捕捉された Bose-Einstein 凝縮系における Bogoliubov de-Gennes の方法とゼロモード

高橋淳一, 中村祐介, 山中由也
早大基幹理工電子光システム

1 初めに

本研究では, 場の量子論の立場から Bose-Einstein 凝縮 (BEC) を記述する. BEC を記述する多くの場の量子論的取り扱いではでは, Bogoliubov 近似が用いられている. しかし, ゼロモードを c 数と置く Bogoliubov 近似では, 特に非一様系においてはエネルギースペクトルが離散的になり、この近似は和の一項を無視することに相当するため, 場の量子論の正準交換関係を明白に破ってしまう. すなわち, Bogoliubov 近似ではゼロモードを量子論的に扱わないため, 理論的には不完全となる. 本研究ではこれらの問題より Bogoliubov 近似を用いない定式化を行い, 問題を克服する. 非一様系においてハミルトニアンを対角化する方法は Generalized Bogoliubov の方法 (GB の方法) [1, 2] と Bogoliubov-de Gennes の方法 (BdG の方法) [3, 4] がある. GB の方法では, 適切に対称性を微小に破る項 (breaking term) をハミルトニアンに入れて, ゼロモードが微小エネルギーを持つモードとして取り扱うことが可能で, そこからゼロモードを含めた Fock 空間の真空を構成することができる. さらに breaking term のゼロ極限で対称性の回復が保証される. 一方, 通常の BdG の方法ではゼロモードは量子座標で記述され, この量子座標に対する状態 (波動関数) を, すなわち系の真空を一意的に決める処方は知られていない. また, GB の方法で行われているような, 場の量子論レベルでの対称性の議論は行われていない. しかし, GB の方法は秩序変数の位相が空間座標に依らない場合しか現時点では定式化されていないため, 凝縮体中に渦やソリトンがあるような場合には対応できない. そこで本研究では秩序変数の位相に空間座標依存性のある場合も扱えるの BdG の方法において, GB の方法の場合のように, 真空の定義や対称性の保持が可能であるかを調べる.

2 モデル

冷却中性原子系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int d^3\boldsymbol{x}\Big[\hat{\psi}^\dagger(x)(K+V-\mu)\hat{\psi}(x) + \frac{g}{2}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)\Big]$$

ここで, $x=(\boldsymbol{x},t)$, $K=-\frac{1}{2m}\nabla^2$, V は外場ポテンシャル, m は粒子の質量, μ は化学ポテンシャル, g は相互作用定数である.

系の対称性が自発的に破れた状況, つまり凝縮体が存在する場合, 場の真空期待値は $\langle\Omega|\hat{\psi}(x)|\Omega\rangle = \xi(\boldsymbol{x})$ となるので,

$$\hat{\psi}(x) = \xi(\boldsymbol{x}) + \hat{\varphi}(x)$$

と分解できる. ただし, $\langle 0\,|\,\hat{\varphi}(x)\,|\,0\rangle = 0$ であり, 秩序変数 $\xi(\boldsymbol{x})$ は任意の複素関数で全粒子数 N_c との間に $N_c = \int d^3\boldsymbol{x}|\xi(\boldsymbol{x})|^2$ という関係がある. なお, 本研究では秩序変数は時間に依存しないものを想定した. この場の分割を用いてハミルトニアンを書き換える, その際, 場の二次以下の項を非摂動項 $\hat{H}_0$ とし, 三次以上の項を摂動項 $\hat{H}_I$ とする.

3 Bogoliubov de-Gennes の方法

この方法は, BdG 方程式の完全系を用いて非摂動ハミルトニアンを対角化する方法である. BdG 方程式は

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L} \end{pmatrix} \boldsymbol{y}_n(\boldsymbol{x}) = \omega_n \boldsymbol{y}_n(\boldsymbol{x})$$

で与えられる. ただし, $\mathcal{L} = K + V - \mu + 2g|\xi(\boldsymbol{x})|^2, \mathcal{M} = g\xi^2(\boldsymbol{x})$ である. BdG 方程式の固有値は一般に複素数となるが, ここでは実数の範囲内で議論する. また, BdG 方程式にはゼロモードと呼ばれる零固有値を持つ解が存在する. これらの解は不定計量内積 $(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{t}) \equiv \int d^3\boldsymbol{x} \boldsymbol{s}^\dagger(\boldsymbol{x})\sigma_3 \boldsymbol{t}(\boldsymbol{x})$ の下で直交性を示す. しかし, この不定計量内積の下ではゼロモードが全てのモードと直交してしまうため BdG 方程式の固有関数だけでは完全系を張れない. そこで, $T\boldsymbol{y}_{-1}(\boldsymbol{x}) = I\boldsymbol{y}_0(\boldsymbol{x})$ を満たすモード $\boldsymbol{y}_{-1}$ を導入する. このモードは共役モードと呼ばれ, ゼロモードとは直交せず, 他のモードとは直交する性質を持つ. なお, I はゼロモードと共役モード間の規格化定数である [3] .

