光格子中における二重極子振動と超流動臨界運動量

齋藤 拓也1

概要

本研究では、平均場近似を用いて Bose-Hubbard 模型を解析し、光格子に閉じ込められたボース気体の超流動安定性を 研究した。一様な光格子中における単位格子当たりの平均粒子数が1である系の Landau 不安定性、及び、動的不安定 が引き起こす臨界運動量を励起スペクトルから決定し、超流動-Mott 絶縁体転移点に向かってオンサイト相互作用を増 加させたとき、この2つの臨界運動量が近づくことを見つけた。次に、実際の実験と対応づけるため、調和トラップポ テンシャルを付け加えた系を考えた。トラップ中心を突然動かすことにより二重極子振動を引き起こし、その後の実時 間発展を計算した。本研究では、オンサイト相互作用のみが働くノーマルボソンと双極子相互作用が働くハードコアダ イポーラーボソンの2つの種類の粒子を考えた。どちらの場合でも、局所的な運動量の最大値が一様系における動的不 安定が引き起こす臨界運動量を超えたとき、二重極子振動に著しい減衰が起こることを見つけた。ハードコアダイポー ラーボソンの場合では、超固体相の境界に近い超流動相の領域で二重極子振動による動的不安定が起こると、チェッカー ボード型の密度波を持つ超固体を形成することを見つけた。



N) T 🕂	Introduction
第2章	モデルと定式化
2.1	Bose-Hubbard 模型
2.2	Gutzwiller approximation
2.3	励起スペクトル
2.4	局所的な運動量....................................
年。辛	
\$F3早	一様な光格子中における臨界連動重
第3早 第4章	一様な光格子中における臨界連動量 ノーマルボソンの二重極子振動
第3章 第4章 4.1	一様な光格子中における臨界連動量 ノーマルボソンの二重極子振動 安定な二重極子振動と減衰を伴った二重極子振動
第3章 第4章 4.1 4.2	 一様な光格子中における臨界連動量 ノーマルボソンの二重極子振動 安定な二重極子振動と減衰を伴った二重極子振動 局所的な臨界運動量 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・
第3章 第4章 4.1 4.2 4.3	一様な光格子中における臨界連動量 ノーマルボソンの二重極子振動 安定な二重極子振動と減衰を伴った二重極子振動 局所的な臨界運動量 品所的な臨界運動量 臨界運動量

1東京理科大学理学研究科物理学専攻:二国研究室:修士2年

第5章	ハードコアダイポーラーボソンの二重極子振動	11
5.1	基底状態	11
5.2	臨界運動量	12
5.3	動的な相転移現象....................................	12
第6章	Summary	13
補足	Gutzwiller 近似から励起エネルギーの導出	14

第1章 Introduction

超流動-Mott 絶縁体量子相転移が観測されて以来 [1]、極低温気体が光格子に閉じ込められた系は、強相関物理学を研 究するための理想的な舞台となっている [2]。励起スペクトル [3-6]、量子臨界 [7]、輸送現象 [8-10] などを含む最近の実 験によって、強相関極低温気体が持つ多くの興味深い性質が明らかにされている。特に、超流動臨界運動量に関連した輸 送現象は大変注目を浴びている。光格子中の極低温気体の実験では、動く光格子を用いたり [9, 11, 12]、突然調和トラッ プの中心をずらすことにより二重極子振動を引き起こしたり [8, 10, 13] することによって輸送現象が調べられている。 Gross-Pitaevskii(GP) 平均場近似が有効である相互作用の弱い領域では、動く光格子を使うか、二重極子振動を引き起 こすかいった方法によらず、低温でのトラップ系における臨界運動量は、一様系における動的不安定による臨界運動量 と定量的に一致することが示されている [11-15]。中間領域や強く相互作用している領域では、トラップ系、非トラップ 系における臨界運動量は、動く光格子を用いたときには既に得られているが [9, 16, 17]、二重極子振動からは得られてい なく、どのようになるか明らかにされていない。

光格子に加えて、強相関物理学の研究の新しい可能性が、強い磁気双極子-双極子相互作用が働く原子気体 [18, 19] や 極性分子気体 [20, 21] の生成によって開かれた。双極子相互作用が働くボース気体が光格子に閉じ込められたときには、 対角(結晶)長距離秩序と非対角(超流動)長距離秩序の両方を有する超固体相の存在が示唆されている [22-29]。段下 氏と山本氏は2次元光格子に閉じ込められた双極子相互作用が働くボース気体の臨界運動量を計算し、超固体相の臨界運 動量が Mott 絶縁体相や密度波相などの絶縁体相とは異なり有限であり、さらに、超流動相の臨界運動量よりはるかに小 さくなっているという性質により、超固体相が判別できることを提唱した [28]。文献 [28] は一様系で解析を行なっている ので、実際の実験に対応した調和トラップを考慮した計算をすることによって、この提唱がより信頼できるものになる。 この論文では、Gutzwiller 近似を用いて、光格子中におけるオンサイト相互作用のみが働くボース気体と双極子相互 作用が働くボース気体の超流動の輸送現象を研究した。まず始めに、各次元でオンサイト相互作用のみが働くボース気 体の励起スペクトルを計算することによって、一様な光格子中における単位格子当たりの平均粒子数が1である系の臨 界運動量を解析し、Landau 不安定性と動的不安定性の境界を示す。次に、運動方程式を数値的に解くことで、オンサイ ト相互作用のみが働くボース気体と双極子相互作用が働くボース気体、それぞれの場合において、二重極子振動の時間 発展を計算する。どちらの場合も、局所的な運動量の最大値が一様な光格子中の動的不安定性による臨界運動量を越え たときに、二重極子振動の著しい減衰が起こることを示す。さらに、特定のパラメーター領域で、二重極子振動モード と単極子振動モードが共鳴的に結合する現象を見つけた。双極子相互作用が働くボース気体では、文献 [28] で予言され ているように、超固体相に近い超流動状態のとき、二重極子振動による動的不安定性が起こった後にチェッカーボード型 の密度波を形成することを明らかにする。

この論文は、以下のように構成されている。2章では、Bose-Hubbard 模型とGutzwiller 平均場近似に基づく物理量や 運動方程式の定式化を行う。3章では、励起スペクトルから、一様な1次元、2次元、3次元光格子中における単位格子 当たりの平均粒子数が1の系の臨界運動量を計算する。4章では、調和トラップが結合した光格子中における臨界運動量 を二重極子振動から決定する。5章では、ハードコアダイポーラーボソンの二重極子振動を解析する。6章では、我々の 研究結果とそこから得られた知見をまとめる。

