 、断面積 A の円筒形の系を考える。温度 T において片方の壁と反対の壁においての系の位相が θ ねじれた状態の自由エネルギーを $F(T, \theta)$ とすれば、位相のねじれがない場合との差は

$$\Delta F(T, \theta) = F(T, \theta) - F(T, 0) \quad (2.72)$$

とおける。また、系の位相変化率の平均は

$$\overline{\nabla\phi} = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \nabla\phi(\mathbf{r}) = \frac{\theta}{L} \quad (2.73)$$

である。当然 $\Delta F(T, \theta)$ は $\overline{\nabla\phi}$ の関数になっていて、 $\overline{\nabla\phi} = 0$ のとき 0 になる。その関数の形は、自由エネルギーの現象論的な表式 (2.53) の範囲では $\Delta F \propto \overline{\nabla\phi}^2$ と考えられる。また、位相の変化率は自由エネルギー密度を誘起させることから、系全体の自由エネルギー変化は系の体積 V に比例すると考えられる。そのため、 $\Delta F(T, \theta)$ は熱力学関数 $\Upsilon(T)$ を係数として

$$\Delta F(T, \theta) \simeq \frac{1}{2} \Upsilon(T) V \overline{\nabla\phi}^2 = \frac{\Upsilon(T) A \theta^2}{2L} \quad (2.74)$$

と表される。系の形が決まっていれば、位相をひねったときの自由エネルギーの変化は $\Upsilon(T)$ の大きさによって決まり、これはヘリシティモジュラスと呼ばれ、位相のひねりに対する剛性を表している。自由エネルギーとして式 (2.53) を採用したため、この式は位相のひねりが小さいほど正確になる。これは式 (2.73) から、熱力学極限で正確になることを示している。よって、ヘリシティモジュラスは

$$\Upsilon(T) = \lim_{A, L \rightarrow \infty} \left[\frac{2L}{A\theta^2} \Delta F(T, \theta) \right] \quad (2.75)$$

と定義される。これを超流動密度と関係づけるには、超流動相では位相のひねりが超流動の速度に対応していることを利用する。Bose 粒子の質量を m とすると、超流動速度 v_s は位相の変化率を用いて

$$v_s = \frac{\hbar}{m} \nabla\phi \quad (2.76)$$

であるので、Bose 系で位相をひねったときの自由エネルギーの変化を超流動の運動エネルギーの増分と考えれば

$$\Delta F(T, \theta) = \frac{1}{2} V \rho_s(T) v_s^2(\theta) \quad (2.77)$$

となる。 $\rho_s(T)$ は超流動密度を表す。この式を式 (2.74) と比較することにより、超流動密度とヘリシティモジュラスの関係が

$$\rho_s(T) = \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \Upsilon(T) \quad (2.78)$$

と導かれる。ヘリシティモジュラスは超流動密度と比例関係になっているため、ヘリシティモジュラスは超流動性を議論するのに適した量であるといえる。ヘリシティモジュラスは熱平衡状態にある系の自由エネルギーを用いて計算されるため、次に示す渦による超流動流の崩壊など、動的な現象の詳細の議論には向かないものの、BKT 転移の転移温度前後で急激な飛びを示すことが 2 次元 XY 模型 (2 次元ヘリウム 4 は 2 次元 XY 模型にマッピングされる) においてモンテカルロ法を中心に理論計算で示されており [42, 43]、2 次元でも超流動転移を記述できることがわかっている。

では、実際にヘリシティモジュラスに飛びが現れる BKT 転移温度付近では何が起きているのだろうか。この問題は Berezinskii、Kosterlitz、Thouless らによって渦の励起を考えることで説明された [31, 32]。ここでは簡単な量子渦の量子化に関する説明と、量子渦ができることでなぜ超流動流が不安定になるのか、そして渦を考えることによる BKT 転移温度の計算を行う。

渦の量子化についての議論は Onsager によって行われた [44]。一般に、超流動体中の閉曲線に沿った位相変化 $\Delta\phi$ を考えると、 $\Delta\phi$ は 2π の整数倍、つまり n を整数として $\Delta\phi = 2\pi n$ でなければならない。そこで

$$\Gamma = \oint d\mathbf{r} \mathbf{v} \cdot \quad (2.79)$$

で与えられる循環を考えると、 $\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla\phi$ であるから、

$$\Gamma = \frac{2\pi\hbar n}{m} = \frac{h}{m} n \quad (2.80)$$

と循環が量子化されることがわかる。 n は巻き付き数と呼ばれ循環を分類する。超流動体中の流れに関しては、流れがポテンシャル流であることから

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0 \quad (2.81)$$

という制限が課されるが、系が多重連結の場合や位相が特異点を持つ場合、波動関数が 0 になる点が存在する場合には上で述べたような量子化された渦が生じ得る。例えばこれはトーラスの容器に入った超流動流や渦芯を持つ渦糸なら可能である。

次に、このような量子化された量子渦が超流動体内に生じた場合に超流動流が不安定になることを示す。そこには phase slip[45, 10] という現象が深く関わっている。超流動流がパイプの中で一様に流速 \mathbf{v}_s で流れている場合を考える。そのときは図 2.3 のように位相は等間隔で配置される。ここに上側の壁から渦糸が励起され (図 2.2 (a))、パイプを横

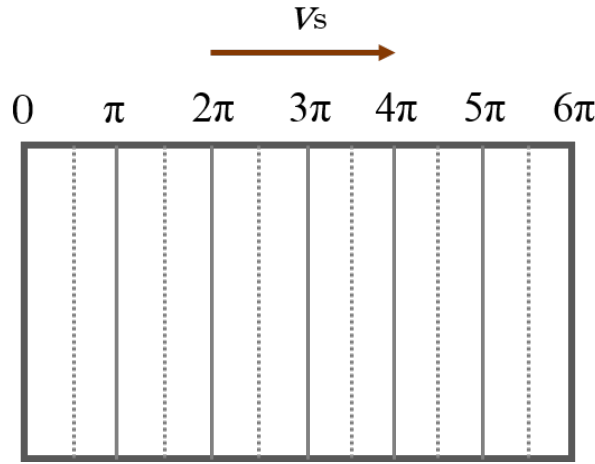
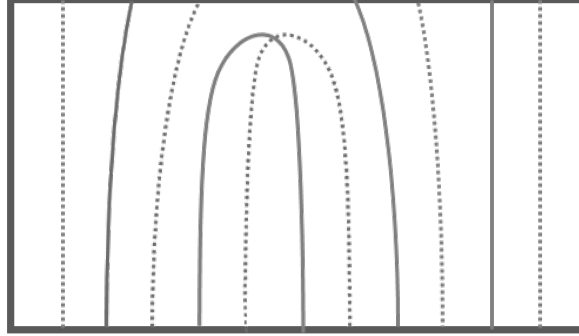


図 2.2 一様な超流動流の位相配置。太線は π の整数倍の位相を表す等高線、点線は半整数倍を表す等高線である。

断するように下側の壁に移動していったとする。そして最終的に渦糸が下の壁に吸収された (図 2.2 (b)) とすれば、図 2.2 (b) の上側のように位相が 2π 分渦糸に奪い取られ位相勾配が緩やかになる。位相の勾配が緩やかになるということは超流動流の流速が減速することに相当する。この現象は phase slip と呼ばれ、Anderson[45] により初めて提唱された。phase slip により超流動流は減速するため、渦糸が超流動体中に発生すれば超流動流が不安定になる。phase slip は渦糸対の生成によっても生じる。先ほどと同様にパイプの中の一様な超流動流を考えたときに、何かしらの摂動が加わることである点の超流動の粒子数密度が小さくなったとする (図 2.4 (a))。減少が大きく粒子数密度が 0 になる (図 2.4 (b)) と、上で述べたように渦糸が生じることが可能になりその点において渦糸対が生成する (図 2.4 (c))。その後渦糸対は分離し (図 2.4 (d))、最終的に phase slip が起こる (図 2.4 (e))。いま長さ L のトーラス型のパイプ中を流れている粒子数 N を含んだ超流動流の流速が $v_{s,n} = \frac{\hbar n}{mL}$ と量子化されていて、phase slip により巻き付き数の 1 つ小さい

(a)



(b)

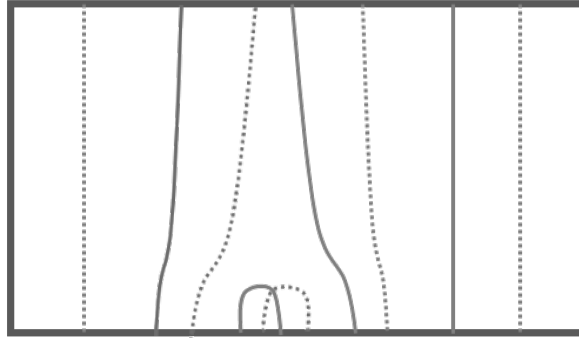


図 2.3 渦糸の発生による phase slip の模式図。上の壁から渦糸が励起 (a) された後、下側の壁に吸収 (b) され、渦糸の発生前に比べて位相の勾配が緩やかになっている。

流れ $v_{s,n-1} = \frac{\hbar(n-1)}{mL}$ に移行したとすれば、そのとき散逸するエネルギー ΔE は

$$\begin{aligned}\Delta E &= \frac{1}{2}mN(v_{s,n}^2 - v_{s,n-1}^2) \\ &= \frac{\hbar^2 N}{2mL}(2n-1)\end{aligned}\tag{2.82}$$

となる。このような離散的なエネルギー散逸は Avenel らによって実験によって確かめられている [4, 46]。それ以外にも、トーラス容器内の液体ヘリウム 4 を用いた実験 [47, 48] やトーラス型トラップ中の冷却原子気体を用いた実験 [49, 50] においても phase slip が観測されている。

では次に、このような渦糸が発生する BKT 転移温度を見積もる。転移温度を見積もるには、渦糸がある状態とない状態のエネルギーの差を比較すればよい。いまある点を中心として巻き付き数が $n = 1$ の渦糸ができていとする。 $n = 1$ のみ考えるのは、エネ

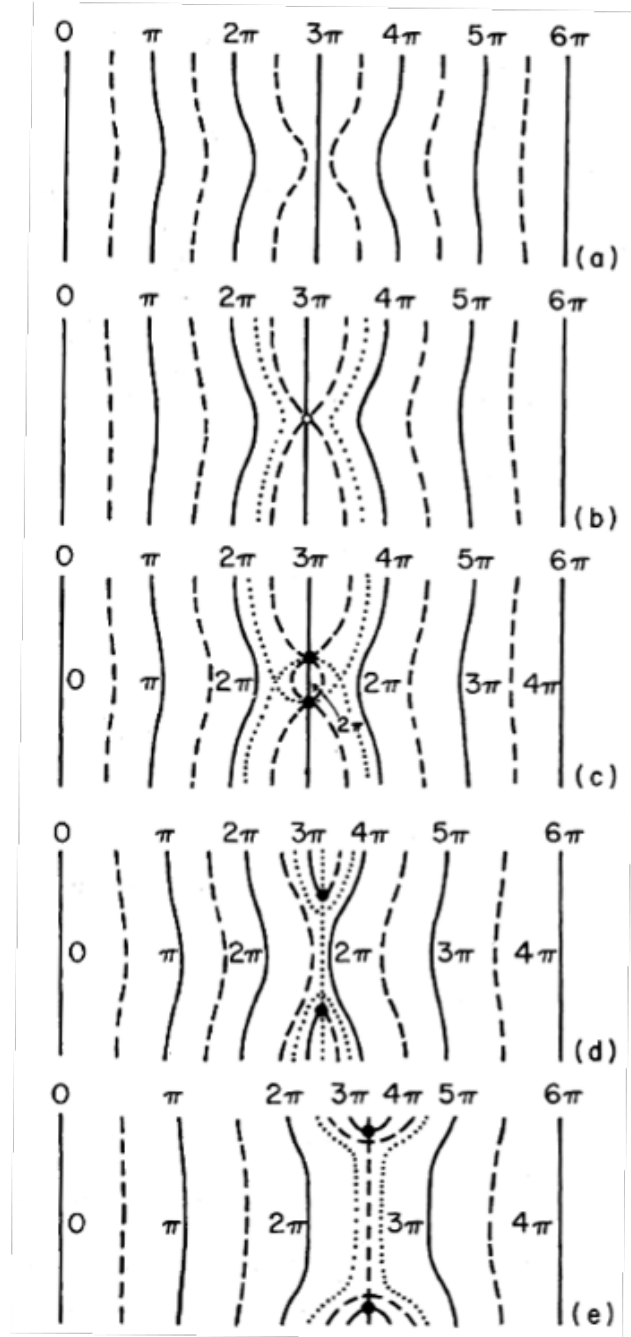


図 2.4 渦糸対の生成による phase slip[10]。ある点で超流動の粒子数密度が減少し密度が 0 になった (a)(b) 後、その点で渦糸対が生成し (c)、それが独立な渦糸に分離 (d)(e) することで phase slip が生じている。

ギーが一番低く励起されやすいので超流動流の不安定性に最も効いてくるからである。渦系の軸を中心とした 2 次元極座標を考え、凝縮体の波動関数を

$$\Psi(r, \phi) = f(r)e^{i\phi(r)} \quad (2.83)$$

とおく。一様な角度方向には系は一様であるとし f の角度方向の依存性をおとした。これを凝縮体のエネルギー

$$E = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right] \quad (2.84)$$

に代入すれば、

$$\begin{aligned} E_v &= \int_0^D dr r \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2mr^2} f^2 + \frac{1}{2} U_0 f^4 \right] \\ &= 2\pi \int_0^D dr r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2mr^2} f^2 + \frac{1}{2} U_0 f^4 \right] \end{aligned} \quad (2.85)$$

となる。ここで、 D は十分大きいカットオフの距離である。また、循環 Γ が

$$\Gamma = 2\pi r v_s = \frac{2\pi\hbar}{m} \quad (2.86)$$

と表されることから超流動の角度方向の速度と位相の微分が

$$v_s = \frac{\hbar}{mr} \quad (2.87)$$

$$\nabla \rho = \frac{1}{r} \quad (2.88)$$

となることを用いた。

次に渦がない場合の一様系のエネルギーを求める。半径 D 内の粒子数を N_D とすれば、系のエネルギーは

$$E_u = \frac{1}{2} \left(\frac{N_D}{\pi D^2} \right)^2 U_0 \times \pi D^2 = \frac{1}{2} \frac{N_D^2}{\pi D^2} U_0 \quad (2.89)$$

である。また、半径 D 内の粒子数は

$$N_D = 2\pi \int_0^D dr r f^2 \quad (2.90)$$

であるから、系のエネルギーは

$$E_u = \frac{2\pi U_0}{\pi D^2} \left(\int_0^D dr r f^2 \right)^2 \quad (2.91)$$

となる。渦に関するエネルギーは結局、

$$\begin{aligned}\epsilon_v &= E_v - E_u \\ &= 2\pi \int_0^D dr r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2mr^2} f^2 + \frac{1}{2} U_0 f^4 \right] - \frac{2\pi U_0}{\pi D^2} \left(\int_0^D dr r f^2 \right)^2\end{aligned}\quad (2.92)$$

となる。

BKT 転移温度をおおまかに見積もるために式 (2.92) 中の主要項である第2項を用いて渦のエネルギーを近似的に求めると、

$$\epsilon_v = \frac{\pi \hbar^2 n}{m} \log \frac{D}{\xi} \quad (2.93)$$

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mnU_0}} \quad (2.94)$$

となる^{*2}。 n は渦から十分遠い領域での粒子数密度であり、 ξ は渦の粒子数密度勾配がなくなる渦の中心からの距離である。ここから渦による自由エネルギーの変化 $\Delta F = \epsilon_v - TS$ を求めるが、エントロピー S は渦の配置に関するおよその状態数 $\frac{\pi D^2}{\pi \xi^2} = \left(\frac{D}{\xi} \right)^2$ を用いれば

$$\Delta F = 2k_B \log \frac{D}{\xi} \quad (2.95)$$

となる。よって自由エネルギー変化は

$$S = \left(\frac{\pi \hbar^2 n}{m} - 2k_B T \right) \log \frac{D}{\xi} \quad (2.96)$$

である。 $\Delta F < 0$ であれば渦が励起したほうがエネルギーが低くなるから、BKT 転移温度は

$$T_{BKT} = \frac{\pi \hbar^2 n}{2mk_B} \quad (2.97)$$

と見積もられる。1 粒子密度行列は $T > T_{BKT}$ では冪的な距離依存性を示し、 $T < T_{BKT}$ では指数関数的な距離依存性を示す。BKT 転移やそれに伴う渦糸に関する実験は冷却原子気体においても近年活発に進められており [51, 52, 53, 54]、精密な転移温度の決定や渦のダイナミクスの観測が進められている。

以上が 2 次元系に関する超流動性の議論であるが、最後に少し 1 次元系の超流動性についても触れておく。1 次元系ではヘリシティモジュラスが 0 になるにも関わらず、超流動

^{*2} 正確な積分の値は数値計算から $\epsilon_v = \frac{\pi \hbar n}{m} \log \frac{1.464D}{\xi}$ となる [28]。

性を示すことが例えば谷口らの実験 [55] から示されている。この食い違いはヘリシティモジュラスが熱平衡状態での自由エネルギーを用いて計算されていることによると考えられる*³。現実の実験では完全ではないにせよ 1 次元では非常に多くの保存量が存在するために熱平衡になるのに多大な時間がかかるため、非平衡の効果を入れて議論しなければならない。この問題に対する考察は Eggle らによって行われたが [56]、非平衡に関する複雑な問題でこれからも更なる議論が必要であると考えられる。

ここまで次元性に関する議論を含めた超流動性を考察してきた。ここでの内容は本研究を理解するために必須な項目ばかりではないが、本研究の物理的背景や計算の正当性を考える上では極めて重要な問題である。

2.1.3 光格子中の超流動

光格子とは対向させたレーザーの干渉によって作られた周期ポテンシャルである [21, 22]。光格子中に冷却原子気体を閉じ込めた光格子冷却原子系は、Feshbach 共鳴 [14] を用いた粒子間相互作用強度の操作法 [71, 24] や光格子マイクロスコープ [25, 26] のような実空間・実時間観測法が発展しているため、極めて高精度かつ多彩な量子現象のシミュレーションを行うことができる。この項では、光格子系で観測された最も重要な現象である超流動-Mott 絶縁体転移を中心に、光格子中の超流動の性質を考える。超流動-Mott 絶縁体転移は本研究において流れがない静的な場合の基礎となる現象となっているため、超流動流の不安定性を理解する上でも非常に重要な現象である。

光格子の原理

既に述べたように光格子は対向させたレーザーの干渉によって作られた定在波であるが、レーザーによる定在波が原子に与える力は以下のようにレーザーに含まれる電場と原子の分極によって説明できる。図 2.6 のように 1 次元系でレーザー光の定在波が作る電場を考える。定在波の周波数を ω とすれば

$$\mathbf{E}(x) = E(x) \sin(\omega t) \hat{y} \quad (2.98)$$

となる。また、電場によって誘起される原子の分極は、分極率を α とすれば

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}(x) \quad (2.99)$$

*³ このようにヘリシティモジュラスに非平衡効果が入らないという問題は昔から懸念されていた [41]。

であり、原子が電場から受ける力は、分極が電場方向と完全に一致するとすると

$$\mathbf{F} = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(x) = -|\mathbf{p}||\mathbf{E}| = -\alpha|E|^2 = -\alpha E^2(x) \sin^2(\omega t) \quad (2.100)$$

である。いま、 $\omega \gg 1$ とすると、原子が受ける力の時間平均は

$$\bar{\mathbf{F}} = -\frac{\alpha E^2(x)}{2} = -\frac{\alpha E_0^2}{2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{\lambda_L}\right) \quad (2.101)$$

ただし、 $E(x) = E_0 \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda_L}\right)$ 、 λ_L はレーザーの波長である。これより、レーザー光による定在波は、レーザー光の半分の波長の周期ポテンシャルを作ることになる。

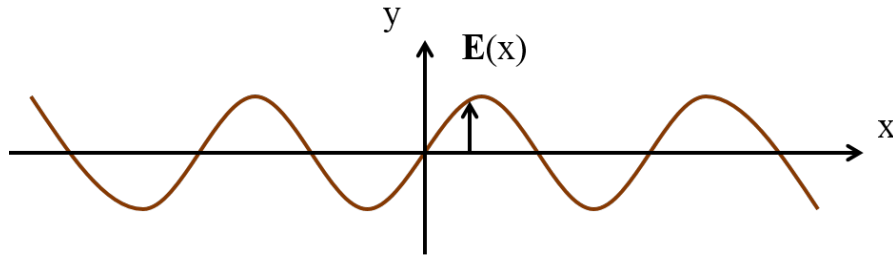


図 2.5 レーザー光による電場

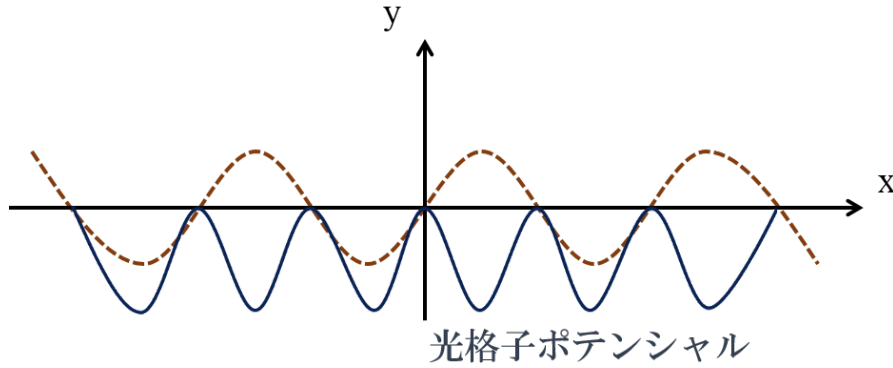


図 2.6 定在波と光格子ポテンシャル

光格子中の粒子の基本的な性質

光格子中の原子は結晶中の電子と類似性を持つ。最も大きな共通点はどちらも周期ポテンシャル中に粒子が存在するため Bloch 波を形成していることである。逆に電子系には

ない冷却原子光格子系だけの特徴は、Bose 系の生成が可能であること、電氣的に中性な原子を用いた実験が可能であること、粒子間相互作用が操作できることなどが上げられる。そのため冷却原子光格子系では、電子系が持つ性質をさらに掘り下げる研究や電子系にはない性質の発見と応用が数多くなされている。そこでここでは、ごく一部であるが冷却原子光格子系の基本的な実験を紹介しながら静的な性質や動的な性質を説明する。

光格子系ではブロッホ波が生じるため、バンドが形成される。光格子中では光格子ポテンシャルの深さを変えることでタイトバインディングモデルのフラットなバンドから自由粒子のパラボリックなバンドまでを滑らかにつないだ観測が可能である [57]。図 (2.7) のように、光格子ポテンシャルが反跳エネルギー^{*4}の 20 倍程度のときはほぼタイトバインディングモデルになっており、そこから光格子の深さを小さくしていくと自由粒子のバンドにマッピングされる。このバンドをエネルギーの低いところから粒子が占有していったとすればブリルアンゾーンが観測されるはずであるが、実際に実験で Bose 系 [58] の場合と Fermi 系 [59] の場合それぞれで 2 次元正方形の第 1 ブリルアンゾーンの形状がはっきり観測されている。

このようなバンド構造から、周期ポテンシャル中の粒子の重要な特徴である Bloch 振動や Landau-Zener トンネリングなどの動的な現象も考えることができる。どちらの実験も光格子を作る対向レーザーの波長に差をつけることでうなりを作り、光格子に速度を持たせることで粒子にも速度を持たせて観測を行うのが一般的である。光格子の速度が Bose 系の波数に対応し、粒子の速度から光格子の速度を差し引いたものが波束の速度となる。Bloch 振動はバンドの伝導帯が波数に対する周期構造をとることに起因して生じる現象である。波束の速度、つまり実際の粒子の速度はバンドエネルギーを運動量で微分した群速度として計算されるので、粒子を加速させて粒子の波数を変えていけばバンドの周期性を反映して粒子の速度にも周期性が現れる。実際に Morsch らの実験ではこのような状況設定において Bloch 振動が観測されており [17]、この実験ではたしかに Bloch 周期 $\tau_B = \frac{h}{Mad}$ (h はプランク定数、 M はルビジウム原子の質量、 a は光格子の加速度、 d は光格子の格子定数) を周期として振動する Bloch 振動が観測されており、最低エネルギーバンドを想定して理論的に算出された Bloch 振動の結果とも一致することが示されている (図 2.9)。一方 Landau-Zener トンネリングは、粒子に加速度を与えたときに系が非平衡になることによって粒子がエネルギーの高いバンドに遷移する現象である。実験としては光格子を数回振り最低エネルギーバンドから上のバンドへの遷移を見ることで Landau-Zener トンネリングの観測が行われた [18]。この実験では、Landau-Zener トンネ

^{*4} 光格子中の原子が単一光子の運動量を持ったときの運動エネルギー。

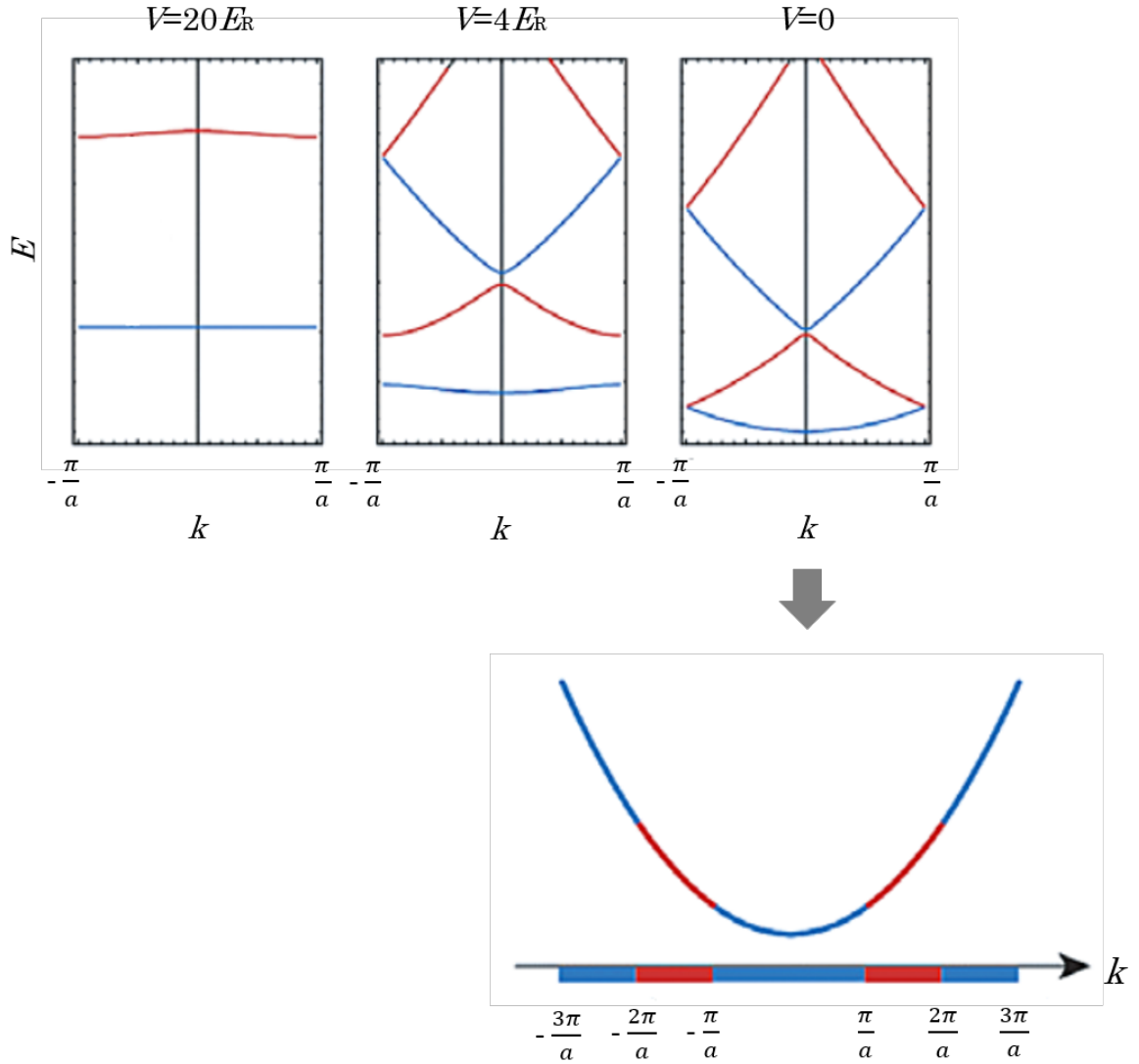


図 2.7 光格子の深さに対応したバンド (図は文献 [21] のものを少し改変したもの)。 k は波数、 E はエネルギー、 V は反跳エネルギー E_R を単位としてで測った光格子ポテンシャルの深さ。下の段は自由粒子のバンド。

リングによって最低エネルギーから 1 つ上のバンドに遷移した波数 $k = 0$ の粒子が光格子ポテンシャルを切るとバンドの周期性が解け最低エネルギーバンドの $k = \pm 2k_B$ (k_B は第 1 ブリルアンゾーン端の波数) に遷移することを利用して、バンドの光格子を振ってから光格子ポテンシャルを切った後に粒子の運動量分布の振動を見ることで Landau-Zener トンネリングを確かめている (図 2.10)。本研究においても超流動が光格子と相対速度を持つ状況を考えるため、今まで述べたような Bloch 振動や Landau-Zener トンネリング

