ランダムポテンシャル中の強相関ボース流体におけるボース凝縮の局在と超流動の消失

大阪市立大学理学部物理学科
素励起物理学研究室

小林未知数・坪田誠

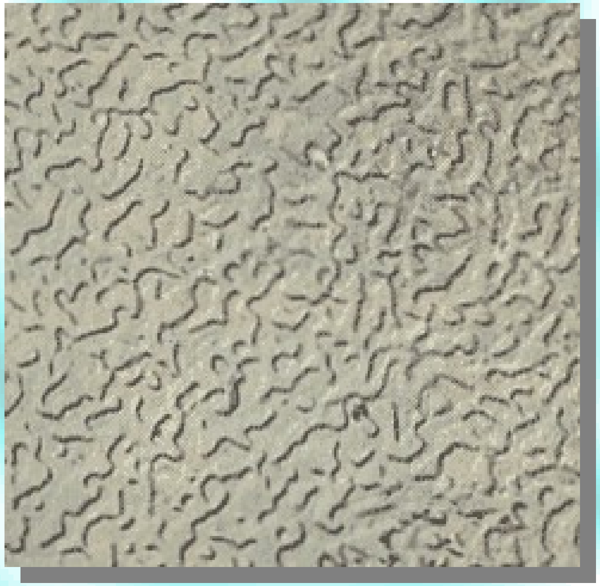
2005年度日本物理学会年次大会（2005／3／27）

1. 研究内容
2. モデル
3. 計算方法
4. 計算結果
5. まとめ

研究内容

高圧下における多孔質ガラス中の液体^{4}Heの超流動の振る舞いを調べる

多孔質ガラス

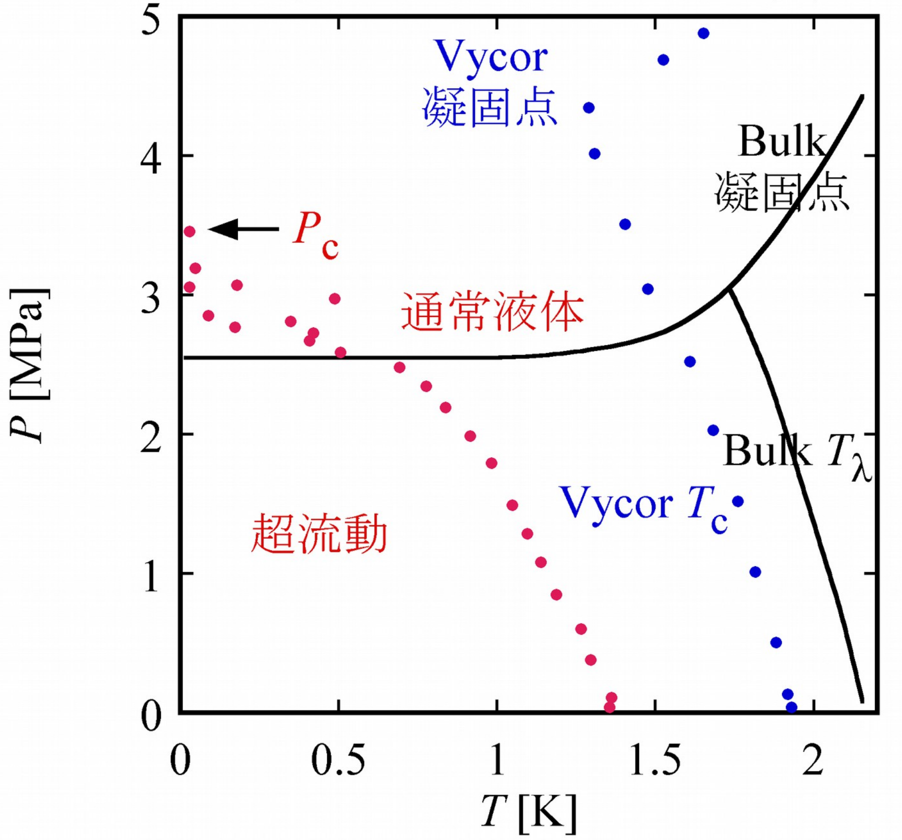


	孔径 (Å)	空間充填率 (%)	表面積 (m^2/cm^3)
Geltech silica	~30	~40	~130
Vycor	~70	~50	~150
Aerogel	~100	~90	~250

高圧下での実験

Yamamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93** 075302 (2004)

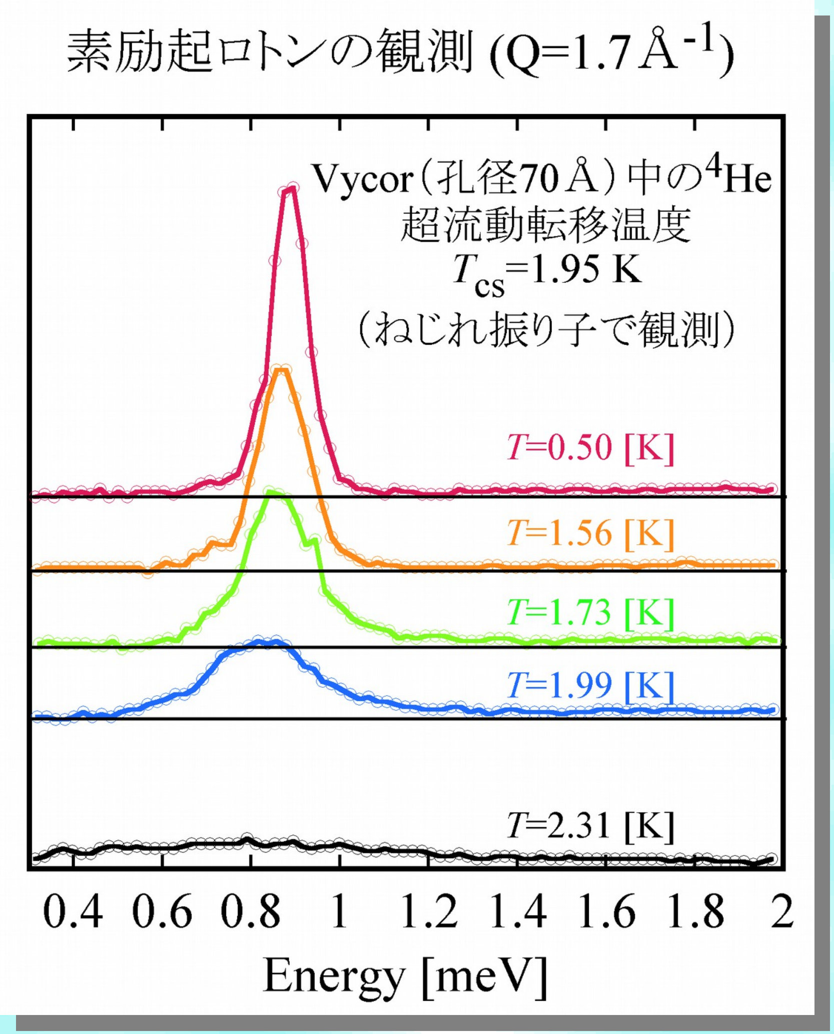
Geltech Silica（孔径25Å）、Vycor（孔径70Å）に^{4}Heを注入したときの相図



- 孔径の小さいGeltech Silica中では、絶対零度においても高圧下($P > 3.5$ MPa)で液体状態のまま超流動が消失する(強相関効果による量子相転移？)。
- 孔径の大きいVycorでは固化が先に起こってしまう。

