

Lee-Yang のクラスター展開法による BCS 理論の導出

作道直幸¹ 理化学研究所、日本学術振興会特別研究員 (PD)

本研究は、西田祐介氏 (東京工業大学)、上田正仁氏 (東京大学) との共同研究である。原著論文は文献 [1]。

1 イントロダクション：BCS-BEC クロスオーバー

レーザー冷却等によって極低温に冷却された原子気体は、Feshbach 共鳴を用いて原子間の相互作用を自由に変調できる。この性質を用いて極低温の二成分 (つまりスピン 1/2) フェルミ原子気体の原子間引力を連続的に変化させることで、「フェルミ面近くの粒子のクーパ対が起こす BCS 状態」から「二つのフェルミ粒子が強く束縛した二原子分子のボース-アインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein condensation, BEC) 状態」までの連続的な変化が実験的に実現された [2]。この現象は BCS-BEC クロスオーバーと呼ばれ、フェルミ系とボース系の量子凝縮現象を構成粒子の詳細やスケールに依らず統一的に理解するモデルとして古くから考えられてきた [3]。

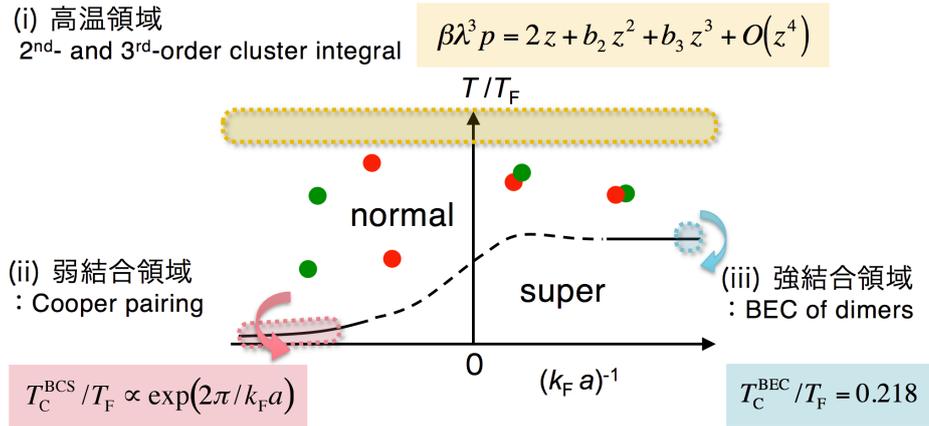


図 1: BCS-BEC クロスオーバーにおける相図の概略図。パラメータは、無次元に規格化した s 波散乱長の逆数 $(k_F a)^{-1}$ と温度 T/T_F 。高温では通常の気体 (normal gas) だが、低温で超流動体 (superfluid) に相転移する。先行研究では、Lee-Yang のクラスター展開の方法を用いて、(i) 任意の s 波散乱長における高温領域の熱力学 [8, 11]、(iii) 強結合領域における相転移温度 T_c^{BEC} [11]、が正しく計算された。本研究では (ii) 弱結合領域における相転移温度 T_c^{BCS} を正しく計算する理論を提案する。

冷却原子気体のような希薄で極低温の気体は、粒子間引力の到達距離 r_0 が、平均粒子間距離 (これは、Fermi 波数の逆数 k_F^{-1} のオーダーである)、 s 波散乱長 a 、熱的ド・ブロイ長 $\lambda = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$ よりも十分小さい。このとき、系のハミルトニアンは単純な接触相互作用で表すことができる：

$$\hat{H} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + g \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \hat{c}_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_3\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3\uparrow}. \quad (1)$$

ここで、 m は粒子の質量、 T は温度であり、 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / (2m)$ とおいた。相互作用の強さ $g (< 0)$ は、くりこみによって s 波散乱長 a と結びつく：

