

ランダムポテンシャル中の希薄ボース 気体のボース凝縮と超流動

数物系専攻

小林 未知数

目次

第1章	序論	2
第2章	実験	6
2.1	超流動の測定	6
2.2	ボース凝縮の測定	8
第3章	ランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデルを用いた解析計算	11
3.1	ボース凝縮と超流動の理論的取り扱い	11
3.1.1	純粋な系	13
3.1.2	ランダムポテンシャル中の系	18
3.2	計算結果	20
3.2.1	パラメーターの決定	20
3.2.2	実験との比較と理論的予言	22
3.3	揺らぎにおける高次の計算	25
3.3.1	Hartree-Fock 近似	26
3.3.2	高次の摂動論	28
第4章	ランダムポテンシャル中の GP モデルを用いた超流動の数値的解析	32
4.1	GP 方程式とその取り扱い	32
4.2	ランダムポテンシャルとその取り扱い	33
4.3	計算結果	35
4.3.1	基底状態	35
4.3.2	流れ場をかけたときの応答	38
第5章	周期ポテンシャル中のボース凝縮の超流動-Mott 絶縁体量子相転移とそれに伴う凝縮体の干渉	43
5.1	中性アルカリ原子気体の超流動-Mott 絶縁体転移	43
5.2	ボースハバードモデルを用いた Mott 絶縁体の解析	45
5.3	周期ポテンシャル中の Gross-Pitaevskii 方程式を用いた超流動-Mott 絶縁体の解析	48
第6章	結論	52

第1章 序論

Vycor ガラスのような多孔質ガラスに閉じ込められたいわゆるランダム系での液体 ^4He のボース・アインシュタイン凝縮（以下ボース凝縮）と超流動は量子流体に関する非常に重要な問題の1つである。このような制限された空間の中でボース流体がどのような影響を受けるであろうか、ということは理論的にも実験的にも非常に興味深い。

λ 点と呼ばれる温度 2.17[K] 以下で液体 ^4He は粘性を持っていないかのように振舞う、超流動状態へと転移する。超流動は超伝導とともにマクロなスケールで量子状態が現れる現象であり、これらの現象を理解することは量子統計力学の最重要課題であった。超流動は現象論的な二流体モデルを用いてその観測事実のほとんどを説明することができる [1]。二流体モデルとは超流動 ^4He が粘性のない超流体と粘性を持つ常流体の二つの成分から成るといえるモデルである。一方、 λ 点における超流動転移はボース凝縮によって引き起こされると考えられてきたが、これは超流動 ^4He 中の量子渦の観測により支持され [2, 3]、中性子散乱の実験によって確認された [4]。ボース凝縮とは巨視的な数の粒子が1粒子の基底状態を占有し、巨視的波動関数を作り出す現象である。粘性のない超流動はこの巨視的波動関数によって記述することができる [5]。しかしながらボース凝縮と超流動の正確な関係は未だ良く分かっていない。超流動とボース凝縮はお互いに密接な関係にあるのだが、片方がもう片方の必要条件でも十分条件でもない。例えば二次元ボース系ではボース凝縮は存在しないが超流動は存在する、ということが Kosterlitz と Thouless によって証明され [6]、この超流動は薄膜 ^4He で観測された [7]。このようなボース凝縮と超流動の関係を調べる恰好の例がランダム系におけるボース流体である [8, 9]。ボース凝縮体はランダムネスによって捕らえられ、その一部は超流体よりはむしろ常流体として振る舞い、ボース凝縮と超流動が分離することでこの系の相図に特徴的な常流動の相が現れると考えられている。ランダムネスを調節することでボース凝縮や超流動を上手く制御することができれば、ボース凝縮と超流動の詳しい関係が明らかになるであろう。

実験には Vycor ガラスのような多孔質ガラス中の液体 ^4He を用いる。バルクの液体 ^4He に比べて、この系の特徴は液体 ^4He の注入量や Vycor ガラスの孔径を変化させることで、超流動の振る舞いを制御できることにある。Reppy 達はこれを用いて比熱や超流動密度など様々な物理量の測定を行っており [10, 11]、特に超流動が Vycor ガラスによって著しく抑制されることで、以下のようにバルクの液体 ^4He の超流動とは著しく異なる振る舞いを観測した。

1. 注入量が大きく、 ^4He のボース凝縮のコヒーレンス長が Vycor ガラスの孔径よりも十分小さいと、系は二次元的な振る舞いを示す。
2. 注入量が小さく、コヒーレンス長が孔径と同程度かそれ以上の場合、系は三次元的な振る舞いを示し、さらに超流動密度や転移温度は注入量の減少とともに小さくなってゆく。また、ある注入量以下で超流動密度が絶対零度付近においてすら存在しないという実験結果が報告されている。

一方ボース凝縮は Dimeo 達 [12] や Plantevin 達 [13] によって、中性子散乱を用いて観測されている。この実験において、ボース凝縮が超流動のないところで存在する可能性が示されており非常に興味深い。これら実験の詳細は 2 章で述べる。

この問題は理論的側面からも非常に興味深い。ボース凝縮によって生じる巨視的相関はランダムネスにより破壊され、ボース凝縮や超流動の転移温度は低下すると考えられる。Huang と Meng は Vycor ガラスへの ^4He の注入量が少ないという状況を仮定し、ランダムポテンシャル中の三次元希薄ボース気体のモデルを提唱した [14]。Vycor ガラスのようなランダムネスを解析的に扱うのは困難であり、彼らはデルタ関数的な不純物ポテンシャルを導入し、ボコリューボフ変換とアンサンブル平均を用いて計算を行った。彼らの計算によるとボース凝縮と超流動はともにランダムポテンシャルによって抑制され、絶対零度においても超流動がある密度以下で消失してしまう。これは Reppy 達が行った実験と定性的に一致している。さらに彼らは低密度の領域において、温度の減少とともに超流動相が再び常流動相へ転移する、いわゆる「再起型転移」があり得るという事を予言した。しかしながら彼らのモデルは Vycor ガラスの孔径依存性を考慮に入れておらず、そういった意味で実験との定量的な比較を通してのモデルの正当性の議論は不可能である。またこの系を記述するための別のモデルとして、共鳴輸送積分、同一サイト内の粒子間反発ポテンシャルとランダムポテンシャルを考慮した Fisher 達によるボース・ハバードモデルがある [15]。このモデルでは絶対零度において超流動相、Mott 絶縁体相のほかに金属における Anderson 絶縁体 [16] に類似のボースガラス相が存在する。ボースガラス相とはランダムポテンシャルによってボース凝縮体が局在し、超流動にならない相である。しかしながらボースガラス相において計算された励起スペクトル [17] と中性子散乱の実験から得られたスペクトル [13] とが定性的に一致する領域は未だ見つかっておらず、したがって実際にボースガラス相が存在するかどうかは不明である。しかしながらこのモデルの研究はフェルミ粒子系のハバードモデルに比べるとまだ研究が進んでおらず、その理解は不十分であるのが現状である。最後に Huang と Meng のモデルはアンサンブル平均を用いて系に並進対称性を回復させているため、ボースガラス相は記述できない。

以上を踏まえ、本論文では以下の 2 つの計算を行っている。1 つめは実験との定量的な比較を行うことを前提に、デルタ関数の代わりにランダムポテンシャルの孔径依存性を考慮することで Huang と Meng のモデル [14] を改良したランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデル [18] を考察する。ランダムポテンシャルの強度は、絶対

零度において超流動が消失する注入量を実験と計算で比較することによって見積もられる。結果としてモデルにフリーパラメータはなくなり、実験結果との定量的な比較が可能になる。凝縮体の多くが熱的に励起されるような高温領域を除いて、我々のモデルは系をほぼ正確に記述することができ、低温領域における比熱や超流動密度の実験との定量的一致は非常に良い。そのほかにも以下のような実験では観測されていない現象を記述することができる。

1. 比熱はフォノンの T^3 の依存性ではなく、ランダムポテンシャルの影響で T に線形な振る舞いをするようになる。ここで T は温度である。したがって精密な測定から比熱の T に線形な振る舞いが観測されれば、それはランダムポテンシャルの影響を観測したことになる。
2. ボース凝縮と超流動を比較することで、低密度領域で超流動が消失した後もボース凝縮が存在するという結果を得た。つまりこのような領域でボース凝縮と超流動の分離が可能である。
3. Huang と Meng のモデル同様、低温低密度領域における超流動の再起型転移の結果を再び得た。またこの再起型転移の実験における観測可能性を議論する。

ただしこのモデルは、希薄であるためにボース凝縮のコヒーレンス長が孔径サイズよりも十分大きいと仮定し、Huang と Meng のモデル同様にアンサンブル平均を用いて、系に並進対称性を回復させている。しかし孔径サイズを大きくし、コヒーレンス長と同じオーダーかそれ以上になると系の並進対称性は消失し、系はランダムポテンシャルの形状にまともに依存するようになる。このような状況を扱うのが例えば Fisher 達のボースハバードモデル [15] である。そこで我々は2つめの計算として Gross-Pitaevskii 方程式 [19, 20] を用いたランダムポテンシャル中のボース系を議論する。この計算はボースハバードモデルと違い、ボース凝縮が作る巨視的波動関数の振幅と位相を同時に知ることができる。我々はランダムポテンシャルのある二次元 Gross-Pitaevskii 方程式を数値的に解くことにより以下のような結果を得た。

1. ランダムポテンシャルの強度を大きくする、またはコヒーレンス長を短くしていくと系はランダムポテンシャルの極小部分に局在するようになり、それによって超流動は大きく抑制され、ついには消失する。
2. 系に流れ場を印加すると、ある臨界流れ場以上で量子渦対が生成・消滅するようになる。この量子渦対の存在によって、超流動は大きく抑制される。またこの臨界流れ場の大きさは系が局在しているほど小さく、ゆえに局在している系は基本的に超流動が抑制される傾向にある。

以上ランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデルの解析計算とランダムポテンシャルのある Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算の2つの計算を用いてランダムポテンシャル中のボース系を議論する。

また液体 ^4He 以外に、1995年に磁気閉じ込めトラップ中の中性アルカリ原子気体

をレーザー冷却、そして蒸発冷却をすることによりボース凝縮を実現させることに成功した。さらに2002年にはこの系において、光周期トラップを用いた超流動-Mott絶縁体量子相転移が観測され、大きな話題を集めている。この問題はポテンシャルが周期型であるため、我々のランダム系とは少し異なるが、非常に深い関係があると思われる、興味深い。我々は Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算を再び用いて、この問題にも取り組んでいる。

本論文は以下のように構成される。

- 2章では Vycor ガラス中の液体 ^4He の実験を紹介する。Reppy 達が行った超流動の観測、そして Dimeo 達や Plantevin 達が行った中性子散乱によるボース凝縮の観測について述べる。
- 3章ではランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデルの解析計算を議論する。モデルの導出、実験との比較、そして未完成であるが高温部分を記述するための式の改良について触れる。
- 4章ではランダムポテンシャルがあるときの Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算を議論する。Gross-Pitaevskii 方程式の導出、系の基底状態の振る舞い、流れ場をかけたときの振る舞いについて触れる。
- 5章では、光周期トラップ中のアルカリ原子気体の超流動-Mott 絶縁体量子相転移、ボースハバードモデルによる Mott 絶縁体転移の解析的な導出を紹介し、周期ポテンシャル中の Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算を用いて、この問題を議論する。
- 6章は結論である。

第2章 実験

本章では多孔質ガラス、主に Vycor ガラス中の液体 ^4He の超流動とボース凝縮に関する実験について説明する。Vycor ガラスとは直径約 $30\text{\AA}\sim 100\text{\AA}$ の空洞が三次元的に虫食い穴のように張り巡らされた構造をもつ多孔質ガラスであり、その空間充填率は $30\sim 70\%$ である (図 2.1)。この系は平均孔径や ^4He の Vycor ガラスへの注入量を調節することで、 ^4He の密度や超流動転移を自由に調節することができるのが特徴である。

2.1 超流動の測定

超流動そのものは一般的に二流体モデルを用いて記述される [1]。つまり超流動状態では流体を粘性、エントロピーを持たない超流体成分 n_s と粘性、エントロピーを持つ常流体成分 n_n とに分けることができ、

$$n = n_s + n_n \quad (2.1.1)$$

のように書くことができるのである。ここで n は流体全体の密度である。 n_s の測定には一般的にねじれ振り子が用いられる。試料 (ここでは液体 ^4He を注入した Vycor ガラス) をねじれ振り子にセットし、ねじれ振り子の振動数と周期を測定する。粘性を持たない超流動成分は慣性モーメントに寄与しないため、ねじれ振り子の振動数や周期は超流動状態でないときに測定されたものと比べると明らかに違う。その周期差 ΔP は超流動密度 n_s に比例している。つまりねじれ振り子の測定原理は超流動密度を、周

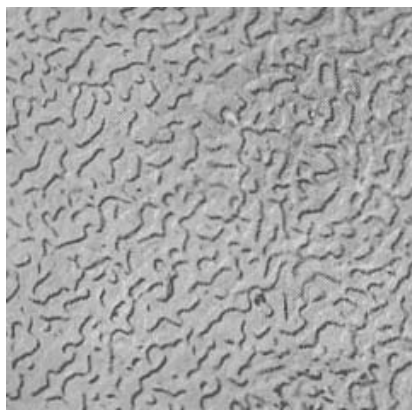


図 2.1: 多孔質 Vycor ガラスの断面図。

期のシフトを通して観測することにある。

Reppy 達はこのねじれ振子を用いて、さまざまな Vycor ガラスの孔径や液体 ^4He の注入量のもと、数多くの興味深い超流動密度や超流動転移温度の振る舞いを観測した [10, 11]。図 2.2(a) は異なる 2 つの注入量における超流動密度の振る舞いを、図 2.2(b) は比較的 low 注入量における Vycor ガラスと 10 倍ほど孔径の大きな Xerogel ガラスにおける超流動密度の振る舞いを両対数グラフで示している。ここで

$$\frac{n_s}{n} = \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\zeta \quad (2.1.2)$$

としたとき (T_c は超流動転移温度)、2 つの図から分かるように注入量または孔径が小さいときに臨界指数 ζ は小さな値をとり、バルクの液体 ^4He の値に近い。注入量または孔径が大きくなるときの ζ は大きな値をとりバルクの ^4He の値からはずれる。これは次の

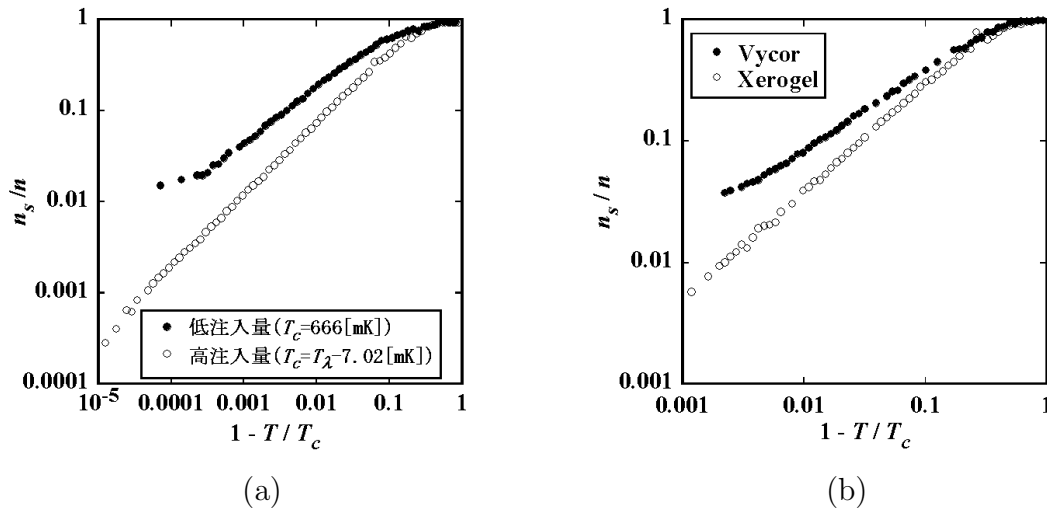


図 2.2: 異なる注入量における超流動密度 (a) (文献 [10] の図 17) と Vycor ガラスと Xerogel ガラスにおける超流動密度 (b) (文献 [10] の図 15) の両対数グラフ。(a) において臨界指数を見積もると $\zeta \simeq 0.62$ (低注入量)、 $\zeta \simeq 0.81$ (高注入量) である。(b) において臨界指数を見積もると $\zeta \simeq 0.63$ (Vycor)、 $\zeta \simeq 0.84$ (Xerogel) である。なおバルクの ^4He では $\zeta \simeq 0.65$ である。

ように理解される。Vycor ガラス中では液体 ^4He の注入量が小さくなれば系のコヒーレンス長は伸びてゆき、Vycor ガラスの平均孔径と同程度かそれ以上になると系は三次元的な振る舞いを示すようになる。逆に注入量が大きい場合や、Xerogel ガラス中の ^4He のように、コヒーレンス長が平均孔径よりも小さい場合、系は Kosterlitz-Thouless 理論 [6] で示されるような二次元的な振る舞いを示すようになり、臨界指数はバルクの液体 ^4He のものと異なる値をとるようになるのである。つまり注入量または孔径が小さいとき ^4He は三次元希薄ボース気体として振舞うであろうと考えられる。

次に注入量の低下における超流動密度や超流動転移温度の変化を示したのが図 2.3 である。これをみると超流動密度も超流動転移温度も注入量が少なくなると減少し、超流動は抑制される。また 500[mK] 以下の極低温で、注入量を下げていったときの ΔP

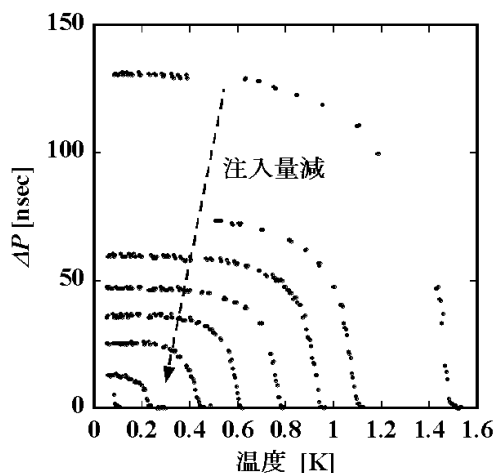


図 2.3: ねじれ振り子の周期差 ΔP の温度依存性 (文献 [10] の図 5)。8 通りの注入量で測定しているが、注入量が少なくなるとともに ΔP (超流動密度) が小さくなっている

の変化をプロットしたのが図 2.4 である。この図から分かるように、超流動がある注入量以下で消失しているのが分かる。これは、超流動になるべき ^4He 原子が、Vycor ガラスという「ポテンシャル」に捕らえられて動けなくなるという描像を想起させる。この描像については 3 章で詳しく解説する。