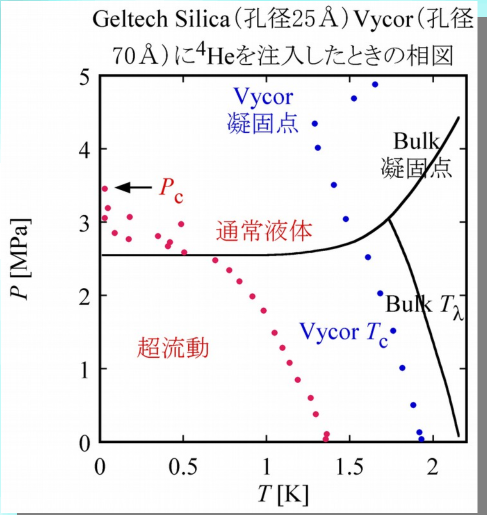
常圧下での中性子散乱実験

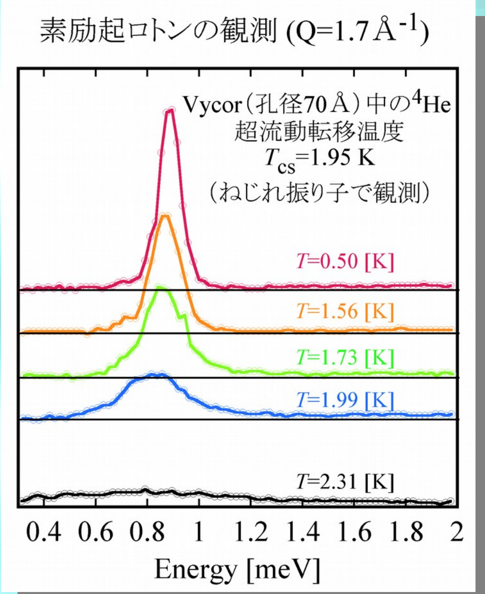
Plantevin *et al.*, Phys. Rev. B **63** 224508 (2001)



超流動転移温度以上においてボース凝縮の存在を示唆するロトンシグナルが見えている。

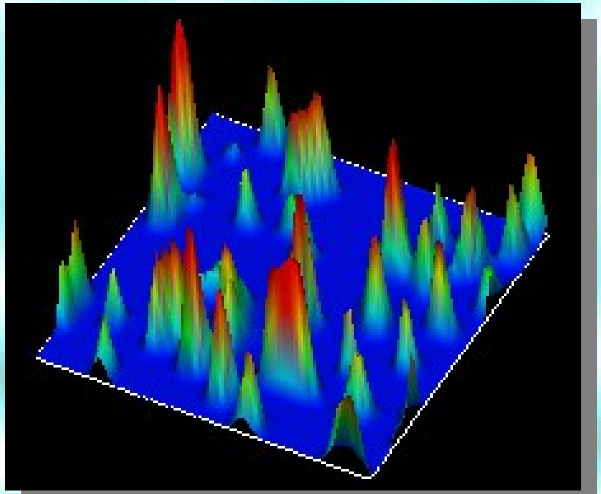
ボース凝縮の局在？

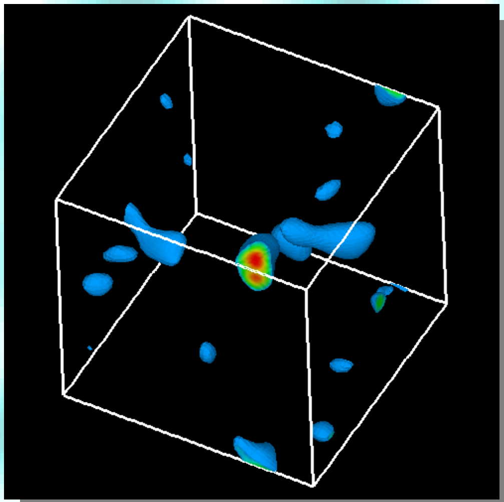




ボース凝縮が超流動に寄与しない

→ボース凝縮が空間的に局在し、マクロスコピックに広がっていないことが考えられる（ボースグラス）。





本研究の目的

1. 多孔質ガラスに閉じこめられた液体^4**He**のボース凝縮をランダムポテンシャル中のボース流体のモデルを用いて議論する。

2. ボース凝縮が絶対零度かつ高圧下（強相関領域）において空間的に局在するかどうか、今回我々が新しく開発した計算法（局在スケール変分法？）を用いて調べる（超流動性の消失を含めて）。

3. 得られた結果を（慶応大学グループの）実験と定量的に比較する。 Yamamoto *et al*., Phys. Rev. Lett. **93** 075302 (2004)

モデル

ランダムポテンシャル中の3次元ボース流体

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \hat{K}$$

$$= \int \mathrm{d}^3x\, \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 - \mu\right]\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \text{ : 無摂動 } \hat{K}_0$$

$$+ \frac{1}{2}\iint \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\, \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')g_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \text{ : 粒子間斥力 } \hat{K}_\mathrm{I}$$

$$+ \int \mathrm{d}^3x\, \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})U(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \text{ : ランダムネス } \hat{K}_\mathrm{R}$$

$\hat{\Psi}$	:	ボース場の演算子
μ	:	化学ポテンシャル
g_0	:	斥力相互作用
U	:	ランダムポテンシャル

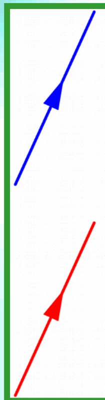
摂動計算

フーリエ変換

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) = \sqrt{\frac{N_0}{V}} + \frac{1}{\sqrt{V}} {\sum_{\boldsymbol{k}}}' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{a}(\boldsymbol{k})$$

$$U(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} U(\boldsymbol{k})$$

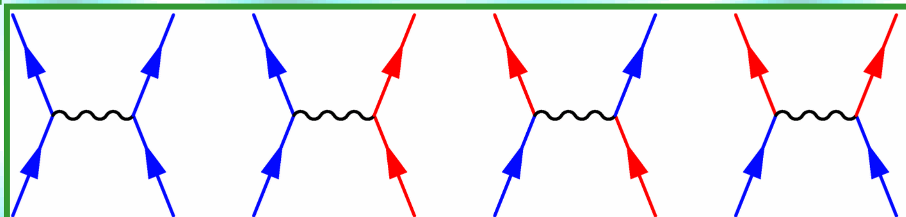
$$g_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} g_0(\boldsymbol{k})$$



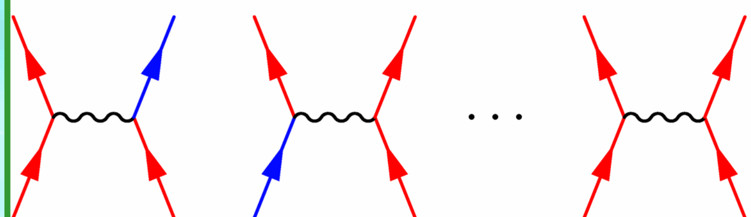
：凝縮体

：非凝縮体

斥力相互作用

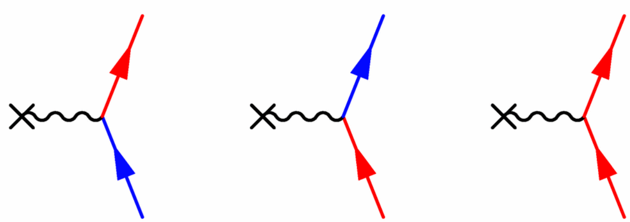


:Bogoliubov 近似



:Ring 近似（電子系の RPA）

ランダムポテンシャル



:二次の摂動論

超流動の計算

二流体モデル

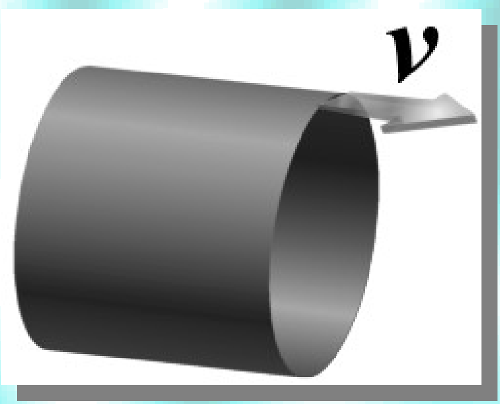
$$N = N_{\mathrm{n}} + N_{\mathrm{s}}$$

N_{n} : 常流体

N_{s} : 超流体

線形応答理論を用いて計算する

P.C.Hohenberg and P.C.Martin,Ann.Phys(NY) **34**,291(1965)



