

博士学位論文

空間的に不均一な系の超流動流の 安定性の研究

Study of stability of superflow in spatially
non-uniform systems

平成 25 年度

東京大学大学院総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系

國見 昌哉

目次

第 1 章	イントロダクション	7
1.1	背景	7
1.2	本論文の構成	8
第 2 章	Bose-Einstein 凝縮と超流動	9
2.1	Bose-Einstein 凝縮	9
2.1.1	理想 Bose 気体	9
2.1.2	非対角長距離秩序	10
2.2	基底状態における超流動の性質	14
2.2.1	非古典的回転慣性	14
2.2.2	非古典的回転慣性 (線形応答理論による導出)	21
2.3	超流動の準安定性	25
2.3.1	永久流状態	26
2.3.2	Landau の臨界速度	28
2.3.3	Feynman の臨界速度	32
2.3.4	Phase slip	35
第 3 章	Bose-Einstein 凝縮系に対する平均場理論	37
3.1	Gross-Pitaevskii 方程式	37
3.1.1	第 1 量子化表示を用いた導出	38
3.1.2	第 2 量子化表示を用いた導出	40
3.1.3	時間に依存しない GP 方程式	41
3.1.4	量子流体方程式	42
3.1.5	一様解	44
3.1.6	ソリトン解	45
3.1.7	量子渦	48
3.2	Bogoliubov 理論	51

3.2.1	Bogoliubov 変換を用いた導出	51
3.2.2	線形安定性解析を用いた導出	54
3.2.3	Bogoliubov 方程式の性質	55
3.2.4	秩序変数のゆらぎ	57
3.2.5	Bogoliubov 励起	58
3.2.6	Landau 不安定性	60
3.2.7	動的不安定性	62
3.2.8	Quantum depletion	63
3.2.9	ゼロエネルギー解	65
第 4 章	超流動固体の励起スペクトルと超流動流の安定性	69
4.1	イントロダクション	69
4.2	モデル	74
4.2.1	GP 方程式	74
4.2.2	Bogoliubov 方程式	78
4.3	結果	80
4.3.1	基底状態	80
4.3.2	準安定状態	89
4.4	まとめと展望	94
第 5 章	Bose 凝縮体中を一定速度で動くポテンシャル存在下での超流動安定性の解析	97
5.1	イントロダクション	97
5.2	モデル	102
5.2.1	GP 方程式	102
5.2.2	Bogoliubov 方程式	105
5.2.3	計算手法	106
5.3	結果	108
5.3.1	2次元系の結果	108
5.3.1.1	GP 方程式の結果	108
5.3.1.2	Bogoliubov 方程式の結果	117
5.3.2	1次元系の結果	129
5.3.2.1	GP 方程式の結果	129
5.3.2.2	Bogoliubov 方程式の結果	131
5.4	まとめと展望	136

第 6 章	まとめと展望	139
	謝辞	143
付録 A	量子力学における Galilei 変換	145
付録 B	数値計算手法	149
B.1	4 章の数値計算	149
B.1.1	GP 方程式	149
B.1.2	Bogoliubov 方程式	151
B.1.3	共存相の計算	152
B.2	5 章の数値計算	155
B.2.1	GP 方程式	155
B.2.2	Bogoliubov 方程式	157
	参考文献	159
	List of Publications	169

第 1 章

イントロダクション

1.1 背景

超流動とは古くから知られている、現在でも多くの研究者を引きつけてやまない巨視的量子現象の一つである。超流動の名前の由来は、通常の流体が流ることができない細管中を低温では ^4He が流ることができるという実験事実による。この実験を行った Kapitza[1] によりこの現象は超流動と名付けられた。この特異な輸送特性はその後多くの研究が行われ、数多くの興味深い性質が明らかになった。その一つが本論文で着目する臨界速度の存在である。超流動流、すなわち無散逸な流れの速度には上限が存在し、この速度を超えると超流動性が失われる。この速度を臨界速度と呼ぶ。

臨界速度は理論的には Landau[2] や Feynman[3] らの先駆的な研究を始めとして、実験的にも液体 ^4He を中心に活発に研究が行われた [4, 5, 6, 7, 8]。しかしながら、液体 ^4He はその相互作用の強さから理論的に扱うのは難しい。

本研究の舞台として想定するのは冷却原子系である。冷却原子系は Bose-Einstein 凝縮 (Bose-Einstein Condensation, BEC) の実験的な実現 [9, 10, 11] 以来、その性質は現在でも活発に研究されている。重要な特徴として多くのパラメータを実験的に操作可能であることが挙げられる。別の重要な特徴としては希薄な系であるということが挙げられる。このことにより理論と実験の定性的だけでなく、定量的な比較をも可能にしている。特に、本研究でも用いる Gross-Pitaevskii 方程式 [12, 13] と Bogoliubov 方程式 [14] は希薄 Bose 系の様々な性質を明らかにしている。実験的に実時間のダイナミクスを追うことが比較的容易である、という点も超流動の基礎的な研究にとって都合が良い。例えば、BEC の回転による渦格子の形成ダイナミクスは有名である [15]。さまざまな混合系 (2成分 BEC, スピン自由度を持った BEC 等) の実験的な実現 [16, 17]、長距離相互作用の強い BEC の実験的な実現 [18, 19, 20]、光学格子系における超流動-Mott 絶縁体転移 [21]、Feshbach 共鳴 [22] を用いた BEC-BCS クロスオーバーの観測 [23]、レーザーを用いた人

工ゲージ場の実現 [24] 等、様々な冷却原子系にユニークな現象が観測されている。

本博士論文のタイトルにある“空間的に不均一な系”という言葉は二つの意味で用いている。一つは自発的に並進対称性を破った超流動体である。これは超流動固体、または超固体と呼ばれている。この状態は結晶秩序と超流動性という一見すると相反する性質が共存するという不思議な状態である。超流動固体の理論的な提案自体は 1970 年代始めと約 40 年ほど前である [25, 26, 27] が、現在その実現可能性が高まったこともあり注目を集めている。特に、固体 ^4He における Kim と Chan らによるねじれ振り子の実験 [28, 29] や、長距離相互作用する BEC における超流動固体の実現可能性が指摘 [30] されて以来多くの研究が行われている。本研究の目的は、このような自発的並進対称性の破れがある系の超流動流の性質を明らかにすることである。特に、超流動固体中の励起状態の性質から超流動流の安定性の研究を行った。

もう一つは超流動体中を動くポテンシャルがある場合の超流動性を解析した研究である。この系は超流動固体の場合とは異なり、外部ポテンシャルによって並進対称性が陽に破れている系である。このような系ではポテンシャルの速度が臨界速度以上になるとソリトンや量子渦等の位相欠陥を放出し、超流動性を失うことが実験的 [31, 32]、理論的 [33, 34] に知られている。本研究の目的は、この超流動崩壊機構を励起状態、ゆらぎの性質から明らかにすることである。最近のリングトラップ中の BEC の実験 [35, 36] を念頭に置き、リング、またはトーラス状の系に BEC がある場合を考えた。

1.2 本論文の構成

ここでは本博士論文の構成を述べる。2章、3章は先行研究のレビューである。2章では BEC と超流動についてその定義、基本的性質をレビューする。3章は本研究で用いる平均場理論である Gross-Pitaevskii 方程式、および Bogoliubov 理論についてのレビューである。4章、5章で本研究の結果を示す。4章が超流動固体の研究である。ソフトコア型と呼ばれる相互作用 [37] をする Bose 粒子系を平均場近似で扱ったときの性質を調べた。この相互作用を用いたとき基底状態として超流動固体状態が実現することが知られている。流れが無い基底状態に対する結果をレビューした後、流れがある場合の準安定状態の性質を励起状態を調べた結果を報告する。5章では外部ポテンシャルが超流動体の中を動く場合の超流動性を調べた研究結果を示す。この超流動状態をその励起状態を調べることでどのような機構によりソリトン、量子渦生成による超流動の崩壊が起きているかを明らかにした。最後に、6章で以上の結果のまとめと展望を述べる。

第 2 章

Bose-Einstein 凝縮と超流動

本章では、Bose-Einstein 凝縮と超流動についての基本事項をレビューする。特に本章では、系の詳細や近似手法に依存しない性質を中心に議論する。

教科書としては [38, 39] が参考になる。論文では [40, 41] や [42] の appendix が参考になる。

2.1 Bose-Einstein 凝縮

2.1.1 理想 Bose 気体

理想 Bose 気体は、1925 年に Einstein[43] により初めて示された、純粋に量子力学的な相転移を示す系である。

質量 m 、スピン 0 の Bose 粒子 N 個が体積 V の箱に閉じ込められ、温度 T の熱浴に接し、平衡状態が実現している状況を考える。この系の 1 粒子スペクトルは $\epsilon_{\mathbf{k}}^0 \equiv \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ で与えられる。ここで、 \mathbf{k} は波数ベクトルである。化学ポテンシャル μ を決定する式は Bose 分布関数 $f(\epsilon_{\mathbf{k}}^0)$ を用いて

$$n \equiv \frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f(\epsilon_{\mathbf{k}}^0) \equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)} - 1}, \quad (2.1)$$

と書ける。ここで、 n は粒子数密度、 $\beta \equiv 1/(k_B T)$ は逆温度で、 k_B はボルツマン定数である。分布関数はその定義から正でなければならない。このことから理想 Bose 気体の化学ポテンシャルは $\mu < 0$ でなければならない。また、高温になるほど熱的に励起される粒子数が増加することが期待される。このようになるためには $|\mu|$ は T の増加関数でなくてはならない。熱力学極限 ($N, V \rightarrow \infty, n: \text{fixed}$) をとり、和を積分で置き換えると

$$n = n_0(T) + \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon), \quad (2.2)$$

を得る。ここで、 $n_0(T)$ は最低エネルギー準位における粒子数密度で*1、 $D(\epsilon)$ は単位体積あたりの1粒子状態密度であり、今の場合、3次元系を考えているので $\epsilon^{1/2}$ に比例する。式(2.2)右辺第2項は $\mu = 0$ となったとき最大値をとる。このときの温度 T_c とおくと、これは

$$T_c = \frac{2\pi}{k_B [\zeta(3/2)]^{2/3}} \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}, \quad (2.3)$$

で与えられる。ここで、 $\zeta(\cdot)$ はツェータ関数である。この温度よりも温度が低いとき、式(2.2)を満たすためには $n_0(T)$ が有限にならなければならない。 $n_0(T)$ は

$$n_0(T) = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right], \quad (2.4)$$

と書ける。これは $T < T_c$ ではマクロな数の粒子が最低エネルギー準位を占めることを意味している。これが Bose-Einstein 凝縮 (Bose-Einstein condensation, BEC) であり、 $n_0(T)$ が理想 Bose 気体の BEC の秩序変数になっている。

BEC は純粋な量子効果による相転移である。実際に比熱を計算してみると $T = T_c$ においてカスプを持つことがわかる。これは自由エネルギーに特異性が現れたことによるものである。また、別の物理量にも特異性が現れる。例えば、 $T < T_c$ では化学ポテンシャルは温度や密度によらず0である。これにより等温圧縮率

$$\kappa^{-1}(T, n) = n^2 \frac{\partial}{\partial n} \mu(T, n), \quad (2.5)$$

は転移温度以下では常に無限大であることがわかる。等温圧縮率は密度ゆらぎに比例しているので、これは BEC を起こしていれば密度ゆらぎが無限大になることを意味している。このことはあとで述べる超流動性と深くかかわっている。

2.1.2 非対角長距離秩序

前小節では相互作用が無い理想3次元の Bose 気体が BEC を有限温度で起こすことを見た。次に、相互作用が有る場合を考える。この場合には前小節で用いた、「最低エネルギー準位をマクロな数の粒子が占める」、という描像は使えない。なぜなら、相互作用がある多体系の量子状態は1粒子のエネルギー準位では特徴付けることができないからである。よって、BEC の概念を相互作用がある系にも適用できるように拡張する必要がある。これを行ったのが Penrose と Onsager[45] である。以下では彼らが導入した、非対角長距離秩序 (Off-Diagonal Long-Range Order, ODLRO) の概念を説明する*2。

*1 詳細は [44] を参照せよ。

*2 Yang[46] によって、Fermi 粒子系の場合にも拡張された。Fermi 粒子系は単独では凝縮できないので、この場合にはクーパー対の凝縮ということになる。

まず、 N 粒子系の密度行列を $\hat{\rho}$ と書くことにする。これを用いて 1 粒子縮約密度行列 $\hat{\rho}_1$ を次のように定義する：

$$\hat{\rho}_1 \equiv N \text{Tr}_{2, \dots, N} [\hat{\rho}]. \quad (2.6)$$

ここで、 Tr の添字は粒子 2 から N までの自由度についてのトレースをとることを意味する。これをスペクトル分解すると、

$$\hat{\rho}_1 = n_{\max} |\Psi\rangle \langle \Psi| + \sum_i n_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|, \quad (2.7)$$

となる。ここで、 n_{\max} は最大固有値、 $|\Psi\rangle$ が最大固有値 n_{\max} に対応する固有ベクトル、 n_i と $|\Psi_i\rangle$ が最大固有値ではない固有値、固有ベクトルとする。ここで、固有ベクトルについては規格化されている

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi_i | \Psi_i \rangle = 1, \quad (2.8)$$

と仮定する。和については最大固有値以外の状態についての和を表すとする。この最大固有値が $n_{\max} = O(N)$ 、その他の固有値が $n_i = O(1)$ を満たすとき、系は BEC を起こしていると定義する。^{*3}

以上の BEC の定義では物理的意味が明確に見えない。物理的な意味を明確にするため、1 粒子縮約密度行列の座標表示

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \hat{\rho}_1 | \mathbf{r}' \rangle, \quad (2.9)$$

を考える。式 (2.7) により、これは

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = n_{\max} \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle \langle \Psi | \mathbf{r}' \rangle + \sum_i n_i \langle \mathbf{r} | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \mathbf{r}' \rangle, \quad (2.10)$$

と書くことができる。ここで、次の量

$$\Psi(\mathbf{r}) \equiv \sqrt{n_{\max}} \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle, \quad (2.11)$$

を考える。 $|\Psi\rangle$ は規格化されていることを仮定していたので次の式

$$n_{\max} = \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (2.12)$$

が成立する。ここで、規格化条件 (2.8) より、 $\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$ 、 $\langle \mathbf{r} | \Psi_i \rangle$ はともに $O(1/\sqrt{V})$ でなければならない。ここで V は系の体積である。ここで、 N/V を固定し $N, V \rightarrow \infty$ の熱力

^{*3} 複数個の固有値が $O(N)$ になることもあり得るが、簡単のためこのような状態は以下考えないことにする。

学極限を考える。このとき、 n_{\max} のみが $O(N)$ で、それ以外は $n_i = O(1)$ であることと、 $\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$ と $\langle \mathbf{r} | \Psi_i \rangle$ のオーダー評価より、式 (2.10) の第2項は熱力学極限下でゼロになる。よって、1粒子縮約密度行列は

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \rightarrow \Psi(\mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{r}'), \quad (2.13)$$

となる。つまり、BEC が起きる条件は熱力学極限下で式 (2.13) がノンゼロになることであると書き換えられる。式 (2.13) で \mathbf{r} と \mathbf{r}' を行列の足とみなすと非対角項が重要になっていることがわかる。このことを非対角長距離秩序があると呼ぶ。このことから、 $\Psi(\mathbf{r})$ は BEC の秩序変数とすることができる。また、式 (2.12) より、 n_{\max} は凝縮している粒子数と解釈できる。

非対角長距離秩序の物理的意味は1粒子縮約密度行列を場の演算子を用いて書くと明確になる。実際に、 $\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ は

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (2.14)$$

$$\langle \cdots \rangle \equiv \text{Tr}[\hat{\rho} \cdots] / \text{Tr}[\hat{\rho}], \quad (2.15)$$

と書けることが証明できる。ここで、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ は Bose 粒子の場の演算子である。この書き換えにより、1粒子縮約密度行列は一種の相関関数であることがわかった。より具体的に言うと、1粒子縮約密度行列は位置 \mathbf{r} にある粒子を消して、別の位置 \mathbf{r}' に加えた状態への確率振幅である。もし、系が BEC を起こしていないとすると、 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ を大きくしていったときに1粒子縮約密度行列は指数関数的にゼロに近づくと期待される。一方、系が BEC を起こしていると、 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ を無限大にする極限で1粒子縮約密度行列は有限値になる。これは長距離秩序の存在に他ならない。

また、上で説明したことは次のように書かれることもある。一般に、相関関数は $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ で

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \xrightarrow{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \rangle \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (2.16)$$

と書くことができる。ここで、期待値 $\langle \cdots \rangle$ は同じ粒子数を持った状態の期待値ではなく、次のように解釈する：

$$\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \rangle \equiv \langle \varphi_N | \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') | \varphi_{N-1} \rangle, \quad (2.17)$$

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle \equiv \langle \varphi_{N-1} | \hat{\psi}(\mathbf{r}) | \varphi_N \rangle. \quad (2.18)$$

ここで、 $|\varphi_N\rangle$ は粒子数 N の状態、 $|\varphi_{N-1}\rangle$ は $|\varphi_N\rangle$ と粒子数が1だけ異なる状態である。期待値 $\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle$ がノンゼロであるということは長距離秩序が存在することと等価である。

ここで、非対角長距離秩序を用いた BEC の定義が前小節の理想 Bose 気体の結果を再現することを確認する。まず、場の演算子を平面波で展開する：

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (2.19)$$

ここで、 $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ は運動量 \mathbf{k} の状態の消滅演算子である。式 (2.19) を式 (2.14) に代入し、

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.20)$$

を得る。ここで、一様系でかつ平衡状態では $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle$ が成り立つことを用いると ($\hat{n}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$ は運動量 \mathbf{k} の状態の数演算子)、

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle}{V} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.21)$$

となる。熱力学極限をとり、 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ を考えれば、式 (2.21) の第 2 項は指数関数部分が激しく振動するためゼロになり、

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle}{V} \quad (2.22)$$

を得る。確かに、波数ゼロの状態に巨視的な数 ($O(N)$) の粒子数が占有していないと (2.22) 右辺はゼロになる。これは前章の結果とコンシステントである。

以上の例で見たように、ODLRO による BEC の判定法は正しく理想気体の結果を再現した。この形式は相互作用がある場合にも原理的には使えるが、実際に計算するのは容易ではない。ただし、特別な場合では相互作用がある場合にも ODLRO が厳密に存在することが示されている [47]。また、Lieb-Liniger モデル [48] において 1 粒子縮約密度行列の計算が実際に行われている例 [49] がある。実験的には冷却原子系の干渉縞を見る実験 [50] により ODLRO の存在が確認されている。

最後に、式 (2.14) で $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ の場合を考える。これは

$$\rho_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (2.23)$$

と書けるため、1 粒子縮約密度行列の対角項は局所粒子数密度を表すことがわかる。このことから非対角長距離秩序に対応させて、対角長距離秩序 (Diagonal Long-Range Order, DLRO) を粒子数密度に関する秩序であるとする。粒子数密度に関する秩序は結晶秩序、つまり固体秩序に対応する。この場合の秩序変数は、粒子数密度の期待値 $n(\mathbf{r}) \equiv \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle$ の Fourier 変換

$$n(\mathbf{k}) \equiv \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

の有限の \mathbf{k} における値 (Bragg peak) である。これが特定の波数 (逆格子ベクトル) のところで鋭いピークを持てば、粒子数密度が周期性を持つということが言え、その状態が固体状態がどうか判定できる。DLRO については第4章で詳しく議論する。

2.2 基底状態における超流動の性質

前節で見たように、Bose-Einstein 凝縮は一種の同時刻相関関数を使って定義されていた。よって、これは純粋に熱力学的な性質である。BEC と超流動状態、すなわち、転移温度以下で粘性がゼロになる現象、との関係は歴史的には London[51] が初めて指摘した。しかしながら、BEC と超流動の関係はそれほど自明ではない。例えば、2.3.2 で見るように理想 Bose 気体は臨界速度がゼロという意味で超流動性を持たない [2]。また、有限温度の二様な2次元系は BEC を起こさないが、Berezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT) 転移 [52, 53] を起こし、超流動性を示すことが知られている。このことは液体 ^4He の実験 [54] で確認されている。また、2次元性の強いトラップに閉じ込めた冷却原子系の実験 [55, 56, 57] でも BKT 転移的な振る舞いが観測されている。このように、BEC は超流動の必要条件でも十分条件でもない。

本節では、Leggett[27, 40, 41, 39] に基づき、超流動状態の性質を議論する。初めに容器の回転に対する超流動体の特徴的な応答である、非古典的回転慣性を説明する。これは Leggett によると、超流動の最も基本的な性質である。次に、準安定状態の性質である永久流状態の説明する。最後に、本論文の主要なテーマである臨界速度について説明する。

2.2.1 非古典的回転慣性

質量 m の N 個の Bose 粒子が、容器中に閉じ込められ (容器のポテンシャルは $U(\mathbf{r})$ とする)、2粒子間の相互作用が $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ で与えられるような状況を考える。このときの第1量子化表示の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = H\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (2.25)$$

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.26)$$

と与えられる。ここで、 $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ は N 体の波動関数であり、以下のように規格化されているとする：

$$\int d\mathbf{r}_1 \cdots \int d\mathbf{r}_N |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 = 1. \quad (2.27)$$

簡単のために波動関数、ポテンシャル、2体相互作用は y と z には依存しないと仮定する。 x 方向については以下の周期境界条件を課す：

$$\psi(x_1, \dots, x_i + L, \dots, x_N, t) = \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N, t). \quad (2.28)$$

ここで、 L はシステムサイズである。

境界条件 (2.28) の下での基底状態のエネルギーを E_0 と書く。これは時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$H\psi_0(x_1, \dots, x_N) = E_0\psi_0(x_1, \dots, x_N), \quad (2.29)$$

の最小固有値である。また、 $\psi_0(x_1, \dots, x_N)$ を基底状態の波動関数であるとする。

次に、容器が x 方向に一定速度 v で動く場合、つまりポテンシャルが $U(x - vt)$ で与えられる場合を考える。これは今、周期境界条件を考えているので容器の回転とみなすこともできる^{*4}。このときの Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t) = H(t; v) \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t), \quad (2.30)$$

$$H(t; v) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i=1}^N U(x_i - vt) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x_i - x_j), \quad (2.31)$$

で与えられ、 $\psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t)$ に対する境界条件は式 (2.28) と同じであるとする。添字 Lab はこの波動関数はポテンシャルが速度 v で動いているように見える座標系でのものであることを明記するために付けた。以下、この座標系を実験室座標系と呼ぶことにする。ここで、以下の座標変換とゲージ変換を考える^{*5}：

$$x'_i \equiv x_i - vt, \quad (2.32)$$

$$t' \equiv t, \quad (2.33)$$

$$\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N, t') = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left(-mvx_i + \frac{1}{2}mv^2t \right) \right] \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t). \quad (2.34)$$

ここでも、添字 Mov はポテンシャルが静止して見える座標系での波動関数であることを表す。この変換を式 (2.30) と (2.31) に代入することで

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N, t') = H' \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N, t'), \quad (2.35)$$

$$H' \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2} + \sum_{i=1}^N U(x'_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x'_i - x'_j), \quad (2.36)$$

^{*4} 以下の記述で $x_i \equiv R\theta_i$, $R \equiv L/2\pi$, $P \equiv L_z/R$ (L_z は角運動量), $\omega \equiv v/R$ とみなすと、半径 R のリング状の系が角速度 ω で回転している系の問題と等価になる。

^{*5} Galilei 変換に対応する。導出は付録 A を見よ。

のように、ハミルトニアン H の時間依存性と速度依存性を消すことができる。速度依存性は Schrödinger 方程式には含まれないが、境界条件

$$\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_i + L, \dots, x'_N, t') = e^{-imvL/\hbar} \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_i, \dots, x'_N, t'), \quad (2.37)$$

に含まれる。この境界条件は捻れた周期境界条件 (Twisted periodic boundary condition) と呼ばれている [58]。この境界条件のもとでの基底状態のエネルギーを $E(v)$ と書く。時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$H' \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N; v) = E(v) \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N; v), \quad (2.38)$$

となる。容器とともに動く座標系における時間に依存しない Schrödinger 方程式 (2.38) と容器が静止している場合 (2.29) を比較すると、方程式の形は境界条件を除いて全く同じであることがわかる。つまり、容器が動いている系の基底状態を求める問題は捻れた境界条件の下での基底状態を求める問題と等価である。

ここで、容器とともに動く座標系の基底状態のエネルギー $E(v)$ の満たすべき性質について議論する。まず、自明ではあるが $v = 0$ のときは $E(v = 0)$ は E_0 に一致する。次に、時間に依存しない Schrödinger 方程式 (2.38) の複素共役をとると、

$$H' \psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_N; v) = E(v) \psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_N; v), \quad (2.39)$$

を得る。ここで、 $\psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_N; v)$ は以下の境界条件

$$\psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_i + L, \dots, x'_N; v) = e^{imvL/\hbar} \psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_i, \dots, x'_N; v), \quad (2.40)$$

を満たす。これは $\psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_N; v)$ は元の方程式 (2.30) で v を $-v$ としたときの境界条件を満たすことを示している。よって、波動関数の複素共役は

$$\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N; -v) = \psi_{\text{Mov}}^*(x'_1, \dots, x'_N; v), \quad (2.41)$$

となり、逆方向にポテンシャルが動いているときの基底状態の波動関数になっていることがわかる。ゆえに、基底状態のエネルギーは以下の関係式を満たす。

$$E(-v) = E(v). \quad (2.42)$$

また、境界条件 (2.37) は次の変換に対し不変である：

$$v \rightarrow v + \frac{2\pi\hbar}{mL} n \quad (n \in \mathbb{Z}). \quad (2.43)$$

容器とともに動く座標系では Schrödinger 方程式 (2.38) には v は含まれていない。よって、基底状態のエネルギーは境界条件の不変性より、以下の周期性を持つことがわかる：

$$E(v + nv_0) = E(v), \quad (2.44)$$

$$v_0 \equiv \frac{2\pi\hbar}{mL}, \quad (2.45)$$

以上の結果から得られる物理を議論する。エネルギーの周期性 (2.44) により、容器が動いていないときの基底状態のエネルギー E_0 は容器の速度 nv_0 のときの基底状態のエネルギーと等しい:

$$E(nv_0) = E_0. \quad (2.46)$$

これは容器が速度 $v = nv_0$ で動いている状態を容器とともに動く座標系から見た状態と、容器が静止しているときの基底状態が厳密に等しいということを示している。また、容器が静止しているときの基底状態の全運動量 P はゼロであるから、容器が動いている場合の全運動量は、容器とともに動く座標系ではゼロになる。これより、容器が動いている時の全運動量を実験室座標系から見れば、 $Nmnv_0$ になるはずである。以下ではこのことを波動関数を使って陽に示す。今、波動関数は

$$\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N, t'; v = nv_0) = \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t; v = 0), \quad (2.47)$$

を満たす。このとき、(2.47) の左辺の量を実験室座標系の量で書き換えると

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t; v = nv_0) &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left(mnv_0 x'_i + \frac{1}{2} mn^2 v_0^2 t' \right) \right] \\ &\times \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N, t'; v = nv_0), \end{aligned} \quad (2.48)$$

となる。ゆえに、実験室座標系での波動関数の関係は式 (2.47) と (2.48) より、

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t; v = nv_0) &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \left(mnv_0 x_i - \frac{1}{2} mn^2 v_0^2 t \right) \right] \\ &\times \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t; v = 0), \end{aligned} \quad (2.49)$$

となる。すなわち、容器が静止している系の波動関数をゲージ変換すれば容器が $v = nv_0$ で動く場合の状態を実験室系からみた波動関数が得られる。これより、容器が動いている場合の実験室系での全運動量は

$$\begin{aligned} P_{\text{Lab}}(v = nv_0) &= \int dx_1 \cdots \int dx_N \psi_{\text{Lab}}^*(x_1, \dots, x_N, t; v = nv_0) \\ &\times \sum_{i=1}^N \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi_{\text{Lab}}(x_1, \dots, x_N, t; v = nv_0) \\ &= Nmnv_0, \end{aligned} \quad (2.50)$$

となる。ここで、最後の等号で式 (2.49) と容器が回転していない場合の運動量はゼロであることを用いた。

次に、ポテンシャルの速度 v が十分に小さい状況 ($|v| \ll v_0$) を考える。このとき基底状態のエネルギーを v で展開すると、

$$E(v) = E_0 + N \frac{\rho_s}{\rho} \frac{1}{2} m v^2 + O(v^4), \quad (2.51)$$

となる。ここで、式 (2.42) より、基底状態のエネルギーは v の偶関数であることと、エネルギーの示量性を用いた。 v^2 の項の係数の ρ_s/ρ が超流動成分の量を表す超流動密度 (superfluid fraction) であり、以下で定義されている：

$$\frac{\rho_s}{\rho} \equiv \frac{1}{Nm} \left. \frac{\partial^2 E(v)}{\partial v^2} \right|_{v=0}. \quad (2.52)$$

ここで、何故、式 (2.52) で定義された量 ρ_s/ρ が超流動性を表す量になっているかを説明する。もし、系に超流動性が無い場合、容器と流体の間で粘性が働き、基底状態では全ての粒子が容器に引きずられて動くことになる。このとき、容器とともに動く座標系からみた基底状態のエネルギーは速度に依存しない。ゆえに、 $\rho_s/\rho = 0$ となる。一方、系に超流動性があるとき、容器と流体の間で粘性が働かない。よって、基底状態でも一部の粒子は容器に引きずられず、静止したままである。つまり、容器とともに動く座標系から見ると、超流動性を持つ粒子は運動しているように見える。この効果は容器とともに動く座標系における基底状態のエネルギーの速度依存性に反映される。全ての粒子が超流動性を持っている場合 (例えば、並進対称性を持ち、自発的に対称性が破れていない系 [59]) は基底状態のエネルギーの $O(v^2)$ の項は $Nmv^2/2$ となり、このとき式 (2.52) より、 $\rho_s/\rho = 1$ となる。このように、 ρ_s/ρ は系の超流動性を反映する量になっている。2つの座標系における全運動量と全エネルギーの典型的な振る舞いを図 2.1、2.2、2.3、2.4 に示す*⁶。以上の超流動体が容器に追従して運動しないという現象は、非古典的回転慣性、または、この現象を初めて観測した Hess と Fairbank に倣い Hess-Fairbank 効果 [60] と呼ばれている。Leggett[40, 39] によれば、この現象は超流動状態の基底状態 (有限温度ならば平衡状態) の性質を反映しているので、超流動の最も基本的な性質である。

超流動密度の別の見方として、Helicity modulus[61] の考え方がある。ひとまず、ポテンシャルを動かすことや、座標変換のことを忘れると、以上の問題は、境界条件を周期境界条件 (2.28) から捻られた周期境界条件 (2.37) に変えたときの基底状態のエネルギーの増加具合を見る問題と等価である。境界条件の変化に対しエネルギーが増加するということは、系が一種の「固さ」を持っていることに相当する。この考え方は超流動の問題に限らず、広く用いられている。例えば、金属と絶縁体を区別する判定法である Drude weight[62]、スピン系における常磁性、強磁性の判定 [63] に用いられている。

*⁶ 参考文献 [41] にも同様の図があるので、これも参照せよ。

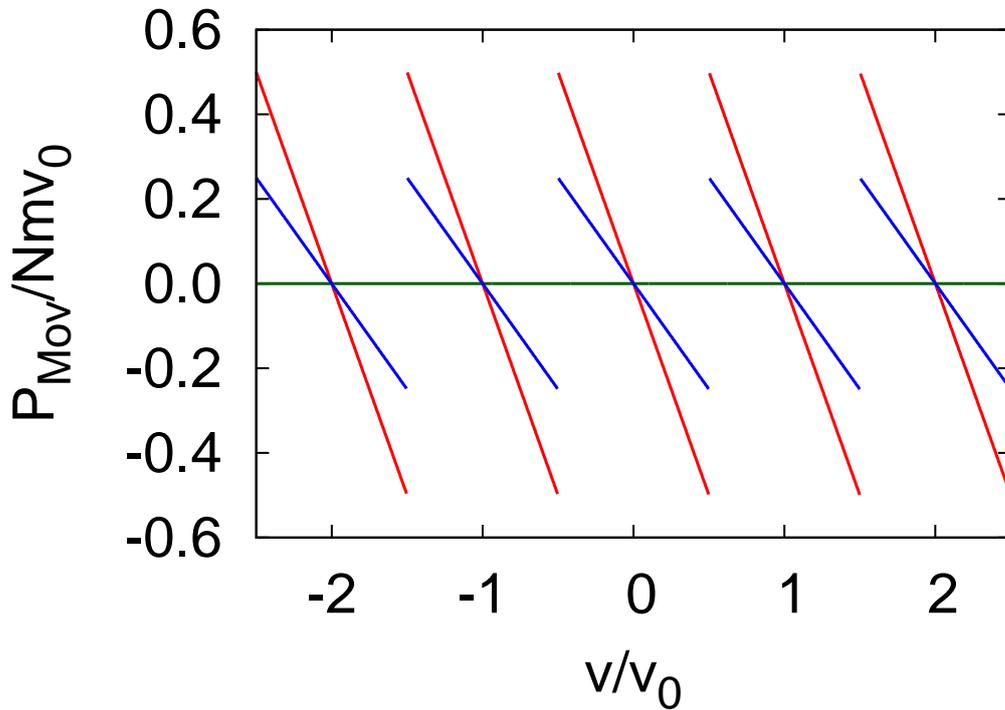


図 2.1 容器とともに動く座標系における基底状態の全運動量の典型的振る舞い。赤線が $\rho_s/\rho = 1$ 、青線が $\rho_s/\rho = 0.5$ 、緑線が $\rho_s/\rho = 0$ の場合を表す。

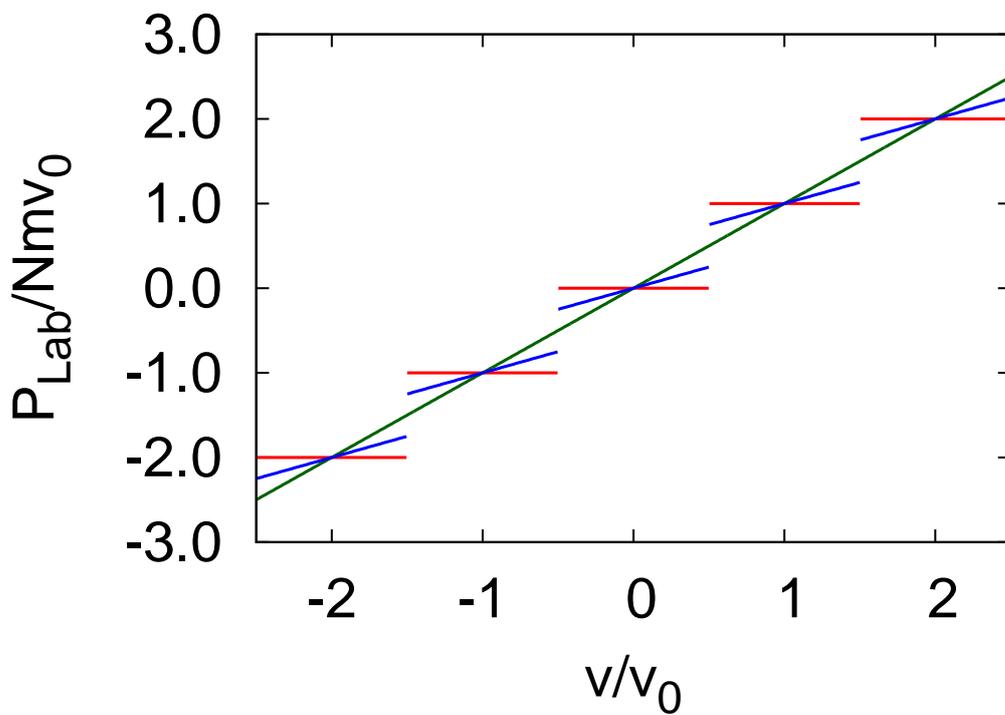


図 2.2 実験室座標系における基底状態の全運動量の典型的振る舞い。赤線が $\rho_s/\rho = 1$ 、青線が $\rho_s/\rho = 0.5$ 、緑線が $\rho_s/\rho = 0$ の場合を表す。

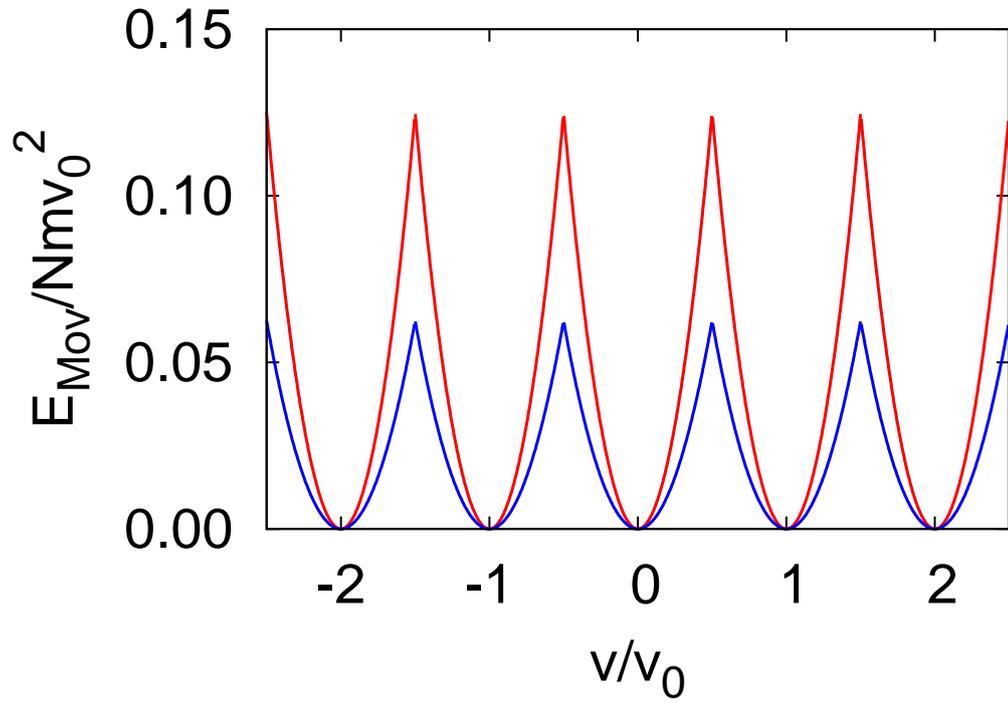


図 2.3 容器とともに動く座標系における基底状態の全エネルギーの典型的振る舞い。赤線が $\rho_s/\rho = 1$ 、青線が $\rho_s/\rho = 0.5$ の場合を表す。 $\rho_s/\rho = 0$ の場合は $E_{\text{Mov}} = 0$ なのでプロットしていない。

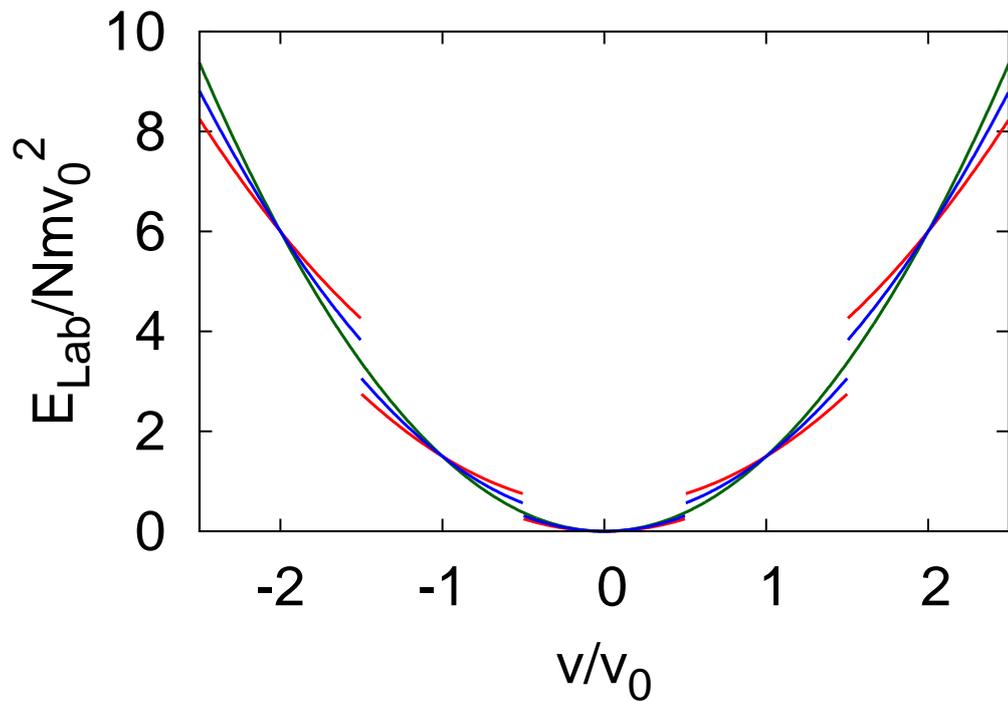


図 2.4 実験室座標系における基底状態の全エネルギーの典型的振る舞い。赤線が $\rho_s/\rho = 1$ 、青線が $\rho_s/\rho = 0.5$ 、緑線が $\rho_s/\rho = 0$ の場合を表す。

2.2.2 非古典的回転慣性 (線形応答理論による導出)

前小節では、超流動密度を基底状態のエネルギーを見ることで導出した。これとは別の方法で超流動密度の表式が Baym[64] により導出された。Baym は線形応答理論を用い定式化した。本小節では [64, 65, 66] を参考に超流動密度の導出を行う。

問題設定は 2.2.1 と同様で、容器が一定速度 \mathbf{v} で動く系を考える。第 2 量子化表示でハミルトニアンを書き下すと、

$$\hat{H}(t) = \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (2.53)$$

となる。ここで、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})(\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}))$ はスピンゼロの Bose 粒子の消滅 (生成) 演算子、 $U(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$ が容器を表す外場、 \hat{H}_{int} は相互作用ハミルトニアンである。ここでは 2.2.1 の問題を有限温度に拡張して考える。2.2.1 で議論したように、基底状態 (有限温度では平衡状態) では超流動性を持つ粒子は容器に引きずられることはない。一方、超流動性を持たない常流動成分は容器に引きずられる。平衡状態が実現すると、容器とともに動く座標系から見ると、常流動成分は静止しているように見える。この現象をハミルトニアン (2.53) を使い、平衡統計力学に基づき解析することはできない。なぜなら、ハミルトニアン (2.53) は時間に陽に依存しており、これを素朴に平衡状態における密度行列の公式 $\hat{\rho} \equiv e^{-\beta \hat{H}} / Z$ に代入することはできないからである (β は逆温度、 Z は分配関数)。容器が動く系の平衡状態を考える際にはハミルトニアンとして式 (2.53) ではなく、容器とともに動く系のハミルトニアンを実験室系の変数を用いて表した

$$\hat{H}' \equiv \hat{H} - \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{P}}, \quad (2.54)$$

$$\hat{H} \equiv \hat{H}(t=0), \quad (2.55)$$

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv -\frac{i\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}) - \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right], \quad (2.56)$$

を考えれば良いことがわかっている。ここで、 $\hat{\mathbf{P}}$ は全運動量演算子である。このときの密度行列は

$$\hat{\rho} \equiv \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}'}, \quad (2.57)$$

で与えられる。

ここで、容器の速度は十分小さい状況を考える。これにより、式 (2.54) の $-\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{P}}$ の項を摂動項とみなすことができる。以下では、容器を動かすことにより生じる実験室座標系から見た粒子流密度の期待値 $\Delta \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ を線形応答理論に基づき計算する。この量は容器

に追隨する常流動成分に比例するはずである。久保公式 [67] によれば、 $\Delta \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ は

$$\Delta J_i(\mathbf{r}, t) = \frac{im}{\hbar} \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{J}_i(\mathbf{r}, t), \hat{J}_j(\mathbf{r}', t')] \rangle_{\text{eq}} v_j e^{\epsilon t'}, \quad (2.58)$$

で与えられる。ここで、 i と j は座標のインデックス、 $\epsilon (> 0)$ は収束因子、 $\langle \dots \rangle_{\text{eq}}$ 平衡状態における期待値

$$\langle \dots \rangle_{\text{eq}} \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}} \dots], \quad (2.59)$$

を表す。ここで、以下の量

$$\gamma_{ij}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') \equiv \langle [\hat{J}_i(\mathbf{r}, t), \hat{J}_j(\mathbf{r}', t')] \rangle_{\text{eq}}, \quad (2.60)$$

$$\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \gamma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega), \quad (2.61)$$

を導入する。これらを式 (2.58) に代入し、

$$\Delta J_i(\mathbf{r}, t) = \frac{im}{\hbar} \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)}{i\omega + \epsilon} v_j e^{\epsilon t} \quad (2.62)$$

を得る。 $t = 0$ のとき、今考えているハミルトニアンに一致するので $t = 0$ 、 $\epsilon \rightarrow +0$ とし、

$$\begin{aligned} \Delta J_i(\mathbf{r}) &= m \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)}{\hbar\omega} v_j \\ &\equiv \rho_{ij}^n(\mathbf{r}) v_j, \end{aligned} \quad (2.63)$$

を得る。ここで、常流動密度テンソル $\rho_{ij}^n(\mathbf{r})$ を定義した。上記の導出でわかるように、常流動密度は容器を動かしたときの系の応答で特徴付けられる。すなわち、輸送係数の一種になっていることがわかる。

ここで、非摂動状態が一様な場合を考える。このとき、 $\gamma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$ は $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ の関数なので、フーリエ分解を用いて

$$\gamma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) \equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.64)$$

と書ける。ここで、 x, y, z 方向の長さはそれぞれ L_x, L_y, L_z で、周期境界条件を課してあるとする。 $V \equiv L_x L_y L_z$ は系の体積である。ここで、次の関数を導入する：

$$\Delta(k_i) \equiv \frac{1}{2\pi} \frac{\sin(k_i L_i / 2)}{k_i / 2}. \quad (2.65)$$

これより、常流動密度テンソルは

$$\rho_{ij}^n(\mathbf{r}) = \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Delta(k_x) \Delta(k_y) \Delta(k_z) \frac{\gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}, \quad (2.66)$$

となる。ここで、 $\gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$ を縦成分と横成分に分ける：

$$\gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{k_i k_j}{k^2} \gamma_L(\mathbf{k}, \omega) + \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \gamma_T(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.67)$$

$$\gamma_L(\mathbf{k}, \omega) \equiv \sum_{i,j} \frac{k_i k_j}{k^2} \gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.68)$$

$$\gamma_T(\mathbf{k}, \omega) \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.69)$$

また、 $\mathbf{v} = v \mathbf{e}_x$ (\mathbf{e}_x は x 方向の単位ベクトル) とする。このとき熱力学極限下における $\rho_{xx}^n(\mathbf{r})$ を考える。すると、計算結果は熱力学極限の順序に依存し得ることがわかる。これを以下で示す。まず、 y, z 方向の熱力学極限をとった後、 x 方向の熱力学極限をとることを考える。このとき、

$$\Delta(k_i) \xrightarrow{L_x \rightarrow \infty} \delta(k_i), \quad (2.70)$$

の関係を用い、和を積分に直すと、常流動密度は

$$\begin{aligned} & \lim_{L_x \rightarrow \infty} \left[\lim_{L_y, L_z \rightarrow \infty} \rho_{xx}^n(\mathbf{r}) \right] \\ &= \lim_{L_x \rightarrow \infty} \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2\pi}{L_x} \sum_{k_x} e^{ik_x x} \Delta(k_x) \frac{\gamma_{xx}(k_x, k_y = 0, k_z = 0, \omega)}{\omega} \\ &= \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_L(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}, \end{aligned} \quad (2.71)$$

となる。最後の等号で式 (2.67) を用いた。一方、逆に、 x 方向の熱力学極限をとった後、 y, z 方向の熱力学極限をとると、同様の計算で

$$\lim_{L_y, L_z \rightarrow \infty} \left[\lim_{L_x \rightarrow \infty} \rho_{xx}^n(\mathbf{r}) \right] = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_T(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}, \quad (2.72)$$

を得る。このように、熱力学極限の順序で異なる結果になり得ることがわかる。

式 (2.71) と (2.72) の違いを以下で具体的に見ていく。式 (2.71) の極限は容器を動かす方向と垂直な方向の熱力学極限を先にとるものであった。この状況は、図 2.5(a) で示したように、 x 方向に閉じている容器を動かすことに対応している。閉じた容器を一定速度 v で動かしているので、このときの流体の粒子流密度は $\rho \mathbf{v}$ となる。ここで、 ρ は全粒子数密度である。よって、この極限では

$$\rho = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_L(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}, \quad (2.73)$$

を得る。つまり、縦応答では超流動性を見ることはできない。この式は粒子数保存則に基づく、f-sum ルールを用いても証明することができる [64, 65, 66]。

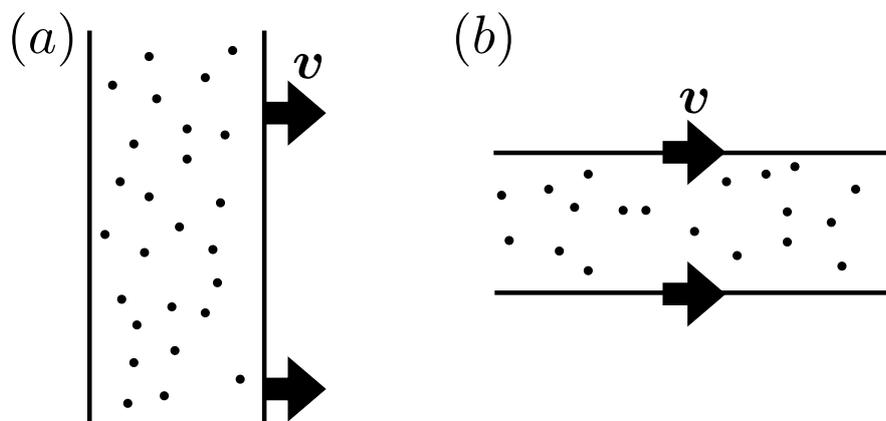


図 2.5 (a) 有限の長さの容器を速度 v で並進する様子を表した図。(b) 無限に長い方向に容器を動かす状況を表した図。

一方、式 (2.72) で用いた極限に対応するのが図 2.5(b) である。すなわち、無限に長い方向に向かって容器を動かすという状況に対応している。常流動成分は容器の壁との間の相互作用により粘性を感じる。その結果、十分時間が経った後は平衡状態に達し、常流動成分は容器と同じ速度で動く状態が実現する。よって、このときの流体の実験室座標系から見た粒子流密度は常流動密度 ρ_n を用いて、 $\rho_n v$ で与えられる。ゆえに、常流動密度は横応答を用いて

$$\rho_n = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{m}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\gamma_T(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}, \quad (2.74)$$

と表すことができる。全粒子数密度から常流動密度を引くことにより、超流動密度 ρ_s は

$$\rho_s \equiv \rho - \rho_n, \quad (2.75)$$

と定義される。

もし系が超流動性を持っていなければ $\rho_n = \rho$ なので、結果は極限の取り方に依存しない。極限の取り方に依存して結果が変わるということが超流動性を獲得するのに必要である。これは、粒子流密度相関関数 $\gamma_{ij}(\mathbf{k}, \omega)$ が $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ で特異的になっていることを意味する。つまり、粒子流密度の長距離相関が超流動性を生み出していると言える。

最後に、上記の現象は古典系では起きないことを指摘しておく。なぜなら、古典系では粒子流密度相関関数は運動量相関関数に対応するが、これはエネルギー等分配則により特異性を持つことは決して無いからである。

2.3 超流動の準安定性

前節では、超流動状態の基底状態 (有限温度では平衡状態) の性質を議論した。しかし、超流動が示す非自明な性質は基底状態だけではなく、その励起状態にも現れる。例えば、2.3.1 で説明するような永久流状態がその一例である。ここでは、まず具体例を示す前に、基底状態が満たす一般的性質について [41, 39] をもとに議論する。

2.2.1 と全く同じ状況、つまり、容器が一定速度 v で動いている系を考える。このときの基底状態の波動関数を $\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N : v)$ と書くことにする。これを用いて次の波動関数を定義する：

$$\bar{\psi}_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N : v) \equiv \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N m n v_0 x'_i \right] \psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N : v). \quad (2.76)$$

ここで、 n はゼロでない整数であるとする。この波動関数は捻られた境界条件 (2.37) を満たすが、系が並進対称性を持っていない限り Schrödinger 方程式のエネルギー固有状態にはなっていないことに注意が必要である。新しく作った状態 (2.76) におけるエネルギーの期待値を $\bar{E}_{\text{Mov}}(v)$ とすると、基底状態のエネルギー $E_{\text{Mov}}(v)$ との差 $\Delta E_{\text{Mov}}(v) \equiv \bar{E}_{\text{Mov}}(v) - E_{\text{Mov}}(v)$ は

$$\Delta E(v) = n v_0 P_{\text{Mov}}(v) + N \frac{1}{2} m (n v_0)^2, \quad (2.77)$$

となる。ここで、 $P_{\text{Mov}}(v)$ は容器とともに動く座標系から見た基底状態における全運動量である。ここで、新しく作った状態 (2.76) のエネルギーは、元の状態 $\psi_{\text{Mov}}(x'_1, \dots, x'_N : v)$ が基底状態であるという仮定より、元の状態のエネルギー以上にならなければならない。よって、 $\Delta E(v) \geq 0$ という条件から、基底状態の全運動量は

$$|P_{\text{Mov}}(v)| \leq N \frac{1}{2} m v_0, \quad (2.78)$$

を満たさなくてはならないことがわかる。条件 (2.78) を実験室系の量で書き直すと

$$|P_{\text{Lab}}(v) - N m v| \leq N \frac{1}{2} m v_0, \quad (2.79)$$

となる。逆に言えば条件 (2.78) (または (2.79)) を満たさない状態が存在したとき、それは基底状態ではありえず、励起状態である^{*7}。

^{*7} 励起状態の中には条件 (2.79) を満たすものがあることに注意。すなわち、条件 (2.79) は基底状態が満たすべき必要条件であり、十分条件ではない。