第2章 モデルと定式化

2.1 Bose-Hubbard 模型

調和トラップが結合した深い光格子に、ボース気体が閉じ込められた系を考える。この系は、以下の Bose-Hubbard 模型により、よく記述されることが知られている [30, 31]。

$$\hat{H} = -J\sum_{\mathbf{j}}\sum_{\alpha=1}^{d} (\hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}} + \text{H.c.}) + \frac{U}{2}\sum_{\mathbf{j}}\hat{n}_{\mathbf{j}}(\hat{n}_{\mathbf{j}}-1) + \sum_{\mathbf{j}}(\epsilon_{\mathbf{j}}-\mu)\hat{n}_{\mathbf{j}},$$
(2.1.1)

ここで、 $\epsilon_{j} = \Omega |a_{j} - \mathbf{r}_{0}(t)|^{2}$ は調和トラップポテンシャルであり、a、dは、格子定数、空間の次元をそれぞれ表している。 ベクトル j、 \mathbf{e}_{α} は、サイトの添字、 α 方向の単位ベクトルをそれぞれ示していて、方向 $\alpha = 1, 2, 3$ はx, y, z方向を意味 している。 $\hat{a}_{j}(\hat{a}_{j}^{\dagger})$ はサイト j における消滅(生成)演算子であり、 $\hat{n}_{j} = \hat{a}_{j}^{\dagger}\hat{a}_{j}$ はサイト j における数演算子である。J, U, Ω, μ は、それぞれ、ホッピング強度、オンサイト相互作用パラメーター、調和トラップの曲率、化学ポテンシャルであ る。調和トラップが結合した光格子中におけるボース気体の二重極子振動を考えるときは、トラップの曲率を $\Omega = 0.01J$ と固定した。 $\mathbf{r}_{0}(t) = Da\theta(t)\hat{e}_{1}$ は、二重極子振動を引き起こすために、t = 0でトラップ中心をx方向に距離 Daだけ動 かすことを意味している。ここで、 $\theta(t)$ は、ステップ関数である。動かす距離 Daを変えることで、ボース気体の運動 量を調節した。以後、図とキャプションを除いて、 $J = \hbar = a = 1$ の単位系を適用している。

2.2 Gutzwiller approximation

光格子中におけるボース気体の基底状態、励起スペクトル、実時間発展を計算するため、以下で記述される Gutzwiller 近似を用いた。この近似は、多体系の波動関数を1サイトの局所状態の直積であると仮定している。

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{j}} \sum_{n} f_{\mathbf{j},n}(t) |n\rangle_{\mathbf{j}}$$
(2.2.1)

ここで、 $|n\rangle_{\mathbf{j}}$ は、サイト \mathbf{j} における局所的な Fock 状態を表していて、係数 $f_{\mathbf{j},n}$ に関する規格化条件は、 $\sum_{n} |f_{\mathbf{j},n}|^{2} = 1$ である。有効作用 $\int dt \left\langle \Psi_{G} \left| i \frac{d}{dt} - \hat{H} \right| \Psi_{G} \right\rangle = \int dt \left[\sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} f_{\mathbf{j},n}^{*} \frac{df_{\mathbf{j},n}}{dt} - E[\{f_{\mathbf{j},n}\}] \right]$ を最小化することによって、 $f_{\mathbf{j},n}$ が 従う、以下の方程式を導出できる。

$$i\frac{df_{\mathbf{j},n}(t)}{dt} = \frac{\partial E[\{f_{\mathbf{j},n}\}]}{\partial f_{\mathbf{j},n}^*}$$
(2.2.2)

ここで、エネルギー $E[\{f_{j,n}\}]$ は

$$E[\{f_{\mathbf{j},n}\}] = \langle \Psi_G | \hat{H} | \Psi_G \rangle = -\sum_{\mathbf{j}} \sum_{\alpha=1}^d (\Phi_{\mathbf{j}}^* \Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_\alpha} + \Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_\alpha}^* \Phi_{\mathbf{j}}) + \sum_{\mathbf{j}} \sum_n \left[\frac{U}{2}(n-1) - \mu_{\mathbf{j}} \right] n |f_{\mathbf{j},n}|^2$$
(2.2.3)

で与えられる。したがって、f_{j,n}に関する運動方程式は、

$$i\frac{df_{\mathbf{j},n}(t)}{dt} = -\sum_{\alpha=1}^{d} \left[\sqrt{n}f_{\mathbf{j},n-1}(\Phi_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}} + \Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}) + \sqrt{n+1}f_{\mathbf{j},n+1}(\Phi_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} + \Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*}) \right] \\ + \left[\frac{U}{2}n(n-1) + (\epsilon_{\mathbf{j}} - \mu)n \right] f_{\mathbf{j},n}$$

$$(2.2.4)$$

となる。ここで、 $\Phi_j = \langle \Psi_G | \hat{a}_j | \Psi_G \rangle = \sum_n \sqrt{n} f^*_{\mathbf{j},n-1} f_{\mathbf{j},n} \mathbf{k}$ 、サイト**j**における超流動オーダーパラメーターである。 式 (2.2.4) は、明らかに実時間発展の方程式であるが、虚時間発展を用いて計算することより、基底状態を計算すること 4

も可能である [33]。定常状態では、 $f_{\mathbf{j},n}(t) = \tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}$ の形で書け、 $\tilde{f}_{\mathbf{j},n}$ は時間に依存せず、位相因子 $\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}$ は、式 (2.2.5) で与えられる。

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{j}} = -\sum_{\alpha=1}^{d} \left[(\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}) \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}}^{*} + (\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*}) \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}} \right] + \sum_{n} \left[\frac{U}{2} (n-1) - \mu_{\mathbf{j}} \right] n |\tilde{f}_{\mathbf{j},n}|^{2}$$
(2.2.5)

ここで、 $\mu_{j} = \mu - \epsilon_{j}$ は、サイト**j**における有効化学ポテンシャルであり、 $\tilde{\Phi}_{j} = \sum_{n} \sqrt{n} \tilde{f}_{j,n-1}^{*} \tilde{f}_{j,n-1} \tilde{f}_{j,n}$ は、定常状態の超流動 オーダーパラメーターである。励起スペクトルの計算手法については、次の節で説明する。光格子中におけるボース気体 の様々な現象や性質を解析するために、Gutzwiller 近似は、Bose-Hubbard 模型に対してよく適用される。この近似は、 平均場近似の1種であるため、高次元における計算のほうがより正確である。実際に、3次元では、励起スペクトル [6] や臨界運動量 [9] などの興味深い性質が実験と定量的によい一致が見られている。2次元では、超流動-Mott 絶縁体転移 の特徴を捉えていることから、この近似は定性的に有効であると考えられている。それとは対照的に、非常に相互作用 が弱い領域 $U \ll 1$ を除いて、Gutzwiller 近似は1次元においては有効ではないことが知られている。しかし、この近似 のレベルで保持される超流動の輸送現象の基本的な性質を理解するためには、1次元系の解析でも有益であるため、本 論文では、Gutzwiller 近似を用いて1次元系を解析している。