管を引っ張ることによって作られる速度場は粘性を持つ常流体が原因である。

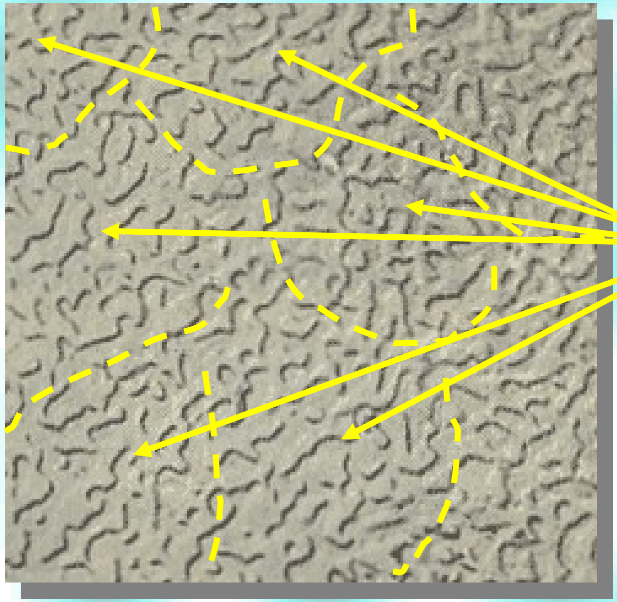
$$< \hat{j}_i(\boldsymbol{x},t) > = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \ < [\hat{H}_{\mathrm{ex}}(t'), \hat{j}_i(\boldsymbol{x},t)] >$$

$$= \frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int d\boldsymbol{x}' \ D^R_{ij}(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}',t')\, v_j(\boldsymbol{x}',t')$$

$$D_{ij}(\boldsymbol{k}) \equiv \lim_{k_0\to 0} D_{ij}(k) = \frac{k_i k_j}{k^2}A(\boldsymbol{k}) + \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right)B(\boldsymbol{k})$$

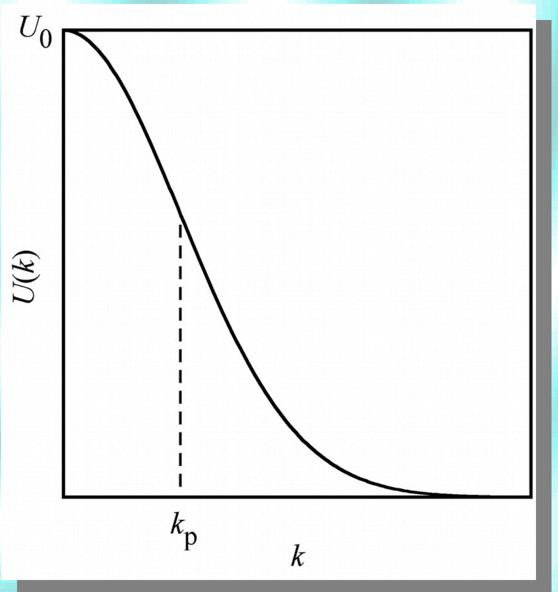
$$N_{\mathrm{n}} = \frac{V}{\hbar m}\lim_{\boldsymbol{k}\to 0} B(\boldsymbol{k})$$

ランダムポテンシャルの計算



ランダムポテンシャルに関してアンサンブル平均をとる：観測されるマクロな物理量はそれぞれのサブシステムを平均したものになると仮定する

$$< U(\boldsymbol{k}) >_{\mathrm{av}} = U_0 \exp\left[-\frac{k^2}{2k_{\mathrm{p}}^2} \right]$$



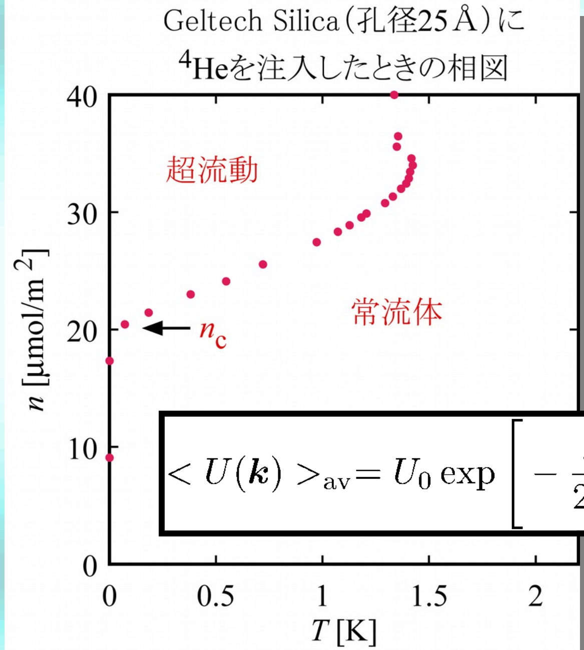
$U(\boldsymbol{k})$: $U(\boldsymbol{x})$ のフーリエ変換

$r_{\mathrm{p}} = 2\pi / k_{\mathrm{p}}$: 孔径

U_0 : ランダムポテンシャルの平均強度

パラメーターの決定

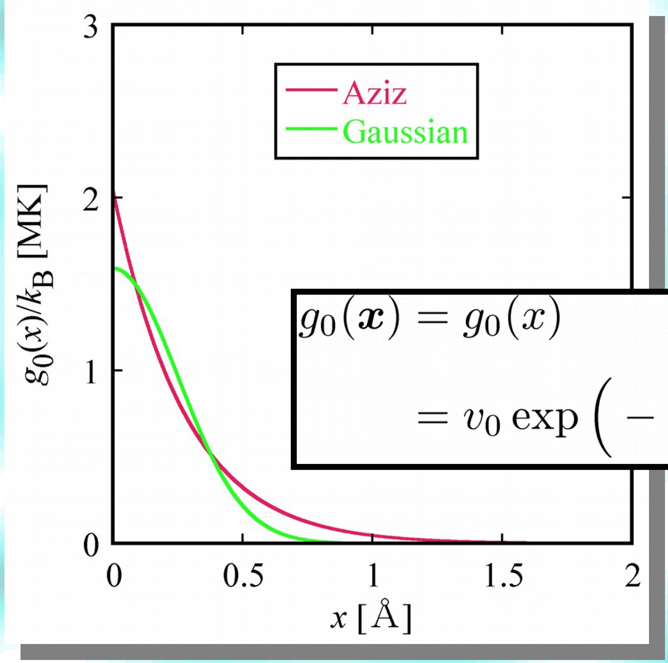
Yamamoto *et al*., Phys. Rev. Lett. **93** 075302 (2004)



$$< U(\boldsymbol{k}) >_{av} = U_0 \exp\left[-\frac{k^2}{2k_p^2}\right]$$

$$U_0 = 1.425 \times 10^{-9} [\mathrm{K}]$$

R. A. Aziz *et al*., Phys. Rev. Lett **74** 1586 (1995)



$$g_0(\boldsymbol{x}) = g_0(x) = v_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$v_0 = 1.51913 \times 10^6 \ [\mathrm{K}]$$

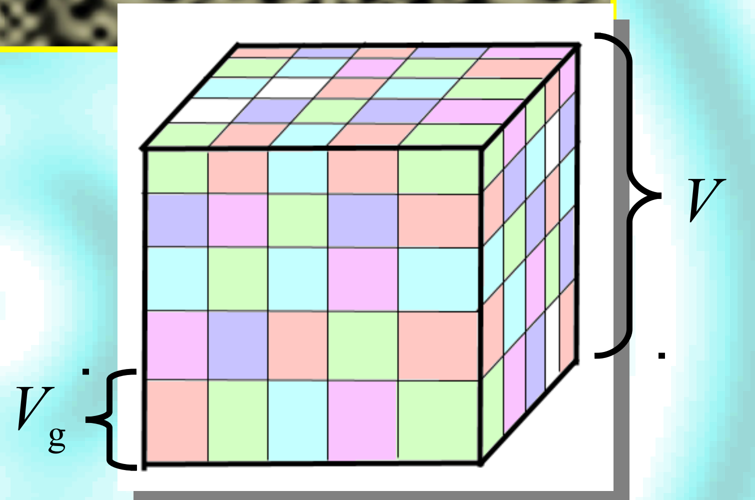
$$\sigma = 0.25149 \ [\text{Å}]$$

すべてのパラメーターが決められ、フリーパラメーターはなくなった！

局在ボース凝縮の計算方法

ボース凝縮の空間的な局在を議論する新しい方法の開発

系を体積 V_g の部分系に分ける
(各部分系に系が局在すると仮定)