2.3.1 永久流状態

2.3 で説明した励起状態の中でも重要な状態が実験の時間スケールに比べその寿命が著しく長い準安定状態である。特に、静止している容器中をずっと超流動流が流れ続ける状態 ($v = 0$ の場合に不等式 (2.79) を満たさない状態に対応) である、永久流状態 (Persistent current state) は重要である。この状態は流れを持つ分だけエネルギーが高いため、基底状態 (有限温度を考える場合、平衡状態) ではない (図 2.6 参照)。よって、この状態を実現するには工夫が必要である。以下では永久流状態を作るための思考実験を考える。

まず、容器中の流体の温度を超流動転移温度 T_c よりも高い温度に保つ。そして、容器を十分速い速度 $v \gg v_0 = 2\pi\hbar/mL$ で動かす。今、温度は転移温度以上なので、十分時間が経てば平衡状態が実現し、流体の全成分が壁に引きずられる状態となる。次に、容器の速度を保ちつつ温度を T_c 以下に下げる。その後、容器を急に止める。容器を止めた直後は流体の状態によらずほぼ全流体が流れている状態となる。もし、系が常流動状態であれば十分時間が経てば流れが減衰し、最終的には流体は静止する。一方、流体が超流動性を持っていれば、容器との間の粘性が働かないため、流れがいつまでたっても減衰しないということが期待される。このような状態は液体 ^4He の実験 [4, 5]、リングトラップ中の BEC [68, 69, 70, 71] 等で観測されている。

永久流状態が何故長時間安定に存在できるかは、循環の量子化 [72, 3] という概念が深くかかわっている。以下ではこの概念を参考文献 [73] に従って議論する。秩序変数を用いた、より具体的な議論は 3.1.7 で行う。

容器が静止しているときの基底状態の波動関数を $\psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ とする。この波動関数を用いて次の波動関数を作る：

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \prod_{i=1}^N \left[f(\mathbf{r}_i) e^{i\varphi(\mathbf{r}_i)} \right] \psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.80)$$

ここで、波動関数は規格化されており、 $f(\mathbf{r})$ と $\varphi(\mathbf{r})$ は実数関数でともに空間変化がミクロな長さスケールに比べゆっくりで、 $f(\mathbf{r})$ は 1 に近いと仮定する。この新しく作った状態 (2.80) が永久流状態を表しうることが期待できる。例えば、系が並進対称性を持つ場合、 $f(\mathbf{r}) = 1$ 、 $\varphi(\mathbf{r}) = m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}/\hbar$ とおけば、この状態も Schrödinger 方程式の固有状態であり、一様流状態を表すことがわかる。波動関数 (2.80) は一様流状態を並進対称性が無い場合にも拡張したものに对应するものとする。

この波動関数を用いて局所粒子数密度、粒子流密度を計算する。粒子数密度は第 1 量子

化表示で

$$n(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}_1 \cdots \int d\mathbf{r}_N |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (2.81)$$

と与えられる。粒子流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ も、第1量子化表示で

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}_1 \cdots \int d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \{ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) (-i\hbar \nabla_i) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &\quad + [-i\hbar \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \} \\ &\simeq \int d\mathbf{r}_1 \cdots \int d\mathbf{r}_N \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}) \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2, \\ &= n(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.82)$$

と書ける。ここで、 $f(\mathbf{r})$ の空間変化が緩やかであること、基底状態における粒子流密度はゼロであることを用いた。式 (2.82) の表式から、局所的な速度場が

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}), \quad (2.83)$$

と与えられることがわかる。これはポテンシャル流なので、速度場は渦無し

$$\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}, \quad (2.84)$$

であることがわかる。しかしながら、ある閉曲線 C まわりの線積分 (循環と呼ばれる) は

$$\Gamma \equiv \oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}), \quad (2.85)$$

は一般には有限値をとり得る。なぜなら、式 (2.83) を (2.85) に代入すると、

$$\Gamma = \frac{\hbar}{m} \oint_C d\varphi, \quad (2.86)$$

となるが、波動関数の一意性を用いると循環が

$$\Gamma = \frac{2\pi\hbar}{m} n, \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (2.87)$$

となるからである。これより循環はある整数 n で特徴付けられることがわかる。これを循環の量子化と呼ぶ。また、 $\kappa \equiv 2\pi\hbar/m$ は循環量子、 n は巻き付き数、または winding number と呼ばれている。このようなことが起こるためには、閉曲線 C が囲む領域が多重連結になっている必要である。本小節では系の形状が多重連結 (リングやトーラス) の場合を考えるが、系が単連結であっても波動関数がゼロになる点が存在すれば n は有限値になる。この状態を量子渦状態と呼ぶ。量子渦については 2.3.3 や 3.1.7 で議論する。

循環が量子数 n で特徴付けられているので、その速度場もまた量子数 n で特徴付けられると考えられる。よって、流れが減衰するためには量子数 n を変化させる必要がある。しかし、これには一般に大きなエネルギーが必要であると期待できる。なぜなら、量子数 n は系のトポロジーを変化させない限り変わらないが、このような変化は波動関数を大きく変形させる必要があるからである。以上のような理由で永久流状態が安定に存在できると考えられる。

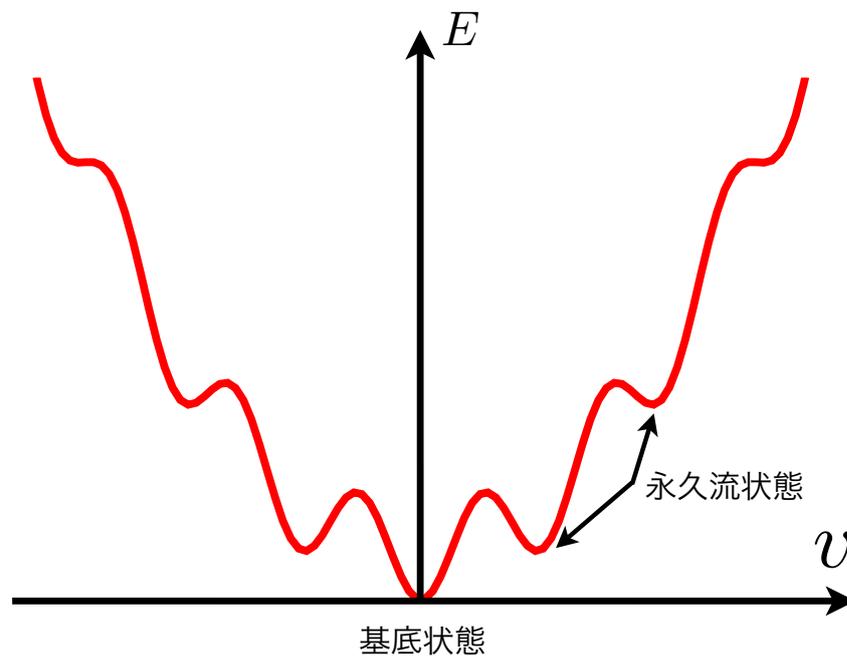


図 2.6 永久流状態を表した模式的な図。縦軸がエネルギー、横軸が速度を表す。エネルギーの極小点がそれぞれ永久流状態に対応する。

2.3.2 Landau の臨界速度

2.3.1 で議論した永久流状態や、動く容器中の準安定状態は一旦実現すると長い寿命を持つ。しかし、これらの状態は任意の速度 (永久流の速度、または容器の速度) で存在できるわけではない。この超流動が保たれる上限の速度は臨界速度 (critical velocity) 呼ばれる。臨界速度の値は系の詳細や容器の形状等に依存し、一般に予測することは難しい。しかし、特別な場合では臨界速度の表式を計算することができる。ここでは Landau[2] によって提唱された、ある場合に適用可能な臨界速度を与える公式を導出し、その物理的意味を考察する。以下の導出は Landau オリジナルのものではなく、文献 [74, 75] をもとにした。

一様な流体中を不純物ポテンシャルが一定速度 v で動く系を考える。第 2 量子化表示

でのハミルトニアンは、

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ext}}(t), \quad (2.88)$$

$$\hat{H}_{\text{ext}}(t) \equiv \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (2.89)$$

と与えられる。ここで、 \hat{H}_0 が運動エネルギー項と相互作用項をあわせたハミルトニアンで、 $U(\mathbf{r}, t)$ は一定速度で動く不純物を表し、以下のように与えられるとする：

$$U(\mathbf{r}, t) \equiv U_{\text{imp}}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t). \quad (2.90)$$

ポテンシャルは十分遠方ではゼロになるものを仮定する。また、 \hat{H}_0 は全運動量演算子 $\hat{\mathbf{P}}$ と可換

$$[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{P}}] = \mathbf{0}, \quad (2.91)$$

であることと、非摂動状態は自発的に並進対称性を破っていないと仮定する。

不純物ポテンシャルの影響は十分小さいと仮定しこれを摂動項とみなす。これより、線形応答理論を用いて不純物ポテンシャルの運動による系のエネルギーの時間変化を調べることにする。これを調べるため、まず不純物ポテンシャルの運動による局所粒子数密度の変化 $\Delta n(\mathbf{r}, t)$ を考える。これは久保公式 [67] により

$$\Delta n(\mathbf{r}, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \phi_{nn}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') U(\mathbf{r}', t'), \quad (2.92)$$

$$\phi_{nn}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') \equiv \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{n}(\mathbf{r}, t), \hat{n}(\mathbf{r}', t')] \rangle_{\text{eq}}, \quad (2.93)$$

と与えられる。ここで、 $\phi_{nn}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$ は応答関数で、 $\langle \dots \rangle_{\text{eq}}$ は平衡状態における期待値を表す。系の全エネルギーの時間微分は線形応答の範囲内で

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(t) &\equiv \frac{d}{dt} \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{H}(t)] \\ &\simeq \int d\mathbf{r} \frac{dU(\mathbf{r}, t)}{dt} [\langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{eq}} + \Delta n(\mathbf{r}, t)], \end{aligned} \quad (2.94)$$

と書ける。ここで、仮定より $\langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle_{\text{eq}} \equiv n = \text{const}$ なので、式 (2.90) を用いると、式 (2.94) の最右辺第 1 項はゼロになる。時刻 $-T/2$ から $+T/2$ の間のエネルギーの時間変化 $\Delta E(T)$ を

$$\Delta E(T) \equiv \int_{-T/2}^{+T/2} dt \int d\mathbf{r} \frac{dU(\mathbf{r}, t)}{dt} \Delta n(\mathbf{r}, t), \quad (2.95)$$

と定義する。系の体積を V とし、以下の Fourier 変換

$$U(\mathbf{r}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} U(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} U(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.96)$$

$$\Delta n(\mathbf{r}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \Delta n(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \Delta n(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.97)$$

を式 (2.95) を代入すると

$$\begin{aligned} \Delta E(T) &= \int_{-T/2}^{+T/2} dt \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega') e^{-i(\omega'+\omega)t} \Delta U(\mathbf{r}, \omega') \Delta n(\mathbf{r}, \omega) \\ &\simeq \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} i\omega U(\mathbf{r}, -\omega) \Delta n(\mathbf{r}, \omega) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} i\omega U^*(\mathbf{k}, \omega) \Delta n(\mathbf{k}, \omega), \end{aligned} \quad (2.98)$$

を得る。ここで、十分長い時間 T に対し、

$$\int_{-T/2}^{T/2} dt e^{-i\omega t} \simeq 2\pi\delta(\omega), \quad (2.99)$$

が成立することと、 $U(\mathbf{r}, t)$ が実数であることを用いた。また、粒子密度の変化量は式 (2.92) の時間に対する Fourier 変換により、

$$\Delta n(\mathbf{r}, \omega) = - \int d\mathbf{r}' \phi_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) U(\mathbf{r}', \omega), \quad (2.100)$$

$$\phi_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\epsilon)t} \phi_{nn}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t' = 0), \quad (2.101)$$

と書ける。ここで、 $\epsilon > 0$ は微小量である。この空間に対する Fourier 変換は

$$\Delta n(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{V} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} [1 - e^{-\beta(E_m - E_n)}]}{\hbar\omega + E_n - E_m + i\epsilon} \langle n | \hat{n}(\mathbf{k}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(-\mathbf{k}) | n \rangle U(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.102)$$

$$U(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi U_{\text{imp}}(\mathbf{k}) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}), \quad (2.103)$$

のように与えられる。ここで、 $\hat{n}(\mathbf{k})$ は密度演算子 $\hat{n}(\mathbf{r})$ の Fourier 変換

$$\hat{n}(\mathbf{k}) \equiv \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (2.104)$$

であり、 $|n\rangle$ は完全性条件

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}, \quad (2.105)$$

を満たすハミルトニアン \hat{H}_0 の固有エネルギー E_n を与えるエネルギー固有状態である。また、スペクトル関数、および動的構造因子

$$I_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n | \hat{n}(\mathbf{k}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(-\mathbf{k}) | n \rangle \delta(\hbar\omega + E_n - E_m), \quad (2.106)$$

$$S_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{I_{nn}(\mathbf{k}, \omega)}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (2.107)$$

を導入する。ここで、式 (2.99) よりデルタ関数について

$$[\delta(\omega)]^2 = \frac{T}{2\pi} \delta(\omega), \quad (2.108)$$

が成り立つことを用いると、単位時間あたりのエネルギーロス

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta E}{T} \equiv \frac{dE}{dt} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{F}, \quad (2.109)$$

$$\mathbf{F} \equiv \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} |U_{\text{imp}}(\mathbf{k})|^2 \mathbf{k} S_{nn}(\mathbf{k}, \omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) / V, \quad (2.110)$$

のように書ける。ここで、 \mathbf{F} は Drag force と呼ばれている。

式 (2.109) はエネルギー散逸を表すので、超流動状態ではゼロになると期待できる。逆に、超流動状態が壊れているのであれば、この量は有限になる。エネルギー散逸が有限になる条件は (2.106)、(2.107)、(2.110) からわかるように、デルタ関数の引数 $\hbar\omega + E_n - E_m$ がゼロになる点が存在することである。簡単のため絶対零度 $T = 0$ を考える。このとき動的構造因子は

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \sum_m \langle g | \hat{n}(\mathbf{k}) | \mathbf{P}_m \rangle \langle \mathbf{P}_m | \hat{n}(-\mathbf{k}) | g \rangle \delta(\hbar\omega + E_g - E_{\mathbf{P}_m}), \quad (2.111)$$

となる。ここで、 $|g\rangle$ は基底状態 (エネルギー E_g) の状態ベクトル、 $|\mathbf{P}_m\rangle$ は運動量 \mathbf{P}_m である励起状態 (エネルギー $E_{\mathbf{P}_m}$) である。ここで、一様系の性質^{*8}より、 $\mathbf{P}_m = \hbar\mathbf{k}$ となる励起状態しか動的構造因子に寄与しないことがわかる。励起状態のエネルギーを $\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv E_{\hbar\mathbf{k}} - E_g$ と書くと、式 (2.110) 中のデルタ関数は、

$$\delta(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + E_g - E_{\hbar\mathbf{k}}) = \delta(\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (2.112)$$

となり、この引数がゼロになる条件から、Landau の臨界速度の公式

$$v_{\text{Landau}} = \min_k \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar k} \right), \quad (2.113)$$

^{*8} 全運動量演算子 $\hat{\mathbf{P}}$ としたとき、密度演算子は $\hat{n}(\mathbf{r}) = e^{-i\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \hat{n}(\mathbf{r} = \mathbf{0}) e^{i\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{r} / \hbar}$ と書けることと、非摂動状態のエネルギー固有状態は運動量固有状態と同時固有状態に取れることを用いる。

を得る。この速度を超えると、 dE/dt が有限になり得ることがわかる。

Landau の臨界速度の具体例として励起スペクトルが厳密に計算できる理想 Bose 気体を挙げる。他の例は 3.2.6 で見ることにする。この場合、励起スペクトルは $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ であり、Landau の臨界速度はゼロである。このことは理想 Bose 気体では超流動流が流れるような準安定状態は存在できないということを意味する。このことは 2.1.1 で見たように、理想 Bose 気体の圧縮率が発散していることに関係している。なぜなら、圧縮率の発散は密度ゆらぎの発散を意味しているので、理想 Bose 気体は粒子数密度と結合するような摂動に対して弱いことがわかる。ゆえに、理想 Bose 気体では微小な摂動に対しても系が敏感に応答することから超流動流状態は準安定ではいられなくなる。

Landau の臨界速度は線形応答理論を用いて導出された。これは摂動論なので、不純物ポテンシャルの影響が十分小さい系で有効である。実際の系では Landau の臨界速度が観測されることは少ない。これよりも小さい速度での超流動の崩壊が観測される。この理由は、不純物や容器の入っている壁と流体との相互作用が摂動的に取り扱えないことに起因するのではないかと考えられる。

2.3.3 Feynman の臨界速度

2.3.2 では線形応答理論を用いて Landau の臨界速度を導出した。しかし、実際の実験では Landau の臨界速度よりも小さい値の臨界速度が観測されている。このとき量子渦の生成が起きていることが ^4He の実験 [76] や冷却原子系の実験 [31, 32, 77, 78] で明らかになっている。この量子渦の生成による超流動の崩壊の機構を初めて提案したのは Feynman [3] であり、またこのときの臨界速度は Feynman の臨界速度と呼ばれている。ここでは、Feynman の臨界速度の表式の導出を行う。

幅 d の十分長い細管中を流体が速度 v で流れており、それが細管の出口から流れてるような状況を考える。仮に古典流体を考えると、流体の速度が十分小さいときは流れが層流であるが、速度が十分大きくなると図 2.7 で示したような渦を含む不規則な流れに移行することが多い。超流動体でも古典流体と同様に流れが大きくなると、渦が生成されると期待される。ただし、超流動の場合、2.3.1 で説明したように循環は量子化されているため、古典流体のような渦ではなく、循環が量子化された量子渦が生成される。量子渦を生成するにはエネルギーが必要である。量子渦生成に必要なエネルギーは超流動体の運動エネルギーによるものであるとする。超流体の運動エネルギーが量子渦ができるために必要なエネルギーと等しくなるときの超流体の速度が臨界速度である。以下では、これらのエネルギーを見積もることで臨界速度を求める。

図 2.8 のように、細管の出口において量子渦対を間隔 x で生成するような状況を考える。簡単のため、量子渦対は $n = 1$ と -1 のものとし、速度場は紙面に垂直方向には一様

であると仮定する。このとき図 2.8 の黒破線 (閉曲線 C とする) に沿って速度場を線積分したものは

$$\oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}) = vx = \kappa, \quad (2.114)$$

となる。ここで、細管の上下 (図 2.8 の赤破線の上下) では速度場はゼロ、細管の中心で v であると仮定した。渦中心の速度は $v/2$ であるとする、渦対ができるのに要する時間 T は

$$T = \frac{2x}{v}, \quad (2.115)$$

と書ける。よって、単位長さ (紙面に垂直な方向) あたりの渦対のエネルギーを $E(d)$ とすると、単位時間、単位長さあたりに渦対の生成に必要なエネルギーは

$$\frac{E(d)}{T} = \frac{v}{2x} E(d) = \frac{1}{2\kappa} v^2 E(d), \quad (2.116)$$

で与えられる。渦対のエネルギー $E(d)$ は粒子数密度を n_0 、 ξ を量子渦の半径程度の長さの量であるとする、

$$E(d) = \frac{m\kappa^2 n_0}{2\pi} \log\left(\frac{d}{\xi}\right), \quad (2.117)$$

で与えられる。この式の導出は 3.1.7 で行う。

渦生成に必要なエネルギーを求めたので、次に超流動体の運動エネルギーの評価を行う。超流体の運動エネルギー密度は

$$n_0 \times \frac{1}{2} m v^2, \quad (2.118)$$

で与えられる。このようなエネルギーを持つ流体が細管から流れ出てきている。単位時間、単位長さ (紙面に垂直な方向) あたりに細管から流れ出るエネルギーは、

$$n_0 \times \frac{1}{2} m v^2 \times d \times v, \quad (2.119)$$

となる。このエネルギーが渦対を作るのに必要なエネルギーと等しくなる速度が臨界速度である。よって、式 (2.116)、(2.117) と (2.119) より、Feynman の臨界速度は

$$v_F = \frac{\kappa}{2\pi d} \log\left(\frac{d}{\xi}\right), \quad (2.120)$$

となる。

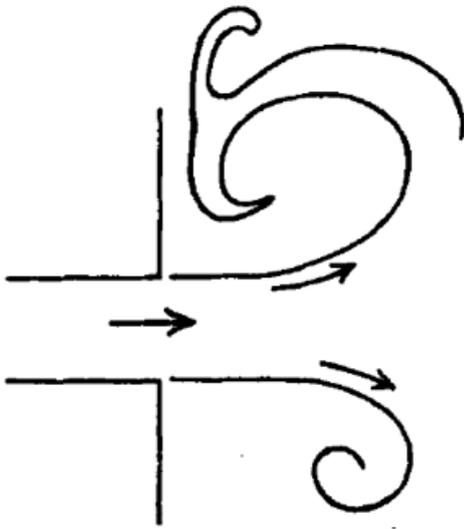


図 2.7 通常の流体で期待される流れ。文献 [3] より。

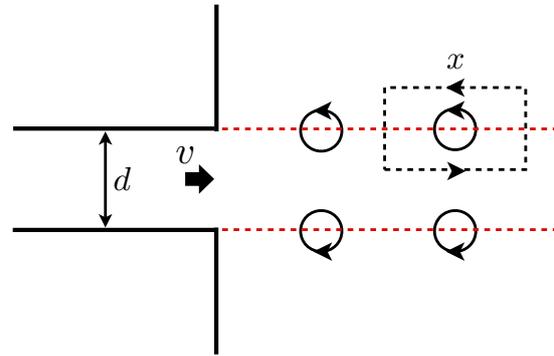


図 2.8 Feynman の臨界速度の導出時に考えている状況。

Feynman の臨界速度の表式 (2.120) からわかるように、循環量子 κ と細管の幅 d に依存する。 κ は \hbar と原子の質量にしか依存しないので、臨界速度は系の形状に強く依存することが示唆される。これは Landau の臨界速度が励起エネルギーのみで決まっていたことと対照的である。また、実際には 2 次元的な渦対ではなく、3 次元的な渦輪が生じる可能性もある。このときの臨界速度の表式は (2.120) とは少し異なった形 (特に \log に依存する部分) になる [79]。しかしながら、渦輪の場合でも $1/d$ の依存性、つまり、管の幅が大きくなると、臨界速度は減少するという振る舞いは変わりはない。

2.3.4 Phase slip

2.3.3 では量子渦が生じ得る最小の速度を求めた。ここでは何故量子渦が生じると超流動流が減衰するのかという点についてより深く議論する。

x 方向にのびた容器中を超流体が $+x$ 方向に流れている状況を考える。このとき波動関数の形は式 (2.80) で与えられているとする。初期状態としては容器中でほとんど一様な流れが生じているような状態を考える。このときの波動関数の位相は容器の全域で $\varphi_{\text{ini}}(\mathbf{r}) \simeq mvx/\hbar$ のように書けるとする (図 2.9(a) に対応)。次に、何らかの理由で局所的に波動関数の振幅が小さくなったとする (図 2.9(b) に対応)。連続の方程式から、振幅が小さくなっている付近では位相の空間変化が激しくなることが期待される。波動関数の振幅がより小さくなり、やがてゼロになる。このときに量子渦対が生成される (図 2.9(c) に対応)。その後、量子渦対が流れに垂直な方向に運動し (図 2.9(d)、(e) に対応)、やがて、容器の壁に到達し量子渦対は消滅する。このダイナミクスで初期状態 (図 2.9(a)) と終状態 (図 2.9(e)) を比較すると、位相勾配が緩やかになっていることがわかる。簡単のため x 方向には周期境界条件が課されているとすると (長さ L とする)、位相は $\varphi_{\text{ini}}(\mathbf{r}) \simeq mvx/\hbar$ から $\varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}) \simeq m(v - 2\pi/L)x/\hbar$ に変化していることがわかる。このような渦の超流動流に対し垂直な方向への運動による超流動流の減衰は phase slip と呼ばれており、Anderson[81] により提案された。Phase slip は液体 ^4He の実験 [7, 82, 83] や、冷却原子気体の実験 [70, 71, 35] で観測されている。

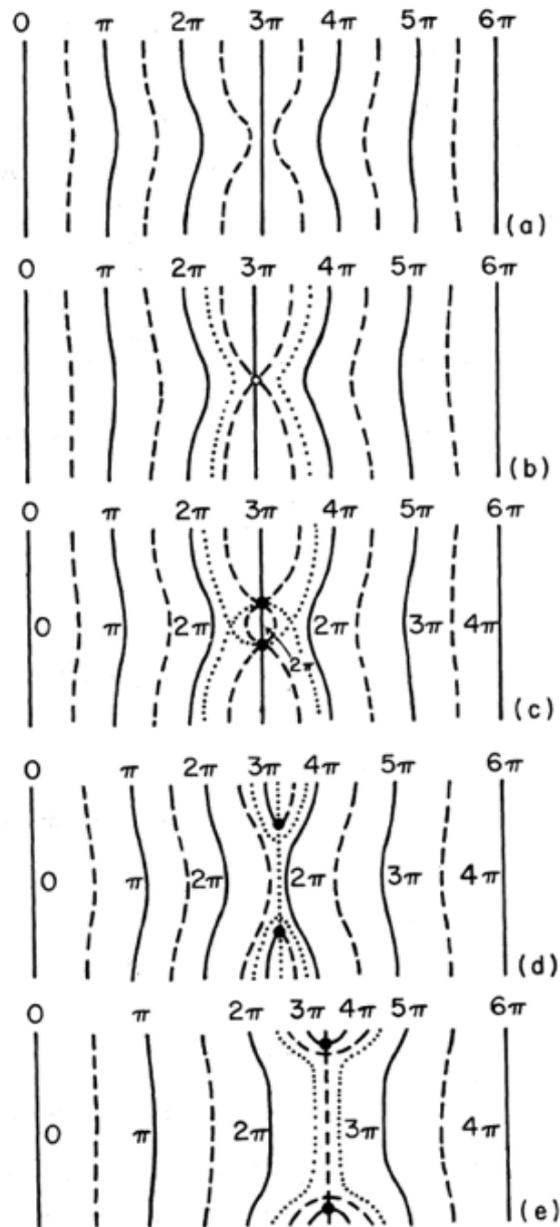


図 2.9 超流動体が容器中を流れているときの Phase slip の様子を模式的に説明した図。図は全て波動関数の位相の等位相面をプロットしたもので、(a) から (e) へ時間発展する様子を示している。文献 [80] より。

第 3 章

Bose-Einstein 凝縮系に対する平均場理論

本章では、Bose 凝縮系で用いられる平均場理論をレビューする。特に BEC の秩序変数が従う運動方程式である Gross-Pitaevskii 方程式 [12, 13] と、低エネルギーの集団励起モードを記述する Bogoliubov 理論 [14] の導出を行う。

本章の内容は教科書としては主に [79, 84, 85, 39, 86, 87, 66] を参考にした。論文では [88, 89, 90, 91] が参考になる。

3.1 Gross-Pitaevskii 方程式

Gross-Pitaevskii(GP) 方程式とは BEC の秩序変数が従う運動方程式である。その方程式の形から分野によっては非線形 Schrödinger 方程式 (Non-Linear Schrödinger Equation, NLSE) と呼ばれることもある。この方程式そのものは古くから研究されていたが、冷却原子系の Bose 凝縮が実験的に成功して以降、よりさまざまな角度から研究が行われている。例えば、冷却原子系の実験を念頭に置いた研究、量子渦のダイナミクス、特に量子乱流の研究 [92, 93]、可積分系としての研究 [94]、多成分系の BEC の研究 [95] などである。

本節では、まず、GP 方程式を 2 種類の方法で導く。その後、秩序変数の物理的意味を議論し、特別な場合の解析解、一様解、ソリトン解を示す。最後に本論文第 5 章でのテーマでもある量子渦について議論する。

3.1.1 第1量子化表示を用いた導出

以下特に断らない限り、質量 m 、スピン 0 の Bose 粒子系を考える*¹。出発点は N 体の時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (3.1)$$

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (3.2)$$

である。ここで、 $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ は N 体の波動関数、 $U(\mathbf{r}_i, t)$ は時間に依存する外場、 $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ は 2 体の相互作用、 H は座標表示した系のハミルトニアンを表す。また、 N 体波動関数は対称化

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (3.3)$$

されているとする。Gross-Pitaevskii 理論では多体の波動関数を次の形に仮定する：

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \prod_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i, t). \quad (3.4)$$

ここで、 $\phi(\mathbf{r}_i, t)$ は、とある 1 粒子状態の波動関数で、規格化条件

$$1 = \int d\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (3.5)$$

を満たすとする。この仮定は全ての粒子がある 1 粒子状態を占めていることを意味している。つまり、系が Bose-Einstein 凝縮 (Bose-Einstein Condensation, BEC) をしていると仮定したことに相当する。また、仮定 (3.4) の形から、この仮定は Hartree 近似を行っていることと同等であることがわかる。式 (3.4) を用いてこの系のエネルギー期待値を計算すると、

$$\begin{aligned} E(t) &= \int d\mathbf{r}_1 \cdots \int d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) H \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \\ &\simeq N \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r}, t)|^2 + N \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}, t) |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &\quad + \frac{N^2}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 |\phi(\mathbf{r}', t)|^2, \end{aligned} \quad (3.6)$$

*¹ より正確に言うと、以下の理論は純粋にスピン 0 の粒子 (例えば、⁴He) でなくても hyperfine state の自由度が一つしか無いような状況 (例えば、磁場によりトラップした冷却原子系) のときにも適用可能である。

となる。ここで規格化条件 (3.5) と $N \gg 1$ であることを用いた。ここで、凝縮体波動関数 (Condensate wave function) を次のように定義する。

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \sqrt{N}\phi(\mathbf{r}, t). \quad (3.7)$$

これが BEC の秩序変数である。

次に、凝縮体波動関数の従う運動方程式を求める。そのため、まずラグランジアン L を

$$L \equiv \int d\mathbf{r} \mathcal{L}[\Psi, \nabla\Psi, \partial_t\Psi], \quad (3.8)$$

で定義する。ここで、 \mathcal{L} はラグランジアン密度で、以下のように与えられる：

$$\mathcal{L}[\Psi, \nabla\Psi, \partial_t\Psi] \equiv \frac{i\hbar}{2} \left[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right] - \mathcal{H}[\Psi, \nabla\Psi, \pi, \nabla\pi]. \quad (3.9)$$

ここで、 $\pi(\mathbf{r}, t)$ は $\Psi(\mathbf{r}, t)$ と正準共役な運動量で

$$\pi(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\delta L}{\delta \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t)} = i\hbar \Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (3.10)$$

で与えられる。また、 \mathcal{H} はハミルトニアン密度である。系の全エネルギー (3.6) の表式からこれは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[\Psi, \nabla\Psi, \pi, \nabla\pi] &\equiv \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + U(\mathbf{r}, t) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \end{aligned} \quad (3.11)$$

となる。Euler-Lagrange 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\delta L}{\delta \partial_t \Psi^*(\mathbf{r}, t)} \right] + \nabla \cdot \left[\frac{\delta L}{\delta \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)} \right] - \frac{\delta L}{\delta \Psi^*(\mathbf{r}, t)} = 0, \quad (3.12)$$

に以上の結果を代入することで時間に依存する Gross-Pitaevskii 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.13)$$

を得る。

3.1.2 第2量子化表示を用いた導出

前小節では座標表示した多体のハミルトニアンから Hartree 近似を用いることで秩序変数が従う運動方程式である GP 方程式を導いた。本小節では第2量子化表示を用いた GP 方程式の導出を行う。

第2量子化表示のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.14)$$

で与えられる。ここで、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ と $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ は Bose 粒子の生成消滅演算子で、以下の交換関係を満たす：

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (3.15)$$

場の演算子の Heisenberg 表示は

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{U}_T^\dagger(t) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{U}_T(t), \quad (3.16)$$

$$\hat{U}_T(t) \equiv \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right], \quad (3.17)$$

である。ここで $\hat{U}_T(t)$ は時間並進の演算子、 \hat{T} は時間順所積である。ハミルトニアンが時間に陽に依存しない場合 ($\hat{H}(t) = \hat{H}$) は

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (3.18)$$

と簡単になる。場の演算子に対する Heisenberg 方程式は交換関係 (3.15) を用いると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \\ + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。

ここで、場の演算子の期待値 $\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ が凝縮体波動関数となること、すなわち

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (3.20)$$

を仮定する。これを用いて場の演算子を次のように書く：

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) &= \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle + \left[\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) - \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle \right] \\ &\equiv \Psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\phi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.21)$$

ここで、 $\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)$ は Bose 凝縮に参加していない粒子の生成消滅演算子と解釈できる。 $\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)$ が満たす交換関係は $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ の交換関係と $\Psi(\mathbf{r}, t)$ が c -数であることから

$$[\hat{\phi}(\mathbf{r}), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\phi}(\mathbf{r}), \hat{\phi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0, \quad (3.22)$$

でなければならない。また、式 (3.20) と (3.21) から $\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)$ の期待値はゼロ

$$\langle \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad (3.23)$$

である。式 (3.21) を Heisenberg 方程式 (3.19) に代入し、両辺の期待値をとり、 $\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)$ の含まれている項は無視することにより、時間に依存する GP 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.24)$$

を得る。もちろん、第 1 量子化を用いて導いた表式 (3.13) と一致する。

3.1.3 時間に依存しない GP 方程式

本小節では時間に依存しない定常状態における GP 方程式の導出を行う。そのため外場は時間に依存しないもの ($U(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r})$) とする。定常状態なので凝縮体波動関数は次のように書ける：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (3.25)$$

ここで μ はエネルギーの次元を持つ実数であるが、以下の議論により系の化学ポテンシャルであることがわかる。

2.1.2 の議論により、凝縮体波動関数は時刻 t の N 粒子系の状態ベクトル $|N, t\rangle$ と $N-1$ 粒子系の状態ベクトル $|N-1, t\rangle$ を用いて

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle N-1, t | \hat{\psi}(\mathbf{r}) | N, t \rangle, \quad (3.26)$$

と書ける。定常状態では $|N, t\rangle$ の時間依存性は、この状態のエネルギーを E_N と書くと、 $e^{-iE_N t/\hbar}$ となる。ゆえに、定常状態の凝縮体波動関数の時間依存性は

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \propto e^{-i(E_N - E_{N-1})t/\hbar} \quad (3.27)$$

となる。今、粒子数 N は十分大きい状況を考えているので $E_N - E_{N-1} \simeq \partial E / \partial N$ と近似できる。これは化学ポテンシャルの定義そのものであるので、式 (3.25) の μ は化学ポテンシャルであることが示せた。

式 (3.25) を時間に依存する GP 方程式 (3.24) に代入すると時間に依存しない GP 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}'V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\Psi(\mathbf{r}')|^2\Psi(\mathbf{r}) = \mu\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.28)$$

を得る。

3.1.4 量子流体方程式

前小節までで GP 方程式の導出は完了したが、その物理的意味をまだ議論していなかった。本小節では、GP 方程式を書き換えることで、凝縮体波動関数の物理的意味を明らかにする。

式 (3.5) と (3.7) により、凝縮体波動関数の絶対値の 2 乗を全空間で積分したものは系の全粒子数に一致する：

$$N = \int d\mathbf{r}|\Psi(\mathbf{r},t)|^2. \quad (3.29)$$

これより、凝縮体波動関数の絶対値の 2 乗は局所粒子数密度と解釈するのが妥当である。よって局所粒子数密度を

$$n(\mathbf{r},t) \equiv |\Psi(\mathbf{r},t)|^2, \quad (3.30)$$

と書くことにする。これを用いて凝縮体波動関数を振幅と位相部分に分離する：

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sqrt{n(\mathbf{r},t)}e^{i\varphi(\mathbf{r},t)}. \quad (3.31)$$

ここで、 $\varphi(\mathbf{r},t)$ は凝縮体波動関数の位相で、実数関数である。式 (3.31) を時間に依存する GP 方程式 (3.24) に代入し、式を整理すると実部と虚部に対応する 2 つの方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r},t) = -\nabla \cdot \left[n(\mathbf{r},t)\frac{\hbar}{m}\nabla\varphi(\mathbf{r},t) \right], \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\mathbf{r},t) = & -U(\mathbf{r},t) - \int d\mathbf{r}'V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')n(\mathbf{r}',t) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{n(\mathbf{r},t)}}\nabla^2\sqrt{n(\mathbf{r},t)} - \frac{\hbar^2}{2m}[\nabla\varphi(\mathbf{r},t)]^2, \end{aligned} \quad (3.33)$$

を得る。ここで、式 (3.32) は、粒子数密度の時間微分がダイバージェンスを用いて表せることから、粒子数の保存を表す連続の方程式である。粒子流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ を

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m}[\Psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\Psi(\mathbf{r},t) - \Psi(\mathbf{r},t)\nabla\Psi^*(\mathbf{r},t)] \quad (3.34)$$

$$= n(\mathbf{r},t)\frac{\hbar}{m}\nabla\varphi(\mathbf{r},t), \quad (3.35)$$

と定義すると、連続の方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r}, t) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \\ &\equiv -\nabla \cdot [n(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)],\end{aligned}\quad (3.36)$$

と書ける。ここで $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ は Bose 凝縮体の局所的な速度場を表し、以下で定義される：

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{m}\nabla\varphi(\mathbf{r}, t).\quad (3.37)$$

以上の結果から、凝縮体波動関数は、その振幅の 2 乗が局所粒子数密度、位相勾配が局所的な速度に比例するという物理的意味を持っていることがわかった。つまり、GP 方程式を解くことにより、Bose 凝縮体の局所粒子数密度、局所速度場の時間発展の情報が得られる。

このことは GP 方程式を流体力学的な方程式に書き換えることでより明確になる。式 (3.33) の両辺に ∇ をかけ、式 (3.37) を用いると

$$m\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left[\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2}m\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)^2 \right],\quad (3.38)$$

$$\tilde{\mu}(\mathbf{r}, t) \equiv U(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}'V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')n(\mathbf{r}', t) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{n(\mathbf{r}, t)}}\nabla^2\sqrt{n(\mathbf{r}, t)},\quad (3.39)$$

を得る。この式と古典流体力学の Euler 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) + [\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla]\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)}\nabla P(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{M}\nabla U(\mathbf{r}, t),\quad (3.40)$$

を比較する。ここで、 $\rho(\mathbf{r}, t)$ は古典流体の質量密度、 $P(\mathbf{r}, t)$ は圧力、 M は構成粒子の質量、 $U(\mathbf{r}, t)$ は外場である。今、運動が断熱的で、粒子数が一定の状況を考えて、単位質量あたりのエンタルピー w は熱力学より、

$$dw = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)}dP,\quad (3.41)$$

と書ける。よって、Euler 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \times \nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left[\frac{1}{2}\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)^2 + w(\mathbf{r}, t) + \frac{U(\mathbf{r}, t)}{M} \right],\quad (3.42)$$

となる。渦なし ($\nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0}$) の状況を考える限り、GP 方程式から得た流体力学的方程式 (3.38) は Euler 方程式と数学的によく似た形をしていることがわかる。大きく違う点は式 (3.39) の右辺第 3 項に現れている項である。この項は \hbar を陽に含んでいるため、形式的に Euler 方程式に対する量子補正の効果を表しているように見える。このような理由で式 (3.39) の右辺第 3 項は量子圧力項と呼ばれている。

以上と同様の方法で、GP 方程式から運動量保存則を導くことができる。運動量密度は粒子流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ に質量 m を書けたもので与えられる。これの時間微分をとり、時間に依存する GP 方程式 (3.24) を用いることで

$$m \frac{\partial}{\partial t} J_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \Pi_{ij}(\mathbf{r}, t) - \left[\frac{\partial}{\partial x_i} U(\mathbf{r}, t) \right] n(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x'_i} \right) n(\mathbf{r}', t) n(\mathbf{r}, t), \quad (3.43)$$

$$\Pi_{ij}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \Psi(\mathbf{r}, t) + \text{c.c.} \right] + \frac{\delta_{ij}}{2} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (3.44)$$

を得る。ここで、添字 i, j は方向のインデックスで x, y, z のいずれかを表し、 $\Pi_{ij}(\mathbf{r}, t)$ は運動量流速テンソルである。ここで、式 (3.43) の右辺第 2、3 項はダイバージェンスを用いて書くことはできない。ただし、式 (3.43) の右辺第 3 項は両辺を積分した際には、微分項の反対称性により 0 になる。一方、式 (3.43) の右辺第 2 項の積分は一般にはゼロではない。これは外場が存在することにより系が並進対称性を持っておらず、全運動量

$$\mathbf{P}(t) \equiv m \int d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (3.45)$$

が保存量になっていないことに起因する。もし、 $U(\mathbf{r}, t)$ がゼロであれば、式 (3.43) は粒子流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ に対する連続の方程式になっているため、これは局所的な運動量保存則を表す。

3.1.5 一様解

前小節では、GP 方程式から導かれる保存則について議論した。本章では特別な場合の GP 方程式の解を具体的に構成する。

一様系 ($U(\mathbf{r}, t) = 0$)、かつ相互作用がデルタ関数型

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.46)$$

で書ける場合を考える。ここで、 g は相互作用の強さを表す定数であり、3次元系では以下の式で与えられる*2：

$$g \equiv \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \quad (3.47)$$

*2 低次元系の場合にはこの表式は使えない。詳しくは参考文献 [42] を見よ。

ここで、 a_s は s 波散乱長である。このとき時間に依存しない GP 方程式 (3.28) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) - \mu\Psi(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2\Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.48)$$

となる。平均粒子密度を n_0 と書くことにすると、方程式 (3.48) は以下の平面波解を持つことが容易に示せる：

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0}e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (3.49)$$

$$\mu = gn_0 + \frac{1}{2}mv^2. \quad (3.50)$$

ここで、 \mathbf{v} は速度ベクトルであり、定数ベクトルであるとする。

3.1.6 ソリトン解

前小節で示した解は平面波解であり、ある意味自明な解であった。GP 方程式の非自明な解でかつ重要なものにソリトン解と呼ばれるものがある。ソリトン (solitary wave) (孤立波) からその名前がついており、ソリトン同士の衝突の前後でその波形を変えない等の非自明な性質を持つ。ソリトンは古くから研究されており、さまざまな非線形微分方程式の特解として現れることが知られている [96]。ここではこれ以上深入りせず、GP 方程式のソリトンのみ紹介する。

凝縮体波動関数は x にしか依存せず、相互作用の強さ g が正の場合 (斥力相互作用) を考える。このとき以下の境界条件

$$|\Psi(x)| \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} \sqrt{n_0}, \quad \varphi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} \frac{mvx}{\hbar} \pm \text{const}, \quad (3.51)$$

を満たす解として以下の解が存在する：

$$\Psi(x) = \sqrt{n_0}e^{imvx/\hbar} \left\{ \sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_s}\right)^2} \tanh \left[\sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_s}\right)^2} \frac{x - x_0}{\xi} \right] + i\frac{v}{v_s} \right\}, \quad (3.52)$$

$$\mu = gn_0 + \frac{1}{2}mv^2. \quad (3.53)$$

ここで、 v はソリトンの速度で前小節の \mathbf{v} を $\mathbf{v} \equiv v\mathbf{e}_x$ としたものである (\mathbf{e}_x は x 方向の単位ベクトル)。 ξ は回復長 (healing length) と呼ばれるこの系の特徴的な長さスケールを与える量で、以下で定義される：

$$\xi \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{mgn_0}}. \quad (3.54)$$

v_s は系の音速で以下で与えられる：

$$v_s \equiv \sqrt{\frac{gn_0}{m}} = \frac{\hbar}{m\xi}. \quad (3.55)$$

また、 x_0 は長さの次元を持つ実定数で、ソリトンの中心位置を表す。

ソリトン解の密度、位相をそれぞれ図 3.1、図 3.2 に示す。図より、ソリトンの中心では密度が減少し、中心から十分離れた所では、平面波解とほとんど変わらない振る舞いをするのがわかる。 $v = 0$ のときのソリトンは中心で密度が厳密に 0 になる。このとき原点では波動関数が値を持たないため、位相を定義することができない。このことからソリトンは位相欠陥の一種である。位相が原点で定義できないため、位相は原点での連続性を保つ必要がなくなる。実際に、 $v = 0$ の場合に位相は原点で π ジャンプする。これは波動関数が位相の原点を適当に選ぶことにより実数で書くことができ、このとき原点で符号を変えることによるものである。このようなソリトンを特に、ダークソリトン、それ以外 ($v \neq 0$) のソリトンはグレイソリトンと呼ぶことにする^{*3}。グレイソリトンの場合には波動関数がゼロのなる点が存在しないため、厳密には位相欠陥とは呼べないが、これも慣習でソリトンと呼ばれる。また、ソリトンの速度が系の音速に等しいときソリトン解 (3.52) は平面波解と一致し、ソリトンは消滅することがわかる。

本小節で示したのは一様無限系の場合のソリトン解であるが、一様有限系で、周期境界条件を課したときにもソリトン解が存在することが知られており、解は楕円関数を用いて表すことができる [97]。また、引力相互作用する場合にもソリトン解が存在し、ブライツソリトンと呼ばれている。このソリトンは、ダークソリトンと異なり、ソリトン中心で密度が大きくなるようなものである。

ソリトンは冷却原子系の実験 [98, 99, 100, 101, 102] で実際に観測されている。ただし、実験では厳密な 1 次元系は作れないので、高次元空間中にある 1 次元ソリトンを考える必要がある。ソリトンは 1 次元系においては安定に存在できるが、高次元空間に、本小節で紹介したような、ある一方向にのみ空間依存性を持つソリトン解は横方向の摂動に対し不安定であることが知られている。この不安定性は Snake 不安定性 [103, 104, 105] と呼ばれており、実験でも観測されている [100, 101]。Snake 不安定性が起き、十分時間発展させると、次小節で紹介する量子渦が生成する [104] ことが知られており、量子渦生成を考える上で重要な不安定性である。

^{*3} 文献によってこれらの呼び方は異なることに注意。

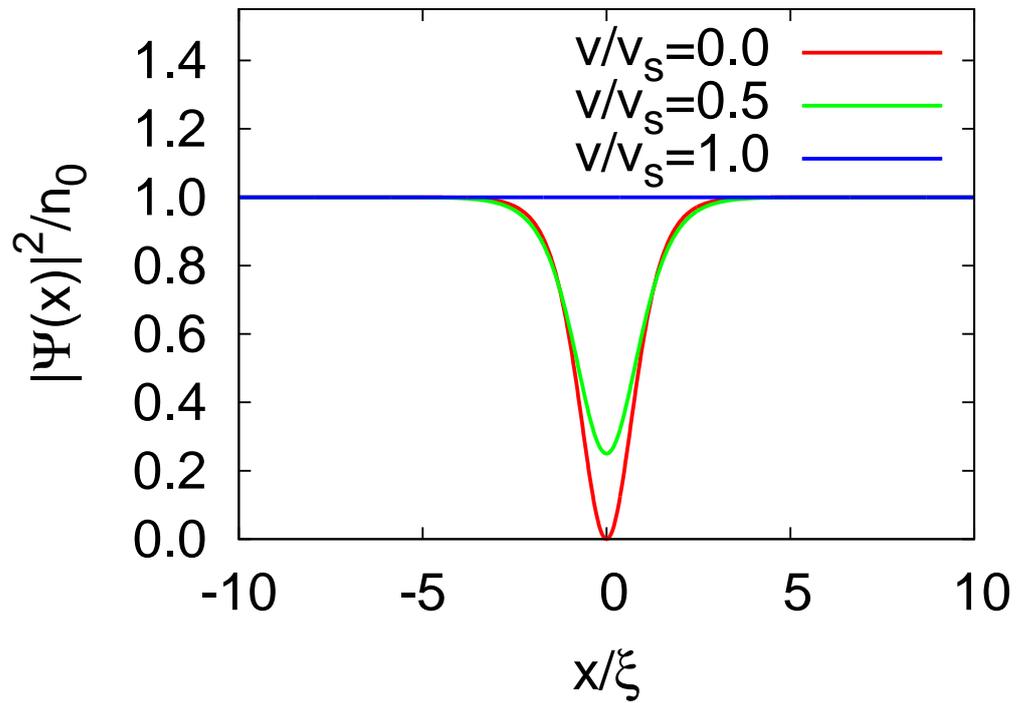


図 3.1 ソリトン解 (3.52) の絶対値の 2 乗をプロットしたもの。 $x_0 = 0$ とした。

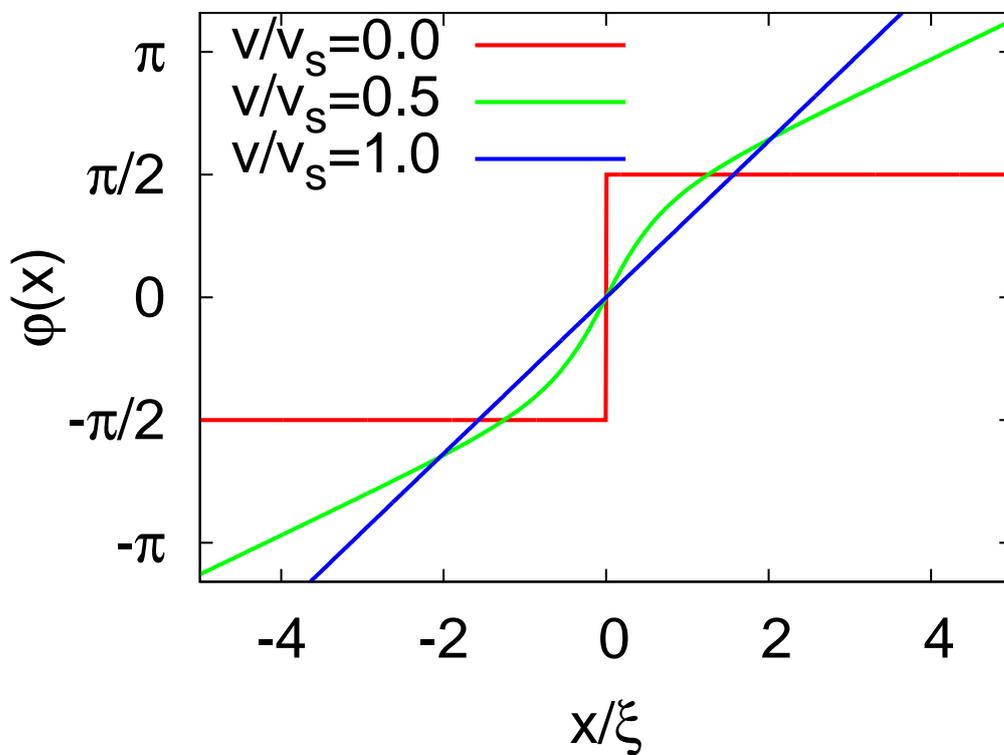


図 3.2 ソリトン解 (3.52) の位相 $\varphi(x)$ をプロットしたもの。 $x_0 = 0$ とした。

3.1.7 量子渦

量子渦とは、超流動体中にできる渦のことであり、古典流体における渦とは大きく性質が異なる。

3.1.4 で示したように、BEC 中の局所的な速度場は秩序変数の位相勾配に比例し、

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (3.56)$$

と書ける。ここで、古典流体力学において、渦を特徴づける量の一つである渦度 [106] を計算してみる。渦度は

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, t) \equiv \nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \quad (3.57)$$

で定義される量である。式 (3.56) を式 (3.57) に代入すると、

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0}, \quad (3.58)$$

となり、渦度はゼロになる。ここで、渦を特徴付けるもう一つの量である循環を計算する。循環の定義は

$$\Gamma \equiv \oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \quad (3.59)$$

で与えられる。ここで C は任意の閉曲線を表し、積分はこの閉曲線 C にそった線積分である。閉曲線 C が単連結領域を囲む場合、循環は常にゼロとなる。しかし、 C が多重連結領域を囲む場合には、一般に循環は値を持つ可能性がある。式 (3.59) に式 (3.56) を代入すると、

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\hbar}{m} \oint_C d\mathbf{r} \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{\hbar}{m} \oint_C d\varphi, \end{aligned} \quad (3.60)$$

となる。ここで、 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ は凝縮体波動関数の位相であることを思い出すと、波動関数の一価性により、位相をある経路にそって一周したとき、位相差が 2π の整数倍にならなければならない。ゆえに、循環はある整数 n を用いて、

$$\Gamma = \frac{2\pi\hbar}{m} n \equiv \kappa n, \quad (3.61)$$

となり、循環量子 $\kappa \equiv 2\pi\hbar/m$ を単位として量子化される。このように、量子渦は古典的な渦とは異なり、量子数 n のみで特徴付けられる。この循環の量子化は波動関数の一価性

により起きることを考えると、この現象は決して古典流体力学では起きず、量子流体特有の現象であることがわかる。

ここで、実際に n が有限になり得る状況を考える。 n が有限になるためには考えている領域が多重連結でなければならない。よって、例えば、リング状の容器に超流動体を閉じ込めた場合が考えられる。これは系の形状そのものが多重連結になっている場合に相当する。しかし、系の形状が単連結であっても、凝縮体波動関数がある点でゼロになることによって多重連結領域を作り、 n が有限になる場合がある。これはリングの内径をゼロにした極限に対応する。このような場合が量子渦がある状態と呼ぶ。

実際に、量子渦がある場合の波動関数を構成してみる。例えば、簡単のために高さ l 、半径 R の円筒状の容器を考える。ここでは、円筒座標系 (r, θ, z) を用いる。凝縮体の波動関数を z 方向には一様であるとして、ある整数 n を用いて、次の形に仮定する：

$$\Psi(\mathbf{r}) \equiv \sqrt{n_0} f(r) e^{in\theta}. \quad (3.62)$$

このとき循環は n がゼロでない限り、ゼロである。ここで、運動エネルギーを考える。これは

$$E_{\text{kin}} = \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 = \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2 n_0}{2m} [|\nabla f(r)|^2 + f(r)^2 |\nabla \varphi(\theta)|^2], \quad (3.63)$$