2.2 ボース凝縮の測定

ボース凝縮の測定には中性子散乱が用いられる。ボース凝縮とはマクロな数の粒子がその一粒子基底状態を占有するということであり、中性子を用いてボース凝縮した ^4He 原子を励起させることでそれを観測することができる。Dimeo 達 [12] や Plantevin 達 [13] は多孔質ガラス中を液体 ^4He で完全に満たしたものに中性子を当て、液体 ^4He を注入しない場合の結果との差を取り、そのボース凝縮のシグナルを観測した。図 2.5 はいくつかの温度での波数 $1.70 [\text{\AA}^{-1}]$ における中性子散乱の測定結果である。バルクの液体 ^4He では、この波数領域で凝縮体からのロトンの励起が観測される。ロトンは液体 ^4He のボース凝縮に固有のものであり、ロトンの励起が見えることでボース凝縮の存在を支持している [1]。Vycor ガラス中においても図 2.5 から分かるように、ロトンの励起がエネルギー $0.9 [\text{meV}]$ 付近で見えており、ボース凝縮が Vycor ガラス中でも存在することを示している。興味深いことに、この系においてねじれ振り子により超

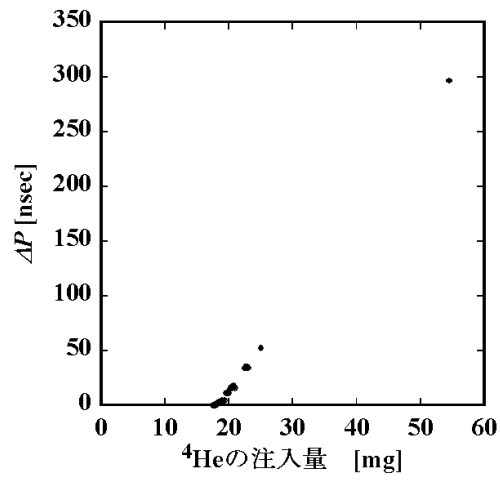


図 2.4: 500[mK] における ΔP (超流動密度) の注入量依存性 (文献 [10] の図 11)。

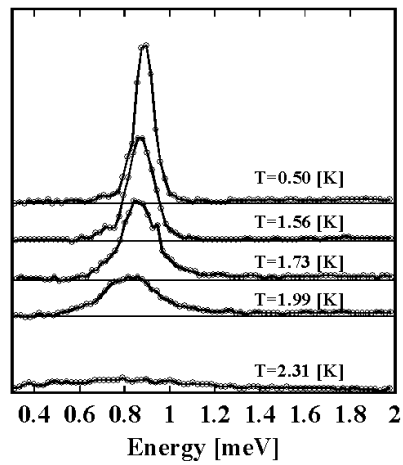


図 2.5: 波数 1.70 \AA^{-1} における中性子散乱の測定結果 (文献 [13] の図 4)。

流動転移温度 $T_c=1.95$ [K] が観測されているが、図 2.5 では $T=1.99$ [K] においてもロトンの励起が見えている。つまりこの実験結果は、Vycor ガラス中において超流動転移温度以上でのボース凝縮の存在の可能性を示している。現時点ではボース凝縮体の定量的な測定や、注入量を変化させたときの測定などは行われていないが、いずれこれらの測定も可能になるであろう。

第3章 ランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデルを用いた解析計算

相互作用のない三次元理想ボース気体の場合、よく知られているように低温において巨視的な数の粒子が基底状態を占有し、ボース凝縮を起こす。粒子間に相互作用があるときも同様にボース凝縮が実現していると考えられ、液体 ^4He の場合、超流動への相転移が起こる [1, 5]。前章の液体 ^4He の実験で用いたような多孔質ガラス中で、ボース凝縮や超流動がどのように抑制されるかを理論的に考察するのが本章の目的である。そのための解析的モデルとしてランダムポテンシャル中の希薄ボース気体を用いる [18]。

類似した問題としてランダムポテンシャル中のフェルミ粒子系の金属-アンダーソン絶縁体転移の問題がある [16, 21, 22]。しかし解析的扱いはフェルミ粒子系よりもボース粒子系の方が複雑である。なぜなら、粒子間相互作用のないボース粒子系を考えた場合、すべての粒子がランダムポテンシャルの空間的な極小点に凝縮してしまうからである。他方フェルミ粒子系ではパウリの原理が働くため、このようなことは起こらない。つまりフェルミ粒子系では最も簡単なモデルとしてランダムポテンシャル中の自由フェルミ粒子系のモデルが可能であり、そこから粒子間相互作用を摂動として取り込むことが可能である。ところがボース粒子系でははじめに粒子間相互作用を考えないといけないのである。

本章では次のように話を進める。まず最初にランダムポテンシャルのない場合において相互作用をしているボース系の微視的理論を展開する。次に超流動現象を記述する二流体モデルを踏まえ、線形応答理論を用いて超流動の微視的理論について解説する。そしてこれらの結果をランダムポテンシャルが存在する系へと展開する。最後にこの結果を多孔質 Vycor ガラス中の液体 ^4He の実験と比較する。

3.1 ボース凝縮と超流動の理論的取り扱い

相互作用しているボース粒子系の大正準ハミルトニアンは次のように記述される [23]。

$$\begin{aligned}\hat{K} &\equiv \hat{H} - \mu\hat{N} \\ &= \int d\mathbf{x} \hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu + U(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger \hat{\Psi}(\mathbf{x}')^\dagger v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (3.1.1)$$

ここで μ は化学ポテンシャル、 m はボース粒子 1 個の質量である。また $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger$ はボース場の消滅および生成演算子であり、次の交換関係を満たす。

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}')^\dagger] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}')] = [\hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger, \hat{\Psi}(\mathbf{x}')^\dagger] = 0 \quad (3.1.2)$$

$U(\mathbf{x})$ は外場であり、ここでは多孔質ガラスを想定したランダムポテンシャルである。さらに $v(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ は位置 \mathbf{x} と \mathbf{x}' にある粒子間に働く相互作用であり、次のような形を仮定する。

$$v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.1.3)$$

これは粒子間の相互作用が剛体芯反発ポテンシャルであることを意味し、多体ボース系が希薄であるときにより近似となる。もちろんバルクの液体 ^4He は希薄ではないので、この仮定はよい近似とは言えないが多孔質ガラス中の液体 ^4He の場合、注入量が少ないと ^4He 原子は希薄となり、この近似は妥当であると考えられる。

また式 (3.1.3) 中の g は剛体芯反発ポテンシャルの結合定数であり、二体散乱の微視的理論からその形が求められる [23]。具体的には三次元では $g = 4\pi a\hbar^2/m$ となる。ここで a は原子 1 個の s 波散乱長である。

結局これらの仮定のもとで、大正準ハミルトニアンは次のようになる。

$$\hat{K} = \int d\mathbf{x} \hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu + U(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} \hat{\Psi}(\mathbf{x})^\dagger \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (3.1.4)$$

このハミルトニアンをフーリエ変換を用いて波数空間での表示に直す。具体的には

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \sqrt{n_0} + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (3.1.5)$$

$$U(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} U_{\mathbf{k}} \quad (3.1.6)$$

を用いる。 V は系の体積である。また $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ は波数 \mathbf{k} の 1 粒子の消滅演算子である。系はボース凝縮の状態で、 $\mathbf{k} = 0$ の量子状態を巨視的な数の粒子が占有していると仮定し、 $\hat{a}_0 \rightarrow a_0 = \sqrt{N_0} = \sqrt{n_0 V}$ として \hat{a}_0 を c-数に置き換えた。 n_0 はボース凝縮している粒子の数密度となる。

フーリエ変換 (3.1.5), (3.1.6) を用いると、ハミルトニアン (3.1.4) は次のような形になる。

$$\hat{K} \equiv \hat{K}_{\text{kin}} + K_0 + \hat{K}_2 + \hat{K}_3 + \hat{K}_4 + \hat{K}_{R1} + \hat{K}_{R2} \quad (3.1.7)$$

$$\hat{K}_{\text{kin}} = -V\mu n_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.1.8)$$

$$K_0 = \frac{g}{2} V n_0^2 \quad (3.1.9)$$

$$\hat{K}_2 = \frac{g}{2} n_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (4\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}) \quad (3.1.10)$$

$$\hat{K}_3 = g \sqrt{\frac{n_0}{V}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} + \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}) \quad (3.1.11)$$

$$\hat{K}_4 = \frac{g}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \quad (3.1.12)$$

$$\hat{K}_{R1} = \sqrt{\frac{n_0}{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (U_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger + U_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}) \quad (3.1.13)$$

$$\hat{K}_{R2} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \neq 0} U_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \quad (3.1.14)$$

$K_0 \sim \hat{K}_4$ はハミルトニアン の 粒子間相互作用の部分を考えたときに非凝縮体の粒子の演算子が 0~4 個関与する項である (1 個だけ関与する項は運動量が保存しないため存在しない)。同様に $\hat{K}_{R1}, \hat{K}_{R2}$ はハミルトニアン の $U(x)$ の部分において非凝縮体の粒子の演算子が 1 または 2 個関与する項である。 \hat{K}_{kin} は運動エネルギーの項である。 \hat{K}_{kin} と K_0 を無摂動ハミルトニアン、残りを摂動として摂動論を展開する [23]。

注意しておかなければならないことだが、上で議論した波数表示は系が一様で並進対称であるときによい量子数となりうる。つまり $U(x)$ のようなランダムポテンシャルがあると系は並進対称性を失い、波数はよい量子数とはならず、このような波数表示は意味がないように考えられるかも知れない。これについては後に議論する。

3.1.1 純粋な系

まずは純粋な系として、式 (3.1.7) の \hat{K}_2 の摂動論を展開する (有効ハミルトニアン $\hat{K}_{\text{eff1}} \equiv \hat{K}_{\text{kin}} + K_0 + \hat{K}_2$)。次のような正常温度 Green 関数 \mathcal{G} と異常温度 Green 関数 \mathcal{G}_{12} を定義する。

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau; \tau') \equiv -\text{Tr}\{e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff1}})} \text{T}_\tau[\hat{a}_{\mathbf{k}}(\tau) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau')]\} \quad (3.1.15)$$

$$\mathcal{G}_{12}(\mathbf{k}, \tau; \tau') \equiv -\text{Tr}\{e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff1}})} \text{T}_\tau[\hat{a}_{\mathbf{k}}(\tau) \hat{a}_{-\mathbf{k}}(\tau')]\} \quad (3.1.16)$$

ここで $\beta = 1/k_B T$ であり、 Ω は熱力学関数である。さらに τ は虚数時間であり、ハイゼンベルク表示

$$\hat{A}(\tau) = e^{\hat{K}_{\text{eff1}} \tau} \hat{A} e^{-\hat{K}_{\text{eff1}} \tau} \quad (3.1.17)$$

を用いた。 T_τ は (虚数の) 時間の順序付けを意味する。さらに無摂動正常温度 Green 関数 \mathcal{G}^0 は

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \tau; \tau') &\equiv -\text{Tr}\{e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff1}})} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}(\tau) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger(\tau')\} \\ &= \frac{1}{\beta \hbar} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/\hbar} \quad (3.1.19)$$

と計算できる。ここで相互作用表示

$$\hat{A}_I(\tau) = e^{(\hat{K}_{\text{kin}} + K_0)\tau} \hat{A} e^{-(\hat{K}_{\text{kin}} + K_0)\tau} \quad (3.1.20)$$

を用いた。

Green 関数の 1 次の摂動展開はファインマンダイアグラムで図 3.1 ように、2 次の摂動展開は図 3.2 のように表示できる。最終的にこれらのファインマンダイアグラムが



図 3.1: 正常温度 Green 関数 (a) と異常温度 Green 関数 (b) の \hat{K}_2 による 1 次の摂動。実線の矢印は無摂動の温度 Green 関数、点線の矢印は凝縮体、丸印は凝縮体、非凝縮体の両方を含む粒子間相互作用を表す。

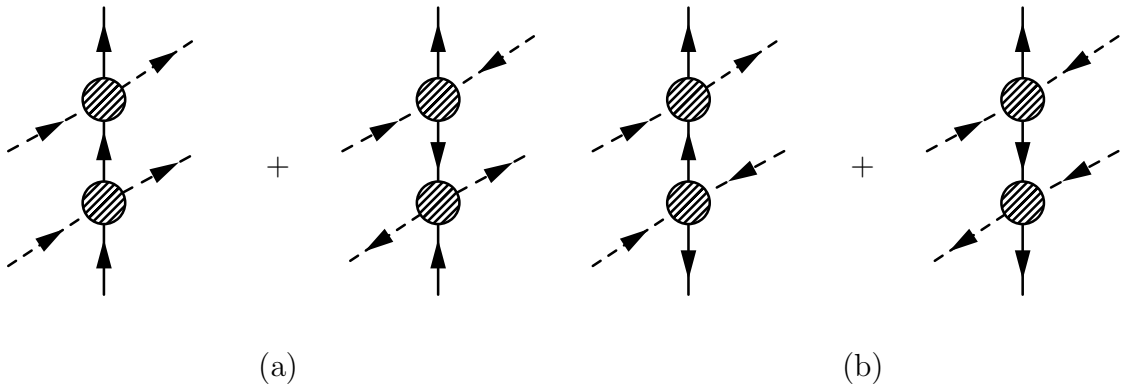


図 3.2: 正常温度 Green 関数 (a) と異常温度 Green 関数 (b) の \hat{K}_2 による 2 次の摂動。

ら図 3.3 のような Dyson 方程式を推測できる。この Dyson 方程式は考えられるすべてのファインマンダイアグラムを含んでおり、すべての次数の摂動を計算できる。この Dyson 方程式を解けば以下のような Green 関数を得ることができる。

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{|u_k|^2}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{|v_k|^2}{i\omega_n + E_k/\hbar} \quad (3.1.21)$$

$$\mathcal{G}_{12}(\mathbf{k}, \omega_n) = -u_k v_k \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k/\hbar} - \frac{1}{i\omega_n + E_k/\hbar} \right) \quad (3.1.22)$$

ただし

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\epsilon_k^\mu + gn_0}{E_k} + 1 \right\} \quad (3.1.23)$$

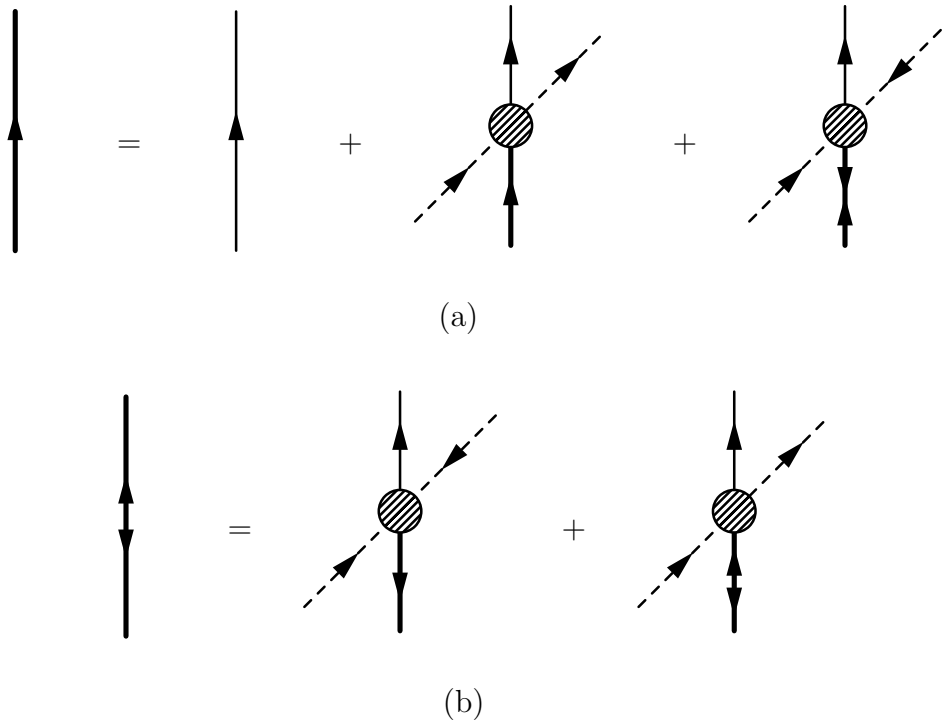


図 3.3: \hat{K}_2 による摂動から得られる正常温度 Green 関数 (a) と異常温度 Green 関数 (b) の Dyson 方程式。太い矢印は摂動を取り込んだ温度 Green 関数を表す。

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\epsilon_k^\mu + gn_0}{E_k} - 1 \right\} \quad (3.1.24)$$

$$E_k^2 = \epsilon_k^{\mu 2} + 2gn_0\epsilon_k^\mu \quad (3.1.25)$$

$$\epsilon_k^\mu = \epsilon_k - \mu + gn_0 \quad (3.1.26)$$

である。この温度 Green 関数から系の全粒子数とエネルギーを求めることができ、それは以下のようになる。

$$n = n_0 - \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{V} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\omega_n \eta} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (3.1.27)$$

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{2}\mu n_0 - \frac{1}{2} \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{V} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\omega_n \eta} (i\hbar\omega_n + \epsilon_k + \mu) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (3.1.28)$$

化学ポテンシャルは粒子数に対して E を最小にするように決めることができ、最終的に次の形を得る。

$$\frac{\partial E}{\partial n} \simeq \frac{\partial E}{\partial n_0} = 0 \quad (3.1.29)$$

$$\mu \simeq gn_0 \quad (3.1.30)$$

式 (3.1.30) は系の励起スペクトルである式 (3.1.25) の E_k がギャップレスにならなければいけない ($\epsilon_k^\mu = \epsilon_k$) という Goldstone の定理や、摂動 \hat{K}_2 の化学ポテンシャルに対して一

一般的に成り立つ Hugenholtz-Pines の定理 [24] から導くことができる。式 (3.1.30) の化学ポテンシャルと g の具体的な形である $g = 4\pi a\hbar^2/m$ を用いると、式 (3.1.27),(3.1.28) の最終的な形を得る。

$$n = n_0 + n_1 + n_T \quad (3.1.31)$$

$$\frac{E}{V} = \frac{E_1}{V} + \frac{E_T}{V} \quad (3.1.32)$$

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}}(n_0 a)^{3/2} \\ n_T &= \frac{4}{\sqrt{\pi}\lambda^3} \int_0^\infty dt \frac{t(t^2 + \theta/2)}{\sqrt{t^2 + \theta} [\exp(t\sqrt{t^2 + \theta}) - 1]} \\ \frac{E_1}{V} &= \frac{2\pi a\hbar^2 n_0^2}{m} \\ \frac{E_T}{V} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}\lambda^3\beta} \int_0^\infty dt \frac{t[2t^4 + 2\theta t^2 + \theta^2/4]}{\sqrt{t^2 + \theta} [\exp(t\sqrt{t^2 + \theta}) - 1]} \end{aligned}$$

ここで $\theta = 8\pi a\hbar^2\beta n_0/m$ 、 $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ (熱的ドブロイ波長) である。式 (3.1.31) 中の n_1 は粒子間相互作用がもたらす絶対零度での非凝縮体、 n_T は温度励起による非凝縮体を表し、式 (3.1.32) 中の E_1 は粒子間相互作用がもたらす絶対零度でのエネルギー、 E_T は温度によって励起した準粒子のエネルギーを表す。

次に超流動密度を計算する。現在、超流動密度は次のような描像で計算できると考えられている。まず十分長い管を仮定し、その管を引っ張る。系が超流動状態になっていると、粘性を持っている常流動成分のみが引っ張ることに対して応答し、超流動成分は何も応答しない。よって引っ張ることに対する系の運動量の線形応答を計算すれば、常流動密度 n_n が計算でき、超流動密度 n_s は $n - n_n$ から得られる [25]。