部分系の個数 $= V/V_g$

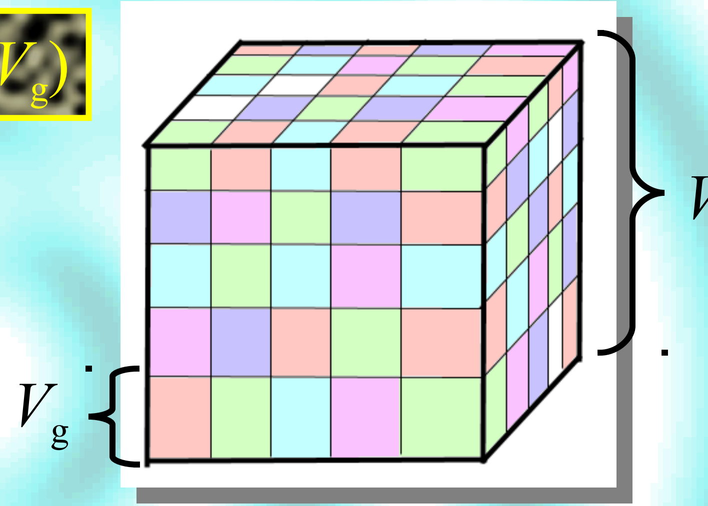
1部分系のエネルギー $e(V_g)$ を計算し、全部分系のエネルギー
$E(V_g) = e(V_g)\ V/\ V_g$ を最小にするV_gを求める

局在ボース凝縮の計算2

計算の本質

1部分系のエネルギー $e(V_{\mathrm{g}})$

$e(V_{\mathrm{g}}) / V_{\mathrm{g}}$: 理想気体や弱相関気体では V_{g} に依存しないが、強相関領域では依存するようになり、その最小値を求める。



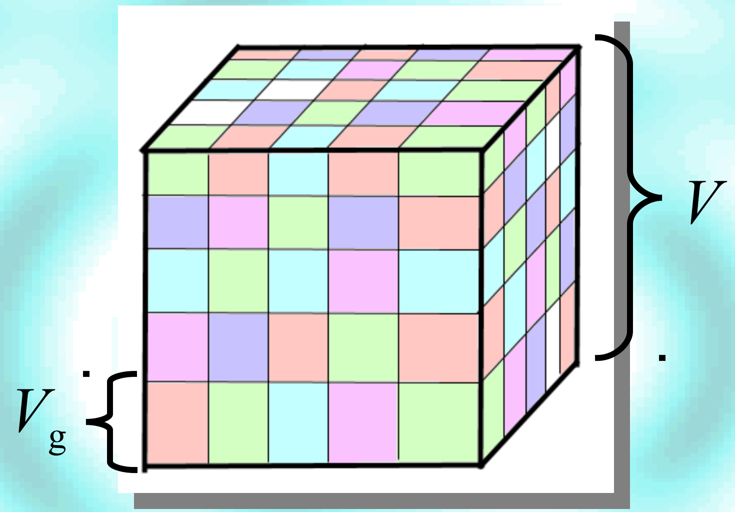
$\xi = (V_{\mathrm{g}})^{1/3}$:局在ボース凝縮体のコヒーレンス長

V_{g} の減少 ⇒

- •揺らぎの増加による $e(V_{\mathrm{g}}) / V_{\mathrm{g}}$ の増加
- •ランダムポテンシャルの局在効果による $e(V_{\mathrm{g}}) / V_{\mathrm{g}}$ の減少

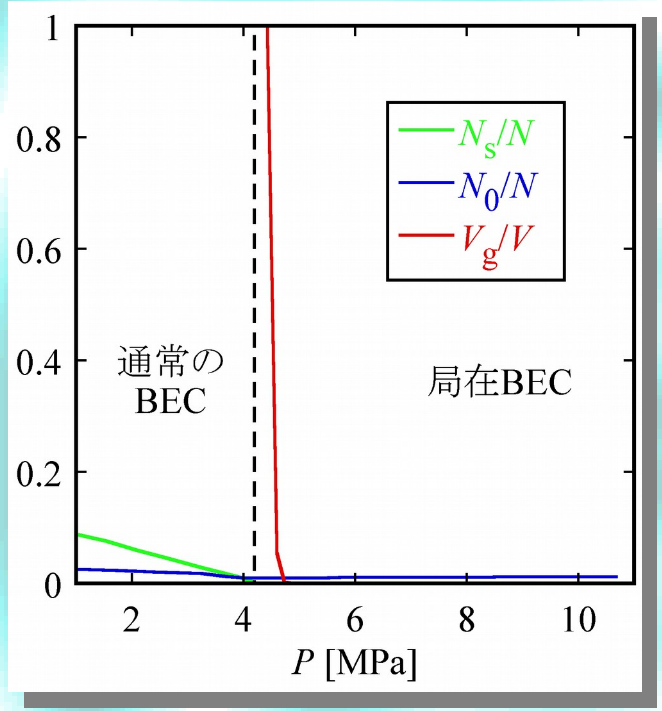
揺らぎとランダムポテンシャルの競合により V_{g} が決まる

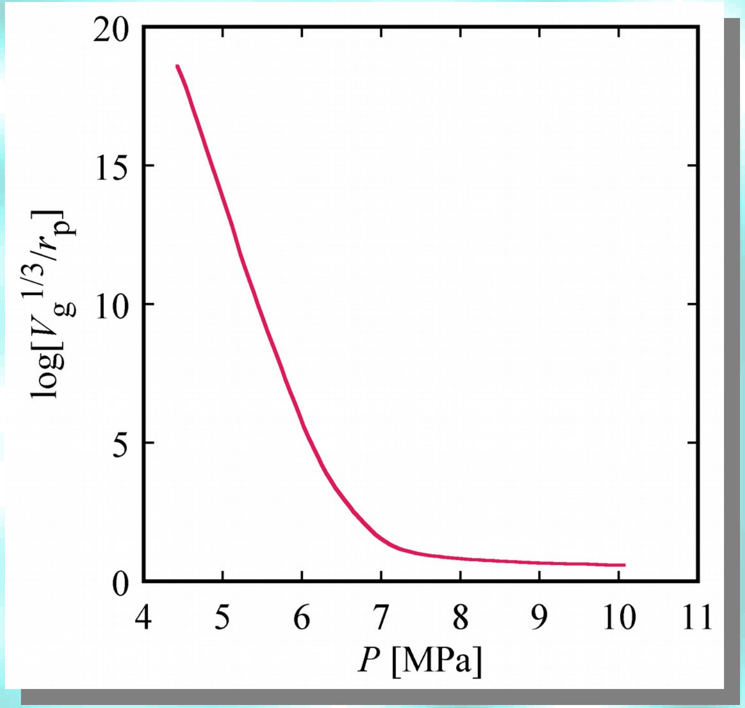
局在ボース凝縮の計算方法3



- $V_g \gg r_p (V_g \sim V)$: ボース凝縮は広がっている。(物理量は $V_g = V$ つまり通常の計算方法を用いて計算する)
- $V_g \sim r_p (V_g \ll V)$: 局在したボース凝縮が安定。