2.3 励起スペクトル

文献 [23, 34] では、Gutzwiller 近似から一様な光格子系の励起スペクトルを計算するための処方箋を提示しているが、本 研究では、一様系に加え、トラップ系の集団モードの振動数を得るためにも励起スペクトルを計算した。既に、Kovrizhin *et al.* が、トラップ系の励起スペクトルを計算するための拡張を行っているが、彼らは明確な定式化を説明していないた め、以下でその詳細を述べる。

次のように定常解の周りに微小な揺らぎを考える。

$$f_{\mathbf{j},n}(t) = \left[\tilde{f}_{\mathbf{j},n} + \delta f_{\mathbf{j},n}(t)\right] e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}$$
(2.3.1)

このとき、

$$\frac{\partial E[\{f_{\mathbf{j},n}\}]}{\partial f_{\mathbf{j},n}^*} = \frac{\partial E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{j},n}^*} + \sum_{\mathbf{l}}\sum_{m} \left[\frac{\partial^2 E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}\partial f_{\mathbf{j},n}^*}\delta f_{\mathbf{l},m}e^{-i\omega_{\mathbf{l}}t} + \frac{\partial^2 E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}^*\partial f_{\mathbf{j},n}^*}\delta f_{\mathbf{l},m}^*e^{i\omega_{\mathbf{l}}t}\right]$$
(2.3.2)

であることに注意し、形式的に式 (2.2.4) を揺らぎ $\delta f_{\mathbf{j},n}$ の 1 次の項まで展開することで、 $\delta f_{\mathbf{j},n}$ が満たすべき方程式 (2.3.3) を得る。

$$i\frac{d\delta f_{\mathbf{j},n}}{dt} = -\omega_{\mathbf{j}}\delta f_{\mathbf{j},n} + \sum_{\mathbf{l}}\sum_{m} \left[\frac{\partial^2 E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}\partial f_{\mathbf{j},n}^*}\delta f_{\mathbf{l},m}e^{-i\omega_{\mathbf{l}}t} + \frac{\partial^2 E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}^*\partial f_{\mathbf{j},n}^*}\delta f_{\mathbf{l},m}^*e^{i\omega_{\mathbf{l}}t}\right]$$
(2.3.3)

揺らぎを Bogoliubov 変換することにより、

$$\delta f_{\mathbf{j},n} = u_{\mathbf{j},n} e^{-i\omega t} + v_{\mathbf{j},n}^* e^{i\omega^* t} \tag{2.3.4}$$

次の線形方程式が導かれる。

$$\omega u_{\mathbf{j},n} = -\sum_{m} \sum_{\alpha=1}^{d} \left[\left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m} \\
+ \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m} \\
+ \left\{ \sqrt{n(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1} + \sqrt{(n+1)m} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m-1} \right\} v_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m} \\
+ \left\{ \sqrt{n(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1} + \sqrt{(n+1)m} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m} \\
- \sum_{\alpha=1}^{d} \left[\sqrt{n} (\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}) u_{\mathbf{j},n-1} + \sqrt{n+1} (\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*}) u_{\mathbf{j},n+1} \right] \\
+ \left[\frac{U}{2} n(n-1) - n\mu_{\mathbf{j}} - \tilde{\omega}_{\mathbf{j}} \right] u_{\mathbf{j},n}$$
(2.3.5)

5

$$-\omega v_{\mathbf{j},n} = -\sum_{m} \sum_{\alpha=1}^{a} \left[\left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m-1} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1} \right\} v_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ + \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ + \left\{ \sqrt{n(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} + \sqrt{(n+1)m} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ + \left\{ \sqrt{n(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} + \sqrt{(n+1)m} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1}^{*} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ - \sum_{\alpha=1}^{d} \left[\sqrt{n} (\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*}) v_{\mathbf{j},n-1} + \sqrt{n+1} (\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}) v_{\mathbf{j},n+1} \right] \\ + \left[\frac{U}{2} n(n-1) - n\mu_{\mathbf{j}} - \tilde{\omega}_{\mathbf{j}} \right] v_{\mathbf{j},n}$$

$$(2.3.6)$$

この方程式を解くことで、振動数 ω と励起の波動関数 $(u_{\mathbf{j},n}, v_{\mathbf{j},n})$ を得ることができ、定常状態の安定性を判別すること ができる。すべての励起が条件 $\mathcal{N}\omega \geq 0$ を満たすときに、定常状態は安定である。ここで、 $\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{i}} \sum_{n} (|u_{\mathbf{j},n}|^2 - |v_{\mathbf{j},n}|^2)$ は規格化定数であり、 $\mathcal{N}\omega$ は、式 (2.3.1) で与えられる微小な揺らぎによって生じるエネルギーの変化を示す¹。 $\mathcal{N}\omega < 0$ を満たす励起が存在するとき系はエネルギー的に不安定であることを意味し、Landau 不安定性と呼ばれている。有限の 値の虚部を伴った励起、すなわち |Im[ω]| > 0 の出現は、時間ごとに揺らぎが指数関数的に増大していくことを意味し、動 的不安定と呼ばれている [36]。十分に低い温度の原子気体の系では、エネルギーの散逸の過程が存在しないため Landau 不安定性は系を不安定にできないが、動的不安定性は劇的に系を崩壊させることができる [12, 37, 38]。したがって、常 に動的不安定性による臨界運動量は Landau 臨界運動量よりも大きい値をとるが、動的不安定性による臨界運動量を計 算することも重要である。

局所的な運動量 $\mathbf{2.4}$

一様系の臨界運動量と比較することで、トラップ系における臨界運動量は質量中心の運動量ではなく、局所的な運動 量により特徴付けられる。α方向の局所的な運動量は以下で記述される。

$$p_{\mathbf{j}}^{\alpha} = \sin^{-1} \left(\frac{I_{\mathbf{j}}^{\alpha}}{2\sqrt{n_{\mathbf{j}}^{c} n_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{c}}} \right)$$
(2.4.1)

ここで、 $n_{\mathbf{i}}^{c} = |\Phi_{\mathbf{j}}|^{2}$ はサイト**j**における凝縮体密度であり、Gutzwiller 近似において $I_{\mathbf{j}}^{\alpha} = (\Phi_{\mathbf{j}}^{*}\Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}} - \Phi_{\mathbf{j}}\Phi_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*})/i$ は、 サイト \mathbf{j} からサイト $\mathbf{j} + \mathbf{e}_{\alpha}$ に流れるカレントである。トラップ系における局所的な運動量の最大値が、一様系での動的 不安定による臨界運動量を越えたとき、二重極子振動の著しい減衰が起こることを4章で示す。