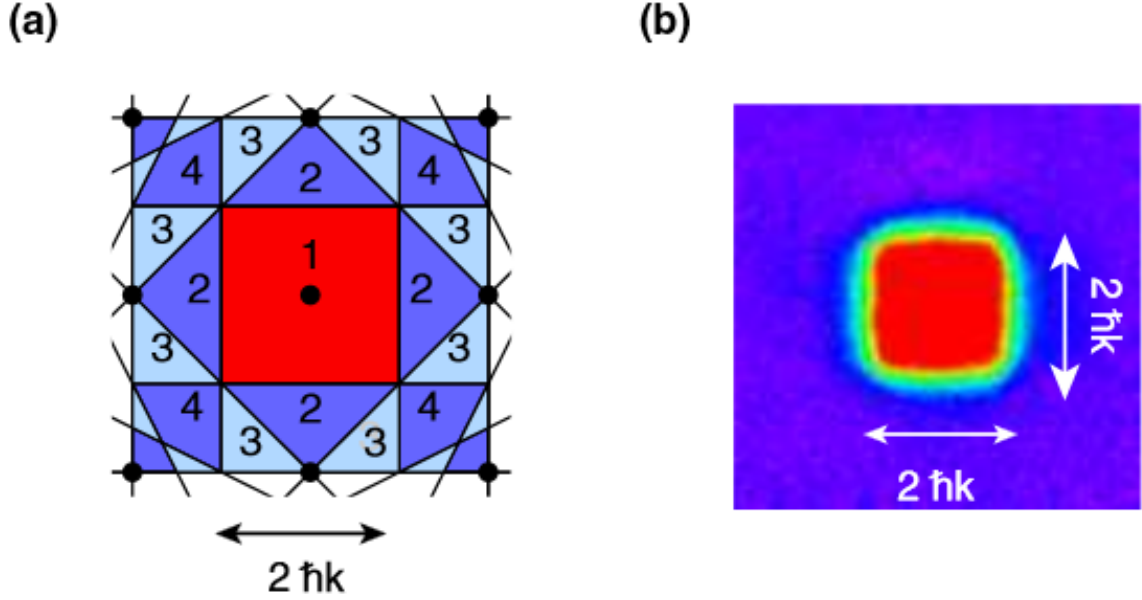


図 2.8 光格子系におけるブリルアンゾーンの観測 [58]。(a): 2 次元系のブリルアンゾーンの模式図。軸は結晶運動量である。(b): 第 1 ブリルアンゾーンまでを粒子が占有した場合の結晶運動量空間での粒子分布。光格子ポテンシャルの深さは $V = 12E_R$ となっている。

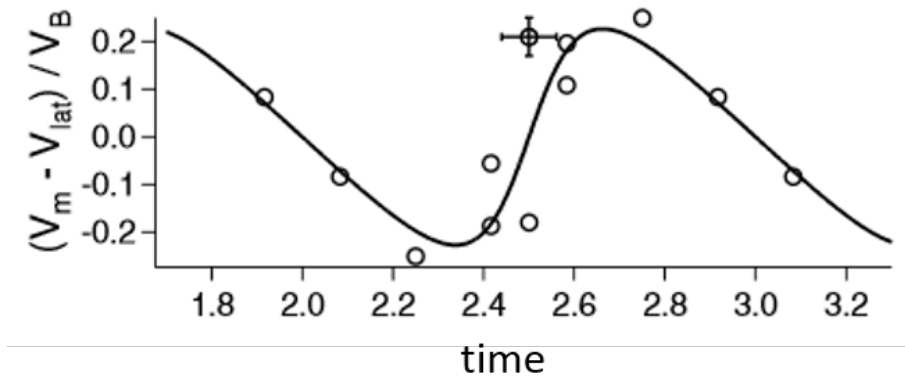


図 2.9 光格子系における Bloch 振動の観測 [17]。 v_m は粒子の速度であり、そこから格子の速度 v_{lat} を差し引くことで粒子の波束の速度を観測している。点は実験、実線は最低エネルギーバンド中の Bloch 振動を想定したときの理論値。Bloch 周期は 1.2ms。

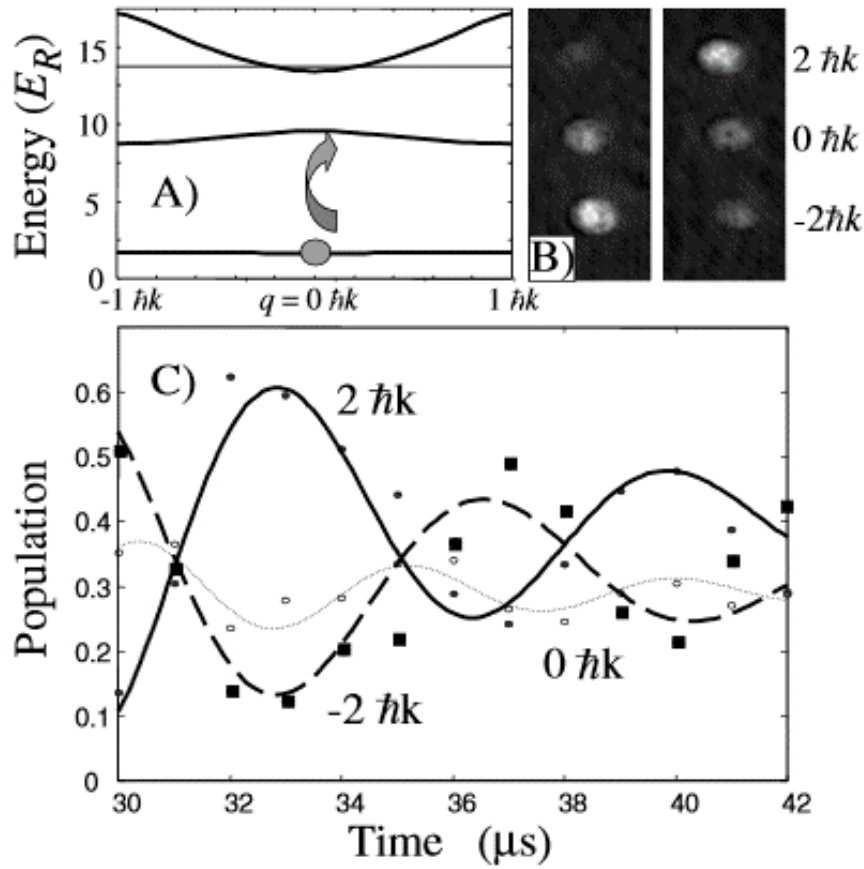


図 2.10 Landau-Zener トンネリングの観測 [18]。A) 最低エネルギーバンドから 1 つ上のバンドへの Landau-Zener トンネリングに関する模式図。B) 粒子の運動量分布。C) 光格子ポテンシャルを切った後のそれぞれの運動量の占有率の振動。

の効果は念頭に置いておく必要がある。

光格子と Bose-Hubbard モデル

光格子中の粒子は Bloch 波を形成していると述べたが、光格子ポテンシャル強度や粒子間相互作用強度が十分強くなってくると Mott 絶縁体に近くなりバンド理論が有効でなくなってくるため、Bloch 波による記述はあまり有効ではなくなる。代わりに波動関数を Wannier 関数で近似した Bose-Hubbard モデルを用いることで、幅広いパラメータ領域において超流動-Mott 絶縁体転移などを始めとして光格子系の様々な現象を良く記述できることがわかっている [61, 62]。Bose-Hubbard モデルは非常に簡易化されたモデルであるものの、そこには豊富な物理が含まれる。

元々扱うべきハミルトニアンは式 (2.19) であるが、そこに系のダイナミクスに関係するエネルギーは最低エネルギーバンドから他バンドへの遷移エネルギーよりも十分に小さいという仮定と、光格子中の原子はそれぞれのサイト（周期ポテンシャルの底を 1 つのサイトとする）に局在した波動関数、つまり

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i a(i)w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.102)$$

のように Wannier 関数で展開した形で書けることを用いれば

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle}^{n.n.} \left(a_i^\dagger a_j + H.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) \quad (2.103)$$

となる。このハミルトニアンは Bose-Hubbard モデルと呼ばれる。ここで $\langle i, j \rangle$ は隣接サイトのすべての組についての和をとることを表し、

$$U_0 = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \int d^3\mathbf{r} |w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)|^4 \quad (2.104)$$

$$t = \int d^3\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.105)$$

である。また、ハミルトニアンを導出する際、ボソンの交換関係

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, [a_i, a_j] = 0, [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (2.106)$$

を用いた。Bose-Hubbard モデルの第 1 項は隣接サイトの粒子の飛び移りを表し、第 2 項がサイト内の粒子間相互作用である。図 2.11 に Bose-Hubbard モデルのイメージを示す。隣接サイト間のホッピング確率を表す t は実験的には光格子ポテンシャルの深さを変化させることで操作できる。つまり Bose-Hubbard モデルにおいて系を特徴づけるパラメータ比 U_0/t は、光格子の深さと粒子間相互作用強度により決定され実験と対応付けられる。本研究では $U_0 > 0$ の斥力相互作用の場合のみを取り扱う。

超流動-Mott 絶縁体転移

本研究では光格子ポテンシャルの深さを様々変えた場合の超流動流を解析しているが、その性質を調べるためにはまず超流動体に流れがない場合に光格子ポテンシャルの深さを変えていったときの系の性質を知る必要がある。このとき光格子系で起こる最も重要な現象が超流動-Mott 絶縁体転移である。超流動-Mott 絶縁体転移は結晶中の電子でも見られ

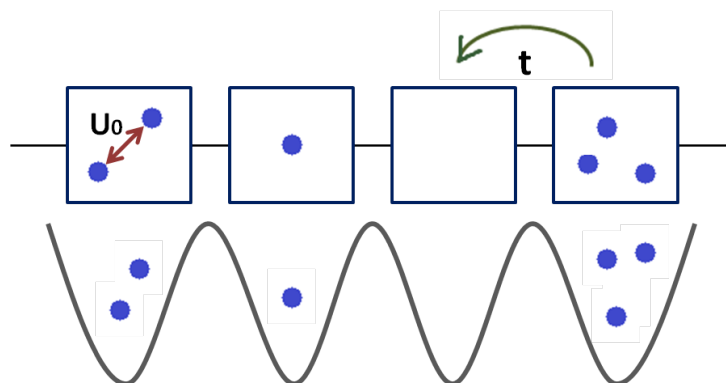


図 2.11 Bose-Hubbard モデルのイメージ図。上段がサイト内の粒子間相互作用とサイト間のホッピングを表した図になっており、下段がそれに対応した光格子冷却原子系の図である。

る現象であり、特に Mott 絶縁体の示す反強磁性やそこからの揺らぎなどは銅酸化物高温超伝導を理解する上で非常に重要な現象となっている [63]。光格子冷却原子系では Bose 気体を用いた超流動-Mott 絶縁体転移が観測され [22]、図 2.12 光格子ポテンシャルの深さを変えていったときの運動量分布の変化ががクリアに確認された。図 2.12 では、光格子ポテンシャルの存在しない a では $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ に Bose-Einstein 凝縮を示すピークが存在し、光格子ポテンシャルを深くしていくと $b \sim f$ のようにポテンシャルの周期性を表すサイドピークが立ちながら凝縮ピークはぼやけていく。さらにポテンシャルを深くすると g, h のように凝縮ピークはなくなり Mott 絶縁体に転移したことが確認できる。さらに近年では光会合分光を利用した光格子マイクロスコープという技術を用いて実空間、実時間における粒子数分布を測定することが可能になっており、それにより超流動-Mott 絶縁体転移の観測も進んでいる [25, 26]。図 2.13 に光格子マイクロスコープを用いた超流動-Mott 絶縁体転移の観測の様子を示す。光格子ポテンシャルの深さが浅いときは粒子数は空間的に揺らいでいるが、ポテンシャルが充分深くなると粒子数は各サイト均一に収まり、運動量空間では分布がぼやけている。このように、実空間において超流動状態は各サイトの粒子数が揺らいだ状態であり、Mott 絶縁体では各サイトの粒子数が確定した状態であることがわかる (図 2.14)。光格子マイクロスコープは今後スピンの弁別性も向上させられる可能性があり、本研究を始めとする光格子スピン系の観測に対しても強力な手段になる可能性を秘めている。

以上の実験における超流動-Mott 絶縁体転移は先ほど紹介した Bose-Hubbard モデルを用いて理論的に予測されていた [62, 64]。Bose-Hubbard モデルによる解析では U_0/t

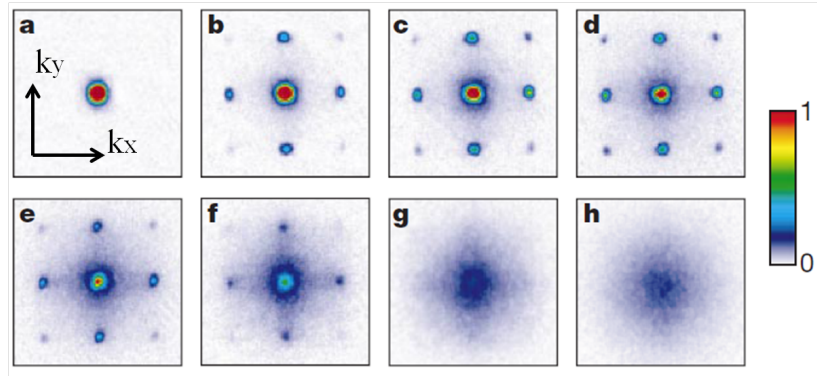


図 2.12 それぞれの光格子ポテンシャルの深さに対する原子の運動量分布 [22]。a は格子ポテンシャルがないときの $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ 凝縮ピークが見えており、b~f では系の周期性を示すサイドピークが見えている。g,h では凝縮ピークはなくなり Mott 絶縁体になっている。ポテンシャルの深さは反跳エネルギー E_r を単位としてそれぞれ、a: $0E_r$, b: $3E_r$, c: $7E_r$, d: $10E_r$, e: $13E_r$, f: $14E_r$, g: $16E_r$, h: $20E_r$ である。

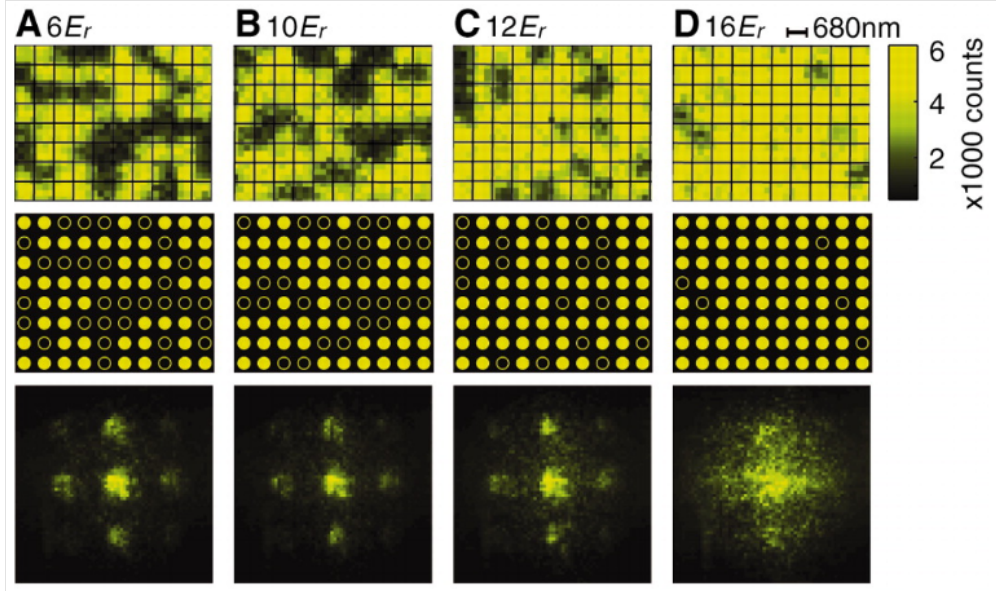


図 2.13 超流動-モット絶縁体転移の光格子マイクロ스코プを用いた観測 [25]。上段：光格子中の粒子数の実空間分布、中段：実空間分布をドット化したもの、下段：運動量空間での粒子数分布。実空間分布では、黄色い部分が奇数個の粒子が存在しているサイト、黒い部分が偶数個の粒子が存在しているサイトとなっている。

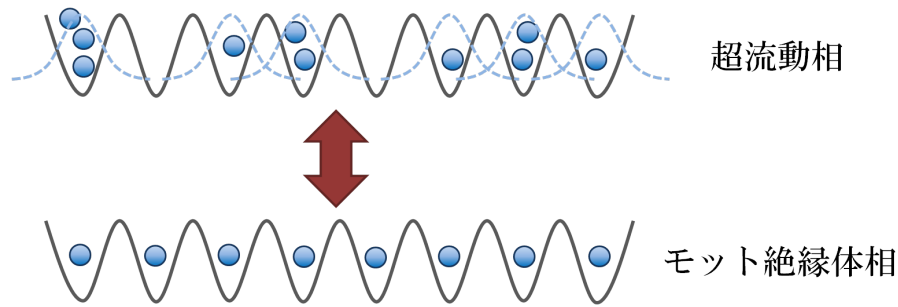


図 2.14 超流動体、モット絶縁体それぞれの実空間での粒子分布イメージ。

や化学ポテンシャル μ を変えたときの超流動-Mott 絶縁体転移に関する相図も導出することができ、本研究でも用いる Gutzwiller 近似に基づいた相図 2.15 でも系の 1 サイトあたりの平均粒子数に応じた Mott ロープ^{*5}が現れていることが確認できる。

2.2 超流動流の不安定性

2.1.2 項で述べたように超流動は動的な現象であるため、超流動性は Bose-Einstein 凝縮のみでなく有限の速度を持つ超流動流の安定性から議論すべきである。特に粒子間に相互作用がある場合には、超流動体のスペクトル解析でも示したように超流動流は有限の臨界速度を持つ。臨界速度以上の速度では超流動流は何かしらの励起を生じ減速または空間的な一様性が乱れ Bose-Einstein 凝縮を保てない状況になる。このような超流動流の不安定性は励起の発生機構によって分類されており、代表的な不安定性としては、元々超流動ヘリウムで議論が始まった Landau 不安定性や Feynman 不安定性、光格子中の超流動流では本研究で取り扱う動的不安定性などが挙げられる。よってシチュエーションによりこれらの不安定性の中で一番臨界速度の小さなものが基本的にそのシチュエーションでの超流動性を決めることになる。これらの不安定性はさらに大きく分類すれば、Landau 不安定性や Feynman 不安定性などの有限のエネルギー散逸を伴う不安定性と動的不安定性のようなエネルギー散逸を伴わない不安定性に分けることもできる。そこで本項ではこの分類に従って不安定性の機構を示す。

^{*5} ロープ (lobe) は耳たぶなど丸い突出した部分を意味する。

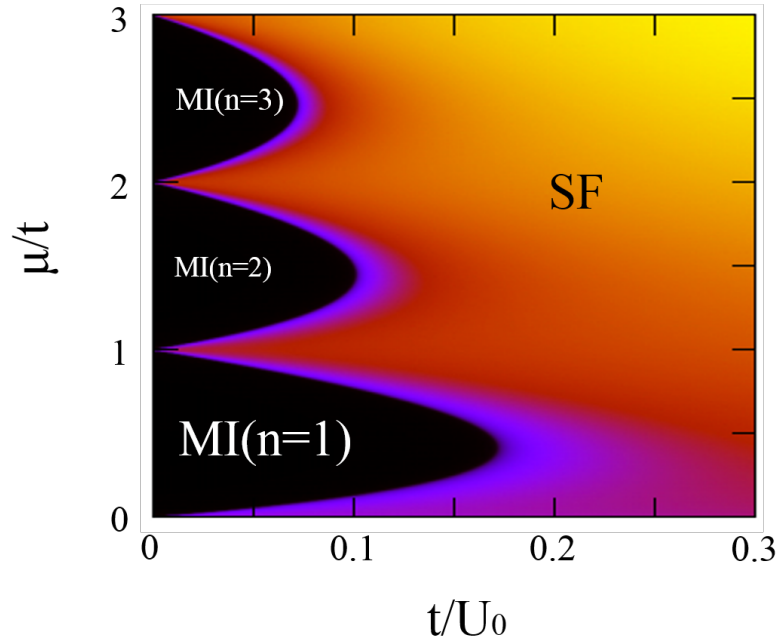


図 2.15 Gutzwiller 近似を用いた Bose-Hubbard モデルの超流動-Mott 絶縁体転移に関する相図。 n は 1 サイトあたりの平均粒子数を表しており、Mott ロープ内では粒子数は一定である。横軸は粒子間相互作用強度とホッピング振幅の比、縦軸は化学ポテンシャルとホッピング振幅の比、色の濃淡は超流動のオーダーパラメータ $\langle \Psi \rangle$ を表す。色が明るいほど超流動性が強い。

2.2.1 エネルギー散逸を伴う不安定性

エネルギー散逸を伴う不安定性とは、超流動体が例えば壁や障害物、もしくは熱励起した非凝縮粒子とエネルギーのやりとりをすることで励起を生じ、それらの外部環境にエネルギーを放出することで超流動流が不安定になるような不安定性である。このような場合には超流動流の励起エネルギーは負になることが知られている。つまりこの不安定性は、臨界速度以上で超流動体に負のエネルギーを持つ励起が生じ、超流動流が準安定状態からさらに安定な状態へ遷移するという機構を持つ。以下ではそのような機構で説明できる Landau 不安定性と Feynman 不安定性を考察する。

Landau 不安定性

Landau 不安定性はその名の通り Landau が提唱した不安定性の機構であり、基本的な

説明は 2.1.2 項で述べた通りである。しかし、2.1.2 項で述べた説明は古典的なイメージによったものであり、ここでは超流動体の励起スペクトルと不安定性の関係をさらにクリアに述べる。

いま、図 2.1 の状況を再考する。励起が生じる前の安定な状況では超流動体は静止しているため励起エネルギーが定義できる。例えばボース・アインシュタイン凝縮した冷却原子気体を考えると、基本的には希薄で実効的な相互作用も小さいボース気体なので Bogoliubov 近似を用いた微視的理論により励起スペクトルを議論することが可能であり、その励起スペクトルは式 (2.34) で表され図 (2.16) の形になる。このようなスペクトルを持つ励起のうち $\epsilon(p)$ (簡単のため次元を考え運動量をベクトル表記でなくしている) の励起エネルギーを持つ励起が超流動体に生じたとする。すると超流動体の静止している基底状態のエネルギーを E_0 とすれば当然励起が生じた後のエネルギーは $E_0 + \epsilon(p)$ となる。ここで、管壁の運動量変化などを考えなくて済むように、ここからは壁の重心座標系で考える。つまり、壁が静止していて超流動体が流れている状況を考える。これにより系全体の運動量変化やエネルギー変化は全て超流動体に押し付けられたことになる。そのため、系の運動量やエネルギーの保存則は超流動体のエネルギーが変化しないことに置き換えられる。この系での励起エネルギーを求めれば、超流動流の臨界速度を求めることができる。まず座標変換としてガリレイ変換を系に施すことで超流動体のエネルギーがどのように変更されるか考える。管壁と超流動流の相対速度が V であるとする。ガリレイ変換は超流動体の運動エネルギー項と粒子間相互作用項のうち運動エネルギー項にのみ変化を及ぼし、運動エネルギーは

$$\frac{m}{2} \sum_i v_i^2 \rightarrow \frac{m}{2} \sum_i (v_i - V)^2 = \frac{m}{2} \sum_i v_i^2 - PV + \frac{m}{2} NV^2 \quad (2.107)$$

と変化する。ここで、 m は粒子の質量、 v_i は i 番目の粒子の速度、 P は粒子の全運動量、 N は全粒子数である。つまりガリレイ変換により運動エネルギーが $-PV + \frac{m}{2} NV^2$ の分だけ変更を受けた。よって超流動体の基底エネルギーもガリレイ変換により $E_0 - PV + \frac{m}{2} NV^2$ と変更を受ける。いま、超流動体に励起がないときは $P = 0$ 、励起が生じたいときは $P = p$ となるので、超流動流に励起が生じる前と生じた後のエネルギーの変化は

$$E_0 + \frac{m}{2} NV^2 \rightarrow E_0 + \epsilon(p) - pV + \frac{m}{2} NV^2 \quad (2.108)$$

となる。これらの差をとれば、超流動流の励起エネルギー E'_p が求まり、

$$E'_p = \epsilon(p) - pV \quad (2.109)$$

となる。超流動体の励起エネルギーには超流動体の運動エネルギーの変化も含まれるため、静止しているときの励起エネルギー $\epsilon(p)$ と $-pV$ だけずれていることに注意が必要である。この励起エネルギーが負になるとき自発的に励起が発生することができて、その条件は

$$V > \frac{\epsilon(p)}{p} \quad (2.110)$$

となる。以上から超流動流の臨界速度は

$$V_c = \frac{\epsilon(p)}{p} \quad (2.111)$$

であることがわかる。この条件は図 2.17 に示すように、 $E_p = pV$ で表される直線の傾きが静止した超流動体の励起エネルギーの傾きを超えた時が Landau 不安定性発生であることを示している。希薄冷却原子気体では長波長領域での励起はフォノンであるため、超流動流は臨界速度を超えるとフォノンを励起する代わりに速度の小さい状態へ遷移する。一方で超流動液体ヘリウム 4 では、強い短距離相互作用が重要になるため希薄 Bose 気

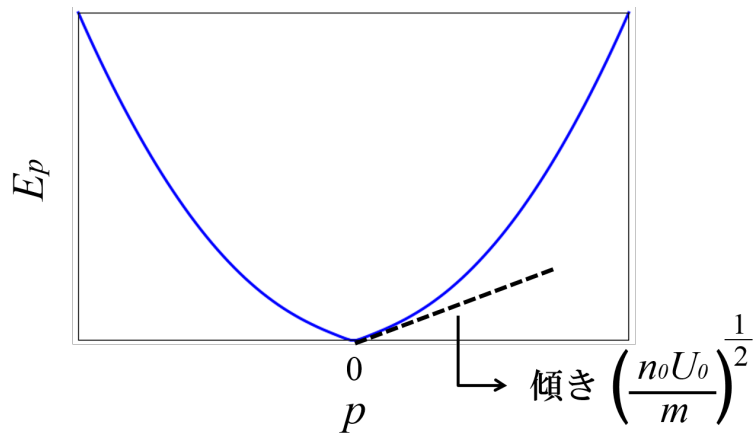


図 2.16 Bogoliubov 近似を用いた微視的理論による Bose 気体の励起スペクトル。

体のスペクトルとは異なり、フォノンに加えて短波長領域にロトンと呼ばれる励起が見られる。ロトンのスペクトルは図 2.18 のようにエネルギーが最小値をとるような下に凸の形になっており、理論的には Feynman[65] が初めて定性的にロトンの分散を示した。図 2.18 からわかるように、超流動ヘリウム 4 のスペクトルでは式 (2.18) を満たすのはロトンとなる。

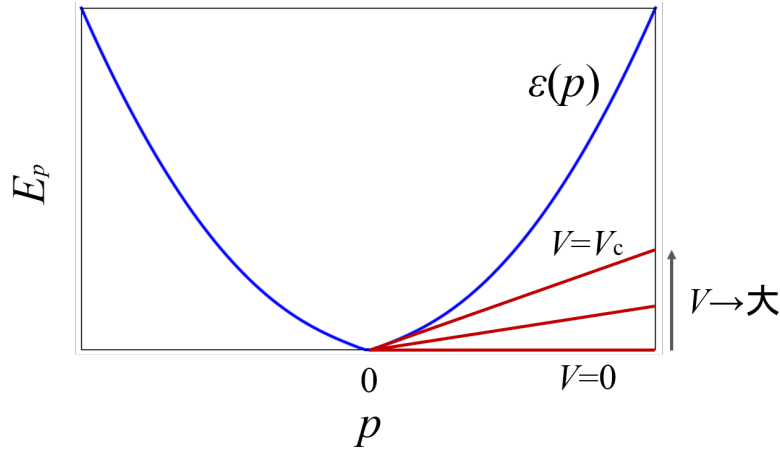


図 2.17 超流動流の励起スペクトルからみた励起発生条件。

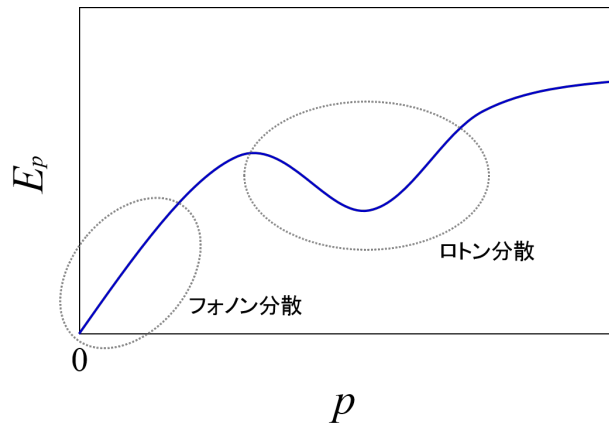


図 2.18 液体ヘリウム 4 の励起スペクトル。

本研究では希薄な冷却 Bose 原子気体を想定するため、基本的に考えなければならないのはフォノン励起による Landau 不安定性だけである。実際に冷却 Bose 原子気体を用いた実験で Landau 不安定性を示唆するフォノンの励起の存在が確認されている [66, 67]。しかし多くの実験では、渦の励起を示しながら超流動流が減速する Feynman の臨界速度が Landau の臨界速度を下回るため、粒子数密度の非常に低い場合 [68] を除いてはほぼ Feynman 不安定性が観測される。次の項で Feynman 不安定性の機構を示す。