具体的な計算方法を述べる。実際には系に流れ場をかけたときの運動量の線形応答の横方向の成分が常流動となる。線形応答理論によると時間 t_0 から加え始めた j 方向の流れ場 v_j のハミルトニアン

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ex}}(t) &= \int d\mathbf{x} v_j(\mathbf{x}, t) \hat{\Xi}_j(\mathbf{x}, t) \\ \hat{\Xi}_j(\mathbf{x}, t) &= i\hbar \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_j} \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

に対する、位置 \mathbf{x} 、時間 t の i 方向の運動量の応答は

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_i(\mathbf{x}, t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr}\{e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff}})} [\hat{H}_{\text{ex}}(t'), \hat{j}_i(\mathbf{x}, t)]\} \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int d\mathbf{x}' D_{ij}^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') v_j(\mathbf{x}', t') \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

となる。ここで $D_{ij}^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ は遅延感受率

$$iD_{ij}^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \text{Tr}\{e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff}})} [\hat{j}_i(\mathbf{x}, t), \hat{\Xi}_j(\mathbf{x}', t')]\} \quad (3.1.35)$$

であり、この遅延感受率の横方向の成分が常流体成分 ρ_n/ρ となる。また $\hat{j}_i(\mathbf{x}, t)$ は i 方向の運動量演算子

$$\hat{j}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2i} \lim_{\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \mathbf{x}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial \bar{x}_i} \right) \hat{\Psi}(\bar{\mathbf{x}}, t)^\dagger \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \quad (3.1.36)$$

である。

次のような虚時間形式の温度感受率を定義する。

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = -\text{Tr} \left\{ e^{\beta(\Omega - \hat{K}_{\text{eff}})} \text{T}_\tau [\hat{j}_i(\mathbf{x}, \tau) \hat{\Xi}_j(\mathbf{x}', \tau')] \right\} \quad (3.1.37)$$

再びフーリエ変換を用いて波数表示に直すと、式 (3.1.15), (3.1.16) で定義した温度 Green 関数を用いて温度感受率を表すことができる。詳細な計算は省略するとして、最終的に式 (3.1.37) はフーリエ変換した形で

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{ij}(\mathbf{k}, \omega_n) &= \lim_{\eta \rightarrow +0} \hbar^2 \frac{1}{V} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{\bar{\mathbf{k}}, \bar{n}} \bar{k}_i \bar{k}_j e^{i\omega_n \eta} \\ &\quad \times \left[\mathcal{G}(\bar{\mathbf{k}} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \omega_n) \mathcal{G}(\bar{\mathbf{k}} - \frac{\mathbf{k}}{2}, \omega_n - \omega_n) \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{G}_{21}(\bar{\mathbf{k}} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \omega_n) \mathcal{G}_{12}(\bar{\mathbf{k}} - \frac{\mathbf{k}}{2}, \omega_n - \omega_n) \right] \end{aligned} \quad (3.1.38)$$

となる。回転不変の系では \mathcal{D}_{ij} を縦成分 \mathcal{A} と横成分 \mathcal{B} に分解することができる。

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \lim_{\omega_n \rightarrow 0} \mathcal{D}_{ij}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{k_i k_j}{k^2} \mathcal{A}(\mathbf{k}) + \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \mathcal{B}(\mathbf{k}) \quad (3.1.39)$$

常流動密度 n_n はその横成分の長波長極限で定義される。

$$\begin{aligned} n_n &= \frac{1}{\hbar m} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \mathcal{B}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{\hbar}{3m} \frac{1}{\beta \hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, n} k^2 e^{i\omega_n \eta} \\ &\quad \times \left[\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) - \mathcal{G}_{21}(\mathbf{k}, \omega_n) \mathcal{G}_{12}(\mathbf{k}, \omega_n) \right] \end{aligned} \quad (3.1.40)$$

式 (3.1.21), (3.1.22) の温度 Green 関数を用いれば超流動密度の最終的な形を得る。

$$n_s = n + \frac{\hbar^2}{3m} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1} \right) \quad (3.1.41)$$

$$= n - n_{nT} \quad (3.1.42)$$

$$n_{nT} = \frac{8}{3\sqrt{\pi} \lambda^3} \int_0^\infty dt \frac{t^4 \exp(t\sqrt{t^2 + \theta})}{[\exp(t\sqrt{t^2 + \theta}) - 1]^2}$$

ここで式 (3.1.42) 中の n_{nT} は準粒子の温度励起によって生じる常流体成分を表す。式 (3.1.41) は Landau の準粒子描像とガリレイ変換不変性に基づいた Khalatnikov の表式からも得ることができ [26]、ここまでの線形応答理論による超流動密度の導出と矛盾しない。

3.1.2 ランダムポテンシャル中の系

次にランダムポテンシャルがある場合に対し、定式化を発展させる。摂動として式 (3.1.13) の \hat{K}_{R1} を考え、無摂動ハミルトニアンは今までの計算で用いた \hat{K}_{eff1} を使う (有効ハミルトニアン $\hat{K}_{\text{eff2}} = \hat{K}_{\text{eff1}} + \hat{K}_{R1}$)。しかしランダムポテンシャルが加わると系は並進対称性を失うため、今まで用いてきた波数が良い量子数でなくなり、フーリエ変換を用いた定式化が、もはやできなくなるように思える。しかしランダムポテンシャルに関してアンサンブル平均を取ると、再び系は並進対称性を回復する。そしてアンサンブルに関して平均化されたランダムポテンシャルは2つの特徴的なパラメーターのみを持つようになる。1つはランダムポテンシャルの特徴的な強度、もう1つは多孔質ガラスの平均孔径を反映した特徴的なサイズである。ランダムポテンシャルのフーリエ変換 $U_{\mathbf{k}}$ はその特徴的なサイズよりも大きな波数の領域で減衰するはずであり、次のようなガウス分布を仮定する。

$$\frac{1}{V} \langle U_{\mathbf{k}} U_{-\mathbf{k}} \rangle_{\text{av}} \equiv R(k) = R_0 \exp \left[-\frac{k^2}{2k_p^2} \right], \quad (3.1.43)$$

ここで $\langle \dots \rangle_{\text{av}}$ はアンサンブル平均を意味し、 R_0 は平均化されたランダムポテンシャルの特徴的な強度で、 $(\text{energy})^2(\text{length})^3$ の次元を持つ。また $k_p = 2\pi/r_p$ であり r_p は多孔質ガラスの平均孔径、つまりランダムポテンシャルの特徴的なサイズを意味する。このアンサンブル平均をとるという操作は次のような考察から正当化される。多孔質ガラス中への注入量が少ないと液体 ^4He は希薄となり、そのボース凝縮のコヒーレンス長は数 $100\text{\AA} \sim 1000\text{\AA}$ にまで長くなるといわれている。一方、今考えている多孔質 Vycor ガラスの平均孔径は数 10\AA である。よってコヒーレンス長は孔径よりも十分長く、系はポテンシャルの空間変化よりはむしろ空間平均された量に依存するであろうと考えられる。よって多孔質 Vycor ガラス中で系は三次元的にほぼ一様となり、波数表示やランダムポテンシャルに関するアンサンブル平均が正当化されるのである。ランダムポテンシャルに関して式 (3.1.43) を用いていることで、我々のモデルは Huang と Meng のモデル [14] とは完全に異なっている。

上の考察を踏まえ、 \hat{K}_{R1} に関する摂動論を展開する。再び温度 Green 関数を定義する。今度は無摂動温度 Green 関数が式 (3.1.21), (3.1.22) の \mathcal{G} と \mathcal{G}_{12} になる。1次の摂動は粒子線が保存しないため存在せず、2次の摂動はファインマンダイアグラムで図 3.4 のように表すことができる。この摂動を取り込んだ結果、温度 Green 関数は次のようになる。

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, \omega_n) - n_0 R(k) \beta \hbar \delta_{\omega_n, 0} \frac{(u_k - v_k)^4}{E_k^2} \quad (3.1.44)$$

$$\mathcal{G}_{12}(\mathbf{k}, \omega_n) = \mathcal{G}_{12}^0(\mathbf{k}, \omega_n) - n_0 R(k) \beta \hbar \delta_{\omega_n, 0} \frac{(u_k - v_k)^4}{E_k^2} \quad (3.1.45)$$

ただし、無摂動の温度 Green 関数 $\mathcal{G}^0, \mathcal{G}_{12}^0$ は式 (3.1.21), (3.1.22) の $\mathcal{G}, \mathcal{G}_{12}$ に等しい。こ

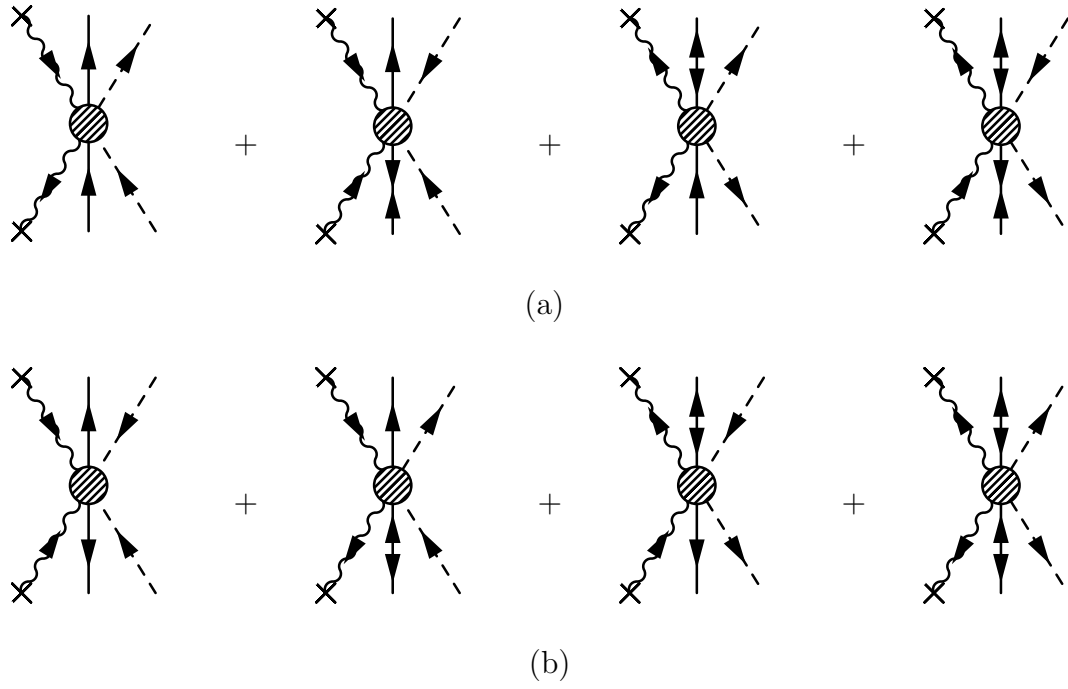


図 3.4: 正常温度 Green 関数 (a) と異常温度 Green 関数 (b) の \hat{K}_{R1} による 2 次の摂動。実線の矢印は無摂動の温度 Green 関数、点線の矢印は凝縮体、波線はランダムポテンシャルを表す。

の温度 Green 関数を用いて、粒子数とエネルギーを計算すれば

$$n = n_0 + n_1 + n_T + n_R \quad (3.1.46)$$

$$\frac{E}{V} = \frac{E_1}{V} + \frac{E_T}{V} + \frac{E_R}{V} \quad (3.1.47)$$

$$n_R = \frac{m^2 R_0}{8\pi^{3/2} \hbar^4} \sqrt{\frac{n_0}{a}} \left[e^{2\alpha} (1 + 4\alpha) \{1 - \text{erf}(\sqrt{2\alpha})\} - 2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \right]$$

$$\frac{E_R}{V} = \frac{m\sqrt{a}n_0^{3/2} R_0}{4\sqrt{\pi}\hbar^2} \left[-e^{2\alpha} (5 + 4\alpha) \{1 - \text{erf}(\sqrt{2\alpha})\} + \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha}} (1 + \alpha) \right]$$

となる。ここで $\alpha = 4\pi a n_0 / k_p^2$ である。erf は誤差関数を表す。式 (3.1.46) 中の n_R はランダムポテンシャルと凝縮体の散乱によって引き起こされる非凝縮体を、式 (3.1.46) 中の E_R はその散乱がもつエネルギーを表す。式 (3.1.46) において $a \rightarrow 0$ とすると n_R は発散する。これは本章の最初に述べたように、ランダムポテンシャルの存在下で粒子間相互作用が重要であることを意味している。さらに式 (3.1.40) から超流動密度も計算できて

$$n_s = n - n_{nT} - n_{nR} \quad (3.1.48)$$

$$n_{nR} = \frac{4}{3} n_R$$

が得られる。式 (3.1.48) 中の $n_{nR} = 4/3nR = n_R + 1/3n_R$ という関係から分かるように、ランダムポテンシャルは非凝縮体よりも多くの常流体を生み出している。つまり凝縮体のいくらかはランダムポテンシャルに捕らえられ、常流体に属していることとなり、さらに $n \simeq n_{nR}$ という状況では絶対零度でも超流動にならないことが分かる。

最後にここまでの計算では温度 Green 関数を用いた摂動論を展開してきたが、 \hat{K}_2, \hat{K}_{R1} において

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{\hat{c}_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} + g_{\mathbf{k}} \quad (3.1.49)$$

というボコリューボフ変換を用いて \hat{K}_2 と \hat{K}_{R1} を対角化することによっても同様の結果が得られる [18]。つまり今まで用いてきた摂動計算がすべての次数の摂動を含んでいることを表している。

3.2 計算結果

式 (3.1.46), (3.1.47), (3.1.48) を用いて、系の凝縮体密度やエネルギー、比熱、そして超流体密度などの物理量を計算し、粒子間相互作用や特にランダムポテンシャルがこれらの物理量にどのような影響を与えるのか考察できるようになった。しかし $\hat{K}_3, \hat{K}_4, \hat{K}_{R2}$ の項が残っており、これらの項を取り入れた摂動計算をさらに進めなければいけない。だが、これらの項は非凝縮体同士の高次の散乱や、非凝縮体とランダムポテンシャルとの散乱など、凝縮体の項をほとんど含まない。それゆえ低温において凝縮体がほとんど熱的に励起されず、ほぼ一定となる領域ではここまでの摂動計算で十分に系を記述できていると考えられる。もちろん凝縮体の量が劇的に変化するような高温領域を考えるとこれらの項を考える必要がある。それは 3.3 節で検討することにし、本節ではここまでの計算で物理量を定量的に計算し、低温領域での実験結果と比較することにする。

3.2.1 パラメーターの決定

実験との定量的な比較をするためには幾つかのパラメーターを決定しなければならない。 $m \simeq 6.6 \times 10^{-27} [\text{kg}]$, $a \simeq 5.0 \times 10^{-10} [\text{m}]$ は ^4He 原子の質量と s 波散乱長である。その他のパラメーターは Reppy 達の実験から決定する [10]。体積 V は Vycor ガラス中の孔の空いている部分の体積、つまり Vycor ガラス全体の体積の約 40% であり、 $1 \times 10^{-6} [\text{m}^3]$ のオーダーである。Vycor ガラス中の ^4He の密度 n は次のようにして見積もられる。Vycor ガラス中では ^4He 原子はファンデルワールス引力によって孔の表面 ($\simeq 10^8 [\text{m}^2/\text{m}^3]$) を第 1 層として完全に覆ってしまい、壁に吸着しない残りの ^4He 原子のみが希薄気体として振舞う。そのため希薄気体の密度 n は液体 ^4He の注入量から吸着量を引くことによって見積もられ、大体 $1 \times 10^{-5} n_{\text{bulk}} \lesssim n \lesssim 0.7 n_{\text{bulk}}$ であると考え

られる。ここで $n_{bulk} \simeq 2.1 \times 10^{28} [\text{m}^{-3}]$ はバルクの液体 ^4He の密度である。壁に吸着した ^4He の第1層は固体として振る舞い、Vycor ガラスの平均孔径 30\AA は実質 $2a$ だけ減ることになり、 $r_p \simeq 20[\text{\AA}]$ となる。残ったパラメータはランダムポテンシャルの特徴的な強度 R_0 であり、これは実験との比較によって見積もられる。図 3.5(a) は 2.1 節で議論した絶対零度近傍での超流動の観測実験の拡大図である。ここでねじれ振子子の周期差 ΔP に比例する超流動成分が約 $17.5[\text{mg}]$ の注入量で消失している。一方図 3.5(b) は式 (3.1.48) から得られた絶対零度での超流動密度である。実験同様に超流動密度がある注入量で消失するが、その注入量は R_0 に依存する。つまり R_0 が図 3.5 の (a) と (b) を比較することによって見積もられ、ここでは $R_0 \simeq 5 \times 10^{-75} \text{J}^2\text{m}^3$ が得られる。ここで R_0 から換算した ^4He 原子 1 個あたりのエネルギー $R_w \equiv \sqrt{R_0 n}$ を定義すると、 R_w/k_B は $0.001 \sim 1[\text{K}]$ のオーダーとなる。また超流動密度は実験においても計算にお

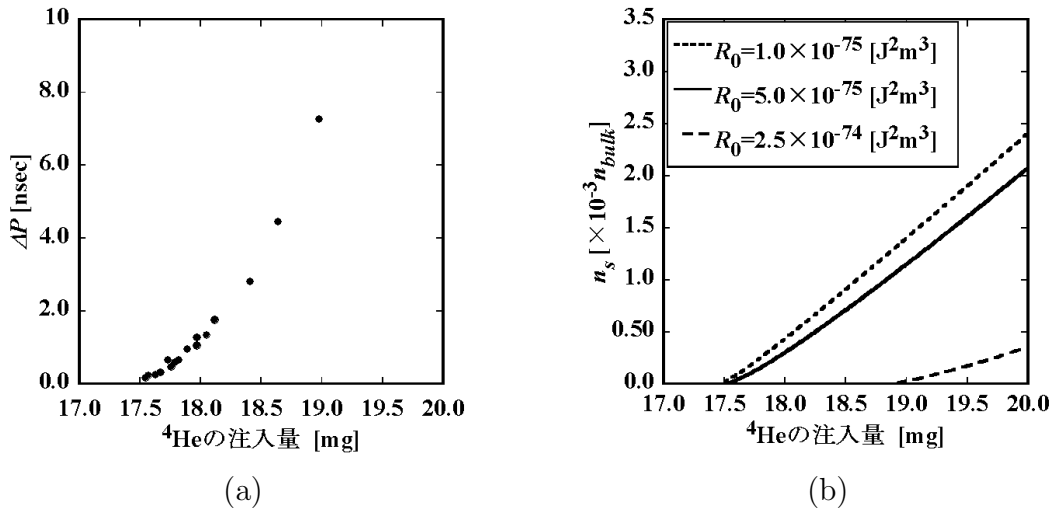


図 3.5: 実験における絶対零度付近での超流動の測定結果 (a) (文献 [10] の図 12) と絶対零度での超流動密度の計算結果。 ΔP はねじれ振子子の周期差であり、ほぼ超流動密度に比例する。