第3章 一様な光格子中における臨界運動量

この章では、式 (2.3.5) と式 (2.3.6) を数値的に解くことで各次元の一様な光格子中における ν = 1 である系の励起スペ クトルを計算し、前の節で述べた判別方法によって Landau 不安定性と動的不安定性による臨界運動量を決定する。ここ で、νは単位格子当たりの粒子数である。オンサイト相互作用、または、流れの運動量を断熱的に増加させたときの凝縮 粒子数を実時間発展の運動方程式 (2.2.4) から計算するという手法により、文献 [16, 17] で動的不安定性による臨界運動 量は既に得られている。文献 [16, 17] に対する我々の手法の明確な有意性は、Landau 不安定性による臨界運動量も得ら れることである。それに付け加え、動的不安定性による臨界運動量もより正確に計算できることも主張したい。例えば、 U
ightarrow 0の極限で、文献 [16, 17] で得られた臨界運動量は、GP による平均場近似理論から予言されている $p = \pi/2$ [39]

¹Appendix A を参照

6



図 3.1: ボース気体の運動量 p が異なるときの U/J = 3、 $\nu = 1$ における一様な l 次元光格子中の励起スペクトル $\omega(k)$ 。 (a) : p = 0、(b) : $p = p_{LI} \simeq 0.85$; Landau 不安定性の開始を示している、(c) と (d) : $p = 0.94 > p_{DI1}$ 。

よりもわずかに大きいが、我々の手法では以下で見るように GP の予言と正確な一致を示す。一様な運動量を持つボース気体の励起スペクトルを計算するために、以下のように式 (2.1.1) に位相因子を付け加える。

$$\hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}} \to \hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{e}_{\alpha}} \tag{3.0.1}$$

これは、光格子が一様な運動量 – **p** で動いている状況を表している。係数 $f_{j,n}$ が実数であるという条件を課し、式 (2.2.4) の虚時間発展を実行することによって、零運動量状態の定常解を得る。この状態は、静的な光格子中において運動量 **p** を持つ状態と等価である。定常状態の係数 $\tilde{f}_{j,n}$ を式 (2.3.5) と式 (2.3.6) に代入し、対角化することによって、流れが存 在した状況下における励起スペクトルを得る。図 3.1 は、流れの運動量 p の値が異なるときの U/J = 3 における 1 次元 光格子に閉じ込められたボース気体の励起スペクトルである。ほとんどのパラメーター領域において Bogoliubov 励起に 対応するブランチが Landau 不安定性と動的不安定性を決定するため、まず、このブランチだけを描いた。p = 0 のと き、このブランチは、 $|k| \ll 1$ でフォノン分散を持っている (図 3.1(a))。pを増加させたとき、k < 0の領域でのフォノ ン分散の傾きは減少していき、 $p = p_{\text{LI}} \simeq 0.85$ で傾きがゼロになる (図 3.1(b))。これは、Landau 不安定性の発現を意味 する。さらに pを増加させていくと、ある値を越えたときに $|k| \ll 1$ での励起スペクトルの虚部が有限の値を持つ。こ れは動的不安定の発現を示していて、この閾値を p_{DII} と定義する。

図 3.2 は、各次元での Landau 不安定性による臨界運動量 p_{LI} (赤い波線)と $|k| \ll 1$ での励起によって引き起こされる動的不安定性による臨界運動量 p_{DI1} (黒い実線)である。 $U \to 0$ のとき、次元に依らず、 $p_{\text{LI}} \to 0$ 、 $p_{\text{DI1}} \to \pi/2$ である。Uを増加させたときには、 p_{DI1} は単調に減少し、 p_{LI} は p_{DI1} に近づく振る舞いを見せる。相互作用が強い領域($U \gtrsim U_c/2$)では、 p_{LI} と p_{DI1} はほとんど同じ値をとり、 $U = U_c$ で両方の臨界運動量ともゼロになる。ここで、 U_c は超流動-Mott 転移点におけるオンサイト相互作用である。 p_{DI1} の振る舞いは、文献 [16, 17]の結果と一致している。

1 次元において相互作用が十分に弱い領域では、短波長の励起によって引き起こされる動的不安定性のほうが、 $|k| \ll 1$ での励起によって引き起こされる動的不安定性よりも先に起こる。この特殊な動的不安定性による臨界運動量 p_{D12} を青い点線で描いた(図 3.2(a))。この動的不安定性を理解するために、ボース気体の運動量が異なるときのU/J = 0.1における Bogoliubov モード、amplitude モードとそのアンチモードに対応する4本の励起スペクトルを描いた(図 3.3)。pを増加させたとき、amplitude モードは下降していき、Bogoliubov モードとの反発を示す(図 3.3(b) と (c))。pをさらに増加させると、amplitude モードは anti-Bogoliubov モードと、そして、Bogoliubov モードは anti-amplitude モードとそれぞれ結合する。この結合したモードがこの動的不安定性を引き起こすことが見られる [36]。我々は、この動的不安



図 3.2: 一様な光格子における $\nu = 1$ である系の臨界運動量とU/Jの関係。(a): 1 次元、(b): 2 次元、(c): 3 次元。赤い破線、黒い実線、青い点線は、Landau 不安定性による臨界運動量 (p_{LI})、長波長の励起によって引き起こされる動的不安定 (p_{DI1})、短波長の励起によって引き起こされる動的不安定 (p_{DI2}) をそれぞれ示している。



図 3.3: 流れの運動量 pが異なるときの弱い相互作用 U/J = 0.1、 $\nu = 1$ における 1 次元光格子中の励起スペクトル $\omega(k)$ 。 (a): p = 0、(b): p = 0.5; Bogoliubov モードと amplitude モードの反発の開始を示している、(c): p = 1.2、(d) と (e): p = 1.3、短波長の励起による動的不安定性を示している。

定性により秩序ベクトル $k \simeq \pm 0.3\pi$ と $\pm 0.5\pi$ を持った密度波が形成されると主張する。このような動的不安定性は、オフサイト相互作用が存在する系では既に見つけられているが [28, 40-42]、オンサイト相互作用のみのが存在する標準的な Bose-Hubbard 模型では、初めて得られた知見である。

第4章 ノーマルボソンの二重極子振動

この章では、調和トラップが結合した1次元、または、2次元光格子にボース気体が閉じ込られた系を考える。 $U > U_c$ のときに、平均粒子数が1の Mott plateau がトラップ中心に形成するように、全粒子数 N を1次元では N = 45、2次元では N = 3000 に固定する。まず、式 (2.2.4)の虚時間発展により基底状態を計算する。次に、二重極子振動を引き起こすためにトラップ中心を突然移動させ、その後の実時間発展を計算する。これと似た動的過程は同様の Gutzwiller 近似を使い、文献 [35, 43] で既に調べられているが、二重極子振動と臨界運動量の関係には注目していない。そこで、我々は二重極子振動から臨界運動量を決定することに興味を持った。