Feynman 不安定性

現在までに実験で観測された超流動流の不安定性は、渦の励起と phase slip による流速の減衰に起因するものが多くを占めている。このような不安定性は Feynman 不安定性と呼ばれ Feynman が初めて提唱した [9]。Feynman 不安定性は液体ヘリウム 4 の実験 [7] や MIT のグループを中心とした冷却原子系を用いた実験 [69, 70, 71] において観測され、理論的にも非常に多くの研究が行われている [72, 73, 74, 75]。Feynman 不安定性の機構については 2.1.2 項の BKT 転移のところで基本的な部分は考察したが、ここでは実際の実験に即して Feynman の臨界速度を導出する。

MIT の実験では Bose 気体の中に青色に離調されたレーザーを貫かせることで斥力的な障害物を作り、その障害物を移動させることで超流動流の臨界速度を観測している [69]。このような場合の量子渦の発生の仕方には渦の列や渦のリングなど様々な種類が考えられているが、基本的なものとしては障害物の通った跡にできる渦のペアが考えられる (図 2.19)。このような量子渦のペアは、障害物付近の流速が一様な部分の流速より大きいことで*6局所的にフォノン励起に関する Landau の臨界速度を超えた流速を持つ部分が生じるために起こる [72]。このとき大局的なフォノンが生じることはできないので代わりに流れる向きが反対の量子渦ペアが生成される。

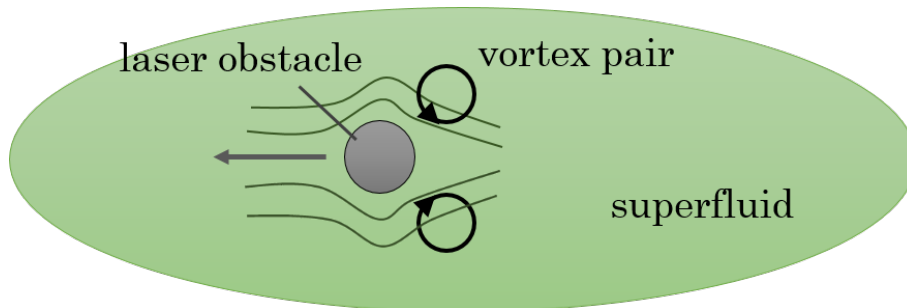


図 2.19 レーザーによる斥力的障害物を移動させたときに超流動体内に生じる量子渦のペア。

Feynman の臨界速度を求めるためには式 (2.93) で表される量子渦のエネルギー 2 つ分に量子渦の相互作用エネルギーを足した量子渦ペアのエネルギーを求めればよい。2 つの渦がどちらも巻き付き数が 1 の渦の場合には渦間の相互作用エネルギーは

$$\epsilon_{int} \simeq -\frac{2\pi\hbar^2 n}{m} \log \frac{D}{d} \quad (2.112)$$

*6 一番大きいところで一様な部分の流速の 2 倍程度。

となる [28]。 d は渦芯間の距離であり、 $d \ll \xi$ とした。 よって量子渦ペアのエネルギーは

$$\epsilon_{pair} \simeq \frac{2\pi\hbar^2 n}{m} \log \frac{d}{\xi} \quad (2.113)$$

である。 このエネルギーが超流動流の D^2 のオーダーの範囲内の運動エネルギー $\sim \frac{1}{2}mv^2nD^2$ と等しいときに量子渦ペアが生じ得る。 以上から Feynman の臨界速度は

$$v_F \sim \frac{4\pi\hbar^2}{m^2 D^2} \log \frac{d}{\xi} \quad (2.114)$$

と見積もられる。 この臨界運動量は一般的に Landau の臨界速度より小さいことが知られている。 先に述べた、障害物の周りの最大の流速が一樣な流速の2倍程度あるという事実から、音速の半分の速度で Feynman 不安定性が起きてもよさそうだが、実験ではそれよりも小さい速度での超流動流の減衰が観測されている。 これは実際には渦のダイナミクスや冷却原子気体のトラップの効果などさらに多くの効果を取り込まないと正しい臨界速度を見積もることはできないことを示しており、現在でも量子渦の発生、特に量子渦のダイナミクスに関する議論は尽きていない。

2.2.2 動的不安定性

動的不安定性という言葉自体は今回考える光格子中の超流動流の不安定性以外にも様々な場面に登場する。 広義には、系が予測できない非定常状態に移行するような不安定性全般である。 例えば、古典流体の層流から乱流への遷移や星のカオスの軌道も動的不安定性と考えられるし、生物の分野では細胞中の微小管と呼ばれる組織における重合が続いている状態から^{*7}から急激な脱重合状態への変化も動的不安定性と呼ばれるようである。 しかし、物理（数学）の分野に限れば、運動方程式の線形安定性解析で判別される解の不安定性がほぼ動的不安定性の定義であるといえる。 つまり、系の中のある摂動モード^{*8}を表す関数が、 A と $\epsilon > 0$ を定数として

$$\delta\Psi = Ae^{\epsilon t} \quad (2.115)$$

のように時間とともに指数関数的に発散するような形をとれば系が動的不安定であるといえる。 これは力学系においては Lyapunov 指数が正の値をとること、量子系においては摂動モードの固有値が複素数になることに対応する。 このような固有値による安定性の解析

^{*7} 分子同士の結合反応。

^{*8} 摂動という言葉を系の微小な乱れ、運動方程式の解からのずれという意味で用いる。

は本研究でも時間発展シミュレーションと併用する。そして本研究では動的不安定性という言葉をもっと狭い意味で用い、これから見ていく光格子中の超流動流のエネルギー散逸の伴わない不安定性として定義する。詳しくは動的不安定性の物理的描像のところで説明するが、動的不安定性は超流動流の粒子間相互作用による非線形性と光格子の周期ポテンシャルが絡み合っ、超流動流内の微小な空間的乱れが指数関数的に発散するような不安定性である。動的不安定性はエネルギー散逸を伴わない不安定性であるため、ほぼ孤立系でエネルギー散逸のある不安定性の可能性を排除できる冷却原子気体で初めてクリアに観測され注目されている。以下では、動的不安定性の観測や数学的、物理的解釈、そして本研究のテーマでもある超流動流の動的不安定性に関する相図を示す。

動的不安定性の観測

動的不安定性の観測は 2000 年付近から現在に至るまで多くのグループによって行われている [76, 77, 78, 79, 80, 81]。動的不安定性の判別の仕方としては、光格子系の放物線状のトラップの位置を突然ずらすことで超流動体に加速度を持たせてトラップ内での超流動体の重心の往復運動の振幅を観測する方法 [76] や、光格子を構成する対向レーザーの波長に差を持たせることでうなりを生じさせ光格子を平行移動させることで超流動体と光格子に相対速度を持たせ超流動流の臨界速度を測定する方法 [77, 78, 80, 81] などがある。その中でも Fallani らの実験 [78] は光格子ポテンシャルが非常に浅い系において動的不安定性による超流動流の崩壊を実空間で見事に観測し、臨界速度も明らかにした (図 2.20)。この観測では Landau 不安定性のようなエネルギー散逸を伴う不安定性も少なからず起きていることが確認されているが、冷却原子系はほぼ孤立系であるためにその不安定性による超流動流の減衰のタイムスケールは動的不安定性のタイムスケールに比べ非常に長いことも確かめられ、実験で観測されている超流動流の崩壊は動的不安定性のみによって引き起こされていると考えてよい。図 2.20 からわかるように、動的不安定性による超流動流の崩壊では超流動体に激しい密度変調が起きていることが確認でき、この密度変調が動的不安定性を引き起こす主要な励起であることがわかる。しかし、この密度変調は動的不安定性に関する多くの情報を含んでいるにも関わらず、Sarlo[79] らの GP 方程式による解析の中で多少触れられている以外は研究が進められていない。そのため密度変調の原理や格子ポテンシャル深さへの依存性など不明な点が多いままとなっている。

線形安定性解析

動的不安定性は Machholm[82] や Wu[83, 84] のグループが粒子間相互作用の弱い (光

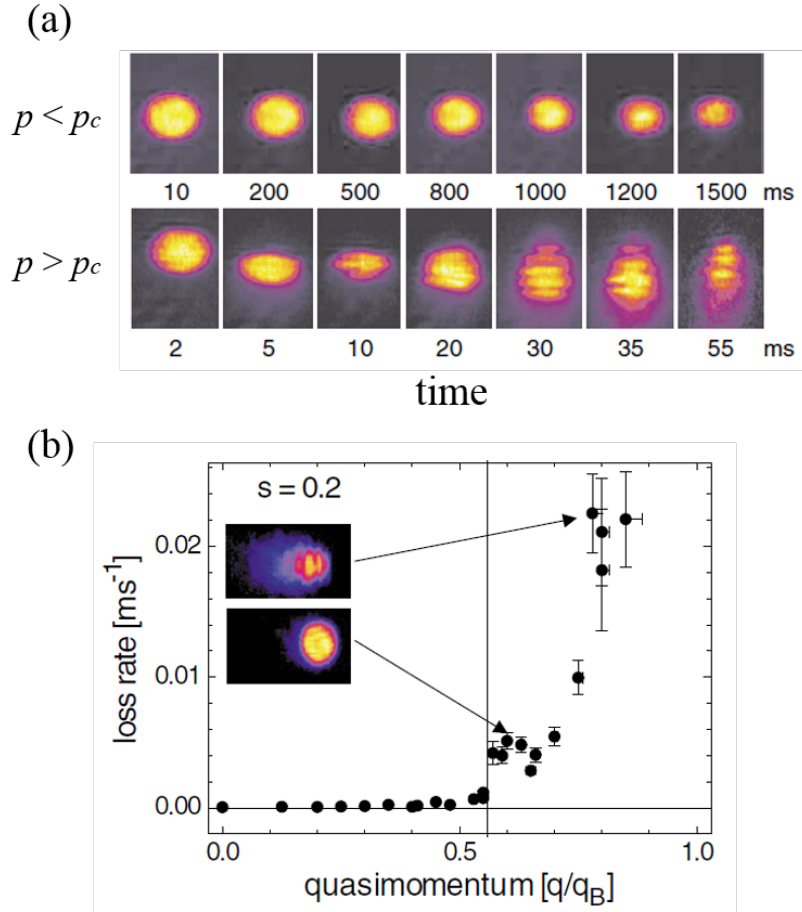


図 2.20 動的不安定性による超流動流の崩壊の観測 [78]。(a): 実空間における粒子数密度分布の時間変化。超流動流の流れ方向は上向き。上段が超流動流が臨界速度以下の場合、下段が臨界速度以上の場合の観測である。臨界速度以上では短いタイムスケールで密度変調を示しながら急激に超流動流が崩壊している。(b): 超流動流の臨界運動量の測定。縦軸は超流動体の寿命の逆数、横軸は第 1 ブリルアンゾーン端の運動量 q_B を基準とした超流動流の運動量で、インセットは崩壊が起き始めてからの超流動体の実空間粒子数密度分布を表している。

格子ポテンシャルの浅い) 弱相関極限での線形安定性解析により基本的原理を明らかにした。その後、強相関領域の動的不安定性に関する研究など多くの理論的興味が注がれた [85, 86, 87, 88, 89]。ここではまず、動的不安定性の基本的原理を理解するために Wu と Niu が用いた線形安定性解析を用いた手法により Landau 不安定性と動的不安定性の理論的判別法を示す。

弱相関極限では、超流動体は式 (2.52) の GP 方程式に従うが、光格子系では光格子ポ

テンシャルの項が加わり

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + v \cos(2k_L x) \Psi + U_0 |\Psi|^2 \Psi \quad (2.116)$$

となる。 v は光格子ポテンシャルの振幅、 k_L は光格子を構成するレーザーの波数を表す。ここでは簡単のために1次元系を考えている。ここでオーダーパラメータに摂動 $\delta \Psi$ を加え、GP 方程式に $\Psi = \Psi + \delta \Psi$ を代入して整理すれば、

$$i\hbar \frac{\partial \delta \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta \Psi + v \cos(2k_L x) \delta \Psi + U_0 [2|\Psi|^2 \delta \Psi + \Psi^2 \delta \Psi^*] \quad (2.117)$$

のようになる。式 (2.117) は複素共役をとれば

$$-i\hbar \frac{\partial \delta \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta \Psi^* + v \cos(2k_L x) \delta \Psi^* + U_0 [2|\Psi|^2 \delta \Psi^* + (\Psi^*)^2 \delta \Psi] \quad (2.118)$$

となり、これら2式は行列を用いて

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta \Psi \\ \delta \Psi^* \end{pmatrix} = \sigma_z \mathcal{M} \delta \Psi \quad (2.119)$$

と表現できる。 \mathcal{M} は

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v \cos(2k_L x) + 2U_0 |\Psi|^2 & U_0 \Psi^2 \\ U_0 (\Psi^*)^2 & -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v \cos(2k_L x) + 2U_0 |\Psi|^2 \end{pmatrix}$$

である。また σ_z は

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (2.120)$$

で定義される行列である。以上から、行列 $\sigma_z \mathcal{M}$ の固有値 ϵ が負であると系は負のエネルギーを持った方がエネルギー的に安定になるため、励起を生じて超流動流が減衰する。これは Landau 不安定性を示している。実際に周期ポテンシャルが存在しない $v = 0$ の場合を考えれば、固有値が負になる最小の超流動流の速度は $v_{\min} = \sqrt{U_0} = c_s$ と音速に一致することがわかり、確かに Landau 不安定性を示していることがわかる。それに対して固有値が虚数になると、摂動モードは時間に対して指数関数的に発散^{*9}をしてしまうことがわかる。これにより、Landau 不安定性とは別の臨界速度を超えると超流動流は時間と

^{*9} 虚部の符号によっては減衰モードの可能性もあるが、虚部が現れるときは必ずプラスマイナス両方の符号を持つ虚部がセットで現れることが数学的に示されている [83]。

ともに急激に非定常状態へ遷移することが示される^{*10}。これが動的不安定性である。またこの解析から、粒子間相互作用か光格子ポテンシャルのどちらかが存在しなければ固有値が複素数にならないことも簡単に示される。つまりこの節の冒頭で述べた通り、数学的にも動的不安定性が凝縮体の非線形性と周期ポテンシャルが絡み合った現象であることも理解できる。その意味で、粒子間相互作用がないときに一番生じやすい Landau 不安定性の粒子間相互作用依存性と動的不安定性の粒子間相互作用依存性が大きく異なることも推測できる。このように GP 方程式から動的不安定性の存在を示すことができたが、これだけでは物理的描像がわかりづらい。そのため次の項では動的不安定性の物理的描像をさらに深く考察する。

動的不安定性の物理的描像

エネルギー散逸なしの動的不安定性が生じ、かつ励起が光格子ポテンシャルによって潰されない条件は、超流動流の励起エネルギー ϵ^{*11} に $\epsilon(-q) + \epsilon(q - q_B) = 0$ の束縛条件が存在することである [82]。 q_B は逆格子ベクトルに対応した波数である。この式の意味するところは、励起エネルギーの総エネルギーが 0 であること、励起の波数の合計が逆格子ベクトルに対応する波数に一致することである。それによりエネルギー散逸のない励起が可能であり、2 つの励起（冷却原子気体ではフォノン）により作られる定在波が光格子に潰されず共鳴が起こることになる。これにより系の一様性が乱れ超流動流の減衰が起こる。Bose-Hubbard モデルで考えれば、全エネルギーは保存しながら相互作用エネルギーとホッピングエネルギーの間でエネルギーのやり取りが自発的に起こっていることになる。このように、初期状態の様な超流動流の状態と定在波が生じた状態が縮退するため、系に加わった摂動（空間的乱れ）は密度変調として急激に発達するわけである。

動的不安定性に関する相図

Fallani らの実験は粒子間相互作用が弱く光格子ポテンシャルの浅い弱相関領域に関するものであったが、光格子冷却原子系は強相関系の物理をシミュレーションできるのが大きなアドバンテージであるため、実験や理論は自然と強相関系の動的不安定性の研究に発展した。それらの研究の最も重要な功績の 1 つは、理論 [87, 88]、実験 [80] の両方で動的不安定性に関する相図が得られたことである。これにより、基本的には古典的な不安定性

^{*10} 線形安定性解析では摂動に関する 2 次以上の項を無視しているため、摂動が発散するという非物理的な解が現れている。そのため、この解析は解の安定性のみを議論するに留まることに注意すること。

^{*11} 静止している超流動ではなく、超流動流の励起エネルギーであることに注意。

である動的不安定性と純粋に量子効果により現れる超流動-Mott 絶縁体転移の関係が明らかになった。

動的不安定性に関する相図は初め Altman らによって理論的に推測された [87, 88]。Altman らは凝縮体の運動方程式に平均場近似レベルの近似を施す手法である動的 Gutzwiller 近似を用いて Bose-Hubbard モデルを解析することにより、線形安定性解析ではわからない超流動流崩壊のダイナミクスを明らかにし、さらにそこから動的不安定性に関する相図を導出した。図 2.21 に Altman らが導出した次元が $d = 1, 2, 3$ 次元の場合の相図を示す。横軸は Mott 転移の起きる粒子間相互作用強度 U_c で規格化された Bose-Hubbard モデルの粒子間相互作用強度、縦軸が超流動流の運動量であり、相図の境界を示すラインが臨界運動量を表している。つまり、境界より左下では超流動流は安定した流れを保持し、境界より右上では超流動流は安定した流れを保てない。どの次元においても $U \rightarrow 0$ では $p/\pi = 0.5$ より少し大きい臨界運動量を持ち^{*12}、 U を大きくしていくと臨界運動量は滑らかに小さくなっていき Mott 転移点で 0 になる。このように、Landau 不安定性とは異なり、粒子間相互作用強度が強いほど臨界速度が小さくなることが明らかになった。次元が大きいほど相図の安定領域が広がるのは、簡単には次元が大きい方が粒子の運動に関する自由度が高いため運動エネルギーが得をすることで超流動性が増していることに起因すると考えられる。

このような相図は超流動流に関する運動方程式を解くことで時間発展シミュレーションを行い、超流動流の崩壊を実際に確かめることで得られる。時間発展シミュレーションは、初期状態として超流動流の流れが有限で $U = 0$ の基底状態を求めそこから U を大きくした場合と、初期状態として有限の粒子間相互作用を持つ超流動体が静止しているところから超流動体に加速度を持たせ流速を早くしていく 2 つの場合に対して行われた。例えば初期状態として $U = 0$ とした場合の超流動流の崩壊を見てみると（図 2.22）、運動量 p のところに凝縮している粒子数の割合で定義される凝縮密度（condensate fraction）がある臨界粒子間相互作用に達すると急激に減少していることがわかる。これが動的不安定性による超流動流の崩壊を表していて、このようなシミュレーションを様々な U や p について行うことで相図の境界が決定される。図 2.22 において、右上の図は時間とともに粒子間相互作用を一定の増加率で増加させる様子を、右下の図の矢印は相図における時間発展の軌跡を表している。

理論で予測された相図はしばらくして Mun らのグループによって実験的に検証された

^{*12} Altman らの計算ではまだ相図の見積もりが甘く、我々の不安定性判定法では正確に $p/\pi = 0.5$ となる。また、線形安定性解析でわかったように、 U が完全に 0 のところでは、動的不安定性が起らないことは注意しなければならない。

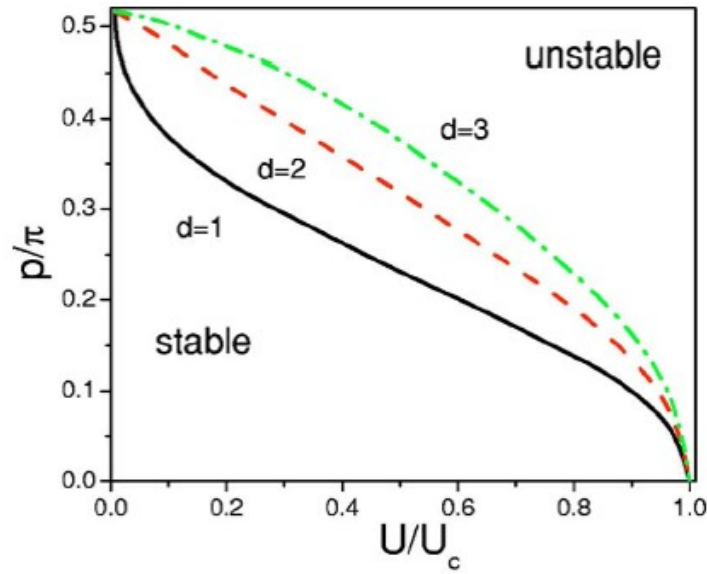


図 2.21 Bose-Hubbard モデルに基づく動的不安定性に関する相図 [87, 88]。 U_c は流れがない $p = 0$ の場合に超流動-Mott 絶縁体転移の起こる粒子間相互作用。 $d = 1, 2, 3$ 次元それぞれにおいて相図境界の左下では超流動流が安定に存在し、右上では超流動流が動的不安定性により崩壊する。

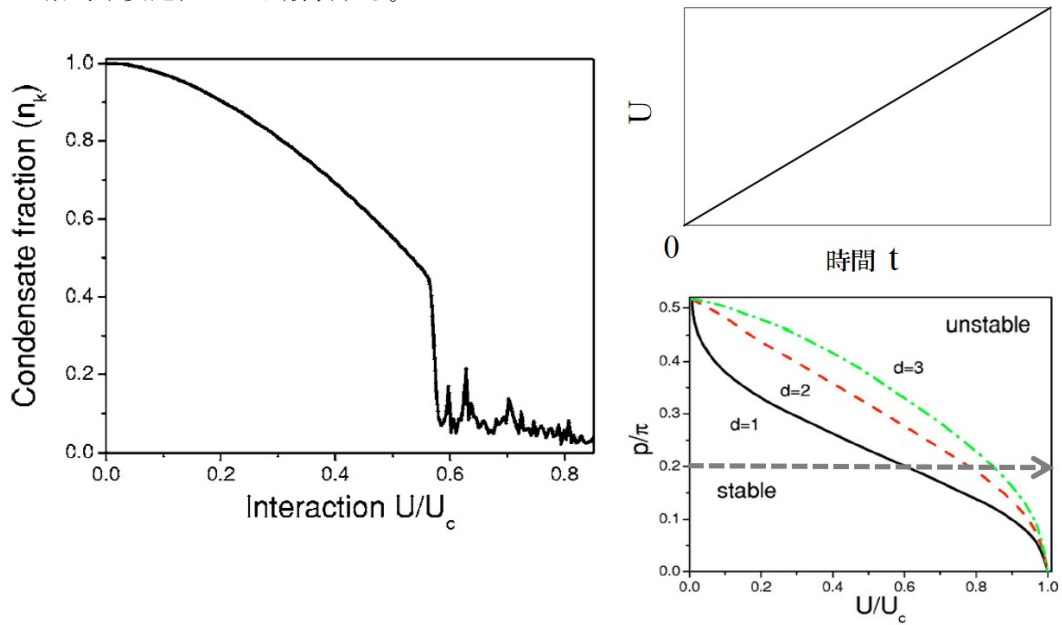


図 2.22 凝縮密度の時間発展シミュレーション [88]。初期状態として粒子間相互作用のない $U = 0$ の超流動流の基底状態をとり、右上のように時間とともに一定の増加率で U を増加させると左図のようにある臨界粒子間相互作用強度で凝縮密度が急激に減少する。右下の図の矢印は相図におけるこの時間発展シミュレーションの軌跡を示す。

[80]。Mun らの実験では、光格子ポテンシャルの深さ (U/t) を一定にした状態で図 2.23 のように運動量 $p(t)$ を時間とともに変化させる。 p_M は目的の運動量であり、トラップポテンシャル中で粒子数分布が偏らないように、目的の運動量を最大値として運動量 p を振動させる。この振動の 1 往復を 1 サイクルとし、このサイクルを適切な回数繰り返すことにより動的崩壊を観測する。1 サイクルは 10ms 程度であり、この速度は断熱性を保つためには十分遅く、原子気体の熱励起の目安である数 μm より速い。このサイクルの p_M を運動量 p として、それぞれの光格子ポテンシャルの深さや運動量の大きさに対して Time of flight 法により凝縮密度を測定することで、動的不安定性に関する相図を求めた。図 2.24 に Mun の実験で求められた 3 次元での相図を示す。黒い点の実験により求められた臨界運動量で、赤い実線は Altman らによる理論的相図である。この結果から、3 次元においては実験と理論で導出された相図境界が非常によく一致していることがわかる。しかし、実験では 1 次元系では弱相関極限以外で巻き付き数の小さい流れへの量子トンネリングによる効果が強く効いてくることで動的相図の境界を定めることが困難であることが確認されている。このような量子トンネリングの影響は Polkovnikov らの論文の中でも指摘されている [88]。

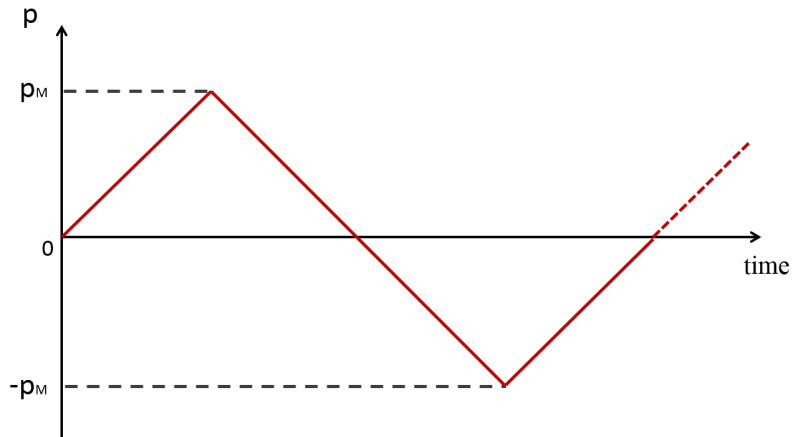


図 2.23 Mun らのグループの実験における運動量の時間変化 [80]。

これらの相図はスピン自由度が凍結された、つまりスピンレスの超流動流について導出されているが、上に述べたように量子トンネリングのような量子効果は超流動のダイナミクスに大きく影響を与えるため、量子的自由度であるスピン自由度も動的不安定性に影響を与えるはずである。しかし、古典的な不安定性に量子的かつ微視的な自由度がどのように影響を与えるかは自明ではない。そこで本研究ではスピン自由度が動的不安定性に与え

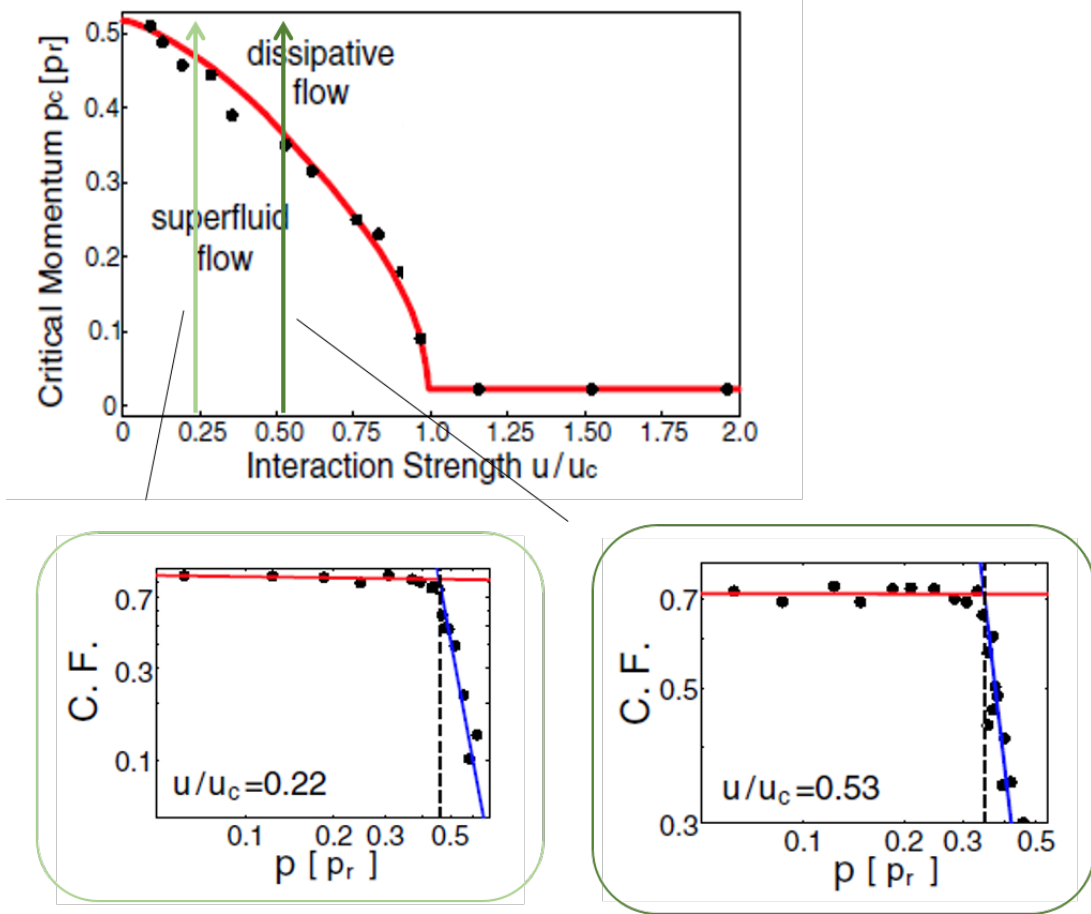


図 2.24 Mun らの実験による動的不安定性に関する相図 [80]。上図における黒い点が実験により観測された臨界運動量、赤線が Altman らの理論的相図境界となっている。 u_c は Mott 転移の粒子間相互作用強度、 p_r は反跳運動量を表す。下の図は相図境界を定めるための凝縮密度の測定に関する図で、それぞれの粒子間相互作用（実際には光格子ポテンシャルの深さを操作）においてある臨界運動量で凝縮密度が急激に減少している。