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2)$$

¹e-mail address: sakumichi@gmail.com

ここで、 V は系の体積。ハミルトニアン (1) で記述される系は、系の状態方程式が a, k_F, λ だけで決まるため、系の相図は無次元化された温度 T/T_F と s 波散乱長の逆数 $(k_F a)^{-1}$ だけで決まる。ここで、 T_F はフェルミ温度。図 1 に示した相図のように、この系は高温では通常の気体であり、低温で超流動相に相転移する。この系の BCS-BEC クロスオーバーの相転移温度はファインマンダイアグラムによる展開法 [4] や量子モンテカルロ法 [5] を始めとする様々な方法で研究されてきたが、本研究ではそれらと異なるクラスター展開法に基づく研究を行った。

2 手法：Lee-Yang のクラスター展開法

一般に、系の熱力学的性質は大分配関数 $\Xi_V = \text{Tr} \exp[\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]$ から求まる熱力学関数 $\beta p = \lim_{V \rightarrow \infty} V^{-1} \ln \Xi_V$ で決まる。ここで、 $\beta = (k_B T)^{-1}$ は逆温度、 μ は化学ポテンシャル、 p は圧力。クラスター展開とは、系の熱力学関数のフガシティー $z = \exp(\mu/k_B T)$ による展開である [6]：

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\lambda^3}{V} \ln \Xi_V = b_1 z + b_2 z^2 + b_3 z^3 + b_4 z^4 + \dots \quad (3)$$

各 b_n は n 体のクラスター積分と呼ばれる無次元量で、ハミルトニアン (1) で記述される二成分フェルミ気体では、次元解析から λ/a のみに依存することがわかる。 z が小さい極限は、位相空間密度 $\rho \lambda^3$ が小さい極限 ($\rho = N/V$ は粒子数密度) と一致するため、クラスター展開は低密度からの展開になっており、稀薄な冷却原子気体で特に有用である。低次のクラスター積分 b_1, b_2, b_3 は任意の λ/a で計算されており [7, 8]、ユニタリー気体における実験 [9] と高い精度で一致する。

さて、このクラスター展開を用いて BCS-BEC クロスオーバーの相転移温度を計算できるか、という問題を考える。 z による展開を有限次で打ち切ると熱力学関数が多項式になるため、相転移 (熱力学関数の解析性の喪失) が扱えない。従って、相転移を扱うには z の高次の項を含む無限和を取り込む必要がある。我々は、クラスター展開を用いて相転移を扱うために、 z の高次の項を系統的に計算する手法である Lee-Yang のクラスター展開法 [10] を用いた。この方法を用いれば、図 2 に示すよう、系の大分配関数がグラフ展開の方法で計算できる。図 2 において、 n 本 ($n = 1, 2, \dots$) の入る線と出る線を持つバーテックスは、 n 体のクラスター関数 U_n と呼ばれる関数を表し、(全ての粒子を区別する) ボルツマン粒子からなる量子力学の n 体問題の解から計算できる [10]。例えば、 H_1 と H_2 をそれぞれ一体と二体のハミルトニアンとすると、一体と二体のクラスター関数は、それぞれ $U_1 = \exp(-\beta H_1)$ と $U_2 = \exp(-\beta H_2) - \exp(-\beta H_1) \otimes \exp(-\beta H_1)$ となる。

$$\begin{aligned} \ln \Xi_V &= \sum (\text{全ての相異なる Lee-Yang の基本グラフ}) \\ &= \underbrace{\text{●} \rightarrow \text{●}}_{z^1 \text{ の項}} + \underbrace{\text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●}}_{z^2 \text{ の項}} + \underbrace{\text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●}}_{z^3 \text{ の項}} + \underbrace{\text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●}}_{z^3 \text{ の項}} + \underbrace{\text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●} \rightarrow \text{●}}_{z^4 \text{ の項}} + \dots \end{aligned}$$

図 2: 大分配関数は、外線を持たない、全ての相異なる Lee-Yang の基本グラフの和から計算される。Lee-Yang の基本グラフは、入る線と出る線の数が等しいバーテックスと、2 つのバーテックスをつなぐ線からなる有向グラフである。 n 本の入る線と出る線を持つバーテックスは、 n 体のクラスター関数 U_n を表し、量子力学の n 体問題の解から計算できる。各グラフにおいて方向付きの線の本数の合計が、そのグラフが表す項の z の次数を表す。