となる。円筒の中心 $r = 0$ では、式 (3.63) 第 2 項の位相勾配部分が発散する。なぜなら、位相勾配は

$$\nabla \varphi(\theta) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (n\theta) \mathbf{e}_\theta = \frac{n}{r} \mathbf{e}_\theta, \quad (3.64)$$

と書けるからである。ここで \mathbf{e}_θ は角度方向の単位ベクトルである。エネルギーは有限な値を持つはずなので、エネルギーが発散しないために円筒中心 $r = 0$ では凝縮体波動関数の振幅がゼロにならなければならない。これは渦中心 (渦芯) では凝縮体が存在しないことを意味している。

次に、渦があることによる運動エネルギーの増加分を計算する。これは式 (3.63) の最右辺第 2 項で与えられる。これを厳密に計算することはできないので近似的に評価してみる。 $f(r)$ は r がある値 b より小さいときはゼロ、それより大きいときは 1 になると仮定する。この仮定は実際の量子渦は有限の大きさの渦芯を持つと考えられることに基づく。これより単位長さあたりの渦の運動エネルギーは

$$\begin{aligned} E_{\text{vortex}}/l &\simeq \frac{\hbar^2 n_0}{2m} \int_b^R dr r \int_0^{2\pi} d\theta \frac{n^2}{r^2} \\ &= \frac{mn_0 \kappa^2 n^2}{4\pi} \log \left(\frac{R}{b} \right) \end{aligned} \quad (3.65)$$

となる。以上の議論では b の値がわからないが、GP 方程式を数値的に解いた結果、 b は回復長 ξ のオーダーであることが示されている [107]。よって、以下では $b = \xi$ とする。

式 (3.65) から、渦が存在することにより増加するエネルギーは n^2 に比例することがわかった。これは $n = 2$ の渦が 1 本あるよりも、 $n = 1$ の渦が 2 本あるときの方がエネルギー的に得であることを示している。実際に、 $n > 1$ の渦は不安定であることが、Bogoliubov 方程式を用いた解析で示されている [108]。

最後に、量子渦が複数ある場合を考える。このとき量子渦の渦芯の位置を $\mathbf{r}_i (i = 1, \dots, N_v)$ と書くことにする。ここで、 N_v は量子渦の個数に対応し、それぞれの渦に対する量子数を n_i とする。このとき渦度は

$$\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \kappa \sum_{i=1}^{N_v} n_i \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{e}_z, \quad (3.66)$$

とすることができる。ここで、 $\delta^{(2)}(\mathbf{r})$ は 2 次元デルタ関数である。ここで、次の関係式を満たす関数 $\psi(\mathbf{r})$ を導入する。

$$v_x(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial y} \psi(\mathbf{r}), \quad v_y(\mathbf{r}) = -\frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}). \quad (3.67)$$

$\psi(\mathbf{r})$ は流れの関数と呼ばれており [106]、今の場合以下で与えられる：

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\kappa}{2\pi} \sum_{i=1}^{N_v} n_i \ln \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}{\xi}. \quad (3.68)$$

流れの関数は

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -\omega_z(\mathbf{r}), \quad (3.69)$$

を満たすことが直接計算することで示すことができる。式 (3.69) と部分積分を用いることにより、複数の量子渦があるときのエネルギーは次のようになる：

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= \frac{m}{2} \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) v(\mathbf{r})^2 \\ &= -\frac{m\kappa^2 n_0}{4\pi} \sum_{i \neq j} n_i n_j \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\xi} + \text{const.} \end{aligned} \quad (3.70)$$

式 (3.70) より、もし、2 つの量子渦が同じ符号 ($\text{sign}(n_i) = \text{sign}(n_j)$) であるとき相互作用は斥力、異なる符号 ($\text{sign}(n_i) = -\text{sign}(n_j)$) の場合、相互作用は引力となることがわかる。

3.2 Bogoliubov 理論

Bogoliubov 方程式は Bose 凝縮体中の低エネルギー励起を記述する方程式である。歴史的には、Bogoliubov[14] が一様系の場合の Bose 気体の低エネルギー励起を Bogoliubov 変換を導入して計算した。外場や量子渦があるような空間不均一な場合に Bogoliubov の理論を拡張したのは Fetter[88] である。これらの理論が提案された当初は、実験的に実現している Bose 凝縮体が液体 ^4He しか存在しなかった。3.2.8 で示すが、Bogoliubov 理論は希薄 Bose 気体に対する理論になっており、液体 ^4He に対しては良い近似になっていない。これらの理論が爆発的に用いられるようになったのは、冷却原子気体の Bose-Einstein 凝縮が実現した 1995 年以降である [9, 10, 11]。冷却原子気体の典型的な粒子数密度はおよそ $10^{14}/\text{cm}^3$ であり、空気の密度と比較して 5 桁も小さい。そのため、Bogoliubov 理論は定性的にだけでなく、定量的にも実験とよく一致するという研究結果が数多く報告されている [90, 85]。

空間的に不均一な系で Bogoliubov 方程式を解くことは本博士論文の中心課題である。本節ではその準備のため、はじめに、Bogoliubov 方程式の導出を行う。ここでは、Bogoliubov 変換を用いた場の理論的方法と、線形安定性解析を用いた方法を紹介する。その後、励起スペクトルの性質を議論し、これから超流動流の安定性に関する情報を得ることができることを示す。また、Bogoliubov 方程式の解から、励起スペクトルだけではなく、秩序変数の揺らぎに関する情報も得ることができることを示す。また、自発的に対称性が破れた場合には、Bogoliubov 方程式から得られる励起スペクトルには、南部-Goldstone モードが含まれることを示し、そのゼロエネルギー励起状態の波動関数は対称性の議論から得られることを示す。最後に、Bogoliubov 理論を用いた近似の善し悪しを判定する quantum depletion を議論する。

3.2.1 Bogoliubov 変換を用いた導出

出発点は以下のハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - \mu \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (3.71)$$

である。以下本節では外場の時間依存性は無いもの ($U(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r})$) とし、簡単のために相互作用がデルタ関数型 ($V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$) で与えられる場合を考える。本論文第 4 章では相互作用がデルタ関数型でないときを扱うが、そのときの Bogoliubov 方程式はあらためて導出する。また、 μ は化学ポテンシャルである。場の演算子に式 (3.21) を代入

し、 $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ の2次の項まで残す近似を行う。その結果ハミルトニアンは以下ようになる：

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} \simeq E_{\text{GP}} + \int d\mathbf{r} \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - \mu \right] \hat{\phi}(\mathbf{r}) \\ + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} \left[4|\Psi(\mathbf{r})|^2 \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{r})^2 \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) + \Psi^*(\mathbf{r})^2 \hat{\phi}(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (3.72)$$

ここで、 $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ についての1次の項は $\Psi(\mathbf{r})$ が時間に依存しない GP 方程式の解であることによりゼロになることを用いた。 E_{GP} は GP 方程式のエネルギー汎関数で

$$E_{\text{GP}} \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 + \int d\mathbf{r} [U(\mathbf{r}) - \mu] |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^4, \quad (3.73)$$

で定義されている。また、表記の簡略化のために以下の記号を定義する：

$$\mathcal{L} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - \mu + 2g|\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (3.74)$$

今考えているハミルトニアンは式 (3.72) で与えられているが、これは $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ について2次形式になっている。このハミルトニアンを以下の Bogoliubov 変換を用いて対角化することを考える：

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) = \sum_{i, \epsilon_i > 0} \left[u_i(\mathbf{r}) \hat{a}_i - v_i^*(\mathbf{r}) \hat{a}_i^\dagger \right]. \quad (3.75)$$

ここで、 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ は複素関数で、これらはハミルトニアン (3.72) が対角化されるという条件により決める。 \hat{a}_i (\hat{a}_i^\dagger) が新たに導入した生成 (消滅) 演算子であり、 i がエネルギー ϵ_i (本小節では実数かつ正と仮定する) をとる状態のラベルを表す。ここで導入した和は正のエネルギーを持つ状態に限る。交換関係は Boson のものに従うと仮定する：

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (3.76)$$

場の演算子 $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ の交換関係の式 (3.21) に Bogoliubov 変換の定義式 (3.75) を代入すると以下の関係式を得る：

$$\sum_i [u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') - v_i^*(\mathbf{r}) v_i(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.77)$$

$$\sum_i [u_i(\mathbf{r}) v_i^*(\mathbf{r}') - v_i^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}')] = 0. \quad (3.78)$$

また、Bogoliubov 変換の逆変換は

$$\hat{a}_i = \int d\mathbf{r} \left[u_i^*(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}) + v_i^*(\mathbf{r}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \right], \quad (3.79)$$

で与えられる*4。この逆変換の式を式 (3.76) に代入すれば別の関係式

$$\int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})] = \delta_{ij}, \quad (3.80)$$

$$\int d\mathbf{r} [u_i(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r}) - v_i(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})] = 0, \quad (3.81)$$

を得る。

式 (3.75) をハミルトニアン (3.72) に代入すると

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = E_{\text{GP}} &+ \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \left\{ \left[u_j^*(\mathbf{r})\mathcal{L}u_i(\mathbf{r}) - \frac{g}{2}\Psi^*(\mathbf{r})^2 v_j^*(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}) - \frac{g}{2}\Psi(\mathbf{r})^2 u_j^*(\mathbf{r})v_i(\mathbf{r}) \right] \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right. \\ &+ \left[v_j(\mathbf{r})\mathcal{L}v_i^*(\mathbf{r}) - \frac{g}{2}\Psi^*(\mathbf{r})^2 u_j(\mathbf{r})v_i^*(\mathbf{r}) - \frac{g}{2}\Psi(\mathbf{r})^2 v_j(\mathbf{r})u_i^*(\mathbf{r}) \right] \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \\ &+ \left[-v_j(\mathbf{r})\mathcal{L}u_i(\mathbf{r}) + \frac{g}{2}\Psi^*(\mathbf{r})^2 u_j(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}) + \frac{g}{2}\Psi(\mathbf{r})^2 v_j(\mathbf{r})v_i(\mathbf{r}) \right] \hat{a}_j \hat{a}_i \\ &\left. + \left[-u_j^*(\mathbf{r})\mathcal{L}v_i^*(\mathbf{r}) + \frac{g}{2}\Psi^*(\mathbf{r})^2 v_j^*(\mathbf{r})v_i^*(\mathbf{r}) + \frac{g}{2}\Psi(\mathbf{r})^2 u_j^*(\mathbf{r})u_i^*(\mathbf{r}) \right] \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \right\}, \quad (3.82) \end{aligned}$$

を得る。この時点ではまだハミルトニアンは対角化されていない。ここで、対角化するために以下の関係式が成立すると仮定する：

$$\mathcal{L}u_i(\mathbf{r}) - g[\Psi(\mathbf{r})]^2 v_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i u_i(\mathbf{r}), \quad (3.83)$$

$$-\mathcal{L}v_i(\mathbf{r}) + g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 u_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i v_i(\mathbf{r}). \quad (3.84)$$

これが $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ を決定する方程式であり、Bogoliubov 方程式と呼ばれている [14, 88]。これらの方程式を式 (3.82) に代入すれば、非対角項が消えることが証明できる。行列形式で書くと

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L} & -g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \epsilon_i \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (3.85)$$

となる。ここで注目すべきなのは式 (3.85) の左辺の行列は非エルミート行列であるということである。この事実により、固有値 ϵ_i は実数である保証がない。ひとまず、本小節では Bogoliubov 方程式の固有値 ϵ_i が実数で与えられる場合を考える。

Bogoliubov 方程式 (3.83) と (3.84) を式 (3.82) に代入し、式 (3.80) や (3.81) を用い、整理すると以下のように対角化されたハミルトニアンを得る：

$$\hat{\mathcal{H}} = E_{\text{GP}} + \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \sum_i \epsilon_i \int d\mathbf{r} |v_i(\mathbf{r})|^2. \quad (3.86)$$

*4 式 (3.79) を式 (3.75) に代入すれば逆変換になっていることは確かめられる。

ここで、消滅演算子 \hat{a}_i に対する真空 $|0\rangle$ を

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0, \quad (3.87)$$

を満たすものとして定義する。これより、Bogoliubov 近似では基底状態のエネルギーが

$$E_G = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = E_{\text{GP}} - \sum_i \epsilon_i \int d\mathbf{r} |v_i(\mathbf{r})|^2, \quad (3.88)$$

と与えられる。式 (3.88) の最右辺の第1項は平均場近似によるエネルギーなので、最右辺第2項は平均場のエネルギーに対する量子ゆらぎによる補正項とみなすことができる。実際に、この項は生成消滅演算子の非可換性から生じたものである。また、この補正項は Lee-Huang-Yang 補正 [109, 110] と呼ばれている。

3.2.2 線形安定性解析を用いた導出

本小節では、前小節とは異なる方法で Bogoliubov 方程式を導出する。こちらの方が導出は容易である。時間に依存する GP 方程式 (3.24) を考える。定常解は $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \Psi(\mathbf{r})$ で与えられるとする。このとき、何らかの理由で解が定常解からわずかにずれた状況を考える。数式でこの状況を表すと

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} [\Psi(\mathbf{r}) + \delta\Psi(\mathbf{r}, t)], \quad (3.89)$$

と書ける。ここで、 $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ は微小量であるとする。式 (3.89) を時間に依存する GP 方程式 (3.24) に代入し、 $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ については1次の項まで残すと、次の方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{L} \delta\Psi(\mathbf{r}, t) + g\Psi(\mathbf{r})^2 \delta\Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (3.90)$$

を得る。ここで、 $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ を

$$\delta\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv +e^{-i\epsilon t/\hbar} u_i(\mathbf{r}), \quad (3.91)$$

$$\delta\Psi^*(\mathbf{r}, t) \equiv -e^{-i\epsilon t/\hbar} v_i(\mathbf{r}), \quad (3.92)$$

とおくと、Bogoliubov 方程式

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L} & -g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \epsilon_i \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (3.93)$$

を得る。

以上の方法は非線形微分方程式の固定点 (定常解) まわりの線形安定性解析の手法 [111] を GP 方程式に適用したことにほかならない。この導出では量子性、すなわち演算子の非可換性は一切登場しないにもかかわらず、その結果は Bogoliubov 変換を用いたものと完

全に一致する。この理由は Bose 粒子では、1 粒子 Green 関数の極と 2 粒子 Green 関数の極が一致するという事情にある [112, 113]。これは物理的には 1 粒子励起と集団励起の分散関係が一致することに対応する。Bogoliubov 変換による導出は、基底状態からの微小励起を相互作用が無い準粒子とみなすという描像に基づいている。よってこれは 1 粒子励起を見ていることになる。一方、線形安定性解析による導出では、秩序変数である凝縮体波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ の微小ゆらぎの振動モードを求めている。秩序変数のゆらぎは多数の粒子が参加していると考えられるので、集団励起を見ていることとなる。以上のことから、本論文で紹介した 2 つの導出法で同じ方程式が得られるものと考えられる。ただし、最近の研究で 1 粒子 Green 関数の極と 2 粒子 Green 関数の極は一致しないという報告 [114, 115] があることを指摘しておく。

3.2.3 Bogoliubov 方程式の性質

本小節では Bogoliubov 方程式が示す一般的な数学的性質をまとめる。まず、Bogoliubov 方程式を以下のように書くことにする：

$$H_B \mathbf{x}_i = \epsilon_i \mathbf{x}_i, \quad (3.94)$$

$$H_B \equiv \begin{bmatrix} \mathcal{L} & -g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L} \end{bmatrix}, \quad (3.95)$$

$$\mathbf{x}_i \equiv \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix}. \quad (3.96)$$

重要な性質の 1 つは行列 H_B が非エルミート行列であることである。これにより H_B の固有値 ϵ_i は一般に複素数となる。固有値が複素数になることはその状態が不安定であることを示しているが、これについての物理的な議論はここでは行わず 3.2.7 で行う。次に、以下のベクトルを導入する：

$$\mathbf{y}_i \equiv \begin{bmatrix} v_i^*(\mathbf{r}) \\ u_i^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \sigma_1 \mathbf{x}_i^*. \quad (3.97)$$

ここで、 σ_1 はパウリ行列の第 1 成分である。この \mathbf{y}_i に対し、左から H_B を作用させ、Bogoliubov 方程式を用いることで

$$\begin{aligned} H_B \mathbf{y}_i &= \begin{bmatrix} \mathcal{L} & -g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_i^*(\mathbf{r}) \\ u_i^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \\ &= -\epsilon_i^* \begin{bmatrix} v_i^*(\mathbf{r}) \\ u_i^*(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.98)$$

を得る。これは \mathbf{y}_i は Bogoliubov 方程式の固有ベクトルで、その固有値は $-\epsilon_i^*$ あることを示している。つまり、固有値 ϵ_i と $-\epsilon_i^*$ は常にペアで現れる。また、 ϵ_i がゼロになる場

合は必ず縮退することがわかる。この場合の詳細な議論は 3.2.9 で行う。また、以下の議論では $\epsilon_i = 0$ の場合は除いて考える。

次に、以下のベクトルを導入する：

$$\mathbf{z}_i \equiv \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ -v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \sigma_3 \mathbf{x}_i. \quad (3.99)$$

ここで、 σ_3 はパウリ行列第3成分である。 \mathbf{z}_i の左から H_B^\dagger を作用させ、Bogoliubov 方程式を用いることで、

$$\begin{aligned} H_B^\dagger \mathbf{z}_i &= \begin{bmatrix} \mathcal{L} & g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ -g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ -v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \\ &= \epsilon_i \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ -v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.100)$$

を得る。この式は \mathbf{z}_i が行列 H_B の左固有ベクトルになっていることを示している。

Bogoliubov 方程式の固有関数間の直交性を調べるため、次の内積を導入する：

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \equiv \int d\mathbf{r} \mathbf{x}_i^\dagger \sigma_3 \mathbf{x}_j. \quad (3.101)$$

具体的に計算してみると、

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})], \quad (3.102)$$

となる。ここで次の内積を考える：

$$(\mathbf{x}_i, H_B \mathbf{x}_j). \quad (3.103)$$

Bogoliubov 方程式を用いれば直ちに、

$$(\mathbf{x}_i, H_B \mathbf{x}_j) = \epsilon_j (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \epsilon_j \int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})], \quad (3.104)$$

が示せる。一方、部分積分と式 (3.100) を用いることで

$$(\mathbf{x}_i, H_B \mathbf{x}_j) = \int d\mathbf{r} (H_B^\dagger \mathbf{z}_i)^\dagger \sigma_3 \mathbf{x}_j = \epsilon_i^* \int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})], \quad (3.105)$$

となることも示せる。式 (3.104) と (3.105) を用いて、

$$(\epsilon_i^* - \epsilon_j) \int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})] = 0, \quad (3.106)$$

を得る。もし、 $i \neq j$ であるならば、積分部分がゼロにならない。また、 ϵ_i が複素数ならば、 $i = j$ であっても $\epsilon_i^* \neq \epsilon_i$ なので、積分部分がゼロになる。 ϵ_i が実数のときは $i = j$ のとき、積分は値を持ち得る。Bogoliubov 方程式は $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ に対する

線形の微分方程式であるから、この値を $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ の規格化条件として用いることができる。この値をどのように設定すべきかは、Bogoliubov 方程式からだけでは求めることができない。場の演算子を用いた議論 (3.2.1 を参照せよ) によりこの値は 1 にすべきということがわかる。 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ に対する規格直交性をまとめると

$$\int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})] = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{for } \epsilon_i \text{ and } \epsilon_j \in \mathbb{R} \\ 0 & \text{for } \text{Im}\epsilon_i \neq 0 \text{ or } \text{Im}\epsilon_j \neq 0 \end{cases}, \quad (3.107)$$

となる。

ここで、 ϵ_i が実である場合を考える。このとき $-\epsilon_i$ も Bogoliubov 方程式の固有値になることは前に示した。固有値 ϵ_i に対応する固有ベクトルを \mathbf{x}_i は式 (3.107) の意味で規格化されている、すなわち

$$(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) = 1, \quad (3.108)$$

と仮定する。ペアである固有値 $-\epsilon_i$ に対応する固有ベクトル \mathbf{y}_i のノルムを計算すると

$$(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_i) = \int d\mathbf{r} [|v_i(\mathbf{r})|^2 - |u_i(\mathbf{r})|^2] = -1, \quad (3.109)$$

となり、規格化条件を満たさない。よって、このような負のノルムを持つような状態は以下考えないことにする。多くの場合、正のノルムを持つ状態のエネルギーは正である。しかし、場合によってはノルムが正であるが、負のエネルギーを持つ状態が現れる。このような状態は Landau 不安定性と呼ばれる不安定性を示す。具体的には 3.2.6 で示す。

3.2.4 秩序変数のゆらぎ

本小節では、Bogoliubov 方程式の波動関数 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ から秩序変数のゆらぎに関する情報が得られることを示す。

式 (3.89) を用いると密度は $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ のオーダーまでで

$$n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \Psi^*(\mathbf{r})\delta\Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi(\mathbf{r})\delta\Psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (3.110)$$

と書ける。これに式 (3.91) と (3.92) を代入すると、

$$n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r})|^2 + 2\text{Re} \left[\delta n_i(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_i t/\hbar} \right], \quad (3.111)$$

$$\delta n_i(\mathbf{r}) \equiv \Psi^*(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r})v_i(\mathbf{r}), \quad (3.112)$$

を得る。ここで、式 (3.111) の右辺第 2 項がモード i による密度ゆらぎの寄与を表している。よって、 $\delta n_i(\mathbf{r})$ を計算することにより、局所的な密度ゆらぎの大きさを得ることがわかる。

同様にして位相ゆらぎの大きさも計算できる。 $\Psi(\mathbf{r}, t)/|\Psi(\mathbf{r}, t)|$ を計算すると、

$$\frac{\Psi(\mathbf{r}, t)}{|\Psi(\mathbf{r}, t)|} = e^{-i\mu t/\hbar} e^{i\varphi(\mathbf{r})} \left\{ 1 + \frac{i}{|\Psi(\mathbf{r})|^2} \text{Im} \left[\delta P_i(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon_i t/\hbar} \right] \right\}, \quad (3.113)$$

$$\delta P_i(\mathbf{r}) \equiv \Psi^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{r}) v_i(\mathbf{r}), \quad (3.114)$$

を得る。密度ゆらぎ場合と同様に式 (3.113) の右辺第 2 項がモード i による位相ゆらぎの寄与である。

他の物理量のゆらぎも以上の方法を用いれば計算することができる。

3.2.5 Bogoliubov 励起

前小節までで、Bogoliubov 方程式を導出し、その性質を議論した。ここでは、具体的に Bogoliubov 方程式を解いてそこから得られる物理を議論する。一般の系に対し Bogoliubov 方程式を解くことは難しいので外場がない一様系 ($U(\mathbf{r}) = 0$) でかつ、凝縮体波動関数が平面波で与えられる場合 (3.1.5 参照) を考える。

凝縮体波動関数と化学ポテンシャルは式 (3.49) と (3.50) により

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0} e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (3.115)$$

$$\mu = gn_0 + \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2, \quad (3.116)$$

と与えられる。周期境界条件の下で考えると $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は平面波で展開できて、

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}, \quad (3.117)$$

$$v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k}}, \quad (3.118)$$

となる。ここで、 V は考えている系の体積であり、 \mathbf{k} が励起の波数である。これらを Bogoliubov 方程式 (3.93) に代入すると、展開係数 $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ に対する固有値方程式

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 + \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} + gn_0 & -gn_0 \\ gn_0 & -\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} - gn_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} = \epsilon_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{bmatrix}, \quad (3.119)$$

を得る。ここで、 $\epsilon_{\mathbf{k}}^0 \equiv \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ は自由粒子の励起スペクトルである。これを対角化することにより、固有値と固有ベクトルは

$$\epsilon_{\mathbf{k},v} = \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} + \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^0(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + 2gn_0)} \equiv \hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} + \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (3.120)$$

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + gn_0 + \epsilon_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad (3.121)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + gn_0 - \epsilon_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad (3.122)$$

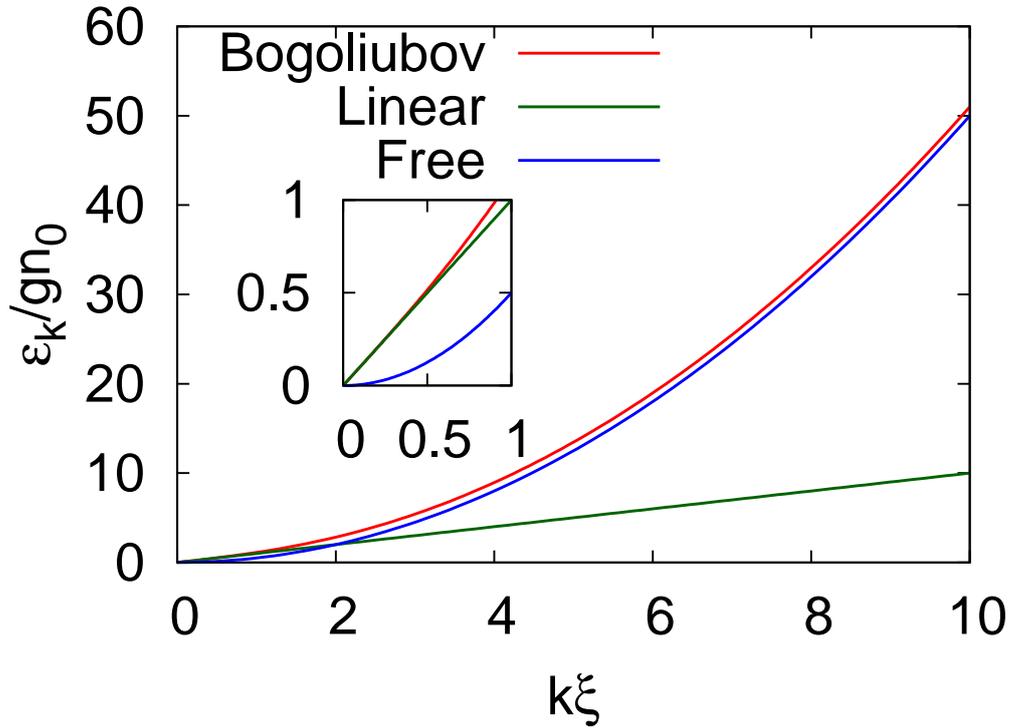


図 3.3 $v = 0$ のときの Bogoliubov 励起をプロットしたもの。インセットは長波長領域を拡大したもの。

と得られる。これらが規格化条件 (3.107) を満たしていることは代入することで確認できる。

まず、 $v = 0$ かつ $g > 0$ 、つまり流れが無く、斥力相互作用する場合を考える。このときの分散関係を図 3.3 に示す。 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は長波長極限と短波長極限で以下のように書ける：

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \hbar v_s k & \text{for } k \rightarrow 0 \\ \epsilon_{\mathbf{k}}^0 + gn_0 & \text{for } k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.123)$$

ここで、 v_s は式 (3.55) で定義された音速である。この振る舞いからわかるように、斥力相互作用する Bose 気体の分散関係は長波長極限で線形分散となる。これは理想気体の分散関係 ($\epsilon_{\mathbf{k}}^0 \propto k^2$) とは全く異なる性質である。この物理的起源は斥力の相互作用の存在により理想 Bose 気体では無限大であった圧縮率が有限になったことによる。実際、音速と圧縮率 κ は以下の関係式で結ばれている：

$$v_s = \frac{1}{\sqrt{mn_0\kappa}}. \quad (3.124)$$

これより、理想気体では音速が 0 であることがわかり、線形分散は現れないことが見て取れる。

この励起のことを Bogoliubov 励起、または Bogoliubov モードと呼ぶ^{*5}。また、この励起モードは $U(1)$ 対称性の自発的破れにともなう Nambu-Goldstone モードである。実際に、長波長極限で位相ゆらぎの大きさを (3.114) で計算すると、

$$\begin{aligned} |\delta P_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 &= \left| \sqrt{\frac{n_0}{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}) \right|^2 \\ &= \frac{n_0}{V} \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + 2gn_0}{\epsilon_{\mathbf{k}}^0}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} \infty, \end{aligned} \quad (3.125)$$

と長波長で大きな位相ゆらぎを持つ。一方で密度ゆらぎの大きさは

$$\begin{aligned} |\delta n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 &= \left| \sqrt{\frac{n_0}{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}) \right|^2 \\ &= \frac{n_0}{V} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0, \end{aligned} \quad (3.126)$$

と長波長では十分小さいことがわかる。

この Bogoliubov モードは実際に実験で観測されている。初めに観測されたのは液体 ^4He における中性子非弾性散乱実験 [116] である。冷却原子系では音波測定実験 [117] で得られた値と、Bogoliubov 理論で予測される値は良い一致を示している。また、より直接的には Bragg 散乱による実験 [118] で分散関係が測定され、これも Bogoliubov 理論と良い一致を示している。

3.2.6 Landau 不安定性

前小節と全く同じ状況を考える。ただし、ここでは $\mathbf{v} = -ve_x$ ($v > 0$) かつ $g > 0$ の状況を考える。ここで、 e_x は x 軸方向の単位ベクトル出る。つまり斥力相互作用する Bose 系からなる凝縮体が x 方向に速度 $-v$ で流れている状況を考える。このときの励起スペクトルは式 (3.120) で与えられる。これを図 3.4 にプロットする。図 3.4 より、 $v \leq v_s$ のときには励起スペクトルは常に正であるが、 $v > v_s$ のときに負の励起エネルギーが生じることがわかる。これは負の励起を生じることによりよりエネルギーの低い状態に遷移ができることを意味している。すなわち、 $v > v_s$ の状態は不安定な状態であると言える。 $v = v_s$ が安定性の境目となっており、一様系の臨界速度を与える。すなわち、一様系の希薄 Bose 気体の臨界速度は系の音速と一致する^{*6}。これは 2.3.2 で導出した Landau の臨

^{*5} Bogoliubov モードは線形分散であることから固体中のフォノンとのアナロジーでしばしばフォノンモードと呼ばれることがある。しかし、本論文中ではこの呼び方は一切しない。なぜなら第 4 章において Bogoliubov モードと結晶格子の振動によるフォノンモードを同時に扱う場面があり、紛らわしいからである。

^{*6} 一様系の臨界速度が常に音速に一致するわけではない。例えば液体 ^4He では長波長のモードではなく、短波長のロトン励起により Landau の臨界速度が決まる。

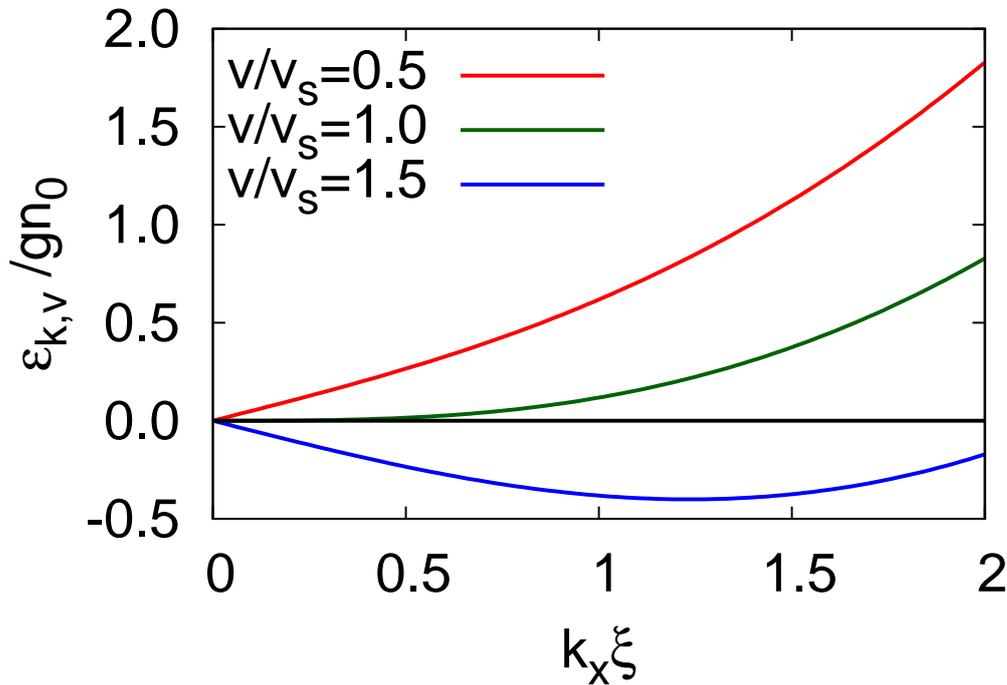


図 3.4 $\mathbf{v} = -v\mathbf{e}_x$, $k_y = k_z = 0$ のときの Bogoliubov 励起をプロットしたもの。黒線は $\epsilon_{k,v} = 0$ のラインである。

界速度の表式に $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ の励起スペクトルの表式 (3.120) を代入することでも得られる。

このような、負の励起エネルギーが生じる不安定性のことを Landau 不安定性 (Landau instability, LI) と呼ぶ。上で挙げた平面波状態以外にも、周期ポテンシャル中があるときの GP 方程式や、Bose-Hubbard モデル等、連続的な並進対称性を持たない系においても Landau 不安定性が生じることが知られている [119, 120, 121, 122]。

実験的に観測される臨界速度は多くの場合 Landau の臨界速度よりも小さい。これは Bogoliubov 励起や、 ${}^4\text{He}$ におけるロトン励起が起きるよりも小さい速度で量子渦の生成が起きていることによる。量子渦の生成については詳しくは第 5 章で見ることにするので、ここではこれ以上言及しない。

ここで、冷却原子系における Landau 不安定性についてコメントをしておく。上で述べたように Landau 不安定性は負の励起エネルギーを生じることで起きる。これは、Landau 不安定性はエネルギー散逸をとまなうことを意味している。液体 ${}^4\text{He}$ の場合、エネルギー散逸は ${}^4\text{He}$ が入っている容器 (熱浴とみなす) との相互作用により起きる。一方、冷却原子系では事情が異なる。冷却原子系では、ほぼ真空中に磁場、またはレーザーにより作ったトラップ中に原子が閉じ込められている。このトラップは保存力であるためトラップ間では散逸は生じない。すなわち、トラップは液体 ${}^4\text{He}$ の場合の容器とは異なり、熱浴の役割を果たさない。冷却原子系では熱的に励起された非凝縮体成分との衝突が

主な散逸機構である。非凝縮体成分の数は温度を低くすると小さくなる。よって、低温では Landau 不安定性が起きにくいと期待される。このことは実際に光学格子を用いた臨界速度の測定実験 [123] において確認されており、理論的研究 [124] ともコンシステントである。以上から、低温における冷却原子系の不安定性は次章 3.2.7 で説明する動的不安定性が主である。

最後に、Landau の臨界速度と超流動の崩壊との関係について指摘する。上で説明したように、Landau の臨界速度を超えると超流動が壊れると素朴には考えたいが、Pitaevskii[125] により Landau の臨界速度を超えると、別の超流動状態に転移する可能性が指摘された。具体的には、 ^4He のロトン励起のように、短波長において Landau 不安定性が起きると、不安定性が起きた波数に対応する周期構造ができるというシナリオである。このシナリオは実験的に観測されたという報告はないが、理論的に様々な系で起きることが示されている [126, 127, 128, 129]。文献 [129] の内容については第 4 章で取り上げ、そこで詳しい議論をする。以上のことから、一様系の Landau の臨界速度は一様な超流動状態の安定性限界を与えるもので、必ずしも超流動が崩壊する境界を与えるものではないと解釈するのが妥当である。

3.2.7 動的不安定性

本小節では Landau 不安定と並んで重要な不安定性である動的不安定性について解説する。3.2.5 で $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ で $g = -|g|$ とした系を例として考える。これは流れがない、一様な引力相互作用する Bose 気体である。このとき Bogoliubov 励起は式 (3.120) より

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^0(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - 2|g|n_0)}, \quad (3.127)$$

と与えられる。これを図 3.5 に示す。式 (3.127) からわかるように、長波長領域 ($k\xi \leq 2$) において励起スペクトルが複素数になることがわかる。Bogoliubov 方程式の導出過程において、秩序変数の定常解からのずれの時間依存性は $e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar}$ としていたことを思い出すと、このような状態は不安定であり、不安定性の成長は指数関数的であることがわかる。このような励起スペクトルが複素数になるような不安定性を動的不安定性 (Dynamical Instability, DI) と呼ぶ。

この例からわかるように、一様無限系においては引力相互作用する BEC は不安定である。しかし、不安定性が長波長で起きることを考えると、有限系に閉じ込めた場合はこの不安定性が抑えられると期待される。実際に、有限サイズのリングやトラップに閉じ込めた場合には BEC が安定に存在できることが理論的 [130, 97]、実験的 [11, 131] に確認されている。

ここで、挙げた引力 BEC の場合以外にも動的不安定性を示す系は数多く存在する。い

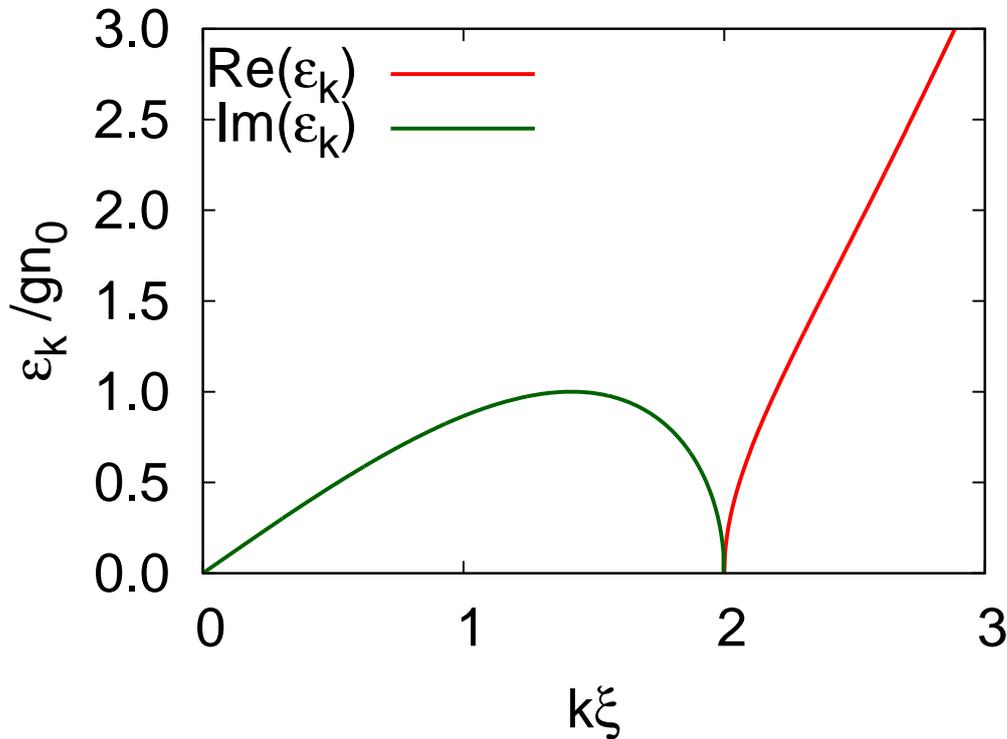


図 3.5 引力相互作用する凝縮体の Bogoliubov 励起をプロットしたもの。赤線は励起スペクトルの実部、緑線が虚部を表している。

くつか列挙すると、2成分 BEC における相分離 [132]、長距離相互作用する Bose 気体のロトン不安定性 [133]、一定速度で動く光学格子系 [134]^{*7}、等である。

3.2.8 Quantum depletion

Quantum depletion とは Bose 凝縮に参加していない粒子数のことである。相互作用がない理想 Bose 気体の場合これは温度で決まる。相互作用があると、熱的な励起に加え、相互作用により最低励起状態から押しやられた粒子が存在する。GP 方程式と Bogoliubov 方程式はほとんど全ての粒子が Bose 凝縮すると仮定して導かれていた。よって、Quantum depletion が小さいことは GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いる正当性を保証する。以下では、絶対零度の一様系において Quantum depletion を具体的に計算する。

全粒子数 N は場の演算子を用いて

$$N = \int d\mathbf{r} \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3.128)$$

^{*7} Landau 不安定性が起きる速度よりも大きな速度では励起スペクトルに虚部が現れる。

と与えられる。式 (3.21) と (3.23) を式 (3.128) に代入することで

$$N = \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \int d\mathbf{r} \langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3.129)$$

を得る。この式から凝縮していない粒子数 N_{dep} を

$$N_{\text{dep}} \equiv \int d\mathbf{r} \langle \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\phi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3.130)$$

で定義する。Bogoliubov 変換 (3.75) と期待値は絶対零度を考えて、Bogoliubov 準粒子の真空 $|0\rangle$ でとることにすると N_{dep} は

$$N_{\text{dep}} = \sum_{i, \epsilon_i > 0} \int d\mathbf{r} |v_i(\mathbf{r})|^2, \quad (3.131)$$

と変形できる。これより、凝縮していない粒子の局所粒子数密度は励起状態の波動関数 $v_i(\mathbf{r})$ を用いて

$$n_{\text{dep}}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{i, \epsilon_i > 0} |v_i(\mathbf{r})|^2, \quad (3.132)$$

と表せることがわかる。

次に、一様系の場合に quantum depletion を具体的に計算する。このときの励起状態の波動関数は式 (3.118) と (3.122) より

$$v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + gn_0 - \epsilon_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad (3.133)$$

と与えられる。式 (3.133) を (3.131) に代入することにより、

$$\frac{N_{\text{dep}}}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + gn_0 - \epsilon_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.134)$$

となる。この表式には波数の和が含まれているため、計算結果は考えている空間次元に強く依存することが示唆される。

まず、空間3次元の系を考える。熱力学極限を取り、和を積分に直すことで quantum depletion は

$$\frac{N_{\text{dep}}}{N} \simeq \frac{8}{3} \left(\frac{na_s^3}{\pi} \right)^{1/2} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{d}{\xi} \right)^3, \quad (3.135)$$

となる。ここで、全粒子数密度 $n \equiv N/V$ を導入し、凝縮体密度を $n_0 \simeq n$ と近似し、式 (3.47) を用いて式を整理した。また2つ目の等号で平均粒子間距離 $d \equiv 1/n^{1/3}$ を用いた。Quantum depletion が小さいという条件は、 s 波散乱長が平均粒子間距離よりも十分短

い、または回復長が平均粒子間距離よりも十分長いことである。これは系が十分希薄であるという条件に他ならない。式で表すと

$$a_s \ll d, \quad \Leftrightarrow \quad d \ll \xi, \quad (3.136)$$

となる。この条件は実際の冷却原子系の実験でも満たされている。

次に空間 2 次元系の Quantum depletion を計算する。3 次元系と同様の計算を行うと、結果は

$$\frac{N_{\text{dep}}}{N} \simeq \frac{1}{4\pi} \left(\frac{d}{\xi} \right)^2, \quad (3.137)$$

となる。ここで $d \equiv 1/n^{1/2}$ は 2 次元における平均粒子間距離である。2 次元系においても回復長が平均粒子間距離に比べて十分長ければ quantum depletion は小さくなることを示している。

最後に、1 次元系の quantum depletion を計算する。しかし、これは発散することが式 (3.134) からわかる。なぜなら、式 (3.134) の被積分関数は $k \rightarrow 0$ において $O(k^{-1})$ だからである。Quantum depletion を小さいということを前提にしているのが GP 方程式による近似なので、1 次元系では GP 方程式を用いた平均場近似が良くないということを示している。この結果は一様無限な 1 次元系では絶対零度でさえ長距離秩序が存在しないという Hohenberg-Mermin-Wagner の定理 [135, 136] とコンシステントである。また、Hohenberg-Mermin-Wagner の定理は 2 次元の有限温度でも長距離秩序が存在しないことを示している。ここでは計算しないが、2 次元系で有限温度の quantum depletion は発散することが示されている [66]。これも Hohenberg-Mermin-Wagner の定理とコンシステントな結果である。

3.2.9 ゼロエネルギー解

特別な場合を除いて、Bogoliubov 方程式の解を解析的に計算することは難しい。しかし、連続的な対称性が自発的に破れた場合に出現する Nambu-Goldstone モードのゼロエネルギー解については容易に得ることができる。本小節では具体的にゼロエネルギー解の導出を $U(1)$ 対称性と並進対称性が自発的に破れた場合に行う。

ここでは、外場がなく、相互作用がデルタ関数型で与えられる場合を考える。時間に依存しない GP 方程式の解を $\Psi(\mathbf{r})$ と書く。このとき、系のハミルトニアン

$$H = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right], \quad (3.138)$$

は以下の2つの変換に対し不変である：

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi'(\mathbf{r}) \equiv \Psi(\mathbf{r})e^{i\theta}, \quad (3.139)$$

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi''(\mathbf{r}) \equiv \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (3.140)$$

ここで、 θ は任意の実定数で、 \mathbf{a} は任意の実ベクトルである。これらの変換はそれぞれ $U(1)$ のグローバルゲージ変換と空間の並進操作である。これらの変換後の波動関数 $\Psi'(\mathbf{r})$ 、 $\Psi''(\mathbf{r})$ も対称性より、GP 方程式の解である。

まず、 $U(1)$ のゲージ変換 (3.139) から考える。 θ が無限小の量であるとし、テーラー展開すると

$$\Psi'(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) + i\theta\Psi(\mathbf{r}) + O(\theta^2), \quad (3.141)$$

となる。ここで、式 (3.141) の右辺第2項を式 (3.89) の $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ と同一視する。これは微小ゲージ変換による波動関数の変化を摂動とみなすことに対応する。式 (3.91) と (3.92) で $\epsilon_i = 0$ とすると、 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ は

$$u_B(\mathbf{r}) = i\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.142)$$

$$v_B(\mathbf{r}) = i\Psi^*(\mathbf{r}), \quad (3.143)$$

と得られる。実際に、これらを Bogoliubov 方程式 (3.93) に代入し、GP 方程式を用いることで、ゼロエネルギー解になっていることが示せる。

同様に、空間並進の場合を考える。 $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ まわりのテーラー展開は

$$\Psi''(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \cdot \nabla\Psi(\mathbf{r}) + O(\mathbf{a}^2), \quad (3.144)$$

となる。今、並進対称性が自発的に破れている場合 (例えば、ソリトン解や第4章で扱う超流動固体状態) を考えているので、波動関数は空間に依存する。ゆえに、式 (3.144) 右辺の微分はゼロではない。このとき、

$$u_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \Psi(\mathbf{r}), \quad (3.145)$$

$$v_j(\mathbf{r}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \Psi^*(\mathbf{r}), \quad (3.146)$$

が Bogoliubov 方程式のゼロエネルギー解になる*8。ここで、 $j(= x, y, z)$ は並進対称性が破れている方向のインデックスである。

*8 両辺の ∇ をとった GP 方程式を用いると証明できる。

これらのモードの密度ゆらぎと、位相ゆらぎをそれぞれ式 (3.112) と (3.114) から計算すると、

$$\delta n_B(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.147)$$

$$\delta P_B(\mathbf{r}) = 2i|\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (3.148)$$

$$\delta n_j(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x_j} |\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (3.149)$$

$$\delta P_j(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{i\hbar} J_j(\mathbf{r}), \quad (3.150)$$

となる。ここで、 $J_j(\mathbf{r})$ は粒子流密度 (3.34) の j 成分である。これより、 $U(1)$ 対称性の破れにともなうゼロエネルギー解は位相ゆらぎ、並進対称性の破れにともなうゼロエネルギー解は密度ゆらぎが主要な寄与を与えることがわかる。

ここで用いた手法の物理的意味を議論する。自発的に連続対称性が破れている場合、その状態はエネルギー的に無限に縮退している。ゼロエネルギー励起とはこの縮退した状態間の遷移を表している。この遷移は、考えている状態に破れている対称性の生成子を作用させることで実現する。もし、無限小に異なる状態に遷移させる場合、エネルギーコストはかからないと期待できる。無限小変換による波動関数の変化と、Bogoliubov 方程式の波動関数を同一視することでゼロエネルギー解が得られるというのはこのような理由による。

本小節で用いた手法は、 $U(1)$ 対称性や、並進対称性の破れ以外の対称性が破れた場合に出現するゼロモードに対しても有効であると考えられる。例えば、回転対称性や、スピナー BEC[95] におけるスピン空間の回転対称性が自発的に破れた場合にもゼロエネルギー解を得るのに使えると期待される。

第 4 章

超流動固体の励起スペクトルと超流動流の安定性

4.1 イントロダクション

我々の日常生活で接する物質の基本的な状態として、液体、気体、固体の物質の三態が挙げられる。このうち、液体と気体については温度を十分低温にすることにより超流動状態に転移することが液体 ^4He や冷却原子気体の実験によりわかっている。素朴な疑問として、固体が超流動性を獲得することはあるのか、ということが考えられる。このような超流動性を示す固体は超流動固体、または超固体と呼ばれている。

固体の超流動性と関連した議論として、Penrose と Onsager[45] により、固体が BEC を起こすのか、ということが議論された。彼らの結論は格子点の数と原子数が同じである完全結晶では固体は BEC を起こさないというものであった。この結論は固体状態の波動関数が格子点付近に局在しており、遠く離れた原子との波動関数との重なりがほとんどゼロであるため、ODLRO を持ち得ないことに起因している。超固体状態を初めて肯定的に議論したのは Andreev と Lifshitz[25] である。彼らは固体中にできる空格子点が BEC を起こし、超流動性を獲得するというシナリオを提案した。また、ほぼ同時期に Chester[26] による変分波動関数による議論、Leggett[27] の固体状態における NCRI、松田と恒藤 [137] による格子モデルによる ODLRO と DLRO の共存など、超流動固体の可能性が理論的に議論された。

実験的には固体 ^4He による超流動固体の探索がなされた。 ^4He は軽いため零点振動が大きく、その振幅は格子定数の約 30% と見積もられている [138]*¹。この量子性の強さのため ^4He で超流動固体の実現が期待された。実際に、比較的近年になり固体の ^4He での

*¹ この零点振動の大きさのため ^4He は常圧では絶対零度でも固化しない。

超流動性の兆候を観測したとの報告が Kim と Chan[28, 29] によりなされた。彼らはねじれ振子を用いて固体 ^4He の共振周期を測定することにより、NCRI を見積もった。共振周期 τ は系のバネ定数 K と慣性モーメント I を用いて $\tau = 2\pi\sqrt{I/K}$ と書ける。ゆえに、共振周期の減少を観測すれば (K は一定であるとする) それは慣性モーメントの減少を意味するため、これより NCRI を評価することができる。実験の結果、100mK 以下の低温では有限の NCRI があることが報告された。しかし、その後の剪断係数 (shear modulus) の測定実験により [139, 140]、低温における剪断係数の増加が確認された。また、この温度依存性は Kim と Chan の実験の NCRI の温度依存性に良く似ていることも示された。剪断係数は固体の固さに関係する量である。よって、仮に慣性モーメントが変化しなくても、剪断係数の増加が起これば、共振周期の減少は観測される。このため、Kim と Chan の実験結果は必ずしも固体 ^4He の超流動性を示しているとは言えないことが示された。より最近の実験装置を改良した実験 [141] においては固体 ^4He の超固体の存在について否定的な結果が報告されている。

超流動固体の実現が期待されている別の系に長距離相互作用する冷却原子系がある。通常、冷却原子系はその希薄さのため、相互作用を接触型相互作用で良く近似できることが知られている。しかし、非アルカリ原子等の最外殻電子数が多い原子の BEC では電子が持つ磁気モーメント由来の双極子相互作用が、アルカリ原子等に比べて強くなる。実際に、 ^{52}Cr [18]、 ^{164}Dy [19]、 ^{168}Er [20] の磁気双極子相互作用が他の原子種に比べて強い BEC が実験的に実現している。また、電気双極子モーメントを持つ異核種の分子も実験で実現している [142, 143, 144]。これらの系でも双極子相互作用が強いことが知られている。このような、双極子相互作用が強い系における BEC は dipolar BEC[145] と呼ばれている。理論的には光学格子上の dipolar BEC を Bose-Hubbard モデルで解析した結果、超固体相の実現が予言された [30]。加えて、Bose-Hubbard モデルの量子モンテカルロ計算による研究でも、Dipolar BEC における超固体相 [146, 147] の存在は支持されている。

強い双極子相互作用する系は有力な超流動固体の候補であるが、いくつか欠点がある。その一つが双極子相互作用の異方性である。双極子相互作用は磁気または電気双極子の向きによって、相互作用が斥力だったり、引力だったりする。特に、引力は BEC を崩壊させる不安定性を引き起こすため超流動固体を考える上ではあまり好ましくない。実際に、異方的双極子相互作用をする系の量子モンテカルロ計算を用いた研究で、超固体相が出現しないという報告がある [148]。等方的で強い斥力の相互作用をする系を作る方法として、Rydberg 状態と基底状態をレーザーを用いて弱く結合させる方法が理論的に提案されている [149, 150]。ここで、Rydberg 状態とは原子の主量子数 n が 50 ~ 100 のような大きな値に励起された状態のことである。Rydberg 状態では原子が強く分極しているため、Rydberg 状態間に強い van der Waals 相互作用が働く。このとき強い van der Waals 相

相互作用を反映して、有効相互作用が $V_{\text{Ry}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \propto 1/(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^6 + a^6)$ のような形になることが理論的に示された [149, 150]。Henkel らは、この相互作用をする系を平均場近似を用いて解析し、基底状態が超流動固体状態になることを示した。また、量子モンテカルロ計算においても基底状態が超流動固体状態になることが示されている [151, 152, 153]。

冷却原子系を念頭においた、実験的に実現可能な相互作用ではないものの、理論的により取り扱いが容易なソフトコア型の相互作用と呼ばれている相互作用を用いても基底状態として超流動固体状態が実現することが知られている。このことを初めて示したのが Pomeau と Rica [37] である。彼らはソフトコア型相互作用 $V_{\text{soft}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \propto \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ ($\theta(\cdot)$ は Heaviside の階段関数) のような相互作用する系を平均場近似で取り扱い、超流動固体の存在を示した。その後も平均場近似の範囲では数多くの研究 [154, 155, 156, 157, 158, 159] がなされている。また、量子モンテカルロ計算による研究 [160, 161] も行われており、基底状態はやはり超流動固体になることが示されている。ここで、ソフトコア型の相互作用と Rydberg 原子系での有効相互作用を比べたものを図 4.1 に示す。このように、ソフトコア型の相互作用は Rydberg 原子系での有効相互作用を単純化したものとみなせる。