計算結果

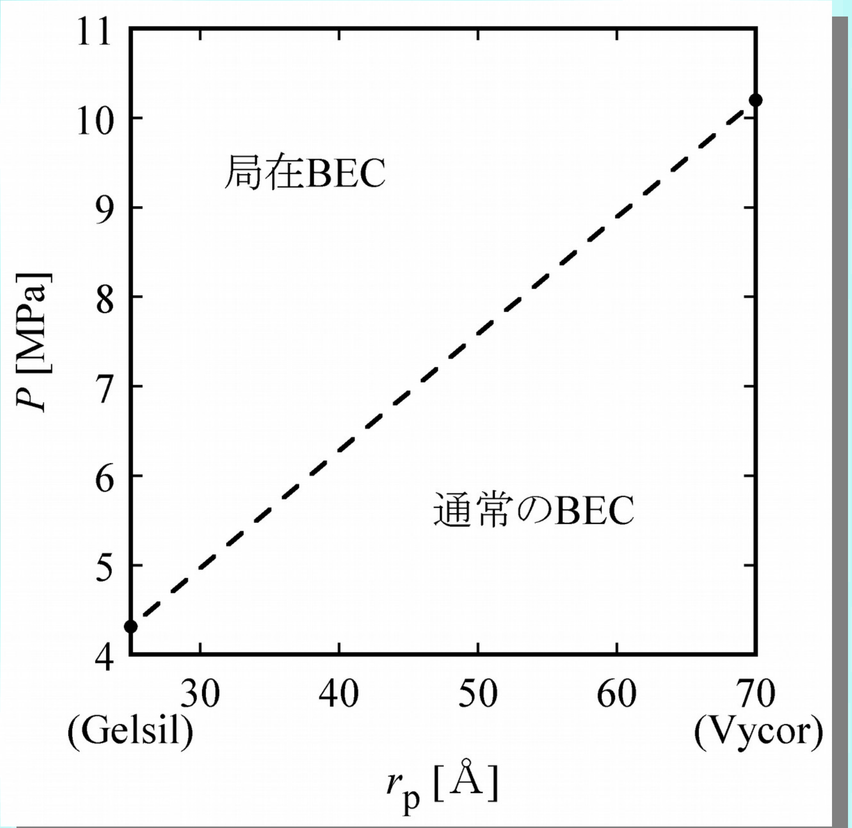


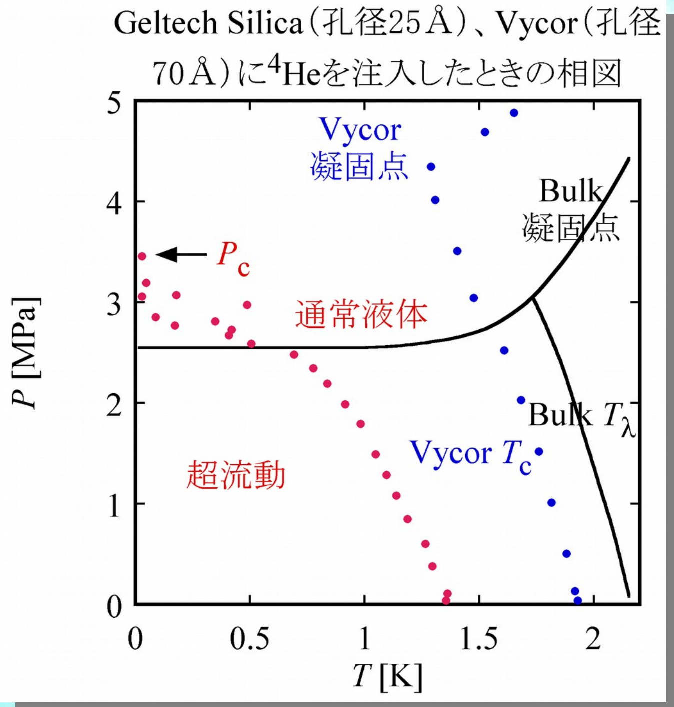


•高圧下において、超流動の消失とボース凝縮の局在はほぼ同時に起こり局在スケールは多孔質ガラスの孔径に落ち着く。

•超流動消失(ボース凝縮局在)の転移圧力 ~4.3 [MPa] は実験の値 ~3.5 [MPa]よりやや大きい(オーダーは同じ)。

Vycorとの比較





孔径のより大きなVycorガラスでは転移圧力が高くなる ~ 10 [MPa]：局在が起こる前に^{4}Heの固化が起こるのか？

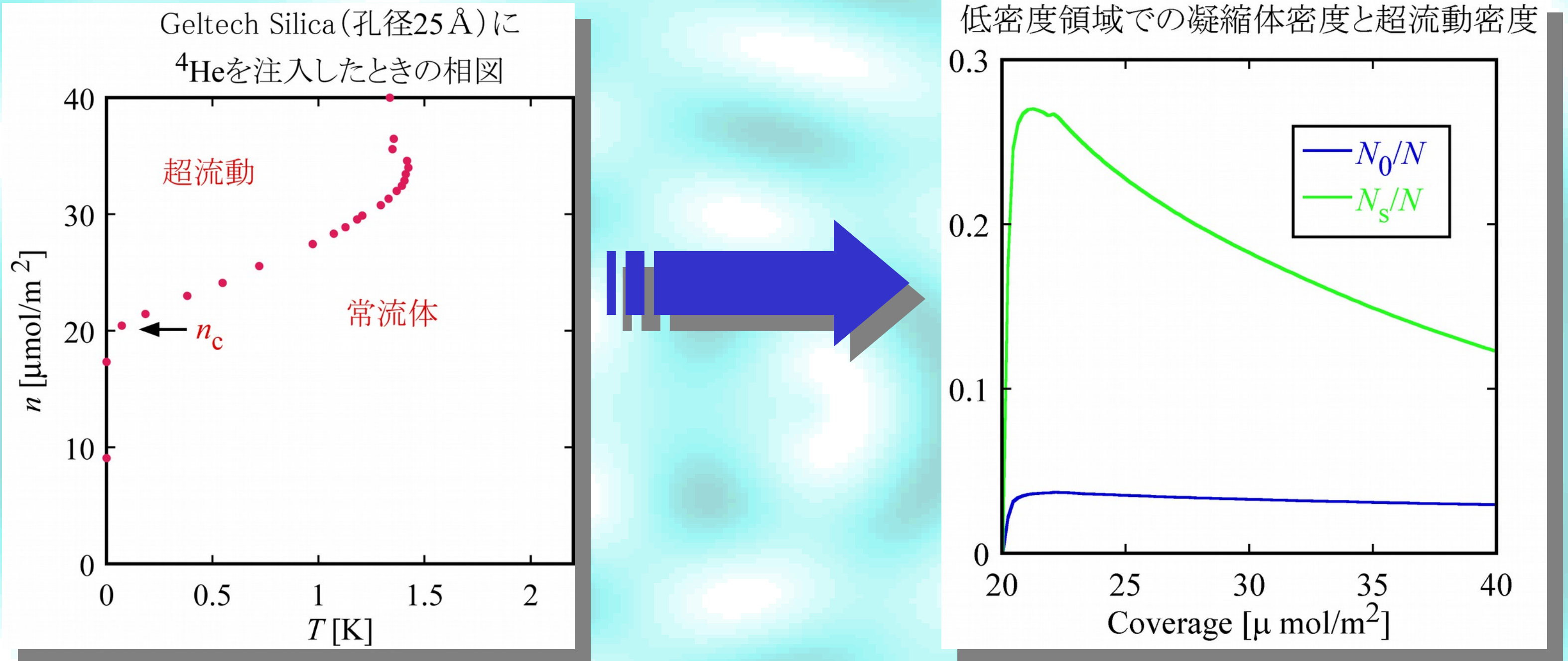
まとめ

- 絶対零度での多孔質ガラス中の液体^{4}Heのボース凝縮の局在を議論する新しい方法（局在スケール変分法？）を開発した。
- 高圧下においてランダムポテンシャル中でボース凝縮は局在し、超流動性を失う。
- ボース凝縮局在の転移圧力は孔径とともに増大する。

今後の課題：有限温度への拡張
粒子間の長距離引力相互作用を考慮

ランダムポテンシャルの強度

Yamamoto *et al*., Phys. Rev. Lett. **93** 075302 (2004)