いても、超流動が消失する注入量付近でほぼ線形に近い形で立ち上がっているが、実験において n_s の大きさが得られていないためその傾きまでは比較できない。しかし超流動が消失する注入量 $17.5[\text{mg}]$ 付近での注入量に対する ΔP や超流動密度の臨界指数 x を次のように定義する。

$$\Delta P \propto (C/17.5 - 1)^x \quad (3.2.1)$$

ここで $C[\text{mg}]$ は図 3.5 中の注入量である。実験では $x = 1.19 \pm 0.17$ であり、見積もった R_0 で計算した値では $x = 1.21$ と実験に近く、この R_0 の値は妥当であると考えられる。

3.2.2 実験との比較と理論的予言

すべてのパラメーターを決定することができたので、実験と計算との定量的な比較を行う。比熱の比較を行うが、比熱は式 (3.1.47) のエネルギーを温度で微分することによって得られる。図 3.6 は低温領域における実験と我々の計算結果の比較である。図

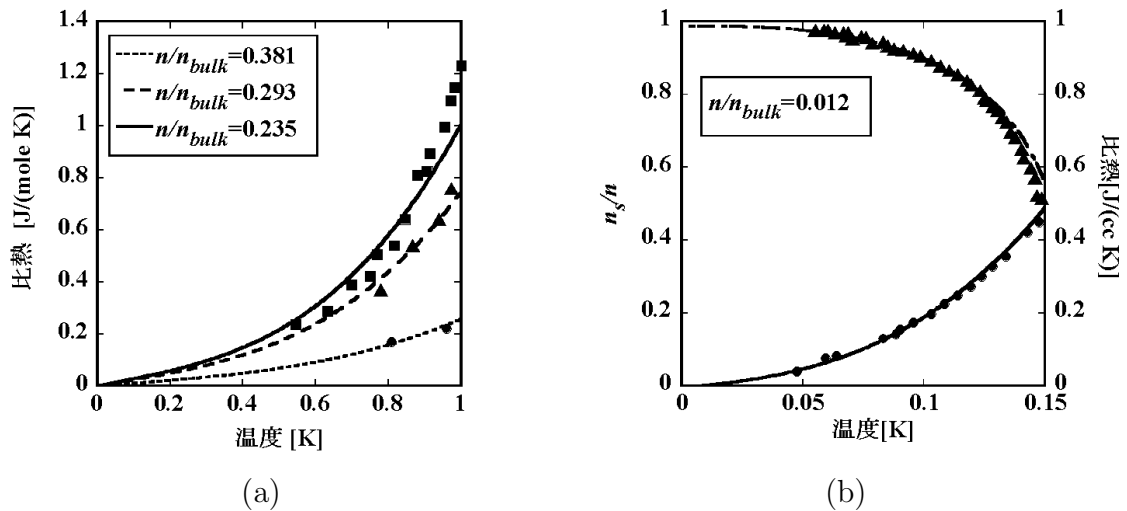


図 3.6: 実験 (点) と計算 (線) で得られた比熱のデータ。(a) の実験データは文献 [10] の図 1 を参照しており丸、三角、四角の点はそれぞれ full pores, $\sigma = 0.780$, $\sigma = 0.636$ に相当する。ここで σ は最大注入量 (full pores coverage) に対する注入量の比である。(b) では超流動密度も比較している ($T_c = 0.163$ [K])。

3.6(a) は比較的注入量の多いときの比熱の比較であり、密度 n は実験における ^4He の注入量から見積もった。一方、図 3.6(b) は注入量の小さいときの比熱と超流動密度の比較であり、密度 n は注入量に関する情報がなかったため、超流動の転移温度から見積もった (文献 [10] の図 8)。理論と実験はフリーパラメーターなしで定量的に良く一致している。特に注入量、つまり密度の小さな図 3.6(b) での一致は非常に良い。つまり Vycor ガラス中で液体 ^4He が三次元希薄ボース気体のように振舞うという我々の描像が裏付けられたことになる。図 3.6(a) では 1.0 [K] 以上で凝縮体密度 n_0 は急激に減少し、そのため計算と実験はあまり一致しなくなる。しかし図 3.6(b) では超流動転移温度近傍の非常に高い温度にわたるまで凝縮体密度はほとんど変化せず、計算と実験の比熱はよく一致する。これは系が図 3.6(a) のときより希薄であり、温度励起よりはむしろランダムポテンシャルの影響を強く受けているためである。これについては後述する。

我々の計算は実験とよく一致するだけでなく、実験ではまだ観測されていないランダムポテンシャルが引き起こす効果を幾つか予言することができる。図 3.7 は図 3.6(a) の対数表示である。この図から明らかなようにランダムポテンシャルがない場合、比

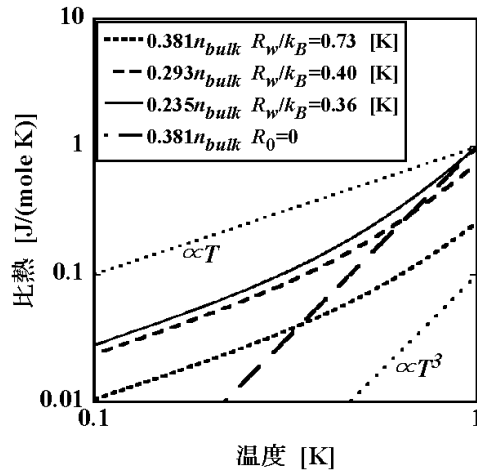


図 3.7: 図 3.6(a) の両対数表示。 $n/n_{bulk} = 0.381$ における $R_0 = 0$ での比熱と $\propto T, \propto T^3$ の線が追加されている。

熱はフォノンの寄与による温度の 3 乗の振る舞いを示すが、ランダムポテンシャルがあると、その振る舞いは低温で温度に線形になる。これは低温でランダムポテンシャルの寄与が、素励起の寄与よりも大きいことを意味している。式 (3.1.47) 中の E_R は n_0 を介してのみ温度に依存する。また E_R は凝縮体のランダムポテンシャルによる散乱によって生じる項であり、与えられる比熱は凝縮体がランダムポテンシャルを抜け出すのに必要なエネルギーであることを意味する。もし実験でこのような低温における温度に線形の比熱が観測されれば、それはランダムポテンシャルの効果をよりはっきりと観測したということの意味するであろう。

図 3.8 は我々のモデルから計算された n_0 と n_s の温度と密度依存性である。 n_0, n_s と

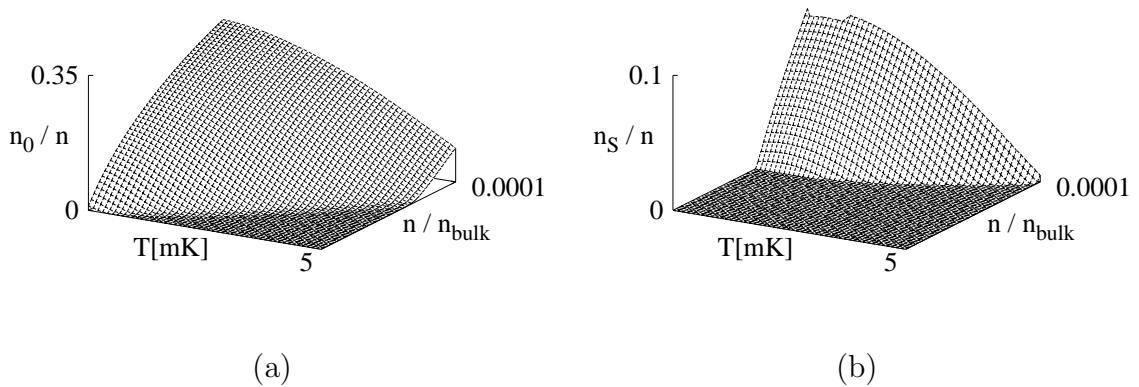


図 3.8: n_0 (a) と n_s (b) の温度と粒子密度依存性。 ($R_0 = 5.0 \times 10^{-75} [\text{J}^2 \text{m}^3]$)

もに密度の減少に伴って減っているが、これは密度が小さいほどランダムポテンシャル

ルの影響が大きいことを意味している。つまりより希薄な図 3.6(b) は、図 3.6(a) に比べ、ランダムポテンシャルの影響が大きく、超流動は温度励起よりはむしろランダムポテンシャルによって抑制されている。よって超流動転移温度付近におけるまで、我々のモデルは実験の比熱と超流動を良く再現できるのである。さらに図 3.8 は n_0 と n_s の違いをより明確に表している。超流動密度は前に述べたとおり、絶対零度においてもある密度以下で消失しているが、凝縮体は存在している。この状況は 3.1 節で予測したように、ポテンシャルによって凝縮体が捕らえられ超流動に参加できないということの意味する。2.2 節で紹介した中性子散乱の実験も同様の状況、つまり超流動転移温度以上での凝縮体の存在を観測している [13]。低温、低注入量における中性子散乱の実験で凝縮体の定量的な測定が行われれば、このような状況を観測することができるであろうと我々は期待している。

図 3.9 は超流動が消失する直前の密度領域における超流動密度の温度依存性である。このような領域では超流動密度が温度の減少に伴って再び消失するという再起型の転移をすることがわかる。この再起型の転移は次のように理解される。図 3.10 に示され

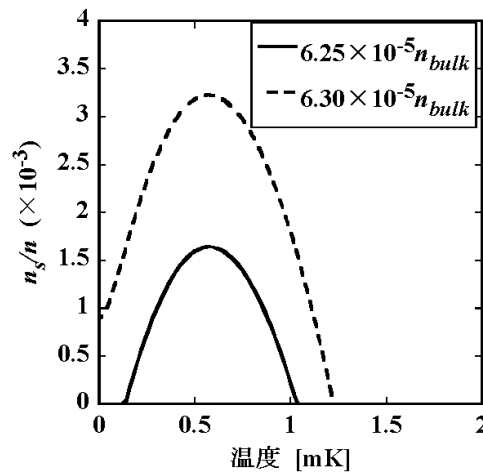


図 3.9: 低温、低密度領域における n_s の温度依存性。温度の減少に伴って再び消失している。

ているように、ランダムポテンシャルと凝縮体の散乱によって引き起こされる凝縮体の抑制 n_R は温度の増加に伴い、 n_0 とともに減少する。よってランダムポテンシャルによる超流動密度の抑制 $n_{nR} = 4/3n_R$ も温度の増加とともに減少する。もちろん素励起による超流動の抑制 n_{nT} は温度とともに増加するが、 $T \leq 0.5[\text{mK}]$ という低温において、 n_{nR} の減少は n_{nT} の増加よりも大きい。これは言い換えると、ランダムポテンシャルによって捕らえられていた凝縮体が熱的励起によってその束縛を抜け出し、超流動に参加するということを意味している。この再起型の転移は低温、低密度領域の

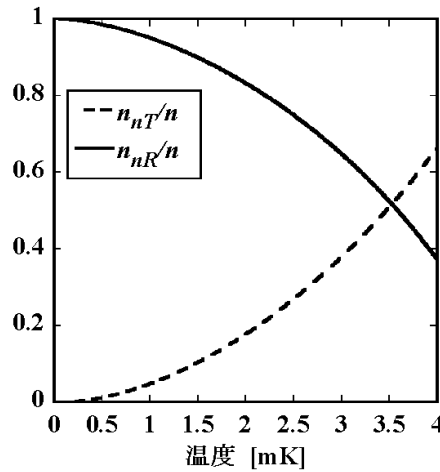


図 3.10: 再起型転移に関する n_{nT} と n_{nR} の温度依存性。密度は $n = 6.25 \times 10^{-75} n_{bulk}$ (図 3.9 の実線)。

みで起こり、実験ではまだ観測されていない。しかし、これから述べるように R_0 を大きくすることによって、観測が可能になるかもしれない。 n_s が極大値を取る温度 T_{max} と $\Delta n_s \equiv n_s(T = T_{max}) - n_s(T = 0)$ を定義すると、これらの粒子密度依存性は図 3.11 のようになる。両者の値は R_0 とともに増加している。これはもし実験において R_0 の値を大きくすることができるならば、この再起型の転移はより観測が容易になることを意味している。 R_0 はランダムポテンシャルの特徴的な強度であり、たとえば Vycor ガラスの空間充填率を下げることによって大きくすることができるであろうと考えられる。

3.3 揺らぎにおける高次の計算

3.2 節までにおいて、 \hat{K}_2, \hat{K}_{R1} までの摂動論を展開し、それが低温において実験と定量的に良く一致するという結果を得た。しかし温度が上がるに伴い、凝縮体から非凝縮体への励起が大きくなるので高温領域において物理量を比較する場合、非凝縮体の高次の項 $\hat{K}_3, \hat{K}_4, \hat{K}_{R2}$ を無視することはできない。しかしこれは容易ではなく、数学的に多くの困難を抱えているのが現状である。本節では Hartree-Fock 近似を用いて \hat{K}_4 の項を取り入れる、または \hat{K}_{R1} がない場合において \hat{K}_3, \hat{K}_4 を直接摂動展開する、という 2 つを行い、それぞれが抱える問題点を指摘する。

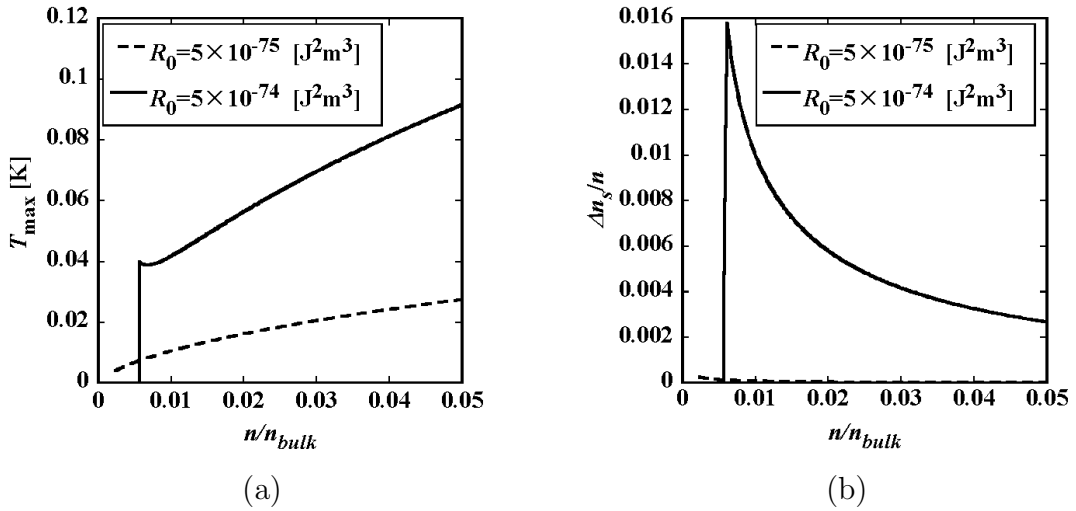


図 3.11: T_{\max} (a) と Δn_s (b) の粒子密度依存性。 T_{\max} は n_s が極大値を取るときの温度であり、 $\Delta n_s \equiv n_s(T = T_{\max}) - n_s(T = 0)$ である。

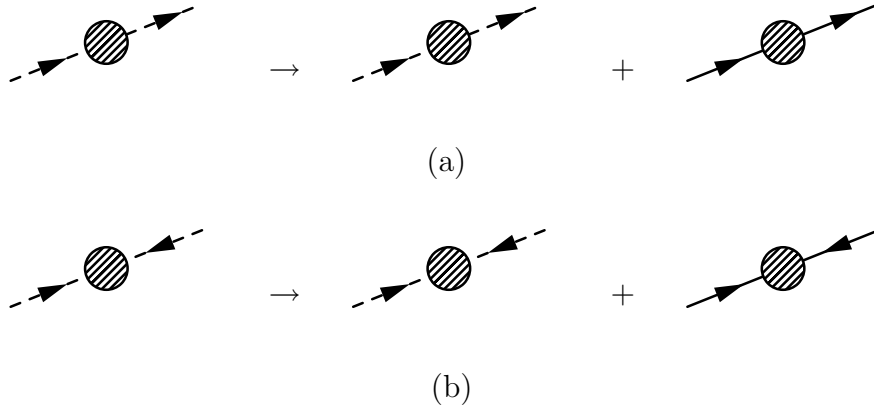


図 3.12: Hartree-Fock 近似で用いる \hat{K}_4 に関する相互作用。実線は Green 関数ではなく、 ω_n に依存しない非凝縮体の粒子密度 n' (a), \tilde{n}' (b) を表す。

3.3.1 Hartree-Fock 近似

Hartree-Fock 近似では、図 3.12 のように \hat{K}_2 の摂動のダイアグラム中の相互作用の部分の凝縮体の粒子線に非凝縮体の粒子線を付け加えることによって、 \hat{K}_4 の項を取り入れる [23]。図中の実線が非凝縮体の粒子密度 n', \tilde{n}' であり、それぞれ

$$n' = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} = - \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{V} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\omega_n \eta} \mathcal{G}^{HF}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (3.3.1)$$

$$\tilde{n}' = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger = - \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{1}{V} \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{\mathbf{k}, n} e^{i\omega_n \eta} \mathcal{G}_{21}^{HF}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (3.3.2)$$

で求められる。ここで $\mathcal{G}^{HF}, \mathcal{G}_{12}^{HF}$ は Hartree-Fock 近似 (図 3.12) で求められた温度 Green 関数であり、次のような形になる。

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{HF}(\mathbf{k}, \omega_n) &= \frac{|u_k^{HF}|^2}{i\omega_n - E_k^{HF}/\hbar} - \frac{|v_k^{HF}|^2}{i\omega_n + E_k^{HF}/\hbar} \\ &\quad - n_0 R(k) \beta \hbar \delta_{\omega_n, 0} \frac{(u_k^{HF} - v_k^{HF})^4}{E_k^2} \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{12}^{HF}(\mathbf{k}, \omega_n) &= -u_k^{HF} v_k^{HF} \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k^{HF}/\hbar} - \frac{1}{i\omega_n + E_k^{HF}/\hbar} \right) \\ &\quad - n_0 R(k) \beta \hbar \delta_{\omega_n, 0} \frac{(u_k^{HF} - v_k^{HF})^4}{E_k^2} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

ここで

$$|u_k^{HF}|^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\epsilon_k + g\tilde{n}}{E_k^{HF}} + 1 \right\} \quad (3.3.5)$$

$$|v_k^{HF}|^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\epsilon_k + g\tilde{n}}{E_k^{HF}} - 1 \right\} \quad (3.3.6)$$

$$E_k^{HF2} = \epsilon_k^2 + 2g\tilde{n}\epsilon_k \quad (3.3.7)$$

である。ただし化学ポテンシャルに関しては前回と同様の方法で $\mu = g(n_0 + 2n' - \tilde{n}')$ を得た。ここで \tilde{n} は低温において

$$\begin{aligned} \tilde{n} &= n_0 + \tilde{n}' \\ &\simeq n_0 + n_R^{HF} \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

$$n_R^{HF} = \frac{m^2 R_0}{8\pi^{3/2} \hbar^4} \sqrt{\frac{n_0^2}{\tilde{n}a}} \left[e^{2\alpha^{HF}} (1 + 4\alpha^{HF}) \{1 - \text{erf}(\sqrt{2\alpha^{HF}})\} - 2\sqrt{\frac{2\alpha^{HF}}{\pi}} \right]$$