ここで、何故 Rydberg 型の相互作用やソフトコア型の相互作用が固体秩序を形成するのかを議論する。これらの相互作用の共通の性質として、その Fourier 変換したもの ($\bar{V}(\mathbf{k})$ と書く) が、有限の波数の領域で負になることが挙げられる。有限波数による引力 ($\bar{V}(\mathbf{k}) < 0$) と、運動エネルギー項 ($\hbar^2 k^2 / 2m > 0$) の競合により、相互作用が強い場合には結晶秩序を組んでエネルギーを下げ、固体相が安定化すると考えられる。実際に、相互作用の Fourier 変換を計算したものを図 4.2 に示す。確かに、Rydberg 型の相互作用やソフトコア型の相互作用の Fourier 変換は有限波数で負になる領域がある。しかし、湯川型相互作用 $V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-r/a} / r$ はその Fourier 変換がローレンツ関数になるため、常に正になる。実際に、湯川型相互作用をする系では、量子モンテカルロ計算による研究により、超流動固体は存在しないことが示されている [162]。相互作用の Fourier 変換が有限波数の領域で負になることが超流動固体出現の必要条件ではないかという予想も立てられている [163]。

Rydberg 型の相互作用やソフトコア型の相互作用する系で実現する超流動固体相は droplet-crystal 相、または、cluster supersolid 相 [152, 160] と呼ばれている。この理由は、十分低温になると粒子が集まってクラスターを形成し、クラスターが結晶構造を組むからである (図 4.3 参照)。さらに、相互作用が強すぎなければ、ODLRO が存在するため、クラスター間の粒子のホッピングという形で超流動性を獲得する。

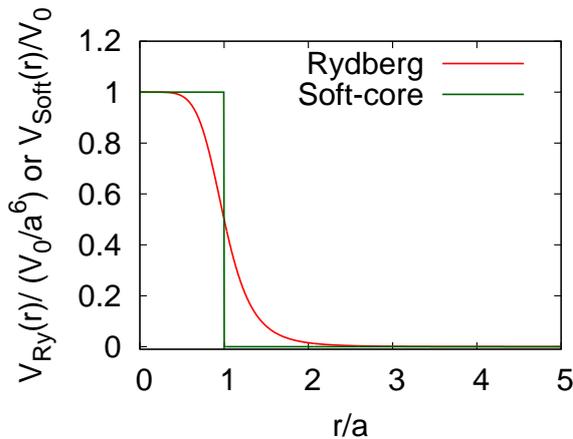


図 4.1 Rydberg 原子系の有効相互作用 $V_{\text{Ry}}(r) = V_0/(r^6 + a^6)$ とソフトコア型相互作用 $V_{\text{soft}}(r) = V_0\theta(a - r)$ の比較。

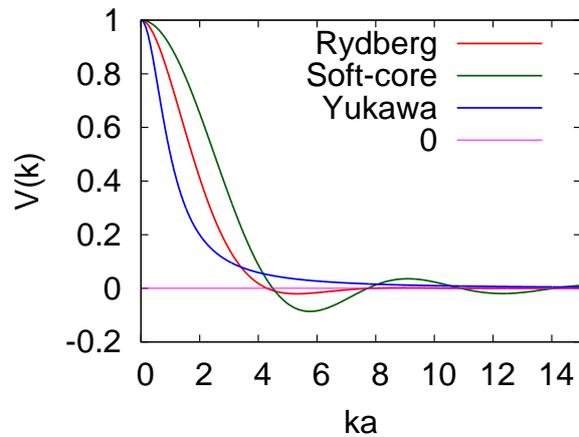


図 4.2 Rydberg 原子系の有効相互作用、ソフトコア型相互作用、湯川相互作用の Fourier 変換 (空間 3 次元) をプロットしたもの。縦軸は $k = 0$ で 1 になるように規格化した。

以上で述べたように、超流動固体相について多くのことが調べられており、基底状態または、平衡状態については量子モンテカルロ法を用いた研究から多くの知見が得られている。しかしながら、超流動の基底状態または、平衡状態の性質だけからでは永久流状態のような準安定状態としての超流動の性質を十分に理解することはできない。準安定状態は非平衡状態の特別な場合であるから、この状態に対しては量子モンテカルロ法を用いてアプローチすることは現在のところ不可能である。超固体相の超流動流の準安定性を調べた先行研究として、段下と山本ら [164] による、格子系のモデルである Bose-Hubbard モデルで平均場近似を用いた研究がある。彼らの研究により、格子系での超流動固体相の臨界速度、励起スペクトルが明らかになった。いままで述べてこなかったが、ここで、格子系における超固体相と、連続系における超固体相の違いを言及しておく。固体相というのは 2.1.2 でも述べたが、自発的に並進対称性を破った相のことである。連続系では外場が無ければハミルトニアンが連続的な並進対称性を持つ。よって、連続系で固体相というときには、自発的に連続的な並進対称性を破った相のことをいう。一方、格子系ではそもそも系のハミルトニアンは格子の形状を反映した離散的な並進対称性しか持っていない。格子系で超固体相と呼ぶときには、自発的に系の持つ離散対称性を破り、より低い離散対称性しかもたない相のことをさす。例えば先行研究 [164] では、2次元の正方格子状の系を考えており、超固体相としてはチェッカーボード型の密度プロファイルを持つ相が実現することが示されている。

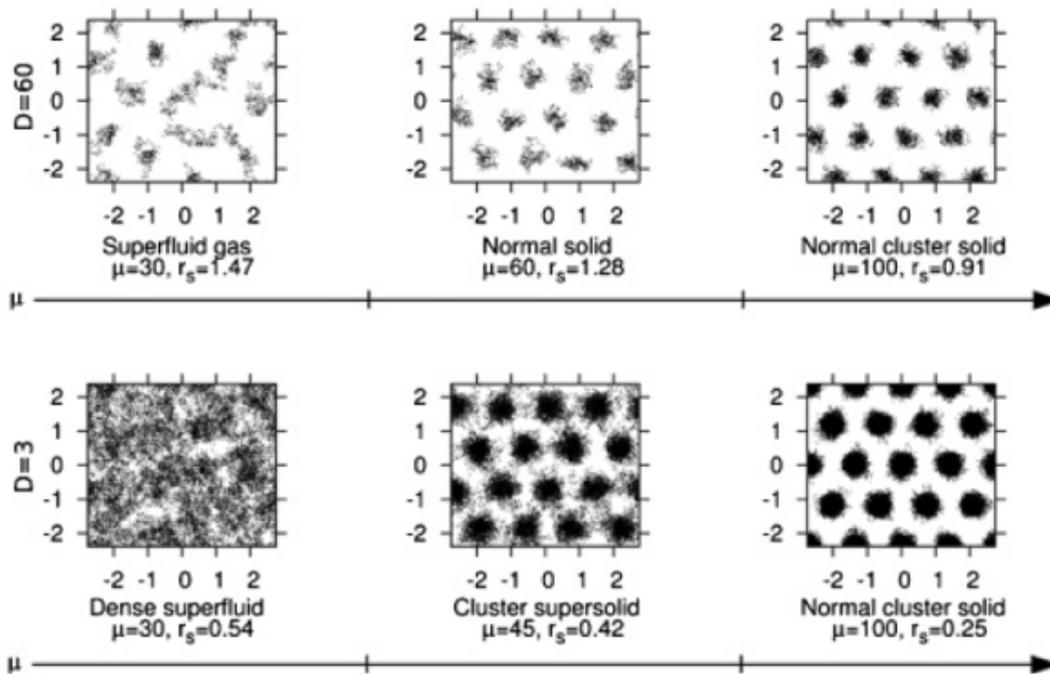


図 4.3 量子モンテカルロ法による計算によって得られたソフトコア系における密度のスナップショット。 μ は化学ポテンシャル、 r_s はソフトコア型の相互作用の到達距離 a で測った平均粒子間距離、 D は相互作用の強さを表す。下段中心のスナップショットが cluster supersolid 相である。文献 [160] より。

この対称性の破れ方の違いは超流動流の不安定化のメカニズムを大きく変える可能性がある。なぜなら、連続系では自発的に連続的な並進対称性を破るため、低エネルギー励起として格子系には無い Nambu-Goldstone モードが新たに出現するからである。低エネルギー励起の性質は超流動の安定性に深くかかわっている。格子系では存在しない並進対称性の破れにともなう Nambu-Goldstone モードが超流動の不安定化に寄与するかどうかはわかっていない。

本研究の目的は、連続系における超流動固体相の超流動流の準安定性を明らかにすることである。そのため、超流動固体が実現する最も簡単なモデルであると思われるソフトコア型の相互作用する系を平均場近似、すなわち GP 方程式を用いて解析を行った。加えて、超流動流の安定性を調べるため、Bogoliubov 方程式も解くことにより、励起スペクトルを得た。この結果から、超流動流が安定に存在できる相互作用の強さと流れの速度の範囲を決定した。

本章は以下のような構成になっている：4.2 では本研究で用いた GP 方程式、および Bogoliubov 方程式の説明を行う。4.3 では本研究の結果を示す。最後に、4.4 でまとめと今後の展望を述べる。

4.2 モデル

4.2.1 GP 方程式

ここでは、時間に依存する GP 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

を考える。ここで、考える空間次元は 2 次元で、 ∇^2 は 2 次元ラプラシアン $\nabla^2 \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ 、積分 $\int_S d\mathbf{r}$ は 2 次元積分、 S は積分領域を表す。積分領域については後で説明する。 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ はソフトコア相互作用 [165, 37]

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv V_0 \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (4.2)$$

を用いる。ここで、 $V_0 (> 0)$ は斥力相互作用の強さを表す定数、 $\theta(\cdot)$ は Heaviside の階段関数、 $a (> 0)$ は相互作用の到達距離を表す。この相互作用を用いると、相互作用がある程度強いとき基底状態が超流動固体状態になることが平均場近似による研究 [37, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 127, 166, 129, 167, 168] や、量子モンテカルロ計算による研究 [160, 161] により示されている。以下では定常状態 $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \Psi(\mathbf{r})$ を考える。時間に依存しない GP 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2 \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

で与えられる。 μ は化学ポテンシャルで、粒子数が一定の条件

$$N = \int_S d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (4.4)$$

により決める。ここで、積分領域 S について説明する。まず、定常解 $\Psi(\mathbf{r})$ は結晶秩序を持つと仮定し、以下の境界条件を満たすものとする：

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}), \quad (4.5)$$

$$\phi(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2) = \phi(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

ここで、 $\mathbf{q} \equiv m\mathbf{v}/\hbar$ は凝縮体の速度に対応する波数で、 $\phi(\mathbf{r})$ は考えている結晶の単位胞を構成する基本並進ベクトル \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 の並進に対して周期的になる関数である。どのような結晶の形を仮定するかは 4.3 で述べる。また、 n_1 、 n_2 は \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 方向の単位胞の数を N_1 、 N_2 として、

$$-\frac{N_i}{2} \leq n_i < \frac{N_i}{2}, \quad \text{for even } N_i, \quad (4.7)$$

$$-\frac{N_i - 1}{2} \leq n_i \leq \frac{N_i - 1}{2}, \quad \text{for odd } N_i, \quad (4.8)$$

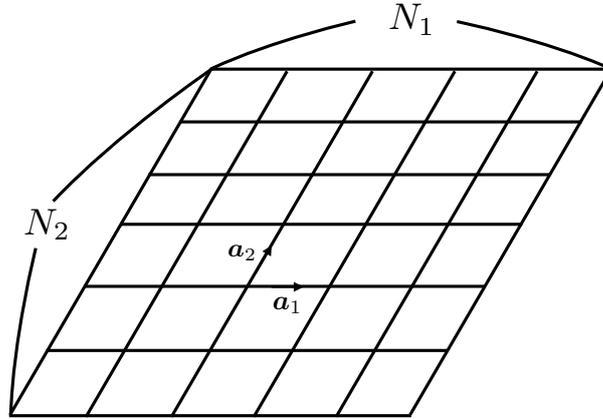


図 4.4 考えている状況の模式図。 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 が基本並進ベクトル、 N_1 、 N_2 がそれぞれ \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 方向のユニットセルの数。

を満たす整数である。全単位胞数は $N_1 N_2$ である。積分領域 S はこの結晶全体である。さらに、凝縮体波動関数には $N_i \mathbf{a}_i$ の並進に対しては周期的であるという境界条件 (Born-von Karman の境界条件 [169])

$$\Psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \Psi(\mathbf{r}), \quad (4.9)$$

を課す (図 4.4 参照)。式 (4.5)、(4.6)、(4.9) を合わせると、波数 \mathbf{q} は

$$\mathbf{q} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2, \quad (4.10)$$

を満たすものでなければならない。ここで、 \mathbf{b}_1 、 \mathbf{b}_2 は、 $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ を満たす逆格子空間の基本並進ベクトルである。

以上の議論により、凝縮体波動関数は以下のように、展開できることがわかる：

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.11)$$

ここで、 $C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}$ が展開係数で、 \mathbf{G} は考えている単位胞の逆格子ベクトルであり、 \mathbf{b}_i を用いて

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2, \quad (4.12)$$

と書ける。 m_1 、 m_2 は任意の整数である。式 (4.11) を時間に依存しない GP 方程式 (4.3) に代入することで、展開係数に関する方程式を得る。その際、以下の関係式と量

$$\frac{1}{S} \int_S d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{S_{\text{u.c.}}} \int_{\text{u.c.}} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'}, \quad (4.13)$$

$$n_0 \equiv \frac{N}{S} = \frac{N_{\text{u.c.}}}{S_{\text{u.c.}}}, \quad (4.14)$$

を用いる。ここで、 S は考えている結晶全体の面積、 $S_{\text{u.c.}}$ は単位胞の面積、 n_0 は平均粒子密度、 $N_{\text{u.c.}}$ は単位胞にある粒子数である。ここで、凝縮体関数の周期性を用いた。以上より、展開係数に関する方程式は

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 + n_0 \bar{V}(\mathbf{0}) \right] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}', \Delta \mathbf{G}' \neq \mathbf{0}} \bar{V}(\Delta \mathbf{G}') C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta \mathbf{G}'}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta \mathbf{G}'} = \mu C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}, \quad (4.15)$$

となる。ここで、 $\bar{V}(\mathbf{k})$ は相互作用の Fourier 変換で以下で与えられる。

$$\begin{aligned} \bar{V}(\mathbf{k}) &\equiv \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ &= 2\pi V_0 a^2 \frac{J_1(ka)}{ka}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

ここで、 $J_1(\cdot)$ は1次の Bessel 関数である。また、粒子数に関する条件 (4.4) は

$$n_0 = \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2, \quad (4.17)$$

と書ける。

4.3 では式 (4.15) を粒子数条件 (4.17) を満たすように数値的に解いた結果を示す。数値計算手法の詳細については付録 B で解説する。

また、1粒子あたりのエネルギー、化学ポテンシャル、粒子流密度、1粒子あたりの全運動量の表式はそれぞれ以下のように与えられる：

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mN} \int_S d\mathbf{r} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2N} \int_S d\mathbf{r} \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2 |\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (4.18)$$

$$\mu = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \int_S d\mathbf{r} \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2 |\Psi(\mathbf{r})|^2}{\int_S d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2}, \quad (4.19)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \nabla \Psi^*(\mathbf{r})], \quad (4.20)$$

$$\frac{\mathbf{P}}{N} = \frac{m}{N} \int_S d\mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r}). \quad (4.21)$$

これらの式に (4.11) を代入し、直交性 (4.13) と粒子数条件 (4.17) を用いることでこれら

の物理量の展開係数に関する表式を得る：

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= \frac{\hbar^2}{2mn_0} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2 \\ &+ \frac{1}{2n_0} \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3} V(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_3) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1+\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_2} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \mu &= \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2 \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\{\mathbf{G}_i\}} V(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_3) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1+\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_2} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1} \right\} / \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2, \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} (2\mathbf{q} + \mathbf{G} - \mathbf{G}') e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.24)$$

$$\frac{\mathbf{P}}{N} = \hbar \mathbf{q} + \frac{\hbar}{n_0} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{G} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2. \quad (4.25)$$

4.2.2 Bogoliubov 方程式

ここでは、ソフトコア相互作用する系に対する Bogoliubov 方程式を導く。時間に依存する GP 方程式 (4.1) に

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \left[\Psi(\mathbf{r}) + u(\mathbf{r})e^{-i\epsilon t/\hbar} - v^*(\mathbf{r})e^{i\epsilon^* t/\hbar} \right], \quad (4.26)$$

を代入し、 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ について1次の項を残すと、ソフトコア相互作用する系に対する Bogoliubov 方程式

$$\epsilon u(\mathbf{r}) = Ku(\mathbf{r}) + \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\Psi^*(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r})u(\mathbf{r}') - \Psi(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r})v(\mathbf{r}')], \quad (4.27)$$

$$\epsilon v(\mathbf{r}) = -Kv(\mathbf{r}) - \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\Psi(\mathbf{r}')\Psi^*(\mathbf{r})v(\mathbf{r}') - \Psi^*(\mathbf{r}')\Psi^*(\mathbf{r})u(\mathbf{r}')], \quad (4.28)$$

$$K \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu + \int_S d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2, \quad (4.29)$$

を得る。 ϵ が励起スペクトルに対応する。

4.2.1 で説明したように、凝縮体波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ は周期性を持っている。Bogoliubov 方程式は $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ に対しては線形の微分方程式であるので、Bloch の定理が適用できる。ただし、 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ そのものには Bloch の定理は適用できず、以下で定義する $\bar{u}(\mathbf{r})$ と $\bar{v}(\mathbf{r})$ に対し Bloch の定理が適用できる：

$$u(\mathbf{r}) \equiv e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \bar{u}(\mathbf{r}), \quad (4.30)$$

$$v(\mathbf{r}) \equiv e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \bar{v}(\mathbf{r}). \quad (4.31)$$

この理由は、Bogoliubov 方程式 (4.27) と (4.28) の右辺第2項の被積分関数にある。ここには引数が \mathbf{r}' である凝縮体波動関数が含まれているため、ここから出てくる平面波の因子 $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}$ をキャンセルしなければ Bloch の定理は使えない。式 (4.30) や (4.31) のように $\bar{u}(\mathbf{r})$ と $\bar{v}(\mathbf{r})$ を定義すれば平面波の因子をキャンセルすることができる。素励起の結晶運動量を $\hbar\mathbf{k}$ 、バンドのインデックスを n と書くと、 $\bar{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ と $\bar{v}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ に対する境界条件は

$$\bar{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \bar{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}), \quad (4.32)$$

$$\bar{v}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \bar{v}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}), \quad (4.33)$$

$$\mathbf{R} \equiv n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2, \quad (4.34)$$

と書ける。また、4.2.1 と同様 Born-von Karman の境界条件から、結晶運動量は整数 n_1 、 n_2 を用いて

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2, \quad (4.35)$$

と書ける。 n_1 、 n_2 に関しては条件 (4.7) または (4.8) を満たすものとする。

以上の議論により、 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ は次のように展開できることがわかる^{*2}：

$$u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.36)$$

$$v_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}. \quad (4.37)$$

ここで、 $A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}$ と $B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}$ はそれぞれ $u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ と $v_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ に対する展開係数である。これらを Bogoliubov 方程式 (4.27) と (4.28) に代入することで、展開係数についての Bogoliubov 方程式

$$D_{\mathbf{G}}^+ A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} + \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^+ A_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} - \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^+ B_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} = \epsilon_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}, \quad (4.38)$$

$$-D_{\mathbf{G}}^- B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} - \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{-*} B_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} + \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{-*} A_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} = \epsilon_{\mathbf{k},n} B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}, \quad (4.39)$$

を得る。ここで、以下の変数

$$D_{\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} \pm \mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \mu + n_0 \bar{V}(\mathbf{0}) + \sum_{\mathbf{G}'} \bar{V}(\pm \mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}') |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}|^2, \quad (4.40)$$

$$S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} [\bar{V}(\Delta\mathbf{G}) + \bar{V}(\pm \mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}')] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta\mathbf{G}}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}, \quad (4.41)$$

$$W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} \bar{V}(\pm \mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}') C_{\mathbf{q}+2\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G}-\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}, \quad (4.42)$$

を表記の簡略化のために導入した。

また、 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ に対しては規格化条件

$$\int_S d\mathbf{r} [|u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2 - |v_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2] = N_1 N_2 \int_{\text{u.c.}} d\mathbf{r} [|u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2 - |v_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})|^2] = 1, \quad (4.43)$$

を課す。これを展開係数で表すと

$$\sum_{\mathbf{G}} [|A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}|^2 - |B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}|^2] = \frac{1}{N_1 N_2 S_{\text{u.c.}}}, \quad (4.44)$$

と書ける。

^{*2} $v_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ の展開で \mathbf{G} の符号がマイナスになっているのは Bogoliubov 変換の定義の仕方によるものである。詳しくは [170] を参照せよ。

4.3 結果

本節ではソフトコア相互作用系の GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解いた結果を示す。まず、4.3.1 では流れが無い場合の結果、すなわち基底状態における相関や励起スペクトルの結果を示す。この結果は先行研究 [37, 159, 166] 等で既に得られているので本研究のオリジナルな結果ではないが、理解の助けになるためレビューをかねてここでまとめておく。4.3.2 では本研究の主な結果である超流動流があるときの超固体相の準安定性を調べた結果を示す。超流動流が存在するときの励起スペクトル、および準安定状態の存在するパラメータ領域を示す。また、超固体相だけではなく、ストライプ相と呼ばれる相が準安定状態として安定に存在できることを示す。

4.3.1 基底状態

基底状態では流れが無いのでここでは、 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の状態のみに着目する。また、簡単のため熱力学極限 ($N, N_1 N_2 \rightarrow \infty, n_0 : \text{fixed}$) を考え、素励起の結晶運動量 \mathbf{k} は連続量であるとして取り扱う。また、相互作用の強さを特徴付ける無次元パラメータ

$$g \equiv \frac{\pi n_0 m a^4 V_0}{\hbar^2}, \quad (4.45)$$

を導入する。これは $\pi n_0 a^2 V_0 / (\hbar^2 / m a^2)$ のように書くと、系に特徴的な相互作用エネルギーと特徴的な運動エネルギーの比になっていることがわかる。すなわち、 g が大きいほど相互作用が強い状況を表す。また、GP 方程式 (4.3) を長さを a 、エネルギーを $\epsilon_0 \equiv \hbar^2 / m a^2$ 、凝縮体波動関数を $\sqrt{n_0}$ で無次元化するとこの系を特徴付けるパラメータは g だけになることがわかる。

まず、GP 方程式の解として一様解

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0}, \quad (4.46)$$

$$\mu = \pi n_0 V_0 a^2, \quad (4.47)$$

は常に存在することがわかる。これは (4.3) に代入すれば直ちに確認することができる。また、このときの1粒子あたりのエネルギーは

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{2} \pi n_0 V_0 a^2, \quad (4.48)$$

と計算できる。この結果を Bogoliubov 方程式 (4.27) と (4.28) に代入すると、一様解における Bogoliubov 方程式が

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 + n_0 \bar{V}(\mathbf{k}) & -n_0 \bar{V}(\mathbf{k}) \\ n_0 \bar{V}(\mathbf{k}) & -\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - n_0 \bar{V}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = \epsilon_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} u(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (4.49)$$

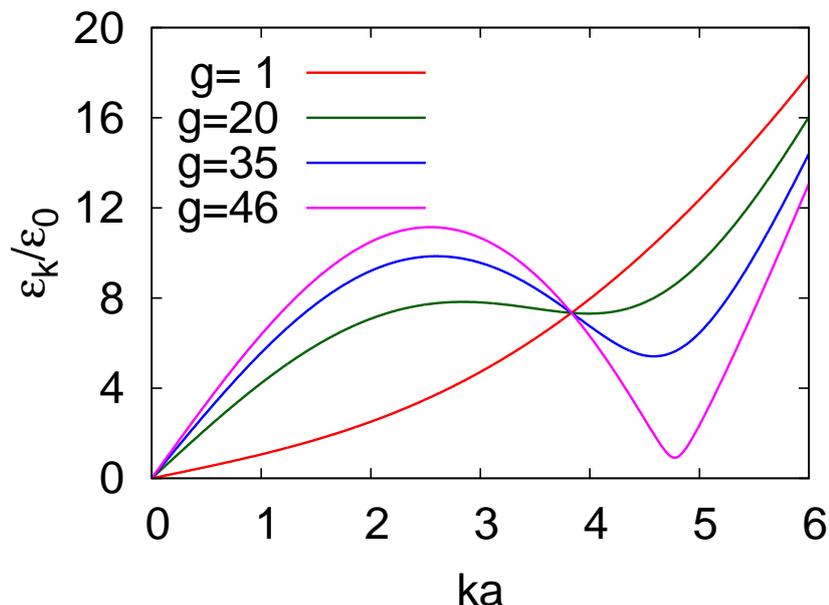


図 4.5 基底状態における励起スペクトル。

と得られる。ここで、 $\epsilon_{\mathbf{k}}^0 \equiv \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ は自由粒子のエネルギーで、 $u(\mathbf{k})$ 、 $v(\mathbf{k})$ はそれぞれ $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{k})$ 、 $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} v(\mathbf{k})$ で定義されている。式 (4.49) を対角化することにより、一様解の場合の励起スペクトルが

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^0 [\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + 2n_0 \bar{V}(\mathbf{k})]} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 4\pi n_0 V_0 a^2 \frac{J_1(ka)}{ka} \right]}, \end{aligned} \quad (4.50)$$

と得られる。これを図 4.5 に示す。相互作用が弱い状態 (例えば $g = 1$) では励起スペクトルは波数に対し単調増加関数である。これは 3.2.5 で示したデルタ関数型相互作用する系と定性的には同じである。一方、相互作用がある程度強くなると ($g \geq 15.81$ であることを示すことができる) スペクトルに極小点が見られるようになる。これは液体 ${}^4\text{He}$ で見られているロトン励起と良く似た形をしているので、以降ロトン、またはロトンミニマムと呼ぶ。相互作用をより強くすると次の値

$$g_c \equiv 46.30 \dots, \quad (4.51)$$

$$k_c a \equiv 4.780 \dots, \quad (4.52)$$

でロトンミニマムがゼロになる。これ以上の g の値では励起スペクトル (4.50) が複素数になる。すなわち、系が動的不安定性を起こす。これより一様な状態 (超流体相、SF 相) は $g \leq g_c$ の領域で基底状態か準安定状態であることがわかる。また、この動的不安定性は有限波数のモードが不安定化を引き起こしている。これはこの波数に対応する周期構造

を持った別の相がより安定な状態として存在する可能性を示唆している。基底状態を決定するためには、このような結晶秩序を持った状態を求め、エネルギーを比較する必要がある。しかし、結晶秩序を持った状態は解析的に扱うことはできないので、以下で数値計算した結果を示す。

結晶秩序を持った基底状態の候補としてここでは三角格子と四角格子を仮定する。この仮定により凝縮体波動関数を式 (4.11) のように展開することができる。具体的には以下の基本並進ベクトルを用いた：

$$\text{三角格子} : \begin{cases} \mathbf{a}_1 = \lambda \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_x + \frac{1}{2} \mathbf{e}_y \right) \\ \mathbf{a}_2 = \lambda \mathbf{e}_y \end{cases}, \quad (4.53)$$

$$\text{四角格子} : \begin{cases} \mathbf{a}_1 = \lambda \mathbf{e}_x \\ \mathbf{a}_2 = \lambda \mathbf{e}_y \end{cases}. \quad (4.54)$$

ここで、 \mathbf{e}_x 、 \mathbf{e}_y はそれぞれ x 、 y 方向の単位ベクトル、 λ は格子間隔であり、以下の計算では λ を最適化して、エネルギーが最小となる λ の値を解として採用した。また、対応する逆格子空間の基本並進ベクトルは

$$\text{三角格子} : \begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}\lambda} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}\lambda} \left(-\frac{1}{2} \mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_y \right) \end{cases}, \quad (4.55)$$

$$\text{四角格子} : \begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{e}_y \end{cases}, \quad (4.56)$$

となる。三角格子の場合に対応する第1ブリルアンゾーンを図 4.6 に示す。

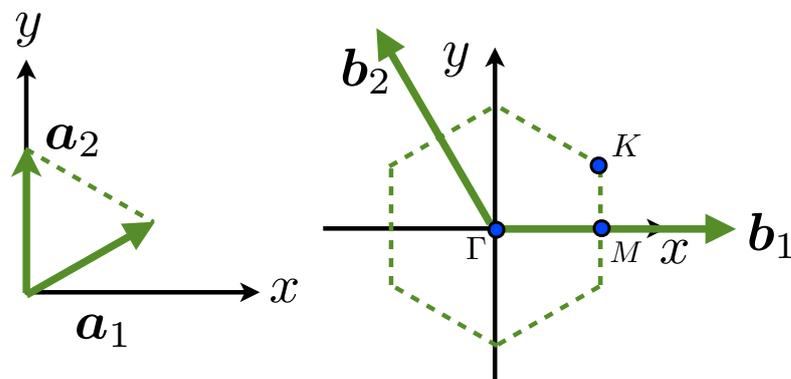


図 4.6 三角格子の基本並進ベクトルと第1ブリルアンゾーンを図示したもの。

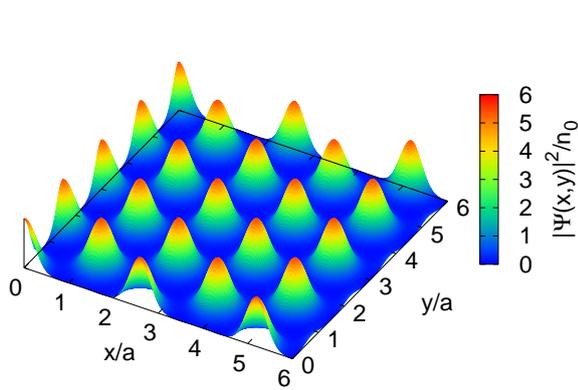


図 4.7 $g = 45$ における三角格子解の密度の空間プロファイル。文献 [129] より。

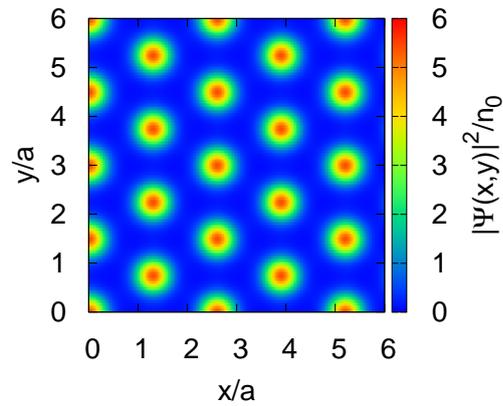


図 4.8 $g = 45$ における三角格子解の密度の空間プロファイル。図 4.7 と同じものを上から見た図。

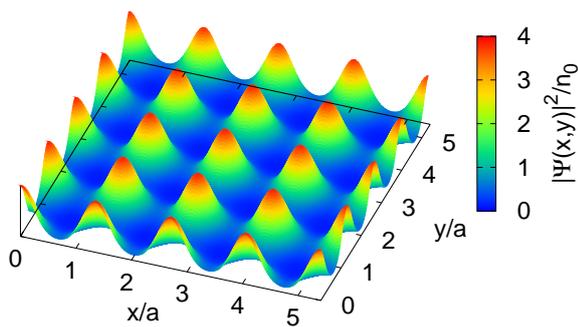


図 4.9 $g = 50$ における四角格子解の密度の空間プロファイル。

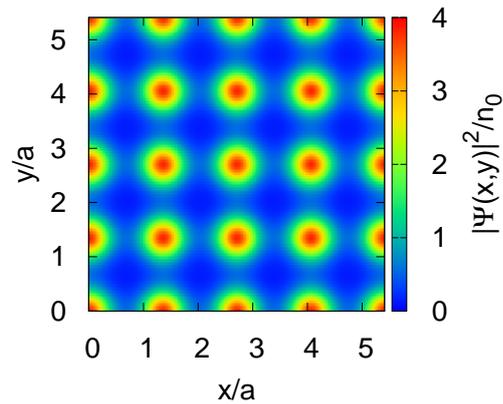


図 4.10 $g = 50$ における四角格子解の密度の空間プロファイル。図 4.9 と同じものを上から見た図。

まず、各結晶構造における密度プロファイルを示す。図 4.7、図 4.8 に三角格子を仮定したときの GP 方程式の解、図 4.9、図 4.10 に四角格子を仮定したときの GP 方程式の解を示す。基底状態を決定するため、三角格子、四角格子、一様解の 1 粒子あたりのエネルギーを比較する。結果を図 4.11 に示す。図より、 g が十分大きいときは常に三角格子解が最低エネルギー状態になることがわかる。図 4.12 に三角格子解のエネルギーと一様解のエネルギーの交点付近を拡大したものを示す。三角格子解のエネルギーと一様解のエネルギーが交差していることから、一様状態から三角格子状態へは 1 次転移することがわかる。この結果は液体-固体転移の Ginzburg-Landau 理論 [63] の結果とコンシステントである。ただし、図 4.12 の交点が転移点では無いことに注意が必要である。なぜなら、今の場合コントロールパラメータは g であるが、これには平均粒子数密度 n_0 が含まれてい

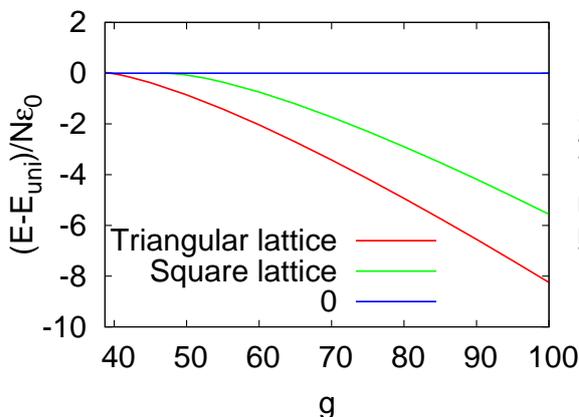


図 4.11 三角格子解、四角格子解と一様解との 1 粒子あたりのエネルギーの比較。

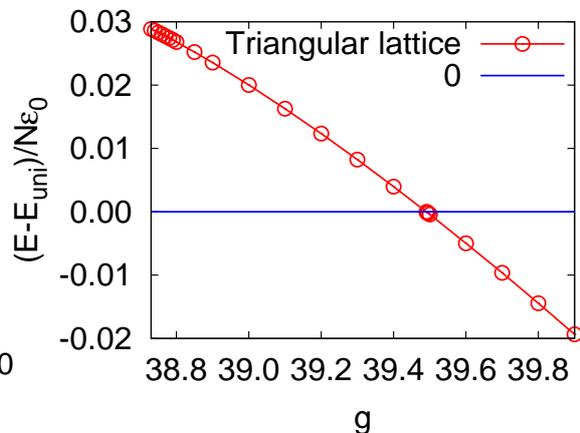


図 4.12 図 4.11 の三角格子解のエネルギーとゼロとの交点付近を拡大したもの。

る (式 (4.45) 参照)。これは示量変数をコントロールパラメータにしていることに対応するので、1 次転移が起きる場合、熱力学の一般論 [171] から一様状態と三角格子状態の間にはこれらの共存相が現れるはずである。今の計算は、結晶構造を仮定したものであるため、共存相は現れない。

超流体と超固体の共存相を見るため結晶構造を仮定しない計算も行った。具体的な計算手法は付録 B で述べる。共存相の密度プロファイルを図 4.13、4.14 および 4.15 に示す。図のように、一様状態と三角格子状態が共存していることがわかる。また、 g を大きくしていくと三角格子の割合が増加することも見て取れる。

共存相が基底状態になり始める g と、完全に三角格子状態になる g の値をそれぞれ g_{SF} と g_{SS} とする。 g_{SF} と g_{SS} を決定するため、共通接線の方法を用いる [172]。3次元系の超流体-超固体の共存に対してこの手法は用いられている [168]。以下で我々の系に対する共通接線の方法の適用方法を説明する。我々の計算では g をコントロールパラメータとして 1 粒子あたりのエネルギーを求めていた。共通接線を引くためには、粒子数密度の関数としてエネルギーを求めなくてはならない。このために、数値計算で求めた無次元化された 1 粒子あたりのエネルギー $\epsilon_{\text{Num}} \equiv E_{\text{calc}} / (N\epsilon_0)$ を単位面積あたりのエネルギーに変換する。無次元化された単位面積あたりのエネルギーは $\epsilon_{\text{area}} \equiv E / (S\epsilon_0/a^2)$ である。よって、両者の間には

$$\epsilon_{\text{area}} = (n_0 a^2) \epsilon_{\text{Num}}, \quad (4.57)$$

の関係がある。また、無次元化した $\tilde{V}_0 \equiv V_0/\epsilon_0$ の値を一つ決めることで、与えた g の値から対応する粒子数密度 $n_0 a^2$ の値が得られる。この手続きにより、エネルギーを無次元化された粒子数密度 $n_0 a^2$ で書くことができる。一様状態のエネルギーは (4.48) と得られているので、数値計算により計算した三角格子状態のエネルギーから共通接線を引くこと

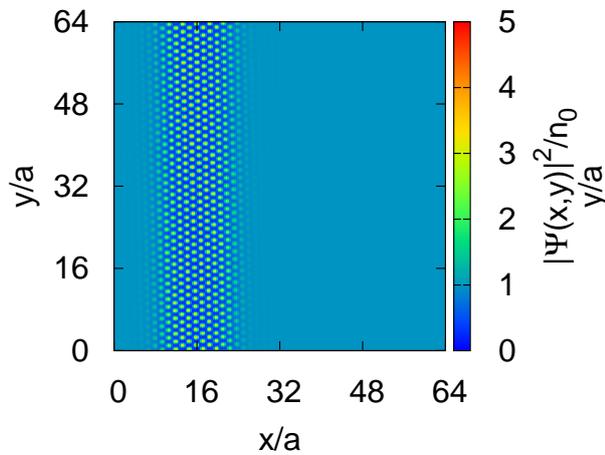


図 4.13 $g = 38.5$ における共存相の密度プロファイル。

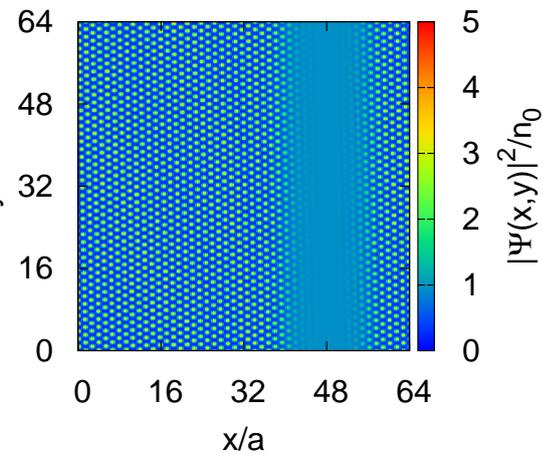


図 4.14 $g = 40$ における共存相の密度プロファイル。

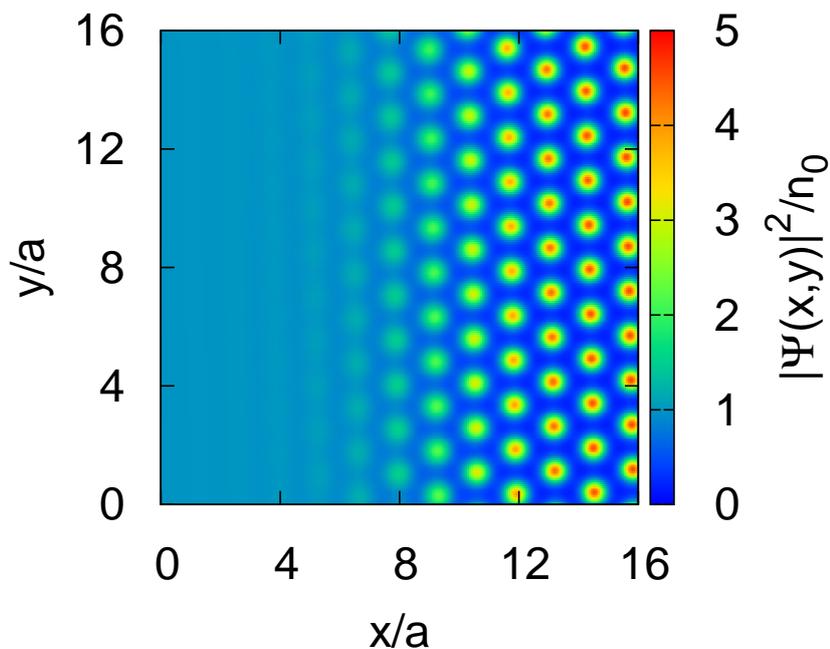


図 4.15 $g = 38.5$ における共存相の界面付近の密度プロファイルの拡大図。

ができる。共通接線を求める際に、エネルギーの粒子数微分が必要であるが、これはスプライン補間を用いて数値的に計算を実行した。その結果、 g_{SF} 、 g_{SS} として

$$g_{SF} \simeq 38.44, \quad (4.58)$$

$$g_{SS} \simeq 40.98, \quad (4.59)$$

を得た。この結果は化学ポテンシャルをコントロールパラメータとして計算した渡辺らの結果 [166] とコンシステントである。

以上の結果から、基底状態の相図を書くことができる。基底状態の相図を図 4.16 に示



図 4.16 基底状態における相図。ここで、Superfluid、Coexistence、Supersolid はそれぞれ一様状態、共存相、三角格子状態を表す。

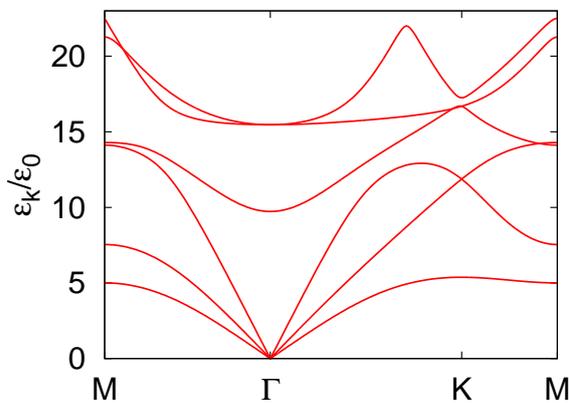


図 4.17 $g = 45$ における三角格子状態の励起スペクトル。 M 、 Γ 、 K 点の定義は図 4.6 のキャプションを参照せよ。文献 [129] より。

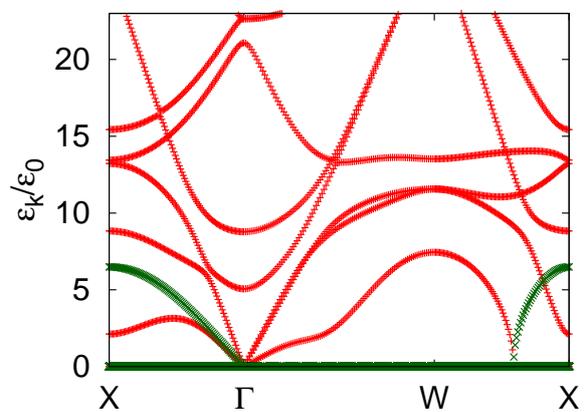


図 4.18 $g = 50$ における四角格子状態の励起スペクトル。 X 、 Γ 、 W はそれぞれ、第 1 ブリルアンゾーン内の $\mathbf{k} = (\pi/\lambda, 0)$ 、 $(0, 0)$ 、 $(\pi/\lambda, \pi/\lambda)$ の点を表す。 λ が格子間隔である。赤点が励起スペクトルの実部、緑点が虚部を表す。

す。まとめると、相互作用が小さい領域では一様な超流動状態、相互作用が強い場合には三角格子を組んだ超流動固体状態が基底状態となる。超流体-超固体転移は 1 次転移であり、密度をコントロールパラメータとしているので、共存相が相図に現れる。

最後に、三角格子状態と四角格子状態の励起スペクトルを図 4.17 と図 4.18 に示す。三角格子状態では長波長 (Γ 点付近) で 3 個のギャップレスかつ波数に対し線形の低エネルギー励起が存在する。これらはエネルギーの低い順に $U(1)$ 対称性の自発的な破れにともなう Bogoliubov モード、並進対称性の自発的破れにともなう横波の Phonon モード、並進対称性の自発的破れにともなう縦波の Phonon モードに対応する。これらはゆらぎの性質を見ることにより区別できる。各バンドの $\mathbf{k}a \simeq 2.42 \times 10^{-2} \mathbf{e}_x$ における密度ゆらぎ $\delta n_i(\mathbf{r})$ と位相ゆらぎ $\delta P_i(\mathbf{r})$ (定義は式 (3.112) と (3.114) を参照) を図 4.19(a) から (f) に

示す。ゆらぎの空間パターンとその大きさを見ることにより、図 4.19(a) と (b) から最低エネルギーバンドは縦波で、位相ゆらぎが主要な寄与を与えることがわかる。よって、これは Bogoliubov モードであるとわかる。次のバンドは図 4.19(c) と (d) より、横波で密度ゆらぎが主要であることから、横波の Phonon モードである。第 3 バンドは図 4.19(e) と (f) より、縦波の Phonon モードであることが結論付けられる。四角格子状態は図 4.11 から、基底状態としては実現しないが、準安定状態としては存在する可能性がある。しかし、図 4.18 より、四角格子状態は励起エネルギーに有限の虚部を持ち、動的不安定性を示す。この性質は相互作用の強さ g にはよらなかった。つまり、四角格子状態は GP 方程式の解として存在するが、常に不安定であることがわかった。よって、これ以降は四角格子状態は考えないことにする。

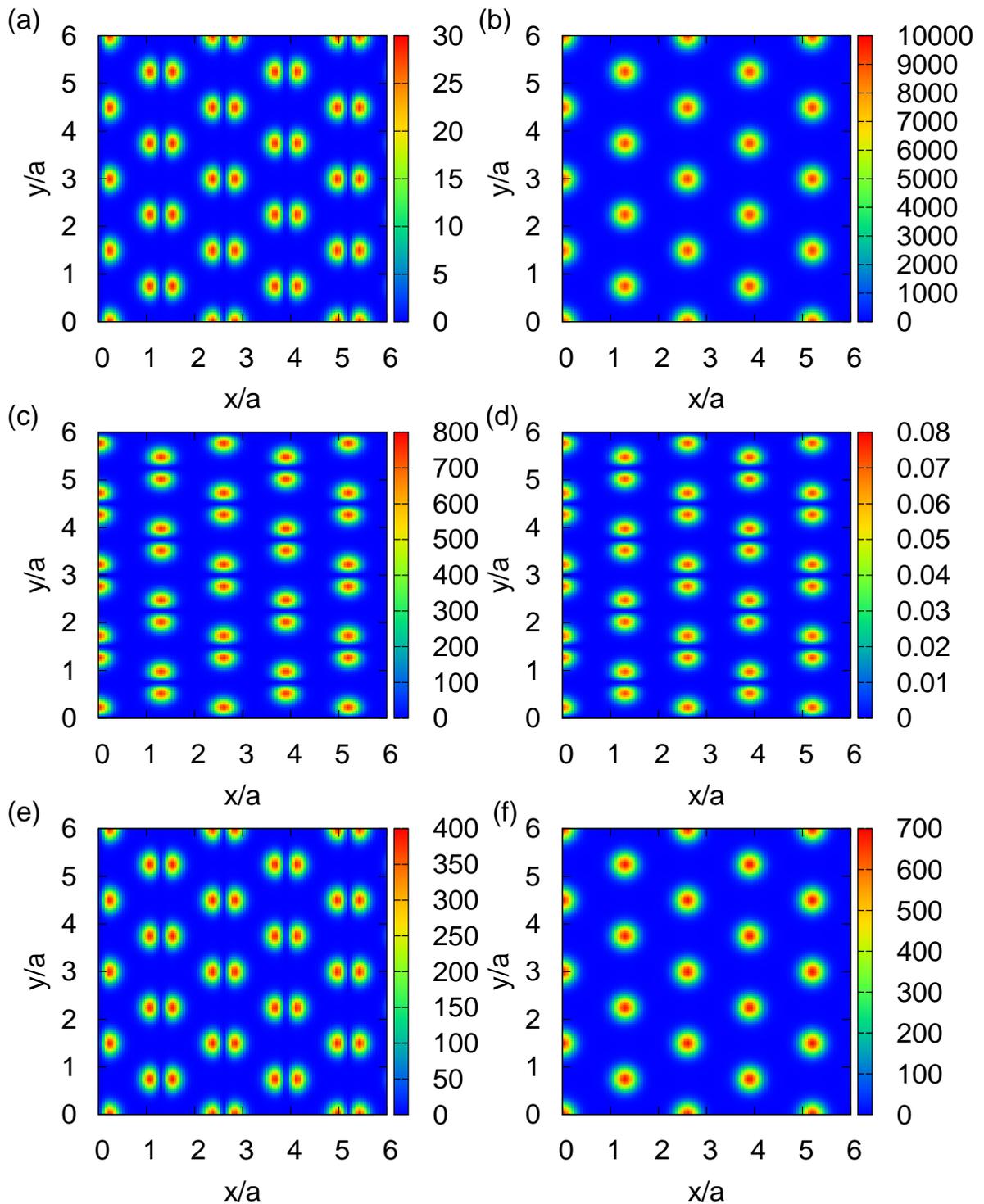


図 4.19 $g = 45$ の三角格子状態における $\mathbf{k}a \simeq 2.42 \times 10^{-2} \mathbf{e}_x$ の (a) Bogoliubov モードによる密度ゆらぎ (b) Bogoliubov モードによる位相ゆらぎ (c) 横波 Phonon モードによる密度ゆらぎ (d) 横波 Phonon モードによる位相ゆらぎ (e) 縦波 Phonon モードによる密度ゆらぎ (f) 縦波 Phonon モードによる位相ゆらぎ。同様の結果は文献 [167] でも得られている。ここでは励起状態波動関数の規格化は考慮していないことに注意。

4.3.2 準安定状態

ここでは超流動流がある $q \neq 0$ の状態の準安定性を調べた結果を示す。流れの方向は $+x$ 方向であると仮定する。すなわち、 $q \equiv qe_x (q > 0)$ であるとする。また、4.3.1 で扱った共存相は扱わず、均一相にのみ着目する。

まず、本研究の主要な結果である超流動流がある状態が準安定となるパラメータ領域を示した相図を図 4.20、および図 4.21 に示す。準安定状態として超流体相 (Superfluid 相、SF 相)、超固体相 (Supersolid 相、SS 相) に加え、基底状態では存在しなかったストライプ相 (Stripe 相) の 3 つの相が準安定状態として存在できることがわかった。ストライプ相とは 1 次元方向にのみ並進対称性が自発的に破れた相である。超流体相は赤線で囲まれた領域、超固体相は青破線よりも右側の領域で準安定、ストライプ相は赤線と緑点破線、青点線で囲まれた領域内で準安定に存在できる。一つパラメータを与えたときに複数の状態が準安定状態になることがあることを反映し (例えば、 $g = 40$ 、 $qa = 0.8$ では超流体相と超固体相の 2 つが準安定となる)、相図上で重なる領域が存在することに注意。以下では、各相の準安定性について順番に説明する。

まず、超流体相について説明する。超流体相は流れがある場合でも解析的に GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解くことができる。凝縮体波動関数、化学ポテンシャル、励起エ

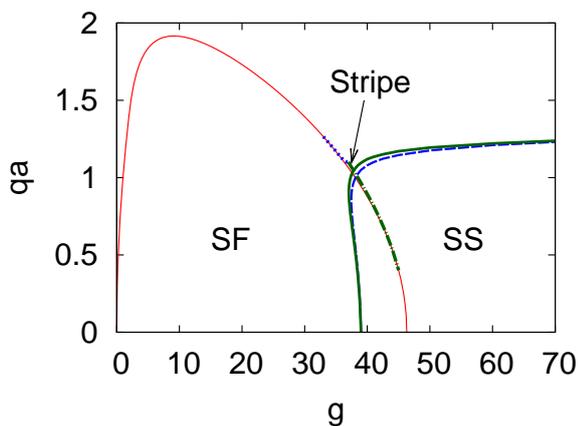


図 4.20 超流体相 (SF)、超固体相 (SS)、ストライプ相 (Stripe) の準安定なパラメータ領域を示した図。赤線が超流体相が Landau 不安定性のラインである。他の線の説明は図 4.21 で行う。文献 [129] より。

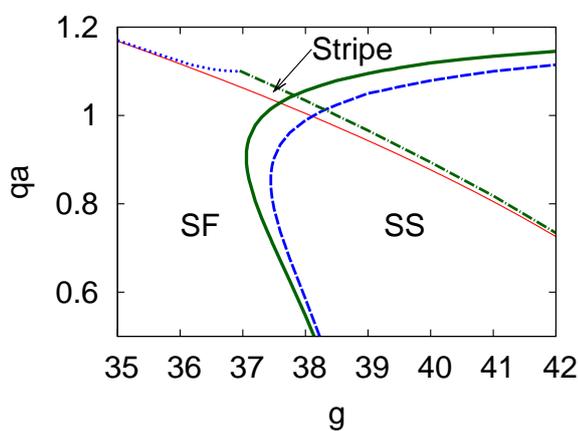


図 4.21 図 4.20 を拡大したもの。青破線が超固体相の Landau 不安定性のライン、緑線が超固体相の動的不安定性のライン、青点線がストライプ相における長波長の動的不安定性のライン、緑点破線がストライプ相の有限波数の動的不安定性のライン。文献 [129] より。

エネルギーは以下のように得られる：

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n_0} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.60)$$

$$\mu = \pi n_0 V_0 a^2 + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m}, \quad (4.61)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k},\mathbf{q}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}{m} + \sqrt{\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + 4\pi n_0 V_0 a^2 \frac{J_1(ka)}{ka} \right]}. \quad (4.62)$$