超流動が消失する注入量はランダムポテンシャルの強度
U_0=1.425×10^{-9} [K] (r_p=25Å) で一致する。

Vycor (r_p=70Å) の場合、U_0=6.442×10^{-10} [K] と見積もられる。

J. D. Reppy, J. Low Temp. Phys. **87** (1992)
M. Kobayashi and M. Tsubota, Phys. Rev. B **66** (2002)

粒子間相互作用

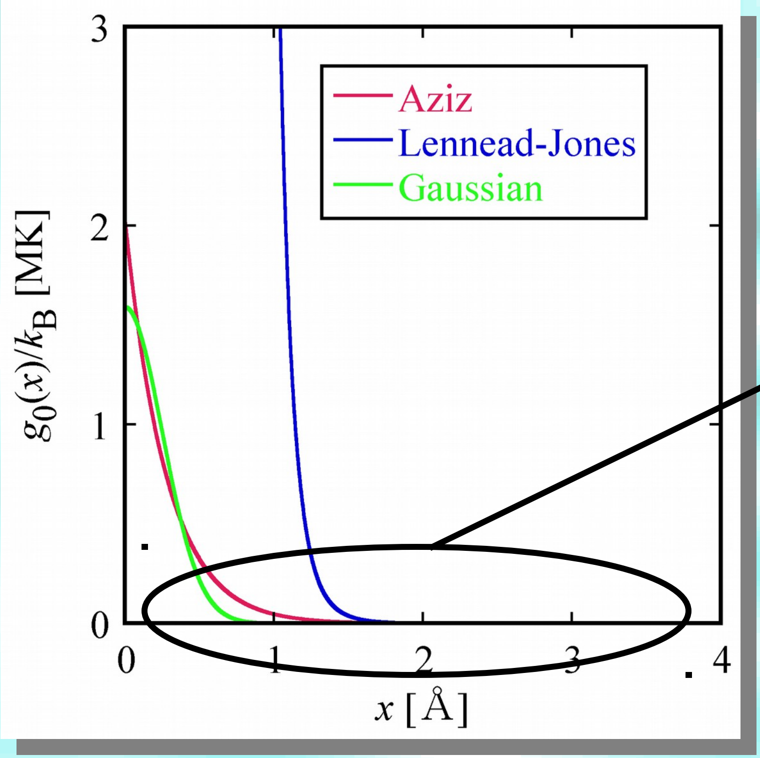
粒子間相互作用：ガウス型を仮定

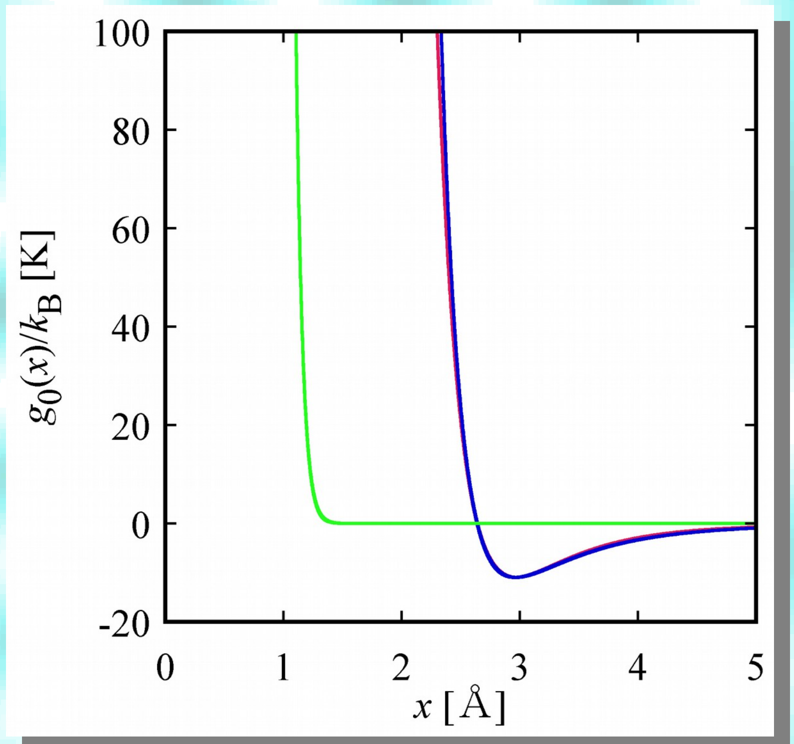
$$g_0(\boldsymbol{x}) = g_0(x) = v_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