4.1 安定な二重極子振動と減衰を伴った二重極子振動



図 4.1: U/J = 6のときの調和トラップが結合した 1 次元光格子中における質量中心 $x_{com}(t)$ の時間発展。(a): D = 4.3における安定な二重極子振動、(b): D = 4.4における減衰を伴う二重極子振動。

二重極子振動の基本的な性質を示すために、調和トラップが結合した1次元光格子にボース気体が閉じ込められた系の動的過程を解析する。図 4.1 は、安定な二重極子振動と減衰を伴った二重極子振動の質量中心の時間発展の様子である。ここで、質量中心は $x_{com} = \sum_j jn_j / \sum_j n_j$ によって与えられる。図 4.1(a)が示すように、displacement Dがある臨界 displacement D_c より小さい場合には、二重極子振動の振幅はほとんど減衰しない。この減衰が起こらない二重極子振動は、安定な超流動の特徴である。これとは対照的に、displacement Dが臨界 displacement D_c を越えたとき、振幅が著しく減衰する (図 4.1(b))。わずかな displacement の増加が著しい減衰が引き起こすという性質により、超流動の安定性を特徴付ける臨界 displacement D_c を正確に決定できる。

4.2 局所的な臨界運動量

一様系における臨界運動量と比較するため、 $D = D_c$ のときのトラップ系における質量中心の運動量 $p_{com} = \sin^{-1}(v_{com}/2)$ と式 (2.4.1) で定義される局所的な運動量を計算する。ここで、 $v_{com} = dx_{com}/dt$ は質量中心の速度である。図 4.2 は、相互作用が弱い場合 (U = 2(a))と相互作用が強い場合 (U = 10(b))における、局所的な運動量 p_j 、凝縮体密度 n_j^c 、密度 n_j 、局所的な流れ密度 I_j である。時間 t は、質量中心の運動量が最大値をとる時間を選び、この時間を t_{max} と定義した。



図 4.2: $D = D_{\rm c}$ 、 $t = t_{\rm max}$ のときの1次元光格子中における、局所的な運動量 p_i (黒い実線)、局所的な凝縮体密度 $n_{\rm c}^{\rm c}$ (赤 い破線)、局所的な密度 (青い点線)、局所的な流れ密度 $I_i(緑の鎖線)$ 。(a) : U/J = 2、(b) : U/J = 10。

相互作用が弱い場合では、局所的な運動量はほとんど一定である(図 4.2(a))。その一方、相互作用が強い場合では、局所 的な運動量は強く空間に依存していて、単位格子当たりの平均粒子数がほぼ1であるサイトでピークを持つ (図 4.2(b))。 この理由は、平均粒子数が1に近い領域では Mott plateau の形成の前兆として凝縮体密度が強く抑えつけられているか らである。局所的な運動量の空間依存性により、質量中心の運動量の最大値は局所的な運動量の最大値よりもかなり小 さい値をとる。この空間依存性は、Mott 転移近傍においてより顕著である。

臨界運動量 4.3



図 4.3: $D = D_c$ と $t = t_{\text{max}}$ のときの局所的な運動量の最大値 $p_{\text{max}}($ シンボルマーク付きの黒い実線)、質量中心の運動量 $p_{com}($ 赤い波線) と U/Jの関係。(a): 1D、(b): 2D。青い点線は、一様系における動的不安定性による臨界運動量 p_{DI1} である。

図 4.3 は、 $D = D_c$ と $t = t_{max}$ のときの局所的な運動量の最大値 p_{max} 、及び、質量中心の運動量の最大値 p_{com} と Uの関係である。比較のため、3章で得た一様系でv=1における動的不安定性が引き起こす臨界運動量 ppu を描いた。 我々は、トラップ系における局所的な運動量の最大値 $p_{\max}(t = t_{\max})$ と一様系における動的不安定性による臨界運動量 p_{DI1} が定量的に一致することを見つけた。その一方、 $p_{\text{com}}(t = t_{\text{max}})$ は p_{DI1} と全く異なった値をとる。このことから、 次の重要な結果を導いた。二重極子振動から一様系における臨界運動量を測定するためには、time-of-flight images から 比較的簡単に測定できる質量中心の運動量 [8, 10, 13] ではなく、局所的な運動量を測定する必要がある。局所的な運動 量はこれまで実験的に測定されていないが、単位格子のスケールでの物理量の観測ができるまで発展した近年の実験技 術を考えれば [7,44]、局所的な運動量は今後の実験で観測できるようになると期待される。

4.4 Mode coupling



図 4.4: *U*/*J* = 7.78 のときの調和トラップが結合した 1 次元光格子中における減衰と回復を伴った質量中心 *x*_{com}(*t*) の 運動



図 4.5: (a) 調和トラップが結合した1次元光格子中における第1のモードの振動数 ω_1 (黒い実線) と第2モードの振動数 ω_2 (赤い破線)、(b) ω_2/ω_1 。

長時間の動的過程に注目したとき、特定の相互作用の領域 U = 7.5 - 7.8 において臨界運動量以下の運動量領域でも、 減衰と回復を伴う二重極子振動が起こることを見つけた。図 4.4 は、U = 7.78 における減衰と回復を伴う二重極子振 動である。これとよく似た二重極子振動の振る舞いは既に、文献 [35, 43] で見られているが、詳しい理解はされていな い。そこでこの現象を理解するために、式 (2.3.5) と 式 (2.3.6) を対角化することによって励起スペクトルを計算する。 図 4.5(a) は、第1モードと第2モードの振動数を示していて、それぞれ、二重極子振動モードと単極子振動モードの振 動数に対応する。そして、単極子モードの振動数 ω_2 と二重極子振動の振動数 ω_1 の比 ω_2/ω_1 を図 4.5(b) に示した。我々 は、減衰と回復を伴う二重極子振動が起こる領域と ω_2/ω_1 がおよそ2となる領域が一致していることを見つけた。した がって、この現象は、式 (2.2.4)の非線形効果によって、二重極子振動モードと単極子振動モードの結合が起こった現象 であると解釈できる。この領域では、このモードの結合により臨界運動量以下においても二重極子振動の振幅の減衰が 起こるが、このモードの結合によって引き起こされた減衰は、動的不安定性によって引き起こされた減衰よりもかなり 小さいので、臨界運動量を決定できる。

第5章 ハードコアダイポーラーボソンの二重極子振動

この章では、調和トラップが結合した2次元光格子にダイポーラーボソンが閉じ込められた系を考える。簡単のため、 ハードコア極限 ($U \to \infty$)を考える。これは、局所的な Hilbert 空間を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ のみに限定することを意味する。ダイ ポールモーメントは、格子平面に対して垂直方向に分極していることを仮定する。この系は、以下の Bose-Hubbard 模 型でよく記述される。

$$\hat{H} = -J \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\alpha=1}^{d} (\hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}} + h.c.) + \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{j}\neq\mathbf{l}} \frac{\hat{n}_{\mathbf{j}} \hat{n}_{\mathbf{l}}}{r_{\mathbf{j},\mathbf{l}}^{3}} + \sum_{\mathbf{j}} (\epsilon_{\mathbf{j}} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{j}}$$
(5.0.1)