一様状態の臨界速度は Landau の臨界速度の公式

$$v_c^{\text{SF}} = \min_{\mathbf{k}} \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k},\mathbf{q}=0}}{\hbar k} \right), \quad (4.63)$$

で求めることができる。これを計算した結果が図 4.20 の赤線に対応する。この赤線で囲まれた領域内では超流体相が準安定に存在できる。

超流体相の相互作用が弱いときと強いときの励起スペクトルを図 4.22 と 4.23 に示す。相互作用が十分弱いときはロトンミニマムが存在せず、長波長のモードが不安定化する。一方、相互作用が強いときはロトンミニマムが存在し、有限波数のモードが不安定化することが図から見て取れる。不安定性の起こる波数が長波長から有限波数に切り替わる g は解析的に求めることができる。その結果 $g \leq 2$ では長波長のモードが不安定化、 $g > 2$ では有限波数のモードが不安定化を引き起こすことが示すことができる。有限波数の不安定性はパラメータ領域によっては、ストライプ相への転移を引き起こす。これについては後で説明する。

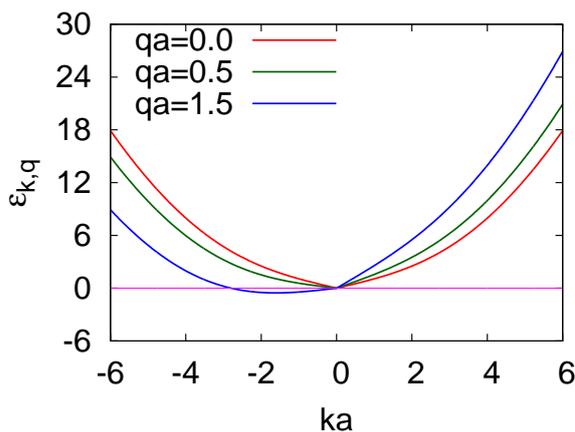


図 4.22 $g = 1$ における超流体相の流れがある場合の $k_y = 0$ のときの励起スペクトル。

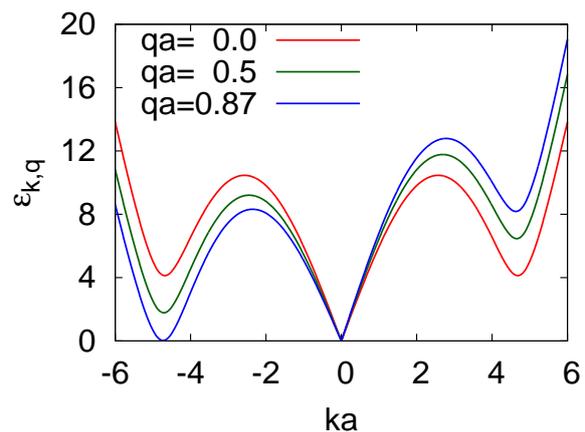


図 4.23 $g = 40$ における超流体相の流れがある場合の $k_y = 0$ のときの励起スペクトル。

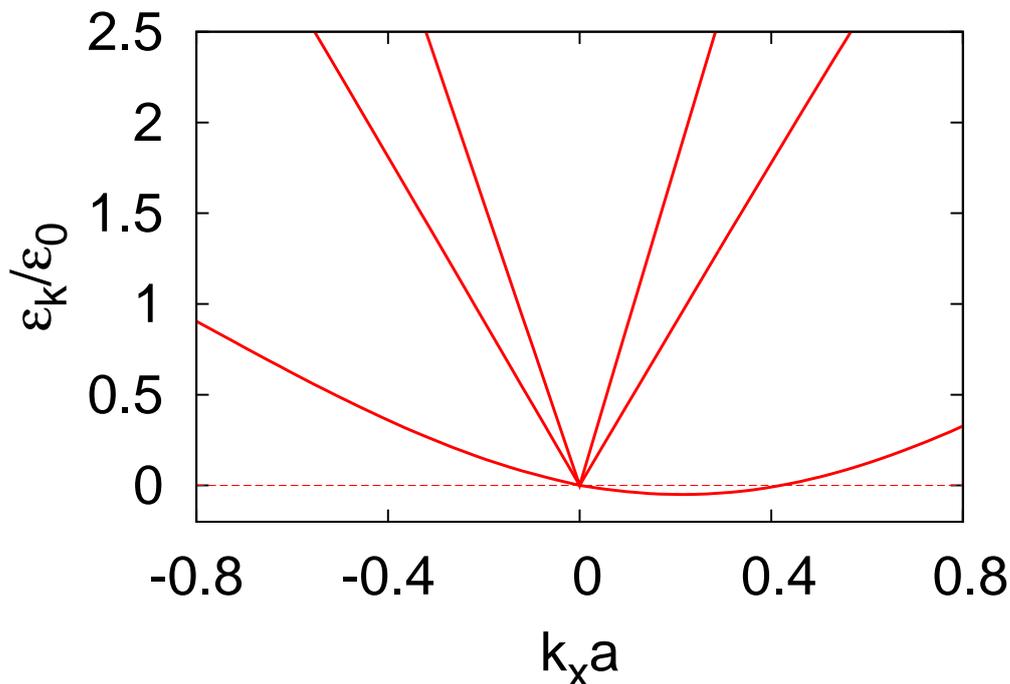


図 4.24 $g = 45$ の三角格子状態における $k_y = 0$ の励起スペクトルの長波長部分を拡大したもの。点線はゼロのラインを表す。文献 [129] より。

次に、超固体相の準安定性について説明する。超固体相の安定性は、 $q \neq 0$ の GP 方程式の解を数値的に求めた後、Bogoliubov 方程式より、励起スペクトルを計算し、スペクトルの異常性の有無で判定した。超固体相が準安定な領域は図 4.20、または図 4.21 の青破線、または緑実線よりも右側の領域である。この領域外では超固体相は不安定、または GP 方程式の解ではない。青破線は Landau 不安定性の起こるライン、緑実線は動的不安定性が起こるラインである。また、これらの不安定性はともに長波長のモードで起きる。Landau 不安定性を起こしているときの典型的なスペクトルを図 4.24 に示す。4.3.1 で示したように、超固体相 (三角格子状態) では低エネルギー励起として Nambu-Goldstone モードである Bogoliubov モード、横波の Phonon モード、縦波の Phonon モードの 3 個が存在していた。図 4.24 でもエネルギーの低い順に Bogoliubov モード、横波の Phonon モード、縦波の Phonon モードとなっている。これより、不安定化するモードは Bogoliubov モードであり、並進対称性の自発的破れにともなうモードである横波の Phonon モード、縦波の Phonon モードは超流動流の不安定化には寄与しないことがわかった。

ここで、超流動流と結晶の異方性について議論する。本研究では、流れの方向を $+x$ 方向に制限し、結晶の対称性は流れがある場合にも常に正三角形に保たれると仮定した計算を行った。一般に、流れがある場合には系に異方性が生じるので、正三角形よりも、例えば二等辺三角形の結晶を組んだ方がより低いエネルギーの状態を実現できるのではないか

と期待できる。実際に、我々は二等辺三角形を仮定した計算を行ない、流れがある場合には正三角形の場合よりもエネルギーが低くなることを確認した。しかし、正三角形の場合と二等辺三角形の場合のエネルギー差は微小であり、考慮したとしても図 4.20 や図 4.21 の変化はこのプロットレンジでは確認できないほどであった。よって、流れにより格子が正三角形から歪む効果は無視した。また、励起スペクトルも結晶の構造を反映した異方性を持つため、流れが x 方向であったときと、例えば y 方向であった場合に、不安定性の機構が変わる可能性が一般にはある。しかし、今の場合、この効果もほとんど無視できる。なぜなら、超固体相では不安定性は長波長領域で起きるからである。流れが無い場合には、長波長の Bogoliubov モードの分散関係はほとんど結晶運動量の方向によらず等方的である。これは、長波長のモードは格子の存在による影響をほとんど受けないことによる。実際に、 $+y$ 方向に流れがある場合の超固体相の臨界速度を計算を行ったが、結果は $+x$ 方向の流れがある場合とほとんど変わらなかった。以上により、超固体相における超流動流の不安定化を考える際には結晶の異方性はほとんど無視できる。

次に、ストライプ相の準安定性について説明する。この相も超固体相と同様に、解析計算では求めることはできないので、数値的に GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解き、励起スペクトルを求め、その異常性の有無で準安定性を決定した。ストライプ相の準安定領域は図 4.21 の赤線と青破線、緑点破線に囲まれた比較的狭い領域である。ストライプ相における典型的な密度プロファイルは図 4.25 と 4.26 に示す。ストライプ相の準安定領域が超流体相の準安定の限界ラインである赤線よりも上の領域にあることから示唆されるように、ストライプ相は超流体相から連続的につながっている。実際に、一様系の Landau の臨界速度を超すと密度の振動の振幅が連続的に大きくなっていくことを確認した。また、密度の振動周期は一様系で Landau 不安定性が起きる波数に対応する長さに非常に近い。以上より、ストライプ相は一様系での流れの方向に沿った有限の波数で Landau 不安定性が起きることで、その有限波数のモードが成長しできたものだと解釈できる。この周期構造の安定化の機構は Pitaevskii[125] により提案されており、その後 Ancilotto ら [126] や Baym と Pethick[128]、また著者ら [127] によって、議論されているが、存在と安定性を直接示したのは本研究が初めてである。

ストライプ相における典型的な励起スペクトルを図 4.27 と 4.28 に示す。ストライプ相では破れている対称性の数が超固体相よりも少ない。それを反映して Nambu-Goldstone モードの数も超固体相よりも 1 つ少ない Bogoliubov モードと縦波 Phonon モードの 2 個となる。また、超固体相とは異なり、最も低エネルギーのモードが縦波 Phonon モードであり、その次にエネルギーの低いモードが Bogoliubov モードになる。また、 q をより大きくするとストライプ相は動的不安定性を起こし不安定化する。このとき相互作用の強さ g によって、有限波数のモードが動的不安定性を起こすか (図 4.21 緑点破線に対応)、長波長のモードが動的不安定性を起こすか (図 4.21 青点線に対応) が異なる。

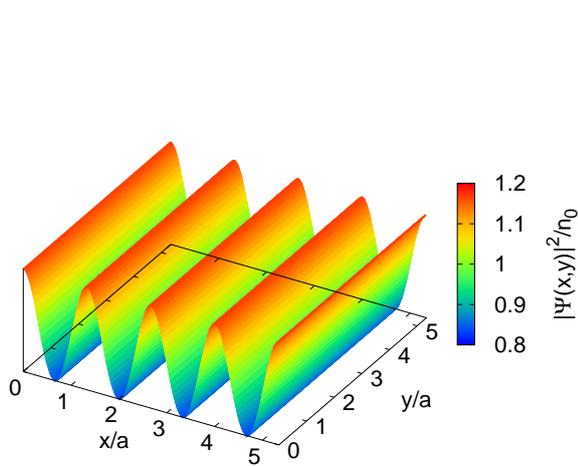


図 4.25 $g = 37.5$, $qa = 1.05$ におけるストライプ相の密度プロファイル。 $+x$ 方向に超流動流が流れている。文献 [129]

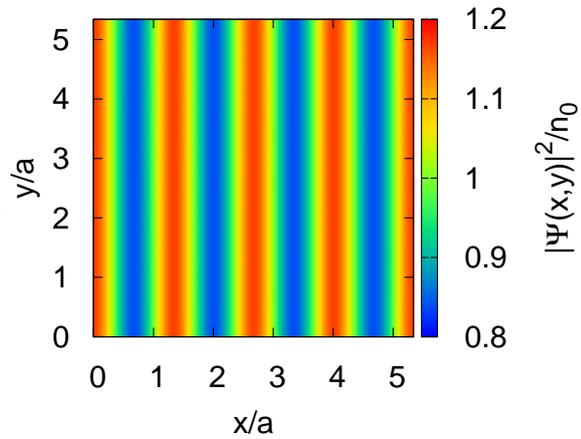


図 4.26 $g = 37.5$, $qa = 1.05$ におけるストライプ相の密度プロファイル。図 4.25 と同じものを上から見た図。

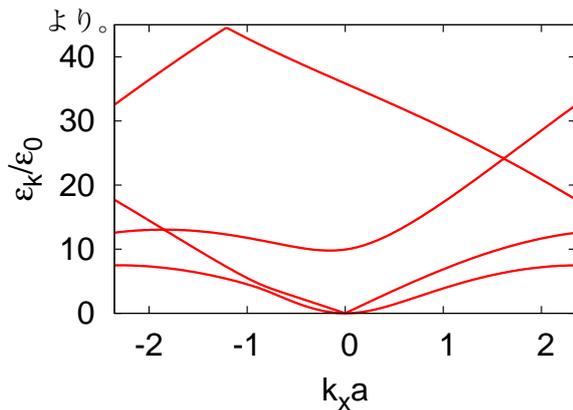


図 4.27 $g = 37.5$, $qa = 1.05$ のストライプ相における $k_y = 0$ の励起スペクトル。文献 [129] より。

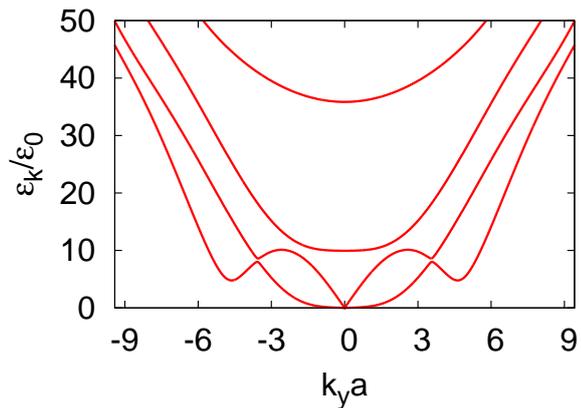


図 4.28 $g = 37.5$, $qa = 1.05$ のストライプ相における $k_x = 0$ の励起スペクトル。

本研究では、超流動流があるときの準安定状態の候補として一様な超流体相、三角格子を組む超固体相、1方向にのみ対称性が破れたストライプ相の3つの可能性を仮定して準安定状態の存在するパラメータ領域を決定した。この仮定により、凝縮体波動関数が式 (4.11) のように展開でき、数値計算が比較的容易に実行できた。しかしながら、式 (4.11) のように書けない状態が一般には準安定状態として存在し得る。その一つの例が 4.3.1 で扱った超流体-超固体の共存相である。4.3.1 では流れの無い基底状態のみを計算したが、共存相で流れがある場合も準安定状態として存在し得る。また、この状態は図 4.13 と 4.14 で示したように界面がある。よって、均一な超固体相とは異なり、界面と流れの方向の角度によって不安定化の機構が変わる可能性がある。別の可能性としては文献 [159] で報告されているような、格子欠陥や結晶粒界 (grain boundary) を含んだような状

態である。文献 [159] ではこのような欠陥を含んだ状態の方がそうでない状態より超流動密度が上昇するという報告がなされており、流れがある場合の準安定性にも非自明な効果を生む可能性が十分ある。ここで挙げた状態は結晶秩序が壊れているような状態なので、凝縮体波動関数が式 (4.11) の形で書けない。例えば、 $L \times L$ のサイズの正方形の系に対して周期境界条件を用いて計算する必要が生じ、結晶秩序がある場合と比べて数値計算のコストが大きい。

4.4 まとめと展望

本研究ではソフトコア相互作用する Bose 粒子系を Gross-Pitaevskii 方程式と Bogoliubov 方程式を用いて基底状態、および超流動流がある準安定状態の性質を調べた。ソフトコア相互作用系では、基底状態では超流体相、超固体相および超流体-超固体相の共存相が現れる。また、超固体相の低エネルギー励起として自発的な $U(1)$ 対称性と並進対称性の自発的破れにともなう Nambu-Goldstone モードが合計 3 個存在する。この系の超流動流の安定性を見るため準安定状態として均一相である超流体相、超固体相、ストライプ相を仮定し、超流動流がある状態の励起スペクトルを計算した。この結果から相互作用の強さと、流れの速度に対してそれぞれの相が準安定に存在できるパラメータ領域を決定した。

残った課題の一つは並進対称性を破る外場がある場合の励起スペクトルを求めることである。2.3.2 で説明したように、外部ポテンシャルが無い系の計算から得られた臨界速度は外部ポテンシャルが十分弱いときの結果を再現すると期待される。よって、本研究の結果は系の乱れが小さいクリーンな系の臨界速度を再現するものと考えられる。よって、強いポテンシャルが存在する場合に超流動流がある状態が準安定に存在できるかは本研究からはわからない。先行研究として、Pomeau ら [37] の無限に強い円形のポテンシャルがある系で GP 方程式を解いた研究がある。彼らはポテンシャルを横切る無散逸な流れは存在しないと結論づけている。一方、穴釜により Pomeau らとほぼ同じ系の数値計算から、円形のポテンシャルを横切る無散逸流の存在が主張されている [173]。ただし、両者ともに GP 方程式のみを用いた研究であり、安定性解析は行われていない。これらの結果の食い違いは外部ポテンシャルがある場合に、Bogoliubov 方程式を直接解き、安定性解析を実際に行うことで解決可能であると考えている。

別の課題としては、超固体相に対する平均場近似の妥当性の検証がある。本研究では GP 方程式と Bogoliubov 方程式という秩序変数を仮定した平均場近似とそのまわりの微小振動を考えるとという枠組み内で行った。しかし、3.2.8 で説明したように、デルタ関数型の相互作用の場合には相互作用が強くなると GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いた近似は悪くなることが知られている。本研究で用いたのは、デルタ関数型相互作用ではな

く、ソフトコア型の相互作用であるが、この場合にも相互作用が強いと近似が悪くなるのではないかと素朴には考えられる。ただし、定量的にどの程度強くなると近似が使えなくなるかはまだわかっていない。しかし、ソフトコア系の量子モンテカルロ計算 (QMC) を用いた先行研究 [160, 161] とこれらの研究と平均場近似の結果の比較を行った研究 [167] からいくつかの知見が得ることができる。ひとつは相互作用が十分強い (およそ $g \gtrsim 70$) ときには基底状態は超固体相ではなく通常の固体相となり超流動性を持たなくなる。本研究で用いた近似では、凝縮体波動関数は常にゼロになることは無いので、通常の固体相は記述することは不可能である。よって、 $g \gtrsim 70$ では本研究の結果は正しくない可能性がある。一方、超流体-超固体転移の転移点の値は QMC と平均場近似で大きな差が無いことが報告されている [167]。加えて、超流体相と超固体相における励起スペクトルも QMC と平均場近似の結果は定量的に良い一致を示すことも報告されている。これから、相互作用が強すぎない領域では平均場近似でも十分多体問題の結果を再現できる可能性がある。ただし、QMC の結果は平衡状態に対する結果なので、本研究で扱った準安定状態も平均場近似で良い結果を与えるかは自明では無い。また、平均場近似と QMC の良い一致がソフトコア型ポテンシャルの特殊性によるものか、より一般の、例えば双極子相互作用等の相互作用でも成り立つものかはわかっていない。これらを明らかにすることが今後の課題の一つである。

第 5 章

Bose 凝縮体中を一定速度で動くポテンシャル存在下での超流動安定性の解析

5.1 イントロダクション

超流動を一言で言うならば、量子力学的効果により粘性がゼロになる現象のことをいう。しかし、一言に超流動と言ってもさまざまな現象がこれには含まれている。例えば、第 2 章で説明した Hess-Fairbank(HF) 効果 (NCRI)、量子渦、永久流を始めとする準安定性、他にも Josephson 効果 [174] 等がある。

本研究では超流動の準安定性、特に準安定性がいかにして破れるかに着目する。これについての研究は第 2 章で説明した、Landau[2] や Feynman[3] の超流動臨界速度についての理論的研究を初めとして、液体 ^4He による実験的研究も数多く行われている [4, 6, 7, 8]。さらに、冷却原子系における BEC の実現 [9, 10, 11] 以来、冷却原子系の BEC における超流動性を調べる実験が数多く行われている。そのうち本研究と関わりが大きいものをいくつか取り上げる。

冷却原子系の実験で臨界速度を初めて観測したのは MIT のグループである [31, 32, 77]。彼らはトラップされた BEC 中に青方離調したレーザーを照射することで斥力ポテンシャルを生成した。さらに、レーザーを動かし、BEC をかき乱すことでその超流動性を調べた。その結果レーザーの速度がある速度よりも小さいときはほとんど散逸がおきず、ある速度を超えると散逸が発生することがわかった (図 5.2 参照)。ここで観測された臨界速度の値はおよそ系の音速の 10 分の 1 程度であった。この臨界速度の値は Landau の臨界速度よりも小さいため、超流動の崩壊機構は Landau のものとは異なることが示唆される。実際に、BEC の干渉パターンを利用した研究により、臨界速度以上では量子渦が生成さ

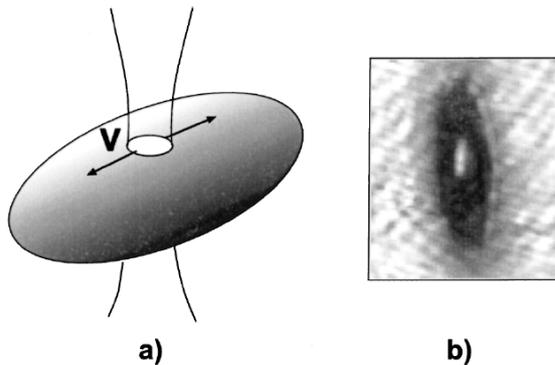


図 5.1 実験の模式図。文献 [31] より。

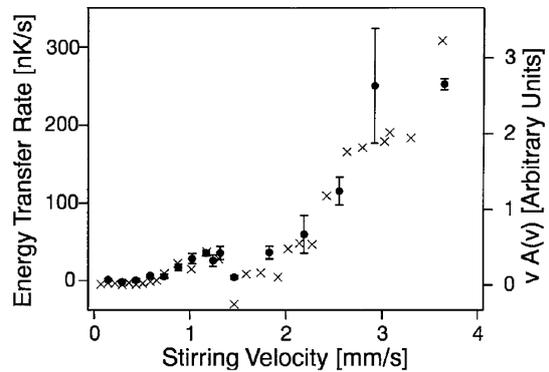


図 5.2 レーザーの速度に対するエネルギー散逸の大きさ。文献 [32] より。

れていることが明らかになった [77]。より最近の実験では臨界速度と量子渦対の生成、渦対のダイナミクスの観測がなされている [78]。また、レーザーの形状をシート状にすることにより、臨界速度以上におけるソリトンの生成も観測されている [102]。

ここまでで紹介した実験は全て調和ポテンシャル中にトラップされた BEC にレーザーを照射するタイプの実験であった。最近の実験技術の進歩によりこれとは少し異なるタイプの実験も行われている。それがリングトラップ中に BEC を閉じ込めるタイプの実験 [175] である。この系と上で述べた実験の最大の違いは BEC を閉じ込めている領域のトポロジーが単連結か多重連結かということである。この違いはとても大きい。なぜなら、周期境界条件を用いて解析できるという計算上の利点だけではなく、複数の異なった超流動の性質、例えば、HF 効果と準安定性を区別できるという利点があるからである*¹。

リングトラップの実験では永久流状態が観測されている [68]。この実験では、初期状態としてトラップ中に静止した BEC を用意し、Laguerre-Gaussian ビームを当てることで BEC に角運動量を与え、その流れの減衰度合いを見ることで寿命が観測された。また別の実験ではリングトラップに加え別のレーザーにより、リングの弱い点、すなわち weak-link を作ることに成功している [69]。この weak-link があるトラップ中の実験でも Laguerre-Gaussian ビームで角運動量を与えることで永久流状態を観測している。本研究で考える系に近い実験としては、リングトラップ中の weak-link を回転させるという実験が行われている [35, 36](図 5.3 参照)。この実験では weak-link の回転速度を制御するこ

*¹ Leggett の教科書 [39] には

However, it turns out that those experiments are in some sense of a hybrid nature, and that the true nature of the phenomenon emerges more clearly if we consider a multiply connected (ring) geometry and distinguish two superficially similar but conceptually very different effects.

とある。

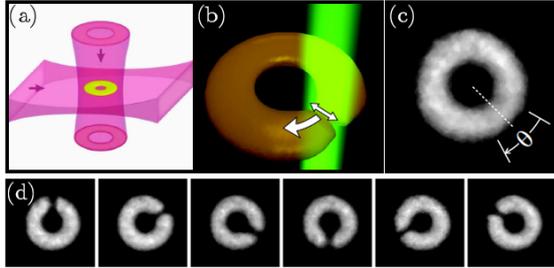


図 5.3 リングトラップ実験の模式図。文献 [35] より。

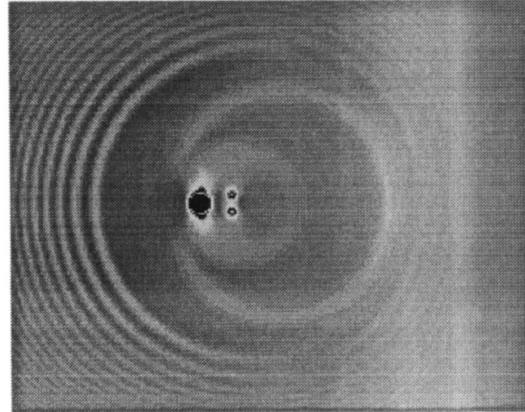


図 5.4 臨界速度以上における量子渦対の放出ダイナミクス。文献 [33] より。

とで臨界速度、 2π -phase slip、量子渦の観測に成功している。ごく最近、2つの weak-link があるリングトラップを作り、冷却原子系で SQUID を実現したという報告もある [176]。

以上で述べたように、冷却原子系における超流動性を調べる実験的研究は活発に行われているが、理論的な研究はこれ以上に活発に行われている。この系は非線形偏微分方程式である GP 方程式で良く記述できることや、モデルとしては比較的簡単に見えるにもかかわらず様々な非自明な現象を見ることができるといえる。このため、上で述べた実験を説明するという動機だけではなく、非線形物理や流体物理の観点、パターン形成、量子乱流の理解を目指す研究など、様々な観点から研究されている。以下では、その全てを追うことは不可能であるので、本研究と関わりが深い研究を中心に紹介する。

GP 方程式を用いてこの問題に初めて取り組んだのは Frisch ら [33] である。彼らは 2次元の GP 方程式を用いて、円状のポテンシャルがあるときに、超流動速度が臨界速度以上になると量子渦対が流れの下流に向かって放出されることを数値計算によって示した (図 5.4 参照)。また、このときの臨界速度は系の音速の 0.4 倍程度であることも明らかになった。この振る舞いは定性的には上で述べた実験結果と一致している。Frisch らの研究の 1次元版と言うべき研究は Hakim[34] によって行われた。彼はポテンシャル障壁がある 1次元系を GP 方程式を用いて解析した。1次元の GP 方程式の特徴の一つはソリトン解があることである。臨界速度以下の定常状態に対し彼はソリトン解を利用して厳密解を与えた。厳密解から、臨界速度以下では安定定常解と不安定定常解が一つずつ存在すること、臨界速度はポテンシャルの強さに対し単調に減少することが示された。また、臨界速度以上では数値計算により、ソリトンが周期的に放出されるというダイナミクスが存在することが示された (図 5.5 参照)。

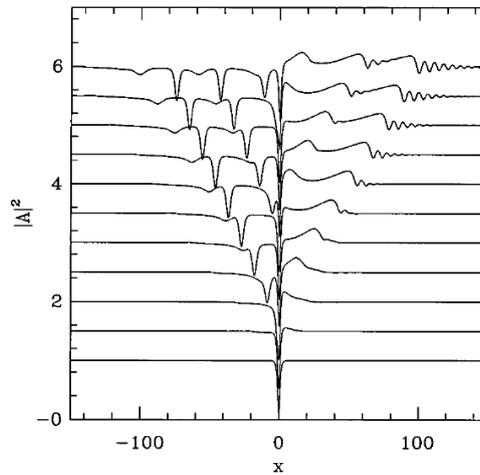


図 5.5 臨界速度以上の放出によるソリトン放出のダイナミクス。流れの方向は $-x$ 方向である。文献 [34] より。

Frisch らや Hakim の研究をより非線形物理的な観点で押し進めたのが Huepe と Brachet[177]、Pham と Brachet[178] らの研究である。彼らは臨界速度における超流動-非超流動への転移を GP 方程式の定常解の分岐であるにとらえ、安定定常解と不安定定常解の構造をより詳細に調べた。また、分岐構造から期待されるスケーリング則、具体的には臨界速度近傍の量子渦またはソリトンの放出の時間間隔に対するスケーリング則を数値計算から見出した。これらの研究結果については本研究の結果と密接に関係するため 5.3 でも触れる。

ここまで紹介した先行研究はほぼ全て GP 方程式のみを用いた研究であった。1次元のポテンシャル障壁がある場合には、Bogoliubov 方程式は Bogoliubov 励起の透過反射問題の観点から Kovrizhin[179]、Kagan ら [180]、段下ら [181] によって解かれている。特に、低エネルギー極限で Bogoliubov 励起が完全透過することから、この現象は異常トンネル効果と呼ばれている。異常トンネル効果は凝縮体の速度が臨界速度に達すると消滅する、すなわち完全透過性が失われることが示されている [181]。この完全透過性の消失の物理的起源は高橋により議論された [182, 183, 170]。その結果によると、臨界速度直上においてのみ密度ゆらぎに寄与する Bogoliubov 方程式のゼロエネルギー解が存在することが解析的に示された。臨界速度直上ではこのゼロエネルギー解の存在により密度ゆらぎが増大し、完全透過性が失われると解釈できる。この密度ゆらぎの性質をより詳細に調べたのが渡部、加藤らの研究である [184, 185]。彼らは局所スペクトル関数を導入し、臨界速度近傍における低エネルギーの振る舞いから超流動の崩壊を議論した。

以上で述べたように、ソリトン、量子渦の生成による超流動の崩壊の問題は様々な観点からの研究が行われ、様々な研究結果が得られている。しかしながら、上で述べた様々な結果の物理的意味、超流動崩壊機構の理解はまだ不十分である。特に2次元系以上の量

子渦の問題に関しては、ポテンシャルの存在により、励起状態の解析が難しいため、いままで計算が行われおらず、1次元系に比べると理解が不十分である。本研究の目的は量子渦生成による超流動崩壊機構の解明を目指すことである。そのため、2次元系、また比較のため1次元系において一定速度で動くポテンシャルがあるときに、GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解き、その励起状態の構造、性質を明らかにすることを試みた。特に臨界速度近傍の性質を中心に研究を行った。また、超流動性の理解に集中するために、有限系で周期境界条件を課した下での問題を取り扱う。上で述べたように、この問題設定は理論的な取り扱いが簡単になる以上に超流動性を引き出す上でとても有利である。また、近年の冷却原子系の実験的状況を見ると、周期境界条件下での問題は非現実的な問題設定ではないことを強調しておく。実際に、本研究で扱う問題設定は上で述べた Wright ら [35, 36] の実験に非常に近い。

本章の構成は以下のようにになっている：5.2 では本研究での問題設定を示す。具体的には、GP 方程式と Bogoliubov 方程式の説明を行い、数値計算手法について簡単に述べる。5.3 では2次元系の GP 方程式、Bogoliubov 方程式、および1次元系における GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解いた結果を示す。最後に 5.4 においてまとめと今後の展望を述べる。また、本章の結果の一部は文献 [186] に基づいている。

5.2 モデル

5.2.1 GP 方程式

考える系は一辺の長さ L の正方形トーラス領域 ($-L/2 \leq x, y \leq L/2$)、または長さ L のリング中 ($-L/2 \leq x \leq L/2$) に Bose 粒子 N 個が閉じ込められている系である。以下では2次元のトーラスを念頭に置いた説明を行う。次元性が効くことがあればその都度説明を加えることにする。この系に x 方向に一定速度 $-\mathbf{v}$ ($\mathbf{v} \equiv v\mathbf{e}_x, v > 0$) で動く外部ポテンシャルがかかっているとす (図 5.6 参照)。これを $U(\mathbf{r} + \mathbf{v}t)$ と書き、以下の Gauss 型であると仮定する：

$$U(\mathbf{r}) = U_0 \exp \left[- \left(\frac{x}{d} \right)^2 - \left(\frac{y}{d} \right)^2 \right]. \quad (5.1)$$

ここで、 U_0 はポテンシャルの強さを表し、以下斥力の場合 ($U_0 > 0$) を扱う。また、 d はポテンシャルの幅を表す。Bose 粒子間の相互作用は斥力のデルタ関数型 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ($g > 0$) の場合を考える。このとき、時間に依存する GP 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{L}}^2 \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) + U(\mathbf{r}_{\mathbf{L}} + \mathbf{v}t) \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) + g |\Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)|^2 \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t), \quad (5.2)$$

と与えられる。ここで、ポテンシャルが速度 $-\mathbf{v}$ で動いているように見える座標系を以下実験室座標系と呼び、実験室座標系の変数であることを明示するために添字 \mathbf{L} を座標と凝縮体波動関数に付けた。また、境界条件は考えている系がトーラスなので、周期境界条件

$$\Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}} + L\mathbf{e}_x, t) = \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t), \quad (5.3)$$

$$\Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}} + L\mathbf{e}_y, t) = \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t), \quad (5.4)$$

を凝縮体波動関数に課す。この境界条件により、次の Winding number

$$W \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-L/2}^{+L/2} dx_{\mathbf{L}} \frac{\partial}{\partial x_{\mathbf{L}}} \varphi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t), \quad (5.5)$$

が定義できる。 $\varphi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)$ は凝縮体波動関数の位相である。また、この系の全エネルギーと全運動量は

$$E_{\mathbf{L}}(t) = \int d\mathbf{r}_{\mathbf{L}} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla_{\mathbf{L}} \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)|^2 + U(\mathbf{r}_{\mathbf{L}} + \mathbf{v}t) |\Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)|^4 \right], \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(t) &= m \int d\mathbf{r}_{\mathbf{L}} \mathbf{J}_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) \\ &= - \frac{i\hbar}{2} \int d\mathbf{r}_{\mathbf{L}} [\Psi_{\mathbf{L}}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) \nabla_{\mathbf{L}} \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) - \Psi_{\mathbf{L}}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t) \nabla_{\mathbf{L}} \Psi_{\mathbf{L}}^*(\mathbf{r}_{\mathbf{L}}, t)], \end{aligned} \quad (5.7)$$

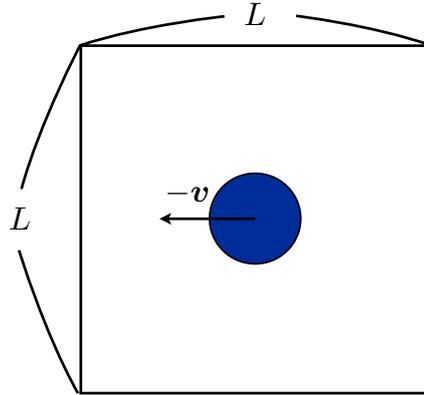


図 5.6 考えている系の模式図。

で与えられる。

ここで、GP 方程式 (5.2) の解の中で、超流動状態を表すものが欲しい。超流動状態は散逸が無い状態であるから、全エネルギーの時間微分がゼロ ($dE_L(t)/dt = 0$) を満たす GP 方程式の解がその候補となる。全エネルギーの時間微分は次のように書くことができる：

$$\frac{dE_L(t)}{dt} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{F}(t), \quad (5.8)$$

$$\mathbf{F}(t) \equiv - \int d\mathbf{r}_L \nabla_L U(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t) |\Psi_L(\mathbf{r}_L, t)|^2. \quad (5.9)$$

ここで、 $\mathbf{F}(t)$ は Drag force と呼ばれている。全エネルギーの時間微分がゼロになる十分条件は $\mathbf{F}(t) = \mathbf{0}$ が成立することである。この条件は凝縮体波動関数が以下のような時間と空間依存性を持っていれば実現できる：

$$\Psi_L(\mathbf{r}_L, t) = \Psi_L(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t). \quad (5.10)$$

これは運動量保存則を用いると証明することができる。運動量保存則は式 (3.43) より、今の場合

$$m \frac{\partial}{\partial t} J_{L,i}(\mathbf{r}_L, t) = - \frac{\partial}{\partial x_{L,j}} \Pi_{L,ij}(\mathbf{r}_L, t) - \left[\frac{\partial}{\partial x_{L,i}} U(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t) \right] n(\mathbf{r}_L, t), \quad (5.11)$$

で与えられる。もし、凝縮体波動関数が式 (5.10) の形で書けるならば、粒子流密度と運動量流束テンソルも同じ時空間依存性を持つので、式 (5.11) は

$$m(\mathbf{v} \cdot \nabla_L) J_{L,i}(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t) = - \frac{\partial}{\partial x_{L,j}} \Pi_{L,ij}(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t) - \left[\frac{\partial}{\partial x_{L,i}} U(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t) \right] n(\mathbf{r}_L + \mathbf{v}t), \quad (5.12)$$

と書くことができる。式 (5.12) の両辺を積分すると、右辺第 2 項が Drag force そのものであり、それ以外の項はダイバージェンスの形で書けているのでゼロになり、 $\mathbf{F}(t) = \mathbf{0}$ が証明できた。

式(5.10)の形は超流動状態の候補はポテンシャルとともに動く座標系における時間に依存しない定常解であることを意味している。以下では座標変換を行い、ポテンシャルとともに動く座標系における GP 方程式を導く。そのために、以下の変数変換を行う(付録 A 参照)：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 t + \frac{i}{\hbar} m \mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_L\right) \Psi_L(\mathbf{r}_L, t), \quad (5.13)$$

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_L + \mathbf{v}t. \quad (5.14)$$

これらを、実験室系の GP 方程式に代入し、式を整理すると、ポテンシャルとともに動く座標系における GP 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.15)$$

を得る。ここで、変換(5.13)により、 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ に対する境界条件は、周期境界条件(5.3)、(5.4)ではなく、捻られた境界条件

$$\Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_x, t) = e^{imvL/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.16)$$

$$\Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_y, t) = \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.17)$$

に変化する。ポテンシャルとともに動く座標系における全エネルギーは

$$E = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + U(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right], \quad (5.18)$$

で与えられ、これは時間を陽に含んでいないため、保存量となる。

以下では、ポテンシャルとともに動く座標系における定常状態を考える。時間に依存しない定常解は、化学ポテンシャルを μ として凝縮体波動関数を $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \Psi(\mathbf{r})$ とすると、時間に依存しない GP 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) - \mu \Psi(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r})|^2 \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (5.19)$$

を解くことにより得ることができる。化学ポテンシャルは全粒子数が N であるという条件

$$N = \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (5.20)$$

により決める。

5.2.2 Bogoliubov 方程式

次に、この系の Bogoliubov 方程式を導出する。ポテンシャルとともに動く座標系における時間に依存しない GP 方程式 (5.15) に

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \left[\Psi(\mathbf{r}) + u(\mathbf{r})e^{-i\epsilon t/\hbar} - v^*(\mathbf{r})e^{i\epsilon^* t/\hbar} \right], \quad (5.21)$$

を代入し、 $u(\mathbf{r})$ と $v(\mathbf{r})$ の 2 次以上の項は無視することで Bogoliubov 方程式

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L} & -g[\Psi(\mathbf{r})]^2 \\ g[\Psi^*(\mathbf{r})]^2 & -\mathcal{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \epsilon_i \begin{bmatrix} u_i(\mathbf{r}) \\ v_i(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (5.22)$$

$$\mathcal{L} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - \mu + 2g|\Psi(\mathbf{r})|^2, \quad (5.23)$$

を得る。ここで、 $\Psi(\mathbf{r})$ が時間に依存しない GP 方程式 (5.19) の解であることを用いた。また、 i は励起状態のラベルで、 ϵ_i が状態 i の励起エネルギーである。励起状態の波動関数の規格化はゼロエネルギー解でないならば (3.107) により

$$\int d\mathbf{r} [u_i^*(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r}) - v_i^*(\mathbf{r})v_j(\mathbf{r})] = \begin{cases} \delta_{ij} & \text{for } \epsilon_i \text{ and } \epsilon_j \in \mathbb{R} \\ 0 & \text{for } \text{Im}\epsilon_i \neq 0 \text{ or } \text{Im}\epsilon_j \neq 0 \end{cases}, \quad (5.24)$$

を満たすように決める。

ここで、 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ の境界条件の決定法について述べる。式 (5.21) からわかるように、励起状態の波動関数 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ は凝縮体波動関数の定常解からの微小のずれを基準モードで展開したものである。式 (5.21) の括弧内第 2、第 3 項をまとめて $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ と書くことにする。すなわち、式 (5.21) を

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} [\Psi(\mathbf{r}) + \delta\Psi(\mathbf{r}, t)], \quad (5.25)$$

と書く。ここで、左辺は凝縮体波動関数なので、捻られた周期境界条件 (5.16)、(5.17) を満たすべきである。右辺第 1 項は捻られた周期境界条件を満たすので、第 2 項も捻られた周期境界条件を満たさなくてはならない。すなわち、 $\delta\Psi(\mathbf{r}, t)$ は

$$\delta\Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_x, t) = e^{imvL/\hbar} \delta\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.26)$$

$$\delta\Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_y, t) = \delta\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.27)$$

を満たさなくてはならない。これより、 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ の境界条件は

$$u_i(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_x) = e^{+imvL/\hbar} u_i(\mathbf{r}), \quad (5.28)$$

$$u_i(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_y) = u_i(\mathbf{r}), \quad (5.29)$$

$$v_i(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_x) = e^{-imvL/\hbar} v_i(\mathbf{r}), \quad (5.30)$$

$$v_i(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_y) = v_i(\mathbf{r}), \quad (5.31)$$

のようになる。 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ に対する境界条件が異なることに注意が必要である。

5.2.3 計算手法

ここでは、GP 方程式と Bogoliubov 方程式の数値計算手法の概要を述べる。詳細については付録 B.2 で解説する。

計算の流れとしては、第4章と同様である。すなわち、GP 方程式の定常解を求め、その結果を Bogoliubov 方程式に代入し、数値的に対角化する、という手順は変わらない。異なる点は GP 方程式の定常解を虚時間発展法で求める点である。虚時間発展の GP 方程式は

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) - \mu(t) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.32)$$

で与えられる。ここで、化学ポテンシャルの時間依存性は全粒子数が一定になるように決める。この方程式を長時間時間発展させることにより、定常解を得る。ただし、実際に数値計算で用いた式は (5.32) ではなく、これを変形したものである。以下ではどのように方程式を変形したかを説明する。

今、凝縮体波動関数は境界条件 (5.16)、(5.17) を満たしている。よって、以下の波数ベクトル

$$\mathbf{G} \equiv \frac{2\pi}{L} (n_1 \mathbf{e}_x + n_2 \mathbf{e}_y), \quad (n_1, n_2 \in \mathbb{Z}) \quad (5.33)$$

を用いて次のように展開することができる：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n_0} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}. \quad (5.34)$$

ここで、 $n_0 \equiv N/S$ は平均粒子数密度、 $S \equiv L^2$ は系の面積^{*2}、 $\mathbf{q} \equiv m\mathbf{v}/\hbar$ は \mathbf{v} に対応する波数ベクトル、 $C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)$ が展開係数である。式 (5.34) を式 (5.32) に代入し、式を整理することにより、展開係数 $C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)$ が従う方程式

$$\begin{aligned} -\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t) &= \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 - \mu(t) \right] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t) + \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{G}'} \bar{U}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}(t) \\ &\quad + gn_0 \sum_{\mathbf{G}', \Delta \mathbf{G}} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta \mathbf{G}}^*(t) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}(t) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta \mathbf{G}}(t), \end{aligned} \quad (5.35)$$

を得る。ここで、 $\bar{U}(\mathbf{k})$ は外場の Fourier 変換

$$\begin{aligned} \bar{U}(\mathbf{k}) &\equiv \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \\ &= U_0 \pi d^2 \exp \left[-\frac{1}{4} (\mathbf{k}d)^2 \right], \end{aligned} \quad (5.36)$$

^{*2} 1次元を考える場合は以下の式で粒子数密度は $n_0 \equiv N/L$ で、面積は系の長さ L で置き換えればよい。

である。また、粒子数に関する条件 (5.20) により、 $C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)$ について

$$1 = \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)|^2, \quad (5.37)$$

が成り立つ。

Bogoliubov 方程式についても凝縮体波動関数と同様、平面波で展開し、展開係数に対する Bogoliubov 方程式を書き下すことができる。励起状態の波動関数についての展開は境界条件 (5.28), (5.29)、(5.30)、(5.31) により、以下のように展開できる：

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i} e^{+i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (5.38)$$

$$v_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{G}} B_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}. \quad (5.39)$$

これより、展開係数 $A_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}$ 、 $B_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}$ に対する Bogoliubov 方程式は

$$D_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i} + \frac{1}{S} \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} \bar{U}(-\Delta\mathbf{G}) A_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} + 2gn_0 \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} S_{\Delta\mathbf{G}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} - gn_0 \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}} B_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} = \epsilon_i A_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}, \quad (5.40)$$

$$-D_{\mathbf{G}} B_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i} - \frac{1}{S} \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} \bar{U}^*(-\Delta\mathbf{G}) B_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} - 2gn_0 \sum_{\Delta\mathbf{G} \neq 0} S_{\Delta\mathbf{G}}^* B_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} + gn_0 \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^* A_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},i} = \epsilon_i B_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}, \quad (5.41)$$

となる。各変数の定義は以下の通りである：

$$D_{\mathbf{G}} \equiv \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 - \mu + \frac{\bar{U}(\mathbf{0})}{S} + 2gn_0, \quad (5.42)$$

$$S_{\Delta\mathbf{G}} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta\mathbf{G}}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}, \quad (5.43)$$

$$W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+2\mathbf{G}-\mathbf{G}'+\Delta\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}. \quad (5.44)$$

5.3 結果

5.3.1 2次元系の結果

ここでは、まず2次元系の数値計算結果を示す。以下では長さは回復長 $\xi \equiv \hbar/\sqrt{mgn_0}$ 、エネルギーは $\epsilon_0 \equiv gn_0 = \hbar^2/m\xi^2$ 、時間は $\tau \equiv \hbar/\epsilon_0$ 、速度は音速 $v_s \equiv \sqrt{gn_0/m}$ 、凝縮体波動関数は $\sqrt{n_0}$ でスケールすることにする。

5.3.1.1 GP 方程式の結果

初めに、GP 方程式の計算結果を示す。図 5.7 と 5.8 はそれぞれ $(L, U_0, d) = (32\xi, 5\epsilon_0, 2.5\xi)$ 、 $(48\xi, 5\epsilon_0, 2.5\xi)$ のときの安定定常解の1粒子あたりのエネルギーの速度依存性を示したものである。ここで、色の違いは異なるエネルギー分枝に属するというを示している。ただし、時間反転対称性より、ある速度 v での定常解が見つければ同じエネルギーを持つ速度 $-v$ の解が存在するため、時間反転した分枝は同じ色で示した。図 5.7 と 5.8 よりエネルギーは速度に対し周期的になっていることが見て取れる。この原因は捻られた境界条件 (5.16) にある。この境界条件は速度を v から $v + 2\pi\hbar n/(mL)$ (n は任意の整数) と置き換えても不変だからである。よって、本研究では主に v をゼロにしたときに基底状態となる分枝 (図 5.7 と 5.8 の赤色で示した分枝) に着目する^{*3*4}。速度が $|v| \leq \pi\hbar/mL \equiv v_0/2$ のとき、赤色の分枝の解は基底状態を与える。速度が $|v_0|/2$ よりも大きいとき、他の分枝がより低いエネルギーを与えるため、赤色の分枝の解は励起状態を与える。後で具体的に示すが、ここで示した解は全て安定定常解である。よって、 $|v| \geq v_0/2$ の解は準安定状態 (エネルギー汎関数の極小を与える状態であるが、最低エネルギー状態ではない) を記述することがわかる。赤色の分枝は速度を大きくしていくと途中で途切れる。この分枝の途切れる点が準安定状態の消失点、すなわち臨界速度に対応する。

ここで、異なる分枝は winding number により区別されることを指摘しておく。具体例として、赤色の分枝の $v = 0$ の状態と緑色の分枝の $v = v_0$ の状態を例に説明する。赤色の分枝の波動関数を $\Psi(\mathbf{r}; v = 0)$ と書くことにする。この状態は基底状態であるので、位相の原点を適切に選ぶことにより、波動関数を実数かつ、節を持たないものにすることができる。この状態の winding number は波動関数が実数かつ節を持たないので式 (5.5) よりゼロである。一方、緑色の分枝の解を $\Psi_M(\mathbf{r}_M; v = v_0)$

^{*3} これ以外の分枝の解は全て赤色の分枝の解で $v \rightarrow v + 2\pi\hbar n/mL$ の置き換えをすれば得られるので、これにのみ着目すれば十分である。

^{*4} 実際の計算は赤色分枝の $v \geq 0$ の状態を数値計算で求めた。時間反転対称性と周期性を用いて図 5.7 と 5.8 を書いた。

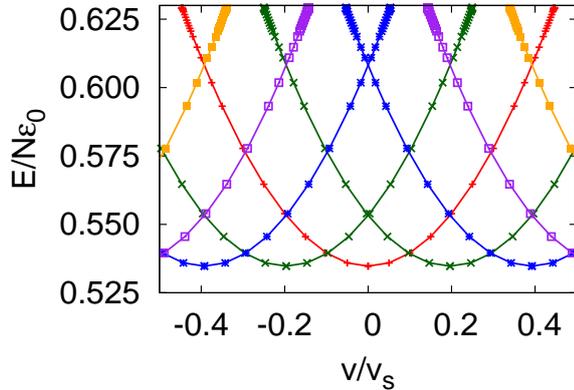


図 5.7 $L = 32\xi$, $U_0 = 5\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$ のときの 1 粒子あたりのエネルギーの速度依存性。

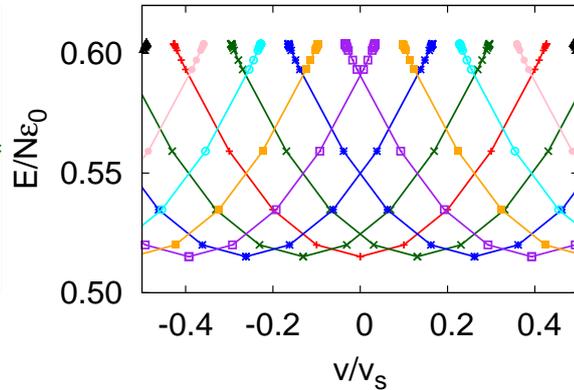


図 5.8 $L = 48\xi$, $U_0 = 5\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$ のときの 1 粒子あたりのエネルギーの速度依存性。

とする。添字 M はポテンシャルとともに動く座標系の量であることを表している。2.2.1 の議論より、この波動関数と、赤色分枝における波動関数は等しい。すなわち $\Psi(\mathbf{r}; v = 0) = \Psi_M(\mathbf{r}_M; v = v_0)$ が成り立つ。Winding number は実験室系の波動関数で定義されている。緑色分枝の波動関数 $\Psi_M(\mathbf{r}_M; v = v_0)$ から実験室系の波動関数を求めると $\Psi_L(\mathbf{r}_L, t; v = v_0) \propto e^{-imv_0x_M/\hbar}\Psi_M(\mathbf{r}_M; v = v_0)$ となる。ここで、 $\Psi_M(\mathbf{r}_M; v = v_0)$ は実数かつ節を持たないものであったから、winding number に寄与するのは平面波の部分のみである。以上から、緑色の分枝では winding number が -1 の状態であることがわかる。

異なる分枝間の違いが winding number で記述されることから、臨界速度を超えたとき phase slip を起こし、別の分枝への遷移が起きることが示唆される。このような 2π -phase slip が起きることはリングトラップの実験 [35] で確認されている。ただし、本研究の枠組みをそのまま使用してもこのようなダイナミクスは見ることができないことに注意が必要である。なぜなら、本研究で用いたモデルではポテンシャルとともに動く座標系における全エネルギーは保存量であるからである。よって、エネルギーの散逸するダイナミクスを見ることはできない。ただし、GP 方程式に現象論的に散逸項を導入し [187]、ダイナミクス計算を行えばこのような phase slip を数値計算で見ることが可能である。

ここで示したエネルギーと速度の性質は光学格子系、すなわち周期ポテンシャル中の BEC において提案されている swallow tail 構造 [188, 189] とよく似ている。Swallow tail 構造の模式図を図 5.9 に示す。Swallow tail 構造の物理的意味は Mueller により詳しく論じられている [190]。Mueller によれば、swallow tail 構造はヒステリシスが起きることを意味しており、準安定な超流動状態の存在を示唆するものである。模式図 5.9 に、ヒステリシスの様子を示す。ここでは初期状態として赤色の分枝中の黒点で示した点を選ぶ。こ

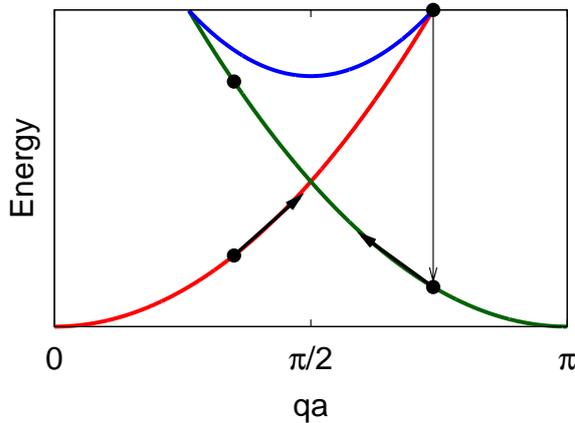


図 5.9 Swallow tail 構造の模式図。縦軸がエネルギー、横軸が速度に対応する波数 q である。 a は格子定数である。赤線、緑線、青線がそれぞれ定常解のエネルギーを表す。青線の解はエネルギー極大の点 (saddle-point) を表し、動的不安定性を示す。