BdG 方程式の固有関数系に共役モードを加えた関数系を用いて非摂動ハミルトニアンを対角化する. 場が次のように展開できるので

$$\begin{pmatrix} \hat{\varphi}(\boldsymbol{x}) \\ \hat{\varphi}^\dagger(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \sum_{n=1} \{\hat{a}_n \boldsymbol{y}_n(\boldsymbol{x}) + \hat{a}_n^\dagger \sigma_1 \boldsymbol{y}_n^*(\boldsymbol{x})\} - i\hat{Q}\boldsymbol{y}_0(\boldsymbol{x}) + \hat{P}\boldsymbol{y}_{-1}(\boldsymbol{x})$$

非摂動ハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \frac{I\hat{P}^2}{2} + \sum_{n=1} \omega_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$$

となる. ここで, この非摂動ハミルトニアンのゼロモードセクターは量子座標 $\hat{Q}$ の自由粒子型波動関数 $\psi(Q,t)$ で記述されることになるが, $\psi(Q,t)$ を一意的に決める処方が知られていない. つまり, ゼロモードセクターを含んだ真空の定義は自明ではない.

4 結果

この問題を解決するため Breaking term を導入する [1]

$$\hat{H}_\varepsilon(t) = \varepsilon\bar{\epsilon} \int d\boldsymbol{x} \Big[\xi^*(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) + \xi(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},t)\Big]$$

ここで ε は微小な無次元量, $\bar{\epsilon}$ はこの系の典型的なエネルギースケールである. 対称性が自発的に破れた理論を構成する際, このような項を元のハミルトニアンに加え, ハミルトニアンの対称性を破ることにより無限に縮退した真空の中から一つの状態を選び議論をする. そして計算の最後で $\varepsilon \to 0$ の極限を取ることで元々のハミルトニアンの持つ対称性を回復させる. 詳細は省くが, breaking term を導入するとハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^\varepsilon &= \frac{1}{2}(\hat{\Phi}, T_\varepsilon \hat{\Phi}) \\ &= \frac{\tilde{\omega}_0^\varepsilon \tilde{D}}{2}\hat{Q}_\varepsilon^2 + \frac{\tilde{\omega}_0^\varepsilon}{2\tilde{D}}\hat{P}_\varepsilon^2 + \sum_{n=1} \omega_n^\varepsilon \hat{a}_n^{\varepsilon\dagger} \hat{a}_n^\varepsilon + (\text{c–number}) \end{aligned}$$

と調和振動子型となる. $\tilde{\omega}_0^{\varepsilon}, \tilde{D}$ は $O\left(\varepsilon^{1/2}\right)$ の定数である.

従って, 量子力学の調和振動子と同様に $\hat{P}_\varepsilon, \hat{Q}_\varepsilon$ に線形変換

$$\hat{a}_0^{\varepsilon} = \sqrt{\frac{1}{2\tilde{D}}}\hat{P}_\varepsilon - i\sqrt{\frac{\tilde{D}}{2}}\hat{Q}_\varepsilon$$

を施すことにより, ゼロモード部分に消滅演算子を定義することができる. そこで, ゼロモードの真空はその消滅演算子で消去される状態 $|0\rangle_\varepsilon$ と定義する.

このように定義した真空が次の形の Ward-高橋恒等式（WT 恒等式）

$$\begin{aligned}|\xi(\boldsymbol{x})|^2 = \frac{\varepsilon\bar{\epsilon}}{2}\int d^4x'\Big[& -\xi^*(\boldsymbol{x})\xi^*(\boldsymbol{x}')\Delta^{12}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';t-t') + \xi(\boldsymbol{x})\xi(\boldsymbol{x}')\Delta^{21}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';t-t') \\ & -\xi^*(\boldsymbol{x})\xi(\boldsymbol{x}')\Delta^{11}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';t-t') + \xi(\boldsymbol{x})\xi^*(\boldsymbol{x}')\Delta^{22}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}';t-t')\Big]\end{aligned}$$

を満たしているかどうか調べる. ここで, Δ^{ij} は

$$i\Delta^{ij}(x,x') = {}_\varepsilon\langle 0|\,T[\varphi^i(x)\bar{\varphi}^j(x')]\,|0\rangle_\varepsilon$$

$\varphi^i = (\ \hat{\varphi}\quad \hat{\varphi}^\dagger\ )^t$, $\bar{\varphi}^j = (\ \hat{\varphi}^\dagger\quad -\hat{\varphi}\ )$ である. WT 恒等式は Heisenberg 方程式, 正準交換関係から近似なしで導かれるものである. また, WT 恒等式から南部-Goldstone 定理（NG 定理）の成立も保証される. そこで, 本研究ではこの真空が WT 恒等式を満たすことを調べた. 証明の詳細は省くが, ここで定義した真空は WT 恒等式を満たすものであることが示される. また, この証明にはゼロモード項 $\hat{P}_\varepsilon, \hat{Q}_\varepsilon$ の存在が本質的である.

また, 上の議論を平衡 Thermo Field Dynamics [5] を用いて有限温度の場合に拡張して調べた. 結果として, 有限温度非一様系においても, WT 恒等式の成立, 従って NG 定理の成立を示すことができた. この証明にも量子化されたゼロモード項 $\hat{P}_\varepsilon, \hat{Q}_\varepsilon$ の存在が本質的である. 結論として, 有限温度場の量子論においても, 量子化されたゼロモードの存在が, 正当な場の量子論のためには不可欠である.

参考文献

[1] M. Okumura and Y. Yamanaka, Phys. Rev. A **68**, 013609 (2003).

[2] M. Okumura and Y. Yamanaka, Prog. Theor. Phys. **111** , 199 (2004).

[3] M. Lewenstein and L. You, Phys. Rev. Lett. **77**, 3489 (1996).

[4] H. Matsumoto and S. Sakamoto, Prog. Theor. Phys. **107**, 679 (2002).

[5] H. Umezawa, *Advanced Field Theory — Micro, Macro, and Thermal Physics* (AIP, New York, 1993).