ここで、*V* はダイポール相互作用の強さであり、 $r_{j,1} = a|j-1|$ はサイトjと1の距離である。ダイポール相互作用は ~ $r_{j,1}^{-3}$ で減衰していくので、本研究では $r_{j,1} \leq 7a$ の範囲のダイポール相互作用までを考慮した。 $V \leq 10$ のとき、このカット オフの導入は系の定量的な性質をわずかに変えるだけであり、相図や臨界運動量などの定性的な性質には全く影響を及 ぼさない。再び、 $\hbar = J = a = 1$ の単位系を扱い、前の章と同様 Gutzwiller 近似を用いることで系を解析する。

5.1 基底状態



図 5.1: $\Omega = 0.01J$ 、N = 900のときの基底状態におけるトラップ中心周りの平均密度 \bar{n}_{ctr} (青い点線)、平均凝縮体密度 n_{ctr}^{c} (黒い実線)、静的構造因子 $S_{ctr}(\pi,\pi)/5(赤い破線)$ と V/Jの関係。

調和トラップの曲率を $\Omega = 0.01$ 、全粒子数をN = 900とし、式 (5.0.1) で記述される系の基底状態を計算する。V < 4.5の条件下では、基底状態は2つの場合が考えられる。Vが小さいとき、基底状態は超流動領域のみから構成されている。Vが十分に大きいとき、基底状態はトラップ中心周りにチェッカーボード型の密度波の秩序を持つ超固体領域とその超固体を囲んでいる超流動領域から構成されている。この2つの状態の区別するため、トラップ中心周りの平均凝縮体密度 $n_{\rm ctr}^c$ と静的構造因子 $S_{\rm ctr}(\pi,\pi)$ を図 5.1 に示す。 $n_{\rm ctr}^c = \sum_{j \in {\rm ctr}} |\Phi_j|^2/25$ と $S_{\rm ctr}(\pi,\pi) = \sum_{j,l \in {\rm ctr}} e^{i(\pi,\pi)\cdot(j-1)}\langle n_j n_l \rangle/25$ と定義した。ここで、 $\sum_{\rm cerr}$ はトラップ中心周りの5×5サイトにおける和を示している。これらの物理量により、 $n_{\rm ctr}^c \neq 0$ かつ $S_{\rm ctr}(\pi,\pi) = 0$ のとき超流動状態、 $n_{\rm ctr}^c \neq 0$ かつ $S_{\rm ctr}(\pi,\pi) \neq 0$ のとき超固体状態と判定でき、その境界はV = 3.26である。さらに、文献 [28] で得られた一様系で $\nu = 0.4$ における結果と比較するために、平均密度 $\bar{n}_{\rm ctr} = (n_0 + n_{e_1})/2$ も図 5.1に付け加えた。超固体領域では、トラップ中心の密度は $\bar{n}_{\rm ctr} \simeq 0.4$ である。一方、超流動領域では 0.4 より大きな値をとるが、この領域では臨界運動量は平均粒子数にほとんど依存しない。そのため、文献 [28] との臨界運動量の比較が可能である¹。

¹文献 [28] でも、Gutzwiller 近似と同じレベルの近似を用いている。

5.2 臨界運動量

式 (5.0.1) で記述される系の基底状態を得たので、前の章で示した手法により二重極子振動を計算した。ハードコアダ イポーラーボソンの場合でも、臨界 displacement D_c が正確に決定できることを見つけた。図 5.2(a) のシンボルマーク 付きの黒い実線は、 $D = D_c$ 、 $t = t_{max}$ における局所的な運動量の最大値 p_{max} と V の関係である。 p_{max} と文献 [28] で 得られた一様系で $\nu = 0.4$ における動的不安定性が引き起こす臨界運動量がよく一致することを見つけた。 p_{max} は、超 固体への転移点近くで最小の値をとっていて、超固体状態における p_{max} は、超流動状態における p_{max} より明らかに小 さい。超流動領域が超固体領域の回りに存在しているパラメーター領域では、超流動状態の臨界運動量と超固体状態の 臨界運動量と異なる2つの臨界運動量が存在することを意味するが、この領域でも一様系の結果とよい一致が見られる ことを我々は強調したい。これは、超固体領域の臨界運動量は超流動領域の臨界運動量より小さいということ、そして、 局所的な凝縮体密度が最も小さい値をとる超固体領域で局所的な運動量が最大値をとるということが理由である。次に、 超固体を観測する方法について議論する。局所的な運動量が測定できれば、先ほど述べた臨界運動量の性質により、超 固体とその他の状態(超流動、Mott 絶縁体、密度波を形成している絶縁体など)を判別することができる。しかし、臨 界運動量の測定よりも臨界 displacement の測定のほうが簡単であるので、臨界 displacement と V の関係を図 5.2(b) に 示した。超固体領域の D_c は、超流動状態の D_c よりも明らかに小さい値をとる。したがって、我々は臨界 displacement D_c の測定により超固体を観測できると主張する。



図 5.2: (a) $D = D_c$ 、 $t = t_{max}$ における局所的な運動量の最大値 (シンボルマーク付きの黒い実線) と V/Jの関係。一様 系で $\nu = 0.4$ における動的不安定性の臨界運動量 (赤い波線) [28]。(b) 臨界 displacement D_c と V/Jの関係。

5.3 動的な相転移現象

ー様系では、超固体の相境界近くの超流動相において超流動の運動量を増加させたとき、**k** = (π , π)を伴った励起に よって引き起こされた動的不安定性により超固体相への転移が起こることが示唆されている。実験は、調和トラップが 結合された系で行われるため、トラップ系において、この動的な相転移が起こるかどうかを確かめることは重要である。 この目的のため、転移点に近い超流動状態が実現されるパラメーターとして *V*/*J* = 3.2 を選んだ。図 5.3(a) は、基底状 態の密度分布である。この状態を初期状態とし、トラップ中心を *D* = 2 だけ移動させ、二重極子振動の時間発展を計算 する。超固体への動的な相転移を特徴づける密度波秩序の形成を定量化するために、静的構造因子 *S*_{ctr}(π , π)の時間発展 を図 5.4 に示した。時間 *t* \simeq 150 の後、*S*_{ctr}(π , π) は増減を繰り返し、*t* = 310 において *S*_{ctr}(π , π) が最大値をとってい る。図 5.3(b) は、*t* = 310 における密度分布であり、チェッカーボード型の密度波がトラップ中心で形成されていること 主張する。