のように近似して表すことができる (Popov 近似)。ここで $\alpha^{HF} = 4\pi a \tilde{n} / k_p^2$ である。これを用いて粒子密度を計算すれば以下ようになる。

$$\begin{aligned} n &= n_0 + n' \\ &= n_0 + n_1^{HF} + n_T^{HF} + n_R^{HF} \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

$$\begin{aligned} n_1^{HF} &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (\tilde{n}a)^{3/2} \\ n_T^{HF} &= \frac{4}{\sqrt{\pi}\lambda^3} \int_0^\infty dt \frac{t(t^2 + \theta^{HF}/2)}{\sqrt{t^2 + \theta^{HF}} [\exp(t\sqrt{t^2 + \theta^{HF}}) - 1]} \end{aligned}$$

ここで $\theta^{HF} = 8\pi a \hbar^2 \beta \tilde{n} / m$ である。超流動密度も計算できて

$$n_s = n - n_{nT}^{HF} - n_{nR}^{HF} \quad (3.3.10)$$

$$n_{nT}^{HF} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}\lambda^3} \int_0^\infty dt \frac{t^4 \exp(t\sqrt{t^2 + \theta^{HF}})}{[\exp(t\sqrt{t^2 + \theta^{HF}}) - 1]^2}$$

$$n_{nR}^{HF} = \frac{4}{3} n_R^{HF}$$

となる。ここまでの式を見てみると、Hartree-Fock 近似は $n_0 \rightarrow \tilde{n}$ となった以外にほとんど何も変わっていない。特に低温領域における凝縮体密度や超流動密度は定性的にも定量的にもほとんど変化せず、Hartree-Fock 近似を使ったところであまり興味深い結果は得られない。 \hat{K}_{R2} についても同様に Hartree-Fock 近似が使える (図 3.13) n_R^{HF} は

$$n_R^{HF} = \frac{m^2 R_0}{16\pi^{3/2}\hbar^4} \sqrt{\frac{(n + \tilde{n})^2}{\tilde{n}a}} \left[e^{2\alpha^{HF}} (1 + 4\alpha^{HF}) \{1 - \text{erf}(\sqrt{2\alpha^{HF}})\} - 2\sqrt{\frac{2\alpha^{HF}}{\pi}} \right] \quad (3.3.11)$$

というような修正を受けるがやはり式 (3.3.8) と比べ、ほとんど変化が見られない。ま

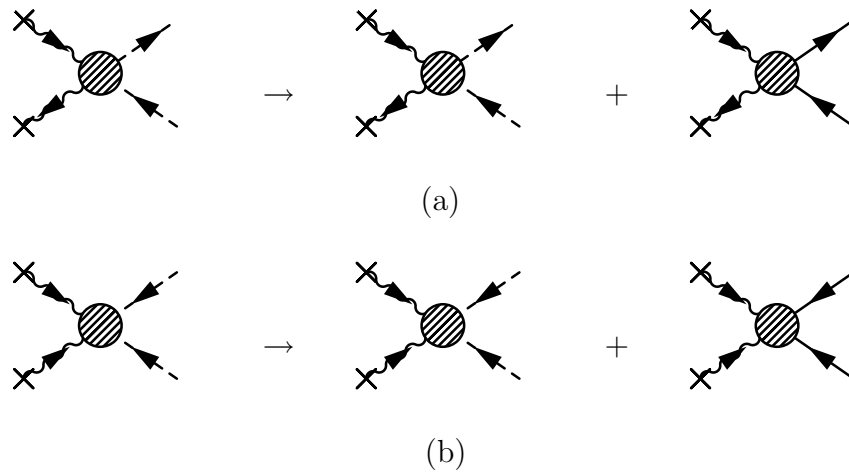


図 3.13: Hartree-Fock 近似で用いる \hat{K}_{R2} に関する相互作用。

た凝縮体の転移温度付近のような高温部分においては定量的に大きな差が現れるが、そもそも式 (3.3.8) において Popov 近似を用いているため、得られた結果がやはり物理的に正しいかどうかは疑問である。結果として Hartree-Fock 近似を用いた \hat{K}_4 や \hat{K}_{R2} の取り込みにはあまり大きな期待はできないことが分かる。

3.3.2 高次の摂動論

高温領域を記述するのに、Hartree-Fock 近似を用いるのはあまり適当でないということが分かった。よって摂動によってまともに \hat{K}_3 と \hat{K}_4 を取り込むことを試みる。 \hat{K}_3 の奇数次の摂動は粒子線が保存しないので存在せず、偶数次の摂動のみ寄与する。あまりに項が多いので $\mathcal{G}(k, \omega_n)$ のみที่เกี่ยวข้องのもののみ書き下したとき、2次と4次のファインマンダイアグラムは図 3.14 のようになる。また \hat{K}_4 の1次と2次の摂動のファインマンダイアグラムは $\mathcal{G}(k, \omega_n)$ のみที่เกี่ยวข้องのもののみ書き下せば、図 3.15 のよう

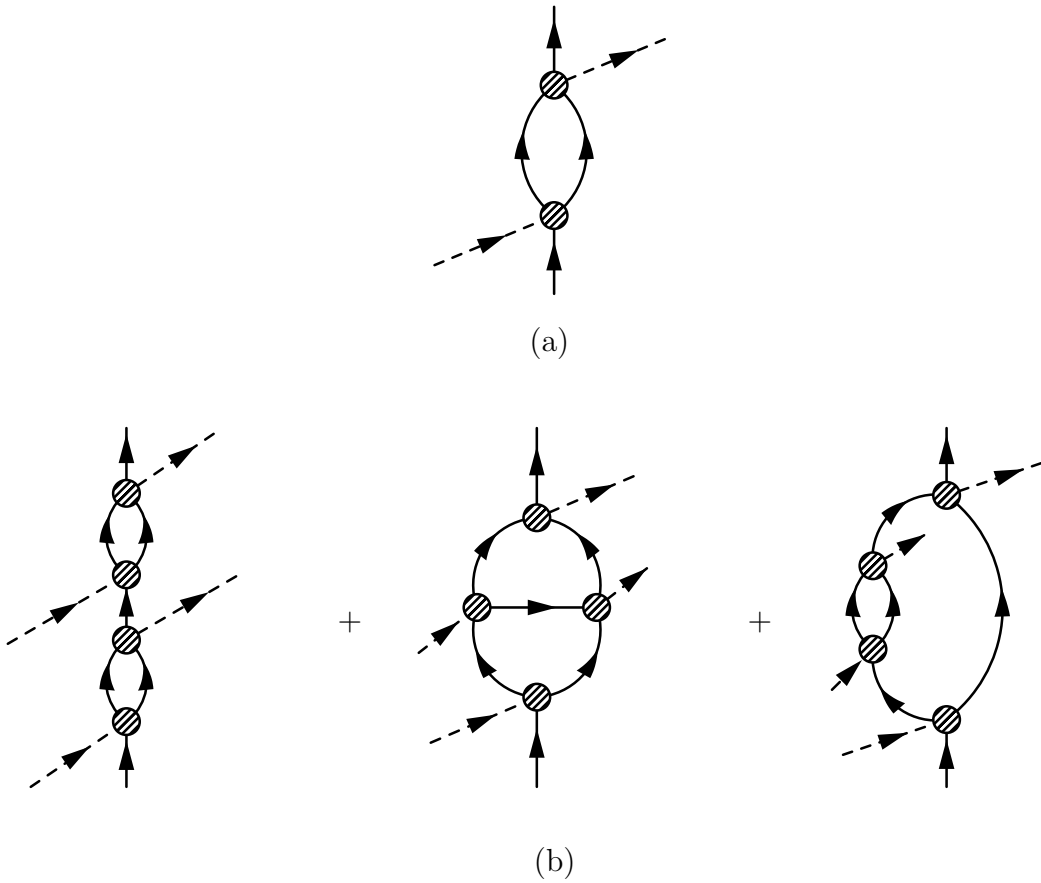


図 3.14: \hat{K}_3 による 2 次の摂動 (a) と 4 次の摂動 (b) の $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ のみが関与するもの。

になる。 \hat{K}_3 の摂動に関しては 4 次までで Dyson 方程式を、 \hat{K}_4 の摂動に関しては図 3.16 のような Bethe-Salpeter 方程式を取り入れた Dyson 方程式を用いて摂動を計算し、全粒子密度を計算すると次のような結果が得られる。

$$n = n_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon_k - \sqrt{\epsilon_k^2 + 2n_0 g \epsilon_k}}{2\sqrt{\epsilon_k^2 + 2n_0 g \epsilon_k}} + \frac{n_0 g}{2\epsilon_k + 2\mu} + \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + 2n_0 g \epsilon_k}} \frac{1}{\exp(\beta\sqrt{\epsilon_k^2 + 2n_0 g \epsilon_k}) - 1} \right] \quad (3.3.12)$$

驚くべきことに式 (3.3.12) は二次元系において絶対零度以外でも有限の n_0 を与えることになる。これは粒子間相互作用のある二次元ボース系で凝縮体の密度を見積もるときに粒子間相互作用の高次の項 \hat{K}_3, \hat{K}_4 が必ず必要であることを意味している。もちろんこのままの形式では Kosterlis-Thouless の超流動転移温度付近のような量子渦によって凝縮体が空間的に揺らいでいる状況を記述することはできないが、低温で凝縮体密度および位相の空間揺らぎが十分小さければ有効と考えられる。

三次元系においても凝縮体の量をより高温まで正確に見積もることができると考えられる。また絶対零度における凝縮体の密度は

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left(\frac{32}{3} - 2\sqrt{2}\pi \right) \sqrt{\frac{n_0 a^3}{\pi}} \quad (3.3.13)$$

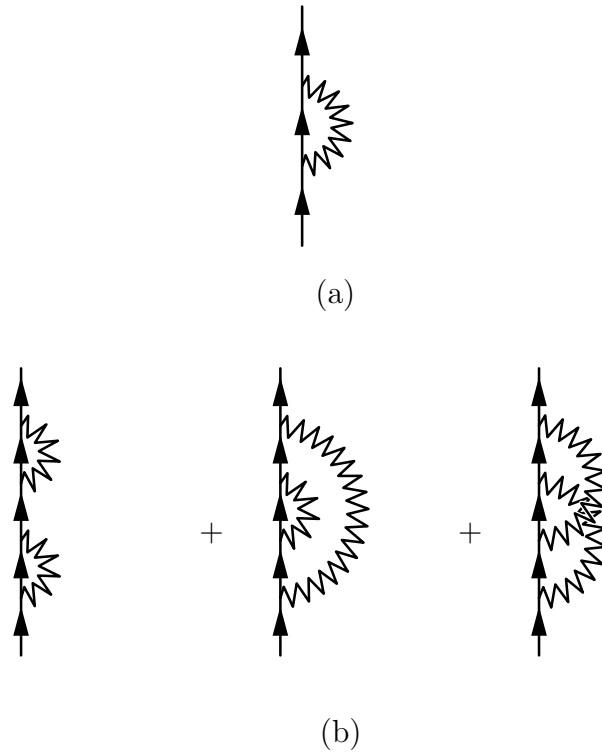


図 3.15: \hat{K}_4 による 1 次の摂動 (a) と 2 次の摂動 (b) の $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ のみが関与するもの。

となり、式 (3.1.27) から求めた

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{n_0 a^3}{\pi}} \quad (3.3.14)$$

よりも若干大きな量になっている。これは非凝縮体同士の相互作用を考えているため、凝縮体がより励起されにくくなっているためであると考えられる。とはいえ、絶対零度ではその量はほとんど変わらない。問題点としては、 \hat{K}_3, \hat{K}_4 の摂動のすべてを取り入れているわけではないので式 (3.3.12) がどの温度領域まで正確に表現できるかは分からない。無視した項がどれほど効いてくるのか、より詳しい解析が必要であると考えられる。

現在、ランダムポテンシャルの効果 \hat{K}_{R1} や \hat{K}_{R2} を取り入れた摂動計算や超流動密度の計算はまだ完成していない。特に \hat{K}_{R2} の摂動計算は複素数 $U_{\mathbf{k}}$ の位相によって物理量が大きく異なってくるため、その扱いは非常に困難である。これらの計算を行い、高温領域まで我々のランダムポテンシャル中の希薄ボース気体の描像を拡張して実験と比較することが今後の課題である。

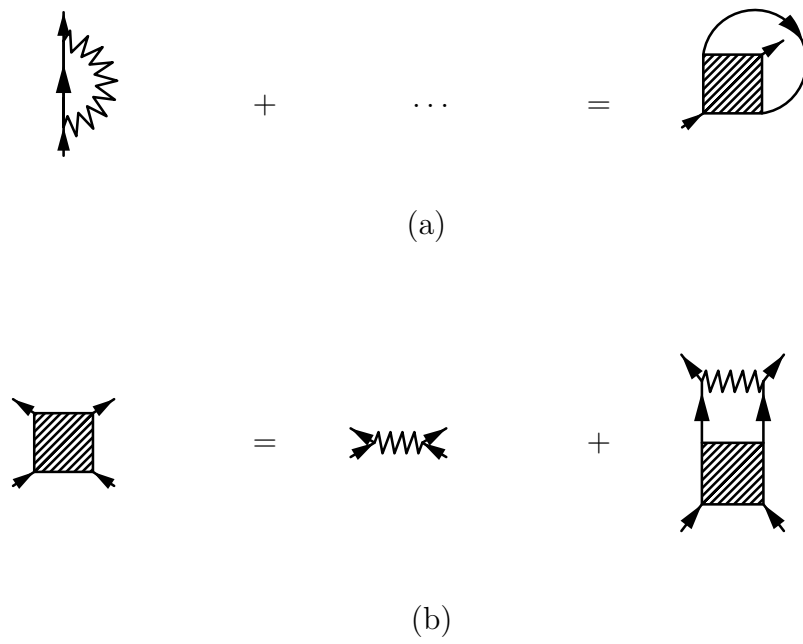


図 3.16: \hat{K}_4 の摂動における有効相互作用 (a) と、その Bethe-Salpeter 方程式において $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$ のみที่เกี่ยวข้องするもの (b)。

第4章 ランダムポテンシャル中のGPモデルを用いた超流動の数値的解析

前章で行った解析計算では、BECのコヒーレンス長がランダムポテンシャルの特徴的なサイズよりも長いために系がポテンシャルの空間平均に依存し、ランダムポテンシャルのアンサンブル平均を用いて、系のボース凝縮体密度や比熱などの物理量の熱平衡状態の振る舞いを計算した。ところがランダムポテンシャルの特徴的なサイズが大きくなってコヒーレンス長を超えると、系はポテンシャルの局所的な形状そのものに依存するようになる。これは実験でも実現可能であり、例えばボース凝縮体の局在などの効果が現れるようになってくると考えられる。このような状況下では統計的物理量だけではなく、ボース凝縮体の波動関数そのものの振る舞いも非常に興味深い。本章ではランダムポテンシャル中の二次元ボース系において、様々なコヒーレンス長やポテンシャル強度におけるボース凝縮の絶対零度での巨視的波動関数そのものを Gross-Pitaevskii 方程式 [19, 20] の数値計算によって求め、その振る舞いを議論する。最終的に実験との比較を行う場合は三次元系での計算が必要になってくるが、二次元系の計算においてもランダムポテンシャルがボース系に与える様々な効果を明らかにすることが可能であり、例えばボース凝縮の巨視的波動関数の局在化や、量子渦対の生成、消滅に伴う超流動の抑制効果などを計算することができる。こういった効果は三次元系でも十分に期待できるものである。また Gross-Pitaevskii 方程式を用いた計算の一番の特徴は、波動関数の振幅と位相を同時に知ることができることであり、不純物ボース系で通常用いられているボース・ハバードモデルやジョセフソン結合アレーモデル [15] とは決定的に異なる。Gross-Pitaevskii 方程式を用いた数値計算によって不純物ボース系の新たな局面を知ることができるであろう。

4.1 GP 方程式とその取り扱い

前章のハミルトニアン の式 (3.1.4) から始める。これをハイゼンベルク表示

$$\hat{K}(t) = \int d\mathbf{x} \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu + U(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)^\dagger \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.1)$$

に変換する。波動関数 $\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t)$ をボース凝縮の巨視的波動関数 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ とそのまわりのゆらぎ $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ とに分ける。

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}, t) + \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.2)$$

絶対零度において揺らぎ $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ は無視できるほど小さいと考えるとハミルトニアンはもはや c -数となり、ここからラグランジュ密度

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{x}, t) = & i\hbar\Phi(\mathbf{x}, t)^*\partial_t\Phi(\mathbf{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Phi(\mathbf{x}, t)^*\cdot\nabla\Phi(\mathbf{x}, t) \\ & + \left[\mu - U(\mathbf{x}) - \frac{g}{2}\Phi(\mathbf{x}, t)^*\Phi(\mathbf{x}, t)\right]\Phi(\mathbf{x}, t)^*\Phi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

が得られる。これをラグランジュの運動方程式に代入することで次の Gross-Pitaevskii 方程式が得られる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu + U(\mathbf{x}) + g|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2\right]\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.4)$$

この Gross-Pitaevskii 方程式を数値的に扱えるようにするために次のような無次元化を行う。

$$\mathbf{x} \rightarrow \xi\mathbf{x} \quad \xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m\mu} \quad (4.1.5)$$

$$t \rightarrow \frac{\hbar}{\mu}t \quad (4.1.6)$$

$$U(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mu U(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.7)$$

$$\Phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \sqrt{\frac{\mu}{g}}\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.8)$$

これを行うことによって無次元化された Gross-Pitaevskii 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\mathbf{x}, t) = \left[-\nabla^2 - 1 + U(\mathbf{x}) + |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2\right]\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.9)$$

を得る。ここで式 (4.1.5) 中の ξ は回復長と呼ばれ、壁や後述する量子渦の芯などで $\Psi(\mathbf{x}, t)$ が抑圧されたとき、バルクの値にまで回復する特徴的な長さを表す。以降は式 (4.1.9) を数値的に解くことで、巨視的波動関数の時間発展を調べる。

4.2 ランダムポテンシャルとその取り扱い

式 (4.1.4) 中のランダムポテンシャル $U(\mathbf{x})$ は図 4.1 のように空間に等間隔 λ ごとに乱数を振り、それを適当に補間することによって作る [27]。このようにすると λ がちょうどランダムポテンシャルの山の間の特徴的なサイズとなり、例えば多孔質 Vycor ガラスの平均孔径に相当する量となる。これを 2 次元に拡張したものが図 4.2(a) である。