Lee-Yang のクラスター展開法を用いて正しく計算できることがわかっているのは、図 1 に示すように、任意の s 波散乱長における高温領域の熱力学と、強結合領域における相転移温度 (自由な二原子分子ボソンの BEC 転移の温度) $T_c^{\text{BEC}}/T_F \simeq 0.218$ [11] である (図 1 の (i) と (iii) に対応)。弱結合領域では BCS 理論によると相転移温度が $T_c^{\text{BCS}}/T_F \simeq 0.61 \exp[2\pi/(k_F a)]$ となるが、この方法を用いて T_c^{BCS} が導出できるかどうかは明らかではないため、本研究ではこの問題を解決する。この方法を用いて T_c^{BCS} を導出する方法がわかれば、ユニタリー領域を含む BCS-BEC クロスオーバーの相転移温度を計算する新しい理論を確立するための足がかりになると期待される。

3 結果

Lee-Yang のクラスター展開法において、全てのグラフの和を計算するためには任意の n 体問題の解が必要があり、それは非常に困難である。そこで本研究では、図 3 に示した梯子形グラフの無限和 $\mathcal{P}_{\text{pair}}$ を考えて、このグラフまで取り込む近似

$$\ln \Xi_V \simeq \ln \Xi_{\text{ideal},V} + \mathcal{P}_{\text{pair}} \quad (4)$$

を用いた。ここで、 $\ln \Xi_{V,\text{ideal}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + z e^{-\beta \hbar^2 k^2 / (2m)}]$ は自由フェルミ気体の大分配関数。 $\mathcal{P}_{\text{pair}}$ には、BCS 理論の導出に必要な、フェルミ面の形成とそれに伴うクーパーペアの形成、クーパーペアがボソンであることによる量子統計性の効果が含まれるため (詳しい考察は、本研究の原著論文 [1] を参照。)、 $\mathcal{P}_{\text{pair}}$ の発散を調べれば相転移温度 T_c^{BCS} が導出できるのではないかと期待される。

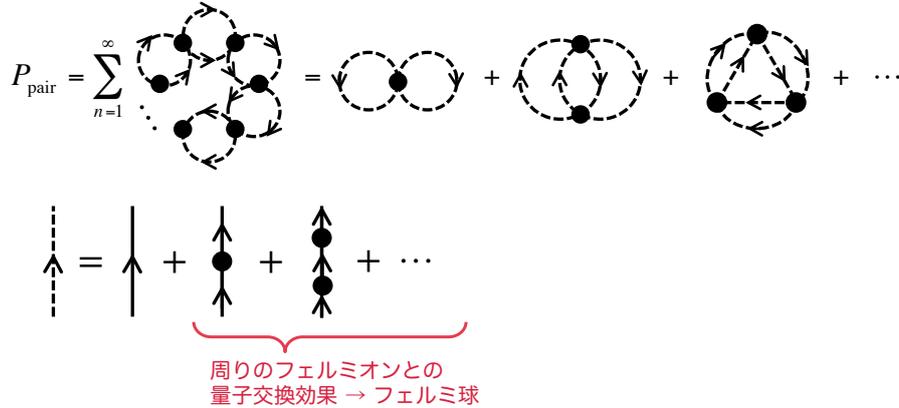


図 3: 本研究では、全ての相異なる Lee-Yang の基本グラフの中で、 $\mathcal{P}_{\text{pair}}$ と書かれるものを考える。点線は、周りのフェルミオンとの量子交換効果を取り込むために、一体のクラスター関数からなる無限和を取り込んだものになる。

本研究で扱うのは弱結合領域なので、二体のクラスター関数 U_2 を相互作用の強さ g の一次までで近似する。 g の一次まで取った U_2 を式 (4) に代入して式変形を行うと、

$$\mathcal{P}_{\text{pair}} = - \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{K}} \ln \left\{ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \left[\frac{1 - n_F(\mathbf{k}_1) - n_F(\mathbf{k}_2)}{i\Omega_l - (\epsilon_{\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{k}_2} - 2\mu)} + \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{p}}} \right] - \frac{m}{4\pi \hbar^2 a} \right\} + \text{constant}. \quad (5)$$