図 5.3: V/J = 3.2、D = 2 における二重極子振動中の密度分布。(a): Jt/ħ = 0、(b): Jt/ħ = 310



図 5.4: V/J = 3.2、D = 2における二重極子振動中の静的構造因子 $S_{ctr}(\pi, \pi)$ の時間発展。

第6章 Summary

本研究では、Gutzwiller 近似を用いて、ボース気体が光格子に閉じ込められた系における超流動の輸送現象を研究し た。各次元において一様な光格子中の励起スペクトルから Landau 不安定性、動的不安定性による臨界運動量を決定し た。特に、1次元において相互作用が非常に弱いとき、短波長の励起によって引き起こされる動的不安定性の存在を発 見した。トラップ系では、突然トラップ中心を移動することで引き起こされる二重極子振動の時間発展を解析した。ト ラップ系における局所的な運動量の最大値によって定義される臨界運動量が、一様系の動的不安定性による臨界運動量 と定量的に一致することを見つけた。それに加えて、特定のパラメーター領域において、二重極子振動モードと単極子 振動モードの結合によって引き起こされる共鳴現象を見つけた。さらに、ハードコアダイポーラーボソンの臨界運動量 を調べ、一様系と同様に、超固体状態における臨界運動量が超流動状態における臨界運動量よりも小さいことを示した。 この結果により、我々は、臨界 displacement の測定によって超固体が観測できると主張する。最後に、超流動状態から 超固体状態への動的な相転移が二重極子振動によっても引き起こされることを示した。

補足 Gutzwiller 近似から励起エネルギーの導出

補足では、GP 方程式の場合と同様、定常状態からのエネルギーの変化が $\mathcal{N}\omega$ と記述されることを示す。 式 (2.3.5) × $u_{\mathbf{j},n}^*$ – 式 (2.3.6)* × $v_{\mathbf{j},n}$ を計算し、**j**、nについて和をとることにより、

$$\begin{split} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} (\omega |u_{\mathbf{j},n}|^{2} + \omega^{*} |v_{\mathbf{j},n}|^{2}) &= -\sum_{\mathbf{j}} \sum_{n,m} \sum_{\alpha=1}^{d} \left[\left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j},n}^{*} u_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ &+ \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} u_{\mathbf{j},n}^{*} u_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m} \\ &- \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} v_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha},m}^{*} v_{\mathbf{j},n} \\ &- \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m}^{*} v_{\mathbf{j},n} \\ &- \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m}^{*} v_{\mathbf{j},n} \\ &- \left\{ \sqrt{nm} \tilde{f}_{\mathbf{j},n-1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m}^{*} v_{\mathbf{j},n} \\ &+ \sqrt{n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m-1}^{*} + \sqrt{(n+1)(m+1)} \tilde{f}_{\mathbf{j},n+1} \tilde{f}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m+1}^{*} \right\} v_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha},m}^{*} v_{\mathbf{j},n} \\ &+ \sqrt{n+1} \left(\tilde{\Phi}_{\mathbf{j}-\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} + \tilde{\Phi}_{\mathbf{j}+\mathbf{e}_{\alpha}}^{*} \right) \left(u_{\mathbf{j},n}^{*} u_{\mathbf{j},n-1} - v_{\mathbf{j},n-1}^{*} v_{\mathbf{j},n} \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \left[\left\{ \frac{U}{2} n(n-1) - n\mu_{\mathbf{j}} \right\} \left(|u_{\mathbf{j},n}|^{2} - |v_{\mathbf{j},n}|^{2} \right) - \left(\tilde{\omega}_{\mathbf{j}} |u_{\mathbf{j},n}|^{2} - \tilde{\omega}_{\mathbf{j}}^{*} |v_{\mathbf{j},n}|^{2} \right) \right]$$
 (A.0.1)

となる。

式 (A.0.1) から式 (A.0.1) の複素共役を引くことで

$$(\omega - \omega^*) \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} (|u_{\mathbf{j},n}|^2 - |v_{\mathbf{j},n}|^2) = (\omega - \omega^*) \mathcal{N} = 0$$
(A.0.2)

となる。これは、 $N \neq 0$ のとき、線形方程式 (2.3.5)、(2.3.6)の解 $_{\omega}$ は実数となることを意味する。 定常状態からのエネルギーの変化を計算するために、

$$E' = E - \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \omega_{\mathbf{j}} |f_{\mathbf{j},n}|^2$$
(A.0.3)

を定義し、式 (A.0.3) に、式 (2.3.1) を代入する。揺らぎ $\delta f_{\mathbf{j},n}$ の l 次の項は消えるので¹、揺らぎの 2 次の項まで形式的 に展開する。

$$\begin{split} \delta E^{\prime(2)} &= -\sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \tilde{\omega}_{\mathbf{j},n} \delta f_{\mathbf{j},n}^{*} \delta f_{\mathbf{j},n} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{m} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \left(\delta f_{\mathbf{l},m} \frac{\partial}{\partial f_{\mathbf{l},m}} + \delta f_{\mathbf{l},m}^{*} \frac{\partial}{\partial f_{\mathbf{l},m}^{*}} \right) \left(\delta f_{\mathbf{j},n} \frac{\partial}{\partial f_{\mathbf{j},n}} + \delta f_{\mathbf{j},n}^{*} \frac{\partial}{\partial f_{\mathbf{j},n}^{*}} \right) E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\omega_{\mathbf{j}}t}\}] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \left[\delta f_{\mathbf{j},n}^{*} \left\{ \tilde{\omega}_{\mathbf{j}} \delta f_{\mathbf{j},n} + \sum_{\mathbf{l}} \sum_{m} \left(\frac{\partial^{2} E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m} \partial f_{\mathbf{j},n}^{*}} \delta f_{\mathbf{l},m} + \frac{\partial^{2} E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}^{*} \partial f_{\mathbf{j},n}^{*}} \delta f_{\mathbf{l},m}^{*} \right) \right\} \\ &+ \delta f_{\mathbf{j},n} \left\{ \tilde{\omega}_{\mathbf{j}} \delta f_{\mathbf{j},n}^{*} + \sum_{\mathbf{l}} \sum_{m} \left(\frac{\partial^{2} E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}^{*} \partial f_{\mathbf{j},n}^{*}} \delta f_{\mathbf{l},m}^{*} + \frac{\partial^{2} E[\{\tilde{f}_{\mathbf{j},n}e^{-i\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}t}\}]}{\partial f_{\mathbf{l},m}^{*} \partial f_{\mathbf{j},n}^{*}} \delta f_{\mathbf{l},m} \right) \right\} \right]$$
(A.0.4)

式 (2.3.3)を用いることで、

$$\delta E'^{(2)} = \frac{1}{2}i \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \left(\delta f_{\mathbf{j},n}^* \frac{d\delta f_{\mathbf{j},n}}{dt} - \delta f_{\mathbf{j},n} \frac{d\delta f_{\mathbf{j},n}^*}{dt} \right)$$
(A.0.5)