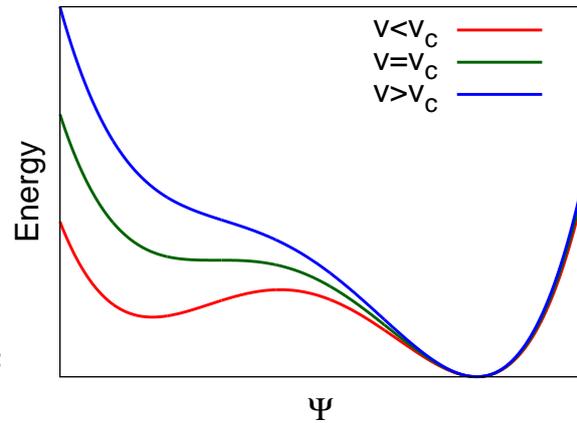


図 5.10 Swallow tail 構造があるときのエネルギー汎関数の模式図。 $qa > \pi/2$ の状況を考えている。図左にある極小点が図 5.9 の赤色の分枝、図の中心にある極大点が図 5.9 の青色の分枝、図の右側にある極小点が図 5.9 の緑色の分枝の解に対応する。

これから速度をある程度上げ、また初期の速度に戻すという操作を考える。速度を上げていくと、やがて swallow tail の端 (臨界速度に対応) に達する。これ以上速度を大きくしようとすると、phase slip を起こし、緑の分枝への遷移が起きる。遷移が起きた後、速度を初期状態に戻す。この結果、終状態としては緑色の分枝の状態であることがわかり、確かにヒステリシスを示すことがわかる。このような構造はポテンシャルの形にもよるが、ポテンシャルエネルギーが相互作用エネルギーに比べ小さいときに現れることが知られている [191, 192, 193]。これは本研究で考えている状況とも一致している。なぜなら、本研究で考えている系である $L \times L$ の正方形を一つのユニットセルとみなすと、ポテンシャルはシステムサイズに比べて十分小さい領域に局在しているからである。本研究で用いた系を周期ポテンシャル系とみなすと、ポテンシャルエネルギーは小さい状況に対応する。

また、swallow tail 構造があるときのエネルギー汎関数の振る舞いの模式図を図 5.10 に示す。図 5.10 での $qa > \pi/2$ の領域では赤色の分枝は基底状態ではない。これを表したのが図 5.10 の赤色の線の左側の極小値である。この状態がよりエネルギーの低い右側の極小点に行くためにはエネルギーバリアーを乗り越えなければならない。臨界速度に近づくにつれエネルギーバリアーの高さが低くなる。臨界速度直上では、エネルギーバリアーがゼロになる。このとき、極小点と極大点是对消滅する。この振る舞いは数学的に言うと、サドルノード (saddle-node) 分岐 [111, 194] が起きることに対応する。本研究ではエネルギー汎関数の極大点に対応する不安定定常解は求められていない。しかし、安定定常解の振る舞いや後で見る励起状態の振る舞いなどからサドルノード分岐が起きていること

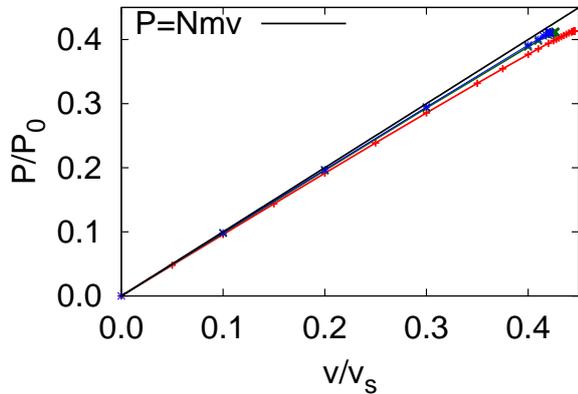


図 5.11 ポテンシャルとともに動く座標系から見た系の全運動量を速度の関数でプロットしたもの。ここで、 $P_0 \equiv Nmv_s$ である。パラメーターは赤線が $(L, U_0, d) = (32\xi, 5\epsilon_0, 2.5\xi)$ 、緑線が $(48\xi, 5\epsilon_0, 2.5\xi)$ 、青線が $(64\xi, 10\epsilon_0, 2.5\xi)$ である。

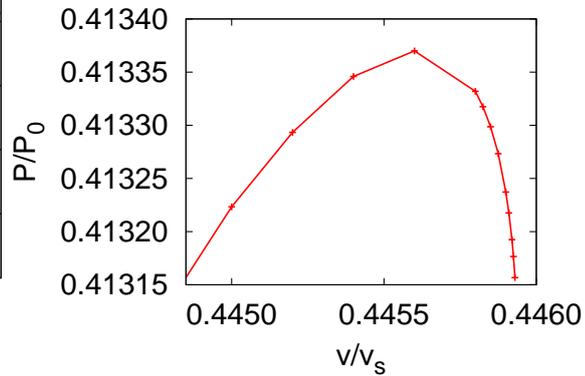


図 5.12 図 5.11 における赤線のデータ $((L, U_0, d) = (32\xi, 5\epsilon_0, 2.5\xi))$ の臨界速度付近を拡大したもの。

はほぼ確実であり、不安定定常解も存在するはずである。実際に、解析計算ができる 1 次元のモデルでは不安定定常解が求められている [34]。2 次元系の場合に、不安定定常解を数値的に求めるのは今後の課題である。

周期ポテンシャル中の系と本研究で扱った系は以上のような類似点があると述べた。しかし、違う点もある。これを見るために、ポテンシャルとともに動く座標系における全運動量を速度の関数としてプロットしたものを図 5.11 を示す。速度が小さい領域では全運動量はほとんど $P = Nmv$ と書ける。速度ゼロにおける運動量の速度微分は超流動密度 ρ_s になる。この結果は超流動密度がほとんど粒子数密度に等しいことを示している。臨界速度近傍を拡大したものを図 5.12 に示す。図 5.12 より、臨界速度近傍では速度の増加に対し全運動量が減少するという振る舞いが見られる。すなわち、有効質量が負になる状態が現れる。この振る舞い自体は周期ポテンシャル中の系でも見られる [191, 192, 193]。特に、段下と土屋は解析計算により、負の有効質量が生じる速度において動的不安定性が起きることを示している [193]。しかし、本研究で扱った系では有効質量が負の状態も安定定常解であり、動的不安定性は生じない。この違いの起源を明らかにするには、励起スペクトルを見る必要があるため、詳しくは 5.3.1.2 で議論する。

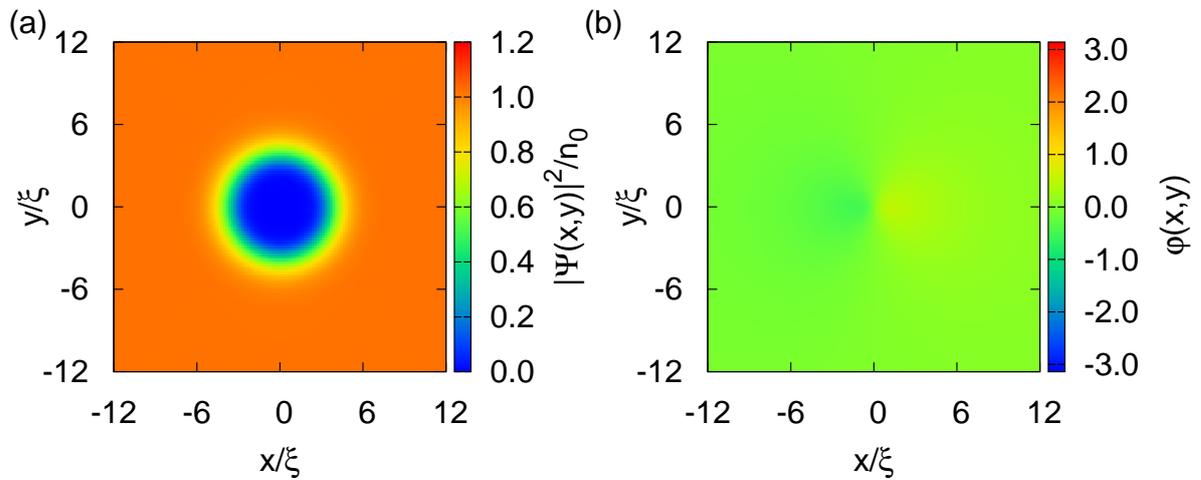


図 5.13 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 5\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.1v_s \simeq 0.23444v_c$ における (a) 密度の空間プロファイル、(b) 位相の平面波部分を取り除いたものの空間プロファイル。

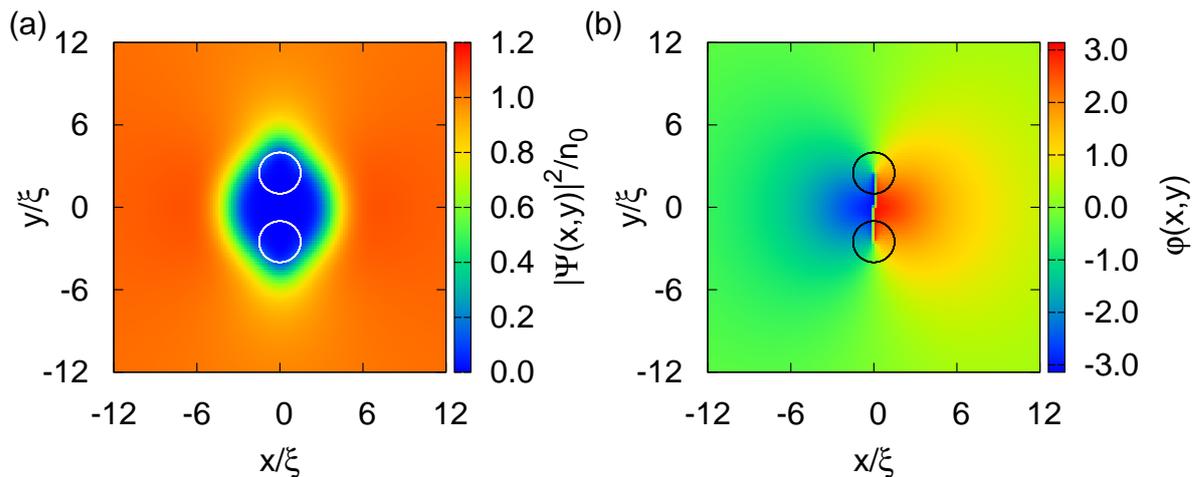


図 5.14 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 5\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.426545v_s \simeq 0.99999v_c$ における (a) 密度の空間プロファイル、(b) 位相の平面波部分を取り除いたものの空間プロファイル。白丸と黒丸は Ghost vortex pair の位置を表している。文献 [186] より。

ここで、凝縮体波動関数の密度と位相の空間プロファイルを示す。図 5.13 は $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 5\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.1v_s \simeq 0.23444v_c$ における密度の空間プロファイル (a) と位相の空間プロファイル (b) を示したものである。ここで、位相に関しては平面波成分 $e^{im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ の寄与を差し引いたものをプロットしている。このときの速度は臨界速度 $v_c \simeq 0.42655v_s$ よりも十分小さい。臨界速度の評価方法については 5.3.1.2 で述べる。図 5.13(b) より、位相はほとんど変化しておらず、速度がほぼ全域で平面波的になっていることを示している。次に、臨界速度近傍の密度と位相の空間プロファイルを図 5.14 に示す。図 5.13 との最大の違いは量子渦対が存在することである。量子渦対の位置を白丸、

または黒丸で示す。図 5.14(a) より、この量子渦対はポテンシャルの内部の凝縮体密度が小さい領域に存在することがわかる。このような量子渦のことは幽霊渦対 (Ghost vortex pair, GVP) と呼ばれている [187]。先行研究では GV、または GVP はダイナミクスの中で見いだされた [187, 195]。本研究では、定常状態でも GVP が存在し得ることを示した。GVP は別の見方をすれば、ポテンシャル中にピン止めされている量子渦対ということもできる。このことから、ポテンシャルの速度が臨界速度を超えると、GVP のピン止めはずれ、量子渦が現れると期待できる。実際に、臨界速度以上の状態の時間発展を計算すると、量子渦が発生する様子が見ることができ。これを示したのが図 5.15 と 5.16 である。これらは、 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 10\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ の計算結果で、初期状態として GVP がある臨界速度以下の定常解 ($v = 0.4v_s < v_c \simeq 0.43034v_s$) を用い、速度を $v > v_s$ として GP 方程式 (5.15) の実時間発展を計算した結果である。計算手法の詳細は付録 B.2 で説明する。図 5.15 と 5.16 の違いは用いた速度が異なる点である。どちらの結果も量子渦の生成が見られる。速度が大きい方がより多くの量子渦を出すことがわかる。同様のダイナミクスは多くの先行研究で見いだされている [33, 177, 196, 197, 198, 199]。

ここまでは臨界速度近傍において GVP が存在するパラメータ領域の結果を示したが、実は、GVP の有無はパラメータに依存している。表 5.1 に少なくとも速度が $|(v_c - v)/v_c| \gtrsim 10^{-5}$ の範囲内で GVP の存在の有無を調べた結果を示す。明確な境界は調べたパラメータ数が少ないため断言できないが、ポテンシャルが弱いときには GVP は存在しにくい傾向にある。実際に、ポテンシャルが比較的弱い $L = 48\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ における GP 方程式の定常解の密度と位相の空間プロファイルを図 5.17 と 5.18 に示す。図 5.17 は速度が臨界速度から遠い $v = 0.1v_s \simeq 0.2169898v_c$ 、図 5.18 は臨界速度に近い $v = 0.4608505v_s \simeq 0.9999985v_c$ の結果である。GVP が調べた範囲で存在しなかった $L = 32\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ における臨界速度以上のダイナミクスの計算結果を図 5.19 に示す。このときでも量子渦が出現することがわかる。これらの結果から、GVP が臨界速度以下で存在するかどうかは量子渦が臨界速度以上で出現するかどうかの判定材料にはならないということである。量子渦が出現するための必要条件は密度が空間のある点でゼロになることである。GVP が存在しないパラメータ領域では、臨界速度以下ではポテンシャルが弱いため、密度がゼロになる定常解は存在しない。この場合、ダイナミクスの途中で密度がゼロになり量子渦が生じるものと考えられる。

表 5.1 パラメータと GVP の有無の関係。

$(L/\xi, U_0/\epsilon_0, d/\xi)$	GVP の有無	$(L/\xi, U_0/\epsilon_0, d/\xi)$	GVP の有無
(24, 0.5, 2.5)	無	(32, 10, 5)	有
(24, 10, 2.5)	有	(32, 20, 2)	有
(32, 1, 2)	無	(32, 20, 2.5)	有
(32, 1, 2.5)	無	(48, 1, 2.5)	無
(32, 1, 5)	無	(48, 5, 2.5)	有
(32, 5, 2)	有	(48, 10, 2.5)	有
(32, 5, 2.5)	有	(48, 20, 2.5)	有
(32, 10, 2)	有	(64, 10, 2.5)	有
(32, 10, 2.5)	有		

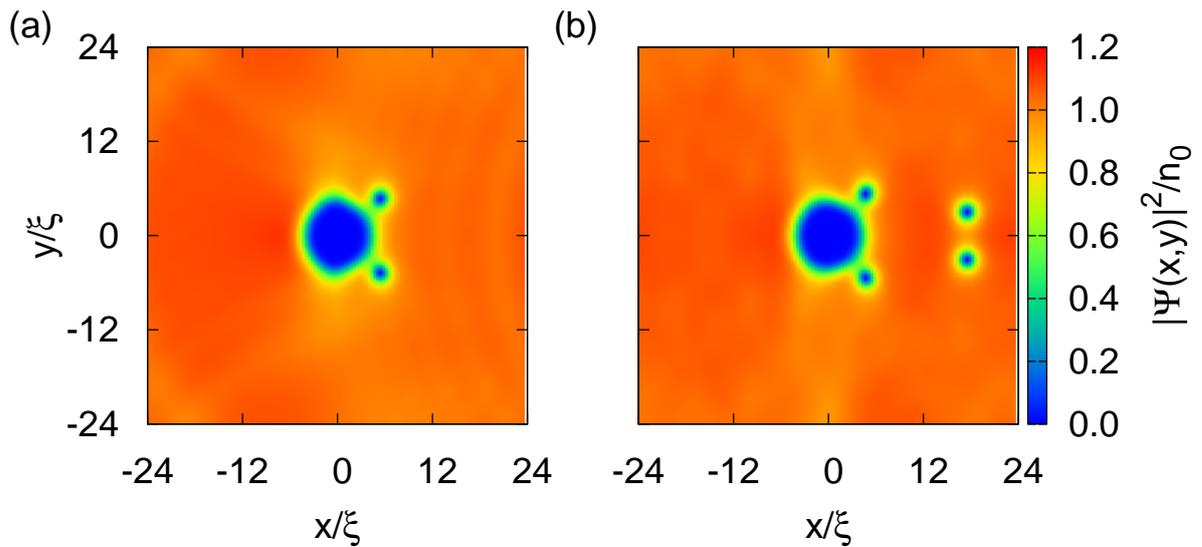


図 5.15 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 10\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.5v_s \simeq 1.1619v_c$ における密度の空間プロファイルのスナップショット。時刻はそれぞれ (a) $t = 30\tau$ 、(b) $t = 75\tau$ である。初期状態は $v = 0.4v_s \simeq 0.92950v_c$ における定常解を用いた。

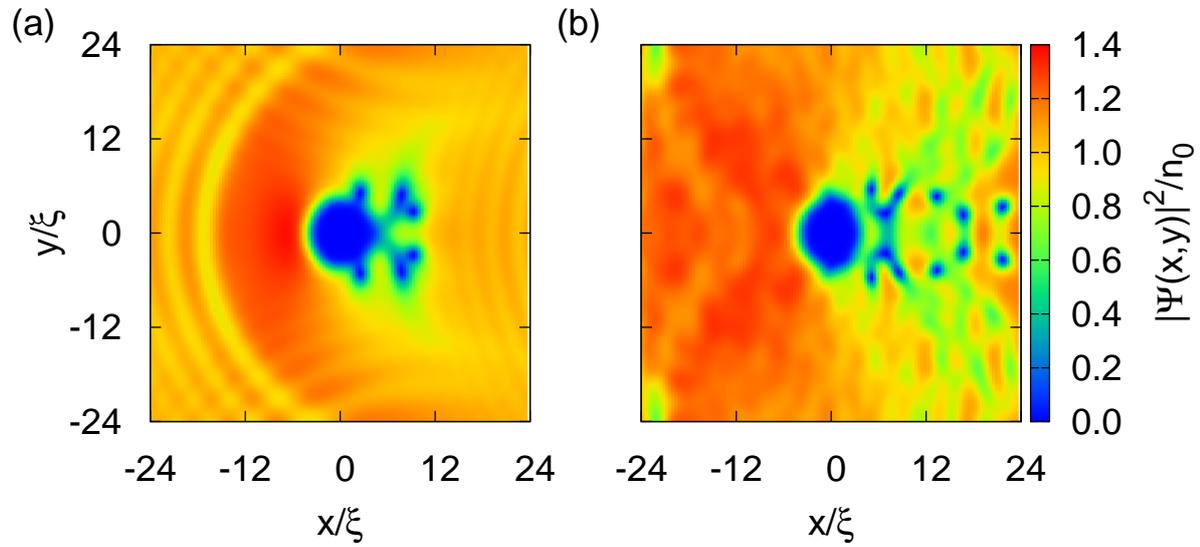


図 5.16 $L = 48\xi$, $U_0 = 10\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $v = 0.8v_s \simeq 1.8590v_c$ における密度の空間プロファイルのスナップショット。時刻はそれぞれ (a) $t = 20\tau$ 、(b) $t = 50\tau$ である。初期状態は $v = 0.4v_s \simeq 0.92950v_c$ における定常解を用いた。

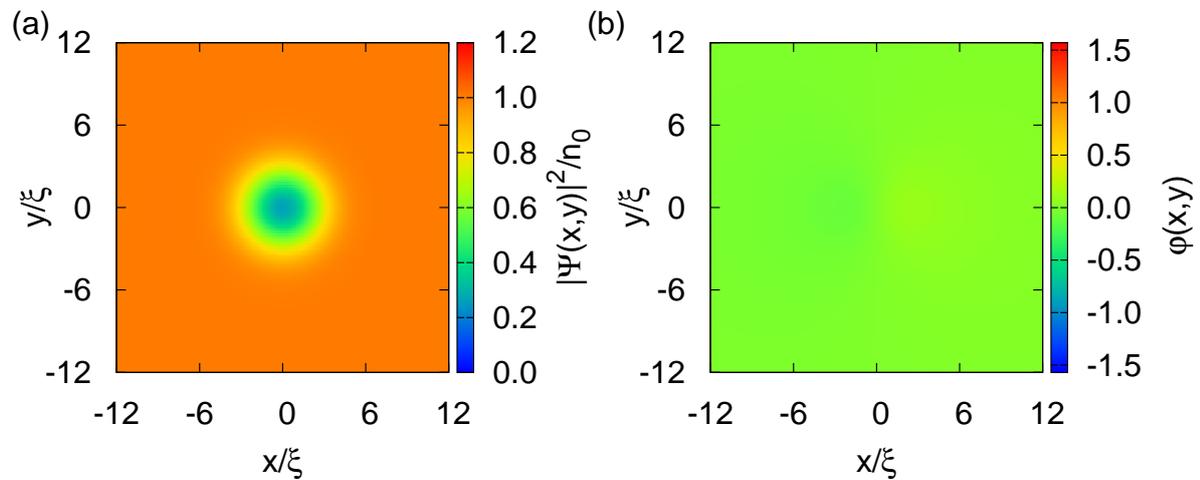


図 5.17 $L = 48\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $v = 0.1v_s \simeq 0.2169898v_c$ における (a) 密度の空間プロファイル、(b) 位相の平面波部分を取り除いたものの空間プロファイル。

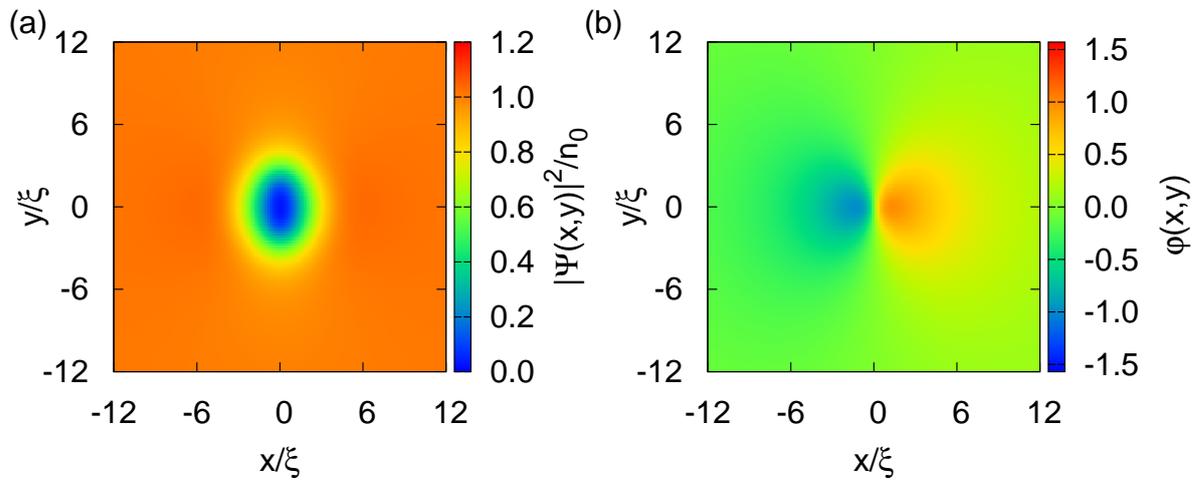


図 5.18 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.4608505v_s \simeq 0.9999985v_c$ における (a) 密度の空間プロファイル、(b) 位相の平面波部分を取り除いたものの空間プロファイル。

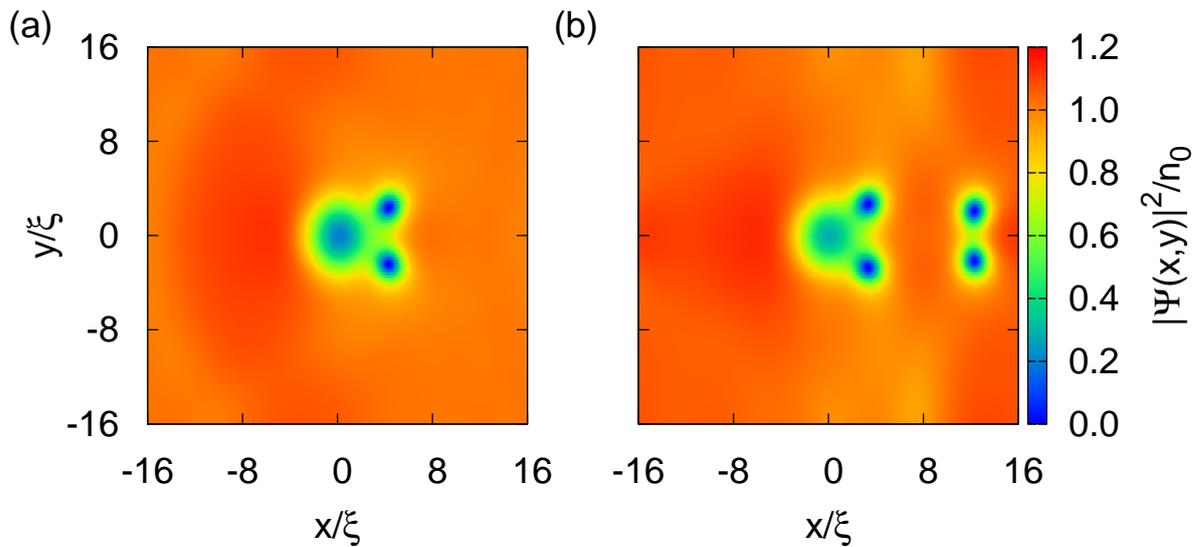


図 5.19 $L = 32\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ 、 $v = 0.6v_s \simeq 1.301939v_c$ における密度の空間プロファイルのスナップショット。時刻はそれぞれ (a) $t = 20\tau$ 、(b) $t = 45\tau$ である。初期状態は $v = 0.4v_s \simeq 0.8679591v_c$ における定常解を用いた。

5.3.1.2 Bogoliubov 方程式の結果

ここでは、Bogoliubov 方程式を解いた結果を示す。まず、 $(L, U_0, d) = (32\xi, 10\epsilon_0, 2.5\xi)$ 、 $(48\xi, 10\epsilon_0, 2.5\xi)$ における励起スペクトルの速度依存性を図 5.20 と 5.21 に示す。本研究では有限サイズの系を扱っているため、Bogoliubov 方程式の固有値は離散的になる。また、ここで示した固有値は全て実数であるので、ここで用いた GP 方程式の定常解は全て安定定常解であることもわかる。

超流動の不安定化を見る上で最も重要なモードは、最もエネルギーが低い第 1 励起状態である。第 1 励起状態のエネルギー (以下エネルギーギャップと呼ぶ) の速度依存性を様々なパラメータでプロットしたものを図 5.22(a)、5.23(a)、5.24(a) に示す。これらに共通する性質として、速度が小さいときにはほとんど速度に対し線形に減少し、臨界速度近傍になると急激に減少する、という点が挙げられる。前者の性質については一様系のスペクトルが反映されたものと考えられる。なぜなら、ポテンシャルが無いときの第 1 励起状態のエネルギーは解析的に計算でき、次の形で与えられるからである：

$$\Delta = \frac{2\pi}{L/\xi} gn_0 \left[-\frac{v}{v_s} + \sqrt{\frac{\pi^2}{(L/\xi)^2} + 1} \right]. \quad (5.45)$$

この表式からわかるように、ポテンシャルが無いときはエネルギーギャップは速度に対し線形に減少する。実際に (5.45) とポテンシャルがあるときの励起スペクトルを比較すると、速度がゼロ付近か臨界速度付近以外では、ほとんど変わらないことがわかる (図 5.22(a)、5.23(a) 参照)。速度ゼロ付近で一樣な場合とずれるのは、 $v = 0$ で第 1 励起エネルギーが 4 重縮退しているからである。ポテンシャルが入ることにより、この準位が分裂するため一様系のエネルギーから少しずれる。また、ポテンシャルの形を固定しシステム

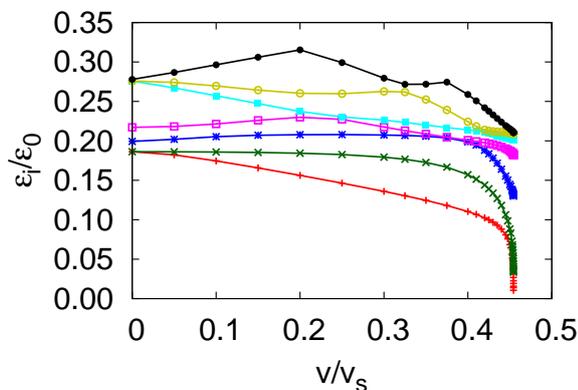


図 5.20 $L = 32\xi$ 、 $U_0 = 10\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ における励起スペクトルの速度依存性。第 7 励起状態までをプロットした。

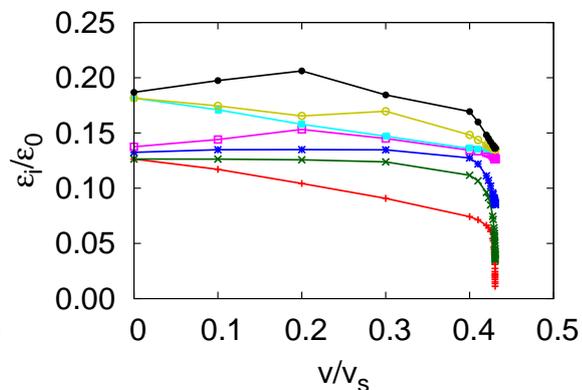


図 5.21 $L = 48\xi$ 、 $U_0 = 10\epsilon_0$ 、 $d = 2.5\xi$ における励起スペクトルの速度依存性。第 7 励起状態までをプロットした。

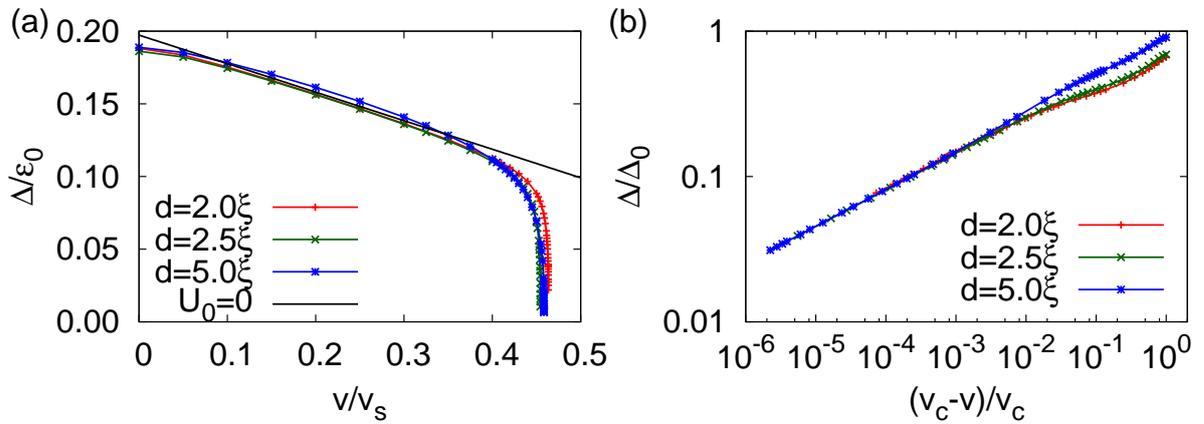


図 5.22 (a) $L = 32\xi$, $U_0 = 10\epsilon_0$, $d = 2\xi, 2.5\xi, 5\xi$ におけるエネルギーギャップの速度依存性。黒線はポテンシャルが無いときのエネルギーギャップ。(b)(a) のフィッティングした結果。

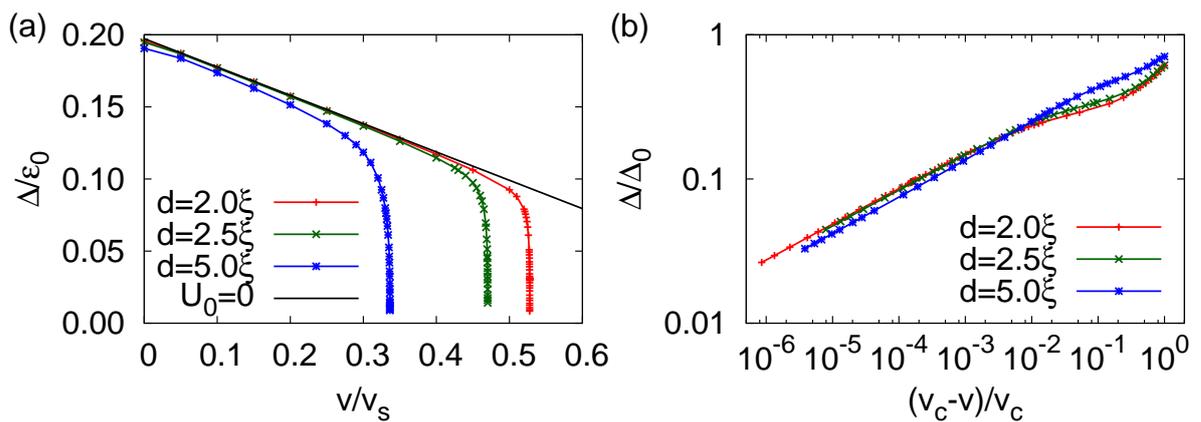


図 5.23 (a) $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 2\xi, 2.5\xi, 5\xi$ におけるエネルギーギャップの速度依存性。黒線はポテンシャルが無いときのエネルギーギャップ。(b)(a) のフィッティングした結果。

サイズを変えた場合の振る舞いをプロットしたのが図 5.24(a) である。システムサイズが大きい方がエネルギーギャップが小さいのは、一様系のスペクトル (5.45) でも同様である。この振る舞いも一様系のものが反映している結果であると考えられる。

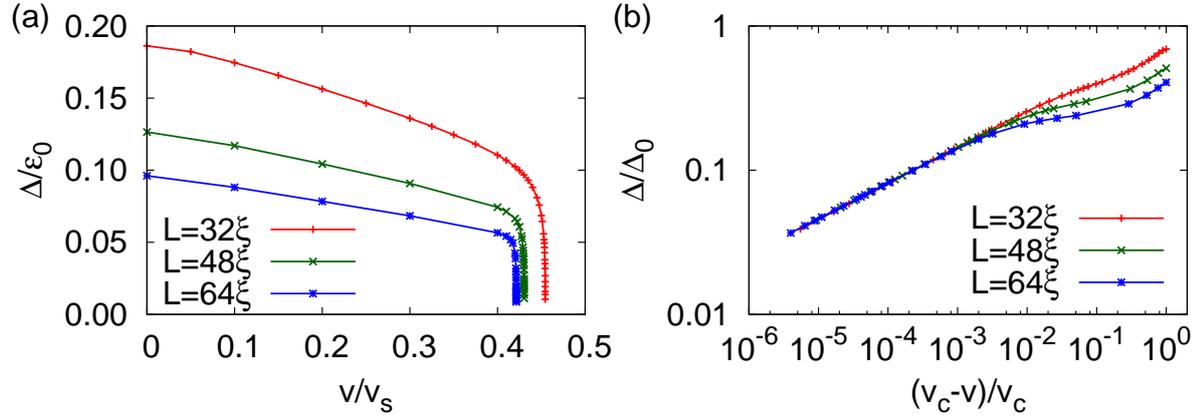


図 5.24 (a) $L = 32\xi, 48\xi, 64\xi$, $U_0 = 10\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$ におけるエネルギーギャップの速度依存性。(b)(a) のフィッティングした結果。

一方、臨界速度近傍におけるエネルギーギャップの急激な減少は、一様系のものとは明らかに異なる振る舞いである。これを調べるために、次のようなフィッティング関数

$$\Delta_{\text{fit}} = \Delta_0 \left(\frac{v_c - v}{v_c} \right)^c, \quad (5.46)$$

を仮定し、フィッティングを行った。ここで、フィッティングパラメータは Δ_0 , v_c , c である。フィッティングには臨界速度に近い 4 点を使用した。この結果を示したのが図 5.22(b)、5.23(b)、5.24(b) である。これらの図より、臨界速度近傍のエネルギーギャップは、ポテンシャルの強さ、幅、システムサイズにはほとんど依存せず、(5.46) の関数形で書けることがわかる。定量的な結果を表 5.2 に示す。これより、臨界速度近傍において、エネルギーギャップは $\Delta \propto |v_c - v|^{1/4}$ のスケーリング則に従うことがわかる。

ここで、臨界速度近傍のスケーリング則の物理的意味を議論する。エネルギーギャップはエネルギーの次元を持つ量なので、このスケーリング則の存在は臨界速度に向かって、特徴的な時間スケールのベキ的な発散があるということを意味している。これは臨界速度直上において断熱条件が常に破れることを意味している。一般に、断熱条件とは系に含まれるパラメータを十分ゆっくり変化させるときに、系の状態が変化しないための条件である。この条件は考えているエネルギー準位と遷移し得るエネルギー準位の間隔を ΔE とすると、パラメータの変化を $\hbar/\Delta E$ よりもゆっくりと時間をかけて変化させることとして与えられる。ただし、ここで述べた断熱条件は線形の Schrödinger 方程式で成り立つものである。本研究で扱っているのは非線形の Schrödinger 方程式である。この場合、断熱条件は Bogoliubov 方程式の最低励起エネルギーの逆数に \hbar を掛けたもの、すなわち \hbar/Δ よりもゆっくりとパラメータを変化させるといふものに置き換わることが知られている [200]。臨界速度直上では $\hbar/\Delta = \infty$ であるため、断熱条件を満たすことができなくなる。よって、他の状態に遷移する確率が 1 になるため、ここで定常解の消失が起きるのである。

表 5.2 フィッティング結果。() はフィッティングによる誤差を表す。文献 [186] より。

L/ξ	U_0/ϵ_0	d/ξ	exponent	L/ξ	U_0/ϵ_0	d/ξ	exponent
18	5	0.5	0.24814(6)	32	5	2.5	0.25125(3)
24	0.5	2.5	0.24842(7)	32	10	2.0	0.24905(9)
24	10	2.5	0.25133(8)	32	10	2.5	0.25139(7)
32	1	2.0	0.24879(6)	32	20	2.0	0.24994(5)
32	1	2.5	0.24880(5)	32	20	2.5	0.25130(6)
32	1	5.0	0.25191(5)	48	10	2.5	0.24875(9)
32	5	2.0	0.24849(6)	64	10	2.5	0.24862(6)

る。これが臨界速度直上におけるエネルギーギャップの消失の物理的意味である。

次に、スケーリング則の指数 $1/4$ の意味について議論する。この値は本研究とほぼ同様の系を解析した Huepe と Brachet ら [177] により報告されているハミルトニアン・サドルノード分岐 (Hamiltonian Saddle-Node 分岐、HSN 分岐) によるものと理解できる。HSN 分岐の標準形は次の形で与えられる [177] :

$$\frac{d^2}{dt^2} u(t) = \mu - u(t)^2. \quad (5.47)$$

ここで、 $u(t)$ 、 μ はともに実数で、 μ がパラメータであるとする。 μ が本研究での $v_c - v$ に対応する。この微分方程式の定常解 ($u_0 = \pm\sqrt{\mu}$ for $\mu \geq 0$) 周りの線形安定性解析を行うと確かに、その固有値が分岐点 $\mu = 0$ 近傍で $\mu^{1/4}$ とスケールされることがわかり、本研究で扱った系と同じ振る舞いをするのがわかる。Huepe と Brachet らは線形安定性解析は行ってはいないものの、全エネルギーの臨界速度近傍におけるスケーリング則と、不安定定常解の振る舞いから、この系の分岐構造は HSN 分岐であると結論づけている。本研究では不安定定常解は求められていないものの、線形安定性解析を行い、標準形 (5.47) に矛盾しないエネルギーギャップのスケーリング則を得たという意味では、彼らの研究と相補的になっていると言える。ただし、指数の値については、いくつかの議論がある。そのひとつが臨界速度以上における指数の値である。Huepe らは臨界速度以上におけるダイナミクスを計算し、量子渦の放出の周期に $|v - v_c|^{-1/2}$ のスケーリング則があると報告している。この指数は、通常のサドルノード (SN) 分岐の標準形

$$\frac{d}{dt} u(t) = \mu - u(t)^2, \quad (5.48)$$

で見られるものであり、臨界速度以下で見られるものとは異なっている。何故、臨界速度以上と以下で異なった指数になるのかは本研究の結果から明らかにすることはできない。しかし、本研究の結果からいくつかの可能性を指摘することができる。そ

のひとつが先行研究における数値計算の不十分さである。彼らの調べた速度の領域は $(v - v_c)/v_c = 0.01 \sim 0.1$ の領域である (文献 [177] の Fig. 8 参照)。しかし、本研究のエネルギーギャップのスケーリングの結果からこの速度領域では正しいスケーリング則が見られない可能性があることがわかる (例えば、図 5.24(b) を見よ)。もうひとつの可能性が境界条件の違いである。実は、Huepe らの論文では、用いた境界条件が明示されていない。境界条件の違いが指数を変える可能性があることは 1 次元の結果からより明確にわかるので、5.3.2 で詳しく議論する。ともかく、境界条件が明示されていないので、本研究と先行研究 [177] の結果を単純に比較することはできない。

ここで、周期ポテンシャル中の問題と本研究で扱ったトーラス系 (リング系) の違いについてコメントしておく。これらの系の違いは Bogoliubov 方程式の境界条件に現れる。本研究で扱った Bogoliubov 方程式の境界条件はトーラスであることと、ポテンシャルとともに動く座標系に座標変換したことにより式 (5.28)、(5.29)、(5.30)、(5.31) で与えられる。トーラス系 (リング系) との比較のため、1 次元の長さ L のリングの系を考える。この系に一定速度 $-v (v > 0)$ で動く周期ポテンシャル $U_{\text{periodic}}(x + vt)$ がかかっているとする。周期ポテンシャルの周期は a 、で、 $L = N_L a (N_L \text{ は自然数})$ を満たすとする。このとき、5.2.1 と 5.2.2 と同様に、ポテンシャルとともに動く座標系に座標変換し、その座標系で GP 方程式と Bogoliubov 方程式を考える。このとき、凝縮体波動関数および励起状態の波動関数は捻られた周期境界条件

$$\Psi(x + L) = e^{+imvL/\hbar} \Psi(x), \quad (5.49)$$

$$u(x + L) = e^{+imvL/\hbar} u(x), \quad (5.50)$$

$$v(x + L) = e^{-imvL/\hbar} v(x), \quad (5.51)$$

を満たさなければならない。ここまでは、本研究で扱ったものと同じである。ここで、凝縮体波動関数については次の周期性

$$\Psi(x) = e^{imvx/\hbar} \phi(x), \quad (5.52)$$

を仮定する [191, 193]。ここで、 $\phi(x)$ は $\phi(x + a) = \phi(x)$ を満たす周期関数とする。この波動関数 (5.52) は境界条件 (5.49) を満たすことは容易に確認できる。この仮定の下では Bogoliubov 方程式に Bloch の定理を適用することができる。その結果、励起状態の波動関数については、次のような形の境界条件を満たすものを考えればよいことになる (4.2.2 も参照せよ)：

$$u_k(x + a) = e^{+imva/\hbar} e^{ika} u_k(x), \quad (5.53)$$

$$v_k(x + a) = e^{-imva/\hbar} e^{ika} v_k(x), \quad (5.54)$$

ここで、 k は結晶運動量である。周期境界条件から結晶運動量は $k = 2\pi/L$ の整数倍の値をとる。このように、周期ポテンシャル系では波動関数が周期ポテンシャル中を 1 周期

進むと位相 ka を獲得する。これは一般に 2π の整数倍ではない。我々の考えている系は系の形状、すなわち波動関数の一価性の要請から結晶運動量ゼロの状態しか許されない ($N_L = 1$ の状況に対応している)。このことが、有効質量が負の状態が不安定定常解でないことにつながる。なぜなら、周期ポテンシャル中の問題では動的不安定性は結晶運動量 k が π/a のところで起きるからである [193]。我々の系では有限の結晶運動量を持つ状態は境界条件から許されていないので負の有効質量が直ちに系の不安定化にはつながらないのである。

ここまでは、励起スペクトルの性質についての結果を示してきた。ここからは、ゆらぎの性質について議論する。3.2.4 で議論したように、秩序変数のゆらぎは式 (3.112) と (3.114) により

$$\delta n_i(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r})v_i(\mathbf{r}), \quad (5.55)$$

$$\delta P_i(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}) + \Psi(\mathbf{r})v_i(\mathbf{r}), \quad (5.56)$$

と与えられる。 $\delta n_i(\mathbf{r})$ がモード i による局所密度揺らぎ、 $\delta P_i(\mathbf{r})$ がモード i による局所位相ゆらぎである。第1励起状態によるゆらぎの大きさを示したのが図 5.25 と図 5.26 である。図 5.25 が GVP があるパラメータ、図 5.26 が GVP が無いパラメータの結果である。両者ともに、位相ゆらぎの大きさは臨界速度近傍になっても、 $v = 0.1v_s$ の結果に比べ最大値が1桁程度大きくなるだけだが、密度ゆらぎは臨界速度近傍では $v = 0.1v_s$ の結果と比べ、3桁程度大きくなることからわかる。この結果の物理的な意味は図 5.10 から説明できる。臨界速度近傍においてはエネルギー汎関数の極小点周りの曲率が小さくなると期待される。エネルギー汎関数がこのような形をするというのは励起スペクトル結果 (図 5.20、図 5.21 参照) からも予測できる。臨界速度近傍では速度が小さいときに比べて低エネルギーの励起状態の数が増えている。 $v = 0$ のエネルギーギャップ以下の状態が4個と増加している。これにより、エネルギー汎関数の極小点周りの曲率が小さくなり、秩序変数の振幅 (=密度) のゆらぎが大きくなるものと考えられる。

位相ゆらぎが密度ゆらぎに比べ変化しないこともエネルギー汎関数の振る舞いで理解できる。なぜなら、位相ゆらぎの方向は図 5.10 で、紙面に垂直な方向であるからである。超流動の減衰に主に寄与するゆらぎはエネルギーバリアーを超える方向のゆらぎ、すなわち密度ゆらぎと考えられるので、この意味でも準安定状態の崩壊には位相ゆらぎはあまり寄与しないものと考えられる。

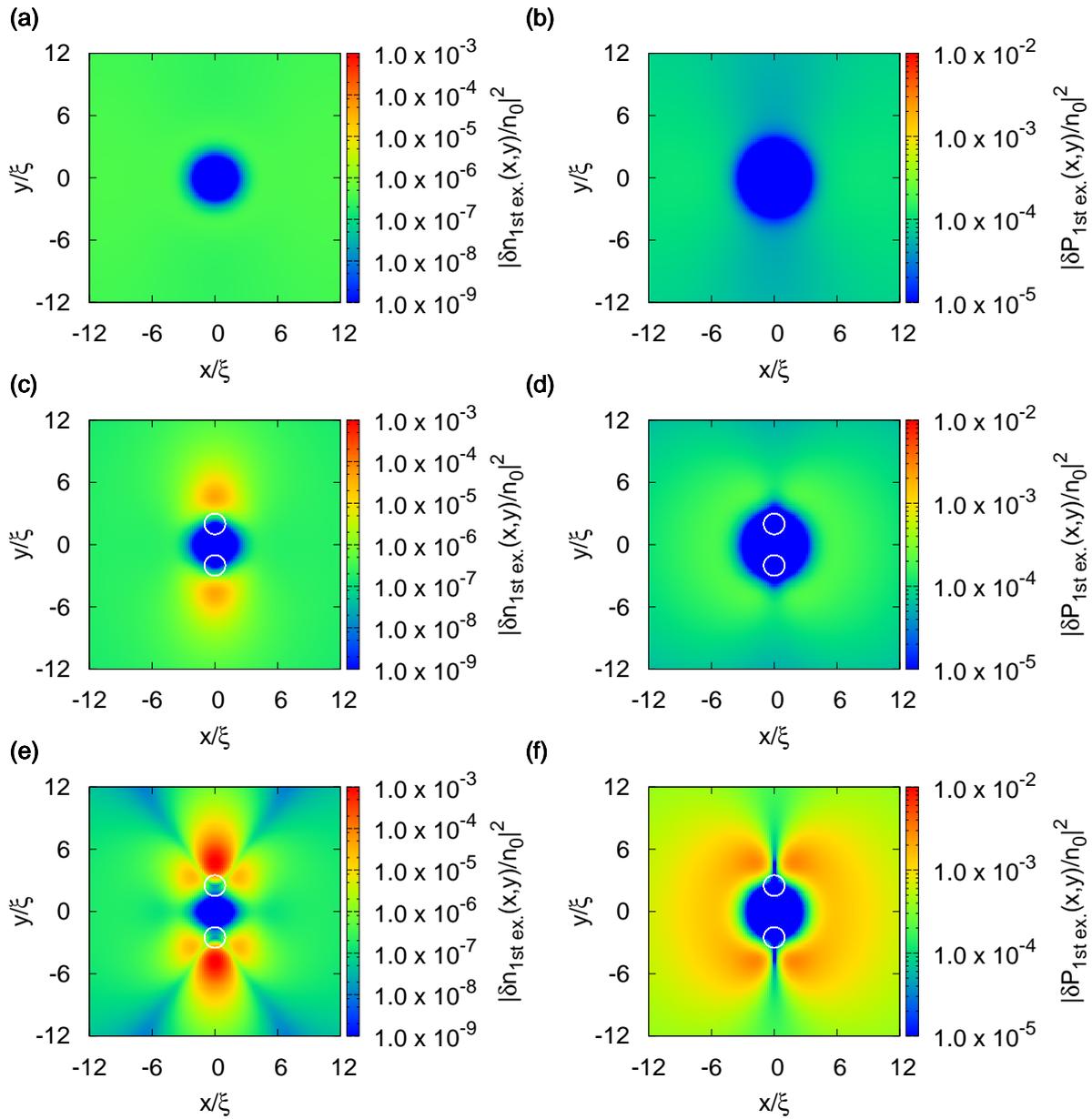


図 5.25 $L = 48\xi$, $U_0 = 5\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における (a) $v = 0.1v_s \simeq 0.2344387v_c$ (c) $v = 0.42v_s \simeq 0.9846426v_c$ (e) $v = 0.42655v_s \simeq 0.9999983v_c$ の第 1 励起状態による局所密度ゆらぎ、(b) $v = 0.1v_s$ (d) $v = 0.42v_s$ (f) $v = 0.42655v_s$ の第 1 励起状態による局所位相ゆらぎ。白丸は GVP の位置を表す。

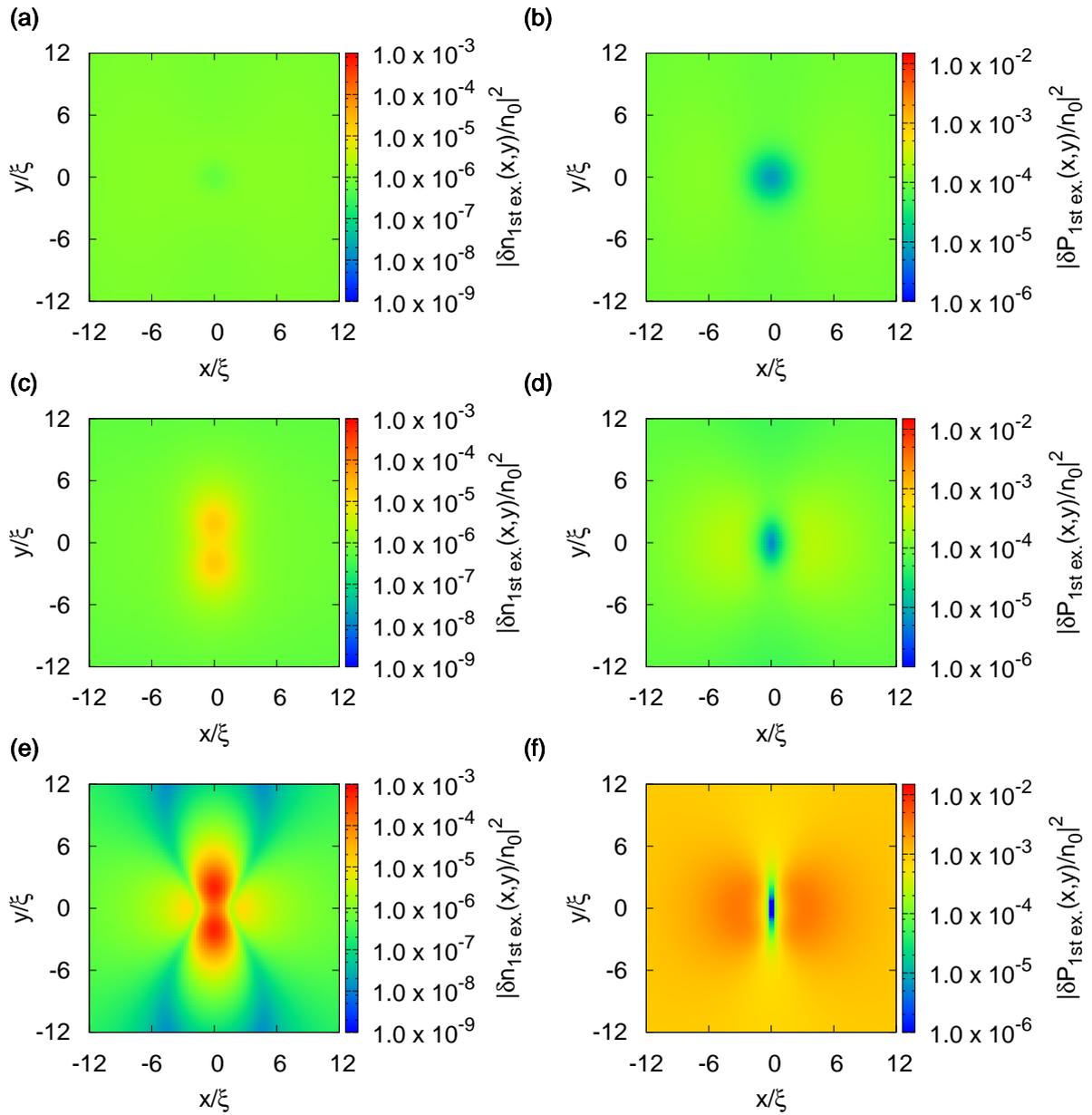


図 5.26 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における (a) $v = 0.1v_s \simeq 0.2126738v_c$ (c) $v = 0.45v_s \simeq 0.9570320v_c$ (e) $v = 0.4702v_s \simeq 0.9999921v_c$ の第 1 励起状態による局所密度ゆらぎ、(b) $v = 0.1v_s$ (d) $v = 0.45v_s$ (f) $v = 0.4702v_s$ の第 1 励起状態による局所位相ゆらぎ。