る影響に注目する。したがって次の節では、スピン自由度を持つ冷却原子気体の静的、動的両方の場合での基本的性質を示していく。

2.3 スピン自由度と冷却原子気体

研究目的の節で述べたように、本研究ではスピン自由度が超流動流のダイナミクスに及ぼす影響を考察する。Bose 気体では粒子の持ち得るスピンの大きさは S が正の整数の場合に限られる。本研究ではその中でも最も基礎的な $S = 1$ のスピン自由度を取り扱う。基

礎的とはいえ、 $S = 1$ のスピン自由度をもつ Bose 系は非常に多彩な物理を示すことが知られており、その性質を調べることは基礎物性の理解において重要なことはもちろんのこと、SQUID を超える可能性を秘める超高感度磁気センサー [94] を始めとするスピン自由度を持つ超流動体の応用にとっても極めて重要である。

2.3.1 $S = 1$ のスピン自由度を持つ Bose 原子とその相互作用

$S = 1$ のスピン自由度を持つ Bose 原子

$S = 1$ のスピンを持つ Bose 原子の内トラップのしやすさなどからよく実験に用いられるものとして、 ^{23}Na と ^{87}Rb が挙げられる。これらの原子は表 2.3.1 のような特徴を持つ。

	核スピン I	核磁気モーメント μ / μ_N	電子スピン J	電子配置
^{23}Na	3/2	2.218	1/2	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
^{87}Rb	3/2	2.751	1/2	$(\text{Ar}) 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1$

表 2.24 ^{23}Na と ^{87}Rb の特徴

これらの原子は核スピンと電子スピンの合成から $S = 1, 2$ をとり得る。しかし、外部磁場がないときの原子の結合ハミルトニアン \mathcal{H}_{hf} は $\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$ を用いることで、 $\mathcal{H}_{\text{hf}} = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = A[1/2 S(S+1) - I(I+1) - J(J+1)]$ と表され、 $S = 1$ のときは $\mathcal{H}_{\text{hf}} = -5/4A$ 、 $S = 2$ のときは $\mathcal{H}_{\text{hf}} = 3/4A$ であり、各磁気モーメントが正のときは A も正となるので $S = 1$ のときの方がエネルギー的に安定となる。そのため ^{23}Na と ^{87}Rb の原子はともに $S = 1$ のスピン自由度をもつことになる。このように $S = 1$ のスピン自由度を持つ原子は磁気量子数 $S_z = 1, 0, -1$ をとることができるため、3つの区別できる状態が存在する。

$S = 1$ スピン間の相互作用 [95]

スピン自由度を考えない系に対してスピン自由度が入るとハミルトニアンの相互作用項が変化する。いま、希薄 Bose 気体を考え、3体以上の相互作用は無視できるものとする。したがって、ハミルトニアン中の接触型相互作用（s 波散乱のみ考えた相互作用）

$$\mathcal{H}_U = \sum_{a,a',b,b'} U_{aa'bb'} \int d^3\mathbf{r} \psi_a^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{a'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{b'}(\mathbf{r}) \psi_b(\mathbf{r}) \quad (2.121)$$

のみを考える。ここで、添え字は磁気量子数 ($a = 1, 0, -1$) を表す。相互作用 U は射影演算子を用いて

$$U = g_0 P_0 + g_2 P_2 \quad (2.122)$$

と書かれる。ただし $g_F = 4\pi\hbar^2 F/m$ である。 P_0 と P_2 は $S = 1$ の2スピンを合成したスピン状態 $S' = 0, 2$ に対応する射影演算子である^{*13}。相互作用項をスピン依存性により分類するために、 \mathcal{H}_U を2スピンの内積 $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ による項とそれ以外の項に分ける。

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \sum_{S'=0,2} \frac{1}{2} (\mathbf{S}'^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2) P_{S'} = \sum_{S'=0,2} \frac{1}{2} [S'(S'+1) - 2S(S+1)] P_{S'} = P_2 - 2P_0 \quad (2.123)$$

$$\sum_{S'=0,2} P_{S'} = P_0 + P_2 = 1 \quad (2.124)$$

の2つの条件から U を $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ を用いて表すと

$$U = c_0 + c_2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.125)$$

となる。ただし

$$c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}, \quad c_2 = \frac{g_2 - g_0}{3} \quad (2.126)$$

である。これによりハミルトニアン of 相互作用項は

$$\mathcal{H}_U = \sum_{a,a',b,b'} \int d^3\mathbf{r} \frac{c_0}{2} \psi_a^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{a'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{a'}(\mathbf{r}) \psi_a(\mathbf{r}) + \frac{c_2}{2} \psi_a^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{a'}^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{S}_{ab} \cdot \mathbf{S}_{a'b'} \psi_{b'}(\mathbf{r}) \psi_b(\mathbf{r}) \quad (2.127)$$

と導かれる。さらに c_2 の項の計算を進めると

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{c_2} = \frac{c_2}{2} \int d^3\mathbf{r} \big(& \psi_1^\dagger \psi_1^\dagger \psi_1 \psi_1 + \psi_{-1}^\dagger \psi_{-1}^\dagger \psi_{-1} \psi_{-1} + 2\psi_1^\dagger \psi_0^\dagger \psi_0 \psi_1 + 2\psi_{-1}^\dagger \psi_0^\dagger \psi_0 \psi_{-1} \\ & - 2\psi_1^\dagger \psi_{-1}^\dagger \psi_{-1} \psi_1 + 2\psi_0^\dagger \psi_0^\dagger \psi_1 \psi_{-1} + 2\psi_1^\dagger \psi_{-1}^\dagger \psi_0 \psi_0 \big) \end{aligned} \quad (2.128)$$

となる。ここで絶対零度を仮定し、スピンによる波動関数の空間的違いはほぼないとして

$$\psi_s \approx \hat{a}_s \phi(\mathbf{r}), \quad \psi_s^\dagger \approx \hat{a}_s^\dagger \phi^*(\mathbf{r}) \quad s = 1, 0, -1 \quad (2.129)$$

^{*13} $S' = 1$ は2つの原子の交換に対して波動関数が対象であるというボソンの条件から現れない。

のように場の演算子を Bose 粒子の消滅（生成）演算子で置き換える。すると \mathcal{H}_U は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_U = \frac{U_0}{2} N(N-1) + \frac{U_2}{2} & (a_1^\dagger a_1^\dagger a_1 a_1 + a_{-1}^\dagger a_{-1}^\dagger a_{-1} a_{-1} - 2a_1^\dagger a_{-1}^\dagger a_{-1} a_1 + 2a_1^\dagger a_0^\dagger a_0 a_1 \\ & + 2a_{-1}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{-1} + 2a_0^\dagger a_0^\dagger a_1 a_1 + 2a_1^\dagger a_{-1}^\dagger a_0 a_0) \end{aligned} \quad (2.130)$$

と表される。ここで $N = a_1^\dagger a_1 + a_0^\dagger a_0 + a_{-1}^\dagger a_{-1}$ 、 $U_s = c_s \int d^3 \mathbf{r} |\phi(\mathbf{r})|^4$ ($s = 0, 2$) である。演算子を表すハットの記号は省略した。これをさらに

$$S_+ \equiv \sqrt{2}(a_1^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{-1}), \quad S_- \equiv \sqrt{2}(a_0^\dagger a_1 + a_{-1}^\dagger a_0), \quad S_z \equiv (a_1^\dagger a_1 - a_{-1}^\dagger a_{-1}) \quad (2.131)$$

の昇降演算子などを用いて表すことで

$$\mathcal{H}_U = \frac{U_0}{2} N(N-1) + \frac{U_2}{2} \left[\frac{1}{2}(S_+ S_- + S_- S_+) + S_z^2 - 2N \right] = \frac{U_2}{2} (\hat{\mathbf{S}}^2 - 2N) \quad (2.132)$$

と表される。ここで $\hat{\mathbf{S}}$ は系全体の合成スピンを表す演算子である。この表式からわかるように、エネルギーをより小さくするためには、 $U_2 > 0$ のときに系のスピンの期待値 $\langle \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle$ を小さくするような反強磁性的な効果、 $U_2 < 0$ のときに $\langle \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle$ を大きくするような強磁性的な効果が現れる。実際の原子では、例えば ^{87}Rb が $U_2 < 0$ の強磁性的な相互作用 [91, 90]、 ^{23}Na が $U_2 > 0$ の反強磁性的な相互作用 [92, 93] を持つ。電子の $\frac{1}{2}$ のスピン間相互作用との大きな違いは、式 (2.130) の最後の 2 項に現れているスピントリップ項で、電子系では磁気量子数で分類されるスピン成分間の交換のみを表しスピン成分の割合を変化させなかったスピントリップ項が、 $S = 1$ の Bose 系では 3 成分存在することでスピン成分同士が合計の S_z を保存しながら混ざり合いスピン成分の割合が変化する (図 2.25)。この成分間の混ざり合いという特徴は、現在活発に冷却原子の分野で研究されている複数種の原子を混ぜた多成分混合系にも存在しないものであり、Bose 系特有の興味深い性質である。

スピン系の研究を行うための冷却原子気体を用いた実験においては、スピン自由度を凍結させないように磁気トラップを用いず光学トラップのみを用いて原子を補足する。逆に磁気量子数を $S_z = 1$ のみなど 1 成分のみになるように磁場で制限すれば実質的にスピン間相互作用が全体のエネルギーの基準をずらすようにだけ効くため、スピン自由度を凍結させることが可能である。このような系はスピンレス系の研究の舞台となっている。

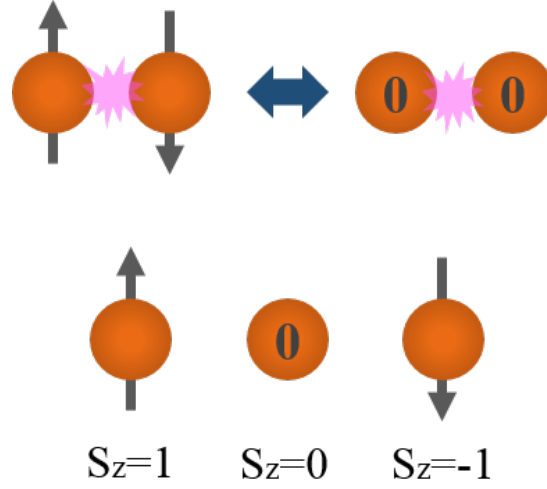


図 2.25 $S = 1$ Bose 粒子系の散乱におけるスピントリフ。 $S_z = \pm 1$ の粒子 2 個から $S_z = 0$ の粒子 2 個への変化、またその逆の過程のスピントリフが生じる。

2.3.2 光格子中の $S = 1$ Bose 系

$S = 1$ Bose-Hubbard モデル

光格子系を考える際には、(2.3) の項で導出したハミルトニアン of 相互作用項が各サイト内のみで有効であり隣接サイト間の相互作用が無視できるとすれば、

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \sigma=0,\pm 1}}^{n,n} \left(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + H.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{\mathbf{S}}_i^2 - 2n_i) \quad (2.133)$$

と表される $S = 1$ Bose-Hubbard モデルが導出できる [95, 96, 97]。 σ はスピンの S_z 成分を表す。 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルは光格子中の $S = 1$ Bose 系をよく記述する。 Fermi 系の場合には Pauli の排他律により同サイトにおける複数粒子の占有は禁止されるが、 Bose 系ではそのような制限が存在しないために無数に粒子が入り得る。 この事実により、 Bose 系では磁性に関しても Fermi 系とは大きく異なることがこのモデルからも見てとれる。 本研究では $U_0 > 0$ の斥力相互作用の場合のみ考えていく。

$S = 1$ Bose 系の静的相図

図 (2.15) に示した超流動-Mott 絶縁体転移に関する相図は $S = 1$ のスピン自由度が加わることで大きく変化することが理論的な先行研究からわかっている [98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106]。それらの先行研究により、スピンレスの相図と比べて Mott ロープの大きさが大きく変化すること、 $U_2 > 0$ と $U_2 < 0$ で変化の仕方が異なること、 $U_2 > 0$ では 1 サイトあたりの平均粒子数の偶奇性が強く現れること、Mott 領域内でスピンスグレット相やスピネマティック相など複雑な磁性相が現れること、など数多くの興味深い特徴が明らかにされた。中でも特に、 $U_2 > 0$ の反強磁性的な場合に平均粒子数の偶奇性が強く相図に現れることは $S = 1$ スピン系の重要な特徴である。図 (2.15) の導出と同様に、 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルに基づき Gutzwiller 近似を用いて超流動-Mott 絶縁体転移に関する相図を図 (2.26) に描いた。この相図とスピンレス Bose-Hubbard モデルの相図 (2.15) を比較すれば、 $U_2 < 0$ の強磁性的な相互作用の場合ではスピンレスの場合よりもスピンの相互作用によりモット領域全体が小さくなっているのに対し、 $U_2 > 0$ の反強磁性的な相互作用の場合にはスピンレスの場合に対して、 n が奇数のモット領域は小さくなり、 n が偶数のモット領域は大きく広がっているのがわかる。これらの相図の変化をハミルトニアン (4.1) から考察する。いま、 U_2 項を各成分の粒子

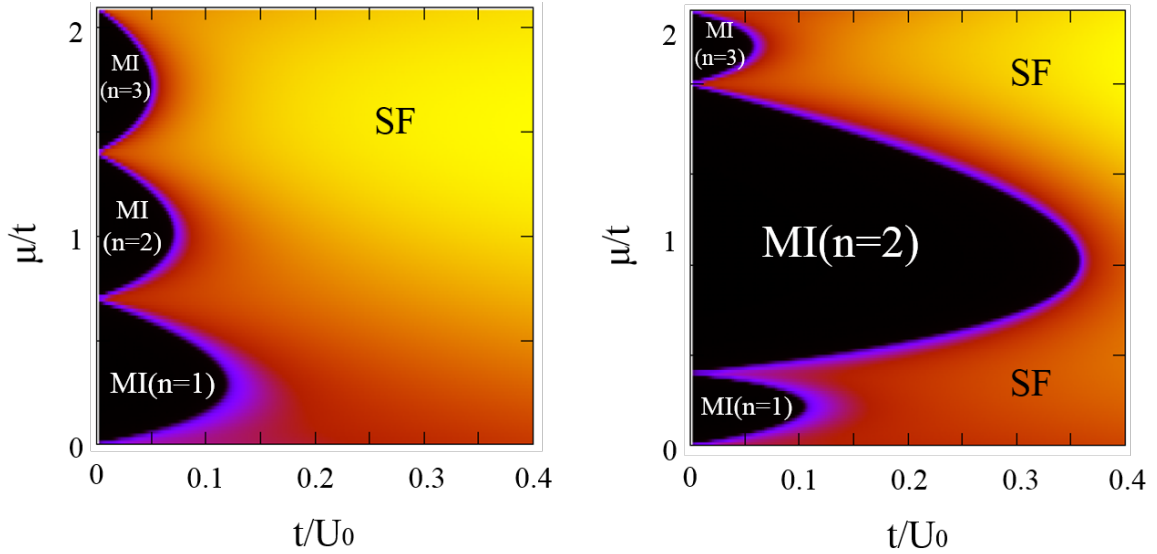


図 2.26 Gutzwiller 近似を用いた $S = 1$ Bose-Hubbard モデルに基づく静的相図。明るい部分が超流動領域、黒い部分が Mott 領域を表す。左図: $U_2 = -0.3U_0$ 、右図: $U_2 = 0.3U_0$ 。

数演算子を用いて表すと

$$\begin{aligned} \frac{U_2}{2}(\hat{S}^2 - 2\hat{n}) = & \frac{U_2}{2}(n_1^2 - 2n_1n_{-1} + n_{-1}^2 - n_1 - n_{-1} + 2n_1n_0 + 2n_0n_{-1}) \\ & + U_2(a_1^\dagger a_{-1}^\dagger (a_0)^2 + (a_0^\dagger)^2 a_1 a_{-1}) \end{aligned} \quad (2.134)$$

と表される（サイトの添え字と演算子を表すハットは省略）。 $U_2 < 0$ のときはサイト内の原子は $\langle \hat{S}^2 \rangle$ を大きくする方がエネルギー的に得をするために強磁性的になるので粒子は $S_z = 1$ 成分のみか $S_z = -1$ 成分のみとなる。例えば $S_z = 1$ 成分のみの基底状態の波動関数を考えれば、式 (2.134) のエネルギー期待値は

$$E_U = \frac{U_0}{2}n_1(n_1 - 1) + \frac{U_2}{2}n_1(n_1 - 1) = \frac{U_0 + U_2}{2}n_1(n_1 - 1) \quad (2.135)$$

となり、 U_2 項が U_0 項に繰り込まれる。いま $U_2 < 0$ なので U_0 は実効的に小さくなりモット絶縁体の領域は小さくなる。それに対して $U_2 > 0$ のときは平均粒子数の偶奇性によって考え方が異なる。まず、各 S_z 成分同士、または各 S_z 成分間のオンサイトエネルギーを考える。本来スピンスリップの項の存在によりハミルトニアンを対角化してオンサイトエネルギーを求めなければならないが、磁性等を深く考察せず定性的な Mott ロープの変化のみを説明する場合にはスピンスリップ項を無視したオンサイトエネルギーで問題ない。サイトに 2 つだけ粒子が存在する場合、スピンスリップ項を無視したオンサイトエネルギーは図 2.27 のようになる。ここから、 $U_2 > 0$ の場合にも、スピン間相互作用に

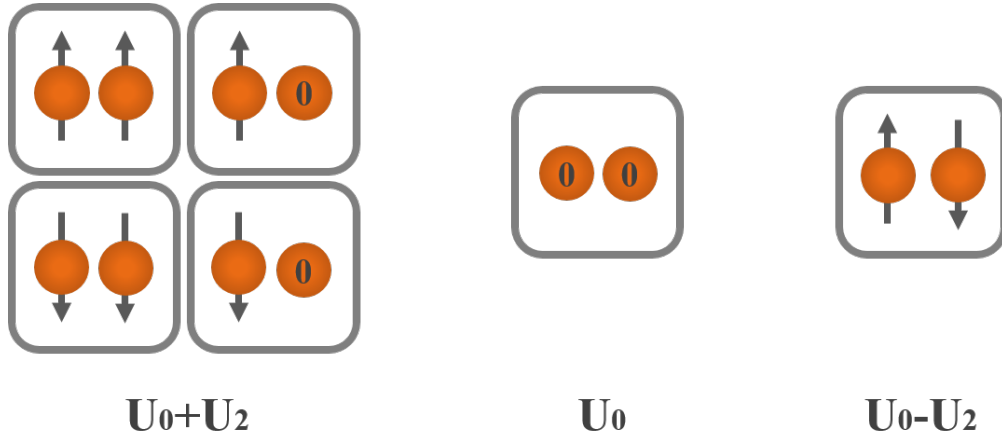


図 2.27 サイトに 2 つ粒子がいる場合のオンサイトエネルギー。

よってエネルギーが下がる $S_z = \pm 1$ が 1 つのサイトに入った状態が存在することがわかる。ここで隣接サイトの粒子の飛び移りによりサイトの粒子数が揺らぐことを考えると、

$S_z = \pm 1$ が入ったサイトを作りオンサイトエネルギーを下げようとするため、平均粒子数が奇数の場合には粒子数が偶数のサイトを作りエネルギーを下げようとする効果でサイトの粒子数が平均粒子数から大きく揺らぎ、平均粒子数が偶数の場合にはその効果で平均粒子数からの粒子数揺らぎが抑えられることがわかる。つまりスピン間相互作用は、平均粒子数が奇数の場合には Bose 気体が Mott 絶縁体になるのを妨げ、平均粒子数が偶数の場合には Mott 絶縁体になるのを促進する働きをすることがわかる。したがって、静的相図では平均粒子数が奇数だとモット絶縁体の領域は小さくなり、平均粒子数が偶数だとモット絶縁体の領域は大きく広がることが理解できる。本研究ではこのような静的な基底状態を初期状態として超流動に速度を持たせていくため、上記の $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの静的な性質を理解することが必須となる。

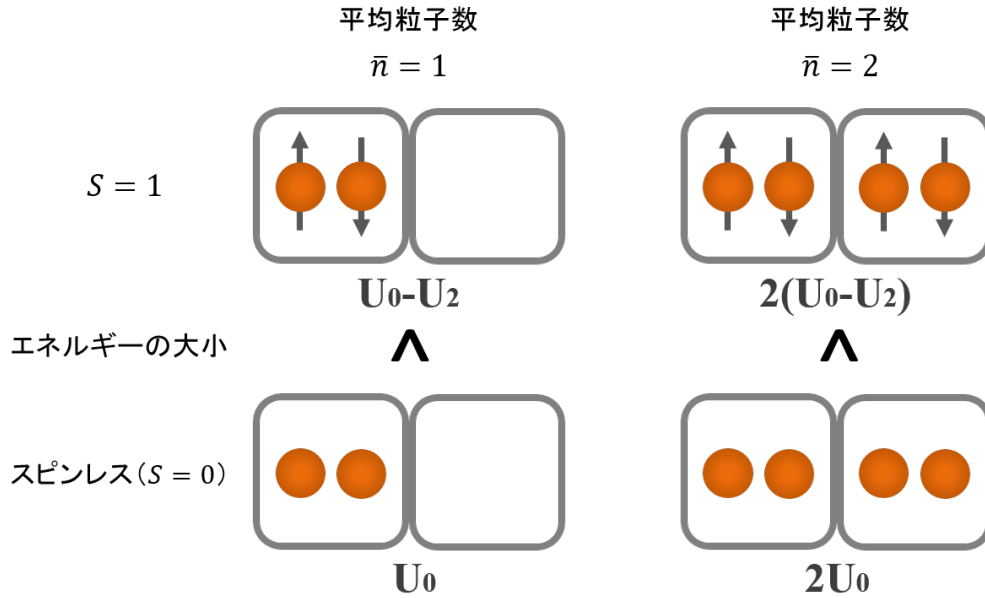


図 2.28 スピン間相互作用がある場合とない場合のエネルギー比較。平均粒子数が奇数の場合も偶数の場合も図の配置のようにすれば $S=1$ の方がエネルギーが低いため、同じ U_0 の値では、平均粒子数が奇数の場合にはスピンレスの場合より $S = 1$ のスピン自由度をもつ場合の方が図のように粒子数がサイトによって偏った（粒子数が揺らいだ）状態が実現しやすくなり、平均粒子数が偶数の場合にはスピンレスの場合より $S = 1$ のスピン自由度をもつ場合の方が粒子数がサイトに均等に振り分けられた（粒子数が揺らがない）状態が実現しやすくなる。

2.3.3 $S = 1$ のスピン自由度を持つ冷却原子気体のダイナミクス

最後に、 $S = 1$ スピン Bose 気体のダイナミクスに関する先行研究を紹介する。本研究でも $S = 1$ のスピン自由度を持つ超流動流の崩壊を時間発展シミュレーションで追っていくため、スピン間相互作用が崩壊にどのように作用するかを理解するために特に $S = 1$ の系に特有のスピンフリップに関するダイナミクスは理解しておく必要がある。冷却原子気体のスピンドイナミクスに関する研究は Stamper-Kurn と Ueda のレビューに非常によくまとめられている [19]。

冷却原子系におけるスピンフリップのダイナミクスを観測するには、平衡状態の Bose 気体に磁場を印加しスピン成分を偏らせた状態から、磁場を切ることでスピンを自由に時間発展させる。すると系が平衡状態にないためにスピン成分は図 (2.29) スピンフリップにより混ざり合う [107]。これはスピンミキシングと呼ばれる。スピンミキシングのダイナミクスに関しては理論的 [95, 108, 109] にも実験的 [110, 111] にも数多くの研究が行われ、多くの興味深い現象が明らかにされている。本研究でもこのスピンミキシングがどの

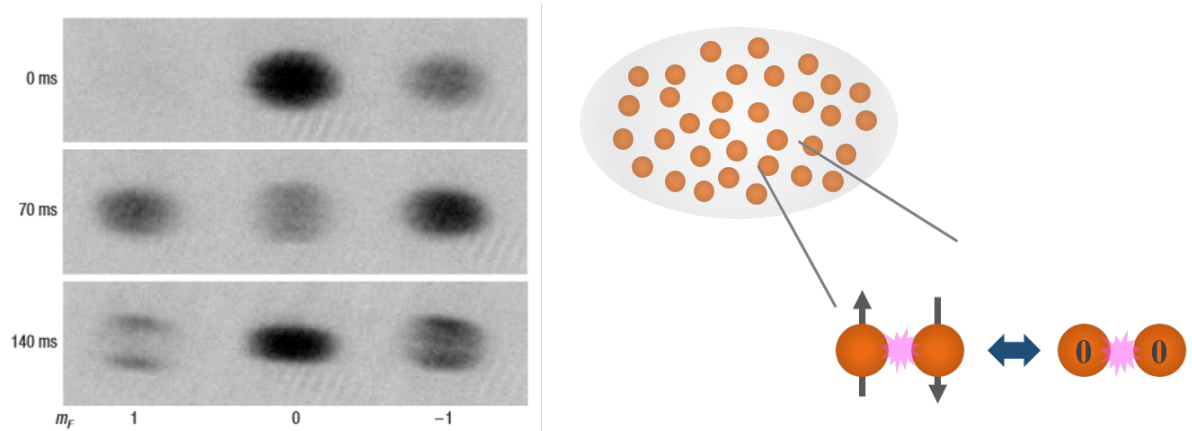


図 2.29 左図: $S = 1$ Bose 気体におけるスピン成分間の混ざり合い [107]、右図: スピンミキシングのイメージ図。色の濃さがそれぞれのスピン成分の粒子数密度の大きさを表す。 $t = 0$ の初期条件は磁場を印加することで $S_z = 1, 0, -1$ 成分の割合を $0 : 3 : 1$ と調整している。

ように超流動流の崩壊に関与するか詳しく議論する。

さらにごく最近、Zhao らによって光格子中の $S = 1$ Bose 気体のダイナミクスに関する実験も行われた [20]。現在までに光格子系でスピンのダイナミクスが観測された例は極めて少なく、この実験を皮切りに今後本研究を含めた光格子スピン系のダイナミクスに関

する理論的推測の実験的検証が数多く進められていく可能性が高い。Zhao らの実験では、初期状態のスピン成分の割合を同じにしても、光格子ポテンシャルの深さに依存してスピンミキシングのダイナミクスや非平衡スピン状態が長時間後に落ち着く準安定スピン状態が大きく異なることを明らかにしている。原子種は反強磁性的な相互作用を示す ^{23}Na を用いている。図 (2.30) に Zhao らの実験で観測されたスピンのダイナミクスを示した。どの光格子ポテンシャルの深さにおいても $S_z = 0$ の成分の割合が同じになるような非平衡初期状態からスタートするが、長時間経った後では光格子ポテンシャルの深さによってスピン成分の割合が大きく異なっていることがわかる。このように、光格子ポテンシャルが超流動体中のスピンのダイナミクスに強く影響を与えることが示されたため、本研究においても、光格子ポテンシャルが系の空間的周期性や超流動-Mott 絶縁体転移に反映されるだけでなく、スピンミキシングにどのように影響を与えそれが動的不安定性にどう効いてくるかも注意深く考察する必要がある。

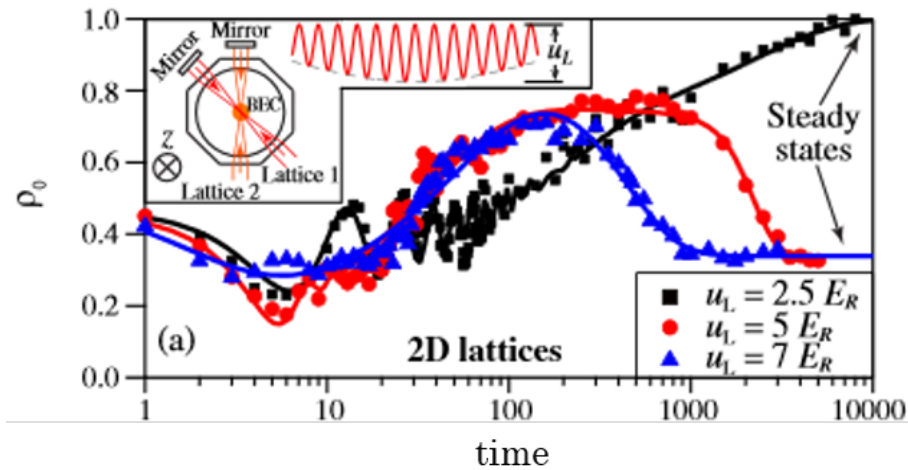


図 2.30 スピンミキシングダイナミクスの光格子ポテンシャルの深さに対する依存性 [20]。光格子ポテンシャルが $u_L = 2.5E_R, 5E_R, 7E_R$ それぞれの場合においてスピンの $S_z = 0$ 成分の割合の時間変化を観測している。原子種は ^{23}Na を用いており、インセットに実験装置の構成が示されている。