^{4}He粒子間相互作用に対するAzizポテンシャルとの比較から決定

$$v_0/k_B = 1.51913 \times 10^6 \ [\mathrm{K}]$$

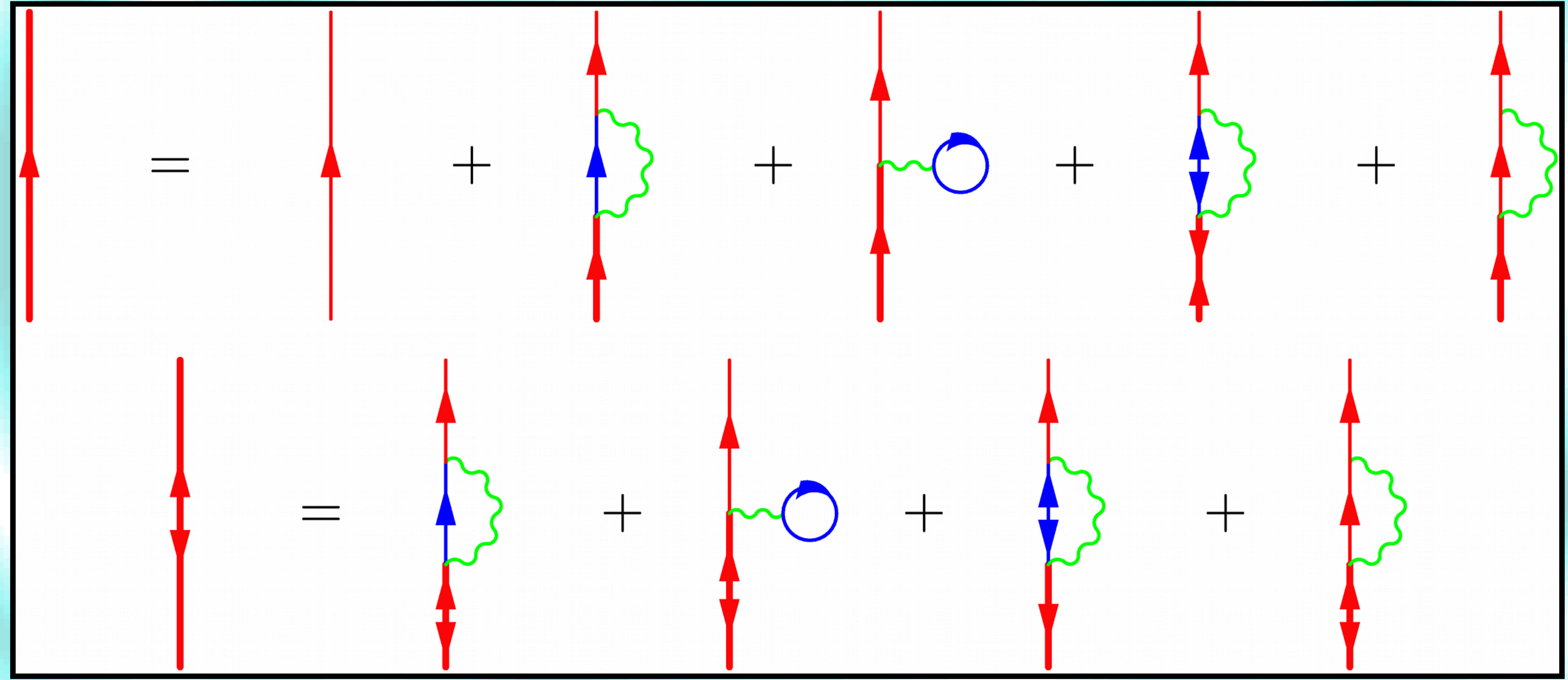
$$\sigma = 0.25149 \ [\text{Å}]$$





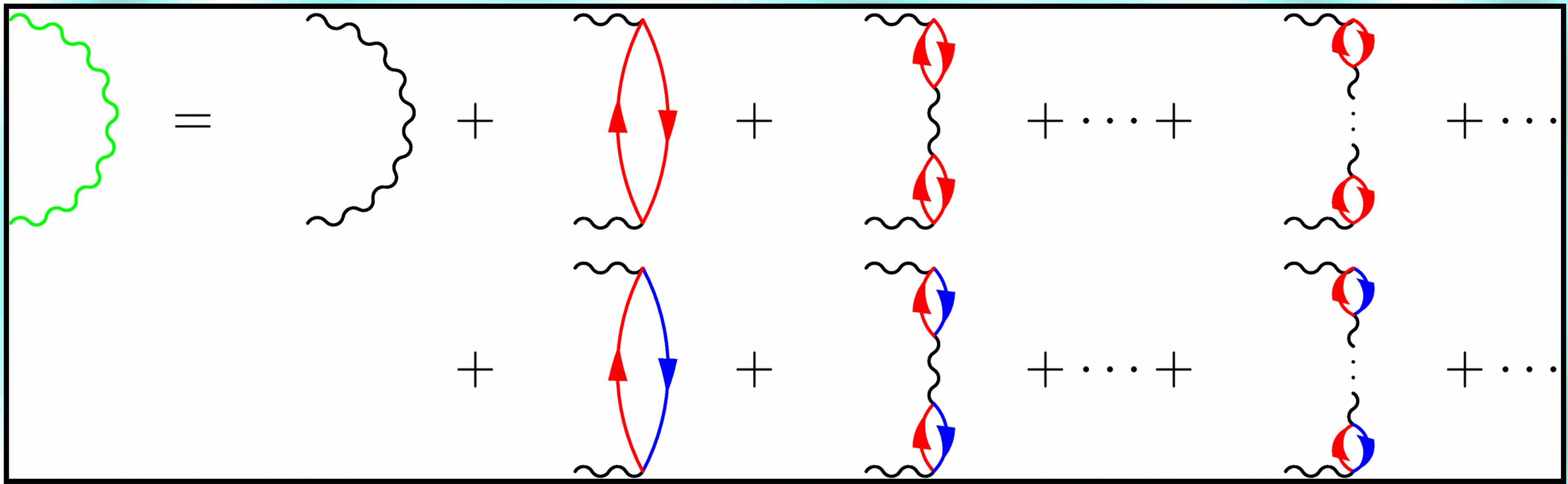
摂動計算の詳細1

Bogoliubov近似におけるDyson方程式



摂動計算の詳細2

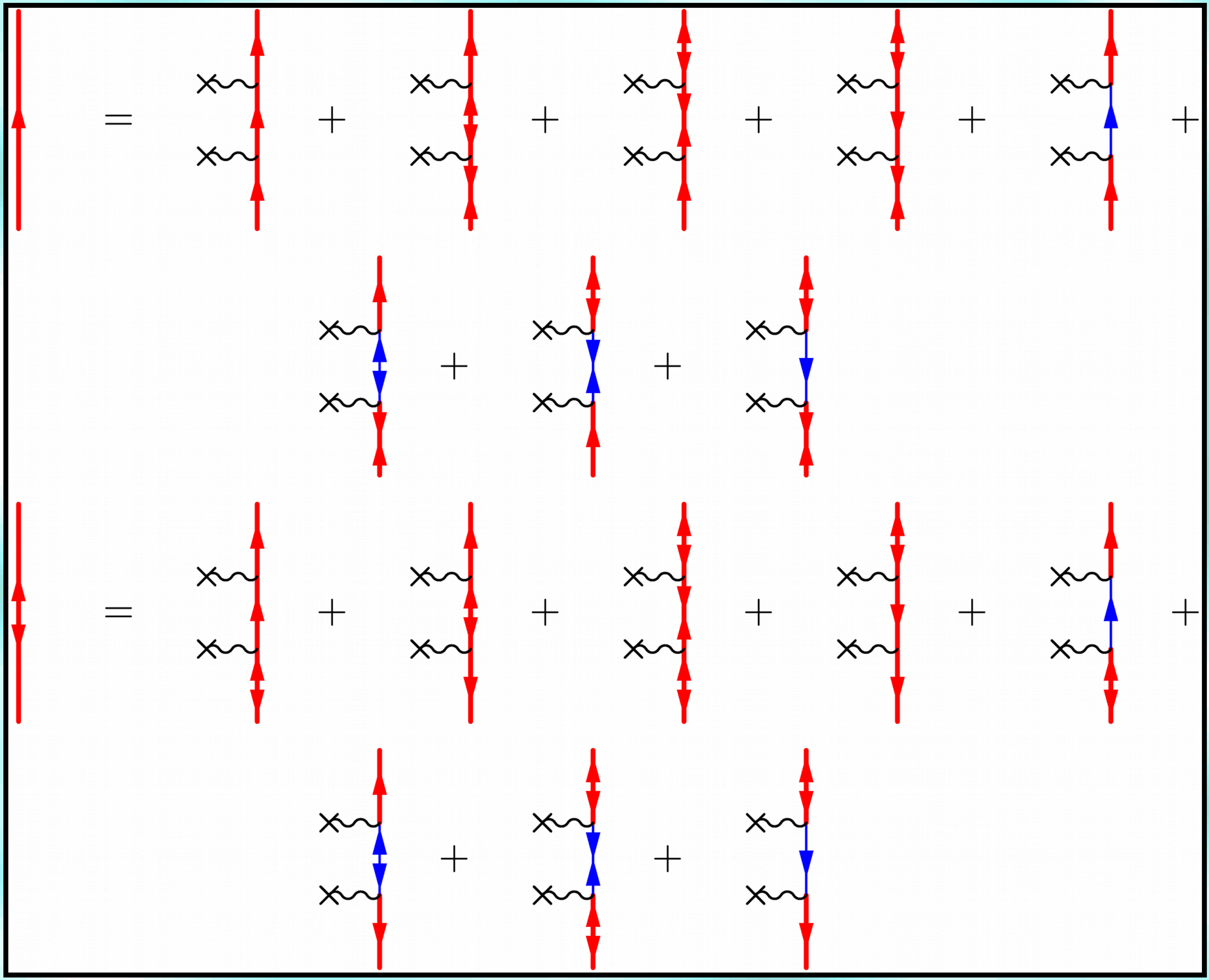
Ring近似による有効相互作用の計算



高密度(高圧力)極限では相互作用の摂動のなかでRingダイアグラムが支配的になる(電子系のRPA)。

摂動計算の詳細3

ランダムポテンシャルによる2次の摂動



摂動計算の詳細4

Green関数

$$G_{11}(k) = \frac{u_{\boldsymbol{k}}^2}{k_0 - E_{\boldsymbol{k}} + \mathrm{i}\eta} - \frac{v_{\boldsymbol{k}}^2}{k_0 + E_{\boldsymbol{k}} - \mathrm{i}\eta} - \frac{N_0 |U(k)|^2}{V^2} (2\pi\mathrm{i})\delta(k_0) \frac{(u_{\boldsymbol{k}} - u_{\boldsymbol{k}})^4}{E_{\boldsymbol{k}}}$$
$$- \frac{1}{\hbar^2 V^2} \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\frac{(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2)(u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{q}} + u_{\boldsymbol{q}} v_{\boldsymbol{k}})^2}{(k_0 - E_{\boldsymbol{k}}/\hbar + \mathrm{i}\eta)^2 (k_0 + E_{\boldsymbol{q}}/\hbar - \mathrm{i}\eta)^2} \right.$$
$$\left. + \frac{2u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \{ u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{q}}^2 + v_{\boldsymbol{q}}^2) + u_{\boldsymbol{q}} v_{\boldsymbol{q}} (u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) \}}{(k_0 - E_{\boldsymbol{k}}/\hbar + \mathrm{i}\eta)(k_0 + E_{\boldsymbol{k}}/\hbar - \mathrm{i}\eta)} \left(\frac{1}{k_0 - E_{\boldsymbol{q}}/\hbar + \mathrm{i}\eta} - \frac{1}{k_0 + E_{\boldsymbol{k}}/\hbar - \mathrm{i}\eta} \right) \right.$$

$$G_{12}(k) = -\frac{u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}}{k_0 - E_{\boldsymbol{k}} + \mathrm{i}\eta} + \frac{u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}}{k_0 + E_{\boldsymbol{k}} - \mathrm{i}\eta} - \frac{N_0 |U(k)|^2}{V^2} (2\pi\mathrm{i})\delta(k_0) \frac{(u_{\boldsymbol{k}} - u_{\boldsymbol{k}})^4}{E_{\boldsymbol{k}}}$$
$$- \frac{1}{\hbar^2 V^2} \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\frac{(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2)(u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{q}} + u_{\boldsymbol{q}} v_{\boldsymbol{k}})^2}{(k_0 - E_{\boldsymbol{k}}/\hbar + \mathrm{i}\eta)^2 (k_0 + E_{\boldsymbol{q}}/\hbar - \mathrm{i}\eta)^2} \right.$$
$$\left. + \frac{2u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \{ u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{q}}^2 + v_{\boldsymbol{q}}^2) + u_{\boldsymbol{q}} v_{\boldsymbol{q}} (u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2) \}}{(k_0 - E_{\boldsymbol{k}}/\hbar + \mathrm{i}\eta)(k_0 + E_{\boldsymbol{k}}/\hbar - \mathrm{i}\eta)} \left(\frac{1}{k_0 - E_{\boldsymbol{q}}/\hbar + \mathrm{i}\eta} - \frac{1}{k_0 + E_{\boldsymbol{k}}/\hbar - \mathrm{i}\eta} \right) \right.$$