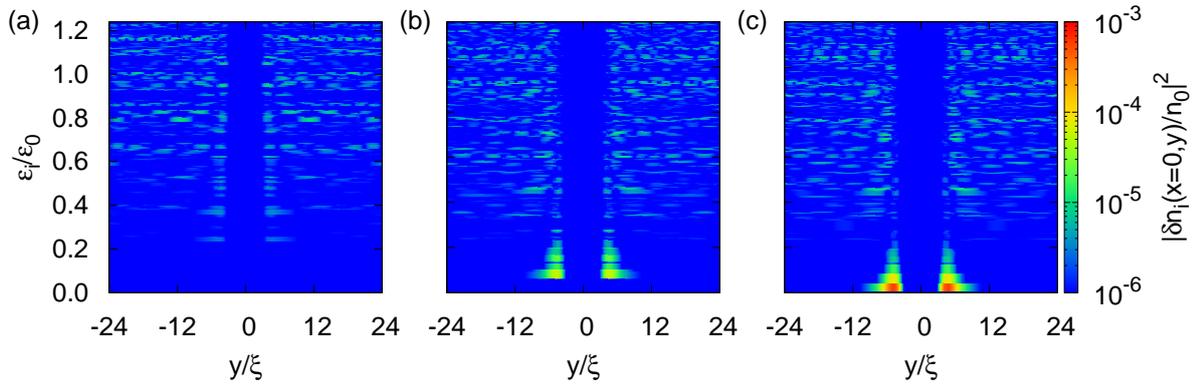


図 5.27 $L = 48\xi$, $U_0 = 5\epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における (a) $v = 0.1v_s \simeq 0.2344387v_c$ (b) $v = 0.42v_s \simeq 0.9846426v_c$ (c) $v = 0.42655v_s \simeq 0.9999983v_c$ の $x = 0$ における局所密度ゆらぎのエネルギー依存性。

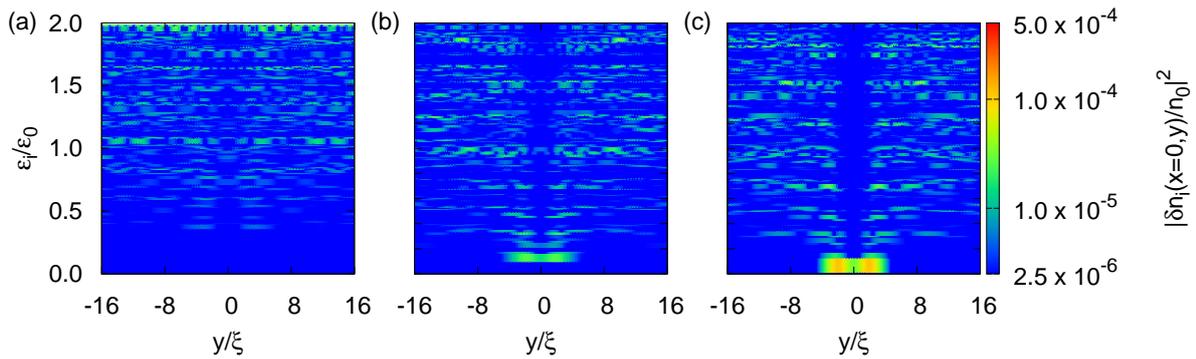


図 5.28 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 2.5\xi$, $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における (a) $v = 0.1v_s \simeq 0.2126738v_c$ (b) $v = 0.45v_s \simeq 0.9570320v_c$ (c) $v = 0.4702v_s \simeq 0.9999921v_c$ の $x = 0$ における局所密度ゆらぎのエネルギー依存性。

図 5.25、5.26 では第 1 励起状態の局所ゆらぎのみを示した。それ以外のモードによる局所密度ゆらぎを図 5.27、5.28 に示す。ただし、 $x = 0$ に沿ったもの示した。これらの図からも臨界速度近傍における低エネルギーの密度ゆらぎの増大が見ることができる。

次に、quantum depletion の計算結果を示す。Quantum depletion とは 3.2.8 で説明したように、Bose 凝縮に参加していない粒子の数のことである。GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いる近似の範囲内では、quantum depletion が小さいことが仮定されている。つまり、quantum depletion が小さいことが GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いた近似がよい近似であるための必要条件である。

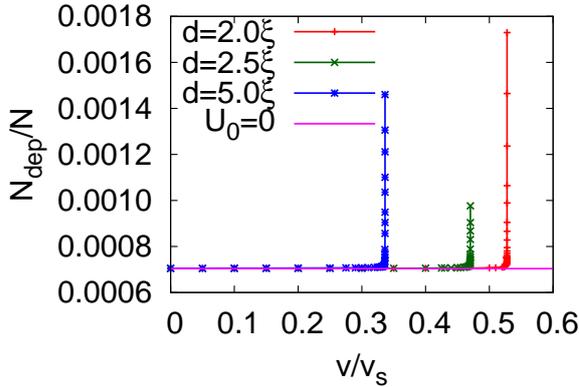


図 5.29 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 2\xi$ (赤線)、 2.5ξ (緑線)、 5ξ (青線)、 $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における quantum depletion の速度依存性。

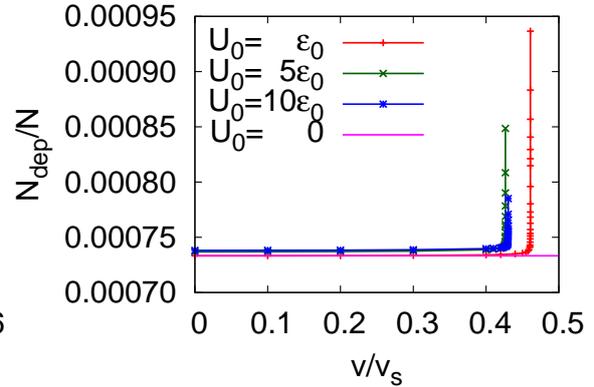


図 5.30 $L = 48\xi$, $d = 2.5\xi$, $U_0 = \epsilon_0$ (赤線)、 $5\epsilon_0$ (緑線)、 $10\epsilon_0$ (青線)、 $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ における quantum depletion の速度依存性。

今の場合の quantum depletion は (3.131) より

$$\begin{aligned} \frac{N_{\text{dep}}}{N} &= \frac{1}{N} \sum_{i, \epsilon_i > 0} \int d\mathbf{r} |v_i(\mathbf{r})|^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i, \epsilon_i > 0} \sum_{\mathbf{G}} |B_{\mathbf{q}+\mathbf{G}, i}|^2 \end{aligned} \quad (5.57)$$

と与えられる。数値計算結果を示す前に、まずポテンシャルが無い場合の quantum depletion の振る舞いについて指摘しておく。このとき、 $v_i(\mathbf{r})$ は式 (3.133) で与えられる。このとき速度 \mathbf{v} 依存性は平面波 $e^{-im\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ の形でしか入らない。よって、一様系の quantum depletion は速度 \mathbf{v} には依存しないことがわかる。

次に、ポテンシャルがあるときの quantum depletion の結果を示す。結果を議論する前に、これらを計算する際にフィッティングを用いたのでその説明を行う。Quantum depletion の定義 (5.57) には、固有状態についての無限和が含まれるが数値計算上ではカットオフを導入して有限和として計算を行った。ポテンシャルがあるときにこのカットオフ依存性がどのようになるかは自明ではないが、2次元一様系の場合、式 (3.134) より波数のカットオフを G_c とすると、quantum depletion のカットオフ依存性は $O(G_c^{-2})$ となることを示すことができる。よって、ポテンシャルがある場合でも一様系の場合とカットオフ依存性は同じであると仮定し、次のフィッティング関数を用いて計算を行った：

$$\frac{N_{\text{dep}}^{\text{fit}}}{N} = \frac{N_{\text{dep}}^{\text{cal}}}{N} - \frac{b}{(G_c\xi)^2}. \quad (5.58)$$

ここで、 $N_{\text{dep}}^{\text{cal}}/N$ と b がフィッティングパラメータである。実際の計算では、カットオフを変えた計算を行い、3つのデータを用いてフィッティングを行った。

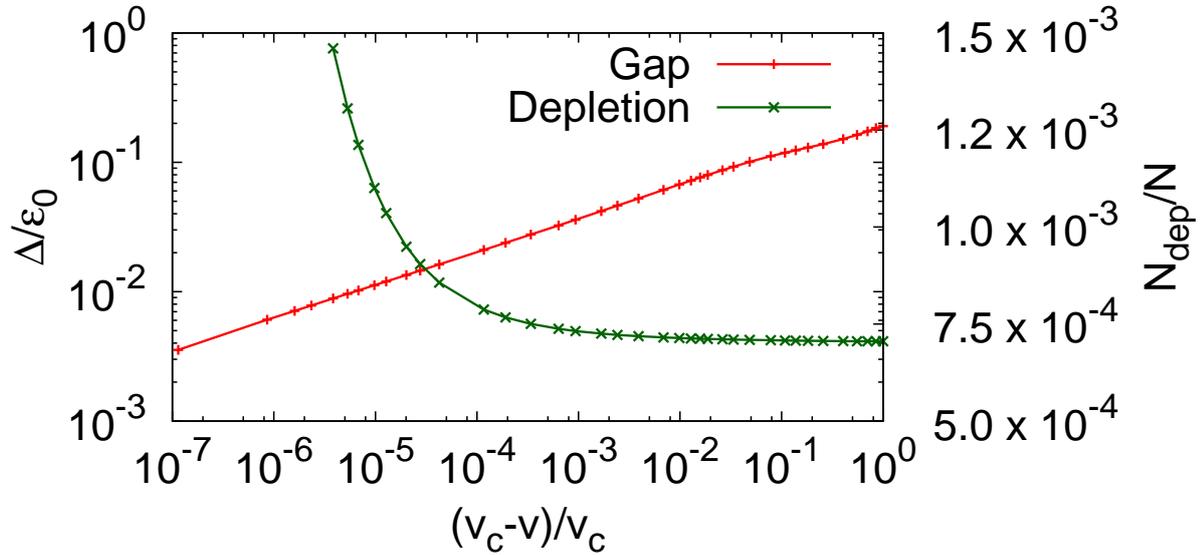


図 5.31 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = 5\xi$, $1/\sqrt{n_0\xi^2} = 0.1$ におけるエネルギーギャップ (左の軸) と quantum depletion (右の軸) の速度依存性をプロットしたもの。横軸は、臨界速度で規格化し、両対数プロットをしている。

図 5.29 と 5.30 に quantum depletion の計算結果を示す。フィッティングによるエラーはこのプロットレンジでは小さくて見えない程度なので図には示していない。これらの図から、quantum depletion は速度が臨界速度に比べて十分小さいときは一様系の結果とほとんど変わらないが、臨界速度に近づくと急激に増大し始めることがわかる。この臨界速度近傍の振る舞いは、エネルギーギャップと似ている。エネルギーギャップと quantum depletion を同時にプロットしたものを図 5.31 に示す。この図から、quantum depletion が増加し始める $(v_c - v)/v_c \sim 10^{-3}$ の領域ではエネルギーギャップが log-log プロットでほぼ直線になっているため、スケーリング則が成り立つ領域であることがわかる。すなわち、エネルギーギャップの急激な減少と quantum depletion の急激な増大はほぼ同じ領域で起きていることがわかる。この振る舞いは低エネルギー領域における状態の増加と、密度ゆらぎの増大により quantum depletion が増加したものと言える。また、 $(v_c - v)/v_c$ が小さい領域では quantum depletion は両対数プロットで直線になっていないため、本研究で調べた範囲では quantum depletion はべき的なスケーリング則は持っていないことがわかる。よって、臨界速度直上で quantum depletion が発散するかどうかは、この結果だけからでは判断できない。これを明らかにするのは今後の課題である。

最後に、quantum depletion の $\delta \equiv 1/\sqrt{n_0\xi^2}$ 依存性を示す。 δ は平均粒子間距離と回復長の比で与えられる量であり、この値が小さいほど Bogoliubov 近似が良くなる。なぜなら、 δ は計算上では励起状態の波動関数 $u_i(\mathbf{r})$ と $v_i(\mathbf{r})$ の規格化条件にのみ含まれ、 $v_i(\mathbf{r}) = O(\delta)$ であるからである (付録 B.2.2 を参照)。 δ を変化させたときの quantum

depletion の計算結果を図 5.32 に示す。この結果から、 $\delta = 0.5$ 程度でも臨界速度近傍を除けば $N_{\text{dep}}/N \ll 1$ であると言え、ポテンシャルが動いている場合でも Bogoliubov 近似は良い近似になっていると期待できる。また、 δ がより小さければ、臨界速度より近い領域でも quantum depletion は十分小さい。これらの結果から、本研究で得た結果は δ がそれほど大きく無いときに、臨界速度のごく近傍を除けば信頼できると言える。

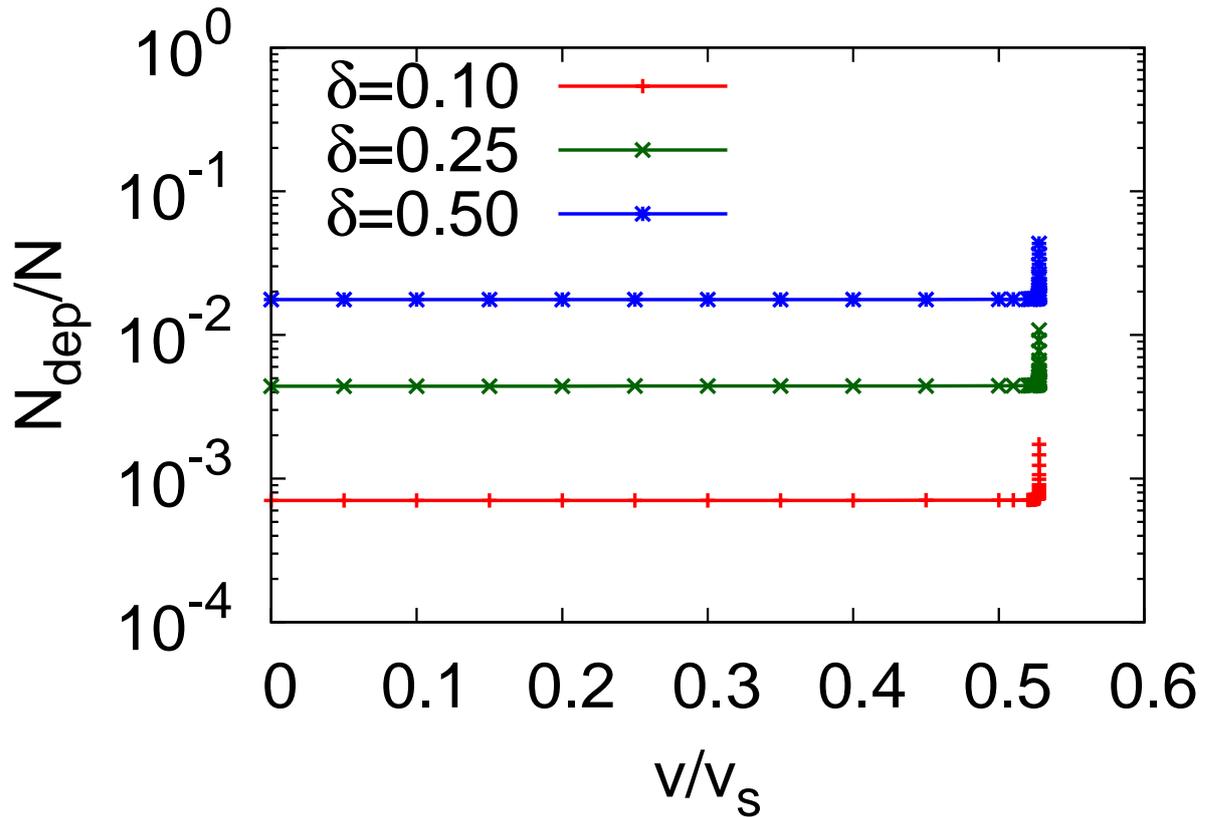


図 5.32 $L = 32\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = 2\xi$ における quantum depletion の速度依存性。

5.3.2 1次元系の結果

次に、2次元と同様の計算を1次元系でも行った結果を示す。

5.3.2.1 GP 方程式の結果

考える状況は2次元の場合とほとんど同じで、有限の長さ L の1次元のリング系に、一定速度で動くガウシアン型ポテンシャル $U(x+vt) = U_0 \exp[-(x+vt)^2/d^2]$ がある場合を考える。実験室座標系からポテンシャルとともに動く座標変換への座標変換を行い、捻られた境界条件の下、GP 方程式と Bogoliubov 方程式を解いた。

まずは、密度プロファイルと位相プロファイルを図 5.33、5.34、5.35、5.36 に示す。ポテンシャルのある領域付近で密度が小さくなり、それ以外の領域ではほとんど一様解になるという振る舞いは無限系の場合の先行研究の結果と良く似ている [201, 34, 202, 178, 181, 182, 203, 185]。ただし、位相プロファイルの結果は無限系のものとは少し異なる。なぜなら、無限系の問題では位相に関する境界条件は無遠方でバルクの解と類似した漸近系を持つとして課されているため、本研究で用いた捻られた周期境界条件とは違うからである。最近、捻られた周期境界条件の下、ポテンシャルがある系を GP 方程式を用いて解析した研究が報告されており、この結果と良く似た結果になっている [204]。

次に、エネルギーと速度の関係を図 5.37、5.38 に示す。この振る舞いは2次元の結果 (図 5.7、5.8 参照) とほぼ同一のものであることがわかる。また、図 5.39、5.40 で示す運動量と速度の関係も2次元の結果 (図 5.11、5.12) と良く似ている。このことから、2次

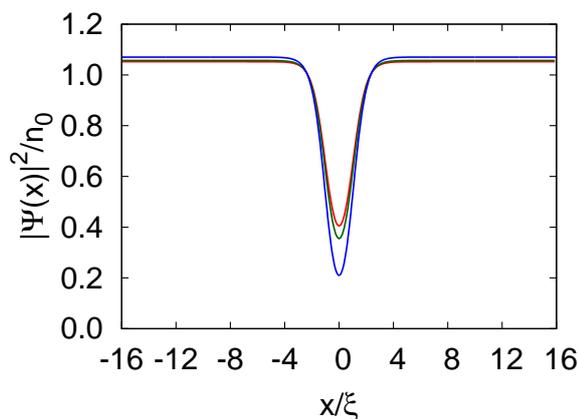


図 5.33 $L = 32\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ の密度プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.7026655v_c$ (緑線), $v = 0.284629v_s \simeq 0.9999948v_c$ (青線) の解である。

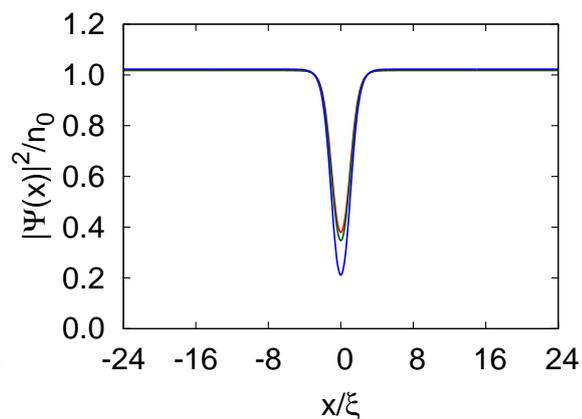


図 5.34 $L = 96\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ の密度プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.83057414v_c$ (緑線), $v = 0.2407972v_s \simeq 0.9999964v_c$ (青線) の解である。

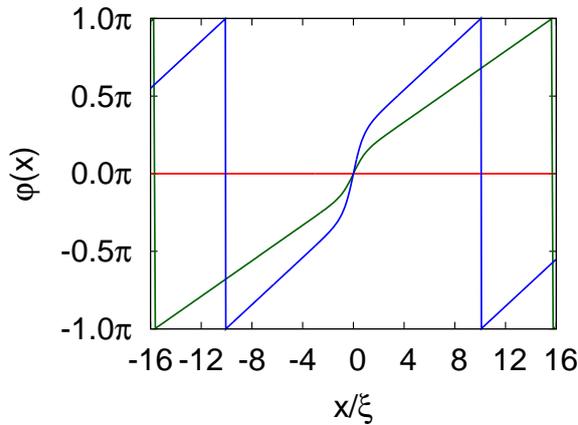


図 5.35 $L = 32\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ の位相プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.7026655v_c$ (緑線), $v = 0.284629v_s \simeq 0.9999948v_c$ (青線) の解である。

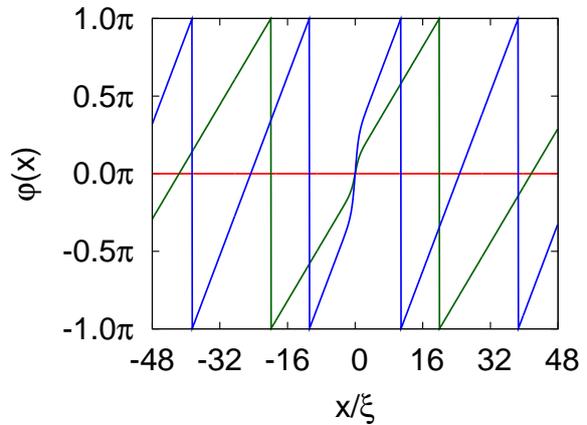


図 5.36 $L = 96\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ の位相プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.83057414v_c$ (緑線), $v = 0.2407972v_s \simeq 0.9999964v_c$ (青線) の解である。

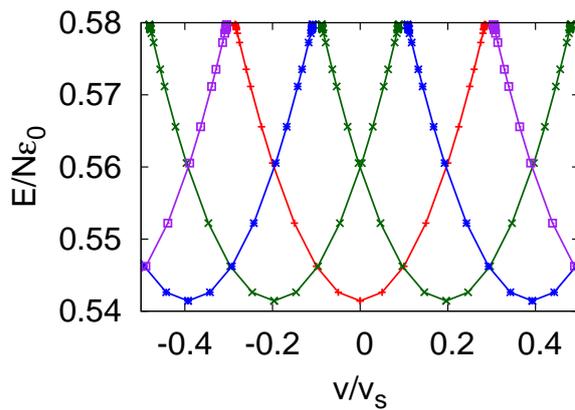


図 5.37 $L = 32\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ における 1 粒子あたりのエネルギーの速度依存性。

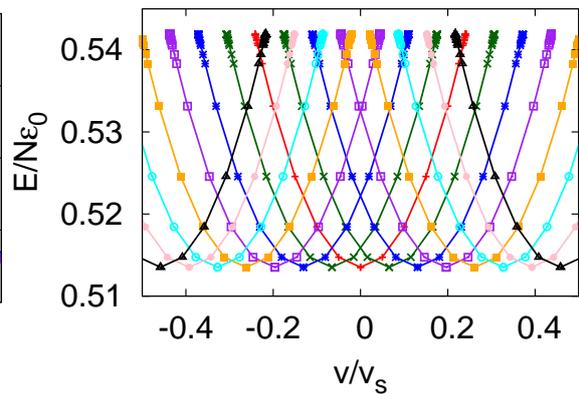


図 5.38 $L = 96\xi, U_0 = \epsilon_0, d = \xi$ における 1 粒子あたりのエネルギーの速度依存性。

元の場合の超流動不安定化の機構と 1 次元の不安定化機構は同じであることが示唆される。このことは 5.3.2.2 で示す励起スペクトルの結果からも見て取れる。

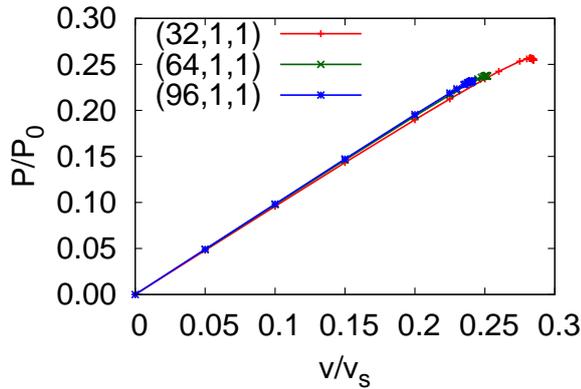


図 5.39 $L = 32\xi$ (赤線)、 $L = 64\xi$ (緑線)、 $L = 96\xi$ (青線)、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = \xi$ における運動量と速度の関係。ここで、 $P_0 \equiv Nmv_s$ である。

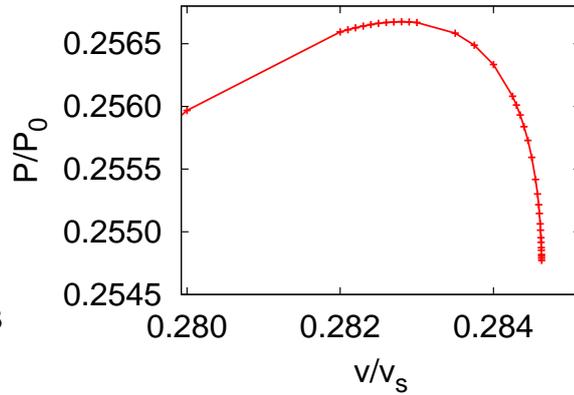


図 5.40 図 5.39 の $L = 32\xi$ 、 $U_0 = \epsilon_0$ 、 $d = \xi$ の臨界速度付近を拡大したもの。

5.3.2.2 Bogoliubov 方程式の結果

ここでは、Bogoliubov 方程式を解いた結果を示す。図 5.41、5.42 は励起スペクトルの速度依存性である。2次元の結果(図 5.20、5.21)と比べて低エネルギーのモードの数が少ないことがわかる。例えば $v = 0$ を見ると、2次元では第1から第4励起状態の4つのモードが非常に近いエネルギーを持っているが、1次元では第1、第2励起状態と第3、第4励起状態の間にはエネルギー差がある。しかし、第1励起状態に着目すると2次元の場合とほとんど同じ振る舞いをするのがわかる。これを示したのが図 5.43(a)と 5.44(a) である。2次元と同様に、速度が小さい領域ではほとんど線形にエネルギーギャップが減少し、臨界速度付近になると急激に減少する。臨界速度近傍の結果についてフィッティングを行った結果が図 5.43(b)と 5.44(b) である。この結果から1次元の場合でも臨界速度近傍ではエネルギーギャップのスケール則が成り立つことがわかる。より定量的な結果を表 5.3 に示す。フィッティング結果から指数は1次元でも $1/4$ に非常に近い値をとることがわかる。以上より、1次元の超流動の崩壊機構も2次元のものと同じであると言える。

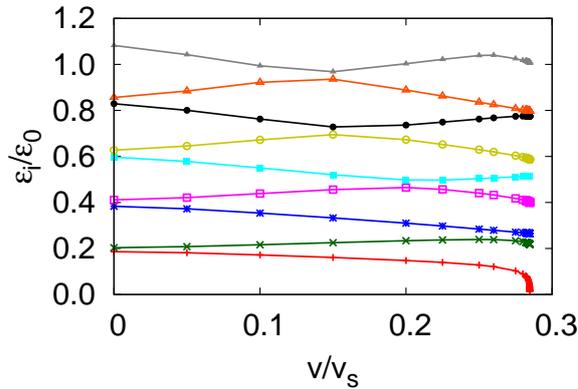


図 5.41 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$ における励起スペクトルの速度依存性。第 9 励起状態までプロットした。

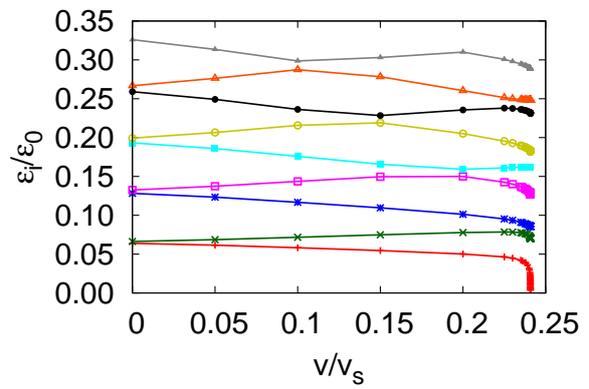


図 5.42 $L = 96\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$ における励起スペクトルの速度依存性。第 9 励起状態までプロットした。

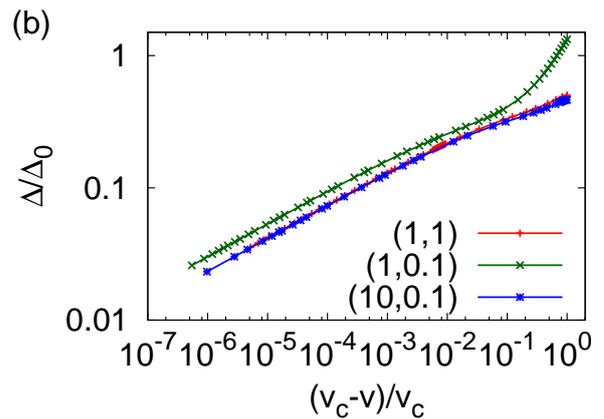
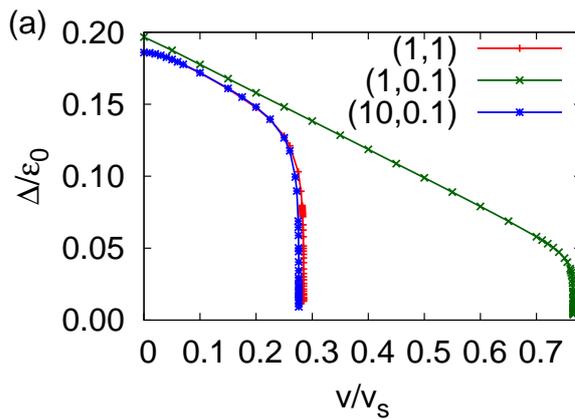


図 5.43 (a) $L = 32\xi$, $(U_0/\epsilon_0, d/\xi) = (1, 1)$ (赤線)、 $(1, 0.1)$ (緑線)、 $(10, 0.1)$ (青線) におけるエネルギーギャップの速度依存性。(b) (a) をフィッティングした結果。

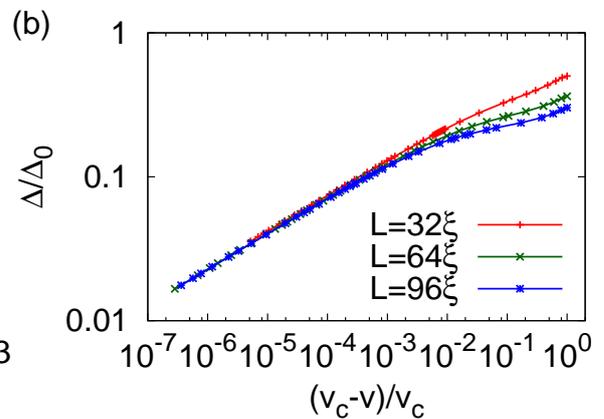
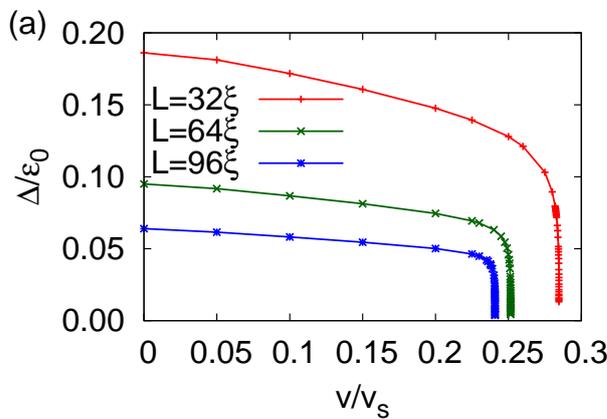


図 5.44 (a) $L = 32\xi$ (赤線)、 64ξ (緑線)、 96ξ (青線)、 $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$ におけるエネルギーギャップの速度依存性。(b) (a) をフィッティングした結果。

表 5.3 フィッティング結果。() はフィッティングによる誤差を表す。

L/ξ	U_0/ϵ_0	d/ξ	exponent
32	1	0.1	0.24860(5)
32	1	1	0.24837(4)
32	10	0.1	0.24868(7)
64	1	1	0.24886(6)
96	1	1	0.23837(5)
96	1	2.5	0.24988(1)
100	0.5	4	0.2482(1)

ここで、1次元の場合の先行研究の結果との比較を行う。1次元の系のスケーリング則は Pham と Brachet ら [178] により報告されている。彼らは不安定定常解の虚部 (growth rate に対応) についてのスケーリング則が成り立つことを示している。ただし、彼らのスケーリング則の指数は我々の $1/4$ ではなく $1/2$ である。すなわち、Pham らの結果は HSN 分岐ではなく SN 分岐が起きることを示唆している。以下ではこの違いについて議論する。彼らの系と本研究で扱った系の異なる点は境界条件である。彼らは無限に長い系に局在したポテンシャル障壁のある系を扱ったが、彼らの用いた境界条件は無限遠方で凝縮体波動関数が平面波になるというものであった。この境界条件は物理的には無限遠方で一定の流れを作るような粒子浴に系がつながっていることを意味する。この状況は本研究で扱った系とは全く異なる。なぜなら、本研究で扱った系は周期境界条件を用いているため、孤立系であり、外部との粒子やエネルギーのやり取りを行わないからである。このことから、先行研究と本研究で扱った系は方程式だけみるとほぼ同じ系に見えるが、境界条件の違いにより全く違う系になっている。よって、指数が本研究と先行研究で一致しなければならない理由は無いと見える。また、ここでの考察から次のような指数の違いの理由についてひとつの予想が立てられる。外部とのエネルギーをやり取りするということは、エネルギーが保存量でないことを意味している。SN 分岐と HSN 分岐の標準形を見ると、前者は散逸系の方程式であり、後者は保存系の方程式である。すなわち、エネルギーが保存量であるかどうかは SN 分岐と HSN 分岐かを決めているのではないかと予想できる。これが正しいかどうかを証明するのは今後の課題である。

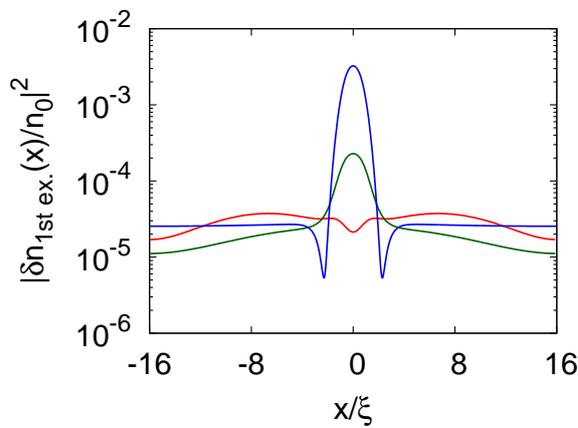


図 5.45 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$, $1/n_0\xi = 0.1$ における第 1 励起状態による局所密度ゆらぎの空間プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.7026655v_c$ (緑線), $v = 0.284629v_s \simeq 0.9999948v_c$ (青線) の結果である。

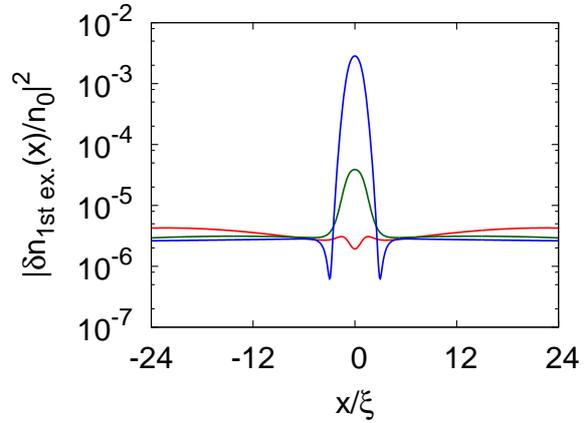


図 5.46 $L = 96\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$, $1/n_0\xi = 0.1$ における第 1 励起状態による局所密度ゆらぎの空間プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.83057414v_c$ (緑線), $v = 0.2407972v_s \simeq 0.99999964v_c$ (青線) の結果である。

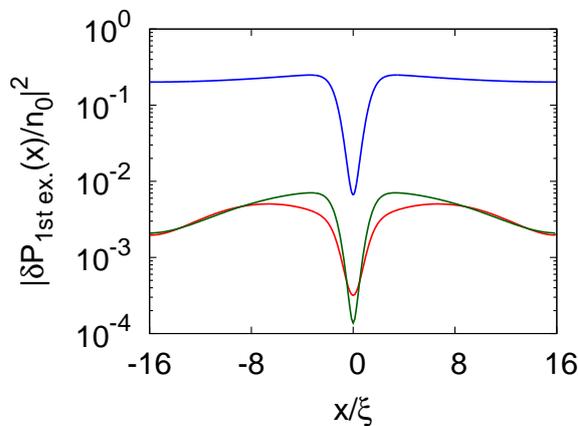


図 5.47 $L = 32\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$, $1/n_0\xi = 0.1$ における第 1 励起状態による局所位相ゆらぎの空間プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.7026655v_c$ (緑線), $v = 0.284629v_s \simeq 0.9999948v_c$ (青線) の結果である。

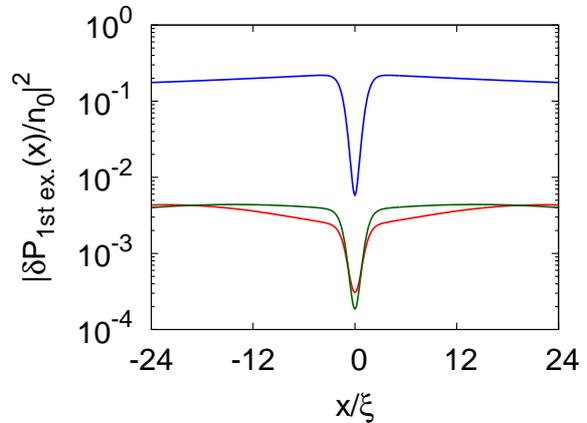


図 5.48 $L = 96\xi$, $U_0 = \epsilon_0$, $d = \xi$, $1/n_0\xi = 0.1$ における第 1 励起状態による局所位相ゆらぎの空間プロファイル。各線はそれぞれ $v = 0$ (赤線), $v = 0.2v_s \simeq 0.83057414v_c$ (緑線), $v = 0.2407972v_s \simeq 0.99999964v_c$ (青線) の結果である。

次に、局所的な密度ゆらぎの空間プロファイルを図 5.45、5.46 に、位相ゆらぎの空間プロファイルを図 5.47、5.48 に示す。臨界速度に近づくにつれてポテンシャル付近の密度ゆらぎが急激に増大することが見られる。また、位相ゆらぎも速度が大きくなると増大

するが、密度ゆらぎに比べて増大量は少ない。この振る舞いは2次元のものと良く似ており、この結果も1次元と2次元が同じメカニズムであることを示唆している。

5.4 まとめと展望

本研究では、トーラス、またはリング中に閉じ込められた Bose 凝縮体中を一定速度で動くポテンシャルがあるときの超流動の安定性を GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いて解析を行った。GP 方程式を数値的に解いた結果から、これらの系は光学格子系での swallow tail 構造と同様の構造を持っていることがわかった。Swallow tail 構造の存在は準安定な超流動状態が存在することを意味している。エネルギー汎関数の視点から見ると、Swallow tail 構造は2つのエネルギー極小の状態が一つのエネルギー極大の状態により隔てられていることを意味している。エネルギー極小のうちエネルギーの高い方が準安定状態に対応する。この状態からよりエネルギーの低い状態への遷移はエネルギーバリアーにより禁止されている。エネルギーバリアーの高さは系のパラメータで決まっているが、これがゼロになる状態が臨界速度状態であると言える。本研究で扱ったトーラス系とリング系は以上で述べたエネルギー汎関数の振る舞いとコンシステントである。それは Bogoliubov 方程式の結果からも見ることができる。実際に、臨界速度近傍では第1励起状態(エネルギーギャップ)に対するスケーリング則 $\Delta \propto |v_c - v|^{1/4}$ が成り立つことを示した。このスケーリング則の存在は臨界速度に近づくにつれて、特徴的な時間スケールの発散が起こることを意味している。時間スケールの発散が起きるということは、臨界速度直上においては断熱条件を満たすことが不可能になる。これが準安定状態の消失につながる。また、スケーリング則の指数 $1/4$ というのは Hamiltonian saddle-node 分岐 [177] において見られるものと同じである。エネルギーバリアーの消失による準安定状態の消滅は saddle-node 分岐で記述できるため [190]、この結果も swallow tail 構造の存在を支持している。また、本研究では臨界速度近傍における密度ゆらぎの増大があることを示した。平均場近似の範囲内では密度ゆらぎは秩序変数である凝縮体波動関数の振幅のゆらぎと同一視できる。秩序変数の振幅ゆらぎは、エネルギー汎関数でみると、エネルギーバリアーを乗り越える方向へのゆらぎが大きいことを意味している。ゆらぎの性質も swallow tail 構造の存在と矛盾しない。

以上で述べたように、本研究で述べた系は基本的に周期ポテンシャル中の swallow tail 構造を持つ系と非常に似た性質を持つ。しかし、本研究で扱った系の超流動の崩壊機構は周期ポテンシャル中のものとは異なる。周期ポテンシャル中の系では凝縮体速度の値が swallow tail の端に達する前に有限の結晶運動量を持つモードが不安定化を引き起こすことが知られている [121, 193]。しかし、本研究で扱った系では、境界条件から有限の結晶運動量を持つモードの存在は禁止されているため、このような不安定化は起きない。この結果はトーラス系やリング系では swallow tail 構造が直接超流動の不安定化に関わっていることを意味している。よって、トーラス系やリング系では周期ポテンシャル中の問題と

比べ、swallow tail 構造を調べることの重要性がより高いと言える。

Swallow tail 構造は基本的に 1 次元方向にのみ周期ポテンシャルがある系、またはリング系を念頭に研究されてきた。本研究の結果は 2 次元の場合でも swallow tail 構造が存在し得ることを示している。ただし、本研究では不安定定常解を求めることはできていない。不安定定常解を求めることができればどのような swallow tail 構造になっているかははっきりすることができる。これは課題の一つである。

また、本研究では quantum depletion の計算を行い、用いた近似の妥当性の議論を行った。この結果から、 δ が小さくなく、臨界速度のごく近傍を除いた速度領域であれば quantum depletion は十分小さいとみなせることがわかった。すなわち、本研究で得たエネルギーギャップのスケールリング則や、ゆらぎの増大といった結果は GP 方程式と Bogoliubov 近似を用いた近似の範囲内でも十分よく記述できていると考えられる。

本研究で得たスケールリング則、特にその指数は先行研究のもの [177, 178] とは異なっていた。この違いの原因については系が孤立系か外部の粒子浴とつながっていることが可能性として挙げられることを議論した。この可能性が正しいものか、それとも他の要因によって決まっているかを明らかにするのは課題の一つである。1 次元系については、周期境界条件の下でも GP 方程式、Bogoliubov 方程式ともに解析的に解くことが可能であるので、解析計算を用いてこの違いを明らかにできるのではないかと考えている。

重要な、また面白い課題の一つとして準安定状態の寿命評価が挙げられる。引力 BEC 系において、GP 方程式と Bogoliubov 方程式を用いた枠組み内でインスタントン法により、準安定状態の寿命評価が行われている [205, 206]。これを実際に実行するには不安定定常解を求めることが必要である。また、より実験に近い状況のモデルを用いれば、準安定状態の寿命を理論と実験で比較することが可能ではないかと期待できる。

本研究で扱った系では臨界速度を超えると 2π -phase slip が起きる。Phase slip は循環の量子化が深い関係にあることは明らかである。では、循環の量子化が単純ではない場合にどのような現象が起きるのだろうか？このような単純な循環の量子化が起きない系としてスピン 1 の spinor BEC が挙げられる [95]。このような系における準安定状態、すなわち swallow tail 構造がスピン 0 の場合とどのように違うのか、また、未知の機構による超流動の崩壊がおきるのかどうかを調べるのは面白い問題であると思う。

本研究は GP 方程式をもとにした平均場理論の範囲内で行った。この結果がより高次のゆらぎを取り入れた理論 (例えば、[207]) で計算を行ったときに変更を受けるのかどうかを調べることも課題である。1 次元系においては Sykes ら [208] により量子ゆらぎにより Drag force が臨界速度以下でもゼロにならないという結果が報告されている。本研究では Drag force ゼロの状態を出発点にしているため、Sykes らの結果を考えると出発点から再考する必要があるかもしれない。ただ、彼らと本研究で扱った系の境界条件も我々が用いたものと違うので、上で述べたようにこの違いも考慮しつつ議論する必要があ

る。また、2次元以上の系の高次ゆらぎを取り入れた計算は行われていないため、これを行うことも今後の課題である。

第 6 章

まとめと展望

本博士論文では空間不均一な超流動体、超流動固体と超流動体中をポテンシャルが一定速度で動く系の 2 つの系の超流動性についての研究結果を報告した。

第 2 章、第 3 章では先行研究のレビューを行った。第 2 章ではまず、Bose-Einstein 凝縮の定義、非対角長距離秩序の導入を行った。次に超流動の基本的性質を基底状態の性質、準安定状態の性質に分けて説明した。第 3 章では Bose 粒子系に対する平均場理論である Gross-Pitaevskii 理論、およびその励起状態を記述する Bogoliubov 理論についてのレビューを行った。

第 4 章、第 5 章が本研究のオリジナルな結果を含む章である。第 4 章ではソフトコア相互作用する Bose 粒子系に対し平均場理論を用いてその性質、特に超流動流に対する安定性を調べた結果を報告した。先行研究により、この系は基底状態では超流動固体状態が実現することが知られている。先行研究の結果のレビュー、特に基底状態の相図、励起スペクトルの性質等の説明を行った後、本研究オリジナルな結果である流れがある場合の準安定状態の性質についての結果を示した。GP 方程式と Bogoliubov 方程式を流れがある場合について解くことにより、超流動固体相の流れに対する安定性を議論し、超流動固体相が流れに対し安定となるパラメータ領域を明らかにした。超流動固体相の不安定に寄与するのは $U(1)$ 対称性の破れにともなう Bogoliubov モードであることがわかった。並進対称性の破れにともなう Phonon モードについては流れがある場合でもほとんどスペクトルの形を変えず、超流動流の不安定化にはほとんど寄与しないことがわかった。また、超流動固体相とは異なる 1 次元方向にのみ並進対称性が自発的に破れたストライプ相が流れによって誘起されることを示した。このストライプ相は Pitaevskii[125] によってその存在が予言されていたが、本研究では具体的なモデルでその存在と安定性を明らかにした。

第 5 章では、超流動体中を一定速度で動くポテンシャルがある系の超流動性、特にその準安定性について励起状態から調べた結果を報告した。類似の系に対する研究は過去の先行研究でも多く行われている [33, 34, 177, 178]。その結果から様々な性質、例えば臨界

速度以上におけるソリトンや量子渦生成が起きることが知られている。しかし、その励起状態の性質は、系が並進対称性を持たないことによる解析の難しさのため、ほとんど調べられていなかった。このこともあり、この系における超流動崩壊機構の理解は他の系に比べ不十分であった。また、先行研究では流れをどのように作るかという点についてはその研究によってまちまちであった。本研究では最近の冷却原子系におけるリングトラップ中の BEC の実験的実現を念頭に置き、周期境界条件を課した有限サイズの系の超流動性を明らかにすることを目的にした。周期境界条件は超流動性を見るという上で都合がよい上に、実際の計算も容易になるという利点がある。本研究では Gross-Pitaevskii 方程式に加え、Bogoliubov 方程式を解くことにより励起状態、およびそのゆらぎの性質を明らかにした。まず、この系が光学格子系で研究されている swallow tail 構造 [190] と似た構造を持つことを明らかにした。この構造は準安定状態とヒステリシスの存在を意味している。また、臨界速度近傍における励起スペクトルのスケーリング則を見いだした。このスケーリングの物理的意味は臨界速度直上では断熱条件の破れが起きることである。これは swallow tail 構造の存在と矛盾しない。また、励起状態の波動関数から、ゆらぎの性質も明らかにした。臨界速度近傍では秩序変数の振幅、すなわち密度ゆらぎの増大が起こることがわかった。この結果はエネルギーバリアーの消失の観点からも矛盾は無い。また、quantum depletion の計算を行い、近似の妥当性の議論を行った。

次に、今後の課題を述べる。本博士論文で行った研究は Gross-Pitaevskii および、Bogoliubov 理論に基づいたものである。超流動固体の研究、超流動体の研究ともに平均場近似を超えた理解をするのが今後の一番の課題である。

超流動固体の研究に関しては、基底状態の性質については量子モンテカルロ法による研究が盛んに行われている [151, 152, 153, 160, 161]。その結果から、相互作用が十分強い場合には超流動固体は存在せず、通常の固体相が実現することが示されている。本研究で用いた近似では非対角長距離秩序を常に仮定するので、このような通常の固体相を記述することが不可能であった。これは、流れのある場合についても同じで、例えば、臨界速度を超えると非対角長距離秩序が消えてしまうような不安定性がもしあった場合、本研究で用いた近似内では記述できない。より広い範囲、特に流れがあるような準安定状態でも適用可能な理論を構築し、超流動固体相における流れの性質をより深く理解することが課題である。

超流動体の研究に関しても、平均場近似を超えたとき何が起こるのかを明らかにするのが課題である。特に、先行研究 [208] により、量子ゆらぎにより Drag force が臨界速度よりも小さい領域でも誘起されるという結果が報告されている。このような量子ゆらぎの効果が超流動性に与える影響はまだ理解されていない点が多い。量子渦生成に対する量子ゆらぎの効果の研究は今後の課題である。

最後に、今後の展望を述べる。今後は本論文第5章で行った研究をより掘り下げていきたいと考えている。

第5章でも述べたが、リングトラップ中の BEC という超流動の基本的性質を研究するのに理想的な系が実験的に実現している。このような系における超流動性を十分に理解することはより複雑な状況下での超流動の理解にもつながると考えられる。しかし、本研究で用いたモデルは実験と完全には対応していない。例えば、トラップポテンシャルの効果などが含まれていない。よって、実際の実験を念頭に置いたモデルで解析を行うことが課題の一つである。特に、文献 [36] ではいくつかの点において実験と理論の不一致が報告されている。この不一致を GP 方程式および Bogoliubov 方程式を解くことで解決できるのではないかと考えている。

多成分系、特に内部自由度を持つ Spinor BEC などの系の超流動の理解も今後の課題の一つである。本研究では粒子数密度と結合する外場による超流動の崩壊を考えた。しかし、Spinor BEC では局所的な磁場をかけることにより、磁化と結合するポテンシャルを考えることができる。このような磁気的なポテンシャルにより超流動を壊す場合に何が起こるのかは明らかになっていない。また、Spinor BEC では量子ゆらぎの効果が重要であるという指摘がなされている [209]。量子ゆらぎが Spinor BEC における超流動の性質にどのような影響を与えるかを調べるのも面白い課題であると思う。

本研究では、空間的に不均一な系における超流動の基本的性質に焦点をあてた研究を行った。空間不均一性がある系は一見すると問題が複雑になるため嫌われがちである。しかし、この空間不均一性が超流動の減衰、量子渦の生成などの様々な非自明な現象を引き起こしている。超流動を考える上で、空間的な不均一性は避けて通れないものではないかと思う。

超流動という現象は、本博士論文の中で扱った範囲でも、様々な視点からの研究が必要となった。これが超流動を研究するにあたって難しい点であり、最大の魅力ではないかと思う。今後は、冷却原子系に限らず、量子多体問題としての超流動の基本的性質を明らかにするような研究を行っていきたい。

謝辞

まず初めに、指導教員である加藤雄介准教授に感謝します。研究に関する議論、論文の執筆をはじめ、発表練習等多くの時間を私のために割いてくださいました。また、研究環境、特に、数値計算環境の整備等、大変お世話になりました。そのおかげで修士時代を含め5年間ストレス無く研究生生活を過ごすことができたと思います。

ほぼ毎週行われているランチセミナーにおいて吉岡大二郎教授、簗口友紀助教には研究に関する多くの有益なコメントを頂きました。感謝します。また、吉岡先生には毎年行われるホームパーティーにお招きいただき、また奥様の普段食べる機会のないようなおいしい料理を振る舞って頂きました。佐々真一教授(現京都大学教授)には修士時代に行われた加藤研佐々研セミナーにおいて分岐理論とGP方程式の関係についてのレクチャーをして頂きました。また、2012年の冬学期に行われた特異摂動論の講義は自分の研究にとって大変有益でした。清水明教授には計算機関係のトラブル時に大変お世話になりました。

永井佑紀さんには修士時代の共同研究に加え、数値計算の基礎や、計算機の管理等で大変お世話になりました。小林未知数助教(現京都大学助教)には修士時代に共同研究者として議論して頂きました。また、GP方程式の時間発展のプログラムを提供して頂きました。本研究で用いた手法の一部はこのプログラムをベースに改良を施したものになっています。段下一平京都大学助教には2013年夏に京都大学基礎物理学研究所においてセミナーをする機会を与えて頂きました。また、同時に研究に関する有益な議論もして頂き感謝します。渡部昌平さんには修士時代より、またその後も研究会で会うたびに、研究に関する有益な議論をして頂きました。荒畑恵美子東大生産研助教には超流動固体の研究での数値計算手法について有益な議論をして頂きました。特に、第4章で用いた数値計算手法は荒畑さんが用いた手法を改良したのものになっています。高橋大介さんには修士2年からずっと同部屋で過ごしたこともあり、研究だけでなく日常的な世間話等でも大変お世話になりました。特に、私のソリトンに関する知識のほとんどは高橋さんとの会話、議論から得たものです。渡辺悠樹君には第4章の研究内容について有益な議論をして頂きました。穴釜剛君とは超流動固体の共同研究でお世話になりました。星野晋太郎さんには本博士論文の草稿を丁寧に読んで頂き、有益なコメントを頂きました。その他にも加藤研メンバー