第 3 章 光格子中を流れる超流動流の崩壊と集団励起

3.1 問題提起と研究目的

前節の動的不安定性の項で述べたように、動的不安定性の臨界速度に関する研究は数多くなされたものの、Altman や polkovnikov によってなされたような時間発展シミュレーション [87, 88] による超流動流のダイナミクスに関する研究は極めて少ない。しかし、動的不安定性は非平衡な現象であるために、その原理や性質解明には時間発展シミュレーションが非常に重要となる。特に、図 2.20 に示した、Fallani らのグループ [78] によって観測された動的崩壊に伴う密度変調の発生は初期条件などの状況設定に依存して時間発展が決まるため、時間発展シミュレーションによりその性質を精査するべきである。この密度変調は動的不安定性に関する多くの知見を与えるはずであり、その性質解明は重要な課題である。そこで本研究では、時間発展シミュレーションと線形不安定性解析を組み合わせることでこの密度変調の原理や性質を明らかにすることを目的とする。

3.2 計算手法

3.2.1 Bose-Hubbard モデル

本研究では動的不安定性の解析に Bose-Hubbard モデルを用いる。Bose-Hubbard モデルは式 (2.11) に示したが、ここにもう一度載せておく。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle}^{n.n.} \left(a_i^\dagger a_j + H.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) \quad (3.1)$$

$\langle i, j \rangle$ は隣接サイトのすべての組についての和をとることを表している。第 1 項目が光格子におけるサイト間のホッピング項、第 2 項がサイト内の粒子間相互作用項である。ただし、静的な基底状態を考えると時のみサイトあたりの平均粒子数を調整するために化学ポテンシャル項を加えた

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle}^{n.n.} \left(a_i^\dagger a_j + H.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i \quad (3.2)$$

をハミルトニアンとして用いる。本研究ではこのハミルトニアンによりサイトあたりの平均粒子数を $\bar{n} = 1$ と定めるよう化学ポテンシャルを決定し、その後時間発展をさせるときに化学ポテンシャル項をなくした式 (hubbard) のハミルトニアンを用いて粒子数を固定したまま時間発展をさせる。

3.2.2 Gutzwiller 近似と運動方程式

波動関数としては Gutzwiller 変分関数を採用する [88]。

$$|\Psi\rangle = \prod_j \left[\sum_{n_j} f_j(n_j) |n_j\rangle \right] \quad (3.3)$$

この変分関数はサイト j における様々な粒子数状態 $|n_j\rangle$ の重ね合わせで表されており、さらにサイトに関する直積をとってある。 $f_j(n_j)$ は状態 $|n_j\rangle$ に関する重みを表し、Gutzwiller パラメータと呼ばれる。Gutzwiller 変分関数はサイトごとに Gutzwiller パラメータが区別されているため粒子数密度のサイト間の差異（密度変調）は捉えられるが、 n_1, n_2, \dots のようにサイト間のホッピングを正確に記述できる基底をとっているわけではないために、物理的に考慮される効果は1サイト近似と同等となっている。また、超流動流の運動量を

$$a_j \mapsto a_j e^{ipj}, \quad a_j^\dagger \mapsto a_j^\dagger e^{-ipj} \quad (3.4)$$

として導入する。これは波動関数を $|n_j\rangle \mapsto e^{-ipjn_j} |n_j\rangle$ と表し、運動量を波動関数の位相の空間微分として導入することと同等である。例えば絶対零度の凝縮体を $\psi = \rho e^{i\varphi(r)}$ と粒子数密度と位相により表現した場合、凝縮体の位置 r での流れは $J = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi$ となり、位置による位相差が運動量に値する。このような Gutzwiller 変分関数に関して、時間も考慮した変分

$$S \equiv \langle \Psi | i\hbar \frac{d}{dt} - H | \Psi \rangle \quad (3.5)$$

が Gutzwiller パラメータ f に関して極値をとる条件 $S = 0$ を課せば、Gutzwiller パラメータについての運動方程式

$$i\dot{f}_j(n_j) = \frac{U_0}{2} n_j(n_j - 1) f_j(n_j) - tz \left(\sqrt{n_j} f_j(n_j - 1) \psi_j + \sqrt{n_j + 1} f_j(n_j + 1) \psi_j^* \right) \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \psi_j = \frac{1}{z} & \left[\sum_{n_{j+1}} \sqrt{n_{j+1} + 1} f_{j+1}^*(n_{j+1}) f_{j+1}(n_{j+1} + 1) e^{ip} \right. \\ & + \sum_{n_{j-1}} \sqrt{n_{j-1} + 1} f_{j-1}^*(n_{j-1}) f_{j-1}(n_{j-1} + 1) e^{-ip} \\ & \left. + \sum_{j'} \sum_{n_{j'}} \sqrt{n_{j'} + 1} f_{j'}^*(n_{j'}) f_{j'}(n_{j'} + 1) \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

が導かれる。 z は $2 \times$ 次元 d 、 j' は超流動流の流れと垂直な方向の隣接サイトを表す。なお作用 S の変分を行う際、平均場近似

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle \simeq \langle a_i^\dagger \rangle \langle a_j \rangle \quad (3.8)$$

を施してある。本研究では式 (3.6) の運動方程式に基づき超流動流の時間発展シミュレーションを行う。

本研究では絶対零度の 2 次元系でサイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ の場合を取り扱う。2 次元を選んだのは、揺らぎの効果が小さく Gutzwiller 近似が比較的有効な 2、3 次元系の内、計算時間が短くて済む方を選んだためである。前章で述べたように 2 次元では絶対零度以外では Bose-Einstein 凝縮が超流動性の必要十分条件ではなくなるが、本計算は絶対零度であるため Bose-Einstein 凝縮を超流動と同等なものとして扱う。系には全方向に周期境界条件を課し、サイト数は流れ方向のみ多くとり 160×2 とする。今回注目する密度変調は流れ方向にしか生じないため、このような系のサイズを考えれば密度変調の性質は十分議論が可能である。また、Gutzwiller 波動関数における粒子数の上限は $n_{\max} = 5$ と定める。サイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ の場合には、 $n \geq 6$ の粒子数状態を加えても $n_{\max} = 5$ の場合の結果とほぼ差がでないことは計算によって確認済みである。このような設定から、本計算で扱う Gutzwiller パラメータの総数は $160 \times 2 \times 6 = 1920$ となる。

3.2.3 強相関領域における線形安定性解析

本研究では、上記の時間発展シミュレーションと併用して線形安定性解析を行うことで動的不安定性に伴い現れる密度変調に関する詳しい情報を得る。粒子間相互作用の弱い弱相関極限における GP 方程式の線形不安定性解析に関しては動的不安定性に関する議論をした項で示したが、本研究では弱相関領域から Mott 転移点付近の強相関領域までの密度変調を統一的に扱いたい。そのために、Hui[89] らによって示された、Gutzwiller 変分関

数において $n_{\max} = 2$ と基底を非常に制限した線形安定性解析に基づいて解析を行う。今回の計算ではサイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ であるため、基底は平均粒子数からサイトの粒子が最低限の 1 だけ揺らぐことができる。つまりこの計算は粒子数の揺らがない強相関領域ほど正確になる。この解析はこのように基底を必要最低限しかとらないにも関わらず、弱相関領域から強相関領域に渡る動的不安定性の相図を比較的正確に再現できることが確かめられている。

Gutzwiller 近似に基づく線形安定性解析は式 (3.6) の運動方程式から求まる解に微小な摂動を加えて解析をすればよい。ただし、今の場合は線形安定性解析に現れる行列の大きさを極力小さくするために $n_{\max} = 2$ とし、それに伴い Gutzwiller 波動関数を

$$|\Omega\rangle = \prod_i |\Omega_i\rangle \quad (3.9)$$

$$|\Omega_i\rangle = \cos \frac{\theta_i}{2} |\bar{n}\rangle_i + e^{i\eta_i} \sin \frac{\theta_i}{2} \left[\cos \frac{\chi_i}{2} e^{-i\varphi_i} |\bar{n} - 1\rangle_i + \sin \frac{\chi_i}{2} e^{i\varphi_i} |\bar{n} + 1\rangle_i \right] \quad (3.10)$$

と表す。 \bar{n} はサイトあたりの平均粒子数であり、 θ 、 χ 、 φ は変数である。ここで隣接サイト間の位相差を \mathbf{p} とすれば、超流動流は運動量 \mathbf{p} を持ち

$$\varphi_i = \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i \quad (3.11)$$

である。 φ 以外の位相は場所に寄らず一様であるとするし、エネルギーを計算すれば

$$\begin{aligned} E_{U_0} &= \langle \Omega | \frac{U_0}{2} \sum_i (n_i - \bar{n})^2 | \Omega \rangle \\ &= \frac{NU_0}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$E_\mu = -\mu N \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos \chi \quad (3.13)$$

$$E_t = -\frac{tN}{4} \sin^2 \sum_{\vec{\delta}} (e^{i\mathbf{p} \cdot \vec{\delta}} + e^{-i\mathbf{p} \cdot \vec{\delta}}) \left[\bar{n} + \sin^2 \frac{\chi}{2} + \sqrt{\bar{n}^2 + \bar{n}} \sin \chi \cos 2\eta \right] \quad (3.14)$$

となる。ただし N はサイト数、 $\vec{\delta}$ はあらゆる 2 サイト間の距離である。また、ここでは化学ポテンシャルを考慮し Bose-Hubbard モデルのハミルトニアンに化学ポテンシャルの項 $-\mu \sum_i (n_i - \bar{n})$ を加えた。ここで、流れ方向が立方格子の軸方向であるとすれば

$$E_t = -\frac{tN\bar{n}z}{4} \gamma_{\mathbf{p}} \sin^2 \theta \left[1 + \frac{1}{\bar{n}} \sin^2 \frac{\chi}{2} + \sqrt{1 + \frac{1}{\bar{n}}} \sin \chi \cos 2\chi \right] \quad (3.15)$$

$$\gamma_{\mathbf{p}} = \frac{\cos p + d - 1}{d} \quad (3.16)$$

となる。ただし、 d は次元、 $z = 2d$ である。ここで、サイトあたりの平均粒子数が整数であるという条件を課すと、流れをもたらす位相部分以外の $|\bar{n} - 1\rangle$ と $|\bar{n} + 1\rangle$ の係数は等しくて良いから $\chi = \pi/2$ 、その条件の下エネルギーを最小にするのは $\eta = 0$ である。結局 1 サイトあたりのエネルギーは

$$E = \frac{U_0}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \frac{t\bar{n}z}{4} \gamma_{\mathbf{p}} \sin^2 \theta \left(1 + \frac{1}{\bar{n}} + \sqrt{1 + \frac{1}{\bar{n}}} \right) \quad (3.17)$$

となる。さらに今回想定する $\bar{n} = 1$ の状況を考え、 E を θ に関して変分すると

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = \frac{\sin \theta}{4} (U_0 - 2tz\gamma_{\mathbf{p}} \cos \theta) \quad (3.18)$$

となり、 $\frac{\delta E}{\delta \theta} = 0$ から

$$\sin \theta = 0 \quad (\text{モット絶縁相}) \quad (3.19)$$

$$U_0 = (3 + 2\sqrt{2})tz\gamma_{\mathbf{p}} \cos \theta \quad (\text{超流動相}) \quad (3.20)$$

のような基底状態を与える条件が導かれる。どちらの条件がモット絶縁相か超流動相かの判断は $|\Omega\rangle$ の表式から明らかである。

さらにこの基底状態からの微小摂動（励起）を考える。いま、状態 $|\bar{n}\rangle$ 、 $|\bar{n} \pm 1\rangle$ を生成する演算子をそれぞれ t_{0i}^\dagger 、 $t_{\pm 1i}^\dagger$ と書く。^{*14} 束縛条件は $\sum_{\alpha} t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha i} = 1$ とする。これらの演算子をユニタリー変換することで、基底状態の演算子 d_{0i}^\dagger とそこからの直交する励起状態 d_{1i}^\dagger 、 d_{2i}^\dagger を考えれば

$$\begin{pmatrix} d_{0i}^\dagger \\ d_{1i}^\dagger \\ d_{2i}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} & \frac{e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\frac{e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} & -\frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ \frac{e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{0i}^\dagger \\ t_{1i}^\dagger \\ t_{2i}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

のようになる。この励起が微少であると仮定すれば

$$d_{0i}^\dagger \simeq d_{0i} \quad (3.22)$$

と近似できるから

$$d_{0i}^\dagger d_{0i} \simeq d_{0i}^{\dagger 2} \simeq d_{0i}^2 \simeq 1 - d_{1i}^\dagger d_{1i} - d_{2i}^\dagger d_{2i} \quad (3.23)$$

^{*14} 例えば $t_{0i}^\dagger |\text{vac}\rangle = |\bar{n}\rangle_i$ 。

となり、最終的に

$$d_{0i}^\dagger \simeq d_{0i} \simeq \sqrt{1 - d_{1i}^\dagger d_{1i} - d_{2i}^\dagger d_{2i}} \simeq 1 - \frac{1}{2} d_{1i}^\dagger d_{1i} - \frac{1}{2} d_{2i}^\dagger d_{2i} \quad (3.24)$$

となる。以上からハミルトニアンを d_{1i}^\dagger や d_{2i}^\dagger を用いて表すと

$$\mathcal{H} = \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{M}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (3.25)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (d_{1k}^\dagger, d_{1,-k}, d_{2k}^\dagger, d_{2,-k}) \quad (3.26)$$

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 2\gamma_{\mathbf{p}} - \cos^2 \theta \gamma_+ & -\cos^2 \theta \gamma_+ & -\cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- \\ -\cos^2 \theta \gamma_+ & 2\gamma_{\mathbf{p}} - \cos^2 \theta \gamma_+ & -\cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- \\ -\cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & -\cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & (2\gamma_{\mathbf{p}} - \gamma_+) \cos^2 \frac{\theta}{2} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \gamma_+ \\ \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- & \cos^2 \frac{\theta}{2} \gamma_+ & (2\gamma_{\mathbf{p}} - \gamma_+) \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

と導かれる。ここで、 $\gamma_{\pm} = \frac{1}{2}(\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{p}} \pm \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{p}})$ 、 $k \in [-\pi, \pi]$ である。ここから $\sigma \equiv \text{diag}(1, -1, 1, -1)$ によって定義される $\sigma \mathcal{M}$ を対角化し、固有値の少なくとも 1 つが虚部を持つかどうかで動的不安定性発生の有無を判別できる。また、固有値に現れる虚部の大きさ^{*15}が摂動モードの指数関数的発散の速さを表すため、虚部の大きさが一番大きい摂動モードが時間発展シミュレーションにおいて超流動流を壊す主要な寄与になることがわかる。

3.2.4 状況設定

ここでは主に時間発展シミュレーションにおける状況設定を示す。計算の流れとしては、まず流れのない超流動体の粒子間相互作用を有限のある値に設定し基底状態を求める。そこから超流動流を一定の加速度 α で加速し（つまり運動量を $p = \alpha t$ と増加させる。 t は時間を表す。）、超流動流の動的不安定性による崩壊をシミュレートする。この計算を実行する際、初期状態には微小な空間的な乱れを入れておく。絶対零度で熱揺らぎなどは計算に入らないため、この人為的な乱れがない限り動的不安定性は起こらない。このような乱れは実験では必ず入っていると考えられる。

本計算では時間発展シミュレーション中は系の全エネルギーが保存されておりエネルギー散逸が起きないため、Landau 不安定性や Feynman 不安定性のようなエネルギー散逸を伴う不安定性が生じることはない。前章で述べたように、Fallani[78] らのグループの実験では Landau 不安定性などのエネルギー散逸を伴う不安定は多少起きているもの

^{*15} ここでの大きさとは A を実数として虚部が Ai と表されるとき A の大きさを指す。

の、それによる超流動流の減衰のタイムスケールに比べ動的不安定性による超流動流の崩壊のタイムスケールは非常に長いことがわかっているため、本計算の動的不安定性のみ起こるという仮定は実験とも対応していると考えられる。また、本計算では周期境界条件を課しているものの、動的不安定性の本質的な部分には何も影響を及ぼさない。これは Altman[87, 88] らが周期境界条件を用いて理論的に導いた動的相図と Mun[80] らが求めた実験による動的相図が一致していることから明らかである。また、動的不安定性は第1ブリルアンゾーン内での運動量で生じるためブロッホ振動は考慮する必要はなく、また超流動流の加速度は十分小さいものとして Landau-Zener トンネリングは無視し、1バンドの Bose-Hubbard モデルで計算が十分であるとする。

3.2.5 重要な物理量

本研究結果において重要となる物理量は超流動体の運動量空間における粒子数分布関数 $n_{\mathbf{k}}$ 、実空間における粒子数分布関数 $b_{\mathbf{r}}$ 、超流動流の臨界運動量 p_c 、超流動流のシミュレーションにおける崩壊運動量 p_d である。

◆ $n_{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k}} &= \sum_{\sigma=0,\pm 1} \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \langle a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} \rangle e^{-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}} \end{aligned} \quad (3.28)$$

と定義され、 \mathbf{k} は BEC の波数、 \mathbf{r}_{ij} はサイト i, j の位置ベクトルの差、 N_s はサイト数である。本計算では、運動量 \mathbf{p} を持った粒子数

$$n_{\mathbf{k}=\mathbf{p}} = \frac{1}{N_s} \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \langle a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} \rangle e^{-\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_{ij}} \quad (3.29)$$

によって凝縮成分の割合を定義する。この $n_{\mathbf{k}=\mathbf{p}}$ の変化を見ることで動的不安定性発生の判断を行う。

◆ $n_{\mathbf{r}}$

$$n_{\mathbf{r}} = \langle n_j \rangle = \sum_{\sigma} \langle a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} \rangle \quad (3.30)$$

と定義され、動的不安定性により実空間分布にどのような変化が起こるかを見る。

◆ p_c と p_d

本研究では動的不安定性に関わる 2 つの特徴的な運動量 p_c と p_d を定義する。 p_c は光格子中で超流動流の流速を完全断熱的に、つまり加速度 $\alpha = 0$ で増加させたときに超流動流が崩壊し始める運動量である。それに対して p_d はある有限の加速度 α で超流動流を加速させていったときに実際に崩壊が起き始める運動量である。実験的にもシミュレーションにおいても加速度は有限となるため、実際に実験やシミュレーションで観測される運動量は p_d である。これらの定義からわかるように、 $\alpha \rightarrow 0$ では $p_c = p_d$ となる。実際に p_c を見積もるには、様々な加速度で p_d を求め、そこから外挿をすればよい。

◆ p_c の求め方

上で述べたように p_c は複数の加速度で求めた p_d から外挿もできるが、本計算ではさらに正確に p_c を決定できるように、以下に示すような群速度の計算による p_c の求め方を採用する。超流動流の群速度は一樣な超流動流の密度 $\rho(p)$ を用いて $v(p) = \rho(p) \sin(p)$ と表される。 $v(p)$ の中に現れている周期性は Bloch バンドの周期性が反映されたものである。絶対零度における Gutzwiller 近似の範囲内での超流動密度 $\rho(p)$ は凝縮密度 $n_{k=p} = \langle \hat{a}_{k=p}^\dagger \hat{a}_{k=p} \rangle = |\langle \hat{a}_{k=p} \rangle|^2$ と同等である。この凝縮密度は、運動量 p をもつ d 次元超流動流の有効ホッピング振幅 $t' = t(d + \cos(p) - 1)$ と粒子間相互作用 U_0 の比 t'/U_0 に比例するため運動量を増加させると単調に減少する。そのため群速度はある運動量 $p = p_c (< \pi/2)$ で最大値を持つ。この運動量 p_c を超えると超流動流の有効質量は負になり、かつ圧縮率 $\kappa \equiv \frac{\langle n \rangle}{\mu}$ を用いて表される Gutzwiller 近似における音速 $c_s = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2t\rho}{\kappa}}$ [112] は複素数になる。これは線形安定性解析における固有値が複素数になることに対応している。このような数学的背景の下、超流動流は p_c を超えると動的に不安定になることがわかる。最後に群速度の式からこのような p_c の表式を求めると、

$$p_c = \arctan \left(- \frac{n_{k=p=p_c}}{\left(\frac{dn_{k=p}}{dp} \right)_{p=p_c}} \right) \quad (3.31)$$

となる。これは右辺にも p_c が現れるセルフコンシステントな式になっている。この式から、

$$p_c \propto \frac{n_{k=p=p_c}}{\left(\frac{dn_{k=p}}{dp} \right)_{p=p_c}} \quad (3.32)$$

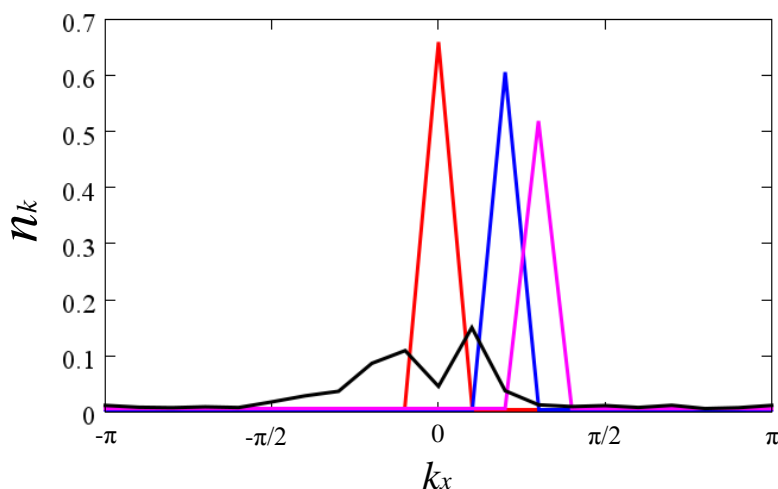


図 3.1 $U/U_c = 0.5$ 。 $p/\pi = 0$ (赤)、0.2 (青)、0.25 (紫)、0.3 (黒)。

であることがわかる。ここで、超流動流の臨界運動量は凝縮密度のみで決定されるわけではなく、超流動流の運動量を大きくしたときの凝縮密度の変化率も関与することは注目し値する。この表式は次の章で用いるモデル $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにも適用できることを注意しておく。本研究では動的相図の境界をこの p_c で定める。

3.3 結果と考察

3.3.1 崩壊時のダイナミクス

図 3.1 に運動量空間での粒子数分布の時間発展を示す。粒子間相互作用は $U_0/U_c = 0.5$ と定めている。 U_c は超流動-Mott 絶縁体転移の臨界相互作用強度であり、 $U_c = 23.3$ である。超流動流の運動量を大きくしていくと初め $k_x = 0$ に凝縮していた粒子が $k_x = p$ に凝縮するように運動量空間でずれていく。その際、上で述べたように有効ホッピング振幅が $t' = t(d - \cos(p) - 1)/d$ であることから、凝縮ピークは運動量の増加とともに小さくなっていくこともわかる。そして臨界運動量 p_c を超えると超流動流が動的不安定性により不安定になり、図の黒線のように運動量空間での凝縮ピークが失われる結果が得られた。ただし、凝縮ピークはないものの崩壊後に $k_x = 0$ 付近に粒子が分布していることから、超流動流が崩壊すると同時に系全体の流速が減衰したことも見て取れる。

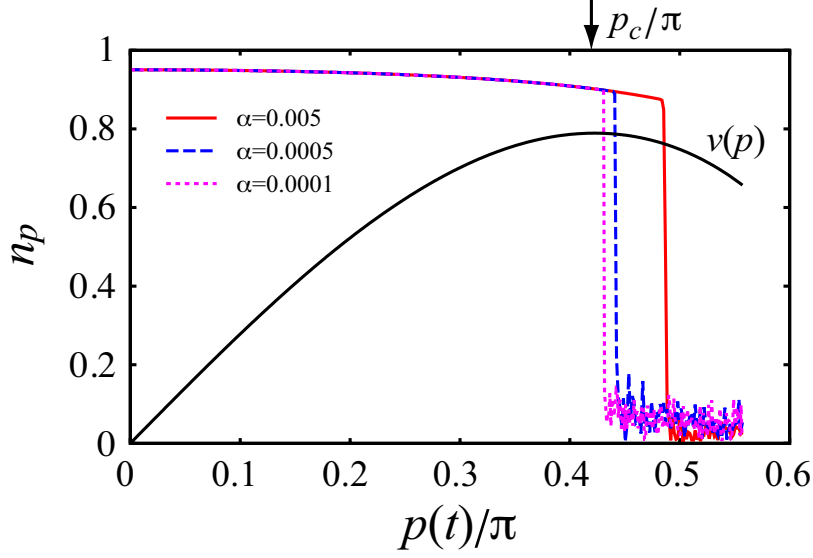


図 3.2 超流動流の運動量を $p(t) = \alpha t$ で増加させたときの凝縮密度 $n_{k=p}$ 。粒子間相互作用は $U/U_c = 0.2$ と固定されている。超流動流の群速度 $v(p)$ は矢印で示してある臨界運動量 p_c で最大値をとる。凝縮密度は超流動流の動的崩壊を反映して p が p_c を超えた後急激な現象を示している。その他パラメーターは次元が $d = 2$ 、格子サイズが $L = 160 \times 2$ となっている。

図 3.2 には群速度の計算と超流動流の崩壊に伴う凝縮密度の時間変化を示す。粒子間相互作用の大きさは $U_0/U_c = 0.2$ である。ここで U_c は超流動-Mott 絶縁体転移が起きるときの U_0 である。群速度は時間発展シミュレーションによる計算ではなく、運動量 p を持つ一様な超流動流の基底状態を仮定したときの群速度である。この群速度の最大値を求めることで臨界運動量が $p_c/\pi = 0.42$ と決定されている。それに対して時間発展シミュレーションにより求まる凝縮密度は p_c より大きい p_d で動的不安定性により急激に減少することが確かめられる。また、加速度が小さいほど p_c に近づいていることから、動的不安定性を引き起こす超流動体中の乱れの発達には有限の時間がかかり、加速度が p_c と p_d の差、言い換えれば超流動流の崩壊の遅延効果をもたらすことがわかる。

3.3.2 崩壊に伴う集団励起現象

次に、超流動流での実空間での時間発展を見る。図 3.3 に p_d 付近の運動量での粒子数の実空間分布を示す。加速度は $\alpha = 0.005$ と定め、粒子間相互作用を $U_0/U_c = 0.2$ と $U_0/U_c = 0.8$ の場合にシミュレーションを行った。 p_c と p_d は $U_0/U_c = 0.2$ のとき

$p_c/\pi = 0.423$ 、 $p_d/\pi = 0.486$ 、 $U_0/U_c = 0.8$ のとき $p_c/\pi = 0.178$ 、 $p_d/\pi = 0.22$ となっている。図 3.3 の結果から、超流動流の崩壊に伴い密度変調が流れ方向に成長していつていくことがわかる。このような密度変調の発生は p_d より小さい運動量から生じており、超流動流の崩壊の前駆現象ともなっている。また密度変調の流れ方向の断面図から、密度変調の波長は粒子間相互作用強度が大きいほど長くなることが確認された。つまり、超流動流の崩壊を引き起こす主要なモードは粒子間相互作用強度に依存していることが明らかになった。また、系に密度変調が認識できる最低限の大きさがあれば、これらの結果は系のサイズに依存しないことを確認している。密度変調の時間発展をさらに詳しく見るために粒子数の実空間分布を Fourier 変換した結果を図 3.4 に示す。この結果を見ると、粒子間相互作用が $U_0/U_c = 0.2$ と $U_0/U_c = 0.8$ のどちらの場合においても基本的な密度変調の成長の仕方は同じであることがわかる。まず一様な超流動流の運動量が p_c を超えるとある波長の主要なモードの密度変調が発生する。その後その密度変調の高調波にあたる密度変調が現れ、さらに時間が経つと主要な密度変調が顕著でありながらもさまざまな波長の密度変調が混ざり合う。主要なモードの密度変調が発生してから高調波は密度変調により感じる自分自身からの周期ポテンシャルにより優先的に誘起されたものであると考えられる。また、図 3.5 のように加速度が変化すると現れる主要なモードの密度変調の波長も変化することがわかった。密度変調の波長は加速度が大きいほど小さくなっている。では、この主要モードの密度変調の波長はどのように決定されているのだろうか。次の項では密度変調の波長が粒子間相互作用強度や超流動流の加速度に依存する理由を線形安定性解析を用いて考察していく。

3.3.3 線形安定性解析による密度変調の理解

どの波長のモードが超流動流を崩壊させる主要な寄与かは Gutzwiller パラメータに関する運動方程式 3.6 を線形安定性解析することによって理解できる。Gutzwiller 波動関数の基底を平均粒子数から 1 だけの粒子数を考慮した $n_{\max} = 2$ に設定すれば式 (3.27) で表される集団励起モードに関する行列が求まる。この行列の 4 つの固有値を求めると、

$$\epsilon^2 = \frac{1}{2} \left[A^2 + B^2 - C^2 - D^2 \pm \left\{ (A^2 - B^2 - C^2 + D^2)^2 + 16(A + C)(B + D)E^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3.33)$$