1式 (2.2.4) が、揺らぎの1次の項が零となる条件により導出されるため

となり、この式に Bogoliubov 変換の式 (2.3.4) を代入すると

$$\delta E'^{(2)} = \frac{1}{2} i \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} \{ (u_{\mathbf{j},n}^{*} e^{i\omega^{*}t} + v_{\mathbf{j},n} e^{-i\omega t}) (-i\omega u_{\mathbf{j},n} e^{-i\omega t} + i\omega^{*} v_{\mathbf{j},n}^{*} e^{i\omega^{*}t}) - (u_{\mathbf{j},n} e^{-i\omega t} + v_{\mathbf{j},n}^{*} e^{i\omega^{*}t}) (i\omega^{*} u_{\mathbf{j},n}^{*} e^{i\omega^{*}t} - i\omega v_{\mathbf{j},n} e^{-i\omega t}) \}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{n} (\omega + \omega^{*}) (|u_{\mathbf{j},n}|^{2} - |v_{\mathbf{j},n}|^{2}) e^{-i(\omega - \omega^{*})t}$$
(A.0.6)

となる。式 (A.0.2) より、 $\mathcal{N} \neq 0$ のとき ω は実数であるので、励起エネルギー $\delta E^{(2)}$ は

$$\delta E^{(2)} = \mathcal{N}\omega \tag{A.0.7}$$

となることが示された。

参考文献

- [1] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature 415, 39 (2002).
- [2] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- [3] T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl, and T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. 92, 130403 (2004).
- [4] D. Clément, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 102, 155301 (2009).
- [5] P. T. Ernst, S. Götze, J. S. Krauser, K. Pyka, D.-S. Lühmann, D. Pfannkuche, and K. Sengstock, Nat. Phys. 6, 56 (2009).
- [6] U. Bissbort, S. Götze, Y. Li, J. Heinze, J. S. Krauser, M. Weinberg, C. Becker, K. Sengstock, and W. Hofstetter, Phys. Rev. Lett. 106, 205303 (2011).
- [7] X. Zhang, C.-L. Hung, S.-K. Tung, and C. Chin, arXiv:1109.0344v1 (2011). To appear in Science.
- [8] C. D. Fertig, K. M. O'Hara, J. H. Huckans, S. L. Rolston, W. D. Phillips, and J. V. Porto, Phys. Rev. Lett. 94, 120403 (2005).
- [9] J. Mun, P. Medley, G. K. Campbell, L. G. Marcassa, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 99, 150604 (2007).
- [10] D. McKay, M. White, M. Pasienski, and B. DeMarco, Nature 453, 76 (2008).
- [11] L. Fallani, L. De Sarlo, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 93, 140406 (2004).
- [12] L. De Sarlo, L. Fallani, J. E. Lye, M. Modugno, R. Saers, C. Fort, and M. Inguscio, Phys. Rev. A 72, 013603 (2005).
- [13] S. Burger, F. S. Cataliotti, C. Fort, F. Minardi, M. Inguscio, M. L. Chiofalo, and M. P. Tosi, Phys. Rev. Lett. 86, 4447 (2001).
- [14] B. Wu and Q. Niu, Phys. Rev. A 64, 061603 (2001).
- [15] M. Modugno, C. Tozzo, F. Dalfovo, Phys. Rev. A 70 043625 (2004).

- [16] E. Altman, A. Polkovnikov, E. Demler, B. I. Halperin, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. 95, 020402 (2005).
- [17] A. Polkovnikov, E. Altman, E. Demler, B. Halperin, and M. D. Lukin, Phys.Rev. A 71, 063613 (2005).
- [18] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, Phys. Rev. Lett. 94, 160401 (2005)
- [19] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn, and B. L. Lev, Phys. Rev. Lett. 107, 190401 (2011).
- [20] K.-K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe'er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. S. Jin, and J. Ye, Science **322**, 231 (2008).
- [21] K. Aikawa, D. Akamatsu, M. Hayashi, K. Oasa, J. Kobayashi, P. Naidon, T. Kishimoto, M. Ueda, and S. Inouye, Phys. Rev. Lett. 105, 203001 (2010).
- [22] K. Goral, L. Santos, and M. Lewenstein, Phys. Rev. Lett. 88,170406 (2002).
- [23] D. L. Kovrizhin, C. V. Pai, and S. Sinha, Europhys. Lett. 72, 162 (2005).
- [24] S. Yi, T. Li, and C. P. Sun, Phys. Rev. Lett. 98, 260405 (2007).
- [25] I. Danshita and C. A. R. S de Melo, Phys. Rev. Lett. 103, 225301 (2009).
- [26] B. Capogrosso-Sansone, C. Trefzger, M. Lewenstein, P. Zoller, and G. Pupillo, Phys. Rev. Lett. 104, 125301 (2010).
- [27] L. Pollet, J. D. Picon, H. P. Büchler, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. 104, 125302 (2010).
- [28] I. Danshita and D. Yamamoto, Phys. Rev. A 82, 013645 (2010).
- [29] T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima, J. Phys. Soc. Jpn. 80, 113001 (2011).
- [30] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, Phys. Rev. B 40, 546 (1989).
- [31] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 81, 3108 (1998).
- [32] D. S. Rokhsar and B. G. Kotliar, Phys. Rev. B 44, 10328(1991).
- [33] M.Yamashita and M. W. Jack, Phys. Rev. A 76, 023606(2007)
- [34] K. V. Krutitsky and P. Navez, Phys. Rev. A. 84, 033602(2011).
- [35] D. L. Kovrizhin, G. V. Pai, and S. Sinha, arXiv:0707.2937v1 (2007).
- [36] B. Wu and Q. Niu, New J. Phys. 5, 104 (2003).
- [37] S. Konabe and T. Nikuni, J. Phys. B **39**, S101 (2006).
- [38] K. Iigaya, S. Konabe, I. Danshita, and T. Nikuni, Phys. Rev. A 74, 053611 (2006).
- [39] A. Smerzi, A. Trombettoni, P. G. Kevrekidis, and A. R.Bishop, Phys. Rev. Lett. 89, 170402 (2002).
- [40] A. A. Burkov and A. Paramekanti, Phys. Rev. Lett. 100, 255301 (2008).
- [41] R. Ganesh, A. Paramekanti, and A. A. Burkov, Phys. Rev. A 80, 043612 (2009).
- [42] Y. Yunomae, D. Yamamoto, I. Danshita, N. Yokoshi, and S. Tsuchiya, Phys. Rev. A 80, 063627 (2009).
- [43] M. Snoek and W. Hofstetter, Phys. Rev. A. 76, 051603 (2011).
- [44] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Cillen, S. Fölling, L. Pollet, and M. Greiner, Science 329, 547 (2010).