摂動計算の詳細5

素励起のスペクトル

$$E_{\boldsymbol{k}}^2 = \epsilon_k^2 + \frac{2}{V}\left[N_0 g_0(\boldsymbol{k}) + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \left\{g(q) - g(k-q)\right\}\right]\epsilon_k + \frac{2N_0 g_0(\boldsymbol{k})}{V^2}\sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \left\{g(q) - g(k-q)\right\} + \frac{1}{V^2}\left[\sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \left\{g(q) - g(k-q)\right\}\right]^2$$

有効相互作用

$$g(k) = g_0(\boldsymbol{k}) + \frac{N_0 g_0(\boldsymbol{k})^2}{V\{\mathrm{i}\hbar k_0 - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\} - N_0 g_0(\boldsymbol{k}) + \mathrm{i}\eta}$$

化学ポテンシャル
(Hugenholtz-Pines理論)

$$\mu = \frac{N_0 g_0(0)}{V} - \frac{1}{2\pi \mathrm{i} V}\sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \frac{g(q)}{q_0 - (\epsilon_{\boldsymbol{q}} - \mu) + \mathrm{i}\eta}$$

Bogoliubov
係数

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{\epsilon_k + N_0 g_0(k)/V + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \left\{g(q) - g(k-q)\right\}/V}{E_{\boldsymbol{k}}} + 1\right]$$

$$v_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{\epsilon_k + N_0 g_0(k)/V + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\boldsymbol{q}} \mathrm{d}q_0 \left\{g(q) - g(k-q)\right\}/V}{E_{\boldsymbol{k}}} - 1\right]$$

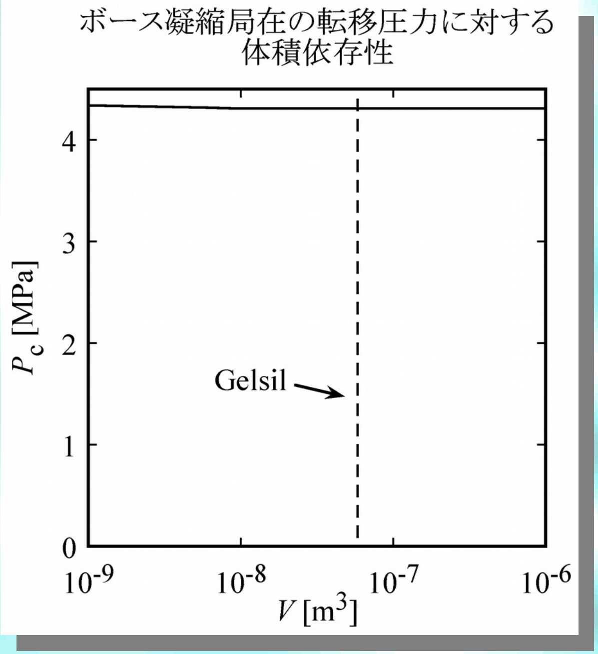
圧力の計算

圧力はエネルギーの数値微分によって得られる

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} \simeq -\frac{E(V+\Delta V)-E(V)}{\Delta V}$$

$$\Delta V \simeq 0.01V$$

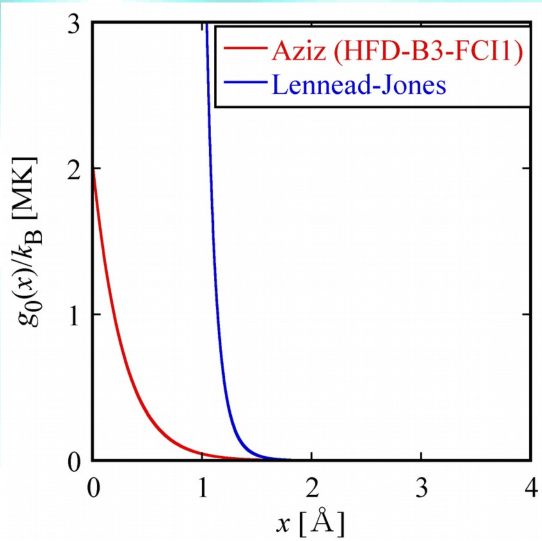
$$V = 5.940 \times 10^{-8}[\mathrm{m}^3]$$ (慶応グループの Gelsil)

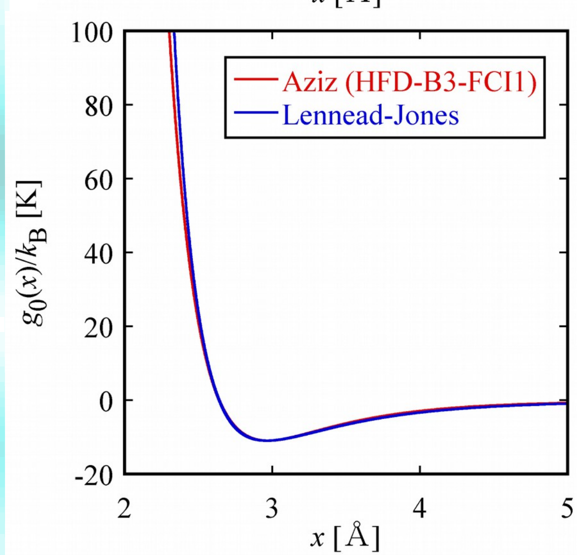


実際には転移圧力等の物性はマクロなサイズにおける体積にはほとんど依存しない

Azizポテンシャル

R. A. Aziz *et al*., Phys. Rev. Lett **74** 1586 (1995)





Aziz potential (HFD-B3-FCI1 potential)

$V($

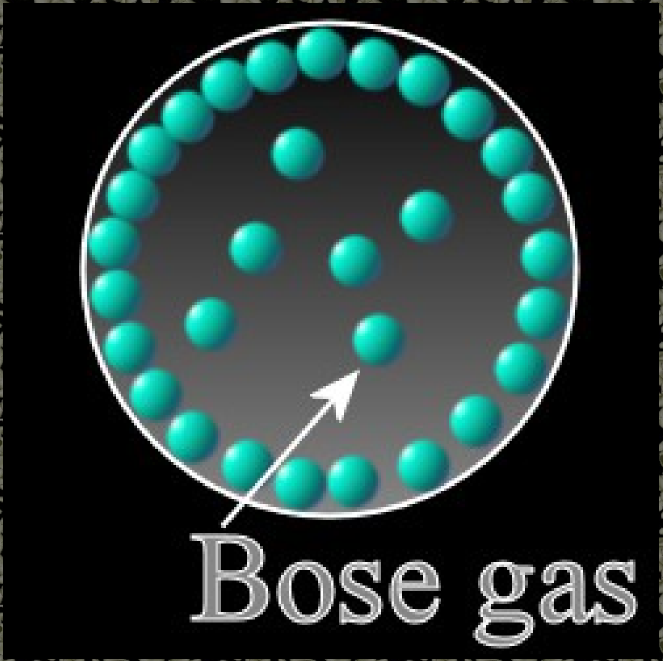
$$- \exp\left[-\left(\frac{d}{r}-1\right)^2\right]\left(\frac{c_6}{r^6}+\frac{c_8}{r^8}+\frac{c_{10}}{r^{10}}\right)\ (r<d)$$

$$= A\exp(-\alpha r+\beta r^2)-\left(\frac{c_6}{r^6}+\frac{c_8}{r^8}+\frac{c_{10}}{r^{10}}\right)\ (r>d)$$

$$\left.\begin{aligned}
A &= 2.047943770224\times 10^6[\mathrm{K}] \\
\alpha &= 3.5615518310143854[\text{Å}^{-1}] \\
\beta &= -0.2357999965247211[\text{Å}^{-2}] \\
c_6 &= 10130.537661599437[\mathrm{K}\text{Å}^6] \\
c_8 &= 27397.5435410066 3[\mathrm{K}\text{Å}^8] \\
c_{10} &= 99775.29311535569[\mathrm{K}\text{Å}^{10}] \\
d &= 4.2684154[\text{Å}]
\end{aligned}\right\}$$

実験データは全く含まれていない

孔の中での粒子数の見積もり



多孔質ガラス中で粒子は孔の壁に吸着する。残りの粒子がボース流体として振る舞うと仮定する。

粒子数

＝（注入された原子数ー吸着した原子数）