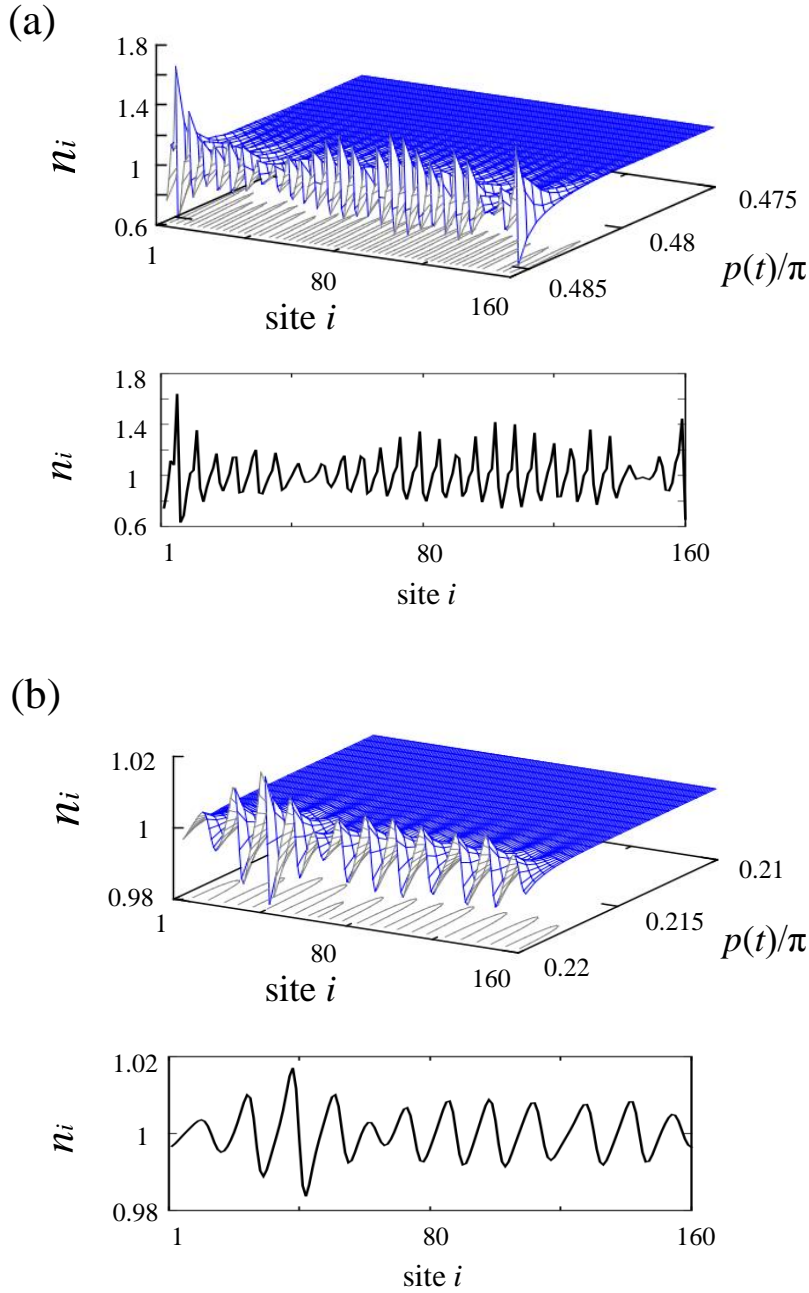


図 3.3 崩壊運動量直前の実空間での粒子数分布の時間発展。粒子間相互作用強度はそれぞれ $U/U_c = 0.2$ (a)、 $U/U_c = 0.8$ (b) となっている。ここで、 U_c は超流動-Mott 転移が起きる臨界粒子間相互作用強度である。その他のパラメータは $d = 2$ 、 $L = 160 \times 2$ 、 $\alpha = 0.005$ と定めた。(a) と (b) における下の図はそれぞれ $p/\pi = 0.486$ と $p/\pi = 0.22$ における密度変調の断面図を示している。臨界運動量と崩壊運動量はそれぞれ (a) $(p_c/\pi, p_d/\pi) = (0.423, 0.486)$ 、(b) $(0.178, 0.22)$ である。本計算では全方向に周期境界条件を課しており、図の中のサイトは超流動流の流れ方向のサイトを示している。

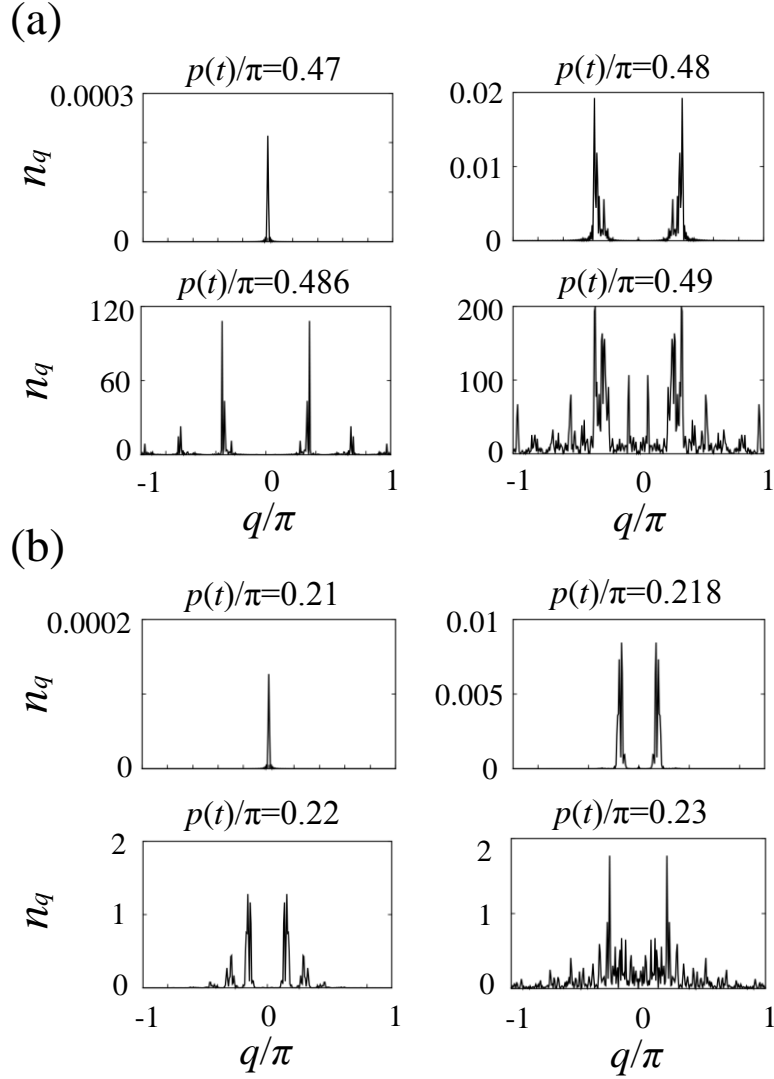


図 3.4 図 3.3 に対応する運動量と動的崩壊後の運動量における $\delta n_i (= n_i - n)$ のフーリエ変換。(a) $U/U_c = 0.2$ and (b) $U/U_c = 0.8$ 。 q は密度変調の波数である。メインピークは (a)、(b) でそれぞれ $q/\pi \sim 0.32$ と $q/\pi \sim 0.16$ に現れている。

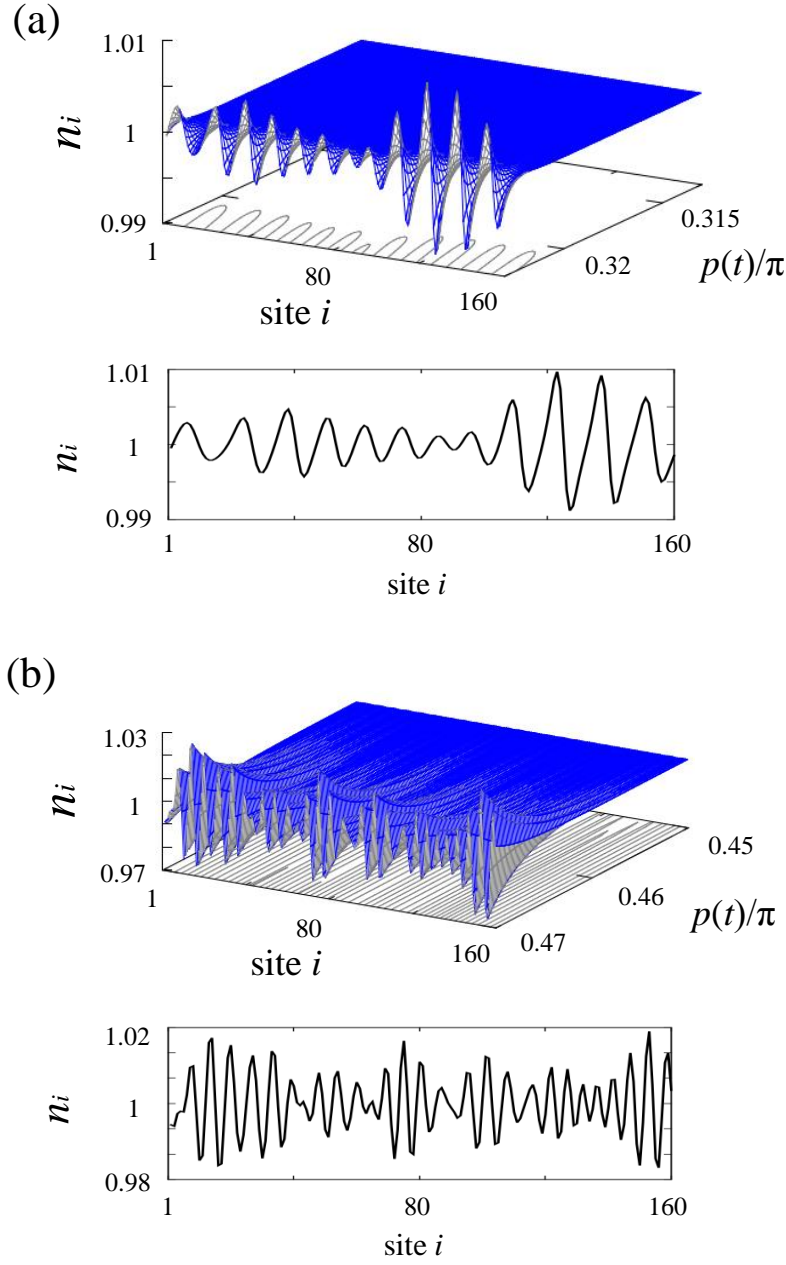


図 3.5 加速度が $\alpha = 0.0005$ (a) と $\alpha = 0.05$ (b) における粒子数分布。粒子間相互作用は $U_0/U_c = 0.5$ と定めた。崩壊運動量は $p_d = 0.323$ (a)、 $p_d = 0.47$ となっている。

となる。ここで A 、 B 、 C 、 D はそれぞれ

$$\begin{aligned} A &= 2\gamma_{\mathbf{p}} - \cos^2 \theta \gamma_+, \quad B = (2\gamma_{\mathbf{p}} - \gamma_+) \cos^2 \frac{\theta}{2}, \\ C &= \cos^2 \theta \gamma_+, \quad D = \cos^2 \frac{\theta}{2} \gamma_+, \quad E = \cos \theta \cos \frac{\theta}{2} \gamma_- \end{aligned} \quad (3.34)$$

である。固有値 ϵ が少なくとも 1 つ虚部を持てば動的不安定性が発生する。式 (3.33) から、最終的な動的不安定性発生条件

$$\cos^2 k - \frac{2 \cos p}{u^2} (\gamma_{\mathbf{p}}^3 + u^2 \gamma_{\mathbf{p}} - u^2) \cos k + \frac{1}{u^2} (4\gamma_{\mathbf{p}}^4 - 2\gamma_{\mathbf{p}}^3 + 4u^2 \gamma_{\mathbf{p}}^2 - 6u^2 \gamma_{\mathbf{p}} + u^2) < 0 \quad (3.35)$$

を導くことができる。ここで、 $t=1$ 、 $z=4$ とし、 $u \equiv \frac{U_0}{4(3+2\sqrt{2})}$ である。

図 3.6 (a) にいくつかの U_0 の値に対して式 (3.35) から得られた動的不安定性の集団励起モードに関する相図境界を示す。相図境界より右側の領域では超流動流は動的不安定性により不安定になり、左側の領域では安定である。 U_0 が小さいほど安定領域は大きくなっている。この相図から、超流動流の運動量を大きくしていくとどの U_0 の値に対しても必ず $k = 0$ の集団励起モードが最初に動的不安定性を引き起こすことがわかる。そのため、それぞれの U_0 に対して $k = 0$ の相図境界が p_c となる。例えば $U_0/U_c = 0.8$ のときの p_c は図 3.6 (a) 中に指し示した点の運動量である。一方、有限の加速度を持つ超流動流が実際に崩壊するのは、例えば $U_0/U_c = 0.8$ において図 3.6 (a) 内に示される p_d である。 p_c と p_d の差は手法のところで述べた遅延効果によるものである。つまり、この遅延効果により $k = 0$ 以外の有限の波長を持つモードが混ざり、密度変調が見えることになる。そこで、それらのモードの中で動的不安定性を引き起こす一番主要なモードを探すために p_d 付近の運動量での集団励起モードの固有値の虚部の大きさを見る。図 3.6 (b)、(c) に $U_0/U_c = 0.2$ と $U_0/U_c = 0.8$ の場合の p_d 付近での ϵ の虚部の大きさを示す。これを見ると、虚部の大きさはある集団励起モードの波数 k で最大値を持っており、密度変調として現れているモードはこの最大値付近の波数を持つものであることがわかる。

これらの結果から動的不安定性に伴う密度変調の加速度と粒子間相互作用への依存性がわかる。まず、 $U_0/U_c = 0.2$ と $U_0/U_c = 0.8$ において同じ加速度で遅延効果が現れたとすると図 3.6 (a) のオレンジの領域と青い領域中のモードに対応する密度変調が現れる。すると相図と図 3.6 (b)、(c) から明らかなように粒子間相互作用が小さい $U_0/U_c = 0.2$ の場合の方が波長の短い密度変調が主要モードとして不安定性に寄与する。それに対して、加速度が大きくなればオレンジや青の領域は広がるためより波長の短い密度変調が現れやすくなる。このように密度変調の加速度と粒子間相互作用への依存性が理解できる。

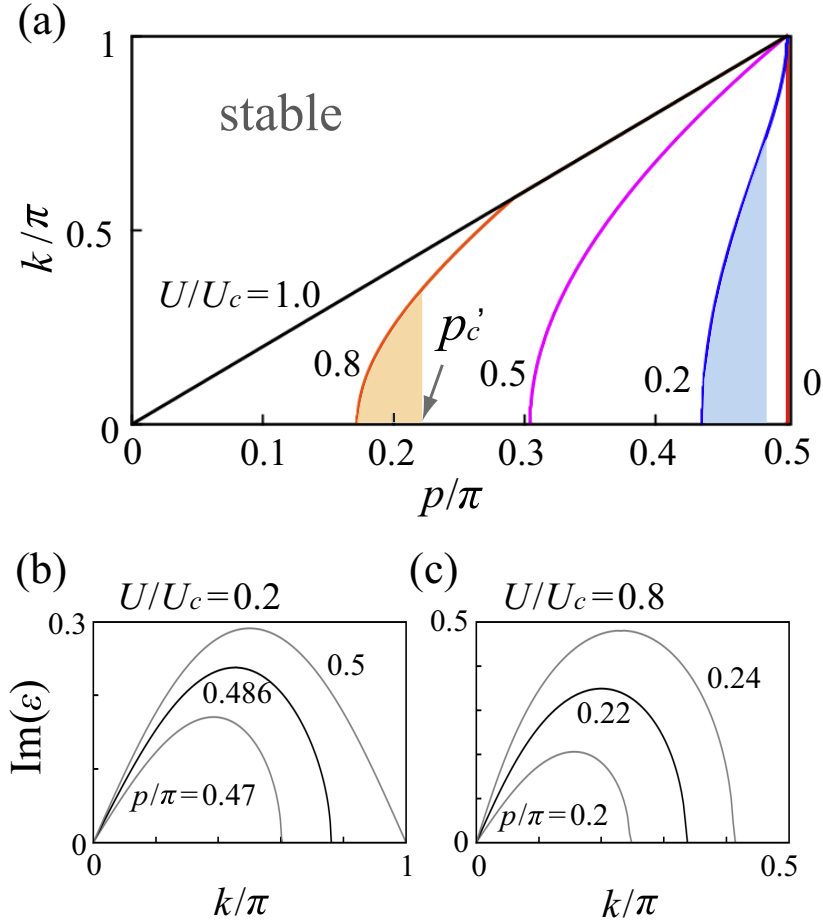


図 3.6 (a): いくつかの粒子間相互作用強度に対する超流動流の安定性に関する相図。 p は超流動流の運動量を表し、 k は励起モードの波数を表す。超流動流はそれぞれの粒子間相互作用に対して相図境界より左側の領域で安定であり、相図境界より右側の領域では動的不安定性により不安定となる。それぞれの相図境界における $k = 0$ の点は臨界運動量 p_c を示す。影になっている領域は図 3.3 と 3.4 における密度変調に関する励起モードを含む領域である。(b)、(c): 波数 k の関数として示されたエネルギー固有値 ϵ の虚部。パラメーターは、(b) では $U/U_c = 0.2$ 、 $p/\pi = 0.47, 0.486, 0.5$ 、(c) では $U/U_c = 0.8$ 、 $p/\pi = 0.2, 0.22, 0.24$ となっている。色の濃い実線は $p = p_d$ のときのものである。その他パラメーターは $n = 1$ 、 $d = 2$ となっている。

3.4 まとめ

この章では動的不安定性により崩壊する際に現れる密度変調のメカニズムとその性質を議論した。そこでの主要な結論は、波数が 0 の励起モードが超流動流の臨界運動量を決めているものの、超流動流に加速度が存在することで有限の波長を持つ密度変調が現れていることや弱相関領域では超流動流の運動量を増加させてもエネルギー分散がフォノンの分散を保つのに対し、強相関領域ではエネルギー分散がフォノン分散から大きくずれるために短波長の密度変調が現れづらくなることである。これにより、超流動流の加速度の効果が初めて明らかになり、さらに強相関領域では今まで研究されていた弱相関領域とは励起が大きく異なるため、粒子間相互作用の変化は密度変調の波長変化という形で動的不安定性に現れることが明らかになった。

第 4 章 光格子中におけるスピン 1 の自由度を持つ超流動流の動的不安定性

4.1 問題提起と研究目的

前章では超流動流の崩壊のダイナミクスや崩壊に伴う密度変調の性質について詳しく調べ、動的不安定性に関する深い知見を得ることができた。次にこの章では、スピン自由度を考慮した超流動流の動的不安定性に関する解析と考察を示していく。

今までの先行研究ではスピン自由度を考慮しないスピンレスな系のみがその研究対象とされてきた。しかしスピン自由度を持つ冷却原子気体の性質を議論したところで述べたように、スピン自由度を持つ Bose 気体は静的な場合にもダイナミクスにおいても非常に多彩な現象を示し、また光格子系でもスピンレスの系とは大きく振る舞いが異なることがわかっていく。そのため、スピン自由度が超流動流の不安定性に与える影響も非常に興味深い。そこで本研究では Bose 粒子の持つスピン自由度の中で最も基礎的な $S = 1$ のスピン自由度に注目する。

以上を踏まえて、本研究では $S = 1$ のスピン自由度が超流動流の動的不安定性に与える影響を明らかにすることを目的とする。その中でも特に主要な興味は以下の 3 点である。

1. 巨視的な流体力学的不安定性である動的不安定性が量子的な微視的自由度であるスピン自由度に影響を受けるか？
2. $S = 1$ Bose 系の超流動-Mott 転移に現れる平均粒子数の偶奇性が動的不安定性にも表れるか？
3. スピンミキシングは動的不安定性にどのように影響するか？

動的不安定性は古典流体にも表れるような基本的に古典的な流体力学的不安定性であるため、スピン自由度のような量子的な自由度にどれほど影響を受けるかはまず初めに注目すべき問題である。また、 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの解析によって、 $U_2 > 0$ の反強磁性的な相互作用が存在する場合には超流動-Mott 転移の相図にサイトあたりの平均粒子数の偶奇性が強く現れることを述べたが、このような偶奇性が超流動流の動的な相図にも現れるかは自明ではないため興味を持たれる。最後に、 $S = 1$ Bose 気体のダイナミクスで一番重要な性質はスピンミキシングであるが、このスピンレス系には存在しない効果が動的不安定性に及ぼす影響を明らかにすることでスピンレス系とスピン系の差異を理解することができると考えられる。本研究では上記の課題に沿って $S = 1$ 超流動流の動的不安

定性の性質を明らかにしていく。

4.2 計算手法

4.2.1 S=1 Bose-Hubbard モデル

本研究では式 (4.1) で表される $S = 1$ Bose-Hubbard モデルを用いる。ここに再度 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルを載せておく。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\substack{n.n. \\ \sigma=0,\pm 1}} \left(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma} + H.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\hat{\mathbf{S}}_i^2 - 2n_i) \quad (4.1)$$

σ はスピンの S_z 成分を表す。前章の Bose-Hubbard モデルのときと同様、静的な基底状態を求める際のみ化学ポテンシャル項 $-\mu \sum_i n_i$ を考慮する。

4.2.2 Gutzwiller 近似と運動方程式

スピンレスの場合の Gutzwiller 波動関数は自然に以下の $S = 1$ Gutzwiller 波動関数へ拡張される。

$$|\Psi\rangle = \prod_j \left[\sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} f_j(n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}) |n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}\rangle \right] \quad (4.2)$$

$n_{j,\sigma}$ は j サイトにおける $S_z = \sigma$ の成分の粒子数である。また、超流動流の運動量を

$$a_{j\sigma} \mapsto a_{j\sigma} e^{ipj}, \quad a_{j\sigma}^\dagger \mapsto a_{j\sigma}^\dagger e^{-ipj} \quad (4.3)$$

のようにスピン成分によらない一様な流れとして導入する。スピンレスの場合と同様に時間を含んだ変分法により運動方程式を導出すると

$$\begin{aligned}
 i\dot{f}_j(n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}) = & \frac{U_0}{2} n_j (n_j - 1) f_j(n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}) \\
 & + \frac{U_2}{2} (n_{j,1}^2 - 2n_{j,1}n_{j,-1} + n_{j,-1}^2 - n_{j,1} - n_{j,-1} + 2n_{j,1}n_{j,0} + 2n_{j,0}n_{j,-1}) \\
 & \times f_j(n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}) \\
 & + U_2 \sqrt{n_{j,1}(n_{j,0} + 1)(n_{j,0} + 2)} n_{j,-1} f_j(n_{j,-1} - 1, n_{j,0} + 2, n_{j,1} - 1) \\
 & + U_2 \sqrt{(n_{j,1} + 1)n_{j,0}(n_{j,0} - 1)(n_{j,-1} + 1)} f_j(n_{j,-1} + 1, n_{j,0} - 2, n_{j,1} + 1) \\
 & - tz (\sqrt{n_{j,-1}} f_j(n_{j,-1} - 1, n_{j,0}, n_{j,1}) \psi_{j,-1} + \sqrt{n_{j,-1} + 1} f_j(n_{j,-1} + 1, n_{j,0}, n_{j,1}) \psi_{j,-1}^*) \\
 & - tz (\sqrt{n_{j,0}} f_j(n_{j,-1}, n_{j,0} - 1, n_{j,1}) \psi_{j,0} + \sqrt{n_{j,0} + 1} f_j(n_{j,-1}, n_{j,0} + 1, n_{j,1}) \psi_{j,0}^*) \\
 & - tz (\sqrt{n_{j,1}} f_j(n_{j,-1}, n_{j,0} - 1, n_{j,1}) \psi_{j,1} + \sqrt{n_{j,1} + 1} f_j(n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1} + 1) \psi_{j,1}^*)
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_{j,1} = & \frac{1}{z} \left[\sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j+1,1} + 1} f_{j+1}^*(n_{j+1,-1}, n_{j+1,0}, n_{j+1,1}) f_{j+1}(n_{j+1,-1}, n_{j+1,0}, n_{j+1,1} + 1) e^{ip} \right. \\
 & + \sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j-1,1} + 1} f_{j-1}^*(n_{j-1,-1}, n_{j-1,0}, n_{j-1,1}) f_{j-1}(n_{j-1,-1}, n_{j-1,0}, n_{j-1,1} + 1) e^{-ip} \\
 & \left. + \sum_{j'} \sum_{n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}} \sqrt{n_{j',1} + 1} f_{j'}^*(n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}) f_{j'}(n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1} + 1) \right] \tag{4.5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_{j,0} = & \frac{1}{z} \left[\sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j+1,0} + 1} f_{j+1}^*(n_{j+1,-1}, n_{j+1,0}, n_{j+1,1}) f_{j+1}(n_{j+1,-1}, n_{j+1,0} + 1, n_{j+1,1}) e^{ip} \right. \\
 & + \sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j-1,0} + 1} f_{j-1}^*(n_{j-1,-1}, n_{j-1,0}, n_{j-1,1}) f_{j-1}(n_{j-1,-1}, n_{j-1,0} + 1, n_{j-1,1}) e^{-ip} \\
 & \left. + \sum_{j'} \sum_{n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}} \sqrt{n_{j',0} + 1} f_{j'}^*(n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}) f_{j'}(n_{j',-1}, n_{j',0} + 1, n_{j',1}) \right] \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi_{j,-1} = & \frac{1}{z} \left[\sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j+1,-1} + 1} f_{j+1}^*(n_{j+1,-1}, n_{j+1,0}, n_{j+1,1}) f_{j+1}(n_{j+1,-1} + 1, n_{j+1,0}, n_{j+1,1}) e^{ip} \right. \\
 & + \sum_{n_{j,-1}, n_{j,0}, n_{j,1}} \sqrt{n_{j-1,-1} + 1} f_{j-1}^*(n_{j-1,-1}, n_{j-1,0}, n_{j-1,1}) f_{j-1}(n_{j-1,-1} + 1, n_{j-1,0}, n_{j-1,1}) e^{-ip} \\
 & \left. + \sum_{j'} \sum_{n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}} \sqrt{n_{j',-1} + 1} f_{j'}^*(n_{j',-1}, n_{j',0}, n_{j',1}) f_{j'}(n_{j',-1} + 1, n_{j',0}, n_{j',1}) \right] \tag{4.7}
 \end{aligned}$$

が得られる。この運動方程式に基づき超流動流崩壊のシミュレーションを行う。

4.2.3 状況設定と重要な物理量

基本的な状況設定と重要な物理量はスピン自由度のない解析と同様であり、2 次元光格子系での計算を行う。超流動流は加速度 α で加速させる。ただし、 $U_2 < 0$ の強磁性的なスピン間相互作用の場合の基底状態はサイト内の合成スピンを回転させた多くの状態が縮退しているが、初期状態としてはスピン成分が全て $S_z = 1$ となった基底状態を選ぶことにする。

4.3 結果

4.3.1 崩壊のダイナミクスとスピンの挙動

図 4.1 にはサイトあたりの平均粒子数 $\bar{n} = 1$ 、 $\alpha = 0.005t$ 、 $U_0 = 10$ としたときの $S = 0$ (スピンレス) Bose-Hubbard モデルと $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにより計算された $n_{k=p}$ の時間変化を示す。 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの U_2 は $U_2/U_0 = -0.3$ と $U_2/U_0 = 0.3$ に定めた。磁場などの外場はなく時間発展においてスピンの全 S_z 成分 ($S_z = \sum_i S_{i,z}$) は保存されている。図 4.1 ではどの場合でも超流動流の運動量 $p(t)$ の増加に伴って $n_{k=p}$ は徐々に減少し、ある運動量で動的不安定性の発生を表す急激な現象を示している。超流動の崩壊は $S = 0$ (スピンレス) Bose-Hubbard モデルでは $p_d = 0.38$ 、 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの $U_2/U_0 = -0.3$ では $p_d = 0.45$ 、 $U_2/U_0 = 0.3$ では $p_d = 0.44$ の運動量で生じている。つまり、スピン 1 を持つ超流動体はスピンレスの超流動体より臨界運動量が大きいことがわかる。さらに面白いことに、 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの $U_2/U_0 = 0.3$ の初期状態と $S = 0$ Bose-Hubbard モデルの初期状態の凝縮密度はほぼ同じにもかかわらず、臨界運動量は $S = 1$ の場合の方がかなり大きいことも見て取れる。このことから、超流動性を決定づける超流動流の臨界速度は超流動体の静的な凝縮密度のみでは決定しないことがわかる。これは式 (3.31) で表される p_c の決定に、超流動流の運動量を大きくしたときの凝縮密度の変化率 $\frac{\partial n_{k=p}}{\partial p}$ が関与していることに起因する。ここで見られたスピン自由度の臨界運動量への影響は動的不安定性に関する相図を考察する際に議論する。

次に、 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの時間発展においてスピンミキシングがどのように現れているかを示す。 $U_2/U_0 = -0.3$ の場合は全 S_z が保存されているために初期状態