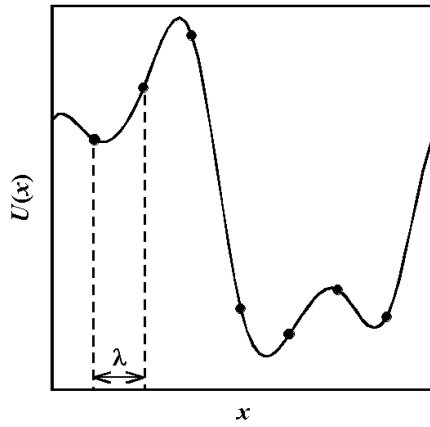
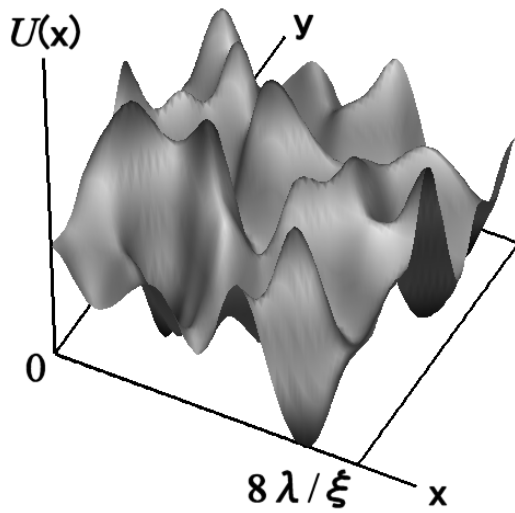
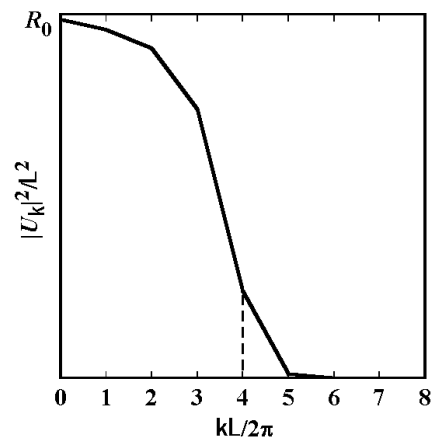


図 4.1: 1次元ランダムポテンシャル $U(x)$ の一例。乱数を間隔 λ ごとに振り、これを補間する。



(a)



(b)

図 4.2: 2次元ランダムポテンシャル $U(\mathbf{x})$ の一例 (a) と 100 個のアンサンブル平均におけるランダムポテンシャルのフーリエ変換 U_k (b)。ここで k は系の波数、 L は一方向の系の大きさである。

またランダムポテンシャルの平均強度と特徴的なサイズ λ を固定し、そのフーリエ変換における 100 個のアンサンブル平均を取ったものが図 4.2(b) である。図 4.2(a) では一方向にポテンシャルの山が平均 4 個できるように λ を調節している ($\lambda = L/8$)、図 4.2(b) では $kL/2\pi = 4$ のところで $|U_k|^2$ が減衰するようなガウス分布に近い形をとっており、 $k = 0$ で特徴的な強度 R_0 を持つ。ここで k は無次元化した系の波数、 L は一方向の系の大きさ、 L は L を無次元化したもの $L = L/\xi$ である。当然ながら、これは 3 章で用いたランダムポテンシャル式 (3.1.43) の設定が妥当であることを示している。

4.3 計算結果

この節では実際に式 (4.1.9) を数値計算した結果について説明する。数値計算法については、空間に関しては周期的境界条件を用いたスペクトル法を、時間に関しては 4 次のルンゲ-クッタ法を用いて計算している [28]。まずはじめに様々なパラメーターで基底状態を求めた結果を、そして得られた基底状態からさらに流れ場をかけたときの系の応答について説明する。

4.3.1 基底状態

基底状態は式 (4.1.9) に仮想的な粘性項を入れた式

$$(i - \gamma) \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) = \left[-\nabla^2 - 1 + U(\mathbf{x}) + |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.1)$$

を用いて、適当な初期の $\Phi(\mathbf{x}, t)$ から時間発展させ、定常状態を見つけることによって得られる。ここで γ は粘性項である。

図 4.2(a) のランダムポテンシャルの元で得られた基底状態を図 4.3 (R_0 依存性) と図 4.4 (ξ 依存性) に示す。両方の図を見てみると分かる通り基底状態の波動関数はポテンシャルが大きいとき、または回復長が短いときにポテンシャルの最小部分に局在する。また回復長が短いときは、ポテンシャルの最小部分だけでなく幾つかの極小部分に局在していることがわかる。これは次のようにして理解できる。ポテンシャルの大きいときは波動関数の閉じ込め効果が強く働くために、波動関数がより局在するがこれは普通の Schrödinger 方程式でも同様である。次に回復長が短い場合だが、ポテンシャルがない場合、平衡状態では式 (4.1.4) で $\mu = g|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ が成り立ち、つまり式 (4.1.5) から $\xi^2 = \hbar^2/2mg|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ となる。よって回復長が短いということは g が大きい、つまり粒子間相互作用が強いということを意味する。ポテンシャルがある場合も事情は同様で、強い斥力相互作用のために波動関数は、ポテンシャルの最小部分にのみ局在するよりも、広がって複数の極小部分に局在したほうがエネルギーが低くなる。

得られた基底状態に関して、式 (3.1.35) を用いて、微小流れ場に対する線形応答の遅延感受率を計算し、そこから超流動密度を得ることができる。ただし式 (3.1.35) 中

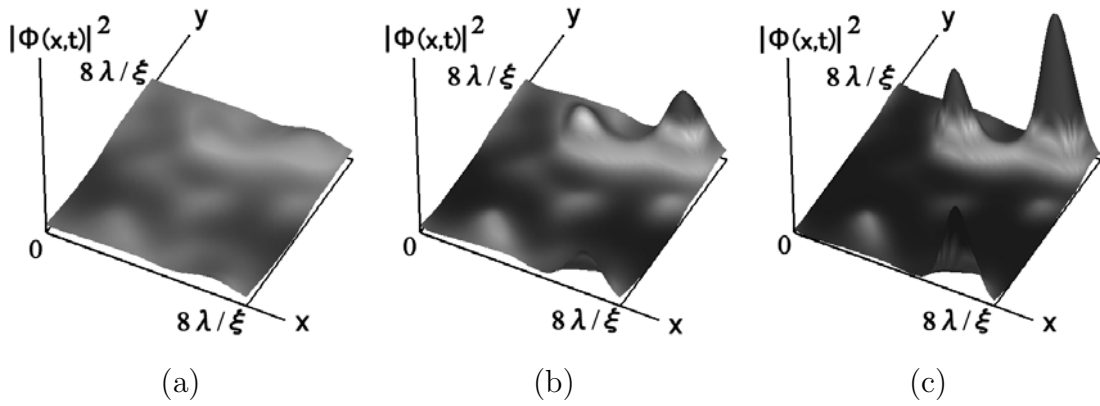


図 4.3: $\xi/\lambda = 2$ における基底状態 $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ の R_0 依存性。それぞれ $\sqrt{R_0/V} = 10$ (a), 30 (b), 60 (c)。ただし $V = L^2$ である。また $\int dx |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 = 64\lambda^2/\xi^2$ となるように計算している

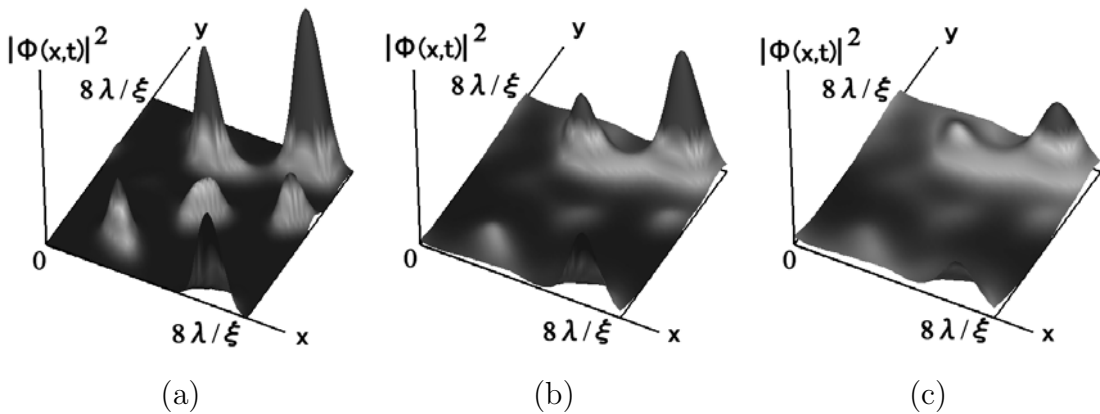


図 4.4: $\sqrt{R_0/V} = 50$ における $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ の ξ 依存性。それぞれ $\xi/\lambda = 1$ (a), 2 (b), 3 (c)。

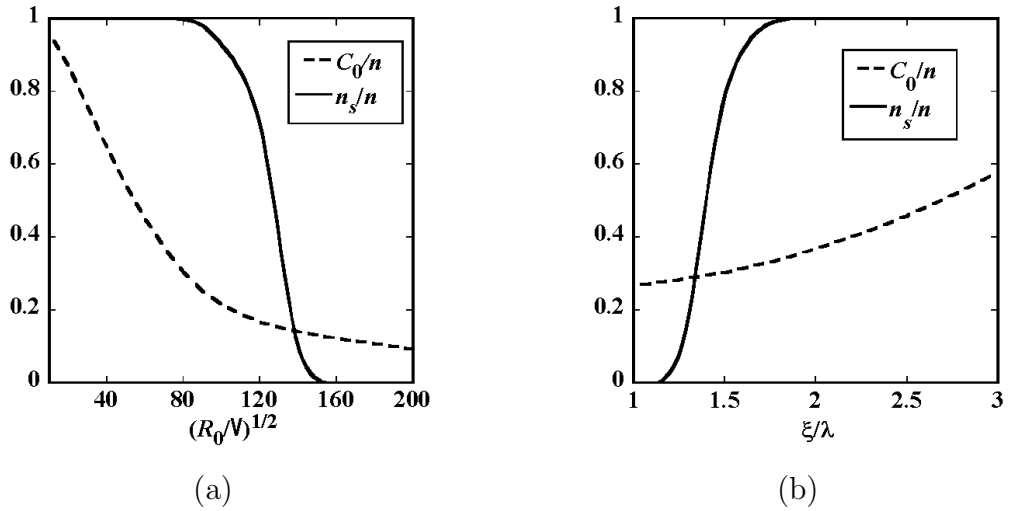


図 4.5: 超流動密度 n_s と相関関数 C_0 の R_0 依存性 (a) と ξ 依存性 (b)。ただし (a) では $\xi/\lambda = 2$ 、(b) では $\sqrt{R_0/V} = 50$ における 100 個のアンサンブル平均を取っている。

の交換関係は $\Phi(x, t)$ がもはや c -数であるため q -数の交換関係の代わりに古典力学の Poisson の交換関係を用いて計算した。図 4.5 は基底状態における超流動密度 n_s と相関関数の空間平均値

$$C_0 = \langle \Phi(x, t) \Phi(x', t') \rangle \quad (4.3.2)$$

の R_0 依存性 (a) と ξ 依存性 (b) である。ただし 1 つの決まった R_0, ξ において 100 個のアンサンブル平均を用いて計算している。この図からわかるように R_0 の大きいときや ξ の小さいとき、つまり波動関数がより局在した状態において超流動密度が急激に減少し、超流動が破壊されていることが分かる。また相関関数 C_0 も同様に R_0 の大きいとき、 ξ の小さいときに減少しているが超流動密度ほど急激ではなく、超流動がないところでも有限の値を持っている。つまり系に相関が残っていても、超流動が消えてしまうということがあり得るということを示している。これは 3 章の図 3.8 で議論した状況、つまりボース凝縮が存在していながら超流動が存在しないという状況と非常に似ている。ただし本章では、相関関数や超流動の抑制は波動関数の局在効果に直接的に起因していると考えられる。つまり相関がある系が局在しているために超流動になれないということであり、この状況は Fischer 達がボースハバードモデルで議論しているようなボースガラスと非常に深い関係にあるのかもしれないが、詳しいところはよく分かっていない。

超流動密度は $n_s/n = 1$ の状態から $n_s/n = 0$ の状態へ急激に転移し、 R_0 と ξ に対して超流動-常流動の相図を描くと図 4.6 のようになる。この相図は、波動関数の局在効果による超流動の破壊を明確に示している。

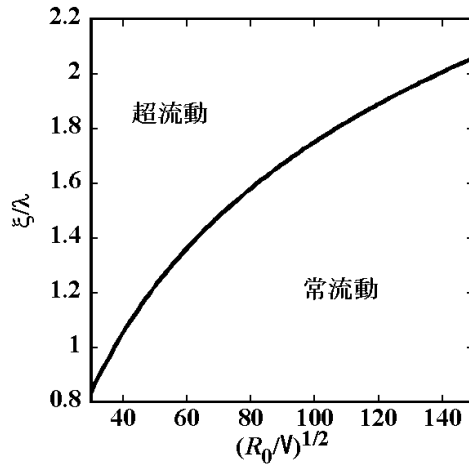


図 4.6: 基底状態から計算された超流動密度によって得られる超流動-常流動の相図。

4.3.2 流れ場をかけたときの応答

前節では、得られた基底状態に微小流れ場を加えたときの線形応答を計算したが、今度は実際に基底状態に有限の流れ場をかけることで、その非線形の応答を計算する。系に流れ場があることは系が速度をもって運動していることと同じであり、従って流れ場があるときの Gross-Pitaevskii 方程式は式 (4.1.4) をガリレイ変換することで得られる。流れ場 v があるときの Gross-Pitaevskii 方程式は次のようになる。

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) = \left[-\nabla^2 - 1 + U(\mathbf{x}) + |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 + i\mathbf{v} \cdot \nabla \right] \Phi(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.3)$$

ただし $v \rightarrow \sqrt{\mu/2m} \mathbf{v}$ の無次元化を行った。

実際に得られた基底状態に流れ場を加えると、ある大きさの流れ場以上で量子渦が対になって生成・消滅するという結果が得られた。量子渦とは超流動や超伝導に固有の渦であり、その循環が量子化されているものである。ボース凝縮している状態の系の速度は式 (3.1.36), (4.1.2) より、 $v(\mathbf{x}, t) = \hbar/m \nabla \theta(\mathbf{x}, t)$ と書くことができる。ここで $\theta(\mathbf{x}, t)$ は複素数 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ の位相である。よって $\text{rot} v(\mathbf{x}, t) = 0$ となり、ボース凝縮系では通常、渦が存在できない。しかし位相 $\theta(\mathbf{x}, t)$ を定義できない一点 $\Phi(\mathbf{x}, t) = 0$ を考え、その周りで位相が一周して 2π だけずれているような状況を考えて場合、その点だけは $\text{rot} v(\mathbf{x}, t) \neq 0$ となり、渦が存在できる。渦の周りでの速度場の一周線積分（循環）は

$$\oint v(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{l} = \int \text{rot} v(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{s} = 2\pi \frac{\hbar}{m} \quad (4.3.4)$$

と量子化される。このように量子渦は波動関数 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ の位相 $\theta(\mathbf{x}, t)$ の空間構造を調べれば、その存在を確認できる。図 4.7 は 1 つの量子渦と反対方向の量子渦が対になっ

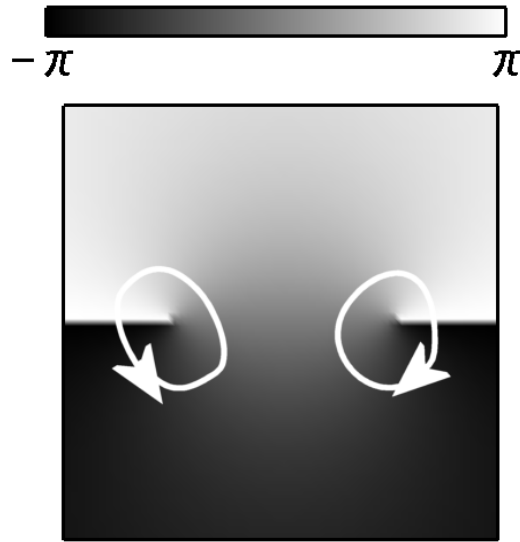
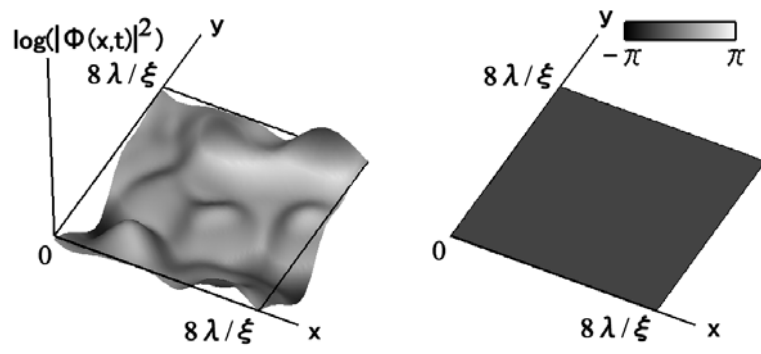


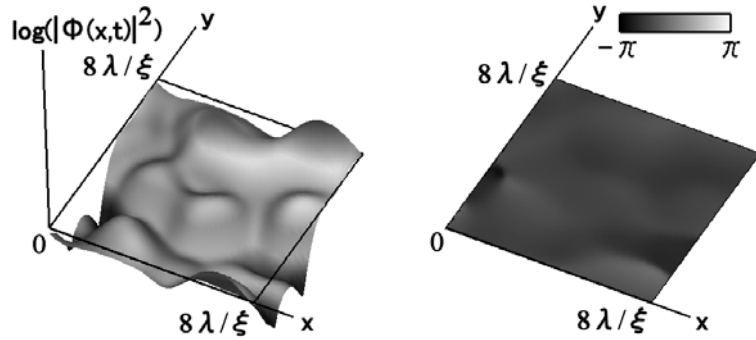
図 4.7: 渦対のあるときの波動関数の位相。黒い領域が $-\pi$ 、白い領域が π となっており、渦のある場所を矢印で示している。

ている量子渦対が存在するときの波動関数の位相の空間構造の例である。黒い部分が $\theta(x, t) = -\pi$ を、白い部分が $\theta(x, t) = \pi$ を表し、この図中のブランチカットの端点を一周すると位相が 2π だけずれているので、この端点が量子渦であることがわかる。

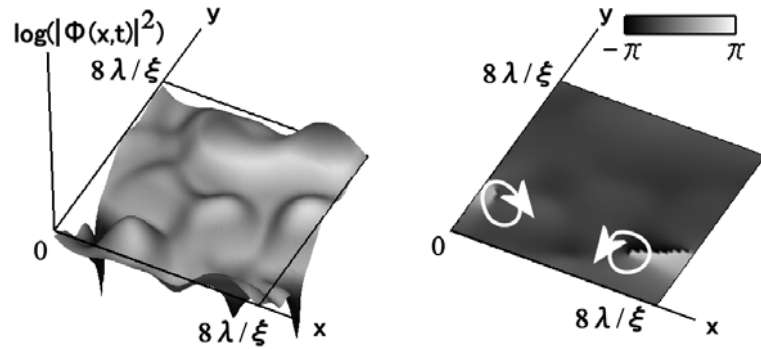
図 4.4(b) の基底状態に流れ場をかけたときの波動関数の振幅と位相を図 4.8 に示す。この図から分かるように、一様な位相である $t = 0$ の基底状態から位相が乱れ始め、 $t = 0.23$ では量子渦対が観測される。その後しばらく動き続けた後に再び $t = 0.44$ で対消滅しようとしているのが分かる。この量子渦が超流動に与える影響を考察する。今までは運動量の流れ場に対する応答として線形応答理論を用いたが、今回は式 (3.1.33) から実際に運動量の流れ場で割ることで、その感受率を計算し、応答を調べた。感受率のフーリエ 0 成分 $D_{\mathbf{k}=0}(t)$ と、渦対の数の時間変化を示したものが図 4.9 である。この図からわかるように、量子渦が生成されると感受率が著しく増大していることが分かる。感受率が増大しているということは流れ場に対して系が強く応答しているということであり、それは超流動の破壊を意味している。つまり量子渦の生成は超流動を抑制する方向に働いているということが分かる。また図 4.10 は $D_{\mathbf{k}=0}(t)$ と渦対の個数の、流れ場の大きさに対する依存性である。この図から分かるように、ある臨界流れ場 v_c を超えると量子渦対が生成するようになり、それと同時に感受率も著しく増大している。つまり超流動がその臨界流れ場以上で消滅するというを示している。図 4.11 はこの臨界流れ場 v_c のポテンシャルの強度 R_0 依存性 (a) と回復長 ξ 依存性 (b) である。これを見るとポテンシャルの強度の大きい方が、また回復長の短い方が v_c が小さく、渦対が容易に生成する。特に図 4.5 と比べてみて、超流動密度がない領域での v_c は著しく小さい。結論として、大きなランダムポテンシャル強度と小さな回復長は、波