(仲井良太さん、田代憲司さん、根本隼さん、Chung Chun-Kit(Ray)さん、黒澤範行君、藤井宏之君、宋秋登君、正木祐輔君、越田真史君、篠嵩美沙子さん)、吉岡研究室メンバー(水野勝之さん、櫻井靖久さん、三輪駿君)にはセミナーや研究生活でお世話になりました。福島研究室(特に、博士3年時に同室であった酒井佑士君)、清水研究室、國場研究室の皆様にも大変お世話になりました。東大理学系研究科の溝口知成君には2012年の秋から2013年の初めにかけて正木君とともに行った自主ゼミでお世話になりました。また、総合文化の同期である皆様、特に神田大樹君、千葉康一君、早川新吾君、宮坂大作君、山田直樹君、には修士から博士1年にかけて大変お世話になりました。秘書の豊田さん、松田さんには事務手続き等でお世話になりました。同学年である、遠藤晋平君、上西慧理子さん、増山雄太君には多くの刺激を受けました。

以上の方々に加え、他の多くの方々のおかげで本博士論文を執筆することができました。改めて感謝します。

本研究は日本学術振興会の特別研究員(DC1)として3年間特別研究員奨励費の支援(23-9376)を受けました。

最後に、経済的な支援をして頂いた両親に感謝します。

付録 A

量子力学における Galilei 変換

ここでは、量子力学において Galilei 変換がどのように表されるかを見る。参考文献は [210] である。

以下では簡単のため 1 粒子問題を考える。まず古典力学を考える。ある慣性系で座標と運動量が \mathbf{r} と \mathbf{p} で表されているとする。この慣性系に対し速度 \mathbf{v} で動く別の慣性系の座標と運動量 \mathbf{r}' と \mathbf{p}' と \mathbf{r} と \mathbf{p} の関係は

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t, \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}, \quad (\text{A.2})$$

で与えられる。ここで、 m は粒子の質量である。

量子力学においては関係式 (A.1) と (A.2) を位置演算子 $\hat{\mathbf{r}}$ と運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ に置き換えた関係式が成り立つはずである。これを次のように書くことにする：

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{U}_G^\dagger(\mathbf{v}, t)\hat{\mathbf{r}}\hat{U}_G(\mathbf{v}, t) = \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{v}t, \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{\mathbf{p}}' = \hat{U}_G^\dagger(\mathbf{v}, t)\hat{\mathbf{p}}\hat{U}_G(\mathbf{v}, t) = \hat{\mathbf{p}} - m\mathbf{v}. \quad (\text{A.4})$$

以下では、(A.3) と (A.4) を満たすようなユニタリー演算子 $\hat{U}_G(\mathbf{v}, t)$ の表式を求める。まず、 \mathbf{v} が無限小であるとしてこれを陽に表すため $\Delta\mathbf{v}$ と書くことにする。このとき、 $\hat{U}_G(\Delta\mathbf{v}, t)$ を $\Delta\mathbf{v}$ について展開すると

$$\hat{U}_G(\Delta\mathbf{v}, t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{B}} + O(\Delta\mathbf{v}^2), \quad (\text{A.5})$$

と書ける。ここで、 $\hat{\mathbf{B}}$ は $\hat{U}_G(\Delta\mathbf{v}, t)$ がユニタリー演算子なので、エルミート演算子でなければならない。式 (A.5) を式 (A.3) と (A.4) に代入すると、 $\hat{\mathbf{B}}$ が満たすべき関係式

$$-\frac{i}{\hbar}[\hat{r}_i, \hat{B}_j]\Delta v_j = -\Delta v_i t, \quad (\text{A.6})$$

$$-\frac{i}{\hbar}[\hat{p}_i, \hat{B}_j]\Delta v_j = -m\Delta v_i, \quad (\text{A.7})$$

を得る。これらの関係式を満たす \hat{B} は

$$\hat{B} = -\hat{p}t + m\hat{r}, \quad (\text{A.8})$$

であることを示すことができる。これより、無限小 Galilei 変換の演算子が

$$\hat{U}_G(\Delta\mathbf{v}, t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta\mathbf{v} \cdot (-\hat{p}t + m\hat{r}), \quad (\text{A.9})$$

となることがわかった。有限の \mathbf{v} に対する表式は以下のようにして得ることができる。まず、 $\Delta\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}/n$ (n は自然数) と書く。 n 回の無限小変換を行い、 $n \rightarrow \infty$ の極限をとることにより、有限の速度に対するユニタリー変換の表式

$$\begin{aligned} \hat{U}_G(\mathbf{v}, t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\hat{U}_G(\mathbf{v}/n, t) \right]^n \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{v}t - m\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

を得ることができる。ここで、任意の 2 個の演算子 \hat{C} と \hat{D} の交換関係が c -数であるときに適用可能な公式

$$\exp(\hat{C} + \hat{D}) = \exp(-[\hat{C}, \hat{D}]/2) \exp(\hat{C}) \exp(\hat{D}), \quad (\text{A.11})$$

を用いると、式 (A.10) は次のようにも書くことができる：

$$\hat{U}_G(\mathbf{v}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{v}t\right), \quad (\text{A.12})$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{v}t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} m\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}\right). \quad (\text{A.13})$$

次に、Galilei 変換で波動関数がどのように変換を受けるかを見てみる。ある状態ベクトルを $|\psi(t)\rangle$ と書くことにする。この座標表示は

$$\psi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle, \quad (\text{A.14})$$

である。演算子の変換が式 (A.3) や (A.4) で与えられるとき、状態ベクトルの変換は $|\psi'(t)\rangle = \hat{U}_G(\mathbf{v}, t) |\psi(t)\rangle$ で与えられる*¹。 $|\mathbf{r}'\rangle \equiv |\mathbf{r} - \mathbf{v}t\rangle$ とすると、波動関数の変換則は式 (A.12) を用いると、

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{r}', t) &= \langle \mathbf{r}' | \psi'(t) \rangle \\ &= \langle \mathbf{r}' | \hat{U}_G(\mathbf{v}, t) |\psi(t)\rangle \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 t - \frac{i}{\hbar} m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}\right) \psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

*¹ ある演算子 \hat{X} のユニタリー変換が $\hat{X} \rightarrow \hat{X}' \equiv \hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{U}$ で定義されたとする。このとき、状態ベクトル $|\phi\rangle$ 、 $|\psi\rangle$ 間の行列要素 $\langle \phi | \hat{X} | \psi \rangle$ は $\langle \phi | \hat{X} | \psi \rangle \rightarrow \langle \phi | \hat{X}' | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{U} | \psi \rangle \equiv \langle \phi' | \hat{X} | \psi' \rangle$ と変換されるからである。

となる。ここで、並進演算子の性質

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}\right)|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{a}\rangle, \quad (\text{A.16})$$

を用いた。

具体例として、 $\psi(\mathbf{r}, t)$ が平面波状態

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}t\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}\right), \quad (\text{A.17})$$

で与えられる場合を考える。式 (A.17) を (A.15) に代入すると

$$\psi'(\mathbf{r}', t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}(\mathbf{p}_0 - m\mathbf{v})^2t\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_0 - m\mathbf{v})\cdot\mathbf{r}'\right], \quad (\text{A.18})$$

となる。この状態は、運動量 $\mathbf{p}_0 - m\mathbf{v}$ 、エネルギー $(\mathbf{p}_0 - m\mathbf{v})^2/2m$ の平面波状態なので、確かに Galilei 変換されていることがわかる。

以上により、第 1 量子化表示における Galilei 変換のユニタリー演算子の表式を求めた。しかし、超流動の問題を扱う際には第 2 量子化表示における Galilei 変換の演算子の表式が必要になる場合がある。これは第 1 量子化表示と第 2 量子化表示の対応関係から以下のように得られる：

$$\hat{U}_G(\mathbf{v}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\hat{N}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}m\mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{C}}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{v}t\right), \quad (\text{A.19})$$

$$\hat{N} \equiv \int d\mathbf{r}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.20})$$

$$\hat{\mathbf{C}} \equiv \int d\mathbf{r}\hat{n}(\mathbf{r})\mathbf{r}, \quad (\text{A.21})$$

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv -\frac{i\hbar}{2}\int d\mathbf{r}\left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\nabla\hat{\psi}(\mathbf{r}) - \nabla\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\right]. \quad (\text{A.22})$$

ここで、 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ は場の消滅演算子、 \hat{N} は全粒子数演算子、 $\hat{\mathbf{C}}$ は重心演算子、 $\hat{\mathbf{P}}$ は全運動量演算子である。これらを用いると、Galilei 変換による、場の演算子の変換則は

$$\begin{aligned} \hat{\psi}'(\mathbf{r}', t) &\equiv \hat{U}_G^\dagger(\mathbf{v}, t)\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)\hat{U}_G(\mathbf{v}, t) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}m\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}\right)\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

となることが示せる。

付録 B

数値計算手法

本付録では本研究で用いた数値計算手法の詳細について解説する。

B.1 4章の数値計算

ここでは、4章で用いた数値計算手法の解説を行う。B.1.1、B.1.2の手法に関しては文献 [211, 212] を参考にした。

B.1.1 GP 方程式

解くべき GP 方程式は式 (4.15)、(4.16) より

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 + \pi n_0 V_0 a^2 \right] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \\ + 2\pi V_0 a^2 \sum_{\mathbf{G}', \Delta\mathbf{G} \neq \mathbf{0}} \frac{J_1(|\Delta\mathbf{G}|a)}{|\Delta\mathbf{G}|a} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta\mathbf{G}}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G}} = \mu C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

である。化学ポテンシャルを決定する粒子数条件は式 (4.17) より、

$$n_0 = \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2, \quad (\text{B.2})$$

である。また、1粒子あたりのエネルギーは

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2}{2mn_0} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}|^2 \\ + \frac{1}{2n_0} \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3} V(\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_3) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1+\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_3}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_2} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}_1}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

と与えられる。

数値計算を実行するために、これらの式の無次元化を行う。そのために、以下の変数を導入する：

$$\tilde{q} \equiv qa, \quad \tilde{G} \equiv Ga, \quad \tilde{V}_0 \equiv V_0/\epsilon_0, \quad (\text{B.4})$$

$$\tilde{C}_{\tilde{G}} \equiv C_{q+G}/\sqrt{n_0}, \quad \tilde{\mu} \equiv \mu/\epsilon_0. \quad (\text{B.5})$$

以降 $\tilde{\quad}$ がついている変数は無次元化した変数を表すことにする。これらの変数を用いると、無次元化された GP 方程式は

$$\left[\frac{1}{2}(\tilde{q} + \tilde{G})^2 + g \right] \tilde{C}_{\tilde{G}} + \sum_{\Delta\tilde{G} \neq 0} \tilde{S}_{\Delta\tilde{G}} \tilde{C}_{\tilde{G}+\Delta\tilde{G}} = \tilde{\mu} \tilde{C}_{\tilde{G}}, \quad (\text{B.6})$$

$$\tilde{S}_{\Delta\tilde{G}} \equiv 2g \frac{J_1(|\Delta\tilde{G}|)}{|\Delta\tilde{G}|} \sum_{\tilde{G}'} \tilde{C}_{\tilde{G}'+\Delta\tilde{G}}^* \tilde{C}_{\tilde{G}'}, \quad (\text{B.7})$$

となる。無次元された粒子数条件は

$$1 = \sum_{\tilde{G}} |\tilde{C}_{\tilde{G}}|^2, \quad (\text{B.8})$$

$$(\text{B.9})$$

と書ける。1 粒子あたりのエネルギーは

$$\frac{\tilde{E}}{N} = \frac{1}{2} \sum_{\tilde{G}} (\tilde{q} + \tilde{G})^2 |\tilde{C}_{\tilde{G}}|^2 + g \sum_{\tilde{G}_1, \tilde{G}_2, \tilde{G}_3} \frac{J_1(|\tilde{G}_1 - \tilde{G}_3|)}{|\tilde{G}_1 - \tilde{G}_3|} \tilde{C}_{\tilde{G}_1+\tilde{G}_2-\tilde{G}_3}^* \tilde{C}_{\tilde{G}_3}^* \tilde{C}_{\tilde{G}_2} \tilde{C}_{\tilde{G}_3}, \quad (\text{B.10})$$

GP 方程式 (B.6) は $\tilde{C}_{\tilde{G}}$ についての非線形の方程式であるが、非線形項 ($\tilde{S}_{\Delta\tilde{G}}$) については自己無道着に解くことにして、 μ を固有値とする固有値方程式とみなして数値計算を行う。数値計算のフローチャートは以下ようになる：

- (1) 格子定数 λ を選ぶ。
- (2) 初期値として適当な $\tilde{C}_{\tilde{G}}$ を選ぶ。
- (3) $\tilde{C}_{\tilde{G}}$ を $\tilde{S}_{\Delta\tilde{G}}$ に代入して、式 (B.6) を数値的に対角化する。
- (4) 各固有状態に対し 1 粒子あたりのエネルギーを計算する。
- (5) 最低の 1 粒子あたりのエネルギーを持つ固有状態を選ぶ。
- (6) (3)~(5) を収束するまで繰り返す。
- (7) 異なる λ を選び (2)~(6) を繰り返し、1 粒子あたりのエネルギーが最小になる λ を求める。

実際の計算ではプロセス (5) については、計算コストの削減のため、最低の 1 粒子あたりのエネルギーを持つ固有状態ではなく、最小の固有値を持つ状態を選んだ。こう選んだとしても、初期値を適切に選べば同じ答えになることは確認済みである。

B.1.2 Bogoliubov 方程式

解くべき Bogoliubov 方程式は以下のように与えられていた：

$$D_{\mathbf{G}}^+ A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} + \sum_{\Delta\mathbf{G}\neq\mathbf{0}} S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^+ A_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} - \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^+ B_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} = \epsilon_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}, \quad (\text{B.11})$$

$$-D_{\mathbf{G}}^- B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n} - \sum_{\Delta\mathbf{G}\neq\mathbf{0}} S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{-*} B_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} + \sum_{\Delta\mathbf{G}} W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{-*} A_{\mathbf{k}+\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G},n} = \epsilon_{\mathbf{k},n} B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}. \quad (\text{B.12})$$

各変数の定義は

$$D_{\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} \pm \mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \mu + n_0 \bar{V}(\mathbf{0}) + \sum_{\mathbf{G}'} \bar{V}(\pm\mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}') |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}|^2, \quad (\text{B.13})$$

$$S_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} [\bar{V}(\Delta\mathbf{G}) + \bar{V}(\pm\mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}')] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta\mathbf{G}}^* C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}, \quad (\text{B.14})$$

$$W_{\mathbf{G},\Delta\mathbf{G}}^{\pm} \equiv \sum_{\mathbf{G}'} \bar{V}(\pm\mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{G}') C_{\mathbf{q}+2\mathbf{G}+\Delta\mathbf{G}-\mathbf{G}'} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}, \quad (\text{B.15})$$

である。

GP 方程式の場合と同様に以下の無次元変数を導入する：

$$\tilde{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}a, \quad \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k},n} \equiv \epsilon_{\mathbf{k},n}/\epsilon_0, \quad (\text{B.16})$$

$$\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},n} \equiv A_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}/\sqrt{n_0}, \quad \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},n} \equiv B_{\mathbf{k}+\mathbf{G},n}/\sqrt{n_0}. \quad (\text{B.17})$$

これにより、無次元化された Bogoliubov 方程式は

$$\tilde{D}_{\tilde{\mathbf{G}}}^+ \tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},n} + \sum_{\Delta\tilde{\mathbf{G}}\neq\mathbf{0}} \tilde{S}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^+ \tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}},n} - \sum_{\Delta\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^+ \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}},n} = \tilde{\epsilon}_{\tilde{\mathbf{k}},n} \tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},n}, \quad (\text{B.18})$$

$$-\tilde{D}_{\tilde{\mathbf{G}}}^- \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},n} - \sum_{\Delta\tilde{\mathbf{G}}\neq\mathbf{0}} \tilde{S}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{-*} \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}},n} + \sum_{\Delta\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{-*} \tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}},n} = \tilde{\epsilon}_{\tilde{\mathbf{k}},n} \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},n}. \quad (\text{B.19})$$

となり、各無次元化された変数は

$$\tilde{D}_{\tilde{\mathbf{G}}}^{\pm} \equiv \frac{1}{2} (\tilde{q} \pm \tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}})^2 - \tilde{\mu} + g + 2g \sum_{\tilde{\mathbf{G}'}} \frac{J_1(|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|)}{|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|} |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}'}}|^2, \quad (\text{B.20})$$

$$\tilde{S}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{\pm} \equiv 2g \sum_{\tilde{\mathbf{G}'}} \left[\frac{J_1(|\Delta\tilde{\mathbf{G}}|)}{|\Delta\tilde{\mathbf{G}}|} + \frac{J_1(|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|)}{|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|} \right] \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^* \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}'}}', \quad (\text{B.21})$$

$$\tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{\pm} \equiv 2g \sum_{\tilde{\mathbf{G}'}} \frac{J_1(|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|)}{|\pm\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}'|} \tilde{C}_{2\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}}-\tilde{\mathbf{G}'}} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}'}}', \quad (\text{B.22})$$

となる。

B.1.3 共存相の計算

第 4 章でも述べたが、共存相は結晶秩序を持たない相であるため B.1.1 や B.1.2 で用いた手法は使うことができない。ここでは、直交関数展開を使わない実空間で GP 方程式の定常解を得るための手法を解説する。

解きたい GP 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \mu \Psi(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.23})$$

の拘束条件

$$N = \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (\text{B.24})$$

のもとでの定常解 ($\partial \Psi(\mathbf{r}, t) / \partial t = 0$) である。また、考えている領域は $0 \leq x, y \leq L$ の正方形の領域とし、周期境界条件

$$\Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_x, t) = \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \Psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_y, t) = \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.25})$$

を課す。

まず、以下の無次元変数を導入する：

$$\tilde{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}/a, \quad \tilde{\mu} \equiv \mu/\epsilon_0, \quad \tilde{t} \equiv t/(\hbar/\epsilon_0), \quad (\text{B.26})$$

$$\tilde{V}(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') \equiv V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\epsilon_0, \quad \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)/\sqrt{n_0}. \quad (\text{B.27})$$

これにより、無次元化された GP 方程式は

$$i \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = -\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) - \tilde{\mu} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) + n_0 a^2 \int d\tilde{\mathbf{r}}' \tilde{V}(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}', \tilde{t})|^2 \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (\text{B.28})$$

となる。無次元化された粒子数条件は

$$1 = \frac{1}{\tilde{L}^2} \int d\tilde{\mathbf{r}} |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})|^2, \quad (\text{B.29})$$

と書ける。

ここで、単純に方程式 (B.28) を時間発展させても定常解は得られないことを指摘しておく。なぜなら、方程式 (B.28) はエネルギーを保存するダイナミクスしか記述できないからである。これを回避するために、虚時間発展法を用いる。すなわち、方程式 (B.28) の代わりに \tilde{t} を $-i\tilde{t}$ で置き換えた以下の方程式

$$-\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = -\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) - \tilde{\mu}(\tilde{t}) \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) + n_0 a^2 \int d\tilde{\mathbf{r}}' \tilde{V}(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}', \tilde{t})|^2 \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (\text{B.30})$$

を解くことを考える。方程式 (B.28) と (B.30) は同じ定常解を持つ。また、方程式 (B.30) はエネルギー散逸があるダイナミクスを記述できるため、長時間時間発展させれば、安定定常解が得られると期待できる。ただし、素朴に \tilde{t} を $-i\tilde{t}$ に置き換えた方程式では時間発展とともに粒子数も減少してしまう。これを防ぐため、化学ポテンシャルに時間依存性を導入し、各時間で粒子数を保つようにした。 $\tilde{\mu}(\tilde{t})$ の決定方程式はこの後で導出する。

表記の簡略化のため以下の変数を導入する：

$$\tilde{K}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \equiv -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (\text{B.31})$$

$$\tilde{I}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \equiv n_0 a^2 \int d\tilde{\mathbf{r}}' \tilde{V}(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}', \tilde{t})|^2 \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}). \quad (\text{B.32})$$

ここで、式 (B.32) は Fourier 変換を用いると

$$\tilde{I}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = n_0 a^2 \frac{1}{\tilde{L}^2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left[e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \tilde{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \tilde{n}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{t}) \right] \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (\text{B.33})$$

$$\tilde{n}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{t}) \equiv \int d\tilde{\mathbf{r}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})|^2, \quad (\text{B.34})$$

のように畳み込みの形で書くことができる。これは、数値計算上では高速 Fourier 変換 (Fast Fourier Transformation, FFT) を用いて計算量を大幅に削減できることを意味している。実際に、相互作用の計算には FFT を用いた。この手法は文献 [213] 等でも用いられている。

以下では、数値計算を行うため、時間と空間を離散化する。時間間隔を Δt とする。空間は、 x 、 y 方向ともにメッシュ N_m 点で分割する。メッシュ間隔は $\Delta x = \Delta y \equiv \tilde{L}/N_m$ とする。また、波動関数等は以下のように書くことにする：

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \rightarrow \Psi_{i,j}^n. \quad (\text{B.35})$$

ここで、上付き添字 n が時間ステップ、下付き添字 i と j がそれぞれ x 方向、 y 方向の座標のラベルを表すとする。各メッシュ点の座標は

$$x_i = \Delta x(i-1), \quad y_j = \Delta y(j-1), \quad (i, j = 1, \dots, N_m) \quad (\text{B.36})$$

とラベルされているとする。時間方向については Euler 法を用いて離散化する。以上により、離散化された GP 方程式は

$$\Psi_{i,j}^{n+1} = \Psi_{i,j}^n - \Delta t \left[K_{i,j}^n - \mu^n \Psi_{i,j}^n + I_{i,j}^n \right], \quad (\text{B.37})$$

となる。ここで、 $K_{i,j}^n$ は

$$K_{i,j}^n \equiv -\frac{1}{2} \frac{\Psi_{i+1,j}^n - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} - \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i,j+1}^n - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i,j-1}^n}{\Delta y^2}, \quad (\text{B.38})$$

と離散化される。また、周期境界条件は

$$\Psi_{N_m+1,j}^n = \Psi_{1,j}^n, \quad \Psi_{0,j}^n = \Psi_{N_m,j}^n, \quad (\text{B.39})$$

$$\Psi_{i,N_m+1}^n = \Psi_{i,1}^n, \quad \Psi_{i,0}^n = \Psi_{i,N_m}^n, \quad (\text{B.40})$$

と書ける。粒子数条件は

$$N_m^2 = \sum_{i,j} |\Psi_{i,j}^n|^2, \quad (\text{B.41})$$

と離散化される。式 (B.41) により、化学ポテンシャルの時間依存性を導出することができる。時刻 $n+1$ でも (B.41) が成立するとする。すなわち、

$$N_m^2 = \sum_{i,j} |\Psi_{i,j}^{n+1}|^2, \quad (\text{B.42})$$

が成り立つことを要請する。式 (B.42) に GP 方程式 (B.37) を代入し、式 (B.41) を用いると、化学ポテンシャルの従う方程式

$$\mu^{n+1} = \frac{N_m^2 - \sum_{i,j} |\Psi_{i,j}^n|^2 + 2\Delta t \sum_{i,j} \text{Re} [\Psi_{i,j}^{n*} (K_{i,j}^n + I_{i,j}^n)]}{2\Delta t \sum_{i,j} |\Psi_{i,j}^n|^2}, \quad (\text{B.43})$$

を得る。

B.2 5章の数値計算

B.2.1 GP 方程式

ここでは、GP 方程式の数値計算手法について述べる。解くべき虚時間 GP 方程式は式 (5.35) より

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^2 - \mu(t) \right] C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t) + \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{G}'} \bar{U}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}(t) + gn_0 \sum_{\mathbf{G}', \Delta \mathbf{G}} C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'+\Delta \mathbf{G}}^*(t) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}'}(t) C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}+\Delta \mathbf{G}}(t), \quad (\text{B.44})$$

である。この時間に依存しない定常解を長時間時間発展することにより得る。ただし、展開係数 $C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)$ は規格化条件

$$1 = \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t)|^2, \quad (\text{B.45})$$

を満たさなければならない。

数値計算を実行するために、以下の無次元変数を導入する：

$$\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n \equiv C_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}(t), \quad \tilde{\mathbf{q}} \equiv \mathbf{q}\xi, \quad \tilde{\mathbf{G}} \equiv \mathbf{G}\xi, \quad \tilde{\mu}^n \equiv \mu(t)/gn_0, \quad (\text{B.46})$$

$$\tilde{U}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv \bar{U}(\mathbf{k})/(gn_0\xi^2), \quad \tilde{S} \equiv S/\xi^2, \quad \tilde{t} \equiv t/(\hbar/gn_0). \quad (\text{B.47})$$

ここで、B.1.3 と同様に、時間についての離散化を行い、時間間隔を $\Delta \tilde{t}$ とし、時間についてのラベルを上付き添字で表すことにした ($\tilde{t} = \Delta \tilde{t} \times n$, $n \in \mathbb{Z}$)。これより、虚時間 GP 方程式は次のようになる：

$$\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^{n+1} = \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n - \Delta \tilde{t} \left\{ \left[\frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{G}})^2 - \tilde{\mu}^n \right] \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n + \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}'}} \tilde{U}(\tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}') \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n + \sum_{\tilde{\mathbf{G}'}, \Delta \tilde{\mathbf{G}}} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}'+\Delta \tilde{\mathbf{G}}}}^{n*} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}'}}^n \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}+\Delta \tilde{\mathbf{G}}}}^n \right\}. \quad (\text{B.48})$$

ここで、化学ポテンシャルの時間依存性は B.1.3 と同様に規格化条件 (B.45) に虚時間 GP 方程式 (B.48) を代入することにより、

$$\mu^n = \frac{1 - \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n|^2 + 2\Delta \tilde{t} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{D}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n|^2 - 2\Delta \tilde{t} \text{Re} \left[\sum_{\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{S}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^{n*} \right]}{2\Delta \tilde{t} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n|^2}, \quad (\text{B.49})$$

を得る。ここで、表記の簡略化のために以下の変数を導入した：

$$\tilde{D}_{\tilde{\mathbf{G}}} \equiv \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{G}})^2, \quad (\text{B.50})$$

$$\tilde{S}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n \equiv \tilde{U}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n + \tilde{I}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n, \quad (\text{B.51})$$

$$\tilde{U}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n \equiv \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{U}(\tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}') \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'}^n, \quad (\text{B.52})$$

$$\tilde{I}_{\tilde{\mathbf{G}}}^n \equiv \sum_{\Delta\tilde{\mathbf{G}}} \left\{ \left[\sum_{\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{n*} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'}^n \right] \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^n \right\}. \quad (\text{B.53})$$

無次元化した 1 粒子あたりのエネルギーと 1 粒子あたりの全運動量の表式は以下のよう
に与えられる：

$$\begin{aligned} \tilde{E} &\equiv \frac{E}{N\epsilon_0} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} (\tilde{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{G}})^2 |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}|^2 + \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}, \Delta\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{U}(\Delta\tilde{\mathbf{G}}) \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{*} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}, \tilde{\mathbf{G}}', \Delta\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}^{*} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}^{*} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}+\Delta\tilde{\mathbf{G}}}, \end{aligned} \quad (\text{B.54})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{P}} &\equiv \frac{\mathbf{P}}{Nmv_s} \\ &= \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} (\tilde{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{G}}) |\tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}}|^2. \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

実際の数値計算では式 (B.48) と (B.49) を適当な初期値を与え長時間時間発展することにより、定常解を得た。また、和の上限は解析計算では無限大であるが、数値計算では無限大は計算できないので、カットオフの波数 $\tilde{\mathbf{G}}_c \equiv \mathbf{G}_c \xi$ を与え有限和として計算を行った。

B.2.2 Bogoliubov 方程式

Bogoliubov 方程式の数値計算を行うため、次の無次元変数を導入する：

$$\tilde{u}_i(\tilde{\mathbf{r}}) \equiv u_i(\mathbf{r})/\sqrt{n_0}, \quad \tilde{v}_i(\tilde{\mathbf{r}}) \equiv v_i(\mathbf{r})/\sqrt{n_0}, \quad (\text{B.56})$$

$$\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},i} \equiv A_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}, \quad \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},i} \equiv B_{\mathbf{q}+\mathbf{G},i}. \quad (\text{B.57})$$

これより、式 (5.38) と (5.39) は

$$\tilde{u}_i(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{n_0\xi^2}} \frac{1}{\sqrt{\tilde{S}}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},i} e^{+i(\tilde{\mathbf{q}}+\tilde{\mathbf{G}})\cdot\tilde{\mathbf{r}}}, \quad (\text{B.58})$$

$$\tilde{v}_i(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{1}{\sqrt{n_0\xi^2}} \frac{1}{\sqrt{\tilde{S}}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} \tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},i} e^{-i(\tilde{\mathbf{q}}+\tilde{\mathbf{G}})\cdot\tilde{\mathbf{r}}}, \quad (\text{B.59})$$

と書ける。これより、規格化条件 (5.24) は

$$\int d\tilde{\mathbf{r}} [|\tilde{u}_i(\tilde{\mathbf{r}})|^2 - |\tilde{v}_i(\tilde{\mathbf{r}})|^2] = \frac{1}{n_0\xi^2} \equiv \delta^2, \quad (\text{B.60})$$

$$\sum_{\tilde{\mathbf{G}}} [|\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}},i}|^2 - |\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},i}|^2] = 1, \quad (\text{B.61})$$

となる。ここで、 δ は平均粒子間距離と回復長の比で与えられる無次元量であり、これは手で与えるパラメータである。

無次元化された Bogoliubov 方程式は

$$\tilde{\mathcal{D}}_{\tilde{\mathbf{G}}}\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}} + \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}' \neq \tilde{\mathbf{G}}} \tilde{U}(\tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}')\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}'} + 2 \sum_{\tilde{\mathbf{G}}' \neq \tilde{\mathbf{G}}} \tilde{R}_{\tilde{\mathbf{G}}'-\tilde{\mathbf{G}}}\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}'} - \sum_{\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\tilde{\mathbf{G}}'}\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}'} = \tilde{\epsilon}\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}}, \quad (\text{B.62})$$

$$-\tilde{\mathcal{D}}_{\tilde{\mathbf{G}}}\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}} - \frac{1}{\tilde{S}} \sum_{\tilde{\mathbf{G}}' \neq \tilde{\mathbf{G}}} \tilde{U}^*(\tilde{\mathbf{G}} - \tilde{\mathbf{G}}')\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}'} - 2 \sum_{\tilde{\mathbf{G}}' \neq \tilde{\mathbf{G}}} \tilde{R}_{\tilde{\mathbf{G}}'-\tilde{\mathbf{G}}}^*\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}'} + \sum_{\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\tilde{\mathbf{G}}'}^*\tilde{A}_{\tilde{\mathbf{G}}'} = \tilde{\epsilon}\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}}}, \quad (\text{B.63})$$

$$\tilde{\mathcal{D}}_{\tilde{\mathbf{G}}} \equiv \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{G}})^2 - \tilde{\mu} + \frac{\tilde{U}(\mathbf{0})}{\tilde{S}} + 2, \quad (\text{B.64})$$

$$\tilde{R}_{\tilde{\mathbf{G}}'-\tilde{\mathbf{G}}} \equiv \sum_{\tilde{\mathbf{G}}''} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}''+\tilde{\mathbf{G}}'-\tilde{\mathbf{G}}}^* \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}''}, \quad (\text{B.65})$$

$$\tilde{W}_{\tilde{\mathbf{G}},\tilde{\mathbf{G}}'} \equiv \sum_{\tilde{\mathbf{G}}''} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}-\tilde{\mathbf{G}}''+\tilde{\mathbf{G}}'} \tilde{C}_{\tilde{\mathbf{G}}''}. \quad (\text{B.66})$$

となる。

無次元化された quantum depletion は式 (5.57) より、

$$\frac{N_{\text{dep}}}{N} = \frac{\delta^2}{\tilde{S}} \sum_i \sum_{\tilde{\mathbf{G}}} |\tilde{B}_{\tilde{\mathbf{G}},i}|^2, \quad (\text{B.67})$$

と与えられる。

参考文献

- [1] P. Kapitza, *Nature* **141**, 74 (1938).
- [2] L. D. Landau, *J. Phys. (USSR)* **5**, 71 (1941).
- [3] R. P. Feynman, *Prog. Low. Temp. Phys.* **1**, 17 (1955).
- [4] H. Kojima, W. Veith, E. Guyon, and I. Rudnick, *J. Low Temp. Phys.* **8**, 187 (1972).
- [5] J. R. Clow and J. D. Reppy, *Phys. Rev. A* **5**, 424 (1972).
- [6] T. Ellis, C. I. Jewell, and P. V. E. McClintock, *Phys. Lett.* **78A**, 358 (1980).
- [7] O. Avenel and E. Varoquaux, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2704 (1985).
- [8] E. Varoquaux, M. W. Meisel, and O. Avenel, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2291 (1986).
- [9] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science*, **269** (1995).
- [10] 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).
- [11] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [12] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961).
- [13] L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961).
- [14] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. (USSR)* **11**, 23 (1947).
- [15] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, W. Ketterle, *Science*, **292**, 476 (2001).
- [16] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 586 (1997).
- [17] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H. -J. Miesner, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, *Nature* **396**, 345 (1998).
- [18] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 160401 (2005).

- [19] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn, and B. L. Lev, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 190401 (2011).
- [20] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, and F. Ferlaino, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 210401 (2012).
- [21] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature*, **415**, 39 (2002).
- [22] H. Feshbach, *Ann. Phys.* **19**, 287 (1962).
- [23] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 040403 (2004).
- [24] Y. -J. Lin, R. L. Compton, K. Jiménez-García, J. V. Porto, and I. B. Spielman, *Nature* **462**, 628 (2009).
- [25] A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, *Sov. Phys. JETP* **29**, 1107 (1969).
- [26] G. V. Chester, *Phys. Rev. A* **2**, 256 (1970).
- [27] A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1543 (1970).
- [28] E. Kim and M. H. W. Chan, *Nature (London)* **427**, 225 (2004).
- [29] E. Kim and M. H. W. Chan, *Science* **305**, 1941 (2004).
- [30] K. Góral, L. Santos, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 170406 (2002).
- [31] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2502 (1999).
- [32] R. Onofrio, C. Raman, J. M. Vogels, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2228 (2000).
- [33] T. Frisch, Y. Pomeau, and S. Rica, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1644 (1992).
- [34] V. Hakim, *Phys. Rev. E*, **55**, 2835 (1997).
- [35] K. C. Wright, R. B. Blakestad, C. J. Lobb, W. D. Phillips, and G. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 025302 (2013).
- [36] K. C. Wright, R. B. Blakestad, C. J. Lobb, W. D. Phillips, and G. K. Campbell, *Phys. Rev. A* **88**, 063633 (2013).
- [37] Y. Pomeau and S. Rica, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2426 (1994).
- [38] 上田正仁, 現代量子物理学 – 基礎と応用 – (培風館, 東京, 2004).
- [39] A. J. Leggett, *Quantum Liquids* (Oxford University Press, Oxford, 2006).
- [40] A. J. Leggett, *Phys. Fenn.* **8**, 125 (1973).
- [41] A. J. Leggett, in *Low Temperature Physics Proceedings*, Lecture notes in Physics, **394**, M. J. R. Hoch and R. H. Lemmer (eds.) (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [42] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- [43] A. Einstein, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, **I**, 3 (1925).

-
- [44] 田崎晴明, 統計力学 II (培風館, 東京, 2008).
- [45] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [46] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).
- [47] E. H. Lieb and R. Seiringer, Phys. Rev. Lett. **88**, 170409 (2002).
- [48] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
- [49] J. Sato, E. Kaminishi, and T. Deguchi, arXiv:1303.2775 (2013).
- [50] I. Bloch, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, Nature, **403**, 166 (2000).
- [51] F. London, Nature, **141**, 643 (1938).
- [52] V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP. **32**, 610 (1972).
- [53] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
- [54] D. J. Bishop and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **40**, 1727 (1978).
- [55] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, Nature, **441**, 1118 (2006).
- [56] R. Desbuquois, L. Chomaz, T. Yefsah, J. Léonard, J. Beugnon, C. Weitenberg, and J. Dalibard, Nature Phys. **8**, 645 (2012).
- [57] J. Choi, S. W. Seo, Y. Shin, Phys. Rev. Lett. **110**, 175302 (2013).
- [58] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, Phys. Rev. B **66**, 134529 (2002).
- [59] A. J. Leggett, J. Stat. Phys. **93**, 927 (1998).
- [60] G. B. Hess and W. M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. **19**, 216 (1967).
- [61] M. E. Fisher, M. N. Barber, and D. Jasnow, Phys. Rev. A, **8**, 1111 (1973).
- [62] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A171 (1964).
- [63] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [64] G. Baym, in *Mathematical Methods in Solid State and Superfluid Theory*, edited by R. C. Clark and G. H. Derrick (Oliver and Boyd, Edinburgh, 1969), p121.
- [65] D. Forster, *Hydrodynamics Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* (Benjamin, Reading, MA, 1975).
- [66] M. Ueda, *Fundamentals and New Frontiers of Bose-Einstein Condensation*, (World Scientific Co. Pte. Ltd., 2010).
- [67] 戸田盛和他, 現代物理学の基礎 5, 統計物理学 (岩波書店, 東京, 1978).
- [68] C. Ryu, M. F. Anderson, P. Cladé, V. Natarajan, K. Helmerson, and W. D. Phillips, Phys. Rev. Lett. **99**, 260401 (2007).
- [69] A. Ramanathan, K. C. Wright, S. R. Muniz, M. Zelan, W. T. Hill III, C. J. Lobb, K. Helmerson, W. D. Phillips, and G. K. Cambell, Phys. Rev. Lett. **106**, 130401 (2011).

- [70] S. Moulder, S. Beattie, R. P. Smith, N. Tammuz, and Z. Hadzibabic, *Phys. Rev. A*, **86**, 013629 (2012).
- [71] S. Beattie, S. Moulder, R. J. Fletcher, and Z. Hadzibabic, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 025301 (2013).
- [72] L. Onsager, *Nuovo Cimento* **6**, Suppl. 2, 249 (1949).
- [73] P. Nozières and D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids* Vol. II. (Addison-Wesley, Reading, MA, 1990).
- [74] G. E. Astrakharchik and L. P. Pitaevskii, *Phys. Rev. A*, **70**, 013608 (2004).
- [75] A. Y. Cherny, J.-S. Caux, and J. Brand, *Front. Phys.* **7**, 54 (2012).
- [76] G. W. Rayfield and F. Reif, *Phys. Rev.* **136**, A1194 (1964).
- [77] S. Inouye, S. Gupta, T. Rosenband, A. P. Chikkatur, A. Görlitz, T. L. Gustavson, A. E. Leanhardt, D.E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 080402 (2001).
- [78] T. W. Neely, E. C. Samson, A. S. Bradley, M. J. Davis, and B. P. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 160401 (2010).
- [79] 山田一雄, 大見哲巨, 超流動 (培風館, 東京, 1995).
- [80] J. S. Langer and M. E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 560 (1967).
- [81] P. W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 298 (1966).
- [82] O. Avenel and E. Varoquaux, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 416 (1988).
- [83] A. Amar, Y. Sasaki, R. L. Lozes, J. C. Davis, and R. E. Packard, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2624 (1992).
- [84] P. Nozieres and D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids* (Perseus, Cambridge, MA, 1999).
- [85] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [86] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
- [87] 坪田誠, 西森拓, 量子渦のダイナミクス/砂丘と風紋の動力学 (培風館, 東京, 2008).
- [88] A. L. Fetter, *Ann. Phys.* **70**, 67 (1972).
- [89] A. Griffin, *Phys. Rev. B*, **53**, 9341 (1996).
- [90] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [91] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307 (2001); *ibid*, **75**, 1083 (2003).
- [92] C. F. Barenghi, R. J. Donnelly and W. F. Vinen(Eds.), *Quantized Vortex dynamics and Superfluid Turbulence*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 2001).

-
- [93] M. Tsubota, M. Kobayashi, and H. Takeuchi, *Phys. Rep.* **522**, 191 (2013).
- [94] L. D. Faddeev and L. A. Takhtajan, *Hamiltonian Methods in the Theory of Solitons* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1987).
- [95] Y. Kawaguchi and M. Ueda, *Phys. Rep.* **520**, 253 (2012).
- [96] 和達三樹, 非線形波動 (岩波書店, 東京, 1992).
- [97] R. Kanamoto, L. D. Carr, and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **79**, 063616 (2009).
- [98] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, and K. Sengstock, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5198 (2000).
- [99] J. Denschlag, J. E. Simsarian, D. L. Feder, C. W. Clark, L. A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E. W. Hagley, K. Helmerson, W. P. Reinhardt, S. L. Rolston, B. I. Schneider, and W. D. Phillips, *Science*, **287**, 97 (2000).
- [100] Z. Dutton, M. Budde, C. Slowe, and L. V. Hau, *Science*, **293**, 663 (2001).
- [101] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. A. Regal, D. L. Feder, L. A. Collins, C. W. Clark, and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2926 (2001).
- [102] P. Engels and C. Atherton, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 160405 (2007).
- [103] V. E. Zakharov and A. M. Rubenchik, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65**, 997 (1973) [*Sov. Phys. JETP*, **38**, 494 (1974)].
- [104] C. Josserand and Y. Pomeau, *Europhys. Lett.* **30**, 43 (1995).
- [105] J. Brand and W. P. Reinhardt, *Phys. Rev. A*, **65**, 043612 (2002).
- [106] 巽友正, 流体力学 (培風館, 東京, 1982).
- [107] V. L. Ginzburg and L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **34**, 1240 (1958) [*Sov. Phys. JETP* **7**, 858 (1958)].
- [108] H. Pu, C. K. Law, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. A*, **59**, 1533 (1999).
- [109] T. D. Lee and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **105**, 1119 (1957).
- [110] T. D. Lee, K. Huang, and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **106**, 1135 (1957).
- [111] M. C. Cross and P. C. Hohenberg, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851 (1993).
- [112] J. Gavoret and P. Nozières, *Ann. Phys. (N. Y.)* **28**, 349 (1964).
- [113] P. Szépfalusy and I. Kondor, *Ann. Phys. (N. Y.)* **82**, 1 (1974).
- [114] T. Kita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084606 (2011).
- [115] K. Tsutsui and T. Kita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 033001 (2014).
- [116] D. G. Henshaw and A. D. B. Woods, *Phys. Rev.* **121**, 1266 (1961).
- [117] M. R. Andrews, D. M. Kurn, H. -J. Miesner, D. S. Durfee, C. G. Townsend, S. Inouye, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 533 (1997).
- [118] J. Steinhauer, R. Ozeri, N. Katz, and N. Davidson, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 120407

- (2002).
- [119] B. Wu and Q. Niu, *Phys. Rev. A* **64**, 061603(R) (2001).
- [120] A. Smerzi, A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis, and A. R. Bishop, **89**, 170402 (2002).
- [121] B. Wu and Q. Niu, *New. J. Phys.* **5**, 104 (2003).
- [122] M. Krämer, C. Menotti, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Eur. Phys. J. D* **27**, 247 (2003).
- [123] L. De Sarlo, L. Fallani, J. E. Lye, M. Modugno, R. Stars, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. A* **72**, 013603 (2005).
- [124] K. Iigaya, S. Konabe, I. Danshita, and T. Nikuni, *Phys. Rev. A* **72**, 053611 (2006).
- [125] L. P. Pitaevskii, *JETP Lett.* **39**, 511 (1984).
- [126] F. Ancilotto, F. Dalfovo, L. P. Pitaevskii, and F. Toigo, *Phys. Rev. B* **71**, 104530 (2005).
- [127] M. Kunimi, Y. Nagai, and Y. Kato, *Phys. Rev. B* **84**, 094521 (2011).
- [128] G. Baym and C. J. Pethick, *Phys. Rev. A* **86**, 023602 (2012).
- [129] M. Kunimi and Y. Kato, *Phys. Rev. B* **86**, 060510(R) (2012).
- [130] R. Kanamoto, H. Saito, and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **67**, 013608 (2003).
- [131] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 985 (1997).
- [132] P. Ao and S. T. Chui, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 535 (2000).
- [133] L. Santos, G. V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 250403 (2003).
- [134] E. Altman, A. Polkovnikov, E. Demler, B. I. Halperin, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 020402 (2005).
- [135] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967).
- [136] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [137] H. Matsuda and T. Tsuneto, *Suppl. Prog. Theo. Phys.* **46**, 411 (1970).
- [138] 中嶋貞雄他, 現代物理学の基礎 8, 物性 II (岩波書店, 東京, 1972).
- [139] J. Day and J. Beamish, *Nature*, **450**, 853 (2007).
- [140] J. Day, O. Syshchenko, and J. D. Beamish, *Phys. Rev. B* **79**, 214524 (2009).
- [141] D. Y. Kim and M. H. W. Chan, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 155301 (2012).
- [142] K. -K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe'er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julianne, D. S. Jin, and J. Ye, *Science* **322**, 231 (2008).
- [143] J. Deiglmayr, A. Grochola, M. Repp, K. Mörtbauer, C. Glück, J. Lange, O.

-
- Dulieu, R. Wester, and M. Weidemüller, Phys. Rev. Lett. **101**, 133004 (2008).
- [144] K. Aikawa, D. Akamatsu, M. Hayashi, K. Oasa, J. Kobayashi, P. Naidon, T. Kishimoto, M. Ueda, and S. Inouye, Phys. Rev. Lett. **105**, 203001 (2010).
- [145] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau, Rep. Prog. Phys. **72**, 126401 (2009).
- [146] B. Capogrosso-Sansone, C. Trefzger, M. Lewenstein, P. Zoller, and G. Pupillo, Phys. Rev. Lett. **104**, 125301 (2010).
- [147] L. Pollet, J. D. Picon, H. P. Büchler, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **104**, 125302 (2010).
- [148] T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima, Phys. Rev. A **86**, 963635 (2012).
- [149] N. Henkel, R. Nath, and T. Pohl, Phys. Rev. Lett. **104**, 195302 (2010).
- [150] J. Honer, H. Weimer, T. Pfau, and H. P. Büchler, Phys. Rev. Lett. **105**, 160404 (2010).
- [151] G. Pupillo, A. Micheli, M. Boninsegni, I. Lesanovsky, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **104**, 223002 (2010).
- [152] F. Cinti, P. Jain, M. Boninsegni, A. Micheli, P. Zoller, and G. Pupillo, Phys. Rev. Lett. **105**, 135301 (2010).
- [153] N. Henkel, F. Cinti, P. Jain, G. Pupillo, and T. Pohl, Phys. Rev. Lett. **108**, 265301 (2012).
- [154] C. Josserand, Y. Pomeau, and S. Rica, Phys. Rev. Lett. **98**, 195301 (2007).
- [155] C. Josserand, Y. Pomeau, and S. Rica, Eur. Phys. J. Special Topics **146**, 47 (2007).
- [156] A. Aftalion, X. Blanc, and R. L. Jerrard, Phys. Rev. Lett. **99**, 135301 (2007).
- [157] N. Sepúlveda, C. Josserand, S. Rica, Phys. Rev. B **77**, 054513 (2008).
- [158] S. Rica, International J. Bifurcation and Chaos, **19**, 2783 (2009).
- [159] N. Sepúlveda, C. Josserand, and S. Rica, Eur. Phys. J. B **78**, 439 (2010).
- [160] S. Saccani, S. Moroni, and M. Boninsegni, Phys. Rev. B **83**, 092506 (2011).
- [161] S. Saccani, S. Moroni, and M. Boninsegni, Phys. Rev. Lett. **108**, 175301 (2012).
- [162] M. Rossi, S. L. Zavattari, D. E. Galli, and L. Reatto, Phys. Rev. B **84**, 052204 (2011).
- [163] M. Boninsegni, J. Low. Temp. Phys. **168**, 137 (2012).
- [164] I. Danshita and D. Yamamoto, Phys. Rev. A, **82**, 013645 (2010).
- [165] Y. Pomeau and S. Rica, Phys. Rev. Lett. **71**, 247 (1993).
- [166] H. Watanabe and T. Brauner, Phys. rev. D **85**, 085010 (2012).
- [167] T. Macrì, F. Maucher, F. Cinti, and T. Pohl, Phys. Rev. A **87**, 061602(R)

- (2013).
- [168] F. Ancilotto, M. Rossi, and F. Toigo, *Phys. Rev. A* **88**, 033618 (2013).
- [169] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Brooks/Cole Cengage Learning, 1976).
- [170] 高橋大介, 東京大学, 博士学位論文 (2012).
- [171] 清水明, 熱力学の基礎 (東京大学出版, 東京, 2007).
- [172] 久保亮五編, 大学演習 熱学・統計力学 (修正版) (裳華房, 東京, 1998).
- [173] 穴釜剛, 東京大学, 修士学位論文 (2012).
- [174] B. D. Josephson, *Phys. Lett.* **1**, 251 (1962).
- [175] S. Gupta, K. W. Murch, K. L. Moore, T. P. Purdy, and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 143201 (2005).
- [176] C. Ryu, P. W. Blackburn, A. A. Blinova, and M. G. Boshier, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 205301 (2013).
- [177] C. Huepe and M-E. Brachet, *Physica D*, **140**, 126 (2000).
- [178] C. T. Pham and M. Brachet, *Physica D*, **163**, 127 (2002).
- [179] D. L. Kovrizhin, *Phys. Lett. A* **287**, 392 (2001).
- [180] Y. Kagan, D. L. Kovrizhin, and L. A. Maksimov, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 130402 (2003).
- [181] I. Danshita, N. Yokoshi, and S. Kurihara, *New J. Phys.* **8**, 44 (2006).
- [182] D. Takahashi and Y. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 023001 (2009).
- [183] 高橋大介, 東京大学, 修士論文 (2009).
- [184] Y. Kato and S. Watabe, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 035302 (2010).
- [185] S. Watabe and Y. Kato, *Phys. Rev. A*, **88**, 063612 (2013).
- [186] M. Kunimi and Y. Kato, *J. Low Temp. Phys.* **175**, 201 (2014).
- [187] K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M Ueda, *Phys. Rev. A*, **67**, 033610 (2003).
- [188] B. Wu and Q. Niu, *Phys. Rev. A* **61**, 023402 (2000).
- [189] D. Diakonov, L. M. Jensen, C. Pethick, and H. Smith, *Phys. Rev. A* **66**, 013604 (2002).
- [190] E. J. Mueller, *Phys. Rev. A* **66**, 063603 (2002).
- [191] M. Machholm, C. J. Pethick, and H. Smith, *Phys. Rev. A* **67**, 053613 (2003).
- [192] B. T. Seaman, L. D. Carr, and M. J. Holland, *Phys. Rev. A* **71**, 033622 (2005).
- [193] I. Danshita and S. Tsuchiya, *Phys. Rev. A*, **75**, 033612 (2007).
- [194] J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, (Springer-Verlag, New York, 1983).
- [195] K. Fujimoto and M. Tsubota, *Phys. Rev. A*, **83**, 053609 (2011).

-
- [196] T. Winiecki and C. S. Adams, *Europhys. Lett.* **52**, 257 (2000).
- [197] A. Aftalion, Q. Du, and Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 090497 (2003).
- [198] K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 150404 (2010).
- [199] T. Aioi, T. Kadokura, T. Kishimoto, and H. Saito, *Phys. Rev. X*, **1**, 021003 (2011).
- [200] J. Liu, B. Wu, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 170404 (2003).
- [201] A. Baratoff, J. A. Blackburn, and B. B. Schwartz, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1096 (1970).
- [202] N. Pavloff, *Phys. Rev. A*, **66**, 013610 (2002).
- [203] F. Piazza, L. A. Collins, and A. Smerzi, *Phys. Rev. A*, **81**, 033613 (2010).
- [204] M. Cominotti, D. Rossini, M. Rizzi, F. Hekking, and A. Minguzzi, arXiv:1310.0382 (2013).
- [205] M. Ueda and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1576 (1998).
- [206] C. Huepe, L. S. Tuckerman, S. Mérens, and M. E. Brachet, *Phys. Rev. A* **68**, 023609 (2003).
- [207] Y. Castin and R. Dum, *Phys. Rev. A* **57**, 3008 (1998).
- [208] A. G. Sykes, M. J. Davis, and D. C. Roberts, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 085302 (2009).
- [209] N. T. Phuc, Y. Kawaguchi, and M. Ueda, *Phys. Rev. A* **84**, 043645 (2011).
- [210] 猪木慶治, 川合光, 量子力学 I (講談社, 東京 1994).
- [211] E. Arahata and T. Nikuni, *Phys. Rev. A* **79**, 063606 (2009).
- [212] 荒畑恵美子, 東京理科大学, 博士学位論文 (2010).
- [213] H. Saito, Y. Kawaguchi, and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 230403 (2009).

List of Publications

- M. Kunimi, Y. Nagai and Y. Kato, “Josephson effects in one-dimensional supersolids”, *Phys. Rev. B*, **84**, 094521 (2011).
- M. Kunimi, M. Kobayashi, and Y. Kato, “Dynamics of one-dimensional supersolids”, *J. Phys.: Conf. Ser.* **400**, 012037 (2012).
- M. Kunimi and Y. Kato, “Mean-field and stability analysis of two-dimensional flowing soft-core bosons modeling a supersolid”, *Phys. Rev. B*, **86**, 060510(R) (2012).
- M. Kunimi and Y. Kato, “Precursor Phenomena of Nucleations of Quantized Vortices in the Presence of a Uniformly Moving Obstacle in Bose-Einstein Condensates”, *J. Low Temp. Phys.* **175**, 201 (2014).