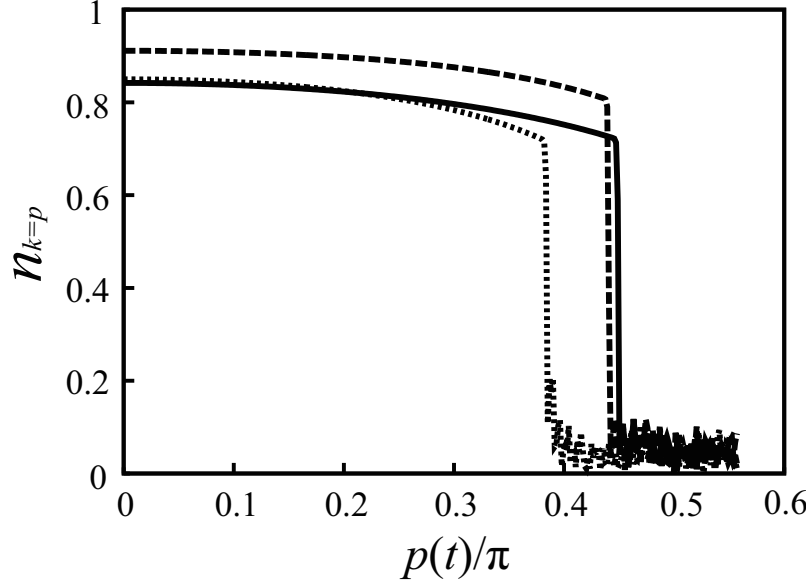


図 4.1 次の 3 つの場合の凝縮密度 $n_{k=p}$ の時間発展: $S = 1$ Bose-Hubbard モデルで $U_2/U_0 = 0.3$ としたもの (実線) と $U_2/U_0 = -0.3$ としたもの (破線)、 $S = 0$ Bose-Hubbard モデル (点線)。運動量 p は時間とともに $p(t) = 0.005t$ にしたがって増加させている。パラメータは $U_0 = 10$ 、 $n = 1$ となっている。崩壊運動量は $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの $U_2/U_0 = 0.3$ の場合に $p_d = 0.45$ 、 $U_2/U_0 = -0.3$ の場合に 0.44 、 $S = 0$ Bose-Hubbard モデルで 0.38 となっている。

であるスピンがすべて $S_z = 1$ になっている状態は固定されスピンミキシングが起こらない。そのためここでは $U_2/U_0 = 0.3$ の反強磁性的相互作用の場合のみ注目する。図 4.2 に $U_0/U_{0c} = 0.2$ (a) と $U_0/U_{0c} = 0.8$ (b) の場合の凝縮密度とスピン成分の割合 n_γ/\bar{n} ($\gamma = 0, \pm 1$) の時間変化を示す。ここで U_{0c} は超流動-Mott 絶縁体転移の臨界相互作用であり、 $U_2/U_0 = -0.3$ のとき $U_{0c} = 37.9$ である。本計算で選んだ初期状態と全 S_z の保存から時間発展中は $n_1 = n_{-1}$ が保たれている。まず $U_0/U_{0c} = 0.2$ では、超流動流の運動量 $p(t)$ を大きくしていくとスピンの混ざり合いが起こり $S_z = 0$ 成分の割合 n_0 が増えていき、その後超流動流の崩壊とともにスピンミキシングも激しく乱雑な振る舞いを示す。一方 $U_0/U_{0c} = 0.8$ では、 n_0 が減少してから崩壊に伴う乱雑な振る舞いを示す。しかし、 $U_0/U_{0c} = 0.8$ の場合にはスピンミキシングの混ざり合いの程度は小さく (時間発展における n_γ の変化率が小さい)、スピン自由度は比較的固定されている。このような振る舞いは $n_i \geq 2$ であるサイトが粒子間相互作用が強い強相関領域では非常に少なくなつてスピンプリップの効果がほとんど効いてこないことに起因すると考えられる。

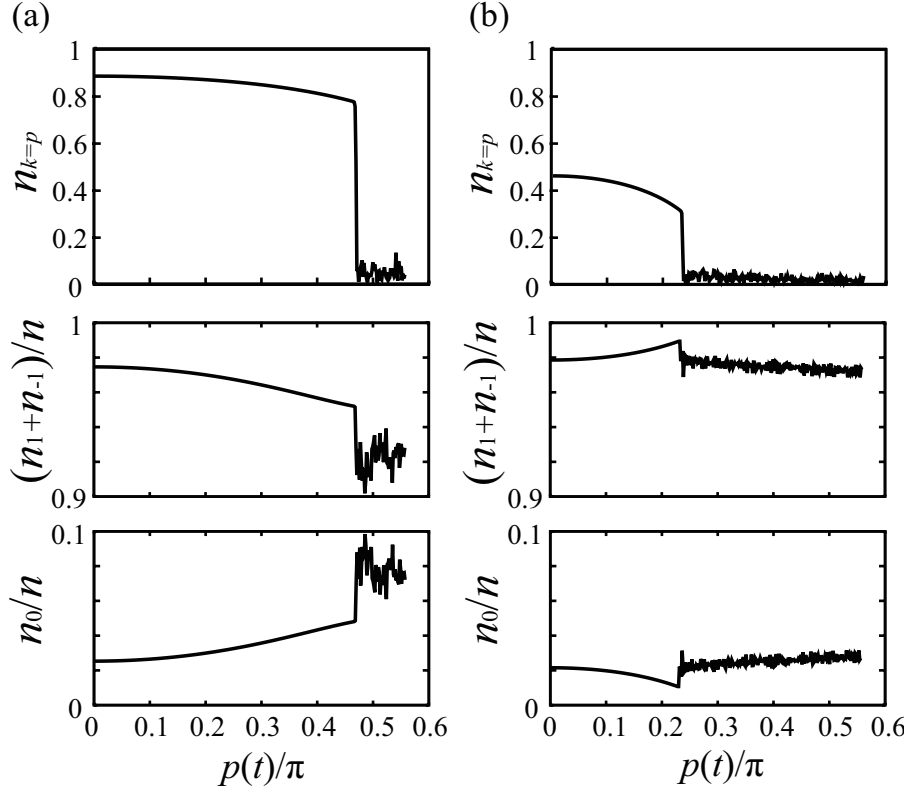


図 4.2 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにおいて $U_2/U_0 = 0.3$ としたときの凝縮密度 $n_{k=p}$ と各スピン成分の粒子数の割合 n_γ/n ($\gamma = 0, \pm 1$) の時間発展。粒子間相互作用は (a) で $U_0/U_{0c} = 0.2$ 、(b) で $U_0/U_{0c} = 0.8$ と定められている。ここで $U_{0c}(= 37.9)$ 超流動-Mott 転移が起こる臨界粒子間相互作用強度である。サイトあたりの平均粒子数は $n = 1$ となっている。

4.3.2 動的不安定性に関する相図

サイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ の場合

以上に凝縮密度とスピンのダイナミクスを示したが、ここではこれらの計算をもとに動的不安定性に関する相図にスピン自由度が与える影響を考えていく。まずスピン成分が全て $S_z = 1$ に固定されていて比較的取り扱いやすい $U_2 > 0$ の場合を考察する。図 4.3 (a) に、 $\bar{n} = 1$ における $S = 0$ Bose-Hubbard モデル (青) と $S = 1$ Bose-Hubbard モデルで $U_2/U_0 = -0.3$ とした場合 (赤) の動的不安定性に関する相図を示す。相図の境界は式 (3.31) によって決定される p_c である。相図の境界より左下側では超流動流は安定で、右上側では超流動流は動的不安定により不安定となる。まず、相図の基本的な傾向として、

$S = 0$ の場合も $S = 1$ の場合も $U_0 = 0$ での $p_c = \pi/2$ からそれぞれの $U_0 = U_{0c}$ での $p_c = 0$ までが滑らかにつながった形をしている。ここで、 $S = 0$ の場合には $U_{0c} = 23.3$ 、 $S = 1$ の場合には $U_{0c} = 33.3$ である。相図上のバツ印は $U_0 = 10$ 、 $U_2/U_0 = -0.3$ における p_d を表していて、矢印は p_d を求める際に計算された時間発展の軌跡である。相図とバツ印のずれは、前章で説明したような加速度による遅延効果である。相図は全粒子間相互作用領域で $S = 0$ よりも $S = 1$ の場合の方が安定領域が広がっていることがわかる。

この相図をハミルトニアンから考察する。全ての粒子が $S_z = 1$ であるスピンが固定されている今回の場合には、式 (2.134) において $n_0 = n_{-1} = 0$ とするとハミルトニアンの U_2 項が非常に簡単になって、式 (2.135) のように U_0 項に繰り込まれる。つまり、今回のケースではスピントリプルが起きないために U_2 が U_0 を小さくシフトさせる効果しかもたらさない。よってスピン自由度がない場合と比べると実効的な U_0 が $0.7U_0$ に小さくなったと考えられるため、相図境界は右にシフトする。そのため、図 4.3 (b) のように横軸を $S = 0$ Bose-Hubbard モデルと $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの U_{0c} でそれぞれ規格化すれば、2 つの相図境界は完全に一致する。このようにスピン間相互作用が強磁性的な相互作用である場合はスピンレスの場合と物理的には実質同等である。

次に、スピン間相互作用が反強磁性的な $U_2 > 0$ の場合を議論する。この場合はハミルトニアンのスピントリプル項が残りスピンミキシングが起こるため、強磁性的な場合の簡単な粒子間相互作用の繰り込みでは説明ができなくなる。図 4.4 (a) に $\bar{n} = 1$ における $S = 0$ Bose-Hubbard モデル（青）と $S = 1$ Bose-Hubbard モデルで $U_2/U_0 = 0.3$ とした場合（赤）の動的不安定性に関する相図を示す。この相図から、 $U_0 \lesssim 5$ の領域では $S = 0$ と $S = 1$ の相図境界はほぼ重なり（実際には $S = 1$ の方が微かに下に出ている）、 $U_0 \gtrsim 5$ で徐々に境界が離れていっている。 $U_0 \gtrsim 5$ での境界の分離は基本的に $S = 0$ Bose-Hubbard モデルと $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの超流動-Mott 絶縁体転移の U_{0c} の差からくるものであると考えられる。 $S = 0$ と $S = 1$ の U_{0c} の差に関する簡単な考察は 2.3.2 節で述べている。ここでも簡潔に考察をまとめておくと、 $U_2 > 0$ のスピン間相互作用があるために $-2U_2$ のエネルギー利得を持つ局所スピントリプル状態 $|n_j, S_j, S_{j,z}\rangle = |2, 0, 0\rangle$ （この表式の定義は参考文献 [113] の (23) 式参照）が生じやすくなり、平均粒子数 $\bar{n} = 1$ から粒子数が揺らいだ方が系のエネルギーが得をすることになりスピンレスの場合より Mott 転移をしづらくなるということである。これは基本的に静的な効果である。

それに対して、このような静的な効果を取り除き動的なスピンミキシングの相図への影響を取り出すために、相図の横軸を $S = 0$ Bose-Hubbard モデルと $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの U_{0c} でそれぞれ規格化したものが図 4.4 (b) である。この相図は大

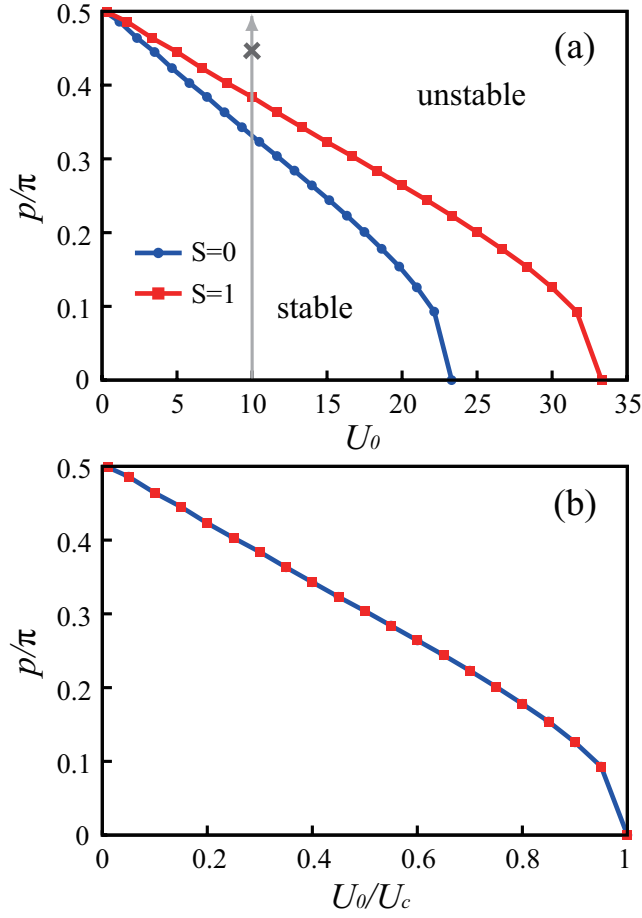


図 4.3 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにおいて $U_2/U_0 = -0.3$ としたときの動的不安定性に関する相図と $S = 0$ Bose-Hubbard モデルでの相図。(a) は横軸が U_0 、(b) では横軸が U_0/U_c となっている。超流動流は相図境界より上側で動的不安定性により不安定になる。(a) における矢印は図 4.1 における時間発展の軌跡を表しており、バツ印は図 4.1 における崩壊運動量を表している。(b) における 2 つの相図境界は完全に一致している。サイトあたりの平均粒子数は $n = 1$ である。

きく $U_0/U_{0c} > 0.6$ の、 $S = 0$ と $S = 1$ の相図境界が一致している領域 (Region1) と、 $U_0/U_{0c} < 0.6$ の相図境界がかい離している領域 (Region2) に分けることができる。 $U_2 < 0$ の強磁性的な相互作用の場合にはスピンミキシングがないために図 4.3 (b) のように相図境界が完全に一致したのに対して、図 4.4 (b) の Region2 における相図境界のかい離は臨界運動量へのスピンミキシングによる動的な効果を表している。

ではまず Region1 の比較的強相関な領域でのスピンミキシングについて考察する。強相関領域では粒子数が大きく揺らがないとし、 $n_{\max} = 2$ であるとする、オンサイトエネ

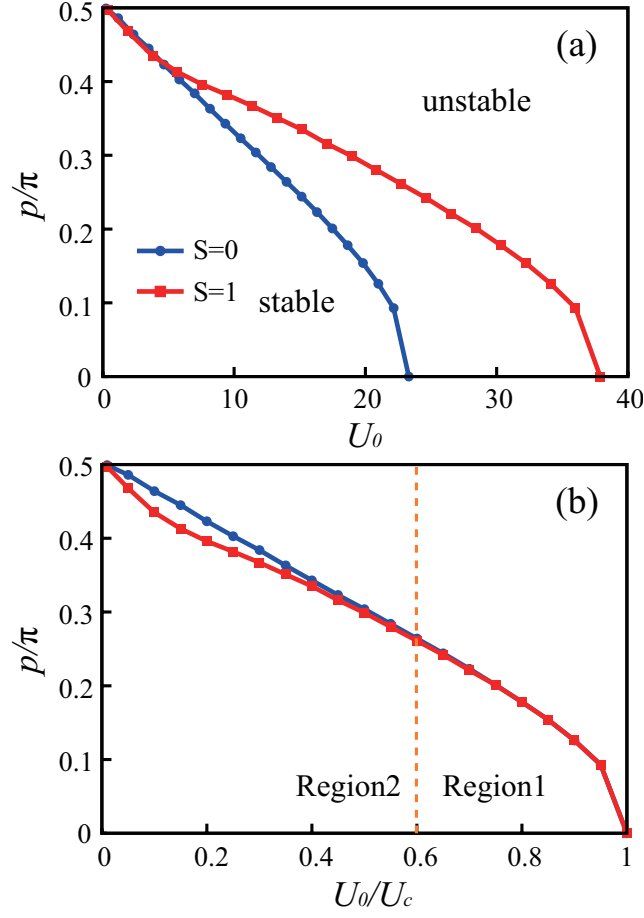


図 4.4 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにおいて $U_2/U_0 = 0.3$ としたときの動的不安定性に関する相図と $S = 0$ Bose-Hubbard モデルでの相図。(a) は横軸が U_0 、(b) では横軸が U_0/U_c となっている。(b) では、相図を $U_0/U_c > 0.6$ の Region1 と $U_0/U_c < 0.6$ の Region2 に分けている。サイトあたりの平均粒子数は $n = 1$ である。

ルギーに関わる系のスピン状態は局所スピンスグレット状態 $|n_j, S_j, S_{j,z}\rangle = |2, 0, 0\rangle \equiv |S_j = 0\rangle$ とスピンが伸びた状態 $|S_j = 2\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{\eta} |2, 2, \eta\rangle$ の割合だけで決定づけられる。局所スピンスグレット状態の割合は

$$\begin{aligned}
 P_0 &= \frac{\langle \Psi_G | S_j = 0 \rangle \langle S_j = 0 | \Psi_G \rangle}{\langle \Psi_G | S_j = 0 \rangle \langle S_j = 0 | \Psi_G \rangle + \langle \Psi_G | S_j = 2 \rangle \langle S_j = 2 | \Psi_G \rangle}, \\
 &= \frac{|\langle \Psi_G | S_j = 0 \rangle|^2}{|\langle \Psi_G | S_j = 0 \rangle|^2 + |\langle \Psi_G | S_j = 2 \rangle|^2}, \\
 &= \frac{\frac{1}{3} |f(0, 2, 0) - \sqrt{2} f(1, 0, 1)|^2}{\sum_{n_{i,1}+n_{i,0}+n_{i,-1}=2} |f(n_{i,1}, n_{i,0}, n_{i,-1})|^2}.
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

と計算され、オンサイトエネルギーが有限となる基底だけで考えれば $|S_j = 2\rangle$ の状態の割合は $P_2 = 1 - P_0$ である。図 4.5 に $p = 0$ (点線) と $p = p_c$ (実線) の P_0 を示す。すると強相関領域では $p = 0$ と $p = p_c$ で P_0 がほぼ変わらないことがわかる。これはスピンミキシングがほとんど起こらず系のスピン状態が変化していないことを示している。これは図 4.2 の結果の傾向とも確かに一致している。このような傾向は強相関領域では粒子数が揺らがないためにサイトに 2 つ以上粒子が存在する状況でしか起こらないスピンフリップの発生確率が非常に低いことに起因すると考えられる。そのため Region1 ではスピンの静的な効果による相図のシフトのみが現れることになる。

次に Region2 のスピンミキシングの効果を考察する。図 4.5 (a) からわかるように、弱相関領域では P_0 の値は $p = 0$ と $p = p_c$ で大きく変化している。これは弱相関領域ではスピンミキシングにより系のスピン状態が大きく変化していることを表している。このようなスピンミキシングが臨界運動量の決定にどのような影響を与えているかは式 (3.31) から考察できる。 p_c は式 (3.31) の形から凝縮密度 $n_{k=p}$ に比例し、超流動流の運動量を大きくしたときの凝縮密度の変化率 $\left| \frac{\partial n_{k=p}}{\partial p} \right|$ に反比例することがわかるが、弱相関領域では凝縮密度は $S = 0$ でも $S = 1$ でも 1 に近くそれらの差は小さい。そのため弱相関領域では凝縮密度の変化率が臨界運動量の決定にとって主要な要素となっている。したがって超流動流の運動量を大きくしていったときに起こるスピンミキシングが凝縮密度をどのように変化させるかを考えればよい。実際に凝縮密度に強く関係する $n_j \geq 3$ のサイトの割合を $p = 0$ (点線) と $p = p_c$ (実線) の場合について計算したのが図 4.5 (b) である。これにより位相のひねりに対して粒子数の揺らぎが抑制されていることがわかるが^{*16}、例えば $U_0/U_{0c} = 0.1$ の場合に、 $p = 0$ と $p = p_c$ の $n_j \geq 3$ サイトの割合の差 $\delta n_{k=p} = n_{k=p=0} - n_{k=p=p_c}$ は $S = 1$ のとき 0.045、 $S = 0$ のとき 0.025 と倍近くの差がある。つまり、スピンミキシングによって運動量を大きくしたときの各サイトの粒子数揺らぎの抑制がかなり強められていることがわかる。そのため、 $\left| \frac{\partial n_{k=p}}{\partial p} \right|$ は $S = 0$ の場合と比べ $S = 1$ の場合の方が大きくなる。つまりスピンミキシングは臨界運動量 p_c を減少させる効果があることが理解できる。

以上をまとめると、強相関領域の Region1 ではスピンミキシングが抑制されているために $S = 0$ Bose-Hubbard モデルと $S = 1$ Bose-Hubbard モデルの動的相図の差は超流動-Mott 絶縁体転移の臨界相互作用 U_{0c} に差にほぼ集約され臨界運動量は $S = 0$ より $S = 1$ の場合の方が大きくなり、弱相関領域の Region2 ではスピンミキシングが超流動流の運動量を大きくしたときの凝縮密度の変化率を大きくするため臨界運動量は $S = 0$

^{*16} これは実効的なホッピング振幅が $t' = t(d + \cos(p) - 1)/d$ となることから明らかである。

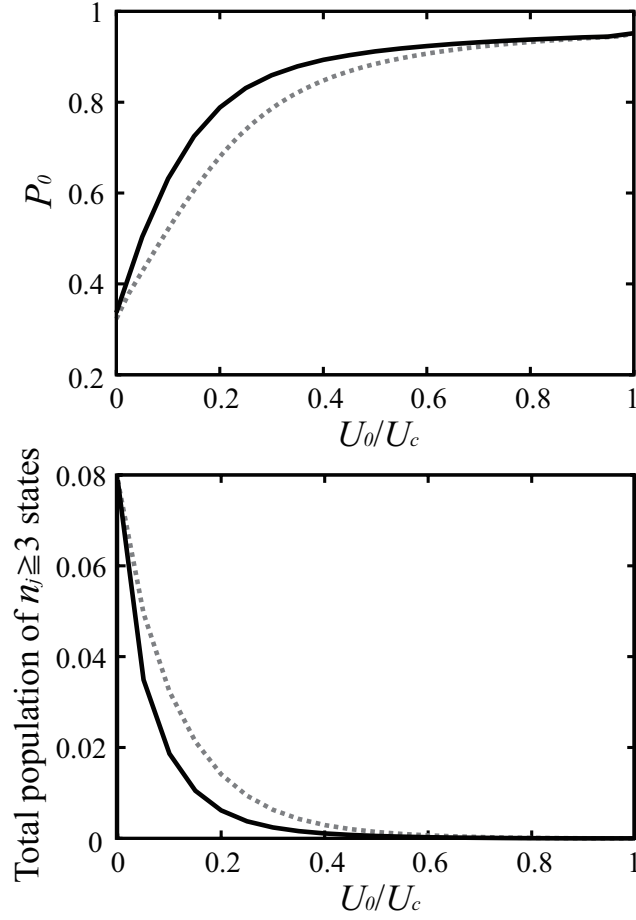


図 4.5 (a): スピンシングレット状態 $|S_j = 0\rangle$ の $p = 0$ (破線) と $p = p_c$ (実線) における占有率。(b): $p = 0$ (破線) と $p = p_c$ (実線) における $n_j \geq 3$ の状態の総占有率。パラメーターは図 4.4 と同様に $U_2/U_0 = 0.3$ 、 $n = 1$ と定めている。

より $S = 1$ の場合の方が小さくなると理解される。

サイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ 以外の場合

ここまでサイトあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 1$ の場合のみ扱ってきたが、スピン間相互作用が反強磁性的な場合の超流動-Mott 絶縁体転移の相図には平均粒子数の偶奇性が現れるという興味深い性質があった。では、そのような量子相転移の粒子数密度依存性は基本的に古典的な不安定性である動的不安定性にも表れるのであろうか。ここでは $\bar{n} = 1$ 以外の平均粒子数について、 \bar{n} が整数の場合と非整数の場合を分けて考察していく。

まず、図 4.6 に $U_2/U_0 = 0.3$ とした $S = 1$ Bose-Hubbard モデルより導出されたサイ

トあたりの平均粒子数が $\bar{n} = 2$ (a)、3 (b)、4 (c) の場合の動的不安定性に関する相図を示す。これらの相図から、動的不安定性に関する相図にも明らかに平均粒子数に関する偶奇性が現れていることがわかる。基本的な傾向としては、 \bar{n} が奇数の場合には $S = 0$ に比べ $S = 1$ の相図の方が安定領域が広がっていて、 \bar{n} が偶数の場合には $S = 0$ に比べ $S = 1$ の相図の方が安定領域が狭まっている。しかし、図 4.6 (b) に示される $\bar{n} = 3$ の場合には、弱相関領域で大きく相図の安定領域が狭まっていることがわかる。これは、 $\bar{n} = 1$ の場合に考察したように、スピンミキシングが臨界運動量を小さくしている効果が表れているためであるが、粒子数が多いためにスピンスリッパが起こりやすくなり、スピンミキシングの臨界運動量抑制効果が $\bar{n} = 1$ のときより強くなっているためであると考えられる。この抑制効果は粒子数が多くなるほど強くなると考えられる。それに対して図 4.6 (a),(c) の $\bar{n} = 2, 4$ の場合には、 U_{0c} がシフトする効果で相図の安定領域が $S = 0$ よりも $S = 1$ で狭まっているが、図 4.6 (d) のように、 $\bar{n} = 2$ の場合に横軸を $S = 0$ と $S = 1$ の U_{0c} でそれぞれ規格化した相図を描くと、相図の安定領域は広がっている。つまり、サイトあたりの平均粒子数が偶数の場合にはスピンミキシングの効果が臨界運動量を大きくするように作用することがわかる。このように、スピンミキシングの作用の仕方にも平均粒子数に関する偶奇性が現れることが明らかになった。

次に、サイトあたりの平均粒子数が非整数の場合の動的相図を図 4.7 に示す。平均粒子数はそれぞれ $\bar{n} = 0.8$ (a)、1.2 (b)、1.8 (c)、2.2 (d) である。平均粒子数が非整数の場合には、粒子間相互作用をいくら強くしても平均粒子数からずれた余剰粒子（平均粒子数の小数部分）の存在のために粒子数の揺らぎが抑えきれず、結果として超流動-Mott 絶縁体転移を示さない。そのため、臨界運動量が強相関領域でも 0 にならないことが知られており [88]、実際に本計算で得られた相図でも $S = 0$ 、 $S = 1$ の両場合で臨界運動量が 0 にならないことが確認できる。また、相図境界は定性的には $S = 0$ と $S = 1$ で一致している。しかし、定量的なずれ方は平均粒子数が非整数においても奇数から少し粒子数がずれた場合と偶数から少し粒子数がずれた場合で偶奇性がはっきり表れていることがわかる。ずれ方の特徴としては、平均粒子数が $\bar{n} = 1$ から少しずれた図 4.7 (a)、(b) では $S = 1$ の場合の臨界運動量が $S = 0$ の場合より大きい粒子間相互作用強度で最小値をとっているのに対し、平均粒子数が $\bar{n} = 2$ から少しずれた図 4.7 (c)、(d) では $S = 1$ の場合の臨界運動量が $S = 0$ の場合より小さい粒子間相互作用強度で最小値をとっている。これは、サイトあたりの平均粒子数が奇数の場合にはスピン間相互作用が粒子数揺らぎを増強しているためにスピン間相互作用が余剰粒子の効果を実効的に強くしてしまい、平均粒子数が偶数の場合にはスピン間相互作用が粒子数揺らぎを抑制しているためにスピン間相互作用が余剰粒子の効果を実効的に弱めていることに起因する。ここで、余剰粒子の効果を弱める・

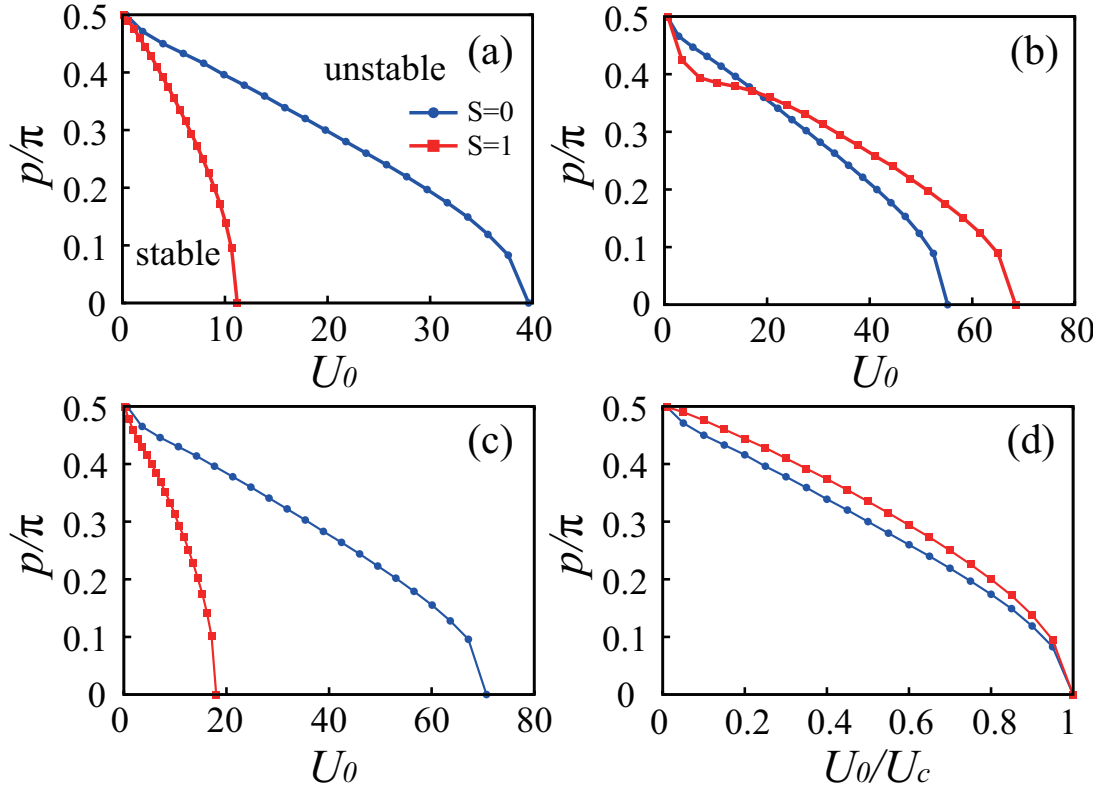


図 4.6 次の 3 つの平均粒子数における $S = 1$ Bose-Hubbard モデルと $S = 0$ Bose-Hubbard モデルでの動的不安定性に関する相図: (a) $n = 2$ 、(b) $n = 3$ 、(c) $n = 4$ 。(d) は (a) の横軸を U_0/U_{0c} と規格化したものとなっている。 U_2/U_0 は $S = 1$ のすべての場合で 0.3 に固定されている。臨界粒子間相互作用は $S = 0$ の場合に $U_{0c} = 39.6$ ($n = 2$)、55.2 ($n = 3$)、70.7 ($n = 4$)、 $S = 1$ の場合に $U_{0c} = 11.2$ ($n = 2$)、68.45 ($n = 3$)、18.0 ($n = 4$) となっている。