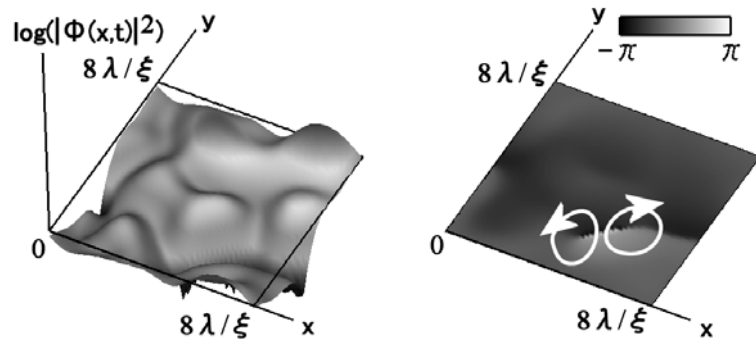
(a)



(b)



(c)



(d)

図 4.8: 図 4.4(b) の基底状態に y 方向に流れ場 $v = 1.5$ をかけたときの時間 $t = 0$ (a), $t = 0.17$ (b), $t = 0.23$ (c), $t = 0.44$ (d) での波動関数の振幅 (左) と位相 (右)。ただし振幅は量子渦をより確認しやすくするため対数スケールで示している。位相の図では渦のあるブランチカットの端点を矢印で示している。

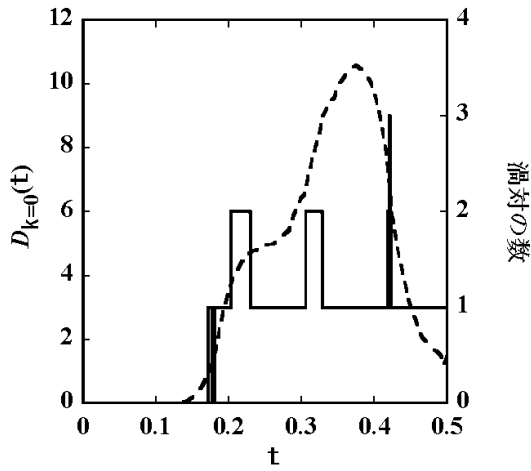


図 4.9: 図 4.4(b) の基底状態に y 方向に流れ場 $v=1.5$ をかけたときの感受率 $D_{\mathbf{k}=0}(t)$ (点線) と渦対の数 (実線) の t 依存性。

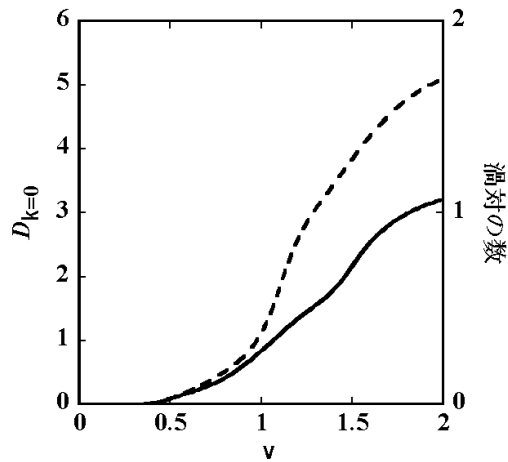


図 4.10: 感受率 $D_{\mathbf{k}=0}$ (点線) と渦対の数 (実線) の流れ場の大きさに対する依存性。ただし、 $\sqrt{R_0}/V = 50, \xi/\lambda = 2$ における 100 個のアンサンブル平均と 500 個の時間平均をとっている。

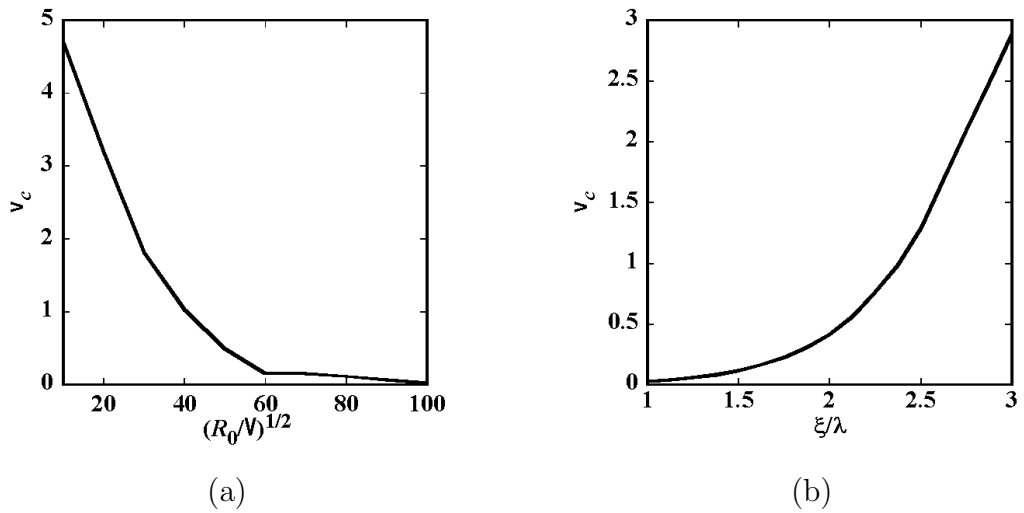


図 4.11: 臨界流れ場 v_c の R_0 依存性 (a) と ξ 依存性 (b)。ただし (a) では $\xi/\lambda = 2$ 、(b) では $\sqrt{R_0/V} = 50$ における 100 個のアンサンブル平均を取っている。

動関数を局在させるだけでなく量子渦を生成させやすくさせることで超流動をさらに抑制する方向に働くということが分かった。ランダムポテンシャル中のボース系における量子渦と超流動の関係はいまだ理解されていないことが多いが、この計算でこれらが非常に密接な関係にあるということを見ることができたといえよう。

第5章 周期ポテンシャル中のボース凝縮の超流動-Mott絶縁体量子相転移とそれに伴う凝縮体の干渉

特に4章での議論に非常に関係ある話題として光周期トラップ中の中性アルカリ原子気体のボース凝縮の超流動-Mott絶縁体転移の観測の実験がある。Mott絶縁体とは粒子間斥力のために、もはや粒子は自由に動けなくなり超流動（電子系の場合は電気伝導）が消失する現象である。本章では再びGross-Pitaevskii方程式の数値計算により、このMott絶縁体に対する物理現象の再現・考察を試みる。

本章では、中性アルカリ原子気体のボース凝縮、そして光トラップ中での超流動-Mott絶縁体量子相転移の実験的背景について簡単に述べた後、系が周期的であるがゆえに現れるMott絶縁体について、Fisher達のボースハバードモデルを用いて簡単に説明する。そして我々の行っている、周期ポテンシャル中のGross-Pitaevskii方程式の数値計算によって得られた幾つかの結果について紹介する。

5.1 中性アルカリ原子気体の超流動-Mott絶縁体転移

1995年、中性アルカリ原子気体のボース凝縮が成功し、それまで液体 ^4He のみでしか存在しなかったボース凝縮の理論的・実験的研究が爆発的に進んだ[29]。これは磁気トラップ中に閉じ込めた ^{87}Rb , ^{23}Na , ^7Li などを初めとする様々なボース気体に対し、レーザー冷却と蒸発冷却を用いてその温度を下げることでボース凝縮を実現させるものである。この系はバルクの液体 ^4He のボース凝縮・超流動に比べ、

1. 気体であるために粒子間相互作用が小さく、それゆえに理論的に扱いやすい。
2. 中性子を用いずに、直接ボース凝縮を観測できる。

などを初めとする多くの理由により、発見当時から現在に至るまで大きな注目を浴びている。

また2002年2月には磁気トラップ中に閉じ込めたボース凝縮体をさらに光トラップに閉じ込め、光トラップの大きさを大きくしていくことでボース凝縮体の超流動-Mott絶縁体の量子相転移が観測された[30]。磁気トラップはボース凝縮体にとって放物線型の閉じ込めポテンシャルを生み、光トラップは周期型ポテンシャルの働きをする。磁

気トラップに閉じ込めた凝縮体に一方向から光を当てるとちょうど図 5.1 のような描像となり、光を三方向から当てることで、磁気トラップの中心部分には図 5.2 のような三次元周期ポテンシャルが作られる。周期ポテンシャル中で凝縮体は、各々の光トラッ

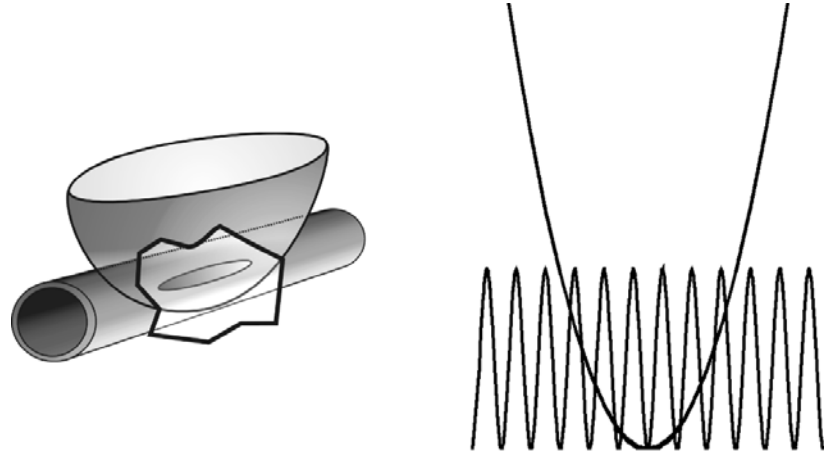


図 5.1: 実験で作られる一次元周期ポテンシャルのイメージ図。左図のように磁気トラップに閉じ込められた凝縮体に横から光を当てることで、右図のようにトラップの中に周期ポテンシャルが作られる。

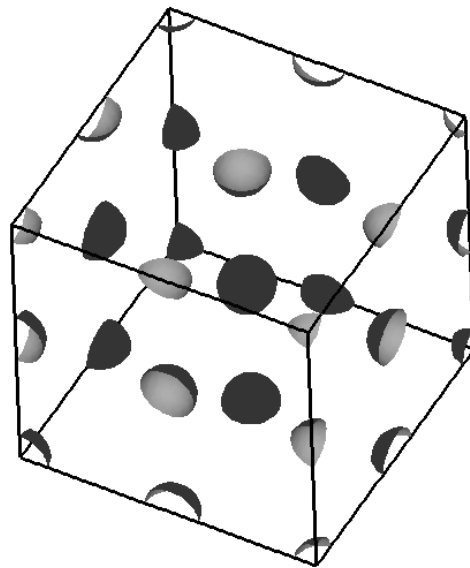


図 5.2: 三次元周期ポテンシャルのイメージ図。図中に現れる面は、周期ポテンシャルの等ポテンシャル面である。

プの極小部分に集まるが磁気トラップと光トラップの両方はずすと凝縮体は開放され広がってゆき、異なるトラップの極小に集まっていた凝縮体同士が干渉し、その干渉模様が観測されるはずであるが、光トラップの強さを大きくしてゆくと、あるトラッ

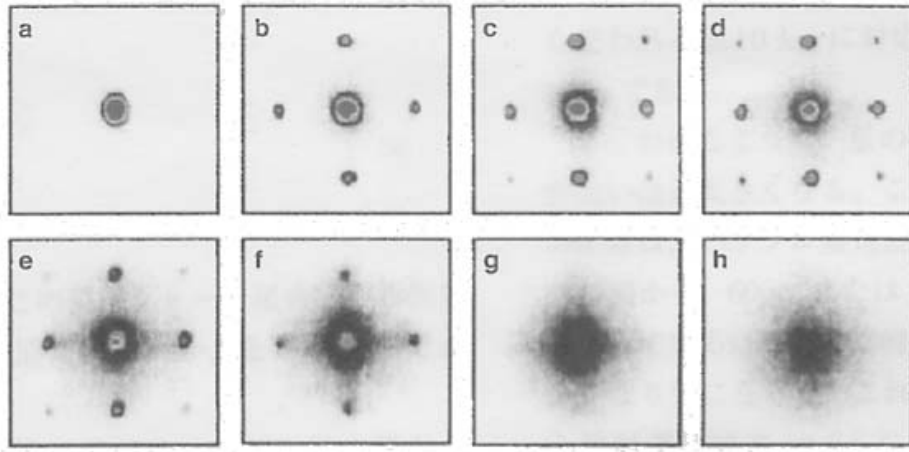


図 5.3: 三次元光トラップ中のアルカリ原子気体の干渉模様を観測 ([30] の図 2)。超流動状態にあるときは干渉模様が見え (a~f)、Mott 絶縁体にあるときは見えない (g,h)。ポテンシャルの大きさは a から h に進むにつれ増えている。

ポテンシャルの強さ以上で干渉模様はもはや観測されなくなる。この実験結果を図 5.3 に表す。図中の a から f の間では干渉パターンが現れており、これは原子集団がコヒーレントな超流動状態であることを意味する。ところが光トラップの強さを大きくしてゆき、図中の g, h になると干渉模様はもはや消えてしまい、これはポテンシャルの極小に各々の原子集団が局在した Mott 絶縁体状態であることを意味する。つまり f, g の間での凝縮体の超流動-Mott 絶縁体転移の観測が成功したことがこの図から分かる。最後にこの実験で原子は十分冷却されており、温度による熱揺らぎの効果は十分無視できる領域にあり、これが量子相転移であることを付け加えておく。

5.2 ボースハバードモデルを用いた Mott 絶縁体の解析

本節では 5.3 節での Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算を行う準備として、Fisher 達が行ったボースハバードモデルを用いた周期ポテンシャル中のボース凝縮系の超流動-Mott 絶縁体 [15] を簡単に議論し、その相図を考察するところまで導く。

Mott 絶縁体は粒子間相互作用のために粒子がもはや自由に動けなくなり、超流動に寄与しなくなる現象である。Mott 絶縁体を記述するには粒子間相互作用が必ず必要であり、式 (3.1.4) のハミルトニアンから出発する。ただしポテンシャル $U(x)$ はここでは周期ポテンシャルである。ここで場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ を次のように展開する。

$$\hat{\Psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i w(x - x_i) \hat{a}_i \quad (5.2.1)$$

ここで i は周期ポテンシャルの各極小部分を表し (以後サイトと呼ぶ)、 N は系の全サイト数、 x_i はサイト i の位置ベクトルである。 $w(x - x_i)$ はワニア関数であり、サイト i

に局在した一粒子状態の波動関数である。ワニア関数は次のようにブロッホ関数 $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ の重ねあわせで作ることができる。

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right] \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= \epsilon_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \\ w(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

このワニア関数を用いるとハミルトニアンは次のようなボースハバードモデルのハミルトニアンとなる。

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) - \sum_i \mu \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{g}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1) \quad (5.2.3)$$

このハミルトニアンの第1項目は粒子が i サイトから j サイトへ移るための運動エネルギー項であり、

$$J_{ij} = -\frac{1}{N} \int d\mathbf{x} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right] w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (5.2.4)$$

は i, j 間の共鳴輸送積分である。第2項目はオンサイトエネルギー、第3項目はオンサイト斥力相互作用を表す。

式 (5.2.3) において、周期ポテンシャルが非常に強く、粒子はサイト間をまったく移動できないとして、 $J_{ij} = 0$ の状態を考える。このとき系は当然 Mott 絶縁体の状態であり、1 サイト内の粒子数は完全に固定された

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = a_i^* a_i = n \quad (5.2.5)$$

と記述できるはずである。ここで n は1 サイトあたりの粒子数であり、自然数である。この状態から J_{ij} を摂動として取り込んだときの系の相図を考察する。 $J_{ij} = 0$ としたときのハミルトニアン (5.2.3) は式 (5.2.5) を用いて

$$\hat{K} = K = \sum_i \left[-\mu n + \frac{g}{2} n(n-1) \right] \quad (5.2.6)$$

となる。よって1 サイトあたりのエネルギー ε は

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{g} &= -xn + \frac{1}{2} n(n-1) \\ &= \frac{1}{2} \left[n - \left(x + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \frac{(x + 1/2)^2}{2} \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

となる。ここで $x = \mu/g$ である。式 (5.2.7) から分かるように、 $l-1 < x < l$ (l は自然数) にあるときに ε は $n = l$ で最小値を持つ。つまり x がこの範囲にあるときに系は各サイトに l の粒子が入っている Mott 絶縁体となる。しかし $x = l$ のときは $\varepsilon = l, l+1$ の2つの値で極小値を持つため、各サイトの粒子数は決まらず、したがって Mott 絶縁体は破れ、超流動状態になると考えられる。

次に J_{ij} を摂動として加えると、 J_{ij} の大きさがある臨界値を越えたときに Mott 絶縁体から超流動状態に転移するであろう。このときの絶対零度の相図を超伝導のギンツブルク-ランダウの方法と同様の平均場近似を使って求める。まずハミルトニアン (5.2.3) を無摂動部分 \hat{K}_0 と摂動部分 \hat{K}_1 に分ける。

$$\begin{aligned}\hat{K} &= \hat{K}_0 + \hat{K}_1 \\ \hat{K}_0 &= -\sum_i \mu \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{g}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 1) \\ \hat{K}_1 &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i)\end{aligned}\quad (5.2.8)$$

このようにしたときの系の分配関数 Z は

$$\begin{aligned}Z &= Z_0 \langle T_\tau \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \hat{K}_1(\tau) \right] \rangle \\ Z_0 &= \text{Tr} \exp(-\beta \hat{K}_0)\end{aligned}\quad (5.2.9)$$

となる。ただし $\hat{K}_1(\tau), T_\tau$ は 3 章での議論同様、それぞれ虚時間のハイゼンベルク表示、虚時間の時間順序付けである。超伝導の場合と同様に平均場 $\psi_i(\tau)$ を導入し、

$$\hat{K}_1 \simeq -\frac{J}{N} (\sum_i \hat{a}_i^\dagger) (\sum_j \hat{a}_j) \quad (5.2.10)$$