を得る。ここで、 $n_F(\mathbf{k})$ は Fermi 分布関数。式 (5) において、 $l = 0, \mathbf{K} = 0$ の成分に注目して無限和の発散を調べれば、Thouless criterion [12] が導出される。弱結合領域では、低温で $\mu \simeq \epsilon_{\mathbf{k}}$ と近似できることから、Thouless criterion と合わせることで、 T_c^{BCS} が導出できる [1]。これが本研究の主結果である。

最後に注意点と今後の展望を述べる。式 (4) と (5) を合わせれば、Nozières - Schmitt-Rink (NSR) の BCS-BEC クロスオーバー理論で用いられる粒子数方程式 [4] が導出できる [1]。従って、弱結合領域で得られた結果を強結合領域まで外挿すれば NSR の BCS-BEC クロスオーバー理論 [4] を再現する。このことから、一見、Lee-Yang のクラスター展開法を用いて BCS-BEC クロスオーバーの全領域で相転移温度が計算できるように見える。しかし、式 (5) は二体のクラスター関数 U_2 を相互作用の強さ g の一次で近似して得られたものであるため、本研究の場合にそのような外挿の正当性は定かではない。他方で、強結合領域において U_2 を g の一次で近似せずに非摂動的に取り扱って $\mathcal{P}_{\text{pair}}$ を計算すれば、強結合領域の正しい相転移温度 $T_c^{\text{BEC}}/T_F \simeq 0.218$ を得る [1, 11]。従って、本研究で行った Lee-Yang のクラスター展開法による BCS-BEC クロスオーバーの解析は、少なくとも高温領域、弱結合領域、強結合領域を正しく取り扱えている (図 1)。今後、ユニタリー領域を含む BCS-BEC クロスオーバーの全領域の相転移温度を Lee-Yang のクラスター展開を用いて計算するために、今回よりも一般的な形式 [13, 14] を用いた解析を行う。

参考文献

- [1] N. Sakumichi, Y. Nishida, and M. Ueda, arXiv:1310.4665 [cond-mat.quant-gas].
- [2] *The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas*, edited by W. Zwerger (Springer, Berlin, 2012), and references therein.
- [3] D. M. Eagles, Phys. Rev. **186**, 456 (1969); A. J. Leggett, in *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* (Springer-Verlag, Berlin, 1980), pp. 13-27.
- [4] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985); C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria and J. R. Engelbrecht, Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993).
- [5] A. Bulgac, *et al.*, Phys. Rev. A **78**, 023625 (2008); E. Burovski, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090402 (2008).
- [6] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, New York, 1987), 2nd ed., Sec. 10.2.
- [7] T.-L. Ho and E. J. Mueller, Phys. Rev. Lett. **92**, 160404 (2004); X.-J. Liu, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 160401 (2009); Phys. Rev. A **82**, 023619 (2010); D. B. Kaplan and S. Sun, Phys. Rev. Lett. **107**, 030601 (2011); X.-J. Liu, Phys. Rep. **524**, 37. (2013).
- [8] X. Leyronas, Phys. Rev. A **84**, 053633 (2011).
- [9] M. Horikoshi, *et al.*, Science **327**, 442 (2010); S. Nascimbène, *et al.*, Nature (London) **463**, 1057 (2010); M. J. H. Ku, *et al.*, Science **335**, 563 (2012).
- [10] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **113**, 1165 (1958); **117**, 22 (1960).
- [11] T. Ohkuma and M. Ueda, Phys. Rev. A **73**, 063608 (2006).
- [12] D. J. Thouless, Ann. Phys. **10**, 553 (1960).
- [13] N. Sakumichi, N. Kawakami and M. Ueda, Phys. Rev. A **85**, 043601 (2012).
- [14] N. Sakumichi, N. Kawakami and M. Ueda, arXiv:1202.6532 [cond-mat.quant-gas].