強めるというのは、粒子数揺らぎにより余剰粒子とそうでない粒子の差を見えづらくする・見えやすくすることを指す。このように、サイトあたりの平均粒子数が非整数の場合でも、スピン間相互作用により平均粒子数の偶奇性の傾向が残ることが明らかになった。

4.3.3 動的崩壊に伴う密度変調と磁場の印加に対する応答

最後に、動的不安定性に伴う密度変調と磁場の印加に対する超流動流の応答を議論する。ここでは、前章で議論した動的不安定性に伴う密度変調がスピン自由度が入ることでのように変化するか、また磁場を印加したときに崩壊がどのように変化するかを見る。 $S = 1$ Bose-Hubbard モデルにおけるスピン間相互作用強度は $U_2/U_0 = 0.3$ として議論

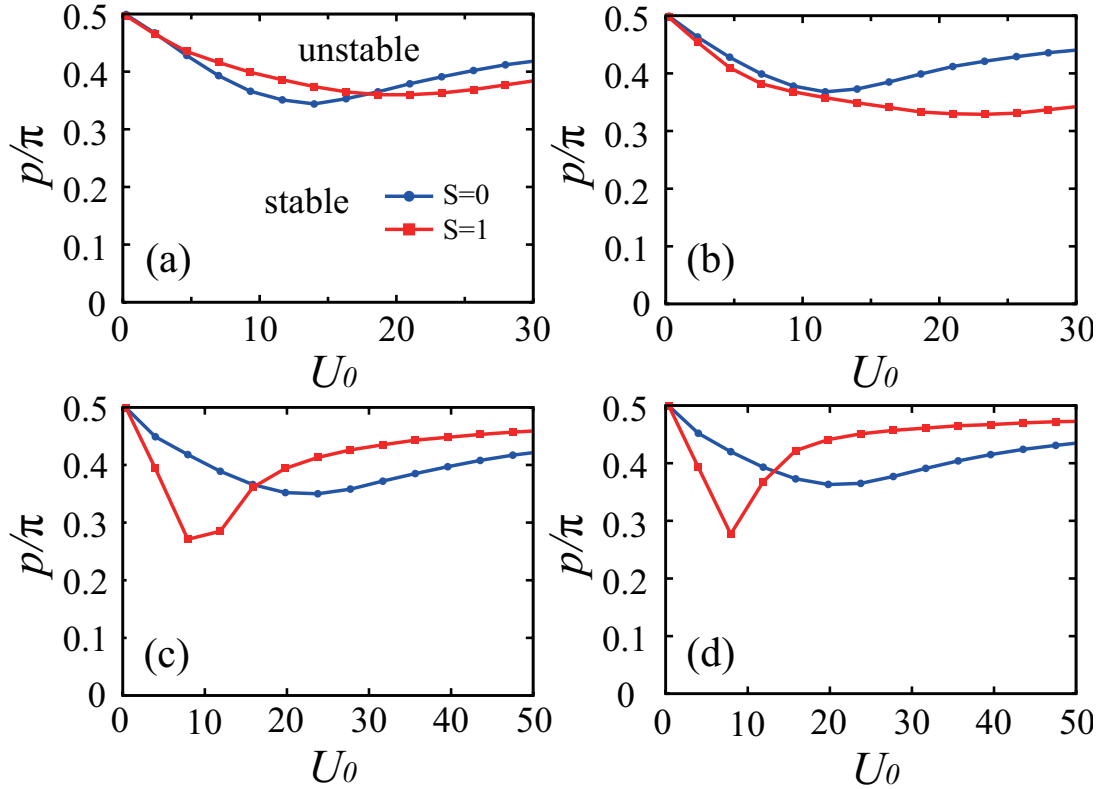


図 4.7 次の平均粒子数に対する動的相図: (a) $n = 0.8$ 、(b) $n = 1.2$ 、(c) $n = 1.8$ 、(d) $n = 2.2$ 。スピン間相互作用は $S = 1$ のすべての場合で $U_2/U_0 = 0.3$ としている。

を進めていく。

図 4.8 (a) に $S_z = 0, \pm 1$ のスピン成分の動的崩壊時の粒子数分布を示す。これを見ると、動的崩壊に伴う密度変調は $S_z = \pm 1$ 成分で全く同様の挙動、 $S_z = 0$ 成分も振幅はことなるものの基本的にはほとんど似た挙動を示していることがわかる。そのため、図 4.8 (b) のようにスピン成分の全てを足した密度変調と $S_z = 1$ 成分と $S_z = -1$ 成分の粒子数の差に比例する磁化分布を見ると、密度変調は生じているが磁化変調は生じていないことがわかる。

それに対して、超流動流に磁場を印加すると各スピン成分のエネルギーに差が生じるため状況が変化する。図 4.9 (a) には、磁場を印加し $S_z = 1$ 成分と $S_z = -1$ 成分の割合を $n_1 : n_{-1} \sim 7 : 3$ とした超流動流の動的崩壊付近での粒子数分布を示した。すると、 $S_z = \pm 1$ の間でエネルギー差が生じたために、波長や振幅について密度変調の発達の仕方も異なっていることがわかる。それに対し、磁場を印加した場合の全粒子の密度分布と磁化分布を見てみると (図 4.9 (b))、密度変調とともに磁化変調が起きていることがわか

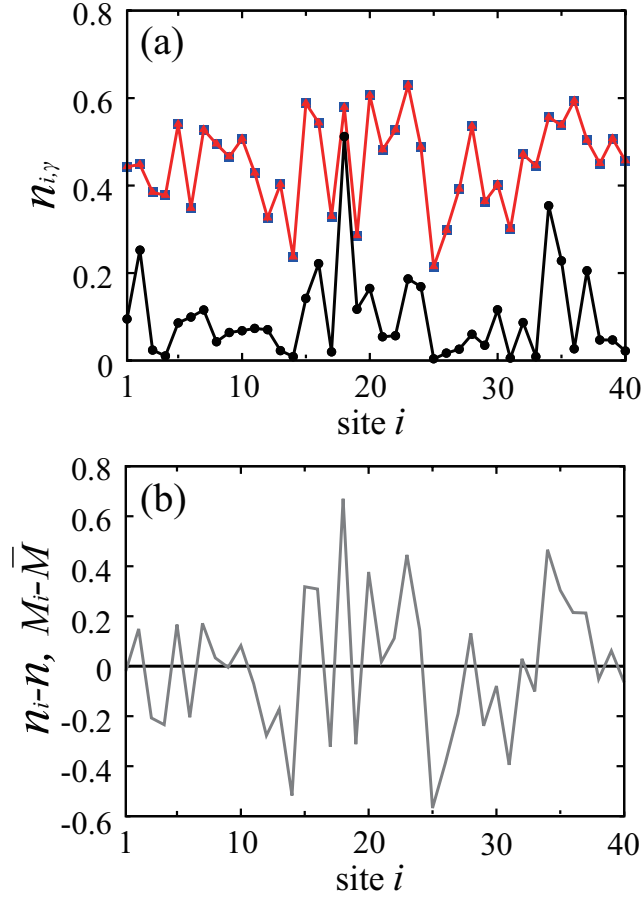


図 4.8 磁場が印加されていない場合の動的崩壊に伴う密度変調。(a): $S_z = 1$ 成分の字通空間における粒子数分布 (三角点)、 $S_z = 0$ の分布 (丸点)、 $S_z = -1$ の分布 (四角点)。 $S_z = \pm 1$ の粒子数分布は完全に一致している。(b): 粒子数 (灰色) と磁化 (黒線) の平均値からのずれの実空間における分布。パラメーターは $n = 1$ 、 $U_0 = 10$ 、 $U_2/U_0 = 0.3$ 、 $\alpha = 0.005$ で固定されている。これらの結果は $p_d/\pi = 0.45$ で超流動流が崩壊したあとの $p/\pi = 0.46$ における分布である。

る。このように、磁場の印加の有無により崩壊時の磁化変調の有無が決定づけられることが明らかになった。また、磁場を印加していない時の崩壊運動量は $p_d/\pi = 0.45$ なのに対し、磁化を印加した場合には $p_d/\pi = 0.427$ と崩壊運動量が小さくなっている。このように、磁場によって超流動性が大きく変化する事実は、磁場による超流動の操作にもつながる可能性があるため注目に値する。

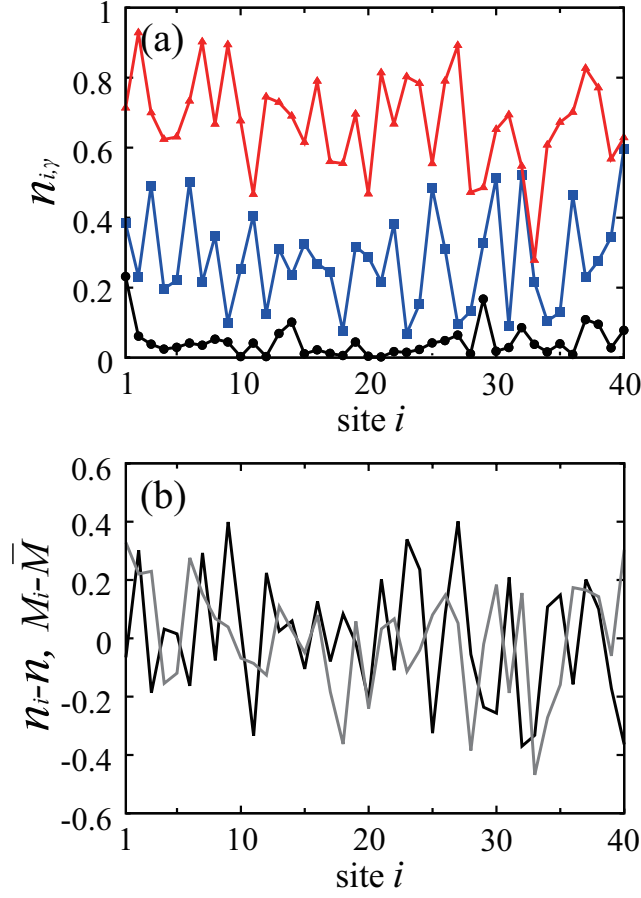


図 4.9 (Color online) 磁場を印加した場合の動的崩壊に伴う密度変調。(a): $S_z = 1$ 成分の字通空間における粒子数分布 (三角点)、 $S_z = 0$ の分布 (丸点)、 $S_z = -1$ の分布 (四角点)。b): 粒子数 (灰色) と磁化 (黒線) の平均値からのずれの実空間における分布。パラメータは図 4.8 と同様 $n = 1$ 、 $U_0 = 10$ 、 $U_2/U_0 = 0.3$ 、 $\alpha = 0.005$ に固定されている。磁場は $p = 0$ でスピン成分を $n_1 : n_{-1} \sim 7 : 3$ と調整するように空間的に一様に印加されている。これらの結果は $p_d/\pi = 0.44$ で超流動流が崩壊したあとの $p/\pi = 0.427$ における分布である。

4.4 まとめ

この章ではスピン自由度が超流動流の動的不安定に与える影響を議論した。そこではまず、スピン自由度が超流動流の臨界運動量に大きく影響することが明らかにされた。これにより、微視的な自由度であるスピン自由度が巨視的な量子現象の古典的な不安定性にまで影響を与えることがわかった。この影響の仕方を明確にするために動的不安定性に関す

る相図を導出したところ、光格子のサイト内のスピン間相互作用が $U_2 < 0$ の強磁性的な場合には、スピントリップ項が 0 になるためにスピンミキシングが起こらず、実質的な物理はスピンレスの場合の変わらないことがわかった。そのため、動的相図境界の $S = 1$ とスピンレスのずれは超流動-Mott 絶縁体転移のクリティカルな U_0 のずれのみで説明できる。それに対し $U_2 > 0$ の場合には、超流動-Mott 絶縁体転移が起こるクリティカルな U_0 のずれだけでは説明できない、スピンミキシングに起因する相図境界のずれが存在することがわかった。そのずれ方は、サイトあたりの平均粒子数が奇数の場合にはスピンレスのときよりも $S = 1$ のときの方が安定領域が弱相関側で減少し、偶数の場合には安定領域が弱相関から強相関側にかけて広がった。これにより、静的な超流動-Mott 絶縁体転移の相図に現れるサイトあたりの平均粒子数に関する偶奇性が動的な相図にも表れることが明らかにされた。このようなスピンミキシングによる相図境界のずれは、超流動流の臨界運動量が、凝縮密度に比例するだけでなく、超流動流の運動量を変化させたときの凝縮密度の変化率に反比例しているためである。これらの結果から、スピン自由度を持つ超流動流の超流動性はスピンの動的な効果によりスピンレスの超流動流の超流動性と大きく異なることが結論付けられる。

第 5 章 結論と今後の研究課題

5.1 結論

本研究ではまず超流動流が動的不安定性により崩壊する際に現れる密度変調のメカニズムとその性質を議論した。そこでは、波数が 0 の励起モードが超流動流の臨界運動量を決めているものの、超流動流に加速度が存在することで有限の波長を持つ密度変調が現れていることを明らかにした。また、弱相関領域では超流動流の運動量を増加させてもエネルギー分散がフォノンの分散を保つのにに対し、強相関領域ではエネルギー分散がフォノン分散から大きくずれるために短波長の密度変調が現れづらくなることを明らかにした。これにより、超流動流の加速度の効果が初めて明らかになり、さらに強相関領域では今まで研究されていた弱相関領域とは励起が大きく異なるため、動的不安定性の性質も変わることが明らかになった。次に、本研究の主題であるスピン自由度が超流動流の動的不安定性に与える影響を議論した。そこでは、スピン自由度が超流動-Mott 絶縁体転移に与える静的な影響だけではなく、スピンミキシングのような動的な効果が動的不安定性に関する相図に影響を与えることを明らかにした。これは超流動-Mott 絶縁体転移が Bose-Einstein 凝縮による凝縮密度だけで定義されるのに対し、臨界運動量で表される超流動性の定義には加えて位相のひねりに対する超流動流の応答も加わるという事実に起因するためであると考えられる。このように、光格子中の超流動性は静的な場合と動的な場合で区別されるべきであり、スピン自由度の効果はどちらにも影響を与え、超流動-Mott 転移の臨界相互作用強度や臨界運動量を変化させることがわかる。

本研究により、古典的な流体力学的不安定性に量子力学的自由度であるスピン自由度が大きく影響を与えることが明らかになった。超流動-Mott 絶縁体のような純粋な量子相転移にスピン自由度が大きく影響することは比較的想像に難くないが、古典的な非平衡現象にもスピン自由度が影響するかどうかは自明ではなかったため、その点が明らかになったのが本研究で最も大きな成果である。さらに、スピン自由度の有無やスピン間相互作用の種類や強さ、サイトあたりの平均粒子数に依存する動的不安定性に関する相図の変化を系統的に明らかにできたことで、光格子中のスピン自由度を持つ超流動体を応用する際の安定性操作などの可能性も考えることができる。

5.2 今後の研究課題

本研究は Gutzwiller 近似という平均場近似的手法によるものであるが、特に今回のようなスピン系や多原子種が含まれる多成分系では平均場からの揺らぎの効果が重要になるため、今後はそのような揺らぎの効果が超流動流の臨界運動量に与える影響も考察する必要がある。これは非平衡現象に対する量子揺らぎの効果という未だほとんど明らかになっていないテーマとなる。また、本研究では各スピン成分が同じ速度を持つ場合を議論したが、系に磁場勾配を印加すれば $S_z = 1$ と $S_z = -1$ の成分を逆向きに流すことも可能である。このようにして生じたスピン流の不安定性は今回の超流動流とは大きく異なる励起現象を示す可能性があり、超流動の内部自由度の効果が今回よりもさらに本質的に現れると考えられる。したがって、超流動に内部におけるスピン流の安定性に関する研究は今後詳細な研究が望まれる。最後に、超流動流に一様磁場を印加した場合に超流動流の臨界運動量に変化したことは前章の結果に示したが、これにより磁場による超流動性の操作の可能性を探索することも今後の研究課題の 1 つとなる。以上のように、スピン自由度を持つ超流動体に関する研究はまだ多くの可能性を秘めており、今後もそのメカニズムや応用の探索が必要である。

参考文献

- [1] J. R. Clow and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **19**, 291 (1967).
- [2] W. J. Trela and W. M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. **19**, 822 (1967).
- [3] G. Kukich, R. P. Henkel, and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **21**, 197 (1968).
- [4] E. Varoquaux, M. W. Meisel, and O. Avenel, Phys. Rev. Lett. **57**, 2291 (1986).
- [5] M. J. Baird, F. R. Hope, and A. F. G. Wyatt, Nature(London) **304**, 325 (1983).
- [6] F. R. Hope, M. J. Baird, and A. F. G. Wyatt, Phys. Rev. Lett. **52**, 1528 (1984).
- [7] G. W. Rayfield and F. Reif, Phys. Rev. **136**, A1194 (1964).
- [8] L. D. Landau, J. Phys. (USSR) **5**, 71 (1941).
- [9] R. P. Feynman, Prog. Low. Temp. Phys. **1**, 17 (1955).
- [10] J. S. Langer and Michael E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **19**, 560 (1967).
- [11] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [12] 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**, 3969 (1995).
- [13] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [14] H. Feshbach, Ann. Phys. **19**, 287 (1962).
- [15] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, W. Ketterle, Science **292**, 476 (2001).
- [16] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature, **415**, 39 (2002).
- [17] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini, and E. Arimondo, Phys. Rev. Lett. **87**, 140402 (2001).
- [18] J. H. Denschlag, J. E. Simsarian, H. Häffner, C. McKenzie, A. Browaeys, D. Cho, K. Helmerson, S. L. Rolston, and W. D. Phillips, J. Phys. B **35**, 3096 (2002).
- [19] D. M. Stamper-Kurn and M. Ueda, Rev. Mod. Phys. **85**, 1191 (2013).
- [20] L. Zhao, J. Jiang, T. Tang, M. Webb, and Y. Liu, Phys. Rev. Lett. **114**, 225302 (2015).

-
- [21] I. Bloch, Nat. Phys. **1**, 23 (2005).
 - [22] M. Greiner, S. Fölling, Nature **453**, 736 (2008).
 - [23] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, Nature **392**, 151 (1998).
 - [24] Ph. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen and B. J. Verhaar, Phys. Rev. Lett. **81**, 69 (1998).
 - [25] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet, and M. Greiner, Science **329**, 547 (2010).
 - [26] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, and S. Kuhr, Nature **467**, 68 (2010).
 - [27] E. Demler and T. Kitagawa, *Strongly correlated systems in atomic and condensed matter physics* (Harvard University, 2010).
 - [28] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (CAMBRIDGE, 2001).
 - [29] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 138 (1962).
 - [30] 上田正仁著, 現代量子物理学 (培風館, 2004).
 - [31] V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
 - [32] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
 - [33] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).
 - [34] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
 - [35] M. D. Girardeau and R. Arnowitt, Phys. Rev. **113**, 775 (1959).
 - [36] M. D. Girardeau, Phys. Rev. A **58**, 775 (1998).
 - [37] I. Bloch, T. W. Hansch, and T. Esslinger, Nature, **403**, 166 (2000).
 - [38] 山田一雄, 大見哲巨著, 超流動 (培風館, 1995)
 - [39] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **20**, 1064 (1950).
 - [40] *Collected papers of L. D. Landau* (Oxford: Pergamon Press, 1985).
 - [41] H. E. Fisher, M. N. Barber, D. Jasnow, Phys. Rev. A **8**, 1111 (1973).
 - [42] J. E. Van Himbergen and S. Chakravarty, Phys. Rev. B **23**, 359 (1981).
 - [43] K. Harada and N. Kawashima, Phys. Rev. B **55**, R11 949 (1997).
 - [44] L. Onsager, Nuovo Cimento Suppl. **6**, 249 (1949).
 - [45] P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. **38**, 298 (1966).
 - [46] O. Avenel and E. Varoquaux, Phys. Rev. Lett. **60**, 416 (1988).
 - [47] J. W. Clow and J. D. Reppy, Phys. Rev. A **5**, 424 (1972).

-
- [48] H. Kojima, W. Veith, E. Guyon, and I. Rudnick, *J. Low Tem. Phys.* **8**, 187 (1972).
- [49] S. Moulder, S. Beattie, R. P. Smith, N. Tammuz, and Z. Hadzibabic, *Phys. Rev. A*, **86**, 013629 (2012).
- [50] K. C. Wright, R. B. Blakestad, C. J. Lobb, W. D. Phillips, and G. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 025302 (2013).
- [51] Z. Hadzibabic, P. Küger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, *Nature (London)*, **441**, 1118 (2006).
- [52] V. Schweikhard, S. Tung, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 030401 (2007).
- [53] R. Desbuquois, L. Chomaz, J. Yefsah, T. Leonard, J. Beugnon, C. Weitenberg, and J. Dalibard, *Nat. Phys.* **8**, 645 (2012).
- [54] J. Choi, S. W. Seo, and Y. Shin, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 175302 (2013).
- [55] J. Taniguchi, R. Fujii, and M. Suzuki, *Phys. Rev. B* **84**, 134511 (2011).
- [56] T. Eggle, M. A. Cazalilla, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 275302 (2011).
- [57] A. Kastberg, W. D. Phillips, S. L. Rolston, and R. J. C. Spreeuw, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1542 (1995).
- [58] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160405 (2001).
- [59] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 080403 (2004).
- [60] M. Raizen, C. Salomon, and Q. Niu, *Phys. Today* **50**, No. 7, 30 (1997).
- [61] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [62] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [63] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [64] J. K. Freericks and H. Monien, *Europhys. Lett.* **26** (7), 545 (1994).
- [65] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **94**, 363 (1954).
- [66] D. S. Jin, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 420 (1996).
- [67] D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, S. Inouye, M. R. Andrews, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 500 (1998).
- [68] P. O. Fedichev and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **63**, 045601 (2001).

-
- [69] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **83**, 2502 (1999).
- [70] R. Onofrio, C. Raman, J. M. Vogels, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **85**, 2228 (2000).
- [71] S. Inouye, S. Gupta, T. Rosenband, A. P. Chikkatur, A. G"orlitz, T. L. Gustavson, A. E. Leanhardt, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **87**, 080402 (2001).
- [72] T. Frisch, Y. Pomeau, and S. Rica, Phys. Rev. Lett. **69**, 1644 (1992).
- [73] T. Winiecki, J. F. McCann, and C. S. Adams, Phys. Rev. Lett. **82**, 5186 (1999).
- [74] M. Crescimanno, C. G. Koay, R. Peterson, R. Walsworth, Phys. Rev. A **62**, 063612 (2000).
- [75] T. W. Neely, E. C. Samson, A. S. Bradley, M. J. Davis, and B. P. Anderson, Phys. Rev. Lett. **104**, 160401 (2010).
- [76] S. Burger, F. S. Cataliotti, C. Fort, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **86**, 4447 (2001).
- [77] F. Cataliotti, L. Fallani, F. Ferlaino, C. Fort, P. Maddaloni, and M. Inguscio, New. J. Phys. **5**, 71 (2003).
- [78] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **93**, 140406 (2004).
- [79] L. De Sarlo, L. Fallani, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. A **72**, 013603 (2005).
- [80] J. Mun, P. Medley, G. K. Campbell, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **99**, 150604 (2007).
- [81] A. J. Ferris, M. J. Davis, R. W. Geursen, P. B. Blakie, and A. C. Wilson, Phys. Rev. A **77**, 012712 (2008).
- [82] M. Machholm, C. J. Pethick, and H. Smith, Phys. Rev. A **67**, 053613 (2003).
- [83] B. Wu and Q. Niu, Phys. Rev. A **64**, 061603 (2001).
- [84] B. Wu and Q. Niu, New J. Phys. **5**, 104 (2003).
- [85] A. Smerzi, A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis, and A. R. Bishop, Phys. Rev. Lett. **89**, 170402 (2002).
- [86] M. Modugno, C. Tozzo, and F. Dalfovo, Phys. Rev. A **70**, 043625 (2004).
- [87] E. Altman, A. Polkovnikov, E. Demler, B. I. Halperin, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **95**, 020402 (2005).

-
- [88] A. Polkovnikov, E. Altman, E. Demler, B. Halperin, and M. D. Lukin, Phys. Rev. A **71** 063613 (2005).
- [89] H.-Y. Hui, R. Barnett, R. Sensarma, and S. Das Sarma, Phys. Rev. A **84**, 043615 (2011).
- [90] E. G. M. van Kempen, S. J. J. M. F. Kokkelmans, D. J. Heinzen, and B. J. Verhaar, Phys. Rev. Lett. **88**, 093201 (2002).
- [91] M.-S. Chang, C. D. Hamley, M. D. Barrett, J. A. Sauer, K. M. Fortier, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, Phys. Rev. Lett. **92**, 140403 (2004).
- [92] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, Nature **396**, 345 (1998).
- [93] J. P. Burke, Jr., C. H. Greene, and J. L. Bohn, Phys. Rev. Lett. **81**, 3355 (1998).
- [94] M. Vengalattore, J. M. Higbie, S. R. Leslie, J. Guzman, L. E. Sadler, and D. M. Stamper-Kurn, Phys. Rev. Lett. **98**, 200801 (2007).
- [95] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. **81**, 5257 (1998).
- [96] E. Demler and F. Zhou, Phys. Rev. Lett. **88**, 163001 (2002).
- [97] A. Imambekov, M. Lukin, and E. Demler, Phys. Rev. A **68**, 063602 (2003).
- [98] K. V. Krutitsky, and R. Graham, Phys. Rev. A **70**, 063610 (2004).
- [99] S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kimura, Phys. Rev. A **70**, 043628 (2004).
- [100] T. Kimura, S. Tsuchiya, and S. Kurihara, Phys. Rev. Lett. **94**, 110403 (2005).
- [101] M. Yamashita and M. W. Jack, Phys. Rev. A **76**, 023606 (2007).
- [102] M. Rizzi, D. Rossini, G. De Chiara, S. Montangero, and R. Fazio, Phys. Rev. Lett. **95**, 240404 (2005).
- [103] S. Bergkvist, I. P. McCulloch, and A. Rosengren, Phys. Rev. A **74**, 053419 (2006).
- [104] V. Apaja and O. F. Syljuåsen, Phys. Rev. A **74**, 035601 (2006) .
- [105] G. G. Batrouni, V. G. Rousseau, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **102**, 140402 (2009).
- [106] Y. Toga, H. Tsuchiura, M. Yamashita, K. Inaba, and H. Yokoyama, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 063001 (2012).
- [107] M. Chang, Q. Qin, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, Nat. Phys. **1**, 111 (2005).
- [108] D. R. Romano and E. J. V. de Passos, Phys. Rev. A **70**, 043614 (2004).
- [109] W. Zhang, D. L. Zhou, M.-S. Chang, M. S. Chapman, and L. You, Phys. Rev.

-
- A **72**, 013602 (2005).
- [110] A. Widera, F. Gerbier, S. Folling, T. Gericke, O. Mandel, and I. Bloch, Phys. Rev. Lett. **95**, 190405 (2005).
- [111] E. M. Bookjans, C. D. Hamley, and M. S. Chapman, Phys. Rev. Lett. **107**, 210406 (2011).
- [112] K. V. Krutitsky and P. Navez, Phys. Rev. A **84**, 033602 (2011).
- [113] M. Yamashita and M. W. Jack, Phys. Rev. A **76**, 023606 (2007).

謝辞

研究指導教員である土浦宏紀准教授には大変お世話になりました。学部生の頃から長い間熱心に指導をしていただき、最近ではゼミや進捗報告などディスカッションの場を多く設けていただくことで多くの考え方を学ばせていただきました。深く感謝いたします。指導教員である佐久間昭正教授には、学部生の頃から研究に対する姿勢など多くを学ばせていただいたほか、研究室が分かれてしまった今でも研究のしやすい環境を整えていただきました。本論文の副査である東北大学応用物理学専攻の小池洋二教授、淡路智准教授には審査の際にそれぞれの分野の視点から貴重なご意見をいただきました。また、筑波大学の都倉康弘教授には NTT のインターンで大変お世話になり、また本論文の副査を引き受けていただきました。共同研究者である NTT 物性科学基礎研究所の山下眞主任研究員とは多くのディスカッションをさせていただき、大学では触れることのできない様々なアイデアや研究に対する考え方を学ばせていただきました。これらの方々に深く感謝の意を表します。本研究室の宮寄博司准教授、清水幸弘准教授にも、研究分野が異なるにも関わらず、研究生生活や研究内容について多くのご助言をいただきました。物質・材料研究機構の梅裕太研究員には、研究室の先輩であったときから多くのディスカッションに付き合っただき、本研究の基礎をともに作り上げていただきました。本研究室の吉岡匠哉助教には本研究に関わることから分野外の多くの物理に関して議論させていただきました。基礎物性研究室の方々には改めてここに感謝の意を表します。また、私生活から研究までさまざまな相談に乗っていただいた基礎物性研究室の同輩や後輩達にも感謝の意を表します。最後に、本研究を行うにあたりお世話になったすべての関係者の方々に深く感謝の意を表します。

浅岡類