という近似を行う。これは任意のサイトから任意のサイトへ一定の共鳴輸送積分 J で移ることができるという近似である。この近似を行うと分配関数は

$$\begin{aligned}Z \propto \int \prod_i D\psi_i(\tau) D\psi_i(\tau)^* \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \sum_i \{ -\psi_i(\tau)^* \psi_i(\tau) \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{J}{N}} [\psi_i(\tau) \hat{a}_i^\dagger(\tau) + \psi_i(\tau)^* \hat{a}_i(\tau)] \right]\end{aligned}\quad (5.2.11)$$

となるが、ここで有効作用 $S(\psi, \psi^*)$ を

$$Z \propto \int \prod_i D\psi_i(\tau) D\psi_i(\tau)^* \exp[-S(\psi, \psi^*)] \quad (5.2.12)$$

と定義すると、 $S(\psi, \psi^*)$ は ψ, ψ^* に関して次のように展開できる。

$$S(\psi, \psi^*) = \alpha |\psi|^2 + \gamma |\psi|^4 + \dots \quad (5.2.13)$$

$|\psi|^4$ の項まで考える。 γ を計算すると $\gamma > 0$ となるが、そのとき $\alpha < 0$ だと、ある有限の $|\psi|$ で $S(\psi, \psi^*)$ は最小となり、系は超流動となる。しかし $\alpha > 0$ だと $|\psi| = 0$ のみ $S(\psi, \psi^*)$ は最小となり、系は超流動状態でなくなり、この系では Mott 絶縁体となる。つまり $\alpha = 0$ が相転移点となり、これより大きな J で超流動 ($\alpha < 0$)、小さな J で Mott 絶縁体 ($\alpha > 0$) となっている。 α を計算すると

$$\alpha = \beta \left[1 + \frac{J}{2Ng} \sum_i \left\{ \frac{1}{n-1-x} - \frac{1}{n-x} \right\} \right] \quad (5.2.14)$$

となり、相転移点は

$$\frac{J}{g} \equiv y = -2[x - (n - 1)][x - n] \quad (5.2.15)$$

で起こる。式 (5.2.15) を具体的にプロットすると図 5.4 のようになる。この相図から分

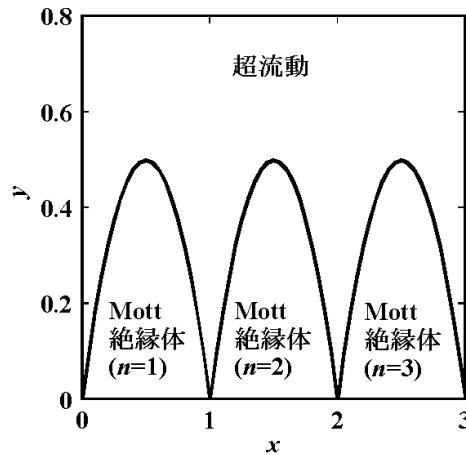


図 5.4: 平均場近似を用いて求めた絶対零度でのボースハバードモデルの相図。

かるように、 y の小さなおところでは、 $l - 1 < x < l$ の間で $x = l$ の Mott 絶縁体となっており、 $x = l$ では微小の y に対しても Mott 絶縁体が破れている。これは $J = 0$ のときに行った考察とまったく矛盾しない結果となっている。

5.3 周期ポテンシャル中の Gross-Pitaevskii 方程式を用いた超流動-Mott 絶縁体の解析

前節ではボースハバードモデルを用いて超流動-Mott 絶縁体転移を議論した。しかしこのモデルでは周期トラップのひとつの極小部分の中における凝縮体の空間構造や凝縮体全体の位相の情報を得ることができず、したがって実験結果で得られている凝縮体の干渉模様の変化との直接の対応がつかみにくい。そこで我々は 4 章で用いた二次元 Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算のテクニックを用いて、この超流動-Mott 絶縁体転移を議論することを試みた。ここでは Gross-Pitaevskii 方程式 (4.1.9) 中の $U(\mathbf{x})$ は次のような周期ポテンシャルをとる (図 5.5)。

$$U(\mathbf{x}) = U(x, y) = -U_0 \cos^2(kx) \cos^2(ky) \quad (5.3.1)$$

ここで U_0 は周期ポテンシャルの特徴的な大きさである。このポテンシャルの元で 4 章同様、散逸を入れた Gross-Pitaevskii 方程式を時間発展させることにより、基底状態を求

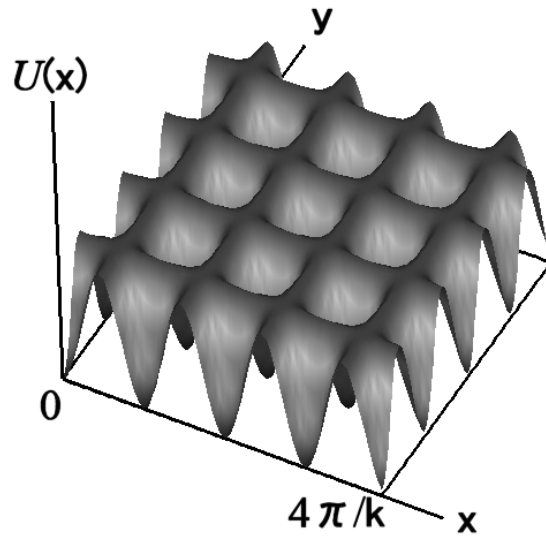


図 5.5: 式 (5.3.1) の周期ポテンシャル。ただし $kL/2\pi = 2$ である。

める。幾つかの U_0 で基底状態を求めたものが図 5.6 である。 U_0 が大きな方が基底状態は局在していることが分かる。次に、基底状態に対してポテンシャルをはずし ($U(\mathbf{x}) = 0$)、

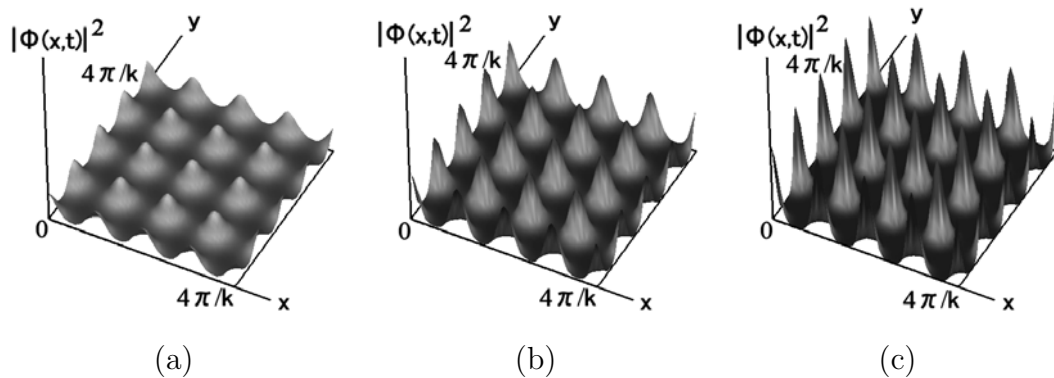


図 5.6: 式 (5.3.1) のポテンシャルから得られた Gross-Pitaevskii 方程式の基底状態の $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ 。ただし回復長は $\xi/\lambda = 2$ で、 U_0 はそれぞれ (a)50, (b)100, (c)200 である。また 4 章同様、 $\int d\mathbf{x} |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 = 64\lambda^2/\xi^2$ となるように計算している

その波動関数の時間発展を調べる。図 5.6(a),(c) を初期状態とした $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ の時間発展を図 5.7 に示す。この図から分かるようにポテンシャルの小さなときは、ポテンシャルをはずしたときに波動関数の隣同士の振幅の山がつながるように広がってゆくが、ポテンシャルの大きなときは山同士の中央に干渉模様が現れる。これはポテンシャルの小さなときにあった山同士の相関が、ポテンシャルの大きなときには消失し、お互いが干渉し合うためであると思われる。また基底状態における超流動密度 n_s と相関関数 C_0 の U_0 依存性を計算したものが図 5.8(a) である。4 章のランダムポテンシャルのとき

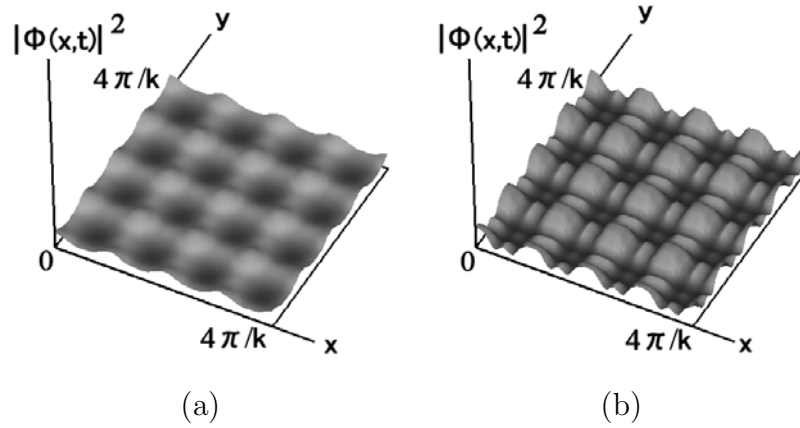


図 5.7: 図 5.6 を初期状態として、周期ポテンシャルをはずしたときの時間発展において、 $t = 0.024$ のときの $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$ 。(a) は図 5.6(a) に、(b) は図 5.6(b) にそれぞれ対応している。

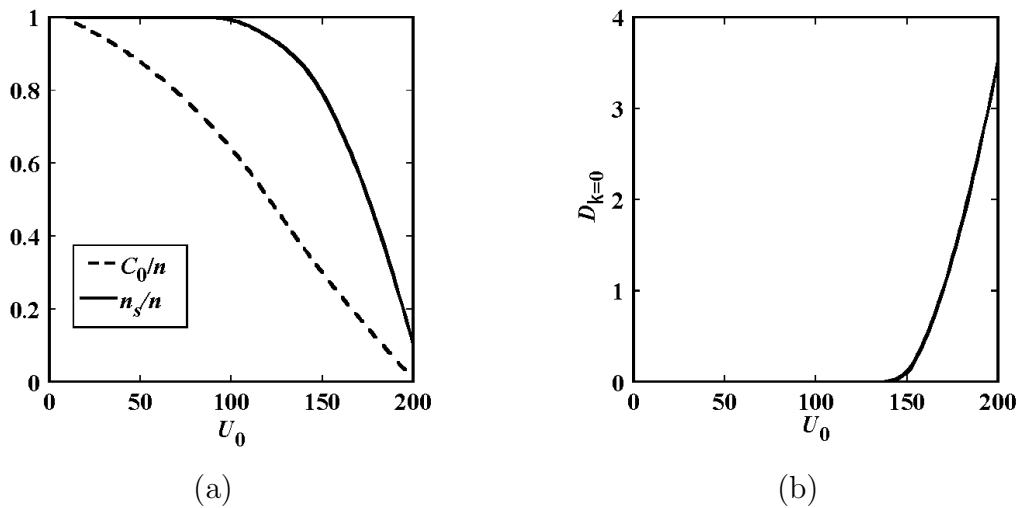


図 5.8:

とは違って、 $U_0 = 200$ 付近で超流動密度、相関関数ともに消失しようとしていることが分かる。これはランダムポテンシャルのときのように系に相関が残ったまま超流動が消失するのではなく、相関と超流動はより密接な関係にあることを示している。このように周期ポテンシャルの場合はランダムポテンシャルのときとは異なる機構で超流動が消失している可能性があるかもしれない。また微小な流れ場をかけたときの系の感受率のフーリエ 0 成分の時間平均 D の U_0 依存性を計算したものが図 5.8(b) である。この図から明らかに $U_0 = 200$ 付近で感受率が増大し、超流動が破壊されていることが分かる。

以上の計算を通して、周期ポテンシャル中のボース凝縮体の非常に興味深い現象が得られた。しかしこの計算結果が実験、特に Mott 絶縁体転移とどのように関連するのかははっきりせず、さらに計算を進める必要があるであろう。我々の現在の課題として次の 3 点が挙げられる。

- 実験と状況を合わせるために、二次のトラップポテンシャルに系を閉じ込め、そこから開放したときのダイナミクスを計算し、実験結果と比較する。
- Mott 絶縁体には必ずエネルギーギャップが存在する。我々の計算において励起スペクトルを計算し、本当にエネルギーギャップが出現するのかどうか確かめる。
- 周期ポテンシャルとランダムポテンシャルで、超流動などの物理はどのように異なるであろうかということを明らかにする。

これらの研究が現在進行している。この計算によってボース凝縮体の超流動-Mott 絶縁体転移の物理はより明らかになることであろう。

第6章 結論

本研究では、多孔質ガラス中の液体 ^4He のボース凝縮・超流動現象に対してランダムポテンシャル中の希薄ボース気体のモデルを用いて、物理量の解析的な導出、実験との比較を行った。また二次元 Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算を用いて、ランダムポテンシャル中でのボース凝縮の巨視的波動関数・超流動や量子渦の振る舞いのシミュレーションを行った。さらに光周期トラップ中の中性アルカリ原子気体のボース凝縮における超流動-Mott 絶縁体転移に対して、再び二次元 Gross-Pitaevskii 方程式を用いて、波動関数の振る舞いを調べた。以下に本論文で得られた結果および今後の課題を示す。

1. ランダムポテンシャル中の希薄ボース気体の解析計算

- (a) 多孔質 Vycor ガラス中の液体 ^4He は大部分が Vycor ガラスの壁面に吸着し、残りわずかが希薄ボース気体として振舞うと仮定することによって Vycor ガラス中の ^4He の密度を、そして絶対零度付近で超流動密度が消失する ^4He の密度を実験と比較することによってランダムポテンシャルの大きさを見積もることができた。これによって我々のモデルにフリーパラメーターがなくなり、実験結果と定量的に物理量を比較することができるようになった。
- (b) 低温領域において、我々のモデルと実験との比熱や超流動密度は定量的に一致する。ここから我々のモデルは、実験における ^4He の振る舞いを良く再現しているであろうと考えられる。
- (c) 低温での比熱の温度に線形な振る舞い、低密度領域でのボース凝縮の存在下における超流動の消失、低密度領域における超流動の再起型転移など、我々のモデルは実験では観測されていないランダムポテンシャルが引き起こす興味ある現象を予言することができる。とくに超流動の再起型転移においては、ランダムポテンシャルの強度を上げることにより、実験でより観測が容易になるであろうということを示すことができた。
- (d) 我々のモデルは非凝縮体の高次の項を無視しているため、多くの非凝縮体が励起されるような高温領域を記述することができない。高温領域を記述するためにモデルの近似を上げる必要があるが、Hartree-Fock 近似はあまり良い近似とはいえず、今後の課題として非凝縮体の高次の項を直接計算する必要がある。

2. ランダムポテンシャル中の Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算。

- (a) ランダムポテンシャル中で、Gross-Pitaevskii 方程式の基底状態はランダムポテ

ンシャルが大きいほど、また回復長が短いほど局在し、それによって超流動密度や相関関数は抑制される。しかし相関関数の抑制は超流動密度に比べて緩やかで、系に相関を残したまま超流動は消失する。

- (b) 基底状態に流れ場をかけると、ある臨界流れ場以上で量子渦対が生成・消滅するようになる。臨界流れ場は、系が局在しているほど小さく、よって量子渦対は容易に生成・消滅するようになる。またこの量子渦対の存在によって超流動は大きく抑制される。
- (c) 今後の課題として、実験と比較するために系の次元を三次元にして計算する必要がある。また現在の二次元系の計算がそのまま適用できるような実験を探すことも重要であると考えている。

3. 周期ポテンシャル中の Gross-Pitaevskii 方程式の数値計算。

- (a) ある周期ポテンシャルの大きさ以上で、ポテンシャルをはずしたときの波動関数の振る舞いに変化するという結果が得られた。またその付近において相関関数・超流動密度ともに消失し、ランダムポテンシャルの場合と異なる機構で超流動が消失している可能性があると考えられる。
- (b) 今後の課題として、実験に合わせたシミュレーション、励起スペクトルの計算、系の回復長依存性や相関の描画など多数挙げられる。

謝辞

本研究を進めるにあたりまして、多くの方々の協力と支援をいただきました。この場を借りて感謝の意を表したいと思います。

坪田誠先生には、指導教官として本研究全般にわたって指導をしていただきました。心より感謝いたします。そして研究全般にわたって、貴重な援助と助言をいただき、また数値計算においては坪田誠先生とともに指導していただきました飯田武先生に心より感謝いたします。

最後に、この2年間お世話になりました大阪市立大学理学部素励起物理学研究室の皆様へ感謝いたします。

関連図書

- [1] D. R. Tilley and J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity* (Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 1990), Third Edition.
- [2] W. F. Vinen, Proc. Roy. Soc. **A 260** (1961) 218.
- [3] P. W. Karn, D. R. Starks and W. Zimmermann, Jr. , Phys. Rev. **B 21** (1980) 1797.
- [4] P. E. Sokol, in *Bose-Einstein Condensation* (Cambridge University Press, 1995), edited by A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari, p. 51.
- [5] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons, 1987), Second Edition.
- [6] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. **C 6** (1973) 1181.
- [7] D. J. Bishop and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **40** (1978) 1727.
- [8] N. Trivedi, in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics V*, (Springer, Berlin, 1993); W. Krauth, N. Trivedi and D. Ceperley, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 2307.
- [9] K. Huang, in *Bose-Einstein Condensation* (Cambridge University Press, 1995), edited by A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari, p. 31.
- [10] J. D. Reppy, J. Low. Temp. Phys. **87** (1992) 205.
- [11] B. C. Crooker, B. Hebral, E. N. Smith, Y. Takano and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 666.
- [12] R. M. Dimeo, P. E. Sokol, C. R. Anderson, W. G. Stirling, K. H. Anderson and M. A. Adams, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 5860.
- [13] O. Plantevin, B. Fåk, H. R. Glyde, N. Mulders, J. Bossy, G. Coddens and H. Schober, Phys. Rev. **B 63** (2001) 224508.
- [14] K. Huang and H. F. Meng, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 644.

- [15] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein and D. S. Fisher, Phys. Rev. **B** **40** (1989) 546.
- [16] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109** (1958) 1492.
- [17] W. Krauth, N. Trivedi and D. Ceperley, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 2307.
- [18] M. Kobayashi and M. Tsubota, Phys. Rev. **B** **66** (2002) 174516.
- [19] E. P. Gross, J. Math. Phys. **4** (1963) 195.
- [20] L. P. Pitaevskii, Soviet Phys. -JBTP **13** (1961) 451.
- [21] J. S. Langer and T. Neal, Phys. Rev. Lett. **16** (1966) 984.
- [22] L. P. Gor'kov, A. I. Larkin and D. E. Khmel'nitskii, JETP Lett. **30** (1979) 248.
- [23] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [24] N. M. Hugenholtz and D. Pines, Phys. Rev. **116** (1959) 489.
- [25] P. C. Hohenberg and P. C. Martin, Ann. Phys. (N. Y.) **34** (1965) 291.
- [26] L. M. Khalatnikov, *Introduction to the Theory of Superfluidity*, (Benjamin, New York, 1965), p. 13.
- [27] H. Fangohr, S. J. Cox and P. A. J. de Groot, Phys. Rev. **B** **64** (2001) 064505
- [28] 大野 豊、磯田和男：数値計算ハンドブック (オーム社 1990)
- [29] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, (Cambridge University Press, 2002).
- [30] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch, Nature **415** (2002) 39.